

# Semiklassische Näherungen zur Spin-Bahn Kopplung



Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften  
(Dr. rer. nat.)  
der naturwissenschaftlichen Fakultät II - Physik  
der Universität Regensburg

vorgelegt von  
Christian Amann  
aus Aidenbach

2001

Die Arbeit wurde von Prof. Dr. M. Brack angeleitet.  
Das Promotionsgesuch wurde am 02.05.2001 eingereicht.  
Das Kolloquium fand am 03.07.2001 statt.

Prüfungsausschuss:	Vorsitzender:	Prof. Dr. D. Göritz
	1. Gutachter:	Prof. Dr. M. Brack
	2. Gutachter:	PD Dr. M. Suhrke
	weiterer Prüfer:	Prof. Dr. K. Richter

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Klassische Dynamik</b>	<b>9</b>
2.1	Hamiltonsche Systeme . . . . .	9
2.2	Diskrete Erhaltungsgrößen . . . . .	11
2.3	Stabilität von periodischen Bahnen . . . . .	11
2.4	Die reduzierte Monodromiematrix für $D = 3$ . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Semiklassische Näherungen</b>	<b>17</b>
3.1	EBK-Quantisierung . . . . .	17
3.2	Der glatte und der oszillatorische Teil der Zustandsdichte . . . . .	18
3.3	Spurformeln . . . . .	19
3.3.1	Die Gutzwillersche Spurformel . . . . .	19
3.3.2	Spurformeln für Systeme mit Symmetrien . . . . .	20
3.3.3	Semiklassische Störungsrechnung . . . . .	21
3.4	Die Fouriertransformierte von $\delta g(E)$ . . . . .	21
3.5	Semiklassische Näherungen zur LS-Kopplung . . . . .	23
3.5.1	Die Fälle schwacher und starker Kopplung . . . . .	24
3.5.2	Die Methode nach Littlejohn/Flynn . . . . .	25
3.5.3	Der exakte Zugang von Bolte und Keppeler . . . . .	29
3.5.4	Vergleich von SCL und WCL . . . . .	33
<b>4</b>	<b>LS-Kopplung im 2-dim. Elektronengas</b>	<b>35</b>
4.1	Ursprung der Spin-Bahn Kopplung im 2DEG . . . . .	36
4.2	Der Fall mit periodischen Randbedingungen . . . . .	37
4.3	Das 2DEG im harmonischen Potentialtopf . . . . .	41
4.3.1	Die semiklassische Behandlung mit der WCL-Methode . . . . .	43
4.3.2	Vergleich von $\delta g_{SK}(E)$ mit $\delta g_{QM}(E)$ . . . . .	46
4.3.3	EBK-Quantisierung . . . . .	46

<b>5</b>	<b>3-dim. Oszillator mit LS-Kopplung</b>	<b>51</b>
5.1	Quantenmechanische Eigenschaften . . . . .	53
5.2	Dynamik der Systeme $H_0 \pm \kappa \mathbf{C} $ . . . . .	55
5.2.1	Planare Bahnen . . . . .	57
5.2.2	3-dim. Bahnen . . . . .	59
5.2.3	Stabilitätsverhalten . . . . .	61
5.2.4	Bifurkationen . . . . .	62
5.3	Semiklassische Beschreibung . . . . .	65
5.3.1	Der glatte Anteil . . . . .	65
5.3.2	Exakte Spurformeln für die integrablen Grenzfälle . . . . .	65
5.3.3	Numerische Auswertung der Spurformel . . . . .	69
5.3.4	Semiklassische Störungsrechnung . . . . .	73
<b>6</b>	<b>Mode-Conversion</b>	<b>77</b>
6.1	Auftreten von Mode-Conversion . . . . .	77
6.2	Globale Mode-Conversion . . . . .	78
6.2.1	Periodische Bahnen entlang MC Flächen . . . . .	78
6.2.2	Das Verhalten in der Nähe von $\kappa = 0$ . . . . .	79
6.3	Lokale Mode-Conversion . . . . .	81
6.3.1	Fouriertransformierte des Quantenresultates . . . . .	81
6.3.2	WCL-Methode . . . . .	83
6.3.3	Das Auftreten von Mode-Conversion bei der SCL-Methode . . . . .	83
6.3.4	Dia- und adiabatische Hamiltonfunktion . . . . .	86
6.3.5	Parabolische Mode-Conversion . . . . .	89
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>93</b>
<b>A</b>	<b>Bezeichnungen</b>	<b>95</b>
<b>B</b>	<b>Maslov-Index im 3-dim. Oszillator</b>	<b>97</b>
<b>C</b>	<b>Lösung von Dgl. (4.22)</b>	<b>99</b>
<b>D</b>	<b>Modulationsfaktor</b>	<b>101</b>
<b>E</b>	<b>Numerische Auswertung der Spurformel</b>	<b>105</b>
E.1	Bahnensuche . . . . .	105
E.2	Wirkung, Stabilitätsamplitude und Maslov-Index . . . . .	107
E.2.1	Bestimmung von $\mu$ . . . . .	107
E.2.2	Bestimmung von $\nu$ . . . . .	108
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>109</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

*... mit anderen Worten müssen wir im allgemeinen annehmen, daß man einem Elementarteilchen in der Quantenmechanik einen gewissen Eigen-Drehimpuls zuschreiben kann, der mit der Bewegung des Teilchens im Raum nichts zu tun hat. Diese Eigenschaft ist eine spezifische Quanteneigenschaft (die beim Übergang  $\hbar \rightarrow 0$  verschwindet...) und erlaubt prinzipiell keine klassische Interpretation... [Lan 74].*

Diese Textpassage entstammt aus dem Lehrbuch von Landau/Lifschitz und spiegelt den offensichtlichen Konflikt wieder, den eine semiklassische Theorie des Spins haben sollte.<sup>1</sup> Es stellt sich jedoch heraus, dass, ebenso wie im spinfreien Fall eine semiklassische Theorie Quanteneffekte in Termen klassischer Mechanik erklären kann, auch eine **Integration des Quanteneffekts Spin in eine semiklassische Theorie möglich ist**. Allerdings geschieht dies nicht immer im vertrauten Bild eines sich rotierenden Teilchens.

Der Ursprung der Semiklassik (SK) -darunter versteht man Näherungen, die sich im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  ergeben- reicht mit Einführung der Bohrschen Quantisierungsbedingung noch vor Beginn der Quantenmechanik (QM) zurück. Die Forderung, dass der Bahndrehimpuls nur ganzzahlige Vielfache von  $\hbar$  annehmen darf, erklärte erfolgreich das Termschema des Wasserstoffs und dazu ähnlicher Atome. Auch der Spin tritt bereits in dieser „Alten Quantenmechanik“ in Erscheinung. Erstmals von Pauli 1925 abstrakt als eine „Vierte Quantenzahl“ eingeführt [Pau 25], wurde er kurz darauf von Uhlenbeck und Goudsmith als die uns vertraute Elektroneneigenschaft interpretiert [Uhl 25].

Es zeigte sich jedoch bald, dass in beiden Punkten die klassischen Vorstellungen

---

<sup>1</sup>Mit Spin ist stets der quantenmechanische Spin gemeint

aufgegeben werden mussten. So scheiterte die Energiequantisierung bereits am Helium, dem zweiten Element des Periodensystems. Auch die Vorstellung eines sich rotierenden Elektrons führte zu Widersprüchen.

Die durch Heisenberg und Schrödinger eingeleitete „Neue Quantenmechanik“ lieferte dagegen eine vereinheitlichte Theorie. Sie rechtfertigt in der WKB-Näherung nicht nur das von Bohr ursprünglich ad-hoc eingeführte Postulat, sondern kennt auch keine fundamentalen Schwierigkeiten, die sich bei Behandlung von klassisch nicht integrierbaren Systemen stellen. Die von Dirac begründete relativistische Wellenmechanik lieferte zudem eine natürliche Forderung nach dem Spin. Die nichtrelativistische Näherung dieser Gleichung führt einer zweikomponentigen Gleichung, der auch einen Term  $\sim (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s}$  enthält. Dabei werden die Bahnfreiheitsgrade  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{p}$  auf nichttriviale Art an die des Spins  $\mathbf{s}$  gekoppelt, man spricht auch von einer Spin-Bahn Kopplung (LS-Kopplung). Die semiklassische Interpretation dieses Terms wird Hauptgegenstand der vorliegenden Arbeit sein. Die LS-Kopplung tritt dabei nicht nur in atomphysikalischen Problemen auf. Während sie dort meist relativ geringen Einfluss auf die Energieniveaus hat, ist sie bei einer korrekten Kernbeschreibung unbedingt notwendig. Mayer und Haxel zeigten, dass nur durch Hinzunahme dieses empirischen Terms Kernspektren und Schaleneffekte in einem Ein-Teilchen Modell richtig wiedergegeben werden können [May 48],[Hax 49].

Auf zunehmendes Interesse stößt die LS-Kopplung momentan in Halbleitersystemen. Insbesondere für zukünftige Entwicklungen, bei denen der Spin eine tragende Rolle spielen soll, bekommt die LS-Kopplung als Wechselwirkung zur Elektronenbewegung eine ganz besondere Bedeutung. Eine Eigenschaft, die solche Systeme besitzen ist, dass sie von den Größenordnungen her, in den Bereich der mesoskopischer Systeme fallen. Dieser Bereich zwischen Quanten- und klassischem Regime zeigt bereits Quanteneffekte. Diese können, aufgrund der Komplexität mit quantenmechanischen Mitteln allerdings nicht ohne weiteres behandelt werden.

Der Beschreibung solcher Systeme kam eine Entwicklung zugute, die 1971 Gutzwiller mit Einführung der nach ihm benannten Spurformel einleitete [Gut 71]. Diese lieferte das über 50 Jahre vermisste Gegenstück zur Bohr-Sommerfeld Quantisierung im Falle eines klassisch nicht integrierbaren Systems. Zentrale Rolle bei der Beschreibung von Quanteneffekten nehmen klassische periodische Bahnen ein. Man spricht auch von einer „Periodic-Orbit Theorie“ (POT). Die Bahnen beschreiben dabei Quantenfluktuationen gegenüber der gemittelten spektralen Dichte. Inzwischen wurden ähnliche Spurformeln an verschiedenste Situationen und Observablen, wie Gesamtenergie, Suszeptibilität oder Leitwerte, angepasst. Spurformel werden häufig benutzt im Zusammenhang mit theoretischen Fragestellungen und Experimenten aus dem Bereich des Quantenchaos (z.B. [Stö 99]). Sie erlauben aber auch eine sehr einfache klassische Interpretation von Schaleneffekten bei Kernen [Boh 79], Metallclustern [Nis 90] oder auch Quantendots [Bra 97c]. Weitergehende Anwendungen sind Transportprobleme, z.B. [Ric 95] oder Kernspaltungen [Bra 97b]. Auch das Helium-Problem kann

inzwischen als gelöst angesehen werden [Tan 00].

Bislang wurde in all solchen Anwendungen nichttriviale Spin-Effekte ausgeklammert, obwohl viele der semiklassisch beschriebenen Systeme bekanntermaßen eine starke LS-Kopplung aufweisen. Es stellt sich bei der Einbindung des Spins eine ganz ähnliche Problematik, wie bei der Übertragung des integrablen Falls zum nicht integrablen. Auch hier bedarf es auf Seiten der SK ganz neuer Methoden, während quantenmechanisch keine konzeptionelle Änderungen notwendig sind.

Eine naheliegendes Vorgehen, das zudem die Vorstellung eines sich rotierendes Teilchens unterstützt, basiert auf kohärenten Spinzustände. Klassische Bewegungsgleichungen in einem um zwei Dimensionen vergrößerten Phasenraum können daraus abgeleitet werden können. Diese Methode nimmt allerdings keine Rücksicht auf die diskrete Natur des Spins und die bisherigen Analysen beschränkten sich auf rein klassische Untersuchungen [Roz 92].

Andere Möglichkeiten der Einbindung wahren dagegen den quantenmechanischen Charakter des Spins. In diesem Sinne wurden bereits entsprechende Erweiterungen der Gutzwillerschen Spurformel vorgeschlagen [Lit 91],[Fri 93] und streng begründet [Bol 98]. Diese werden im Verlaufe dieser Arbeit näher untersucht. Die Hauptidee bei der Herleitung der modifizierten Spurformel besteht in einem WKB-ähnlichen matrixwertigen Ansatz. Dabei wird zwischen den Fällen schwacher und starker Kopplung unterschieden. Ein wichtiges Ziel dieser Arbeit wird sein, diese verschiedenen Arten einer Spineinbindung zu untersuchen. Neben analytisch zugänglichen Systemen, wo ein exakter Vergleich zu den entsprechenden Resultaten der QM möglich ist, werden auch kompliziertere, nicht integrable Fälle untersucht. Gerade bei diesen Fällen kommt neben der Anschaulichkeit einer semiklassischen Theorie auch noch der Vorteil einer erheblichen Reduzierung des Rechenaufwandes hinzu.

Im einzelnen gliedert sich die Arbeit wie folgt:

Kapitel 2 führt, soweit notwendig, in wichtige und häufig benötigte Begriffe und Eigenschaften von Hamiltonschen Systemen ein. Es wird auch ein spezielles 3-dim. Koordinatensystem vorgestellt, dass bei semiklassischen Untersuchungen von Vorteil sein kann. Kapitel 3 behandelt neben den allgemein bekannten semiklassischen Theorien wie EBK-Quantisierung und Spurformeln vor allem diejenigen, die eine Einbindung des Spins ermöglichen. Hier findet auch die Unterscheidung der Fälle schwacher und starker Kopplung statt. Es folgen zwei Kapitel, wo die vorgestellten Methoden an physikalisch motivierten Systemen angewendet werden. Im einzelnen sind dies 2-dim. Elektronengassysteme mit verschiedenen Einschlusspotentialen (Kapitel 4), sowie der allgemeine Fall eines 3-dim Oszillators mit LS-Kopplung (Kapitel 5). Gerade dieser ist ein sehr wichtiges System, da einerseits die natürliche Beschreibung eines Spins drei Dimensionen fordert, andererseits der Oszillator als harmonische Näherung von besonderer Bedeutung ist.

In Kapitel 5 wird abschließend noch das Problem der Mode-Conversion angesprochen, einem noch nicht befriedigend gelöstem Problem, das unter gewissen Umständen auftreten kann. Es werden dabei klassische Signaturen eines Spinflips erkannt.

# Kapitel 2

## Klassische Dynamik in Hamiltonschen Systemen

*Es folgt eine Einführung wichtiger Eigenschaften von Hamiltonschen Systemen. Daneben werden einige, bislang nur in zweidimensionalen Systemen gebräuchliche Begriffe, auf den  $D$ -dim. Fall erweitert. Abschließend wird ein spezielles 3-dim Koordinatensystems vorgestellt, das stets der Trajektorie folgt und gewisse Vorteile ergibt.*

### 2.1 Hamiltonsche Systeme

Viele Problemstellungen aus dem Bereich der Nichtlinearen Dynamik beschränken sich auf den Fall von höchstens zwei Freiheitsgraden,  $D = 2$ . Dies liegt daran, dass in konservativen Systemen dies der einfachste Fall ist, bei dem das dynamische Verhalten von regulär bis hin zu ergodisch sein kann.<sup>1</sup>

Physikalisch relevante Systeme besitzen oft mehr als diese zwei Freiheitsgrade, üblicherweise sind es drei, bei  $N$ -Teilchenproblemen sogar  $3N$ . Die nun folgende Einführung der Notation und Begriffen wird daher unabhängig von der Dimension formuliert. Die Themenauswahl orientiert sich nach dieser Arbeit und hat nicht den Anspruch auf Vollständigkeit. Dazu sei auf entsprechende Standardliteratur verwiesen, etwa [Arn 89], [Wig 90].

Die klassische Hamiltonfunktion  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  ist eine Funktion von den zueinander kanonisch konjugierten Koordinaten, Ort  $\mathbf{r}$  und Impuls  $\mathbf{p}$ . Kombiniert bilden sie den  $2D$ -komponentigen Phasenraumvektor  $\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$ . Davon abhängige Funktionen  $F$  werden wahlweise mit  $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  oder  $F(\boldsymbol{\gamma})$  bezeichnet.

---

<sup>1</sup>In dissipativen Systemen ist dies bereits in einer Dimension möglich [Sch 00].

Der Phasenraumvektor genügt den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen:

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}(t) = \mathbf{X}_H(\boldsymbol{\gamma}(t)) \quad (2.1)$$

wobei  $\mathbf{X}_H(\boldsymbol{\gamma}(t)) = \begin{pmatrix} \partial H / \partial \mathbf{p} \\ -\partial H / \partial \mathbf{r} \end{pmatrix}_{|\boldsymbol{\gamma}(t)}$  auch als Fluss bezeichnet wird.  $\boldsymbol{\gamma}(t)$  legt die

Phasenraumtrajektorie fest. In einem konservativem System läuft diese auf den Flächen konstanter Energie  $E$  und entlang der Bahn gilt  $H(\boldsymbol{\gamma}(t)) = E = \text{const.}$  Sind neben der Energie mindestens  $D - 1$  weitere unabhängige Erhaltungsgrößen vorhanden, so ist das System integrabel. Hier befinden sich die Trajektorien auf Phasenraumflächen, die topologisch typischerweise Zylinder- bzw. Torusstruktur besitzen. Ist das System abgeschlossen, so liegt ein  $D$ -Torus vor.

Bei nichtintegrablen Systemen unterscheidet man weiter zwischen ergodischen und solchen mit gemischtem Phasenraum.<sup>2</sup> Erstere liegen dann vor, wenn jede Trajektorie das gesamte Phasenraumvolumen gleichmäßig ausfüllt. In physikalischen Anwendungen sind jedoch gemischte Systeme die Regel. Hier existieren Phasenraumbereiche mit regulärer Bewegung, aber auch Bereiche des Chaos.

Zur Visualisierung und Gewinnung eines qualitativen Verständnisses der zugrundeliegenden Dynamik kann die Technik des Poincaré-Schnitts verwendet werden. Hierbei werden die positiv orientierten Schnittpunkte einer Trajektorie mit einem  $(2D - 1)$ -dim. Unterraum, (üblicherweise  $(r_i = 0)$ ,  $i = 1, \dots, D$ ) gebildet. Dessen Schnitt mit der Energieschale ergibt wiederum einen  $(2D - 2)$ -dim. Unterraum, den sogenannten Poincaré-Schnitt. Nur bei  $D = 2$  Problemen ist dieser wegen  $(2D - 2) = 2$  eine Ebene im eigentlichen Sinn. Für  $D > 2$  kann, solange keine weiteren Erhaltungsgrößen vorliegen, der  $(2D - 2)$ -dim. Schnittraum nicht mehr in der üblichen Weise dargestellt werden. Nur in Fällen mit ausreichender Anzahl an kontinuierlichen Erhaltungsgrößen gelingt dies wieder. Allerdings müssen hier für eine komplette Analyse Schnitte bei unterschiedlichen Werten der Erhaltungsgrößen erstellt werden. Dem Poincaré-Schnitt kann die zugrundeliegende Dynamik entnommen werden. In integrablen Systemen bilden sich 1-dim. Kurven aus, in ergodischen entstehen dagegen verrauschte flächige Strukturen. Im gemischten Fall sind beide Bereiche gemeinsam vorhanden, hier entstehen im Übergangsbereich selbstähnliche Strukturen.

Die Abbildung, die gemäß (2.1) einen Punkt der Poincaré-Ebene zum nächsten Schnittpunkt propagiert, heißt Poincaré-Abbildung. Fixpunkte von dieser bzw. derer iterierter Abbildung sind **periodischen Bahnen**. Sie werden mit  $\gamma_i$  bezeichnet, wobei  $i$  optional zur näheren Kennzeichnung dient. Diese schließen sich im Phasenraum mit der Periode  $T_\gamma$ , d.h.  $\boldsymbol{\gamma}_i(t) = \boldsymbol{\gamma}_i(t + T_\gamma)$  für alle  $t$ . Eine sehr wichtige

---

<sup>2</sup>Einen Sonderstatus nehmen pseudo-integrable Systeme ein, vgl. [Ric 81].

Eigenschaft von periodischen Bahnen wird durch deren klassische Wirkung

$$S_\gamma(E) = \int_\gamma \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \int_0^{T_\gamma} \mathbf{p}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}(t) dt \quad (2.2)$$

gegeben. Sie spielt eine wichtige Rolle bei der *EBK*-Quantisierung und in Spurformeln.

## 2.2 Diskrete Erhaltungsgrößen

Die Poincaré-Abbildung ist in der Regel kompliziert. Meist kann dafür kein geschlossener Ausdruck angegeben werden und muss durch numerische Integration von (2.1) bestimmt werden. Die Fixpunktsuche gestaltet sich, speziell in höherdimensionalen Systemen, entsprechend aufwendig. Ein Verfahren hierzu beschreibt Anhang E. Durch Existenz von Erhaltungsgrößen ergeben sich jedoch Vereinfachungen. Im folgenden werden Auswirkungen diskreter Erhaltungsgrößen diskutiert. Diese liegen vor, wenn eine Phasenraumtransformation  $P : \gamma \mapsto P(\gamma)$  die Hamiltonfunktion invariant lässt.

$$P(H(\gamma)) := H(P(\gamma)) = H(\gamma). \quad (2.3)$$

Damit folgt, dass mit jeder Lösung  $\gamma(t)$  der Bewegungsgleichung wegen

$$P\dot{\gamma}(t) = P(X_H(\gamma(t))) = X_H(P(\gamma(t))) \quad (2.4)$$

$P(\gamma(t))$  ebenfalls eine Lösung ist. Ist nun der Anfangswert von  $\gamma$  invariant unter  $P$ , so sind beide Bahnen zu jeder Zeit identisch

$$P(\gamma(0)) = \gamma(0) \Rightarrow P(\gamma(t)) = \gamma(t) \quad \text{für alle } t \quad (2.5)$$

Wäre dies nicht der Fall, so gäbe es zwei Lösungen von (2.1) mit gleichem Anfangswert, im Widerspruch zum Eindeutigkeitsatz. Dies führt dazu, dass bestimmte Bahnen ausschließlich auf den  $P$ -invarianten Unterräumen des Phasenraums existieren. Ist deren Dimension gering genug, so kann darauf ein Poincaré-Schnitt wenigstens ein Teilbild der Dynamik wiedergeben. Obwohl dadurch nur geringe Teile des Phasenraums abgedeckt sind, sind solche Unterräume gerade im Zusammenhang mit der POT sehr wichtig. In vielen Fällen finden sind gerade hier die relevanten Bahnen kurzer Periode.

## 2.3 Stabilität von periodischen Bahnen

Eine weitere wichtige Eigenschaft von periodischen Bahnen wird durch deren Stabilität gegeben. Sie beschreibt das Verhalten von Bahnen nach einem Umlauf, wenn

ihre Anfangsbedingungen gestört werden. In linearer Näherung vermittelt die Monodromiematrix den Zusammenhang zwischen Anfangs-  $\delta\gamma$  und Endvariation  $\Delta\gamma$ .

$$\Delta\gamma = M_\gamma \delta\gamma \quad (2.6)$$

Man beachte, dass  $M_\gamma$  nicht nur von der Bahn  $\gamma$  abhängt sondern auch vom gewählten Koordinatensystem. Eine mögliche Bestimmung kann durch Lösen der Dgl.

$$\dot{\mathcal{X}}(t) = JH''_{|\gamma(t)} \mathcal{X}(t), \quad \mathcal{X}(0) = \mathbb{1}_{2D} \quad (2.7)$$

$$\text{mit } H'' = \frac{\partial^2 H(\gamma)}{\partial \gamma^\dagger \partial \gamma}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_D \\ -\mathbb{1}_D & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

entlang der Bahn  $\gamma$  erfolgen. Die Hessematrix  $H''$  wird dabei entlang der Trajektorie  $\gamma(t)$  ausgewertet. Sie wird multipliziert mit der symplektischen Einheitsmatrix  $J$ .  $\mathcal{X}(t)$  ist der sogenannte Matrizziant. Zum Zeitpunkt der Periode entspricht er der Monodromiematrix, d.h.  $M = \mathcal{X}(T_\gamma)$ . Man kann zeigen (z.B. [Eke 90]), dass deren Eigenwerte  $\lambda_i$   $i = 1, \dots, 2D$  folgende Eigenschaften besitzen:

- Sie sind unabhängig von der gewählten Anfangsvariation  $\delta\gamma$ .
- $\lambda_i = 1$  für mindestens zwei  $i$ . Die zugehörigen Eigenvektoren sind einer längs des Flusses und ein weiterer senkrecht zur Energieschale. Weitere triviale Eigenwerte existieren bei Vorhandensein von kontinuierlichen Erhaltungsgrößen.
- Mit dem Eigenwert  $\lambda_i$  existieren stets auch die Eigenwerte  $\lambda_i^{-1}$  und  $\lambda_i^*$ . Dies folgt aus der Symplektizität des Matrizzianten  $X(t)$  bzw. von  $M$ .

Oft werden die Eigenwerte  $\lambda_i = 1$  herausgenommen und man bildet die reduzierte Monodromiematrix  $\tilde{M}$ . Alternativ wird sie auch als **Stabilitätsmatrix** bezeichnet.

$$M = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & * \\ & \ddots \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_{2(1+k)} & * \\ 0 & \tilde{M}_{2D-2(1+k)} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Die mit \* markierten Stellen bezeichnen beliebige Einträge. Die Dimension von  $\tilde{M}$  verringert sich bei Vorhandensein von  $k$  kontinuierlichen Erhaltungsgrößen auf  $2D - 2(k+1)$ . Im Falle von  $D = 2$  und  $k = 0$  ist wegen dem paarweise Auftreten von Eigenwerten ein eindeutiger Zusammenhang zwischen irgendeinem Eigenwert  $\lambda \neq 1$  und der Spur der Stabilitätsmatrix gegeben:

$$\text{tr } \tilde{M} = \lambda + \lambda^{-1} \quad (2.10)$$

Es hat sich eingebürgert diesen Ausdruck zur Charakterisierung der Stabilität einer Bahn zu verwenden. Dabei wird zwischen stabil ( $|\operatorname{tr} \tilde{M}| < 2$ ), marginal stabil ( $|\operatorname{tr} \tilde{M}| = 2$ ) und instabil ( $|\operatorname{tr} \tilde{M}| > 2$ ) unterschieden. Eine besondere Stellung nimmt der Wert ( $\operatorname{tr} \tilde{M} = 2$ ) ein. Hier kann es zu Bifurkationen isolierter periodischer Bahnen kommen. Dabei entstehen oder verschwinden Bahnen, wenn ein Parameter kontinuierlich verändert wird. In mehr als zwei Dimensionen gibt es **keinen eindeutigen** Zusammenhang zwischen  $\operatorname{tr} \tilde{M}$  und dem Stabilitätsverhalten einer Bahn<sup>3</sup>. Es lässt sich aber ein entsprechend verallgemeinerter Begriff einführen. Dazu werden, unter der Voraussetzung, dass alle Eigenwerte  $\neq 1$  mit ihrem inversen paarweise angeordnet sind, folgende Summen

$$\Lambda_i = \lambda_{2i} + \lambda_{2i-1} = \lambda_{2i} + \lambda_{2i}^{-1} \quad (2.11)$$

gebildet. Oder anders ausgedrückt,  $\Lambda$  summiert jeweils die zueinander inversen Eigenwerte.  $\Lambda$  wird als **Stabilitätswert** bezeichnet, vgl. Abb. 2.1. Es gilt der Zusammenhang

$$\operatorname{tr} \tilde{M} = \sum_{i=1}^{D-1-k} \Lambda_i. \quad (2.12)$$

Bei einem 2-dim. System mit  $k = 0$  reduziert sich daher  $\Lambda$  gerade auf  $\operatorname{tr} \tilde{M}$ . Weiterhin sei eingeführt:

Eine Bahn heiße

- **stabil** falls  $|\Lambda_i| < 2$  für alle  $i = 1, \dots, D - 1 - k$ .
- **instabil** falls  $|\Lambda_i| > 2$  für alle  $i = 1, \dots, D - 1 - k$ .
- **gemischt** stabil in allen anderen Fällen.

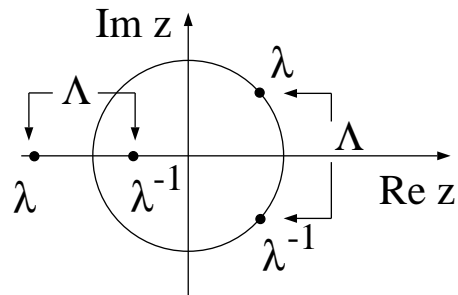


Abbildung 2.1: Der Stabilitätswert  $\Lambda$  ist die Summe der zueinander inversen Eigenwerte von  $\tilde{M}$ .

Gemischt stabile Bahnen zeigen, je nach Richtung der Störung im Phasenraum, sowohl stabiles als auch instabiles Verhalten. Man beachte jedoch, dass das stabile Phasenraumvolumen um einen Fixpunkt vom Maße Null ist, sobald  $\Lambda_i > 2$ ,  $i =$

<sup>3</sup>Es gilt zwar etwa im Falle  $D = 3$ :  $|\det(\tilde{M} - \mathbf{1})|^{1/2} = 2 - 2 \operatorname{tr} \tilde{M} + \frac{1}{2}(\operatorname{tr}^2 \tilde{M} - \operatorname{tr} \tilde{M}^2)$ . Hier wird aber neben  $\operatorname{tr} \tilde{M}$  auch die Kenntnis von  $\operatorname{tr} \tilde{M}^2$  benötigt.

$0, \dots, D - 1 - k$  gilt.

Bifurkationen treten im Fall  $D > 2$  dann auf, wenn  $\Lambda_i = 2$  für mindestens ein  $i = 1, \dots, D - 1 - k$  gilt. Im Zusammenhang mit Spurformeln wird es an diesen Punkten zu Divergenzen kommen, vgl. Ausdruck (3.4) und (3.5).

## 2.4 Die reduzierte Monodromiematrix für $D = 3$

Die Monodromiematrix eines Hamiltonschen Systems besitzt, wie bereits gesehen, stets die zwei trivialen Eigenwerte  $\lambda = 1$ . Diese entsprechen einem Eigenvektor der entlang der periodischen Bahn zeigt und einem weiteren senkrecht zur Energieschale. In vielen Anwendungen sind diese beiden Vektoren bedeutungslos, etwa bei der Bestimmung der Stabilitätsamplitude, oder sogar hinderlich, wie im Falle des Newton-Raphson Verfahrens zur Bahnsuche. Eckardt und Wintgen zeigten, wie durch Benutzung eines lokalen Koordinatensystem diese absepariert werden können [Eck91]. Die nun folgende Untersuchung verallgemeinert deren Idee auf den Fall  $D = 3$ . Es muss dazu eine lineare Koordinatentransformation gefunden werden, so dass die neuen Koordinaten folgende Eigenschaft zeigen.

1. Eine Koordinate zeigt längs der Bahn.
2. Eine weitere liegt senkrecht zur Energieschale.
3. Die verbleibenden vier sind paarweise kanonisch konjugiert, senkrecht untereinander und auch senkrecht zu 1. und 2.

Folgende Matrix vermittelt eine solche Abbildung. (Aus Platzgründen erfolgt ein Wechsel der Notation  $r_x = x, r_y = y, r_z = z, p_x = u, p_y = v, p_z = w$ ).

$$A = \begin{pmatrix} \dot{x} & \frac{\dot{y}^2 + \dot{z}^2 + \dot{v}^2 + \dot{w}^2 - \dot{u}\dot{v} - \dot{x}\dot{y}}{\alpha\beta} & \frac{-(\dot{x}-\dot{y})\dot{z} - (\dot{u}-\dot{v})\dot{w}}{\beta\gamma} & -\frac{\dot{u}}{\alpha^2} & \frac{-\dot{x}\dot{v} + \dot{y}\dot{u}}{\alpha\beta} & \frac{-(\dot{x}-\dot{y})\dot{w} + \dot{z}(\dot{u}-\dot{v})}{\beta\gamma} \\ \dot{y} & \frac{\dot{x}^2 + \dot{z}^2 + \dot{u}^2 + \dot{w}^2 - \dot{x}\dot{y} - \dot{u}\dot{v}}{\alpha\beta} & \frac{(\dot{x}-\dot{y})\dot{z} + (\dot{u}-\dot{v})\dot{w}}{\beta\gamma} & -\frac{\dot{v}}{\alpha^2} & \frac{\dot{x}\dot{v} - \dot{y}\dot{u}}{\alpha\beta} & \frac{-\dot{z}(\dot{u}-\dot{v}) + (\dot{x}-\dot{y})\dot{w}}{\beta\gamma} \\ \dot{z} & \frac{-(\dot{x}+\dot{y})\dot{z} - (\dot{u}+\dot{v})\dot{w}}{\alpha\beta} & \frac{\gamma}{\beta} & -\frac{\dot{w}}{\alpha^2} & \frac{(\dot{x}+\dot{y})\dot{w} - \dot{z}(\dot{u}+\dot{v})}{\alpha\beta} & 0 \\ \dot{u} & \frac{\dot{x}\dot{v} - \dot{y}\dot{u}}{\alpha\beta} & \frac{(\dot{x}-\dot{y})\dot{w} - \dot{z}(\dot{u}-\dot{v})}{\beta\gamma} & \frac{\dot{x}^2}{\alpha^2} & \frac{\dot{y}^2 + \dot{z}^2 + \dot{v}^2 + \dot{w}^2 - \dot{u}\dot{v} - \dot{x}\dot{y}}{\alpha\beta} & \frac{-(\dot{x}-\dot{y})\dot{z} - (\dot{u}-\dot{v})\dot{w}}{\beta\gamma} \\ \dot{v} & \frac{-\dot{x}\dot{v} + \dot{y}\dot{u}}{\alpha\beta} & \frac{\dot{z}(\dot{u}-\dot{v}) - (\dot{x}-\dot{y})\dot{w}}{\beta\gamma} & \frac{\dot{y}^2}{\alpha^2} & \frac{\dot{x}^2 + \dot{z}^2 + \dot{u}^2 + \dot{w}^2 - \dot{x}\dot{y} - \dot{u}\dot{v}}{\alpha\beta} & \frac{-\dot{z}(\dot{u}-\dot{v}) + (\dot{x}-\dot{y})\dot{w}}{\beta\gamma} \\ \dot{w} & \frac{-(\dot{x}+\dot{y})\dot{w} + \dot{z}(\dot{u}+\dot{v})}{\alpha\beta} & 0 & \frac{\dot{z}}{\alpha^2} & \frac{-(\dot{x}+\dot{y})\dot{z} - (\dot{u}+\dot{v})\dot{w}}{\alpha\beta} & \frac{\gamma}{\beta} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad \alpha &= \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2 + \dot{u}^2 + \dot{v}^2 + \dot{w}^2} \\ \beta &= \sqrt{2(\dot{z}^2 + \dot{w}^2) + (\dot{x} - \dot{y})^2 + (\dot{v} - \dot{u})^2} \\ \gamma &= \sqrt{(\dot{x}^2 - \dot{y}^2) + (\dot{u}^2 - \dot{v}^2)} \end{aligned} \quad (2.13)$$

$A$  ist symplektisch ( $A^{-1} = -JA^\dagger J$ ) und phasenraumvolumenerhaltend  $\det(A) = 1$ . Man erkennt in der ersten Spalte den Flussvektor und in der vierten den senkrecht zur Energieschale liegenden Vektor.

Mit dieser Abbildung ergibt sich unmittelbar die reduzierte Monodromiematrix. Eine etwas langwierige Rechnung zeigt, dass diese folgende Gestalt hat.

$$\tilde{M}(t) = A^{-1}(t)\mathcal{X}(t)A(0) = \begin{pmatrix} 1 & * & * & * & * & * \\ 0 & a_{1,1} & a_{1,2} & * & b_{1,1} & b_{1,2} \\ 0 & a_{2,1} & a_{2,2} & * & b_{2,1} & b_{2,2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_{1,1} & c_{1,2} & * & d_{1,1} & d_{1,2} \\ 0 & c_{2,1} & c_{2,2} & * & d_{2,1} & d_{2,2} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Es gehen nur die Werte der Blockmatrizen  $A, B, C, D$  ein. Die eigentliche Vereinfachung tritt bei einer numerischen Bestimmung von  $\tilde{M}$  ein. Durch Auswerten von (2.14) und (2.8)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(A^{-1}\mathcal{X}) &= L(A^{-1}\mathcal{X}) \\ \text{mit} \quad L &= \begin{pmatrix} 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & l_{1,1} & l_{1,2} & * & l_{1,3} & l_{1,4} \\ 0 & l_{2,1} & l_{2,2} & * & l_{2,3} & l_{2,4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l_{3,1} & l_{3,2} & * & l_{3,3} & l_{3,4} \\ 0 & l_{4,1} & l_{4,2} & * & l_{4,3} & l_{4,4} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

ergibt sich eine Lösung von  $A^{-1}\mathcal{X}$  und wegen (2.14) auch eine von  $\tilde{M}$ . Man erkennt, dass nur die Blöcke  $A - D$  in einem 4-komponentigen System koppeln. Damit reduziert der totale Aufwand zum Lösen der Bahnbewegung und Stabilität von  $6 + (6 \cdot 6) = 42$  auf  $4 + (4 \cdot 4) = 20$  Komponenten.

Andererseits sind die einzelnen  $l_{i,j}$  in der Regel sehr komplizierte von der Phasenraumtrajektorie und der Zeit abhängige Terme. Es hängt daher vom jeweiligem System ab, ob der reduzierte Formalismus numerische Vorteile nach sich zieht. Anhang B zeigt jedoch, wie Transformation (2.13) ausgenutzt werden kann, um den Maslov-Index eines 3-dim. Oszillators zu bestimmen.



# Kapitel 3

## Semiklassische Näherungen

*Dieses Kapitel gibt zunächst eine Zusammenfassung derjenigen semiklassischen Theorien, die sich auf skalare Wellengleichungen beziehen. Es sind dies die EBK-Quantisierung, semiklassische Spurformeln sowie semiklassische Störungsrechnung. Daneben wird das Problem angesprochen, das bei Fouriertransformation von  $\delta g(E)$  in klassisch nicht harmonischen Systemen auftritt. Zentraler Punkt dieses Kapitels werden die Theorien von Littlejohn und Flynn bzw. die von Bolte und Keppeler sein. Sie ermöglichen die semiklassische Einbindung der LS-Kopplung.*

### 3.1 EBK-Quantisierung

Die Quantisierung von klassisch integrablen Systemen geht mit mit der Bohr-Sommerfeld Quantisierungsbedingung noch vor die Einführung der QM zurück. Im Rahmen der nach Wentzel [Wen 26], Kramers [Kra 26] und Brillouin [Bri 26] benannten WKB-Näherung konnte dieses, zunächst ad-hoc eingeführte Postulat inklusive Nullpunktskorrekturen, gerechtfertigt werden.

In moderner Form (dies betrifft v.a. den Übergang zu Torusvariablen) gilt diese Regel allgemein für ein  $D$ -dim. integrables System und wird nach Einstein [Ein 17], Brillouin [Bri 26b] und Keller [Kel 58] als EBK-Quantisierung bezeichnet.

Zu deren Betrachtung sei ein geschlossenes System angenommen. Ist dieses integrabel, so findet nach dem Poincaré-Hopf-Theorem die Bewegung auf einem  $D$ -Torus im Phasenraum statt. Darauf liegen  $D$  primitive Schleifen  $\mathcal{C}_i$ ,  $i = 1, \dots, D$ , die weder zu einem Punkt zusammenziehbar sind noch ineinander überführbar sind. Die EBK-Quantisierungsbedingung besagt nun, dass entlang jeder dieser Schleifen die

Bedingung

$$S_k = \oint_{\mathcal{C}_k} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi\hbar(n_k + \mu_k/4) \quad n_k \in \mathbb{N}, \quad k = 1, \dots, D \quad (3.1)$$

erfüllt sein muss. Dieses Resultat ist korrekt im semiklassischen Sinne, d.h. für große Quantenzahlen.<sup>1</sup>

Bedingung (3.1) resultiert aus der Tatsache, dass in einem semiklassischen Ausdruck der Wellenfunktion diese eindeutig definiert werden muss. Da die klassische Wirkung in einer  $2\pi$  periodischen Funktion erscheint, muss diese eine entsprechende Vielfache davon sein. Zusätzliche Phasenkorrekturen in Form der Maslov-Indizes  $\mu_k$  ergeben sich im Zusammenhang mit Kaustiken der Trajektorie (Details z.B. in [Tab 89]).

