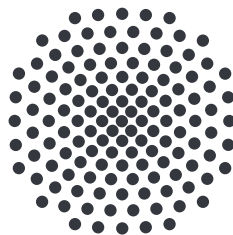


# Hoch angeregte Resonanzen im Absorptionsspektrum von Kupferoxydul in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern

Bachelorarbeit von  
**Matthias Schmidt**

19. August 2018

Prüfer: Prof. Dr. Jörg Main



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



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>5</b>
1.1. Motivation und Einführung in das Thema . . . . .	5
1.2. Aufbau der Arbeit . . . . .	6
<b>2. Theoretische Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1. Exzitonen . . . . .	7
2.1.1. Kupferoxydul . . . . .	8
2.2. Hamiltonfunktion von Kupferoxydul in gekreuzten Feldern . . . . .	9
2.3. Regularisierung . . . . .	12
2.4. Stabilität der Bahnen . . . . .	15
2.5. Closed-Orbit-Theorie . . . . .	17
2.6. Harmonische Inversion . . . . .	19
<b>3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen</b>	<b>23</b>
3.1. Geschlossen periodische Bahnen in der $xy$ -Ebene . . . . .	23
3.1.1. Numerische Suche der Bahnen . . . . .	23
3.1.2. Diskussion der geschlossen periodischen Bahnen . . . . .	26
3.1.3. Vergleich der Bahnen mit Wasserstoff . . . . .	27
3.2. Stabilitätsuntersuchung . . . . .	31
3.2.1. Vergleich mit Wasserstoff . . . . .	33
3.3. Berechnung der Spektren . . . . .	35
3.3.1. Bestimmung des Maslovindex . . . . .	37
3.3.2. Berechnung der Antwortfunktion . . . . .	38
3.3.3. Vergleich mit Wasserstoff . . . . .	40
3.3.4. Harmonische Inversion . . . . .	42
<b>4. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>45</b>
<b>A. Atomare Einheiten</b>	<b>47</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>49</b>
<b>Danksagung</b>	<b>51</b>



# 1. Einleitung

## 1.1. Motivation und Einführung in das Thema

Seit der theoretischen Beschreibung von Exzitonen durch Frenkel [1], Peierls [2] und Wannier [3] und deren erster experimentellen Nachweis in Kupferoxydul durch Hayashi und Katsuki in 1950 [4, 5], sowie Gross und Karryjew in 1952 [6], ist das physikalische Interesse auf dem Forschungsgebiet der Exzitonen über die letzten Jahrzehnte nicht zuletzt deshalb gestiegen, weil interessante Teile des Spektrums im sichtbaren und ultravioletten Teil liegen [7]. Die Arbeitsgruppe um Kazimierczuk *et al.* [8] schaffte es 2014 ein nahezu perfektes Wasserstoffspektrum für die gelbe Exzitonserie in Kupferoxydul bis zu einer Hauptquantenzahl von  $n = 25$  aufzuzeichnen. Dies bestätigte das wasserstoffähnliche Verhalten der Exzitonen, die aus einem angeregten Elektron im Leitungsband und einem positiv geladenen Loch im Valenzband bestehen. Die Untersuchung von Kupferoxydul in starken gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern findet in der Störungstheorie keine korrekten Lösungen. Die klassische Relativbewegung aus Elektron und Loch weist allerdings kurze geschlossene Bahnen durch den Ursprung auf. Für diese Bahnen wurde eine semiklassische Theorie zur Berechnung von Photoabsorptionsspektren aufgestellt, die Closed-Orbit-Theorie. Sie wurde von Du und Delos [9] entwickelt, um wasserstoffähnliche Rydbergatome in äußeren Magnetfeldern durch klassische Elektronenbahnen beschreiben zu können. Diese kann auf einfache Weise um ein elektrisches Feld erweitert werden. Die Elektronenbahnen müssen dann allerdings numerisch berechnet werden. Aufgrund der guten Ergebnisse [9], die durch die Closed-Orbit-Theorie erzielt wurden, findet diese in wasserstoffähnlichen Systemen Anwendung. In einer früheren Arbeit von Marcel Wagner [10] wurde die Closed-Orbit-Theorie auf Wasserstoff in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern angewandt. Der Vergleich mit exakten quantenmechanischen Rechnungen von Frank Schweiner [11] zeigten, dass auch in diesem System die Anwendung der Theorie gute Übereinstimmung mit den exakten Lösungen findet. In der vorliegenden Arbeit soll diese Theorie nun auf das wasserstoffähnliche System der Exzitonen in Kupferoxydul angewendet werden und mit den Ergebnissen von Wasserstoff verglichen werden.

## 1.2. Aufbau der Arbeit

Zu Beginn der Arbeit wird in Kapitel 2 eine Einführung in die Begrifflichkeit der Exzitonen gegeben, wie sie im Rahmen dieser Arbeit verwendet wird. Zusätzlich wird ein kurzer Einblick in den Festkörper Kupferoxydul gegeben, in dem die Exzitonen experimentell zuerst nachgewiesen wurden. Anschließend wird in den theoretischen Grundlagen gezeigt, wie die vereinfachten Charakteristiken des Festkörpers elegant im wasserstoffähnlichen System der Rydberg-Exzitonen berücksichtigt werden können und wie die Behandlung in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern aussieht. In Kapitel 3 wird die Suche der Bahnen in der  $xy$ -Ebene beschrieben und die Bahnen in ihrer Struktur analysiert. Die gefundenen geschlossen periodischen Bahnen werden im Anschluss mittels der Stabilitätsmatrix auf ihre Stabilität untersucht. Ziel der Arbeit ist es, die notwendigen Schritte bis hin zur Berechnung der Photoabsorptionsspektren mit Hilfe der Closed-Orbit-Theorie aus den semiklassischen Bahnen mittels der Harmonischen Inversion zu vollziehen. Hierfür wird die semiklassische Antwortfunktion und deren Fouriertransformierte benötigt. Am Ende jedes Abschnittes werden die Ergebnisse mit dem Wasserstoffatom verglichen.

# 2. Theoretische Grundlagen

## 2.1. Exzitonen

Der Grundzustand eines Halbleiters zeichnet sich dadurch aus, dass das Valenzband vollständig gefüllt ist und sich gleichzeitig keine Elektronen im Leitungsband befinden. Durch die Wechselwirkung zwischen Licht und den Elektronen im Valenzband können diese in das Leitungsband des Festkörpers angeregt werden. Das fehlende Elektron im Valenzband hinterlässt ein Loch, das als lokal positive Ladung mit effektiver Masse  $m_h$  angesehen werden kann.

Als Exziton wird das Quasi-Teilchen aus dem angeregten Elektron im Leitungsband und dem hinterlassenen Loch im Valenzband bezeichnet. Die entgegengesetzten Ladungen wechselwirken mittels einer Coulomb-Interaktion und können im einfachsten Fall durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = E_g + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (2.1)$$

beschrieben werden. Dabei wird das Elektron mit e (engl. *electron*) und das Loch mit h (engl. *hole*) indiziert. Die Energie der Bandlücke  $E_g$  ist konstant und muss vom Elektron bei seiner Anregung überwunden werden. Die Bandlückenenergie spielt für die Bewegungsgleichungen keine Rolle und muss daher für deren Herleitung nicht weiter berücksichtigt werden. Der beschriebene Prozess der Anregung des Elektrons aus dem Valenzband in das Leitungsband, bei dem nur zwei Bänder beteiligt sind, stellt eine vereinfachte Betrachtung der komplexen Bandstruktur dar. Die restlichen Bänder werden durch die Dielektrizitätskonstante  $\epsilon$  berücksichtigt. Diese Konstante ist bei kubischer Symmetrie üblicherweise isotrop [12]. Die Struktur der Hamiltonfunktion der Exzitonen ähnelt stark dem Hamiltonian von Wasserstoff. Man spricht daher auch von einem wasserstoffähnlichen System. Die Wasserstoffanalogie kann weiter ausgeweitet werden. Die Rydbergenergie  $E_R$  und der Bohrradius  $a_0$  sind analog zum Wasserstoff definiert und skalieren mit den Werten in Wasserstoff,

$$E_{R,\text{exc}} = E_{R,H} \frac{\mu}{m_0\epsilon^2}, \quad a_{\text{exc}} = a_0 \frac{m_0\epsilon}{\mu}. \quad (2.2)$$

Die reduzierte Masse  $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$  in einem Zweikörperproblem unterscheidet sich im Allgemeinen von der reduzierten Masse in Wasserstoff. Für Wasserstoff lässt sich, aufgrund des großen Massenverhältnisses zwischen Kern und Elektron von  $m_p \simeq$

$1836 m_e$ , die reduzierte Masse zu  $\mu_H \approx m_e$  vereinfachen. Das Masseverhältnis des Loches zum Elektron liegt in einem Festkörper in derselben Größenordnung und die reduzierte Masse muss explizit berechnet werden. Setzt man in Gl. (2.2) typische Materialparameter ein, so findet man

$$1 \text{ meV} \leq E_{R,\text{exc}} \leq 200 \text{ meV} \ll E_g \quad (2.3)$$

und

$$50 \text{ nm} \geq a_{\text{exc}} \geq 1 \text{ nm} \geq a. \quad (2.4)$$

Da der Bohrradius von Exzitonen deutlich größer als die Gitterkonstante des Festkörpers, in dem sie auftreten, ist, breiten sich deren Orbitale weit über die Einheitszellen aus. Dadurch lässt sich die Kontinuitätsapproximation rechtfertigen, die die Isotropie der Dielektrizität und die effektiven Massen in einem Festkörper annimmt [7].

### 2.1.1. Kupferoxydul

Die theoretische Untersuchung der Resonanzen im Absorptionsspektrum wird für Kupferoxydul durchgeführt. Deshalb soll eine kurze Einführung in den Festkörper gegeben werden. Kupferoxydul ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ) ist ein rötlich brauner Festkörper, der in einer kubischen Gitterstruktur kristallisiert. Die Sauerstoffionen ordnen sich dabei in einem *bcc* (*body-centered-cubic*) und die Kupferionen in einem *fcc* (*face-centered-cubic*) Subgitter an [7]. Die Gitterkonstante in der Pseudodiamantstruktur [13] beträgt  $a = 0,42696 \text{ nm}$ . Aufgrund seiner geringen Leitfähigkeit [14] findet Kupferoxydul kaum technische Anwendung und ist daher unter den Halbleitern wenig verbreitet. Seit dem experimentellen Nachweis von Exzitonen durch Hayashi und Katsuki in 1950 [4], sowie Gross und Karryjew in 1952 [6], ist im Rahmen der physikalischen Grundlagenforschung von Rydberg-Exzitonen das Interesse an Kupferoxydul gestiegen.

Die Größe der dipolaktiven P-Exzitonen wurde durch Gallagher mittels der Formel [15]

$$\langle r \rangle = \frac{1}{2} a_{\text{exc}} [3n^2 - L(L + 1)], \quad (2.5)$$

auf einen mittleren Radius von  $\langle r \rangle = 1,04 \mu\text{m}$  bestimmt. Dafür wurde der Bohrradius für Exzitonen von  $a_{\text{exc}} = 1,11 \text{ nm}$  verwendet und die P-Exzitonen besitzen einen Drehimpuls von  $L = 1$ . Der mittlere Bahnradius ist somit über 2000 mal größer als die Gitterkonstante des Festkörpers.

Kupferoxydul eignet sich für Untersuchung von Exzitonen besonders gut, da die Rydberg-Energie für Exzitonen mit ungefähr  $E_R \approx 92 \text{ meV}$  im Vergleich mit anderen Halbleitern, zum Beispiel GaAs mit  $E_{R,\text{GaAs}} \approx 4,2 \text{ meV}$ , groß ist. Die Energie der Rydbergzustände lässt sich mit

$$E_n = E_g - \frac{E_R}{(n - \delta_P)^2} \quad (2.6)$$



Tabelle 2.1.: Verwendete Materialparameter von Kupferoxydul. Zusätzlich wurde die reduzierte Masse  $\mu$  berechnet und mit aufgeführt [16].

Elektronenmasse	$m_e = 0,99 m_0$
Lochmasse	$m_h = 0,58 m_0$
Energie der Bandlücke	$E_g = 2,17208 \text{ eV}$
Dielektrizitätskonstante	$\varepsilon = 7,5$
reduzierte Masse	$\mu = 0,365 m_0$

an experimentelle Daten fitten. Die daraus resultierenden Werte für die beiden Fitparameter  $\delta_P$  und  $E_g$  ergeben sich zu

$$\delta_P = 0,23 \quad \text{und} \quad E_g = 2,17208 \text{ eV} [8]. \quad (2.7)$$

Dabei stellt  $\delta_P$  den Quantendefekt und  $E_g$  die Energie der Bandlücke dar. Die für die vorliegende Arbeit verwendeten Materialparameter von Kupferoxydul sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst [16]. Zusätzlich wird die reduzierte Masse  $\mu$  berechnet und in die Tabelle mit aufgenommen, da diese für Exzitonen in  $\text{Cu}_2\text{O}$  eine entscheidende Rolle spielt.

## 2.2. Hamiltonfunktion von Kupferoxydul in gekreuzten Feldern

Für die Hamiltonfunktion in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern werden die Felder derart angelegt, dass

$$\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z, \quad \mathbf{F} = F\mathbf{e}_x, \quad (2.8)$$

gilt. Die Felder werden durch das Prinzip der minimalen Kopplung in die Hamiltonfunktion eingeführt. Für die Impulse und die Energie des Systems folgt daraus die Transformation

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}, \quad (2.9a)$$

$$E \rightarrow E - q\Phi. \quad (2.9b)$$

Dabei stellt  $\mathbf{A}$  das Vektorfeld und  $\Phi$  das Skalarfeld aus der Elektrodynamik dar. Für  $q$  wird jeweils die Ladung der Teilchen eingesetzt. Das Loch besitzt die Ladung  $q_h = +e$ , das Elektron  $q_e = -e$ . Aufgrund der Homogenität der Felder wird eine symmetrische Eichung gewählt, so dass sich für  $\mathbf{A}$  und  $\Phi$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2}B \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Phi = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{F} = -xF, \quad (2.10)$$

ergibt. Für das Lösen der Hamiltonfunktion aus Gl. (2.1) wird das Zweikörperproblem in seine Schwer- bzw. Relativkomponenten aufgeteilt [17],

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h, \quad (2.11a)$$

$$\mathbf{p} = \frac{m_h \mathbf{p}_e - m_e \mathbf{p}_h}{m_e + m_h}, \quad (2.11b)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h}{m_e + m_h}, \quad (2.11c)$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_h. \quad (2.11d)$$

Die Schwerpunktskoordinate soll in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt werden und der Fokus auf die Relativbewegung des Elektron-Loch-Paares gelegt werden. Die Relativkoordinate wird mit  $r$  und der Relativimpuls mit  $p$  gekennzeichnet. Für die Hamiltonfunktion ergibt sich nach einigen Rechenschritten

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu} \mathbf{p}^2 + \frac{1}{2} \underbrace{\frac{m_h - m_e}{m_e m_h}}_{=1/\mu^*} L_z B + \frac{1}{8} \rho^2 B^2 + Fx - \frac{1}{\varepsilon r} = E. \quad (2.12)$$

Dabei steht  $L_z = xp_y - yp_x$  für die  $z$ -Komponente des Drehimpulses und  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  stellt den auf die  $xy$ -Ebene projizierten Abstand zum Ursprung dar. Die Größe  $\mu^*$  wird aufgrund ihrer Ähnlichkeit mit der Berechnung der reduzierten Masse  $\mu$  eingeführt. Gleichung (2.12) beinhaltet bereits atomare Einheiten. Für den Materialparameter  $\varepsilon$  und die effektiven Massen  $m_e, m_h, \mu$  wird ein Einheitensystem konstruiert, dass die Materialparameter in  $\text{Cu}_2\text{O}$  berücksichtigt und zusätzlich die reduzierte Masse als atomares Maß für Massen verwendet (siehe Anhang A). Führt man dieses Einheitensystem in Gl. (2.12) ein, so kann der gesamte Einfluss von Kupferoxydul auf die Exzitonen in einen Vorfaktor  $\kappa$  zusammengefasst werden,

$$\kappa = \frac{\mu}{\mu^*} = \frac{m_h - m_e}{m_e + m_h} = -0,2611. \quad (2.13)$$

Die endgültige Hamiltonfunktion der betrachteten Exzitonen lässt sich somit ausdrücken als

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 + \frac{1}{2} \kappa L_z B + \frac{1}{8} \rho^2 B^2 + Fx - \frac{1}{r} = E. \quad (2.14)$$

Genauer zur Konstruktion des Einheitensystem in  $\text{Cu}_2\text{O}$  und den daraus folgenden Werten für die betrachteten physikalischen Größen im Vergleich zum Wasserstoffatom kann dem Anhang A entnommen werden. In dem Vorfaktor  $\kappa$  manifestiert sich der Einfluss der Materialparameter und der effektiven Massen in Kupferoxydul. Er stellt

den mathematischen Unterschied zwischen Wasserstoff und dem Kupferoxydul dar. Das Vorzeichen von  $\kappa_{\text{Cu}_2\text{O}}$  ist negativ und der Betrag kleiner als er in Wasserstoff ist,

$$|\kappa_{\text{Cu}_2\text{O}}| < \kappa_{\text{H}} = 1 \quad (2.15)$$

Für Wasserstoff (H, engl. *Hydrogen*) wird diesem Faktor keine besondere Bedeutung zuteil, da er dort unter der Annahme eines unendlich schweren Kerns zu  $\kappa_{\text{H}} = 1$  wird und folglich in den Gleichungen nicht auftaucht. Besonders anzumerken ist das unterschiedliche Vorzeichen der beiden Faktoren  $\kappa_i$ . Die Wirkung des paramagnetischen Terms  $\kappa_i BL_z/2$  wirkt bei positivem Vorzeichen in dieselbe Richtung als der Term, der Proportional zu  $\mathbf{B}^2$  ist,  $\propto \mathbf{B}^2$ . Für das negative Vorzeichen, das in Kupferoxydul auftritt, wirken diese Terme entgegengesetzt. Für die weitere theoretische Behandlung der Bewegungsgleichungen wird die Indizierung von  $\kappa$  fallen gelassen. Da die Herleitung die Exzitonbewegung in Kupferoxydul behandeln soll, wird  $\kappa = \kappa_{\text{Cu}_2\text{O}}$ , solange nicht explizit ein Vergleich mit Wasserstoffatom gezogen wird.

