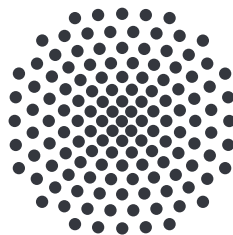


Parameterabhängigkeit des Quantenchaos bei Rydberg-Exzitonen im Magnetfeld

Bachelorarbeit von
Jeanine Laturner

24. August 2017

Prüfer: Apl. Prof. Dr. Main



1. Institut für Theoretische Physik
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| 1. Einleitung | 5 |
| 1.1. Motivation und Einführung in das Thema | 5 |
| 1.2. Aufbau der Arbeit | 6 |
| 2. Chaos in klassischen Systemen | 7 |
| 2.1. Integrabilität | 7 |
| 2.2. Ljapunow-Stabilität | 8 |
| 3. Chaos in quantenmechanischen Systemen | 11 |
| 3.1. Semiklassische Beschreibung | 11 |
| 3.2. Statistische Eigenschaften des quantenmechanischen Spektrums | 12 |
| 3.2.1. Entfaltung des Spektrums | 12 |
| 3.2.2. Wignersche Vermutung | 13 |
| 3.3. Symmetrietransformationen | 13 |
| 3.3.1. \hat{T} -invarianter Hamiltonoperator mit $\hat{T}^2 = \mathbb{1}$ | 15 |
| 3.3.2. \hat{T} -invarianter Hamiltonoperator mit $\hat{T}^2 = -\mathbb{1}$ | 15 |
| 3.3.3. Hamiltonoperatoren ohne \hat{T} -Invarianz | 16 |
| 3.4. Niveauabstoßung | 16 |
| 3.5. Theorie der Zufallsmatrizen | 19 |
| 3.5.1. Gaußsches orthogonales Ensemble (GOE) | 20 |
| 3.5.2. Gaußsches unitäres Ensemble (GUE) | 24 |
| 3.5.3. Verallgemeinerung auf $\dim(\hat{H}) > 2$ | 26 |
| 3.6. Übergang zwischen zwei Symmetrieklassen | 26 |
| 3.6.1. Übergang von P nach GOE | 27 |
| 3.6.2. Übergang von P nach GUE | 27 |
| 3.6.3. Übergang von GOE nach GUE | 28 |
| 3.7. Verallgemeinerter Übergang zwischen drei Symmetrieklassen | 29 |
| 3.7.1. Ansatz 1: verallgemeinerte Brody-Verteilung | 30 |
| 3.7.2. Ansatz 2: Kombination zweier analytischer Übergangsfunktionen | 37 |
| 4. Rydberg-Exzitonen in Cu_2O | 41 |
| 4.1. Grundlagen | 41 |
| 4.2. Beobachtbare Übergänge | 46 |

| | |
|---|-----------|
| 5. Beliebige Übergänge zwischen P, GOE und GUE in Cu_2O | 47 |
| 5.1. Vergleich der beiden verallgemeinerten Funktionen | 47 |
| 5.2. Diskussion der Übergänge | 50 |
| 6. Zusammenfassung und Ausblick | 55 |
| A. Zeitumkehr-Operator | 57 |
| Literaturverzeichnis | 59 |
| Danksagung | 61 |

1. Einleitung

1.1. Motivation und Einführung in das Thema

Während klassisches Chaos über die Empfindlichkeit gegenüber den Anfangsbedingungen definiert werden kann, war lange Zeit nicht klar wie sich Chaos in der Quantenmechanik charakterisieren lässt. Die Untersuchung von Spektren komplexer Kerne und Energieniveau-Fluktuationen führte in den 1950er und 1960er Jahren zur Entwicklung der Theorie der Zufallsmatrizen (engl. “Random matrix theory,“) von Eugene Wigner, Freeman Dyson und anderen theoretischen Physikern.

Das Studium der Verteilung der Abstände zwischen benachbarten Spektrallinien (Nächste-Nachbar-Verteilung) führte auf ein Kriterium zur Unterscheidung zwischen quantenmechanischen Systemen, welche klassisch reguläres (das heißt nicht chaotisches) oder chaotisches Verhalten zeigen. Während die Abstände in klassisch regulären Systemen poissonverteilt sind, gehören Hamiltonoperatoren von klassisch chaotischen Systemen entweder dem Gaußschen orthogonalen (GOE), dem Gaußschen unitären (GUE) oder dem Gaußschen symplektischen Ensemble (GSE) an. Der Übergang von nicht chaotischem zu chaotischem Verhalten geht mit dem Bruch von systemeigenen Symmetrien einher. Die große Errungenschaft der Theorie der Zufallsmatrizen war die Erkenntnis, dass ein Hamiltonoperator bestimmter Symmetrie und eine Zufallsmatrix gleicher Symmetrie die selbe Nächste-Nachbar-Verteilung besitzen. Dadurch genügt es, die Symmetrien eines Systems zu kennen, ohne dass der Hamiltonoperator im Detail bekannt sein muss.

Die Theorie der Zufallsmatrizen gewann an Popularität als Bohigas, Giannoni und Schmit [1] vermuteten, dass sich die Theorie universell auf alle Spektren chaotischer Systeme anwenden ließe. Zur Bekräftigung der Vermutung werden physikalische Systeme gesucht, in welchen durch geeignete Wahl von Systemparametern¹ möglichst viele der oben genannten Symmetrieklassen beobachtet werden können, bzw. durch Variation der Systemparameter auch Übergänge zwischen diesen.

Kürzlich konnte gezeigt werden, dass Rydberg-Exzitonen in Cu_2O mit extern angelegtem Magnetfeld ein System sind, deren Nächste-Nachbar-Verteilung je nach Wahl der Systemparameter poissonverteilt ist, bzw. GOE- oder GUE-Statistik zeigt [2]. In den letzten Jahren konnten aus der Theorie der Zufallsmatrizen analytische Funktionen zur Beschreibung des Übergangs zwischen zwei Statistiken (Ensembles) hergeleitet werden (vgl. [3]). Es existiert bisher allerdings keine Funktion, welche beliebige Übergänge

¹Bei dem in der vorliegenden Arbeit betrachteten System sind das zum Beispiel die Magnetfeldstärke bzw. -richtung oder ein Parameter, der die kubische Symmetrie des Kristalls wiedergibt.

zwischen allen drei Statistiken (P, GOE und GUE) beschreibt. Dies ist Ziel dieser Arbeit.

1.2. **Aufbau der Arbeit**

In Kapitel 2 erfolgt zunächst eine kurze Einführung in die Charakterisierung chaotischen Verhaltens in klassischen Systemen. Dies dient dazu, die Notwendigkeit anderer Kriterien zur Definition von Chaos in quantenmechanischen Systemen in Kapitel 3 aufzuzeigen.

In Kapitel 3 wollen wir die verschiedenen Symmetrieklassen des Hamiltonoperators betrachten (Abschnitt 3.3) und mit der Theorie der Zufallsmatrizen die zugehörigen Nächste-Nachbar-Verteilungen herleiten, welche eine Möglichkeit zur Charakterisierung des quantenmechanischen Chaos bieten (Abschnitt 3.5). Außerdem werden die drei analytischen Übergangsfunktionen erklärt (Abschnitt 3.6) und Ansätze für eine verallgemeinerte Übergangsfunktion zur Beschreibung beliebiger Übergänge vorgestellt und mit den analytischen Übergangsfunktionen verglichen (Abschnitt 3.7).

Kapitel 4 bietet eine kurze Einführung in das physikalische System von Rydberg-Exzitonen in Cu_2O bei extern angelegtem Magnetfeld. In Abschnitt 4.2 werden die beobachtbaren Übergänge beschrieben.

In Kapitel 5 wollen wir schließlich die verallgemeinerten Übergangsfunktionen auf das physikalische System anwenden und nach einem Vergleich der beiden Ansätze beliebige Übergänge diskutieren.

Anschließend an dieses Kapitel folgt eine kurze Zusammenfassung mit Ausblick auf weiterführende Untersuchungsmöglichkeiten.

2. Chaos in klassischen Systemen

Obgleich die Bewegungsgleichungen der Mechanik deterministisch und damit deren Lösungen bei gegebenen Anfangsbedingungen für alle Zeiten eindeutig bestimmt sind, bedeutet dies nicht zwangsläufig, dass wir für ähnlich gewählte Anfangsbedingungen auch ähnliche Lösungen erhalten.

Ein System, für welches die Lösung der beschreibenden Differentialgleichung sehr empfindlich von den Anfangsbedingungen abhängt, wird chaotisch genannt. Es lässt sich nicht mehr vorhersagen wie das System langfristig auf kleine Änderungen reagiert. Dies wird populärwissenschaftlich auch als „Schmetterlingseffekt“ bezeichnet.

Im Allgemeinen lassen sich nur für das Auftreten von regulärem, das heißt nicht-chaotischem Verhalten hinreichende Bedingungen finden. Für chaotisches Verhalten existieren dagegen meist nur notwendige Bedingungen. Sind diese Bedingungen erfüllt, kann es bei einem System zu chaotischem Verhalten kommen, jedoch nicht zwingend.

2.1. Integrierbarkeit

Integrierbarkeit ist beispielsweise eine hinreichende Bedingung für reguläres Verhalten. Ein System heißt integrabel, wenn sich die Lösung der Differentialgleichung auf die Berechnung eindimensionaler Integrale zurückführen lässt, welche die Bewegung vollständig bestimmen. Anschaulich bedeutet dies, dass ein Hamiltonsches System mit N unabhängigen Freiheitsgraden auch N linear unabhängige Erhaltungsgrößen besitzt:

$$I_n(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = I_n = \text{const.} \quad (2.1)$$

mit dem Index n als natürliche Zahl von 1 bis N . Nach dem *Satz von Liouville* [4] müssen die Funktionen I_n in Involution sein, das heißt ihre Poisson-Klammern müssen verschwinden

$$\{I_i, I_j\} = 0 \quad \forall i, j \in 1, \dots, N \quad (2.2)$$

und ihre totalen Differentiale

$$dI_n = \sum_{k=1}^N \frac{\partial I_n}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial I_n}{\partial p_k} dp_k \quad (2.3)$$

sind linear unabhängig.

Ein nicht-integrables System, welches weniger unabhängige Erhaltungsgrößen als Freiheitsgrade besitzt, kann dagegen Bereiche chaotischen als auch Bereiche regulären Verhaltens zeigen.

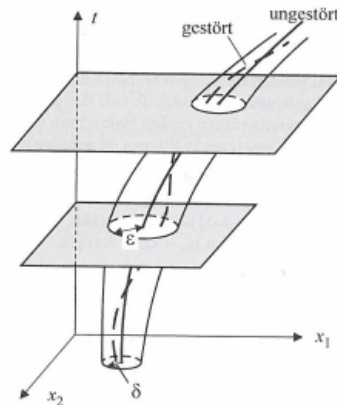


Abbildung 2.1.: Ljapunow-Stabilität einer Trajektorie (entnommen aus [4]).

2.2. Ljapunow-Stabilität

Oft kann die allgemeine Lösung einer nichtlinearen Differentialgleichung gar nicht bestimmt werden, wobei spezielle Lösungen jedoch möglicherweise bekannt sind. Mithilfe des Ljapunow-Exponenten können die entsprechenden Trajektorien auf ihre Stabilität bezüglich kleinen Änderungen der Anfangsbedingungen untersucht werden. Der Ljapunow-Exponent lässt sich nach [4] aus folgenden Überlegungen herleiten:

Bewegungsgleichungen (auch nicht-hamiltonscher Systeme) lassen sich umschreiben in die allgemeine Form:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= f_i(x_1, \dots, x_n, t), & i &= 1, \dots, N, \\ \text{bzw. } \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}_i(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Sei $\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$ mit den Anfangsbedingungen \mathbf{x}_0 nun eine Lösung der Differentialgleichungen. Sie heißt stabil, wenn

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta(\varepsilon) > 0, |\mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}}_0| < \delta(\varepsilon) : \forall t |\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t) - \mathbf{x}(\hat{\mathbf{x}}_0, t)| < \varepsilon \quad (2.5)$$

gilt. Ansonsten heißt sie instabil.

Dies bedeutet, dass, wenn $\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$ eine stabile Lösung ist, für jedes ε ein $\delta(\varepsilon)$ gefunden werden kann, so dass alle gestörten Lösungen $\mathbf{x}(\hat{\mathbf{x}}_0, t)$ mit Anfangsbedingungen $\hat{\mathbf{x}}_0$, welche in der δ -Umgebung dieser stabilen ungestörten Lösung mit Anfangsbedingung \mathbf{x}_0 gestartet sind, sich für alle Zeiten in einer ε -Umgebung der ungestörten Lösung befinden. Zur Veranschaulichung ist die Ljapunow-Stabilität in Abbildung 2.1 dargestellt.

Allerdings ist allgemein zu beachten, dass bei der Definition in Gleichung (2.5) nur kleine Störungen der Anfangsbedingungen berücksichtigt werden.

Um die Stabilität einer bestimmten Lösung $\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$ zu untersuchen, betrachten wir zunächst die Abweichung von dieser Lösung als neue Variable:

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t). \quad (2.6)$$

Für eine ungestörte Bewegung gilt:

$$\boldsymbol{\xi}(t) = 0. \quad (2.7)$$

Nun wird unter Berücksichtigung von Gleichung (2.4) die Änderung der Abweichung berechnet:

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{\mathbf{x}} - \dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}(\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)). \quad (2.8)$$

Nach Einsetzen der umgeformten Gleichung (2.6) lässt sich die Änderung der Abweichung nur in Abhängigkeit von der ungestörten Bewegung schreiben:

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi} + \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)) = \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}, t). \quad (2.9)$$

In den meisten Fällen lässt sich die neu definierte Funktion $\mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}, t)$ in einen in $\boldsymbol{\xi}$ linearen Term $\mathbf{A}(t)\boldsymbol{\xi}$ und in einen nichtlinearen Term $\mathbf{h}(\boldsymbol{\xi}, t)$ aufspalten. Es kann davon ausgegangen werden, dass die Stabilität der Trajektorie hauptsächlich durch benachbarte Trajektorien beeinflusst wird, weshalb für kleine Störungen der nichtlineare Term vernachlässigt werden kann. Zusätzlich sollen nur Fälle betrachtet werden, in denen die Matrix \mathbf{A} zeitunabhängig ist. Dies führt schließlich auf folgende Differentialgleichung

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}(t) = \mathbf{A} \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.10)$$

deren komponentenweise Lösung der Exponentialansatz

$$\xi_i(t) = A_i e^{\lambda_i t}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.11)$$

mit den Eigenwerten λ_i liefert.

Der Realteil dieser Eigenwerte wird Ljapunow-Exponent genannt und entscheidet über die Stabilität der Lösung. Es lassen sich folgende drei Fälle unterscheiden:

1. Die Lösung ist stabil, falls alle Eigenwerte λ_i einen negativen Realteil besitzen, da jede kleine Störung asymptotisch gegen 0 läuft.
2. Die Lösung ist instabil, falls mindestens einer der Eigenwerte einen positiven Realteil besitzt.
3. In allen anderen Fällen, d.h. bei einigen Eigenwerten mit verschwindendem Realteil und ansonsten Eigenwerten mit negativem Realteil, lässt sich durch Linearisieren der DGL in ξ keine Aussage über die Stabilität der Lösung treffen. Hier muss die zweite Methode von Ljapunow (auf die hier allerdings nicht näher eingegangen werden soll, vgl. [4]) angewendet werden.

3. Chaos in quantenmechanischen Systemen

Als Folge der Heisenbergschen Unschärferelation lassen sich in der Quantenmechanik keine Trajektorien definieren. In physikalischen Systemen, in denen Quanteneffekte wichtig sind, haben demnach klassische Kriterien wie der Ljapunow-Exponent zur Differenzierung zwischen regulärem und chaotischen Verhalten keine Bedeutung mehr. Es stellt sich nun die Frage nach neuen Methoden, um Gruppen verschiedener Quantendynamiken zu unterscheiden. Im klassischen Grenzfall, das heißt für $\hbar \rightarrow 0$, sollte ein Teil dieser Gruppen auf reguläres und der andere auf chaotisches Verhalten führen.

Seit den 1980er Jahren konnten verschiedene Kriterien gefunden werden, welche sich auf das Energiespektrum, die Energieeigenvektoren oder die Zeitentwicklung geeigneter Erwartungswerte beziehen. In dieser Arbeit soll chaotische und nicht-chaotische Dynamik anhand des Energiespektrums betrachtet werden, welches uns später auf die Theorie der Zufallsmatrizen (engl. "random matrix theory") führen wird.

3.1. Semiklassische Beschreibung

Semiklassisch kann mithilfe der Moyal-Klammern ein Zusammenhang zwischen den klassischen Poisson-Klammern und den quantenmechanischen Kommutatorrelationen gefunden werden, wodurch nun auch quantenmechanisch die Integrabilität eines Systems definiert werden kann [5]. Demnach ist ein quantenmechanisches System mit N Freiheitsgraden genau dann integrabel, falls es N Operatoren \mathbf{O}_n gibt, welche untereinander kommutieren und damit

$$[\mathbf{O}_i, \mathbf{O}_j] = 0 \quad \forall i, j \tag{3.1}$$

erfüllen. Allerdings muss ein quantenmechanisches System, dessen klassisches Pendant integrabel ist, nicht zwingend quantenintegrabel sein. (Vgl. hierzu die Arbeit von Hietarinta [6].)

Die Eigenwerte (Quantenzahlen) zweier Operatoren, welche miteinander kommutieren, werden als verträglich bezeichnet, da sich diese bei einer Messung nicht stören. Ein System mit N unabhängigen, paarweise kommutierenden Operatoren wird demnach durch N verschiedene Quantenzahlen beschrieben.

Falls das klassische System nun nicht integrabel ist, besitzt es weniger Erhaltungsgrößen als Freiheitsgrade. Im Vergleich zum obigen Fall bedeutet das im semiklassischen Limes

den Wegfall der zugehörigen Quantenzahlen und damit eine Reduktion der Entartung. Dies führt im Spektrum zu einer Niveauabstoßung.

3.2. Statistische Eigenschaften des quantenmechanischen Spektrums

Der Hamiltonoperator beinhaltet viele Informationen über das quantenmechanische System. Es bietet sich daher an, dessen Anregungsspektrum auf Eigenschaften, welche chaotisches oder nicht-chaotisches Verhalten andeuten, näher zu untersuchen. Da diese Eigenschaften jedoch möglichst universell für alle quantenmechanischen Systeme gelten sollen, soll nicht die Lage der einzelnen Niveaus betrachtet werden, welche vom jeweiligen System abhängig sind, sondern die statistische Verteilung $P(s)$ der Niveauabstände zu nächsten Nachbarn: $s_n = E_{n+1} - E_n$.

Allerdings ist auch hier das Energiespektrum nicht komplett unabhängig vom behandelten System. Die Wahrscheinlichkeit einen bestimmten Niveauabstand anzutreffen, hängt noch von der Energie ab. Zur universellen Betrachtung wird das Spektrum in eine Darstellung transformiert, bei welcher der mittlere Abstand zweier benachbarter Niveaus auf 1 normiert wird. Dies wird auch als Entfaltung des Spektrums bezeichnet [7].

3.2.1. Entfaltung des Spektrums

Die Stufenfunktion

$$N(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \Theta(E - E_n) \quad (3.2)$$

beschreibe die Anzahl an Niveaus, deren Energie $\leq E$ ist. Sie kann in einen mittleren, systemspezifischen Anteil $\langle N(E) \rangle$ und einen fluktuierenden Anteil $N_{fl}(E)$ zerlegt werden:

$$N(E) = \langle N(E) \rangle + N_{fl}(E). \quad (3.3)$$

Semiklassisch nimmt jeder quantenmechanische Zustand das Phasenraumvolumen $(2\pi\hbar)^d$ ein. Die mittlere Anzahl ist daher über das Integral

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d q d^d p \Theta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \quad (3.4)$$

gegeben. Zur Berechnung des Integrals für verschiedene Systeme siehe [8]. Da nur der fluktuierende Anteil universelles Verhalten zeigt, versuchen wir $\langle N(E) \rangle$ „loszuwerden“. Mit der als Entfaltung bezeichneten Abbildung $E \mapsto x$ werden neue Variablen

$$x_i = \langle N(E_i) \rangle \quad (3.5)$$

eingeführt. Das entfaltete Spektrum besitzt nun eine konstante Zustandsdichte bzw. einen konstanten mittleren Abstand von 1 zwischen Niveau und nächstem Nachbar. Im Folgenden wird angenommen, dass das Spektrum bereits entfaltet sei. Hieraus kann dann die Nächste-Nachbar-Verteilung bestimmt werden, welche die Häufigkeit angibt, mit der ein bestimmter Niveauabstand $s_i = x_{i+1} - x_i$ auftritt.

