

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	3
1 Das klassische Sinai–Billard	7
1.1 Einführung	7
1.2 Periodische Orbits	12
1.3 Die Poincaré–Abbildung	13
2 Semiklassische Quantisierung	19
2.1 Klassisch integrable Hamilton–Systeme	19
2.2 Nichtintegrale Hamilton–Systeme	22
2.2.1 Zeitentwicklungsoperator und Resolvente	22
2.2.2 Wirkungsintegral und Wirkungsfunktion	23
2.2.3 Die klassischen Green–Funktionen	29
3 Das quantenmechanische Sinai–Billard	35
3.1 Die KKR–Methode	35
3.1.1 Die Kohn–Rostoker–Determinante	35
3.1.2 Symmetrien	39
3.2 Das Energiespektrum des Sinai–Billards	41
3.2.1 Die Bandstruktur	41
3.2.2 Die Energieabstandsverteilung von integralen Systemen und Zufallsmatrizen	44
3.2.3 Die Energieabstandsverteilungen des Sinai–Billards	47
3.2.4 Periodische Orbits und das Energiespektrum des Sinai–Billards	66
Schluß	80

A Die Kohn–Rostoker–Methode in zwei Dimensionen	84
A.1 Die Green–Funktion und die Kohn–Rostoker–Determinante . . .	84
A.2 Die Strukturkonstanten	86
A.3 Die Ewald–Methode	88
A.4 Symmetrien	97
A.4.1 Symmetrieeigenschaften der Strukturkonstanten	97
A.4.2 Symmetrisierte Wellenfunktionen	100
A.4.3 Symmetrisierung der Kohn–Rostoker–Matrix	104
A.5 Integraldarstellung der Hankel–Funktion	110
A.6 Die Streuphase eines Potentials endlicher Reichweite	111
 Literaturverzeichnis	 113

Einleitung

Klassisches Chaos in dynamischen Systemen wird seit ca. 15 Jahren mit großem Interesse untersucht [1, 2]. Wir wollen hier die große Klasse von zeitunabhängigen *Hamilton-Systemen* betrachten. Diese werden durch ihre jeweilige Hamilton-Funktion beschrieben, welche ein Integral der Bewegung darstellt. Die zeitliche Entwicklung eines solchen Systems kann rein reguläres Verhalten aufweisen, z.B. Periodizität oder Quasiperiodizität, aber auch irreguläres Verhalten bis hin zu extremer Chaotizität. Regularität liegt in jedem Fall dann vor, wenn die Bewegung durch $n - 1$ weitere Integrale der Bewegung auf eine n -dimensionale Hyperfläche des $2n$ -dimensionalen Phasenraumes eingeschränkt wird (im Falle der Kompaktheit ein n -Torus). Dabei ist n gleich der Anzahl Freiheitsgrade. Ein solches System heißt *integrabel*. Bei einem Freiheitsgrad ist das immer der Fall, da nur ein Integral – nämlich die Hamilton-Funktion – benötigt wird. Ist die Anzahl der Freiheitsgrade größer als Eins, so ist das System gewöhnlich nicht integrabel. Beispiele sind für $n = 2$ das Hénon-Heiles System [3] oder für $n = 3$ das anisotrope Kepler-Problem [4]. Ein Beispiel für ein integrables System stellt der harmonische Oszillator mit beliebig vielen Freiheitsgraden dar. Ein nichtintegrables System kann chaotisches Verhalten zeigen, z.B. empfindliche Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen, d.h. exponentielles Auseinanderlaufen von anfangs benachbarter Trajektorien und praktische Unvorhersagbarkeit.

Quantenchaos wurde bald nach dem Aufkommen der klassischen Chaostheorie mit bis heute stark wachsendem Interesse untersucht [5, 6]. Trotzdem ist die quantenmechanische Chaostheorie nicht so weit fortgeschritten wie die klassische Chaostheorie. Hier wird von folgender Überlegung ausgegangen: Die klassische Mechanik stellt den Grenzfall einer ganz anderen dynamischen Theorie dar, nämlich den Grenzfall der Quantenmechanik, wenn die betrachteten Wirkungen des Systems gegen das Plank'sche Wirkungsquantum \hbar sehr groß werden. Die Frage, welche sich hier stellt, ist das zentrale Thema des Quantenchaos. Sie lautet folgendermaßen: Auf welche Art und Weise machen sich die klassisch chaotischen Eigenschaften eines Systems in seiner quantenmechanischen Beschreibung bemerkbar? Und außerdem, gibt es universelle Eigenschaften quantenmechanischer Systeme, durch welche klassisch chaotische Systeme von klassisch regulären Systemen unterschieden werden können?

Zwei wichtige Untersuchungsobjekte des Quantenchaos sind zum einen die Eigenfunktionen und zum anderen die Energieeigenwerte des Hamilton-Operators. Bei den Eigenfunktionen eines chaotischen Billardsystems werden irregulär verlaufende Knotenlinien beobachtet [7]. Auffällig sind Bildungen von "Narben" (scars) in der Umgebung typischer periodischer Orbits des Systems [8, 9]. Jüngste Untersuchungen zeigen, daß in einigen Fällen "chaotische Wellenfunktionen" rein semiklassisch konstruiert werden können [10, 11]. Eine wichtige Rolle spielen hier die klassischen Orbits des Systems. Diese Er-

gebnisse weisen darauf hin, daß die Eigenschaften von Eigenfunktionen eines Hamilton-Systems durch die klassischen Trajektorien bestimmt werden. Doch erhält man daraus noch keine universellen Merkmale der Eigenfunktionen, die klassisch chaotische von klassisch regulären Hamilton-Systemen unterscheiden.

Anders verhält es sich bei dem zweiten wichtigen Untersuchungsobjekt des Quantenchaos, dem Energiespektrum eines Hamilton-Operators. Hier konnte in [12] gezeigt werden, daß integrable Systeme generisch ein Energiespektrum besitzen, dessen Energiewerte zueinander völlig unkorreliert sind. Weiterhin wurde vermutet, daß klassisch chaotische Systeme Energiespektren besitzen, deren statistischen Eigenschaften denen von Zufallsmatrizen entsprechen. Die Energiewerte sind hier stark korreliert. Dieses wird numerisch bestätigt, z.B. in den Arbeiten [7, 13, 14], und findet eine Erklärung mit Hilfe semiklassischer Methoden in [15]. Eine experimentelle Bestätigung der bisherigen numerischen Ergebnisse findet sich in [16], wo an Stelle eines numerisch bestimmten Energiespektrums die Eigenfrequenzen von Mikrowellenresonatoren von der typischen Form klassisch chaotischer Billards untersucht wurden. Ebenfalls in dieses Bild passen die Ergebnisse von [17]. Hier wurde ein Übergang von einem völlig unkorrelierten Spektrum zu einem stark korrelierten Spektrum beobachtet, wenn das System durch Verändern eines Parameters klassisch gesehen von regulärem Verhalten zu chaotischem Verhalten wechselt.

Wichtig sind Methoden zur Berechnung des Energiespektrums, in welche die klassischen Eigenschaften eines Systems direkt eingehen. Das sind die Gutzwiller-Spurformel und ähnliche Darstellungen, die in den Arbeiten [18, 19, 20] bzw. [21] entwickelt worden sind. Diese stellen die Spektraldichte als Summe über die periodischen Orbits des klassischen Systems dar, wobei die Beiträge der einzelnen Orbits durch ihre Topologie und Stabilität bzw. Instabilität definiert sind. Die Spurformeln sind aber nur semiklassisch exakt und besitzen den Mangel, daß sie nicht absolut konvergieren. Daher sind sie zur Berechnung von Energiespektren nur in Ausnahmefällen geeignet, z.B. im Fall des anisotropen Kepler-Problems [22, 23]. Ein exaktes Analogon zur Gutzwiller-Spurformel existiert im Fall der freien Bewegung eines Teilchens auf einer Fläche mit konstanter negativer Krümmung. Sie kann aus der *Selberg-Spurformel* hergeleitet werden und ist absolut konvergent [25]. In [25] werden außerdem mit Hilfe dieses Ergebnisses zahlreiche Energieeigenwerte des Hadamard-Gutzwiller-Modells, ein klassisch extrem chaotisches System, bestimmt. Diese Energieeigenwerte weisen deutliche Unkorreliertheit auf, was gegen die bisherigen Annahmen spricht.

Der Aufwand zur Untersuchung eines dynamischen Systems nimmt mit der Anzahl an Freiheitsgraden zu, daher ist es von praktischem Vorteil zweidimensionale Systeme zu untersuchen. In diese Kategorie fallen Billardsysteme, in denen auch das volle Spektrum chaotischen Verhaltens gefunden werden kann [26]. Wir wollen in dieser Arbeit die statistischen Eigenschaften des Energiespektrums eines klassisch extrem chaotischen Systems untersuchen,

des zweidimensionalen Sinai–Billards [27]. Es ist aus folgenden Gründen von besonderem Interesse: Dem Hamilton–Operator des Sinai–Billards entspricht der Hamilton–Operator eines Teilchens, das sich in dem periodischen Potential eines zweidimensionalen Kristalls bewegt. Daraus ergibt sich eine Vielzahl von unabhängigen Energiespektren, die jeweils durch den Symmetrietyyp ihrer Eigenfunktionen definiert sind. Interessant ist es, zu überprüfen, welche statistischen Eigenschaften diese Spektren besitzen und ob sie sich in diesen unterscheiden. Weiterhin sind wir hier in der Lage, zur Berechnung dieser Spektren wohlbekannte und erprobte Methoden aus der theoretischen Festkörperphysik, wie sie zur Berechnung von Bandstrukturen verwendet werden, anzuwenden.

Im ersten Kapitel stellen wir das klassische Sinai–Billard vor. Außerdem gehen wir auf eine Variante ein, das sogenannte *Soft–Billard*. Dieses System erlaubt es, den chaotischen Charakter des Systems durch Variieren eines Systemparameters zu verändern. Die periodischen Orbits, welche später von besonderer Bedeutung sind, diskutieren wir genauer. Wir schließen das Kapitel mit der *Poincaré–Abbildung* ab, mit der das dynamische Verhalten des Systems graphisch vorteilhaft demonstriert werden kann.

Das zweite Kapitel verwenden wir, um verschiedene semiklassische Quantisierungsmethoden zu diskutieren. Vom Spezialfall nichtintegrierbarer Hamilton–Systeme, für den es einfache Quantisierungsregeln gibt, gehen wir über zum Fall der nichtintegrierbaren Systeme. Dieser Abschnitt dient dazu, die direkte Wirkung von klassischen Eigenschaften des Systems, das sind klassische Übergangswahrscheinlichkeiten bzw. topologische Eigenschaften der Trajektorien, auf das quantenmechanische System zu demonstrieren. Insbesondere semiklassische Näherungen der Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators und der Resolvente des Hamilton–Operators stehen hier im Mittelpunkt. Wir gelangen schließlich zur semiklassischen Darstellung der Spektraldichte, die nur durch die Eigenschaften der periodischen Orbits bestimmt wird.

Das dritte Kapitel dient dazu, zum einen verschiedene Energiespektren des Sinai–Billards und des Soft–Billards zu berechnen, zum anderen diese statistisch zu untersuchen. Als Grundlage zur Berechnung der Spektren dient die *Kohn–Rostoker–Methode* [28, 29]. Nur für den Spezialfall einer ganz bestimmten Symmetrieklasse von Eigenfunktionen des Sinai–Billards ist sie in [13] durchgeführt worden. Auf diese Arbeit wird auch in [14] zurückgegriffen, um Energieeigenwerte derselben Symmetrieklasse mit Hilfe der Kohn–Rostoker–Methode zu bestimmen. Allerdings gelangte man – zwecks statistischer Untersuchung – sowohl in [13] als auch in [14] zu einer genügend großen Anzahl von Energieeigenwerten erst durch gleichzeitige Betrachtung von mehreren voneinander unabhängigen Energiespektren. Die Aussagekraft dieser Untersuchungen ist dadurch zweifelhaft. Wir wollen entsprechende statistische Untersuchungen auf solider Grundlage durchführen. Dazu berechnen wir mit Hilfe der Kohn–Rostoker–Methode die Energiespektren verschiedener Symmetrieklassen mit einer jeweils genügend großen Anzahl von Energieeigenwer-

ten, so daß aussagekräftige statistische Untersuchungen durchgeführt werden können. Benötigt wird dafür die allgemeine Kohn–Rostoker–Methode für den zweidimensionalen Fall. Da eine vollständige Herleitung in der Literatur nicht zu finden ist, führen wir diese hier durch. Insbesondere die zweidimensionale *Ewald–Methode* ist hier von Bedeutung. Der Umfang dieses Unternehmens hat uns dazu veranlaßt, die Einzelheiten der Herleitung in den Anhang zu verlegen. Die wichtigsten Schritte erläutern wir aber in diesem Kapitel.

Im weiteren Verlauf führen wir Kriterien zur Beurteilung statistischer Eigenschaften von Energiespektren ein. Wichtige Beispiele sind dabei drei Ensembles von Zufallsmatrizen. Anschließend demonstrieren wir die Ergebnisse der statistischen Untersuchungen der Spektren verschiedener Symmetrieklassen des Sinai–Billards. Damit können wir in Zusammenhang mit den oben formulierten Vermutungen über statistische Eigenschaften “chaotischer Spektren” erstaunliche Ergebnisse präsentieren. Anschließend sind wir in der Lage, durch eine spezielle Fourier–Transformation den Einfluß der periodischen Orbits des Sinai–Billards “sichtbar” zu machen. Dadurch wird ein Mechanismus deutlich, der – abhängig vom klassischen Typ des Systems – für universelle Eigenschaften des quantenmechanischen Systems verantwortlich ist.

Kapitel 1

Das klassische Sinai–Billard

1.1 Einführung

Das klassische zweidimensionale Sinai–Billard besteht aus dem zweidimensionalen Torus, auf dem sich ein kreisförmiges Streuzentrum mit Radius R befindet. Ein Teilchen auf dem Torus bewegt sich mit der kinetischen Energie $E = 1$ und führt bis auf Reflexionen am Rande des Streuzentrums eine freie Bewegung aus. Das kreisförmige Streuzentrum hat also die Funktion einer Potentialschwelle der Höhe $U > 1$. Die Bewegung des Teilchens kann identifiziert werden mit der Bewegung eines Teilchens auf dem Einheitsquadrat, in dessen Mitte sich das kreisförmige Streuzentrum befindet. Verläßt das Teilchen das Quadrat durch eine Seite, so tritt es an der gegenüberliegenden Seite mit derselben Geschwindigkeit wieder ein.

Eine weitere Sichtweise liegt darin, die Bewegung eines Teilchens in einem zweidimensionalen periodischen Gitter mit quadratischer Einheitszelle zu betrachten, wie es in Abb. 1.1 dargestellt ist.

Die Gitterkonstante sei gleich Eins. An den Gitterpunkten $\vec{g}_{ij} = (i, j)$, $i, j \in \mathcal{Z}$, befindet sich jeweils ein kreisförmiges Streuzentrum. Dieses System wird auch “erweitertes” Sinai–Billard genannt [30]. Eine Beispieltrajektorie im erweiterten Sinai–Billard und ihre äquivalente Darstellung im quadratischen Billard sind in Abb. 1.2 zu sehen. Die defokussierende Wirkung des Streuzentrums im Sinai–Billard führt dazu, daß anfangs benachbarte Trajektorien mit der Zeit exponentiell auseinanderlaufen. D.h., die Trajektorien des Sinai–Billards besitzen exponentielle Instabilitäten [31, 32]. Diese Eigenschaft und die Kompaktheit der Energiehyperfläche führen dazu, daß fast jede Trajektorie auf der Energiehyperfläche dicht liegt. Das Sinai–Billard ist also ergodisch [33, 13]. Anders ausgedrückt, stellt dieses Billard ein Kolmogorov–System (K-System) dar, in dem jede nichttriviale Partition positive Kolmogorov–Sinai–Entropie (KS–Entropie) besitzt. Diese Eigenschaft trifft auch auf das erweiterte Sinai–Billard zu [34]. Ist der Radius des Streuzentrums klein ge-

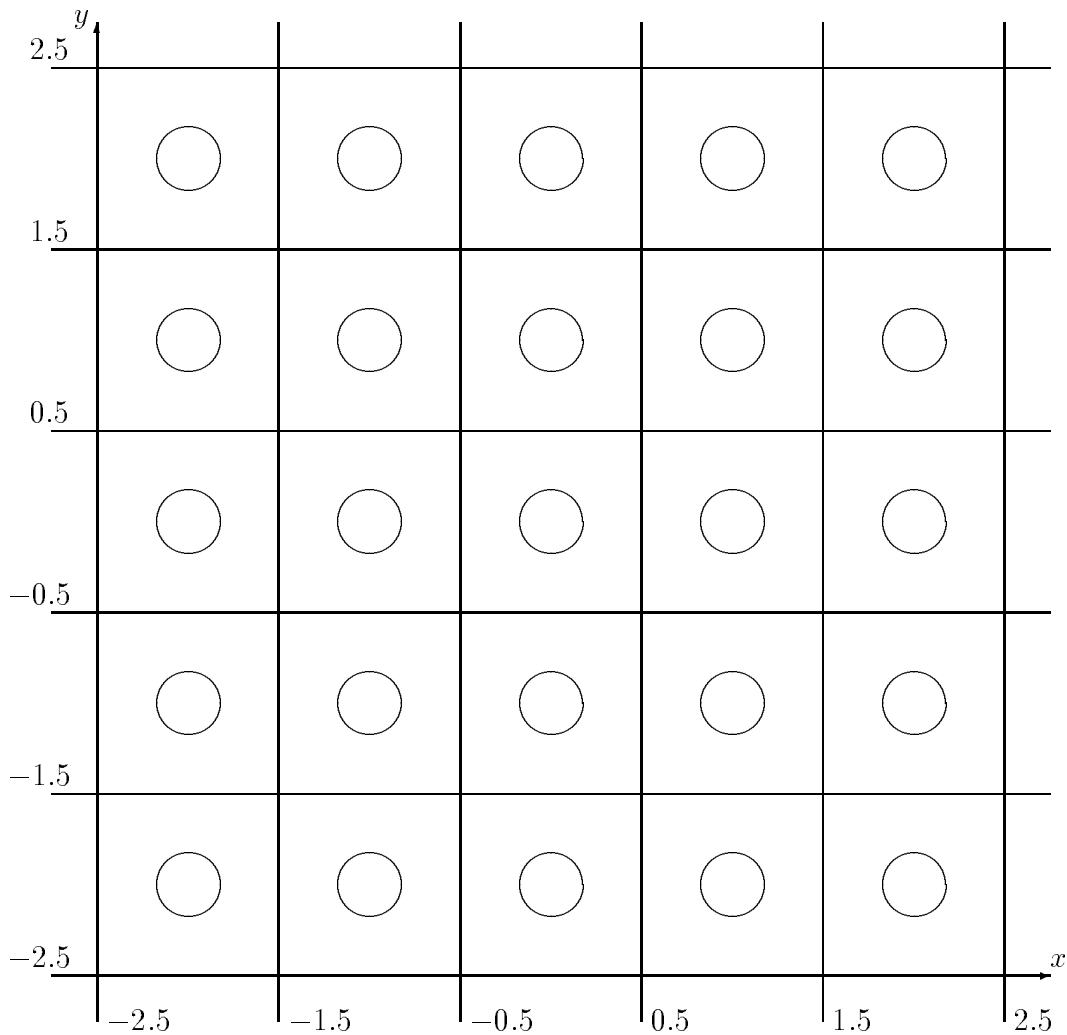


Abbildung 1.1: *Erweitertes Sinai-Billard.*

nug, so ist die KS-Entropie durch den Ausdruck

$$h \simeq -d \log R \tag{1.1}$$

gegeben [33, 34]. Dabei ist d gleich der geometrischen Dimension des Sinai-Billards (hier ist $d = 2$).

Die genannten Eigenschaften zeigen, daß das Sinai-Billard ein stark chaotisches dynamisches System ist, in dem das Verhalten von Trajektorien über einen langen Zeitraum praktisch unvorhersagbar ist. Es gibt keine Bereiche im Phasenraum, wo sich das System stabil unter Änderung von Anfangsbedingungen verhält. Außerdem treten nach Gl. (1.1) die chaotischen Eigenschaften sofort auf, wenn der Radius des Streuzentrums ungleich Null ist. Die KS-Entropie nimmt sogar mit kleiner werdendem Radius zu. Veranschaulicht wird das chaotische Verhalten durch das Beispiel einer Trajektorie, die in Abb. 1.3 dargestellt ist. Die dort abgebildete Trajektorie durchläuft

109 Kollisionen mit dem Streuzentrum. Der obere Teil der Abbildung läßt erahnen, daß die Trajektorie – wenn man sie nur lange genug verfolgt – den Ortsraum, aber auch die Energiehyperfläche, des kompakten Sinai–Billards beliebig dicht ausfüllt.

Die Situation kann sich drastisch ändern, wenn dem Streuzentrum eine Potentialhöhe U kleiner als Eins zugewiesen wird [31]. Solange U größer als Null ist, ist das System – zumindest numerisch betrachtet – ergodisch. Befindet sich U aber zwischen Null und einem kritischen Wert

$$U_c = - \left(\frac{1}{1 - 2R} \right)^2, \quad (1.2)$$

so kann die Existenz eines stabilen periodischen Orbits nachgewiesen werden. Dieser entspricht einem elliptischen Fixpunkt einer geeigneten Poincaré–Abbildung [31]. Eine Umgebung dieses periodischen Orbits ist daher invariant unter der zeitlichen Entwicklung, und das System verliert die Eigenschaft der Ergodizität. Ist U kleiner gleich U_c , dann ist das System – numerisch betrachtet – wieder ergodisch.

Wie in Abb. 1.3 zu erkennen ist, steht dem ergodischen Verhalten einer Trajektorie im kompakten Sinai–Billard ein diffusives Verhalten von Trajektorien im erweiterten Sinai–Billard gegenüber. Betrachtet man den mittleren quadratischen Abstand σ^2 eines Ensembles von Teilchen als Funktion der Zeit, so lassen sich Hinweise auf eine “anomale” Diffusion finden [30]. Das Frequenzspektrum $S(\omega)$ der Autokorrelationsfunktion $C(t) = \langle \vec{v}(0) \cdot \vec{v}(t) \rangle$ wird zuerst numerisch und dann aus einer analytischen Entwicklung von $C(t)$ berechnet. Beide Untersuchungen zeigen, daß sich $S(\omega)$ bei kleinen Frequenzen wie $|\ln(\omega)|$ verhält. $\frac{1}{2}z^2\sigma^2(z)$ ist gleich $\tilde{S}(z)$, der Laplace–Transformierten von $S(\omega)$. Daraus kann für $\sigma^2(t)$ im Limes $t \rightarrow \infty$ der Ausdruck

$$\sigma^2(t) \sim t \ln t$$

hergeleitet werden. Dieser beschreibt eine logarithmische Divergenz des Diffusionskoeffizienten.

Abbildung 1.2: *Trajektorie im Sinai–Billard (oberes Bild) und ihre äquivalente Darstellung im erweiterten Sinai–Billard (unteres Bild).*

Abbildung 1.3: *Trajektorie über einen längeren Zeitraum im Sinai-Billard (oberes Bild) und ihre äquivalente Darstellung im erweiterten Sinai-Billard (unteres Bild).*

1.2 Periodische Orbits

Periodische Orbits geraten immer mehr in das Zentrum der Diskussion klassisch chaotischer Systeme und ihrer quantenmechanischen Analoga [35]. Auch wir interessieren uns für die periodischen Orbits des Sinai-Billard.

Es gibt zwei Klassen von periodischen Orbits in diesem System. Die eine Klasse besteht aus Trajektorien, die geradlinig zwischen den Streuzentren hindurchlaufen, ohne sie zu berühren. Eine solche Trajektorie besitzt eine konstante Geschwindigkeit \vec{v} , deren Richtung durch einen Gittervektor gegeben ist. Für die Geschwindigkeit gilt also

$$\vec{v} = |\vec{v}| \frac{(i, j)}{\sqrt{i^2 + j^2}}, \quad i, j \in \mathcal{Z}.$$

Durch die Richtung (i, j) wird jeweils eine einparametrische Familie F_{ij} von periodischen Orbits definiert, die durch Parallelverschiebung auseinander hervorgehen. Dabei sind i und j teilerfremd. Eine solche Familie existiert nur, wenn zur Richtung (i, j) eine Gerade existiert, die keine der Streuzentren trifft. Benachbarte Gitterlinien parallel zum Vektor (i, j) besitzen einen Abstand von $\frac{1}{\sqrt{i^2 + j^2}}$. Daher existiert die Familie F_{ij} , falls die Ungleichung

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{i^2 + j^2}} &> 2R, \\ \Leftrightarrow \sqrt{i^2 + j^2} &< \frac{1}{2R} \end{aligned} \quad (1.3)$$

erfüllt ist. Durch diese Gleichung wird die Anzahl der Familien F_{ij} beschränkt. Da durch

$$L_{ij} = \sqrt{i^2 + j^2} \quad (1.4)$$

die Länge eines periodischen Orbits aus der Familie F_{ij} gegeben ist, wird durch Gl. (1.3) zusätzlich eine obere Schranke der Längen der periodischen Orbits dieser Klasse definiert.

Die andere Klasse besteht aus periodischen Orbits, die Streuzentren treffen. Diese Orbits liegen isoliert im Phasenraum und sind in ihrer Länge und Anzahl nicht beschränkt; im Gegenteil, ihre Anzahl nimmt mit der Länge sehr schnell zu [13].

1.3 Die Poincaré–Abbildung

Ein sehr hilfreiches Instrument zur Untersuchung des dynamischen Verhaltens von Hamilton–Systemen stellt die Poincaré–Abbildung dar. Ihre Konstruktion verläuft folgendermaßen: Auf der Energiehyperfläche des Phasenraumes wird eine geeignete Untermannigfaltigkeit ausgewählt, die von den zu betrachtenden Trajektorien transversal geschnitten wird. Diese Untermannigfaltigkeit nennen wir Poincaré–Fläche und bezeichnen sie mit F_E . Ein Punkt x auf dieser Hyperfläche definiert eindeutig die Trajektorie γ_x , die durch ihn läuft. Die Poincaré–Abbildung G ist ein Diffeomorphismus von F_E auf F_E . Sie bildet einen Punkt x aus F_E auf denjenigen Punkt ab, der durch den nächsten Schnittpunkt von γ_x mit F_E definiert ist. Die Punktfolge, die man durch iterierte Anwendung der Poincaré–Abbildung auf einen Startwert erhält, bezeichnen wir als Orbit.

Bei den folgenden Betrachtungen des Sinai–Billards bewege sich das Teilchen mit der Energie $E = 1$, wobei wir dem Streuzentrum eine variable Potentialhöhe U zuordnen. Der Radius des Streuzentrums ist kleiner als $1/2$. Unsere Poincaré–Fläche definieren wir als die Menge der Punkte des Phasenraums mit $y = -0.5$ und Geschwindigkeit in y –Richtung $v_y > 0$. Der Betrag der Geschwindigkeit des Teilchens, wenn es sich frei bewegt, sei $|\vec{v}| = \sqrt{E} = 1$ ($m = 2$). Er kann sich nur innerhalb des Streuzentrums ändern. Da das Sinai–Billard eine Seitenlänge von 1 besitzt, ist die gesamte Poincaré–Fläche durch den Bereich $-0.5 \leq x < 0.5$ und $-1 \leq v_x \leq 1$ erfaßt.

Im folgenden ist die Poincaré–Abbildung für einen festen Radius $R = 0.3$, aber zu verschiedenen Potentialhöhen U des Streuzentrums numerisch untersucht worden. Nach Gl. (1.2) ergibt sich für den Wert $R = 0.3$ eine kritische Energie von -5.25 . Daher erwarten wir, daß sich das System für $U > 0$ und für $U < -5.25$ ergodisch verhält. Für $0 > U > -5.25$ ist die Existenz eines elliptischen Fixpunktes bewiesen.

Zur Bestätigung dieser Annahmen ist die Poincaré–Abbildung zuerst für $U = 0.5$ und den Startwert $(x, v_x) = (0.0, 0.01)$ 20000 mal iteriert worden. Der resultierende Orbit ist in Abb. 1.4 aufgetragen.

Abbildung 1.4: *Poincaré-Abbildung für $R = 0.3, U = 0.5$.*

Es ist zu sehen, daß der Orbit die Poincaré–Fläche gleichmäßig ausfüllt. Das ist ein deutlicher Hinweis auf die Ergodizität des Systems. Auffällig sind zwei Bereiche, der eine bei $v_x = 0$ und $-0.5 < x < -0.3$ bzw. $0.3 < x < 0.5$, der andere bei $v_x \approx \pm 0.7$ und $|x| \leq 0.1$. Jeder Punkt auf diesen Linien stellt einen Fixpunkt dar. Diese Punkte repräsentieren die Familien von periodischen Trajektorien mit Geschwindigkeit $\vec{v} = (0, \pm 1)$ und $\vec{v} = (1, \pm 1)/\sqrt{2}$. Trajektorien in der Nähe dieser periodischen Orbits können einige Zeit im Nahbereich dieser Orbits bleiben, bis sie schließlich das Streuzentrum treffen. Diese Linien von Fixpunkten bilden eine Nullmenge in der Poincaré–Fläche bzw. die dazugehörigen Trajektorien eine Nullmenge in der Energiehyperfläche. Dadurch schmälern sie die Ergodizität des Systems nicht.

Weiterhin ist die Poincaré–Abbildung in den Abbildungen 1.5 bis 1.7 zu jeweils 80 gleichmäßig verteilten Startwerten jeweils 400 mal iteriert worden.

Für $U = -0.4$ in Abb. 1.5 hat sich die Situation gegenüber Abb. 1.4 verändert. Man erkennt neun elliptische periodische Punkte umgeben von “Inseln”, die invariant unter der Dynamik sind. Den periodischen Punkten entsprechen einfache periodische Orbits im Phasenraum. Dem elliptischen Fixpunkt in der Mitte der Abbildung entspricht der periodische Orbit, der auf kürzestem Weg mit $v_x = 0$ von einem Streuzentrum zum nächsten läuft.

In Abb. 1.6 beträgt der Wert des Potentials $U = -1.0$. Die fokussierende Eigenschaft des Streuzentrums ist so stark geworden, daß die stabilisierende Wirkung auf Orbits in der Nähe der periodischen Orbits wieder abgenommen hat. Entsprechend ist Anzahl der sichtbaren Inseln geringer geworden.

Für $U = -5.0$ in Abb. 1.7 ist nur noch die Insel im Punkt $(x, v_x) = (0, 0)$ zu sehen. Verringert man U weiter, so erhält man für $U < -5.25$ wieder ein Verhalten wie in Abbildung 1.4.

Abbildung 1.5: *Poincaré-Abbildung für $R = 0.3, U = -0.4$.*

Abbildung 1.6: *Poincaré-Abbildung für $R = 0.3, U = -1.0$.*

Abbildung 1.7: *Poincaré-Abbildung für $R = 0.3, U = -5.0$.*

Kapitel 2

Semiklassische Quantisierung

Die semiklassische Mechanik betrachtet den Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ der Quantenmechanik. Das entspricht dem Fall großer Wirkungen. Sie beschreibt den Übergang von der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik und ist daher angemessen für den Vergleich dieser beiden dynamischen Theorien hinsichtlich Chaos und Ordnung. Von besonderem Interesse sind in diesem Zusammenhang die statistischen Eigenschaften der Energiespektren quantenmechanischer Hamilton-Systeme. Daher beginnen wir damit, semiklassische Methoden zur Berechnung der Energieeigenwerte von Hamilton-Operatoren zu betrachten.

2.1 Klassisch integrable Hamilton-Systeme

In den folgenden Ausführungen betrachten wir ein zeitunabhängiges Hamilton-System im $2n$ -dimensionalen Phasenraum Γ mit den Koordinaten $x = (x_1, \dots, x_n)$, $p = (p_1, \dots, p_n)$ und der Hamilton-Funktion $H = H(x, p)$. Dieses System heißt *integrabel*, falls n Konstanten der Bewegung

$$C(x, p) = (C_1(x, p), \dots, C_n(x, p))$$

existieren, deren Gradienten in jedem Punkt linear unabhängig sind und deren Poisson-Klammern

$$\{C_i, C_j\} = \sum_{k=1 \dots n} \frac{\partial C_i}{\partial x_k} \frac{\partial C_j}{\partial p_k} - \frac{\partial C_j}{\partial x_k} \frac{\partial C_i}{\partial p_k}$$

paarweise verschwinden. Die Hamilton-Funktion H ist eines der Integrale, wir schreiben $H = C_1$. Die Bewegung findet dann auf einer n -dimensionalen Hyperfläche $\Sigma \subset \Gamma$ statt. Falls Σ kompakt und zusammenhängend ist, ist Σ diffeomorph zum n -Torus $T^n = \{(\varphi_1, \dots, \varphi_n) \bmod 2\pi\}$ [36].

In diesem Fall ist es günstig, die zu den *Winkelvariablen* $\varphi_1 \dots \varphi_n$ konjugierten *Wirkungsvariablen* $I = (I_1, \dots, I_n)$ einzuführen. Dazu werden die

elementaren Zyklen $\gamma_1 \dots \gamma_n$ in Σ folgendermaßen definiert: Beim Durchlaufen des Zyklus γ_i ändert sich der Winkel φ_j um den Wert 2π falls $i = j$ ist, andernfalls bleibt φ_j unverändert. Damit werden die Wirkungsvariablen definiert durch

$$I_i(C) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i} p dx, \quad (2.1)$$

$i = 1 \dots n$. Sie sind als Funktionen der Konstanten C_i selber Konstanten der Bewegung. In [36] wird gezeigt, daß die Transformation $(x, p) \rightarrow (\varphi, I)$ kanonisch ist. Außerdem lassen sich die Größen $I_i = I_i(C)$ nach den Konstanten C_i auflösen, und wir erhalten die C_i als Funktionen der Wirkungsvariablen. Weil die Hamilton-Funktion $H = C_1$ selber zu den Integralen der Bewegung gehört, ist sie als Funktion der Wirkungsvariablen darstellbar: $H = H(I)$. Sie ist demnach zyklisch in den Winkelvariablen.

Nach der EBK-Methode (Einstein-Brillouin-Keller [37, 38, 39]) erhält man die quantenmechanischen Energiewerte dieses Hamilton-Systems wie folgt: $m = (m_1, \dots, m_n)$ sei ein Vektor mit ganzzahligen Komponenten $m_i = 0, 1, 2, \dots, i = 1 \dots n$. Der Vektor I_m sei definiert durch die Gleichung

$$I_m = (m + \frac{1}{4}\alpha)\hbar. \quad (2.2)$$

Die Größe α ist ein Vektor, dessen Komponente α_i gleich der Anzahl der Kaustiken ist, die der i -te elementare Zyklus γ_i im Phasenraum durchläuft. Die Zahlen α_i besitzen in der Literatur die Bezeichnung Maslov-Indizes [4], die Komponenten m_i werden auch "Quantenzahlen" genannt [13]. Die quantenmechanischen Energiewerte dieses Systems sind nach der EBK-Methode gegeben durch

$$E_m = H(I_m). \quad (2.3)$$

Ein einfaches Beispiel ist der n -dimensionale harmonische Oszillator. Die Hamilton-Funktion in Winkel- und Wirkungsvariablen lautet

$$H = \omega \cdot I \quad (2.4)$$

mit den n Frequenzen $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n)$. Die Variablen (x, p) können mit Hilfe der Gleichungen

$$\begin{aligned} x_i &= \sqrt{\frac{2I_i}{m\omega_i}} \sin \varphi_i, \\ p_i &= \sqrt{2m\omega_i I_i} \cos \varphi_i \end{aligned}$$

ermittelt werden. Die elementaren Zyklen γ_i stellen Ellipsen in der (x_i, p_i) -Ebene dar, besitzen also zwei Umkehrpunkte, denen jeweils eine Kaustik entspricht. Folglich sind die Maslov-Indizes $\alpha_i = 2$ für $i = 1 \dots n$. Damit ergibt sich aus den Gln. (2.2) und (2.3) für die quantenmechanischen Energien des harmonischen Oszillators nach der EBK-Methode der Ausdruck

$$E_m = \hbar \sum_{i=1}^n \omega_i (m_i + 1/2) \quad (2.5)$$

Das zweidimensionale Sinai–Billard ist integrabel, wenn die Potentialhöhe des Streuzentrums gleich Null ist. In diesem Fall betrachten wir die Bewegung eines freien Teilchens auf dem zweidimensionalen Torus bzw. in einem zweidimensionalen periodischen Gitter. Die Hamilton–Funktion lautet

$$H = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m}. \quad (2.6)$$

Die Seitenlänge des Billards haben wir gleich Eins gewählt. Damit ergeben sich die Wirkungsvariablen zu

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \int_0^1 p_i dx_i = \frac{p_i}{2\pi}, \quad (2.7)$$

und die Hamilton–Funktion in diesen Variablen ist

$$H(I) = \frac{4\pi^2}{2m} (I_1^2 + I_2^2). \quad (2.8)$$

Die beiden elementaren Zyklen sind gerade Linien im Phasenraum, nämlich zwei beliebige Trajektorien, die parallel zur x –Achse bzw. parallel zur y –Achse verlaufen. Folglich besitzen sie keine Kaustiken. Die Maslov–Indizes α_i sind Null. Daher lauten die quantenmechanischen Energien des zweidimensionalen Sinai–Billards im integrablen Fall

$$E_m = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2m} (m_1^2 + m_2^2). \quad (2.9)$$

Die EBK–Methode ist nur in wenigen Systemen exakt, z.B. im Fall der beiden oben genannten Systeme und im Fall des Wasserstoffatoms. Im allgemeinen liefert sie die exakten Energiewerte im Limes $\hbar \rightarrow 0$, der dem Grenzfall hoher Energien entspricht [6]. Nicht anwendbar ist die EBK–Methode, wenn das Hamilton–System nicht integrabel ist, der Phasenraum also nicht vollständig mit Tori ausgefüllt ist. Gerade diese Situation stellt den Normalfall in der Menge der Hamilton–Systeme dar. Dadurch wird deutlich mit welchem Interesse Quantisierungsmöglichkeiten nichtintegrabler Systeme untersucht werden. Auch wir wollen uns im nächsten Abschnitt diesem Fall widmen.

