

**Untersuchungen zur Theorie  
der periodischen Orbitale  
für den Fall einer Kreisscheibe  
im homogenen Magnetfeld**

Diplomarbeit  
von  
Joachim Blaschke  
aus Hof

durchgeführt am Institut I für theoretische Physik  
der Universität Regensburg  
unter Anleitung von Prof. Dr. M. Brack  
Dezember 1995

4.,korrigierte Auflage  
16. - 20. Stück  
April 1996

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Semiklassische Ansätze</b>	<b>5</b>
2.1	Überblick . . . . .	5
2.2	Die Theorie der periodischen Bahnen . . . . .	8
2.2.1	Die POT von Gutzwiller . . . . .	8
2.2.2	Die POT von Creagh und Littlejohn . . . . .	10
2.2.3	Anwendung der POT . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Auswertung von semiklassischen Spurformeln</b>	<b>13</b>
3.1	Konvergenz der PO-Summen . . . . .	14
3.2	Billardsysteme . . . . .	16
3.2.1	Analogie zur Fouriertransformation . . . . .	16
3.2.2	Numerische Auswertung . . . . .	17
3.3	Allgemeine Systeme . . . . .	19
3.4	Der harmonische Oszillator als Beispiel . . . . .	20
3.5	Fensterfunktionen . . . . .	21
3.6	Vergleich mit der Quantenmechanik . . . . .	22
3.7	Zusammenfassung . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Das Kreisbillard</b>	<b>27</b>
4.1	Quantenmechanische Behandlung . . . . .	28
4.2	EBK-Quantisierung . . . . .	28
4.3	Die semiklassische Spurformel . . . . .	29
4.4	Numerische Auswertung der Spurformel . . . . .	31
4.5	Vergleich mit den quantenmechanischen Ergebnissen . . . . .	33
4.6	Bestimmung der POT-Eigenwerte . . . . .	34
4.6.1	Bestimmung der Peakpositionen der PO-Summe . . . . .	35
4.6.2	Asymptotische Peakpositionen . . . . .	36
4.6.3	Aharonov-Bohm-Billard . . . . .	38
4.6.4	Diskussion . . . . .	40
<b>5</b>	<b>Das Kreisbillard im homogenen Feld</b>	<b>41</b>
5.1	Die quantenmechanische Behandlung . . . . .	42
5.2	POT für beliebig starke Felder . . . . .	44
5.2.1	Klassifikation der klassischen periodischen Orbits . . . . .	44
5.2.2	Die Orbits mit Wandreflektionen . . . . .	46
5.2.3	Die Zyklotronorbits . . . . .	50
5.2.4	Auswertung der PO-Summe . . . . .	53

5.3	POT für schwache Felder . . . . .	56
5.4	Vergleich der POT mit der QM . . . . .	58
5.4.1	Der Bereich $R_c > R$ . . . . .	58
5.4.2	Der Bereich $R_c < R$ . . . . .	59
5.5	Randkorrekturen der POT . . . . .	61
5.5.1	Zusammenhang zwischen Randeffekten und dem Maslov-Index . . .	61
5.5.2	Eindimensionale Näherung der Randeffekte . . . . .	63
5.5.3	Berechnung der Reflektionsphasen . . . . .	63
5.5.4	Die POT-Summe mit effektiven Reflektionsphasen . . . . .	64
5.6	Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	68
<b>6</b>	<b>Leitwerte von Quantendots</b>	<b>71</b>
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>77</b>
<b>A</b>	<b>Fehlerabschätzung bei Summation bis zum <math>m_0</math>-Eck</b>	<b>i</b>
<b>B</b>	<b>Numerische Bestimmung der POT-Eigenwerte</b>	<b>v</b>
B.1	Bestimmung der Peakpositionen der PO-Summe . . . . .	v
B.2	Das Konvergenzverhalten der Peakpositionen . . . . .	vi
B.2.1	Einfluß von $m_0$ auf die Peakpositionen . . . . .	vi
B.2.2	Einfluß von $L_{max}$ auf die Peakpositionen . . . . .	viii
B.2.3	Abhängigkeit des Konvergenzverhaltens von der Fensterfunktion . .	ix
B.3	Bestimmung der asymptotischen Peakpositionen . . . . .	x
<b>C</b>	<b>Nullstellenbestimmung von <math>{}_1F_1</math></b>	<b>xi</b>
C.1	Abschätzung der Nullstelle . . . . .	xi
C.2	Iterative Verbesserung der Nullstelle . . . . .	xii

# Kapitel 1

## Einführung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Theorie der periodischen Bahnen, die meist nach dem englischen Namen „Periodic Orbit Theory“ als *POT* bezeichnet wird. Sie stellt über sogenannte *Spurformeln* einen Zusammenhang zwischen den klassischen periodischen Bahnen eines Systems und dessen Zustandsdichte her. Eine solche Beschreibung quantenmechanischer Effekte durch Größen der klassischen Physik heißt *semiklassisch*. Diese Ansätze sind Näherungen, also in ihrem Gültigkeitsbereich und ihrer Genauigkeit der Quantenmechanik unterlegen. Sie beziehen ihre Berechtigung zum einen aus dem ungleich größeren Maß an Anschaulichkeit. Dadurch werden experimentell meßbare Eigenschaften von Systemen oft auch intuitivem Verständnis und nicht nur numerischer Verifikation zugänglich. Zum anderen sind solche Ansätze im Grenzbereich zwischen Quantenphysik und klassischer Physik geeignete Werkzeuge. Dort, wo die klassische Physik aufgrund von Quantenkorrekturen keine befriedigenden Ergebnisse mehr liefert und der Rechenaufwand für die quantenmechanische Lösung aufgrund großer Teilchenzahlen nicht mehr zu bewältigen ist, können semiklassische Methoden erfolgreich eingesetzt werden. Dabei ist die Frage nach dem Gültigkeitsbereich der semiklassischen Näherung natürlich von entscheidender Bedeutung. Diese Frage wird auch in dieser Arbeit immer wieder diskutiert werden. Es wird dabei versucht, dem Fehler nicht nur einen numerischen Wert, sondern auch eine physikalische Bedeutung zuzuordnen.

Die Untersuchungen werden an einem einfachen Modellsystem, dem Kreisbillard, durchgeführt. Darunter versteht man einen zweidimensionalen, radialsymmetrischen Potentialtopf mit harten Wänden. Dieses System ist ohne Feld, mit zentraler Flußlinie und im homogenen Magnetfeld untersucht. Es ist in all diesen Fällen quantenmechanisch noch exakt lösbar, was eine Analyse der Fehler der POT erleichtert.

Die Arbeit ist in sechs Teile gegliedert. Nach dieser Einführung wird zunächst in Kapitel 2 eine kurze Übersicht über andere semiklassische Ansätze gegeben, um den Kontext dieser Arbeit zu umreißen. Dabei werden auch die Grundideen der POT vorgestellt. Die POT ermöglicht eine Darstellung der Einteilchenniveaudichte eines Systems als Summe über dessen klassische periodische Bahnen, wobei als Summanden nur (von der periodischen Bahn abhängige) Größen der klassischen Physik auftreten. Diese Darstellung kann meist nur die Grobstruktur der Niveaudichte reproduzieren. Reimann [35] hat festgestellt, daß die POT für den Fall des Kreisbillards sogar Näherungen der einzelnen Energieniveaus liefert. Das erste Ziel dieser Arbeit ist die genaue numerische Bestimmung dieser Werte und deren Vergleich mit den Ergebnissen der Quantenmechanik sowie anderer semiklassischer Näherungen.

Bei der Auswertung von PO-Summen treten erhebliche Konvergenzprobleme auf. Üblicherweise werden diese Probleme durch das Einführen einer exponentiellen Dämpfung der Beiträge längerer Orbits umgangen. Dieser Ansatz liefert aber für die Bestimmung der Eigenwerte keine ausreichend genaue Fehlerabschätzung. Kapitel 3 beschäftigt sich daher detaillierter mit diesem Konvergenzproblem. Die zunächst sehr formalen Überlegungen führen auf eine allgemeinere Methode zur Auswertung von PO-Summen. Mit ihrer Hilfe können die semiklassischen Näherungen der Eigenwerte des Kreisbillards mit engen Fehlergrenzen bestimmt werden. Das wird in Kapitel 4 durchgeführt.

In letzter Zeit finden Quantendots großes Interesse. Es handelt sich dabei um Halbleiterheterostrukturen, in denen sich ein zweidimensionales Elektronengas ausbildet. Dieses kann durch lithographische Methoden räumlich so eng begrenzt werden, daß sich Quantisierungseffekte zeigen. Das Kreisbillard ist als einfaches Modell für runde Quantendots geeignet. In einer einfachen Näherung ist Leitwert eines Quantendots, der durch Punktkontakte mit dem umliegenden Elektronengas verbunden ist, proportional zur Niveaudichte des Kreisbillards an der Fermikante. Für diesen Fall damit ist eine Bestimmung der Leitwerte mit den Methoden der POT möglich. Perssons [31] Messungen der Leitwerte von Quantendots im Magnetfeld motivierten semiklassische Untersuchungen des Kreisbillards im homogenen Feld. Reimann [35, 34] hat für dieses System eine Näherung der POT für schwache Felder vorgestellt. Die von ihr berechnete Schalenstruktur zeigt mit den gemessenen Leitwerten bei kleinen Feldern qualitative Übereinstimmung. Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung einer Spurformel für beliebig starke Felder. Diese wird in Kapitel 5 vorgestellt. In Kapitel 6 werden die semiklassisch berechneten Schalenstrukturen mit den Experimenten bei schwachen Feldern von Persson [31] verglichen. Ein Ausblick auf das zu erwartende Verhalten bei starken Feldern beschließt die Arbeit.

# Kapitel 2

## Semiklassische Ansätze

*Dieses Kapitel enthält einen Überblick über historische und aktuelle Ansätze semiklassischer Näherungen. Dazu werden die Grundideen der Semiklassik erläutert. Nach diesem knappen Einblick in den Kontext der Arbeit wird der im weiteren verwendete Ansatz, die Theorie der periodischen Bahnen nach Gutzwiller bzw. Creagh, vorgestellt.*

### 2.1 Überblick

Die Entwicklung der Quantenmechanik wurde um 1900 mit der Planck-Hypothese ausgelöst. Diese besagt, daß Energien nicht kontinuierlich, sondern in kleinsten Einheiten, also gequantelt, auftreten. Mit dieser Annahme konnte Planck das Strahlungsgesetz des schwarzen Körpers erstmals im gesamten Spektralbereich korrekt beschreiben. Niels Bohr gelang die Erklärung der diskreten Energieniveaus des Wasserstoffs mit dem Postulat der gequantelten Wirkungen, der sogenannten *Bohrschen Quantisierungsregel*:

$$S = \oint pdq = 2\pi n\hbar \quad (n \in \mathbb{N}) \quad . \quad (2.1)$$

Danach sind nur Zustände mit solchen Energien erlaubt, bei denen die Wirkung längs des klassischen Wegs bei einer Periode ein ganzzahliges Vielfaches von  $2\pi\hbar$  ist.

Ein solcher Ansatz, der mit den Methoden der klassischen Physik versucht, mikroskopisch korrekte Ergebnisse zu erreichen, wird als *semiklassisch* bezeichnet. Auch nach Aufstellen der Wellenfunktionsdynamik von Schrödinger, die heute als korrekte Beschreibung für mikroskopische Systeme anerkannt wird, ist das Interesse an solchen Ansätzen erhalten geblieben. Das liegt zum einen an der, im Vorwort schon erwähnten, größeren Anschaulichkeit mechanischer Modelle. Zum anderen ist der numerische Aufwand zur Berechnung der semiklassischen Näherung meist um Größenordnungen geringer als der für die exakte quantenmechanische Lösung. Inzwischen wurde eine Vielzahl semiklassischer Näherungen entwickelt. Um den in dieser Arbeit verwendeten Weg in diesen Kontext einordnen zu können, werden in einem groben Überblick die verschiedenen Ansätze zunächst kurz charakterisiert.

Historischer Ausgangspunkt ist die oben genannte Bohrsche Quantisierungsregel. Ihre Erweiterung auf mehrdimensionale, separable Systeme ist unter dem Namen *Bohr-Sommerfeld-Quantisierung* bekannt:

$$S_i = \oint p_i dq_i = 2\pi n_i \hbar \quad (n_i \in \mathbb{N}) \quad . \quad (2.2)$$

Beide Ansätze sind prinzipiell nur auf integrable Systeme anwendbar, also auf solche, die ebenso viele ( $f$ ) Freiheitsgrade wie Erhaltungsgrößen besitzen. Genau bei diesen Systemen ist die Phasenraumdynamik auf der Oberfläche eines  $f$ -dimensionalen Torus lokalisiert. Damit konnte Einstein [16] 1917 die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung durch

$$S_{\Gamma_i} = \oint_{\Gamma_i} \vec{p} d\vec{q} = 2\pi n_i \hbar \quad (n_i \in \mathbb{N}) \quad , \quad (2.3)$$

in einer gegen kanonische Transformationen invarianten, auch für nicht-separable Systeme gültigen Form verallgemeinern. Bei dieser sogenannten *Torusquantisierung* ist direkt erkennbar, daß nur integrable Systeme behandelt werden können: Die Quantisierung der Wirkungen muß genau längs der topologisch unabhängigen geschlossenen Bahnen  $\Gamma_i$  auf dem (eben nur in integrablen Systemen existenten) Phasenraumtorus vorgenommen werden.

All diese Ansätze postulieren einen direkten Zusammenhang zwischen *einer* klassischen Größe (einer klassischen Bahn bzw. dem klassisch invarianten Torus) und den Quantenzuständen eines Systems. Es wird sich später herausstellen, daß im allgemeinen kein solcher direkter Zusammenhang besteht.

Diese empirischen Postulate der Wirkungsquantisierung wurden bald von der Wellenmechanik, die die experimentellen Ergebnisse besser erklären konnte, abgelöst. Ausgehend von der Schrödingergleichung entwickelte sich eine zweite Gruppe semiklassischer Ansätze. Wentzel [46] und Brillouin [10] entwickelten unabhängig voneinander 1926 eine Methode zur iterativen Berechnung eindimensionaler Wellenfunktionen. Der erste Iterationsschritt entspricht einer Näherung der Schrödingergleichung in erster Ordnung in  $\hbar$ , in der nur Größen der klassischen Mechanik auftreten. Die Eigenwerte dieser Approximation entsprechen denen der Bohrschen Quantisierungsregel. Kramers [28] erkannte, daß die Näherung in der Nähe eines klassischen Umkehrpunktes zusammenbricht. Er löste daher die Schrödingergleichung in der Umgebung der klassischen Umkehrpunkte exakt und paßte die Phasen der genäherten Wellenfunktionen in großem Abstand an die exakte Lösung an. Diese „connection formulas“ ergeben die Quantisierungsbedingung

$$S = 2\pi\hbar \left( n + \frac{\alpha}{2} \right) \quad (n \in \mathbb{N}) \quad , \quad (2.4)$$

wobei  $\alpha \in \mathbb{N}_0$  von der Art der Umkehrpunkte abhängt. Diese Regel ist als *korrigierte Bohr-Sommerfeld-Quantisierung* bekannt. Die Näherung der Schrödingergleichung mit dem Ansatz von Wentzel, Kramers und Brillouin wird nach den Autoren meist als *WKB-Methode* bezeichnet. Der Term  $\alpha/2$  in der Quantisierungsbedingung entspricht einer zusätzlichen Phase von  $-\pi/2$  je Umkehrpunkt bzw.  $-\pi$  pro Reflektion an einer harten Wand. In Kapitel 5.5.3 wird dieser Phasenfaktor nochmals genauer diskutiert.

Eine entsprechende Korrektur der Torusquantisierung wurde 1956 von Keller [25] vorgestellt. Die mehrdimensionalen Entsprechungen der eindimensionalen Umkehrpunkte, die *Kaustiken*, führen wieder zu zusätzlichen Phasen. Die Quantisierungsbedingung lautet damit

$$S_{\Gamma_i} = 2\pi\hbar \left( n_i + \frac{\alpha}{4} \right) \quad (n_i \in \mathbb{N}) \quad . \quad (2.5)$$

Das ist als *EBK-Näherung* nach Einstein, Brillouin und Keller bekannt.

WKB- und EBK-Näherung ermöglichen nicht nur eine Approximation der Eigenwerte, sondern auch der Wellenfunktionen. Sie sind aber, genau wie die oben beschriebenen Wirkungsquantisierungen, nur auf integrable Systeme anwendbar.

Für nichtintegrable Systeme gab es bis 1970, als Gutzwiller [20] die Theorie periodischer Bahnen (POT) entwickelte, keine semiklassische Beschreibung. Die Grundideen der POT sind im nächsten Kapitel dargestellt. Das Ergebnis der Analyse Gutzwillers ist die Darstellung der Niveaudichte eines Systems in einer „PO-Summe“, einer Summe, die sich über alle klassischen, periodischen Bahnen mit Energie  $E$  erstreckt. Damit werden die Quantenzustände mit der *Gesamtheit* aller klassischen Orbits in Verbindung gebracht.

Mit dem Ansatz von Gutzwiller wurden auch nichtintegrable und chaotische Systeme einer semiklassischen Beschreibung zugänglich. Das hat das Interesse an semiklassischen Formulierungen stark vergrößert, so daß in der darauffolgenden Zeit viele neue semiklassische Ansätze entwickelt wurden. Besonders bekannt ist die Methode von Berry und Tabor [6], die mit Hilfe von Poisson-Summationen und Sattelpunktsnäherungen aus den impliziten Lösungen der EBK-Quantisierung eine PO-Summe ableitet. Balian und Bloch [3, 4] verwenden eine Entwicklung der Greensfunktion nach Reflektionen und erhalten im wesentlichen zur POT von Gutzwiller identische Resultate. Ihr Formalismus kann allerdings – im Gegensatz zu Gutzwillers POT – auch Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien behandeln. Eine entsprechende Erweiterung der POT von Gutzwiller wurde von Strutinsky und Magner [39] und in allgemeiner Form von Creagh und Littlejohn [14] durchgeführt. Diese Methode ist Ausgangspunkt für die vorliegende Arbeit und wird im nächsten Abschnitt vorgestellt. Allen semiklassischen Näherungen gemeinsam ist die Idee, die quantenmechanische Beschreibung an geeigneten Stellen nach Potenzen von  $\hbar$  zu entwickeln und sich auf den führenden Term zu beschränken. Das entspricht im wesentlichen der Näherung der Wellenfunktion durch eine ebene Welle mit dem Wellenvektor  $k(r) = \sqrt{E - V(r)}$ . Es gibt in jüngster Zeit auch Versuche, eine systematische Entwicklung bis zu höheren Ordnungen in  $\hbar$  durchzuführen (vergleiche z.B. Gaspard und Alonso [17]). Solche Berechnungen sind jedoch sehr aufwendig.

## 2.2 Die Theorie der periodischen Bahnen

### 2.2.1 Die POT von Gutzwiller

Mit der Veröffentlichung von Gutzwiller [20] begann die Renaissance der semiklassischen Beschreibungen. Die POT war die erste Möglichkeit, auch nicht-integrable Systeme semiklassisch zu behandeln. Das Interesse an der POT wurde noch dadurch verstärkt, daß sie auch chaotische Systeme beschreiben kann. Da diese Arbeit eine Weiterentwicklung der POT von Gutzwiller verwendet, sollen die wichtigsten Schritte bei deren Ableitung kurz vorgestellt werden.

Ausgangspunkt ist der Propagator in der Feynman-Pfadintegraldarstellung

$$K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t) = \int_{\Gamma} e^{i\frac{R}{\hbar}} \mathcal{D}(\Gamma) \quad . \quad (2.6)$$

Dabei geht das Integral über alle (nicht nur die klassischen) Pfade  $\Gamma$  von  $\mathbf{r}'$  nach  $\mathbf{r}''$  in der Zeit  $t$ .  $R$  ist die (gesamte) Wirkung, die mit  $R = \int \mathcal{L} dt$  das Integral längs des Weges über die Lagrangefunktion  $\mathcal{L}$  des Systems ist. Eine Sattelpunktsnäherung in  $R$  reduziert das unendlichdimensionale Integral auf eine gewichtete Summe über die dominanten Pfade. Das sind diejenigen, auf denen  $R$  stationär wird. Nach dem Lagrangeschen Extremalprinzip sind das genau die klassischen Trajektorien. Damit läßt sich der Propagator durch

$$K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t) \approx \left( \frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^{n/2} \sum_{\substack{\text{klassische} \\ \text{Bahnen}}} \sqrt{\det \left| -\frac{\partial^2 R}{\partial \mathbf{r}'' \partial \mathbf{r}'} \right|} e^{i\frac{R}{\hbar}} \quad (2.7)$$

approximieren. Diese Darstellung läßt sich bis 1927 auf Van Vleck [43] zurückverfolgen. 1951 wurde sie von Morette [29] auf diese Weise aus dem Pfadintegral abgeleitet. Die Greensfunktion ist über eine Laplace-Transformation aus dem Propagator zu berechnen:

$$G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E) \approx -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t) e^{\frac{i}{\hbar} E t} dt \quad . \quad (2.8)$$

Mit einer Sattelpunktsnäherung ist diese Integration wieder analytisch durchführbar, die Summation erfolgt dann über alle klassischen Bahnen der Energie  $E$  von  $\mathbf{r}'$  nach  $\mathbf{r}''$ .

Gutzwiller berücksichtigt zusätzlich die Effekte an den *konjugierten Punkten*, an denen die verwendete Sattelpunktsnäherung versagt. Das ist analog zur Berücksichtigung der Umkehrpunkte in der WBK-Näherung und entspricht der physikalischen Forderung

$$K(x_3, x_1, t) = \int K(x_3, x_2, t) K(x_2, x_1, t) dx_2$$

für den Propagator. Diese Bedingung führt wieder zu zusätzlichen Phasentermen  $-\mu\pi/2$ . Der sogenannte *Maslov-Index*  $\mu$  ist nur durch die Topologie der Bahn bestimmt. Die Niveaudichte ergibt sich aus dem Imaginärteil der Spur der Greensfunktion:

$$g_E = -\frac{1}{\pi} \Im \langle \mathbf{r}' | G | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{1}{\pi} \Im \int G(\mathbf{r}', \mathbf{r}', E) d\mathbf{r}' \quad . \quad (2.9)$$

Die Spurbildung wertet die Greensfunktion an  $\mathbf{r}'' = \mathbf{r}'$  aus. Für die Pfade von  $\mathbf{r}'$  nach  $\mathbf{r}''$  in Limes  $\mathbf{r}'' \rightarrow \mathbf{r}'$  gibt es prinzipiell zwei Möglichkeiten, die in Abbildung 2.1 am Beispiel eines Billardsystems illustriert sind. Als *indirekte* Bahnen bezeichnet man solche, die auch im Limes  $\mathbf{r}'' \rightarrow \mathbf{r}'$  eine endliche Länge haben; *direkte* Bahnen sind die, deren Länge bei  $\mathbf{r}'' = \mathbf{r}'$  verschwindet. Bei der Auswertung der Spur der Greensfunktion ist eine

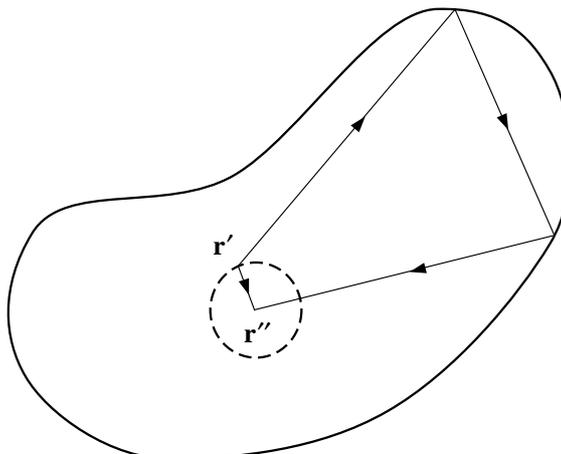


Abbildung 2.1: Skizze der direkten und indirekten Bahnen von  $\mathbf{r}'$  nach  $\mathbf{r}''$  in einem Billardsystem (nach [35]).

Sattelpunktsnäherung nötig, die für die direkten Pfade zusammenbricht. Eine gesonderte Analyse der Spur für diese Pfade zeigt, daß sie genau den Thomas-Fermi-Anteil der Niveaudichte ergeben. Bei der semiklassischen Berechnung wird die Niveaudichte daher in zwei Teile aufgespalten:

$$g_E = \tilde{g}_E + \delta g_E \quad . \quad (2.10)$$

Dabei ist  $\tilde{g}_E$  der sogenannte *glatte Anteil* der Niveaudichte, der dem Beitrag der direkten Bahnen entspricht und der zur (erweiterten) Thomas-Fermi-Niveaudichte identisch ist. Der *oszillierende Anteil*  $\delta g_E$  der Niveaudichte kommt von den indirekten Bahnen. Die Sattelpunktsnäherung ergibt für diese:

$$\delta g_E \approx \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{PO} \frac{T_0}{\sqrt{|\det(M - I)|}} \cos\left(\frac{S}{\hbar} - (\mu + \nu)\frac{\pi}{2}\right) \quad . \quad (2.11)$$

Die Summation erstreckt sich jetzt nur noch über alle klassischen *periodischen* Bahnen, die im folgenden als *PO* bezeichnet werden.

In Gleichung 2.11 ist  $M$  die sogenannte Monodromiematrix, die der Sensibilität einer Bahn gegen Änderungen der Anfangsbedingungen entspricht.  $\mu$  ist der Maslov-Index und  $\nu$  ein zusätzlicher Term, der das Vorzeichen von  $\det(M - I)$  enthält.  $T_0$  ist die Umlaufzeit um ein primitives Orbit, d.h. die Laufzeit bis zu dem Punkt, an dem sich die Bahn im Phasenraum das erste Mal schließt.

Die Ableitung von Gleichung 2.11 ist in der vorgestellten Form nur für *isolierte* Bahnen gültig. Darunter versteht man Bahnen, denen im Phasenraum keine anderen klassischen, periodischen Bahnen mit gleicher Energie benachbart sind. Für nicht-isolierte Bahnen bricht die verwendete Sattelpunktsnäherung zusammen, was Divergenzen der „Amplituden“  $T_0/\sqrt{|\det(M - I)|}$  verursacht. Dafür ist schon von Gutzwiller 1970 [20] eine einfache Interpretation angegeben worden: Die POT ersetzt im wesentlichen die Dynamik der Wellenfunktionen durch die klassischen Trajektorien. Diese Näherung ist also analog zu dem Übergang von der Wellenoptik zur geometrischen Optik. In einem Fokuspunkt wird die Intensität eines Lichtbündels gemäß der geometrischen Optik unendlich. Das entspricht den hier auftretenden Divergenzen. Die Wellenoptik ergibt allerdings eine endliche Intensität im Bereich einer Wellenlänge. Die Wellenlänge –und daher die Intensität im Fokus– hängen vom Wert von  $\hbar$  ab, der in der Strahlenoptik nicht auftritt. Analog ist bei den

in der Spurformel aufgrund der Symmetrien auftretenden Divergenzen keine unendliche, sondern eine um eine Ordnung von  $\sqrt{\hbar}$  größere Amplitude zu erwarten.

Die Spurformel von Gutzwiller kann also, da sie nur für isolierte Bahnen gilt, keine Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien beschreiben. Die Erweiterung der POT auf solche Systeme wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

### 2.2.2 Die POT von Creagh und Littlejohn

Erweiterungen der POT auf Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien wurden von Struinsky und Magner [39] und, in allgemeinerer Form, von Creagh und Littlejohn [14] angegeben. Letztere ist Ausgangspunkt der vorliegenden Arbeit und soll nun vorgestellt werden. Die Grundidee von Creagh und Littlejohn zur Erweiterung der POT auf Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien ist eine Abspaltung der Symmetrieentartung im Hamiltonian. Das symmetriereduzierte System kann dann analog zu Gutzwillers Vorgehen behandelt werden, während die Dynamik in den Koordinaten, nach denen die Hamiltonfunktion entartet ist, exakt berechnet werden kann. Diese Analyse ist sehr aufwendig, sodaß hier nur das Ergebnis zitiert wird. Die Spurformel eines symmetrieentarteten Systems<sup>1</sup> ergibt sich zu

$$\begin{aligned} {}^{\text{POT}}\delta g_E &= -\frac{1}{\pi} \Im \left[ \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{k/2}} \sum_{\Gamma} \int_{\Gamma} dt d\mu(g) |K_{\Gamma}|^{-1/2} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma} \frac{\pi}{2}} \right] = \\ &=: -\frac{1}{\pi} \Im \left[ \sum_{\Gamma} A_{\Gamma} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma} \frac{\pi}{2}} \right] . \end{aligned} \quad (2.12)$$

$k$  ist dabei die Dimension der Symmetrieentartung. Der Vorfaktor der Spurformel ist proportional zu  $\hbar^{-k/2}$ , so daß z.B. Bahnen mit eindimensionaler (kontinuierlicher) Symmetrie um den Faktor  $\hbar^{-1/2}$  stärker gewichtet sind als isolierte Orbits. Das deckt sich mit der oben angeführten physikalischen Erklärung der Divergenz der ursprünglichen Spurformel von Gutzwiller für den Fall von Symmetrieentartungen. Der Term  $\int_{\Gamma} dt$  entspricht der Umlaufzeit  $T_0$  um das primitive Orbit;  $\int_{\Gamma} d\mu(g)$  ist das Integral über die Symmetrieentartung.  $\mu(g)$  ist dabei das Maß der Gruppe, die die Symmetrie erzeugt.  $K$  ist das Produkt aus drei Faktoren:

$$K = Q \det(W) \det(\tilde{M} - I) . \quad (2.13)$$

$(\tilde{M} - I)$  entspricht dem Term  $(M - I)$  in der ursprünglichen Spurformel von Gutzwiller. Die Tilde auf dem  $M$  soll lediglich andeuten, daß in diesem Fall nur das symmetriereduzierte Teilsystem betrachtet werden muß.  $Q$  hängt nicht von der Dynamik, sondern lediglich von der Symmetriegruppe ab. Für abelsche Symmetrien ist  $Q = 1$ , für dreidimensionale Rotationssymmetrie ist  $Q = J^{-2}$ , wobei  $J$  der gesamte Drehimpuls ist.

Eine Bahn, die im symmetriereduzierten Teilsystem periodisch ist, muß das im vollständigen Phasenraum nicht sein. Dieser Effekt der Symmetriereduktion wird durch den Faktor  $\det(W)$  berücksichtigt, wobei  $W$  durch

$$W = \frac{\partial \Theta_i}{\partial J_i} \quad (2.14)$$

bestimmt ist. Dabei sind  $\Theta_i$  die erzeugenden Operatoren der Symmetrie und  $J_i$  die dazugehörigen Erhaltungsgrößen. Die genaue Konstruktion dieser Koordinaten in mehreren

<sup>1</sup>Dies ist nicht die allgemeinste Form, die von Creagh und Littlejohn angegeben wird, sondern eine (im folgenden unwesentliche) Einschränkung, die auch in [12] vorgestellt wird.

Dimensionen ist in [14] angegeben. Die letzte unbekannte Größe in Gleichung 2.12 ist  $\sigma$ , das als  $\sigma = \mu - \delta$  definiert ist. Dabei ist  $\delta$  die Zahl der negativen Eigenwerte der Matrix  $W$  und entspricht der Phasenkorrektur der Vorzeichenwechsel von  $\det(W)$ .  $\mu$  ist der Maslov-Index. Zu seiner Bestimmung werden von Creagh und Littlejohn geometrische Interpretationen des Phasenraums angegeben [13]. In einfachen Fällen ist der Maslov-Index auch aus der Bewegung im Ortsraum ablesbar. Für jede Reflektion an einer harten Wand ist  $\mu = 2$ , an jeder *Kaustik*  $\mu = 1$ . Eine Kaustik ist bei Creagh und Littlejohn die Grenzfläche der klassischen Bahnen, die von einem Punkt mit leicht unterschiedlichen  $\Theta_i$  ausgehen. Das ist in Abbildung 2.2(A) für den Fall eines Kreisbillards dargestellt. Die Definitionen von Kaustik oder *konjugiertem Punkt* variiert allerdings stark zwischen den Autoren. In Abbildung 2.2(B) ist noch die Definition von Keller skizziert: Bei ihm sind Kaustiken durch die Berührflächen *eines* periodischen Orbits bestimmt.

Damit sind alle Größen in der PO-Summe nach Gleichung 2.12 beschrieben. In Kapitel 5

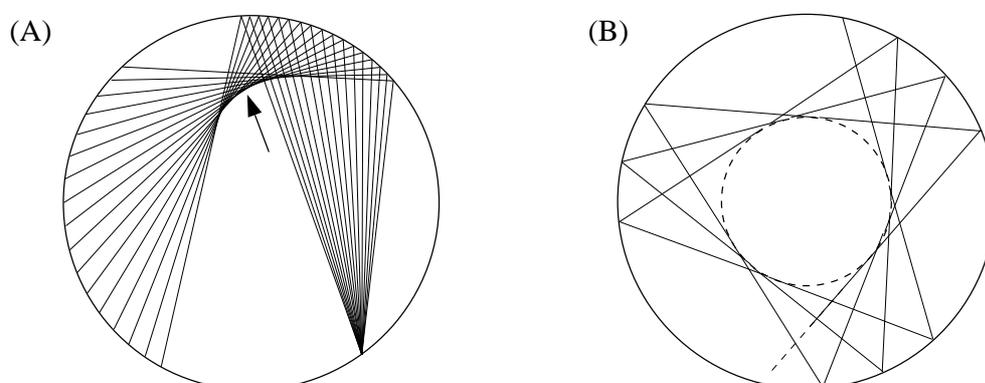


Abbildung 2.2: Die Definitionen von konjugierten Punkten oder Kaustiken nach Creagh und Littlejohn (A) und Keller (B)

wird mit Hilfe dieser Spurformel das Kreisbillard im homogenen Magnetfeld behandelt. Der in Gleichung 2.12 hergestellte Zusammenhang zwischen der Zustandsdichte eines Systems und seinen klassischen periodischen Bahnen darf nicht überinterpretiert werden. Die klassischen Bahnen „erzeugen“ nur im Sinn der Sattelpunktsnäherung die Niveaudichte des Systems. Sie sind die Repräsentanten der Bereiche im Phasenraum, in denen die Wirkung fast konstant ist. Diese *Bereiche*, nicht die klassischen periodischen Bahnen selbst, liefern den dominanten Beitrag zum Pfadintegral.

### 2.2.3 Anwendung der POT

Die POT beschreibt die Niveaudichte eines *Einteilchensystems* als Summe von Termen der Form  $A_\Gamma \cos \Phi_\Gamma$  über alle klassischen, periodischen Bahnen  $\Gamma$ . Bei *Vielteilchensystemen* mit großen Teilchenzahlen ist das Modell der Einteilchenbewegung in einem effektiven Potential, das das Mittel aller Wechselwirkungen und Korrelationen der Teilchen enthält, in vielen Fällen eine gute Näherung. Kennt man dieses effektive Potential (z.B. aus selbstkonsistenten Dichtefunktionalrechnungen) oder seine phänomenologische Parametrisierung (z.B. Wood-Saxon-Potentiale für Kerne), so ist das Vielteilchensystem als effektives Einteilchensystem zu behandeln. Auf diese Weise sind auch Vielteilchensysteme für eine semiklassische Beschreibung zugänglich.

Bei den im folgenden betrachteten Fermionensystemen besetzen die  $N$  Teilchen im Grundzustand aufgrund des Pauliprinzip die  $N$  Zustände mit den niedrigsten Energien. Der Ab-

stand zwischen dem letzten besetzten und dem nächsten (freien) Niveau ist die minimale Anregungsenergie des Systems und bestimmt damit seine Stabilität. Die Eigenenergien sind nicht äquidistant<sup>2</sup> sondern bilden Gruppen, die sogenannten *Schalen*. Ist der Abstand zum ersten unbesetzten Niveau besonders groß, spricht man von einem *Schalenabschluß*. Das System ist dann stabiler als die Systeme mit etwas mehr oder etwas weniger Teilchen, es ist *magisch*. Die starke Variation der Stabilität (und anderer physikalischer Größen) mit der Teilchenzahl wird unter dem Begriff der *Schaleneffekte* zusammengefaßt. Diese treten in allen endlichen Fermionensystemen auf. Die bekanntesten Beispiele sind die magischen Zahlen bei den Atomkernen, die Schalenabschlüsse des elektronischen Systems bei den chemisch stabilen Edelgasen, die magischen Zahlen bei Metallclustern oder auch, was in letzter Zeit großes Interesse findet, bei den Eigenschaften von Quantendots.

Diese Schalenstruktur ist aber nicht nur in den Eigenwerten, sondern schon in der *geglätteten* Niveaudichte enthalten. Darunter versteht man die Faltung der quantenmechanischen Eigenwerte mit einer Glättungsfunktion, typischerweise einer Gauss-Kurve. Wählt man die charakteristische Breite  $\gamma$  dieser Glättungsfunktion größer als die Niveauabstände innerhalb einer Schale, aber kleiner als die Schalenabstände, so wird zwar über die eng benachbarten Niveaus einer Schale gemittelt, nicht aber über verschiedene Schalen hinweg. Ein Minimum der geglätteten Niveaudichte entspricht dann genau einem Schalenabschluß. Eine solche Mittelung beschreibt die in realen Systemen auftretenden Störungen meist sehr gut. So verbreitert sich eine Spektrallinie schon durch Lebensdauereffekte von einem  $\delta$ -Peak zu einer Lorenzkurve. Endliche Temperaturen und Störstellen führen zu einer Verbreiterung der Niveaus, die etwa einer Gauss-Kurve entspricht. Dadurch sind im Experiment die einzelnen Energieniveaus oft nicht auflösbar, und es wird nur eine gemittelte Niveaudichte beobachtet. Für die physikalischen Eigenschaften eines Systems ist daher die exakte Lage der Energieniveaus oft nicht relevant; die wesentliche Größe ist die Schalenstruktur, die der gemittelten Niveaudichte entspricht.

In Kapitel 3 wird gezeigt, daß die Auswertung der semiklassischen Spurformel automatisch auf eine solche Mittelung führt. Die Berechnung der Spurformel wird einfacher, wenn nur grobe Strukturen der Niveaudichte betrachtet werden sollen. Bei der quantenmechanischen Berechnung tritt der entgegengesetzte Effekt ein: Zur Berechnung der Grobstruktur der Niveaudichte ist ein großes  $\gamma$  bei der Mittelung nötig, und es müssen mehr Eigenwerte berücksichtigt werden.

Mit der POT können somit (unter anderem) alle Systeme beschrieben werden, bei denen die effektive Einteilchennäherung gerechtfertigt und das effektive Einteilchenpotential bekannt ist. Sie eignet sich besonders zur Berechnung der Schalenstruktur eines Systems. Diese Schalenstruktur schlägt sich in endlichen Fermionensystemen in vielen physikalischen Größen nieder und ist daher häufig einer experimentellen Bestimmung zugänglich.

---

<sup>2</sup>Die Ausnahme ist der harmonische Oszillator.

## Kapitel 3

# Auswertung von semiklassischen Spurformeln

*In diesem Abschnitt werden die Schwierigkeiten bei der praktischen Auswertung von semiklassischen Spurformeln behandelt. Die Konvergenzprobleme der Spurformeln liegen an der Verwendung eines ungeeigneten Konvergenzbegriffes. Der für solche Probleme angemessene Konvergenzbegriff wird vorgestellt. Die Analogie zur Fouriertransformation wird ausgenutzt, um für eine große Gruppe von Systemen ein mit diesem Konvergenzbegriff konsistentes Verfahren zur numerischen Approximation zu entwickeln. Die übliche Gauss-Glättung der Niveaudichte ist als Spezialfall in diesem Verfahren enthalten.*

Eine analytische Summation von Spurformeln der Form 2.11 und 2.12 oder von vergleichbaren Ausdrücken von Berry und Tabor [6] ist nur in Ausnahmefällen möglich (ein Beispiel dafür ist der harmonische Oszillator [?]). Bei der numerischen Auswertung treten erhebliche Konvergenzprobleme auf. Im allgemeinen werden die Grenzen der semiklassischen Methode, also die Fehler durch Beschränkung auf die führende Ordnung in  $\hbar$ , für diese Divergenzen verantwortlich gemacht [3]. Da diese Fehler für längere Bahnen größer werden, wird damit eine (meist exponentielle) Unterdrückung der Beiträge der längeren Bahnen zur PO-Summe gerechtfertigt.

Die Methode von Balian und Bloch [4] umgeht dieses Problem elegant durch die Einführung eines kleinen Imaginärteils in die Energie<sup>1</sup>. Das entspricht der Ersetzung der  $\delta$ -Peaks der quantenmechanischen Niveaudichte durch Lorenz-Kurven und analog einer Faltung der semiklassischen Niveaudichte mit einer solchen Funktion. In Näherung ist das wieder äquivalent zu einer exponentiellen Unterdrückung der Beiträge längerer Bahnen. Diese Methode des sogenannten „smoothing“ der Niveaudichte hat sich inzwischen als Standard etabliert.

Hier wird ein anderer, allgemeinerer Ansatz gewählt. Statt physikalische Argumente zu verwenden, die die Manipulation an der Spurformel zur Vermeidung der Divergenzen rechtfertigen, werden die PO-Summen rein mathematisch betrachtet. Von diesem Standpunkt aus ergeben sich die Konvergenzprobleme lediglich aus der Verwendung eines ungeeigneten Konvergenzbegriffs. Die für Spurformeln geeignete Definition von Konvergenz wird in Abschnitt 3.1 vorgestellt. Die enge Analogie zur Fouriertransformation ermöglicht eine

---

<sup>1</sup>Damit berücksichtigen sie gleichzeitig sogenannte *imaginäre Orbits* in klassisch verbotenen Bereichen. Diese Orbits sind in der Umgebung von Orbitbifurkationen und bei Tunneleffekten relevant und müssen in anderen Ansätzen zusätzlich eingeführt werden.

sehr exakte Beschreibung der Effekte einer numerischen Auswertung von PO-Summen. Das wird zunächst im Kapitel 3.2 für den Spezialfall der Billards vorgestellt und in Kapitel 3.3 auf allgemeinere Systeme erweitert. Ergebnis ist ein Verfahren zur numerischen Auswertung von Spurformeln, das das bekannte „smoothing“ als Spezialfall enthält.

Untersucht wird eine Spurformel des Typs von Gleichung 2.12. In diesem Kapitel wird zur Vereinfachung der Notation der Vorfaktor  $-\frac{1}{\pi}\Im[\dots]$  nicht mitnotiert. Um die Zahl der Indices nicht unnötig zu vergrößern, wird dafür weiterhin die Schreibweise  ${}^{\text{POT}}\delta g_E$  verwendet. Die unterdrückten Faktoren können bei Bedarf bei jedem Term, in dem eine Exponentialfunktion auftritt, ergänzt werden.

### 3.1 Konvergenz der PO-Summen

Die *Konvergenz* einer Summe  $\sum_n a_n$  ist in  $\mathbb{C}$  (bzw. in  $\mathbb{R}$ ) üblicherweise (vergleiche z.B. [44]) definiert als

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \text{ konvergent gegen } c \Leftrightarrow \forall \varepsilon > 0 \exists m_0 \in \mathbb{N} \forall m > m_0 : \left| \sum_{n=0}^m a_n - c \right| < \varepsilon. \quad (3.1)$$

Der Wert einer Spurformel soll nicht von der Summationsreihenfolge abhängen. Das ist genau dann der Fall, wenn die Summe *absolut konvergent* ist:

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \text{ absolut konvergent} \Leftrightarrow \sum_{n=1}^{\infty} |a_n| < \infty. \quad (3.2)$$

Falls man auch  $\pm\infty$  als mögliche Summenwerte zulassen möchte, ist dieses Kriterium durch das der *unbedingten Konvergenz*

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \text{ unbed. kgt.} \Leftrightarrow \left\{ \sum_{\substack{n=1 \\ a_n > 0}}^{\infty} a_n, \sum_{\substack{n=1 \\ a_n < 0}}^{\infty} a_n \right\} \neq \{\infty, -\infty\} \quad (3.3)$$

zu ersetzen. Typische PO-Summen nach Gleichung 2.12 erfüllen keine dieser Voraussetzungen<sup>2</sup>. Das bedeutet, daß der Wert der PO-Summe (falls er überhaupt existiert) von der Summationsreihenfolge abhängt<sup>3</sup>.

