

**Quantenmechanik zwischen Regularität und Chaos:  
Vom gemischten Phasenraum zu ungeordneten Systemen**

**Dissertation**

zur Erlangung des Doktorgrades  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultäten  
der Georg-August-Universität zu Göttingen

vorgelegt von

**Matthias Weiß**

aus Salmünster

Göttingen 2000

D7

Referent:

Prof. Dr. Theo Geisel

Koreferent:

Prof. Dr. Kurt Schönhammer

Tag der mündlichen Prüfung : 31.10.2000

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>13</b>
2.1	Hamiltonsche Mechanik . . . . .	13
2.1.1	Integrable Systeme . . . . .	13
2.1.2	Poincaré-Schnitte . . . . .	14
2.1.3	Vom integrablen zum chaotischen Phasenraum . . . . .	15
2.1.4	Charakteristika gemischter Phasenräume . . . . .	18
2.1.5	Gekickte Modellsysteme . . . . .	22
2.1.5.1	Die Standardabbildung . . . . .	23
2.1.5.2	Die Separatrixabbildung . . . . .	26
2.2	Quantenmechanik . . . . .	27
2.2.1	Quantensignaturen chaotischer Dynamik . . . . .	27
2.2.2	Quantenchaos und gemischter Phasenraum . . . . .	30
2.2.3	Quantisierung gekickter Systeme . . . . .	32
2.2.3.1	Unitäre Zeitentwicklung gekickter Systeme . . . . .	32
2.2.3.2	Nicht-unitäre Zeitentwicklungsoperatoren . . . . .	33
<b>3</b>	<b>Quantensysteme mit gemischtem Phasenraum</b>	<b>37</b>

3.1	Geschlossenen Systeme . . . . .	38
3.1.1	Eine neue Klasse von Eigenzuständen . . . . .	38
3.1.2	Der Anteil hierarchischer Eigenzustände . . . . .	39
3.2	Das Kettenmodell . . . . .	45
3.2.1	Das klassische Kettenmodell . . . . .	45
3.2.2	Quantenmechanische Realisierung . . . . .	47
3.3	Offene Systeme . . . . .	51
3.3.1	Numerische Untersuchung offener Systeme . . . . .	52
3.3.2	Approximative Behandlung offener Systeme . . . . .	56
3.4	Ausblick . . . . .	60
<b>4</b>	<b>Chaos und Lokalisierung</b>	<b>63</b>
4.1	Dynamische Lokalisierung . . . . .	63
4.1.1	Standardabbildung und Bandzufallsmatrizen . . . . .	65
4.2	Ungeordnete quasi-eindimensionale Systeme mit Magnetfeld . . . . .	67
4.2.1	Gebrochene Zeitumkehrinvarianz in der Standardabbildung . . . . .	69
4.2.2	WBRM-Ensemble mit gebrochener Zeitumkehrinvarianz . . . . .	71
4.3	Ausblick . . . . .	76
<b>5</b>	<b>Exponentielle und faktorielle Lokalisierung</b>	<b>79</b>
5.1	Das 1D-Anderson Modell mit elektrischem Feld . . . . .	79
5.1.1	Skalierungsansatz für Lokalisierungslängen . . . . .	82
5.2	Numerische Untersuchung des Modells . . . . .	85
5.2.1	Skalierungseigenschaften unendlicher Proben . . . . .	85
5.2.2	Skalierungseigenschaften endlicher Proben . . . . .	86
5.2.3	Skalierungseigenschaften der Eigenvektoren . . . . .	90

---

<b>6 Zusammenfassung</b>	<b>95</b>
<b>Anhang</b>	<b>97</b>
<b>A</b>	<b>97</b>
A.1 Die Husimi-Darstellung . . . . .	97
A.2 Kumulative Statistik nächster Niveauabstände . . . . .	98
A.3 Die Niveauezahlvarianz . . . . .	99
<b>B</b>	<b>101</b>
B.1 Numerik und Symmetrien in der Standardabbildung . . . . .	101
B.2 Bandmatrizen und die Cayley-Form . . . . .	105



# Kapitel 1

## Einleitung

*Sokrates der alte Greis  
Sagte oft in tiefen Sorgen:  
Ach wieviel ist doch verborgen,  
Was man immer noch nicht weiß.*  
Wilhelm Busch

Die klassische Hamilton-Mechanik erweckt auf den ersten Blick den Eindruck, ein geschlossen formuliertes und gut bekanntes Feld der theoretischen Physik zu sein, in dem keine grundlegenden Fragen mehr zu beantworten sind. Bereits am Ende des 19. Jahrhunderts zeigte Poincaré jedoch, daß die kanonische Störungsreihe für ein leicht gestörtes, zuvor integrables Hamilton-System im allgemeinen divergiert [1], weil die Nenner der Expansionskoeffizienten zu Null konvergieren ('Problem der kleinen Nenner'). Erst mit der Entwicklung der superkonvergenten Störungstheorie und dem Beweis des KAM-Theorems durch Kolmogorov, Arnold und Moser (1950-1960) wurde klar, daß bei moderaten Störungen doch ein endlicher Anteil der invarianten Tori im Phasenraum nahezu unverändert bleibt, wohingegen das zugehörige Komplement Anlaß zu *chaotischer* Dynamik gibt [2, 3]. In Folge entwickelte sich ein neues Feld der klassischen Mechanik, dessen rasante Entwicklung sich bis heute fortsetzt – die Erforschung chaotischer Hamilton-Systeme.

Chaotische Dynamik zeichnet sich durch eine sensitive Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen aus, d.h. die Trajektorien zweier infinitesimal unterschiedlicher Anfangsbedingungen entfernen sich unter der Dynamik exponentiell schnell voneinander, wobei die Rate der Separation durch den Lyapunov-Exponenten gegeben ist. Das KAM-Theorem bildet eine Brücke zwischen den Extremen integrierbarer bzw. voll chaotischer Hamilton-Systeme. Im Kern besagt es, daß der Phasenraum eines integrablen Systems für kleine Störungen nicht sofort zu einer strukturlosen chaotischen See mutiert, sondern daß ein endlicher Anteil der invarianten Tori mit hinreichend irrationaler Windungszahl in deformierter Form erhalten bleibt, aber von Bereichen chaotischer Bewegung umgeben ist. Ein solcher *gemischter Pha-*

*senraum*, in dem Bereiche regulärer und chaotischer Dynamik koexistieren, ist sogar der typische Fall eines Hamilton-Systems [4]. Korrelationsfunktionen zerfallen in diesen Systemen charakteristischerweise algebraisch langsam im Gegensatz zu den analogen Größen im voll chaotischen System, die üblicherweise exponentiell schnell zerfallen. Das prominenteste Beispiel für solch eine Größe ist die Wahrscheinlichkeit  $P(t)$ , daß eine chaotische Trajektorie mindestens eine Zeit  $t$  in der Nähe der Inseln regulärer Bewegung bleibt. Diese Funktion zerfällt im gemischten Phasenraum gemäß  $P(t) \sim t^{-\gamma}$ . Die Frage, ob und wie man den Exponenten  $\gamma$  direkt aus der selbstähnlichen Struktur des gemischten Phasenraums entnehmen kann, ist in diesem Kontext die wohl wichtigste und umstrittenste Frage. Für den Spezialfall einer exakt renormierbaren Phasenraumstruktur, die einen KAM-Torus mit Windungszahl des goldenen Schnitts  $\sigma_g = (\sqrt{5} - 1)/2$  approximiert, konnte  $\gamma = 3$  vorhergesagt werden [5, 6], wofür kürzlich auch numerische Unterstützung vorgelegt wurde [7]. Wie im Rahmen dieser Arbeit gezeigt wird, basieren jedoch sowohl die Vorhersage als auch die numerische Unterstützung auf fehlerhaften Annahmen [8]. Diese Untersuchung legt den Schluß nahe, daß  $\gamma$  eine stark systemspezifische Größe ist und i.a. nicht mit den bisherigen vereinfachten Renormierungsargumenten vorhergesagt werden kann.

Neben einer Erforschung der klassischen Mechanik chaotischer Systeme, hat im Verlauf der letzten beiden Jahrzehnte das Interesse an der Quantenmechanik chaotischer Dynamik stark zugenommen. Grund dafür ist das vollständige Fehlen einer chaotischen Quantendynamik als Konsequenz der Unschärferelation. Sie konterkariert den Begriff von infinitesimal benachbarten Anfangsbedingungen, so daß die Quantendynamik klassisch chaotischer Systeme keine sensitive Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen zeigen kann, vielmehr mittelt man quantenmechanisch über eine unendliche Menge von benachbarten Anfangsbedingungen. Gleichwohl stellt sich in Anbetracht des Korrespondenzprinzips die Frage nach Quantensignaturen klassisch chaotischer Dynamik. Die eigentliche Definition des Forschungsgebiets *Quantenchaos* ist somit die Suche nach Quantensignaturen der klassisch chaotischen Dynamik im semiklassischen Limes. Vielfältige Fortschritte im Verständnis von Quantenchaos konnten insbesondere für voll chaotische Systeme erzielt werden (siehe z.B. [9] und dortige Referenzen). Die Suche nach Quantensignaturen der viel typischeren Systeme mit gemischtem Phasenraum steckt aber nach wie vor in den Kinderschuhen, da sie bereits klassisch eine sehr komplexe Dynamik zeigen. Überdies wurde in den meisten quantenmechanischen Untersuchungen angenommen, daß der gemischte Phasenraum als Überlagerung zweier unabhängiger Komponenten (chaotische und reguläre Region) angesehen werden kann, was der hierarchischen Anordnung der Inseln regulärer Dynamik keinerlei Rechnung trägt. Insbesondere kann man mit dieser Vereinfachung auch keine Quanteneffekte des typischen Merkmals gemischter Phasenräume beobachten, dem algebraischen Zerfall von  $P(t)$ , der wesentlich von der komplexen Struktur des Phasenraums abhängt.

Eine der wenigen bekannten Quantensignaturen gemischter Phasenräume, die auch die hierarchische Anordnung der regulären Inseln einbezieht, ist die semiklassische Vorhersage fraktaler Leitwertfluktuationen [10] als Funktion eines Parameters (Energie oder Magnet-

feld). Der Vorhersage folgend, determiniert der algebraische Abfall  $P(t) \sim t^{-\gamma}$  die fraktale Dimension  $D = 2 - \gamma/2$  der reproduzierbaren Leitwertfluktuationen, deren Existenz und Eigenschaften experimentell [11,12] und numerisch [13] verifiziert werden konnten. In jüngsten numerischen Untersuchungen [14] wurde jedoch noch ein zweiter Typ Leitwertfluktuationen in diesen Systemen beobachtet, der sich nicht mit der semiklassischen Theorie beschreiben läßt, nämlich eine glatte Leitwertkurve mit isolierten, scharfen Resonanzen. Die Varianz der Leitwertinkremente zeigte in diesen Untersuchungen *unterhalb* des mittleren Niveauabstandes ein Potenzgesetz, dessen Exponent nahe am Wert des klassischen  $\gamma$  lag. Diese Beobachtung ist umso erstaunlicher, als die Quantenmechanik das klassische Verhalten nur für Zeiten nachahmen kann, die über die Energie-Zeit-Unschärfe mit Energien *oberhalb* des mittleren Niveauabstandes verbunden sind. Das rätselhafte Auftreten des klassischen Exponenten  $\gamma$ , sowie die Existenz zweier Typen von Leitwertfluktuationen zeigt, daß selbst dieser Aspekt gemischter Systeme noch weitergehende Forschung erfordert.

In dieser Arbeit werden einige sehr grundlegende Quantensignaturen gemischter Phasenräume untersucht, nämlich das Auftreten und die Quantifizierung einer neuen Klasse von *hierarchischen* Eigenzuständen [15], sowie ihr Einfluß auf die statistischen Eigenschaften von Spektrum und Eigenfunktionen. Neben einem qualitativen und quantitativen Verständnis der Quantenmechanik gemischter Systeme, bieten die in diesem Kontext ebenfalls erhaltenen Ergebnisse für offene Quantensysteme mit gemischtem Phasenraum einen Erklärungsansatz für das Auftreten der beiden oben zitierten Leitwertfluktuationen [16].

Von gleicher Wichtigkeit wie die eben genannten grundlegenden Fragestellungen ist der Bezug vollständig chaotischer Dynamik zu festkörperphysikalischen Fragestellungen. Beispielsweise zeigt sich, daß sich die klassisch diffusive Dynamik einiger voll chaotischer Systeme nicht notwendig auf das Quantensystem übertragen muß. Vielmehr beobachtet man Lokalisierungseffekte, die rein quantenmechanischer Natur sind. Solche kontraintuitiven Befunde erinnern stark an das Verhalten der Anderson-Modelle, die ein Paradigma der Festkörperphysik ungeordneter Systeme sind. Eindimensionale bzw. quasi-eindimensionale Modelle dieser Klasse zeigen ebenfalls trotz ihres klassisch diffusiven Verhaltens für jede noch so geringe Unordnung exponentiell lokalisierte Eigenfunktionen [17] und verhalten sich dementsprechend im Limes unendlich großer Proben immer wie Isolatoren. Wie von Fishman, Grempel und Prange gezeigt werden konnte [18], lassen sich chaotische Systeme zu einem gewissen Grad auf diese Anderson-Modelle abbilden, so daß die quantenmechanische Unterdrückung des klassischen Chaos über die Anderson-Lokalisierung erklärt werden kann.

Der überwiegende Teil der Untersuchungen zu ungeordneten bzw. chaotischen Systemen mit Lokalisierung befaßte sich mit den Grenzfällen reiner Symmetrieklassen wie z.B. erhaltener Zeitumkehrinvarianz. Für ungeordnete quasi-eindimensionale Systeme rückte in jüngster Zeit aber immer mehr die Frage nach Lokalisierungs- und Fluktuationseigenschaften bei zunehmender Brechung der Zeitumkehrinvarianz in das Zentrum des Interesses, was experimentell z.B. mit dünnen Drähten im Magnetfeld untersucht werden kann. Die-

se Fragestellung wurde insbesondere deshalb attraktiv, weil es erstmals mit Hilfe supersymmetrischer Techniken möglich war, die Lokalisierungslängen von Eigenzuständen bei schwach gebrochener Zeitumkehrinvarianz analytisch zu berechnen [19–21] und auch erste Experimente bei tiefen Temperaturen [22, 23] für diesen Übergangsbereich verfügbar waren. Während allerdings die supersymmetrischen Vorhersagen das *spontane* Auftreten *zweier* charakteristischer Lokalisierungslängen bei schwach gebrochener Zeitumkehrinvarianz fordern, legen Experiment und erste numerische Untersuchungen [24] die *kontinuierliche* Vergrößerung *einer* charakteristischen Lokalisierungslänge nahe. Die Kontroverse um die beiden qualitativ sehr unterschiedlichen Skalierungsgesetze wird in dieser Arbeit eindeutig zugunsten der einparametrischen Skalierung entschieden [25]. Weiterhin werden die asymptotische Einhüllende eines zeitevolvierten Wellenpaketes angegeben, sowie dessen Fluktuationseigenschaften um diese Einhüllende untersucht, die einige Forderungen an eine zukünftige vollständige Beschreibung der Lokalisierung bei schwach gebrochener Zeitumkehrinvarianz stellen.

Ein weitere Aspekt ungeordneter Systeme ist die Vergleichbarkeit der lokalisierten Eigenzustände eindimensionaler und quasi-eindimensionaler Proben. Während eine gemeinsame Grobstruktur auf Skalen mehrerer Lokalisierungslängen im vollkommen feldfreien Fall gesichert ist [26], stellt sich die Frage, ob diese Vergleichbarkeit z.B. auch beim Anlegen eines statischen elektrischen Feldes erhalten bleibt. Während man bei perfekten Kristallen mit statischem elektrischen Feld aufgrund der Bloch-Oszillationen keinen makroskopischen Strom erhält, ist das Verhalten ungeordneter Proben im elektrischen Feld gekennzeichnet durch ein subtiles Wechselspiel der Anderson- und der Wannier-Stark-Lokalisierung. Unter gewissen Voraussetzungen zeigen solche Systeme Übergänge von exponentiell zu faktoriell lokalisierten Wellenfunktionen, wobei es keineswegs klar ist, ob die Eigenzustände eindimensionaler Proben vergleichbar sind mit Eigenzuständen quasi-eindimensionaler Systeme. Mit Hilfe einer Skalierungsuntersuchung mehrerer Lokalisierungsmaße wird diese Frage in der vorliegenden Arbeit eindeutig positiv beantwortet [27] und damit eine wichtige konzeptuelle Lücke in der Vergleichbarkeit ungeordneter eindimensionaler und quasi-eindimensionaler Systeme geschlossen.

Der Aufbau dieser Arbeit ist wie folgt: Im **zweiten Kapitel** werden Grundlagen zu chaotischen Hamilton-Systemen und deren Quantensignaturen referiert, sowie das notwendige Handwerkszeug für die nachfolgenden Untersuchungen bereitgestellt. In diesem Zuge werden zwei gekickte Modellsysteme explizit vorgestellt, die für die numerischen Untersuchungen herangezogen werden. In diesem Kontext wird auch das Langzeitverhalten der kumulativen Statistik von Aufenthaltszeiten  $P(t)$  im Spezialfall eines exakt skalierbaren gemischten Phasenraums untersucht, das von den renomierungstheoretischen Vorhersagen deutlich abweicht [8]. Das **dritte Kapitel** beschäftigt sich mit Quantensignaturen gemischter Phasenräume, wobei zunächst geschlossene Systeme im Mittelpunkt stehen. Der Fokus liegt dabei auf der Einführung und Charakterisierung einer neuen Klasse hierarchischer Eigenzustände, die anschließend mit Hilfe eines analytisch zugänglichen Modells qualitativ und quantitativ erklärt werden [15]. Im Anschluß erfolgt die Einführung absorbierender

Randbedingungen und die detaillierte Untersuchung der so erhaltenen offenen Quantensysteme mit gemischtem Phasenraum [16]. Das **vierte Kapitel** vollzieht den Schwenk zu voll chaotischen Systemen und deren lokalisierten Eigenzuständen. Das Hauptaugenmerk wird dabei auf der Untersuchung von Lokalisierungslängen und Fluktuationseigenschaften in quasi-eindimensionalen Systemen bei zunehmender Brechung der Zeitumkehrinvarianz liegen [25]. Daran schließt sich im **fünften Kapitel** die Untersuchung eines Isolator-Isolator-Übergangs an, den man in ungeordneten eindimensionalen Systemen mit statischem elektrischem Feld findet [27]. Das **sechste Kapitel** faßt die zentralen Ergebnisse der Arbeit zusammen.



# Kapitel 2

## Grundlagen

Ziel dieses Kapitels ist es, eine kurze Einführung in das Verhalten von Hamilton-Systemen vom integrablen bis zum voll chaotischen Limes zu geben, wobei Systeme mit gemischtem Phasenraum im Zentrum des Interesses stehen. Nach einer kurzen Zusammenstellung der wichtigsten Aspekte der klassischen Mechanik, erfolgt die Vorstellung der numerisch besonders einfach zu behandelnden gekickten Modellsysteme. Im Rahmen der expliziten Behandlung zweier beispielhafter Abbildungen dieser Klasse, wird auch ein erstes Ergebnis dieser Arbeit vorgestellt, das rein klassischer Natur ist [8]. Darauf aufbauend werden anschließend typische Größen und Definitionen eingeführt, die üblicherweise zur Untersuchung von Quantensignaturen klassisch chaotischer Dynamik herangezogen werden.

### 2.1 Hamiltonsche Mechanik

#### 2.1.1 Integrierte Systeme

Hamiltonsche Systeme zeichnen sich durch die Eigenschaft aus, daß all ihre Zwangsbedingungen holonom sind und infolgedessen alle dynamische Information einer einzigen Funktion  $H$ , der Hamilton-Funktion, entnommen werden kann. Ein Hamilton-System hat  $d$  Freiheitsgrade, wenn  $H$  nur von  $d$  kanonisch konjugierten Variablenpaaren abhängt<sup>1</sup>: Den  $d$  verallgemeinerten Orten  $q_i$  und den  $d$  dazu kanonisch konjugierten verallgemeinerten Impulsen  $p_i$ . Die Achsen der  $2d$  kanonisch konjugierten Variablen spannen den Phasenraum auf, in dem jeder Punkt einem Bewegungszustand des Systems entspricht. Die Dynamik im

---

<sup>1</sup>Ohne Einschränkung der Allgemeinheit sei hier eine autonome Hamilton-Funktion angenommen, deren Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße ist, denn durch eine einfache Variablentransformation kann jedes nicht-autonome dynamische System auf ein autonomes zurückgeführt werden.

Phasenraum kann man zum einen durch direkte Integration der hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial}{\partial q_i}H = -\{p_i, H\} \quad \dot{q}_i = \frac{\partial}{\partial p_i}H = \{q_i, H\} \quad i = 1, \dots, d \quad (2.1)$$

für einzelne Orbits studieren. Eleganter und adäquater für einen späteren Vergleich mit der Quantenmechanik ist jedoch die Formulierung mit Hilfe der Liouville-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho_{\text{cl}} = \{H, \varrho_{\text{cl}}\} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d}{dt}\varrho_{\text{cl}} = 0, \quad (2.2)$$

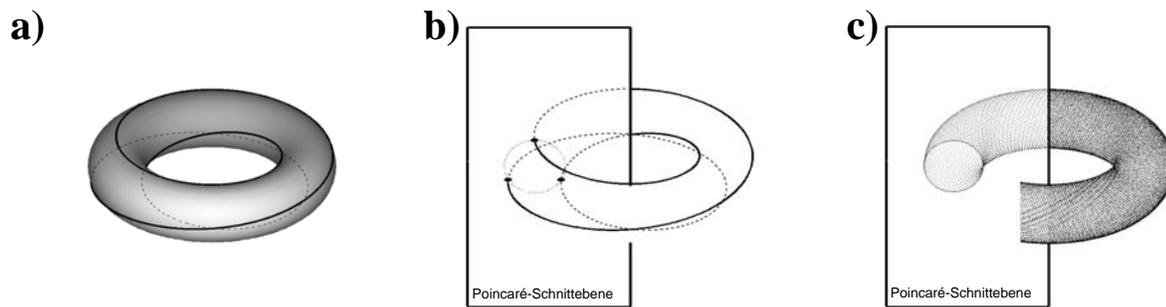
die das Konzept der Phasenraumdichte  $\varrho_{\text{cl}}$  nutzt. Die Kontinuitätsgleichung (2.2) beschreibt die Erhaltung des Phasenraumvolumens unter einer hamiltonschen Dynamik, was eine direkte Konsequenz der symplektischen Struktur des Phasenraums ist. Die Poisson-Klammern in obigen Gleichungen sind dabei wie üblich definiert als

$$\{F, G\} = \sum_{i=1}^d \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i}. \quad (2.3)$$

Im einfachsten Falle existieren in einem Hamilton-System neben der Energie noch weitere  $d - 1$  Erhaltungsgrößen (z.B. der Drehimpuls), so daß  $H$  nach einer kanonischen Transformation nur noch von einem vollständigen Satz Wirkungs- und Winkelvariablen  $(\mathbf{I}, \boldsymbol{\omega}) = (I_1, \dots, I_d, \omega_1, \dots, \omega_d)$  abhängt. Diese Variablen haben die besondere Eigenschaft, daß die Wirkungen  $I_i$  gerade die Konstanten der Bewegung beschreiben und mithin zeitlich konstant sind:  $\{I_i, H\} = 0$ . Weiterhin stehen die Wirkungen in Involution, d.h. für alle  $i \neq j$  gilt  $\{I_i, I_j\} = 0$ . Die Hamilton-Funktion hängt damit nur noch linear von den zyklischen Winkelvariablen  $\boldsymbol{\omega}$  ab, und die Dynamik im Phasenraum läßt sich ohne Einschränkung der Allgemeinheit auf einen  $d$ -dimensionalen Torus  $S_1(I_1) \times \dots \times S_1(I_d)$  beschränken. Jeder mögliche Bewegungszustand des Systems ist in dieser Darstellung durch einen Satz von  $d$  Kreisfrequenzen  $\omega_1, \dots, \omega_d$  charakterisiert, mit der die irreduziblen 1-Tori  $S_1(I_i)$  durchlaufen werden. Die Vereinigung aller periodischen Orbits, deren Kennzeichen ein rationales Verhältnis der Kreisfrequenzen ist, bildet die Menge der sog. *resonanten Tori* im Phasenraum. Quasiperiodische Trajektorien hingegen zeichnen sich durch irrationale Frequenzverhältnisse aus und bilden im Phasenraum das Komplement zu den resonanten Tori – die sog. *nicht-resonanten Tori*. Existiert eine kanonische Transformation auf einen vollständigen Satz von Wirkungs- und Winkelvariablen, so heißt das Hamilton-System *integrabel*. Offensichtlich sind eindimensionale autonome Hamilton-Systeme aufgrund der Energieerhaltung integrabel.

### 2.1.2 Poincaré-Schnitte

Meist ist ein Hamilton-System, das es zu untersuchen gilt, so hochdimensional, daß eine direkte Veranschaulichung des Phasenraums nicht mehr möglich ist. Schon ein autonomes



**Abbildung 2.1:** Konstruktion eines Poincaré-Schnittes für ein System mit zwei Freiheitsgraden. **a)** Ein periodischer Orbit mit Frequenzen  $\omega_1, \omega_2 = 3\omega_1$  auf dem 2-Torus. **b)** Der Orbit aus a) erzeugt auf der Poincaré-Schnittebene drei Punkte, die auf einem invarianten Kreis liegen. **c)** Ein quasiperiodischer Orbit füllt einen invarianten Kreis der Poincaré-Schnittebene dicht aus.

System mit zwei Freiheitsgraden läßt sich durch Ausbeutung der Energieerhaltung i.a. nur auf einen 3-dimensionalen Phasenraum reduzieren, dessen graphische Aufbereitung bereits problematisch ist. Um dennoch ein qualitatives Bild der Dynamik zu erhalten, ist es üblich, sog. *Poincaré-Schnitte* zu betrachten. Typischerweise handelt es sich dabei um zweidimensionale Schnitte durch den hochdimensionalen Phasenraum. Die Dynamik eines autonomen Hamilton-Systems mit zwei Freiheitsgraden  $(q_1, p_1), (q_2, p_2)$  kann z.B. unter Ausnutzung der Energieerhaltung und einer Einschränkung wie  $p_2 \geq 0$  auf eine stroboskopische Abbildung in der zweidimensionalen Ebene reduziert werden – einen Poincaré-Schnitt (siehe Abb. 2.1). Die stroboskopische Abbildung, die jedem Punkt des Poincaré-Schnitts seinen Nachfolger zuordnet, heißt Poincaré-Abbildung und ist aufgrund der hamiltonschen Dynamik flächentreu. Fixpunkte bzw. periodische Orbits manifestieren sich in Poincaré-Schnitten als endliche Punktmengen, deren Elemente dynamisch miteinander verbunden sind. Quasiperiodische Bewegung stellt sich dagegen als Torusschnitt dar, während chaotisches Verhalten eine 'See' von irregulären Punkten hervorruft. Besonders einfach erhält man einen Poincaré-Schnitt im Falle getriebener Systeme mit einem Freiheitsgrad (z.B. gekickte Systeme). Hier reicht es vollkommen aus, eine stroboskopische Abbildung einzuführen, die den Bewegungszustand nur an vielfachen der Antriebsperiode  $\tau$  darstellt.

### 2.1.3 Vom integrablen zum chaotischen Phasenraum

Sobald es keinen vollständigen Satz von Wirkungs- und Winkelvariablen mehr gibt, mit dessen Hilfe man die Dynamik auf einen  $d$ -dimensionalen Torus beschränken kann, ist das System nicht mehr integrabel. Inwieweit sich das qualitative Verhalten des Systems beim Übergang von Integrabilität zur Nichtintegrabilität ändert, ist Gegenstand der folgenden Theoreme, die in leicht abgewandelter Form aus Referenz [2] entnommen wurden, und auf die für eine detailliertere Darstellung verwiesen sei.

### KAM-Theorem (Kolmogorov, Arnold, Moser)

Ist ein integrables Hamilton-System  $H_0(\mathbf{I})$  nicht entartet, d.h.

$$\det \left| \frac{\partial^2 H_0}{\partial \mathbf{I}^2} \right| \neq 0 \quad ,$$

dann werden unter einer hinreichend kleinen Störung  $\epsilon H_1$  die meisten nicht-resonanten Tori nicht zerstört, sondern nur etwas verformt. Im Phasenraum des gestörten Systems  $H = H_0 + \epsilon H_1$  windet sich um diese deformierten *KAM-Tori* eine dichte Menge von Integralkurven der Dynamik mit einem vollständigen Satz von Wirkungs- und Winkelvariablen. Für die Menge der KAM-Tori existiert eine Funktion  $c(\epsilon)$ , so daß

$$\forall_{\mathbf{K} \in \mathbf{Z}^d} |\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{K}| \geq c(\epsilon) |\mathbf{K}|^{-\nu} \quad \text{mit} \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} c(\epsilon) = 0 \quad (2.4)$$

gilt. Für Systeme mit zwei Freiheitsgraden vereinfacht sich diese Bedingung zu:

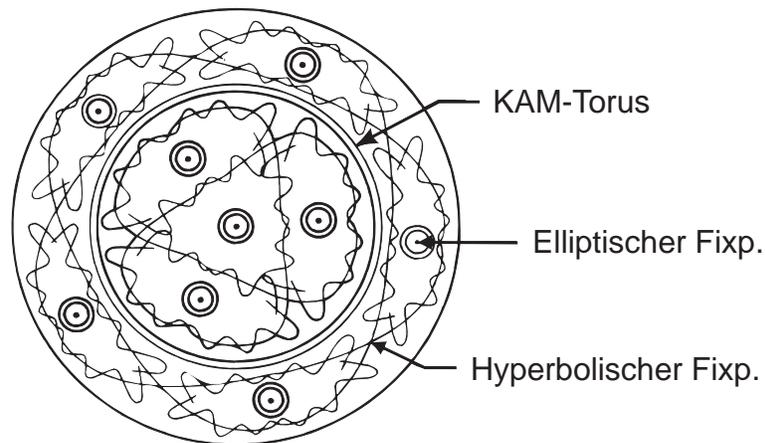
$$\forall_{p,q \in \mathbf{Z}} \left| \frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{p}{q} \right| > \frac{c(\epsilon)}{|q|^{5/2}} \quad (2.5)$$

Ist die Störung klein, so ist das Maß des Komplements der KAM-Tori ebenfalls klein.

Die Bedingungen (2.4),(2.5) sichern, daß nur nicht-resonante Tori mit hinreichend inkommensurablen Frequenzen unzerstört bleiben. Ohne auf die spezifische Natur von  $c(\epsilon)$  eingehen zu müssen, läßt sich mit Hilfe eines zahlentheoretischen Arguments eine qualitative Antwort auf die Frage geben, in welcher Reihenfolge nicht-resonante Tori zerstört werden. Jedes reelle Verhältnis  $r = \omega_1/\omega_2$  von Windungszahlen läßt sich als Kettenbruch der Form

$$r = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \dots}}} =: [a_0; a_1, a_2, a_3, \dots] \quad (2.6)$$

schreiben. Rationale Zahlen haben damit per definitionem eine endliche Kettenbruchentwicklung, irrationale Zahlen immer eine unendliche Sequenz. Je langsamer die Konvergenz der Sequenz ist, desto irrationaler die Zahl und desto später zerbricht ein KAM-Torus. Jede endliche Näherung der Sequenz, die nur die ersten  $n$  Glieder beachtet, wird als Approximand  $n$ -ter Ordnung bezeichnet. Offensichtlich beschreibt  $[1, 1, 1, \dots]$  die irrationalste Zahl, den *goldenen Schnitt*  $\sigma_g = (\sqrt{5} + 1)/2$ , dessen Approximanden die Quotienten aufeinanderfolgender Glieder der Fibonacci-Folge sind. Die stabilsten KAM-Tori sollten demnach irrationale Windungsverhältnisse aufweisen, deren Kettenbruchentwicklung in einer Sequenz von Einsen endet.



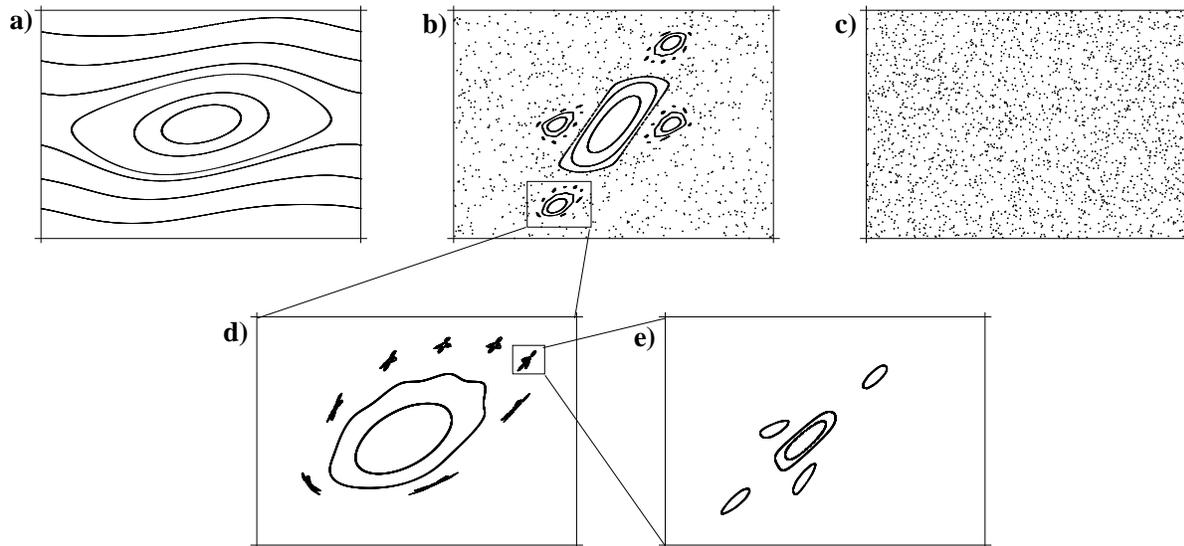
**Abbildung 2.2:** Resonante Tori gehen für wachsende Störung des integrablen Systems in eine alternierende Kette von elliptischen und hyperbolischen Fixpunkten über. Nicht-resonante Tori bleiben bei hinreichender Inkommensurabilität ihrer Windungszahlen als KAM-Tori erhalten. Ebenfalls gezeigt sind die homokline Bündel, die der Keim chaotischer Dynamik sind.

### Poincaré-Birkhoff-Theorem

Sei eine flächentreue homöomorphe Abbildung eines planaren Kreisrings auf sich selbst gegeben. Werden die beiden Randkreise des Rings in gegensätzlichem Drehsinn abgebildet, so hat die Abbildung mind. 2 Fixpunkte.

Wendet man dieses Theorem und seine Folgerungen auf die oben eingeführte Poincaré-Abbildung an, so folgt daraus, daß ein resonanter Torus von  $H_0$  mit Periode  $q$ , der zwischen zwei nicht-resonanten Tori mit unterschiedlichem Drehsinn lag, bei Einführung der Störung  $\epsilon H_1$  auf  $2qk$  ( $k \in \mathbf{Z}$ ) Fixpunkte abgebildet wird, die alternierend elliptisch (stabil) und hyperbolisch (instabil) sind. Jeder der elliptischen Fixpunkte ist wiederum umgeben von KAM-Tori und zerbrochenen resonanten Tori, die ihrerseits wieder in elliptische und hyperbolische Fixpunkte zerbrochen sind, usw. Stabile und instabile Mannigfaltigkeiten jedes dieser hyperbolischen Fixpunkte schneiden einander beliebig oft in sog. homokline Punkten, dürfen sich selbst aber nie schneiden. Das entstehende homokline Bündel muß weiterhin der Flächentreue der Poincaré-Abbildung Rechnung tragen, so daß ein unüberschaubares Wirrwarr von Schlaufen der Mannigfaltigkeiten entsteht (siehe Abb. 2.2). Die Umgebung der hyperbolischen Fixpunkte ist somit verantwortlich für das Entstehen chaotischer Bewegung.

Die beiden Theoreme zeigen, daß zwar für jede Störstärke  $\epsilon > 0$  alle resonanten Tori in eine abzählbare Menge von Fixpunkten zerfallen, die überabzählbare Menge der nicht-resonanten Tori aber zum überwiegenden Teil in deformierter Form erhalten bleibt. Bei hinreichend kleiner Störung sieht der Phasenraum von  $H$  also immer noch aus wie derjenige des ungestörten Systems  $H_0$ , da lediglich die Menge der resonanten Tori mit beliebig kleinem



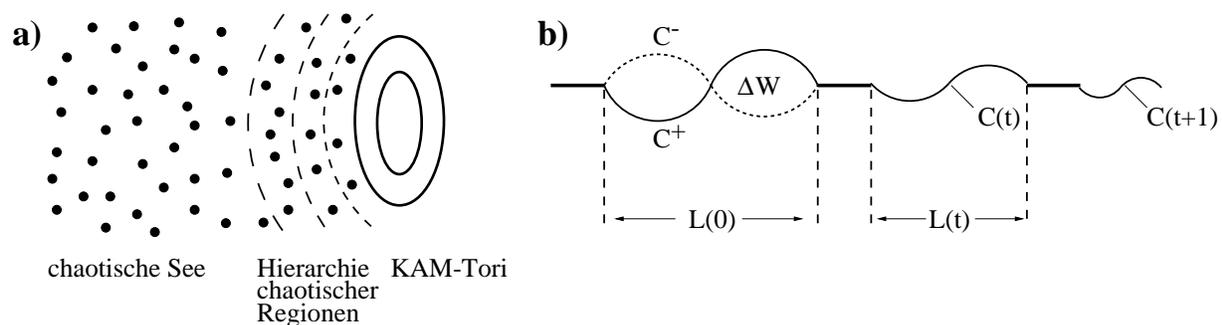
**Abbildung 2.3:** Typischer Phasenraum eines **a)** (fast) integrablen, **b)** gemischten, **c)** voll chaotischen Systems. Sukzessive Vergrößerungen des gemischten Phasenraums sind in **d)** und **e)** gezeigt.

Lebesgue-Maß verändert wurde. Ein beispielhafter Poincaré-Schnitt für diesen Sachverhalt ist in Abb. 2.3a gezeigt. Mit steigender Störstärke  $\epsilon$  verschwinden immer mehr KAM-Tori und die Lagen chaotischer Dynamik um die hyperbolischen Fixpunkte vergrößern sich. Sobald ein hinreichend großer Anteil der nicht-resonanten Tori zerstört ist, beobachtet man das typische Bild eines *gemischten* Phasenraums wie er in Abb. 2.3b gezeigt ist. Die elliptischen Fixpunkte sind von unzerstörten KAM-Tori umgeben und bilden Inseln regulärer Bewegung, die in einem Meer chaotischer Dynamik liegen. Um jede der sichtbaren Inseln herum liegt wiederum ein Kranz elliptischer Fixpunkte mit umrundenden KAM-Tori, so daß sich eine herunterskalierende Hierarchie von Inseln ergibt (siehe Vergrößerungen in Abb. 2.3d,e). Erst wenn die Störung so groß geworden ist, daß alle nicht-resonanten Tori zerstört sind, erhält man das zur Integrabilität entgegengesetzte Extrem — den voll chaotischen Phasenraum (Abb. 2.3c). Hier herrscht nun für fast jede Anfangsbedingung<sup>2</sup> sensitive Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen, d.h. der Phasenraum besteht fast nur noch aus chaotischer See.

### 2.1.4 Charakteristika gemischter Phasenräume

Meist ist der Parameterbereich, in dem man gemischte Phasenräume beobachtet, nicht auf den Gültigkeitsbereich des KAM-Theorems beschränkt, das nur eine obere Schranke für die Störstärke angibt, bis zu der die Phasenräume von  $H$  und  $H_0$  vergleichbar sind.

<sup>2</sup>Diese Einschränkung berücksichtigt die Existenz der im Phasenraum dicht liegenden instabilen periodischen Orbits, die eine Menge vom Lebesgue-Maß Null bilden.

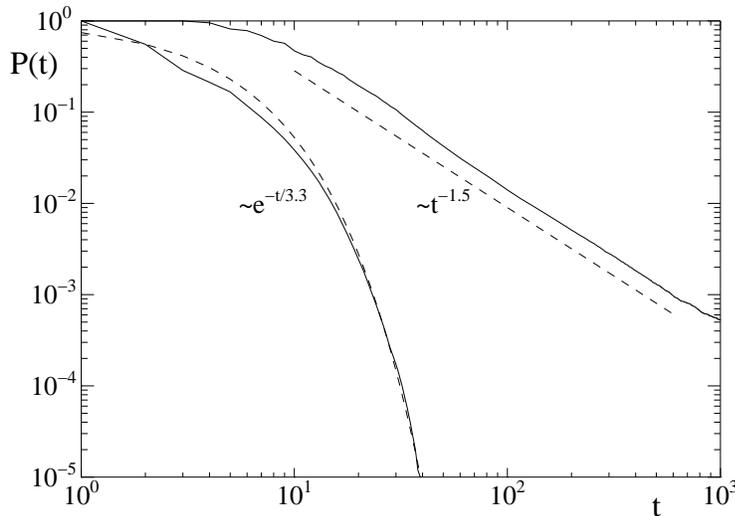


**Abbildung 2.4:** a) Skizze eines gemischten Phasenraums mit chaotischer See, KAM-Tori und umgebenden partiellen Transportbarrieren (z.B. Cantori), die zu einer Hierarchie chaotischer Regionen führen. b) Skizze zum Transport über einen Cantorus, wobei die invarianten Kurven  $C^\pm$  das auszutauschende Phasenraumvolumen  $\Delta W$  einschließen. Aufgrund der Ähnlichkeit des Transportvorgangs mit einem Drehkreuz, wird  $\Delta W$  auch als *Turnstile* bezeichnet.

Ein gemischter Phasenraum ist vielmehr der typische Fall eines Hamilton-Systems [4] und existiert meist über einen sehr großen Bereich der Störung, was auch an untenstehenden Beispielen der Standard- und Separatrixabbildung deutlich wird.

Der offensichtliche Unterschied eines gemischten Phasenraums zu integrierbaren oder voll chaotischen Systemen, manifestiert sich in der Existenz einer selbstähnlichen Abfolge von Inselstrukturen auf immer kleineren Skalen (Abb. 2.3). Daneben existiert weiterhin eine herunterskalierende Hierarchie von chaotischen Regionen um diese Inseln herum, deren Vereinigung die chaotische invariante Menge bildet. Das bedeutet, daß jede Trajektorie, die einen Punkt in einer zusammenhängenden, chaotischen invarianten Menge hat, komplett in dieser Menge liegt und fast alle Trajektorien dieser Art, die Menge im Limes  $t \rightarrow \infty$  ausfüllen. Die chaotischen Regionen sind allerdings durch partielle Transportbarrieren getrennt, die eine freie Bewegung der Trajektorien innerhalb der chaotischen invarianten Menge behindern. Die Natur der partiellen Transportbarrieren ist vielfältig: Es kann sich dabei z.B. um Cantori, d.h. zu Cantor-Mengen zerfallene KAM-Tori, oder stabile und instabile Mannigfaltigkeiten handeln [28–33]. Eine vereinfachte Skizze dieser Strukturierung des Phasenraums ist in Abb. 2.4a gezeigt, wobei der Einfachheit halber eine eindimensionale Hierarchie von Regionen angenommen wurde. Im folgenden soll der Phasenraumtransport durch Cantori am Beispiel diskreter flächentreuer Abbildungen, z.B. einer Poincaré-Abbildung, veranschaulicht werden (für Details siehe [34]), da vieles darauf hindeutet, daß dies der dominante Mechanismus für das Hängenbleiben chaotischer Trajektorien ist.

Sei ein invarianter KAM-Torus einer flächentreuen Abbildung  $\mathcal{M}(K)$  gegeben, dessen Windungsverhältnis  $r$  hinreichend irrational ist, um erst für Parameterwerte  $K > K_c$  zerstört zu werden. Anders als der Zerfall resonanter Tori in eine endliche Menge von Fixpunkten, bildet solch ein zerstörter KAM-Torus für  $K > K_c$  eine instabile löchrige invariante Menge – einen Cantorus [35, 36]. Die Existenz eines einzigen Lochs in diesem fraktalen Gebilde hat aufgrund der irrationalen Windungszahl eine unendliche Menge von Lücken zur Folge,



**Abbildung 2.5:** Zerfall von  $P(t)$  für ein voll chaotisches und ein gemischtes System. Zum besseren Vergleich sind Fits gemäß (2.8) gestrichelt eingezeichnet.

die im einfachsten Falle durch  $t$ -fache Iteration einer 'größten' Lücke  $L(0)$  hervorgehen<sup>3</sup>. Sei nun  $C(t)$  eine glatte Kurve, die die Endpunkte der Lücke  $L(t) = \mathcal{M}^t L(0)$  verbindet. Dann sind durch

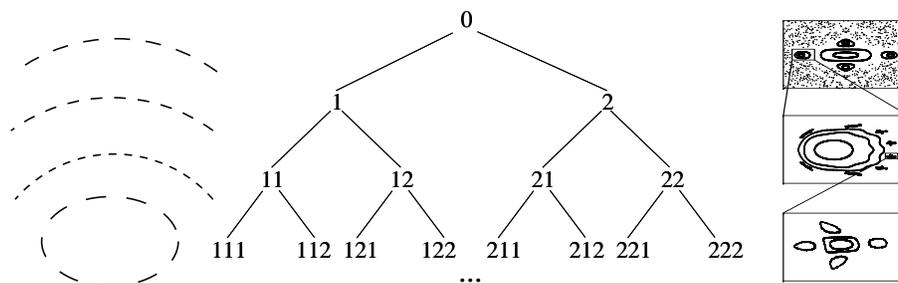
$$C^\mp = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \mathcal{M}^{-t} C(t) \quad (2.7)$$

zwei invariante glatte Verbindungskurven der Endpunkte von  $L(0)$  gegeben. Sie können nicht identisch sein, da sie sonst die Lücke schließen und ein invarianter Torus ohne Lücken entstünde, was wegen  $K > K_c$  unmöglich ist. Somit sind  $C^+, C^-$  unterschiedlich und schließen ein Phasenraumvolumen  $\Delta W$  ein, das in einer Iteration der Abbildung  $\mathcal{M}$  über den Cantorus transportiert wird (Abb. 2.4b). Der Transport des Phasenraumvolumens  $\Delta W$  erinnert stark an die Funktionsweise eines Drehkreuzes, dessen Achse der homokline Punkt  $C^+ \cap C^-$  ist, weshalb  $\Delta W$  auch als *Turnstile* bezeichnet wird<sup>4</sup>. Eine Skizze der eben beschriebenen Konstruktion ist in Abb. 2.4b gezeigt. Im Verlauf der weiteren Untersuchungen kommt es zwar nicht auf die spezielle Natur der partiellen Transportbarrieren an, jedoch wird immer wieder auf die Anschauung des Turnstile-Bildes verwiesen.