2.2 Nichtintegrale Hamilton–Systeme

2.2.1 Zeitentwicklungsoperator und Resolvente

Wir wollen hier an ein elementares Resultat der Spektraltheorie erinnern, das den Zusammenhang zwischen der *Resolvente* des Hamilton–Operators und seinem Spektrum darstellt. Es wird für die weitere Diskussion noch benötigt.

Wir gehen von einem abzählbaren Spektrum $\{E_j\}$, $j \in M$ (M ist eine Indexmenge) des Hamilton–Operators H aus. Die Resolvente ist definiert als

$$R(z) = (zI - H)^{-1}, \quad (2.10)$$

dabei bezeichnen wir mit I den Einheitsoperator. $R(z)$ ist in diesem Fall eine meromorphe Funktion in z über ganz \mathbb{C} . $R(z)$ läßt sich durch einseitige Fourier–Transformation

$$R(z) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt U(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}zt\right) \quad (2.11)$$

aus dem Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right) \quad (2.12)$$

berechnen [40]. Die Ortsdarstellungen

$$G(x, x', t) = \langle x' | U(t) | x \rangle \quad (2.13)$$

und

$$G(x, x', z) = \langle x' | R(z) | x \rangle \quad (2.14)$$

nennen wir *Zeit–Green–Funktion* bzw. *Energie–Green–Funktion*.

Die Eigenwerte E_j seien zur Vereinfachung der Schreibweise nicht entartet. Die dazugehörigen Eigenfunktionen Φ_j bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im Hilbert–Raum. Für die Projektoren $P_j = |\Phi_j\rangle\langle\Phi_j|$ auf die jeweiligen Eigenräume gilt

$$\sum_{j \in M} P_j = I. \quad (2.15)$$

Aus der Eigenwertgleichung

$$HP_j = E_j P_j$$

folgt mit Gl. (2.15) für $R(z)$ der Ausdruck

$$R(z) = \sum_{j \in M} \frac{P_j}{z - E_j}. \quad (2.16)$$

Für die Spur des Projektors P_j gilt

$$\text{Spur } P_j = \|\Phi_j\|^2 = 1,$$

was für die Spur der Resolvente den Ausdruck

$$\text{Spur } R(z) = \sum_{j \in M} \frac{1}{z - E_j} \quad (2.17)$$

liefert. Die Spur der Resolvente besitzt also die Eigenwerte des Hamilton-Operators als einfache Pole auf der reellen Achse der komplexen Energieebene.

Wir betrachten nun die Identität

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = P(1/x) \mp i\pi\delta(x), \quad (2.18)$$

die im Sinne von Distributionen zu verstehen ist. Dabei ist $P(1/x)$ gleich dem Cauchyschen Hauptwert. Mit ihrer Hilfe und Gl. (2.17) können wir die *Spektraldichte* des Hamilton-Operators,

$$\rho(E) = \sum_{j \in M} \delta(E - E_j), \quad (2.19)$$

ausdrücken durch

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Spur } R(E + i\epsilon) \right]. \quad (2.20)$$

Diese Gleichung stellt den direkten Zusammenhang zwischen der Resolvente des Hamilton-Operators und seinem Spektrum dar. Die Auswertung der rechten Seite der Gleichung läßt sich z.B. in der Ortsdarstellung durchführen. Dazu benötigen wir die Ortsdarstellung von $R(z)$, die Energie-Green-Funktion. Unser Ziel ist es, durch eine semiklassische Näherung der Energie-Green-Funktion einen semiklassischen Ausdruck der Spektraldichte mit Hilfe von Gl. (2.20) zu gewinnen.

2.2.2 Wirkungsintegral und Wirkungsfunktion

Im vorhergegangenen Abschnitt haben wir den Zusammenhang zwischen der Resolvente und dem Spektrum eines Hamilton-Operators dargestellt. In der semiklassischen Mechanik betrachtet man Näherungen der Zeit- und Energie-Green-Funktion, die sogenannten *klassischen Green-Funktionen* [41]. Diese werden bestimmt durch die Eigenschaften der klassischen Trajektorien des Systems. Insbesondere zeigt es sich, daß genau die periodischen Orbits für das Spektrum des Hamilton-Operators verantwortlich sind. Aber gerade in den periodischen Orbits manifestieren sich die klassisch chaotischen Eigenschaften des Systems auf sehr prägnante Art und Weise. Dieser Zusammenhang macht die periodischen Orbits bei der Untersuchung von Quantenchaos so interessant. Unter diesem Aspekt beginnen wir damit, klassische Übergangswahrscheinlichkeiten durch Eigenschaften klassischer Trajektorien

auszudrücken. Nachfolgend werden wir sehen, daß diese Größen wesentliche Bestandteile der Green-Funktionen sind.

Als erstes bemühen wir die Lagrangesche Formulierung der klassischen Mechanik. Die Lagrange-Funktion L hängt vom Ort $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ und von der Geschwindigkeit $\dot{x} = (\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots, \dot{x}_n)$ ab. Wir betrachten im folgenden zeitunabhängige Systeme; für diese gilt

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0. \quad (2.21)$$

Die Bewegungsgleichungen sind

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1 \dots n. \quad (2.22)$$

Eine spezielle Trajektorie im Konfigurationsraum nennen wir γ . Sie ist eindeutig definiert durch zwei Anfangsbedingungen $\gamma(0) = x_0$ und $\dot{\gamma}(0) = v_0$. Geben wir aber ein Randwertproblem mit Hilfe von drei Parametern x' , x'' und t , durch die Gleichungen

$$\gamma(0) = x' \text{ und } \gamma(t) = x''$$

vor, so ist γ – sofern überhaupt eine Lösung existiert – nicht immer eindeutig definiert. Da γ eine Trajektorie im Konfigurationsraum bezeichnet, schreiben wir synonym für $\gamma(t)$ und $\frac{d}{dt}\gamma(t)$ auch $x(t)$ bzw. $\dot{x}(t)$. Ist nun γ eine Trajektorie mit $\gamma(0) = x'$ und $\gamma(t) = x''$, dann ist das Wirkungsintegral R definiert durch das Integral

$$R(x'', x', t) = \int_0^t L(x(\tau), \dot{x}(\tau)) d\tau \quad (2.23)$$

über γ . Der Impuls $p = (p_1 \dots p_n)$ wird definiert als

$$p := \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \quad (2.24)$$

Die Energie

$$E = \dot{x}p - L = \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L \quad (2.25)$$

ist konstant, was mit Hilfe der Gln. (2.21) und (2.22) gezeigt werden kann.

Für das Wirkungsintegral schreiben wir

$$\begin{aligned} R(x'', x', t) &= \int_0^t [L(x(\tau), \dot{x}(\tau)) + E] d\tau - Et \\ &= \int_0^t \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{x} d\tau - Et \\ &= \int_{x'}^{x''} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} dx - Et \\ &= \int_{x'}^{x''} p dx - Et. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Daraus folgen die Gleichungen

$$\frac{\partial R}{\partial x'} = -p', \quad \frac{\partial R}{\partial x''} = p'', \quad \frac{\partial R}{\partial t} = -E, \quad (2.27)$$

und das totale Differential von R lautet

$$dR = -p'dx' + p''dx'' - E dt. \quad (2.28)$$

Zur Vereinfachung der folgenden Betrachtungen setzen wir voraus, daß sich der Impuls als $p = m\dot{x}$ schreiben läßt. Wir bezeichnen den Ortsraum mit U , den Impulsraum mit V , unser Phasenraum ist jetzt $\Omega = U \times V$. Eine Trajektorie in Ω nennen wir $\gamma(t) = (x(t), p(t))$, mit $x(t) \in U$ und $p(t) \in V$. Weiterhin bezeichnen wir den Startpunkt einer Trajektorie mit $\gamma(0) = (x', p')$ und den Endpunkt einer Trajektorie mit $\gamma(t) = (x'', p'')$.

Jetzt wechseln wir die unabhängigen Variablen, indem wir von dem Tripel (x', x'', t) zu den Variablen (x', p', t) übergehen. Eine Trajektorie γ ist durch die Anfangsbedingungen $\gamma(0) = x'$ und $m\dot{\gamma}(0) = p'$ eindeutig definiert. Die Zeit t definiert dann eindeutig den Endpunkt $x'' = \gamma(t)$ und den Endimpuls $p'' = m\dot{\gamma}(t)$, die als Funktionen $x''(x', p', t)$ bzw. $p''(x', p', t)$ geschrieben werden können.

Wir definieren eine spezielle Trajektorie γ , indem wir p' , x' und t festhalten. Wir betrachten jetzt die lokale Umgebung von γ genauer, dazu untersuchen wir das Verhalten des Endpunktes x'' bei kleiner Veränderung von p' . Sei $\tilde{V} \subset V$ eine kleine Umgebung von p' . Die Abbildung Ψ bilde von \tilde{V} nach U ab über die Abbildungsvorschrift

$$\Psi : \tilde{V} \longrightarrow U,$$

$$\Psi(p) = x''(x', p, t).$$

Mit $D\Psi$ bezeichnen wir die Ableitung (Jacobi-Matrix) von Ψ . Ist $D\Psi$ in p' nicht invertierbar, so wird x'' konjugierter Punkt zu x' genannt [4]. In einem konjugierten Punkt verhalten sich die Trajektorien auf typische Weise. Dazu betrachten wir die Menge der Trajektorien, die in x' mit einem Impuls aus \tilde{V} starten. In einem konjugierten Punkt x'' verringert sich der Rang von $D\Psi$. Gleichbedeutend schneiden die Trajektorien die Haupttrajektorie γ teilweise, so daß ihre Einhüllende gewöhnlich eine Kaustik bildet. In Ausnahmefällen kann x'' einen Fokus dieser Trajektorien darstellen.

Nachfolgend sei vorausgesetzt, daß $D\Psi$ in p' invertierbar ist. Zur Abkürzung setzen wir

$$N = D\Psi|_{p=p'} = \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial p'_j} \right) = \left(\frac{\partial x''_i}{\partial p'_j} \right). \quad (2.29)$$

(Die Schreibweise $\frac{\partial}{\partial p'_j}$ bedeutet hier die Ableitung nach der Koordinate p_j an der Stelle p' .) Nach Voraussetzung existiert die Inverse

$$M = N^{-1} = \left(\frac{\partial p'_i}{\partial x''_j} \right). \quad (2.30)$$

Damit folgt für die Differentialformen $d^n x''$ und $d^n p'$ der Zusammenhang

$$d^n p' = \det M d^n x''. \quad (2.31)$$

Es sei eine Dichte im Punkt (x', p') durch eine Funktion $\rho(x', p')$ gegeben, so daß

$$\rho(x', p') d^n x' d^n p' \quad (2.32)$$

die Wahrscheinlichkeit darstellt, einen Systempunkt im infinitesimalen Volumenelement $d^n x' d^n p'$ bei (x', p') vorzufinden. Schreiben wir

$$C_\gamma(x'', x', t) := \det M, \quad (2.33)$$

dann gibt der Ausdruck

$$\rho(x', p'(x'', x', t)) |C_\gamma(x'', x', t)| d^n x' d^n x'' \quad (2.34)$$

die Wahrscheinlichkeit an, mit der irgendein Systempunkt vom infinitesimalen Volumenelement $d^n x'$ bei x' in der Zeit t entlang der Trajektorie γ zum infinitesimalen Volumenelement $d^n x''$ bei x'' läuft. Mit Hilfe des Wirkungsintegrals und Gl. (2.27) können wir C_γ schreiben als

$$C_\gamma(x'', x', t) = \det \left(\frac{\partial p'_i}{\partial x''_j} \right) = \det \left(-\frac{\partial^2 R}{\partial x'_i \partial x''_j} \right). \quad (2.35)$$

Da wir zeitunabhängige Systeme betrachten, liegt es nahe, die Betrachtungen auf Trajektorien in der Energiehyperfläche einzuschränken. Dazu tauschen wir in der Größe C_γ die Zeit t gegen die Energie E aus. Die Energie E ist durch Gl. (2.25) festgelegt. Die Wirkungsfunktion $S(x'', x', E)$ ist definiert durch

$$\begin{aligned} S(x'', x', E) &= \int_{x'}^{x''} p dx \\ &= R(x'', x', t) + Et. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Dabei folgt die zweite Zeile aus Gl. (2.26). S ist die Legendre-Transformierte von R bezüglich t zugunsten von $-E$. Mit Hilfe von Gl. (2.28) erhält man für das totale Differential von S

$$dS = -p' dx' + p'' dx'' + t dE. \quad (2.37)$$

Und für die partiellen Ableitungen von S gilt

$$\frac{\partial S}{\partial x'} = -p', \quad \frac{\partial S}{\partial x''} = p'', \quad \frac{\partial S}{\partial E} = t. \quad (2.38)$$

Als nächstes wollen wir die partiellen Ableitungen von R in Gl. (2.35) durch partielle Ableitungen von S ausdrücken. Gl. (2.36) schreiben wir als

$$R(x'', x', t) = S(x'', x', E(x'', x', t)) - E(x'', x', t) t. \quad (2.39)$$

Mit den Gln. (2.38) und (2.39) erhalten wir

$$\frac{\partial R}{\partial x_j''} = \frac{\partial S}{\partial x_j''} + \frac{\partial S}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial x_j''} - t \frac{\partial E}{\partial x_j''} = \frac{\partial S}{\partial x_j''},$$

und es folgt

$$\frac{\partial}{\partial x_i'} \frac{\partial R}{\partial x_j''} = \frac{\partial}{\partial x_i'} \left(\frac{\partial S}{\partial x_j''} \right) = \frac{\partial^2 S}{\partial x_i' \partial x_j''} + \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x_j''} \frac{\partial E}{\partial x_i'}.$$

t und x_i' sind unabhängige Variablen. Unter Beachtung von Gl. (2.38) ergibt sich damit

$$\frac{\partial t}{\partial x_i'} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_i' \partial E} + \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \frac{\partial E}{\partial x_i'} = 0,$$

und für die partiellen Ableitungen von R erhalten wir die Gleichung

$$-\frac{\partial^2 R}{\partial x_i' \partial x_j''} = -\frac{\partial^2 S}{\partial x_i' \partial x_j''} + \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x_i'} \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x_j''} / \frac{\partial^2 S}{\partial E^2}. \quad (2.40)$$

Die mit diesen Einträgen versehene Matrix kann zur Berechnung ihrer Determinante in Gl. (2.35) wie folgt umgeformt werden: Die Matrixelemente in Gl. (2.40) können geschrieben werden als

$$-\frac{\partial^2 R}{\partial x_i' \partial x_j''} = b_{ij} + c_i d_j$$

mit

$$b_{ij} = -\frac{\partial^2 S}{\partial x_i' \partial x_j''},$$

$$c_i = \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x_i'},$$

und

$$d_j = \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x_j''} / \frac{\partial^2 S}{\partial E^2}.$$

Die Determinante der Matrix M ist damit darstellbar durch

$$\det M = \det \begin{pmatrix} b_{11} + c_1 d_1 & b_{12} + c_1 d_2 & \dots & b_{1n} + c_1 d_n & 0 \\ b_{21} + c_2 d_1 & b_{22} + c_2 d_2 & \dots & b_{2n} + c_2 d_n & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ b_{n1} + c_n d_1 & b_{n2} + c_n d_2 & \dots & b_{nn} + c_n d_n & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Folgende Zeilen- und Spaltenumformungen ändern den Wert der Determinante nicht: Wir addieren zu jeder Zeile mit dem Index i das c_i -fache der letzten Zeile, also die Zeile $(0, 0, \dots, 0, c_i)$, und erhalten in der letzten Spalte

den Spaltenvektor $(c_1, c_2, \dots, c_n, 1)$. Subtrahieren wir jetzt von jeder Spalte zum Index j das d_j -fache der letzten Spalte, so erhalten wir den Ausdruck

$$\det M = \det \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} & c_1 \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} & c_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} & c_2 \\ -d_1 & -d_2 & \dots & -d_n & 1 \end{pmatrix}.$$

Wir multiplizieren die letzte Zeile mit $\frac{\partial^2 S}{\partial E^2}$, die ersten n Spalten mit -1 und erhalten nun endgültig die Gleichung

$$-C_\gamma \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = (-1)^{n+1} \det D_{n+1} =: D_\gamma(x'', x', E). \quad (2.41)$$

Dabei ist

$$D_{n+1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial x'_i \partial x'_j} & \frac{\partial^2 S}{\partial x'_i \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x'_j} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

eine $(n+1)$ -dimensionale Matrix, die in der letzten Zeile und Spalte die partiellen Ableitungen nach E enthält.

In der semiklassischen Mechanik spielen die Größen C_γ und D_γ bedeutende Rollen. Die Dichte ρ von Systempunkten Gl. (2.32), ist in der semiklassischen Mechanik durch die Konstante $\frac{1}{h^n}$ gegeben. Damit gibt gemäß Gl. (2.32)

$$\frac{1}{h^n} |C_\gamma(x'', x', t)| d^n x' d^n x''$$

den Beitrag von γ zur Übergangswahrscheinlichkeit an, mit der das System vom Ort x' in der Zeit t zum Ort x'' wechselt. Die Größe

$$\frac{1}{h^{n/2}} \sqrt{|C_\gamma(x'', x', t)|}$$

besitzt die physikalische Dimension $1/\text{Länge}^n$ und stellt den Beitrag von γ zur quantenmechanischen Übergangsamplitude für den Wechsel vom Ort x' zum Ort x'' in der Zeit t dar. Sie entspricht der Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators, also der Zeit-Green-Funktion. Der Ausdruck

$$\frac{1}{h^{(n+1)/2}} \sqrt{|D_\gamma(x'', x', E)|}$$

besitzt die Dimension $1/(\text{Länge}^n \cdot \text{Energie})$, beschreibt also eine Dichte von Übergangsamplituden bezüglich der Energie. Diese Größe entspricht der Energie-Green-Funktion in der Quantenmechanik.

2.2.3 Die klassischen Green-Funktionen

Nach den Vorüberlegungen des letzten Abschnittes wollen wir semiklassische Darstellungen der beiden Green-Funktionen vorstellen, mit denen sich für die Spektraldichte (Gl. (2.20)) ein Ausdruck herleiten läßt, der nur durch Eigenschaften der periodischen Orbits des klassischen Hamilton-Systems bestimmt wird. In diesem Abschnitt wollen wir den Zugang über den Pfadintegralformalismus referieren, wie er schon in den Arbeiten [18, 19] entwickelt worden ist. Übersichtsartikel findet man z.B. in [41] oder in [42].

Der wesentliche Schritt ist die Darstellung der Zeit-Green-Funktion Gl. (2.13) mit Hilfe von Pfadintegralen. Wir untersuchen also die Funktion

$$G(x', x, t) = \langle x' | \exp(-\frac{i}{\hbar} H t) | x \rangle. \quad (2.43)$$

Wir gehen davon aus, daß sich der Hamilton-Operator als Summe von kinetischer und potentieller Energie darstellen läßt. Außerdem sei die kinetische Energie gegeben durch $T = p^2/2m$ mit dem Impulsoperator p und der Masse m . Das Potential V hänge nur von den Orten ab.

Für $\lambda \in \mathbb{C}$ und $N \in \mathcal{N}$ gilt

$$\exp(-\lambda(T + V)) = [\exp(-\frac{\lambda}{N}(T + V))]^N.$$

Zur Auswertung dieses Ausdrucks greifen wir auf die Campbell-Baker-Hausdorff-Formel

$$\exp(-\frac{\lambda}{N}(T + V)) = \exp(-\frac{\lambda}{N}T) \exp(-\frac{\lambda}{N}V) \exp\left(\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{N}\right)^2 [T, V] + O\left(\left(\frac{\lambda}{N}\right)^3\right)\right)$$

zurück [43]. Im Limes $N \rightarrow \infty$ kann man den letzten Faktor vernachlässigen, indem man ihn durch $\exp(0) = 1$ ersetzt. Setzen wir $\lambda = \frac{i}{\hbar}t$, so erhalten wir damit für die Green-Funktion

$$\begin{aligned} G(x', x, t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x' | [\exp(-\frac{\lambda}{N}T) \exp(-\frac{\lambda}{N}V)]^N | x \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots \int dx_{N-1} \\ &\quad \times \prod_{j=0}^{N-1} \langle x_{j+1} | \exp(-\frac{\lambda}{N}T) \exp(-\frac{\lambda}{N}V) | x_j \rangle \end{aligned} \quad (2.44)$$

mit $x_0 = x$ und $x_N = x'$. Mit Hilfe dieser Gleichung haben wir die Green-Funktion formal definiert als Integral über alle klassischen Pfade $\{x, x_1, \dots, x_{N-1}, x'\}$, die in der Zeit t von x nach x' führen.

Falls die Abstände $|x_{j+1} - x_j|$ klein genug sind, gilt für die Matrixelemente in Gl. (2.44)

$$\begin{aligned} &\langle x_{j+1} | \exp(-\frac{\lambda}{N}T) \exp(-\frac{\lambda}{N}V) | x_j \rangle \\ &= \left(\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2}\right)^{n/2} \exp(-\frac{mN}{2\lambda\hbar^2}(x_{j+1} - x_j)^2) \exp(-\frac{\lambda}{N}V(x_j)), \end{aligned} \quad (2.45)$$

dabei gibt n die Anzahl der Freiheitsgrade unseres Systems an. Wir setzen diesen Ausdruck in Gl. (2.44) ein und erhalten mit $\lambda = \frac{i}{\hbar}t$ die Gleichung

$$G(x', x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi i \hbar t} \right)^{nN/2} \int dx_1 \dots \int dx_{N-1} \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{mN}{2t} (x_{j+1} - x_j)^2 - \frac{t}{N} V(x_j) \right) \right]. \quad (2.46)$$

Definieren wir $\Delta t = t/N$, so ist die Summe im Exponenten in Gl. (2.46) gleich

$$\sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t} \right)^2 - V(x_j) \right] \Delta t.$$

Lassen wir $N \rightarrow \infty$ gehen, also $\Delta t \rightarrow 0$, dann geht dieser Ausdruck in das Integral

$$\int_0^t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right] dt = \int_0^t L(\dot{x}, x) dt$$

über, ist also gleich dem klassischen Wirkungsintegral R , das wir durch Gl. (2.23) definiert haben.

Nun definieren wir eine diskrete Version des Wirkungsintegrals als

$$R_N(x', \{x_i\}, x) := \sum_{j=0}^{N-1} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t} \right)^2 - V(x_j) \right], \quad (2.47)$$

und für die Green-Funktion erhalten wir den kompakten Ausdruck

$$G(x', x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi i \hbar t} \right)^{nN/2} \int dx_1 \dots \int dx_{N-1} \exp \left[\frac{i}{\hbar} R_N(x', \{x_i\}, x) \right]. \quad (2.48)$$

Die Auswertung dieses Mehrfachintegrals mit Hilfe der *Methode der Stationären Phase* ist ein wichtiger Schritt im Pfadintegralformalismus. Als erstes werden stationäre Punkte der Exponentialfunktion gesucht. An diesen Stellen gilt

$$\frac{\partial R_N(x', \{x_i\}, x)}{\partial x_j} = 0$$

$$\Leftrightarrow m \left(\frac{x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1}}{(\Delta t)^2} \right) = -\frac{\partial V(x_j)}{\partial x_j} \text{ für } j = 1, 2, \dots, N-1. \quad (2.49)$$

Für $N \rightarrow \infty$, also $\Delta t \rightarrow 0$, sind das genau die Bewegungsgleichungen, die sich aus den Lagrangeschen Gln. (2.22) ergeben. Das bedeutet, daß gerade diejenigen klassischen Pfade, die den Trajektorien entsprechen, den Hauptbeitrag zur Green-Funktion liefern.

R_N wird um jede Trajektorie, die von x nach x' läuft, bis zur zweiten Ableitung entwickelt. In den dadurch erhaltenen neuen Koordinaten kann die

Integration, entsprechend der Methode der Stationären Phase, durchgeführt werden. Das endgültige Ergebnis im Limes $N \rightarrow \infty$ wird durch die Gleichung

$$G(x, x', t) = \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^{n/2} \sqrt{C_{\alpha}(x', x, t)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} R_{\alpha}(x', x, t) - i\kappa_{\alpha} \frac{\pi}{2} \right] \quad (2.50)$$

als Summation über alle klassischen Trajektorien α , die in der Zeit t von x nach x' führen, dargestellt [18, 4]. Die Funktion C_{α} ist durch Gl. (2.35) definiert. Die Zahl κ_{α} ist gleich der Anzahl zu x konjugierter Punkte entlang der Trajektorie α bis zum Ort x' .

In Gl. (2.50) ist die Verbindung von klassischer Mechanik und Quantenmechanik direkt ersichtlich. Die quantenmechanische Übergangsamplitude $G(x', x, t)$ wird dargestellt durch Superposition klassischer Übergangsamplituden, in die dynamische Eigenschaften der Trajektorien – nämlich Ableitungen des Wirkungsintegrals an Start- und Endpunkten – eingehen. Außerdem tritt in dieser Superposition jeder Summand mit einer komplexen Phase auf, die durch die Wirkung und durch topologische Eigenschaften der jeweiligen Trajektorie bestimmt ist.

Die Energie–Green–Funktion kann nach den Gln. (2.11) und (2.50) als Fouriertransformierte

$$G(x', x, E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^{n/2} \sqrt{C_{\alpha}(x', x, t)} \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} R_{\alpha}(x', x, t) - i\kappa_{\alpha} \frac{\pi}{2} + \frac{i}{\hbar} Et \right] \quad (2.51)$$

aus $G(x', x, t)$ berechnet werden. Wieder bietet sich hier die Methode der Stationären Phase an. Die stationären Punkte der Exponentialfunktion liegen dort, wo

$$\frac{\partial R_{\alpha}(x', x, t)}{\partial t} + E = 0$$

ist. Nach Gl. (2.27) ist das gleichbedeutend mit

$$E_{\alpha} = E,$$

wobei E_{α} gleich der Energie ist, die der Trajektorie α zugeordnet ist. Zur Energie–Green–Funktion tragen also nur diejenigen Trajektorien bei, welche von x nach x' laufen und die Energie E besitzen. Diese Trajektorien bezeichnen wir mit β . Die Durchführung der Methode der Stationären Phase verlangt den Wechsel in C_{β} von der Zeit t zur Energie E . Für die Energie–Green–Funktion erhält man schließlich die Darstellung

$$G(x', x, E) = \sum_{\beta} \frac{2\pi}{(2\pi i \hbar)^{(n+1)/2}} \sqrt{(-1)^{n+1} D_{\beta}(x', x, E)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{\beta}(x', x, E) - i\mu_{\beta} \frac{\pi}{2} \right]. \quad (2.52)$$

Dabei ist D_{β} durch die Gln. (2.41) und (2.42) definiert. Die Zahlen μ_{β} entsprechen den Maslov–Indizes in Gl. (2.2) und geben die Anzahl konjugierter

Punkte der Trajektorie β an. Diese Punkte stellen hier Singularitäten von $D_\beta(x', x, E)$ dar und werden von Kaustiken oder Umkehrpunkten im Phasenraum verursacht [4].

Um die Spektraldichte nach Gl. (2.20) zu berechnen, wird die Spur von $G(x', x, E)$ berechnet, das Integral

$$\int dx G(x, x, E).$$

Wieder liefert die Methode der Stationären Phase eine Bedingung für die stationären Punkte, nämlich

$$\lim_{x' \rightarrow x} \frac{dS(x', x, E)}{dx} = \lim_{x' \rightarrow x} \left(\frac{\partial S(x', x, E)}{\partial x} + \frac{\partial S(x', x, E)}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial dx} \right) = -p + p' = 0. \quad (2.53)$$

Die Anfangs- und Endimpulse dieses geschlossenen Orbits sind demnach gleich. Also handelt es sich hier um periodische Orbits, die den größten Beitrag zur Integration liefern. Die Ausführung der Integration liefert dann für die Spektraldichte den Ausdruck

$$\rho(E) = \sum_{\beta} \sum_{p=1}^{\infty} a_{\beta,p} \sin \left[p \left(\frac{S_{\beta}(E)}{\hbar} - \mu_{\beta} \frac{\pi}{2} \right) \right] + \rho_{av}(E), \quad (2.54)$$

der eine Summe über alle periodischen Orbits β und deren Iterationen p darstellt.

In den Amplitudenfaktor $a_{\beta,p}$ gehen dynamische Eigenschaften des periodischen Orbits β ein: Ist β isoliert, dann besitzt $a_{\beta,p}$ für $n = 2$ die Gestalt

$$a_{\beta,p} = \begin{cases} \frac{1}{\pi \hbar} \frac{T_{\beta}}{2 \sin\left(\frac{p u_{\beta}}{2}\right)} & \text{falls } \beta \text{ stabil,} \\ \frac{1}{\pi \hbar} \frac{T_{\beta}}{2 \sinh\left(\frac{p u_{\beta}}{2}\right)} & \text{falls } \beta \text{ instabil.} \end{cases} \quad (2.55)$$

Hier ist T_{β} gleich der Periodendauer von β , und die reellen Zahlen u_{β} haben folgende Bedeutung: Wir legen durch die Trajektorie β an beliebiger Stelle (x, p) eine transversale Poincaré–Ebene. Diese Ebene hat die Dimension $d = 2n - 2$, nämlich die Dimension der Energiehyperfläche minus eins. In unserem Fall, für $n = 2$, ist $d = 2$. Die Jacobi–Matrix der durch den Fluß induzierten Poincaré–Abbildung hat in (x, p) die Eigenwerte λ_{+} und λ_{-} . Diese sind entweder reell (hyperbolischer Fall, der periodische Orbit ist instabil) oder komplex vom Betrag Eins (elliptischer Fall, der periodische Orbit ist stabil). Ihr Produkt ist in jedem Fall gleich Eins. Diese Eigenwerte stehen in Beziehung zu den Zahlen u_{β} durch die Gleichungen

$$\lambda_{\pm} = \exp(\pm u_{\beta}) \quad (2.56)$$

im hyperbolischen Fall und

$$\lambda_{\pm} = \exp(\pm i u_{\beta}) \quad (2.57)$$

im elliptischen Fall. In dieser Form, wenn alle periodischen Orbits isoliert sind, wird Gl. (2.54) in der Literatur auch *Gutzwiller–Spurformel* genannt [17, 44]. Gl. (2.55) zeigt, daß die Amplitude eines stabilen isolierten Orbits in p oszilliert und dabei sehr große Werte annehmen kann. Sie wird betragsmäßig nicht kleiner als $\frac{1}{\hbar} \frac{T_\beta}{2}$. Die Amplitude eines instabilen periodischen Orbits dagegen, ist betragsmäßig nicht größer als $\frac{1}{\hbar} \frac{T_\beta}{2}$. Sie wird mit wachsender Instabilität oder zunehmendem p sehr schnell klein.

Für nicht isolierte periodische Orbits β , die in einer l_β -dimensionalen Familie F_β liegen, nimmt die Amplitude $a_{\beta,p}$ die Gestalt

$$a_{\beta,p} = \frac{1}{\hbar^{1+l_\beta/2}} A_{\beta,p}(E) \quad (2.58)$$

an. Dabei ist $A_{\beta,p}(E)$ proportional zu dem Maß der Familie F_β [13].

Der Summand $\rho_{av}(E)$ in Gl. (2.54) stammt von dem Orbit der Länge Null und stellt die mittlere Spektraldichte zur Energie E dar. $\rho_{av}(E)$ ist die Ableitung der mittleren Modenzahl $\bar{N}(E)$, welche die mittlere Anzahl der Energiewerte E_i mit $E_i \leq E$ angibt. Für $\bar{N}(E)$ gibt es eine einfache semiklassische Regel: $\bar{N}(E)$ ist gleich dem Volumen Ω_E derjenigen Teilmenge des Phasenraums, in dem $H(x, p)$ kleiner ist als E , dividiert durch h^n .

Im Fall eines zweidimensionalen Billards ist Ω_E gleich der Fläche der Kreisscheibe im Impulsraum mit Radius $P = \sqrt{2mE}$, multipliziert mit der Fläche A des Billards im Ortsraum, in dem sich ein Teilchen aufhalten kann. Also gilt

$$\bar{N}(E) \approx \frac{\pi 2mEA}{h^2} = \frac{mA}{2\pi\hbar^2} E. \quad (2.59)$$

Diese Näherung kann noch verbessert werden [45, 46]. Für ein zweidimensionales Billard, d.h ein zweidimensionales kompaktes Grundgebiet mit von Neumann- bzw. Dirichlet-Randbedingungen, gibt es zusätzliche Terme, die den Umfang und topologische Eigenschaften des Billards berücksichtigen. $\bar{N}(E)$ stellt sich dann dar als

$$\bar{N}(E) = \frac{mA}{2\pi\hbar^2} E + K \begin{cases} +\frac{L}{4\pi} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & \text{(Von Neumann),} \\ -\frac{L}{4\pi} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & \text{(Dirichlet).} \end{cases} \quad (2.60)$$

Dabei ist L gleich dem Umfang des Billards, und in K gehen topologische Eigenschaften, z.B. die Krümmung des Randes des Billards, ein.

Gl. (2.54) ist schlecht dafür geeignet, bei klassisch chaotischen Systemen eine große Anzahl Energieeigenwerte des Hamilton-Operators zu berechnen. Zum einen ist die Summe im allgemeinen nur bedingt konvergent [25]. Zum anderen ist die Anzahl periodischer Orbits eines chaotischen dynamischen Systems sehr groß. Es gibt nur in Ausnahmefällen die Möglichkeit, genügend viele periodische Orbits zu bestimmen, so daß die Summe einigermaßen konvergiert (z.B. im anisotropen Kepler-Problem [4]). Gerade im Sinai-Billard

scheint das aber unmöglich zu sein [13]. Trotzdem werden wir später mit Hilfe von Gl. (2.54) sehr wohl die Wirkung der periodischen Orbits auf das Spektrum des Sinai-Billard demonstrieren können.

Kapitel 3

Das quantenmechanische Sinai–Billard

Zur Untersuchung von Quantenchaos am Beispiel des Sinai–Billards wollen wir statistische Eigenschaften des Energiespektrums dieses Hamilton–Systems untersuchen. Dazu benötigen wir eine große Anzahl von Energiewerten. Wie wir oben festgestellt haben, sind semiklassische Methoden, z.B. die Berechnung der Gutzwiller–Spurformel, zur Berechnung dieser Energiewerte nicht geeignet. Daher werden wir die Energien auf der Grundlage einer quantenmechanisch exakten Theorie berechnen. Dazu wählen wir die KKR–Methode (Korringa, Kohn, Rostoker [28, 29]).