Die Spurformel der POT ist eine Approximation der quantenmechanischen Niveaudichte. Diese ist mit  ${}^{\text{QM}}g_E = \sum_n \delta(E - \varepsilon_n)$  eine Summe von  $\delta$ -Funktionen an den Eigenwerten  $\varepsilon_n$ . Die Konvergenz einer Funktionenfolge gegen eine  $\delta$ -Funktion kann nicht mit den oben genannten Konvergenzkriterien behandelt werden. Falls die semiklassische Näherung gut genug ist, die  $\delta$ -Funktionen der Niveaudichte zu reproduzieren, ist keine Konvergenz im Sinne der oben angegebenen Definitionen zu erwarten. Die Konvergenzprobleme der PO-Summen liegen also an der Verwendung eines unangemessenen Konvergenzbegriffs. Der zur Behandlung von Spurformeln geeignete Konvergenzbegriff ist der der *Distributions-theorie*. Hier sind die nötigen Grundlagen [2, 45] kurz zusammengefaßt.

*Distributionen* gehören zur Menge der Abbildungen  $P$  von Funktionen  $F$  in die komplexen Zahlen. Diese Abbildung wird meist als Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  geschrieben:

$$P : F \rightarrow \mathbb{C}, \quad P[F] =: \langle P, F \rangle = c \in \mathbb{C}. \quad (3.4)$$

<sup>2</sup>Im Anhang A wird für das Kreisbillard gezeigt, daß es Energien gibt, für die die PO-Summe nicht unbedingt konvergent ist. Diese Werte von  $E$  haben sogar Häufungspunkte, sind also nicht isoliert.

<sup>3</sup>Diese Abhängigkeit ist nach dem Riemannschen Umordnungssatz sehr stark: Für eine nicht unbedingt konvergente Summe ist es möglich, eine Summationsreihenfolge zu wählen, mit der die Summe gegen einen *beliebig* gewählten Grenzwert konvergiert oder auch divergiert (vergleiche z.B. [44]).

Eine Distribution muß zusätzlich *linear*

$$\langle P, \lambda F + \mu G \rangle = \lambda \langle P, F \rangle + \mu \langle P, G \rangle \quad (3.5)$$

und *stetig*

$$t_n \in T, t_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} t \implies \langle P, t_n \rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle P, t \rangle \quad (3.6)$$

sein. Dabei ist  $T$  die Menge der sogenannten *Testfunktionen*<sup>4</sup>. Die Konvergenz von Distributionen ist über das Skalarprodukt definiert (*schwache Konvergenz*):

$$P_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P \quad :\Leftrightarrow \quad \forall t \in T \quad \exists c \in \mathbb{C} \quad \text{so daß} \quad \langle P_n, t \rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c \quad (3.7)$$

Dabei ist die Konvergenz auf der rechten Seite die Konvergenz in  $\mathbb{C}$ . Das Skalarprodukt läßt sich für lokal integrable Funktionen  $F(x)$  mit dem Integral identifizieren

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(x)G(x) dx \equiv \langle F, G \rangle \quad , \quad (3.8)$$

womit lokal integrable Funktionen eine Teilmenge der Distributionen sind. Auch die bekannte  $\delta$ -Funktion ist eine Distribution:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)G(x) dx = \langle \delta, G \rangle := G(0) \quad (\in \mathbb{C}) \quad . \quad (3.9)$$

Mit diesen Begriffen läßt sich die Konvergenz von PO-Summen formulieren. Für eine beliebige Numerierung  $\Gamma_m$  ( $m \in \mathbb{N}$ ) der periodischen Bahnen  $\Gamma$  definiert man die Teilsummen  $P_n$  der Spurformel

$$P_n := \sum_{m=0}^n A(\Gamma_m) e^{i \frac{S(\Gamma_m)}{\hbar} - i \sigma(\Gamma_m) \frac{\pi}{2}} \quad . \quad (3.10)$$

Damit die PO-Summe *wohldefiniert* ist, muß der Grenzwert zusätzlich unabhängig von der gewählten Numerierung der Orbits (d.h. von der Summationsreihenfolge) sein. Mit

$$P_n^\pi := \sum_{m=0}^n A(\Gamma_{\pi(m)}) e^{i \frac{S(\Gamma_{\pi(m)})}{\hbar} - i \sigma(\Gamma_{\pi(m)}) \frac{\pi}{2}} \quad , \quad (3.11)$$

wobei  $\pi$  eine Permutation aus der Menge aller Permutationen  $\Pi$  ist, lautet dann das Konvergenzkriterium für semiklassische Spurformeln

$$\begin{aligned} \sum_{\Gamma} A_{\Gamma} e^{i \frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i \sigma_{\Gamma} \frac{\pi}{2}} \quad \text{konvergent} \quad :\Leftrightarrow \\ :\Leftrightarrow \quad \forall t \in T \quad \exists c \in \mathbb{C} \quad \text{sodaß} \quad \forall \pi \in \Pi : \quad \langle P_n^\pi, t \rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c \quad . \end{aligned} \quad (3.12)$$

Wenn man von der Konvergenz der PO-Summe spricht, muß also diese Bedingung getestet werden. Konvergenzbetrachtungen nach Gleichung 3.1 sind mathematisch nicht sinnvoll. Diese Überprüfung von Gleichung 3.12 ist jedoch so aufwendig, daß sie in dieser Arbeit nicht durchgeführt wurde. Im folgenden wird daher angenommen, daß alle verwendeten PO-Summen im Sinne von Gleichung 3.12 konvergent sind. Falls diese Bedingung erfüllt

<sup>4</sup>Testfunktionen sind beliebig oft stetig differenzierbare, *finite* Funktionen. Für physikalische Anwendungen genügt die vereinfachte Definition

$$t \in T \quad :\Leftrightarrow \quad t \in C^\infty \wedge \exists x_0 \in \mathbb{R} : \forall |x| > x_0 \quad t(x) = 0 \quad .$$

ist, ist die PO-Summe nach einer Intergration<sup>5</sup> eine „normale“ Funktion. So können z.B. gefaltete Niveaudichten  $g(E) * f(E)$  oder Zustandssummen  $Z(E_F) = \int_{E=0}^{E_F} g_E dE$  mit dem Konvergenzbegriff von Gleichung 3.1 behandelt werden. Im nächsten Abschnitt wird gezeigt, daß die praktische Auswertung der PO-Summe für viele Systeme von selbst zu einer solchen Faltung führt.

## 3.2 Billardsysteme

Die Struktur der PO-Summe nach Gleichung 2.12 erinnert an eine Fouriertransformation (FT). Es liegt daher nahe zu versuchen, die Kenntnisse über Fouriertransformationen auf Spurformeln zu übertragen. Das wird hier zunächst am Beispiel von Billardsystemen durchgeführt, eine Erweiterung auf allgemeinere Systeme wird in Abschnitt 3.3 gegeben. Unter Billardsystemen versteht man (nicht unbedingt zweidimensionale) Gebiete mit konstantem Potential, die von einer harten Wand ( $V = \infty$ ) umgeben sind. In solchen Systemen sind die klassischen Bahnen gerade Linien; die Reflektion an den Wänden ist elastisch und folgt dem Reflektionsgesetz. Da die klassische Dynamik in Billards so einfach zu berechnen ist, sind sie ein beliebtes Objekt zur Untersuchung semiklassischer Methoden.

### 3.2.1 Analogie zur Fouriertransformation

Für Billardsysteme hängt die Trajektorie eines Teilchens nicht von der Energie ab. Es ist deshalb möglich, alle klassischen geschlossenen Orbits unabhängig von der Energie zu klassifizieren. Sei  $G$  eine solche Klassifikation<sup>6</sup>. Auch die Topologie und daher der Maslov-Index und die Stabilität der Bahnen sind von  $E$  unabhängig. Die Amplituden aller Orbits haben deshalb die gleiche Abhängigkeit von der Energie:

$$A_\Gamma = A(E, G) =: A_E(E) \cdot A_1(G) \quad . \quad (3.13)$$

Die Wirkung längs einer Bahn ist bei Billards durch

$$\frac{S_\Gamma}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int p dq = k L_\Gamma \quad (3.14)$$

gegeben. Dabei ist  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  der Wellenvektor und  $L_\Gamma = L(G)$  die gesamte Bahnlänge. Die Spurformel nach Gleichung 2.12 ist für Billards daher von der Form

$$\begin{aligned} \text{POT} \delta g_E &= \sum_{G=0}^{\infty} A_\Gamma e^{i \frac{S_\Gamma}{\hbar} - i \sigma_\Gamma \frac{\pi}{2}} = \\ &= \sum_{G=0}^{\infty} A_E(E) \underbrace{A_1(G) e^{-i \sigma(G) \frac{\pi}{2}}}_{=: A_2(G)} e^{ikL(G)} \quad . \end{aligned} \quad (3.15)$$

Das läßt sich formal<sup>7</sup> auf die Summation über die Orbitlänge transformieren:

$$\text{POT} \delta g_E = \sum_L A_E(E) \underbrace{A_2(G(L))}_{=: A_3(L)} e^{ikL} = A_E(E) \sum_L A_3(L) e^{ikL} \quad . \quad (3.16)$$

<sup>5</sup>nicht die PO-Summe selbst !

<sup>6</sup>Im folgenden ist ohne Einschränkung  $G$  als eindimensional angenommen:  $G \in \mathbb{N}_0$ . Die Wahl von  $G$  entspricht der Festlegung einer Summationsreihenfolge der (eventuell mehrdimensional unendlichen) PO-Summe.

<sup>7</sup>Diese Umformung ist nur formal zu verstehen. Bei allgemeinen  $L(G)$  muß über die verschiedenen Äste der Umkehrfunktion  $G(L)$  summiert werden. Das wurde zur einfacheren Darstellung nicht speziell notiert. Der Unterschied ist im folgenden aber unwesentlich.

Diese Darstellung ähnelt stark einer Fouriersumme. Im allgemeinen werden die  $L$ , über die zu summieren ist, weder äquidistant sein, womit Gleichung 3.16 die Form einer Fourierreihe hätte, noch kontinuierlich, wodurch sie einem Fourierintegral entspräche. Eine Theorie solcher Summen mit unregelmäßigen Stützstellen wird erst in letzter Zeit entwickelt (vergleiche z.B. [23]). Die Näherung des folgenden Abschnitts besteht darin, die Gültigkeit des Faltungssatzes der Fouriertransformation für diese Summe anzunehmen. Diese Näherung scheint gerechtfertigt, da der Faltungssatz für Fourierintegrale exakt und für Fouriersummen (mit nicht zu wenigen Termen) in sehr guter Näherung gilt. Außerdem entspricht (wie in Kapitel 2.2.2 dargestellt wurde) die Summe über die klassischen periodischen Orbits einem Integral über ihre Umgebungen, so daß eine Behandlung als (Fourier-) Integral auch physikalisch angemessen scheint. In dieser Näherung wird  ${}^{\text{POT}}\delta g_E$  dann als Fouriertransformation

$${}^{\text{POT}}\delta g_E = A_E(E) \cdot \mathcal{F}[A_4(L)] \quad (3.17)$$

geschrieben<sup>8</sup>. Der Fehler dieser Näherung, der in Abbildung 4.6 auf Seite 35 für das Kreisbillard dargestellt ist, ist immer so klein, daß er bei der Betrachtung der gefalteten Niveaudichte vernachlässigt werden kann. Darauf wird noch mehrmals eingegangen.

### 3.2.2 Numerische Auswertung

Wie oben bereits angeführt, ist eine analytische Summation der PO-Summe nur in Ausnahmefällen möglich. Meistens ist man daher auf eine numerische Auswertung angewiesen, bei der nur endlich viele Terme berücksichtigt werden können. Der Unterschied zwischen der unendlichen PO-Summe  ${}^{\text{POT}}\delta g_E$  und der endlichen, berechneten Summe, die als  ${}^{\text{POT}}\delta g_E^F$  notiert wird, wird im folgenden als Fehler der numerischen Auswertung bezeichnet. Dieser Begriff bezieht sich also nicht auf Fehler durch die endliche Rechengenauigkeit. Diese wurden getrennt abgeschätzt und ausreichend klein gehalten.

Um diesen Effekt der numerischen Auswertung zu berücksichtigen, wird eine *Fensterfunktion*  $F(L)$  definiert, die das Abschneiden der Summation bewirkt. Definiert man  $F(L) = 1$ , falls das Orbit der Länge  $L$  in der numerischen Auswertung der PO-Summe berücksichtigt wird, und  $F(L) = 0$  sonst, so gilt für den Wert der abgebrochenen Summe, d.h. für die numerische Approximation der Spurformel:

$$\begin{aligned} {}^{\text{POT}}\delta g_E^F &= A_E(E) \sum_L F(L) A_3(L) e^{ikL} = \\ &= A_E(E) \mathcal{F}[F(L) A_4(L)] = \\ &= A_E(E) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\mathcal{F}[F(L)] * \mathcal{F}[A_4(L)]) = \\ &= {}^{\text{POT}}\delta g_E * f(k) \quad , \end{aligned} \quad (3.18)$$

wobei in der zweiten Zeile der Faltungssatz verwendet wurde. Bei der letzten Umformung wurde  $f(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F}[F(L)]$  gesetzt. Bis auf den Normierungsfaktor ist  $f(k)$  also die Fouriertransformierte der Fensterfunktion  $F(L)$ . Insgesamt ist also

$${}^{\text{POT}}\delta g_E^F = \sum_{\Gamma} F(L) A_{\Gamma} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma} \frac{\pi}{2}} = {}^{\text{POT}}\delta g_E * \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(k) \quad . \quad (3.19)$$

<sup>8</sup> $A_4$  statt  $A_3$  kompensiert die nicht-äquidistanten Abstände der  $L$ .  
Formal ist  $A_4(L) := \sum_{n \in \mathbb{N}} A_3(L) \delta(G(L) - n)$ .

Damit ist die Auswirkung der numerischen Berechnung auf die semiklassische Niveaudichte bestimmt.

Gleichung 3.18 gilt aber auch für allgemeine Fensterfunktionen  $F(L)$ . Daher liegt es nahe,  $F(L)$  so zu wählen, daß der Fehler durch das Abbrechen der Summation bei der numerischen Auswertung möglichst klein ist, d.h. daß  $f(k)$  möglichst angenehme Eigenschaften bekommt. Diese Forderung ist mathematisch schwer zu fassen. Idealerweise sollte  $f(k)$  einen sehr schmalen zentralen Peak und keine Nebenpeaks haben. Da die Breite des Hauptpeaks und die Höhe der Seitenbänder in gewisser Weise komplementäre Eigenschaften sind, muß für den jeweiligen Anwendungsfall ein Kompromiß gefunden werden. Verwendet man die übliche exponentielle Dämpfung der längeren Bahnen, also

$$F(L) = e^{-\frac{1}{2}(L\gamma)^2} \quad , \quad (3.20)$$

so ist

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{k}{\gamma}\right)^2} \quad , \quad (3.21)$$

und Gleichung 3.19 ist äquivalent zur üblichen Glättung der Niveaudichte mit einer Gaußkurve der Breite  $\gamma$  in  $k$ .

Damit ist gezeigt, daß die übliche Glättung der Niveaudichte durch die exponentielle Dämpfung der Beiträge längerer Orbits zur PO-Summe nur eine günstige Variante des bei der numerischen Auswertung unvermeidlichen Abbrechens der Summation nach endlich vielen Termen darstellt. Vom mathematischen Standpunkt aus betrachtet ist die Glättung nicht nötig, um Konvergenzprobleme der PO-Summen zu beseitigen. Sie ermöglicht aber die Anwendung des Konvergenzbegriffs von Gleichung 3.3<sup>9</sup>.

In der ursprünglichen Definition sollte die Fensterfunktion das notwendige Abbrechen der Summation bei der numerischen Auswertung durchführen. Dazu muß  $F(L)$  einen beschränkten Träger haben<sup>10</sup>, d.h. es muß gelten:

$$\exists L_{max} \forall L > L_{max} \quad F(L) = 0 \quad . \quad (3.22)$$

Die üblicherweise verwendete Gaußkurve als Fensterfunktion erfüllt aber gerade nicht die Bedingung des beschränkten Trägers, die PO-Summe ist weiterhin unendlich. Das zusätzlich notwendige Abschneiden der PO-Summe bei der numerischen Auswertung wird im allgemeinen nicht als weitere Näherung berücksichtigt, so daß Gleichung 3.18 in diesem Fall nur näherungsweise<sup>11</sup> erfüllt ist. Die fehlende Fehlerabschätzung führt dann oft zu unnötig großem numerischen Aufwand<sup>12</sup>.

Das Problem der Wahl einer optimalen Fensterfunktion bei gegebenem Träger wurde ausführlich untersucht (vgl. z.B. [22]). In diesem Kontext ist eine einfache Fehler*berechnung* jedoch wichtiger als eine absolute Fehler*minimierung*. Deshalb werden im folgenden einfache, analytisch fouriertransformierbare Fensterfunktionen mit beschränktem Träger gewählt. Diese werden in Kapitel 3.5 vorgestellt.

<sup>9</sup>unter der Voraussetzung, daß Konvergenz nach Gleichung 3.12 gegeben ist.

<sup>10</sup>Das ist sicher notwendig, da die  $\infty$ -fache Wiederholung eines beliebigen Orbits die Länge  $\infty$  hat. Falls die Längen der klassischen Bahnen Häufungspunkte besitzen, ist diese Einschränkung aber nicht hinreichend, die Zahl der Terme in Gleichung 3.18 endlich zu halten (vergleiche dazu Kapitel 3.7 auf Seite 24).

<sup>11</sup>Dieses Vorgehen entspricht exakt der Faltung der Niveaudichte mit der Fouriertransformierten einer *abgeschnittenen* Gaußkurve, ist aber so numerisch nur schwer zu handhaben.

<sup>12</sup>So ist zum Beispiel die Berechnung der Niveaudichte des Kreisbillards für eine Glättungsweite  $\gamma = 0.02$ , für die in [35] alle Bahnen bis zu einer Länge von  $L = 30000$  berücksichtigt werden, schon mit den Bahnen bis  $L = 150$  möglich.

Im nächsten Abschnitt wird der vorgestellte Formalismus auf allgemeinere Systeme als die bisher betrachteten Billards erweitert.

### 3.3 Allgemeine Systeme

In Abschnitt 3.2.1 wurden nur Billardsysteme betrachtet, d.h. Systeme, die die folgenden Voraussetzungen erfüllen:

1. Es ist eine energieunabhängige Klassifikation der Orbits möglich. Die Topologie der Orbits hängt also nicht von  $E$  ab.
2. Die Amplitude aller Orbits hat die gleiche Abhängigkeit von der Energie:  

$$A = A_E(E) \cdot A_G(G)$$
3.  $\frac{S_\Gamma}{\hbar} = kL_\Gamma$

Die erste Bedingung ist durch geeignete Klassifikation der Bahnen stets erfüllbar. Voraussetzungen 2 und 3 können gelockert werden. Dabei wird zunächst mit der letzten begonnen. Systeme, deren Wirkung gemäß

$$\frac{S(E, G)}{\hbar} = e(E) \cdot g(G) \quad (3.23)$$

separiert, werden im weiteren als *Systeme mit separabler Wirkung* bezeichnet.  $e(E)$  ist die natürliche Variable der Energie für das System,  $g(G)$  sind die verallgemeinerten Bahn­längen. In diesem Fall kann die Argumentation von Abschnitt 3.2.1 unverändert übernommen werden. Analog zu Gleichung 3.18 gilt dann

$$\begin{aligned} \text{POT } g_E^F &: = \sum_{\Gamma} F(g) A_{\Gamma} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma} \frac{\pi}{2}} \\ &= \sum_{G=0}^{\infty} F(g(G)) A_E(E) A_1(G) e^{ie(E)g(G) - i\sigma(G) \frac{\pi}{2}} \\ &= \text{POT } g_E * f(e) \end{aligned} \quad (3.24)$$

für beliebige Fensterfunktionen  $F$ . Damit  $\text{POT } g_E^F$  tatsächlich numerisch auswertbar ist, muß  $F$  wieder einen beschränkten Träger besitzen. Bei Systemen mit separabler Wirkung führt die numerische Auswertung also wieder zu einer Faltung der Niveaudichte, diesmal aber nicht in  $k$ , sondern in der natürlichen Variablen der Energie  $e(E)$ .

Eine weitere Verallgemeinerung ist auf die Fälle möglich, bei denen der Term in der Exponentialfunktion auf die Form des separablen Systems transformiert werden kann. Dazu muß es ein  $e(E)$ , ein  $g(E, G)$  und ein  $\tilde{\sigma}$  geben, die

$$\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - \sigma_{\Gamma} \frac{\pi}{2} = e \cdot g - \tilde{\sigma}(g) \quad (3.25)$$

erfüllen. Das ist meist sogar auf verschiedene Weisen möglich, wie in Abschnitt 3.4 am Beispiel des harmonischen Oszillators gezeigt wird. Mit Gleichung 3.25 ist

$$\text{POT } g_E^F = \sum_g F(g) \underbrace{A(E(e), G(e, g)) e^{-i\tilde{\sigma}(g)}}_{=: A_2(e, g)} e^{ieg} \quad . \quad (3.26)$$

Falls  $A_2(e, g)$  in  $e$  und  $g$  separiert, d.h.  $A_2(e, g) = A_E(E) \cdot A_G(G)$  erfüllt ist, gilt wieder Gleichung 3.24. Im Unterschied zu den vorher betrachteten Fällen ist die Fensterfunktion  $F$  jetzt über  $g$  von  $E$  abhängig und nicht mehr alleine eine Funktion des Orbits, also des Klassifikationsparameters  $G$ . Damit hängt die Breite der Fensterfunktion in der PO-Summe von der Energie, bei der die Summe ausgewertet werden soll, ab. Bei verschiedenen Energien müssen dann auch unterschiedlich viele periodische Bahnen berücksichtigt werden.

Die Separationsbedingung  $A_2(e, g) = A_E(E) \cdot A_G(G)$  ist meist jedoch nicht erfüllt. Falls sich  $A_2(e, g)$  aber als  $A_E(E) \cdot A_G(e, g)$  schreiben läßt, wobei sich  $A_G(e, g)$  in Abhängigkeit von  $e$  über die charakteristische Breite  $\gamma$  der Fouriertransformierten der Fensterfunktion nur wenig ändert, ist Gleichung 3.24 eine gute Näherung. Bezeichnet man die charakteristische Länge in  $e$ , in der sich  $A_2$  ändert, als  $\chi$ , so gilt dann

$$\text{POT} g_E^F \approx \text{POT} g_E * f(e) \quad \text{für} \quad \gamma \ll \chi \quad . \quad (3.27)$$

Das bedeutet, daß es für alle Systeme, die Bedingung 3.25 für gewisse  $e, g$  und  $\tilde{\sigma}$  erfüllen, stets eine Glättungsweite  $\gamma$  der Niveaudichte gibt, *unter* der die Unterdrückung längerer<sup>13</sup> Bahnen in guter Näherung einer Faltung der Niveaudichte entspricht.

### 3.4 Der harmonische Oszillator als Beispiel

Als Beispiel für die vorgestellten Verfahren zur Auswertung von PO-Summen ist der ein-dimensionale harmonische Oszillator geeignet. Für einen Oszillator der Eigenfrequenz  $\omega_0$  lautet die semiklassische Spurformel (vergleiche auch Kapitel 5.2.3):

$$\text{POT} \delta g_E = \frac{2\pi}{\omega_0} \sum_G e^{iG \frac{2\pi E}{\hbar\omega_0} - iG\pi} \quad . \quad (3.28)$$

Mit  $e(E) := E$  und  $g(G) = G$  ist der Oszillator ein System mit separabler Wirkung. Die natürliche Glättungsvariable ist also  $E$ . Nach Gleichung 3.19 gilt

$$\text{POT} \delta g_E^F = \frac{2\pi}{\omega_0} \sum_G F(G) e^{Gi \frac{2\pi E}{\hbar\omega_0} - iG\pi} = \text{POT} \delta g_E * f(E) \quad . \quad (3.29)$$

Der harmonische Oszillator ist semiklassisch sogar exakt. Sein glatter Anteil der Niveaudichte in  $E = 1/(\hbar\omega_0)$ . Damit ist

$$\text{POT} \delta g_E^F(E) = \sum_{n=0}^{\infty} f \left( E - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 \right) - \frac{1}{\hbar\omega_0} \quad . \quad (3.30)$$

Die Auswertung der Spurformel mit einer Fensterfunktion  $F(L)$  ergibt also eine Summe von Glättungsfunktionen  $f(E)$ . Die Peaks der so berechneten Niveaudichte befinden sich genau an den quantenmechanischen Eigenwerten und haben für alle Energien dieselbe Breite. Die Spurformel des harmonischen Oszillators kann aber auch wie folgt ausgewertet werden<sup>14</sup>. Mit  $e(E) := \frac{2\sqrt{E}}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{\sqrt{E}}$ ,  $g(E, G) := G\pi\sqrt{E}$  und  $\tilde{\sigma} = 0$  ist

$$\frac{S_\Gamma}{\hbar} - \sigma_\Gamma \frac{\pi}{2} = \frac{2\pi\sqrt{E}}{\hbar\omega_0} G - \pi G = \left( \frac{2\sqrt{E}}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{\sqrt{E}} \right) G\pi\sqrt{E} = g \cdot e \quad . \quad (3.31)$$

<sup>13</sup>Hier im allgemeinen Sinn von „Orbits mit größerem  $g(E, G)$ “

<sup>14</sup>Eine weitere Möglichkeit, die aber von  $\sigma(G) = nG\pi$  ( $n \in \mathbb{N}$ ) Gebrauch macht, wird bei der Behandlung der Zyklotronorbits in Kapitel 5.2.3 vorgestellt. Sie ermöglicht eine zur Glättung in  $k$  analoge Auswertung.

Die Amplituden sind in diesem Fall konstant, so daß nach Gleichung 3.27

$${}^{\text{POT}}g_E^F := \frac{2\pi}{\omega_0} \sum_g F(g) e^{ieg} = {}^{\text{POT}}g_E * f(e) \quad (3.32)$$

gilt. Die Berechnung der PO-Summe wird auf diese Weise für große Energien einfacher, da durch  $g = G\pi\sqrt{E}$  mit größerem  $E$  immer weniger Bahnen berücksichtigt werden müssen. Diese Auswertung entspricht damit nur einer Glättung der Niveaudichte in  $e$ , für große Energien also in  $\sqrt{E}$ .

Bei der Auswertung der PO-Summe kann also nicht nur die Fensterfunktion entsprechend den Anforderungen gewählt werden, sondern oft auch die Variable der Glättung, zu der die numerische Auswertung analog sein soll. Die Wahl dieser Variablen ist zum einen durch die Bedingung (3.43) eingeschränkt, zum anderen muß  $F(g(E, G))$  für alle betrachteten Energien in  $G$  einen beschränkten Träger haben. Diese Randbedingungen sind teilweise sehr restriktiv und geben Anhaltspunkte, in welcher Energiekoordinate eine Glättung der Niveaudichte sinnvoll ist.

### 3.5 Fensterfunktionen

In dieser Arbeit wird nicht das übliche Gauss-Fenster bei der Auswertung der Spurformel eingesetzt. Um die PO-Summe exakt berechenbar zu machen, werden Fensterfunktionen mit beschränktem Träger verwendet. Um die entsprechende Faltung der quantenmechanischen Eigenwerte (vergleiche Kapitel 3.6) möglichst einfach zu halten, sollen die Fensterfunktionen auch analytisch fouriertransformierbar sein. Unter diesen Randbedingungen wurden die drei einfachsten Fensterfunktionen ausgewählt: Das Rechteckfenster, das einem einfachen Abbrechen der PO-Summe entspricht, das Dreieckfenster, und das TxR-Fenster, das aus einer Faltung von Rechteck- und Dreieckfenster entsteht. In Abbildung 3.1 sind in der oberen Reihe diese Fensterfunktionen und darunter ihre Fouriertransformierten dargestellt. Zur Vereinfachung der Notation wird hier statt der verallgemeinerten Orbitlänge

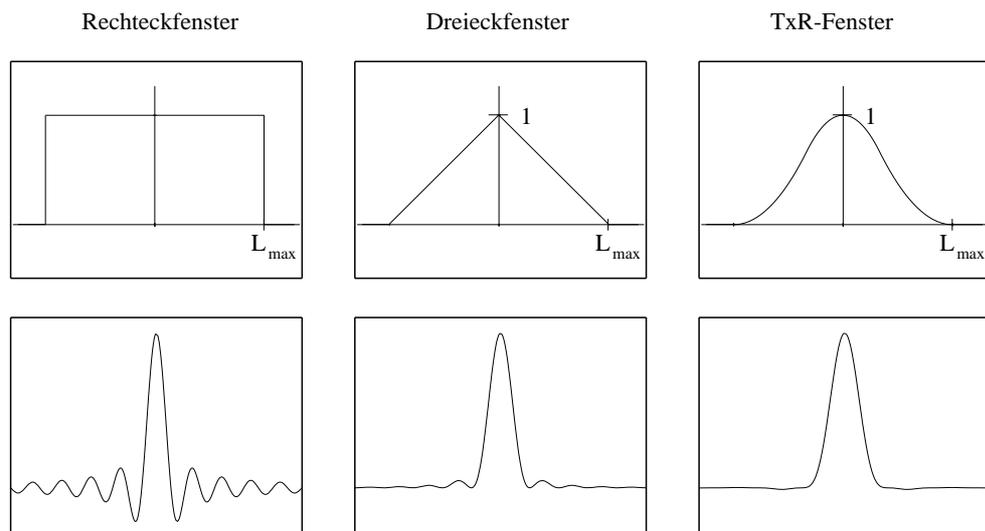


Abbildung 3.1: Die in dieser Arbeit verwendeten Fensterfunktionen (obere Reihe) und ihre Fouriertransformierten (untere Reihe). Die Höhen der Fouriertransformierten wurden normiert.

$G(L)$  aus Kapitel 3.3 die Orbitlänge  $L$  verwendet. Eine Fensterfunktion wird daher durch die Angabe ihrer Form und des Wertes von  $L_{max}$  charakterisiert.

Ein Vergleich mit der üblichen Gauss-Glättung über  $\exp(-\frac{1}{2}\frac{k^2}{\gamma^2})$  ist mit der effektiven Mittelungsbreite  $\gamma_{eff}$  dieser Fenster möglich. Sie berechnet sich zu

$$\gamma_{eff} = \frac{c}{L_{max}} \quad \text{mit} \quad c := \begin{cases} 1.644 & \text{für Rechteckfenster} \\ 2.388 & \text{für Dreieckfenster} \\ 2.950 & \text{für TxR-Fenster} \end{cases} . \quad (3.33)$$

Zur besseren Vergleichbarkeit wird meist nicht die Fläche, sondern die Peakhöhe der Niveaudichte normiert. Für die hier verwendeten Fenster ist der Umrechnungsfaktor von der Flächen- auf die Peakhöhenormierung  $\frac{\tilde{\gamma}}{L_{max}}$  mit

$$\tilde{\gamma} = \begin{cases} \pi & \text{für Rechteckfenster} \\ 2\pi & \text{für Dreieckfenster} \\ 9\pi/4 & \text{für TxR-Fenster} \end{cases} \quad (3.34)$$

Funktionen  $F$  mit beschränktem Träger haben eine Fouriertransformierte, deren Träger unbeschränkt ist. Die Seitenbänder, also die Nebenpeaks, fallen asymptotisch mit  $L^{-(\beta+1)}$  ab [22]. Dabei ist  $\beta$  die kleinste Ordnung der Ableitung von  $F$ , die unstetig ist. Für die verwendeten Fensterfunktionen ist  $\beta = 0$  (Rechteckfenster),  $\beta = 1$  (Dreieckfenster) bzw.  $\beta = 2$  (TxR-Fenster).

Bisher wurde stets die Niveaudichte in  $E$  betrachtet, also die Anzahl der Zustände pro Energieintervall. Das wurde durch den Index  $E$  an das Symbol  $g$  der Niveaudichte angedeutet. Die Umrechnung auf die Energiedichte in  $e = e(E)$  lautet einfach

$$g_e = \frac{dE}{de} g_E \quad . \quad (3.35)$$

Im weiteren wird oft die Niveaudichte in  $k$  verwendet, die sich damit als  $g_k = 2k \cdot g_E$  ergibt.

### 3.6 Vergleich mit der Quantenmechanik

Die Gleichungen 3.19, 3.24 und 3.27 scheinen die Möglichkeit zu eröffnen,  ${}^{\text{POT}}g_E$  exakt aus  ${}^{\text{POT}}g_E^F$  zu berechnen. Damit wäre die semiklassische Niveaudichte direkt mit der quantenmechanischen zu vergleichen. Dafür ist die Näherung in Abschnitt 3.2.1, die die diskrete Summe über die periodischen Bahnen durch ein kontinuierliches Integral ersetzt, aber nicht gut genug<sup>15</sup>. Die Näherung wird mit größerer Zahl der berücksichtigten Orbits besser, also mit kleinerer Glättungsweite der Niveaudichte. Der Fehler ist damit nur bei der Betrachtung der gefalteten Niveaudichte vernachlässigbar, dort aber für alle Glättungsweiten  $\gamma$  (vergleiche Abbildung 4.6 auf Seite 35).

Daher werden die gefalteten Niveaudichten miteinander verglichen. Das ist auch physikalisch sinnvoll, da in der Regel die gefaltete Niveaudichte schon die Eigenschaften des Systems bestimmt. Bei diesem Vergleich muß berücksichtigt werden, daß die semiklassische Spurformel nur den oszillierenden Anteil der Niveaudichte enthält. Der glatten Anteil  $\tilde{g}$ , der nur die langsame Veränderung der Eigenschaften durch die wachsende Teilchenzahl enthält und nicht zu den Schaleneffekten beiträgt, muß in der quantenmechanischen

<sup>15</sup>Sonst wäre ja die gesamte Information der Summe über unendlich viele Bahnen bereits in einer endlichen Summe enthalten.

Niveaudichte kompensiert werden<sup>16</sup>. Der Vergleich der semiklassischen Näherung mit der Quantenmechanik lautet daher

$$\begin{aligned}
& \text{semiklassische Näherung} \\
& \quad \downarrow \\
& \text{POT} \delta g_E \approx \text{QM} g_E - \tilde{g}_E \\
& \text{POT} \delta g_E * f(e) \approx \left( \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) - \tilde{g}_E \right) * f(e) \\
& \text{POT} \delta g_E^F(E) \approx \sum_n f(e(E) - e(\varepsilon_n)) - \tilde{g}_E * f(e) \quad .
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Dabei sind  $\varepsilon_n$  die quantenmechanischen Eigenenergien.  $e(E)$  ist wieder die verallgemeinerte Energiekoordinate aus Kapitel 3.3 und  $f$  die normierte Fouriertransformierte der Fensterfunktion  $F$ . Da diese Fensterfunktion mit beschränktem Träger vorausgesetzt wurde, ist ihre Fouriertransformierte unbeschränkt.  $f(e(E) - e(\varepsilon_n))$  wird daher auch für große  $|E - \varepsilon_n|$  nicht identisch 0. Zur exakten Berechnung der rechten Seite von Gleichung 3.36 müßten daher alle Eigenwerte berücksichtigt werden, was nur in Ausnahmefällen gelingen kann. Im allgemeinen wird die Summation numerisch durchgeführt und daher nach  $n_0$  Eigenwerten abgebrochen. Sinnvollerweise wird dann die Faltung des glatten Anteils der Niveaudichte auch auf diesen Bereich beschränkt. Der dadurch entstehende Fehler soll kurz betrachtet werden.

Bezeichnet man mit  $[\tilde{g}_E]_{\varepsilon_{n_0}}^\infty$  die Einschränkung<sup>17</sup> des glatten Teils der Niveaudichte auf das Intervall  $[\varepsilon_{n_0}, \infty]$ , so ist der Fehler  $\chi(e)$  durch das Abbrechen der Summation

$$\chi(e) = \sum_{n=n_0}^{\infty} f(e - e(\varepsilon_n)) - [\tilde{g}_E]_{\varepsilon_{n_0}}^\infty * f(e) \quad . \tag{3.37}$$

Für integrable Systeme sind die Eigenwerte meist<sup>18</sup> nicht oder nur sehr schwach korreliert (vergleiche z.B. [21]). Mit dieser Annahme kann der Erwartungswert  $\bar{\chi}$  für den Fehler  $\chi$  berechnet werden. Das Ergebnis  $\bar{\chi}(e) = 0$  ist nicht überraschend, da  $\tilde{g}_E$  ja gerade das Mittel der Niveaudichte darstellt. Im nächsten Schritt kann auch der Erwartungswert des Fehlers, also  $\sigma_\chi$ , berechnet werden. Es ergibt sich

$$\sigma_\chi^2(e) = \int_{\Delta}^{\infty} f(e')^2 de' \quad , \tag{3.38}$$

wobei  $\Delta = e_{n_0} - e$  der Abstand zwischen dem Wert  $e$ , an dem die Niveaudichte berechnet werden soll, und  $\varepsilon_{n_0}$ , dem größten noch exakt berücksichtigten Eigenwert, ist. Diese Analyse ist bei der praktischen Anwendung meist unnötig. Die Fehler sind ausreichend klein, wenn man  $\Delta$  größer als etwa  $2\gamma$  wählt, also die Summation bis zu einem Eigenwert  $\varepsilon_{n_0}$  durchführt, der mehr als zwei Glättungsweiten größer ist als der maximale Wert  $e_{max}$ , für den die Niveaudichte berechnet werden soll. Unter dieser Voraussetzung ist

$$\begin{aligned}
\text{POT} \delta g_E^F & \approx \sum_{n=0}^{n_0} f(e - e(\varepsilon_n)) - [\tilde{g}_E]_0^{\varepsilon_{n_0}} * f(e) \\
& = \sum_{n=0}^{n_0} f(e - e(\varepsilon_n)) - \int_0^{\varepsilon_{n_0}} \tilde{g}_E(e(E')) \cdot f(e - e(E')) de \quad .
\end{aligned} \tag{3.39}$$

<sup>16</sup>Alternativ kann man natürlich den glatte Anteil zur semiklassischen Spurformel addieren und die gesamten Niveaudichten  $\text{POT} g_E$  und  $\text{QM} g_E$  vergleichen.

<sup>17</sup>also  $[\tilde{g}_E]_{\varepsilon_{n_0}}^\infty = \begin{cases} \tilde{g}_E & \text{für } E \in [\varepsilon_{n_0}, \infty] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$ .

<sup>18</sup>Ausnahme ist wieder der harmonische Oszillator.

Die oft praktizierte Ersetzung von  $[\tilde{g}_E]_0^{\varepsilon_{n_0}} * f(e)$  durch  $\tilde{g}_E$  ist nur gerechtfertigt, wenn

- 1)  $\tilde{g}_E * f(e) \approx \tilde{g}_E$  und
- 2)  $e_{max} \leq e_{n_0} - 2\gamma$

gilt. Die zweite Bedingung limitiert wieder den Einfluß des Abbrechens der Summation und ist äquivalent zur vorherigen Forderung. Die erste Bedingung ist kritischer. Sie impliziert, daß die Glättungsweite  $\gamma$  klein gegen die Länge ist, in der sich  $\tilde{g}_E$  ändert. Dann ist  $\tilde{g}_E$  in dem Bereich, in dem  $f(e)$  zum Faltungsintegral beiträgt, fast konstant, und durch die Normierung von  $f$  ist Bedingung 1 erfüllt. Gleichung 3.39 gilt aber allgemeiner, und auch in den Fällen, in denen  $\tilde{g}_E * f(e)$  divergiert. Solche Divergenzen treten häufig bei der Verwendung von Rechteckfenstern auf.

### 3.7 Zusammenfassung

Für semiklassische Spurformel der Form

$${}^{\text{POT}}\delta g_E = \sum_{\Gamma} A_{\Gamma} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma}\frac{\pi}{2}} \quad (3.40)$$

wurde eine allgemeine Methode zur numerischen Approximation angegeben. In den folgenden Formeln steht  $F$  für eine Fensterfunktion, die die PO-Summe endlich macht und  $f$  für die normierte Fouriertransformierte von  $F$ .

Zwischen der numerischen Auswertung der Spurformel mit einer Fensterfunktion und der Faltung der Niveaudichte besteht bei Billards der Zusammenhang

$${}^{\text{POT}}\delta g_E^F := \sum_{\Gamma} F(L) A_{\Gamma} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma}\frac{\pi}{2}} = {}^{\text{POT}}g_E * f(k) \quad . \quad (3.41)$$

Für Systeme mit  $A_{\Gamma} = A_E(E) \cdot A_G(G)$  und  $S_{\Gamma} = e(E) \cdot g(G)$  ist analog

$${}^{\text{POT}}\delta g_E^F := \sum_{\Gamma} F(g) A_{\Gamma} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma}\frac{\pi}{2}} = {}^{\text{POT}}g_E * f(e) \quad , \quad (3.42)$$

und in den Fällen, in denen mit geeigneten  $e(E)$ ,  $g(E, G)$  und  $\tilde{\sigma}(G)$

$$S_{\Gamma}/\hbar - \sigma_{\Gamma}\pi/2 = e \cdot g - \tilde{\sigma}(g) \quad (3.43)$$

gilt, ist

$${}^{\text{POT}}\delta g_E^F := \sum_{\Gamma} F(g) A_{\Gamma} e^{i\frac{S_{\Gamma}}{\hbar} - i\sigma_{\Gamma}\frac{\pi}{2}} \approx {}^{\text{POT}}g_E * f(e) \quad \text{für } \gamma \ll \chi \quad . \quad (3.44)$$

Dabei ist  $\gamma$  die charakteristische Breite von  $f(e)$  und  $\chi$  die typische Länge in  $e$ , in der sich  $A_{\Gamma} = A(e, g)$  ändert.

Der Ansatz ist nicht auf Gauss-Mittelung beschränkt, sondern kann für beliebige Glättungen, auch in verschiedenen Energiekoordinaten, eingesetzt werden. Damit ist der numerische Aufwand zur Auswertung der PO-Summe erheblich zu reduzieren. Vor allem ist auf diese Weise der Fehler der semiklassischen Näherung von dem Fehler, der bei der numerischen Auswertung entsteht, zu trennen. Der Vergleich mit den quantenmechanischen Ergebnissen ist möglich mit dem Zusammenhang

$${}^{\text{POT}}\delta g_E^F = \sum_{n=0}^{n_0} f(e - e(\varepsilon_n)) - \int_0^{\varepsilon_{n_0}} \tilde{g}_E(e(E')) \cdot f(e - e(E')) de \quad . \quad (3.45)$$

Der vorgestellte Ansatz ist allgemeiner als die übliche Gauss-Mittelung. Er ermöglicht (in Grenzen) die Wahl der Glättungsvariablen. Da er von exakt auswertbaren Spurformeln ausgeht (siehe Definition der Fensterfunktion auf Seite 17 dieser Arbeit), wird die Konvergenzdiskussion vermieden. Außerdem sind auf diese Weise exakte Aussagen über den Auswertungsfehler möglich.

Das Konvergenzproblem kann aber in anderer Weise wieder auftreten: Es ist, wie schon mehrfach angesprochen, möglich, daß es Häufungspunkte<sup>19</sup> der (verallgemeinerten) klassischen Bahnlängen  $g_{\Gamma}$  gibt. In diesen Fällen ist bei der Verwendung von monotonen Fensterfunktionen die verbleibende Summe trotz oberer Summationsgrenze der Bahnlängen unendlich. In solchen Fällen kann man entweder die Konvergenz dieser verbleibenden Summe getrennt betrachten (dieser Weg wird hier für das Kreisbillard gewählt werden) oder nichtmonotone Fensterfunktionen verwenden, die die Häufungspunkte in der Summation ausblenden. Die Fouriertransformierten solcher Fensterfunktionen sind dann aber meist so kompliziert, daß die entstehende Faltung der Niveaudichte keine Ähnlichkeit mit der Niveaudichte zeigt. Damit ergibt die Auswertung der POT zwar korrekte, aber physikalisch nicht mehr interpretierbare Ergebnisse. Der hier vorgestellte Ansatz zur numerischen Auswertung von PO-Summen kann damit die Konvergenzprobleme nicht völlig beseitigen, sie sind damit aber deutlich einfacher zu kontrollieren.

Die semiklassische Spurformel entpricht im wesentlichen einer Fouriertransformation von  $g$  nach  $e$ . Fouriertransformationen sind umkehrbar, und es stellt sich die Frage, bei welchen Systemen es damit möglich ist, aus den Eigenwerten in  $e$  auf die verallgemeinerten Längen  $g$  der möglichen klassischen periodischen Bahnen zu schließen. Das ist nur für Systeme mit separabler Wirkung möglich, bei denen  $g$  nicht von  $E$  abhängt. Dann ist die Gleichung symmetrisch in  $e$  und  $g$  und eine Rücktransformation ist möglich. Falls die Amplituden aller Bahnen dieselbe Abhängigkeit von der Energie haben, gilt die Umkehrung exakt, ansonsten als Näherung für kleine Glättungsweiten. In den anderen Fällen (ohne separable Wirkung) ist die Umkehrung nicht möglich. Schon beim Kreisbillard im homogenen Magnetfeld ist aus der Fouriertransformation der quantenmechanischen Eigenwerte keine Information über die in der PO-Summe auftretenden klassischen Bahnen mehr zu gewinnen.