3.2.2. Wignersche Vermutung

Abgesehen von sehr einfachen Systemen ist der Hamiltonoperator meist entweder nicht exakt bekannt oder so komplex, dass sich die Eigenwertgleichung nicht lösen lässt. Es hat sich gezeigt, dass Hamiltonoperatoren chaotischer Quantensysteme dieselbe Nächste-Nachbar-Verteilung besitzen, wie Ensemble von Zufallsmatrizen gleicher Symmetrie. Diese Behauptung wird als Wignersche Vermutung bezeichnet und wurde bisher, wenn auch nicht strikt bewiesen, durch viele Arbeiten bestätigt.

Im nächsten Abschnitt sollen daher zunächst verschiedene kanonische Transformationen des Hamiltonoperators betrachtet werden, welche uns zu den zugehörigen Symmetrieklassen führen.

3.3. Symmetrietransformationen

Alle Hamiltonoperatoren lassen sich durch hermitesche Matrizen

$$\hat{H} = \hat{H}^\dagger \quad (3.6)$$

mit reellen Eigenwerten darstellen. Die zu den Eigenwerten E_n gehörenden Eigenvektoren bzw. Zustände $|\psi\rangle$ spannen den Hilbertraum \mathcal{H} auf und bilden eine vollständige Orthonormalbasis (VONB). Eine Transformation \hat{S} bewirkt einen Basiswechsel im Hilbertraum. Eine messbare Größe soll sich dabei unter \hat{S} nicht ändern:

$$|\langle \psi' | \phi' \rangle|^2 = |\langle \hat{S}\psi | \hat{S}\phi \rangle|^2 = |\langle \psi | \phi \rangle|^2 \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (3.7)$$

Betrachten wir das Verhalten des Hamiltonoperators \hat{H} unter der Transformation \hat{S} :

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{S}^{-1} \hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1} \hat{S} | \psi \rangle = \langle \hat{S}\psi | \hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1} | \hat{S}\psi \rangle = \langle \psi' | \hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1} | \psi' \rangle \quad (3.8)$$

Der Hamiltonoperator erfährt demnach die Transformation

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = \hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1}. \quad (3.9)$$

Eine Symmetrietransformation muss die Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (3.10)$$

unverändert und folglich \hat{H} invariant lassen:

$$\hat{H}' = \hat{H}. \quad (3.11)$$

Mit Gl. (3.9) folgt:

$$\hat{S}\hat{H} = \hat{H}\hat{S} \quad \Rightarrow \quad [\hat{H}, \hat{S}] = 0. \quad (3.12)$$

\hat{H} kommutiert offensichtlich mit \hat{S} . In diesem Falle bleiben Eigenwerte E unter der Transformation erhalten:

$$\hat{H} |\psi'\rangle = \hat{H}\hat{S} |\psi\rangle = \hat{S}\hat{H} |\psi\rangle = \hat{S}E |\psi\rangle = E |\psi'\rangle. \quad (3.13)$$

Symmetrietransformationen, die \hat{H} invariant lassen, bilden eine Symmetriegruppe von \hat{H} .

Nach dem Wigner-Theorem muss für eine solche Transformation der Operator \hat{S} entweder unitär oder antiunitär sein. Ein unitärer Operator \hat{U} ist linear

$$U(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = a\hat{U}|\psi\rangle + b\hat{U}|\phi\rangle \quad (3.14)$$

und erfüllt

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbb{1} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \quad (3.15)$$

Ein antiunitärer Operator \hat{T} ist dagegen antilinear:

$$U(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = a^*\hat{U}|\psi\rangle + b^*\hat{U}|\phi\rangle. \quad (3.16)$$

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik gibt es im Wesentlichen eine Symmetrietransformation, welche durch einen antiunitären Operator wirkt¹. Dies ist die Zeitumkehr

$$\mathcal{T} : t \rightarrow t' = -t \quad (3.17)$$

mit dem Zeitumkehr-Operator \hat{T} , dessen Betrachtung uns auf drei verschiedene Symmetrieklassen führt. Falls die Zeitumkehrinvarianz erhalten ist, kann in Systeme mit $\hat{T}^2 = +\mathbb{1}$ und $\hat{T}^2 = -\mathbb{1}$ unterschieden werden (für eine Herleitung siehe Anhang A). Den dritten Fall bilden Systeme, in denen die Zeitumkehrinvarianz verletzt ist.

¹Weitere, durch antiunitäre Operatoren wirkende Symmetrietransformationen können durch Kombination von \mathcal{T} mit einem unitären Operator realisiert werden, da die Multiplikation eines antiunitären und eines unitären Operators einen antiunitären Operator ergibt.

3.3.1. \hat{T} -invarianter Hamiltonoperator mit $\hat{T}^2 = \mathbb{1}$

In einem System, dessen Hamiltonoperator invariant unter Zeitumkehr ist, das heißt für welcher $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$ und $\hat{T}^2 = +\mathbb{1}$ gilt, kann ein Satz zeitumkehrinvarianter Basiszustände $|\psi_n\rangle$ gefunden werden, in welchem \hat{H} reell und symmetrisch ist, ohne in der Diagonalform zu sein.

Die Basis wird aus den Zuständen

$$|\psi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle + \hat{T}a_n |\phi_n\rangle, \quad a_n \in \mathbb{C} \quad (3.18)$$

aufgebaut. Dabei werden die neuen $|\phi_n\rangle$ jeweils so gewählt, dass sie orthogonal zu den $|\psi_m\rangle$ sind. Da $\hat{T}|\psi_i\rangle = |\psi_i\rangle$ gilt, sind die Zustände invariant unter Zeitumkehr. Die neuen Basiszustände $|\psi_n\rangle$ sind zueinander orthogonal

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_m \rangle &= a_n \langle \phi_n | \psi_m \rangle + a_n^* \langle \hat{T}\phi_n | \psi_m \rangle = a_n^* \langle \hat{T}\phi_n | \hat{T}^{-1}\hat{T} | \psi_m \rangle \\ &= a_n^* \langle \hat{T}^2 \phi_n | \psi_m \rangle = a_n^* \langle \phi_n | \psi_m \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

und die Koeffizienten a_n können so gewählt werden, dass $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$ gilt und die Zustände $|\psi_n\rangle$ folglich eine Orthonormalbasis bilden. In dieser Basis ist der Hamiltonoperator \hat{H} reell:

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_m \rangle = \langle \hat{T}\psi_n | \hat{H} | \hat{T}\psi_m \rangle^* \\ &= \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_m \rangle^* = H_{nm}^* \end{aligned} \quad (3.20)$$

Diese Eigenschaft bleibt unter der orthogonalen Transformation

$$\hat{H}' = \hat{O}\hat{H}\hat{O}^T \quad (3.21)$$

erhalten, wobei orthogonale Matrizen die Eigenschaft

$$\hat{O}\hat{O}^T = \mathbb{1} \quad \Rightarrow \quad \hat{O}^T = \hat{O}^{-1} \quad (3.22)$$

besitzen.

3.3.2. \hat{T} -invarianter Hamiltonoperator mit $\hat{T}^2 = -\mathbb{1}$

Als nächstes soll ein System betrachtet werden, dessen Hamiltonoperator zeitumkehrinvariant unter dem Operator \hat{T} ist, welcher nun allerdings $\hat{T}^2 = -\mathbb{1}$ erfüllt. In diesem Falle sind die Zustände $|\psi\rangle$ und $\hat{T}|\psi\rangle$ orthogonal zu einander:

$$\langle \psi | \hat{T}\psi \rangle = \langle \hat{T} | \hat{T}^2 \psi \rangle^* = -\langle T\psi | \psi \rangle^* = -\langle \psi | \hat{T}\psi \rangle = 0 \quad (3.23)$$

Hier wurde ausgenutzt, dass ein Vertauschen der Argumente aufgrund der Antilinearität des Skalarprodukts die komplexe Konjugation aufhebt. Alle Eigenwerte sind demnach doppelt entartet, was auch als Kramers-Entartung bezeichnet wird. Der Hamiltonoperator lässt sich mittels einer symplektischen Transformation auf Diagonalform bringen. Dieser Fall soll in der vorliegenden Arbeit nicht näher erläutert werden und sei nur zur Vollständigkeit erwähnt.

3.3.3. Hamiltonoperatoren ohne \hat{T} -Invarianz

Alle Hamiltonoperatoren sind hermitesch (vgl. Gl. (3.6)), weshalb für ihre Matrixelemente gilt:

$$H_{nm} = H_{mn}^* . \quad (3.24)$$

Im allgemeinen gilt jedoch $H_{mn} \neq H_{nm}$. In Systemen mit gebrochener Zeitumkehrsymmetrie lässt sich der Hamiltonoperator daher allgemein nicht als reelle Matrix darstellen.

Nun sind die Transformationen gesucht, welche die Hermitizität erhalten:

$$(\hat{H}')^\dagger = (\hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1})^\dagger \stackrel{!}{=} \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} . \quad (3.25)$$

Umformen von Gleichung (3.25) führt auf:

$$(\hat{U}^{-1})^\dagger \hat{H}^\dagger \hat{U}^\dagger = (\hat{U}^{-1})^\dagger \hat{H} \hat{U}^\dagger \stackrel{!}{=} \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} . \quad (3.26)$$

Diese Gleichung wird durch unitäre Operatoren gelöst, welche

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad (3.27)$$

erfüllen. Unter unitären Transformationen bleiben auch die Eigenwerte erhalten.

3.4. Niveauabstoßung

Niveauabstoßung ist eine allgemeine Eigenschaft chaotischer quantenmechanischer Systeme, vergleichbar mit Nichtintegrabilität bei klassischen Systemen mit mehr als einem Freiheitsgrad. Quantenmechanische Systeme, welche im klassischen Limes integrabel sind, zeigen daher keine Niveauabstoßung. Der Grad der Niveauabstoßung ist abhängig von der Symmetrie des Systems, bzw. der zugehörigen Transformationsgruppe und soll in diesem Kapitel untersucht werden.

Während in der klassischen Mechanik jede Symmetrie durch das Noether-Theorem mit einer Erhaltungsgröße verbunden ist, folgt in der Quantenmechanik aus jeder Symmetrie eine neue Quantenzahl. Falls der Hamiltonoperator \hat{H} nicht explizit von der Zeit abhängt, kann die Zeitabhängigkeit der Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi = \hat{H} \psi \quad (3.28)$$

mit dem Ansatz

$$\psi_n(\mathbf{x}, t) = \Phi_n(\mathbf{x}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \quad (3.29)$$

absepariert werden und man erhält die stationäre Schrödingergleichung. Diese Systeme werden als konservativ bezeichnet. Zur Energie als klassische Erhaltungsgröße gehört die Quantenzahl n , welche die Energieeigenwerte durchnummeriert. In vollständig chaotischen Systemen ist die Energie die einzige Erhaltungsgröße. Bei einem nicht vollständig chaotischen System kann es weitere Symmetrien geben, welche den Hamiltonoperator zusätzlich vereinfachen. Diese können genutzt werden um die Darstellung der Matrix zu reduzieren, sodass \hat{H} in Blockgestalt vorliegt [9]

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H^{(1)} & 0 & \dots \\ 0 & H^{(2)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Innerhalb eines Blocks hat jede Quantenzahl bis auf die Energie einen festen Wert. Um das Energiespektrum untersuchen zu können, ist gerade diese Blockgestalt notwendig, in der auch das Spektrum in Teilspektren zerlegt wird. Entsprechend Abschnitt 3.2.1 muss die Zustandsdichte auf 1 normiert werden. Zwischen verschiedenen Blöcken können Energieniveaus, abhängig von sogenannten Kontrollparametern, zum Kreuzen gebracht werden. Diese Kontrollparameter können zum Beispiel elektrische oder magnetische Felder, die Felddausrichtung oder auch das Seitenverhältnis in einem Rechteckbillard sein.

Die Auswirkung der Variation eines Parameters im Hamiltonoperator auf eine potentielle Niveaureuzung kann mittels fast entarteter Störungstheorie untersucht werden. Wir betrachten dazu zunächst zwei Niveaus, welche nicht entartet sind und durch eine hermitesche 2×2 Matrix

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

beschrieben werden. Diagonalisieren der Matrix führt uns auf die Eigenwerte

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2/4 + |H_{12}|^2}. \quad (3.32)$$

Eine Niveaureuzung tritt auf, falls

$$|E_+ - E_-| = 2\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2/4 + |H_{12}|^2} = 0 \quad (3.33)$$

gilt. Die Anzahl der nicht negativen Terme der Diskriminante

$$D = \frac{1}{4}(H_{11} - H_{22})^2 + |H_{12}|^2 \quad (3.34)$$

gibt Aufschluss über die Stärke der Niveauabstoßung. Es können nun drei Fälle unterschieden werden:

1. Keine Wechselwirkung zwischen den Zuständen:

Ist $H_{12} = 0$, dann sind die beiden Niveaus völlig unabhängig voneinander. Das System ist im klassischen Grenzfall integrabel. Die Diskriminante besteht nur aus einem nicht-negativen Term

$$D = \frac{1}{4}(H_{11} - H_{22})^2 \quad (3.35)$$

und die Energieeigenwerte vereinfachen sich zu

$$E_+ = H_{11}, \quad E_- = H_{22}. \quad (3.36)$$

Es reicht $n = 1$ Kontrollparameter aus, um eine Kreuzung herbeizuführen.

2. Orthogonale kanonische Transformation:

In diesem Fall ist \hat{H} reell symmetrisch, d.h. $H_{12} = 0$. Die Diskriminante ist

$$D = \frac{1}{4}(H_{11} - H_{22}) + H_{12}^2 \quad (3.37)$$

und setzt sich zusammen aus zwei nichtnegativen Beiträgen. Die Anzahl der für Niveaureuzung benötigten Kontrollparameter beträgt daher $n = 2$.

3. Unitäre kanonische Transformation:

Im allgemeinsten Fall ist H komplex. Die Diskriminante

$$D = \frac{1}{4}(H_{11} - H_{22}) + (\operatorname{Re} H_{12})^2 + (\operatorname{Im} H_{12})^2 \quad (3.38)$$

ist die Summe dreier nichtnegativer Terme. Daher ist auch $n = 3$.

Es kann gezeigt werden, dass der Grad der Niveauabstoßung² $\beta = n - 1$ beträgt. Ein Beweis hierzu findet sich in [10].

Wir wollen nun den ersten Fall noch einmal näher betrachten. In einem im klassischen Grenzfall vollständig integrablem System, entspricht die Blockdarstellung (3.30) schon der Diagonaldarstellung von \hat{H} . Die Matrix wird demnach allein durch reine Symmetriebetrachtung diagonalisiert, die Energieeigenwerte wechselwirken nicht miteinander und sind völlig unkorreliert. Die Nächste-Nachbar-Verteilung lässt sich bereits aus diesen Überlegungen gewinnen.

Wir betrachten einen gegebenen Eigenwert. $P(s) ds$ ist dann die Wahrscheinlichkeit, den benachbarten Eigenwert im Abstand s bis $s + ds$ zu finden. Aufteilen des Intervalls der Länge s in N Teilintervalle der Länge $\frac{s}{N}$ führt uns auf die Formel

$$P(s) ds = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{s}{N}\right)^N ds. \quad (3.39)$$

² β wird auch als Dyson-Parameter bezeichnet.

Im Limes $N \rightarrow \infty$ erhalten wir die Nächste-Nachbar-Verteilung

$$P(s) = e^{-s}. \quad (3.40)$$

Dies ist die Poisson-Verteilung (später abgekürzt mit P). Für kleine Abstände $s \rightarrow 0$ geht die Wahrscheinlichkeit gegen 1. Es tritt keine Niveauabstoßung auf. Die Poisson-Verteilung wird durch den Dyson-Parameter $\beta = 0$ charakterisiert.

3.5. Theorie der Zufallsmatrizen

Die Theorie der Zufallsmatrizen, im Englischen auch "Random matrix theory" (RMT) genannt, wurde in den 1950er und 1960er Jahren entwickelt. Ursprünglich war sie dazu gedacht, Spektren komplexer Kerne zu beschreiben. Die Vermutung von Bohigas, Giannoni und Schmit [1] deutete das erste Mal auf eine allgemeine Anwendbarkeit auf Spektren aller chaotischen Systeme hin.

Mittlerweile hat sich herausgestellt, dass Matrizen \hat{H} genügend hoher Dimension, welche derselben Gruppe von Symmetrietransformationen angehören, auch dieselbe Nächste-Nachbar-Verteilung aufweisen. Dabei kann es sich um ganz unterschiedliche Systeme handeln, von Atomkernen, dem hochangeregten Wasserstoffatom im Magnetfeld bis zum Sinai Billard oder auch Rydberg-Exzitonen in starken Magnetfeldern, welche Gegenstand dieser Arbeit sind. Aufgrund dieser Universalität wird in der Zufallsmatrixtheorie die Matrix des Hamiltonoperators durch eine Matrix ersetzt, deren Matrixelemente zufällig verteilt sind. Die Wahl der Verteilungsfunktion $P(\hat{H})$ der Matrixelemente ist allerdings nicht völlig frei, denn es gibt einige Bedingungen, denen sie genügen muss.

- **Invarianz:** Die Matrix der RMT muss derselben Symmetrieklasse angehören wie der Hamiltonoperator. $P(\hat{H})$ soll daher invariant unter der entsprechenden Symmetrietransformation sein, d.h.

$$P(\hat{H}) = P(\hat{H}') \quad \text{mit} \quad \hat{H}' = \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}. \quad (3.41)$$

- **Normierung:** Da es sich um eine Wahrscheinlichkeit handelt, muss $P(\hat{H})$ auf eins normiert sein, d.h.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\hat{H}) dH = 1. \quad (3.42)$$

- **Statistische Unabhängigkeit:** Als letztes wird die statistische Unabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichten gefordert. Dies entspricht minimal vorausgesetztem Wissen über die Matrixelemente. $P(\hat{H})$ lässt sich daher als Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten schreiben:

$$P(\hat{H}) = \prod_{ij} P_{ij}(H_{ij}). \quad (3.43)$$

Entsprechend der drei Symmetrieklassen des vorherigen Kapitels, kennt die Zufallsmatrixtheorie drei verschiedene Ensemble, das Gaußsche orthogonale, unitäre und symplektische Ensemble, wobei wir die Verteilungsfunktion $P(\hat{H})$ unter Zuhilfenahme der drei Bedingungen (3.41) - (3.43) im Folgenden nur für die beiden erstgenannten herleiten wollen (entsprechend [10, 11]). Es wird sich zeigen, dass es sich dabei um Gaußfunktionen handelt, weswegen diese auch als Gaußsche Ensemble bezeichnet werden. Anschließend wollen wir von $P(\hat{H})$ auf die Verteilung der Eigenwerte $P(E_+, E_-)$ schließen, um daraus schlussendlich die Nächste-Nachbar-Verteilung $P(s)$ zu erhalten.

3.5.1. Gaußsches orthogonales Ensemble (GOE)

Das Gaußsche orthogonale Ensemble bildet das korrespondierende Ensemble zu Hamiltonoperatoren, welche sich unter orthogonaler Transformation diagonalisieren lassen. Entsprechend Abschnitt 3.3.1 lässt sich \hat{H} als reell symmetrische Matrix

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

schreiben, wobei die Matrixelemente H_{ij} durch die Verteilungsfunktion $P(\hat{H})$ festgelegte Zufallszahlen sind.

