

ZUR SEMIKLASSISCHEN BESCHREIBUNG VON SCHALENEFFekten IN ENDLICHEN FERMIONENSYSTEMEN



Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
der Naturwissenschaftlichen Fakultät II – Physik
der Universität Regensburg

vorgelegt
von
Peter Johann Meier
aus Amberg

im Jahr 2009

Das Promotionsgesuch wurde eingereicht am: 19.09.2009

Die Arbeit wurde angeleitet von Prof. Dr. M. Brack.

Prüfungsausschuß:

- Vorsitzender: Prof. Dr. Ch. Schüller
- 1. Gutachter: Prof. Dr. M. Brack
- 2. Gutachter: Prof. Dr. P. Schlagheck
- weiterer Prüfer: Prof. Dr. J. Fabian

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einleitung	3
2	Die Theorie der periodischen Bahnen	7
2.1	Die Gutzwillersche Spurformel	7
2.1.1	Die Niveaudichte	7
2.1.2	Propagator und Greensfunktion	9
2.1.3	Die Spurbildung	15
2.2	Erweiterung auf Systeme mit Symmetrie	18
2.3	Die gemittelte Niveaudichte und die Gesamtenergie	21
2.3.1	Die Mittelung	21
2.3.2	Die Schalenkorrekturenergie	22
2.4	Die sphärische Kavität	24
2.5	Die axialsymmetrische Kavität	27
2.5.1	Die periodischen Bahnen	27
2.5.2	Die Spurformel	29
3	POT in gemischten Systemen	39
3.1	Grenzen der Standard-POT	39
3.2	Bifurkationen	40
3.2.1	Allgemeines	40
3.2.2	Uniformisierung	45
3.3	Symmetrieänderung	50
3.3.1	Störungstheorie	51
3.3.2	Uniformisierung	56
4	Grundzustandsdeformationen von Metallclustern	69
4.1	Metallcluster im Schalenmodell	69
4.2	Deformationsverhalten der periodischen Bahnen	73
4.3	Ergebnisse der semiklassischen Störungstheorie	76
5	Zusammenfassung	85
A	Quantenmechanische Rechnungen	87
A.1	Die Energie-Eigenwerte	87
A.2	Die Niveaudichte	89
A.3	Die Schalenkorrekturenergie	91
B	Zur Bestimmung der periodischen Bahnen	93

C	Zur Parametrisierung der Kavität	96
C.1	Volumenerhaltung	96
C.2	Krümmungsradien	97
C.3	Umrechnung von Kugel- in Zylinderkoordinaten	98
D	Uniforme Integralnäherung	100
	Literaturverzeichnis	103

Kapitel 1

EINLEITUNG

Seit der Einführung der Quantenmechanik zu Beginn des 20. Jahrhunderts und der seither stattgefundenen stetigen Weiterentwicklung ist sie klar als eine der grundlegenden physikalischen Theorien zur Beschreibung der Welt anerkannt. Insbesondere das Verhalten mikroskopischer Systeme auf atomarer und subatomarer Ebene kann nur mit ihrer Hilfe hinreichend genau verstanden werden. Allerdings ist dieses Verständnis immer nur ein theoretisches: Wellenfunktionen, die statt eines festen Ortes eines Teilchens nur mehr Aufenthaltswahrscheinlichkeiten dafür festlegen, und diskrete Energieniveaus statt kontinuierlich annehmbarer Energien sind Konzepte, die nicht auf der anschaulichen Vorstellung von der uns umgebenden makroskopischen Welt beruhen. Letztere wird durch die klassische Mechanik beschrieben, die unserem intuitiven Verständnis der Natur sehr viel mehr entspricht.

Nichtsdestoweniger ist unbestritten, daß die Quantenmechanik *die* grundlegende Theorie ist, die aber auch – gemäß dem Bohrschen Korrespondenzprinzip – im Grenzfall sehr großer Quantenzahlen das bekannte klassische Verhalten beschreibt. Damit erhebt sich aber zugleich die Frage nach dem Übergangsbereich zwischen beiden Sichtweisen: Dies ist die Domäne der sogenannten semiklassischen Methoden, die immer dann angewandt werden können, wenn das Plancksche Wirkungsquantum \hbar klein im Vergleich zur Wirkungsfunktion des entsprechenden klassischen Problems ist. Semiklassische Methoden zeichnen sich also dadurch aus, daß sie quantenmechanische Gleichungen in führender Ordnung von \hbar annähern. Im asymptotischen Grenzfall liefern sie eine korrekte Beschreibung von Zuständen mit großen Quantenzahlen. In der Praxis erweisen sich jedoch oftmals auch schon ihre Ergebnisse für den Grundzustand als sehr brauchbar.

Historisch gesehen sind solche Ansätze bereits sehr alt: Schon die Bohr-Sommerfeld-Regel zur Quantisierung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms aus dem Jahr 1913, also noch vor der Einführung der Wellen- und Quantenmechanik durch Heisenberg und Schrödinger, besagt, daß für die Wirkungsintegrale der klassischen periodischen Bahnen nur ganzzahlige Vielfache von \hbar möglich sind. Während diese Regel aber auf einem nicht weiter begründbaren Postulat beruht, stellt die spätere, nach Wentzel, Kramer und Brillouin benannte WKB-Methode [1, 2, 3]) eine rigorose semiklassische Näherung der Quantenmechanik dar, die für den Spezialfall integrierbarer Systeme gültig ist. Ihre Erweiterung auf mehrdimensionale integrable Systeme erfolgte durch Einstein [4], Brillouin [5] und Keller [6] als sogenannte EBK-Quantisierung. Die notwendige Beschränkung auf integrable Systeme – wodurch z.B. schon die Beschreibung des Heliumatoms, dessen chaotische Dynamik erst viel später erkannt wurde, unmöglich wurde – sowie die immer größeren Erfolge der bis dato jungen Quantenmechanik liessen diese frühen semiklassischen Verfahren jedoch zunächst in Vergessenheit geraten.

Einen neuen Schub erhielt die Semiklassik erst wieder Ende der 60er Jahre des vergangenen Jahrhunderts mit der Veröffentlichung von Gutzwillers berühmter Spurformel

[7]. Ausgehend von Feynmans Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik gelangte er durch konsequente semiklassische Näherungen zu einer Darstellung der quantenmechanischen Niveaudichte als eine Art Fourierreihe über die in dem jeweiligen System möglichen klassischen periodischen Bahnen, woher auch der Begriff „periodic orbit theory“ (POT) rührt. Gutzwillers Spurformel ist für chaotische Systeme gültig, in denen die periodischen Bahnen völlig isoliert sind. Für integrable Systeme hingegen gelang es Berry und Tabor [8], die Niveaudichte als Spurformel auszudrücken, wobei sie von der EBK-Quantisierung ausgingen. Diese Arbeiten markieren den Startpunkt einer bis heute andauernden Weiterentwicklung, z.B. auch auf Systeme mit gemischter Phasenraumdynamik.

Dabei beruht die große Faszination aller Spurformeln darauf, daß eine rein quantenmechanische Größe wie die Niveaudichte eines gegebenen Systems (auch andere Größen wie Leitfähigkeit oder Suszeptibilität können als Spurformeln dargestellt werden) durch die Eigenschaften der entsprechenden klassischen Bahnen ausgedrückt wird. Dabei geht es ausdrücklich nicht darum, die Quantenmechanik durch die klassische Mechanik ersetzen zu wollen. Vielmehr eröffnen sie aber die Möglichkeit einer anschaulichen Interpretation der beobachteten Quanteneffekte durch Verweis auf das Verhalten der klassischen periodischen Bahnen und erlauben damit auch ein intuitiveres Verständnis der Beobachtungen. Insofern können Spurformeln die eingangs angesprochene „Verständnislücke“ auf wissenschaftlich korrekte Weise schließen. Damit stellen sie eine moderne Form des Korrespondenzprinzips dar.

Neben diesen eher wissenschaftstheoretischen Betrachtungen bieten Spurformeln aber auch handfeste praktische Vorteile: Mit steigender Zahl der beteiligten Teilchen werden exakte quantenmechanische Rechnungen numerisch sehr aufwendig. Insbesondere beim Vergleich mit experimentellen Ergebnissen ist man aber oftmals gar nicht an mathematisch exakten, sondern eher an gemittelten oder gar nur qualitativen Resultaten interessiert, so daß der nötige rechentechnische Aufwand umso mehr übertrieben erscheint. Semiklassische Spurformeln stellen hier eine interessante Alternative dar, da sie intrinsisch eine beliebig einstellbare Auflösung ihrer Ergebnisse zulassen, numerisch hingegen sehr anspruchslos sind.

Ähnlich wie die Semiklassik als Theorie zwischen den Grenzfällen der klassischen und der Quantenmechanik steht, bezeichnet man physikalische Systeme, die sich aufgrund ihrer räumlichen Ausdehnung und ihrer damit verbundenen physikalischen Eigenschaften weder eindeutig als makroskopisch noch klar als mikroskopisch einordnen lassen, als *mesoskopisch*. Sie sind „zu klein“, um ausschließlich mit den Methoden der klassischen Mechanik beschrieben werden zu können, da sie auch quantenmechanische Effekte zeigen. Andererseits sind sie „groß genug“, daß für ihr Verständnis nicht der volle quantenmechanische Apparat nötig ist. Endlich große Fermionensysteme fallen in diese Kategorie: Durch die räumliche Begrenzung der sie konstituierenden Fermionen kommt es zur Quantisierung ihrer Energieniveaus, die wiederum wegen des für Fermionen gültigen Pauli-Prinzips zu sogenannten Schalen gebündelt sind. Viele Eigenschaften solcher Systeme lassen sich auf das Bestreben nach einem Schalenabschluß zurückführen, also darauf, daß die letzte Schale unterhalb der Fermienergie mit den zur Verfügung stehenden Fermionen vollständig gefüllt ist und so ein lokales Minimum der Gesamtenergie erreicht wird. Solche sogenannten Schaleneffekte, die für das Verständnis dieser Systeme unverzichtbar sind, sind also quantenmechanischer Natur. Andererseits ist für eine vollständige quantenmechanische Beschreibung zunächst die Kenntnis aller einzelnen Energieniveaus nötig, was bei der typischerweise sehr

großen Zahl beteiligter Teilchen enorm schwierig ist. Es liegt also nahe, daß mesoskopische Systeme das natürliche Anwendungsfeld semiklassischer Methoden sind.

Ein Beispiel für mesoskopische Systeme sind sogenannte Nanostrukturen: Hierbei handelt es sich um nur nanometergroße, künstlich hergestellte Halbleiter-Heterostrukturen, in denen es durch Dotierung einer Schicht zur Ausbildung eines auf zwei Dimensionen beschränkten Elektronengases kommt. Durch auf die Nanostrukturen aufgedampfte Elektroden, deren Geometrie beliebig wählbar ist, kann ein zusätzliches elektrisches Feld angelegt werden, das die Elektronen auch lateral eingrenzt. Man spricht deshalb auch von Quantenpunkten. Bei entsprechender Reinheit der Halbleitermaterialien und sehr tiefen Temperaturen ist die mittlere freie Weglänge und die Phasenkohärenzlänge dieser Elektronen deutlich größer als die Ausdehnung des Systems, so daß sie als frei angesehen werden können. Die Verwendung des Begriffs „elektronisches Billard“ liegt deshalb nahe. Die Leitfähigkeit des Quantenpunktes als experimentell zugängliche Eigenschaft wird zunächst von der vorgegebenen geometrischen Form bestimmt. Ein weiterer experimenteller Parameter, der die Leitfähigkeit stark beeinflusst, ist die Stärke eines zusätzlichen, senkrecht zur Schicht angelegten magnetischen Feldes. Experimentelle Ergebnisse finden sich in [9].

Ein anderes, dreidimensionales Beispiel eines mesoskopischen Systems stellen Metallcluster dar. Generell versteht man unter einem Cluster ein gebundenes System aus bis zu mehreren tausend gleichartigen Atomen oder Molekülen. Sie stellen also den Übergangsbereich zwischen echten Molekülen und dem Festkörper dar. Dadurch lassen sich an ihnen über einen sehr viel größeren Bereich unterschiedlicher Teilchenzahlen Effekte studieren, als dies z.B. bei Atomen oder Kernen wegen derer natürlicher Größenbegrenzung möglich ist. Im Gegensatz zu den zweidimensionalen Nanostrukturen ist die geometrische Form der Cluster nicht experimentell vorgegeben, sondern stellt vielmehr einen intrinsischen freien Parameter des Systems dar, um bei gegebener Teilchenzahl einen Schalenabschluß zu erreichen. Metallcluster werden experimentell erzeugt durch die Expansion eines heißen Metaldampfes über ein Trägergas ins Vakuum, so daß die freien Metallatome durch die schnelle Abkühlung kondensieren und Partikel unterschiedlichster Größe bilden. Die Bindung der darin enthaltenen Atome wird dabei durch delokalisierte Valenzelektronen vermittelt (Beispiele dafür sind Alkali- und Edelmetallcluster). Dabei zeigt sich, daß das Massenspektrogramm dieses Kondensats keineswegs eine glatte Verteilung darstellt, sondern vielmehr klare Peaks bei bestimmten Teilchenzahlen aufweist, die offensichtlich besonders stabile Konfigurationen darstellen [10]. Für nicht allzu große Cluster weiß man, daß viele ihrer Eigenschaften durch ihre elektronische Struktur bestimmt sind. Da das Vielteilchensystem der delokalisierten Valenzelektronen quantenmechanisch aber nicht exakt lösbar ist, greift man auch hier auf das aus der Kern- und Atomphysik bekannte Schalenmodell zurück. Dabei betrachtet man nur ein einzelnes Valenzelektron, das sich in einem mittleren Potential bewegt, das von den übrigen Elektronen sowie von den positiv geladenen Atomrümpfen gebildet wird. Damit lassen sich die Peaks in den Größenverteilungen der Metallcluster als Resultat von Schaleneffekten erklären, wie wir sie bereits im vorletzten Absatz besprochen haben. Ein besonders auffälliger Effekt ist dabei das Auftreten sogenannter Superschalen [11], also einer dem Massenspektrum zusätzlich überlagerten Schwebung, die – wie wir sehen werden – semiklassisch sehr einfach als Interferenz der beiden wichtigsten klassischen periodischen Bahnen interpretiert werden kann.

In der vorliegenden Arbeit beschäftigen wir uns nun mit der semiklassischen Analyse solcher dreidimensionalen mesoskopischen Systeme und stellen den Ergebnissen die entsprechenden quantenmechanischen Resultate gegenüber, um so die praktische Anwendbarkeit, aber auch die Grenzen der hier vorgestellten semiklassischen Methoden aufzuzeigen. Die grobe Gliederung sieht dabei wie folgt aus:

Nach dieser allgemeinen Einleitung stellen wir im zweiten Kapitel die Grundzüge der Theorie der periodischen Bahnen dar. Nach einer kurzen Herleitung der Gutzwillerschen Spurformel, die für das Verständnis der folgenden Kapitel grundlegend ist, zeigen wir, wie man sie auf Systeme mit Symmetrien erweitern kann. Angewandt wird diese Methode dann auf sphärische und axialsymmetrische Kavitäten als Modellfunktionen für das Hintergrundpotential der Valenzelektronen.

Im dritten Kapitel klären wir, warum die Standard-POT in Systemen mit gemischter Phasenraumdynamik (wo also isolierte wie auch entartete periodische Bahnen existieren) wegen des Auftretens von Symmetrieänderungen und Bifurkationen versagt, und stellen zwei Ansätze vor, um die Theorie auch auf diesen Fall zu verallgemeinern.

Im vierten Kapitel gehen wir zunächst noch einmal etwas genauer auf die Beschreibung von Metallclustern im Schalenmodell ein und diskutieren, wie ihr Deformationsverhalten in Abhängigkeit der Teilchenzahl aussieht. Danach wenden wir schließlich unseren theoretischen Apparat auf dieses Modell an und zeigen, welche Übereinstimmung mit den quantenmechanischen Resultaten möglich ist.

Im Anschluß an eine kurze Zusammenfassung haben wir in den Anhängen noch einige rechentechnische Details zusammengefaßt.

DIE THEORIE DER PERIODISCHEN BAHNEN

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, sind die sogenannten Spurformeln das semiklassische Werkzeug, das wir in dieser Arbeit benützen. Sie stellen eine interessante Brücke zwischen klassischer und Quantenmechanik dar, indem sie eine eigentlich rein quantenmechanische Größe, die Einteilchen-Niveaudichte, näherungsweise durch die Eigenschaften der klassischen periodischen Bahnen, die in dem gegebenen System möglich sind, ausdrücken.

Ganz mit am Anfang der Entwicklung dieser „periodic orbit theory“ (POT) stand dabei die Gutzwillersche Spurformel [7]. Da deren Verständnis grundlegend ist für alle ihre später erfolgten Verallgemeinerungen, die wir in dieser Arbeit verwenden, beginnen wir dieses Kapitel mit einer kurzen Herleitung. Ausgehend von der Definition der Niveaudichte möchten wir in kurzen Zügen zeigen, wie man über semiklassische Näherungen für den Propagator und die Greensfunktion zur Gutzwillerschen Spurformel gelangt. Dadurch wird einerseits klar werden, daß ihr Anwendungsbereich beschränkt ist, aber auch, wie sie entsprechend erweitert werden kann. Dies ist der Inhalt des nächsten Abschnitts. Anschließend gehen wir kurz auf die Frage der Konvergenz von Spurformeln ein und zeigen, daß auch die Gesamtenergie des betrachteten Systems von N nicht-wechselwirkenden Fermionen durch Spurformeln ausgedrückt werden kann. Als Anwendung bringen wir schließlich die Herleitung der Spurformel für eine sphärische bzw. eine axialsymmetrische Kavität, die uns als einfaches Modell für das effektive Einteilchenpotential in endlichen Fermionensystemen dient.

2.1 Die Gutzwillersche Spurformel

2.1.1 Die Niveaudichte

Das interessierende d -dimensionale Einteilchen-System werde beschrieben durch einen Hamiltonoperator

$$H = T + V(\mathbf{r}) \quad , \quad (2.1)$$

wobei $T = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ der Operator der kinetischen Energie und $V(\mathbf{r})$ ein lokales Potential ist, in dem sich das Teilchen der Masse m bewegt. Die stationäre Schrödingergleichung für dessen Eigenzustände $|n\rangle$ (n bezeichne in mehrdimensionalen Systemen einen vollständigen Satz von Quantenzahlen) bestimmt seine Energieeigenwerte E_n :

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad . \quad (2.2)$$

Da wir gebundene Systeme betrachten, sind diese Eigenwerte diskret.

Die Einteilchen-Niveaudichte $g(E)$ ist nun ein Maß für die Zahl dN der Eigenwerte pro Energieintervall dE . Sie ist definiert durch

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \sum_n d_n \delta(E - E_n) \quad . \quad (2.3)$$

Summiert wird dabei über das ganze Spektrum, jeder Eigenwert wird mit seinem Entartungsfaktor d_n gewichtet.

Anschaulicher als die singuläre Niveaudichte ist ihr Integral

$$N(E_F) = 2 \int_{-\infty}^{E_F} dE g(E) \quad , \quad (2.4)$$

die Teilchenzahl-Funktion. Sie gibt an, wieviele Teilchen gemäß dem Pauli-Prinzip bis zu einer Fermienergie E_F eingefüllt werden können. Der Faktor 2 trägt der Spin-Entartung Rechnung, die üblicherweise nicht im Entartungsfaktor d_n enthalten ist. $N(E_F)$ ist eine Stufenfunktion, die an den Stellen $E_F = E_n$ jeweils um den Wert d_n springt.

In Billardsystemen¹ erweist sich statt der Energie die Wellenzahl $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ als natürliche Variable. Die Definition der Niveaudichte im k -Raum lautet analog zu Gl. (2.3)

$$g(k) = \sum_n d_n \delta(k - k_n) \quad , \quad (2.5)$$

wobei $k_n = \sqrt{2mE_n/\hbar^2}$. Für die Zahl der Niveaus unterhalb der Fermi-Wellenzahl $k_F = \sqrt{2mE_F/\hbar^2}$ muß natürlich gelten

$$N(k_F) = 2 \int_{-\infty}^{k_F} dk g(k) = N(E_F) \quad , \quad (2.6)$$

so daß für den Zusammenhang zwischen $g(E)$ und $g(k)$ folgt²:

$$g(k) = \frac{dE}{dk} \cdot g(E) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot 2k \cdot g(E) \quad . \quad (2.7)$$

Die Teilchenzahl-Stufenfunktion kann nun zerlegt werden in einen glatten, mittleren Anteil \tilde{N} sowie einen oszillierenden Anteil δN :

$$N(E_F) = \tilde{N}(E_F) + \delta N(E_F) \quad . \quad (2.8)$$

Die gleiche Zerlegung ist auch für ihre Ableitung, die Niveaudichte, möglich:

$$g(E) = \tilde{g}(E) + \delta g(E) \quad . \quad (2.9)$$

Der glatte Anteil \tilde{g} ist in führender Ordnung von \hbar identisch mit der Thomas-Fermi-Niveaudichte.

Für Systeme mit weichem Potential $V(\mathbf{r})$ (d.h. alle seine Ableitungen müssen endlich sein) liefert das erweiterte Thomas-Fermi-Modell [12] eine systematische Entwicklung von \tilde{g} in Potenzen von \hbar und der Energie.

In Billards bzw. Kavitäten gilt hingegen die verallgemeinerte Weyl-Formel [13]. Sie stellt ebenfalls eine Entwicklung in \hbar und in \sqrt{E} dar, wobei die Entwicklungskoeffizienten proportional zu geometrischen Kenngrößen des Systems wie Volumen, Flächen oder Krümmungen sind (siehe Anhang A.2).

¹Unter Billardsystem wollen wir, unabhängig von der Dimension, ein System mit einem unendlich hohen Kastenpotential verstehen. In zwei Dimensionen sprechen wir einfach von Billards, in drei Dimensionen von Kavitäten.

²Wir verwenden der Einfachheit halber für die Niveaudichte im Energie- und im Wellenzahl-Raum das gleiche Symbol g und unterscheiden zwischen beiden Größen nur anhand des Arguments. Es ist also $g(k) \neq g(\sqrt{2mE/\hbar^2})$ bzw. $g(E) \neq g(\hbar^2 k^2/2m)$ zu beachten.

Eine weitere Möglichkeit, den glatten Anteil \tilde{g} der Niveaudichte zu bestimmen, stellt die Strutinsky-Methode [14] dar. Sie ist insbesondere dann geeignet, wenn das Energiespektrum nur numerisch bekannt ist. Die Grundidee dieser Methode ist die Faltung der exakten Niveaudichte mit einer geeignet gewählten Mittelungsfunktion. In Anhang A.2 gehen wir näher darauf ein.

Der oszillierende Anteil δg der Niveaudichte ist betragsmäßig sehr viel kleiner als \tilde{g} . In ihm steckt aber die ganze Information über die Schaleneffekte. δg wird mit Hilfe der Spurformeln durch klassische, periodische Bahnen ausgedrückt. Auf die Herleitung dieser Formeln gehen wir im nun folgenden Abschnitt ein.

2.1.2 Propagator und Greensfunktion

Allgemeines

Der Propagator $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$ ist der quantenmechanische Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein Teilchen, das sich zur Zeit 0 am Ort \mathbf{r}' befindet, nach der Zeit t am Ort \mathbf{r} aufhält. Er ist gegeben durch das Matricelement des Zeitentwicklungsoperators in der Ortsdarstellung und läßt sich mit den Eigenwellenfunktionen $\Phi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n \rangle$ des Hamiltonoperators ausdrücken als

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \langle \mathbf{r} | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \mathbf{r}' \rangle = \sum_n \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} . \quad (2.10)$$

Eine halbseitige Fouriertransformation führt vom zeitabhängigen Propagator auf die energieabhängige Greensfunktion:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \quad (2.11)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \sum_n \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}') \int_0^\infty dt e^{\frac{i}{\hbar} (E - E_n) t} . \quad (2.12)$$

Gibt man der Energie E noch einen kleinen, positiven Imaginärteil ε , so konvergiert das Integral auf der rechten Seite und wir erhalten folgenden Ausdruck für die Greensfunktion:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\varepsilon} \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}') . \quad (2.13)$$

Für die Spur der Greensfunktion gilt also wegen der Orthonormalität der Eigenfunktionen

$$\text{tr } G = \int d^d r G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\varepsilon} . \quad (2.14)$$

Mit der Identität

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi \delta(x) \quad (x, \varepsilon \in \mathbb{R}) \quad (2.15)$$

(\mathcal{P} bezeichnet den Hauptwert) folgt schließlich für die Niveaudichte³ (2.3):

$$g(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\text{tr } G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)] . \quad (2.16)$$

³Mit dem Symbol „tr“ bezeichnen wir hier und im folgenden die Spur einer Matrix.

Die Niveaudichte ist also im wesentlichen gegeben durch die Spur der Greensfunktion. In den nächsten Abschnitten werden wir für den Propagator und die Greensfunktion eine semiklassische Näherung herleiten, die schließlich auf die Spurformel führt.

Propagator

Der Propagator eines freien Teilchens läßt sich mit Hilfe von Gl. (2.10) exakt berechnen. Er ist gegeben durch

$$K_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \right) . \quad (2.17)$$

Dieser Term kann nun auch durch die aus der klassischen Mechanik bekannte Hamiltonsche Prinzipalfunktion $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$ (auch Wirkungsintegral genannt) ausgedrückt werden, die allgemein definiert ist als das Zeitintegral über die Lagrangefunktion $L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t)$:

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \int_0^t dt' L(\mathbf{q}(t'), \dot{\mathbf{q}}(t'), t') . \quad (2.18)$$

R ist nicht nur eine Funktion der Endpunkte \mathbf{r}' und \mathbf{r} sowie des Zeitintervalls t , sondern ganz wesentlich auch ein Funktional $R[\mathbf{q}]$ des Pfades \mathbf{q} , auf dem sich das Teilchen zwischen den beiden Endpunkten bewegt.

Für ein klassisches freies Teilchen findet man insbesondere

$$R_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{t} . \quad (2.19)$$

Für die Determinante der Matrix der zweiten Ableitungen gilt

$$\det \left(-\frac{\partial^2 R_0}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}'} \right) = \left(\frac{m}{t} \right)^d , \quad (2.20)$$

so daß der freie Propagator auch in der folgenden Form geschrieben werden kann:

$$K_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = (2\pi i \hbar)^{-d/2} \sqrt{\det \left(-\frac{\partial^2 R_0}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}'} \right)} \exp \left(\frac{i}{\hbar} R_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \right) . \quad (2.21)$$

Die von van Vleck [16] schon 1928 vorgeschlagene semiklassische Näherung für den Propagator eines Teilchens im Potential $V(\mathbf{r})$ besteht einfach in der Ersetzung der freien Prinzipalfunktion R_0 durch die volle Funktion R , berechnet entlang der klassischen Bahn von \mathbf{r}' nach \mathbf{r} . Weil es i.a. mehrere solche Bahnen b gibt, ist über diese zu summieren:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \sum_b (2\pi i \hbar)^{-d/2} \sqrt{\det C_b} \exp \left(\frac{i}{\hbar} R_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \right) , \quad (2.22)$$

wobei wir definiert haben

$$C_b := -\frac{\partial^2 R_b}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}'} . \quad (2.23)$$

Gutzwiller [7] ging bei seiner Herleitung der Spurformel von der Feynmanschen Pfadintegraldarstellung [17] des Propagators aus. Weil an dieser Stelle Pfade und damit auch periodische Bahnen ins Spiel kommen, möchten wir dieses Konzept hier kurz erläutern.

Aus Gl.(2.10) folgt die sogenannte Kompositionseigenschaft des Propagators

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \int d^d \mathbf{r}'' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; t - t'') K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; t'') \quad . \quad (2.24)$$

Da der Propagator eine Übergangswahrscheinlichkeit darstellt, kann diese Gleichung leicht interpretiert werden: Ein Teilchen, das sich in der Zeit t vom Ort \mathbf{r}' nach \mathbf{r} bewegt, kann dabei zur Zeit t'' alle möglichen Zwischenpunkte \mathbf{r}'' passieren. Um die Gesamtübergangswahrscheinlichkeit zu erhalten, muß das Produkt der Teilwahrscheinlichkeiten über alle diese Punkte integriert werden.

Dieser Prozeß des Unterteilens des Weges kann nun rekursiv immer weitergeführt werden, bis man schließlich im Grenzfall über unendlich viele Zwischenpunkte $\mathbf{q}_j = \mathbf{q}(j \cdot \delta t)$ mit $j = 1, \dots, n-1, \delta t = t/n, n \rightarrow \infty$ zu integrieren hat:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{n-1} d^d q_j K(\mathbf{q}_{j+1}, \mathbf{q}_j; \delta t) K(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_0; \delta t) \quad , \quad (2.25)$$

wobei $\mathbf{q}_0 = \mathbf{r}', \mathbf{q}_n = \mathbf{r}$. Entlang des infinitesimal kleinen Teilwegstücks $\delta \mathbf{q} = \mathbf{q}_{j+1} - \mathbf{q}_j = \mathbf{q}(t' + \delta t) - \mathbf{q}(t')$ kann das Potential lokal als konstant betrachtet werden, so daß man es mit einer quasi-freien Bewegung zu tun hat. Es ist also naheliegend, daß die Integranden jeweils von der Form freier Propagatoren

$$K(\mathbf{q}(t') + \delta \mathbf{q}, \mathbf{q}(t'); \delta t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot \delta t} \right)^{d/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} L(\mathbf{q}(t'), \dot{\mathbf{q}}(t'), t') \cdot \delta t \right) \quad (2.26)$$

sind. Die Exponenten im Gesamtintegranden addieren sich zum Wirkungsintegral $R[\mathbf{q}]$ (2.18), so daß man insgesamt folgendes Ergebnis für den Propagator findet:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int d^d q_1 \dots d^d q_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot \delta t} \right)^{nd/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} R[\mathbf{q}] \right) \quad . \quad (2.27)$$

Jede Folge von Punkten $(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_n)$ entspricht dabei einem Pfad \mathbf{q} , der die beiden Endpunkte \mathbf{r}' und \mathbf{r} verbindet, so daß man vom Pfadintegral spricht. Die quantenmechanische Natur des Propagators kommt nun dadurch zum Ausdruck, daß nicht nur über die klassisch möglichen, sondern über alle Pfade, also z.B. auch nicht-differenzierbare oder unstetige, integriert wird. Das Pfadintegral stellt eine Lagrangesche Formulierung der Quantenmechanik dar, die zur Hamiltonschen Formulierung durch die Schrödingergleichung vollkommen äquivalent ist.

Um den Zusammenhang mit der klassischen Mechanik zu erkennen, läßt man gemäß dem Korrespondenzprinzip die Plancksche Konstante \hbar formal gegen Null gehen. Für das Pfadintegral (2.27) bedeutet dies, daß die Phase $R[\mathbf{q}]/\hbar$ im Exponenten des Integranden sehr groß wird, der Integrand selber also stark oszilliert. Die Beiträge benachbarter Pfade zum Integral heben sich damit aufgrund destruktiver Interferenz größtenteils weg. Einen nicht-verschwindenden Beitrag liefern im Grenzwert $\hbar \rightarrow 0$ nur die Pfade, für die die Phase stationär wird, d.h. für die die Variation der Hamiltonschen Prinzipalfunktion verschwindet:

$$\delta R[\mathbf{q}] = 0 \quad . \quad (2.28)$$

Das sind aber nach dem Hamiltonschen Prinzip genau die klassischen Bahnen. Über die Pfadintegraldarstellung erhält man also auf ganz natürliche Weise die klassische Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik.

Diesen qualitativen Überlegungen entspricht rechnerisch die sogenannte Sattelpunktsnäherung für das Pfadintegral. Diese Methode, ein Integral mit oszillierendem Integranden asymptotisch auszuwerten (auch bekannt als Methode der stationären Phase), ist kennzeichnend für die ganze semiklassische Theorie und wird in der weiteren Herleitung der Spurformel wiederholt angewandt werden.

Um nun zu einer semiklassischen Näherung für den Propagator zu kommen, entwickelt man zuerst das Wirkungsintegral im Exponenten des Pfadintegrals (2.27) um eine klassische Bahn $\bar{\mathbf{q}}$:

$$R[\mathbf{q}] \approx R[\bar{\mathbf{q}}] + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{(n-1)d} R''_{kl} \delta q_k \delta q_l \quad . \quad (2.29)$$

R''_{kl} bezeichne dabei die gemischten zweiten Ableitungen des Wirkungsintegrals nach den Komponenten der Zwischenpunkte \mathbf{q}_j . Im Hauptachsensystem ist die $(n-1)d$ -dimensionale Matrix R'' diagonal, ihre Eigenwerte seien R''_k . Mit dieser Näherung separiert das Pfadintegral (2.27) in ein Produkt aus $(n-1)d$ Fresnelintegralen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_k \exp\left(\frac{i}{2\hbar} R''_k \cdot (\delta q_k)^2\right) = \sqrt{2\pi\hbar} |R''_k|^{-1/2} e^{i \cdot \text{sgn} R''_k \cdot \pi/4} \quad , \quad (2.30)$$

so daß es sich insgesamt schreiben läßt in der Form

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \approx (2\pi i \hbar)^{-d/2} \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{\delta t}\right)^{nd/2} |\det R''|^{-1/2} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} R[\bar{\mathbf{q}}] - i\kappa \frac{\pi}{2}\right) \quad . \quad (2.31)$$

Für den in dieser Formel auftretenden Grenzwert läßt sich folgende Eigenschaft zeigen:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{\delta t}\right)^{nd/2} |\det R''|^{-1/2} = \left| \det \left(\frac{\partial^2 R}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}'} \right) \right|^{1/2} = |\det C|^{1/2} \quad , \quad (2.32)$$

d.h. man erhält für die Amplitude fast den gleichen Ausdruck wie schon in der van Vleck'schen Formel (2.22). Hier ist allerdings die Wurzel aus dem Betrag der d -dimensionalen Matrix C zu nehmen.

In der Phase hingegen tritt zusätzlich ein ganzzahliges Vielfaches κ von $-\frac{\pi}{2}$ auf, das von der Phase im Fresnelintegral (2.30) stammt. Dieser Term stellt sicher, daß die Kompositionseigenschaft (2.24) auch in Sattelpunktsnäherung erfüllt ist. κ ist dabei die Anzahl der sogenannten konjugierten Punkte. Eine Aussage darüber liefert ein Theorem von M. Morse [18]. Es besagt, daß die Matrix C (2.23), ausgewertet an einer klassischen Bahn $\bar{\mathbf{q}}$, ebenso viele negative Eigenwerte hat wie es entlang dieser Bahn konjugierte Punkte gibt.

Betrachten wir zur geometrischen Veranschaulichung die Bewegung eines Teilchens, das vom Punkt \mathbf{r}' startet, allerdings gegenüber der klassischen Trajektorie mit einer kleinen Störung $\delta \mathbf{p}'$ des Anfangsimpulses (Abb. 2.1).

In linearer Näherung ist die daraus resultierende Änderung $\delta \mathbf{r}$ des Endpunktes gegeben durch den Zusammenhang

$$\delta \mathbf{r} = B \cdot \delta \mathbf{p}' = \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{p}'} \right) \delta \mathbf{p}' \quad . \quad (2.33)$$

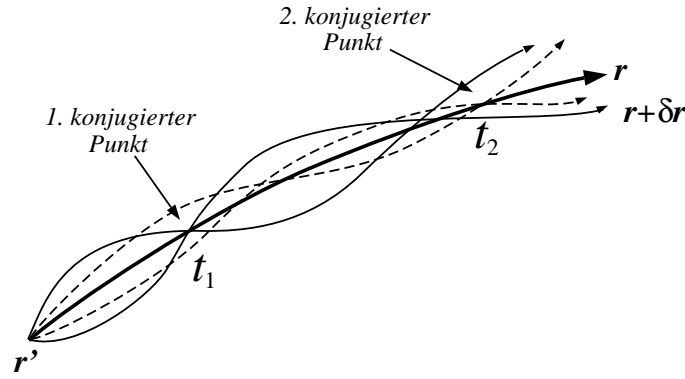


ABBILDUNG 2.1: Mehrere Bahnen, die am Punkt \mathbf{r}' mit leicht verschiedenen Anfangsimpulsen starten, schneiden sich zu den konjugierten Zeiten t_1 und t_2 in den jeweils konjugierten Punkten. $\delta \mathbf{r}$ ist die Differenz ihrer Endpunkte.

Die dabei auftretende Matrix B ist aber wegen der allgemein gültigen Identitäten

$$\frac{\partial R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{p}, \quad \frac{\partial R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)}{\partial \mathbf{r}'} = -\mathbf{p}', \quad \frac{\partial R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)}{\partial t} = -E \quad (2.34)$$

genau die zu C inverse Matrix. Für hinreichend kleine Zeiten t werden sich die beiden Trajektorien einfach linear auseinanderentwickeln, d.h. die Matrix B — und damit C — ist proportional zur Einheitsmatrix, mit positiven Eigenwerten. Mit wachsendem t kann es aber passieren, daß sich die Trajektorien in einem festen Punkt schneiden. Diesen Schnittpunkt nennt man einen konjugierten Punkt. An solch einem Punkt muß gelten $\det B = (\det C)^{-1} = 0$, d.h. einer der Eigenwerte von B und damit von C nimmt negatives Vorzeichen an. Somit entspricht jedem negativen Eigenwert der Matrix C ein konjugierter Punkt.

I.a. hat die klassische Bewegungsgleichung (2.28) mehrere Bahnen als Lösung. Aufgrund des Superpositionsprinzips ist über deren Beiträge zu summieren. Damit lautet nun die Gutzwillersche Näherung für den Propagator

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \approx (2\pi i \hbar)^{-d/2} \sum_b |\det C_b|^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} R_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) - i \kappa_b \frac{\pi}{2} \right) \quad , \quad (2.35)$$

wobei b über alle klassischen Bahnen von \mathbf{r}' nach \mathbf{r} laufe.

Die letzte Formel ist allerdings nur gültig, wenn alle diese Bahnen isoliert sind. Bei der Anwendung der Sattelpunktsnäherung wurde nämlich davon ausgegangen, daß die Eigenwerte R_k'' nur auf isolierten Punkten (eben den konjugierten Punkten) verschwinden. In Systemen mit sehr hoher Symmetrie kann dies aber sogar auf einem kontinuierlichen Bereich der Fall sein, so daß die Sattelpunktsnäherung nicht mehr gerechtfertigt ist. Eine Lösung dieses Problems wird in Abschnitt 2.2 skizziert.

Greensfunktion

Aus der semiklassischen Näherung (2.35) für den Propagator erhält man nun gemäß Gl. (2.11) durch halbseitige Fouriertransformation eine entsprechende Näherung für die energieabhängige Greensfunktion:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \approx (i\hbar)^{-1} (2\pi i\hbar)^{-d/2} \sum_b \int_0^\infty dt |\det C_b|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (R_b + Et) - i\kappa_b \frac{\pi}{2}\right) \quad . \quad (2.36)$$

Das Integral wird wieder in Sattelpunktsnäherung berechnet. Da es sich hier um ein einfaches eindimensionales Integral handelt, möchten wir an dieser Stelle die Vorgehensweise bei der Sattelpunktsnäherung genauer erläutern. Auch hier erwarten wir wieder, daß der führende Beitrag zum Integral im Limes $\hbar \rightarrow 0$ von den Punkten im Integrationsintervall kommt, an denen der Exponent im Integranden stationär ist. Die Beiträge aller anderen Punkte sind wegen des dann stark oszillierenden Integranden von höherer Ordnung in \hbar . Zunächst entwickelt man nun den Exponenten in der Umgebung eines stationären Punktes t_0 bis zur zweiten Ordnung

$$R_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) + Et \approx R_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t_0) + Et_0 + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R_b}{\partial t^2} \right|_{t_0} (t - t_0)^2 \quad . \quad (2.37)$$

Von der Amplitudenfunktion $|\det C_b|$ nimmt man an, daß sie nur schwach mit t oszilliert, so daß man sie in guter Näherung vor das Integral ziehen kann; t_0 sei hinreichend groß. Mit diesen Näherungen hat man das gesuchte Integral im wesentlichen auf das bekannte Fresnelintegral reduziert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\lambda x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{|\lambda|}} e^{i \cdot \text{sgn} \lambda \cdot \pi/4} \quad , \text{ wobei } \lambda = \frac{1}{2\hbar} \left. \frac{\partial^2 R_b}{\partial t^2} \right|_{t_0} \quad , \quad (2.38)$$

so daß sich für die semiklassische Greensfunktion folgender Ausdruck ergibt:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \approx 2\pi (2\pi i\hbar)^{-(d+1)/2} \sum_b |\det C_b|^{1/2} \left| \frac{\partial^2 R_b}{\partial t^2} \right|^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (R_b + Et_0) - i\mu_b \frac{\pi}{2}\right) \quad . \quad (2.39)$$

Im Exponenten steht die Legendre-Transformierte S der Hamiltonschen Prinzipalfunktion, die eine Funktion der Energie ist und für die gilt:

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t_0) + Et_0 = S(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}'' \quad . \quad (2.40)$$

Im weiteren werden wir S einfach als Wirkung bezeichnen. Sie erfüllt ähnliche Relationen wie die Prinzipalfunktion:

$$\frac{\partial S(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{p}, \quad \frac{\partial S(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{\partial \mathbf{r}'} = -\mathbf{p}', \quad \frac{\partial S(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{\partial E} = t \quad . \quad (2.41)$$

Die Amplitudenterme in Gl. (2.39) lassen sich mit den Gln. (2.34) sowie den Rechenregeln für Jacobi-Determinanten zur Determinante einer $(d+1)$ -dimensionalen Jacobi-Matrix D zusammenfassen (Indizes bezeichnen dabei jeweils festgehaltene Größen):

$$\begin{aligned} \det C \cdot \left(\frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \right)^{-1} &= -\det \left(\frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{r}} \right)_t \cdot \left(\frac{\partial t}{\partial E} \right)_{\mathbf{r}} = -\det \left(\frac{\partial(\mathbf{p}', t)}{\partial(\mathbf{r}, E)} \right) \\ &= -\det \left(\frac{\partial(\mathbf{p}', t)}{\partial(\mathbf{r}, E)} \right) =: -\det D \quad . \end{aligned} \quad (2.42)$$

Diese Jacobi-Matrix kann man wegen der Gln. (2.41) auch durch die zweiten Ableitungen der Wirkung S ausdrücken:

$$\det D = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{r}} & \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial E} \\ \frac{\partial t}{\partial \mathbf{r}} & \frac{\partial t}{\partial E} \end{pmatrix} = (-1)^d \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}' \partial \mathbf{r}} & \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial \mathbf{r}} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{pmatrix} . \quad (2.43)$$

Der Index μ_b im Exponenten von Gl. (2.39) ergibt sich schließlich aus κ_b und dem Vorzeichen von λ . Er läßt sich analog zu κ_b interpretieren als die Zahl der konjugierten Punkte entlang der Bahn b — nun allerdings bei fester Energie E gezählt — und ist gegeben durch die Zahl der negativen Eigenwerte der Matrix D . In Billardsystemen sind κ_b und μ_b gleich, i.a. gilt dies jedoch nicht. In Billardsystemen (mit Dirichletschen Randbedingungen) liefert außerdem jeder Reflexionspunkt auf einer klassischen Bahn wegen des singulären Potentials am Rand einen Beitrag 2 zum Gesamtindex.

In der geometrischen Optik kennt man den Begriff der Kaustik. Sie ist die Einhüllende für eine Schar von Lichtstrahlen bei gegebenen Randbedingungen. In Analogie dazu kann man auch die Kaustik eines Bündels von klassischen Trajektorien definieren, die mit der Energie E am Punkt \mathbf{r}' starten. Konjugierte Punkte sind dann genau die Berührungspunkte einer klassischen Bahn mit dieser Kaustik. Quantenmechanisch hat ein Teilchen auch jenseits dieser Grenze eine nicht-verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit, was sich in einer Phasenverschiebung der Wellenfunktion äußert. Der Index μ_b — auch Morse-Index genannt — ist nun nichts anderes als Ausdruck dieser Phasenverschiebung.

Die Gutzwillersche Näherung für die Greensfunktion lautet schließlich also folgendermaßen:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \approx 2\pi(2\pi i \hbar)^{-(d+1)/2} \sum_b |\det D_b|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_b - i\mu_b \frac{\pi}{2}\right) . \quad (2.44)$$

Dabei gilt auch hier die schon beim semiklassischen Propagator (2.35) gemachte Einschränkung auf isolierte Bahnen.

2.1.3 Die Spurbildung

Als letzter Schritt auf dem Weg zu einem semiklassischen Ausdruck für die Niveaudichte ist gemäß Gl. (2.16) die Spur der Greensfunktion $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ zu berechnen (woher auch die Bezeichnung „Spurformel“ rührt), d.h. die beiden räumlichen Argumente \mathbf{r}, \mathbf{r}' werden gleichgesetzt, anschließend wird darüber integriert.

Ersteres bedeutet in Bezug auf Gl. (2.44), daß nur über geschlossene Bahnen zu summieren ist. Dabei ist prinzipiell zu unterscheiden zwischen direkten Bahnen, deren Länge im Grenzfall $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ gegen Null geht, und solchen mit nicht-verschwindender Länge. Von dem Integral über den Beitrag G_0 der direkten Bahnen läßt sich zeigen ([19]), daß es den Thomas-Fermi-Ausdruck für die mittlere Niveaudichte $\tilde{g}(E)$ liefert:

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d^d r G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^d} \int d^d r d^d p \delta(E - H(\mathbf{r}, \mathbf{p})) , \quad (2.45)$$

also das bei der Energie E zugängliche Phasenraumvolumen, dividiert durch das Volumen einer „Quanten-Elementarzelle“.

Alle Bahnen endlicher Länge tragen dagegen zum oszillierenden Anteil $\delta g(E)$ der Niveaudichte bei, mit dem wir uns hauptsächlich beschäftigen. Das zu berechnende Spurintegral wird dabei wiederum in Sattelpunktsnäherung ausgeführt. Die wesentlichen Beiträge zum Integral kommen also von den Punkten, an denen die Wirkung im Exponenten der Greensfunktion (2.44) stationär ist:

$$\frac{\partial S(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)}{\partial \mathbf{r}} = \left(\frac{\partial S(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial S(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{\partial \mathbf{r}'} \right)_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} = \mathbf{p} - \mathbf{p}' = 0 \quad . \quad (2.46)$$

Die Stationaritätsbedingung führt wegen der Eigenschaften (2.41) dazu, daß nicht nur Anfangs- und Endpunkt der klassischen Bahnen, sondern auch deren Impulse an diesen Punkten übereinstimmen müssen. Von der Summe in Gl. (2.44) tragen somit nur die periodischen Bahnen (abgekürzt mit po für *p*eriodic *o*rbit) maßgeblich bei, während die Beiträge der übrigen Bahnen von höherer Ordnung in \hbar sind.