Die Hamiltonfunktion aus Gl. (2.14) besitzt eine klassische Skalierungseigenschaft, die es ermöglicht die freien Parameter Energie  $E$ , elektrische Feldstärke  $F$  und magnetische Flussdichte  $B$  auf zwei Parameter zu reduzieren,

$$\tilde{E} = EB^{-\frac{2}{3}}, \quad \tilde{F} = FB^{-\frac{4}{3}}. \quad (2.16)$$

Durch die Skalierung der Gleichungen verändern sich in Folge die Ortsvektoren  $\mathbf{r}$ , Impulse  $\mathbf{p}$  und die Zeit  $t$ ,

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}B^{\frac{2}{3}}, \quad \tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p}B^{-\frac{1}{3}}, \quad \tilde{t} = tB. \quad (2.17)$$

Die Skalierung bezüglich des Magnetfeldes eliminiert dieses aus der Hamiltonfunktion und tritt erst wieder in Erscheinung, wenn die Größen  $\tilde{E}, \tilde{F}$  reskaliert werden sollen:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{p}}^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2}\kappa(\tilde{x}\tilde{p}_y - \tilde{y}\tilde{p}_x) + \frac{1}{8}(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) + \tilde{x}\tilde{F}. \quad (2.18)$$

Die Größen  $L_z$  und  $\rho$  wurden in Gl. (2.14) wieder rücks substituiert, um die Herleitung der Bewegungsgleichungen besser nachvollziehen zu können. Im Folgenden werden skalierte Größen ohne Tilde geschrieben, da alle auftretenden Größen skaliert sind, sofern nichts anderes angegeben ist. Durch Einführen des Vektors  $\boldsymbol{\gamma} = (\mathbf{r}, \mathbf{p})^T$ , der die kanonischen Orts- und Impulskoordinaten enthält, lassen sich die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen in eleganter Form kompakt schreiben als

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{J} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{\gamma}}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Explizit ausgeschrieben ergeben sich die Differentialgleichungen für die Orts- und Impulskoordinaten wie folgt,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{r} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{p} + \frac{\kappa}{2}(\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}), \quad (2.20a)$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\mathbf{r}}{r^3} + \frac{\kappa}{2}(\mathbf{e}_z \times \mathbf{p}) - \frac{1}{4}(x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y) - F\mathbf{e}_x, \quad (2.20b)$$

wobei die Vektoren  $\mathbf{e}_i$  die Einheitsvektoren in  $(x,y,z)$ -Richtung darstellen. Die gesuchten Bahnen der Elektronenbewegung sollen Kernbahnen sein, die nach gewisser Integrationszeit wieder im Kern enden. Für diese geschlossen periodischen Bahnen tritt bei Annäherung an den Kern für  $r \rightarrow 0$  ein divergentes Verhalten der kanonischen Impulse auf. Dieses Problem kann behoben werden, in dem man in regularisierte Koordinaten mittels einer Kustaanheimo-Stiefel-Transformation wechselt. Diese werden im folgenden Abschnitt eingeführt.

### 2.3. Regularisierung

Die auftretende Singularität des kanonischen Impulses am Kernort soll mittels einer Transformation verhindert werden. Die hier vorgestellte Transformation wurde erstmals von Kustaanheimo und Stiefel [18, 19] verwendet und kann nur in 1-,2-,4- und 8-dimensionalen Räumen auftreten. Um die Transformation durchführen zu können, müssen die Bewegungsgleichungen um eine Dimension erweitert werden. Dazu wird der Ortsvektor, sowie der Impuls, um eine Nullkomponente erweitert,

$$\mathbf{r} \rightarrow (x,y,z,0)^T, \quad (2.21a)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow (p_x, p_y, p_z, 0)^T. \quad (2.21b)$$

Die surjektive Abbildung,

$$\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4, \quad \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{L}(\mathbf{U}) \quad (2.22)$$

bildet den Ortsvektor  $r$  auf eine 4-dimensionale Faser im regularisierten Raum ab. Die Faser ist durch den Faserwinkel  $\alpha$  parametrisiert, der im Folgenden für alle numerischen Berechnungen auf  $\alpha = 0$  gesetzt wird. Durch Einführen der regularisierten Ortskoordinaten  $\mathbf{U} = (U_1, U_2, U_3, U_4)^T$  und der regularisierten Impulse  $\mathbf{P} = (P_1, P_2, P_3, P_4)$ , lässt sich die Abbildung in Matrixschreibweise in expliziter Form angeben,

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{L}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{U} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} U_3 & -U_4 & U_1 & -U_2 \\ U_4 & U_3 & U_2 & U_1 \\ U_1 & U_2 & -U_3 & -U_4 \\ U_2 & -U_1 & -U_4 & U_3 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{U}. \quad (2.23)$$

Das Zeitdifferential  $dt$  wird über

$$dt = 2r d\tau \quad (2.24)$$

skaliert. Dabei ist  $\tau$  die transformierte Zeit, die aus der physikalischen Zeit  $t$  gewonnen werden kann. Die Transformation des Impulses erfolgt über

$$\mathbf{p} = \frac{1}{r} \mathbf{L}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{P}. \quad (2.25)$$

Um die Eindeutigkeit der Bewegungsgleichungen im regularisierten Raum zu erhalten, fordert man, dass die regularisierten Geschwindigkeiten  $\mathbf{U}'$  zu jedem Zeitpunkt senkrecht auf der Faser stehen,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha} \cdot \frac{d\mathbf{U}}{d\tau} = 0. \quad (2.26)$$

Diese Forderung ist äquivalent mit der bilinearen Relation, die eine Erhaltungsgröße im regularisierten Raum darstellt und durch

$$U_2 \frac{dU_1}{d\tau} - U_1 \frac{dU_2}{d\tau} + U_3 \frac{dU_4}{d\tau} - U_4 \frac{dU_3}{d\tau} = 0 \quad (2.27)$$

gegeben ist. Die Herleitung der Bewegungsgleichungen erfolgt analog zu [20], vereinfacht für die Bewegung im reinen Coulombpotential ohne angelegte Felder,

$$\ddot{\mathbf{r}} - \frac{\mathbf{r}}{r^3} = 0. \quad (2.28)$$

Unter Verwendung von Gl. (2.24) ergibt sich

$$r \cdot \mathbf{r}'' - r' \cdot \mathbf{r}' + 4r = 0. \quad (2.29)$$

Die einzelnen Terme werden durch die Relationen

$$\mathbf{r} = \mathbf{L}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{U}, \quad (2.30a)$$

$$\mathbf{r}' = 2\mathbf{L}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{U}', \quad (2.30b)$$

$$\mathbf{r}'' = 2\mathbf{L}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{U}'' + 2\mathbf{L}(\mathbf{U}') \cdot \mathbf{U}', \quad (2.30c)$$

$$r = \frac{1}{2}U^2 \quad (2.30d)$$

$$r' = \mathbf{U} \cdot \mathbf{U}' \quad (2.30e)$$

ersetzt und nach einigen Umformungsschritten kann die Bewegungsgleichung auf die Form des harmonischen Oszillators reduziert werden,

$$\mathbf{U}'' - 2E\mathbf{U} = 0. \quad (2.31)$$

Durch das Einführen des vierdimensionalen Impulses  $\mathbf{P} = \mathbf{U}'$  kann die Hamiltonfunktion auf die folgende Form gebracht werden,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\mathbf{P}^2 - EU^2 = 2. \quad (2.32)$$

Ein Vergleich mit der Hamiltonfunktion im Coulomb-Potential erklärt den Faktor 2 in Gleichung (2.32):

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 - \frac{1}{r} = E &\Rightarrow 2 = 2r(\mathcal{H} - E) + 2 \\ &= rp^2 - 2rE \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{P}^2 - EU^2. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Die Hamiltonfunktion wird für den Fall der gekreuzten Felder zu

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= \frac{1}{2} \mathbf{P}^2 - \left[ E - \frac{1}{2} \kappa L_z + \frac{1}{8} (x^2 + y^2) - Fx \right] \cdot \mathbf{U}^2 \\
 &= \frac{1}{2} \mathbf{P}^2 - [E - F(U_1 U_3 - U_2 U_4)] \mathbf{U}^2 \\
 &\quad + \frac{1}{2} \kappa [(U_1 P_2 - U_2 P_1)(U_3^2 + U_4^2) + (U_3 P_4 - U_4 P_3)(U_1^2 + U_2^2)] \\
 &\quad + \frac{1}{8} (U_1^2 + U_2^2)(U_3^2 + U_4^2) \mathbf{U}^2 \\
 &= 2
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

verallgemeinert. Analog zu den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen in Gl. (2.19) lassen sich die Bewegungsgleichungen in regularisierten Koordinaten kompakt formulieren, indem man den Vektor  $\mathbf{\Gamma} = (\mathbf{U}, \mathbf{P})^T$  einführt,

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{\Gamma} = \mathbf{J} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{\Gamma}}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{2.35}$$

Explizites berechnen der Differentiale, führt auf die Bewegungsgleichungen (2.36),

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{U} = \mathbf{P} + \frac{1}{2} \kappa \begin{pmatrix} -U_2(U_3^2 + U_4^2) \\ U_1(U_3^2 + U_4^2) \\ -U_4(U_1^2 + U_2^2) \\ U_3(U_1^2 + U_2^2) \end{pmatrix} = \mathbf{P} + \mathbf{P}_B(\mathbf{U}(\mathbf{r})), \tag{2.36a}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\tau} \mathbf{P} &= -2Z\mathbf{U} + F\mathbf{U}^2 \begin{pmatrix} -U_3 \\ U_4 \\ -U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \mathbf{U}^2 \begin{pmatrix} U_1(U_3^2 + U_4^2) \\ U_2(U_3^2 + U_4^2) \\ U_3(U_1^2 + U_2^2) \\ U_4(U_1^2 + U_2^2) \end{pmatrix} \\
 &\quad - \kappa \begin{pmatrix} U_1(P_4 U_3 - P_3 U_4) \\ U_2(P_4 U_3 - P_3 U_4) \\ U_3(P_2 U_1 - P_1 U_2) \\ U_4(P_2 U_1 - P_1 U_2) \end{pmatrix} + \frac{\kappa}{2} \begin{pmatrix} -P_2(U_3^2 + U_4^2) \\ P_1(U_3^2 + U_4^2) \\ -P_4(U_1^2 + U_2^2) \\ P_3(U_1^2 + U_2^2) \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{2.36b}$$

wobei die Größe  $Z$  wie folgt definiert ist,

$$Z = -E + F(U_1 U_3 - U_2 U_4) + \frac{1}{8} (U_1^2 + U_2^2)(U_3^2 + U_4^2). \tag{2.37}$$

Die Größe  $\mathbf{P}_B(\mathbf{U}(\mathbf{r}))$  in Gl. (2.36a) wird eingeführt um hervorzuheben, dass die regularisierten Geschwindigkeiten  $\mathbf{U}'$  nur am Kernort mit den regularisierten Impulsen  $\mathbf{P}$  übereinstimmen [11]. In den Bewegungsgleichungen (2.36) sind erneut Skalierungseigenschaften der Bahngleichungen verwendet worden. In regularisierten Koordinaten ergeben sich diese wie folgt,

$$\tilde{\mathbf{U}} = \mathbf{U} B^{-\frac{1}{3}} \quad \tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{P}, \quad \tilde{\tau} = \tau B^{\frac{1}{3}}. \tag{2.38}$$

Die für eine Bahn wichtigen Kenngrößen der Zeit  $t$ , so wie die physikalischen Wirkung  $S$ , können gemäß [11] aus den Differentialgleichungen gewonnen werden,

$$\frac{d}{d\tau}t = \mathbf{U}^2 = 2r, \quad (2.39a)$$

$$\frac{d}{d\tau}S = \mathbf{P}^2 + \frac{\kappa}{2} [(U_1P_2 - U_2P_1)(U_3^2 + U_4^2) + (U_3P_4 - U_4P_3)(U_1^2 + U_2^2)]. \quad (2.39b)$$

Aus dem Zeitdifferential (2.39a) kann am Ende der Bahn die Periodendauer  $T$  bestimmt werden. In regularisierten Koordianten kann diese als ein mittlerer Abstand zum Ursprung interpretiert werden. Für die Umkehrabbildung der Orts- und Impulskomponenten ergibt sich,

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \sqrt{r+z} \cos\left(\frac{\varphi+\alpha}{2}\right) \\ \sqrt{r+z} \sin\left(\frac{\varphi+\alpha}{2}\right) \\ \sqrt{r-z} \cos\left(\frac{\varphi+\alpha}{2}\right) \\ \sqrt{r-z} \sin\left(\frac{\varphi+\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (2.40a)$$

$$\mathbf{P} = \frac{1}{r} \mathbf{L}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{P}. \quad (2.40b)$$

Eine ausführlichere Herleitung der Umkehrabbildung des Impulses  $\mathbf{P}$  kann in [11] gefunden werden.

## 2.4. Stabilität der Bahnen

Die periodischen Bahnen, die als Lösungen der Bewegungsgleichungen (2.36) gefunden werden, sollen auf ihre Stabilität untersucht werden. Diese Untersuchung soll mithilfe einer Stabilitätsmatrix  $\overline{\mathbf{M}}$  erfolgen. Die Stabilitätsmatrix beschreibt in linearer Näherung

$$\gamma(\gamma_0 + d\gamma, t_0 + t) - \gamma(\gamma_0, t_0 + t) = \overline{\mathbf{M}}(\gamma, t) \cdot [\gamma(\gamma_0 + d\gamma, t_0) - \gamma(\gamma_0, t_0)], \quad (2.41)$$

wie sich eine Bahn verhält, wenn ihre Anfangsbedingungen leicht verändert werden. Dabei stellt  $\gamma$  die Bahn im Ortraum dar. Dieselbe Betrachtung kann für Bahnen im regularisierten Raum durchgeführt werden, wenn man  $\gamma$  mit  $\mathbf{\Gamma}$  und  $t$  mit  $\tau$  ersetzt. Schreibt man Gl. (2.41) um, so kann man eine übersichtlichere Definition der Stabilitätsmatrix finden,

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{M}}(\gamma(\gamma_0, t_0), t) &= \frac{\gamma(\gamma_0 + d\gamma, t_0 + t) - \gamma(\gamma_0, t_0 + t)}{\gamma(\gamma_0 + d\gamma, t_0) - \gamma(\gamma_0, t_0)} \\ &= \frac{\partial\gamma(t_0 + t)}{\partial\gamma(t_0)}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Dabei werden die Bahnen für einen beliebigen Zeitpunkt  $t_0$  mit Anfangswerten  $\gamma_0$  betrachtet. Das Argument von  $\overline{\mathbf{M}}(\gamma(\gamma_0, t_0), t)$  soll erkennbar machen, dass jeder Punkt im

Phasenraum eine eigene Stabilitätsmatrix besitzt. Für die Stabilitätsmatrix  $\overline{\mathbf{M}}$  lassen sich Bewegungsgleichungen herleiten, wenn man die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen auf die Stabilitätsmatrix anwendet,

$$\frac{d}{dt}\overline{\mathbf{M}} = \mathbf{J} \cdot \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \gamma^2} \cdot \overline{\mathbf{M}}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Als Startwerte für die Stabilitätsmatrix wird die Einheitsmatrix verwendet,  $\overline{\mathbf{M}}(\gamma(\gamma_0, 0), 0) = \mathbf{1}$ . Die Stabilität der Bahnen lässt sich mit dem, aus den Eigenwerten  $d_i$  konstruierten, Lyapunovexponenten  $\lambda_i$  beschreiben. Dieser ist definiert [21] als

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\ln(d_i(t))}{t}. \quad (2.44)$$

Die Lyapunovexponenten beschreiben wie stark sich zwei nah beieinanderliegende Punkte im Phasenraum im Laufe der Zeit in dynamischen Systemen voneinander entfernen. Ein positiver Lyapunovexponent deutet auf eine instabile Bahn in der zugehörigen Eigenvektorrichtung hin. Für periodische Bahnen, die durch ihre Periodendauer  $T$  charakterisiert sind, vereinfachen sich die Zusammenhänge,

$$\overline{\mathbf{M}}(t + nT) = \overline{\mathbf{M}}^n(t) \Rightarrow d_i(t + nT) = d_i^n(t). \quad (2.45)$$

Dabei stellt  $n \in \mathbb{N}$  die Anzahl der Umläufe dar. Für den Lyapunovexponenten ergibt sich

$$\lambda_i = \frac{\ln(d_i(T))}{T}. \quad (2.46)$$

Die Stabilitätsmatrix besitzt eine symplektische Struktur. Dies lässt sich mathematisch durch

$$\overline{\mathbf{M}}^\dagger \mathbf{J} \overline{\mathbf{M}} = \mathbf{J} \quad (2.47)$$

ausdrücken. Diese Struktur hat zur Folge, dass der Inverse Wert  $d_i^{-1}$  eines Eigenwerts  $d_i$  ebenfalls einen Eigenwert darstellt.