Die Normierungsbedingung (3.42) lautet in diesem Fall

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\hat{H}) dH_{11} dH_{12} dH_{22} = 1 \quad (3.45)$$

und die statistische Unabhängigkeit (3.43) fordert

$$P(\hat{H}) = P_{11}(H_{11})P_{12}(H_{12})P_{22}(H_{22}). \quad (3.46)$$

Wir betrachten jetzt eine allgemeine orthogonale Transformationsmatrix

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta \\ \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Für kleine Winkel ϑ wird Gl. (3.47) nach Taylorentwicklung 1. Ordnung zu

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} 1 & -\vartheta \\ \vartheta & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

unter welcher $P(\hat{H})$ nach Bedingung (3.41) invariant sein soll. Daraus folgt

$$\hat{H}' = \hat{O}\hat{H}\hat{O}^T = \begin{pmatrix} 1 & -\vartheta \\ \vartheta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \vartheta \\ -\vartheta & 1 \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

bzw. für die einzelnen Elemente

$$H'_{11} = H_{11} - 2\vartheta H_{12} + \vartheta^2 H_{22} \approx H_{11} - 2\vartheta H_{12} := H_{11} + \Delta H_{11}, \quad (3.50)$$

$$H'_{22} = H_{22} + 2\vartheta H_{12} + \vartheta^2 H_{22} \approx H_{22} + 2\vartheta H_{12} := H_{22} + \Delta H_{22}, \quad (3.51)$$

$$H'_{12} = H_{12} + \vartheta(H_{11} - H_{22}) - \vartheta^2 H_{12} \approx H_{12} + \vartheta(H_{11} - H_{22}) := H_{12} + \Delta H_{12} \quad (3.52)$$

und

$$P(\hat{H}') = P(\hat{H}) + \Delta P(\hat{H}) \stackrel{!}{=} P(\hat{H}). \quad (3.53)$$

Im Folgenden soll für eine bessere Lesbarkeit $P_{ij}(H_{ij})$ durch P_{ij} abgekürzt werden. Die Änderung der Verteilungsfunktion $\Delta P(\hat{H})$ lässt sich auch schreiben als:

$$\begin{aligned} \Delta P(\hat{H}) &= \left(\frac{dP_{11}}{dH_{11}} \Delta H_{11} \right) P_{12} P_{22} + P_{11} \left(\frac{dP_{12}}{dH_{12}} \Delta H_{11} \right) P_{22} \\ &\quad + P_{11} P_{12} \left(\frac{dP_{22}}{dH_{22}} \Delta H_{11} \right). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Die Ableitungen $\frac{dP_{ij}}{dH_{ij}}$ können über den Logarithmus ausgedrückt werden:

$$\frac{dP_{ij}}{dH_{ij}} = \frac{d \ln P_{ij}}{dH_{ij}} P_{ij}. \quad (3.55)$$

$\Delta P(\hat{H})$ in (3.54) wird nun durch Einsetzen von (3.50) - (3.52) und (3.55) umgeschrieben und anschließend in Gleichung (3.53) eingesetzt. Nach Umformen und unter Berücksichtigung von (3.43) ergibt sich:

$$P(\hat{H}') = P(\hat{H}) \left\{ 1 - \vartheta \left(2H_{12} \frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} - 2H_{12} \frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} - (H_{11} - H_{22}) \frac{d \ln P_{12}}{dH_{12}} \right) \right\}. \quad (3.56)$$

Nach Gleichung (3.53) und weil der infinitesimal kleine Winkel ϑ beliebig sein soll, muss dessen Koeffizient verschwinden. Nach Division durch $2(H_{11} - H_{22})H_{12}$ ist daher

$$\frac{1}{H_{11} - H_{22}} \left(\frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} - \frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} \right) - \frac{1}{2H_{12}} \frac{d \ln P_{12}}{dH_{12}} = 0 \quad (3.57)$$

zu lösen. Da jedes P_{ij} auch nur von H_{ij} abhängt, lässt sich die Differentialgleichung (3.57) separieren und wir erhalten drei Differentialgleichungen; eine für jede Funktion $P_{ij}(H_{ij})$:

$$\frac{d \ln P_{12}}{dH_{12}} = -2AH_{12}, \quad (3.58)$$

$$\frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} + AH_{11} = -B, \quad (3.59)$$

$$\frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} + AH_{22} = -B. \quad (3.60)$$

Die Differentialgleichungen werden durch Gaußfunktionen gelöst. Nach der Substitution $A \rightarrow 2A$ ergibt sich die Gesamtlösung $P(\hat{H})$ als Produkt der Einzellösungen $P_{ij}(H_{ij})$:

$$\begin{aligned} P(\hat{H}) &= P_{11}(H_{11})P_{12}(H_{12})P_{22}(H_{22}) \\ &= C \exp \left[-A (H_{11}^2 + H_{22}^2 + 2H_{12}^2) - B (H_{11} + H_{22}) \right]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Durch geeignete Nullpunktverschiebung kann $B = 0$ gewählt werden. Der Koeffizient von A ist gerade die Spur des Quadrates der Hamilton-Matrix. Daher kann die Lösung auch umgeschrieben werden zu:

$$P(\hat{H}) = C e^{-A \text{Tr}\{\hat{H}^2\}}. \quad (3.62)$$

C und A werden nun durch Normierung und den Mittelwert festgelegt.

Verteilung der Eigenwerte

In Abschnitt 3.4 hatten wir bereits die Eigenwerte der reell symmetrischen Hamilton-Matrix aus (3.44) berechnet:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}^2}. \quad (3.63)$$

Mittels der orthogonalen Transformation wird die Hamilton-Matrix auf Diagonalgestalt gebracht mit den Eigenwerten E_{\pm} . Andererseits lässt sich auch die Hamilton-Matrix in Abhängigkeit von E_{\pm} darstellen

$$\hat{H} = \hat{O} \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix} \hat{O}^T \quad (3.64)$$

mit den Matrixelementen

$$H_{11} = E_+ \cos^2 \vartheta + E_- \sin^2 \vartheta, \quad (3.65)$$

$$H_{22} = E_+ \sin^2 \vartheta + E_- \cos^2 \vartheta, \quad (3.66)$$

$$H_{12} = (E_+ - E_-) \cos \vartheta \sin \vartheta. \quad (3.67)$$

Die Transformation $(H_{11}, H_{22}, H_{12}) \rightarrow (E_+, E_-, \vartheta)$

$$P(\hat{H})dH_{11}dH_{12}dH_{22} = P(E_+, E_-, \vartheta)dE_+dE_-d\vartheta \quad (3.68)$$

auf die Verteilung der Energieeigenwerte erfolgt mit der Jacobi-Determinante J :

$$P(E_+, E_-, \vartheta) = P(\hat{H}) \cdot J, \quad J = \left| \det \frac{\partial(H_{11}, H_{12}, H_{22})}{\partial(E_+, E_-, \vartheta)} \right|. \quad (3.69)$$

Mit $J = E_+ - E_-$ ergibt sich nach Einsetzen schließlich

$$P(E_+, E_-, \vartheta) = C |E_+ - E_-| e^{-A(E_+^2 - E_-^2)}. \quad (3.70)$$

Nächste-Nachbar-Verteilung

Der Abstand der beiden Energieniveaus sei

$$s = E_+ - E_- \quad (3.71)$$

mit dem Nullpunkt

$$E_0 = \frac{1}{2}(E_+ + E_-). \quad (3.72)$$

Mit der Transformation $(E_+, E_-) \rightarrow (s, E_0)$ lassen sich die Energieeigenwerte in den neuen Koordinaten ausdrücken

$$E_{\pm} = E_0 \pm \frac{s}{2} \quad (3.73)$$

und die neue Verteilung ist

$$P(s, E_0) = C s e^{-A(\frac{1}{2}s^2 + 2E_0^2)} \left| \det \frac{\partial(E_+, E_-)}{\partial(s, E_0)} \right|. \quad (3.74)$$

Die Jacobi-Determinante ist in diesem Fall einfach 1. Die Nächste-Nachbar-Verteilung erhält man schließlich nach Mittelung über E_0 :

$$P(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(s, E_0) dE_0 = C' s e^{-\frac{A}{2}s^2}. \quad (3.75)$$

Um die noch unbekanntenen Konstanten C' und A festzulegen, werden zwei Bedingungen benötigt. Dies ist zum einen die Normierungsbedingung der Wahrscheinlichkeit

$$\int_0^{\infty} P(s) ds = 1 \quad (3.76)$$

und zum anderen die aus der Entfaltung stammende Normierung des Erwartungswerts

$$\int_0^{\infty} s P(s) ds = 1. \quad (3.77)$$

Mit Gl. (3.76) und Gl. (3.77) folgt $C' = A = \frac{\pi}{2}$, wodurch sich für ein Gaußsches orthogonales Ensemble schließlich ergibt:

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4}s^2}. \quad (3.78)$$

Diese spezielle Nächste-Nachbar-Verteilung ist auch als Wigner-Verteilung bekannt, welche schon vor der Entwicklung der Zufallsmatrixtheorie gefunden und beobachtet wurde.

Für kleine Abstände $s \rightarrow 0$ ist

$$P(s) \propto s, \quad (3.79)$$

was zu einer linearen Niveauabstoßung ($\beta = 1$) führt.

3.5.2. Gaußsches unitäres Ensemble (GUE)

Die Herleitung der Verteilungsfunktionen für Gaußsche unitäre Ensemble erfolgt analog. In diesem Fall ist \hat{H} eine hermitesche Matrix.

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix} \quad (3.80)$$

und wird anstatt durch drei nun durch vier reelle Parameter festgelegt

$$H_{11}, H_{22}, \text{Re } H_{12}, \text{Im } H_{12}, \quad (3.81)$$

welche als statistisch unabhängig voneinander betrachtet werden. $P(\hat{H})$ soll dieses Mal invariant unter unitärer Transformation sein. Eine allgemeine infinitesimale unitäre Transformation wird bis auf einen irrelevanten Phasenfaktor durch

$$\hat{U} = \mathbb{1} - i\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.82)$$

beschrieben. Dabei ist

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z)^T \quad (3.83)$$

ein infinitesimaler Vektor und

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T \quad (3.84)$$

ein Tensor mit den Paulimatizen σ_i . Für die Hamilton-Matrix ergibt sich

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger = \hat{H} + d\hat{H} \quad (3.85)$$

mit

$$d\hat{H} = +i[\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \hat{H}]. \quad (3.86)$$

Mit der Abkürzung $P_{ij} = P_{ij}(H_{ij})$ erhalten wir für die Änderung der Verteilungsfunktion $\Delta P(\hat{H})$

$$\begin{aligned} \Delta P(\hat{H}) = & \left\{ \varepsilon_x \left[-2 \text{Im}\{H_{12}\} \left(\frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} - \frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} \right) + (H_{11} - H_{22}) \frac{d \ln P_{12}^{\text{Im}}}{d \text{Im}\{H_{12}\}} \right] \right. \\ & + \varepsilon_y \left[-2 \text{Re}\{H_{12}\} \left(\frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} - \frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} \right) + (H_{11} - H_{22}) \frac{d \ln P_{12}^{\text{Re}}}{d \text{Im}\{H_{12}\}} \right] \\ & \left. + \varepsilon_z \left[2 \text{Im}\{H_{12}\} \frac{d \ln P_{12}^{\text{Re}}}{d \text{Im}\{H_{12}\}} - 2 \text{Re}\{H_{12}\} \frac{d \ln P_{12}^{\text{Im}}}{d \text{Im}\{H_{12}\}} \right] \right\} P(\hat{H}), \quad (3.87) \end{aligned}$$

welche aufgrund der Invarianz von $P(\hat{H})$ verschwinden muss. Auch hier löst die Gaußfunktion (3.62) die sich aus Gl. (3.87) ergebenden Differentialgleichungen.

Verteilung der Eigenwerte

Die Transformation

$$\hat{H} = \hat{U} \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix} \hat{U}^\dagger \quad (3.88)$$

erfolgt mit der unitären Matrix

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (3.89)$$

Für die Matrixelemente ergibt sich

$$H_{11} = E_+ \cos^2 \vartheta + E_- \sin^2 \vartheta, \quad (3.90)$$

$$H_{22} = E_+ \sin^2 \vartheta + E_- \cos^2 \vartheta, \quad (3.91)$$

$$H_{12} = H_{21}^* = (E_+ - E_-) e^{i\phi} \cos \vartheta \sin \vartheta \quad (3.92)$$

und für die Transformation $(H_{11}, H_{22}, \text{Re}\{H_{12}\}, \text{Im}\{H_{12}\}) \rightarrow (E_+, E_-, \vartheta, \phi)$ lautet die Jacobi-Determinante

$$J = (E_+ - E_-)^2 \cos \vartheta \sin \vartheta. \quad (3.93)$$

Die Winkelkoordinaten können durch Mittelung ausintegriert werden, sodass sich für die Verteilung der Energieeigenwerte

$$P(E_+, E_-) = C |E_+ - E_-|^2 e^{-A(E_+^2 - E_-^2)} \quad (3.94)$$

ergibt.

Nächste-Nachbar-Verteilung

Die Transformation $(E_+, E_-) \rightarrow (s, E_0)$ ist dieselbe wie in Gleichung (3.73). Die Nächste-Nachbar-Verteilung lautet nach Mittelung über E_0

$$P(s) = C' s^2 e^{-\frac{A}{2}s^2}. \quad (3.95)$$

Über die Normierungsbedingungen (3.76) und (3.77) werden die Konstanten

$$C' = \frac{32}{\pi^2}$$

und

$$A = \frac{8}{\pi}$$

bestimmt. Somit ist für Gaußsche unitäre Ensemble die Nächste-Nachbar-Verteilung

$$P(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi}s^2}. \quad (3.96)$$

Für kleine Abstände $s \rightarrow 0$ dominiert hier das Verhalten

$$P(s) \propto s^2, \quad (3.97)$$

in Übereinstimmung mit der in Abschnitt 3.4 gefundenen quadratischen Abstoßung.

3.5.3. Verallgemeinerung auf $\dim(\hat{H}) > 2$

Die vorangegangenen Rechnungen wurden für die kleinstmögliche Dimension des Hamiltonoperators, d.h. für 2×2 -Matrizen, durchgeführt. Die Ergebnisse lassen sich allerdings für höhere Dimensionen verallgemeinern. Sowohl für das Gaußsche orthogonale als auch für das Gaußsche unitäre Ensemble³ wird die Verteilungsfunktion durch Gleichung (3.62)

$$P(\hat{H}) = C e^{-A \text{Tr}\{\hat{H}^2\}}$$

beschrieben. Es stellt sich heraus, dass dieses Ergebnis unabhängig von der Dimension von \hat{H} gültig ist. Die Anzahl n der benötigten Kontrollparameter muss allerdings an die Dimension N der Hamilton-Matrix angepasst werden und ist

- $n = \frac{N(N-1)}{2}$ für reell-symmetrische
- $n = N^2$ für komplexe

hermitesche $N \times N$ Matrizen.

Ein Vergleich von Gl. (3.70) und (3.94) zeigt, dass der Exponent β des Faktors $|E_+ - E_-|$ in Zusammenhang mit der Anzahl der Kontrollparameter steht. Der Faktor bestimmt nämlich gerade die Stärke, mit der Kreuzungen vermieden werden. Für N Dimensionen lautet die verallgemeinerte Formel

$$P(E) = C \prod_{\mu < \nu}^{1 \dots N} |E_\mu - E_\nu|^{n-1} \exp\left(-A \sum_{\mu=1}^N E_\mu^2\right) \quad (3.98)$$

mit den Eigenenergien E_μ . Es zeigt sich allerdings, dass wir für Matrizen höherer Ordnung qualitativ ähnliche Resultate wie für 2×2 Matrizen erhalten, was die Vereinfachung rechtfertigt.

3.6. Übergang zwischen zwei Symmetrieklassen

Physikalische Systeme sind oft aus Teilen unterschiedlicher Symmetrie aufgebaut oder besitzen klassisch integrable und chaotische Bereiche. Wird ein Parameter des Systems verändert, kann dies zu einem Übergang zwischen zwei Symmetrieklassen führen. Dies kann in der Theorie der Zufallsmatrizen durch einen Übergang zwischen den Ensembles realisiert werden.

Der Hamiltonoperator \hat{H} wird als Summe zweier Operatoren unterschiedlicher Symmetrien geschrieben [3]:

$$\hat{H} = \hat{H}_\beta + \lambda \hat{H}_{\beta'} . \quad (3.99)$$

³Zu Abschnitt 3.5.1 analoge Rechnungen würden zeigen, dass Gleichung (3.62) auch für das Gaußsche symplektische Ensemble gilt.

Dieser Ansatz kommt aus der Störungstheorie. \hat{H}_β ist das ursprüngliche System, welches durch Variation des Kopplungsparameters in ein System anderer Symmetrie übergeht. Für kleine Werte von λ kann dabei $\hat{H}_{\beta'}$ als Störung von \hat{H}_β betrachtet werden. Für große Werte von λ verhält es sich genau umgekehrt. Die Verteilungsfunktionen für die drei möglichen Übergänge $P \rightarrow \text{GOE}$, $P \rightarrow \text{GUE}$ und $\text{GOE} \rightarrow \text{GUE}$ wurden in [3] im Rahmen der Theorie der Zufallsmatrizen hergeleitet.

3.6.1. Übergang von P nach GOE

Der Übergang von einer Poisson-Verteilung (3.40) zur Wigner-Verteilung (3.78) beschreibt den Fall eines klassisch integrablen Systems, welches durch einen chaotischen Beitrag mit antiunitärer Symmetrie und $T^2 = \mathbb{1}$ gestört wird. Die Hamilton-Matrix lässt sich daher schreiben als

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}. \quad (3.100)$$

\hat{H}_0 repräsentiert das klassisch integrable System mit der poissonverteilten Zufallszahl p und \hat{H}_1 ist als reell symmetrische Matrix ein Vertreter des Gaußschen orthogonalen Ensembles. Der Übergang zwischen den zwei Systemen wird durch die Verteilung [3]

$$P_{P \rightarrow \text{GOE}}(s; \lambda) = C s e^{-D^2 s^2} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{4\lambda^2} - x} I_0(z) dx \quad (3.101)$$

beschrieben, mit

$$z = \frac{x D s}{\lambda}, \quad (3.102)$$

$$D(\lambda) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\lambda} U\left(-\frac{1}{2}, 0, \lambda^2\right), \quad (3.103)$$

$$C(\lambda) = 2D(\lambda^2) \quad (3.104)$$

und der hypergeometrischen Funktion $U(a, b, z)$ (vgl. [12], Gl. (13.1.3)) und der modifizierten Besselfunktion $I_0(z)$ (vgl. [12], Gl. (9.6.3)). Für die Grenzfälle $\lambda \rightarrow 0$ und $\lambda \rightarrow \infty$ erhalten wir die Poisson-Verteilung (3.40), bzw. die Wigner-Verteilung (3.78).

3.6.2. Übergang von P nach GUE

In diesem Fall besteht das System aus einem klassisch integrablen Beitrag \hat{H}_0 und einer chaotischen Störung ohne antiunitäre Symmetrien \hat{H}_2 , gekoppelt über den Parameter λ .

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} a & c_0 + ic_1 \\ c_0 - ic_1 & b \end{pmatrix} \quad (3.105)$$

Die Verteilung [3]

$$P_{\text{P} \rightarrow \text{GUE}}(s; \lambda) = C s e^{-D^2 s^2} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{4\lambda^2} - x} \frac{\sinh(z)}{z} \quad (3.106)$$

mit

$$z = \frac{x D s}{\lambda}, \quad (3.107)$$

$$D(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} + \frac{1}{2\lambda} e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) - \frac{\lambda}{2} \operatorname{Ei}(\lambda^2) + \frac{2\lambda^2}{\sqrt{\pi}} {}_2F_2 \left(\frac{1}{2}, 1; \frac{3}{2}, \frac{3}{2}; \lambda^2 \right), \quad (3.108)$$

$$C(\lambda) = \frac{4D(\lambda)^3}{\sqrt{\pi}} \quad (3.109)$$

beschreibt den Übergang. Dabei ist $\operatorname{erfc}(x)$ die komplementäre Fehlerfunktion (vgl. [12], Gl. (7.1.2)), $\operatorname{Ei}(x)$ (vgl. [12], Gl. (5.1.2)) die Integraleponentialfunktion und ${}_2F_2$ eine verallgemeinerte hypergeometrische Funktion (vgl. [13], Gl. (9.14.1)). Erneut lassen sich die zwei Grenzfälle überprüfen. Für $\lambda \rightarrow 0$ und $s > 0$ erhalten wir die Poisson-Verteilung (3.40) und für $\lambda \rightarrow \infty$ wie erwartet die zu GUE gehörende Verteilung (3.96).