---

<sup>19</sup>Häufungspunkte sind, bildlich gesprochen, Punkte mit unendlich vielen Nachbarn. Mathematisch lautet die Definition

$$x \text{ Häufungspunkt von } A \Leftrightarrow \forall \varepsilon > 0 \exists y \in A : |x - y| < \varepsilon \quad .$$



## Kapitel 4

# Das Kreisbillard

*Dieses Kapitel behandelt das Kreisbillard ohne Magnetfeld. Die quantenmechanische Lösung, die EBK-Quantisierung und der Ansatz der POT werden vorgestellt. Mit einer genaueren Konvergenzbetrachtung der PO-Summe wird eine sehr präzise Bestimmung der POT-Einteilchenenergien möglich. Diese werden mit den quantenmechanischen Eigenwerten und denen der EBK-Quantisierung verglichen.*

Unter einem Kreisbillard versteht man ein zweidimensionales, rotationssymmetrisches Gebiet mit konstantem Potential  $V = 0$  im Innenraum und  $V = \infty$  außerhalb. Dieses System kann exakt quantenmechanisch gelöst werden (Abschnitt 4.1), wurde von Keller und Rubinow [26] als Beispiel für die EBK-Quantisierung vorgestellt (Abschnitt 4.2) und kann mit verschiedenen Ansätzen im Rahmen der POT behandelt werden (Abschnitt 4.3). Reimann [35] zeigte, daß die POT die Niveaudichte dieses Systems bis hin zu Einteilchenniveaus auflösen kann. Die Problemstellung dieses Kapitels ist die genaue numerische Bestimmung dieser POT-Eigenwerte und der Vergleich mit den Ergebnissen der Quantenmechanik und der EBK-Näherung.

Dazu werden zunächst die verschiedenen Ansätze vorgestellt (Abschnitte 4.1 bis 4.3). Anschließend wird die gute Übereinstimmung zwischen POT und QM sowohl bei der Berechnung der Schalenstruktur als auch bei der Auflösung der Einteilchenniveaus demonstriert. Mit Hilfe dieser Beobachtungen wird in Kapitel 4.6 eine Strategie zur numerischen Bestimmung der Eigenwerte aus der POT entwickelt. Einige mehr technische Aspekte dieses Abschnitts werden im Anhang behandelt, um im Haupttext die grundsätzliche Idee und die Ergebnisse in den Vordergrund stellen zu können.

Das ganze Kapitel hindurch werden die Größen

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \quad \text{und} \quad kR = \sqrt{\frac{E}{E_0}}$$

verwendet. Dabei ist  $m$  die Masse des Teilchens,  $R$  der Radius des Billards und  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  die Wellenzahl.

## 4.1 Quantenmechanische Behandlung

Die quantenmechanischen Eigenwerte ergeben sich aus der Lösung der Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{\ell,n}(\vec{r}) = \varepsilon_{\ell,n}\psi_{\ell,n}(\vec{r}) \quad (4.1)$$

unter den Randbedingungen

$$\psi_{\ell,n}(\vec{r}) = 0 \quad \text{für} \quad |\vec{r}| \geq R \quad (4.2)$$

(Dirichlet'sche Randbedingungen). In Polarkoordinaten  $(r, \phi)$  separieren der Winkelanteil  $\theta(\phi)$  und der Radialanteil  $\varrho(r)$ . Die Winkelgleichung  $\theta'' + \ell^2\theta = 0$  hat genau für  $\ell \in \mathbf{Z}$  zyklische Lösungen, also solche, die der Randbedingung  $\theta(\phi + 2\pi) = \theta(\phi)$  genügen. Das ergibt die Quantisierungsbedingung für die Drehimpulsquantenzahl  $\ell$ . Die Lösungen der Radialgleichung  $\varrho'' + \varrho'/r + k^2\varrho - \ell^2\varrho/r^2 = 0$  sind die Besselfunktionen  $J_\ell(rk)$ . Mit den Randbedingungen verträglich sind die Lösungen, für die

$$J_\ell(kR) = J_\ell\left(\sqrt{\frac{E}{E_0}}\right) = 0 \quad (\ell \in \mathbf{Z}) \quad (4.3)$$

gilt. Für die Eigenwerte in den dimensionslosen Einheiten  $E/E_0$  ergibt sich damit

$$\varepsilon_{\ell,n} = \frac{E}{E_0} = (j_{n,\ell})^2 \quad (n, \ell \in \mathbf{N}) \quad (4.4)$$

Sie sind also als die Quadrate der Nullstellen  $j_{n,\ell}$  der Besselfunktionen  $J_\ell$ . Diese Gleichung zeigt, daß das oben definierte  $E_0$  die natürliche Energieeinheit des Kreisbillards ist. Die im folgenden verwendeten Eigenwerte wurden numerisch auf 15 Stellen genau bestimmt.

## 4.2 EBK-Quantisierung

Schon kurz nach der Veröffentlichung der EBK-Quantisierung durch Keller [25] 1958 wurde 1960 das Kreisbillard von Keller und Rubinov [26] mit Hilfe dieser Näherungsmethode behandelt.

Wie in Abschnitt 2.1 dargestellt, baut dieser semiklassische Ansatz auf der Torusquantisierung auf. Die große Schwierigkeit ist im allgemeinen, den Phasenraumtorus zu finden<sup>1</sup>, auf den die Dynamik des integrablen Systems beschränkt ist. Beim Kreisbillard, einem sehr einfachen Fall, hilft noch die Anschauung weiter. In Abbildung 4.1(A) ist eine klassische Bahn mit einigen Reflektionen gezeigt. Der Teil des Ortsraums, in dem sich das Teilchen aufhalten kann, wird durch den Rand des Billards und die innere gestrichelte Linie begrenzt. Dieses Gebiet kann man sich als die Projektion des Phasenraumtorus vorstellen, auf dessen Oberfläche sich die Dynamik des Systems abspielt. Die Bahnstücke, die auf der „Oberseite“ verlaufen, sind dunkler gezeichnet. Keller und Rubinov können zeigen, daß diese Vorstellung tatsächlich korrekt ist. Zur Quantisierung der Wirkung wählen sie die beiden in Abbildung 4.1(B) gezeigten Wege. Die Kaustiken, die analog zu den eindimensionalen Umkehrpunkten zusätzliche Beiträge zum Wirkungsintegral erzeugen, sind die Punkte, an denen die Trajektorie von der Oberseite des Torus auf die Unterseite (oder umgekehrt) wechselt. An der inneren Kaustik ist in Analogie zu einem Umkehrpunkt am

<sup>1</sup>Auch Keller gibt kein allgemeines Verfahren zur Konstruktion des Phasenraumtorus an.

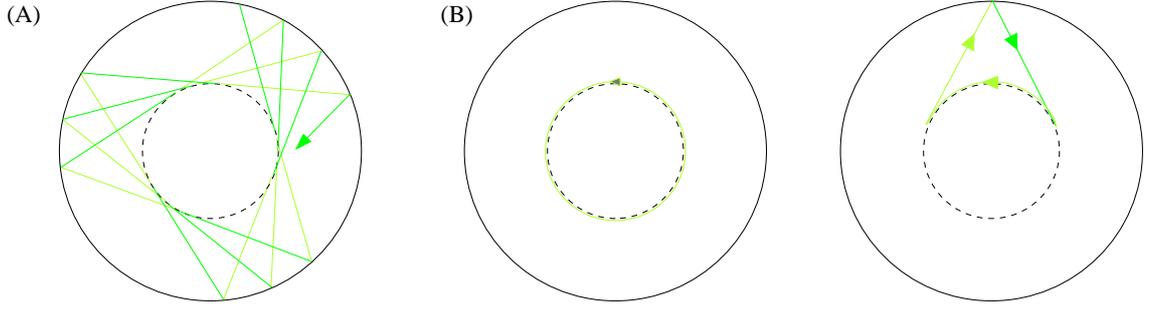


Abbildung 4.1: (A) Eine klassische Trajektorie im Kreisbillard läuft auf einem Torus im Phasenraum, dessen Projektion im Ortsraum erkennbar ist. Die dunkleren Teilstücke der Bahn verlaufen auf der Torusoberseite, die helleren auf der Unterseite. (B) Die zwei nicht ineinander deformierbaren Wege, die Keller und Rubinov zur Quantisierung verwenden.

weichen Potential eine zusätzliche Phase von  $-\pi/2$  zu berücksichtigen, an der äußeren Kaustik, die der Reflexion an einer harten Wand entspricht, eine Phase von  $-\pi$ . Die Auswertung des Wirkungsintegrals liefert schließlich die Quantisierungsbedingung

$$\sqrt{|(kR)^2 - \ell^2|} - \ell \cos^{-1} \left( \frac{\ell}{kR} \right) = \pi \left( n - \frac{1}{4} \right) \quad . \quad (4.5)$$

Die Notation der Quantenzahlen  $\ell$  und  $n$  entspricht der in Gleichung 4.3. Diese transzendente Gleichung für die Eigenwerte in  $kR = \sqrt{\frac{E}{E_0}}$  ist numerisch einfach zu lösen. Auch diese Eigenwerte wurden auf 15 Stellen genau berechnet.

### 4.3 Die semiklassische Spurformel

Balian und Bloch [4] haben eine Spurformel vorgestellt, die auch auf die Kreisscheibe anwendbar ist. Der Ansatz von Gutzwiller [19, 20] ist aufgrund der Rotationssymmetrie des Systems nicht anwendbar, aber mit den Erweiterungen von Strutinsky und Magner [39] oder Creagh und Littlejohn [14] sind Spurformeln für das Kreisbillard zu berechnen [40, 33]. Von Oppen [41] folgt der Methode von Berry und Tabor [6]. Durch Poisson-Summation der Eigenwerte des Kreisbillards in EBK-Näherung nach Gleichung 4.5 in den Quantenzahlen  $n$  und  $\ell$  leitet er einen Ausdruck ab, der über eine Sattelpunktsnäherung eine Spurformel ergibt.

Alle diese Ansätze ergeben für den oszillierenden Anteil der Niveaudichte des Kreisbillards die gleiche Spurformel

$$\text{POT} \delta g_E = \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{kR\pi}} \sum_{\beta} f_{\beta} \frac{\sin^{3/2}(\phi_{\beta})}{\sqrt{an}} \sin \left( kL_{\beta} - 3an \frac{\pi}{2} + \frac{3\pi}{4} \right) \quad . \quad (4.6)$$

Dabei steht  $\beta$  für die Menge aller klassischen periodischen Bahnen. Da die klassische Bewegung im konstanten Potential kräftefrei, also geradlinig verläuft, und der Kreisrand eine ideal harte Wand darstellt, sind die klassischen periodischen Orbits genau die regulären Polygone im Kreis. Diese werden, wie in Abbildung 4.2 gezeigt, durch  $\beta = (a, b, n)$  nach der Reflektionszahl  $a$ , der Umlaufzahl um den Mittelpunkt  $b$  und der Windungszahl  $n$  eines primitiven Orbits klassifiziert. Unter einem primitiven Orbit versteht man eine Bahn, die

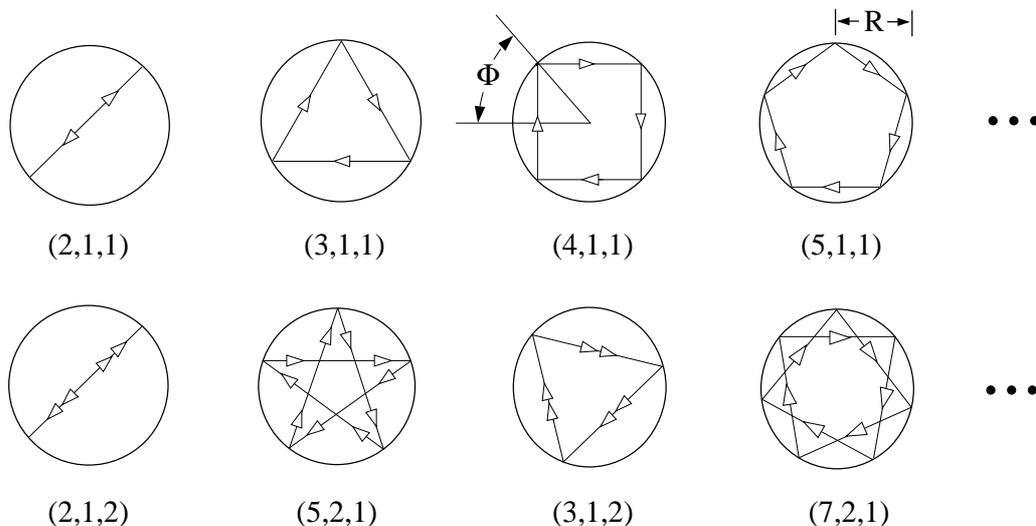


Abbildung 4.2: Die klassischen periodischen Orbits im Kreisbillard sind die dem Kreis einbeschriebenen regulären Polygone. Diese werden nach  $\beta = (a, b, n)$  klassifiziert.

sich im Phasenraum genau einmal schließt. Daher müssen  $a$  und  $b$  in dieser Klassifikation teilerfremd sein<sup>2</sup>.  $\phi_\beta$  ist der halbe Mittelpunktswinkel des Polygons,

$$\phi_\beta = \frac{b}{a}\pi \quad ,$$

und  $L_\beta$  ist die Länge der Bahn:

$$L_\beta = 2Ran \sin \phi_\beta \quad .$$

Die führenden Terme des glatten Anteils der Niveaudichte sind nach Baltes und Hilf [5]

$$\tilde{g}_E = \frac{1}{4E_0} \left( 1 - \frac{1}{kR} \right) \quad . \quad (4.7)$$

Die gesamte semiklassische Niveaudichte ist damit

$${}^{\text{POT}}g_E = \frac{1}{4E_0} \left( 1 - \frac{1}{kR} \right) + \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{kR\pi}} \sum_\beta \frac{1}{\sqrt{an}} \sin^{3/2}(\phi_\beta) \sin \left( kL_\beta - 3an \frac{\pi}{2} + \frac{3\pi}{4} \right) \quad . \quad (4.8)$$

<sup>2</sup>Balian und Bloch klassifizieren die Bahnen mit  $p = an$  und  $t = bn$ , wodurch sie den redundanten dritten Parameter unterdrücken.

## 4.4 Numerische Auswertung der Spurformel

Um bei der Auswertung der Spurformel des Kreisbillards mit den in Kapitel 3 entwickelten Methoden einfache, monotone Fensterfunktionen einsetzen zu können, ist eine weitere Approximation nötig. Die Fehler dieser zusätzlichen Näherungen werden beschrieben und ihre Größe abgeschätzt.

Für Billardsysteme ist  $k$  die natürliche Glättungsvariable (vergleiche Kapitel 3). Das entspricht einer Auswertung der Spurformel mit einer von der Bahnlänge  $L$  abhängigen Fensterfunktion  $F(L)$ . Die Bahnen im Kreisbillard approximieren mit  $n, b = \text{const.}$  für  $a \rightarrow \infty$  den Kreisumfang. Die klassischen Bahnlängen haben dadurch an der Vielfachen des Kreisumfangs Häufungspunkte. Falls eine einfache, monotone Fensterfunktion (mit  $L_{max} > 2R\pi$ ) gewählt wird, ist die PO-Summe auch mit Fensterfunktion weiterhin unendlich. Wie in Kapitel 3.7 dargestellt wurde, kann man in dieser Situation entweder „exotische“ Fensterfunktionen wählen, die an den Häufungspunkten der Bahnlängen null sind, oder die, mit einer monotonen Fensterfunktion weiterhin unendliche, PO-Summe gesondert auf Konvergenz untersuchen. Dieser Weg wird hier eingeschlagen.

In Analogie zu Sieber [38] kann die absolute Konvergenz dieser Summe gezeigt werden<sup>3</sup>. Zur praktischen Berechnung muß noch eine möglichst rasch konvergierende Summationsreihenfolge gewählt und der Fehler durch den Abbruch nach endlich vielen Gliedern abgeschätzt werden. Eine naheliegende Reihenfolge ist die Summation bis zu einer maximalen Eckenanzahl  $m_0$  pro Umlauf. Damit werden alle Bahnen vernachlässigt, die den Umfang besser approximieren als ein  $m_0$ -Eck<sup>4</sup>. Die Teilsumme, die nur über die  $a, b$  mit  $a/b \leq m_0$  summiert, wird mit  ${}^{\text{POT}}\delta g_E^{F, m_0}$  bezeichnet:

$${}^{\text{POT}}\delta g_E^{F, m_0} := \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{kR\pi}} \sum_{\substack{\beta \\ a/b \leq m_0}} F(L_\beta) \frac{1}{\sqrt{an}} \sin^{3/2}(\phi_\beta) \sin(kL_\beta - 3an\frac{\pi}{2} + \frac{3\pi}{4}) \quad (4.9)$$

Diese Summe ist endlich und somit numerisch auswertbar.

Betrachten wir nun den Fehler dieser zusätzlichen Näherung. In Abbildung 4.3 ist  ${}^{\text{POT}}g_E^{F, m_0}$  für das TxR-Fenster mit  $L_{max} = 100$  für  $m_0 = 4$ ,  $m_0 = 6$  und  $m_0 = 8$  grün dargestellt. Man erkennt, daß mit steigendem  $m_0$  die kleinen Strukturen an den mit schwarzen Strichen gekennzeichneten Stellen (die im folgenden als *Störpeaks* bezeichnet werden) schnell kleiner werden und für  $m_0 \rightarrow \infty$  verschwinden. Der übrige Verlauf von  ${}^{\text{POT}}g_E^{F, m_0}$  wird durch Variation von  $m_0$  nicht verändert. Die Fehler, die durch das Abbrechen der Summation nach dem  $m_0$ -Eck entstehen, sind also genau diese Störpeaks. In Abbildung 4.3 sind die Teilsummen  $T_m$ , die nur über die Orbits mit  $a/b = m_0$  summieren, blau eingezeichnet. Die Peaks der  $T_m$  und die Störpeaks treten an denselben Stellen auf. In Anhang A wird eine analytische Bestimmung der Peaks der  $T_m$  durchgeführt, die nach dieser Beobachtung eine gute Abschätzung der Störpeaks ist. Damit ergeben sich die Störpeakpositionen zu

$$kR = \frac{z/m_0 + 3/4}{\sin \pi/m_0} \pi \quad (z \in \mathbf{Z}) \quad (4.10)$$

<sup>3</sup>Sieber zeigt (unter einigen unwesentlichen Voraussetzungen) die absolute Konvergenz der PO-Summe von Billardsystemen bei Glättung über  $k$ . Er benötigt dazu die Voraussetzung *isolierter* Bahnen, da er die PO-Summe nach Gutzwiller verwendet. Die Erweiterung der Spurformel auf Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien kann aber analog auf seine Argumentation angewandt werden. Daher ist das Ergebnis auch für das Kreisbillard gültig.

<sup>4</sup>Da  $m_0$  hier das Verhältnis zwischen Eckenanzahl und Umlaufzahl ist, kann  $m_0$  auch rationale Werte annehmen. Ein „3, 5-Eck“ ist also ein Polygon mit 7 Ecken, das zweimal den Ursprung umläuft.

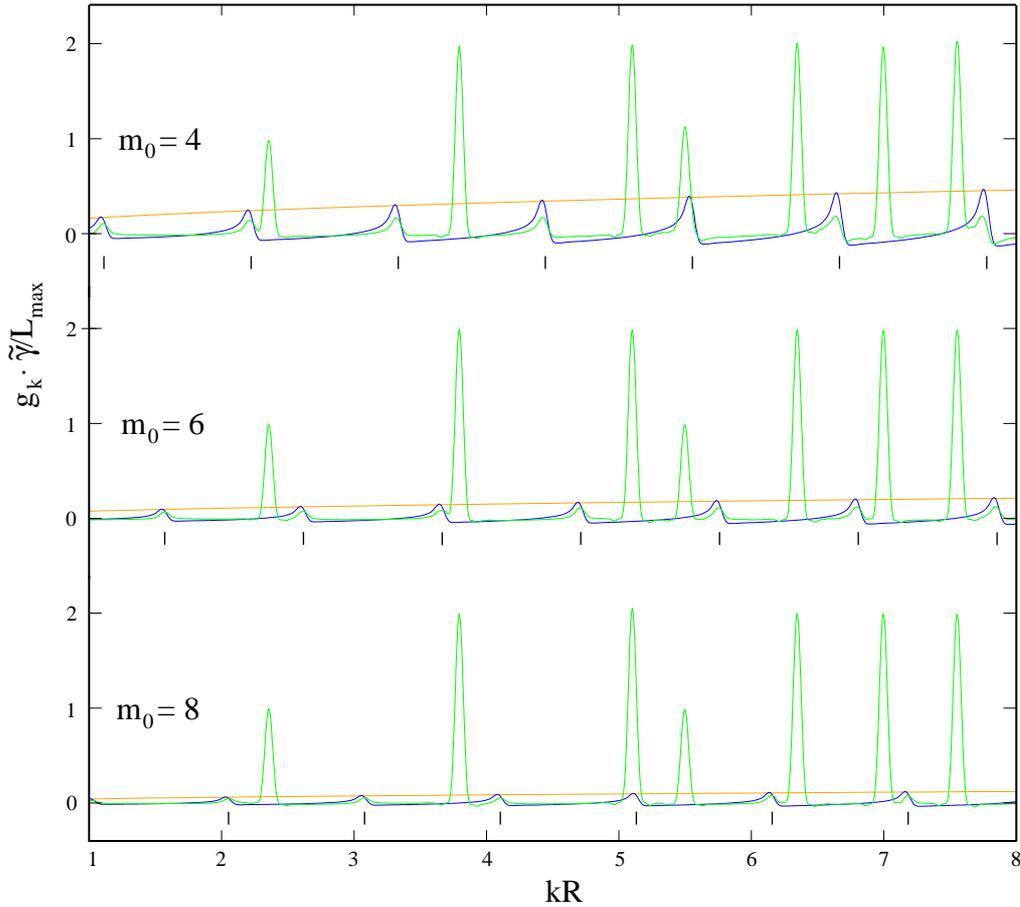


Abbildung 4.3: Das Abbrechen der PO-Summe nach dem  $m$ -Eck ( ${}^{\text{POT}}g_E^{F,m_0}$ , grün) erzeugt kleine Störpeaks. Die Positionen stimmen mit denen der Peaks der Teilsumme  $T_{m_0}$ , die nur über das  $m_0$ -Eck summiert, überein (blau). Die analytische Bestimmung der Peakpositionen für  $T_{m_0}$  ergibt die mit kleinen Strichen markierten Werte; die obere Schranke der Höhen der Störpeaks ist orange eingezeichnet.

Diese Stellen sind in der Abbildung durch rote Striche markiert. Die Höhe der Störpeaks kann durch die Amplitude  $\xi$  von  $T_m$  nach oben abgeschätzt werden. Bei der Darstellung der normierten Niveaudichte in  $kR$  (d.h. in Einheiten  $g_k \cdot \tilde{\gamma}/L_{max}$ ) ergibt sich

$$\xi_k = 2\sqrt{2\pi} \tilde{\gamma} \chi \sqrt{\frac{kR}{L_{max}}} \frac{1}{m_0^2} \left( \frac{m_0}{\pi} \sin \frac{\pi}{m_0} \right) \quad . \quad (4.11)$$

$\xi_k$  ist in Abbildung 4.3 als orange Linie mit eingezeichnet. Meist ist  $\xi/\sqrt{2}$  eine gute Abschätzung für die tatsächliche Höhe der Störpeaks.  $\chi$  hängt von der verwendeten Fensterfunktion ab und ist in Gleichung A.5 im Anhang A definiert. Für das Rechteck-, das Dreieck- bzw. das TxR-Fenster ergibt sich asymptotisch für große  $L_{max}$ :  $\chi \approx 2, 1.33$  und  $1.29$ .  $\tilde{\gamma}$  hängt nur von der verwendeten Fensterfunktion ab und ist auf Seite 22 dieser Arbeit beschrieben.

Damit ist eine Abschätzung der Fehler der numerischen Auswertung der PO-Summe bekannt, und es ist möglich, die Ergebnisse der POT mit den quantenmechanischen Resultaten zu vergleichen. Das wird im folgenden Kapitel durchgeführt.

## 4.5 Vergleich mit den quantenmechanischen Ergebnissen

*Die semiklassische Niveaudichte der POT wird mit der quantenmechanischen verglichen. Es zeigt sich, daß der Fehler der POT lediglich aus einer leichten Verschiebung der Einteilchenenergien besteht.*

Der Vergleich zwischen POT und QM soll zunächst für die Schalenstruktur des Kreisbillards durchgeführt werden. Die Schalenstruktur entspricht, wie in Kapitel 2.2.3 beschrieben, einer über einen weiten Bereich geglätteten Niveaudichte. Zu deren Berechnung ist die POT besonders geeignet, da in diesem Fall nur wenige periodische Bahnen zur PO-Summe beitragen. Die Verwendung eines TxR-Fensters mit  $L_{max} = 7R$  entspricht einer Glättung über  $\gamma = 0.42$ . Das ist die geeignete Glättungsweite zur Darstellung der Schalenstruktur. Beschränkt man sich in der PO-Summe auf  $m_0 = 4$ , so besteht die Spurformel nur noch aus der Summe über die drei kürzesten Bahnen. In Abbildung 4.4 ist der oszillierende Anteil der so berechneten semiklassischen Niveaudichte (grün) mit der entsprechend gefalteten quantenmechanischen (rot) verglichen. Die Übereinstimmung ist sehr gut. Die

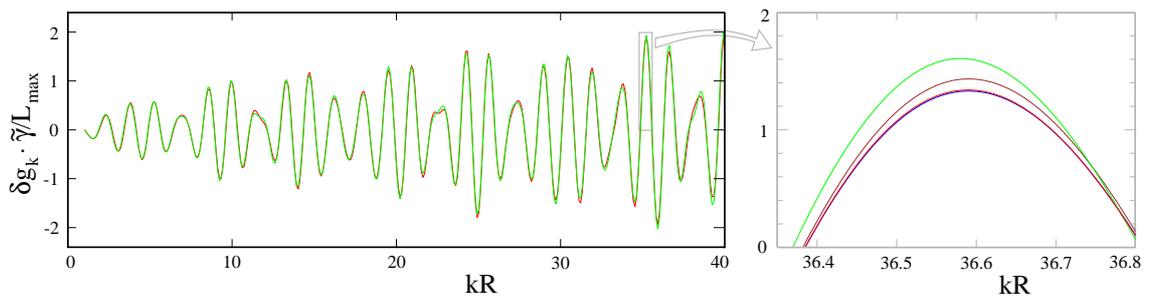


Abbildung 4.4: Bei einer Glättung über  $\gamma \approx 0.42$  genügt die Berücksichtigung der drei kürzesten Bahnen, damit die PO-Summe (grün) die quantenmechanische Niveaudichte (rot) mit großer Genauigkeit reproduziert. Die Ausschnittvergrößerung zeigt, daß die Berücksichtigung weiterer Orbits die Differenz weiter verkleinert: Die braune Kurve berücksichtigt zusätzlich das Fünfeck, die blaue Linie alle Bahnen bis zum 40-Eck.

im herausvergrößerten Detail sichtbare Abweichung der Kurven von etwa 0.2 entspricht der Abschätzung<sup>5</sup> der Höhe der Störpeaks. Diese Differenz wird tatsächlich durch das Abbrechen der Summation nach dem 4-Eck verursacht: Summiert man bis zum Fünfeck (gelbe Kurve) oder bis  $m_0 = 40$  (blaue Kurve), verschwindet die Abweichung zum quantenmechanischen Resultat fast völlig. Bei solchen Glättungsweiten ist damit praktisch kein Unterschied zwischen der QM und der POT feststellbar.

Will man einzelne Einteilchenniveaus trennen, muß man  $\gamma$  kleiner als den Abstand benachbarter Niveaus wählen. Für  $L_{max} = 20$  mit dem TxR-Fenster ist  $\gamma \approx 0.15$ , und die ersten drei Zustände separieren. Diese Situation ist in Abbildung 4.5 gezeigt. Der Vergleich zwischen QM (rot) und POT (grün) zeigt, daß auch für solche kleinen Mittelungsweiten die Übereinstimmung sehr gut ist. Die POT reproduziert also nicht nur die korrekte Schalenstruktur der Niveaudichte, sondern auch ihre Feinstruktur und kann sogar Einteilchenniveaus trennen. In der Ausschnittvergrößerung des ersten Peaks in Abbildung 4.5 erkennt man, daß der quantenmechanische und der semiklassische Peak die gleiche Form

<sup>5</sup>Für so kleine  $m_0$  und  $L_{max}$  sind die Näherungen in Gleichung 4.11 natürlich nicht gerechtfertigt;  $\xi$  läßt sich in diesem Fall aber nach Gleichung A.5 approximieren.

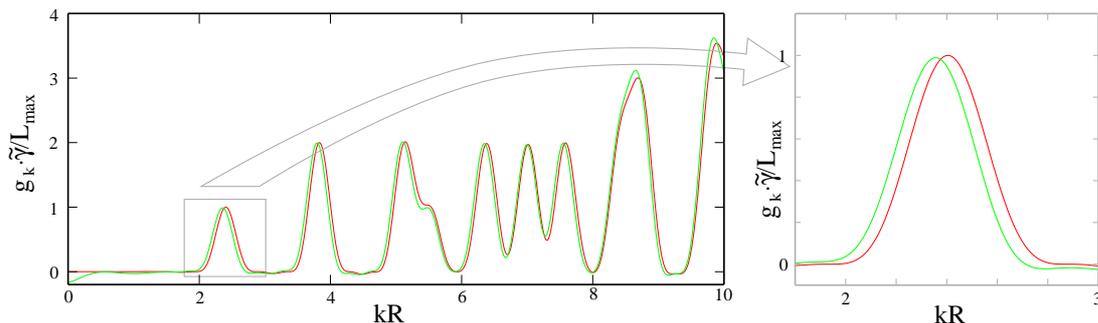


Abbildung 4.5: Bei einer Glättung über  $\gamma \approx 0.15$  separieren die ersten drei Peaks der quantenmechanischen Niveaudichte (rot). Die POT (grün) reproduziert auch diese Quantisierung. Die Ausschnittvergrößerung zeigt, daß der größte Unterschied zwischen POT und QM eine leichte Verschiebung der Eigenwerte ist. Hier ist  $m_0 = 40$  gewählt. Damit sind die die Störpeaks kleiner als  $4 \cdot 10^{-3}$  und nicht sichtbar.

haben, aber leicht gegeneinander verschoben sind. Die gleiche Peakhöhe zeigt, daß die POT die korrekten quantenmechanischen Entartungen ergibt. Die gleiche Form der Peaks zeigt, daß die semiklassische Niveaudichte  ${}^{\text{POT}}\delta g_E$  aus Peaks mit normierten Flächen und einer deutlich kleineren Breite als  $\gamma$  besteht. Das gilt im gesamten beobachteten Bereich bis  $\gamma < 0.002$ . Das legt die Vermutung nahe, daß die PO-Summe, wie auch die quantenmechanische Niveaudichte, aus einer Summe von  $\delta$ -Funktionen besteht. Die leichte Verschiebung der Peaks gegeneinander deutet auf kleine Unterschiede der semiklassischen und der quantenmechanischen Eigenwerte hin. Im nächsten Abschnitt wird diese Verschiebung im Grenzwert verschwindender Glättung bestimmt und geprüft, ob die PO-Summe wirklich einer Summe von  $\delta$ -Funktionen entspricht.

## 4.6 Bestimmung der POT-Eigenwerte

*Im Grenzfall verschwindender Glättung liefert die POT Näherungen für die Lage der quantenmechanischen Energieniveaus, die „POT-Eigenwerte“. Die niedrigsten Eigenwerte werden numerisch bestimmt und mit den quantenmechanischen und denen der EBK-Quantisierung verglichen.*

Die Ergebnisse des letzten Abschnitts weisen darauf hin, daß die semiklassische Spurformel eine Summe von  $\delta$ -Funktionen ist. Es ist noch nicht möglich, aus der PO-Summe analytisch die Positionen dieser  $\delta$ -Funktionen zu bestimmen, obwohl in jüngster Zeit mit der Verwendung der dynamischen  $\zeta$ -Funktion Fortschritte in diese Richtung erzielt werden [42]. In diesem Kapitel wird dieses Problem daher numerisch behandelt.

Es wird der Grenzwert der Peakpositionen für verschwindende Glättung betrachtet. Falls diese Grenzwerte von der verwendeten Fensterfunktion und der Art des Grenzübergangs unabhängig sind, können sie als POT-Eigenwerte bezeichnet werden. Dann ist auch gezeigt, daß die PO-Summe einer Summe von  $\delta$ -Funktionen entspricht. Bei der Berechnung der PO-Summe setzen die numerische Genauigkeit und die zur Verfügung stehende Rechenzeit den praktikablen  $L_{max}$  und  $m_0$  enge Grenzen. Es ist daher nicht zweckmäßig, die asymptotische Peakposition der PO-Summe durch eine Peakposition für großes, gerade noch berechenbares  $L_{max}$  und  $m_0$  abzuschätzen. Stattdessen wurden die Peaks für verschiedene  $(L_{max}, m_0)$  betrachtet und ihr Verhalten nach  $(L_{max}, m_0) = (\infty, \infty)$  extrapoliert. Damit gewinnt man Kontrolle über das Konvergenzverhalten und verbessert die

Genauigkeit der Bestimmung der Peakpositionen erheblich.

Zunächst werden in Kapitel 4.6.1 die Peakpositionen bestimmt. Diese werden in Kapitel 4.6.2 nach  $(L_{max}, m_0) = (\infty, \infty)$  extrapoliert. Nach einem kurzen Abstecher zum Aharonov-Bohm-Billard in Abschnitt 4.6.3 werden die Ergebnisse in Kapitel 4.6.4 diskutiert.

#### 4.6.1 Bestimmung der Peakpositionen der PO-Summe

Die Position eines Peaks kann durch sein Maximum oder seinen Schwerpunkt bestimmt werden. Letzteres ist die gegen kleine Störungen (z.B. von Nachbarpeaks) unempfindlichere Methode. Falls man eine gute Schätzung für die Peakform hat, ist die (numerisch aufwendige) Schwerpunktbestimmung äquivalent zu einem Fit an diese Peakform, wobei Höhe, Mittelpunkt und Breite die Fitparameter sind. Abbildung 4.5 zeigt, daß  $a_i \cdot f(k)$  die Peaks sehr gut approximiert.  $a_i$  ist dabei die quantenmechanische Entartung des Zustandes. Der Fit kann daher auf die Optimierung der Peakmitten  ${}^{\text{POT}}\kappa_k^{F,m_0}$  beschränkt werden. Für verschiedene  $L_{max}$  und  $m_0$  wird also die Funktion

$$p(k) := a_i \left[ \sum_i^{i_{max}} \delta(k - {}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}) \right] * f(k) \quad (4.12)$$

mit variablen  ${}^{\text{POT}}\kappa_k^{F,m_0}$  durch einen gewichteten least-square-fit an  ${}^{\text{POT}}g_k^{F,m_0}$  angepaßt.  $i_{max}$  gibt die Anzahl der Niveaus an, die berücksichtigt werden. Im folgenden wurde  $i_{max} = 7$  gewählt. Die technischen Details sowie die Überlegungen zur Gewichtung finden sich in Anhang B.1. Dort wird auch die Genauigkeit der so bestimmten Peakpositionen abgeschätzt. Sie ist proportional zu  $L_{max}^{-(\beta+2)}$ . Der Parameter  $\beta$  hängt nur von der verwendeten Fensterfunktion ab und ist in Kapitel 3.34 auf Seite 22 beschrieben.

Abbildung 4.6 zeigt für das TxR-Fenster mit  $L_{max} = 300$  und  $m_0 = 39$  die Differenz zwischen  ${}^{\text{POT}}g_k^{F,m_0}$  und  $p(k)$ . Diese Differenz ist kleiner als  $5 \cdot 10^{-3}$ , also kleiner

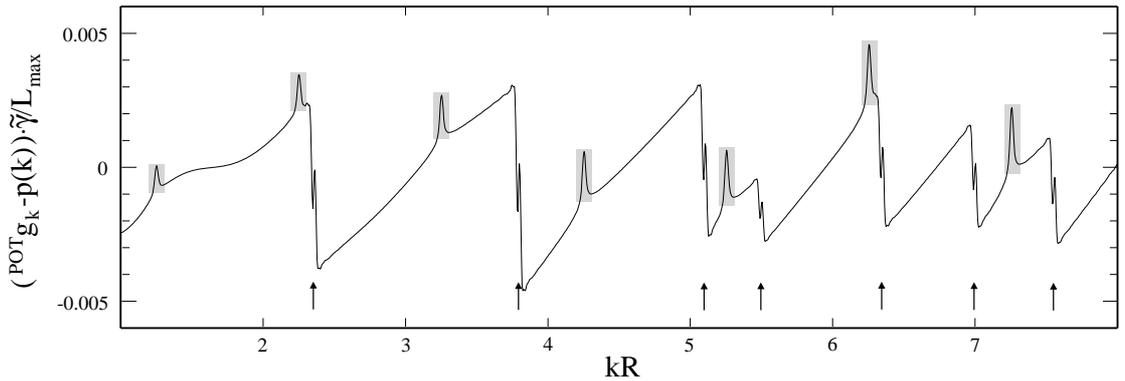


Abbildung 4.6: Differenz zwischen POT und  $p(k)$  für  $L_{max} = 300$  und  $m_0 = 39$ . Der Unterschied zwischen PO-Summe und dem Ansatz  $p(k)$  für die Fit-Funktion ist kleiner als 0,5%. Die grauen Blöcke geben die Störpeakpositionen und -amplituden nach Gleichungen (4.10) und (4.11) an. Die Pfeile markieren die Peakpositionen von  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$ .

als 0,5% der Peakhöhen von  ${}^{\text{POT}}g_k^{F,m_0}$  bzw.  $p(k)$ . Das zeigt, daß der Ansatz nach Gleichung 4.12 gerechtfertigt ist. Bevor in Kapitel 4.6.2 die so berechneten Peakpositionen nach  $(L_{max}, m_0) = (\infty, \infty)$  extrapoliert werden, wird noch kurz die Differenz zwischen  ${}^{\text{POT}}g_k^{F,m_0}$  und  $p(k)$  diskutiert.

Die in Abbildung 4.6 sichtbaren kleinen Peaks sind die aus Abschnitt 4.4 bekannten Störpeaks. Deren asymptotische Positionen nach Gleichung 4.10 und die Abschätzung ihrer Amplitude mit  $\xi_k/\sqrt{2}$  nach Gleichung 4.11 sind zum Vergleich als graue Blöcke mit eingezeichnet. Die Übereinstimmung mit den beobachteten Peaks ist sehr gut. Damit sind diese Strukturen als Artefakte aufgrund der numerischen Auswertung identifiziert. Der übrige Verlauf der Differenz in Abbildung 4.6 zeigt eine starke Regelmäßigkeit. Sie steigt linear zwischen zwei Peakpositionen (Pfeile) und fällt innerhalb der Peakbreite wieder steil ab. Dabei handelt es sich um die Fehler, die durch die in Kapitel 3.2.1 durchgeführte Näherung der diskreten Summe über die periodischen Bahnen als kontinuierliches Integral. Diese Approximation bestand in der Anwendung des Faltungssatzes auf die diskrete PO-Summe. Der Vergleich der Abbildungen 4.4 und 4.6 zeigt, daß in der gefalteten Niveaudichte diese Näherung gegen die Fehler der semiklassischen Näherung zu vernachlässigen ist. Wie es zu erwarten ist, wird der Fehler durch die Anwendung des Faltungssatzes mit steigender Anzahl von Summanden schnell kleiner, und die relative Höhe des Sägezahns nimmt weiter ab.

Obwohl die POT nur eine Näherung in niedrigster Ordnung in  $\hbar$  ist, ist die Übereinstimmung mit der Quantenmechanik im Fall des Kreisbillards sehr gut. Der einzige Einfluß der höheren Ordnungen in  $\hbar$  besteht in einer leichten Verschiebung der Einteilchenenergien. Diese Verschiebung wird im nächsten Abschnitt bestimmt. Das Kreisbillard ist aber ein Sonderfall; Effekte höherer Ordnung in  $\hbar$  können die Niveaudichte durchaus stärker beeinflussen oder sie sogar dominieren. Ein Beispiel dafür ist das von Reimann [35] vorgestellte Aharonov-Bohm-Billard (vergleiche auch Kapitel 4.6.3), bei dem für spezielle Werte des Flusses die Näherung der Niveaudichte in niedrigster Ordnung in  $\hbar$  identisch Null ist. Auch beim Kreisbillard im Magnetfeld, das in Kapitel 5 behandelt wird, haben Effekte in höheren Ordnungen in  $\hbar$  deutlich größeren Einfluß auf die Niveaudichte.

### 4.6.2 Asymptotische Peakpositionen

Zur Bestimmung der asymptotischen Peakpositionen sind viele eher technische Überlegungen nötig. Diese sind in Anhang B.2 und B.3 detaillierter beschrieben. Hier werden nur die wesentlichen Schritte dargestellt und die Ergebnisse präsentiert.

Im ersten Schritt wird gezeigt, daß es zur Bestimmung der asymptotischen  $\text{POT}_{\kappa_i^{F,m_0}}$  für  $(L_{max}, m_0) \rightarrow (\infty, \infty)$  ausreicht, für festes  $m_0$  den Grenzwert für  $L_{max} \rightarrow \infty$  zu betrachten. Abbildung 4.7 zeigt  $\text{POT}_{\kappa_i^{F,39}}$  (grün) für das TxR-Fenster für den Grundzustand ( $\ell = 0, n = 1$ ) und den ersten angeregten Zustand ( $\ell = 1, n = 1$ ). Diese Peakpositionen konvergieren für  $L_{max} \rightarrow \infty$  offensichtlich monoton gegen einen Grenzwert.

Im nächsten Schritt wird empirisch gezeigt, daß abgesehen von einer Streuung der  $\text{POT}_{\kappa_i^{F,m_0}}$  aufgrund der Ungenauigkeit der Peakpositionsbestimmung die  $\text{POT}_{\kappa_i^{F,m_0}}$  unabhängig von der gewählten Fensterfunktion einer Abhängigkeit

$$t_i(L_{max}) = c_0^i + \frac{c_2^i}{L_{max}^2} + \frac{c_3^i}{L_{max}^3} \quad (4.13)$$

folgen. Zur Bestimmung des Grenzwertes der  $\text{POT}_{\kappa_i^{F,m_0}}$  wird eine solche Funktion an die Daten angefitet.