Zu jeder Erhaltungsgröße gehören zwei Eigenwerte der Stabilitätsmatrix, die konstant den Wert 1 besitzen. In Ortskoordinaten ist die Stabilitätsmatrix eine  $(6 \times 6)$ -Matrix und Energie ist die einzige Erhaltungsgröße. In regularisierten Koordinaten liegt zur Energieerhaltung zusätzlich die bilineare Relation als Erhaltungsgröße vor und der 8-dimensionale Phasenraum besitzt eine  $(8 \times 8)$ -Stabilitätsmatrix. Durch einen sogenannten Poincaré-Schnitt ist es möglich eine Matrix aufzustellen, die um die doppelte Anzahl an Erhaltungsgrößen in ihren Dimensionen reduziert ist. In beiden Räumen führt dies auf eine  $(4 \times 4)$ -Matrix mit denselben Eigenwerten, die sogenannte Monodromiematrix  $\mathbf{M}$ . Diese besitzt zwei unabhängige Eigenwertpaare  $d_1 = 1/d_4$  und  $d_2 = 1/d_3$ . Drückt man diese in der Form  $d_i = e^{\mu_i + i\varphi_i}$  aus, so können diese folgendermaßen charakterisiert



werden. Für  $\mu_i = 0$  und  $\varphi_i \neq 0$  ist die Bahn in der Eigenvektorrichtung des Eigenwertes stabil. Ist  $\mu_i \neq 0$  und  $\varphi_i = 0$ , so ergibt sich eine instabile Bahn in der Eigenvektorrichtung zu dem zugehörigen Eigenwert. Diese Einteilung lässt sich geschickter formulieren, wenn man die beiden Stabilitätsindizes  $\varrho_{1,4}$  und  $\varrho_{2,3}$  einführt,

$$\varrho_{1,4} = d_1 + d_4 = d_1 + \frac{1}{d_1}, \quad \varrho_{2,3} = d_2 + d_3 = d_2 + \frac{1}{d_2}. \quad (2.48)$$

Für die stabilen (s, engl. *stable*) Eigenwerte ( $d_i = e^{i\varphi}$ ) kann der zugehörige Stabilitätsindex in zugehöriger Eigenvektorrichtung als

$$\varrho = e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} = 2 \cos(\varphi) \quad (2.49)$$

dargestellt werden. Die instabilen (u, engl. *unstable*) Eigenwerte ( $d_i = e^\mu$ ) führen auf einen Stabilitätsindex der Form

$$\varrho = e^\mu + e^{-\mu} = 2 \cosh(\mu). \quad (2.50)$$

Dies führt auf das Stabilitätskriterium für die vorgegebene Richtung der Eigenwerte und deren Stabilitätsindizes. Ein Stabilitätsindex, der  $-2 \leq \varrho \leq 2$  ist, deutet auf eine stabile Bahn in Richtung der Eigenvektoren der Eigenwerte hin. Gilt für ein Stabilitätsindex  $|\varrho| > 2$ , so ist die Bahn in diese Richtung instabil. Der Winkel  $\varphi$  wird daher auch als Stabilitätswinkel bezeichnet. Die Bahnen lassen sich demzufolge in die vier Stabilitätskategorien (ss), (su), (us) und (uu) unterteilen.

## 2.5. Closed-Orbit-Theorie

Die Closed-Orbit-Theorie [9] beschreibt eine Möglichkeit zur Berechnung von Photoabsorptionsspektren durch Parameter klassischer Elektronenbahnen. Ein Photoabsorptionsspektrum zeichnet sich durch die Lage der Absorptionslinien und deren Intensitäten aus. Der Lage der Absorptionslinien wird die Anregungsenergie der Elektronenzustände zugeschrieben. Die Ausprägung der Absorptionslinien ist durch das Dipolmatrixelement  $\langle i | D | n \rangle$  bestimmt, das die Intensität des Übergangs beschreibt. Quantenmechanisch lässt sich eine Antwortfunktion konstruieren

$$g^{\text{qm.}}(E) = -\frac{1}{\pi} \langle i | DG(E)D | i \rangle = -\frac{1}{\pi} \sum_n \frac{|\langle i | D | n \rangle|^2}{E - E_n + i\epsilon}, \quad (2.51)$$

wobei mit  $G(E)$  die retadierte Greensche Funktion

$$G(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n + i\epsilon}, \quad (2.52)$$

bezeichnet wird. Im Absorptionsspektrum treten Resonanzen auf, wenn die Energie den Wert  $E_n - i\epsilon$  annimmt und in der Funktion eine Singularität auftritt.

In der Semiklassik ergibt sich nach [22] eine Antwortfunktion, die einen konstanten und einen oszillierenden Summanden besitzt. Der oszillierende Beitrag in der Antwortfunktion ist von der Form

$$g^{\text{osc}} = \sum_{\text{c.o.}} \mathcal{A}_{\text{c.o.}} e^{iS_{\text{c.o.}}}. \quad (2.53)$$

Die Amplitude  $\mathcal{A}_{\text{c.o.}}$  beschreibt die Stabilität und die aus- bzw. eingehenden Richtungen [22]. Die genaue Form von  $\mathcal{A}_{\text{c.o.}}$  hängt von der geometrischen Struktur der Felder ab, kann jedoch aus rein klassischen Größen berechnet werden. Auf eine genauere mathematische Herleitung der semiklassischen Antwortfunktion, über die semiklassische Greensfunktion nach Gutzwiller, wird an dieser Stelle verzichtet und auf Literatur verwiesen [22]. Nach einigen mathematisch aufwendigen Schritten kann für die Amplitude  $\mathcal{A}_{\text{c.o.}}$  der folgende Ausdruck gefunden werden,

$$\mathcal{A}_{\text{c.o.}} = 4\pi \frac{\mathcal{Y}^*(\vartheta_f, \varphi_f) \mathcal{Y}(\vartheta_i, \varphi_i)}{\sqrt{|\det(\mathbf{M}_{\text{c.o.}})|}} e^{i\frac{\pi}{2}\mu_{\text{c.o.}}}. \quad (2.54)$$

Die Winkelfunktion  $\mathcal{Y}(\vartheta, \varphi)$  ergibt sich aus dem Anregungsprozess der Elektronenzustände. Dabei wird der Endzustand mit  $f$  (engl. *final*) und der Anfangszustand mit  $i$  (engl. *initial*) indiziert. Die auftretende Determinante  $\det(\mathbf{M}_{\text{c.o.}})$  ist die obere rechte ( $2 \times 2$ )-Matrix der Monodromiematrix  $\mathbf{M}$ . Sie tritt in Gleichung (2.54) durch die Relation

$$\det(\mathbf{M}_{\text{c.o.}}) \sin(\vartheta_i) \sin(\vartheta_f) = \det \left( \frac{\partial(p_{\vartheta_f}, p_{\vartheta_i})}{\partial(\vartheta_f, \vartheta_i)} \right) \quad (2.55)$$

auf und ist ein Maß für die Abhängigkeit der Drehimpulse am Ende der Bahn von den Anfangswinkeln. Der Maslovindex  $\mu_{\text{c.o.}}$  berücksichtigt die Phase der semiklassischen Wellenfunktion und ändert sich, wenn entlang der Bahn eine Kaustik auftritt [10]. (Mehr zur Berechnung des Maslovindex und dem Begriff der Kaustik folgt in Abschnitt 3.3.1. Für die semiklassische Antwortfunktion lässt sich somit

$$\begin{aligned} g^{\text{scl}}(E) &= g_0 + g^{\text{osc}} \\ &= g_0 + 2(E_f - E_i) 4\pi \text{Im} \left\{ \sum_{\text{c.o.}} \frac{\mathcal{Y}^*(\vartheta_f, \varphi_f) \mathcal{Y}(\vartheta_i, \varphi_i)}{\sqrt{|\det(\mathbf{M}_{\text{c.o.}})|}} e^{i[S_{\text{c.o.}} - \frac{\pi}{2}\mu_{\text{c.o.}}]} \right\} \end{aligned} \quad (2.56)$$

finden [23]. In der Antwortfunktion  $g^{\text{scl}}(E)$  wird über alle geschlossenen Bahnen der jeweiligen Energie ( $E$ ) summiert, deren Start- und Endpunkt der Kern ist. Für den Anfangszustand des Exzitons wird die  $|2p_0\rangle$  Wellenfunktion des Wasserstoffatoms gewählt und daraus folgt für die Winkelfunktion [10],

$$\mathcal{Y}(\vartheta, \varphi) = \frac{2^7 e^{-4}}{\sqrt{2\pi}} (4 \cos^2(\vartheta) - 1) \stackrel{\vartheta=\frac{\pi}{2}}{=} -\frac{2^7 e^{-4}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (2.57)$$

Diese Funktion hängt nicht vom Azimutalwinkel  $\varphi$  ab und muss daher nicht weiter berücksichtigt werden. Die Wahl von  $\vartheta = \frac{\pi}{2}$  greift an dieser Stelle bereits die Suche in der  $xy$ -Ebene vorweg. Die Einschränkung auf die  $xy$ -Ebene und die daraus folgenden Konsequenzen für die Bahnen und die Stabilitätsmatrix wird in Abschnitt 3.1.1 ausführlicher behandelt. Für die Energiedifferenz und den konstanten Beitrag zur semiklassischen Antwortfunktion in Gl. (2.57) ergibt sich,

$$E_f - E_i \approx \frac{1}{8}, \quad g_0 = \frac{23}{15} \times 2^{13} \times e^{-8} [10]. \quad (2.58)$$

Die physikalische Wirkung  $S_{c.o.}$  der Bahn wird durch eine Taylorentwicklung bis zur ersten Ordnung um die Energie der geschlossenen periodischen Bahn  $E_0$  approximiert,

$$S_{c.o.} \approx S_{c.o.}(E_0) + T_{c.o.}(E - E_0). \quad (2.59)$$

Setzt man die eingeführten Größen [10] in die Antwortfunktion ein, so erhält man die finale Form als

$$g^{scl}(E) = g_0 \left( 1 + \frac{15}{23} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{c.o.} \frac{1}{\sqrt{|\det(\mathbf{M}_{c.o.})|}} e^{i[S_{c.o.}(E_0) + T_{c.o.}(E - E_0) - \frac{\pi}{2}\mu_{c.o.}]} \right\} \right). \quad (2.60)$$

Zur Signalerzeugung wird die semiklassische Antwortfunktion um die Energie  $E_0$  in einem Energiefenster der Breite  $2\Delta E$  fouriertransformiert [10] und es ergibt sich,

$$\begin{aligned} c(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{E_0 - \Delta E}^{E_0 + \Delta E} g_0 \frac{15}{23} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{c.o.} \frac{1}{\sqrt{|\det(\mathbf{M}_{c.o.})|}} e^{i[S_{c.o.}(E_0) + T_{c.o.}(E - E_0) - \frac{\pi}{2}\mu_{c.o.}]} \right\} dE \\ &= \frac{g_0}{2\pi} \frac{15}{23} \sum_{c.o.} \frac{B^{-\frac{1}{3}}}{\sqrt{|\det(\mathbf{M}_{c.o.})|}} \left\{ e^{i[S_{c.o.}(E_0)B^{-1/3} - \frac{\pi}{2}\mu_{c.o.}]} \Delta E \operatorname{sinc} \left( \Delta E \frac{T_{c.o.}}{B} - t \right) \right. \\ &\quad \left. - e^{-i[S_{c.o.}(E_0)B^{-1/3} - \frac{\pi}{2}\mu_{c.o.}]} \Delta E \operatorname{sinc} \left( \Delta E \frac{T_{c.o.}}{B} + t \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Die auftauchende Sinc-Funktion ist als  $\operatorname{sinc} = \sin(x)/x$  definiert. Die auftretenden Bahnparameter wurde nach Gleichungen (2.16) und (2.17) reskaliert, da die Spektren für bestimmte magnetische Flussdichten  $B$  berechnet werden sollen. Dieses Signal kann mittels der harmonischen Inversion untersucht werden, um semiklassische Photoabsorptionsspektren zu berechnen.

## 2.6. Harmonische Inversion

Das Verfahren der harmonischen Inversion dient der hochauflösenden Analyse eines Spektrums, das aus lorentzförmigen Resonanzen besteht. Ein solches Spektrum kann durch

die Superposition komplexer Lorentzkurven

$$G(E) = \sum_{k=1}^K \frac{d_k}{E - E_k} \quad (2.62)$$

dargestellt werden. Dabei beschreibt  $K$  die Anzahl an auftauchenden Resonanzen im Spektrum. Die Koeffizienten  $E_k$  beschreiben die Position der Resonanzen in der komplexen Ebene und die  $d_k$  legen die Amplitude der  $k$ -ten Resonanz fest. Durch diese Größen wird das Spektrum vollständig beschrieben. Die Berechnung soll kurz skizziert werden.

Das Spektrum aus Gl. (2.62) wird fouriertransformiert und das Integral mittels des Residuensatzes [24] berechnet,

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(E) e^{-iEt} dt \\ &= -i \sum_{k=1}^K d_k e^{-iE_k t} \\ &\approx -i \sum_{k \in \mathcal{M}} d_k e^{-iE_k t}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Das Fourier-Integral wird nur in einem Energiebereich von  $2\Delta E$  ausgewertet. Durch die Annahme, dass die  $i$ -te Resonanz hinreichend weit von der  $k$ -ten Resonanz entfernt liegt, lässt sich behaupten, dass ihr Beitrag im Fouriersignal, das im Energiebereich  $[E_0 - \Delta E, E_0 + \Delta E]$  ausgewertet wird, verschwindend gering ist. Zusätzlich muss die Resonanzkurve der  $k$ -ten Resonanz, die im Energiebereich liegt, gegen den Rand des Energieintervalls schnell genug abflachen, sodass

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(E) e^{-iEt} dt \approx \int_{E_0 - \Delta E}^{E_0 + \Delta E} G(E) e^{-iEt} dt \quad (2.64)$$

genähert werden kann. Die Menge in Gl. (2.63)  $\mathcal{M}$  ist dabei als

$$\mathcal{M} = \{1 \leq k \leq K \wedge \operatorname{Re}(E_k) \in [E_0 - \Delta E, E_0 + \Delta E]\} \quad (2.65)$$

definiert. Die Summation erstreckt sich also nur über Resonanzen, die innerhalb des Energieintervalles liegen. Das Signal  $C(t)$  muss für die numerische Auswertung in äquidistanter Form vorliegen, sodass

$$c_n = C(n\tau) = \sum_{k \in \mathcal{M}} (-id_k) e^{-iE_k n\tau}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.66)$$

gilt. Der Abstand zweier benachbarter Signalpunkte wird hier mit  $\tau$  bezeichnet und sollte nicht mit der regularisierten Zeit, die in Abschnitt 2.3 eingeführt wurde, verwechselt werden. Für  $\tau$  ergibt sich der Zusammenhang [24]

$$\tau = \frac{\pi}{\Delta E} = \frac{t_{\max}}{2K}, \quad (2.67)$$

mit  $t_{\max} = 2K\tau$ . Durch Einführen von  $\tilde{d}_k = -id_k$  und  $z_k = \exp(-iE_k\tau)$  lässt sich eine kompakte Darstellung der Summe finden,

$$c_n = \sum_{k \in \mathcal{M}} \tilde{d}_k z_k^n. \quad (2.68)$$

Die Summe stellt ein nichtlineares Gleichungssystem mit  $N$  Gleichungen und  $2K$  Unbekannten dar. Die Padé-Näherung geht von einem kontinuierlichen Signalverlauf aus, der durch  $n \rightarrow \infty$  mathematisch formuliert werden kann, um die Laurent-Reihe  $g(z)$  in eine geometrische Reihe umzuformulieren,

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{-n} = \sum_{k=1}^K \frac{z \tilde{d}_k}{z - z_k} = \frac{P_K(z)}{Q_K(z)}. \quad (2.69)$$

Die Polynome  $P_K(z)$  und  $Q_K(z)$  sind dabei wie folgt definiert,

$$P_K(z) = \sum_{k=1}^K b_k z^k, \quad Q_K(z) = \sum_{k=1}^K a_k z^k - 1. \quad (2.70)$$

Durch erneutes Anwenden des Residuensatzes und dem Vergleich der Ausdrücke für  $g(z)$  in Gl. (2.69) lassen sich nach [24] die Koeffizienten  $\tilde{d}_k$  durch

$$\tilde{d}_k = \left( \frac{dQ_K(z)}{dz} \Big|_{z=z_k} \right)^{-1} \frac{P_K(z_k)}{z_k} \quad (2.71)$$

berechnen. Die Koeffizienten  $a_k$  und  $b_k$  lassen sich durch Lösen des nichtlinearen Gleichungssystem bestimmen. Eine numerische Nullstellensuche des Polynoms  $Q_K(z)$  führt auf die gesuchten Koeffizienten  $z_k$  [10]. Zuletzt lassen sich die charakteristischen Parameter des Spektrums durch

$$E_k = \frac{i}{\tau} \ln(z_k), \quad d_k = i\tilde{d}_k \quad (2.72)$$

explizit berechnen und das Spektrum vollständig beschreiben.



# 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

In diesem Kapitel werden die geschlossen periodischen Bahnen numerisch gesucht und anschließend auf ihre Stabilität untersucht. Zum Abschluss des Kapitels wird die semi-klassische Antwortfunktion in Hinblick auf das Absorptionsspektrum berechnet. Parallel zur Analyse von Kupferoxydul wird am Ende jedes Abschnittes ein Vergleich mit Wasserstoff gezogen.

## 3.1. Geschlossen periodische Bahnen in der $xy$ -Ebene

Die Vereinfachung der Suche auf die  $xy$ -Ebene bietet sich an, da durch die Forderung  $z = 0$  die Bewegungsgleichungen deutlich vereinfacht werden. Außerdem zeigte sich in [10], dass sich aus den Bahnen in der  $xy$ -Ebene bereits Spektren berechnen lassen, deren Lage der Resonanzen gut mit exakten quantenmechanischen Rechnungen übereinstimmen. Im folgenden Abschnitt wird die numerische Suche in der  $xy$ -Ebene vorgestellt.

### 3.1.1. Numerische Suche der Bahnen

In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich Bahnen in der  $xy$ -Ebene untersucht. Durch die Einschränkung  $z = 0$  für alle Bahnen vereinfachen sich die Bewegungsgleichungen. Aus den Gleichungen (2.40a) und (2.40b) folgen daraus die Zusammenhänge,

$$U_1 = U_3, \quad U_2 = U_4, \quad (3.1)$$

$$P_1 = P_3, \quad P_2 = P_4. \quad (3.2)$$

Der Vorteil, der aus dieser Vereinfachung resultiert, ist, dass die Bahnen zu dem Verbleib in der  $xy$ -Ebene analytisch gezwungen werden. Auch lange Bahnen können sich durch numerische Ungenauigkeiten nicht aus der Ebene entfernen.

Für die Suche der periodisch geschlossenen Bahnen werden die Bewegungsgleichungen (2.36) mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung numerisch integriert. Hierfür werden Anfangsbedingungen der Bahn  $\Gamma$  im regularisierten Raum benötigt. Diese werden derart gewählt, dass das Elektron zu Beginn der Bahn im Kern startet,  $\mathbf{U}_{\text{start}} = 0$ .