3.6.3. Übergang von GOE nach GUE

Als letztes wird der Übergang zwischen zwei chaotischen System betrachtet. Der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \lambda \hat{H}_2 = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} a & c_0 + i c_1 \\ c_0 - i c_1 & b \end{pmatrix} \quad (3.110)$$

setzt sich aus der reell symmetrischen Matrix \hat{H}_1 mit antiunitärer Symmetrie und der hermiteschen Matrix \hat{H}_2 zusammen, bei der die antiunitäre Symmetrie gebrochen ist. Beide Systeme sind über den Parameter λ gekoppelt.

$$P_{\text{GOE} \rightarrow \text{GUE}}(s; \lambda) = C s e^{-D^2 s^2} \operatorname{erf} \left(\frac{D s}{\lambda} \right) \quad (3.111)$$

mit

$$D(\lambda) = \frac{\sqrt{1 + \lambda^2}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda}{1 + \lambda^2} + \operatorname{arccot}(\lambda) \right), \quad (3.112)$$

$$C(\lambda) = 2\sqrt{1 + \lambda^2} D(\lambda)^2 \quad (3.113)$$

ist die Verteilung [3], welche diesen Übergang beschreibt. Für $\lambda \rightarrow 0$ und $s > 0$ ist die Fehlerfunktion $\operatorname{erf} \left(\frac{D s}{\lambda} \right)$ näherungsweise 1 und wir erhalten die Wigner-Verteilung (3.78) für Gaußsche orthogonale Ensemble. Für $\lambda \rightarrow \infty$ führt die Taylorentwicklung 1. Ordnung

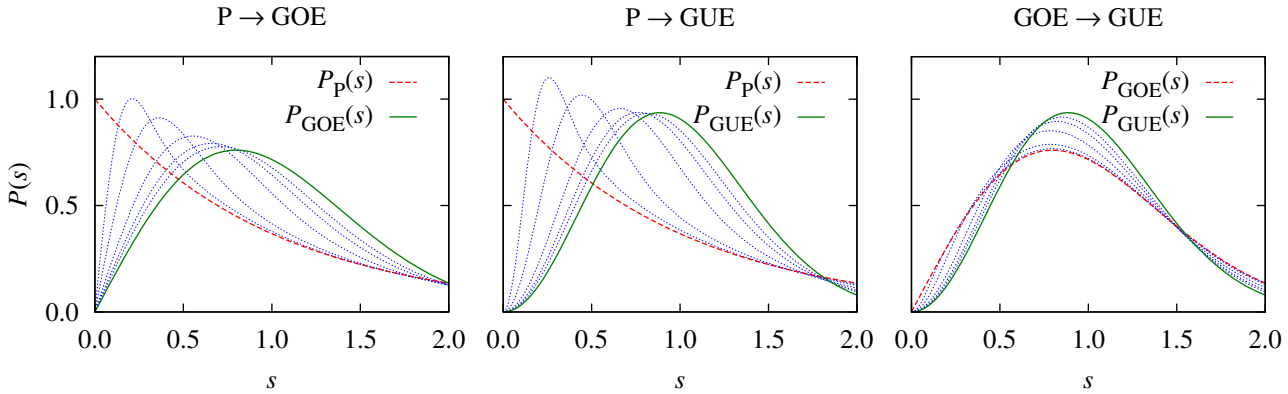


Abbildung 3.1.: Nächste-Nachbar-Verteilung $P(s)$ der Übergänge $P \rightarrow GOE$, $P \rightarrow GUE$ und $GOE \rightarrow GUE$. Die Übergangsfunktionen (3.101), (3.106) und (3.111) sind für $\lambda = 0, 1; 0, 2; 0, 4; 0, 6; 0, 8$ eingezeichnet (blau gepunktete Linien). Die Abbildung ist aus [2] entnommen.

der Fehlerfunktion auf die erwartete Verteilung (3.96).

In Abbildung 3.1 sind die drei Übergänge $P \rightarrow GOE$, $P \rightarrow GUE$ und $GOE \rightarrow GUE$ grafisch dargestellt. Dazu ist jeweils die Start- und Zielverteilung eingezeichnet, sowie die entsprechende Übergangsfunktion für verschiedene Werte des Parameters λ .

Auch in diesem Unterkapitel wurden für die Übergänge nur 2×2 Matrizen betrachtet, da diese eine gute Approximation für Zufallsmatrizen höherer Ordnung sind (vgl. hierzu [3]).

3.7. Verallgemeinerter Übergang zwischen drei Symmetrieklassen

Werden anstatt nur einem, zwei Parameter gleichzeitig in einem System variiert, kann dies zu einem Übergang führen, an welchem drei Symmetrieklassen beteiligt sind. Analog zum vorherigen Abschnitt könnten wir nun den Hamiltonoperator \hat{H} als Summe dreier Operatoren unterschiedlicher Symmetrie schreiben:

$$\hat{H} = \hat{H}_\beta + \lambda_1 \hat{H}_{\beta'} + \lambda_2 \hat{H}_{\beta''} \quad (3.114)$$

Allerdings zeigen schon die Übergangsfunktionen (3.101), (3.106) und (3.111), dass die Rechnung sehr aufwendig ist und unschöne Ergebnisse liefert. Wir wollen hier daher einen anderen Weg gehen und verallgemeinerte Funktionen aus Überlegungen ableiten, um

diese an den bekannten Übergangsfunktionen (3.101), (3.106) und (3.111) der Übergänge $P \rightarrow \text{GOE}$, $P \rightarrow \text{GUE}$ und $\text{GOE} \rightarrow \text{GUE}$ zu testen und in Kapitel 5 auf ein physikalisches System anzuwenden.

3.7.1. Ansatz 1: verallgemeinerte Brody-Verteilung

Brody schlug 1973 (vgl. [14]) zur Beschreibung des Übergangs zwischen der Wigner-Verteilung $P_{\text{GOE}}(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}$ und der Poisson-Verteilung $P_{\text{P}}(s) = e^{-s}$ folgenden Ansatz vor:

$$P_{\omega}(s) = A s^{\omega} e^{-B s^u}, \quad (3.115)$$

in welchem $u = \omega + 1$ linear von ω abhängt und $A(\omega)$ und $B(\omega)$ über die Normierungsbedingungen (3.76) und (3.77) festgelegt werden. Für $\omega = 1$ ergibt sich der Grenzfall $P_{\text{GOE}}(s)$, während $\omega = 0$ zu $P_{\text{P}}(s)$ führt.

Wir wollen uns jetzt nach dem gleichen Prinzip einen allgemeineren Ansatz $P(s; \alpha, \beta)$ überlegen, welcher mittels zweier Parameter α und β ⁴ die drei Grenzfälle

$$P_{\text{P}}(s) = e^{-s^1}, \quad (3.116)$$

$$P_{\text{GOE}}(s) \propto s^1 e^{-c_1 s^2}, \quad (3.117)$$

$$P_{\text{GUE}}(s) \propto s^2 e^{-c_2 s^2} \quad (3.118)$$

verbindet. Wir wählen den Ansatz

$$P(s; \alpha, \beta) = f_1(\alpha, \beta) s^{f_2(\alpha, \beta)} e^{-f_3(\alpha, \beta) \cdot s^{f_4(\alpha, \beta)}}. \quad (3.119)$$

Aus Gleichung (3.116) - (3.118) können wir entnehmen, dass f_4 beim Übergang zwischen 1 (für P) und 2 (für GOE und GUE) variiert. Analog zur Brody-Verteilung (3.115) wählen wir daher

$$f_4(\alpha, \beta) = \beta + 1, \quad (3.120)$$

sodass $\beta \in [0, 1]$. Aus den Gleichungen (3.116) - (3.118) folgt außerdem, dass für $\beta = 0$ auch $f_2 = 0$ gelten muss und für $\beta = 1$ andererseits $f_2 = 1$ oder $f_2 = 2$. Daher wählen wir

$$f_2(\alpha, \beta) = \beta(\alpha + 1), \quad (3.121)$$

damit auch $\alpha \in [0, 1]$ gilt. Die Übergänge aus Abschnitt 3.6 ergeben sich nun durch folgende Wahl der Parameter

$$P \rightarrow \text{GOE} : \alpha = 0, \quad \beta \in [0, 1], \quad (3.122)$$

$$P \rightarrow \text{GUE} : \alpha = 1, \quad \beta \in [0, 1], \quad (3.123)$$

$$\text{GOE} \rightarrow \text{GUE} : \beta = 1, \quad \alpha \in [0, 1], \quad (3.124)$$

⁴Der Parameter β ist hier nicht zu verwechseln mit dem Dyson-Parameter β aus Abschnitt 3.4 und 3.5.

3.7. Verallgemeinerter Übergang zwischen drei Symmetrieklassen

mit den Verteilungen $P_P(s)$ ($\alpha \in [0, 1], \beta = 0$), $P_{\text{GOE}}(s)$ ($\alpha = 0, \beta = 1$) und $P_{\text{GUE}}(s)$ ($\alpha = 1, \beta = 1$). Für den Übergang $P \rightarrow \text{GOE}$ entspricht $P(s; 0, \beta)$ der Brody-Verteilung (3.115) mit $\omega = \beta$.

Die Funktionen f_1 und f_4 werden über die beiden Normierungsbedingungen (3.76) und (3.77) bestimmt. Zur Berechnung der Integrale wird die Definition der Gammafunktion (vgl. [15], Gl. (8.95))

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt \quad (3.125)$$

für $z \in \mathbb{C}$ und $\text{Re}\{z\} > 0$ ausgenutzt. Dazu wird die Transformation $s \rightarrow t$ durchgeführt. Wir fordern, dass der Erwartungswert der Niveauabstände 1 sei:

$$\int_0^\infty s P(s; \alpha, \beta) ds = f_1 \cdot f_3^{-\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}} \frac{\Gamma\left(\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)}{1+\beta} \stackrel{!}{=} 1. \quad (3.126)$$

Des weiteren muss die Verteilung selbst auf 1 normiert sein, da es sich um eine Wahrscheinlichkeit handelt:

$$\int_0^\infty P(s; \alpha, \beta) ds = f_1 \cdot f_3^{-\frac{1+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}} \frac{\Gamma\left(\frac{1+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)}{1+\beta} \stackrel{!}{=} 1. \quad (3.127)$$

Nach Umformen erhalten wir schließlich

$$f_1 = \left(\frac{\Gamma\left(\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)} \right)^{2+\beta+\alpha\beta} \frac{(1+\beta)}{\Gamma\left(\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)}, \quad (3.128)$$

$$f_3 = \left(\frac{\Gamma\left(\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)} \right)^{1+\beta}, \quad (3.129)$$

womit sich für Gl. (3.119)

$$P(s; \alpha, \beta) = \left(\frac{\Gamma\left(\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)} \right)^{2+\beta+\alpha\beta} \frac{(1+\beta)}{\Gamma\left(\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)} s^{\beta(\alpha+1)} \cdot \exp \left[- \left(\frac{\Gamma\left(\frac{2+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1+\beta+\alpha\beta}{1+\beta}\right)} \right)^{1+\beta} \cdot s^{\beta+1} \right] \quad (3.130)$$

ergibt.

Diese verallgemeinerte Übergangsfunktion lässt sich nun für die drei Übergänge (3.122)

- (3.124) mit den aus der RMT hergeleiteten analytischen Übergangsfunktionen aus Abschnitt 3.6 vergleichen. Dazu wird jede der drei analytischen Übergangsfunktionen (3.101), (3.106) und (3.111) für 1000 verschiedene Werte des Parameters λ zwischen 0 und 10 berechnet. Da allerdings für $\lambda > 1$ der Übergang schon fast vollständig abgeschlossen ist, wurden die λ_i nicht linear gewählt, sondern nach folgender Formel:

$$\lambda_i = \frac{1}{100} \cdot 1000^{\frac{i-1}{999}}. \quad (3.131)$$

Für jeden Parameter werden 100 Punkte für $0 \leq s \leq 3$ berechnet. Im Folgenden werden nun nicht die Verteilungen $P(s; \alpha, \beta)$ und $P(s; \lambda)$ verglichen, sondern die sich daraus ergebenden kumulativen Wahrscheinlichkeiten,

$$F(s) = \int_0^s P(s') ds' \quad (3.132)$$

wobei wir in der numerischen Rechnung die Integrale durch eine Summe ersetzen. Dies ist an dieser Stelle noch nicht nötig, sondern erst im Vergleich mit den numerisch berechneten Energieniveaus in Kapitel 5, soll aber schon eingeführt werden, um die Ergebnisse später besser vergleichen zu können. In der verallgemeinerten Funktion (3.130) wird je nach Übergang (3.122) - (3.124) ein Parameter konstant gehalten und der andere variiert. Um für ein bestimmtes Parameterpaar (α, β) der verallgemeinerten Funktion nun die passende Übergangsfunktion $P(s; \lambda)$, d.h. das passende λ zu finden, wird nach Berechnung der beiden kumulativen Wahrscheinlichkeiten (3.132) für jedes der 1000 λ die Abweichung

$$\Delta^{\alpha, \beta}(\lambda) = \int_0^\infty (F(s; \lambda) - F^{\alpha, \beta}(s))^2 ds \quad (3.133)$$

berechnet.⁵ Dabei wird das Integral bei der numerischen Rechnung zu einer Summe über die s_n , $n = 1 \dots 100$. Die kleinste Abweichung

$$\Delta = \min_{\lambda} (\Delta^{\alpha, \beta}(\lambda)) \quad (3.134)$$

bestimmt das passende $F(s; \lambda)$.

In den Abbildungen 3.2 - 3.4 sind für die drei Übergänge jeweils sechs Fälle herausgegriffen. Zu dem jeweiligen Parameterpaar (α, β) der verallgemeinerten Funktion $F(s; \alpha, \beta)$ ist das dazu passende λ mit der zugehörigen kumulierten Übergangsfunktion $F(s; \lambda)$ abgebildet. Außerdem ist die Start- und Zielverteilung des Übergangs eingezeichnet. Von oben nach unten steigt der variierte Parameter innerhalb einer Spalte, sodass der Übergang beobachtet werden kann.

Um allerdings eine Aussage über die Qualität der verallgemeinerten Übergangsfunktion treffen zu können, müssen wir sie für jeden Übergang für einige verschiedene Parameterpaare, d.h. für verschiedene Werte des variierten Parameters⁶ α bzw. β mit der

⁵Das hochgestellte α, β bedeutet, dass diese beiden Parameter konstant gehalten werden, während die Abweichung für verschiedene λ berechnet wird.

⁶ α für den Übergang GOE \rightarrow GUE und β für die Übergänge P \rightarrow GOE und P \rightarrow GUE

Ansatz 1: Vergleich P → GOE

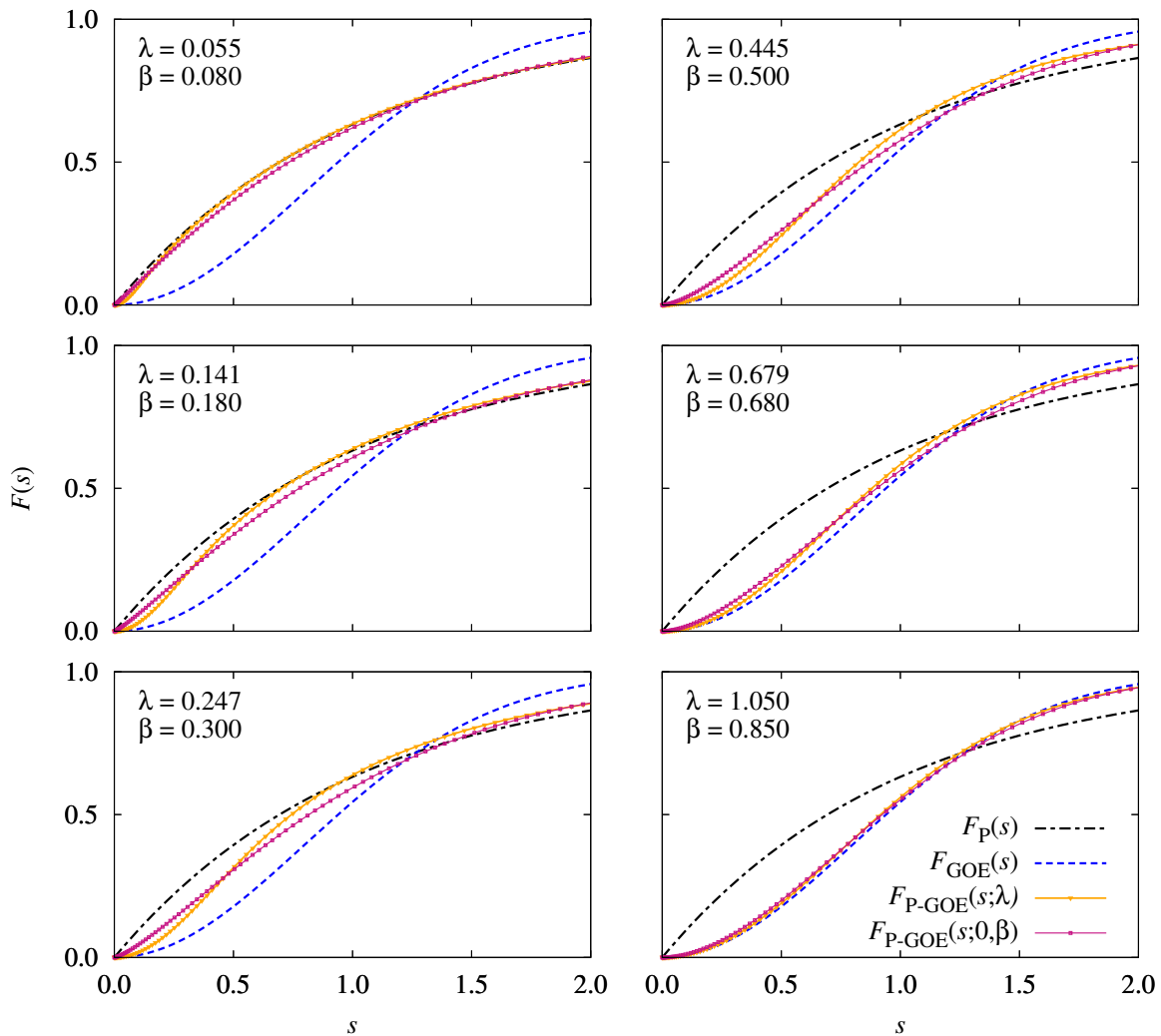


Abbildung 3.2.: Für den Übergang P→GOE sind für sechs verschiedene Werte des Parameters β der verallgemeinerten Funktion $F_{P-GOE}(s; 0, \beta)$ das dazu passende λ mit der zugehörigen kumulierten Übergangsfunktion $F_{P-GOE}(s; \lambda)$ abgebildet. Außerdem sind die Start- und Zielverteilung des Übergangs eingezeichnet. β nimmt innerhalb einer Spalte von oben nach unten zu. Die maximale Abweichung (nach Abb. 3.5 (a)) ist für $\beta = 0,3$ beobachtbar.

Ansatz 1: Vergleich P \rightarrow GUE

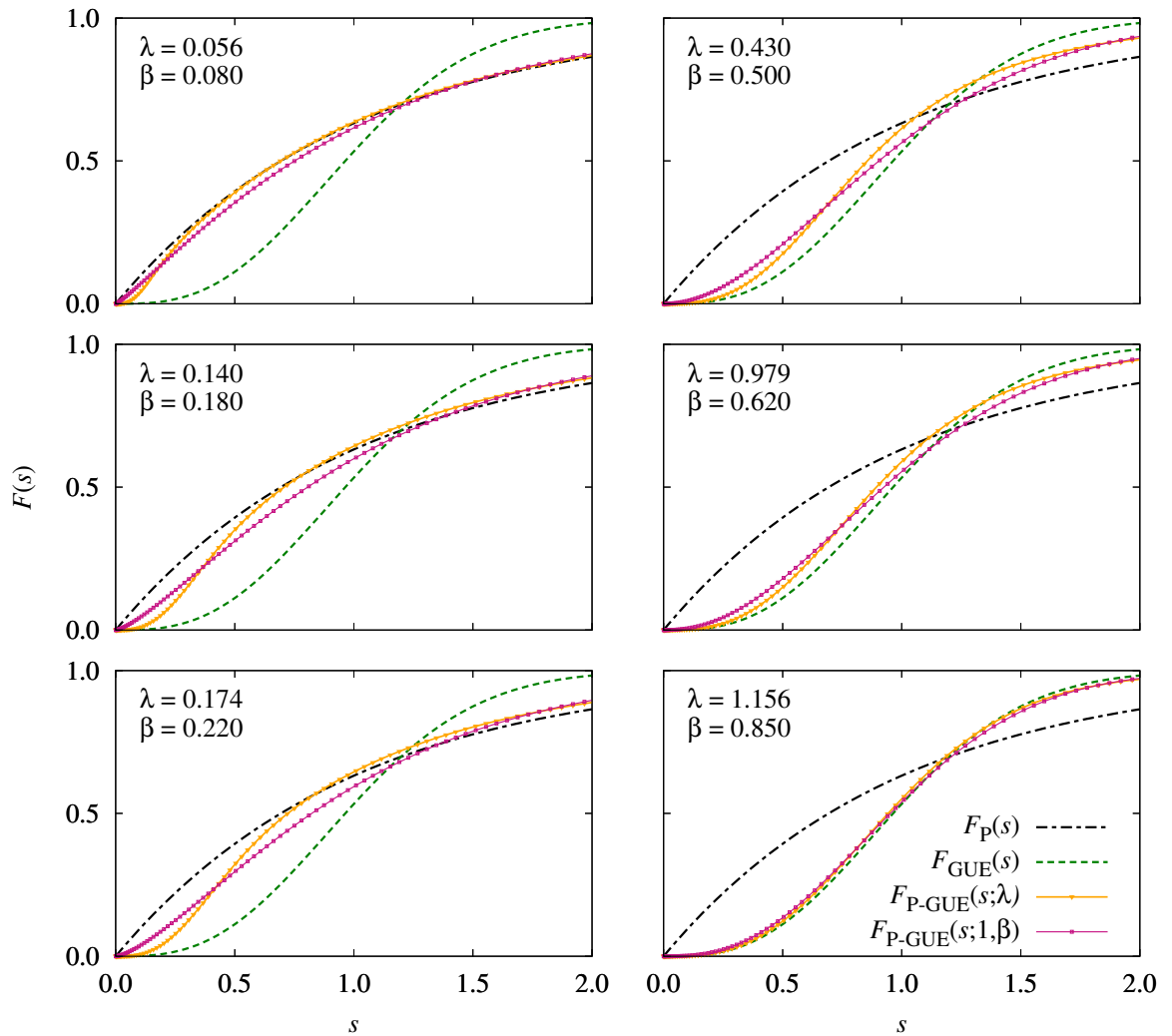


Abbildung 3.3.: Die Darstellung ist wie in Abbildung 3.2, allerdings für den Übergang P \rightarrow GUE, weswegen wir hier die verallgemeinerte Funktion $F_{P-GUE}(s; 1, \beta)$ betrachten. Die maximale Abweichung (nach Abb. 3.5 (b)) ist für $\beta = 0,22$ beobachtbar.

