

Niklas Liebermann

Masterarbeit

EXZEPTIONELLE PUNKTE IN BILLARDSYSTEMEN  
UNTER VERWENDUNG DER SEMIKLASSISCHEN  
THEORIE DER PERIODISCHEN BAHNEN

25. April 2017

1. Institut für Theoretische Physik  
Universität Stuttgart

*Hauptberichter*

Prof. Dr. Jörg Main

*Mitberichter*

Prof. Dr. Rudolf Hilfer



# INHALTSVERZEICHNIS

1	Einführung	5
1.1	<i>Motivation</i>	5
1.2	<i>Aufbau der Arbeit</i>	6
2	Theoretische Grundlagen	7
2.1	<i>Theorie der periodischen Bahnen</i>	7
2.2	<i>Billardsysteme</i>	21
2.3	<i>Nichtthermitesche Quantenmechanik und exzeptionelle Punkte</i>	27
3	Methoden und Ergebnisse	35
3.1	<i>Erweitertes elliptisches Drei-Scheiben-Billard</i>	35
3.2	<i>Berechnung der Resonanzen</i>	36
3.3	<i>Exakt quantenmechanische Vergleichsrechnungen</i>	43
3.4	<i>Suche nach exzeptionellen Punkten</i>	44
3.5	<i>Untersuchung eines exzeptionellen Punktes</i>	48
4	Zusammenfassung und Ausblick	61
A	Anhang	63
A.1	<i>Numerische Bahnminimierung</i>	63
A.2	<i>Krümmungsradius einer Ellipse</i>	63
	Literaturverzeichnis	65
	Danksagung	71
	Ehrenwörtliche Erklärung	73



## EINFÜHRUNG

### 1.1 MOTIVATION

Die im Jahr 1971 erstmals veröffentlichte Gutzwiller-Spurformel ermöglicht die semiklassische Quantisierung nichtintegrabler klassischer Systeme [1–3]. Für die Berechnung der semiklassischen Zustandsdichte werden Bahndaten klassischer periodischer Bahnen verwendet. Die semiklassische Näherung der Zustandsdichte  $\rho^{\text{scd}}$  kann in einen mittleren Anteil  $\bar{\rho}$  und einen fluktuierenden Anteil  $\rho_{\text{po}}$ , der nur durch Kenntnis der periodischen Bahndaten berechnet wird, zerlegt werden. Eines der meistuntersuchten Paradigmen für die Entwicklung und Anwendung der Gutzwiller-Spurformel ist das Drei-Scheiben-Streusystem, ein so genanntes Billardsystem [4, 5]. Hierbei handelt es sich um ein offenes Quantensystem, bestehend aus drei harten Scheiben. Das Ziel im Drei-Scheiben-Billard ist die Berechnung der Eigenenergien des Systems, indem zunächst die klassischen periodischen Bahndaten bestimmt und anschließend die Gutzwiller-Spurformel ausgewertet wird. Da die Spurformel eine unendliche Summe über alle periodischen Bahnen darstellt, treten Konvergenzprobleme auf. Zur Lösung dieser Probleme wurden in der Vergangenheit verschiedene Methoden vorgestellt, unter anderem Cycle-Expansion [6], Pseudo-Orbit-Entwicklungen [7], Padé-Resummation [8], und harmonische Inversion [9].

Die metastabilen Resonanzzustände offener Quantensysteme können als Eigenwerte nichthermitescher Operatoren beschrieben werden. Sie nehmen daher komplexe Werte an. Der Realteil des Eigenwerts stellt die Energie des Zustands dar, der Imaginärteil ist die Zerfallsrate. Eine interessante Eigenschaft offener Quantensysteme ist die mögliche Existenz exzeptioneller Punkte (EPs) [10–13]. Im Gegensatz zu einfacher Entartung zweier oder mehrerer Resonanzen laufen am EP sowohl die Eigenwerte als auch die Eigenvektoren zusammen. Um EPs zu beobachten, muss das System von mindestens einem komplexwertigen oder zwei reellwertigen externen Kontrollparametern abhängen.

In früheren Veröffentlichungen wurden EPs bereits in offenen Billardsystemen – realisiert in Mikrowellenresonatoren – experimentell gefunden [14]. Zur

Beschreibung des EPs wurde dort ein effektiver Hamilton-Operator verwendet. Die in dieser Masterarbeit untersuchte Fragestellung ist, ob EPs numerisch durch semiklassische Quantisierung mittels der Gutzwiller-Spurformel aufgedeckt werden können. Hierzu wird das Drei-Scheiben-Billard als Modellsystem verwendet. Da in vorangegangenen Untersuchungen lediglich der Einfluss eines reellen Parameters – nämlich dem des Abstands  $\delta$  der Scheiben – auf das Spektrum untersucht wurde, muss das System um einen weiteren Parameter erweitert werden. Hierzu erhalten die Scheiben elliptische Form, sodass der zweite Parameter  $\epsilon$  durch die Länge der großen Halbachse gegeben ist. Diese Modifikation des Drei-Scheiben-Billards wird so vorgenommen, dass die charakteristische  $C_{3v}$ -Symmetrie des System erhalten bleibt. Als Methode zur Auswertung der Gutzwiller-Spurformel und zur Berechnung der Resonanzpositionen und -amplituden in der komplexen Ebene wird die harmonische Inversion benutzt. Dieses Vorgehen erlaubt es nicht nur das Vorliegen eines EPs durch Vertauschung zweier Resonanzen bei Umkreisung des EPs im Parameterraum nachzuweisen [10], sondern auch die Linienform der Resonanzen in der gewichteten Zustandsdichte zu untersuchen. Diese kann an einem EP eine nichtlorentzsche Form aufweisen [15].

## 1.2 AUFBAU DER ARBEIT

In Kapitel 2 werden zunächst einige theoretische Grundlagen gelegt, die im späteren Teil der Arbeit benötigt werden. Hierzu gehört eine Einführung in die semiklassische Theorie der periodischen Bahnen mit einer skizzierten Herleitung der Gutzwiller-Spurformel, gefolgt von einer Motivation zu Billardsystemen und chaotischer Dynamik in diesen mit der Vorstellung des Drei-Scheiben-Billards. Zuletzt werden die Eigenschaften offener Quantensysteme mit ihren metastabilen Eigenzuständen und exzeptionelle Punkte diskutiert.

In Kapitel 3 werden die konkret verwendeten Methoden und Ergebnisse vorgestellt. Die elliptische Erweiterung des Drei-Scheiben-Billards wird eingeführt. Anschließend wird die Gewinnung der periodischen Bahndaten und die harmonische Inversion am konkreten System beschrieben. Die sich hieraus ergebenden Ergebnisse werden anhand exakt quantenmechanischer Vergleichsrechnungen verifiziert. Im Weiteren wird ein Verfahren zum Auffinden von EPs im komplexen Spektrum des Drei-Scheiben-Billards vorgestellt. Ein mithilfe dieses Verfahrens gefundener EP wird schließlich auf seine Eigenschaften untersucht.

## THEORETISCHE GRUNDLAGEN

Im vorliegenden Kapitel wird zunächst eine kurze Einführung in die Motivation semiklassischer Theorien gegeben. Anschließend wird die *Theorie der periodischen Bahnen* zur semiklassischen Quantisierung klassischer chaotischer Systeme eingeführt und eine Herleitung der dafür zentralen *Gutzwiller-Spurformel* und ihrer Auswertungsmethoden skizziert.

Im zweiten Abschnitt soll das dieser Arbeit zugrundeliegende *Drei-Scheiben-Billardssystem* vorgestellt werden. In diesem Kontext wird kurz auf die allgemeinen Eigenschaften von Billardsystemen und ihre Verbindung zu regulärer und chaotischer Dynamik eingegangen.

Im dritten Abschnitt werden die Eigenschaften offener Quantensysteme, zu denen auch das Drei-Scheiben-Billard gehört, diskutiert. Dazu gehört besonders das Auftreten *komplexer Resonanzen*. Eng mit den komplexen Resonanzen ist das mögliche Auftreten *exzeptioneller Punkte* in offenen Quantensystemen verknüpft.

### 2.1 THEORIE DER PERIODISCHEN BAHNEN

Quantenmechanische Berechnungen von Eigenenergien und -zuständen in beliebigen Potentiallandschaften sind oftmals analytisch unmöglich und auch numerisch sehr aufwendig. Aus diesem Grund wurden semiklassische Näherungsmethoden entwickelt, die klassische Korrekturen nur bis zu einer gewissen Ordnung in  $\hbar$  entwickeln. Außerdem ist es von grundlegendem Interesse, die klassische Mechanik als effektive Theorie der Quantenmechanik im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  zu betrachten. Hier erlauben semiklassische Theorien in vielen Fällen intuitive Einsichten in die konkreten Probleme. So stellt sich beispielsweise die Frage, wie sich chaotisches Verhalten in klassischen Systemen in einer quantenmechanischen Behandlung verhält.

Die in frühen Formulierungen der Quantenmechanik verwendete Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung findet sich, genauer in der Form der Wentzel-Kramers-Brillouin-Bedingung (WKB-Bedingung), einerseits in der Einstein-Brillouin-Keller-Methode (EBK-Methode) zur semiklassischen Quantisierung klassisch integrierbarer Systeme wieder, andererseits erschlossen Betracht-

tungen des quantenmechanischen Propagators Zusammenhänge zwischen klassischen periodischen Bahnen und Spurformeln zur Berechnung von semiklassischen Zustandsdichten. So existiert für klassisch integrable Systeme die *Berry-Tabor-Spurformel*, für nichtintegrale Systeme die *Gutzwiller-Spurformel*.

Da in der vorliegenden Arbeit ein nichtintegrables System betrachtet werden soll, wird im Folgenden ein Überblick über die Herleitung der Gutzwiller-Spurformel dargestellt. Weil die Gutzwiller-Spurformel eine Summe über unendlich viele periodische Bahnen darstellt, die in der Regel divergent ist, müssen Methoden zur Auswertung gefunden werden. Die Methode der *harmonischen Inversion*, die auch im weiteren Verlauf der Arbeit Verwendung finden soll, wird nachfolgend ebenfalls diskutiert.

### 2.1.1 Gutzwiller-Spurformel

Die 1971 von Martin Gutzwiller vorgestellte *Spurformel* erlaubt es die quantenmechanischen Eigenwerte in semiklassischer Näherung in einem nichtintegrablen System allein durch Kenntnis der klassischen periodischen Bahnen zu berechnen. Im Folgenden soll die Herleitung der Gutzwiller-Spurformel ausgehend vom quantenmechanischen Propagator über die semiklassische Van-Vleck-Näherung skizziert werden.

#### ► *Quantenmechanische Zustandsdichte, greenscher Operator und Propagator*

In der Berechnung wird von der rein-quantenmechanischen Zustandsdichte

$$\rho(E) = \sum_n c_n \delta(E - E_n) \quad (2.1)$$

ausgegangen.  $c_n$  bezeichnet dabei den Entartungsgrad zur  $n$ -ten Eigenenergie  $E_n$ . Die Zustandsdichte soll nun in der Form

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\text{tr } G_E^+) \quad (2.2)$$

dargestellt werden. Wählt man  $G_E^+$  als den *greenschen Operator*

$$G_E^+ = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n + i\epsilon}, \quad (2.3)$$

so ergibt sich in der kontinuierlichen Ortsbasis

$$\begin{aligned} G_E^+(x, x') &= \sum_n \frac{\langle x|n\rangle \langle n|x'\rangle}{E - E_n + i\epsilon} \\ &= \sum_n \frac{\psi_n^*(x) \psi_n(x')}{E - E_n + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (2.4)$$



Dieser Term lässt sich als Integral über den quantenmechanischen Propagator

$$K_{\text{qm}}(x, t, x', t' = 0) = \sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(x') \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right) \quad (2.5)$$

als

$$G_E^+(x, x') = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \exp\left(\frac{-i(E + i\epsilon)t}{\hbar}\right) K_{\text{qm}}(x, t, x', t' = 0) \quad (2.6)$$

ausdrücken.

Bildet man die Spur dieses Operators, führt dies auf

$$\begin{aligned} \text{tr } G_E^+(x, x') &= \int d^3x G_E^+(x, x) \\ &= \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} \int d^3x |\psi_n(x)|^2 \\ &= \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Mit Gleichung (2.6) erhält man

$$\text{tr } G_E^+(x, x') = \sum_n \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^\infty dt \exp\left(\frac{-i(E - E_n + i\epsilon)t}{\hbar}\right). \quad (2.8)$$

Lösen des Integrals führt auf

$$\text{tr } G_E^+(x, x') = \sum_n P \frac{1}{E - E_n} - i\pi\delta(E - E_n), \quad (2.9)$$

wobei  $P$  den *Cauchy-Hauptwert* des Integrals aus Gleichung (2.8) bezeichnet. Der Imaginärteil von  $\text{tr } G_E^+(x, x')$  entspricht hierbei genau der negativen und mit  $\pi$  multiplizierten Zustandsdichte aus Gleichung (2.1).

► *Semiklassische Näherung des quantenmechanischen Propagators*

Als Ausgangspunkt für die semiklassische Näherung der Zustandsdichte aus Gleichung (2.1) wird eine Näherung des in Gleichung (2.6) einfließenden quantenmechanischen Propagators  $K_{\text{qm}}$  verwendet. Für diese Näherung wird die *Pfadintegraldarstellung* des Propagators verwendet. Sie ist gegeben durch

$$K_{\text{qm}}(x, t, x', t') = \int \mathcal{D}[y(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t d\tau L(\dot{y}, y, \tau)\right). \quad (2.10)$$

$L(\dot{y}, y, \tau)$  ist hierbei die klassische Lagrangefunktion des Systems. Es findet eine Integration über alle Pfade mit Anfangspunkt  $y(t')$  und Endpunkt  $y(t)$  statt. Die semiklassische Näherung besteht nun darin, nur die klassischen

Pfade in der Integration zu berücksichtigen. Für die klassischen Pfade gilt das *Hamiltonsche Prinzip*

$$\delta \int_{t'}^t d\tau L(\dot{y}, y, \tau) = 0. \quad (2.11)$$

Diese Bedingung entspricht gerade einer approximativen Auswertung des Integrals aus Gleichung (2.10) nach der *Methode der stationären Phase*.

Das Ergebnis dieser Näherung ist der semiklassische *Van-Vleck-Propagator*

$$K_{\text{scl}}(x, t, x', t' = 0) = (2\pi i \hbar)^{N/2} \sum_{\text{cl}} \sqrt{|c|} \exp\left(\frac{i}{\hbar} R(x, x', t) - i \frac{\pi}{2} \kappa\right). \quad (2.12)$$

Die Summe läuft hierbei über alle klassischen Trajektorien, die die Stationaritätsbedingung aus Gleichung (2.11) erfüllen.  $R$  ist definiert als

$$R(x, x', t) = \int_0^t d\tau L(\dot{x}(\tau), x, \tau) \quad (2.13)$$

und  $c$  ist gegeben durch

$$c = \det \frac{\partial^2 R}{\partial x \partial x'}. \quad (2.14)$$

$\kappa$  zählt die Anzahl der negativen Eigenwerte der zweiten Ableitung von  $R$  nach  $x$  entlang der klassischen Trajektorie.

Der semiklassische Propagator aus Gleichung (2.12) lässt sich nun in den in Gleichung (2.6) definierten Ausdruck des greenschen Operators einsetzen, was auf die semiklassische Form

$$\begin{aligned} G_{E,\text{scl}}^+(x, x') &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \exp\left(\frac{-i(E + i\epsilon)t}{\hbar}\right) K_{\text{scl}}(x, t, x', t' = 0) \\ &= \frac{(2\pi i \hbar)^{N/2}}{i\hbar} \int_0^\infty dt \sum_{\text{cl}} \sqrt{|c|} \exp\left(\frac{i}{\hbar} R(x, x', t) - i \frac{\pi}{2} \kappa\right) \end{aligned} \quad (2.15)$$

führt. Die Summierung erfolgt dabei über alle klassischen Trajektorien, wobei deren Energie  $E = -\partial R / \partial t|_{t_0}$  variabel ist. Zur Auswertung des Integrals wird  $E$  konstant gesetzt, was wiederum einer Approximation nach der Methode der stationären Phase entspricht. Man erhält somit

$$G_{E,\text{scl}}^+ = \frac{2\pi}{(2\pi i \hbar)^{(N+1)/2}} \sum_{\text{cl}, E \text{ const.}} \sqrt{|D|} \exp\left(iS(x, x', E) - i\mu \frac{\pi}{2}\right). \quad (2.16)$$

Hierbei ist

$$D(x, x', E) = \frac{c}{\partial t^2|_{t_0}} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial x'} & \frac{\partial^2 S}{\partial x' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

und

$$\mu = \begin{cases} \kappa & \text{für } \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \Big|_{t_0} > 0, \\ \kappa + 1 & \text{für } \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \Big|_{t_0} < 0. \end{cases} \quad (2.18)$$

$S$  ist die Wirkung entlang der klassischen Bahn mit der Energie  $E$  und durch

$$S(x, x', E) = R(x, x', t) + Et = \int_{x'}^x p \, d\bar{x} \quad (2.19)$$

gegeben.

► *Spurbildung des semiklassischen greenschen Operators und periodische Bahnen*

Um zur semiklassischen Zustandsdichte zu gelangen, muss nun gemäß Gleichung (2.2) die Spur des semiklassisch genäherten Ausdrucks für den greenschen Operator aus Gleichung (2.16) gebildet werden. Zu diesem Zweck ist das Integral

$$\text{tr } G_{E,\text{scl}}^+ = \int d^N x \, G_{E,\text{scl}}^+(x, x) \quad (2.20)$$

auszuwerten. Es müssen also diejenigen Trajektorien betrachtet werden, deren Anfangs- und Endpunkt übereinstimmen. Das Problem lässt sich damit in zwei Teile gemäß

$$d(E) = \bar{d}(E) + d_{\text{po}}(E) \quad (2.21)$$

unterteilen.

Für die Bahnen, bei denen die Weglänge der Trajektorien gegen Null geht, ergibt sich die mittlere Zustandsdichte

$$\bar{d}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d^N x \, d^N p \, \delta(E - H(x, p)). \quad (2.22)$$

Dieser Term wird auch Thomas-Fermi-Term genannt.

Um Gleichung (2.20) für Bahnen mit zwar gleichem Start- und Endpunkt ( $x = x'$ ) aber nichtverschwindender Weglänge auszuwerten, wird ein weiteres Mal die Methode der stationären Phase auf

$$\text{tr } G_{E,\text{scl}}^+ = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar i)^{(N+1)/2}} \int d^N x \sum_{\text{cl}, E \text{ const.}} \sqrt{|D|} \exp\left(iS(x, x', E) - i\mu \frac{\pi}{2}\right) \quad (2.23)$$

angewandt. Es gilt die Bedingung

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial S(x, x, E)}{\partial x} \Big|_{x_0} = \frac{\partial S(x, x', E)}{\partial x} \Big|_{x=x_0} + \frac{\partial S(x, x', E)}{\partial x'} \Big|_{x'=x_0} \\ &= -p' + p. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Dabei ist  $-p'$  der Anfangs- und  $p$  der Endimpuls auf der Trajektorie. Es tragen also nur jene Trajektorien zur Summe bei, für die  $x = x'$  und  $p = p'$  gilt. Dies sind die *periodischen Bahnen*.

Es werden nun lokale Koordinaten in der Umgebung der periodischen Bahnen als

$$x = (q, x_{\perp,1}, \dots, x_{\perp,N-1}) \quad (2.25)$$

eingeführt, um die Integration aus Gleichung (2.23) auszuführen. Die Koordinaten  $(x_{\perp,1}, \dots, x_{\perp,N-1})$  werden im Folgenden mit  $x_{\perp}$  abgekürzt. Die Integration wird nun entsprechend in einen Teil entlang und senkrecht zur periodischen Bahn aufgespalten.

Zunächst gilt in den so gewählten Koordinaten für die Amplitude  $D$  aus Gleichung (2.17)

$$\begin{aligned} D &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial x'} & \frac{\partial^2 S}{\partial x' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{pmatrix} \\ &= -\frac{\partial^2 S}{\partial E \partial q} \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial q'} \det \frac{\partial^2 S}{\partial x'_{\perp} \partial x'_{\perp}} \\ &= (-1)^N \frac{1}{\dot{q} \dot{q}'} \det \frac{\partial p'_{\perp}}{\partial x_{\perp}}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Nun wird die Wirkung  $S$  im Exponenten lokal um die periodischen Bahnen entwickelt. Es gilt

$$S(x, x', E) = \oint p \, dx + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N-1} W_{ij}(q) x_{\perp,i} x_{\perp,j} \quad (2.27)$$

mit

$$W_{ij}(q) = \left( \frac{\partial^2 S}{\partial x_{\perp} \partial x_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial x_{\perp} \partial x'_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial x'_{\perp} \partial x_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial x'_{\perp} \partial x'_{\perp}} \right) \Big|_{x_{\perp}=x'_{\perp}=0}. \quad (2.28)$$

Man erhält schließlich durch Einsetzen und Auswerten der hier auftretenden Fresnel-Integrale den Ausdruck

$$\text{tr } G_{E,\text{scl}}^+ = \frac{1}{\hbar} \sum_{\text{ppo}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S_{\text{ppo}}(E) - i \frac{\pi}{2} \sigma_{\text{ppo}} \right) \frac{1}{|\det M_{\text{ppo}} - \mathbb{1}|} \int \frac{1}{\dot{q}} \, dq. \quad (2.29)$$

Mit

$$\int \frac{1}{\dot{q}} \, dq = \int_{\text{ppo}} dt = T_{\text{ppo}} \quad (2.30)$$

erhält man schließlich die *Gutzwiller-Spurformel*

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{\text{ppo}} \frac{T_{\text{ppo}}}{|\det M_{\text{ppo}} - \mathbb{1}|} \cos \left( \frac{S_{\text{ppo}}}{\hbar} - \frac{\pi}{2} \sigma_{\text{ppo}} \right). \quad (2.31)$$

Hierbei ist  $T_{\text{ppo}}$  die Umlaufzeit für einen Umlauf der periodischen Bahn, den so genannten primitiv-periodischen Orbit,  $S_{\text{po}}$  die klassische Wirkung entlang dieser Bahn,  $\sigma_{\text{po}}$  der Maslov-Index und  $M_{\text{po}}$  die Monodromiematrix.

Die Gutzwiller-Spurformel erlaubt es also nur durch Kenntnis von Bahndaten der klassischen periodischen Bahnen eine semiklassische Zustandsdichte anzugeben.