Zur Berechnung des Spurintegrals wählt man zweckmäßigerweise ein lokales Koordinatensystem, dessen eine Koordinate r_{\parallel} entlang der jeweiligen periodischen Bahn verläuft und die übrigen $d-1$ Koordinaten \mathbf{r}_{\perp} senkrecht dazu:

$$\mathbf{r} = (r_{\parallel}, r_{\perp,1}, \dots, r_{\perp,f-1}) = (r_{\parallel}, \mathbf{r}_{\perp}) \quad . \quad (2.47)$$

Weil es sich dabei um eine orthogonale Koordinatentransformation handelt, ist die zugehörige Jacobi-Determinante gleich 1. Entlang der periodischen Bahn ist die Wirkung konstant, so daß über r_{\parallel} exakt integriert wird, während man für das Integral über \mathbf{r}_{\perp} die Sattelpunktsnäherung verwendet. Man erhält also für den oszillierenden Anteil der Niveaudichte folgenden Ausdruck:

$$\delta g(E) \approx \frac{1}{\pi \hbar} \operatorname{Re} \sum_{ppo} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{ppo} - i(\mu_{ppo} + \nu_{ppo}) \frac{\pi}{2} \right) \oint_{ppo} dr_{\parallel} |\det D_{ppo}|^{1/2} |\det W_{ppo}|^{-1/2} \quad . \quad (2.48)$$

Der Index ppo stehe für die primitive, d.h. einfach durchlaufene periodische Bahn. W ist die Matrix der zweiten Ableitungen der Wirkung nach den Komponenten von \mathbf{r}_{\perp} :

$$W(r_{\parallel}) = \left(\frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}_{\perp} \partial \mathbf{r}_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}_{\perp} \partial \mathbf{r}'_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}'_{\perp} \partial \mathbf{r}_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}'_{\perp} \partial \mathbf{r}'_{\perp}} \right)_0 \quad (2.49)$$

(der Index 0 bedeute, daß die Ableitung an der periodischen Bahn, also bei $\mathbf{r}_{\perp} = \mathbf{r}'_{\perp} = 0$ genommen werde), ν ist die Zahl der negativen Eigenwerte von W . Es läßt sich zeigen [20], daß die Summe $\mu + \nu$ der Phasenindices nicht von r_{\parallel} abhängt und deshalb vor das Integral gezogen werden kann. Die Determinante von W läßt sich mit den Eigenschaften (2.41) und etwas Determinantenrechnung auch darstellen als Determinante einer $(2d-2)$ -dimensionalen Jacobimatrix:

$$\begin{aligned} |\det W(r_{\parallel})| &= \left| \det \left(\frac{\partial \mathbf{p}_{\perp}}{\partial \mathbf{r}_{\perp}} - \frac{\partial \mathbf{p}'_{\perp}}{\partial \mathbf{r}_{\perp}} + \frac{\partial \mathbf{p}_{\perp}}{\partial \mathbf{r}'_{\perp}} - \frac{\partial \mathbf{p}'_{\perp}}{\partial \mathbf{r}'_{\perp}} \right)_0 \right| \\ &= \left| \det \left(\frac{\partial (\mathbf{p}_{\perp} - \mathbf{p}'_{\perp}, \mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}'_{\perp})}{\partial (\mathbf{r}_{\perp}, \mathbf{r}'_{\perp})} \right)_0 \right| \quad . \end{aligned} \quad (2.50)$$

Auch die Determinante der Matrix D kann vereinfacht werden. Weil nämlich die erste Zeile und Spalte der linken oberen Teilmatrix von D (2.43) in dem lokalen Koordinatensystem verschwinden⁴, gilt:

$$|\det D(r_{\parallel})| = \left| \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial r_{\parallel}} \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial r'_{\parallel}} \det \left(\frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}'_{\perp} \partial \mathbf{r}_{\perp}} \right) \right| = \frac{1}{\dot{r}_{\parallel}^2} \left| \det \left(\frac{\partial \mathbf{p}'_{\perp}}{\partial \mathbf{r}_{\perp}} \right) \right|_0. \quad (2.51)$$

Damit kann der Integrand in Gl. (2.48) folgendermaßen zusammengefaßt werden⁵:

$$\begin{aligned} |\det D|^{1/2} |\det W|^{-1/2} &= \frac{1}{\dot{r}_{\parallel}} \left| \det \left(\frac{\partial \mathbf{p}'_{\perp}, \partial \mathbf{r}'_{\perp}}{\partial \mathbf{r}_{\perp}, \partial \mathbf{r}'_{\perp}} \right) \right|_0^{1/2} \left| \det \left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{\perp} - \mathbf{p}'_{\perp}, \mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}'_{\perp})}{\partial(\mathbf{r}_{\perp}, \mathbf{r}'_{\perp})} \right) \right|_0^{-1/2} \\ &= \frac{1}{\dot{r}_{\parallel}} \left| \det \left(\frac{\partial(\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}'_{\perp}, \mathbf{p}_{\perp} - \mathbf{p}'_{\perp})}{\partial(\mathbf{r}'_{\perp}, \mathbf{p}'_{\perp})} \right) \right|_0^{-1/2} \\ &= \frac{1}{\dot{r}_{\parallel}} \left| \det \left(\frac{\partial(\mathbf{r}_{\perp}, \mathbf{p}_{\perp})}{\partial(\mathbf{r}'_{\perp}, \mathbf{p}'_{\perp})} \right) \right|_0^{-1/2} = \frac{1}{\dot{r}_{\parallel}} |\det(M - \mathbb{I})|^{-1/2} \quad (2.52) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir die sogenannte Stabilitätsmatrix M definiert, die beschreibt, wie sich im Phasenraum eine auf der periodischen Bahn senkrechte, infinitesimale Störung des Anfangspunktes $(\mathbf{r}'_{\perp}, \mathbf{p}'_{\perp})$ nach einem Umlauf entlang der Bahn entwickelt, und damit eben Aufschluß über die Stabilität der Bahn im Phasenraum gibt. In Abschnitt 2.5.2 werden wir darauf näher eingehen. An dieser Stelle ist nur wichtig festzustellen, daß die Stabilitätsmatrix eine invariante Eigenschaft einer jeden periodischen Bahn ist. Insbesondere hängt sie nicht vom Startpunkt r_{\parallel} auf der Bahn ab. Die obige Determinante kann deshalb vor das Integral in Gl. (2.48) gezogen werden. Damit bleibt nur mehr das triviale Integral

$$\oint_{ppo} dr_{\parallel} \frac{1}{\dot{r}_{\parallel}} = \oint_{ppo} dt = T_{ppo} \quad (2.53)$$

übrig, das die Periode der primitiven periodischen Bahn liefert.

Faßt man nun alle Ergebnisse zusammen, erhält man schließlich die Gutzwillersche Spurformel:

$$\delta g_{\text{scI}}(E) \approx \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{po} \frac{T_{ppo}(E)}{|\det(M_{po} - \mathbb{I})|^{1/2}} \cos(S_{po}(E)/\hbar - \sigma_{po} \frac{\pi}{2}) \quad (2.54)$$

Sie kann als eine Fourier-Zerlegung für den oszillierenden Teil der Niveaudichte betrachtet werden, zu der jede klassische, periodische Bahn mit einem oszillierenden Term beiträgt. Dabei hängt die Amplitude von der Periode und (über die Stabilitätsmatrix M_{po}) v.a. von der Stabilität der jeweiligen Bahn gegenüber Störungen der Anfangsbedingungen ab, d.h. je stabiler die Bahn, umso größer ist ihr Beitrag zur Niveaudichte (s. Abschnitt 2.5.2). Die Amplitude ist i.a. eine weiche Funktion der Energie. Die Phase ist im wesentlichen gegeben durch die klassische Wirkung $S_{po} = \oint_{po} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}$ der Bahn sowie den sogenannten Maslov-Index σ_{po} , der sich aus den schon erwähnten Indices μ_{po} und ν_{po} zusammensetzt:

$$\sigma_{po} = \mu_{po} + \nu_{po} \quad (2.55)$$

⁴Zum Beweis schreibt man die Energieerhaltung in der Form $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{r}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}}) = E$ und bildet den Gradienten bzgl. \mathbf{r}' . Mit Hilfe der Hamilton-Gleichung ergibt sich die Behauptung.

⁵Mit dem Symbol „ \mathbb{I} “ bezeichnen wir die Einheitsmatrix. Ihre Dimension sollte aus dem Zusammenhang klar sein, hier also $2(d-1)$.

Der Maslov-Index einer periodischen Bahn ist eine nur von ihren topologischen Eigenschaften abhängige Konstante.

Bei der Berechnung des Spurintegrals in Sattelpunktsnäherung wurde davon ausgegangen, daß die Eigenwerte der Matrix W (2.49), also die zweiten Ableitungen der Wirkung, höchstens auf einer endlichen Zahl von Punkten verschwinden, weil die Näherung ansonsten ein divergierendes Ergebnis liefert. Die Gutzwillersche Spurformel (2.54) ist somit nur gültig, wenn es (bei fester Energie) in der Nähe einer periodischen Bahn keine andere Bahn mit gleicher Wirkung gibt, wenn alle Bahn also isoliert sind. Dies ist insbesondere in vollständig chaotischen Systemen der Fall, bei deren Beschreibung die Spurformel auch sehr erfolgreich ist [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28].

Bei Vorhandensein einer kontinuierlichen (räumlichen oder dynamischen) Symmetrie in dem betrachteten System ist die obige Bedingung nicht mehr erfüllt: Hier können Bahnen durch Anwendung von Symmetrioperationen aufeinander abgebildet werden und bilden somit kontinuierliche Familien von Bahnen mit identischer Wirkung. Man nennt diese Bahnen dann entartet (bezüglich ihrer Wirkung). Der Grad f dieser Entartung ist i.a. gleich der Dimension der zugrunde liegenden Symmetriegruppe. In konservativen Systemen hat man überdies noch Invarianz gegenüber zeitlichen Translationen. Die Elemente einer Familie überdecken daher im Integrationsgebiet eine endliche, $(f+1)$ -dimensionale Hyperfläche F , auf der zumindest ein Eigenwert von W verschwindet, so daß das Spurintegral divergiert. In der Gutzwillerschen Spurformel äußert sich das darin, daß mindestens ein Eigenwert der Stabilitätsmatrix M den Wert 1 annimmt und der Nenner damit verschwindet. Integrierte Systeme sind ein Beispiel für das Auftreten solch entarteter Bahnen.

Wie schon in Abschnitt 2.1.2 erwähnt, kann diese Entartung von klassischen Bahnen in Systemen mit sehr hoher Symmetrie auch schon auf der Ebene des Propagators bzw. der Greensfunktion auftreten.

Im nächsten Abschnitt wenden wir uns nun der Frage zu, wie der Gutzwillersche Ansatz auf Systeme mit kontinuierlicher Symmetrie erweitert werden kann.

2.2 Erweiterung auf Systeme mit Symmetrie

Viele physikalische Systeme in der Natur weisen eine kontinuierliche Symmetrie auf und erfüllen deshalb die für die Anwendbarkeit der Gutzwillerschen Spurformel nötige Voraussetzung nicht: Wenigstens einige der möglichen klassischen periodischen Bahnen sind nicht isoliert, sondern liegen vielmehr als Elemente einer ganzen Familie von entarteten Bahnen vor. Dies gilt insbesondere in den Systemen, mit denen wir uns später im Rahmen der Anwendung auf endliche Fermionensysteme beschäftigen wollen: In sphärischen bzw. axialsymmetrischen Kavitäten gehen die periodischen Bahnen in einer entarteten Familie durch Rotation um eine Symmetrieachse auseinander hervor.

Nach dem Gesagten ist aber auch klar, wie der Gutzwillersche Ansatz zu modifizieren ist, um auch für solche Systeme eine Spurformel zu erhalten: Bei der Spurbildung muß über die von einer entarteten Familie überdeckte Hyperfläche exakt integriert werden (analog dem Integral über $r_{||}$ in Gutzwillers Herleitung), während in den dazu senkrechten Richtungen weiterhin die Sattelpunktsnäherung angewandt werden kann.

Dieser Weg wurde zuerst von Strutinsky et al. [29] angewandt. Auf diese Weise konnten sie z.B. die Spurformel für ein zweidimensionales, kreisförmiges Billard bestimmen.

Ganz ähnlich konnten sie das schon erwähnte Problem lösen, daß bereits die Gutzwillersche Näherung für den Propagator (2.35) und damit auch für die Greensfunktion (2.44) divergiert. Als Beispiel sei hier die sphärische Kavität genannt, die später noch ausführlicher behandelt wird (s. Abschnitt 2.4): Sind die beiden Punkte \mathbf{r} und \mathbf{r}' verschieden, so sind alle klassischen Bahnen, die sie verbinden, isoliert. Fallen sie jedoch wie im Spurinintegral zusammen, ist die Wirkung der Bahnen stationär bezüglich einer Rotation um eine Gerade durch den Punkt $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ und den Ursprung. Zur Lösung dieses Problems gingen sie zurück zur Kompositionseigenschaft (2.24) des Propagators. Die räumlichen Argumente in den beiden Teilpropagatoren des Integranden sind verschieden, so daß dafür jeweils der Gutzwiller-Propagator eingesetzt werden kann. Das Integral über \mathbf{r}'' wird nun nicht vollständig in Sattelpunktsnäherung, sondern soweit wie möglich exakt bestimmt. Dadurch erhält man eine symmetrie-angepaßte Form des Propagators und damit der Greensfunktion, deren Spur wie oben beschrieben berechnet wird.

Im Gegensatz zur Gutzwiller-Spurformel (2.54) erhält man aber auf die beschriebene Weise keine allgemein gültige Formel mehr, in der nur noch invariante Größen der periodischen Bahnen auftauchen. Vielmehr muß für jedes System die Spur auf eine der Symmetrie entsprechende Weise erneut berechnet werden. Dies kann insbesondere dann schwierig sein, wenn keine anschauliche räumliche Symmetrie vorliegt.

Einen sehr viel allgemeineren Ansatz zur semiklassischen Beschreibung von Systemen mit kontinuierlicher Symmetrie wählten Creagh und Littlejohn [30]. Zunächst wird senkrecht zur Hyperfläche F wie schon oben in Sattelpunktsnäherung integriert. F ist für jede Bahnfamilie dadurch definiert, daß alle Elemente g der zugrunde liegenden Symmetriegruppe \mathbb{G} auf eine Referenzbahn aus dieser Familie angewandt werden. Anstatt das verbleibende Integral über F nun als räumliches Integral aufzufassen, wird deshalb vielmehr über alle Gruppenelemente g (sowie die Zeit t) integriert. Dazu benützt man das sogenannte Haar-Maß, das als natürliches Maß auf jeder kontinuierlichen Gruppe definiert ist. Das „Gruppen-Volumenelement“ ist dabei gegeben durch $d\mu(g) = d\Theta_1 \dots d\Theta_f = d\Theta$, wobei die Gruppenvariablen Θ die einzelnen Gruppenelemente parametrisieren. Auf diese Weise nützt man die jeweilige Symmetrie optimal aus: Von dem Integranden kann man nämlich durch geschicktes Umformen zeigen, daß er eine für jede Familie von Bahnen invariante Form hat. Das Integral wird dadurch (ähnlich dem über die Zeit t bei der Herleitung der Gutzwiller-Spurformel, siehe Gl. (2.53)) trivial. Insgesamt kommt man so zu einer Formel, die der Gutzwillers sehr ähnlich ist:

$$\delta g_{\text{scI}}(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \frac{1}{(2\pi \hbar)^{f/2}} \sum_F \frac{T_F V_F}{|Q_{J_F} \det(\widetilde{M}_F - \mathbb{I})|^{1/2}} \cos(S_F/\hbar - \sigma_F \frac{\pi}{2} - f \frac{\pi}{4}) \quad . \quad (2.56)$$

Summiert wird nicht mehr über einzelne periodische Bahnen, sondern über alle Bahnfamilien, die jeweils durch eine Hyperfläche F repräsentiert werden. T_F ist wieder die primitive Periode, S_F die Wirkung einer Bahn aus der Familie F . V_F ist das „Gruppenvolumen“ $V_{\mathbb{G}} = \int d\mu(g)$ bzw. bei einer zusätzlichen diskreten Symmetrie von F ein entsprechender Bruchteil davon. Die reduzierte Stabilitätsmatrix \widetilde{M}_F ist eine $2(d-f-1)$ -dimensionale Untermatrix der vollen Stabilitätsmatrix M_F . Sie zeichnet sich dadurch aus, daß die bei der Definition von M_F erwähnte infinitesimale Störung des Anfangspunktes einer periodischen Bahn im Phasenraum nicht nur senkrecht zur Bahn, sondern zu ganz F zu wählen ist. Man untersucht also eine Störung bei festgehaltenem \mathbf{L} , wobei $\mathbf{L} = (L_1, \dots, L_f)$ die zur jeweiligen Symmetrie gehörigen Erhaltungsgrößen bezeichne. J_F , der sogenannte Anholonomie-

Term, ist gewissermaßen komplementär zu \widetilde{M}_F . Er gibt nämlich — ausgedrückt durch die Gruppenkoordinaten Θ — an, um welchen Betrag sich die Bahn nicht mehr schließt, wenn man den Wert von \mathbf{L} für die Bahnfamilie F infinitesimal ändert:

$$J_F = \det \left(\frac{\partial \Theta}{\partial \mathbf{L}} \right)_F . \quad (2.57)$$

Der Faktor Q ist trivial und hängt nur von der jeweiligen Symmetrie ab. So gilt in Systemen mit abelscher (d.h. kommutativer) Symmetrie allgemein $Q = 1$ und bei sphärischer Symmetrie $Q = L^{-2}$ (L ist dabei der Betrag des Gesamtdrehimpulses). Der Maslov-Index σ_F ergibt sich wieder als die Summe der Zahl von konjugierten Punkten entlang einer Bahn aus F sowie eines Beitrages von der Spurbildung senkrecht zu F . In Abschnitt 2.5.2 werden wir diese Größen am Beispiel der Gruppe $SO(1)$, also axialer Symmetrie, genauer erläutern.

Anhand von Gl. (2.56) wird sofort einsichtig, daß der Beitrag zur Niveaudichte von einer Bahnfamilie mit Entartungsgrad f um einen Faktor $\hbar^{-f/2}$ größer ist als der einer isolierten Bahn (siehe Gl. (2.54)). Die Amplitude einer periodischen Bahn ist neben ihrer Stabilität also ganz wesentlich von ihrer Symmetrie-Entartung bestimmt.

Hier deutet sich schon ein Problem an: Ändert man einen äußeren Parameter (wie z.B. ein magnetisches Feld oder die Deformation) auch nur infinitesimal, kann sich der Entartungsgrad f einer Bahnfamilie und damit ihr Beitrag zur Niveaudichte abrupt ändern, im Gegensatz zur quantenmechanischen Niveaudichte, die sich natürlich nur wenig ändern wird. Dieser Widerspruch ist darauf zurückzuführen, daß in diesem Fall nicht mehr alle Sattelpunktsintegrationen in der Herleitung der Spurformel gerechtfertigt sind. In Kapitel 3 werden wir zeigen, wie man diesen Defekt der POT beheben kann.

Im Falle isolierter Bahnen, also für $f = 0$, entspricht Gl. (2.56) wieder genau der Gutzwiller-Formel (2.54). Ein anderer Spezialfall sind integrable Systeme (d.h. es gilt $f = d$). Hier erhält man mit Gl. (2.56) das gleiche Ergebnis wie schon Berry und Tabor [8]. Deren Ausgangspunkt ist die EBK-Quantisierung, die schon in der Einleitung erwähnt wurde. Durch Anwendung der Poisson-Summationsformel und ebenfalls der Sattelpunktsintegration erhalten sie eine Summe über alle rationalen Tori im Phasenraum, die als periodische Bahnen interpretiert werden können. Speziell für Billardsysteme wurde von Balian und Bloch eine Spurformel hergeleitet, die bei beliebiger Symmetrie gültig ist [31]. Sie benützen eine sogenannte Vielfach-Reflexions-Entwicklung der freien Greensfunktion und machen bei der Spurbildung gleichfalls Gebrauch von der Sattelpunktsnäherung. Damit kommt man (in Billardsystemen) zum gleichen Resultat wie mit der Spurformel (2.56). Eine für praktische Rechnungen sehr nützliche Spurformel für isolierte Bahnen als auch solche mit Rotationssymmetrie in einer Kavität stammt von Sieber [32]. Zur Bestimmung der semiklassischen Greensfunktion startet er nicht bei der Schrödingergleichung für die Kavität, sondern benützt eine äquivalente Randintegralgleichung. Die sich ergebende Spurformel stimmt wiederum mit Gl. (2.56) (angewandt auf Kavitäten) überein.

Damit schließen wir die allgemeine Diskussion von Spurformeln in Systemen mit und ohne kontinuierliche Symmetrie ab. Bevor wir uns nun mit speziellen Beispielen beschäftigen, möchten wir uns kurz zwei praktischen Problemen zuwenden: der Konvergenz von Spurformeln, die auf eine Mittelung hinausläuft, und der Möglichkeit, auch den oszillierenden Teil der Gesamtenergie als Spurformel auszudrücken.

2.3 Die gemittelte Niveaudichte und die Gesamtenergie

2.3.1 Die Mittelung

Da die oben besprochenen Spurformeln Näherungen für den oszillierenden Anteil der Niveaudichte darstellen, sollte man erwarten, aus der Position ihrer Pole genäherte Energie-Eigenwerte bestimmen zu können. Damit hätte man eine semiklassische Quantisierung erreicht. In der Praxis ist dies jedoch nur für wenige Modellsysteme möglich. Dies liegt daran, daß Spurformeln i.a. asymptotische Reihen sind, also nicht konvergieren, sondern vielmehr an einer bestimmten Stelle abgebrochen werden müssen. Daneben bringt die Summe über alle periodischen Bahnen auch rein praktische Probleme mit sich. Insbesondere in Systemen mit gemischter Phasenraumstruktur, die weder integrabel noch vollständig chaotisch sind, ist die systematische Suche v.a. nach längeren Bahnen sehr schwierig. In chaotischen Systemen steht man dagegen vor dem Problem, daß die Zahl der periodischen Bahnen exponentiell mit der Energie zunimmt.

Andererseits ist die semiklassische Bestimmung einzelner Energieniveaus im Hinblick auf Anwendungen (siehe Kapitel 4) aber auch gar nicht nötig. Dafür sind auch die gewählten Einteilchen-Potentiale zu modellhaft. Wir sind vielmehr an der groben Schalenstruktur interessiert, die von den Details des Spektrums relativ unabhängig ist. Diese Grobstruktur wird durch eine leicht gemittelte Niveaudichte beschrieben. Technisch entspricht dies einer Faltung der Niveaudichte mit einer symmetrischen, normierten Mittelungsfunktion, deren Breite γ größer als die Abstände zwischen den einzelnen Energieniveaus, jedoch kleiner als die Schalenabstände zu wählen ist. In dieser Arbeit benützen wir dazu eine Gaußfunktion $\frac{1}{\sqrt{\pi}\gamma}e^{-(x/\gamma)^2}$.

Quantenmechanisch bedeutet diese Faltung einfach eine Ersetzung der Deltafunktionen in Gl. (2.3) durch Gaußfunktionen (siehe Anhang A.2). Auch semiklassisch kann diese Faltung (zumindest näherungsweise) analytisch durchgeführt werden. Der glatte Anteil \tilde{g} der Niveaudichte bleibt von dieser Mittelung definitionsgemäß natürlich unberührt. Schreibt man den oszillierenden Anteil δg , also die Spurformel, in der allgemeinen Form

$$\delta g_{\text{scl}}(E) = \text{Re} \sum_{po} A_{po}(E) e^{i(S_{po}(E)/\hbar - \sigma_{po} \cdot \pi/2)} \quad (2.58)$$

(der Index „ po “ bezeichne hier je nach System eine einzelne, isolierte Bahn oder eine ganze Bahnfamilie, A_{po} stehe für die gesamte Amplitude, σ_{po} für den [je nach Symmetriegrad halb- oder ganzzahligen] Maslovindex), ist folgendes Faltungsintegral zu berechnen:

$$\delta g_{\text{scl},\gamma}(E) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\gamma_E} \text{Re} \sum_{po} \int_{-\infty}^{\infty} dE' A_{po}(E') e^{i(S_{po}(E')/\hbar - \sigma_{po} \cdot \pi/2)} e^{-((E-E')/\gamma_E)^2} \quad (2.59)$$

Nun entwickelt man die Wirkung im Exponenten bis zur ersten Ordnung in E' , wodurch wegen $\frac{dS_{po}}{dE} = T_{po}$ (siehe Gl. (2.41)) die Periode T_{po} der Bahn auftaucht. Anschließend ergänzt man den Exponenten quadratisch und bringt alle energie-unabhängigen Terme (einschließlich der Amplitude A_{po} , die nur wenig mit der Energie variiert) vor das Integral. Das verbleibende Gaußintegral kann exakt berechnet werden und hebt sich einfach gegen den Normierungsfaktor weg. Damit kommt man zu folgendem Ergebnis für die gemittelte Spurformel:

$$\delta g_{\text{scl},\gamma}(E) = \text{Re} \sum_{po} A_{po}(E) e^{i(S_{po}(E)/\hbar - \sigma_{po} \cdot \pi/2)} e^{-(\gamma_E T_{po}/2\hbar)^2} \quad (2.60)$$

Die Faltung mit einer Gaußfunktion bewirkt also, daß der Beitrag jeder Bahn(familie) entsprechend ihrer Periode exponentiell gedämpft wird. Diese zusätzliche Dämpfung garantiert die Konvergenz der Spurformel. Praktisch führt sie dazu, daß für die grobe Schalenstruktur semiklassisch nur die kürzesten Bahnen ausschlaggebend sind. Das ist auch intuitiv verständlich, wenn man sich in Erinnerung ruft, daß eine Spurformel letztlich eine Fourier-Zerlegung des oszillierenden Teils der Niveaudichte darstellt. Will man letztere nur grob auflösen, genügen dafür die Terme mit den kleinsten Wirkungen. Die Beschränkung auf relativ wenige Bahnen erleichtert die semiklassische Rechnung natürlich erheblich. Die Interpretation von Schaleneffekten im Rahmen der POT wird damit auch sehr anschaulich.

Die Mittelungsbreite γ_E hat die Dimension einer Energie und ist, wie gesagt, etwas kleiner als die typischen Schalenabstände zu wählen. Da diese Abstände i.a. aber mit der Energie variieren, muß normalerweise auch γ_E energieabhängig sein. Für Billardsysteme eignet sich, wie schon zu Beginn dieses Kapitels erwähnt, statt der Energie E besser die Wellenzahl $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ als unabhängige Variable. Das zeigt sich darin, daß die Energieschalen im k -Raum äquidistant sind. Mittelt man also die Wellenzahl-Niveaudichte⁶

$$\delta g_{\text{scl}}(k) = \text{Re} \sum_{po} A_{po}(k) e^{i(kL_{po} - \sigma_{po} \cdot \pi/2)} \quad (2.61)$$

über k , so kann man die Breite γ_k (die dann natürlich wie die Wellenzahl die Dimension einer inversen Länge hat) konstant wählen. Das Ergebnis der Faltung lautet dann

$$\delta g_{\text{scl},\gamma}(k) = \text{Re} \sum_{po} A_{po}(k) e^{i(kL_{po} - \sigma_{po} \cdot \pi/2)} e^{-\gamma_k^2 L_{po}^2/4} \quad , \quad (2.62)$$

wobei L_{po} die Länge der periodischen Bahnen bezeichnet.

2.3.2 Die Schalenkorrekturenergie

Bislang haben wir als physikalisch relevante Größe immer nur von der Einteilchen-Niveaudichte $g(E)$ gesprochen, die experimentell aber nur schwer zu bestimmen ist. Viel eher ist dagegen die in einem System enthaltene Gesamtenergie U zugänglich, deren Minima (als Funktion von Deformationsparametern) schließlich auch die uns interessierende Grundzustandsdeformation des Systems bestimmen.

U läßt sich jedoch auf die Niveaudichte zurückführen⁷,

$$U(N) = 2 \int_{-\infty}^{E_F(N)} dE E g(E) = 2 \sum_{n \leq n_{\text{max}}} d_n E_n \quad \text{mit} \quad 2 \sum_{n \leq n_{\text{max}}} d_n = N \quad , \quad (2.63)$$

und wird üblicherweise als Funktion der Teilchenzahl angegeben, die über Gl. (2.4) mit der Fermienergie E_F verknüpft ist. Der Faktor 2 berücksichtigt wieder die Spinartung. Ebenso wie die Niveaudichte läßt sich auch die Gesamtenergie in einen glatten und einen oszillierenden Anteil zerlegen,

$$U(N) = \tilde{U}(N) + \delta U(N) \quad , \quad (2.64)$$

⁶Für die dimensionsbehafteten Amplituden $A_{po}(E)$ bzw. $A_{po}(k)$ gilt in analoger Weise dieselbe Bemerkung wie für die Niveaudichten $g(E)$ bzw. $g(k)$ in der Fußnote auf Seite 8.

⁷Ist der höchste besetzte Zustand n_{max} nur teilweise besetzt, muß in dieser Gleichung der Entartungsgrad $d_{n_{\text{max}}}$ natürlich durch die tatsächliche Besetzungszahl $d_{n_{\text{max}}}^*$ ersetzt werden.

wobei \tilde{U} wiederum durch den glatten Anteil der Niveaudichte ausgedrückt wird:

$$\tilde{U}(N) = 2 \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F(N)} dE E \tilde{g}(E) \quad . \quad (2.65)$$

Die hier auftretende „glatte“ Fermienergie \tilde{E}_F ist ebenfalls durch die glatte Niveaudichte definiert,

$$\tilde{N}(\tilde{E}_F) = 2 \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} dE \tilde{g}(E) \stackrel{!}{=} N(E_F) \quad , \quad (2.66)$$

und ist i.a. nicht identisch mit der exakten Fermienergie E_F (siehe Gl. (2.4)). Wir interessieren uns hier v.a. für den oszillierenden Anteil δU der Gesamtenergie, auch Schalenkorrektur-Energie genannt, da er die Information über die Schaleneffekte trägt (siehe Abschnitt 4.1). Die quantenmechanische Berechnung von δU wird in Anhang A.3 beschrieben.

δU kann zumindest näherungsweise auch durch δg ausgedrückt werden. Dazu schreibt man die Fermienergie in der Form $E_F = \tilde{E}_F + \delta E_F$ und entwickelt zunächst die Gesamtenergie U (2.63) bis zur ersten Ordnung in δE_F :

$$U(N) \approx 2 \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} dE E g(E) + 2 \tilde{E}_F g(\tilde{E}_F) \delta E_F \quad . \quad (2.67)$$

Ganz analog entwickelt man die Teilchenzahl N (2.4), löst dann nach δE_F auf und setzt das Ergebnis wieder in Gl. (2.67) ein. Damit findet man für δU folgende Integraldarstellung:

$$\delta U(N) = U(N) - \tilde{U}(N) = 2 \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} dE \left(E - \tilde{E}_F \right) \delta g(E) + \mathcal{O} \left((\delta E_F)^2 \right) \quad . \quad (2.68)$$

Um nun einen semiklassischen Ausdruck für δU erhalten, setzen wir für δg die allgemeine Spurformel (2.58) ein. Um zu einem analytischen Ergebnis für das Integral zu kommen, verwenden wir die gleichen Näherungen wie schon bei der Berechnung der gemittelten Spurformel im letzten Abschnitt. Damit das dabei auftretende Integral

$$\int_{-\infty}^0 dE' E' e^{\frac{i}{\hbar} T_{po} E'} \quad (2.69)$$

konvergiert, gibt man der Periode T_{po} noch einen kleinen, negativen Imaginärteil, den man anschließend wieder gegen Null gehen läßt. Das Endergebnis ist schließlich

$$\delta U_{\text{scl}}(N) \approx 2 \operatorname{Im} \sum_{po} \left(\frac{\hbar}{T_{po}} \right)^2 A_{po}(\tilde{E}_F) e^{i(S_{po}(\tilde{E}_F)/\hbar - \sigma_{po} \cdot \pi/2)} \quad (2.70)$$

bzw. für Billardsysteme (mit einer typischen Länge R und der daraus folgenden natürlichen Energieeinheit $E_0 = \frac{\hbar^2}{2mR^2}$)

$$\delta U_{\text{scl}}(N) \approx 4 E_0 \operatorname{Im} \sum_{po} \frac{\tilde{k}_F}{(L_{po}/R)^2} A_{po}(\tilde{k}_F) e^{i(\tilde{k}_F L_{po} - \sigma_{po} \cdot \pi/2)} \quad . \quad (2.71)$$

Man erhält also auch für δU einen Spurformel-ähnlichen Ausdruck. Im Vergleich zur Niveaudichte wird jedoch der Beitrag jeder Bahn(familie) entsprechend dem Quadrat ihrer

Periode gedämpft. Dieser zusätzliche Dämpfungsfaktor sichert ähnlich wie die Mittelung im vorhergehenden Abschnitt die Konvergenz der Reihe und erlaubt es in praktischen Anwendungen, sich wiederum auf die kürzesten Bahnen zu beschränken.

Um \tilde{E}_F bzw. \tilde{k}_F als Funktion der Teilchenzahl zu berechnen, benützt man zunächst Gl. (2.66), wobei man für $\tilde{g}(E)$ bzw. $\tilde{g}(k)$ die verallgemeinerte Weyl-Formel verwendet und dann nach \tilde{E}_F bzw. \tilde{k}_F auflöst (siehe Anhang A.2).

2.4 Die sphärische Kavität

Nachdem wir nun die allgemeine Theorie der periodischen Bahnen behandelt haben, kommen wir jetzt zu den schon in der Einleitung erwähnten speziellen Beispielen, mit denen wir endliche Fermionensysteme semiklassisch beschreiben wollen (siehe Kapitel 4). Im nächsten Abschnitt werden wir die Spurformel für eine (im Prinzip) beliebig deformierte, aber immer noch axialsymmetrische Kavität herleiten, in diesem Abschnitt beschäftigen wir uns zunächst mit der sphärischen Kavität.

Eine Kavität ist ganz allgemein ein dreidimensionales System, das durch ein unendlich hohes Kastenpotential mit harten Wänden beschrieben wird. Die Bewegung eines Teilchens ist also auf das Innere der Kavität beschränkt, wo es sich wegen des verschwindenden Potentials auf Geraden frei bewegt, bis es an der Wand spiegelnd reflektiert wird. Die klassischen, periodischen Bahnen eines solchen Systems sind somit einfach Polygone. In einer sphärischen Kavität sind sogar nur ebene, reguläre Polygone möglich (vgl. Abb. 2.2). Man kann sie durch ihre Eckenzahl n und Windungszahl t eindeutig charakterisieren. Für die Durchmesser-Bahn gilt $n = 2t$, für alle anderen $n > 2t$.

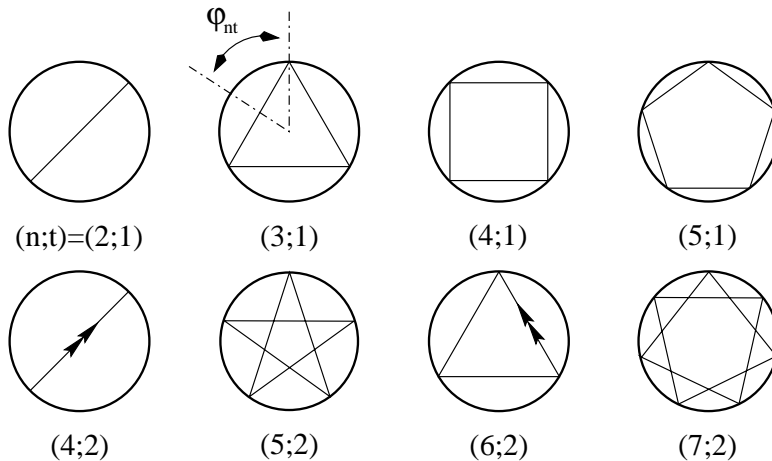


ABBILDUNG 2.2: Die kürzesten periodischen Bahnen in einer kugelförmigen Kavität, klassifiziert durch Ecken- und Windungszahl $(n;t)$. Die dargestellte Ebene enthält jeweils den Mittelpunkt der Kavität und kann beliebig zu ihm orientiert sein. Doppelpfeile sollen andeuten, daß die Bahn zweifach durchlaufen wird.

Wegen des verschwindenden Potentials im Inneren ist die Wirkung einer Bahn einfach proportional zu ihrer Länge L_{nt} sowie zur Wellenzahl $k = \sqrt{2mE}/\hbar$:

$$S_{nt}(k) = \hbar k \cdot L_{nt} \quad . \quad (2.72)$$

Im folgenden werden wir auch alle anderen energieabhängigen Größen als Funktion der Wellenzahl angeben. Für die Länge findet man rein geometrisch

$$L_{nt} = 2Rn \cdot \sin \varphi_{nt} \quad , \quad (2.73)$$

wobei R der Radius der Kavität ist und $\varphi_{nt} = \frac{t}{n}\pi$ die Hälfte des Winkels, der von einer Polygonseite aufgespannt wird.

Die $SO(3)$ -Symmetrie des Systems äußert sich darin, daß sowohl die Bahnen in ihrer Ebene als auch diese Ebenen selbst beliebig um den Mittelpunkt orientierbar sind. Die (echten) Polygon-Bahnen bilden somit eine entartete Familie mit Entartungsgrad $f=3$. Um nämlich eine bestimmte Bahn innerhalb dieser Familie eindeutig festlegen zu können, braucht man — entsprechend der Dimension der Gruppe $SO(3)$ — drei Parameter. Eine mögliche Wahl sind die Angabe einer Drehachse und eines Drehwinkels, um die man eine feste Referenzbahn drehen muß, um zur jeweiligen Bahn zu gelangen. In dieser Arbeit verwenden wir die drei Euler-Winkel, die die relative Lage des Polygons innerhalb der Bewegungsebene sowie die Richtung der Normale auf diese Ebene beschreiben (siehe Abschnitt 3.3.1 für eine genauere Definition).

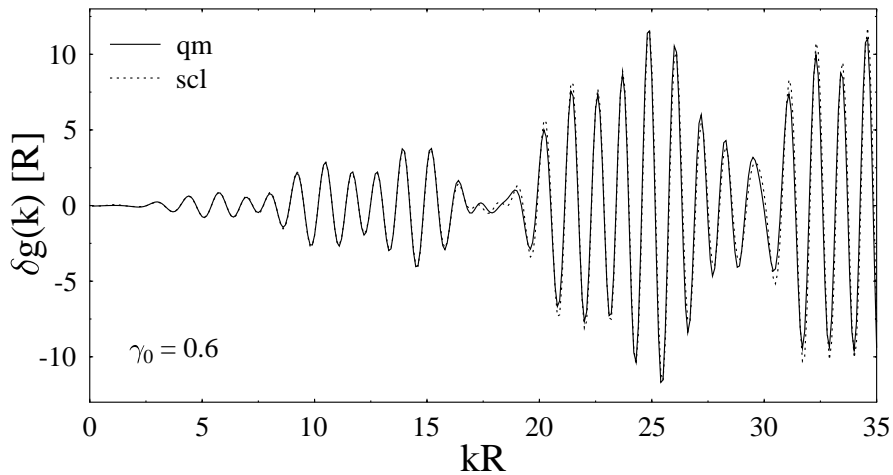


ABBILDUNG 2.3: *Oszillierender Anteil der Niveaudichte für eine sphärische Kavität: Vergleich zwischen quantenmechanischem (durchgezogene Linie) und semiklassischem Ergebnis (gestrichelte Linie).*

Die Entartung der Polygonbahnen in einer sphärischen Kavität geht natürlich ganz entscheidend bei der Herleitung der Spurformel für dieses System mit ein. Diese wurde zum ersten Mal von Balian und Bloch angegeben [31]. Strutinsky et al. [29] fanden mit Hilfe der in Abschnitt 2.2 beschriebenen erweiterten Gutzwiller-Theorie das gleiche Ergebnis.

Auch die allgemeine Spurformel von Creagh und Littlejohn [30] (siehe Abschnitt 2.2) führt zu diesem Resultat. An dieser Stelle geben wir deshalb nur mehr das Ergebnis an:

$$\begin{aligned} \delta g_{\text{scl}}(k) = & R \frac{2}{\sqrt{\pi}} (kR)^{3/2} \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{n>2t} (-1)^t \sin(2\varphi_{nt}) \sqrt{\frac{\sin \varphi_{nt}}{n}} \sin \left(kL_{nt} - \frac{3}{2}n\pi + \frac{3}{4}\pi \right) \\ & - R \frac{kR}{\pi} \sum_{t=1}^{\infty} \frac{1}{t} \sin(4tkR) \quad . \end{aligned} \quad (2.74)$$

Der erste Term auf der rechten Seite von Gl. (2.74) ist der Beitrag der echten Polygonbahnen mit $n > 2t$, der zweite der der Durchmesserbahnen ($n = 2t$). Da letztere bei einer Rotation um die eigene Achse wieder nur auf sich selbst abgebildet werden, sind sie nur zweifach entartet. Sie tragen daher in höherer Ordnung von \hbar zur Niveaudichte bei und können in praktischen Rechnungen vernachlässigt werden.

Abb. 2.3 zeigt den mit Gl. (2.74) berechneten oszillierenden Anteil der Niveaudichte für eine sphärische Kavität. Dabei haben wir eine Mittelungsbreite $\gamma_0 = 0.6$ verwendet⁸. Die Übereinstimmung mit dem entsprechenden quantenmechanischen Resultat (durchgezogene Linie) ist offensichtlich sehr gut. Die einzelnen Energieschalen sind deutlich sichtbar. Darüber hinaus erkennt man aber noch eine zusätzliche Modulation dieser Schalen, die unter der Bezeichnung „Superschalen“ bekannt ist. Dieses Schwebungsmuster ist zurückzuführen auf die Interferenz der Beiträge von Dreiecks- und Vierecksbahn ($n = 3$ bzw. 4, $t = 1$), die sich in ihrer Länge nur wenig unterscheiden.

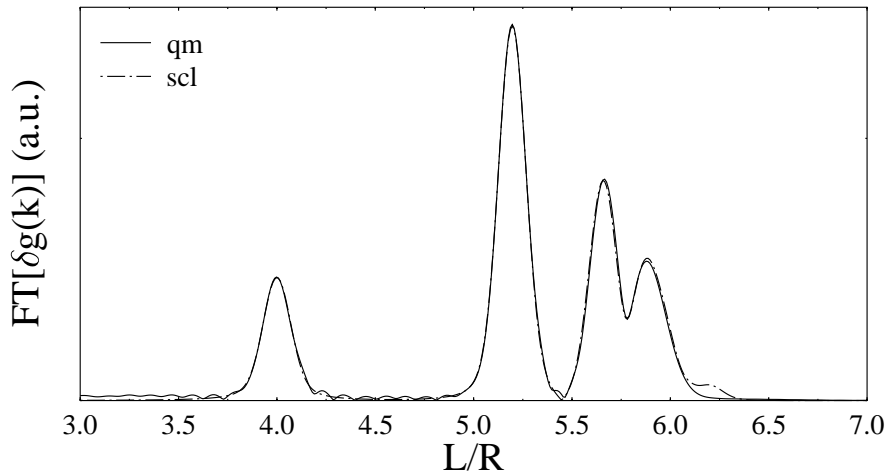


ABBILDUNG 2.4: *Fourierspektrum von $\delta g(k)$ für eine sphärische Kavität (quantenmechanisches und semiklassisches Ergebnis). Die Peaks entsprechen (von links nach rechts) den Bahnen mit $n=2$ bis 5. Längere Bahnen tragen wegen der exponentiellen Dämpfung nicht mehr erkennbar bei.*

⁸Statt der dimensionsbehafteten Breite γ_k geben wir im folgenden immer das dimensionslose $\gamma_0 = \gamma_k R$ an.

Wie schon gesagt, kann die Spurformel als eine Fourierdarstellung des oszillierenden Teils der Niveaudichte interpretiert werden. Unterzieht man daher $\delta g(k)$ einer Fouriertransformation bzgl. k (auf technische Einzelheiten dazu gehen wir in Anhang A.2 ein), erwartet man Peaks genau bei den Längen, die einer periodischen Bahn entsprechen. Der Vergleich der so erhaltenen quantenmechanischen und semiklassischen Fourieramplituden stellt auch einen sehr genauen Test der Qualität der semiklassischen Näherung dar. In Abb. 2.4 zeigen wir das Ergebnis dieses Vergleichs für die sphärische Kavität. Die Position der einzelnen Peaks entspricht genau den Längen der oben diskutierten Polygonbahnen. Deutlich erkennt man auch, daß der Beitrag der Durchmesserbahn bei $L=4R$ wie erwartet trotz der geringen Länge kleiner ist als der der übrigen Bahnen. Deren Amplitude nimmt wegen der Mittelung in δg mit zunehmender Länge ab. Die gute Übereinstimmung der beiden Fourierspektren zeigt, wie gut die semiklassische Näherung in diesem Fall ist.

Schon mit dem einfachen Modell der sphärischen Kavität können einige typische Schalleneffekte von endlichen Fermionensystemen — insbesondere das Auftreten von Superschalen — semiklassisch sehr einfach und anschaulich interpretiert werden. Trotzdem muß man natürlich Deformationen berücksichtigen, um zu einer realistischeren Beschreibung zu kommen. Im nächsten Abschnitt werden wir deshalb die Spurformel für axial deformierte Kavitäten herleiten. Die Spurformel (2.74) für die sphärische Kavität wird aber in Kapitel 3 als Ausgangspunkt einer semiklassischen Störungstheorie wieder wichtig werden.

2.5 Die axialsymmetrische Kavität

Indem man von der sphärischen Symmetrie abgeht und nur mehr axiale Symmetrie fordert, hat man im Prinzip unendlich viele Deformations-Freiheitsgrade zur Verfügung. In der Praxis verwendet man daher eine empirische Parametrisierung der Oberfläche der axialen Kavität, die einerseits dem zu beschreibenden physikalischen System angepaßt ist und andererseits mit möglichst wenig Parametern auskommt. Die in dieser Arbeit benützte Parametrisierung wird bei der Anwendung in Kapitel 4 erläutert, da sie in die Spurformel nicht direkt eingeht.

Im folgenden Abschnitt gehen wir zunächst darauf ein, welche periodischen Bahnen in einer axialen Kavität auftreten.

2.5.1 Die periodischen Bahnen

Grundsätzlich ist klar, daß auch in einer deformierten Kavität alle periodischen Bahnen wiederum Polygone sind. Aufgrund der axialen Symmetrie haben sie jeweils eine feste Komponente l_z des Drehimpulses entlang der z -Achse, die wir als Symmetrieachse wählen. Geometrisch zeigt sich die Symmetrie darin, daß man durch Rotation einer periodischen Bahn um einen beliebigen Winkel um die z -Achse wieder eine periodische Bahn mit identischer Länge und somit Wirkung erhält. Wir haben es also mit einer Familie von einfach entarteten Bahnen zu tun ($f=1$), deren Spurformel durch Gl. (2.56) gegeben ist. Eine Ausnahme stellt die bei jeder Deformation existierende Durchmesserbahn entlang der z -Achse dar. Sie ist isoliert, wird also durch die Gutzwiller-Spurformel (2.54) beschrieben. Allerdings ist ihr Beitrag zur Gesamtniveaudichte (außer bei stark oblaten Deformationen, wo sie die kürzeste Bahn ist) eben wegen ihrer geringeren Symmetrie normalerweise sehr klein.

Im Gegensatz zur sphärischen Kavität, wo alle periodischen Bahnen planar sind, können in einer deformierten Kavität auch nicht-planare Bahnen auftreten. Dies geschieht norma-

erweise aber erst bei relativ großen Deformationen. Außerdem sind diese Bahnen dann gewöhnlich vergleichsweise lang, so daß man sie in einer semiklassischen Beschreibung der groben Schalenstruktur vernachlässigen kann. In dieser Arbeit erscheinen sie nur im Zusammenhang mit den Bifurkationen der Äquatorbahnen (siehe Abschnitt 3.2.1), ansonsten berücksichtigen wir nur planare Bahnen.