Ein Charakteristikum gemischter Phasenräume ist der algebraisch langsame Zerfall von Korrelationsfunktionen, der eine direkte Konsequenz der oben genannten partiellen Transportbarrieren ist. Das wohl prominenteste Beispiel dafür ist die kumulative Statistik von Aufenthaltszeiten  $P(t)$ , die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich eine chaotische Trajektorie länger als eine Zeit  $t$  in der Nähe der Inseln regulärer Bewegung aufhält. In voll chaotischen Systemen definiert man  $P(t)$  hingegen als die Wahrscheinlichkeit, mit der eine chaotische Trajektorie länger als eine Zeit  $t$  in einem beliebig gewählten, makroskopischen Phasenraumvolumen verbleibt. Während  $P(t)$  in Systemen mit gemischtem Phasenraum

<sup>3</sup>Im allgemeinen Fall existiert mehr als nur eine Familie von Lücken.

<sup>4</sup>Natürlich hat jede Familie von Lücken ihren eigenen Turnstile und auch die Anzahl der homoklinen Punkte muß nicht notwendig Eins sein, wie dies in Abb. 2.4b suggeriert wird.



**Abbildung 2.6:** Schematische Darstellung für das Hängenbleiben chaotischer Trajektorien im gemischten Phasenraum. Der Ast  $\{111 \dots\}$  des Entscheidungsbaumes beschreibt das Erkunden der Hierarchie chaotischer Regionen um eine zentrale Insel (linksstehende Skizze), der Ast  $\{222 \dots\}$  repräsentiert das Erkunden der chaotischen Bereiche um Nebeninseln ('Insel um Insel um Insel', rechtsstehender Poincaré-Schnitt mit Vergrößerungen).

einen algebraischen Abfall zeigt, zerfällt das Pendant im voll chaotischen Fall exponentiell (Abb. 2.5):

$$P(t) \sim \begin{cases} e^{-t} & \text{chaotisch} \\ t^{-\gamma} & \gamma > 1 \text{ gemischt} \end{cases} \quad (2.8)$$

Die Einschränkung  $\gamma > 1$  sorgt dabei für eine endliche mittlere Aufenthaltszeit der Trajektorien in der Nähe der regulären Inseln [33]. Um  $P(t)$  zu messen ist es am einfachsten, eine Menge chaotischer Trajektorien zu starten und alle Orbits zu entfernen, deren Phasenraumkoordinaten außerhalb eines zuvor definierten Fensters liegen. Während dieses Fenster im gemischten Phasenraum zweckmäßigerweise um Inseln regulärer Bewegung gelegt wird, kann im voll chaotischen Fall jedes beliebige Fenster herangezogen werden.

Der algebraische Zerfall von  $P(t)$  im gemischten Phasenraum wurde erstmals 1981 von Chirikov und Shepelyansky untersucht [37] und ist eine direkte Folge der oben genannten partiellen Transportbarrieren. Trajektorien, die zufällig in die Hierarchie chaotischer Regionen um die Inseln regulärer Dynamik geraten, werden dort z.B. durch Cantori an einem schnellen Verlassen dieses Bereichs gehindert. Sie geraten durch die chaotische Dynamik ggf. noch tiefer in die hierarchische Abfolge chaotischer Regionen, aus der sie sich erst nach und nach befreien. Die Konsequenz ist ein sehr langes Hängenbleiben von Trajektorien in der Nähe regulärer Inseln, was Anlaß zum algebraischen Zerfall von  $P(t)$  mit einem systemspezifischen Exponenten gibt, wobei meist  $\gamma < 2$  gilt. Die selbstähnliche Struktur eines gemischten Phasenraums bietet dabei vielfältige Möglichkeiten für das Hängenbleiben chaotischer Trajektorien, was in Abb. 2.6 schematisch dargestellt ist: Gemäß der vereinfachten Darstellung in Abb. 2.4a kann die Trajektorie zum einen die Hierarchie chaotischer Regionen um eine zentrale Insel regulärer Bewegung erkunden, was mit einer Sequenz  $\{111 \dots\}$  bezeichnet sei. Wie anhand Abb. 2.3b,d,e ersichtlich ist, existiert weiterhin um jede zentrale Insel eine umgebende kleinere Inselkette, die ihrerseits wiederum von partiellen Transportbarrieren umgeben sind. Eine chaotische Trajektorie kann somit auch entlang des Weges

'Insel um Insel um Insel...' in einen zweiten Ast der Hierarchie chaotischer Regionen gelangen, was mit der Sequenz  $\{222\dots\}$  bezeichnet sei. Man kann damit die Erkundung der gesamten chaotischen invarianten Menge mit einem Entscheidungsbaum (Cayley-Baum, Bethe-Gitter) beschreiben, an dessen Knoten man jeweils die Wahl hat, sich der zentralen Insel weiter zu nähern oder in die chaotische Region der umrundenden Inselkette zu springen (Abb. 2.6). Welcher dieser beiden Mechanismen den dominanten Beitrag zum Hängenbleiben chaotischer Trajektorien liefert, ist a priori nicht klar und hängt stark von der Struktur des Phasenraums ab. Der dynamisch dominante Beitrag kann von Fall zu Fall durch unterschiedliche Äste des Entscheidungsbaumes repräsentiert sein (siehe Diskussion in Kap. 2.1.5.1), so daß es bisher nicht möglich ist, den Exponenten  $\gamma$  vorherzusagen.

### 2.1.5 Gekickte Modellsysteme

Wie bereits erwähnt, kann ein autonomes Hamilton-System mit einem Freiheitsgrad aus Energieerhaltungsgründen und Eindeutigkeit der zum Phasenraumfluß gehörenden Integralkurven kein Chaos zeigen. Die einfachste Möglichkeit eine chaotische Hamilton-Funktion zu konstruieren sind daher gekickte Systeme der Form

$$H(q, p) = T(p) + V(q) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n\tau) \quad . \quad (2.9)$$

Für Zeiten  $t \neq \tau n$ ,  $n \in \mathbb{N}$  ist die Bewegung insofern trivial, als der Impuls konstant bleibt und sich der Ort linear in der Zeit ändert, denn das Potential wirkt nur zu vielfachen Zeiten einer Periode  $\tau$ . Prominente Vertreter der gekickten Systeme sind der gekickte Kreisel [38], das gekickte Harper-Modell, das ein Fülle quantenmechanischer Besonderheiten wie z.B. fraktale Spektren zu bieten hat (siehe [39,40] und dortige Referenzen), sowie die Standard- und die Separatrixabbildung (siehe Abschnitte 2.1.5.1 und 2.1.5.2).

Für einen Poincaré-Schnitt bietet es sich an, die stroboskopische Abbildung zu Zeiten  $t = \tau n$ ,  $n \in \mathbb{N}$  heranzuziehen. Setzt man der Einfachheit halber  $\tau = 1$ , berechnet die hamiltonschen Gleichungen und integriert diese über eine Periode von  $n\tau$  nach  $(n+1)\tau$ , so erhält man eine stroboskopische Abbildung der Form

$$p_{n+1} = p_n - \left. \frac{\partial V}{\partial q} \right|_{q_n} \quad q_{n+1} = q_n + \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{p_{n+1}} \quad . \quad (2.10)$$

Offensichtlich ist diese Abbildung im Falle periodischer  $q$  auf dem Zylinder  $S_1 \times \mathbb{R}$  definiert und numerisch sehr angenehm, da sie leicht iteriert werden kann. Für periodische  $T(p)$  kann die stroboskopische Abbildung (2.10) auch durch Erzwingen periodischer Ränder in Impulsrichtung auf einen Torus reduziert werden. Sowohl  $V(q)$  als auch  $T(p)$  können noch parametrisch von weiteren Variablen abhängen, mit deren Hilfe man den Grad der Chaotizität der Abbildung einstellen kann.

### 2.1.5.1 Die Standardabbildung

Setzt man in Glg. (2.9) die kinetische Energie und das Potential

$$T(p) = \frac{p^2}{2m} \quad \text{bzw.} \quad V(q) = \frac{K}{(2\pi)^2} \cos(2\pi q) \quad (2.11)$$

ein, so beschreibt die Hamilton-Funktion einen Rotator, dem periodisch ein Kick aus einer festen Richtung gegeben wird. Daraus erklärt sich auch der Name *geklickter Rotator* für dieses System. Für  $m = 1$  erhält man aus Glg. (2.10) und (2.11) die Standardabbildung [41, 42]

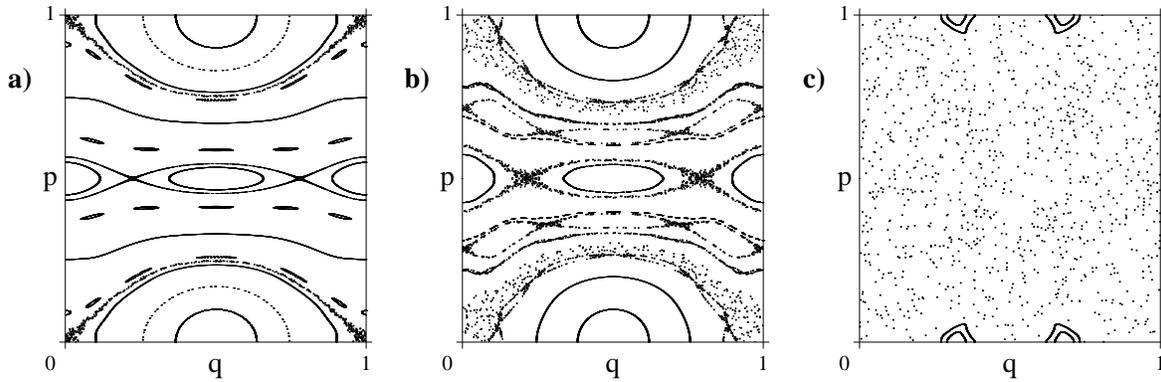
$$p_{n+1} = p_n + \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi q_n) \quad q_{n+1} = q_n + p_{n+1} \quad , \quad (2.12)$$

die erstmals von Boris Chirikov als Modell für die Dynamik von Teilchen in Beschleunigern eingeführt wurde, weshalb sie manchmal auch die Bezeichnung Chirikov-Abbildung trägt. Sie wurde seit ihrer Einführung intensiv untersucht, da sie numerisch leicht zu behandeln ist, jedoch auch experimentell mit Hilfe kalter Atome in einer optischen Falle realisiert werden kann [43]. Überdies zeigt sie eine Fülle typischer Eigenschaften von (teilweise) chaotischen Hamilton-Systemen. Unter Variation der Kickstärke  $K$  kann man das KAM-Szenario sehr gut studieren (Abb. 2.7a), bevor bei  $K_c \approx 0.97163540631$  der letzte ('goldene') KAM-Torus zerbricht (Abb. 2.7b). Im anschließenden Bereich  $K > K_c$  erkennt man noch für Werte von  $K \approx 5$  Inseln regulärer Dynamik (Abb. 2.7c). Erst bei  $K \approx 6.2$  treten neue Phänomene auf, die sog. Beschleunigermoden, die in den folgenden Untersuchungen wegen ihres superdiffusiven Verhaltens ausgeklammert werden. Da man aber selbst für noch größere  $K$  immer wieder Inseln im Phasenraum beobachtet, scheint es der generische Fall zu sein, daß dieses System einen gemischten Phasenraum zeigt, auch wenn das KAM-Theorem schon lange nicht mehr gültig ist. Selbstverständlich kann die Abbildung auch in symmetrischer Form geschrieben werden (Anhang B.1), d.h. eine Symmetrisierung im Kick oder in der freien Entwicklung des Rotors<sup>5</sup> erfolgen.

Für die kritische Kickstärke  $K = K_c$  existiert eine interessante Vorhersage für den Exponenten des algebraischen Zerfalls  $P(t) \sim t^{-\gamma}$ . Die Approximation des letzten, goldenen KAM-Torus mit kleiner werdenden Inselketten, deren Periodizität durch die Glieder der Fibonacci-Folge gegeben sind (prinzipielle Resonanzen)<sup>6</sup>, erlaubt eine exakte Renormierung der 'goldenen' Inselhierarchie [5]. Unter der Annahme, daß das Hängenbleiben chaotischer Trajektorien im wesentlichen durch diese prinzipiellen Resonanzen dominiert wird, kann mit Hilfe renormierungstheoretischer Argumente die Vorhersage  $\gamma = 3$  für den asymptotischen Zerfall von  $P(t)$  abgeleitet werden [5, 6]. Erst in jüngster Zeit erhoben Chirikov

<sup>5</sup>Diese Symmetrisierung wurde in Abb. 2.7 zugrundegelegt.

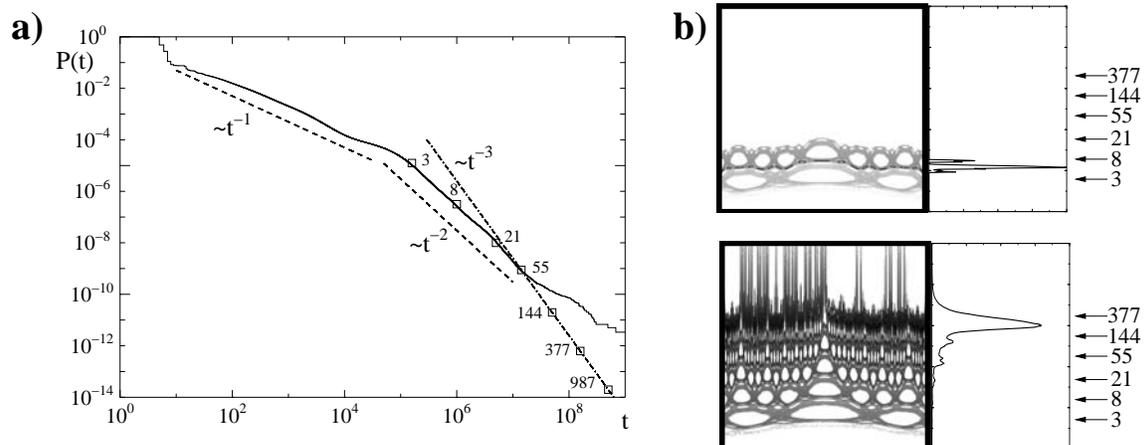
<sup>6</sup>Diese prinzipiellen Resonanzen liegen alternierend ober- und unterhalb des goldenen Torus. In den hier vorgestellten numerischen Untersuchungen wurde der Einfachheit halber nur eine der beiden Seiten behandelt (Abb. 2.8).



**Abbildung 2.7:** Poincaré-Schnitte der symmetrisierten Standardabbildung für **a)**  $K = 0.7$ , **b)**  $K = K_c$ , **c)**  $K = 5$ .

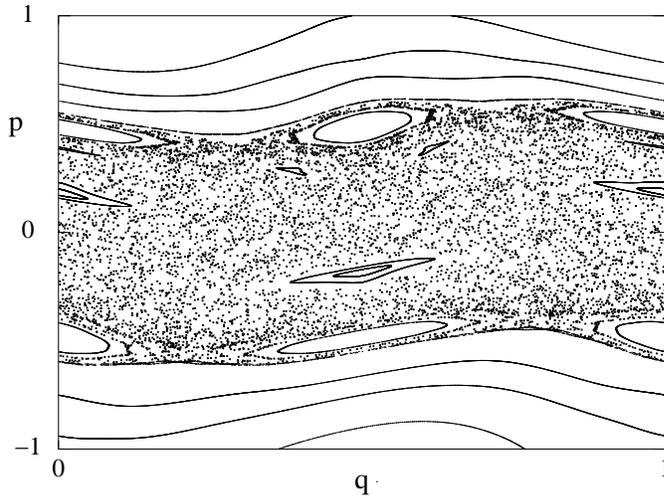
und Shepelyansky den Anspruch, diese Vorhersage erstmals numerisch verifiziert zu haben [7]. In allen vorangegangenen Untersuchungen beobachtete man immer Exponenten, die deutlich kleiner als  $\gamma = 3$  waren, was z.T. als Folge eines Hängenbleibens an nicht-prinzipiellen Resonanzen gewertet wurde [30]. Die Autoren von [7] argumentieren jedoch, daß dieses sehr lange transiente Verhalten letztendlich doch in den vorhergesagten Zerfall übergeht, den sie mit numerischer Hilfe zu  $P(t) \approx 2.5 \cdot 10^{12} t^{-3}$  für Zeiten  $t > 10^7$  abschätzten. Dabei zogen sie jedoch nicht das numerisch bestimmte  $P(t)$  heran, da dieses für Zeiten  $t > 10^7$  statistisch wenig signifikant war. Vielmehr starteten sie viele Trajektorien in der Nähe der hyperbolischen Fixpunkte der prinzipiellen Resonanzen und approximierten  $P(t)$  mit der Statistik über die Zeiten, die jene Trajektorien brauchten, um die Linie  $p = 0.5$  bzw.  $p = 0$  zu kreuzen. Diese Approximation erlaubte letztendlich die Abschätzung von  $P(t)$  im Bereich  $t \in [10^7, 10^9]$ , was zu obigem Gesetz führte und erlaubte gleichzeitig eine Abschätzung, welche prinzipielle Resonanz zu einem bestimmten Zeitpunkt den Hauptbeitrag zum Hängenbleiben liefert (Abb. 2.8).

Die verwendete Methode erscheint allerdings äußerst zweifelhaft, da sie nur die Hierarchie der prinzipiellen Resonanzen des goldenen Torus beachtet, wohingegen die komplexe selbstähnliche Struktur des Phasenraums *vielfältige* Möglichkeiten für das Hängenbleiben einer chaotischen Trajektorie bietet (siehe Kap. 2.1.4). Tatsächlich zeigt das echte, numerisch aufwendig ermittelte  $P(t)$  eine deutliche Abweichung vom vorhergesagten Verlauf (Abb. 2.8a) und bestätigt damit, daß der dynamisch wichtigste Mechanismus für  $P(t)$  *nicht* von der renormierbaren Inselapproximation des goldenen Torus herrührt. Diese Interpretation wird zusätzlich gestützt durch eine Inspektion der Trajektorien, die mind.  $t \approx 10^8$  in der hierarchischen Struktur hängenbleiben (Abb. 2.8b): Dazu entfaltet man zweckmäßigerweise die Inselketten in der Nähe des goldenen Torus mit einer Spline-Kurve, so daß die prinzipiellen Resonanzen auf einer gerade Linie liegen und trägt weiterhin den Abstand dieser Inseln vom goldenen Torus logarithmisch auf. Betrachtet man in dieser Auftragung die Aufenthaltswahrscheinlichkeit einer chaotischen Trajektorie während sie in der Hierar-



**Abbildung 2.8:** **a)** Das numerisch ermittelte  $P(t)$  der Standardabbildung ( $K = K_c$ ) weicht deutlich vom vorhergesagten kubischen Zerfallsverhalten (strichpunktierte Linie) ab. Die Quadrate bezeichnen die in [7] ermittelten numerischen Daten mit Verweis auf die Periode der zugehörigen prinzipiellen Resonanzen. Die gestrichelt eingetragenen Potenzgesetze beschreiben den frühen algebraischen Zerfall approximativ. **b)** Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im entfalteten Phasenraum (siehe Text) für zwei exemplarische Trajektorien mit Aufenthaltszeiten  $\approx 10^8$  als Grau-Skala. Die Projektion der Wahrscheinlichkeiten auf die Achse, die den Abstand zum goldenen Torus angibt, zeigt, an welcher Stelle die Trajektorie am längsten verbleibt, wobei Pfeile die Positionen der prinzipiellen Resonanzen angeben. Die untere Trajektorie entspricht dem in [7] vorhergesagten Typus, der am längsten in der Nähe der prinzipiellen Resonanzen mit Periode 144 und 377 hängenbleibt. Die viel häufigere Klasse der oberen Trajektorie zeigt jedoch ein fundamental anderes Verhalten und ist verantwortlich für die Abweichungen vom kubischen Zerfall.

chie umherwandert, so zeigt nur ein kleiner Anteil der lange gefangenen Trajektorien ein Hängenbleiben an den prinzipiellen Resonanzen, die nach [7] zu diesem Zeitpunkt beitragen sollten. Der überwiegende Anteil der lange gefangenen Trajektorien wird von anderen Strukturen am Verlassen der Hierarchie gehindert. Damit ist der Nachweis erbracht, daß die verwendete Methode in [7] nicht zur Abschätzung des asymptotischen Verlaufs von  $P(t)$  herangezogen werden kann, und daß die prinzipiellen Resonanzen nur zum geringen Teil für das Auftreten langer Aufenthaltszeiten in der Hierarchie chaotischer Regionen verantwortlich sind. Zieht man den Cayley-Entscheidungsbaum (Abb. 2.6) heran, stellt nicht die Sequenz  $\{111 \dots\}$  den dynamisch wichtigsten Ast dar, sondern einer der anderen Äste ist für den asymptotischen Verlauf von  $P(t)$  verantwortlich.



**Abbildung 2.9:** Typischer gemischter Phasenraum der Separatrixabbildung ( $\tau = 3.22$ ,  $r = 400$ ,  $K = 1$ ).

### 2.1.5.2 Die Separatrixabbildung

Analog wie die Standardabbildung läßt sich die sog. Separatrixabbildung [41, 44] ableiten. Mit den Definitionen

$$T(p) = -\frac{\tau}{2\pi} \left\{ p \ln \left( \frac{2\pi|p|}{r} \right) - p \right\} \quad V(q) = \frac{K}{4\pi^2} \cos(2\pi q) \quad (2.13)$$

ergibt sich diese stroboskopische Abbildung zu

$$p_{n+1} = p_n + \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi q_n) \quad q_{n+1} = q_n - \frac{\tau}{2\pi} \ln \left( \frac{|2\pi p_{n+1}|}{r} \right) \quad (2.14)$$

Sie beschreibt vereinfacht das Verhalten eines chaotischen Pendels in der Nähe der Separatrix, was sich auch in ihren Namen widerspiegelt. Sie geht ebenfalls auf Boris Chirikov zurück, der sie erstmalig untersuchte. Ein typischer Phasenraum der Separatrix-Abbildung ist in Abb. 2.9 gezeigt.

Eine Besonderheit der Separatrixabbildung bei den verwendeten Parametern ( $\tau = 3.22$ ,  $r = 400$ ,  $K = 1$ ) ist ein ähnliches Skalierungsverhalten wie es schon in der Standardabbildung bei der kritischen Kickstärke beobachtet wurde. Mit einer analogen Argumentation wie für die Standardabbildung ist es möglich den Zerfallsexponenten  $\gamma \approx 4/3$  der algebraisch zerfallenden kumulativen Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $P(t) \sim t^{-\gamma}$  vorherzusagen [44]. Diese Vorhersage stimmt für  $t \leq 10^6$  sehr gut mit der numerischen Beobachtung überein, wenn auch hier, wie schon in der Standardabbildung, nicht klar ist, ob tatsächlich der auf Dauer wichtigste Mechanismus des algebraischen Hängenbleibens behandelt wird. Da aber der vorhergesagte Exponent  $4/3$  recht klein ist, und sich im Limes  $t \rightarrow \infty$  der kleinste Exponent im Zerfall von  $P(t)$  durchsetzen sollte, kann es sehr wohl sein, daß hier die Renormierung den dynamisch wichtigsten Mechanismus beschreibt. Für alle numerischen Untersuchungen an der Separatrixabbildung werden im folgenden immer die Parameter  $\tau = 3.22$ ,  $r = 400$ ,  $K = 1$  gewählt.

## 2.2 Quantenmechanik

Da es aufgrund der Unschärferelation in der Quantenmechanik keinen Trajektorienbegriff gibt und damit kein Pendant zur sensitiven Abhängigkeit zweier infinitesimal benachbart gestarter Orbits existiert, scheint der Term Chaos im Zusammenhang mit Quantenmechanik keinen rechten Sinn zu machen. Das Korrespondenzprinzip verlangt aber für  $\hbar \rightarrow 0$ , daß die Quantenmechanik in die klassischen Bewegungsgleichungen übergeht, so daß man gleichwohl mit Recht nach Signaturen des klassischen Chaos in der Quantentheorie fragen kann. Im folgenden sollen daher zunächst Quantensignaturen von klassisch voll chaotischen Systemen vorgestellt werden. Daran schließt sich eine einführende Diskussion über Quantensignaturen von Systemen mit gemischtem Phasenraum an, die in Kap. 3 im Zentrum des Interesses stehen. Das Kapitel endet mit der Quantisierung der in Kap. 2.1.5 vorgestellten gekickten Abbildungen.

### 2.2.1 Quantensignaturen chaotischer Dynamik

Viele im Quantenchaos untersuchte Größen stammen ursprünglich aus der Kernphysik, genauer der Kernspektroskopie. Bei der Untersuchung von Zerfallsspektren schwerer Kerne stellte man z.B. fest, daß die Spektren zwar unregelmäßig aussahen, aber keineswegs die statistischen Eigenschaften uniform verteilter Zufallszahlen hatten. In solch einem Fall hätte man für die Abstandsverteilungen zwischen zwei Kernniveaus  $i$  und  $i + n + 1$ , nach geeigneter Entfaltung des Spektrums mit der lokalen Zustandsdichte, Statistiken der folgenden Form erhalten müssen [45]:

$$p(n, s) = \frac{s^n e^{-s}}{n!} \quad . \quad (2.15)$$

Insbesondere wäre die Abstandsverteilung nächster Nachbarn  $p(0, s)$  eine reine Poisson-Verteilung gewesen, was sich nicht mit experimentellen Daten zur Deckung bringen ließ. Da aber auch keine vereinfachten mikroskopischen Modelle zur Bestimmung der Niveaus bekannt waren (meist existierten im Sinne des Kern-Schalenmodells keine guten Quantenzahlen mehr), schlug Wigner 1951 ein Ensemble von Hamilton-Matrizen vor, das der maximalen Unkenntnis des mikroskopischen Systems Rechnung tragen sollte [46]. Die Einträge dieser Hamilton-Matrizen sollten gaußverteilte Zufallszahlen sein, und neben der Hermitizität sollten lediglich grundlegenden Symmetrien wie z.B. die Zeitumkehrinvarianz im Aufbau der Matrix berücksichtigt werden. Im Falle eines spinlosen Systems mit Zeitumkehrinvarianz erhält man so das reelle Ensemble der gaußschen orthogonalen Matrizen (GOE), im Falle gebrochener Zeitumkehrinvarianz das komplex-hermitesche, gaußsche unitäre Ensemble (GUE). Mit Hilfe von  $2 \times 2$ -Matrizen erhält man analytisch einen Ausdruck für die

Verteilung  $p(0, s)$  im Falle von GOE und GUE, die sog. Wigner-Vermutung [38]:

$$p(0, s) = as^\beta e^{-bs^2} \quad \beta, a, b = \begin{cases} 1, & \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4} & \text{GOE} \\ 2, & \frac{32}{\pi^2}, \frac{4}{\pi} & \text{GUE} \end{cases} . \quad (2.16)$$

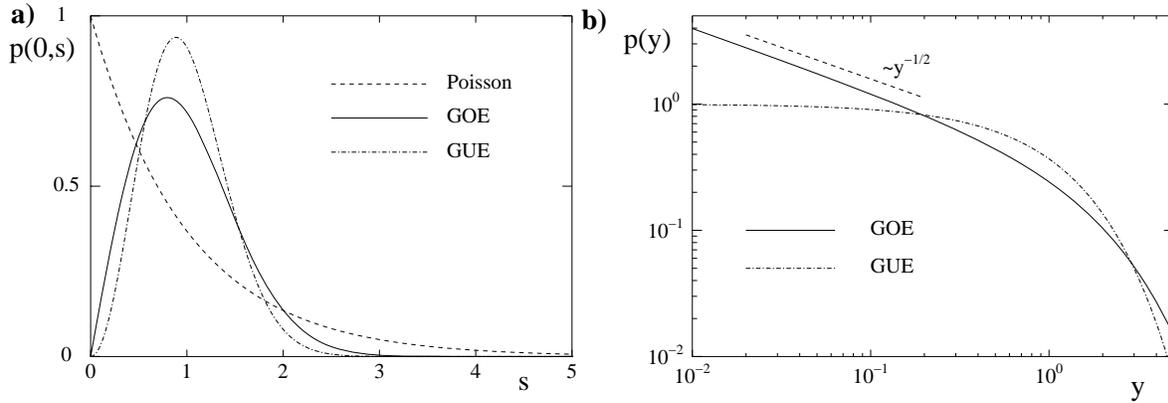
Die Werte für  $a, b$  erhält man aus den Normierungsbedingungen  $\int p(0, s) ds = 1$  und  $\int sp(0, s) ds = 1$ . Die Verteilungen (2.16) zeigten trotz ihres stark vereinfachenden Ursprungs eine erstaunliche Übereinstimmung mit den experimentell gewonnenen Daten. Insbesondere zeigt Glg. (2.16) die lineare (GOE) bzw. quadratische (GUE) Abstoßung nächstbenachbarter Energieniveaus, wohingegen Glg. (2.15) eine Anhäufung von Niveaus vorhersagt (Abb. 2.10a). Eine weitere Ausarbeitung der Zufallsmatrizen-Theorie im Limes unendlich großer Matrizen (random matrix theory, RMT) durch Wigner, Dyson und Mehta [47] sollte sich als analytisch anspruchsvoll erweisen, erbrachte aber neben einer Korrektur der Verteilungen (2.16) um lediglich 2% eine Fülle weiterer spektraler Maße (Anhang A.3).

Die RMT-Modellierung erweist sich auch im Kontext dynamischer Systeme mit klassisch voll entwickeltem Chaos als sehr fruchtbar. Wie oben beschrieben entsteht hamiltonsches Chaos durch das Fehlen mindestens einer Konstante der Bewegung, so daß auch hier im Extremfall bis auf die Energieerhaltung maximale Unkenntnis über das System vorliegt. Ähnlich wie in der Kernspektroskopie kann man also die GOE/GUE-Matrizen zur Modellierung des Spektrums heranziehen und folglich Spektren mit Niveauabstoßung erwarten. Tatsächlich führt der Verlust von zyklischen Variablen der klassischen Hamilton-Funktion in der Quantenmechanik zu einem Verlust guter Quantenzahlen. Damit geht einher, daß die Operatoren einiger Observablen (z.B. Drehimpulsoperator) nicht mehr mit dem Hamilton-Operator vertauschen, was zur Aufhebung von Entartungen führt: Unter Variation der Störung bewegen sich die Niveaus daher zwar aufeinander zu, können sich aber nicht kreuzen. Diese vermiedenen Kreuzungen spiegeln die Niveauabstoßung wider und machen das Spektrum steif, wie dies auch von der RMT vorhergesagt wird. In zahllosen numerischen und experimentellen Untersuchungen hat sich gezeigt, daß Spektren von voll chaotischen Systemen sehr gut durch die Vorhersagen der RMT beschrieben werden, was zuerst von Bohigas, Giannoni und Schmit postuliert und numerisch bestätigt wurde [48]. Trotz der vielfältigen Bestätigungen ist die Bohigas-Giannoni-Schmit-Vermutung noch nicht mathematisch bewiesen, wird aber allgemein als richtig angesehen.

Das zweite Extrem vollkommen integrierbarer Systeme wird sehr gut durch Glg. (2.15) beschrieben, was von Berry und Tabor [49] auf ein sicheres mathematisches Fundament gestellt wurde. In ihre Argumentation geht als wesentlicher Punkt ein, daß integrable Eigenzustände im Sinne der EBK-Quantisierung [50] behandelt werden können und folglich auf invarianten Tori im Phasenraum lokalisiert sind<sup>7</sup>. Ihr Überlapp bzw. ihre Wechselwirkung miteinander ist daher verschwindend, so daß es den Anschein hat als wäre das Spektrum

---

<sup>7</sup>Diese Aussage versteht sich in einer angemessenen Repräsentation der Eigenfunktionen wie z.B. der Husimi-Darstellung (Anhang A.1).



**Abbildung 2.10:** a) Vergleich von  $p(0,s)$  für Poisson-, GOE- und GUE-Spektren b) Verteilungsfunktionen  $p(y)$  für GOE und GUE.

zufällig gewürfelt worden, woraus sich die Verteilungen (2.15) ergeben. Diese Verbindung von spektralen Eigenschaften mit Lokalisierungseigenschaften von Wellenfunktionen rückt eine weitere zentrale Fragestellung in den Vordergrund — die nach den statistischen Eigenschaften der Eigenzustände.

Folgt man den Vorhersagen der RMT, die spektrale Eigenschaften offenbar so gut beschreibt, dann sollten die Eigenfunktionen chaotischer Systeme ausgedehnt sein und gleiche statistische Eigenschaften haben wie die Eigenvektoren von RMT-Matrizen. Eine gängige Größe zur Untersuchung dieser Vermutung ist die Projektion der Eigenfunktionen chaotischer Systeme auf eine typische Basis<sup>8</sup> wie z.B. die Eigenfunktionen  $|n\rangle$  des Ortsoperators. Tatsächlich zeigen die daraus abgeleiteten Absolutquadrate  $y_\alpha = |\langle n|\psi_\alpha\rangle|^2$  nach geeigneter Normierung ( $\langle y \rangle = 1$ ) gute Übereinstimmung mit folgenden RMT-Statistiken [38], die in Abb. 2.10b dargestellt sind:

$$p(y) = \begin{cases} \frac{e^{-y/2}}{\sqrt{2\pi y}} & \text{GOE} \\ e^{-y} & \text{GUE} \end{cases} \quad (2.17)$$

Die Übereinstimmung experimenteller und numerischer Daten mit diesen Verteilungen<sup>9</sup> impliziert, daß die Eigenzustände klassisch chaotischer Systeme uniform über den Phasenraum verschmiert sind und lediglich gaußsche Fluktuationen zeigen. Das berühmte Shnirelman-Theorem, das den Begriff der Quantenergodizität definiert, spiegelt eine mathematisch präzisere Version dieser Folgerung wider. Es sei hier der Vollständigkeit halber leicht verkürzt nach Ref. [51] zitiert:

### Shnirelman-Theorem (Quantenergodizitätstheorem)

Sei  $\Omega$  eine kompakte Mannigfaltigkeit und  $\mathcal{H}$  ein selbstadjungierter positiver

<sup>8</sup>Aufgrund der Chaotizität ist keine Basis außer den Eigenzuständen selbst ausgezeichnet.

<sup>9</sup>Aus historischen Gründen bezeichnet man das Ergebnis für GOE auch als Porter-Thomas-Verteilung.

elliptischer Operator mit Eigenfunktionen  $\phi_1, \phi_2, \dots \in L^2(\Omega)$  und Eigenwerten  $E_1 \leq E_2 \leq \dots$ . Ist der zum Operator  $\mathcal{H}$  korrespondierende klassische Phasenraumfluß  $g_t$  ergodisch, dann existiert eine Untersequenz  $\{\phi_{k_j}\}_{j=1}^\infty$  mit Maß 1 (d.h.  $\lim_{j \rightarrow \infty} (k_j/j) = 1$ ), so daß für jede offene Menge  $\Omega' \subseteq \Omega$  mit glattem Rand

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \int_{\Omega'} |\phi_{k_j}(x)|^2 = \frac{\text{Vol}(\Omega')}{\text{Vol}(\Omega)} \quad (2.18)$$

gilt.

In conclusio besagt dieses Theorem, daß im semiklassischen Limes (hier über den Limes hoher Energieeigenwerte  $E_j$  ( $j \rightarrow \infty$ ) statt mit dem äquivalenten  $\hbar \rightarrow 0$  bezeichnet) fast<sup>10</sup> alle Eigenfunktionen eines klassisch ergodischen Hamilton-Systems uniform über die Hyperfläche konstanter Energie im Phasenraum verschmiert sind. Ähnliche Aussagen wurden bereits 1973 von Percival [52] und 1977 von Berry [53] postuliert, aber nicht bewiesen. Problematisch an obigem Theorem bleibt der Beweis der Ergodizität für chaotische Systeme, der bislang nur für spezielle dynamische Systeme wie das Sinai-Billiard existiert.

### 2.2.2 Quantenchaos und gemischter Phasenraum

Im Gegensatz zu den Grenzfällen integrierbarer bzw. chaotischer Systeme, sind die statistischen Eigenschaften von Spektrum und Eigenzuständen der typischen Systeme mit gemischtem Phasenraum weit weniger gut verstanden. Für die chaotische invariante Menge solcher Systeme ist das Shnirelman-Theorem offensichtlich nicht im mathematisch strikten Sinne anwendbar, da z.B. Ergodizität der Dynamik und Kompaktheit der Menge nicht beweisbar sind. Wie erwähnt lassen sich schon für voll chaotische Systeme die Voraussetzungen nur in wenigen Spezialfällen beweisen. Unter der Annahme, daß das Shnirelman-Theorem aber auch für die chaotische invariante Menge des gemischten Phasenraums anwendbar ist, d.h. RMT-Statistiken für das damit assoziierte Subspektrum erwartet werden können, lassen sich einige Aussagen über die Gestalt von Eigenzuständen im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  und sich daraus ergebende Vorhersagen für die statistischen Eigenschaften des Spektrum machen. Im semiklassischen Limes sollten demnach fast nur noch Eigenfunktionen existieren, die in Husimi-Darstellung (siehe Appendix A.1) auf KAM-Tori lokalisiert bzw. in der chaotischen invarianten Menge uniform ausgedehnt sind. Während letztere eine direkte Konsequenz aus dem Shnirelman-Theorem sind, lassen sich die auf KAM-Tori lokalisierten Eigenzustände im Sinne der EBK-Quantisierung [50] verstehen. Das Spektrum zerfällt dann, abgesehen von Subspektren mit Lebesgue-Maß Null, in mehrere unabhängige, nicht-wechselwirkende Anteile, deren statistische Eigenschaften (z.B.  $p(n, s)$ ) durch ein Spektrum von gleichverteilten Zufallszahlen bzw. durch steife RMT-Spektren gegeben sind. Für die

<sup>10</sup>D.h. bis auf eine Menge vom Lebesgue-Maß Null.

Statistik nächster Niveauabstände  $p(0, s)$  kann man für eine zufällige Überlagerung der verschiedenen Subspektren mit Hilfe von

$$p^{\text{mix}}(0, s) = \frac{d^2}{ds^2} \prod_i \int_s^\infty \left( 1 - \int_0^t p^{(i)}(0, s') ds' \right) dt \quad (2.19)$$

einen Ausdruck ableiten [45]. Beschränkt man sich dabei auf zwei zu überlagernde Spektren mit Anteilen  $f_{\text{BR}}$ ,  $\bar{f}_{\text{BR}} = 1 - f_{\text{BR}}$ , für die man eine Poisson-Statistik bzw. die Wigner-Vermutung für GOE annimmt, so erhält man die sog. Berry-Robnik-Verteilung

$$p_{\text{BR}}(f_{\text{BR}}, s) = e^{-f_{\text{BR}}s} f_{\text{BR}}^2 \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{\pi} \bar{f}_{\text{BR}} s}{2} \right) + \left( 2f_{\text{BR}} \bar{f}_{\text{BR}} + \frac{\pi}{2} s \bar{f}_{\text{BR}}^3 \right) \exp \left( -f_{\text{BR}}s - \frac{\pi}{4} \bar{f}_{\text{BR}}^2 s^2 \right), \quad (2.20)$$

die erstmals von den namensgebenden Autoren in Ref. [54] abgeleitet wurde. Die Funktion  $\operatorname{erfc}(x)$  ist dabei die komplementäre Fehlerfunktion. Dieser Ausdruck mit einem Fit-Parameter  $f_{\text{BR}}$  wurde in extensiven numerischen Untersuchungen bestätigt [55–57] und führte zur Verdrängung der rein heuristischen Brody-Interpolationsformel [58], die eine fraktionale Niveauabstoßung  $p(0, s \ll 1) \sim s^\beta$  vorhersagt. Der Parameter  $f_{\text{BR}}$  wird üblicherweise mit dem relativen Phasenraumanteil der Inseln regulärer Bewegung identifiziert. Die Konsequenzen des gemischten Phasenraums im experimentell viel wichtigeren und interessanteren Fall endlicher  $\hbar$ , werden aber selbst im Falle einer berechtigten Anwendung des Shnirelman-Theorems in keinsten Weise beantwortet. Wie schnell man mit  $\hbar \rightarrow 0$  auf den Grenzfall der Quantenergodizität zukonvergiert, bleibt ebenfalls offen. Fragestellungen dieser Art werden das zentrale Anliegen in Kapitel 3 sein.

Will man die Quantensignaturen des gemischten Phasenraums untersuchen stellt sich weiterhin die allgemeine Frage nach quantenmechanischen Konsequenzen des klassisch algebraischen Zerfalls von  $P(t)$ . Zunächst ist es daher sinnvoll eine zur Klassik analoge quantenmechanische Größe  $P_{\text{qm}}(t)$  zu definieren, die der klassischen Meßvorschrift folgend nur in einem offenen Quantensystem wohldefiniert sein kann. In Analogie zum klassischen Fenster um Bereiche regulärer Bewegung, aus dem Trajektorien herauslaufen und danach entfernt werden, mißt man den Normzerfall eines Wellenpakets beim Einführen eines Projektionsoperators auf eben dieses Fenster. Diese Konstruktion ist äquivalent zur Einführung absorbierender Randbedingungen außerhalb besagten Fensters, was durch einen nicht-unitären Zeitentwicklungsoperator beschrieben wird (siehe Kap. 2.2.3.2). Abhängig vom Wert der effektiven Wirkung  $\hbar$  ahmt  $P_{\text{qm}}(t)$  den klassischen Zerfall von  $P(t)$  einige Zeit nach, bevor ein genuin quantenmechanisches Verhalten einsetzt. Die detaillierte Untersuchung dieses bemerkenswerten Faktums sowie der komplexwertigen Spektren des assoziierten nicht-unitären Zeitentwicklungsoperators ist Gegenstand von Kapitel 3.3.

Ein tieferes Verständnis der durch  $P(t) \sim t^{-\gamma}$  hervorgerufenen Quanteneffekte ist umso mehr geboten als bislang nur eine einzige quantenmechanische Konsequenz des klassisch

algebraischen Zerfalls bekannt war: Mit Hilfe semiklassischer Argumente konnte Ketzmerick zeigen [10], daß das algebraisch lange Hängenbleiben von Trajektorien im semiklassischen Limes zu reproduzierbaren, fraktalen Leitwertfluktuationen als Funktion eines Parameters (z.B. Energie oder Magnetfeld) führt, wobei der klassische Exponent  $\gamma$  die fraktale Dimension zu  $D = 2 - \gamma/2$  bestimmt. Neben experimentellen Verifikationen dieser Vorhersage in Golddrähten [11] und Halbleiter-Nanostrukturen [12], sowie einer numerischen Bestätigung [13], fand man aber in jüngsten numerischen Untersuchungen [14] einen zweiten Typ von Leitwertfluktuationen, der offensichtlich nicht durch die in Ref. [10] entwickelte Theorie beschrieben wird. Anstelle fraktaler Fluktuationen fand man dort im Leitwert als Funktion der Energie einen glatten Hintergrund mit scharfen Resonanzen. Die Varianz der Leitwertinkremente zeigt ferner neben den zu erwartenden Potenzgesetzen mit Exponent 2 auf Skalen weit unterhalb des mittleren Niveau-Abstandes bzw. Exponent 0 auf Skalen weit oberhalb des mittleren Niveau-Abstandes, ein drittes Potenzgesetz im Übergangsbereich, dessen Exponent nahe am Wert von  $\gamma$  liegt. Ob dies jedoch ein Hinweis auf ein universelles Auftreten des klassischen Exponenten  $\gamma$  darstellt, ist gegenwärtig noch offen.

## 2.2.3 Quantisierung gekickter Systeme

### 2.2.3.1 Unitäre Zeitentwicklung gekickter Systeme

Die klassischen Abbildungen vom Typ (2.10) sind stroboskopische (Poincaré-) Abbildungen, die jedem Bewegungszustand  $(q_n, p_n)$  den Zustand  $(q_{n+1}, p_{n+1})$  nach einer Periode  $\tau = 1$  des Antriebs zuordnen. Der adäquate quantenmechanische Operator ist somit der unitäre Zeitentwicklungsoperator für eine Periode des Antriebs

$$\mathcal{U} = \exp(-i\mathcal{H}\tau/\hbar) , \quad (2.21)$$

der einen Anfangszustand  $|\psi(t)\rangle$  in einen späteren Zustand überführt:

$$|\psi(t + n\tau)\rangle = \mathcal{U}^n |\psi(t)\rangle . \quad (2.22)$$

Diese formale Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung beschreibt die zeitliche Evolution eines Anfangszustandes wie es auch die klassischen gekickten Abbildungen tun. Eine Spezialität der gekickten Systeme ist die Form des Zeitentwicklungsoperators, die im Normalfall nur unter Zuhilfenahme der Baker-Hausdorff-Formel ausfaktoriert werden kann. Da bei gekickten Systemen aber das Potential nur zu ganz bestimmten Zeitpunkten wirksam ist, kann  $\mathcal{U}$  sofort in impuls- und ortsartige Operatoren ausfaktoriert werden:

$$\mathcal{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}T(p)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(q)\right) . \quad (2.23)$$

Der zur kanonischen Quantisierung notwendige Kommutator  $[x, p] = i\hbar$  ist dabei so definiert, daß  $\hbar$  die Rolle einer *effektiven* Wirkung übernimmt und der klassische Limes

gerade  $\hbar \rightarrow 0$  entspricht. Als unitärer Operator hat  $\mathcal{U}$  Eigenwerte der Form  $\exp(-i\omega)$ , die sämtlich auf dem komplexen Einheitskreis liegen. Die Werte  $\omega$  sind nur modulo  $2\pi$  bestimmt und werden als Quasienergien bezeichnet. Dieser Name entstammt der ursprünglichen Definition des Zeitentwicklungsoperators (2.21), dessen Eigenwerte die Form  $\exp(-iE\tau/\hbar)$  haben. Formal kann man deshalb für bekannte  $\tau, \hbar$  jedes  $\omega$  als Energie betrachten.