### 2.1.2 Harmonische Inversion

Die konkrete numerische Berechnung der semiklassischen Zustandsdichte aus den klassischen Bahndaten eines chaotischen Systems mittels der Gutzwiller-Spurformel ist eine nichttriviale Aufgabe. Der Grund hierfür liegt in der Tatsache, dass die Gutzwiller-Spurformel in der Umgebung der gesuchten Eigenenergien in der Regel nicht oder nur sehr langsam konvergiert. Um die Konvergenzprobleme der Gutzwiller-Spurformel zu umgehen, wurden verschiedene Resummierungstechniken entwickelt, unter anderem Cycle-Expansion, die Riemann-Siegel-Formel und Pseudo-Orbit-Entwicklungen. Bei diesen Techniken bestehen typischerweise spezielle Anforderungen an das zu quantisierende System. So eignet sich zum Beispiel die Methode der Cycle-Expansion speziell für hyperbolische Systeme mit symbolischer Dynamik – wie beispielsweise die in dieser Arbeit betrachteten Billardsysteme –, während mit anderen Methoden Spektren geschlossener Systeme berechnet werden können.

Weitere Methoden sind die Filterdiagonalisierung (FD) und die harmonische Inversion, auf die im weiteren genauer eingegangen werden soll, da sie in den konkreten Berechnungen in dieser Arbeit angewandt wird. Sie basieren auf der analytischen Fortsetzung der Gutzwiller-Spurformel und benötigen die Kenntnis der klassischen Bahndaten der periodischen Bahnen bis zu einer maximalen Wirkung entlang der Bahn. Die Methoden können sowohl für offene als auch für geschlossene Systeme sowie für Systeme mit gemischt regulär-chaotischer klassischer Dynamik verwendet werden.

Im Folgenden werden zunächst die Grundlagen der harmonischen Inversion vorgestellt. Darauf aufbauend wird die Erweiterung der Bandlimitierung vorgestellt, die die numerische Berechnung der Resonanzen durch Einschränkung auf ein zu berechnendes Frequenzfenster erleichtert.

#### ► Prinzip der harmonischen Inversion zur semiklassischen Quantisierung

Wie in Abschnitt 2.1.1 diskutiert, lässt sich die gesuchte semiklassische Zustandsdichte  $d^{\text{scl}}$  durch die semiklassische Antwortfunktion  $g^{\text{scl}}$  als Funktion

der Energie  $E$  schreiben als

$$d^{\text{scl}}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } g^{\text{scl}}(E). \quad (2.32)$$

Die Antwortfunktion ist gegeben durch

$$\begin{aligned} g^{\text{scl}}(E) &= \bar{g}^{\text{scl}}(E) + g_{\text{po}}^{\text{scl}} \\ &= \bar{g}^{\text{scl}}(E) + \sum_{\text{po}} \mathcal{A}_{\text{po}} \exp(iS_{\text{po}}), \end{aligned} \quad (2.33)$$

wobei die Summe über alle periodischen Bahnen läuft und  $S_{\text{po}}$  die klassische Wirkung entlang der entsprechenden periodischen Bahn bezeichnet. Die Amplituden  $\mathcal{A}_{\text{po}}$  sind gegeben durch

$$\mathcal{A}_{\text{po}} = \frac{T_{\text{ppo}}}{|\det M_{\text{po}} - \mathbb{1}|} \exp\left(-i\sigma_{\text{po}} \frac{\pi}{2}\right) \quad (2.34)$$

mit den entsprechenden Definitionen aus der Gutzwiller-Spurformel aus Abschnitt 2.1.1. Um die harmonische Inversion anzuwenden, muss die Voraussetzung erfüllt sein, dass die klassische Wirkung linear mit einem Skalenparameter  $w$  wächst, die Form der periodischen Bahnen also nicht von der Skalierung des Systems abhängt. Dies ist unter anderem in Billardsystemen gegeben. Die Gesamtwirkung entlang einer periodischen Bahn lässt sich also schreiben als

$$S_{\text{po}} = w s_{\text{po}}. \quad (2.35)$$

Als Fouriertransformierte des fluktuierenden Teils der Antwortfunktion  $g_{\text{po}}^{\text{scl}}$  ergibt sich das semiklassische Signal

$$\begin{aligned} C^{\text{scl}}(s) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g_{\text{po}}^{\text{scl}} \exp(-isw) dw \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\text{po}} \mathcal{A}_{\text{po}} \exp[i(s - s_{\text{po}})w] dw \\ &= \sum_{\text{po}} \mathcal{A}_{\text{po}} \delta(s - s_{\text{po}}). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Diese semiklassischen Größen lassen sich nun den analogen, exakt quantenmechanischen Größen gegenüberstellen. Als quantenmechanische Antwortfunktion ergibt sich

$$g^{\text{qm}} = \sum_k \frac{d_k}{w - w_k + i\epsilon}. \quad (2.37)$$

Die Pole von  $g^{\text{qm}}$  entsprechen dabei den quantenmechanischen Resonanzen an den Stellen  $w_k$ . Die  $d_k$  geben die Multiplizitäten der entsprechenden Resonanzen an. Für nichtentartete Zustände gilt also  $d_k = 1$ . Das quantenmechanische

Signal ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned}
 C^{\text{qm}} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g^{\text{qm}} \exp(-isw) dw \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_k \frac{d_k}{w - w_k + i\epsilon} \exp(-isw) dw \\
 &= -i \sum_k d_k \exp(-iw_k s). \tag{2.38}
 \end{aligned}$$

Das Prinzip der harmonischen Inversion besteht nun darin, das aus den periodischen Bahndaten berechnete semiklassische Signal  $C^{\text{scl}}$  dem quantenmechanischen Analogon  $C^{\text{qm}}$  anzupassen, um die Resonanzen  $w_k$  und die zugehörigen Amplituden  $d_k$  zu bestimmen. Im Allgemeinen führt dieser Vergleich allerdings auf eine sehr große oder gar unendliche Anzahl an Frequenzen im gesamten Spektralbereich.

Die Methode der Filterdiagonalisierung erlaubt es, eine kleine Anzahl an Frequenzen in einem Fenster zu berechnen. Dazu muss das semiklassische Signal  $C^{\text{scl}}$  auf einem äquidistanten Gitter bekannt sein, was eine hinreichend glatte Funktion voraussetzt. Die Summe aus  $\delta$ -Distributionen muss daher zum Beispiel mit einer Gaußfunktion geglättet werden. Da jedoch in diesem Fall auch die Amplituden exponentiell gedämpft werden, muss die Varianz der Gaußfunktion klein gewählt werden, um die Dämpfung gering zu halten. Diese kleine Varianz erfordert aber wiederum eine Abtastung des Signals mit geringen Abständen, was auf eine große Anzahl an Datenpunkten führt. Dieses Verfahren kann deshalb zu numerischen Ungenauigkeiten führen.

► *Erweiterung zur Berechnung von Diagonalelementen quantenmechanischer Operatoren*

Um später bestimmte Eigenschaften von Resonanzamplituden in der Umgebung eines exzeptionellen Punkts zu beobachten, ist es nötig, nicht nur die einfache Zustandsdichte semiklassisch zu berechnen, bei der die Amplituden lediglich den Entartungsgrad angeben. Vielmehr müssen auch Diagonalelemente quantenmechanischer Operatoren berechnet werden [16].

Zu diesem Zweck wird statt der ursprünglich definierten quantenmechanischen Antwortfunktion aus Gleichung (2.37) die mit den Diagonalelementen eines Operators  $\hat{D}$  gewichtete Antwortfunktion

$$g_{\hat{D}}^{\text{qm}} = \sum_k \frac{\langle k | \hat{D} | k \rangle}{w - w_k + i\epsilon} \tag{2.39}$$

verwendet. Sie ergibt sich aus der Multiplikation des greenschen Operators  $G_E^+$  aus Gleichung (2.3) mit  $\hat{D}$ , sodass

$$g_{\hat{D}}^{\text{qm}} = \text{tr}(G^+ \hat{D}). \quad (2.40)$$

Aus der gewichteten Antwortfunktion ergibt sich dann wiederum über

$$\rho_{\hat{D}} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} g_{\hat{D}}^{\text{qm}} \quad (2.41)$$

die gewichtete Zustandsdichte. Im Falle von reellen Eigenenergien ist  $\rho_{\hat{D}}$  eine Summe über  $\delta$ -Funktionen an den Resonanzpositionen, jeweils gewichtet mit den entsprechenden Diagonalelementen. Für offene Systeme mit komplexen Eigenenergien ergeben sich Lorentz-Funktionen, deren Form durch die komplexen Diagonalelemente bestimmt wird.

Zur semiklassischen Berechnung werden die Näherungen bis hin zur semiklassischen Antwortfunktion  $g^{\text{scl}}$  analog durchgeführt, nun aber ausgehend von der quantenmechanischen Antwortfunktion aus Gleichung (2.39). Es ergibt sich, dass sie Amplitude  $\mathcal{A}_{\text{po}}$ , die sich aus den klassischen Bahndaten für jede periodische Bahn ergibt, mit einem Faktor  $D_{\text{po}}$  multipliziert werden muss [16].  $D_{\text{po}}$  ist dabei der Mittelwert der klassischen Observablen  $D(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$  entlang einer periodischen Bahn, also durch

$$D_{\text{po}} = \int_0^{T_{\text{po}}} D(\mathbf{q}_{\text{po}}(t), \mathbf{p}_{\text{po}}(t)) dt \quad (2.42)$$

gegeben.  $D$  ist dabei gerade die Wigner-Transformierte des quantenmechanischen Operators  $\hat{D}$ . Als neue semiklassische Amplitude ergibt sich also als Erweiterung zu Gleichung (2.34)

$$\mathcal{A}_{\text{po}} = \frac{D_{\text{po}} T_{\text{ppo}}}{|\det M_{\text{po}} - \mathbb{1}|} \exp\left(-i\sigma_{\text{po}} \frac{\pi}{2}\right), \quad (2.43)$$

die in dieser Form bis in das semiklassische Signal  $C^{\text{scl}}$  aus Gleichung (2.36) einfließt. Das weitere Vorgehen bei der harmonischen Inversion verändert sich nicht. Beim Anpassen des quantenmechanischen Signals  $C^{\text{qm}}$  an  $C^{\text{scl}}$  erhält man für die Amplituden  $d_k$  allerdings anstelle des Entartungsgrads der  $k$ -ten Resonanz nun die Diagonalelemente  $\langle k | \hat{D} | k \rangle$ .

► *Bandlimitiertes Signal durch analytische Filterung*

Die große benötigte Anzahl an abgetasteten Datenpunkten im Signal lässt sich umgehen, indem das Frequenzfenster in der Fouriertransformation von der Antwortfunktion  $g^{\text{scl}}$  auf das Signal  $C^{\text{scl}}$  auf ein Frequenzfenster eingeschränkt wird [17–20]. Dies lässt sich im vorliegenden Fall sehr einfach analytisch berechnen, da die  $C^{\text{scl}}$  aus einer Summe von  $\delta$ -Distributionen besteht.



Allgemeiner betrachtet ist diese Einschränkung des Frequenzfensters eine Multiplikation der Antwortfunktion mit einer beliebigen Filterfunktion  $f(w)$ .

Im konkreten Fall wird ein rechteckiges Fenster gemäß

$$f(w) = \begin{cases} 1 & \text{für } w \in [w_0 - \Delta w, w_0 + \Delta w], \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.44)$$

verwendet, wobei  $w_0$  die gewählte Zentralfrequenz des Fensters und  $2\Delta w$  die Breite des Fensters ist. Das bandlimitierte semiklassische Signal ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} C_{\text{bl}}^{\text{scl}}(s) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(w) g_{\text{po}}^{\text{scl}} \exp(-isw) dw \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-w_0 - \Delta w}^{w_0 + \Delta w} g_{\text{po}}^{\text{scl}} \exp(-isw) dw \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-w_0 - \Delta w}^{w_0 + \Delta w} \sum_{\text{po}} \mathcal{A}_{\text{po}} \exp(isw_0 - i(s - s_{\text{po}})w) dw \\ &= \sum_{\text{po}} \mathcal{A}_{\text{po}} \frac{\sin[(s - s_{\text{po}})\Delta w]}{\pi(s - s_{\text{po}})} \exp(is_{\text{po}}w_0). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Dieses Signal kann nun auf einem Gitter für klassische Wirkungen  $s_n < s_{\text{max}}$  ausgewertet werden.

Auf analogem Wege erhält man durch Anwendung des Filters  $f(w)$  direkt auf die quantenmechanische Antwortfunktion  $g^{\text{qm}}$  aus Gleichung (2.37) das bandlimitierte quantenmechanische Signal  $C_{\text{bl}}^{\text{qm}}$ , das durch

$$\begin{aligned} C_{\text{bl}}^{\text{qm}} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(w) g^{\text{qm}} \exp(-isw) dw \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-w_0 - \Delta w}^{w_0 + \Delta w} g^{\text{qm}} \exp(-isw) dw \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_k \frac{d_k}{w - w_k + i\epsilon} \exp(-isw) dw \\ &= -i \sum_{k=1}^K d_k \exp[-i(w_k - w_0)s] \end{aligned} \quad (2.46)$$

gegeben ist. Hierbei ist bemerkenswert, dass das Signal im Gegensatz zum nichtbandlimitierten aus Gleichung (2.38) nur aus endlich vielen Frequenzen besteht, nämlich genau denjenigen, für die  $|w_k - w_0| < \Delta w$  gilt, die also im Frequenzfenster liegen. Für ein entsprechend gewähltes Frequenzfenster liegt die Größenordnung von  $K$  bei etwa 50 bis 200 Resonanzen.

Die Anpassung des bandlimitierten semiklassischen Signals, ausgewertet auf einem Gitter der Wirkung  $s$  mit Gitterabstand  $\tau = \pi/\Delta w$  führt nun auf

einen Satz von  $2K$  nichtlinearen Gleichungen. Diese sind gegeben durch

$$C_{\text{bl}}^{\text{scl}}(n\tau) \equiv c_n = -i \sum_{k=1}^K d_k \exp[-i(w_k - w_0)n\tau]. \quad (2.47)$$

$C_{\text{bl}}^{\text{scl}} \equiv c_n$  wird bandlimitiertes dezimiertes Signal genannt. Die Anzahl der Koeffizienten  $c_n$  ist hierbei wesentlich geringer als die für ein mit einer Gaußfunktion geglättetes Signal nötigen Abtaststellen. Die geringere Dimension des Gleichungssystems erleichtert die numerische Lösung erheblich.

Um das nichtlineare Gleichungssystem (2.47) zu lösen, existieren Methoden wie die Übersetzung des nichtlinearen Problems in eines der linearen Algebra unter Verwendung eines linearen Prädiktors (LP), die Lösung eines generalisierten Eigenwertproblems als Signaldiagonalisierung (SD) und die Padé-Approximation (PA) [21]. Diese Vorgehensweisen sind konzeptionell recht unterschiedlich. Die numerisch einfachste Methode, um sowohl die Resonanzpositionen  $w_k$  als auch die zugehörigen Amplituden  $d_k$  zu berechnen, ist jedoch die Padé-Approximation, da lediglich ein lineares Gleichungssystem gelöst und die Nullstellen eines Polynoms gefunden werden müssen. Daher wird diese Vorgehensweise im weiteren Verlauf der Arbeit verwendet und im folgenden Abschnitt genauer vorgestellt.

► *Padé-Approximation des dezimierten Signals*

Aufgabe ist es, das nichtlineare Gleichungssystem (2.47) zu lösen, das prinzipiell über die Form

$$c_n = \sum_{k=1}^K \hat{d}_k z_k^n, \quad n = 0, 1, \dots, 2K - 1 \quad (2.48)$$

verfügt. Es gilt hierbei  $z_k \equiv \exp[-i(w_k - w_0)n\tau]$  und  $\hat{d}_k \equiv -id_k$ . Die Anzahl  $K$  der Frequenzen bewegt sich bei Anwendung eines entsprechenden Frequenzfensters einige Größenordnungen unter der Anzahl für ein nichtdezimiertes Signal.

Für die Berechnung der Padé-Approximation wird zunächst angenommen, dass die Signalkoeffizienten  $c_n$  nicht nur bis  $2K - 1$ , sondern bis zur Unendlichkeit bekannt seien. Im Folgenden wird die komplexwertige Funktion  $g(z)$  betrachtet, deren Maclaurin-Reihenentwicklung durch

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{-n} \quad (2.49)$$

gegeben sein soll. Einsetzen von Gleichung (2.48) und Auswertung als geometrische Reihe führt auf

$$g(z) = \sum_{k=1}^K \hat{d}_k \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z_k}{z}\right)^n = \sum_{k=1}^K \frac{z \hat{d}_k}{z - z_k} \equiv \frac{P_K(z)}{Q_K(z)}. \quad (2.50)$$

Die Funktionen  $P_K$  und  $Q_K$  sind Polynome  $K$ -ten Grades in  $z$ . Die  $z_k$  sind offensichtlich die Nullstellen von  $Q_K$  und damit die Pole von  $g$ . Über die Residuen der letzten beiden Terme lassen sich die Amplituden  $\hat{d}_k$  zu

$$\hat{d}_k = \frac{P_K(z_k)}{z_k Q'_K(z)} \quad (2.51)$$

bestimmen.  $Q'_K(z_k)$  ist hierbei die Ableitung von  $Q_K$  nach  $z$  an der Stelle  $z = z_k$ .

Nun liegen beim konkreten Problem die Koeffizienten  $c_n$  offensichtlich nicht bis zur Unendlichkeit, sondern lediglich bis  $2K - 1$  vor. Der Vorteil der Padé-Approximation liegt nun aber darin, dass die Kenntnis der Koeffizienten  $c_0$  bis  $c_{2K-1}$  genügt, um die Koeffizienten  $a_k$  und  $b_k$  der Polynome

$$P_K(z) = \sum_{k=1}^K b_k z^k \quad (2.52)$$

und

$$Q_K(z) = \sum_{k=1}^K a_k z^k - 1 \quad (2.53)$$

zu berechnen. Die  $a_k$  lassen sich über das Lösen des linearen Gleichungssystems

$$c_n = \sum_{k=1}^K a_k c_{n+k}, \quad n = 0, \dots, K-1 \quad (2.54)$$

bestimmen. Die  $b_k$  sind dann explizit durch

$$b_k = \sum_{m=0}^{K_k} a_{k+m} c_m, \quad m = 0, \dots, K \quad (2.55)$$

gegeben. Die Resonanzpositionen  $z_k$  ergeben sich nun durch Bestimmung der Nullstellen des Polynoms  $Q_K$ . Die Resonanzamplituden  $\hat{d}_k$  lassen sich explizit über Gleichung (2.51) bestimmen. Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems (2.48) wurde also auf die Lösung des linearen Gleichungssystems (2.54) und eine Nullstellensuche – also ein einfacher zu behandelndes nichtlineares Problem – zurückgeführt.

► *Erweiterung der Padé-Approximation für exzeptionelle Punkte*

An einem exzeptionellen Punkt ist es nicht mehr ausreichend, Resonanzen als Pole erster Ordnung in der quantenmechanischen Antwortfunktion  $g^{\text{qm}}$  wie in Gleichung (2.37) zu betrachten. Stattdessen muss der Ansatz auf die Form

$$g^{\text{qm}} = \sum_k \sum_{\alpha=1}^{r_k} \frac{d_{k,\alpha}}{(w - w_k)^\alpha} \quad (2.56)$$

verallgemeinert werden, wobei  $r_k$  der Entartungsgrad der  $k$ -ten Resonanz ist [15]. Das zu Gleichung (2.47) analoge, auf einem Gitter der Wirkung  $s = n\tau$  ausgewertete Signal ergibt sich nach vergleichbarer Herleitung zu

$$C_{\text{bl}}^{\text{qm}}(n\tau) \equiv c_n = -i \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} d_{k,\alpha} \frac{(-in\tau)^{\alpha-1}}{(\alpha-1)!} \exp[-i(w_k - w_0)n\tau]. \quad (2.57)$$

Mit der bereits oben eingeführten Variable  $z_k \equiv \exp[-i(w_k - w_0)n\tau]$  und der Verallgemeinerung

$$\hat{d}_{k,\alpha} \equiv -i d_{k,\alpha} \frac{(-i\tau)^{\alpha-1}}{(\alpha-1)!} \quad (2.58)$$

ergibt sich nun das nichtlineare Gleichungssystem

$$c_n = \sum_k \sum_{\alpha=1}^{r_k} \hat{d}_{k,\alpha} n^{\alpha-1} z_k^n. \quad (2.59)$$

Die Entwicklung in eine Maclaurin-Reihe ergibt dann wiederum analog zum nichtentarteten Fall

$$g(z) = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} \hat{d}_{k,\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} n^{\alpha-1} \left(\frac{z_k}{z}\right)^n \equiv \frac{P_K(z)}{Q_K(z)}. \quad (2.60)$$

Für einen Entartungsgrad  $r_k > 1$  lässt sich die Reihe nicht mehr als geometrische Reihe auswerten. Unter Verwendung der Stirling-Zahlen  $\mathcal{S}$  zweiter Art, die durch

$$\mathcal{S}(n, k) = \frac{1}{k!} \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \binom{k}{\mu} \mu^n \quad (2.61)$$

gegeben sind, kann die Funktion  $g$  aus Gleichung (2.60) jedoch zu

$$g(z) = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} \hat{d}_{k,\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} n! \mathcal{S}(\alpha-1, n) \frac{z z_k^n}{(z - z_k)^{n+1}} \equiv \frac{P_K(z)}{Q_K(z)} \quad (2.62)$$

umgeformt werden. Durch diese Gleichung lässt sich nun eine explizite Darstellung für die gesuchten Resonanzamplituden  $\hat{d}_{k,\alpha}$  finden [15]. Für den

Entartungsgrad  $r_k = 2$ , der im Weiteren ausschließlich betrachtet werden soll, ergibt sich

$$\hat{d}_{k,2} = \frac{2P_K(z_k)}{z_k^2 Q_K^{(2)}(z_k)} \quad (2.63a)$$

und

$$\hat{d}_{k,1} = \frac{2P_K^{(1)}(z_k)}{z_k Q_K^{(2)}(z_k)} - \hat{d}_{k,2} \left( 1 + \frac{z_k Q_K^{(3)}(z_k)}{3Q_K^{(2)}(z_k)} \right). \quad (2.63b)$$

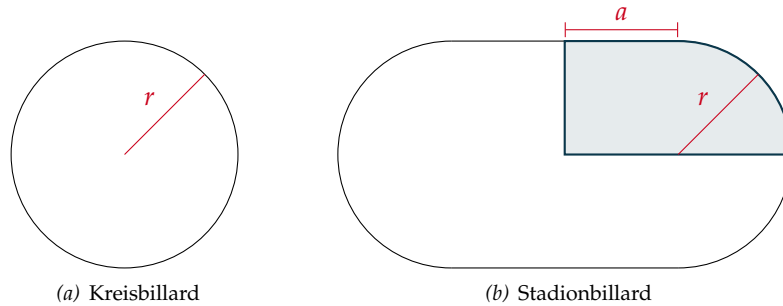
Der geklammerte Hochindex gibt in diesem Fall den jeweiligen Grad der Ableitung nach  $z$  an. Während die Resonanzamplituden, die aus dem Ansatz für nichtentartete Resonanzen mit Gleichung (2.37) gewonnen werden, nah am EP divergieren, hängen die mit dem Ansatz aus Gleichung (2.56) gewonnen Amplituden nur schwach von der Distanz der Resonanzen in der komplexen Ebene ab.