Aus (3.1) folgt eine Quantisierung der klassischen Wirkungen und somit auch die der Energie. Damit klassifiziert sich  $E$  mit  $D$  Quantenzahlen, d.h.  $E = E_{n_1, \dots, n_D}$ .

## 3.2 Der glatte und der oszillatorische Teil der Zustandsdichte

Die EBK-Quantisierung ist in ihrer Anwendung auf klassisch integrable Systeme beschränkt. In ergodischen oder gemischten Fällen kann schon wegen der komplizierten Phasenraumstruktur Bedingung (3.1) nicht angewandt werden. Der zu (3.1) analoge Zusammenhang für solche Systeme wird durch sogenannte Spurformeln vermittelt. Erstmals 1971 von Gutzwiller [Gut 71] formuliert, wurden diese mittlerweile an verschiedenste Situationen angepasst.

Für das Verständnis einer Spurformeln sei zunächst die quantenmechanische Zustandsdichte  $g(E)$  betrachtet. In einem geschlossenen System ergibt sich diese aus Summation der diskreten Eigenenergien  $E_k$ .

$$g(E) = \sum_k \delta(E - E_k) \quad (3.2)$$

Entartungen erscheinen durch  $E_k = E_l$ ,  $k \neq l$ . Bei der Herleitung der Spurformel (z.B. [Gut 90]) nehmen klassische Bahnen der Länge Null einen Sonderstatus an. Deren Berücksichtigung führt zum glatten Anteil  $\tilde{g}(E)$  in der Zustandsdichte. Der verbleibende Beitrag

$$g(E) = \tilde{g}(E) + \delta g(E) \quad (3.3)$$

wird als oszillierender Anteil  $\delta g(E)$  bezeichnet. Der glatte Anteil wird in dieser Arbeit nur am Rande behandelt. Die Auswirkungen der LS-Kopplung auf  $\tilde{g}(E)$  sind

---

<sup>1</sup>In manchen Systemen wie dem harmonische Oszillator oder dem Wasserstoffproblem ist die EBK-Quantisierung auch bei kleinen Quantenzahlen exakt.

schon seit längerem bekannt [Jen 75], eine Anwendung dessen erfolgt in Kapitel 5.3.1.  $\tilde{g}(E)$  ist nur insofern von Bedeutung, da zur Bestimmung von  $\delta g(E)$  dieser Beitrag aus dem Quantenspektrum extrahiert werden muss. Eine Möglichkeit besteht in einer systematische Behandlung von  $\tilde{g}(E)$  in einer Wigner-Kirkwood Entwicklung [Wig 32], [Kir 33]. Je nach mitgenommener  $\hbar$ -Ordnung ergeben sich damit der bekannte Thomas-Fermi bzw. Erweiterter Thomas-Fermi Beitrag. Voraussetzung ist hier die analytische Kenntnis von  $H$ . Für numerische Zwecke kann alternativ die sogenannte Strutinsky-Mittelung erfolgen [Str 67], [Str 68]. Hier lässt sich  $\tilde{g}(E)$  alleine aus der Kenntnis des Spektrum bestimmen. In dieser Arbeit wurde stets dieser Weg gewählt.

### 3.3 Spurformeln

#### 3.3.1 Die Gutzwillersche Spurformel

Die nach Gutzwiller benannte Spurformel liefert einen Zusammenhang zwischen dem oszillierenden Anteil der Zustandsdichte und rein klassischen Größen.

$$\delta g(E) = \frac{1}{\hbar\pi} \sum_{\gamma} \underbrace{\frac{T_{\gamma_0}}{|\det(\tilde{M} - \mathbb{1}_{2D-2})|^{1/2}}}_{\mathcal{A}_{\gamma}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}S_{\gamma} - \frac{\pi}{2}\sigma_{\gamma}\right) \quad (3.4)$$

Die Summe erstreckt sich dabei über alle periodischen Bahnen  $\gamma$  inklusive deren Wiederholungen. Der Faktor vor dem Kosinus-Term wird auch als Stabilitätsamplitude  $\mathcal{A}_{\gamma}$  bezeichnet und enthält neben der primitiven Periode  $T_{\gamma_0}$ , die Stabilitätsmatrix  $\tilde{M}$ . Im Argument der Kosinusfunktion erscheint die klassische Wirkung  $S_{\gamma}$  (vgl. (2.2)) und der Maslov-Index  $\sigma_{\gamma}$ . Diese ganze Zahl bestimmt sich auf nichttriviale Weise aus der Bahntopologie, vgl. Anhang E. Die Energieabhängigkeit auf der rechten Seite erstreckt sich auf  $\mathcal{A}_{\gamma}(E)$ ,  $S_{\gamma}(E)$  und z.T. auch auf  $\sigma(E)$ . Die Spurformel ist in Form (3.4) auf den Fall isolierter Bahnen beschränkt. Dies schließt sowohl Situationen nahe einer Bifurkation aus, als auch Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien. In beiden Fällen divergiert die Amplitude, die sich auch in Form

$$\mathcal{A}_{po} = \frac{T_{\gamma_0}}{|\prod_{i=1}^{D-1}(2 - \Lambda_i)|^{1/2}} \quad (3.5)$$

schreibt, da einer der Stabilitätswerte  $\Lambda = 2$  erfüllt. Bifurkationen lassen sich durch Benutzung von Normalformen [Alm 88] und uniforme Näherungen (z.B. [Sch 97]) behandeln. Im Falle von Symmetrien sei auf den nächsten Abschnitt verwiesen. Ausdruck (3.4) summiert über alle vorhandenen periodischen Bahnen. Deren Stabilitätsamplituden sind dabei von gleicher Größenordnung, so dass Ausdruck (3.4)

keine absolut konvergente Reihe darstellt. Gleichermäßen erkennt man, dass die auf der linken Seite von (3.4) vorhandenen scharf lokalisierten Energiefluktuationen nicht durch Summation über endlich viele Terme zustande kommen können. Nur in einigen seltenen Fällen gelingt die Summe über alle Bahnen. Ansonsten lässt sich das Problem durch die Einführung einer Dämpfungsfunktion lösen. Faltet man die Zustandsdichte, etwa mit einer Gaussfunktion, so dass lediglich ein sogenanntes „Coarse-grained“ Verhalten sichtbar bleibt,

$$g_\rho(E) = \frac{1}{\rho\sqrt{\pi}} \sum_k \exp \left\{ -[(E - E_k)/\rho]^2 \right\} \quad (3.6)$$

so werden umgekehrt in der Spurformel Bahnen großer Wirkung in ihrer Amplitude gedämpft, vgl. [Bra 97].

$$\mathcal{A}_\gamma(E) \rightarrow \mathcal{A}_\gamma(E) \exp \left[ (-\rho T_\gamma / 2\hbar)^2 \right] \quad (3.7)$$

Der Dämpfungsfaktor  $\rho$  wird im folgenden so gewählt, dass in (3.2) benachbarte Zustände gemittelt werden, das Schalenverhalten jedoch erkennbar bleibt. Meist genügen einige wenige Bahnen für eine ausreichende Beschreibung von  $\delta g_\rho(E)$ .

### 3.3.2 Spurformeln für Systeme mit Symmetrien

Spurformel (3.4) ist in ihrer Anwendung auf Systeme mit isolierten periodischen Bahnen beschränkt. Existiert dagegen eine  $k$ -dim. kontinuierliche Symmetrie, so kommt es zur Ausbildung einer  $k$ -dim. Bahnfamilie. Diese, im folgenden mit  $\Gamma$  bezeichnet, bildet eine Menge von Bahnen identischer Wirkung, die mittels  $k$  Parameter stetig ineinander überführbar sind. Eine Folge ist, dass in der Monodromiematrix  $M$  mindestens  $2+2k$  Eigenwerte  $\lambda = 1$  erfüllen. In einer solchen Situation müssen abgewandelte Spurformeln benutzt werden, wie sie in [Ber 76], [Ber 77], [Str 75], [Cre 91] oder [Cre 92] zu finden sind. Stellvertretend sei

$$\delta g(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{k/2}} \sum_\Gamma \frac{T_\Gamma V_\Gamma \cos\left(\frac{1}{\hbar} S_\Gamma - \sigma_\Gamma \frac{\pi}{2} - \frac{k\pi}{4}\right)}{|Q_0|^{1/2} |\mathcal{J}_\Gamma|^{1/2} |\det(\tilde{M} - \mathbb{1})|^{1/2}} \quad (3.8)$$

aus [Cre 92] gezeigt. Die Summe erstreckt sich nun über Bahnfamilien  $\Gamma$ . Die Wirkung  $S_\Gamma$ , die Periode  $T_\Gamma$  sowie der Maslov-Index  $\sigma_\Gamma$  können dabei irgendeiner Bahn der Familie  $\gamma \in \Gamma$  entnommen werden.  $\tilde{M}$  ist die reduzierte Monodromiematrix. Die Ausdrücke  $V_\Gamma$ ,  $\mathcal{J}_\Gamma$  und  $Q_0$  hängen von der zugrundeliegenden Symmetriegruppe ab und sollen an dieser Stelle nicht weiter vertieft werden. Einzelheiten finden sich dazu in [Cre 91], [Cre 92], oder [Bra 97]. An dieser Stelle soll der Einfluss der Bahnentartung auf die  $\hbar$ -Ordnung betont werden. Bahnfamilien mit hoher Entartung dominieren in der Zustandsdichte.

### 3.3.3 Semiklassische Störungsrechnung

Während Spurformel (3.4) nur für Systeme mit isolierten periodischen Bahnen gültig ist, so setzt Spurformel (3.8) gewisse Symmetrien voraus. Behandelt man nun ein System, das mittels Variation eines Parameters zwischen beiden Zuständen wechseln kann, so muss ein Formalismus gefunden werden, der beide Fällen interpoliert. Ein solcher Vorgang wird auch als uniforme Näherung bezeichnet. Ein wichtiges Element stellt in diesem Zusammenhang die von Creagh entwickelte semiklassische Störungsrechnung für symmetriegebrochene Systeme dar [Cre 95],[Bra 98].

Es stellt sich heraus, dass nahe des symmetrischen Falles die dort gültige und oft bekannte Spurformel lediglich durch einen vergleichsweise einfach zu bestimmenden Modulationsfaktor modifiziert werden muss. Sei etwa das System

$$H = H^{(0)} + \alpha H^{(1)}, \quad \alpha \ll 1 \quad (3.9)$$

gegeben.  $H^{(0)}$  besitzt gewisse kontinuierliche Symmetrien, die durch  $H^{(1)}$  gebrochen werden. Dabei verlieren die in  $H^{(0)}$  vorhandenen Bahnfamilien  $\Gamma$  zumindest einen Teil ihrer Entartung. Der Modulationsfaktor bestimmt sich nun aus folgenden Beziehungen:

$$\mathcal{M}_\Gamma(\alpha, E) = \frac{1}{V_G} \int d\mu(g) e^{i\Delta S_{\Gamma_g}(\alpha)} \quad (3.10)$$

$$\text{mit} \quad \Delta S_{\Gamma_g}(\alpha) = -\alpha \int_{\Gamma_g(t)} H^{(1)} dt \quad (3.11)$$

Gleichung (3.11) beschreibt die Wirkungsänderung eines Mitglieds der **ungestörten** Bahnfamilie, während (3.10) diese bezogen auf die Entartung der einzelnen Mitgliedern mittelt. Aufgrund der kontinuierlichen Symmetrie erscheint an dieser Stelle das Gruppenmaß  $d\mu(g)$  der zu  $H^{(0)}$  gehörigen Symmetriegruppe. Die Größe  $\mathcal{M}_\Gamma(\alpha, E)$  erscheint in der Spurformel als zusätzlicher Amplitudenfaktor.

## 3.4 Die Fouriertransformierte von $\delta g(E)$

Die Gutzwillersche Spurformel (3.4) stellt im wesentlichen eine Fourierzerlegung der Größe  $\delta g(E)$  dar. Diese Tatsache kann man ausnutzen, um aus einem gegebenen Eigenwertspektrum auf klassische Größen, wie Bahnperiode oder Maslov-Indizes, zu schließen. Dieser Vorgang wird auch als inverse Quantenchaologie bezeichnet.

Ist das zugrundeliegende klassische System harmonisch, d.h. die Bahnumlaufzeiten sind energieunabhängig, so zerfällt die Wirkung in  $S_\gamma(E) = ET_\gamma$  und die Stabilitätsamplitude zeigt keine Energieabhängigkeit. Führt man eine Fouriertransformation bzgl. der Energie durch

$$\mathcal{FT}(\delta g(E)) = \int_0^\infty \delta g(E) e^{iEt} dt, \quad (3.12)$$

so liegen die Peaks des Betragsquadrats  $|\mathcal{FT}(\delta g(E))|^2$  genau bei den Frequenzen von periodischen Bahnen. Die Phase des i.A. komplexen Ausdrucks (3.12) gibt ferner Auskunft über den in (3.4) auftretenden Maslov-Index. Da die Zustandsdichte normalerweise nur bis zu einem maximalen Energiewert  $E_{max}$  bekannt ist, tritt in der Transformation (3.12) links als Argument  $\delta g(E)\Theta(E_{max}-E)$  auf. Es folgt rechts eine Peakverbreiterung der Ordnung  $\sim E_{max}^{-1}$  sowie spuriose Seitenpeaks. Eine Verbesserung kann erzielt werden, wenn das Spektrum nicht sprunghaft mit  $\Theta(E_{max}-E)$  sondern mit einer weichen Fensterfunktion abgeschnitten wird. Im folgenden wird dazu stets eine Gaussfunktion  $\exp(-[(E-E_{max})/\tau]^2)$  benutzt, wobei  $\tau$  so angepasst wurde, dass die Funktion beim letzten gültigen Eigenwert auf höchstens 5% abgefallen ist. Mehr über die Bedeutung von Fensterfunktionen findet sich in [Bla 97]. Die Benutzung von (3.12) setzt Harmonizität im zugrundeliegenden System voraus. Der 3-dim. Oszillator aus Kapitel 5 erfüllt beispielsweise diese Forderung. Ist dagegen das System nicht harmonisch, so mittelt (3.12) über die Frequenzen von Bahnen verschiedener Energien. Verschmierte Fourierpeaks sind die Folge. In solchen Fällen muss die Transformation bzgl. einer modifizierten Größe erfolgen. Die im folgenden vorgestellte Methode richtet sich dabei nach derjenigen, die Friedrich und Wintgen bei ihren Untersuchungen des Wasserstoffproblems im Magnetfeld verwendet haben [Fri 90]. Es wird jedoch auf das Skalierungsverhalten des in Kapitel 6 auftretenden Problems bereits Rücksicht genommen.

Hierzu sei die Hamiltonfunktion

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \kappa H_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (3.13)$$

betrachtet, wobei die einzelnen Bestandteile gemäß

$$\begin{aligned} H_0(\eta\mathbf{r}, \eta\mathbf{p}) &= \eta^2 H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \\ H_1(\eta\mathbf{r}, \eta\mathbf{p}) &= \eta H_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \end{aligned} \quad \eta \in \mathbb{R}, \quad (3.14)$$

skalieren. Die klassische Dynamik in einem solchen System hängt in der Regel von den beiden Größen  $E$  und  $\kappa$  ab.

Führt man neue Koordinaten ein

$$\tilde{\mathbf{r}} = \kappa^{-1}\mathbf{r} \quad \tilde{\mathbf{p}} = \kappa^{-1}\mathbf{p} \quad (3.15)$$

so transformiert sich (3.13) zu

$$\tilde{H}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) = H_0(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) + H_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) \quad (3.16)$$

wobei die neue Hamiltonfunktion durch  $\tilde{H} = H/\kappa^2$  mit der alten zusammenhängt. Gleiches gilt für die skalierte Energie  $e$ .

$$e = \frac{E}{\kappa^2} \quad (3.17)$$

Am Fehlen von  $\kappa$  in (3.16) erkennt man, dass die Dynamik nunmehr **allein von  $e$**  abhängt. Die Wirkung einer Bahn transformiert sich ebenfalls:

$$S(E) = \int \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \kappa^2 \int \tilde{\mathbf{p}} \cdot d\tilde{\mathbf{r}} = \kappa^2 s(e) \quad (3.18)$$

Erreicht man nun, dass  $e = \text{const.}$  gilt, so bleibt  $s(e)$  ebenfalls konstant. In der Spurformel erscheint wegen (3.18) im Kosinus-Argument der Term  $\kappa^2 \text{const.}$  Transformiert man nun bzgl.  $\kappa^2$ , so treten an den Inversen der skalierten Wirkung  $s(e)$  Maxima auf. Transformiert man dagegen nach  $E$ , so liegen Peaks von periodischen Bahnen wegen (3.17) an der Stelle  $e/s(e)$ . Dieser Ausdruck wird im folgenden nochmals invertiert, so dass letztendlich die Größe  $s(e)/e$  einem Fourierspektrum entnommen werden kann. Man beachte, dass im harmonischen Fall dieser Ausdruck gerade der Periode  $T$  entspricht.

Die Bedingung  $e = \text{const.}$  gibt in der  $\kappa E$ -Ebene einen parabelförmigen Zusammenhang. Die Energien, die in der Fouriertransformation eingehen, müssen sowohl darauf liegen als auch gleichzeitig Eigenwerte des Systems mit entsprechendem  $\kappa$  sein. Diese Forderung löst man in der Praxis dadurch, dass man zunächst bei verschiedenen Werten  $\kappa$  diagonalisiert, und anschließend den interpolierten Verlauf der Niveaus  $E_k(\kappa)$  mit  $e = \text{const.}$  schneidet.

### 3.5 Semiklassische Näherungen zur LS-Kopplung

Mehrkomponentige Systeme, wie Dirac- oder Pauli-Gleichung, können nicht mit Formel (3.4) beschrieben werden. Der naive Versuch würde bereits am Fehlen einer entsprechenden klassischen Hamiltonfunktion scheitern. Die Einbindung des Spins erfolgt quantenmechanisch durch entsprechende Erweiterung des Hilbertraums. Abgesehen von einem gewissen Mehraufwand, der sich bei einer konkreten Anwendung stellt, existieren keine fundamentalen Änderungen gegenüber einer spinfreien QM. Es wird sich herausstellen, dass dies gerade bei einer semiklassischen Behandlung nicht der Fall ist. Das nachfolgende Vorgehen orientiert sich am wichtigen Spin-1/2 Fall, Verallgemeinerungen auf höhere Spin-Systeme ergeben sich aber ohne weiteres. Der entsprechende Hamiltonoperator sei durch

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \underbrace{\left[ \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \right]}_{\hat{H}_0} \mathbb{1}_2 + \kappa \underbrace{\hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}}_{\hat{H}_{\text{LS}}} \quad (3.19)$$

gegeben. Er beschreibt ein Teilchen der Masse  $m$  in einem externen Potential  $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ , das zudem gewissen Wechselwirkungen aufgrund des Spins unterliegt.  $\hat{H}_0$  vereinigt alle zur Einheitsmatrix proportionalen Terme. Die restlichen Terme können stets

in Form von  $\hat{H}_{\text{LS}}$ <sup>2</sup> ausgedrückt werden. Darin koppelt der Vektor  $\hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$  an die Pauli-Matrizen  $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$  mit

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

an.  $\hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$  hat die Funktion eines fiktiven, von der Bahnbewegung erzeugten Magnetfeldes. Es kann sich im Prinzip um jede beliebige glatte Funktion der Phasenraumkoordinaten handeln. Die LS-Kopplung im eigentlichen Sinne besitzt jedoch die Gestalt

$$\kappa \hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \left( \nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{p}} \right). \quad (3.21)$$

Dieser Ausdruck kann aus einer nichtrelativistische Näherungen der Dirac-Gleichung näher begründet werden kann. Im folgenden wird  $\kappa$  nicht fest an dem Vorfaktor in (3.21) gebunden sein, sondern als freier Kontrollparameter dienen.

Befindet sich ein Teilchen der Ladung  $e$  zusätzlich in einem externen Magnetfeld, so kann dies in (3.19) durch Ersetzung des kanonischen Impulses durch den kinetischen  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - e\hat{\mathbf{A}}$  sowie der Ergänzung des fiktiven Magnetfeldes um das externe  $\hat{\mathbf{C}} \rightarrow \hat{\mathbf{C}} + \hat{\mathbf{B}}$ , geschehen. Beim Vektorpotential  $\hat{\mathbf{A}}$  wird in dieser Arbeit stets die symmetrische Eichung benutzt.

### 3.5.1 Die Fälle schwacher und starker Kopplung

Die LS-Kopplung besitzt aufgrund des Spinvektors eine Proportionalität bezüglich  $\hbar$ . Die Kopplungskonstante  $\kappa$  ist von der Form  $\kappa = \hbar\bar{\kappa}$ , wenn  $\bar{\kappa}$  einen von  $\hbar$  freien Beitrag bezeichnet, der im semiklassischen Limes konstant bleibt. Die semiklassische Entwicklung findet üblicherweise in Potenzen von  $\hbar$  statt. Dabei ist der Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$  zu verstehen. Der Wert  $\hbar$  kann natürlich nicht verändert werden. Für die Gültigkeit einer semiklassischen Theorie in einer konkreten Anwendung kommt es vielmehr darauf an, inwieweit typische auftretende Wirkungen  $S$  groß gegenüber  $\hbar$  sind, d.h. der semiklassische Limes kommt durch  $S/\hbar \rightarrow \infty$  zustande.

Bei einem großen Wert von  $\bar{\kappa}$  kann es durchaus Sinn machen, den LS-Term an anderer als vorgesehener Stelle einzuordnen. Im folgenden werden zwei Fälle betrachtet:

#### WCL: Schwache Kopplung oder „Weak Coupling Limit“

Hier wird  $\bar{\kappa} = \text{const.}$  gefordert. Für die Kopplung gilt daher  $\kappa \sim \hbar$ , sie tritt in schwacher Form auf. Der Spin tritt als quantenmechanische und damit kleine Größe auf. Der Term muss bei einer semiklassischen Ordnungsreihe an der Stelle  $\hbar$  berücksichtigt werden.

<sup>2</sup>Die Bezeichnung LS steht allgemein für eine Spin-Bahn Kopplung und wird auch dann verwendet, wenn die Kopplung nicht von der Art  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  ist.

**SCL: Starke Kopplung** oder „**Strong Coupling Limit**“

Hier soll die Kopplung  $\bar{\kappa}$  im Limes unendlich stark werden, und zwar so, dass das Produkt  $\hbar\bar{\kappa}$  konstant bleibt. Dieser Fall einer großen Kopplungskonstante bewirkt, dass der LS-Term bereits in führender Ordnung auftritt.

**3.5.2 Die Methode nach Littlejohn/Flynn**

Littlejohn und Flynn beschäftigten sich ab 1991 in einer Reihe von Arbeiten mit der semiklassischen Behandlung von mehrkomponentigen Wellengleichungen. Das Problem war zu diesem Zeitpunkt nicht neu und wurde bereits von anderen Autoren kurz nach Einführung der Gutzwillerschen Spurformel untersucht. In einer Arbeit von Balian und Bloch findet sich schon 1974 das Konzept der Diagonalisierung des Wellenoperators [Bal 74]. Bernstein befasste sich mit der Einbindung in einer WKB-Theorie [Ber 75]. Die Bedeutung des Berry-Terms erkannten Kuratsjuji und Iida im Zusammenhang mit Pfadintegralen [Kur 85], der NN-Term war auch schon in Arbeiten von Bernstein [Ber 75] und Kaufman [Kau 87] zu finden. Doch erst Littlejohn und Flynn vereinigten alle Punkte, die eine korrekte EBK-Quantisierung ermöglichen [Lit 91]. Eine Anwendung dessen erfolgt in [Lit 92] in einem sphärischen System mit LS-Kopplung. Für die Untersuchung von klassisch nicht integrablen Systemen und damit die Benutzung der Spurformel bedarf es allerdings einer gewissen ad-hoc Annahme, die Frisk und Guhr kurze Zeit später formulierten [Fri 93]. Es hat sich inzwischen herausgestellt, dass deren Vorgehen genau richtig war, der Nachweis wurde allerdings auf anderem Wege beschritten, vgl. Abschnitt 3.5.3. Es folgt nun eine kurze Übersicht der wichtigsten Schritte aus [Lit 91]. Gemäß dem Vorgehen in [Lit 92] und [Fri 93] wird ausschließlich auf den SCL-Fall eingegangen. O.B.d.A kann eine Beschränkung auf den zweikomponentigen Fall stattfinden. Entsprechend lautet die Schrödingergleichung

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (3.22)$$

wobei

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_{1,1}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) & \hat{H}_{1,2}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) \\ \hat{H}_{2,1}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) & \hat{H}_{2,2}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) \end{pmatrix} \quad \Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

zweikomponentig sind. Die Grundidee besteht darin, dass mittels eines unitären Operators  $\hat{U}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$ , das ursprüngliche Problem  $\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$  auf Diagonalform gebracht wird.

$$\hat{U}^\dagger(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})\hat{U}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \hat{\Lambda}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \begin{pmatrix} \lambda_+(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) & 0 \\ 0 & \lambda_-(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Damit entkoppeln die Gleichungen und Spurformel (3.4) bzw. (3.8) können einzeln angewendet werden. Das eigentliche Problem, das bei der Umformung (3.24) auftritt,

liegt darin begründet, dass in  $\hat{H}$  Operatoreinträge auftreten. Mit Hilfe des Weyl-Symbols<sup>3</sup>

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d^3q \exp(-i/\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \langle \mathbf{r} + \mathbf{q}/2 | \hat{A} | \mathbf{r} - \mathbf{q}/2 \rangle, \quad (3.25)$$

die einem Operator  $\hat{A}$  eine klassische Phasenraumfunktion  $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  eindeutig zuordnet, kann jedoch zunächst jeder einzelne Eintrag transformiert werden, bevor die Diagonalisierung der nunmehr komplexwertigen Matrix durchgeführt wird. Der Diagonalausdruck kann anschließend mit der zu (3.25) inversen Transformation wieder rückgängig gemacht werden. Für eine Auswertung der Spurformel ist dieser Schritt nicht mehr notwendig, da ohnehin ein klassischer Ausdruck benötigt wird. Eine weitere Schwierigkeit tritt auf, da die Transformierte des Produkts  $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$  sich gemäß der Moyal-Formel

$$\begin{aligned} C(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \exp \left[ i \frac{\hbar}{2} \left( \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}} \right) \right] B(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \\ &= A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) B(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{i\hbar}{2} \{A(\mathbf{r}, \mathbf{p}), B(\mathbf{r}, \mathbf{p})\} + \mathcal{O}(\hbar^2) \end{aligned} \quad (3.26)$$

bestimmt. Die Pfeile auf den Ableitungen geben hier die Richtung an, in der sie wirken sollen,  $\{..\}$  bezeichnet die klassische Poissonklammer.

Man erkennt, dass höhere Ordnungen des Ordnungsparameters  $\hbar$  unweigerlich auftreten. Dies legt folgenden Potenzreihenansatz nahe:<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} \hat{U}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) &\rightarrow U(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_k \hbar^k U^{(k)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \\ \hat{\Lambda}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) &\rightarrow \Lambda(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_k \hbar^k \Lambda^{(k)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Die Auswertung von (3.24) unter Berücksichtigung von (3.26) ergibt folgendes Resultat:

$$\Lambda^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = U^{(0)\dagger}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) U^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (3.28)$$

Die niedrigste Ordnung bestimmt sich durch Diagonalisierung von  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ . Wertet man (3.28) für das LS-System (3.19) aus so folgt für die beiden Diagonalelemente:

$$\lambda_{\pm}^{(0)} = H_0 \pm \kappa |\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p})| \quad (3.29)$$

<sup>3</sup>Wichtige Eigenschaften dazu finden sich z.B. in [McD 88].

<sup>4</sup>Die in [Lit 91] durchgeführte Entwicklung nach einer zunächst von  $\hbar$  unterschiedlichen kleinen Größe wird hier nicht durchgeführt.

Die Terme sind bis auf das Vorzeichen der LS-Kopplung identisch.

Zur Bestimmung der Terme der nächsten Ordnung werden zusätzlich die Eigenvektoren  $\boldsymbol{\tau}^{(\pm)} = (\tau_1^{\pm}, \tau_2^{\pm})$  zu den Eigenwerten  $\lambda_{\pm}^{(0)}$  benötigt. Es ergibt sich:

$$\Lambda^{(1)} = \begin{pmatrix} \lambda_+^{(1)} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_+^{(1B)} + \lambda_+^{(1NN)} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{(1B)} + \lambda_-^{(1NN)} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

$$\text{mit } \lambda_{\pm}^{(1B)} = -i \sum_{k=1}^2 \tau_k^{*(\pm)} \{ \tau_k^{(\pm)}, \lambda_{\pm}^{(0)} \}, \quad (3.31)$$

$$\lambda_{\pm}^{(1NN)} = -\frac{i}{2} \sum_{k,l=1}^2 \left( H_{k,l} - (E + \lambda_{\pm}^{(0)}) \delta_{k,l} \right) \{ \tau_k^{*(\pm)}, \tau_l^{(\pm)} \}. \quad (3.32)$$

Die Unterscheidung hinsichtlich **Berry-Term**  $\lambda_{\pm}^{(1B)}$  und **No-Name-Term**<sup>5</sup>  $\lambda_{\pm}^{(1NN)}$  ist dadurch bedingt, dass ersterer mit einer geometrischen Phase identifiziert werden kann. Ausserdem unterscheiden sie sich in ihren Eichtransformationseigenschaften (vgl. unten).

Beide Ausdrücke sind in Form (3.31) und (3.32) meist schwer auswertbar, sie können aber folgendermaßen umgeschrieben werden [Fri 93]:

$$\lambda_{\pm}^{(1B)} = \mp \frac{1}{2} (1 - \cos \theta) \dot{\phi} \quad (3.33)$$

$$\lambda_{\pm}^{(1NN)} = \frac{\kappa}{2} \mathbf{e}_B^T V''(\mathbf{r}) \mathbf{e}_B \quad (3.34)$$

$V''(\mathbf{r}) = \partial^2 V(\mathbf{r}) / \partial \mathbf{r}^\dagger \partial \mathbf{r}$  bezeichnet hierbei die Hessematrix des externen Potentials sowie  $\mathbf{e}_B = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)$  den Einheitsvektor des  $\mathbf{C}$ -Vektors in Polarkoordinatendarstellung. Man erkennt sofort, dass die beiden Terme folgende Eigenschaft haben:

- Der Berry-Term besitzt, je nach Polarisierung unterschiedliches Vorzeichen, der NN-Term dagegen gleiches.
- Beide Terme hängen ausschließlich von der Richtung des  $\mathbf{C}$ -Vektors ab.
- Ändert  $\mathbf{C}$  seine Richtung nicht, so gilt  $\lambda_{\pm}^{(1B)} = 0$ . Zeigt  $\mathbf{C}$  immer in Richtung der  $z$ -Achse so folgt zudem

$$\lambda_{\pm}^{(1NN)} = \frac{\kappa}{2} \frac{\partial^2 V(\mathbf{r})}{\partial r_z^2}. \quad (3.35)$$

<sup>5</sup>Von manchen Autoren wird dieser Term auch als Poisson-Krümmungs-Term bezeichnet [Emm 96].

Zwei bislang übergangene Probleme stellen sich als sehr wichtig heraus:

- **Eichinvarianz:** Die Transformation  $U^{(0)}$  in (3.24) ist nicht eindeutig. Jede Spalte von  $U^{(0)}$  und damit die Eigenvektoren  $\boldsymbol{\tau}^\pm$  können einer Eichtransformation unterworfen werden,

$$\boldsymbol{\tau}^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \rightarrow e^{i\theta^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{p})} \boldsymbol{\tau}^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (3.36)$$

die durch den lokalen Winkel  $\theta^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  vermittelt wird. Dabei stellt es sich heraus, dass der Term  $\lambda^{(1B)}$  unter einer solchen Transformation **nicht eichinvariant** ist. Dieser Vorgang entspricht der Situation, wie sie bei der Berry-Theorie zum adiabatischen Transport eines Quantenzustands im Parameterraum auftritt [Ber 84]. Der Eigenvektor  $\boldsymbol{\tau}$  übernimmt dabei die Rolle des Zustands, während die Parametrisierung der Hamiltonfunktionen durch die Phasenraumkoordinate erfolgt.

Durch die Nichteichinvarianz erscheint obiges Vorgehen willkürlich und gewissermaßen nicht wohldefiniert. Littlejohn und Flynn erkannten das Problem und führten nichtkanonische Koordinaten ein. Die Handhabung dieser neuen Koordinaten macht jedoch den Formalismus schwerfällig, da sich diese gemäß

$$\boldsymbol{\gamma}'_i = \boldsymbol{\gamma}_i - i\hbar \boldsymbol{\tau}^\dagger \{ \boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\gamma}_i \}, \quad i = 1, \dots, 2D \quad (3.37)$$

ergeben.  $\boldsymbol{\gamma}$  beschreiben hier die alten Koordinaten, z.B.  $\boldsymbol{\gamma}_i = \mathbf{e}_{r_x}, \dots, \mathbf{e}_{p_x}, \dots$ . Zudem stellt es sich sogar heraus, dass diese neuen Koordinaten auch in Systemen benutzt werden müssen, in denen der Berry-Term verschwindet [Lit 92].

- **Mode-Conversion:** Das zweite Problem wird auch als Mode-Conversion (MC) bezeichnet werden. Diese tritt auf, wenn im Phasenraum die Gleichung

$$\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 0 \quad (3.38)$$

erfüllt ist. Bei obiger Diagonalisierung wurde implizit angenommen, dass (3.38) nicht gilt. Beide Eigenwerte  $\lambda_+$  und  $\lambda_-$  sind daher nicht entartet.<sup>6</sup> An verschiedenen Stellen der Herleitung erscheint diese Forderung. Beispielsweise ist Potenzreihenansatz (3.27) nur in Bereichen fernab dieser Punkte gerechtfertigt [Fri 87]. Überdies sind in einer semiklassischen Theorie nicht nur die exakten Entartungspunkte kritisch, sondern auch all die Bereiche im Phasenraum, die einen mit  $\hbar$  vergleichbaren Abstand dazu besitzen. Leider kann nicht ausgeschlossen werden, dass klassische Bahnen solche Phasenraumbereiche treffen. In Kapitel 6 wird ein solches Beispiel vorgestellt.

---

<sup>6</sup>Daraus folgt auch, dass eine Behandlung des WCL nicht möglich ist, da hier in führender Ordnung global entartete Eigenwerte vorliegen.

Die Anwendung der nichtkanonischen Koordinaten ist aufwendig und verhindert eine einfache Anwendung der Spurformel. Frisk und Guhr machten daher folgende ad-hoc Annahme [Fri 93].

SCL1 Die einzelnen Komponenten

$$\lambda_{\pm}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = H_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \pm \kappa |\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p})| \quad (3.39)$$

fungieren als klassische Hamiltonfunktion. Sie legen einzeln die Dynamik und damit periodische Bahnen, Stabilität und Maslov-Index fest. Es werden wie üblich **kanonische Koordinaten** verwendet.

SCL2 Die semiklassische Wirkung  $S = \int_{\gamma} \mathbf{p} \, d\mathbf{r}$  wird um

$$\Delta S = \int_0^{T_{\gamma}} [\lambda_{\pm}^{\text{1NN}}(\gamma(t)) + \lambda_{\pm}^{\text{1B}}(\gamma(t))] \, dt \quad (3.40)$$

korrigiert.

Tatsächlich stellte sich heraus, dass die Regeln (SCL1) und (SCL2) einem Spezialfall der späteren exakten Theorie von Keppeler und Bolte entsprechen. Dessen Weg soll nun kurz wiedergegeben werden.

### 3.5.3 Der exakte Zugang von Bolte und Keppeler

Eine im semiklassischen Sinne exakte Spurformel für ein System mit LS-Kopplung wurde 1998 von Bolte und Keppeler im Rahmen ihrer Untersuchung zur Spurformel eines Dirac-Teilchens aufgestellt [Bol 98],[Bol 99]. Es folgt ein Überblick über deren Hauptidee sowie die wichtigsten Schritte. Dabei wird von Anfang an auf die spezielle Form der LS-Kopplung eingegangen. Die in [Bol 99] benutzte und für ein exaktes Vorgehen notwendige Dämpfungsfunktion, wird zugunsten einer leichteren Lesbarkeit nicht verwendet. Ganz nebenbei ergibt sich im Falle  $\kappa = 0$  eine zu [Gut 90] alternative Herleitung der Spurformel.

Ausgangspunkt stellt die zeitabhängige Schrödingergleichung dar:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.41)$$

mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) + \kappa \hat{\mathbf{C}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (3.42)$$

Gleichung (3.41) kann durch den Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_V K(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) \Psi_0(\mathbf{q}) d^3q \quad (3.43)$$

gelöst werden, wobei der Integrkern  $K(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)$  über das Ortsvolumen  $V$  integriert wird. Im Falle eines diskreten Spektrums schreibt sich dieser als

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) = \sum_k \Psi_k(\mathbf{r}) \Psi_k^*(\mathbf{q}) e^{-i/\hbar E_k t}. \quad (3.44)$$

Für das weitere Vorgehen wird die Greensfunktion benötigt. Sie ist die zeitliche Fouriertransformierte des Integrkerns.

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{q}, E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty K(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) e^{i/\hbar(E+i\epsilon)t} dt \quad (3.45)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_k \frac{\Psi_k(\mathbf{r}) \Psi_k^*(\mathbf{q})}{E - E_k - i\epsilon} \quad (3.46)$$

Die Zustandsdichte ergibt sich schließlich durch Spurbildung,

$$\text{tr } G(\mathbf{r}, \mathbf{q}, E) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{q}, E) dV \quad (3.47)$$

$$= \sum_k \left[ \mathcal{P} \frac{1}{E - E_k} + i\pi \delta(E - E_k) \right] \quad (3.48)$$

und damit

$$g(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} [\text{tr } G(\mathbf{r}, \mathbf{q}, E)]. \quad (3.49)$$

Die bisherigen Schritte lieferte allgemein den Zusammenhang zwischen Propagator  $K(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)$  und der Zustandsdichte  $g(E)$ . Die Idee einer semiklassischen Behandlung besteht nun darin, dass für  $K(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)$  ein Potenzreihenansatz in Ordnungen von  $\hbar$  gemacht wird und anschließend die Schritte (3.46) bis (3.49) mit diesen ebenfalls durchlaufen werden. Im Sinne der SK brauchen hierbei nur führende Beiträge in  $\hbar$  betrachtet werden. Die Einbindung des Spins erfolgt an dieser Stelle durch einen WKB-Ansatz mit **matrixwertigen Amplituden**.

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_V \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{\hbar}{i} \right)^k a_k(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t; \boldsymbol{\zeta}) e^{i/\hbar \phi(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t; \boldsymbol{\zeta})} d^3\zeta \quad (3.50)$$

Während die Terme  $a_k(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t; \zeta)$  nunmehr  $2 \times 2$  Matrizen sind, bleibt die Phasenfunktion  $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t; \zeta)$  gegenüber dem spinlosen Fall unverändert. Setzt man Ausdruck (3.50) in (3.41) ein und sortiert nach  $\hbar$ -Potenzen, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{2m} (\nabla_{\mathbf{r}}\phi)^2 + V(\mathbf{r}) + \textcircled{1} + \frac{\partial\phi}{\partial t} \right) a_0 \\ & + \left( \frac{\hbar}{i} \right) \left( \left[ \frac{1}{2m} (\nabla_{\mathbf{r}}\phi)^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{\partial\phi}{\partial t} \right] a_1 + \right. \\ & \quad \left. \frac{\Delta_{\mathbf{r}}\phi}{2m} a_0 + \frac{\nabla_{\mathbf{r}}\phi}{m} \nabla_{\mathbf{r}} a_0 - i \textcircled{2} a_0 + \frac{\partial a_0}{\partial t} \right) + \mathcal{O}(\hbar^2) \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Jede der Potenzen von  $\hbar$  muss verschwinden. Das weitere Vorgehen hängt nun entscheidend davon ab, ob der WCL- oder SCL-Fall betrachtet wird.