In Abbildung 4.7 ist die so bestimmte Funktion  $t_i$  als blaue Linie eingezeichnet. Die Übereinstimmung mit den Peakpositionen ist sehr gut. Die Extrapolation von  $t_i$  nach  $L_{max} \rightarrow \infty$  ergibt schließlich  $c_0^i$  als asymptotische Peakposition  $\text{POT}_{\kappa_i}$ . In Tabelle 4.1 ist die Differenz zwischen den so bestimmten  $\text{POT}_{\kappa_i}$  und den  $\text{EBK}_{\kappa_i}$  für die ersten sieben Eigenwerte und für verschiedene Fensterfunktionen zusammengefaßt. Die berechneten Werte

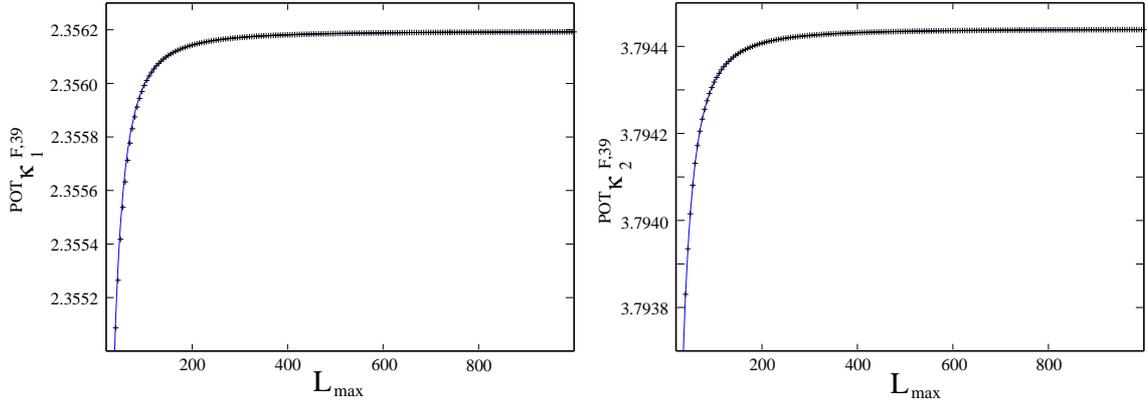


Abbildung 4.7: Die in Kapitel 4.6.1 bestimmten Peakpositionen  $\text{POT}_{\kappa_i}^{F,m_0}$  in Abhängigkeit von  $L_{\max}$  (grün). Die linke Abbildung zeigt den Peak zu  $i = 1$  ( $n = 1, \ell = 0$ ), die rechte den zu  $i = 2$  ( $n = 1, \ell = 0$ ). Die blaue Linie ist die an diese Punkte gefittete Funktion  $t_i$  nach Gleichung 4.13.

sind von der Wahl der Fensterfunktion unabhängig und können daher tatsächlich als POT-Eigenwerte bezeichnet werden ( $c_2^i$  und  $c_3^i$  sind dagegen vom gewählten Fenster, also der Art der Glättung, abhängig). Das zeigt auch daß die Spurformel tatsächlich eine Summe von  $\delta$ -Funktionen ist, und die Verschiebung der Peakpositionen mit steigendem  $L_{\max}$  nur eine Folge der näherungsweisen Anwendung des Faltungssatzes auf die PO-Summe sind.

i	(n, $\ell$ )	Rechteckfenster		Dreieckfenster		TxR-Fenster	
		$c_0^i$ ·10 <sup>-7</sup>	$\sigma$ ·10 <sup>-7</sup>	$c_0^i$ ·10 <sup>-10</sup>	$\sigma$ ·10 <sup>-10</sup>	$c_0^i$ ·10 <sup>-11</sup>	$\sigma$ ·10 <sup>-11</sup>
1	(1,0)	2.785	3.3	-4.174	5.9	-30.79	24
2	(1,1)	1.018	2.5	-1.037	1.8	0.215	0.7
3	(1,2)	-1.481	3.3	2.624	2.8	2.884	3.2
4	(2,0)	-0.830	5.6	-4.038	5.4	9.610	1.2
5	(1,3)	1.763	4.2	1.494	3.6	-44.67	24
6	(2,1)	-1.481	3.9	-1.321	6.3	1.368	3.8
7	(4,0)	1.152	5.6	4.225	1.8	-0.868	1.4

$$c_0^i = \text{POT}_{\kappa_i} - \text{EBK}_{\kappa_i}$$

Tabelle 4.1: Die Differenz  $c_0^i$  der POT- und der EBK-Eigenwerte für die untersten sieben Zustände. Jeder POT-Eigenwert wurde mit dem Rechteck-, dem Dreieck- und dem TxR-Fenster bestimmt. Die  $\sigma$  sind die Standardabweichungen der POT-Eigenwerte;  $\pm\sigma$  entspricht einem Konfidenzintervall von 68 %.

Tabelle 4.1 zeigt, daß innerhalb der Fehlerschranken die POT- und die EBK-Eigenwerte übereinstimmen. Es liegen etwas mehr als die erwarteten 68% der POT-Werte im Bereich einer Standardabweichung um den EBK-Eigenwert. Damit ist - je nach Eigenwert - mit einer Genauigkeit zwischen  $7.2 \cdot 10^{-12}$  und  $2.4 \cdot 10^{-10}$  gezeigt, daß die EBK-Quantisierung und die POT im Falle des Kreisbillards ohne Feld *exakt* dieselben Eigenwerte ergeben.

Tabelle 4.2 vergleicht die Eigenwerte der EBK-Quantisierung mit denen der Quantenmechanik (vergleiche Kapitel 4.1). EBK- und QM-Eigenwerte unterscheiden sich bei den ersten sieben Peaks je nach Peak um 0.3% ( $n = 2, \ell = 1$ ) bis 2% ( $n = 1, \ell = 0$ ). Die

i	$(n, \ell)$	${}^{\text{QM}}\kappa_i$	${}^{\text{EBK}}\kappa_i$	${}^{\text{QM}}\kappa_i - {}^{\text{EBK}}\kappa_i$
1	(1,0)	2.404825557695773	2.356194490192345	$4.863 \cdot 10^{-2}$
2	(1,1)	3.831705970207512	3.794439976085764	$3.727 \cdot 10^{-2}$
3	(1,2)	5.135622301840683	5.100386238868546	$3.524 \cdot 10^{-2}$
4	(2,0)	5.520078110286311	5.497787143782138	$2.229 \cdot 10^{-2}$
5	(1,3)	6.380161895923984	6.345186425660033	$3.498 \cdot 10^{-2}$
6	(2,1)	7.015586669815619	6.997001907674047	$1.858 \cdot 10^{-2}$
7	(4,0)	7.588342434503804	7.553059657105045	$3.528 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 4.2: Vergleich der Eigenwerte der exakten quantenmechanischen Rechnung mit denen der EBK-Quantisierung. Die Differenz ist um mehr als acht Größenordnungen größer als der in Tabelle 4.1 aufgelistete Unterschied zwischen POT und EBK.

Quantenmechanik und die Semiklassik kommen damit zu leicht unterschiedlichen Werten. Das ist verständlich, da die semiklassischen Methoden lediglich eine Näherung niedrigster Ordnung in  $\hbar$  sind. Nur im *klassischen Limes*<sup>6</sup>, also für große Quantenzahlen, verschwinden die Differenzen zwischen QM und EBK. Während der Unterschied der semiklassischen Eigenwerte zu den quantenmechanischen also nicht überraschend ist, war *a priori* nicht zu erwarten gewesen, daß beide semiklassischen Ansätze exakt dieselben Werte liefern. Das wird nach dem Vergleich mit der Situation beim Aharonov-Bohm-Billard im folgenden Abschnitt in Kapitel 4.6.4 diskutiert.

### 4.6.3 Aharonov-Bohm-Billard

Unter einem Aharonov-Bohm-Billard versteht man ein zweidimensionales Billardsystem mit einem (singulären) magnetischen Flußschlauch senkrecht zur Billardebene. Solche Systeme sind schon ausführlich untersucht worden [7, 15]. Hier soll nur das Kreisbillard mit zentrischer Flußlinie untersucht werden. Dieses System ist pseudointegrabel und zeigt klassisch kein chaotisches Verhalten. Eine Untersuchung der Schalenstruktur mit Hilfe der POT wurde von Reimann [35, 33] durchgeführt.

Die quantenmechanische Lösung ist analog zum Fall ohne Flußlinie. Das Vektorpotential resultiert lediglich in einem additiven Term  $\alpha = \frac{e\Phi}{2\pi}$  in der Drehimpulsquantisierung. Dabei ist  $\Phi$  der magnetische Fluß durch das Solenoid. Die quantenmechanischen Eigenwerte ergeben sich damit zu

$$\varepsilon_{n,\ell}^\alpha = \frac{E_{n,\ell}^\alpha}{E_0} = (j_{n,|\ell+\alpha|})^2 \quad , \quad (4.14)$$

wobei die  $j_{n,|\ell+\alpha|}$  wieder die Nullstellen der Besselfunktionen  $J_{|\ell+\alpha|}$  sind. Entsprechend lautet die Gleichung für die EBK-Eigenwerte in diesem Fall

$$\sqrt{|(kR)^2 - |\ell + \alpha|^2} - |\ell + \alpha| \cos^{-1} \left( \frac{|\ell + \alpha|}{kR} \right) = \pi \left( n + \frac{1}{4} \right) \quad . \quad (4.15)$$

Das Kreisbillard und das Aharonov-Bohm-Billard werden also durch dieselben Formeln beschrieben, falls man die Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  durch  $|\ell + \alpha|$  ersetzt. Das Vektorpotential beeinflusst die klassische Bewegung im Billard nicht. Damit entwickelt Reimann –

<sup>6</sup>Der Grenzwert großer Energien ist nicht genau der klassische Limes, da auch für beliebig große Energien Zustände mit einer sehr kleinen Quantenzahl (z.B.  $\ell = 0$ ) existieren. Das erklärt die Ergebnisse von Robnik [32], der numerisch zeigt, daß (in Einheiten des typischen Niveauabstandes) nicht alle EBK-Eigenwerte für große Energien gegen die entsprechenden quantenmechanischen Werte konvergieren.

ausgehend von Gleichung 4.6 unter Berücksichtigung der zusätzlichen Phasen durch den durch die Bahnen eingeschlossenen magnetischen Fluß – eine Spurformel für das Aharonov-Bohm-Billard:

$$\begin{aligned} {}^{\text{POT}}\delta g_E &= \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{kR\pi}} \sum_{\beta} f_{\beta} \frac{\sin^{3/2}(\phi_{\beta})}{\sqrt{an}} \cdot \\ &\cdot \sin\left(kL_{\beta} - 3an\frac{\pi}{2} + \frac{3\pi}{4}\right) \cdot \cos(2\pi\alpha n) \quad . \end{aligned} \quad (4.16)$$

Von Oppen [41] kann analog zum Kreisbillard ohne Flußlinie aus der Gleichung der EBK-Eigenwerte wieder eine Spurformel ableiten. Sie ist mit Gleichung 4.16 identisch. Auch Tatievski [40] kommt zum gleichen Resultat.

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, ob die POT-Eigenwerte auch im Fall des Aharonov-Bohm-Billards denen der EBK-Quantisierung entsprechen.

In Kapitel 3.7 wurde gezeigt, daß die Fouriertransformation der Eigenwerte in  $k$  bei Billardsystemen das Längenspektrum der klassischen periodischen Bahnen ergibt. In Abbildung 4.8 sind diese Längenspektren aus den quantenmechanischen (rot) und den EBK-Eigenwerten (blau) aufgetragen. Das Spektrum der quantenmechanischen und das der

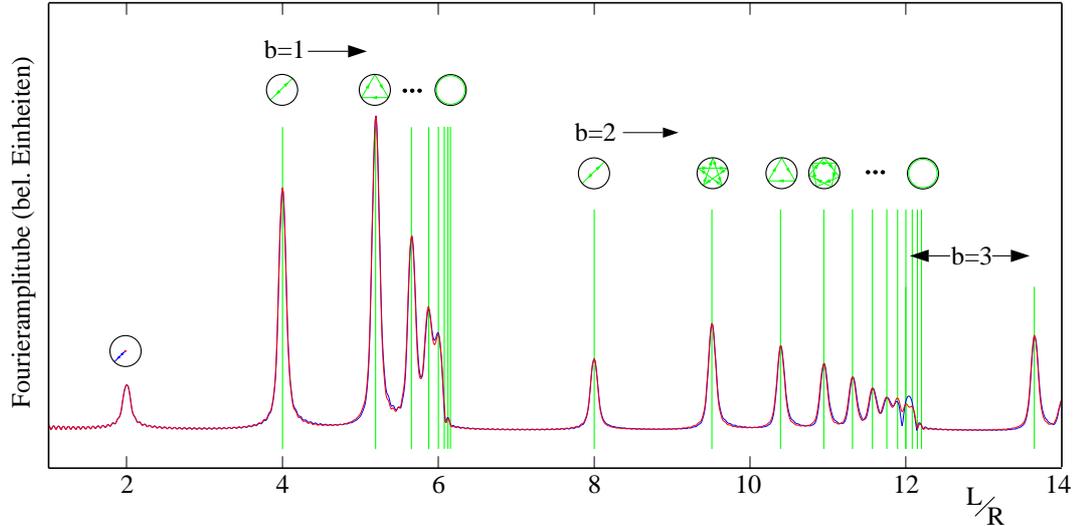


Abbildung 4.8: Das Fourierspektrum der quantenmechanischen (rot) und der EBK-Eigenwerte (blau) für das Aharonov-Bohm-Billard mit  $\alpha = 0.4$ . Die grünen Linien entsprechen den Längen der in der PO-Summe enthaltenen klassischen periodischen Orbits.

EBK-Eigenwerte sind praktisch identisch. Jede grüne Linie entspricht einer klassischen periodischen Bahn im Billard, die in der PO-Summe berücksichtigt wird. Die Übereinstimmung mit den Peaks der Eigenwertspektren ist sehr gut. Sowohl die Quantenmechanik als auch die EBK zeigen aber ein deutliches Signal an  $L = 2R$ . Das entspricht einem an der Flußlinie im Zentrum zurückgestreuten Orbit. Eine solche Bahn tritt in der Spurformel nicht auf. Trotz der starken formalen Ähnlichkeit mit dem Kreisbillard sind in diesem Fall EBK und POT nicht identisch. Die EBK-Näherung reproduziert die quantenmechanischen Ergebnisse in diesem Fall deutlich besser als die POT.

#### 4.6.4 Diskussion

Da bei der Herleitung der Spurformel des Kreisbillards bzw. des Aharonov-Bohm-Billard aus den EBK-Gleichungen nach dem Verfahren von Berry und Tabor [6] eine Sattelpunktsnäherung verwendet wird, sind für die beiden Ansätze keine identischen Resultate zu erwarten. Die Übereinstimmung der Werte sollte etwa von der gleichen Qualität wie die Übereinstimmung zum quantenmechanischen Resultat sein. Beim Kreisbillard sind jedoch, wie in Abschnitt 4.6.2 gezeigt wurde, EBK und POT exakt identisch, die Sattelpunktsnäherung ist also exakt. Das Kreisbillard ist also ein Ausnahmefall, vergleichbar mit dem harmonischen Oszillator. Bei letzterem sind nicht nur die POT- und die EBK-Werte gleich, sondern die semiklassischen Eigenwerte reproduzieren sogar die quantenmechanischen. Diese Übereinstimmung ist schon beim Aharonov-Bohm-Billard nicht mehr gegeben, die Näherungen unterscheiden sich bereits im Längenspektrum der klassischen periodischen Bahnen.

Eine mögliche Interpretation dieser Beobachtung ist, daß beim Kreisbillard die Terme in *zweitniedrigster* Ordnung in  $\hbar$  keinen Beitrag zur Niveaudichte leisten. Beim Aharonov-Bohm-Billard verschwinden die Terme dieser Ordnung nicht, sie dominieren für verschiedene Stärken des Flußschlauchs sogar die Niveaudichte<sup>7</sup>.

Diese Interpretation erklärt sowohl die Übereinstimmung der POT mit den Resultaten der EBK-Quantisierung im Kreisbillard wie auch die Differenzen der beiden Ansätze im Aharonov-Bohm-Fall, obwohl die Sattelpunktsnäherung in beiden Fällen nur in kleinster Ordnung in  $\hbar$  korrekt ist. Außerdem wird damit die extrem gute Übereinstimmung der POT-Resultate mit der Quantenmechanik verständlich, da die Abweichungen in diesem speziellen Fall nur noch von *drittniedrigster* Ordnung in  $\hbar$  sind. Diese Deutung muß aber noch durch weitere Untersuchungen überprüft werden.

---

<sup>7</sup>So verschwindet mit  $\alpha = 0.25$  die Niveaudichte in *niedrigster* Ordnung in  $\hbar$  identisch. Das ist an Gleichung 4.16 leicht ersichtlich, der Cosinus-Term ist für dieses  $\alpha$  identisch null. Die gesamte Niveaudichte verschwindet dagegen nicht, sie wird also von Termen höherer Ordnung in  $\hbar$  dominiert.

## Kapitel 5

# Das Kreisbillard im homogenen Feld

*Das Kreisbillard im homogenen Magnetfeld wird für beliebige Feldstärken semiklassisch und quantenmechanisch behandelt. Der Vergleich beider Methoden zeigt, daß die POT für starke Felder aufgrund von Randeffekten keine befriedigende Näherung der Niveaudichte mehr liefert. Ein Ansatz zur näherungsweise Implementierung dieser Randeffekte in die POT wird entwickelt.*

In diesem Kapitel wird das Kreisbillard im homogenen Magnetfeld betrachtet. Quantenmechanisch wurde dieses System unter anderem von Geerinckx [18], Klama [27] und Robnik [36] diskutiert. Für schwache Felder wurde von Reimann [34, 35] eine semiklassische Spurformel angegeben. Dort wurde das Kreisbillard auch als einfaches Modell eingesetzt, um die Fluktuationen des Leitwerts eines Quantendots in Abhängigkeit von der Dotgröße und dem Magnetfeld zu erklären. Die von Lindelof *et al.* geplanten Messungen der Leitwerte von Quantendots in stärkeren Feldern motivierten die Ausdehnung der semiklassischen Beschreibung auf hohe Feldstärken. Eine solche Beschreibung war bislang nicht bekannt. Die semiklassische Formulierung der Niveaudichte im Magnetfeld ist auch von theoretischem Interesse: Für schwache Felder ähneln die Familien der klassischen periodischen Bahnen den Polygonen, die für  $B = 0$  auftreten (vergleiche Abbildung 4.2). Diese Bahnen sind gegen Rotation um den Kreismittelpunkt entartet. Bei großen Feldstärken sind die klassischen periodischen Bahnen die Zyklotronorbits in der Kreisscheibe. Diese haben statt der eindimensionalen Rotationssymmetrie eine zweidimensionale translatorische Symmetrie. Der Übergang von schwachen zu starken Feldern wird somit mit einer Änderung der Symmetrie der die Niveaudichte dominierenden periodischen Bahnen verbunden sein. Im Gegensatz zu den Untersuchungen von Creagh [12], der eine störungstheoretische Behandlung von Systemen mit „leicht“ gebrochener Symmetrie vorgestellt hat, ist der Symmetrieübergang nicht plötzlich, sondern kontinuierlich: Orbits mit beiden Symmetrien existieren in einem weiten Bereich der Feldstärke nebeneinander. Bei Erhöhung des Magnetfeldes treten Bifurkationen, auf bei denen paarweise Orbits mit Rotationssymmetrie verschwinden. Gleichzeitig treten zusätzliche, translatorisch entartete Bahnen auf.

In Kapitel 5.1 wird zunächst die exakte quantenmechanische Lösung vorgestellt. Diese Daten dienen im weiteren als Referenz, um die Güte der semiklassischen Näherung zu überprüfen und ihre Fehler zu analysieren. In Kapitel 5.2 wird mit dem Ansatz der POT eine Spurformel für beliebige Feldstärken hergeleitet. Die angesprochenen Orbitbifurka-

tionen erzeugen unphysikalische Divergenzen in der semiklassischen Niveaudichte, die in Abschnitt 5.2.4 in einer einfachen Näherung behandelt werden. In Kapitel 5.3 wird die Spurformel bis zur ersten Ordnung im Magnetfeld entwickelt. Es ergibt sich die schon von Reimann [34] oder Tatievski [40] bekannte Näherung. Bei großen Feldstärken werden Effekte höherer Ordnung in  $\hbar$  in der Niveaudichte signifikant. Diese sind in der POT nicht enthalten und bewirken eine deutliche Diskrepanz zum quantenmechanischen Resultat. Diese Korrekturen können als Randeffekte identifiziert werden und werden in Kapitel 5.5 näherungsweise in die POT implementiert.

## 5.1 Die quantenmechanische Behandlung

Im homogenen Magnetfeld lautet die Schrödingergleichung in Coulomb-Eichung

$$\begin{aligned} H\Psi = E\Psi \quad ; \quad H &= \frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A})^2 \\ \vec{A} &= \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}) \quad . \end{aligned} \quad (5.1)$$

In Polarkoordinaten  $(r, \varphi)$  separiert das Problem mit  $\Psi = \rho(r)\Theta(\varphi)$  in die Radialgleichung

$$\rho'' + \frac{1}{r}\rho' + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \left( \frac{eBr}{2\hbar} \right)^2 \right) \cdot \rho = l \frac{\rho}{r^2} \quad (5.2)$$

und die Winkelgleichung

$$\Theta'' - i \left( \frac{eBr}{\hbar} \right)^2 \Theta' = -l\Theta \quad . \quad (5.3)$$

Dabei ist  $l$  der Separationsparameter. Die Winkelgleichung ist wie im feldfreien Fall elementar lösbar und für

$$l = m \left( m - \left( \frac{eBr}{\hbar} \right)^2 \right) \quad (m \in \mathbb{Z}) \quad (5.4)$$

mit den zyklischen Randbedingungen vereinbar.

Mit Magnetfeld skalieren die Eigenenergien nicht mehr mit dem Kreisradius, so daß  $E_0$  keine geeignete Skalierungsgröße mehr ist. Um die Darstellungen in diesem Kapitel aber konsistent mit den früheren zu machen, wird die Energie weiterhin als  $E/E_0 = (kR)^2$  angegeben. Eine geeignete Einheit der Feldstärke ist dann  $B_0 := \hbar/(eR^2)$ . Im folgenden wird das Magnetfeld stets in der dimensionslosen Größe

$$\tilde{B} := \frac{B}{B_0} = \frac{eR^2}{\hbar} B = \sqrt{\frac{E}{E_0}} \frac{R}{R_c} \quad (5.5)$$

angegeben. In diesen Einheiten ist der klassische *Zyklotronradius*  $R_c$

$$R_c = \frac{\hbar k}{eB} = R \frac{kR}{\tilde{B}} \quad . \quad (5.6)$$

Gleichung 5.2 kann auf die Normalform der hypergeometrischen Differentialgleichung

$$rR'' + (c - r)R' - aR = 0 \quad (5.7)$$

transformiert werden. Die Lösungen dieser Differentialgleichung sind die hypergeometrischen Funktionen  ${}_1F_1$  (vgl. z.B. [1]). Die Randbedingungen fordern das Verschwinden der

Wellenfunktion am Rand der Kreisscheibe. Daraus ergeben sich schließlich die Energieeigenwerte zu

$$E_{nl} = \hbar\omega_c \left( \alpha_{nl} + \frac{l + |l|}{2} + \frac{1}{2} \right) \quad . \quad (5.8)$$

Dabei ist

$$\omega_c := \frac{eB}{m} \quad (5.9)$$

die Zyklotronfrequenz und  $\alpha_{nl}$  sind die Nullstellen der hypergeometrischen Funktion:

$${}_1F_1(-\alpha_{nl}; 1 + |l|; x_0) = 0 \quad . \quad (5.10)$$

$x_0 = (R/R_c)^2 = (\tilde{B}/kR)^2$  ist der einzige Parameter des Systems. Diese Lösung wird auch von Geerinckx *et al.* [18] angegeben. Zur expliziten Berechnung der Eigenwerte müssen die Nullstellen von  ${}_1F_1$  numerisch bestimmt werden. Dazu ist ein Verfahren nötig, das sicher keine Nullstelle überspringt, aber trotzdem (wegen der großen Zahl der zu bestimmenden Eigenwerte) schnell arbeitet. Die gängigen Methoden erwiesen sich für diesen Zweck als ungeeignet, so daß eine spezielle Strategie zur Nullstellenbestimmung entwickelt wurde. Diese verwendet eine präzise Abschätzung der Position der Nullstellen und eine dem Problem angepaßte Iterationstechnik. Das Verfahren ist in Anhang C beschrieben. Damit wurden im Bereich von  $\tilde{B} = 0.05$  bis  $\tilde{B} = 200$  die quantenmechanischen Eigenwerte bis  $kR = 60$  auf 6 Stellen genau bestimmt. Abbildung 5.1 zeigt den Verlauf der Eigen-

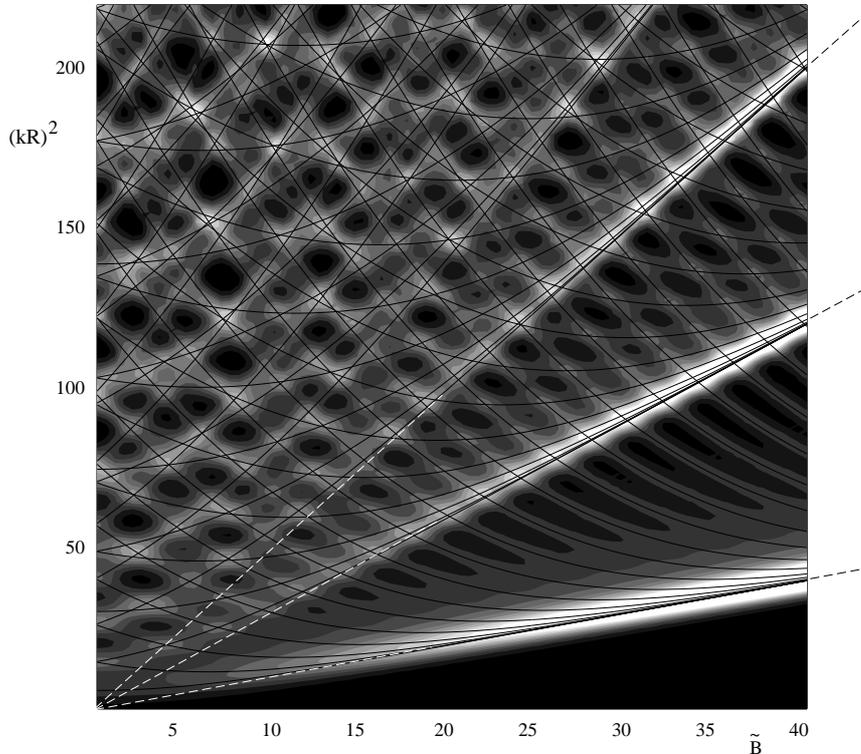


Abbildung 5.1: Die quantenmechanischen Energieeigenwerte der Kreisscheibe im homogenen Magnetfeld. Die gestrichelten Linien entsprechen den Landauniveaus. Die Graustufen geben die über  $\gamma = 1.5$  gemittelte Niveaudichte an.

werte bis  $kR = 15$  in Abhängigkeit vom Feld. Für größere Felder kondensieren mehr und mehr Zustände auf den Landauniveaus, die durch gestrichelte Linien angedeutet sind. Wie für alle räumlich beschränkten Systeme gibt es jedoch bei jeder Feldstärke Zustände mit Energien zwischen den Landauniveaus. Während (im Grenzfall großer Felder) die Lage der Landauniveaus von den Randbedingungen unabhängig ist, reagieren die Zwischenzustände sehr sensibel auf die Randbedingungen.

In Abbildung 5.1 ist als Graustufendarstellung zusätzlich noch die über einen Bereich von  $\gamma = 1.5$  gemittelte quantenmechanische Niveaudichte abgebildet. Der Grauwert enthält damit Informationen über die Schalenstruktur. Dunkle Bereiche entsprechen einer niedrigen Niveaudichte und damit einem besonders stabilen System<sup>1</sup>.

## 5.2 POT für beliebig starke Felder

Mit dem Ansatz von Creagh und Littlejohn [14] für Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien kann eine PO-Summe für das Kreisbillard im homogenen Magnetfeld hergeleitet werden.

Im ersten Abschnitt werden die klassischen periodischen Bahnen des Systems klassifiziert. Diese zerfallen in zwei Gruppen: die Gruppe der polygonähnlichen Bahnen mit Reflektionen am Kreisrand und die der Zyklotronbahnen, die die Wand des Billards nie berühren. In den Kapiteln 5.2.2 und 5.2.3 wird jeweils eine PO-Summe für diese Klassen von Orbits hergeleitet. Die Auswertung der gesamten Spurformel in Abschnitt 5.2.4 ist im wesentlichen analog zum feldfreien Fall. Lediglich die Orbitbifurkationen verlangen eine zusätzliche Näherung.

### 5.2.1 Klassifikation der klassischen periodischen Orbits

Für  $B = 0$  können die Orbits nach  $\beta = (a, b, n)$  klassifiziert werden. Dabei ist (vergleiche Abbildung 4.2 von Kapitel 4)  $a$  die Zahl der Reflektionen des primitiven periodischen Orbits und  $b$  seine Umlaufzahl.  $n$  gibt die Anzahl der Wiederholungen dieses primitiven Orbits an. Das Anlegen eines Magnetfeldes bricht die Zeitumkehrinvarianz. Dadurch haben „linkslaufende“ und „rechtslaufende“ Orbits nicht länger die gleiche Trajektorie. Schwache Felder bewirken lediglich eine leichte Krümmung der Polygonseiten (vergleiche Abbildung 5.2), ohne die Topologie der Bahnen zu verändern. Für Feldstärken, bei denen der Zyklotronradius  $R_c$  größer als der Kreisradius  $R$  ist, können die klassischen periodischen Bahnen daher mit  $\beta^\pm = (a, b, n)^\pm$  klassifiziert werden. Dabei werden Orbits mit nach außen gekrümmten Bögen als „+“-Orbits bezeichnet, die mit nach innen gekrümmten Polygonseiten als „-“-Orbits. Alle Polygone  $\beta = (a, b, n)$  spalten in Anwesenheit eines Magnetfeldes somit in zwei Orbits  $\beta^+$  und  $\beta^-$  auf. Lediglich die ehemaligen Durchmesserbahnen ( $\beta = (2, 1, n)$ ) hängen nicht vom Umlaufsinn ab<sup>2</sup>. Für die Berechnung der Amplituden und der Wirkungen der Orbits werden folgende geometrische Größen verwendet, die in Abbildung 5.2 am Beispiel der  $\beta^+$ -Orbits gezeigt sind:

<sup>1</sup>Eine Ausnahme ist der Bereich unterhalb des ersten Landauniveaus, der für kein System, also auch kein stabiles, zugänglich ist.

<sup>2</sup>Bei allen im folgenden hergeleiteten Formeln für  $\beta^+$ - und  $\beta^-$ -Orbits ergibt die Durchmesserbahn in beiden Fällen dieselben Ergebnisse. Er kann daher sowohl als  $\beta^+$ - als auch als  $\beta^-$ -Orbit betrachtet werden. Er darf jedoch nicht - da er nicht nach dem Umlaufsinn entartet ist - in beiden Fällen berücksichtigt werden. Um die Darstellung einfach zu halten, wird der Durchmesser im folgenden je zur Hälfte bei den  $\beta^+$ - und bei den  $\beta^-$ -Orbits berücksichtigt.

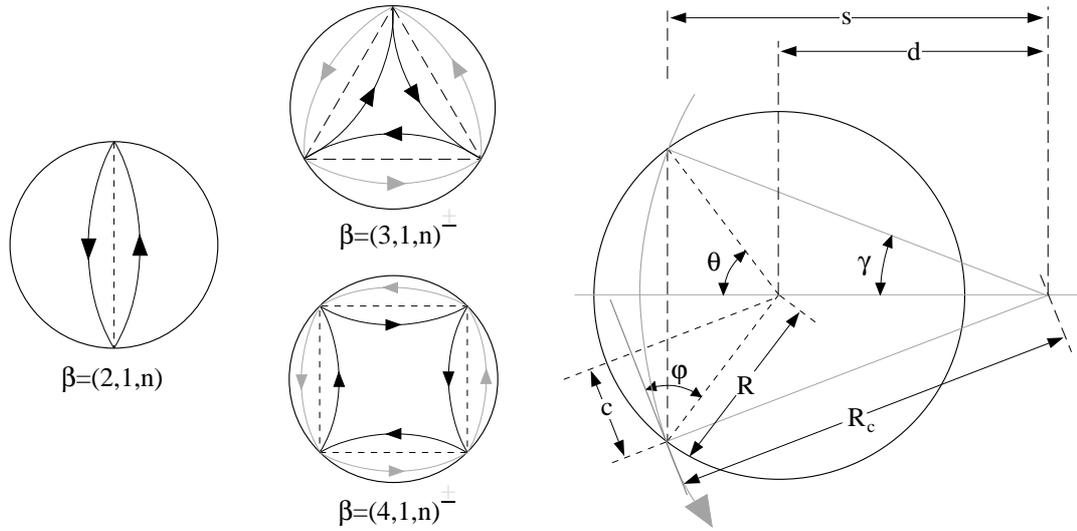


Abbildung 5.2: Klassifizierung der klassischen periodischen Bahnen der Kreisscheibe im homogenen Magnetfeld für  $R_c > R$ . Die Klassifizierung entspricht der im Falle  $B=0$  mit einem zusätzlichen Index, der die Umlaufrichtung angibt. Die Bahnkrümmungen sind hier für negativ geladene Teilchen in einem positiven magnetischen Feld gezeichnet. Im rechten Bild sind die geometrischen Größen, die im Text definiert werden, eingezeichnet.

$\Theta$  ist der halbe Mittelpunktswinkel des Polygons, das durch die Reflektionspunkte der Bahn an der Wand aufgespannt wird.  $\gamma$  ist der halbe (spitze) Mittelpunktswinkel der Zyklotronbewegung und  $\varphi$  der Winkel zwischen der Tangente der Bahn und dem Radiusvektor im Reflektionspunkt. Der Abstand zwischen dem Krümmungszentrum der Bahn und der Polygonseite wird  $s$  genannt, und  $c$  ist die Länge der Projektion des Kreisradius auf die Bahntangente im Reflektionspunkt. Der Abstand zwischen Kreismittelpunkt und Krümmungszentrum der Bahn wird schließlich mit  $d$  bezeichnet. Alle Größen sind geometrisch, also stets positiv definiert.

Wenn der Zyklotronradius kleiner als der Kreisradius wird, ändert sich die Topologie der Bahnen. Die periodischen Bahnen für  $R_c < R$  sind in Abbildung 5.3 gezeigt. Zunächst

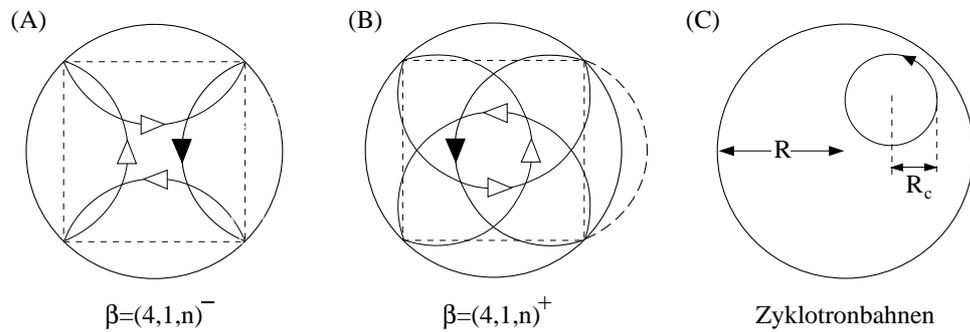


Abbildung 5.3: Klassifizierung der klassischen periodischen Bahnen der Kreisscheibe im homogenen Magnetfeld für  $R_c < R$ . Zur besseren Übersicht ist jeweils ein Teil des Orbits dick gezeichnet. (A) Die  $\beta^-$ -Orbits sind analog zum Fall  $R_c > R$ . (B) Die Topologie der  $\beta^+$ -Orbits ändert sich schlagartig gegenüber dem Bereich  $R_c > R$ . (C) Es entstehen neue, zyklotronartige Bahnen, die ganz im Inneren der Kreisscheibe liegen.

gibt es neue, zyklotronartige Bahnen, die ganz im Inneren der Kreisscheibe liegen. Diese Zyklotronbahnen können mit  $n$  klassifiziert werden, wobei  $n$  wie im Fall der  $\beta$ -Orbits die Anzahl der Wiederholungen der Bahn angibt (Abbildung 5.3(C)). Solange  $R_c$  größer als die halbe Seitenlänge eines Polygons  $R \sin \Theta$  ist, existieren die  $\beta^-$ -Orbits des Bereiches  $R_c > R$  weiter (Abbildung 5.3(A)). Die  $\beta^+$ -Orbits ändern bei  $R = R_c$  dagegen abrupt ihre Topologie. Die neuen  $\beta^+$ -Orbits sind in Abbildung 5.3(B) eingezeichnet. Sie existieren genau wie die  $\beta^-$ -Orbits nur für  $R_c \geq R \sin \Theta$ . An den Punkten  $R_c = R \sin \Theta$  verschwinden damit jeweils ein  $\beta^+$ - und ein  $\beta^-$ -Orbit paarweise.

Die Größen  $\Theta$ ,  $\gamma$ ,  $\varphi$ ,  $s$ ,  $c$  und  $d$  sind analog zum Fall  $R_c > R$  definiert.

Sie berechnen sich zu

$$\Theta = \frac{b}{a} \pi \quad (5.11)$$

$$\gamma = \arcsin \left( \frac{R}{R_c} \sin \Theta \right) \quad (5.12)$$

$$\varphi = \begin{cases} \gamma - \Theta + \pi/2 & \text{für } (\beta^+, R_c > R) \\ -\gamma + \Theta + \pi/2 & \text{für } (\beta^+, R_c < R) \\ |\gamma + \Theta - \pi/2| & \text{für } (\beta^-) \end{cases} \quad (5.13)$$

$$s = \sqrt{R_c^2 - R^2 \sin^2 \Theta} \quad (5.14)$$

$$c = R \cos \varphi \quad (5.15)$$

$$d = \begin{cases} s - R \cos \Theta & \text{für } (\beta^+) \\ s + R \cos \Theta & \text{für } (\beta^-) \end{cases} \quad (5.16)$$

Damit sind sämtliche klassischen periodischen Bahnen des Kreisbillards im homogenen Magnetfeld klassifiziert. Im nächsten Abschnitt wird die PO-Summe über die  $\beta$ -Orbits berechnet; die Zyklotronorbits werden in Kapitel 5.2.3 behandelt.

### 5.2.2 Die Orbits mit Wandreflektionen

Die  $\beta$ -Orbits treten wie im Falle  $B = 0$  in Familien auf, die gegen Drehung um den Mittelpunkt der Kreisscheibe entartet sind. Systeme mit solchen kontinuierlichen Symmetrien können mit dem in Kapitel 2.2.2 vorgestellten Formalismus von Creagh and Littlejohn [14] im Rahmen der POT behandelt werden. Die resultierende PO-Summe ist in Gleichung 2.12 auf Seite 10 allgemein angegeben. Die darin auftretenden Größen sollen jetzt für das Kreisbillard im homogenen Magnetfeld berechnet werden.

Die Symmetrie wird, wie in Abbildung 5.4(A) gezeigt, durch Drehung der Orbits um den Mittelpunkt der Kreisscheibe erzeugt. Diese Symmetrie ist eindimensional und  $k = 1$ . Eindimensionale Symmetrien sind immer abelsch, daher ist  $Q = 1$ . Die zugehörige Erhaltungsgröße zur Symmetrie ist der Drehimpuls  $L$ , der in Coulomb-Eichung als

$$L = |\vec{L}| = \hbar \vec{r} \vec{k} - \frac{eB}{2} r^2 \quad (5.17)$$

geschrieben werden kann. Da  $L$  längs der Bahn eine Erhaltungsgröße ist, kann man den Drehimpuls an den Reflektionspunkten auswerten. Dort ist

$$L = \hbar R k \sin \varphi - \frac{eB}{2} R^2 \quad (5.18)$$

Damit läßt sich  $W$  als

$$W = \frac{d\Psi(L)}{dL} \quad (5.19)$$

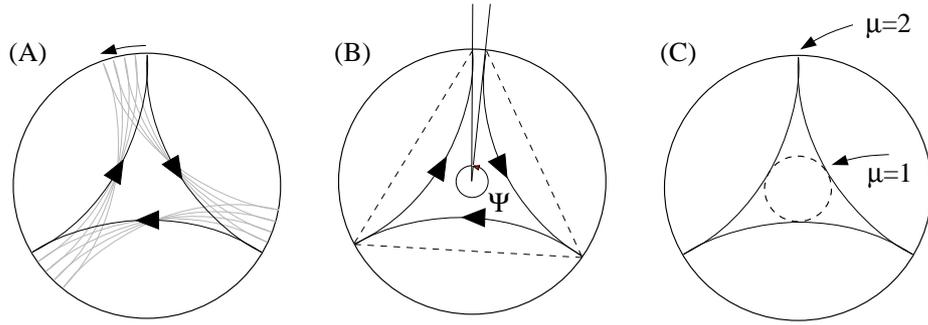


Abbildung 5.4: (A) Die  $\beta$ -Orbits treten in Familien auf, die gegen Drehung um den Mittelpunkt entartet sind. (B)  $\Psi$  ist der Winkel der Drehung, die den Endpunkt einer (nicht notwendig geschlossenen) Bahn auf den Startpunkt abbildet. (C) Der Maslov-Index ist wie bei  $B = 0$  pro Reflektion mit dem Rand  $\mu = 3$ .

schreiben. Dabei ist  $\Psi(L)$ , wie in Abbildung 5.4(B) angegeben, der Winkel, um den man den Endpunkt eines (nicht notwendig periodischen) Orbits mit Drehimpuls  $L$  zurückdrehen muß, damit er mit dem Startpunkt zusammenfällt. Für periodische Orbits ist  $\Psi(L) = 0$ .  $d\Psi/dL$  gibt die Empfindlichkeit der Bahn gegen kleine Änderungen der Anfangsbedingungen an. Da das Kreisbillard auch im Magnetfeld noch integrabel ist, ist der „surface of section“-Term  $\det(\tilde{M} - I)$  aus Gleichung 2.12 gleich 1. Das Integral über  $d\mu(g)$  ist das Integral über den Mittelpunktswinkel. Da die Orbits eine  $a$ -fache Symmetrie gegen Rotation besitzen, ist  $\int_{\Gamma} d\mu(g) = 2\pi/a$ . Wie in Abbildung 5.4 dargestellt, hat jedes Orbit pro (Polygon-)Seite weiterhin eine harte Reflektion an der Außenwand und eine weiche Reflektion an der inneren Kaustik. Der Maslov-Index ist daher derselbe wie im Fall ohne Magnetfeld, nämlich  $\mu = 3an$ . Insgesamt ist die PO-Summe für das Kreisbillard damit

$$\begin{aligned} \text{POT} \delta g_E &= -\frac{1}{\pi} \Im \left[ \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{(1/2)}} \cdot \right. \\ &\quad \left. \cdot \sum_{\text{orbits}} \left( T_{PPO} \cdot \frac{2\pi}{a} \left| \frac{dL}{d\Psi(L)} \right|^{(1/2)} \right) e^{i\frac{S(E)}{\hbar} - i(3a-\delta)\frac{\pi}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Die Größe  $\left| \frac{dL}{d\Psi(L)} \right|$  berechnet sich mit ein wenig ebener Trigonometrie zu

$$\left| \frac{dL}{d\Psi(L)} \right|^{1/2} = \left| \frac{\frac{dL}{d\varphi} \frac{d\varphi}{d\theta}}{\frac{d\Psi}{d\theta}} \right|^{1/2} = \sqrt{\frac{p}{2an} \frac{cd}{s}}, \quad (5.21)$$

wobei  $p$  der kinematische Impuls  $\sqrt{2mE}$  ist. Dieses Ergebnis ist mit den geometrischen Definitionen von  $c, d$  und  $s$  für die  $\beta^+$ - und  $\beta^-$ -Orbits sowohl für  $R_c > R$  als auch für  $R_c < R$  gültig. Für die  $\beta^+$ -Orbits ist  $d\Psi(L)/dL$  stets größer 0 und  $\delta$  damit gleich 1. Für die  $\beta^-$ -Orbits ist  $\delta = 1$  für  $R_c > R$  und  $\delta = 0$  sonst.

Die Länge eines primitiven periodischen Orbits berechnet sich zu

$$L_{PPO} = 2aR_c \xi_{\beta} \quad \text{mit} \quad \xi_{\beta} = \begin{cases} \gamma & \text{für } (R_c > R) \\ (\pi - \gamma) & \text{für } (\beta^+, R_c < R) \\ \gamma & \text{für } (\beta^-, R_c < R) \end{cases}, \quad (5.22)$$

und die Zeit  $T_{PPO}$  zum Durchlaufen des Orbits ist  $T_{PPO} = m \cdot L_{PPO}/p$ .