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

---

Dies führt für die Bahnen  $\Gamma$  auf folgende Startwerte,

$$\Gamma = (0, 0, 0, 0, P_1, P_2, P_3, P_4)^T, \quad (3.3a)$$

$$\text{mit : } P_1 = 2 \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right), \quad (3.3b)$$

$$P_2 = 2 \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right), \quad (3.3c)$$

$$P_3 = 2 \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right), \quad (3.3d)$$

$$P_4 = 2 \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right). \quad (3.3e)$$

Da der Startimpuls in Richtung der  $U_1$ -Achse vorgegeben wird und der Azimutalwinkel von der  $U_1$ -Achse aus gemessen wird, verschwindet dieser,  $\varphi = 0$ . Der Polarwinkel wird auf  $\vartheta = \frac{\pi}{2}$  gesetzt, um die Bahnen auf  $xy$ -Ebene zu zwingen. Die Beschreibung der Startimpulse aus Gl. (3.3) ist äquivalent mit der Betrachtung des vereinfachten Hamiltons im Kern

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \mathbf{P}^2 = 2. \quad (3.4)$$

Dieser führt auf die Startwerte des Impulses

$$\begin{aligned} P_1^2 + P_3^2 &= 2P_1^2 = 2P_3^2 = 4, \\ \Rightarrow P_1 &= P_3 = \pm\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

und erklärt den auftretenden Faktor 2 vor den Impulsen in Gl. (3.3) (b)-(e).

Die Suche nach einfach durchlaufenen geschlossen periodischen Bahnen beginnt ausgehend von einer vorgegebenen skalierten elektrischen Feldstärke  $F$ . Für Kernbahnen, deren Start- und Endpunkt der Kern sein soll, wird eine beliebig gewählte Startenergie  $E_0$ , derart variiert, dass die Bahnen nach einem Umlauf im Kern enden. Diese Suche wird über die Eigenschaften der Bahnen möglich. Bei verschwindender Ortskoordinate  $U_1 = 0$ , soll das für den Impuls senkrecht zu dieser Richtung ebenfalls gelten,  $P_2 = 0$ . Dieses Kriterium wird überprüft und die Energie variiert, sollte das Kriterium nicht erfüllt sein. Abbildung 3.1 stellt eine Veranschaulichung dieses Verfahrens dar. Die durchgezogene Kurve gehört zu einem passenden E-F-Paar. Die beiden gestrichelten Kurven besitzen nach einem halben Umlauf einen nicht verschwindenden Impuls  $P_2$  und treffen deshalb nicht senkrecht auf die Symmetrieachse. Durch Variation der Energie gehen die beiden Kurven in die orangefarbene Kurve über. Diese Nullstellensuche für  $U_1$  wird über ein klassisches Sekantenverfahren implementiert. Die anschließende Suche nach der passenden Energie wird durch dasselbe Verfahren durchgeführt. Der Wert von  $P_2$  wird nach der Energievariation mit dem Wert zuvor verglichen und die Energie anschließend derart



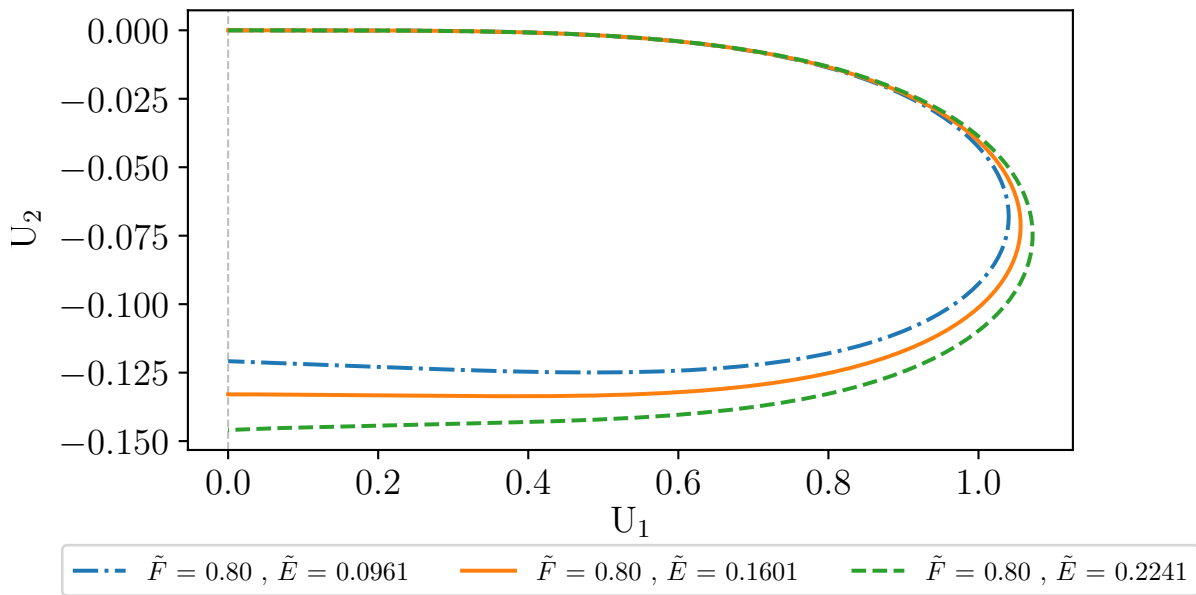


Abbildung 3.1.: Veranschaulichung des Suchverfahrens für geschlossen periodische Bahnen. Die gestrichelten Kurven zeigen den Verlauf eines E-F-Paares, das nicht zu einer geschlossen periodischen Bahn gehört. Bei beiden Kurven wird ersichtlich, dass der Impuls  $P_2$  nicht verschwindet. Die orangefarbene Kurve (durchgezogen) trifft hingegen senkrecht auf die  $U_1$ -Achse, die die Symmetrieachse der Bahnen darstellt. Durch diese Symmetrie ist es hinreichend die Suche auf einen halben Umlauf der Bahnen zu beschränken.

verändert, dass der Impuls  $P_2$  betragsmäßig kleiner wird, bis er schließlich verschwindend gering ist und die geschlossen periodische Bahn als gefunden angesehen werden kann. Aufgrund der Tatsache, dass die Bahnen gegenüber der  $U_1$ -Achse symmetrisch sind, reicht es aus einen halben Umlauf zu betrachten und dort die Bahnen zu untersuchen. Da hierfür nur die Hälfte der Integrationsschritte verwendet werden muss, reduziert sich dadurch der numerische Fehler des Verfahrens.

Um die  $(4 \times 4)$ -Monodromiematrix  $\mathbf{M}$  am einfachsten berechnen zu können, wird die reduzierte Stabilitätsmatrix

$$\overline{\mathbf{M}}_{\text{red.}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \partial_\varphi \mathbf{P} & \partial_\vartheta \mathbf{P} & \partial_\varphi \mathbf{U} & \partial_\vartheta \mathbf{U} \\ \partial_\varphi \mathbf{U} & \partial_\vartheta \mathbf{U} & \partial_\varphi \mathbf{P} & \partial_\vartheta \mathbf{P} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -P_2 & -P_3 & 0 & 0 \\ -P_1 & -P_4 & 0 & 0 \\ -P_4 & P_1 & 0 & 0 \\ -P_3 & P_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -P_2 & -P_3 \\ 0 & 0 & P_1 & -P_4 \\ 0 & 0 & -P_4 & P_1 \\ 0 & 0 & P_3 & P_2 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

eingeführt [10]. Diese beinhaltet die Variationen der Startparameter nach den Bahnwinkeln  $\varphi$  und  $\vartheta$ . Die Monodromiematrix  $\mathbf{M}$  lässt sich aus der reduzierten Stabilitätsmatrix gewinnen, indem man  $\overline{\mathbf{M}}_{\text{red.}}(\text{T})$  am Ende der Bahn auf die transponierte Stabilitätsmatrix zu Beginn der Bahn  $\overline{\mathbf{M}}_{\text{red.}}(0)$  projiziert,

$$\mathbf{M} = \overline{\mathbf{M}}_{\text{red.}}(\text{T}) \overline{\mathbf{M}}_{\text{red.}}(0)^{\text{T}}. \quad (3.7)$$

Die resultierende  $(4 \times 4)$ - Monodromiematrix stimmt mit der aus Abschnitt 2.4 überein. Die Eigenwertpaare, die über den gesamten Verlauf der Bahnen konstant 1 sind, werden nicht weiter untersucht, da die Bahnen in ihren zugehörigen Eigenvektorrichtungen stabil sind. Dieses Verfahren zur Bestimmung der Monodromiematrix  $\mathbf{M}$  bietet sich an, da es den numerischen Fehler verringert, indem es die Anzahl der zu berechnenden Gleichungen reduziert.

### 3.1.2. Diskussion der geschlossen periodischen Bahnen

In Abbildung 3.2 ist der Verlauf geschlossen periodischer Bahnen für verschiedene Feldstärken in Kupferoxydul gezeigt. In (a) sind die Bahnen im regularisierten Raum in der  $U_1U_2$ -Ebene dargestellt und in (b) die Rücktransformation in den Ortsraum. Zusätzlich ist die Symmetrieachse grau gestrichelt eingezeichnet, um die eben erwähnten Symmetrieüberlegungen hervorzuheben. Für zunehmende elektrische Feldstärken werden die Bahnen kürzer und verlieren an Exzentrizität. Nach Gleichung (3.5) sind zwei Startwerte für den Impuls möglich. Abbildung. 3.2 zeigt die positive Lösung. In regularisierten Koordinaten führt der negative Impuls auf eine Bahn, die zur Bahn des positiven Impulses punktsymmetrisch bezüglich des Ursprungs ist. Im Ortsraum fallen die Bahnen

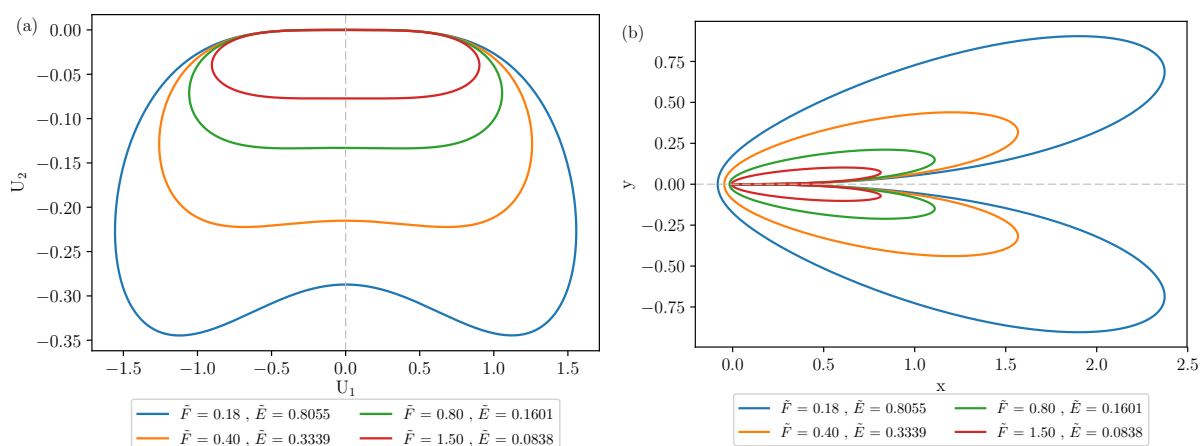


Abbildung 3.2.: Geschlossen periodische Bahnen für verschiedene skalierte elektrische Feldstärken  $\tilde{F}$  und deren zugehörige skalierte Energien  $\tilde{E}$ . In (a) sind die Bahnen in regularisierten Koordinaten und in (b) im Ortsraum dargestellt.

zusammen. Auffällig für Bahnen mit geringen elektrischen Feldern ist die Deformation der Bahnen nach einem halben Umlauf, die sich in Form einer Einbuchtung äußert. Die Deformation der Bahnen wird umso stärker je schwächer das elektrische Feld gewählt wird.

Die Bahnen hängen neben den Startwerten des Ortes und des Impulses von der skalierten elektrischen Feldstärke und der skalierten Energie ab. Zu jeder elektrischen Feldstärke existiert eine Energie, für die die gefundene Bahn geschlossen periodisch ist. Der Zusammenhang zwischen den beiden Größen ist in Abb. 3.3 (a) dargestellt. Ein starkes elektrisches Feld resultiert in einer kleinen Energie. Bei starkem elektrischen Feld werden die mittleren Bahnradien kleiner und die Bahn kürzer. Für verschwindende Feldstärken von  $F < 0,08$  können keine physikalisch sinnvollen Bahnen mehr gefunden werden. Die Kurve zeigt ein asymptotisches Verhalten gegen die grau gestrichelte Linie bei  $F = 0,08$ . In Abbildung 3.3 (b) und (c) sind die beiden Parameter Periodendauer  $T$  und Wirkung  $S$  über die skalierte Energie aufgetragen. Für zunehmende Energien steigen beide Größen an.

### 3.1.3. Vergleich der Bahnen mit Wasserstoff

Eine analoge Untersuchung der Bahnen für das Wasserstoffatom wurde bereits in einer früheren Arbeit von Marcel Wagner [10] durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Arbeit sind hier reproduziert worden und dienen dem Vergleich zwischen Exzitonen in  $\text{Cu}_2\text{O}$  und dem Wasserstoffatom. Dieser Vergleich der gefundenen Bahnen ist in Abb. 3.4 zu sehen. Für beide Systeme wird diesselbe skalierte elektrische Feldstärke von  $F = 0,8$  angelegt. Die Energien der beiden Bahnen weichen stark voneinander ab. Dieser Unterschied ist

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

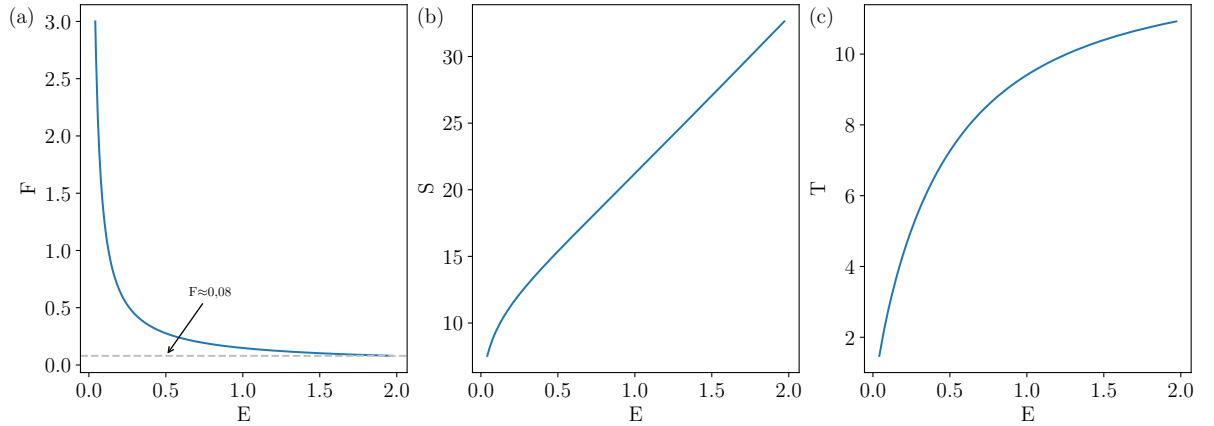


Abbildung 3.3.: (a) skalierte elektrische Feldstärke  $F$ , (b) Wirkung  $S$  und (c) Umlaufdauer  $T$  der gefundenen Bahnen über die skalierte Energie  $E$  aufgetragen.

in Abb. 3.5 (a) deutlicher zu erkennen und wird noch weiter diskutiert.

Die Suche wird in regularisierten Koordinaten durchgeführt und deshalb werden die Unterschiede der Bahnen zuerst in Abb. 3.4 (a) betrachtet. Beide Bahnen starten im Ursprung und propagieren mit den gleichen Startwerten in Richtung der  $U_1$ -Achse. Entscheidender Unterschied der Bahnen in der  $U_1U_2$ -Ebene ist das Krümmungsverhalten. Für Kupferoxydul ist die Kopplung an den paramagnetischen Term durch  $\kappa_{\text{Cu}_2\text{O}} = -0,261$  gegeben. Das negative Vorzeichen resultiert in dem entgegengesetzten Krümmungsverhalten der Bahn in regularisierten Koordinaten. Der betragsmäßig kleinere Wert von  $\kappa_{\text{Cu}_2\text{O}}$  verglichen mit dem von Wasserstoff  $\kappa_{\text{H}} = 1$  führt auf die kleinere Ausprägung der Bahn, da die Kopplung an die magnetischen Terme dadurch weniger stark ausfällt. Der mittlere Bahnradius ist somit bei gleicher elektrischen Feldstärke für Kupferoxydul kleiner als für Wasserstoff. Dieses Verhalten zeigt sich ebenfalls im Ortsraum der Bahnen in (b). Aufgrund der geringeren Kopplung verbleibt die Bahn des Elektron in Kupferoxydul länger in  $x$ -Richtung, bevor die Ablenkung relevant wird. Für Wasserstoff ist die Bahn deutlich länger und ausgeprägter. Aufgrund der Symmetrie der Rücktransformation ist die Durchlaufrichtung der Bahnen die Gleiche. Beide Bahnen werden in positive  $y$ -Richtung abgelenkt und schneiden die  $x$ -Achse senkrecht nach halbem Umlauf, bevor sie aus negativen  $y$ -Werten kommend in den Kern zurückkehren.