Ansatz 1: Vergleich GOE \rightarrow GUE

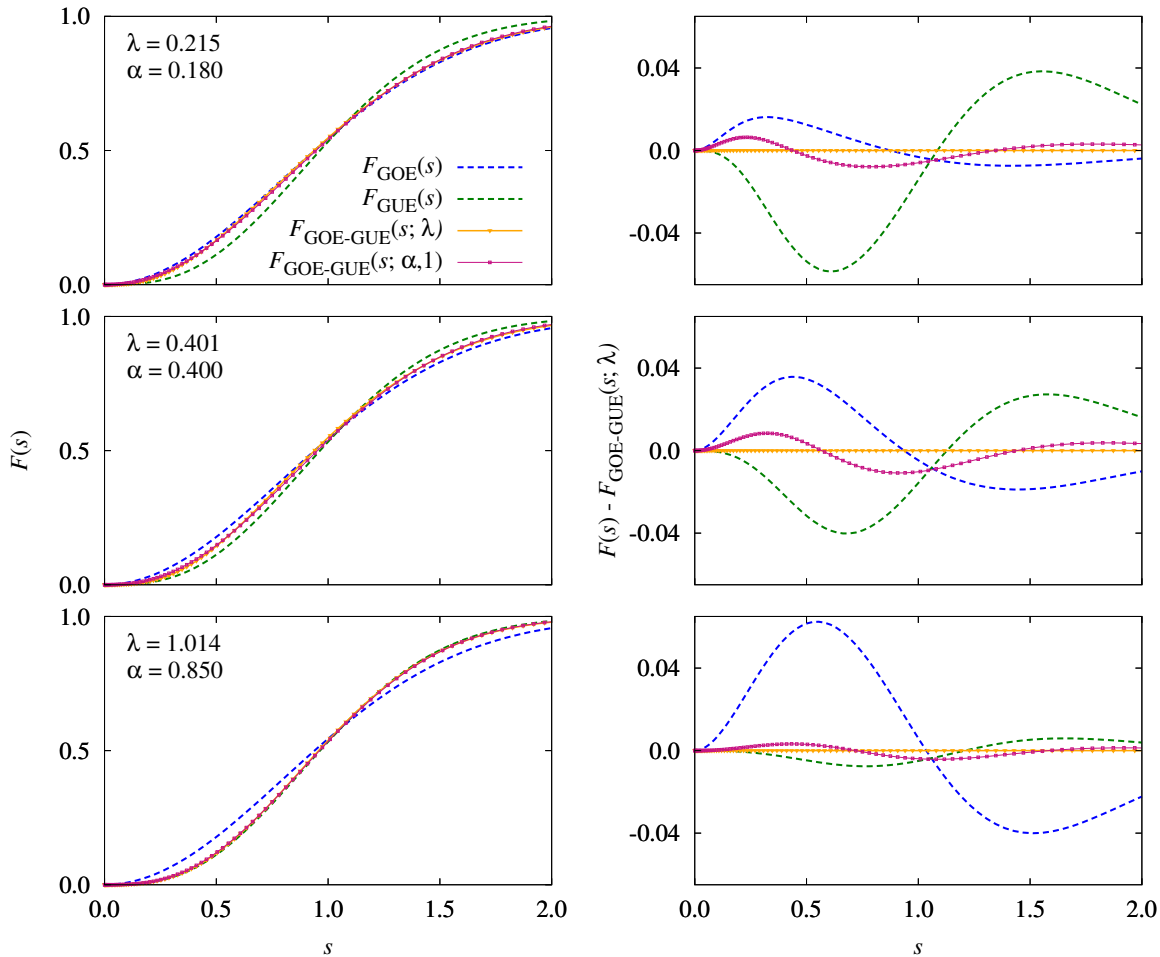


Abbildung 3.4.: Für den Übergang GOE \rightarrow GUE sind in der linken Spalte für drei verschiedene Werte des Parameters α der verallgemeinerten Funktion $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \alpha, 1)$ das dazu passende λ mit der zugehörigen kumulierten Übergangswahrscheinlichkeit $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda)$ abgebildet. Außerdem sind die Start- und Zielverteilung des Übergangs eingezeichnet. Aufgrund der kleinen Abweichung, ist in der rechten Spalte jeweils die Differenz zu $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda)$ dargestellt, um $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \alpha, 1)$ besser mit $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda)$ vergleichen zu können. Die maximale Abweichung (nach Abb. 3.5 (c)) ist für $\alpha = 0,4$ beobachtbar.

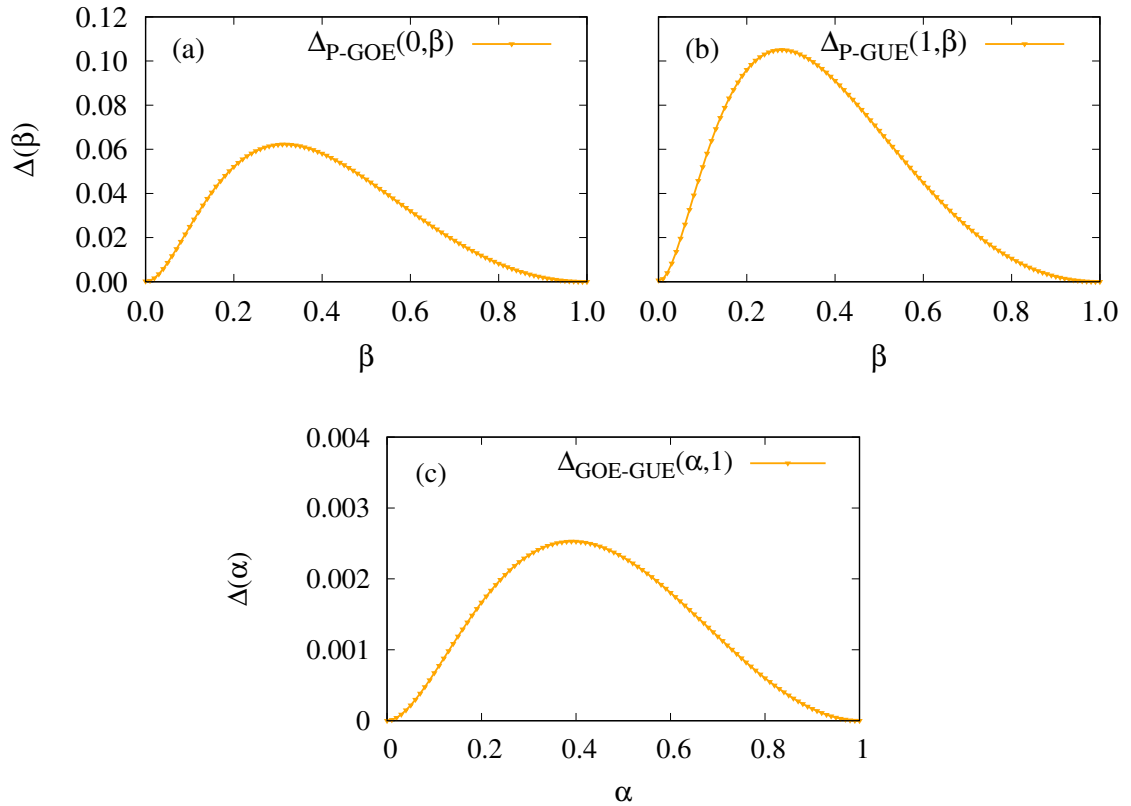


Abbildung 3.5.: Abweichung Δ in Abhängigkeit des variierten Parameters für die Übergänge $P \rightarrow \text{GOE}$ (a), $P \rightarrow \text{GUE}$ (b) und $\text{GOE} \rightarrow \text{GUE}$ (c). Δ wird nach Gleichung (3.134) berechnet.

entsprechenden analytischen Übergangsfunktion vergleichen. Wir schauen uns dazu die Abweichung $\Delta(\alpha)$ bzw. $\Delta(\beta)$ in Abhängigkeit des variierten Parameters an (Abbildung 3.5). Für einen bestimmten Wert des Parameters ist dabei immer das kleinste, durch den Vergleich mit den λ gefundene Δ nach Gleichung (3.133) und (3.134) gemeint. Wie erwartet, ist in den Grenzfällen bei denen α bzw. β den Wert 0 oder 1 annimmt, die Abweichung $\Delta = 0$. Die verallgemeinerte Funktion wurde ja gerade so gewählt, dass sie die Grenzfälle exakt wiedergibt. Bei den Übergängen $P \rightarrow \text{GOE}$ und $P \rightarrow \text{GUE}$ wird β variiert. Von den Grenzfällen weg, zu mittleren Werten von β nimmt die Abweichung daher zu.

Die Abbildungen 3.2 - 3.4 veranschaulichen, was wir auch schon in Abbildung 3.5 gesehen haben. Vor allem für kleine s folgt $F(s; \alpha, \beta)$ für die Übergänge $P \rightarrow \text{GOE}$ bzw. $P \rightarrow \text{GUE}$ zu sehr der Poisson-Verteilung.

Für β oberhalb der maximalen Abweichung stimmen beide Funktionen deutlich besser überein. Den Übergang $\text{GOE} \rightarrow \text{GUE}$ stellt die verallgemeinerte Funktion sehr gut dar.

Hier ist fast keine Abweichung zu erkennen.

3.7.2. Ansatz 2: Kombination zweier analytischer Übergangsfunktionen

Der zweite Ansatz besteht darin, zwei der drei analytischen Übergangsfunktionen über den Parameter α zu mischen⁷. Wir nehmen daher folgenden Ansatz

$$P(s; \alpha, \lambda) = \alpha P_{\text{P-GUE}}(s; \lambda) + (1 - \alpha) P_{\text{P-GOE}}(s; \lambda). \quad (3.135)$$

Bei den Funktionen $P_{\text{P-GUE}}(s; \lambda)$ bzw. $P_{\text{P-GOE}}(s; \lambda)$ handelt es sich um die analytischen Funktionen (3.106) bzw. (3.101) aus Abschnitt 3.6, welche den Übergang $\text{P} \rightarrow \text{GUE}$ bzw. $\text{P} \rightarrow \text{GOE}$ in Abhängigkeit des Parameters λ beschreiben.

Es zeigt sich recht schnell, dass diese verallgemeinerte Übergangsfunktion bereits normiert ist. Die Normierungsbedingungen (3.76) und (3.77) liefern

$$\int_0^\infty P(s; \alpha, \lambda) ds = \alpha + (1 - \alpha) = 1 \quad (3.136)$$

und

$$\int_0^\infty s P(s; \alpha, \lambda) ds = \alpha + (1 - \alpha) = 1, \quad (3.137)$$

da sowohl $P_{\text{P-GUE}}(s; \lambda)$ als auch $P_{\text{P-GOE}}(s; \lambda)$ bereits normiert sind.

Die Grenzübergänge zwischen den drei Statistiken P, GOE und GUE erreichen wir durch folgende Wahl der Parameter:

$$\text{P} \rightarrow \text{GOE} : \alpha = 0, \quad \lambda \in [0, \infty), \quad (3.138)$$

$$\text{P} \rightarrow \text{GUE} : \alpha = 1, \quad \lambda \in [0, \infty), \quad (3.139)$$

$$\text{GOE} \rightarrow \text{GUE} : \lambda = \infty, \quad \alpha \in [0, 1]. \quad (3.140)$$

Dabei führt $\alpha = 0, \lambda = \infty$ auf die Verteilung $P_{\text{GOE}}(s)$, mit $\alpha = 1$ und $\lambda = \infty$ erhalten wir die Verteilung $P_{\text{GUE}}(s)$, sowie für $\alpha \in [0, 1]$ und $\lambda = \infty$ die Poisson-Verteilung $P_{\text{P}}(s)$. Die Wahl der Parameter für die ersten beiden Übergänge (3.138) und (3.139) sind aus Abschnitt 3.6 bekannt, denn für $\alpha = 0$ ist $P(s; \alpha, \lambda) = P_{\text{P-GOE}}(s; \lambda)$ und für $\alpha = 1$ erhalten wir $P(s; \alpha, \lambda) = P_{\text{P-GUE}}(s; \lambda)$. Nun gilt es noch die verallgemeinerte Funktion $P(s; \alpha, \lambda)$ mit der analytischen Funktion $P_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda)$ zu vergleichen. Wir fitten analog zu Ansatz 1 die analytische Funktion⁸ $P_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda')$ an die verallgemeinerte Funktion

⁷ α beschreibt wie in Ansatz 1 auch hier den Übergang eines Systems mit wenigstens einer antiunitären Symmetrie zu einem System ohne jegliche antiunitäre Symmetrie. Trotzdem handelt es sich nicht um den selben Parameter wie in Ansatz 1 und sollte nicht verwechselt werden.

⁸Um Verwirrung zu vermeiden schreiben wird hier die analytische Übergangsfunktion als $P_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda')$ mit dem Parameter λ' , im Gegensatz zur verallgemeinerten Funktion $P(s; \alpha, \lambda)$.

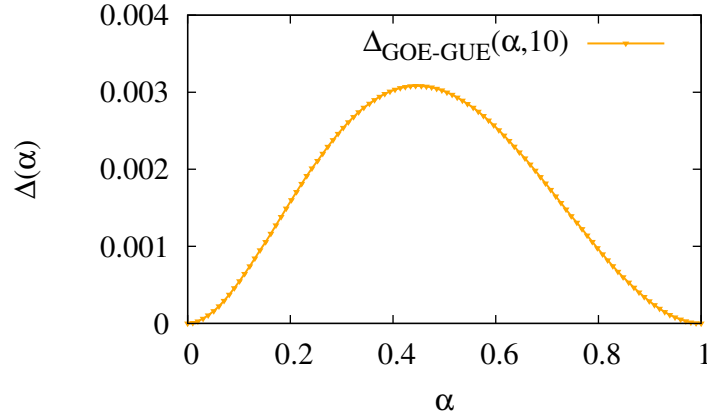


Abbildung 3.6.: Abweichung Δ nach Gleichung (3.142) in Abhängigkeit des Parameters α für den Übergang (3.140) von GOE nach GUE.

$P(s; \alpha, \infty)$, wobei wir für jeden Wert des Parameters α das optimal passende λ' suchen. Dieses finden wir, indem wir die quadratische Abweichung

$$\Delta^{\alpha, \infty}(\lambda') = \int_0^{\infty} (F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda') - F^{\alpha, \infty}(s))^2 ds \quad (3.141)$$

minimieren, d.h.

$$\Delta(\alpha) = \min(\Delta^{\alpha, \infty}(\lambda')). \quad (3.142)$$

Dazu ist noch anzumerken, dass in der numerischen Rechnung aus dem Integral eine Summe über $s_n = 1 \dots 100$ wird (vgl. Ansatz 1). Außerdem können für $\lambda = 10$ die Übergänge (3.138) und (3.139) schon als abgeschlossen betrachtet werden, sodass zur numerischen Auswertung in Gleichung (3.142), $\lambda = 10$ und nicht ∞ gesetzt wird. Auch für $\lambda' = 10$ kann der Übergang GOE \rightarrow GUE als abgeschlossen betrachtet werden, weswegen für den Fit gleichermaßen nur $\lambda' \in [0, 10]$ gewählt wird.

Werten wir Gleichung (3.141) und (3.142) für 100 Werte von $\alpha \in [0, 1]$ aus, erhalten wir Abbildung 3.6. Die Abweichung geht gegen 0 wenn wir uns den Grenzfällen $\alpha = 0$ (GOE) und $\alpha = 1$ (GUE) annähern. Dazwischen steigt sie bis auf einen Wert von $\Delta \approx 0,003$ bei $\alpha \approx 0,44$. Dort stimmt die verallgemeinerte Übergangsfunktion $P(s; \alpha, \lambda)$ am schlechtesten mit der analytischen Funktion $P_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda')$ überein.

In Abbildung 3.7 sind für drei verschiedene Werte von α die verallgemeinerte Funktion $F(s; \alpha, 10)$, die analytische Funktion $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda')$, wobei das passende λ' über den Fit bestimmt wurde, und die kumulativen Wahrscheinlichkeiten der GOE- und GUE-Verteilung eingezeichnet (linke Spalte). Da $F(s; \alpha, 10)$ nur wenig von der analytischen Funktion abweicht, ist jeweils rechts daneben die Differenz zur analytischen Funktion dargestellt. Hierdurch erkennen wir, dass $F(s; \alpha, 10)$ sich für kleine s ($0 < s < 0,5$) zu

Ansatz 2: Vergleich GOE \rightarrow GUE

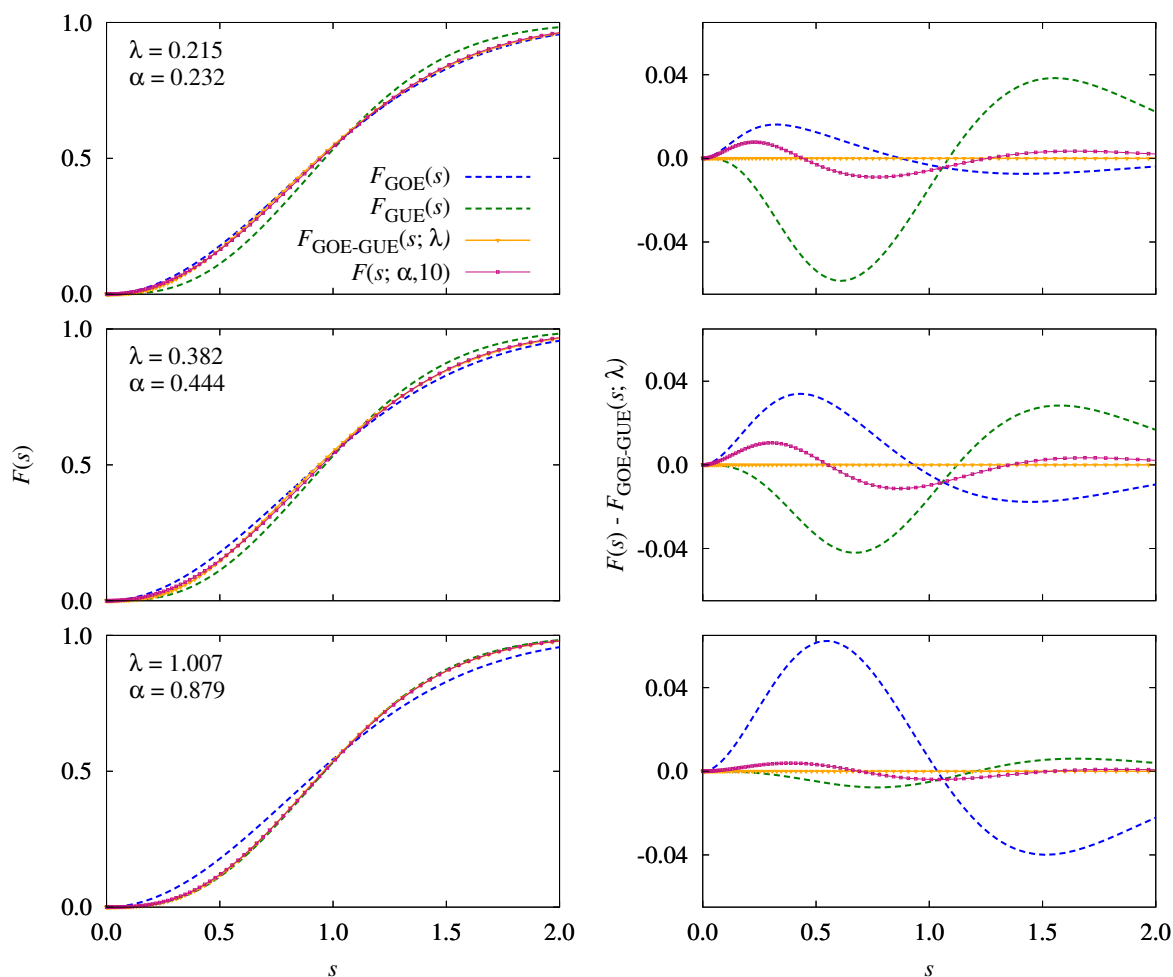


Abbildung 3.7.: Für den Übergang GOE \rightarrow GUE sind in der linken Spalte für drei verschiedene Werte α die verallgemeinerte Funktion $F(s; \alpha, 10)$, die zugehörige analytische Funktion $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda')$ und die kumulativen Wahrscheinlichkeiten der GOE- und GUE-Verteilung abgebildet. Um $F(s; \alpha, 10)$ besser mit $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda')$ vergleichen zu können, ist in der rechten Spalte jeweils die Differenz zu $F_{\text{GOE-GUE}}(s; \lambda')$ dargestellt. Für $\alpha = 0,444$ ist $\Delta(\alpha)$ maximal (vgl. Abbildung 3.6).