Der große Nutzen der ausfaktorierten Abbildung (2.23) erschließt sich, wenn man einen Anfangszustand evolvieren will. Orts- und impulsartige Operatoren werden jeweils in ihrer Eigenbasis ausgewertet, wo sie eine einfache Diagonalform annehmen, und der Wechsel zwischen den beiden Basen mit einer Fourier-Transformation vollzogen. Das spart zum einen sehr viel Speicherplatz, denn statt einer  $N \times N$ -Matrix müssen nur zwei Felder der Länge  $N$  gespeichert werden; zum anderen braucht eine Fourier-Transformation bei geeigneter Wahl von  $N$  (Basis 2, FFT) nur  $\sim N \ln N$  Rechenschritte, wohingegen eine Matrix-Vektor-Multiplikation  $\sim N^2$  Schritte benötigt!

Ist der kinetische Operator  $T(p)$  wie das Potential  $V(q)$   $2\pi$ -periodisch, was im folgenden vorausgesetzt sei, kann man (2.23) zur Eigenwertbestimmung sehr leicht in eine endliche  $N \times N$ -Matrix umschreiben. Aus der Periodizität des Potentials folgt mit Hilfe des Blochschen Theorems, daß für Eigenfunktionen in Ortsdarstellung  $\phi(q) = e^{i\theta_q} \varphi(q)$  und  $\varphi(2\pi + q) = \varphi(q)$  gelten muß. Die sich daraus ergebenden quantisierten Impulse lassen sich weiterhin als  $\hbar(2\pi k + \theta_q)$  schreiben, wobei  $k$  eine ganze Zahl ist. Auf analoge Weise kann auch eine Blochphase  $\theta_p$  in Impulsrichtung eingeführt werden. Im Falle, daß  $2\pi\hbar N = M$  mit ganzen  $N, M$  gilt, läßt sich der Zeitentwicklungsoperator so auf eine Abbildung auf dem Torus reduzieren und als unitäre Matrix  $U_{nm}$  vom Rang  $N$  ausdrücken [59]. Es zeigt sich, daß in der überwiegenden Anzahl numerischer Untersuchungen eine symmetrisierte Version der quantisierten gekickten Abbildung zweckmäßig ist (Anhang B.1). Exemplarisch sei daher  $U_{nm}$  für eine in der freien Entwicklung symmetrisierte Version von (2.23) in Impulsdarstellung angegeben:

$$U_{nm} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{T(\hbar(2\pi n + \theta_q)) + T(\hbar(2\pi m + \theta_q))}{2}\right) \times \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \exp\left(2\pi i k \frac{m-n}{N} - \frac{i}{\hbar} V((2\pi k + \theta_p)/N)\right). \quad (2.24)$$

### 2.2.3.2 Nicht-unitäre Zeitentwicklungsoperatoren

Um offene Quantensysteme zu untersuchen greift man i.a. auf eine Formulierung als Streuproblem zurück. Durch Ankopplung an Kanäle kann man dann die Zeitentwicklung des offenen Systems studieren oder aus den Polen der S-Matrix die interessierenden Resonanzbreiten berechnen. Für gekickte Abbildungen bietet sich ein anderer, einfacherer Zugang an – die Einführung absorbierender Randbedingungen.

Meist legt man absorbierende Randbedingungen auf Linien konstanten Ortes oder Impulses. Denkt man im ersten Fall an ein Billiardsystem, das an bestimmten Stellen Öffnungen im Ortsraum besitzt, durch die Teilchen/Trajektorien entkommen, kann man sich unter letzterem ein optisches Totalreflexions-Billiard vorstellen, aus dem Orbits nur bei Überschreiten eines bestimmten Impulses/Wellenvektors entkommen [60, 61]. In enger Analogie dazu führt man bei gekickten Abbildungen auf dem Zylinder eine Grenze in Impulsrichtung ein, bei deren Überschreiten Trajektorien bzw. Anteile der Wellenfunktion weggeschnitten werden. Klassisch wie quantenmechanisch führt man dazu zweckmäßigerweise einen Projektionsoperator  $\mathcal{P}$  in die Abbildung ein, der außerhalb der Kavität identisch verschwindet. Beim Iterieren der klassischen Abbildung entfernt man so alle Orbits, die die Absorptionsgrenzen überschritten haben, während man quantenmechanisch eine Projektion auf den Hilbertraum der Kavität vornimmt. Unter der Voraussetzung, daß der unitäre Zeitentwicklungsoperator  $\mathcal{U}$  des ausgedehnten Systems bekannt ist, kann man so die nicht-unitäre Abbildung definieren als:

$$\mathcal{A} = \mathcal{P}\mathcal{U} \quad \Rightarrow \quad A_{nk} = \sum_{n \in \text{Kavität}} |n\rangle \langle n| U_{nk} . \quad (2.25)$$

Dabei ist  $|n\rangle$  eine vollständige Orthonormalbasis (z.B. Impulseigenzustände). Für eine symmetrisierte gekickte Abbildung in Impulsdarstellung lautet die Matrix des nicht-unitären Zeitentwicklungsoperators unter Zuhilfenahme von (2.24) demnach:

$$A_{nm} = \sum_{n \in \text{Kavität}} \delta_{nn'} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \frac{T(\hbar(2\pi n' + \theta_q)) + T(\hbar(2\pi m + \theta_q))}{2} \right) \\ \times \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \exp \left( 2\pi i k \frac{m - n'}{N} - \frac{i}{\hbar} V((2\pi k + \theta_p)/N) \right) . \quad (2.26)$$

Durch Reduktion dieser Abbildung auf einen Torus kann man in enger Analogie zu den Ausführungen in Kap. 2.2.3.1 auch das Eigenwertproblem des Operators  $\mathcal{A}$  untersuchen. Das System besteht mit der Quantisierungsbedingung  $2\pi\hbar = M/N$  aus  $M$  Einheitszellen mit insgesamt  $N$  Stützstellen. Zweckmäßigerweise betrachtet man den Zerfall der Norm eines Wellenpakets, das in der zentralen Einheitszelle gestartet wurde, und dessen Beiträge in allen Einheitszellen außerhalb dieser zentralen Einheit abgeschnitten werden. Die zu diagonalisierende Matrix des Operators  $\mathcal{A}$  ist nach dieser Definition nichts anderes als eine nicht-unitäre  $M \times M$ -Submatrix der unitären  $N \times N$ -Matrix (2.24) des geschlossenen Systems auf dem Torus. Die Quasienergien dieser Submatrix sind aufgrund der gebrochenen Unitarität komplex und haben die Form  $\omega_\alpha - i\Gamma_\alpha$ , wobei  $\Gamma_\alpha$  als Zerfallsbreite des zugehörigen Eigenzustandes  $|\alpha\rangle$  angesehen werden kann und somit ein Analogon zu den Polen der Streumatrix darstellt.

Für das nicht-unitäre System läßt sich sehr leicht ein allgemeiner Ausdruck für das quantenmechanische Pendant zum klassischen  $P(t)$  hinschreiben, dem zur besseren Unterscheidung

der Index 'qm' verliehen wird:

$$\begin{aligned}
 P_{\text{qm}}(t) &= \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \mathcal{A}^t | \psi(0) \rangle \\
 &= \sum_{\beta} c_{\beta} \langle \psi(t) | \mathcal{A}^t | \beta \rangle \\
 &= \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha}^* c_{\beta} \langle \alpha | \beta \rangle e^{i(\omega_{\alpha} - \omega_{\beta})t - (\Gamma_{\alpha} + \Gamma_{\beta})t} .
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

Dabei wurde zunächst genutzt, daß das Wellenpaket zum Zeitpunkt  $t$  durch die  $t$ -fache Anwendung des Zeitentwicklungsoperators gegeben ist, und anschließend eine Entwicklung des Anfangswellenpakets in Eigenzustände von  $\mathcal{A}$  vorgenommen:

$$\mathcal{A}^t | \beta \rangle = e^{-i\omega_{\beta}t - \Gamma_{\beta}t} | \beta \rangle . \tag{2.28}$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $c_{\alpha}, c_{\beta}$  lassen sich dabei nicht einfach über  $\langle \alpha | \psi(0) \rangle$  bestimmen, da die Eigenzustände nicht-unitärer Operatoren kein Orthonormalsystem mehr bilden. Im besten Falle ist die Matrix von  $\mathcal{A}$  komplex symmetrisch und kann infolgedessen durch eine verallgemeinerte orthogonale Ähnlichkeitstransformation auf Diagonalf orm gebracht werden. Das bedeutet, daß zwei Eigenvektoren  $x, y$  zwar quasinull ( $x^T y = 0$ ) sein können, aber bzgl. des kanonischen Skalarprodukts nicht senkrecht aufeinander stehen ( $x^{\dagger} y \neq 0$ ). Lediglich numerisch ist daher eine Formulierung als komplex symmetrisches Eigenwertproblem von Bedeutung (siehe Anhang B.1), analytisch bleibt der Ausdruck (2.27) unhandlich.

Numerisch kann  $P_{\text{qm}}(t)$  für gekickte Systeme auf dem Zylinder immer noch sehr effizient bestimmt werden. Analog zur Zeitentwicklung im unitären Fall kann auch hier mittels Fouriertransformationen zwischen Orts- und Impulsraum gewechselt werden, wo der kinetische Operator bzw. das Potential Diagonalf orm haben. Nach Anwendung des unitären Zeitentwicklungsoperators  $\mathcal{U}$ , wird jetzt jedoch jeglicher Anteil der Wellenfunktion außerhalb der spezifizierten Grenzen auf Null gesetzt. Dies entspricht gerade einer orthogonalen Projektion der Wellenfunktion auf den Hilbertraum der gewählten Kavität mittels eines Projektionsoperators  $\mathcal{P}$ .



# Kapitel 3

## Quantensysteme mit gemischtem Phasenraum

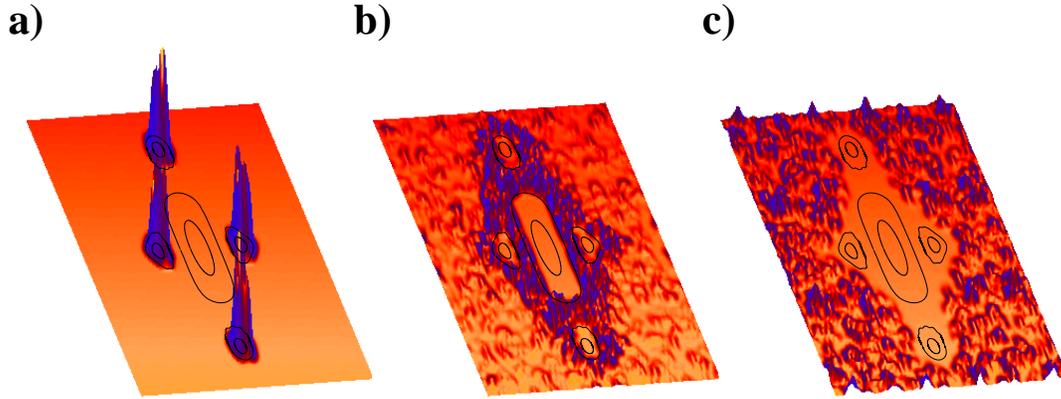
In diesem Kapitel sollen Quantensignaturen von Hamilton-Systemen mit gemischtem Phasenraum herausgearbeitet werden. Der erste Abschnitt widmet sich den Quantensignaturen geschlossener Systeme, die mit Hilfe geklickter Abbildungen auf dem Torus untersucht werden, aber z.B. auch in konservativen zweidimensionalen Billiards beobachtbar sein sollten. Das Hauptergebnis dieser Untersuchungen ist die Charakterisierung und Quantifizierung einer neuen Klasse von *hierarchischen* Eigenzuständen, die eine direkte Konsequenz des gemischten Phasenraums in der Quantenmechanik darstellen [15]. Daran schließt sich die Vorstellung eines einfachen Modellsystems an, das sowohl die typischen klassischen Eigenschaften, als auch die beobachteten Quantensignaturen qualitativ und quantitativ beschreibt. Die daraus ebenfalls resultierenden Vorhersagen für das Verhalten offener Hamilton-Systeme mit gemischtem Phasenraum, werden im nachfolgenden Abschnitt verifiziert. Ein zentrales Ergebnis ist dabei die quantenmechanische Nachahmung der kumulativen Statistik von Aufenthaltszeiten  $P(t)$  bis zu einer Zeit  $t_{\text{qm}}$ , die mit oben genanntem Modell vorhersagbar ist [16]. Daneben steht die Untersuchung der Verteilung von Resonanzbreiten  $\Gamma$  im Vordergrund, die als Folge des algebraischen Abfalls von  $P_{\text{qm}}(t)$  sehr breit ist, und einen universellen Verlauf für kleine  $\Gamma$  aufweist [16]. Die numerisch beobachteten Charakteristika dieser Verteilung werden abschließend mit Hilfe einer vereinfachten Störungsrechnung beschrieben.

## 3.1 Geschlossenen Systeme

### 3.1.1 Eine neue Klasse von Eigenzuständen

Unter der Annahme, daß das Shnirelman-Theorem auch für einen gemischten Phasenraum gilt, erwartet man für hinreichend kleine  $\hbar$  lediglich zwei generische Klassen von Eigenfunktionen – die lokalisierten regulären und die ausgedehnten chaotischen Zustände. Während die regulären Zustände in Husimi-Darstellung auf den klassisch invarianten Tori lokalisiert sind, sollten die chaotischen Zustände gleichmäßig über die chaotische invariante Menge verschmiert sein und ihre statistischen Eigenschaften der RMT folgen. Wie bereits im Anschluß an das Theorem erwähnt, kann diese Sicht aber bestenfalls im fernen Limes  $\hbar \rightarrow 0$  zutreffen. Für endliche  $\hbar$  kann man indessen das Auftreten davon abweichender Eigenzustände erwarten. In diese Klasse fallen z.B. die 'scar'-Zustände, die 'Narben' der klassischen Dynamik sind [62–64]. Diese speziellen Zustände sind in Husimi-Darstellung mehr oder minder stark auf instabilen Fixpunkten der klassischen Dynamik lokalisiert und spiegeln so die endliche Auflösung des Phasenraums in der Quantenmechanik wider. Ihre Zahl steigt zwar absolut im Limes  $\hbar \rightarrow 0$ , ihr relativer Anteil konvergiert aber schnell gegen Null. Sie lassen sich besonders gut in voll chaotischen Systemen wie dem Bunimovich-Billiard beobachten. Obwohl sie auch im gemischten Phasenraum auftreten [65], sollen sie hier nicht weiter im Detail betrachtet werden, da sie als Untermenge einer sehr viel typischeren Klasse von Eigenzuständen betrachtet werden können. Für jedes endliche  $\hbar$  findet sich im gemischten Phasenraum nämlich neben den erwarteten regulären und chaotischen Eigenfunktionen eine dritte Klasse von *generischen* Eigenzuständen: Ihr Träger ist ebenfalls die chaotische invariante Menge, ihr Hauptgewicht ist jedoch in der Nähe der Hierarchie regulärer Inseln konzentriert, wobei ihr Löwenanteil in der Hierarchie chaotischer Regionen liegt, die in Kapitel 2.1 erläutert wurde. Exemplarische Eigenzustände dieser drei generischen Klassen für die quantisierte Standardabbildung sind in Abbildung 3.1 gezeigt.

Es scheint also, als führten die partiellen Transportbarrieren quantenmechanisch zu einer weit stärkeren Strukturierung des Phasenraums als in der Klassik, da sie die chaotische invariante Menge in mind. zwei Gebiete auftrennen. Während die chaotischen Eigenfunktionen den Hauptteil der chaotischen See uniform bedecken und nur schwach in den durch die partiellen Transportbarrieren abgetrennten chaotischen Bereich eindringen, hat die neue Klasse von Eigenzuständen in diesem abgetrennten Teil eine sehr hohe, nahezu uniform ausgedehnte Wahrscheinlichkeitsdichte, im Hauptteil der chaotischen See hingegen nur schwache, ebenfalls uniforme Beiträge. Für  $\hbar \rightarrow 0$  lebt diese dritte Klasse von Eigenzuständen immer tiefer in der Hierarchie chaotischer Regionen (Abb. 3.2d), weshalb diese Wellenfunktionen als *hierarchisch* bezeichnet seien. Beispiele für chaotische, reguläre und hierarchische Wellenfunktionen für eine extrem kleine effektive Wirkung  $\hbar$  sind mit sukzessiven Vergrößerungen in Abb. 3.2 gezeigt. Offensichtlich sind die Transportbarrieren, die bei einem hundertfach größeren  $\hbar$  noch zu einer Abtrennung eines recht großen Teils der chaotischen invarianten Menge führten (Abb. 3.1), jetzt durchlässig, so daß die



**Abbildung 3.1:** Beispielhafter **a)** regulärer, **b)** hierarchischer, **c)** chaotischer Eigenzustand der Standardabbildung ( $K = 2.5, 2\pi\hbar = 1/1000$ ). Die eingetragenen Linien skizzieren die Lage der invarianten Tori des zugehörigen klassischen Phasenraums.

hierarchischen Wellenfunktionen tiefer in der Hierarchie chaotischer Regionen leben.

### 3.1.2 Der Anteil hierarchischer Eigenzustände

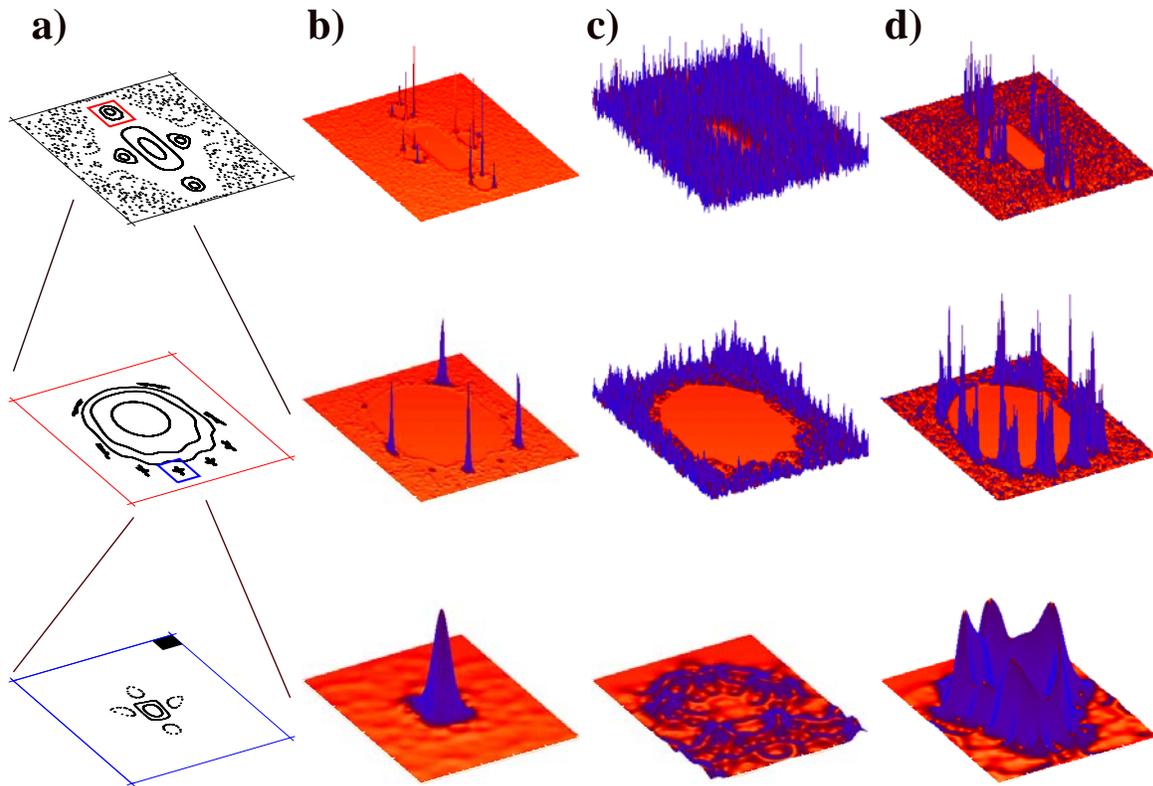
Das Auftreten einer neuen generischen Klasse von Eigenzuständen legt die Frage nach den relativen Anteilen der drei Klassen nahe, insbesondere wie sich der Anteil der neuen hierarchischen Wellenfunktionen mit  $\hbar$  verändert. Um dies zu quantifizieren seien zunächst die klassischen relativen Volumina der regulären Inseln und der chaotischen invarianten Menge mit  $\rho_{\text{reg}}$  bzw.  $\rho_{\text{ch}}$  bezeichnet. Desweiteren bezeichne  $f_{\text{reg}}(\hbar)$ ,  $f_{\text{hier}}(\hbar)$ ,  $f_{\text{ch}}(\hbar)$  den relativen Anteil regulärer, hierarchischer bzw. chaotischer Wellenfunktionen. Offensichtlich gilt mit diesen Definitionen

$$f_{\text{reg}} + f_{\text{hier}} + f_{\text{ch}} = 1 = \rho_{\text{reg}} + \rho_{\text{ch}} . \quad (3.1)$$

Die  $\hbar$ -Abhängigkeit von  $f_{\text{reg}}$  ist für hinreichend kleine  $\hbar$  (für die Standardabbildung bei den untersuchten Kickstärken ab  $N \approx 500$ ) nur sehr schwach, so daß man diesen Term in guter Näherung mit seinem klassischen Pendant  $\rho_{\text{reg}}$  identifizieren kann. Damit vereinfacht sich Glg. (3.1) zu

$$f_{\text{hier}} = \rho_{\text{ch}} - f_{\text{ch}} \quad (3.2)$$

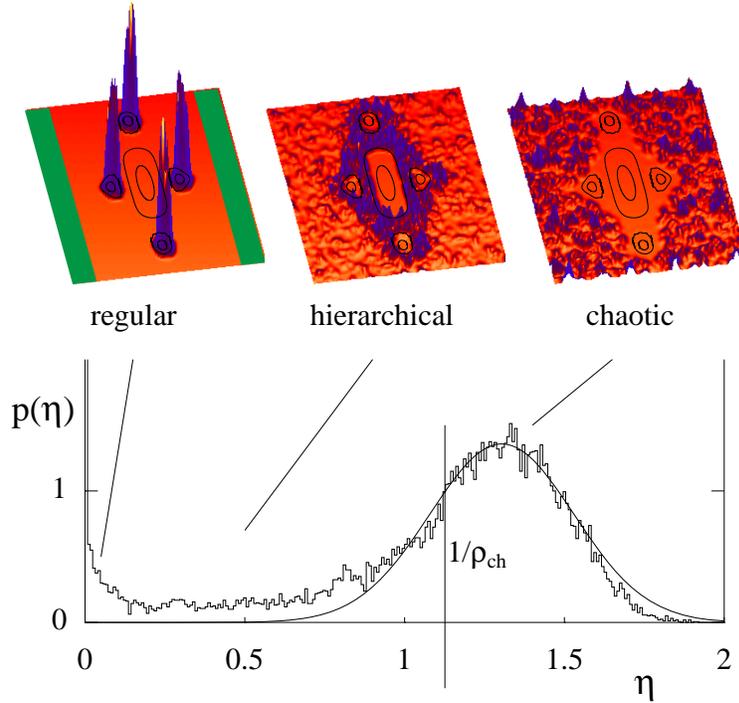
und bietet so eine einfache Bestimmungsgleichung für den Anteil  $f_{\text{hier}}$  hierarchischer Eigenzustände mit Hilfe von Spektrum und Eigenfunktionen



**Abbildung 3.2:** a) Sukzessive Vergrößerungen des klassischen Phasenraums und Beispiele b) regulärer, c) hierarchischer, d) chaotischer Eigenzustände der Standardabbildung ( $K = 2.5$ ,  $2\pi\hbar = 2^{-17}$ ) mit entsprechenden Vergrößerungen. Im klassischen Phasenraum ist zur besseren Veranschaulichung der extrem kleinen effektiven Wirkung ein Kästchen der Fläche  $2\pi\hbar$  eingezeichnet.

Zunächst ist es wichtig, die klassischen Größen  $\rho_{\text{ch}}$  bzw.  $\rho_{\text{reg}}$  möglichst genau zu bestimmen. Zu diesem Zweck wurde ein Bündel zufällig ausgesuchter chaotischer Trajektorien (ca. 100) gestartet und der Poincaré-Schnitt herangezogen, den man mit ca.  $10^4$  Iterationen dieses Bündels erhält. Die chaotischen Trajektorien erkunden in dieser Zeit nahezu die gesamte chaotische invariante Menge. Überdeckt man den Phasenraum mit einem Gitter von Boxen der Breite  $\epsilon$  und bestimmt bei sukzessiver Verfeinerung dieser Partition die relative Anzahl von Boxen  $b(\epsilon)$ , die nicht von einer der chaotischen Trajektorien getroffen wurden, so kann man aus dem Sättigungswert  $b(\epsilon \rightarrow 0)$  den Wert für  $\rho_{\text{reg}}$  bzw.  $\rho_{\text{ch}}$  extrahieren. In den numerisch untersuchten Fällen ( $K = 1.8, 2.5, 3.6$ ) ließ sich  $\rho_{\text{ch}}$  auf diese Weise mit einer absoluten Unsicherheit von  $\pm 10^{-3}$  bestimmen. Die gefundenen Werte sind in untenstehender Tabelle 3.1 aufgeführt.

Eine erste Möglichkeit den Anteil hierarchischer Eigenzustände zu bestimmen, ist das Heranziehen der statistischen Eigenschaften aller Eigenzustände. Ein Maß für die Ausdehnung

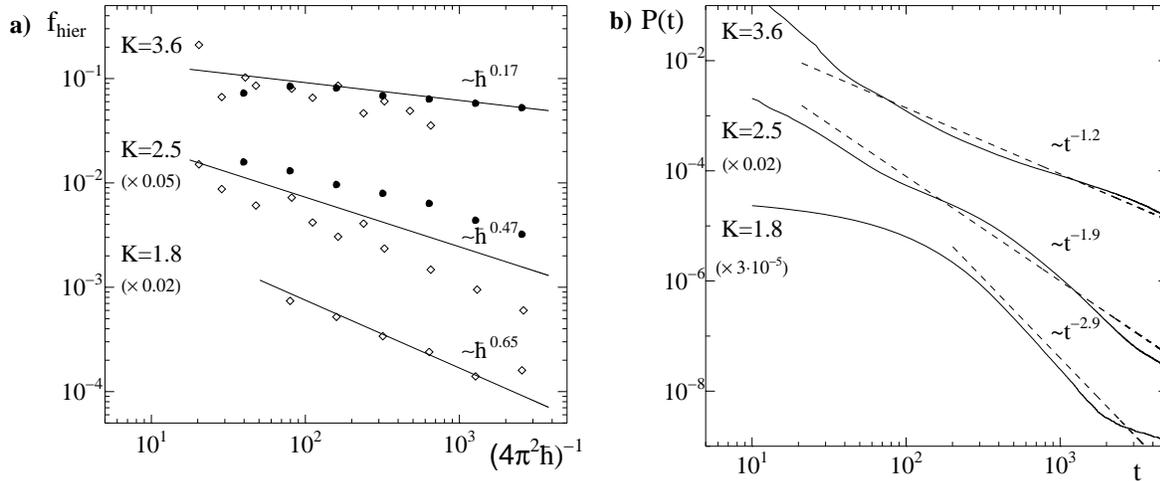


**Abbildung 3.3:** Beispielhafte Statistik  $p(\eta)$  der Standardabbildung ( $K = 2.5, 2\pi\hbar = 1/1000$ ). Der eingetragene Gauß-Fit weicht deutlich vom naiv geschätzten Zentrum bei  $\langle\eta\rangle = 1/\rho_{\text{ch}}$  ab. Oben aufgetragen sind nochmals die drei generischen Eigenzustandsklassen mit einem Verweis auf den Teil der Verteilung  $p(\eta)$ , zu dem sie beitragen. Der zur Bestimmung von  $\eta$  herangezogene Bereich  $\Omega'$  (siehe Glg. (3.3)) ist grün dargestellt.

von Eigenzuständen in gemischten Phasenräumen ist die mit dem Gesamtvolumen  $\Omega$  des Phasenraums skalierte mittlere Wahrscheinlichkeitsdichte  $\eta$  einer Wellenfunktion in einem Teilvolumen  $\Omega'$  der chaotischen See:

$$\eta = \frac{\Omega}{\Omega'} \int_{\Omega'} d(q, p) |\psi(q, p)|^2 . \quad (3.3)$$

Dabei ist die Wahl des Teilvolumens  $\Omega'$  sowie die gewählte Repräsentation des Zustands (z.B. Husimi) für die folgende Analyse unwichtig solange  $\Omega'$  ein Teil der chaotischen See ist, der weit entfernt von den regulären Inseln liegt und weiterhin  $\Omega' \gg \hbar$  gilt. Die Skalierung sichert weiterhin, daß man für eine ausgedehnte Wellenfunktion eines voll chaotischen Phasenraums einen mittleren Wert  $\langle\eta\rangle = 1$  erhielte. Für chaotische Eigenzustände im gemischten Phasenraum, die sich über die gesamte chaotische invariante Menge ausbreiten, erwartet man entsprechend einen Wert  $\langle\eta\rangle \approx 1/\rho_{\text{ch}}$ , wobei die Fluktuationen um diesen Mittelwert näherungsweise gaußsch sein sollten. Obwohl die Bestimmung von  $\eta$  nach Konstruktion nur in einer Phasenraum-Darstellung wie z.B. der Husimi-Repräsentation wohldefiniert ist, kann man für die Standardabbildung auch eine Mittelung in Orts- oder

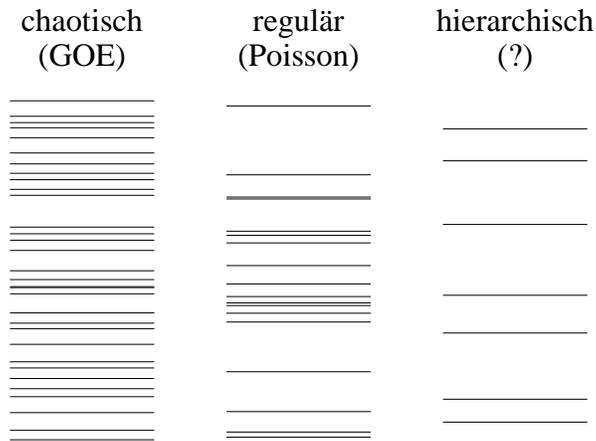


**Abbildung 3.4:** **a)** Skalierung von  $f_{\text{hier}}$  mit  $\hbar$  für drei verschiedene Kickstärken ( $K = 3.6, 2.5, 1.8$ ) der Standardabbildung. Die vollen Punkte wurden mit Hilfe der  $\eta$ -Statistik, die Rauten über einen Fit der Berry-Robnik-Statistik ermittelt. Die durchgezogenen Linien sind Potenzgesetze gemäß Glg. (3.5) mit den aus b) ermittelten Werten für  $\gamma$ . **b)** Klassisches  $P(t)$  für die drei genannten Kickstärken mit gefitteten Potenzgesetzen. Aufgrund der sehr langen exponentiellen Transiente, ist der Fit-Bereich des Potenzgesetzes für  $K = 1.8$  kleiner als in den beiden anderen Fällen.

Impulsdarstellung durchführen, wenn man Stützstellen heranzieht, die hinreichend weit von regulären Inseln entfernt sind (siehe grün schraffierter Bereich in Abb. 3.3). Für einige Kickstärken der Standardabbildung (z.B.  $K = 1.8$ ) ist solch eine Vereinfachung aber nicht möglich, da zu viele Inseln im Phasenraum liegen.

In Abb. 3.3 ist ein Beispiel für die Verteilung  $p(\eta)$  gezeigt. Wie erwartet sind die Fluktuationen von  $\eta$  um den Mittelwert mehr oder minder gaußsch, der Mittelwert  $\langle \eta \rangle = 1/f_{\text{ch}} > 1/\rho_{\text{ch}}$  ist jedoch größer als man es nach obiger Konstruktion für chaotische Eigenfunktionen erwarten würde! Infolgedessen steht den chaotischen Eigenzuständen nur ein Volumen  $f_{\text{ch}} < \rho_{\text{ch}}$  zur uniformen Ausbreitung zur Verfügung, das Restvolumen  $f_{\text{hier}} = \rho_{\text{ch}} - f_{\text{ch}}$  der chaotischen invarianten Menge dient im wesentlichen den hierarchischen Eigenzuständen als Träger (siehe auch Abb. 3.1 und 3.2). Mit Hilfe eines Gauß-Fits an  $p(\eta)$  im Bereich  $\eta \approx 1$ , wobei die Normierung der Gauß-Glocke  $f_{\text{ch}}$  und der Mittelwert  $1/f_{\text{ch}}$  ist<sup>1</sup>, kann man folglich  $f_{\text{ch}}$  bestimmen und über Glg. (3.2) den Anteil hierarchischer Eigenzustände berechnen. Eine Auswertung mehrerer solcher Verteilungen für sinkende  $\hbar$  liefert dann den funktionalen Verlauf von  $f_{\text{hier}}(\hbar)$ . Um eine Verbesserung der Statistik von  $p(\eta)$  zu erhalten, wurde dabei in fast allen Fällen ein Ensemble von Matrizen der Standardabbildung bei identischem  $\hbar$  zu unterschiedlichen Bloch-Phasen  $\theta_p$  (siehe Kap. 2.1.5 und Anhang B.1) diagonalisiert. Die aus den Gauß-Fits und Glg. (3.2) erhaltenen Werte für  $f_{\text{hier}}$

<sup>1</sup>Die Varianz der Gaußverteilung hängt im Gegensatz zur Position des Zentrums stark vom gewählten Mittelungsvolumen  $\Omega'$  ab und ist folglich ein unbekannter Fit-Parameter.



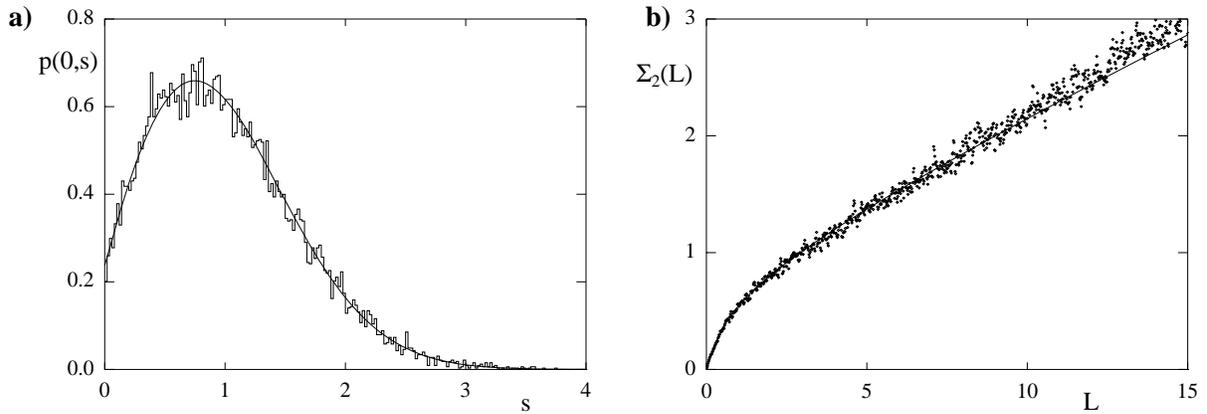
**Abbildung 3.5:** Wie in dieser Skizze veranschaulicht, besteht das Spektrum eines Systems mit gemischtem Phasenraum aus einer unabhängigen Superposition dreier Subspektren (chaotisch, regulär, hierarchisch), wobei meist  $f_{\text{hier}} \ll f_{\text{reg}}, f_{\text{ch}}$  gilt.

unter Variation von  $\hbar$  sind in Abb. 3.4 für  $K = 2.5, 3.6$  als gefüllte Kreise dargestellt. Sie folgen klar einem Potenzgesetz.

Die zweite Methode zur Bestimmung von  $f_{\text{hier}}$  nutzt statt der Eigenzustände das Spektrum des Zeitentwicklungsoperators. Wie in Kap. 2.2.1 erläutert, erhält man für die Statistik nächster Niveauabstände unter der Annahme, daß es nur reguläre und chaotische Eigenzustände gibt, die Berry-Robnik-Verteilung:  $p(0, s) = p_{\text{BR}}(f_{\text{BR}}, s)$ . Im Sinne des Shnirelman-Theorems wird der freie Parameter  $f_{\text{BR}}$  als klassischer relativer Anteil des regulären Phasenraums angesehen:  $f_{\text{BR}} = \rho_{\text{reg}}$ . Die Existenz der hierarchischen Wellenfunktionen erfordert jedoch eine Erweiterung dieses Bildes. Statt der unabhängigen Überlagerung eines regulären (Poisson) und eines chaotischen (RMT) Spektrums, das zur Berry-Robnik-Verteilung (2.20) führte, muß jetzt noch ein drittes, hierarchisches Spektrum herangezogen werden. Es liegt nahe, einen ähnlichen Ansatz wie bei der Ableitung der Berry-Robnik-Verteilung (2.20) zu wählen und alle drei Spektren einfach als statistisch unabhängig anzunehmen und unkorreliert zu überlagern<sup>2</sup>. A priori ist aber nicht klar, welche statistischen Eigenschaften das hierarchische Subspektrum hat, weshalb man so keine geschlossene Form für  $p(0, s)$  ableiten kann. Typischerweise ist aber  $f_{\text{hier}} \ll f_{\text{reg}} + f_{\text{ch}}$ , und der mittlere Niveauabstand im hierarchischen Subspektrum sehr viel größer als in der Überlagerung von chaotischem und regulärem Spektrum (Abb. 3.5), d.h.  $\Delta_{\text{hier}} \gg \Delta_{\text{ch+reg}}$ . Zwei benachbarte Niveaus des hierarchischen Subspektrums sind demnach bei einer unkorrelierten Überlagerung der Spektren i.a. nicht mehr direkt benachbart, so daß sie im Gesamtspektrum nicht mehr zur linearen Niveauabstoßung beitragen, sondern aussehen, als seien sie zufällig ins Spektrum eingewürfelt worden.

Offensichtlich erhöht dies einfach den Poisson-Anteil des Spektrums, so daß man mit der

<sup>2</sup>Die Rechtfertigung ist die Existenz der paarweise nahezu disjunkten Träger von chaotischen, hierarchischen und regulären Eigenzuständen.



**Abbildung 3.6:** Beispiel für **a)**  $p(0, s)$  und **b)**  $\Sigma_2(L)$  für die Standardabbildung ( $K = 2.5, 2\pi\hbar = 2^{-14}$ ). Eingezeichnet sind als volle Linien die Vorhersagen gemäß (2.20) bzw. (A.13) mit identischem Wert für  $f_{\text{BR}}$ .

### Interpretation

$$f_{\text{BR}} = \rho_{\text{reg}} + f_{\text{hier}} \quad (3.4)$$

wieder die alte Berry-Robnik-Verteilung nutzen und aus dem Fit-Parameter  $f_{\text{BR}}$  wiederum die relative Menge hierarchischer Wellenfunktionen extrahieren kann. Wie Bild 3.6 beispielhaft zeigt, stimmen sowohl die neu interpretierte Berry-Robnik-Formel für  $p(0, s)$  als auch die Niveauezahlvarianz  $\Sigma_2(L)$  gemäß Glg. (A.13) (Anhang A.3) sehr gut mit den numerischen Daten überein.

Zur Bestimmung von  $f_{\text{hier}}(\hbar)$  über Glg. (3.4) ist es aus statistischen Gründen wiederum zweckmäßig, ein Ensemble von Matrizen zur Bildung des numerischen  $p(0, s)$  heranzuziehen und weiterhin statt der Verteilung selbst die cumulative Verteilung  $P(s) = \int_0^s p(0, s') ds'$  zu fitten (Anhang A.2), da sie glatter ist als das Histogramm von  $p(0, s)$ . Die ermittelten Werte  $f_{\text{hier}}$  für die Standardabbildung ( $K = 2.5, 3.6$ ) unter Variation von  $\hbar$  sind in Abb. 3.4 als Rauten dargestellt. Sie folgen dem gleichen Potenzgesetz wie die Werte, die mit Hilfe von  $p(\eta)$  ermittelt wurden. Daß sie im Absolutwert nicht übereinstimmen, ist nicht weiter verwunderlich, da den Bestimmungsmethoden unterschiedliche Annahmen zugrunde liegen, die nur cum grano salis erfüllt sind. Die Werte für  $K = 1.8$  wurden aus Tabelle 2 in Ref. [55] entnommen und zeigen ebenfalls ein schönes Potenzgesetz.

Da die hierarchischen Eigenzustände eine Konsequenz der klassischen partiellen Transportbarrieren zu sein scheinen<sup>3</sup> liegt es nahe das beobachtete Potenzgesetz in  $f_{\text{hier}}$  mit dem algebraischen Zerfall von  $P(t)$  in Verbindung zu bringen. Mit Hilfe eines einfachen Modells, das ausführlich in Kap. 3.2 behandelt wird, läßt sich diese Potenzgesetz zu

$$f_{\text{hier}} \sim \hbar^{1-1/\gamma} \quad (3.5)$$

<sup>3</sup>Approximativ wirken die Cantori für große  $\hbar$  wie invariante Tori.

K	$\rho_{\text{ch}}$	$\gamma$	$1 - 1/\gamma$
1.8	0.265	2.9	0.655
2.5	0.112	1.9	0.474
3.6	0.093	1.2	0.167

**Tabelle 3.1:** Die wichtigsten Kennzahlen der Standardabbildung in diesem Abschnitt.

bestimmen. Diese Kurven sind in Abb. 3.4a als durchgezogene Linien dargestellt, wobei das entsprechende  $\gamma$  dem angepaßten Potenzgesetz an das jeweilige  $P(t)$  (Abb. 3.4b, gestrichelt) entnommen wurde. Die Übereinstimmung der numerisch gewonnenen Daten mit der Vorhersage nach Glg. (3.5) ist sehr gut für alle drei Kickstärken  $K$ . Zur besseren Übersicht sind die für Abb. 3.4 wichtigen Werte nochmals in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

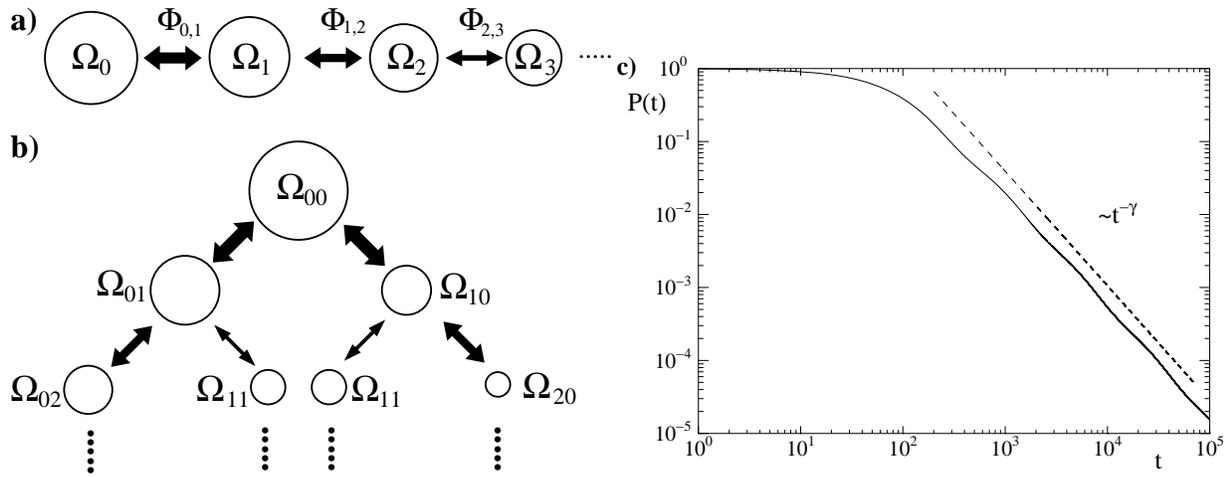
Die Strukturierung des klassischen Phasenraums durch partielle Transportbarrieren führt demnach zur Existenz hierarchischer Eigenzustände, deren relativer Anteil  $f_{\text{hier}}$  mit  $\hbar \rightarrow 0$  auf Null zukonvergiert. Es bleibt zu betonen, daß die absolute Anzahl dieser Eigenzustände gegen Unendlich strebt und der relative Anteil nur algebraisch langsam abnimmt.

## 3.2 Das Kettenmodell

Um die numerischen Ergebnisse des vorigen Abschnitte qualitativ und quantitativ zu beschreiben, bieten sich einfache stochastische Modelle wie Cayley-Bäume oder Bethe-Gitter an, die die wesentliche Eigenschaft gemischter Phasenräume, den Zerfall  $P(t) \sim t^{-\gamma}$ , reproduzieren können. Solche Modelle wurden ca. 1985 zur Beschreibung der klassischen Dynamik eingeführt [28–33]. Der einfachste Vertreter dieser Modellklasse, eine lineare Kette, soll hier nun um einen quantenmechanischen Aspekt erweitert und zur Erklärung der numerischen Ergebnisse des vorangegangenen Kapitels herangezogen werden.