Damit ist

$$\begin{aligned} {}^{\text{POT}}\delta g_E &= \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{Rk\pi}} \sum_{\beta, \pm} f_\beta \underbrace{\frac{1}{\sqrt{an}} \frac{R_c}{R} \xi_\beta \sqrt{\frac{cd}{sR}}}_{=: A_\beta} \cdot \sin\left(\frac{S_\beta}{\hbar} - an\frac{3}{2}\pi + \delta\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \\ &=: \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{Rk\pi}} \sum_{\beta, \pm} f_\beta A_\beta \cdot \sin\left(\frac{S_\beta}{\hbar} - an\frac{3}{2}\pi + \delta\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad . \end{aligned} \quad (5.23)$$

Die Durchmesserbahn wird - um die Darstellung einfach zu halten - je zur Hälfte als  $\beta^+$ - und als  $\beta^-$ -Orbit berücksichtigt. Dazu dient der Faktor  $f_\beta$ , der als  $f_\beta := \frac{1}{2}$  für  $a = 2b$  und  $f_\beta := 1$  sonst definiert ist. Für  $B \rightarrow 0$  ergeben sich asymptotisch die aus Gleichung 4.6 bekannten Amplituden des feldfreien Falles

$$A_\beta^0 = \frac{\sin^{3/2} \Theta}{\sqrt{an}} \quad . \quad (5.24)$$

In Abbildung 5.5 ist  $\left|\frac{A}{A_0}\right|$  für den Durchmesser, das Dreieck, das Viereck und das 10-Eck im Bereich  $R_c > R$  aufgezeichnet. Mit der dimensionslosen Feldstärke  $\tilde{B}$  ist der

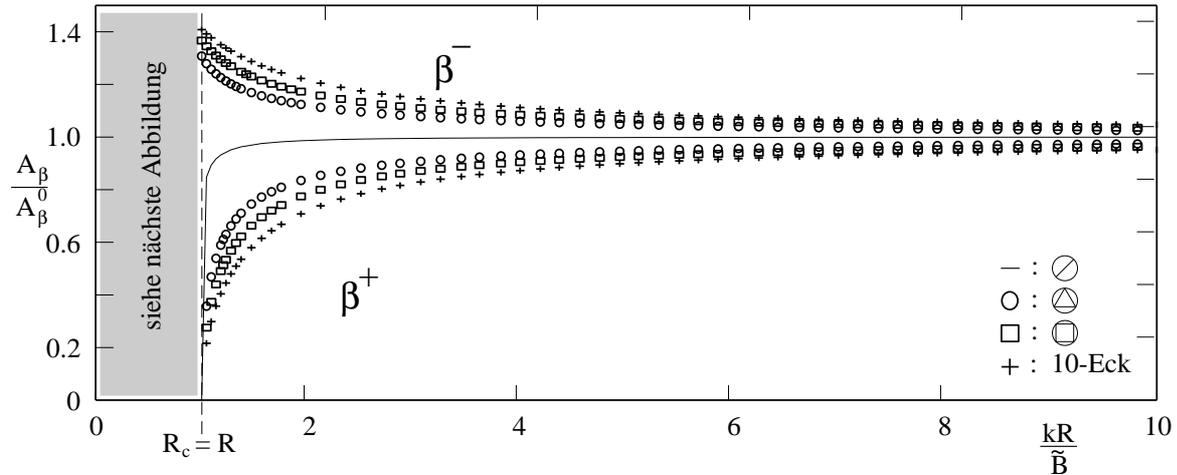


Abbildung 5.5: Die relativen Amplituden der Orbits im Vergleich zum feldfreien Fall für  $R_c > R$ . Die  $\beta^-$ -Orbits werden mit größerem Feld stärker gewichtet, die  $\beta^+$ -Orbits verlieren Einfluss. Ihre Amplitude verschwindet für  $R_c = R$ . Die Abhängigkeit der Amplituden vom Magnetfeld ist insgesamt gering.

Zusammenhang der geometrischen Größen  $R$  und  $R_c$  mit Energie und Magnetfeld durch

$$\frac{R_c}{R} = \frac{kR}{\tilde{B}} \quad (5.25)$$

gegeben.

Mit größeren Feldstärken gewinnen die  $\beta^-$ -Orbits und verlieren die  $\beta^+$ -Orbits an Gewicht. Das Durchmesserorbit zeigt die schwächste Abhängigkeit der Amplitude vom Feld, aber auch die anderen Bahnen hängen nur wenig von der Magnetfeldstärke ab. Die Amplituden der  $\beta^+$ -Orbits verschwinden für  $R_c = R$ . Das ist sehr angenehm, da somit der sonst zu erwartende Sprung in der Niveaudichte durch die abrupte Änderung der Topologie der

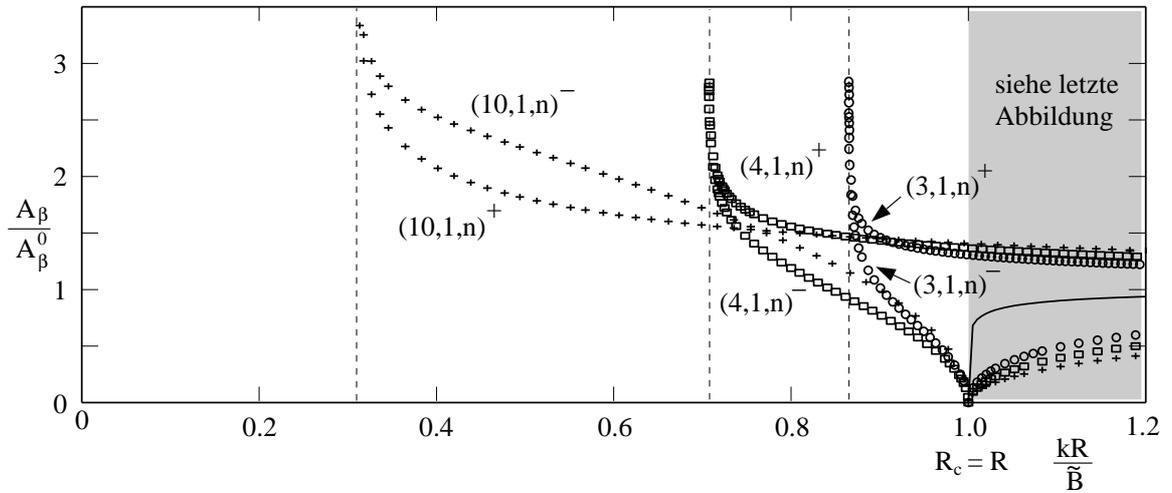


Abbildung 5.6: Die relativen Amplituden der Orbits im Vergleich zum feldfreien Fall für  $R_c < 1.2R$ . Die Amplituden der  $\beta^-$ -Orbits sind an  $R = R_c$  erwartungsgemäß stetig. An den kritischen Punkten  $R_c = R \sin \Theta$  (senkrechte Striche) divergieren sie gegen  $\infty$ .

$\beta^+$ -Orbits an  $R_c = R$  unterdrückt wird.

In Abbildung 5.6 ist  $\left| \frac{A}{A^0} \right|$  für  $R_c < R$  gezeigt. Die  $\beta^-$ -Orbits gehen ohne Topologieänderung vom Bereich  $R_c > R$  in den Bereich  $R_c < R$  über. Daher ist zu erwarten, daß ihre Amplituden an  $R = R_c$  stetig sind. Das ist in der Abbildung auch erkennbar. Die Amplituden der  $\beta^+$  und der  $\beta^-$ -Orbits divergieren an  $R_c = R \sin \Theta$ . Das sind genau die kritischen Punkte, an denen diese Orbits paarweise verschwinden: Falls die Seitenlänge des Polygons ( $a, b$ ) kleiner ist als der doppelte Zyklotronradius, gibt es keine „bouncing orbits“ mit diesen ( $a, b$ ) mehr. Durch diese Divergenz der Amplituden sind auch Divergenzen in der semiklassischen Niveaudichte zu erwarten. Dieses Problem, das mit der Symmetrieänderung aufgrund des magnetischen Feldes zusammenhängt, wird in Kapitel 5.2.4 behandelt.

Zur expliziten Berechnung der PO-Summe fehlen noch die Ausdrücke für die Wirkungen längs eines Orbits. Die Wirkung entlang des gesamten Orbits setzt sich aus dem Integral über den kinematischen Impuls längs der Bahn und dem vom Orbit eingeschlossenen Fluß zusammen. Dabei muß man die mehrfach umlaufenden Bereiche, die in Abbildung 5.7

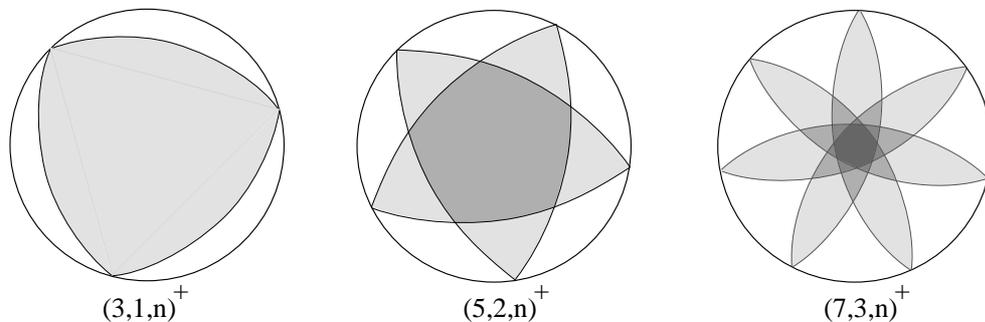


Abbildung 5.7: Bei der Berechnung des magnetischen Flusses durch das periodische Orbit muß man die mehrfach umlaufenden Gebiete (mit dunklerem Grau hinterlegt) entsprechend öfter berücksichtigen.

dunkler hinterlegt sind, entsprechend berücksichtigen. Insgesamt ergibt sich schließlich unter Berücksichtigung des Umlaufsinn

$$F_{PPO} = \begin{cases} R_c^2 (\gamma - \frac{\sin 2\gamma}{2}) + R^2 \frac{\sin 2\Theta}{2} & \text{für } (\beta_+, R_c \geq R) \\ R_c^2 (\pi - \gamma + \frac{\sin 2\gamma}{2}) - R^2 \frac{\sin 2\Theta}{2} & \text{für } (\beta_+, R_c \leq R) \\ R_c^2 (\gamma - \frac{\sin 2\gamma}{2}) - R^2 \frac{\sin 2\Theta}{2} & \text{für } (\beta_-) \end{cases} . \quad (5.26)$$

Mit Gleichung 5.22 ist die Wirkung längs eines periodischen Orbits  $\beta$  damit

$$S_\beta(E) = \int (\vec{p} - e\vec{A}) d\vec{q} = n \cdot (pL_{PPO} - eBF_{PPO}) = napR_c\eta \quad (5.27)$$

$$\text{mit } \eta := \begin{cases} \gamma + \frac{\sin 2\gamma}{2} - \left(\frac{R}{R_c}\right)^2 \frac{\sin 2\Theta}{2} & \text{für } (\beta_+, R_c \geq R) \\ \pi - \gamma - \frac{\sin 2\gamma}{2} + \left(\frac{R}{R_c}\right)^2 \frac{\sin 2\Theta}{2} & \text{für } (\beta_+, R_c \leq R) \\ \gamma + \frac{\sin 2\gamma}{2} + \left(\frac{R}{R_c}\right)^2 \frac{\sin 2\Theta}{2} & \text{für } (\beta_-) \end{cases} .$$

Damit ist die PO-Summe für die  $\beta$ -Orbits vollständig berechnet.

Für  $R_c > R$  gibt es keine Zyklotronorbits, und die Gleichung 5.23 definiert schon den gesamten oszillierenden Teil der semiklassischen Niveaudichte. Für  $R_c < R$  müssen noch die Zyklotronorbits berücksichtigt werden.

### 5.2.3 Die Zyklotronorbits

Im Gegensatz zur Rotationssymmetrie der  $\beta$ -Orbits, die im letzten Abschnitt behandelt wurden, treten die Zyklotronbahnen in translatorisch entarteten Familien auf. Der Hamiltonoperator des Systems nach Gleichung 5.1 ist aber von den Operatoren dieser Verschiebungen  $-x$  bzw.  $y$  abhängig. In diesem Fall ist die geometrische Symmetrie daher nicht gleichzeitig die innere Symmetrie des Hamiltonians. Die Strategie zur Behandlung der Symmetrieentartung bleibt aber dieselbe wie im geometrisch anschaulichen Fall der  $\beta$ -Orbits: Das System wird um die Koordinaten, nach denen der Hamiltonian entartet ist, reduziert. Das Teilsystem ohne weitere kontinuierliche Symmetrien kann mit der ursprünglichen POT von Gutzwiller behandelt werden. Über die Entartung nach den übrigen Koordinaten muß exakt integriert werden. Hier sind diese Koordinaten nicht direkt erkennbar, so daß sie erst durch Diagonalisieren des Hamiltonoperators berechnet werden müssen. Mit

$$\begin{aligned} \pi_x &:= \frac{1}{\sqrt{|eB|}} \left( p_x + \frac{eB}{2} y \right) \\ \pi_p &:= \frac{1}{\sqrt{|eB|}} \left( p_y - \frac{eB}{2} x \right) \\ \omega_c &:= \frac{eB}{m} \end{aligned} \quad (5.28)$$

ist

$$H = \frac{1}{2} \omega_c (\pi_x^2 + \pi_p^2) . \quad (5.29)$$

Außerdem gilt  $[\pi_x, \pi_p] = i\hbar$ .  $\pi_x$  und  $\pi_p$  sind also kanonisch konjugierte Koordinaten. Der Hamiltonoperator hat damit genau die Form eines eindimensionalen harmonischen Oszillators der Frequenz  $\omega_c$ . Er ist von der zweiten Koordinate (des ursprünglich zweidimensionalen Systems) unabhängig, also nach ihr entartet. Um über diese Entartung zu integrieren, muß diese Koordinate explizit bekannt sein. Mit

$$\begin{aligned} \Pi_x &:= \pi_p + \sqrt{|eB|} x \\ \Pi_p &:= \pi_x - \sqrt{|eB|} y \end{aligned} \quad (5.30)$$

gilt

$$[\Pi_x, \Pi_p] = i\hbar \quad \text{und} \quad [\Pi_x, \pi_x] = [\Pi_x, \pi_p] = [\Pi_p, \pi_x] = [\Pi_p, \pi_p] = 0 \quad . \quad (5.31)$$

Damit ist  $\Pi_x$  die zu  $\pi_x$  orthogonale Koordinate und  $\Pi_p$  der dazu konjugierte Impuls. Die Entartung des Hamiltonians nach Gleichung 5.29 ist aus dem Volumen des in  $(\Pi_x, \Pi_p)$  zugänglichen Phasenraums zu berechnen. Es gilt allgemein

$$N = \frac{\int dpdq}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \quad , \quad (5.32)$$

wobei  $n$  die Dimension des Phasenraums ist. Die Transformation der Randbedingungen auf die Koordinaten  $(\Pi_x, \Pi_p)$  erübrigt sich in diesem einfachen Fall, da  $\Pi_x$  und  $\Pi_p$  direkt geometrisch interpretierbar sind.

$$(X, Y) := \left( \frac{1}{\sqrt{|eB|}} \Pi_x, -\frac{1}{\sqrt{|eB|}} \Pi_p \right) \quad (5.33)$$

sind genau die (karthesischen) Koordinaten des Mittelpunkts der Zyklotronbahn;

$$(\tilde{x}, \tilde{p}) := \left( -\frac{1}{\sqrt{|eB|}} \pi_p, \frac{1}{\sqrt{|eB|}} \pi_x \right) \quad (5.34)$$

sind die Relativkoordinaten der Kreisbewegung. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Das zugängliche Volumen in  $(X, Y)$  ist damit als  $(R - R_c)^2 \pi$  direkt aus der

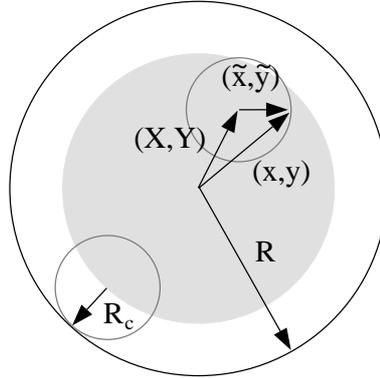


Abbildung 5.8: Die orthogonalen Koordinaten, in denen der Hamiltonian der Bewegung im homogenen magnetischen Feld diagonal ist, lassen sich geometrisch einfach interpretieren. Daraus ist das Volumen des zugänglichen Phasenraums direkt ablesbar (graue Fläche).

Skizze ablesbar, das Phasenraumvolumen in  $(\Pi_x, \Pi_p)$  ist daher  $eB(R - R_c)^2 \pi$ , und für die Entartung ergibt sich

$$N = \frac{eB}{2\hbar} (R - R_c)^2 = \frac{k}{2R_c} (R - R_c)^2 \quad . \quad (5.35)$$

Jetzt muß noch der Hamiltonian nach Gleichung 5.29 semiklassisch behandelt werden. Die Spurformel für den eindimensionalen harmonischen Oszillator ist aber einfach zu berechnen. Die Wirkung ist  $S = \hbar k R_c \pi$ , die Umlaufdauer  $2\pi m R_c / p$ , und der Maslov-Index aufgrund der beiden weichen Reflexionen am Potential ist 2. Damit ergibt sich aus Gleichung 2.11 oder Gleichung 2.12

$$\text{POT} \delta g_E^{HO} = -\frac{1}{\pi} \Im \left[ \frac{1}{i\hbar} \sum_n \frac{2\pi m R_c}{p} e^{i(nR_c k \pi - n\pi)} \right] \quad , \quad (5.36)$$

wobei  $n$  die Wiederholungszahl des Orbits ist. Die gesamte Spurformel für die Zyklotronbahnen in der Kreisscheibe ist somit

$$\text{POT} \delta g_E^{Zyc} = \frac{m}{\hbar^2} (R - R_c)^2 \sum_n \cos(n R_c k \pi - n \pi) \quad . \quad (5.37)$$

Die semiklassische Spurformel für den harmonischen Oszillator ist bekanntermaßen exakt, und die Berechnung der Entartung entspricht dem quantenmechanischen Formalismus.  $\text{POT} \delta g_E^{Zyc}$  ist daher der exakte Ausdruck für den oszillierenden Anteil der Niveaudichte von Landauniveaus.

Die Spurformel der „bouncing orbits“ nach Gleichung 5.23 enthält im Vergleich zur PO-Summe über die Zyklotronorbits nach Gleichung 5.37 einen zusätzlichen Faktor  $\sqrt{\hbar}$ . Das entspricht der höheren Symmetrie der Zyklotronbahnen, die ja zweidimensionale Translationsymmetrie besitzen, während die  $\beta$ -Orbits nur eindimensional nach der Rotation um den Kreismittelpunkt entartet sind. Dadurch ist schon an den Vorfaktoren der Spurformeln ablesbar, daß für große Feldstärken die Zyklotronbahnen, also die Landauniveaus, die Zustandsdichte dominieren werden. Für  $R_c \rightarrow R$  verschwindet der Entartungsfaktor aber quadratisch, so daß ihr Beitrag zur Niveaudichte für kleine Felder stetig gegen Null geht. Das stimmt mit den quantenmechanischen Ergebnissen überein.

Die Berechnung der Spurformel ist im Fall des harmonischen Oszillators auch analytisch möglich. Im Hinblick auf die Kombination mit der Spurformel der  $\beta$ -Bahnen soll sie aber wie diese numerisch mit den Methoden von Kapitel 3 ausgewertet werden. Dort sind für den harmonischen Oszillator bereits zwei Möglichkeiten zur numerischen Berechnung vorgestellt worden, hier wird eine weitere eingesetzt. Eine Umformung der Spurformel für den harmonischen Oszillator ergibt

$$\begin{aligned} \sum_n \cos(n R_c k \pi - n \pi) &= \sum_n \cos(2n R_c k \pi) + \cos((2n + 1) R_c k \pi - \pi) \\ &= (1 - \cos(R_c k \pi)) \sum_n \cos(2n R_c k \pi) + \\ &\quad + \sin(R_c k \pi) \sum_n \sin(2n R_c k \pi) \quad . \end{aligned} \quad (5.38)$$

Mit  $e(E) := k$  und  $g(E, n) := 2n R_c \pi$  separiert jeder der Terme auf der rechten Seite nach Gleichung 3.25. Diese Auswertung nach Gleichung 3.27 entspricht dann exakt<sup>3</sup> der Faltung der Niveaudichte mit einer Glättungsfunktion in  $e(E) = k$ . Da die Fouriertransformation linear ist, gilt dasselbe auch für die gesamte Spurformel des harmonischen Oszillators. Somit ist die Berechnung der Spurformel des harmonischen Oszillators mit einer Fensterfunktion  $F(g)$  äquivalent zu einer Faltung der Niveaudichte in  $k$ . Das ist genau die gewünschte Glättungsvariable, da die Spurformel der  $\beta$ -Orbits (analog zum Fall  $B = 0$ ) auch nach  $k$  geglättet werden soll. Die in diesem Fall geeignete numerische Approximation lautet also

$$\text{POT} \delta g_E^{Zyc, F} := \frac{m}{\hbar^2} (R - R_c)^2 \sum_n F(2n R_c \pi) \cdot \cos(n R_c k \pi - n \pi) \quad . \quad (5.39)$$

Die so mit dem Dreiecksfenster mit  $L_{max} = 20$  berechnete Niveaudichte ist in Abbildung 5.9 gezeigt. Die grauen Flächen geben zum Vergleich die Lage und Entartung der quantenmechanischen Eigenwerte an. Die Übereinstimmung ist, wie analytisch erwartet, exakt. Die Peaks haben genau die Form der Fouriertransformierten des Dreiecksfensters

<sup>3</sup>Die Amplituden sind konstant, daher gilt der Zusammenhang exakt.

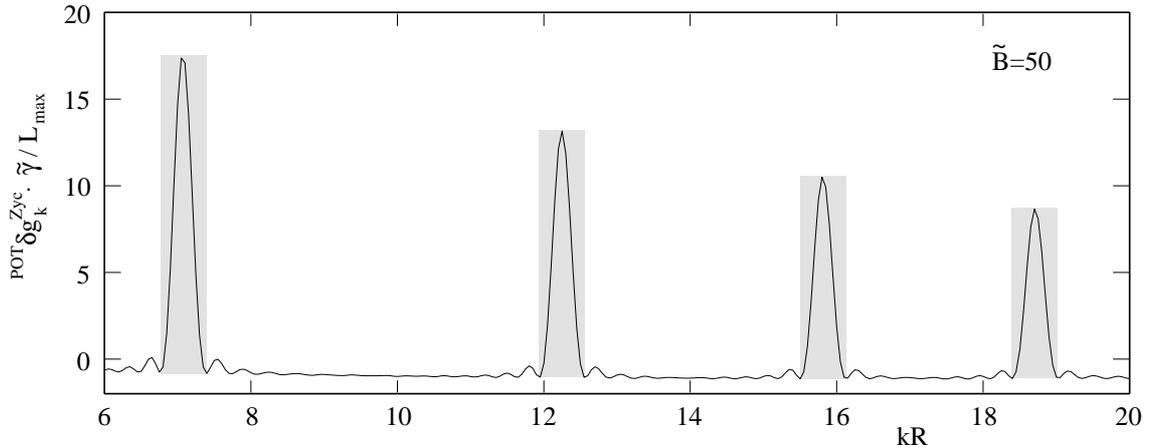


Abbildung 5.9: Die Summe über die Zyklotronorbits (schwarz) ergibt exakt die quantenmechanische Niveaudichte der Landauniveaus auf der Fläche der Kreisscheibe (graue Rechtecke).

(vergleiche Abbildung 3.1 auf Seite 21). Ihre Breite ist unabhängig von  $k$ . Das bestätigt nochmals die Methode der numerischen Auswertung von Spurformeln.

In der Herleitung wurden keine Randeﬀekte berücksichtigt, die Lösung gilt daher nur für unendlich ausgedehnte Systeme. Aus der Quantenmechanik ist bekannt (vergleiche Kapitel 5.1), daß für große Feldstärken, also für  $R_c \ll R$ , der Einfluß des Randes auf die Landauniveaus klein wird. Deshalb wird in diesem Bereich die Niveaudichte gut durch die Summe über die Landauniveaus angenähert. Die quantenmechanischen Zustände zwischen den Landauniveaus, die nur aufgrund der räumlichen Begrenzung des Systems existieren, sind in der Summe über die Zyklotronorbits nicht enthalten. Sie sollten von der PO-Summe über die vom Rand abhängigen „bouncing orbits“  $\beta$  erfaßt werden.

Mit den Gleichungen (5.23) und (5.37) ist jetzt die vollständige semiklassische Niveaudichte für beliebige Feldstärken bekannt. Diese wird im nächsten Abschnitt numerisch ausgewertet (Kapitel 5.2.4) und in Kapitel 5.4 mit den quantenmechanischen Ergebnissen aus Kapitel 5.1 und der POT-Schwachfeldnäherung aus Abschnitt 5.3 verglichen.

#### 5.2.4 Auswertung der PO-Summe

Für  $R_c > R$  hat sich an der Topologie der Bahnen im Vergleich zum feldfreien Fall, der in Abschnitt 4 behandelt wurde, nichts geändert. Die Brechung der Zeitumkehrinvarianz spaltet die PO-Summe in zwei Teilsummen über  $\beta^+$  und  $\beta^-$ . Die Struktur dieser Summen ist aber zu der für  $B = 0$  identisch, und die in Kapitel 4.4 verwendete Strategie zur numerischen Auswertung kann unverändert übernommen werden. Das System ist zwar kein Billardsystem mit separablen Wirkungen mehr, aber mit dem in Kapitel 3 vorgestellten Verfahren immer noch zu behandeln. Mit  $e(e) := k$  und  $g(E, G) := naR_c\eta$  (für die Definition von  $\eta$  siehe Gleichung 5.27) ist nach Gleichung 3.27 die Berechnung der PO-Summe mit einer Fensterfunktion  $F(g)$  vergleichbar<sup>4</sup> mit der Faltung der Zustandsdichte in  $k$ .

<sup>4</sup>Durch die geringe Energieabhängigkeit der Amplituden (vergleiche Abbildungen 5.5 und 5.6) ist die Bedingung  $\gamma \ll \chi$  erfüllt. Die Energieabhängigkeit von  $\sigma$  wird aber vernachlässigt. Im Bereich  $R_c > R$  ist diese Abhängigkeit minimal. Für  $R_c < R$  wird sich die Peakform, nicht aber die Peakfläche dadurch leicht verändern. Das ist jedoch unerheblich, da die PO-Summe in diesem Bereich nachträglich noch gefaltet werden muß (s.u.).

Das zusätzlich zur Verwendung einer Fensterfunktion nötige Abbrechen der Summation nach einer maximalen Eckenzahl pro Umlauf führt wieder zu kleinen Störpeaks, diesmal getrennt für die Teilsummen über  $\beta^+$  und  $\beta^-$ . Die Summation wird jeweils so weit durchgeführt, daß die Störpeaks in der Niveaudichte nicht mehr zu erkennen sind. Insgesamt sind die Effekte aber völlig analog zu den in Kapitel 4.4 behandelten und werden hier nicht nochmals diskutiert. Beim Vergleich mit den quantenmechanischen Ergebnissen werden diese wieder mit der Fouriertransformation der verwendeten Fensterfunktion gefaltet.

Für  $R_c < R$  ändert sich die Struktur der PO-Summe. Die zusätzliche Summe über die Zyklotronorbits wurde schon im letzten Abschnitt ausgewertet und bereitet keine Schwierigkeiten. Problematisch sind in der PO-Summe über die  $\beta$ -Orbits die Orbitbifurkationen, durch die an allen Punkten mit  $R_c = R$  jeweils zwei Orbits schlagartig verschwinden. Wie in Kapitel 5.2.2 gezeigt wurde, divergieren die Amplituden der Bahnen an diesen kritischen Punkten. Die sprunghafte Änderung der Amplitude verletzt sicher die Bedingung  $\gamma \ll \eta$  von Gleichung 3.27, so daß die Verwendung einer Fensterfunktion bei der numerischen Auswertung der PO-Summe nicht mehr der Faltung der Niveaudichte mit  $f(k)$  entspricht. Daher ist nicht zu erwarten, daß die Verwendung einer Fensterfunktion diese Divergenzen an den kritischen Punkten behebt. Abbildung 5.10 zeigt die PO-Summe für  $\tilde{B} = 2.4$ , ausgewertet mit einem Dreieckfenster der Breite  $L_{max} = 50$ . Die senk-

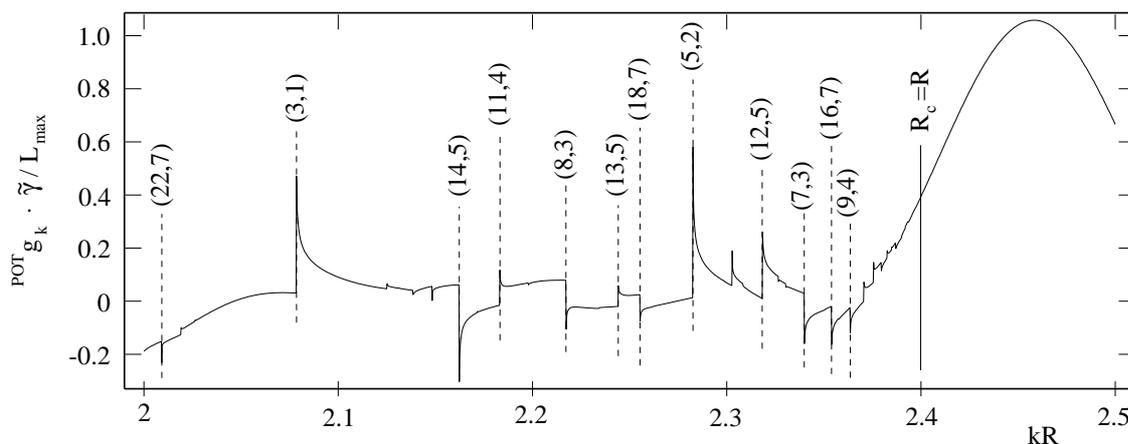


Abbildung 5.10: Die PO-Summe nach Gleichung 5.23 für  $\tilde{B} = 2.4$  bei Auswertung der Summe mit dem Dreiecksfenster mit  $L_{max} = 50$ ,  $m_0 = 6$ . An den kritischen Punkten der Orbitbifurkationen ist die PO-Summe unstetig und divergiert einseitig. Einige kritische Punkte der Orbits mit  $(a,b)$  wurden zum Vergleich eingezeichnet.

rechten Striche geben die Lagen einiger kritischer Punkte an. An diesen Stellen treten tatsächlich Divergenzen der PO-Summe auf. Zur exakten Behandlung müßten die Bifurkationspunkte der Orbits genauer behandelt werden. Die Bifurkationen beim Kreisbillard entsprechen dem typischen Fall einer Orbitbifurkation, bei dem (in Abhängigkeit eines Parameters) zwei Orbits gleichzeitig verschwinden (vergleiche Abbildung 5.11). Dort versagt die Sattelpunktsnäherung in der Herleitung der PO-Summe, wodurch im allgemeinen die Amplituden divergieren. Das wird auch beobachtet. Nach der in Kapitel 2.2.2 vorgestellten Interpretation von Spurformeln sind es aber nicht genau die klassischen periodischen Bahnen, die in der PO-Summe relevant sind, sondern ihre Umgebungen. Es gibt aber auch noch fast-klassische, fast-periodische Bahnen, wenn die klassische periodische Bahn am Bifurkationspunkt schlagartig verschwindet. Diese Bahnen tragen weiterhin zur Niveaudichte

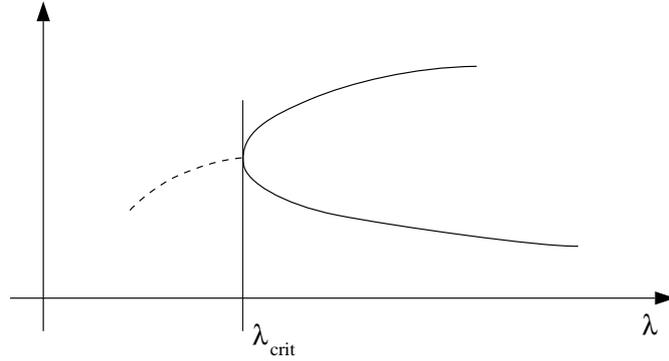


Abbildung 5.11: *Beim typischen Fall einer Orbitbifurkation verschwinden zwei Orbits in Abhängigkeit eines Parameters ( $\lambda$ ) gleichzeitig. Eine exakte Behandlung verlangt die Berücksichtigung sogenannter „imaginärer Orbits“ (getrichelte Linie).*

bei, daher ist physikalisch ein stetiger Übergang der Zustandsdichte über die Bifurkationspunkte zu erwarten. Solche Bifurkationen verlangen anstelle der Sattelpunktsnäherung eine exakte Behandlung. Solche Analysen wurden zum Beispiel von [30] durchgeführt. Ergebnis ist erwartungsgemäß ein weicher Übergang über diese kritischen Punkte. Ein solcher physikalischer, weicher Übergang kann auch einfacher durch eine nachträgliche Faltung der PO-Summe mit einer Glättungsfunktion erreicht werden. In folgenden wird diese grobe Näherung zur Behandlung der Bifurkationspunkte benutzt. Auf diese Weise werden zumindest die unphysikalischen Divergenzen der Zustandsdichte beseitigt.

Bei der numerischen Auswertung für  $R_c < R$  wird daher die PO-Summe zunächst auf einem engen Raster mit einer Fensterfunktion berechnet, die einer Glättung über einen schmalen Bereich entspricht. Diese Funktion wird dann mit einer (breiteren) Glättungsfunktion gefaltet. Beim Vergleich mit den quantenmechanischen Ergebnissen werden die Eigenwerte dann ebenfalls zweimal gefaltet, um die Vergleichbarkeit zu erhalten. Die gesamte semiklassische Niveaudichte wurde somit mit folgenden Formeln berechnet:

$$\begin{aligned}
 R_c > R : \\
 \text{POT } g_E &= \frac{1}{4E_0} \left(1 - \frac{1}{kR}\right) + \\
 &\quad + \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{Rk\pi}} \sum_{\beta, \pm} F(naR_c\eta) f_\beta A_\beta \cdot \sin\left(\frac{S_\beta}{\hbar} - an\frac{3}{2}\pi + \delta\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\pi\right) \\
 R_c < R : \\
 \text{POT } g_E &= \frac{1}{4E_0} \left(1 - \frac{1}{kR}\right) + f_2(k) * \\
 &\quad * \left[ \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{Rk\pi}} \sum_{\beta, \pm} F(naR_c\eta) f_\beta A_\beta \cdot \sin\left(\frac{S_\beta}{\hbar} - an\frac{3}{2}\pi + \delta\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\pi\right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{m}{\hbar^2} (R - R_c)^2 \sum_n F(2nR_c\pi) \cos(nR_ck\pi - n\pi) \right] . \quad (5.40)
 \end{aligned}$$

Die Größen  $A_\beta$ ,  $f_\beta$ ,  $\delta$  und  $\eta$  sind in Abschnitt 5.2.2 definiert.

Die auf diese Weise berechnete PO-Summe wird in Kapitel 5.4 mit den quantenmechanischen Ergebnissen verglichen. Zunächst wird jedoch eine einfache Näherung der PO-Summe für schwache Felder vorgestellt.

### 5.3 POT für schwache Felder

Die PO-Summe nach Gleichung 5.40 ist bei der Auswertung deutlich aufwendiger als die entsprechende Gleichung 4.6 im feldfreien Fall. Für schwache Felder ist  $R_c > R$ , was die Auswertung vereinfacht. Zusätzlich kann man versuchen, eine lineare Näherung in  $\tilde{B}$  durchzuführen. Die Amplituden  $A_\beta$  hängen nur quadratisch vom Feld ab. In einer linearen Näherung kann man sie daher durch die Amplituden für  $\tilde{B} = 0$  ersetzen. Die Entwicklung der Wirkung nach Gleichung 5.27 nach Potenzen von  $\tilde{B}$  ergibt

$$S_\beta^\pm = an \underbrace{\left( 2kR \sin \Theta \mp \frac{1}{2} \sin(2\Theta) \cdot \tilde{B} + \frac{1}{3} \frac{1}{kR} \sin^3 \Theta \cdot \tilde{B}^2 + \mathcal{O}(\tilde{B}^3) \right)}_{\text{Schwachfeld-Näherung}} \quad . \quad (5.41)$$

Dabei gilt das „+“-Zeichen für die  $\beta^-$ -Orbits und umgekehrt. Außer diesem Vorzeichen hängen keine Größen vom Umlaufsinn ab; die Spurformel vereinfacht sich zu

$$\begin{aligned} {}^{\text{POT}}\delta g_E &\approx \frac{1}{E_0} \frac{1}{\sqrt{Rk\pi}} \sum_{\beta=(a,b,n)} \frac{f_\beta}{\sqrt{an}} \sin^{3/2} \Theta \cdot \cos(\sin(2\Theta) \cdot \tilde{B}) \cdot \\ &\cdot \sin \left( kL_\beta \sin \Theta - an \frac{3}{2} \pi + \frac{3}{4} \pi \right) \end{aligned} \quad (5.42)$$

mit  $L_\beta = 2anR \sin \Theta$ . Diese Näherung ist identisch zu der von Reimann [34] angegebenen. Sie wurde unabhängig auch von Tatievski [40] hergeleitet.

Zur Bestimmung des Gültigkeitsbereiches betrachten wir die vernachlässigten Terme in  $\tilde{B}^2$ . PO-Summen reagieren stets sensibler auf kleine Veränderungen der Wirkung als auf Unterschiede in den Amplituden. Das gilt in besonderem Maße beim Kreisbillard bei der Einführung eines Magnetfeldes, da die Amplituden nur sehr schwach von  $\tilde{B}$  abhängen (vergleiche auch Abbildung 5.5). Der größte Fehler der Schwachfeldnäherung ist daher die Vernachlässigung des quadratischen  $\tilde{B}$ -Terms in der Wirkung. Dieser Term ändert sich nach Gleichung 5.41 ( $kR$ ) unabhängig vom Umlaufsinn um

$$\Delta(kR) = \frac{1}{6} \frac{\sin^2 \Theta}{kR} \cdot \tilde{B}^2 \quad . \quad (5.43)$$

Die Durchmesserbahn ist in der PO-Summe dominant, der quadratische Term in  $\tilde{B}$  wird sich daher hauptsächlich durch eine Verschiebung der Niveaudichte um

$$\Delta(kR) \approx \frac{1}{6} \frac{\tilde{B}^2}{kR} \quad (5.44)$$

in Richtung kleinerer Energien auswirken. Der Vergleich der Schwachfeld-Näherung (grau) mit der exakten POT (schwarz) ist in Abbildung 5.12 noch einmal gezeigt. Man erkennt deutlich die Verschiebung der Peaks gegeneinander; die Größe wird durch Gleichung 5.44 richtig abgeschätzt. Die Schwachfeldnäherung stößt damit an ihre Grenzen, wenn man bei ( $kR$ ) kleinere Energiedifferenzen als  $\Delta(kR) = \frac{1}{6} \frac{\tilde{B}^2}{kR}$  untersuchen will. Sie ist zur semiklassischen Quantisierung daher nur bedingt geeignet; für die Bestimmung der groben Schalenstruktur sind die kleinen Verschiebungen der Einteilchenenergien aber weniger relevant.

Die Schalenstruktur des Kreisbillards ist noch bei Glättung der Niveaudichte über  $\gamma \approx 0.4$  zu beobachten. Dabei sind Fehler von etwa  $\Delta(kR) = \gamma/4 = 0.1$  zu tolerieren. Die Schwachfeldnäherung ist beim Kreisbillard daher gültig für

$$\tilde{B} < \sqrt{kR/2} \quad \text{d.h. für} \quad B^2 < \sqrt{2mE} \frac{\hbar}{2R_c^3 e^2} \quad . \quad (5.45)$$

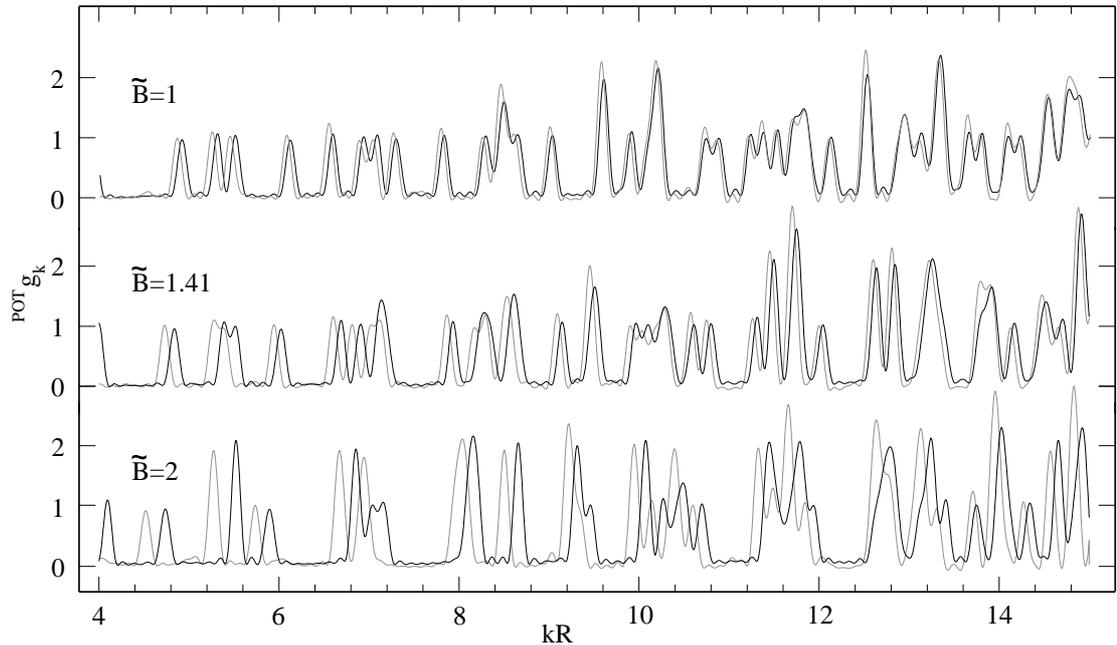


Abbildung 5.12: Der Vergleich der Schwachfeldnäherung (grau) mit der exakten POT (schwarz). Die Verschiebung der Peaks ist wie erwartet etwa  $\frac{1}{6} \frac{\tilde{B}^2}{kR}$  in Richtung kleinerer Energien.

Eine genauere Näherung der PO-Summe nach Gleichung 5.23 besteht darin, den exakten Ausdruck für die Wirkung längs eines Orbits zu verwenden und nur die  $A_\beta$  durch  $A_\beta^0$  zu nähern. Durch die schwache Abhängigkeit der Amplituden vom Feld (vergleiche Abbildung 5.5) ist schon ab  $R_c \approx 2R$  gute Übereinstimmung zu erwarten. Tatsächlich ist die Näherung sogar bis  $R_c = R$  praktisch exakt (ohne Abbildung). Das liegt daran, daß die Niveaudichte der  $\beta^+$ -Orbits bei  $R_c \approx R$  sehr klein ist. Die Vernachlässigung der Amplitudendämpfung hat daher nur einen geringen Einfluß. Die  $\beta^-$ -Orbits, die die Niveaudichte in diesem Bereich dominieren, haben selbst bei  $R_c = R$  nur eine um etwa 30% zu große Amplitude. Die Näherung von  $B$  unabhängiger Amplituden ist eher von theoretischem Interesse. Sie macht deutlich, daß die Amplituden im Gegensatz zu den Wirkungen nur sehr schwachen Einfluß auf die Niveaudichte haben. Das ist für die Behandlung anderer Systeme eine Hilfe, da im allgemeinen die Amplituden am schwierigsten zu bestimmen sind.

## 5.4 Vergleich der POT mit der QM

In den letzten drei Kapiteln wurde das Kreisbillard im homogenen Magnetfeld quantenmechanisch und semiklassisch mit der POT behandelt. Diese Ansätze sollen jetzt miteinander verglichen werden. Dabei wird vor allem interessant sein, ob sich bei großen Feldern die bei den Zyklotronorbits vernachlässigten Randeffekte in der Niveaudichte bemerkbar machen.