3.1 Die KKR–Methode

Die KKR–Methode dient dazu, Energieeigenwerte des Hamilton–Operators zu einem periodischen Potential vom *Muffin–Tin*–Typ zu berechnen. Eine ausführliche Darstellung dieser Methode im Fall eines dreidimensionalen Systems ist z.B. in [47] zu finden. Im Gegensatz dazu gibt es zur zweidimensionalen KKR–Methode in der Literatur nur Hinweise, z.B. in [48]. Daher wollen wir in dieser Arbeit die KKR–Methode für den zweidimensionalen Fall vollständig herleiten. Wegen ihres großen Umfanges haben wir die Ausführungen in den Anhang verlegt. Wir wollen hier nur die wichtigsten Schritte und Ergebnisse zusammenfassen.

3.1.1 Die Kohn–Rostoker–Determinante

Messen wir die Energie $E = \kappa^2$ in Einheiten von $\hbar^2/2m$, dann lautet die stationäre Schrödinger–Gleichung

$$[\Delta + \kappa^2 - U(\vec{r})]\Psi(\vec{r}) = 0. \quad (3.1)$$

$U(\vec{r})$ bezeichnet das Potential unseres Systems, ebenfalls in Einheiten von $\frac{\hbar^2}{2m}$. Wir bezeichnen die zweidimensionale Basis unseres Gitters mit $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2\}$, und

$$\vec{R} = i_1 \vec{a}_1 + i_2 \vec{a}_2, \quad i_1, i_2 \in \mathcal{Z}$$

bezeichne einen Gittervektor des direkten Gitters. $\Omega = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$ ist gleich der Fläche der Elementarzelle. Die Basis des reziproken Gitters $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2\}$ ist definiert durch

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (3.2)$$

Einen Gittervektor des reziproken Gitters stellen wir durch

$$\vec{G} = i_1 \vec{b}_1 + i_2 \vec{b}_2, \quad i_1, i_2 \in \mathcal{Z}$$

dar. Dann folgt mit Gl. (3.2)

$$e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} = 1. \quad (3.3)$$

Das Potential $U(\vec{r})$ ist gitterperiodisch. Es gilt

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$$

für jeden beliebigen Gittervektor \vec{R} . D.h., unser System ist invariant unter der Translationsgruppe des Gitters. Somit können als Eigenfunktionen des Hamilton-Operators Wellenfunktionen Ψ gewählt werden, die sich nach den eindimensionalen Darstellungen der Translationsgruppe transformieren. Diese Funktionen werden auch *Bloch-Funktionen* genannt [49]. Als Randbedingung zu Gl. (3.1) haben wir damit

$$\Psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \Psi(\vec{r}), \quad (3.4)$$

wobei \vec{k} einen Vektor aus der *Brillouin-Zone* (der Elementarzelle des reziproken Gitters) darstellt. Wir sagen, Ψ besitze den *Bloch-Vektor* \vec{k} .

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung wird mit Hilfe einer Green-Funktion gesucht, für die gilt

$$(\Delta_{\vec{r}} + \kappa^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.5)$$

Weiterhin wird von $G(\vec{r}, \vec{r}')$ gefordert, daß eine formale Lösung von Gl. (3.1) unter der Randbedingung Gl. (3.4) durch

$$\Psi(\vec{r}) = \int_{\Omega} d^2 r' G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') \quad (3.6)$$

gegeben ist. Dabei bewirkt Gl. (3.4) die Abhängigkeit von $G(\vec{r}, \vec{r}')$ vom Bloch-Vektor. Mögliche Darstellungen der Green-Funktion sind als Summe über das direkte Gitter durch

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{i}{4} \sum_{\vec{R}} H_0^{(1)}(\kappa |\vec{r} - \vec{r}' - \vec{R}|) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (3.7)$$

mit der Hankel-Funktion $H_0^{(1)}$ [50] oder als Summe über das reziproke Gitter [48] durch

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \frac{e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{\kappa^2 - (\vec{k} + \vec{G})^2} \quad (3.8)$$

gegeben.

Nach Voraussetzung ist das Potential $U(\vec{r})$ vom Muffin-Tin-Typ, es läßt sich daher schreiben als

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} u(|\vec{r} - \vec{R}|) \quad (3.9)$$

mit

$$u(r) = 0 \text{ falls } r > r_m. \quad (3.10)$$

r_m trägt die Bezeichnung *Muffin-Tin-Radius*. Aus Gl. (3.6) erhalten wir

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} d^2 r' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') \right] = 0 \\ \Leftrightarrow & \int_{r' \leq r_m} d^2 r' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') \right] \\ & + \int_{r' > r_m} d^2 r' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') \right] = 0. \end{aligned}$$

Mit den Gln. (3.1) und (3.5) folgt

$$\begin{aligned} & \int_{r' \leq r_m} d^2 r' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') \Delta_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}') - \Psi(\vec{r}') \Delta_{\vec{r}} G(\vec{r}, \vec{r}') \right] \\ & + \int_{r' > r_m} d^2 r' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') \right] = 0. \end{aligned}$$

Der erste Summand wird mit Hilfe des Greenschen Satzes in ein Linienintegral umgewandelt:

$$\begin{aligned} & \int_{r'=r_m} ds' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \Psi(\vec{r}')}{\partial r'} - \Psi(\vec{r}') \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial r'} \right] \\ & + \int_{r' > r_m} d^2 r' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') \right] = 0. \end{aligned}$$

Es gilt $U(\vec{r}') = 0$ für $r' > r_m$, damit folgt

$$\begin{aligned} & \int_{r'=r_m} ds' \left[G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \Psi(\vec{r}')}{\partial r'} - \Psi(\vec{r}') \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial r'} \right] \\ & = \int_{r' > r_m} d^2 r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') = \begin{cases} \Psi(\vec{r}), & r > r_m, \\ 0, & r \leq r_m. \end{cases} \end{aligned} \quad \begin{array}{l} (3.11a) \\ (3.11b) \end{array}$$

Gl. (3.11b) ist der Ausgangspunkt der KKR-Methode. Durch Entwickeln von $\Psi(\vec{r})$ und $G(\vec{r}, \vec{r}')$ in geeigneten Funktionensystemen wird sie in ein lineares homogenes Gleichungssystem umgewandelt. Dazu wird $\Psi(\vec{r})$ für $r \leq r_m$ gemäß

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} a_l(r) e^{il\phi} \quad (3.12)$$

nach dem vollständigen Funktionensystem $\{e^{il\phi}\}$ entwickelt. $\Psi(\vec{r})$ beschreibt im Innern der Muffin-Tin-Scheibe eine Lösung der Schroedinger-Gleichung zum Zentralkraftpotential $u(r)$. Die Entwicklungskoeffizienten $a_l(r)$ erfüllen daher die radiale Schrödinger-Gleichung

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \kappa^2 - \frac{l^2}{r^2} - u(r)\right)a_l(r) = 0. \quad (3.13)$$

Die Green-Funktion $G(\vec{r}, \vec{r}')$ wird im Anhang nach Zylinderfunktionen entwickelt. Das Ergebnis ist

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4} \sum_{l, l'=-\infty}^{\infty} [-iJ_l(\kappa r)H_l^{(1)}(\kappa r')\delta_{ll'} + G_{ll'}J_l(\kappa r)J_{l'}(\kappa r')]e^{il\phi}e^{-il'\phi}. \quad (3.14)$$

J_l bezeichnet die Bessel-Funktion erster Art zum Index l [50]. Die Koeffizienten $G_{ll'}$ heißen *Strukturkonstanten* und hängen von der Gitterstruktur sowie von der Energie und vom Bloch-Vektor ab. Die Entwicklungen von $\Psi(\vec{r})$ und $G(\vec{r}, \vec{r}')$ werden in Gl. (3.11b) eingesetzt. Nach einigen Umformungen und Ausnutzen der Orthogonalität der Funktionen $e^{il\phi}$ gelangt man zu dem linearen Gleichungssystem

$$\sum_{l'} a_{l'}(r') \left[\frac{\partial}{\partial r'} J_{l'}(\kappa r') - J_{l'}(\kappa r') L_{l'}(r') \right] \{ (\cot \eta_l - i)\delta_{ll'} + G_{ll'} \} = 0. \quad (3.15)$$

Dabei sind alle Funktionen an der Stelle $r' = r_m$ zu berechnen. Die Größe $L_{l'}(r')$ ist gleich der logarithmischen Ableitung der Radialfunktion an der Stelle r' , nämlich

$$L_{l'}(r') = \frac{\frac{\partial}{\partial r} a_{l'}(r) \Big|_{r=r'}}{a_{l'}(r')}. \quad (3.16)$$

Ferner ist

$$\cot \eta_l = \frac{\frac{\partial}{\partial r'} Y_l(\kappa r') - L_l(r') Y_l(\kappa r')}{\frac{\partial}{\partial r'} J_l(\kappa r') - L_l(r') J_l(\kappa r')} \quad (3.17)$$

wobei η_l gleich der Streuphase der l -ten Partialwelle bei Streuung am Potential $u(r)$ ist. Y_l bezeichnet die Bessel-Funktion zweiter Art zum Index l [50]. Die notwendige Bedingung zur nichttrivialen Erfüllung von Gl. (3.15) lautet

$$\det A = 0 \quad (3.18)$$

mit

$$A_{ll'} = (\cot \eta_l - i)\delta_{ll'} + G_{ll'}. \quad (3.19)$$

Die Matrixelemente $A_{ll'}$ hängen über die Strukturkonstanten $G_{ll'}$ und Streuphasen η_l parametrisch von der Energie und dem Bloch-Vektor ab. Sind die Größen $G_{ll'}$ und $\cot \eta_l$ in Abhängigkeit von E und \vec{k} bekannt, so stellt die *Kohn-Rostoker-Determinante* nach Gl. (3.18) und (3.19) ein direktes Mittel zur Bestimmung der Energiewerte $\{E_i(\vec{k})\}$ dar.

3.1.2 Symmetrien

Wir spezialisieren jetzt die KKR-Methode auf den Fall des Sinai-Billards. Die Rolle des gitterperiodischen Potentials übernehmen die periodisch angeordneten Streuzentren. Weiterhin betrachten wir die Symmetrien des Sinai-Billards, um daraus spezielle angepaßte Formen der Kohn-Rostoker-Matrix zu entwickeln. Das zweidimensionale Gitter mit quadratischer Einheitszelle besitzt 8 Symmetrioperationen. Das sind die Operationen C_2 (Drehung um π), C_4 , C_4^{-1} (Drehungen um $\pm\frac{\pi}{2}$), σ_y , σ_x (Spiegelungen an der x - bzw. y -Achse), σ_1 , σ_2 (Spiegelungen an den Geraden $y = \pm x$) und die Identität I . Sie bilden die Gruppe C_{4v} .

Das reziproke Gitter besitzt hier ebenfalls die Symmetriegruppe C_{4v} . Die Brillouin-Zone des zweidimensionalen quadratischen Gitters mit Seitenlänge a ist in Abb. 3.1 dargestellt. Sie entspricht der Elementarzelle des reziproken Gitters, ist quadratisch und besitzt die Seitenlänge $2\pi/a$. Ausgezeichnet sind Punkte, die unter mindestens einer Symmetrioperation des quadratischen Gitters, die nicht gleich der Identität ist, auf sich selber oder auf einen äquivalenten Punkt abgebildet werden. (Zwei Punkte des reziproken Gitters sind äquivalent, wenn sie sich um einen Gittervektor des reziproken Gitters unterscheiden.) Das sind hier insbesondere die Punkte der Δ -, Z - und Σ -Linie. Auf diesen Linien besitzen der Γ -, X - und M -Punkt besonders hohe Symmetrie. Die Menge der Symmetrioperationen, die einen Bloch-Vektor im

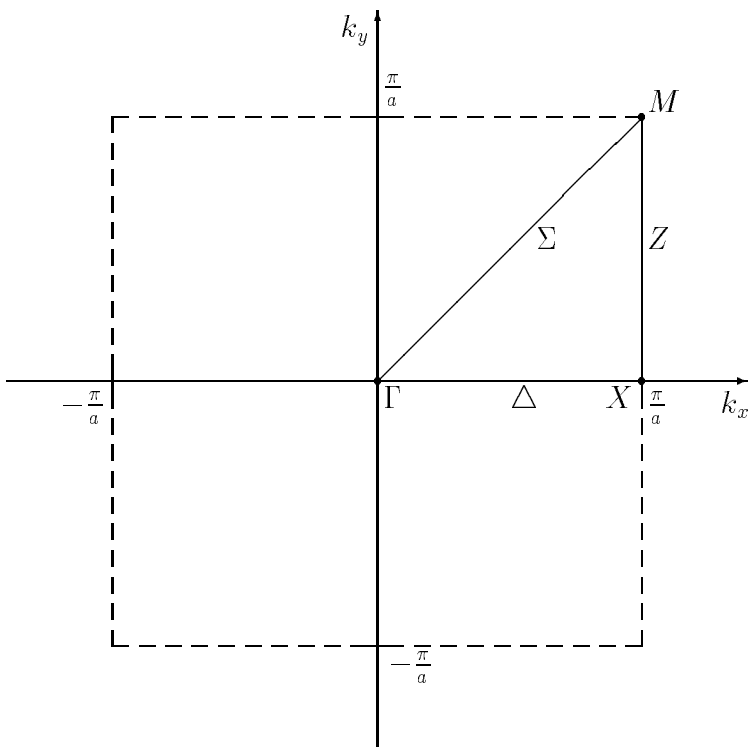


Abbildung 3.1: Brillouin-Zone des quadratischen Gitters mit Seitenlänge a .

obigen Sinne invariant lassen, ist eine Untergruppe von C_{4v} und wird *Gruppe des Bloch-Vektors* genannt. Wir bezeichnen sie mit $\mathcal{G}_{\vec{k}}$. Die ausgezeichneten Punkte sind von besonderem Interesse, wie wir nachfolgend erläutern wollen: Die Anwendung einer Symmetrieoperation A auf eine Wellenfunktion Ψ definieren wir punktweise als

$$A\Psi(\vec{r}) = \Psi(A^{-1}\vec{r}).$$

Besitzt Ψ entsprechend Gl. (3.4) den Bloch-Vektor \vec{k} und ist A eine Symmetrieoperation aus $\mathcal{G}_{\vec{k}}$, dann gilt für die transformierte Funktion $\tilde{\Psi} = A\Psi$

$$\tilde{\Psi}(\vec{r} + \vec{R}) = \Psi(A^{-1}(\vec{r} + \vec{R})) = \Psi(A^{-1}\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot(A^{-1}\vec{R})},$$

da $A^{-1}\vec{R}$ einen Gittervektor des direkten Gitters darstellt. Wegen der Orthogonalität von A hat man

$$e^{i\vec{k}\cdot(A^{-1}\vec{R})} = e^{i(A\vec{k})\cdot\vec{R}} = e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{R}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}, \quad (3.20)$$

dabei ist \vec{G} ein Gittervektor des reziproken Gitters, und das letzte Gleichheitszeichen folgt aus Gl. (3.3). Daher gilt

$$\tilde{\Psi}(\vec{r} + \vec{R}) = \tilde{\Psi}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}.$$

$\tilde{\Psi}$ besitzt also denselben Bloch-Vektor wie Ψ . Daher können die Wellenfunktionen, welche einen festen Bloch-Vektor \vec{k} besitzen, in Klassen aufgeteilt werden, in denen sie sich jeweils nach einer irreduziblen Darstellung von $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ transformieren. Diese Symmetrisierung der Wellenfunktionen bewirkt eine Einschränkung des Lösungsraums von Gl. (3.18) und damit eine Verkleinerung der Dimension der Kohn-Rostoker-Matrix. Außerdem besitzen in diesem Fall die Strukturkonstanten Symmetrierelationen, wodurch die Anzahl unabhängiger Konstanten verringert wird.

Die Symmetrierelationen der Strukturkonstanten werden im Anhang (Abschnitt A.4) aus der Invarianz der sogenannten unvollständigen Green-Funktion unter den Symmetrieoperationen der Gruppe des Bloch-Vektors hergeleitet. Folgendes Programm führen wir im Anhang für alle ausgezeichneten Punkte der Brillouin-Zone durch: Ausgehend von einem ausgezeichneten Punkt der Brillouin-Zone erzeugen wir aus den Basisfunktionen $e^{i\vec{l}\cdot\vec{r}}$, nach denen der Winkelanteil der Wellenfunktion gemäß Gl. (3.12) entwickelt worden ist, einen neuen Satz von symmetrisierten Basisfunktionen. Dieser soll sich nach einer irreduziblen Darstellung von $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ transformieren. Wir erreichen dieses, indem wir die Funktionen $e^{i\vec{l}\cdot\vec{r}}$ mit Hilfe eines geeigneten Projektors auf den zur jeweiligen Darstellung gehörenden Teilraum projizieren. Anschließend können wir mit Hilfe der Symmetrierelationen der Strukturkonstanten und Wellenfunktionen die Kohn-Rostoker-Matrix der Wahl eines bestimmten Bloch-Vektors und einer irreduziblen Darstellung von $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ anpassen. Es zeigt sich, daß dadurch die Dimension der Kohn-Rostoker-Matrix wesentlich verkleinert wird, wodurch wir den numerischen Aufwand zur Berechnung der Kohn-Rostoker-Determinante entsprechend verringern können.

3.2 Das Energiespektrum des Sinai–Billards

Wir wollen die KKR–Methode dazu verwenden, das Energiespektrum des Sinai–Billards zu ausgesuchten Bloch–Vektoren auf den Symmetrielinien der Brillouin–Zone zu berechnen. Wir betrachten zunächst den Fall einer “harten Scheibe”. Dem entspricht klassisch eine Potentialhöhe des Streuzentrums größer als Eins. Es findet vollständige Reflexion am Rande des Streuzentrums statt. Der Muffin–Tin–Radius r_m ist gleich dem Radius R des Streuzentrums. Quantenmechanisch liefert das für die Wellenfunktion die Randbedingung $\Psi(\vec{r}) = 0$ auf dem Rande des Streuzentrums. Nach den Gln. (3.17) und (3.16) ergibt das für den Kotangens der Streuphase die Gleichung

$$\cot \eta_l = \frac{Y_l(\kappa R)}{J_l(\kappa R)}. \quad (3.21)$$

Es erweist sich als günstig, die Matrixelemente $A_{ll'}$ der Kohn–Rostoker–Matrix mit $\tan \eta_l$ zu multiplizieren. Wir erhalten die Matrix \hat{A} mit

$$\hat{A}_{ll'} = (1 - i \tan \eta_l) \delta_{ll'} + \tan \eta_l G_{ll'}. \quad (3.22)$$

Die zu Gl. (3.19) äquivalente Bedingung lautet damit

$$\det \hat{A} = 0. \quad (3.23)$$

Nach Gl. (3.21) gilt

$$\tan \eta_l = \frac{J_l(\kappa R)}{Y_l(\kappa R)}. \quad (3.24)$$

Der Wert der Bessel–Funktion J_l wird schnell klein, wenn der Index l größer als das Argument ist. Die Matrixelemente $\hat{A}_{ll'}$ konvergieren daher mit wachsendem Zeilenindex schnell gegen $\hat{A}_{ll'} = \delta_{ll'}$. Ist $lmax$ die kleinste ganze Zahl größer als κR , dann ist die Determinante in Gl. (3.23) durch die Unterdeterminante $\det \hat{A}_{ll'}$ mit $l, l' = -lmax \cdots lmax$ gut approximiert [13]. Die Kohn–Rostoker–Matrix in dieser Form läßt sich ebenfalls nach den Methoden im Anhang bezüglich einer gewählten Darstellung symmetrisieren. Wir verwenden sie zur numerischen Bestimmung der Energiewerte des Sinai–Billards.

3.2.1 Die Bandstruktur

Als erstes möchten wir einen Überblick geben, indem wir den niederenergetischen Teil der *Bandstruktur* des Sinai–Billards vorstellen. Dazu haben wir zum Radius $R = 0.2$ des Streuzentrums die Energiewerte bis zur Obergrenze $E = 6.0$ (in Einheiten von $4\pi^2$) entlang der Δ –, Z – und Σ –Linie zu dicht nebeneinander liegenden Bloch–Vektoren berechnet. Das Ergebnis ist in Abb. 3.2 zu sehen. Die x –Achse repräsentiert nacheinander die Δ –, Z – und Σ –Linie. Auf jedem dieser Teilstücke haben wir zu 200 äquidistant liegenden

Bloch-Vektoren die Energien berechnet und über der x -Achse aufgetragen. Es entstehen stetige Kurven, welche die Bezeichnung *Bänder* tragen [49]. Außerdem haben wir die Energien den Darstellungen der Gruppe des jeweiligen Bloch-Vektors zugeordnet und die entsprechenden Bänder mit deren Namen bezeichnet.

Abbildung 3.2: *Bandstruktur des Sinai-Billard entlang der Symmetrielinien im Fall der harten Scheibe, $R = 0.2$.*

3.2.2 Die Energieabstandsverteilung von integrablen Systemen und Zufallsmatrizen

In dieser Arbeit wollen wir prüfen, auf welche Art und Weise sich chaotische Eigenschaften eines klassischen Systems im quantenmechanischen Analogon widerspiegeln. Es wird sich zeigen, daß hierbei insbesondere statistische Eigenschaften der Energiespektren eine bedeutende Rolle spielen. Wir betrachten diskrete Energiespektren.

Eine zentrale Größe ist die *Energieabstandsverteilung* $P(S)$. Um Energieabstände unterschiedlicher Systeme statistisch miteinander vergleichen zu können, ist es nötig, auf eindeutige Weise eine Umskalierung der Spektren vorzunehmen, so daß ein genau definierter mittlerer Abstand entsteht [4]. Wir wollen das erläutern. Ein vorgegebenes Spektrum werde mit $\sigma = \{E_i, i = 0, 1, \dots, \infty\}$ bezeichnet. Zuerst wird die *mittlere Modenzahl* $\bar{N}(E)$ bestimmt, welche die mittlere Anzahl von Energiewerten kleiner als E angibt. Im Fall eines Billards bieten sich hierfür die Gln. (2.59) oder 2.60 an. Diese Gleichungen sind zwar nur semiklassisch exakt, sind aber häufig schon im unteren Bereich des Spektrums anwendbar. Wir werden das weiter unten am Beispiel des Sinai-Billard überprüfend. Die Energiewerte $E_i \in \sigma$ sind aufsteigend geordnet, so daß $E_i < E_j$ ist, falls $i < j$. Mittels der Vorschrift

$$\epsilon_i = \bar{N}(E_i) \tag{3.25}$$

wird das Spektrum σ auf die Menge $\{\epsilon_i\}$ transformiert. Die Zahlen ϵ_i besitzen den mittleren Abstand Eins und sind ebenfalls aufsteigend geordnet. Damit kann die Energieabstandsverteilung $P(S)$ wie folgt definiert werden:

$P(S)$ ist gleich der Wahrscheinlichkeit dafür, daß zwei aufeinander folgende Zahlen ϵ_i und ϵ_{i+1} den Abstand $\epsilon_{i+1} - \epsilon_i = S$ besitzen.

Die Energieabstandsverteilung $P(S)$ hängt p. def. vom Hamilton-Operator H des betrachteten Systems ab. Gleichwohl lassen sich einige allgemein gültige Aussagen machen:

Falls das analoge klassische Hamilton-System integrabel ist, erhält man generisch eine *Poisson-Verteilung*

$$P(S) = \exp(-S), \tag{3.26}$$

wie in [12] gezeigt wird. Die Energiewerte sind völlig unkorreliert, liegen also zufällig verteilt auf der Energieachse. Da $P(0)$ ungleich Null ist, spricht man auch von *Energieniveauhäufung*. In [12] stellt sich aber heraus, daß hier ausgerechnet die einfachsten integrablen Systeme – nämlich n -dimensionale harmonische Oszillatoren – aus dem Rahmen fallen. Diese zeigen das Verhalten $P(S) \rightarrow 0$ für $S \rightarrow 0$. Das ist gleichbedeutend damit, daß die Existenz zweier dicht benachbarter Energiewerte sehr gering ist. Diese Eigenschaft wird mit *Energieniveauabstoßung* bezeichnet und ist ein Zeichen für starke Korreliertheit der Energiewerte.

Falls das analoge klassische Hamilton-System nicht integrabel ist, kann zunächst keine allgemeingültige Aussage über $P(S)$ gemacht werden. Es gibt jedoch Vermutungen, die durch numerische Rechnungen belegt werden: Ist das chaotische Verhalten des Systems dominant, so entspricht $P(S)$ der Energieabstandsverteilung eines Ensembles von Zufallsmatrizen; siehe *Random Matrix-Theorie* [51, 52]. Von zentraler Bedeutung ist in dieser Theorie die Gruppe \mathcal{G} der kanonischen Transformationen von H . \mathcal{G} – und damit $P(S)$ – hängt wesentlich vom Verhalten von H unter antiunitärer Transformation ab:

Liegt keine Invarianz unter einer antiunitären Transformation vor, so ist \mathcal{G} gleich der Gruppe der *unitären* Transformationen und es ist

$$P(S) = \frac{32}{\pi^2} S^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} S^2\right). \quad (3.27)$$

$P(S)$ ist hier gleich der Energieabstandsverteilung eines Ensembles von Zufallsmatrizen, deren kanonische Transformationen unitär sind (Gaußsches Unitäres Ensemble GUE).

Ist das System aber invariant unter einer antiunitären Transformation, so kann \mathcal{G} zu einer Untergruppe der unitären Gruppe werden. Dieser Fall ist interessant, weil zeitumkehrinvariante Systeme invariant unter dem antiunitären Zeitumkehroperator T sind. Die folgenden Ausführungen gelten für einen allgemeinen antiunitären Operator T . Gilt $[H, T] = 0$, so hat man zwei Fälle zu unterscheiden:

- Ist $T^2 = 1$, oder – bei Vorliegen einer geeigneten geometrischen Symmetrie – $T^2 = -1$, so kann H als reelle Matrix aufgefaßt werden. Damit kann gezeigt werden, daß G aus allen orthonormalen Transformationen besteht. Die Energieabstandsverteilung ist gegeben durch

$$P(S) = \frac{\pi}{2} S \exp\left(-\frac{\pi}{4} S^2\right) \quad (3.28)$$

und entspricht der Energieabstandsverteilung eines Ensembles von Zufallsmatrizen, deren kanonische Transformationen orthogonal sind (Gaußsches Orthogonales Ensemble GOE).

- Es gilt $T^2 = -1$ und H besitzt keine zusätzlichen geometrischen Symmetrien. In diesem Fall kann gezeigt werden, daß eine Matrixdarstellung von H existiert, in der H eine spezielle Struktur besitzt, die nur unter einer symplektischen Transformation erhalten bleibt. Daher ist G gleich der Gruppe der symplektischen Transformationen. Die Energieabstandsverteilung lautet in diesem Fall

$$P(S) = \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} S^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi} S^2\right). \quad (3.29)$$

Sie entspricht der Energieabstandsverteilung eines Ensembles von Zufallsmatrizen, deren kanonische Transformationen symplektisch sind.

Die Energieabstandsverteilungen in den Gln. (3.27), (3.28) und (3.29) werden *Wigner-Verteilungen* genannt. Im Fall einer Wigner-Verteilung gilt $P(S) \rightarrow 0$ für $S \rightarrow 0$, welches auf starke Korreliertheit der Energieniveaus, also auf Energieniveauabstoßung, hinweist. Der wichtigste Fall ist der Fall eines GOE, da Zeitumkehrinvarianz mit $T^2 = 1$ in zahlreichen Hamilton-Systemen vorgefunden wird, z.B. in allen Hamiltonsystemen mit einem zeitunabhängigen Hamilton-Operator der Form $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, aber auch im Fall des Wasserstoffatoms im homogenen Magnetfeld im Unterraum fester Eigenwerte von J_z und J^2 [51]. Jedes Billard fällt in diese Kategorie, daher ist auch im Fall des chaotischen Sinai-Billard eine Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ des GOE zu erwarten.

Falls im nichtintegrablen Fall das Chaos nicht dominiert, wird erwartet, daß die Energieabstandsverteilung zwischen der Poisson- und der Wigner-Verteilung liegt.

Eine weitere statistische Größe ist die *Steifheit* (rigidity) des Spektrums. Sie besitzt die Bezeichnung $\Delta_3(L, \alpha)$ und ist definiert als

$$\Delta_3(L, \alpha) = \frac{1}{L} \min_{a,b} \int_{\alpha}^{\alpha+L} [N(E) - aE - b]^2 dE. \quad (3.30)$$

$\bar{\Delta}_3(L)$ bezeichnet den Mittelwert über α . Im Fall der Poisson-Verteilung ist $\bar{\Delta}_3(L) = L/15$, im Fall eines GOE gilt $\bar{\Delta}_3(L) = 1/\pi^2(\log L - 0.0687)$ [4].

Ist $n(\alpha, L)$ gleich der Anzahl Energieniveaus im Intervall $[\alpha, \alpha + L]$, dann beschreiben folgende statistische Größen weitere Eigenschaften des Spektrums: Die *Varianz* ist definiert durch

$$\Sigma^2(L) = \langle [n(\alpha, L) - \langle n(\alpha, L) \rangle]^2 \rangle, \quad (3.31)$$

die *Schiefte* (skewness) durch

$$\gamma_1(L) = \frac{\langle [n(\alpha, L) - \langle n(\alpha, L) \rangle]^3 \rangle}{\Sigma^3(L)}, \quad (3.32)$$

und der *Exzess* oder die *Wölbung* (kurtosis) ist

$$\gamma_2(L) = \frac{\langle [n(\alpha, L) - \langle n(\alpha, L) \rangle]^4 \rangle}{\Sigma^4(L)}. \quad (3.33)$$

Hier wird jeweils über die Größe α gemittelt. Analytische Ausdrücke dieser Größen für die hier betrachteten Ensembles sind etwas komplizierter, man findet sie z.B. in [53].

Sind die Energieniveaus zueinander unkorreliert, so ist die Energieabstandsverteilung eine Poisson-Verteilung, was, wie oben gesagt, bei integrablen Systemen in der Regel der Fall ist. Dieser Fall tritt aber auch bei der Überlagerung unabhängiger Energiespektren eines Hamilton-Systems auf, z.B. bei Energiespektren zu verschiedenen fundamentalen Quantenzahlen, wie dem

Gesamtdrehimpuls oder der Parität. Isoliert betrachtet, können die Spektren sehr wohl korreliert sein, also Energieniveaubstöße zeigen. Dieses Phänomen kann experimentell beobachtet werden [54]. Es wird auch numerisch vorgefunden, z.B. bei der Untersuchung von Spektren unterschiedlicher Symmetrieklassen des Stadionbillards [52].

Der klassisch chaotische Fall konnte bisher nur numerisch belegt werden. Man findet z.B. im Stadionbillard eine Energieabstandsverteilung vom GOE-Typ [7]. Hier sind die Energiewerte einer festen Symmetrieklasse untersucht worden. Im Fall des Sinai-Billard ist das Energiespektrum der Γ_2 -Darstellung in [13] und [14] analysiert worden. Wie wir weiter unten noch genauer sehen werden, entsprechen die Eigenwerte dieser Darstellung den Eigenwerten eines dreieckigen Billards ohne Symmetrielinien mit einem kreisförmigen Streuzentrum, dessen Mittelpunkt auf einer Ecke des Billards liegt. Dieses "verkleinerte Sinai-Billard" ist wie das eigentliche Sinai-Billard extrem chaotisch. Die numerisch bestimmte Energieabstandsverteilung in [13] und [14] kann gut durch die Wigner-Verteilung des GOE approximiert werden.

Ein gleichmäßiger Übergang von einer Poisson-Verteilung zu einer Wigner-Verteilung kann in [17] beobachtet werden. Das klassische System wechselt dabei von einer quasiintegrablen Situation, in welcher der Phasenraum von Tori durchsetzt ist, zum praktisch völlig chaotischen Fall, in dem die Tori vollständig verschwunden sind.

3.2.3 Die Energieabstandsverteilungen des Sinai-Billard

In den Arbeiten [13, 14] betrachtete man zur Bestimmung der Energieabstandsverteilung im Sinai-Billard eine Gesamtheit von Energieabständen zur Γ_2 -Darstellung, die aus den Spektren zu unterschiedlichen Radien des Streuzentrums gewonnen wurden. Durch diese Maßnahme konnte eine genügend hohe Zahl von Energieabständen – in beiden Arbeiten ca. 400 – bestimmt werden, so daß die Energieabstandsverteilung berechnet werden konnte. An diesem Vorgehen ist aber zu kritisieren, daß durch die Wahl unterschiedlicher Radien des Streuzentrums physikalisch unterschiedliche Hamilton-Systeme definiert werden. Streng genommen wird dadurch eine Gesamtheit von Energieabständen unterschiedlicher Systeme analysiert. Die statistischen Eigenschaften eines Energiespektrums beziehen sich aber auf ein eindeutig definiertes System. Angesichts dieses Mangels berechnen wir hier zu festen Radien des Sinai-Billard jeweils eine genügend große Anzahl von Energiewerten der Γ_2 -Darstellung, bestimmen die Energieabstandsverteilungen und führen noch weitere Untersuchungen durch (s.u.). Außerdem gehören zum Spektrum des Sinai-Billard neben den Energien der Γ_2 -Darstellung die Energien der Darstellungen Γ_1 , Γ_3 , Γ_4 und Γ_5 . Dabei befinden wir uns im Γ -Punkt der Brillouin-Zone. Wechseln wir zu anderen Punkten der Brillouin-Zone, dann

stoßen wir auf die Spektren der Darstellungen der Gruppe dieser Bloch-Vektoren. Gibt es typische Merkmale des Energiespektrums, die durch chaotische Eigenschaften des klassischen Systems begründet sind, dann ist zu vermuten, daß diese auch hier zu finden sind. Daher wollen wir die Energiespektren zu sämtlichen Darstellungen im Γ -Punkt und zu den Darstellungen zu verschiedenen Bloch-Vektoren auf den Symmetrielinien berechnen und analysieren.