### 3.2.1 Das klassische Kettenmodell

Wie bereits beschrieben ist das grundlegende Charakteristikum eines gemischten Phasenraums die hierarchische Abfolge von chaotischen Regionen auf immer kleineren Skalen. Weiterhin beobachtet man in realen Systemen, daß nicht nur die Volumina der chaotischen Regionen herunterskalieren, sondern daß auch die Flüsse (z.B. turnstiles) über die partiellen Transportbarrieren immer kleiner werden. Der Philosophie der Referenzen [28–33] folgend, in denen der gemischte Phasenraum mit Hilfe dieser Beobachtungen als eine Markov-Kette beschrieben wurde, erscheint es sinnvoll, eine unendliche Kette skalierender Volumina  $\Omega_n = \omega^n \Omega_0$  ( $\omega < 1$ ,  $n \in \mathbb{N}_0$ ) mit verbindenden Flüssen  $\Phi_{n,n+1} = \varphi^n \Phi_{0,1}$  ( $\varphi < 1$ ) als Modell eines gemischten Phasenraums heranzuziehen (siehe Abb. 3.7a). Um



**Abbildung 3.7:** a) Skizze einer Kette mit skalierenden Volumina  $\Omega_j$  und Flüssen  $\Phi_{j,k}$ . b) Skizze eines binären Baumes mit skalierenden Volumina  $\Omega_{jk}$ . Der Übersicht halber sind die skalierenden Flüsse nicht explizit eingetragen, sondern nur durch Pfeile angedeutet. c) Beispiel für  $P(t)$  einer Kette ( $\omega = 0.4, \varphi = 0.2 \Rightarrow \gamma \approx 1.57$ ). Der vorhergesagte Zerfall ist gestrichelt eingezeichnet.

die kumulative Statistik von Aufenthaltszeiten  $P(t)$  zu bestimmen, wurde in Ref. [29] die Verteilung von Zeiten bestimmt, die anfänglich in  $\Omega_1$  gestartete Teilchen brauchten, das Volumen  $\Omega_0$  zu erreichen. Für die zu obiger Kette analoge Markov-Kette, die ohne echte Volumina auskommt, wurde dort abgeleitet, daß

$$P(t) \sim t^{-\gamma} \quad \text{mit} \quad \gamma = \left(1 - \frac{\ln \omega}{\ln \varphi}\right)^{-1} \quad (3.6)$$

gilt. Das Modell einer unendlichen Kette mit skalierenden Volumina und Flüssen kann also das wesentliche Merkmal des gemischten Phasenraums, den algebraischen Zerfall von  $P(t)$ , reproduzieren. Eine beispielhafte Statistik für eine solche Kette ist in Abb. 3.7c gezeigt. Interessant an diesem Modell ist vor allem, daß es die beliebige Wahl des Exponenten  $\gamma$  über die Einstellung der Skalierungsparameter  $\varphi$  und  $\omega$  erlaubt.

Die grundlegenden Annahmen des Kettenmodells sind neben den vereinfachten Skalierungsansätzen:

1. Es existiert für die Dynamik nur eine zentrale Inselhierarchie, d. h. wie in Abb. 2.4a angedeutet, ist die Hierarchie eindimensional.
2. Ergodizität in den Teilvolumina  $\Omega_n$  auf Zeitskalen  $t \ll \Omega_n / \Phi_{n,n-1}$
3. Divergenzfreiheit entlang einer Barriere, d.h. der Nettofluß über eine partielle Transportbarriere ist Null:  $\Phi_{n,n+1} = \Phi_{n+1,n}$ .

Es bleibt die Frage, inwieweit die Annahmen dieses analytisch zugänglichen Modells erfüllt sind. Die Markov-Annahme erfährt ihre Rechtfertigung aus dem mathematischen Nachweis, daß zu jedem Phasenraum eine eindeutige Zerlegung in Markov-Partitionen existiert [66]. Obwohl sich die Grenzziehung dieser Partitionen entlang der nicht näher spezifizierten partiellen Transportbarrieren aufdrängt, hat solch eine Wahl im mathematisch strikten Sinn keinerlei Rechtfertigung. Weiterhin ist die Annahme einer eindimensionalen Hierarchie eine sicherlich sehr grobe Vereinfachung, die der komplizierten Struktur des Phasenraums nicht gerecht wird. Ein realistischeres Modell als die Kette ist z.B. ein binärer Baum (siehe Abb. 3.7b), an dem man an jeder Abzweigung entscheiden kann, ob man sich der zentralen Insel derjenigen Hierarchie-Stufe nähert, in der man sich gerade befindet, oder ob man stattdessen in die nächsttiefer liegende Hierarchie-Stufe springt (vgl. Abb. 2.6 und Diskussion in Kap. 2.1.4). Auch hier kann man analytisch zeigen, daß der Exponent  $\gamma$  durch die Wahl der Skalierungsfaktoren  $\omega_1, \omega_2, \varphi_1, \varphi_2$  (Indizes bezeichnen die Äste des Baums) eindeutig festgelegt ist [30, 31]. Die Bestimmungsgleichung ist jedoch implizit, so daß eine analytische Behandlung nur noch in Ausnahmefällen möglich ist. Trotz all dieser Einwände gegen das einfache Kettenmodell, soll es im weiteren herangezogen werden, da die analytische Bestimmung des algebraischen Zerfalls von  $P(t)$  sowie die Umsetzung in ein quantenmechanisches Modell (siehe nächster Abschnitt) vergleichsweise einfach sind. Weiterhin zeigt sich z.B. bei der Separatrix- und der Standardabbildung, daß ein Ast des binären Baums die Dynamik zu dominieren scheint und eine vereinfachte Beschreibung über das Kettenmodell angebracht ist. Dabei setzt sich der Ast eines binären Baumes durch, dessen Skalierungsparameter den kleinsten Zerfallsexponenten  $\gamma$  determiniert (siehe Diskussion in Kap. 2.1.5.1 und 2.1.5.2), was im Falle der Separatrixabbildung z.B. gerade die Fibonacci-Approximanden des goldenen Torus zu sein scheinen.

### 3.2.2 Quantenmechanische Realisierung

Um eine quantenmechanische Realisierung der klassischen Kette skalierender Volumina zu erhalten, ist es zunächst wichtig die klassischen Phasenraumflüsse mit der Quantenmechanik zu verbinden. Der nachfolgend skizzierte Weg entstammt im wesentlichen einem Übersichtsartikel von Bohigas, Tomsovic und Ullmo [67], auf den für die expliziten Ableitungen und Details verwiesen sei.

Im Falle eines autonomen hamiltonschen Systems  $H$  mit  $d$  Freiheitsgraden ist der Fluß zwischen zwei Phasenraumgebieten  $j, k$ , die durch eine partielle Transportbarriere getrennt sind, auf einer Fläche konstanter Energie gegeben durch

$$\Phi_{j,k}(E) = \frac{1}{T} \int_{R_{[B \times T]}} d(q_1, p_1, \dots, q_d, p_d) \delta(H - E), \quad (3.7)$$

wobei  $R_{[B \times T]}$  die Menge von Trajektorien ist, die die Barriere in einer Zeit  $T$  kreuzen. Der Fluß trägt dieser Definition zufolge die Dimension einer Wirkung zur Potenz  $d - 1$ . Ein

quantenmechanisches Pendant zum klassischen Fluß erhält man aus dem Erwartungswert des Normanteils eines Wellenpakets, der in einer Zeit  $t$  vom Gebiet  $j$  ins Gebiet  $k$  propagiert:

$$\langle \mathcal{U}(t) \mathcal{P}_k \mathcal{U}^\dagger(t) \mathcal{P}_j \rangle_E \approx \frac{\Phi_{j,k}(E)t}{(2\pi\hbar)^d \bar{\rho}(E)} \approx \frac{2\pi t}{\hbar} f_j f_k \bar{\rho}(E) v_{jk}^2. \quad (3.8)$$

Dabei ist  $\mathcal{U}(t) = \exp(-it\mathcal{H}/\hbar)$  der Zeitentwicklungsoperator des hamiltonschen Systems,  $\mathcal{P}_{j,k}$  beschreiben die Projektoren auf den zum Phasenraumgebiet  $j$  bzw.  $k$  gehörenden Hilbertraum<sup>4</sup> und  $\langle \dots \rangle_E$  steht für die Bildung des Erwartungswerts bei fester Energie; weiterhin bezeichnen  $\bar{\rho}(E)$  die mittlere Zustandsdichte zur Energie  $E$  und  $f_j, f_k$  die relativen Phasenraumvolumina der Gebiete  $j, k$ , sowie  $v_{jk}^2 = |\langle j|W|k \rangle|^2$  die typische Übergangsamplitude zwischen zwei Zuständen der Gebiete  $j$  und  $k$ . Auf den letzten Ausdruck der Glg. (3.8) kommt man durch Bildung des Ensemblemittels, was schon durch das Auftauchen einer 'typischen' Übergangsamplitude  $v_{jk}^2$  angedeutet wird. Mit Hilfe von (3.8) erhält man den dimensionslosen Parameter<sup>5</sup>

$$\Lambda_{j,k} = v_{jk}^2 f_j \bar{\rho}(E) f_k \bar{\rho}(E) = \frac{\Phi_{j,k}(E)}{4\pi^2 (2\pi\hbar)^{d-1}}, \quad (3.9)$$

der quantenmechanische und klassische Größen verbindet. Er taucht in der RMT häufig im Kontext der Störungsrechnung auf, wenn ein Hamilton-Operator  $H_0$  durch einen zweiten Hamilton-Operator  $H_1$  gestört wird. Wie in Ref. [67] ausgeführt wird, ist für  $\Lambda_{j,k} \ll 1$  eine störungstheoretische Behandlung der zwei schwach gekoppelten Subspektren  $j$  und  $k$  möglich, wohingegen sie im Falle  $\Lambda_{j,k} \gg 1$  stark miteinander gekoppelt sind. Abgesehen von den Vorfaktoren ist demnach durch

$$\Phi_{j,k} \approx \hbar^{d-1} \quad (3.10)$$

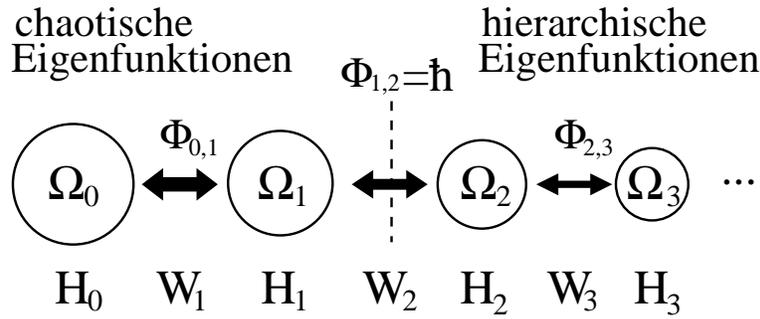
eine Grenze gegeben, die entscheidet ob Spektren stark oder weniger stark gekoppelt sind. Zwei makroskopische Phasenraumgebiete  $j, k$  sind quantenmechanisch entkoppelt, wenn der klassische Fluß weniger als ein Wirkungsquantum enthält (Abb. 3.8). Die Vereinigung aller Bereiche *vor* dieser Flußgrenze bildet den Hauptteil der chaotischen See, der aufgrund der starken Kopplungen RMT-Verhalten zeigt. Für jedes  $\hbar$  überschätzt man den Anteil regulärer Phasenraumbereiche folglich gerade um die dynamisch von der chaotischen See abgekoppelten Bereiche *nach* der Flußgrenze, die der Träger der im Kapitel 3.1.1 beobachteten hierarchischen Zuständen sind.

Setzt man die Skalierungsbedingungen des klassischen Kettenmodells in Glg. (3.10) ein und beachtet, daß nur nächste Nachbarn miteinander gekoppelt sind, so erhält man mit

$$\Phi_{n,n+1}/\hbar^{d-1} \sim \varphi^n / \hbar^{d-1} \quad \Rightarrow \quad n^* = \frac{(d-1) \ln \hbar}{\ln \varphi} \quad (3.11)$$

<sup>4</sup>Diese Definition der Projektoren ist im Sinne der Wigner- bzw. Husimidarstellung (siehe Anhang A.1) zu verstehen.

<sup>5</sup>Der mittlere Niveauabstand des Subspektrums im Gebiet  $j$  ist  $1/(f_j \bar{\rho}(E))$ .



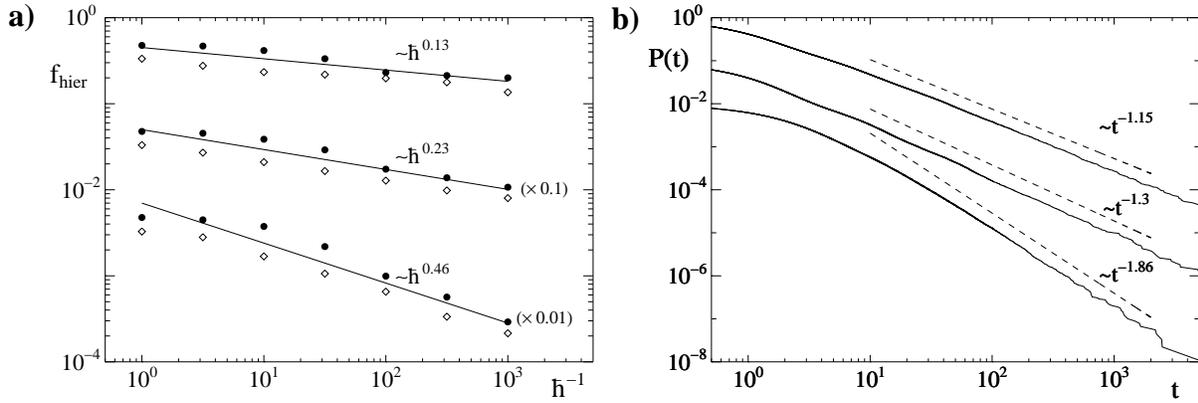
**Abbildung 3.8:** Skizze des Kettenmodells mit eingezeichneter Flußgrenze. Die Bereiche vor dieser Grenze stellen den Träger für chaotische Eigenzustände mit RMT-Statistiken, wohingegen die makroskopischen Bereiche nach der Grenze der Träger hierarchischer Eigenzustände sind. Die mit den Bereichen und Flüssen assoziierten Submatrizen nach Glg. (3.14) sind ebenfalls eingetragen.

eine Abschätzung ab welchem Kettenglied  $n^*$  die Quantenmechanik den skalierenden Fluß nicht mehr auflösen kann. Das Restvolumen bietet somit eine Abschätzung für den relativen Anteil von hierarchischen Eigenzuständen, die durch partielle Transportbarrieren vom Hauptteil der chaotischen See getrennt werden (der echte reguläre Anteil im Kettenmodell ist per constructionem Null):

$$f_{\text{hier}} \sim \sum_{n>n^*} \Omega_n \sim \omega^{n^*} \sim \hbar^{(d-1)(1-1/\gamma)}. \quad (3.12)$$

Dabei wurde ausgenutzt, daß das Gesamtvolumen der Kette gerade durch eine geometrische Reihe gegeben ist und  $\gamma = 1/(1 - \ln \omega / \ln \varphi)$  gilt. Durch diese Ableitung werden die in Kapitel 3.1.2 numerisch gefundenen Ergebnisse für gekickte Systeme ( $d = 2$ ) auf hervorragende Weise bestätigt und erklärt! Zum einen ist das Auftreten hierarchischer Zustände als Konsequenz der Flußgrenze verständlich, zum anderen erhält man zwanglos das Skalierungsverhalten des relativen Anteils hierarchischer Eigenfunktionen. Desweiteren ergibt sich aus der Abschätzung (3.12) die weiterführende Einsicht, daß bei höherdimensionalen Systemen ein Korrekturfaktor  $d - 1$  im Exponenten zu erwarten ist.

Für offene Systeme, wie z.B. gekickte Systeme mit Absorption, kann auf dieser Basis eine Aussage getroffen werden, ob und wie lange der klassische algebraische Zerfall von  $P(t)$  in der Quantenmechanik nachgeahmt wird. Klassisch zeigt bereits eine endliche Kette mit hinreichend vielen Gliedern den gewünschten algebraischen Zerfall, allerdings nur über ein begrenztes Zeitintervall. Da die wesentlich Eigenschaft der Flußgrenze die effektive Verkürzung einer klassisch unendlichen Kette auf endlich viele (d.h.  $n^*$ ) Glieder ist, sollte man deshalb quantenmechanisch nur über ein gewisses Zeitintervall  $t < t_{\text{qm}}$  ein Verhalten  $P_{\text{qm}}(t) = P(t) \sim t^{-\gamma}$  finden. Die Zeitskala  $t_{\text{qm}}$  erhält man aus der inversen Rate  $\sim \Omega_{n^*} / \Phi_{n^*, n^*+1}$  an der mit  $n^*$  bezeichneten Flußgrenze. Bis zur Erforschung des Kettengliedes  $n^*$  mit dieser Rate, erscheint die Kette auch quantenmechanisch unendlich und



**Abbildung 3.9:** **a)** Relativer Anteil  $f_{\text{hier}}$  hierarchischer Eigenzustände für einige RMT-Realisierungen des Kettenmodells (unterschiedliche  $\gamma$ ). Die vollen (offenen) Symbole wurden wie in Abb. 3.4a anhand der Statistik  $p(\eta)$  bzw. der Berry-Robnik-Verteilung ermittelt. Die über (3.6) und (3.12) vorhergesagten Potenzgesetze sind als volle Linien dargestellt. **b)** Verlauf von  $P(t)$  für die zu a) korrespondierenden klassischen Kettenmodelle mit den aus (3.6) vorhergesagten Potenzgesetzen (gestrichelt).

die Quantendynamik ahmt die Klassik nach. Mit (3.11) und (3.6) ergibt sich demnach

$$t_{\text{qm}} \sim \frac{\Phi_{n^*, n^*+1}}{\Omega_{n^*}} \sim \left(\frac{\varphi}{\omega}\right)^{n^*} \sim \hbar^{(1-d)/\gamma}. \quad (3.13)$$

Diese Vorhersage, sowie eine weitergehende Untersuchung von  $P_{\text{qm}}(t)$  werden in Kapitel 3.3 erfolgen. Interessanterweise wurde das Skalierungsverhalten (3.13) bereits 1987 für die Standardabbildung im Spezialfall der kritischen Kickstärke vorhergesagt und ansatzweise numerisch verifiziert [68] indem der Übergang von diffusiver Ausbreitung eines Wellenpakets zur dynamischen Lokalisierung (siehe Kap. 4) untersucht wurde. Die Verallgemeinerung dieser Idee auf beliebige gemischte Systeme sowie eine numerisch detaillierte Untersuchung wurden aber bislang nicht gemacht.

Um die theoretische Vorhersage (3.12) des Modells auch unabhängig von gekickten Systemen numerisch zu bestätigen, soll nun eine quantenmechanische Realisierung der Kette in Termen eines RMT-Ensembles genutzt werden. Dazu ist es sinnvoll eine Hamilton-Matrix der Struktur

$$H = \begin{pmatrix} H_0 & W_1 & & & 0 \\ W_1 & H_1 & W_2 & & \\ & W_2 & H_2 & W_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & & W_n & H_n \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

zu bilden (vgl. Abb. 3.8), wobei der Rang der Diagonalblöcke mit dem Skalierungsfaktor

der Volumina schrumpft ( $\text{rg}H_{j+1} = \omega \text{rg}H_j$ ). Obwohl man eigentlich eine unendlich lange Kette simulieren müsste, reicht es im allgemeinen aus, ca.  $n = 7$  Volumina für numerische Untersuchungen heranzuziehen. Die Elemente der Diagonalblöcke  $H_j$  werden wie die Elemente der verbindenden Nichtdiagonalblöcke  $W_j$  gemäß einer Gaußverteilung gewürfelt, sie unterscheiden sich lediglich in den Varianzen:

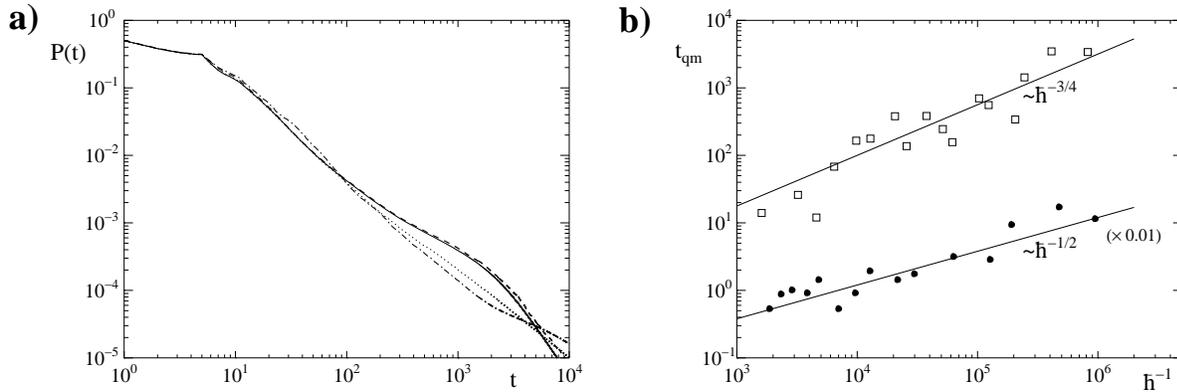
$$\begin{aligned} v_{ij}^2(H_n) &= (1 + \delta_{ij}) \frac{\pi^2 N}{64 f_0 \omega^n} \\ v_{ij}^2(W_n) &= \frac{\Phi_{0,1}}{4\pi^2 f_0^2 \omega^{n+1}} \left(\frac{\varphi}{\omega}\right)^n, \end{aligned}$$

wobei  $\Phi_{0,1}$  und  $f_0 = \Omega_0/(1 - \omega)$  frei wählbare Konstanten sind. Die Indizes  $i, j$  bezeichnen dabei einzelne Matricelemente der Submatrizen  $H_n$  bzw.  $W_n$ , und das Auftreten des Kronecker-Symbols ist konventionsgemäß in Anlehnung an allgemeine Zufallsmatrizen. Durch Einstellen der Skalierungsparameter  $\omega, \varphi$  kann man den klassischen Exponenten  $\gamma$  einstellen und infolgedessen die Relation (3.12) überprüfen. Dazu bieten sich die gleichen Analysemethoden an, wie sie auch in Kap. 3.1.2 zur Untersuchung der gekickten Systeme herangezogen wurden ( $\eta$ -Statistik und Berry-Robnik-Verteilung<sup>6</sup>). Zur Verbesserung der Statistik und der Fits, wurde bei gleichen Parameter-Werten über ein Ensemble verschiedener Matrizenrealisierungen gemittelt. In Abb. 3.9 sind die Resultate für drei verschiedene Werte von  $\gamma$  gezeigt. Die numerischen Daten stimmen über drei Größenordnungen mit der als Linie eingezeichneten Skalierungsrelation (3.12) überein und bestätigen so obige Herleitung. Die klassischen  $P(t)$ -Kurven, die wie erwartet den eingestellten Exponenten (gestrichelte Linien) folgen, sind ebenfalls gezeigt.

### 3.3 Offene Systeme

Üblicherweise untersucht man das Verhalten von offenen Hamilton-Systemen im Rahmen der Streutheorie, wobei die unitäre Streumatrix  $\mathcal{S}$  die Anregung und den Zerfall eines Zustandes bei Ankopplung des internen Hamilton-Operators an (perfekte) Kanäle beschreibt. Dieser Zugang ist analytisch wie numerisch schwierig, so daß man sich meist auf wenige Kanäle bei nicht zu kleinem  $\hbar$  beschränken muß. Einen Ausweg bieten die gekickten Systeme mit absorbierenden Randbedingungen (vgl. Kap. 2.2.3.2), die numerisch leichter zugänglich sind. Die Projektion auf einen geeigneten Unterraum des Hilbertraumes entspricht bei diesen Systemen der Einführung absorbierender Randbedingungen im Phasenraum, und die Norm eines Wellenpakets ist unter der Dynamik des so entstehenden nicht-unitären Zeitentwicklungsoperators folgerichtig nicht mehr erhalten. Aufgrund der in Kap. 2.2.3.2 angesprochenen Unhandlichkeit von Spektrum und Eigenfunktionen absorbierender gekickter Systeme, soll im nachfolgenden Abschnitt zunächst  $P_{\text{qm}}(t)$  numerisch

<sup>6</sup>Im Gegensatz zur Standardabbildung, die im voll chaotischen Fall einem COE-Ensemble mit konstanter Zustandsdichte [47] der Quasienergien entspricht, muß das Spektrum der RMT-Matrix mit der lokalen Zustandsdichte entfaltet werden (siehe z.B. [38]).

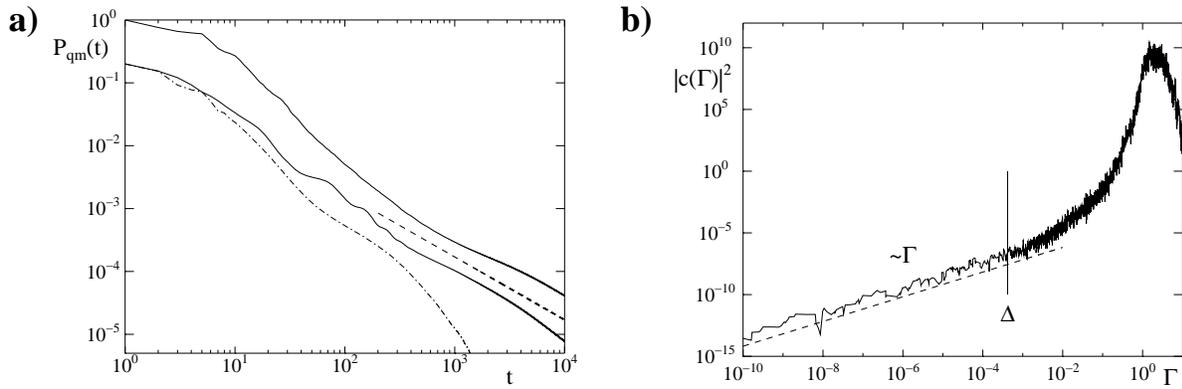


**Abbildung 3.10:** **a)** Vergleich des klassischen  $P(t)$  (gestrichelt) mit den quantenmechanischen  $P_{\text{qm}}(t)$  zu  $\hbar \approx 3.1 \cdot 10^{-4}$ ,  $1.62 \cdot 10^{-5}$ ,  $1.2 \cdot 10^{-6}$  (strichpunktiert, gepunktet, durchgezogen) für die Separatrixabbildung. Die Projektion erfolgte dabei auf die Eigenzustände positiven Impulses, d.h. jeglicher Anteil der Wellenfunktion im Bereich  $p < 0$  wurde abgeschnitten. **b)** Skalierungsverhalten der Zeitskala  $t_{\text{qm}}$  für die Separatrix- (Quadrate) und die Standardabbildung ( $K = 2.5$ , volle Punkte). Zur besseren Übersicht wurde letzterer Datensatz nach unten verschoben. Die Daten der Separatrixabbildung ( $\gamma = 4/3$ ) folgen sehr schön dem aus Glg. (3.13) vorhergesagten Skalierungsgesetz  $t_{\text{qm}} \sim \hbar^{-3/4}$  (volle Linie). Die Daten der Standardabbildung entstammen Ref. [69] und folgen näherungsweise dem dort vorhergesagten Verhalten  $t_{\text{qm}} \sim 1/\sqrt{\hbar}$  (volle Linie), das man mit  $\gamma \approx 1.9$  auch aus Glg. (3.13) erhält.

untersucht und mit der klassischen Kurve verglichen werden. Dabei wird insbesondere auch die vorhergesagte Skalierungsrelation (3.13) überprüft werden. Aufbauend auf den dabei gewonnenen Erkenntnissen, lassen sich in Folge auch einige Konsequenzen für Spektrum und Eigenfunktionen des nicht-unitären Zeitentwicklungsoperators ableiten, was abschließend mit Hilfe einer stark vereinfachten Störungstheorie beschrieben wird.

### 3.3.1 Numerische Untersuchung offener Systeme

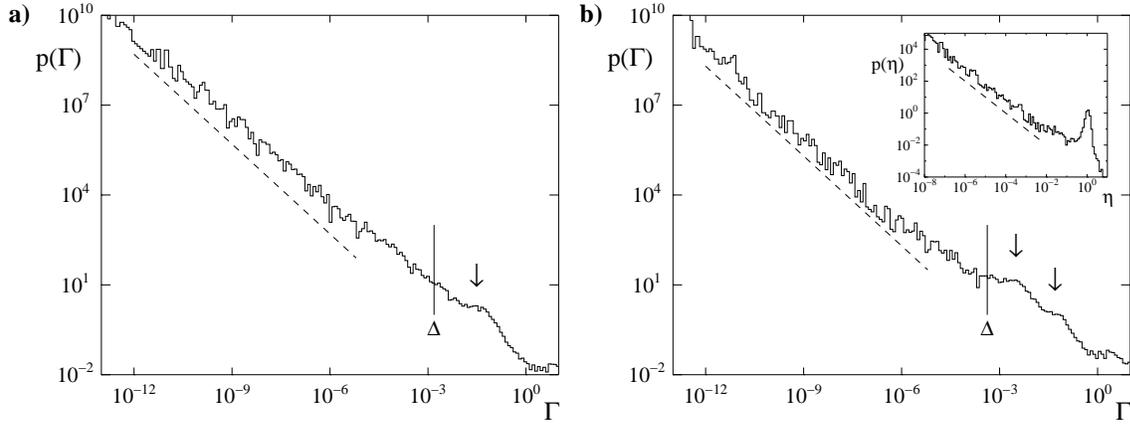
Wie erwähnt ist  $P_{\text{qm}}(t)$  für gekickte Systeme ebenso leicht zugänglich wie das klassische Pendant. Zum Vergleich der beiden Größen, sind in Abb. 3.10a sowohl das klassische  $P(t)$  als auch  $P_{\text{qm}}(t)$  für verschiedene  $\hbar$  am Beispiel der Separatrixabbildung gezeigt. Auffallend ist zunächst, daß die Quantenmechanik die Klassik über eine gewisse Zeit nachahmt, bevor sie ein genuin anderes Verhalten zeigt. Dabei folgen die Kurven mit kleinen  $\hbar$  der Klassik deutlich länger als solche mit vergleichsweise großem  $\hbar$ . Dieser Sachverhalt wurde erstmals von Casati et al. für voll chaotische Systeme [70] numerisch untersucht, denn auch dort findet man nach einiger Zeit quantenmechanische Abweichungen vom exponentiellen klassischen Zerfall. Insbesondere fanden die Autoren, daß die Zeitskala  $t_{\text{qm}}$ , auf der die ersten Abweichungen auftraten mit  $t_{\text{qm}} \sim 1/\sqrt{\hbar}$  skalierte, was in Folge auch analy-



**Abbildung 3.11: a)** Verlauf von  $P_{\text{qm}}(t)$  für die Separatrix- (obere Kurve) und die Standardabbildung (untere Kurve). Zum besseren Vergleich ist die klassische Kurve für die Standardabbildung ebenfalls eingetragen (strichpunktiert). Beide quantenmechanische Kurven zeigen für große Zeiten einen universellen Zerfall  $P_{\text{qm}}(t) \sim 1/t$  (gestrichelt). **b)** Absolutquadrat der Entwicklungskoeffizienten  $c_\alpha$  als Funktion der Resonanzbreiten  $\Gamma_\alpha$ . Unterhalb des mittleren Niveauabstandes  $\Delta$  ist deutlich ein linearer Zusammenhang zwischen den beiden Größen zu erkennen, wie es auch im störungstheoretischen Argument (3.16) eingeht.

tische Rechtfertigung aus supersymmetrischen Rechnungen fand [71, 72]. In einem weiteren Schritt untersuchten Casati et al. [69] die Skalierung von  $t_{\text{qm}}$  für einen gemischten Phasenraum (Standardabbildung,  $K = 2.5$ ) und fanden das gleiche Ergebnis wie im voll chaotischen Fall, woraus sie die Existenz einer universellen Zeitskala  $t_{\text{qm}} \sim 1/\sqrt{\hbar}$  schlossen. Wie aber aus Glg. (3.13) in Kapitel 3.2.2 hervorgeht, sollte die Skalierungsrelation i.a. durch  $t_{\text{qm}} \sim \hbar^{-1/\gamma}$  gegeben sein. Zur genaueren Untersuchung, welche dieser Skalierungen im gemischten Phasenraum tatsächlich gilt, seien im folgenden die Separatrix- und die Standardabbildung ( $K = 2.5$ ) für unterschiedliche  $\hbar$  herangezogen. Die Zeitskala  $t_{\text{qm}}$  wird dabei in enger Analogie zu den Referenzen [69, 70] definiert als der Zeitpunkt, an dem sich  $P_{\text{qm}}(t)$  und das klassische  $P(t)$  um mind. 20% unterscheiden. Die gewonnenen Datenpunkte sind in Abb. 3.10b gegen  $1/\hbar$  aufgetragen.

Offenbar gibt es systematische Abweichungen von  $t_{\text{qm}} \sim 1/\sqrt{\hbar}$ , die mit der spezifischen Natur des gemischten Phasenraums zusammenhängen, was nach der Charakterisierung der hierarchischen Zustände in Kapitel 3.1 sowie der Behandlung des Modells in Kapitel 3.2 nicht weiter verwunderlich erscheint. Zieht man die vorhergesagte Relation (3.13) heran und setzt die Werte  $\gamma = 4/3, 1.9$  für die Separatrix- bzw. Standardabbildung ein, so erhält man die in Abb. 3.10b eingezeichneten Linien, die sich hervorragend mit den numerischen Daten decken. Für die Daten der Standardabbildung bei  $K = 2.5$  findet man mit  $\gamma = 1.9$  also *zufällig* ein Verhalten, das sehr nahe an  $t_{\text{qm}} \sim 1/\sqrt{\hbar}$  liegt, wie in [69] gefordert. Die Relation (3.13) bietet hingegen eine allgemeine Vorhersage, die der spezifischen Natur des gemischten Phasenraums Rechnung trägt.



**Abbildung 3.12:** Beispiele für die Statistiken  $p(\Gamma)$  der **a)** Separatrixabbildung ( $2\pi\hbar = 1/4096$ ) und **b)** Standardabbildung ( $K = 2.5, 2\pi\hbar = 1/15000$ ). Der asymptotische Verlauf  $p(\Gamma) \sim 1/\Gamma$  unterhalb des mittleren Niveauabstandes  $\Delta$  ist in beiden Fällen klar ersichtlich (gestrichelt). Im Inset von b) ist die Statistik  $p(\eta)$  des geschlossenen Systems (gleiche Parameter) gezeigt, die aus störungstheoretischen Gründen ebenfalls ein asymptotisches Gesetz  $p(\eta) \sim 1/\eta$  zeigt.

Es bleibt die Frage, welchen Verlauf  $P_{\text{qm}}(t)$  jenseits der Zeitskala  $t_{\text{qm}}$  hat. Wie in Abb. 3.11a zu sehen ist, scheinen sowohl Standard- als auch Separatrixabbildung in einen universellen Zerfall  $P_{\text{qm}}(t \gg t_{\text{qm}}) \sim 1/t$  überzugehen. Wie in [69] gezeigt wurde, ist die relevante Zeitskala, ab der dieses Verhalten zu beobachten ist, die Heisenbergzeit  $t_H$ . Diese Zeit erhält man aus der Energie-Zeit-Unschärferelation bei Einsetzung des mittleren Niveauabstandes  $\Delta$ , so daß für gekickte Abbildungen gerade  $t_H \sim 1/\Delta \sim N \sim 1/\hbar$  gilt. Spätestens ab diesem Zeitpunkt muß die Quantendynamik dem diskreten Energiespektrum Rechnung tragen, und ein deutlich anderes Verhalten zeigen als die klassische Dynamik. Natürlich geht das Verhalten  $P_{\text{qm}}(t \gg t_{\text{qm}}) \sim 1/t$  für sehr große Zeiten in einen exponentiellen Zerfall über, dessen charakteristische Zeitskala gerade durch das Inverse der kleinsten Resonanzbreite  $1/\min(\Gamma)$  bestimmt ist.

Wie läßt sich nun dieses Verhalten  $P_{\text{qm}}(t) \sim 1/t$  verstehen? Dazu ist es ratsam, Glg. (2.27) etwas umzuformen, so daß man nach geeigneter Umsortierung

$$P_{\text{qm}}(t) = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 e^{-2\Gamma_{\alpha}t} + 2\text{Re} \left( \sum_{\alpha>\beta} c_{\alpha}^* c_{\beta} \langle \alpha | \beta \rangle e^{i(\omega_{\alpha} - \omega_{\beta})t - (\Gamma_{\alpha} + \Gamma_{\beta})t} \right) \quad (3.15)$$

erhält. Da  $P_{\text{qm}}(t) \sim 1/t$  erst für  $t > t_H$  gilt, tragen näherungsweise nur noch Terme mit  $\Gamma_{\alpha} < 1/t_H \sim \Delta$  in der Summe bei, für die eine störungstheoretische Behandlung sinnvoll ist [38,67,69]. In guter Näherung hat die Einführung absorbierender Randbedingungen die Gestalt dieser Eigenzustände kaum verändert, so daß sie nach wie vor approximativ ein vollständiges Orthonormalsystem eines Hilbertunterraums bilden. Damit können die Resonanzbreiten mit den Entwicklungskoeffizienten  $c_{\alpha}$  in erster Ordnung Störungstheorie

folgendermaßen verknüpft werden

$$\forall_{\Gamma_\alpha \ll \Delta} |c_\alpha|^2 \sim \Gamma_\alpha \quad \forall_{\Gamma_\alpha, \Gamma_\beta \ll \Delta} \langle \alpha | \beta \rangle \approx \delta_{\alpha\beta} . \quad (3.16)$$

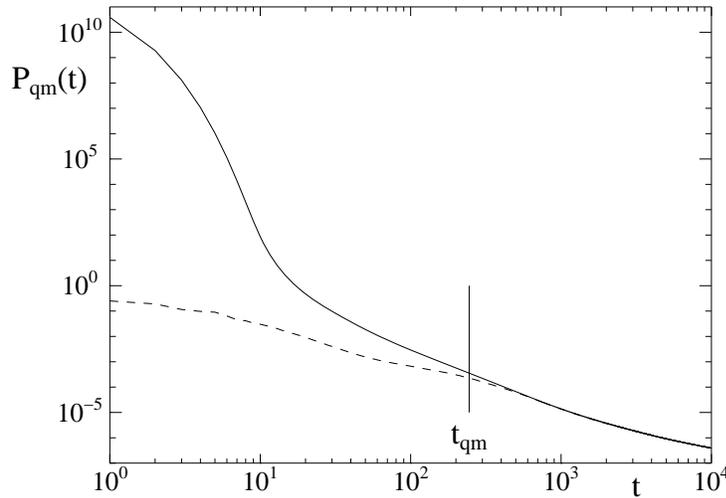
Die lineare Relation  $\Gamma_\alpha \sim |c_\alpha|^2$  für Zustände, deren Resonanzbreiten unterhalb des mittleren Niveauabstandes  $\Delta$  liegen, kann leicht numerisch verifiziert werden (siehe Abb. 3.11b). Aufgrund der approximativen Orthogonalität der Eigenzustände kann der komplizierte Ausdruck  $\text{Re}(\dots)$  in Glg. (3.15) vernachlässigt werden und man erhält

$$P_{\text{qm}}(t > t_H) \approx \sum_{\alpha} |c_\alpha|^2 e^{-2\Gamma_\alpha t} \approx \sum_{\alpha} \Gamma_\alpha e^{-2\Gamma_\alpha t} \approx \int_0^\Delta \Gamma p(\Gamma) e^{-2\Gamma t} d\Gamma . \quad (3.17)$$

Der letzte Schritt zur Kontinuumsnäherung zeigt, daß  $P_{\text{qm}}(t > t_H)$  asymptotisch die gleichen Eigenschaften hat, wie die Laplace-Transformierte von  $\Gamma p(\Gamma)$ , wobei  $p(\Gamma)$  die Verteilung der Resonanzbreiten ist. Damit ist das Langzeitverhalten von  $P_{\text{qm}}(t > t_H)$  eine direkte Konsequenz der Relation  $p(\Gamma < \Delta) \sim 1/\Gamma$ , die man auch numerisch für Standard- und Separatrixabbildung findet (Abb. 3.12). Solange aber die Störungstheorie gilt, sollte wegen  $|c_\alpha|^2 \sim \Gamma_\alpha$  auch  $\eta_\alpha \sim \Gamma_\alpha$  sein, wobei  $\eta_\alpha$  wie in Glg. (3.3) definiert ist und somit eine Größe des *geschlossenen* Systems darstellt. Aus  $p(\Gamma) \sim 1/\Gamma$  folgt mithin  $p(\eta) \sim 1/\eta$ , was im Inset von Abb. 3.12b numerisch bestätigt wird. Die Gauß-Glocke von  $p(\eta)$ , die in Kap. 3.1 zur Bestimmung von  $f_{\text{hier}}$  verwendet wurde, ist in dieser Darstellung nur als scharfe Spitze bei  $\eta \approx 1$  zu erkennen. Die Oszillationen in  $p(\Gamma)$  (Pfeile in Abb. 3.12) lassen sich wie auch der asymptotische Verlauf  $\sim 1/\Gamma$  mit Hilfe einer stark vereinfachten Störungstheorie beschreiben, die in Kap. 3.3.2 vorgestellt wird. Die sehr breite Verteilung  $p(\Gamma)$  von Systemen mit gemischtem Phasenraum, wie sie in Abb. 3.12 gezeigt ist, unterscheidet sich qualitativ von der entsprechenden Statistik im voll chaotischen Fall, wo man  $p(\Gamma) \sim \Gamma^{-3/2}$  in einem engen Bereich  $\Gamma \in [\Gamma_{\text{min}}, \Gamma_{\text{max}}]$  findet [73, 74]<sup>7</sup>.

Der Übergang von  $p(\Gamma) \sim 1/\Gamma$  für  $\Gamma \ll \Delta$  zu einem oszillierenden Zerfall für  $\Gamma \gg \Delta$  ist gerade mit  $1/t_{\text{qm}}$  verknüpft, so daß die quantenmechanische Zeitskala  $t_{\text{qm}} \sim \hbar^{-1/\gamma}$  angibt, ab wann die beiden Terme in Glg. 3.15 von der gleichen Größenordnung sind (Abb. 3.13). Bis zu diesem Zeitpunkt sind die komplizierten Korrelationen der Eigenzustände und des Spektrums nötig, um das klassische  $P(t)$  nachzuahmen. Insbesondere liegt der erste ('Diagonal-') Term in Glg. (3.15) viele Größenordnungen über dem eigentlichen Verlauf von  $P_{\text{qm}}(t)$ , so daß der zweite Term immer einen ähnlich großen, aber strikt negativen Beitrag liefern muß. Für  $t \geq t_{\text{qm}}$  liefert der 'Diagonalterm' jedoch den dominanten Beitrag, die Korrelationen im zweiten Term von (3.15) werden sukzessive ausgedämpft und man beobachtet Abweichungen zwischen dem klassischen  $P(t)$  und  $P_{\text{qm}}(t)$ . Aber erst für Zeiten  $t \gg t_{\text{qm}}$  verschwindet der Beitrag des zweiten Terms näherungsweise und man erhält wie oben gezeigt das universelle Verhalten  $P_{\text{qm}}(t) \sim 1/t$ .

<sup>7</sup>Dabei ist  $1/\Gamma_{\text{min}}$  die Zeitkonstante des klassisch exponentiellen Zerfalls von  $P(t)$  und  $\Gamma_{\text{max}}$  ist als maximale klassische Rate, mit der Trajektorien das klassische System verlassen, ebenfalls von  $\hbar$  unabhängig.



**Abbildung 3.13:** Auftragung von  $P_{\text{qm}}(t)$  (gestrichelt) und des ersten ('Diagonal-') Terms in Glg. (3.15) (durchgezogen). Für  $t \geq t_{\text{qm}}$  kommt der dominante Beitrag in Glg. (3.15) vom Diagonalterm. Der eingetragene Wert für  $t_{\text{qm}}$  wurde aus Abb. 3.10b entnommen.

### 3.3.2 Approximative Behandlung offener Systeme

Um die obigen Ergebnisse zu gekickten Systemen mit absorbierenden Randbedingungen mit Hilfe des Kettenmodells aus Kapitel 3.2 zu reproduzieren, können mehrere Wege beschrieben werden: (i) Kopplung der RMT-Hamilton-Matrix (3.14) an offene Kanäle und explizite Untersuchung der damit assoziierten Streumatrix, (ii) Einführung nicht-hermitescher Anteile in  $H_0$  der Hamilton-Matrix (3.14) ('absorbierende Ränder') oder (iii) Aufbau eines hierarchischen Streusystems mit Hilfe von Quantengraphen analog zur Konstruktion obigen RMT-Ensembles. Eine Besprechung dieser Zugänge würde hier den Rahmen sprengen, weshalb auf die Referenzen [75] und [76] verwiesen sei. Einige Merkmale der Statistik  $p(\Gamma)$  von Resonanzbreiten lassen sich aber im Rahmen einer stark vereinfachten Störungstheorie verstehen, was Gegenstand der folgenden Überlegungen ist.