### 5.4.1 Der Bereich $R_c > R$

Die Topologie der klassischen periodischen Orbits im Bereich  $R_c > R$  ist identisch zu der im Fall  $B = 0$ , der in Kapitel 4 behandelt wurde. Dort konnte die POT nicht nur die Schalenstruktur, also die über einen weiten Bereich gemittelte Niveaudichte, sondern auch die quantenmechanischen Einteilchenenergien sehr gut approximieren. Das weckt die Hoffnung, daß auch im Fall des homogenen Magnetfeldes eine semiklassische Quantisierung möglich ist. In Abbildung 5.13 ist die PO-Summe mit entsprechend kleiner Glättung über

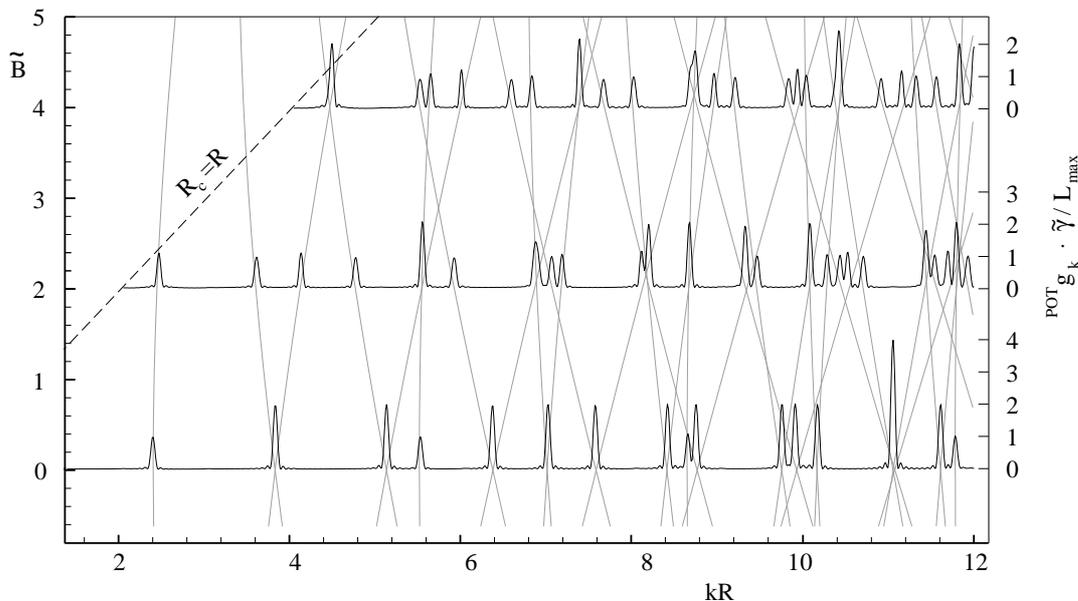


Abbildung 5.13: Der Vergleich der semiklassischen Niveaudichte (schwarz) mit den quantenmechanischen Eigenwerten (grau) in Abhängigkeit vom Magnetfeld. Mit Summation über Orbits bis zu einer Länge von  $100R$  sind die Einteilchenenergieniveaus auflösbar, die Peakhöhen skalieren gut mit den quantenmechanischen Entartungen der Zustände.

$\gamma \approx 0.03$  abgebildet. Die schwarzen Kurven sind die semiklassischen Niveaudichten für  $\tilde{B} = 0, 2$  und  $4$ . Die grauen Linien geben die Lage der quantenmechanischen Eigenwerte in Abhängigkeit vom Magnetfeld an. Auch für  $\tilde{B} \neq 0$  reproduziert die POT die Lage und die Entartung der quantenmechanischen Eigenwerte offenbar sehr gut. Das gilt nicht nur im Bereich des linearen Zeeman-Effekts, also solange die Aufspaltung der bei  $B = 0$  entarteten Niveaus linear in  $B$  ist, sondern auch weit darüber hinaus. In Abbildung 5.14 ist für ein größeres Feld von  $\tilde{B} = 10$  die semiklassische Niveaudichte (schwarz) nochmals genauer mit der entsprechenden quantenmechanischen (grau) verglichen. Die Übereinstimmung hat fast die gleiche Qualität wie im feldfreien Fall (vergleiche dazu Abbildung 4.5 auf Seite 34), lediglich die Entartungen werden nicht so exakt reproduziert. Bemerkenswert ist,

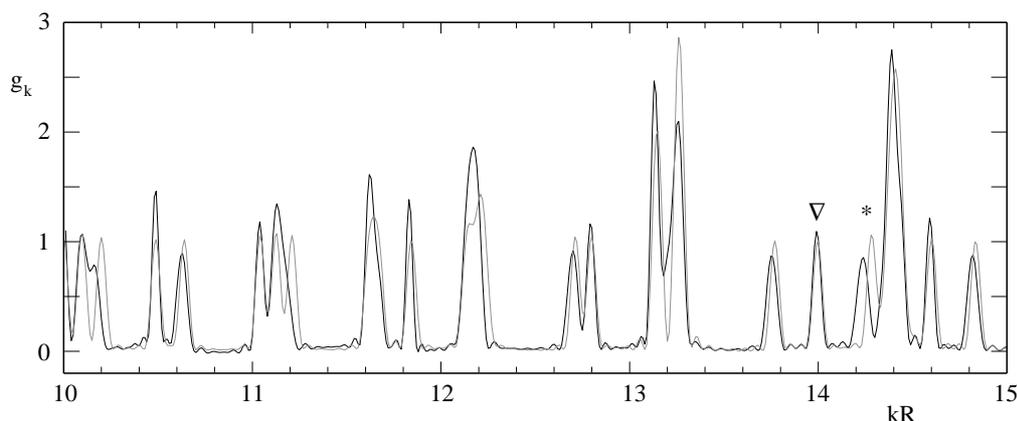


Abbildung 5.14: Der Vergleich der über einen kleinen Bereich von  $\gamma \approx 0.003$  gemittelten semiklassischen Niveaudichte (schwarz) mit dem entsprechenden quantenmechanischen Resultat (grau) für  $\tilde{B} = 10$ . Die Übereinstimmung von Energieniveaus und Entartungen ist fast so gut wie im Fall  $B = 0$ .

daß die gute Übereinstimmung bis an die Grenze des Gültigkeitsbereiches ( $R = R_c$ , also  $kR = \tilde{B}$ ) erhalten bleibt. Bei genauer Betrachtung von Abbildung 5.14 erkennt man, daß einige Zustände nahezu exakt lokalisiert werden ( $\nabla$ ), andere jedoch kleine Abweichungen erkennen lassen (\*). Letzteres sind die Zustände, deren Energie besonders empfindlich von den Randbedingungen abhängt. Solche Zustände werden von Näherungen in erster Ordnung in  $\hbar$  natürlich schlechter reproduziert.

Beim Kreisbillard im homogenen Magnetfeld ist damit im Bereich  $R_c > R$  wie im feldfreien Fall eine semiklassische Quantisierung, also eine Auflösung der Niveaudichte bis zu den Einteilchenenergien möglich. Letztere unterscheiden sich kaum von den quantenmechanischen Werten. Die Übereinstimmung ist nur geringfügig schlechter als für  $B = 0$ .

#### 5.4.2 Der Bereich $R_c < R$

Für  $R_c < R$  kann man schon aufgrund der Herleitung der PO-Summe nicht so optimistisch sein wie für den Bereich  $R_c > R$  und nicht wieder erwarten, daß eine semiklassische Quantisierung möglich ist. Es treten in der PO-Summe zusätzlich die Terme der Zyklotronorbits auf, und die Bifurkationspunkte der „bouncing orbits“ führen zu den in Kapitel 5.2.4 dargestellten Divergenzen. In Abbildung 5.15 ist daher zunächst die über einen weiten Bereich gemittelte Niveaudichte für verschiedene Feldstärken gezeigt (schwarze Kurven). Die grauen Kurven stellen die entsprechend gefalteten quantenmechanischen Zustandsdichten dar. Beide Niveaudichten wurden, um den Einfluß der Orbitbifurkationen auszumitteln, wie in Abschnitt 5.2.4 angegeben, nochmals mit einer Glättungsfunktion mit  $\gamma \approx 0.4$  gefaltet. Die Übereinstimmung ist schlecht und wird nur für größere Felder etwas besser. Nach Kapitel 5.2.3 ist zu erwarten, daß die Landauniveaus, die für große Felder dominant werden, von der POT korrekt beschrieben werden. Das erklärt die bessere Übereinstimmung für großes  $\tilde{B}$ . Die Kurve zu  $\tilde{B} = 10$  zeigt nochmals, daß im Bereich  $R_c > R$ , wie in Kapitel 5.4.1 schon dargestellt, die Niveaudichte von der POT praktisch perfekt beschrieben wird. Aber schon für  $R_c \lesssim R$  treten große Abweichungen auf. Damit scheint die POT im interessanten Bereich völlig zu versagen. Um das genauer zu überprüfen, ist in Abbildung 5.16 die Zustandsdichte mit einer Glättung über  $\gamma \approx 0.055$  dargestellt (schwarze Kurven). Dieses  $\gamma$  ist klein genug, um die meisten Einteilchenniveaus bis  $kR = 14$  zu trennen. Das ist an

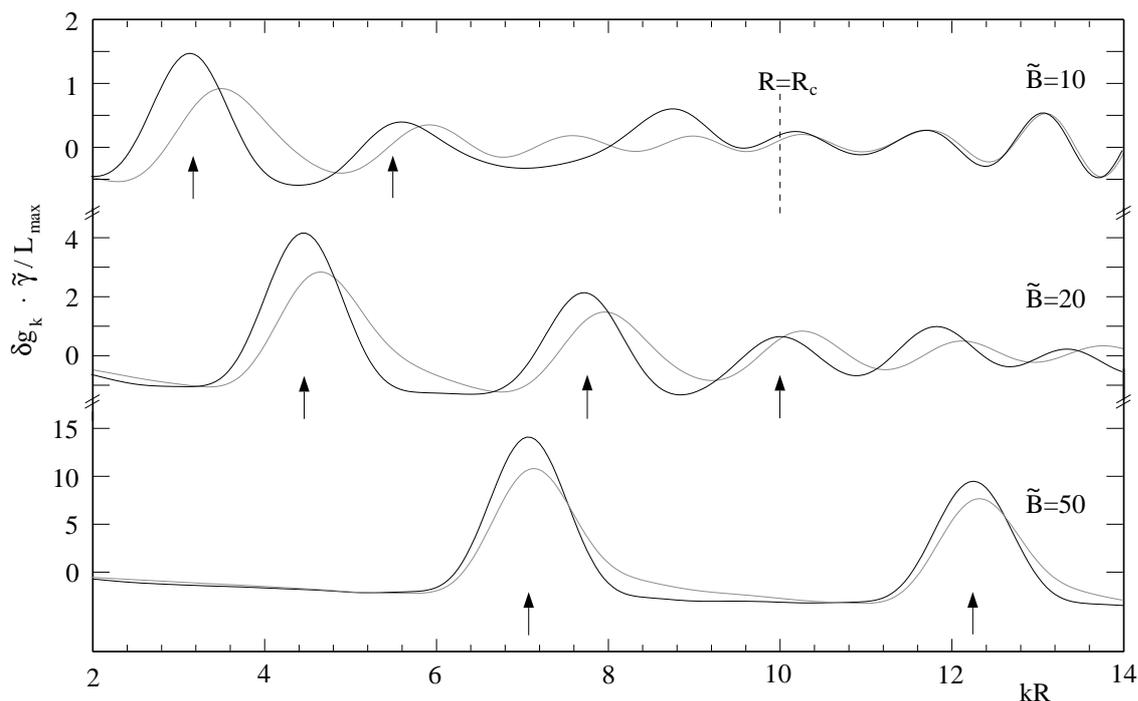


Abbildung 5.15: Die über  $\gamma \approx 0.4$  gemittelte Zustandsdichte (schwarz) im Vergleich zur quantenmechanischen (grau). Die Übereinstimmung ist nur für  $R_c > R$  gut (vergleiche Kapitel 5.4.1). Für sehr große Felder werden die Landauniveaus (Pfeile) näherungsweise richtig beschrieben.

den grauen Kurven, die der quantenmechanischen Niveaudichte entsprechen, gut sichtbar. Bei dieser Auflösung ist zumindest erkennbar, daß für  $R_c \lesssim R$  die POT noch eine Näherung der quantenmechanischen Niveaudichte liefert (sichtbar an der Kurve zu  $\tilde{B} = 10$ ). Die Positionen der Landauniveaus werden, wie erwartet, von der POT reproduziert, die Peakhöhen sind jedoch deutlich zu hoch; sie entsprechen erst für größere Felder in etwa den quantenmechanischen Entartungen. In Kapitel 5.2.3 wurde gezeigt, daß die Summe über die Zyklotronorbits die quantenmechanische Niveaudichte eines unendlich ausgedehnten Systems exakt beschreibt. Die kleineren Entartungen der Landauniveaus im Kreisbillard sind also auf Randeﬀekte der Zyklotronbahnen zurückzuführen. Diese Randeﬀekte sind, wie schon gesagt, von höherer Ordnung in  $\hbar$  und in der POT nicht berücksichtigt. Für große Felder wird ihr relativer Einﬂuß geringer. Das Höhenverhältnis der Peaks in Abbildung 5.16 wird für große  $\tilde{B}$  tatsächlich kleiner.

Diese Randeﬀekte werden wahrscheinlich nicht auf die Zyklotronorbits beschränkt sein, so daß zu vermuten ist, daß sie auch für die Fehler der semiklassischen Niveaudichte außerhalb der Landauniveaus verantwortlich sind. Gerade die Zustände zwischen den Landauniveaus sind, wie aus der Quantenmechanik bekannt ist, besonders empfindlich gegenüber Änderungen der Randbedingungen. Das würde das Versagen der Standard-POT in diesem Bereich erklären.

In nächsten Abschnitt soll diese Vermutung überprüft werden. Dazu werden die Randeﬀekte näherungsweise in die POT implementiert. Falls die These zutrifft, sollte sich die Übereinstimmung zur quantenmechanischen Niveaudichte erheblich verbessern.

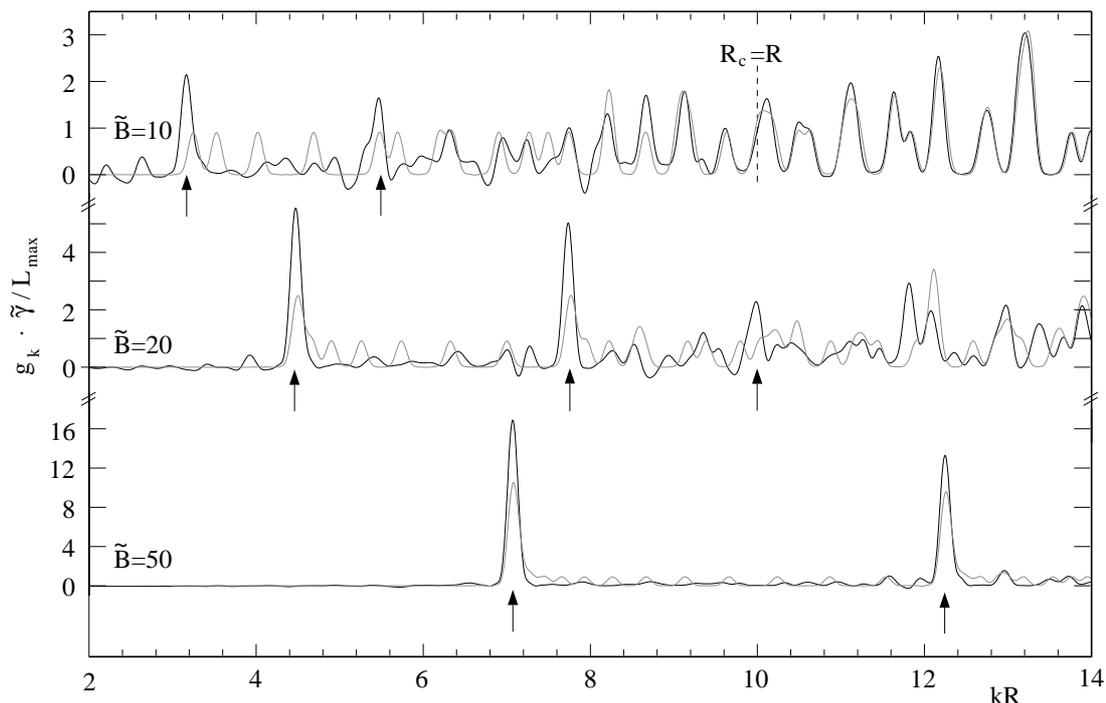


Abbildung 5.16: Dieselbe Situation wie in Abbildung 5.15 mit kleinerer Glättungsweite  $\gamma \approx 0.055$ . Die schwarzen Kurven stellen die POT-Summe dar, die grauen die quantenmechanische Niveaudichte. Im Gegensatz zu Abbildung 5.15 ist erkennbar, daß die POT zumindest im Bereich  $R_c \lesssim R$  eine korrekte Beschreibung liefert. Für große Felder werden auch die Landauniveaus (Pfeile) korrekt wiedergegeben, allerdings mit einer zu hohen Entartung. Im übrigen Bereich ist die Übereinstimmung mit der quantenmechanischen Niveaudichte schlecht.

## 5.5 Randkorrekturen der POT

Die Ergebnisse des letzten Abschnitts weisen darauf hin, daß Randeffekte, die in der POT nicht berücksichtigt werden, die Niveaudichte signifikant beeinflussen. In diesem Kapitel sollen die Randeffekte in die POT implementiert werden. Dafür wird zunächst der Zusammenhang zwischen Randeffekten und dem Maslov-Index im eindimensionalen Fall hergestellt. In einer quasi-eindimensionalen Näherung ist es dann möglich, die Randeffekte in der Spurformel zu berücksichtigen. Die Ergebnisse zeigen, daß mit Berücksichtigung der Randeffekte die POT zumindest für die Schalenstruktur auch im Bereich  $R_c < R$  befriedigende Resultate liefert.

### 5.5.1 Zusammenhang zwischen Randeffekten und dem Maslov-Index

Wie schon mehrfach angesprochen wurde, muß bei semiklassischen Näherungen an klassischen Umkehrpunkten und ihren mehrdimensionalen Entsprechungen, den Kaustiken, ein zusätzlicher Phasenfaktor eingeführt werden, um korrekte Quantisierungsbedingungen zu erhalten. Die Ursache dieses Phasenfaktors im einfachen, eindimensionalen Fall wird im folgenden erläutert.

Zentrale Idee der semiklassischen Näherung ist die lokale Approximation der Wellenfunktion durch eine (ebene) Welle  $\Psi = e^{ikx}$ . Das ist gleichbedeutend mit der Annahme, daß sich das äußere Potential im Bereich einer Wellenlänge kaum ändert. Dies entspricht dem semiklassischen Limit, da mit  $\hbar \rightarrow 0$  auch die de-Broglie-Wellenlänge des Teilchens klein

gegen alle Systemabmessungen wird. In diesem Grenzfall gilt für die (ortsabhängige) Wellenzahl  $k$

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(x))} \quad . \quad (5.46)$$

Mit der Wirkung längs eines Weges  $S$

$$S = \int p dq = \hbar \int k dx = \int \sqrt{2m(E - V(x))} dx \quad (5.47)$$

wird  $\Psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}$ . Diese Näherung bricht jedoch an den klassischen Umkehrpunkten zusammen, da dort die Wellenlänge des Teilchen gegen  $\infty$  geht, was gerade die Näherung zugrundeliegende Annahme verletzt. Daher wird in der Nähe von Umkehrpunkten die Wellenfunktion exakt bestimmt und die semiklassischen Lösungen werden asymptotisch angepaßt. In großer Entfernung resultiert die exakte Behandlung des Umkehrpunktes daher nur in einer zusätzlichen Phasenverschiebung der einlaufenden und der reflektierten semiklassischen Wellen. Für den Fall der Reflexion an einer harten Wand<sup>5</sup> ist das unmittelbar einsichtig: Semiklassisch ist die Phase  $S/\hbar$  für den Weg von einem infinitesimal nahe an der Wand liegenden Punkt zur Wand und zurück offensichtlich 0, während sich quantenmechanisch durch die Randbedingung  $\psi(r) = 0$  an der Wand ein Phasensprung von  $-\pi$  ergibt (vergleiche Abbildung 5.17). Für hinreichend weiche Potentiale ist die

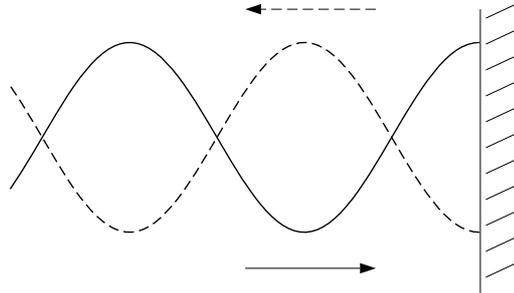


Abbildung 5.17: Die Reflexion einer ebenen Welle an einer harten Wand führt quantenmechanisch aufgrund der Randbedingung  $\psi(r) = 0$  an der Wand zu einem Phasensprung von  $-\pi$ . Semiklassisch ist die Phase durch die Reflexion 0.

Reflexionsphase unabhängig von der speziellen Form des Potentials stets  $-\pi/2$ . Daraus erklärt sich der Maslov-Index  $\mu$ . In der eindimensionalen POT ist  $\mu$  die Summe aus der Zahl der Umkehrpunkte am weichen Potential und der Reflexionen an harten Wänden, wobei letztere doppelt gezählt werden. Durch die Ersetzung der semiklassischen Phase  $S/\hbar$  durch  $S/\hbar - \mu\pi/2$  werden genau die in der Quantenmechanik zusätzlich auftretenden Phasen beim Durchlaufen der klassischen Umkehrpunkte berücksichtigt.

Die Randeekte, die bei der semiklassischen Beschreibung des Kreisbillards in starken Feldern nicht ausreichend berücksichtigt werden, entsprechen vermutlich Reflexionen an einem Potential, das in der Mitte zwischen den vom Maslov-Index beschriebenen Extremen liegt. Diese allgemeine Reflexionsphase läßt sich aus der Differenz zwischen der quantenmechanischen und der semiklassischen Phase bestimmen. Im nächsten Abschnitt wird eine eindimensionale Näherung eingeführt, womit dann die Reflexionsphasen in die POT des Kreisbillards implementiert werden können.

<sup>5</sup>Die harte Wand entspricht natürlich gerade nicht dem semiklassischen Grenzfall, sie eignet sich trotzdem als Beispielsystem.

### 5.5.2 Eindimensionale Näherung der Randeffekte

In Abschnitt 5.2.3 wurde gezeigt, daß die Zyklotronorbits bei Interpretation des (physikalischen) Ortsraums als (abstraktem) Phasenraum genau der Bewegungsgleichung eines eindimensionalen harmonischen Oszillators folgen. Diese Situation ist in Abbildung 5.18(A)

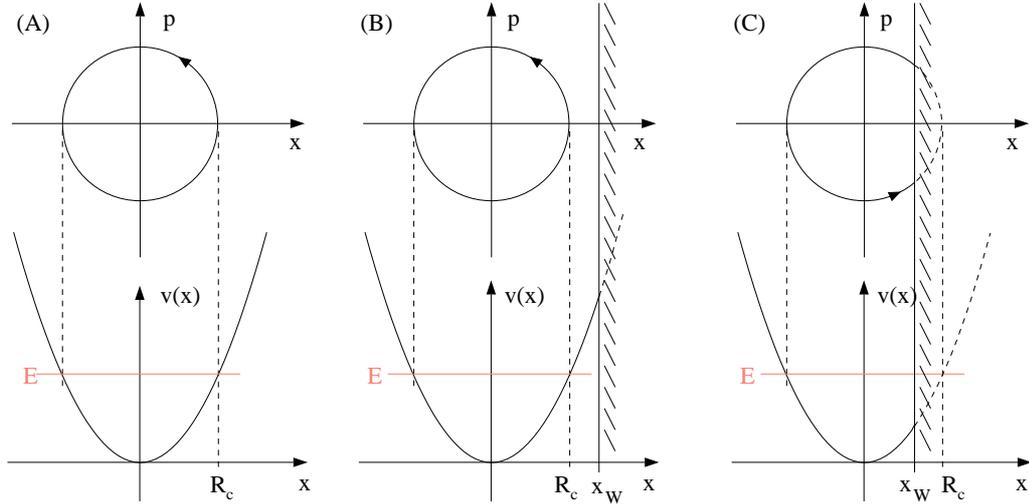


Abbildung 5.18: (A) Die Zyklotronbewegung im Ortsraum entspricht der Phasenraumdynamik eines eindimensionalen harmonischen Oszillators. (B) Für kleine Zyklotronradien im Vergleich zur Krümmung der Billardwand kann die Begrenzung als Gerade genähert werden. Das entspricht dann einer eindimensionalen Bewegung im darunter gezeigten Potential. (C) Auch für die  $\beta^-$ -Orbits mit  $x_W < R_c$  kann eine entsprechende eindimensionale Näherung durchgeführt werden.

dargestellt. Das Magnetfeld bestimmt das Potential  $V$ . Die klassischen Umkehrpunkte in diesem Potential  $E = V(R_c)$  legen den Zyklotronradius  $R_c$  fest. Für kleine Zyklotronradien  $R_c$  im Vergleich zum Kreisradius  $R$  kann der Kreisrand für Bahnen in Wandnähe als Gerade genähert werden (vergleiche Abbildung 5.18(B)). Das entspricht dann einer eindimensionalen Bewegung im darunter gezeichneten Potential. Die klassische Bewegung wird dadurch nicht beeinflusst, da das Teilchen für  $x_W > R_c$  die Wand nicht erreicht. Quantenmechanisch hat das Teilchen aber eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit jenseits des Umkehrpunktes, so daß das Teilchen die Wand spürt. Das wird die quantenmechanische Reflektionsphase gegenüber der Reflektion am reinen Oszillatorpotential ändern. Die zusätzlich in der POT zu berücksichtigende Phase, also der effektive Maslov-Index, wird sich ändern. Dieser Randeffect soll jetzt in dieser quasi-eindimensionalen Näherung berechnet werden.

### 5.5.3 Berechnung der Reflektionsphasen

Die semiklassische Phase für die Reflektion am Potential ist

$$\varphi_{sk} = \int k dx = \frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(E - V(x))} dx \quad . \quad (5.48)$$

Dabei ist  $x_0$  der klassische Umkehrpunkt. Quantenmechanisch kann die Phase durch Lösung der Schrödingergleichung

$$-\hbar^2 \frac{1}{2m} \Psi''(x) = (E - V(x)) \Psi(x) \quad (5.49)$$

berechnet werden. Am einfachsten ist es, das Potential für  $x < 0$  identisch 0 zu setzen. In diesem Bereich wird die Schrödingergleichung durch rechts- und linkslaufende Wellen mit  $\hbar k = \sqrt{2mE}$  gelöst. Da das Potential für  $x \rightarrow \infty$  gegen unendlich geht, muß die gesamte einfallende Welle reflektiert werden, so daß sich im Bereich  $x < 0$  eine stehende Welle herausbilden wird (vergleiche Abbildung 5.19). Aus den Extrema dieser stehenden Welle

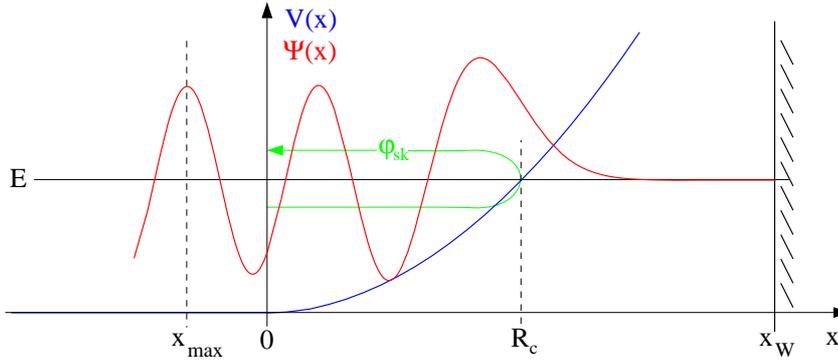


Abbildung 5.19: Eine von links einlaufende Welle wird am (halben) Oszillatorpotential vollständig reflektiert. Aus den Maxima der sich im Bereich  $x < 0$  ausbildenden stehenden Welle kann die quantenmechanische Phase für die Reflektion bestimmt werden.

ist dann die Phasenverschiebung durch die Reflektion am Potential zu bestimmen:

$$\varphi_{QM} = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \cdot x_{max} \quad . \quad (5.50)$$

Die Differentialgleichung (5.49) kann durch Integration von  $x = x_W$  mit den Anfangsbedingungen  $\Psi(x_W) = 0$ ,  $\Psi'(x_W) = 1$  problemlos numerisch gelöst werden. Die ebenfalls numerische Bestimmung der Maxima der stehenden Welle liefert dann  $\varphi_{QM}$ .

Die in der POT zusätzlich zu berücksichtigende Reflektionsphase ist  $\varphi_R = \varphi_{QM} - \varphi_{sk}$ . In Abbildung 5.20 ist  $\varphi_R$  in Abhängigkeit von der Energie, dem Magnetfeld und dem Abstand des Bahnmittelpunktes von der Wand dargestellt. Die Längen sind auf den Zyklotronradius skaliert, so daß  $x/R_c = 1$  dem klassische Umkehrpunkt entspricht. Der andere Parameter ist  $(kR)^2/\tilde{B}$ . Wie zu erwarten war, ist die Reflektion für große Abstände  $x_W$  der Zyklotronbewegung von der Wand „weich“, die Reflektionsphase daher  $-\pi/2$ . Für  $x_W \rightarrow 0$  geht  $\varphi_R$  gegen  $-\pi$ , was einer harten Reflektion entspricht. Der Übergang wird für größere  $(kR)^2/\tilde{B}$  (das entspricht hier dem semiklassischen Limes  $\hbar \rightarrow 0$ ) steiler und geht im Grenzwert gegen eine Stufenfunktion, die dem ursprünglichen Maslov-Index  $\mu = 1$  für  $x_W > R_c$  und  $\mu = 2$  für  $x_W < R_c$  entspricht (dicke Linie).

#### 5.5.4 Die POT-Summe mit effektiven Reflektionsphasen

Der Effekt, daß die Nähe der Umrandung die Reflektionsphase beeinflusst, tritt natürlich nicht nur für die Zyklotronorbits auf. Falls die Zyklotronorbits die Wand berühren, gehen sie in die  $\beta^+$ -Orbits über, deren Reflektionsphase auf dieselbe Weise korrigiert werden muß. In Abbildung 5.18(C) ist diese Situation skizziert. Für die  $\beta^-$ -Orbits ist eine einfache Korrektur der Reflektionsphasen auf diese Weise nicht möglich, da aufgrund ihrer Topologie die Näherung der geraden Wand nicht gerechtfertigt ist. Bei der Berechnung der PO-Summe kann für die  $\beta^+$ -Orbits statt der Maslov-Phase ( $-an\pi$ ) die korrigierte Phase  $an(\varphi_R + \pi/2)$  eingesetzt werden. Bei den Zyklotronorbits ist die Implementierung schwieriger, da die Reflektionsphase vom Abstand der Bahn von der Wand abhängt und damit die

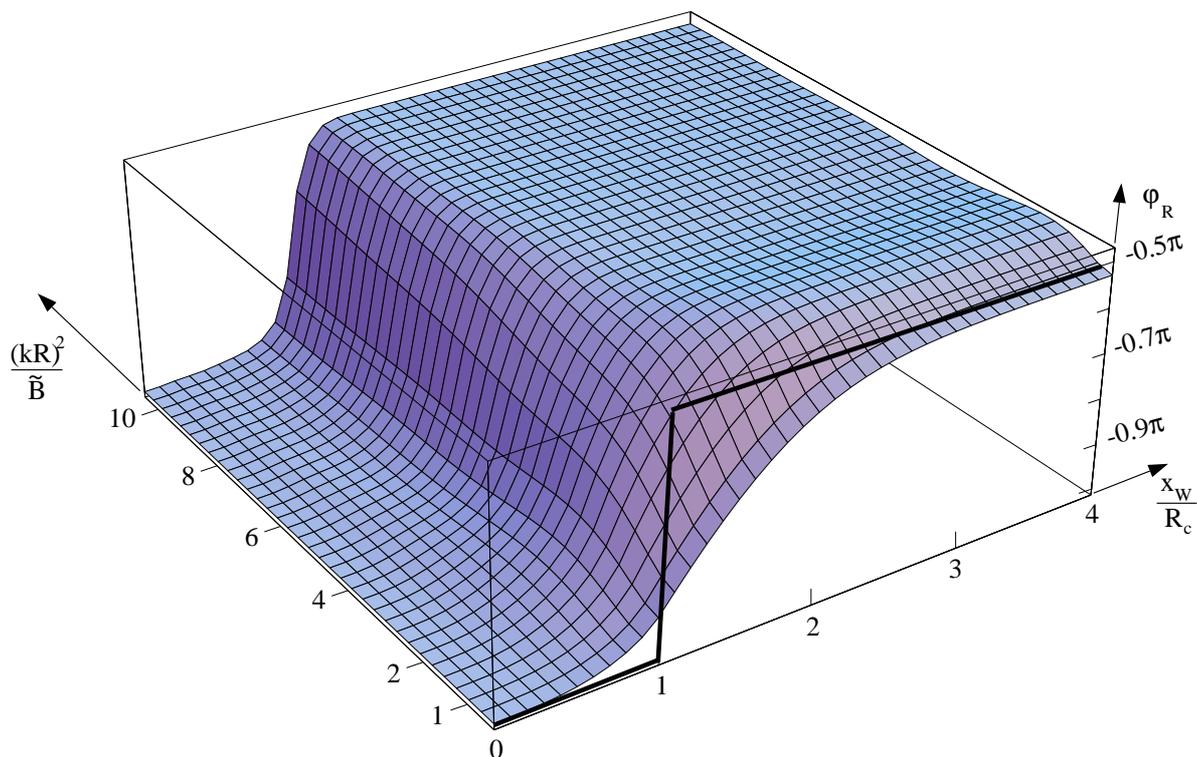


Abbildung 5.20: Die effektive Reflektionsphase bei Reflexion an der Kombination eines parabolischen Potentials und einer harten Wand. Für große Energien und kleine Felder geht die Abhängigkeit der Phase von  $x_W$  gegen die Stufenfunktion (dicke Linie), die dem semiklassischen Maslov-Index entspricht. Bei kleineren  $(kR)^2/\bar{B}$  ist der Übergang weicher.

Entartung der Zyklotronbahnen aufhebt. Jetzt sind nur noch die Orbits mit dem gleichen Abstand zum Kreisrand miteinander entartet. Die Entartung eines schmalen Kreisrings von Zyklotronbahnen (vergleiche Abbildung 5.21) ist in Analogie zu Gleichung 5.35

$$N = BR_c(1 - R_c x_W) dx_W \quad . \quad (5.51)$$

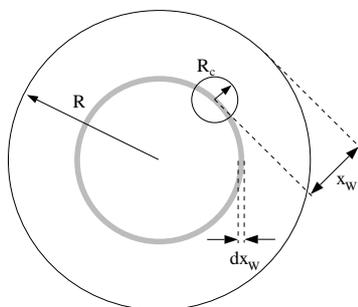


Abbildung 5.21: Durch die Abhängigkeit der effektiven Reflektionsphase  $\varphi_R$  vom Abstand der Zyklotronbahn von der Wand sind nur noch die Bahnen mit dem Mittelpunkt auf einem schmalen Kreisring miteinander entartet. Diese Entartung ist proportional zur Fläche des grau schraffierten Bereiches.

In der Summe über die Wiederholungen eines Zyklotronorbits muß nun zusätzlich über den Wandabstand integriert werden. Die PO-Summe der Zyklotronorbits lautet somit

$$\text{POT} \delta g_E^{\text{Zyc}} = \frac{m}{\hbar^2} \int_0^{R-R_c} dx_W B R_c (1 - R_c x_W) \sum_N \cos(nr k \pi - n \varphi_R(E, \vec{B}, x_W)) \quad (5.52)$$

Zur expliziten Berechnung wurde  $\varphi_R$  einmal auf einem Gitter berechnet. Diese Werte wurden dann in der Berechnung der PO-Summe linear interpoliert. Das Integral über den Wandabstand der Zyklotronorbits wurde numerisch mit der Trapezregel bestimmt.

Die Summe über die Zyklotronorbits mit korrigierten Phasen ist in Abbildung 5.22 schwarz dargestellt. Im Vergleich zu der PO-Summe mit dem ursprünglichen Maslov-Index (grau)

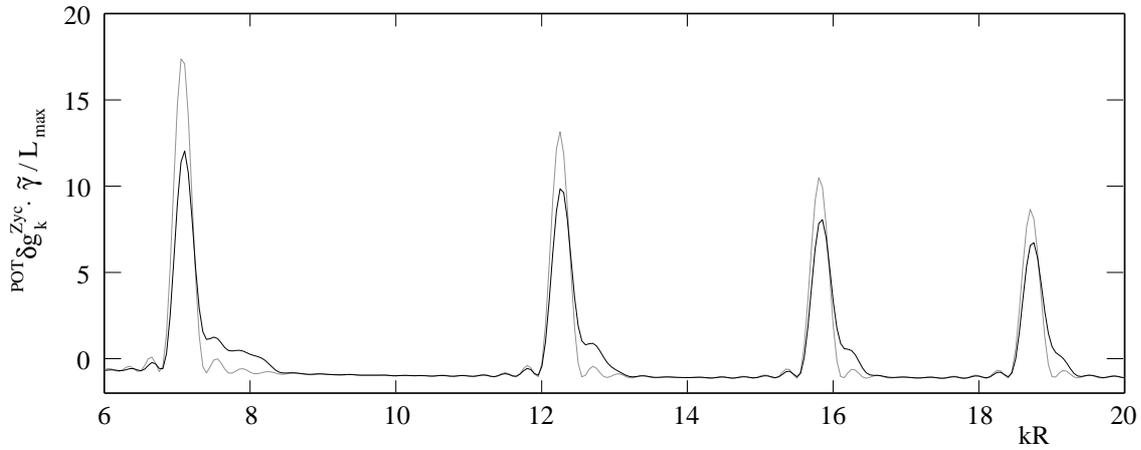


Abbildung 5.22: Die Summe über die Zyklotronbahnen mit Berücksichtigung der effektiven Reflektionsphasen (schwarz). Im Gegensatz zu den Landauniveaus, die ohne Phasenkorrektur berechnet wurden (grau) ist die Entartung deutlich reduziert. Dafür entstehen neue Zustände oberhalb der Landauniveaus.

erkennt man, daß die Entartung der Landauniveaus durch die Berücksichtigung des Randeffektes deutlich kleiner wird. Dafür entstehen neue Zustände mit Energien knapp oberhalb der Landauniveaus. Das ist im Vergleich zur Quantenmechanik durchaus vernünftig, da die Beschränkung des Aufenthaltsbereiches durch die Randbedingungen zu einer Erhöhung der Energie (zumindest einiger Zustände) führen sollte.

In den Abbildungen 5.24 und 5.23 ist die gesamte semiklassische Niveaudichte mit korrigierten Reflektionsphasen dargestellt. Abbildung 5.23 zeigt die Situation von Abbildung 5.16, jedoch diesmal mit der Berücksichtigung der effektiven Reflektionsphasen. Die Unterschiede zur Quantenmechanik sind deutlich kleiner geworden. Insbesondere die Entartung der Landauniveaus (Pfeile) wird jetzt korrekt reproduziert. Die nach oben gewanderten Zustände schließen die Lücke, die ohne Phasenkorrektur oberhalb der Landauniveaus zu beobachten war. Die übrige Verbesserung kommt von den Phasenkorrekturen der „bouncing orbits“; die Zustände zwischen den Landauniveaus kommen immerhin in die Nähe der quantenmechanischen Werte. Das war auch nicht besser zu erwarten. Diese Zustände sind, wie in Kapitel 5.1 schon erwähnt, sehr stark von den Randbedingungen abhängig. Es ist daher nicht zu erwarten, daß mit der einfachen „linearen“ Näherung des Randeffektes diese Zustände korrekt beschrieben werden können.

Bei der Betrachtung der Schalenstruktur spielt die genaue Lage dieser wenigen Zustände natürlich keine so große Rolle. Die Grobstruktur der Niveaudichte wird von der POT mit Phasenkorrektur relativ gut beschrieben, wie in Abbildung 5.24 zu erkennen ist. Der Ver-

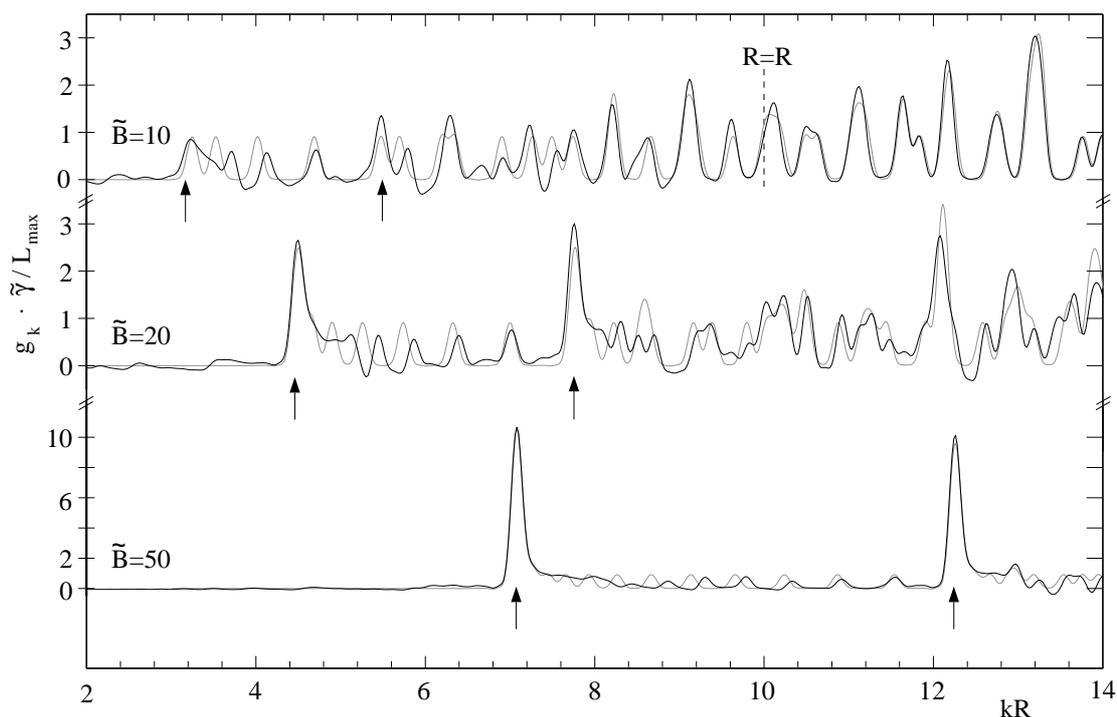


Abbildung 5.23: Die über  $\gamma = 0.055$  gemittelte Zustandsdichte der POT mit korrigierten Reflektionsphasen (schwarz) im Vergleich zum quantenmechanischen Ergebnis (grau). Die Pfeile geben die Lagen der Landauiniveaus an.

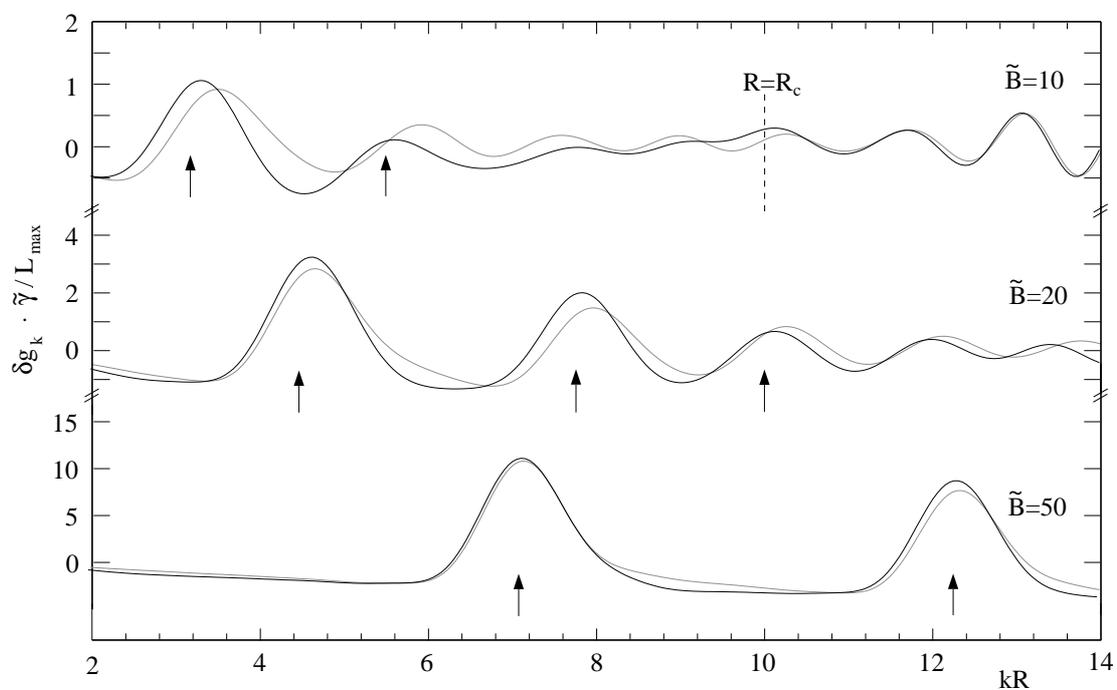


Abbildung 5.24: Die über  $\gamma = 0.4$  gemittelte Zustandsdichte der POT mit korrigierten Reflektionsphasen (schwarz) im Vergleich zum quantenmechanischen Ergebnis (grau).

gleich mit Abbildung 5.15 auf Seite 60, in der die POT ohne Reflektionsphasen mit der Quantenmechanik verglichen ist, zeigt, wie wichtig die Randeffekte auch für die Grobstruktur der Niveaudichte sind. Im nächsten Abschnitt werden die Ergebnisse von Kapitel 5 abschließend noch einmal zusammengefaßt und die Grobstruktur der Niveaudichte diskutiert.