### Behandlung des WCL

Im Falle des WCL enthält  $\kappa$  den Faktor  $\hbar$ . Dementsprechend erscheint in (3.51) an Position  $\textcircled{2}$  der Ausdruck  $\bar{\kappa} \mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ . In führender Ordnung ergeben sich keine Änderungen gegenüber dem spinlosen Fall, d.h.  $\textcircled{1} = 0$ . Es folgt daraus die bekannte Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H(\nabla_{\mathbf{r}}\phi, \mathbf{r}) + \frac{\partial\phi}{\partial t} = 0, \quad (3.52)$$

mit der klassischen Hamiltonfunktion  $H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r})$ . Die klassische Dynamik bleibt von der LS-Kopplung unbeeinflusst.

Die semiklassische Amplitude  $a_0$  bestimmt sich aus dem Term der Ordnung  $\hbar$ . Die genauere Auswertung zeigt, dass sie in der Form

$$a_0(\mathbf{r}(\mathbf{q}, \xi, t), \mathbf{q}, t, \xi) = \sqrt{\det \left( \frac{\partial^2 S(\mathbf{r}, (\mathbf{q}, \xi, t), \mathbf{q}, t, \xi)}{\partial r_k \partial \xi_j} \right)} d(\mathbf{r}(\mathbf{q}, \xi, t), \mathbf{q}, t, \xi) \quad (3.53)$$

geschrieben werden kann. Der Wurzelterm in (3.53) ist identisch zum skalaren Fall. Neu ist jedoch der matrixwertige Faktor  $d(\mathbf{r}(\mathbf{q}, \xi, t), \mathbf{q}, t, \xi)$ . Die weitere Analyse ergibt, dass diese  $2 \times 2$  Matrix folgendem Anfangswertproblem genügen muss:

$$\dot{d}(t) = \frac{i\kappa}{\hbar} (\mathbf{C}(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) d(t), \quad d(0) = \mathbb{1}_2 \quad (3.54)$$

Diese Gleichung kann geometrisch auch in Form eines Spinvektors  $\mathbf{s}(t)$  gedeutet werden, der um das momentane Magnetfeld  $\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  präzediert.

$$\dot{\mathbf{s}}(t) = \frac{\kappa}{\hbar} \mathbf{C}(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) \times \mathbf{s}(t) \quad (3.55)$$

Führt man nun für den semiklassischen Propagator die Schritte (3.46) bis (3.49) durch, so ergibt sich die Spurformel. Hier kommt es durch (3.49) und die zur Integration benötigten Sattelpunktsnäherungen zur Forderung nach periodischen Bahnen. Es stellt sich heraus, dass die Hinzunahme von  $d$  lediglich durch eine zusätzliche Spur zum Zeitpunkt  $T_\gamma$ , in Form einer Amplitudenkorrektur, berücksichtigt werden muss.

$$\mathcal{A}_\gamma \rightarrow \mathcal{A}_\gamma \operatorname{tr} d(T_\gamma) \quad (3.56)$$

Insbesondere wird **keine periodische Spinbewegung** gefordert. Im Falle  $\kappa \rightarrow 0$  ergibt sich wegen  $\operatorname{tr} d(T_\gamma) = 2$  ein trivialer Spin-Faktor.

Das komplette Vorgehen im Falle des WCL lässt sich auch wie folgt zusammenfassen:

WCL1 Die Wirkung  $S_\gamma$ , Stabilitätsamplitude  $\mathcal{A}_\gamma$  und der Maslov-Index  $\sigma_\gamma$  bestimmen sich wie im spinlosen Fall. Die zugrundeliegende Dynamik wird durch  $H_0$  gegeben.

WCL2 Es erscheint in der Spurformel ein zusätzlicher Amplitudenfaktor  $\operatorname{tr} d(T_\gamma)$ , (3.56). Dieser bestimmt sich gemäß Dgl. (3.54)

### Behandlung des SCL

Im Falle des SCL muss der LS-Term bereits in führender Ordnung berücksichtigt werden, entsprechend erscheint in (3.51) dieser an Position ① der Term  $\kappa \mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ , Stelle ② bleibt dagegen unbesetzt. Der führende Beitrag ist nunmehr zweikomponentig. Eine Lösung kann aber gefunden werden, wenn man die klassischen Symbole diagonalisiert. Die Dynamik folgt den beiden Eigenwerten

$$H_\pm(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \pm \kappa |\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p})|. \quad (3.57)$$

Diese sind identisch mit denen aus der Methode von Littlejohn und Flynn. Auch die dortige Annahme von nicht entarteten Eigenwerten muss gemacht werden. Anders als dort erscheinen jedoch die zusätzlichen Ausdrücke, Berry- und NN-Term hier nicht. Die Diagonalisierung wird bereits an klassischen Symbolen durchgeführt und es kommt zu keinen Ordnungsproblemen aufgrund der Moyal-Regel. Berry und NN-Term treten vielmehr erst bei weiterer Auswertung der semiklassischen Amplitude auf. Es zeigt sich dabei, dass sie letztlich genau in Form von Regel SCL2 berücksichtigt werden müssen. Das Problem von nichtkanonischen Koordinaten tritt bei

diesem Zugang nicht auf. Das Vorgehen ist bis auf die Annahme der nichtentarteten Eigenwerte und der semiklassischen Näherung exakt. Bolte und Keppeler konnten so zeigen, dass die ad-hoc Annahme von Frisk und Guhr tatsächlich korrekt waren.

### 3.5.4 Vergleich von SCL und WCL

Die Einbindung des Spins gemäß SCL bzw. WCL sind verschiedene Grenzwertbetrachtungen des gleichen Problems, jedoch mit ganz unterschiedlichen Konsequenzen hinsichtlich der klassischen Dynamik. Im Falle des WCL bleibt diese unverändert. Der Spin dagegen präzediert um das durch  $\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  lokal vorgegebene Magnetfeld, vgl. Abb. 3.1. Es findet keine Rückwirkung des Spins auf die Bahnbewegung statt. In der Spurformel tritt als Zusatzfaktor der Term  $\text{tr } d(T_\gamma)$  auf. Er ergibt sich aufgrund der am Bahnende vorliegenden Spinausrichtung. Orientiert sich dieser etwa während eines Umlaufs in die entgegengesetzte Richtung, so gilt  $\text{tr } d(T_\gamma) = 0$ , die Bahn besitzt keinen Beitrag in der Spurformel; ist er mit der Anfangsposition identisch, gibt es dagegen den maximalen Beitrag, d.h.  $\text{tr } d(T_\gamma) = 2$ . Abgesehen von der semiklassischen Näherung werden keine zusätzlichen Annahmen bei Methode WCL benötigt.

Im Gegensatz dazu setzt die SCL-Methode eine adiabatische Näherung voraus. Diese wird benutzt, wenn lokal die Koordinaten gerade so gedreht werden, dass der Spin sich in  $z$ -Richtung orientiert. Die Bahnbewegung folgt zwei modifizierten Hamiltonfunktionen. Diese können mit den beiden Spinpolarisationen identifiziert werden.

$$H_+ \longleftrightarrow \text{Spin up} \qquad H_- \longleftrightarrow \text{Spin down} \qquad (3.58)$$

Die adiabatische Näherung ist allerdings nur dann gültig, wenn eine Spinausrichtung definiert werden kann. Problematisch sind Bereiche des Phasenraums, wo  $\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  auf kleiner Skala große Richtungsänderungen aufweist. Dies ist gerade in der Nähe der MC Fläche  $\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 0$  der Fall. Eine mögliche Konsequenz ist ein Spinflip. Es kommt zu einer Änderung der Polarisierung, was sich in der klassischen Dynamik durch eine Vertauschung der beiden Hamiltonfunktionen äußert. Eine allgemeine Theorie zu diesem Phänomen existiert leider noch nicht. In Kapitel 6 werden jedoch einige Punkte dazu näher untersucht.

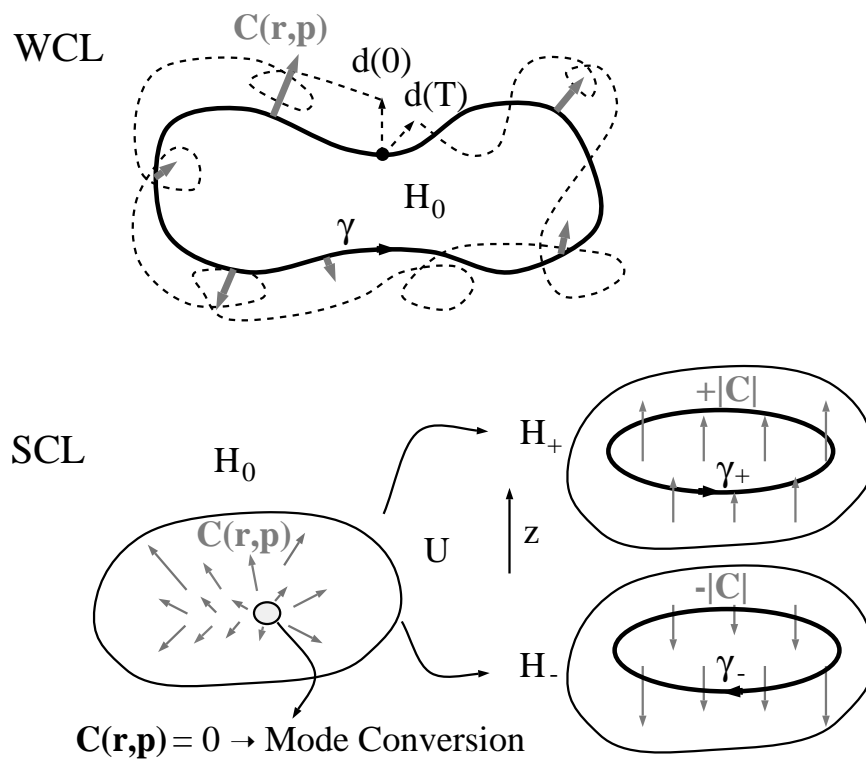


Abbildung 3.1: Bei der WCL-Methode bleibt die klassische Bahn unverändert. Der Spin präzediert um das lokale Magnetfeld  $\mathbf{C}(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ . Im Falle des SCL erfolgt eine lokale Koordinatentransformation derart, dass das Magnetfeld entlang der  $z$ -Achse ausgerichtet ist. Die beiden neuen Systeme  $H_{\pm}$  können mit den Spinpolarisationen identifiziert werden.

# Kapitel 4

## LS-Kopplung im 2-dim. Elektronengas

*In 2-dim. Elektronengasen kann eine LS-Kopplung in Form des Rashba-Terms auftreten. In diesem Abschnitt wird damit die semiklassische Einbindung der LS-Kopplung demonstriert. Die meist analytisch zugänglichen Systeme erlauben eine direkte Kontrolle der gemachten Näherungen.*

Mesoskopische Systeme werden momentan intensiv erforscht. Diese, sich gerade im Übergangsbereich von klassischer zu QM befindlichen Systeme, können aufgrund ihrer Komplexität mit einer mikroskopischen Theorie oft nur bedingt beschrieben werden. Umgekehrt lassen deren Abmessungen bereits die Ausbildung von Quanteneffekten zu, so dass gerade hier semiklassische Beschreibungen oftmals die einzigen möglichen sind. Sehr viele Untersuchungen finden dabei an 2-dim. Elektronengas-systemen (2DEG) statt. Sie zeigen ein reiches Spektrum ganz neuer physikalischer Effekte, wie etwa den (fraktionalen) Quanten-Hall Effekt oder Quasiteilchen mit fraktionaler Statistik. 2DEGs werden üblicherweise durch Halbleiterschichtstrukturen realisiert. Der Einsatz verschiedener Materialien sowie Dotierungen erlauben die weitgehende Kontrolle verschiedener Eigenschaften wie Bandlücke oder die Lage der Fermienergie. Zudem ermöglichen moderne Herstellungsprozesse sowohl laterale als auch vertikale Strukturierung auf einer Skala im  $nm$ -Bereich. Das Experiment kann einer theoretischen Fragestellung angepasst werden. Beispielsweise können künstliche „Atome“ oder „Kristalle“ in Form von Quantendots bzw. Minibandstrukturen hergestellt und theoretisch untersucht werden.

Daneben sind solche Systeme auch für Anwendungen in Form von integrierten Schaltungen interessant. Während momentan Bauelemente stets auf elektronischer Basis arbeiten, wird für die Zukunft auch die Einbindung des Spins in Erwägung gezogen, man spricht auch von „Spintronik“. Im Zusammenhang mit dem Spin-Transport

spielt die LS-Kopplung, wie sie in gewissen Halbleitern auftreten kann, eine sehr wichtige Rolle.

Transportprobleme können experimentell vergleichsweise direkt gemessen werden. Eine volle quantenmechanische Behandlung ist dagegen schwierig. Diesem Umstand verdankt es sich, dass gerade hier semiklassische Theorien eine große Aufmerksamkeit genießen, z.B. Beschreibung der Leitwerte in Übergittersystemen [Ric 95], [Ond 00] oder Kanälen [Bla 00]. Einen Überblick über weitere Anwendungen finden sich in [Bra 97] oder [Ric 00].

Die nun folgenden Modellsysteme beschränken sich stets auf den einfacheren Fall einer Beschreibung der Zustandsdichte. Auch sind sie nicht als möglichst realistische Beschreibung eines Experiments gedacht. Vielmehr dienen sie dazu, die Qualität der in Abschnitt 3.4. vorgestellten semiklassischen Näherungen anhand einer wohldefinierten Problemstellung zu beurteilen. Teilweise kann dabei sogar analytisch vorgegangen werden.

## 4.1 Ursprung der Spin-Bahn Kopplung im 2DEG

Eine Möglichkeit bei der Beschreibung von Halbleitersystemen ist die Verwendung eines  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Multiband-Hamiltonians des Kane-Modells. Ohne auf die Details eingehen zu können (vgl. [Rös 88] und Referenzen darin) sei hier nur erwähnt, dass die weiteren Betrachtungen an einem LS-gekoppelten System durchgeführt werden, wie es bei Benutzung des Kanaschen 3-Bänder Modell auftritt. Ferner soll die  $z$ -Richtung im Potential abseparieren und in dieser Richtung nur der Grundzustand besetzt sein. Solch eine Situation wird mit folgendem effektivem 2-dim. Operator beschrieben.

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \underbrace{\left[ \frac{1}{2m^*} \hat{\boldsymbol{\pi}}^2 + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \right]}_{H_0} \mathbb{1} + \underbrace{\kappa \hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})}_{H_{LS}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (4.1)$$

$$\text{wobei} \quad \hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - e\hat{\mathbf{A}}, \quad \hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \begin{pmatrix} -\langle v'_z \rangle \hat{\pi}_y & \\ \langle v'_z \rangle \hat{\pi}_x & \\ \partial \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) / \partial \hat{r}_x \hat{\pi}_y - \partial \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) / \partial \hat{r}_y \hat{\pi}_x & \end{pmatrix}$$

$\langle v'_z \rangle$  bezeichnet hierbei den Erwartungswert der Ableitung des Potentials in  $z$ -Richtung. Die genaue Herleitung von System (4.1) und die dabei gemachten Näherungen können [Dar 93] entnommen werden. Dort finden sich auch noch zusätzliche Ausdrücke, wie der Zeeman- oder Darwin-Term. Sie werden hier jedoch vernachlässigt, da sie hinsichtlich der semiklassischen Behandlung keine neuen Aspekte mit sich bringen. Auch wird die effektive Masse  $m^*$  stets als konstant vorausgesetzt.

Zum Entstehen einer starken LS-Kopplung -auch im magnetfeldfreien Fall- müssen folgende Voraussetzungen gegeben sein:

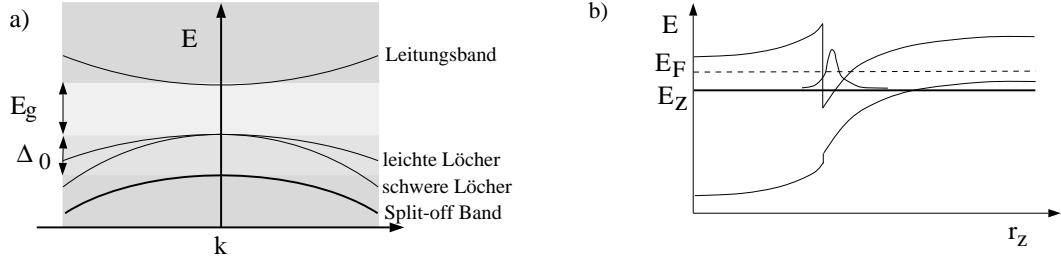


Abbildung 4.1: a) Bänderschema mit Split-Off Band. b) Zur Ausbildung einer LS-Kopplung bedarf es eines asymmetrischen  $z$ -Potentials.

- Das Verhältnis von Split-Off Energie und Bandlücke  $E_g$  im Halbleiter soll möglichst groß sein. Diese Systemeigenschaft ist z.B. bei InAs vorhanden.
- Zur Aufhebung der Spin-Entartung bedarf es entweder der Brechung der Zeitumkehr- oder der räumlichen Inversionsinvarianz. Im magnetfeldfreien Fall muss letzteres der Fall sein. Dies kann etwa durch den in Abb. 4.1 realisierten  $z$ -Potentialverlauf erzielt werden. Es folgt dabei  $\langle v'_z \rangle > 0$ . Alternativ, mit zusätzlicher experimenteller Kontrollmöglichkeit von  $\kappa$ , kann auch ein elektrisches Feld in  $z$ -Richtung angelegt werden.

Systemparameter wie Bandlücke  $E_g$  und Split-Off Verschiebung  $\Delta_0$  erscheinen in der effektiven Masse  $m^*$  sowie im LS-Parameter  $\kappa$ . Man erkennt weiterhin, dass  $\langle v'_z \rangle$  direkten Einfluss auf die Stärke der Kopplung hat.

Der Term  $H_{LS}$  wird auch als Rashba-Term bezeichnet. Entfällt eine laterale Strukturierung  $V(r_x, r_y) = const.$  so gilt  $C_z = 0$ . in diesem Fall wird auch folgende häufig benutzte Notation verwendet.

$$\hat{H}_{LS}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \tilde{\kappa}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{e}_z \quad (4.2)$$

Hier wird  $\tilde{\kappa} := \kappa \langle v'_z \rangle$  zu einer Konstante zusammengefasst.

## 4.2 Der Fall mit periodischen Randbedingungen

Als einfaches System soll zunächst das freie 2DEG mit Rashba-Term untersucht werden.

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m^*} \mathbf{1} + \tilde{\kappa}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{e}_z \quad (4.3)$$

Als Lösung der Schrödingergleichung  $H\Psi = E\Psi$  ergibt sich ein Spektrum mit folgender Energiedispersion:

$$E^\pm(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \tilde{\kappa} k \quad (4.4)$$

Hierbei bezeichnet  $k = |\mathbf{k}| = |\mathbf{p}|/\hbar$  den Betrag des Wellenvektors. Abb. 4.2 entnimmt man, dass der Rashba-Term die Dispersionsparabel um  $\pm\tilde{\kappa}k$  verschiebt, es kommt, wenn man gegen beide Wellenvektoren  $k_x$  und  $k_y$  aufträgt, zur Ausbildung von zwei Energieparaboloiden. Eine bemerkenswerte Folge ist, dass das absolute Energieminimum nicht mehr bei  $k = 0$  auftritt. Ferner erkennt man, dass Gleichung (4.4) exakt der Struktur der beiden SCL-Hamiltonfunktionen entspricht.

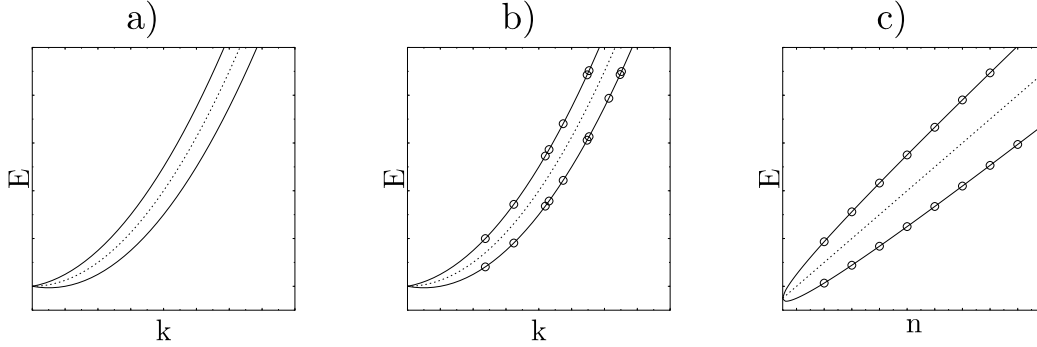


Abbildung 4.2: Aufspalten der Energieniveaus bei Hinzunahme des Rashba-Terms. a) Schematischer Verlauf der Dispersion eines freien 2DEGs. b) Periodische Randbedingungen erfordern diskrete  $\mathbf{k}$ -Werte und Energien. c) Bei senkrecht angelegtem Magnetfeld bilden sich Landau-Niveaus aus. Die durchgezogene Linie zeigt den Verlauf von Beziehung (4.17) bei kontinuierlichem  $n$

Für die weiteren Untersuchungen soll nun System (4.3) periodischen Randbedingungen mit Perioden  $L_x$  und  $L_y$  unterworfen werden<sup>1</sup>. Die Integrierbarkeit dieses Falls ermöglicht einen genauen Vergleich der in Abschnitt 3.5 vorgestellten Methoden. Die Forderung

$$\Psi(x, y) = \Psi(x + L_x, y) \quad \Psi(x, y) = \Psi(x, y + L_y) \quad (4.5)$$

bewirkt, dass nunmehr nur noch diskrete Energien auf den Energieparabeln erlaubt sind, vgl. Abb. 4.2 b).

$$E_{n_x, n_y}^{\pm} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m^*} \left[ \left( \frac{n_x}{L_x} \right)^2 + \left( \frac{n_y}{L_y} \right)^2 \right] \pm 2\tilde{\kappa}\pi\hbar \sqrt{\left( \frac{n_x}{L_x} \right)^2 + \left( \frac{n_y}{L_y} \right)^2} \quad n_x, n_y = 1, 2, \dots \quad (4.6)$$

Der Rashba-Term führt dabei zur symmetrischen Aufspaltung der Eigenwerte. Resultat (4.6) ergibt sich, wenn man eine exakte Diagonalisierung in der Basis von ebenen Wellen  $\Psi(x, y) = \exp[2\pi i(k_x r_x + k_y r_y)]$  durchführt, wobei die Wellenvektoren

<sup>1</sup>Auf die Integrierbarkeit dieses Falls machte mich Stefan Keppeler aufmerksam.

gemäß der Periodizität gewählt werden, d.h.  $k_x = n_x/L_x$ ,  $k_y = n_y/L_y$ . Hierbei zerfällt die Sekulärmatrix in  $2 \times 2$  Blockmatrizen mit den Eigenwerten (4.6).

In den Schritten (4.7)-(4.10) erfolgt nun ausgehend von (4.6) das Aufstellen einer Spurformel. Dies geschieht mittels Poisson-Summation (vgl. z.B. [Tit 48]) und anschließender Auswertung der Integrale. Dabei soll stets nur der führende  $\hbar$ -Beitrag betrachtet werden, die komplette Auswertung aller Ordnungen ergäbe sich aber ohne weiteres. Die Herleitung schließt auch den Fall  $\tilde{\kappa} = 0$  ein, so dass die später benötigte Spurformel von  $H_0$  ebenfalls bereitgestellt wird. Die Zustandsdichte formt sich durch eine Poisson-Summation wie folgt um.

$$\begin{aligned} g_{QM}(E) &= \sum_{\pm} \sum_{n_x, n_y=1}^{\infty} \delta(E - E_{n_x, n_y, \pm}) \\ &\approx \sum_{\pm} \sum_{l_x, l_y=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn_x \int_0^{\infty} dn_y \delta(E - E_{n_x, n_y, \pm}) e^{2\pi i(l_x n_x + l_y n_y)} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Die an dieser Stelle gemachten Näherungen betreffen die Vernachlässigung der Randkorrekturen im Form von zusätzlichen Einfachintegralen. Das Doppelintegral lässt sich mit folgenden Koordinaten leichter auswerten.

$$n_x = L_x R \cos \phi \quad n_y = L_y R \sin \phi \quad (4.8)$$

Hiermit wird erreicht, dass die Energie ausschließlich von  $R$  abhängig ist.

$$E^{\pm}(R) = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m^*} R^2 \pm 2\tilde{\kappa} \pi \hbar R \quad \Leftrightarrow \quad R^{\pm} = \frac{1}{2\pi \hbar} \left( p \sqrt{1 + \left( \frac{\tilde{\kappa} m^*}{p} \right)^2} \pm \tilde{\kappa} m^* \right) \quad (4.9)$$

An zweiter Stelle wurde der Impuls  $p = \sqrt{2Em^*}$  eingeführt. Bezeichnet man weiterhin  $E'^{\pm}(R) = \partial E^{\pm}(R)/\partial R$  so gilt:

$$\begin{aligned} g_{QM}(E) &= \sum_{\pm} \sum_{l_x, l_y=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{R^{\pm} L_x L_y}{|E'^{\pm}(R^{\pm})|} e^{2\pi i R^{\pm} (l_x L_x \cos \phi + l_y L_y \sin \phi)} \\ &= \sum_{\pm} \sum_{l_x, l_y=-\infty}^{\infty} 2\pi \frac{R^{\pm} L_x L_y}{|E'^{\pm}(R^{\pm})|} J_0(2\pi R^{\pm} \mathcal{L}_{l_x, l_y}) \end{aligned} \quad (4.10)$$

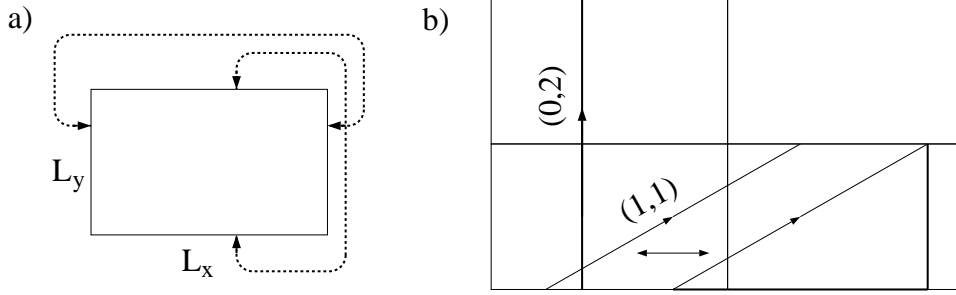


Abbildung 4.3: a) Beim Torus werden gegenüberliegende Seiten des Rechtecks identifiziert. b) Setzt man die Torusfläche periodisch fort und verbindet korrespondierende Punkte so ergeben sich periodische Bahnen. Diese können durch zwei ganze Zahlen  $(l_x, l_y)$  charakterisiert werden und besitzen die Länge  $\mathcal{L}_{l_x, l_y} = \sqrt{(l_x L_x)^2 + (l_y L_y)^2}$ . Sie liegen in einer einparametrischen Familie vor.

Die Größe  $\mathcal{L}_{l_x, l_y} = \sqrt{l_x^2 L_x^2 + l_y^2 L_y^2}$  kann als Länge von periodischen Bahnen des Systems identifiziert werden, vgl. Abb. 4.3. Ersetzt man nun  $R^\pm$  dann ergibt sich schließlich folgende in führender  $\hbar$ -Ordnung exakte Spurformel:

$$\begin{aligned}
 g_{QM}(E) &= \frac{m^* L_x L_y}{2\pi \hbar^2} \sum_{\pm} \sum_{k_x, k_y = -\infty}^{\infty} J_0 \left( \frac{1}{\hbar} p \left[ \sqrt{1 + \left( \frac{\tilde{\kappa} m^*}{p} \right)^2} \pm \frac{\tilde{\kappa} m^*}{p} \right] \mathcal{L}_{k_x, k_y} \right) \\
 &\approx \frac{m^* L_x L_y}{2\pi \hbar^2} \sum_{\pm} \sum_{k_x, k_y = -\infty}^{\infty} J_0 \left( \frac{1}{\hbar} p \left[ 1 \pm \frac{\tilde{\kappa} m^*}{p} \right] \mathcal{L}_{k_x, k_y} \right) \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

Bei der letzten Näherung wurden wegen  $\tilde{\kappa} m^*/p \ll 1$  dieser Term nur in 1. Ordnung berücksichtigt. Die Struktur der Spurformel bleibt gegenüber dem Fall  $\tilde{\kappa} = 0$  weitgehend erhalten. Es kommt lediglich zu einer energieabhängigen Streckung bzw. Stauchung der Periodizität des Systems. Es fällt auf, dass (4.11) nicht der üblichen Schreibweise einer Spurformel entspricht. Wegen  $J_0(x) \approx (2/\pi x)^{1/2} \cos(x - \pi/4)$  für  $x \rightarrow \infty$  ergeben sich im Limes jedoch die Kosinus-Terme.

Die auf den exakten Eigenwerten basierende Spurformel (4.11) wird nun verglichen mit einer, die aus einer semiklassischen Analyse gemäß der WCL-Näherung folgt. Hier lautet das entsprechende Endresultat,

$$g_{SK}(E) = \frac{m^* L_x L_y}{2\pi \hbar^2} \sum_{l_x, l_y = -\infty}^{\infty} \underbrace{2 \cos \left( \frac{\tilde{\kappa} m^* \mathcal{L}_{l_x, l_y}}{\hbar} \right)}_{\text{tr } d_\Gamma} J_0 \left( \frac{1}{\hbar} p \mathcal{L}_{l_x, l_y} \right). \quad (4.12)$$

Dieser Ausdruck setzt sich aus der Spurformel von  $H_0$  zusammen, die an dieser Stelle als bekannt vorausgesetzt ist, und dem zusätzlichen Amplitudenfaktor  $\text{tr } d_\Gamma$ . Dieser

bestimmt sich mit Gleichung (3.54), was in diesem Falle wegen konstanter Impulse elementar erfolgen kann.

Vergleicht man Ausdrücke (4.12) und (4.11), so ergeben sich für  $\tilde{\kappa} \neq 0$  gewisse Unterschiede. Ersetzt man aber in (4.12) für große Argumente die Besselfunktion durch einen Kosinus, benutzt das Additionstheorem und entwickelt nach  $\tilde{\kappa}m^*/p$ , so gilt

$$2 \cos\left(\frac{\tilde{\kappa}m\mathcal{L}_{k_x,k_y}}{\hbar}\right) J_0\left(\frac{1}{\hbar}p\mathcal{L}_{k_x,k_y}\right) \approx J_0\left(\frac{1}{\hbar}p\left[1 \pm \frac{\tilde{\kappa}m}{p}\right]\mathcal{L}_{k_x,k_y}\right) \quad (4.13)$$

und beide Ausdrücke stimmen überein.

Abschließend wird das gleiche System in der SCL-Näherung untersucht. Die Existenz von Erhaltungsgrößen erlaubt dabei eine EBK-Quantisierung. Die beiden Hamiltonfunktionen

$$H_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} \pm \tilde{\kappa}\sqrt{p_x^2 + p_y^2} \quad (4.14)$$

enthalten zyklische Koordinaten  $r_x$  und  $r_y$ . Es folgt die klassische Erhaltung von  $p_x$  und  $p_y$ . Da die Bewegung bereits auf einem Torus stattfindet, ergeben sich auf triviale Weise die primitiven Schleifen  $\mathcal{C}_i$  und die beiden EBK-Quantisierungsbedingungen lauten.

$$S_i = \int p_i dr_i = p_i L_i \stackrel{!}{=} n_i 2\pi\hbar, \quad i = x, y \quad n_i = 1, 2, \dots \quad (4.15)$$

Die Maslov-Indizes aus (3.1) verschwinden wegen der Impulserhaltung ebenso, wie Berry- und NN-Term. Bedingung (4.15) legt die Impulse zu  $p_i = 2\pi\hbar n_i/L_i$  fest. Diese eingesetzt in (4.14) ergibt genau das quantenmechanische Resultat.

Der Vergleich zwischen WCL- und SCL-Behandlung des gleichen Problems verdeutlicht den grundsätzlichen Unterschied beider Methoden. Um Gleichheit zwischen QM und SK zu erzwingen wurde im ersten Fall an verschiedenen Stellen nach Ordnungen von  $\tilde{\kappa}$  entwickelt. Wegen der Identifikation von  $\hbar$  und  $\tilde{\kappa}$  im Falle des WCL ist dieses Vorgehen jedoch korrekt. Dagegen wird bei der Behandlung des SCL an keiner Stelle nach  $\tilde{\kappa}$  genähert. Die an dieser Stelle erzielte Übereinstimmung auch bei kleinen Quantenzahlen kann allerdings i.A. nicht erwartet werden.

### 4.3 Das 2DEG im harmonischen Potentialtopf

Im nun folgenden Abschnitt wird System (4.1) zusätzlich mit einem harmonischen Einschlusspotential versehen. Dieses ist als erster nichtverschwindender Beitrag einer Taylorentwicklung eine gängige Wahl zur Beschreibung eines 2-dim. Quantendots. Mit steigender Teilchenzahl nimmt zwar aufgrund von Abstoßungen der Mean-Field

Verlauf immer stärker den Verlauf eines steilen Potentialtopfes an, das harmonische Potential stellt aber auch in einem solchen Fall ein System mit experimenteller Relevanz dar. Aufgrund einer zum Kohn-Theorem [Koh 61] vergleichbaren Aussage, das streng in harmonischen Systemen gilt [Mak 90],[Bre 89],[Bak 90], bleiben bestimmte Niveauübergänge zumindest im Falle ohne LS-Kopplung unbeeinflusst von einer Zwei-Teilchen Wechselwirkung. Bestimmte Absorptionslinien können auch im Ein-Teilchen Bild verstanden werden. Der Quantendot wird in diesem Kapitel zusätzlich mit einem in  $z$ -Richtung anliegendem Magnetfeld versehen, eine meist im Experiment realisierte Situation. Auf den magnetfeldfreien Fall und die damit verbundenen Komplikationen sei auf Kapitel 6 verwiesen.

Aus (4.1) ergibt sich damit folgender Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{\pi}}^2}{2m^*} + \frac{m^*}{2} (\omega_x^2 \hat{r}_x^2 + \omega_y^2 \hat{r}_y^2) + \kappa \hat{\mathbf{C}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (4.16)$$

$$\text{mit } \hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{eB}{2} \begin{pmatrix} -\hat{r}_y \\ \hat{r}_x \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{C}} = \begin{pmatrix} -\langle v'_z \rangle \pi_y \\ +\langle v'_z \rangle \pi_x \\ m^* \omega_x^2 \hat{r}_x \pi_y - m^* \omega_y^2 \hat{r}_y \pi_x \end{pmatrix}$$

Dieses System beinhaltet zwei Spezialfälle:

- **Sphärischer Fall** ( $\omega_x = \omega_y = \omega_0$ ). Hier existiert mit dem Gesamtdrehimpuls  $J = L + \sigma_z$  eine weitere Erhaltungsgröße.
- **Freier Fall im Magnetfeld** ( $\omega_x = \omega_y = 0$ ). Auch dieser Fall ist integrierbar. Für eine spätere Anwendung werden hier die exakten Eigenwerte angegeben [Byc 84].

$$E_n = \begin{cases} \frac{1}{2} \hbar \omega_c & \text{für } n = 0 \\ \hbar \omega_c (n \pm \sqrt{\frac{1}{4} + \delta^2 n}) & \text{für } n = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (4.17)$$

$$\text{mit } \omega_c = \frac{eB_{ext}}{m^*}, \quad \delta = 2 \left( \frac{\Delta}{\hbar \omega_c} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta = \frac{(\kappa \langle v'_z \rangle)^2 m^*}{2}.$$

Abgesehen von diesen Fällen sowie für  $\kappa = 0$  ist System (4.16) nicht integrierbar. Eigenwerte müssen damit numerisch bestimmt werden. Dies geschieht mittels einer exakten Diagonalisierung in einer speziell gewählten Oszillatorbasis. Diskrete Symmetrien des Systems lassen dabei noch zwei Vereinfachungen zu [Göt 71]:

1. Die Benutzung der Basis  $|n_x, i^{n_y} n_y, s_z\rangle$  wobei  $n_k$  die Eigenzustände des 1-dim. Oszillators und  $s_z$  die von  $\sigma_z$  bezeichnen, führt zu reellen Einträgen in der Sekulärmatrix.
2. Wegen der Erhaltung von  $(-1)^{n_x + n_y} s_z$  zerfällt diese weiter in zwei Blockmatrizen.

### 4.3.1 Die semiklassische Behandlung mit der WCL-Methode

Das Aufstellen einer Spurformel benötigt gemäß WCL1 die Spurformel von  $H_0$ . Diese ergibt sich sogar exakt. Dabei nutzt man aus, dass  $H_0$  als biquadratische Form in den Phasenraumkoordinaten durch eine Transformation in die Normalform eines 2-dim. Oszillators gebracht werden kann. Aus den neuen Frequenzen ergeben sich folgende Eigenenergien [Bog 79]:

$$E_{n_+, n_-}^{(0)} = \hbar\omega_+ \left( n_+ + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_- \left( n_- + \frac{1}{2} \right) \quad n_+, n_- = 0, 1, 2, \dots \quad (4.18)$$

$$\text{mit } \omega_{\pm} = \left[ \frac{1}{2} \left( \omega_c^2 + \omega_x^2 + \omega_y^2 \pm \sqrt{(\omega_c^2 + \omega_x^2 + \omega_y^2)^2 - 4\omega_x^2\omega_y^2} \right) \right]^{1/2} \quad (4.19)$$

$\omega_c = eB_{ext}/m^*$  bezeichnet dabei die Zyklotronfrequenz. Aus Gleichung (4.19) entnimmt man, dass der freie Fall wegen  $\omega_+ = \omega_c$  und  $\omega_- = 0$  eine gewisse Sonderstellung einnimmt. Die Eigenenergien in (4.18) hängen hier nur von einer Quantenzahl ab, sind dafür wegen der Translationsfreiheit jedoch entartet. Diese Entartung ist für jedes Niveau identisch und kann als Faktor vor die Spurformel gestellt werden. Die Spurformel beschreibt die Lage der einfach besetzten Zustände. Sie ergibt sich analytisch aus (4.18) (vgl. [Bra 97]) und lautet:

$$\delta g^{(0)}(E) = \begin{cases} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[ \frac{\sin\left(k \frac{2\pi E}{\hbar\omega_+}\right)}{\hbar\omega_+ \sin\left(k\pi \frac{\omega_-}{\omega_+}\right)} + \frac{\sin\left(k \frac{2\pi E}{\hbar\omega_-}\right)}{\hbar\omega_- \sin\left(k\pi \frac{\omega_+}{\omega_-}\right)} \right] & \text{für } \omega_+/\omega_- \notin \mathbb{Q} \\ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2(-1)^k}{\hbar\omega_c} \cos\left(k \frac{2\pi E}{\hbar\omega_c}\right) & \text{für } \omega_x = \omega_y = 0 \end{cases} \quad (4.20)$$

Der Fall des rationalen Frequenzverhältnisses bleibt unberücksichtigt. Die damit verbundene Problematik wird in [Bra 95] diskutiert. In unserem Fall kann durch geeignete Wahl des Magnetfeldes, dieses Problem stets ausgeschlossen werden.