An dieser Stelle sei noch angemerkt, dass die beiden Bahnen für dieselbe skalierte Feldstärke berechnet wurden. Für die Umrechnung in atomare Einheiten müssen allerdings verschiedene Reskalierungswerte verwendet werden (siehe Anhang A). Der qualitative Vergleich der Bahnen findet im weiteren Verlauf der Arbeit in skalierten Größen statt. Der unterschiedliche Einfluss des äußeren elektrischen Feldes auf die zugehörige Energie ist in Abbildung 3.5(a) dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass bei gleicher Feldstärke die Energie von  $\text{Cu}_2\text{O}$  geringer ausfällt als jene von Wasserstoff. Für große elektrische Feldstärken wird dieser Einfluss zwar sehr gering, bei schwachen Feldern aller-

### 3.1. Geschlossen periodische Bahnen in der $xy$ -Ebene

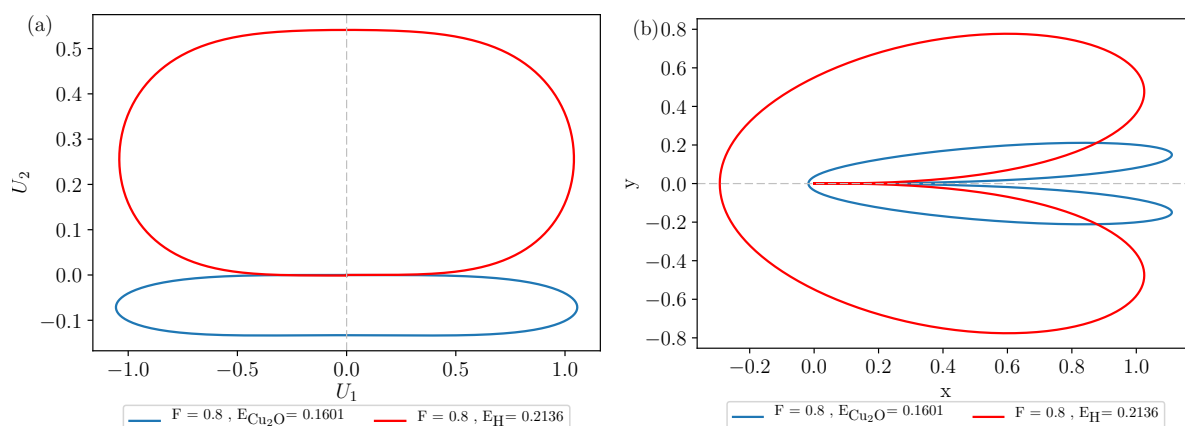


Abbildung 3.4.: Vergleich der geschlossen periodischen Bahnen von  $\text{Cu}_2\text{O}$  (rot) und Wasserstoff (blau). Abbildung (a) zeigt den Vergleich in regularisierten Koordinaten und (b) in der  $xy$ -Ebene der Ortskoordinaten.

dings stark bemerkbar. In der Abbildung sind zusätzlich die Grenzen des asymptotischen Verhaltens eingezeichnet. Die grau gestrichelten Linien kennzeichnen jeweils die minimale Feldstärke, bei der noch eine geschlossen periodische Bahn gefunden werden konnte. Dieses Verhalten ist für beide Kurven erkennbar. Die waagerechte Asymptote liegt bei Wasserstoff  $F_{\text{grenz,H}} \approx 0,47$  deutlich höher als die von Kuperoxydul  $F_{\text{grenz,Cu}_2\text{O}} \approx 0,08$ . In dem Energiebereich ist die Grenze für Kuperoxydul nicht ersichtlich, schaut man sich in Abbildung 3.3 (a) allerdings einen größeren Energiebereich an, so erkennt man das asymptotische Verhalten. In Abbildung 3.5 wurde darauf geachtet, dass ein ähnlicher Energiebereich abgedeckt wird. Dazu musste der Bereich der elektrischen Feldstärke für beide Systeme unterschiedlich gewählt werden. Die Abbildungen 3.5(b) und (c) zeigen, dass bei gleicher Energie die Wirkung, wie auch die Periodendauer, in Kuperoxydul jeweils größer ist als die von Wasserstoff. Betrachtet man allerdings die Bahnen aus Abbildung 3.4, so ist die Elektronenbahn in Wasserstoff länger als die von Kuperoxydul. Für gleiche elektrische Feldstärken fällt die Energie in Kuperoxydul kleiner aus als die von Wasserstoff. Dies hat zur Folge, dass die Bahnen kleiner werden. Da die Suche von vorgegebenen elektrischen Feldern ausgeht, wird zur Veranschaulichung Abb. 3.6 angefertigt. Diese Abbildung zeigt die Periodendauer  $T$  über die skalierte elektrische Feldstärke aufgetragen. Aus diesem Schaubild ist ersichtlich, dass bei gleicher elektrischer Feldstärke  $F$  die Bahnen von Wasserstoff größer ausfallen. Die Periodendauer in regularisierten Koordinaten kann als ein mittlerer Bahnradius interpretiert werden (vgl. Gl.(2.39a)). So lässt sich ein anschauliches Bild zwischen mittlerer Bahnlänge und Periodendauer schaffen.

Ein analoges Bild für die physikalische Wirkung würde dasselbe Verhalten aufweisen. Bei gleicher Feldstärke ist die Wirkung der gefundenen Bahn in Wasserstoff größer als in Kuperoxydul.

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

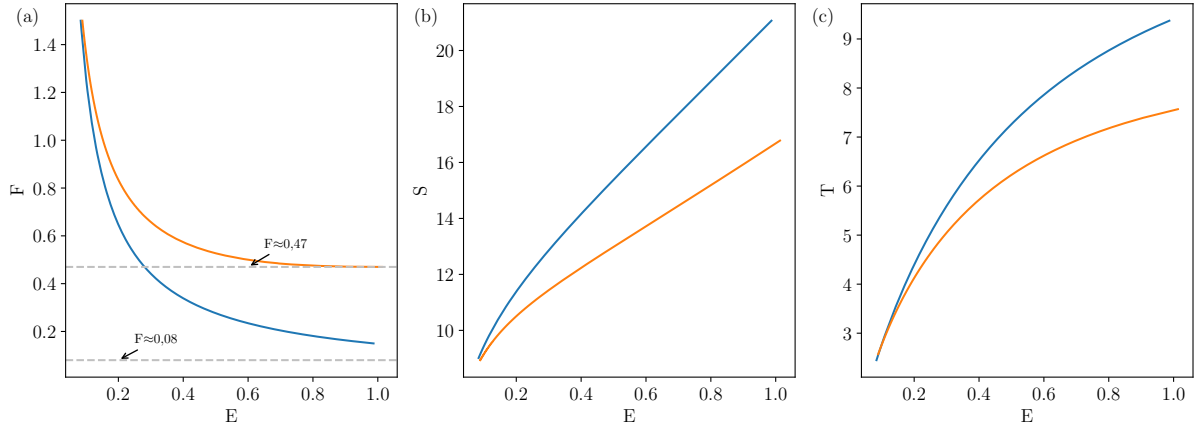


Abbildung 3.5.: (a) Skalierte elektrische Feldstärke  $F$ , (b) physikalische Wirkung  $S$ , (c) Periodendauer  $T$  über die skalierte Energie  $E$  aufgetragen. Der Vergleich zeigt die Kurven für Kupferoxydul  $\text{Cu}_2\text{O}$  in blau und in orange für Wasserstoff  $\text{H}$ . In (a) sind zusätzlich die asymptotischen Grenzen der elektrischen Feldstärken grau gestrichelt eingezeichnet.

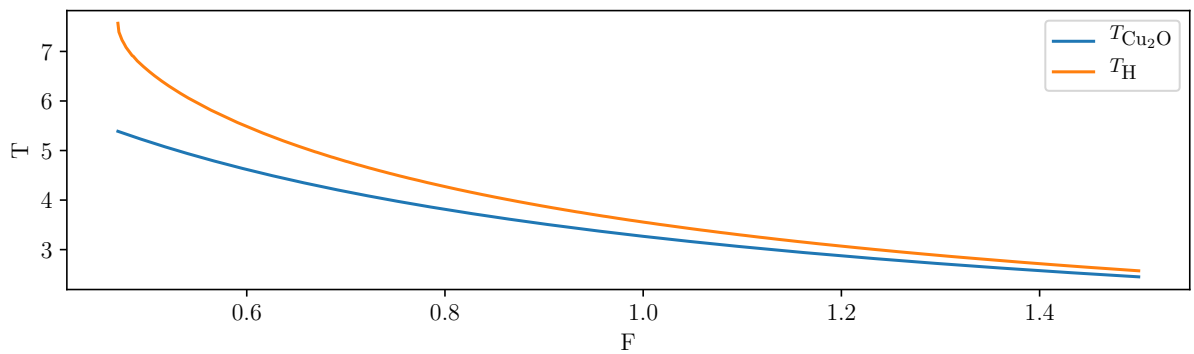


Abbildung 3.6.: Die Periodendauer  $T$  einer einfach durchlaufenen geschlossen periodischen Bahn über die skalierte elektrische Feldstärke für Wasserstoff und Kupferoxydul dargestellt.

## 3.2. Stabilitätsuntersuchung

Die Untersuchung der Bahnen auf ihre Stabilität erfolgt mittels der Stabilitätsmatrix. Die reduzierte  $(8 \times 4)$ -Matrix (vgl. Gl.(3.6)) wird zusammen mit der Bahn integriert und abschließend transponiert auf sich selbst projiziert und so die  $(4 \times 4)$ -Monodromiematrix berechnet. Aus der resultierenden Monodromiematrix  $\mathbf{M}$  werden die Eigenwerte  $d_i$  berechnet und daraus die Stabilitätsindizes  $\varrho_{1,4}$  bzw.  $\varrho_{2,3}$  ermittelt. In Abb. 3.7 sind die Eigenwertpaare und Stabilitätsindizes in einem Diagramm dargestellt. Das starke Wachstum des Eigenwertes  $\text{Re}(d_4)$  sorgt für eine extreme Instabilität der Bahnen in diesen Eigenvektorrichtungen. In (a) ist dieser Verlauf gezeigt. Zusätzlich wurde der Bereich kleiner Energien vergrößert in dem kleinen Fenster dargestellt. Dieses zeigt für  $E \rightarrow 0$  den Stabilitätsindex  $\varrho_{1,4}$  gegen den Stabilitätsbereich laufen. Die geschlossen periodischen Bahnen, die in Ebenen liegen, die durch Eigenvektoren der Eigenwerte  $d_1$  und  $d_4$  aufgespannt werden, sind für alle Energien  $E \geq 0$  instabil, da  $\varrho_{1,4} > 2$ . In (b) ist das Eigenwertpaar  $d_2, d_3$  mit Stabilitätsindex  $\varrho_{2,3}$  zu erkennen. Der Bereich, in dem die Bahnen in der Ebene der Eigenvektoren stabil sind, ist grau hinterlegt. Beim Eintreten des Stabilitätsindex  $\varrho_{2,3}$  in den stabilen Bereich dieser Eigenvektorrichtung bei  $E \approx 0,49$  tritt eine Bifurkation auf. Über den restlichen Energiebereich, der in der Abbildung betrachtet wird, ist die Bahn zu den Eigenwerten  $d_2$  und  $d_3$  stabil.

Eine Eigenschaft der geschlossen periodischen Bahnen ist, dass sie auch für mehrere Durchläufe geschlossen und periodisch sind. Für die Monodromiematrix des  $r$ -fachen Umlaufes folgt, dass diese durch Potenzierung der Monodromiematrix des einfachen Durchlaufes berechnet werden kann, indem man sie mit der Anzahl  $r$  der Durchläufe potenziert,

$$\mathbf{M}(r) = \mathbf{M}^r. \quad (3.8)$$

Dabei stellt  $r \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$  die Anzahl der Umläufe einer periodisch geschlossenen Bahn dar. Auch die Berechnung der Bahnparameter vereinfacht sich für  $r$ -fach durchlaufene geschlossen periodische Bahnen,

$$T \Rightarrow rT, \quad S \Rightarrow rS. \quad (3.9)$$

Diese Zusammenhänge werden später verwendet, um die Berechnung der Antwortfunktion zu vereinfachen. Für geschlossen periodische Bahnen wird die Summation über alle geschlossenen Bahnen lediglich zu einer Summation über die Umlaufzahl  $r$ .

Der obere rechte  $(2 \times 2)$ -Block der Monodromiematrix spielt für die Berechnung der Antwortfunktion eine wesentliche Rolle (vgl. Gl.(2.60)). Die Determinante dieser Untermatrix taucht im Nenner der Antwortfunktion, sowie bei der Berechnung ihrer Fouriertransformierten auf. Zur einfacheren Kennzeichnung des  $(2 \times 2)$ -Matrixblockes wird die Matrix im Folgenden, wie auch in der Theorie, mit  $\mathbf{M}_{c.o.}$  bezeichnet. Da in die Berechnung der Antwortfunktion mehrere Umläufe eingehen, wird die Stabilitätsmatrix aus einem Umlauf potenziert und die Determinante der Untermatrix ausgewertet. In Abb.

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

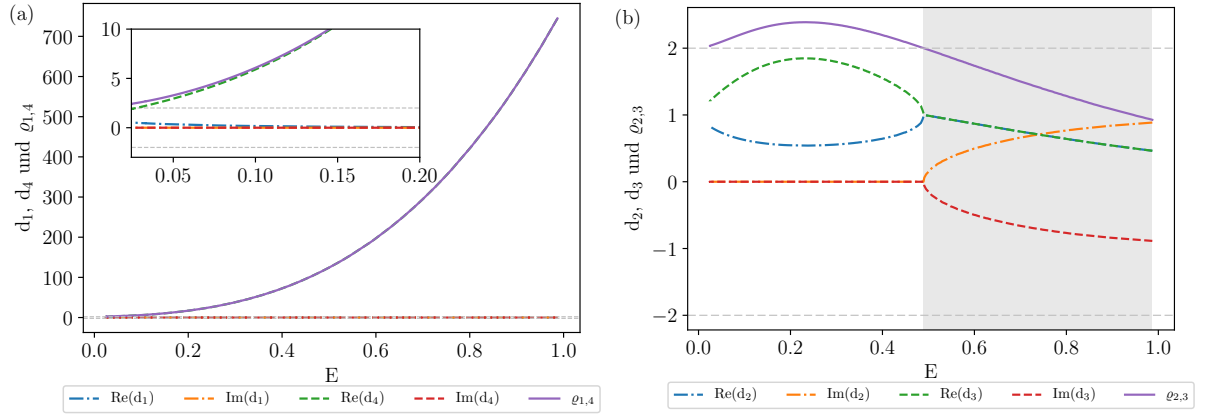


Abbildung 3.7.: Nichttriviale Eigenwertpaare der Stabilitätsmatrix über die skalierte Energie aufgetragen. (a) zeigt, dass das Eigenwertpaar  $d_1, d_4$  über den gesamten Bereich instabil ist und für größere Energien immer instabiler wird. Der Bereich kleiner Energien ist vergrößert dargestellt und lässt erkennen, dass der Stabilitätsindex  $\varrho_{1,4}$  für  $E \rightarrow 0$  stabil wird. (b) zeigt das Eigenwertpaar  $d_2, d_3$  für das bei  $E \approx 0,49$  eine Bifurkation auftritt. Der grau hinterlegte Bereich markiert das Energieintervall, indem stabile Bahnen in diesen Eigenvektorrichtungen gefunden werden.

3.8 ist die Determinante von  $\mathbf{M}_{c.o.}$  dargestellt. Für einen einzelnen Umlauf (a) weist die Determinante keine Nullstellen auf. Für mehrere Umläufe hingegen finden Vorzeichenwechsel in der Determinante statt (b). Durch eine Nullstellensuche können diese gefunden werden. Sie sind in Tabelle 3.1 für die Umläufe  $r = 1$  bis  $r = 12$  zusammengefasst. Im kleinen Fenster der Abb. 3.8 (b) ist der Ausschnitt vergrößert, in dem die beiden weiteren Nullstellen der Determinanten für den Umlauf  $r = 9$  liegen.

Tritt in der Determinante von  $\mathbf{M}_{c.o.}$  ein Vorzeichenwechsel auf, so ändert sich der Maslovindex  $\mu_{c.o.}$ , um eine zusätzliche Phase zu berücksichtigen. Betrachtet man die gefundenen Nullstellen in Tab. 3.1 genauer, so fällt auf, dass eine Nullstelle des  $r$ -ten Umlaufes, ebenfalls bei der  $2r$ -fach durchlaufenen Bahn enthalten ist. Die mehrfach auftretenden Nullstellen sind farbig hinterlegt worden, um diesen Zusammenhang graphisch hervorzuheben. Diese Tatsache lässt sich dadurch erklären, dass das Produkt einer quadratischen Matrix mit sich selbst die Nullstellen des oberen rechten  $(2 \times 2)$ -Blockes beibehält,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} = \left( \begin{array}{c|c} \ddots & \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{D} \\ \hline \ddots & \ddots \end{array} \right). \quad (3.10)$$

Die Determinante setzt sich additiv aus Produkten der Determinanten der Ausgangsmatrizen zusammen. Für die ersten beiden Umläufe lassen sich keine Nullstellen finden.



Tabelle 3.1.: Nullstellen der Determinante des oberen rechten  $(2 \times 2)$ -Blockes der Monodromiematrix in Kupferoxydul für verschiedene Umlaufzahlen von  $r = 1$  bis  $r = 12$ . Es sind erst ab dem dritten Umlauf Nullstellen auffindbar und alle drei Umläufe ist eine zusätzliche Nullestelle zu erkennen. Die mehrfach auftretenden Nullstellen sind farbig hinterlegt, um die Zusammenhänge hervorzuheben.

r	Nullstellen der Determinante $\mathbf{M}_{c.o.}(E,r)$		
1	-		
2	-		
3	0,94536;		
4	0,73953;		
5	0,65076;		
6	0,94536;	0,60216;	
7	0,81771;	0,57262;	
8	0,73953;	0,55520;	
9	0,94536;	0,68506;	0,54111;
10	0,84905;	0,65076;	0,52988;
11	0,78841;	0,62248;	0,52337;
12	0,94536;	0,73953;	0,60216;
			0,51910;

Anschließend kommt in jedem dritten Umlauf eine Nullstelle hinzu. Dies setzt sich zyklisch fort.

Der Determinante des  $(2 \times 2)$ -Blockes wird ein Maß der Drehimpulsabhängigkeit des Elektrons am Ende der Bahn von den Startwinkeln zugeschrieben. An den jeweiligen Nullstellen der Determinante aus Tab. 3.1 sollten daher Bifurkationen der geschlossen periodischen Bahnen mit den jeweiligen Umlaufzahlen auftreten. Um die Einflüsse der Bifurkationen zu berücksichtigen, muss der Maslovindex berechnet werden. Dies geschieht in Abschnitt 3.3.1, nachdem der Vergleich der Stabilitätsuntersuchung mit Wasserstoff gezogen wurde.