Da die Resonanzen aus einer numerischen Nullstellensuche der Funktion  $Q_K$  gewonnen werden, stimmen die so gewonnen Werte in der Regel aufgrund numerischer Ungenauigkeiten nicht exakt überein. In der praktischen Umsetzung ist es daher zweckmäßig, Resonanzen, die nah genug beieinander liegen, als entartet zu betrachten. Ist dieser gewählte Abstand klein gegen die sonstigen auftretenden Abstände zwischen Resonanzen, so liefert der Ansatz für entartete Resonanzen sinnvolle Ergebnisse.

## 2.2 BILLARDSYSTEME

Als Billardsysteme werden dynamische Systeme bezeichnet, bei denen sich die betrachteten Teilchen entlang einer geodätischen – im Falle einer hier ausschließlich betrachteten flachen Geometrie also geraden – Trajektorie bewegen. Die kinetische Energie im System ist also über die gesamte Bewegung hin konstant. Die Bewegungen entlang der Geraden werden nur durch Reflexionen an harten Potentialwänden unterbrochen. Es gilt, dass der Einfallswinkel vor einer Reflexion gleich dem Ausfallswinkel nach einer Reflexion ist.

Eine in der vorliegenden Masterarbeit zentrale Anwendung von Billardsystemen ist die Untersuchung der Quantisierung eines klassischen chaotischen Systems. Ziel ist es hierbei, unter Kenntnis der klassischen chaotischen Dynamik Eigenzustände in einer Potentiallandschaft eines Billardsystems zu finden.



■ *Abbildung 2.1.* Skizze des Kreisbillards und des Stadionbillards. Das Potential ist innerhalb der harten Wände null, außerhalb sind Teilchen verboten. Klassische Teilchen werden an den Wänden gemäß dem Gesetz »Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel« reflektiert. Trajektorien im Kreisbillard weisen reguläres Verhalten auf; im Stadionbillard zeigt sich chaotisches Verhalten.

### 2.2.1 Integrabilität und Chaos

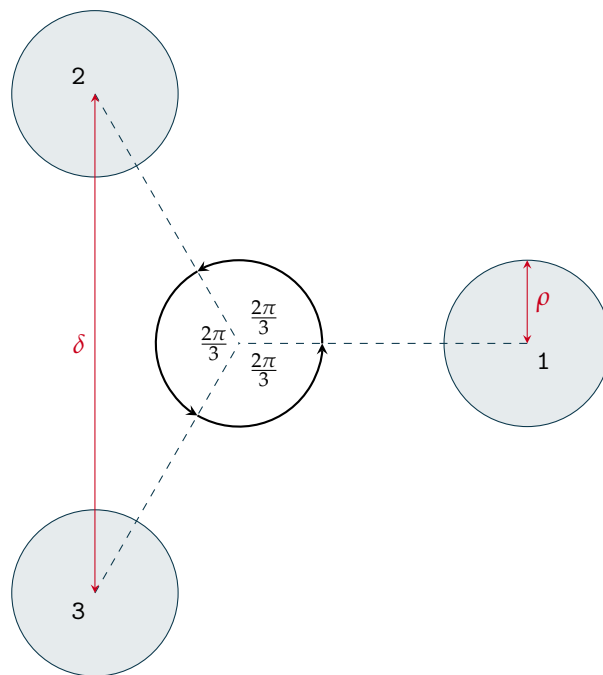
Ein klassisches System dieser Art kann in einer Dimension leicht durch die Hamilton-Funktion

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (2.64)$$

beschrieben werden, wobei das Potential  $V(q)$  entweder null oder unendlich ist. Trotz der vermeintlichen Einfachheit von Billardsystemen können aufgrund der beliebigen Geometrie der harten Potentialwände verschiedene Probleme hamiltonscher Systeme, zum Beispiel Nichtintegrabilität und chaotische Bewegung, auftreten. Andererseits ist es aber möglich eine Poincaréabbildung zu finden, ohne die Bewegungsgleichungen integrieren zu müssen.

Beispiele für Billardsysteme sind einerseits das Kreisbillard und andererseits das Stadionbillard aus *Abbildung 2.1*, bei denen die Bewegung eines Teilchens innerhalb einer kreisförmigen beziehungsweise stadionförmigen Geometrie mit harten Wänden untersucht wird. Das Kreisbillard ist ein integrables System, zeigt also reguläres Verhalten. Wird jedoch die relativ geringfügig erscheinende Modifikation hin zum Stadionbillard vorgenommen, zeigt das System chaotisches Verhalten.

Die Chaotizität eines Systems lässt sich über den Abstand  $a(t)$  zweier im Phasenraum anfänglich benachbarter Trajektorien im zeitlichen Verlauf definieren. Laufen anfangs benachbarte Trajektorien exponentiell auseinander, so zeigt sich chaotisches Verhalten. Das exponentielle Auseinanderlaufen der



■ *Abbildung 2.2.* Skizze des Drei-Scheiben-Billardsystems. Die eingezeichneten Scheiben sind harte Potentialwände, in deren Inneren die Teilchen sich nicht aufhalten dürfen. Es handelt sich daher um ein offenes System. Das System unterliegt einer  $C_{3v}$ -Symmetrie; es ist also invariant unter Drehungen um Vielfache von  $2\pi/3$  und Spiegelungen an einer Symmetrieachse.

Trajektorien lässt sich über den Lyapunov-Exponenten

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \lim_{a(0) \rightarrow 0} \ln \frac{a(t)}{a(0)} \quad (2.65)$$

quantitativ beschreiben. Er beschreibt die lokale Instabilität der Bahnen gegenüber kleinen Störungen in den Anfangsbedingungen. Ist der größte Lyapunov-Exponent positiv, so wird das System als chaotisch, andernfalls als regulär bezeichnet. Diese Definition ist äquivalent zur Tatsache, dass sich bei regulärem Verhalten die Trajektorien in einem beschränkten Gebiet des Phasenraums aufhalten. Dieses Gebiet ist topologisch äquivalent zu einem Torus. Bei chaotischem Verhalten wird der gesamte Phasenraum – im Falle von Billardsystemen eine dreidimensionale Untermannigfaltigkeit konstanter Energie des vierdimensionalen Phasenraums – erkundet.

### 2.2.2 Das Drei-Scheiben-Billard

Das in den weiteren Teilen dieser Masterarbeit behandelte Billardsystem ist das Drei-Scheiben-Billard. Die entsprechende Potentiallandschaft ist in

Abbildung 2.2 skizziert. Innerhalb der Scheiben 1, 2 und 3 ist das Potential unendlich, außerhalb verschwindet das Potential. Für  $\delta/\rho > 2$  berühren sich die Scheiben nicht und es handelt sich um ein offenes Streusystem.<sup>1</sup> Das Drei-Scheiben-Billard ist eines der einfachsten Paradigmen für ein chaotisches Streusystem, dessen differentieller Wirkungsquerschnitt singular ist [24]. Bei einem System mit einer Scheibe existiert keine, bei einem System mit zwei Scheiben existiert eine eingeschlossene Trajektorie. Eine kleine Abweichung von dieser Trajektorie führt zum Verlassen des Systems. Das Zwei-Scheiben-Billard ist damit zwar hyperbolisch, aber nicht chaotisch. Beim Drei-Scheiben-Billard existieren jedoch unendlich viele eingeschlossene Trajektorien – die periodischen Bahnen –, die alle instabil sind. Im Raum aller Trajektorien bilden die periodischen Bahnen eine Untermenge vom Maß null. Dieser Unterraum besitzt eine fraktale Hausdorff-Dimension [25].

Andererseits bietet das Drei-Scheiben-Billard die Möglichkeit, es als Prototyp für ein offenes, chaotisches Quantensystem zu sehen. Ziel in diesem Fall ist die Berechnung der quantenmechanischen Zustände in dieser Potentiallandschaft. Insbesondere eignet sich das System für eine semiklassische Behandlung mittels der Theorie der periodischen Bahnen unter Verwendung der Gutzwiller-Spurformel. Dies führte zur Entwicklung von Auswertungsmethoden der Spurformel, die bereits in Abschnitt 2.1 diskutiert wurden.

Neben der Entwicklung von Resummierungstechniken findet die Untersuchung chaotischer Streuung in einer Reihe von Systemen Anwendung [26]. Als eines von vielen Beispielen lässt sich hier die Modellierung chemischer Reaktionen nennen [27].

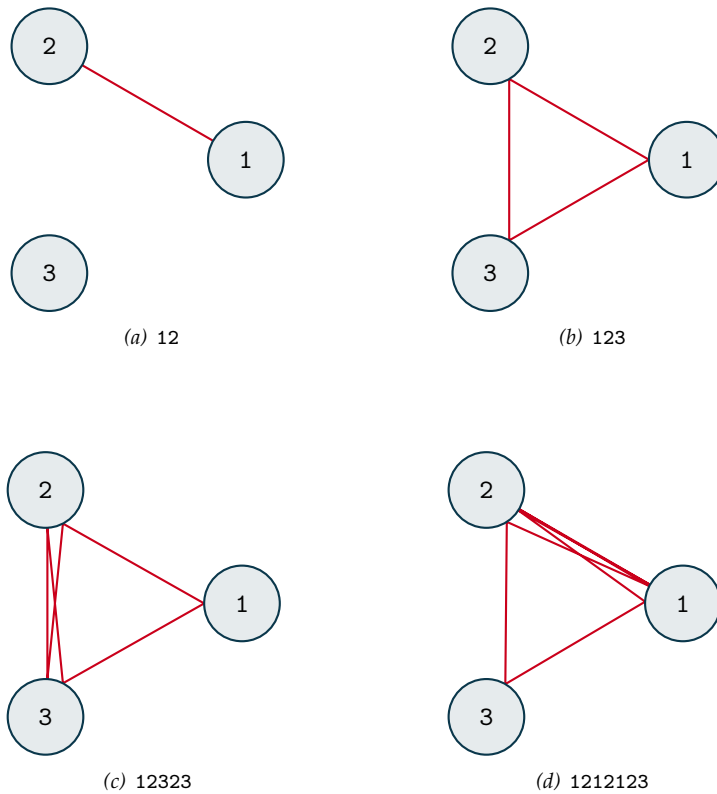
Wie bereits erwähnt handelt es sich beim Drei-Scheiben-Billard um ein offenes System. Während sich in einem abgeschlossenen System rein reelle Eigenzustände ausbilden, ergeben sich aus den gebundenen Zustände bei offenen Systemen langlebige, metastabile Zustände. Diese können mit Hilfe komplexer Eigenwerte beschrieben werden. Eine detaillierte Behandlung der komplexen Resonanzen und deren besonderer Eigenschaften wird im Abschnitt 2.3 vorgenommen.

Im Folgenden werden einige Eigenschaften des Drei-Scheiben-Billards diskutiert, die schließlich eine möglichst effiziente und genaue numerische Berechnung der komplexen Resonanzen mit Hilfe der periodischen Bahnen des Systems erlaubt.

---

<sup>1</sup>Hier ist anzumerken, dass für  $\delta/\rho < 2,04821419$  so genanntes *Pruning* auftritt, bei dem bestimmte Bahnen durch Scheiben laufen können, sodass sich die einfache symbolische Dynamik nicht mehr anwenden lässt [22, 23]. Dieser nichttriviale Sonderfall soll bei allen weiteren Diskussionen ausgeschlossen sein.

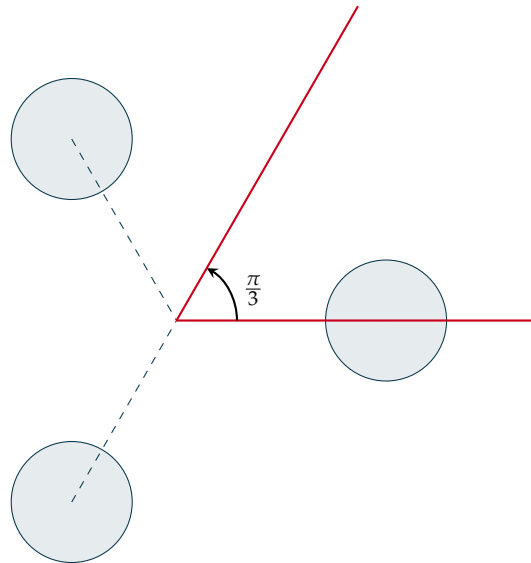




■ *Abbildung 2.3.* Einige Beispiele für die minimierten periodischen Bahnen für bestimmte symbolische Sequenzen. Die so berechneten Bahnen bilden die Grundlage für die semiklassische Quantisierung des Drei-Scheiben-Billardts mittels der Gutzwiller-Spurformel.

► *Symbolische Dynamik*

Für die Auswertung der Gutzwiller-Spurformel werden die periodischen Bahnen benötigt. Beim Drei-Scheiben-Billard lassen sich alle im System vorhandenen periodischen Bahnen durch Einführung der symbolischen Dynamik indizieren. Hierbei wird jede dieser Bahnen durch die Sequenz charakterisiert, mit der sie die Scheiben 1, 2 und 3 durchläuft [28]. Wiederholungen des gleichen Scheibenindex' an aufeinanderfolgenden Positionen einer Sequenz sind offensichtlich nicht erlaubt. Abgesehen von den Mehrfachdurchläufen einer Bahn existiert für jede symbolische Sequenz eine physikalische periodische Bahn, außer es tritt Pruning auf. Aufgrund der  $C_{3v}$ -Symmetrie des Systems kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit mit der Sequenz 12 begonnen werden. Dies ist auch gleichzeitig die einfachste und kürzeste periodische Bahn. Die Länge einer periodischen Bahn lässt sich einfach finden, indem eine Sequenz vorgegeben wird und die geometrische Länge minimiert wird.



■ *Abbildung 2.4.* Fundamentalgebiet des Drei-Scheiben-Billard. Es besteht aus einem Sechstel-Ausschnitt des Gesamtsystems. Die vorliegende  $C_{3v}$ -Symmetrie erlaubt die Einführung einer symmetriereduzierten symbolischen Dynamik.

Damit entsprechen die Ein- und Ausfallwinkel an den Reflexionspunkten bereits den physikalisch korrekten. Einige Beispiele für minimierte periodische Bahnen sind in *Abbildung 2.3* gezeigt.

► *Symmetriereduktion*

Aufgrund der  $C_{3v}$ -Symmetrie des Drei-Scheiben-Billard muss das System bei der Bestimmung der symbolischen Dynamik nicht in seiner Gänze betrachtet werden. Es kann in das Fundamentalgebiet abgebildet werden [6]. Der Fundamentalbereich des Drei-Scheiben-Billard ist in *Abbildung 2.4* gezeigt.

Im Gesamtsystem sind die drei Symbole 1, 2 und 3, die die verschiedenen Scheiben nummerieren, nötig, um eine bestimmte Bahn zu charakterisieren. Im Fundamentalgebiet reduziert sich die symbolische Dynamik auf die zwei Symbole 0 und 1. 0 bezeichnet dabei eine Kollision mit der Halbscheibe im Fundamentalgebiet, die im Gesamtsystem einer Rückkehr zur vorigen Scheibe in der Sequenz entspräche. 1 symbolisiert eine Kollision im Fundamentalgebiet, deren Entsprechung ein Verlauf der Trajektorie zur jeweils dritten Scheibe im Gesamtsystem.

Um alle symmetriereduzierten Sequenzen bis zu einer maximalen Symbollänge  $\ell_{\max}$  zu berechnen, muss zunächst die Potenzmenge von  $\{0, 1\}^\ell$  für  $\ell \leq \ell_{\max}$  betrachtet werden. Ausgeschlossen werden müssen diejenigen

Sequenzen, die durch  $\ell' < \ell$  Permutationen in sich selbst überführt werden können. Sie gehören bereits zur kürzeren Symbollänge  $\ell'$ . Außerdem führen verschiedene Sequenzen einer Symbollänge, die sich durch Permutation ineinander überführen lassen, zu Bahnen, die sich durch Symmetrioperationen ineinander überführen lassen. Hier wird lediglich eine benötigt.

Jede 123-Sequenz kann einfach in eine  $0\underline{1}$ -Sequenz umgerechnet werden. Hierbei lässt sich feststellen, dass die symmetriereduzierte  $0\underline{1}$ -Sequenz oft eine kürzere Periodizität aufweist. Genauer ist die 123-Sequenz entweder gleichlang, doppelt so lang oder dreimal so lang wie die entsprechende  $0\underline{1}$ -Sequenz. Die Reflexionspunkte beim mehrmaligen Durchlauf der 123-Sequenz sind dabei offensichtlich mit denen beim ersten Durchlauf durch Symmetrioperationen ineinander überführbar. Die numerische Berechnung der Daten einer periodischen Bahn mit nur einem Durchlauf einer  $0\underline{1}$ -Sequenz ist damit effizienter und genauer möglich. Es treten so keine einfachen Abhängigkeiten der verschiedenen Argumente der zu minimierenden Funktion mehr auf, was die Konvergenz von üblichen numerischen Minimierungsverfahren verschlechtert.

Die  $C_{3v}$ -Symmetriegruppe besitzt drei irreduzible Darstellungen, die mit  $A_1$ ,  $A_2$  und  $E$  bezeichnet werden. In einer quantenmechanischen Betrachtung ergeben sich somit auch drei Äquivalenzklassen für die Eigenfunktionen des unter den Symmetrioperationen invarianten Hamilton-Operators. Die Zugehörigkeit der Resonanzen zu einem der Unterräume lässt sich unter anderem auch durch die Methode der *Cycle-Expansion* bestimmen [29].

### 2.3 NICHTHERMITISCHE QUANTENMECHANIK UND EXZEPTIONELLE PUNKTE

Beim hier betrachteten Drei-Scheiben-Billardssystem handelt es sich wie bereits beschrieben um ein offenes System. Die Dynamik ist nicht gebunden; klassische Teilchen können aus dem System entfliehen. Auch die quantenmechanischen Analogien solcher Systeme können nicht mehr durch hermitesche Operatoren mit gebundenen Zuständen erfasst werden. Stattdessen werden nichthermitesche Hamilton-Operatoren mit komplexen Eigenwerten zur Beschreibung benötigt.

Im Folgenden soll zunächst die Verwendung solcher *nichthermitescher Operatoren* kurz motiviert werden. Danach wird eine besondere Eigenschaft von komplexen Resonanzen diskutiert, nämlich das Auftreten *exzeptioneller Punkte*.

2.3.1 *Eigenschaften komplexer Resonanzen*

In einer quantenmechanischen Behandlung eines offenen Streusystems existieren keine gebundenen Zustände mehr. Streuprozesse können über die energieabhängige  $S$ -Matrix

$$S(E) = \frac{1 - iK(E)}{1 + iK(E)} \quad (2.66)$$

beschrieben werden [30]. Dabei ist

$$K(E) = \frac{1}{2} V^\dagger \frac{1}{E - H} V \quad (2.67)$$

die  $M \times M$ -dimensionale Wigner- $K$ -Matrix, wobei  $V$  die Kopplung der  $N$  Eigenzustände des hermiteschen Hamilton-Operators  $H$  an die  $M$  Streukanäle beschreibt. Durch Einführung des effektiven Hamilton-Operators

$$\mathcal{H} = H - \frac{i}{2} V V^\dagger \quad (2.68)$$

ergibt sich

$$S(E) = 1 - iV^\dagger \frac{1}{E - \mathcal{H}} V. \quad (2.69)$$

Der zusätzliche Term  $-i/2 V V^\dagger$  im effektiven Hamilton-Operator sorgt für die Kopplung der reellen, gebundenen Zustände an die Zerfallskanäle.  $\mathcal{H}$  ist antihermitesch und besitzt daher die *komplexen Eigenwerte*  $\mathcal{E}_n = E_n - i\Gamma_n/2$ .

Für jede Energie  $E$  lässt sich über die  $S$ -Matrix eine durchschnittliche Verweildauer, die Wigner-Smith-Verzögerungszeit, berechnen [31]. Diese ist dort besonders groß, wo die  $S$ -Matrix Pole besitzt, also gerade bei  $E = \mathcal{E}_n$ . Die den komplexen Eigenwerten  $\mathcal{E}_n$  zugeordneten Zustände können also als *langlebige, metastabile Eigenzustände* des offenen Systems betrachtet werden.

Betrachtet man die Zeitentwicklung eines Zustands  $|\psi(t=0)\rangle$  mit der komplexen Eigenenergie  $\mathcal{E} = E - i\Gamma/2$ , so erhält man

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{E} t\right) |\psi(0)\rangle \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} E t\right) \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \Gamma t\right) |\psi(0)\rangle. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Für die Norm des Zustands ergibt sich dann

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \exp\left(-\frac{\Gamma}{\hbar} t\right). \quad (2.71)$$

Der Imaginärteil einer komplexen Eigenenergie  $\mathcal{E}$  lässt sich also als Zeitskala für den Zerfall eines Zustands auffassen [25]. Aus Kausalitätsgründen muss der Imaginärteil von  $\mathcal{E}$  negativ sein, die komplexen Resonanzen liegen also in der unteren komplexen Halbebene.

### 2.3.2 Exzeptionelle Punkte

Der Begriff des *exzeptionellen Punktes* (EP) hat seinen Ursprung im mathematischen Kontext und bezeichnet dort Verzweigungspunktsingularitäten in den Eigenspektren linearer Abbildungen. Mit der nichthermiteschen Beschreibung offener Quantensysteme lässt sich einem EP auch physikalische Bedeutung zuweisen. Im Folgenden wird zunächst kurz auf die mathematischen Eigenschaften von Verzweigungspunkten eingegangen, bevor die Eigenschaften von EPs im physikalischen Kontext diskutiert werden.