Vorab wollen wir die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen der Darstellungen, die wir im Anhang (Abschn. A.4.2) einführen, diskutieren. Die Darstellungen sind bis auf Γ_5 sämtlich eindimensional. Ihre Charaktere bzgl. der reinen Spiegelungen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_x$ und σ_y lauten 1 oder -1 [49]. Die zugehörigen Wellenfunktionen sind daher symmetrisch oder antisymmetrisch unter der jeweiligen Spiegelung. D.h., auf der Symmetrielinie, an der gespiegelt wird, ist die Ableitung der Wellenfunktion in orthogonaler Richtung gleich Null (die Wellenfunktion besitzt dort einen “Bauch”), oder der Wert der Wellenfunktion selber ist gleich Null (die Symmetrielinie stellt eine Knotenlinie der Wellenfunktion dar). Die Symmetrielinien des Sinai-Billardes bezüglich der oben genannten Spiegelungen laufen durch den Ursprung und werden jeweils durch eine Gitterlinie dargestellt. Eine Wellenfunktion Ψ besitzt bzgl. einer Geraden, die durch Parallelverschiebung um einen Gittervektor aus einer Symmetrielinie g hervorgeht, dieselben Symmetrieeigenschaften wie zu g . Das folgt aus Gl. (3.4). Sei \vec{R} der kürzeste Gittervektor orthogonal zu g . Besitzt der Bloch-Vektor von Ψ dieselbe Richtung wie g , dann besitzt Ψ bzgl. einer Geraden, die aus Parallelverschiebung von g um den Vektor $\vec{R}/2$ hervorgeht, dieselbe Symmetrie wie zu g . Zum Beweis betrachten wir Abb. 3.3. Die Symmetrielinie g läuft durch den Ursprung. Zwei parallele Geraden g_1 und g_2 , die durch Parallelverschiebung um den Vektor $\pm\vec{R}/2$ aus g entstehen, sind eingezeichnet. Der Abstand von \vec{r}_1 und \vec{r}_2 zu g_1 sei ϵ , außerdem sind $\vec{r}'_1 = \vec{r}_1 + \vec{R}$ und $\vec{r}'_2 = \vec{r}_2 + \vec{R}$. Der Bloch-Vektor steht senkrecht auf \vec{R} , daraus folgt mit Gl. (3.4) für die betrachtete Wellenfunktion Ψ :

$$\Psi(\vec{r}_1) = \Psi(\vec{r}'_1), \quad \Psi(\vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}'_2). \quad (3.34)$$

Besteht nun Symmetrie bzgl. Spiegelung an g , dann gilt

$$\Psi(\vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}'_1) \Rightarrow \Psi(\vec{r}_1) = \Psi(\vec{r}_2), \quad \Psi(\vec{r}'_1) = \Psi(\vec{r}'_2).$$

Damit besteht ebenfalls Symmetrie bzgl. Spiegelung an g_1 und g_2 . Besteht hingegen Antisymmetrie bzgl. Spiegelung an g , dann folgt mit Gl. (3.34)

$$\Psi(\vec{r}_2) = -\Psi(\vec{r}'_1) \Rightarrow \Psi(\vec{r}_1) = -\Psi(\vec{r}_2), \quad \Psi(\vec{r}'_1) = -\Psi(\vec{r}'_2).$$

In diesem Fall besteht ebenfalls Antisymmetrie bzgl. Spiegelung an g_1 und g_2 . Diese Situation – der Bloch-Vektor besitzt die Komponente Null orthogonal zur Symmetrielinie – trifft auf die Wellenfunktionen der Darstellungen zur Δ -Linie und zur Σ -Linie zu. Die Wellenfunktionen der Darstellungen zur

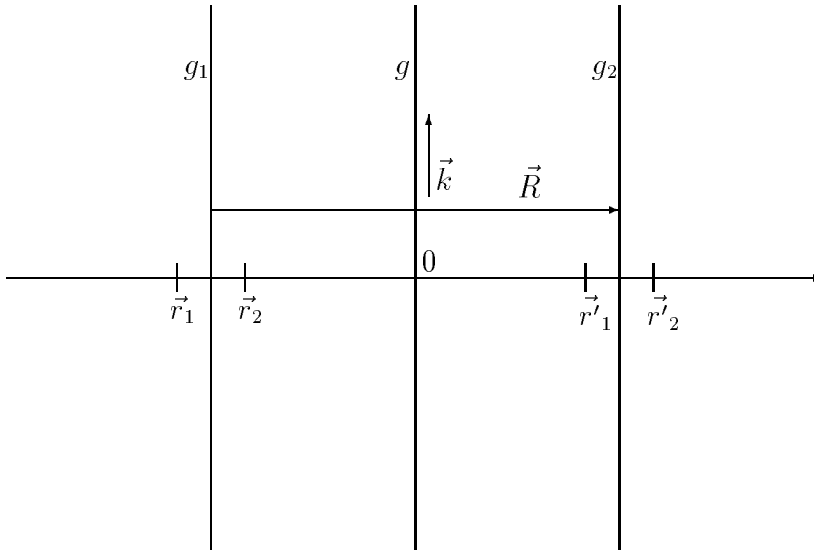


Abbildung 3.3: Weitere Symmetrielinien parallel zu g , der Fall $\vec{k} = 0$ eingeschlossen.

Z -Linie besitzen Symmetrie bzw. Antisymmetrie bzgl. Spiegelung an der y -Achse. Der Bloch-Vektor besitzt hier die Komponente π/a orthogonal zur Symmetrielinie. In diesem Fall folgt aus Gl. (3.4)

$$\Psi(\vec{r}_1) = -\Psi(\vec{r}'_1), \quad \Psi(\vec{r}_2) = -\Psi(\vec{r}'_2). \quad (3.35)$$

Betrachten wir jetzt Abb. 3.3, dann folgt bei Symmetrie bzgl. Spiegelung an g Antisymmetrie unter Spiegelung an g_1 und g_2 , bei Antisymmetrie bzgl. Spiegelung an g Symmetrie unter Spiegelung an g_1 und g_2 . Mit Hilfe dieser Überlegungen lassen sich die Symmetrietypen der diversen Symmetrielinien zu allen eindimensionalen Darstellungen bestimmen. Sie sind in Abb. 3.4 dargestellt.

Den Symmetrielinien vom antisymmetrischen Typ entsprechen Knotenlinien der Wellenfunktion. Diese Situation entspricht genau der Randbedingung, die man bei der Quantisierung eines klassischen Systems erhält, in dem die Trajektorien an diesen Linien reflektiert werden. Auf Symmetrielinien vom symmetrischen Typ ist die Normalableitung der Wellenfunktion gleich Null. Die Wellenfunktion besitzt dort einen Bauch. Ein klassisches Analogon, wie die Reflexion bei Symmetrielinien vom antisymmetrischen Typ, gibt es hier nicht. Entsprechend dieser Argumentation kann den Darstellungen, die nur Symmetrielinien vom antisymmetrischen Typ besitzen, ein Billard als klassisches Analogon zugeordnet werden. Dieses Billard wird jeweils durch die Symmetrielinien begrenzt. Dies trifft auf die Darstellungen Γ_2 , Δ_2 und Σ_2 zu.

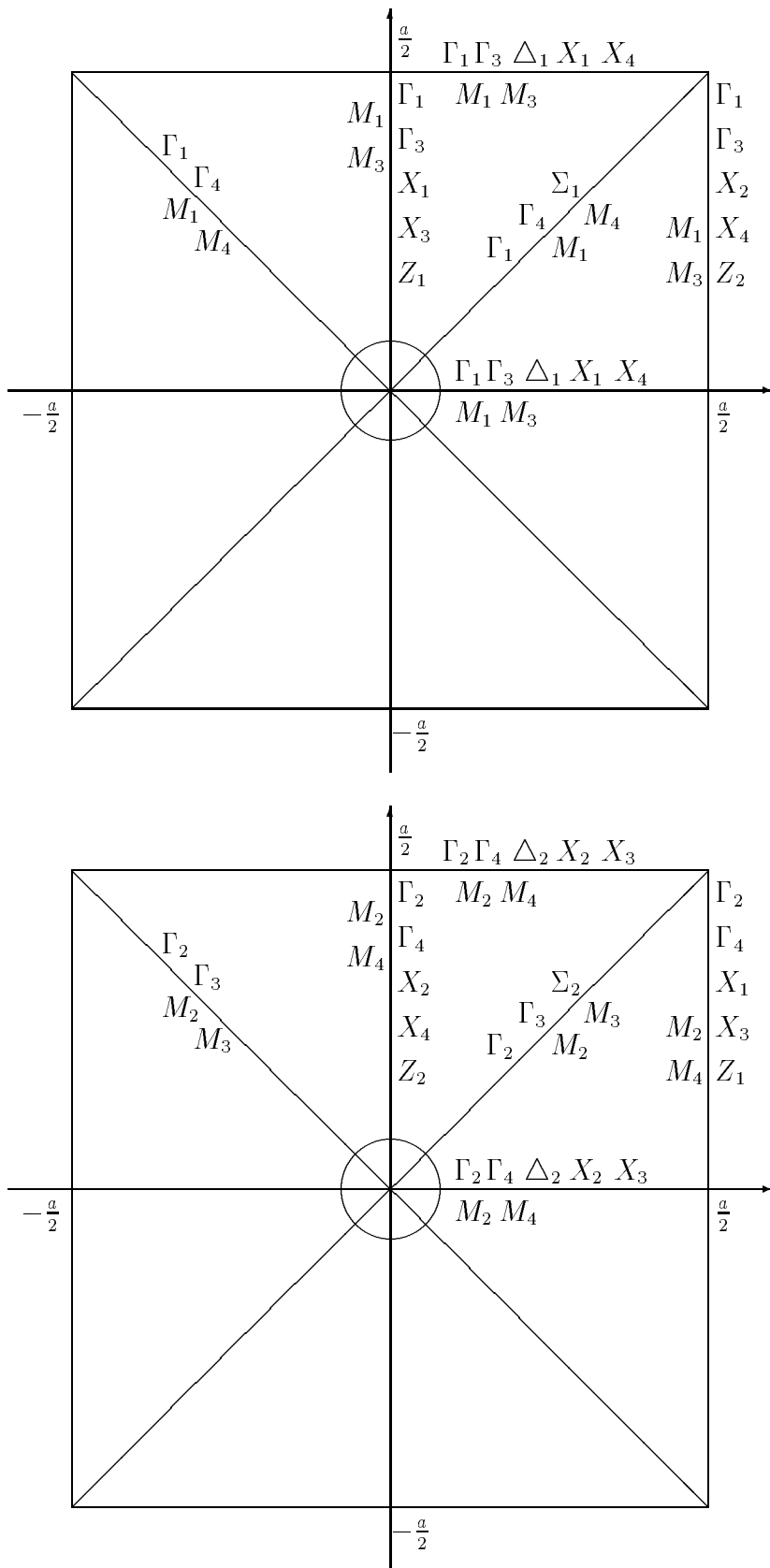


Abbildung 3.4: Symmetriotyp der diversen Darstellungen auf den Symmetrielinien; oben Symmetrie, unten Antisymmetrie.

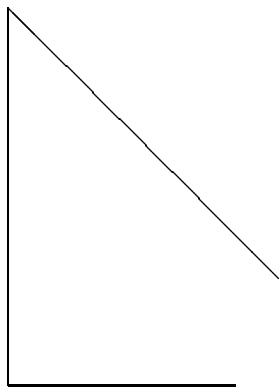


Abbildung 3.5: *Billard zur Γ_2 -Darstellung*

Die Symmetrielinien der Γ_2 -Darstellung begrenzen ein Dreieck, dem genau ein Achtel der Einheitszelle des Sinai-Billard entspricht. Im Fall der harten Scheibe wird die Ecke im Zentrum des Sinai-Billard durch das Streuzentrum abgeschnitten. Das Billard ist in Abb. 3.5 zu sehen. Die Wellenfunktionen und Energiewerte der Γ_2 -Darstellung entsprechen also genau denjenigen, welche man aus der Quantisierung des durch die Symmetrielinien begrenzten klassischen Billards erhält. Es ist, wie das Sinai-Billard selbst, klassisch extrem chaotisch.

Die Symmetrielinien der Δ_2 -Darstellung begrenzen ein unendlich ausgedehntes Billard parallel zur x -Achse der Breite $a/2$. Der Σ_2 -Darstellung kann ein Billard zugeordnet werden, das unendlich ausgedehnt parallel zur Winkelhalbierenden des ersten Quadranten verläuft. Es besitzt die Breite $a/\sqrt{2}$. Auf den Rändern dieser Billards liegen mit konstantem Abstand die Streuzentren. Die Wellenfunktionen gehorchen zusätzlich der Randbedingung, die durch den Bloch-Vektor und Gl. (3.4) vorgegeben ist.

Wir wollen jetzt die Energieabstandsverteilungen der Darstellungen im Γ -Punkt ($\vec{k} = 0$) vorstellen. Zur Transformation der Spektren gemäß Gl. (3.25) benötigen wir die mittlere Modenzahl $\bar{N}(E)$. Dem Spektrum der Darstellung Γ_2 entspricht das Spektrum, das aus der Quantisierung des Billards in Abb. 3.5 hervorgeht. Daher greifen wir hier zur Bestimmung der mittleren Modenzahl auf Gl. (2.60) im Fall von Dirichlet-Randbedingungen zurück. Die Fläche des Billards beträgt $A = \frac{1}{8}(a^2 - R^2\pi)$ und der Umfang ist $L = a(1 + \sqrt{\frac{1}{2}}) - 2R + \frac{2\pi R}{8}$ ($a = 1$). Im Fall $R \neq 0$ ist der Parameter K gleich $\frac{31}{96}$; für $R = 0$ gilt $K = \frac{3}{8}$ [13]. In den Abbildungen 3.6 und 3.7 sind $\bar{N}(E)$ und $N(E)$ im Intervall $0 \leq E \leq 400$ für vier verschiedene Radien des Streuzentrums aufgetragen. Die Energieeinheit beträgt hier $4\pi^2$. Gl. (2.60) ist asymptotisch gültig für große Energien oder im Limes $\hbar \rightarrow 0$. Für einen endlichen Energiebereich, wie wir ihn betrachten, kann sie daher nur eine Näherung sein. Gerade das genügt für unser Anliegen. Wir benötigen eine eindeutig bestimmte mittlere Modenzahl. In den Abbildungen 3.6 und 3.7 ist zu sehen, daß Gl. (2.60) die mittlere Modenzahl $\bar{N}(E)$ im Fall der Γ_2 -Darstellung sehr gut wiedergibt.

Abbildung 3.6: Modenzahl $N(E)$ (Treppenfunktion) und mittlere Modenzahl $\bar{N}(E)$ (glatte Kurve) im Fall der Γ_2 -Darstellung für zwei verschiedene Radien des Streuzentrums.

Abbildung 3.7: Modenzahl $N(E)$ (Treppenfunktion) und mittlere Modenzahl $\bar{N}(E)$ (glatte Kurve) im Fall der Γ_2 -Darstellung für zwei verschiedene Radien des Streuzentrums.

Allen weiteren Darstellungen kann kein Grundgebiet mit durchgehender von Neumann- oder Dirichlet-Randbedingung zugeordnet werden. Das gilt auch für die Γ_1 -Darstellung, obwohl sie nur Symmetrielinien vom symmetrischen Typ besitzt. Am Rande des Streuzentrums sind die Wellenfunktionen aller Darstellungen gleich Null. Das entspricht der Dirichlet-Randbedingung. Trotzdem verwenden wir Gl. (2.60) zur Berechnung von $\bar{N}(E)$. Wir bestimmen die Koeffizienten A , L und K durch Minimierung der Summe

$$\sum_i \left[N(E_i) - (A \cdot E_i + L \cdot \sqrt{E_i} + K) \right]^2.$$

Die Summe läuft über alle mit Hilfe der KKR-Methode bestimmten Energiewerte. $N(E_i)$ ist gleich der exakten Modenzahl zur Energie E_i . (Hier kann L sowohl positive als auch negative Werte annehmen, A ist nicht gleich der Fläche des Billards.) Mit Hilfe von $\bar{N}(E)$ und Gl. (3.25) lassen sich nun die Energieabstandsverteilungen der verschiedenen Energiespektren berechnen.

Die Energieabstandsverteilungen der Γ_1 - und Γ_2 -Darstellung sind in Abb. 3.8 und 3.9 aufgetragen. Die Spektren sind jeweils für die angegebenen Radien im Intervall $0 < E < 1193$ bestimmt worden. Die Anzahl der Energieabstände zur Darstellung Γ_1 beträgt 467 für $R = 0.1$, 423 für $R = 0.2$, 345 für $R = 0.3$ und 249 für $R = 0.4$. Im Fall der Darstellung Γ_2 sind die Anzahlen der berechneten Energieabstände gleich 413, 375, 295 und 213 für die Radien 0.1, 0.2, 0.3 bzw. 0.4. Die Anzahl der Energieniveaus und damit die Anzahl der Ener-

Abbildung 3.8: *Energieabstandsverteilungen der Γ_1 -Darstellung für $R = 0.1, \dots, 0.4$. Die glatten Kurven entsprechen der Wigner-Verteilung des GOE.*

Abbildung 3.9: *Energieabstandsverteilungen der Γ_2 -Darstellung für $R = 0.1, \dots, 0.4$ und Wigner-Verteilungen des GOE (glatte Kurven).*

gieabstände nimmt jeweils mit wachsendem Radius des Streuzentrums ab; denn mit wachsendem Radius des Streuzentrums nimmt die Fläche im Ortsraum, in der sich das Teilchen aufhalten kann, ab (siehe auch Gl. (2.59)). Das Ergebnis ist für alle betrachteten Radien gleich. In beiden Darstellungen werden die Energieabstandsverteilungen durch die Wigner-Verteilung des GOE gut approximiert. Insbesondere der lineare Anstieg im Ursprung und der exponentielle Abfall für große Abstände sind zu erkennen. Das Ergebnis der Arbeiten [14] und [13] wird damit weitgehend bestätigt. Dort ist eine Energieabstandsverteilung vom GOE-Typ im Fall der Γ_2 -Darstellung gefunden worden. Allerdings wurde dafür eine Gesamtheit von Energieabständen zu den Radien $R = 0.1$, $R = 0.2$, $R = 0.3$ und $R = 0.4$ zu Grunde gelegt. Wir haben Energieabstandsverteilungen vom GOE-Typ für jeden dieser Radien gefunden.

Es folgen die Energieabstandsverteilungen der Darstellungen Γ_3 und Γ_4 in den Abbildungen 3.10 und 3.11. Die Anzahlen der berechneten Energieabstände für die Radien 0.1, 0.2, 0.3 und 0.4 betragen im Fall von Γ_3 449, 413, 360, 288, im Fall von Γ_4 446, 401, 351, 289. Das Ergebnis ist wieder unabhängig vom Radius des Streuzentrums. Auch hier wird in beiden Darstellungen die Energieabstandsverteilung durch die Wigner-Verteilung des GOE gut approximiert. Bis hierher unterstützen unsere Ergebnisse die Vermutung, daß klassisch chaotische Systeme Energieniveauabstoßung aufweisen, oder genauer, daß die Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ ist.

Abbildung 3.10: *Energieabstandsverteilungen der Γ_3 -Darstellung für $R = 0.1, \dots, 0.4$. Die glatten Kurven entsprechen der Wigner-Verteilung des GOE.*

Abbildung 3.11: *Energieabstandsverteilungen der Γ_4 -Darstellung für $R = 0.1, \dots, 0.4$ und Wigner-Verteilungen des GOE (glatte Kurven).*

Abbildung 3.12: *Energieabstandsverteilungen im Fall der Γ_5 -Darstellung für $R = 0.1, \dots, 0.4$. Die glatten Kurven stellen die Wigner-Verteilung des GOE bzw. die Poisson-Verteilung dar.*

Völlig abweichend von unseren bisherigen Feststellungen verhält sich die zweidimensionale Darstellung Γ_5 . Hier konnten im Intervall $0 < E < 1193$ für die Radien $R = 0.1, 0.2, 0.3$ und 0.4 905, 898, 880 bzw. 864 Energieabstände berechnet werden. Die Energieabstandsverteilungen zu diesen Radien sind in Abb. 3.12 zu sehen. Das Ergebnis steht im krassen Gegensatz zu den eindimensionalen Darstellungen. Beim Radius $R = 0.1$ sehen wir noch eine gute Übereinstimmung mit der Wigner-Verteilung des GOE. Mit steigendem Radius verändert sich aber die Energieabstandsverteilung, indem die Tendenz zur Energieniveauhäufung zunimmt. Bei $R = 0.4$ besitzt $P(S)$ große Ähnlichkeit mit der Poisson-Verteilung. Eine Erklärung hierfür konnten wir nicht finden.

Eine Poisson-Verteilung hätten wir eigentlich bei der Überlagerung von Spektren unterschiedlicher Darstellungen erwartet. Um diesen Effekt zu demonstrieren, zeigen wir in Abb. 3.13 die Energieabstandsverteilungen, die aus der Überlagerung der Spektren verschiedener Darstellungen im Γ -Punkt hervorgehen. Überlagert haben wir jeweils die Spektren der Darstellungspaare $\Gamma_1 \Gamma_3$, $\Gamma_2 \Gamma_4$, $\Gamma_1 \Gamma_4$ und $\Gamma_2 \Gamma_3$. Diese Darstellungspaare haben wir aus Gründen gewählt, auf die wir weiter unten eingehen werden. Wir haben als Radius des Streuzentrums $R = 0.2$ gewählt. Es ist zu sehen, daß sämtliche Energieabstandsverteilungen durch die Poisson-Verteilung gut genähert werden. Das hat seine Ursache in der Unkorreliertheit der Energiewerte unterschiedlicher Darstellungen, wie wir oben schon festgestellt haben.

Γ_1, Γ_3 Γ_2, Γ_4 Γ_1, Γ_4 Γ_2, Γ_3

Abbildung 3.13: *Energieabstandsverteilungen im Fall der Überlagerung von Spektren unterschiedlicher Darstellungen, $R = 0.2$. Die glatten Kurven stellen die Poisson-Verteilung dar.*

Wir betrachten nun die Energieabstandsverteilungen auf der Δ -Linie. Hier gibt es bei festem Bloch-Vektor die zwei eindimensionalen Darstellungen Δ_1 und Δ_2 . Wir haben die Bloch-Vektoren $\vec{k} = (0.3, 0)$, $\vec{k} = (0.2, 0)$, $\vec{k} = (0.1, 0)$ und $\vec{k} = (0.01, 0)$ (in Einheiten von $2\pi/a$) für unsere Untersuchungen ausgewählt. Auf der Basis von jeweils 1000 Energiewerten sind die Energieabstandsverteilungen $P(S)$ der Δ_1 - und Δ_2 -Darstellung zu den Radien $R = 0.1$, $R = 0.2$, $R = 0.3$ und $R = 0.4$ des Streuzentrums bestimmt worden. Es stellt sich heraus, daß $P(S)$ hier qualitativ unabhängig vom Radius des Streuzentrums ist. Daher haben wir der Übersichtlichkeit wegen die Energieabstandsverteilungen der Darstellungen Δ_1 und Δ_2 zu den vier Bloch-Vektoren nur zum Radius $R = 0.2$ in den Abbildungen 3.14 und 3.15 aufgetragen. In beiden Darstellungen ist ein qualitativ gleiches Verhalten der Energieabstandsverteilungen zu sehen. Im Fall eines relativ großen Bloch-Vektors, nämlich $\vec{k} = (0.3, 0)$ und $\vec{k} = (0.2, 0)$, liegt eine gute Übereinstimmung mit der Wigner-Verteilung des GOE vor. Das Spektrum weist Energieniveaubstößung auf. Wird der Bloch-Vektor aber kleiner, $\vec{k} = (0.1, 0)$, so verändert sich die Energieabstandsverteilung, und es tritt eine Tendenz zur Energieniveauhäufung auf. Für $\vec{k} = (0.01, 0)$ ist jede Übereinstimmung mit der Wigner-Verteilung des GOE verschwunden. Die Energieabstandsverteilung wird jetzt durch die Poisson-Verteilung gut genähert. Das Spektrum ist folglich völlig unkorreliert. Zusammenfassend erfährt die Energieabstandsverteilung bei Annäherung an den Γ -Punkt einen Übergang von der Wigner-

$$\vec{k} = (0.3, 0)$$

$$\vec{k} = (0.2, 0)$$

$$\vec{k} = (0.1, 0)$$

$$\vec{k} = (0.01, 0)$$

Abbildung 3.14: *Energieabstandsverteilungen der Δ_1 -Darstellung zu unterschiedlichen Bloch-Vektoren. $R = 0.2$. Die glatten Kurven entsprechen der Poisson-Verteilung bzw. der Wigner-Verteilung des GOE.*

$$\vec{k} = (0.3, 0)$$

$$\vec{k} = (0.2, 0)$$

$$\vec{k} = (0.1, 0)$$

$$\vec{k} = (0.01, 0)$$

Abbildung 3.15: *Energieabstandsverteilungen der Δ_2 -Darstellung zu unterschiedlichen Bloch-Vektoren. $R = 0.2$. Poisson-Verteilungen und Wigner-Verteilungen des GOE wie in Abb. 3.14.*

Verteilung des GOE zur Poisson-Verteilung.

Es liegt die Vermutung nahe, daß das Verhalten der Energieabstandsverteilung auf der Δ -Linie auch auf anderen Symmetrielinien zu finden ist, die durch den Γ -Punkt laufen. Diese Eigenschaft besitzt neben der Δ -Linie nur noch die Σ -Linie. Zu einem festen Bloch-Vektor gibt es hier die beiden eindimensionalen Darstellungen Σ_1 und Σ_2 . Wir wollen wie auf der Δ -Linie die Abhängigkeit der Energieabstandsverteilung vom Bloch-Vektor überprüfen. Die Energieabstandsverteilungen der Σ_1 - und Σ_2 -Darstellung haben wir zu den Bloch-Vektoren $\vec{k} = (0.25, 0.25)$, $\vec{k} = (0.2, 0.2)$, $\vec{k} = (0.04, 0.04)$ und $\vec{k} = (0.01, 0.01)$ berechnet. Sie sind auf der Basis von jeweils 1000 Energiewerten zu den Radien $R = 0.1$, $R = 0.2$, $R = 0.3$ und $R = 0.4$ bestimmt worden. Wie auf der Δ -Linie liegt hier qualitativ eine Unabhängigkeit der Energieabstandsverteilung vom Radius des Streuzentrums vor. Daher haben wir $P(S)$ nur für $R = 0.2$ im Fall beider Darstellungen zu den vier Bloch-Vektoren in den Abbildungen 3.16 und 3.17 aufgetragen. Wieder ist eine bemerkenswerte Übereinstimmung zwischen den jeweiligen Energieabstandsverteilungen der Σ_1 - und Σ_2 -Darstellung zu sehen. Abweichend vom Verhalten auf der Δ -Linie können wir hier in keinem Fall eine gute Übereinstimmung von $P(S)$ mit der Wigner-Verteilung des GOE beobachten; für jeden betrachteten Bloch-Vektor liegt eine starke Abweichung vom linearen Anstieg der Wigner-Verteilung des GOE in der Nähe von Null vor. Die

$$\vec{k} = (0.25, 0.25)$$

$$\vec{k} = (0.2, 0.2)$$

$$\vec{k} = (0.04, 0.04)$$

$$\vec{k} = (0.01, 0.01)$$

Abbildung 3.16: *Energieabstandsverteilungen der Σ_1 -Darstellung zu verschiedenen Bloch-Vektoren, $R = 0.2$; außerdem Poisson-Verteilungen und Wigner-Verteilungen des GOE.*

$$\vec{k} = (0.25, 0.25)$$

$$\vec{k} = (0.2, 0.2)$$

$$\vec{k} = (0.04, 0.04)$$

$$\vec{k} = (0.01, 0.01)$$

Abbildung 3.17: Energieabstandsverteilungen der Σ_2 -Darstellung zu verschiedenen Bloch-Vektoren, $R = 0.2$. Poisson-Verteilungen und die Wigner-Verteilungen des GOE wie in Abb. 3.16.

Spektren weisen starke Tendenz zur Unkorreliertheit auf. In der Nähe des Γ -Punktes, bei $\vec{k} = (0.01, 0.01)$, sehen wir wie auf der Δ -Linie eine sehr gute Übereinstimmung mit der Poisson-Verteilung. Das Spektrum ist hier völlig unkorreliert.

Wir haben die Spektren sämtlicher Darstellungen im X -Punkt und auf der Z -Linie zu $\vec{k} = (0.5, 0.2)$ untersucht. Auf der Basis von jeweils 500 bzw. 800 Energiewerten haben wir die Energieabstandsverteilungen zu den Radien $R = 0.1$, $R = 0.2$, $R = 0.3$ und $R = 0.4$ berechnet. Zu jeder betrachteten Darstellung haben wir qualitativ das gleiche Verhalten der Energieabstandsverteilung beobachtet. $P(S)$ ist beispielhaft für die Darstellungen X_3 und Z_2 und die genannten Radien des Streuzentrums in den Abbildungen 3.18 und 3.19 dargestellt. Es ist zu sehen, daß die Energieabstandsverteilungen für X_3 und Z_2 im Fall eines kleinen Radius des Streuzentrums, $R = 0.1$, durch die Wigner-Verteilung des GOE gut approximiert werden. Bei wachsendem Radius wird die Übereinstimmung immer schlechter. Für beide Darstellungen nimmt die Tendenz zur Energieniveauhäufung zu. Bei $R = 0.4$ gibt es nur noch geringe Abweichungen von der Poisson-Verteilung. Im Fall dieser beiden Bloch-Vektoren finden wir also mit wachsendem Radius des Streuzentrums einen Übergang von der Wigner-Verteilung des GOE zur Poisson-Verteilung. Das entspricht dem Übergang von Korreliertheit zu starker Unkorreliertheit der Energien dieser Spektren. Eine Erklärung dieses Phänomens existiert nicht.

Abbildung 3.18: *Energieabstandsverteilungen der X_3 -Darstellung für $R = 0.1, \dots, 0.4$. Die glatten Kurven entsprechen der Wigner-Verteilung des GOE und der Poisson-Verteilung.*

Abbildung 3.19: *Energieabstandsverteilungen der Z_2 -Darstellung für $R = 0.1, \dots, 0.4$ zu $\vec{k} = (0.5, 0.2)$; außerdem Wigner-Verteilungen des GOE und Poisson-Verteilungen.*

Wir haben festgestellt, daß auf der gesamten Σ -Linie und auf der Δ -Linie in der Nähe des Γ -Punktes starke Unkorreliertheit der Energiewerte vorzufinden ist. Das steht im Gegensatz zur allgemeinen Vermutung, daß in klassisch chaotischen Systemen grundsätzlich Energieniveauabstoßung, also Korreliertheit der Energiewerte, existiert. Das beobachtete Verhalten auf der Δ - und Σ -Linie in der Nähe des Γ -Punktes besitzt jedoch eine nichtklassische Erklärung:

Die Darstellung eines Energieniveaus geht auf jeder der beiden Symmetrielinien bei Annäherung des Bloch-Vektors an den Γ -Punkt stetig in eine der Darstellungen Γ_1 bis Γ_5 über. Das ist zum Beispiel in Abb. 3.2 an der Bandstruktur zu sehen. Die möglichen Übergänge sind durch die *Kompatibilitätsrelationen* definiert [49]. Diese sind durch die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen bestimmt. Die Darstellung Γ_5 ist mit allen Darstellungen auf beiden Symmetrielinien kompatibel. Aus Abb. 3.4 sind die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen der eindimensionalen Darstellungen zu ersehen. Demnach ist die Darstellung Δ_1 kompatibel mit Γ_1 und Γ_3 , Δ_2 mit Γ_2 und Γ_4 , Σ_1 ist kompatibel mit Γ_1 und Γ_4 , Σ_2 mit Γ_2 und Γ_3 . Eine Energieabstandsverteilung geht bei Annäherung des Bloch-Vektors an den Γ -Punkt über in die Energieabstandsverteilung des Spektrums, das durch Überlagerung der Spektren der kompatiblen Darstellungen entsteht. Z.B. geht das Spektrum der Δ_1 -Darstellung in die Überlagerung der Spektren der Γ_1 -, Γ_3 - und Γ_5 -Darstellung über. Schon allein die Überlagerung des Γ_1 - und Γ_2 -Spektrums (ohne Γ_5 -Spektrum) ergibt starke Unkorreliertheit, wie in Abb. 3.13 zu sehen ist. Analog erklärt sich die Unkorreliertheit des Δ_2 -, des σ_1 - und des σ_2 -Spektrums in der Nähe des Γ -Punktes. Die Energieabstandsverteilungen der Überlagerungen der in Frage kommenden Darstellungen (bis auf die Γ_5 -Darstellung) sind in Abb. 3.13 zu sehen.

Wir haben im Sinai-Billard sowohl Energieabstandsverteilungen vom Wigner-Typ des GOE als auch vom Poisson-Typ gefunden. Die Ergebnisse waren abhängig vom Bloch-Vektor und in einigen Fällen auch vom Radius des Streuzentrums. Dieses Ergebnis scheint gegen die Erwartung zu sprechen, daß im klassisch chaotischen Sinai-Billard quantenmechanisch grundsätzlich Energieniveauabstoßung vorzufinden ist. Wie oben gesagt, läßt sich dafür keine direkte Erklärung finden. Man muß bei diesen Überlegungen allerdings beachten, daß das Sinai-Billard als Ganzes nicht das klassische Analogon der einzelnen Spektren ist, die wir betrachtet haben. Das vollständige Spektrum des Sinai-Billards ist durch die gesamte Bandstruktur gegeben, von der wir den niederenergetischen Teil in Abb. 3.2 dargestellt haben.

Wir wollen der Frage weiter nachgehen, inwieweit ein klassisch chaotisches System quantenmechanisch eine Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ des GOE besitzt. Der Extremfall eines klassisch chaotischen Systems ist ein ergodisches System. Ein solches System besitzt einen kompakten Phasenraum. Betrachten wir die klassischen Analoga, die wir weiter oben den Spektren einiger Darstellungen zugeordnet haben (S. 51), dann trifft diese Eigen-

schaft nur auf das Dreiecksbillard in Abb. 3.5 zu, das der Γ_2 -Darstellung entspricht. Daher wollen wir das Spektrum dieser Darstellung noch genauer untersuchen. Abb. 3.9 unterstützt unsere Hypothese, daß klassischem Chaos quantenmechanisch Energieniveauabstoßung, also eine Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ, entspricht. Bei den obigen Untersuchungen entsprach das Streuzentrum einer "harten Scheibe", also einer Potentialschwelle von unendlicher Höhe U . Nun wollen wir untersuchen, was passiert, wenn U endlich wird. Die klassische Situation haben wir in Kap. 1 untersucht; das klassische Teilchen bewegte sich dort mit der Gesamtenergie Eins. Wir haben festgestellt, daß das System die Eigenschaft der Ergodizität verliert, wenn U kleiner gleich Null und größer als ein (negativer) kritischer Wert U_c ist. Dabei ist U_c durch Gl. (1.2) gegeben. Wir wollen jetzt das Spektrum der Γ_2 -Darstellung zu verschiedenen Werten von U untersuchen. Es stellt sich die Frage, welche Werte von U für unsere Fragestellung von Bedeutung sind. Im Fall $R = 0.3$ haben wir im klassischen System Energien zwischen $U_c = -5.25$ und $U = 1$ betrachtet. Im Gegensatz zur Energie des Teilchens im klassischen Fall besitzen die quantenmechanischen Energiewerte, die wir numerisch bestimmen können, eine Größenordnung von 10^0 bis 10^3 . Wir wählen Potentialhöhen, die diesen Größenordnungen entsprechen.

Der Tangens der Streuphase ist nach Gl. (3.17) durch

$$\tan \eta_l = \left. \frac{\frac{\partial}{\partial r'} J_l(\kappa r') - L_l(r') J_l(\kappa r')}{\frac{\partial}{\partial r'} Y_l(\kappa r') - L_l(r') Y_l(\kappa r')} \right|_{r'=R} \quad (3.36)$$

gegeben. Zur Berechnung der logarithmischen Ableitung $L_l(r')$ wird hier die allgemeine Lösung von Gl. (3.13) zu einem konstanten Potential benötigt. Diese Gleichung geht dann über in die Besselsche Differentialgleichung, weshalb man die allgemeine Lösung durch Bessel-Funktionen ausdrücken kann. Der Wert der Ableitung der Bessel-Funktion J_l ebenso wie der Wert der Bessel-Funktion selber wird schnell klein, wenn der Index l größer als das Argument ist. Daher ist die Determinante in Gl. (3.23) – wie im Fall der harten Scheibe – durch die Unterdeterminante $\det \hat{A}_{ll'}$ mit $l, l' = -lmax \dots lmax$ gut approximiert, wobei $lmax$ die kleinste ganze Zahl größer als κR ist.