## 5.6 Zusammenfassung der Ergebnisse

Mit dem Formalismus von Creagh und Littlejohn [14] ist eine analytische Darstellung der semiklassischen Niveaudichte des Kreisbillards im Magnetfeld möglich. Diese reproduziert im Bereich  $R > R_c$ , also für  $kR > \tilde{B}$  die quantenmechanische Niveaudichte sehr gut und liefert sogar Näherungen der Einteilchenenergien. Für die Berechnung der Schalenstruktur ist in diesem Bereich eine einfache Näherung möglich, die auf andere Weise schon von Reimann [34] und unabhängig von Tatievski [40] hergeleitet wurde.

Für starke Felder dominieren die neu entstehenden Zyklotronbahnen die Niveaudichte. Sie sind, im Gegensatz zur eindimensionalen Entartung der „bouncing orbits“, zweidimensional entartet und tragen um einen Faktor  $1/\sqrt{\hbar}$  stärker zur Niveaudichte bei.

Der Übergang der polygonähnlichen Bahnen zu den Zyklotronbahnen geschieht über Orbitbifurkationen, die zu Divergenzen der Spurformel führen. Die exakte Behandlung dieser Bifurkationspunkte ist aufwendig. Eine einfache Näherung besteht in der nachträglichen Glättung der berechneten Niveaudichte. Bei großen Feldstärken ( $kR \lesssim \tilde{B}$ ) haben Randeffekte, die in der POT nicht berücksichtigt werden, einen so starken Einfluß auf die Niveaudichte, daß selbst die grobe Schalenstruktur davon stark beeinflusst wird. Eine „lineare“ Näherung dieser Randeffekte genügt aber, um die Schalenstruktur semiklassisch wieder befriedigend erklären zu können. Die volle Quantisierung in diesem Bereich liefert für die stark von den Randbedingungen abhängigen Zustände mit Energien zwischen den Landau-niveaus nur schlechte Resultate. Zur korrekten Berechnung müßten noch „Krümmungskorrekturen“ der Randeffekte berücksichtigt werden, was den Rahmen des semiklassischen Ansatzes sicher übersteigt; eine Berücksichtigung solcher Effekte ist aufwendiger als die exakte quantenmechanische Lösung.

In Abbildung 5.25 ist die semiklassisch mit Randkorrekturen berechnete Schalenstruktur des Kreisbillards im homogenen Magnetfeld für eine Mittelung über  $\gamma \approx 0.42$  nochmals über einen größeren Energiebereich gezeigt. Für große Energien und bei kleinen Feldern, also für  $kR > \tilde{B}$  (d.h.  $R_c < R$ ; Gebiet rechts der durchgezogenen Linie), ist die Superschalenstruktur aufgrund der Interferenz des Durchmesser- und des Dreiecksorbits weiterhin erhalten. In diesem Bereich reproduziert die POT (schwarz) die quantenmechanische Niveaudichte (grau) sehr gut.

Für  $kR \ll \tilde{B}$  dominieren die Landauniveaus die Zustandsdichte. Dort sind die Minima der Niveaudichte nicht länger äquidistant in  $kR$ , sondern in  $(kR)^2$ . Für solche Feldstärken sind zwischen den großen Peaks der Landauniveaus kleinere Abweichungen aufgrund der vernachlässigten höheren Ordnungen der Randeffekte erkennbar. Diese Fehler sind aber nur wesentlich, wenn man versucht, die Einteilchenenergien dieser Zwischenzustände aus der POT zu bestimmen.

Auch im Übergangsbereich  $R_c \lesssim R$  wird die quantenmechanische Niveaudichte von der POT gut reproduziert. Lediglich an den Bifurkationspunkten der wichtigsten Bahnen (Dreieck und Viereck) sind größere Fehler erkennbar. Das liegt an der starken Näherung der Bifurkationspunkte durch eine einfache Glättung. Die exakte Implementierung der Orbitbifurkationen wäre der nächste Schritt, um die Übereinstimmung zu verbessern.

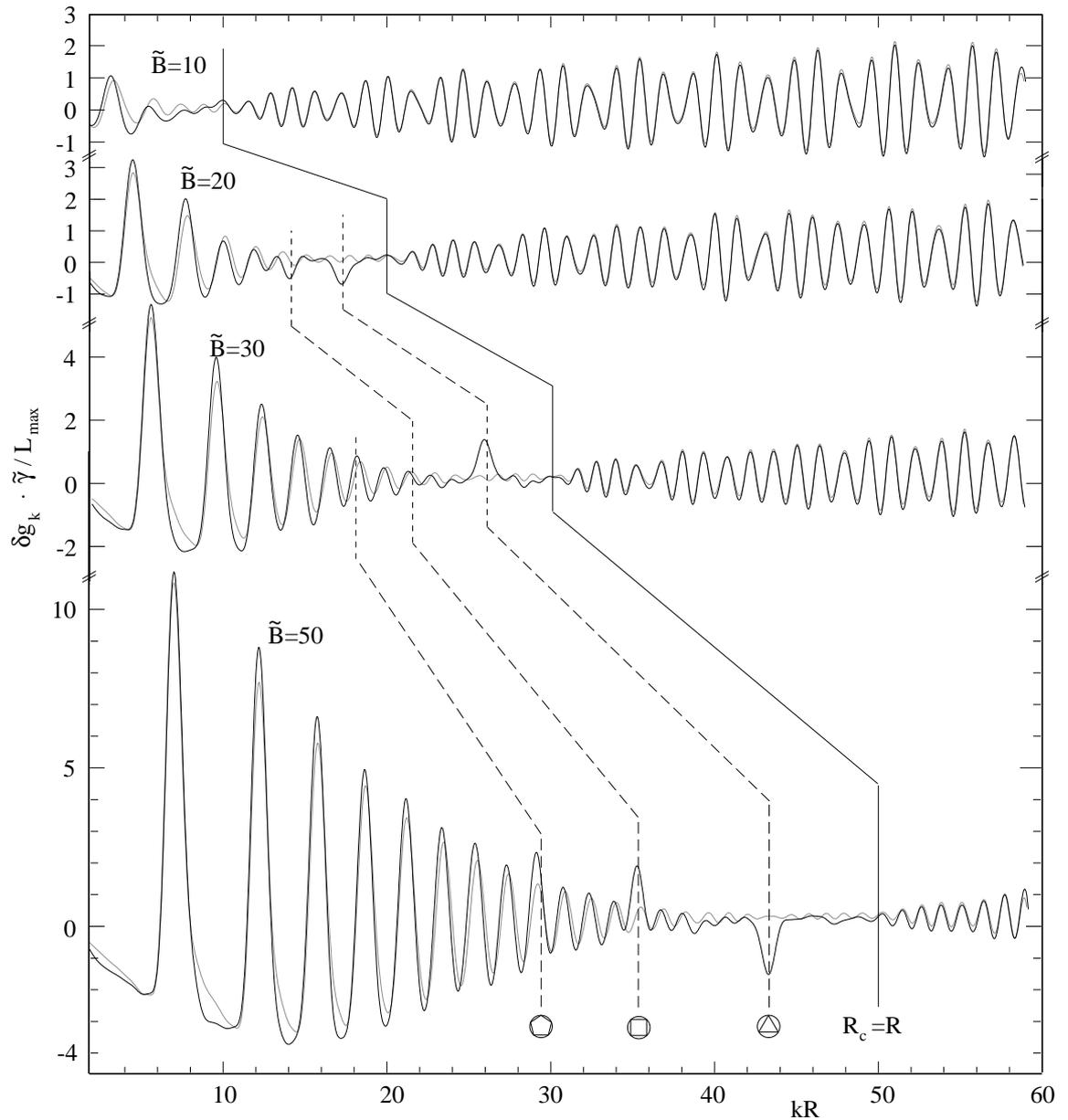


Abbildung 5.25: Die Schalenstruktur der Kreisscheibe im homogenen Magnetfeld bei Glättung über  $\gamma \approx 0.42$ . Schwarz sind die Ergebnisse der semiklassischen Rechnung mit Phasenkorrektur, grau die quantenmechanische Niveaudichte. Auch bei  $B \neq 0$  ist für große Energien die Schalenstruktur der vom feldfreien Fall ähnlich. Sie wird von den Superschalen aufgrund der Interferenz von Durchmesser- und Dreiecksbahn geprägt. Für kleinere Energien und größere Felder dominieren die Landauorbits die Zustandsdichte. In diesem Bereich sind die Schalenstrukturen weitaus stärker ausgeprägt. Die POT reproduziert in allen Bereichen gut das quantenmechanische Resultat, signifikante Abweichungen treten nur an den Bifurkationspunkten der wichtigsten Orbits auf.

Auffällig ist die Symmetrie der Schalenstruktur in einem kleinen Gebiet im Übergangsbereich. Die Symmetrielinie liegt nicht, wie zunächst zu vermuten ist, an dem Punkt, an dem die ersten Zyklotronorbits auftreten und die Durchmesserbahnen verschwinden. Die Niveaudichte ist um den Bifurkationspunkt der Dreiecksbahnen symmetrisch, also um  $R_c = \sqrt{3/4}R$ .

Im Bereich  $kR > \tilde{B}$  sind zur Berechnung der gezeigten Niveaudichte nur Durchmesser, Dreiecks-, Vierecks- und Fünfecksbahn nötig. Aufgrund der Orbitbifurkationen im Bereich  $kR < \tilde{B}$  müssen dort zunächst deutlich mehr periodische Bahnen berücksichtigt werden, damit die Divergenzen der Niveaudichte durch Faltung mit einer Glättungsfunktion herausgemittelt werden können. Hier wurden alle Bahnen mit weniger als 10 Ecken pro Umlauf berücksichtigt, die kürzer als  $L_{max} = 20R$  sind. Auch wenn in diesem Bereich die Anzahl der zu berücksichtigenden Terme deutlich höher ist, ist der numerische Aufwand (besonders für große Energien) immer noch um Größenordnungen geringer als für die exakte quantenmechanische Lösung.

Die Näherung des Randeffektes mit dem vorgestellten Ansatz ist nicht mehr rein semiklassisch. Das zweidimensionale Problem wird in zwei eindimensionale zerlegt, von denen eines exakt quantenmechanisch gelöst wird. Es wäre natürlich wünschenswert, auch den Randeffekt semiklassisch bestimmen zu können, also eine Funktion zu finden, die die Abhängigkeit der Reflektionsphase (in allgemeinen, glatten Potentialen) beschreibt. Dazu müßte außer dem klassischen Umkehrpunkt noch die Steigung des Potentials an dieser Stelle berücksichtigt werden. Das wäre ein interessanter Ausgangspunkt für weitere Untersuchungen.

## Kapitel 6

# Leitwerte von Quantendots

*Reimann [35] hat in einem einfachen Modell den Leitwert eines Quantendots im Magnetfeld mit der Niveaudichte eines Kreisbillards in Verbindung gebracht. Der Vergleich der experimentellen Werte mit den semiklassischen Berechnungen für kleine Felder zeigt eine qualitative Übereinstimmung. Mit der in Kapitel 5 entwickelten Spurformel können auch stärkere Magnetfelder behandelt werden.*

Quantendots sind zweidimensionale Vielelektronensysteme, deren Teilchenzahl und Abmessung die Ausprägung von Schaleneffekten ermöglicht. Sie können experimentell in Halbleiter-Heterostrukturen (meist GaAs/GaAlAs) realisiert werden. Infolge von Bandverbiegungen an der Grenzschicht der Halbleitermaterialien liegt die Valenzbandkante in einer dünnen Schicht unterhalb des Fermi-niveaus. Die Schichtdicke ist so gering, daß die Anregungsenergie in der Richtung senkrecht zur Schicht weit höher liegt als die typische Energie im System, so daß sich das System in diesem Freiheitsgrad stets im Grundzustand befindet. Das ist unter dem Begriff des *zweidimensionalen Elektronengases* (2DEG) bekannt. Die freien Weglängen der Elektronen sind im 2DEG sehr groß, da die Dotieratome, die als Störstellen fungieren, nicht in der Grenzschicht lokalisiert sind. Durch lithographische Methoden ist eine enge räumliche Einschränkung des 2DEG in den anderen Raumrichtungen möglich. Diese lateralen Beschränkungen liegen typischerweise in der Größenordnung der Fermiwellenlänge und sind kleiner als die Phasenkohärenzlänge des Systems. Damit sind in solchen Systemen die Voraussetzungen für das Auftreten von quantenmechanischen Effekten erfüllt und die Ausbildung von Schalenstrukturen ist zu erwarten.

In dem hier betrachteten Experiment von Persson [31] wird durch auf der Oberfläche angebrachte Gates ein elektrostatisches, etwa kreissymmetrisches Potential erzeugt. Durch die Variation der Gatespannung läßt sich die Größe des Quantendots beeinflussen. Das zweidimensionale Elektronengas ist durch zwei Punktkontakte mit dem Elektronengas außerhalb des Dots verbunden. Abbildung 6.1 zeigt den Aufbau schematisch.

Im einfachsten Modell des resonanten Tunnelns durch die Punktkontakte kann der Leitwert eines Quantendots proportional zur Niveaudichte an der Fermikante angenommen werden [24, 35]. Das ermöglicht eine direkte Berechnung des Leitwertes mit den Methoden der POT.

Das elektrostatische Confinementpotential ist weich und dem eines Oszillators ähnlich. Aus selbstkonsistenten Dichtefunktionalrechnungen ist bekannt, daß für größere Teilchenzahlen das effektive Einteilchenpotential einem Topf ähnelt, dessen Wände mit zunehmender Teilchenzahl immer steiler werden. Das kommt von den bei großen Teilchenzahlen dominanten Beiträgen der Austausch- und Korrelationswechselwirkungen zum effektiven Einteilchen-

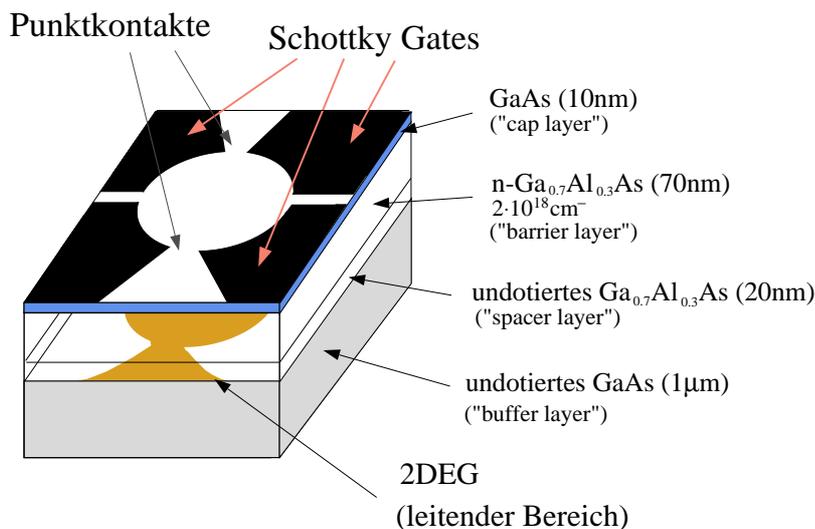


Abbildung 6.1: Der schematische Aufbau zur Messung des Leitwertes eines Quantendots. Die mit (1) und (2) bezeichneten Bereiche sind die Gates. Durch Anlegen einer Spannung werden die Elektronen unter den Gateflächen verdrängt, wodurch sich in der Mitte ein Quantendot ausbildet. (nach [35])

potential. Dieser Effekt ist auch aus anderen Vielteilchensystemen wie zum Beispiel Metallclustern oder Atomkernen bekannt. Für runde Dots mit großen Teilchenzahlen ist das Kreisbillard daher ein angemessenes erstes Modell. Der semiklassische Zugang ist speziell im Bereich sehr großer Teilchenzahlen interessant, da dort keine selbstkonsistenten quantenmechanischen Rechnungen mehr durchgeführt werden können.

Persson [31] hat an einem Quantendot nach Abbildung 6.1, dessen Radius er mit etwa  $0.3 \dots 0.4 \mu\text{m}$  abschätzt und der etwa 1000-2000 Elektronen enthält, den Leitwert in Abhängigkeit vom Magnetfeld gemessen. Durch Änderung der Gatespannung konnte er die Größe des Dots verändern. Die Messung wurde bei Temperaturen unter  $2\text{K}$  durchgeführt. Abbildung 6.2 zeigt als Graustufendiagramm die gemessenen Leitwerte. Dabei entsprechen die helleren Stellen den größeren Leitwerten. Mit der effektiven Masse der Elektronen in GaAs von  $m \approx 0.067 m_e$  und der Fermienergie des Systems, die mit  $13.2 \text{ meV}$  angegeben wird, kann die Niveaudichte des Kreisbillards für die experimentellen Parameter berechnet werden. Die Glättung wurde aus der freien Weglänge der Elektronen von etwa  $7 \mu\text{m}$  und dem Radius des Dots von  $R = 0.3 \mu\text{m}$  zu  $\gamma \approx 0.15$  abgeschätzt. In Abbildung 6.3 ist die nach Gleichung 5.40 berechnete semiklassische Niveaudichte des Kreisbillards gezeigt. Der Vergleich der Graustufendiagramme zeigt ähnliche Strukturen. Dieser Vergleich wurde schon von Reimann [35] durchgeführt. Die von ihr verwendete Näherung der POT, die Gleichung 5.42 entspricht, ist nach Gleichung 5.45 für Feldstärken bis etwa  $0.1T$  gültig. Deshalb sind die Ergebnisse der beiden Ansätze im gemessenen Feldstärkenbereich identisch. Beide Ansätze stimmen auch in sehr guter Näherung mit dem quantenmechanischen Resultat für die Kreisscheibe überein, wie in Kapitel 5.4.1 gezeigt wurde. Die Oszillationen der Leitwerte in  $B$  und in  $R$  können mit Hilfe der dominanten periodischen Bahnen befriedigend erklärt werden [35]. Mit der in Kapitel 5 vorgestellten POT kann jetzt in diesem Modell auch das zu erwartende Verhalten bei stärkeren Feldern berechnet werden. In Abbildung 6.4 ist dieselbe Situation für größere  $B$  gezeigt.

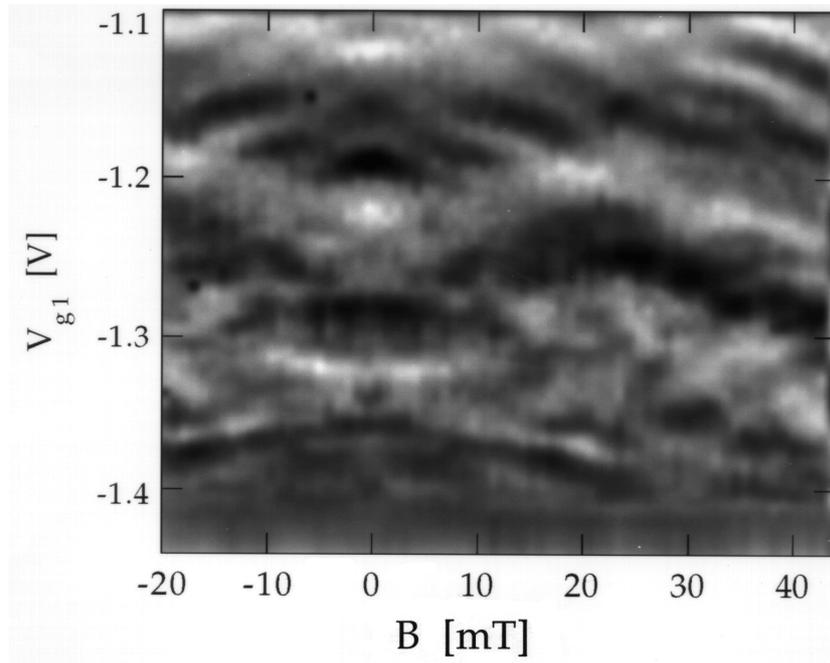


Abbildung 6.2: Die von Persson [31] gemessenen Leitwerte eines Quantendots in Abhängigkeit vom Magnetfeld und dem Dotradius, der durch die angelegte Gatespannung festgelegt wird. Ein glatter Untergrund der Leitwerte wurde subtrahiert; hellere Stellen entsprechen einem größeren Leitwert.

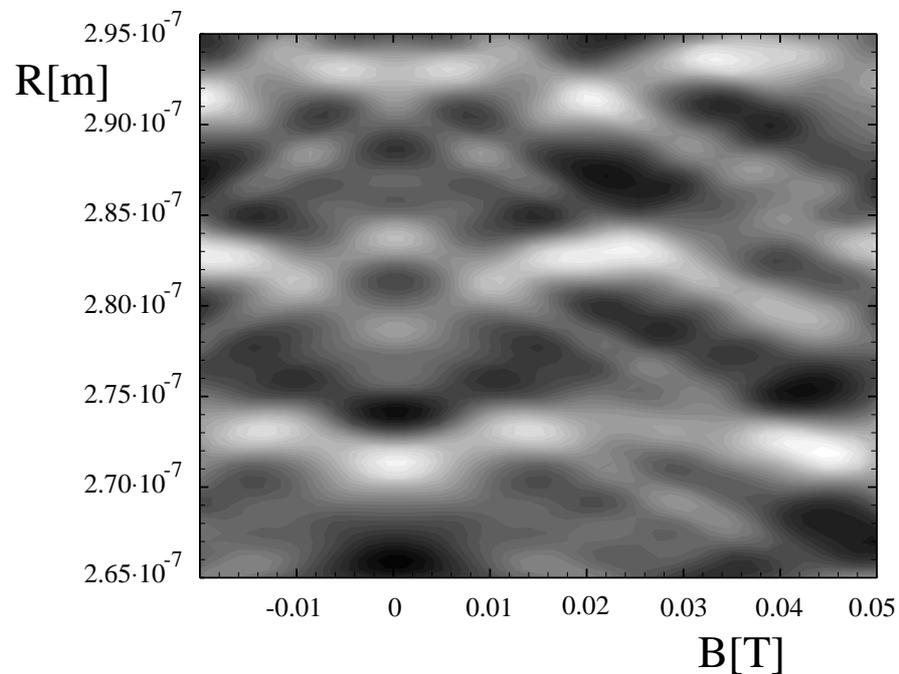


Abbildung 6.3: Der oszillierende Teil der semiklassische Niveaudichte des Kreisbillards im Magnetfeld nach Gleichung 5.40. Hellere Stellen entsprechen einer größeren Niveaudichte. Ein Vergleich mit den experimentellen Werten in Abbildung 6.2 zeigt vergleichbare Strukturen.

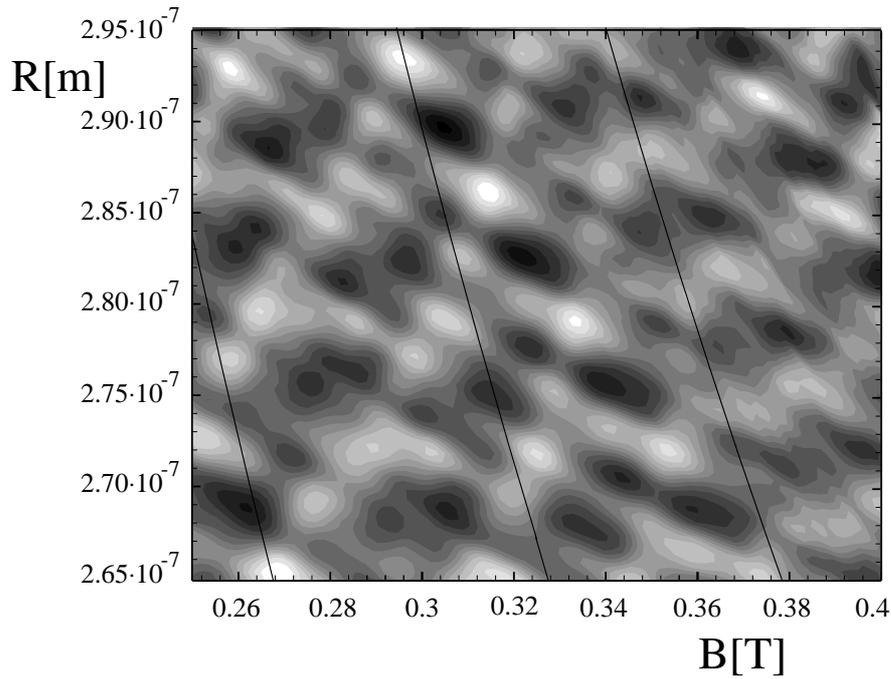


Abbildung 6.4: Der oszillierende Teil der semiklassische Niveaudichte des Kreisbillards im Magnetfeld nach Gleichung 5.40 für größere Feldstärken. Die eingezeichneten Linien entsprechen (von links nach rechts) den kritischen Punkten der klassischen Durchmesser-, Dreiecks- bzw. Vierecksbahn.

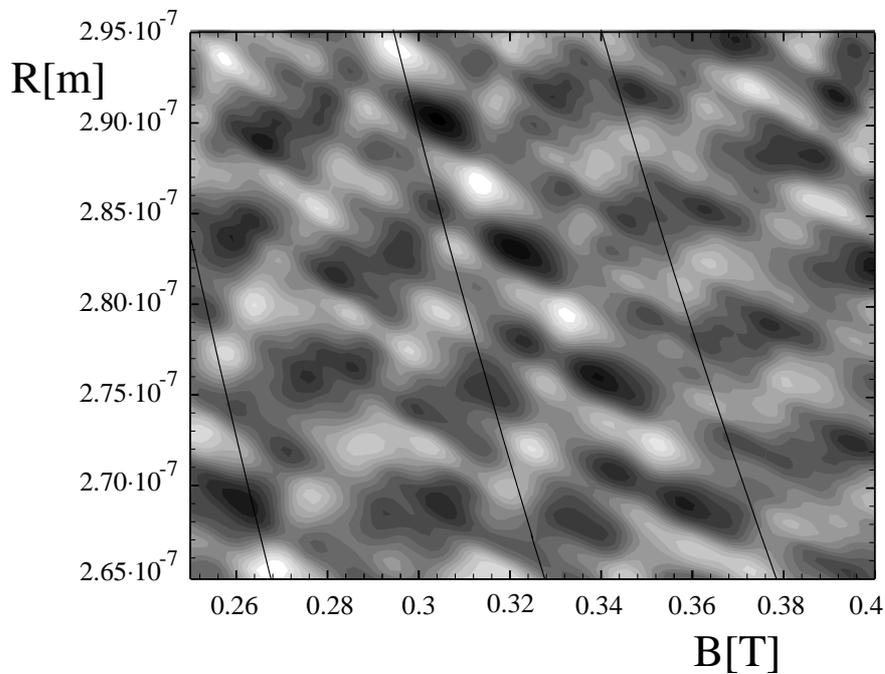


Abbildung 6.5: Die Situation von Abbildung 6.4, diesmal aber mit der quantenmechanischen Lösung des Kreisbillards im Magnetfeld. Selbst an den Bifurkationspunkten der Durchmesser-, der Dreiecks- und Vierecksbahn ist die Übereinstimmung mit der POT gut.

Die eingezeichneten Linien entsprechen (von rechts nach links) den kritischen Punkten für Durchmesser, Dreiecks- und Vierecksbahn. Nach Abschnitt 5.6 sind höchstens an diesen Stellen noch signifikante Abweichungen der POT vom quantenmechanischen Resultat zu erwarten. Dieses ist in Abbildung 6.5 gezeigt. Die Graustufenplots sind fast nicht zu unterscheiden. Selbst an den Bifurkationspunkten sind keine Abweichungen erkennbar. Die Darstellungen zeigen keine grundlegende Änderung der Struktur, vor allem das charakteristische Zickzack-Muster bleibt erhalten. Experimente zur Messung der Leitwerte in diesem Feldstärkebereich werden zur Zeit von Lindelof *et al.* durchgeführt, Ergebnisse liegen im Moment noch nicht vor. In Abbildung 6.6 ist die Situation nochmals für höhere Feldstärken gezeigt. In diesem Bereich ändert sich das Verhalten drastisch: Das Zickzack-

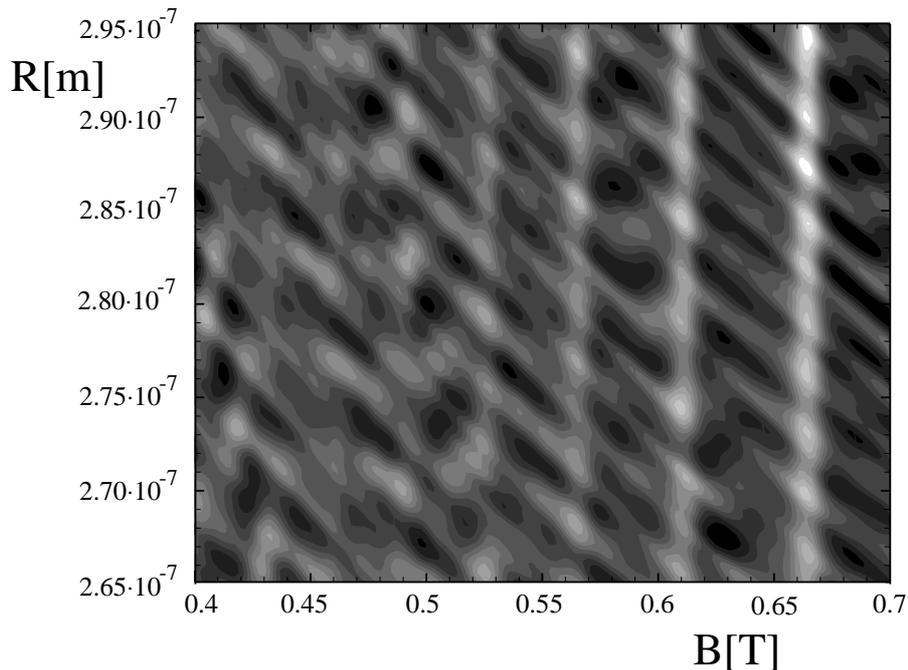


Abbildung 6.6: *Der oszillierende Teil der Niveaudichte des Kreisbillards im Magnetfeld für große Feldstärken. Man kann deutlich den Übergang vom typischen Zickzack-Muster bei kleineren Feldstärken zu den senkrecht laufenden Linien der Landauniveaus bei größeren Feldern erkennen.*

Muster wird von senkrecht laufenden Streifen mit sehr großer Amplitude abgelöst, die den Landauniveaus des Systems entsprechen. Spätestens bei diesen Feldstärken verliert das verwendete Modell seine Gültigkeit. Zum einen sind die Landauniveaus stark lokalisierte Zustände, die kaum zum Leitwert beitragen werden, zum anderen ist das Modell des resonanten Tunnelns in diesen Bereichen sicher auch eine unzulässige Vereinfachung. Für diesen Bereich muß ein Transportmodell entwickelt werden. Gerade für große Quantendots bietet sich hier wieder ein semiklassischer Zugang an.



# Kapitel 7

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Untersuchungen zur Theorie der periodischen Orbitale, kurz POT durchgeführt. Dieser Ansatz verbindet in sogenannten Spurformeln die Niveaudichte eines mikroskopischen oder mesoskopischen Systems mit einer Summe über dessen klassische periodische Bahnen. Eine solche Darstellung ist nur näherungsweise korrekt, zur exakten Beschreibung sind quantenmechanische Methoden nötig. Mit ihren im Widerspruch zur täglichen Erfahrung stehenden Prinzipien<sup>1</sup> entzieht sich die Quantenmechanik jedoch einem intuitiven Verständnis. Das motiviert eine unmittelbar „begreifbare“ Darstellung in klassisch-mechanischen Größen, die im täglichen Umgang unser Denken geprägt haben. Die Theorie der periodischen Bahnen kann eine solche Darstellung liefern.

Bindeglied zwischen der klassischen Physik und der Quantenphysik und daher zentrales Element der POT sind die oben genannten Spurformeln. Die Auswertung dieser Ausdrücke führt auf ernsthafte Konvergenzprobleme. Diese Probleme wurden im ersten Teil der Arbeit einer genaueren Untersuchung unterzogen. Es wurde gezeigt, daß sie auf die Verwendung eines nicht angemessenen Konvergenzbegriffs zurückzuführen sind. Die Analogie mit der Fouriertransformation wurde ausgenutzt, um ein allgemeines Verfahren zur numerischen Auswertung semiklassischer Spurformeln zu entwickeln. Diese Methode enthält als Spezialfall die übliche Glättung der Niveaudichte mit einer Gauss-Funktion. Sie ist jedoch allgemeiner und ermöglicht zusätzlich eine gute Fehlerabschätzung. Damit kann der numerische Aufwand bei der Auswertung von Spurformeln stark reduziert werden. Das Konvergenzproblem der Spurformeln wird mit diesem Verfahren auf die Behandlung von Häufungspunkten in den verallgemeinerten Längen der klassischen Bahnen zurückgeführt. Dafür wurden zwei Ansätze vorgestellt.

Im folgenden wurde das Kreisbillard, ein einfaches, zweidimensionales Modellsystem, betrachtet. Von Reimann [35] wurde bereits gezeigt, daß die POT im Fall des Kreisbillards die Niveaudichte bis zu Einteilchenniveaus auflösen kann. Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigte sich mit deren numerischer Bestimmung. Mit der verbesserten Methode zur Auswertung von Spurformeln konnte in engen Fehlergrenzen gezeigt werden, daß beim Kreisbillard EBK und POT identische Werte für die Eigenenergien liefern. Die Äquivalenz von POT und EBK gilt schon im Fall des Aharonov-Bohm-Billard nicht mehr, was durch die Analyse der Fourierspektren der EBK- und der quantenmechanischen Eigenwerte gezeigt werden konnte. Das Kreisbillard ist somit ein Ausnahmefall. Die vorgeschlagene

---

<sup>1</sup>Man denke dabei nur an Schrödingers Katze [37] oder an einen Abgeordneten, der beim Hammelsprung im Bundestag durch beide Türen gleichzeitig läuft ...

Erklärung nimmt das Verschwinden von Beiträgen in zweithöchster Ordnung in  $\hbar$  zur Niveaudichte des Systems an. Sie bedarf aber noch genauerer Untersuchungen.

Der Hauptteil dieser Arbeit befaßte sich mit der semiklassischen Behandlung des Kreisbillards im Magnetfeld. Es war möglich, in analytisch geschlossener Form eine PO-Summe für beliebig starke Felder anzugeben. Die Entwicklung bis zum linearen Term in  $B$  führt auf eine schon von Reimann [34, 35] aus anderen Überlegungen hergeleitete semiklassische Formel für schwache Magnetfelder. Der Gültigkeitsbereich dieser Näherung konnte abgeschätzt werden. Der Vergleich der Spurformel mit den quantenmechanischen Ergebnissen zeigt einen starken Einfluß von Randeffekten in höherer Ordnung von  $\hbar$  auf die Niveaudichte, so daß die POT, eine Näherung in erster Ordnung von  $\hbar$ , keine befriedigenden Resultate erzielt. In einem quasi-eindimensionalen Modell konnten diese Effekte durch eine Phasenkorrektur in die POT implementiert werden. Damit kann die Schalenstruktur der Kreisscheibe für alle Feldstärken durch die POT gut beschrieben werden. Die einzigen signifikanten Abweichungen stammen von Orbitbifurkationen, deren exakte Behandlung noch aussteht.

Die größten Abweichungen der Feinstruktur der Zustandsdichte von den quantenmechanischen Ergebnissen bestehen bei den Zuständen zwischen den Landauniveaus. Diese sind stark von den Randbedingungen abhängig, so daß eine „lineare“ Näherung der Randeffekte nicht ausreichend ist.

Die verwendete Korrektur der Reflektionsphasen benutzt eine eindimensionale quantenmechanische Beschreibung. Ein nächster Schritt wäre eine semiklassische Behandlung der Reflektion in höherer Ordnung von  $\hbar$ . Vermutlich ist schon die Berücksichtigung der Steigung des Potentials im Umkehrpunkt ausreichend, um die dominierenden Effekte zu beschreiben.

Die semiklassische Behandlung ermöglicht im Fall des starken Magnetfelds eine vage Zuordnung verschiedener klassischer Bahnen zu speziellen Energieniveaus. In welchen Fällen eine solche Aufteilung möglich ist, ist ein noch unerforschtes Gebiet.

Im letzten Teil der Arbeit wurde das Kreisbillard im Magnetfeld als Modell für Quantendots eingesetzt. Mit den vorliegenden Ergebnissen der von Persson *et al.* [31] durchgeführten Messung des Leitwerts eines Quantendots im Magnetfeld konnte eine qualitative Übereinstimmung erzielt werden. Der Vergleich der Ergebnisse für starke Felder mit den momentan laufenden Messungen von Lindelof *et al.* wird sicher interessant, ist aber eher skeptisch zu beurteilen. Aufgrund der sehr starken Vereinfachungen ist nicht zu erwarten, daß das verwendete Modell in diesem Bereich noch zutrifft. Eine Verbesserung ist von einem semiklassischen Transportmodell zu erwarten, dessen Erarbeitung geplant ist.

## Anhang A

# Fehlerabschätzung bei Summation bis zum $m_0$ -Eck

Die PO-Summe des Kreisbillards ist auch mit einer Fensterfunktion  $F(L)$ , die die Längen der zur Spurformel beitragenden Bahnen nach oben begrenzt, nicht numerisch berechenbar. Die verbleibende Summe  ${}^{\text{POT}}\delta g^F$  ist aufgrund der Häufungspunkte der Bahnlängen der klassischen Orbits bei Vielfachen des Kreisumfangs immer noch unendlich. Zur numerischen Berechnung werden nur Orbits mit weniger als  $m_0$  Ecken pro Umlauf berücksichtigt. Das führt, wie in Kapitel 4.4 gezeigt wurde, zu kleinen spuriösen Strukturen in der semi-klassischen Niveaudichte (vergleiche Abbildung 4.3). Im folgenden werden ihre Positionen analytisch bestimmt und ihre Amplituden nach oben abgeschätzt.

Zunächst wird Gleichung 4.9 in Teilsummen  $T_m$  über  $a/b = m = \text{const.}$  ( $a, b$  teilerfremd) zerlegt:

$$\begin{aligned} T_m &:= \frac{1}{E_0} \underbrace{\frac{\sin^{3/2}(\pi/m)}{\sqrt{mkR\pi}}}_{=: c} \sum_{n=1}^{\infty} F(L_m \cdot n) \frac{1}{\sqrt{n}} \sin \left[ \underbrace{n \cdot m \left( 2kR \sin(\pi/m) - \frac{3}{2}\pi \right)}_{=: x} + \frac{3\pi}{4} \right] \\ &= c \sum_{n=1}^{\infty} F(L) \frac{1}{\sqrt{n}} \sin \left( n \cdot x + \frac{3\pi}{4} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Damit ist dann

$$\begin{aligned} {}^{\text{POT}}\delta g_E^F &= \sum_{m \in \Phi} T_m \\ {}^{\text{POT}}\delta g_E^{F, m_0} &= \sum_{\substack{m \in \Phi \\ m \leq m_0}} T_m \end{aligned}$$

Wie in Kürze gezeigt wird, konvergiert jedes  $T_m$  gegen eine äquidistante Summe von  $\delta$ -Funktionen. Die Positionen dieser  $\delta$ -Funktionen liegen (fast) alle an Punkten, an denen  ${}^{\text{POT}}\delta g_E^F$  keine Peaks hat. Das bedeutet, daß die verschiedenen  $T_m$  sich zum großen Teil gegenseitig kompensieren. Wenn die Summation nach  $m = m_0$  abgebrochen wird, können diejenigen  $T_m$  mit  $m > m_0$  nicht mehr zur Kompensation beitragen. Analog zu einer abgebrochenen Fourier-Summe wird der Fehler durch den Term, mit dem die Summation abgebrochen wird, dominiert. Das ist in diesem Fall die Teilsumme  $T_m$  mit  $m = m_0$ . Diese Überlegung wird durch Abbildung 4.3 bestätigt. Dort ist  $T_4$ ,  $T_6$  und  $T_8$  blau dargestellt. Die Peaks befinden sich an denselben Positionen wie die Störpeaks von  ${}^{\text{POT}}\delta g_E^{F, m_0}$  (grün).

$T_m$  für  $m \neq m_0$  besitzt dagegen völlig andere Peakpositionen. Damit sind die Störpeaks in  $\text{POT} \delta g_E^{F,m_0}$  durch  $T_{m_0}$  abzuschätzen.

Die Peakpositionen sind die Stellen, an denen  $T_{m_0}$  für  $L_{max} \rightarrow \infty$  bestimmt gegen  $\pm\infty$  divergiert<sup>1</sup>. Da  $n^{-1/2}$  eine monotone Nullfolge ist, konvergiert  $T_m$  alle  $x \neq 2z\pi$  ( $z \in \mathbf{Z}$ ) gegen ein  $c \in \mathbb{R}$  [11]. Für  $x = 2z\pi$  ist

$$T_m = \frac{c}{\sqrt{2}} \sum_{n=1}^{\infty} F(L_m \cdot n) \frac{1}{\sqrt{n}} \quad \Rightarrow \quad T_m \xrightarrow{L_{max} \rightarrow \infty} \infty \quad (\text{A.2})$$

Damit sind für  $L_{max} \rightarrow \infty$  die Peakpositionen von  $T_{m_0}$  durch  $x = 2z\pi$ , d.h. durch

$$kR = \frac{z/m + 3/4}{\sin \pi/m} \pi \quad (z \in \mathbf{Z}) \quad (\text{A.3})$$

gegeben. Diese Werte von  $kR$  sind in Abbildung 4.3 durch rote Striche markiert. Obwohl Gleichung A.3 die asymptotischen Peakpositionen für  $L_{max} \rightarrow \infty$  angibt, ist die Übereinstimmung schon für kleine  $L_{max}$  nahezu exakt.

Die Amplituden der Störpeaks können durch die Maxima von  $T_{m_0}$  abgeschätzt werden. An den asymptotischen Peakpositionen nach Gleichung A.3 ist  $\sin(n \cdot x + \frac{3}{4}\pi) = 1/\sqrt{2}$ . Daher gilt für die Maxima  $T_m^{max}$  von  $T_{m_0}$

$$\frac{c}{\sqrt{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F(L_{m_0} \cdot n)}{\sqrt{n}} \leq T_{m_0}^{max} \leq c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F(L_{m_0} \cdot n)}{\sqrt{n}} =: \xi_E \quad , \quad (\text{A.4})$$

wobei  $L_{m_0} = 2m_0 \sin(\pi/m_0)$  die Bahnlänge des einfach durchlaufenen  $m_0$ -Ecks ist. Für die normierte Niveaudichte im  $k$ -Raum gilt dann

$$\begin{aligned} \xi_k &:= \xi_E \frac{\tilde{\gamma}}{L_{max}} 2kR = \\ &= 2\sqrt{2\pi} \tilde{\gamma} \sqrt{\frac{kR}{L_{max}}} \frac{1}{m_0^2} \underbrace{\sqrt{\frac{L_{m_0}}{L_{max}}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F(L_{m_0} \cdot n)}{\sqrt{n}}}_{=: \chi} \left( \frac{m_0}{\pi} \sin \frac{\pi}{m_0} \right) = \\ &= 2\sqrt{2\pi} \tilde{\gamma} \chi \sqrt{\frac{kR}{L_{max}}} \frac{1}{m_0^2} \left( \frac{m_0}{\pi} \sin \frac{\pi}{m_0} \right) \lesssim \\ &\lesssim 2\sqrt{2\pi} \tilde{\gamma} \chi \sqrt{\frac{kR}{L_{max}}} \frac{1}{m_0^2} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Dabei ist  $\tilde{\gamma}$  der Normierungsfaktor für die Peakhöhen von Abschnitt 3.5.  $\tilde{\gamma}$  hängt nur von der gewählten Fensterfunktion ab.  $\chi$  ist für kleine  $L_{max}/L_{m_0}$  leicht direkt zu berechnen; für große  $L_{max}/L_{m_0}$  kann die Summe in  $\chi$  durch ein Integral genähert werden:

$$\chi \approx \sqrt{\frac{L_{m_0}}{L_{max}}} \int_{n=1}^{\infty} \frac{F(L_{m_0} \cdot n)}{\sqrt{n}} dn = \frac{1}{\sqrt{L_{max}}} \int_{L_{m_0}}^{L_{max}} \frac{F(L)}{\sqrt{L}} dL \quad (\text{A.6})$$

Der Wert dieses Integrals ist von der verwendeten Fensterfunktion abhängig. Für die in der Arbeit verwendeten  $F(L)$  ist es analytisch auswertbar und es ergibt sich

---

<sup>1</sup>Bestimmte Divergenz von  $a_n$  nach  $\pm\infty$  ist definiert als  $a_n \rightarrow \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} \infty : \Leftrightarrow \forall E \in \mathbb{R} \exists n_0 \in \mathbb{N} \forall n \geq n_0 \quad a_n \begin{matrix} > \\ < \end{matrix} E$ .

$$\begin{aligned}
\text{Rechteckfenster : } \chi_R &= 2 & -2\sqrt{\frac{L_{m_0}}{L_{max}}} &< \tilde{\chi}_R \\
\text{Dreieckfenster : } \chi_D &= \frac{4}{3} & -2\sqrt{\frac{L_{m_0}}{L_{max}}} + \frac{2}{3}\left(\frac{L_{m_0}}{L_{max}}\right)^{3/2} &< \tilde{\chi}_D \\
\text{TxR-Fenster : } \chi_{TxR} &= \frac{8}{5}\frac{3\sqrt{3}-1}{3\sqrt{3}} & -2\sqrt{\frac{L_{m_0}}{L_{max}}} + \frac{6}{5}\left(\frac{L_{m_0}}{L_{max}}\right)^{5/2} &< \tilde{\chi}_{TxR}
\end{aligned} \tag{A.7}$$

Für  $L_{max} \rightarrow \infty$  hängt  $\chi$  nur noch von der gewählten Fensterfunktion ab:

$$\begin{aligned}
\chi_R &\xrightarrow{L_{max} \rightarrow \infty} \tilde{\chi}_R = 2 \\
\chi_D &\xrightarrow{L_{max} \rightarrow \infty} \tilde{\chi}_D = 1,33 \\
\chi_{TxR} &\xrightarrow{L_{max} \rightarrow \infty} \tilde{\chi}_{TxR} = 1,29
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Für große  $L_{max}/L_{m_0}$  ist  $\xi_k$  damit proportional zu  $\sqrt{kR/L_{max}} m_0^{-2}$ . Die so abgeschätzten Maxima von  $T_{m_0}$  sind in Abbildung 4.3 orange eingezeichnet, die Übereinstimmung mit  $T_{m_0}$  (blau) ist gut. Die Höhe der Störpeaks kann durch  $T_{m_0}^{max}$  nach oben abgeschätzt werden. Tatsächlich sind die Höhen der Störpeaks etwa  $\xi_k/\sqrt{2}$ .