► *Verzweigungspunkte analytischer Funktionen*

Holomorphe Funktionen  $f(z)$  können sowohl einen als auch mehrere Werte an einer bestimmten Stelle  $z = z_0$  in der komplexen Ebene annehmen. Bei Mehrwertfunktionen hängt der Funktionswert bei  $z_0$  dann vom gewählten Weg in der analytischen Fortsetzung ab. Man spricht dann von verschiedenen Verzweigungen der Funktion  $f$ . Beispiele für Mehrwertfunktionen im Komplexen sind die Umkehrfunktionen der analytischen Fortsetzungen von trigonometrischen, hyperbolischen, exponentiellen und Potenzfunktionen mit ganzzahligen Exponenten. Die konsistente Handhabung solcher Funktionen erfordert die Einführung von Verzweigungsschnitten oder von Riemann-Flächen. Als Verzweigungspunktsingularitäten werden in diesen Konzepten nun diejenigen Punkte bezeichnet, an denen sich zwei oder mehr Verzweigungen zusammenfügen lassen, da die Funktionswerte der verschiedenen Verzweigungen dort übereinstimmen. Wenn man beispielsweise die komplexe Erweiterung der Wurzelfunktion  $f(z) = \sqrt{z}$  betrachtet, so besitzt die im Allgemeinen mehrwertige Funktion bei  $z_0 = 0$  nur den Funktionswert  $f(0) = 0$ .  $z_0 = 0$  ist ein Verzweigungspunkt.

► *Exzeptionelle Punkte im physikalischen Kontext*

Als *exzeptioneller Punkt* (EP) wird nun ein Verzweigungspunkt bezeichnet, der in linearen Abbildungen, die von einem komplexwertigen Parameter  $\kappa$  abhängen, auftritt. Betrachtet man zum Beispiel die parameterabhängige, auf einem Gebiet  $D$  der komplexen Ebene holomorphe, lineare Abbildung  $\mathbf{T}(\kappa) : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ , so gilt für die Eigenwerte  $\lambda$  die Bestimmungsgleichung

$$\det(\mathbf{T}(\kappa) - \lambda \mathbf{1}) = 0. \quad (2.72)$$

Dies ist eine algebraische Gleichung vom Grad  $n$ . Die Lösungen  $\lambda(\kappa)$  sind dann auf dem Gebiet  $D$  entweder holomorphe Funktionen oder aber Verzwei-

gungen holomorpher Funktionen mit ausschließlich algebraischen Singularitäten. EPs sind nun diese Verzweigungspunktsingularitäten der holomorphen Funktionen.

Bei der Annäherung an einen EP  $\kappa_{EP}$ , der als isolierter Punkt im Parameterraum für  $\kappa$  auftritt, laufen zwei ursprünglich zu unterschiedlichen Verzweigungen einer holomorphen Funktion gehörende Eigenwerte zusammen. Sie sind in dem Sinne exzeptionell, also außerordentlich, dass sich die Anzahl verschiedener, im betrachteten System auftretender Eigenwerte genau bei  $\kappa_{EP}$  verringert. EPs unterscheiden sich aber wesentlich von einfachen Entartungen wie sie auch bei hermiteschen Systemen auftreten, bei denen ebenfalls Eigenwerte aufeinanderfallen können. Bei Entartungen in hermiteschen Systemen unterscheiden sich grundsätzlich die zugehörigen Eigenvektoren. Am EP existiert zu den entarteten Eigenwerten jedoch lediglich ein linear abhängiger Eigenvektor. Die Dimension des Eigenraums ist am EP also verringert. In der Matrixdarstellung bilden die Eigenwerte und -vektoren einen Jordanblock.

EPs zeigen eine weitere, unter anderem für ihren Nachweis wichtige Eigenschaft. Wird ein EP mit einem kleinen Radius im komplexen Parameterraum von  $\kappa$  umrundet, so treten bei Untermengen der parameterabhängigen Eigenwerte zyklische Vertauschungen auf. Erst nach  $p$  Umrundungen im Parameterraum kehren die Eigenwerte an ihre ursprüngliche Position zurück. Diese Vertauschungen treten nur für Untermengen der Eigenwerte auf. Alle restlichen Eigenwerte kehren bereits nach einer Umrundung wieder an ihre ursprüngliche Position zurück. Ist  $p = 2$ , so spricht man verkürzt von einem EP<sub>2</sub>, für  $p = 3$  von einem EP<sub>3</sub> und so weiter. Die Resonanzvertauschung ist außerdem mit dem Auftreten einer geometrischen Phase in den zu den vertauschenden Eigenwerten gehörenden Eigenvektoren bei Umrundung verknüpft. Für den Fall einer komplex-symmetrischen Matrix, dem im physikalischen Kontext häufigsten, wird bei einem EP<sub>2</sub> einer der beiden Eigenvektoren nach einer Umrundung mit  $(-1)$  multipliziert.

In früheren theoretischen Untersuchungen wurde die Existenz von EPs bereits in Atom- [32–35] und Molekülspektren [36], bei der Streuung von Teilchen an Potentialbarrieren [37], in Atomwellen [38–41] und in offenen Bose-Hubbard-Systemen [42] gezeigt. Außerdem treten sie in instabilen Lasern [43], Resonatoren [44] und Lichtleitern [45, 46] auf. Experimentell wurden sie in Mikrowellenkavitäten [14, 47, 48], Metamaterialien [49], photonischen Kristallen [50], elektronischen Schaltungen [51] und in chaotischen Exziton-Polariton-Systemen [52] nachgewiesen.

### 2.3.3 Beispiel zur Zustandsvertauschung in einer nichthermiteschen linearen Abbildung

Im Folgenden wird ein einfaches Beispiel einer nichthermiteschen linearen Abbildung  $\mathbf{M}$  diskutiert, anhand deren die Eigenschaften von EPs veranschaulicht werden können [11]. Die Abbildung sei als zweidimensionale, von einem komplexwertigen Parameter  $\kappa$  abhängige Matrix gegeben durch

$$\mathbf{M}(\kappa) = \begin{pmatrix} 1 & \kappa \\ \kappa & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.73)$$

Die Eigenwerte von  $\mathbf{M}$  sind zwei Verzweigungen einer holomorphen Funktion und gegeben durch

$$\lambda_1(\kappa) = \sqrt{1 + \kappa^2}, \quad (2.74a)$$

$$\lambda_2(\kappa) = -\sqrt{1 + \kappa^2}. \quad (2.74b)$$

Die zugehörigen Eigenvektoren sind

$$\mathbf{v}_1(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1 - \sqrt{1 + \kappa^2} \end{pmatrix}, \quad (2.75a)$$

$$\mathbf{v}_2(\kappa) = \begin{pmatrix} -\kappa \\ 1 + \sqrt{1 + \kappa^2} \end{pmatrix}. \quad (2.75b)$$

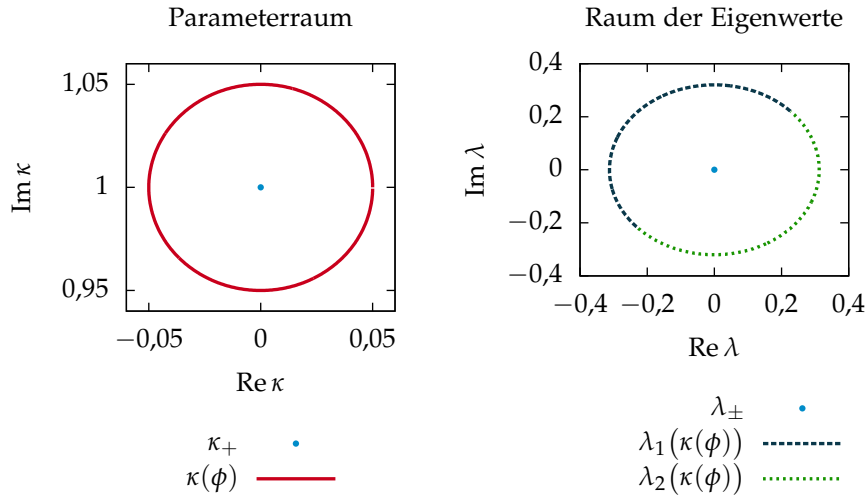
Im durch  $\mathbf{M}$  beschriebenen System treten die zwei EPs  $\kappa_{\pm} = \pm i$  auf. Hierfür stimmen nicht nur die Eigenwerte  $\lambda_1(\pm i) = \lambda_2(\pm i) = 0$  überein, sondern es existiert auch nur noch der linear abhängige Eigenvektor

$$\mathbf{v}(\pm i) = \begin{pmatrix} \mp i \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.76)$$

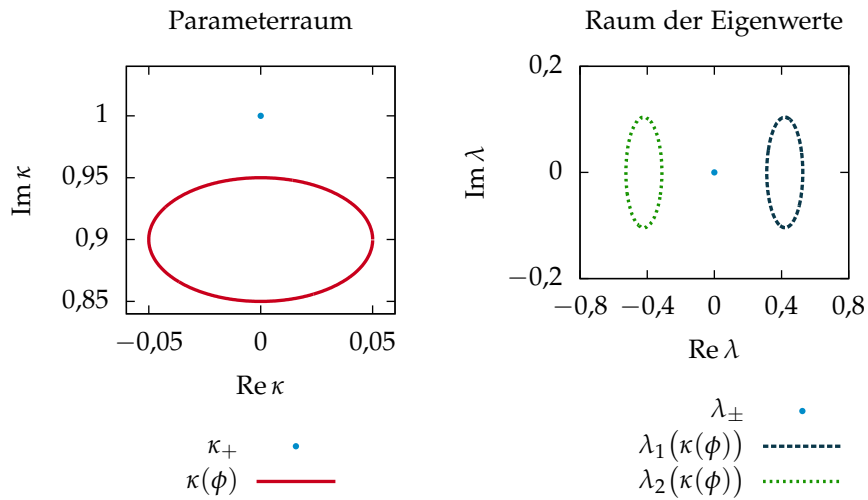
Um das im vorigen Abschnitt erwähnte, charakteristische Vertauschungsverhalten der Eigenwerte bei Umrundung des EPs  $\kappa_+$  im Parameterraum zu untersuchen, wird die Parametrisierung

$$\kappa(\phi) = i + r \exp(i\phi) \quad (2.77)$$

mit dem Radius  $r$  gewählt. Die Umrundung im Parameterraum und die jeweils zugehörigen Eigenwerte sind in Abbildung 2.5 dargestellt. Wird der EP in die Umrundung eingeschlossen, so vertauschen die Eigenwerte für eine Umrundung im Parameterraum die Plätze. Erst nach zwei Umrundungen kehren sie zu ihrem Ausgangspunkt zurück. Wird der EP nicht eingeschlossen, tritt dieses Verhalten nicht auf.



(a) Umrundung im Parameterraum, bei der der EP  $\kappa_+$  eingeschlossen wird. Im Raum der Eigenwerte vertauschen  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$ .



(b) Umrundung im Parameterraum, bei der der EP  $\kappa_+$  nicht eingeschlossen wird. Die Eigenwerte  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  kehren nach einer Umrundung an ihre Ausgangsposition zurück.

■ **Abbildung 2.5.** Umrundung eines Punktes im Parameterraum mit Radius  $r = 0,05$  und zugehörige Eigenwerte  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  der Abbildung  $\mathbf{M}$ . Wird der EP bei  $\kappa_+ = i$  in die Umrundung eingeschlossen, so ergibt sich das charakteristische Vertauschungsverhalten der Eigenwerte.



Dieses Verhalten lässt sich in diesem einfachen Modell auch analytisch finden. Für die Eigenwerte ergibt sich in einer Entwicklung für  $r \ll 2$

$$\begin{aligned}\lambda_1(\kappa(\phi)) &= \sqrt{1 + (i + r \exp(i\phi))^2} = \sqrt{r} \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \sqrt{2i + r \exp(i\phi)} \\ &\approx \sqrt{2r} \exp\left[i\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2}\right)\right]\end{aligned}\quad (2.78a)$$

und

$$\lambda_2(\kappa(\phi)) \approx -\sqrt{2r} \exp\left[i\left(\frac{5\pi}{4} + \frac{\phi}{2}\right)\right]. \quad (2.78b)$$

Auch hier wird deutlich, dass aufgrund des Faktors  $1/2$  vor der Variable  $\phi$  die Eigenwerte für eine Umkreisung mit  $\phi = 0 \dots 2\pi$  gerade vertauschen und für zwei Umrundungen für  $\phi = 4\pi$  wieder an ihren Ursprungsort in der komplexen Ebene zurückkehren.



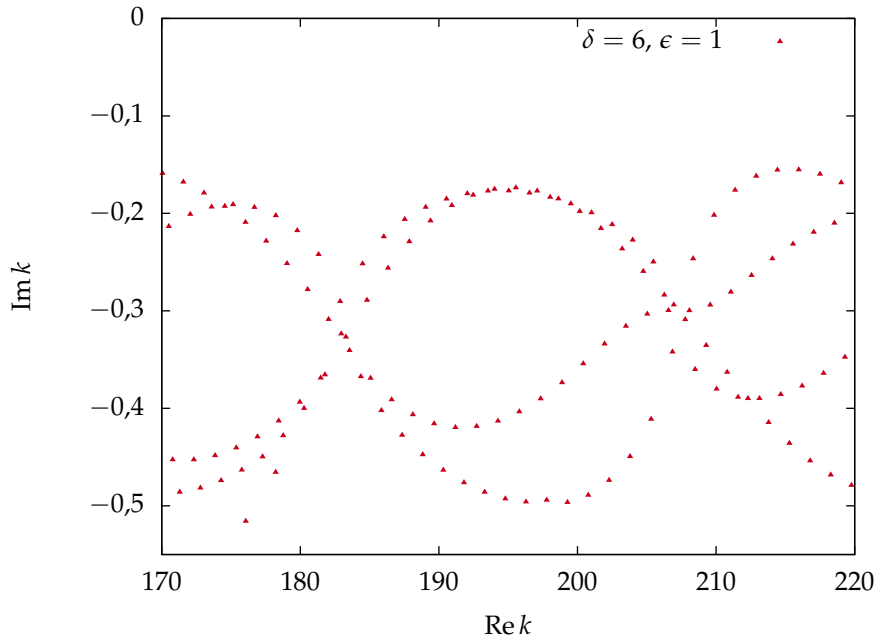
## METHODEN UND ERGEBNISSE

### 3.1 ERWEITERTES ELLIPTISCHES DREI-SCHEIBEN-BILLARD

Das Spektrum des Drei-Scheiben-Billards – wie in Abbildung 3.1 für einen Scheibenabstand von  $\delta = 6$  und einen Ausschnitt zwischen  $\text{Re } k_{\min} = 170$  und  $\text{Re } k_{\max} = 220$  gezeigt – besteht aus isolierten Resonanzen in der unteren komplexen Halbebene. Bei kontinuierlicher Variation des Abstands der kreisförmigen Scheiben aus Abbildung 2.2 verschieben sich auch die Resonanzen in der komplexen Ebene. Für das Auffinden exzeptioneller Punkte, also dem Verschmelzen zweier Resonanzen in der komplexen Ebene, zusammen mit den zugehörigen Zuständen, sind jedoch ein komplexer oder zwei reelle Parameter vonnöten.

Bei der semiklassischen Quantisierung des Drei-Scheiben-Billards über periodische Bahnen handelt es sich zunächst um ein geometrisches Problem. Die Einführung eines komplexen Parameters ist also nicht sinnvoll. Die Erweiterung soll die  $C_{3v}$ -Symmetrie des Systems erhalten, um die symmetriereduzierte symbolische Dynamik bei der Berechnung der periodischen Bahndaten weiterhin anwenden zu können.

Eine mögliche Erweiterung bestünde in der Variation des Radius' der Scheiben. Die Form der periodischen Bahnen bleibt davon allerdings nahezu unbeeinflusst, was eine gezielte Veränderung des komplexen Spektrums unmöglich macht. Es wird daher zu einer elliptischen Form der Scheiben übergegangen. Hierzu wird der reelle Parameter  $\epsilon$  eingeführt, der die Länge der großen Halbachse der elliptischen Scheibe bestimmt. Die Länge der kleinen Halbachse wird auf der Länge 1 festgehalten. Die großen Halbachsen zeigen zum Symmetriemittelpunkt, um die  $C_{3v}$ -Symmetrie des ursprünglichen Systems zu erhalten. Der zweidimensionale Parameterraum wird nun also durch die Parameter  $\delta$ , dem Abstand der Mittelpunkte der elliptischen Scheiben, und  $\epsilon$  aufgespannt. Eine Skizze des so erweiterten Systems ist in Abbildung 3.2 gezeigt.



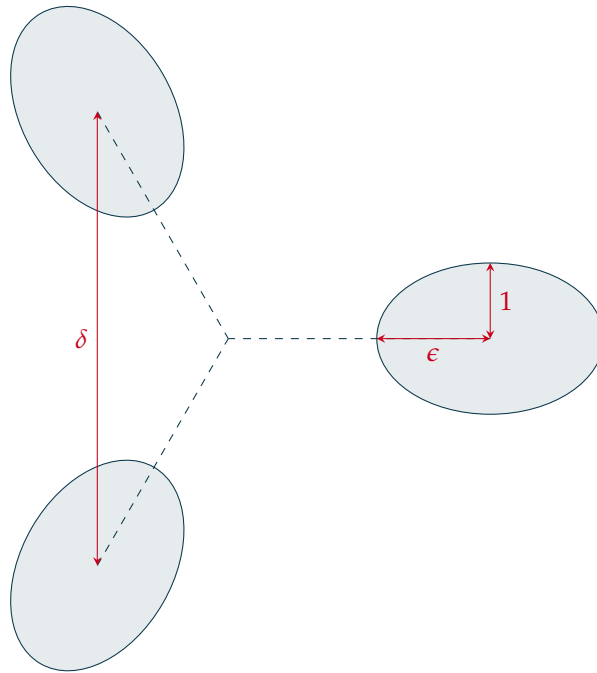
■ *Abbildung 3.1.* Ausschnitt des Spektrums des Drei-Scheiben-Billard mit kreisförmigen Scheiben zentriert um einen bereits relativ hohen Realteil der Wellenzahl  $\text{Re } k_0 = 195$  und einer Fensterbreite von  $2\Delta k = 50$ . Die Resonanzen werden semiklassisch mit der Gutzwiller-Spurformel und bandlimitierter harmonischer Inversion berechnet.

### 3.2 BERECHNUNG DER RESONANZEN

Der Prozess, um die semiklassischen Resonanzen im elliptischen Drei-Scheiben-Billard zu berechnen, gliedert sich in drei Schritte. Zunächst muss die symbolische Dynamik der periodischen Bahnen bestimmt werden; in diesem Fall wird die symmetriereduzierte symbolische Dynamik verwendet. Im zweiten Schritt müssen für alle Bahnen der bestimmten symbolischen Dynamik die Bahndaten der entsprechenden periodischen Bahnen berechnet werden. Daraus werden die Signalpunkte für die im dritten Schritt durchgeführte bandlimitierte harmonische Inversion festgelegt.

#### 3.2.1 Bestimmung der symbolischen Dynamik

Die symbolische Dynamik der periodischen Bahnen – also die Sequenz, in der die Scheiben 1 bis 3 periodisch durchlaufen werden – muss so bestimmt werden, dass alle Bahnen bis zu einer maximalen Wirkung  $S_{\max}$ , für ein Billardsystem also bis zu einer maximalen geometrischen Länge  $L_{\max}$ , beinhaltet sind. In der konkreten numerischen Umsetzung wird hierzu die symmetriereduzierte Bezeichnung einer Sequenz unter Verwendung der Symbole  $\underline{0}$  und  $\underline{1}$

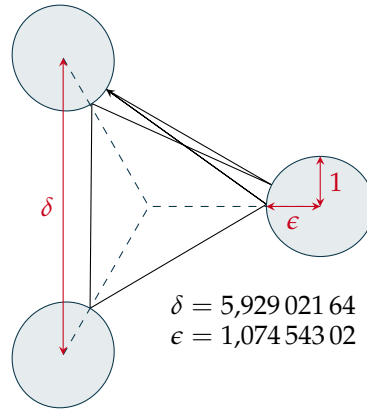


■ *Abbildung 3.2.* Skizze des erweiterten Drei-Scheiben-Billardsystems mit elliptischen Scheiben. Der zweidimensionale Parameterraum zur kontinuierlichen Variation des Systems besteht aus dem Abstand  $\delta$  der Scheiben und der Länge  $\epsilon$  der großen Halbachsen der elliptischen Scheiben. Die Länge der kleinen Halbachsen wird bei 1 festgehalten. Die großen Halbachsen zeigen zum Symmetriemittelpunkt, damit das System weiterhin eine  $C_{3v}$ -Symmetrie aufweist.

und eine maximale Symbollänge  $\ell_{\max}$  – wie in Abschnitt 2.2.2 beschrieben – vorgegeben. Das Prinzip zum Auffinden der 01-Sequenzen der symmetriereduzierten Bahnen mit Ausschluss von verschiedenen Sequenzen, die zu denselben physikalischen Bahnen führen, wird dort ebenfalls diskutiert.

Die so gefundenen symmetriereduzierten Sequenzen führen jedoch bei der konkreten Berechnung nicht automatisch bei einem Durchlauf zu einer geschlossenen Bahn. Teilweise wären dafür mehrere Durchläufe der symmetriereduzierten Sequenz nötig. Die symmetriereduzierten Bahnen sind erforderlich zur Berechnung der Resonanzen in den symmetriereduzierten Unterräumen. Im Folgenden werden nur die Resonanzen im Unterraum  $A_1$  betrachtet. Die Verwendung symmetriereduzierter Bahnen sorgt außerdem für eine numerisch stabilere Minimierung der Bahn, da die zu minimierende skalare Funktion von weniger Variablen abhängt, die außerdem keine triviale Abhängigkeit mehr besitzen wie dies bei Mehrfachdurchläufen der Fall wäre.

Zur korrekten Berechnung des semiklassischen Signals, welche in den folgenden Abschnitten diskutiert wird, reicht jedoch die Kenntnis der Bahn-



■ *Abbildung 3.3.* Periodische Bahn im Gesamtraum zur Sequenz 1212123. Im Vergleich zur gleichen Sequenz für  $\epsilon = 1$  aus Abbildung 2.3(d) ändert sich die periodische Bahn bei einer leichten Veränderung der Parameter ebenfalls nur unmerklich.

daten der symmetriereduzierten Bahnen aus. Zur korrekten Bestimmung der physikalischen Bahn durch Minimierung muss jedoch nach dem einfachen Durchlaufen der  $01$ -Sequenz vor dem Anfang und nach dem Ende der Sequenz je ein zusätzlicher Reflexionspunkt hinzugefügt werden. Der Winkel  $\phi_0$  des Reflexionspunkts an der vor dem Beginn der Sequenz hinzugefügten Scheibe wird mit dem Winkel letzten Scheibe  $\phi_\ell$  der Sequenz identifiziert, der Winkel  $\phi_{\ell+1}$  der nach dem Ende der Sequenz hinzugefügten Scheibe mit  $\phi_1$ .