### 3.2.1. Vergleich mit Wasserstoff

Für den Vergleich mit Wasserstoff werden die Materialparameter des Systems geändert und dieselbe Stabilitätsuntersuchung durchgeführt. Abbildung 3.9 zeigt das Verhalten der beiden Eigenwertpaare und den zugehörigen Stabilitätsindizes  $\varrho_{1,4}$  und  $\varrho_{2,3}$ . In (a) ist auffällig, dass der Stabilitätsindex  $\varrho_{1,4}$  kein divergentes Verhalten für steigende Werte von  $E$  aufweist. Bei einer Energie von  $E \approx 0,64$  nimmt der Stabilitätsindex sein Maximum an und entwickelt sich in eine stabilere Bahn für die zugehörige Eigenvektorrichtung. Dennoch werden die Bahnen nicht stabil in dieser Richtung für das betrachtete Energieintervall. Für Kupferoxydul zeichnet sich ausschließlich ein divergentes Verhalten für den

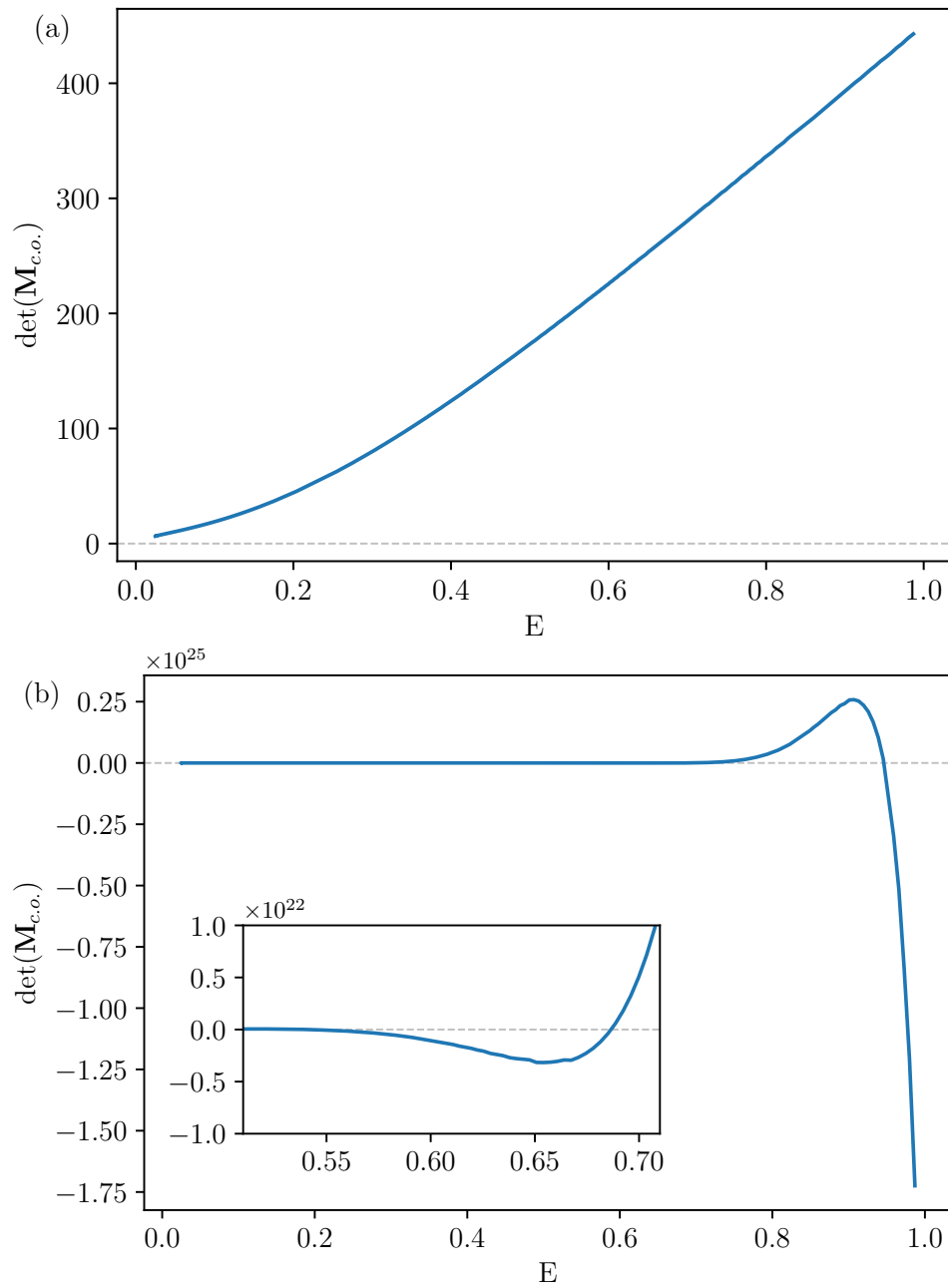


Abbildung 3.8.: Determinante des oberen rechten  $(2 \times 2)$ -Blockes der Monodromiematrix in  $\text{Cu}_2\text{O}$ . In (a) für einen Umlauf und in (b) über neun Umläufe gegen die skalierte Energie aufgetragen. Der kleine Ausschnitt zeigt den Bereich, in dem die beiden weiteren Nullstellen liegen.

Stabilitätsindex  $\varrho_{1,4}$  ab. Ein ähnliches Verhalten in der Stabilität der Bahnen zeichnet sich für das Eigenwertpaar  $d_2$  und  $d_3$  ab. Sowohl für Kupferoxydul, als auch Wasserstoff, beginnt der teilstabile Bereich (us) der Bahnen mit einer auftretenden Bifurkation im Lösungsverhalten der Bahnen. In Wasserstoff ist der betrachtete Energiebereich groß genug, um eine zweite Bifurkation erkennen zu können. Mit dem Auftreten der Bifurkation ist das Verlassen des Stabilitätsbereiches verbunden. Für Kupferoxydul wurden ebenfalls Rechnungen in höheren Energiebereich durchgeführt; eine zweite Bifurkation wurde in diesem Bereich allerdings nicht gefunden. Der Verlauf der Bahnstabilität für  $E \rightarrow 0$  deutet für beide Systeme auf eine Bifurkation bei  $E = 0$  hin, da sich die Stabilitätsindizes der Grenze bei  $+2$  annähern, jedoch Energien  $E \leq 0$  in den Abbildungen nicht mehr dargestellt sind. Die Bahnen lassen sich durch die Indizierungen (vgl. Abschnitt 2.4) in Abb. 3.10 nach der Stabilität in der jeweiligen Eigenvektorrrichtungen der Eigenwertpaare kategorisieren. Der erste Buchstabe der Einteilung wird den Eigenvektorrrichtungen des Paares  $d_2, d_3$  zugeschrieben. Da für  $\varrho_{2,3}$  nur un stabile Bahnen (u) gefunden wurden, können die Bahnen nur teilstabil (su) sein. In Abbildung 3.10 sind diese Bereiche veranschaulicht. Im grau hinterlegten Bereich sind die geschlossen periodischen Bahnen in Kupferoxydul teilstabil. Da in der Abbildung nicht eindeutig ersichtlich ist, dass der Bereich durch die rote Markierung nicht unterbrochen wird, ist dieser Teilbereich erneut mit (su) beschriftet, ohne dass sich das Verhalten zwischenzeitlich geändert hat. Der rote Bereich kennzeichnet das teilstabile (us) Verhalten von Wasserstoff. In allen anderen Teilbereichen sind die Bahnen instabil in allen Eigenvektorrrichtungen zu den Eigenwerten.

Die Untersuchung der  $\mathbf{M}_{c.o.}$  weist ebenfalls Unterschiede auf. Die Nullstellensuche des  $(2 \times 2)$ -Matrixblockes findet bereits ab dem ersten Umlauf  $r = 1$  eine Nullstelle. Für jeden zusätzlich betrachteten Umlauf kommt eine Nullstelle hinzu. Für Kupferoxydul lag der Zyklus eine zusätzliche Nullstelle in dem Determinantenverlauf vorzufinden bei drei Umläufen. Eine analoge Darstellung der Determinant für verschiedene Umlaufzahlen lässt sich in [10] finden. Da die Nullstellen der  $\det(\mathbf{M}_{c.o.})$  für die Berechnung der Antwortfunktion und des Maslovindex eine entscheidende Rolle spielen, sollen diese für Wasserstoff noch kurz genannt werden und sind in Tab. 3.2 zusammengefasst. Für Wasserstoff treten im gleichen Energiebereich mehr Bifurkationen auf, als es für Kupferoxydul der Fall ist. Dieses Verhalten äußert sich ebenfalls durch das Auftreten von mehreren Kaustiken, die durch die Berechnung des Maslovindex festgestellt werden. Die Berechnung des Maslovindex erfolgt im nächsten Abschnitt.

### 3.3. Berechnung der Spektren

Für die Berechnung der Antwortfunktion und dem darauffolgenden Signal  $c(t)$ , das die Fouriertransformierte der Antwortfunktion  $g^{sc1}(E)$  darstellt, ist die Berücksichtigung der Phase unabdinglich. Diese Phase wird durch den Wert des Maslovindex multipliziert mit dem Faktor  $\frac{\pi}{2}$  bestimmt. Bevor die Antwortfunktion ermittelt werden kann, muss

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

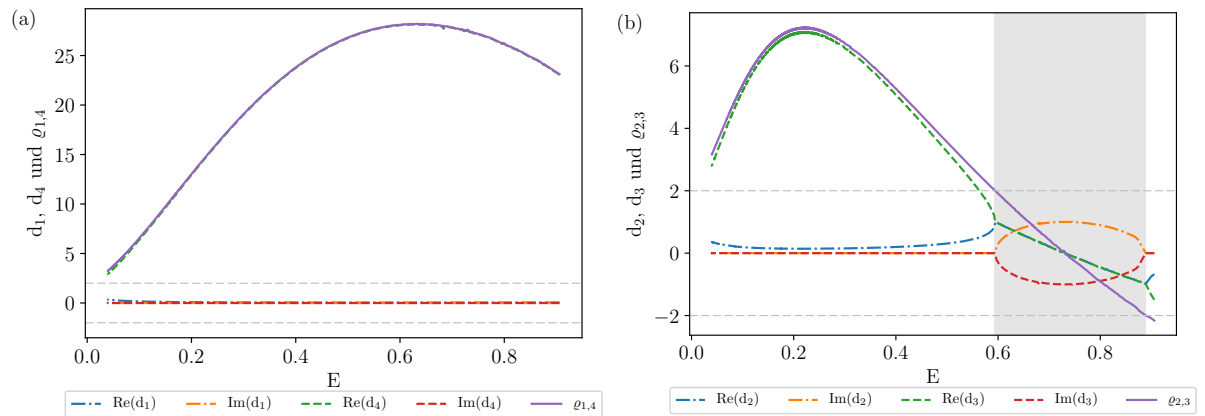


Abbildung 3.9.: Eigenwertpaare der Monodromiematrix von Wasserstoff. Der grau hinterlegte Bereich in (b) kennzeichnet die stabilen Bahnen  $-2 \leq \varrho_{2,3} \leq 2$  in dieser Eigenvektorrichtung. Für das Eigenwertpaar  $d_1, d_4$  sind die Bahnen für jede betrachtete Energie instabil.

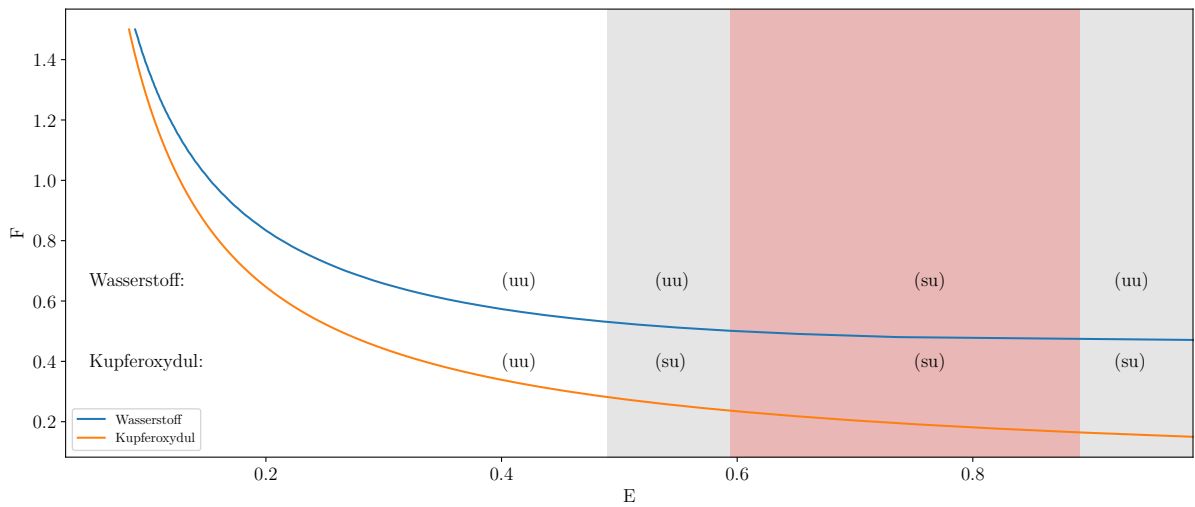


Abbildung 3.10.: Skalierte elektrische Feldstärke über die Energie in Hinblick auf die Stabilitätskategorien aufgetragen. Die farbigen hinterlegten Bereiche zeigen die Energieintervalle für die eine Eigenvektorrichtung der Systeme stabil ist. Der graue Bereich kennzeichnet die Stabilität von Kupferoxydul, der rote Bereich den von Wasserstoff. Da aus der Abbildung nicht direkt ersichtlich ist, dass der graue Bereich nicht unterbrochen wird, sind die Stabilitätskategorisierungen für alle Teilintervalle eingezeichnet worden.

Tabelle 3.2.: Die Nullstellen der Determinante  $\mathbf{M}_{c.o.}$  des Wassertoffsystems in Abhängigkeit der Umlaufzahlen  $r$  von  $r = 1$  bis 8. Für jeden Umlauf lässt sich eine zusätzliche Nullstelle finden und Nullstellen des  $r$ -ten Umlaufes treten auch im  $2r$ -ten Umlauf auf. Mehrfach auftretenden Nullstellen wurden farbig hinterlegt.

$r$	Nullstellen der Determinante $\mathbf{M}_{c.o.}(E,r)$							
1	0,89071;							
2	0,72979;	0,89071;						
3	0,65941;	0,80658;	0,89071;					
4	0,63189;	0,72979;	0,84049;	0,89071;				
5	0,61865;	0,68560;	0,77642;	0,85765;	0,89071;			
6	0,61133;	0,65941;	0,72979;	0,80658;	0,86740;	0,89071;		
7	0,60688;	0,64290;	0,69774;	0,76311;	0,82664;	0,87342;	0,89071;	
8	0,60396;	0,63189;	0,67540;	0,72979;	0,78793;	0,84049;	0,87739;	0,89071;

zuerst der Maslovindex  $\mu_{c.o.}$  der Bahnen berechnet werden. Die Berechnung und dessen Interpretation wird im folgenden Abschnitt behandelt.

### 3.3.1. Bestimmung des Maslovindex

Als Kaustik bezeichnet man das Verschwinden der Variation des Ortsvektors  $\delta\mathbf{U}$  nach dem Azimutalwinkel  $\varphi$ , dem Polarwinkel  $\vartheta$ , der regularisierten Zeit  $\tau$  oder dem Faserwinkel  $\alpha$  an einem Punkt der Bahn. Zusätzlich zu dem Verschwinden der Variationen dürfen keine kollinearen Paare an Vektoren dieser Variationen auftreten. Diese Bedingungen lassen sich mathematisch am besten dadurch formulieren, dass die Determinante der Matrix

$$\begin{pmatrix} \delta_\varphi U_1 & \delta_\vartheta U_1 & \delta_\tau U_1 & \delta_\alpha U_1 \\ \delta_\varphi U_2 & \delta_\vartheta U_2 & \delta_\tau U_2 & \delta_\alpha U_2 \\ \delta_\varphi U_3 & \delta_\vartheta U_3 & \delta_\tau U_3 & \delta_\alpha U_3 \\ \delta_\varphi U_4 & \delta_\vartheta U_4 & \delta_\tau U_4 & \delta_\alpha U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{M}_{1,3} & \overline{M}_{1,4} & U'_1 & -U_2 \\ \overline{M}_{2,3} & \overline{M}_{2,4} & U'_2 & U_1 \\ \overline{M}_{3,3} & \overline{M}_{3,4} & U'_3 & U_4 \\ \overline{M}_{4,3} & \overline{M}_{4,4} & U'_4 & -U_3 \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

verschwindet. Für semiklassische Wellenfunktionen führt eine auftretende Kaustik auf die Erhöhung der Phase um  $\frac{\pi}{2}$ . Jede gefundene Nullstelle der Determinante erhöht den Maslovindex  $\mu_{c.o.}$  um 1. Die Variationen der einzelnen Orstkoordinaten  $U_i$  nach den Winkeln  $\varphi$  und  $\vartheta$  sind die Einträge des oberen rechten Blockes der reduzierten  $(4 \times 2)$ -Stabilitätsmatrix  $\overline{\mathbf{M}}$ . Die Variation  $\delta_\tau U_i$  entspricht dem totalen Differential nach der regularisierten Zeit  $\tau$ ,  $d\mathbf{U}/d\tau$ . Die vierte Spalte der linken Matrix in Gl. (3.11) lässt sich als partielle Ableitung nach dem Faserwinkel  $\alpha$  auffassen. Dafür wird die Umkehrabbildung von  $\mathbf{U}$  nach  $\alpha$  differenziert. Diese Matrix wird nach jedem Integrationsschritt der Bewegungsgleichungen aufgestellt und die Determinante berechnet. Der Maslovindex

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

---

Tabelle 3.3.: Die Paare aus skaliertes elektrischer Feldstärke und skaliertes Energie, die zur Berechnung der Spektren berücksichtigt werden. Die Energien sind für  $\text{Cu}_2\text{O}$  und Wasserstoff aufgeführt. Die elektrischen Feldstärken der Systeme werden derart gewählt, dass sie die einzelnen Stabilitätsbereiche abdecken und ungefähr miteinander übereinstimmen. Der Wert der größten Feldstärke liegt deutlich von der Stabilitätsgrenze entfernt.