Diese planaren Bahnen kann man nach der Lage ihrer Bewegungsebene in verschiedene Klassen einteilen. Die einfachsten sind die sogenannten Äquatorbahnen. Ihre Bewegungsebene steht senkrecht zur Symmetrieachse an den Stellen, an denen die Oberfläche der Kavität eine Tangente parallel zur z -Achse besitzt, d.h. die Ebene schneidet die Kavität im rechten Winkel (siehe Abb. 2.5, links). Die Schnittkurve ist einfach ein Kreis, die periodischen Bahnen sind die gleichen regulären Polygone, wie wir sie schon bei der sphärischen Kavität besprochen haben. Sie haben hier nur einen geringeren Entartungsgrad $f = 1$. Unabhängig von der Deformation existiert immer mindestens eine Äquatorbahnebene, i.a. sind aber auch mehrere möglich.

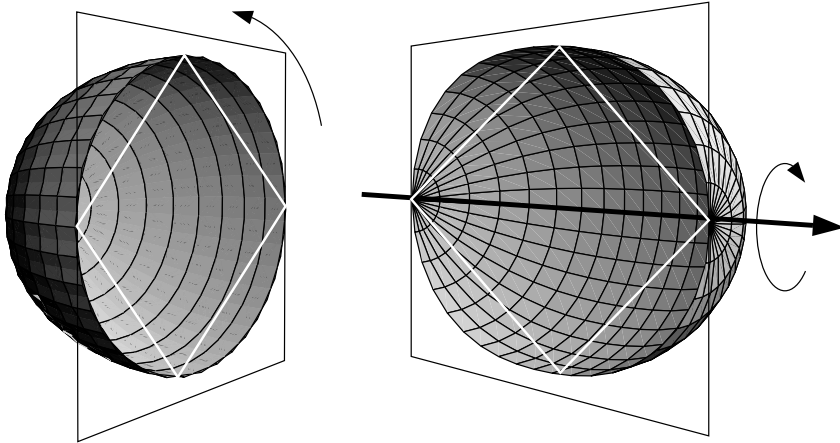


ABBILDUNG 2.5: Die Lage der Bewegungsebenen von Äquator- (links) und Meridianbahnen (rechts), dargestellt am Beispiel der Vierecksbahn in einer quadrupol-deformierten Kavität. Der dicke Pfeil bezeichnet die Symmetrieachse, die dünnen Pfeile deuten eine mögliche Rotation der Bahn an, die deren Eigenschaften aber unverändert lassen.

Eine andere Klasse von planaren Bahnen sind die Meridianbahnen, deren Bewegungsebene die Symmetrieachse enthält (siehe Abb. 2.5, rechts). Es handelt sich somit um die gleichen Bahnen wie in einem zweidimensionalen Billard, aus dem durch Rotation um die z -Achse die Kavität hervorgeht. Ist dieses Billard integrabel (wie z.B. bei einer elliptischen Berandung⁹), so kann man die periodischen Bahnen analytisch bestimmen. In einem streng chaotischen Billard kann man dazu die Methode der symbolischen Dynamik verwenden. I.a. ist das Auffinden dieser Bahnen jedoch nur mehr numerisch möglich. In Anhang B beschreiben wir einen entsprechenden, einfachen Algorithmus.

⁹In diesem Fall ist neben der Energie das Produkt der Drehimpulse bezüglich der beiden Brennpunkte eine weitere Erhaltungsgröße.

In der letzten Klasse fassen wir alle übrigen planaren Bahnen zusammen. Im Gegensatz zu den Äquator- und Meridianbahnen existieren sie nicht für jede Deformation, da ihre Bewegungsebene gewissermaßen schief zur Symmetrieachse liegen müßte. In dieser Arbeit vernachlässigen wir sie (bis auf eine Erwähnung in Abschnitt 3.2.1) ganz.

Nachdem wir uns nun klargemacht haben, welche periodischen Bahnen es in einer axial-symmetrischen Kavität gibt, werden wir im folgenden Abschnitt die Spurformel für dieses System herleiten. Dabei erleichtert die Beschränkung auf Äquator- und Meridianbahnen die Rechnung erheblich, weil man es nämlich im wesentlichen nur mehr mit einer zwei-dimensionalen Dynamik zu tun hat.

2.5.2 Die Spurformel

Unser Ausgangspunkt ist die allgemeine Spurformel (2.56) für Systeme mit entarteten periodischen Bahnen. Inhalt dieses Abschnittes ist die Herleitung konkreter Ausdrücke für die einzelnen Größen, die dort auftauchen. Dabei zeigt sich, daß sowohl die reduzierte Stabilitätsmatrix \widetilde{M} als auch der Anholonomieterm J und der Maslovindex σ mit Hilfe der vollen Stabilitätsmatrix M bestimmt werden können. Daher beschäftigen wir uns zunächst etwas eingehender mit ihr.

Die Stabilitätsmatrix

Gegeben sei eine geschlossene, klassische Bahn mit Periode T . Betrachten wir nun eine infinitesimale Störung $(\delta\mathbf{r}', \delta\mathbf{p}')$ des Anfangspunktes im Phasenraum. Sie bewirkt eine infinitesimale Verschiebung $(\delta\mathbf{r}, \delta\mathbf{p})$ des Endpunktes nach der Zeit T . Der lineare Zusammenhang zwischen beiden ist durch die sogenannte Monodromiematrix \mathcal{M} gegeben:

$$\begin{pmatrix} \delta\mathbf{r} \\ \delta\mathbf{p} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \delta\mathbf{r}' \\ \delta\mathbf{p}' \end{pmatrix} . \quad (2.75)$$

\mathcal{M} ist eine $2d$ -dimensionale Matrix. Sie ist i.a. nicht symmetrisch, dafür aber symplektisch, d.h. ihre Eigenwerte treten in Paaren auf, deren Produkt 1 ist. Weiterhin haben in konservativen Systemen zwei dieser Eigenwerte den Wert 1. Die zugehörigen Eigenvektoren entsprechen einer infinitesimalen Änderung der Energie bzw. einer Verschiebung entlang der Bahn. Die Stabilitätsmatrix M , die schon bei der Diskussion der Gutzwiller-Spurformel (2.54) auftauchte, ist nun jene $2(d-1)$ -dimensionale Untermatrix von \mathcal{M} , die die trivialen Eigenwerte 1 nicht enthält. Ihre Eigenvektoren stehen senkrecht zu der Bahn, ihre Eigenwerte geben Aufschluß über deren Stabilität.

In Billardsystemen läßt sich die Stabilitätsmatrix wegen der relativ einfachen klassischen Dynamik analytisch angeben [33]. Zunächst gehen wir auf den zweidimensionalen Fall ein, der dann leicht auf drei Dimensionen verallgemeinert werden kann.

Die Bewegung eines Teilchens in einem Billard setzt sich zusammen aus aufeinanderfolgenden Paaren von reiner Translationsbewegung (d.h. das Teilchen bewegt sich frei auf einer Geraden) und anschließender Reflexion an der Wand. Jede dieser Teilbewegungen wird durch eine entsprechende zweidimensionale Teilstabilitätsmatrix M_T bzw. M_R beschrieben, die man rein geometrisch herleiten kann:

$$M_T = \begin{pmatrix} 1 & l/p \\ 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad M_R = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \frac{2p}{R_0 \sin \alpha} & -1 \end{pmatrix} . \quad (2.76)$$

Dabei ist l die Länge des jeweiligen Bahnsegmentes, p der Betrag des Impulses, R_0 der Krümmungsradius der Billardberandung am entsprechenden Reflexionspunkt und α der Einfallswinkel des Teilchens in diesem Punkt, gemessen gegen die Tangente an die Randkurve. Die gesamte Stabilitätsmatrix einer periodischen Bahn mit n Reflexionen ist dann das Produkt der jeweiligen Paare von Teilmatrizen:

$$M = \prod_{j=1}^n M_R^{(j)} M_T^{(j \leftarrow j-1)} \quad . \quad (2.77)$$

In drei Dimensionen wählt man sinnvollerweise ein lokales Koordinatensystem $(r_{\parallel}, r_{\perp})$, dessen Achsen senkrecht zur Bahn und parallel bzw. senkrecht zu der momentanen Bewegungsebene¹⁰ orientiert sind, die in jedem Reflexionspunkt von dem ein- und dem auslaufenden Bahnsegment definiert wird.

Die Translationsmatrix M_T kann dann sofort auf den dreidimensionalen Fall erweitert werden. Für den Fall, daß eine der beiden Hauptkrümmungsrichtungen in der momentanen Bewegungsebene liegt, gilt dies auch für die Reflexionsmatrix M_R . Wählt man die Phasenraumkoordinaten in der Reihenfolge $(r_{\parallel}, p_{\parallel}, r_{\perp}, p_{\perp})$, so haben beide Blockform:

$$M_T = \begin{pmatrix} M_{T,\parallel} & 0 \\ 0 & M_{T,\perp} \end{pmatrix} \quad , \quad M_R = \begin{pmatrix} M_{R,\parallel} & 0 \\ 0 & M_{R,\perp} \end{pmatrix} \quad . \quad (2.78)$$

Die Untermatrizen $M_{T,\parallel} = M_{T,\perp}$ sind identisch mit der entsprechenden zweidimensionalen Matrix (2.76), ebenso $M_{R,\parallel}$, wobei jedoch R_0 durch den Hauptkrümmungsradius R_{\parallel} in der Ebene zu ersetzen ist. In $M_{R,\perp}$ erscheint entsprechend der zweite Hauptkrümmungsradius R_{\perp} :

$$M_{R,\perp} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{2p \sin \alpha}{R_{\perp}} & 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.79)$$

Die Verallgemeinerung der Matrix M_R auf den Fall, daß keine der beiden Hauptkrümmungsrichtungen in der Bewegungsebene liegt, ist in [32] angegeben. Im ganz allgemeinen Fall nicht-ebener Bahnen taucht noch eine dritte Matrix auf, die die Drehung des lokalen Koordinatensystems nach jeder Reflexion beschreibt. Da beide Verallgemeinerungen aber für die uns interessierenden Äquator- und Meridianbahnen nicht nötig sind, gehen wir hier nicht näher darauf ein. Die Gesamtstabilitätsmatrix ist dann durch das zu Gl. (2.77) analoge Produkt der oben erläuterten (4×4) -Matrizen gegeben und hat ebenfalls Blockform, wobei die einzelnen Blöcke die Bewegung parallel bzw. senkrecht zur Bewegungsebene beschreiben:

$$M = \begin{pmatrix} M_{\parallel} & 0 \\ 0 & M_{\perp} \end{pmatrix} \quad , \quad M_{\parallel/\perp} = \prod_{j=1}^n M_{R,\parallel/\perp}^{(j)} M_{T,\parallel/\perp}^{(j \leftarrow j-1)} \quad . \quad (2.80)$$

Die reduzierte Stabilitätsmatrix

Die Stabilitätsmatrix M_F einer Familie F von periodischen Bahnen hat aufgrund der axialen Symmetrie wiederum zwei triviale Eigenwerte 1. Die zugehörigen Eigenvektoren liegen

¹⁰Die Indices „ \parallel “ und „ \perp “ beziehen sich hier also auf die Lage relativ zur Bewegungsebene und nicht wie in Abschnitt 2.1.3 zur Bahn selbst. Vielmehr hat der dort verwendete Vektor r_{\perp} hier die zwei Komponenten r_{\parallel} und r_{\perp} .

nämlich parallel zu der von F im Phasenraum aufgespannten Hyperfläche, beschreiben also eine infinitesimale Drehung um die Symmetrieachse bzw. eine Änderung von l_z . Die reduzierte Stabilitätsmatrix \widetilde{M} , die in die Spurformel (2.56) eingeht, ist dann die zweidimensionale Untermatrix von M , die die nichttrivialen Eigenwerte enthält. Mit anderen Worten muß die bei der Definition der Stabilitätsmatrix erwähnte Störung des Anfangspunktes einer Bahn im Phasenraum senkrecht zu ganz F gewählt werden, so daß dabei neben der Energie auch l_z erhalten bleibt. Für die Klasse der Äquatorbahnen bedeutet dies anschaulich, daß der Störvektor senkrecht auf ihrer Bewegungsebene stehen muß. \widetilde{M} ist dann gegeben durch die Matrix M_\perp in Gl. (2.80). Ganz analog gilt für die Meridianbahnen $\widetilde{M} = M_\parallel$.

λ_1 und λ_2 bezeichne die beiden Eigenwerte von \widetilde{M} , λ_1^r und λ_2^r entsprechend die Eigenwerte der zur r -fach durchlaufenen Bahn gehörigen Matrix \widetilde{M}^r . Da λ_1 und λ_2 zueinander invers sind, kann man sie einfach durch die Spur von \widetilde{M} ausdrücken:

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} \operatorname{tr} \widetilde{M} \pm \sqrt{\frac{1}{4} (\operatorname{tr} \widetilde{M})^2 - 1} \quad . \quad (2.81)$$

Abhängig vom Wert von $\operatorname{tr} \widetilde{M}$ kann man nun eine Aussage über die Stabilität der jeweiligen Bahn treffen. Im Fall $|\operatorname{tr} \widetilde{M}| < 2$ ist $\lambda_{1/2}$ eine komplexe Zahl vom Betrag 1, $\lambda_{1/2}^r$ kann daher mit dem sogenannten Stabilitätswinkel

$$\chi_s = \arccos \left(\frac{1}{2} \operatorname{tr} \widetilde{M} \right) \quad (2.82)$$

dargestellt werden als $\lambda_{1/2}^r = e^{\pm i r \chi_s}$. Eine kleine Störung der Anfangsbedingungen führt also nur zu einer Oszillation um die klassische Bahn, die somit stabil ist. Entsprechend gilt für eine instabile Bahn $|\operatorname{tr} \widetilde{M}| > 2$. $\lambda_{1/2}$ ist dann reell, $\lambda_{1/2}^r$ kann geschrieben werden als $\lambda_{1/2}^r = e^{\pm r \chi_u}$, wobei der Ljapunow-Exponent

$$\chi_u = \operatorname{Arcosh} \left(\frac{1}{2} |\operatorname{tr} \widetilde{M}| \right) \quad (2.83)$$

ein Maß für das exponentielle Wegdriften der gestörten Bahn ist. Der Spezialfall $|\operatorname{tr} \widetilde{M}| = 2$ führt zu einer Divergenz, deren physikalische Bedeutung und mathematische Behandlung Thema in Kapitel 3 ist.

Auch der in der Spurformel (2.56)¹¹ stehende Stabilitätsterm $\Delta := |\det(\widetilde{M}^r - \mathbb{I})|^{1/2}$ kann durch den Stabilitätswinkel bzw. den Ljapunow-Exponenten ausgedrückt werden. Man findet leicht

$$\Delta = \begin{cases} 2 \left| \sin \frac{r \chi_s}{2} \right| & \left(|\operatorname{tr} \widetilde{M}| < 2 \right) \\ 2 \sinh \frac{r \chi_u}{2} & \left(\operatorname{tr} \widetilde{M} > 2 \quad \vee \quad (\operatorname{tr} \widetilde{M} < -2 \quad \wedge \quad r \text{ gerade}) \right) \\ 2 \cosh \frac{r \chi_u}{2} & \left(\operatorname{tr} \widetilde{M} < -2 \quad \wedge \quad r \text{ ungerade} \right) \end{cases} \quad . \quad (2.84)$$

Im ersten Fall spricht man auch von elliptischen, in den anderen von hyperbolischen Bahnen.

¹¹Die r -fachen Wiederholungen der periodischen Bahnen sind dort implizit in der Summe über alle Bahnen miteingeschlossen.

Die obigen Ausdrücke lassen sich für eine Äquatorbahn noch vereinfachen, weil deren n Bahnsegmente alle gleichwertig sind. Für die reduzierte Stabilitätsmatrix gilt

$$\widetilde{M} = M_{\perp} = (M_{R,\perp} M_{T,\perp})^n = \begin{pmatrix} 1 & l_{nt}/p \\ -\frac{2p \sin \alpha_{nt}}{R_{\perp}} & 1 - \frac{2l_{nt} \sin \alpha_{nt}}{R_{\perp}} \end{pmatrix}^n. \quad (2.85)$$

Dabei ist R_{\perp} der Krümmungsradius in einer Ebene senkrecht zur Äquatorbahnebene. Er ist einer der beiden Hauptkrümmungsradien der Kavität und identisch mit dem Krümmungsradius eines Billards, das durch Projektion der Kavität auf die z - ρ -Ebene entsteht. Im folgenden nennen wir ihn R_1 . Für den Einfallswinkel α_{nt} gilt $\alpha_{nt} = \varphi_{nt}$ mit $\varphi_{nt} = \frac{t}{n}\pi$. $l_{nt} = 2R_{\parallel} \sin \varphi_{nt}$ bezeichnet die Länge eines Bahnsegmentes. R_{\parallel} ist der Krümmungsradius in der Bahnebene und für Äquatorbahnen identisch mit dem anderen Hauptkrümmungsradius R_2 der Kavität. Auf die Berechnung der Hauptkrümmungsradien gehen wir in Anhang C ein. $p = \hbar k$ ist der Impuls.

Die gesamte Äquatorbahn ist die n -fache Wiederholung eines Segments. Der Stabilitätsterm ist somit durch Gl. (2.84) gegeben, wobei $r = n$ zu setzen und statt $\text{tr} \widetilde{M}$ nur die Spur der Teilmatrix $(M_{R,\perp} M_{T,\perp})$ zu bestimmen ist:

$$\text{tr}(M_{R,\perp} M_{T,\perp}) = 2 - \frac{2l_{nt} \sin \alpha_{nt}}{R_{\perp}} = 2 - 4 \frac{R_2}{R_1} \sin^2 \varphi_{nt}. \quad (2.86)$$

Für eine Äquatorbahn ist der Stabilitätsterm also analytisch gegeben und hängt nur ab von der Ecken- und Windungszahl der Bahn und den beiden Hauptkrümmungsradien der Kavität (an der Stelle, wo sie die Äquatorbahnebene schneidet).

Bei den Meridianbahnen ist solch eine geschlossene Lösung nicht allgemein möglich. Vielmehr muß man die Spur der gesamten reduzierten Stabilitätsmatrix $\widetilde{M} = M_{\parallel}$ (2.80) berechnen, wobei $R_{\parallel} = R_1$ und $R_{\perp} = R_2$ zu setzen ist.

Der Anholonomieterm

Der Anholonomieterm J wurde in Abschnitt 2.2 schon allgemein definiert. In unserem speziellen Fall axialer Symmetrie ($f = 1$) ist er ein Skalar.

Ändert man den Wert der z -Komponente l_z des Drehimpulses einer periodischen Bahn infinitesimal, so ist diese Bahn i.a. nicht mehr geschlossen, sondern ihr Endpunkt ist um einen infinitesimalen Rotationswinkel $d\varphi$ gegen den Anfangspunkt verschoben. J ist dann der Quotient

$$J = \frac{d\varphi}{dl_z}. \quad (2.87)$$

Für eine Kavität kann man diese Größe anhand einfacher geometrischer Überlegungen wiederum auf die Stabilitätsmatrix zurückführen. Betrachten wir dazu die Projektion zunächst des ersten Segmentes einer Bahn auf die x - y -Ebene (siehe Abb. 2.6). p_{ρ} sei die entsprechende Komponente des Impulses, ρ die des Radialstrahls eines Punktes auf der Bahn und η der Zwischenwinkel. l_z ist gegeben durch $l_z = p_{\rho} \rho \sin \eta = p_{\rho} \rho_{\min}$, wobei ρ_{\min} der minimale, senkrechte Abstand der Bahn zur z -Achse ist. Die Variation von l_z ist also $dl_z = \rho_{\min} dp_{\rho} + p_{\rho} d\rho_{\min}$. Davon verschwindet der erste Summand: Bei den Äquatorbahnen ist p_{ρ} gleich dem Betrag des Gesamtimpulses, dp_{ρ} entspricht somit auch einer Variation der Energie, die aber konstant gehalten werden soll. Für die Meridianbahnen

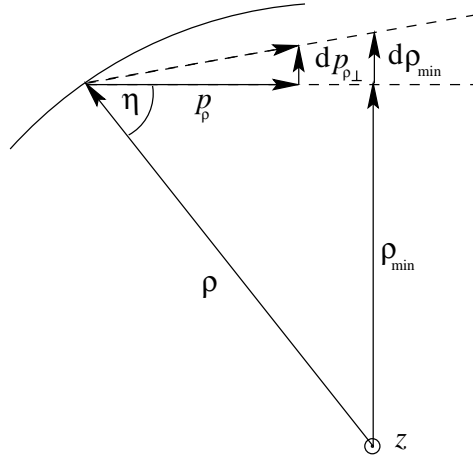


ABBILDUNG 2.6: Projektion des ersten Bahnsegmentes auf die x - y -Ebene: ρ ist der Abstand des Startpunktes von der z -Achse, p_ρ die ρ -Komponente des Startimpulses. Eine infinitesimale Änderung von l_z führt zu einer Änderung $d\rho_{\min}$ des Abstandes des Bahnsegmentes von der z -Achse und damit zu einer Änderung von p_ρ senkrecht zur Bahn.

gilt immer $\rho_{\min} = 0$. Der zweite Summand läßt sich durch Anwendung des Strahlensatzes noch umformulieren, so daß man insgesamt $dl_z = \rho \cos \eta d\rho_\perp$ erhält. Eine Variation von l_z entspricht also einer Variation von p_ρ senkrecht zur Bahn.

Betrachten wir nun die Projektion des letzten Bahnsegmentes auf die x - y -Ebene (siehe Abb. 2.7). Der Winkel $d\varphi$ ist gegeben durch $d\varphi = \frac{ds}{\rho} = \frac{d\rho_\perp}{\rho \cos \eta}$, wobei ds das Bogenelement und $d\rho_\perp$ die Variation von ρ wiederum senkrecht zur Bahn ist. Das durch ρ_\perp und p_{ρ_\perp} definierte lokale Koordinatensystem im Phasenraum ist senkrecht zur Bahn und parallel zur Äquatorebene orientiert. Die Bewegung in diesem System wird also durch die zur reduzierten Stabilitätsmatrix \widetilde{M} komplementäre Teilmatrix \overline{M} der Gesamtstabilitätsmatrix M beschrieben. Insgesamt findet man somit

$$J = \frac{1}{(\rho \cos \eta)^2} \frac{d\rho_\perp}{dp_{\rho_\perp}} = \frac{1}{(\rho \cos \eta)^2} \overline{M}_{12} \quad . \quad (2.88)$$

ρ ist der Abstand des Startpunktes von der z -Achse¹². Für die Meridianbahnen gilt $\eta = 0$ und $\overline{M} = M_\perp$, für die Äquatorbahnen $\eta = \frac{\pi}{2} - \varphi_{nt}$ und $\overline{M} = M_\parallel$.

Außerdem kann man für letztere das Matrixelement \overline{M}_{12} durch vollständige Induktion auch analytisch berechnen und erhält damit einen geschlossenen Ausdruck für den Anholonomieterm:

$$|J| = \frac{2n}{pR_2 \sin \varphi_{nt}} \quad . \quad (2.89)$$

¹²Man kann zeigen, daß der Anholonomieterm (2.88) einer periodischen Bahn trotzdem unabhängig von der Wahl des Startpunktes ist. In praktischen Rechnungen verwendet man natürlich einen Punkt, der nicht auf der z -Achse liegt ($\rho \neq 0$).

Der Beitrag ν ist allgemein gegeben durch die Zahl der negativen Eigenwerte der Matrix \widetilde{W} , die analog zu Gl. (2.49) die zweiten Ableitungen der Wirkung nach den zur Bahnfamilie senkrechten Koordinaten \tilde{r} enthält:

$$\widetilde{W} = \frac{\partial^2 S}{\partial \tilde{r} \partial \tilde{r}} + \frac{\partial^2 S}{\partial \tilde{r} \partial \tilde{r}'} + \frac{\partial^2 S}{\partial \tilde{r}' \partial \tilde{r}} + \frac{\partial^2 S}{\partial \tilde{r}' \partial \tilde{r}'} = \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{r}} - \frac{\partial \tilde{p}'}{\partial \tilde{r}} + \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{r}'} - \frac{\partial \tilde{p}'}{\partial \tilde{r}'} \quad (2.91)$$

In unserem Fall ist \widetilde{W} einfach ein Skalar, so daß ν entsprechend dem Vorzeichen von \widetilde{W} nur die Werte 0 oder 1 annehmen kann. \widetilde{W} kann seinerseits durch die Elemente der reduzierten Stabilitätsmatrix \widetilde{M} ausgedrückt werden. Diese ist nämlich gegeben durch

$$\widetilde{M} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{r}}{\partial \tilde{r}'} & \frac{\partial \tilde{r}}{\partial \tilde{p}'} \\ \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{r}'} & \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{p}'} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \widetilde{M}_{11} & \widetilde{M}_{12} \\ -(\widetilde{M}_{12})^{-1} & \widetilde{M}_{22} \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

(die spezielle Form des Elementes \widetilde{M}_{21} ist eine Folge der symplektischen Eigenschaft der Stabilitätsmatrix), so daß man mit Gl. (2.91) für \widetilde{W} leicht findet [20, 32]

$$\widetilde{W} = \frac{\widetilde{M}_{11} + \widetilde{M}_{22} - 2}{\widetilde{M}_{12}} = \frac{\text{tr } \widetilde{M} - 2}{\widetilde{M}_{12}} \quad (2.93)$$

Ist nun \widetilde{W} positiv, so gilt $\nu=0$, ansonsten $\nu=1$. Damit ist auch der Maslovindex $\sigma = \mu + \nu$ eindeutig festgelegt und auf die Stabilitätsmatrix M zurückgeführt.

Für die Äquatorbahnen läßt sich σ wieder analytisch bestimmen. Die Eckpunkte liefern einen Beitrag $2n$, die Vorzeichenwechsel des Elementes M_{12} unabhängig von der Deformation einen Beitrag $\mu_{\parallel} = n - 1$ (der Beweis erfolgt durch vollständige Induktion). Der Beitrag μ_{\perp} des Elementes M_{34} sowie der Index ν von der Spurbildung sind dagegen deformationsabhängig. Insbesondere bei den stabilen Bahnen ändern sich diese Größen in Abhängigkeit vom Verhältnis der beiden Krümmungsradien. Das Ergebnis vereinfacht sich jedoch wesentlich, wenn man den Stabilitätsterm (2.84, oben) ohne Betragsstriche schreibt. Die dann nötigen Vorzeichen können als zusätzlicher Beitrag zum Maslovindex aufgefaßt werden. Dabei zeigt es sich, daß der Gesamtindex nur mehr von der Eckenzahl n abhängt. Insgesamt findet man dafür

$$\sigma_{nt} = \begin{cases} 3n - 1 & (\tau > 1) \\ 3n & (|\tau| < 1) \\ 4n - 1 & (\tau < -1) \end{cases} \quad \text{mit} \quad \tau = 1 - 2 \frac{R_2}{R_1} \sin^2 \varphi_{nt} \quad (2.94)$$

Ergebnisse

In den letzten Abschnitten haben wir die reduzierte Stabilitätsmatrix \widetilde{M} , den Anholonomieterm J sowie den Maslovindex σ für den Fall einer axialsymmetrischen Kavität hergeleitet. Die übrigen Größen, die in der allgemeinen Spurformel (2.56) auftauchen, sind trivial: Der Faktor Q hat den Wert 1, weil wir es mit einer abelschen Symmetrie zu tun haben. Die primitive Periode T und die Wirkung S sind direkt proportional zur Bahnlänge L : $T = \frac{1}{r} \frac{m}{\hbar k} L$ (r ist die Wiederholungszahl) bzw. $S = \hbar k \cdot L$. V_F ist das Gruppenvolumen

$V_{\text{SO}(1)} = \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi$ dividiert durch die Zähligkeit einer eventuellen diskreten Rotationssymmetrie der Bahnfamilie F . Bei den Äquatorbahnen ist das einfach die Eckenzahl n , bei den Meridianbahnen ist es 2 oder 1, je nachdem, ob die Bahn symmetrisch zur z -Achse ist oder nicht.

Faßt man alle diese Ergebnisse für die Äquatorbahnen zusammen, so lautet deren Spurformel folgendermaßen:

$$\delta g_{\text{eq}}(k) = R \sqrt{\frac{kR}{\pi}} \left(\frac{R_2}{R} \right)^{3/2} \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{n \geq 2t} f_{nt} \frac{\sin^{3/2} \varphi_{nt}}{\sqrt{n} \Delta_{nt}} \cos \left(kL_{nt} - \sigma_{nt} \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (2.95)$$

R ist der Radius einer Kugel mit gleichem Volumen wie die Kavität und dient hier nur als Skalierungsfaktor, um dimensionslose Größen zu erhalten. R_2 ist der Radius des Schnittkreises von Äquatorbahnebene und Kavität. n und t sind Ecken- bzw. Windungszahl der Bahnen. Der Faktor f_{nt} hat für Durchmesserbahnen ($n=2t$) den Wert 1, für alle anderen ist er gleich 2. Eine Zeitumkehr führt nämlich bei letzteren dazu, daß die Bahn in umgekehrter Richtung durchlaufen wird, während die ersteren nur wieder auf sich selbst abgebildet werden. Der Winkel φ_{nt} ist gegeben durch $\varphi_{nt} = \frac{t}{n}\pi$, die Bahnlänge durch $L_{nt} = 2n R_2 \sin \varphi_{nt}$. Die Ausdrücke für den Stabilitätsterm Δ_{nt} und den Maslovindex σ_{nt} sind in der folgenden Tabelle zusammengefaßt:

$\tau = 1 - 2 \frac{R_2}{R_1} \sin^2 \varphi_{nt}$	χ	Δ_{nt}	σ_{nt}
$\tau > 1$	$\text{Arcosh} \tau$	$\sinh \frac{n\chi}{2}$	$3n - 1$
$ \tau < 1$	$\arccos \tau$	$\sin \frac{n\chi}{2}$	$3n$
$\tau < -1 \quad \wedge \quad n \text{ gerade}$	$\text{Arcosh}(-\tau)$	$\sinh \frac{n\chi}{2}$	$4n - 1$
$\tau < -1 \quad \wedge \quad n \text{ ungerade}$	$\text{Arcosh}(-\tau)$	$\cosh \frac{n\chi}{2}$	$4n - 1$

(2.96)

Sie sind abhängig vom Wert der Größe τ , in die wiederum der Krümmungsradius R_1 der Kavität senkrecht zur Bahnebene eingeht. Für die Äquatorbahnen einer Ebene sind die beiden Krümmungsradien natürlich konstant. Gibt es mehrere Äquatorbahnebenen, so ist über diese ebenfalls noch zu summieren. Gl. (2.95) stimmt mit der von Balian und Bloch [31] bereits 1972 hergeleiteten Spurformel für Äquatorbahnen überein.

Die Spurformel für die Meridianbahnen nimmt folgende Gestalt an:

$$\delta g_{\text{mer}}(k) = R \sqrt{\frac{2kR}{\pi}} \sum_F \frac{f_F}{N_F} \frac{\rho_F/R}{|p(M_{\perp,F})_{12}/R|^{1/2}} \frac{L_F/R}{\Delta_F} \cos \left(kL_F - \sigma_F \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (2.97)$$

Sie hat keine einfache, geschlossene Form; vielmehr müssen ihre Elemente für jede periodische Bahn F explizit berechnet werden. Der Faktor f_F hat für Bahnen mit Zeitumkehrsymmetrie (das sind solche, die an zwei Eckpunkten senkrecht auf die Berandung auftreffen, also z.B. Durchmesserbahnen) den Wert 1, für alle anderen den Wert 2. Für Bahnen, die spiegelsymmetrisch bzgl. der z -Achse sind, gilt $N_F=2$, ansonsten gilt $N_F=1$. Die Länge L_F ergibt sich einfach als Summe der Längen der Teilstimente. Ausgehend von einem beliebigen Startpunkt (allerdings mit nicht-verschwindendem Abstand ρ_F zur z -Achse), bestimmt man den Maslovindex σ_F sowie die Matrizen $M_{\perp,F}$ und $M_{\parallel,F}$ gemäß den in den vorhergehenden Abschnitten erklärten Regeln. Das rechte, obere Element von $M_{\perp,F}$ geht direkt in die Formel (2.97) ein, während die Spur von $M_{\parallel,F}$ mit Gl. (2.84) den

Stabilitätsterm Δ_F festlegt. Mit der von Sieber [32] benützten Methode kommt man für die Meridianbahnen zum gleichen Ergebnis wie in Gl. (2.97). Angewandt auf die bei jeder Deformation existierende, senkrecht zur Symmetrieachse verlaufende Durchmesserbahn, die sowohl zu den Meridianbahnen als auch zu den Äquatorbahnen gezählt werden kann, liefert Gl. (2.97) erwartungsgemäß das gleiche Ergebnis wie Gl. (2.95).

Der Beitrag zum oszillierenden Anteil der Niveaudichte sowohl von den Äquatorbahnen als auch von den Meridianbahnen ist proportional zu $k^{1/2}$. Dies spiegelt die einfache Entartung dieser Bahnen wieder¹³. Da die Durchmesserbahnen (im Gegensatz zur Situation in der sphärischen Kavität) die gleiche Entartung aufweisen wie die echten Polygonbahnen und sie außerdem die kürzesten Bahnen sind, liefern sie i.a. den größten Beitrag zu einer gemittelten Niveaudichte.

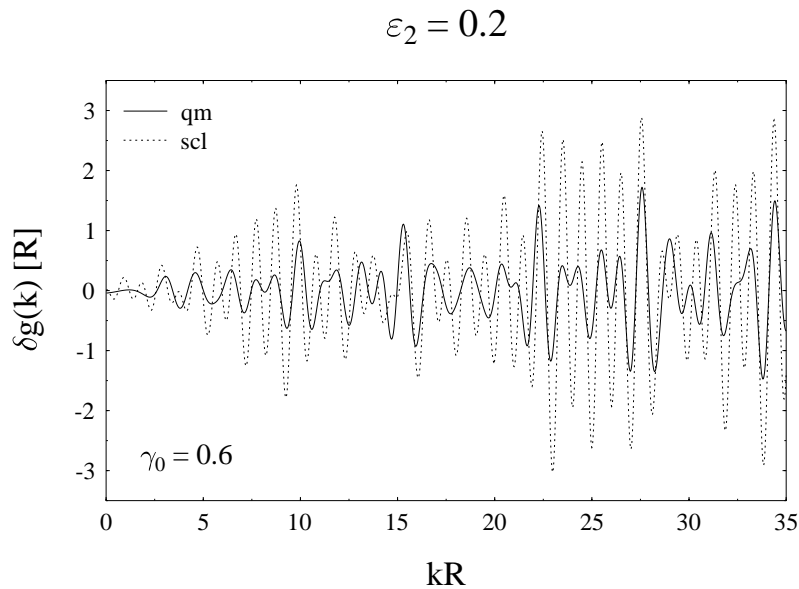


ABBILDUNG 2.8: *Der oszillierende Anteil der Niveaudichte einer axialsymmetrischen, quadrupol-deformierten Kavität mit $\varepsilon_2 = 0.2$. Gezeigt ist ein Vergleich des quantenmechanischen Resultats (durchgezogene Linie) mit dem der erweiterten Gutzwiller-Theorie (gestrichelte Linie).*

Die letzte Aussage gilt natürlich nicht für die Durchmesserbahn entlang der Symmetrieachse. Sie ist isoliert und ihr Beitrag zur Gesamtniveaudichte deshalb trotz ihrer geringen Länge nur relativ klein. Letzterer ist durch die Gutzwiller-Spurformel (2.54) gegeben. Die darin auftretende Stabilitätsmatrix M ist die volle (4×4) -Matrix (2.80) (mit $n = 2$), die aber wegen der einfachen Geometrie der Bahn¹⁴ nur aus zwei identischen Blöcken besteht. Der Stabilitätsterm $|\det(M - \mathbb{I})|^{1/2}$ kann daher leicht direkt berechnet werden. Der Beitrag der konjugierten Punkte zum Maslovindex wird auf die gleiche Weise bestimmt wie für die Meridianbahnen; deren Regel zur Bestimmung des Beitrags von der Spurbildung muß hingegen auf beide Blöcke der Stabilitätsmatrix M angewandt werden, da bei dieser isolierten Bahn die Spur über die Greensfunktion ja in zwei Richtungen in Sattelpunkts-

¹³Die periodischen Bahnen in der sphärischen Kavität tragen entsprechend ihrer Entartung mit $k^{3/2}$ bzw. k bei.

¹⁴Die beiden Krümmungsradien R_1 und R_2 sind an den Reflexionspunkten, den Polen der Kavität, jeweils gleich (siehe Anhang C).

näherung bestimmt wird. Führt man diese Rechnung explizit durch, zeigt sich, daß man den Maslovindex sogar ganz weglassen lassen kann, wenn man dafür den Stabilitätsterm ohne Betrag schreibt. Insgesamt findet man folgende Formel für den Beitrag der isolierten Durchmesserbahn zur Gesamtniveaudichte (wir geben nur das Ergebnis für die einfach durchlaufene Bahn [$r = 1$] an):

$$\delta g_{\text{iso}}(k) = \frac{R_{1,1} R_{1,2}}{2\pi (l - R_{1,1} - R_{1,2})} \cos(2kl) \quad . \quad (2.98)$$

Dabei sind $R_{1,1}$ und $R_{1,2}$ die Krümmungsradien an den beiden Polen und l die Länge eines Bahnsegmentes, also einfach der Abstand der Pole. Die Amplitude ist erwartungsgemäß konstant in k .

Der semiklassische Ausdruck für den oszillierenden Anteil der Niveaudichte einer axialsymmetrischen Kavität ist schließlich die Summe der Beiträge von den einzelnen Bahnklassen (wobei wir, wie gesagt, eventuell existierende nicht-planare und „schiefliegende“ planare Bahnen vernachlässigen):

$$\delta g_{\text{scl}}(k) = \delta g_{\text{eq}}(k) + \delta g_{\text{mer}}(k) + \delta g_{\text{iso}}(k) \quad . \quad (2.99)$$

Zum Abschluß dieses Kapitels zeigen wir zwei Beispiele, in denen wir obige Formel für eine rein quadrupol-deformierte Kavität (zur genauen Parametrisierung siehe Kap. 4) ausgewertet haben und mit dem entsprechenden quantenmechanischen Ergebnis (auf seine Bestimmung wird in Anhang A.2 eingegangen) verglichen. In Abb. 2.8 haben wir dies für eine relativ stark ($\varepsilon_2 = 0.2$), in Abb. 2.9 für eine nur schwach deformierte Kavität ($\varepsilon_2 = 0.05$) getan.

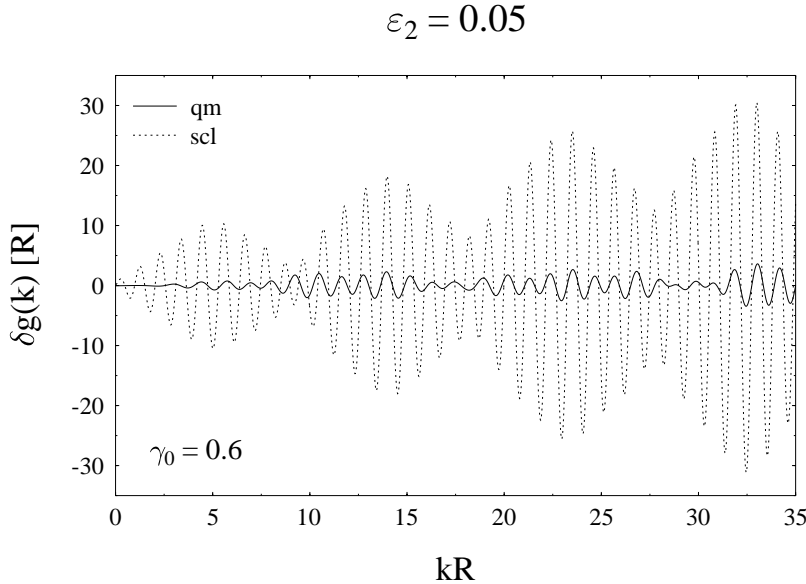


ABBILDUNG 2.9: Wie Abb. 2.8, allerdings für $\varepsilon_2 = 0.05$.

In beiden Fällen ist die Übereinstimmung sehr schlecht, das semiklassische Ergebnis ist jeweils zu groß. Offensichtlich ist die Voraussetzung, daß man die Beiträge aller Bahnfamilien und -klassen jeweils getrennt voneinander betrachten kann, nicht erfüllt. Im nächsten Kapitel diskutieren wir eingehender die Ursachen für das divergierende semiklassische Ergebnis und zeigen Methoden, wie die POT erweitert werden muß, um auch in solchen Fällen anwendbar zu sein.

Im letzten Kapitel haben wir die Gutzwillersche Spurformel für Systeme mit isolierten periodischen Bahnen sowie ihre Erweiterung auf Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien (im folgenden sprechen wir einfach von der erweiterten Gutzwiller-Theorie) besprochen. Bei den zwei dazu gezeigten Beispielen stimmen die Ergebnisse dieser Theorie nur sehr schlecht mit den quantenmechanischen Resultaten überein. In diesem Kapitel gehen wir auf die Ursache dieser Diskrepanz ein und zeigen dann Möglichkeiten, diese zu beheben.

3.1 Grenzen der Standard-POT

Ein wesentlicher Schritt bei der Herleitung der Spurformel (2.54) bzw. (2.56) ist die Berechnung des Spurintegrals in Sattelpunktsnäherung. Dabei entwickelt man zunächst die Wirkung S im Exponenten des Integranden bis zur zweiten Ordnung, d.h. man ersetzt die Wirkung in der Umgebung eines stationären Punktes (der ja immer einer periodischen Bahn[familie] entspricht) durch eine Parabel. Die übrigen Punkte im Integrationsgebiet tragen wegen destruktiver Interferenz kaum zum Integral bei. Schließlich muß man noch über alle stationären Punkte summieren und gelangt so zu einer analytisch lösbaren Form des Spurintegrals.

Dieses Vorgehen ist aber nur gerechtfertigt, wenn die stationären Punkte genügend weit voneinander entfernt sind, wenn also die einzelnen (Familien von) periodischen Bahnen als isoliert betrachtet werden können, weil nur dann der Fehler bei der Approximation der Wirkung durch einzelne Parabeln klein ist. Wenn dagegen zumindest lokal die zweite Ableitung der Wirkung gegen Null geht, gilt dies gerade nicht mehr und die Standard-POT versagt. Dann geht nämlich mindestens ein Eigenwert der (reduzierten) Stabilitätsmatrix in der Spurformel (2.54) bzw. (2.56) gegen Eins, was sich in einer Divergenz der Amplituden äußert.

Man kann zwei Fälle unterscheiden, in denen die beschriebene Bedingung nicht erfüllt ist: Bifurkationen und Änderungen der Symmetrie. Ist das interessierende System abhängig von einem kontinuierlichen Parameter ε (z.B. einem äußeren Feld oder einem Deformationsfreiheitsgrad), so ändern manche periodische Bahnen bei bestimmten Werten von ε ihre Stabilität. Gleichzeitig entstehen dabei in der Regel neue periodische Bahnen, so daß man von einer Bifurkation, also einer Aufspaltung der ursprünglichen Bahn spricht. In der Nähe der Bifurkation liegen die stationären Punkte im Spurintegrationsintervall, denen die beteiligten Bahnen entsprechen, sehr nahe beieinander, ihre Wirkung unterscheidet sich nur wenig. Die Bahnen können also nicht mehr als isoliert betrachtet werden, sondern geben vielmehr einen gemeinsamen Beitrag zur Niveaudichte. Bifurkationen sind auch die Ursache dafür, daß die Zahl der periodischen Bahnen in einem System mit zunehmender Chaotizität stark ansteigt, da v.a. längere Bahnen mit großen Wiederholungszahlen schon bei relativ kleinen Änderungen von ε immer öfter aufspalten.

Divergierende Amplituden treten auch auf, wenn sich durch Änderung von ε die zugrundeliegende kontinuierliche Symmetrie des Systems erhöht, z.B. beim Übergang von axialer zu sphärischer Symmetrie. Zunächst isolierte Bahn(familien) gleichen sich in ihrer Wirkung immer mehr an, bis sie im Grenzfall schließlich entartet sind, die Wirkung also sogar in einem endlichen Intervall einen konstanten Wert annimmt, so daß die Amplituden in der Spurformel wiederum divergieren. Bei der Diskussion der Spurformel (2.56) haben wir ja bereits auf dieses Problem hingewiesen.

Bei der uns interessierenden Anwendung (siehe Kap. 4) ist die oben genannte Voraussetzung ebenfalls nicht erfüllt. Die Systeme zeichnen sich nämlich durch eine gemischte Phasenraumstruktur aus, d.h. sie sind weder integrabel noch vollkommen chaotisch. Die auftretenden Familien von periodischen Bahnen jeweils gleicher Eckenzahl sind dementsprechend weder isoliert noch sind sie identisch (so daß man sie als Elemente einer größeren Familie auffassen könnte). Will man diese Systeme semiklassisch beschreiben, muß man also Wege finden, Bifurkationen und Symmetrieänderungen im Rahmen der POT adäquat behandeln zu können.

3.2 Bifurkationen

In diesem Abschnitt beschreiben wir zunächst allgemeine Eigenschaften von Orbitbifurkationen am Beispiel der axialsymmetrischen Kavität und skizzieren dann eine Methode, den Beitrag bifurkierender Bahnen zur Niveaudichte zu bestimmen.

3.2.1 Allgemeines

Bifurkationen treten in einer axialen Kavität sowohl bei den Äquator- als auch bei den Meridianbahnen auf. Weil bei ersteren die Amplitude in der Spurformel (2.56) als geschlossener Ausdruck gegeben ist (siehe Gl. (2.95)), kann man über deren Divergenzen analytisch vorhersagen, bei welchen Deformationen sie bifurkieren. Darauf gehen wir im Anschluß ein. Bei den Meridianbahnen läßt sich dies wiederum nur numerisch feststellen. An ihnen kann man sich aber gut veranschaulichen, was bei einer Bifurkation passiert.

Betrachten wir dazu die in Abb. 3.1 gezeigten Fourierspektren der quantenmechanisch und semiklassisch berechneten Niveaudichten aus Abb. 2.8. Die periodischen Bahnen, die den einzelnen Peaks entsprechen, sind eingezeichnet. Man erkennt, daß die Amplituden der Äquatorbahnen sehr gut übereinstimmen, während der semiklassische Beitrag der Meridianbahnen viel zu groß ist. Offensichtlich sind sie in diesem Fall für den Unterschied zwischen quantenmechanischer und semiklassischer Niveaudichte verantwortlich. Die verschiedenen Meridianbahnen mit jeweils gleicher Eckenzahl unterscheiden sich in ihrer Länge nur so wenig, daß sie in diesem Fourierspektrum nicht mehr getrennt aufgelöst werden. Es liegt also nahe zu vermuten, daß sie (zumindest einige) nicht vollständig isoliert sind.

Um dies zu überprüfen, betrachten wir, wie sich die Längen z.B. der Viereckbahnen als Funktion des Quadrupolparameters ε_2 entwickeln (siehe Abb. 3.2). Für Werte von $\varepsilon_2 \lesssim 0.19$ findet man neben der Äquatorbahn (deren Länge in der Abbildung nicht dargestellt ist) nur zwei Meridianbahnen, eine rechteckige und eine rautenförmige. Dann aber spaltet letztere plötzlich auf und es entsteht eine weitere Bahn, die bezüglich der x - y -Ebene nicht mehr spiegelsymmetrisch ist. Diese beiden Bahnen müssen also in der Nähe des Bifurkationspunktes tatsächlich als zusammengehörig betrachtet werden.