3. Chaos in quantenmechanischen Systemen

sehr wie GOE verhält. Wir sehen auch, dass die Abweichung abnimmt, wenn wir uns den Grenzfällen $\alpha = 0$ und $\alpha = 1$ nähern.

Ein Vergleich von Ansatz 2 mit Ansatz 1 zeigt, dass für den Übergang GOE→GUE die verallgemeinerten Funktionen ähnlich stark von der analytischen Funktion abweichen, während die verallgemeinerte Brody-Verteilung diesen Übergang noch minimal besser beschreibt. Allerdings lässt sich bei den beiden anderen Übergängen natürlich ein deutlicher Unterschied feststellen. Während $F(s; \alpha, \beta)$ deutlich größere Fehler aufweist als beim Übergang GOE→GOE, ist $F(s; \alpha, \lambda)$ nach Definition identisch mit den analytischen Übergangsfunktionen.

4. Rydberg-Exzitonen in Cu_2O

Vor Kurzem konnte gezeigt werden [2], dass Rydberg-Exzitonen in Kupfer(I)-oxid mit einem extern angelegten Magnetfeld ein System darstellen, in welchem sowohl alle drei in Abschnitt 3.5 hergeleiteten Nächste-Nachbar-Verteilungen als auch die in Kapitel 3.6 besprochenen Übergänge zwischen diesen, beobachtet werden können. Viele quantenmechanische physikalische Systeme, die klassisch chaotisches Verhalten zeigen, sind zeitumkehrinvariant oder besitzen wenigstens eine antiunitäre Symmetrie und zeigen daher GOE-Statistik. Bekannte Beispiele sind Kernspektren [8] oder das Wasserstoffatom im externen Magnetfeld [5], in welchen der Übergang von P nach GOE bei zunehmender Magnetfeldstärke beobachtet werden kann. Systeme, in welchen alle antiunitären Symmetrien gebrochen sind und daher GUE-Verhalten zeigen, sind deutlich schwerer zu finden und meist recht exotisch. (Als Beispiele wären hier „kicked rotator“ oder „kicked top“ zu nennen [10].) Noch rarer sind Systeme, in denen alle drei Übergänge beobachtet werden können. Bisher gibt es nur drei physikalische Systeme, in welchen dies möglich ist: der „kicked top“, das „Anderson Modell“ [16] und Rydberg-Exzitonen in einem extern angelegten Magnetfeld. Allerdings ist der „kicked top“ ein zeitabhängiges System und kann daher nicht innerhalb der Zufallsmatrixtheorie behandelt werden und die Parameter des „Anderson Modell“ sind schlecht experimentell realisierbar. Rydberg-Exzitonen dagegen sind ein realistisches physikalisches System, dessen die Übergänge bestimmenden Systemparameter im Experiment gut umgesetzt werden können und daher besonders interessant sind. Wir wollen im Folgenden nun das System näher betrachten, um zu erklären, wie die Übergänge zustande kommen.

4.1. Grundlagen

Exzitonen sind gebundene Zustände zwischen einem Elektron aus dem Leitungsband und einem positiv geladenem Loch des Valenzbandes. Abhängig von deren Abstand wird in Mott-Wannier- und Frenkel-Exzitonen unterschieden [17]. Ersteres sind Exzitonen bei denen der Abstand zwischen Elektron und Loch groß im Vergleich zum Gitterabstand ist.

Da zwischen Loch und Elektron eine abgeschirmte Coulomb-Kraft wirkt, werden Exzitonen häufig analog zum Wasserstoffatom behandelt. Diese Analogie ist allerdings nur in Halbleitern, deren Valenz- und Leitungsbänder nicht entartet, isotrop und parabolisch sind, zulässig. Das Valenzband von Kristallen mit Diamant- und Zinkblendenstruktur ist am Γ -Punkt (im Zentrum der ersten Brillouinzone) jedoch entartet. Dies ist auch bei dem Halbleiter Kupfer(I)-oxid (Cu_2O) der Fall, welcher in einer kubischen Struktur

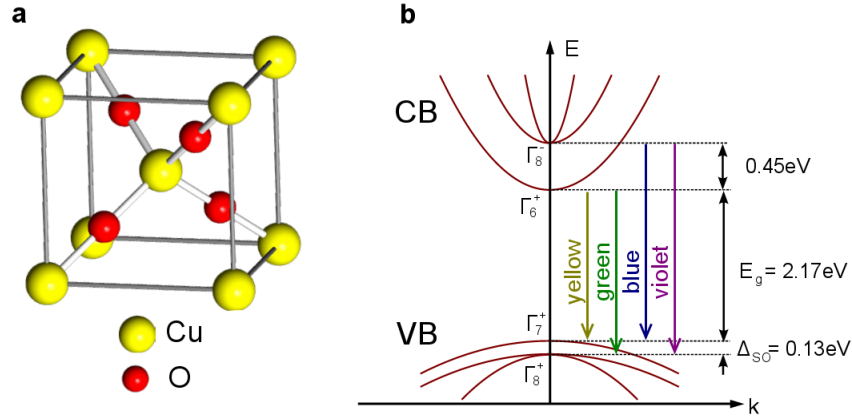


Abbildung 4.1.: (a) Die Elementarzelle von Cu_2O ist aus zwei Gittern aus Sauerstoff- bzw. Kupferatomen aufgebaut, welche gegeneinander gedreht sind. Während die Sauerstoffatome (rot) ein kubisch raumzentriertes Gitter (bcc) bilden, sind die Kupferatome (gelb) in einem kubisch flächenzentriertem Gitter (fcc) angeordnet. (b) Schematische Darstellung der elektronischen Bandstruktur von Cu_2O um den Γ -Punkt. Die Grafik ist entnommen aus [19]

kristallisiert (vgl. Abbildung 4.1 (a)).

In diesem direkten Halbleiter wurden 1952 erstmals Exzitonen gefunden. 2014 erlangte Cu_2O neue Aufmerksamkeit als Wissenschaftler aus Dortmund [18] aufgrund der verhältnismäßig hohen Bindungsenergie von 86meV der Exzitonen, das Absorptionsspektrum der gelben Exzitonsreihe bis zu einer Hauptquantenzahl von $n = 25$ beobachten konnten. Die Bindungsenergie $E_B = -\frac{R_y}{n^2}$ (mit der Rydberg-Energie R_y) von Exzitonen beträgt in den meisten Halbleitern im Grundzustand ($n = 1$) wenige meV. Die Bindungsenergien angeregter Exzitonen ($n > 1$) liegen dann schnell so nahe beieinander, dass sie nicht mehr aufgelöst und unterschieden werden können.

Die Ausdehnung des Exzitons lässt sich abhängig von n berechnen. Für $n = 25$ erhalten wir eine Ausdehnung von mehr als $2\mu\text{m}$, weswegen hier auch von Rydberg-Exzitonen gesprochen wird.

Wir wollen nun den Halitonoperator betrachten, durch welchen ein Exziton der gelben Exzitonsreihe beschrieben wird. Ohne extern angelegte Felder lautet dieser:

$$H = E_g + V(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h) + H_e(\mathbf{p}_e) + H_h(\mathbf{p}_h). \quad (4.1)$$

$E_g = 2.17\text{eV}$ ist die Energie der Bandlücke. Hierbei handelt es sich nur um eine Nullpunktverschiebung und wird daher im Folgenden nicht weiter berücksichtigt.

$$V(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \quad (4.2)$$

ist die Coulombwechselwirkung zwischen Elektron und Loch, welche durch die dielektrische Konstante ε abgeschirmt wird und H_e ist die kinetische Energie des Elektrons. Das unterste Leitungsband (vgl. Abb. 4.1 (b)) stammt von den 4s-Elektronen des Kupfers (Γ_6^+ -Symmetrie) und ist in der Nähe des Γ -Punkts näherungsweise parabolisch. Wir können die kinetische Energie daher schreiben als

$$H_e = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e^2}, \quad (4.3)$$

mit der effektiven Elektronenmasse m_e . Aufgrund der kubischen Symmetrie von Cu_2O ist das 3-fach entartete Valenzband deformiert und kann nicht mehr parabolisch angenähert werden. Der Ausdruck [20] der kinetischen Energie des Lochs $H_h(\mathbf{p}_e)$ ist daher deutlich komplexer:

$$\begin{aligned} H_h(\mathbf{p}_e) = & H_{\text{SO}} + (1/2\hbar^2 m_0) \{ \hbar^2(\gamma_1 + 4\gamma_2) \mathbf{p}_h^2 + 2(\eta_1 + 2\eta_2) \mathbf{p}_h^2 (\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h) \\ & - 6\gamma_2 (p_{h1}^2 \mathbf{I}_1^2 + \text{c.p.}) - 12\eta_2 (p_{h1}^2 \mathbf{I}_1 \mathbf{S}_{h1} + \text{c.p.}) \\ & - 12\gamma_3 (\{p_{h1}, p_{h2}\} \{\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2\} + \text{c.p.}) \\ & - 12\eta_3 (\{p_{h1}, p_{h2}\} (\mathbf{I}_1 \mathbf{S}_{h2} + \mathbf{I}_2 \mathbf{S}_{h1}) + \text{c.p.}) \}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dabei ist $\{a, b\} = \frac{1}{2}(ab + ba)$ und c.p. steht für zyklische Permutation. \mathbf{I}_j und \mathbf{S}_{hj} sind die drei Spinmatrizen des Quasispins $I = 1$ bzw. des Lochspins $S_h = 1/2$:

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h = \sum_{j=1}^3 \mathbf{I}_j \mathbf{S}_{hj}. \quad (4.5)$$

Die Spin-Bahn-Kopplung H_{SO} zwischen Quasispin I und Lochspin S_h führt zu einer Aufspaltung des 6-fach¹ entarteten Valenzbandes in ein oberes 2-fach entartetes Band (Γ_7^+ -Symmetrie) und ein unteres 4-fach entartetes Band (Γ_8^+ -Symmetrie) mit einer Energiedifferenz von $\Delta_{\text{SO}} = 0.13 \text{ eV}$ (vgl. Abbildung 4.1 (b)). Da H_{SO} allerdings sphärische Symmetrie besitzt und daher unerheblich für die folgende Symmetriebetrachtung ist, muss sie nicht berücksichtigt werden.

m_0 bezeichnet in Gleichung (4.4) die freie Elektronenmasse und die Parameter γ_i die Luttinger-Parameter. Sie beschreiben genauso wie die η_i das Verhalten des Lochs in der Nähe des Γ -Punktes (vgl. [21]). γ_1 und η_1 bestimmen die mittlere effektive Masse des Lochs, während die anderen Parameter die Aufspaltung der Bänder und deren Verzerrung durch die kubische Symmetrie des Kristalls beschreiben. Die Parameter η_i sind dabei deutlich kleiner als die Luttinger-Parameter. Gleichung (4.4) kann nun in einen Beitrag mit sphärischer Symmetrie und Koeffizient μ' und einen mit kubischer Symmetrie und Koeffizient δ' aufgeteilt werden. Beide Koeffizienten lassen sich in Abhängigkeit der Luttinger-Parameter schreiben, wobei nur

$$\delta' = \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{\gamma_1'} \quad \text{mit} \quad \gamma_1' = \gamma_1 + \frac{m_0}{m} \quad (4.6)$$

¹Die zusätzliche 3-fache Entartung beruht auf dem Lochspin, welcher hier hinzugezählt wird.

für uns relevant ist.

Befindet sich das Exziton in einem extern angelegten Magnetfeld, erhalten wir durch minimale Substitution

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (4.7)$$

mit der Ladung $q = \pm e$ und nach Einführen von Relativ- und Schwerpunktskoordinaten (wobei der Schwerpunkt im Ursprung ruhen soll)

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h, \quad \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_e - \mathbf{p}_h), \quad (4.8)$$

den Hamiltonoperator [2]

$$H = V(\mathbf{r}) + H_e(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})) + H_h(-\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})). \quad (4.9)$$

Da wir konstante Magnetfelder betrachten ist das Vektorpotential gegeben durch

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}), \quad (4.10)$$

mit dem Magnetfeld

$$B(\varphi, \theta) = B \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \vartheta \\ \sin \varphi \sin \vartheta \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Wir haben hier die Energie von Elektron- und Lochspin im Magnetfeld nicht berücksichtigt, da diese invariant unter der in Abschnitt 4.2 folgenden Symmetriebetrachtung ist [2]. Bevor wir die Schrödingergleichung lösen wird das Koordinatensystem gegebenenfalls so rotiert, dass die Quantisierungsachse in Magnetfeldrichtung liegt.

Zum Lösen der Schrödingergleichung wird für die Wellenfunktion des Exzitons der Ansatz

$$|\Psi\rangle = \sum_{NLGM_G} c_{NLGM_G} |\Pi\rangle, \quad (4.12)$$

$$|\Pi\rangle = |N, L, I, G, M_G\rangle, \quad (4.13)$$

mit komplexen Koeffizienten c gewählt. Die radiale Quantenzahl N hängt dabei folgendermaßen mit der Hauptquantenzahl n zusammen:

$$N = n - L - 1. \quad (4.14)$$

Da der Drehimpuls $L = 0, \dots, n - 1$ des Exzitons und der Quasispin I gekoppelt sind, wird der Gesamtimpuls

$$G = L + I, \quad (4.15)$$

mit der z -Komponente $M_G = -G, \dots, G$ als neue Quantenzahl eingeführt.

Der Ansatz (4.12), (4.13) wir nun in die zeitunabhängige Schrödingergleichung $\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ eingesetzt:

$$\sum_{NLGM_G} c_{NLGM_G} \hat{H} |\Pi\rangle = \sum_{NLGM_G} E c_{NLGM_G} |\Pi\rangle. \quad (4.16)$$

Wir multiplizieren nun Gl. (4.16) von links mit dem Vektor $\langle \Pi' |$

$$\sum_{NLGM_G} c_{NLGM_G} \langle \Pi' | \hat{H} |\Pi\rangle = \sum_{NLGM_G} E c_{NLGM_G} \langle \Pi' | \Pi\rangle. \quad (4.17)$$

$\langle \Pi' | \hat{H} |\Pi\rangle$ sind die Matrixelemente der Matrix \hat{H} und $\langle \Pi' | \Pi\rangle$ definieren die Matrixelemente der Matrix \hat{M} . Damit lässt sich die Schrödingergleichung in der Form

$$\hat{D} \mathbf{c} = E \hat{M} \mathbf{c} \quad (4.18)$$

schreiben. Der Vektor \mathbf{c} enthält die Koeffizienten c_{NLGM_G} . Gleichung (4.18) beschreibt ein verallgemeinertes Eigenwertproblem, welches sich mit einer geeigneten LAPACK-Routine lösen lässt.

Auch wenn die Basis unendlichdimensional ist, ist numerisch die Dimension der Matrizen und damit die Dimension der Basis beschränkt. Es werden daher die beiden Quantenzahlen n_{\max} und G_{\max} , mit

$$n = N + L + 1 \leq n_{\max}, \quad (4.19)$$

$$G \leq G_{\max} \quad (4.20)$$

vorgegeben, welche so gewählt werden, dass möglichst viele Eigenwerte konvergieren, der Rechenaufwand aber noch tragbar ist.

In konstanten externen Feldern besitzt der klassische Hamiltonoperator eine Skalierungseigenschaft [22], sodass die Abhängigkeit von den zwei Parametern Energie E und Magnetfeldstärke B auf einen Parameter, die skalierte Energie \hat{E} reduziert werden kann. Dazu wird folgende Substitution

$$\hat{\mathbf{r}} = \gamma^{2/3} \mathbf{r}, \quad \hat{\mathbf{p}} = \gamma^{-1/3} \mathbf{p}, \quad \hat{E} = \gamma^{-2/3} E, \quad (4.21)$$

mit dem Skalierungsfaktor $\gamma = \frac{B}{B_0}$ durchgeführt. Diese Skalierung lässt sich jedoch nicht vollständig auf die Quantenmechanik übertragen, da sie die Kommutatorrelation $[r_i, p_i] = i\hbar \delta_{ij}$ verletzen würde. Allerdings lässt sich auch quantenmechanisch die skalierte Energie einführen, indem nur

$$\hat{\mathbf{p}} = \gamma^{-1/3} \mathbf{p}, \quad \hat{E} = \gamma^{-2/3} E \quad (4.22)$$

substituiert wird, mit $\gamma = \frac{B}{B_0}$ und $B_0 = \frac{2.3505 \times 10^5 \text{ T}}{\gamma_1^2 \epsilon^2}$.

4.2. Beobachtbare Übergänge

Wir wollen nun diskutieren, wie die Systemparameter zu wählen sind, damit die in Abschnitt 3.6 besprochenen Übergänge beobachtet werden können.

Für $\gamma_2 = \gamma_3 = \delta' = 0$ entspricht der Hamiltonoperator des Exzitons nach Transformation auf Hartree-Einheiten für Exzitonen dem des Wasserstoffatoms im externen Magnetfeld. In diesem Fall ist noch eine antiunitäre Symmetrie erhalten, die Zeitumkehr mit anschließender Spiegelung an einer Ebene senkrecht zum Magnetfeld. Wir erhalten eine GOE-Verteilung, wenn wir die Abstände nächster Nachbarn betrachten, wie wir sie auch beim Wasserstoffatom im externen Magnetfeld beobachten können.

Für $\delta' \neq 0$ besitzt der Hamiltonoperator auch kubische Symmetrie. In diesem Fall bleibt die gerade beschriebene antiunitäre Symmetrie nur dann erhalten, wenn das Magnetfeld entlang einer der neun Symmetrieebenen des Kristalls ausgerichtet ist. In allen anderen Fällen ist auch die letzte antiunitäre Symmetrie gebrochen und die Nächste-Nachbar-Verteilung ist die eines Gaußschen unitären Ensembles.

Wir erhalten demnach einen Übergang von GOE nach GUE, wenn wir bei konstanter Magnetfeldstärke und $\delta' = \text{const.} \neq 0$ die Magnetfeldrichtung ändern, beispielsweise für $\vartheta = \text{const.}$, φ passend variieren. Ergebnisse hierzu sind in [2] zu finden. Alternativ kann auch φ konstant gehalten und der Anteil der kubischen Symmetrie des Hamiltonoperators erhöht, das heißt δ' variiert werden (vergleiche hierzu [23]).

Der Übergang von P nach GUE lässt sich beobachten, wenn wir die Richtung des Magnetfeldes konstant so wählen, dass sie maximal nicht in der Symmetrieebene, das heißt zwischen zwei Symmetrieebenen des Kristalls, liegt. $\delta' = -0,15$ sorgt für die kubische Symmetrie. Nun wird die skalierte Energie variiert. Für niedrige Energien ($\hat{E} \approx -0,8$) ist kein chaotisches Verhalten beobachtbar, die Nächste-Nachbar-Verteilung ist poissonverteilt. Mit ansteigender skaliertes Energie lässt sich ein Übergang zur GUE-Verteilung beobachten, welcher bei $\hat{E} \approx -0,3$ etwa abgeschlossen ist.

Schließlich wollen wir noch den Übergang von P nach GOE besprechen. Dieser lässt sich beobachten, wenn $\delta' = 0$ gilt und die skalierte Energie variiert wird. Für kleine Energien erhalten wir die Poisson-Verteilung, für größere Energien erfolgt der Übergang Richtung GOE. Dieser Übergang kann, wie oben besprochen, auch im Wasserstoffatom beobachtet werden.