Wir haben das Spektrum der Γ_2 -Darstellung zum Radius $R = 0.2$ des Streuzentrums zu verschiedenen Werten von U zwischen -500 und 500 bestimmt. Die Energieabstandsverteilungen sind in Abb. 3.20 dargestellt. Wir wollen zuerst auf den integrablen Fall $U = 0$ eingehen. Das Spektrum läßt sich analytisch bestimmen, denn die Lösungen vom Γ_2 -Typ der Gl. (3.1) mit $U(\vec{r}) \equiv 0$ sind gegeben durch

$$\Psi_{mn}(x, y) = \sin(2\pi mx) \sin(2\pi ny) - \sin(2\pi my) \sin(2\pi nx) \quad (3.37)$$

mit $m, n = 1 \dots \infty$ und $m \neq n$. Durch Einsetzen in Gl. (3.1) erhalten wir die Energiewerte

$$E_{mn} = 4\pi^2(m^2 + n^2) \quad (3.38)$$

Abbildung 3.20: Energieabstandsverteilungen der Γ_2 -Darstellung zu verschiedenen Potentialhöhen U des Streuzentrums. Der Radius des Streuzentrums beträgt $R = 0.2$. Die glatten Kurven stellen die Wigner-Verteilung des GOE bzw. die Poisson-Verteilung dar.

mit $m, n = 1 \dots \infty$ und $n \neq m$. Die Energieabstandsverteilung $P(S)$ dieses Spektrums existiert nicht [13]. Das Spektrum enthält u.a. unendlich viele Entartungen. Die erste ist gegeben durch $E_{18} = E_{47}$. Trotzdem haben wir $P(S)$ formal zu den untersten 1176 Energiewerten bestimmt. In die Berechnung der anderen Energieabstandsverteilungen gehen jeweils die untersten 411 bis 514 Energiewerte der Spektren ein. Für U -Werte ungleich Null ist in Abb. 3.20 bei Anwachsen von $|U|$ ein deutlicher Übergang von Energieniveauhäufung nach Energieniveauabstoßung, also von Unkorreliertheit nach Korreliertheit der Energien zu sehen. Dieser Effekt ist sowohl bei negativen als auch bei positiven U -Werten vorhanden. Bei $U = -10$ und $U = 10$ ist die Ähnlichkeit zum Fall $U = 0$ unübersehbar. Das hat seine Gründe darin, daß gemessen an der Größenordnung der Energiewerte des Systems, diese Potentialhöhen sehr klein sind. Die Partialwellen einer einlaufenden Welle erfahren an einem solchen Streuzentrum nur geringe Phasenverschiebungen. Anschaulich gesprochen spürt das Teilchen von dem Streuzentrum nur wenig. Wird der Betrag der Potentialhöhe größer, so nehmen auch die Phasenverschiebungen der Partialwellen zu. Das Teilchen erfährt stärkere Streuung, das Energiespektrum entfernt sich immer weiter vom Spektrum des integrierbaren Falls. Das äußert sich darin, daß die Energieabstandsverteilungen bei $U = 20$ und $U = -20$ zwar noch deutliche Tendenz zur Poisson-Verteilung besitzen, aber dann, bei Ansteigen von $|U|$, in die Wigner-Verteilung des GOE übergehen. Zusammenfassend sind hier folgende Zusammenhänge zu sehen: Ist $|U|$ groß, so haben wir klassisch den chaotischen Fall vorliegen und finden quantenmechanisch eine Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ vor. Wird $|U|$ klein, so geht das System in den klassisch regulären Fall über, und parallel dazu geht die Energieabstandsverteilung in die Poisson-Verteilung über.

3.2.4 Periodische Orbits und das Energiespektrum des Sinai-Billard

Für weitere Untersuchungen der berechneten Spektren greifen wir auf die Spurformel Gl. (2.54) zurück, welche eine semiklassische Approximation der Spektraldichte wiedergibt. In Gl. (2.54) gehen die Eigenschaften aller klassischen periodischen Orbits ein. Wir sind aber in der Lage, mit Hilfe der exakt berechneten Energiespektren des Sinai-Billard, die Spektraldichte jeweils exakt anzugeben. Betrachten wir Gl. (2.54) als gute Näherung der exakten Spektraldichte, so bietet sich hier die Möglichkeit, den Beitrag der periodischen Orbits zum Spektrum des Sinai-Billard zu untersuchen. Dafür betrachten wir zunächst die Spurformel Gl. (2.54) genauer:

Betrachtet man das Spektrum, das einer festen Darstellung Γ einer Symmetriegruppe \mathcal{G} zugeordnet ist, so gibt es zur Darstellung der Spektraldichte eine symmetrisierte Form von Gl. (2.54) [55]. Wir möchten nur die für unser Anliegen wesentlichen Merkmale der symmetrisierten Spurformel näher

erläutern. Einzelheiten kann man [55] entnehmen. Die Summation erstreckt sich weiterhin über alle periodischen Orbits und deren Wiederholungen. Die Amplitude $a_{\beta,p}$ in Gl. (2.54) besitzt den zusätzlichen Faktor $n_{\Gamma} \chi^{\Gamma}(g_{\beta}^p)$. n_{Γ} ist gleich der Dimension von Γ , und $\chi^{\Gamma}(g_{\beta}^p)$ ist gleich dem Charakter des Elementes g_{β}^p aus \mathcal{G} in der Darstellung Γ (g_{β}^p ist gleich der p -ten Potenz von g_{β}). Die Symmetrieoperation g_{β} ergibt sich aus geometrischen Eigenschaften des periodischen Orbits. Im Fall der Gruppe C_{nv} geht ein Orbit, der speziell C_{nv} -Symmetrie besitzt, schon mit dem n -ten Teil seiner Gesamtlänge in die Spurformel ein. Insgesamt geht weiterhin jeder periodische Orbit in die symmetrisierte Spurformel ein. Dabei trägt er entweder mit seiner Gesamtlänge oder je nach seiner Symmetrie schon mit einem Teilstück und den Wiederholungen zur Summe bei. Unterschiedliche Darstellungen unterscheiden sich nur in den Amplituden durch die Faktoren $\chi^{\Gamma}(g_j^p)$. Speziell im Γ -Punkt geht ein Orbit, der selber C_{4v} -Symmetrie besitzt, mit einem Viertel seiner Gesamtlänge und den entsprechenden Wiederholungen in die Summe ein.

Wir wollen untersuchen, welchen absoluten Beitrag die periodischen Orbits zur Spektraldichte des Sinai-Billard liefern. Dazu können wir uns auf eine bestimmte Darstellung beschränken, da – wie wir oben bemerkt haben – alle periodischen Orbits in jede Darstellung eingehen. Die Darstellungen werden durch ihre Charaktere unterschieden, diese sind im Sinai-Billard mit Ausnahme der Γ_5 -Darstellung sämtlich vom Betrag Eins, entscheiden also nicht über den absoluten Beitrag eines periodischen Orbits. Wir wählen die Darstellung Γ_2 im Γ -Punkt der Brillouin-Zone, die einen weiteren Vorteil bietet. Das Spektrum der Γ_2 -Darstellung geht aus der Quantisierung des Billards hervor, das wir in Abb. 3.5 dargestellt haben. Darauf ist die Spurformel (2.54) direkt anwendbar.

Zur Illustration haben wir im linken Teil der Abb. 3.21 zwei periodische Orbits des Sinai-Billard dargestellt. Der Orbit α ist ein nichtisolierter periodischer Orbit der Länge Eins. Er gehört zur eindimensionalen Familie F_{01} . Der Orbit β ist isoliert und besitzt C_{4v} -Symmetrie. Nach unseren Vorbemerkungen geht er mit einem Viertel seiner Gesamtlänge und den Wiederholungen in die Spurformel ein. In der rechten Hälfte der Darstellung sind die Analoga der beiden Orbits im symmetrisierten Sinai-Billard dargestellt. Wir haben die periodischen Orbits auch hier entsprechend mit α und β bezeichnet. Es ist zu sehen, daß der Orbit α wieder die Länge Eins besitzt. Der Orbit β besitzt hier tatsächlich nur ein Viertel der ursprünglichen Länge. Mit dieser Länge geht er in die Spurformel des symmetrisierten Sinai-Billard ein, also auch in die symmetrisierte Spurformel der Γ_2 -Darstellung.

Wir betrachten nun Gl. (2.54). Die Energie E substituieren wir durch $E = \kappa^2$ und erhalten so die Wirkungsfunktion und damit die Spektraldichte als Funktionen von κ . Um auszudrücken, daß wir die Wirkungsfunktion bzw. die Spektraldichte als Funktionen von κ betrachten, schreiben wir an Stelle von $S_{\beta}(\kappa^2)$ und $\rho(\kappa^2)$ im folgenden $S_{\beta}(\kappa)$ bzw. $\rho(\kappa)$. Den oszillierenden Teil der

Abbildung 3.21: Zwei periodische Orbits im Sinai-Billard (links) und ihre Analoga im symmetrisierten Sinai-Billard (rechts).

Spektraldichte bezeichnen wir mit

$$\rho_{\text{osc}}(E) = \rho(E) - \rho_{\text{av}}(E). \quad (3.39)$$

Damit ergibt sich aus Gl. (2.54)

$$\rho_{\text{osc}}(\kappa) = \sum_{\beta} \sum_{p=-\infty, p \neq 0}^{\infty} \tilde{a}_{\beta,p} e^{ip \frac{S_{\beta}(\kappa)}{\hbar}} \quad (3.40)$$

mit

$$\tilde{a}_{\beta,p} = \text{sgn}(p) \frac{a_{\beta,|p|}}{2i} e^{-ip\mu_{\beta} \frac{\pi}{2}}$$

Wir betrachten den Fall der harten Scheibe. In dieser Situation bewegt sich das Teilchen mit konstantem Geschwindigkeitsbetrag. Da wir die Energie in Einheiten von $\hbar^2/2m$ messen, ist der Impulsbetrag entlang einer beliebigen Trajektorie zur Energie κ^2 gegeben durch $p = \hbar\kappa$. Ist L_{β} gleich der Länge der Trajektorie β , so erhalten wir nach Gl. (2.36) für die Wirkung $S_{\beta}(\kappa)$ den Ausdruck

$$S_{\beta}(\kappa) = L_{\beta} \hbar \kappa. \quad (3.41)$$

Den oszillierenden Teil der Spektraldichte können wir damit ausdrücken durch

$$\rho_{\text{osc}}(\kappa) = \sum_{\beta} \sum_{p=-\infty, p \neq 0}^{\infty} \tilde{a}_{\beta,p} e^{ipL_{\beta}\kappa}. \quad (3.42)$$

$\rho_{\text{osc}}(\kappa)$ läßt sich somit in semiklassischer Näherung durch eine Superposition von harmonischen Funktionen darstellen, deren Frequenzen gleich den Längen der periodischen Orbits und deren Vielfachen entsprechen.

Unser nächstes Vorgehen dient dem Zweck, diese Aussage anhand der numerisch berechneten Spektren der Γ_2 -Darstellung zu überprüfen. Wie wir sehen werden, wird uns dafür die Fourier-Transformation periodischer Funktionen von Nutzen sein. Wir betrachten die exakte oszillierende Spektraldichte $\rho_{\text{osc}}(\kappa)$ auf einem Intervall $[0, K]$. Die Funktionen

$$\frac{1}{\sqrt{K}} e^{in\frac{2\pi}{K}\kappa}, \quad n \in \mathcal{Z},$$

bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im Vektorraum $L^2[0, K]$. D.h., auf dem Intervall $[0, K]$ läßt sich $\rho_{\text{osc}}(\kappa)$ darstellen durch die Reihe

$$\rho_{\text{osc}}(\kappa) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{n,\text{osc}} e^{in\frac{2\pi}{K}\kappa} \quad (3.43)$$

mit eindeutig bestimmten Koeffizienten $c_{n,\text{osc}}$. Die Menge $\{c_{n,\text{osc}}\}$ bezeichnen wir als das Fourier-Spektrum der Spektraldichte $\rho_{\text{osc}}(\kappa)$.

Betrachten wir Gl. (3.42) als gute Näherung der exakten oszillierenden Spektraldichte, also in guter Näherung als äquivalent zu Gl. (3.43), so entsprechen die Frequenzen $n\frac{2\pi}{K}$ den Längen pL_β der periodischen Orbits. Ist $n\frac{2\pi}{K} \approx pL_\beta$ für irgendeinen Orbit β und ein p , so ist zu erwarten, daß für die entsprechenden Fourier-Koeffizienten gilt: $c_{n,\text{osc}} \approx \tilde{a}_{\beta,p}$. Daher können wir jede Frequenz

$$L_n = n \frac{2\pi}{K} \quad (3.44)$$

mit der Länge eines hypothetischen periodischen Orbits identifizieren.

Die Koeffizienten $c_{n,\text{osc}}$ können berechnet werden mit Hilfe der zu Gl. (3.43) äquivalenten Gleichung

$$\begin{aligned} c_{n,\text{osc}} &= \frac{1}{\sqrt{K}} \int_0^K e^{-in\frac{2\pi}{K}\kappa} [\rho(\kappa) - \rho_{\text{av}}(\kappa)] d\kappa \\ &= c_n - c_{n,\text{av}}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{\sqrt{K}} \int_0^{K^2} \frac{1}{2\sqrt{E}} e^{-in\frac{2\pi}{K}\sqrt{E}} \rho(E) dE \\ &= \frac{1}{\sqrt{K}} \sum_{E_i \leq K^2} \frac{1}{2\sqrt{E_i}} e^{-in\frac{2\pi}{K}\sqrt{E_i}}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

wobei wir die Darstellung (2.19) der Spektraldichte angewendet haben. Die Koeffizienten $c_{n,\text{av}}$ gehen aus der Fourier-Transformation der mittleren Spektraldichte $\rho_{\text{av}}(\kappa)$ hervor.

Nach Gl. (3.45) entspricht das Fourier-Spektrum von $\rho_{osc}(\kappa)$ dem Fourier-Spektrum von $\rho(\kappa)$ bis auf den Anteil der Koeffizienten $c_{n,av}$. $\rho_{av}(\kappa)$ stellt eine langsam und schwach oszillierende Funktion dar, da sie nur die mittlere Spektraldichte wiedergibt. Daher kann man erwarten, daß sie nur bei kleinen Frequenzen einen relativ kleinen Beitrag zum Fourier-Spektrum liefert. Deshalb wollen wir die Koeffizienten $c_{n,av}$ vorerst vernachlässigen und besitzen damit durch Gl. (3.46) eine gute Möglichkeit, das Fourier-Spektrum der oszillierenden Spektraldichte näherungsweise zu berechnen. Es ist allerdings noch folgender Sachverhalt zu beachten:

Durch die Fourier-Transformation wird $\rho(\kappa)$ als eine periodische Funktion betrachtet. Die periodische Fortsetzung von $\rho(\kappa)$ bewirkt eine Unstetigkeit an den Intervallgrenzen 0 und K . Diese Unstetigkeit verursacht das Auftreten unerwünschter Frequenzen im Fourier-Spektrum. Diese Frequenzen lassen sich dämpfen, wenn $\rho(\kappa)$ an den Intervall-Grenzen künstlich geglättet wird. Üblich ist die Verwendung eines *Hanning-Fensters* [56]. D.h., wir bestimmen auf dem Intervall $[0, K]$ die Fourier-Reihe der Funktion

$$\check{\rho}(\kappa) = \frac{1}{2} \left[1.0 - \cos\left(\frac{2\pi}{K}\kappa\right) \right] \rho(\kappa). \quad (3.47)$$

Dieses geschieht dadurch, daß wir in Gl. (3.46) die Summanden zu den Energien E_i jeweils mit dem Faktor $\frac{1}{2} \left[1.0 - \cos\left(\frac{2\pi}{K}\sqrt{E_i}\right) \right]$ multiplizieren.

Wir haben das Verfahren anhand des Spektrums der Γ_2 -Darstellung im integralen Fall (der Radius des Streuzentrums ist gleich Null) getestet. Entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 1.2 können alle periodischen Orbits nach den eindimensionalen Familien F_{ij} klassifiziert werden. Ihre Längen L_{ij} sind durch Gl. (1.4) bestimmt. Die Längen L_{ij} inklusive ihrer Vielfachen bis zur Länge 10 haben wir in der Tabelle 3.1 aufgeführt. Die Fourier-

$i, j; p$	$p \cdot L_{ij}$	$i, j; p$	$p \cdot L_{ij}$	$i, j; p$	$p \cdot L_{ij}$	$i, j; p$	$p \cdot L_{ij}$
0,1; 1	1.0	0,1; 5	5.0	1,7; 1	7.071	5,7; 1	8.602
1,1; 1	1.414	3,4; 1	5.0	1,1; 5	7.071	1,2; 4	8.944
0,1; 2	2.0	1,5; 1	5.099	2,3; 2	7.211	0,1; 9	9.0
1,2; 1	2.236	2,5; 1	5.385	2,7; 1	7.280	1,9; 1	9.055
1,1; 2	2.828	1,1; 4	5.656	3,7; 1	7.615	2,9; 1	9.219
0,1; 3	3.0	3,5; 1	5.830	5,6; 1	7.810	6,7; 1	9.219
1,3; 1	3.162	0,1; 6	6.0	0,1; 8	8.0	5,8; 1	9.433
2,3; 1	3.605	1,6; 1	6.082	1,8; 1	8.062	1,3; 3	9.486
0,1; 4	4.0	1,3; 2	6.324	4,7; 1	8.062	4,9; 1	9.848
1,4; 1	4.123	4,5; 1	6.403	1,4; 2	8.246	1,1; 7	9.899
1,1; 3	4.242	1,2; 3	6.708	1,1; 6	8.485	0,1;10	10.0
1,2; 2	4.472	0,1; 7	7.0	3,8; 1	8.544	3,4; 2	10.0

Tabelle 3.1: *Längen der periodischen Orbits im integralen Fall inklusive ihrer Vielfachen bis zur Länge 10.*

Transformation der Spektraldichte wurde für das Energieintervall $[0, 1200]$ durchgeführt. Dafür gilt $K = \sqrt{4\pi^2 \cdot 1200} \approx 217.7$. Die Länge eines Orbits, der dem Koeffizienten c_n zugeordnet ist, beträgt somit $L_n \approx n \cdot 0.029$. Zur graphischen Darstellung eines Fourier-Spektrums tragen wir den Absolutbetrag der Koeffizienten c_n gegen die entsprechenden Längen L_n auf und verbinden die aufeinander folgenden Punkte durch gerade Linien. In Abb. 3.22 haben wir das Fourier-Spektrum der Spektraldichte einmal mit und einmal ohne Hanning-Fenster dargestellt. Die gestrichelten Linien markieren die Längen L_{ij} der periodischen Orbits entsprechend Tabelle 3.1 auf der L -Achse. In beiden Teilen der Abbildung ist zu erkennen, daß das Fourier-Spektrum der Γ_2 -Darstellung deutliche Peaks an den Stellen L_{ij} der periodischen Orbits aufweist. Im oberen Teil der Abbildung, ohne Hanning-Fenster, ist ein Untergrund von kleiner Amplitude über den ganzen betrachteten Frequenzbereich zu sehen. Dieser neigt dazu, Einzelheiten des Spektrums bei kleinen Amplituden zu verwischen (z.B. in der Umgebung von $L = 6$). Mit Hanning-Fenster, im unteren Teil der Abbildung, verschwindet dieser Untergrund. Die Peaks des Fourier-Spektrums treten noch besser hervor. Auffällig sind zwei Peaks zwischen Null und Eins. Der Peak nahe bei Null gehört zur Länge $\frac{2\pi}{K}$, also zum Fourier-Koeffizienten c_1 . Er steht in keinem Zusammenhang mit dem eigentlichen Fourier-Spektrum, denn er entsteht durch die Multiplikation von $\rho(\kappa)$ mit dem Hanning-Fenster. Der Term $\cos(\frac{2\pi}{K}\kappa)$ in Gl. (3.47) besitzt die Frequenz $\frac{2\pi}{K}$. Der andere Peak bei ca. 0.7 ist von kleiner Amplitude und kann der mittleren Spektraldichte zugeschrieben werden. Im folgenden beachten

Abbildung 3.22: *Fourier-Transformierte der Spektraldichte des Γ_2 -Spektrums für den integralen Fall $R = 0$; unten mit, oben ohne Hanning-Fenster.*

wir diese Peaks nicht weiter. Für die weiteren Berechnungen von Fourier-Spektren verwenden wir das Hanning-Fenster. Den Koeffizienten c_1 setzen wir zur graphischen Darstellung gleich Null.

Ist der Radius R des Streuzentrums größer als Null, so existiert nach Gl. (1.3) und Gl. (1.4) ein periodischer Orbit der Länge L_{ij} falls

$$L_{ij} < \frac{1}{2R} = L_R \quad (3.48)$$

ist. Die Obergrenzen L_R abhängig von R sind in Tabelle 3.2 zu sehen. In

R	L_R
0.1	5.0
0.2	2.5
0.3	$1.\bar{6}$
0.4	1.25

Tabelle 3.2: Obergrenzen L_R für verschiedene Radien R des Streuzentrums.

Abb. 3.23 sind die Fourier-Spektren der Spektraldichte zum Energie-Intervall $[0, 1180]$ für die Radien $R = 0.1$, $R = 0.2$, $R = 0.3$ und $R = 0.4$ des Streuzentrums im Fall der Γ_2 -Darstellung dargestellt. Die Längen der periodischen Orbits, die Gl. (3.48) erfüllen, sind inklusive ihrer Vielfachen durch die gestrichelten Linien markiert. Der Fall $R = 0$ entspricht dem integrablen System. Dieses Fourier-Spektrum war schon im unteren Teil der Abb. 3.22 zu sehen. Wir haben es hier für den direkten Vergleich mit den anderen Fourier-Spektren noch einmal aufgetragen. Wie oben schon gesagt, wird das Fourier-Spektrum im Fall $R = 0$ durch die nichtisolierten periodischen Orbits des Sinai-Billard bestimmt. Wir betrachten auch hier der Übersichtlichkeit wegen das Fourier-Spektrum auf dem Intervall $[0, 10]$. Sämtlichen periodischen Orbits mit einer Länge L_{ij} aus diesem Intervall entspricht ein Peak des Fourier-Spektrums. Es finden sich aber auch keine weiteren Peaks, denen keine Länge L_{ij} zugeordnet werden kann (bis auf Frequenzen kleiner als Eins, die wir vernachlässigen können, s.o.). Das Fourier-Spektrum enthält demnach nur die Längen aller nichtisolierten periodischen Orbits.

Beim Wechsel zum Radius $R = 0.1$ ändert sich das Bild schlagartig. Mit wachsender Länge nimmt ein diffuser Untergrund zu, es entstehen zahlreiche zusätzliche Frequenzen. Die durch Gl. (3.48) erlaubten Längen periodischer Orbits nehmen in ihrer Anzahl ab. Den noch zugelassenen nichtisolierten periodischen Orbits und ihren Vielfachen lassen sich zum großen Teil Peaks des Spektrums zuweisen. Die Übereinstimmungen sind bei einigen Längen recht gut, wirken bei anderen Längen eher zufällig. Es gibt sehr viele Frequenzen, die den nichtisolierten periodischen Orbits nicht zugeordnet werden können. Bei den größeren Radien ist das Bild ähnlich, nur die durch Gl. (3.48) zugelassenen periodischen Orbits inklusive ihrer Wiederholungen nehmen in ihrer Anzahl weiter ab.

Abbildung 3.23: *Fourier-Transformierte der Spektraldichte des Γ_2 -Spektrums im Fall der harten Scheibe für verschiedene Radien R des Streuzentrums. Der Fall $R = 0$ entspricht Abb. 3.22 unten. Nichtisolierte periodische Orbits sind durch gestrichelte Linien markiert.*

Die Längen der kürzesten isolierten periodischen Orbits lassen sich analytisch bestimmen. Die Orbits kollidieren mit genau zwei oder vier harten Scheiben des Sinai–Billards. Wir finden nur wenig Übereinstimmungen dieser Längen mit Peaks des Fourier–Spektrums, die außerdem wegen des diffusen Untergrundes eher zufällig wirken. Daher können diese Längen in keinem der berechneten Fourier–Spektrren eindeutig lokalisiert werden.

Diese Beobachtungen können mit Hilfe von Gl. (2.54), in der die Spektralichte durch Summation über alle periodischen Orbits entsteht, gedeutet werden: Ist der Radius des Streuzentrums $R = 0$, so existieren nur nichtisolierte periodische Orbits. Genau ihre Längen sind im Fourier–Spektrum zu sehen. Sobald der Radius größer als Null ist, existiert eine unendliche Zahl von isolierten periodischen Orbits. Sie sind aber im Fourier–Spektrum nicht zu sehen. Das hat seinen Grund darin, daß diese Orbits in Gl. (2.54) ein sehr geringes Gewicht besitzen. Die Ursache für ihr geringes Gewicht liegt zum einen in ihrer Instabilität und zum anderen – wie wir annehmen können – in ihrem geringen Maß im Vergleich zu den nichtisolierten periodischen Orbits. Wegen ihres geringen Gewichtes sind sie im Fourier–Spektrum isoliert nicht zu sehen. Sie gehen sozusagen im “Rauschen” unter. Die Anzahl nichtisolierter periodischer Orbits ist, sobald der Radius des Streuzentrums größer als Null ist, nur noch endlich. Denn die maximale Länge, die ein solcher Orbit haben darf, ist durch Gl. (3.48) beschränkt. Obwohl diese Orbits durch die Vielfachen ihrer Längen noch unendlich viele Summanden zur Spurformel beitragen, nimmt damit ihr Gesamtgewicht stark ab. Kurz gesagt, bewirkt das Auftreten des Streuzentrums ein schlagartiges Verschwinden der Dominanz der nichtisolierten periodischen Orbits.

Weiterhin haben wir das Fourier–Spektrum zu verschiedenen Potentialhöhen U des Streuzentrums berechnet. Das betrachtete Energieintervall ist auch hier das Intervall $[0, 1180]$. In Abb. 3.24 sind die Fourier–Spektrren zu den Werten $U = -10$, $U = -20$, $U = -50$, $U = -100$ und $U = -500$, in Abb.3.25 zu $U = 10$, $U = 20$, $U = 50$, $U = 100$ und $U = 500$ dargestellt. Zum Vergleich haben wir in beiden Abbildungen den Fall $U = 0$ hinzugefügt. Die Stellen L_{ij} der nichtisolierten periodischen Orbits sind durch die gestrichelten Linien markiert. In beiden Abbildungen verhält sich das Fourier–Spektrum mit zunehmendem Betrag von U qualitativ gleich. Den Fall $U = 0$ haben wir schon vorher diskutiert. Nimmt $|U|$ zu, so ist bei $|U| = 10$ das Fourier–Spektrum so gut wie unverändert. Nur unwesentliche kleine Veränderungen sind zu sehen. Das Spektrum wird weiterhin ausschließlich von den nichtisolierten periodischen Orbits dominiert. Im Fall $|U| = 20$ hat sich das Bild immer noch kaum verändert. Bei größeren Längen sind kleine neue Amplituden andeutungsweise zu erkennen. Die Dominanz der nichtisolierten periodischen Orbits bleibt unverändert.

Abbildung 3.24: *Fourier-Transformierte der Spektraldichte des Γ_2 -Spektrums zu verschiedenen Potentialhöhen U des Streuzentrums. Der Radius des Streuzentrums ist $R = 0.2$. Nichtisolierte periodische Orbits sind durch gestrichelte Linien markiert.*

Abbildung 3.25: *Wie Abb. 3.24, jedoch andere U -Werte.*

Bei $|U| = 50$ hat sich das Bild jedoch merklich geändert. Es sind viele neue, hauptsächlich kleine Amplituden, entstanden. Die Dominanz der nichtisolier-ten periodischen Orbits ist zwar noch vorhanden, nimmt aber mit zunehmender Frequenz ab. Ist $|U| = 100$, so sind die Peaks bei kleinen Längen noch eindeutig einem nichtisolierten periodischen Orbit zuzuordnen. Mit zunehmender Länge ist ein wachsender Untergrund neuer Frequenzen zu sehen, so daß das Zusammentreffen von einigen Peaks mit Längen L_{ij} wohl nur zufällig erscheint. Im Fall $|U| = 500$ hat sich die Situation noch weiter verschärft. Auch bei kleinen Längen sind die Peaks an den Stellen L_{ij} so klein geworden, daß sie nur noch unwesentliche Auswirkungen auf die Spektraldichte besitzen können. Der Rest des Fourier-Spektrums besteht aus vielen neuen Frequenzen auf einem diffusen Untergrund, so daß Zusammentreffen von Längen nichtisolierter periodischer Orbits mit Peaks des Fourier-Spektrums wohl nur zufällig sind. Zusammengefaßt finden wir sowohl bei negativen als auch bei positiven Potentialhöhen U des Streuzentrums bei Zunahme von U einen kontinuierlichen Übergang von absoluter Dominanz des Fourier-Spektrums durch die Frequenzen der nichtisolierten periodischen Orbits zu einer Situation, in der das Fourier-Spektrum durch eine Vielzahl von Frequenzen dominiert wird, die durch die isolierten periodischen Orbits verursacht werden.

Zur Erläuterung der vorangegangenen Beobachtungen greifen wir auf Gl. (3.40) zurück. Wenn eine Trajektorie β mit keinem Streuzentrum zusammenstößt oder an den Streuzentren reflektiert wird, ist ihre Wirkung durch Gl. (3.41) gegeben. Besitzt das Streuzentrum eine endliche Potentialhöhe U , so ist letzteres nicht immer der Fall, falls U kleiner als die kinetische Energie des Teilchens ist. (Die potentielle Energie außerhalb der Streuzentren ist gleich Null.) Exakt gesagt, wird das Teilchen genau dann reflektiert, wenn für den Betrag $|P_n|$ der Normalkomponente des Impulses im Auftreffpunkt am Rand des Streuzentrums gilt

$$\frac{|P_n|^2}{2m} < U.$$

Ein periodischer Orbit β , der durch Streuzentren läuft, durchlaufe dabei außerhalb der Streuzentren Strecken der Gesamtlänge L_β^a und innerhalb Strecken der Gesamtlänge L_β^i . Seine Wirkung ist dann gegeben durch

$$S_\beta(\kappa) = \hbar\kappa L_\beta^a + \hbar\kappa\sqrt{1 - \frac{U}{\kappa^2}} L_\beta^i. \quad (3.49)$$

In Gl. (3.40) eingesetzt, bewirkt dieser Ausdruck das Auftreten einer Vielfalt von Frequenzen im Fourier-Spektrum. Wenn aber κ groß wird, dann konvergiert der Faktor $\sqrt{1 - \frac{U}{\kappa^2}}$ gegen Eins. $S_\beta(\kappa)$ ist dann näherungsweise gegeben durch

$$S_\beta(\kappa) \approx \hbar\kappa(L_\beta^a + L_\beta^i) = \hbar\kappa L_\beta, \quad (3.50)$$

und L_β ist wieder gleich der Gesamtlänge des periodischen Orbits. D.h., für große Energien relativ zur Potentialhöhe des Streuzentrums oszillieren die

Summanden in Gl. (3.40) wieder mit den Frequenzen L_β . Das entspricht der klassischen Vorstellung. Ist nämlich die kinetische Energie groß genug relativ zur Potentialhöhe der Streuzentren, so spürt das Teilchen die Streuzentren praktisch nicht. Die Impulsänderung bzw. Ablenkung, die es an den Streuzentren erfährt, kann dann vernachlässigt werden. Demnach sind diese Orbits von denen im Fall $U = 0$ kaum zu unterscheiden. Die Fourier-Spektren sind zum Energieintervall $[0, 1180]$ berechnet worden. Für kleine Beträge von U , also $U = \pm 10$, $U = \pm 20$ und eventuell $U = \pm 50$ konvergiert die Spektraldichte mit wachsendem κ also schnell gegen die des integrablen Falls. Hier dominieren folglich die nichtisolierten periodischen Orbits das Spektrum. Bei zunehmenden Werten von U werden die Streuzentren immer spürbarer. Es treten genau die Effekte auf, die wir auch schon im Fall der harten Scheibe in Abb.3.23 gesehen haben: Die Dominanz der nichtisolierten periodischen Orbits verschwindet, und das Fourier-Spektrum wird dominiert durch einen Untergrund von Frequenzen der durch isolierte periodische Orbits verursacht wird.

Über diese Beobachtungen wollen wir zurückkommen zu unserer weiter oben geäußerten Vermutung, daß klassisch chaotische Systeme quantenmechanisch eine Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ besitzen und bei klassisch weniger chaotischen Systemen eine Tendenz zur Energieniveauhäufung vorzufinden ist. Letzteres ist gleichbedeutend mit einer gewissen Unkorreliertheit der Energieniveaus. Wir betrachten auch weiterhin das Dreiecksbillard nach Abb. 3.5. Im integrablen Fall $R = 0$, bzw. gleichbedeutend $U = 0$, existiert zwar streng genommen die Energieabstandsverteilung nicht, aber in Abb. 3.20 konnten wir sehen, daß hier deutliche Energieniveauhäufung vorzufinden ist. Das bestätigt unsere Vermutung, daß nichtchaotische Systeme eine Tendenz zur Energieniveauhäufung besitzen. Deutliche Energieniveauhäufung war aber auch zu erwarten, da integrable Systeme generisch eine Energieabstandsverteilung vom Poisson-Typ besitzen. In Abb. 3.9 konnten wir feststellen, daß – sobald R ungleich Null ist – die Energieabstandsverteilung unseres Systems der Wigner-Verteilung des GOE entspricht. Das entspricht unseren Erwartungen, da das Billard, sobald R ungleich Null ist, extrem chaotisch ist.

In diesem Zusammenhang betrachten wir noch einmal die Fourier-Transformierten der Spektraldichte zu verschiedenen Radien des Streuzentrums, die in Abb. 3.23 zu sehen sind. Nur im Fall $R = 0$, im integrablen Fall, wurde das Fourier-Spektrum durch die nichtisolierten periodischen Orbits dominiert. Bei Radien ungleich Null gingen diese Frequenzen in einem Untergrund von neuen Frequenzen unter, die auf die Existenz einer sehr großen Anzahl isolierter periodischer Orbits zurückzuführen sind. Es drängt sich die Vermutung auf, daß die Dominanz von nichtisolierten periodischen Orbits mit Energieniveauhäufung einhergeht, während ein Mangel bzw. eine Unterdrückung dieser Orbits durch isolierte periodische Orbits zur Energieniveauabstoßung, also zu einer Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ führt. Dazu betra-

chen wir noch einmal Abb. 3.20, in der wir die Energieabstandsverteilungen unseres Systems zu verschiedenen Potentialhöhen U des Streuzentrums aus dem Intervall $[-500, 500]$ aufgetragen haben. Bei ansteigendem Betrag von U sehen wir einen fließenden Übergang von deutlicher Energieniveauhäufung bei kleinen Potentialhöhen zu Energieniveauabstoßung bei großen Potentialhöhen mit einer Energieabstandsverteilung, die der Wigner-Verteilung des GOE sehr ähnlich ist. Diese Beobachtung ist verständlich, wenn man bedenkt, daß ein Zunehmen der Potentialhöhe relativ zur Größenordnung der betrachteten Energieeigenwerte eine stärkere Ablenkung des klassischen Teilchens verursacht, also den chaotischen Charakter des Systems verstärkt. Zu genau den hier diskutierten Potentialhöhen U , haben wir in den Abbildungen 3.24 und 3.25 die Fourier-Spektren dargestellt. Wie wir oben schon im einzelnen gesagt haben, finden wir hier beim Übergang von kleinen Beträgen von U zu großen Beträgen von U einen kontinuierlichen Wechsel von einem Fourier-Spektrum, das von den nichtisolierten periodischen Orbits dominiert wird, zu einem Fourier-Spektrum, in dem die Frequenzen der nichtisolierten periodischen Orbits durch einen Untergrund neuer Frequenzen unterdrückt werden. Der Vergleich von Abb. 3.20 mit den Abbildungen 3.24 und 3.25 liefert also einen hervorragenden Beleg für unsere Vorstellung, daß die Existenz nichtisolierter periodischer Orbits Energieniveauhäufung verursacht, und daß deren Unterdrückung durch die isolierten periodischen Orbits zu Energieniveauabstoßung führt.

Eine heuristische Erklärung dieser Phänomene wäre die folgende: Die Existenz des Streuzentrums im Fall der harten Scheibe bewirkt, daß die Zahl der nichtisolierten periodischen Orbits wegen Gl. (1.3) endlich wird. D.h., die β -Summe in Gl. (3.42) läßt sich in eine endliche Summe Σ_1 über die nichtisolierten periodischen Orbits und in eine unendliche Summe Σ_2 über die isolierten periodischen Orbits zerlegen. Die p -Summation bleibt in beiden Teilen eine unendliche Summe. Σ_2 liefert wegen der geringen Amplituden der isolierten periodischen Orbits nur einen sehr kleinen Beitrag zur Spektraldichte. Die Oszillationen in $\rho_{osc}(\kappa)$ werden hauptsächlich durch die endliche Summe Σ_1 hervorgerufen. Sie sind daher relativ regelmäßig. Die Delta-Peaks der Spektraldichte, welche Σ_1 auf der Energieachse verursacht, liegen daher auch relativ regelmäßig. Die dadurch definierten Energiewerte besitzen demnach relativ gleichmäßige Abstände voneinander und zeigen somit eine gewisse Korreliertheit. Das bewirkt Energieniveauabstoßung, also eine Tendenz zur Wigner-Verteilung. Die Energieniveauabstoßung wird daher durch die endliche Anzahl nichtisolierter periodischer Orbits verursacht. Unsere bisherigen Beobachtungen im Fall des Sinai-Billardes belegen diese Vermutung. Was aber verursacht Energieniveauhäufung? Das könnte eine unendliche Zahl von nichtisolierten periodischen Orbits sein, denn dann wird die Summe Σ_1 eine unendliche Summe über β und besitzt eine unendliche Zahl von Frequenzen L_{ij} . Diese erzeugen durch ihre Überlagerung unregelmäßige Oszillationen in $\rho_{osc}(\kappa)$, also unregelmäßig verteilte Delta-Peaks in der Spektraldichte. Die entsprechenden Energiewerte sind dann auf

Abbildung 3.26: *Sinai–Billard im Fall $R = 0.5$*

der Energieachse eher zufällig verteilt und besitzen demnach eine Tendenz zur Energieniveauhäufung bzw. zur Poisson–Verteilung. Das entspricht dem integrierbaren Fall des Sinai–Billards.