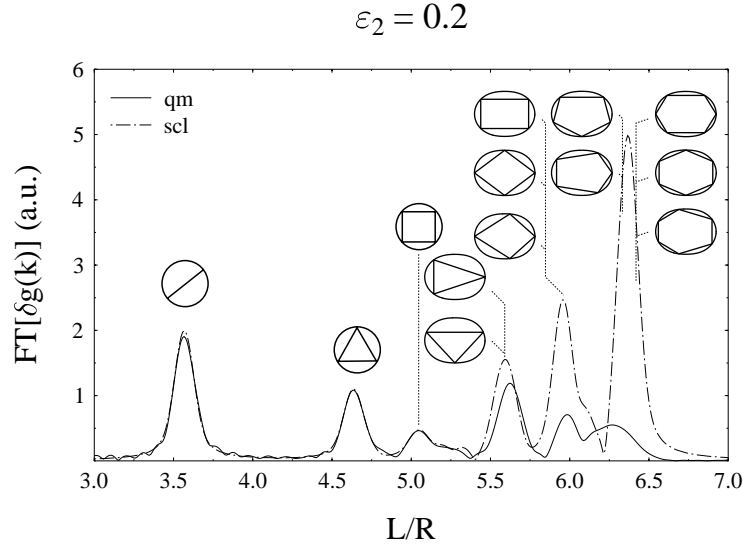


ABBILDUNG 3.1: Das Fourierspektrum zu den Niveaudichten aus Abb. 2.8. Die den einzelnen Peaks entsprechenden Äquator- und Meridianbahnen sind eingezeichnet. Die Amplituden der Äquatorbahnen stimmen sehr gut überein, bei den Meridianbahnen dagegen sind die semiklassischen Amplituden viel zu groß.

Interessant ist es auch, sich das Stabilitätsverhalten der an der Bifurkation beteiligten Bahnen klar zu machen. Gemäß Abschnitt 2.5.2 ist es durch die Spur der reduzierten Stabilitätsmatrix \widetilde{M} bestimmt (siehe Abb. 3.3). Am Bifurkationspunkt überschreitet $\text{tr } \widetilde{M}$ für die symmetrische Rautenbahn den Wert 2, aus einer stabilen wird also eine instabile Bahn, während die neu entstandene Bahn (zumindest zunächst) stabil ist. $\text{tr } \widetilde{M} = 2$ bedeutet aber gleichzeitig auch, daß der Stabilitätsterm Δ (2.84) verschwindet, so daß die Amplitude in der Spurformel (2.56) wie beobachtet divergiert¹.

Bifurkationen von periodischen Bahnen lassen sich auch sehr gut anhand eines sogenannten Poincaré-Schnittes veranschaulichen. Dabei handelt es sich gewissermaßen um die auf zwei Dimensionen reduzierte Darstellung der Dynamik des Systems im Phasenraum. Der Poincaré-Schnitt enthält alle Schnittpunkte einer Menge von typischen Trajektorien mit einer sinnvoll gewählten zweidimensionalen Fläche im Phasenraum. Chaotische Trajektorien erzeugen dabei wegen ihrer Ergodizität eine ganze Wolke von Punkten, während periodische Bahnen Fixpunkte dieser Abbildung sind, sie schneiden die Fläche immer im selben Punkt bzw. einer Folge von endlich vielen Punkten. Ist die periodische Bahn stabil, erzeugt eine benachbarte quasiperiodische Bahn eine ellipsenförmige Kurve um diesen Fixpunkt herum (daher auch die Bezeichnung „elliptische Bahn“). Ist sie dagegen instabil, liegt ihr Fixpunkt im Schnittpunkt der Asymptoten zweier (zumindest lokal) hyperbelförmiger Kurven („hyperbolische Bahn“). Auf diese Weise erlaubt ein Poincaré-Schnitt, sehr

¹Der Anholonomieterm J ändert sich auch in der Nähe einer Bifurkation nur weich mit der Deformation und hat daher keinen Einfluß auf die Divergenz.

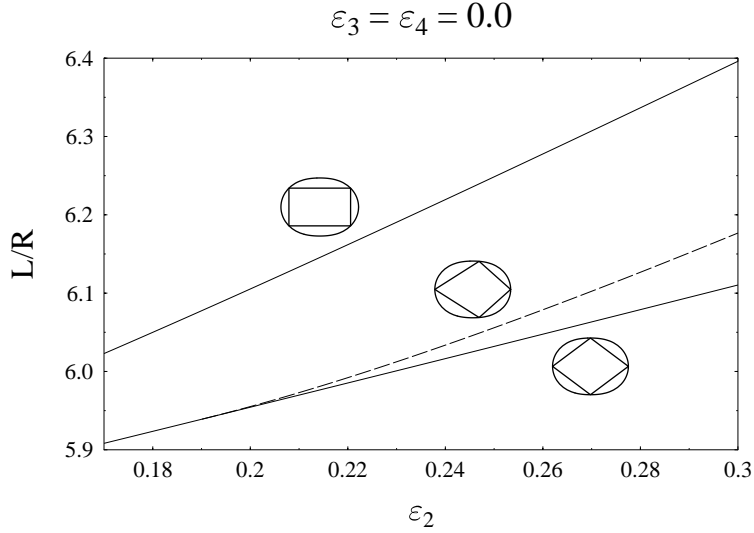


ABBILDUNG 3.2: Die Länge der viereckigen Meridianbahnen in einer deformierten Kavität als Funktion des Quadrupolparameters. Bei $\varepsilon_2 \approx 0.19$ bifurkiert die rautenförmige Bahn (durchgezogene Linie unten) und es entsteht eine neue, unsymmetrische Bahn (gestrichelte Linie).

schnell Aussagen über die Natur eines Systems machen zu können, ob es also integrabel oder chaotisch ist bzw. eine gemischte Phasenraumstruktur hat.

Für die Meridianbahnen in einer axialen Kavität erhält man einen Poincaré-Schnitt auf sehr einfache Weise, indem man für jeden Eckpunkt einer Reihe von Trajektorien den Winkel α , der die Impulsrichtung in diesem Punkt charakterisiert (siehe Anhang B), gegen den Polarwinkel ϑ des Punktes aufträgt². In Abb. 3.4 haben wir dies für eine Situation kurz vor der oben beschriebenen Bifurkation getan. Der Mittelpunkt entspricht der dargestellten, stabilen, rautenförmigen Bahn (genauer gesagt ihrer oberen Ecke). Die ihn umgebenden ellipsenförmigen Kurven bilden zusammen eine „stabile Insel“. Die weiter außen liegenden, kleineren stabilen Inseln gehören bereits zu einer anderen Bahn. Überschreitet man den Bifurkationspunkt, erhält man ein Bild wie in Abb. 3.5. Aus dem stabilen ist ein instabiler Fixpunkt geworden, der sich nun zwischen den neu entstandenen stabilen Inseln zu seinen beiden Seiten befindet. Diese entsprechen den neuen, drachenförmigen Bahnen. Das Nebeneinander von geordneten und chaotischen Bereichen in beiden Poincaré-Schnitten macht sehr anschaulich klar, daß wir es mit einem gemischten System zu tun haben.

An dieser Stelle möchten wir darauf hinweisen, daß das besprochene Beispiel einer Orbitbifurkation nicht allgemein gültig ist. Je nach Anzahl der beteiligten Bahnen und ihrem jeweiligen Stabilitätsverhalten lassen sich nämlich alle Bifurkationen in verschiedene, endlich viele Klassen einteilen. Darauf werden wir im nächsten Abschnitt 3.2.2 eingehen. Al-

²Genaugenommen handelt es sich dabei nicht um zwei zueinander konjugierte Variablen. Dies wären z.B. die Länge der Billardberandung bis zum Eckpunkt und die Impulskomponente parallel zum Rand. Diese beiden Variablenpaare können aber eineindeutig ineinander umgerechnet werden, die Abbildungen ändern sich also nicht qualitativ.

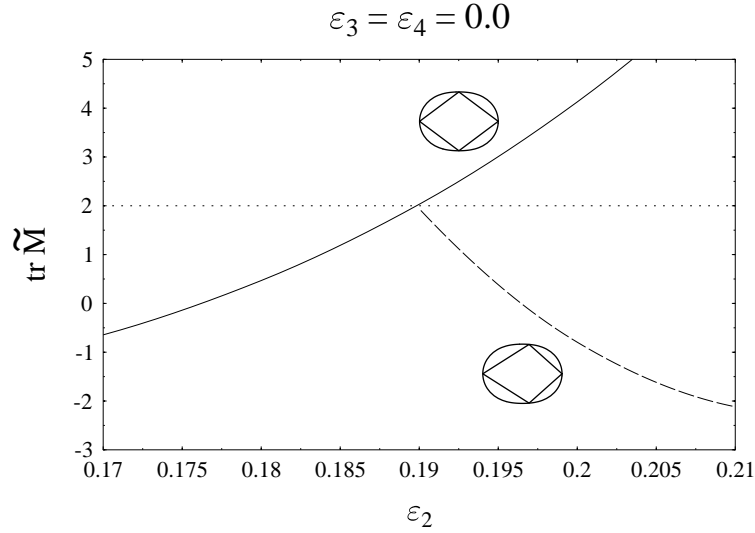


ABBILDUNG 3.3: Die Spur der reduzierten Stabilitätsmatrix \widetilde{M} für die beiden an der oben beschriebenen Bifurkation beteiligten Bahnen, wiederum als Funktion von ε_2 . Am Bifurkationspunkt selbst nimmt $\text{tr } \widetilde{M}$ den Wert 2 an.

len gemeinsam ist jedoch das Auftreten neuer periodischer Bahnen, verbunden mit einem Wechsel der Stabilität und damit einer Divergenz in den semiklassischen Amplituden.

Bei den Äquatorbahnen sind diese Divergenzen analytisch vorhersagbar, da deren Amplitude ja als geschlossener Ausdruck vorliegt (siehe Gl. (2.95)). Divergierende Amplituden treten demnach immer genau dann auf, wenn der Stabilitätsterm Δ_{nt} den Wert 0 annimmt. Diese Bedingung führt mit den Ausdrücken für Δ_{nt} in Tabelle (2.96) letztlich auf folgende Gleichung, die erfüllt sein muß, damit eine Bifurkation der Äquatorbahnen vorliegt:

$$\frac{R_2}{R_1} = \frac{\sin^2\left(\frac{j}{n}\pi\right)}{\sin^2\left(\frac{t}{n}\pi\right)} \quad (j \in \mathbb{N}) \quad . \quad (3.1)$$

Dabei ist R_2 der Radius der Kavität an der Stelle, wo sie sich mit der Bewegungsebene der Äquatorbahnen schneidet, R_1 ist der Hauptrümmungsradius der Kavität senkrecht zu dieser Ebene, n und t bezeichnen die Ecken- und Windungszahl der Bahnen und j ist eine beliebige natürliche Zahl. Da für die uns interessierende Anwendung nur die kürzesten Bahnen wichtig sind, beschränken wir uns auf den Fall $t = 1$.

Für $j = 0$ ist die Gleichung — unabhängig von n — nur dann erfüllt, wenn $R_1 = \infty$ gilt, d.h. die Krümmung der Randkurve verschwindet, es liegt eine lokale Translations-symmetrie vor. Geometrisch kann man das so interpretieren, daß aus der ursprünglichen Bewegungsebene i.a. zwei neue, dazu parallele Ebene hervorgehen. Die neuen periodischen Bahnen in dieser Ebene sind also wiederum Äquatorbahnen, allerdings mit i.a. anderen Radien R_1 und R_2 .

Der Fall $j = 1$ liefert — ebenfalls unabhängig von n — die Bedingung $R_1 = R_2$, d.h. man hat eine lokale Kugelsymmetrie. Aus der ursprünglichen Bewegungsebene entsteht eine

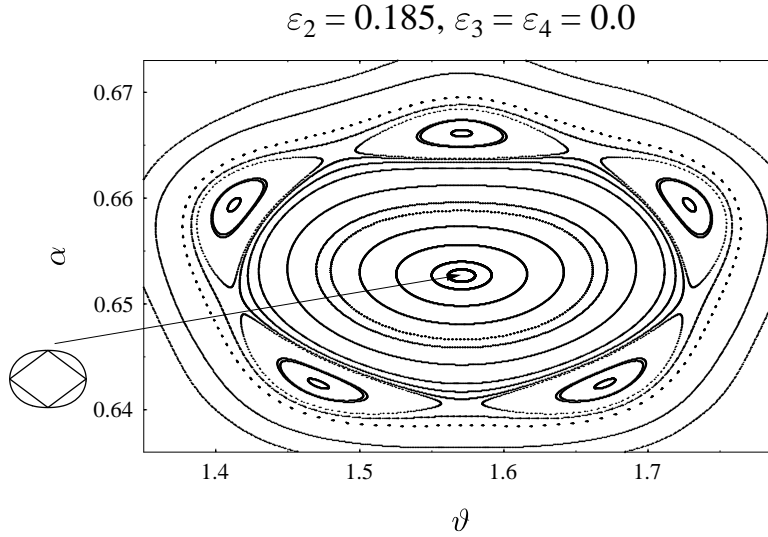


ABBILDUNG 3.4: Ein Poincaré-Schnitt in der Umgebung des oberen Eckpunktes der dargestellten periodischen Bahn, kurz vor der weiter oben beschriebenen Bifurkation. Man erkennt ganz klar eine stabile Insel aus ellipsenförmigen Kurven.

neue, zur z -Achse schräge Ebene. Die neuen periodischen Bahnen sind keine Äquatorbahnen mehr. Vielmehr handelt es sich um eine der Bahnklassen, die wir bei der Bestimmung der Spurformel in Abschnitt 2.5 vernachlässigt haben.

Während also für $R_1 = \infty$ und $R_1 = R_2$ alle Äquatorbahnen gleichzeitig bifurkieren, tun dies in allen Fällen, in denen die obige Gleichung mit einem $j > 1$ erfüllt ist, nur Bahnen mit bestimmter Eckenanzahl n . Dabei kann man sich wegen der Periodizität der oben rechts stehenden Funktion bei festem n auf die Betrachtung der $j \leq \text{int}(\frac{n}{2})$ beschränken. Das einfachste Beispiel ist dann mit $n = 4, j = 2$ gegeben. Es führt auf die Bedingung $R_2 = 2R_1$. Bei diesem Verhältnis der beiden Hauptkrümmungsradien (einer lokal stark oblaten Deformation) bifurkiert also genau die Vierecks-Äquatorbahn. Geometrisch kann man sich das so vorstellen, daß die Eckpunkte der Bahn aus der Äquatorebene heraustreten und somit eine neue, nicht-planare periodische Bahn entsteht (in diesem Falle von tetraedrischer Gestalt). Auch alle weiteren, möglichen Kombinationen von n und $j \leq \text{int}(\frac{n}{2})$ kennzeichnen das Auftreten echt dreidimensionaler Bahnen (die wir in Abschnitt 2.5 nicht berücksichtigt haben).

Ganz allgemein kann man feststellen, daß bei den Bifurkationen der periodischen Bahnen in der axialsymmetrischen Kavität deren Entartung erhalten bleibt, denn auch die neu entstandenen Bahnen weisen die Rotationssymmetrie bezüglich der z -Achse auf. Eine Ausnahme von dieser Regel bildet nur die Durchmesserbahn entlang der Symmetrieachse. Während diese Bahn selbst isoliert ist, sind die aus ihr entstehenden Bahnen entartet. Es findet also eine Symmetriehöherung statt.

Damit beschließen wir die Diskussion der allgemeinen Eigenschaften von Orbitbifurkationen, soweit sie für unsere Anwendung wichtig sind. Wir haben gezeigt, daß bei einer Bifurkation die (erweiterten) Gutzwiller-Amplituden der bifurkierenden Bahn divergieren.

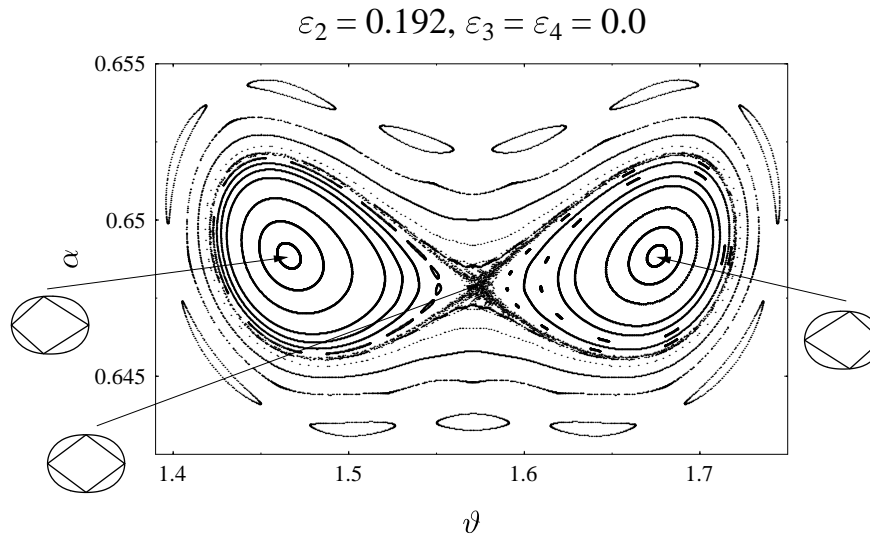


ABBILDUNG 3.5: Ein Poincaré-Schnitt für eine Situation kurz nach der Bifurkation. Die stabile Insel im Mittelpunkt ist verschwunden, dort findet man nun einen hyperbolischen Fixpunkt zwischen zwei neuen stabilen Inseln. Die zugehörigen periodischen Bahnen sind eingezeichnet.

Klassisch läßt sich das durch das Auftreten neuer periodischer Bahnen mit ähnlicher Wirkung erklären. Um die — physikalisch gesehen spuriösen — Divergenzen zu vermeiden, ist es nötig, die beteiligten Bahnen gemeinsam zu betrachten. Wie dies formal geschieht, ist Inhalt des folgenden Abschnitts.

3.2.2 Uniformisierung

Nach dem in Abschnitt 3.1 Gesagten ist prinzipiell klar, wie die Standard-POT erweitert werden muß, um dem Auftreten benachbarter, beinahe entarteter Bahnen bei einer Bifurkation Rechnung zu tragen: Statt bei der Berechnung des Spurintegrals die Wirkung S im Exponenten des Integranden im Rahmen der Sattelpunktsnäherung nur bis zur zweiten Ordnung zu entwickeln, müssen auch höhere Terme berücksichtigt werden, deren stationäre Punkte den beteiligten Bahnen entsprechen. Dies führt i.a. aber zu sehr komplizierten Exponenten, die eine analytische Lösung unmöglich machen.

Durch eine kanonische Transformation der Koordinaten läßt sich die Form von S und damit des Spurintegrals aber wesentlich vereinfachen. Dabei macht man Gebrauch von der Tatsache, daß letztere invariant unter kanonischen Transformationen ist [34]. Die einfachste Gestalt, die die Wirkung S bei einer bestimmten Bifurkation annehmen kann, ist dabei durch ihre sogenannte Normalform gegeben. Sie beschreibt die klassische Bewegung in der Nähe einer periodischen Bahn und enthält somit alle Information über Anzahl und Anordnung der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. Eine Klassifikation aller generischen³

³Unter „generisch“ versteht man in der Physik lose „typisch“ oder „bis auf bestimmte Ausnahmen“. Vermutlich sind Systeme ohne jegliche (kontinuierliche oder diskrete) Symmetrien generisch im streng mathematischen Sinne.

Bifurkationen in einem zweidimensionalen, konservativen System wurde von Meyer [35] gegeben. Grundsätzlich kann man fünf Klassen sogenannter perioden-vervielfachender Bifurkationen unterscheiden, bei denen aus der r -fachen Wiederholung einer zentralen Bahn neue Satellitenbahnen hervorgehen. Eine genauere Beschreibung der einzelnen Klassen folgt im Anschluß.

Obwohl die uns interessierenden Systeme dreidimensional sind, können die wichtigsten auftretenden Bifurkationen trotzdem den oben erwähnten Klassen zugeordnet werden, weil man sich wegen der Rotationssymmetrie bezüglich der z -Achse im wesentlichen auf eine Meridianebene beschränken kann. Auch die Forderung nach Generizität ist bei diesen Bifurkationen nicht immer erfüllt (z.B. bei einer Spiegelsymmetrie bezüglich der x - y -Achse). Außerdem erfolgt — wie bei den Beispielen im letzten Abschnitt — auch nicht immer eine Periodenvervielfachung. Es zeigt sich jedoch, daß diese nicht-generischen Bifurkationen oftmals trotzdem durch die gleichen Normalformen wie die generischen Bifurkationen beschrieben werden können, die man dann nur anders interpretieren muß. Wir werden dies am Ende dieses Abschnittes an einem Beispiel klar machen.

Die erste Verallgemeinerung der Standard-POT, die eine Behandlung von Bifurkationen erlaubt, stammt von Ozorio de Almeida et al. [36]. Durch Anwendung der Theorie der Normalformen gelangten sie zu einer Näherung für den gemeinsamen, endlichen Beitrag der beteiligten Bahnen zur Niveaudichte, die allerdings nur in der Umgebung der Bifurkation gültig ist. In größerer Entfernung davon, wo man schon wieder isolierte Bahnen vorliegen hat, läßt sich auf ihr Ergebnis erneut die Sattelpunktsnäherung anwenden, was zu einer Summe einzelner, Gutzwiller-ähnlicher Terme für die Niveaudichte führt. Allerdings stellen die so erhaltenen Amplituden nur eine Näherung an die echten Gutzwiller-Ausdrücke dar.

Während also die Gutzwiller-Theorie nur in genügend großer Entfernung von der Bifurkation, die Formel von Ozorio de Almeida dagegen nur in deren Nähe eine brauchbare semiklassische Näherung darstellt, fehlte zunächst eine Theorie, die diese beiden Ansätze vereinigt, die also gewissermaßen zwischen beiden Bereichen interpoliert. Diese wurde von Sieber et al. entwickelt [37]. Durch eine abgeänderte Form der Methode von Ozorio de Almeida et al. und die Berücksichtigung noch höherer Terme in den Normalformen erhielten sie analytische Formeln für den Beitrag bifurkierender Bahnen zur Niveaudichte. Dabei erscheinen in diesen Ausdrücken nur die Größen, die schon aus der Gutzwiller-Spurformel (2.54) für die beteiligten Bahnen bekannt sind. Dies stellt sicher, daß diese Formeln auch gegen den exakten asymptotischen Grenzwert für isolierte Bahnen konvergieren. Sie sind somit tatsächlich über den ganzen Bereich von der Bifurkation bis hin zu den isolierten Bahnen gültig, weshalb man von einer „uniformen Näherung“ spricht. An dieser Stelle gehen wir nicht weiter auf ihre Herleitung ein und geben nur kurz die Ergebnisse wieder. Dabei beschreiben wir auch kurz die typischen Eigenschaften der verschiedenen Bifurkationsklassen.

Bei der isochronen Bifurkation (auch Tangentenbifurkation genannt) findet man nach der Bifurkation zwei periodische Bahnen, eine stabile und eine instabile, während vorher keine (reellen) Bahnen existieren. Genaugenommen muß man dort aber ihre komplexwertigen Vorläufer, sogenannte „ghost orbits“, berücksichtigen. Bei diesem Typ von Bifurkation findet keine Periodenvervielfachung im eigentlichen Sinne statt, da die primitiven Perioden der beteiligten Bahnen am Bifurkationspunkt identisch sind. Die uniforme Nähe-

rung für den gemeinsamen Beitrag δg_{unif} der beiden reellen Bahnen zur Niveaudichte kann durch Besselfunktionen mit gebrochen-zahligem Index ausgedrückt werden und lautet

$$\delta g_{\text{unif}}(E) = \sqrt{\frac{2\pi}{3\hbar}} |\Delta S| \left(\bar{A} \cdot \cos(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2}) \cdot \left(J_{-1/3}(|\Delta S|/\hbar) + J_{1/3}(|\Delta S|/\hbar) \right) + \right. \\ \left. \sigma \cdot \Delta A \cdot \sin(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2}) \cdot \left(J_{-2/3}(|\Delta S|/\hbar) - J_{2/3}(|\Delta S|/\hbar) \right) \right). \quad (3.2)$$

$\bar{S} = \frac{1}{2}(S_1 + S_2)$ ist die mittlere Wirkung der beiden Bahnen, $\Delta S = \frac{1}{2}(S_1 - S_2)$ die Differenz der Wirkungen, $\sigma = \text{sgn}(\Delta S)$ ihr Vorzeichen, $\bar{A} = \frac{1}{2}(A_1 + A_2)$ die mittlere Amplitude, $\Delta A = \frac{1}{2}(A_1 - A_2)$ die Differenz der Amplituden sowie $\bar{\sigma} = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$ der mittlere Maslov-index. Dabei sind diese Größen (wie auch in den nächsten Formeln) so gewählt, daß der (erweiterte) Gutzwiller-Beitrag der einzelnen Bahnen jeweils die Form $A_j \cdot \cos(S_j/\hbar - \sigma_j \frac{\pi}{2})$ ($j = 1, 2$) hat⁴. Im Grenzwert $|\Delta S| \rightarrow \infty$, also weit weg von der Bifurkation, kann man die Besselfunktionen durch ihre asymptotischen Entwicklungen ersetzen und erhält dann wie erwartet die Summe der zwei Gutzwiller-Beiträge. Formel (3.2) ist symmetrisch unter Vertauschung der beiden Indices.

Die nächste Klasse ist die der perioden-verdoppelnden oder auch Gabelbifurkationen („pitchfork bifurcations“). Sie zeichnen sich dadurch aus, daß es vor solch einer Bifurkation nur eine reelle, die zentrale Bahn gibt, die dann ihre Stabilität wechselt, wobei gleichzeitig eine neue Bahn mit entgegengesetzter Stabilität entsteht. Die primitive Periode dieser Satellitenbahn ist, wie der Name schon sagt, das Doppelte der primitiven Periode der zentralen Bahn. In einem Poincaré-Plot äußert sich das so, daß man nach der Bifurkation symmetrisch zu beiden Seiten des Fixpunktes, der der zentralen Bahn entspricht, zwei neue Fixpunkte findet, die jeweils zu einer Windung der Satellitenbahn gehören (ganz ähnlich wie in Abb. 3.5). Die uniforme Näherung für den gemeinsamen Beitrag beider Bahnen zur Niveaudichte lautet dann:

$$\delta g_{\text{unif}}(E) = \sqrt{\frac{\pi}{2\hbar}} |\Delta S| \left(\left(\frac{A_1}{2} + \frac{A_0}{\sqrt{2}} \right) \left(\cos(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2} - \sigma \frac{\pi}{8}) \cdot J_{1/4}(|\Delta S|/\hbar) + \right. \right. \\ \left. \left. \cos(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{8}) \cdot J_{-1/4}(|\Delta S|/\hbar) \right) + \right. \\ \left(\frac{A_1}{2} - \frac{A_0}{\sqrt{2}} \right) \left(\cos(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2} - \sigma \frac{\pi}{8}) \cdot J_{3/4}(|\Delta S|/\hbar) + \right. \\ \left. \left. \cos(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{8}) \cdot J_{-3/4}(|\Delta S|/\hbar) \right) \right). \quad (3.3)$$

Dabei bezeichnen A_0 und A_1 die Amplitude von zentraler bzw. Satellitenbahn, \bar{S} und $\bar{\sigma}$ das arithmetische Mittel ihrer Wirkungen bzw. Maslov-Indices und $\Delta S = \frac{1}{2}(S_1 - S_0)$ ihre Wirkungsdivergenz.

Bei der perioden-verdreifachenden Bifurkation existieren sowohl vor- als auch nachher zwei reelle Bahnen, wiederum zentrale und Satellitenbahn genannt, deren primitive Perioden im Bifurkationspunkt im Verhältnis 1:3 stehen. Die Bahnen nähern sich einander immer weiter an, fallen dann im Bifurkationspunkt zusammen, um schließlich wieder aus-

⁴In unseren Beispielen, also bei Vorliegen einer Rotationssymmetrie, ist σ_j halbzahlig, ansonsten ganzzahlig.

einander zu gehen. Daher spricht man auch von einer „touch and go“-Bifurkation. Die uniforme Näherung dafür lautet (mit denselben Bezeichnungen wie oben)

$$\begin{aligned} \delta g_{\text{unif}}(E) = & \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} |\Delta S| \left(\left(\frac{A_0}{2} + \frac{A_1}{2\sqrt{3}} \right) \left(\cos(\bar{S}/\hbar - \sigma_1 \frac{\pi}{2}) \cdot J_{-1/6}(|\Delta S|/\hbar) - \right. \right. \\ & \left. \left. \sigma \cdot \sin(\bar{S}/\hbar - \sigma_1 \frac{\pi}{2}) \cdot J_{1/6}(|\Delta S|/\hbar) \right) - \right. \\ & \left(\frac{A_0}{2} - \frac{A_1}{2\sqrt{3}} \right) \left(\cos(\bar{S}/\hbar - \sigma_1 \frac{\pi}{2}) \cdot J_{-5/6}(|\Delta S|/\hbar) - \right. \\ & \left. \left. \sigma \cdot \sin(\bar{S}/\hbar - \sigma_1 \frac{\pi}{2}) \cdot J_{5/6}(|\Delta S|/\hbar) \right) \right). \quad (3.4) \end{aligned}$$

Eine weitere Klasse ist die der Bifurkationen mit Wiederholungszahlen $r \geq 5$, die alle nach dem gleichen Schema ablaufen: Eine zentrale, stabile Bahn bifurkiert, ohne ihre Stabilität zu wechseln, und erzeugt dabei zwei Satellitenbahnen, eine stabile und eine instabile. Das Verhältnis der primitiven Perioden von zentraler und Satellitenbahn beträgt 1:r. Im Poincaré-Schnitt bilden die Satellitenbahnen nach der Bifurkation um den elliptischen Fixpunkt der zentralen Bahn eine Kette aus $2r$ abwechselnd elliptischen und hyperbolischen Fixpunkten, die ihren jeweils r Windungen entsprechen (s. Abb. 3.4 als Beispiel für $r = 5$). Die Wirkungsdivergenz der beiden Satellitenbahnen untereinander wächst mit zunehmender Entfernung vom Bifurkationspunkt weit schwächer als die Differenz zwischen der Wirkung der zentralen Bahn und dem Wirkungsmittelwert der Satellitenbahnen. Dieses Verhalten erlaubt es, bei der Herleitung der uniformen Näherung (die wir hier nicht angeben) zusätzliche Vereinfachungen vorzunehmen. Sie besteht aus drei Termen, nämlich dem Gutzwiller-Beitrag der zentralen Bahn, einem gemeinsamen Beitrag der Satellitenbahnen sowie einem (als Integral ausgedrückten) Interferenzterm. Obwohl die einzelnen Terme am Bifurkationspunkt divergieren, hebt sich die Summe der Divergenzen gerade wieder weg, so daß man wieder ein endliches Resultat erhält.

Die perioden-vervierfachenden Bifurkationen stellen die letzte Klasse generischer Bifurkationen in zwei Dimensionen dar. Sie treten in zwei verschiedenen Formen auf: Im einen Fall findet man das gleiche Verhalten wie im letzten Absatz (nur mit $r = 4$), im anderen gibt es vor und nach der Bifurkation eine stabile, zentrale Bahn, eine reelle, instabile sowie eine komplexe Satellitenbahn. Bei der Bifurkation wird die reelle Satellitenbahn komplex und umgekehrt. In beiden Fällen jedoch sind alle auftretenden Wirkungsdivergenzen von der gleichen Größenordnung, was letztlich dazu führt, daß die uniforme Näherung nur als Integral angegeben werden kann, das (bis auf einige Spezialfälle) numerisch berechnet werden muß.

Bei der Herleitung der hier erläuterten uniformen Näherungen wurde davon ausgegangen, daß die an einer Bifurkation beteiligten Bahnen nicht weiter bzw. nicht gleich wieder bifurkieren. Um nämlich solche Folgen von Bifurkationen beschreiben zu können, ist es nötig, höhere Terme in den Normalformen zu berücksichtigen. Oftmals ist es dann möglich, durch Variation eines zweiten äußeren Parameters zwei aufeinanderfolgende Bifurkationen zusammenfallen zu lassen. Man spricht dann von einer Bifurkation mit Kodimension zwei. Beispiele für die Relevanz solcher Bifurkationen finden sich in [38, 39].

Eine andere Voraussetzung ist, wie schon erwähnt, die Generizität des Systems. Ist diese nicht erfüllt, wenn also z.B. diskrete Symmetrien vorliegen, kann es noch weitere Klassen

von Bifurkationen geben, die zunächst diese Symmetrien bei den periodischen Bahnen brechen. Um auch solche Bifurkationen zu beschreiben, muß man wiederum höhere Terme in den Normalformen mitnehmen. Beispiele dafür finden sich in [40]. In einigen Fällen lassen sich — mit leichten Veränderungen — trotzdem die obigen Formeln verwenden.

Als Beispiel dafür, das zugleich die Qualität dieser uniformen Näherungen demonstrieren soll, kommen wir auf die im vorhergehenden Abschnitt beschriebene Bifurkation der rautenförmigen Meridianbahn zurück. Dabei tritt zwar keine Periodenvervielfachung auf. Trotzdem kann man sie, wenn man A_1 durch $2A_1$ ersetzt, mit der Formel (3.3) für generische, perioden-verdoppelnde Bifurkationen behandeln. Die beiden drachenförmigen, bis auf eine Spiegelung identischen Satellitenbahnen entsprechen hier den beiden Umlaufrichtungen der im generischen Fall auftretenden Satellitenbahn. In Abb. 3.6 zeigen wir für eine Situation kurz nach der Bifurkation, bei $\varepsilon_2 = 0.192$, einen Vergleich des quantenmechanischen Ergebnisses mit dem Resultat der semiklassischen, uniformen Näherung.

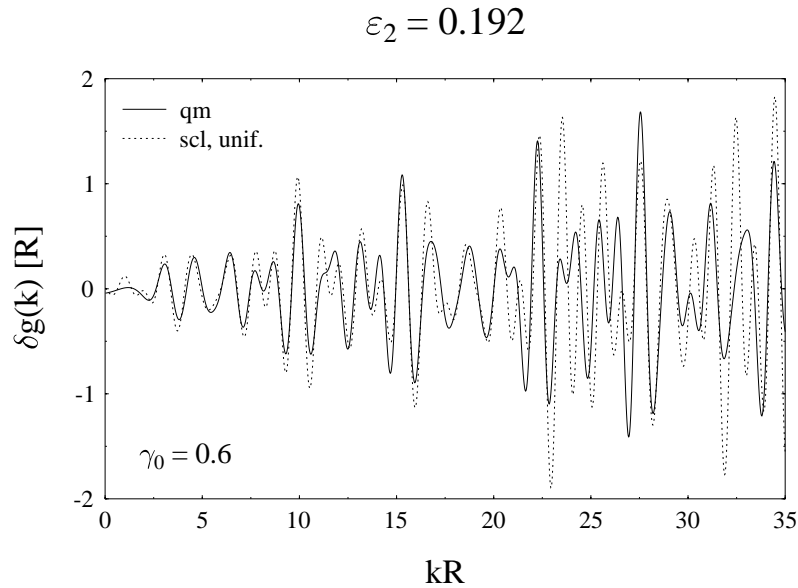


ABBILDUNG 3.6: *Der oszillierende Anteil der Niveaudichte einer axialsymmetrischen, quadrupol-deformierten Kavität mit $\varepsilon_2 = 0.192$. Gezeigt ist ein Vergleich von quantenmechanischem Resultat (durchgezogene Linie) und semiklassischer, uniformer Näherung (gestrichelte Linie).*

Die Übereinstimmung ist — sowohl was die Periode als auch die Amplitude angeht — schon sehr viel besser als in Abb. 2.8, wo wir nur die erweiterte Gutzwiller-Formel verwendet haben. Die übrige Diskrepanz ist — neben unvermeidlichen numerischen Ungenauigkeiten — einerseits darauf zurückzuführen, daß die neu entstandenen Satellitenbahnen bereits kurz vor einer erneuten Bifurkation stehen. Ein anderer Grund ist darin zu suchen, daß die schon bei sehr kleinen Deformationen einsetzende Aufspaltung zwischen den verschiedenen Meridianbahnen mit gleicher Eckenzahl (siehe Abb. 3.1 bzw. 3.2) immer noch recht gering ist, so daß man eigentlich alle diese Bahnen jeweils gemeinsam betrachten muß. Wie man dieses grundsätzliche Problem allgemein behandeln kann, ist Inhalt des nächsten Abschnitts.

3.3 Symmetrieänderung

Bei einer Symmetriebrechung ändern sich schon durch einen infinitesimal von Null verschiedenen Wert des Parameters⁵ ε die periodischen Bahnen eines Systems schlagartig. Kontinuierliche Familien von bezüglich ihrer Wirkung entarteten Bahnen werden ersetzt durch diskrete Mengen von isolierten Bahnen bzw. Familien mit geringerem Entartungsgrad. Weil aber der Beitrag einer periodischen Bahn zur Niveaudichte, wie wir schon in Abschnitt 2.2 eingesehen haben, sehr stark von ihrem Entartungsgrad abhängt und die Spurformeln für jeden Symmetrietyp vollkommen verschieden sind, ergibt sich insgesamt ein (als Funktion von ε) unstetiger semiklassischer Ausdruck für die Niveaudichte. Typischerweise nehmen nämlich beim Übergang zu einer höheren Symmetrie für jeden neuen Entartungsgrad zwei Eigenwerte der (reduzierten) Stabilitätsmatrix den Wert 1 an, so daß die Amplituden in den Spurformeln (2.54) bzw. (2.56) divergieren. Dies widerspricht natürlich der Tatsache, daß die Niveaudichte als quantenmechanische Größe eine stetige Abhängigkeit von kontinuierlichen Parametern zeigt.

Genau das ist die Ursache für die große Diskrepanz zwischen quantenmechanischem und semiklassischen Ergebnis in Abb. 2.9. Das wird besonders gut klar, wenn man das zugehörige Fourier-Spektrum betrachtet (siehe Abb. 3.7⁶). Hier sind es (neben allen anderen Bahnen) besonders die jeweils zwei Meridianbahnen mit drei bzw. fünf Ecken, die sich in ihren Längen nur äußerst wenig unterscheiden und deswegen eigentlich nicht getrennt behandelt werden können.

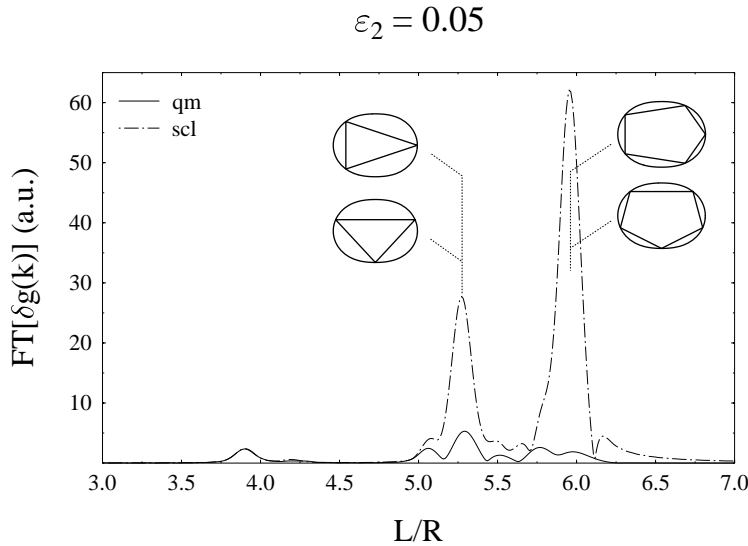


ABBILDUNG 3.7: Das Fourierspektrum zu den Niveaudichten aus Abb. 2.9. Die zu den zwei größten Peaks gehörenden Meridianbahnen sind eingezeichnet. Offensichtlich sind v.a. sie für die schlechte Übereinstimmung der Kurven in Abb. 2.9 verantwortlich.

⁵ ε sei so gewählt, daß $\varepsilon = 0$ den Zustand mit der höheren Symmetrie bezeichne.

⁶Der besseren Erkennbarkeit wegen zeigen wir hier die Bahnen für $\varepsilon_2 = 0.2$, die sich in ihrer Form aber nicht qualitativ von denen für $\varepsilon_2 = 0.05$ unterscheiden.

Ganz allgemein kann man in dem uns interessierenden Beispiel des Übergangs von axialer zu Kugelsymmetrie diese Divergenz zumindest für die Äquatorbahnen sofort analytisch zeigen. Bildet man nämlich in Tabelle (2.96) den Grenzwert $R_2 \rightarrow R_1$, so geht der Stabilitätsterm Δ_{nt} unabhängig von der Ecken- und Windungszahl gegen Null.

In diesem Abschnitt besprechen wir nun Möglichkeiten, dieses Problem divergierender Amplituden bei Änderungen der dem System zugrundeliegenden kontinuierlichen Symmetrie zu beheben. Zunächst gehen wir auf einen störungstheoretischen Ansatz ein, der sich als sehr leicht zu handhaben und damit für praktische Anwendungen sehr brauchbar erweist. Anschließend zeigen wir eine Methode, wie man im Rahmen einer uniformen Näherung — ganz analog zur Behandlung von Bifurkationen im letzten Abschnitt — den gemeinsamen Beitrag zur Niveaudichte von Bahnen, die bei einer Symmetriebrechung aus einer Bahnfamilie hervorgehen, berechnen kann, so daß man sowohl im Falle höherer Symmetrie als auch isolierter Bahn(famili)en den richtigen Grenzwert erhält.

3.3.1 Störungstheorie

In einer quantenmechanischen Rechnung stellt eine Symmetriebrechung durch „Einschalten“ des Parameters ε kein großes Problem dar. Ist ε nicht allzu groß, so ist die Störungstheorie die einfachste Methode, die resultierende Aufspaltung und Verschiebung der Eigenenergien zu berechnen. Dieser Gedanke legt es nahe, auch in der semiklassischen Rechnung störungstheoretische Methoden anzuwenden und so zu einem divergenzfreien semiklassischen Ausdruck für die Niveaudichte zu kommen. Solch ein Ansatz wurde zum ersten Mal von Ozorio de Almeida [41] verfolgt. Eine ähnliche, etwas allgemeinere Methode wurde von Creagh [42] vorgestellt. Auf sie gehen wir im folgenden näher ein. Beiden Verfahren ist gemeinsam, daß im Ergebnis der Beitrag einer entarteten Bahnfamilie zur Niveaudichte mit wachsendem ε auf oszillierende Weise abnimmt.

Ausgangspunkt der Störungstheorie von Creagh ist die Herleitung der Spurformel (2.56) für das symmetrische System mit seinen noch ungestörten, in entarteten Familien vorliegenden periodischen Bahnen. Bei der Spurbildung wurde zunächst über alle Koordinaten senkrecht zu der von jeder Bahnfamilie aufgespannten Hyperfläche F in Sattelpunktsnäherung integriert. Daran ändert sich auch nichts, wenn man den Effekt der Symmetriebrechung berücksichtigen möchte. Die Integration parallel zu F wird dagegen komplizierter, da die Familie nun ja aufgebrochen ist und sich ihre Mitglieder in ihrer Wirkung unterscheiden. An dieser Stelle ist, um zu einer geschlossenen, allgemeinen Formel für das Endergebnis zu kommen, die Beschränkung auf hinreichend kleine Störungen der Symmetrie nötig, die die klassischen Größen nur wenig ändern. Insbesondere geht man davon aus, daß in erster Ordnung von ε die Familien von periodischen Bahnen zunächst erhalten bleiben und auch ihre semiklassischen Amplituden sich nicht ändern. Berücksichtigt wird nur die Änderung ΔS_F der Wirkung ihrer Mitglieder, da diese in die Phase eingeht und daher den wichtigsten Effekt auf die Niveaudichte ausübt. Dann kann man das Integral über die parallelen Koordinaten wiederum umformen in ein Integral über die Elemente der (ungestörten) Symmetriegruppe \mathbb{G} , das schließlich den sogenannten Modulationsfaktor

$$M_F(E; \varepsilon) = \langle e^{i \Delta S_F(E; \varepsilon; g)/\hbar} \rangle_{g \in \mathbb{G}} = \frac{1}{V_{\mathbb{G}}} \int_{\mathbb{G}} d\mu(g) e^{i \Delta S_F(E; \varepsilon; g)/\hbar} \quad (3.5)$$

liefert⁷. Dieser Faktor ist gewissermaßen das Gruppenmittel (angedeutet durch die spitzen Klammern) des Terms, in dessen Phase im wesentlichen die Wirkungsänderung ΔS_F steht. Er hängt natürlich von ε und von der Energie sowie von der jeweiligen Bahnfamilie F ab. Insgesamt erhält man so eine Spurformel für Systeme mit näherungsweise Symmetrie, die sich von der Spurformel (2.56) nur durch eben diesen Modulationsfaktor unterscheidet, mit dem der Beitrag jeder Familie multipliziert wird. Weil dieser Faktor i.a. komplexwertig ist (d.h. er bewirkt in der Spurformel sowohl eine Modulation der Amplitude als auch eine Phasenverschiebung), geben wir das Ergebnis der Einfachheit halber in komplexer Schreibweise an:

$$\delta g_{\text{pert}}(E; \varepsilon) = \text{Re} \sum_F A_F(E) M_F(E; \varepsilon) e^{i(S_F(E)/\hbar - \sigma_F \cdot \pi/2 - f \cdot \pi/4)} \quad . \quad (3.6)$$

Dabei bezeichnen wir mit A_F die gesamte Amplitude in Formel (2.56) einschließlich aller Konstanten. Gl. (3.6) ist bemerkenswert einfach, wenn man sich vergegenwärtigt, daß sie die Brechung einer beliebigen Symmetrie beschreibt, wobei nicht einmal die Kenntnis der periodischen Bahn(famili)en im niedriger-symmetrischen Fall nötig ist. Alle Information darüber steckt nämlich — zumindest näherungsweise — in dem Ausdruck für die Wirkungsänderung ΔS_F . Darauf werden wir gleich etwas näher eingehen. Hat man die Bahnfamilien und die zugehörige Spurformel für das symmetrische System einmal ermittelt, besteht der einzige Mehraufwand nur mehr in der Berechnung des Modulationsfaktors M_F , die im schlimmsten Fall auf die numerische Bestimmung eines mehrdimensionalen Integrals hinausläuft.

M_F (bzw. sein Betrag) verhält sich als Funktion von ε ähnlich wie eine J_0 -Besselfunktion. Bei $\varepsilon=0$ hat es per Konstruktion für alle Bahnfamilien den Wert 1, d.h. man gelangt wie erwartet wieder zur Spurformel (2.56) für das symmetrische System. Mit wachsendem ε wird der Beitrag jeder Familie hingegen allmählich gedämpft, so wie es die Symmetrierniedrigung ja auch erwarten läßt.