## Anhang B

# Numerische Bestimmung der POT-Eigenwerte

### B.1 Bestimmung der Peakpositionen der PO-Summe

Die Peakpositionen der semiklassischen Niveaudichte des Kreisbillards wurden durch einen gewichteten least-square-fit von  ${}^{\text{POT}}\delta g_k^{F,m_0}$  an

$$p(k) := a_i \sum_{i=1}^{i_{max}} f(k - {}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}) \quad (\text{B.1})$$

ermittelt. Da die Peakamplituden von  ${}^{\text{POT}}g^F$  sehr gut den quantenmechanischen Entartungen der Niveaus entsprechen (vgl. Abb 4.5), wurde auf das Anpassen der Amplituden  $a_i$  verzichtet. Die  $a_i$  wurden daher gleich der quantenmechanischen Entartung des Zustandes  $i$  gesetzt. Kleine Fehler der Amplituden sollten aufgrund der Symmetrie der Peaks die  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  nicht verschieben, weshalb eine exakte Bestimmung der Amplituden zur Ermittlung der Peakpositionen auch nicht nötig ist. Fitparameter sind damit gerade die Peakpositionen  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$ .

Der least-square-fit wurde durch die Minimierung einer quadratischen Abstandsfunktion zwischen  ${}^{\text{POT}}g_k$  und  $p(k)$  realisiert. Diese Abstandsfunktion wird an fest gewählten Stützstellen ausgewertet. Die Berechnung der PO-Summe, die den Rechenaufwand dominiert, muß damit nur einmal für jede Stützstelle durchgeführt werden. Es wurden jeweils 20 Stützstellen äquidistant zwischen den ersten beiden Nebenminima der gemittelten EBK-Niveaudichte gewählt. Diese Breite stellt sicher, daß der Peak von  ${}^{\text{POT}}\delta g_k^{F,m_0}$  innerhalb der Meßpunkte liegt. Da die Peakpositionen am exaktesten an den Flanken zu ermitteln sind, wurden die Meßpunkte proportional zur Steigung von  ${}^{\text{POT}}\delta g_k^{F,m_0}$  gewichtet. Die Berechnung der Abstandsfunktion wurde in FORTRAN durchgeführt. Zur Minimierung der Abstandsfunktion wurde das Programm MINUIT eingebunden. Alle Berechnungen wurden in *Double Precision*, also mit 16 Stellen Genauigkeit, durchgeführt.

Im folgenden ist die Kenntnis der absoluten Genauigkeit der Bestimmung der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  nicht nötig. Es muß nur die Abhängigkeit dieser Genauigkeit von  $L_{max}$  bekannt sein. Diese ist durch die Korrelation der Fitparameter und durch den Einfluß von nicht in  $p(k)$  berücksichtigten Peaks bestimmt. Beide Effekte sind proportional zur Verschiebung eines Peaks durch den Überlapp mit den Seitenbändern der Nebenpeaks. Der Abfall der Seitenbänder ist proportional zu  $L_{max}^{-(\beta+1)}$ , wobei  $\beta$  nur von der Fensterfunktion abhängt (vergleiche Kapitel 3.5 auf Seite 21). Die Breite der Peaks ist proportional zu  $L_{max}^{-1}$ . Die

gegenseitige Beeinflussung der Positionen benachbarter Peaks ist damit proportional zu  $L_{max}^{-(\beta+2)}$ . Die zu erwartende Genauigkeit des Fits hat dieselbe Abhängigkeit:

$$\sigma \propto L_{max}^{-(\beta+2)} \quad (\text{B.2})$$

Da die Seitenbänder eines Peaks in Abhängigkeit von  $L_{max}$  eine rasch oszillierende Funktion darstellen (im Vergleich zur Dichte der Stützpunkte in  $L_{max}$ , an denen  $\text{POT}\kappa_i^{F,m_0}$  bestimmt wird), ist eine Streuung der berechneten  $\text{POT}\kappa_i^{F,m_0}$  zu erwarten. Die Breite dieser Verteilung sollte proportional zu  $L_{max}^{-(\beta+2)}$  sein. Dieses Verhalten wird tatsächlich beobachtet. Vergleiche dazu die Abbildungen auf Seite ix des Anhangs B.3.

## B.2 Das Konvergenzverhalten der Peakpositionen

Die POT-Eigenwerte  $\text{POT}\kappa_i$  sind die asymptotischen Peakpositionen der  $\text{POT}\kappa_i^{F,m_0}$  für  $m_0, L_{max} \rightarrow \infty$ , falls dieser Grenzwert unabhängig von der Fensterfunktion und der Art des Grenzübergangs ist. Die Verwendung von  $\text{POT}\kappa_i^{F,m_0}$  für große, gerade noch zu berechnende  $m_0$  und  $L_{max}$  als Näherung für  $\text{POT}\kappa_i$  ist problematisch. Zum einen sind durch die Rechenkapazität und -genauigkeit den maximal berechenbaren  $m_0$  und  $L_{max}$  enge Grenzen gesetzt, zum anderen hat man dann keinerlei Kontrolle über das Konvergenzverhalten. Deshalb wird hier versucht, das Konvergenzverhalten zu bestimmen und aus der Extrapolation für  $m_0, L_{max} \rightarrow \infty$  eine Schätzung für die POT-Eigenwerte zu gewinnen. Diese Strategie ist immer dann erfolgreich, wenn die Konvergenz einer bekannten – oder leicht erkennbaren – analytischen Funktion folgt. Betrachten wir zunächst den zweiten Peak, der dem quantenmechanischen Eigenwert ( $n = 1, \ell = 1$ ) entspricht. Dabei wird das TxR-Fenster verwendet. Der Einfluß der Fensterfunktion und des gewählten Peaks auf das Ergebnis wird im Anschluß behandelt. Zunächst wird der Einfluß von  $m_0$  auf die Peakposition bestimmt. Der Einfluß wird sich als klein herausstellen. Danach wird die Abhängigkeit von  $L_{max}$  ermittelt. Im letzten Schritt wird geprüft, ob die ermittelten Konvergenzeigenschaften von der gewählten Fensterfunktion abhängig sind.

### B.2.1 Einfluß von $m_0$ auf die Peakpositionen

Nach Kapitel 4.4 hat  $m_0$  nur Einfluß auf die Störpeaks. Einer dieser Störpeaks, die aus Abbildung 4.3 schon bekannt sind, ist in Abbildung B.1 vergrößert dargestellt. Hier wurde  $m_0 = 39$ ,  $L_{max} = 200, 400$  bzw.  $800$  und das TxR-Fenster gewählt. Dieser Störpeak ist für alle Störpeaks mit  $m_0 \geq 8$  typisch<sup>1</sup>. Um ihn isoliert betrachten zu können, wurden zunächst die Hauptpeaks nach Gleichung 4.12 subtrahiert. Diese Differenz (die in Abbildung 4.6 dargestellt ist) wurde noch vom lineare Anteil des „Sägezahns“ befreit.

Im linken Diagramm erkennt man, daß die Peakhöhen proportional zu  $1/\sqrt{L_{max}}$  sind. Das entspricht der in Gleichung A.5 hergeleiteten Abhängigkeit. Die Ausschnittvergrößerung (rechtes Bild) zeigt, daß die langreichweitigen Peakausläufer aber proportional zu  $1/L_{max}$  sind. Der gesamte Peak skaliert noch mit  $m_0^{-2}$ , wie aus Gleichung 4.11 hervorgeht. Die langreichweitigen Ausläufer der Störpeaks werden die Positionen der Nachbarpeaks verschieben.

Betrachten wir zunächst die Abhängigkeit dieser Verschiebung von  $m_0$ . Die Höhen der Störpeaks skalieren mit  $m_0^{-2}$ . Falls sich die Positionen der Störpeaks nicht ändern, ist die erwartete Verschiebung der Nachbarpeaks durch die Ausläufer daher auch proportional zu  $m_0^{-2}$ . In Abbildung B.2 sind die  $\text{POT}\kappa_i^{F,m_0}$  für das TxR-Fenster mit  $L_{max} = 100$

<sup>1</sup>Störpeaks zu kleinerem  $m_0$  werden asymmetrisch.

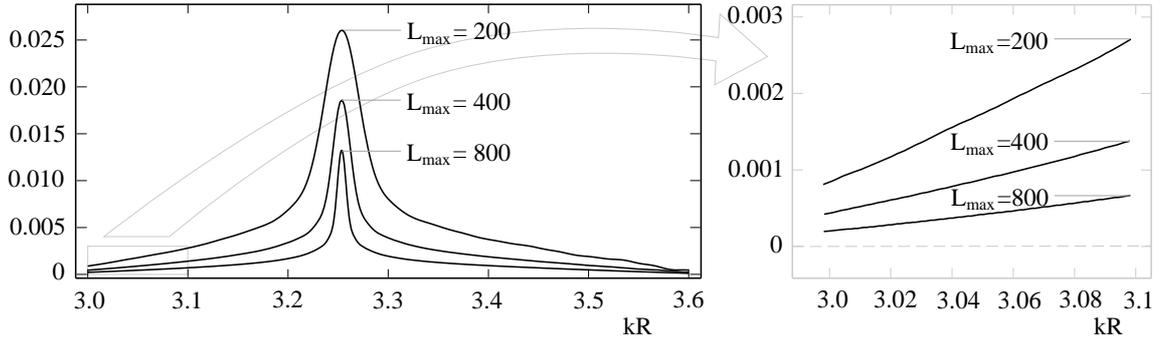


Abbildung B.1: Der Störpeak an 3.2535 für  $m_0 = 39$ ,  $L_{max} = 200$ , 400 bzw. 800. Die Hauptpeaks nach Gleichung 4.12 und der lineare Anteil des Sägezahns (vgl. Abbildung 4.6) wurden kompensiert. Die Peakhöhe ist proportional zu  $1/\sqrt{L_{max}}$  (linkes Bild), die langreichweitigen Ausläufer sind proportional zu  $1/L_{max}$  (rechtes Bild).

in Abhängigkeit von  $m_0$  aufgetragen. Dabei wurden Werte für  $m_0$  mit einer Schrittweite von  $\Delta m = 4$  berechnet, wodurch die Störpeakpositionen (siehe Gleichung 4.10) etwa konstant bleiben. Im linken Diagramm ist  $\kappa_1^{F,m_0}$ , also der Peak mit  $(n = 1, \ell = 0)$  darge-

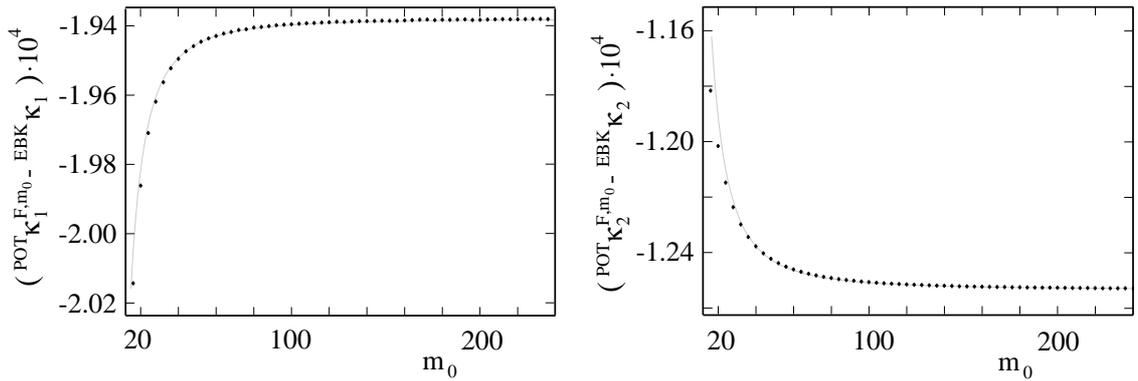


Abbildung B.2: Die Differenz der Peakpositionen  $\text{POT}_{\kappa_i}^{F,m_0}$  und der EBK-Eigenwerte  $\text{POT}_{\kappa_i}$  für den Peak  $i = 1$  ( $n = 1, \ell = 0$ , links) und  $i = 2$  ( $n = 1, \ell = 1$ , rechts) in Abhängigkeit von der maximal in der PO-Summe berücksichtigten Eckenzahl des primitiven Orbits  $m_0$ . Die Abhängigkeit folgt einem  $m_0^{-2}$ -Gesetz (graue Linie).

stellt, im rechten  $\kappa_2^{F,m_0}$ . Die  $\text{POT}_{\kappa_i}^{F,m_0}$  konvergieren gegen einen Grenzwert. Das zeigt, daß die Störpeaks die  $\kappa_i^{F,m_0}$  tatsächlich verschieben und die Verschiebung für verschwindende Störpeakhöhe gegen Null geht. An die berechneten Peakpositionen (Punkte) ist jeweils eine zu  $m_0^{-2}$  proportionale Funktion angepasst (blaue Linie). Die gute Übereinstimmung bestätigt, daß die Verschiebung proportional zu  $m_0^{-2}$  ist. Der Einfluß der Störpeaks auf die  $\text{POT}_{\kappa_i}^{F,m_0}$  ist ab  $m_0 = 40$  kleiner als  $2 \cdot 10^{-6}$ .

## B.2.2 Einfluß von $L_{max}$ auf die Peakpositionen

Der Einfluß der Störpeaks skaliert auch mit  $L_{max}$ . Die Störpeakausläufer sind proportional zu  $1/L_{max}$  (vergleiche Abbildung B.1). Die Breiten der Peaks hängen mit  $L_{max}^{-1}$  von  $L_{max}$  ab. Die Verschiebung der Peaks durch die Ausläufer der Störpeaks ist damit proportional zu  $L_{max}^{-2}$ .

Damit verschwindet der Einfluß der Störpeaks nicht nur mit  $m_0 \rightarrow \infty$ , sondern auch für beliebiges, festes  $m_0$  mit  $L_{max} \rightarrow \infty$ . Da der Wert von  $m_0$  nur die Störpeaks beeinflusst ist es möglich, den Grenzwert der Peakpositionen statt für  $m_0 \rightarrow \infty$  und  $L_{max} \rightarrow \infty$  auch für festes  $m_0$  zu bestimmen, wenn man  $L_{max}$  gegen unendlich extrapoliert. Da dieser Grenzwert einfacher zu bestimmen ist, wird dieser Weg eingeschlagen. Dafür wurde  $m_0 = 39$  gewählt. Der Einfluß der Störpeaks nach Abbildung B.2 ist dann schon relativ klein und der Rechenaufwand (der linear mit  $m_0$  ansteigt) noch vertretbar. Der gewählte Wert von 39 hat außerdem noch den Vorteil, daß sich die Störpeaks mit keinem der ersten 7 Peaks überlappen.

Für die Abhängigkeit der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  von  $L_{max}$  (außer dem diskutierten Effekt auf die Störpeaks) gibt es keinen analytischen Anhaltspunkt. Deshalb wird diese Abhängigkeit empirisch ermittelt.

Abbildung B.3(A1) auf Seite ix zeigt für  $L_{max} = 20 \dots 1000$  und  $m_0 = 39$  die Peakpositionen  ${}^{\text{POT}}\kappa_2^{F,m_0}$  (grün). Sie konvergieren monoton gegen einen Grenzwert (gestrichelte Linie). Durch die Vergrößerung von  $L_{max}$  verschieben sich die  ${}^{\text{POT}}\kappa_i$  ab  $L_{max} = 100$  noch um etwa  $2 \cdot 10^{-4}$ . Das ist um den Faktor 100 mehr als die Verschiebung aufgrund der Unterdrückung der Störpeaks, die oben diskutiert wurde. Die Abhängigkeit der Peakposition von  $L_{max}$  ist also deutlich größer als der Einfluß der Störpeaks.

Zur Bestimmung der funktionalen Abhängigkeit der Peakpositionen  ${}^{\text{POT}}\kappa_i$  von  $L_{max}$  soll nun eine Art graphische Taylorentwicklung durchgeführt werden. Dazu wird der Grenzwert<sup>2</sup>  $c_0$  der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  mit  $\Delta_0 := {}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0} - c_0$  kompensiert. In Abbildung B.3(A2) ist  $\Delta_0 \cdot L_{max}$  gegen  $L_{max}$  aufgetragen. Dieser Wert scheint gegen 0 zu konvergieren.  $\Delta_0 \cdot L_{max}^2$  in Abbildung B.3(A3) geht dagegen asymptotisch gegen einen Wert  $c_2 \neq 0$ . Der führende Term in der Abhängigkeit der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  von  $L_{max}$  ist also  $c_2 \cdot L_{max}^{-2}$ . Kompensiert man diese Abhängigkeit mit  $\Delta_2 := {}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0} - c_0 - c_1 L_{max}^{-2}$  und betrachtet in Abbildung B.3(A4)  $\Delta_2 \cdot L_{max}^3$ , so konvergieren diese Werte gegen  $c_3 \neq 0$ . Das zeigt, daß der nächste Term von der Ordnung  $L_{max}^{-3}$  ist. Ein Term der Ordnung  $L_{max}^{-4}$  (Abbildung B.3(A5)) ist nicht festzustellen, die Punkte streuen um den Wert 0. In Anhang B.1 wurde die Genauigkeit der Bestimmung der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  diskutiert. Für des TxR-Fenster ergab sich eine Proportionalität der Genauigkeit zu  $L_{max}^{-4}$ . Es ist daher wahrscheinlich, daß die beobachtete Streuung der Werte in Abbildung B.3(A5) durch die Genauigkeit des Fits der Peakpositionen hervorgerufen wird.

Das Konvergenzverhalten der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  folgt damit einer Abhängigkeit von  $L_{max}$  nach

$$t_i(L_{max}) = {}^{\text{EBK}}\kappa_i + c_0^i + \frac{c_2^i}{L_{max}^2} + \frac{c_3^i}{L_{max}^3} \quad . \quad (\text{B.3})$$

Jetzt ist noch zu untersuchen, ob das Konvergenzverhalten von der verwendeten Fensterfunktion abhängig ist.

---

<sup>2</sup>Die Werte für die  $c_i$  werden in Anhang B.3 bestimmt

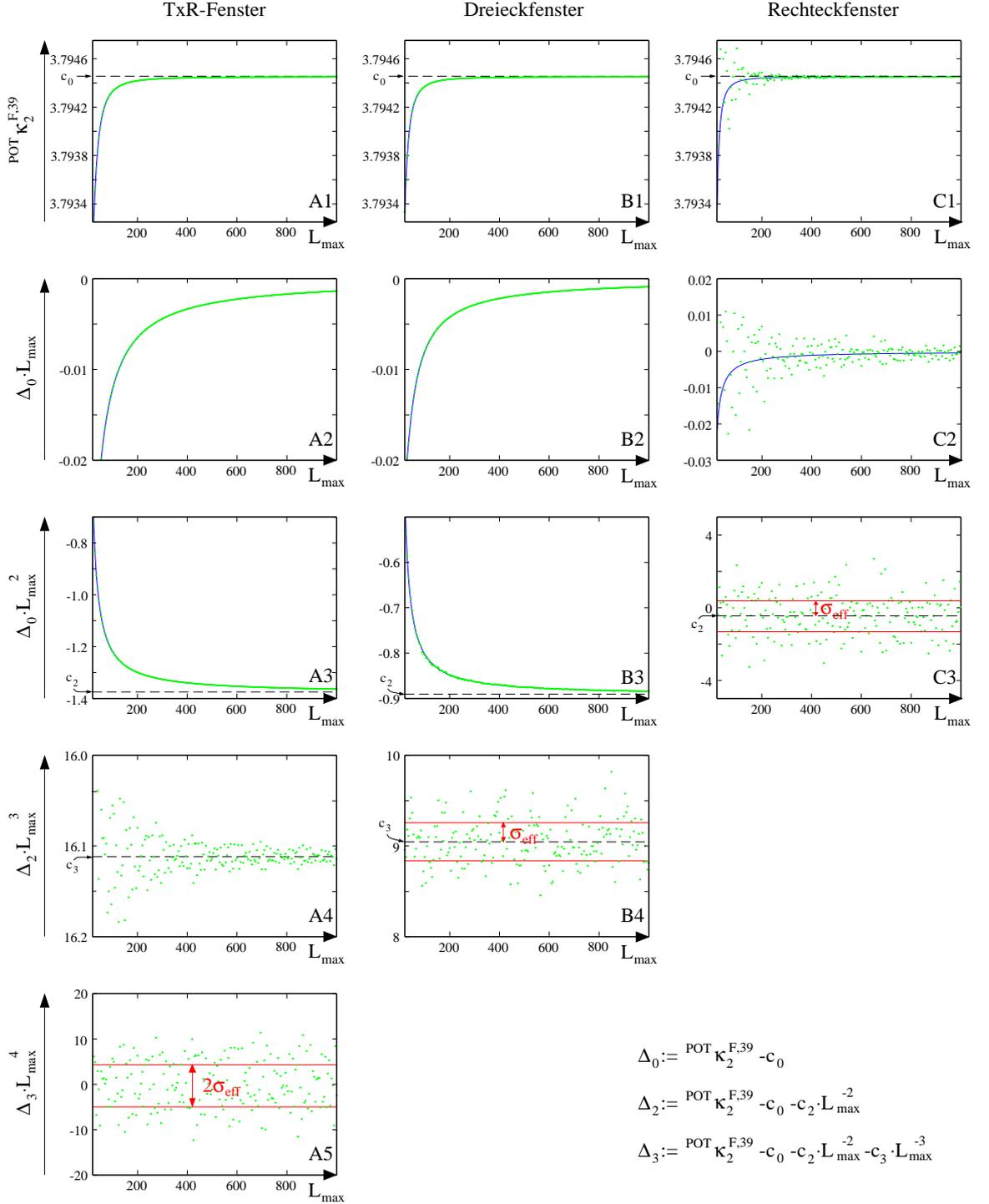


Abbildung B.3: Die Konvergenz der  $\text{POT}_{\kappa_2}^{F,m_0}$  (grün) für  $m_0 = 39$ . Von oben nach unten sind sukzessive die Beiträge von Termen  $L_{\max}^{-n}$  kompensiert. Höhere Terme als  $L_{\max}^{-3}$  werden nicht beobachtet. Aus der Streuung der Datenpunkte sind die effektiven Standardabweichungen der  $\text{POT}_{\kappa_2}^{F,m_0}$  abgeschätzt (rote Linien). Die angepassten  $t_i(L_{\max})$  sind als blaue Linien eingezeichnet.

### B.2.3 Abhängigkeit des Konvergenzverhaltens von der Fensterfunktion

In Abbildung B.3 sind die Diagramme, mit denen im letzten Abschnitt das Konvergenzverhalten für das TxR-Fenster ermittelt wurde auch für das Dreieckfenster (Spalte B) und

das Rechteckfenster (Spalte C) gezeigt. Der größte Unterschied zum TxR-Fenster ist die Steuerung der Datenpunkte: Beim Rechteckfenster ist diese  $\propto L_{max}^{-2}$ , beim Dreieckfenster  $\propto L_{max}^{-3}$ . Das bestätigt die Überlegungen von Anhang B.1: Die in Anhang B.1 abgeschätzte Genauigkeit der ermittelten Peakpositionen hat genau dieselbe Abhängigkeit von  $L_{max}$  wie die beobachteten Streuungen. Beim Rechteckfenster sind die Streuungen so groß, daß die Beobachtung des  $L_{max}^{-3}$ -Terms schon nicht mehr möglich ist. Ansonsten wirkt sich die Wahl der Fensterfunktion zwar auf die Werte der  $c_j$ , nicht jedoch auf die Form von Gleichung B.3 aus. Die anderen untersuchten Peaks verhalten sich völlig äquivalent, so daß unabhängig vom Peak und von der Fensterfunktion das Konvergenzverhalten der Peakposition durch Gleichung B.3 beschrieben werden kann.

### B.3 Bestimmung der asymptotischen Peakpositionen

In Anhang B.2 wurde gezeigt, daß sich die Abhängigkeit der Peakpositionen  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  von  $L_{max}$  durch Gleichung B.3 beschreiben läßt. Diesem Verhalten sind aufgrund von Fit-ungenauigkeiten (vergleiche Anhang B.1) Streuungen proportional zu  $L_{max}^{-(\beta+2)}$  überlagert. Zur Bestimmung der POT-Eigenwerte  ${}^{\text{POT}}\kappa_i$  wird daher eine Funktion der Form (B.3) mit gewichtetem least-square-fit an die Peakpositionen angepaßt, die in Anhang B.1 berechnet wurden. Die Gewichtung der Datenpunkte wurde umgekehrt proportional zu ihrer geschätzten Genauigkeit, also proportional zu  $L_{max}^{(\beta+2)}$  gewählt. Beim Fit wurden nur die Werte mit  $L_{max} \geq 100$  berücksichtigt, da für zu kleine  $L_{max}$  die Peaks selber überlappen und dadurch eine starke Korrelation der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  bewirken, die sich negativ auf die Genauigkeit auswirkt. Beim Rechteckfenster erscheint es aufgrund der großen Streuung nicht sinnvoll, einen  $L_{max}^{-3}$ -Term anzupassen. Für dieses Fenster wurde  $c_3 \equiv 0$  gesetzt; für die anderen Fensterfunktionen wurden  $c_1$ ,  $c_2$  und  $c_3$  angepaßt. Die Berechnung der Abstandsfunktion wurde in FORTRAN durchgeführt, zur Minimierung selbst wurde wieder MINUIT eingebunden. Die Rechengenauigkeit war auch hier *Double Precision*.

Es wurden die ersten 7 Peaks bei  $m_0 = 39$  bis  $L_{max} = 1000$  mit einer Schrittweite  $\Delta L_{max} = 5$  gefittet. Diese Rechnung wurde für das Rechteck-, das Dreieck- und das TxR-Fenster durchgeführt. Die Ergebnisse für die  $c_0$  sind in Tabelle 4.6 auf Seite 34 zusammengefaßt.

In Abbildung B.3 sind blau die Fitkurven  $t_2(L_{max})$  mit eingezeichnet. Die gute Übereinstimmung mit den  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  (grün) bestätigt die Wahl der Fitfunktion nach Gleichung B.3. Zur Abschätzung der Genauigkeit der berechneten  $c_j$  muß man annehmen, daß die Streuung der  ${}^{\text{POT}}\kappa_i^{F,m_0}$  einer Gauss-Verteilung folgt. Kennt man dann die Standardabweichungen der einzelnen Werte, so kann man daraus die Standardabweichung der  $c_j$  bestimmen. Die „effektive Standardabweichung“ der  ${}^{\text{POT}}\kappa_2^{F,m_0}$  wurden aus den Abbildung<sup>3</sup> B.3(A5,B4,C3) (rote Linien) bestimmt. Damit wurden die in Tabelle 4.6 angegebenen Fehler bestimmt. Diese Fehlerabschätzung kann nur ein grober Anhaltspunkt sein, da die Unsicherheit in der Wahl der Fit-Funktion  $t_i(L_{max})$  auf diese Weise nicht berücksichtigt werden kann. Die Wahl von  $t_i(L_{max})$  nach Gleichung B.3 kann nur durch die Beobachtungen dieses Anhangs, speziell von Abbildung B.3 gerechtfertigt werden. Deshalb wurde das Verfahren so ausführlich geschildert.

---

<sup>3</sup>und analogen Plots für die anderen ( $i \neq 2$ ) Peaks

# Anhang C

## Nullstellenbestimmung von ${}_1F_1$

Eine numerische Nullstellenbestimmung benötigt zwei Schritte: Zunächst wird die Lage der Nullstelle abgeschätzt. Diese Schätzung wird dann iterativ verbessert, bis die gewünschte Genauigkeit erreicht ist. Ein schneller Algorithmus fordert daher eine möglichst gute Schätzung der Nullstelle und eine schnell konvergierende Iteration. Da der hier verwendete Algorithmus in beiden Punkten nicht dem Standard-Verfahren entspricht, wird er kurz vorgestellt.

### C.1 Abschätzung der Nullstelle

Zur Interpolation einer Nullstelle der hypergeometrischen Funktion  ${}_1F_1(-\alpha_n, 1 + |l|, x_0)$  werden vier Abschätzungen eingesetzt:

1. Die Nullstellen sind bei Darstellung in  $\sqrt{\alpha_{n,l}}$  sehr gut linear in  $l$ . Die Nullstelle  $\alpha_{n,l}$  kann daher mit

$$\alpha_{n,l} \approx \left( -2\sqrt{-\alpha_{n,l-1}} - \sqrt{-\alpha_{n,l-2}} \right)^2 \quad (\text{C.1})$$

abgeschätzt werden.

2. Für große  $(-\alpha)$  ist das asymptotische Verhalten von  ${}_1F_1$  (vergleiche [1])

$$\begin{aligned} {}_1F_1(-\alpha_n, 1 + |l|, x_0) &\approx \Gamma(1 + |l|) e^{x_0/2} \cdot \left( \frac{1 + |l|}{2} x_0 + \alpha x_0 \right)^{-|l|/2} \\ &\cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos \left( \sqrt{2(1 + |l|)x_0 + 4\alpha x_0} - \frac{1 + |l|}{2} \pi + \frac{\pi}{4} \right) \quad . \quad (\text{C.2}) \end{aligned}$$

Die Lage einer Nullstelle läßt sich damit durch

$$-\alpha_{n,l} \approx \left( \frac{\pi}{2\sqrt{x_0}} + \sqrt{\frac{1 + |l|}{2} + \alpha_{n-1,l}} \right)^2 - \frac{1 + |l|}{2} \quad (\text{C.3})$$

interpolieren.

3. Aus dem asymptotischen Verhalten ergibt sich ein im Grenzwert konstanter Abstand der Wurzeln der Nullstellen mit steigendem  $n$ . Daher ist

$$\sqrt{\alpha_{n,l}} \approx \sqrt{\alpha_{n-1,l}} - \frac{\pi}{2\sqrt{x_0}} \quad . \quad (\text{C.4})$$

4. Für große  $x_0$  und kleine  $|l|$ , d.h. im Bereich der Landau-Quantisierung, ist der Nullstellenabstand etwa 1:

$$\alpha_{n,l} \approx \alpha_{n-1,l} - 1 \quad (\text{C.5})$$

Da die unterste Nullstelle der hypergeometrischen Funktion in  $(-\alpha)$  monoton in  $|l|$  steigt, ist es zur Bestimmung aller Nullstellen unter einer gegebenen Schranke sinnvoll, zunächst alle Nullstellen zu  $|l| = 0$  unter diesem Wert zu bestimmen und dann zu  $|l| \rightarrow |l| + 1$  überzugehen. Abschätzung (1) ist bei weitem die exakteste und wird nach Möglichkeit verwendet, d.h. normalerweise für  $|l| \geq 2$ . Andernfalls wird geprüft, welche der Näherungen (2-4) im letzten Schritt  $n \rightarrow n + 1$  das genaueste Ergebnis geliefert hätte. Diese wird dann für den nächsten Schritt verwendet.

Der starke Zusammenhang zwischen den Eigenwerten für verschiedenen Feldstärken wurde bewußt nicht verwendet. Dieser Zusammenhang gibt die Möglichkeit einer einfachen Überprüfung der Vollständigkeit: Fehlende Eigenwerte wären in Abbildungen wie 5.1 als Lücken in den Linien erkennbar. Das ist nicht der Fall, das Eigenwertspektrum wurde also vollständig berechnet.

## C.2 Iterative Verbesserung der Nullstelle

Die so abgeschätzte Lage der Nullstelle soll nun iterativ verbessert werden. Dazu sind viele verschiedene Algorithmen bekannt. Um Instabilitäten der Iteration mit Sicherheit auszuschließen, wird ein sogenanntes „bracketing“-Verfahren verwendet, d.h. ein Algorithmus, der stets ein Intervall bestimmt, innerhalb dessen die Funktion das Vorzeichen wechselt. Durch die gute erste Schätzung ist es möglich, ein sehr schnell konvergierendes Verfahren zu verwenden:

Aus dem Intervall  $[x_1, x_2]$ , in dem der Vorzeichenwechsel stattfindet und den Funktionswerten an den Intervallgrenzen  $[y_1, y_2]$ , die aus dem letzten Iterationsschritt bekannt sind, wird die Lage der Nullstelle zunächst durch lineare Interpolation abgeschätzt (vergleiche Abbildung C.1). Durch der Funktionswert  $y_t$  an diesem Punkt  $x_t$  wird eine Gerade mit der

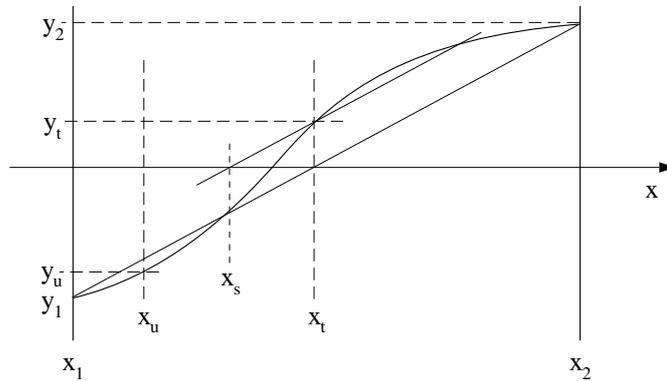


Abbildung C.1: Der zur iterativen Verbesserung der Nullstellenschätzung eingesetzte Algorithmus. Die Bezeichnungen sind im Text erklärt.

Steigung der Interpolationsgeraden gelegt. Deren Schnittpunkt mit der x-Achse ist  $x_s$ . An  $x_{t2} = 2x_t - x_s$  wird  ${}_1F_1$  nochmals ausgewertet. Das neue Suchintervall ist das Teilintervall, das innerhalb von  $[x_1, x_2]$  liegt und in dem der Vorzeichenwechsel von  ${}_1F_1$  liegt.

Dieser Algorithmus benötigt je Iterationsschritt zwei Funktionsaufrufe. Falls das übergebene Intervall bereits so klein war, daß die Funktion innerhalb nahezu linear ist, ist dieses Verfahren sehr effizient. In diesem Fall (für den das Verfahren konstruiert ist) ist das neue Intervall  $[x_u, x_t]$ . Dieses Intervall ist dann typischerweise um den Faktor  $10^3$  bis  $10^6$  kleiner als das Ausgangsintervall  $[x_1, x_2]$ . Die meisten Nullstellen können so mit ein oder zwei Iterationen auf  $10^{-6}$  genau bestimmt werden. Dazu sind dann 4-6 Auswertungen von  ${}_1F_1$  nötig.

Wie für alle schnellen Verfahren gibt es Spezialfälle, in denen sie nicht oder nur sehr langsam konvergieren. Das wird in jedem Schritt überprüft. Falls ein solcher Fall eintritt, wird zum Intervallhalbierungsverfahren gewechselt. Das Intervallhalbierungsverfahren ist das schnellste Vorgehen, das seine Konvergenzgeschwindigkeit auch unter ungünstigen Bedingungen garantiert. Für eine Verkleinerung des Suchintervalls um den Faktor  $10^6$  sind dann allerdings über 20 Berechnungen von  ${}_1F_1$  nötig. Falls das Intervallhalbierungsverfahren ein gut lineares Verhalten im Suchintervall feststellt, wird daher wieder zum anderen Algorithmus gewechselt.

Zur Berechnung der hypergeometrischen Funktion  ${}_1F_1$  wurde die in MATHEMATICA integrierte Routine verwendet.



# Literaturverzeichnis

- [1] Abramowitz, M. und Stegun, I. A., *Handbook of mathematical functions*, Dover publications, New York (1990)
- [2] Al-Gwaiz, M. A., *Theory of distributions*, Marcel Dekker Inc., New York
- [3] Balian, R., und Bloch, C., *Ann. of Phys.* **60**, 401 (1970); **63**, 592 (1971); **64**, 271 (1971);
- [4] Balian, R., und Bloch, C., *Ann. of Phys.* **69**, 76 (1972); **85**, 514 (1974)
- [5] Baltès, H. P., und Hilf, E. R., *Spectra of finite Systems*, Bibliographisches Institut, Mannheim (1972)
- [6] Berry, M. V., und Tabor, M., *Proc. R. Soc. Lond. A.* **349**, 101 (1976); **356**, 375 (1977)
- [7] Berry, M. V., und Robnik, M., *J. Phys. A* **19**, 649 (1986)
- [8] Brack, M., Bhaduri, R. K., Meier, Ch., Law, J., und Murthy, M. V. N., *Chaos* **5**, 317 (1995)
- [9] Brack, M., und Jain, S. R., *Phys. Rev. A* **51**, 3462 (1995)
- [10] Brillouin, M. L., *J. phys. radium* **6**, 353 (1926)
- [11] Bronstein, I. N. und Semendjajew, K. A., *Taschenbuch der Mathematik*, G. Teubner, Leipzig (1979)
- [12] Creagh, S. C., *Trace formula for broken symmetry*, *Ann. Phys. (NY)* (1995)
- [13] Creagh, S. C., Robbins, J. M., und Littlejohn, R. G., *Phys. Rev. A* **42**, 1907 (1990)
- [14] Creagh, S. C., und Littlejohn, R. G., *Phys. Rev. A* **44**, 836 (1990); *J. Phys. A* **25**, 1643 (1991)
- [15] Date, G., Jain, S. R., und Murthy, M. V. N., *Phys. Rev. E* **51**, 198 (1995)
- [16] Einstein, A., *Deut. Phys. Ges.* **19**, 82 (1917)
- [17] Gaspard, P. und Alonso, D., *Phys. Rev. A* **47**, R3468
- [18] Geerinckx, F., Peeters, M. und Devreese, J. T., *J. Appl. Phys.* **68**, 3435 (1990)
- [19] Gutzwiller, M. C., *J. Math. Phys.* **8**, 1979 (1967); *J. Math. Phys.* **10**, 1004 (1969)
- [20] Gutzwiller, M. C., *J. Math. Phys.* **11**, 1791 (1970); *J. Math. Phys.* **12**, 343 (1971)

- [21] Gutzwiller, M. C., *Chaos in classical and Quantum mechanics*, Springer Verlag, New York (1990)
- [22] Harris, F.J., Proceedings of the IEEE **66**, 51 (1978)
- [23] Hinsin, G., *Abtastsätze mit unregelmäßigen Stützstellen*, Dissertation, Universität Aachen (1991)
- [24] Johnson, M. und Grincwajg, A., Appl. Phys. Lett. **51**,1729 (1987)
- [25] Keller, J. B., Ann. of Phys. **4**, 180 (1958)
- [26] Keller, J. B., und Rubinov, S. I., Ann. of Phys. **9**,24 (1960)
- [27] Klama, S. und Rößler, U., Ann. Physik **1**, 460 (1992)
- [28] Kramers, H. A., Zeits. f. Physik **39**, 828 (1926)
- [29] Morette, C., Phys. Rev. **81**, 848 (1951)
- [30] Ozorio de Almeida, A. M. und Hannay, J. H., J. Phys. A **20**, 5873 (1987)
- [31] Persson, M., *Electron Transport in Mesoscopic Semiconductor Nanostructures*, Dissertation, Chalmers University of Technology, Göteborg (1994) (unveröffentlicht)
- [32] Prosen, T. and Robnik, M., J. Phys. A: Math. Gen. **26**, L37-L44 (1993)
- [33] Reimann, S. M., Brack, M., Magner, A. G., Blaschke, J., Murthy, M. V. N., Phys. Rev. A **53**, 39 (1996)
- [34] Reimann, S. M., Persson, M., Lindelof, P. E., und Brack, M., Z. Phys. B (im Druck)
- [35] Reimann, S. M., *Elektronische Schalen effekte in mesoskopischen Systemen*, Dissertation, Universität Regensburg (1995)
- [36] Robnik, M., J Phys. A **19**, 3619 (1986)
- [37] Schrödinger, E., Die Naturwissenschaften **48**, 52 (1935)
- [38] Sieber M., Chaos **2**, 35 (1992);  
Sieber, M. und Steiner, F., Phys. Rev. Lett. **67**, 1941 (1991);  
Matthies, C. und Steiner, F. , Phys. Rev. A **44**, R7877 (1991).
- [39] Strutinsky, V. M., Nukleonika **20**, 679 (1975)  
Strutinsky, V. M., und Magner, A. G., Sov. J. Part. Nucl. **7**, 138 (1976)
- [40] Tatjevski, B.,Staempfli, P. und Bennemann, K. H., Comp. Mat. Sci. **2**, 459 (1994)  
Tatjevski, B., *Berechnung der elektronischen Schalenstruktur der Kugel, des Kreises, des Ringes und anderer Geometrien*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (1993) (unveröffentlicht)
- [41] von Oppen, F., Dissertation, University of Washington (1993) (unveröffentlicht)
- [42] Voros, A., J. Phys. A**21**, 685 (1988)
- [43] Van Vleck, J. H., Proc. Natl. Acad. Sci. USA **14** 178 (1928)

- [44] Walter, W., *Analysis I*, Springer Verlag, Berlin (1990)
- [45] Walter, W., *Einführung in die Theorie der Distributionen*, Bibliographisches Institut AG, Zürich (1974)
- [46] Wentzel, G., *Zeits. f. Physik* **38**, 518 (1926)



Herrn Prof. Dr. Matthias Brack, bei dem ich während dieser Diplomarbeit nicht nur viel gelernt habe, sondern der mich auch mit seinem Spaß an der Physik angesteckt hat,

Stephen Creagh, der mir mit seiner Geduld, Hilfsbereitschaft und seinem didaktischen Geschick über die Tücken der Semiklassik hinweggeholfen hat,

Thomas, Steffi, Peter für die angenehme Zusammenarbeit in der Arbeitsgruppe,

Wolfgang, Thomas und Fritz, die mir nach meinen Bruchlandungen aufgrund meines untrüglichen Sinns für die Möglichkeiten, ein Programm nicht ordnungsgemäß zu benutzen, immer wieder aufgeholfen haben,

Anja, Caren und Steffi für das Aufspüren von Rechtschreibfehlern und die Hinweise auf die wildesten Gedankensprünge und Satzverknüpfungen, die dem Leser dieser Version dadurch erspart bleiben,

dem Cafe-E-Team für leibliche Verpflegung zu allen Tages- und Nachtstunden und für die großen Tassen mit heißem Tee zum Händwärmen an den kalten Sonntagnachmittagen vor dem Rechner,

und natürlich ganz besonders bei Didi, der Farbe in diese Arbeit gebracht hat und bei so vielen Punkten dieser Liste genannt werden müßte,

daß ich ihn zusammenfassend einmal, aber ganz besonders erwähnen möchte.

Ihnen allen ein dickes

# Dankeschön

Si on est arrivé à la dernière page,

on ferme le livre.