Sei das Kettenmodell, wie in Abb. 3.14 skizziert, nur mit dem ersten Volumen  $\Omega_0$  an offene Kanäle angekoppelt. Unter der Annahme, daß die Ankopplung an die Kanäle schwach ist, kann man eine störungstheoretische Behandlung des offenen Systems heranziehen und so die Resonanzbreiten  $\Gamma \ll \Delta$  bestimmen, wobei  $\Delta$  der mittlere Niveauabstand des geschlossenen Systems ist. Folgt man Ref. [67] und zieht Glg. (3.9) heran, dann ist der charakteristische Wert der Resonanzbreiten für die einzelnen Volumina  $\Omega_n, n \in \mathbb{N}_0$  gegeben durch

$$\langle \Gamma_n \rangle \sim \Lambda_{0,1} \prod_{j=1}^n \Lambda_{j,j+1} . \quad (3.18)$$

Schematisch hat man demnach im Kettenmodell Stützstellen für die Verteilung von Resonanzbreiten bei den Werten

$$\Gamma_n \sim \prod_{j=1}^n \varphi^j = \varphi^{n(n+1)/2} . \quad (3.19)$$

Der relative Anteil am Gesamtspektrum nimmt dabei gemäß  $\omega^n$  ab, so daß zu jeder Stützstelle  $\Gamma_n$  ein Wert  $P_n$  der kumulativen Verteilung

$$P_n = P(\Gamma_n) = \int_0^{\Gamma_n} p(\Gamma') d\Gamma' = \sum_{j=n}^{\infty} \omega^j = \frac{\omega^n}{1-\omega} \quad (3.20)$$

gehört. Löst man jetzt (3.19) nach  $n$  auf, erhält man unter Beachtung, daß  $n > 0$  gelten muß die Relation

$$n = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2 \ln \Gamma}{\ln \varphi}} \sim \sqrt{\frac{2 \ln \Gamma}{\ln \varphi}} \quad \text{für } \Gamma \ll \varphi. \quad (3.21)$$

Setzt man dieses Ergebnis in (3.20) ein und differenziert nach  $\Gamma$ , so erhält man unter Auslassung konstanter Vorfaktoren

$$p(\Gamma) = \frac{\partial P(\Gamma)}{\partial \Gamma} \sim \frac{\exp\left(\sqrt{\frac{2 \ln \Gamma}{\ln \varphi} + \frac{1}{4} \ln \omega}\right)}{\Gamma \sqrt{\frac{2 \ln \Gamma}{\ln \varphi} + \frac{1}{4}}} \sim \frac{1}{\Gamma} \sqrt{\frac{\ln \varphi}{\ln \Gamma}} \omega^{-\sqrt{2 \ln \Gamma / \ln \varphi}} \quad \text{für } \Gamma \ll \varphi. \quad (3.22)$$

D.h. in Übereinstimmung mit den numerischen Beobachtungen in Kap. 3.3.1 strebt die Verteilung von Resonanzbreiten im Limes kleiner  $\Gamma$  gegen eine universelle Verteilung  $p(\Gamma) \sim 1/\Gamma$  mit logarithmisch kleinen Korrekturen. Diese grobe Abschätzung des asymptotischen Verlaufs zieht natürlich keine Schwankungen um die Stützstelle in Betracht, was in nachfolgender stochastischer Argumentation für das Kettenmodell getan wird.

Angenommen es existieren zunächst keine Verbindungen zwischen den einzelnen Gliedern der Kette ( $\forall_{i,j} \Phi_{i,j} = 0$ ) und nur das erste Glied  $\Omega_0$  ist an offene Kanäle gekoppelt (Abb. 3.14), dann kann eine RMT-Realisierung nach Glg. (3.14) mit  $W_j = 0$  ( $j = 0, \dots, n$ ) blockweise diagonalisiert werden. Die erhaltenen Spektren  $\text{Spek}(\Omega_j)$  dieses ungestörten Systems bestehen per constructionem für alle  $j > 0$  aus GOE-Spektren mit einem mittleren Niveauabstand  $\Delta_j$ , lediglich  $\text{Spek}(\Omega_0)$  besteht aus komplexen Energien der Form  $E_0 + i\eta$ . Das Auftreten der Resonanzbreite  $\eta$  im Imaginärteil reflektiert die endliche Lebenszeit von Zuständen, deren Träger  $\Omega_0$  ist, aufgrund der Ankopplung an offene Kanäle. Unter der Annahme, daß die Kopplungsmatrizen  $W_j$  als kleine Störung des eben behandelten Systems angesehen werden können, ist der erste nicht-verschwindende Term der Störungsreihe für die Eigenenergien in quadratischer Ordnung. Das folgt direkt aus der Eigenschaft der Nebendiagonalmatrizen  $W_j$  Eigenzustände  $|j\rangle$  aus  $\Omega_j$  auf die dazu orthogonalen Unterräume von  $\Omega_{j\pm 1}$  abzubilden. Deshalb gilt  $\langle j|W|j\rangle = 0$ , d.h. der lineare Term der Störungsreihe verschwindet. Die zweite Ordnung ergibt dann wie üblich Korrekturterme, in deren Nenner die Energiedifferenzen zwischen Eigenenergien  $E_j \in \text{Spek}(\Omega_j)$   $E_{j\pm 1} \in \text{Spek}(\Omega_j \pm 1)$  stehen [77]. Allgemein hat diese Korrektur in nicht-entarteter Störungstheorie die folgende Form:

$$E_m^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n|W|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (3.23)$$

Da für verschwindende Kopplung die Spektren  $\text{Spek}(\Omega_j)$  unabhängig voneinander sind, ist die Wahrscheinlichkeit für zufällige Entartungen von Niveaus aus benachbarten Subspektren sehr hoch. Bei schwacher Kopplung der Subspektren sollten diese (fast vollständigen) Entartungen den dominanten Beitrag in (3.23) liefern, da der Nenner dann nahezu verschwindet, was die Verwendung der entarteten Störungstheorie nahelegt. Im einfachsten Falle kann die gesamte Summe in (3.23) durch *einen* dominanten Beitrag in der Summe approximiert werden. Im Rahmen der entarteten Störungstheorie wechselwirken dann nur noch nächstbenachbarte Niveaus aus benachbarten ungestörten Spektren, wie dies in Abb. 3.14 durch gestrichelte Linien angedeutet ist. Die zu diesen Niveaus korrespondierenden Eigenenergien des gestörten Systems sind dann approximativ gegeben durch die Eigenwerte von Matrizen der folgenden Form:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} E_0 + i\eta & \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_1 & E_1 & \lambda_2 & \\ & & \lambda_2 & E_2 & \lambda_3 \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & 0 & & & \lambda_n & E_n \end{pmatrix} . \quad (3.24)$$

Dabei ist  $\lambda_j$  der typische Wert der Kopplungsmatrix  $W_j$  nach Glg. (3.15). Da das wesentliche Interesse der Statistik von Resonanzbreiten gilt, bietet es sich nicht an, alle Eigenenergien des gestörten Systems auf die eben skizzierte Weise auszurechnen. Vielmehr ist es ratsam einen stochastischen Zugang heranzuziehen, in den die wichtigsten Eigenschaften des Eigenwertproblems (3.24) eingehen.

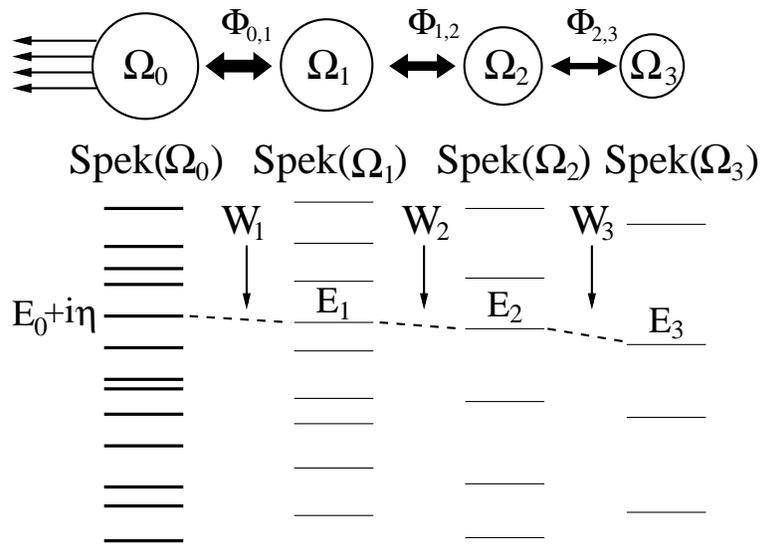
Sei  $p(\Delta E)$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Energieabstand  $\Delta E$ , den ein Niveau  $E_j \in \text{Spek}(\Omega_j)$  vom nächstliegenden Niveau  $E_{j-1}$  des benachbarten Subspektrums  $\text{Spek}(\Omega_{j-1})$  einnimmt, wenn  $E_j$  zufällig in letzteres Spektrum eingewürfelt wird. Diese Verteilung erhält man sehr einfach aus der Wahrscheinlichkeit  $P(\Delta E)$ , daß der Abstand  $|E_j - E_{j-1}| \leq \Delta E$  (in Einheiten des mittleren Niveaubabstandes  $\Delta_{j-1}$ ) ist:

$$P(\Delta E) = \int_0^{2\Delta E} sp(0, s)ds + \int_{2\Delta E}^{\infty} \frac{2\Delta E}{s} sp(0, s)ds , \quad (3.25)$$

wobei  $p(0, s)$  die Statistik nächster Niveaubabstände (vgl. Kap. 2.2) in  $\text{Spek}(\Omega_{j-1})$  ist. Einsetzen der Wigner Vermutung (2.16) für GOE ergibt dann

$$p(\Delta E) = \frac{\partial P(\Delta E)}{\partial(\Delta E)} = 2e^{-\pi(\Delta E)^2} . \quad (3.26)$$

Damit können ausgehend von einem willkürlich gewählten Niveau  $E_n \in \text{Spek}(\Omega_n)$  unter Beachtung der mittleren Niveaubabstände alle im statistischen Sinne nächstbenachbarten Niveaus  $E_{n-1}, \dots, E_1$  ausgewürfelt und in (3.24) eingesetzt werden. Der Realteil des letzten, komplexen Energiewertes  $E_0 + i\eta$  wird ebenfalls auf diese Weise ausgewürfelt, wobei



**Abbildung 3.14:** Skizze einer Kette, die an offene Kanäle gekoppelt ist. Die Subspektren  $\text{Spek}(\Omega_j)$  bei verschwindenden Kopplungen  $\Phi_{j,j\pm 1}$  sind ebenso dargestellt, wie die approximative Kopplung nächstbenachbarter Niveaus in benachbarten Subspektren (gestrichelt).

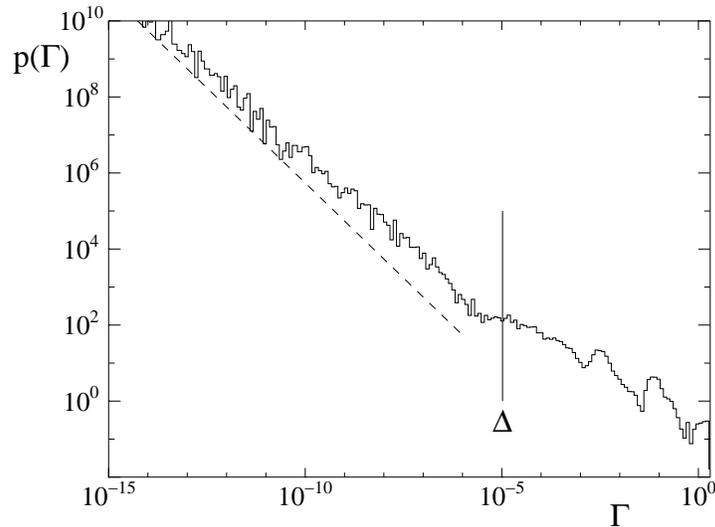
in Glg. (3.25) statt der Wignervermutung die Poisson-Verteilung (2.15) eingesetzt werden muss<sup>8</sup>. Der Imaginärteil soll der Einfachheit halber für jedes gewürfelte Niveau  $E_0$  auf den gleichen konstanten Wert  $\eta$  gesetzt werden. Die Kopplungselemente  $\lambda_j$  in (3.24) werden als gaußverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert  $\sqrt{v^2(W_j)}$  (vgl. Glg. (3.15)) gewürfelt. Diagonalisierung des so erhaltenen Eigenwertproblems (3.24) ergibt dann  $n$  komplexe Eigenenergien des gestörten Systems, deren Imaginärteil  $\Gamma$  für die Resonanzbreitenverteilung  $p(\Gamma)$  herangezogen wird.

Zur Erstellung von  $p(\Gamma)$  muß ferner beachtet werden, daß es  $\omega$ -fach weniger Energien  $E_j$  als Energien  $E_{j-1}$  ( $j = 1, \dots, n$ ) gibt. Zur Erstellung der Resonanzbreitenstatistik diagonalisiert man daher  $\omega^n N$  Matrizen der Form (3.24) vom Rang  $n$ ,  $\omega^{n-1} N$  Matrizen vom Rang  $n - 1$  (d.h. die letzte Zeile und Spalte werden entfernt) etc. nach obigem statistischen Schema. Der mittlere Niveauabstand des dazu analogen geschlossenen Systems ist demnach gegeben durch

$$\Delta = \frac{1 - \omega}{N(1 - \omega^{n+1})},$$

wenn alle Energien  $E_j$  aus dem Intervall  $[0, 1]$  gezogen wurden. Eine typische Verteilung  $p(\Gamma)$ , wie man sie nach diesem Vorgehen erhält, ist in Abb. 3.15 gezeigt. Trotz des stark approximativen Zugangs reproduzieren die Daten zwei generische Eigenschaften der Verteilung  $p(\Gamma)$ , die schon in Kap. 3.3 beobachtet wurden:

<sup>8</sup>Obwohl die komplexen Eigenwerte in der gaußschen Zahlenebene eine kubische Niveauabstoßung zeigen [78], sind die Projektionen der Niveaus auf die reelle Energieachse unkorreliert, so daß sie Poisson-Statistiken zeigen.



**Abbildung 3.15:** Verteilung  $p(\Gamma)$  nach dem vereinfachten, stochastischen Störungsansatz ( $n = 7, \omega = 0.5, \varphi = 0.05$ , 32000 Niveaus). Die gestrichelte Linie gibt den asymptotischen Verlauf  $p(\Gamma) \sim 1/\Gamma$  an, der unterhalb des mittleren Niveauabstandes  $\Delta$  einsetzt. Die Oszillationen oberhalb  $\Delta$  sind den in Abb. 3.12 gezeigten sehr ähnlich.

1. Unterhalb des mittleren Niveauabstandes  $\Delta$  findet man  $p(\Gamma) \sim 1/\Gamma$ .
2. Oberhalb des mittleren Niveauabstandes bilden sich Oszillationen aus.

Die breite Verteilung  $p(\Gamma)$  und ihre grundlegenden Merkmale sind somit als eindeutige Konsequenz der hierarchischen Anordnung chaotischer Bereiche im Phasenraum aufzufassen, denn dies war die wesentliche Annahme in beiden oben skizzierten Zugängen.

### 3.4 Ausblick

Trotz der zahlreichen Ergebnisse dieses Kapitels bleiben immer noch viele Fragen zu den Quantensignaturen gemischter Phasenräume unbeantwortet. Beispielsweise sind die in Kap. 3.1.2 angesprochenen statistischen Eigenschaften des hierarchischen Subspektrums (z.B.  $p_{\text{hier}}(0, s)$ ) noch unbekannt. Weiterhin sollte man im geschlossenen Quantensystem über den Zerfall von Korrelationsfunktionen der Form  $C(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2$  Auskunft über die Verbindungen von Spektrum und Eigenfunktionen erhalten, da  $C(t)$  über eine Fouriertransformation mit dem Spektralmaß bzw. der lokalen Zustandsdichte verbunden ist.

Die Existenz hierarchischer Eigenzustände legt ferner eine Erklärung der in Kap. 2.2.2 angesprochenen unterschiedlichen Leitwertfluktuationen im gemischtem Phasenraum nahe, die es zu überprüfen gilt: Die ausgedehnten chaotischen Eigenzustände werden bei der

Öffnung des Quantensystems stark verändert, was zum Nachahmen des klassischen  $P(t)$  für Zeiten  $t < t_{\text{qm}}$  und zum Auftreten fraktaler Leitwertfluktuationen führt. Da  $t_{\text{qm}}$  wesentlich kleiner ist als die Heisenbergzeit  $2\pi\hbar/\Delta$ , sollten die fraktalen Fluktuationen auf Energieskalen  $2\pi\hbar/t_{\text{qm}} \gg \Delta$  zu beobachten sein. Die hierarchischen Zustände hingegen bleiben durch ihre schwache Ankopplung an die chaotische See bei der Öffnung nahezu unverändert und machen sich als scharfe Resonanzen im Leitwert bemerkbar. Die Verknüpfung fraktaler Leitwertfluktuationen mit der Nachahmung des klassischen  $P(t)$  rückt auch die Frage in den Vordergrund, welche quantenmechanischen Korrelationen zum Verhalten  $P(t) \sim P_{\text{qm}}(t) \sim t^{-\gamma}$  für  $t < t_{\text{qm}}$  führen (vgl. Glg. (3.15)), und welchen Einfluß die breite, störungstheoretisch behandelbare Statistik  $p(\Gamma) \sim 1/\Gamma$  auf den Leitwert und dessen Fluktuationen hat.

Weitere faszinierende Einblicke in die Quantensignaturen gemischter Phasenräume sind zu erwarten, wenn die hier vorgestellten Untersuchungen auf Systeme mit fraktalem Spektrum und gemischtem Phasenraum (z.B. das gekickte Harper-Modell) oder auf hierarchische Zustände um Inseln der Beschleunigermoden erweitert werden.



# Kapitel 4

## Chaos und Lokalisierung

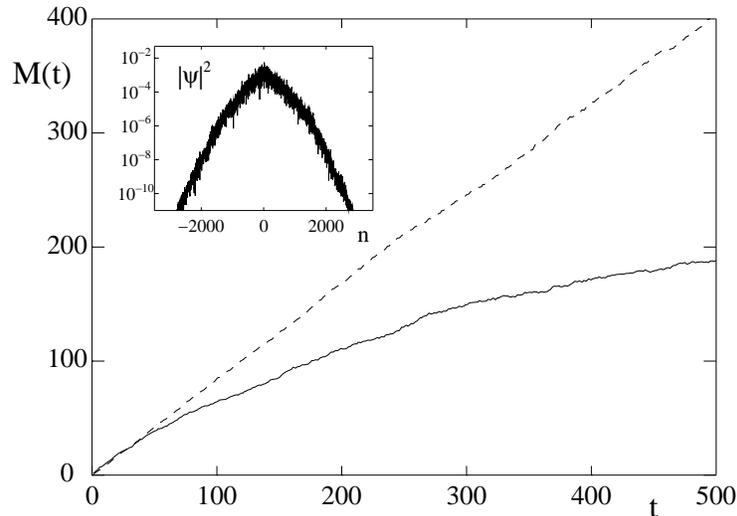
Nachdem der gemischte Phasenraum in den vorherigen Kapiteln im Vordergrund stand, soll nun der Schwenk zu voll chaotischen Systemen mit klassisch diffusiver Dynamik vollzogen werden. Quantenmechanisch zeigen diese Systeme unter bestimmten Bedingungen exponentiell lokalisierte Wellenfunktionen, was im scharfen Gegensatz zur klassischen Dynamik steht. Das Hauptaugenmerk wird im folgenden auf der Form der asymptotischen Einhüllenden sich ausbreitender Wellenpakete, die Veränderung ihrer Lokalisierungslänge und die Fluktuationen um die Einhüllende bei zunehmender Brechung der Zeitumkehrinvarianz liegen. Insbesondere wird sich in diesen Untersuchungen zeigen, daß entgegen einer analytischen Vorhersage mit Hilfe der Supersymmetrie, numerisch kein Hinweis auf *zwei* charakteristische Längenskalen bei schwach gebrochener Zeitumkehrinvarianz zu finden ist [25]. Als typische Systeme zu diesen Untersuchungen, werden die Standardabbildung und ein Ensemble von Band-Zufallsmatrizen herangezogen.

### 4.1 Dynamische Lokalisierung

Betrachtet man sich den Phasenraum der Standardabbildung bei hohen Kickstärken (z.B.  $K = 10$ ), so findet man eine unstrukturierte chaotische See, die von fast jeder Anfangsbedingung im Limes  $t \rightarrow \infty$  erforscht wird. Weiterhin beobachtet man, daß die Impulsvarianz  $M(t) = \langle p(t)^2 \rangle - \langle p(t) \rangle^2$  einer anfänglich im Impulsraum lokalisierten Menge von Trajektorien linear in der Zeit anwächst, wobei der Diffusionskoeffizient eine oszillierende Funktion der Kickstärke ist [79]. Quantenmechanisch beobachtet man hingegen, daß sich ein anfänglich im Impulsraum lokalisiertes Wellenpaket für irrationale  $\hbar$  zunächst diffusiv verhält, nach einiger Zeit aber Lokalisierung eintritt und  $M(t)$  nicht mehr anwächst<sup>1</sup>. Ein

---

<sup>1</sup>Nähme man ein rationales  $\hbar$ , erhielte man wegen der damit verbundenen Periodizität des Systems ballistische Ausbreitung sobald die Wellenfunktion die Ränder einer Einheitszelle erreicht.



**Abbildung 4.1:** Beispiel für dynamische Lokalisierung in der Standardabbildung ( $K = 10$ ). Gezeigt ist die Impulsvarianz  $M(t)$  für ein Bündel klassischer Trajektorien (gestrichelt) und für ein quantenmechanisches Wellenpaket ( $\hbar \approx 1/150$ ). Die Quantenmechanik weicht für große Zeiten vom klassisch diffusiven Verhalten  $M(t) = Dt$  ab und sättigt. Ebenfalls gezeigt ist das zugehörige exponentiell lokalisierte Wellenpaket zur Zeit  $t = 500$ .

Beispiel für solch eine *dynamische Lokalisierung* ist in Abb. 4.1 gezeigt.

Dieses Verhalten läßt sich mit Hilfe der sog. Maryland-Konstruktion [18, 80] verstehen. Projiziert man die Eigenzustände  $|\varphi\rangle$  des Zeitentwicklungsoperators  $\mathcal{U}$  mit Quasienergie  $\omega$  (vgl. Glg. 2.23 in Kap. 2.2.3) auf die Eigenbasis des kinetischen Operators  $T(p)$ , so erhält man

$$\epsilon_m \varphi_m + \sum_{n \neq 0} v_n \varphi_{m+n} = -v_0 \varphi_m, \quad (4.1)$$

wobei  $\epsilon_m = \tan(\omega - 2\pi^2 \hbar^2 m^2)$  ist, und  $v_n$  die Fourierkoeffizienten von  $-\tan(V(q)/(2\hbar))$  in Bezug auf die Impuls-Eigenbasis bezeichnet. Die Form von (4.1) ist typisch für sog. *Tight-Binding Modelle* mit Gitterplätzen  $m$ , on-site Potential  $\epsilon_m$ , hopping-Termen  $v_n$  zum  $n$ -ten Nachbargitterplatz und Energieeigenwert  $-v_0$ . Die Tight-Binding-Approximation wird in der Festkörperphysik häufig genutzt um das Verhalten von einzelnen, stark ans Atomgitter gebundenen Elektronen in isolierten Orbits zu beschreiben. Ein weiteres Anwendungsgebiet ist die Modellierung (quasi-) eindimensionaler ungeordneter Systeme, deren Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung durch

$$\mathcal{H} = \sum_m \epsilon_m a_m^+ a_m + \sum_{n \neq m} v_n a_{m+n}^+ a_m \quad (4.2)$$

gegeben ist. Die zugehörige Schrödingergleichung auf dem Gitter nimmt dann komponentenweise die Struktur (4.1) an. Das on-site Potential  $\epsilon_m$  ist in solchen Fällen eine Sequenz

von Zufallszahlen und man erhält aus Glg. (4.2) die sog. Anderson-Modelle [17] mit exponentiell lokalisierten Eigenzuständen. Die Lokalisierung ist dabei ein genuin quantenmechanischer Effekt, da solche Systeme klassisch diffusiv sind. Er beruht im wesentlichen auf Interferenzeffekten, die durch die unordnungsinduzierte Rückstreuung hervorgerufen werden. Das einfachste Anderson-Modell mit hopping-Termen nur zu nächsten Nachbarn wird in Kapitel 5 ausführlicher diskutiert, weshalb auf eine detaillierte Beschreibung der Anderson-Modelle an dieser Stelle verzichtet wird. Obwohl der Standardabbildung mit ihrem voll chaotischen Phasenraum keineswegs ein echtes Zufallspotential zugrunde liegt, wie es die Anderson-Modelle erfordern, führt die freie Phasenentwicklung zwischen zwei Kicks bei irrationalen  $\hbar$  zu einem pseudo-zufälligen on-site Potential. Damit greifen approximativ wieder die Argumente der Anderson-Lokalisierung und die dynamische Lokalisierung wird somit verständlich.

Eine wichtige Eigenschaft der Tight-Binding-Glg. (4.1) ist die Kopplung weniger nächstbenachbarter Gitterplätze, was dem Hamilton-Matrix eine Bandstruktur verleiht. Tatsächlich ist die quantisierte Standardabbildung in Impulsdarstellung eine solche Bandmatrix, in der alle Matrixelemente mit einem größeren Abstand als  $b \approx K/(2\pi^2\hbar)$  von der Hauptdiagonalen näherungsweise vernachlässigbar sind. Diese Gestalt führt direkt auf ein weiteres RMT-Ensemble: Die Wigner-Bandzufallsmatrizen (WBRM), die wie ihre voll besetzten Analoga GOE/GUE definiert sind, jedoch statt voller Besetzung eine Bandstruktur aufweisen. Sie sind analytisch weit weniger zugänglich als vollbesetzte GOE/GUE-Matrizen, weshalb sie erst mit Einzug verbesserter Computer wieder eine größere Beachtung fanden. Auch sie zeigen dynamische Lokalisierung und sind somit abstrakte Modelle voll chaotischer gekickter Systeme. Weiterhin dienen sie als Modelle für ungeordnete quasi-eindimensionale (quasi-1D) Systeme (z.B. dünne Drähte mit vielen Defekten), was im folgenden von großer Bedeutung sein wird. Die WBRM-Analoga zu GOE, GUE seien mit BGOE bzw. BGUE bezeichnet. Im folgenden wird die zentrale Frage sein, wie sich die dynamische Lokalisierung in gekickten Abbildungen sowie dem WBRM-Ensemble bei zunehmender Brechung der Zeitumkehrinvarianz verändert. Die Grenzfälle erhaltener bzw. vollständig gebrochener Zeitumkehrinvarianz sind dabei in letzterem Modell gerade durch die reinen BGOE- bzw. BGUE-Matrizen gegeben. Zunächst sollen aber einige Skalierungseigenschaften der Standardabbildung zitiert und mit analogen Größen des WBRM-Ensembles verglichen werden.

### 4.1.1 Standardabbildung und Bandzufallsmatrizen

Für die Standardabbildung, deren dynamische Lokalisierung im Impulsraum über die Maryland-Konstruktion verständlich wird, fanden sich folgende Skalierungsregeln [81]:

$$b \approx K/(2\pi^2\hbar) \quad t_D = b^2/4 \quad D \sim b^2 \quad l_\infty \sim b^2 \quad (4.3)$$

Dabei ist  $b$  die oben bereits erwähnte Bandbreite der Matrix des Zeitentwicklungsoperators in Impulsdarstellung, außerhalb derer alle Einträge approximativ Null sind. Die diffusive Zeitskala  $t_D$  bezeichnet die Zeit, nach der das lineare Anwachsen der Varianz gemäß

$M(t) = Dt$  in eine approximative Sättigung übergegangen ist (vgl. Abb. 4.1). Die Lokalisierungslänge  $l_\infty$  des dynamisch lokalisierten Wellenpakets im Limes  $t \rightarrow \infty$  ist dabei die charakteristische Länge der exponentiellen Einhüllenden der tatsächlichen Wellenfunktion. Analoge Größen fand man auch für das WBRM-Ensemble [82, 83]:

$$l_\infty \sim b^2 \quad R_0 \sim b \quad t_D \sim b^2/R_0 \quad D \sim b^2 R_0, \quad (4.4)$$

wobei  $R_0$  den Radius der für Zufallsmatrizen typischen halbkreisförmigen Zustandsdichte angibt [38, 83]. Das Auftauchen von  $R_0$  in den Skalierungsrelationen von  $t_D$  und  $D$  ist der typische Fall, denn im Gegensatz zu den Quasienergien des Zeitentwicklungsoperators, die im Intervall  $[0, 2\pi]$  gleichverteilt sind, zeigen die reellen Energien hamiltonscher Systeme keineswegs eine Gleichverteilung.

Wie in [82, 83] numerisch für das BGOE-Ensemble gezeigt wurde, folgen die asymptotischen Einhüllenden der lokalisierten Wellenpakete  $\psi(n, t)$  ( $n$  bezeichnet die Gitterplätze) für alle Bandbreiten  $b$  der folgenden Skalierungsrelation

$$f_s(x) = b^2 f_s(n) \quad \text{mit} \quad x = \frac{n}{b^2}, \quad f_s(x) = \langle \lim_{t \rightarrow \infty} |\psi(n, t)|^2 \rangle, \quad (4.5)$$

wobei  $\langle \dots \rangle$  für eine Mittelung über verschiedene Realisierungen der Unordnung steht. Ferner wurde gezeigt, daß die Form von  $f_s(x)$  der von Gogolin analytisch abgeleiteten Form [84]

$$f_s(x) = \frac{\pi^2}{16l_\infty} \int_0^\infty \eta \sinh(\pi\eta) \frac{(1 + \eta^2)^2}{(1 + \cosh(\pi\eta))^2} \exp\left(-\frac{1 + \eta^2}{4l_\infty} |x|\right) d\eta \quad (4.6)$$

entspricht<sup>2</sup>. Später wurde von Zhirov analytisch gezeigt, daß dieser Ausdruck nicht nur für BGOE, sondern auch im Falle stark gebrochener Zeitumkehrinvarianz (BGUE) gültig ist [85]. Der funktionale Verlauf von (4.6) sagt voraus, daß man im Zentrum des Wellenpakets eine Lokalisierungslänge findet, die um einen Faktor 4 kleiner ist, als in den weiter entfernten Bereichen, denn in den Grenzfällen kann man (4.6) folgendermaßen approximieren:

$$f_s(x) \approx \begin{cases} \exp(|x|/l_\infty) & |x| \leq l_\infty \\ |x|^{-3/2} \exp(|x|/(4l_\infty)) & |x| \gg 4l_\infty \end{cases}. \quad (4.7)$$

In [83] wurde weiterhin gezeigt, daß die Fluktuationen der asymptotischen Wellenpakete der BGOE um die Einhüllende (4.6) lognormal-verteilt sind, und daß die Varianz  $M(b, t)$  des Wellenpakets zu allen Zeiten  $t$  und für alle Bandbreiten  $b$  der Skalierungsrelation

$$M(b, t) = b^2 \tilde{M}(t/b^{3/2}) \quad (4.8)$$

folgt.

---

<sup>2</sup>Ursprünglich wurde dieses Ergebnis für eindimensionale Systeme abgeleitet und  $l_\infty$  bezeichnete die mittlere freie Weglänge.

## 4.2 Ungeordnete quasi-eindimensionale Systeme mit Magnetfeld

Das Interesse an quasi-eindimensionalen (quasi-1D) Systemen hat in den letzten Jahren stark zugenommen, da es im Zuge der fortschreitenden Nanostrukturierung möglich wurde, sehr dünne Drähte als experimentelle Realisierung solcher Systeme zu untersuchen. Während theoretisch und experimentell bereits große Fortschritte im Verständnis der quasi-1D Systeme in den Extremen erhaltener bzw. voll gebrochener Zeitumkehrinvarianz (T-Invarianz) zu verzeichnen waren, ist für den Übergangsbereich mit schwach gebrochener T-Invarianz bislang fast nichts bekannt. Die einzigen bisherigen Ergebnisse beruhen auf einem heuristischen Zugang von Bouchaud [86], einer semiklassischen Analyse von Imry und Lerner [87], sowie einer Untersuchung mit Hilfe von Transfermatrizen [24]. Das Hauptresultat dieser Arbeiten ist eine Verdopplung der Lokalisierungslänge  $l_\infty$  bei vollständig gebrochener Zeitumkehrinvarianz als Konsequenz der Zerstörung des Effekts der schwachen Lokalisierung, wobei eine sigmoide Interpolation zwischen den Grenzfällen angenommen wurde. Die Vorhersage einer Verdopplung der Lokalisierungslänge wurde jüngst in sub-mikron dünnen Drähten aus dotiertem GaAs bestätigt [22, 23]: Für ansteigende Magnetfelder berichten die Autoren von einer kontinuierlichen Abnahme der Aktivierungsenergie, die bei der Hälfte des feldfreien Wertes sättigt.

Diesem Experiment folgte kürzlich die erste rein analytische Behandlung des Übergangs von erhaltener zu voll gebrochener Zeitumkehrsymmetrie [19], was bislang nur störungstheoretisch möglich schien. In dieser Arbeit zeigen Kolesnikov und Efetov mit Hilfe der Supersymmetrie, daß jedes noch so schwache Magnetfeld zu einer Verdopplung der Lokalisierungslänge in Bereichen weit weg vom Zentrum der Wellenfunktion führt. Während die Wellenfunktion in der Nähe des Zentrums nach wie vor mit der charakteristischen Länge  $l_{\text{BGOE}}$  abfällt, sollten die weiter außen liegenden Schwänze mit  $l_{\text{BGUE}} = 2l_{\text{BGOE}}$  abklingen. Sie zeigen dies anhand eines analytischen Ausdrucks für den folgenden Dichte-Dichte-Korrelator bei fester Energie  $E$  und schwach gebrochener T-Invarianz

$$p_\infty(r) = \left\langle \sum_\alpha |\psi_\alpha(0)|^2 |\psi_\alpha(r)|^2 \delta(H - E) \right\rangle \quad (4.9)$$

$$\stackrel{X \ll 1}{\cong} a \frac{\sqrt{l_{\text{BGOE}}}}{r^{3/2}} \left[ \exp\left(-\frac{r}{4l_{\text{BGOE}}}\right) + bX^2 \ln^2(X) \exp\left(-\frac{r}{4l_{\text{BGUE}}}\right) \right]. \quad (4.10)$$

Dabei bezeichnet  $r$  die longitudinale Position innerhalb des dünnen Drahtes und  $\langle \dots \rangle$  die Mittelung über viele Realisierungen der Unordnung. Der analytische Ausdruck (4.10) zeigt neben der offensichtlichen Korrespondenz des ersten Terms mit Glg. (4.7) einen zweiten Term mit verdoppelter Lokalisierungslänge  $l_{\text{BGUE}} = 2l_{\text{BGOE}}$  für  $X \ll 1$ , wobei  $X \sim \Phi/\Phi_0$  die relative Stärke des Magnetfeldes bezeichnet und  $a, b$  Konstanten der Größenordnung Eins sind. Für  $X \approx 1$  ist der magnetische Fluß  $\Phi$  durch ein Gebiet mit der typischen Ausdehnung einer Lokalisierungslänge von der Größenordnung eines

elementaren Flußquants  $\Phi_0 = h/e$ , und die Zeitumkehrinvarianz ist stark gebrochen. Durch Integration über die Energie geht dieser Korrelator in das asymptotische Wellenpaket  $f_s(r) = \lim_{t \rightarrow \infty} |\psi(r, t)|^2$  über [85], das in den Grenzfällen erhaltener bzw. voll gebrochener Zeitumkehrsymmetrie gerade durch die Gogolin-Funktion (4.6) beschrieben wird.

Die Vorhersage, daß bereits sehr schwache Magnetfelder zu einer Verdopplung der asymptotischen Lokalisierungslänge führen, wurde nachfolgend von Schomerus und Beenakker numerisch untersucht [24]. Mit Hilfe der Borland-Vermutung<sup>3</sup> [88] und des Transfermatrizenansatzes zeigten sie, daß die asymptotische Form des zeitentwickelten Wellenpakets, d.h. der über die Energie integrierte Korrelator, *keine* zwei Lokalisierungslängen zeigt, sondern daß man eine sigmoid zwischen den Grenzfällen interpolierende Funktion findet. Die Untersuchung ließ allerdings einige Lücken, denn folgende Punkte blieben unbeantwortet, was auch in den Referenzen [19, 20, 24] hervorgehoben wird:

1. Ist die Borland-Vermutung in diesem Kontext anwendbar?

Die Supersymmetrie-Rechnungen ziehen ein geschlossenes System heran, wohingegen man bei Anwendung der Borland-Vermutung per definitionem ein offenes System betrachtet. Wie in Kap. 3.3 gesehen, kann die Öffnung eines Systems zu nichttrivialen Effekten führen, so daß in [24] ggf. die falsche Numerik zur eigentlichen Fragestellung gemacht wurde. Dieser Punkt wird insbesondere in [20, 21] hervorgehoben, wo die Autoren zeigen, daß die Öffnung des Systems zu spektralen Veränderungen führt, aufgrund derer das Auftreten der zweiten Lokalisierungslänge u.U. nicht beobachtbar ist.

2. Sorgen seltene Eigenzustände, die mit der Transfermatrizenmethode weggemittelt werden, für das Auftreten zweier Lokalisierungslängen?

Im Transfermatrizenansatz der Ref. [24] berechnet man die Lokalisierungslänge über das Ensemblemittel  $\langle \ln(|\psi(r, t \rightarrow \infty)|^2) \rangle$ , was seltene Realisierungen der Unordnung ausmittelt, wohingegen sie in  $\ln(\langle |\psi(r, t \rightarrow \infty)|^2 \rangle)$  Beachtung finden.

3. Gilt die negative Aussage auch für den eigentlichen Korrelator?

Da in Ref. [24] das asymptotische Wellenpaket, d.h. der über die Energie integrierte Korrelator, betrachtet wurde, ist ad hoc nicht klar, ob die Aussage für den Korrelator nicht vielleicht doch stimmen.

In den folgenden beiden Kapiteln werden diese Punkte eindeutig zu Ungunsten der supersymmetrischen Vorhersage beantwortet und eine numerisch untermauerte Skalierungstheorie für den Übergang bei Brechung der T-Invarianz aufgestellt. Dazu sollen zunächst einige qualitative Untersuchungen an der Standardabbildung unternommen werden, bevor eine detaillierte Untersuchung am eher festkörperphysikalisch motivierten WBRM-Ensemble erfolgt.

---

<sup>3</sup>Die Borland-Vermutung besagt, daß die Lokalisierungslänge eines diffusiven Systems durch das Inverse des größten Lyapunov-Exponenten der zugehörigen Transfermatrix gegeben ist (siehe auch Kap. 5.1).

### 4.2.1 Gebrochene Zeitumkehrinvarianz in der Standardabbildung

Um die Zeitumkehrinvarianz geklickter Systeme zu brechen, d.h. das Pendant zu einem Magnetfeld einzuführen, ist es essentiell, zunächst die Symmetrien der jeweiligen Abbildung zu betrachten. Im Fall der Standardabbildung findet man klassisch *zwei* unabhängige antikanonische Symmetrien, die in der Quantenmechanik Anlaß zu zwei antiunitären Symmetrien  $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$  geben. Für den Zeitentwicklungsoperator  $\mathcal{U}$  gilt daher  $\mathcal{S}_j \mathcal{U} \mathcal{S}_j = \mathcal{U}^{-1}$  mit  $j = 1, 2$ . Während  $\mathcal{S}_1$  die Invarianz unter der Transformation  $q \rightarrow q, p \rightarrow -p$ , bzw. quantenmechanisch die Konjugation in Impulsdarstellung ( $\mathcal{S}_1 : \langle k | \psi \rangle \mapsto \langle \psi | k \rangle$ ) beschreibt, gibt  $\mathcal{S}_2$  mit  $q \rightarrow 1 - q, p \rightarrow p$  das zugehörige Pendant in Ortsdarstellung an ( $\mathcal{S}_2 : \langle n | \psi \rangle \mapsto \langle \psi | n \rangle$ ). Die Kombination  $\mathcal{S}_1 \mathcal{S}_2$  ist eine unitäre Symmetrie, so daß beide Symmetrien unter  $\mathcal{U}$  erhalten bleiben. Um nun generell die Zeitumkehrinvarianz der Standardabbildung zu brechen, müssen *beide* Symmetrien  $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$  gebrochen werden [89]. Wird dies nicht getan, führt die verbleibende Symmetrie zu starken Tunneleffekten zwischen sog. Mott-Zuständen, d.h. zufällig nahezu entarteten Eigenzuständen, wie sie in ähnlicher Stärke bei gänzlicher Erhaltung aller Symmetrien zu beobachten sind [89]. Bei voll gebrochenen Symmetrien sind solche Tunneleffekte dagegen stark unterdrückt. Um die Symmetrien  $\mathcal{S}_1$  und  $\mathcal{S}_2$  zu brechen, hat sich folgende Modifikation der Standardabbildung als sinnvoll erwiesen [89]

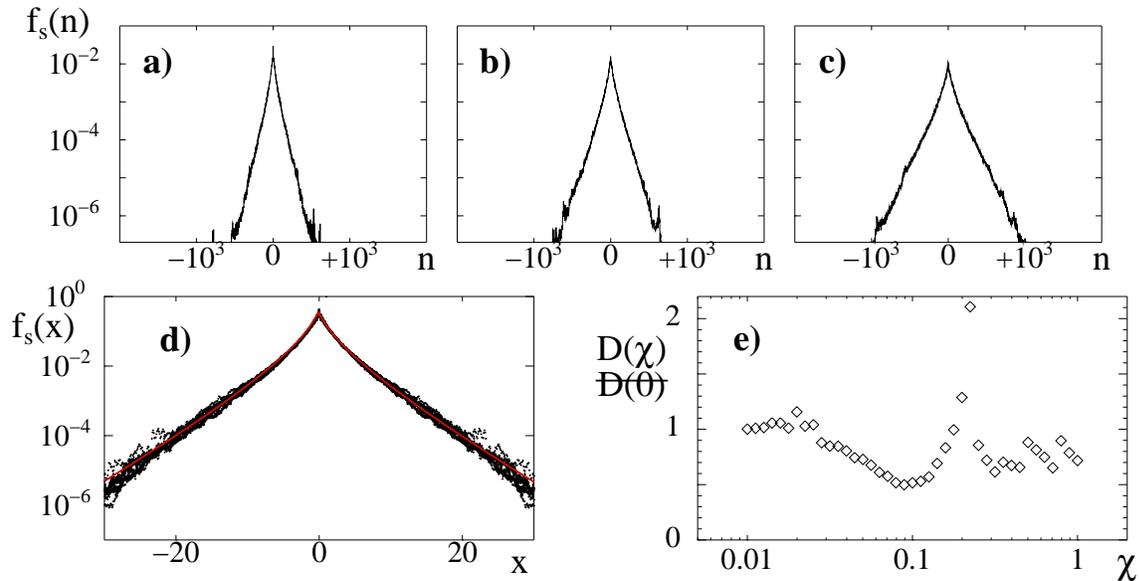
$$V(q) = \cos(2\pi q) \cos\left(\frac{\pi\chi}{2}\right) + \frac{1}{2} \sin(4\pi q) \sin\left(\frac{\pi\chi}{2}\right) \quad T(p) = \frac{p^2}{2} + \varphi p, \quad (4.11)$$

die für  $\chi, \varphi = 0$  wieder in die ursprüngliche Standardabbildung übergeht. Das Lokalisierungsverhalten bei Brechung der T-Invarianz kann mit dieser Abbildung allgemein für  $\varphi \neq 0$  und  $\chi \in [0, 1[$  untersucht werden, wobei  $\chi = 0$  und  $\chi \approx 0.1$  dem Grenzfall erhaltener bzw. voll gebrochener Zeitumkehrinvarianz entspricht. Eine ähnliche Abbildung wurde bereits in Ref. [90] untersucht, jedoch unterließen die Autoren die Einführung des Parameters  $\varphi$  und brachen so nur eine der beiden Symmetrien.

In Abb. 4.2a-c sind einige beispielhafte Profile  $f_s(n)$  der modifizierten Standardabbildung für  $\varphi = (\ln \pi - 1)/\pi$  und verschiedene  $\chi$  gezeigt, die eine kontinuierlich anwachsende Lokalisierungslänge nahelegen. Aufgrund der starken Fluktuationen ist es dabei nötig, viele Wellenpakete zu leicht unterschiedlichen  $\hbar$  zu superponieren<sup>4</sup>, um die exponentielle Einhüllende  $f_s(n)$  des asymptotischen Wellenpakets gut zu erkennen. Tatsächlich lassen sich alle so berechneten Profile  $f_s(n)$  sehr gut mit Glg. (4.6) beschreiben, was eine *einparametrische* Skalierung anzeigt, die im Widerspruch zu den supersymmetrischen Vorhersagen steht. Zur Unterstützung dieser Aussage sind in Abb. 4.2d einige Wellenpakete mit verschiedenen  $\chi \in [0, 1[$  unter Nutzung der Skalierungsannahme

$$f_s(x) = l_\infty(\chi) f_s(n) \quad x = n/l_\infty(\chi) \quad (4.12)$$

<sup>4</sup>Eine Mittelung über unterschiedliche Startpositionen des Anfangswellenpakets ist mit Vorsicht zu verwenden, da die Variation der Anfangspositionen mehrere Lokalisierungslängen betragen sollte, um Korrelationen auszuschließen.



**Abbildung 4.2:** Beispiele für das gemittelte asymptotische Wellenpaket  $f_s(n)$  der modifizierten Standardabbildung ( $K = 20$ ,  $\hbar \approx 0.046$ ,  $t = 10^4$ ) für **a)**  $\chi = 0$ , **b)**  $\chi = 0.03$ , **c)**  $\chi = 0.95$ . **d)** Superposition einiger asymptotischer Wellenpakete für verschiedene  $\chi \in [0, 1[$  mit der Skalierungsannahme (4.12). Die analytischen Kurve (4.6) ist farbig dargestellt. **e)** Das Verhältnis der klassischen Diffusionskoeffizienten  $D(\chi)/D(\chi = 0)$  für  $K = 20$  zeigt starke Fluktuationen, d.h.  $l_\infty(\chi)$  verändert sich nicht nur durch die Brechung der T-Invarianz sondern auch durch Veränderungen des klassischen Phasenraums.

dem Verlauf von Glg. (4.6) superponiert, wobei die Lokalisierungslänge  $l_\infty(\chi)$  als Fit-Parameter fungiert. Die numerischen Daten zeigen eine hervorragende Übereinstimmung mit dem analytischen Ausdruck.