### 3.2.2 Berechnung der Bahndaten periodischer Bahnen

Ziel dieses Schritts ist die Bestimmung der benötigten Bahndaten der periodischen Bahnen, deren symbolische Dynamik zuvor bestimmt wurde, um das bandlimitierte semiklassische Signal  $C_{\text{bl}}^{\text{scl}}(s)$  aus Gleichung (2.45) auf einem Gitter der Wirkung  $s$  zu berechnen. Wie bereits in den theoretischen Grundlagen diskutiert, ist die Wirkung einer periodischen Bahn in einem Billardsystem schlicht durch die Länge  $L_{\text{po}}$  der Bahn gegeben. Die Länge einer Bahn der Symbollänge  $\ell$  für einen bestimmten Parametersatz  $(\delta, \epsilon)$  unter Vorgabe einer symbolischen Sequenz  $\{b_1, \dots, b_\ell\}$  besteht aus der Summe der einzelnen Teilstücke und ist ausgedrückt durch die Reflexionswinkel an den jeweiligen elliptischen Scheiben gegeben durch

$$L(\delta, \epsilon, \{b_1, \dots, b_{\ell_{\text{po}}}\}, \{\phi_1, \dots, \phi_{\ell_{\text{po}}}\}) = \sum_{j=1}^{\ell_{\text{po}}} \|\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j\| \quad (3.1)$$

mit

$$\mathbf{x}_j = \mathbf{r}_{b_j}^\delta + \mathbf{R}_{b_j} \begin{pmatrix} \epsilon \cos \phi_j \\ \sin \phi_j \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

$\mathbf{r}_1^\delta, \mathbf{r}_2^\delta$  und  $\mathbf{r}_3^\delta$  sind die für einen Wert von  $\delta$  festen Mittelpunkte der elliptischen Scheiben 1 bis 3. Die Reflexionspunkte selbst sind dann in entsprechend lokalen elliptischen Koordinaten mit einer um  $\epsilon$  gestreckten großen Halbachse gegeben. Die zu den Scheiben gehörenden zweidimensionalen Rotationsmatrizen

$$\mathbf{R}_i = \begin{pmatrix} \cos \theta_i & -\sin \theta_i \\ \sin \theta_i & \cos \theta_i \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

drehen den nachfolgenden Vektor um den Winkel  $\theta_i$ , sodass für  $\phi_j = 0$  der Reflexionspunkt gerade am Punkt mit dem kürzesten Abstand zum Symmetriemittelpunkt und damit auf der großen Halbachse der Ellipse liegt. Es ist also  $\theta_1 = \pi$ ,  $\theta_2 = -\pi/3$  und  $\theta_3 = \pi/3$ . Wie bereits im Grundlagenteil beschrieben ist die physikalische periodische Bahn zu einer Sequenz  $\{b_1, \dots, b_\ell\}$  mit den korrekten Ein- und Ausfallswinkeln bei den Reflexionen diejenige mit der minimalen Länge  $L_{\text{po}}$ . Das sich stellende numerische Problem zur Bestimmung der periodischen Bahn ist also die Minimierung der skalaren Funktion  $L$  mit  $\ell_{\text{po}}$  Parametern. Angaben zur verwendeten Funktion und die analytische Ableitung der Gesamtlänge aus Gleichung (3.1) sind im Anhang in Abschnitt A.1 zu finden. Abbildung 3.3 zeigt beispielhaft eine periodische Bahn für eine Sequenz der Symbollänge  $\ell = 7$ .

Außerdem werden die Eigenwerte der Monodromiematrix  $\mathcal{M}_{\text{po}}$  der periodischen Bahn benötigt. Da bei Billardsystemen die potentielle Energie zwischen den Reflexionen verschwindet, tragen nur die Längen der Segmente und die Kollisionen selbst zu  $\mathcal{M}_{\text{po}}$  bei [53]. Die Monodromiematrix einer periodischen Bahn der Symbollänge  $\ell_{\text{po}}$  ergibt sich als Matrixprodukt aus den einzelnen Beiträgen zu

$$\mathcal{M}_{\text{po}} = M_{\ell+1}^t M_\ell^r M_\ell^t \dots M_1^r M_1^t. \quad (3.4)$$

$M_i^t$  ist der Beitrag des  $i$ -ten Trajektoriensegments,  $M_i^r$  der Beitrag der Reflexion nach dem  $i$ -ten Segment. Sie sind jeweils gegeben durch

$$M_i^t = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ L_i & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad M_i^r = - \begin{pmatrix} 1 & b_i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

mit der Länge  $L_i$  des  $i$ -ten Segments und  $b_i = (r_i \cos \gamma_i)^{-1}$ , wobei  $r_i$  der Krümmungsradius und  $\gamma_i$  der Reflexionswinkel an der  $i$ -ten Scheibe ist [53].

Die Gleichung zur Bestimmung des Krümmungsradius' eines Punktes auf einer Ellipse ist im Anhang in Abschnitt A.2 aufgeführt. Die Eigenwerte  $\lambda$  der resultierenden  $2 \times 2$ -Matrix können einfach berechnet werden. Da  $\mathcal{M}_{\text{po}}$  symplektische Struktur aufweist, sind die beiden Eigenwerte reziprok zueinander.

Des Weiteren wird der Maslovindex benötigt. Bei Billardsystemen erhöht er sich um 2 bei jeder Reflexion. Er ist also durch  $\sigma_{\text{po}} = 2\ell_{\text{po}}$  gegeben [54]. Der Maslovindex geht als Phase in das Signal ein. Eingesetzt ergibt sich also entweder der Vorfaktor 1 für hyperbolische oder  $-1$  für invershyperbolische periodische Bahnen.

Das zu berechnende bandlimitierte Signal des vorliegenden Billardsystems, dessen allgemeine Form bereits im Abschnitt vor Gleichung (2.45) hergeleitet wurde, lautet also insgesamt

$$C_{\text{bl}}^{\text{scl}}(L) = \sum_{\text{ppo}} \sum_{r=1}^{r_{\text{max}}} \mathcal{A}_{\text{po}} \frac{\sin[(L - rL_{\text{po}})\Delta k]}{\pi(L - rL_{\text{po}})} \exp(irL_{\text{po}}k_0) \quad (3.6)$$

mit der Amplitude

$$\mathcal{A}_{\text{po}} = \frac{L_{\text{ppo}}(-1)^{r\ell_{\text{po}}}}{|(1 - \lambda_{\text{ppo}}^r)(1 - 1/\lambda_{\text{ppo}}^r)|}. \quad (3.7)$$

Konkret berechnet werden also nur die Bahndaten zu den primitiv-periodischen Bahnen (indiziert mit ppo). Die Mehrfachdurchläufe werden über die Summe in  $r$  bis  $r_{\text{max}}$  aufsummiert.  $r_{\text{max}}$  ist dabei so gewählt, dass der  $r_{\text{max}}$ -fache Umlauf der kürzesten primitiv-periodischen Bahn mindestens der Länge der längsten primitiv-periodischen Bahn der Symbollänge  $\ell_{\text{max}}$  entspricht. So ist sichergestellt, dass alle Bahnen bis zu einer maximalen geometrischen Länge  $L_{\text{max}}$  zum Signal beitragen. Bahnen mit  $L_{\text{po}} > L_{\text{max}}$  werden verworfen.

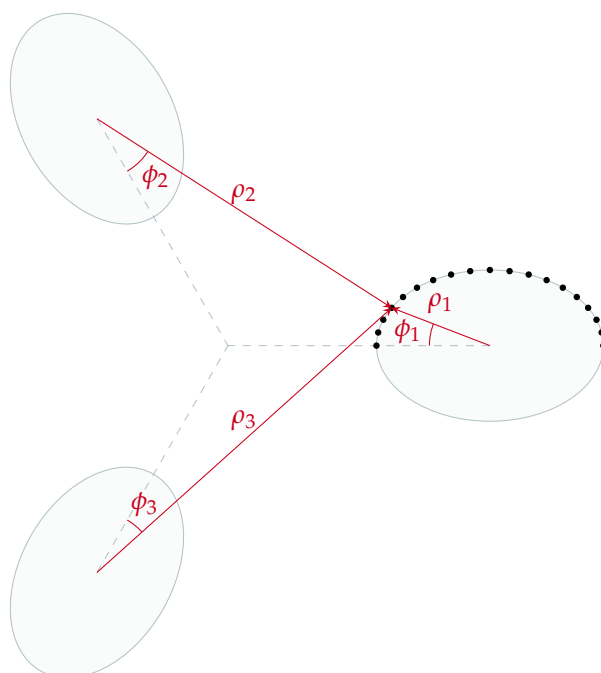
### 3.2.3 Bandlimitierte harmonische Inversion

Um die quantenmechanischen Resonanzen schließlich zu berechnen, wird die harmonische Inversion, wie in Abschnitt 2.1.2 vorgestellt, durchgeführt. Die Signalepunkte  $c_n$  werden auf einem Gitter

$$L_n \equiv n\tau = n \frac{L_{\text{max}}}{2K} \quad (3.8)$$

für Gleichung (3.6) ausgewertet und bis zur maximalen betrachteten Länge  $L_{\text{max}}$  berechnet. Die Anzahl  $K$  der Signalepunkte sollte dabei mindestens der Anzahl der Resonanzen im betrachteten Fenster  $[k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k]$  entsprechen.  $K$  bestimmt damit auch die Dimension des zu lösenden nichtlinearen Gleichungssystems. In der konkreten Implementierung liegt  $K$  in der Größenordnung von 50 bis 200. Als Maximallänge der periodischen Bahnen





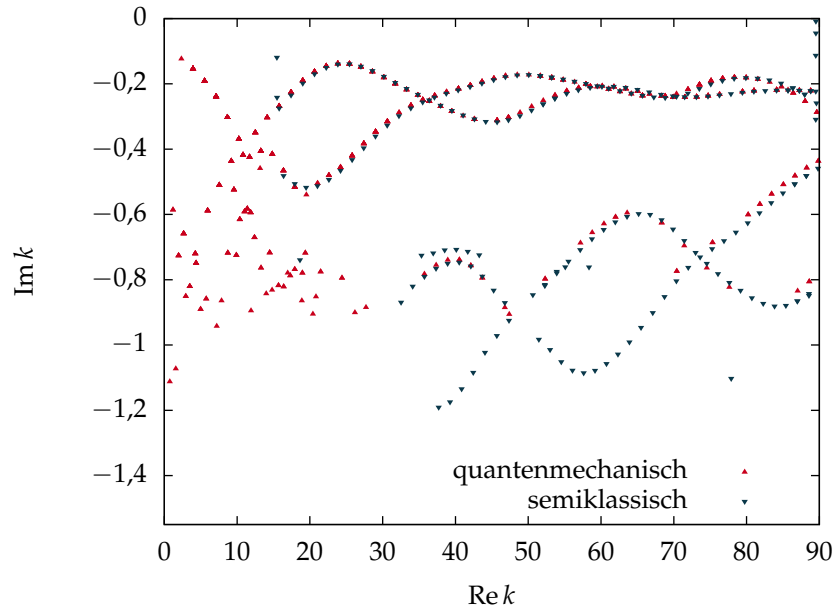
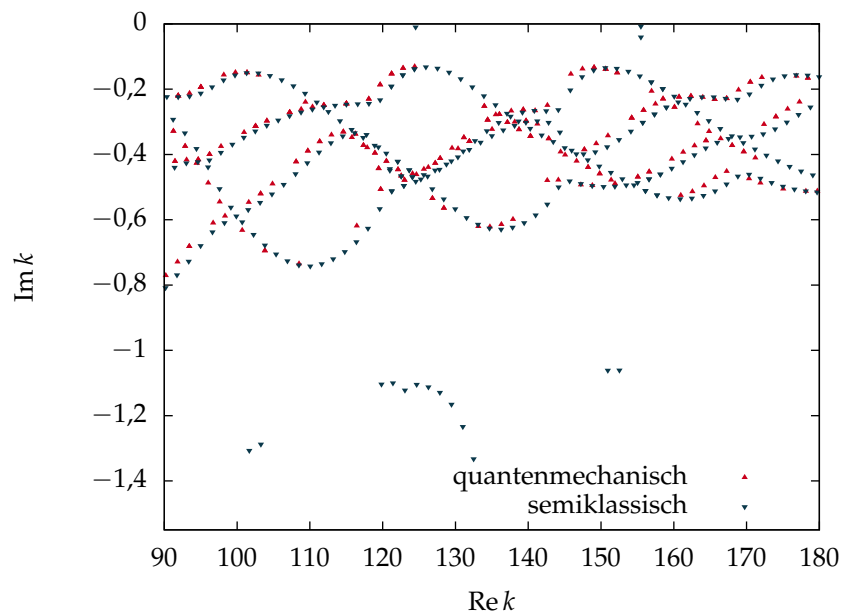
■ *Abbildung 3.4.* Diskretisierung der Berandung zur quantenmechanischen Berechnung von komplexen Eigenenergien im elliptischen Drei-Scheiben-Billard. Auf den Randpunkten muss die Wellenfunktion verschwinden. Aus Symmetriegründen genügt es, lediglich die Hälfte einer Scheibe zu diskretisieren und jeden Punkt in lokalen Polarkoordinaten ausgehend von den Mittelpunkten der drei Scheiben darzustellen. Die Anzahl der Randpunkte bestimmt die Anzahl der Spalten der Matrix  $\mathbf{A}(k)$ , deren Determinante für die gesuchten Resonanzen verschwinden muss.

wird  $L_{\max} = 52$  gewählt, sodass für Parameterwerte nahe der Konfiguration ( $\delta = 6, \epsilon = 1$ ) eine Berechnung der Bahndaten der periodischen Bahnen bis zu einer maximalen Symbollänge von  $\ell_{\max} = 13$  ausreichend ist.

Bei der bandlimitierten Implementierung der harmonischen Inversion ergibt sich aus der Maximallänge  $L_{\max}$  unmittelbar die Breite des Frequenzfensters über

$$\Delta k = \frac{\pi}{\tau} = \frac{2\pi K}{L_{\max}}. \quad (3.9)$$

Mit den gewählten Werten für  $K$  und  $L_{\max}$  von oben ergibt sich also eine Fensterbreite zwischen  $2\Delta k = 12,08$  und  $2\Delta k = 48,33$ . Das sich ergebende  $K$ -dimensionale Gleichungssystem wird, wie in Abschnitt 2.1.2 diskutiert, mittels Padé-Approximation gelöst.

(a) Vergleich für kleine Realteile der Wellenzahl  $k$ .(b) Vergleich für große Realteile der Wellenzahl  $k$ .

■ **Abbildung 3.5.** Vergleich des semiklassisch mit dem quantenmechanisch berechneten Spektrum des elliptischen Drei-Scheiben-Billard für die Parameter  $\delta = 5,92896$  und  $\epsilon = 1,07454$ . Es zeigt sich gute Übereinstimmung für niedrige Real- und Imaginärteile der Wellenzahl  $k$ . Für große Realteile von  $k$  konvergiert die quantenmechanische Berechnung nur schlecht.

## 3.3 EXAKT QUANTENMECHANISCHE VERGLEICHSRECHNUNGEN

Statt der semiklassischen Berechnung über die Gutzwiller-Spurformel, die – wie bereits ausführlich diskutiert – auf Sattelpunktnäherungen des quantenmechanischen Propagators aufbaut, kann auch die stationäre Schrödingergleichung direkt numerisch gelöst werden. Innerhalb des Drei-Scheiben-Billardsystems ist  $V = 0$  und es gilt

$$(\Delta + k^2)\psi = 0 \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.10)$$

Auf den Berandungen der elliptischen Scheiben muss die Wellenfunktion  $\psi$  identisch verschwinden. Gleichung (3.10) muss also unter Beachtung dieser Randbedingung gelöst werden.

Als Ansatz für die Wellenfunktionen wird

$$\psi(x, y) = \sum_{i=1}^3 \sum_m c_m \left[ H_m^{(1)}(k\rho_i(x, y)) \cos(m\phi_i(x, y)) \right] \quad (3.11)$$

gewählt.  $H_m^{(1)}$  bezeichnet die  $m$ -te Hankelfunktion erster Art. Die Hankelfunktionen – auch Besselfunktionen dritter Art genannt – sind als komplexe Superposition der Besselfunktionen erster und zweiter Art über

$$H_m^{(1)}(x) = J_m(x) + iY_m(x) \quad (3.12)$$

gegeben und lösen daher ebenfalls die Besselsche Differentialgleichung. Die Besselgleichung ist der radiale Anteil der Laplacegleichung in zylindrischer Symmetrie. Die Hankelfunktionen stellen einen Ansatz für den retardierten (auslaufenden) Anteil der Wellenfunktion im gesamten Streuproblem dar. Im Ansatz beinhaltet ist die erforderliche Asymptotik  $H^{(1)} \sim \exp(ix)$ .  $(\rho_i, \phi_i)$  bezeichnet ein Koordinatensystem in lokalen Polarkoordinaten vom Mittelpunkt der Scheibe  $i$  aus gesehen.

Um nun eine numerische Lösung von Gleichung (3.10) mit der Randbedingung zu ermöglichen und damit die komplexen Wellenzahlen  $k$  zu bestimmen, wird *die Hälfte der Berandung einer elliptischen Scheibe* diskretisiert. Weitere Diskretisierungspunkte auf anderen Rändern würden aus Symmetriegründen offensichtlich zu gleichen Beiträgen in Gleichung (3.11) führen. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird für die Berechnung der Berandung die obere Hälfte von Scheibe 1 gewählt. Die Wahl der Koordinaten und die Diskretisierung der Berandung sind in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt. An jedem der diskreten Randpunkte  $(x^n, y^n)$  muss  $\psi$  verschwinden. Wird die Berandung in  $N$  Punkte diskretisiert, so ergeben sich die  $K$  Gleichungen

$$\psi(x^n, y^n) = \sum_{i=1}^3 \sum_{m=0}^M c_m \left[ H_m^{(1)}(k\rho_i^n(x, y)) \cos(m\phi_i^n(x, y)) \right] \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.13)$$

Die  $m$ -Quantenzahlen werden hierbei ebenfalls nur bis zu einem maximalen  $M$  mitgenommen. Dies ist ein lineares Gleichungssystem

$$A_{nm}(k)c_m = 0 \quad (3.14)$$

mit den Matrixelementen

$$A_{nm}(k) = \sum_{i=1}^3 \left[ H_m^{(1)} \left( k\rho_i^n(x, y) \right) \cos \left( m\phi_i^n(x, y) \right) \right], \quad (3.15)$$

das lösbar ist, wenn

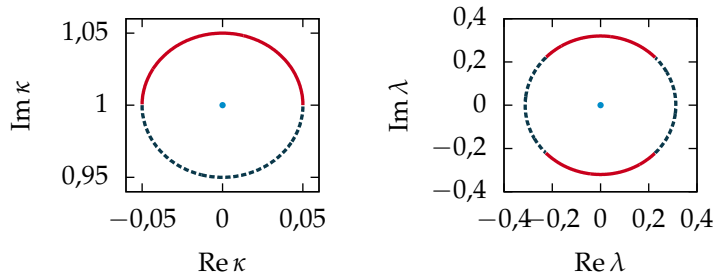
$$\det \mathbf{A}(k) = 0 \quad (3.16)$$

gilt. Um eine symmetrische Matrix zu erhalten, wird  $M = N$  gewählt. Das Problem der Bestimmung der komplexen Resonanzen  $k$  wurde also auf die Nullstellensuche der Determinante einer  $N \times N$ -Matrix zurückgeführt.

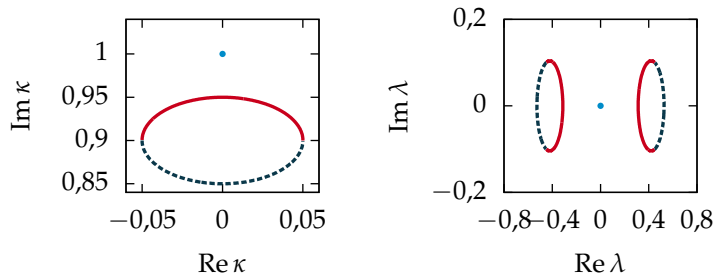
Die Determinantenberechnung großer Matrizen und die Nullstellensuche in der komplexen Ebene sind numerisch aufwendige Aufgabenstellungen. Um Konvergenz zu erreichen, muss ein Startwert in der Nähe der Nullstelle gewählt werden. Es ist möglich, die Startwerte auf einem Gitter in der komplexen Ebene äquidistant zu wählen oder aber die semiklassisch berechneten Resonanzen als Ausgangspunkt zu verwenden. Ein Vergleich der semiklassisch und quantenmechanisch berechneten ist in Abbildung 3.5 zu sehen. Für sehr kleine Realteile von  $k$  zeigt die semiklassische Berechnungsmethode schlechte Konvergenz. Für den Bereich von  $\text{Re } k = 20$  bis etwa  $\text{Re } k = 90$  und vergleichsweise kleine Imaginärteile zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den Berechnungsmethoden. Um Resonanzen mit großen Real- und Imaginärteilen zu berechnen, müssen viele Diskretisierungspunkte und Beiträge hoher  $m$ -Quantenzahlen berücksichtigt werden. Die Bestimmung der Determinante der auftretenden Matrix wird daher numerisch schwierig. Die Konvergenz der komplexen Nullstellensuche ist dementsprechend schlecht. Auch der Bereich um  $\text{Re } k = 195$ , wo sich die bei Umrundung des EPs vertauschenden Resonanzen befinden, ist quantenmechanisch nur mit großem numerischen Aufwand zugänglich, was die Bedeutung der semiklassischen Methoden veranschaulicht.

#### 3.4 SUCHE NACH EXZEPTIONELLEN PUNKTEN

Ziel ist es nun, aus einem aus isolierten Punkten bestehenden Spektrum (siehe Abbildung 3.1) durch Variation der Parameter  $\delta$  und  $\epsilon$  exzeptionelle Punkte zu finden. Als Charakteristikum exzeptioneller Punkte, das zur Identifikation verwendet werden soll, wird die in Abschnitt 2.3.3 diskutierte Zustandvertauschung bei Umkreisung des EP im Parameterraum verwendet.



(a) Umrundung im Parameterraum, bei der der EP  $\kappa = i$  eingeschlossen wird. Im Raum der Eigenwerte vertauschen  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$ .



(b) Umrundung im Parameterraum, bei der der EP  $\kappa = i$  nicht eingeschlossen wird. Die Eigenwerte  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  kehren nach einer Umrundung an ihre Ausgangsposition zurück.