Der nächste Schritt besteht in der Auswertung von Dgl. (3.54). Dazu wird eine Parametrisierung aller periodischen Bahnen benötigt. Ein harmonischer Oszillator besitzt die Eigenschaft, dass die Phasenraumtrajektorie harmonische Bewegungen in allen Koordinaten ausführt. Gilt ferner  $\omega_+/\omega_- \notin \mathbb{Q}$ , so existieren, abgesehen von Wiederholungen, lediglich zwei Bahnen mit den Frequenzen  $\omega_{\pm}$ . In Spurformel (4.20) können diese gerade mit den beiden Summanden in der eckigen Klammer identifiziert werden, vgl. auch Abb. 4.4. Nachfolgende Behandlung unterscheidet nun zwischen:

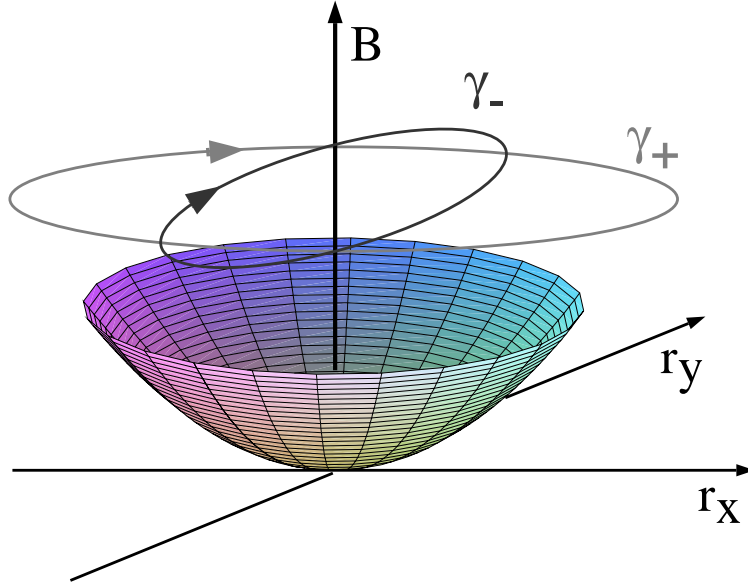


Abbildung 4.4: Im 2-dim. Quantendot mit Magnetfeld gibt es zwei elliptische Bahnen  $\gamma_{\pm}$  und deren Wiederholungen.

### 1. Isotroper Fall ( $\omega_x = \omega_y = \omega_0 > 0$ )

Aus Symmetriegründen sind die beiden Bahnen rotationssymmetrisch. Bei gegebener Energie  $E$  wird durch

$$\gamma_{\pm}(t) = \begin{pmatrix} R_{\pm}(E) \cos(\omega_{\pm}t) \\ R_{\pm}(E) \sin(\omega_{\pm}t) \\ -R_{\pm}(E)m^*(\omega_{\pm} - \omega_c/2) \sin(\omega_{\pm}t) \\ R_{\pm}(E)m^*(\omega_{\pm} - \omega_c/2) \cos(\omega_{\pm}t) \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

eine mögliche Parametrisierung gegeben.  $R_{\pm}(E) = \sqrt{2E [m^*(\omega_{\pm}^2 + \omega_0^2)]^{-1}}$  bezeichnet hier den Zyklotronradius. Das entlang der Bahn  $\gamma_{\pm}$  ausgewertete Dgl-System ist von folgender Gestalt:

$$\dot{d}(t) = \frac{i}{\hbar} D(t) d(t) \quad (4.22)$$

$$\text{mit } D(t) = \kappa R_{\pm}(E) \omega_{\pm} \begin{pmatrix} m^{*2} \omega_0^2 R_{\pm}(E) & -\langle v'_z \rangle e^{-i\omega_{\pm}t} \\ \langle v'_z \rangle e^{+i\omega_{\pm}t} & -m^{*2} \omega_0^2 R_{\pm}(E) \end{pmatrix}$$

Es handelt sich um ein lineares System 1. Ordnung mit nicht konstanter Koeffizientenmatrix. Es stellt sich allerdings heraus, dass ein geschlossener Ausdruck des

Modulationsfaktors trotzdem existiert. Details finden sich in Anhang C. Die Amplituden von Spurformel (4.20) werden entsprechend korrigiert. Es folgt ein geschlossener Ausdruck einer Spurformel des isotropen Falls von Quantendot (4.16):

$$\delta g(E) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[ \frac{\text{tr } d(kT_{\gamma_+}) \sin\left(k \frac{2\pi E}{\hbar\omega_+}\right)}{\hbar\omega_+ \sin\left(k\pi \frac{\omega_-}{\omega_+}\right)} + \frac{\text{tr } d(kT_{\gamma_-}) \sin\left(k \frac{2\pi E}{\hbar\omega_-}\right)}{\hbar\omega_- \sin\left(k\pi \frac{\omega_+}{\omega_-}\right)} \right] \quad (4.23)$$

mit der Amplitudenkorrektur

$$\text{tr } d(kT_{\gamma_{\pm}}) = 2(-1)^k \cos \left( \pi k \sqrt{1 + \frac{16E^2 \left(\frac{\kappa}{\hbar}\right)^2 \omega_0^4}{m^{*2}(\omega_{\pm}^2 + \omega_0^2)^2} + \frac{8Em^* \left[ \left(\frac{\kappa}{\hbar}\right)^2 \langle v_z' \rangle^2 + \frac{\kappa}{\hbar} \omega_0^2 \right]}{\omega_{\pm}^2 + \omega_0^2}} \right) \quad (4.24)$$

## 2. Freier Fall ( $\omega_x = \omega_y = 0$ )

Die Behandlung dieses Falls ähnelt weitgehend dem des isotropen. Hauptunterschied besteht im Vorhandensein nur eines Bahntyps der Frequenz  $\omega_+ = \omega_c$ . Der zweite verschwindet wegen  $\omega_- = 0$ , was der Translationsentartung im System Rechnung trägt. Abgesehen davon kann obiges Vorgehen übernommen werden. Ausdruck (4.24) vereinfacht sich wegen  $\omega_0 = 0$  und unter Anwendung von Additionstheoremen ergibt sich schließlich:

$$\delta g_{SK}(E) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{\hbar\omega_c} \cos \left[ 2\pi \left( \frac{E}{\hbar\omega} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{16E\Delta}{\hbar^2\omega^2} + 1} \right) k \right] \quad (4.25)$$

Dieser Ausdruck kann erneut verglichen werden mit demjenigen, der sich aus Umformung des exakt bekannten Spektrums ergibt. Nach Poisson-Summation folgt hierbei:

$$\delta g_{QM}(E) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{\hbar\omega_c} \cos \left[ 2\pi \left( \frac{E}{\hbar\omega} + \frac{2\Delta}{\hbar\omega} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{16E\Delta}{(\hbar\omega)^2} + \frac{16\Delta^2}{(\hbar\omega)^2} + 1} \right) k \right] \quad (4.26)$$

Es lassen sich zwei Unterschiede ausmachen:

1. Unter der Wurzel enthält der exakte Ausdruck einen Zusatzterm. Dieser ist von höherer  $\hbar$  Ordnung und liegt außerhalb der Gültigkeit einer semiklassischen Näherung.
2. Ausdruck (4.26) enthält einen weiteren Term, der eine Verschiebung der Zustandsdichte bewirkt. Ein ähnliches Resultat wird sich bei der EBK-Quantisierung zeigen.

### 3. Anisotroper Fall ( $\omega_x \neq \omega_y$ )

Dieser Fall ist hinsichtlich einer semiklassischen Behandlung insofern interessant, da das Quantenspektrum aufgrund fehlender Erhaltungsgrößen nicht ohne weiteres zugänglich ist. Es kann nur auf numerische Weise bestimmt werden. Der semiklassische Zugang gestaltet sich dagegen vergleichsweise einfach. Dies liegt daran, dass im System  $H_0$  alle periodischen Bahnen bekannt sind und überdies eine exakte Spurformel zur Verfügung steht. Es verbleibt die Bestimmung des Modulationsfaktors. Hierbei genügt es, den Modulationsfaktor für den primitiven Umlauf numerisch zu bestimmen, da für alle weiteren Wiederholungen

$$d(kT_{\gamma_{\pm}}) = [d(T_{\gamma_{\pm}})]^k \quad (4.27)$$

gilt.

#### 4.3.2 Vergleich von $\delta g_{SK}(E)$ mit $\delta g_{QM}(E)$

Abb. 4.5 zeigt einen Vergleich zwischen von  $\delta g_{QM}(E)$  mit dem in WCL-Näherung bestimmten  $\delta g_{SK}(E)$ . Dabei wurde ein System mit einem Frequenzverhältnis  $\omega_x = \omega_0$ ,  $\omega_y = 1.23\omega_0$  untersucht, das einem Magnetfeld von  $\omega_c = 0.2\omega_0$  ausgesetzt wurde. Die LS-Kopplung wurde mit  $\kappa = 0.2(m^*\omega_0)^{-1}$ , der Dämpfungsfaktor mit  $\rho = 0.3\hbar\omega_0$  angesetzt.

Teilbild a) demonstriert, dass ohne Berücksichtigung der Kopplung, die Einschnürungen nicht reproduzieren werden können. Dagegen kommt es zu einer hervorragenden Übereinstimmung sobald die LS-Kopplung mit der WCL-Methode hinzugenommen wird. Das Resultat kann dabei noch verbessert werden, wenn man neben dem primitiven Bahnmlauf auch die erste Wiederholung mitberücksichtigt. Die Schwebung in b) kommt durch das Vorhandensein von zwei Einhüllenden, entsprechend den Modulationsfaktoren beider Bahnen, zustande. Figur c) gibt deren Verlauf wieder. Der Vergleich muss bei Energien von etwa  $80\hbar\omega_0$  enden, da ab dieser Energie das quantenmechanische Spektrum nicht mehr vollständig ist. Da aber bis zu diesem Wert  $\delta g_{SK}(E)$  das exakte Resultat sehr gut wiedergibt, kann angenommen werden, dass dies auch noch bei höheren Energien der Fall sein wird. Abb. 4.5 (d) und (e) zeigen hierzu den Verlauf der Modulationsfaktoren und den von  $\delta g_{SK}(E)$ .

#### 4.3.3 EBK-Quantisierung

Bislang konnte das 2DEG im Magnetfeld erfolgreich mit der WCL-Methode beschrieben werden. In diesem Abschnitt wird der Sonderfall des freien 2DEG herangezogen um eine EBK-Quantisierung durchzuführen. Dies wird ähnlich zum freien Fall mit periodischen Randbedingung erfolgen.

Ausgangspunkt ist (4.16) mit  $\omega_x = \omega_y = 0$ . Es ist zweckmäßig die beiden SCL-Hamiltonfunktionen in ebenen Polarkoordinaten zu formulieren:

$$H_{\pm} = \frac{1}{2m^*} \left( p_r^2 + \frac{p_{\phi}^2}{r^2} \right) + \frac{\omega_c}{2} p_{\phi} + \frac{m^*}{2} \left( \frac{\omega_c}{2} \right)^2 r^2 \pm \kappa \langle v'_z \rangle \sqrt{p_r^2 + \frac{p_{\phi}^2}{r^2} + \omega_c m^* p_{\phi} + m^{*2} \left( \frac{\omega_c}{2} \right)^2 r^2} \quad (4.28)$$

$\phi$  ist zyklisch, es folgt die Erhaltung des Drehimpulses  $p_{\phi}$ . Somit sind beide Hamiltonfunktionen klassisch integrabel. Periodische Lösungen existieren nur in Form von kreisförmigen Zyklotronbahnen einer bestimmten Orientierung. Für die weitere Auswertung kann daher von  $p_r = 0$  und  $p_{\phi} > 0$  ausgegangen werden. Die Bewegungsgleichungen vereinfachen sich damit.

$$\begin{aligned} \dot{r} &= 0 \\ \dot{p}_r &= \frac{[\omega_c m^* r^2 - 2p_{\phi}] [2p_{\phi} + m^* r (2\kappa \langle v'_z \rangle + r\omega_c)]}{4m^* r} \\ \dot{\phi} &= \frac{p_{\phi}}{m^* r^2} + \frac{\kappa \langle v'_z \rangle}{r} + \frac{\omega_c}{2} \\ \dot{p}_{\phi} &= 0 \end{aligned} \quad (4.29)$$

Aus der zweiten Gleichung und der Forderung von  $\dot{p}_r \stackrel{!}{=} 0$  (wegen Kreisbahn!) folgt  $p_{\phi} = m^* \omega_c r^2 / 2$ . Die EBK-Bedingung ergibt nun

$$\oint p_{\phi} d\phi = 2\pi p_{\phi} = \pi m^* \omega_c r^2 \stackrel{!}{=} 2\pi \hbar (n + 1/2), \quad n = 0, 1, \dots, \quad (4.30)$$

was die Zyklotronradien und damit die Energie festlegt.

$$E_n^{EBK} = \hbar \omega_c \left( n + 1/2 \pm \delta \sqrt{n + 1/2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (4.31)$$

An dieser Stelle müsste gemäß [Lit 92] noch eine Korrektur durch den Berry- und NN-Term erfolgen. Es stellt sich allerdings heraus, dass beide Terme identisch verschwinden:

- Es gilt Drehimpulserhaltung. Damit verschwindet Ausdruck (3.33) wegen  $\dot{\phi} = 0$  und der Berry-Term ist Null.
- Der NN-Term entfällt ebenfalls. Dies hängt damit zusammen, dass im freien 2DEG die Bewegung des  $\mathbf{C}$ -Vektors ausschließlich in der  $xy$ -Ebene erfolgt. Die Matrix  $U$  ist daher von der Form

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\phi} & -1 \\ 1 & e^{-i\phi} \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

und die Poissonklammern in (3.32) verschwinden.

Ausdruck 4.31 stellt demnach den kompletten Energieausdruck im Rahmen der EBK-Näherung dar. Im Gegensatz zum obigen Falles des Torus werden die Energien nicht exakt quantisiert. Ähnliches Verhalten trat bereits im WCL desselben Systems auf. Im Limes großer Quantenzahlen  $n \rightarrow \infty$  stimmt jedoch der EBK-Ausdruck mit dem quantenmechanischen überein.

$$\begin{aligned}
 E_n^{EBK} &= \hbar\omega_c \left( n + 1/2 \pm \delta\sqrt{n + 1/2} \right) & (4.33) \\
 &\approx \hbar\omega_c \left( n + \delta\sqrt{n} \right) \\
 &\approx \hbar\omega_c \left( n \pm \sqrt{\delta^2 n + 1/4} \right) = E_n^{QM} & \text{für } n \rightarrow \infty
 \end{aligned}$$

Dies zeigt allerdings nur, dass der Sonderstatus des harmonischen Oszillators verloren geht.

Erneut fällt auf, dass keine Näherung nach  $\kappa$  gemacht werden muss. Dagegen müssen diese bei der WCL-Behandlung des gleichen Problems schon gemacht werden, etwa beim Vernachlässigen des Terms  $\Delta^2$  in der Spurformel (4.26).

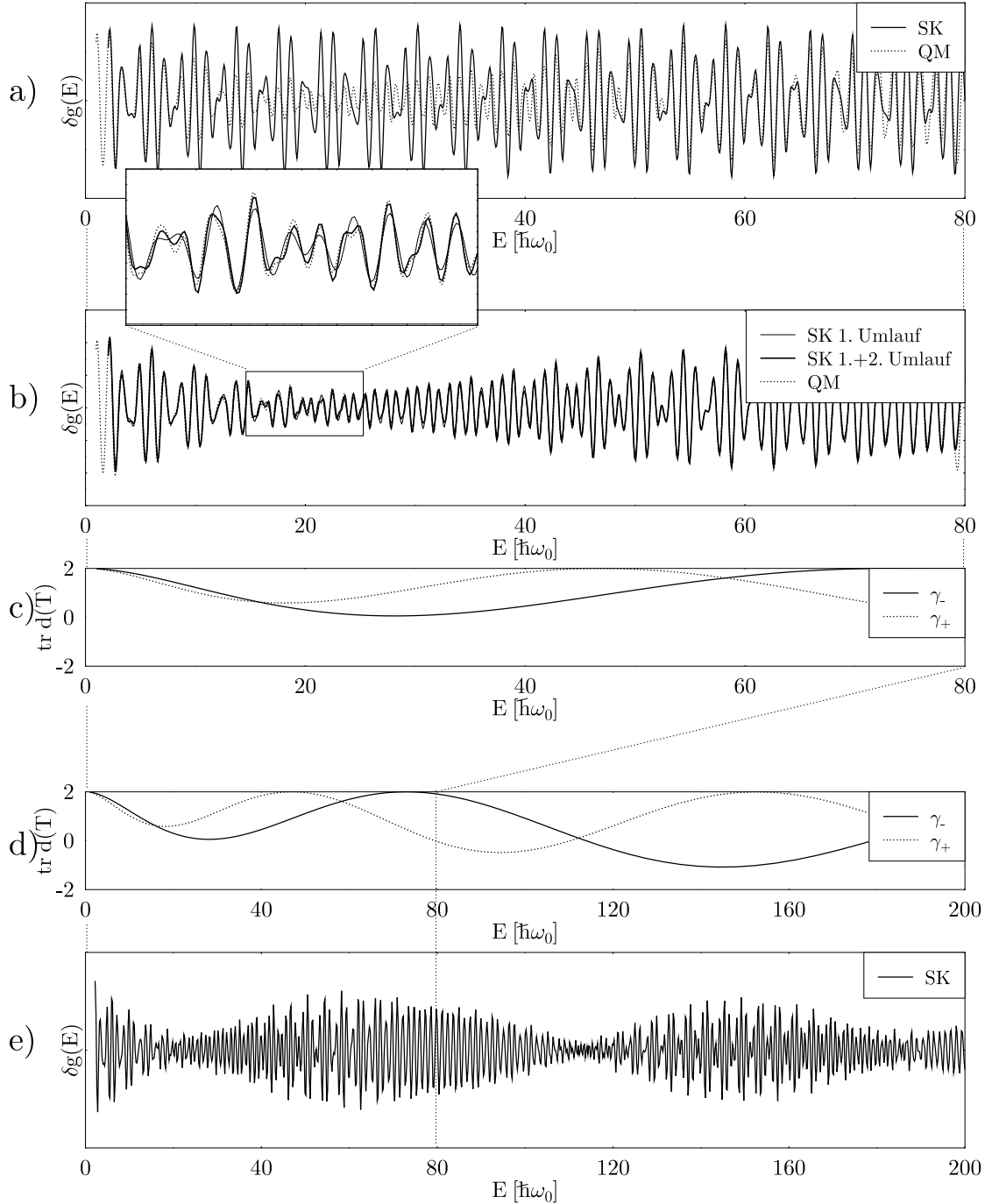


Abbildung 4.5: Vergleich der *qm.* Zustandsdichte  $\delta g_{QM}(E)$  mit der semiklassischen  $\delta g_{SK}(E)$ . a) Semiklassisches Ergebnis ohne LS-Korrektur. b) SK mit LS-Korrektur. Weitere Verbesserung des Resultats bei Mitnahme der ersten Wiederholung. c) und d) Verlauf der Modulationsfaktoren beider Bahnen. e) Extrapolation des semiklassischen Resultats bis  $E = 200 \hbar\omega_0$ . (Parameterwerte:  $\omega_x = \omega_0, \omega_y = 1.23 \omega_0, \kappa = 0.1(m^*\omega_0)^{-1}, \omega_c = 0.2 \omega_0$ , Dämpfungsfaktor  $\rho = 0.3 \hbar\omega_0$ ).



# Kapitel 5

## Der 3-dim. harmonische Oszillator mit LS-Kopplung

*Dieses Kapitel behandelt den anisotropen 3-dim. Oszillator mit LS-Kopplung. Dieses System ist als harmonische Näherung eines beliebigen weichen Potentials von besonderer Bedeutung. Es werden für die integrablen Sonderfälle sowie für den Fall kleiner Deformation geschlossene Spurformeln angegeben. Die allgemeine semiklassische Beschreibung erfolgt in der SCL-Näherung. Die resultierende Dynamik wird ausführlich diskutiert.*

Das harmonische Oszillatorpotential

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^D \frac{\omega^2}{2} r_k^2 \quad (5.1)$$

ist eines der am meist studierten Modelle in der Physik. Seine wichtigste Bedeutung liegt wohl darin begründet, dass es bei der Entwicklung eines beliebigen Potentials den ersten nichtverschwindenden Beitrag stellt. Neben dieser physikalischen Relevanz gestaltet sich das eigentliche Oszillatorproblem als vergleichsweise einfach. Es existieren geschlossene Lösungsausdrücke sowohl für die klassische Bewegungsgleichung, als auch im Falle der quantenmechanischen Wellengleichung. Der Begriff „harmonisch“ bezeichnet dabei nur im engeren Sinne Potentiale der Form (5.1). Bei klassischen Systemen versteht man darunter oft nur die Energieunabhängigkeit von Bahnperioden, während bei quantenmechanischen Problemen auch die Äquidistanz von Energieniveaus gemeint ist. Näheres hierzu und Beispiele für Nichtäquivalenz der Begriffe „Klassisch Harmonisch“ und „Quantenharmonisch“ finden sich in [Nie 81]. Die dem  $D$ -dim. isotropen Oszillator zugrundeliegende Symmetrie ist mit  $SU(D)$  besonders hoch. Zusätzliche dynamische Erhaltungsgrößen und Entartungen sind die Folge. Zudem existieren Zusammenhänge mit dem ebenfalls sehr wichtigen Kepler-Problem, z.B. [Sti 71].

Auch hinsichtlich einer semiklassischen Behandlung ergeben sich beim harmonischen Oszillator einige Besonderheiten. Beispielsweise liegt einer der seltenen Fälle vor, wo auch für kleine Quantenzahlen eine exakte semiklassische Quantisierung möglich ist. Desweiteren können für verschiedenste Frequenzverhältnisse Spurformeln geschlossen angegeben und deren Übergangsverhalten studiert werden [Bra 95]. Das folgende Kapitel versucht, diese Studien für eine zusätzliche LS-Kopplung zu verallgemeinern. Die Kopplung wird in ihrer natürlichen Form vorgegeben.

$$\hat{H}_{\text{LS}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \kappa \left( \nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{p}} \right) \hat{\sigma} \quad (5.2)$$

I.A. führt dieser Term zum Verlust der Separabilität des Problems.

Bisherige Untersuchungen an solchen Systemen beschränkten sich rein auf die Analyse der klassischen Bewegung [Roz 92]. Der Spin wurde mittels kohärenten Spin-Zuständen integriert, was zur Ausbildung eines gemischten Phasenraums führt. Im Gegensatz dazu wird in dieser Arbeit die Einbindung im Sinne einer diskreten Spinquantenzahl erfolgen. Es stellt sich dabei heraus, dass zur Beschreibung der Fall starker Kopplung (SCL) nötig ist. Der Zusatzterm in der Hamiltonfunktion führt dabei zum Verlust von klassischen Erhaltungsgrößen. Der resultierende Phasenraum ist gemischt. Trotz des Verlusts an Integrabilität bleibt die wichtige Skalierungseigenschaft

$$\hat{H}(\eta\hat{\mathbf{r}}, \eta\hat{\mathbf{p}}) = \eta^2 \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) \quad (5.3)$$

des Oszillators erhalten.<sup>1</sup> Das überraschende Ergebnis der semiklassischen Behandlung wird sein, dass trotz komplizierter Dynamik in einem 6-dim. Phasenraum die Zustandsdichte  $\delta g(E)$  meist durch einige wenige und zudem einfach zu bestimmende Bahnen erfolgen kann.

Damit steht auch eine Methode zur Verfügung, die in vielen physikalischen Problemstellungen Anwendung finden kann. Ein prominentes Beispiel ergibt sich aus dem Bereich der Kernphysik. Aufgrund der komplizierten Viel-Teilchen Wechselwirkung, deren genaue Form zudem noch unbekannt ist, erfolgt die Kernbeschreibung meist in einem effektivem Ein-Teilchen Potential. Eine gängige Wahl stellt hierbei der harmonischer Oszillator dar. Meist wird er jedoch, zum Zwecke steilerer Wände, noch um einen  $\mathbf{L}^2$ -Term zum sogenannten Nilsson-Modell modifiziert [Nil 55].

Bisherige semiklassische Untersuchungen an solchen oder auch kastenförmigen Kernmodellen wurden ohne LS-Kopplung unternommen. Es ergaben jedoch bereits bei diesem einfacheren Bild erstaunliche Zusammenhänge zwischen beobachtbaren Größen, wie Schalenabschlüsse [Boh 79] oder Asymmetrie in der Kernspaltung, und dem Auftreten von periodischen Bahnen [Bra 95]. Verfeinerungen lassen sich bei Hinzunahme einer LS-Kopplung erwarten [Bra 01], zumal erst diese Wechselwirkung eine

---

<sup>1</sup>Im skalaren Fall sind Hamiltonfunktionen mit (5.3) immer integrierbar

korrekte Übereinstimmung der Schalenabschlüsse im Ein-Teilchen Bild ermöglicht [May 48], [Hax 49].

Weitere Anwendungen ergeben sich auch im Bereich von Quantenpunkten. Im Gegensatz zu den in den vorherigen Kapitel untersuchten 2-dim. Systemen müssen diese jedoch echt 3-dim. sein, d.h. es darf keine Abseparation der  $z$ -Richtung stattfinden. Zudem muss das Confinement starke LS-Kopplung aufweisen, wie es etwa bei InAs der Fall ist.

## 5.1 Quantenmechanische Eigenschaften

Der Hamiltonoperator des anisotropen harmonischen Oszillators mit LS-Kopplung lautet:

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \underbrace{\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \right]}_{\hat{H}_0} \mathbb{1}_2 + \underbrace{\kappa \hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})}_{\hat{H}_{\text{LS}}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

mit  $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} \omega_i^2 \hat{r}_i^2$  und  $\hat{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{p}}$  (5.4)

Hierbei wurde die Masse  $m$  bereits durch Einführung von neuen Koordinaten unterdrückt. Die Oszillatorfrequenzen  $\omega_i$ ,  $i = x, y, z$  müssen nicht notwendig identisch sein. Deformationen werden im folgenden durch zwei Parameter  $\alpha$  und  $\beta$

$$\omega_x = \omega_0 \quad \omega_y = (1 + \alpha)\omega_0 \quad \omega_z = (1 + \alpha)^\beta \omega_0, \quad (5.5)$$

beschrieben, wobei o.B.d.A  $\alpha \geq 0$  und  $\beta \geq 1$  gesetzt werden kann. Dabei steuert  $\alpha$  die Gesamtdeformation, während  $\beta \neq 1$  zur Triaxialität führt. Die Wahl  $\alpha = 0$  gibt den sphärischen Fall.

Der Term  $\hat{H}_{\text{LS}}$  bewirkt den Verlust der Separabilität und macht das Problem normalerweise zu einem nichtintegrierten. Lediglich der sphärische Fall  $\alpha = 0$  bleibt aufgrund der drei Erhaltungsgrößen Energie  $E$ , Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$  und dessen  $z$ -Komponente  $J_z$ , integrierbar. Gleichung (5.4) nimmt hier die vertraute Gestalt an

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega_0^2}{2} r^2 + \kappa \omega_0^2 \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (5.6)$$

Man beachte, dass in der Literatur die LS-Kopplung meist den Vorfaktor  $\kappa \omega_0 \hbar / 2$  aufweist. Hier und im folgenden wird allerdings der mit Gleichung (5.4) konsistente Term  $\kappa \omega_0^2$  verwendet.

Lösungen der Schrödingergleichung  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  lassen sich im sphärischen Fall geschlossen angeben.

$$E_{n,l} = \hbar\omega_0(n + 2l + 3/2) + \kappa\hbar\omega_0^2 \begin{cases} l & 2l\text{-fach entartet} \\ -(l+1) & (2l+2)\text{-fach entartet} \end{cases} \quad n, l \in \mathbb{Z} \quad (5.7)$$

Für schwache LS-Kopplung ( $\kappa \ll 1$ ) können dagegen für alle Frequenzverhältnisse mittels quantenmechanischer Störungsrechnung genäherte Ausdrücke angegeben werden. Einschließlich dritter Ordnung lauten diese:

$$\begin{aligned} E_{n_x, n_y, n_z}^{(0)} &= \sum_{i=x,y,z} \hbar\omega_i \left( n_i + \frac{1}{2} \right) & (5.8) \\ E_{n_x, n_y, n_z}^{(1)} &= 0 \\ E_{n_x, n_y, n_z}^{(2)} &= \frac{\kappa^2}{2} \left\{ \left[ \omega_x \left( \frac{\omega_y^2 (\omega_y^2 + 3\omega_x^2)}{\omega_x^2 - \omega_y^2} + \frac{\omega_z^2 (\omega_z^2 + 3\omega_x^2)}{\omega_x^2 - \omega_z^2} \right) n_x + \frac{\omega_y \omega_z (\omega_y - \omega_z)^2}{2(\omega_y + \omega_z)} \right] \right. \\ &\quad \left. + [\text{cycl.}] \right\} \\ E_{n_x, n_y, n_z}^{(3)} &= \kappa^3 \left\{ \left[ \frac{\omega_x \omega_y \omega_z^2 [\omega_x^4 (2\omega_y^2 + \omega_z^2) - \omega_y^4 (2\omega_x^2 + \omega_z^2)]}{(\omega_x^2 - \omega_y^2) (\omega_y^2 - \omega_z^2) (\omega_z^2 - \omega_x^2)} (2n_x + 1) (2n_y + 1) \right] \right. \\ &\quad \left. + [\text{cycl.}] \right\} \end{aligned}$$

Die Korrektur erster Ordnung verschwindet, während der Term zweiter Ordnung, wenn man von einer konstanten Verschiebung absieht, linear in den Quantenzahlen  $n_i$  ist. Erst ab dritter Ordnung geht diese einfache Struktur verloren.

Die Bestimmung des Eigenwertspektrums muss in der allgemeinen Situation durch exakte Diagonalisierung erfolgen. Es werden dabei die Basiszustände

$$|n_x, i^{n_y} n_y, n_z, s_z\rangle. \quad (5.9)$$

benutzt.  $|n_i\rangle$ ,  $i = x, y, z$  bezeichnen die 1-dim. Oszillatoreigenzustände,  $|s_z\rangle$  die von  $\sigma_z$ . Durch Ausnutzen von Symmetrien läßt sich der Diagonalisierungsaufwand noch reduzieren [Göt 71]:

- Die Quantenzahlen  $(-1)^{n_x+n_y+n_z}$  sowie  $(-1)^{n_x+n_y} s_z$  bleiben erhalten. Somit kann eine Zerlegung in vier Blockmatrizen erfolgen, wovon jedoch je zwei identische Eigenwerte besitzen. Dies folgt aus der Kramers-Entartung.
- Man kann erreichen, dass die Säkularmatrix reellwertige Einträge besitzt. Dies wird in obiger Basiswahl (5.9) durch den speziellen Vorfaktor des  $|n_y\rangle$  Zustands realisiert.

Da  $\hat{H}_{LS}$  nur wenige Basiszustände miteinander koppelt, ist die Säkularmatrix nur dünn besetzt. Mit dem speziell dafür ausgelegten Lanczos-Verfahren [Cul 85] können Matrizen bis zur Größe von etwa  $2 \cdot 10^5 \times 2 \cdot 10^5$  diagonalisiert werden. Insgesamt stehen damit gültige Eigenwerte bis ca.  $E_{max} = 60\hbar\omega_0$ <sup>2</sup> zur Verfügung. Abb. 5.1 b) und c) zeigen den Verlauf der untersten Energieniveaus eines anisotropen Oszillator mit  $\alpha = 0.1212$  und  $\beta = 2$  in Abhängigkeit von  $\kappa$ .<sup>3</sup>

Es zeigt sich, dass bereits bei einem Wert von  $\kappa = 0.1$  eine merkliche Verbiegung der Niveaus einsetzt, der Effekt kann als „groß“ eingestuft werden. Dies erkennt man auch daran, dass dieser Bereich bereits außerhalb des Gültigkeitsbereichs einer störungstheoretischen Behandlung liegt. Der Vergleich mit dem exakten Spektrum demonstriert, dass nur unterhalb von  $\kappa = 0.05$  alle Niveaus noch relativ gut wiedergegeben werden. Auch ein Übergang zu höheren Störordnungen verbessert das Resultat nicht wesentlich. Ähnliches Verhalten zeigt sich auch bei variabler Deformation und fester LS-Kopplung, vgl. Abb.5.1 a).

## 5.2 Dynamik der Systeme $H_0 \pm \kappa|\mathbf{C}|$

Bevor auf die semiklassische Beschreibung eingegangen wird, soll zunächst die zugehörige klassische Dynamik untersucht werden. Die beiden SCL-Hamiltonfunktionen

$$\begin{aligned} H_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) \pm \kappa|\mathbf{C}| \\ \text{mit } V(\mathbf{r}) &= \frac{m}{2} \sum_{i=x,y,z} \omega_i^2 r_i^2 \quad \text{und} \quad \mathbf{C} = \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \end{aligned} \quad (5.10)$$

nehmen dabei die zentrale Rolle bei der Beschreibung von System (5.4) ein. Zunächst sei festgestellt, dass  $H_{\pm}$  zeitumkehrinvariant ist. Es folgt die zweifache Entartung aller periodischen Bahnen mit Ausnahme von möglichen Librationen. Als Librationen werden Bahnen bezeichnet, die zwischen zwei Umkehrpunkten pendeln. Die Bewegungsgleichungen  $\dot{\gamma}(t) = X_{H_{\pm}}(\gamma(t))$  lauten ausführlich geschrieben (Hinweis: Im folgenden Abschnitt bezeichnen  $i$  und  $j$  stets die planaren Komponenten und  $k$  die dazu senkrechte):

$$\begin{aligned} \dot{r}_i &= p_i \pm \epsilon_{ijk}\kappa|\mathbf{C}|^{-1}(C_j\omega_k^2 r_k - C_k\omega_j^2 r_j) \\ \dot{p}_i &= -\omega_i^2 r_i \pm \epsilon_{ijk}\kappa|\mathbf{C}|^{-1}(C_j\omega_i^2 p_k - C_k\omega_i^2 p_j) \end{aligned} \quad i, j, k = x, y, z \quad (5.11)$$

Es handelt sich um ein sechskomponentiges nichtlineares Dgl-System erster Ordnung. Periodische Lösungen sind nicht offensichtlich und müssen in der Regel nu-

<sup>2</sup> Der genaue Wert hängt von Deformation und Kopplung ab.

<sup>3</sup>Die teilweise krummen Werte von  $\alpha$  dienen zur Vermeidung von zufälligen Entartungen. Das benutzte Lanczos-Verfahren kann nicht den Entartungsgrad der Energien erkennen.

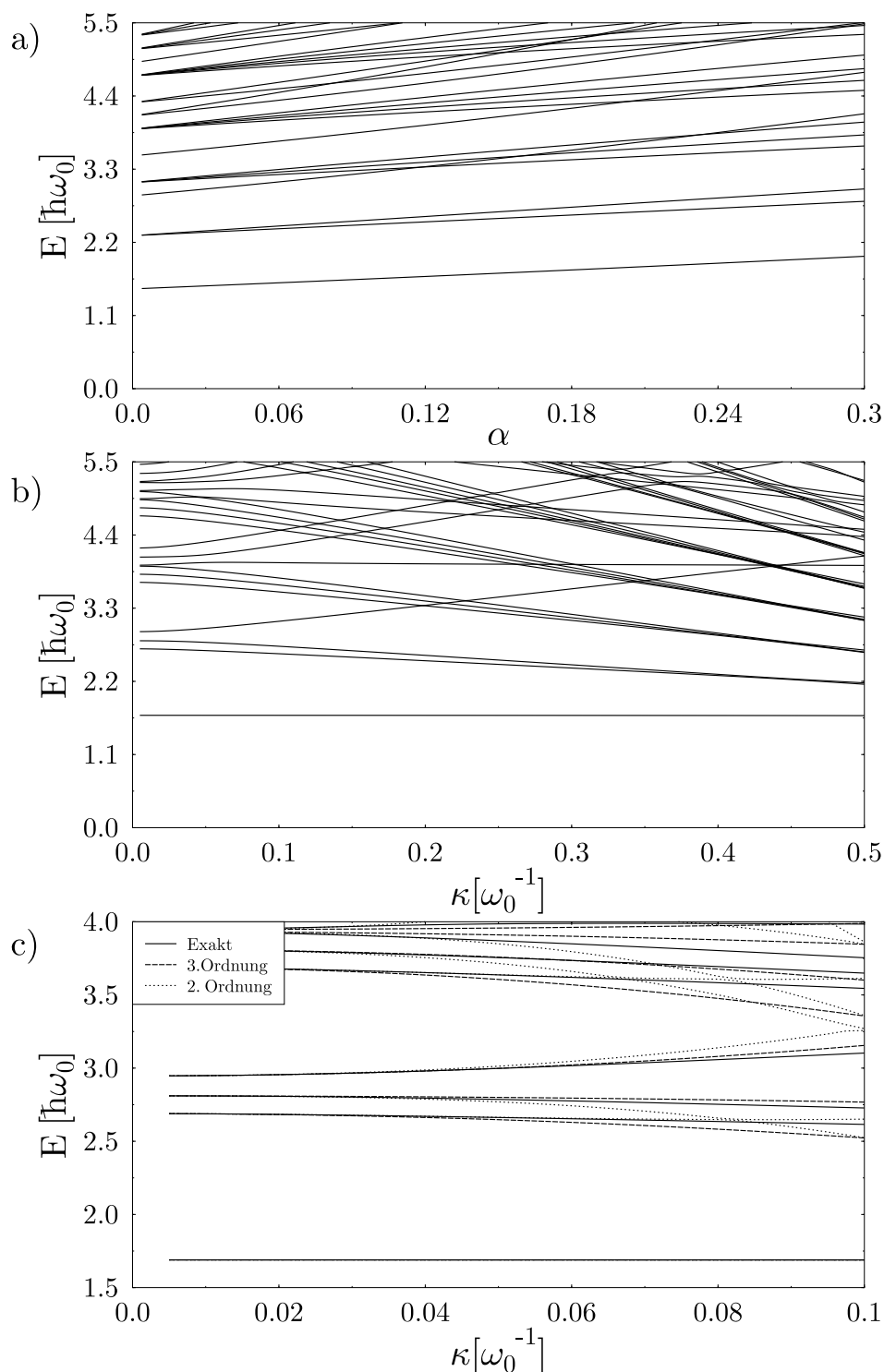


Abbildung 5.1: Verbiegung der Energieniveaus bei Änderung der Deformation und fester Kopplung a), sowie bei variabler LS-Kopplung und fester Deformation ( $\omega_x : \omega_y : \omega_z = 1 : 1.1212 : 1.25727$ ) b). Abb. c) vergleicht das Ergebnis der exakten Diagonalisierung mit dem der Störungstheorie 2. und 3. Ordnung

merisch gefunden werden, vgl. dazu Anhang E. Für gewisse Bahnen ergeben sich jedoch enorme Vereinfachungen.