Im anderen Extremfall, wenn alle periodischen Orbits isoliert sind, ist Σ_1 gleich Null. Dann gehen in die Spektraldichte alle Frequenzen dieser periodischen Orbits ein. Das liefert mit der gleichen Argumentation wie oben wieder eine Energieniveauhäufung. Das Sinai–Billard im Fall der harten Scheibe besitzt für $R = 0.5$ keine nichtisolierten periodischen Orbits, sondern nur isolierte periodische Orbits. Dieses Billard haben wir in Abb. 3.26 dargestellt. Mit Hilfe der KKR–Methode läßt sich auch im Fall $R = 0.5$ das Energiespektrum berechnen. Wir haben dieses bis zur Energie $E = 1180$ bestimmt. In diesem Energiebereich liegen 137 Energiewerte vom Γ_2 –Typ. Die Energieabstandsverteilung haben wir auf dieser Basis bestimmt. Wir haben diese zusammen mit dem Fourier–Spektrum der Spektraldichte in Abb. 3.27 aufgetragen. Die Anzahl der Energiewerte ist recht klein verglichen mit den vorangegangenen Untersuchungen. Dennoch weist die Energieabstandsverteilung auf starke Energieniveauhäufung hin. Das Fourier–Spektrum besteht aus einem Untergrund vieler kleiner Peaks, nichtisolierte periodische Orbits sind nicht vorzufinden. Das belegt unsere Vermutung.

Schluß

Mit Hilfe der in dieser Arbeit vollständig hergeleiteten Kohn–Rostoker–Methode für einen zweidimensionalen Kristall waren wir in der Lage, die Bandstruktur des Sinai–Billards bis in den höherenergetischen Bereich zu berechnen. Insbesondere die Flexibilität dieser Methode unter Wechsel des Muffin–Tin–Potentials (dem nur ein Anpassen der Streuphase in Gl. (3.18) entspricht) ist von großem praktischen Nutzen. Dadurch konnten wir ohne erhebliche Vergrößerung des numerischen Aufwandes die Energiespektren des Sinai–Billards zum einen zu verschiedenen Radien, zum anderen zu unter-

Abbildung 3.27: *Energieabstandsverteilung (oberes Bild) und Fourier-Spektrum der Spektraldichte (unteres Bild) der Γ_2 -Darstellung für $R = 0.5$ im Fall der Γ_2 -Darstellung.*

schiedlichen Potentialhöhen des Streuzentrums berechnen. Auf der Grundlage dieser Energiespektren konnten wir aussagekräftige Untersuchungen zu der in der Einleitung gestellten Fragestellung durchführen.

Erstes Ziel dieser Untersuchungen war es festzustellen, ob es universelle Eigenschaften des Energiespektrums des Hamilton-Operators gibt, in welchen sich klassisch integrable Systeme von klassisch chaotischen Systemen unterscheiden. Die Erwartung, daß zeitumkehrinvariante klassisch chaotische Systeme eine Energieabstandsverteilung vom Wigner-Typ des GOE besitzen, wurde einerseits bestätigt. Denn für den Fall der Γ_2 -Darstellung und einer "harten Scheibe", der dem klassisch extrem chaotischen Billard in Abb. 3.5 entspricht, haben wir für alle betrachteten Radien des Streuzentrums kleiner als 0.5 eine Energieabstandsverteilung gefunden, die der Wigner-Verteilung des GOE entspricht. Andererseits veränderte sich das Bild, als wir die zweidimensionale Darstellung Γ_5 betrachteten oder den Γ -Punkt der Brillouin-Zone verließen. Hier findet man sowohl Energieabstandsverteilungen vom Wigner-Typ des GOE, als auch welche, die zur Energieniveauhäufung tendieren. Die Abweichungen von der Wigner-Verteilung konnten zum Teil durch die Symmetrieeigenschaften der Eigenfunktionen in der Nähe von Punkten höherer Symmetrie der Brillouin-Zone begründet werden. Es gab aber auch Bloch-Vektoren, wo die Abweichungen von der Wigner-Verteilung keine Erklärung besaßen. Befindet sich der Bloch-Vektor außerhalb des Γ -Punktes, so ist das klassische Analogon (falls es überhaupt existiert) ein periodisch fortgesetztes Billard, das daher nicht mehr kompakt ist. D.h., die klassische Voraussetzung, die nach allgemeinem Verständnis zu einer Wigner-Verteilung des

GOE führt, nämlich Chaotizität im Sinne von Ergodizität, ist außerhalb des Γ -Punktes nicht erfüllt. Unsere Beobachtungen sind daher nicht unbedingt als Widerspruch zur anfangs angenommenen Vermutung zu betrachten. Auch in [25] sind zu einem zeitumkehrinvarianten und klassisch extrem chaotischen System starke Abweichungen von der Wigner-Verteilung des GOE gefunden worden.

Nach dem Wechsel vom Fall der “harten Scheibe” zum Soft-Billard, in dem das Streuzentrum eine endliche Potentialhöhe besitzt, veränderten sich die Ergebnisse. War die Potentialhöhe verglichen mit den Größenordnungen der Energieeigenwerte des quantenmechanischen Systems sehr klein, so fanden wir im Fall der Γ_2 -Darstellung eine Energieabstandsverteilung mit deutlicher Energieniveauhäufung. Das anfangs diskutierte klassische System zeigte in dieser Situation teilweise reguläre Dynamik. Die Beobachtungen entsprechen also der Vermutung, daß klassisch regulärem Verhalten quantenmechanisch Energieniveauhäufung entspricht, bzw. der Tatsache, daß im Spezialfall der Integrabilität quantenmechanisch generisch eine Poisson-Verteilung vorzufinden ist. Anschließend ließen wir den klassisch chaotischen Charakter des Systems durch fortschreitendes Anheben der Potentialhöhe des Streuzentrums wieder zunehmen. Parallel dazu fanden wir einen gleichmäßigen Übergang der Energieabstandsverteilung Energieniveauhäufung zur Wigner-Verteilung des GOE, also zu starker Energieniveauabstoßung. Das ergänzt unser Bild damit, daß eine Tendenz zu klassisch irregulärem Verhalten eine Tendenz zur Energieniveauabstoßung verursacht, und bestätigt die Erwartung, daß im Fall der klassischen Chaotizität die Wigner-Verteilung des GOE zu erwarten ist.

Zweites Ziel unserer Untersuchungen war es, festzustellen, welche Rolle die periodischen Orbits im Energiespektrum eines quantenmechanischen Systems spielen. Aufschlußreiche Ergebnisse brachte hier die Fourier-Transformation der Spektraldichten der unterschiedlichen Energiespektren zu Tage:

Die Spektraldichte eines Billards erwies sich als eine Superposition von harmonischen Funktionen, deren Frequenzen gleich den Längen der periodischen Orbits sind. Das bestätigt die Gültigkeit der Spurformel (2.54), welche eine semiklassische Näherung der Spektraldichte durch Summation über alle periodischen Orbits darstellt, über den semiklassischen Bereich hinaus. Das größte Gewicht, auch in den klassisch nichtintegrablen Fällen (sowohl im Fall endlicher Potentialhöhe, als auch im Fall der “harten Scheibe”), hatten dabei die nichtisolierten periodischen Orbits, sozusagen als Reminiszenzen des integrablen Systems. Sie tragen daher die Verantwortung für die jeweilige Struktur des Energiespektrums. Sowohl durch [13] als auch durch [21] wird diese Beobachtung untermauert. In [13] wird für den desymmetrisierten Fall des Sinai-Billards (Γ_2 -Darstellung) eine spezielle Spurformel zur Berechnung der Spektraldichte direkt aus Gl. (3.18) mit semiklassischen Methoden hergeleitet. Es stellt sich heraus, daß der Beitrag der isolierten periodischen Orbits als Funktion der Energie E mit E^{-1} abfällt, wohingegen der Beitrag der nichtisolierten periodischen Orbits nur mit $E^{-\frac{1}{2}}$ abfällt. Zu demselben Ergebnis

kommt man in [21], wo eine spezielle Spurformel zur Berechnung der Spektraldichte des Helmholtz-Operators zu einem beliebigen Grundgebiet mit Dirichlet- bzw. von Neumann-Randbedingungen mit Hilfe semiklassischer Methoden bestimmt wird. Asymptotisch, für große Energien, wird also das Energiespektrum durch die nichtisolierten periodischen Orbits dominiert.

Anhang A

Die Kohn–Rostoker–Methode in zwei Dimensionen

A.1 Die Green–Funktion und die Kohn– Rostoker–Determinante

In diesem Kapitel wollen wir die KKR–Methode für den zweidimensionalen Fall vollständig herleiten. Unser Ausgangspunkt ist Gl. (3.11b). $\Psi(\vec{r})$ wird für $r \leq r_m$ entsprechend Gl. (3.12) nach dem vollständigen Funktionensystem $\{e^{il\phi}\}$ entwickelt. Die Green–Funktion $G(\vec{r}, \vec{r}')$ entwickeln wir nach Zylinderfunktionen. Dazu zerlegen wir $G(\vec{r}, \vec{r}')$ gemäß

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G_0(\vec{r}, \vec{r}') + D(\vec{r}, \vec{r}'). \quad (\text{A.1})$$

in einen Anteil $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$, der eine spezielle Lösung von Gl. (3.5) ist, und in einen Anteil $D(\vec{r}, \vec{r}')$ der eine Lösung der homogenen Gleichung

$$(\Delta + \kappa^2)D(\vec{r}, \vec{r}') = 0 \quad (\text{A.2})$$

darstellt.

Wir betrachten zunächst den ersten Summanden, die Funktion $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$. Diese ist gegeben durch die Green–Funktion des freien Teilchens [57]:

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{i}{4}H_0^{(1)}(\kappa|\vec{r} - \vec{r}'|). \quad (\text{A.3})$$

Die Hankel–Funktion läßt sich entsprechend

$$H_0^{(1)}(\kappa|\vec{r} - \vec{r}'|) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il(\phi-\phi')} \begin{cases} J_l(\kappa r)H_l^{(1)}(\kappa r'), & r \leq r' \\ J_l(\kappa r')H_l^{(1)}(\kappa r), & r \geq r' \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

nach Bessel-Funktionen entwickeln [57]. Für das Folgende wird $r \leq r'$ gewählt, also läßt sich $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ durch die Reihe

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(\kappa r) H_l^{(1)}(\kappa r') e^{il\phi} e^{-il\phi'} \quad (\text{A.5})$$

darstellen.

Die Funktion $D(\vec{r}, \vec{r}')$ hängt ebenso wie $G(\vec{r}, \vec{r}')$ von \vec{k} und κ^2 ab. Als Lösung der homogenen Gleichung (A.2) läßt sich $D(\vec{r}, \vec{r}')$ wie folgt nach Bessel-Funktionen entwickeln:

$$D(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4} \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} G_{ll'} J_l(\kappa r) J_{l'}(\kappa r') e^{il\phi} e^{-il'\phi'}. \quad (\text{A.6})$$

Dadurch sind die *Strukturkonstanten* $G_{ll'}$, die von \vec{k} und κ^2 abhängen, definiert. Mit den Gln. (A.1), (A.5) und (A.6) erhalten wir

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4} \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} [-iJ_l(\kappa r) H_l^{(1)}(\kappa r') \delta_{ll'} + G_{ll'} J_l(\kappa r) J_{l'}(\kappa r')] e^{il\phi} e^{-il'\phi'}. \quad (\text{A.7})$$

Setzt man die Entwicklungen von $\Psi(\vec{r})$ (3.12) und $G(\vec{r}, \vec{r}')$ (A.7) in Gl. (3.11b) ein, so folgt:

$$\int_{r'=r_m} ds' \sum_{l,l',l''} e^{i(l\phi - (l'-l'')\phi')} \left(\frac{\partial}{\partial r'} a_{l''}(r') - a_{l''}(r') \frac{\partial}{\partial r'} \right) \times \left[-iJ_l(\kappa r) H_l^{(1)}(\kappa r') \delta_{ll'} + G_{ll'} J_l(\kappa r) J_{l'}(\kappa r') \right] = 0.$$

Integration über ϕ' und die Gleichung

$$\int_0^{2\pi} d\phi' e^{i(l''-l')\phi'} = 2\pi \delta_{l''l'}$$

liefern

$$\sum_{l,l'} e^{il\phi} \left(\frac{\partial}{\partial r'} a_{l'}(r') - a_{l'}(r') \frac{\partial}{\partial r'} \right) \times \left[-iJ_l(\kappa r) H_l^{(1)}(\kappa r') \delta_{ll'} + G_{ll'} J_l(\kappa r) J_{l'}(\kappa r') \right] = 0. \quad (\text{A.8})$$

Hier und bei den folgenden Gleichungen sind alle Funktionen an der Stelle $r' = r_m$ zu berechnen. Die *logarithmische Ableitung* der Radialfunktion ist definiert als

$$L_{l'}(r') = \frac{\frac{\partial}{\partial r} a_{l'}(r) \Big|_{r=r'}}{a_{l'}(r')}. \quad (\text{A.9})$$

Da die Funktionen $e^{il\phi}$ linear unabhängig sind, folgt damit aus Gl. (A.8)

$$\sum_{l'} a_{l'}(r') \left(L_{l'}(r') - \frac{\partial}{\partial r'} \right) \left[-iH_l^{(1)}(\kappa r') \delta_{ll'} + G_{ll'} J_{l'}(\kappa r') \right] = 0.$$

Daraus erhalten wir die Gleichung

$$\sum_{\nu} a_{\nu}(r') \left[\frac{\partial}{\partial r'} J_{\nu}(\kappa r') - J_{\nu}(\kappa r') L_{\nu}(r') \right] \{ \beta_l \delta_{l\nu} + G_{l\nu} \} = 0$$

mit

$$\beta_l = -i \frac{\frac{\partial}{\partial r'} H_l^{(1)}(\kappa r') - H_l^{(1)}(\kappa r') L_l(r')}{\frac{\partial}{\partial r'} J_l(\kappa r') - J_l(\kappa r') L_l(r')}.$$

Wegen

$$H_l^{(1)}(z) = J_l(z) + iY_l(z)$$

können wir β_l umschreiben in

$$\beta_l = \frac{\frac{\partial}{\partial r'} Y_l(\kappa r') - L_l(r') Y_l(\kappa r')}{\frac{\partial}{\partial r'} J_l(\kappa r') - L_l(r') J_l(\kappa r')} - i$$

Im Abschnitt A.6 berechnen wir die Streuphase η_l eines zweidimensionalen radialsymmetrischen Potentials mit endlicher Reichweite. Ist die Reichweite des Potentials gleich dem Muffin-Tin-Radius, so lautet nach Gl. (A.96) der Kotangens der Streuphase

$$\cot \eta_l = \frac{\frac{\partial}{\partial r'} Y_l(\kappa r') - L_l(r') Y_l(\kappa r')}{\frac{\partial}{\partial r'} J_l(\kappa r') - L_l(r') J_l(\kappa r')}.$$

Damit erhalten wir

$$\beta_l = \cot \eta_l - i.$$

Jetzt lautet das Ergebnis

$$\sum_{\nu} a_{\nu}(r') \left[\frac{\partial}{\partial r'} J_{\nu}(\kappa r') - J_{\nu}(\kappa r') L_{\nu}(r') \right] \{ (\cot \eta_l - i) \delta_{l\nu} + G_{l\nu} \} = 0. \quad (\text{A.10})$$

Die notwendige Bedingung zur Erfüllung von Gl. (A.10) lautet

$$\det A = 0, \quad (\text{A.11})$$

mit

$$A_{l\nu} = (\cot \eta_l - i) \delta_{l\nu} + G_{l\nu}. \quad (\text{A.12})$$

Die Matrix $A_{l\nu}$ und ihre Determinante werden als *Kohn-Rostoker-Matrix* bzw. *Kohn-Rostoker-Determinante* bezeichnet.

A.2 Die Strukturkonstanten

Um die Matrixelemente der Kohn-Rostoker-Matrix zu bestimmen, benötigen wir ein Verfahren zur Berechnung der Strukturkonstanten $G_{l\nu}$. Diesem Problem wollen wir uns in diesem Abschnitt widmen. Aus den Gln. (A.1),

(A.3) und (3.7) erhalten wir für die unvollständige Green-Funktion die Darstellung

$$D(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{i}{4} \sum_{\vec{R} \neq 0} H_0^{(1)}(\kappa |\vec{r} - \vec{r}' - \vec{R}|) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}. \quad (\text{A.13})$$

Mit $\vec{r}, \vec{r}' \in \Omega$ gilt $|\vec{r} - \vec{r}'| \leq |\vec{R}|$ für $\vec{R} \neq 0$, und Anwendung von Gl. (A.4) liefert

$$\begin{aligned} D(\vec{r}, \vec{r}') &= -\frac{i}{4} \sum_{\vec{R} \neq 0} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i l (\phi_{\vec{r}-\vec{r}'} - \phi_{\vec{R}})} J_l(\kappa |\vec{r} - \vec{r}'|) H_l^{(1)}(\kappa R) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \\ &= -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\sum_{\vec{R} \neq 0} H_l^{(1)}(\kappa R) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - l \phi_{\vec{R}})} \right] J_l(\kappa |\vec{r} - \vec{r}'|) e^{i l \phi_{\vec{r}-\vec{r}'}} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa |\vec{r} - \vec{r}'|) e^{i l \phi_{\vec{r}-\vec{r}'}} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

mit den *reduzierten Strukturkonstanten*

$$G_l = -i \sum_{\vec{R} \neq 0} H_l^{(1)}(\kappa R) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - l \phi_{\vec{R}})}. \quad (\text{A.15})$$

Mit Hilfe der Gleichung [57]

$$J_l(\kappa |\vec{r} - \vec{r}'|) e^{i l \phi_{\vec{r}-\vec{r}'}} = \sum_{n, n'=-\infty}^{\infty} \delta_{l, n-n'} J_n(\kappa r) J_{n'}(\kappa r') e^{i(n \phi_{\vec{r}} - n' \phi_{\vec{r}'})}$$

folgt aus Gl. (A.14)

$$\begin{aligned} D(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l \sum_{n, n'=-\infty}^{\infty} \delta_{l, n-n'} J_n(\kappa r) J_{n'}(\kappa r') e^{i(n \phi_{\vec{r}} - n' \phi_{\vec{r}'})} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{n, n'=-\infty}^{\infty} G_{n-n'} J_n(\kappa r) J_{n'}(\kappa r') e^{i n \phi_{\vec{r}}} e^{-i n' \phi_{\vec{r}'}}. \end{aligned}$$

Der Vergleich mit Gl. (A.6) liefert für die Strukturkonstanten das wichtige Ergebnis

$$G_{ll'} = G_{l-l'}. \quad (\text{A.16})$$

Dieser Ausdruck reduziert die Anzahl unabhängiger Strukturkonstanten, wodurch der numerische Aufwand der KKR-Methode entscheidend verringert wird.

Wie aus Gl. (3.7) und Gl. (3.8) zu ersehen ist, ist $G(\vec{r}, \vec{r}')$ eine Funktion, die nur vom Abstand $\vec{r} - \vec{r}'$ abhängt. Daher schreiben wir im folgenden an Stelle von $G(\vec{r}, \vec{r}')$ vereinfacht $G(\vec{r} - \vec{r}')$ oder nur noch $G(\vec{r})$. Das gleiche gilt für $D(\vec{r}, \vec{r}')$.

Wichtige Symmetrieeigenschaften der reduzierten Strukturkonstanten gewinnen wir aus einer Darstellung der Green-Funktion als Summe über das

reziproke Gitter. Dazu wird die Reihenentwicklung der ebenen Welle nach Bessel-Funktionen [50]

$$\begin{aligned} e^{iz \sin \phi} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\phi} J_n(z) \\ \Rightarrow e^{iz \cos \phi} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n e^{in\phi} J_n(z) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

in Gl. (3.8) eingesetzt. Damit erhalten wir für die Green-Funktion die Darstellung

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n \frac{e^{in(\phi_{\vec{r}} - \phi_{\vec{k} + \vec{G}})} J_n(|\vec{k} + \vec{G}|r)}{\kappa^2 - |\vec{k} + \vec{G}|^2},$$

und die unvollständige Green-Funktion ist aufgrund der Gln. (A.1) und (A.3) durch

$$\begin{aligned} D(\vec{r}) &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n \frac{e^{in(\phi_{\vec{r}} - \phi_{\vec{k} + \vec{G}})} J_n(|\vec{k} + \vec{G}|r)}{\kappa^2 - |\vec{k} + \vec{G}|^2} + \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\kappa r) \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[i^n \sum_{\vec{G}} \frac{J_n(|\vec{k} + \vec{G}|r)}{J_n(\kappa r)} \frac{e^{-in\phi_{\vec{k} + \vec{G}}}}{\kappa^2 - |\vec{k} + \vec{G}|^2} \right] e^{in\phi_{\vec{r}}} J_n(\kappa r) \\ &\quad + \frac{i}{4} \frac{H_0^{(1)}(\kappa r)}{J_0(\kappa r)} J_0(\kappa r) \end{aligned}$$

gegeben. Der Vergleich mit Gl. (A.14) liefert für G_l den Ausdruck

$$G_l = \frac{4}{\Omega} i^l \sum_{\vec{G}} \frac{J_l(|\vec{k} + \vec{G}|r)}{J_l(\kappa r)} \frac{e^{-il\phi_{\vec{k} + \vec{G}}}}{\kappa^2 - |\vec{k} + \vec{G}|^2} + i\delta_{l,0} \frac{H_0^{(1)}(\kappa r)}{J_0(\kappa r)}. \quad (\text{A.18})$$

Aus Gl. (A.18) ergeben sich für die reduzierten Strukturkonstanten die folgenden wichtigen Eigenschaften:

$$\text{Im } G_0 = 1, \quad G_{-l} = G_l^* \quad \text{für } l \neq 0. \quad (\text{A.19})$$

Dadurch wird die Kohn-Rostoker-Matrix hermitesch, und ihre Hauptdiagonale ist reell.

A.3 Die Ewald-Methode

Sowohl Gl. (A.15) als auch Gl. (A.18) sind zur numerischen Berechnung der Strukturkonstanten nicht geeignet, da die Summen sehr langsam konvergieren [48]. Daher wenden wir hier die *Ewald-Methode*, die in den Arbeiten [58] und [47] für den Fall eines dreidimensionalen Gitters präsentiert wird, an. Wir wollen in diesem Abschnitt die Ewald-Methode für den Fall eines zweidimensionalen Gitters vollständig herleiten. Ausgangspunkt in beiden Fällen

ist jeweils eine Darstellung der Green-Funktion als Summe über das direkte Gitter. In unserem Fall greifen wir auf Gl. (3.7) zurück, was die Integraldarstellung der Hankel-Funktion gemäß Gl. (A.90) im Abschnitt A.5 ins Spiel bringt. In drei Dimensionen gelangt man über eine entsprechende Darstellung der Green-Funktion zur Integraldarstellung der Funktion $\frac{e^{i\kappa|\vec{r}-\vec{R}|}}{|\vec{r}-\vec{R}|}$ [58]. Dabei bekommt κ in [47] aus Konvergenzgründen einen kleinen Imaginärteil, der später gleich Null gesetzt werden kann.

Wie angekündigt, erhalten wir für die Green-Funktion nach Gl. (3.7) und Gl. (A.90) die Darstellung

$$G(\vec{r}) = -\frac{i}{4} \sum_{\vec{R}} \frac{1}{i\pi} \int_{0 \exp i(\pi+\phi_\kappa)}^{\infty \exp i\phi_\kappa} t^{-1} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} dt e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}. \quad (\text{A.20})$$

Φ_κ ist hier gleich dem Polarwinkel von κ in der komplexen Zahlenebene, der hier gleich Null ist. Wir behalten uns damit vor, κ später mit einem Imaginärteil zu versehen. Der Integrationsweg (für ein allgemeines komplexes κ mit $\text{Re } \kappa > 0$) ist in Abb. A.7 zu sehen.

Für die nächsten Schritte müssen in Gl. (A.20) Summation und Integration vertauschbar sein. An entsprechender Stelle in drei Dimensionen ist das der Fall. In zwei Dimensionen dagegen trifft das zunächst nicht zu, wie wir nachfolgend erläutern wollen: Die Vertauschbarkeit von Summation und Integration in Gl. (A.20) verlangt, daß auf dem gesamten Integrationsweg die Ungleichung

$$\text{Re } (\vec{r} - \vec{R})^2 t > 0 \Leftrightarrow \text{Re } t > 0 \quad (\text{A.21})$$

erfüllt ist. Andernfalls ist die Summe über \vec{R} in Gl. (A.20) bei t -Werten, die Gl. (A.21) nicht erfüllen, nicht mehr absolut konvergent. Gl. (A.21) ist auf dem in Abb. A.7 gewählten Integrationsweg in der Nähe von Null nicht erfüllt. Daher ist die Vertauschbarkeit von Summation und Integration bei diesem Integrationsweg nicht gegeben. Diesen Mangel beheben wir, indem wir den Integrationsweg in der Nähe von Null verändern:

Entsprechend unseren vorhergehenden Bemerkungen wollen wir den Integrationsweg des Integrals

$$I = \int_{0 \exp i(\pi+\phi_\kappa)}^{\infty \exp i\phi_\kappa} t^{-1} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} dt \quad (\text{A.22})$$

verändern. Dabei ist noch folgendes zu beachten: Ist Gl. (A.21) auf dem Integrationsweg erfüllt, so ist die Existenz des Integrals genau dann gegeben, wenn auf dem Integrationsweg in der Nähe von Null die Ungleichung

$$\text{Re } \frac{\kappa^2}{4t} < 0, \quad (\text{A.23})$$

erfüllt ist. Das können wir für $\text{Re } t > 0$ nur dadurch erreichen, daß wir κ einen imaginären Beitrag geben. Diesen können wir später wieder gleich Null

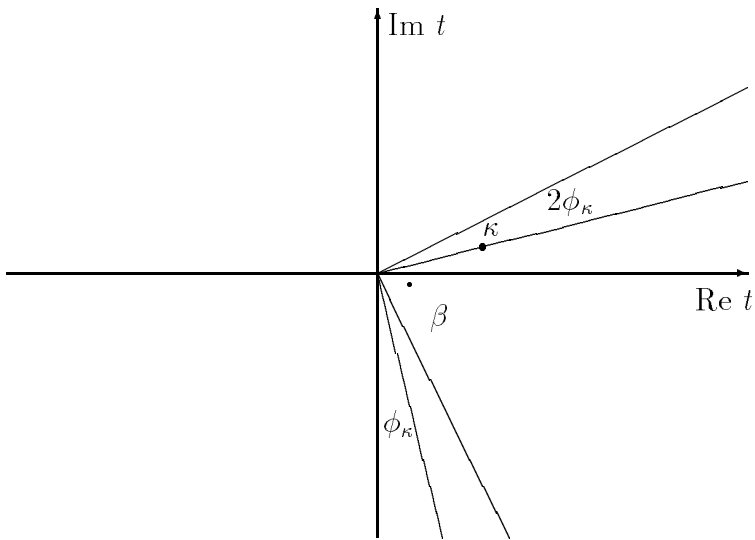


Abbildung A.1:

setzen. Gl. (A.23) ist nun äquivalent zu der Bedingung

$$\frac{\pi}{2} < 2\phi_\kappa - \phi_t < \frac{3}{2}\pi.$$

Zur Veranschaulichung haben wir die Verhältnisse in Abb. A.1 dargestellt. Lassen wir den Integrationsweg in der Nähe von Null so verlaufen, daß ϕ_t gegen $\beta = -\pi/2 + \phi_\kappa$ konvergiert, dann sind die Ungleichungen (A.23) und (A.21) erfüllt. Außerdem erweist es sich als günstig, die Tangente des Integrationsweges im Unendlichen zu verändern. Wir wählen dort als Tangente die reelle Achse. Der neue Integrationsweg ist in Abb. (A.2) zu sehen. Es verbleibt noch zu zeigen, daß das betrachtete Integral I seinen Wert auf dem

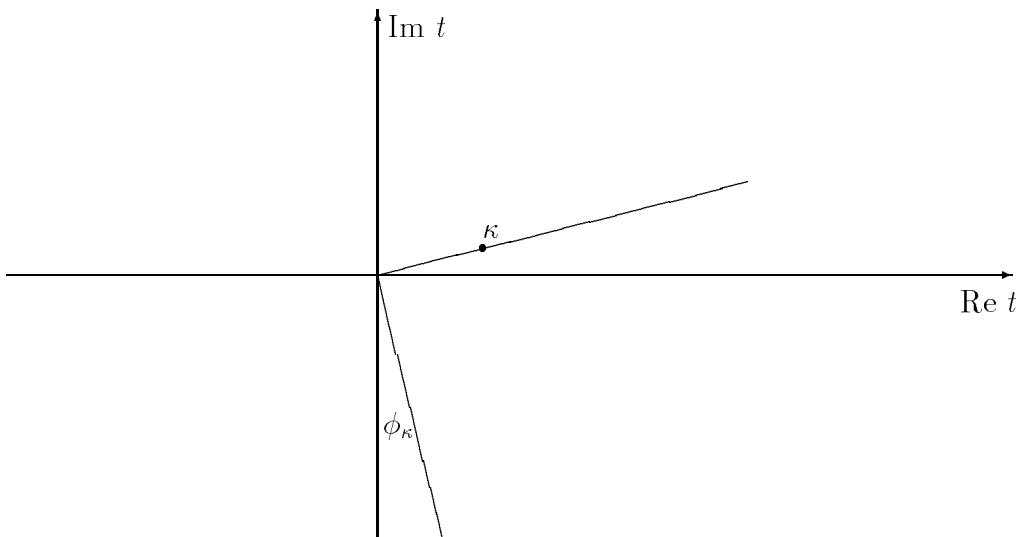


Abbildung A.2: *Neuer Integrationsweg.*

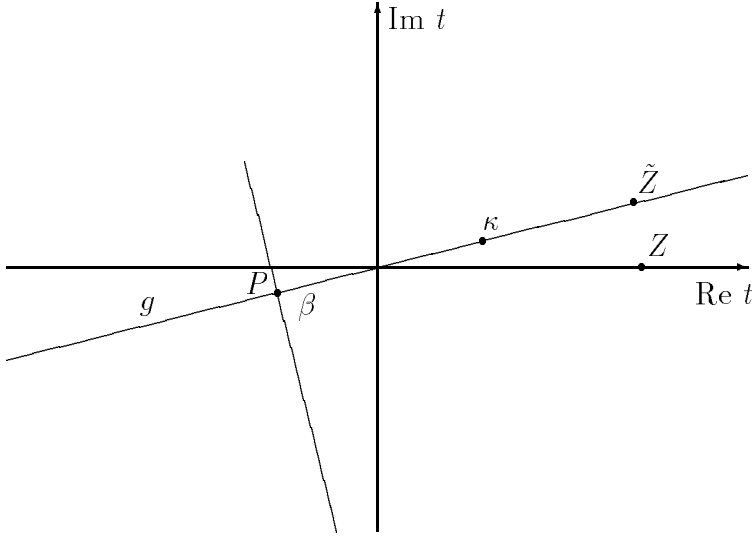


Abbildung A.3:

neuen Integrationsweg behält: Die exponentielle Konvergenz des Integranden in Gl. (A.22) gegen Null bei Annäherung an beide Grenzen des neuen Integrationsweges sichert zunächst die Existenz des Integrals. Der Integrand ist auf ganz \mathcal{C} bis auf die Stelle $t = 0$ holomorph. Dort besitzt er eine wesentliche Singularität. Daher können wir den ursprünglichen Integrationsweg beliebig verbiegen. Nur die Endpunkte und die Tangente in $t = 0$ und im Unendlichen müssen beibehalten werden, damit der Wert des Integrals erhalten bleibt. Wir verändern den ursprünglichen Integrationsweg so, wie es in Abb. A.3 zu sehen ist. Bis zum Punkt P läuft der Integrationsweg auf der Geraden g . g schließt mit der reellen Achse den Winkel ϕ_κ ein. Von P aus läuft der Integrationsweg in Richtung positiver reeller Achse. Die Tangente im Punkt P besitzt den zuvor bestimmten Winkel β relativ zur reellen Achse. Im Punkt Z stößt der Integrationsweg auf die reelle Achse und läuft auf dem Kreisbogen mit Radius Z bis zum Punkt \tilde{Z} auf der Geraden g . Auf g läuft er dann weiter nach $\infty \exp i\phi_\kappa$. Den Wert von I haben wir damit nicht verändert. Das betrachtete Integral läßt sich nun zerlegen in $I = I_1 + I_2 + I_3 + I_4$ mit

$$I_1 = \int_{0 \exp i(\pi+\phi_\kappa)}^P t^{-1} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} dt, \quad (\text{A.24})$$

$$I_2 = \int_P^Z t^{-1} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} dt, \quad (\text{A.25})$$

$$I_3 = \int_Z^{\tilde{Z}} t^{-1} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} dt, \quad (\text{A.26})$$

$$I_4 = \int_{\tilde{Z}}^{\infty \exp \phi_\kappa} t^{-1} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} dt. \quad (\text{A.27})$$

Der Integrand in Gl. (A.24) ist auf der Strecke $\overline{0P}$ beschränkt. Lassen wir also P gegen Null laufen, so konvergiert I_1 gegen Null, während I konstant bleibt. Läuft Z gegen ∞ , dann bewirkt der Faktor $\exp -(\vec{r} - \vec{R})^2 t$ im Integranden,

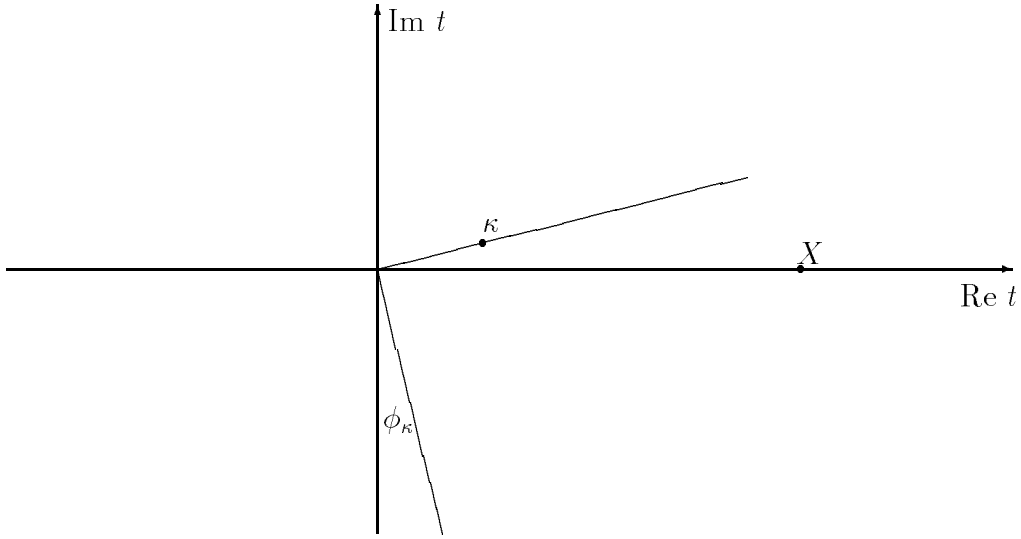


Abbildung A.4: Integrationsweg zum Parameter X .

daß I_3 und I_4 gegen Null konvergieren. Dann konvergiert I_2 gegen I , was zu zeigen war.