■ **Abbildung 3.6.** Umrundung eines Punktes im Parameterraum im  $2 \times 2$ -Matrixmodell mit Radius  $r = 0,05$  und zugehörige Eigenwerte  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  mit zweifacher Einfärbung. Wird der EP bei  $\kappa = i$  in die Umkreisung eingeschlossen, so äußert sich die Zustandsvertauschung im Resonanzraum durch einen vierfachen Farbwechsel. Resonanzen, die nicht vertauschen, weisen lediglich einen zweifachen Farbwechsel auf.

### 3.4.1 Umrundung im Parameterraum

Im einfachen Beispiel des  $2 \times 2$ -Matrixmodells, das in Abbildung 2.5 dargestellt wird, lassen sich die Eigenwerte analytisch berechnen und daher einfach zuordnen. Anhand der Zuordnung lässt sich dann einfach das Vertauschungsverhalten im Resonanzraum beobachten. Für das elliptische Drei-Scheiben-Billard werden die Eigenwerte jedoch für jeden Parameterpunkt der Umkreisung numerisch berechnet. Eine Zuordnung der Resonanzen im Vergleich zum vorherigen Schritt der Umkreisung ist somit nicht mehr automatisch gegeben. Eine solche Zuordnung ließe sich zum einen anhand numerischer Kriterien, wann zwei Resonanzen in aufeinanderfolgenden Schritten der Umkreisung als einander zugehörig angesehen werden, umsetzen. So könnten zum Beispiel immer Resonanzen mit dem geringsten kartesischen Abstand einander zugeordnet werden. Eine solche Zuordnung ist jedoch im Prinzip

willkürlich und unter Umständen fehlerbehaftet, da einzelne Resonanzen in einzelnen Schritten der Umkreisung nicht konvergiert sein können.

Stattdessen wird eine Methode gewählt, die es erlaubt, eine Zustandsvertauschung auch ohne die schrittweise Verfolgung von Resonanzen bei Umkreisung zu identifizieren. Die Umkreisung im Parameterraum wird zweifarbig kodiert. Eine Umkreisung des Punktes  $(\delta_0, \epsilon_0)$  mit den Radien  $r_\delta$  und  $r_\epsilon$  im Parameterraum lässt sich durch

$$\begin{pmatrix} \delta_i \\ \epsilon_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_0 \cos \phi_i \\ \epsilon_0 \sin \phi_i \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

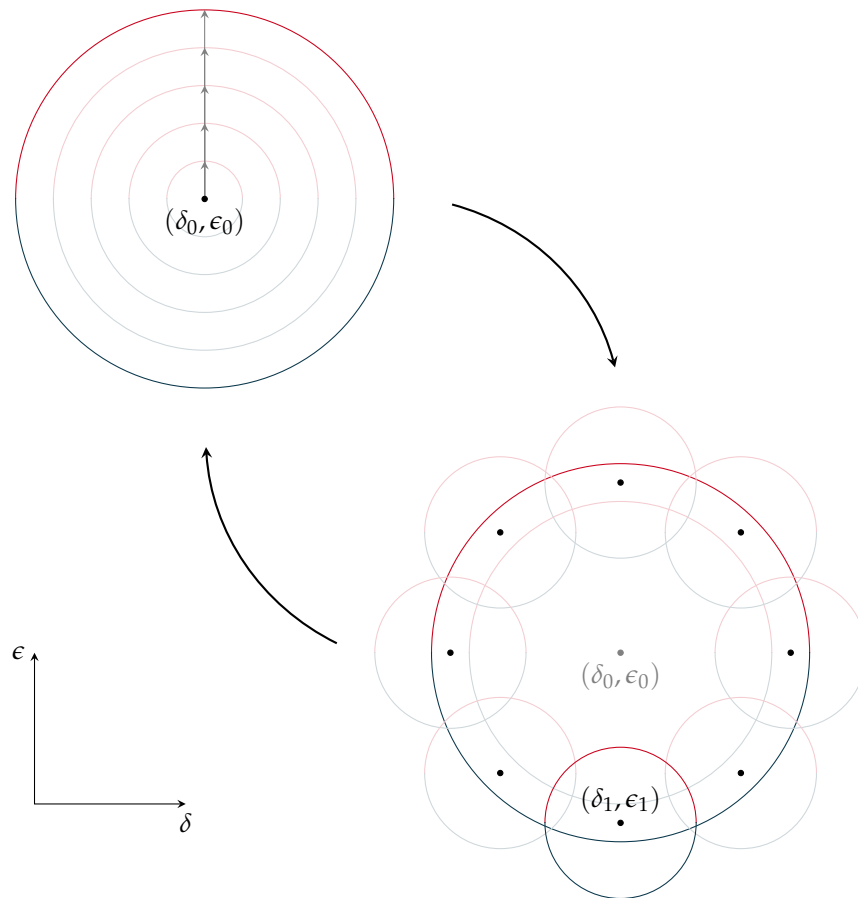
parametrisieren. Die zur ersten – also zu  $\phi = 0 \dots \pi$  – gehörende Hälfte der Umkreisung wird im Folgenden rot, die zur zweiten – also zu  $\phi = \pi \dots 2\pi$  – gehörende Hälfte der Umkreisung blau eingefärbt.

Im Raum der Resonanzen äußert sich eine solche Einfärbung folgendermaßen: Für eine Resonanz, die nach einer Umkreisung wieder zu ihrer Ausgangsposition zurückkehrt, also kein Vertauschungsverhalten zeigt, überträgt sich die Zweifärbung direkt auf den Resonanzraum. Die nichtvertauschende Resonanz zeigt also einen zweifachen Farbwechsel während der Umkreisung. Für ein Resonanzpaar, das Vertauschungsverhalten zeigt, zeigt sich jedoch ein vierfacher Farbwechsel entlang einer Umkreisung. Dieses Vorgehen wird anhand des einfachen Beispiels aus Abschnitt 2.3.3 in Abbildung 3.6 veranschaulicht.

#### 3.4.2 Iteratives Verfahren zur Lokalisierung exzeptioneller Punkte

Die Suche nach exzeptionellen Punkte wird bei kreisrunden Scheiben ( $\epsilon_0 = 1$ ) in einem Abstand von  $\delta_0 = 6$  begonnen. Das Spektrum zeigt in diesem Fall die in Abbildung 3.1 dargestellte Struktur aus verschiedenen Resonanzbändern. Würde man zu kleineren Werten von  $\delta$  übergehen, so würde sich diese Struktur auflösen, hin zu irregulär verteilten Resonanzen.

Das nun folgende Verfahren zum Auffinden eines EPs ist in Abbildung 3.7 illustriert. Ausgehend von  $(\delta_0 = 6, \epsilon_0 = 1)$  als Mittelpunkt wird durch schrittweises Vergrößern der Radien  $r_\delta$  und  $r_\epsilon$  der Umkreisung das Spektrum danach untersucht, ob sich bei einem Resonanzpaar Vertauschungsverhalten zeigt (siehe Abbildung 3.7 links oben). Das Spektrum wird im oben abgebildeten Bereich für hohe Realteile von  $k$  zwischen  $\text{Re } k = 170$  und  $\text{Re } k = 220$  untersucht. Während isolierte Resonanzen meist elliptische Form beim Umkreisen im Parameterraum zeigen, weisen nahe beieinanderliegende oft verformte Verläufe in der komplexen Ebene auf. Dies kann ein Hinweis darauf sein, dass ein EP knapp außerhalb der gewählten Umkreisung liegt und dieser bei weiterer



■ *Abbildung 3.7.* Illustration des Vorgehens zum Auffinden exzeptioneller Punkte im Spektrum des elliptischen Drei-Scheiben-Billiards. Ausgehend von einem beliebig gewählten Startpunkt  $(\delta_0, \epsilon_0)$  im Parameterraum wird schrittweise der Radius der Umkreisung vergrößert, wenn kein Vertauschungsverhalten im Spektrum beobachtet werden kann (blasse Einfärbung). Wird eine Vertauschung beobachtet (kräftige Einfärbung), werden im Ring zwischen dem vorigen und dem aktuellen Schritt Umkreisungen mit kleineren Radien durchgeführt. Für einen Mittelpunkt  $(\delta_1, \epsilon_1)$ , bei dessen Umkreisung der EP enthalten ist, wird wiederum zum ersten Schritt übergegangen. Dieses Vorgehen lässt sich im Prinzip zur Lokalisierung des EPs mit beliebiger Genauigkeit verwenden.

Vergrößerung der Radien eingeschlossen wird und somit ein Vertauschungsverhalten auftritt.

Tritt in Schritt  $i_0$  der Vergrößerung der Umkreisungsradien eine Vertauschung von Resonanzen auf, das in Schritt  $i_0 - 1$  noch nicht auftrat, so weiß man, dass sich im Ring zwischen den Umkreisungen  $i_0 - 1$  und  $i_0$  ein EP

befinden muss. Die Mittelpunkte der Umkreisungen werden im nächsten Schritt nun innerhalb dieses Rings gewählt (siehe Abbildung 3.7 rechts unten). Die Radien der Umkreisungen müssen so gewählt werden, dass der komplette Ring eingeschlossen ist. Die Anzahl an Umkreisungen muss so gewählt werden, dass sich bei gewähltem Radius die Umkreisungen überlappen. In einer der Umkreisungen mit den kleineren Radien muss sich der EP befinden und es wird sich im Spektrum Vertauschungsverhalten zeigen. Ausgehend von diesem Mittelpunkt lässt sich das Verfahren wiederholen, dieses Mal allerdings mit deutlich kleineren Umkreisungsradien. So lässt sich iterativ die Position des EPs im Parameterraum mit im Prinzip beliebiger Genauigkeit bestimmen.

### 3.5 UNTERSUCHUNG EINES EXZEPTIONELLEN PUNKTES

Unter Verwendung des in Abschnitt 3.4.2 vorgestellten Verfahrens konnte ausgehend vom Drei-Scheiben-Billard mit runden Scheiben ( $\epsilon_0 = 1$ ) und Abständen  $\delta_0 = 6$  ein exzeptioneller Punkt nahe der Originalkonfiguration nachgewiesen werden. Die Position des gefundenen EPs liegt im Parameterraum bei ( $\delta_{EP} = 5,92902$ ,  $\epsilon_{EP} = 1,07454$ ).

#### 3.5.1 Umrundung des exzeptionellen Punktes

Eine beispielhafte Umkreisung des EPs mit den Radien  $r_\delta = r_\epsilon = 0,003$  ist in Abbildung 3.8 sowohl im Parameterraum als auch im Resonanzraum dargestellt.

Das Vertauschungsverhalten bei Umrundung eines EPs lässt sich auch auf eine weitere Weise darstellen. Hierzu wird die Variable

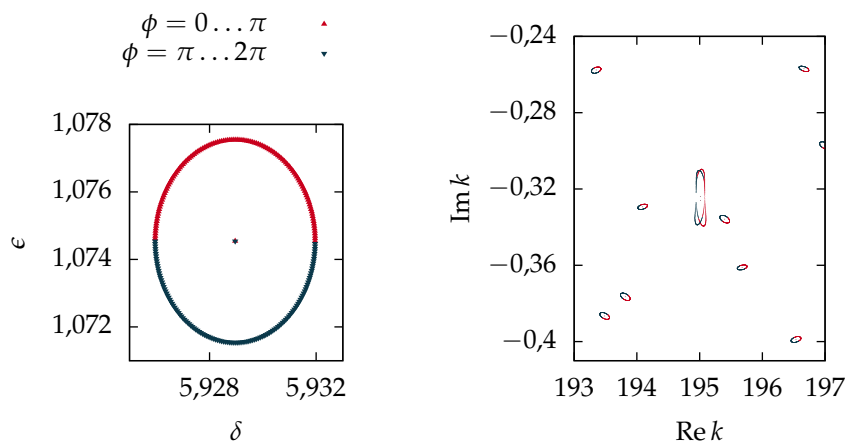
$$\eta = (k_2 - k_1)^2 \quad (3.18)$$

als komplexe, quadrierte Differenz zwischen den vertauschenden Resonanzen definiert. Ein notwendiges Kriterium für einen EP ist die Entartung von  $k_1$  und  $k_2$ . Für die oben gezeigte Umkreisung des EPs sind die Werte für  $\eta$  in Abbildung 3.9 aufgetragen. Wird ein geschlossener Pfad im Parameterraum gewählt, so durchläuft auch  $\eta$  einen geschlossenen Pfad in der komplexen Ebene. Wird der Ursprung in der  $\eta$ -Ebene bei einer Umrundung einfach eingeschlossen, so umläuft der Pfad im Parameterraum einen exzeptionellen Punkt.

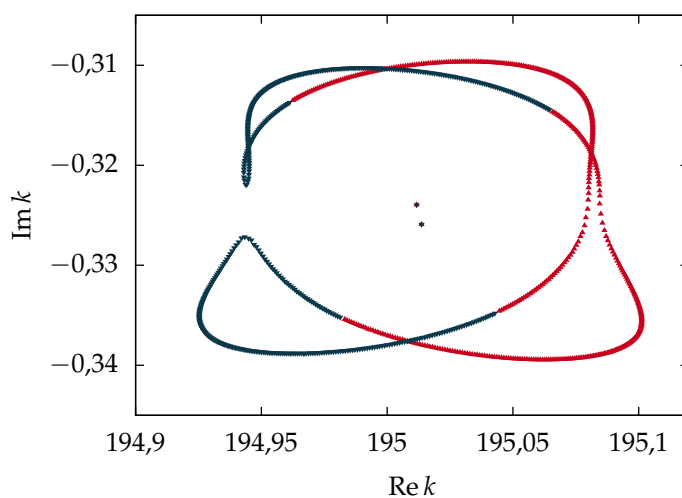
Mathematisch lässt sich das Umrunden des Ursprungs  $\eta_0 = 0$  in der komplexen Ebene über die Windungszahl

$$W_{\eta_0=0} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{\eta} d\eta \quad (3.19)$$



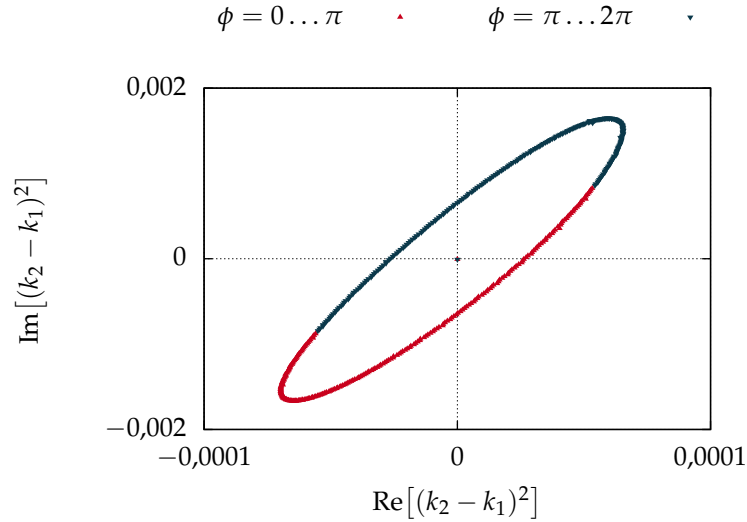


(a) Umkreisung des EPs im Parameterraum. (b) Ausschnitt des Spektrums bei Umkreisung mit vertauschendem Resonanzpaar.



(c) Vergrößerung des vertauschenden Resonanzpaars mit vierfachem Farbwechsel.

■ **Abbildung 3.8.** Umkreisung eines exzeptionellen Punktes ( $\delta_{EP} = 5,92902$ ,  $\epsilon_{EP} = 1,07454$ ) des elliptischen Drei-Scheiben-Billardards mit Radien  $r_\delta = r_\epsilon = 0,003$ . Das zugehörige Resonanzpaar im Spektrum, das einen vierfachen Farbwechsel, also Vertauschungsverhalten, zeigt, liegt im Bereich für hohe Realteile der Wellenzahl  $k$ . Die anderen Resonanzen im Fenster zeigen nur einen zweifachen Farbwechsel, kehren also nach einer Umkreisung zu ihrer Ausgangsposition zurück. Alle Resonanzen wurden in jedem Schritt mittels semiklassischer Quantisierung und harmonischer Inversion berechnet.



■ *Abbildung 3.9.* Werte für  $\eta = (k_2 - k_1)^2$  für die in *Abbildung 3.8* gezeigte Umkreisung des EPs. Der Ursprung wird bei der Umkreisung eingeschlossen. Für die aus diesen Werten numerisch berechnete Windungszahl ergibt sich  $W_{\eta_0=0} = 1,0010 + 0,0037i$ , was mit der Erwartung  $W_{\eta_0=0} = 1$  für die Umrundung eines EPs im Rahmen der numerischen Ungenauigkeiten gut übereinstimmt.

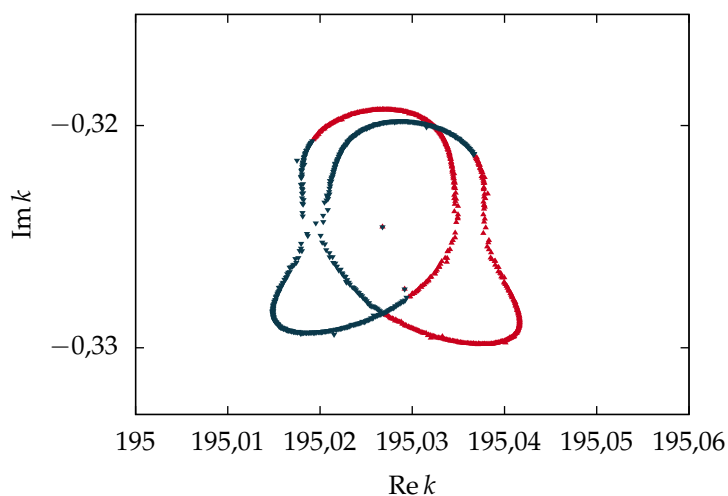
fassen, wobei  $\mathcal{C}$  einen geschlossenen Pfad um  $\eta_0$  bezeichnet. Wählt man eine Parametrisierung  $\eta(\phi)$  der Umkreisung mit  $\phi = 0 \dots 2\pi$ , so erhält man für die Windungszahl des Ursprungs den Ausdruck

$$W_{\eta_0=0} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \frac{\eta'(\phi)}{\eta(\phi)} d\eta, \quad (3.20)$$

wobei  $\eta'(\phi)$  die Ableitung von  $\eta$  nach  $\phi$  bezeichnet. Numerisch wird die Umkreisung in diskreten Schritten  $\phi_i$  durchgeführt, bei denen jeweils aus dem komplexen Spektrum  $\eta(\phi_i)$  berechnet wird. Für diskrete Funktionswerte ergibt sich aus dem Integral aus Gleichung (3.20) die Summe

$$W_{\eta_0=0} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{i=1}^N \frac{\eta(\phi_{i+1}) - \eta(\phi_{i-1})}{\eta(\phi_i)}. \quad (3.21)$$

Wertet man diesen Ausdruck für die in *Abbildung 3.8* mit zugehörigen Werten für  $\eta$  aus *Abbildung 3.9* gezeigte Umkreisung, die in  $N = 512$  Schritten durchgeführt wurde, aus, so ergibt sich für die numerisch berechnete Windungszahl  $W_{\eta_0=0} = 1,0010 + 0,0037i$ . Dieser Wert liegt im Rahmen der numerischen Ungenauigkeiten in guter Übereinstimmung mit dem für die Umrundung eines EPs erwarteten Wert  $W_{\eta_0=0} = 1$ . Für  $W_{\eta_0=0} = 0$  läge gar keine Entartung der Resonanzen vor, für  $W_{\eta_0=0} = 2$  läge eine einfache Entartung ohne Zustandsvertauschung, also kein EP, vor. Liegt der numerisch



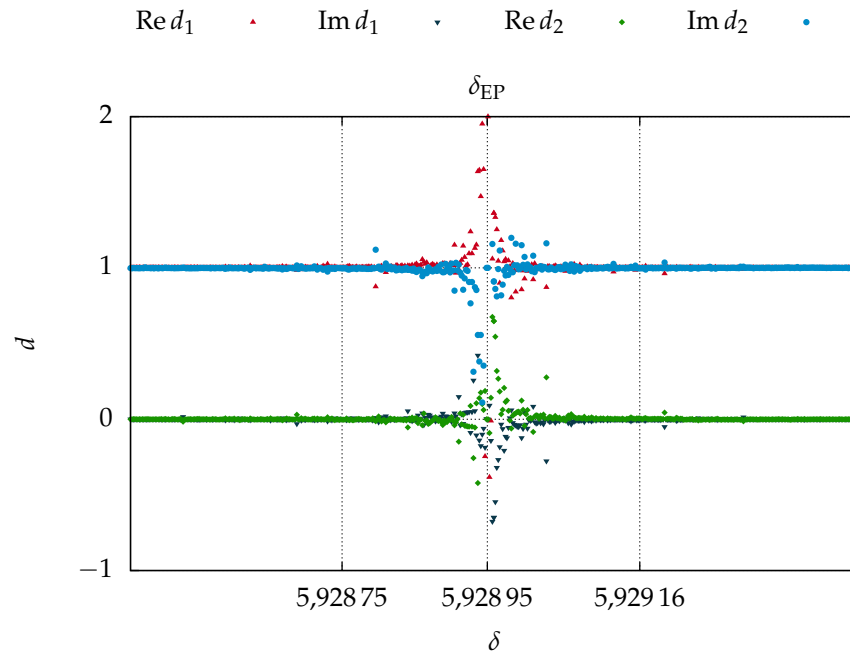
■ *Abbildung 3.10.* Resonanzen bei Umkreisung des EPs mit Radien  $r_\delta = r_\epsilon = 0,000\,005$ . Aufgrund von Ungenauigkeiten ist nicht mehr entscheidbar, ob eine Zustandsvertauschung vorliegt. Die Positionen des EPs im Parameterraum lässt sich also nur auf fünf Nachkommastellen genau bestimmen.

berechnete Wert für  $W_{\eta_0=0}$  zwischen zwei Werten, so muss die Anzahl der Schritte bei der Umkreisung erhöht werden, um eine Aussage zu erhalten.

### 3.5.2 Genauigkeit der Positionsbestimmung des exzeptionellen Punktes

Im Prinzip erlaubt es das in Abschnitt 3.4.2 vorgestellte, iterative Verfahren, die Position eines EPs im Parameterraum mit beliebiger Genauigkeit zu bestimmen. Jedoch unterliegen die semiklassisch berechneten Resonanzen Ungenauigkeiten, sowohl wegen begrenzter numerischer Genauigkeit als auch wegen semiklassischer Fehler.