Wertepaar	$F_{\text{Cu}_2\text{O}}$	$E_{\text{Cu}_2\text{O}}$	$F_{\text{H}}$	$E_{\text{H}}$
1	0,380	0,34300	0,600	0,36141
2	0,270	0,51322	0,520	0,52143
3	0,230	0,61304	0,500	0,60098
4	0,195	0,73669	0,480	0,74851

entspricht der Anzahl der gefundenen Nullstellen. Dieses Verfahren behandelt jede gefundene Nullstelle äquivalent. Am Anfang und Ende einer jeden Bahn tritt ein Phasensprung von nur  $\frac{\pi}{4}$  auf. Dies kann man zeigen, indem man die Felder am Kernort vernachlässigt und die Bahnen im reinen Coulombpotential beschreibt. Für dieses Problem beschreiben die Besselfunktionen die exakte Lösung. Da diese Nullstellen am Anfang und Ende jeder Bahn nicht erfasst werden, kann jede Nullstelle in Hinblick auf den Maslovindex gleich behandelt werden.

In Tab. 3.3 sind die betrachteten Wertepaare der elektrischen Feldstärke und der Energie zusammengefasst, für die im Weiteren die Analyse der Spektren durchgeführt werden soll. Der Fokus wird dabei darauf gelegt, Energien aus den verschiedenen Stabilitätskategorien auszuwählen, die für beide Systeme grob übereinstimmen. Das Wertepaar 1 liegt weit entfernt von der Grenze zum teilstabilen Bereich der Bahnen in beiden Systemen. Für Wertepaar 2 gehört die Energie von Kupferoxydul bereits zu teilstabilen Bahnen. Für die Wertepaare 3 und 4 sind die Bahnen für  $\text{Cu}_2\text{O}$  und Wasserstoff stabil in der Eigenvektorrichtung zu dem Eigenwertpaar  $d_2, d_3$ . Zu diesen Wertepaaren werden mittels Gleichung (3.11) die Maslovindizes  $\mu_{c.o.}$  berechnet. Es zeigt sich in Tabelle 3.4, dass für instabile Bahnen (uu) der Maslovindex für jeden durchlaufenen Umlauf um 4 anwächst. Aufgrund auftretender Kaustiken kann sich  $\mu_{c.o.}$  bei teilstabilen Bahnen um 4 oder 5 ändern. Diese treten offenbar bei größeren Energien häufiger auf, weshalb der Maslovindex sich dort in beiden System häufiger um 5 geändert hat, als dies bei geringen Energien eintritt. Es ist kein expliziter Einfluss der unterschiedlichen Stabilitäten der Bahnen auf den Anstieg des Maslovindex über die Anzahl der Umläufe zu erkennen.

#### 3.3.2. Berechnung der Antwortfunktion

Die Berechnung der Antwortfunktion nach Gleichung (2.60) verändert sich für geschlossen periodische Bahnen dahingehend, dass die Summation über alle geschlossenen Bah-

Tabelle 3.4.: Die berechneten Maslovindizes der ersten sieben Umläufe für die Wertepaare aus Tab. 3.3 für beide Systeme. Der Maslovindex wächst für instabile Bahnen abhängig von der Anzahl der auftretenden Kaustiken um 4 und für teilstabile Bahnen um 4 oder 5.

Maslovindex $\mu_{c.o.}$	Kupferoxydul				Wasserstoff			
Wertepaar	1	2	3	4	1	2	3	4
Umlaufzahl								
1	4	4	4	4	4	4	4	4
2	8	8	8	8	8	8	8	9
3	12	12	12	12	12	12	12	13
4	16	16	16	17	16	16	16	18
5	20	20	20	21	20	20	20	22
6	24	24	24	25	24	24	25	27
7	28	28	29	29	28	28	29	31

nen in eine Summe über die Umläufe  $r$  übergeht,

$$g^{\text{scl}}(E) = g_0 \left( 1 + \frac{15}{23} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{r=1}^{r_{\max}} \frac{B^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{|\det(\mathbf{M}_{c.o.}(r))|}} \times e^{i[rS_{c.o.}B^{-1/3} + rT_{c.o.}(E-E_0)B^{-1/3} - \frac{\pi}{2}\mu_{c.o.}(r)]} \right\} \right). \quad (3.12)$$

Die Bahnparameter Energie, elektrische Feldstärke, physikalische Wirkung und Periodendauer entstammen den gefundenen Bahnen aus Abschnitt 3.1.2. In Gleichung (3.12) werden die Größen durch die magnetische Flussdichte  $B$  reskaliert. Als Magnetfeld wird eine Feldstärke von  $B = 3 \text{ T}$  verwendet, die in dieser Größe für Experimente in Laboren üblich ist. Die Determinante  $\det(\mathbf{M}_{c.o.})$  entstammt dem rechten oberen  $(2 \times 2)$ -Block der Monodromiematrix  $\mathbf{M}$ . Diese Determinante wächst für mehrere Umläufe sehr stark in ihrer Größe an. Dies lässt sich aus den Abbildungen 3.8 ableiten. Dadurch wird der Beitrag der einzelnen Summanden aus Gl. (3.12) kleiner für größere  $r$ . Dies zeigt sich eindrücklich in der Darstellung der Fouriertransformation. Die Antwortfunktion ist in Abbildung 3.11 dargestellt. Die Funktion oszilliert um den konstanten Wert  $g_0$  in einer nahezu sinusförmigen Funktion. Die ansteigende Flanke ist leicht steiler als die abfallende. Zusätzlich wurde die reskalierte Energie in Elektronenvolt (eV) umgerechnet, um die Größenordnung der Energie anschaulicher darzustellen. Die Abbildung zeigt das Wertepaar 3 aus Tabelle 3.3. Um den Einfluss der Linearisierung zu zeigen, wurden zusätzlich Energien gewählt, die nahe um die Energie  $E_0$  des Wertepaares liegen. Es zeigt sich, dass die Linearisierung um ein kleines Intervall um den Entwicklungspunkt eine gute Approximation darstellt, da die einzelnen Antwortfunktionen nahezu übereinstimmen.

Die Fouriertransformation kann nach Gl. (2.61) berechnet werden. In der Funktion tau-

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

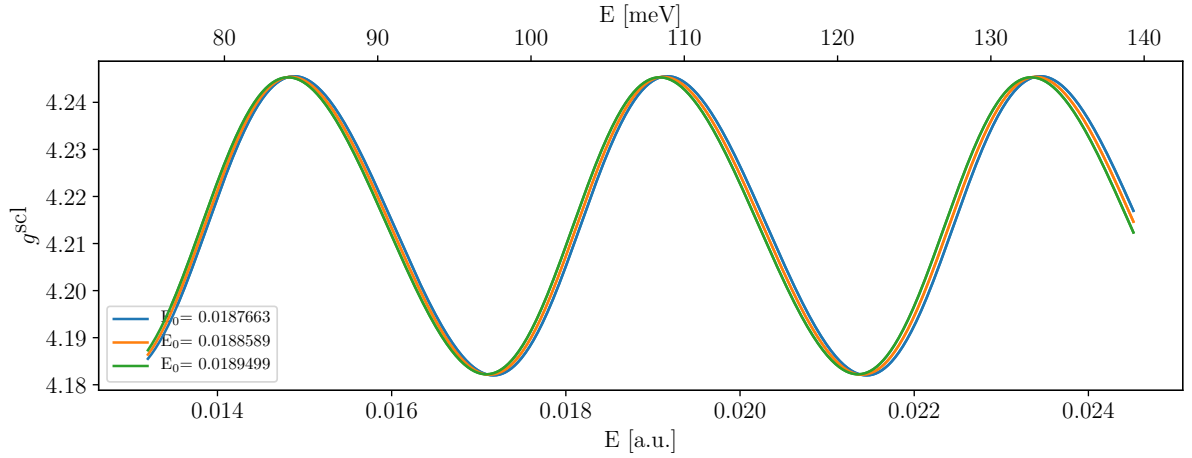


Abbildung 3.11.: Antwortfunktion des dritten Wertepaares von Kupferoxydul aus Tab. 3.3 über die unskalierte Energie aufgetragen. Zusätzlich wurden die Kurven von zwei sehr ähnlichen Energien dargestellt, um zu zeigen, dass die Linearisierung der Wirkung eine gute Approximation in einem kleinen Energieintervall um  $E_0$  ist. Dabei werden sieben Umläufe berücksichtigt und die Reskalierung der Energie mit einer Feldstärke von  $B = 3 \text{ T}$  durchgeführt. Zusätzlich wird die Energie aus atomaren Einheiten  $E [\text{a.u.}]$  in Elektronenvolt  $E [\text{eV}]$  umgerechnet.

chen dieselben Bahnparameter als in der Antwortfunktion auf. Das halbe Energiefenster des Integrals wird auf  $\Delta \tilde{E} = 2$  gesetzt. Diese Energie wird durch  $E_0 = \tilde{E}_0 B^{2/3}$  reskaliert und ergibt im atomaren Einheitensystem von Kupferoxydul bei einer magnetischen Feldstärke von  $3 \text{ T}$  einen Wert von  $\Delta E \approx 0,0615$ . Die Abbildung 3.12 zeigt die Fouriertransformation für das dritte Wertepaar aus Tab. 3.3, aufgeteilt in den (a) Real- und (b) den Imaginärteil. Die zugehörige Bahn besitzt eine Periodendauer von  $\tilde{T}_{\text{c.o.}} = 7,9305$ . Die Reskalierung in Kupferoxydul findet mit einer laborähnlichen magnetischen Feldstärke von  $B = 3 \text{ T}$  statt. Durch Umformen der Gl. (2.17) lassen sich die Größen reskalieren. Dies führt auf eine unskalierte Periodendauer von  $T_{\text{c.o.}} \approx 1469,78$ . Die Peaks im Spektrum liegen bei Vielfachen der Periodendauer der einfach durchlaufenen geschlossenen periodischen Bahn von  $E_0 = 0,01885$ . Obwohl die Summe der Antwortfunktion bis zum siebten Umlauf ausgewertet wird, ist das Signal  $c(t)$  nur bis zum vierten Umlauf dargestellt, weil der Beitrag zum Signal  $c(t)$  ab dem dritten Umlauf verschwindend gering ist und in der Abbildung 3.12 kaum zu erkennen wäre.

#### 3.3.3. Vergleich mit Wasserstoff

Abbildung 3.13 zeigt die Antwortfunktion für das Wasserstoffmodell. Die Periode der Funktion ist deutlich kürzer als in Kupferoxydul für atomare Energieeinheiten des jeweiligen Systems. Außerdem ist der Unterschied zu einer Sinusfunktion deutlicher aus-



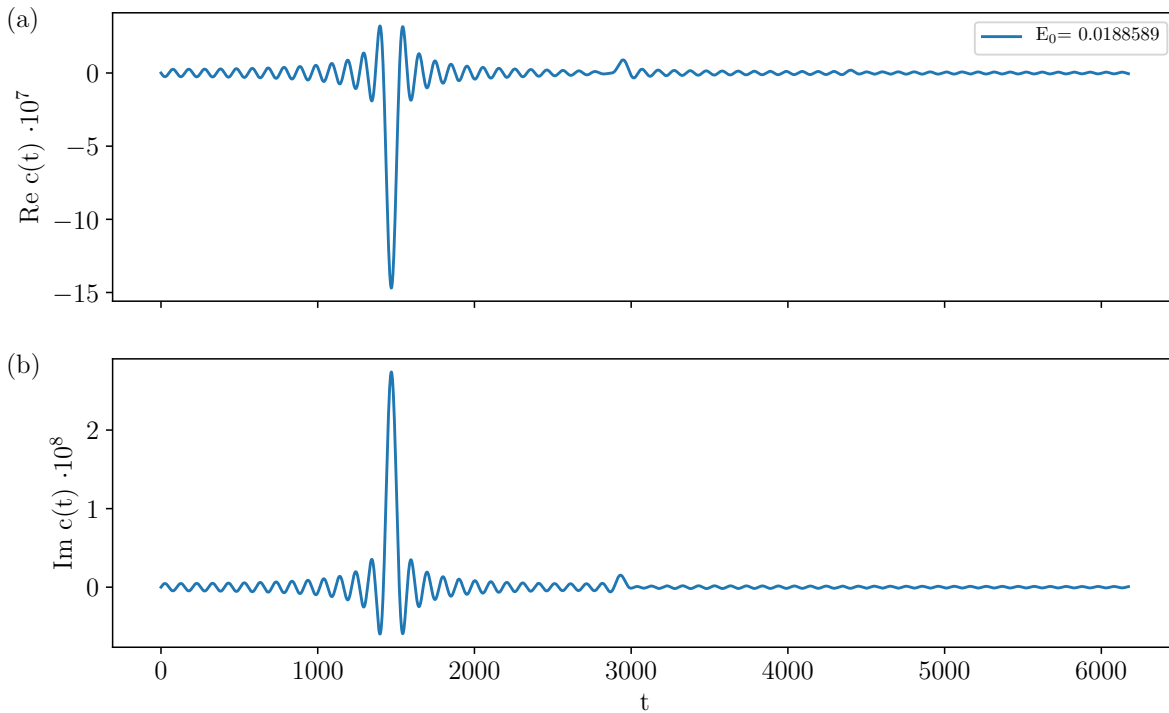


Abbildung 3.12.: Fouriertransformation der Antwortfunktion für die Energie  $E_0 = 8,2389 \times 10^{-3}$  der Bahn Kupferoxydul. Die Fouriertransformierte wird in ihren Realteil (a) und ihren Imaginärteil (b) aufgeteilt. Bei ganzzahligen Vielfachen der Periodendauer  $T_{c.o.}$  des einfachen Umlaufes sind Peaks zu erkennen. Da bereits der Peak beim dritten Umlauf kaum mehr zu erkennen ist, wird nur ein Ausschnitt des gesamten Spektrums dargestellt. Die Auswertung des Integrals der Fouriertransformation geschieht über ein Energieintervall der halben Breite  $\Delta \tilde{E} = 2$ . Diese Energie entspricht einem reskalierten Wert von  $\Delta E = 0,0615$  in  $\text{Cu}_2\text{O}$ .

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

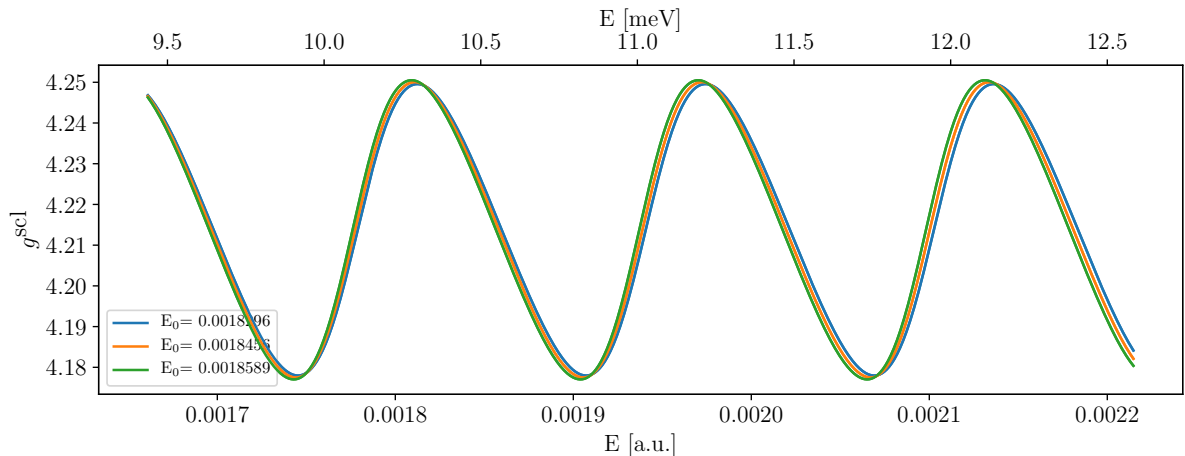


Abbildung 3.13.: Die Antwortfunktion von Wasserstoff für dieselben elektrische Feldstärke  $F$ , die in der Antwortfunktion von Kupferoxydul verwendet wurde, über die reskalierte Energie dargestellt. Die beiden zusätzlichen Kurven, die nahe um  $E_0$  gewählt wurden, verdeutlichen auch hier die gute Approximation durch die Linearisierung. Die Reskalierung für Wasserstoff wird, aufgrund des deutlich größeren Umrechnungsfaktor der magnetischen Flussdichte in Wasserstoff, für ein Magnetfeld von  $B = 40$  T durchgeführt. Die Periode des Signals ist deutlich kleiner als in  $\text{Cu}_2\text{O}$ .

geprägt. Die ansteigende Flanke der Funktion ist erkennbar steiler als die abfallende Flanke. Für Kupferoxydul fiel diese Ausprägung weniger stark aus.

Für das verwendete Wertepaar 3 ergibt sich eine Bahn mit Periodendauer  $\tilde{T}_{c.o.} = 6,62371$ . Reskaliert mit  $B = 40$  T ist die Periodendauer  $T_{c.o.} \approx 38922$  in atomaren Zeiteinheiten von Wasserstoff. Die enorme Diskrepanz zwischen den beiden Werten für die Periodendauer in den jeweiligen Einheitensystemen rührt daher, dass der Umrechnungsfaktor der magnetischen Feldstärke sich um eine Größenordnung von  $10^3$  unterscheidet. Die Peaks in Abb. 3.14 liegen bei Vielfachen dieser Periodendauer. Da der Wert der Periodendauer deutlich größer ist als in  $\text{Cu}_2\text{O}$  und folglich die Peaks weiter voneinander getrennt sind, sehen die Peaks in der fouriertransformierten Antwortfunktion von Wasserstoff deutlich schärfer aus als in Kupferoxydul und der Bereich zwischen zwei Peaks flacht stärker ab.

#### 3.3.4. Harmonische Inversion

Für die Harmonische Inversion müssen die Bahnparameter des Signales  $c(t)$  in reskalierter Form vorliegen. Die Reskalierung findet bei einer Fedstärke von  $B = 3$  T bzw.  $B = 40$  T respektive für beide Systeme statt. Im Anschluss soll die harmonische Inversion nach Abschnitt 2.6 für ein halbes Energieintervall von  $\Delta E = 2$  durchgeführt werden.