Da es sich hier um einen störungstheoretischen Zugang handelt, darf ε aber auch nicht zu groß werden. Trotzdem kann man aus dem Grenzwert $\varepsilon \rightarrow \infty$ noch physikalische Information gewinnen: In diesem Fall kann man den Modulationsfaktor nämlich asymptotisch auswerten, indem man das Integral (3.5) in Sattelpunktsnäherung berechnet. Die stationären Punkte von ΔS_F im Exponenten des Integranden sowie die Punkte an den Integrationsgrenzen entsprechen dann — im Rahmen der Beschränkung auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ — den periodischen Bahn(famili)en im System mit gestörter Symmetrie. Wir werden dies gleich noch an einem Beispiel veranschaulichen. Setzt man das Ergebnis der asymptotischen Auswertung wieder in Gl. (3.6) ein, so erhält man eine Summe von Beiträgen, die allerdings wieder nur eine Näherung für die tatsächlichen (erweiterten) Gutzwiller-Ausdrücke darstellen, die man in diesem Fall — weit weg von der höheren Symmetrie — erwartet. In diesem Sinne handelt es sich also nicht um eine uniforme, sondern um eine nur lokale Näherung zur Beschreibung der Symmetriebrechung.

Über die Wirkungsänderung ΔS_F haben wir noch nichts Genauereres gesagt. Sie ist eine Funktion der Energie E , von ε und der Bahnfamilie F , aber i.a. auch der jeweiligen Bahn innerhalb der Familie. Diese Abhängigkeit bringen wir durch das Gruppenelement g im Argument von ΔS_F zum Ausdruck, weil ja jede dieser Bahnen genau einem $g \in \mathbb{G}$

⁷Wir definieren M_F hier mit dem Normierungsfaktor $\frac{1}{V_{\mathbb{G}}}$. $V_{\mathbb{G}}$, das Gruppenvolumen, steht deshalb weiterhin explizit in der Amplitude.

entspricht (siehe Abschnitt 2.2). Da wir uns auf die erste Ordnung in ε beschränken, kann man ΔS_F explizit angeben. Wir geben hier nur den für Billardsysteme gültigen Ausdruck wieder. Für eine Bahn mit n Ecken lautet er [43]:

$$\Delta S_F(E; \varepsilon; g) = \hbar k \cdot \Delta L_F(\varepsilon; g) = \hbar k \sum_{j=0}^{n-1} 2 \sin \alpha_j \cdot \Delta r_j(\varepsilon; g) \quad . \quad (3.7)$$

Die ganze Energieabhängigkeit steckt in der Wellenzahl k . Die Gesamtlängenänderung ΔL_F ist die Summe der Längenänderungen an den einzelnen Reflexionspunkten j , die (bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$) jeweils nur vom senkrechten Abstand Δr_j der gestörten zur ungestörten Billardberandung sowie vom Reflexionswinkel α_j der Bahn (relativ zur Tangente an die ungestörte Berandung) abhängen.

Anwendung auf multipol-deformierte Kavitäten

Weil wir diese Störungstheorie bei der Bestimmung der (relativ kleinen) Grundzustandsdeformationen von Metallclustern anwenden wollen (siehe Kap. 4), führen wir die Berechnung des Modulationsfaktors am Beispiel der multipol-deformierten Kavität vor. Ausgangspunkt der Rechnung ist die sphärische Kavität mit ihrer Kugelsymmetrie, die zu einer nur mehr axialsymmetrischen Kavität deformiert wird. Die Spurformel haben wir in Gl. (2.74) angegeben, die entarteten Bahnfamilien F sind durch die regulären Polygone mit Ecken- und Windungszahl n und t gegeben (siehe Abschnitt 2.4). Dort haben wir auch schon erwähnt, daß wir zur Parametrisierung der $SO(3)$ -Gruppenelemente, also der Rotationen im Dreidimensionalen, und damit zur Kennzeichnung einer einzelnen periodischen Bahn innerhalb ihrer Familie die drei Euler-Winkel φ, ϑ, ψ verwenden⁸, die auf eine feste Referenzbahn angewandt werden. φ beschreibt eine Drehung um die z -Achse, die die x - in die x' -Achse überführt. Bei der anschließenden Drehung um diese x' -Achse um den Winkel ϑ geht die z - in die z' -Achse über. Schließlich dreht man die Bahn noch um den Winkel ψ um die z' -Achse. Als Referenzbahn für alle Familien mit $n > 2t$ definieren wir die Bahn, die in der x - y -Ebene liegt, mit einem Eckpunkt auf der x -Achse⁹. Alle Eckpunkte sind dann durch die Angabe des Azimutwinkels $\varphi_j = 2\frac{j}{n}\pi$, ($j = 0, \dots, n-1$) festgelegt. Mittels Drehmatrizen kann man zeigen, daß diese Referenz-Eckpunkte durch Anwendung der Euler-Rotationen auf Punkte abgebildet werden, deren Polarwinkel ϑ_j durch

$$\cos \vartheta_j(\varphi, \vartheta, \psi) = \sin \vartheta \sin(\varphi_j + \psi) \quad (3.8)$$

bestimmt ist. Mehr braucht man darüber nicht zu wissen, denn die Verschiebung Δr der Billardberandung, die man direkt aus der Parametrisierung (4.1) der Oberfläche ablesen kann, hängt nur vom Kosinus dieses Polarwinkels ab. Der Parameter ε ist hier durch den Vektor der Multipol-Parameter $\varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$ gegeben. Der Reflexionswinkel α_j ist für alle j gleich und identisch mit dem Winkel $\varphi_{nt} = \frac{t}{n}\pi$. Damit lautet der Ausdruck für die Gesamtlängenänderung

$$\Delta L_{nt}(\varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4; \varphi, \vartheta, \psi) = 2 \sin \varphi_{nt} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq 1}}^4 R \varepsilon_i P_i(\cos \vartheta_j(\varphi, \vartheta, \psi)) =: \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq 1}}^4 \Delta L_{nt}^{(i)} \quad . \quad (3.9)$$

⁸Zwei von ihnen, nämlich φ und ϑ , entsprechen den beiden Winkeln der Polarkoordinaten.

⁹Als Referenzbahn für die Durchmesserbahnen $n = 2t$ erweist sich die Bahn entlang der z -Achse als günstig, weil sich die Rechnung dann sehr vereinfacht. Wir geben weiter unten nur das Ergebnis dieser Rechnung an.

ΔL_{nt} hängt erwartungsgemäß nicht vom Eulerwinkel φ ab, weil dieser ja eine Drehung um die z -Achse beschreibt, die auch im deformierten Fall Symmetrieachse bleibt. Die Teillängenänderungen $\Delta L_{nt}^{(i)}$, die von den einzelnen Multipol-Freiheitsgraden herrühren, können jeweils ausgerechnet werden. Man findet¹⁰ [44]

$$\Delta L_{nt}^{(0)} = 2R n \varepsilon_0 \sin \varphi_{nt}, \quad (3.10)$$

$$\Delta L_{n=2t}^{(2)} = 4R t \varepsilon_2 P_2(\cos \vartheta), \quad \Delta L_{n \neq 2t}^{(2)} = -R n \varepsilon_2 \sin \varphi_{nt} P_2(\cos \vartheta), \quad (3.11)$$

$$\Delta L_{n \neq 3t}^{(3)} = 0, \quad \Delta L_{n=3t}^{(3)} = -\frac{5}{8}\sqrt{3} R n \varepsilon_3 \sin^3 \vartheta \sin(3\psi), \quad (3.12)$$

$$\Delta L_{n=2t}^{(4)} = 4R t \varepsilon_4 P_4(\cos \vartheta), \quad \Delta L_{n \neq 2t, 4t}^{(4)} = \frac{3}{4} R n \varepsilon_4 \sin \varphi_{nt} P_4(\cos \vartheta),$$

$$\Delta L_{n=4t}^{(4)} = \frac{105}{16} \sqrt{2} R t \varepsilon_4 \left(\sin^4 \vartheta \left(\frac{1}{3} \cos(4\psi) + 1 \right) - \frac{8}{7} \sin^2 \vartheta + \frac{8}{35} \right). \quad (3.13)$$

Bei einer reinen Quadrupoldeformation ($\varepsilon_3 = \varepsilon_4 = 0$) ist ΔL_{nt} für alle Bahnen unabhängig von ψ , was auf eine weitere Entartung der gestörten Bahnen hinweist. Ein Quadrupol ist nämlich in erster Ordnung von ε_2 identisch mit einem Sphäroid, dessen Meridianbahnen tatsächlich eine weitere kontinuierliche Symmetrie aufweisen (siehe Fußnote auf Seite 28). Diese Entartung ist natürlich ebenfalls nur exakt bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon_2^2)$. Auch bei den höheren Multipolen tritt diese Entartung auf (im Rahmen der Näherung), aber auffälligerweise nicht bei genau jenen Bahnen, bei denen das Verhältnis von Ecken- zu Windungszahl mit der Ordnung des Multipols übereinstimmt. Man könnte sagen, daß die Bahnen mit einer i -zähligen Symmetrie mit einem Multipol der Ordnung i in Resonanz geraten.

Der letzte Schritt bei der Berechnung des Modulationsfaktors ist gemäß Gl. (3.5) die Bestimmung des Gruppenintegrals. Dabei lautet das Volumenelement $d\mu$ für die Gruppe $SO(3)$, ausgedrückt durch die Euler-Winkel [46]:

$$d\mu(\varphi, \vartheta, \psi) = d\varphi d\vartheta \sin \vartheta d\psi. \quad (3.14)$$

Die Winkel φ und ψ laufen von 0 bis 2π , ϑ bis π . Das Gruppenvolumen ergibt sich damit zu $V_G = 8\pi^2$. Das Integral über φ ist wie gesagt trivial und liefert nur die Konstante 2π . Dies gilt in allen Fällen mit $n \neq jt$ ($j = 2, \dots, 4$) auch für das Integral über ψ . Ansonsten kann es aber immer durch eine J_0 -Besselfunktion mit mehr oder weniger kompliziertem Argument ausgedrückt werden. Das verbleibende Integral über ϑ kann bei einer reinen Quadrupol-Deformation noch analytisch gelöst werden und liefert im wesentlichen eine Kombination von Fresnel-Integralen [44]. Im allgemeinen Fall ist solch eine geschlossene Lösung nicht mehr möglich, so daß man das ϑ -Integral numerisch berechnen muß. Mit der Substitution $u := \cos \vartheta$ findet man die folgenden Ausdrücke für die Modulationsfaktoren:

$$M_{n=2t}(E; \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4) = \int_0^1 du \exp\left(4itk(\varepsilon_0 + \varepsilon_2 P_2(u) + \varepsilon_4 P_4(u))\right) \quad (3.15)$$

$$M_{n=3t}(E; \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4) = \int_0^1 du \exp\left(3\sqrt{3}itk\left(\varepsilon_0 - \frac{1}{2}\varepsilon_2 P_2(u) + \frac{3}{8}\varepsilon_4 P_4(u)\right)\right) \cdot J_0\left(\frac{15}{8}\sqrt{3}tk\varepsilon_3(1-u^2)^{3/2}\right) \quad (3.16)$$

¹⁰Für die Berechnung der Längenänderung der Durchmesserbahnen ($n=2t$) erweist es sich als günstig, als Referenzbahn die Bahn entlang der z -Achse zu wählen.

$$M_{n=4t}(E; \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4) = \int_0^1 du \exp\left(\sqrt{2} itk \left(4\varepsilon_0 - 2\varepsilon_2 P_2(u) + \frac{3}{2}\varepsilon_4 - \frac{15}{2}\varepsilon_4(1-u^2) + \frac{105}{16}\varepsilon_4(1-u^2)^2\right)\right) \cdot J_0\left(\frac{35}{16}\sqrt{2} tk\varepsilon_4(1-u^2)^2\right) \quad (3.17)$$

$$M_{n \geq 5t}(E; \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4) = \int_0^1 du \exp\left(in \sin\varphi_{nt} k \left(2\varepsilon_0 - \varepsilon_2 P_2(u) + \frac{3}{4}\varepsilon_4 P_4(u)\right)\right) \quad (3.18)$$

In Abb. 3.8 haben wir die Spurformel (3.6) mit diesen Modulationsfaktoren auf das schon benutzte Beispiel einer quadrupol-deformierten Kavität mit $\varepsilon_2 = 0.05$ angewandt.

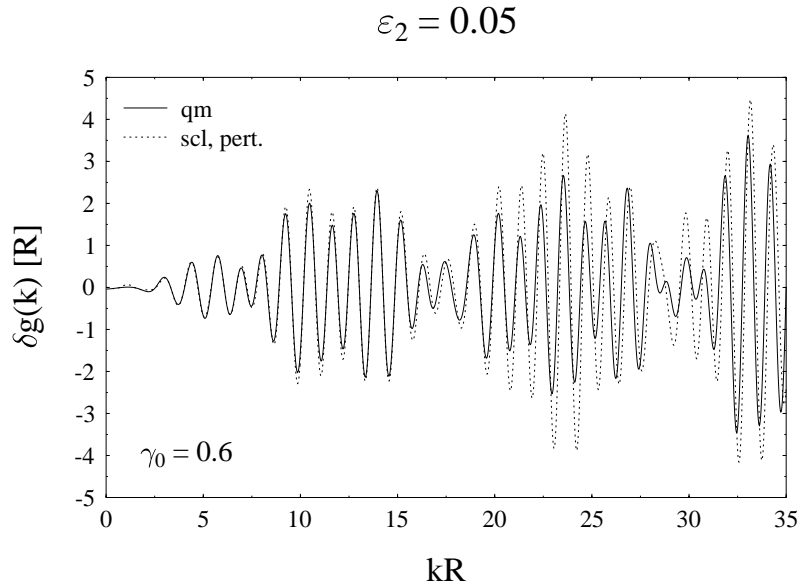


ABBILDUNG 3.8: Der oszillierende Anteil der Niveaudichte einer axialsymmetrischen, quadrupol-deformierten Kavität mit $\varepsilon_2 = 0.05$. Gezeigt ist ein Vergleich von quantenmechanischem Ergebnis (durchgezogene Linie) und dem Resultat der semiklassischen Störungstheorie (gestrichelte Linie).

Im Vergleich zu Abb. 2.9 ist die Übereinstimmung mit dem quantenmechanischen Ergebnis nun schon sehr viel besser. Erst ab etwa der zweiten Superschale treten allmählich größer werdende Unterschiede auf. Das ist aber bei dieser störungstheoretischen Näherung auch zu erwarten, da die als klein vorausgesetzte Wirkungsänderung ΔS (3.7) nicht nur mit ε , sondern auch mit der Energie E bzw. mit der Wellenzahl $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ zunimmt.

Wie schon weiter vorne erwähnt, liefert die Störungstheorie auch Aussagen über die im gestörten System zu erwartenden periodischen Bahnen, wenn man sich — als ersten Schritt einer asymptotischen Auswertung des Modulationsfaktors (3.5) — die (bezüglich g) stationären Punkte von $\Delta S_F(E; \varepsilon; g)$ betrachtet, die im Limes $\varepsilon \rightarrow \infty$ den größten Beitrag zum Gruppenintegral (3.5) liefern. In unserem Beispiel findet man für alle Eckenzahlen einen stationären Punkt bei $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ (siehe Gln. (3.10)–(3.13)). Dies entspricht einer Drehung der Referenzbahn in die z - ρ -Ebene: Man kommt also genau zu den Meridianbahnen, von denen wir ja wissen, daß sie im deformierten Fall eine wichtige Klasse von periodischen

Bahnen bilden. Der Euler-Winkel ψ beschreibt nun noch die Orientierung dieser Meridianbahnen in ihrer Bewegungsebene. In allen Fällen, in denen ΔL unabhängig von ψ ist (siehe Gln. (3.10)–(3.13)), wären demnach die Bahnen in ihrer Ebene noch frei drehbar, also zusätzlich entartet. Wie wir aus der Diskussion der periodischen Bahnen in Abschnitt 2.5.1 wissen, ist diese Aussage nicht richtig. Um auch für diese Bahnen die Aufspaltung in ψ richtig beschreiben zu können, müßte man in dem Ausdruck für ΔL noch höhere Terme in den Deformationsparametern ε_2 , ε_3 und ε_4 berücksichtigen.

Neben den stationären Punkten im Integrationsgebiet tragen auch noch dessen Randpunkte wesentlich zum Integral bei¹¹. In unserem Beispiel sind es genau die Äquatorbahnen, die diesen Randpunkten bei $\vartheta = 0$ bzw. π entsprechen. Bei dieser Orientierung der Bewegungsebene beschreibt ψ genauso wie der Eulerwinkel φ eine Drehung um die Symmetrieachse, so daß ΔL hier erwartungsgemäß nicht von ψ abhängt. Damit liefert die asymptotische Auswertung des Modulationsfaktors auch die zweite Klasse von periodischen Bahnen, die bei jeder Deformation existiert. In entsprechenden Fällen erhält man mit dieser Methode auch einen Hinweis auf eventuelle Familien von planaren Bahnen mit „schrägliegender“ Bewegungsebene. Andere mögliche Familien, also z.B. zusätzliche Äquatorbahnen, deren Bewegungsebene nicht den Koordinatenursprung enthält, oder nicht-planare Bahnen, können so allerdings nicht bestimmt werden, da sie ja nicht aus einer einfachen Rotation der Referenzbahn, wie sie die Eulerwinkel beschreiben, hervorgehen. Allerdings treten solche Bahnfamilien auch erst bei relativ großen Deformationen auf, so daß man von einer Störungstheorie auch gar keinen Hinweis darauf erwarten kann.

Zusammenfassend kann man also sagen, daß die asymptotische Auswertung des Modulationsfaktors (3.5) die Aufspaltung der Familien von entarteten, periodischen Bahnen in isolierte Bahnen bzw. Familien mit geringerer Entartung anschaulich widerspiegelt.

3.3.2 Uniformisierung

Im letzten Abschnitt haben wir einen störungstheoretischen Ansatz zur Behandlung von Symmetrieänderungen beschrieben, die in der Standard-POT ein großes Problem darstellen. Dabei erweist sich dieser Ansatz für hinreichend kleine Störungen des höhersymmetrischen Systems als sehr gute und auch leicht zu handhabende Näherung. In größerer Entfernung vom symmetrischen Grenzfall werden ihre Ergebnisse erwartungsgemäß schlechter. Dort ist dann wiederum die (erweiterte) Gutzwiller-Theorie gültig. In einigen Systemen gibt es sogar einen Bereich, in dem die Ergebnisse beider Theorien sehr gut übereinstimmen [47]. I.a. ist es aber unklar, bei welchem Wert der Störung man zwischen beiden umschalten soll. Wünschenswert ist daher — ähnlich wie bei der Beschreibung von Bifurkationen (siehe Abschnitt 3.2) — eine uniforme Näherung, die für beide Bereiche gleichermaßen gültig ist. Im folgenden erläutern wir die Herleitung einer solchen Näherung. Dabei gehen wir zunächst auf die Symmetrieänderung in zwei Dimensionen ein, um die prinzipielle Vorgehensweise zu erklären. Anschließend verallgemeinern wir das Ergebnis auf drei Dimensionen am speziellen Beispiel des Übergangs von einer sphärischen zu einer quadrupol-deformierten Kavität.

Eine uniforme Näherung zur Beschreibung der Symmetriebrechung in zwei Dimensionen wurde zuerst von Tomsovic et al. [48] entwickelt, aufbauend auf einer Arbeit von Ozorio de Almeida [41]. Eine Vereinfachung ihrer Ergebnisse wurde schließlich noch von Sieber [49]

¹¹Bei unserem zweidimensionalen Integral ist ihr Beitrag sogar genauso groß, wie wir im letzten Kapitel gezeigt haben.

vorgenommen. Wir geben hier nur die grundlegende Idee wieder, ohne auf diese Arbeiten genauer einzugehen.

Nach dem bei der Herleitung der semiklassischen Störungstheorie Gesagten ist im Grunde klar, was zu tun ist: Bei der Berechnung des Gruppenintegrals über die Mitglieder g der entarteten Bahnfamilie muß deren Wirkungsänderung $\Delta S(E; \varepsilon; g)$, die sie beim Einschalten der Störung erfahren, exakt und nicht nur in erster Ordnung berücksichtigt werden. Darüberhinaus muß natürlich beachtet werden, daß sich auch ihre Amplituden ändern, die in der Störungstheorie noch als konstant angenommen wurden. Dieses Programm ist aber i.a. nicht durchführbar, weil man normalerweise das exakte ΔS nicht kennt. Darüberhinaus wären die so entstehenden Integrale in den meisten Fällen auch nicht analytisch zu lösen. Daher benützt man im Prinzip die gleiche Methode wie schon bei der Behandlung von Bifurkationen: Man macht eine Variablentransformation dergestalt, daß die Wirkung in den neuen Variablen eine möglichst einfache Form annimmt. Wir sprechen kurz wieder von einer Normalform der Wirkung. Bei dieser Transformation sollen die Position der stationären Punkte sowie die Funktionswerte an diesen Stellen erhalten bleiben, so daß man damit auch weiterhin die gleichen periodischen Bahnen beschreibt. Während die Normalformen zur Beschreibung von bifurkierenden Bahnen im wesentlichen Polynome in den Phasenraumvariablen sind, werden hier Winkelfunktionen bzw. Kugelflächenfunktionen verwendet.

Herleitung für zweidimensionale Systeme

In einem generischen zweidimensionalen System mit einer kontinuierlichen Symmetrie ist deren Verhalten unabhängig von der Art der Störung sehr einfach: Die Familien von entarteten periodischen Bahnen brechen stets auf in jeweils eine stabile und eine instabile isolierte Bahn. Handelt es sich bei der Symmetrie um eine Drehsymmetrie, würde man das Spurintegral durch die zugehörige SymmetrievARIABLE, also einen Drehwinkel φ , formulieren. Es liegt also nahe, auch als transformierte Variable einen Winkel zu verwenden, den wir kurzerhand wieder mit φ bezeichnen¹². Gleichwohl kann man damit auch die Brechung anderer Symmetrien behandeln, soweit die Familien von periodischen Bahnen wie oben geschildert aufbrechen. Die einfachste Funktion, die (mit ihren stationären Punkten) dieses Aufspalten wiedergibt, ist der Kosinus, d.h. die transformierte Wirkungsfunktion lautet: $S(\varphi) = s_0 + s_1 \cdot \cos \varphi$. Dabei sind s_0 und s_1 nur mehr Funktionen der Energie und von ε . Auf ihre Bestimmung gehen wir gleich ein. Bis zu diesem Punkt ist das Vorgehen noch exakt. Die einzige Näherung besteht nun darin, daß man die Amplitude inklusive der Jacobi-Determinante, die vom Übergang zu den neuen Variablen herrührt, entwickelt in eine Funktion vom gleichen Typ wie die Wirkung¹³. Der gemeinsame Beitrag der beiden beteiligten Bahnen zur Niveaudichte nimmt damit zunächst folgende Form an:

$$\delta g_{\text{unif}} = \text{Re} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi (a_0 + a_1 \cdot \cos \varphi) e^{i((s_0 + s_1 \cdot \cos \varphi)/\hbar - \bar{\sigma} \cdot \pi/2)} \quad . \quad (3.19)$$

¹²Eigentlich müßte man zwischen dem Winkel φ und dem transformierten Winkel $\hat{\varphi}$ und entsprechend zwischen den Wirkungen $S(\varphi)$ und $\hat{S}(\hat{\varphi})$ unterscheiden. Weil aber im folgenden nur mehr von den transformierten Größen die Rede ist, lassen wir den Akzent der Einfachheit halber gleich wieder weg.

¹³In der Näherung von Ozorio de Almeida [41] wird die Amplitude — ähnlich wie in Creaghs Störungstheorie — als konstant angenommen.

Dieses Integral kann analytisch sehr einfach durch die Besselfunktionen J_0 und J_1 ausgedrückt werden:

$$\delta g_{\text{unif}} = a_0 \cdot J_0(s_1/\hbar) \cdot \cos(s_0/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2}) - a_1 \cdot J_1(s_1/\hbar) \cdot \sin(s_0/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2}) \quad . \quad (3.20)$$

Die Amplitudenkoeffizienten a_0 , a_1 und der Maslovindex $\bar{\sigma}$ sind zunächst noch unbestimmt. Sie sind aber genauso wie s_0 und s_1 dadurch festgelegt, daß der obige Ausdruck im Grenzfall weit weg von der Symmetrie, also für $s_1/\hbar \rightarrow \infty$, gegen den entsprechenden Gutzwillerausdruck konvergieren soll. In diesem Grenzfall kann man das Integral mit der Sattelpunktnäherung [50], auch Näherung der stationären Phase genannt, asymptotisch auswerten:

$$\int_a^b dx g(x) e^{i\alpha f(x)/\hbar} \xrightarrow{\alpha/\hbar \rightarrow \infty} \sum_{\{x_j\}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\alpha|f''(x_j)|}} g(x_j) e^{i\alpha f(x_j)/\hbar} e^{i \operatorname{sgn}(f''(x_j)) \cdot \pi/4} + \mathcal{O}(\hbar) \quad . \quad (3.21)$$

α bezeichne hier einen reellen, positiven Parameter, summiert wird über die Menge $\{x_j\}$ aller stationären Punkte¹⁴ der Funktion $f(x)$ im Intervall $[a; b]$. Angewandt auf das Integral im Ansatz (3.19) findet man (mit der Definition $\sigma := \operatorname{sgn}(s_1)$) den folgenden asymptotischen Ausdruck¹⁵:

$$\delta g_{\text{unif}} \xrightarrow{|s_1/\hbar| \rightarrow \infty} \operatorname{Re} \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi|s_1|}} \left((a_0 + a_1) e^{i((s_0+s_1)/\hbar - \bar{\sigma} \cdot \pi/2 - \sigma \cdot \pi/4)} + (a_0 - a_1) e^{i((s_0-s_1)/\hbar - \bar{\sigma} \cdot \pi/2 + \sigma \cdot \pi/4)} \right) \quad . \quad (3.22)$$

Die beiden Summanden stammen von den stationären Punkten bei $\varphi = 0$ bzw. 2π und bei $\varphi = \pi$. Erstere liefern wegen der Periodizität des Integranden den gleichen Beitrag, der jedoch, weil sie genau auf dem Rand des Integrationsgebietes liegen, jeweils mit einem Faktor $\frac{1}{2}$ multipliziert werden muß. Identifiziert man diese Summanden nun mit den Gutzwillerausdrücken $\operatorname{Re}[A_{s/u} e^{i(S_{s/u}/\hbar - \sigma_{s/u} \cdot \pi/2)}]$ für den Beitrag der stabilen und der instabilen isolierten Bahn zur Niveaudichte, findet man für die bislang unbestimmten Parameter:

$$\begin{aligned} s_0 &= \frac{1}{2}(S_u + S_s) := \bar{S}, & s_1 &= \frac{1}{2}(S_u - S_s) := \Delta S, & \bar{\sigma} &= \frac{1}{2}(\sigma_u + \sigma_s) \quad , \\ a_0 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar} |\Delta S|} (A_u + A_s) =: \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar} |\Delta S|} \bar{A} \quad , \\ a_1 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar} |\Delta S|} (A_u - A_s) =: \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar} |\Delta S|} \Delta A \quad . \end{aligned} \quad (3.23)$$

Mit diesem Ergebnis lautet die uniforme Näherung für den gemeinsamen Beitrag der beiden isolierten Bahnen zur Niveaudichte, die bei der Symmetriebrechung in zwei Dimensionen aus einer entarteten Bahnfamilie hervorgehen, explizit:

$$\delta g_{\text{unif}} = \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar} |\Delta S|} \left(\bar{A} \cdot J_0(\Delta S/\hbar) \cdot \cos(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2}) - \Delta A \cdot J_1(\Delta S/\hbar) \cdot \sin(\bar{S}/\hbar - \bar{\sigma} \frac{\pi}{2}) \right) \quad . \quad (3.24)$$

¹⁴Wo also gilt: $f'(x_j) = 0$. Natürlich darf die zweite Ableitung von f an diesen Punkten nicht verschwinden. Falls ein stationärer Punkt am Rande des Integrationsintervalls liegt ($x_j = a$ oder $x_j = b$), muß die rechte Seite dieser Gleichung mit dem Faktor $\frac{1}{2}$ multipliziert werden. Falls im ganzen Intervall $[a; b]$ kein stationärer Punkt von $f(x)$ existiert, entfällt der führende Term und es verbleiben nur Randkorrekturen, die in Ordnung $\mathcal{O}(\hbar)$ beitragen, vgl. 3.33. Eine weitere Voraussetzung für die Anwendbarkeit dieser Formel ist ein hinreichend glattes Verhalten der Funktion $g(x)$ im Intervall $[a; b]$. Die Formel (3.21) wurde für den Spezialfall einer quadratischen Funktion $f(x)$ schon in den Gln. (2.30) und (2.38) angewandt.

¹⁵Zum gleichen Ergebnis gelangt man auch, wenn man direkt in Gl. (3.20) die bekannte asymptotische Formel $J_n(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos(x - n\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})$ für die Besselfunktionen einsetzt.

Sie ist auf uniforme Weise, d.h. ohne unphysikalische Divergenzen zu liefern, für den gesamten Bereich von exakter Symmetrie, wo eine entartete Bahnfamilie vorliegt, bis weit weg von der Symmetrie¹⁶, wo diese in zwei isolierte Bahnen aufgebrochen ist, gültig. Mit den obigen Bestimmungsgleichungen konvergiert sie für den letzteren Grenzfall $|\Delta S| \rightarrow \infty$ per Konstruktion gegen die Summe der beiden Gutzwillerterme $A_s \cdot \cos(S_s/\hbar - \sigma_s \cdot \frac{\pi}{2}) + A_u \cdot \cos(S_u/\hbar - \sigma_u \cdot \frac{\pi}{2})$ mit $\sigma_{s/u} = \sigma_0 \pm \frac{1}{2}$. Im symmetrischen Grenzfall $|\Delta S| \rightarrow 0$ hingegen liefert sie gemäß dem Ansatz (3.19) den erweiterten Gutzwillerausdruck $A_0 \cdot \cos(S_0/\hbar - \sigma_0 \cdot \frac{\pi}{2})$ der Bahnfamilie, d.h. mit anderen Worten, die Gutzwilleramplituden $A_{s/u}$ divergieren in diesem Fall ihrerseits wie $\sqrt{1/|\Delta S|}$.

Verallgemeinerung auf quadrupol-deformierte Kavitäten

Nachdem wir somit das Prinzip der Herleitung einer uniformen Näherung erläutert haben, die die Symmetriebrechung in zwei Dimensionen beschreibt, möchten wir dieses Prinzip nun auf drei Dimensionen verallgemeinern. Dabei ergibt sich die Schwierigkeit, daß in drei Dimensionen das Aufspalten einer Familie von entarteten periodischen Bahnen in einzelne isolierte Bahnen bzw. Bahnfamilien mit niedrigerer Entartung nicht mehr nach einem universellen Schema abläuft, sondern sehr stark von der gewählten Störung abhängig ist. Im Hinblick auf die Anwendung in Kapitel 4 beschränken wir uns deshalb auf die Beschreibung der Symmetriebrechung beim Übergang von der sphärischen zu axialsymmetrischen Kavitäten. Deren periodische Bahnen haben wir bereits in Abschnitt 2.5.1 besprochen. Weiterhin setzen wir voraus, daß im deformierten Fall (neben der isolierten Durchmesserbahn entlang der Symmetrieachse) nur planare Bahnen existieren, und zwar eine Familie von Äquatorbahnen sowie die Meridianbahnen¹⁷. Für eine rein quadrupol-deformierte Kavität sind all diese Bedingungen erfüllt, weshalb wir im folgenden diesen Spezialfall betrachten.

Als Gruppenvariablen wählen wir wie schon bei der Anwendung der Störungstheorie auf dieses System (siehe Abschnitt 3.3.1) die Eulerwinkel φ, ϑ, ψ . Zunächst müssen wir eine geeignete Modell-Wirkungsfunktion¹⁸ $S(\varphi, \vartheta, \psi) = \hbar k L(\varphi, \vartheta, \psi)$ finden, die mit ihren stationären Punkten das Aufspalten der dreifach entarteten Polygonbahnen in der sphärischen Kavität in die nur mehr einfach entarteten Äquator- und Meridianbahnen der deformierten Kavität wiedergibt. Wegen der gewählten axialen Symmetrie muß sie unabhängig von φ sein. Für die verbleibende Funktion zweier Winkelvariablen liegt eine Entwicklung in Kugelflächenfunktionen nahe. Die kürzestmögliche Entwicklung, die bezüglich ϑ (dieser Winkel beschreibt die Orientierung der Bahnebene) zwei stationäre Punkte aufweist, lautet:

$$\begin{aligned} L(\vartheta, \psi) &= l_{00} + l_{20} \cdot P_{20}(\cos \vartheta) + l_{22} \cdot \cos 2\psi \cdot P_{22}(\cos \vartheta) \\ &= l_{00} + l_{20} \cdot \frac{1}{2}(3 \cos^2 \vartheta - 1) + l_{22} \cdot \cos 2\psi \cdot 3 \sin^2 \vartheta \quad . \end{aligned} \quad (3.25)$$

¹⁶ Andererseits darf man sich aber nicht zu weit davon entfernen, weil die isolierten Bahnen dann ihrerseits evtl. schon wieder bifurkieren.

¹⁷ Grund für die letztere Einschränkung ist die Tatsache, daß wir von einem kugelsymmetrischen System ausgehen, d.h. alle periodischen Bahnen können durch Anwendung einer Rotation aus der Gruppe $SO(3)$ aufeinander abgebildet werden. Daher müssen wir uns auch auf solche Deformationen beschränken, bei denen man die möglichen Bahn(familien) als Ergebnis einer Rotation einer Referenzbahn(familie) betrachten kann. Mehrere Äquatorbahnebenen oder nicht-planare Bahnen können somit nicht auf diese Weise behandelt werden.

¹⁸ Da wir hier ja Billardsysteme behandeln, benützen wir im folgenden statt der eigentlichen Wirkungs-funktion S die Längenfunktion L . k bezeichne wiederum die Wellenzahl.

Die stationären Punkte dieser Wirkungsfunktion liegen bei $\vartheta=0$ (unabhängig von ψ) und bei $(\vartheta, \psi) = (\frac{\pi}{2}, 0)$ bzw. $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. Sie entsprechen der Äquatorbahn (gekennzeichnet mit dem Index „eq“), für die ψ ja genauso wie φ eine Drehung um die Symmetrieachse darstellt, und den Meridianbahnen (Index „mer“), von denen (bei fester Ecken- und Windungszahl) jeweils zwei Familien existieren, nämlich eine instabile (Index „u“) und eine stabile (Index „s“), ähnlich wie im eben beschriebenen zweidimensionalen Fall. Mit dieser Gleichsetzung findet man für die Parameter l_{00}, l_{20}, l_{22} folgende Bestimmungsgleichungen:

$$\begin{aligned} l_{00} &= \frac{1}{3}(L_{\text{eq}} + L_u + L_s), & l_{20} &= \frac{2}{3}(L_{\text{eq}} - \frac{1}{2}(L_u + L_s)) =: \frac{2}{3}(L_{\text{eq}} - \bar{L}) =: \frac{2}{3}\Delta L, \\ l_{22} &= \frac{1}{6}(L_u - L_s) =: \frac{1}{3}\delta L \end{aligned} \quad (3.26)$$

und die Längenfunktion lautet schließlich (mit der Substitution $u := \cos \vartheta$):

$$L(u, \psi) = \bar{L} + \Delta L \cdot u^2 + \delta L \cdot \cos 2\psi \cdot (1 - u^2) \quad . \quad (3.27)$$

An dieser Stelle möchten wir noch einmal kurz auf die Störungstheorie in Abschnitt 3.3.1 zurückkommen. Dort haben wir für die Längenänderung $\Delta L_{nt}^{(2)}$ (siehe Gl. (3.11)) der (sphärischen) Polygonbahnen, die durch die Quadrupoldeformation in erster Ordnung von ε_2 hervorgerufen wird, einen Ausdruck gefunden, der im wesentlichen dem zweiten Summanden auf der rechten Seite von Gl. (3.25) entspricht. Daraus schließen wir, daß l_{20} und damit ΔL ebenfalls von der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon_2)$ sind. Im Rahmen der Störungstheorie waren die Meridianbahnen jedoch noch zusätzlich entartet. Die Aufspaltung in jeweils eine Familie von stabilen und instabilen Bahnen wird erst durch den dritten, ψ -abhängigen Summanden in Gl. (3.25) beschrieben. Folglich müssen l_{22} bzw. δL mindestens von der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon_2^2)$ sein. Es gilt also — wie man auch leicht numerisch überprüfen kann, siehe Abb. 3.9 — $|\delta L| \ll |\Delta L|$, weswegen wir im folgenden nur Terme in erster Ordnung von $\frac{\delta L}{\Delta L}$ berücksichtigen.

An diesem Beispiel zeigt sich sehr klar, inwiefern die uniforme Näherung über die Störungstheorie hinausgeht: Die exakte Wirkungsänderung wird nicht nach Potenzen des Störparameters entwickelt, sondern (mit der Kenntnis der exakten, im deformierten Fall existierenden periodischen Bahnen) auf eine möglichst einfache Funktion abgebildet, die also immer noch exakt ist. Erst durch die Entwicklung der Amplitude nimmt man eine Näherung vor.

In unserem Beispiel machen wir für die Amplitudenfunktion $A(u, \psi)$ zunächst noch keinen expliziten Ansatz¹⁹. Der gemeinsame Beitrag von Äquatorbahn, stabiler und instabiler Meridianbahn zur Niveaudichte hat folgende Form²⁰:

$$\delta g_{\text{unif}} = \text{Re} \frac{1}{2\pi} \int_0^1 du \int_0^{2\pi} d\psi A(u, \psi) e^{i(kL(u, \psi) - \sigma_0 \cdot \pi/2)} \quad . \quad (3.28)$$

Zur näheren Festlegung von $A(u, \psi)$ und zur Bestimmung des ungestörten Maslovindex σ_0 müssen wir dieses Integral wieder asymptotisch auswerten. Dabei ist bei einem zweidimensionalen Integral wie in Gl. (3.28) zu beachten, daß es verschiedene Typen von stationären

¹⁹Wir könnten auch bereits an dieser Stelle für $A(u, \psi)$ eine Entwicklung vom gleichen Typ wie für die Wirkung ansetzen und nach demselben Prinzip wie im zweidimensionalen Fall fortfahren. Wir folgen hier aber einer in [51] angegebenen Methode, die zu einer geschlossenen, sehr anschaulichen Lösung führt. In [52] dient die Störungstheorie explizit als Ausgangspunkt eines Ansatzes für eine uniforme Näherung. Das Endergebnis dieser Rechnung ist unserem (s. Gl. (3.39)) sehr ähnlich, die numerischen Ergebnisse sind praktisch nicht unterscheidbar.

²⁰Das Volumenelement dieser $SO(3)$ -Gruppenintegration wurde bereits in Gl. (3.14) angegeben.

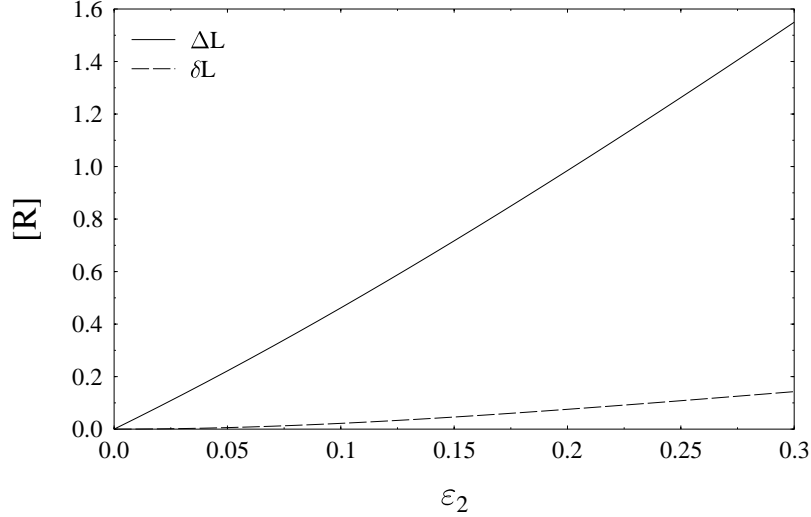


ABBILDUNG 3.9: Als Funktion der Quadrupoldeformation ε_2 ein numerischer Vergleich der Längendifferenz ΔL von Äquator- und Meridianbahn mit der Längendifferenz δL zwischen den beiden Meridianbahnen, hier am Beispiel der Vierecksbahnen. Ganz offensichtlich gilt $|\delta L| \ll |\Delta L|$.

Punkten gibt, die maßgeblich zum Gesamtintegral beitragen. Für echt stationäre Punkte \mathbf{x}_j im Integrationsgebiet \mathcal{D} gilt [50]

$$\int_{\mathcal{D}} d^2x g(\mathbf{x}) e^{i\alpha f(\mathbf{x})/\hbar} \xrightarrow{\alpha/\hbar \rightarrow \infty} \sum_{\{\mathbf{x}_j\}} \frac{2\pi\hbar}{\alpha \sqrt{|\det f''(\mathbf{x}_j)|}} g(\mathbf{x}_j) e^{i\alpha f(\mathbf{x}_j)/\hbar} e^{i(\text{sgn}\lambda_1 + \text{sgn}\lambda_2) \cdot \pi/4} \quad (3.29)$$

Mit echt stationär meinen wir hier Punkte \mathbf{x}_j , an denen die Matrix $f''(\mathbf{x}_j)$ der zweiten Ableitungen der Phasenfunktion $f(\mathbf{x})$ nur von Null verschiedene Eigenwerte λ_1 und λ_2 hat. Die Punkte $(u, \psi) = (0, 0)$ bzw. $(0, \frac{\pi}{2})$ in unserem Beispiel sind von diesem Typ. Der „Punkt“ $u = 1$ hingegen beschreibt eine ganze stationäre Kurve. Entlang dieser Kurve ist die Phasenfunktion $f(\mathbf{x})$ konstant und ein Eigenwert von $f''(\mathbf{x})$ verschwindet, so daß die letzte Formel nicht anwendbar ist. Der asymptotische Beitrag solch einer stationären Kurve $\Gamma := \{\mathbf{x}(t) : t \in [a; b]\}$ läßt sich als Kurvenintegral formulieren [50]

$$\int_{\mathcal{D}} d^2x g(\mathbf{x}) e^{i\alpha f(\mathbf{x})/\hbar} \xrightarrow{\alpha/\hbar \rightarrow \infty} e^{i(\alpha f(\mathbf{x}_\Gamma)/\hbar - \pi/2)} \int_a^b dt \left| \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) \right| \cdot \frac{\frac{\partial}{\partial x_1} f(\mathbf{x}(t))}{|\nabla f(\mathbf{x}(t))|^2} \cdot g(\mathbf{x}(t)) \quad (3.30)$$

In unserem Beispiel vereinfacht sich der Integrand in dieser Formel erheblich, weil es sich bei der Kurve $\Gamma := \{(u, \psi) : u = 1 \wedge \psi \in [0; 2\pi]\}$ ja nur um eine einfache Gerade handelt. Das verbleibende bestimmte Integral ist analytisch lösbar.

Mit diesen allgemeinen Formeln kann man das uns interessierende Integral (3.28) asymptotisch auswerten mit dem Ergebnis:

$$\delta g_{\text{unif}} \xrightarrow{|\Delta L|, |\delta L| \rightarrow \infty} \text{Re} \left[\frac{A(u=1)}{2k|\Delta L|} e^{i(kL_{\text{eq}} - (\sigma_0 + \sigma) \cdot \pi/2)} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{A(0, 0)}{2\sqrt{2}k\sqrt{|\delta L(\Delta L - \delta L)|}} e^{i(kL_u - \sigma_0 \cdot \pi/2 + (\sigma - \sigma') \cdot \pi/4)} + \\
& + \frac{A(0, \frac{\pi}{2})}{2\sqrt{2}k\sqrt{|\delta L(\Delta L + \delta L)|}} e^{i(kL_s - \sigma_0 \cdot \pi/2 + (\sigma + \sigma') \cdot \pi/4)} \Big] \quad . \quad (3.31)
\end{aligned}$$

Dabei haben wir definiert $\sigma := \text{sgn}(\Delta L)$ bzw. $\sigma' := \text{sgn}(\delta L)$. Die einzelnen Summanden können (in dieser Reihenfolge) mit den erweiterten Gutzwillerausdrücken $\text{Re}[A_{\text{eq}/u/s} \cdot e^{i(S_{\text{eq}/u/s}/\hbar - \sigma_{\text{eq}/u/s} \cdot \pi/2)}]$ der Äquatorbahn und der instabilen bzw. stabilen Meridianbahn identifiziert werden²¹. Für den Maslovindex σ_0 findet man damit sofort:

$$\sigma_0 = \sigma_{\text{eq}} - \sigma = \bar{\sigma} + \frac{1}{2}\sigma \quad \text{mit} \quad \bar{\sigma} = \frac{1}{2}(\sigma_u + \sigma_s) \quad . \quad (3.32)$$

Die Ausdrücke für die Amplituden werden wir gleich im Anschluß benötigen.

Der nächste Schritt ist nun die Ausführung der Integrationen in Gl. (3.28). Um dabei zu einem analytischen Ergebnis zu kommen, benutzen wir für die Integration über u folgende allgemeingültige uniforme Näherung:

$$\begin{aligned}
\int_0^b dx g(x) e^{if(x)/\hbar} & \approx \frac{1}{2} g(0) \sqrt{\frac{2\pi i \hbar}{f''(0)}} e^{if(0)/\hbar} + \frac{\hbar}{i} \frac{g(b)}{f'(b)} e^{if(b)/\hbar} + \\
& + i \sigma'' g(0) \sqrt{\frac{\hbar}{|f''(0)|}} e^{if(0)/\hbar} \int_B^\infty dx \frac{e^{i\sigma'' x^2/2}}{x^2} \quad (3.33)
\end{aligned}$$

mit $\sigma'' := \text{sgn}(f''(0))$. B bezeichne die Größe $B = \sqrt{2\sigma'' \cdot (f(b) - f(0))/\hbar}$. Es wird vorausgesetzt, daß die Phasenfunktion $f(x)$ ihren einzigen stationären Punkt bei $x=0$ hat. Der erste Term auf der rechten Seite ist der uns schon bekannte asymptotische Beitrag dieses Punktes zum Gesamtintegral (siehe Gl. (3.21)). Der mittlere Term stellt den asymptotischen Beitrag des Randpunktes bei $x=b$ (mit $b>0$) dar. Der letzte Term, Interferenzterm genannt, sorgt dafür, daß diese Näherung trotz ihrer asymptotischen Natur ($f''(0) \rightarrow \infty$) auch im Grenzfall $f''(0) \rightarrow 0$ zum exakten Ergebnis führt. Die Herleitung dieser Näherung beschreiben wir in Anhang D. Für unser Problem stellt die Anwendung dieser Formel keinen Verlust an Genauigkeit dar, da wir ja sowieso nicht das exakte Spurintegral lösen (das wir gar nicht explizit kennen), sondern nur eine uniforme Näherung dafür vornehmen wollen (was sich letztlich in einer Entwicklung der Amplitudenfunktion äußert), die in den beiden Grenzfällen exakter bzw. stark gestörter Symmetrie das richtige Ergebnis liefert und dazwischen weich interpoliert. Unser Spurintegral (3.28) nimmt mit dieser Näherung folgende Form an:

$$\begin{aligned}
\delta g_{\text{unif}} & = \text{Re} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{i\sigma}{2\pi}} I(\psi) \right) \tilde{A}(\psi) \cdot e^{i(kL(0,\psi) - \sigma_0 \cdot \pi/2)} + \\
& + A_{\text{eq}} \cdot \cos(kL_{\text{eq}} - \sigma_{\text{eq}} \cdot \frac{\pi}{2}) \quad . \quad (3.34)
\end{aligned}$$

Dabei wurden folgende Abkürzungen benutzt²²:

$$\tilde{A}(\psi) := \sqrt{\frac{2\pi i}{kL''(0, \psi)}} A(0, \psi), \quad I(\psi) := \int_{B(\psi)}^\infty dx \frac{e^{i\sigma x^2/2}}{x^2}, \quad B(\psi) := \sqrt{2\sigma k(\Delta L - \delta L \cdot \cos 2\psi)} \quad . \quad (3.35)$$

²¹Hierbei ist zu beachten, daß die so definierten Maslovindices $\sigma_{\text{eq}/u/s}$ halbzahlig sind, siehe Gln. (2.95) und (2.97).