Nach diesen Vorbemerkungen geht Gl. (A.20) über in

$$G(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{\exp i(-\frac{\pi}{2} + \phi_\kappa)} dt \sum_{\vec{R}} t^{-1} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}. \quad (\text{A.28})$$

Dabei haben wir Summation und Integration vertauscht. Der Integrationsweg wird so verschoben, daß er ab der Stelle X auf der positiven reellen Achse verläuft. Die Integration wird aufgeteilt in eine Integration von $0 \exp i(-\frac{\pi}{2} + \phi_\kappa)$ bis X und in eine Integration von X bis ∞ . Wir haben das in Abb. A.4 dargestellt. Die Green-Funktion läßt sich dann darstellen durch die Summe

$$G(\vec{r}) = G_1(\vec{r}) + G_2(\vec{r})$$

mit

$$G_1(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^X \int_{\exp i(-\frac{\pi}{2} + \phi_\kappa)} dt t^{-1} e^{\frac{\kappa^2}{4t}} \left[\sum_{\vec{R}} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{R})} \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{A.29})$$

und

$$G_2(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_X^\infty dt \sum_{\vec{R}} t^{-1} e^{\frac{\kappa^2}{4t}} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}. \quad (\text{A.30})$$

Der Term in eckigen Klammern ist gitterperiodisch in \vec{r} und kann durch eine Fourier-Reihe dargestellt werden. Im dreidimensionalen Fall [47] wird an entsprechender Stelle auf eine Identität nach [58] zurückgegriffen. Wir drücken diesen Term aus durch

$$\begin{aligned} \alpha(\vec{r}) &= \sum_{\vec{R}} e^{-(\vec{r}-\vec{R})^2 t} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{R})} \\ &= \sum_{\vec{G}} a_n e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}. \end{aligned}$$

Die Koeffizienten a_n lassen sich berechnen als

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^2 r' e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}'} \alpha(\vec{r}') \\
&= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^2 r' \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}'} e^{-(\vec{r}'-\vec{R})^2 t} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}'-\vec{R})} \\
&= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^2 r' \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{G}\cdot(\vec{r}'-\vec{R})} e^{-(\vec{r}'-\vec{R})^2 t} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}'-\vec{R})}
\end{aligned}$$

(unter Berücksichtigung von Gl. (3.3)). Setzen wir $\vec{r} = \vec{r}' - \vec{R}$, so folgt

$$a_n = \frac{1}{\Omega} \int_{R^2} d^2 r e^{-r^2 t - i\vec{r}\cdot(\vec{k}+\vec{G})}.$$

Mit

$$r^2 t + i\vec{r}\cdot(\vec{k}+\vec{G}) = \left(\vec{r}\sqrt{t} + i(\vec{k}+\vec{G})/2\sqrt{t}\right)^2 + |\vec{k}+\vec{G}|^2/4t$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{1}{\Omega} e^{-\frac{|\vec{k}+\vec{G}|^2}{4t}} \int_{R^2} d^2 r e^{-\left(\vec{r}\sqrt{t} + \frac{i(\vec{k}+\vec{G})}{2\sqrt{t}}\right)^2} \\
&= \frac{1}{\Omega} e^{-\frac{|\vec{k}+\vec{G}|^2}{4t}} \int_{R^2} d^2 r e^{-r^2 t} \\
&= \frac{\pi}{\Omega t} e^{-\frac{|\vec{k}+\vec{G}|^2}{4t}}.
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
G_1(\vec{r}) &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^X \frac{dt}{\exp i(-\frac{\pi}{2} + \phi_\kappa)} t^{-1} e^{\frac{\kappa^2}{4t}} \sum_{\vec{G}} \frac{\pi}{\Omega t} e^{-\frac{|\vec{k}+\vec{G}|^2}{4t}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \\
&= -\frac{1}{4\Omega} \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \int_0^X \frac{dt}{\exp i(-\frac{\pi}{2} + \phi_\kappa)} \frac{e^{(\kappa^2 - |\vec{k}+\vec{G}|^2)/4t}}{t^2}.
\end{aligned}$$

Mit $E = \kappa^2$ und der Substitution $y = 1/t$ folgt

$$\begin{aligned}
G_1(\vec{r}) &= \frac{1}{4\Omega} \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \int_{\infty}^{1/X} \frac{dy}{\exp i(\frac{\pi}{2} - \phi_\kappa)} e^{\frac{E - |\vec{k}+\vec{G}|^2}{4} y} \\
&= \frac{1}{4\Omega} \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \frac{4}{E - |\vec{k}+\vec{G}|^2} e^{\frac{E - |\vec{k}+\vec{G}|^2}{4X}} \\
&= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \frac{e^{\frac{E - |\vec{k}+\vec{G}|^2}{4X}}}{E - |\vec{k}+\vec{G}|^2} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}}. \tag{A.31}
\end{aligned}$$

An dieser Stelle lassen wir den Imaginärteil von κ gegen Null gehen. Die Reihe (A.31) konvergiert absolut für beliebiges X größer als Null, solange E ungleich $|\vec{k}+\vec{G}|^2$ ist für jeden Gittervektor \vec{G} des reziproken Gitters. Die Summe von G_1 und G_2 ist daher eine analytische Funktion in E über ganz \mathcal{C}

mit Ausnahme der einfachen Polstellen $|\vec{k} + \vec{G}|^2$. Das entspricht aber der Gl. (3.8). Somit wird $G(\vec{r})$ durch die Summe von $G_1(\vec{r})$ und $G_2(\vec{r})$ in der gesamten komplexen Ebene dargestellt. Im folgenden werden G_1 und G_2 nach Bessel-Funktionen (im dreidimensionalen Fall nach sphärischen Bessel-Funktionen) bezüglich der Variablen \vec{r} entwickelt. Dabei betrachten wir den Grenzfall $\vec{r} \rightarrow 0$. Unter Anwendung von Gl. (A.17) erhalten wir aus Gl. (A.31) den Ausdruck

$$\begin{aligned} G_1(\vec{r}) &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}, l} \frac{e^{\frac{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2}{4X}}}{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2} i^l e^{i l (\phi_{\vec{r}} - \phi_{\vec{k} + \vec{G}})} J_l(|\vec{k} + \vec{G}|r) \\ &= \sum_l \left[\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \frac{e^{\frac{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2}{4X}}}{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2} i^l e^{-i l \phi_{\vec{k} + \vec{G}}} \frac{J_l(|\vec{k} + \vec{G}|r)}{J_l(\kappa r)} \right] J_l(\kappa r) e^{i l \phi_{\vec{r}}}. \end{aligned}$$

Für $\vec{r} \rightarrow 0$ gilt $J_l(|\vec{k} + \vec{G}|r)/J_l(\kappa r) \rightarrow |\vec{k} + \vec{G}|^{|l|}/\kappa^{|l|}$. Dann geht $G_1(\vec{r})$ über in

$$G_1(\vec{r}) = \sum_l \left[\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \frac{e^{\frac{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2}{4X}}}{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2} i^l e^{-i l \phi_{\vec{k} + \vec{G}}} \frac{|\vec{k} + \vec{G}|^{|l|}}{\kappa^{|l|}} \right] J_l(\kappa r) e^{i l \phi_{\vec{r}}}. \quad (\text{A.32})$$

Um mit $G_2(\vec{r})$ fortzufahren, verwenden wir in Gl. (A.30) die Integraldarstellung der Hankel-Funktion (Anhang Gl. (A.90)). Damit erhalten wir die Darstellung

$$G_2(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_X^\infty dt \sum_{\vec{R} \neq 0} t^{-1} e^{\frac{E}{4t}} e^{-(\vec{r} - \vec{R})^2 t} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} - \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\kappa r) + I$$

mit

$$I = \frac{1}{4\pi} \int_{0 \exp \pi i}^X dt t^{-1} e^{\frac{E}{4t}} e^{-r^2 t}. \quad (\text{A.33})$$

Für $\vec{r} \rightarrow 0$ gilt

$$\begin{aligned} e^{-(\vec{r} - \vec{R})^2 t} &= e^{-(r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{R} + R^2)t} \longrightarrow e^{-2\vec{r} \cdot \vec{R} t} e^{-R^2 t} \\ &\Rightarrow e^{-(\vec{r} - \vec{R})^2 t} \longrightarrow e^{-R^2 t} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l e^{i l (\phi_{\vec{r}} - \phi_{\vec{R}})} J_l(2i t r R). \end{aligned}$$

Der Faktor $e^{-2\vec{r} \cdot \vec{R} t}$ ist entsprechend Gl. (A.17) nach Bessel-Funktionen entwickelt worden. Für $G_2(\vec{r})$ folgt in diesem Grenzfall

$$\begin{aligned} G_2(\vec{r}) &= -\frac{1}{4\pi} \int_X^\infty dt t^{-1} e^{\frac{E}{4t}} \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{-R^2 t} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} \sum_l i^l e^{i l (\phi_{\vec{r}} - \phi_{\vec{R}})} J_l(2i t r R) \\ &\quad - \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\kappa r) + I \\ &= -\frac{1}{4\pi} \sum_l \left[\int_X^\infty dt t^{-1} e^{\frac{E}{4t}} \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{-R^2 t} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} i^l e^{-i l \phi_{\vec{R}}} \frac{J_l(2i t r R)}{J_l(\kappa r)} \right] \\ &\quad \times e^{i l \phi_{\vec{r}}} J_l(\kappa r) - \frac{i}{4} H_0(\kappa r) + I. \end{aligned}$$

Im Limes $r \rightarrow 0$ gilt $J_l(2itrR)/J_l(\kappa r) \rightarrow (2i)^{|l|} t^{|l|} R^{|l|} / \kappa^{|l|}$, damit ist

$$\begin{aligned}
G_2(\vec{r}) &= -\frac{1}{4\pi} \sum_l \left[i^l (2i)^{|l|} \kappa^{-|l|} \sum_{\vec{R} \neq 0} R^{|l|} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - l\phi_{\vec{R}})} \int_X^\infty dt t^{|l|-1} e^{-R^2 t + \frac{E}{4t}} \right] \\
&\quad \times e^{il\phi_{\vec{r}}} J_l(\kappa r) - \frac{i}{4} H_0(\kappa r) + I \\
&= \sum_l \left[-\frac{1}{4\pi} i^l (2i)^{|l|} \kappa^{-|l|} \sum_{\vec{R} \neq 0} R^{|l|} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - l\phi_{\vec{R}})} \int_X^\infty dt t^{|l|-1} e^{-R^2 t + \frac{E}{4t}} \right. \\
&\quad \left. - \delta_{l0} \frac{i H_0(\kappa r)}{4 J_l(\kappa r)} e^{-il\phi_{\vec{r}}} + \delta_{l0} \frac{I}{J_l(\kappa r)} e^{-il\phi_{\vec{r}}} \right] J_l(\kappa r) e^{il\phi_{\vec{r}}}.
\end{aligned}$$

Der Term $\alpha_l = \frac{I}{J_l(\kappa r)} e^{-il\phi_{\vec{r}}}$ geht für $l = 0$ und $\vec{r} \rightarrow 0$ über in

$$\alpha_0 = I = \frac{1}{4\pi} \int_{0 \exp \pi i}^X dt t^{-1} e^{\frac{E}{4t}}.$$

Mit der Substitution $y = E/4t$ erhalten wir

$$\alpha_0 = -\frac{1}{4\pi} \int_{\infty \exp \pi i}^{\frac{E}{4X}} y^{-1} e^y dy. \quad (\text{A.34})$$

Der Integrationsweg ist in Abb. A.5 skizziert.

Die *Exponentialintegralfunktion* ist definiert durch

$$\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{y} e^y dy,$$

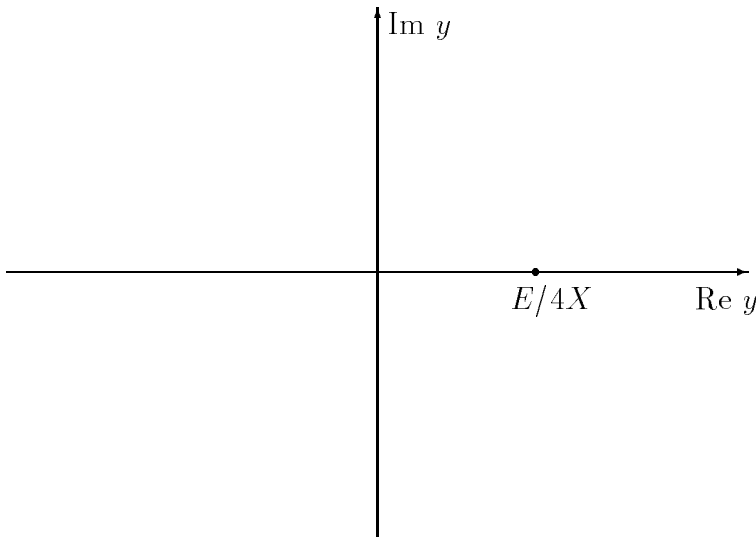


Abbildung A.5: Integrationsweg für α_0

wobei der Integrationsweg auf der reellen Achse liegt [50]. Nun gilt nach dem Residuenkalkül

$$\begin{aligned}\text{Ei}\left(\frac{\mathbb{E}}{4\mathbb{X}}\right) &= -4\pi I + \pi i \text{Res}_0 \frac{1}{y} e^{-y} \\ &= -4\pi I + \pi i.\end{aligned}$$

Damit haben wir

$$I = -\frac{1}{4\pi} \text{Ei}\left(\frac{\mathbb{E}}{4\mathbb{X}}\right) + \frac{i}{4}. \quad (\text{A.35})$$

Insgesamt lautet jetzt $G_2(\vec{r})$ im Grenzfall $\vec{r} \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}G_2(\vec{r}) &= \sum_l \left[-\frac{1}{4\pi} i^l (2i)^{|l|} \kappa^{-|l|} \sum_{\vec{R} \neq 0} R^{|l|} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - l\phi_{\vec{R}})} \int_X^\infty dt t^{|l|-1} e^{-R^2 t + \frac{\mathbb{E}}{4t}} \right. \\ &\quad \left. - \delta_{l0} \frac{i H_0(\kappa r)}{4 J_l(\kappa r)} e^{-il\phi_{\vec{r}}} + \delta_{l0} \left(-\frac{1}{4\pi} \text{Ei}\left(\frac{\mathbb{E}}{4\mathbb{X}}\right) + \frac{i}{4} \right) \right] J_l(\kappa r) e^{il\phi_{\vec{r}}}. \quad (\text{A.36})\end{aligned}$$

Für die Green-Funktion gilt nach den Gln. (A.1), (A.3) und (A.14)

$$\begin{aligned}G(\vec{r}) &= \frac{1}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) e^{il\phi_{\vec{r}}} - \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\kappa r) \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{1}{4} \left[G_l - i \delta_{l0} \frac{H_0^{(1)}(\kappa r) e^{-il\phi_{\vec{r}}}}{J_l(\kappa r)} \right] J_l(\kappa r) e^{il\phi_{\vec{r}}}. \quad (\text{A.37})\end{aligned}$$

Ein Koeffizientenvergleich in der Gleichung $G(\vec{r}) = G_1(\vec{r}) + G_2(\vec{r})$ im Grenzfall $\vec{r} \rightarrow 0$ mit Hilfe der Gln. (A.32), (A.36) und (A.37) liefert

$$\begin{aligned}\frac{1}{4} \left[G_l - i \delta_{l0} \frac{H_0^{(1)}(\kappa r) e^{-il\phi_{\vec{r}}}}{J_l(\kappa r)} \right] &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \frac{e^{\frac{\mathbb{E} - |\vec{k} + \vec{G}|^2}{4\mathbb{X}}}}{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2} i^l e^{-il\phi_{\vec{k} + \vec{G}}} \frac{|\vec{k} + \vec{G}|^{|l|}}{\kappa^{|l|}} \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} i^l (2i)^{|l|} \kappa^{-|l|} \sum_{\vec{R} \neq 0} R^{|l|} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - l\phi_{\vec{R}})} \int_X^\infty dt t^{|l|-1} e^{-R^2 t + \frac{\mathbb{E}}{4t}} \\ &\quad - \delta_{l0} \frac{1}{4} \left[\frac{i H_0^{(1)}(\kappa r) e^{-il\phi_{\vec{r}}}}{J_l(\kappa r)} + \frac{1}{\pi} \text{Ei}\left(\frac{\mathbb{E}}{4\mathbb{X}}\right) - i \right].\end{aligned}$$

Die reduzierte Strukturkonstante zerlegen wir in drei Summanden und erhalten

$$G_l = G_l^{(1)} + G_l^{(2)} + G_l^{(3)}$$

mit

$$G_l^{(1)} = \frac{4}{\Omega} \sum_{\vec{G}} \frac{e^{\frac{\mathbb{E} - |\vec{k} + \vec{G}|^2}{4\mathbb{X}}}}{E - |\vec{k} + \vec{G}|^2} i^l e^{-il\phi_{\vec{k} + \vec{G}}} \frac{|\vec{k} + \vec{G}|^{|l|}}{\kappa^{|l|}} \quad (\text{A.38})$$

$$G_l^{(2)} = -\frac{1}{\pi} i^l (2i)^{|l|} \kappa^{-|l|} \sum_{\vec{R} \neq 0} R^{|l|} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - l\phi_{\vec{R}})} \int_X^\infty dt t^{|l|-1} e^{-R^2 t + \frac{\mathbb{E}}{4t}} \quad (\text{A.39})$$

$$G_l^{(3)} = \delta_{l0} \left[i - \frac{1}{\pi} \text{Ei}\left(\frac{\mathbb{E}}{4\mathbb{X}}\right) \right]. \quad (\text{A.40})$$

Schnelle Konvergenz der Summen in Gl. (A.38) und (A.39) ist durch den Faktor $e^{\frac{E-|\vec{k}+\vec{G}|^2}{4X}}$ bzw. $e^{-R^2t+\frac{E}{4t}}$ gewährleistet. Das zeigt sich auch bei numerischer Berechnung der Strukturkonstanten. Hier kann durch geschickte Wahl des Parameters X die Konvergenz optimiert werden.

A.4 Symmetrien

A.4.1 Symmetrieeigenschaften der Strukturkonstanten

Ausgehend von den Überlegungen in Abschnitt 3, entwickeln wir hier Symmetrierelationen der Strukturkonstanten in Abhängigkeit vom Bloch-Vektor. Ist A ein Element aus der Gruppe des Bloch-Vektors \vec{k} , dann ist A normerhaltend, und es folgt aus Gl. (A.13)

$$\begin{aligned}
D(A^{-1}\vec{r}) &= -\frac{i}{4} \sum_{\vec{R} \neq 0} H_0^{(1)}(\kappa|A^{-1}\vec{r} - \vec{R}|) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \\
&= -\frac{i}{4} \sum_{\vec{R} \neq 0} H_0^{(1)}(\kappa|\vec{r} - A\vec{R}|) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \\
&= -\frac{i}{4} \sum_{\vec{R} \neq 0} H_0^{(1)}(\kappa|\vec{r} - \vec{R}|) e^{i\vec{k} \cdot A^{-1}\vec{R}} \\
&= D(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{A.41}$$

Dabei haben wir für das letzte Gleichheitszeichen Gl. (3.20) angewendet. $D(\vec{r})$ ist also invariant unter der Anwendung jeder Symmetrieoperation A aus der Gruppe des jeweiligen Bloch-Vektors. Nach Gl. (A.14) ist Gl. (A.41) gleichbedeutend mit

$$\begin{aligned}
\frac{1}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) e^{il\phi_{\vec{r}}} &= \frac{1}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) e^{il\phi_{A^{-1}\vec{r}}} \\
\Leftrightarrow 0 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) [e^{il\phi_{\vec{r}}} - e^{il\phi_{A^{-1}\vec{r}}}.
\end{aligned} \tag{A.42}$$

Nachfolgend wollen wir zu den verschiedenen Symmetrieoperationen A unseres zweidimensionalen Gitters zeigen, welche Konsequenzen sich aus Gl. (A.42) für die Strukturkonstanten ergeben, falls A ein Element der Gruppe des Bloch-Vektors ist.

– Ist A eine Drehung, also

$$\phi_{A^{-1}\vec{r}} = \phi_{\vec{r}} + \Delta\phi,$$

so folgt aus Gl. (A.42)

$$0 = \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l (1 - e^{il\Delta\phi}) J_l(\kappa r) e^{il\phi_{\vec{r}}}.$$

Wegen der linearen Unabhängigkeit der Funktionen $J_l e^{il\phi}$ ergibt sich

$$G_l = 0$$

außer wenn $l = n \frac{2\pi}{\Delta\phi}$, wobei n ganzzahlig ist.

– Beschreibt A die Spiegelung an der x -Achse ($A = \sigma_y$), so gilt

$$\phi_{A^{-1}\vec{r}} = -\phi_{\vec{r}}.$$

Damit erhalten wir aus Gl. (A.42)

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) [e^{il\phi_{\vec{r}}} - e^{-il\phi_{\vec{r}}}] \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) 2i \sin(l\phi_{\vec{r}}) \\ &= 2i \sum_{l=1}^{\infty} (G_l - (-1)^l G_{-l}) J_l(\kappa r) \sin(l\phi_{\vec{r}}), \end{aligned}$$

und es folgt mit Gl. (A.19)

$$G_l = (-1)^l G_{-l}^*,$$

was

$$\phi_{G_l} = \frac{l}{2}\pi + k\pi, \quad k \in \mathbb{Z}$$

impliziert. Daraus erhalten wir

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} G_l &= 0, \quad \text{falls } l \text{ gerade,} \\ \operatorname{Re} G_l &= 0, \quad \text{falls } l \text{ ungerade.} \end{aligned} \tag{A.43}$$

– Gilt $A = \sigma_x$ (Spiegelung an der y -Achse), so folgt

$$\phi_{A^{-1}\vec{r}} = \pi - \phi_{\vec{r}}$$

und außerdem

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) [e^{il\phi_{\vec{r}}} - e^{il(\pi-\phi_{\vec{r}})}] \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) [e^{il\phi_{\vec{r}}} - (-1)^l e^{-il\phi_{\vec{r}}}] \\ &= \sum_{l \text{ gerade}} G_l J_l(\kappa r) 2i \sin(l\phi_{\vec{r}}) + \sum_{l \text{ ungerade}} G_l J_l(\kappa r) 2 \cos(l\phi_{\vec{r}}) \\ &= 2i \sum_{l=2, l \text{ gerade}}^{\infty} (G_l - G_{-l}) J_l(\kappa r) \sin(l\phi_{\vec{r}}) + 2 \sum_{l=1, l \text{ ungerade}}^{\infty} (G_l - G_{-l}) J_l(\kappa r) \cos(l\phi_{\vec{r}}). \end{aligned}$$

Unter Beachtung von Gl. (A.19) haben wir damit

$$G_l = G_{-l} = G_l^*. \quad (\text{A.44})$$

G_l ist in diesem Fall reell.

– Ist $A = \sigma_1$ (Spiegelung an der Geraden $y = x$) mit

$$\phi_{A^{-1}\vec{r}} = \frac{\pi}{2} - \phi_{\vec{r}},$$

so folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) [e^{il\phi_{\vec{r}}} - e^{i(\frac{\pi}{2}-\phi_{\vec{r}})l}] \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) e^{il\frac{\pi}{4}} 2i \sin l(\phi_{\vec{r}} - \frac{\pi}{4}) \\ &= 2i \sum_{l=1}^{\infty} (G_l e^{il\frac{\pi}{4}} - (-1)^l G_{-l} e^{-il\frac{\pi}{4}}) J_l(\kappa r) \sin l(\phi_{\vec{r}} - \frac{\pi}{4}) \end{aligned}$$

und

$$G_l = i^l G_{-l} = i^l G_l^*.$$

Damit gilt

$$\phi_{G_l} = l\frac{\pi}{4} + k\pi, \quad k \in \mathcal{Z},$$

und es folgt für l gerade:

$$\begin{aligned} \text{Im}G_l &= 0, \text{ falls } l/2 \text{ gerade } (l = 4, 8, 12, \dots), \\ \text{Re}G_l &= 0, \text{ falls } l/2 \text{ ungerade } (l = 2, 6, 10, \dots); \end{aligned}$$

für l ungerade:

$$\begin{aligned} \text{Re}G_l &= -\text{Im}G_l, \text{ falls } (l+1)/2 \text{ gerade } (l = 3, 7, 11, 15, \dots), \\ \text{Re}G_l &= \text{Im}G_l, \text{ falls } (l+1)/2 \text{ ungerade } (l = 1, 5, 9, \dots). \end{aligned}$$

– Falls A die Spiegelung an der Geraden $y = -x$ beschreibt ($A = \sigma_2$), ist

$$\phi_{A^{-1}\vec{r}} = \frac{3}{2}\pi - \phi_{\vec{r}}.$$

Es folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) [e^{il\phi_{\vec{r}}} - e^{i(\frac{3}{2}\pi-\phi_{\vec{r}})l}] \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_l J_l(\kappa r) e^{-il\frac{\pi}{4}} 2i \sin l(\phi_{\vec{r}} + \frac{\pi}{4}) \\ &= 2i \sum_{l=1}^{\infty} (e^{-il\frac{\pi}{4}} G_l - (-1)^l e^{il\frac{\pi}{4}} G_{-l}) J_l(\kappa r) \sin l(\phi_{\vec{r}} + \frac{\pi}{4}) \end{aligned}$$

und

$$G_l = i^{-l} G_{-l} = i^{-l} G_l^*.$$

Daraus ergibt sich für l gerade:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}G_l &= 0, \text{ falls } l/2 \text{ gerade } (l = 4, 8, 12, \dots), \\ \operatorname{Re}G_l &= 0, \text{ falls } l/2 \text{ ungerade } (l = 2, 6, 10, \dots); \end{aligned}$$

für l ungerade:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}G_l &= -\operatorname{Re}G_l \text{ falls } (l+1)/2 \text{ ungerade } (l = 1, 5, 9, \dots), \\ \operatorname{Re}G_l &= \operatorname{Im}G_l \text{ falls } (l+1)/2 \text{ gerade } (l = 3, 7, 11, 15, \dots). \end{aligned}$$

A.4.2 Symmetrisierte Wellenfunktionen

Wir wollen jetzt, ausgehend von ausgesuchten Bloch-Vektoren, neue Sätze von symmetrisierten Basisfunktionen aus dem Funktionensystem der $\{e^{il\phi}\}$ entwickeln. Diese sollen sich nach den jeweiligen irreduziblen Darstellungen der Gruppe des Bloch-Vektors transformieren. Wir erhalten die symmetrisierten Basisfunktionen durch Anwendung des nachfolgend definierten Projektors auf die Funktionen $e^{il\phi}$:

Zur irreduziblen Darstellung Γ der Gruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ ist

$$P^{(\Gamma)} = \frac{n_\Gamma}{g} \sum_{S \in \mathcal{G}_{\vec{k}}} \chi^{*(\Gamma)}(S)S \quad (\text{A.45})$$

der Projektor, der ein Element des Hilbertraums auf denjenigen Teilraum projiziert, dessen Elemente sich nach der irreduziblen Darstellung Γ transformieren [59]. n_Γ ist gleich der Dimension von Γ , g ist gleich der Anzahl der Elemente in $\mathcal{G}_{\vec{k}}$, und $\chi^{(\Gamma)}(S)$ ist der Charakter von S in der Darstellung Γ .

Wenden wir die acht Symmetrieoperationen des quadratischen Gitters jeweils auf den Basisvektor $e^{il\phi}$ an, so erhalten wir

$$\begin{aligned} Ie^{il\phi} &= e^{il\phi} \\ C_4e^{il\phi} &= i^{-l}e^{il\phi} \\ C_4^{-1}e^{il\phi} &= i^le^{il\phi} \\ C_2e^{il\phi} &= (-1)^le^{il\phi} \\ \sigma_ye^{il\phi} &= e^{-il\phi} \\ \sigma_xe^{il\phi} &= (-1)^le^{-il\phi} \\ \sigma_1e^{il\phi} &= i^le^{-il\phi} \\ \sigma_2e^{il\phi} &= i^{-l}e^{-il\phi}. \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

\vec{k} liegt im Punkt Γ

Im Fall $\vec{k} = 0$ ist die Gruppe von \vec{k} gleich der Gruppe C_{4v} :

$$\mathcal{G}_{\vec{k}} = \{I, C_4, C_4^{-1}, C_2, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_1, \sigma_2\}, \quad g = 8.$$

Sie besitzt vier eindimensionale und eine zweidimensionale Darstellung. Mit Hilfe der Charaktertafel ([49]) erhält man als Projektoren dieser Darstellungen

$$\begin{aligned} P(\Gamma_1) &= \frac{1}{8}(I + C_4 + C_4^{-1} + C_2 + \sigma_y + \sigma_x + \sigma_1 + \sigma_2) \\ P(\Gamma_2) &= \frac{1}{8}(I + C_4 + C_4^{-1} + C_2 - \sigma_y - \sigma_x - \sigma_1 - \sigma_2) \\ P(\Gamma_3) &= \frac{1}{8}(I - C_4 - C_4^{-1} + C_2 + \sigma_y + \sigma_x - \sigma_1 - \sigma_2) \\ P(\Gamma_4) &= \frac{1}{8}(I - C_4 - C_4^{-1} + C_2 - \sigma_y - \sigma_x + \sigma_1 + \sigma_2) \\ P(\Gamma_5) &= \frac{2}{8}(2I - 2C_2). \end{aligned}$$

Wenden wir diese Projektoren auf die Basisfunktion $e^{il\phi}$ an, so erhalten wir als symmetrisierte Basisfunktionen die Funktionen

$$\begin{aligned} P(\Gamma_1)e^{il\phi} &= \frac{1}{8} \left[e^{il\phi} + i^{-l}e^{il\phi} + i^l e^{il\phi} + (-1)^l e^{il\phi} \right. \\ &\quad \left. + e^{-il\phi} + (-1)^l e^{-il\phi} + i^l e^{-il\phi} + i^{-l} e^{-il\phi} \right] \\ &= \frac{1}{8} \left(1 + (-1)^l + i^l + i^{-l} \right) \left(e^{il\phi} + e^{-il\phi} \right) \\ &= \begin{cases} 0 & \text{falls } l = \pm 1, 2, 3, 5, 6, 7, 9, \dots \\ \cos l\phi & \text{falls } l = \pm 0, 4, 8, 12, \dots \end{cases} \quad (\text{A.47}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(\Gamma_2)e^{il\phi} &= \frac{1}{8} \left(1 + (-1)^l + i^l + i^{-l} \right) \left(e^{il\phi} - e^{-il\phi} \right) \\ &= \begin{cases} 0 & \text{falls } l = \pm 1, 2, 3, 5, 6, 7, 9, \dots \\ i \sin l\phi & \text{falls } l = 0, \pm 4, 8, 12, \dots \end{cases} \quad (\text{A.48}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(\Gamma_3)e^{il\phi} &= \frac{1}{8} \left[e^{il\phi} - i^{-l}e^{il\phi} - i^l e^{il\phi} + (-1)^l e^{il\phi} \right. \\ &\quad \left. + e^{-il\phi} + (-1)^l e^{-il\phi} - i^l e^{-il\phi} - i^{-l} e^{-il\phi} \right] \\ &= \frac{1}{8} \left(1 + (-1)^l - i^l - i^{-l} \right) \left(e^{il\phi} + e^{-il\phi} \right) \\ &= \begin{cases} 0 & \text{falls } l = \pm 0, 1, 3, 4, 5, 7, 8, \dots \\ \cos l\phi & \text{falls } l = \pm 2, 6, 10, \dots \end{cases} \quad (\text{A.49}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(\Gamma_4)e^{il\phi} &= \frac{1}{8} \left(1 + (-1)^l - i^l - i^{-l} \right) \left(e^{il\phi} - e^{-il\phi} \right) \\ &= \begin{cases} 0 & \text{falls } l = \pm 1, 3, 4, 5, 7, 8, \dots \\ i \sin l\phi & \text{falls } l = \pm 2, 6, 10, \dots \end{cases} \quad (\text{A.50}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P^{(\Gamma_5)} e^{il\phi} &= \frac{1}{2} e^{il\phi} (1 - (-1)^l) \\
&= \begin{cases} 0 & \text{falls } l \text{ gerade} \\ e^{il\phi} & \text{falls } l \text{ ungerade.} \end{cases} \tag{A.51}
\end{aligned}$$

\vec{k} liegt auf der Δ -Linie

Hier besitzt die Gruppe von \vec{k} die Bezeichnung C_s . Sie stellt sich dar als

$$\mathcal{G}_{\vec{k}} = \{I, \sigma_y\}, \quad g = 2$$

und besitzt zwei eindimensionale Darstellungen. Unter Zuhilfenahme der Charaktertafel [49] lauten die Projektoren

$$\begin{aligned}
P^{(\Delta_1)} &= \frac{1}{2}(I + \sigma_y) \\
P^{(\Delta_2)} &= \frac{1}{2}(I - \sigma_y).
\end{aligned}$$

Die symmetrisierten Basisfunktionen sind

$$\begin{aligned}
P^{(\Delta_1)} e^{il\phi} &= \frac{1}{2} (e^{il\phi} + e^{-il\phi}) \\
&= \cos l\phi \tag{A.52}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P^{(\Delta_2)} e^{il\phi} &= \frac{1}{2} (e^{il\phi} - e^{-il\phi}) \\
&= i \sin l\phi. \tag{A.53}
\end{aligned}$$

\vec{k} liegt auf der Σ -Linie

Die Gruppe von \vec{k} ist auch hier die Gruppe C_s und ist gegeben durch

$$\mathcal{G}_{\vec{k}} = \{I, \sigma_1\}, \quad g = 2.$$

Die Projektoren der beiden Darstellungen sind

$$\begin{aligned}
P^{(\Sigma_1)} &= \frac{1}{2}(I + \sigma_1) \\
P^{(\Sigma_2)} &= \frac{1}{2}(I - \sigma_1).
\end{aligned}$$

Als symmetrisierte Basisfunktionen erhalten wir

$$\begin{aligned}
P^{(\Sigma_1)} e^{il\phi} &= \frac{1}{2} (e^{il\phi} + i^l e^{-il\phi}) \\
&= \frac{1}{2} e^{i\frac{\pi}{4}} (e^{il(\phi - \frac{\pi}{4})} + e^{-il(\phi - \frac{\pi}{4})}) \\
&= e^{i\frac{\pi}{4}} \cos l \left(\phi - \frac{\pi}{4} \right) \tag{A.54}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P^{(\Sigma_2)} e^{il\phi} &= \frac{1}{2} (e^{il\phi} - i^l e^{-il\phi}) \\
&= \frac{1}{2} e^{i\frac{\pi}{4}} (e^{il(\phi - \frac{\pi}{4})} - e^{-il(\phi - \frac{\pi}{4})}) \\
&= i e^{i\frac{\pi}{4}} \sin l \left(\phi - \frac{\pi}{4} \right). \tag{A.55}
\end{aligned}$$

\vec{k} liegt auf der Z -Linie

Hier gilt

$$\mathcal{G}_{\vec{k}} = \{I, \sigma_x\}, \quad g = 2.$$

Ihre Bezeichnung lautet wie auf der Δ - und Σ -Linie C_s . Die Projektoren sind

$$\begin{aligned} P^{(Z_1)} &= \frac{1}{2}(I + \sigma_x) \\ P^{(Z_2)} &= \frac{1}{2}(I - \sigma_x). \end{aligned}$$

Sie liefern als symmetrisierte Basisfunktionen die Funktionen

$$\begin{aligned} P^{(Z_1)} e^{il\phi} &= \frac{1}{2}(e^{il\phi} + (-1)^l e^{-il\phi}) \\ &= \begin{cases} \cos l\phi & \text{falls } l \text{ gerade} \\ i \sin l\phi & \text{falls } l \text{ ungerade} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

$$\begin{aligned} P^{(Z_2)} e^{il\phi} &= \frac{1}{2}(e^{il\phi} - (-1)^l e^{-il\phi}) \\ &= \begin{cases} \cos l\phi & \text{falls } l \text{ ungerade} \\ i \sin l\phi & \text{falls } l \text{ gerade.} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

\vec{k} liegt im Punkt X

Die Gruppe von \vec{k} trägt die Bezeichnung C_{2v} und ist gegeben durch

$$\mathcal{G}_{\vec{k}} = \{I, C_2, \sigma_x, \sigma_y\}, \quad g = 4.$$

Sie besitzt vier eindimensionale Darstellungen. Die Projektoren ergeben sich mit Hilfe der Charakter Tafel [49] als

$$\begin{aligned} P^{(X_1)} &= \frac{1}{4}(I + C_2 + \sigma_x + \sigma_y) \\ P^{(X_2)} &= \frac{1}{4}(I + C_2 - \sigma_x - \sigma_y) \\ P^{(X_3)} &= \frac{1}{4}(I - C_2 + \sigma_x - \sigma_y) \\ P^{(X_4)} &= \frac{1}{4}(I - C_2 - \sigma_x + \sigma_y). \end{aligned}$$

Die symmetrisierten Basisfunktionen sind

$$\begin{aligned} P^{(X_1)} e^{il\phi} &= \frac{1}{4}(e^{il\phi} + (-1)^l e^{il\phi} + e^{-il\phi} + (-1)^l e^{-il\phi}), \\ &= \frac{1}{4}(1 + (-1)^l)(e^{il\phi} + e^{-il\phi}) \\ &= \begin{cases} \cos l\phi & \text{falls } l \text{ gerade} \\ 0 & \text{falls } l \text{ ungerade} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

$$\begin{aligned}
P^{(X_2)} e^{il\phi} &= \frac{1}{4} (1 + (-1)^l) (e^{il\phi} - e^{-il\phi}) \\
&= \begin{cases} i \sin l\phi & \text{falls } l \text{ gerade} \\ 0 & \text{falls } l \text{ ungerade} \end{cases} \quad (\text{A.59})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P^{(X_3)} e^{il\phi} &= \frac{1}{4} (e^{il\phi} - (-1)^l e^{il\phi} + (-1)^l e^{-il\phi} - e^{-il\phi}) \\
&= \frac{1}{4} (1 - (-1)^l) (e^{il\phi} - e^{-il\phi}) \\
&= \begin{cases} i \sin l\phi & \text{falls } l \text{ ungerade} \\ 0 & \text{falls } l \text{ gerade} \end{cases} \quad (\text{A.60})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P^{(X_4)} e^{il\phi} &= \frac{1}{4} (1 - (-1)^l) (e^{il\phi} + e^{-il\phi}) \\
&= \begin{cases} \cos l\phi & \text{falls } l \text{ ungerade} \\ 0 & \text{falls } l \text{ gerade.} \end{cases} \quad (\text{A.61})
\end{aligned}$$

\vec{k} liegt im Punkt M

Hier besitzt der Bloch-Vektor dieselbe Symmetrie wie im Γ -Punkt. Die Gruppe des Bloch-Vektors ist wieder gleich der Gruppe C_{4v} . Die fünf Darstellungen nennen wir $M_1 \dots M_5$, sie besitzen dieselben symmetrisierten Basisfunktionen wie die Darstellungen $\Gamma_1 \dots \Gamma_5$.