Abbildung 3.10 zeigt eine Umkreisung des Punktes  $(\delta_{EP}, \epsilon_{EP})$  im Resonanzraum für die Radien  $r_\delta = r_\epsilon = 0,000\,005$ , die also etwa drei Größenordnungen kleiner sind als in Abbildung 3.8. Es ist zu erkennen, dass die Resonanzen bei kontinuierlicher Änderung der Parameter deutliche Schwankungen aufweisen. Im Besonderen ist nicht mehr eindeutig zu entscheiden, ob eine Zustandsvertauschung vorliegt. Es ist also auch nicht mehr zu entscheiden, ob in der Umkreisung mit den kleineren Radien tatsächlich ein EP vorliegt. Aufgrund der Genauigkeit der Berechnungen ist eine Bestimmung der EP-Position somit auf fünf Nachkommastellen genau möglich.



■ *Abbildung 3.11.* Semiklassisch berechnete Resonanzamplituden der am EP vertauschenden Resonanzen bei Variation des Parameters  $\delta$ , sodass  $\delta_{\text{EP}}$  in der Mitte der Abbildung passiert wird.  $\epsilon$  wird bei  $\epsilon_{\text{EP}}$  konstant gehalten. Für die harmonische Inversion wird der Ansatz aus Gleichung (3.23) verwendet. Wie erwartet zeigen die Amplituden den Wert 1 bis nahe an den EP. Beim EP zeigt sich undefiniertes Verhalten.

### 3.5.3 Eigenschaften von Diagonalmatrixelementen nahe des exzeptionellen Punktes

Wie bereits in Abschnitt 2.1.2 ausführlich diskutiert, wird zur Auswertung der Gutzwiller-Spurformel die Methode der harmonischen Inversion verwendet. Ziel ist es, das semiklassische Signal an einen Ansatz für ein quantenmechanisches anzupassen, das aus einem Ansatz für die Antwortfunktion  $g$  gewonnen wird. Aus der Antwortfunktion kann über

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \text{Im } g \quad (3.22)$$

die Zustandsdichte gewonnen werden. Im Falle reeller Resonanzen ergäbe sich so ein Spektrum aus  $\delta$ -Distributionen, für komplexe Resonanzen ergeben sich Lorentzkurven in der Zustandsdichte.

#### ► Semiklassisch berechneter Entartungsgrad am exzeptionellen Punkt

Der einfachstmögliche und in Abschnitt 2.1.2 zuerst diskutierte Ansatz, um ein Spektrum aus einzelnen Resonanzen in der komplexen Ebene zu erfassen,

ist durch

$$g^{\text{qm}} = \sum_k \frac{d_k}{w - w_k} \quad (3.23)$$

gegeben. An den Polen in der komplexen Ebene liegen die Resonanzen, die Amplituden  $d_k$  bestimmen den Entartungsgrad. Das oben erwähnte semiklassische Signal, das aus den klassischen Bahndaten der periodischen Bahndaten berechnet wird, wird aus einer Näherung des exakt quantenmechanischen Ansatzes gewonnen (siehe Abschnitt 2.1.1). In der Herleitung aus Gleichung (2.7) wird die Amplitude für eine Resonanz hierbei explizit auf 1 festgesetzt. Konvergierte Resonanzen nach Durchführung der harmonischen Inversion zeichnen sich deswegen dadurch aus, dass sich Werte für  $d_k$  nahe der reellen 1 ergeben.

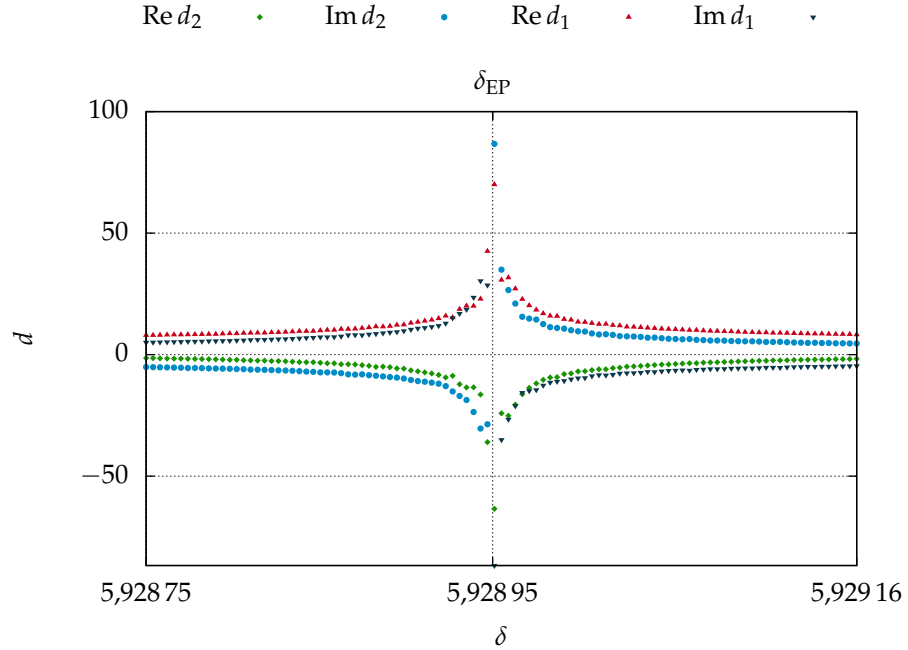
Abbildung 3.11 zeigt die Amplituden der vertauschenden Resonanzen in der Nähe des EPs bei ( $\delta_{\text{EP}} = 5,929\,02$ ,  $\epsilon_{\text{EP}} = 1,074\,54$ ). Dabei wird der Parameter  $\delta$  in einem kleinen Bereich um  $\delta_{\text{EP}}$  variiert, während  $\epsilon$  bei  $\epsilon_{\text{EP}}$  konstant gehalten wird. Bis sehr nah an den EP zeigen die Amplituden das erwartete Verhalten und die Amplituden liegen nahe bei 1. In der unmittelbaren Umgebung des EPs zeigt sich undefiniertes Verhalten.

#### ► *Matrixelemente am exzeptionellen Punkt*

In früheren Untersuchungen von EPs wurde gezeigt, dass semiklassische Matrixelemente bei Verwendung des Ansatzes aus Gleichung (3.23) divergieren [15]. Dort wurde ein Wasserstoffatom in gekreuzten magnetischen und elektrischen Feldern untersucht. Der betrachtete Operator war in diesem Fall der Dipoloperator zur Berechnung von Photoabsorptionsspektren.

Um dieses Verhalten auch im vorliegenden elliptischen Drei-Scheiben-Billard nachzuweisen, wird im Folgenden ein beispielhafter Operator definiert, dessen Diagonalmatrixelemente semiklassisch mittels der Gutzwiller-Spurformel berechnet werden sollen. Die entsprechende Erweiterung für die Gutzwiller-Spurformel wurde in Abschnitt 2.1.2 vorgestellt.

Beispielhaft gewählt werden die Operatoren  $\hat{r}$  und  $\hat{r}^2$  definiert. Für die semiklassische Berechnung werden im Allgemeinen die Wigner-Transformierten  $r$  und  $r^2$  der Operatoren benötigt. Im diesem Falle entspricht dies aber einfach dem klassischen Erwartungswert der Operatoren, da  $\hat{r}$  und  $\hat{r}^2$  nicht impulsabhängig sind.  $r$  bezeichnet den zweidimensionalen Richtungsvektor vom Symmetriemittelpunkt zu einem entsprechenden Trajektorienpunkt.  $r^2$  ist dementsprechend der quadrierte Abstand und  $r = \sqrt{r^2}$  der nichtquadrierte Abstand zum Symmetriemittelpunkt. Für jede periodische Bahn muss



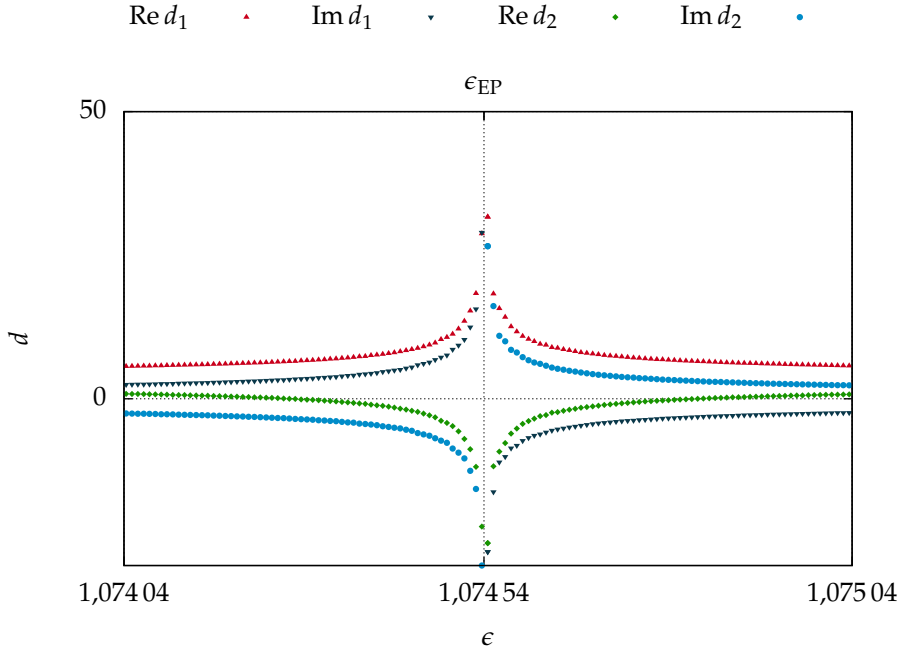
■ *Abbildung 3.12.* Semiklassisch berechnete Diagonalmatrixelemente des Operators  $\hat{r}^2$  bei variiertem  $\delta$  und konstantem  $\epsilon = \epsilon_{\text{EP}}$  für die Resonanzen, die Vertauschungsverhalten bei Umrundung des EPs aufweisen. Für die Berechnung wurde der Ansatz mit ausschließlich einfachen Polen in der quantenmechanischen Antwortfunktion verwendet. Die Matrixelemente steigen in der Umgebung des EPs an und divergieren direkt am EP. Das bedeutet, dass der Ansatz am EP nicht mehr gültig ist.

nun gemäß Gleichung (2.1.2) der Mittelwert  $r_{\text{po}}$  beziehungsweise  $r_{\text{po}}^2$  des entsprechenden Erwartungswerts entlang der klassischen Bahn berechnet werden. Für ein Billardsystem lässt sich die Berechnung in die Teilsegmente der Gesamtrajektorien zerlegen und einfach geschlossen auswerten. Für den Mittelwert  $r_{\text{po}}^2$  entlang eines Durchlaufs einer periodischen Bahn, wobei der Abstandsvektor  $r$  für ein Trajektoriensegment  $i$  mit den Reflexionspunkten  $x_i$  und  $x_{i+1}$  über

$$r_i(\lambda) = \frac{1}{2}[(x_i + x_{i+1}) + \lambda(x_{i+1} - x_i)], \quad \lambda \in [-1/2, 1/2] \quad (3.24)$$

parametrisiert werden kann, gilt dann

$$\begin{aligned} r_{\text{po}}^2 &= \frac{1}{L_{\text{po}}} \int_{\text{po}} r^2 d\gamma \\ &= \frac{1}{2L_{\text{po}}} \sum_{i=1}^{\ell_{\text{po}}} \int_{-1}^1 r_i^2(\lambda) d\lambda \\ &= \frac{1}{2L_{\text{po}}} \sum_{i=1}^{\ell_{\text{po}}} \left[ \frac{1}{4}(x_i + x_{i+1})^2 + \frac{1}{12}(x_{i+1} - x_i)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$



■ *Abbildung 3.13.* Semiklassisch berechnete Diagonalmatrixelemente des Operators  $\hat{r}^2$  bei variiertem  $\epsilon$  und konstantem  $\delta = \delta_{\text{EP}}$  für die vertauschenden Resonanzen. Auch hier zeigt sich zu *Abbildung 3.12* analoges divergentes Verhalten bei Annäherung an den EP.

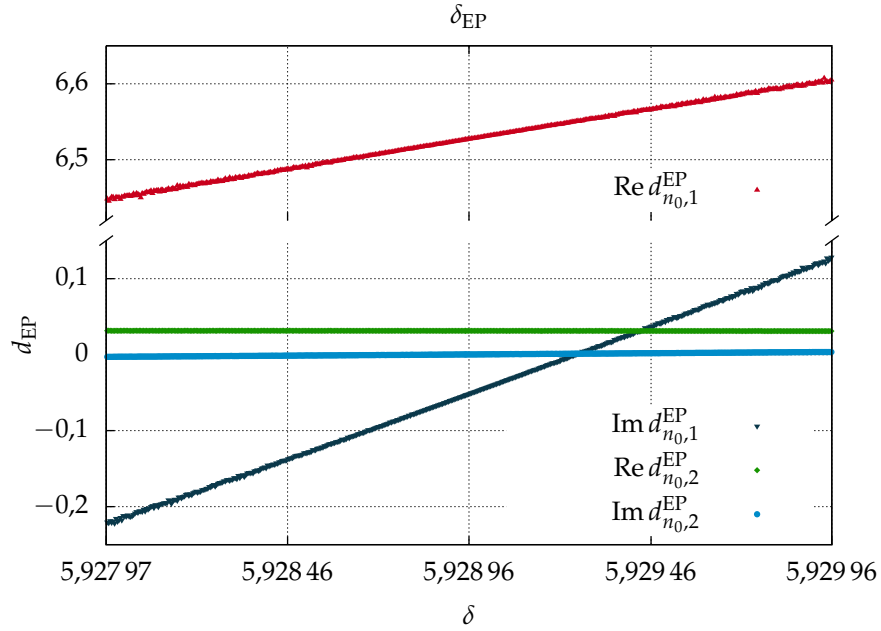
Für  $r$  ergibt sich analog

$$\begin{aligned}
 r_{\text{po}} &= \frac{1}{2L_{\text{po}}} \sum_{i=1}^{\ell_{\text{po}}} \int_{-1}^1 \sqrt{r_i^2(\lambda)} \, d\lambda \\
 &= \frac{1}{2L_{\text{po}}} \sum_{i=1}^{\ell_{\text{po}}} \frac{1}{8} \sqrt{(x_{i+1} - x_i)^2} \\
 &\quad \cdot \left[ \left( q_i - \frac{p_i^2}{4} \right) \ln \frac{\frac{p_i}{2} + 1 + \sqrt{1 + p_i + q_i}}{\frac{p_i}{2} - 1 + \sqrt{1 - p_i + q_i}} \right. \\
 &\quad \left. + \left( \frac{p_i}{2} + 1 \right) \sqrt{1 + p_i + q_i} - \left( \frac{p_i}{2} - 1 \right) \sqrt{1 - p_i + q_i} \right]
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

mit

$$p_i = \frac{2(x_{i+1}^2 - x_i^2)}{(x_{i+1} - x_i)^2} \quad \text{und} \quad q_i = \frac{(x_i + x_{i+1})^2}{(x_{i+1} - x_i)^2}. \tag{3.27}$$

Um die Diagonalmatrixelemente nun semiklassisch zu berechnen, muss der Beitrag jeder periodischen Bahn mit  $r_{\text{po}}^2$  beziehungsweise  $r_{\text{po}}$  gewichtet werden. Die Operatoren wurden so gewählt, um die Verwendung der symmetriereduzierten periodischen Bahnen weiterhin zu ermöglichen.



■ *Abbildung 3.14.* Semiklassisch berechnete Diagonalmatrixelemente  $\langle n_0, \alpha | \hat{r}^2 | n_0, \alpha \rangle$  entlang der  $\delta$ -Achse bei konstantem  $\epsilon = \epsilon_{\text{EP}}$  unter Verwendung des Ansatzes aus Gleichung (3.29). Die so definierten Amplituden zeigen keine Divergenz mehr am EP. Es gibt einen von null verschiedenen Beitrag des Terms mit dem Pol zweiter Ordnung.

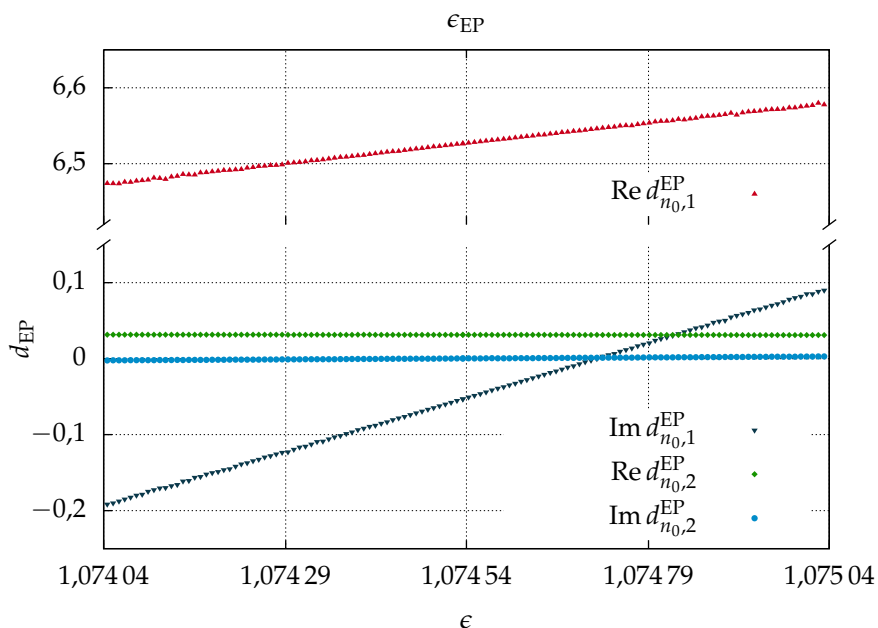
Betrachtet man nun analog zu *Abbildung 3.11* den Verlauf der Diagonalmatrixelemente in der Nähe des EPs unter Verwendung des Ansatzes

$$g_{\hat{D}}^{\text{qm}} = \sum_k \frac{\langle k | \hat{D} | k \rangle}{w - w_k} \quad (3.28)$$

für die quantenmechanische Antwortfunktion mit einfachen Polen, so ergibt sich bei Variation von  $\delta$  bei  $\epsilon = \epsilon_{\text{EP}}$  *Abbildung 3.12*. Für variiertes  $\epsilon$  und konstant gehaltenes  $\delta = \delta_{\text{EP}}$  ergibt sich in *Abbildung 3.13* das gleiche Bild. Die Matrixelemente zeigen einen Anstieg nahe am EP und divergieren direkt bei  $(\delta_{\text{EP}}, \epsilon_{\text{EP}})$ . Dieses Verhalten wurde bereits bei der oben erwähnten Betrachtung des Wasserstoffatoms in gekreuzten magnetischen und elektrischen Feldern beobachtet [15]. Die Divergenz rührt daher, dass der für die Anpassung des semiklassischen Signals gewählte Ansatz aus Gleichung (3.28) am EP keine Gültigkeit mehr besitzt.

Wird stattdessen für die quantenmechanische Antwortfunktion ein Ansatz gewählt, der abhängig vom Entartungsgrad  $r_k$  der  $k$ -ten Resonanz auch Pole





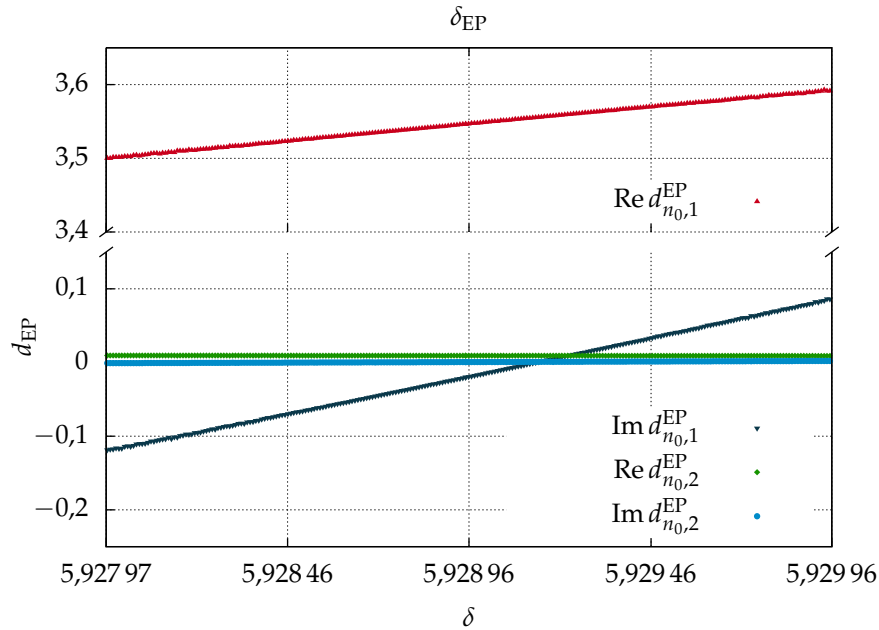
■ *Abbildung 3.15.* Semiklassisch berechnete Diagonalmatrixelemente  $\langle n_0, \alpha | \hat{r}^2 | n_0, \alpha \rangle$  entlang der  $\epsilon$ -Achse bei konstantem  $\delta = \delta_{\text{EP}}$  unter Verwendung des Ansatzes aus Gleichung (3.29). Analog zu *Abbildung 3.14* zeigt sich auch hier keine Divergenz am EP.

höherer Ordnung erlaubt, nämlich

$$g^{\text{qm}} = \sum_k \sum_{\alpha=1}^{r_k} \frac{\langle k, \alpha | \hat{D} | k, \alpha \rangle}{(w - w_k)^\alpha} \equiv \sum_k \sum_{\alpha=1}^{r_k} \frac{d_k^{(\alpha)}}{(w - w_k)^\alpha}, \quad (3.29)$$

so zeigt sich keine Divergenz der Matrixelemente mehr am EP. Die so berechneten Matrixelemente hängen nur noch schwach davon ab, wie nah sich zwei Resonanzen kommen. Der Verlauf der Matrixelemente am EP für den Operator  $\hat{D} = \hat{r}^2$  und variiertes  $\delta$  mit konstantem  $\epsilon = \epsilon_{\text{EP}}$  wird in *Abbildung 3.14* und für variiertes  $\epsilon$  in *Abbildung 3.15* gezeigt. Die Matrixelemente für den Operator  $\hat{r}$  sind in *Abbildung 3.16* zu sehen.