### 5.2.1 Planare Bahnen

System 5.10 besitzt Spiegelungssymmetrien  $P_i$ ,  $i = x, y, z$  entlang bestimmten Ebenen.

$$P_i(r_j, p_j) = \begin{cases} (-r_j, -p_j) & \text{falls } j = i \\ (r_j, p_j) & \text{falls } j \neq i \end{cases} \quad (5.12)$$

Es kommt nach Abschnitt 2.2 daher zur Ausbildung von planaren Bahnen in den Unterräumen  $(r_i = 0, p_i = 0)$ ,  $i = x, y, z$ , was im Konfigurationsraum gerade den von den Achsen aufgespannten Ebenen entspricht. 2-dim. Bahnen  $\gamma_{ij}$  können damit durch ihre Bahnebene  $ij$  bezeichnet werden. Die Bewegungsgleichungen (5.11) vereinfachen sich in der  $ij$ -Ebene zu:

$$\dot{\gamma}_{ij}(t) = A_{\pm}^{adia} \gamma_{ij}(t) \quad (5.13)$$

mit der konstanten Koeffizientenmatrix

$$A_{\pm}^{adia} = \begin{pmatrix} 0 & \mp \text{sign}(C_k) \kappa \omega_i^2 & 1 & 0 \\ \pm \text{sign}(C_k) \kappa \omega_j^2 & 0 & 0 & 1 \\ -\omega_i^2 & 0 & 0 & \mp \text{sign}(C_k) \kappa \omega_i^2 \\ 0 & -\omega_j^2 & \pm \text{sign}(C_k) \kappa \omega_j^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

Diese Gleichungen besitzen ein sprunghaftes Verhalten, sobald  $\text{sign}(C_k)$  wechselt. Betrachtet man die zugehörigen Poincaré-Schnitte, so ergibt sich ein ungewohntes Muster in der Nähe von  $r_i = 0$ . An diesen Stellen ist die MC-Bedingung (3.38) erfüllt. Auf die damit verbundene Problematik wird in Kapitel 6 noch näher eingegangen. Dort wird auch das Ersetzen von  $A^{adia}$ <sup>4</sup> durch

$$A_{\pm}^{dia} = \begin{pmatrix} 0 & \mp \kappa \omega_i^2 & 1 & 0 \\ \pm \kappa \omega_j^2 & 0 & 0 & 1 \\ -\omega_i^2 & 0 & 0 & \mp \kappa \omega_i^2 \\ 0 & -\omega_j^2 & \pm \kappa \omega_j^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

im gewissen Sinne gerechtfertigt. Hier muss der Schritt von (5.14) nach (5.15) ohne Begründung stattfinden, und kann erst an der Qualität der damit erzielten Ergebnisse beurteilt werden. Die Bewegungsgleichungen sind nun linear, entsprechend regulär

<sup>4</sup>Die Bezeichnungen dia- und adiabatisch werden in Kapitel 6 näher begründet.

gestaltet sich der Poincaré-Schnitt. Beim Vergleich der nach (5.13) und (5.15) berechneten Schnitte fällt auf, dass große Bereiche, etwa die von  $H_+^{adia}$ , gerade eine Kombination von  $H_-^{dia}$  und  $H_+^{dia}$  sind. Darin enthalten sind auch die markanten Fixpunkte von  $H^{dia}$ . Es sind dies die Bereiche, deren zugehörige Trajektorien keinen Vorzeichenwechsel in  $C_k$  aufweisen. Das Wechseln von  $A_+^{adia}$  zu  $A_-^{dia}$  ist für diese, sofern man die Gesamtheit der Systeme  $H_+$  und  $H_-$  betrachtet, bedeutungslos. Die Frequenzen der zu den isolierten Fixpunkten zugehörigen Bahnen  $\gamma_{ij}^\pm$  ergeben sich aus den Eigenwerten von  $A^{dia}$ . Im Falle  $\kappa(1 + \alpha)^\beta < 1$  gibt es insgesamt sechs ver-

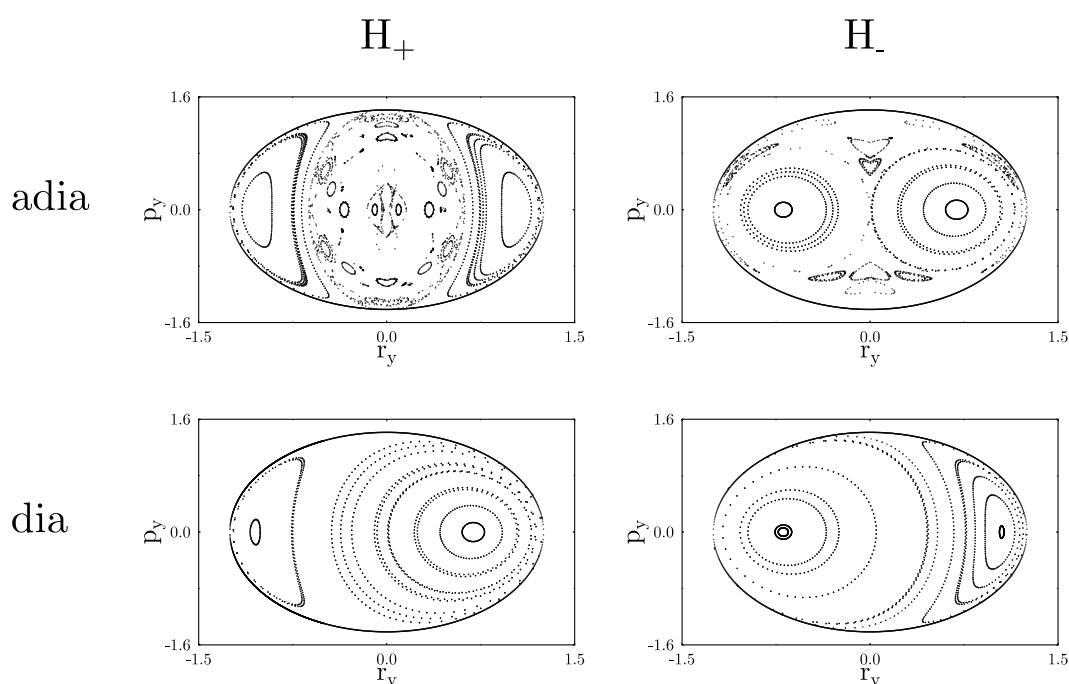


Abbildung 5.2: Die Poincaré-Schnitte wurden gemäß (5.13) bestimmt, wobei einmal der diabatistische Fall (5.14) und einmal der adiabatische (5.15) zugrundegelegt wurde.

schiedene positive Werte durch mögliche Kombinationen der Bahnebenen  $ij$  und  $H_\pm$ .

$$\omega_{ij}^\pm = \left[ \frac{1}{2} \left( \omega_i^2 + \omega_j^2 + 2\kappa^2 \omega_i^2 \omega_j^2 \pm \sqrt{(\omega_i^2 - \omega_j^2)^2 + 8\kappa^2 \omega_i^2 \omega_j^2 (\omega_i^2 + \omega_j^2)} \right) \right]^{1/2} \quad (5.16)$$

Daneben existieren auch die entsprechenden Negativen, sie werden jedoch nicht eigens bezeichnet. Periodische Lösungen können mit Hilfe der Eigenvektoren von  $A^{dia}$  bestimmt werden und entsprechen den beiden stabilen Fixpunkten in den Poincaré-

Schnitten. Die Bahnen besitzen im Konfigurationsraum die Gestalt,

$$\begin{aligned} r_i^\pm(t) &= R_i^\pm \cos(\omega_{ij}^\pm t + \phi_{ij}^\pm) \\ r_j^\pm(t) &= R_j^\pm \sin(\omega_{ij}^\pm t + \phi_{ij}^\pm) \\ r_k^\pm(t) &= 0 \end{aligned} \quad i, j, k = x, y, z, \quad \text{paarweise verschieden} \quad (5.17)$$

wobei die genauen Werte der Amplituden  $R_i^\pm, R_j^\pm$  sowie der Winkel  $\phi_{ij}^\pm$  von den Systemparametern und -energie abhängen.

Gilt  $\omega_{ij}^+/\omega_{ij}^- \notin \mathbb{Q}$  so existieren keine weiteren Fixpunkte in Abb. 5.2. Die Torusschnitte in 5.2 sind quasiperiodisch und aus einer Linearkombination der Lösungen  $\gamma_{ij}^\pm$  können keine weiteren periodische Bahnen gebildet werden. Im Grenzfall  $\kappa \rightarrow 0$  nimmt die Bahnexzentrizität immer stärker zu. Bei  $\kappa = 0$  fallen je zwei Bahnen zu einer, entlang der Achse pendelnden Bahn, zusammen. Wie noch später gezeigt wird, ist dieser Vorgang jedoch keine Bifurkation im herkömmlichen Sinne, insbesondere gilt am Verzweigungspunkt nicht  $\Lambda = 2$ .

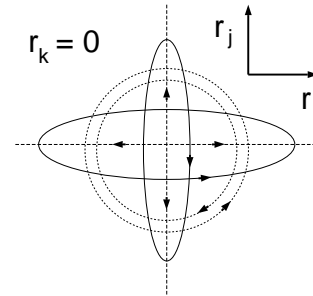


Abbildung 5.3: Planare Bahnen besitzen i.A. elliptische Form. Sonderfälle sind Kreis- ( $\alpha = 0$ ) und Librationsbahnen ( $\kappa = 0$ ).

Im sphärischen Fall ergeben sich einige Besonderheiten. Hier vereinfacht sich (5.10) zu

$$H_\pm = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega_0^2}{2} r^2 \pm \kappa \omega_0 |\mathbf{L}| \quad (5.18)$$

wobei  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  der klassische Drehimpuls ist. Da dieser erhalten ist, verläuft die Bahnbewegung auf jeden Fall in einer Ebene. Diese bleibt jedoch noch frei orientierbar, so dass periodische Bahnen in einer zweiparametrischen Familie vorliegen. Ferner gilt in (5.17)  $R_i^\pm = R_j^\pm$  und alle Bahnen sind kreisförmig. Schließlich fallen in (5.16) je drei der Frequenzen zusammen. Es ergeben sich zwei Frequenzen und Perioden.

$$\omega^\pm = \omega_0(1 \pm \kappa \omega_0), \quad T^\pm = \frac{2\pi}{\omega_0(1 \pm \kappa \omega_0)} \quad (5.19)$$

### 5.2.2 3-dim. Bahnen

Neben den bisher untersuchten planaren existieren weitere 3-dim. Bahnen. Allerdings kann hier kein Verfahren angegeben werden, um auf deren Form und Eigenschaft zu schließen. Sie müssen auf numerische Art bestimmt werden. Es stellt sich

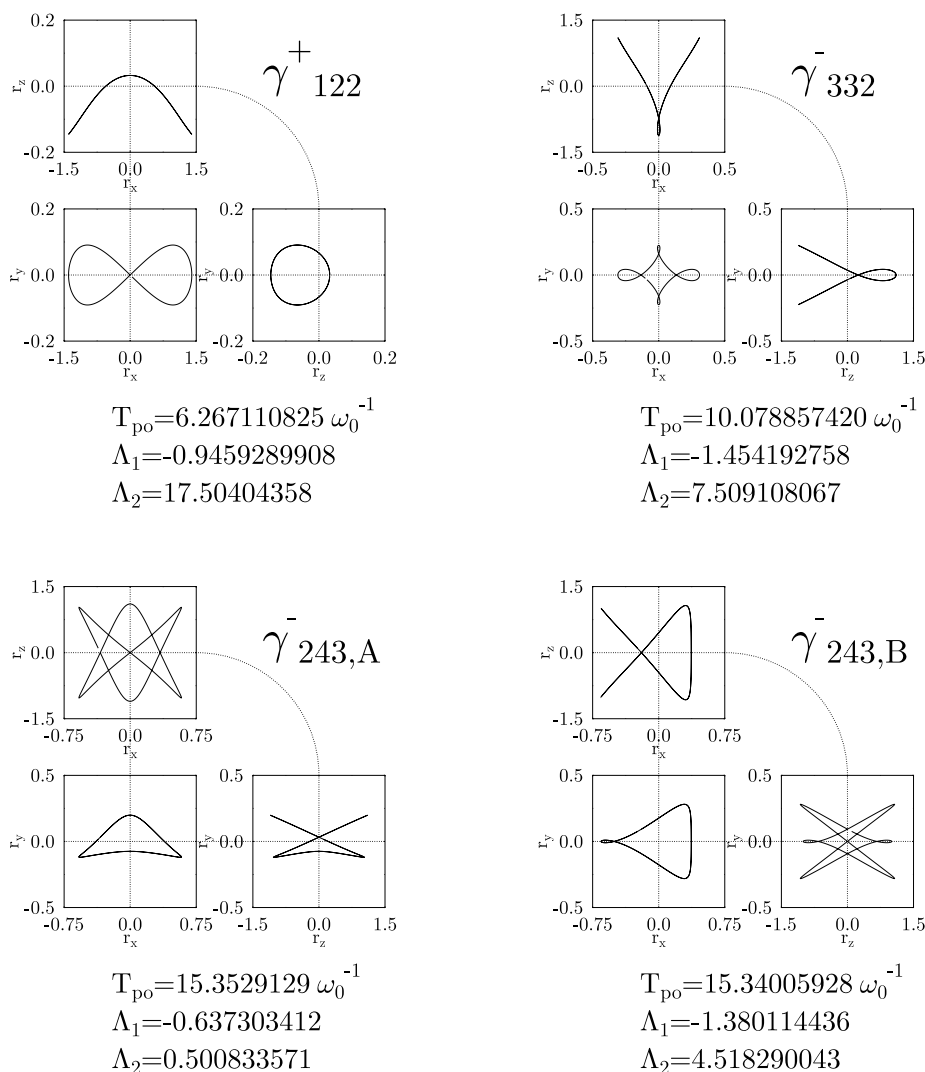


Abbildung 5.4: Eine Auswahl von 3-dim. Bahnen sowie deren Eigenschaften bei  $\alpha = 0.1212, \beta = 2, \kappa = 0.1\omega_0^{-1}$ . Es werden die drei Projektionen dargestellt.

heraus, dass es eine Vielzahl an verschiedenen Bahntypen gibt. Abb. 5.4 zeigt einige in Form von Projektionen auf die verschiedenen  $ij$ -Ebenen. Die Bezeichnung der 3-dim. Bahnen richtet sich nach Anzahl der Nulldurchgänge der jeweiligen Ortskoordinaten,  $r_i(t) = 0$ . Der Vergleich der beiden unteren Bahnen in Abb. 5.4 zeigt jedoch, dass selbst diese Notation noch nicht eindeutig ist. Auf eine bestimmte Systematik, die etwa die Existenz von gewissen Bahnen bei gegebenen Parametersätzen vorhersagt, konnte nicht geschlossen werden. Da allerdings die Wahrscheinlichkeit

des Auffindens mit der Gewichtung in der Spurformel einhergeht<sup>5</sup>, fallen die Fehler aufgrund nicht berücksichtigter Bahnen gering aus. Es stellt sich sogar heraus, dass für einen großen Deformations- und Kopplungsbereich alle 3-dim. Bahnen entweder relativ instabil ( $\Lambda \gg 2$ ) oder eine vergleichsweise große Periode besitzen. Ihr Beitrag in der Spurformel kann meist vernachlässigt werden. Relevante Beiträge besitzen erst diejenigen Bahnen, die aus den planaren bifurkieren (vgl. unten).

### 5.2.3 Stabilitätsverhalten

Durch die große Anzahl an Parametern  $\alpha, \beta$  und  $\kappa$  gestaltet sich eine komplette Beschreibung aller Bahnen mit ihrem jeweiligen Stabilitätsverhalten als sehr aufwendig. Die nun folgenden Untersuchungen zielen auch nicht auf eine komplette Analyse der durch (5.10) gegebenen Dynamik hinaus. Es soll vielmehr sichergestellt werden, dass die semiklassische Behandlung der LS-Kopplung frei von störenden Begleitumständen, wie Bifurkationen, gesondert betrachtet werden kann. Die Stabilitätsanalyse findet auch nur bei den wichtigen planaren Bahnen für die Fälle kleiner Deformation und Kopplung statt.

Das Verhalten einer 3-dim. Bahn wird durch zwei Stabilitätswerte  $\Lambda_1$  und  $\Lambda_2$  beschrieben.

Bei planaren Bahnen erfolgt die Beschreibung in der Bahnebene mit einem linearem System. Zudem separiert in der Hessematrix die  $k$ -Komponente von den  $i$ - und  $j$ -Komponenten. Dies führt dazu, dass ein Stabilitätswert von  $\gamma_{ij}^\pm$ -im folgenden mit  $\Lambda_\parallel$  bezeichnet, da er die Stabilität in der Bahnebene beschreibt- dem des 2-dim. Oszillators mit Frequenzen  $\omega_{ij}^+$  und  $\omega_{ij}^-$  gleicht [Bra 97].

$$\Lambda_\parallel = 2 \cos(2\pi \omega_{ij}^\mp / \omega_{ij}^\pm) \quad (5.20)$$

Der dazu senkrechte Stabilitätswert  $\Lambda_\perp$  folgt dagegen einem komplizierteren Verhalten und kann nicht geschlossen angegeben werden. Abb. 5.5 zeigt die  $\Lambda$ -Werte aller planaren Bahnen für verschiedene Situationen. In einem Falle wurde  $\kappa$  bei fester Deformation  $\alpha = 0.1212$ ,  $\beta = 2$  variiert, im anderen dagegen war  $\kappa = 0.1\omega_0^{-1}$  fest und die Deformation variabel. Zudem wurde nach Herkunft  $H_\pm$  der Bahn unterschieden. Man erkennt, dass vier Bahnen die Eigenschaft  $|\Lambda_\parallel| < 2$  und  $|\Lambda_\perp| < 2$  erfüllen und folglich stabil sind. Bei den verbleibenden gilt jedoch  $|\Lambda_\perp| > 2$ . Sie sind gemischt stabil. Diese wurden, aufsteigende Frequenzen  $\omega_x < \omega_y < \omega_z$  vorausgesetzt, immer in der  $xz$ -Ebene beobachtet. Einhergeht, dass stabile Bahnen gerade Maslov-Index aufweisen während gemischt stabile ungerade besitzen. Eine Erklärung dessen erfolgt

---

<sup>5</sup>Stabile bzw. leicht instabile Bahnen werden erfahrungsgemäß leichter gefunden als stark instabile

in [Sug00]. Für kleine Werte von  $\kappa$  gilt

$$\begin{aligned} \Lambda_{\parallel}(\kappa) &\rightarrow \Lambda_1^{(0)} \\ \Lambda_{\perp}(\kappa) &\not\rightarrow \Lambda_2^{(0)} \end{aligned} \quad \text{für } \kappa \rightarrow 0, \quad (5.21)$$

wenn  $\Lambda_i^{(0)}$ ,  $i = 1, 2$  die beiden Stabilitätswerte des 3-dim. Oszillators ohne LS-Kopplung bezeichnen. Auf den nicht stetigen Verlauf von  $\Lambda_{\perp}$  wird in Kapitel 6 noch näher eingegangen.

### 5.2.4 Bifurkationen

In 3-dim. Systemen kann es zu einer Bifurkationen kommen, sobald eine der beiden Größen  $\Lambda_i$ ,  $i = 1, 2$  den Wert zwei annimmt. Aus Abb. (5.5) erkennt man, dass dies bei bestimmten Deformationen und Kopplungen der Fall sein kann. Bifurkationen sind im Zusammenhang mit einer Auswertung der Spurformel problematisch, da dort die Stabilitätsamplitude divergiert. Eine Lösungsmöglichkeit besteht im Übergang zu Normalformen sowie uniformen Näherungen, Einzelheiten und Anwendungen hierzu finden sich in [Sch97] und [Kai00]. Im folgenden soll erneut das Verhalten der planaren Bahnen untersucht werden. Dazu wurden in Abb. 5.6 bei den Werten von  $\beta = 2$  und  $\beta = 3$  die Bifurkationspunkte in einer  $\kappa\omega_{y/z}$  Ebene markiert. Man erkennt, dass Systeme kleiner Deformation und Kopplung frei von Bifurkationen sind. Ab gewissen Werten kommt es jedoch zu einer Anhäufungen solcher. Gerade dieser Umstand macht die Anwendung uniformer Näherungen nur bedingt möglich, da diese von streng getrennten Punkten ausgehen. Weiterhin existieren neben den in Diagramm 5.6 dargestellten Verzweigungspunkten planarer Bahnen auch noch diejenigen, die 3-dim. Bahnen ausführen. Dies soll abschließend an einem Beispiel verdeutlicht werden:

Eine der Bifurkationen, die eine planare Bahn typischerweise ausführt, zeigt Abb. 5.7. Hier wurde bei festem  $\kappa = 0.1\omega_0^{-1}$  und  $\beta = 2$  der Deformationsparameter  $\alpha$  variiert. Am Wert  $\alpha = 0.3977$  entspringen dabei aus der planaren Bahn  $\gamma_{xy}^-$  zwei neue. Dies entspricht der Situation einer Pitchfork-Bifurkation, [Alm88]. Es kommt allerdings nicht zur Periodenverdopplung des generischen Falls, sondern zur Ausbildung zweier Bahnen mit verminderter Symmetrie, vgl. hierzu auch [Bra99]. Mit wachsendem  $\alpha$  drehen sich diese Bahnen immer stärker aus der ursprünglichen Bahnebene heraus und verschmelzen schließlich bei  $\alpha = 0.4450$  mit der Bahn  $\gamma_{yz}^-$ . Auf dem Weg dorthin bifurkiert die entstandene 3-dim. Bahn erneut, da deren Stabilitätswert bei  $\alpha = 0.425$   $\Lambda_i = 2$  für einer  $i = 1, 2$  erfüllt.

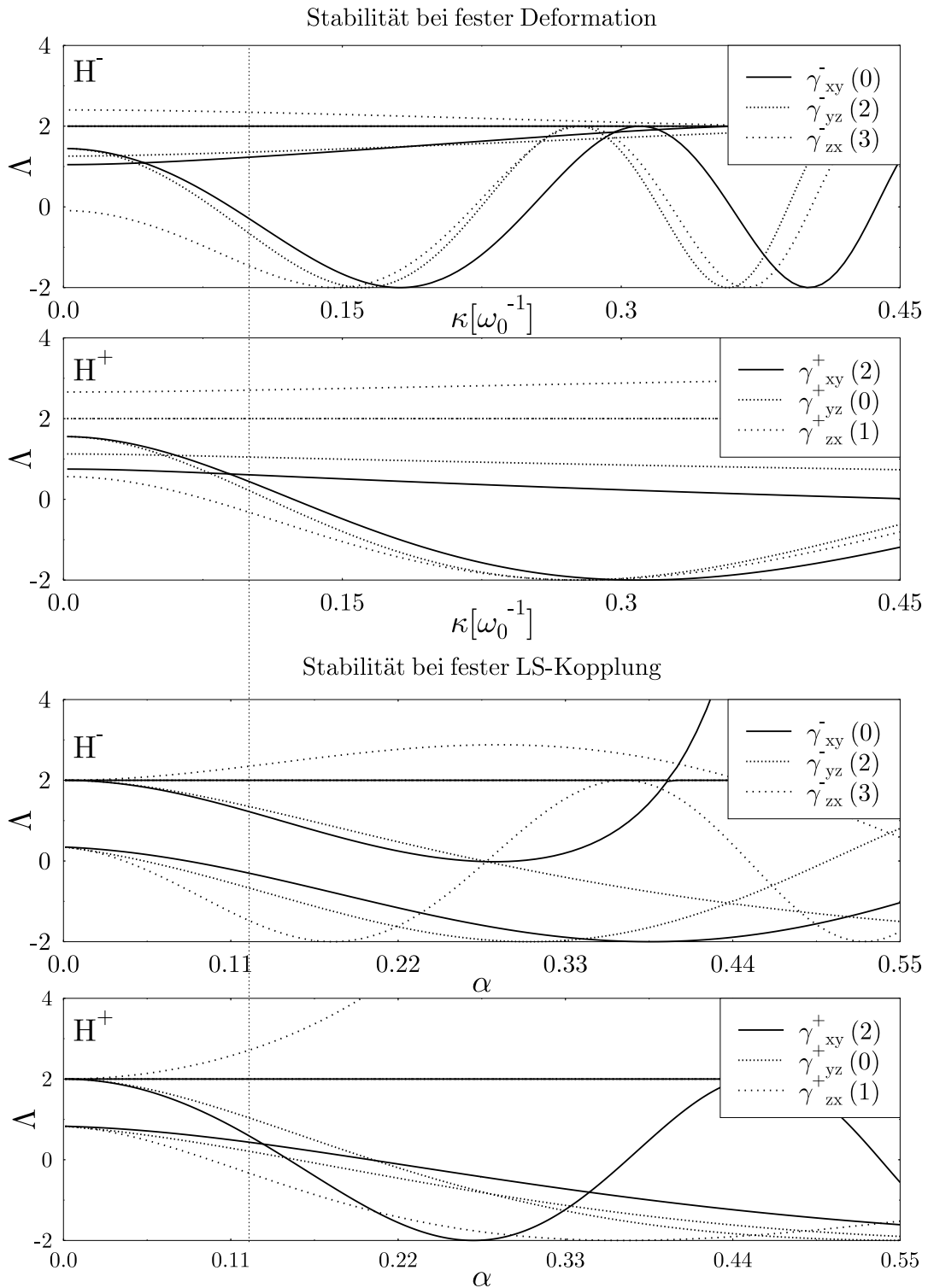


Abbildung 5.5: Stabilitätswerte der planaren Bahnen. Es existieren je drei Bahnen  $(xy, yz, zx)$  für  $H_+$  und für  $H_-$ . Die Zahl nach der Bahnbezeichnung ist der Maslov-Index  $\sigma \bmod 4$ . In den beiden oberen Figuren werden die Spuren bei gegebener Deformation ( $\alpha = 0.1, \beta = 2$ ) und variabler LS-Kopplung gezeigt, in den unteren, die mit fester Kopplung  $\kappa = 0.1\omega_0^{-1}$  und variablen  $\alpha$ . Der senkrechte Strich markiert den gemeinsamen Wert.

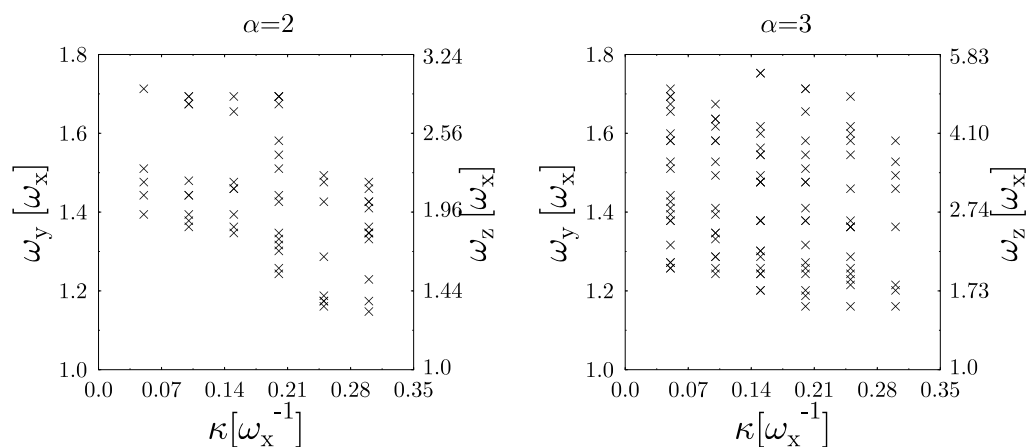


Abbildung 5.6: Bifurkationspunkte der planaren Bahnen. Der Bereich kleiner Deformation und LS-Kopplung ist frei von Verzweigungen.

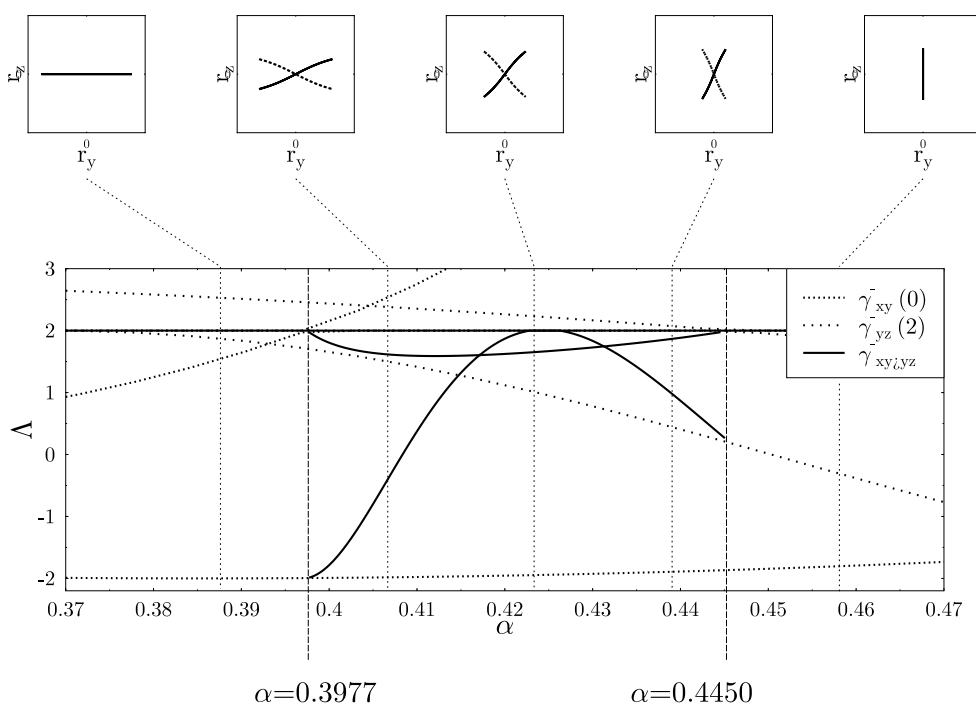


Abbildung 5.7: Bifurkation einer planaren Bahn. Bei der Deformation  $\alpha = 0.3977$  entspringt aus der planaren Bahn  $\gamma_{xy}^-$  zwei neue. Diese drehen sich bei steigender Deformation von der  $xz$ -Ebene in die  $yz$ -Ebene und verschmelzen mit der  $\gamma_{yz}^-$  Bahn. Der obere Bereich zeigt die Bahnen in Projektion auf die  $zy$ -Ebene.

## 5.3 Semiklassische Beschreibung

### 5.3.1 Der glatte Anteil

Anders als in der Beschreibung des periodischen Anteils, konnte eine LS-Kopplung schon seit längerem in die des glatten berücksichtigt werden. Die Methode kann in [Jen 75] gefunden werden. Sie erweitert die Wigner-Kirkwood Entwicklung auf den Fall eines LS-Potentials. Kernstück stellt hierbei eine Entwicklung sowohl nach  $\hbar$  als auch nach  $\kappa$  sowie die Mitnahme der führenden Ausdrücke beider Terme dar. Auf den Fall des Oszillators übertragen, findet sich folgender geschlossener Ausdruck des glatten Anteils der Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} \tilde{g}(E)_{sc} &= \frac{1 + \kappa^2(\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)}{\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} E^2 \\ &- \frac{(\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2) + \kappa^2 [(\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)^2 + 2(\omega_x^2 \omega_y^2 + \omega_y^2 \omega_z^2 + \omega_z^2 \omega_x^2)]}{12\hbar \omega_x \omega_y \omega_z} \\ &+ \mathcal{O}(\dots^4) \end{aligned} \quad (5.22)$$

$\mathcal{O}(\dots^4)$  fasst dabei Ausdrücke  $\sim \hbar^i \kappa^j$  mit  $i + j \geq 4$  zusammen. Die Zustandsdichte wächst weiterhin wie  $\sim E^2$  an, der LS-Term erhöht jedoch den Vorfaktor. Ähnliches gilt für die Nullpunktskorrektur.

Abb. 5.8 vergleicht den glatten Anteil mit dem entsprechenden Ergebnis einer Strutinsky-Mittelung. Man erkennt, dass ohne Berücksichtigung der LS-Kopplung die Dichte zu gering ausfällt, während mit in Abb. 5.8 links keine Unterschiede mehr erkennbar sind. Erst bei Vergrößerung erkennt man eine geringe Differenz, die sich durch Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung in (5.23) ergibt. Diese könnten im Prinzip hinzugenommen werden, die Anzahl der zu berechnenden Ausdrücke wächst jedoch enorm an. Die Ursache der Unstimmigkeiten ab etwa  $50 \hbar \omega_0$  dagegen ist eine Folge des beschränkt gegebenen Quantenspektrums.

### 5.3.2 Exakte Spurformeln für die integrablen Grenzfälle

Ähnlich wie bei den Systemen aus Kapitel 4 kann in gewissen Fällen aus dem bekannten Quantenspektrum eine Spurformel bestimmt werden. In System (5.4) kommen dafür nur die Fälle ohne Kopplung sowie der sphärische Fall in Frage. Tatsächlich kann beidesmal eine exakte Spurformel hergeleitet werden, Tab. 5.1 zeigt diese im Vergleich.<sup>6</sup>

Der in Abschnitt 4.2 vollzogene Weg gelingt aufgrund der komplizierteren Struktur des Spektrums hier nicht. Alternativ kann jedoch wie folgt vorgegangen werden,

<sup>6</sup>Die Spurformel eines Teilchens in einer sphärischen Hohlkugel mit LS-Kopplung, wo das Spektrum nur implizit bekannt ist, findet sich in [Mei 00]

$$\begin{array}{ccc} \hbar^{-3} & \hbar^{-2} & \hbar^{-1} \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \end{array}$$

- Sphärischer Fall ohne Kopplung ( $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega_0; \kappa = 0$ )

$$\begin{aligned} \delta g(E) = & \frac{E^2}{2(\hbar\omega_0)^3} \left( 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos\left(\frac{1}{\hbar}T_0 k E\right) \right) \\ & + \frac{-1}{8(\hbar\omega_0)} \left( 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos\left(\frac{1}{\hbar}T_0 k E\right) \right) \end{aligned}$$

- Deformierter Fall ohne Kopplung ( $\kappa = 0$ )

$$\delta g(E) = \left[ \frac{1}{2\hbar\omega_x} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{\sin(k\pi\frac{\omega_y}{\omega_x}) \sin(k\pi\frac{\omega_z}{\omega_x})} \cos\left(\frac{2\pi}{\hbar\omega_x} k E\right) \right] + [cycl.]$$

- Sphärischer Fall mit Kopplung ( $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega_0$ )

$$\begin{aligned} \delta g(E) = & \sum_{\pm, k=1}^{\infty} \frac{2E}{(\hbar\omega_0)^2 (1 \pm \kappa\omega_0)^2 \sin\left(\frac{2k\pi}{1 \pm \kappa\omega_0}\right)} \sin\left(\frac{1}{\hbar}T_{\pm} k E - \frac{\pi}{2}\sigma_{\pm} k\right) \\ & + \sum_{\pm, k=1}^{\infty} \frac{(\mp 1 - 2\kappa\omega_0)}{\hbar\omega_0 (1 \pm \kappa\omega_0)^2 \sin\left(\frac{2k\pi}{1 \pm \kappa\omega_0}\right)} \sin\left(\frac{1}{\hbar}T_{\pm} k E - \frac{\pi}{2}\sigma_{\pm} k\right) \\ & + \sum_{\pm, k=1}^{\infty} \frac{2 \cos\left(\frac{2k\pi}{1 \pm \kappa\omega_0}\right)}{\hbar\omega_0 (1 \pm \kappa\omega_0)^2 \sin^2\left(\frac{2k\pi}{1 \pm \kappa\omega_0}\right)} \cos\left(\frac{1}{\hbar}T_{\pm} k E - \frac{\pi}{2}\sigma_{\pm} k\right) \\ & + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{\hbar\omega_0 \sin^2(k\pi\kappa\omega_0)} \cos\left(\frac{1}{\hbar}T_0 k E - \frac{\pi}{2}\sigma_0 k\right) \end{aligned}$$

mit:

$$\begin{aligned} T_{\pm} &= \frac{2\pi}{\omega_0(1 \pm \kappa\omega_0)} & T_0 &= \frac{2\pi}{\omega_0} \\ \sigma_{\pm} &= \frac{2(\pm 1 + 2\kappa\omega_0)}{1 \pm \kappa\omega_0} & \sigma_0 &= 4\pi\kappa\omega_0 \end{aligned}$$

Tabelle 5.1: Exakte Spurformeln für Spezialfälle des Systems (5.4). Die rechten Seiten sind entsprechend der  $\hbar$  Ordnung eingerückt.

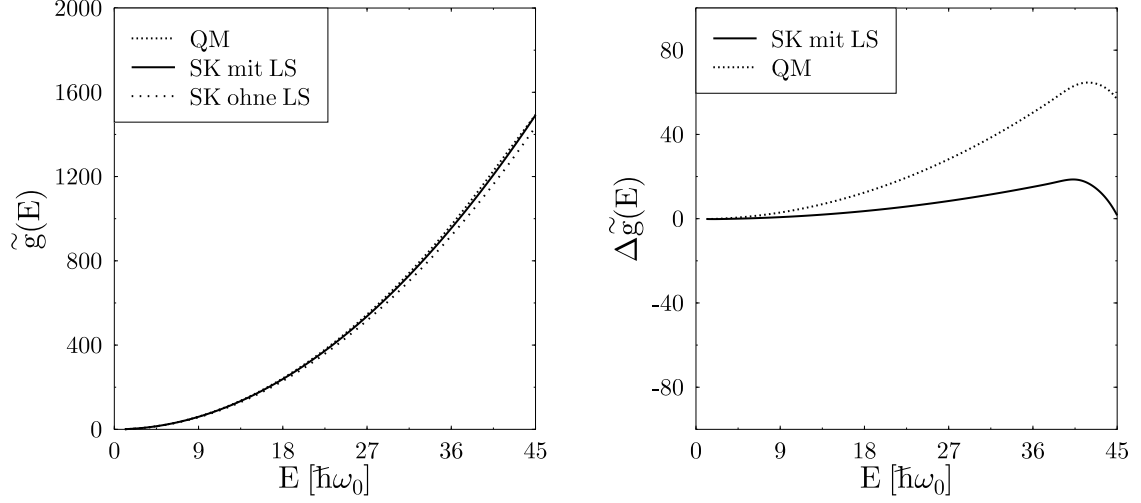


Abbildung 5.8: Vergleich von  $\tilde{g}_{QM}(E)$  mit  $\tilde{g}_{SK}(E)$ . Links: Ohne LS-Kopplung fällt  $\tilde{g}_{SK}(E)$  zu gering aus. Bei einer Berücksichtigung sind auf dieser Skala keine Unterschiede zu  $\tilde{g}_{QM}(E)$  erkennbar. Rechts: Differenz von  $\tilde{g}_{QM}(E)$  und  $\tilde{g}_{SK}(E)$ . Die rasch einsetzenden Abweichungen bei hohen Energien sind Ursache von fehlenden quantenmechanischen Eigenwerten. (Parameterwerte:  $\omega_x = \omega_0$ ,  $\omega_y = 1.1212\omega_0$ ,  $\omega_z = 1.2571\omega_0$  und  $\kappa = 0.1\omega_0^{-1}$ ).

was anhand des sphärischen Falls mit LS-Kopplung demonstriert werden soll (vgl. auch [Bra97]). Zunächst bestimmt man die Zustandssumme mittels einer Laplace-Transformation.

$$Z(\beta) = \mathcal{L}_\beta[g(E)] = \int_0^\infty e^{-\beta E} g(E) dE = \sum_{n,l} d(l) e^{-\beta E_{n,l}} \quad (5.23)$$

Die Eigenwerte  $E_{n,l}$  und deren Entartung  $d(l)$  werden durch (5.7) gegeben. Entscheidend für das Gelingen einer exakten Umformung ist nun, dass die Form des Eigenwertspektrums eine Summation über  $n$  und  $l$  zulässt. Es ergibt sich.

$$Z(\beta) = \frac{e^{-\beta\hbar\kappa\omega_0^2}}{4 \sinh(\beta\hbar\omega_0)} \left( \frac{e^{\beta\hbar\omega_0/2}}{\sinh(\beta\hbar\omega_0(1 - \kappa\omega_0)/2)} + \frac{e^{\beta\hbar\omega_0/2}}{\sinh(\beta\hbar\omega_0(1 + \kappa\omega_0)/2)} \right) \quad (5.24)$$

Die anschließende Rücktransformation

$$g(E) = \mathcal{L}_E^{-1}[Z(\beta)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} e^{\beta E} Z(\beta) d\beta \quad (5.25)$$

führt man zweckmäßigerweise mit dem Residuenkalkül aus. Die Berücksichtigung der Pole in (5.24) führt dabei zu der  $k$ -Summe in der Spurformel. Nach Wegnahme des glatten Anteils ( $k = 0$ ) und einem Zusammenfassen der  $+k$  und  $-k$  Term ergibt sich schließlich der führende Beitrag.

Die Tabelle verdeutlicht die wesentlichen Unterschiede, die sich durch Hinzunahme von Deformation bzw. LS-Kopplung ergeben. Eine vollständige Diskussion der anisotropen Fälle ohne LS-Kopplung finden sich in [Bra 95]. Hier werden nur Effekte der LS-Kopplung diskutiert.

Deren Hinzunahme führt neben komplizierteren Amplituden und Maslov-Indizes zu zwei wesentlichen Unterschieden.

- Neben der primitiven Periode  $T_0$  treten zwei weitere, nach oben und unten verschobene und mit  $T_{\pm}$  bezeichnete auf.
- Die  $\hbar$ -Ordnung des führenden Beitrags ist verändert. Damit geht auch eine unterschiedliche Energieabhängigkeit der Amplitude einher.