A.4.3 Symmetrisierung der Kohn-Rostoker-Matrix

Wir wollen nun für jede irreduzible Darstellung Γ , die wir im letzten Abschnitt besprochen haben, den Lösungsraum von Gl. (3.15) auf denjenigen Teilraum einschränken, der durch die zu Γ gehörende symmetrisierte Basis aufgespannt wird.

Sämtliche eindimensionale Darstellungen, die im letzten Abschnitt betrachtet wurden, besitzen in dem Unterraum, der durch die Funktionen $e^{il\phi}$ und $e^{-il\phi}$ aufgespannt wird, eine eindimensionale Basis. Diese Basis ist gegeben durch symmetrisierte Basisfunktionen der Form $b_l = b_l^+ e^{il\phi} + b_l^- e^{-il\phi}$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Zur Vereinfachung der noch folgenden Gleichungen führen wir die Größe

$$\gamma_l = \frac{\partial}{\partial r'} J_l(\kappa r') - J_l(\kappa r') L_l(r') \quad (\text{A.62})$$

ein. γ_l erfüllt die Gleichung

$$\gamma_l = (-1)^l \gamma_{-l}. \quad (\text{A.63})$$

Ist die Matrix \tilde{A} durch

$$\tilde{A}_{ll'} = \gamma_l \{ (\cot \eta_l - i) \delta_{ll'} + G_{ll'} \}, \quad l, l' = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.64})$$

gegeben, dann ist Gl. (3.18) äquivalent zu

$$\det \tilde{A} = 0. \quad (\text{A.65})$$

Betrachten wir Gl. (A.64) und (3.15), so wird deutlich, daß die Matrix \tilde{A} der Darstellung eines linearen Operators in der Basis $e^{il\phi}$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, entspricht. Die Lösungsvektoren der Gleichung $\tilde{A}\vec{x} = 0$ geben genau die Vektordarstellungen der gesuchten Eigenfunktionen $\Psi(\vec{r})$ des Sinai-Billard in der Basis der Funktionen $e^{il\phi}$ gemäß Gl. (3.12) wieder.

Die Lösungen von Gl. (A.65) können wir nun auf denjenigen Teilraum einschränken, der durch die symmetrisierte Basis $\{b_l, l = 0, 1, 2, 3, \dots\}$ zu einer irreduziblen Darstellung Γ aufgespannt wird. Dafür verkleinern wir den Urbildraum von \tilde{A} auf den gewünschten Teilraum. D.h., wir gehen über zur symmetrisierten Kohn-Rostoker-Matrix A^Γ , deren Matrixelemente durch

$$A_{ll'}^\Gamma = b_l^+ \tilde{A}_{ll'} + b_{l'}^- \tilde{A}_{l-l'}, \quad (\text{A.66})$$

$l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, $l' = 0, 1, 2, 3, \dots$, gegeben sind. Damit liefern die Lösungen des Gleichungssystems

$$\sum_{l'=0}^{\infty} a_{l'}(r) A_{ll'}^\Gamma = 0, \quad (\text{A.67})$$

$l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, die Energiewerte unseres Systems zur Darstellung Γ . Dabei ist noch zu beachten, daß es bei einigen Darstellungen nur für bestimmte Werte von l eine symmetrisierte Basisfunktion b_l gibt. Wir können sagen, daß die Funktionen b_l nur für bestimmte Werte von l ungleich Null sind. Z.B. ist in der Γ_2 -Darstellung ist b_l genau dann ungleich Null, wenn $l = 4n$, $n \in \mathcal{Z}$. In einem solchen Fall gilt also $b_l \neq 0 \Leftrightarrow l \in I^\Gamma$, wobei I^Γ die entsprechende Indexmenge darstellt. Zusätzlich kann für jede hier betrachtete Darstellung Γ gezeigt werden, daß für jedes l die beiden Zeilen der Matrix A^Γ mit den Indizes l und $-l$ voneinander linear abhängig sind. Das bedeutet, daß die beiden entsprechenden Gleichungen zu den Indizes l und $-l$ des Gleichungssystems (A.67) äquivalent sind. Daher können wir die symmetrisierte Kohn-Rostoker-Matrix weiter verkleinern, indem wir die Zeilen zu negativen Indizes streichen. Außerdem zeigt es sich, daß die Zeilen zu den Indizes l mit $l \notin I^\Gamma$ gleich Null sind. Die Existenz einer nichttrivialen Lösung von Gl. (A.67) ist also gleichbedeutend mit

$$\det \left(A_{ll'}^\Gamma \right)_{l, l' \in I^\Gamma} = 0. \quad (\text{A.68})$$

Im folgenden berechnen wir die symmetrisierte Matrix A^Γ gemäß Gl. (A.66) zu sämtlichen eindimensionalen Darstellungen. Wir berücksichtigen auch die Kohn-Rostoker-Matrix der zweidimensionalen Γ_5 -Darstellung, deren Symmetrisierung aber an entsprechender Stelle noch eine spezielle Betrachtung erfordert. Zunächst folgt aus den Gln. (A.63) und (A.66)

$$A_{ll'}^\Gamma = \gamma_l \left\{ b_l^+ [(\cot \eta_l - i)\delta_{ll'} + G_{ll'}] + (-1)^{l'} b_{l'}^- [(\cot \eta_l - i)\delta_{l-l'} + G_{l, -l'}] \right\}. \quad (\text{A.69})$$

In den folgenden Ausdrücken bezeichnen wir mit dem Symbol G die reduzierten Strukturkonstanten, deren Zusammenhang mit den eigentlichen Strukturkonstanten (von denen sie sich nur durch die Indizierung unterscheiden) durch Gl. (A.16) gegeben ist.

\vec{k} liegt im Punkt Γ

In diesem Fall ist $G_l = 0$, außer wenn $l = 4n$, $n \in \mathcal{Z}$. Für $l \neq 0$ ist G_l reell, $G_l = G_{-l}$ für alle $l \neq 0$.

$\Gamma = \Gamma_1$:

Nach Gl. (A.47) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} + e^{-il\phi})$, $l = 0, 4, 8, \dots$,

Nach Gl. (A.69) ergeben sich Matrixelemente der symmetrisierten Kohn–Rostoker–Matrix als

$$A_{ll'}^{\Gamma_1} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta - i)(\delta_{ll'} + \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} + G_{l+l'}] \quad (\text{A.70})$$

mit $l, l' = 0, 4, 8, \dots$

$\Gamma = \Gamma_2$:

Nach Gl. (A.48) ist $b_l = 1/2(e^{il\phi} - e^{-il\phi})$, $l = 4, 8, 12, \dots$. Die Matrixelemente der symmetrisierten Kohn–Rostoker–Matrix lauten damit

$$A_{ll'}^{\Gamma_2} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta - i)(\delta_{ll'} - \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} - G_{l+l'}] \quad (\text{A.71})$$

und $l, l' = 4, 8, 12, \dots$

$\Gamma = \Gamma_3$:

Entsprechend Gl. (A.49) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} + e^{-il\phi})$, $l = 2, 6, 10, \dots$, und die Matrixelemente der symmetrisierten Kohn–Rostoker–Matrix lauten

$$A_{ll'}^{\Gamma_3} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta - i)(\delta_{ll'} + \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} + G_{l+l'}] \quad (\text{A.72})$$

mit $l, l' = 2, 6, 10, \dots$

$\Gamma = \Gamma_4$:

Nach Gl. (A.50) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} - e^{-il\phi})$, $l = 2, 6, 10, \dots$, und wir haben

$$A_{ll'}^{\Gamma_4} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta - i)(\delta_{ll'} - \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} - G_{l+l'}], \quad (\text{A.73})$$

wobei $l, l' = 2, 6, 10, \dots$

$\Gamma = \Gamma_5$:

Diese Darstellung ist zweidimensional, nach Gl. (A.51) ist $b_l = e^{il\phi}$ aber $l = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$. Die Dimension der Kohn–Rostoker–Matrix ist entsprechend höher als bei den eindimensionalen Darstellungen im Γ -Punkt. Wir können die Dimension aber noch weiter reduzieren, indem wir zu jedem zweidimensionalen Eigenraum eines Energieeigenwertes E nur einen eindimensionalen Unterraum zum Aufbau der Kohn–Rostoker–Matrix berücksichtigen.

Das geschieht folgendermaßen: Sei

$$\Psi_1 = \sum_{l'=1,3,5,\dots} b_{l'}^+ e^{il'\phi} + b_{l'}^- e^{-il'\phi}$$

Eigenfunktion vom Typ Γ_5 zum Energieeigenwert E , also Lösung von Gl. (3.15). Unter Beachtung der Gln. (A.62) und (A.63) gilt also

$$\sum_{l'=1,3,5,\dots} \gamma_{l'} \{A_{ll'} b_{l'}^+ - A_{l,-l'} b_{l'}^-\} = 0 \quad (\text{A.74})$$

für beliebiges l , dabei ist $A_{ll'}$ gleich der Kohn–Rostoker–Matrix nach Gl. (3.19). Die Gleichung zum Index $-l$ lautet

$$\begin{aligned} \sum_{l'=1,3,5,\dots} \gamma_{l'} \{A_{-ll'} b_{l'}^+ - A_{-l,-l'} b_{l'}^-\} &= 0 \\ \Leftrightarrow \sum_{l'=1,3,5,\dots} \gamma_{l'} \{A_{ll'} b_{l'}^- - A_{l,-l'} b_{l'}^+\} &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.75})$$

wobei wir die im Γ -Punkt gültige Relation $A_{ll'} = A_{-l,-l'}$ ausgenutzt haben. Damit ist die Funktion

$$\Psi_2 = \sum_{l'=1,3,5,\dots} b_{l'}^- e^{il'\phi} + b_{l'}^+ e^{-il'\phi}$$

ebenfalls Lösung von Gl. (3.15) zum Energieeigenwert E . Wir können voraussetzen, daß Ψ_1 weder symmetrisch noch antisymmetrisch bzgl. Spiegelung an der x -Achse ist. Das zeigt die Charaktertafel [49]. Daher ist Ψ_2 linear unabhängig von Ψ_1 , und der zweidimensionale Eigenraum zum Eigenwert E wird von Ψ_1 und Ψ_2 aufgespannt. Also ist auch jede Linearkombination von Ψ_1 und Ψ_2 Eigenfunktion zum Eigenwert E , nämlich jede Funktion der Form

$$\Psi = \Psi_1 + c\Psi_2 \quad (\text{A.76})$$

mit beliebiger Zahl c . Für c gleich Eins haben wir

$$\Psi = \sum_{l'=1,3,5,\dots} (b_{l'}^+ + b_{l'}^-)(e^{il'\phi} + e^{-il'\phi}). \quad (\text{A.77})$$

Wir können also feststellen, daß es zu jedem Eigenwert der Γ_5 -Darstellung eine zugehörige Eigenfunktion gibt, die sich gemäß Gl. (A.77) darstellen läßt. Daher ist es möglich, als Elemente einer symmetrisierten Basis im Fall der Γ_5 -Darstellung Basisvektoren der Form

$$b_l = \frac{1}{2}(e^{il\phi} + e^{-il\phi}), \quad l = 1, 3, 5, \dots$$

zu wählen. Die symmetrisierten Matrixelemente lauten dann

$$A_{ll'}^{\Gamma_5} = \gamma_{l'} [(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} - \delta_{l,-l'}) + G_{l,-l'} - G_{l+l'}], \quad (\text{A.78})$$

mit $l, l' = 1, 3, 5, \dots$

\vec{k} liegt auf der Δ -Linie

In diesem Fall ist $G_l = (-1)^l G_{-l}$.

$\Gamma = \Delta_1$:

Nach Gl. (A.52) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} + e^{-il\phi})$, $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Die symmetrisierte Kohn-Rostoker-Matrix besteht aus den Elementen

$$A_{ll'}^{\Delta_1} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} \left[(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} + (-1)^{l'} \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} + (-1)^{l'} G_{l+l'} \right] \quad (\text{A.79})$$

mit $l, l' = 0, 1, 2, \dots$

$\Gamma = \Delta_2$:

Entsprechend Gl. (A.53) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} - e^{-il\phi})$, $l = 1, 2, 3, \dots$, und wir erhalten als Matrixelemente der symmetrisierten Kohn-Rostoker-Matrix die Größen

$$A_{ll'}^{\Delta_2} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} \left[(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} - (-1)^{l'} \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} - (-1)^{l'} G_{l+l'} \right] \quad (\text{A.80})$$

und $l, l' = 1, 2, 3, \dots$

\vec{k} liegt auf der Σ -Linie:

Es gilt $G_l = i^l G_{-l}$.

$\Gamma = \Sigma_1$:

Nach Gl. (A.54) ist $b_l = 1/2(e^{il\phi} + i^l e^{-il\phi})$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Die symmetrisierte Kohn-Rostoker-Matrix besitzt die Elemente

$$A_{ll'}^{\Sigma_1} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} \left[(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} + i^{-l'} \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} + i^{-l'} G_{l+l'} \right], \quad (\text{A.81})$$

$l, l' = 0, 1, 2, \dots$

$\Gamma = \Sigma_2$:

Aufgrund von Gl. (A.55) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} - i^l e^{-il\phi})$, $l = 1, 2, 3, \dots$. Damit erhalten wir

$$A_{ll'}^{\Sigma_2} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} \left[(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} - i^{-l'} \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} - i^{-l'} G_{l+l'} \right] \quad (\text{A.82})$$

mit $l, l' = 1, 2, 3, \dots$

\vec{k} liegt im Punkt X :

Hier gilt $G_l = G_{-l}$, $G_l = 0$ falls l ungerade.

$\Gamma = X_1$:

Nach Gl. (A.58) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} + e^{-il\phi})$, $l = 0, 2, 4, \dots$. Die Matrixelemente der symmetrisierten Kohn-Rostoker-Matrix stellen sich dar als

$$A_{ll'}^{X_1} = \gamma_{l'} \frac{1}{4} \left[(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} + \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} + G_{l+l'} \right] \quad (\text{A.83})$$

mit $l, l' = 0, 2, 4, \dots$

$\Gamma = X_2$:

Entsprechend Gl. (A.59) ist $b_l = 1/2(e^{il\phi} - e^{-il\phi})$, $l = 2, 4, 6, \dots$. Als Matrixelemente der symmetrisierten Kohn–Rostoker–Matrix erhalten wir

$$A_{ll'}^{X_2} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} - \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} - G_{l+l'}] \quad (\text{A.84})$$

mit $l, l' = 2, 4, 6, \dots$

$\Gamma = X_3$:

Nach Gl. (A.60) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} - e^{-il\phi})$, $l = 1, 3, 5, \dots$. Und wir erhalten

$$A_{ll'}^{X_3} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} + \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} + G_{l+l'}], \quad (\text{A.85})$$

wobei $l, l' = 1, 3, 5, \dots$

$\Gamma = X_4$:

Aufgrund von Gl. (A.61) gilt $b_l = 1/2(e^{il\phi} + e^{-il\phi})$, $l = 1, 3, 5, \dots$. Daraus ergibt sich

$$A_{ll'}^{X_4} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} - \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} - G_{l+l'}] \quad (\text{A.86})$$

und $l, l' = 1, 3, 5, \dots$

\vec{k} liegt auf der Linie Z

In diesem Fall ist $G_l = G_{-l}$.

$\Gamma = Z_1$:

Nach Gl. (A.56) ist $b_l = 1/2(e^{il\phi} + (-1)^l e^{-il\phi})$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Die Matrixelemente der symmetrisierten Kohn–Rostoker–Matrix lauten

$$A_{ll'}^{Z_1} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} + \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} + G_{l+l'}] \quad (\text{A.87})$$

mit $l, l' = 0, 1, 2, \dots$

$\Gamma = Z_2$:

Wegen Gl. (A.57) ist $b_l = 1/2(e^{il\phi} - (-1)^l e^{-il\phi})$, $l = 1, 2, 3, \dots$. Die symmetrisierte Kohn–Rostoker–Matrix besitzt die Elemente

$$A_{ll'}^{Z_2} = \gamma_{l'} \frac{1}{2} [(\cot \eta_l - i)(\delta_{ll'} - \delta_{l-l'}) + G_{l-l'} - G_{l+l'}] \quad (\text{A.88})$$

mit $l, l' = 1, 2, 3, \dots$

A.5 Integraldarstellung der Hankel–Funktion

Die Hankel–Funktion $H_\nu^{(1)}(z)$ (Bessel–Funktion dritter Art [50]) läßt sich folgendermaßen darstellen [60]:

$$H_\nu^{(1)}(z) = \frac{1}{i\pi} \int_0^\infty \exp i\pi u^{-\nu-1} e^{\frac{1}{2}z(u-\frac{1}{u})} du, \quad (\text{A.89})$$

dabei gilt $\text{Re } z > 0$. Der Integrationsweg ist in Abb. A.6 skizziert. Ist κ komplex mit $\text{Re } \kappa > 0$ und R reell, so folgt aus Gl. (A.89)

$$H_0^{(1)}(\kappa R) = \frac{1}{i\pi} \int_0^\infty \exp i\pi u^{-1} e^{\frac{1}{2}\kappa R(u-\frac{1}{u})} du.$$

Mit $u = -\frac{2R}{\kappa}t$, $du = -\frac{2R}{\kappa}dt$ sowie $\phi_\kappa = \arg \kappa$ erhält man

$$\begin{aligned} H_0^{(1)}(\kappa R) &= \frac{1}{i\pi} \int_{0 \exp i(\pi+\phi_\kappa)}^\infty \exp i\phi_\kappa t^{-1} e^{\frac{1}{2}\kappa R(-\frac{2R}{\kappa}t+\frac{\kappa}{2Rt})} dt \\ &= \frac{1}{i\pi} \int_{0 \exp i(\pi+\phi_\kappa)}^\infty \exp \phi_\kappa t^{-1} e^{-R^2 t + \frac{\kappa^2}{4t}} dt. \end{aligned} \quad (\text{A.90})$$

Der Integrationsweg ist in Abb. A.7 skizziert.

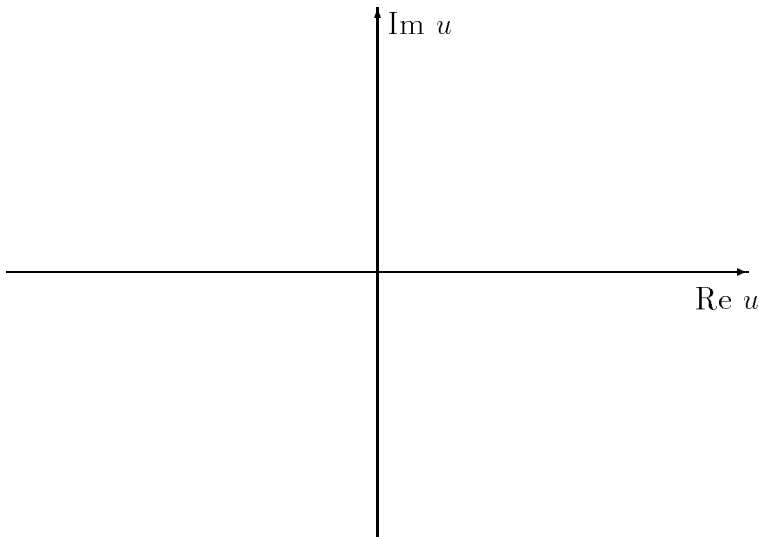


Abbildung A.6: Integrationsweg zur Integraldarstellung der Hankel–Funktion $H_\nu^{(1)}(z)$.

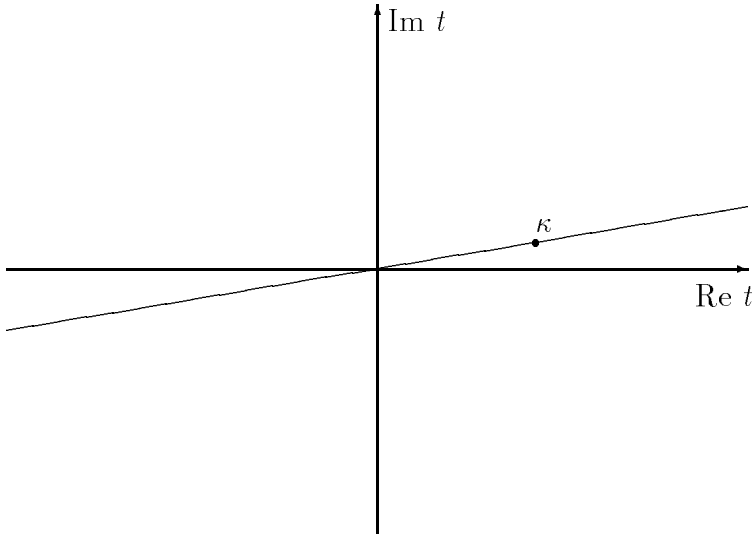


Abbildung A.7: Integrationsweg zur Integraldarstellung der Hankel-Funktion $H_0^{(1)}(\kappa R)$.

A.6 Die Streuphase eines Potentials endlicher Reichweite

Die Schrödinger Gleichung in zwei Dimensionen lautet

$$[-\Delta + V(r)]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (\text{A.91})$$

dabei messen wir die Energie in Einheiten von $\frac{\hbar^2}{2m}$. Das Potential V ist radialsymmetrisch und in unserem Fall außerhalb der *Muffin-Tin-Scheibe* gleich Null. Durch die Wahl eines Produktansatzes der Form $\Psi(\vec{r}) = R(r)T(\phi)$, wobei r den Betrag und ϕ den Polarwinkel des Vektors \vec{r} darstellt, erhalten wir die Gleichungen

$$\frac{d^2 T_l(\phi)}{d\phi^2} + l^2 T_l(\phi) = 0, \quad (\text{A.92})$$

und

$$\left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) + \kappa^2 - V - \frac{l^2}{r^2} \right] R_l(r) = 0 \quad (\text{A.93})$$

mit $\kappa^2 = E$. Gl (A.92) liefert als Lösungen $T_l(\phi) = e^{il\phi}$ mit $l \in Z$. Die Radiallösungen $R_l(r)$ hängen von l ab. Für $r \leq r_m$ seien diese synonym mit $a_l(r)$ bezeichnet. Ist $r > r_m$, so ist $V(r) = 0$ und Gl. (A.93) geht in die *Besselsche Differentialgleichung* über. Die allgemeine Lösung von Gl. (A.93) lautet dann

$$R_l(r) = A_l J_l(kr) + B_l Y_l(kr) \quad (\text{A.94})$$

mit den Bessel-Funktionen J_l, Y_l und aus den Randbedingungen zu bestimmenden Koeffizienten A_l und B_l [50].

Betrachtet man das Problem der Streuung einer ebenen Welle an dem Zentralpotential $V(\vec{r})$, so wird in [61] gezeigt, daß a_l asymptotisch die Phasenverschiebung η_l zur l -ten Partialwelle der ebenen Welle besitzt mit

$$\tan \eta_l = -\frac{B_l}{A_l}. \quad (\text{A.95})$$

Aus der Kenntnis von $a_l(r)$ läßt sich $\tan \eta_l$ bestimmen:

Die Radialfunktion muß in $r = r_m$ stetig differenzierbar sein. Also gilt

$$\begin{aligned} a_l &= A_l J_l + B_l Y_l, \\ a_l' &= A_l J_l' + B_l Y_l', \end{aligned}$$

wobei die Funktionswerte jeweils in $r = r_m$ zu berechnen sind. (Dabei bedeutet das Zeichen der Ableitung die partielle Ableitung nach der Variablen r .) Für den Quotienten B_l/A_l ergibt sich daraus

$$\frac{B_l}{A_l} = \frac{a_l' J_l - a_l J_l'}{a_l Y_l' - a_l' Y_l},$$

und mit

$$L_l := \frac{a_l'}{a_l}$$

folgt

$$\begin{aligned} \frac{B_l}{A_l} &= \frac{L_l J_l - J_l'}{Y_l' - L_l Y_l} \\ \Rightarrow \tan \eta_l &= \frac{J_l' - L_l J_l}{Y_l' - L_l Y_l}. \end{aligned} \quad (\text{A.96})$$

Literaturverzeichnis

- [1] S. Jorna (ed.), *Topics in nonlinear dynamics*, American Institute of Physics, New York (1978)
- [2] G. Iooss, R.H.G. Helleman und R. Stora (eds.), *Chaotic behaviour of deterministic systems*, Les Houches 1981, North-Holland, Amsterdam (1983)
- [3] M. Hénon und C. Heiles, *The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments*, *Astron. J.* **69** (1964) 409–415
- [4] M. C. Gutzwiller, *Chaos in classical and quantum mechanics*, Springer-Verlag, New York (1990)
- [5] G. Casati, B. V. Chirikov, F. M. Izraelev und J. Ford, *Stochastic behaviour of a quantum pendulum under a periodic perturbation* in *Stochastic behaviour in classical and quantum hamiltonian systems*, ed. G. Casati und J. Ford in *Lecture Notes in Physics* **93** 334–352 Springer-Verlag Berlin, New York (1979)
- [6] M. V. Berry, *Semiclassical mechanics of regular and irregular motion* in *Chaotic behaviour in deterministic systems*, Les Houches 1983, eds. G. Iooss, R. H. G. Helleman und R. Stora, North-Holland, Amsterdam (1984).
- [7] S. D. McDonald und A. N. Kaufman, *Spectrum and eigenfunctions for a hamiltonian with stochastic trajectories*, *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979) 1189–1191
- [8] B. Eckhardt, G. Hose und E. Pollak, *Quantum mechanics of a classically chaotic system: Observations on scars, periodic orbits and vibrational adiabaticity*, *Phys. Rev. A* **39** (1989) 3776–3793
- [9] E. J. Heller, *Qualitative properties of eigenfunctions of classically chaotic hamiltonian systems* in *Quantum chaos and statistical nuclear physics*, ed. T. H. Seligman und H. Nishioka, *Lecture Notes in Physics* **263**, Springer-Verlag, Berlin (1986)

- [10] S. Tomsovic und E. J. Heller, *Long-time semiclassical dynamics of chaos: The stadium billiard*, Phys. Rev. E **47** (1993) 282–299
- [11] S. Tomsovic und E. J. Heller, *Semiclassical construction of chaotic eigenstates*, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 1405–1408
- [12] M. V. Berry und M. Tabor, *Level clustering in the regular spectrum*, Proc. R. Soc. London Ser. A **356** (1977) 375–394
- [13] M. V. Berry, *Quantizing a classically ergodic system. Sinai’s billiard and the KKR–method*, Ann. Phys. N. Y. **131** (1981) 163–216
- [14] O. Bohigas, M. J. Giannoni und C. Schmit, *Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws*, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 1–4
- [15] M. V. Berry, F. R. S., *Semiclassical theory of spectral rigidity*, Proc. R. Soc. London A **400** (1985) 229–251
- [16] H. –J. Stöckmann und J. Stein, *Quantum chaos in billiards studied by microwave absorption*, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 2215–2218
- [17] H. Friedrich und D. Wintgen, *The Hydrogen Atom in a uniform magnetic field – an example of chaos*, Phys. Rep. **183** (1989) 37–79
- [18] M. C. Gutzwiller, *Phase–Integral approximation in momentum space and the bound states of an atom*, J. Math. Phys. **8** (1967) 1979–2000
- [19] M. C. Gutzwiller, *Energy spectrum according to classical mechanics*, J. Math. Phys. **11** (1970) 1791–1806
- [20] M. C. Gutzwiller, *Periodic orbits and classical quantization conditions*, J. Math. Phys. **12** (1971) 343–358
- [21] R. Balian und C. Bloch, *Distribution of eigenfrequencies for the wave equation in a finite domain: III. Eigenfrequency density oscillations*, Ann. Phys. **69** (1972) 76–160
- [22] M. C. Gutzwiller, *Classical quantization of a Hamiltonian with ergodic behaviour*, Phys. Rev. Lett. **45** (1980) 150–153
- [23] M. C. Gutzwiller, *The quantization of a classically ergodic system*, Physica D **5** (1982) 183–207
- [24] A. Selberg, J. Indian Math. Soc. **20** (1956) 47
- [25] R. Aurich und F. Steiner, *Periodic orbit sum rules for the Hadamard–Gutzwiller model*, Physica **39D** (1989) 169–193
- [26] M. V. Berry, *Regularity and chaos in classical mechanics, illustrated by three deformations of a circular billiard*, Eur. J. Phys. **2** (1981) 91–102

- [27] YA. G. Sinai, *Russ. Math. Surv.* **25** (1970) 137–189
- [28] W. Kohn, N. Rostoker, *Phys. Rev.* **94** (1954) 1111
- [29] J. Korrington, *Physica* **13** (1947) 392
- [30] A. Zacherl, T. Geisel, J. Nierwetberg und G. Radons, *Power spectra for anomalous diffusion in the extended Sinai billiard*, *Phys. Lett.* **114A** (1986) 317–321
- [31] P. R. Baldwin, *Soft billiard systems*, *Physica* **29D** (1988) 321–342
- [32] N. S. Krylov, *Works on the Foundation of Statistical Mechanics*, Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey (1979)
- [33] J. P. Bouchaud und P. Le Doussal, *Numerical study of a d -dimensional periodic Lorentz gas with universal properties*, *J. Stat. Phys.* **41** (1985) 225–247
- [34] B. Friedman, Y. Oono und I. Kubo, *Univeral behaviour of Sinai billiard systems in the small-scatterer limit*, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 709
- [35] P. Cvitanovic, *Chaos focus issue on periodic orbit theory*, eds. I. Percival und A. Wirzba, *Chaos* **1** No. 2 (1992)
- [36] V. I. Arnol'd, *Mathematical methods of classical dynamics*, Springer-Verlag, New York (1978)
- [37] A. Einstein, *Verhandl. Deut. Phys. Ges.* **19** (1917) 82–92
- [38] L. Brillouin, *J. Phys. Radium* **7** (1926) 353–368
- [39] J. B. Keller, *Ann. Phys.* **4** (1958) 180–188
- [40] R. H. Jelitto, *Theoretische Physik 5: Quantenmechanik II*, Aula-Verlag Wiesbaden (1984)
- [41] M. C. Gutzwiller, *The semiclassical quantization of chaotic hamiltonian systems in Chaos and quantum physics*, Les Houches 1989, eds. M. J. Giannoni, A. Voros und J. Zinn-Justin, North Holland, Amsterdam (1991)
- [42] L. E. Reichl, *The transition to chaos*, Springer-Verlag, Berlin (1992)
- [43] A. J. Dragt und J. M. Finn, *Lie series and invariant functions for analytic symplectic maps*, *J. Math. Phys.* **17** (1976) 2215—2227
- [44] D. Wintgen, *Quantisiertes Chaos*, *Phys. Bl.* **49** (1993) 641–644
- [45] M. Kac, *Can one hear the shape of a drum*, *Am. Math. Mon.* **73** no. 4 part II (1966) 1–23

- [46] H. P. Baltes und E. R. Hilf, *Spectra of finite systems*, B-I Wissenschaftsverlag, Mannheim (1978)
- [47] F. S. Ham und B. Segall, *Energy bands in periodic lattices – Green’s function method*, Phys. Rev. **124** (1964) 1786–1796
- [48] H. M. Ozorio de Almeida, *Real-space methods for interpreting electron micrographs in cross-grating orientations*, Acta Cryst. **A31** (1975) 435
- [49] V. Heine, *Group theory in quantum mechanics*, Pergamon Press, London (1960)
- [50] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, U. S. National Bureau of Standards, Washington D. C. (1964)
- [51] F. Haake, *Quantum signatures of chaos*, Springer-Verlag, Berlin (1991)
- [52] O. Bohigas, *Random matrix theories and chaotic dynamics* in *Chaos and quantum physics*, Les Houches 1989, eds. M. -J. Giannoni, A. Voros und J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam (1991)
- [53] O. Bohigas, R.U. Haq und A. Pandey, *Higher order correlations in spectra of complex systems*, Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 1645–1648
- [54] N. Rosenzweig und C. E. Porter, *Repulsion of energy levels* in *Statistical theory of spectra: Fluctuations*, ed. C. E. Porter, Academic Press, New York (1965)
- [55] J. M. Robbins, *Discrete symmetries in periodic-orbit theory*, Phys. Rev. A **40** (1989) 2128–2136
- [56] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge (1987)
- [57] P. M. Morse und H. Feshbach, *Methods of theoretical physics*, Mc Graw-Hill Book Company Inc. , New York (1952)
- [58] P. P. Ewald, *Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale*, Ann. Phys. **64** (1921) 253
- [59] D. S. Schonland, *Molecular symmetry*, D. Van Nostrand Company LTD, London (1965)
- [60] G. N. Watson, *A treatise on the theory of bessel functions*, University Press, Cambridge (1952)
- [61] I. R. Lapidus, *Quantum-mechanical scattering in two dimensions*, Am. J. Phys. **50(1)** (1982) 45

Lebenslauf:

Name	Rainer Horstmann
Geburtstag	26.02. 1964
Geburtsort	Mussum, jetzt Bocholt
Familienstand	verheiratet
Eltern	Hubert Horstmann Anna Horstmann geb. Epping
Schulbildung	
1970–1974	Grundschule in Mussum, jetzt Bocholt
1974–1983	Marien–Gymnasium in Bocholt
6.6. 1983	Abitur
Grundwehrdienst	vom 1.7.83 bis 29.9.84
Studium	
ab WS 1983/84	Studiengang Physik–Diplom an der Westfälischen Wilhelms–Universität in Münster
3.10. 1986	Vordiplom Physik, WWU Münster
27.11. 1989	Diplom Physik, WWU Münster
Dezember 1989	Beginn der Dissertation im Institut für Theoretische Physik I bei Prof. Dr. P. Eckelt, WWU Münster
Tätigkeiten	
Juli 88 – Nov. 89	Studentische Hilfskraft am Institut für Theoretische Physik I, WWU Münster
Dezember 1989	Wissenschaftliche Hilfskraft
ab Januar 1990	Wissenschaftlicher Mitarbeiter