Im dort gezeigten Fall sind zwei Resonanzen beteiligt. Statt einer Superposition zweier einfacher Pole an nahezu derselben Position  $w_k$  besteht der Beitrag der vertauschenden Resonanzen nun in einem Pol erster und einem zweiter Ordnung. Aufgrund der oben diskutierten Ungenauigkeiten werden die Resonanzpositionen nicht in allen Stellen der numerischen Genauigkeit übereinstimmen. Für die Bestimmung der Matrixelemente aus Gleichung (3.29) mittels harmonischer Inversion ist es dafür ausreichend, Resonanzen unterhalb eines bestimmten Mindestabstands als entartet anzusehen



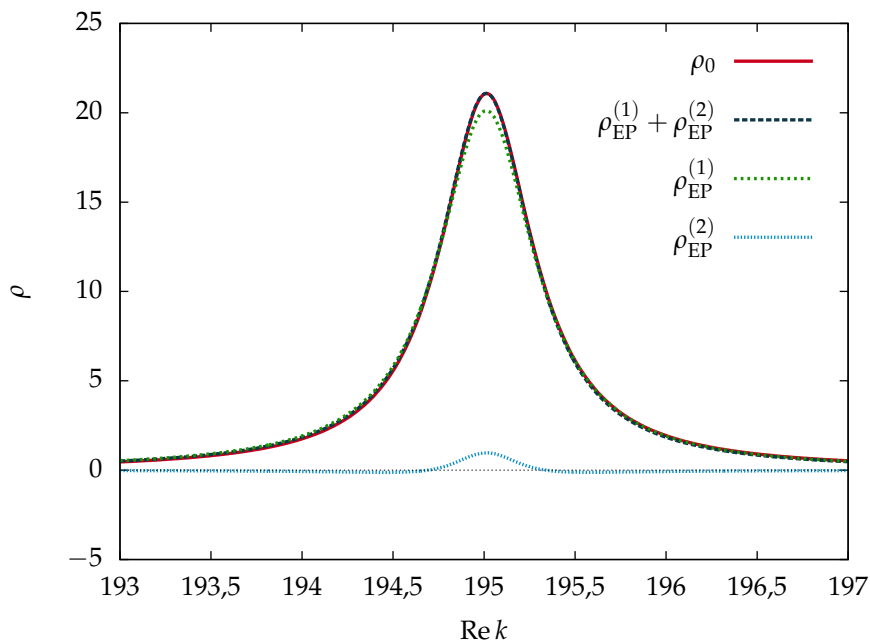
■ *Abbildung 3.16.* Semiklassisch berechnete Diagonalmatrixelemente  $\langle n_0, \alpha | \hat{\rho} | n_0, \alpha \rangle$  entlang der  $\delta$ -Achse bei konstantem  $\epsilon = \epsilon_{EP}$  unter Verwendung des Ansatzes aus Gleichung (3.29). Wie aus den klassischen Erwartungswerten zu erwarten ist, liegen die Matrixelemente von  $\hat{\rho}$  konsistenterweise unter denen von  $\hat{\rho}^2$ .

und den arithmetischen Mittelwert aus den Resonanzpositionen zu bilden.

► *Nichtlorentzisches Linienprofil in der gewichteten Zustandsdichte*

Mittels Gleichung (3.22) lässt sich aus den angepassten Antwortfunktionen  $g$  die Zustandsdichte bestimmen. Ist die Antwortfunktion mit den Diagonalmatrixelementen eines Operators  $\hat{D}$  gewichtet, so ergibt sich daraus ebenfalls die mit diesen Diagonalmatrixelementen gewichtete Zustandsdichte  $\rho_{\hat{D}}$ . Im Fall von abgeschlossenen Systemen mit reellen Resonanzpositionen werden die dort in der Zustandsdichte auftretenden  $\delta$ -Distributionen direkt mit den Matrixelementen gewichtet. Für das hier vorliegende offene System und die sich ergebenden Lorentzfunktionen bei nichtentarteten Resonanzen werden durch die komplexen Matrixelemente sowohl Höhe als auch Breite vorgegeben.

Abbildung 3.17 zeigt die mit den Diagonalmatrixelementen des Operators  $\hat{\rho}^2$  gewichtete Zustandsdichte, die über dem Realteil der Wellenzahl  $k$  aufgetragen ist, in einem Ausschnitt, in dem die vertauschenden Resonanzen liegen. Die rote Kurve wurde hierbei aus dem Ansatz mit ausschließlich einfachen Polen aus Gleichung (3.28) gewonnen. Aufgrund der auftretenden



■ *Abbildung 3.17.* Linienform der Resonanzen in der mit den Diagonalmatrixelementen von  $\hat{\rho}^2$  gewichteten Zustandsdichte. Der Ausschnitt zeigt den Bereich um  $\text{Re } k = 195$ , wo das Vertauschen der Resonanzen bei Umrundung im Parameterraum beobachtet werden kann. Unter Verwendung des Ansatzes aus Gleichung (3.29) zeigt sich ein nichtverschwindender Beitrag des Terms mit dem Pol zweiter Ordnung. Das bedeutet, dass die Gesamtlinienform nichtlorentzsch ist, ein weiterer Indikator für das Vorliegen eines EPs.

Divergenz können hierzu die Matrixelemente nicht exakt am EP, aber in der nahen Umgebung, ausgewertet werden. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit dem in dunkelblau aufgetragenem aus Gleichung (3.29) gewonnenen Profil, das sich aus der Summe der Beiträge des Pols erster und zweiter Ordnung ergibt. Trägt man die Beiträge erster (grüne Linie) und zweiter Ordnung (hellblaue Linie) getrennt auf, so erkennt man den nichtverschwindenden Beitrag zweiter Ordnung. Die Gesamtlinienform bei der Resonanzposition, in deren Umgebung das Vertauschungsverhalten bei Umrundung im Parameterraum zu beobachten ist, ist also nichtlorentzsch.



## ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Drei-Scheiben-Billardssystem, das weithin als Modellsystem für die Anwendung der semiklassischen Quantisierung offener Systeme verwendet wurde, erweitert, um exzeptionelle Punkte (EPs) im komplexen Spektrum zu finden. Im System wurden die kreisrunden durch elliptische Scheiben ersetzt, sodass der zweidimensionale, reelle Parameterraum durch den Abstand der Scheiben und die Länge der großen Halbachsen aufgespannt wurde. Die Erweiterung wurde so vorgenommen, dass die charakteristische  $C_{3v}$ -Symmetrie des Systems erhalten blieb. Dies erlaubte es, zur Berechnung der Resonanzen mittels der Gutzwiller-Spurformel die klassischen periodischen Bahndaten des symmetriereduzierten Systems zu verwenden. Zur Überprüfung der semiklassisch berechneten Resonanzen wurden numerisch aufwendige exakt quantenmechanische Rechnungen durchgeführt. Für Realteile der Wellenzahl  $k$  zwischen 10 und 90 und betragsmäßig kleine Imaginärteile zeigten sich gute Übereinstimmungen zwischen semiklassischen und quantenmechanischen Rechnungen. Für große Real- und betragsmäßig große Imaginärteile konvergierten die quantenmechanischen Rechnungen nur schlecht.

Im semiklassisch berechneten Spektrum wurden EPs über ein iteratives Verfahren gesucht. Als Charakteristikum eines EPs für die Suche wurde das Vertauschungsverhalten zweier Resonanzen bei Umrundung im Parameterraum benutzt. Nahe der Anfangskonfiguration ( $\delta_0 = 6, \epsilon_0 = 1$ ) wurde ein

■ *Tabelle 4.1.* Zusammenfassung der Eigenschaften des exzeptionellen Punktes.

Parameter	$\delta = 5,928\,96, \epsilon = 1,074\,54$
Resonanzposition	$k = 195,0130 - i0,324\,544$
Diagonalmatrixelemente von $\hat{r}^2$	$d_{n_0,1} = 6,528\,114 - i0,049\,424$ $d_{n_0,2} = 0,031\,336 + i0,000\,251$
Diagonalmatrixelemente von $\hat{r}$	$d_{n_0,1} = 3,546\,677 - i1,931\,056$ $d_{n_0,2} = 0,009\,288 + i0,000\,547$

EP bei ( $\delta_{\text{EP}} = 5,928\,96, \epsilon_{\text{EP}} = 1,074\,54$ ) gefunden, dessen Eigenschaften in Tabelle 4.1 zusammengefasst sind. Dass ein EP so nahe bei einer beliebig gewählten Anfangskonfiguration gefunden wurde, legt den Schluss nahe, dass sich im elliptischen Drei-Scheiben-Billard prinzipiell unendlich viele EPs finden lassen.

Für die Analyse von Matrixelementen nahe am EP wurden die Operatoren  $\hat{r}^2$  und  $\hat{r}$  definiert. Deren Berechnung war über eine einfache Erweiterung der Gutzwiller-Spurformel mit klassischen Erwartungswerten der Operatoren möglich. Die Analyse der Diagonalmatrixelemente dieser Operatoren zeigte, dass – wenn für die quantenmechanische Antwortfunktion ein Ansatz mit ausschließlich Polen erster Ordnung gewählt wurde – diese, wie in früheren Untersuchungen gezeigt, divergierten. Wenn allerdings für die quantenmechanische Antwortfunktion ein Ansatz gewählt wurde, der bei nahe zusammenliegenden Resonanzen Pole höherer Ordnung erlaubt, so verschwand die Divergenz am EP. Es ergab sich ein von null verschiedener Beitrag des Terms zweiter Ordnung nahe am EP, was zu einer nichtlorentzischen Linienform in der mit den Diagonalmatrixelementen der erwähnten Operatoren gewichteten Zustandsdichte führte.

## ANHANG

## A.1 NUMERISCHE BAHNMINIMIERUNG

Bei der Bestimmung der periodischen Bahnen einer bestimmten symbolischen Sequenz muss numerisch eine skalare Funktion (die Gesamtlänge  $L$ ) mehrerer Variablen (den Reflexionspunkten, die durch die Winkel  $\phi_i$  beschrieben werden) minimiert werden.

Für die numerischen Berechnungen wird die Programmiersprache *Fortran* verwendet. Die Minimierungen werden mit der Routine SUMSL der Bibliothek TOMS611 durchgeführt. Die Routine verlangt als Eingabe die Funktion und der analytische Gradient der Funktion. Im Quasi-Newton-Verfahren wird eine Sekantenapproximation der Hessematrix berechnet, die nur im Bedarfsfall ausgewertet wird [55].

Der Gradient der Funktion zur Bestimmung der Gesamtlänge aus Gleichung (3.1) ist gegeben durch

$$\nabla_j L = \frac{\mathbf{t}'_j \cdot \left[ \left( \mathbf{r}_{b_j}^\delta + \mathbf{t}_{j-1} \right) - \left( \mathbf{r}_{b_{j-1}}^\delta + \mathbf{t}_{j-1} \right) \right]}{\left\| \left( \mathbf{r}_{b_{j+1}}^\delta + \mathbf{t}_{j+1} \right) - \left( \mathbf{r}_{b_j}^\delta + \mathbf{t}_j \right) \right\|} - \frac{\left[ \mathbf{t}'_j \cdot \left( \mathbf{r}_{b_{j+1}}^\delta + \mathbf{t}_{j+1} \right) - \left( \mathbf{r}_{b_j}^\delta + \mathbf{t}_j \right) \right]}{\left\| \left( \mathbf{r}_{b_{j+1}}^\delta + \mathbf{t}_{j+1} \right) - \left( \mathbf{r}_{b_j}^\delta + \mathbf{t}_j \right) \right\|} \quad (\text{A.1})$$

mit

$$\mathbf{t}_j = \mathbf{R}_{b_j} \begin{pmatrix} \epsilon \cos \phi_j \\ \sin \phi_j \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{t}'_j = \mathbf{R}_{b_j} \begin{pmatrix} -\epsilon \sin \phi_j \\ \cos \phi_j \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

## A.2 KRÜMMUNGSRADIUS EINER ELLIPSE

Für die Bestimmung der Monodromiematrizen einer periodischen Bahn werden die Krümmungsradien an den Reflexionspunkten der elliptischen Scheiben benötigt. Für eine Ellipse mit den Halbachsen  $a$  und  $b$  gilt für den Krüm-

mungsradius am Punkt  $(x_r = a \cos \phi_r, y_r = a \sin \phi_r)$

$$r = a^2 b^2 \left( \frac{\cos \phi_r}{a^2} + \frac{\sin \phi_r}{b^2} \right)^{3/2}. \quad (\text{A.3})$$



## LITERATURVERZEICHNIS

- [1] M. C. Gutzwiller. »Phase-Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom«. *Journal of Mathematical Physics* 8.10 (1967), 1979–2000.
- [2] M. C. Gutzwiller. »Periodic Orbits and Classical Quantization Conditions«. *Journal of Mathematical Physics* 12.3 (1971), 343–358.
- [3] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [4] B. Eckhardt. »Fractal properties of scattering singularities«. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 20.17 (1987), 5971.
- [5] P. Gaspard und S. A. Rice. »Scattering from a classically chaotic repeller«. *The Journal of Chemical Physics* 90.4 (1989), 2225–2241.
- [6] P. Cvitanović und B. Eckhardt. »Periodic-orbit quantization of chaotic systems«. *Physical Review Letters* 63.8 (1989), 823–826.
- [7] M. V. Berry und J. P. Keating. »A rule for quantizing chaos?«. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 23.21 (1990), 4839.
- [8] J. Main u. a. »Semiclassical quantization by Padé approximant to periodic orbit sums«. *Europhysics Letters* 48.1–2 (1999), 135–139.
- [9] J. Main. »Use of harmonic inversion techniques in semiclassical quantization and analysis of quantum spectra«. *Physics Reports* 316.4–5 (1999), 233–338.
- [10] N. Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- [11] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. 2nd ed. 1995 edition. Berlin: Springer, 2013.
- [12] W. D. Heiss. »Phases of wave functions and level repulsion«. *The European Physical Journal D – Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics* 7.1 (1999), 1–4.
- [13] W. D. Heiss. »The physics of exceptional points«. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 45.44 (2012), 444016.

- [14] C. Dembowski u. a. »Experimental Observation of the Topological Structure of Exceptional Points«. *Physical Review Letters* 86.5 (2001), 787–790.
- [15] J. Fuchs u. a. »Harmonic inversion analysis of exceptional points in resonance spectra«. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 47.12 (2014), 125304.
- [16] B. Eckhardt u. a. »Semiclassical matrix elements from periodic orbits«. *Physical Review A* 45.6 (1992), 3531–3539.
- [17] M. R. Wall und D. Neuhauser. »Extraction, through filter-diagonalization, of general quantum eigenvalues or classical normal mode frequencies from a small number of residues or a short-time segment of a signal. I. Theory and application to a quantum-dynamics model«. *The Journal of Chemical Physics* 102.20 (1995), 8011–8022.
- [18] V. A. Mandelshtam und H. S. Taylor. »Spectral Analysis of Time Correlation Function for a Dissipative Dynamical System Using Filter Diagonalization: Application to Calculation of Unimolecular Decay Rates«. *Physical Review Letters* 78.17 (1997), 3274–3277.
- [19] V. A. Mandelshtam und H. S. Taylor. »Harmonic inversion of time signals and its applications«. *The Journal of Chemical Physics* 107.17 (1997), 6756–6769.
- [20] J. Main u. a. »Decimation and harmonic inversion of periodic orbit signals«. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 33.6 (2000), 1247.
- [21] J. Main u. a. »Decimation and harmonic inversion of periodic orbit signals«. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 33.6 (2000), 1247.
- [22] K. T. Hansen. »Symbolic dynamics. I. Finite dispersive billiards«. *Nonlinearity* 6.5 (1993), 753–769.
- [23] K. Weibert, J. Main und G. Wunner. »Periodic orbit quantization of chaotic systems with strong pruning«. *Physics Letters A* 297.1–2 (2002), 87–91.
- [24] W. Lu u. a. »Microwave study of quantum  $n$ -disk scattering«. *Physical Review E* 61.4 (2000), 3652–3663.
- [25] A. Eberspächer. »Fractal Weyl law for three-dimensional chaotic hard-sphere scattering systems«. Diplomarbeit. Stuttgart: Universität Stuttgart, 2010.

- [26] P. Gaspard. *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*. Cambridge Nonlinear Science Series. Cambridge University Press, 2005.
- [27] I. Burghardt und P. Gaspard. »Molecular transition state, resonances, and periodic-orbit theory«. *The Journal of Chemical Physics* 100.9 (1994), 6395–6411.
- [28] P. Gaspard und S. A. Rice. »Exact quantization of the scattering from a classically chaotic repeller«. *The Journal of Chemical Physics* 90.4 (1989), 2255–2262.
- [29] P. Cvitanovic und B. Eckhardt. »Symmetry decomposition of chaotic dynamics«. *Nonlinearity* 6.2 (1993), 277–311.
- [30] Y. V. Fyodorov und D. V. Savin. »Resonance Scattering of Waves in Chaotic Systems«. *The Oxford Handbook of Random Matrix Theory*. Oxford University Press, 2011.
- [31] L. Reichl. *The Transition to Chaos: Conservative Classical Systems and Quantum Manifestations*. 2. Aufl. Springer, 2004.
- [32] A. I. Magunov, I. Rotter und S. I. Strakhova. »Strong laser field effects in autoionization«. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 32.6 (1999), 1489.
- [33] A. I. Magunov, I. Rotter und S. I. Strakhova. »Laser-induced continuum structures and double poles of the  $S$ -matrix«. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34.1 (2001), 29.
- [34] O. Latinne u. a. »Laser-Induced Degeneracies Involving Autoionizing States in Complex Atoms«. *Physical Review Letters* 74.1 (1995), 46–49.
- [35] H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. »Exceptional Points in Atomic Spectra«. *Physical Review Letters* 99.17 (2007), 173003.
- [36] R. Lefebvre u. a. »Resonance Coalescence in Molecular Photodissociation«. *Physical Review Letters* 103.12 (2009), 123003.
- [37] E. Hernández, A. Jáuregui und A. Mondragón. »Non-Hermitian degeneracy of two unbound states«. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 39.32 (2006), 10087.
- [38] K. Rapedius u. a. »Nonlinear resonant tunneling of Bose–Einstein condensates in tilted optical lattices«. *Physical Review A* 82.6 (2010), 063601.
- [39] H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. »Discovery of exceptional points in the Bose–Einstein condensation of gases with attractive  $1/r$  interaction«. *Physical Review A* 77.1 (2008), 013618.

- [40] R. Gutöhrlein u. a. »Bifurcations and exceptional points in dipolar Bose–Einstein condensates«. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 46.30 (2013), 305001.
- [41] N. Abt, H. Cartarius und G. Wunner. »Supersymmetric Model of a Bose–Einstein Condensate in a  $\mathcal{PT}$ -Symmetric Double-delta Trap«. *International Journal of Theoretical Physics* 54.11 (2015), 4054–4067.
- [42] E. M. Graefe u. a. »A non-Hermitian  $\mathcal{PT}$  symmetric Bose–Hubbard model: eigenvalue rings from unfolding higher-order exceptional points«. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 41.25 (2008), 255206.
- [43] M. V. Berry. »Mode degeneracies and the petermann excess-noise factor for unstable lasers«. *Journal of Modern Optics* 50.1 (2003), 63–81.
- [44] S. Klaiman, U. Günther und N. Moiseyev. »Visualization of Branch Points in  $\mathcal{PT}$ -Symmetric Waveguides«. *Physical Review Letters* 101.8 (2008), 080402.
- [45] J. Wiersig, S. W. Kim und M. Hentschel. »Asymmetric scattering and nonorthogonal mode patterns in optical microspirals«. *Physical Review A* 78.5 (2008), 053809.
- [46] J. Wiersig. »Enhancing the Sensitivity of Frequency and Energy Splitting Detection by Using Exceptional Points: Application to Microcavity Sensors for Single-Particle Detection«. *Physical Review Letters* 112.20 (2014), 203901.
- [47] B. Dietz u. a. »Exceptional Points in a Microwave Billiard with Time-Reversal Invariance Violation«. *Physical Review Letters* 106.15 (2011), 150403.
- [48] S. Bittner u. a. »Scattering experiments with microwave billiards at an exceptional point under broken time-reversal invariance«. *Physical Review E* 89.3 (2014), 032909.
- [49] M. Lawrence u. a. »Manifestation of  $\mathcal{PT}$  Symmetry Breaking in Polarization Space with Terahertz Metasurfaces«. *Physical Review Letters* 113.9 (2014), 093901.
- [50] B. Zhen u. a. »Spawning rings of exceptional points out of Dirac cones«. *Nature* 525.7569 (2015), 354–358.
- [51] T. Stehmann, W. D. Heiss und F. G. Scholtz. »Observation of exceptional points in electronic circuits«. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 37.31 (2004), 7813.

- [52] T. Gao u. a. »Observation of non-Hermitian degeneracies in a chaotic exciton-polariton billiard«. *Nature* 526.7574 (2015), 554–558.
- [53] E. B. Bogomolny. »Smoothed wave functions of chaotic quantum systems«. *Physica D: Nonlinear Phenomena* 31.2 (1988), 169–189.
- [54] B. Eckhardt u. a. *Quantum Chaos*. Hrsg. von G. Casati und B. V. Chirikov. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [55] J. E. Dennis Jr., D. M. Gay und R. E. Walsh. »An Adaptive Nonlinear Least-Squares Algorithm«. *ACM Transactions on Mathematical Software* 7.3 (1981), 348–368.



## DANKSAGUNG

Während der Anfertigung dieser Masterarbeit erhielt ich von zahlreichen Personen Unterstützung. Bedanken möchte ich mich bei

- meinem Betreuer Prof. Dr. Jörg Main, der mir dieses Thema angeboten hat, für die intensive und sehr engagierte Betreuung und die Möglichkeit mich stets mit allen auftauchenden Fragen an ihn zu wenden,
- Prof. Dr. Rudolf Hilfer für die Übernahme des Mitberichts,
- Prof. Dr. Günter Wunner für die Möglichkeit die Masterarbeit am 1. Institut für Theoretische Physik anzufertigen,
- meinen Büronachbarn Lukas Oberreiter, Daniel Dizdarevic und Jonathan Luft für die gute Büroatmosphäre und die Diskussionen über alle Aspekte dieser Arbeit,
- Karoline Weinspach für aufmerksames und kritisches Korrekturlesen,
- Priv.-Doz. Dr. Holger Cartarius und Robin Gutöhrlein für die perfekte IT-Administration am Institut,
- allen weiteren Mitarbeitern des 1. Instituts für Theoretische Physik für die angenehme Arbeitsatmosphäre und nicht zuletzt
- meinen Eltern für die umfangreiche ideelle und finanzielle Unterstützung während meines gesamten Studiums.





## EHRENWÖRTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre hiermit,

- dass ich diese Masterarbeit 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,
- dass ich die Arbeit weder vollständig noch in Teilen bereits veröffentlicht habe, es sei denn, der Prüfungsausschuss hat die Veröffentlichung vorher genehmigt und
- dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, den 25. April 2017

Niklas Liebermann