Im nächsten Kapitel wollen wir nun die Ansätze aus Abschnitt 3.7 nutzen um, abhängig von den zwei Systemparametern δ' und \hat{E} , die drei Übergänge zwischen den Grenzfällen P, GOE und GUE, wie auch beliebige Übergänge in unserem System aus Rydberg-Exzitonen in Cu_2O bei konstantem extern angelegtem Magnetfeld zu beschreiben.

5. Beliebige Übergänge zwischen P, GOE und GUE in Cu_2O

In diesem Kapitel sollen die verallgemeinerten Übergangsfunktionen (3.130) und (3.135) durch Vergleich mit Nächsten-Nachbar-Verteilungen der numerischen Spektren des physikalischen Systems aus Kapitel 4 getestet werden.

Dazu werden die Eigenwerte des Hamiltonoperators des Exzitons durch Lösen des verallgemeinerten Eigenwertproblems (4.18) für den Parameter δ' zwischen $-0,02$ und $-0,16$ (in Schritten von $0,02$) und die skalierte Energie \hat{E} von $-0,3$ bis $-0,9$ (in Schritten von $0,1$) bestimmt. Nach Kapitel 4 erwarten wir mit steigender skaliertes Energie von $-0,9$ bis $-0,3$ (das heißt mit zunehmender Magnetfeldstärke) einen Übergang von nicht chaotischem (bzw. klassisch regulärem) zu chaotischem Verhalten, das heißt von Poisson- zu GOE- oder GUE-Statistik. Mit zunehmendem Einfluss der kubischen Symmetrie des Valenzbandes, das heißt mit größer werdendem $|\delta'|$ wird die letzte verbleibende antiunitäre Symmetrie im System gebrochen und wir erwarten einen Übergang von GOE nach GUE. Die Variation beider Systemparameter lässt uns beliebige Übergänge beobachten.

Aus Konvergenzgründen werden bei der Berechnung der Nächsten-Nachbar-Verteilung nur Energieniveaus zwischen $E_{\min} \approx -0.8 \text{ meV}$ und $E_{\max} \approx -1.9 \text{ meV}$ berücksichtigt, was je nach Parameterpaar (δ', \hat{E}) etwa $400 - 600$ Energieniveaus entspricht. Da die Anzahl nicht sehr groß ist, wird die kumulative Wahrscheinlichkeit aus Gleichung (3.132) berechnet, um Fluktuationen zu minimieren.

Wir erhalten daher 56 Parameterpaare (δ', \hat{E}) , mit deren Spektren die verallgemeinerten Übergangsfunktionen verglichen werden. Dazu werden die Funktionen $F(s; \alpha, \beta)$ bzw. $F(s; \alpha, \lambda)$ an die kumulativen Wahrscheinlichkeiten, welche aus den numerischen Spektren berechnet wurden, gefittet. Die Parameter α, β bzw. α, λ werden über die minimale quadratische Abweichung bestimmt (vgl. Abschnitt 3.7).

5.1. Vergleich der beiden verallgemeinerten Funktionen

Beim Vergleich der verallgemeinerten Übergangsfunktionen $F(s; \alpha, \beta)$ und $F(s; \alpha, \lambda)$ mit den analytischen Übergangsfunktionen in Abschnitt 3.7 hat sich schon gezeigt, dass die analytischen Funktionen von $F(s; \alpha, \lambda)$ besser wiedergegeben werden. Auch die kumulativen Wahrscheinlichkeiten der numerisch berechneten Exzitonspektren werden durch den zweiten Ansatz besser beschrieben.

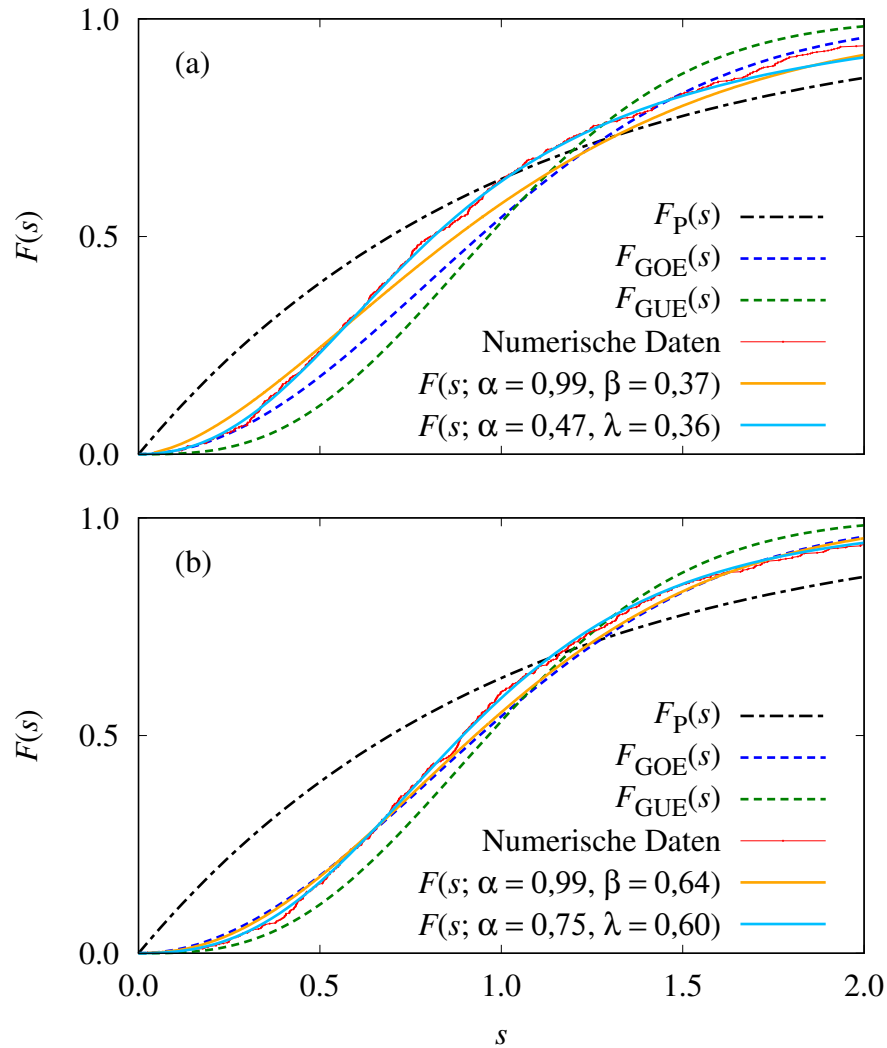


Abbildung 5.1.: Die kumulative Wahrscheinlichkeit des numerischen Spektrums für (a) $\hat{E} = -0,7, \delta' = -0,06$ und (b) $\hat{E} = -0,6, \delta' = -0,1$ ist in rot dargestellt. An diese werden die verallgemeinerten Übergangsfunktionen $F(s; \alpha, \beta)$ und $F(s; \alpha, \lambda)$ gefittet, mit den Fitparametern (a) $\alpha = 0,99, \beta = 0,37$ für $F(s; \alpha, \beta)$; $\alpha = 0,47, \beta = 0,36$ für $F(s; \alpha, \lambda)$ und (b) $\alpha = 0,99, \beta = 0,64$ für $F(s; \alpha, \beta)$; $\alpha = 0,75, \beta = 0,60$ für $F(s; \alpha, \lambda)$. Außerdem sind die kumulativen Wahrscheinlichkeiten $F_P(s), F_{GOE}(s)$ und $F_{GUE}(s)$ eingezeichnet.

Abbildung 5.1 (a) und 5.1 (b) zeigen beispielhaft für zwei numerische Spektren die berechnete kumulative Wahrscheinlichkeit, die daran gefitteten verallgemeinerten Über-

gangsfunktionen $F(s; \alpha, \beta)$ und $F(s; \alpha, \lambda)$, sowie die kumulative Wahrscheinlichkeit der drei Grenzverteilungen $F_P(s)$, $F_{\text{GOE}}(s)$ und $F_{\text{GUE}}(s)$.

Das numerische Spektrum in Abbildung 5.1 (a) ergibt sich aus dem verallgemeinerten Eigenwertproblem mit $\hat{E} = -0,7$ und $\delta' = -0,06$. Der Fit liefert uns für $F(s; \alpha, \beta)$ die Parameter $\alpha = 0,99$ und $\beta = 0,37$. Für $F(s; \alpha, \lambda)$ erhalten wir $\alpha = 0,47$ und $\lambda = 0,36$. Es ist deutlich zu erkennen, dass letztere verallgemeinerte Übergangsfunktion die numerischen Daten besser wiedergibt.

Auch in Abbildung 5.1 (b) ist nach etwas genauerem Hinsehen ein deutlicher Unterschied zwischen den beiden Fitfunktionen festzustellen. Hier wurde Gleichung (4.18) für $\hat{E} = -0,6$ und $\delta' = -0,1$ gelöst. Die skalierte Energie liegt demnach gerade zwischen regulärem und chaotischem Verhalten, was uns den großen Einfluss der kubischen Struktur des Valenzbandes zeigt, da das Spektrum in Abbildung 5.1 (b) mehrheitlich chaotisches Verhalten zeigt. Die kumulative Verteilung der numerischen Daten liegt Nahe bei $F_{\text{GOE}}(s)$ und $F_{\text{GUE}}(s)$. Die erste Übergangsfunktion $F(s; \alpha, \beta)$ mit ihren Fitparametern $\alpha = 0,99$ und $\beta = 0,64$ zeigt zu wenig des GUE-Verhaltens und entspricht nahezu $F_{\text{GOE}}(s)$.

Wir entdecken hier ein weiteres Problem dieser verallgemeinerten Übergangsfunktion. Während die Fitparameter der zweiten verallgemeinerten Übergangsfunktion mit $\alpha = 0,75$ und $\lambda = 0,60$ nach (3.138) – (3.140) den Zustand gut widerspiegeln¹ und sich auch wie zu erwarten deutlich von den Fitparametern aus Abbildung 5.1 (a) unterscheiden, ist für $F(s; \alpha, \beta)$ beides Mal $\alpha = 0,99$. Auch für alle anderen numerischen Spektren erhalten wir aus dem Fit $\alpha \approx 1$.

Schauen wir uns hierzu noch einmal den Ansatz der ersten verallgemeinerten Übergangsfunktion aus Gleichung (3.119) an:

$$P(s; \alpha, \beta) \propto s^{\beta(\alpha+1)} e^{-f_3(\alpha, \beta) \cdot s^{\beta+1}}.$$

Für $\alpha = 1$ erhalten wir

$$P(s; 1, \beta) \propto s^{2\beta} e^{-f_3(1, \beta) \cdot s^{\beta+1}} \quad (5.1)$$

Und damit für $\beta \approx \frac{1}{2}$

$$P(s) \propto s e^{-f_3 \cdot s^{3/2}}, \quad (5.2)$$

was für kleine s der Wignerverteilung (3.78)

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2} \quad (5.3)$$

der GOE-Statistik entspricht. Aus diesen Gründen entscheiden wir uns gegen $F(s; \alpha, \beta)$, welche wir im Folgenden nicht weiter betrachten wollen, und für $F(s; \alpha, \lambda)$ als verallgemeinerte Übergangsfunktion.

¹ α liegt mit 0,47 zwischen GUE und GOE und $\lambda = 0,6$ zeigt die Tendenz zu chaotischem Verhalten.

Es sei hier noch anzumerken, dass durch Einführen eines weiteren Parameters in Ansatz (3.135)

$$P(s; \alpha, \lambda_1, \lambda_2) = \alpha P_{P-GUE}(s; \lambda_1) + (1 - \alpha) P_{P-GOE}(s; \lambda_2) \quad (5.4)$$

keine bemerkbare Verbesserung des Fits erzielt werden konnte, weswegen dieser Ansatz nicht weiter verfolgt wurde.

5.2. Diskussion der Übergänge

Wir wollen nun die verschiedenen Übergänge diskutieren. Dazu ermitteln wir zu jedem numerischen Spektrum die Fitparameter α und λ unserer verallgemeinerten Übergangsfunktion $P(s; \alpha, \lambda)$. In Abbildung 5.2 und 5.3 werden jeweils einer der Systemparameter δ' und \hat{E} konstant gehalten, während der andere variiert wird. Wir sehen also, wie sich die Fitparameter in Abhängigkeit des Systemparameters verändern. Da wir beispielsweise für $\lambda = 0$ unabhängig von α immer eine Poisson-Verteilung erhalten (vgl. Gl. (3.122) und (3.123)) und der Parameter α somit nicht immer eindeutig ist, gewichten wir ihn in den Abbildungen 5.2 und 5.3 mit λ , wodurch wir links unten, unterhalb der grünen Winkelhalbierenden Poisson-Statistik erhalten. Die rechte untere Ecke des Dreiecks, unterhalb der Winkelhalbierenden entspricht GOE-Statistik und die obere Ecke ist GUE-Statistik.

In Abbildung 5.2 (a) mit $\delta' = -0,02$ lässt sich für kleine skalierte Energien sehr gut Poisson-Statistik beobachten. Die Parameterpunkte befinden sich in der linken unteren Ecke des Dreiecks. Für höhere skalierte Energien erhalten wir einen leichten Übergang nach GOE, wobei λ unterhalb von 0,4 bleibt. Das Verhalten ist überwiegend regulär bis schwach chaotisch. Für $\delta' = -0,14$ (selbe Abbildung) oder $\delta' = -0,16$ (Abb. 5.2 (b)) hingegen ist λ für alle betrachteten skalierten Energien stets oberhalb von 0,4. Für $\delta' = -0,14$ und $\hat{E} = -0,4$ erhalten wir (v.a. für $s < 0,5$) weitgehend GUE-Statistik, jedoch nicht vollständig. Dazu müssten wir noch höhere skalierte Energien betrachten. Dies ist allerdings auf Grund von Konvergenzproblemen schwierig.

Für hohe skalierte Energien, aber unter Vernachlässigung der kubischen Struktur des Valenzbandes, zeigt das System GOE-Statistik. Dies ist zum Beispiel für $\delta' = -0,04$ und $\hat{E} = -0,4$ der Fall. Das GOE-Verhalten zeigt sich deutlich für kleine und große Abstände s . Übergänge von P nach GOE lassen sich gerade für $\delta' = -0,04$ in Abb. 5.2 (b) und in Abb. 5.2 (c) für $\delta' = -0,06$ gut beobachten. Die Punkte der Fitparameter verlaufen mit steigender skaliertes Energie annähernd horizontal nach rechts.

Auf der grünen Linie ist $\alpha = 1$, von links unten nach rechts oben lässt sich der Übergang von P nach GUE beobachten. Dies ist zum Beispiel schön für $\delta' = -0,12$ (Abb. 5.2 (f)) beobachtbar. Auf den Ausreißer bei $\hat{E} = -0,6$ wird im Anschluss näher eingegangen.

Allgemein lässt sich beobachten, dass, wenn der Einfluss der kubischen Struktur des Valenzbandes, d.h. $|\delta'|$ steigt, die Entwicklung der Fitparameter von einer eher horizontalen Bewegung (vgl. Abb. 5.2 (b) für $\delta' = -0,04$ und Abb. 5.2 (c) für $\delta' = -0,06$) in eine diagonale Bewegung übergeht (vgl. Abb. 5.2 (f) für $\delta' = -0,12$ und Abb. 5.2 (a) für $\delta' = -0,14$).

Wir erkennen auch, dass schon für niedrige Energien das chaotische Verhalten zunimmt, wenn die kubische Struktur berücksichtigt wird. In Abbildung 5.3 (a) steigt λ für zunehmendes $|\delta'|$. Obwohl die skalierte Energie $\hat{E} = -0,9$ sehr niedrig ist, lässt sich hier schon ein Übergang von P nach GUE beobachten.

Mit zunehmender skaliertener Energie, das heißt zunehmender Stärke des Magnetfeldes, wandern die Punkte weg von der grünen Linie in die Ebene hinein. Aus der Literatur (beispielsweise [5]) ist bekannt, dass unabhängig von der Valenzbandstruktur ein Übergang von nicht chaotischem (P) zu chaotischem Verhalten (GOE) stattfindet. In unserem Fall mischt sich die GOE-Statistik unter zunehmender Berücksichtigung der kubischen Struktur des Valenzbandes in den P-GUE-Übergang. Während wir für mittlere skalierte Energien ein Gemisch aus allen drei Statistiken erhalten, verlaufen die Punkte für große Energien annähernd vertikal. λ ist dauerhaft größer als 0,3 (vgl. Abb. 5.3 (e) und (f)) und wir beobachten den Übergang von GOE nach GUE.

In Abbildung 5.4 unten wird von jeder kumulativen Wahrscheinlichkeit $F_{\text{GOE}}(s)$ abgezogen, um die Unterschiede, vor allem für kleine s , besser erkennen zu können. In gelb ist die verallgemeinerte Übergangsfunktion mit den, mittels Fit bestimmten, Parametern $\alpha = 0,44$ und $\lambda = 0,75$ abgebildet. Für $\delta' = -0,12$ würden wir im Vergleich zu den restlichen Punkten in Abb. 5.2 (f) allerdings eher $\alpha \approx 1$ erwarten. Es sind daher zusätzlich die erweiterte Übergangsfunktion für drei weitere Parameterpaare (α, λ) abgebildet, welche nach Gleichung (3.133) eine ähnliche quadratische Abweichung besitzen. Es zeigt sich, dass $\alpha = 1,0$ und $\lambda = 0,55$ die numerischen Daten für kleine s deutlich besser beschreiben, wo die ursprünglichen Fitparameter zu sehr GOE-Statistik zeigen.

Ersichtlich werden auch die Fluktuationen des numerischen Spektrums, vor allem für mittlere s , welche hier zu einer mehrdeutigen Wahl der Fitparameter führen. Diese sind auf die recht geringe Anzahl von Energieniveaus zurückzuführen, welche zur Berechnung der kumulativen Wahrscheinlichkeit des numerischen Spektrums benutzt werden.

Andererseits verändert sich $F(s; \alpha, \lambda)$ bei kleinen Variationen von β und vor allem α nur wenig, was auch zu Fehlern führt. Unterschiede sind in der oberen Abbildung 5.4 beispielsweise kaum zu erkennen, sondern erst in der differenzierteren, unteren Abbildung.

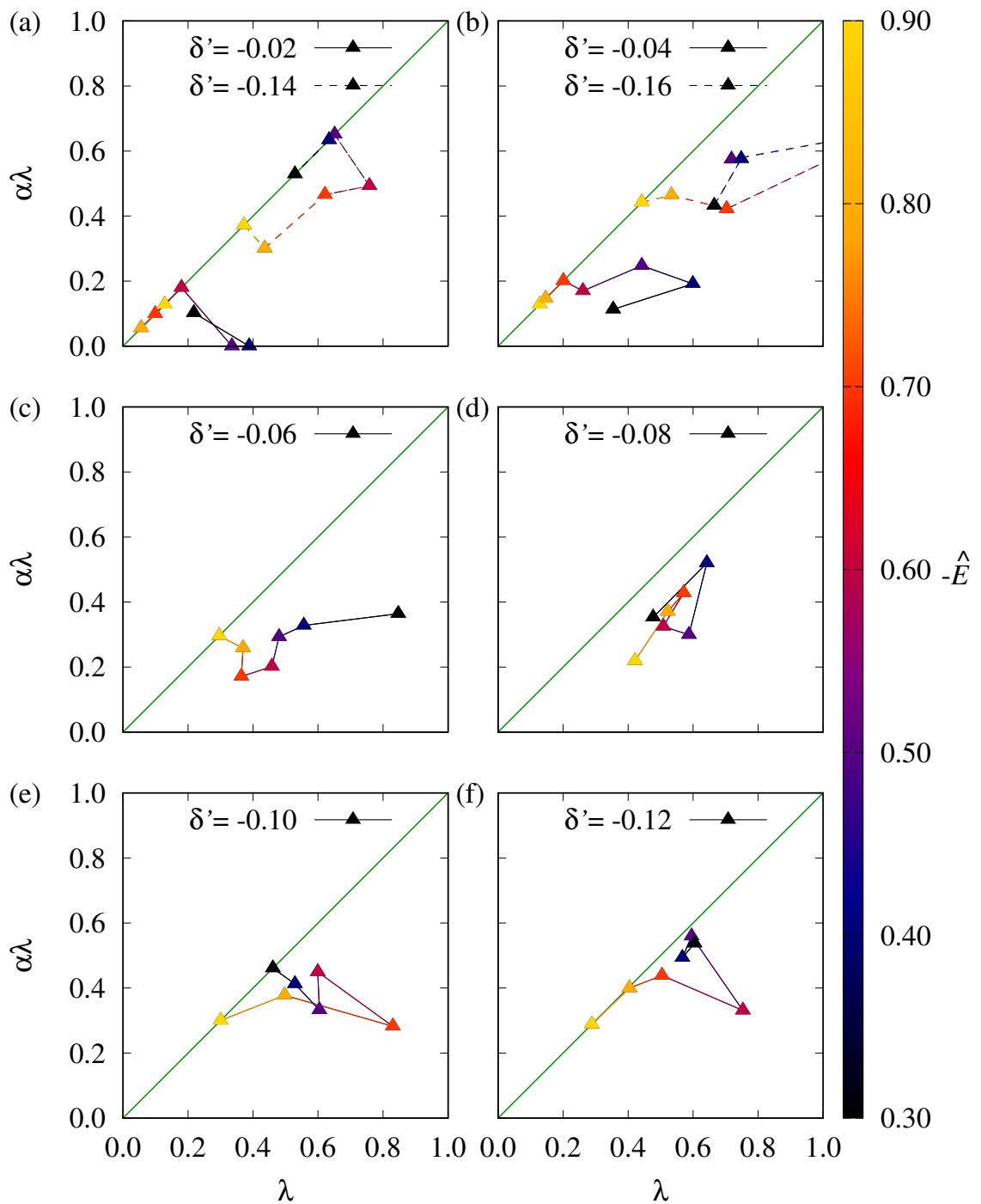


Abbildung 5.2.: Für einen konstanten Wert von δ' wird jeweils \hat{E} (Farbskala) variiert und die, über den Fit an die numerischen Daten, bestimmten Parameter $\alpha\lambda$ und λ der verallgemeinerten Übergangsfunktion aufgetragen.