Prinzipiell ist es möglich durch diese Skalierung alle Lokalisierungslängen  $l_\infty(\chi)$  zu bestimmen und so das Verhältnis  $\beta(\chi) = l_\infty(\chi)/l_\infty(\chi = 0)$  zu erhalten, das einen kontinuierlichen Übergang  $\beta(\chi) \rightarrow 2$  verdeutlichen würde. Die Veränderung von  $\chi$  führt jedoch zu modifizierten Potentialen und somit zu unterschiedlichen Phasenräumen. Meist bleibt der Phasenraum zwar voll chaotisch und strukturlos, für  $K = 20$ ,  $\chi \approx 0.2$  tauchen aber beispielsweise Beschleunigermoden auf. Selbst wenn der Phasenraum voll chaotisch bleibt, kann sich dennoch die klassische Diffusionskonstante  $D(\chi)$  drastisch ändern (Abb. 4.2e) und somit zu stark veränderten Lokalisierungslängen führen. Tatsächlich müßte man daher die veränderte klassische Dynamik aus dem Verhältnis  $\beta(\chi)$  extrahieren, um einen rein quantenmechanisch erzeugten kontinuierlichen Übergang  $\beta(\chi) \rightarrow 2$  beobachten zu können. In Anbetracht dieser Schwierigkeit soll die Brechung der T-Invarianz im folgenden detailliert am WBRM-Ensemble untersucht werden, das als Zufallsmatrizen-Ensemble keine solchen Unannehmlichkeiten bereitet und ferner konzeptuell näher an ungeordneten Systemen liegt als die pseudo-zufälligen chaotischen Abbildungen.

### 4.2.2 WBRM-Ensemble mit gebrochener Zeitumkehrinvarianz

Der übliche theoretische Zugang für ungeordnete quasi-1D Systeme ist die Modellierung mit Hilfe des WBRM-Ensembles, der zu folgender Tight-Binding-Gleichung führt<sup>5</sup>:

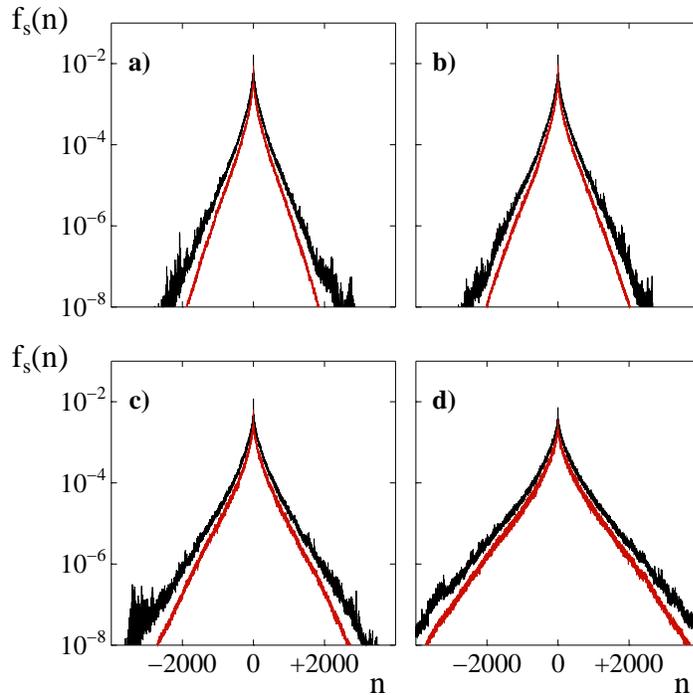
$$i \frac{d\psi_n(t)}{dt} = \sum_{m=n-b}^{n+b} H_{nm} \psi_n(t) . \quad (4.13)$$

Dabei ist  $H_{nm} = S_{nm} + i\alpha A_{nm}$  eine komplexe hermitesche Bandmatrix der Breite  $b$ , die aus einer reellen symmetrischen Matrix  $S_{nm}$  und einer reellen antisymmetrischen Matrix  $A_{nm}$  zusammengesetzt ist. Die Einträge der beiden Matrizen sind unabhängige, gaußverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert Null und Varianz  $v_{nm}^2 = 1 + \delta_{nm}$ , wobei natürlich die Diagonale von  $A_{nm}$  exakt Null ist. Die Bandbreite definiert gerade die langreichweitige Kopplung zwischen Gitterpunkten mit einer Entfernung  $|n-m| \leq b$  bzw. die Anzahl transversaler Moden in einem dünnen Draht. Der Symmetriebrechungsparameter  $\alpha$  wichtet den imaginären antisymmetrischen Anteil der Hamilton-Matrix und führt zum Übergang BGOE  $\rightarrow$  BGUE. Formal kann  $\alpha$  wie schon  $X$  in Glg. (4.10) mit dem relativen magnetischen Fluß in Verbindung gebracht werden [91]. Ist  $k$  eine typische transversale Länge des quasi-1D Drahtes (z.B. Radius), dann gibt  $\Phi = kBl_\infty$  den magnetischen Fluß durch die Fläche eines Drahtsegments mit longitudinaler Ausdehnung einer Lokalisierungslänge  $l_\infty$  an. Der Quotient aus diesem Fluß und dem elementaren Flußquantum  $\Phi_0 = h/e$  ist proportional zu  $\alpha$ , so daß man für  $\alpha = 0$  und  $\alpha \approx 1$  den BGOE- bzw. BGUE-Limes erhält.

Wie schon im Fall der Standardabbildung soll zunächst die asymptotische Form eines Wellenpakets, d.h. der über die Energie gemittelte Korrelator (4.10), untersucht werden. Wie sich später zeigen wird, treffen die dabei resultierenden Aussagen über das Verhalten der Lokalisierungslänge auch auf den eigentlichen Korrelator (4.10) zu. Die zeitliche Evolution eines anfänglich scharf lokalisierten Wellenpakets ( $\delta$ -Paket) gemäß der Schrödinger-Gleichung (4.13) wurde numerisch mit Hilfe der Cayley-Form und einem adaptiven Gitter (siehe Anhang B.2) untersucht. In Abb. 4.3 sind einige asymptotische Profile  $f_s(n)$  für  $b = 15$  und verschiedene Werte von  $\alpha \in [0, 1]$  gezeigt, die durch Mittelung über ca. 200 Realisierungen der Unordnung (d.h. Zufallsmatrizen  $H_{nm}$ ) entstanden. Während die äußeren Kurven einem arithmetisch gemittelten Wellenpaket entsprechen, sind die inneren Kurven durch Mittelung der logarithmierten Wellenfunktion (geometrisches Mittel) entstanden. Offensichtlich erhält man in letzterem Fall wesentlich glattere Kurven und eine Lokalisierungslänge, die im Vergleich zur ersten Methode um ca. einen Faktor 2 kleiner ist. Dieses Phänomen ist eine Konsequenz der lognormal-verteilten Fluktuationen von Eigenzuständen und asymptotischem Wellenpaket (Abb. 4.5) um die exponentielle Einhüllende. Bei Verwendung des arithmetischen bzw. geometrischen Mittels zur Bestimmung der Lokalisierungslänge, führt dies zum Auftreten des in der Literatur wohlbekannten Faktors 2 (siehe z.B. [83, 92] für Details).

---

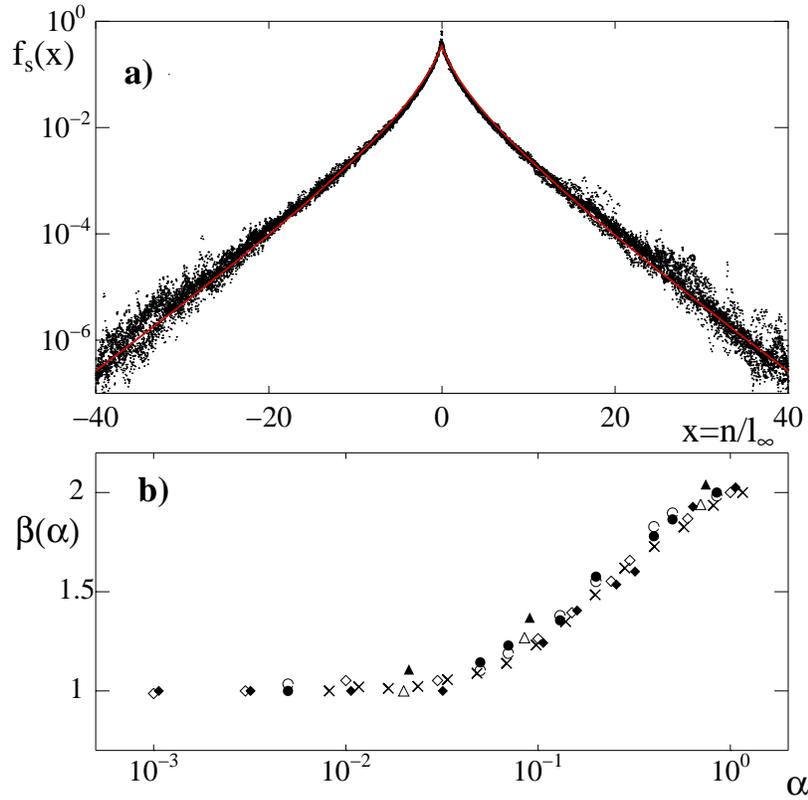
<sup>5</sup>Man beachte die formale Analogie der korrespondierenden stationären Schrödinger-Gleichung zur Maryland-Glg. (4.1).



**Abbildung 4.3:** Asymptotisches Wellenpaket für  $b = 15$  und **a)**  $\alpha = 0$ , **b)**  $\alpha = 0.02$ , **c)**  $\alpha = 0.085$  und **d)**  $\alpha = 0.7$  zu Zeiten  $t = 10^4$ . Gezeigt sind sowohl das arithmetische Mittel  $f_s(n)$  (schwarz) als auch das dazu korrespondierende geometrische Mittel (rot).

Obwohl man den Vorhersagen von Ref. [19–21] zufolge das Auftreten von zwei Lokalisierungslängen erwarten sollte, zeigen *beide* Mittelungen keine Anzeichen für das Auftreten zweier charakteristischen Längenskalen. Dies beantwortet direkt die offenen Punkte 1) und 2) in obiger Liste: Da im vorliegenden Fall ein *geschlossenes* System untersucht wurde, das keinen Gebrauch von der Borland-Vermutung macht, kann es nicht am Versagen dieser Vermutung liegen, wenn die supersymmetrischen Vorhersagen in [24] nicht beobachtet wurden. Weiterhin zeigen *beide* Mittelungen keine Anzeichen für das Auftreten einer zweiten Lokalisierungslänge, d.h. es kann nicht an seltenen Realisierungen der Unordnung bzw. an seltenen Eigenfunktionen liegen, die in beiden Fällen unterschiedlich in Betracht gezogen werden. Mit diesen Aussagen bleibt aber noch ein gewichtiges Argument übrig, das man ins Feld führen kann: In der Supersymmetrie betrachtet man immer den Fall unendlich langer Drähte mit unendlich vielen transversalen Moden, d.h.  $N, b \rightarrow \infty$ ,  $b/N = \text{const.}$ , wohingegen man numerisch aus Gründen der Rechenzeit nur  $N < 5 \cdot 10^4$ ,  $b < 20$  untersuchen kann. Um diesem berechtigten Einwand zu begegnen, soll im folgenden gezeigt werden, daß man  $b$  mit Hilfe einer heuristischen Skalierungstheorie aus den Ergebnissen entfernen kann, so daß obige Aussagen auch im Falle  $N, b \rightarrow \infty$ ,  $b/N = \text{const.}$  gelten. Weiterhin wird sich im Verlauf dieser Skalierungstheorie zeigen, welche Anforderungen eine analytische Beschreibung des Übergangs BGOE  $\rightarrow$  BGUE erfüllen muß.

Wenn man sich die Profile  $f_s(n)$  der Wellenpakete in Abb. 4.3 genauer betrachtet, stellt man fest, daß ihre Form im gesamten Bereich von BGOE  $\rightarrow$  BGUE sehr ähnlich ist. Weiterhin klang in Kap. 4.1.1 schon an, daß der von Gogolin abgeleitete Ausdruck (4.6)



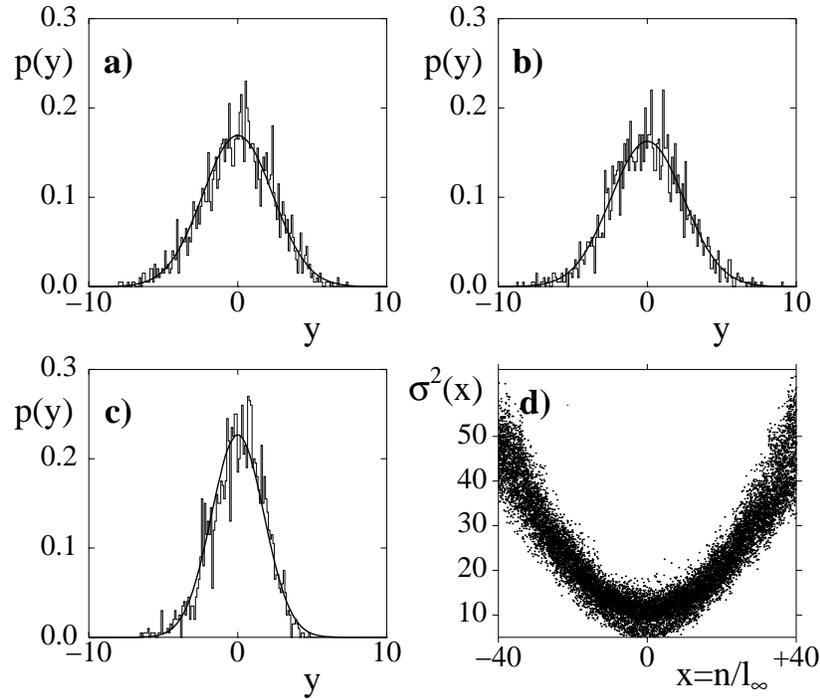
**Abbildung 4.4:** **a)** Asymptotische Wellenpakete  $f_s(x)$  für  $b = 5, 10, 15$  und  $\alpha \in [0, 1]$  skaliert gemäß Glg. (4.14). Die rote Linie ist die theoretische Vorhersage (4.6). **b)** Verhältnis der Lokalisierungslängen  $\beta(\alpha)$  nach Glg. (4.15). Die offenen Symbole sind über Fits von  $f_s(n)$  mit (4.6) bestimmt, die vollen Punkte entstammen einer direkten Bestimmung der charakteristischen Längen des geometrisch gemittelten Wellenpakets. Die Bandbreiten  $b = 5, 10, 15$  sind mit Rauten, Kreisen und Dreiecken bezeichnet, Kreuze geben experimentell gewonnene Daten aus [22, 23] an, deren Magnetfelder  $B$  mit  $B = 2200\alpha$  genähert wurden.

für das stationäre Wellenpaket in den beiden Grenzfällen exakt stimmt. Die naheliegende Idee ist daher, die arithmetisch gemittelten stationären Wellenpakete zu verschiedenen  $\alpha$  mit dem zu (4.12) analogen Skalierungsansatz

$$f_s(x, t \rightarrow \infty) = l_\infty(\alpha) f_s(n, t \rightarrow \infty) \quad \text{mit} \quad x = n/l_\infty(\alpha) \quad (4.14)$$

übereinander zu legen, wobei  $l_\infty(\alpha)$  über einen Fit mit (4.6) ermittelt wird. In Abb. 4.4a ist dies für  $b = 5, 10, 15$  und viele verschiedene  $\alpha \in [0, 1]$  getan. Der gute Überlapp der Daten sowie die hervorragende Übereinstimmung mit dem ebenfalls gezeigten analytischen Ausdruck (4.6), bestätigt die Skalierungsannahme (4.14) in hervorragender Weise. In Abb. 4.4b sind die mit (4.6) ermittelten Lokalisierungslängen gemäß

$$\beta(\alpha) = \frac{l_\infty(\alpha)}{l_\infty(0)} \quad (4.15)$$



**Abbildung 4.5:** Verteilung  $p(y)$  der logarithmischen Fluktuationen einzelner asymptotischer Wellenpakete um die Einhüllende  $f_s(n)$  für  $b=5$  und verschiedene Werte des Symmetriebrechungs-Parameters: **a)**  $\alpha = 0.003$ , **b)**  $\alpha = 0.03$ , **c)**  $\alpha = 0.3$ . In allen drei Fällen entspricht  $p(y)$  näherungsweise einer Gaußverteilung. **d)** Varianz von  $y$  für  $b = 5, 10, 15$  und verschiedene Werte für  $\alpha$ , skaliert mit Glg. (4.17).

gezeigt. Ebenfalls eingetragen sind die charakteristischen Längen, die man durch einen Fit an den exponentiellen Abfall der geometrisch gemittelten asymptotischen Wellenpakete erhält, sowie experimentelle Daten aus [22, 23]. Wie bereits erwartet zeigt sich keine spontane Verdopplung der Lokalisierungslänge wie in [19–21] gefordert, sondern ein kontinuierlicher Übergang von  $\beta = 1$  zu  $\beta = 2$ , der hervorragend mit den experimentellen Daten aus [22, 23] übereinstimmt. Durch die Skalierungen (4.14) und (4.15) ist weiterhin die Bandbreite herauskaliert worden, so daß obige Widersprüche zu den Vorhersagen der Supersymmetrie tatsächlich auch im Limes  $N, b \rightarrow \infty$ ,  $b/N = \text{const.}$  gelten. Eine analytische Theorie des BGOE  $\rightarrow$  BGUE-Übergangs muß demnach einen sigmoiden Übergang der Lokalisierungslängen sowie eine Verallgemeinerung des Gogolin-Ausdrucks (4.6) beinhalten.

Eine weitere Vorhersage der Supersymmetrie bzgl. der Fluktuationen von  $f_s(n)$  um die Einhüllende sind allerdings korrekt. Die Autoren von Ref. [19] leiten für diese Fluktuationen in großem Abstand vom Zentrum des Wellenpakets eine lognormal-Verteilung ab. In Abb. 4.5a-c sind die Verteilungen  $p(y)$  dieser Fluktuationen  $y = \ln(|\psi(n, t \rightarrow \infty)|^2)$  im Abstand  $n = 6b^2 \pm 2$  vom Zentrum des stationären Wellenpakets bei Variation der Unordnung

und für verschiedene  $\alpha$  gezeigt. Sie sind in guter Näherung gaußverteilt, und bestätigen somit die Vorhersage. Ein nützlicher Indikator dieser universellen Fluktuationseigenschaft ist die asymptotische Varianz

$$\sigma^2(n) = \langle (\ln |\psi(n, t \rightarrow \infty)|^2)^2 \rangle - \langle \ln |\psi(n, t \rightarrow \infty)|^2 \rangle^2 \quad (4.16)$$

die in Abb. 4.5d mit der Skalierungsannahme

$$\sigma^2(x) = \frac{\sigma^2(n)}{\sqrt{l_\infty}} \quad x = \frac{n}{l_\infty} \quad (4.17)$$

gezeigt ist. Die gute Übereinstimmung der Kurve für verschiedene  $b$  und  $\alpha$  bestätigt wiederum, daß sich das mittlere asymptotische Profil des Wellenpakets, wie auch alle höheren Momente, die zum Messen der Lokalisierungslänge herangezogen werden können (siehe Kap. 5.1.1), *kontinuierlich* mit  $\alpha$  ändert.

Eine globale Charakterisierung der Diffusion und anschließenden Lokalisierung ist weiterhin durch das zweite Moment des sich ausbreitenden Wellenpakets  $M(t)$  gegeben

$$M(t) = \left\langle \sum_m m^2 |\psi_m(t)|^2 \right\rangle, \quad (4.18)$$

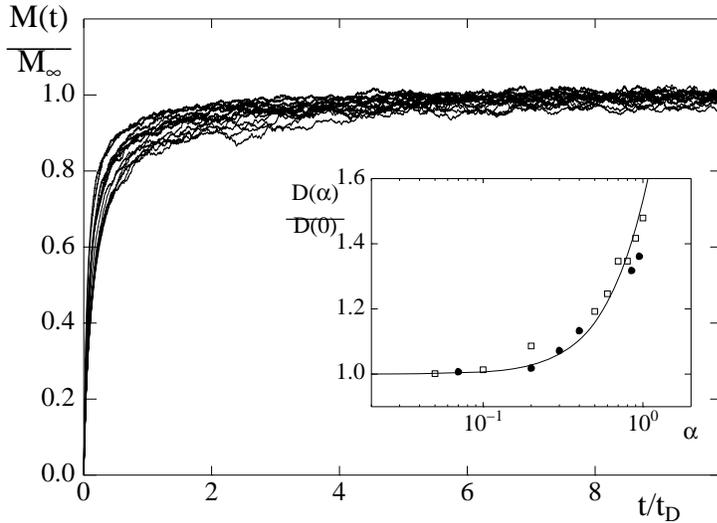
wobei  $\langle \dots \rangle$  wieder die Mittelung über verschiedene Realisierungen der Unordnung symbolisiert. Diese Funktion erreicht aufgrund der Anderson-Lokalisierung zu einer Zeit  $t \approx t_D$  einen Sättigungswert  $M_\infty \sim l_\infty^2(\alpha)$ . Bis zu diesem Zeitpunkt wächst die Varianz in guter Näherung linear  $M(t) = Dt$ , wobei für die Diffusionskonstante aus supersymmetrischen Rechnungen ein Zusammenhang mit dem mittleren Niveauabstand  $\Delta$  bekannt ist [91]:  $D = \Delta l_\infty$ . Es zeigt sich, daß im vorliegenden Modell

$$\frac{\Delta(\alpha)}{\Delta(0)} = \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{2}} \quad \frac{t_D(\alpha)}{t_D(0)} = \frac{\beta(\alpha)}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{2}}} \quad \frac{D(\alpha)}{D(0)} = \beta(\alpha) \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{2}} \quad (4.19)$$

gelten muß, was für die Diffusionskonstante in Abb. 4.6 numerisch verifiziert ist. Die weiteren Skalierungsrelationen implizieren damit ein Skalierungsverhalten der Varianz  $M(t)$  gemäß

$$M(t, \alpha) = M_\infty(\alpha) \tilde{M}(t/t_D(\alpha)), \quad (4.20)$$

was ebenfalls in Abb. 4.6 verifiziert ist. Die weniger gute Skalierung von  $M(t)$  gemäß (4.20) könnte ein Indiz für die Unterdrückung von Mott-Zuständen mit steigendem  $\alpha$  sein. Im Fall  $\alpha = 0$  führen diese zufällig entarteten Zustände zum Auftreten von Wellenfunktionen mit mehr als einem ausgeprägten Maximum, die im Zeitbereich  $t > t_D$  für langreichweitigen Transport verantwortlich sind [83]. Wie in [89] gezeigt wird, sind die Mott-Zustände aber im Falle starker Brechung der Zeitumkehrsymmetrie stark unterdrückt, so daß die



**Abbildung 4.6:** Varianz  $M(t)$  für  $b = 5, 10, 15$  und verschiedene Werte  $\alpha \in [0, 1]$ , skaliert mit Glg. (4.20). Der gute Überlapp der Daten bestätigt die abgeleitete Skalierungsvorhersage. Im Inset ist die Diffusionskonstante  $D(\alpha)$  für  $b = 30, 40$  (Quadrate bzw. Punkte) gezeigt, die der theoretischen Relation (4.19) (volle Linie) folgt.

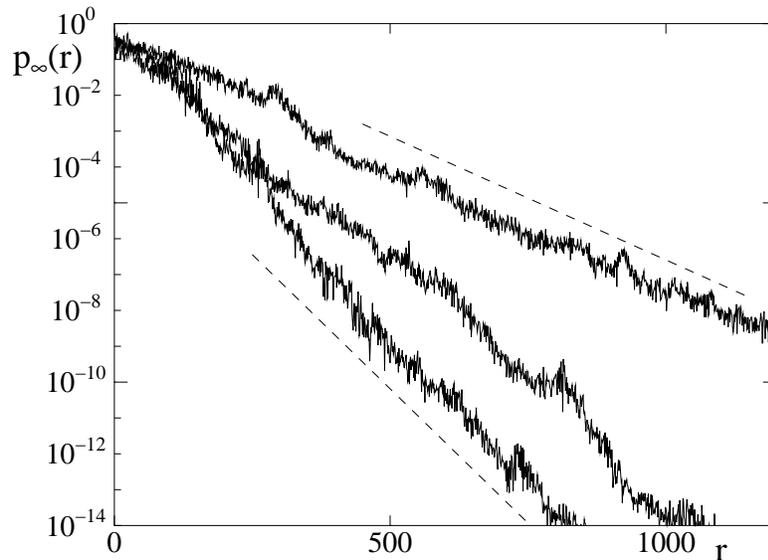
Varianz  $M(t)$  schneller auf den Sättigungswert zukonvergieren sollte. Tatsächlich zeigen die Kurven in Abb. 4.6 mit steigenden  $\alpha$  ein schärferes Abknicken bei  $t \approx t_D$ , so daß nur für  $t \ll t_D$  und  $t \gg t_D$  ein schönes Skalierungsverhalten beobachtbar ist. Eine analytische Theorie des Übergangs von erhaltener zu gebrochener Zeitumkehrinvarianz muß auch diese Skalierungen, sowie die aufgezeigten Abweichungen in Betracht ziehen.

Abschließend soll noch gezeigt werden, daß nicht nur das asymptotische Wellenpaket, sondern auch der echte Korrelator (4.10) keinerlei Anzeichen für das Auftreten zweier Lokalisierungslängen zeigt. Dazu wurden einige Matrizen mit  $b = 5, N = 5000$  für verschiedene  $\alpha$  exakt diagonalisiert und alle Eigenzustände in einem schmalen Energieintervall  $E \in [-0.05, 0.05]$  zur Berechnung des Korrelators (4.10) herangezogen<sup>6</sup>. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.7 gezeigt. Wie erwartet zeigt sich auch hier keine zweite Lokalisierungslänge, was aus der analytischen Verbindung des asymptotischen Wellenpakets und des Korrelators nach Zhirov [85] auch zu erwarten war. Erst für  $\alpha \approx 1$  zeigt sich eine starke, uniforme Vergrößerung der Lokalisierungslänge auf den erwarteten doppelten Wert.

### 4.3 Ausblick

Es bleibt nach den hier vorgestellten Ergebnissen aufzuklären, aus welchem Grund die Unstimmigkeiten der numerischen und experimentellen Untersuchungen mit den Vorhersagen der Supersymmetrie auftauchen. Daß die Fluktuationseigenschaften des asymptotischen Wellenpakets bereits korrekt beschrieben wurden, könnte darauf hinweisen, daß ein modifizierter supersymmetrischer Zugang auch die Form der Einhüllenden nach Glg. (4.6)

<sup>6</sup>Der Radius der halbkreisförmigen Zustandsdichte war  $\approx 2$ , so daß diese Wahl praktisch einer  $\delta$ -Funktion in der Energie entspricht.



**Abbildung 4.7:** Korrelator (4.10) des WBRM-Ensembles ( $b = 5$ ,  $N = 5000$ ) für  $\alpha = 0, 0.1, 1$ , wobei jeweils über ca. 600 Zustände gemittelt wurde. Wie schon für das asymptotische Wellenpaket, findet sich auch hier kein Hinweis auf eine zweite Lokalisierungslänge. Vielmehr beobachtet man eine sigmoide Interpolation zwischen den Extremen, d.h. ein einparametriges Skalenverhalten. Die gestrichelt eingezeichneten Exponentialkurven entsprechen dem BGOE- bzw. BGUE-Grenzfall und unterscheiden sich gerade um einen Faktor 2 in der Lokalisierungslänge.

und damit das kontinuierliche Anwachsen einer einzigen Lokalisierungslänge reproduzieren könnte. Neben dieser zukünftigen analytischen Behandlung quasi-eindimensionaler Systeme bei zunehmender Brechung der Zeitumkehrinvarianz, ist es weiterhin von Interesse, das bislang weitgehend unbekannt Schicksal der Mott-Zustände in diesem Übergangsbereich aufzuklären. Wie bereits im Rahmen der Diskussion um Glg. (4.20) anklang, sorgt das Auftreten dieser Zustände für langreichweitigen Transport und beeinflusst damit direkt die Leitfähigkeit. Angesichts der hier vorgestellten Untersuchungen, liegt die Vermutung eines kontinuierlichen Aussterbens der Mott-Zustände bei zunehmender Brechung der T-Invarianz nahe. Ob diese Vermutung allerdings zutreffend ist, bleibt zu überprüfen.



# Kapitel 5

## Exponentielle und faktorielle Lokalisierung

Nachdem im vorhergehenden Kapitel die sukzessive *Vergrößerung* der Lokalisierungslänge bei Brechung der Zeitumkehrinvarianz im Vordergrund stand, soll es in diesem Kapitel um einen Isolator-Isolator-Übergang, d.h. einer *Verringerung* der Lokalisierungslänge, gehen. Als Modell dient dabei das eindimensionale Anderson Modell mit konstantem elektrischen Feld, in dem man einen Übergang von exponentiell zu faktoriell lokalisierten Eigenzuständen beobachten kann. Im Mittelpunkt der numerischen Untersuchung steht dabei Verifikation der Annahme, daß die bekannte Ähnlichkeit der Eigenzustände von 1D und quasi-1D Systemen *ohne* Feld auf Skalen größer als der Lokalisierungslänge, auch bei der Einführung eines elektrischen Feldes erhalten bleibt [27].

### 5.1 Das 1D-Anderson Modell mit elektrischem Feld

Der Startpunkt für die folgenden Untersuchungen ist das 1D-Anderson Modell mit statischem elektrischem Feld, dessen Schrödinger-Gleichung in der tight-binding Approximation

$$i\frac{d\psi_n(t)}{dt} = (\epsilon_n + neF)\psi_n(t) + V\psi_{n+1}(t) + V\psi_{n-1}(t) \quad (5.1)$$

lautet, wobei  $\psi_n(t)$  die (zeitabhängige) Amplitude der Wellenfunktion auf dem Gitterplatz  $n$  angibt. Weiterhin ist  $e$  die Elektronladung,  $F$  die Stärke des statischen elektrischen Feldes,  $\epsilon_n$  das (Unordnungs-) Potential auf dem Gitterplatz  $n$  und  $V$  die Rate mit der ein Teilchen zum nächstbenachbarten Gitterplatz hüpfte. Im Falle von  $F = 0$  reduziert sich Glg. (5.1) damit auf einen Spezialfall des WBRM-Ensembles. Mit Hilfe der Transformati-

on  $\psi_n(t) = \exp(-iEt)\phi_n$  erhält man aus Glg. (5.1) die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$E\phi_n = (\epsilon_n + neF)\phi_n + V\phi_{n+1} + V\phi_{n-1} \quad (5.2)$$

für die Energieeigenwerte  $E$  und die Eigenzustände  $\phi(E)$  mit dem Gitterindex  $n$ . Die beiden Grenzfälle von Glg. (5.2) sollen wegen ihrer grundsätzlichen Bedeutung im folgenden erläutert werden. Sie lassen sich wie folgt charakterisieren:

1. perfektes Gitter (d.h.  $\epsilon_n = \epsilon, n \in \mathbb{Z}$ ) mit elektrischem Feld ( $F \neq 0$ )
2. Gitter mit Unordnungspotential ( $\epsilon_n$  Zufallszahlen) ohne elektrisches Feld ( $F = 0$ ).

Zunächst sei der erste Fall betrachtet, für den sich beweisen läßt, daß die Eigenzustände  $\phi(E)$  durch sog. Wannier-Stark-Zustände gegeben sind, die einen faktoriellen Abfall [93,94] zeigen, d.h.

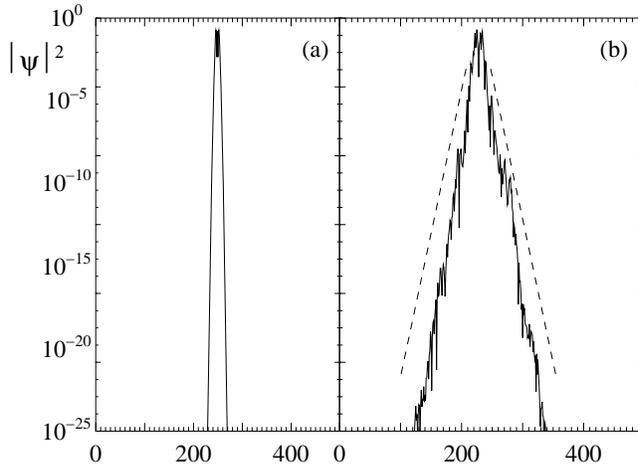
$$\phi_n(E) = J_{m-n}(2/(eF)) \rightarrow \frac{1/(eF)^{|n|}}{|n|!} \quad \text{für } n \rightarrow \pm\infty \quad . \quad (5.3)$$

Dabei ist  $J_n$  die Besselfunktion vom Grade  $n$ . Die Wannier-Stark-Zustände bilden ein vollständiges Orthonormalsystem [95], und ihre Eigenwerte  $meF$  die sog. Wannier-Stark-Leiter [96] mit äquidistanten Energien. Die faktorielle Stark-Lokalisierung, die im Extremfall zur Lokalisierung auf einem Gitterplatz führen kann, wurde mehrfach experimentell in Halbleiter-Übergittern beobachtet [97,98]. Einem einzelnen Wannier-Stark-Zustand kann man aufgrund seiner faktoriellen Lokalisierung, im Gegensatz zu exponentiell lokalisierten Wellenfunktionen, keine natürliche Lokalisierungslänge zuweisen. In der Literatur ist es daher gebräuchlich, durch  $l_{\text{el}} = 1/(eF)$  eine Lokalisierungslänge zu definieren. Der reziproke Zusammenhang von  $l_{\text{el}}$  und  $F$  macht deutlich, daß die Lokalisierungslänge selbst bei kleinen Feldstärken nicht perturbativ zu erhalten ist, obwohl die Störungstheorie in puncto Energieeigenwerten angebracht ist. Ein typischer Wannier-Stark-Zustand ist in Abb. 5.1a gezeigt.

Drückt man die zeitabhängige Wellenfunktion eines Teilchens durch eine Überlagerung der Wannier-Stark-Zustände aus, so erhält man für den Propagator des Teilchens [95]

$$\Psi_n(t) = J_n^2 \left( \frac{4V}{eF} \sin \left( \frac{eFt}{\hbar} \right) \right) \quad . \quad (5.4)$$

Das Argument der Besselfunktion ist eine oszillierende Funktion mit Frequenz  $\omega_B = eF/\hbar$ , was zu den den berühmten Bloch-Oszillationen [99,100] Anlaß gibt. Diese bemerkenswerte Vorhersage, daß perfekte periodische Systeme ohne Störstellen beim Anlegen eines konstanten elektrischen Feldes **keinen** makroskopischen Stromfluss zeigen, erscheint im Hinblick auf das tägliche Leben kontraintuitiv. Trotzdem läßt sich diese Vorhersage für experimentelle Realisierungen perfekter Gitter mit statischem elektrischem Feld bei bei sehr tiefen



**Abbildung 5.1:** Zwei repräsentative Eigenfunktionen des tight binding Modells (5.2). **(a)** Wannier-Stark-Zustand mit faktorieller Lokalisierung ( $eF = 0.5$ ,  $l_{el} = 2$ ) **(b)** Anderson Regime mit exponentieller Lokalisierung ( $W = 5$ ,  $l_{\infty} = 3.4$ ); gestrichelte Linien zeigen die exponentielle Einhüllende mit Lokalisierungslänge  $l_{\infty}/2$ . Die Verminderung um einen Faktor 2 ergibt sich aus der Betrachtung des Absolutquadrats von  $\phi_n \sim \exp(-|n - n_0|/l_{\infty})$ .

Temperaturen, wo die inelastischen Elektron-Phonon-Streuungen vernachlässigbar werden, verifizieren. Semiklassisch gesprochen sind die Bloch-Oszillationen eine Konsequenz der Bragg-Reflexion von Teilchen am Rand der Brillouin-Zone, so daß sich nur stehende Wellen ausbilden, die nicht zum makroskopischen Transport beitragen.

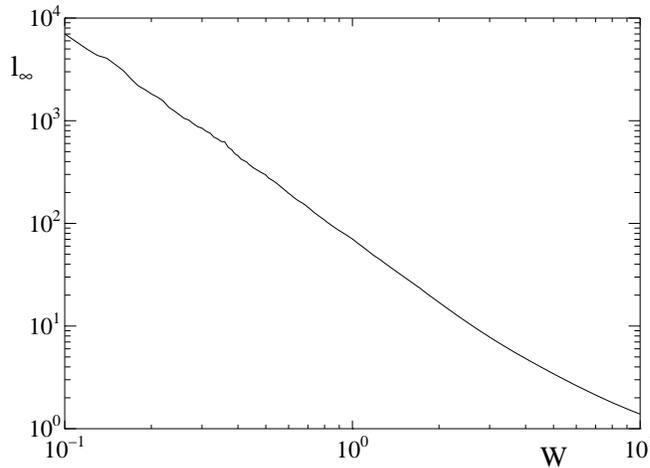
Der zweite Spezialfall in obiger Liste kommt gänzlich ohne elektrisches Feld aus, jedoch ist das Potential ungeordnet. Die  $\epsilon_n$  werden jetzt zufällig und  $\delta$ -korreliert aus einer Verteilung  $p(\epsilon)$  mit Mittelwert Null und Varianz  $\sigma^2$  gezogen. Der Einfachheit halber wird im folgenden eine uniforme Verteilung  $\epsilon_n \in [-W, W]$  gewählt, was dem ursprünglichen Anderson-Modell [17] entspricht, das in den letzten Jahren sehr intensiv untersucht wurde<sup>1</sup>. Für dieses Modell findet man im Falle unendlich ausgedehnter Proben für jedes  $W > 0$ , daß alle Eigenzustände exponentiell lokalisiert sind. Somit läßt sich hier im Gegensatz zu den Wannier-Stark-Zuständen eine wohldefinierte Lokalisierungslänge  $l_{\infty}$  angeben. Die charakteristische Länge des exponentiellen Abfalls ist durch den Lyapunov-Exponenten  $\gamma$  des klassisch diffusiven Systems gegeben und kann mit Hilfe der Transfermatrix-Methode ermittelt werden<sup>2</sup>. Dabei wird das asymptotische Verhalten des Zufallsmatrizenprodukts  $\Pi M_n$  herangezogen, wobei die  $M_n$  definiert sind als

$$\xi_{n+1} = M_n \xi_n; \quad M_n = \begin{pmatrix} v_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad v_n = \frac{E - \epsilon_n}{V} \quad (5.5)$$

mit dem Ortsvektor  $\xi_n = (x_n, x_{n-1})$ . Aus der Eigenschaft von  $M_n$ , benachbarte Gitterpunkte aufeinander abzubilden, erklärt sich der Name Transfermatrix. Der Lyapunov-Exponent, d.h. die inverse Lokalisierungslänge, bestimmt sich asymptotisch aus dem exponentiellen

<sup>1</sup>Oft wird die Verallgemeinerung dieses Anderson-Modells mit Kopplungen zu mehr als nur den nächsten benachbarten Gitterplätzen bzw. veränderten Statistiken  $p(\epsilon)$  ebenfalls als Anderson-Modell bezeichnet, was auch schon in Kap. 4.1 anlang.

<sup>2</sup>Dies ist die in Kap. 4.1 angesprochene Borland-Vermutung [88]).



**Abbildung 5.2:** Veränderung der Lokalisierungslänge  $l_\infty$  mit der Unordnungsstärke  $W$  im 1D Anderson-Modell. Die Werte wurden mit Hilfe der Transfermatrizen-Methode berechnet (siehe Glg. (5.5)).

Abklingen eines Anfangsvektors  $\xi_1$ :

$$l_\infty^{-1} = \gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\ln \left( \prod_{n=1}^N |M_n \xi_n| \right)}{|\xi_1|} . \quad (5.6)$$

Trotz der offensichtlichen Abhängigkeit der Lokalisierungslänge von der Realisierung der Unordnung für endliche  $N$ , existiert für  $N \rightarrow \infty$  ein wohldefinierter Grenzwert  $l_\infty$  [101]. Für die untenstehenden Untersuchungen wurden Proben der Länge  $N = 5 \cdot 10^5$  ( $4 \cdot 10^6$ ) für große (kleine) Werte von  $W$  herangezogen. Die ermittelte Relation  $l_\infty(W)$  ist in Abb. 5.2 gezeigt.

Ausgehend von den beiden erläuterten Spezialfällen kann man im Modell (5.2) das Auftreten zweier charakteristischer Längen  $l_{el}$ ,  $l_\infty$  erwarten. Vor der eigentlichen Untersuchung des Modells, soll aber zunächst im folgenden Abschnitt das notwendige Handwerkszeug beschrieben werden, das aus der Skalierungstheorie ungeordneter Systeme stammt und dort weit verbreitet ist.

### 5.1.1 Skalierungsansatz für Lokalisierungslängen

Das Hauptaugenmerk der unten aufgeführten Untersuchungen liegt auf den Eigenschaften der Eigenzustände, insbesondere ist deren Lokalisierungsgrad von Interesse. Dabei sollen Aussagen sowohl für endliche Systeme als auch für unendlich ausgedehnte Proben gemacht werden. Zunächst ist es problematisch eine Lokalisierungslänge zu definieren, die im endlichen wie im unendlichen System eine wohldefinierte Bedeutung hat, ist doch die Standarddefinition einer Lokalisierungslänge gegeben durch

$$l^{-1} := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |\psi_n| , \quad (5.7)$$

was offensichtlich in endlichen Proben keinen Sinn macht. Im nachfolgenden wird daher auf die Definition multifraktaler Lokalisierungslängen zurückgegriffen, die in der Theorie ungeordneter quasi-1D Systeme eingeführt wurden [26] und in ähnlicher Form schon früher benutzt wurden [102]. Sie haben den Vorteil, daß sie für beliebige Systemgrößen wohldefiniert und numerisch leicht zugänglich sind.

Eine der meistgenutzten Größen ist die entropische Länge, die mit Hilfe der Informationsentropie

$$\mathcal{H} = - \sum_n w_n \ln(w_n) \quad w_n = |\phi_n|^2 \quad \sum_n w_n = 1 \quad (5.8)$$

definiert wird. Dabei ist  $w_n$  die Wahrscheinlichkeitsdichte des gewählten Eigenzustands am Ort  $n$  der gewählten Basis. Im einfachsten Falle einer gleichmäßig verschmierten Wellenfunktion auf einem Gitter der Länge  $N$  gilt  $w_n = 1/N$  und somit  $\mathcal{H} = \ln(N)$ . Man definiert üblicherweise die Lokalisierungslänge als die Anzahl besetzter Gitterpunkte, was im eben genutzten Beispiel  $L = \exp(\mathcal{H}) = N$  impliziert. Um quasi-1D Systeme zu untersuchen normierte man daher die Lokalisierungslänge so, daß sie im Extremfall voll ausgedehnter Eigenzustände gerade die Länge des Systems angab [103]. Dies führte zur Definition der entropische Lokalisierungslänge  $L_1$  als:

$$L_1 = N \exp(\langle \mathcal{H} \rangle - \mathcal{H}_{\text{ref}}) \quad (5.9)$$

Die Klammern  $\langle \dots \rangle$  bedeuten dabei Mittelung über Eigenzustände mit gleicher Struktur und verschiedene Realisierungen des Unordnungspotentials. Der Normierungsfaktor wird über ein Referenzensemble bzw. dessen Entropie  $\mathcal{H}_{\text{ref}}$  festgelegt. Im Falle ungeordneter quasi-1D Systeme war das Referenzensemble gerade die Menge der GOE-Matrizen. Für sie findet man mit Hilfe der Annahme voll ausgedehnter Eigenzustände, deren Komponenten unabhängige gaußverteilte Zufallszahlen sind  $\mathcal{H}_{\text{ref}} \approx \ln(N/2.07)$  [103].

In analoger Art und Weise läßt sich ein ganzer Satz von Lokalisierungslängen  $L_q$  definieren:

$$L_q = N \left( \frac{\langle P_q \rangle}{P_q^{\text{ref}}} \right)^{\frac{1}{1-q}} \quad \text{mit} \quad P_q = \sum_{n=1}^N w_n^q \quad q = 2, 3, \dots \quad (5.10)$$

Der Nenner in diesen Definitionen ist wiederum ein Referenzensemble für vollständig ausge dehnte Zustände. Im Spezialfall  $q = 2$  reduziert sich die Größe  $P_2$  auf das sog. Besetzungszahlverhältnis, das in der Festkörperphysik sehr häufig genutzt wird. Das Referenzensemble der GOE-Matrizen liefert in diesem Falle  $P_2 = 3/N$ . Die durch (5.9),(5.10) definierten Lokalisierungslängen entsprechen einer intuitiven Wahl von Lokalisierungsmaßen und sind in endlichen wie unendlichen Proben wohldefiniert.