²² $L''(0, \psi)$ stehe hier für die zweite Ableitung von $L(u, \psi)$ nach u an der Stelle $u=0$.

Die Gleichsetzung des letzten Terms mit dem Beitrag der Äquatorbahn erfolgte anhand der asymptotischen Auswertung in Gl. (3.31). Mittels der Substitution $y^2 := x^2 + 2\sigma k \cdot \delta L \cdot \cos 2\psi$ (die bewirkt, daß nicht mehr die untere Integrationsgrenze B , sondern der Integrand selbst ψ -abhängig ist) und der konsequenten Vernachlässigung von Termen höherer als erster Ordnung in $\frac{\delta L}{\Delta L}$ kann das Integral $I(\psi)$ folgendermaßen umgeformt werden:

$$I(\psi) = \int_{\tilde{B}}^{\infty} dy \frac{1}{y^2} \left(1 + \frac{3\sigma k \cdot \delta L \cdot \cos 2\psi}{y^2} \right) e^{i(\sigma y^2/2 - k \cdot \delta L \cdot \cos 2\psi)}, \quad \tilde{B} := \sqrt{2k|\Delta L|} \quad . \quad (3.36)$$

Für die modifizierte Amplitudenfunktion $\tilde{A}(\psi)$ machen wir den Ansatz $\tilde{A}(\psi) = a_1 + a_2 \cdot \cos 2\psi$. Die Koeffizienten a_1 und a_2 können bestimmt werden, indem man die Werte von $\tilde{A}(0)$ bzw. $\tilde{A}(\frac{\pi}{2})$ gemäß dieses Ansatzes mit den entsprechenden Werten gemäß der obigen Definition von $\tilde{A}(\psi)$ gleichsetzt. Letztere können ja nach der asymptotischen Auswertung in Gl. (3.31) durch die Amplituden A_u und A_s ausgedrückt werden. Damit findet man:

$$a_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{i\sigma}{2\pi} k |\delta L|} (A_u + A_s) =: \sqrt{\frac{i\sigma}{2\pi} k |\delta L|} \bar{A}, \quad a_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{i\sigma}{2\pi} k |\delta L|} (A_u - A_s) =: \sqrt{\frac{i\sigma}{2\pi} k |\delta L|} \delta A \quad . \quad (3.37)$$

Setzt man nun all diese Ergebnisse in Gl. (3.34) ein, kann das Integral über ψ ausgeführt werden und man erhält schließlich folgende geschlossene Formel für eine uniforme Näherung des gemeinsamen Beitrags der drei Bahnfamilien zur Niveaudichte:

$$\begin{aligned} \delta g_{\text{unif}} = & \sqrt{2\pi k |\delta L|} \left(\bar{A} \cdot J_0(k \cdot \delta L) \cdot \cos(k\bar{L} - \bar{\sigma} \cdot \frac{\pi}{2}) - \delta A \cdot J_1(k \cdot \delta L) \cdot \sin(k\bar{L} - \bar{\sigma} \cdot \frac{\pi}{2}) \right) + \\ & + A_{\text{eq}} \cdot \cos(kL_{\text{eq}} - \sigma_{\text{eq}} \cdot \frac{\pi}{2}) + \\ & + 2\sqrt{k|\delta L|} \bar{A} \int_{\tilde{B}}^{\infty} dx \frac{1}{x^2} \cos(k\bar{L} + \frac{\sigma}{2} x^2 - (\sigma_0 - \sigma) \cdot \frac{\pi}{2}) \quad . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Diese Formel ist sehr einfach zu interpretieren: Den ersten Term kennen wir schon von der Besprechung des zweidimensionalen Falles (siehe Gl. (3.24)). Er enthält den Beitrag der Meridianbahnen, die zunächst noch gemeinsam betrachtet werden müssen, weil ihr Längenunterschied δL sehr viel kleiner ist als der zwischen ihnen und der Äquatorbahn, ΔL . Erst im Grenzfall $\delta L \rightarrow \infty$ zerfällt dieser Beitrag, wie schon oben gezeigt, in die erweiterten Gutzwillerbeiträge von stabiler und instabiler Bahn. Der zweite Term ist explizit der erweiterte Gutzwillerbeitrag der Äquatorbahn. Der dritte Term schließlich, der Interferenzterm, berücksichtigt gewissermaßen die Wechselwirkung zwischen diesen beiden Klassen von Bahnen²³. Er verschwindet offensichtlich für $\Delta L \rightarrow \infty$, so daß diese Formel tatsächlich das richtige asymptotische Verhalten für große Störungen der Kugelsymmetrie zeigt. Durch Umformen des Interferenzterms (im wesentlichen eine partielle Integration) kann man Gl. (3.38) noch in eine andere, zwar etwas unübersichtlichere, dafür integralfreie Gestalt bringen:

$$\begin{aligned} \delta g_{\text{unif}} = & \sqrt{2\pi k |\delta L|} \left(\bar{A} \cdot (J_0(k \cdot \delta L) - 1) \cdot \cos(k\bar{L} - \bar{\sigma} \cdot \frac{\pi}{2}) - \delta A \cdot J_1(k \cdot \delta L) \cdot \sin(k\bar{L} - \bar{\sigma} \cdot \frac{\pi}{2}) \right) + \\ & + \left(A_{\text{eq}} - \sqrt{2|\delta L|/|\Delta L|} \bar{A} \right) \cdot \cos(kL_{\text{eq}} - \sigma_{\text{eq}} \cdot \frac{\pi}{2}) + 2\sqrt{\pi k |\delta L|} \bar{A} \cdot \\ & \cdot \left(C(\sqrt{2k|\Delta L|/\pi}) \cdot \cos(k\bar{L} - \sigma_0 \cdot \frac{\pi}{2}) - \sigma \cdot S(\sqrt{2k|\Delta L|/\pi}) \cdot \sin(k\bar{L} - \sigma_0 \cdot \frac{\pi}{2}) \right) \end{aligned} \quad (3.39)$$

²³Die bei Bifurkationen mit Wiederholungszahlen $r \geq 5$ beteiligten periodischen Bahnen (siehe Seite 48) zeigen ein ganz ähnliches Aufspaltungsverhalten. Die Herleitung der dafür gültigen uniformen Näherung verläuft daher ganz analog zu der oben gezeigten.

Dabei stehen C bzw. S für die Fresneelfunktionen:

$$C(x) := \int_0^x dy \cos\left(\frac{\pi}{2}y^2\right), \quad S(x) := \int_0^x dy \sin\left(\frac{\pi}{2}y^2\right) \quad . \quad (3.40)$$

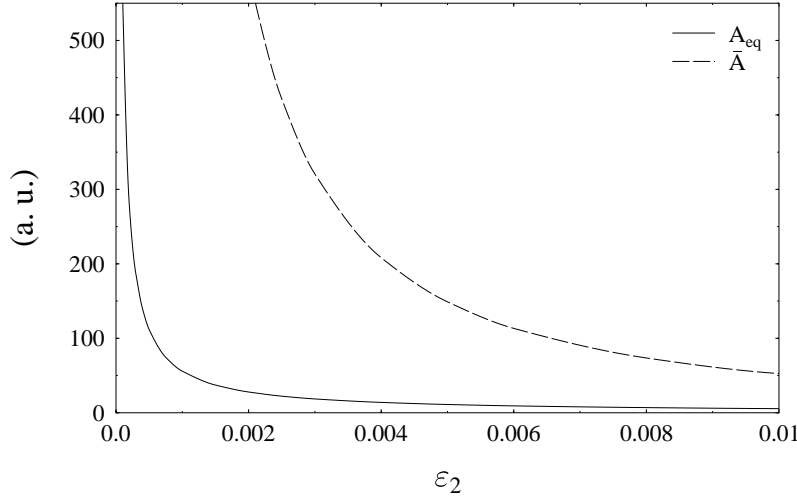


ABBILDUNG 3.10: Die Amplitude A_{eq} der Äquatorvierecksbahn (durchgezogene Linie) und die mittlere Amplitude \bar{A} der Meridianvierecksbahnen (gestrichelte Linie) als Funktion des Deformationsparameters ε_2 : Beide divergieren für $\varepsilon_2 \rightarrow 0$.

Durch Anwendung der für diese Integrale gültigen asymptotischen Formeln $C(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi x} \sin\left(\frac{\pi}{2}x^2\right)$ und $S(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi x} \cos\left(\frac{\pi}{2}x^2\right)$ erhält man auch in dieser Darstellung die im Grenzfall $\Delta L \rightarrow \infty$ erwarteten separaten Beiträge von Meridian- und Äquatorbahnen.

Im anderen Grenzfall, $\delta L, \Delta L \rightarrow 0$, divergieren zwar die Gutzwilleramplituden (siehe Abb. 3.10), der Gesamtausdruck bleibt jedoch gemäß der Konstruktion des Spurintegrals Gl. (3.28) endlich. Bei genauerer Betrachtung findet man, daß die Amplitude $2\sqrt{\pi k|\delta L|} \cdot C(\sqrt{2k|\Delta L|/\pi}) \cdot \bar{A}$ genau gegen den im sphärischen Fall gültigen Wert (siehe Gl. (2.74)) konvergiert, während alle anderen Terme in Gl. (3.39) zusammen gegen Null gehen. In Abb. 3.11 wird dies am Beispiel der Vierecksbahnen veranschaulicht²⁴.

Die bisher gezeigte Herleitung geht von einer Aufspaltung der dreifach entarteten Bahnen in der sphärischen Kavität in jeweils einfach entartete Äquator- und Meridianbahnen aus. Sie ist daher nur auf echte Polygonbahnen, nicht aber auf die (in der Kugel zweifach entartete) Durchmesserbahn anwendbar, die ja in eine einfach entartete Äquatorbahn und in die isolierte Bahn entlang der Symmetrieachse aufspaltet. Zu deren Beschreibung verwenden wir als Referenzbahn diejenige entlang der Symmetrieachse. Die Modell-Längenfunktion $L(\varphi, \vartheta, \psi)$ muß nicht nur unabhängig vom Eulerwinkel φ , sondern wegen der

²⁴Die dort sichtbare starke Oszillation bei Werten von $\varepsilon_2 < 0.005$ ist spurios, sie ist auf numerische Rundungsfehler zurückzuführen, die bei den in diesem Bereich extrem kleinen Längendifferenzen viel stärker ins Gewicht fallen.

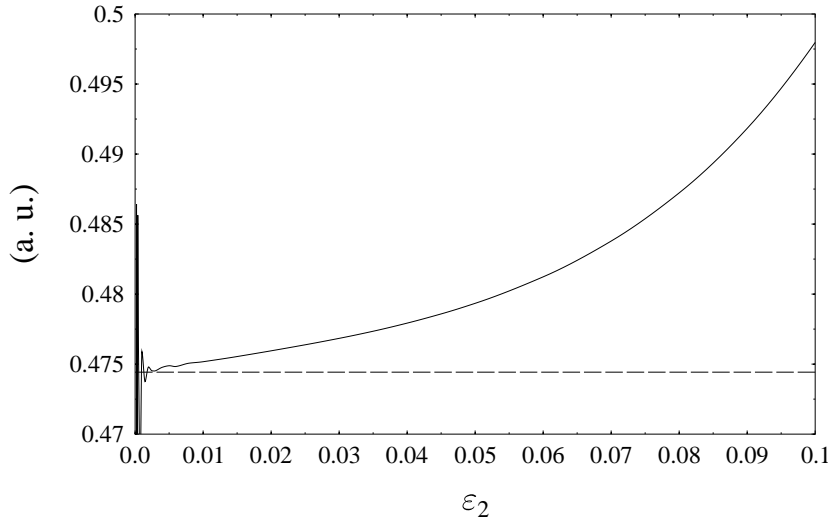


ABBILDUNG 3.11: Zur Veranschaulichung der Konvergenz der uniformen Näherung (3.39) im sphärischen Grenzfall: Dargestellt ist der in dieser Formel auftretende Term $2\sqrt{\pi k|\delta L|} \cdot C(\sqrt{2k|\Delta L|/\pi}) \cdot \bar{A}$ (durchgezogene Linie) als Funktion von ε_2 , berechnet für die Vierecksbahnen. Für $\varepsilon_2 \rightarrow 0$ konvergiert er genau gegen den entsprechenden Amplitudenwert aus der sphärischen Spurformel Gl. (2.74), in diesem Fall $(\sqrt{2}\pi)^{-1/2} \approx 0.4744$ (gestrichelte, horizontale Linie).

Invarianz der Durchmesserbahnen bei einer Drehung um die eigene Längsachse auch unabhängig von ψ sein. Darüberhinaus muß $L(\vartheta)$ mit obiger Wahl der Referenzbahn einen stationären Punkt bei $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ aufweisen, der der Äquator-Durchmesserbahn entspricht, während die isolierte Durchmesserbahn durch die Randpunkte bei $\vartheta=0$ bzw. π repräsentiert wird. Mit diesen Vorgaben finden wir (wiederum nach der Substitution $u := \cos \vartheta$) für die Längenfunktion

$$L(u) = L_{\text{eq}} + \Delta L_{\text{dia}} \cdot u^2, \quad \Delta L_{\text{dia}} := L_{\text{iso}} - L_{\text{eq}} \quad . \quad (3.41)$$

Es handelt sich also um den Spezialfall $\delta L=0$ der Längenfunktion Gl. (3.27) für die echten Polygonbahnen, wobei die isolierte Durchmesserbahn die Rolle der echten Äquatorbahnen und die Äquatordurchmesserbahn die der Meridianbahnen übernimmt.

Für die Amplitude machen wir einen Ansatz von derselben Form wie für die Wirkung: $A(u) = a_0 + a_1 \cdot u^2$. Zur Bestimmung der Koeffizienten a_0 , a_1 und des Maslovindex berechnen wir zunächst den asymptotischen Wert des Spurintegrals Gl (3.28), wofür uns der allgemeine Ausdruck schon bekannt ist:

$$\int_a^b dx g(x) e^{i\alpha f(x)} \xrightarrow{\alpha \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha|f''(a)|}} g(a) e^{i\alpha f(a)} e^{i \cdot \text{sgn}(f''(a)) \cdot \pi/4} + \quad (3.42)$$

$$+ \frac{g(b)}{\alpha|f'(b)|} e^{i\alpha f(b)} e^{-i \cdot \text{sgn}(f'(b)) \cdot \pi/2} \quad . \quad (3.43)$$

Er setzt sich aus dem Beitrag des stationären Punktes bei a und des Randpunktes bei b zusammen, die wir mit den entsprechenden (erweiterten) Gutzwillerausdrücken identifizieren. Das Spurintegral ist wegen der fehlenden Abhängigkeit von ψ analytisch ausführbar und kann wiederum durch die Fresnefunktionen ausgedrückt werden. Insgesamt ergibt sich damit folgender Ausdruck für den gemeinsamen Beitrag von isolierter und einfach entarteter Durchmesserbahn zur Niveaudichte:

$$\begin{aligned} \delta g_{\text{unif,dia}} = & \left(A_{\text{iso}} - A_{\text{eq}} / \sqrt{\pi k |\Delta L_{\text{dia}}|} \right) \cdot \cos(k L_{\text{iso}} - \sigma_{\text{iso}} \cdot \frac{\pi}{2}) + \\ & \sqrt{2} A_{\text{eq}} \cdot \left(C(\sqrt{2k |\Delta L_{\text{dia}}| / \pi}) \cdot \cos(k L_{\text{eq}} - \sigma_0 \cdot \frac{\pi}{2}) - \right. \\ & \left. \sigma \cdot S(\sqrt{2k |\Delta L_{\text{dia}}| / \pi}) \cdot \sin(k L_{\text{eq}} - \sigma_0 \cdot \frac{\pi}{2}) \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

mit dem Maslovindex $\sigma_0 = \sigma_{\text{eq}} + \frac{1}{2}\sigma$ und $\sigma = \text{sgn}(\Delta L_{\text{dia}})$.

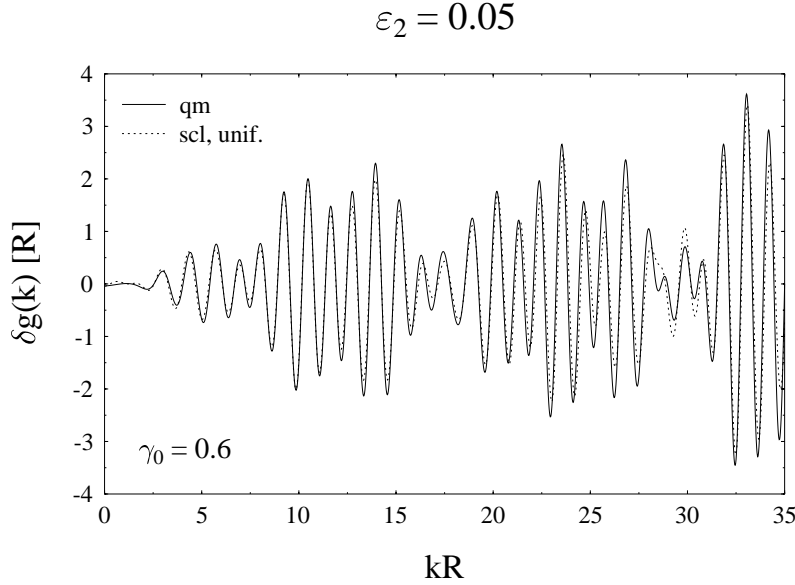


ABBILDUNG 3.12: *Der oszillierende Anteil der Niveaudichte einer quadrupol-deformierten Kavität mit $\varepsilon_2 = 0.05$. Gezeigt ist ein Vergleich von quantenmechanischem Ergebnis (durchgezogene Linie) und dem Resultat der semiklassischen uniformen Näherung (gestrichelte Linie).*

Abb. 3.12 zeigt das Ergebnis dieser Rechnungen für das schon mehrfach behandelte Beispiel $\varepsilon_2 = 0.05$ (siehe Abb. 2.9 und 3.8). Obwohl man sich bei dieser geringen Deformation noch immer sehr nahe am sphärischen Grenzfall mit seinen divergierenden Gutzwiller-Amplituden befindet, ist die Übereinstimmung mit dem quantenmechanischen Resultat hervorragend. Dies wird auch deutlich, wenn man sich die entsprechenden Fourierspektren in Abb. 3.13 betrachtet. Hier wird auch deutlich, daß sich bei dieser Deformation die Äquatorbahnen in ihrer Länge schon klar von den jeweils zwei Meridianbahnen gleicher Eckenzahl unterscheiden, während letztere noch nicht als einzelne Peaks aufgelöst werden können. Tatsächlich kommt man numerisch zum gleichen Ergebnis wie in den bei-

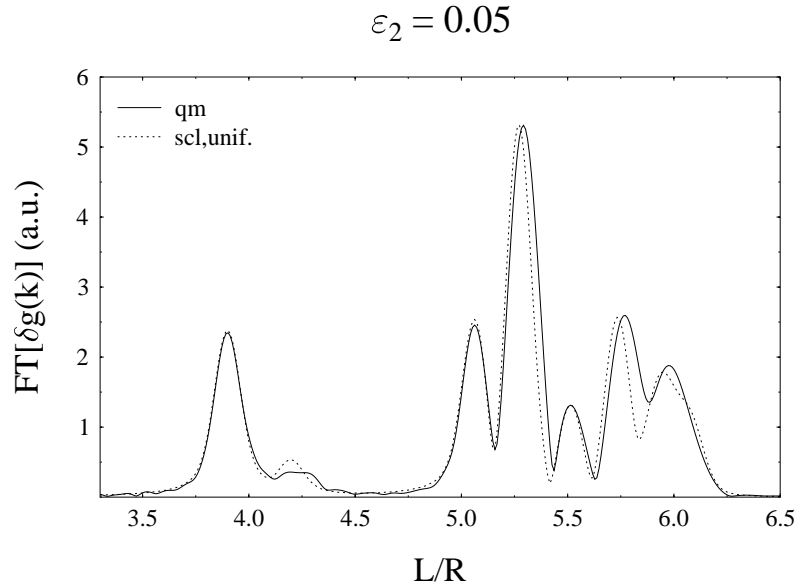


ABBILDUNG 3.13: *Das Fourierspektrum zu den Niveaudichten aus Abb. 3.12.*

den letzten Abbildungen, wenn man in Gl. (3.38) den Interferenzterm vernachlässigt, also Äquatorbahn und Meridianbahnen unabhängig betrachtet.

Als Beispiel für die Gültigkeit der in diesem Abschnitt hergeleiteten uniformen Näherungen auch bei größeren Deformationen zeigen wir in Abb. 3.14 und 3.15 noch die Ergebnisse für $\varepsilon_2 = 0.10$. Die Übereinstimmung der beiden Niveaudichten ist auch hier sehr gut. Im Fourierspektrum deutlich zu sehen ist die im Vergleich zum vorhergehenden Beispiel größere relative Bedeutung der Äquator-Durchmesserbahn, die ja mit zunehmender Deformation immer kürzer und deren Beitrag damit bei der Mittelung am wenigsten gedämpft wird. Weiterhin erkennt man eine mit zunehmender Eckenzahl leicht schlechter werdende Übereinstimmung der beiden Kurven für die Peaks der Meridianbahnen. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die Meridianbahnen bei noch größerer Deformation Bifurkationen durchlaufen, deren Einfluß allerdings schon hier spürbar wird.

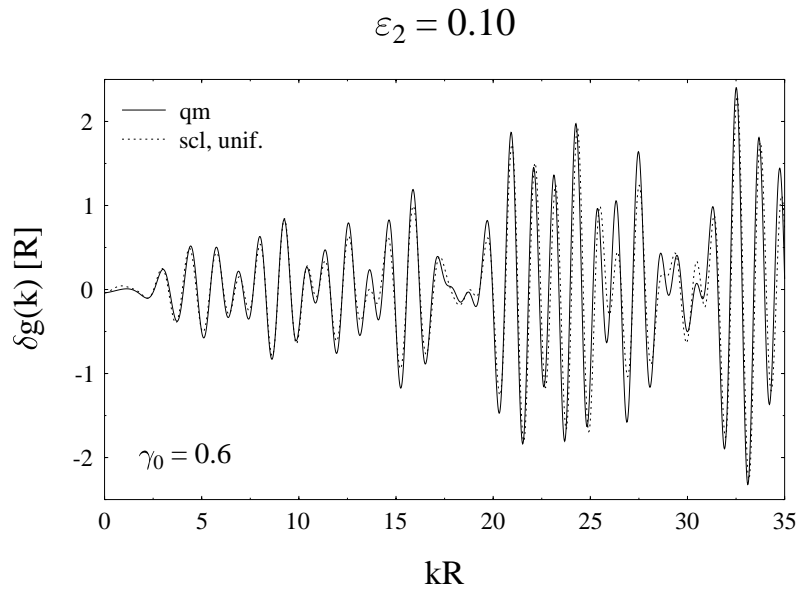


ABBILDUNG 3.14: *Der oszillierende Anteil der Niveaudichte einer quadrupol-deformierten Kavität mit $\varepsilon_2 = 0.10$. Gezeigt ist ein Vergleich von quantenmechanischem Ergebnis (durchgezogene Linie) und dem Resultat der semiklassischen uniformen Näherung (gestrichelte Linie).*

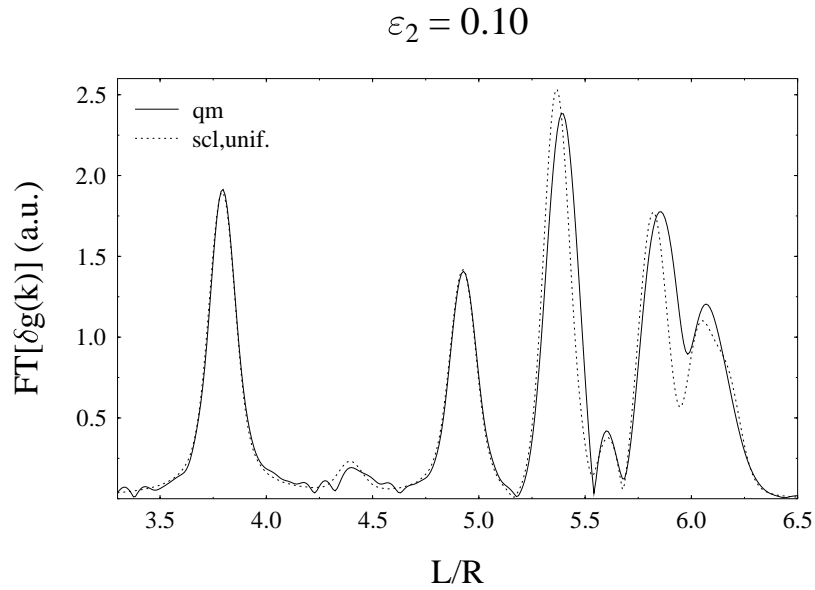


ABBILDUNG 3.15: *Das Fourierspektrum zu den Niveaudichten aus Abb. 3.14.*

GRUNDZUSTANDSDEFORMATIONEN VON METALLCLUSTERN

In den vorangegangenen Kapiteln haben wir die Grundzüge der semiklassischen Theorie der periodischen Bahnen behandelt. Als ein Beispiel der Anwendung dieser Methoden auf ein realistisches endliches Fermionensystem versuchen wir nun, das typische Deformationsverhalten von einfachen Metallclustern zu reproduzieren.

4.1 Metallcluster im Schalenmodell

Wie schon in der Einleitung zu dieser Arbeit erwähnt, stellen Metallcluster ein sehr kompliziertes quantenmechanisches Vielteilchensystem dar, das nicht exakt lösbar ist. Es ist aber bekannt, daß ihre geometrische Gestalt, für die wir uns hier interessieren, für eine nicht allzu große Zahl der sie konstituierenden Atome vornehmlich von den Eigenschaften ihrer Valenzelektronen bestimmt wird, so daß man deren Wechselwirkung mit und auch die zwischen den Atomrümpfen zunächst nicht explizit betrachtet. Eine weitere drastische Vereinfachung in der Beschreibung dieses immer noch sehr komplexen Systems besteht darin, die einzelnen Valenzelektronen als unabhängig voneinander zu betrachten. Die positiv geladenen Atomrümpfe sowie die übrigen Valenzelektronen erzeugen in diesem Modell ein sogenanntes effektives Einteilchenpotential, in dem sich das interessierende Elektron bewegt. Es handelt sich hier also um das aus der Atom- und Kernphysik bereits bekannte Schalenmodell. Die einzelnen Anwendungsgebiete dieses Modells unterscheiden sich v.a. in der Wahl einer passenden phänomenologischen Potentialfunktion. Allen gemeinsam ist, daß die Energieeigenwerte in diesen Potentialen in Gruppen gebündelt sind, eben den sogenannten Schalen, zwischen denen sich Energielücken befinden. Das System ist dann besonders stabil, wenn eine solche Schale gemäß dem für Fermionen gültigen Pauli-Prinzip mit den zur Verfügung stehenden Valenzteilchen gerade gefüllt, die Schale also abgeschlossen ist. Dann bedarf es nämlich einer relativ hohen Energie, um ein weiteres Teilchen hinzuzufügen, das ja erst in der nächsten, energetisch höherliegenden Schale eingebaut werden kann.

Die geometrische Gestalt freier Metallcluster ist – ebenso wie die von Atomen und Kernen – nicht durch äußere Zwangsbedingungen festgelegt. Vielmehr haben sie noch Deformationsfreiheitsgrade, mit denen die Position und die Entartung der einzelnen Energieniveaus und damit auch der Schalen variieren. Die Grundzustandsdeformation, die sich schließlich im Gleichgewicht einstellt, zeichnet sich dadurch aus, daß – bei gegebener Zahl von Valenzelektronen – wie oben beschrieben ein Schalenabschluß angestrebt und damit die Gesamtenergie des Systems minimiert wird.

Aus der Kernphysik weiß man jedoch, daß einfache Summation der Einteilchenenergien, wie sie das Schalenmodell liefert, nicht auf die richtige Gesamtenergie führt. Trotzdem ist es mit Hilfe der von Strutinsky [14, 15] entwickelten Schalenkorrektur-Methode zumindest näherungsweise möglich, die korrekte Gesamtenergie aus dem Einteilchenspektrum

zu berechnen, auch wenn letzteres nur numerisch bekannt ist. Dazu zerlegt man zunächst, wie in Gl. (2.64) bereits gezeigt, die Energie in einen mittleren und einen oszillierenden Anteil. Der mittlere Anteil, der den Großteil der Energie ausmacht, wird dabei durch eine Faltung aus der Gesamtenergie gewonnen. In einem zweiten Schritt ersetzt man dann diesen Anteil, der im Schalenmodell nicht richtig wiedergegeben wird, durch die Energie, die ein phänomenologisches Tröpfchenmodell liefert. Der oszillierende Anteil, den man auch Schalenkorrektur-Energie nennt, ist rein quantenmechanischer Natur. Er beinhaltet die ganze Information über die Schaleneffekte und wird deshalb beibehalten.

Für das effektive Einteilchenpotential, in dem sich die delokalisierten Valenzelektronen bewegen, verwenden wir das einfache Modell einer Kavität, also eines dreidimensionalen Potentialtopfes mit unendlich hohen, ideal reflektierenden Wänden. Trotz seiner offensichtlichen Einfachheit beschreibt dieses Potential hinreichend große Metallcluster überraschend gut [53, 54, 55].

Da man von den Metallclustern weiß, daß ihre Form im Grundzustand nicht allzusehr von der Kugelgestalt abweicht, beschreiben wir die Oberfläche der Kavität in Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) als eine Entwicklung in Kugelflächenfunktionen („Multipol-Entwicklung“), wobei wir uns auf den axialsymmetrischen Fall beschränken:

$$r_s(\vartheta) = R \left(1 + \varepsilon_0 + \sum_{j=2}^4 \varepsilon_j P_j(\cos \vartheta) \right) . \quad (4.1)$$

Der Index „s“ stehe für „shape“. ε_0 ist eine Funktion der übrigen ε_j und wird so gewählt, daß das Volumen der Kavität gleich dem einer Kugel vom Radius R ist, d.h. man verlangt wegen der Inkompressibilität der Clustermaterie Volumenerhaltung. P_j bezeichnet das j -te Legendre-Polynom. ε_2 , ε_3 und ε_4 sind die Deformationsparameter und beschreiben jeweils den Quadrupol-, Oktupol- und Hexadekapolanteil der Kavität. Realistische Deformationen liegen in dem Bereich $0 \leq |\varepsilon_2|, |\varepsilon_3|, |\varepsilon_4| \lesssim 0.2$. Der sphärische Grenzfall ist gegeben für $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = 0$. Höhere Multipolanteile sind im Rahmen des von uns gewählten Modells physikalisch irrelevant und berücksichtigen wir daher nicht, ebenso wie einen Dipolanteil ($j = 1$), der ja im wesentlichen nur eine Translation beschreibt.

Die Beschränkung auf axiale Symmetrie ist aus physikalischer Sicht sehr wohl gerechtfertigt, weiß man doch aus anderen Untersuchungen [56, 57, 58], daß Metallcluster meist nicht triaxial sind. Für eine Beschreibung im Rahmen der POT bringt sie den Vorteil mit sich, daß die wichtigsten periodischen Bahnen leicht zu finden und ihre Amplituden in der Spurformel einfach zu berechnen sind (siehe Abschnitt 2.5).

In Anhang C haben wir einige Formeln zu dieser Parametrisierung zusammengestellt, die für diese Arbeit wichtig sind. Die Bestimmung der quantenmechanischen Energieeigenwerte für solche Kavitäten wird in Anhang A.1 beschrieben.

Bevor wir nun unseren semiklassischen Apparat auf dieses System anwenden, wollen wir zunächst einen Überblick darüber geben, wie das qualitative Deformationsverhalten von Metallclustern überhaupt aussieht, das wir damit reproduzieren wollen. Die systematische Änderung der Grundzustandsdeformation von Natriumclustern mit der Zahl der Valenzelektronen wurde nämlich bereits in [59] theoretisch untersucht. Ohne auf die Details dieser Rechnung näher einzugehen¹, geben wir die dort präsentierten Ergebnisse hier kurz wieder.

¹ Auch dort wurde die Schalenkorrekturmethode angewandt, allerdings mit einem realistischeren Woods-Saxon-Potential.

Abb. 4.1 zeigt die Multipoldeformationen² von Natriumclustern im Grundzustand für Teilchenzahlen von 90 bis 310.

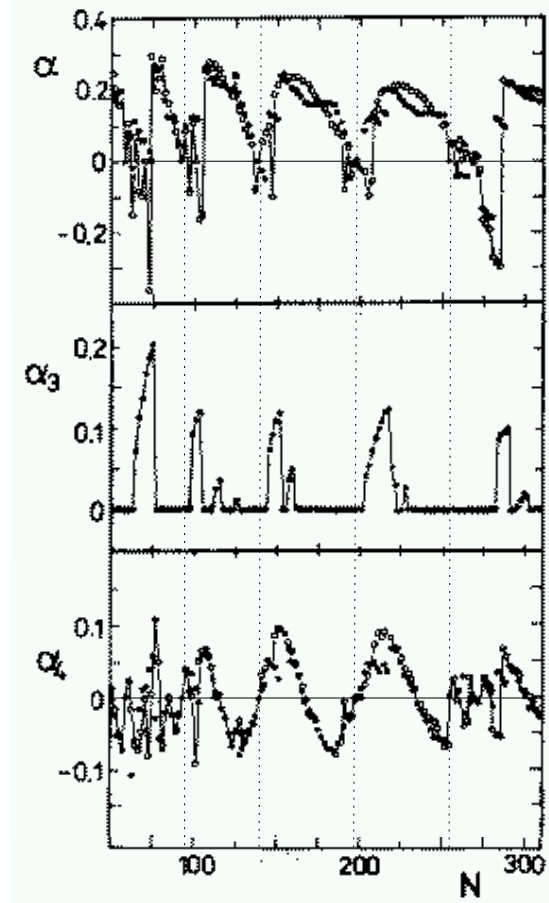


ABBILDUNG 4.1: Die Grundzustands-Deformationsparameter α , α_3 und α_4 von Natriumclustern für Teilchenzahlen von 90 bis 310 gemäß [59] (woraus diese Grafik leicht verändert entnommen wurde; nur die Kurven entlang der ausgefüllten Punkte sind hier von Bedeutung). Die senkrechten, gestrichelten Linien bezeichnen die magischen Zahlen bei 92, 138, 198 und 254.

Für alle drei Multipolaritäten erkennt man ganz deutlich ein regelmäßiges Muster. Der obere Teil der Abbildung beschreibt die Quadrupoldeformation: Offensichtlich sind die meisten Cluster (v.a. die größeren mit Teilchenzahlen ab etwa $N = 100$) prolata. Nur jeweils zu Beginn einer neuen Schale haben die Cluster oblate Form. Dieses systematische Verhalten ist aus der Kernphysik wohlbekannt [60] und wurde sowohl quantenmechanisch [61] als auch semiklassisch [62, 63] zu erklären versucht. Im mittleren Teil der Abbildung

²Die Oberfläche der Cluster wurde in der hier zitierten Arbeit ebenfalls durch eine Multipol-Entwicklung parametrisiert, jedoch bis zur 6. Ordnung und nicht in Kugelkoordinaten, sondern in sogenannten Cassinischen Koordinaten. Der Unterschied ist in dem vorliegenden Parameterbereich jedoch relativ gering und wird hier vernachlässigt, da wir ohnehin nur an dem qualitativen Deformationsverhalten interessiert sind. Die Parameter α , α_3 und α_4 entsprechen dann den Parametern ε_2 , ε_3 und ε_4 in Gl. (4.1).

wird der Oktupolanteil an der Deformation dargestellt³: Nur Cluster knapp jenseits eines Schalenabschlusses sind — mit steigender Teilchenzahl in stärkerem Maße — oktapoldeformiert. Dann fällt dieser Deformationsparameter schlagartig auf Null und behält diesen Wert bis zum nächsten Schalenabschluß bei, d.h. die Cluster in diesem Bereich sind spiegelsymmetrisch zur x - y -Ebene. Die plötzliche Werteänderung ist auf die Koexistenz zweier konkurrierender Minima der Gesamtenergie zurückzuführen, die in diesem Bereich ihre Rollen tauschen. Das Zusammenspiel von Quadrupol- und Oktupoldeformation wird auch in [64, 65] sowohl quantenmechanisch als auch semiklassisch untersucht. Der untere Teil von Abb. 4.1 zeigt schließlich die Hexadekapoldeformation. Für die größeren Cluster (wiederum ab $N \approx 100$) ist α_4 zu Beginn einer neuen Schale positiv und wechselt dann etwa in der Mitte der Schale das Vorzeichen. Anschaulich formuliert haben sie zunächst eher zitronenförmige, dann faßähnliche Gestalt, während sie dazwischen praktisch rein quadrupoldeformiert sind. Das Zusammenwirken aller drei Multipolordnungen wird in [66] diskutiert.

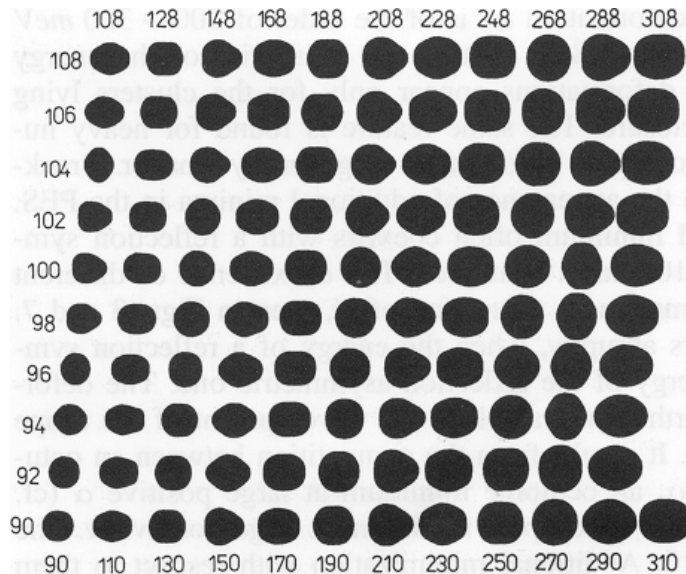


ABBILDUNG 4.2: Übersicht über die axialsymmetrischen Grundzustandsformen von Natriumclustern (mit geraden Teilchenzahlen von 90 bis 310) gemäß [59]. Die Symmetrieachse liegt horizontal.

Abb. 4.2 faßt die obigen Ergebnisse in einer graphischen Übersicht noch einmal zusammen.

³Da eine Änderung des Vorzeichens von α_3 ja nur einer Spiegelung an der x - y -Ebene entspricht, physikalisch also nichts ändert, wird α_3 als positiv definiert.

4.2 Deformationsverhalten der periodischen Bahnen

Um nun Kavitäten — als Modell für das effektive Einteilchenpotential der Valenzelektronen in Metallclustern — mittels einer uniform gültigen, semiklassischen Spurformel beschreiben zu können, müssen wir zunächst wissen, welche periodischen Bahnen bei diesen allgemeinen Deformationen, wie sie oben gezeigt wurden, existieren. Bislang haben wir bei der Herleitung einer solchen Näherung (siehe Abschnitt 3.3.2) ja nur eine reine Quadrupoldeformation berücksichtigt.

Abb. 4.3 zeigt das Ergebnis dieser Bahnsuche für die kürzesten, die Durchmesserbahnen bei einer Kombination von Quadrupol- und Oktupoldeformation. Bei $\varepsilon_2 = 0$ existieren für alle Werte von ε_3 nicht nur die isolierte und die Äquatorbahn, sondern zwei weitere, schrägliegende Durchmesserbahnen. Bei nicht-verschwindenden Werten von ε_2 zeigt sich, daß diese Bahnen jeweils aus einer Bifurkation der isolierten bzw. der Äquatorbahn hervorgehen. Obwohl man sich also bezüglich beider Deformationsfreiheitsgrade noch ganz in der Nähe des sphärischen Grenzfalles befindet, kommt es schon bei diesen einfachsten Bahnen zu Bifurkationen.

Bei den Dreiecksbahnen findet man bei einer reinen Oktupoldeformation — wie auch im Falle einer reinen Quadrupoldeformation — neben der Äquatorbahn noch zwei Meridianbahnen (siehe Abb. 4.4, oben). Im Gegensatz zur Quadrupoldeformation ist aber hier deren Längenunterschied größer als der zwischen ihrem Mittelwert und der Äquatorbahn. Kommt zur Oktupol- noch eine Quadrupoldeformation hinzu (Abb. 4.4, Mitte; die Kurve für die Äquatorbahn liegt außerhalb des hier gezeigten Bereichs.), zeigt sich, daß bei extrem kleinen Werten von ε_3 zunächst sogar drei Meridianbahnen existieren, von denen dann jedoch zwei zu einer verschmelzen, also gewissermaßen eine inverse Bifurkation durchlaufen.

Bei den Vierecksbahnen treten schon bei einer reinen Oktupoldeformation Bifurkationen auf (Abb. 4.4, unten): Bereits bei $\varepsilon_3 \approx 0.06$ ereignet sich eine Tangentenbifurkation, bei der ohne reellwertige Vorläufer zwei neue Bahnen, eine stabile und eine instabile, entstehen.

Diese exemplarische Untersuchung, bei der der Hexadekapolfreiheitsgrad ja noch gar nicht berücksichtigt wurde, macht folgendes klar: Durch das Zusammenspiel mehrerer Deformationsfreiheitsgrade treten Bifurkationen periodischer Bahnen beliebig nahe beim sphärischen Grenzfall auf. Mit den bislang vorgestellten uniformen Näherungen ist es nicht möglich, dieses Verhalten angemessen zu beschreiben, da sie jeweils explizit für einen der beiden Fälle — Bifurkationen oder Nähe zum sphärischen Grenzfall — hergeleitet wurden, was durch die Wahl einer passenden Normalform für die Wirkungsfunktion S geschah. Zur Behandlung solcher realistischer Deformationen ist vielmehr eine Art „Hyper-Uniformisierung“ nötig, die diese beiden Ansätze vereinigt. Dieses Programm wurde in der vorliegenden Arbeit aber nicht weiter verfolgt und unseres Wissens auch noch nicht in der Literatur vorgestellt.

Um dennoch semiklassische Voraussagen über die Grundzustandsdeformationen von Metallclustern machen zu können, wenden wir uns im nächsten Abschnitt wieder der Störungstheorie zu, die in Kapitel 3.3.1 bereits beschrieben wurde. Dabei ist die explizite Kenntnis der isolierten Bahnen und deren Bifurkationen nicht nötig, solange die Deformationsparameter ε_j den Gültigkeitsbereich der Störungstheorie nicht überschreiten. Wie wir sehen werden, ist dies für die typischen Grundzustandsdeformationen von Abb. 4.1 tatsächlich auch der Fall.

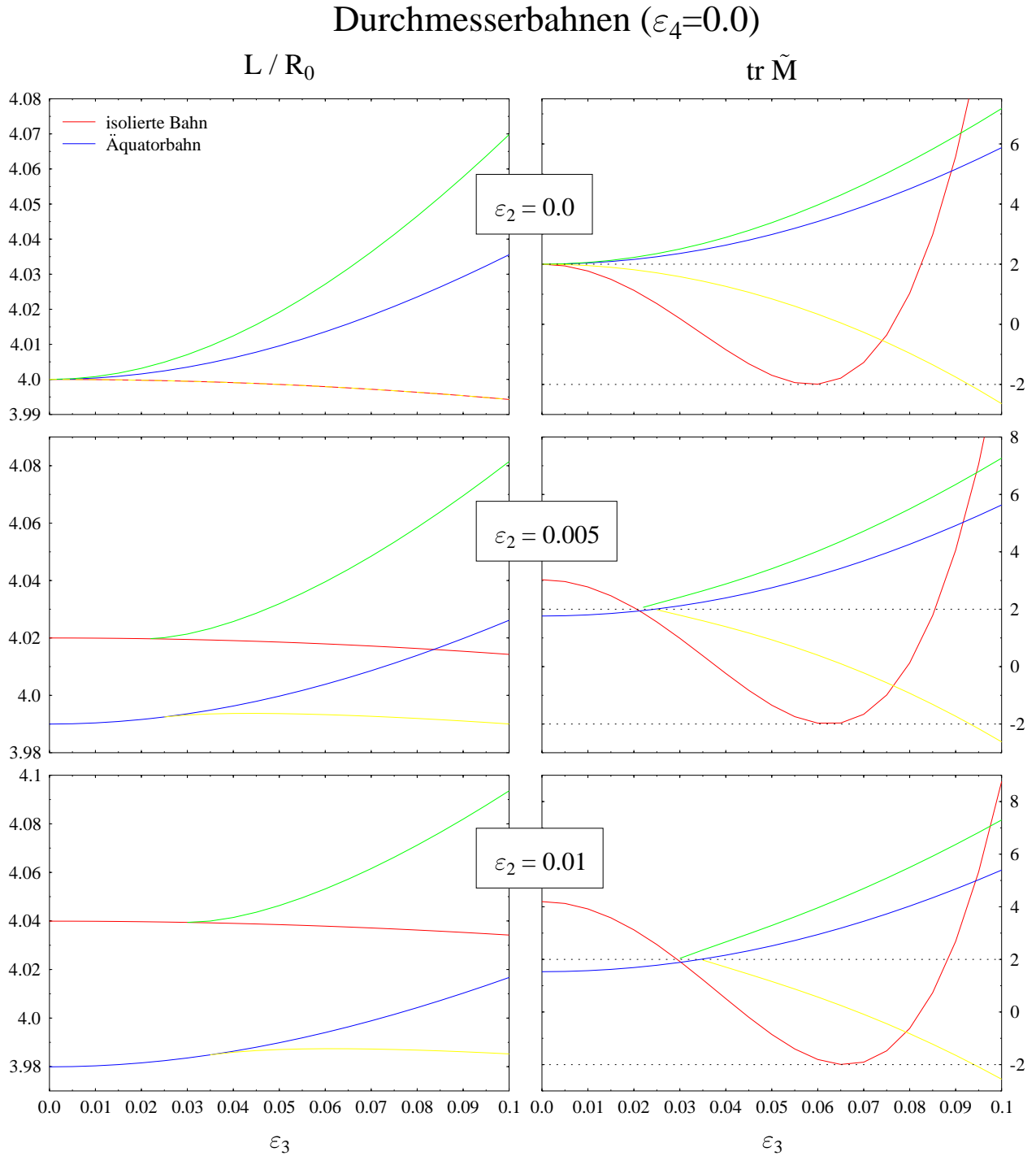


ABBILDUNG 4.3: Die Spur der reduzierten Stabilitätsmatrix (rechts) und die Länge (links) der Durchmesserbahnen als Funktion von ε_3 , dargestellt für $\varepsilon_4=0$ und drei verschiedene Werte von ε_2 . Neben der isolierten (rote Kurve) und der Äquatorbahn (blaue Kurve) existieren zwei weitere, schrägliegende Bahnen (grüne und gelbe Kurve).