Beide Phänomene können auf einfache Weise in der SCL-Näherung interpretiert werden. Ohne Kopplung besitzt der harmonische Oszillator  $SU(3)$ -Symmetrie. Alle klassischen Bahnen haben Periode  $T_0$  und treten in einer vierparametrischen Familie auf. Dies führt, entsprechend Spurformel (3.8), zur  $E^2/\hbar^3$  Proportionalität des führenden Beitrags. Die Hinzunahme der LS-Kopplung bricht die Symmetrie nun teilweise. Falls

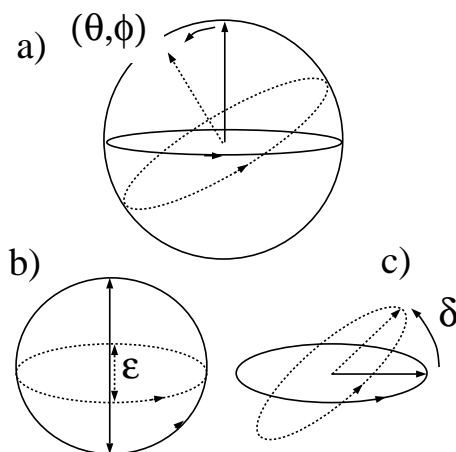


Abbildung 5.9: Im Falle mit LS-Kopplung kann die Bahnebene durch einen Polarwinkel charakterisiert werden (a). Ohne Kopplung kann zusätzlich die Kreisbahn gestaucht (b) und in der Ebene gedreht werden (c)

$$\kappa\omega \notin \mathbb{Q} \quad (5.26)$$

gilt, so sind nach Abschnitt 5.2.1 Kreisbahnen die einzig möglichen periodischen Lösungen. Deren Ebene bleibt im Raum frei orientierbar, die jeweilige Bahn ist jedoch darin fixiert. Dies reduziert die Bahnentartung um zwei Freiheitsgrade, vgl. Abb. 5.9. Der führende Beitrag in der Spurformel ändert sich entsprechend von  $\hbar^{-3}$  nach  $\hbar^{-2}$ . Die veränderte Periode ergibt sich wegen (5.19) ebenfalls unmittelbar. In Spurformel (5.23) treten weitere Ausdrücke der Ordnung  $\hbar^{-1}$  auf. Die Terme mit den Perioden  $T_{\pm}$  entsprechen dabei Randkorrekturen obiger zweiparametrischen Bahnfamilie. Der Term mit der ursprünglichen Periode kann im SCL-Formalismus nicht erklärt werden. Eine genauere Diskussion dazu erfolgt in Kapitel 6. Die klassische Integrierbarkeit, auch im Falle einer LS-Kopplung, bietet zudem die Möglichkeit einer EBK-Quantisierung. Die Energien von  $H_0$

$$E = \hbar\omega_0(n + 3/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.27)$$

sollen dabei als bekannt vorausgesetzt werden. Die LS-Korrektur ergibt sich, gemäß den SCL-Hamiltonfunktionen aus dem Term  $H_{\text{LS}} = \pm\kappa\omega_0^2|L|$ . Eine wesentliche Bedeutung kommt in diesem Zusammenhang dem NN-Term zu,  $\lambda_{NN}^{(1)} = \hbar\kappa\omega_0^2/2$ . Der Berry-Term verschwindet aufgrund der sphärischen Symmetrie. Erst dadurch ergeben sich mit der semiklassischen Quantisierungsbedingung  $L = \hbar(l + 1/2)$ ,  $l = 0, 1, 2, \dots$  die exakten Eigenwerte in (5.7).

$$\Delta E = \pm\kappa\hbar\omega^2(l + 1/2) + \frac{\hbar\kappa\omega_0^2}{2} = \kappa\hbar\omega_0^2 \begin{cases} -l & j = l + \frac{1}{2} \\ l + 1 & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.28)$$

Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass ohne Benutzung der nichtkanonischen Koordinaten dieses Vorgehen nur die Lage der Eigenwerte richtig wiedergibt, nicht aber deren Entartung, vgl. [Lit 92].

### 5.3.3 Numerische Auswertung der Spurformel

System (5.4) ist mit Ausnahme einiger Spezialfälle nicht integrierbar. Einen gewissen Zwischenstatus nimmt der axiale Fall mit  $\beta = 1$  ein. Hier existieren Bahnfamilien und Spurformel (3.4) muss durch eine entsprechende vom Typ (3.8) ersetzt werden. Dieser Fall wird im folgenden ausgeklammert. Einen ersten Eindruck über die zu erwartenden Auswirkungen einer LS-Kopplung im System (5.4) vermittelt Abb. 5.10. Sie zeigt bei unterschiedlichen Werten der Ankopplung eine Fourieranalyse von  $\delta g_{QM}(E)$ . Da das zugrundeliegende System gemäß

$$H(\eta\mathbf{r}, \eta\mathbf{p}) = \eta^2 H(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad \eta \in \mathbb{R}, \quad (5.29)$$

skaliert, kann in der Energietransformierten die Frequenz bzw. die Bahnperiode entnommen werden. Das System weist eine Deformation von 1 : 1.1212 : 1.2571 auf.

Bei  $\kappa = 0$  ergibt sich damit die bekannte Struktur mit den drei Hauptpeaks gemäß den Librationsbahnen. Der Dämpfungsfaktor  $\rho = 0.5\hbar\omega$  wurde in Abb. 5.11 so gewählt, dass auch noch die erste Wiederholung sichtbar ist. Das Einschalten der LS-Kopplung bewirkt nun ein Aufspalten der einzelnen Peaks, was sich zu einer komplett veränderten Struktur weiterentwickelt. Im folgenden wird nun versucht, diese Beobachtung zu erklären.

Zunächst sei festgestellt, dass ein Vorgehen in der WCL-Näherung nicht möglich ist. Dies liegt im wesentlichen daran, dass entlang den Librationsbahnen  $\gamma_i$ ,  $i = x, y, z$  der LS-Term identisch verschwindet,  $\mathbf{C}(\gamma_i(t)) \equiv 0$ ,  $i = x, y, z$  für alle  $t$ . Eine Auswertung der Dgl. (3.54) ergibt den trivialen Modulationsfaktor zwei, was in der Spurformel zu keinen prinzipiellen Änderungen führt.

Die Dynamik der beiden SCL-Hamiltonfunktionen  $H_{\pm} = H_0 \pm \kappa|\mathbf{C}|$  wurde bereits in Abschnitt 5.2 untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass im wesentlichen sechs verschiedene periodische Bahnen kleiner Wirkung existieren (+ sechs Zeitumgekehrte). In Abb. 5.10 sind dem Fourierspektrum deren Perioden unterlegt. Man erkennt eine bemerkenswerte Übereinstimmung mit dem Verlauf der Hauptpeaks. Das gleiche gilt für deren erste Wiederholung. Hier erlaubt die bessere Auflösung des Spektrums sogar die Auflösung aller Bahnen. Weitere Peaks, die keiner planaren Bahn zugeordnet werden können, rühren von 3-dim. Bahnen her. Beispielsweise kann der relativ markante Peak bei  $T = 10$ ,  $\kappa = 0.2$  der Bahn  $\gamma_{332}^-$  zugeordnet werden.

Die Gültigkeit einer Auswertung der Spurformel zeigt Abb. 5.11. Neben den analytisch bekannten Perioden überprüft dieser Test auch die Stabilitätsamplitude, sowie die genauen Phasen. Diese werden nur korrekt wiedergegeben, wenn gemäß SCL2 bzgl.

$$\lambda_B^{(1)} = 0 \quad \lambda_{NN}^{(1)} = \kappa\pi \frac{\omega_{ij}}{\omega_k} \hbar \quad (5.30)$$

korrigiert wird. Im Bereiche kleiner Energien sind Unterschiede zwischen  $\delta g_{SK}(E)$  und  $\delta g_{QM}(E)$  erkennbar. Dabei handelt es sich um die üblichen Fehler einer semiklassischen Näherung. Im Energieintervall  $10\hbar\omega_0 - 45\hbar\omega_0$  ist dagegen die Übereinstimmung, trotz der geringen Anzahl an beteiligten Bahnen, sehr gut. Darüber hinaus stehen nicht mehr alle quantenmechanischen Eigenwerte zur Verfügung. Figur 5.11 c) zeigt allerdings eine semiklassische Extrapolation des Schalenverlaufs dieses Systems. Ähnlich gute Ergebnisse wurden auch bei anderen Kopplungs- und Deformationswerten beobachtet, solange

- der LS-Parameter  $\kappa$  nicht zu klein wird, vgl. auch Kapitel 6.
- Deformation und LS-Kopplung sich im bifurkationsfreien Gebiet von Abb. 5.6 befinden.

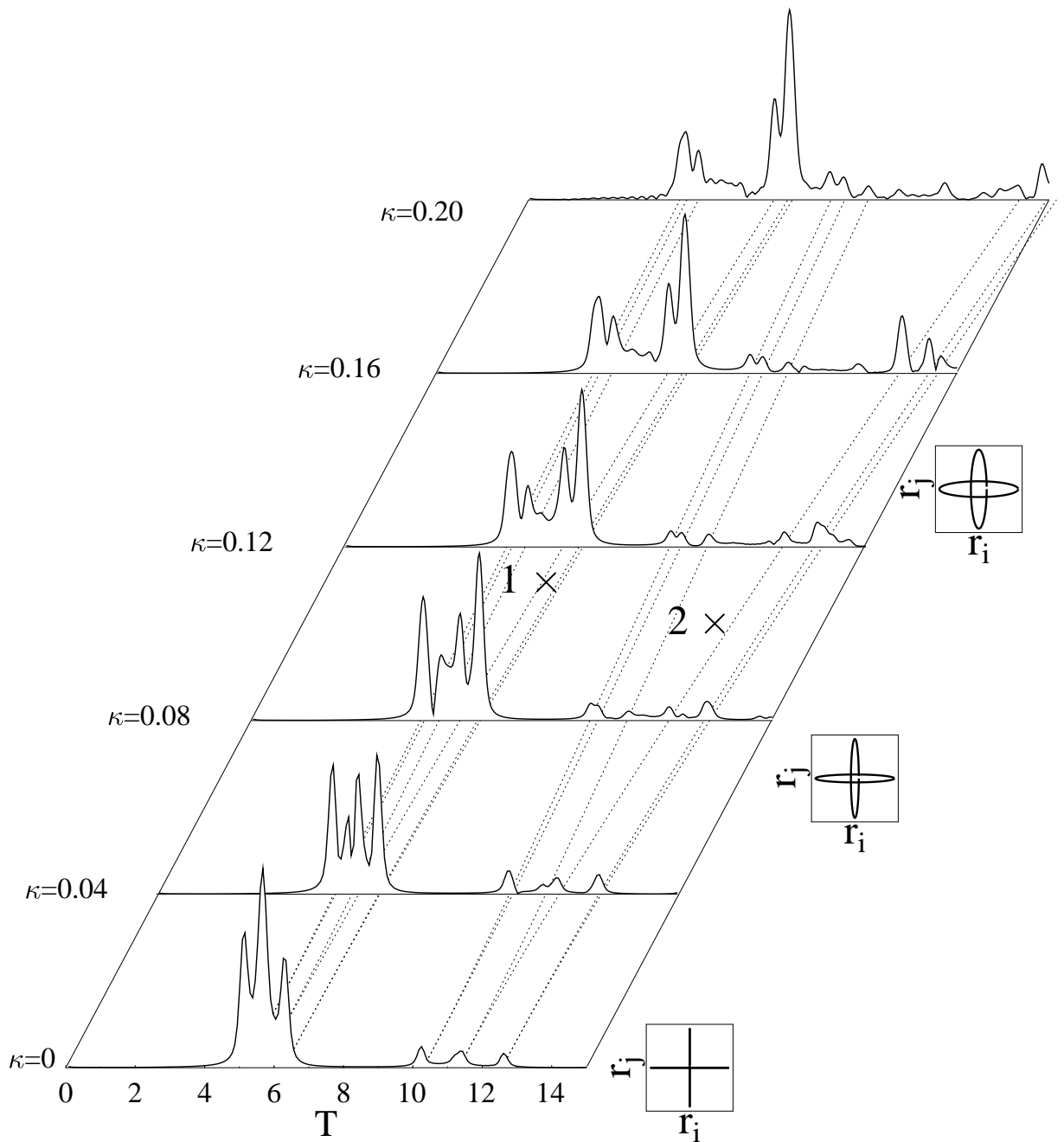


Abbildung 5.10: *Fourieranalysen aufgenommen bei verschiedenen Werten der LS-Kopplung. Daruntergelegt sind die nach (5.16) berechneten Frequenzen der planaren Bahnen, sowie deren ersten Wiederholungen. Die meisten Peaks entsprechen diesen (Parameter:  $\alpha = 1.1212$ ,  $\beta = 2$ ,  $\kappa$  und  $T$  in Einheiten von  $\omega_0^{-1}$ ,  $\rho = 0.5\hbar\omega_0$ ).*

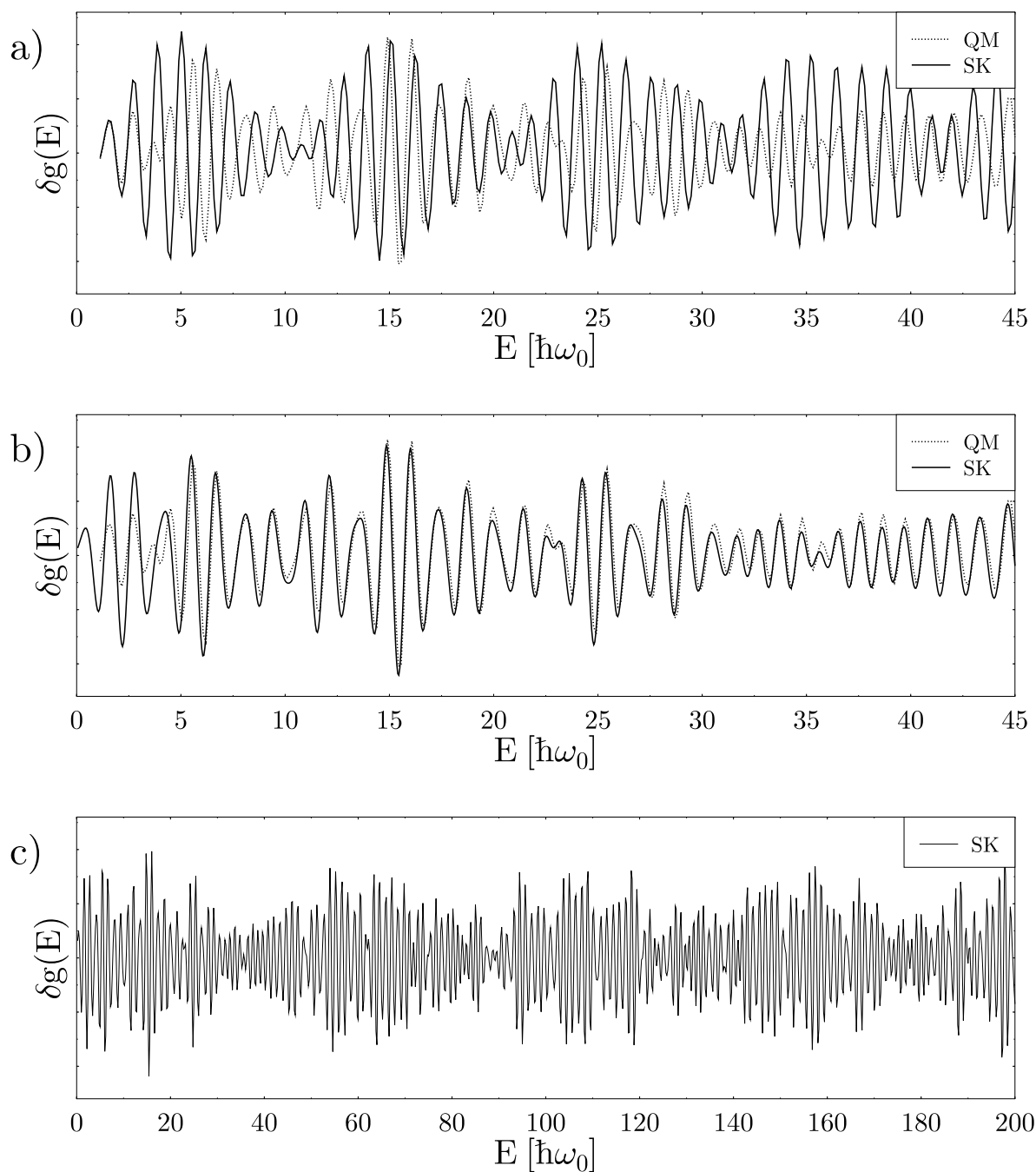


Abbildung 5.11: Vergleich von  $\delta g_{SK}(E)$  und  $\delta g_{QM}(E)$  des Systems (5.4) mit  $\alpha = 0.1212, \beta = 2$  bei einer Dämpfung von  $\rho = 0.5\hbar\omega_0$ . a) Ohne LS-Korrektur existiert keine Übereinstimmung. b) Gute Übereinstimmung lässt sich bei Benutzen der SCL-Methode erkennen. c) Extrapolation des semiklassischen Resultats zu hohen Energien.

### 5.3.4 Semiklassische Störungsrechnung

Die veränderte Zustandsdichte kann im Rahmen der SCL-Methode sehr gut wiedergegeben werden. Von Nachteil ist, dass die Stabilitätsamplitude nur numerisch bekannt ist. Ein geschlossener Ausdruck dagegen kann für den Fall eines leicht aus der sphärischen Symmetrie gestörten Systems angegeben werden.

Dazu nutzt man Kenntnis der Spurformel des isotropen Falles aus und benutzt die in Kapitel 3.3 vorgestellte semiklassische Störungstheorie. Als Störterm  $H_1$  wirken alle nichtsphärischen Anteile sowohl von  $H_0$  als auch des LS-Terms  $H_{LS}$ . Berry- und NN-Korrektur brauchen als Terme höherer Ordnung nicht berücksichtigt zu werden. Da nur kleine Deformationen untersucht werden, reichen bei der Parameterwahl (5.5) die führenden Ordnungen aus:

$$\omega_x = \omega_0 \quad \omega_y = (1 + \alpha)\omega_0 \quad \omega_z = (1 + \alpha\beta)\omega_0 \quad (5.31)$$

$\alpha$  agiert im weiteren als Störparameter, während  $\beta$  als kleiner aber fester Parameter benutzt wird.  $H_0$  wird durch (5.6) gegeben und besitzt, wie bereits erwähnt, kreisförmige in einer zweiparametrischen Familie vorliegende periodische Bahnen. Die Auswertung der Gleichungen (3.11) und (3.10) ergibt folgenden Modulationsfaktor (Einzelheiten finden sich im Anhang).

$$\mathcal{M}_{\Gamma_{\pm}}(\alpha, E) = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta \, d\theta \, e^{i\delta_{\pm}\alpha E(2+\beta+(\beta-2)\cos^2\theta)} J_0(\delta_{\pm}\beta\alpha \sin^2\theta E) \quad (5.32)$$

Die Integration über  $\theta$  kann i.A. nicht mehr erfolgen. Für spezielle Verhältnisse von  $\alpha : \beta$ , darunter die wichtige axiale Deformation mit  $\beta = 0$  können analytische Ausdrücke gefunden werden. Im folgenden soll stellvertretend  $1 : \alpha : 2\alpha$ -Deformation näher untersucht werden, wo der Modulationsfaktor besonders einfach ist. Endresultat ist eine Spurformel, die in komplett analytischer Weise den fluktuierenden Anteil einer  $1 : \alpha : 2\alpha$ -Deformation wiedergibt.

$$\begin{aligned} \delta g(E) = \operatorname{Re} \left\{ \sum_{\pm} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2E \left[ J_{-\frac{1}{4}}(-\delta_{\pm}\alpha E) + J_{\frac{1}{4}}(-\delta_{\pm}\alpha E) \right]}{(\hbar\omega_0)^2 (1 \pm \kappa\omega_0)^2 \sin\left(\frac{2k\pi}{1 \pm \kappa\omega_0}\right)} \right. \\ \left. \times \exp \left( i \left[ \left\{ \frac{1}{\hbar} T_{\pm}(k) + 4\delta_{\pm}\alpha \right\} E - \frac{1}{2} \sigma_{\pm}(k) \pi \right] \right) \right\} \quad (5.33) \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$\delta_{\pm} = -\frac{\pi(1 \pm 2\kappa\omega_0)}{2\omega_0(1 \pm \kappa\omega_0)^2} \quad T_{\pm} = \frac{2\pi}{\omega_0(1 \pm \kappa\omega_0)} \quad \sigma_{\pm}(k) = \frac{2(\pm 1 + \kappa\omega_0)}{1 \pm \kappa\omega_0}$$

Abb. 5.12 zeigt einen Vergleich von  $\delta g_{SK}(E)$  und  $\delta g_{QM}(E)$  bei einer leichten Störung ( $\omega_x : \omega_y : \omega_z = 1 : 1.01151 : 1.02302$ ). Man erkennt, dass die semiklassische

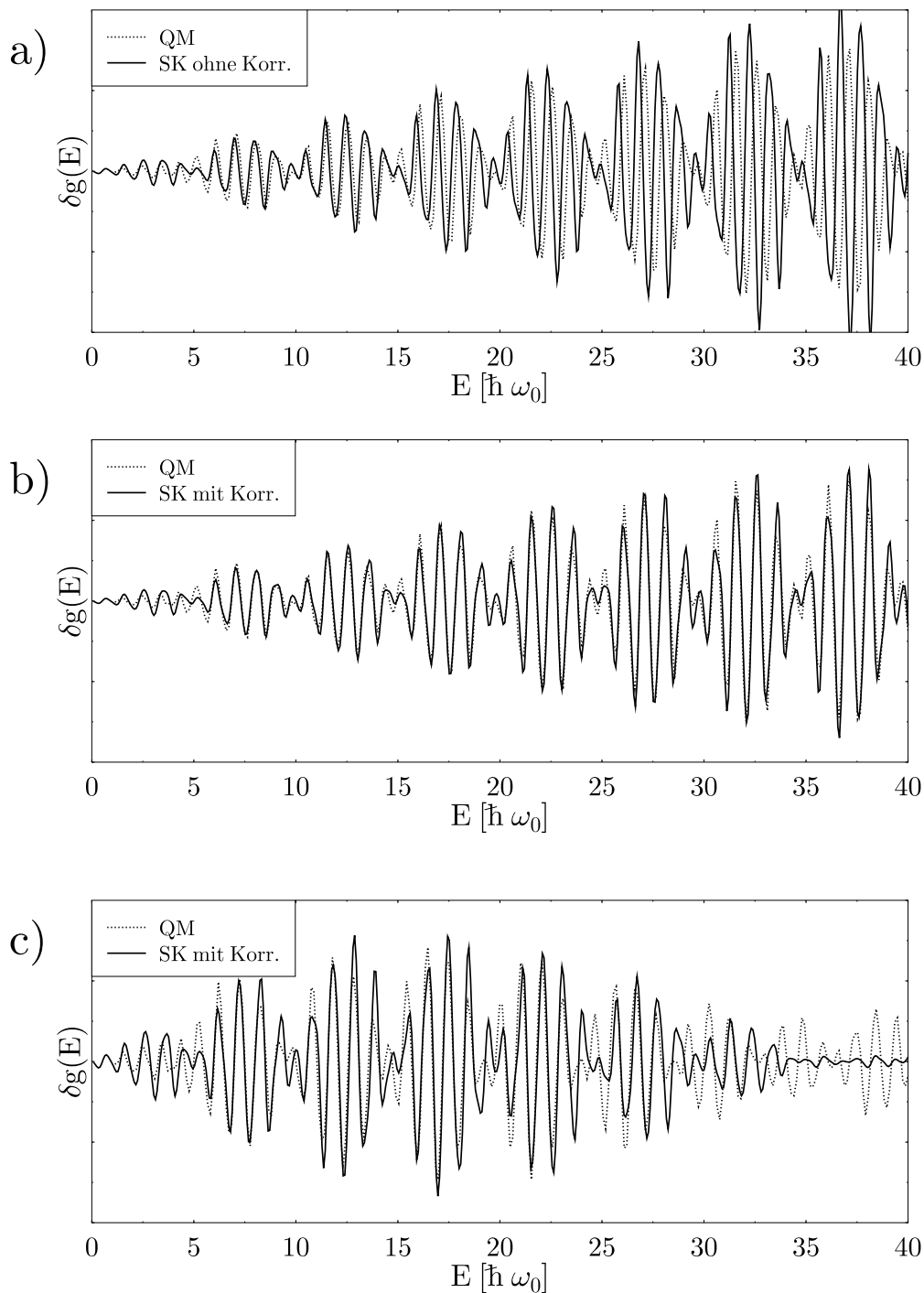


Abbildung 5.12: Vergleich von semiklassischer Störungsrechnung mit exaktem Resultat. a) Ohne Störungskorrektur ist eine Phasenverschiebung zu beobachten. b) Mit Korrektur wird diese behoben ( $\alpha = 0.01$ ). c) Bei größerer Deformation ( $\alpha = 0.03$ ) versagt die Störungstheorie (Parameter:  $\beta = 2$ ,  $\kappa = 0.1 \omega_0^{-1}$ ,  $\rho = 0.2 \hbar \omega_0$ ).

Theorie ohne Berücksichtigung des Störterms ein falsches Phasenverhalten aufweist (a)), während sie bei Hinzunahme den Verlauf gut wiedergeben kann (b)). Mit größer werdender Störungen ( $\alpha > 0.03$ ) wird die Übereinstimmung jedoch zunehmend schlechter. Abhilfe bietet hier eine uniforme Näherung, wie sie z.B. in [Bra 99] angewendet wird.



# Kapitel 6

## Mode-Conversion

*Mode-Conversion (MC) tritt bei der semiklassischen Behandlung der LS-Kopplung ausschließlich im Zusammenhang mit der SCL-Methode auf. An Phasenraumpunkten mit verschwindender LS-Kopplung bricht die dort benötigte adiabatische Näherung zusammen. In diesem Abschnitt werden aus quantenmechanischen Informationen Rückschlüsse auf klassische Dynamik und das Eintreten eines möglichen Spinflips gezogen.*

### 6.1 Auftreten von Mode-Conversion

Das Problem der MC tritt nur in der **SCL-Näherung** auf und zwar in Phasenraumbereichen auf, wo die MC-Bedingung

$$\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 0 \tag{6.1}$$

erfüllt ist. Bei der üblichen LS-Kopplung (5.2) legt Bedingung (6.1) gerade 3-dim. Unterräume fest.

Auf diesen Flächen treten bei Diagonalisierung des Wellenoperators entartete Eigenwerte auf. Die beiden SCL-Hamiltonfunktionen stimmen überein,  $H_+ = H_-$ . An verschiedenen Stellen bei der in Abschnitt 3.4. skizzierten Herleitung treten dadurch Probleme auf. Unter anderem ist Ansatz 3.27 nur streng gerechtfertigt, falls Beziehung (6.1) nicht zutrifft [Fri 87]. Wie bereits erwähnt sind auch die in einer  $\hbar$  Umgebung liegenden Bereiche betroffen.

Die bislang in der SCL-Näherung untersuchten Systeme besaßen die Eigenschaft, dass alle wesentlichen Spurformelbeiträge von Bahnen herrührten, die das MC-Problem nicht aufwiesen. Im Verlaufe dieses Kapitels wird sich jedoch herausstellen, dass dieser Umstand nicht immer gewährleistet sein muss. Es werden Systeme vorgestellt, wo sogar alle kurzen Bahnen in irgendeiner Form davon betroffen sind.

Leider existiert bislang noch keine umfassende Theorie, wie in solchen Situationen die Beträge in Spurformeln ermittelt werden können. Bisherige Problemstellungen in diesem Zusammenhang beschränken sich auf eine Dimension  $D = 1$  [Lit 94].

Das Vorgehen in diesem Kapitel beschränkt sich daher auf die Analyse der quantenmechanischen Ergebnisse, um anschließend Rückschlüsse auf das klassische Verhalten zu ziehen. Empirisch gefundene Modelle und Regeln werden damit verglichen. Die ausgewählten Beispiele sind zumeist Spezialfälle der in Kapitel 4 und 5 untersuchten Systeme. Das Problem der MC tritt dabei in unterschiedlicher Form auf, es wird unterschieden zwischen:

- **Globale MC:** Periodische Bahnen liegen komplett auf oder nahe der der MC-Fläche.
- **Lokale MC:** Periodische Bahnen erfüllen nur zu diskreten Zeiten die MC-Bedingung (6.1).

## 6.2 Globale Mode-Conversion

### 6.2.1 Periodische Bahnen entlang MC Flächen

Am folgenden Beispiel kann mittels analytisch bekannten Ergebnissen gefolgert werden, dass die MC-Problematik tatsächlich zu beobachtbaren Unstimmigkeiten in der Spurformel führt. Dazu werde der 3-dim. sphärische Oszillator mit LS-Kopplung aus Abschnitt 5.3.2 und dessen sogar in allen Quantenzahlen exakten Spurformel betrachtet, vgl. auch Tab. 5.1.

Die führenden Beiträge konnten Bahnen der Perioden  $T_{\pm}$  zugeordnet werden. Weitere Terme dieser Perioden entsprechen Randkorrekturen derselben Bahnfamilie. Im Rahmen der SCL-Analyse weitgehend unerklärbar bleibt jedoch der Beitrag

$$\delta g(E) = \dots + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{\hbar\omega_0 \sin^2(k\pi\kappa\omega_0)} \cos\left(\frac{1}{\hbar}T_0kE - \frac{\pi}{2}\sigma_0k\right), \quad (6.2)$$

der formal einer Bahn mit der ursprünglichen Periode  $T_0$  entspricht. Dazu sei zunächst festgestellt, dass wegen der sphärischen Symmetrie  $\mathbf{L}$  erhalten ist. Dies führt dazu, dass im Falle  $|\mathbf{L}| > 0$  die SCL-Hamiltonfunktionen  $H_{\pm} = H_0 \pm \kappa\omega|\mathbf{L}|$  durch geeignete Drehung des Koordinatensystems stets in die Form  $H_{\pm} = H_0 \pm \kappa\omega|L_z|$  gebracht werden können. Die zugehörige Dynamik wird durch ein lineares Dgl-System vergleichbar mit dem von (5.14) beschrieben.

$$\dot{\gamma}(t) = A_{\pm}\gamma(t) \quad (6.3)$$

mit

$$A_{\pm} = \begin{pmatrix} 0 & \mp \text{sign}(L_z)\kappa\omega_0^2 & 1 & 0 \\ \pm \text{sign}(L_z)\kappa\omega_0^2 & 0 & 0 & 1 \\ -\omega_0^2 & 0 & 0 & \mp \text{sign}(L_z)\kappa\omega_0^2 \\ 0 & -\omega_0^2 & \pm \text{sign}(L_z)\kappa\omega_0^2 & 0 \end{pmatrix}$$

Dessen einzige periodische Lösungen besitzen die Umlaufzeit  $T_{\pm}$ . Gilt dagegen  $\mathbf{L} = 0$ , so ist die MC-Bedingung (6.1) erfüllt und in System (6.3) kommt es wegen dem  $\text{sign}(L_z)$ -Term zu einem undefinierten Verhalten.

Es sei noch bemerkt, dass sich die Bahnperiode  $T_0$  ergibt, wenn im Falle  $\mathbf{L} = 0$ , diese Bedingung **zuerst** in die Hamiltonfunktion eingesetzt und anschließend aus  $H_{\pm} = H_0$  die Bewegungsgleichungen bestimmt werden. Dieses Vorgehen kann jedoch nicht näher begründet werden und lässt auch keine Rückschlüsse auf die Amplitude in der Spurformel (6.2) zu.

### 6.2.2 Das Verhalten in der Nähe von $\kappa = 0$

Globale MC tritt ebenfalls auf, wenn ganz allgemein der LS-Parameter  $\kappa$  gegen Null geht. Hierbei nähern sich die beiden SCL-Hamiltonfunktionen an

$$\kappa \rightarrow 0 \implies |H_{\pm}(\boldsymbol{\gamma}) - H_{\mp}(\boldsymbol{\gamma})| \rightarrow 0 \quad \text{für alle } \boldsymbol{\gamma}, \quad (6.4)$$

und fallen bei  $\kappa = 0$  schließlich zusammen. Das Zusammenbrechen der SCL-Näherung in einer solchen Situation kann im folgenden demonstriert werden. Anhand des anisotropen 3-dim. Oszillators (5.4) wird gezeigt, dass die durch  $H_{\pm}$  vermittelte klassische Bewegung keinen glatten Übergang zwischen  $\kappa = 0$  und  $\kappa > 0$  besitzt. Bekanntlich wird für  $\kappa = 0$  das System durch die drei Librationsbahnen  $\gamma_i$ ,  $i = x, y, z$  beschrieben. Wählt man  $\kappa > 0$ , so entspringen daraus die durch (5.17) parametrisierten elliptischen Bahnen. Dieser Vorgang ist jedoch keine Bifurkation im üblichen Sinne. Dies zeigt z.B. der Verlauf der Stabilitätswerte von  $\gamma_{zx}^+$  und  $\gamma_{yz}^+$  in Abb. 6.1. Obwohl die Bahnen im Phasenraum bei  $\kappa \rightarrow 0$  zu  $\gamma_y$  verschmelzen, besitzt keiner der Stabilitätswerte dort den Wert zwei. Umgekehrt ist auch die Pendelbahn  $\gamma_y$  i.A. stabil und damit  $\Lambda_i \neq 2$ ,  $i = 1, 2$  (vgl. kreisförmige Markierung). Abb. 6.1 lässt zudem erkennen, dass der Sprung bei dem senkrechten Stabilitätswert  $\Lambda_{\perp}$  stattfindet. Der Verlauf von  $\Lambda_{\parallel}$  endet dagegen gemäß (5.21) am entsprechenden Wert von  $\gamma_y$ . Während die in der SCL-Näherung bestimmten Wirkungen und Perioden einen glatten Verlauf besitzen, kommt es bei den Stabilitätswerten z.T. zu unstetigem Verhalten.

Dagegen ist anzunehmen, dass ein entsprechender quantenmechanischer Übergang glatt verläuft, vgl. auch Abb. 5.1. Mittels Störungsrechnung kann hier das Verhalten genähert bestimmt werden. Die sich ergebenden Energiekorrekturen einschließlich

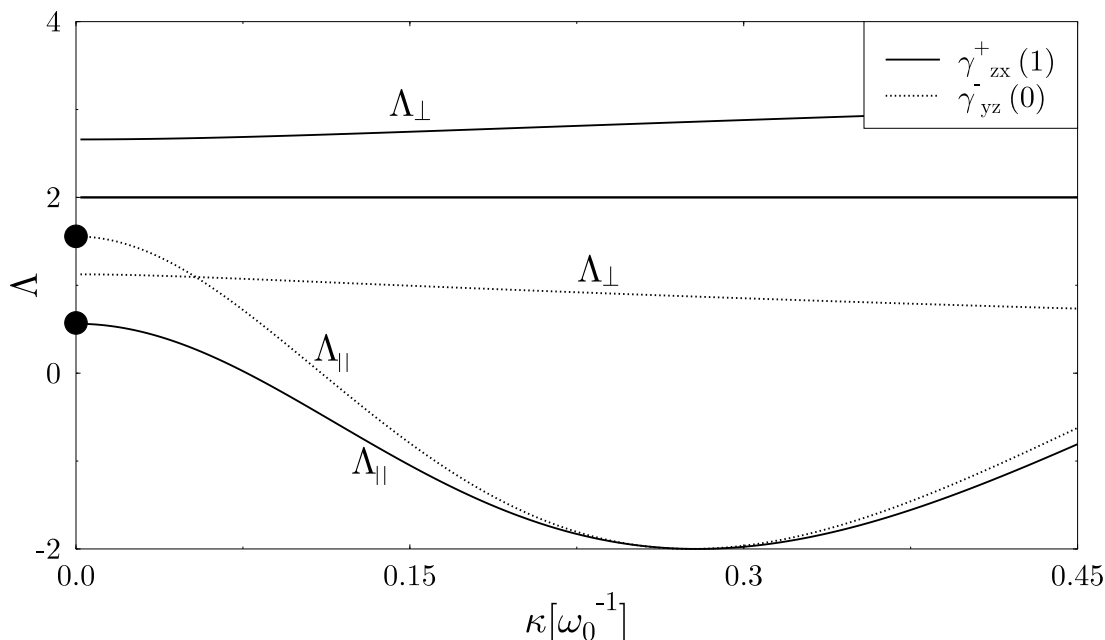


Abbildung 6.1: Verlauf der Stabilitätswerte der Bahnen  $\gamma_{xz}^+$  und  $\gamma_{yz}^+$ . Im Grenzfall  $\kappa \rightarrow 0$  stimmen lediglich die parallelen Stabilitätswerte mit dem der Bahn  $\gamma_y$  des 3-dim. Oszillators ohne Kopplung (kreisförmige Markierung) überein. Bei den senkrechten kommt es zum Sprung.

zweiter Ordnung sind linear in den Quantenzahlen, so dass das System nahe  $\kappa = 0$  einem 3-dim. Oszillator mit drei modifizierten Frequenzen entspricht.

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \sum_{i=x, y, z} \hbar \tilde{\omega}_i (n_i + 1/2) \quad (6.5)$$

$$\text{wobei} \quad \tilde{\omega}_i = \omega_i \left( 1 + \frac{\kappa^2}{2} \left[ \frac{\omega_j^2 (\omega_j^2 + 3\omega_i^2)}{\omega_i^2 - \omega_j^2} + \frac{\omega_k^2 (\omega_k^2 + 3\omega_i^2)}{\omega_i^2 - \omega_k^2} \right] \right)$$

$i, j, k = x, y, z$  paarweise verschieden

Abschließend sei noch auf einen interessanten Zusammenhang hingewiesen: Entwickelt man die sechs verschiedenen Frequenzen der planaren Bahnen nach  $\kappa$ , so ergeben sich:

$$\bar{\omega}_{ij} = \omega_i \left( 1 + \frac{\kappa^2 \omega_j^2 (\omega_j^2 + 3\omega_i^2)}{2 (\omega_i^2 - \omega_j^2)} \right) \quad \text{wobei} \quad i, j = x, y, z \quad i \neq j \quad (6.6)$$

Der Vergleich mit (6.5) zeigt eine ähnliche Struktur. Im Unterschied zu dort sind jedoch sechs Terme vorhanden. Man beachte auch, dass die drei Frequenzen in (6.5) nicht der Mittelwert von (6.6) sind!

## 6.3 Lokale Mode-Conversion

Lokale MC tritt auf, sobald die Trajektorie nur zu gewissen Zeitpunkten die MC-Bedingung (6.1) erfüllt. Folgendes 2-dim. System erlaubt auf die damit verbundenen Konsequenzen aufmerksam zu machen:

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \underbrace{\frac{1}{2} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \omega_x^2 \hat{r}_x^2 + \omega_y^2 \hat{r}_y^2)}_{H_0} \mathbb{1} + \underbrace{\kappa (-\hat{p}_y \hat{\sigma}_x + \hat{p}_x \hat{\sigma}_y)}_{H_{LS}} \quad (6.7)$$

Es handelt sich dabei im wesentlichen um den aus Kapitel 4 bekannten anisotropen Quantendot, der jedoch hier **keinem externen Magnetfeld** ausgesetzt wird. Vereinfachend werden Masse  $m^*$  und der Parameter  $\langle v'_z \rangle$  gleich eins gesetzt, sowie die Diagonalterme des Rashba-Terms vernachlässigt. Letzteres kann in Systemen mit, verglichen zur  $z$ -Struktur großen, lateralen Strukturen gerechtfertigt werden. An dieser Stelle dient die Vernachlässigung jedoch alleine dazu, dass weniger kurze periodische Bahnen bei der späteren klassischen Behandlung auftreten. Die Aufmerksamkeit kann damit ausschließlich auf das Problem der MC gelenkt werden. Das weitere Vorgehen gestaltet sich nun wie folgt. Zunächst wird das exakte quantenmechanische Ergebnis herangezogen, um auf klassische Größen zu schließen. Hierbei besitzt die Wahl eines 2-dim. Problems gegenüber einem 3-dim. System den Vorteil, dass die Eigenwertdichte  $\tilde{g}(E)$  weniger stark anwächst. Ein breiteres Energieintervall sowie eine schärfere Fouriertransformierte sind die Folge. Es wird sich allerdings herausstellen, dass im Gegensatz zu den in Kapitel 4 und 5 behandelten Systemen in (6.7) periodische Bahnen nicht ohne weiteres identifiziert werden können.