Für ungeordnete quasi-1D Systemen in Anwesenheit statischer elektrischer Felder wurde numerisch mit Hilfe des WBRM-Ensembles gezeigt [104,105], daß alle Lokalisierungseigenschaften von Eigenfunktionen durch die folgenden Parameter beschreibbar war:

$$\beta_q^\infty = \frac{L_q}{l_{\text{el}}} \quad \beta_q^N = \frac{L_q}{N} \quad , \quad (5.11)$$

wobei der obere Index  $\infty(N)$  für unendliche (endliche) Systeme steht. Weiterhin wurde gefunden, daß die  $\beta_q^{\infty,N}$  nur von den Verhältnissen der charakteristischen Längen  $l_\infty, l_{el}$  im System abhängen. Für endliche Systeme kommt selbstverständlich eine weitere charakteristische Länge, die Probenlänge  $N$ , hinzu und man fand folgende Skalierungsgesetze [104, 105]:

$$\beta_q^\infty = \beta_q^\infty(\lambda_\infty) \quad \beta_q^N = \beta_q^N(\lambda_\infty, \lambda_N) \quad \text{mit} \quad \lambda_\infty = \frac{l_\infty}{l_{el}} \quad \lambda_N = \frac{l_\infty}{N} . \quad (5.12)$$

Die Hauptfrage im weiteren wird sein, ob sich die Ergebnisse für ungeordnete quasi-1D Systeme mit elektrischem Feld auf 1D Anderson Modelle mit elektrischem Feld übertragen lassen. Diese zunächst trivial anmutende Frage ist keineswegs ad hoc zu beantworten, da jüngste Studien zwar gezeigt haben, daß die Eigenzustände ungeordneter quasi-1D und 1D-Systeme auf Skalen  $> l_\infty$  die gleichen statistischen Eigenschaften haben, auf feineren Skalen aber deutlich unterschiedlich sind [26, 106]. Ob die Ähnlichkeit auf großen Skalen insbesondere beim Anlegen eines starken elektrischen Feldes, das zu faktorieller Lokalisierung führt, erhalten bleibt, ist a priori nicht klar. Man kann also mitnichten von obigen Resultaten schon auf den zu untersuchenden Fall schließen.

Ferner lassen sich die erwähnten quasi-1D Systeme mit Hilfe des WBRM-Ensembles modellieren, das auch Wechselwirkungen zwischen weiter voneinander entfernten Gitterplätzen erlaubt. Das zu beleuchtende System wird dagegen durch eine tridiagonale Matrix beschrieben, die nur Wechselwirkungen zwischen benachbarten Gitterplätzen zuläßt. Die erste nichttriviale Frage, die sich daher stellt, ist diejenige nach dem richtigen Referenzensemble, das in den Definitionen der Lokalisierungslängen auftaucht. Für WBRM-Systeme im Limes verschwindender Unordnung greift man zurück auf die voll besetzten Zufallsmatrizen (GOE), deren ausgedehnte Eigenfunktionen gaußverteilte Einträge haben. Für 1D tight-binding Systeme erhält man aber im Grenzfall verschwindender Unordnung freie Wellen als Lösung, weshalb man nicht GOE als Referenz heranziehen kann [107, 108]. Weiterhin ist a priori nicht klar ob dieser Grenzfall in der Gegenwart eines statischen elektrischen Feldes noch als Referenzensemble dienen kann, denn wie oben erwähnt können die  $L_q$  selbst für schwache elektrische Felder nicht perturbativ behandelt werden. Trotzdem erscheint es sinnvoll die freien Wellen als Referenzensemble zu wählen, was durch die spätere Numerik auch bestätigt wird. Dazu seien an dieser Stelle die Lösungen des perfekten 1D Systems ohne elektrisches Feld kurz referiert:

$$E^{(k)} = 2V \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \quad \phi_n^{(k)} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{nk\pi}{N+1}\right) , \quad (5.13)$$

mit  $k, n = 1, \dots, N$ . Dies führt dann auf

$$\mathcal{H}_{\text{ref}} = \ln(2N) - 1 \quad \text{und} \quad P_2^{\text{ref}} = \frac{3}{2N} . \quad (5.14)$$

## 5.2 Numerische Untersuchung des Modells

In den folgenden beiden Abschnitten werden die Skalierungsgesetze für unendlich ausgedehnte bzw. endliche Systeme untersucht. Neben den oben definierten Lokalisierungslängen  $L_q$  ist dabei auch die Verteilung der quadrierten Komponenten der Eigenzustände von Interesse, die im dritten und letzten Unterabschnitt behandelt wird. Der Einfachheit halber wurde in den numerischen Untersuchungen  $V = 1$  gewählt.

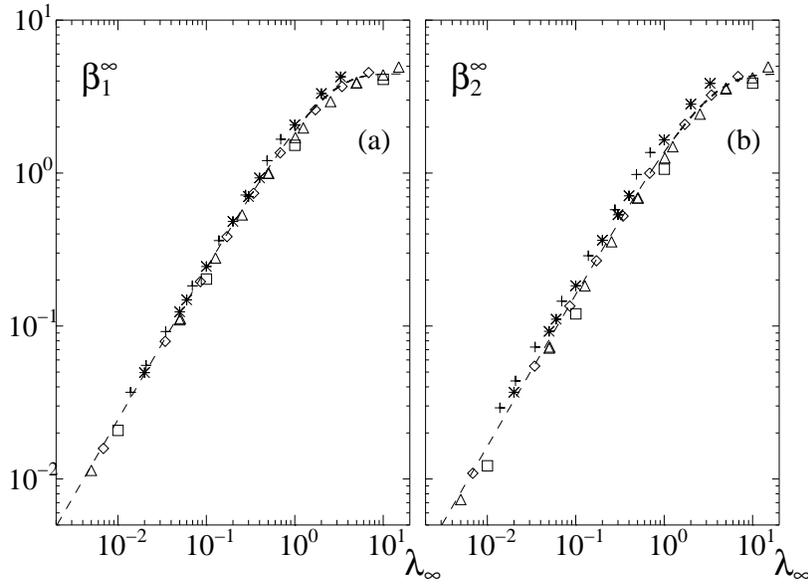
### 5.2.1 Skalierungseigenschaften unendlicher Proben

In diesem Abschnitt soll zunächst das Skalierungsverhalten einer unendlich ausgedehnten Probe untersucht werden, da hier nur zwei relevante Längenskalen auftreten ( $l_\infty, l_{el}$ ). Numerisch kann selbstverständlich kein unendlich ausgedehntes System untersucht werden, jedoch lassen sich die Eigenschaften schon im Falle sehr großer Matrizen mit  $N \gg l_\infty, l_{el}$  herausarbeiten. In Anlehnung an den Fall des WBRM-Ensembles sei angenommen, daß die Lokalisierungslänge mit dem Parameter  $\lambda_\infty$  skaliert. Die auftretenden Spezialfälle  $\lambda_\infty \ll 1$  ( $\lambda_\infty \gg 1$ ) werden von nun an wegen ihrer offensichtlichen Verwandtschaft zu den oben diskutierten Grenzfällen des Modells als Anderson- (Stark-) Regime bezeichnet. Basierend auf den Überlegungen des vorigen Abschnitts kann erwartet werden, daß die  $L_q$  skalieren wie

$$L_q = l_\infty f(\lambda_\infty) \quad \text{mit} \quad f(\lambda_\infty) \simeq \begin{cases} 1 & \lambda_\infty \ll 1 \\ \frac{1}{\lambda_\infty} & \lambda_\infty \gg 1 \end{cases} \quad (5.15)$$

wobei  $\beta_q^\infty = \lambda_\infty f(\lambda_\infty)$  gilt.

Um die Skalierungseigenschaft (5.15) numerisch zu untersuchen, wurden tridiagonale Matrizen vom Rang  $N = 10^4$  diagonalisiert, die sich aus Glg. (5.2) ergeben. Die Feldstärke  $F$  sowie die Unordnung des Potentials wurden so variiert, daß immer  $l_\infty, l_{el} \ll N$  galt. Es sollte an dieser Stelle betont werden, daß sowohl  $L_q$  als auch  $l_\infty$  energieabhängig sind. Aus diesem Grunde wurden nur solche Eigenzustände zur Untersuchung herangezogen, deren Energien in einem schmalen Energiefenster  $E \in [0.95, 1.05]$  lagen. Auf diese Weise ist sichergestellt, daß  $\Delta l_\infty / l_\infty \leq 0.06$  gilt und die Lokalisierungslängen fast nicht mehr von der Energie abhängen. Die einzelnen Werte für die  $\beta_q^\infty$  entstanden durch Mittelung über alle Eigenzustände aus dem oben spezifizierten Energiefenster für verschiedene Realisierungen des Unordnungspotentials. Die Anzahl der Eigenzustände pro Datenpunkt lag bei einigen Hundert. In Abb. 5.3 sind die numerischen Ergebnisse für  $\beta_1^\infty$  und  $\beta_2^\infty$  gezeigt. Die verwendeten unterschiedlichen Werte für die Unordnungsstärke  $W$  sind mit verschiedenen Symbolen bezeichnet. Sie fallen nahezu auf eine Linie, was die Skalierungsvermutung  $\beta_q^\infty = \lambda_\infty f(\lambda_\infty)$  sehr schön bestätigt. Eine detaillierte Untersuchung analoger Größen im WBRM-Ensemble führte zu einer approximativen Formel für  $\beta_q^\infty$  [104], die auch hier als



**Abbildung 5.3:** Skalierung von (a)  $\beta_1^\infty$  (b)  $\beta_2^\infty$  bzgl.  $\lambda_\infty$  in einer (nahezu) unendlich ausgedehnten Probe ( $l_\infty, l_{el} \ll N = 10^4$ ). Die Matrizenensemble zu unterschiedlichen  $W$  bzw.  $l_\infty$  sind mit verschiedenen Symbolen bezeichnet. Ein least squares fit gemäß Glg. (5.16) ist als gestrichelte Linie mit (a)  $a_1^0 = 4.45$ ,  $a_1^1 = 0.55$  bzw. (b)  $a_2^0 = 4.43$ ,  $a_2^1 = 0.37$  eingetragen.

Beschreibung dienen soll:

$$\beta_q^\infty \approx a_q^0 (1 - \exp(-a_q^1 \lambda_\infty)) \quad , \quad (5.16)$$

wobei die Parameter  $a_q^0$ ,  $a_q^1$  mit Hilfe eines least squares fits ermittelt werden müssen. Für die vorliegenden Daten ergab sich dabei  $a_q^0 = 4.45$  ( $4.43$ )  $a_q^1 = 0.55$  ( $0.37$ ) für  $q = 0$  ( $1$ ). Die zu diesen Werten gehörenden Kurven sind in Abb. 5.3 als gestrichelte Linien dargestellt. Das sehr gute Skalierungsverhalten der numerisch gewonnenen Daten wird durch die sehr geringen Abweichungen von den Fits gemäß Glg. (5.16) nochmals nachhaltig unterstrichen. Insbesondere reproduzieren die Datenpunkte das von Glg. (5.16) vorhergesagte Plateau für große  $\lambda_\infty$ .

## 5.2.2 Skalierungseigenschaften endlicher Proben

Den eher akademisch interessanten Untersuchungen zu unendlich ausgedehnten Proben stehen die experimentell relevanten endlichen Proben gegenüber, die in diesem Abschnitt im Zentrum des Interesses stehen. Viele gängige experimentelle Fragestellungen wie z.B. die statistischen Eigenschaften der Leitfähigkeit sind direkt mit den Eigenfunktionen und deren Lokalisierungsgrad verknüpft, weshalb es von großem Interesse ist, analoge Skalierungseigenschaften wie für unendliche Proben zu kennen.

Für endliche 1D Anderson Modelle ohne elektrisches Feld konnte gezeigt werden [107–109], daß die statistischen Eigenschaften der Eigenzustände lediglich durch den Parameter  $\lambda_N = l_\infty/N$  bestimmt sind, wobei  $N$  die Probenlänge (Anzahl der Gitterpunkte) angibt. Die Skalierungsrelation erwies sich als relativ einfache Funktion:

$$\beta_q^N(\lambda_N) = \frac{c_q \lambda_N}{1 + c_q \lambda_N} \quad , \quad (5.17)$$

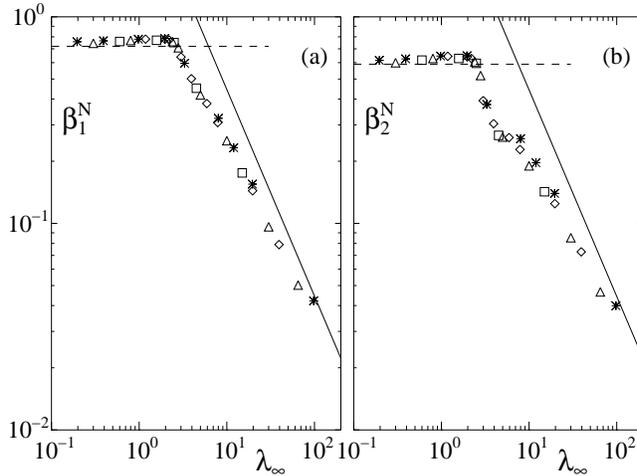
mit den Konstanten  $c_q \approx 2.6$  (1.5) für  $q = 1$  (2), die aus least squares fits bestimmt wurden [107–109]. Diese Relation ist zwar nur für  $q = 2$  exakt, für alle anderen  $q$  erwies sich Glg. (5.17) aber als sehr gute Näherung zu den korrekten Ausdrücken [26]. Im vorliegenden Falle kommt noch ein statisches elektrisches Feld hinzu, so daß neben  $N$  und  $l_\infty$  noch eine weitere charakteristische Länge  $l_{el}$  von Bedeutung ist. Aus den Untersuchungen des vorangegangenen Abschnitts ist schon bekannt, daß der Parameter  $\lambda_\infty = l_\infty/l_{el}$  im Falle unendlich ausgedehnter 1D Anderson Modelle mit elektrischem Feld die Skalierungseigenschaften bestimmt. Auf der anderen Seite enthält das zu untersuchende endliche Pendant als Grenzfall das 1D Anderson Modell ohne Feld, weshalb man vermuten kann, daß  $\lambda_N$  als zweiter Skalierungsparameter auftritt. Im folgenden soll mit Hilfe numerischer Untersuchungen und einiger analytischer Abschätzungen die Erwartung bestätigt werden, daß die Lokalisierungsmaße  $\beta_q^N$  nur von den Parametern  $\lambda_\infty$ ,  $\lambda_N$  abhängen.

Um die Lokalisierungslängen  $L_q$  für endliche Systeme der Größe  $N$  zu bestimmen und daraus die endlichen Analoga zu  $\beta_q^\infty$  zu berechnen, wurde derselbe Ansatz wie in Kap. 5.2.1 gewählt. Die zur Glg. (5.2) assoziierten Matrizen vom Rang  $N$  wurden für verschiedene Realisierungen (mind. 100) des Unordnungspotentials diagonalisiert und die  $L_q$  durch Mittelung über alle dabei gefundenen Eigenzustände im Energieintervall  $E \in [0.95, 1.05]$  ermittelt. Die Probengröße wurde in allen unten aufgeführten numerischen Untersuchungen im Bereich  $N = 200 - 1000$  variiert.

Um den Skalierungsansatz (5.12) für endliche Systeme zu untersuchen, soll zunächst  $\lambda_N$  konstant gehalten und  $\lambda_\infty$  variiert werden. Dies entspricht den Untersuchungen zu unendlichen Proben aus dem letzten Abschnitt bei endlichem  $N$ . In Abb. 5.4 sind die numerisch gewonnenen Daten zu  $\lambda_N = 1$  dargestellt. Unterschiedliche Symbole bezeichnen unterschiedliche Feldstärken  $F$  und Unordnungsstärken  $W$ . Der gute Überlapp der Datenpunkte bestätigt die vermutete Skalierungsrelation  $\beta_q^N = \beta_q^N(\lambda_\infty)$ . Um etwas mehr Einsicht in den Verlauf der Punkte zu erhalten, soll zunächst das Anderson Regime ( $\lambda_\infty \ll 1$ ) herangezogen werden. In diesem Grenzfall kann man wegen  $l_\infty \ll l_{el}$  den Effekt des elektrischen Feldes weitestgehend vernachlässigen und  $\beta_q^N$  auf Glg. (5.17) reduzieren. Dieser Ausdruck hängt nicht mehr von  $\lambda_\infty$  ab, so daß  $\beta_q^N$  eine Konstante wird, die durch

$$\beta_q^N(\lambda_\infty \ll 1, \lambda_N = 1) = \frac{c_q}{1 + c_q} \quad (5.18)$$

gegeben ist. Diese Vorhersage ist in Abb. 5.4 als gestrichelte Linie eingezeichnet und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Datenpunkten. Im entgegengesetzten Li-



**Abbildung 5.4:** Skalierung von (a)  $\beta_1^N$  (b)  $\beta_2^N$  bzgl.  $\lambda_\infty$  in endlichen Proben ( $\lambda_N = 1$ ). Matrizenensemble zu unterschiedlichen  $N$  und  $W$  sind mit verschiedenen Symbolen gekennzeichnet. Die gestrichelten Linien entsprechen dem asymptotischen Verhalten (5.18), die durchgezogenen Linien der approximativen Skalierung (5.20) mit (a)  $a_1^0 = 4.45$ ,  $c_1 = 2.59$  bzw. (b)  $a_2^0 = 4.43$ ,  $c_2 = 1.45$ .

mes  $\lambda_\infty \gg 1$  ist die Stark-Lokalisierung dominant und es gilt  $N, l_\infty \gg l_{el}$ . Aus Kontinuitätsgründen muß  $\beta_q^N$  für immer längere Proben in den Stark Grenzfall der unendlichen Proben übergehen, so daß es sinnvoll ist  $\beta_q^N$  durch Glg. (5.16) zu nähern. Für  $\lambda_\infty \gg 1$  führt diese Formel auf  $\beta_q^\infty \approx a_q^0$ . Mit einem Wechsel der Variablen von  $\beta_q^\infty$  zu  $\beta_q^N$  gemäß den definierenden Glgen. (5.11) erhält man daher

$$\beta_q^N = \frac{l_{el}\beta_q^\infty}{N} = \frac{\lambda_N a_q^0}{\lambda_\infty}. \quad (5.19)$$

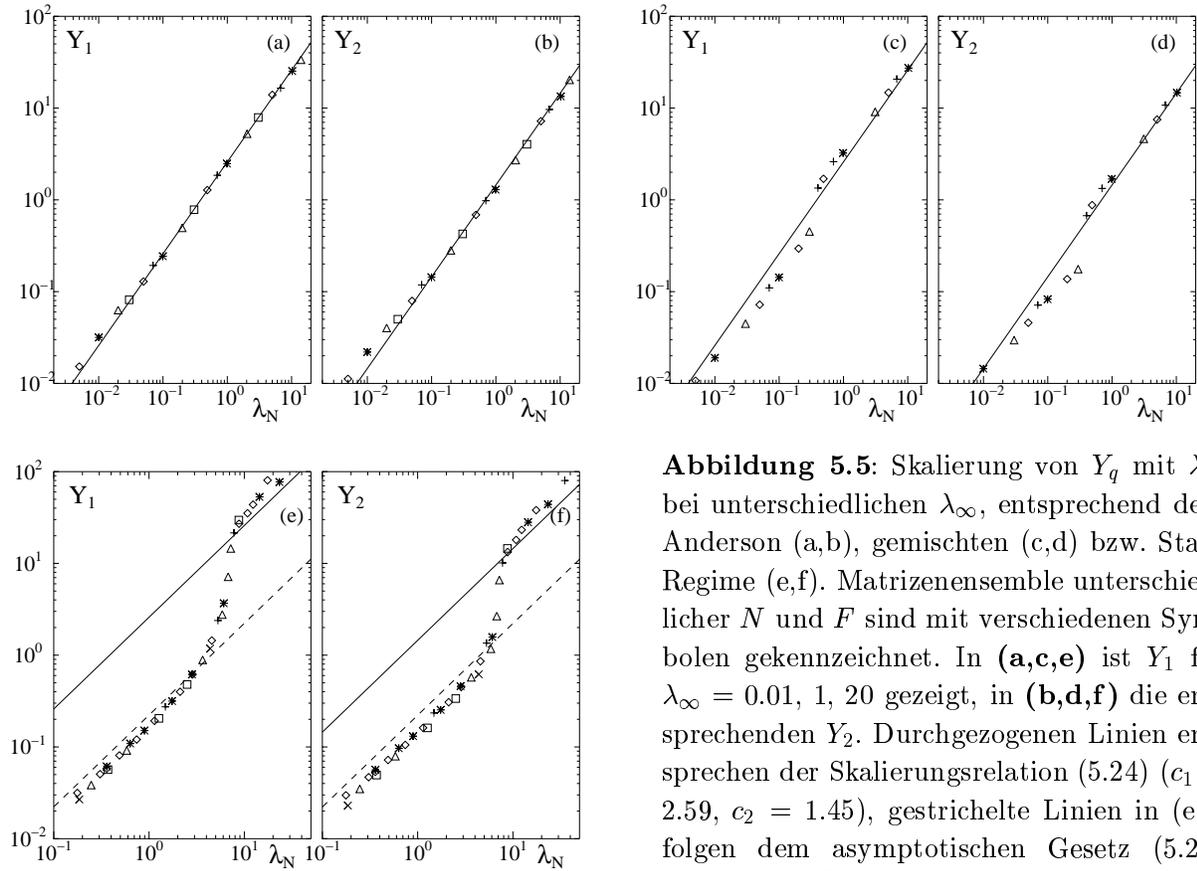
Eine doppelt logarithmische Auftragung von  $\beta_q^N$  gegen  $\lambda_\infty$  führt auf

$$\ln(\beta_q^N(\lambda_\infty \gg 1, \lambda_N = 1)) \approx \ln(a_q^0) - \ln(\lambda_\infty), \quad (5.20)$$

was in Abb. 5.4 als durchgezogene Linie dargestellt ist; die Kurve stimmt mit den Daten zufriedenstellend überein. Eine mehr als approximative Beschreibung kann durch obige Abschätzung auch nicht erwartet werden, da strenggenommen der Variablenwechsel von  $\beta_q^N$  zu  $\beta_q^\infty$  nur gültig ist, wenn nicht nur  $N \gg l_{el}$  sondern auch  $N \gg l_\infty$  gilt. Obwohl diese letzte Bedingung nicht erfüllt ist, gibt Glg. (5.20) dennoch eine sinnvolle Abschätzung für den Verlauf von  $\beta_q^N$ .

Um nun die Skalierung der  $\beta_q^N$  bzgl. des zweiten Parameters zu untersuchen, wird  $\lambda_\infty$  konstant gehalten und  $\lambda_N$  variiert. Die Lokalisierungslängen wurden analog zum obigen Vorgehen bei  $\lambda_N = 1$  und variablen  $\lambda_\infty$  bestimmt, mit dem Unterschied, daß nun  $\lambda_N$  bei festen  $\lambda_\infty = 0.01, 1, 20$  variiert wurde. Diese drei Werte für  $\lambda_\infty$  entsprechen gerade dem Anderson Regime, dem gemischten Fall und dem Stark Regime. Die numerischen Ergebnisse sind in Abb. 5.5 dargestellt, wobei aus Gründen der besseren Darstellung die neue Variable

$$Y_q = \frac{\beta_q}{1 - \beta_q} \quad (5.21)$$



**Abbildung 5.5:** Skalierung von  $Y_q$  mit  $\lambda_N$  bei unterschiedlichen  $\lambda_\infty$ , entsprechend dem Anderson (a,b), gemischten (c,d) bzw. Stark Regime (e,f). Matrizenensemble unterschiedlicher  $N$  und  $F$  sind mit verschiedenen Symbolen gekennzeichnet. In (a,c,e) ist  $Y_1$  für  $\lambda_\infty = 0.01, 1, 20$  gezeigt, in (b,d,f) die entsprechenden  $Y_2$ . Durchgezogene Linien entsprechen der Skalierungsrelation (5.24) ( $c_1 = 2.59, c_2 = 1.45$ ), gestrichelte Linien in (e,f) folgen dem asymptotischen Gesetz (5.25) ( $a_1^0 = 4.45, a_2^0 = 4.43$ ).

eingeführt wurde, die gegen  $\lambda_N$  in doppelt logarithmischer Darstellung aufgetragen ist. Unterschiedliche Symbole bezeichnen dabei Matrizen-Ensemble unterschiedlicher Kombinationen von  $N$  und elektrischer Feldstärke  $F$ . Die Symbole fallen wiederum in allen drei Fällen auf eine Kurve, was die Skalierungshypothese (5.12) untermauert. Interessanterweise zeigen sich deutlich unterschiedliche Verhalten der Kurven mit steigenden  $\lambda_\infty$ . Im Gegensatz zum uniform skalierenden Anderson Regime (Abb. 5.5a,b) zeigt das Stark Regime zwei unterschiedliche Asymptoten, die die gleiche Steigung haben und nur durch eine Lücke getrennt sind.

Um das Verhalten der  $Y_q(\lambda_N)$  zu verstehen und die asymptotischen Kurven zu bestimmen sei zunächst das Anderson Regime ( $\lambda_\infty \ll 1$ , Abb. 5.5a,b) untersucht. Per definitionem gilt hier näherungsweise Glg. (5.17) und man erhält

$$\ln(Y_q) = \ln(\lambda_N) + \ln(c_q) \quad . \quad (5.22)$$

Ein least squares fit mit dieser Funktion führte auf  $c_q = 2.59(1.45)$  für  $q = 1, (2)$ , was sich sehr gut mit den oben referierten Werten (2.6, 1.5) deckt. Die beiden Fits sind in Abb. 5.5a-f als durchgezogene Linien dargestellt. Da  $\lambda_\infty$  klein aber endlich ist, kann man das Skalierungsverhalten für  $\lambda_N \ll \lambda_\infty \ll 1$ , dem Grenzfall unendlicher Proben im Anderson-

Regime, auch aus Glg. (5.16) ableiten. Entwickelt man Glg. (5.16) bis zur 1. Ordnung erhält man  $\beta_q^\infty \approx a_q^0 a_q^1 \lambda_\infty$ . Einsetzen in Glg. (5.19), was nach Konstruktion hier ohne Einschränkung möglich ist, liefert

$$\beta_q^N \approx a_q^0 a_q^1 \lambda_N . \quad (5.23)$$

Umformung gemäß der Definition von  $Y_q$  liefert so

$$\ln(Y_q) \approx \ln(\lambda_N) + \ln(a_q^0 a_q^1) , \quad (5.24)$$

was  $c_q = a_q^0 a_q^1$  mit den in Kapitel 5.2.1 gefundenen  $a_q^{1,2}$  impliziert. Ein Vergleich der oben gefundenen  $c_q$  mit  $a_q^0 a_q^1 = 2.45$ , (1.64) für  $q = 1$ , (2) zeigt eine gute Übereinstimmung.

Im entgegengesetzten Limes  $\lambda_\infty \gg 1$  muß zwischen zwei Fällen unterschieden werden. Ist  $\lambda_N \gg \lambda_\infty$  setzt die Probenlänge  $N$  die kleinste Längenskala und die Eigenzustände erstrecken sich über die gesamte Probe, was einem metallischen Verhalten entspricht. Dies ist aber ebenfalls im reinen Anderson Regime für hinreichend große  $\lambda_N$  der Fall, und da sich der Lokalisierungsmechanismus in beiden Fällen der einschränkenden Probengeometrie geschlagen geben muß, kann man aus Stetigkeitsgründen erwarten, daß Glg (5.22) wiederum gilt. Wie in Abb. 5.5a-f ersichtlich ist, deckt sich diese Vorhersage (durchgezogene Linie) im Falle großer  $\lambda_N$  hervorragend mit den numerischen Daten. Im zweiten Falle gilt  $\lambda_N \ll \lambda_\infty$ , was einem extremen Stark Regime entspricht, wo man wiederum Glg. (5.19) ansetzen kann. Dies führt auf

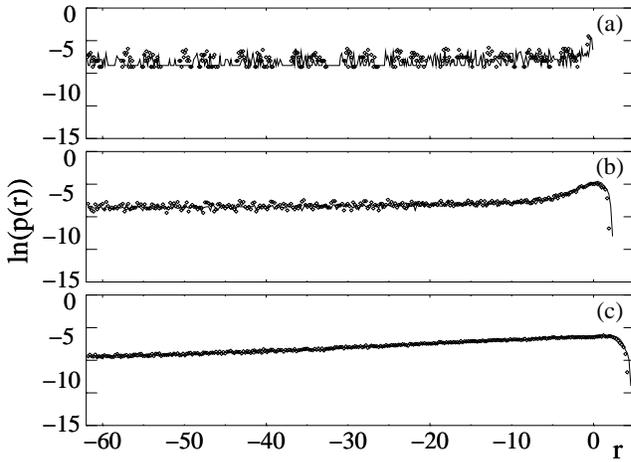
$$\ln(Y_q) \approx \ln(\lambda_N) + \ln\left(\frac{a_q^0}{\lambda_\infty}\right) . \quad (5.25)$$

Diese Kurve ist für  $\lambda_\infty = 20$  und die in Kapitel 5.2.1 ermittelten Werten für  $a_q^0$  in Abb. 5.5e,f gestrichelt dargestellt und beschreibt sehr gut die numerischen Daten. Aus diesen beiden Grenzfällen kann man folgern, daß bei  $\lambda_N \approx \lambda_\infty$  ein Übergang zwischen den beiden asymptotischen Regimen der Glgen. (5.24),(5.25) stattfindet. Die Lücke der beiden Asymptoten ergibt sich damit zu

$$\ln(c_q) - \ln(a_q^0) + \ln(\lambda_\infty) \approx \ln(a_q^1) + \ln(\lambda_\infty) . \quad (5.26)$$

### 5.2.3 Skalierungseigenschaften der Eigenvektoren

Um zu zeigen, daß nicht nur die gewählten Lokalisierungsmaße  $\beta_q^{\infty,N}$  skalierendes Verhalten bzgl.  $\lambda_\infty$ ,  $\lambda_N$  zeigen, soll nun die Skalierungseigenschaft für die komplette Verteilung der Absolutquadrate der Eigenzustandskomponenten  $w_n = |\phi_n|^2$  gezeigt werden. Wiederum wurde ein Ensemble von Hamilton-Matrizen mit unterschiedlichen Realisierungen des Unordnungspotentials diagonalisiert, so daß einige Tausend  $w_n$  der gefundenen Eigenzustände im Energiefenster  $E \in [0.95, 1.05]$  für die numerischen Verteilungen zur Verfügung standen. Aufgrund des Wettbewerbs von  $N$ ,  $l_\infty$ ,  $l_{el}$  ergeben sich 3 Grenzfälle der Verteilung, die wie folgt unterschieden werden können:



**Abbildung 5.6:** Skalierung von  $p(r)$  mit  $\lambda_\infty$  im Falle nahezu unendlicher Proben. Die zwei verwendeten Datensätze ( $l_\infty \approx 6, 10$ ) sind mit Symbolen bzw. durchgezogenen Linien bezeichnet. In allen drei Fällen **(a)**  $\lambda_\infty = 10$ , **(b)**  $\lambda_\infty = 1$ , **(c)**  $\lambda_\infty = 0.1$ . überlappen die beiden Datensätze sehr gut, so daß man von einer Skalierung der Verteilung mit  $\lambda_\infty$  sprechen kann.

1.  $l_\infty < l_{el} < N$  &  $l_{el} < l_\infty < N$  (unendliche Probe)
2.  $l_\infty < N < l_{el}$  &  $N < l_\infty < l_{el}$  (Anderson Regime)
3.  $N < l_{el} < l_\infty$  &  $l_{el} < N < l_\infty$  (Stark Regime)

Der erste Punkt entspricht gerade dem Fall unendlich ausgedehnter Proben, da immer  $N \gg l_\infty, l_{el}$  gilt. Da bereits bekannt ist, daß  $\beta_q^\infty$  für  $q = 1, 2$  in diesem Falle mit  $\lambda_\infty$  skaliert, liegt die Vermutung nahe, daß auch die gesamte Verteilung der  $w_n$  mit diesem Parameter skaliert. In Anlehnung an die Normierung von  $\beta_q^\infty$  mit Hilfe von  $l_{el}$ , werden auch die quadrierten Einträge der Eigenfunktionen  $w_n$  mit diesem Faktor normiert. Numerisch ist es weiterhin sinnvoll statt  $w_n l_{el}$  die Variable

$$r = \ln(w_n l_{el}) \quad (5.27)$$

und entsprechend die Verteilung  $p(r)$  zu betrachten. Numerisch wurden wie schon im Kapitel 5.2.1 Matrizen vom Rang  $N = 10^4$  unter Beachtung der Bedingung  $N \gg l_\infty, l_{el}$  für unterschiedliche  $\lambda_\infty$  diagonalisiert. Daraus wurden  $r$  und die Verteilung  $p(r)$  berechnet, die in Abb. 5.6 semilogarithmisch aufgetragen ist. Zum Nachweis der Skalierungseigenschaft wurden zwei unterschiedliche Unordnungsstärken herangezogen, die in Abb. 5.6 als Rauten bzw. durchgezogene Linien dargestellt sind. Die beiden Datensätze liegen in allen drei Abbildungen sehr gut aufeinander, was die vermutete Skalierung der Verteilung mit  $\lambda_\infty$  bestätigt.

Das zweite und dritte Paar von Bedingungen bezieht sich jeweils auf endliche Proben, weshalb Skalierung mit  $\lambda_\infty$  und  $\lambda_N$  zu erwarten ist. In enger Analogie zur Definition von  $\beta_q^N$  erfolgt die Normierung der Wellenfunktionseinträge nun mit der Probenlänge, was auf die Variable

$$r = \ln(w_n N). \quad (5.28)$$

führt. Vor der numerischen Untersuchung von  $p(r)$  seien kurz die asymptotischen Grenzfälle der Verteilung qualitativ beleuchtet. Sie lassen sich aus

$$p(r) = \langle \delta(r - \ln(wN)) \rangle \quad (5.29)$$

bestimmen, wobei der jeweilige funktionale Verlauf des Absolutquadrats der Wellenfunktionen einzusetzen ist und  $\langle \dots \rangle$  wiederum eine Unordnungsmittelung bezeichnet. Im Falle  $N \ll l_\infty, l_{el}$  setzt die Probenlänge die relevante Längenskala, die Eigenzustände sind praktisch ausgedehnt und fühlen keine Stark- oder Anderson-Lokalisierung. Approximativ sind in diesem Fall die Wellenfunktionen durch die freien Wellen aus Glg. (5.13) gegeben. Durch Einsetzen dieses Ansatzes in Glg. (5.29) erhält man [109]:

$$p(r) = \frac{e^r}{\pi \sqrt{e^r(2 - e^r)}} \quad (5.30)$$

Trägt man diese Verteilung semilogarithmisch gegen  $r$  auf, so erhält man approximativ eine Kurve mit Steigung  $1/2$ , was durch Entwicklung von Glg. (5.30) verifiziert werden kann. Die Verteilung hat weiterhin eine Spitze bei  $r = 0$ .

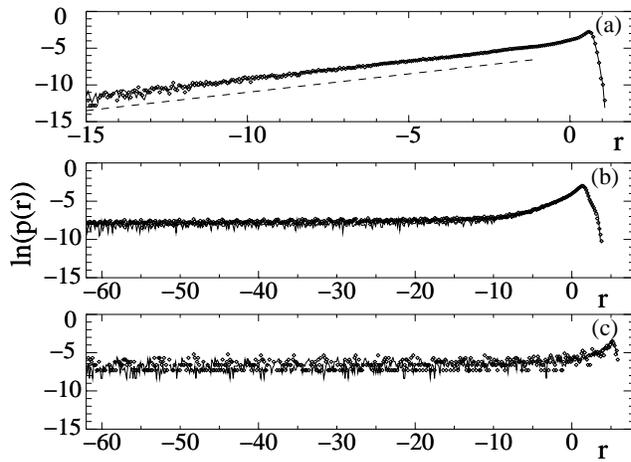
Im Falle  $l_\infty \ll N, l_{el}$  erreicht man das Anderson-Regime mit exponentiell lokalisierten Wellenfunktionen der Form  $w_n = \exp(-|n - n_0|/l_\infty)$ . Aus Glg. (5.29) erhält man daraus für  $r \ll 0$  [109]:

$$p(r) = l_\infty/N. \quad (5.31)$$

Eine semilogarithmische Auftragung dieser Relation gegen  $r$  resultiert in einer horizontalen Linie auf der Höhe  $\ln(l_\infty/N)$  für  $r \ll 0$ , die für große Wert von  $r$  rapide abfällt.

Für den zweiten Punkt in obiger Liste wurde bereits in Referenz [109] anhand eines reinen 1D Anderson-Modells nachgewiesen, daß die Skalierungseigenschaft erfüllt ist und die eben geschilderten Grenzfälle mit den Daten gut übereinstimmen. Da die Kurven in Referenz [109] weitgehend mit den in Abb 5.7. dargestellten Kurven übereinstimmen, soll hier auf eine Reproduktion dieser Ergebnisse verzichtet werden.

Es bleibt noch das dritte Paar von Bedingungen mit  $\lambda_\infty \gg 1$  zu beleuchten, das dem Stark-Regime endlicher Proben entspricht. Die numerischen Ergebnisse für Ensemble dreier ausgewählter Werte von  $\lambda_N, \lambda_\infty$  sind in Abb. 5.7 dargestellt. Sie zeigen zum einen ein sehr schönes Skalierungsverhalten und werden weiterhin qualitativ durch die obigen Grenzverteilungen Glgen. (5.30),(5.31) beschrieben. Während das für den Fall  $N \ll l_{el}$  (Abb. 5.7a) nicht weiter verwunderlich ist, da die Eigenzustände fast keine (Stark-) Lokalisierung zeigen, ist der Fall der Stark-Lokalisierung eigentlich nicht durch Glg.(5.31) erfasst. Man beobachtet weiterhin beim Verlauf von Abb. 5.7a bis Abb. 5.7c eine sukzessive Verbreiterung der Verteilung, wobei das Maximum sich zu größeren  $r$  hinbewegt. In Abb. 5.7c, dem extremen Stark-Regime, leben die Eigenzustände eigentlich nur noch auf einem Gitterplatz  $w_n \approx \delta_{nm}$ , d.h. man erhält  $p(r = \ln(N)) \approx 1/N$  während die restlichen,



**Abbildung 5.7:** Skalierung von  $p(r)$  mit  $\lambda_N$  im Stark Regime ( $\lambda_\infty = 20$ ). Wiederum zeigen die zwei verwendeten Datensätze (Symbole und durchgezogene Linie) in allen drei Fällen **(a)**  $\lambda_N = 100$  (Stark Regime) **(b)**  $\lambda_N = 2$  (gemischt) **(c)**  $\lambda_N = 0.05$  (Anderson Regime) einen sehr guten Überlapp. Weiterhin bestätigt sich in **(a)** das in Glg. (5.30) abgeleitete asymptotische Verhalten (gestrichelte Linie) sowie die qualitative Sättigung für  $r \ll 0$  in **(c)**.

faktoriell kleinen Einträge der Stark-lokalisierten Eigenfunktionen für einen langen, niedrigen Schwanz von  $p(r)$  im Bereich kleiner  $r$  sorgen, der an das Verhalten aus Glg. (5.31) erinnert.

In summa kann man aus dem skalierenden Verhalten der betrachteten Verteilungen schließen, daß  $\beta_q^\infty$  bzw.  $\beta_q^N$  nicht nur für  $q = 1, 2$  sondern für alle  $q \geq 1$  mit den Parametern  $\lambda_\infty, \lambda_N$  skalieren. Damit kann man auch schließen, daß die Einführung eines elektrischen Feldes nichts an der Ähnlichkeit der Grobstruktur der Eigenzustände von 1D und quasi-1D Systemen auf Skalen  $> l_\infty$  verändert.



# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit werden Quantensignaturen klassisch chaotischer Dynamik sowie Quanteneffekte ungeordneter Systeme untersucht. Dabei liegt das Hauptaugenmerk zunächst auf der Untersuchung der klassischen Dynamik von hamiltonschen Systemen mit gemischtem Phasenraum, die sich durch eine Koexistenz von Bereichen mit chaotischer und regulärer Dynamik auszeichnen. Ein Charakteristikum dieser typischen Systeme ist der algebraische Abfall der Wahrscheinlichkeit  $P(t) \sim t^{-\gamma}$ , mit der eine chaotische Trajektorie mindestens eine Zeit  $t$  in der Nähe der Bereiche regulärer Dynamik verbleibt. Der Exponent  $\gamma$  kann dabei selbst im Spezialfall gut bekannter Phasenraumstrukturen nicht vorhergesagt werden, denn die asymptotische Vorhersage  $\gamma = 3$  aus einer Renormierungstheorie, die jüngst numerische Unterstützung fand, wird hier numerisch falsifiziert. Vielmehr wird in diesem Kontext gezeigt, daß der algebraische Abfall durch ein Hängenbleiben chaotischer Trajektorien in verschiedenen Hierarchien des selbstähnlich strukturierten Phasenraums erzeugt wird, die nicht in besagter Renormierungstheorie beachtet werden.

Im nachfolgenden Kapitel werden die Quantensignaturen gemischter Phasenräume, insbesondere im Hinblick auf den algebraischen Zerfall des klassischen  $P(t)$  untersucht. Eine der ersten bekannten Quantensignaturen ist die Existenz einer neuen generischen Klasse von hierarchischen Eigenzuständen, die hier erstmals charakterisiert und quantifiziert werden. Ihre Anzahl divergiert im semiklassischen Limes ( $\hbar \rightarrow 0$ ), jedoch sinkt ihr relativer Anteil am Spektrum algebraisch langsam gemäß  $f_{\text{hier}} \sim \hbar^{1-1/\gamma}$ , wobei  $\gamma$  der Exponent des klassischen  $P(t)$  ist. Die Existenz sowie die Abnahme des relativen Anteils dieser neuen Klasse von Wellenfunktion wird mit Hilfe eines einfachen stochastischen Modells erklärt und quantifiziert. Weiterhin ergibt sich aus diesem Modell eine quantenmechanische Zeitskala  $t_{\text{qm}} \sim \hbar^{-1/\gamma}$ , bis zu der das quantenmechanische Pendant das klassische  $P(t)$  nachahmt. Diese Vorhersage wird numerisch für einen gemischten Phasenraum durch Einführung absorbierender Randbedingungen bestätigt. Weiterhin findet sich in den untersuchten Systemen mit absorbierenden Randbedingungen eine extrem breite Verteilung von Resonanzbreiten, deren typische Merkmale durch eine stark vereinfachte Störungstheorie des genannten

stochastischen Modells beschrieben werden können.

Danach wird ein Schwenk zu voll chaotischen Hamilton-Systemen sowie den eng verwandten ungeordneten quasi-eindimensionalen Systemen vollzogen. Trotz ihrer klassisch diffusiven Dynamik zeigen die beiden approximativ aufeinander abbildbaren Modellklassen exponentiell lokalisierte Eigenzustände, wie man sie bei Isolatoren erwartet. Der Fokus der Untersuchungen liegt hier auf Veränderungen der Lokalisierungseigenschaften bei sukzessiver Brechung der Zeitumkehrinvarianz. Einer Vorhersage aus supersymmetrischen Rechnungen zufolge, sollten bereits für sehr schwache Brechungen der Zeitumkehrinvarianz alle Eigenzustände unterschiedliche charakteristische Lokalisierungslängen am Zentrum und in den asymptotischen Ausläufern zeigen. Wie hier erstmals eindeutig demonstriert wird, stimmt diese Vorhersage nicht mit den numerischen Beobachtungen überein. Man findet vielmehr eine einzige charakteristische Lokalisierungslänge, die sich stetig mit dem Parameter  $\alpha$  der Brechung der Zeitumkehr verändert. Mit Hilfe einer numerisch untermauerten Skalierungstheorie werden Fluktuationseigenschaften, Diffusionskoeffizienten und diffusive Zeitskalen sowie das asymptotische Aussehen eines zeitevolvierten Wellenpakets für alle Werte dieses Parameters  $\alpha$  angegeben.

Im Anschluß daran erfolgt eine detaillierte Skalierungsuntersuchung eindimensionaler ungeordneter Systeme mit elektrischem Feld. Diese Systeme zeigen für steigende Stärke des elektrischen Feldes einen Isolator-Isolator-Übergang mit exponentiell bzw. faktoriell lokalisierten Eigenzuständen. Es zeigt sich, daß alle Lokalisierungslängen, die man mit Hilfe der Informationsentropie, dem Besetzungszahlverhältnis etc. definieren kann, im Falle unendlicher bzw. endlicher Proben vollständig durch einen bzw. zwei Skalierungsparameter determiniert werden. Diese Untersuchung zeigt erstmalig, daß selbst bei Anlegen eines statischen elektrischen Feldes, die Lokalisierungseigenschaften eindimensionaler und quasi-eindimensionaler ungeordneter Systeme auf Skalen größer als einer Lokalisierungslänge übereinstimmen.

# Anhang A

## A.1 Die Husimi-Darstellung

Anders als in der Klassik existiert in der Quantenmechanik kein Konstrukt einer Phasenraumdichte  $0 \leq \varrho_{\text{cl}} \leq 1$ , da die quantenmechanischen Operatoren der entsprechenden klassischen kanonisch konjugierten Variablen nicht mehr vertauschen. Ließ sich die klassische Dynamik eines  $d$ -dimensionalen Systems durch den  $2d$ -dimensionalen Phasenraum und die Liouville-Gleichung beschreiben, so reduziert sich die Quantendynamik auf die Schrödinger-Gleichung und eine  $d$ -dimensionale Wellenfunktion. Trotzdem gelang es Wigner [110] eine reelle Funktion  $W$  eines quantenmechanischen Zustandes  $|\psi\rangle$  zu definieren, die nur von den klassischen Phasenraumkoordinaten  $q, p$  abhängt, und die im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  in die klassische Phasenraumdichte  $\varrho_{\text{cl}}$  übergeht. Im Falle, daß der Zustand  $|\psi\rangle$  in Ortsdarstellung bekannt sei, ist diese Wigner-Funktion folgendermaßen definiert:

$$W(q, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \langle q + x/2 | \psi \rangle \langle \psi | q - x/2 \rangle \quad (\text{A.1})$$

Die so definierte Größe ist zwar immer reell, hat aber den Nachteil, daß sie offensichtlich auch negative Werte annehmen kann. Denn angenommen  $|\psi\rangle$  sei in Ortsdarstellung eine scharf lokalisierte Funktion, dann oszilliert  $W$  im Vorzeichen, im Widerspruch zur positiven Phasenraumdichte  $\varrho_{\text{cl}}$ . Im semiklassischen Limes  $\hbar \rightarrow 0$  verstärken sich diese Oszillationen noch, so daß der Übergang  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} W(q, p) = \varrho_{\text{cl}}$  sehr kompliziert ist.