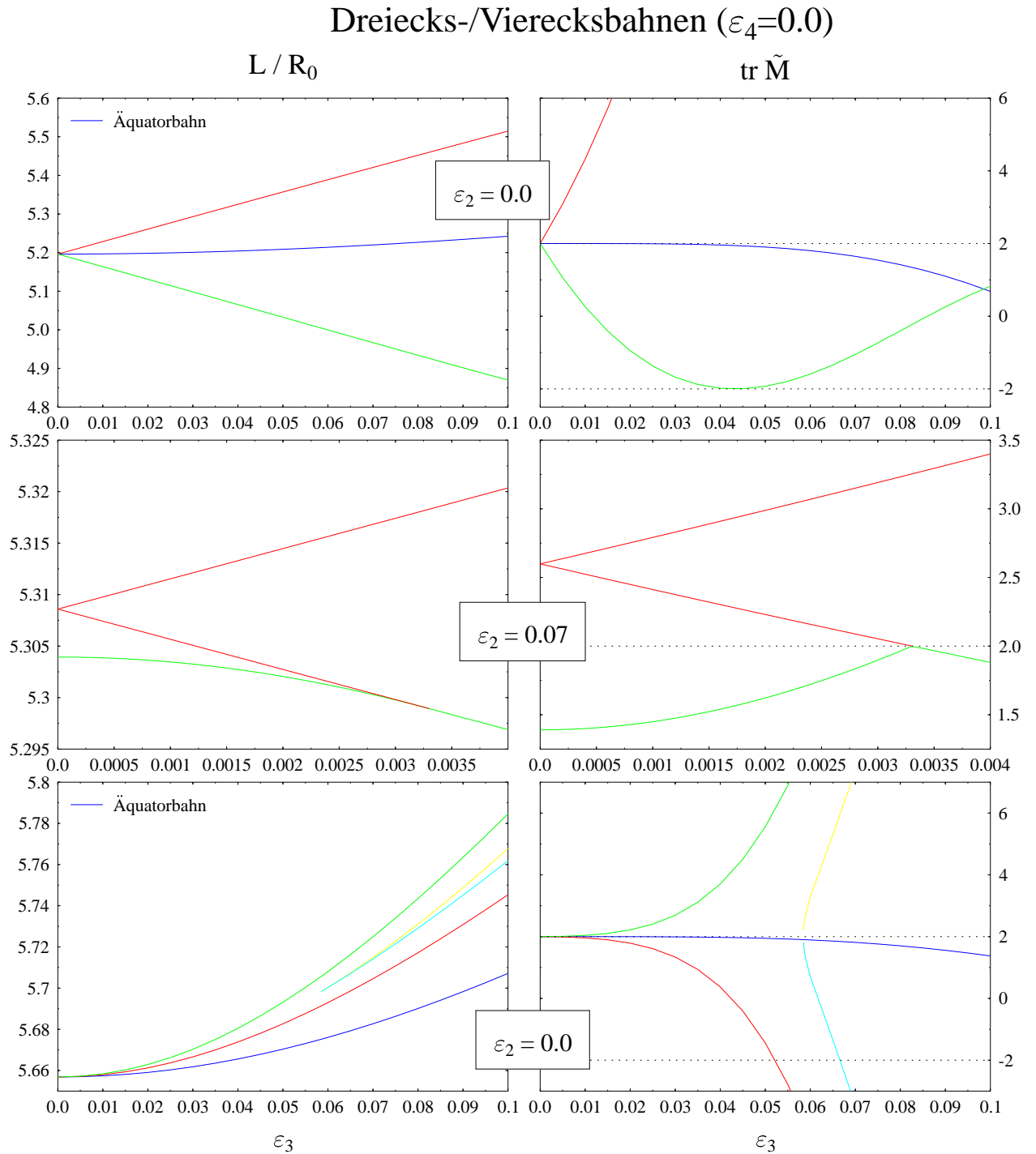


ABBILDUNG 4.4: Die Spur der reduzierten Stabilitätsmatrix (rechts) und die Länge (links) der Dreiecks- (oben und Mitte) und Vierecksbahnen (unten) als Funktion von ε_3 (bei $\varepsilon_4 = 0$). Interessant bei beiden Bahnfamilien ist, daß bereits bei sehr kleinen Deformationen Bifurkationen auftreten.

4.3 Ergebnisse der semiklassischen Störungstheorie

Um die Grundzustandsdeformationen zu finden, minimieren wir die Gesamtenergie — bei fester Teilchenzahl N — bezüglich der Deformationsparameter $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4)$. Im Rahmen der Schalenkorrekturmethode setzt sich die Gesamtenergie dabei zusammen aus einem mittleren Anteil U_{LDM} , den das Tröpfchenmodell liefert, und der Schalenkorrekturenergie δU , die wir einerseits mit Hilfe der semiklassischen Störungstheorie und zum Vergleich exakt quantenmechanisch berechnen:

$$U(N; \boldsymbol{\varepsilon}) = U_{\text{LDM}}(N; \boldsymbol{\varepsilon}) + \delta U(N; \boldsymbol{\varepsilon}) \quad . \quad (4.2)$$

Im Tröpfchenmodell berücksichtigen wir nur die Oberflächenenergie,

$$U_{\text{LDM}}(N; \boldsymbol{\varepsilon}) = 4\pi \sigma r_{\text{S}}^2 N^{2/3} A(\boldsymbol{\varepsilon}) / A_0 \quad , \quad (4.3)$$

da die Volumenenergie ja deformationsunabhängig und somit für die Minimierung unerheblich ist. In die Oberflächenenergie geht das Verhältnis der Oberflächen $A(\boldsymbol{\varepsilon})$ und A_0 von deformierter und sphärischer Kavität ein sowie die Oberflächenspannung σ und der Wigner-Seitz-Radius r_{S} . Wir verwenden für beide die Werte aus [59] ($\sigma = 0.0111 \text{ eV}/\text{\AA}^2$, $r_{\text{S}} = 2.17 \text{ \AA}$), die an Natriumcluster angepaßt sind.

Die Bestimmung der quantenmechanischen Schalenkorrekturenergie wird in Anhang A.3 erläutert. In Abschnitt 2.3.2 haben wir gezeigt, wie man im Rahmen der POT die Schalenkorrekturenergie näherungsweise durch eine Spurformel ausdrücken kann, indem man den Unterschied zwischen glatter und exakter Fermienergie nur bis zur ersten Ordnung berücksichtigt, siehe Gl. (2.69). Hier gehen wir über diese Näherung hinaus und berechnen die Schalenkorrekturenergie exakt gemäß ihrer Definition (siehe Gln. (2.64), (2.63), (2.9) und (2.65)):

$$\delta U(N; \boldsymbol{\varepsilon}) = 2E_0 \int_{-\infty}^{k_{\text{F}}(N; \boldsymbol{\varepsilon})} dk (kR)^2 (\tilde{g}(k; \boldsymbol{\varepsilon}) + \delta g(k; \boldsymbol{\varepsilon})) - 2E_0 \int_{-\infty}^{\tilde{k}_{\text{F}}(N; \boldsymbol{\varepsilon})} dk (kR)^2 \tilde{g}(k; \boldsymbol{\varepsilon}) \quad . \quad (4.4)$$

Diese Integraldarstellung kann durch einfache Umformungen auf folgende Gestalt gebracht werden, in der ganz rechts wieder die oben erwähnte, genäherte semiklassische Schalenkorrekturenergie δU_{scl} (Gl. (2.71), allerdings ausgewertet bei der exakten Fermiwellenzahl k_{F}) erscheint:

$$\delta U_{\text{scl,ex}}(N; \boldsymbol{\varepsilon}) = \tilde{U}(k_{\text{F}}; \boldsymbol{\varepsilon}) - \tilde{U}(\tilde{k}_{\text{F}}; \boldsymbol{\varepsilon}) + (N - \tilde{N}(k_{\text{F}}; \boldsymbol{\varepsilon})) k_{\text{F}}^2 \cdot E_0 + \delta U_{\text{scl}}(k_{\text{F}}; \boldsymbol{\varepsilon}) \quad . \quad (4.5)$$

\tilde{U} und \tilde{N} ergeben sich über Gl. (2.65) bzw. (2.66) aus der mittleren Niveaudichte \tilde{g} , für die wir die verallgemeinerte Weyl-Formel (A.15) verwenden. Gl. (2.66) liefert auch die glatte Fermiwellenzahl \tilde{k}_{F} als Funktion der Teilchenzahl und der Deformation, so wie in Gl. (A.17) beschrieben. Die exakte Fermiwellenzahl k_{F} muß dagegen iterativ mit Hilfe von Gl. (2.4) und (2.9) bestimmt werden.

Für den oszillierenden Anteil δg der Niveaudichte in Gl. (2.9) verwenden wir schließlich im Rahmen unserer semiklassischen Störungstheorie die perturbative Spurformel (3.6) mit den Amplituden, Wirkungen und Maslovindices aus Gl. (2.74) und den Modulationsfaktoren (3.15) bis (3.18). Dieselben Größen gehen natürlich auch in δU_{scl} ein (Gl. (2.71),

dort muß jedoch die Amplitude durch das Produkt aus Amplitude und entsprechendem Modulationsfaktor ersetzt werden).

Insgesamt machen wir bei der Herleitung von Gl. (4.5) nur eine einzige Näherung: In den Integralen über δg in Gl. (2.4) und (2.69) wird — wie schon in Abschnitt 2.3.1 und 2.3.2 — die gesamte Amplitude als hinreichend konstant angenommen, so daß sie vor das Integral gezogen werden kann. Diese Näherung ist aber angesichts des stark oszillierenden Charakters von δg sehr gut erfüllt.

Die Mittelungsbreite γ (siehe Abschnitt 2.3.1) der Gesamtspurformel für δg wird auf Null gesetzt, da wir zur Bestimmung der exakten Fermiwellenzahl k_F natürlich von einer möglichst exakten, d.h. auch nicht gemittelten Niveaudichte ausgehen müssen. Trotz dieses Verzichts auf eine Mittelung konvergiert das Verfahren, da ja schon die Amplituden in der Spurformel (2.74) mit zunehmender Länge der periodischen Bahnen gegen Null gehen. Es zeigt sich, daß die mit dieser Methode ermittelten Grundzustandsdeformationen mit einer maximalen Windungs- und Eckenzahl von 3 bzw. 30 praktisch konvergiert sind [67].

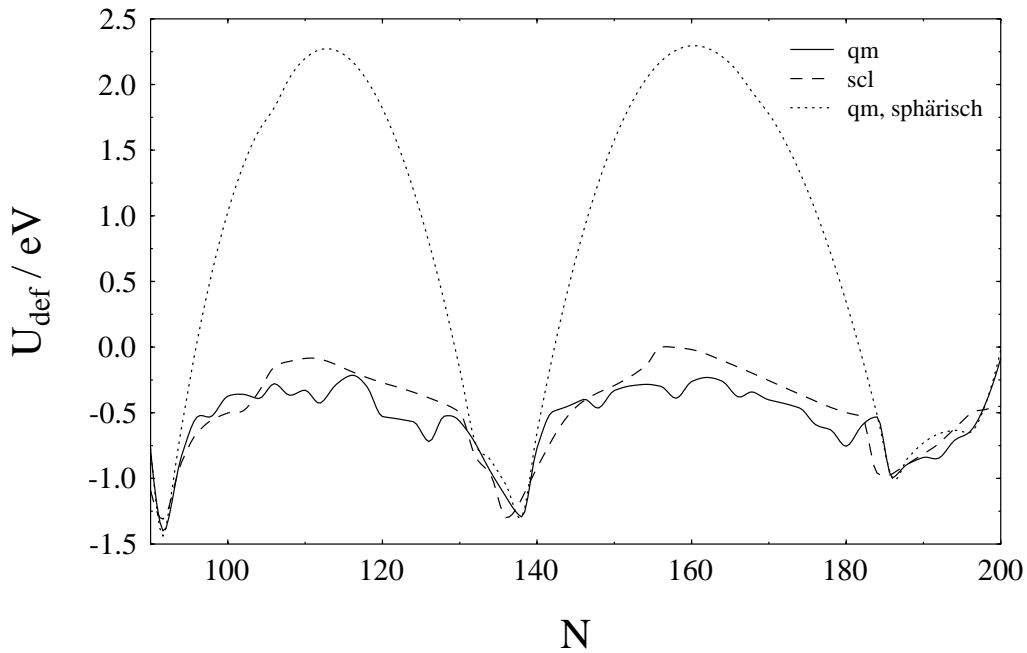


ABBILDUNG 4.5: Die Deformationsenergie U_{def} als Funktion der Teilchenzahl N . Quantenmechanisch und semiklassisch berechnete Werte (durchgezogene bzw. gestrichelte Linie) nach gleichzeitiger Minimierung bezüglich $\varepsilon_2, \varepsilon_3$ und ε_4 und quantenmechanische Werte bei sphärischer Form (gepunktete Linie).

In Abb. 4.5 zeigen wir die bezüglich ε minimierte Deformationsenergie⁴ $U_{\text{def}} := U(N; \varepsilon) - U_{\text{LDM}}(N; \mathbf{0})$ als Funktion der Teilchenzahl N im Bereich $90 \leq N \leq 200$, berechnet semi-

⁴Als Energieeinheit verwenden wir hier eV. Der Zusammenhang mit der natürlichen Energieeinheit $E_0 = \frac{\hbar^2}{2mR^2}$ ist (mit der Elektronenmasse und dem hier verwendeten Wigner-Seitz-Radius) gegeben durch $E_0(N) \approx 0.8089 \cdot N^{-2/3} \cdot \text{eV}$.

klassisch gemäß Gl. (4.5) und quantenmechanisch (gestrichelte bzw. durchgezogene Linie) sowie zum Vergleich die quantenmechanische Deformationsenergie bei fester, sphärischer Gestalt der Cluster (gepunktete Linie). Ganz deutlich erkennt man dort die Schalenabschlüsse bei den magischen Zahlen $N = 92, 138$ und 186 als scharfe Minima. Ebenso klar wird durch die unteren Kurven der Effekt der Deformationsfreiheitsgrade: Die Gesamtenergie im Gleichgewichtszustand wird in den Bereichen zwischen den magischen Zahlen im Vergleich zur rein sphärischen Gestalt deutlich verringert. Dies ist durch das Zustandekommen neuer Schalenabschlüsse in den deformierten Clustern zu erklären. Offensichtlich ist auch die Übereinstimmung zwischen quantenmechanischer und semiklassischer Kurve sehr gut, was ja angesichts des störungstheoretischen Zugangs bei der Berechnung von δU_{sel} v.a. bei größeren Deformationen nicht von vorneherein zu erwarten ist.

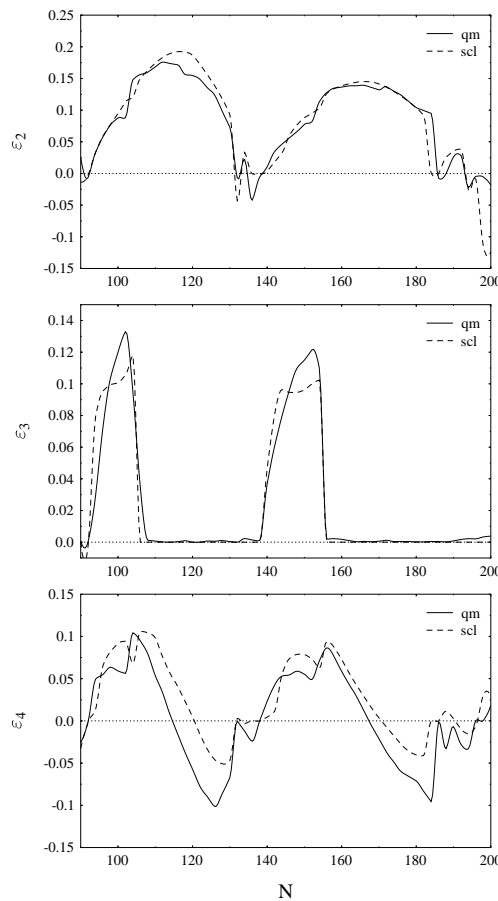


ABBILDUNG 4.6: *Quantenmechanisch und semiklassisch berechnete Grundzustandsdeformationen $\varepsilon_2, \varepsilon_3$ und ε_4 (durchgezogene bzw. gestrichelte Linie) als Funktion der Teilchenzahl N .*

Noch interessanter ist natürlich, welche Grundzustandsdeformationen mit beiden Methoden gefunden werden und wie weit sich deren Ergebnisse unterscheiden. Dies ist in Abb. 4.6 dargestellt: Zunächst erkennt man, daß sich beide Kurven – insbesondere die für die Werte von ε_2 und ε_3 – erstaunlich gut entsprechen. Dies ist umso verwunderlicher,

als die so bestimmten Werte für die Deformationsparameter z.T. bereits in einer Größenordnung liegen, bei der man von einer störungstheoretischen Rechnung keine brauchbaren Ergebnisse mehr erwartet. Dies ist aber wohl auch der Grund dafür, daß die maximalen Oktupol- und Hexadekupol-Deformationen in der semiklassischen Rechnung etwas unterschätzt werden.

Ebenfalls sehr gut reproduziert wird die am Ende von Abschnitt 4.1 vorgestellte Systematik der Grundzustandsdeformationen: Spärische Formen bei den magischen Teilchenzahlen 92, 138 und 186. Nach diesen Schalenabschlüssen kurzzeitig oblate, für den Großteil der neuen Schale hingegen prolate Formen; anfangs ein starker Oktupolanteil, der dann schlagartig auf Null fällt; und jeweils etwa in der Mitte der Schale der Übergang von positiver zu negativer Hexadekupoldeformation.

$$U_{\text{def}}(\varepsilon_2, \varepsilon_3; \varepsilon_4=0.0), \quad N = 138$$

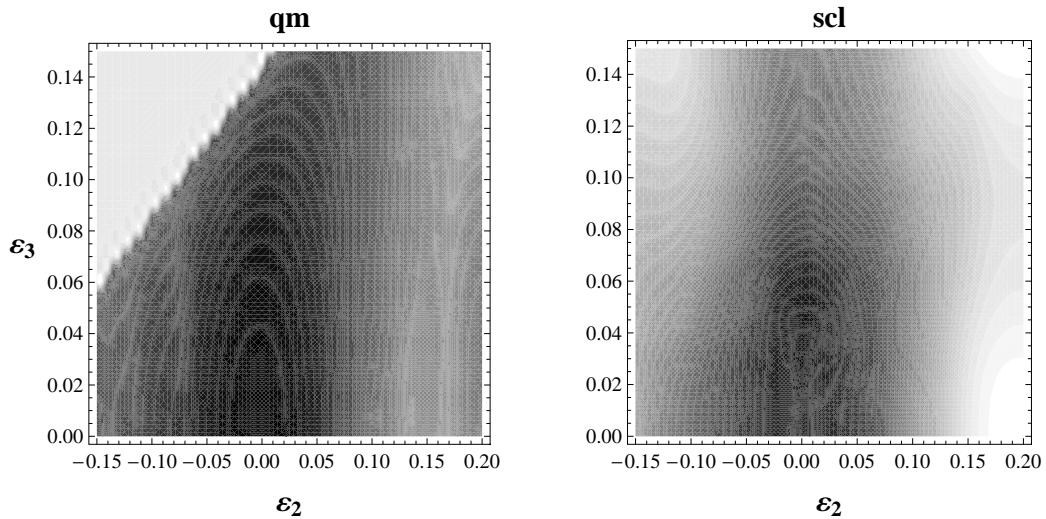


ABBILDUNG 4.7: Konturplot von quantenmechanisch und semiklassisch berechneter Deformationsenergie als Funktion von ε_2 und ε_3 , für feste Teilchenzahl $N = 138$ und konstantes $\varepsilon_4 = 0.0$.

Das Zustandekommen dieser Systematik läßt sich auch sehr anschaulich anhand von Konturplots der Deformationsenergie aufzeigen. Abb. 4.7 ist ein solcher Plot für die magische Teilchenzahl 138, als Funktion von ε_2 und ε_3 bei konstantem $\varepsilon_4 = 0.0$, im Vergleich von quantenmechanischem⁵ und semiklassischem Ergebnis. Das einzige Minimum bei der sphärischen Form ist eindeutig. Erhöht man die Teilchenzahl (s. Abb. 4.8 für das Beispiel $N = 146$), so erkennt man nun zwei konkurrierende Minima. Beide liegen bei nicht-verschwindenden Werten von ε_2 , eines aber (das weniger tiefe) bei $\varepsilon_3 = 0$. Bei noch größerem N (s. Abb. 4.9 für $N = 160$) ist das Minimum im prolatale Bereich nach wie vor das tiefere, liegt aber nun seinerseits bei $\varepsilon_3 = 0$: Hier hat also das plötzliche Verschwinden des Oktupolanteils der Grundzustandsdeformation stattgefunden.

⁵Der helle Bereich links oben in dieser Graphik (und entsprechend auch in den folgenden Plots) steht für Deformationsbereiche, wo eine quantenmechanische Berechnung mit der von uns gewählten Basis nicht möglich ist, s.a. Anhang A

$$U_{\text{def}}(\varepsilon_2, \varepsilon_3; \varepsilon_4=0.0), \quad N = 146$$

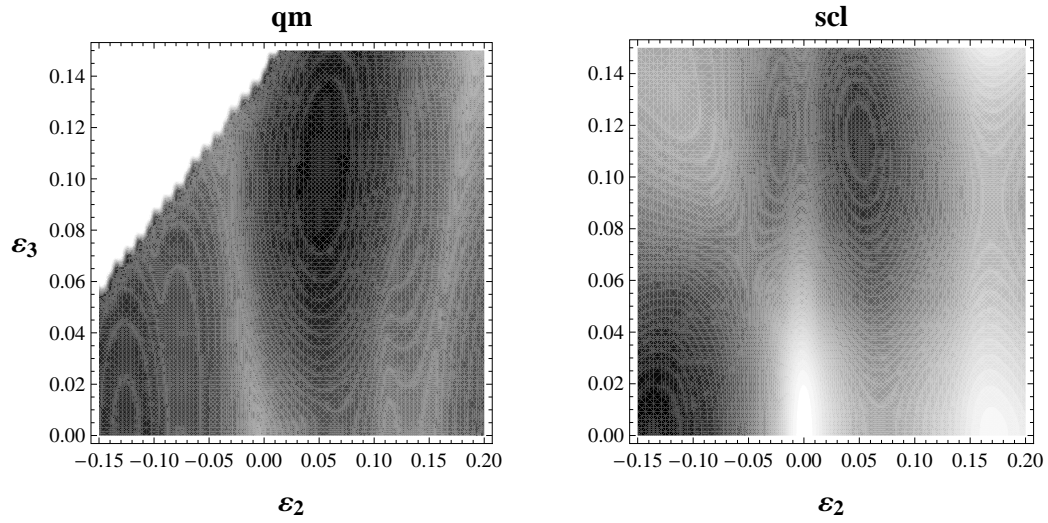


ABBILDUNG 4.8: wie Abb. 4.7, aber für $N = 146$

$$U_{\text{def}}(\varepsilon_2, \varepsilon_3; \varepsilon_4=0.0), \quad N = 160$$

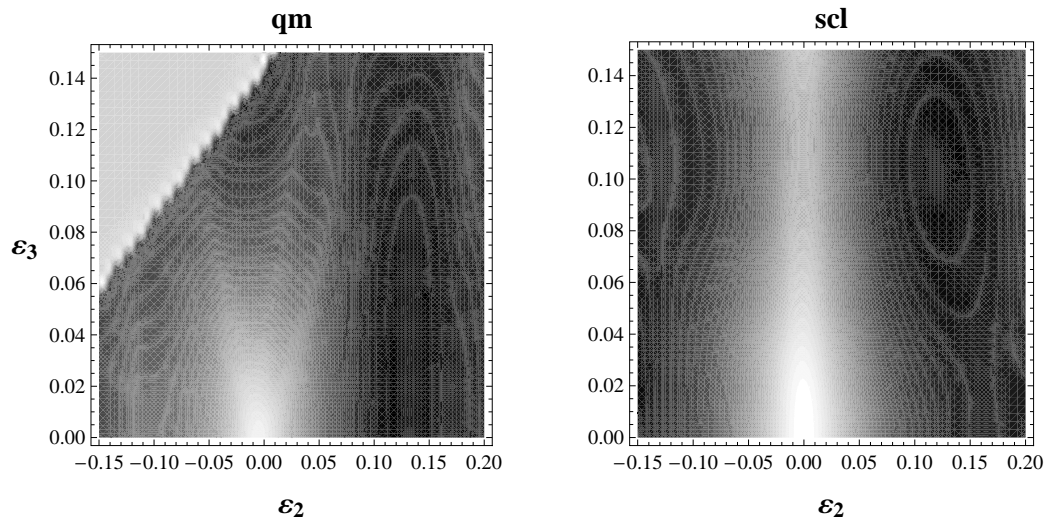


ABBILDUNG 4.9: wie Abb. 4.7, aber für $N = 160$

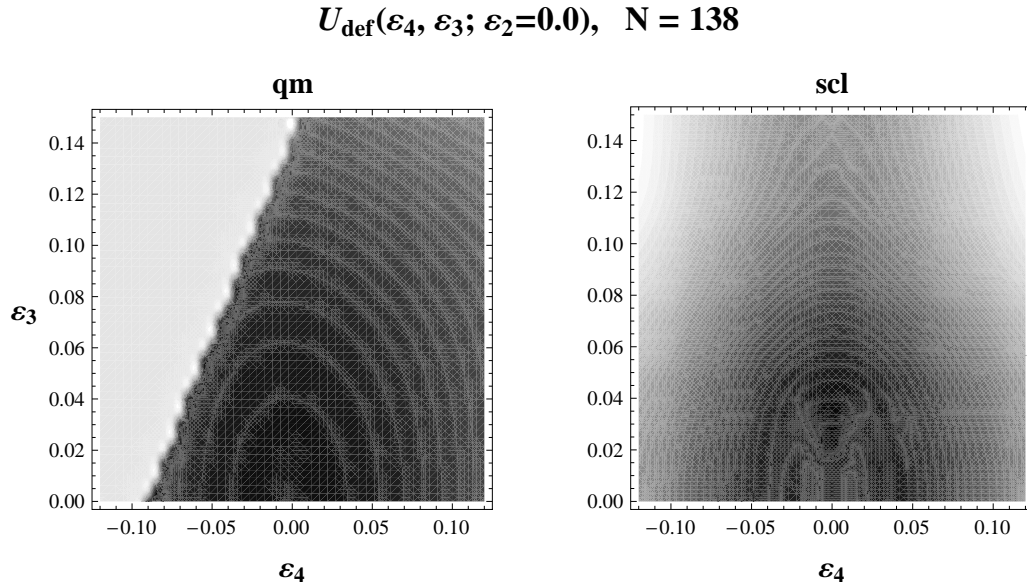


ABBILDUNG 4.10: *Konturplot von quantenmechanisch und semiklassisch berechneter Deformationsenergie als Funktion von ε_3 und ε_4 , für feste Teilchenzahl $N = 138$ und konstantes $\varepsilon_2 = 0.0$.*

Abb. 4.10 zeigt noch einmal das Ergebnis für $N = 138$, nun aber als Funktion von ε_3 und ε_4 (bei $\varepsilon_2 = 0.0$). Wie erwartet liegt das Minimum bei sphärischer Form. Geht man weiter zu $N = 154$, so findet man erneut zwei Minima. Beide liegen bei einem nicht-verschwindenden Wert von ε_3 und einem betragsmäßig etwa gleichem Wert von ε_4 . Hier deutet sich also der Vorzeichenwechsel des Gleichgewichtswertes von ε_4 bei noch größerem N an.

Auch das Zusammenspiel von Quadrupol- und Hexadekapoldeformation kann sehr gut reproduziert werden. In Abb. 4.12 ist das Ergebnis für $N = 144$ (bei konstantem $\varepsilon_3 = 0.0$) dargestellt: Hier, leicht jenseits einer magischen Zahl, sind klar sogar mehrere Minima zu unterscheiden, die sich um die spärliche Gestalt gruppieren; die tieferen Minima liegen jedoch eindeutig bei positiven Werten für ε_4 . Geht man weiter zu $N = 180$, findet sich nur mehr ein deutliches Minimum, nun – wie erwartet – bei negativem ε_4 und positivem ε_2 .

Diese Beispiele ließen sich noch beliebig fortführen. Zusammenfassend kann man aber bei allen festhalten: Obwohl sich in den quantitativen Details (d.h. in der Position und der Amplitude der Minima) natürlich Unterschiede zwischen den quantenmechanischen und semiklassischen Ergebnissen zeigen, ist die qualitative Übereinstimmung verblüffend. Dies gilt umso mehr, wenn man sich noch einmal klar macht, daß für die semiklassischen Rechnungen nicht einmal die Kenntnis der tatsächlich möglichen klassischen periodischen Bahnen nötig ist, sondern ausschließlich die trivialen Bahnen der sphärischen Kavität eingehen. Die Deformation fließt nur bei der (numerisch anspruchslosen) Berechnung der Modulationsfaktoren ein, die sich aus einer störungstheoretischen Betrachtung ergeben. Trotz dieser Näherung erweist sich die vorgestellte Methode demnach als geeignet, die Grundzustandsdeformationen von Metallclustern im Rahmen des Schalenmodells zu erklären.

$$U_{\text{def}}(\varepsilon_4, \varepsilon_3; \varepsilon_2=0.0), \quad N = 154$$

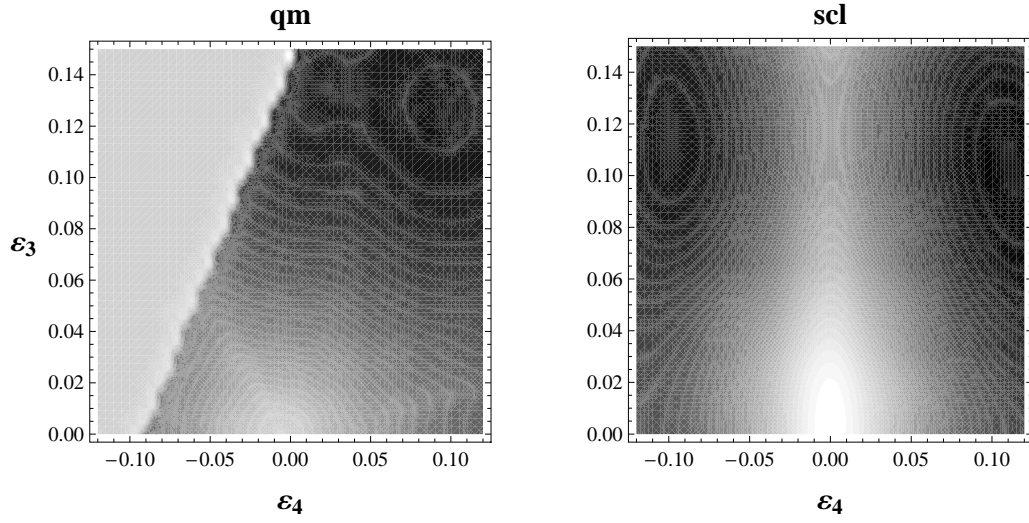


ABBILDUNG 4.11: wie Abb. 4.10, aber für $N = 154$

$$U_{\text{def}}(\varepsilon_2, \varepsilon_4; \varepsilon_3=0.0), \quad N = 144$$

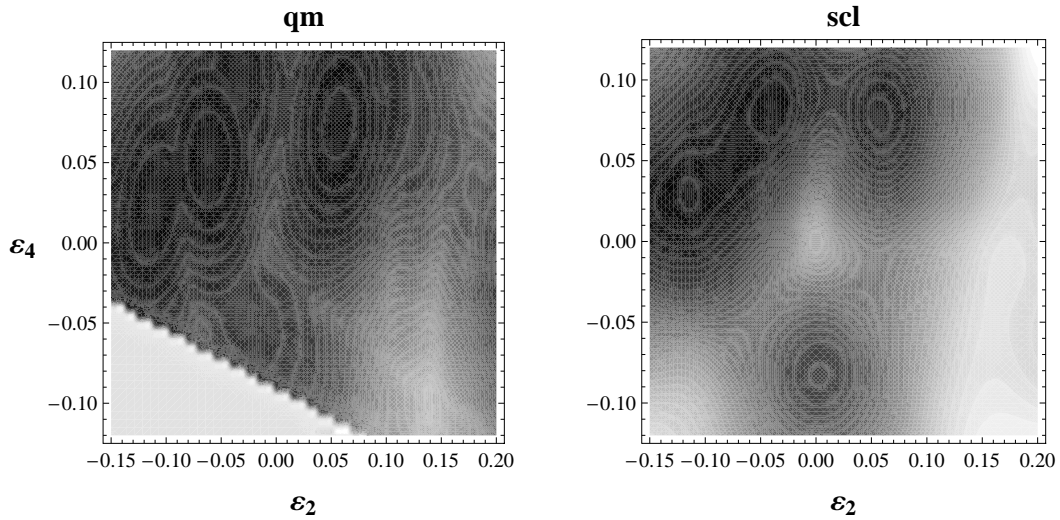


ABBILDUNG 4.12: Konturplot von quantenmechanisch und semiklassisch berechneter Deformationsenergie als Funktion von ε_2 und ε_4 , für feste Teilchenzahl $N = 144$ und konstantes $\varepsilon_3 = 0.0$.

$$U_{\text{def}}(\varepsilon_2, \varepsilon_4; \varepsilon_3=0.0), \quad N = 180$$

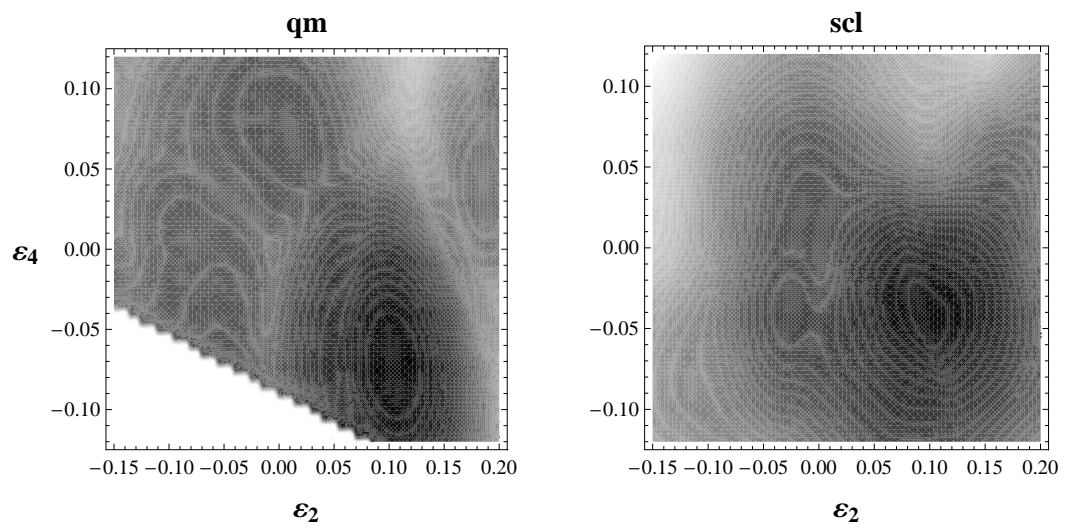


ABBILDUNG 4.13: wie Abb. 4.12, aber für $N = 180$.

Das grundlegende Faszinosum der von Gutzwiller begründeten Theorie der periodischen Bahnen besteht darin, daß sie es erlaubt, aus den Eigenschaften der in einem gegebenen physikalischen System möglichen klassischen periodischen Bahnen näherungsweise Aussagen über dessen quantenmechanisches Verhalten zu machen. Dadurch ermöglicht sie oftmals ein für die menschliche Anschauung intuitiveres Verständnis.

In der hier vorgelegten Arbeit haben wir versucht, diesen modernen semiklassischen Formalismus auf Metallcluster als ein realistisches Beispiel eines endlichen Fermionensystems anzuwenden. Deren Deformationsverhalten ist durch Schaleneffekte bestimmt, also klar quantenmechanischer Natur. Mit ihrer typischen räumlichen Ausdehnung handelt es sich andererseits um ein mesoskopisches System, für das sich eine semiklassische Beschreibung anbietet. Dabei haben wir die Cluster im Schalenmodell betrachtet und als effektives Einteilchenpotential das einer zylindersymmetrischen Kavität verwendet, dessen geometrische Gestalt empirisch parametrisiert wurde.

Entsprechend haben wir zunächst die Herleitung der Gutzwillerschen Spurformel sowie ihrer Verallgemeinerung auf Systeme mit kontinuierlicher Symmetrie wiedergegeben und schließlich für den Spezialfall des oben genannten Modellpotentials explizit berechnet sowie die möglichen periodischen Bahnen bestimmt. Beim Vergleich der Ergebnisse dieser Formel mit den entsprechenden quantenmechanischen Resultaten stellte sich zunächst eine teilweise deutliche Diskrepanz heraus.

Als Ursache dafür konnten wir einerseits Orbitbifurkationen identifizieren, also das in Abhängigkeit von den Deformationsparametern plötzliche Auftreten neuer periodischer Bahnen. Als Lösung dafür haben wir für verschiedenen Klassen von Bifurkationen sogenannte uniforme Spurformeln präsentiert, die auch in der Nähe einer Bifurkation sehr gute Resultate liefern. Ein anderer Fall, in dem die Theorie versagt, liegt vor bei kleinen Deformationen, genauer gesagt beim Bruch der sphärischen hin zur zylindrischen Symmetrie. Für diesen Grenzfall haben wir sowohl eine störungstheoretische Näherung angegeben als auch (für den Spezialfall einer reinen Quadrupoldeformation) eine uniforme Spurformel berechnet, die beide im Rahmen ihrer Näherung sehr gute Ergebnisse zeigen.

Im Hinblick auf die praktische Anwendung haben wir uns anschließend mit den bei einer allgemeineren Multipoldeformation möglichen periodischen Bahnen beschäftigt und dabei festgestellt, daß Orbitbifurkationen schon bei beliebig kleinen Deformationen auftreten können. Dieser Fall wird von keiner der oben genannten uniformen Näherungen beschrieben, so daß wir diesen Zugang nicht weiter verfolgt haben. Im Gegensatz dazu hat sich die relativ einfache störungstheoretische Spurformel als überraschend stabil erwiesen. Deswegen haben wir diese Methode gewählt, um damit schließlich die Schalenkorrekturenergie zu berechnen und über deren Minimum die Grundzustandsdeformation eines Clusters bei gegebener Teilchenzahl zu bestimmen. Die Übereinstimmung dieser Resultate mit den (rechentechnisch deutlich aufwendigeren) quantenmechanischen Rechnungen ist erstaun-

lich gut. Die in der Natur auftretenden Clusterdeformationen sind offensichtlich von einer Größenordnung, in der die störungstheoretische Näherung noch sehr gut erfüllt ist. Der große praktische Vorteil dieser Methode ist, daß keine explizite Kenntnis der möglichen periodischen Bahnen im deformierten Fall nötig ist, so daß man die Probleme mit Symmetrieverlust und Bifurkation elegant vermeiden kann. Allein mit den trivialen Bahnen im sphärischen Fall und der störungstheoretischen Spurformel sind bereits sehr gute qualitative Aussagen über das Deformationsverhalten von Metallclustern möglich.

Anhang A

QUANTENMECHANISCHE RECHNUNGEN

In diesem Kapitel wird die Berechnung der quantenmechanischen Größen beschrieben. Wir beginnen mit einer kurzen Darstellung des quantenmechanischen Eigenwertproblems und seiner numerischen Lösung. Anschließend zeigen wir, wie man, ausgehend von den so bestimmten Energieeigenwerten, die Niveaudichte als auch die Schalenkorrekturenergie erhält.

A.1 Die Energie-Eigenwerte

Ausgangspunkt für die quantenmechanische Behandlung des Problems ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Da wir uns nur mit axialsymmetrischen Systemen beschäftigen, liegt die Verwendung von Zylinderkoordinaten ρ, z und φ nahe. Dann separiert der vom Azimutwinkel φ abhängige Teil der Wellenfunktion und man hat es im wesentlichen nur mehr mit einem zweidimensionalen Problem zu tun. Die Eigenfunktionen und -werte können dann nach dem Wert der Quantenzahl ν , die der Projektion l_z des Drehimpulses auf die z -Achse entspricht, klassifiziert werden, und die Hamiltonmatrix zerfällt in Blöcke mit festem ν , was die Diagonalisierung natürlich vereinfacht.

Schreibt man die restliche Wellenfunktion $\Phi_{\nu,n}(\rho, z)$ in der Form

$$\Phi_{\nu,n}(\rho, z) = \Psi_{\nu,n}(\rho, z) / \sqrt{\rho} \quad , \quad (\text{A.1})$$

so lautet die Schrödinger-Gleichung zu fester Drehimpulsquantenzahl ν für die Funktion $\Psi_{\nu,n}(\rho, z)$ schließlich

$$H_\nu \Psi_{\nu,n}(\rho, z) = E_{\nu,n} \Psi_{\nu,n}(\rho, z) \quad , \quad (\text{A.2})$$

wobei der Hamiltonoperator die Form

$$H_\nu = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{4\rho^2} - \frac{\nu^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (\text{A.3})$$

hat (m ist die Teilchenmasse). Das Potential ist im Inneren der Kavität identisch Null, da wir ein Kastenpotential mit harten, unendlich hohen Wänden verwenden.

Ansonsten geht das Potential nur in die Randbedingung ein: Wir haben es mit einem Dirichletschen Randwertproblem zu tun, d.h. wir fordern, daß die Wellenfunktion am Rand der Kavität verschwindet:

$$\Psi_{\nu,n}(\rho_s(z), z) = 0 \quad . \quad (\text{A.4})$$

$\rho_s(z)$ beschreibt die Form der Kavität.

Wegen der Zeitumkehrsymmetrie sind — unabhängig von der Deformation — die Energieeigenwerte zur Drehimpulsquantenzahl $\nu=0$ einfach, alle anderen zweifach entartet.

Zur numerischen Berechnung der Eigenwerte folgen wir der von Koizumi et al. [69] vorgeschlagenen Methode, auf dessen Fortran-Programmcode auch das von uns benutzte Programm aufbaut.

Der erste Schritt ist die Diskretisierung der in Zylinderkoordinaten vorliegenden Variablen. Da Rotationssymmetrie vorliegt, haben wir es mit einem quasi-zweidimensionalen Problem zu tun, der Azimutwinkel φ taucht nicht mehr auf. Die diskreten, äquidistant gewählten Punkte liegen in der z - ρ -Ebene in dem Bereich $z_{\min} \leq z \leq z_{\max} \wedge 0 \leq \rho \leq \rho_{s,\max}$, wobei z_{\min} und z_{\max} der unterste bzw. oberste Punkt der Kavität auf der z -Achse sind und $\rho_{s,\max}$ der größte Wert von $\rho_s(z)$ in diesem z -Bereich ist. Die Punkte haben die Koordinaten

$$\rho_i = i \frac{\rho_{s,\max}}{N_\rho}, \quad i = 1, \dots, N_\rho \quad (\text{A.5})$$

$$z_j = z_{\min} + j \frac{z_{\max} - z_{\min}}{N_z}, \quad j = 1, \dots, N_z \quad (\text{A.6})$$

Als Basisfunktionen verwenden wir die normierten Eigenfunktionen einer zylindrischen Kavität, also Produkte von Sinusfunktionen für die z -Richtung¹

$$\langle p_{j'} | z_j \rangle = \sqrt{\frac{2}{N_z}} \sin(p_{j'}(z_j - z_{\min})), \quad p_{j'} = j' \frac{\pi}{z_{\max} - z_{\min}}, \quad j' = 1, \dots, N_z \quad (\text{A.7})$$

und den Besselfunktionen mit ganzzahligem Index (für die ρ -Richtung)

$$\langle \rho_i | l; z_j \rangle = \frac{\sqrt{2\rho_i}}{\rho_s(z_j) |J_{\nu+1}(\xi_{\nu,l})|} J_\nu \left(\xi_{\nu,l} \frac{\rho_i}{\rho_s(z_j)} \right) =: \Omega_{ijl} \quad (\text{A.8})$$

($\xi_{\nu,l}$ bezeichnet die l -te Nullstelle der Besselfunktion der Ordnung ν ; z_j ist hier nur als Parameter, nicht als Quantenzahl aufzufassen). Die spezielle Form der Basisfunktionen garantiert dabei, daß sie (und damit auch die gesuchte Eigenfunktion) die Randbedingung erfüllen. Allerdings beschränkt man sich mit dieser Wahl der Basis auf Kavitäten, deren Randkurve $\rho_s(z)$ für alle Werte von z eindeutig ist². Ansonsten müßte man statt der einfachen Besselfunktion die Eigenfunktionen eines Kreisrings, also Linearkombinationen aus Bessel- und Neumannfunktionen, verwenden.

Der ρ -abhängige Anteil der Hamiltonmatrix ist in der gewählten Basis schon diagonal mit den Eigenwerten

$$E_{\nu j l}^{(\rho)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\xi_{\nu,l}}{\rho_s(z_j)} \right)^2 \quad (\text{A.9})$$

Verwendet man für den z -abhängigen Teil des Hamiltonoperators die Impulsdarstellung, vereinfachen sich seine Matrixelemente erheblich. Sie lauten in diskretisierter Form:

$$\begin{aligned} \langle z_{j_1}, l_1 | H_\nu | z_{j_2}, l_2 \rangle &= \langle z_{j_1} | \langle l_1; z_{j_1} | H_\nu | l_2; z_{j_2} \rangle | z_{j_2} \rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{N_z} \sum_{j'=1}^{N_z} p_{j'}^2 \cdot \sin(p_{j'}(z_{j_1} - z_{\min})) \cdot \sin(p_{j'}(z_{j_2} - z_{\min})) \cdot \sum_{i=1}^{N_\rho} \Omega_{ij_1 l_1} \Omega_{ij_2 l_2} + \\ &+ E_{\nu j_1 l_1}^{(\rho)} \delta_{j_1 j_2} \delta_{l_1 l_2} \quad (\text{A.10}) \end{aligned}$$

¹Wegen der Ortsdiskretisierung gibt es nur endlich viele Basisfunktionen in dieser Richtung. Daher erscheint im Normierungsfaktor auch die Zahl N_z der Gitterpunkte in z -Richtung.

²Dies gilt z.B. im Falle der Multipolparametrisierung nicht für die Werte $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 0$, $\varepsilon_4 = -0.2$, wo die Kurve in der Nähe der beiden Pole stark konkav ist.

Um diese Matrix und den damit verbundenen numerischen Aufwand ihrer Diagonalisierung möglichst klein zu halten, berechnet man nur die Matrixelemente zwischen den Basisfunktionen $|l; z_j\rangle$, bei denen die Energie $E_{\nu jl}^{(\rho)}$ kleiner als eine festzulegende Abschneide-Energie E_c ist. Die gesuchten Energie- und damit auch die Wellenzahl-Eigenwerte $E_{\nu,n}$ bzw. $k_{\nu,n} = \sqrt{2mE_{\nu,n}/\hbar^2}$ ergeben sich schließlich durch Diagonalisierung dieser Matrix für alle Werte von ν .

Insgesamt wird die Größe der Basis also bestimmt durch den gewählten Maximalwert ν_{\max} der Drehimpulsquantenzahl ν , durch die Zahl N_z der Gitterpunkte in z -Richtung, durch die maximale Knotenzahl l_{\max} in ρ -Richtung sowie natürlich durch den Wert von E_c . Bei unseren Rechnungen verwenden wir i.a. ein z - ρ -Gitter mit 50×50 Punkten sowie die Werte $\nu_{\max} = 40$, $l_{\max} = 20$ und $E_c = 5000$ (wir setzen $\frac{\hbar^2}{2m} \equiv 1$). Diese Wahl der Basis stellt einen Kompromiß dar zwischen annehmbarer Rechenzeit einerseits und andererseits einer genügend großen Zahl von hinreichend genauen Energieeigenwerten, wie man sie für die Berechnung der Niveaudichte benötigt.