### 6.3.1 Fouriertransformierte des Quantenresultates

Das unterschiedliche Skalierungsverhalten von  $H_0$  und  $H_{LS}$  verhindert zunächst eine einfache Fouriertransformation bzgl. der Energie, wie sie etwa in Kapitel 5 durchgeführt wurde. Es muss vielmehr nach der in Abschnitt 3.4 vorgestellten Methode vorgegangen werden. Die Transformation findet entlang der Linie konstanter skaliertener Energie

$$e = \frac{E}{\kappa^2} \quad (6.8)$$

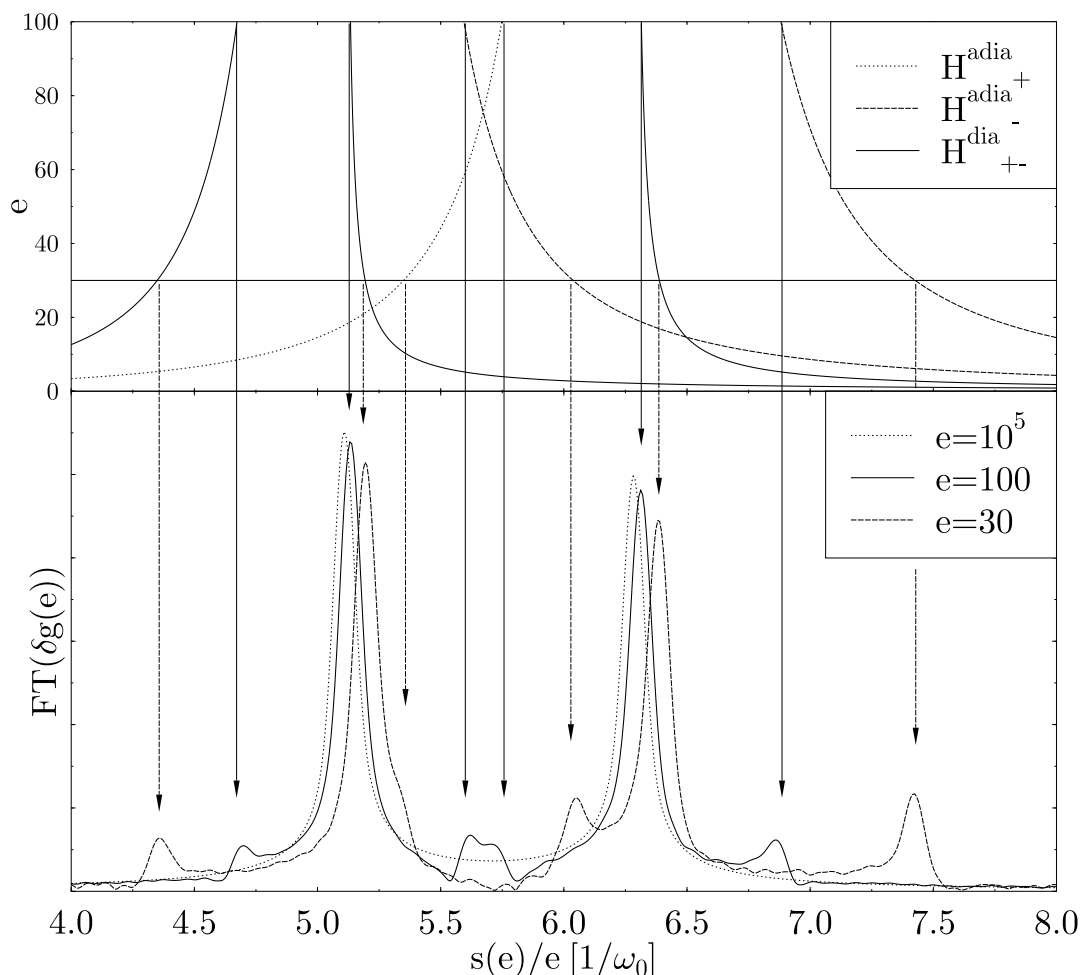


Abbildung 6.2: *Unterer Bereich: Fouriertransformierte des Systems (6.7) bei verschiedenen Werten von  $e$ . Die Frequenzen betragen  $\omega_x = \omega_0, \omega_y = 1.23\omega_0$ . Oberer Bereich: Verlauf von  $s(e)/e$  in Abhängigkeit von  $e$ . Zugrundegelegt wurden die adiabatische Hamiltonfunktion  $H_{\pm}^{\text{adia}}$  sowie die diabatischen  $H_{\pm}^{\text{dia}}$ . Alle wesentlichen Peaks können damit erklärt werden. (Dämpfung:  $\rho = 0.2\hbar\omega_0$ )*

in der  $\kappa E$ -Ebene statt. Die Position eines Fourierpeaks markiert den Quotienten  $s(e)/e$  einer periodischen Bahn.

Abb. 6.2 zeigt im unteren Bereich das Ergebnis einer solchen Untersuchung bei verschiedenen Werten von  $e$ . Die Frequenzwahl  $\omega_x : \omega_y = 1 : 1.23$  garantiert dabei einerseits die Trennung der Hauptpeaks, ohne dass diese mit den ersten Wiederholungen zusammenfallen. Der Fall hoher Energie  $e = 10^5$  ist bei der gewählten

Skala nicht von einem Oszillator ohne LS-Kopplung zu unterscheiden. Dies folgt unmittelbar aus (6.8), da der Grenzfall  $e = \infty$  gerade dem verschwindender Kopplung entspricht. Mit abnehmender Energie können zwei Veränderungen beobachtet werden:

1. Die beiden Hauptpeaks wandern leicht nach rechts.
2. Es treten vier weitere Nebenmaxima auf.

Inwieweit lässt sich dieses Ergebnis mit Hilfe von periodischen Bahnen interpretieren? Zur Beantwortung dieser Frage soll versuchsweise die WCL-Näherung benutzt werden.

### 6.3.2 WCL-Methode

Regeln WCL1 und WCL2 schreiben vor, dass die Spurformel von  $H_0$  (sie besitzt im wesentlichen die Gestalt (4.20)) um den Faktor  $\text{tr } d(T_\gamma)$  modifiziert werden muss. Kurze periodische Bahnen liegen in  $H_0$  nur in Form der beiden Librationsbahnen  $\gamma_i$ ,  $i = x, y$  vor. Die Auswertung von Dgl. (3.54) entlang  $\gamma_i$  ergibt nun

$$\text{tr } d_{\gamma_i}(t) = \cos[\kappa \sin(\omega_i t)], \quad i = x, y \quad (6.9)$$

und damit

$$\text{tr } d_{\gamma_i}(T_{\gamma_i}) = 2, \quad i = x, y. \quad (6.10)$$

Man beachte, dass hier das triviale Resultat wegen der zeitabhängigen Koeffizientenmatrix nicht so offensichtlich ist, wie beim 3-dim. Oszillators des Kapitel 5. Das Resultat ist vielmehr darauf zurückzuführen, dass die Bahnen während einer Periode einen symmetrischen  $\mathbf{C}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ -Verlauf besitzen. Der Spin präzediert zunächst vom ersten Umkehrpunkt zum zweiten in einer Richtung, während beim Rückweg die Präzession genau im umgekehrten Sinne erfolgt. Anfangs- und Endposition des Spinvektors sind damit identisch. Erst durch Anlegen eines externen Magnetfeldes wird diese Symmetrie gebrochen, was auch die erfolgreiche Behandlung im Abschnitt 4.3 erklärt.

### 6.3.3 Das Auftreten von Mode-Conversion bei der SCL-Methode

Die zu System (6.7) gehörigen SCL Hamiltonfunktionen lauten in den skalierten Koordinaten (vgl. Abschnitt 3.4)

$$\tilde{H}_\pm(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) = H_0(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) \pm |\tilde{\mathbf{p}}|. \quad (6.11)$$

Aufgrund des nichtquadratischen LS-Terms geht die klassische Harmonizität des Systems verloren. Es ergibt sich das folgende vierkomponentige Bewegungsgleichungssystem:

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{r}}_i &= \tilde{p}_i \pm \tilde{p}_i |\tilde{\mathbf{p}}|^{-1} \\ \dot{\tilde{p}}_i &= -\omega_i^2 \tilde{r}_i\end{aligned}\quad i = x, y \quad (6.12)$$

Die Hinzunahme der LS-Kopplung zerstört die Linearität, es kommt zur Ausbildung eines gemischten Phasenraums. Anhand der Poincaré Schnitte (Abb. 6.3) beider Systeme  $H_{\pm}$  lässt sich dies leicht erkennen. Im Grenzwert hoher Energien wird das Verhalten zunehmend regulär, was sich erneut mit (6.8) in Verbindung bringen lässt. Gleichzeitig werden die beiden Schnitte identisch. Das Verhalten in der Nähe des Ursprungs von  $H_-$  bzw.  $H_+$  entspricht der Situation eines instabilen bzw. stabilen Fixpunktes. Die zugehörigen Bahnen pendeln entlang der  $x$ - bzw.  $y$ -Achse. Weitere Fixpunkte liegen auf der Berandung. Insgesamt existieren vier Librationsbahnen  $\gamma_i^{\pm}$ ,  $i = x, y$ , resp. deren Wiederholungen. Je zwei davon sind (in)stabil. Für die weitere Analyse der Bewegungsgleichung nutzt man die Existenz von Spiegelungssymmetrien aus. Diese bewirken, dass sich die Bewegung auf invariante Unterräume ( $\tilde{r}_i \equiv 0, \tilde{p}_i \equiv 0$ ),  $i = x, y$  reduzieren lässt. Mit Ausnahme des MC-Punktes lauten dort die reduzierten Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{r}}_i &= \tilde{p}_i \pm \text{sign } \tilde{p}_i \\ \dot{\tilde{p}}_i &= -\omega_i^2 \tilde{r}_i\end{aligned}\quad i = x, y. \quad (6.13)$$

Diese Gleichungen ergeben sich auch formal aus der 1-dim Hamiltonfunktion.<sup>1</sup>

$$H_{\pm}^{adia} = \frac{1}{2} (\tilde{p}_i^2 + \omega_i^2 \tilde{r}_i) \pm |\tilde{p}_i|. \quad (6.14)$$

Am MC-Punkt kann dagegen keine Gleichung definiert werden. Es lassen sich aber Lösungen  $\gamma_{\pm}^{adia}$  mit einem stetigen Verlauf von  $\gamma(t)$  konstruieren. In den Ableitungen  $\dot{\gamma}(t)$  kommt es jedoch zu Sprüngen, was auch in den Phasenraumschnitten (Abb. 6.5 b)) am eckigen Verlauf der adiabatischen Lösung deutlich wird. Gleichzeitig verhindert der sprunghafte Verlauf der Hessematrix in (2.8) entlang der Bahn eine Bestimmung des Stabilitätswertes und damit auch die der semiklassischen Amplitude. Eine qualitative Zuordnung kann jedoch mit Hilfe der Poincaré-Schnitte erfolgen, da Bahnen in einer Umgebung der Fixpunkte keine MC-Problematik und damit reguläre Bewegungsgleichungen aufweisen.

Bei niedrigen Energien lassen sich weitere Fixpunkte ausmachen. Diese fallen für  $e \rightarrow \infty$  mit dem Zentrumspunkt zusammen und wandern bei kleiner werdender Energie nach aussen. Die Form der Bahn sowie deren Lage im Poincaré-Schnitt

<sup>1</sup> Achtung: Ein sofortiges Nullsetzen von  $r_j$  und  $p_j$  in Ausdruck (6.11) ist i.A. nicht korrekt.

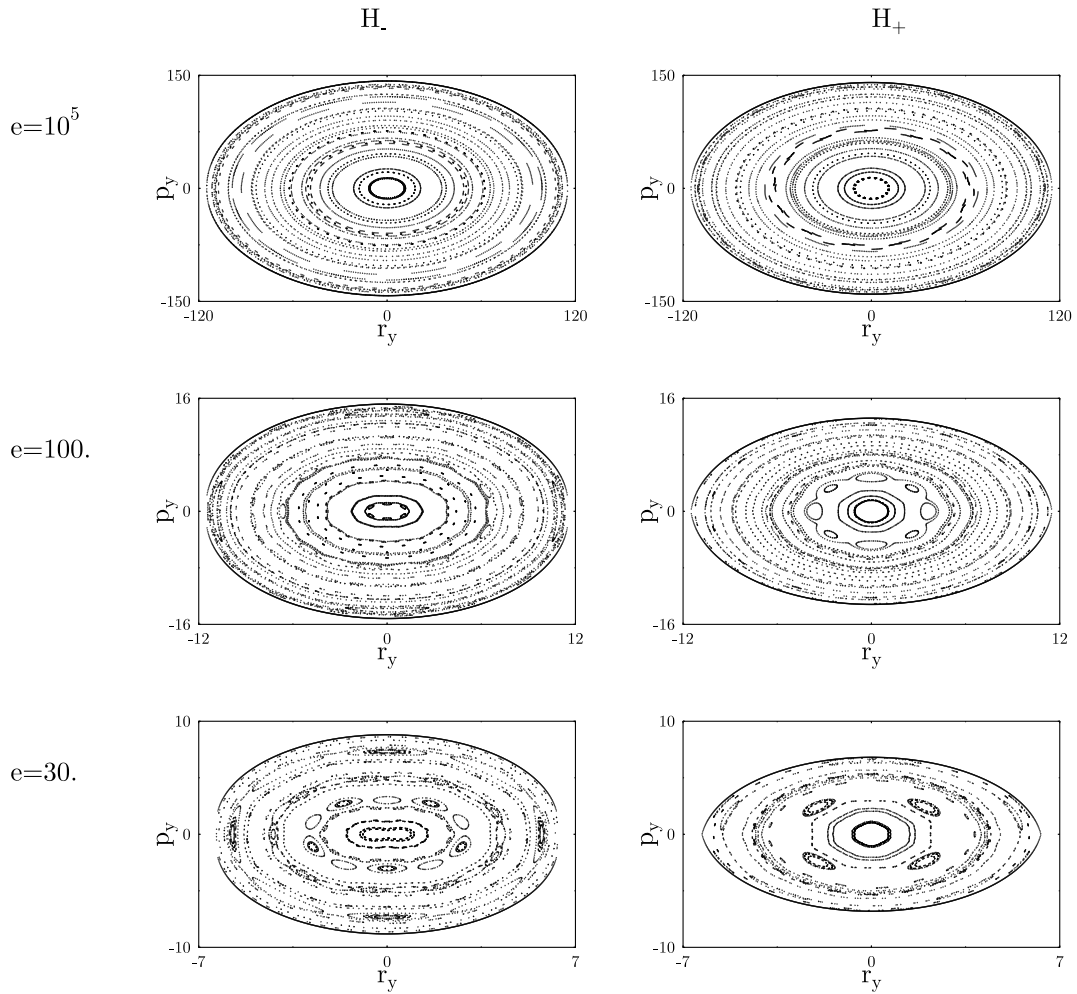


Abbildung 6.3: *Poincaré Schnitte der Systeme (6.11) aufgenommen bei unterschiedlichen skalierten Energien. Der chaotische Bereich nimmt mit abnehmender Energie zu.*

zeigt Abb. 6.4. Man kann nachprüfen, dass im untersuchten Energiebereich auch diese zusätzlichen Bahnen die Bedingung  $\tilde{\mathbf{p}} = 0$ , wenn auch nicht exakt, so doch näherungsweise erfüllen.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass alle kurzen periodischen Bahnen von der MC-Problematik betroffen sind.

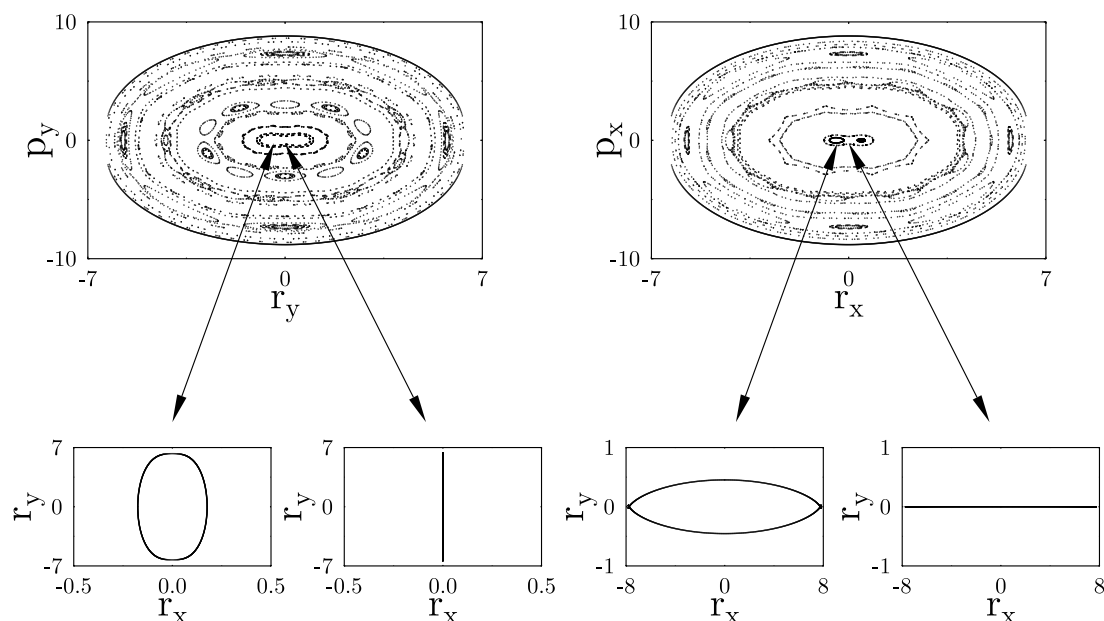


Abbildung 6.4: *Periodische Bahnen von System (6.7) sind Librationen entlang den Achsen. Daneben existieren bei  $e = 30$  zwei weitere kurze Bahntypen.*

### 6.3.4 Dia- und adiabatische Hamiltonfunktion

Die Problematik mit sprunghaften Bewegungsgleichungen wurde in vergleichbarer Situation von Frisk und Guhr beobachtet [Fri 93]. Sie interpretierten die in der klassischen Bewegung auftretenden Sprünge als unphysikalisch und glätteten sie. Auf obiges System übertragen, hieße das, dass die sign-Funktion in (6.13), ignoriert wird. Entsprechend muss die zugrundeliegende Hamiltonfunktion (6.14) folgendermaßen modifiziert werden:

$$H_{\pm}^{adia} = \frac{1}{2} (\tilde{p}_k + \omega_k^2 \tilde{r}_k^2) \pm |\tilde{p}_k| \quad \rightarrow \quad H_{\pm}^{dia} = \frac{1}{2} (\tilde{p}_k + \omega_k^2 \tilde{r}_k^2) \pm \tilde{p}_k \quad k = x, y \quad (6.15)$$

Dieses Vorgehen kann auch im Sinne eines Spinflips interpretiert werden: Gemäß den in Abschnitt 3.4 gemachten Ausführungen können die Hamiltonfunktionen  $H_{\pm}$  mit den beiden Spinpolarisationen identifiziert werden. Das Ersetzen der diabatischen Funktion durch die adiabatische ist nun so zu verstehen, dass jedesmal, wenn MC-Bedingung (6.1) zutrifft, eine Vertauschung der Hamiltonfunktionen stattfindet: Daher rühren auch die Bezeichnungen adia- und diabatisch her.

SF1	$C = 0$	$\iff$	Spinflip	$\iff$	$H_{\pm} \leftrightarrow H_{\mp}$
-----	---------	--------	----------	--------	-----------------------------------

Abb. 6.5 skizziert die beiden Flächen  $H_{\pm}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) = const.$  in der Nähe des MC-Punktes  $\tilde{\mathbf{p}} = 0$ . Sie besitzen die Gestalt eines Doppelkegels, es tritt diabotische MC auf. Am Spinflip-Punkt wechselt die Trajektorie des System. Im Phasenraum besitzen die entsprechenden diabatischen Lösungen  $\gamma_{\pm}^{dia}$  einen glatten Verlauf. Das Vorgehen in (6.15) kann, abgesehen, dass dadurch ein glattes Verhalten erzielt wird, hier nicht näher begründet werden. Eine umfassende Theorie des MC-Problems existiert momentan noch nicht.

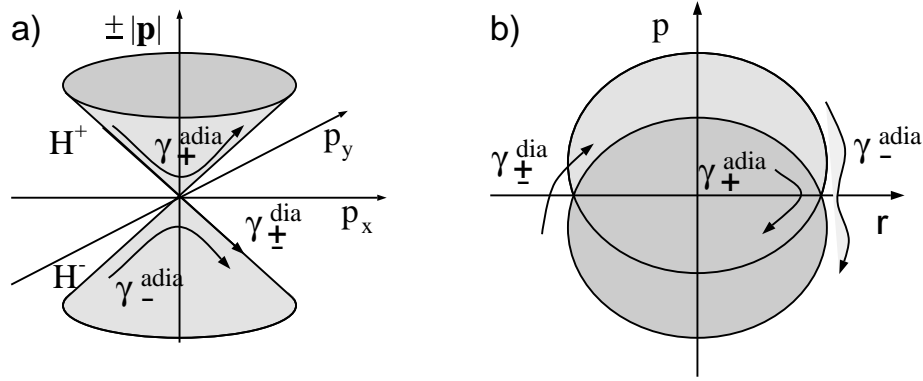


Abbildung 6.5: a) Flächen konstanter Energie des LS-Terms.  $\gamma_{\pm}$  durchläuft den MC-Punkt und wechselt von  $H_+$  nach  $H_-$ .  $\gamma_+$  verbleibt auf  $H_+$ ,  $\gamma_-$  auf  $H_-$ . b) Periodische Librationsbahnen im Orts/Impulsdigramm. Die Bahnen  $\gamma_{\pm}, \gamma_+\gamma_-$  besitzen unterschiedlichen Verlauf an den MC-Punkten und sammeln unterschiedliche Wirkung (entspricht der Fläche) während eines Umlaufs auf.

Das weitere Vorgehen zielt auf Beantwortung der Frage hin, inwieweit das Vorgehen SF1 gerechtfertigt ist. Dazu werden Bahnperioden und klassische Wirkungen aus der adiabatischen Theorie der der diabatischen gegenübergestellt.

$$\begin{aligned}
 T_{i,+}^{adia}(e) &= \frac{2}{\omega_i} \arccos\left(\frac{1-2e}{1+2e}\right) & T_{\pm}^{dia} &= \frac{2\pi}{\omega_i} \\
 T_{i,-}^{adia}(e) &= 2\left(\frac{2\pi}{\omega_i} - \frac{1}{2}T_{i,+}(e)\right) & & \\
 s_{i,\pm}^{adia}(e) &= \left(e + \frac{1}{2}\right) T_{\pm}^{adia}(e) - \frac{2\sqrt{2e}}{\omega_i} & s_{i,\pm}^{dia}(e) &= \left(e + \frac{1}{2}\right) T_{i,\pm}^{dia}
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

Im adiabatischen Fall kommt es zur Aufspaltung aller Terme, während der diabatische exakt deren Mittelwert entspricht. Abb. 6.5 b) visualisiert die verschiedenen

Wirkungen entsprechend der eingeschlossenen Fläche. Mit Ausnahme des Terms  $1/2$  in der Wirkung entspricht  $s_{\pm}^{dia}(e)$  dem Resultat des Oszillators ohne LS-Kopplung. Im Grenzfall  $e \rightarrow \infty$  stimmen diabatische mit den adiabatischen Resultaten überein. Abb. 6.2 zeigt im oberen Bereich den Verlauf der relevanten Größe  $s(e)/e$ . Gemäß der in [Fri 93] gemachten Erfahrung entsprechen die dominierenden Peaks gerade den diabatischen Bahnen. Die leichte Rechtsverschiebung wird mit Ausdruck (6.16) erklärt.

Anders als in [Fri 93] treten jedoch **zusätzliche Peaks** genau an Stellen einer adiabatischen Theorie auf. Zwei der Peaks könnten durch die bifurkierten Bahnen erklärt werden, die bei  $e = 30$  immer noch nahe der adiabatischen Librationsbahn liegen. Es existieren jedoch keine Bahnen als mögliche Erklärung der verbleibenden Nebenmaxima. Vermutlich lässt sich das MC-Problem nicht in Beiträge einzelner Bahnen separieren und kann nur in einer gesamtheitlichen Theorie, die auch noch Bifurkationen enthält, gelöst werden.

In einem einfachen Modell muss allerdings Regel SF1 durch SF2 ersetzt werden.

SF2	$\mathbf{C} = 0$	$\iff$	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Spinflip} \iff H_{\pm} \leftrightarrow H_{\mp} \\ \text{kein Spinflip} \iff H_{\pm} \leftrightarrow H_{\pm} \end{array} \right.$
-----	------------------	--------	--

Zur vollständigen Interpretation des Quantenresultates muss sowohl der dia- als auch der adiabatische Fall herangezogen werden. Entsprechend tritt Spinflip auf oder nicht. SF2 besagt dabei nur, dass beide Fälle auftreten, aber nichts über deren Gewichtungen.

Diese Aussage steht nicht im Widerspruch zu der in [Fri 93] gemachten Beobachtung. Diese basierten auf eine vergleichsweise geringen Auflösung, so dass die möglicherweise auch dort vorhandenen Nebenmaxima nicht zu erkennen waren.

Eine weitere Beobachtung, die SF2 unterstützt, zeigt Abb. 6.6. Erneut ist die Fouriertransformierte bei  $e = 30$  dargestellt, allerdings auf größerer Skala. Weitere Peaks treten nun entsprechend der ersten Bahnwiederholung auf. Sie sollten bei genau dem doppelten Wert des primitiven Umlaufs (vgl. Pfeilposition) liegen. Bei den Hauptpeaks trifft dies auch zu. Ganz anders ist jedoch die Situation der Nebenpeaks. Hier tritt der Peak genau zwischen dem zu erwartenden Wert und der Wiederholung des Hauptmaximum auf. Dies ist entgegen jeglicher Erfahrung, da eine periodische Bahn stets auch entsprechende erste Wiederholungen besitzt. Mit SF2 ergibt sich jedoch eine sehr einfache Erklärung: Der Wiederholungspeak entsteht als Kombination einer dia- mit einer adiabatischen Bahn,  $\gamma_{\pm}^{adia} + \gamma_{\pm}^{dia}$ . Während einer vollen Periode kommt es dabei zweimal zum Spinflip und zweimal zur Beibehaltung der Polaris-

tion. Der nicht erkennbare Peak von  $2\gamma_{\pm}^{adia}$  ist dadurch erklärbar, dass ein Spinflip am MC-Punkt mit erhöhter Wahrscheinlichkeit auftritt. Eine Bahn ohne Spinflip ist unwahrscheinlich und kann daher nicht beobachtet werden.

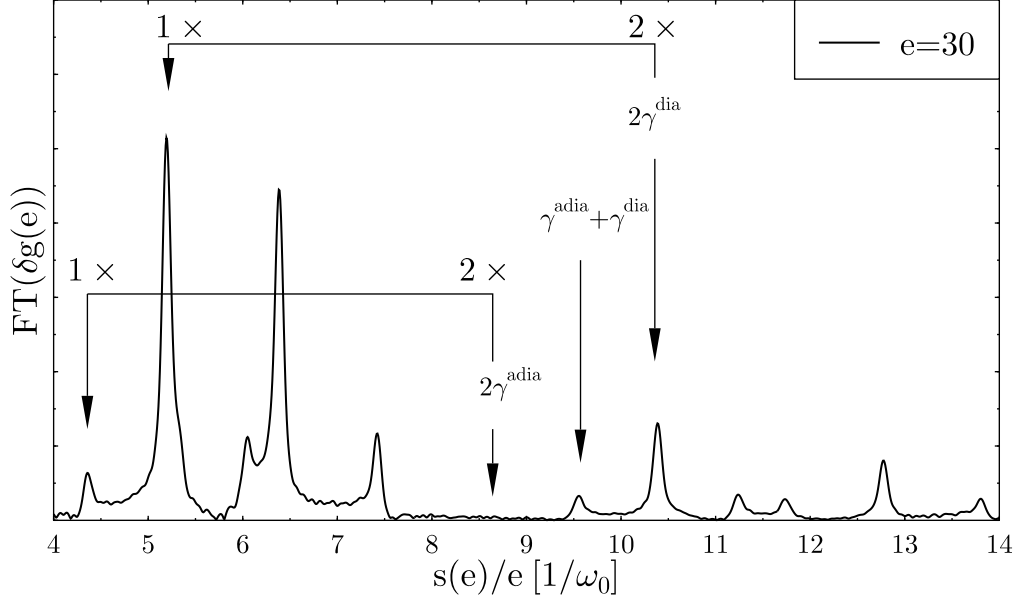


Abbildung 6.6: Verdoppelt man  $s(e)/e$  der primitiven Umläufe, so finden sich keine Fourierpeaks für die adiabatischen Bahnen. Es tritt jedoch ein Peak auf, der als Kombination von  $\gamma^{adia}$  und  $\gamma^{dia}$  interpretiert werden kann.

### 6.3.5 Parabolische Mode-Conversion

Abschließend soll ein zu System (6.7) leicht verändertes betrachtet werden.

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \underbrace{\frac{1}{2} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \omega_x^2 \hat{r}_x^2 + \omega_y^2 \hat{r}_y^2)}_{H_0} \mathbf{1} + \underbrace{\kappa (-\hat{p}_y^2 \hat{\sigma}_x + \hat{p}_x^2 \hat{\sigma}_y)}_{H_{LS}} \quad (6.17)$$

In der 'LS'-Kopplung tritt hier anders als in (6.7) der Impuls quadratisch auf. Der Term ist damit auch keine LS-Kopplung im eigentlichen Sinne, da fundamentale Symmetrieeigenschaften sich hierbei ändern. Ausdruck (6.17) dient vielmehr als mathematisches Objekt dem Studium der MC-Problematik. Zudem skaliert der Operator gemäß  $\hat{H}(\eta\hat{\mathbf{r}}, \eta\hat{\mathbf{p}}) = \eta^2 \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$  und der Übergang zu neuen Koordinaten ist überflüssig. Einer Fouriertransformierten sind sofort die Bahnperioden  $T$  abzulesen.

Abb. 6.7 zeigt eine solche bei verschiedenen Werten von  $\kappa$ . Man erkennt die mit  $\kappa$  zunehmende Aufspaltung der Perioden. Die meisten Peaks gruppieren sich dabei um die Werte  $2\pi/\omega_i$   $i = x, y$ , was den Perioden des Oszillators ohne  $H_{LS}$  entspricht. Die Frequenzen wurden hier im Verhältnis  $\omega_x : \omega_y = 1 : 1.57$  gewählt.

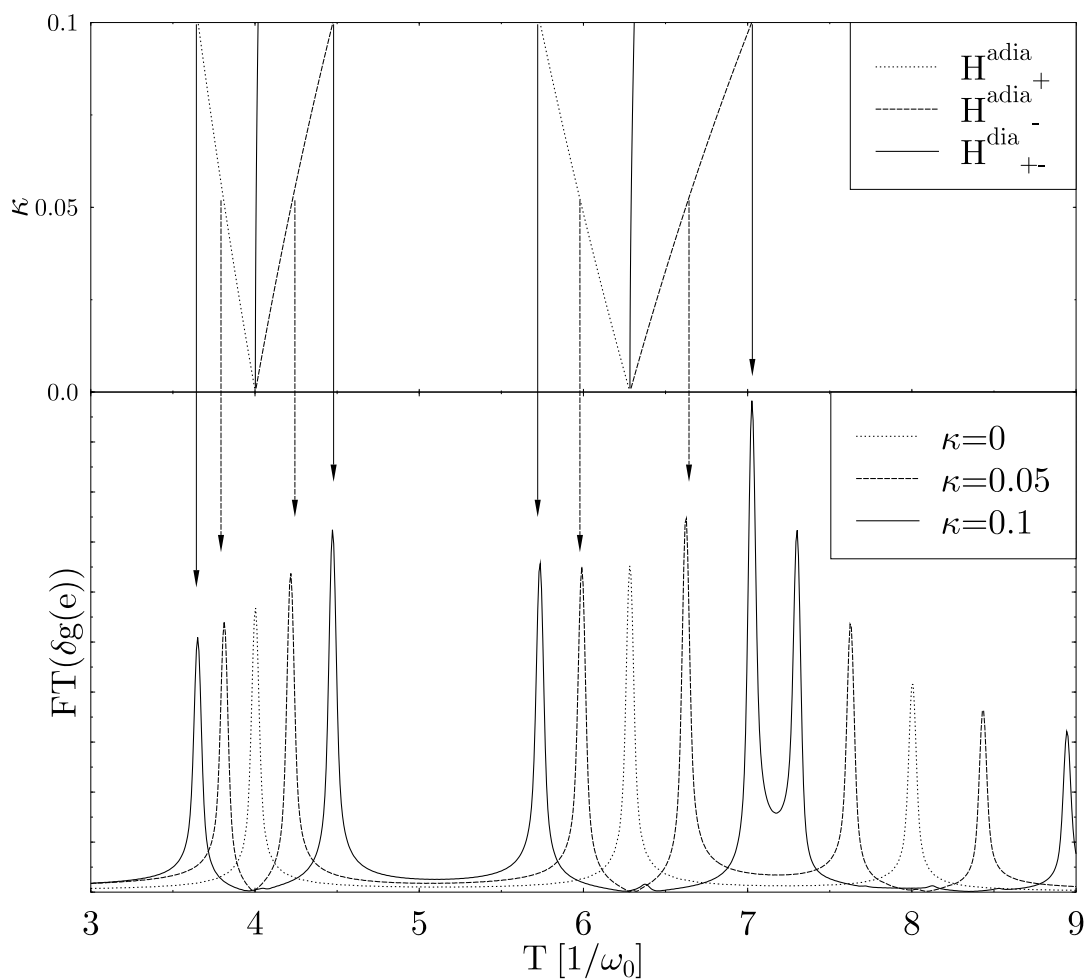


Abbildung 6.7: *Unterer Bereich: Fouriertransformation des Systems (6.17). Das Frequenzverhältnis beträgt  $\omega_x : \omega_y = 1 : 1.57$ ,  $\kappa$  wurde variiert. Oberer Bereich: Verlauf von  $T(\kappa)$ . Zugrundegelegt wurden die adiabatische Hamiltonfunktion  $H_{\pm}^{adia}$  bzw. die diabatischen  $H_{-}^{dia}$  und  $H_{+}^{dia}$ . (Dämpfung  $\rho = 0.2\hbar\omega_0$ )*

Anders als im vorherigen Fall ergeben sich die veränderten Perioden schon in der WCL-Näherung. Auswertung der Dgl. entlang den  $k$ -fachen Wiederholungen der

Librationsbahnen  $\gamma_i$ ,  $i = x, y$  ergibt folgenden nichttrivialen Modulationsfaktor

$$\text{tr } d(kT_{\gamma_i}) = 2 \cos \left( \frac{2\pi k E \kappa}{\hbar \omega_i} \right) \quad i = x, y \quad (6.18)$$

Dieser kann per Additionstheorem auf den  $\cos$ -Term in der Spurformel übertragen werden. Man erhält dabei:

$$\delta g(E) = \sum_{\pm, k=1}^{\infty} (-1)^k \left[ \frac{\sin \left( k \frac{2\pi E}{\hbar \omega_x} (1 \pm \kappa) \right)}{\hbar \omega_x \sin \left( k \pi \frac{\omega_y}{\omega_x} \right)} + \frac{\sin \left( k \frac{2\pi E}{\hbar \omega_y} (1 \pm \kappa) \right)}{\hbar \omega_y \sin \left( k \pi \frac{\omega_x}{\omega_y} \right)} \right] \quad (6.19)$$

Das MC Problem tritt im Rahmen des WCL nicht auf. Untersucht man das System dagegen im SCL-Formalismus, so lauten die Hamiltonfunktionen

$$H_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \pm \kappa \sqrt{p_x^4 + p_y^4}. \quad (6.20)$$

Die Flächen konstanter Energie bilden zwei Paraboloiden, die sich am MC-Punkt berühren. Es tritt **parabolische MC** auf, im Gegensatz zu der im vorherigen Abschnitt beobachteten diabolischen, vgl. Abb. 6.5. Die Folgen dieses unterschiedlichen Verhaltens sollen nun weiter untersucht werden. Analog zu (6.7) besitzt System (6.17) die Pendelbahnen  $\gamma_i$ ,  $i = x, y$  als kurze periodische Lösungen. Sie werden mit ähnlichen Bewegungsgleichungen beschrieben. Im Gegensatz zu dort führt aber bereits der adiabatische Ausdruck zu glatten Lösungen.

$$\begin{aligned} \dot{r}_i &= p_i \pm 2\kappa p_i, \\ \dot{p}_i &= -\omega_i^2 r_i, \end{aligned} \quad i = x, y. \quad (6.21)$$

Es ergeben sich vier primitive Bahnperioden

$$T_{i,\pm}^{adia} = \frac{2\pi}{\omega_{\pm,i}}, \quad \text{mit } \omega_{\pm,i} = \omega_i \sqrt{1 \pm 2\kappa} \quad i = x, y. \quad (6.22)$$

Wegen  $(1 \pm 2\kappa)^{-1/2} \approx 1 \pm \kappa$  kann für kleine Werte  $\kappa$  dieses Ergebnis mit der modifizierten Wirkung in (6.19) identifiziert werden. Löst man dagegen das entsprechende diabatische System, so ergeben sich insgesamt nur zwei Perioden. Sie liegen nahe den beiden ursprünglichen.

$$T_i^{dia} = \frac{\pi}{\omega_i} \left[ (1 + 2\kappa)^{-1/2} + (1 - 2\kappa)^{1/2} \right] = \frac{2\pi}{\omega_i} + \mathcal{O}(\kappa^2), \quad i = x, y \quad (6.23)$$

Im Fourierspektrum ist dieser Peak an der ursprünglichen Periode praktisch nicht sichtbar. Das bedeutet, dass das System (6.17) keine Spinflip zeigt. Inwieweit dies mit dem nichttrivialen Resultat der WCL-Methode und der Eigenschaft des MC-Punktes zusammenhängt, kann allerdings nicht erklärt werden. Dies lässt sich wohl erst in der noch ausstehenden vereinheitlichten Theorie erkennen.



# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Gegenstand dieser Arbeit sind Theorien, die die Einbindung einer LS-Kopplung in semiklassische Spurformeln ermöglichen. Es wurde der Frage nachgegangen, inwieweit die durch die Kopplung veränderte quantenmechanische Zustandsdichte mit klassisch zugänglichen Größen interpretiert werden kann. Quantenmechanisch tritt der Spin in Form einer mehrkomponentigen Wellengleichung auf. Dieser Umstand verhindert die Anwendung der Gutzwillerschen Spurformel in ihrer ursprünglichen Form. Die Einbindung des Spins kann auf verschiedene Arten geschehen. Diese Arbeit stützt sich dabei auf Theorien, bei der die quantenmechanische Natur des Spins gewahrt bleibt. Es existieren zwei Grenzwerte einer Ankopplung, nämlich der eines kleinen Spins mit schwacher Kopplung (WCL) bzw. der eines großen mit starker (SCL). Im ersten Fall bleibt die klassische Dynamik unverändert. In der Spurformel tritt der Spin lediglich in Form eines zusätzlichen Modulationsfaktors auf. Der zweite Fall führt zu einer modifizierten Dynamik. Die Beschreibung des quantenmechanischen Systems erfolgt durch zwei mit den beiden Spinpolarisationen zu identifizierenden Hamiltonfunktionen.

Beide Methoden wurden anhand verschiedener Beispiele illustriert und wo möglich auch untereinander verglichen. Die Systeme entstammen dabei jenen Feldern der Physik, wo einerseits semiklassische Näherungen gerechtfertigt und praktiziert werden, andererseits systembedingt ein starker LS-Beitrag auftritt.

In Kapitel 4 wurden hierzu verschiedene 2-dim. Systeme aus dem Bereich der Halbleiterphysik untersucht. Die LS-Kopplung tritt hier in Form des Rashba-Terms auf. In meist analytischer Weise konnte dabei das exakte Ergebnis der QM mit denen der WCL bzw. SCL-Näherung verglichen werden.

Kapitel 5 behandelt ausführlich den allgemeinen 3-dim. Oszillator mit LS-Kopplung. Dieses Modell tritt u.A. in der Kernphysik auf, ist jedoch auch als harmonische Näherung eines beliebigen Potentials von genereller Bedeutung. Hier muss die Beschreibung in starker Kopplung erfolgen. Trotz der komplizierten Dynamik ergibt sich schließlich das Ergebnis, dass in vielen interessanten Fällen die Zustandsdichte

in Form von wenigen Bahnen interpretiert werden kann. Desweiteren wurden für die integralen und leicht deformierten Fälle analytische Spurformel angegeben.