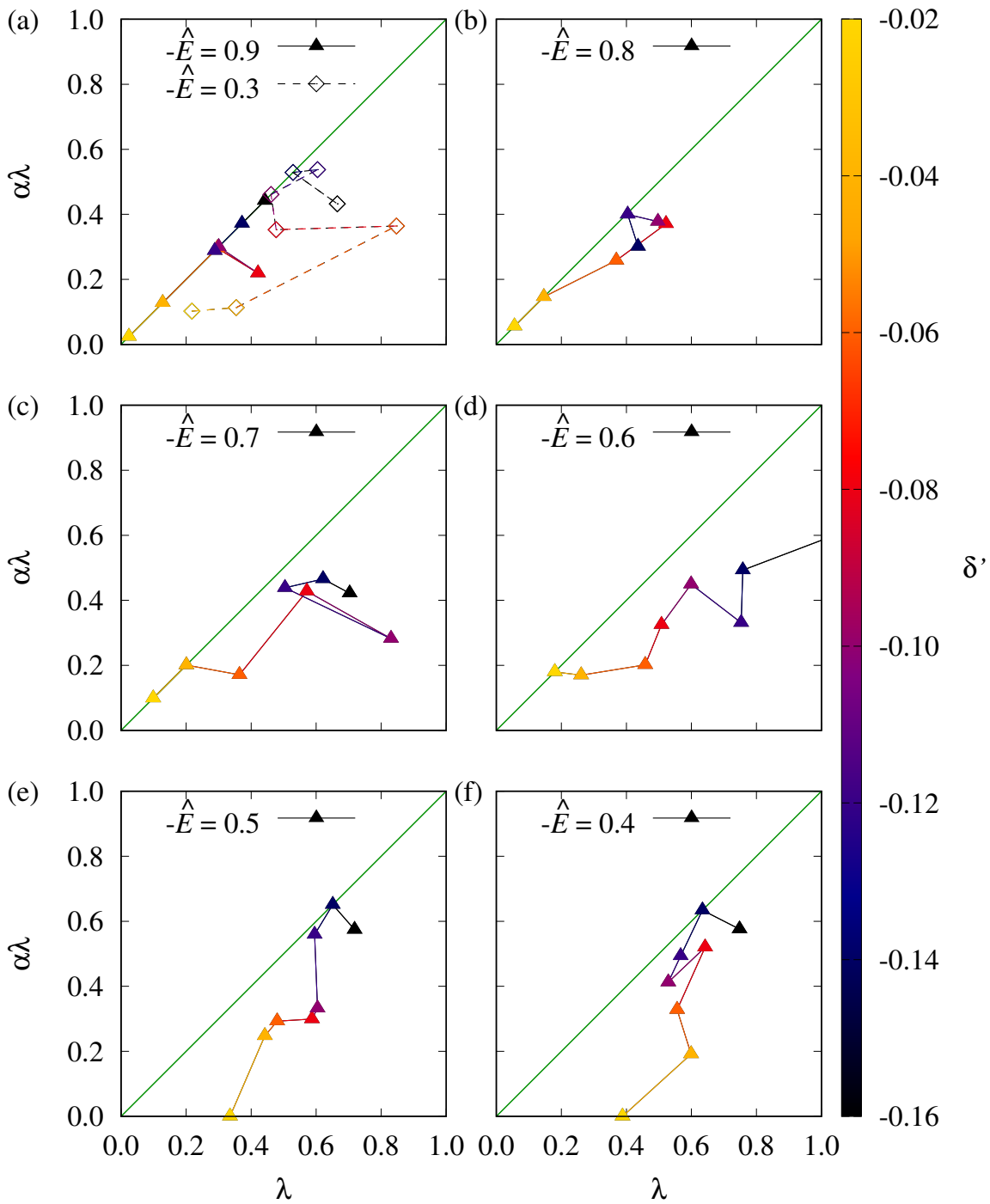


Abbildung 5.3.: Für einen konstanten Wert von \hat{E} wird jeweils δ' (Farbskala) variiert und die, über den Fit an die numerischen Daten, bestimmten Parameter $\alpha\lambda$ und λ der verallgemeinerten Übergangsfunktion aufgetragen.

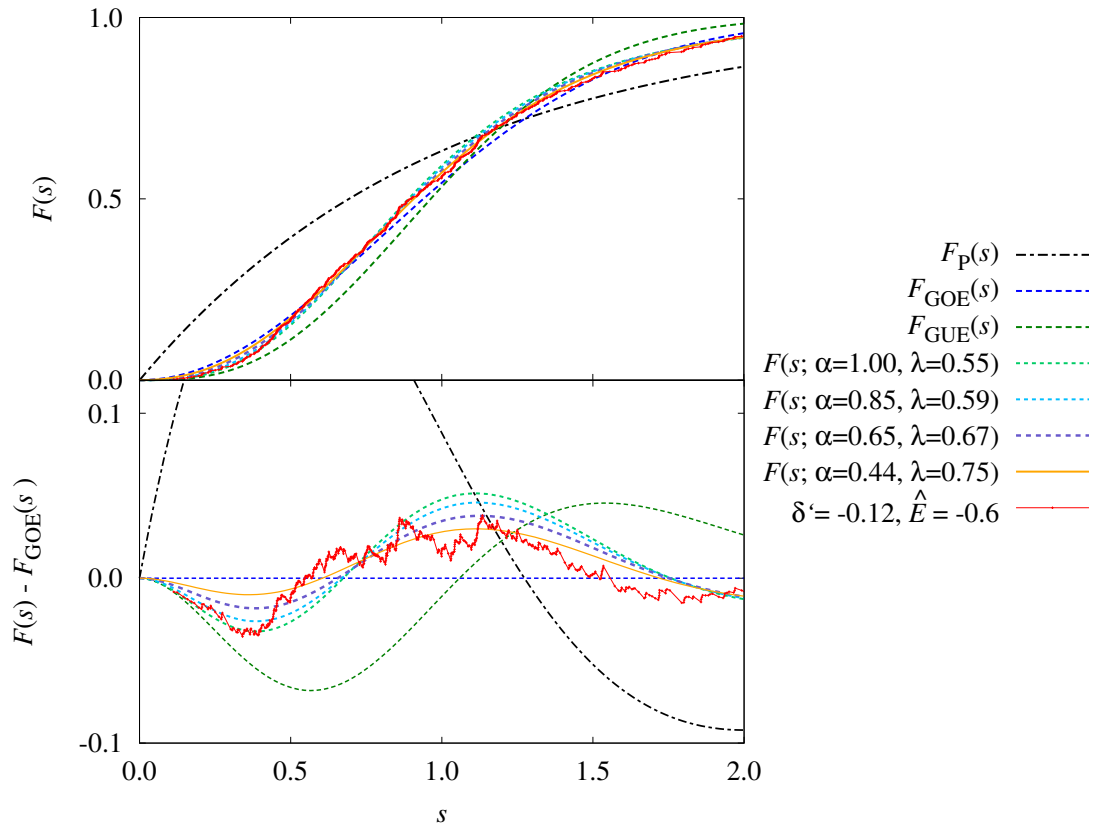


Abbildung 5.4.: Die kumulative Wahrscheinlichkeit des numerischen Spektrums für $\delta' = -0,12$ und $\hat{E} = -0,6$ ist in rot eingezeichnet. Um Unterschiede, vor allem zwischen GOE- und GUE-Statistik, besser erkennen zu können, wird im unteren Bild von jeder kumulativen Wahrscheinlichkeit $F_{\text{GOE}}(s)$ abgezogen. In gelb ist die an die numerischen Daten gefittete verallgemeinerte Übergangsfunktion abgebildet - in hellgrün, hellblau und lila drei alternative Parametersätze mit ähnlicher quadratischer Fehlerabweichung zum Vergleich. Außerdem sind die kumulativen Wahrscheinlichkeiten der Verteilungen P, GOE und GUE zur Orientierung eingezeichnet.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der Arbeit war es, eine verallgemeinerte Übergangsfunktion zu finden, welche die Übergänge $P \rightarrow \text{GOE}$, $P \rightarrow \text{GUE}$ und $\text{GOE} \rightarrow \text{GUE}$, wie auch beliebige Übergänge zwischen diesen drei Statistiken richtig beschreibt. Dazu wurden zwei Ansätze gefunden:

$$P(s; \alpha, \beta) = f_1(\alpha, \beta) s^{\beta(\alpha+1)} e^{-f_3(\alpha, \beta) \cdot s^{\beta+1}} \quad (6.1)$$

und

$$P(s; \alpha, \lambda) = \alpha P_{P-\text{GUE}}(s; \lambda) + (1 - \alpha) P_{P-\text{GOE}}(s; \lambda). \quad (6.2)$$

Die Ansätze wurden zunächst mit den analytischen Übergangsfunktionen (3.101), (3.106) und (3.111), welche sich durch störungstheoretische Überlegungen aus der Theorie der Zufallsmatrizen herleiten lassen, verglichen. Schon dort zeigte sich, dass diese durch den zweiten Ansatz besser beschrieben werden.

Die Vermutung bestätigte sich, als die verallgemeinerten Übergangsfunktionen im zweiten Schritt mit numerischen Spektren verglichen wurden. Diese lassen sich durch Lösen des verallgemeinerten Eigenwertproblems, welches sich aus der Schrödingergleichung des Rydberg-Exziton im externen Magnetfeld in Abhängigkeit der Systemparameter \hat{E} und δ' ergibt, berechnen. \hat{E} ist die skalierte Energie, die über die Magnetfeldstärke variiert wird und δ' beschreibt den Einfluss der kubischen Struktur des Valenzbandes. Diese sorgt für den Bruch der letzten antiunitären Symmetrie des Systems und ermöglicht den Übergang nach GUE.

Der Fit von Gl. (6.1) an die numerischen Daten lieferte in allen Fällen $\alpha \approx 1$, da sich (6.1) für $\beta \approx \frac{1}{2}$, für kleine s annähernd wie die Wignerverteilung (GOE) verhält. Daher können mit $\alpha \approx 1$ fälschlicherweise alle drei Statistiken dargestellt werden. Ein Verbesserungsvorschlag wäre hier, für $\alpha \in [0, 1]$, β einzuschränken auf $\beta \in [\alpha, 1]$. Da der Ansatz 2 aber allgemein eine bessere Übereinstimmung zeigte, wurde dieser für die weiteren Betrachtungen genutzt.

Während einer der Systemparameter \hat{E} oder δ' konstant gehalten wurde und der andere variiert, konnten durch Auftragen der Fitparameter die verschiedenen Übergänge $P \rightarrow \text{GOE}$, $P \rightarrow \text{GUE}$ und $\text{GOE} \rightarrow \text{GUE}$ beobachtet werden, welche sich auch, abhängig von \hat{E} und δ' , teilweise mischten. Allerdings waren diese mit einigen Fluktuationen verbunden. Da zur Berechnung der numerischen Spektren nur etwa 400 – 600 Energieniveaus dienten, könnte die Berücksichtigung einer höheren Anzahl von Energieniveaus zu einer Verbesserung führen. Dies würde allerdings eine höhere Dimension der Matrizen erfordern, was

eine steigende Rechenzeit verursacht. Eine weitere Möglichkeit wäre auch, mehr als 56 numerische Spektren auszuwerten, um eine feinere Auflösung der Übergänge zu erhalten.

Da die Ansätze für die verallgemeinerten Übergangsfunktionen nicht aus der Theorie der Zufallsmatrizen hergeleitet wurden, sondern sich aus Überlegungen ergaben, wäre auch eine mathematische Herleitung verallgemeinerter Übergangsfunktionen sehr interessant, wenn auch sehr wahrscheinlich mit hohem Aufwand verbunden.

A. Zeitumkehr-Operator

Der Zeitumkehr-Operator \hat{T} besitzt die allgemeine Form

$$T = UK \tag{A.1}$$

mit der komplexen Konjugation \hat{K} und einem passenden unitären Operator \hat{U} . Es ergibt physikalisch Sinn zu fordern, dass eine Wellenfunktion $|\psi\rangle$ bei zweimaligem Anwenden des Zeitumkehr-Operators bis auf einen eventuellen Phasenfaktor wieder in sich selbst übergeht. Das heißt

$$\hat{T}^2 = \alpha, \quad \text{mit } |\alpha| = 1 \tag{A.2}$$

Einfügen von (A.1) in (A.2) führt uns auf

$$\hat{U}\hat{K}\hat{U}\hat{K} = \hat{U}\hat{U}^*\hat{K}^2 = \hat{U}\hat{U}^* = \alpha. \tag{A.3}$$

Multiplizieren mit \hat{U}^{-1} . liefert

$$\hat{U}^* = \alpha \hat{U}^{-1} \stackrel{(3.15)}{=} \alpha \hat{U}^\dagger = \alpha (\hat{U}^*)^T. \tag{A.4}$$

Da nach Transponieren der Gleichung (A.4) auch gilt

$$(\hat{U}^*)^T = \alpha \hat{U}^*, \tag{A.5}$$

ergibt sich schließlich durch Einsetzen von (A.5) in (A.4)

$$\hat{U}^* = \alpha^2 \hat{U}^* \tag{A.6}$$

und damit $\alpha^2 = 1$, bzw. die zwei Fälle

$$T^2 = \pm 1. \tag{A.7}$$

Es lässt sich zeigen, dass $T^2 = +1$ für Teilchen ohne oder mit ganzzahligem Spin und $T^2 = -1$ für Teilchen mit halbzahligem Spin gilt.

Literaturverzeichnis

- [1] O. Bohigas, M. J. Giannoni und C. Schmit. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.* 52, 1–4 (1984).
- [2] Frank Schweiner, Jörg Main und Günter Wunner. GOE-GUE-Poisson transitions in the rearest neighbor spacing distribution of magnetoexcitons. *Phys. Rev. E* 95, 062205 (2017).
- [3] Sebastian Schierenberg, Falk Bruckmann und Tilo Wettig. Wigner surmise for mixed symmetry classes in random matrix theory. *Phys. Rev. E* 85, 061130 (2012).
- [4] Friedhelm Kuypers. *Klassische Mechanik*. John Wiley & Sons, New York, 10. Auflage (2016).
- [5] Wolfgang Schweizer. Das diamagnetische Wasserstoffatom- Ein Beispiel für Chaos in der Quantenmechanik. Habilitationsschrift (1995).
- [6] Jarmo Hietarinta. Classical versus quantum integrability. *Journal of Mathematical Physics* 25, 1833–1840 (1984).
- [7] Oriol Bohigas, Marie-Joya Giannoni und Charles Schmit. Spectral fluctuations, random matrix theories and chaotic motion. In: *Stochastic Processes in Classical and Quantum Systems - Proceedings of the 1st Ascona-Como International Conference Held in Ascona, Ticino (Switzerland), June 24–29, 1985*, herausgegeben von Sergio Albeverio, G. Casati und D. Merlini, Kapitel 11, Seiten 118–138. Springer Berlin Heidelberg, Wiesbaden (1986).
- [8] Oriol Bohigas. Random matrix theories and chaotic dynamics. In: *Les Houches Session LII (1989): Chaos et physique quantique / Chaos and Quantum Physics*, herausgegeben von Marie-Joya Giannoni, A. Voros und J. Zinn-Justin, Kapitel 2, Seiten 94–102. North Holland, Amsterdam (1991).
- [9] Hans-Jürgen Stöckmann. *Quantum Chaos - An Introduction*. Cambridge University Press, Cambridge, erste Auflage (1999).
- [10] Fritz Haake. *Quantum Signatures of Chaos*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, erste Auflage (1991).
- [11] Jörg Main. Nichtlineare Dynamik. Vorlesungsskript (2015).

- [12] Milton Abramowitz und Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions - With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Courier Corporation, New York (1964).
- [13] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, San Diego (1994).
- [14] T. A. Brody. A statistical measure for the repulsion of energy levels. *Lettere al Nuovo Cimento (1971-1985)* 7, 482–484 (1973).
- [15] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 7. Auflage (2008).
- [16] Pragya Shukla. Level statistics of Anderson model of disordered systems: connection to Brownian ensembles. *Journal of Physics: Condensed Matter* 17, 1653 (2005).
- [17] Rudolf Gross und Achim Marx. *Festkörperphysik*. Walter de Gruyter GmbH Co KG, M, zweite Auflage (2014).
- [18] T. Kazimierczuk, D. Fröhlich, S. Scheel, H. Stolz und M. Bayer. Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu₂O. *Nature* 514, 343–347 (2014). Letter.
- [19] T. Kazimierczuk, D. Fröhlich, S. Scheel, H. Stolz und M. Bayer. Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu₂O - Supplementary information. *Nature* 514, 343–347 (2014). Letter.
- [20] Frank Schweiner, Jörg Main, Günter Wunner, Marcel Freitag, Julian Heckötter, Christoph Uihlein, Marc Aßmann, Dietmar Fröhlich und Manfred Bayer. Magnetoexcitons in cuprous oxide. *Phys. Rev. B* 95, 035202 (2017).
- [21] Frank Schweiner, Jörg Main, Matthias Feldmaier, Günter Wunner und Christoph Uihlein. Impact of the valence band structure of Cu₂O on excitonic spectra. *Phys. Rev. B* 93, 195203 (2016).
- [22] H. Hasegawa, S. Adachi und H. Harada. On the scaling properties of the energy spectrum of hydrogen in a uniform magnetic field. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 16, L503 (1983).
- [23] Frank Schweiner, Jörg Main und Günter Wunner. Magnetoexcitons Break Antiunitary Symmetries. *Phys. Rev. Lett.* 118, 046401 (2017).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich gerne bei allen bedanken, die mich während der Bachelorarbeit unterstützt haben:

Zuerst bei Herrn Priv.-Doz. Dr. Holger Cartarius dafür, dass er mich ermutigte, eine theoretische Arbeit auch ohne große Programmierkenntnisse zu wagen. Ich danke Herrn Prof. Dr. Günter Wunner für die Aufnahme am 1. Institut für Theoretische Physik. Außerdem möchte ich mich ganz herzlich bei Herrn Apl. Prof. Jörg Main und Herrn Frank Schweiner für das interessante Thema, die gute Betreuung und ihre Geduld bedanken. Dabei möchte ich mich besonders bei Herrn Frank Schweiner für seine gut strukturierten und verständlich geschriebenen Programme bedanken, welche das Einarbeiten in Fortran sehr erleichterten. Des weiteren gilt mein Dank Herrn Dr. Robin Gutöhrlein in technischen Fragen und für seine Hilfe und Zeit bei Programmierproblemen.

Herzlichen Dank gilt auch meinem Bürokollegen Jonathan Luft für seine Hilfe, kurzweilige Gespräche und Kekse :) Außerdem habe ich mich über die offene Art und Hilfsbereitschaft am Institut gefreut, wodurch ich hier eine angenehme Zeit verbringen durfte.

Zu guter Letzt gilt mein Dank meiner Familie und meinem Freund für die Unterstützung und Motivation während meines bisherigen Studiums!

Erklärung

Ich versichere,

- dass ich diese Bachelorarbeit selbständig verfasst habe,
- dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
- dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist,
- und dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, den 24. August 2017

Jeanine Laturner