A.2 Die Niveaudichte

Nachdem wir die numerische Berechnung der Wellenzahl-Eigenwerte $k_{\nu,n}$ erläutert haben, wollen wir nun kurz erklären, wie man daraus den leicht gemittelten, oszillierenden Anteil $\delta g_\gamma(k)$ der Niveaudichte bestimmt, mit dem wir die entsprechenden semiklassischen Ergebnisse vergleichen.

Zunächst ist das ungemittelte $\delta g(k)$ gemäß Gl. (2.9) die Differenz von Gesamtniveaudichte $g(k) = \sum_{\nu,n} d_\nu \delta(k - k_{\nu,n})$ (Gl. 2.3) und ihrem glatten Anteil $\tilde{g}(k)$. Letzterer bleibt von der Mittelung definitionsgemäß unverändert. Bei $g(k)$ führt sie, wie schon in Abschnitt 2.3.1 erwähnt, auf eine Faltung mit einer normierten Mittelungsfunktion, für die wir eine Gaußfunktion wählen, letztlich also auf eine Ersetzung der Delta- durch Gaußfunktionen:

$$g_\gamma(k) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \gamma_k} \int_{-\infty}^{\infty} dk' g(k') e^{-((k-k')/\gamma_k)^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi} \gamma_k} \sum_{\nu,n} d_\nu e^{-((k-k_{\nu,n})/\gamma_k)^2} \quad . \quad (\text{A.11})$$

Die Breite γ_k ist dabei etwas größer als die Abstände zwischen den einzelnen Wellenzahl-niveaus innerhalb einer Schale, aber kleiner als die Schalenabstände selbst zu wählen. Typische Werte sind $\gamma_0 = \gamma_k R \approx 0.4 - 0.6$.

Zur Berechnung des glatten Anteils $\tilde{g}(k)$ verwenden wir die sogenannte Strutinsky-Methode [14]. Deren Grundidee ist ebenfalls eine Faltung der exakten Niveaudichte mit einer Mittelungsfunktion $f(x)$ über einen Wellenzahlbereich Γ_k , der groß genug gewählt werden muß, um den oszillierenden Anteil „auszuschmieren“, d.h. Γ_k muß den mittleren Schalenabständen entsprechen. Allerdings darf Γ_k auch nicht zu groß werden, weil sich sonst die unvermeidbar endliche Basis bei der numerischen Bestimmung der Eigenenergien bemerkbar macht. Von der Mittelungsfunktion $f(x)$ wird nur vorausgesetzt, daß sie symmetrisch um ihr Maximum bei $x=0$, sowie positiv, differenzierbar und normiert ist.

Die bei dieser Mittelung erhaltene glatte Funktion ist i.a. jedoch nur eine Näherung für $\tilde{g}(k)$. Um diese zu verbessern, ergänzt man $f(x)$ um passend gewählte, sogenannte Krümmungskorrektur-Terme und benützt somit als Faltungskern die Funktion³

$$f_M(x) = \sum_{\mu=0}^M a_{2\mu} f^{(2\mu)}(x) \quad . \quad (\text{A.12})$$

Die Faktoren $a_{2\mu}$ ergeben sich aus den μ -ten Momenten der Mittelungsfunktion. Läßt sich die exakte mittlere Niveaudichte als Polynom der Ordnung $2M+1$ (oder kleiner) in k schreiben, wird sie durch diese Methode identisch reproduziert, ansonsten erhält man einen lokalen Fit der exakten mittleren Dichte durch ein Polynom der Ordnung $2M$.

Mit den Krümmungskorrektur-Termen verwendet man also als Näherung für den exakten mittleren Anteil $\tilde{g}(k)$ der Niveaudichte den Ausdruck

$$\tilde{g}_{\Gamma,M}(k) = \frac{1}{\Gamma_k} \sum_{\nu,n} d_\nu \sum_{\mu=0}^M a_{2\mu} f^{(2\mu)}\left(\frac{k-k_{\nu,n}}{\Gamma_k}\right) \quad . \quad (\text{A.13})$$

Wir wählen als Mittelungsfunktion wiederum eine Gaußfunktion, für die gilt:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad , \quad f^{(\mu)}(x) = \frac{(-1)^\mu}{\sqrt{\pi}} H_\mu(x) e^{-x^2} \quad , \quad a_{2\mu} = \frac{(-1)^\mu}{2^{2\mu} \mu!} \quad . \quad (\text{A.14})$$

H_μ bezeichnet dabei das μ -te Hermite-Polynom. In unseren Rechnungen hat sich der Wert $2M=6$ der Ordnung der Krümmungskorrektur als ausreichend erwiesen. Mit einem Wert von $\Gamma_0 \approx 2-3$ werden alle Oszillationen in der Niveaudichte herausgemittelt.

Die Niveaudichte $g(k)$ ist aufgrund der mit einer endlichen Basis bestimmten Eigenwerte $k_{\nu,n}$ mit einem gewissen Fehler behaftet. Die Strutinsky-Methode hat nun den Vorteil, daß sie genau den zu dieser fehlerhaften Niveaudichte gehörenden mittleren Anteil $\tilde{g}(k)$ bestimmt, so daß sich in der Differenz $\delta g_\gamma(k) = g_\gamma(k) - \tilde{g}(k)$ der Fehler zum größten Teil wieder weghebt.

Der exakte mittlere Anteil $\tilde{g}(k)$ der Niveaudichte in einer Kavität wurde von Balian und Bloch [13] berechnet. Die ersten Terme dieser sogenannten verallgemeinerten Weyl-Formel lauten (bei Dirichletschen Randbedingungen):

$$\tilde{g}(k) = \frac{V}{2\pi^2} k^2 - \frac{A}{8\pi} k + \frac{C}{6\pi^2} \quad . \quad (\text{A.15})$$

Dabei ist V das Volumen und $A = \oint dA$ die Oberfläche der Kavität. C ist die mittlere Krümmung, die mit Hilfe der beiden Krümmungsradien R_1 und R_2 definiert ist als

$$C = \frac{1}{2} \oint dA \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad . \quad (\text{A.16})$$

Durch Vergleich mit der nach der Strutinsky-Methode berechneten mittleren Niveaudichte (A.13) läßt sich sehr einfach eine Aussage über die Qualität der numerischen Eigenwerte $k_{\nu,n}$ machen.

³Der Exponent in Klammern bezeichne die entsprechende mehrfache Ableitung nach dem Funktionsargument.

Durch Integration der exakten mittleren Niveaudichte (siehe Gl. (2.66)) erhält man einen Ausdruck für die exakte mittlere Teilchenzahl \tilde{N} als Funktion der Fermi-Wellenzahl k_F :

$$\tilde{N}(k_F) = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 - \frac{A}{8\pi} k_F^2 + \frac{C}{3\pi^2} k_F \quad , \quad (\text{A.17})$$

der mit Hilfe der Formel von Cardano [71] nach k_F aufgelöst werden kann.

Neben dem quantenmechanischen und semiklassischen Ergebnis für $\delta g_\gamma(k)$ vergleichen wir in dieser Arbeit auch deren Fouriertransformierte miteinander. Dabei ist man natürlich an einer möglichst guten Auflösung interessiert. Wie aus der Theorie der Fouriertransformation bekannt, ist die Breite der Peaks im Fourierpektrum indirekt proportional zur Länge dieses k -Intervalls, in dem $\delta g_\gamma(k)$ gegeben ist. Dieses ist aber im quantenmechanischen Fall wegen der endlichen Basis notwendigerweise nur bis zu einem Maximalwert k_{\max} gegeben.

Im Fourierpektrum erhält man dann neben den „physikalischen“ Peaks noch weitere, spuriose Signale. Sie sind darauf zurückzuführen, daß man bei diesem Vorgehen in Wirklichkeit nicht $\delta g_\gamma(k)$ selbst, sondern das Produkt von $\delta g_\gamma(k)$ mit einer rechteckigen Fensterfunktion $\Theta(k_{\max}-k)$ der Fouriertransformation unterzieht. Die Fouriertransformierte dieses Produktes ist gleich dem Faltungsprodukt der Fouriertransformierten von $\delta g_\gamma(k)$ und der Fensterfunktion. Letztere hat aber wegen der singulären Natur der Fensterfunktion viele Seitenpeaks, die durch die Faltung zu den beobachteten spuriösen Signalen führen.

Um sie möglichst zu vermeiden, verwendet man deshalb eine andere Fensterfunktion, die bei $k=0$ ebenfalls den Wert 1 hat, dann aber weich gegen Null geht, also z.B. eine Gauß- oder eine Fermifunktion. Wir benützen eine bei $k=0$ zentrierte Gaußfunktion, deren Breite etwa ein Drittel bis die Hälfte des Wertes von $k_{\max}R=90$ beträgt.

A.3 Die Schalenkorrekturenergie

Die Schalenkorrekturenergie $\delta U(N)$ wurde schon in Abschnitt 4.1 angesprochen. Hier erklären wir nun kurz, wie man diese Größe aus den Energie-Eigenwerten $E_{\nu,n}$ bestimmt.

$\delta U(N)$ ist der oszillierende Anteil der Gesamtenergie $U(N)$, also die Differenz von $U(N)$ und seinem mittleren Anteil $\tilde{U}(N)$. $U(N)$ selbst ist einfach die Summe der Eigenenergien $E_{\nu,n}$ (siehe Gl. (2.63)), $\tilde{U}(N)$ wurde in Gl. (2.65) definiert. Wir führen dieses Integral wieder im k -Raum aus, da wir dann die im letzten Abschnitt bestimmte mittlere Niveaudichte $\tilde{g}(k)$ mit konstanter Mittelungsbreite Γ_k benützen können. Es ist also folgendes Integral zu berechnen:

$$\tilde{U}(N) = 2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\tilde{k}_F(N)} dk k^2 \tilde{g}(k) \quad (\text{A.18})$$

$$= 2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\nu,n} d_\nu \sum_{\mu=0}^M a_{2\mu} \underbrace{\int_{-\infty}^{\tilde{x}_F} dx (\Gamma_k x + k_{\nu,n})^2 H_{2\mu}(x) e^{-x^2}}_{=: I_\mu(\tilde{x}_F)} \quad , \quad (\text{A.19})$$

wobei wir mit x die Größe $\frac{k-k_{\nu,n}}{\Gamma_k}$ substituieren. Das Integral I_μ ist analytisch lösbar und liefert abhängig vom Wert von μ folgendes Ergebnis:

$$I_\mu(\tilde{x}_F) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \Gamma_k^2 + k_{\nu,n}^2 \right) (1 + \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\tilde{x}_F)) - \left(\frac{1}{2} \Gamma_k \tilde{x}_F + k_{\nu,n} \right) \Gamma_k e^{-\tilde{x}_F^2} & (\mu = 0) \\ \Gamma_k^2 (1 + \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\tilde{x}_F)) - 2\tilde{k}_F (\Gamma_k + \tilde{k}_F \tilde{x}_F) e^{-\tilde{x}_F^2} & (\mu = 1) \\ - \left[\left(\tilde{k}_F^2 - \frac{\Gamma_k^2}{2\mu-2} \right) \mathrm{H}_{2\mu-1}(\tilde{x}_F) + \Gamma_k \left(2\tilde{k}_F + \frac{\Gamma_k \tilde{x}_F}{\mu-1} \right) \mathrm{H}_{2\mu-1}(\tilde{x}_F) \right] e^{-\tilde{x}_F^2} & (\mu \geq 2) \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

Die Fermi-Wellenzahl $\tilde{k}_F(N)$ (und damit auch $\tilde{x}_F(N)$) muß dabei iterativ aus der Gleichung für die Teilchenzahl

$$\tilde{N}(\tilde{k}_F) = 2 \int_{-\infty}^{\tilde{k}_F} dk \tilde{g}(k) \stackrel{!}{=} N \quad (\text{A.21})$$

bestimmt werden, für die man mit Gl. (A.13) findet:

$$\tilde{N}(\tilde{k}_F) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\nu,n} d_\nu \left(1 + \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\tilde{x}_F) - 2 \sum_{\mu=1}^M a_{2\mu} \mathrm{H}_{2\mu-1}(\tilde{x}_F) e^{-\tilde{x}_F^2} \right) \quad (\text{A.22})$$

Anhang B

ZUR BESTIMMUNG DER PERIODISCHEN BAHNEN

In diesem Anhang beschreiben wir einen einfachen Algorithmus zur Bestimmung der periodischen Bahnen in einem zweidimensionalen Billard, dessen Randkurve in Polarkoordinaten gegeben ist. Wir benützen diesen Algorithmus, um die Meridianbahnen in einer axialsymmetrischen, multipol-deformierten Kavität zu finden. Der Algorithmus läßt sich ohne weiteres auch auf Randkurven verallgemeinern, die in kartesischen Koordinaten gegeben sind, und damit zur Bestimmung der Meridianbahnen in einer Kavität verwenden, die in Zylinderkoordinaten parametrisiert ist.

Da es sich bei diesen periodischen Bahnen wegen des verschwindenden Potentials im Inneren des Billards um einfache Polygone handelt, die an den Eckpunkten dem Reflexionsgesetz genügen, kann man sie rein geometrisch bestimmen. Die Grundidee dieses Algorithmus ist sehr einfach: Jede Bahn in dem Billard ist durch einen Startpunkt und eine Anfangsrichtung eindeutig festgelegt. Nun variiert man diese Startbedingungen so lange, bis man (bei fester Eckenzahl n) eine nahezu periodische Bahn gefunden hat. Die Position ihrer Eckpunkte dient dann als Ausgangswert für die numerische Lösung eines Gleichungssystems, das durch die Forderung gegeben ist, daß an jedem Eckpunkt das Reflexionsgesetz erfüllt sein muß.

Die Randkurve sei in Polarkoordinaten durch die Funktion $r_s(\varphi)$ gegeben. Der Startpunkt $(r_s(\varphi_1), \varphi_1)$ und der Startwinkel α_1 einer Bahn (gemessen gegen die Tangente an die Kurve im Startpunkt in positiver φ -Richtung, siehe Abb. B.1) legen eine Gerade fest, deren Gleichung in Polarkoordinaten lautet:

$$r_g(\varphi) = r_s(\varphi_1) \frac{\sin(\beta_1 - \varphi_1)}{\sin(\beta_1 - \varphi)} . \quad (\text{B.1})$$

Dabei ist β_1 der Winkel der Geraden gegen die positive x -Achse und gegeben durch

$$\beta_1 = \pi + \varphi_1 + \alpha_1 - \delta_1 . \quad (\text{B.2})$$

δ_1 ist seinerseits der Winkel zwischen dem Radialstrahl zum Startpunkt und der dortigen Tangente. Er hängt von der Steigung der Randkurve in diesem Punkt ab:

$$\delta_1 = \begin{cases} -\arctan \frac{r'_s(\varphi_1)}{r_s(\varphi_1)} & (r'_s(\varphi_1) < 0) \\ \pi - \arctan \frac{r'_s(\varphi_1)}{r_s(\varphi_1)} & (r'_s(\varphi_1) > 0) \end{cases} . \quad (\text{B.3})$$

Der nächste Eckpunkt φ_2 der Bahn ist nun der nächstgelegene Schnittpunkt der Geraden $r_g(\varphi)$ mit der Randkurve, ist also festgelegt durch die Forderung

$$r_g(\varphi_2) - r_s(\varphi_2) = 0 . \quad (\text{B.4})$$

Zur Lösung dieser Gleichung ermittelt man zunächst durch schrittweises Erhöhen des Polarwinkels φ einen Näherungswert für φ_2 , der dann als Ausgangswert einer Newton-Iteration dient. Damit hat man also den zweiten Eckpunkt φ_2 als Funktion von φ_1 und α_1 bestimmt.

Die Richtung des zweiten Bahnsegmentes ist nun aber wegen der Reflexionsbedingung auch schon festgelegt. Man findet durch Vergleich der auftretenden Winkel

$$\alpha_2(\varphi_1, \alpha_1) = \varphi_2 - \varphi_1 + \delta_1 - \delta_2 - \alpha_1 \quad . \quad (\text{B.5})$$

Durch Wiederholung dieser Schritte lassen sich somit $n+1$ Eckpunkte der Bahn bestimmen. Nun vergleicht man den $(n+1)$ -ten Eckpunkt mit dem Startpunkt. Ist die Differenz $\varphi_{n+1} - \varphi_1$ größer als ein festzulegender Maximalwert, verwirft man die Bahn und beginnt die Iteration mit leicht veränderten Startbedingungen neu.

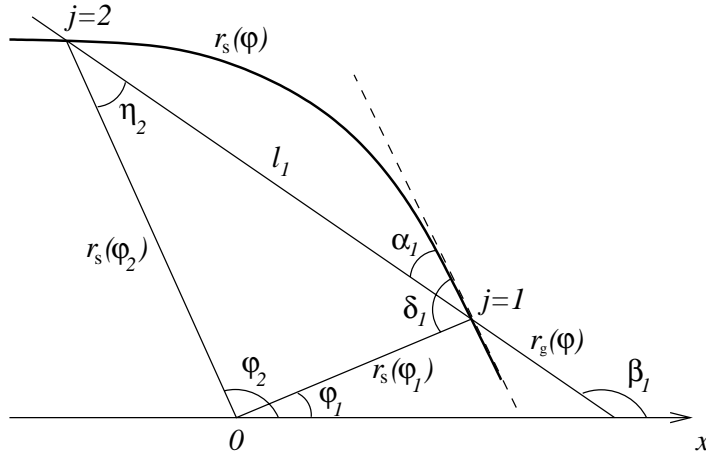


ABBILDUNG B.1: Zur Veranschaulichung der im Text erwähnten Größen: Gezeigt ist das Bahnsegment mit der Länge l_1 zwischen den Punkten $j=1$ und $j=2$, den dazugehörigen Radialstrahlen sowie ein Teil der Randkurve $r_s(\varphi)$ (fett) mit der Tangente (gestrichelt) im Punkt $j=1$.

Ansonsten bilden die n ersten Eckpunkte eine geschlossene, fast periodische Bahn. Nun muß man ihre Positionen noch so lange variieren, bis die Reflexionsbedingung überall erfüllt ist, um eine echt periodische Bahn zu erhalten. Zu diesem Zweck drückt man zunächst ganz allgemein den Einfallswinkel α_j und den Ausfallswinkel α'_j als Funktion der Position der benachbarten Eckpunkte aus. Man findet geometrisch:

$$\alpha_j(\varphi_{j-1}, \varphi_j) = \pi - \delta_j - \eta_j \quad (\text{B.6})$$

$$\alpha'_j(\varphi_j, \varphi_{j+1}) = \varphi_{j+1} - \varphi_j + \eta_{j+1} + \delta_j - \pi \quad . \quad (\text{B.7})$$

Dabei ist η_j der Winkel zwischen dem Radialstrahl zum Punkt j und dem Bahnsegment mit der Länge l_{j-1} zwischen den Punkten $j-1$ und j :

$$\sin \eta_j = \frac{r_s(\varphi_{j-1})}{l_{j-1}} \sin(\varphi_j - \varphi_{j-1}) \quad , \quad (\text{B.8})$$

$$l_{j-1}^2 = r_s^2(\varphi_j) + r_s^2(\varphi_{j-1}) - 2 r_s(\varphi_j) r_s(\varphi_{j-1}) \cos(\varphi_j - \varphi_{j-1}) \quad . \quad (\text{B.9})$$

Die Forderung nach Gleichheit von Ein- und Ausfallswinkel definiert nun ein System von n Gleichungen

$$\alpha'_j - \alpha_j = 0 \quad (j = 1, \dots, n) \quad (\text{B.10})$$

mit den n Unbekannten φ_j . Dieses Gleichungssystem löst man schließlich numerisch, wobei die oben bestimmte fast periodische Bahn als Ausgangswert dient.

Durchläuft man nun in einer Doppelschleife alle Werte für die Startbedingungen φ_1 und α_1 auf einem hinreichend feinen Gitter, kann man auf die beschriebene Weise alle periodischen Bahnen mit gegebener Eckenzahl bestimmen. Zuletzt müssen noch eventuell mehrfach gefundene, identische Bahnen aussortiert werden.

Anhang C

ZUR PARAMETRISIERUNG DER KAVITÄT

In diesem Anhang stellen wir einige Formeln zusammen, die im Zusammenhang mit den Parametrisierungen der axialen Kavität stehen und die in den vorangegangenen Kapiteln ohne Herleitung verwendet wurden.

C.1 Volumenerhaltung

Wie schon in Kapitel 4 erwähnt, wählen wir die Parametrisierungen so, daß das Volumen V der Kavität bei einer Deformation erhalten bleibt, also gleich dem einer Kugel vom Radius R ist.

Bei der Multipol-Parametrisierung

$$r_s(\vartheta) = R \left(1 + \varepsilon_0 + \sum_{j=2}^4 \varepsilon_j P_j(\cos \vartheta) \right) \quad . \quad (C.1)$$

führt diese Bedingung letztlich auf eine Bestimmungsgleichung für ε_0 :

$$V = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{r_s(\vartheta)} dr r^2 = \frac{2\pi}{3} \int_{-1}^1 dx \tilde{r}_s^3(x) \stackrel{!}{=} \frac{4\pi}{3} R^3 \quad , \quad (C.2)$$

wobei wir die Substitution $x \equiv \cos \vartheta$ und entsprechend $\tilde{r}_s(x) \equiv r_s(\vartheta)$ vorgenommen haben. Multipliziert man den rechten Integranden aus, erhält man im wesentlichen Integrale über Produkte aus zwei bzw. drei Legendre-Polynomen. Erstere sind wegen der Orthogonalität dieser Funktionen trivial:

$$\int_{-1}^1 dx P_i(x) P_j(x) = \frac{2}{2i+1} \delta_{ij} \quad . \quad (C.3)$$

Letztere können durch spezielle 3- j -Symbole ausgedrückt werden, die folgendes Ergebnis liefern [70]:

$$\int_{-1}^1 dx P_{j_1}(x) P_{j_2}(x) P_{j_3}(x) = 2 \frac{(n-2j_1)!(n-2j_2)!(n-2j_3)!}{(n+1)!} \frac{\left(\frac{n}{2}\right)!^2}{\left(\frac{n}{2}-j_1\right)!^2 \left(\frac{n}{2}-j_2\right)!^2 \left(\frac{n}{2}-j_3\right)!^2} \quad , \quad (C.4)$$

wobei $n = j_1 + j_2 + j_3$ gerade sein muß (ansonsten verschwindet das Integral). Setzt man diese Ergebnisse in obige Gleichung ein, so erkennt man, daß ε_0 als reelle Nullstelle des kubischen Polynoms $(\varepsilon_0 + 1)^3 + 3v(\varepsilon_0 + 1) + 2w$ mit den Koeffizienten

$$v = \frac{1}{5} \varepsilon_2^2 + \frac{1}{7} \varepsilon_3^2 + \frac{1}{9} \varepsilon_4^2, \quad w = \frac{1}{35} \varepsilon_2^3 + \frac{9}{1001} \varepsilon_4^3 + \frac{2}{35} \varepsilon_2 \varepsilon_3^2 + \frac{3}{35} \varepsilon_2^2 \varepsilon_4 + \frac{3}{77} \varepsilon_3^2 \varepsilon_4 + \frac{10}{231} \varepsilon_2 \varepsilon_4^2 - \frac{1}{2} \quad (C.5)$$

gegeben ist. Diese kann wiederum mit der Formel von Cardano [71] bestimmt werden:

$$\varepsilon_0 = u_1 + u_2 - 1, \quad u_{1/2} = \sqrt[3]{-w \pm \sqrt{v^3 + w^2}}. \quad (\text{C.6})$$

Es zeigt sich, daß ε_0 erst in zweiter Ordnung in den Deformationsparametern ε_2 , ε_3 und ε_4 von Null verschieden ist.

Während also das Volumen V für alle Deformationen konstant gehalten wird, müssen die Oberfläche A und die mittlere Krümmung C , die in der Weylschen Formel (A.15) auftauchen, jeweils neu (i.a. numerisch) berechnet werden. Dabei lautet das Flächenelement dA in Zylinder- bzw. Kugelkoordinaten

$$dA = 2\pi \rho_s(z) \sqrt{1 + \rho_s'^2(z)} dz = 2\pi r_s(\vartheta) \sin \vartheta \sqrt{r_s^2(\vartheta) + r_s'^2(\vartheta)} d\vartheta. \quad (\text{C.7})$$

C.2 Krümmungsradien

Wichtige geometrische Kenngrößen der Kavität, die in die Spurformel miteingehen, sind die beiden Hauptkrümmungsradien.

Wegen der axialen Symmetrie enthält eine der beiden Hauptkrümmungsebenen immer die z -Achse. Den zugehörigen Krümmungsradius bezeichnen wir mit R_1 . Er ist identisch mit dem einer Kurve, die durch Projektion der Berandung der Kavität auf die z - ρ -Ebene entsteht (siehe Abb. C.1).

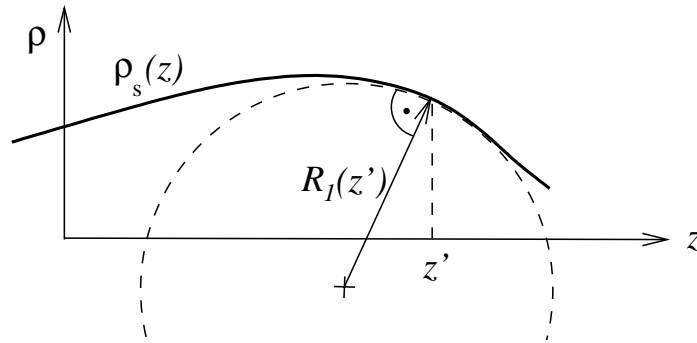


ABBILDUNG C.1: Zur Veranschaulichung des Krümmungsradius R_1 : Der Krümmungskreis liegt in der z - ρ -Ebene. Im Punkt z' ist er tangential zur Kurve $\rho_s(z)$, steht aber senkrecht auf der Oberfläche der Kavität, die durch Rotation dieser Kurve um die z -Achse entsteht.

In Zylinder- und Kugelkoordinaten ist er gegeben durch [72]

$$R_1(z) = \frac{(1 + \rho_s'^2(z))^{3/2}}{\rho_s''(z)}, \quad R_1(\vartheta) = \frac{(r_s^2(\vartheta) + r_s'^2(\vartheta))^{3/2}}{r_s^2(\vartheta) + 2 r_s'(\vartheta) r_s''(\vartheta) - r_s(\vartheta) r_s'''(\vartheta)}. \quad (\text{C.8})$$

Die zweite Hauptkrümmungsebene steht senkrecht auf der ersten als auch (im jeweils interessierenden Punkt) auf der Oberfläche der Kavität. Der entsprechende Krümmungsradius R_2 in diesem Punkt ist einfach dessen Abstand vom Schnittpunkt der Krümmungsebene mit der z -Achse (siehe Abb. C.2).

Man findet dafür [72]

$$R_2(z) = \rho_s(z) \sqrt{1 + \rho_s'^2(z)} \quad , \quad R_2(\vartheta) = \frac{r_s(\vartheta) \sin \vartheta \sqrt{r_s'^2(\vartheta) + r_s''^2(\vartheta)}}{r_s(\vartheta) \sin \vartheta - r_s'(\vartheta) \cos \vartheta} \quad . \quad (C.9)$$

An den beiden Polen der Kavität ($z = z_{\min/\max}$ bzw. $\vartheta = 0, \pi$) ist dieser Abstand nicht mehr eindeutig definiert. Nach Anwendung der Regel von L'Hospital für diesen Grenzwert zeigt sich, daß dort¹ die beiden Krümmungsradien jeweils gleich sind,

$$\lim_{z \rightarrow z_{\min/\max}} R_2(z) = R_1(z_{\min/\max}) \quad , \quad \lim_{\vartheta \rightarrow 0} R_2(\vartheta) = R_1(0) \quad , \quad \lim_{\vartheta \rightarrow \pi} R_2(\vartheta) = R_1(\pi) \quad , \quad (C.10)$$

was anschaulich auch klar ist.

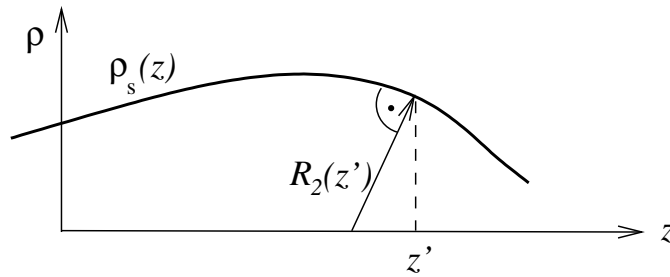


ABBILDUNG C.2: Zur Veranschaulichung des Krümmungsradius R_2 : Der Krümmungskreis liegt hier senkrecht zur Bildebene mit dem Mittelpunkt auf der z -Achse. Er steht senkrecht zur Kurve $\rho_s(z)$ als auch wiederum zur Oberfläche der Kavität.

Die Bewegungsebene der Äquatorbahnen ist durch die Bedingung $\rho_s'(z) = 0$ festgelegt, so daß sich die Formeln für die Krümmungsradien in Zylinderkoordinaten in diesem Fall noch vereinfachen:

$$R_{1,\text{eq}}(z) = \frac{1}{\rho_s''(z)} \quad , \quad R_{2,\text{eq}}(z) = \rho_s(z) \quad . \quad (C.11)$$

C.3 Umrechnung von Kugel- in Zylinderkoordinaten

Das von uns zur Berechnung der quantenmechanischen Energieeigenwerte verwendete Programm macht explizit Gebrauch von der axialen Symmetrie des Problems, indem es intern mit Zylinderkoordinaten arbeitet (siehe Anhang A.1). Daher ist bei Anwendung der Multipolparametrisierung (C.1) zuerst eine Umrechnung in dieses Koordinatensystem nötig.

Dazu drückt man zunächst den Radius r_s als Funktion der z -Koordinate aus, indem man in der Parametrisierung (C.1) die Identität $\cos \vartheta = \frac{z}{r_s}$ einsetzt. Multipliziert man noch mit r_s^4 , so ist $r_s(z)$ als reelle Nullstelle eines Polynoms fünften Grades gegeben, die man leicht numerisch bestimmen kann:

$$r_s^5 - R_0 \sum_{j=0}^4 a_j z^j r_s^{4-j} = 0 \quad . \quad (C.12)$$

¹Dabei geht mit ein, daß natürliche Formen an den Polen keine Spitzen aufweisen, daß also gilt: $\rho_s'(z_{\min/\max}) = \infty$ bzw. $r_s'(0) = r_s'(\pi) = 0$.

Dabei lauten die Koeffizienten

$$a_0 = 1 + \varepsilon_0 - \frac{1}{2} \varepsilon_2 + \frac{3}{8} \varepsilon_4, \quad a_1 = -\frac{3}{2} \varepsilon_3, \quad a_2 = \frac{3}{2} \varepsilon_2 - \frac{15}{4} \varepsilon_4, \quad a_3 = \frac{5}{2} \varepsilon_3, \quad a_4 = \frac{35}{8} \varepsilon_4 \quad . \quad (\text{C.13})$$

Schließlich erhält man $\rho_s(z)$ mittels der Identität $\rho_s(z) = \sqrt{r_s^2(z) - z^2}$.

Zur Bestimmung der Äquatorbahnen ist es nötig, diejenigen Punkte auf der z -Achse zu finden, an denen die Kavität eine zur Symmetrieachse parallele Tangente hat, an denen also $\rho'_s(z) = 0$ gilt. Für die Multipolparametrisierung muß man dazu erst die Umrechnungsformeln $\rho_s = r_s(\vartheta) \sin \vartheta$ und $z = r_s(\vartheta) \cos \vartheta$ einsetzen und anschließend die Kettenregel anwenden. Mit den Substitutionen aus Abschnitt C.1 erhält man letztlich folgende Gleichung

$$(1 - x^2) \tilde{r}_s^l(x) - x \tilde{r}_s(x) = 0 \quad , \quad (\text{C.14})$$

die wiederum leicht numerisch nach $x = \cos \vartheta$ und damit nach ϑ aufgelöst werden kann.

Anhang D

UNIFORME INTEGRALNÄHERUNG

In diesem Anhang leiten wir eine uniforme Näherung für ein Integral der Form

$$I = \int_0^b dx g(x) e^{if(x)} \quad (\text{D.1})$$

her. Der linke Randpunkt $x=0$ sei der einzige stationäre Punkt der Phasenfunktion $f(x)$, d.h. es gilt $f'(0) = 0$. Weiterhin sei $b > 0$.

Der asymptotische Grenzwert eines solchen Integrals im Limes $f''(0) \rightarrow \infty$ ist wohl bekannt (siehe Gl. (3.21)). Dieser Grenzwert divergiert jedoch (aufgrund der bei seiner Herleitung gemachten Näherungen) im anderen Grenzfall $f''(0) \rightarrow 0$. Die uniforme Näherung hingegen liefert in beiden Fällen das exakte Ergebnis, während sie im Zwischenbereich das exakte Integral (das eben i.a. nicht bekannt ist) nur interpoliert. In diesem Sinne stellt die uniforme Näherung eine Verallgemeinerung der asymptotischen Auswertung von Integralen mit obiger Gestalt dar.

Damit der stationäre Punkt nicht mehr am Rand des Integrationsintervalls liegt, verschiebt man die untere Integrationsgrenze zunächst nach $-\infty$. Zum Ausgleich subtrahiert man das Integral von $-\infty$ bis 0 und ersetzt es gleich durch seinen asymptotischen Wert:

$$I \approx \int_{-\infty}^b dx g(x) e^{if(x)} - \frac{1}{2} g(0) \sqrt{\frac{2\pi i}{f''(0)}} e^{if(0)} \quad (\text{D.2})$$

Im nächsten Schritt macht man nun eine Variablentransformation $x \mapsto \tilde{x}$, so daß die Phasenfunktion $f(x)$ in der neuen Variablen eine möglichst einfache Form annimmt, ohne aber ihre für das Integral wesentlichen Eigenschaften zu ändern. In diesem Fall ist dies eine quadratische Funktion:

$$f(x) =: f(0) + \frac{1}{2} f''(0) \cdot \tilde{x}^2 \quad (\text{D.3})$$

Der Punkt $x=0$ entspricht $\tilde{x}=0$, b wird abgebildet auf $\tilde{b} = \sqrt{2(f(b) - f(0))/f''(0)}$. Durch ein- bzw. zweimaliges Ableiten der obigen Definition nach \tilde{x} findet man für die Ableitung der alten nach der neuen Variablen an den Stellen $\tilde{x} = \tilde{b}$ bzw. $\tilde{x} = 0$

$$\left. \frac{dx}{d\tilde{x}} \right|_{\tilde{b}} = \frac{f''(0) \cdot \tilde{b}}{f'(b)}, \quad \left. \frac{dx}{d\tilde{x}} \right|_0 = 1 \quad (\text{D.4})$$

Das Integral I sieht in der neuen Variablen wie folgt aus:

$$I \approx -\frac{1}{2} g(0) \sqrt{\frac{2\pi i}{f''(0)}} e^{if(0)} + \tilde{I}, \quad \tilde{I} := \int_{-\infty}^{\tilde{b}} d\tilde{x} \tilde{g}(\tilde{x}) e^{if''(0) \cdot \tilde{x}^2/2 + if(0)}, \quad \tilde{g}(\tilde{x}) := g(x(\tilde{x})) \cdot \frac{dx}{d\tilde{x}} \quad (\text{D.5})$$

Die nicht explizit bekannte Amplitudenfunktion $\tilde{g}(\tilde{x})$ nähert man durch eine lineare Funktion an: $\tilde{g}(\tilde{x}) \approx \tilde{g}_0 + \tilde{g}_1 \tilde{x}$. Für die Koeffizienten findet man

$$g_0 = \tilde{g}(0) = g(0), \quad g_1 = \frac{f''(0)}{f'(b)} g(b) - \frac{g(0)}{\tilde{b}} \quad . \quad (\text{D.6})$$

Diese Entwicklung setzt man in den letzten Ausdruck für I ein. Im Ausdruck für \tilde{I} verschiebt man nach dem gleichen Prinzip wie schon oben gezeigt die obere Integrationsgrenze nach ∞ . Dann kann man (bis auf eines) alle Integrale durch partielle Integration lösen und erhält die uniforme Näherung

$$I \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi i}{f''(0)}} g(0) e^{if(0)} + \frac{g(b)}{if'(b)} e^{if(b)} + \frac{ig(0)}{f''(0)} e^{if(0)} \int_{\tilde{b}}^{\infty} d\tilde{x} \frac{1}{\tilde{x}^2} e^{if''(0) \cdot \tilde{x}^2/2} \quad . \quad (\text{D.7})$$

Macht man in dem verbliebenen Integral noch die Substitution $x := \sqrt{|f''(0)|} \tilde{x}$, kommt man schließlich zu der in Gl. (3.33) angegebenen Form der uniformen Näherung.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] Wentzel, G., Z. f. Physik **38** (1926), 518
- [2] Kramer, H. A., Z. f. Physik **39** (1926), 828
- [3] Brillouin, M. L., Compt. Rend. **183** (1926), 24
- [4] Einstein, A., Verh. Dt. Phys. Ges. **19** (1917), 82
- [5] Brillouin, M. L., J. phys. radium **6** (1926), 353
- [6] Keller, J. B., Ann. Phys. (N.Y.) **4** (1958), 180
- [7] Gutzwiller, M. J., J. Math. Phys. **8** (1967), 1979; J. Math. Phys. **10** (1969), 1004; J. Math. Phys. **11** (1970), 1791; J. Math. Phys. **12** (1971), 343; *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, New York, 1991)
- [8] Berry, M. V., Tabor, M., Proc. Roy. Soc. Lond. A **349** (1976), 101; J. Phys. A **10** (1977), 371
- [9] Persson, M., Pettersson, J., von Sydow, B., Lindelof, P. E., Kristensen, A., Berggreen, A., Phys. Rev. B **52** (1995), 8921
- [10] Knight, W. D., Clemenger, K., de Heer, W. A., Saunders, W. A., Chou, M. Y., Cohen, M. L., Phys. Rev. Lett. **52** (1984), 2141
- [11] Pedersen, J., Bjørnholm, S., Borggreen, J., Hansen, K., Martin, T. P., Rasmussen, H. D., Nature **353** (1991), 733
- [12] Jennings, B. K., Ann. Phys. (N. Y.) **84** (1974), 1
- [13] Balian, R., Bloch, C., Ann. Phys. **60** (1970), 401
- [14] Strutinsky, V. M., Sov. J. Nucl. Phys. **3** (1966), 449; Nucl. Phys. A **95** (1967), 420; Nucl. Phys. A **122** (1968), 1
- [15] Brack, M., Damgaard, J., Jensen, A. S., Pauli, H. C., Strutinsky, V. M., Wong, C. Y., Rev. Mod. Phys. **44** (1972), 320
- [16] van Vleck, J. H., Proc. Natl. Acad. Sci. USA **14** (1928), 178
- [17] Feynman, R. P., Rev. Mod. Phys. **20** (1948), 267; Feynman, R. P., Hibbs, A. R., *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw–Hill, New York, 1964)
- [18] Morse, M., *The Calculus of Variations in the Large*, Am. Math. Soc. Colloquium Publ. **18** (New York, 1934)
- [19] Berry, M. V., Mount, K. E., Rep. Prog. Phys. **35** (1972), 315

- [20] Creagh, S. C., Robbins, J. M., Littlejohn, R. G., Phys. Rev. A **42** (1990), 1907
- [21] Gutzwiller, M. J., Physica **D 5** (1982), 183
- [22] Wintgen, D., Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 1589; **61** (1988), 1803; Friedrich, H., Wintgen, D., Phys. Rep. **183** (1989), 39
- [23] Lu, Delos, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 1731
- [24] Aurich, Sieber, M., Steiner, F., Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 483; Sieber, M., Steiner, F., Physica D **44** (1990), 248
- [25] Cvitanovic, Eckhardt, Phys. Rev. Lett. **68** (1989), 823
- [26] Szerdi, T., Goodings, T. A., Phys. Rev. E **48** (1990), 3513 und 3529
- [27] Brack, M., Bhaduri, R. K., Law, J., Maier, Ch., Murthy, M. V. N., Chaos **5** (1995), 317
- [28] Rost, J. M., Tanner, G., in: *Classical, Semiclassical and Quantum Dynamics in Atoms*, hrsg. v. Friedrich, H., Eckardt, B. (Springer, Berlin/New York, 1997)
- [29] Strutinsky, V. M., Nukleonika (Poland) **20** (1975), 679; Strutinsky, V. M., Magner, A. G., Sov. J. Part. Nucl. **7** (1976), 138
- [30] Creagh, S. C., Littlejohn, R. G., Phys. Rev. A **44** (1991), 836; J. Phys. A **25** (1992), 1643
- [31] Balian, R., Bloch, C., Ann. Phys. **69** (1972), 76
- [32] Sieber, M., ULM-TP/97-10, Oktober 1997
- [33] Wirzba, A., *Non-paper about 3-d Jacobians*, unveröffentlicht, Darmstadt, 1995
- [34] Miller, W. H., Adv. Chem. Phys. **25** (1974), 69
- [35] Meyer, K. R., Trans. Am. Math. Soc. **149** (1970), 95
- [36] Ozorio de Almeida, A. M., *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization* (Cambridge University Press, Cambridge, 1988); Ozorio de Almeida, A. M., Hannay, J. H., J. Phys. A **20** (1987), 5873
- [37] Sieber, M., J. Phys. A **29** (1996), 4715; Schomerus, H., Sieber, M., J. Phys. A **30** (1997), 4537; Schomerus, H., Sieber, M., J. Phys. A **31** (1998), 165
- [38] Sadovskii, D. A., Shaw, J. A., Delos, J. B., Phys. Rev. Lett. **75** (1995), 2120; Sadovskii, D. A., Delos, J. B., Phys. Rev. E **54** (1996), 2033
- [39] Schomerus, H., Europhys. Lett. **38** (1997), 423; Schomerus, H., Haake, F., Phys. Rev. Lett. **79** (1997), 1022; Schomerus, H., J. Phys. A **31** (1998), 4167
- [40] de Aguiar, M. A. M., Malta, C. P., Baranger, M., Davies, K. T. R., Ann. Phys. **180** (1987), 167; de Aguiar, M. A. M., Malta, Physica D **30** (1988), 413; Ozorio de Almeida, A. M., de Aguiar, M. A. M., Physica D **41**(1990), 391; Prado, S. D., de Aguiar, M. A. M., Ann. Phys. **231** (1994), 290

- [41] Ozorio de Almeida, A. M., in: *Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics*, Lecture Notes in Physics **263**, 197 (Springer Verlag, New York/Berlin, 1986)
- [42] Creagh, S. C., Ann. Phys. (N. Y.) **248** (1996), 60
- [43] Pavloff, N., J. Phys. A **28** (1995), 4123
- [44] Meier, P., Diplomarbeit, Universität Regensburg, unveröffentlicht, 1995
- [45] Meier, P., Brack, M., Creagh, S. C., Z. Phys. D **41** (1997), 281
- [46] Gel'fand, I. M., Minlos, R. A., Shapiro, Z. Ya., *Representations of the rotation and Lorentz groups and their applications* (Pergamon Press, Oxford, 1963)
- [47] Brack, M., Creagh, S. C., Law, J., Phys. Rev. A **57** (1997), 788
- [48] Tomsovic, S., Grinberg, M., Ullmo, D., Phys. Rev. Lett. **75** (1996), 4346; Ullmo, D., Grinberg, M., Tomsovic, S., Phys. Rev. E **54** (1996), 136
- [49] Sieber, M., J. Phys. A **30** (1997), 4563
- [50] Wong, R., *Asymptotic Approximations of Integrals* (Academic Press, Inc., 1989)
- [51] Sieber, M., persönliche Mitteilung
- [52] Brack, M., Meier, P., Tanaka, K., J. Phys. A **32** (1999), 331
- [53] Nishioka, H., Hansen, K., Mottelson, B. R., Phys. Rev. B **42** (1990), 9377
- [54] Brack, M., Rev. Mod. Phys. **65** (1993), 677
- [55] Brack, M., in: *Large Clusters of Atoms and Molecules*, S. 1, hrsg. v. Martin, T. P., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996)
- [56] Lauritsch, G., Reinhard, P. G., Meyer, J., Brack, M., Phys. Lett. A **160** (1991), 179
- [57] Yannouleas, C., Landmann, U., Phys. Rev. B **51** (1995), 1902
- [58] Frauendorf, S., Reimann, S., Brack, M., Z. Phys. D **43** (1995), 125
- [59] Frauendorf, S., Pashkevich, V. V., Ann. Phys. **5** (1996), 34
- [60] Möller, P., Nix, J. R., Myers, W. D., Swiatecki, W. J., Atom. Dat. Nucl. Data Tab. **59** (1995), 185
- [61] Bohr, A., Mottelson, B. R., *Nuclear Structure*, Bd. 2 (Benjamin, New York, 1975)
- [62] Strutinsky, V. M., Magner, A. M., Ofengenden, S. R., Doessing, T., Z. Phys. A **283** (1977), 269
- [63] Frisk, H., Nucl. Phys. A **511** (1990), 309
- [64] Arita, K., Matsuyanagi, K., Prog. Theor. Phys. **89** (1993), 389; **90** (1993), 747; **91** (1994), 723; Phys. Lett. B **336** (1994), 279; Nucl. Phys. A **59** (1995), 9; Sugita, A., Arita, K., Matsuyanagi, K., Prog. Theor. Phys. **100** (1999), 597

- [65] Heiss, W. D., Nazmitdinov, R. G., Radu, S., Phys. Rev. B **51** (1995), 1874
- [66] Heiss, W. D., Nazmitdinov, R. G., Radu, S., Phys. Rev. C **52** (1995), 3032
- [67] Pashkevich, V. V., Meier, P., Brack, M., Unzhakova, A. V., Phys. Lett. A **294** (2002), 314
- [68] Brack, M., Bhaduri, R. K., *Semiclassical Physics* (Addison-Wesley, Reading, 1997)
- [69] Koizumi, H., Sugano, S., Ishii, Y., Z. Phys. D **28** (1993), 223
- [70] Rotenberg, M., Bivins, R., Metropolis, N., Wooten jr., J. K., *The 3-j and 6-j Symbols* (The Technology Press, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, 1959)
- [71] Bronstein, I. N., Semendjajew, K. A., Musiol, G., Mühlig, H., *Taschenbuch der Mathematik* (Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 1995)
- [72] Gray, A., *Differentialgeometrie* (Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, Oxford, 1994)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich kurz, aber nicht minder herzlich all jenen danken, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben, v.a. den Mitgliedern der Arbeitsgruppe Brack sowie allen befreundeten Wissenschaftlern, von denen ich während dieser Zeit lernen durfte.

Ganz besonders danke ich dabei Matthias selbst, v.a. für seine schier unendliche Geduld und die stete Ermunterung, diese Arbeit abzuschließen.

*O wie schwer ist das Schreiben:
Es trübt die Augen, quetscht
die Nieren und bringt zugleich
allen Gliedern Qual. Drei Fin-
ger schreiben, der ganze Körper
leidet ...*

Seufzer eines
Skriptoriumsmönchs aus dem
achten Jahrhundert