Bei der semiklassischen Behandlung des Spins treten neben den üblichen Problemen der POT, wie Bifurkationen oder Symmetriebrechungen, ganz neue auf: Die WCL-Näherung ist zwar eine in allen Situationen gültige Theorie. Sie kann jedoch nicht immer die aufgrund der LS-Kopplung veränderte quantenmechanische Zustandsdichte beschreiben. Die empfindlichere SCL-Methode bricht dagegen zusammen, wenn das MC-Problem auftritt. Diese tiefliegende Problematik konnte bislang noch nicht befriedigend gelöst werden. In dieser Arbeit wurde hierzu zum einen gezeigt, dass das Problem in bestimmten Situationen tatsächlich auftritt. Zudem ergibt sich aus Analyse der quantenmechanischen Ergebnisse klassische Signaturen, die auf einen Spinflip hindeuten.

Auch ohne vollständige Lösung des MC-Problems sind durchaus weitere Anwendungen denkbar. Systeme mit stark polarisierten Phasenräumen können auch in der SCL-Näherung unter Ignorieren der MC beschrieben werden. Die in dieser Arbeit benutzten einfachen Modelle könnten zu realistischeren ausgebaut werden, z.B. das Ersetzen des 3-dim. Oszillatorpotentials aus Kapitel 6 durch das häufig benutzte Woods-Saxon Potential. Weitere Möglichkeiten sind Betrachtungen anderer Observablen als die der Energie. Im Hinblick auf Spintransport sind vor allem Leitwerte interessant.

Die untersuchte LS-Kopplung ist ein spezieller Fall einer generellen Kopplung von mehrkomponentigen Wellengleichungen. Alle wesentlichen Mechanismen aber auch Probleme, die sich dabei stellen, konnten bereits hier erkannt werden. Das Übertragen auf andere Wechselwirkungen sollte daher ohne weiteres möglich sein. Gekoppelte Gleichungen treten z.B. bei der elektromagnetischen Wellenausbreitung im Plasma oder der von elastischen Wellen in Festkörpern auf. In der Quantenoptik beschreiben ähnliche Systeme das Wechselwirken eines Mehrniveau-Systems mit Licht (Jaynes-Cummings Modell).

Zur umfassenden Lösung ist aber das Verständnis der MC unbedingt notwendig. Auch ist die Interpolation zwischen der WCL- und SCL-Näherung noch nicht komplett verstanden. Möglicherweise kann dies in der alternativen Beschreibung des Spins mit kohärenten Zuständen erfolgen. Dieser, in der vorliegenden Arbeit nicht näher untersuchte Zugang hat prinzipiell den Nachteil, dass die Phasenraumdimension um zwei vergrößert werden muss. Zudem ist noch nicht bekannt, inwieweit die Behandlung des Spin als kontinuierliche und damit dem Limes einer großen Spinquantenzahl entsprechenden Größe, zu Fehlern bei der Beschreibung eines Spin-1/2 Teilchens führt. Umgekehrt ergeben sich jedoch keine Singularitäten bei den klassischen Bewegungsgleichungen, wie sie sonst im Falle der MC auftreten. Weitere Untersuchungen zu diesem Thema sind bereits im Gang.

# Anhang A

## Bezeichnungen

$\alpha$	Deformationsparameter 1 beim 3-dim. Oszillator	53
$\mathbf{A}$	Vektorpotential	24
$\mathcal{A}$	Stabilitätsamplitude	19
$\beta$	Deformationsparameter 2 beim 3-dim. Oszillator	53
$\mathbf{C}$	fiktives Magnetfeld im LS-Term	23
$\gamma = \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$	Phasenraumkoordinate	9
$\gamma$	Periodischen Bahn	10
$\gamma(t)$	Bahn in der Phasenraumparametrisierung	9
$\Gamma$	Periodische Bahnfamilie	21
$e$	skalierte Energie	22
$E$	Energie	10
$\Lambda = \lambda + \lambda^{-1}$	Stabilitätswert	13
$\kappa$	LS-Kopplungsparameter	23
$\bar{\kappa}$	von $\hbar$ freier LS-Kopplungsparameter	24
$\tilde{\kappa} := \langle v'_z \rangle \kappa$	LS-Kopplungsparameter	37
LS-Kopplung	Spin-Bahn Kopplung	6
<b>WCL</b>	Fall schwacher Kopplung	24
<b>WCL1, WCL2</b>	Regeln zur Spurformel auswertung im Falle des WCL	32
MC	Mode-Conversion	29
$M, \tilde{M}$	Monodromiematrix, Stabilitätsmatrix	12
$\mathbf{p}$	Impulskoordinate mit Komponenten $p_k$	9
PE	Poincaré-Ebene	105
$\mathbf{r}$	Konfigurationskoordinate mit Komponenten $r_k$	9
$\rho$	Dämpfungskonstante	20

$s$	skalierte klassische Wirkung	23
$S$	Klassische Wirkung	11
$\sigma$	Maslov-Index	19
$\sum_{\pm} a_{\pm} := a_{+} + a_{-}$	Summation über $\pm$	39
SF1, SF2	Regeln zum Spinflip	87
SCL	Fall starker Kopplung	24
SCL1,SCL2	Regeln zur Spurformelauswertung im Falle des SCL	29

## Anhang B

# Der Maslov-Index im anisotropen 3-dim. harmonischen Oszillator

Es soll für den 3-dim. anisotropen harmonischen Oszillator eine Spurformel analytisch bestimmt werden. Die Herleitung kann dabei weitgehend der des 2-dim. Falls folgen, wie sie in [Bra 97] zu finden ist. Für die Hamiltonfunktion

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_{i=x,y,z} \frac{1}{2} p_i^2 + \frac{\omega_i^2}{2} r_i^2 \quad (\text{B.1})$$

sei angenommen, dass alle Paare  $\omega_i : \omega_j \neq \mathbb{Q}$ ,  $i, j = x, y, z$  erfüllen. Wegen des irrationalen Frequenzverhältnisses existieren lediglich drei periodische Bahnen (und deren Wiederholungen) entlang den Achsen. Die Stabilitätsamplitude  $\mathcal{A}_{\gamma_i}$ , die klassische Wirkung  $S_{\gamma_i}$  und auch ein Bestandteil ( $\mu$ ) des Maslov-Index, können analog zum 2-dim. Fall bestimmt werden, vgl. [Bra 97]. Für den  $l$ -fachen Umlauf der Bahn  $\gamma_i$ ,  $i = x, y, z$  lauten diese:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\gamma_i} &= [2\omega_i |\sin(k\pi\omega_j/\omega_i) \sin(l\pi\omega_k/\omega_i)|]^{-1} \\ S_{\gamma_i}(E) &= \frac{2\pi l}{\omega_i} E && i, j, k = x, y, z \text{ paarw. versch.} \\ \mu_{\gamma_i}(l) &= 2l + [2l\omega_j/\omega_i] + [2l\omega_k/\omega_i] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Hier bezeichnet  $[a]$  den ganzzahligen Anteil von  $a$ .

Der noch ausstehende Index  $\nu$  kann dagegen nicht ohne weiteres aus [Bra 97] übernommen werden. Das Vorgehen folgt nun dem in Anhang E beschriebenen Verfahren und benutzt das Koordinatensystem aus Abschnitt 2.4.

$\nu$  bestimmt sich aus der Anzahl der negativen Eigenwerte der Matrix  $W = B^{-1}A + DB^{-1} - B^{-1} - B^{*-1}$  wobei  $A \dots D$  die Blockmatrizen der Stabilitätsmatrix sind.

Diese erhält man nun wenn man die Phasenraumkurve  $\gamma_i(t)$  in den Matrizen  $\mathcal{X}$  und Transformationsmatrix  $T$  einsetzt und (2.14) auswertet. Es folgt:

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & * & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega_j t) & 0 & 0 & \sin(\omega_j t)/\omega_j & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\omega_z t) & 0 & 0 & \sin(\omega_k t)/\omega_k \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\omega_j \sin(\omega_j t) & 0 & 0 & \cos(\omega_j t) & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_k \sin(\omega_k t) & 0 & 0 & \cos(\omega_k t) \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Für die Anzahl der neg. Eigenwerte ergibt sich nach kurzer Rechnung:

$$\nu_i(l) = \frac{1}{2}(\text{sign}(\tan(l\pi\omega_j/\omega_i)) + \text{sign}(\tan(l\pi\omega_k/\omega_i)) + 2) \quad (\text{B.4})$$

$$= \frac{1}{2} [(-1)^{[2l\omega_j/\omega_i]} + (-1)^{[2l\omega_k/\omega_i]} + 2] \quad (\text{B.5})$$

und wegen  $[2a] + \frac{1}{2}((-1)^{2a} + 1) = 2[a] + 1$  lautet der Maslov-Index:

$$\sigma_i(l) = 2l + 2[l\omega_j/\omega_i] + 2[l\omega_k/\omega_i] + 2 \quad (\text{B.6})$$

Damit ergibt sich die korrekte Spurformel aus [Bra 95].

$$\begin{aligned} \delta g(E) = & \frac{1}{2\hbar\omega_x} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{\sin(l\pi\omega_y/\omega_x) \sin(l\pi\omega_z/\omega_x)} \cos\left(l \frac{2\pi E}{\hbar\omega_x}\right) \\ & + [\text{cycl.}] \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

# Anhang C

## Lösung von Dgl. (4.22)

Die Bestimmung des Modulationsfaktors gemäß der SCL-Methode erfolgt durch das Lösen der Dgl. (3.54). Es handelt sich hierbei um ein lineares Dgl. System 1. Ordnung mit zeitabhängiger Koeffizientenmatrix  $D(t)$ .

$$\dot{d}(t) = D(t)d(t) \qquad d(0) = Id_{2 \times 2} \qquad (C.1)$$

Eine formale Lösung wird mit  $d(t) = Id_{2 \times 2} \mathcal{T} e^{\int_0^t A(t') dt'}$  gegeben, wobei  $\mathcal{T}$  der Zeitordnungsoperator ist. Dieser Ausdruck kann in der Praxis aber meist nicht ausgewertet werden. Allgemeine Kriterien, die zu geschlossenen Lösungsausdrücke führen sowie konstruktive Verfahren zu deren Gewinnung finden sich in [Eru 66].

Im folgenden wird der in Kapitel 4 benötigte Fall

$$D(t) = i \begin{pmatrix} A & Be^{i\omega t} \\ Be^{-i\omega t} & -A \end{pmatrix}, \qquad A, B \in \mathbb{R}, \qquad (C.2)$$

näher diskutiert. Dieser lässt sich lösen, indem man zunächst durch Auflösen und Ersetzung der einzelnen Komponenten das System in eine Dgl. 2. Ordnung transformiert. Dabei stellt es sich heraus, dass die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten wegfällt. Das neue zeitunabhängige Problem kann elementar gelöst werden womit auch eine Lösung des ursprünglichen Systems angegeben werden kann. Diese lautet mit entsprechender Anfangsbedingung:

$$d(t) = \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}i\omega t} \left( \cos \frac{\tilde{\omega}t}{2} - i \frac{\omega - 2A}{\tilde{\omega}} \sin \frac{\tilde{\omega}t}{2} \right) & i \frac{2B}{\tilde{\omega}} e^{\frac{1}{2}i\omega t} \sin \frac{\tilde{\omega}t}{2} \\ i \frac{2B}{\tilde{\omega}} e^{-\frac{1}{2}i\omega t} \sin \frac{\tilde{\omega}t}{2} & e^{-\frac{1}{2}i\omega t} \left( \cos \frac{\tilde{\omega}t}{2} + i \frac{\omega - 2A}{\tilde{\omega}} \sin \frac{\tilde{\omega}t}{2} \right) \end{pmatrix} \qquad (C.3)$$

mit der neuen Frequenz  $\tilde{\omega} = \omega \sqrt{1 + \frac{4}{\omega^2}(A^2 + B^2 - A\omega)}$ .

Der Modulationsfaktor ergibt sich durch Spurbildung

$$\text{tr}(d(t)) = 2 \cos \left( \frac{\omega t}{2} \right) \cos \left( \frac{\tilde{\omega}t}{2} \right) + 2 \frac{\omega - 2A}{\tilde{\omega}} \sin \left( \frac{\omega t}{2} \right) \sin \left( \frac{\tilde{\omega}t}{2} \right), \qquad (C.4)$$

und besitzt folgende Werte bei den Perioden  $T_\gamma = \frac{2\pi k}{\omega}$

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}(d(T_\gamma)) &= 2(-1)^k \cos \left( \pi k \sqrt{1 + \frac{4}{\omega^2}(A^2 + B^2 - A\omega)} \right) \\ &\sim 2(-1)^k \cos \left( \pi k \sqrt{1 - \frac{4A}{\omega}} \right)\end{aligned}\tag{C.5}$$

Für die letzte Umformung wurde  $A/\omega \ll 1, B/\omega \ll 1$  angenommen.

# Anhang D

## Der Modulationsfaktors des deformierten Oszillators

In diesem Abschnitt finden sich Details zur Bestimmung des Modulationsfaktors des leicht aus der sphärischen Symmetrie gestörten harmonischen Oszillators mit LS-Kopplung. Es werden die im Abschnitt 5.4.1 festgelegten Bezeichnungen übernommen.

$$H_{\pm} = H_{\pm}^{(0)} + H_{\pm}^{(1)} \quad (\text{D.1})$$

mit der kompletten Hamiltonfunktion

$$H_{\pm} = \left( \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) \right) \pm \kappa |\mathbf{C}|, \quad (\text{D.2})$$
$$V(\mathbf{r}) = \omega_0^2/2 (r_x^2 + \alpha^2 r_y^2 + \beta^2 \alpha^2 r_z^2), \quad \mathbf{C} = \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}$$

und dem ungestörten Problem

$$H_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{2} (p^2 + \omega_0^2 r^2) \pm \kappa \omega_0^2 |\mathbf{L}|, \quad (\text{D.3})$$
$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}.$$

Da die  $H_{\pm}^{(1)}$  als Differenz von  $H_{\pm}$  und  $H_{\pm}^{(0)}$  nicht analytisch weiterverarbeitet werden kann, wird dessen Beitrag in führender Ordnung von  $\alpha$  betrachtet. Es ergibt sich:

$$H_{\pm}^{(1)} = \left\{ \omega_0^2 (r_y^2 + \beta^2 r_z^2) + |\mathbf{C}|^{-1} [2\kappa(r_y^2 + \beta r_z^2)p_x^2 - (r_y p_y + r_z p_z)r_x p_x + (r_y p_z - r_z p_y)(r_y p_z - \beta r_z p_y)] \right\} \alpha + \mathcal{O}(\alpha^2) \quad (\text{D.4})$$

Es existieren zwei Bahnfamilien  $\Gamma_{\pm}$  und deren  $k$ -fache Wiederholungen mit den Perioden  $T_{\pm}k$ . Eine Parametrisierung kann nun folgendermaßen erfolgen:

$$\gamma_0^{\pm}(t) = \sqrt{\frac{E}{\omega_{\pm}}} \begin{pmatrix} \cos(\omega_{\pm}t) \\ \sin(\omega_{\pm}t) \\ 0 \\ -\omega_0 \sin(\omega_{\pm}t) \\ \omega_0 \cos(\omega_{\pm}t) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.5})$$

$$\gamma^{\pm}(\theta, \phi, t) = D_y(\theta) D_z(\phi) \gamma_0^{\pm}(t) \quad (\text{D.6})$$

mit den Abkürzungen  $\omega_{\pm} = \omega_0(1 \pm \kappa\omega_0)$ .  $\gamma_0^{\pm}(t)$  sind kreisförmige Bahnen in der  $xy$ -Ebene. Alle anderen Familienmitglieder ergeben sich durch Drehungen mit den Phasenraumdrehmatrizen  $D_y$  und  $D_z$

$$D_{y,z} = \begin{pmatrix} \tilde{D}_{y,z} & 0 \\ 0 & \tilde{D}_{y,z} \end{pmatrix} \quad (\text{D.7})$$

$$\tilde{D}_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad \tilde{D}_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{D.8})$$

Sämtliche Bahnen inklusive deren unterschiedlichen Orientierungen werden durch die auf der 2-Sphäre liegenden Polarwinkel  $(\theta, \phi)$  gegeben. Die Wirkungsänderung (3.11) ergibt in dieser Parametrisierung,

$$\begin{aligned} \Delta S_{\theta,\phi}(\alpha, E) &= -\frac{\alpha\delta_{\pm}}{2} [3 + 2\beta - (2\beta - 1) \cos 2\theta - \cos 2\phi - \cos \phi \cos \theta] E \\ \text{mit } \delta_{\pm} &= -\frac{\pi(1 \pm 2\kappa\omega_0)}{2\omega_0(1 \pm \kappa\omega_0)^2} \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Zur Bestimmung des Modulationsfaktor integriert man über die Einheitskugel. Die  $\phi$ -Integration kann dabei analytisch ausgeführt werden.

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\Gamma_{\pm}}(\alpha, E) &= \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\phi e^{i\Delta S_{\theta,\phi}(\alpha, E)} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta e^{i\delta_{\pm}\alpha E(2+\beta+(\beta-2)\cos^2\theta)} J_0(\delta_{\pm}\beta\alpha \sin^2\theta E) \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Für zwei Arten von Deformation kann schließlich die verbleibende Integration ebenfalls durchgeführt werden.

- Axiale Deformation ( $\beta = 0$ )

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\Gamma_{\pm}}(\alpha, E) &= -\frac{1 \pm \kappa\omega_0}{2} \sqrt{\frac{\omega_0}{2\alpha(1 \pm 2\kappa\omega_0)}} e^{i(2\alpha\delta_{\pm}E + \pi/4)} \\ &\quad \times \operatorname{Erfi} \left( \frac{e^{i\pi/2}}{1 \pm \kappa\omega_0} \sqrt{\frac{\pi\alpha(1 \pm 2\kappa\omega_0)E}{\omega_0}} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

- $1 : \alpha : 2\alpha$ -Deformation ( $\beta = 2$ )

$$\mathcal{M}_{\Gamma_{\pm}}(\alpha, E) = \frac{e^{i4\delta_{\pm}\alpha E}}{2\sqrt{2}} [J_{-1/4}(-\delta_{\pm}\alpha E) + J_{1/4}(-\delta_{\pm}\alpha E)] \quad (\text{D.12})$$

Da die Modulationsfaktoren im Allgemeinen auch einen Imaginärteil enthalten, muss die Multiplikation mit der ins Komplexe erweiterte Spurformel durchgeführt werden und anschließend der Realteil genommen werden, vgl. auch [Bra 98]. Es folgt eine Spurformel für den leicht deformierten harmonischen Oszillator mit LS-Kopplung:

$$\delta g(E) = \operatorname{Re} \left\{ \sum_{\pm} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2E\mathcal{M}_{\Gamma_{\pm}}(\alpha, E)}{(\hbar\omega_0)^2(1 \pm \kappa\omega_0)^2 \sin\left(\frac{2k\pi}{1 \pm \kappa\omega_0}\right)} e^{i(T_{\pm}(k)E/\hbar - \pi/2\sigma_{\pm}(k))} \right\} \quad (\text{D.13})$$



# Anhang E

## Numerische Auswertung der Spurformel

Dieser Abschnitt fasst diejenigen Schritte zusammen, die bei einer numerischen Auswertung der Gutzwillerschen Spurformel notwendig sind. Das Vorgehen dient dem Bereitstellen eines anwendbaren Rezeptes, ohne jedoch dieses näher theoretisch zu rechtfertigen. Hier sei auf entsprechende Quellen verwiesen. Es werde stets eine Hamiltonfunktion  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  mit **weichem** Potentialverlauf vorausgesetzt. Ausgenommen sind insbesondere Billardpotentiale. Die Auswertung der Spurformel gliedert sich in zwei Hauptschritte:

- Auffinden einer periodischen Bahn.
- Bestimmung der Wirkung, Stabilitätsamplitude und des Maslov-Index.

Sie werden einzeln vorgestellt.

### E.1 Bahnensuche

Das Auffinden von periodischen Bahnen ist äquivalent zu dem Problem der Fixpunktsuche der Poincaré-Abbildung  $f$ . Diese propagiert bekanntlich einen auf der Poincaré-Ebene (PE) liegenden Vektor  $\gamma_0$  gemäß den klassischen Bewegungsgleichungen solange, bis der Punkt  $f_0(\gamma_0)$  wiederum auf PE zu liegen kommt. Der Index 0 bei  $f$  soll andeuten, dass die Propagationszeit vom Vektor  $\gamma_0$  abhängt. In der Regel gilt für zwei verschiedene Punkte  $\gamma_1 \neq \gamma_0$  nicht notwendig  $f_0(\gamma_1) \in \text{PE}$ . Zwischen zwei im Phasenraum benachbarten Punkten  $\gamma_0, \gamma_1$  gilt in linearer Näherung folgender Zusammenhang mit der Monodromiematrix  $M$ .

$$M(\gamma_1 - \gamma_0) \approx f_0(\gamma_1) - f_0(\gamma_0) \tag{E.1}$$

In der Praxis bestimmt sich  $M$  dadurch, dass zusätzlich zu den  $2D$  Komponenten der Bewegungsgleichung noch  $D \times D$  Komponenten, entsprechend Gleichung (2.8) mitintegriert werden.

Für einführende Überlegungen sei zunächst, entgegen obiger Feststellung,

$$f_0(\gamma) \in \text{PE} \quad (\text{E.2})$$

angenommen. Die Idee besteht nun darin,  $\gamma_1$  so zu wählen, dass in (E.1)  $\gamma_1 = f_0(\gamma_1)$  gilt. Dies führt mit (E.1) zu

$$\gamma_1 = \gamma_0 + (M - \mathbb{1})^{-1} (\gamma_0 - f(\gamma_0)). \quad (\text{E.3})$$

Wegen der Näherung in (E.1) kann man nicht erwarten, dass  $\gamma_1$  sofort ein Fixpunkt ist. Es kommt in der Regel aber zur raschen Konvergenz.

Wegen der Nichtgültigkeit von (E.2) sind jedoch noch Modifikationen notwendig. Man erkennt bereits an (E.3), dass die beiden trivialen Eigenwerte, im Falle einer periodischen Bahn, die Inversion von  $M - \mathbb{1}$  unmöglich machen. Eine Möglichkeit besteht nun darin, dass ein der Bahn folgendes Koordinatensystem benutzt wird, wie es im Falle  $D = 2$  in [Eck91] zu finden ist. Die Monodromiematrix wird dabei so geändert, dass die zur PE gehörigen Koordinaten abseparieren. Eine Verallgemeinerung auf den 3-dim. Fall erfolgt dazu in Kapitel 2. Die dafür benötigten Transformationen sind allerdings sehr aufwendig.

Alternativ kann obiges Problem aber auch folgendermaßen umgangen werden. Mittels Einführung zweier zusätzlicher Komponenten wird System (E.3) zu einem nicht-singulären gemacht. Dieses lautet:

$$\begin{pmatrix} \mathbb{1} - M & \mathbf{v}(\gamma_0) & H'(\gamma_0) \\ \mathbf{a}^\dagger & 0 & 0 \\ (H'(\gamma_0))^\dagger & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 - \gamma_0 \\ \delta t \\ \delta E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\gamma_0) - \gamma_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.4})$$

$H' = \partial H / \partial \gamma$  bezeichnet die Ableitung der Hamiltonfunktion, sowie  $\mathbf{v} = X_H(\gamma_0) = \dot{\gamma}_0$  den Fluss. Der Vektor  $\mathbf{a}$  ist irgendein Normalenvektor der PE. Die erste Zeile der Matrix entspricht dabei im wesentlichen Gleichung (E.3). Es ergeben sich jedoch noch Korrekturen, die dafür sorgen, dass  $\gamma_1$  auf der richtigen Energieschale und PE verbleibt. Durch iteratives Auflösen dieses  $2D + 2$  Gleichungssystems kann ein Fixpunkt bestimmt werden. Probleme treten nur dann auf, wenn zusätzliche primitive Eigenwerte in der Monodromiematrix auftreten, z.B. bei Bifurkationen oder dem Vorhandensein kontinuierlicher Symmetrien.

## E.2 Wirkung, Stabilitätsamplitude und Maslov-Index

Bei der Fixpunktsuche wird neben der Bahn auch die Monodromiematrix  $M$  bestimmt. Damit ergeben sich auch sofort die Wirkung  $S = \int \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}$  und Stabilitätsamplitude. Letztere folgt aus (3.5), da neben den Eigenvektoren von  $M$  auch die Periode  $T$  bekannt ist.

Etwas komplizierter gestaltet sich die Bestimmung des Maslov-Index. Für  $D = 2$  Systeme gibt es eine geometrische Interpretation in Form einer Windungszahl [Cre 90],[Eck 91]. Desweiteren gibt es gewisse Vereinfachungen bei instabilen periodischen Bahnen, wo die dabei auftretende (in)stabile Mannigfaltigkeit in Verbindung mit dem darauf definierten Index gebracht werden kann [Rob 91],[Rob 92].

Das folgende Verfahren ist dagegen auch für stabile Bahnen gültig. Es wird ausführlich im Anhang von [Cre 90] beschrieben. Der Maslov-Index setzt sich aus zwei Beiträgen zusammen,

$$\sigma = \mu + \nu. \tag{E.5}$$

Sie werden einzeln bestimmt.

### E.2.1 Bestimmung von $\mu$

Der Index  $\mu$  hängt damit zusammen, dass bei Projektion der Trajektorie  $\gamma(t)$  in den Konfigurationsraum Kaustiken entstehen können. Läuft die Bahn über eine solche, so kommt es zu einer ganzzahligen Änderung von  $\mu$ . Bei der Herleitung der Spurformel tritt  $\mu$  als Folge von bestimmten Sattelpunktsnäherungen auf.

Zur konkreten Auswertung werden  $D$  Vektoren benötigt:

$$X_H(\gamma_0), \quad \mathbf{e}_1, \quad \dots, \quad \mathbf{e}_{D-1} \tag{E.6}$$

Ersterer beschreibt den Fluss der Hamiltonfunktion, während die restlichen  $\mathbf{e}_i, \quad i = 1, \dots, D - 1$  so gewählt werden, dass deren einzige Nichtnullkomponenten  $\Delta p_k = 1$  und  $\Delta p_D = -\dot{r}_k/\dot{r}_N$  sind. Hierfür sei o.B.d.A.  $\dot{r}_D \neq 0$  angenommen. Die Vektoren verfolgt man zeitlich und ordnet sie wie folgt an.

$$T = (\mathbf{e}_1(t), \dots, \mathbf{e}_{D-1}(t), X_H(\gamma(t))) = \begin{pmatrix} U(t) \\ V(t) \end{pmatrix} \tag{E.7}$$

$U$  und  $V$  sind zwei  $D \times D$  Matrizen und beinhalten Orts- bzw. Impulskomponenten. Aus dem Verlauf von

$$R(t) = U(t)V^{-1}(t) \tag{E.8}$$

ergibt sich  $\mu$  gemäß der Regel.

- $\mu$  wird zunächst als Anzahl der negativen Eigenwerte von  $R(t)$  für  $t \rightarrow 0+$  festgelegt.
- Man erhöht/erniedrigt  $\mu$  entsprechend dem Signaturwechsel von  $R(t)$  bei jedem Nulldurchgang von  $U(t)$ . Die Signatur einer Matrix ist dabei die Anzahl positiver Eigenwerte minus Anzahl negativer Eigenwerte.

In einem System der Form  $H = T + V(\mathbf{r})$ , d.h. ohne impulsabhängigen Potential, vereinfacht sich dieses Vorgehen:  $\mu$  ergibt sich sofort aus der Anzahl der Nulldurchgänge von  $U(t)$ .

### E.2.2 Bestimmung von $\nu$

Der Ursprung des Index  $\nu$  ist bei der Spurbildung  $\text{tr} G(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  am Ende der Herleitung der Spurformel zu finden. Er bestimmt sich folgendermaßen. Zu den oben benutzten Impulskoordinaten  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_{D-1}$  legt man entsprechende Ortskoordinaten fest. Diese müssen nicht unbedingt die dazu konjugierten sein. Es genügt, wenn sie nur deren Raum aufspannen. Bzgl. diesen Koordinaten kann die Bestimmung der reduzierten Monodromiematrix  $\tilde{M}$  erfolgen. Man erreicht dies beispielsweise durch Projektion der Spalten von  $M$  auf die gewählten Koordinaten. Der Index  $\nu$  ergibt sich schließlich aus der Anzahl der negativen Eigenwerte von

$$W = B^{-1}A + DB - B^{-1} - B^{*-1} \quad (\text{E.9})$$

wenn  $A, B, C, D$  die einzelnen Blockmatrizen von  $\tilde{M}$  sind.

Man beachte, dass die einzelnen Indizes  $\mu, \nu$  bei einer gegebenen Bahn durchaus von der Startposition abhängen können. Ihre Summe  $\sigma$  ist jedoch eine topologische Invariante.

# Literaturverzeichnis

- [Alm 88] Ozorio de Almada, *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization*, Cam. Univ. Press (1988).
- [Arn 89] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer Verlag (N.Y.) (1989).
- [Bak 90] P. Bakshi, D. A. Baroido, K. Kempa, Phys. Rev. B **42**, 7416 (1990).
- [Bal 74] R. Balian, C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **85**, 514 (1974).
- [Ber 75] I. B. Bernstein, Phys. Fluids **19**, 320 (1975).
- [Ber 76] M. V. Berry, M. Tabor, Proc. R. Soc. Lond. **A 349**, 101 (1976).
- [Ber 77] M. V. Berry, M. Tabor, J. Phys **A 25**, 371 (1977).
- [Ber 82] J. Bergou, E. Ehlotzky, J. Phys. B **15** L185 (1982).
- [Ber 84] M. V. Berry, Phys. R. Soc. Lond. **A 392**, 45 (1984).
- [Bla 97] J. Blaschke, Diplomarbeit, (1997).
- [Bla 00] J. Blaschke, M. Brack, Europhysics-Letters **50**, 293 (2000).
- [Bog 79] R. Bogdanovic, M. S. Gopinathan, J. Phys. A **12**, 1457 (1979).
- [Boh 79] A. Bohr, B. Mottelson, *Struktur der Atomkerne* Carl Haser Verlag München Wien (1979).
- [Bol 98] J. Bolte, S. Keppeler, Phys. Rev. Let. **81**, 1987 (1998).
- [Bol 99] J. Bolte, S. Keppeler, Annals of Physics **274**, 125 (1999).
- [Bre 89] L. Brey, N. F. Johnson, B. I. Halperin, Phys. Rev. B **40**, 10647 (1989).
- [Bri 26] L. Brillouin, Compt. Rend. **183**, 24 (1926).

- [Bri 26b] L. Brillouin, J. Phys. Radium **7**, 353 (1926).
- [Bra 95] M. Brack, S. R. Jain, Phys. Rev. A **51**, 3462 (1995).
- [Bra 97] M. Brack, R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics*, (Frontiers in Physics, Vol. 96), Addison Wesley (1997).
- [Bra 97b] M. Brack, S. M. Reimann, M. Sieber, Phys. Rev. Lett. **79**, 1817 (1997).
- [Bra 97c] M. Brack, J. Blaschke, S. C. Creagh, A. G. Magner, P. Meier, S. M. Reimann, Z. Phys. D **40**, 276 (1997).
- [Bra 98] M. Brack, S. C. Creagh, J. Law, Phys. Rev. A **57**, 788 (1998).
- [Bra 99] M. Brack, P. Meier, K. Tanaka, J. Phys. A **32**, 331 (1999).
- [Bra 01] M. Brack, C. Amann, Semiclassical calculation of shell effects in deformed nuclei, *Fission Dynamics of Atomic Clusters and Nuclei*, D. Brink et al. (World Scientific, Singapore 2001).
- [Byc 84] Y. Bychkov, E. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
- [Cre 90] S. C. Creagh, J. M. Robbins, R. G. Littlejohn, Phys. Rev. A **42**, 1907 (1990).
- [Cre 91] S. C. Creagh, R. G. Littlejohn, Phys. Rev. A **44**, 836 (1991).
- [Cre 92] S. C. Creagh, R. G. Littlejohn, J. Phys. A **25**, 1643 (1992).
- [Cre 95] S. C. Creagh, Annals of Physics **248**, 60 (1995).
- [Cul 85] J. K. Cullum, R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithm for Large Symmetric Eigenvalue Computations, Vol. I,II*, Birkhäuser, Boston-Basel-Stuttgart (1985).
- [Dar 93] T. Darnhofer, U. Rössler, Phys. Rev. B **23**, 47 (1993).
- [Eck 91] B. Eckhardt, D. Wintgen, J. Phys. A **24**, 4335 (1991).
- [Ein 17] A. Einstein, Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19**, 82 (1917).
- [Eke 90] I. Ekeland, *Convexity Methods in Hamiltonian Mechanics*, Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete 3. Folge Bd.19, Springer (1990).
- [Emm 96] C. Emmrich, A. Weinstein, Comm. Math. Phys. **176**, 701 (1996).

- [Eru 66] P. Erugin, *Linear Systems of Ordinary Differential Equations with Periodic and Quasi-Periodic Coefficients*, Academic Press New York (1966).
- [Fri 93] H. Frisk and T. Guhr, *Annals of Physics* **221**, 229 (1993).
- [Fri 87] L. Friedland and A. N. Kaufman, *Phys. Fluids* **30**, 10 (1987).
- [Fri 90] H. Friedrich, D. Wintgen, *Phys. Rep.* **183**, 39 (1989).
- [Gay 92] *Irregular Atomic Systems and Quantum Chaos*, ed. J. C. Gay, Gordon and Breach Science Publishers S. A. (1992).
- [Göt 71] U. Götze, H. C. Pauli, K. Alder, *Nuclear Physics A* **175**, 481 (1971).
- [Gut 67] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys* **8**, 1979 (1967).
- [Gut 71] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys* **12**, 343 (1971).
- [Gut 90] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag (N.Y.) (1990).
- [Hax 49] O. Haxel, J. H. D. Jensen, H. E. Suess, *Phys. Rev.* **75** (1948).
- [Jen 75] B. K. Jennings, R. K. Bhaduri, M. Brack, *Nuclear Physics A* **253**, 185 (1975).
- [Kai 00] J. Kaidel, Diplomarbeit, Univ. Regensburg (2000).
- [Kau 87] A. N. Kaufman, H. Ye, Y. Hui, *Phys. Lett. A* **120**, 327 (1987).
- [Kel 58] J. B. Keller, *Ann. Phys. (N.Y.)* **4**, 180 (1958).
- [Kur 85] H. Kuratsuji, S. Iida, *Prog. Theor. Phys.* **74**, 439 (1985); *Phys. Lett.* **111A**, 220 (1985); *Phys. Rev. D* **37**, 441 (1988); *Phys. Lett. B* **184**, 242 (1987).
- [Kir 33] J. G. Kirkwood, *Phys. Rev.* **44**, 31 (1933).
- [Koh 61] W. Kohn, *Phys. Rev.* **123**, 1242 (1961).
- [Kra 26] H. Kramers, *Z. Phys.* **39**, 828 (1926).
- [Lan 74] L. M. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III, Quantenmechanik*, Akademie-Verlag-Berlin (1974).
- [Lic 83] A. J. Lichtenberg, M. A. Leibermann, *Regular and Stochastic Motion* Springer-Verlag, (N.Y.) (1983).

- [Lit 91] R. G. Littlejohn, W. G. Flynn, Phys. Rev. A **44**, 5239 (1991).
- [Lit 92] R. G. Littlejohn, W. G. Flynn, Phys. Rev. A **45**, 7697 (1992).
- [Lit 92a] R. G. Littlejohn, W. G. Flynn, Chaos **2**, 149 (1992).
- [Lit 94] R. G. Littlejohn, W. G. Flynn, Annals of Physics **243**, 334 (1994).
- [Lit 87] R. G. Littlejohn, J. M. Robbins, Phys. Rev. A **36**, 2953 (1987).
- [Mak 90] P. A. Maksym, T. Chakraborty, Phys. Rev. Lett. **65**, 108 (1990).
- [May 48] M. G. Mayer, Phys. Rev. **75**, 1969 (1948).
- [McD 88] S. W. McDonald, Phys. Rep. **158**, 337 (1988).
- [Mei 00] C. G. Meister, Diplomarbeit, Regensburg (2000).
- [Nie 81] M. M. Nieto, Phys. Rev. D. **24**, 1030, (1981).
- [Nil 55] S. G. Nilsson, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **29**, 16 (1955).
- [Nis 90] H. Nishioka, K. Hansen, B. R. Mottelson, Phys. Rev. B **42** 9377 (1990).
- [Ond 00] R. Onderka, M. Suhrke, U. Rössler, Phys. Rev. B **62**, 10918 (2000).
- [Pau 25] W. Pauli, Z. Physik **31**, 765, (1925).
- [Ric 81] P. J. Richens, M. V. Berry, Physica **2D**, 495 (1981).
- [Ric 95] K. Richter, Europhys. Lett. **29**, 7 (1995).
- [Ric 00] K. Richter, *Semiclassical Theory of Mesoscopic Quantum Systems*, Springer Tracts in Modern Physics, Volume 161 (2000).
- [Rob 91] J. N. Robbins, Nonlinearity **4**, 343 (1991).
- [Rob 92] J. N. Robbins, Chaos **4**, 145 (1992).
- [Rös 88] U. Rössler, F. Malcher, G. Lommer, *Spin-Splitting in Structured Semiconductors* in *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II*, ed. G. Landwehr, Springer-Verlag (1988).
- [Roz 92] P. Rozmej, R. Arvieu, Nucl. Phys. A **545**, 497 (1992).
- [Sch 97] H. Schomerus, M. Sieber, J. Phys. A **30**, 4537 (1997).
- [Sch 00] H. G. Schuster *Deterministic Chaos* Physik-Verlag, Weinheim (1984).

- [Sti 71] E. L. Stiefel, G. Scheifele, *Linear and Regular Celestial Mechanics*, (Springer-Verlag Berlin, 1971).
- [Stö 99] H. J. Stöckmann, *Quantum Chaos*, Cambridge University Press UK, (1999).
- [Str 67] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. A **95**, 420 (1967).
- [Str 68] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. A **122**, 1 (1968).
- [Str 75] A. M. Strutinsky, Nucleonik **20**, 679 (1975).
- [Sug 00] A. Sugita, Phys. Lett. A **266**, 321 (2000).
- [Tab 89] M. Tabor, *Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics*, Wiley (N.Y.), (1989).
- [Tan 00] G. Tanner, K. Richter, J. M. Rost, Red. Mod. Phys. **72**, 497 (2000).
- [Tit 48] E. C. Titchmarsh, *Introduction to the Theory of Fourier Integrals*, Second Edition, Clarendon Press, Oxford (1948).
- [Uhl 25] G. E. Uhlenbeck, S. A. Goudsmith, Naturwissenschaften **13**, 953 (1925).
- [Wen 26] G. Wentzel, Z. Phys. **38**, 518 (1926).
- [Wig 90] S. Wiggins, *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*, Springer-Verlag (N.Y.), (1990).
- [Wig 32] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).



# Dank

Mein Dank gilt allen, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben:

- **Prof. Dr. M. Brack**, bei dem ich mit jeder Frage „anklopfen“ konnte. Die Diskussionen mit ihm und viele seiner Anregungen trugen wesentlich zu dieser Arbeit bei.
- **Stephan Kümmel, Benedikt Lehmann-Dronke und Holger Hehl** bildeten ein Team, dass man nie lange um Rat und Tat bitten musste. Gleichzeitig bereicherten sie den Büroalltag um so manche Anekdote. Holgers EDV-Wissen fand in meiner Person einen regelmäßigen User.
- **Jörg Kaidel** für die vielen wertvollen, nicht jedesmal im „Chaos“ endenden Diskussionen.
- **Mikhail Pletyukhov and Mitaxi Mehta** for answering many high dimensional questions.
- **Joachim Blaschke, Peter Meier und Kaori Tanaka**, die „Alten Semiklassiker“ gaben mir nicht nur in der Einarbeitungszeit wertvolle Hilfe.
- **Carlo Meister**, für die angenehme Zusammenarbeit und hilfreiche Diskussionen.
- **Stefan Keppeler und Dr. Jens Bolte**, für die Diskussionen und Hinweise zur semiklassischen Interpretation der LS-Kopplung.
- **Roland Onderka und Michael Langenbuch**, für die Einarbeitungshilfen und Gesprächen zu den 2DEGs.
- Alle weiteren „Schäfers“, „Schröders“ und „Hoffmänner“, die mich in dieser Zeit begleitet haben.
- Meinen **Eltern**.