Um dennoch eine Größe zu konstruieren, die reell und positiv ist und einer Projektion der Wellenfunktion auf den klassischen Phasenraum entspricht, mittelt man  $W$  über kohärente Zustände. Die kohärenten Zustände sind Wellenfunktionen mit gaußscher Wahrscheinlichkeitsdichte in Orts- und Impulsdarstellung bei minimaler Unschärfe, die an einem beliebig gewählten Ort  $q, p$  im Phasenraum zentriert werden können. Sie 'leben' somit auf dem Phasenraum und sind durch ihren gaußschen Abfall für eine grobe Mittelung der Wigner-Funktion  $W$  geeignet. Die entstehende Darstellung des Zustandes  $|\psi\rangle$  ist unter dem Namen *Husimi-Darstellung* [111] bekannt. Mit Hilfe der Gabor-Transformation läßt sich die

Husimi-Darstellung folgendermaßen schreiben:

$$\langle q, p | \psi \rangle = \left( \frac{s}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \int \exp \left( -\frac{s(x-q)^2}{2\hbar} - i \frac{p(x-q/2)}{\hbar} \right) \langle x | \psi \rangle dx \quad (\text{A.2})$$

Die Husimi-Darstellung ist somit nichts anderes als der Überlapp einer Wellenfunktion mit einer im Phasenraum zentrierten Gauß-Glocke. Der Parameter  $s$  gibt dabei an, wie stark man zwischen den extremalen Orts- und Impulsdarstellungen ( $s \rightarrow \infty$  bzw.  $s = 0$ ) interpoliert. Typischerweise kann man  $s = 1$  verwenden.

## A.2 Kumulative Statistik nächster Niveauabstände

Die in den Kapiteln 2 und 3 auftauchende spektrale Statistik  $p(0, s)$  ist für die numerische Handhabung meist wenig hilfreich. Der Nachteil der Statistik nächster Niveauabstände  $p(0, s)$  liegt hauptsächlich in der Aufbereitung der numerisch gewonnenen Daten, denn ihrer Definition zufolge gibt sie an, mit welcher Wahrscheinlichkeit man einen Niveauabstand im Intervall  $[s, s+ds]$  findet. Das impliziert, daß man aus der numerisch gewonnene Menge der Abstände  $s$  ein Histogramm machen muß, um es mit der Vorhersage  $p(0, s)$  vergleichen zu können. Diese Methode hat den Nachteil, daß die Wahl der Boxenbreite des Histogramm willkürlich ist, was einen Vergleich mit der analytischen Vorhersage bei einer geringen Anzahl von Datenpunkten sehr erschwert. Abhilfe schafft hier das Ausnutzen der statistisch optimalen kumulativen Statistik, die durch

$$P(s) = \int_0^s p(0, s') ds' \quad (\text{A.3})$$

definiert ist. Das bedeutet numerisch, daß man lediglich alle  $N$  Abstände  $s$  der Größe nach zu ordnen braucht, und diesen  $N$ -Vektor  $\mathbf{s}$  gegen den  $N$ -Vektor  $\mathbf{P} = (1, 2, \dots, N)/N$  auftragen muß, um eine Visualisierung der kumulativen Statistik zu erhalten. Diese Auftragung muß nun nur noch mit dem entsprechenden (analytisch lösbaren) Integral der Vorhersage (z.B. GOE) verglichen werden. Auf diese Weise lassen sich Vorhersage und Daten ohne die willkürliche Wahl eines Histogramm-Parameters vergleichen. Für die Glgen. (2.15),(2.16) findet man folgende kumulativen Ausdrücke:

$$P(s) = \begin{cases} 1 - e^{-s} & \text{Poisson} \\ 1 - \exp\left(-\frac{\pi s^2}{4}\right) & \text{GOE} \\ \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{4}{\pi}}s\right) - \frac{4}{\pi}s \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right) & \text{GUE} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Im Falle gemischter Systeme mit zwei Komponenten kann man nach einigen algebraischen Fingerübungen aus der Berry-Robnik-Formel (2.20) folgende kumulative Statistik bestimmen:

$$P(s) = 1 - f_{\text{BR}} e^{-f_{\text{BR}} s} \operatorname{erfc} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \bar{f}_{\text{BR}} s \right\} - \bar{f}_{\text{BR}} \exp \left\{ \frac{f_{\text{BR}}^2}{\pi \bar{f}_{\text{BR}}^2} - \frac{\pi}{4} \bar{f}_{\text{BR}}^2 \left( s + \frac{2f_{\text{BR}}}{\pi \bar{f}_{\text{BR}}^2} \right)^2 \right\}, \quad (\text{A.5})$$

wobei  $\bar{f}_{\text{BR}} = 1 - f_{\text{BR}}$  und  $\text{erfc}(x)$  die komplementäre Fehlerfunktion ist. Dieser Ausdruck wurde in Kap. 3.1 zur Bestimmung von  $f_{\text{BR}}$  und damit zur Ermittlung von  $f_{\text{hier}}$  herangezogen. In diesem Zusammenhang wurde auch die sog.  $U$ -Funktion verwendet, die lediglich eine Transformation der cumulativen Statistik gemäß

$$U(s) = \frac{2}{\pi} \text{acos}(\sqrt{1 - P(s)}) \quad (\text{A.6})$$

darstellt [55]. Die  $U$ -Funktion hat den Vorteil, daß die statistischen Schwankungen über den gesamten Bereich der vorkommenden Abstände  $s$  konstant sind, was einen etwas stabileren Fit erlaubt.

## A.3 Die Niveauezahlvarianz

Neben der Statistik nächster Niveauabstände sind vor allem die aus der 2-Punkt-Clusterfunktion  $Y_2(x)$  abgeleiteten Größen von Interesse, die im Gegensatz zu den Verteilungen  $p(n, s)$  exakte 2-Punkt-Korrelationsfunktionen sind. Ein prominentes Beispiel dafür ist die Niveauezahlvarianz  $\Sigma_2(L)$ :

$$\Sigma_2(L) = \langle (n(L) - L)^2 \rangle = L - 2 \int_0^L (x - L) Y_2(x) dx , \quad (\text{A.7})$$

wobei  $n(L)$  die Anzahl von Niveaus in einem Energieintervall der Länge  $L$  angibt und  $\langle \dots \rangle$  für eine Mittelung über viele Intervalle der Länge  $L$  steht.

Eine alternative Beschreibung für  $\Sigma_2(L)$  erhält man über die Formulierung der 2-Punkt-Korrelationsfunktion  $Y_2(s)$  als Summe über die Nachbarstatistiken  $p(n, s)$  [45]

$$Y_2(s) = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} p(n, s) , \quad (\text{A.8})$$

die bei Einsetzung in Glg. (A.7)

$$\begin{aligned} \Sigma_2(L) &= L(1 - L) + 2L \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^L p(n, s) ds - 2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^L sp(n, s) ds \\ &= L(1 - L) + 2L \sum_{n=0}^{\infty} P_n(L) - 2 \sum_{n=0}^{\infty} LP_n(L) + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^L P_n(s) ds \\ &= L(1 - L) + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^L P_n(s) ds , \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

ergibt. Dabei ist  $P_n(s)$  die cumulative Verteilung zu  $p(n, s)$  gemäß (A.3). Von der ersten zur zweiten Zeile wurde weiterhin eine partielle Integration des zweiten Terms durchgeführt,

so daß man die gesamte Niveauezahlvarianz als Summe der integrierten cumulativen Statistiken  $P_n(s)$  ausdrücken kann.

Die analytischen Ausdrücke für GOE und GUE sind [45]:

$$\Sigma_2^{\text{GUE}}(L) = \frac{\ln(2\pi L) + \gamma_e + 1 - \cos(2\pi L) - \text{Ci}(2\pi L)}{\pi^2} + L \left( 1 - \frac{2}{\pi} \text{Si}(2\pi L) \right) \quad (\text{A.10})$$

$$\Sigma_2^{\text{GOE}}(L) = 2\Sigma_2^{\text{GUE}}(L) + \left( \frac{\text{Si}(\pi L)}{\pi} \right)^2 - \frac{\text{Si}(\pi L)}{\pi} . \quad (\text{A.11})$$

Hier bezeichnet  $\text{Si}(x)$ ,  $\text{Ci}(x)$  den Integralsinus bzw. -cosinus und  $\gamma_e = 0.5772\dots$  die Eulersche Konstante. Statistiken wie  $\Sigma_2(L)$  messen langreichweitige Korrelationen und somit die Steifigkeit des Spektrums. Im Falle eines 'weichen' Spektrums von Zufallszahlen ergibt sich im Gegensatz zu GOE/GUE

$$Y_2(L) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Sigma_2(L) = L . \quad (\text{A.12})$$

Da die 2-Punkt-Funktion  $\Sigma_2(L)$  für superponierte Spektren einfach additiv ist, erhält man für die Überlagerung verschiedener Spektren mit relativen Anteilen  $f_i$  [45]:

$$\Sigma_2^{\text{mix}}(L) = \sum_i \Sigma_2^{(i)}(f_i L) \quad , \quad \sum_i f_i = 1 , \quad (\text{A.13})$$

wobei  $\Sigma_2^{(i)}$  die Niveauezahlvarianz des  $i$ -ten Subspektrums beschreibt.

# Anhang B

## B.1 Numerik und Symmetrien in der Standardabbildung

Wie in Kapitel 2.1.5 gezeigt, kann der Zeitentwicklungsoperator  $\mathcal{U}$  der Standardabbildung für  $2\pi\hbar = M/N$  auf eine  $N \times N$ -Matrix mit parametrischer Blochphase  $\theta_p$  reduziert werden. Im folgenden soll gezeigt werden, welche Symmetrieeigenschaften dieser Matrix numerisch genutzt werden können. Dazu seien zunächst einige allgemeine Betrachtungen vorangestellt, bevor eine detaillierte Betrachtung der Standardabbildung erfolgt.

### Lemma:

Die Eigenvektoren  $v$  einer symmetrischen unitären Matrix  $U$  sind reell.

### Beweis:

Sei folgende Eigenwertgleichung gegeben:

$$Uv = \lambda v . \tag{B.1}$$

Durch Multiplikation von links mit  $U^{-1} = U^\dagger$  erhält man

$$U^\dagger v = \lambda^{-1} v \quad \Rightarrow \quad (U^*)^T v = U^* v = \lambda^* v , \tag{B.2}$$

wobei die Symmetrie  $U = U^T$  und die spezielle Form des Eigenwerts unitärer Matrizen  $\lambda = \exp(i\phi)$  genutzt wurde. Durch Addition bzw. Subtraktion von (B.1) und (B.2) erhält man

$$\operatorname{Re}(U)v = \operatorname{Re}(\lambda)v \quad \text{bzw.} \quad \operatorname{Im}(U)v = \operatorname{Im}(\lambda)v \tag{B.3}$$

Aufgrund der Symmetrie von  $U$  sind Real- und Imaginärteil der Matrix symmetrische reelle Matrizen, die bekanntermaßen [112] reelle Eigenvektoren haben.

Als Folge dieses Lemmas können  $\text{Re}(U)$  und  $\text{Im}(U)$  separat diagonalisiert werden und die erhaltenen Eigenwerte mit der zu erfüllenden Bedingung  $\text{Re}(\lambda)^2 + \text{Im}(\lambda)^2 = 1$  zur Ermittlung des Spektrums  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  herangezogen werden. Zum einen kann man sich dabei auf die effektiven und speichersparenden Diagonalisierungsroutinen für reelle symmetrische Matrizen zurückziehen (z.B. LAPACK), zum anderen reicht es, die Eigenvektoren *einer* der beiden Matrizen zu bestimmen.

**Lemma:**

Vertauscht eine Matrix  $U$  mit dem Paritätsoperator  $P$ , d.h. ist die Matrix symmetrisch bzgl. der Antidiagonalen, so zerfällt das Spektrum in zwei nichtwechselwirkende Teile, die mit symmetrischen bzw. antisymmetrischen Eigenvektoren identifiziert werden können.

**Beweis:**

Aus der Eigenwertgleichung  $Uv = \lambda v$  folgt durch Multiplikation mit dem Paritätsoperator  $PUv = \lambda Pv$  und durch Ausnutzen der Vertauschbarkeit  $U(Pv) = \lambda(Pv)$ . Daraus ergibt sich, daß die symmetrischen bzw. antisymmetrischen Eigenvektoren  $v \pm Pv$  des Paritätsoperators, die der Eigenwertgleichung

$$P(v \pm Pv) = \pm v + Pv = \pm 1(v \pm Pv) \quad (\text{B.4})$$

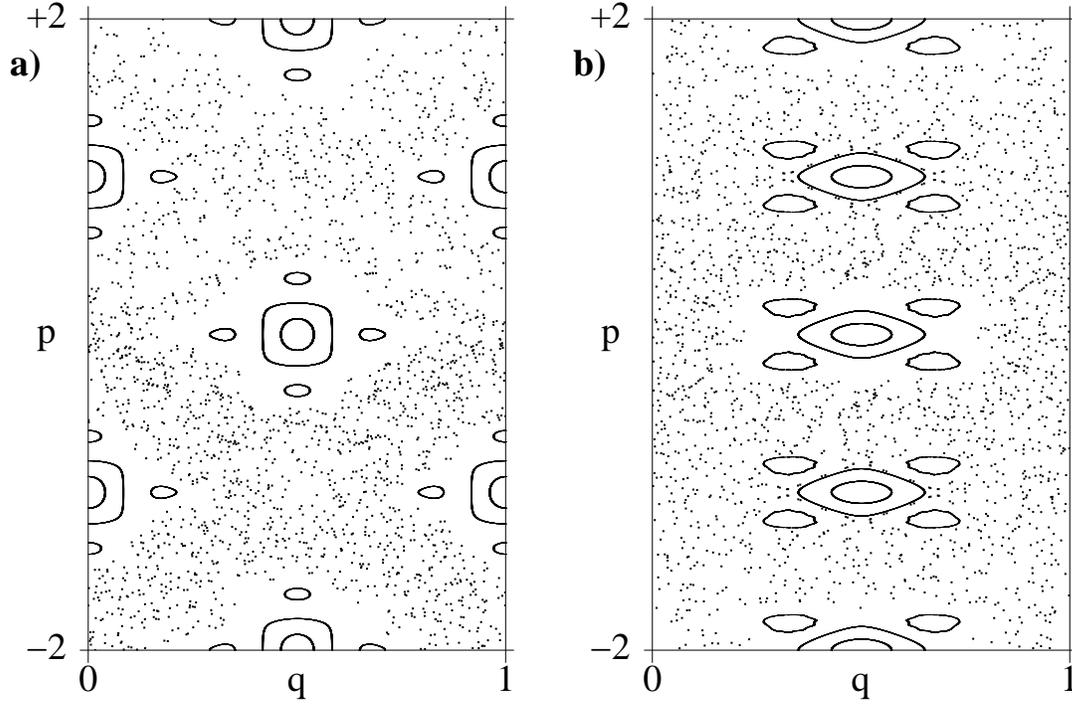
genügen, ebenfalls Eigenvektoren von  $U$  sind, so daß die Behauptung bewiesen ist.

Eine Konsequenz des Lemmas ist, daß bei Erfüllung der Voraussetzungen, das Spektrum einer solchen Matrix selbst im Fall von hartem Chaos keine RMT-Statistiken zeigt, da durch die Überlagerung zweier nichtwechselwirkenden Subspektren der Poisson-Anteil effektiv erhöht wird! Weiterhin kann man das Eigenwertproblem einer  $N \times N$ -Matrix auf zwei Probleme der Größe  $\sim N/2 \times N/2$  reduzieren:

$$\begin{aligned} \text{sym./antisym. Zustände } \forall_{n \leq N/2} v_n &= \pm v_{N+1-n} \\ \Rightarrow \forall_{j \leq N/2} U_{jk}^{\text{red}} &= \sum_{k=1}^{N/2} U_{j,k} \pm U_{j, N+1-k} . \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Durch Diagonalisieren der reduzierten Matrix kann man so das (anti)symmetrische Spektrum bestimmen.

Im folgenden sollen zwei spezielle Versionen der Standardabbildung bzgl. der Erfüllung dieser numerisch nützlichen Symmetrien untersucht werden (vgl. Abb. B.1):



**Abbildung B.1:** Poincaré-Schnitt der Standardabbildung ( $K = 2.5$ ) über mehrere Einheitszellen. **a)** Symmetrisierung in der freien Entwicklung, vgl.  $\mathcal{U}^{(1)}$ . **b)** Symmetrisierung im Kick, vgl.  $\mathcal{U}^{(2)}$ .

1.  $\mathcal{U}^{(1)} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{T(p)}{2}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(q)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{T(p)}{2}\right)$  in Impulsdarstellung
2.  $\mathcal{U}^{(2)} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{V(q)}{2}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} T(p)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{V(q)}{2}\right)$  in Ortsdarstellung

In Bezug auf das eigentliche Hamilton-System der Standardabbildung, den gekickten Rotator, entspricht  $\mathcal{U}^{(1)}$  einer Aufspaltung in der freien Entwicklung, wohingegen  $\mathcal{U}^{(2)}$  die Symmetrisierung im Kick beschreibt.

ad  $\mathcal{U}^{(1)}$

Sei  $\kappa = K/(4\pi^2\hbar)$  und  $g_{jk} = \exp\left\{-i\pi^2\hbar\left[\left(j + \frac{N-1}{2}\right)^2 + \left(k + \frac{N-1}{2}\right)^2\right]\right\}$ . Dann gilt offensichtlich  $g_{jk} = g_{kj}$  und weiterhin

$$\begin{aligned}
 U_{jk} &= g_{jk} \times \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left\{-i\kappa \cos\left(\frac{2\pi s + \theta_p}{N}\right) + \frac{2\pi i s(k-j)}{N}\right\} \\
 &= g_{kj} \times \sum_{s=1}^N \exp\left\{-i\kappa \cos\left(\frac{2\pi(N-s) + \theta_p}{N}\right) + \frac{2\pi i(N-s)(k-j)}{N}\right\}, \quad (\text{B.6})
 \end{aligned}$$

nach der Substitution  $s \rightarrow N - s$ .

Mit  $\cos\left(2\pi + \frac{-2\pi s + \theta_p}{N}\right) = \cos\left(\frac{-2\pi s + \theta_p}{N}\right)$  und  $\exp(2\pi N(k - j)/N) = 1$  ergibt sich unter Beachtung, daß die Summanden  $s = 0$  und  $s = N$  identische Ergebnisse liefern:

$$\begin{aligned} U_{jk} &= g_{kj} \times \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left\{-i\kappa \cos\left(\frac{-2\pi s + \theta_p}{N}\right) + \frac{2\pi i(j - k)}{N}\right\} \\ &= U_{kj} \quad \text{für } \theta_p = \mathbb{Z}\pi, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

d.h. die Matrix ist nur für spezielle Wahlen der Blochphase  $\theta_p$  symmetrisch.

Die Spiegelung der Matrixelemente an der Antidiagonalen ist durch die Vertauschung der Indizes  $j, k \rightarrow N - k + 1, N - j + 1$  gegeben. Offensichtlich ändert sich durch diese Transformation nichts an der Fouriersumme, lediglich  $g_{jk}$  ist davon betroffen:

$$g_{N-1-k, N-1-j} = \exp\left\{-i\pi^2 \hbar \left[ \left(\frac{3N+1}{2} - k\right)^2 + \left(\frac{3N+1}{2} - j\right)^2 \right]\right\}. \quad (\text{B.8})$$

Wie man mit etwas Geduld nachrechnen kann, ist dieser Ausdruck identisch mit  $g_{jk}$  im Falle gerader  $M$  und ungerader  $N$ , d.h. in diesem Fall ist eine Vertauschung von  $\mathcal{U}^{(1)}$  mit dem Paritätsoperator sichergestellt.

#### ad $\mathcal{U}^{(2)}$

Für diese Matrix gilt offensichtlich mit Vertauschung der Indizes und anschließender Umbenennung der Summe über  $s \rightarrow -s$

$$\begin{aligned} U_{jk} &= \exp\left\{-i\frac{\kappa}{2} \left[ \cos\left(\frac{2\pi j + \theta_p}{N}\right) + \cos\left(\frac{2\pi k + \theta_p}{N}\right) \right]\right\} \\ &\quad \times \sum_{s=1}^N \exp\left\{-i\pi^2 \hbar s^2 + \frac{2\pi i s(k - j)}{N}\right\} \\ &= U_{kj} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

für alle Blochphasen  $\theta_p$ . Eine analoge Rechnung wie in obigem Falle zeigt weiterhin, daß die Vertauschbarkeit mit dem Paritätsoperator wieder nur in Spezialfällen gegeben ist.

Die Diagonalisierung und Reduktion des nicht-unitären Eigenwertproblems in Kap. 3.3 wurde in Version  $\mathcal{U}^{(1)}$  durchgeführt, was eine Ranghalbierung der komplexen symmetrischen Submatrix  $V_{jk}$  des unitären Zeitentwicklungsoperators erlaubte. Dabei wurde nur der antisymmetrische Anteil berücksichtigt, der zur Diagonalisierung im Extremfall ( $\text{rg}V \approx 10^4$ ) bis zu 2 Wochen Rechenzeit (Compaq XP1000) brauchte und einen Speicherbedarf von ca. 1.8 GB hatte. Die Ensemble-Diagonalisierungen zu verschiedenen  $\theta_p$  in Kapitel 3.1 wurden hingegen aufgrund der Symmetrie von  $U_{jk}$  in Version  $\mathcal{U}^{(2)}$  durchgeführt. Aus Konsistenzgründen sind in Kapitel 3 trotzdem alle Wellenfunktionen in Version  $\mathcal{U}^{(1)}$

dargestellt, denn durch Anwendung eines halben Kicks und einer halben freien Entwicklung berechnet man leicht aus den Eigenvektoren  $v$  von  $\mathcal{U}^{(2)}$  die Pendantes für  $\mathcal{U}^{(1)}$ :

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{T(p)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} \cdot \underbrace{\left( e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}T(p)} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} \right)}_{\mathcal{U}^{(2)}} v = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{T(p)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} (\lambda v)$$

$$\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{T(p)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{T(p)}{2}}}_{\mathcal{U}^{(1)}} \left( e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{T(p)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} \cdot v \right) = \lambda \left( e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{T(p)}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{V(q)}{2}} \cdot v \right) \quad (\text{B.10})$$

## B.2 Bandmatrizen und die Cayley-Form

Um die Zeitentwicklung eines Anfangszustandes gemäß der tight-binding-Gleichung (4.13) numerisch zu untersuchen, kann man auf ein einfaches Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung zurückgreifen oder die sehr viel elegantere Cayley-Form nutzen [113, 114]. Obwohl beide Verfahren im Mittel den gleichen Rechenaufwand aufweisen ( $\sim bN$  Schritte für einen Zeitschritt, bei einer Matrix vom Rang  $N$  und einer Bandbreite  $b$ ), hat die einfache und vielseitige Runge-Kutta-Methode den Nachteil, daß man i.a. nur sehr kleine Zeitschritte verwenden kann, da die Unitarität der Zeitentwicklung nicht explizit in den Algorithmus einfließt. Anders bei der Cayley-Form, die zwar in der Genauigkeit nur von 2. Ordnung ist, aber die Unitarität eben auch bis zur 2. Ordnung erhält. Dieses Verfahren ist entsprechend stabiler und man kann ohne Einbußen in der Genauigkeit der Ergebnisse die Zeitinkremente 1-2 Größenordnungen größer als im Runge-Kutta-Verfahren wählen. Man erhält die Cayley-Form durch Entwicklung des Zeitentwicklungsoperators  $\mathcal{U}$  für kleine Zeiten unter Beachtung der Unitarität:

$$\mathcal{U}(\delta t) = \exp(-i\mathcal{H}\delta t) \approx \frac{\mathbf{1} - i\mathcal{H}\delta t/2}{\mathbf{1} + i\mathcal{H}\delta t/2} . \quad (\text{B.11})$$

Dabei wurde  $\hbar = 1$  gesetzt bzw. in  $\mathcal{H}$  oder  $\delta t$  absorbiert. Damit läßt sich die Zeitentwicklung  $|\psi(t + \delta t)\rangle = \mathcal{U}(\delta t)|\psi(t)\rangle$  schreiben als:

$$(\mathbf{1} + i\mathcal{H}\delta t/2)|\psi(t + \delta t)\rangle = (\mathbf{1} - i\mathcal{H}\delta t/2)|\psi(t)\rangle , \quad (\text{B.12})$$

d.h. in praxi erhält man aus dem Zustandsvektor zur Zeit  $t$  den Zustandsvektor zum Zeitpunkt  $t + \delta t$  durch Lösung obigen Gleichungssystems ( $\mathcal{H}$ ,  $\mathbf{1}$  sind z.B. eine WBRM- bzw. die Einheits-Matrix und  $|\psi\rangle$  ist ein Spaltenvektor). Die Cayley-Form ist somit nichts anderes als eine Variante des Crank-Nicholson-Verfahrens, das allgemein für Anfangswertprobleme von partiellen Differentialgleichungen genutzt wird [113].

In Ref. [114] wurde für Simulationen des WBRM-Ensembles mit Bandbreite  $b$  gezeigt, daß das Zeitinkrement lediglich  $\delta t \leq 1/\sqrt{b}$  erfüllen muß, um numerisch exakte Ergebnisse zu erhalten. Bleibt man mit der Wahl des Inkrements (deutlich) unterhalb dieser Grenze, so sind die Ergebnisse mindestens ebenso präzise wie die aus der Runge-Kutta-Methode erhaltenen.

Für  $b \approx 15$  ist im Cayley-Verfahren z.B.  $\delta t = 0.1$  eine sehr konservative Wahl, die aber immer noch um Größenordnungen schneller ist als das vergleichbare Runge-Kutta-Verfahren, das mit  $\delta t \approx 10^{-4}$  mind. das Hundertfache an Rechenschritten/Zeit benötigt. Ein weiterer Trick ist das selbstexpandierende Gitter, mit dessen Hilfe man finite-size-Effekte unterdrücken kann. Man startet zunächst mit einem kleinen Gitter und einer Bandmatrix mit entsprechend kleinem Rang. Sobald die Wahrscheinlichkeitsdichte des entwickelten Wellenpakets am Rand des Gitters einen kritischen Wert (z.B.  $10^{-15}$ ) überschreitet, wird das Gitter vergrößert, indem neue Gitterpunkte am Rand zugefügt werden. So bleibt die Dynamik auf dem alten Teil des Gitters erhalten, es kommen lediglich neu zu erforschende Bereiche hinzu.

# Literaturverzeichnis

- [1] H. Poincaré, *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Tome III, Nachdruck, Dover Publ. Inc., New York (1957).
- [2] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, 2nd edition, Graduate Texts in Mathematics 60, Springer-Verlag (1989).
- [3] R.S. MacKay, J.D. Meiss, *Hamiltonian Dynamical Systems*, IOP Publishing Ltd. (1987).
- [4] L. Markus and K.R. Meyer, *Generic Hamiltonian Dynamical Systems Are neither Integrable nor Chaotic*, Memoirs of the American Mathematical Society, No. 114 (American Mathematical Society, Providence, RI, 1974).
- [5] R.S. MacKay, *Renormalization in area-preserving maps*, Advanced Series in Nonlinear Dynamics Vol. 6, World Scientific (1993).
- [6] B.V. Chirikov, *Chaotic Dynamics in Hamiltonian Systems with Divided Phase Space*, Lect. Notes Phys. **179**, 29 (1983).
- [7] B.V. Chirikov, D.L. Shepelyansky, *Asymptotic Statistics of Poincare Recurrences in Hamiltonian Systems with Divided Phase Space*, Phys. Rev. Lett. **82**, 582 (1999).
- [8] M. Weiss, L. Hufnagel, R. Ketzmerick, in Vorbereitung.
- [9] G. Casati, B.V. Chirikov, *Chaos and Order - Between Order and Disorder*, Cambridge University Press (1995).
- [10] R. Ketzmerick, *Fractal conductance fluctuations in generic chaotic cavities*, Phys. Rev. B **54**, 10841 (1996).
- [11] H. Hegger, B. Huckestein, K. Hecker, M. Janssen, A. Freimuth, G. Reckziegel, R. Tuzinski, *Fractal Conductance Fluctuations in Gold Nanowires*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3855 (1996).
- [12] A.S. Sachrajda, R. Ketzmerick, C. Gould, Y. Feng, P.J. Kelly, A. Delage, Z. Wasilewski, *Fractal Conductance Fluctuations in a Soft-Wall Stadium and a Sinai Billiard*, Phys. Rev. Lett. **80**, 1948 (1998).

- [13] G. Casati, I. Guarneri, G. Maspero, *Fractal Survival Probability Fluctuations*, Phys. Rev. Lett. **84**, 63 (2000).
- [14] B. Huckestein, R. Ketzmerick, C. Lewenkopf, *Quantum transport through ballistic cavities: Soft vs. hard quantum chaos*, Phys. Rev. Lett. **84**, 5504 (2000).
- [15] R. Ketzmerick, L. Hufnagel, F. Steinbach, M. Weiss, *New Class of Eigenstates in Generic Hamiltonian Systems*, Phys. Rev. Lett. **85**, 1214 (2000).
- [16] R. Ketzmerick, L. Hufnagel, M. Weiss, *Conductance Fluctuations of Generic Billiards: Fractal or Isolated?*, in Vorbereitung.
- [17] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [18] S. Fishman, D.R. Grempel, R.E. Prange, *Chaos, Quantum Recurrences, and Anderson Localization*, Phys. Rev. Lett. **49**, 509 (1982).
- [19] A.V. Kolesnikov and K.B. Efetov, *Two-scale localization in disordered wires in a magnetic field*, Phys. Rev. Lett. **83**, 3689 (1999).
- [20] A.V. Kolesnikov and K.B. Efetov, *Comment on 'Search for two-scale localization in disordered wires in a magnetic field'*, cond-mat/0005048 (2000).
- [21] A.V. Kolesnikov and K.B. Efetov, *Two-scale localization of wavefunctions in disordered wires in a weak magnetic field*, cond-mat/0005101 (2000).
- [22] Yu.B. Khavin, M.E. Gershenson and A.L. Bogdanov, *Decoherence and the Thouless Crossover in One-Dimensional Conductors*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1066 (1998)
- [23] Yu.B. Khavin, M.E. Gershenson and A.L. Bogdanov, *Strong localization of electrons in quasi-one-dimensional conductors*, Phys. Rev. B **58**, 8009 (1998).
- [24] H. Schomerus and C.W. Beenakker, *Search for two-scale localization in disordered wires in a magnetic field*, Phys. Rev. Lett. **84**, 3927 (2000).
- [25] M. Weiss, T. Kottos, T. Geisel, *Spreading and localization of wavepackets in disordered wires in a magnetic field*, submitted to Phys. Rev. Lett., cond-mat/0005339.
- [26] Y.V. Fyodorov, A.D. Mirlin, *Statistical properties of eigenfunctions of random quasi 1D one-particle Hamiltonians*, Int. J. Mod. Phys. **8**, 3795 (1994).
- [27] M. Weiss, T. Kottos, T. Geisel, *Scaling properties of one-dimensional Anderson models in an electric field: Exponential versus factorial localization*, Phys. Rev. B **62**, 1765 (2000).
- [28] R.S. MacKay, J.D. Meiss, I.C. Percival, *Transport in Hamiltonian Systems*, Physica D **13**, 55 (1984).

- [29] J. D. Hanson, J. R. Cary, J. D. Meiss, *Algebraic Decay in Self-similar Markov Chains*, J. Stat. Phys. **39**, 327 (1985).
- [30] J. D. Meiss, E. Ott, *Markov-Tree model of intrinsic transport in Hamiltonian systems*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2741 (1985).
- [31] T. Geisel, A. Zacherl, G. Radons, *Generic  $1/f$  noise in chaotic Hamiltonian dynamics*, Phys. Rev. Lett. **59**, 2503 (1987).
- [32] J.D. Meiss, *Symplectic maps, variational principles, and transport*, Rev. Mod. Phys. **64**, 795 (1992).
- [33] J. D. Meiss, *Average exit time for volume-preserving maps*, Chaos **7**, 139 (1997).
- [34] R.S. MacKay, J.D. Meiss, I.C. Percival, *Stochasticity and Transport in Hamiltonian Systems*, Phys. Rev. Lett. **52**, 697 (1984).
- [35] S. Aubry, G. Andre in *Solitons and Condensed Matter Physics*, ed. A.R. Bishop and T. Schneider, 264, Springer (1978).
- [36] I.C. Percival, in *Nonlinear Dynamics and the Beam-Beam-Interaction -1980*, ed. M. Month and J.C. Herrera, AIP Conference Proceedings No. 57, 1179 (1980).
- [37] B.V. Chirikov, D.L. Shepelyansky, in *Proceedings of the IXth Intern. Conf on Non-linear Oscillations, Kiev, 1981 [Naukova Dumka **2**, 420 (1984)]* (engl. Übersetzung: Princeton University Report No. PPP-TRANS-133, 1983).
- [38] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, Springer Series in Synergetics Bd. 54, Springer-Verlag (1991).
- [39] R. Ketzmerick, K. Kruse, T. Geisel, *Avoided band crossings: Tuning metal-insulator transitions in chaotic systems*, Phys. Rev. Lett. **80**, 137 (1998).
- [40] K. Kruse, *Spektrale und dynamische Eigenschaften ausgedehnter Quantensysteme*, Dissertation, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Bericht 15/1998 (1998).
- [41] B.V. Chirikov, *A universal instability of many-dimensional oscillator systems*, Phys. Rep. **52**, 263 (1979).
- [42] G. Casati, B.V. Chirikov, J. Ford, F.M. Izrailev, , Lect. Notes Phys **93**, 334 (1979).
- [43] F.L. Moore, J.C. Robinson, C.F. Bharucha, B. Sundaram, M.G. Raizen, *Atom optics realization of the quantum delta-kicked rotor*, Phys. Rev.Lett. **75** 4598 (1995).
- [44] B.V. Chirikov, D.L. Shepelyansky, *Correlation properties of dynamical chaos in Hamiltonian systems*, Physica D **13**, 395 (1984).

- [45] O. Bohigas, *Random Matrix Theories and Chaotic Dynamics*, in *Chaos and Quantum Physics, Les Houches 1989, Session LII*, North Holland (1991).
- [46] T. Guhr, A. Müller-Groeling, H.A. Weidenmüller, *Random Matrix Theories in Quantum Physics: Common Concepts*, Phys. Rep. **299**, 189 (1998).
- [47] M.L. Mehta, *Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels*, Academic Press (1990).
- [48] O. Bohigas, M.J. Giannoni, C. Schmit, *Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws*, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
- [49] M.V. Berry, M. Tabor, *Level clustering in the regular spectrum*, Proc. R. Soc. London Ser. A **356**, 375 (1977).
- [50] A. Einstein, *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verh. Deutsch. Phys. Ges. **19**, 82 (1917).
- [51] V.F. Lazutkin, *KAM Theory and Semiclassical Approximations to Eigenfunctions*, Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete 3. Folge, Band 24, Springer-Verlag (1993).
- [52] I. C. Percival, *Regular and irregular spectra*, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys **6**, L229 (1973).
- [53] M.V. Berry, *Regular and irregular semiclassical wavefunctions*, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 2083 (1977).
- [54] M.V. Berry, M. Robnik, *Semiclassical level spacings when regular and chaotic orbits coexist*, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 2413 (1984).
- [55] T. Prosen, M. Robnik, *Semiclassical energy level statistics in the transition region between integrability and chaos: transition from Brody-like to Berry-Robnik behaviour*, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 8059 (1994).
- [56] T. Prosen, M. Robnik, *Numerical demonstration of the Berry-Robnik level spacing distribution*, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, L459 (1994).
- [57] T. Prosen, *Numerical demonstration of the semiclassical matrix element probability distribution between integrability and chaos*, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 569 (1994).
- [58] T.A. Brody, *A statistical measure for the repulsion of energy levels*, Lett. Nuovo Cimento **7**, 482 (1973).
- [59] S.-J. Chang, K.-J. Shi, *Evolution and exact eigenstates of a resonant quantum system*, Phys. Rev. A **34**, 7 (1986).

- [60] J.U. Nöckel, A.D. Stone, *Ray and wave chaos in asymmetric resonant optical cavities*, Nature **385**, 45 (1997).
- [61] C. Gmachl, F. Capasso, E.E. Narimanov, J.U. Nöckel, A.D. Stone, J. Faist, D.L. Sivco, A.Y. Cho, *High-Power Directional Emission from Microlasers with Chaotic Resonators*, Science **280**, 1556 (1998).
- [62] E.J. Heller, *Bound-state eigenfunctions of classically chaotic Hamiltonian systems: Scars of periodic orbits*, Phys. Rev. Lett. **53**, 1515 (1984).
- [63] S. Sridhar, *Experimental observation of scarred eigenfunctions of chaotic microwave cavities*, Phys. Rev. Lett. **67**, 785 (1991).
- [64] L. Kaplan, E.J. Heller, *Linear and Nonlinear Theory of Eigenfunction Scars*, Ann. Phys. **264**, 171 (1998).
- [65] G. Radons, R. Prange, *Wave functions at the critical Kolmogorov-Arnold-Moser-Surface*, Phys. Rev. Lett. **61**, 1691 (1988).
- [66] Ya.B. Pesin, Russ. Math. Surveys **32**, 55 (1977).
- [67] O. Bohigas, S. Tomsovic, D. Ullmo, *Manifestations of classical phase space structures in quantum mechanics*, Phys. Rep. **223**, 45 (1993).
- [68] S. Fishman, D.R. Grempel, R.E. Prange, S. Fishman, *Temporal crossover from classical to quantal behaviour near dynamical critical points*, Phys. Rev. A **36**, 289 (1987).
- [69] G. Casati, G. Maspero, D.L. Shepelyansky, *Quantum Poincare Recurrences*, Phys. Rev. Lett. **82**, 524 (1999).
- [70] G. Casati, G. Maspero, D.L. Shepelyansky, *Relaxation process in a regime of quantum chaos*, Phys. Rev. E **56**, R6233 (1997).
- [71] D.V. Savin, V.V. Sokolov, *Quantum versus classical decay laws in open chaotic systems*, Phys. Rev. E **56**, R4911 (1997).
- [72] K.M. Frahm, *Quantum relaxation in open chaotic systems*, Phys. Rev. E **56**, R6237 (1997).
- [73] F. Borgonovi, I. Guarneri, *Statistics of lifetimes in a classically chaotic system*, Phys. Rev. A **43**, 4517 (1991).
- [74] G. Casati, G. Maspero, D.L. Shepelyansky, *Quantum Fractal Eigenstates*, Physica D **131**, 311 (1999).
- [75] L. Hufnagel, Dissertation, in Vorbereitung.
- [76] F. Steinbach, Dissertation, in Vorbereitung.

- [77] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Springer (1998).
- [78] R. Grobe, F. Haake, H.J. Sommers, *Quantum Distinction of Regular and Chaotic Dissipative Motion*, Phys. Rev. Lett. **61**, 1899 (1988).
- [79] D.L. Shepelyansky, *Localization of diffusive excitation in multi-level systems*, Physica D **28**, 103 (1987).
- [80] D.R. Grempel, R.E. Prange, S. Fishman, *Quantum dynamics of a nonintegrable system*, Phys. Rev. A **29**, 1639 (1984).
- [81] F.M. Izrailev, *Simple models of quantum chaos: Spectrum and Eigenfunctions*, Phys. Rep. **196**, 299 (1990).
- [82] F.M. Izrailev, T. Kottos, A. Politi, S. Ruffo and G.P. Tsironis, *Quantum diffusion and localization of wavepackets in disordered media*, Europh. Lett. **34**, 441 (1996).
- [83] F.M. Izrailev, T. Kottos, A. Politi, G.P. Tsironis, *Evolution of wave packets in quasi-one-dimensional and one-dimensional random media: Diffusion versus localization* Phys. Rev. E **55**, 4951 (1997).
- [84] A.A. Gogolin, *Localization of electrons in a one-dimensional strongly disordered conductor*, Sov. Phys. JETP, **44**, 1003 (1976).
- [85] O.V. Zhirov, *Density-Density Correlators in Infinite Random Matrices*, chaodyn/9712001 (1997).
- [86] J.P. Bouchaud, *A theory of magnetoconductance in Anderson insulators*, J. Phys. I (Paris) **1**, 985 (1991).
- [87] I.V. Lerner and Y. Imry, *Magnetic-field dependence of the localization length in Anderson insulators*, Europhys. Lett. **29**, 49 (1995).
- [88] R.E. Borland, Proc. R. Soc. London A **274**, 529 (1963).
- [89] G. Casati, R. Graham, I. Guarneri, F.M. Izrailev, *Tunneling between localized states in classically chaotic systems*, Phys. Lett. A **190** 159 (1994).
- [90] R. Blümel and U. Smilansky, *Symmetry Breaking and Localization in Quantum Chaotic Systems*, Phys. Rev. Lett. **69**, 217 (1992).
- [91] K.B. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos* Cambridge University Press, New York, (1997).
- [92] B.V. Chirikov, *Time-dependent Quantum Systems*, in *Chaos and Quantum Physics, Les Houches 1989, Session LII*, North Holland (1991).

- [93] M. Luban, J.H. Luscombe, *Localization by electric fields in one-dimensional tight-binding systems*, Phys. Rev. B **34**, 3674 (1986).
- [94] C.L. Roy, P.K. Mahapatra, *Bloch electrons in finite crystals in the presence of a uniform electric field*, Phys. Rev. B **25**, 1046 (1982).
- [95] H. Fukuyama, R.A. Bari, H.C. Fogedby, *Tightly bound electrons in a uniform electric field*, Phys. Rev. B **8**, 5579 (1973).
- [96] G.H. Wannier, Phys. Rev. **117**, 432 (1960).
- [97] E.E. Mendez, F. Agullo-Rueda, J.M. Hong, *Stark localization in GaAs-GaAlAs superlattices under an electric field*, Phys. Rev. Lett. **60**, 2426 (1988).
- [98] R.H. Yu, *Wannier-Stark localization in modulation-doped multiple-quantum-well structures*, Phys. Rev. B **49**, 4673 (1994).
- [99] F. Bloch, Z. Phys. **52**, 555 (1928).
- [100] C. Zener, Proc. R. Soc. (London) Ser. A **145**, 523 (1934).
- [101] V.I. Oseledec, Trans. Moscow Math. Soc. **19**, 197 (1968).
- [102] C. Papatrantafillou, E.N. Economou *Eigenfunctions in one-dimensional disordered systems. II. Results and discussion*, Phys. Rev. B **13**, 920 (1976).
- [103] G. Casati, I. Guarneri, F.M. Izrailev, R. Scharf, *Scaling behavior of localization in quantum chaos*, Phys. Rev. Lett. **64**, 5 (1990).
- [104] G. Casati, B. Chirikov, I. Guarneri, F.M. Izrailev, *Band-random-matrix model for quantum localization in conservative systems*, Phys. Rev. E **48**, R1613 (1993).
- [105] M. Feingold, A. Gioletta, F.M. Izrailev, L. Molinari, *Two-Parameter Scaling in the Wigner Ensemble*, Phys. Rev. Lett. **70**, 2936 (1993).
- [106] I.V. Kolokolov, *The spatial statistical properties of wave functions in a disordered finite one-dimensional sample*, Europhys. Lett. **28**, 193 (1994).
- [107] G. Casati, I. Guarneri, F. Izrailev, S. Fishman, L. Molinari, *Scaling of the information length in 1D tight-binding models*, J. Phys. Cond. Matt. **4**, 149 (1992).
- [108] F.M. Izrailev, T. Kottos, G.P. Tsironis, *Scaling properties of the localization length in one-dimensional paired correlated binary alloys of finite size*, J. Phys. Cond. Matt. **8**, 2823 (1996).
- [109] L. Molinari, *Scaling of distribution eigenvectors in a 1D Anderson model*, J. Phys. Cond. Matt. **5**, L319 (1993).

- [110] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [111] K. Husimi, Progr. Phys. Math. Soc. Japan **22**, 264 (1940).
- [112] G. Fischer, *Lineare Algebra*, Vieweg (1975).
- [113] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical recipes in C*, 2. Aufl., Cambridge University Press (1992).
- [114] A. Politi, S. Ruffo, L. Tessieri, *Time evolution of wave-packets in quasi-1D disordered media*, Eur. Phys. J. B **14**, 673 (2000).

# Danksagung

Prof. Dr. Theo Geisel möchte ich für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe und die vielfältigen Möglichkeiten zur Weiterbildung danken, die er mir im Verlaufe meiner Arbeit gab. Sein immerwährendes Engagement für das Wohlergehen der Arbeitsgruppe kann nicht hoch genug eingeschätzt werden.

Priv.Do. Dr. Roland Ketzmerick und Dr. Tsampikos Kottos danke ich für die vielen interessanten Diskussionen und Anregungen bei der Bearbeitung der verschiedenen Themen.

Prof. Dr. Oswald Haan sei an dieser Stelle für die Hilfe beim Umgang mit der CRAY T3E und insbesondere die Implementation der parallelen FFT-Routinen am Anfang des Projekts 'Quantensignaturen gemischter Phasenräume' gedankt.

Lars Hufnagel möchte ich für die fruchtbare Zusammenarbeit und die vielen erhellenden Diskussionen danken.

Dr. Wolf-Dieter Brandt, Dr. Udo Ernst und Dr. Ragnar Fleischmann danke ich für die vielfältigen Hilfen und Tips im täglichen Kampf mit den Rechnern.

Allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Steffen Arnrich, Rita Bartels, Matthias Bethge, Dmitri Bibitchkov, Dirk Brockmann, Markus Diessmann, Silke Dodel, Michael Hermann, Matthias Kaschube, Karsten Kruse, Norbert Mayer, Björn Naundorf, Alexander Ossipov, Marc-Felix Otto, Hans-Ekkhard Plessner, Holger Schanz, Olaf Scherf, Michael Schnabel, Dennis Springguth, Frank Steinbach, Tom Tetzlaff, Marc Timme, Corinna Trautsch, Fred Wolf möchte ich für die gute Atmosphäre in der Gruppe danken.

Meiner Frau Birgit, meinen Eltern sowie meinen Freunden möchte ich hier danken für ihre Geduld mit mir in schwierigen Phasen.