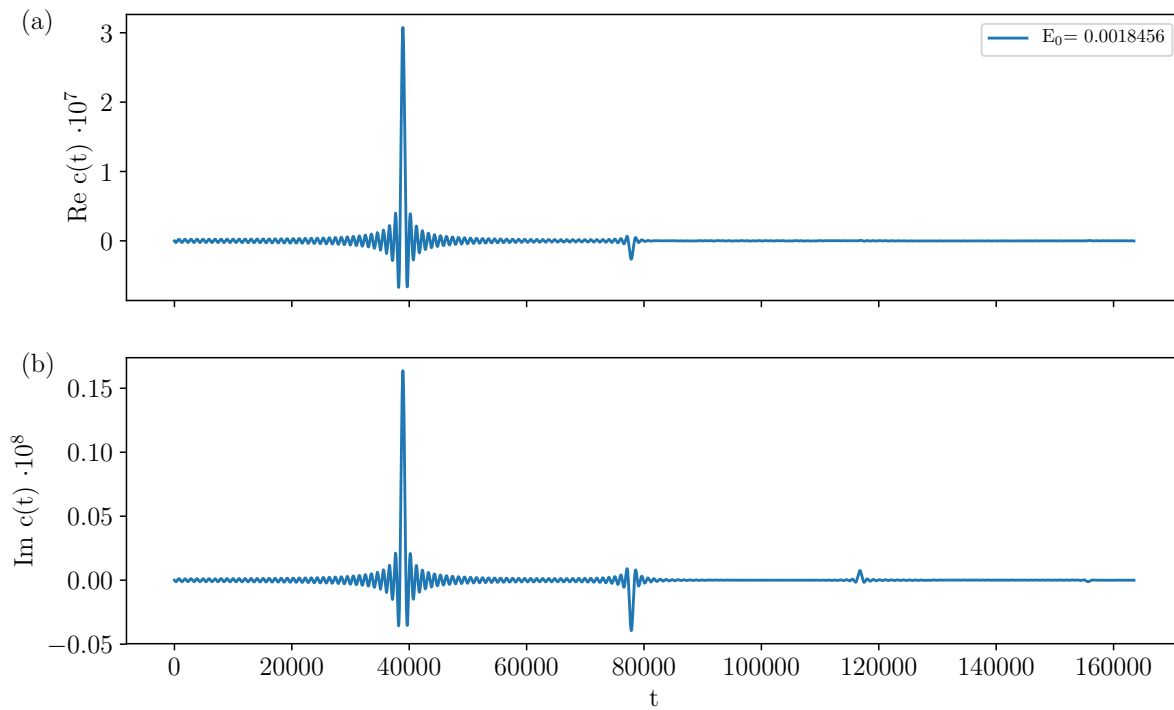


Abbildung 3.14.: Die fouriertransformierte Antwortfunktion des dritten Wertepaares von Wasserstoff. Im Vergleich zu Kupferoxydul ist der Peak, der dem dritten Umlauf zugeordnet wird, noch zu erkennen. Analog zur Darstellung in Kupferoxydul wird nur der relevante Teil des Spektrums gezeigt, in dem die Summanden einen nichtverschwindenden Beitrag zum Signal leisten. Die Auswertung des Integrals geschieht in einem gleich großen Energiefenster  $\Delta E$ .

### 3. Untersuchung geschlossen periodischer Bahnen

---

Für diese ist es entscheidend, dass das Signal  $c(t)$  in äquidistanten Punkten vorliegt. Leider konnte der vorhandene Algorithmus für die Harmonische Inversion von Jacob Fuchs [25] nicht kompiliert werden. Da es über den zeitlichen Rahmen dieser Bachelorarbeit hinausgegangen wäre, das Programm lauffähig zu bekommen, muss an dieser Stelle auf die explizite Berechnung der Spektren verzichtet werden. Für das betrachtete Kupferoxydulmodell liegen keine quantenmechanischen Rechnungen vor, wodurch sich die Interpretation der Ergebnisse auf den Vergleich mit Wasserstoff beschränkt hätte. Deshalb seien an dieser Stelle nur kurz die Ergebnisse der harmonischen Inversion für die Spektren in Wasserstoff skizziert. In der Arbeit von Marcel Wagner [10] konnten die Spektren berechnet und mit den exakten quantenmechanischen Ergebnissen von Frank Schweiners Arbeit [11] verglichen werden. Es zeigt sich, dass für die Berücksichtigung mehrerer Umläufe die harmonische Inversion eine sehr gute Übereinstimmung mit den quantenmechanischen Spektren ergibt. Betrachtet man zusätzlich noch nichtperiodisch geschlossene Bahnen, so konnten sogar variierende Breiten in den Resonanzen erkannt werden, die bei den quantenmechanischen Resonanzen ebenfalls auftreten.

## 4. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden hoch angeregte Resonanzen im Absorptionsspektrum von Kupferoxydul untersucht. Dabei wurde vor Allem die semiklassischen Bewegungen der Exzitonen betrachtet. Als Exziton bezeichnet man das Quasi-Teilchen, das bei Anregung eines Elektrons aus dem Valenz- in das Leitungsband entsteht und als wasserstoffähnliches System behandelt wird. In einem vereinfachten Modell des Festkörpers Kupferoxydul und dessen Wechselwirkungen mit einem angeregten Exziton konnten semiklassisch Bewegungsgleichungen hergeleitet werden. Dabei wurde gezeigt, wie sich der Einfluss der Dielektrizitätskonstanten  $\varepsilon$  und der effektiven Massen in einem einzigen Faktor  $\kappa$  ausdrücken lassen. Die Bewegungsgleichungen wurden mittels eines Runge-Kutta-Verfahrens 4. Ordnung numerisch integriert und die Forderung nach geschlossener Periodizität in einem Sekantenverfahren formuliert. Das negative Vorzeichen von  $\kappa$  führte auf ein entgegengesetztes Krümmungsverhalten der Bahnen im Vergleich zu den analogen Bahnen in Wasserstoff. Zusätzlich tritt für schwache elektrische Felder eine Deformation der Bahn in regularisierten Koordinaten auf. Für geringe elektrische Feldstärken wächst die Bahngröße allgemein an, wodurch sich die Deformation stärker ausprägt. Die Deformation lässt sich durch die entgegengesetzten Vorzeichen der magnetischen Terme in der Hamiltonfunktion erklären. Der Zusammenhang zwischen elektrischer Feldstärke und Energie zeigte dasselbe asymptotische Verhalten, wie es für Wasserstoff nach [10] festgestellt wurde. Die Asymptote liegt mit  $E \approx 0,08$  für Kupferoxydul deutlich tiefer als in Wasserstoff mit  $E \approx 0,47$ .

Durch die Stabilitätsuntersuchung ließ sich für eines der Eigenwertpaare ein Energiebereich finden, in dem die Bahnen stabil in den zugehörigen Eigenvektorrichtungen sind. Der zugehörige Stabilitätsindex weist ein verglichen mit Wasserstoff ähnliches Verhalten auf. Bei Eintreten in den stabilen Bereich tritt eine Bifurkation auf. In Wasserstoff konnte zusätzlich noch das Austreten des Stabilitätsindex aus dem stabilen Bereich aufgelöst werden. Dieses wird ebenfalls von einer Bifurkation begleitet. Für das zweite Eigenwertpaar konnte ausschließlich instabiles Verhalten im betrachteten Energiebereich festgestellt werden. Der Stabilitätsindex zu diesem Eigenwertpaar zeigt in Kupferoxydul ein divergentes Verhalten. In Wasserstoff hingegen ist ein Maximum des Stabilitätsindex vorhanden. Für größer werdende Energien nähert sich  $\rho$  in diesen Eigenvektorrichtungen erneut der Stabilitätsgrenze an. Die betrachteten geschlossen periodischen Bahnen sind folglich maximal teilstabil.

Für die Berechnung der Spektren wird die semiklassische Phase berücksichtigt, die durch den Maslovindex bestimmt wird. Für das Auftreten der Kaustiken zeigte sich

kein expliziter Zusammenhang zwischen der Stabilität der Bahnen und dem Wachstum des Maslovindex über die Anzahl der Umläufe. In der semiklassischen Antwortfunktion zeigte sich, dass die Periode in Kuperoxydul größer als in Wasserstoff ist. Die Antwortfunktion ähnelt einer Sinus-Funktion; die ansteigende Flanke ist jedoch steiler als die abfallende. Dies ist in Wasserstoff deutlicher ausgeprägt. Die Fouriertransformierte der Antwortfunktion stellt ein Signal  $c(t)$  dar, das Peaks bei Vielfachen der Periodendauer des einfachen Umlaufes besitzt. Die Amplitude der Peaks nehmen mit steigender Umlaufzahl sehr schnell ab und tragen zum Signal kaum bei.

Die Berechnung der Photoabsorptionsspektren mittels der Harmonischen Inversion konnte, aufgrund eines Programmfehlers, nicht durchgeführt werden. Dieser Schritt steht daher noch aus, um die hier durchgeführten Betrachtungen zu vervollständigen. Die Ergebnisse würden den Vergleich der Lage und Ausprägung der Resonanzen mit Wasserstoff ermöglichen. Zusätzlich sollte der Vergleich mit exakten quantenmechanischen Spektren in  $\text{Cu}_2\text{O}$  gezogen werden, sobald diese vorhanden sind. Nach [10] müssen auch nichtperiodische Bahnen zur Berechnung der Spektren berücksichtigt werden, um eine variierende Breite der Resonanzen zu erhalten. Dieses Phänomen tritt in quantenmechanischen Spektren ebenfalls auf. Somit wäre es von Interesse, die Suche nach Bahnen in der  $xy$ -Ebene mit anderen Startwerten zu wiederholen und auch auf Bahnen außerhalb der Ebene auszuweiten.

# A. Atomare Einheiten

Die Einführung atomarer Einheiten geschieht formell durch das Setzen von

$$m_e = e = \hbar = a_0 = 1. \quad (\text{A.1})$$

Die Größen werden dadurch dimensionslos. Dies hat den großen Vorteil, dass einzelne Systeme unabhängig vom Material betrachtet werden können. Die Materialparameter verschwinden in die Umrechnungsfaktoren der atomaren Einheit, die in Tab. A.1 zusammengefasst sind. Das Einheitensystem lässt sich derart erweitern, dass nicht nur Längen, Massen und Ladungen in Vielfachen von Naturkonstanten angegeben werden, sondern auch die für diese Arbeit relevanten Größen der Energie  $E$ , der elektrischen Feldstärke  $F$  und der magnetischen Flussdichte  $B$  durch derartige Umrechnungsfaktoren dimensionslos gemacht werden können. Die atomaren Einheiten dieser Größen wurden aus den Materialparametern und den effektiven Massen von  $\text{Cu}_2\text{O}$  berechnet. Da sich aus der Herleitung der semiklassischen Bewegungsgleichungen ergab, dass die reduzierte Masse  $\mu$  der Exzitonen als Maß der Masse geeigneter ist als die Elektronenmasse, wird diese in den Hartree-Einheiten auf eins gesetzt. Die Berechnung sei an dieser Stelle nochmals explizit ausgeschrieben,

$$\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h} = \frac{0,99 m_0 \cdot 0,58 m_0}{0,99 m_0 + 0,58 m_0} = 0,365 m_0. \quad (\text{A.2})$$

In Tab. A.1 wird deshalb die vorkommende Masse mit  $\mu$  bezeichnet. Im Wasserstoffmodell wird der Einfachheit halber die reduzierte Masse von Wasserstoff  $\mu_H$  gleich der Elektronenmasse  $m_e$  gesetzt, da die Differenz zwischen den beiden Größen in Wasserstoff hinreichend klein für die vorliegenden Betrachtungen ist.

Tabelle A.1.: Umrechnungsfaktoren der beiden Systeme aus den Hartree-Einheiten in SI-Einheiten. Die Definition der Hartree-Einheiten wurde dahingehend verändert, dass die reduzierte Masse  $\mu$  als Maß der Masse gilt. Die Werte für Wasserstoff werden aus [26] entnommen. Für Kupferoxydul werden die Umrechnungsfaktoren mit der Elektronenmasse  $m_e = 0,99 m_0$ , der Lochmasse  $m_h = 0,58 m_0$  und dem Materialparameter  $\varepsilon_r = 7,5$  berechnet [16]. Da die Größen für Kupferoxydul nicht genauer bestimmt sind, werden die berechneten Größen ebenfalls nicht genauer angegeben. Die Dielektrizitätskonstante ist durch  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$  gegeben und ist in Vakuum  $\varepsilon = \varepsilon_0$ . Für die Elementarladung  $e$  und den Drehimpuls  $\hbar$  wurden für Kupferoxydul dieselben Werte als in Wasserstoff verwendet.

Größe	Hartree-Einheit	Wasserstoffatom	Kupferoxydul
Masse	$\mu$	$9,109\,382 \cdot 10^{-31}$ kg	$3,325 \cdot 10^{-31}$ kg
Elementarladung	$e$	$1,602\,176 \cdot 10^{-19}$ C	$1,602 \cdot 10^{-19}$ C
Drehimpuls	$\hbar = h/2\pi$	$1,054\,572 \cdot 10^{-34}$ Js	$1,054 \cdot 10^{-34}$ Js
Energie	$E = \mu e^4 / (4\pi\varepsilon\hbar)^2$	$4,359\,744 \cdot 10^{-18}$ J	$2,819 \cdot 10^{-20}$ J
Zeit	$t = \hbar/E_H$	$2,418\,884 \cdot 10^{-17}$ s	$3,581 \cdot 10^{15}$ s
Länge	$a_0 = 4\pi\varepsilon\hbar^2 / (\mu e^2)$	$0,529\,177 \cdot 10^{-10}$ m	$1,087 \cdot 10^{-9}$ m
Elektrische Feldstärke	$F = E_H(ea_0)$	$5,142\,206 \cdot 10^{11} \frac{\text{V}}{\text{m}}$	$1,624 \cdot 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}}$
Magnetische Flussdichte	$B = \hbar/(ea_0^2)$	$2,350\,517 \cdot 10^5$ T	$5,567 \cdot 10^2$ T



# Literaturverzeichnis

- [1] J.A. Frenkel. On the absorption of light and the trapping of electrons and positive holes in crystalline dielectrics. *Phy. Z. Sowjetunion* 9, 533 (1936).
- [2] R. Peierls. Zur Theorie der Absorptionsspektren fester Körper. *Annalen der Physik* 405, 905 (1932).
- [3] G. H. Wannier. The structure of electronic excitation levels in insulating crystals. *Phys. Rev.* 52, 191 (1937).
- [4] M. Hayashi und K. Katsuki. Absorption spectrum of cuprous oxide. *J. Phys. Soc. Jpn.* 5,381 (1950).
- [5] M. Hayashi und K. Katsuki. Hydrogen-like absorption spectrum of cuprous oxide. *J. Phys. Soc. Jpn* 7,599 (1952).
- [6] E.F. Gross und I.A. Karryjew. The optical spectrum of the exciton. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* (1952).
- [7] Frank Schweiner. *Theory of excitons in cuprous oxide*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2017).
- [8] T. Kazimierczuk, D. Fröhlich, S. Scheel, H. Stolz und M. Bayer. Giant Rydberg excitons in the copper oxide  $\text{Cu}_2\text{O}$ . *Nature* 514, 343 (2014).
- [9] M. L. Du und J. B. Delos. Effect of closed classical orbits on quantum spectra: Ionization of atoms in a magnetic field. I. Physical picture and calculations. *Phys. Rev.* 38, 1896-1912 (1988).
- [10] Marcel Wagner. *Anwendung der Closed-Orbit-Theorie auf das Wasserstoffatom in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern bei positiven Energien*. Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2015).
- [11] Frank Schweiner. *Klassische Dynamik und Lokalisierung von Resonanzen in der Umgebung des Stark-Sattelpunktes beim Wasserstoffatom in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern*. Masterarbeit, Universität Stuttgart (2015).
- [12] F. Schöne, S. O. Krüger, P. Grünwald, H. Stolz, S. Scheel, M. Aßmann, J. Heckötter, J. Thewes, D. Fröhlich und M. Bayer. Deviation of the excitation level spectrum in cuprous oxide from the hydrogen series. *Phys. Rev. B* 93, 075203 (2016).

- [13] Jonathan Luft. *Closed-Orbit Theorie für Magnetoexzitonen in Kupferoxydul*. Masterarbeit, Universität Stuttgart (2018).
- [14] A. Abragam und B. Bleaney. *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*. Clarendon Press, Oxford (1970).
- [15] T. F. Gallagher. Rydberg atoms. *Rep. Prog. Phys.* 51, 143 (1988).
- [16] Frank Schweiner, Patric Rommel, Jörg Main und Günter Wunner. Exciton-phonon interaction breaking all antiunitary symmetries in external magnetic fields. *Phys. Rev. B* 96, 035207 (2017).
- [17] Patric Rommel, Frank Schweiner, Jörg Main, Julian Heckötter, Marcel Freitag, Dietmar Fröhlich, Kevin Lehninger, Marc Aßmann und Manfred Bayer. Magneto-Stark effect of yellow excitons in cuprous oxide. *Phys. Rev. B* 98, 085206 (2018).
- [18] P. Kustaanheimo und E. L. Stiefel. Perturbation theory of Kepler motion based on spinor regularization. *J. Reine Angew. Math.* 204 (1965).
- [19] G. Scheifele und E. Stiefel. *Linear and regular celestial mechanics*, Band 174 von *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, Berlin (1971).
- [20] Jörg Main. *Das hochangeregte Wasserstoffatom im Magnetfeld und in gekreuzten magnetischen und elektrischen Feldern*. Doktorarbeit, Universität Bielefeld (1991).
- [21] H. D. Meyer. Theory of the Lyapunov exponents of Hamiltonian systems and a numerical study on the transition from regular to irregular classical motion. *J. Chem. Phys.* 84, 3147 (1986).
- [22] T. Bartsch. *The hydrogen atom in an electric field and in crossed electric and magnetic fields: Closed-orbit theory and semiclassical quantization*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2002).
- [23] Thomas Bartsch, Jörg Main und Günter Wunner. Semiclassical quantization of the hydrogen atom in crossed electric and magnetic fields. *Phys. Rev. A* 67, 063411 (2003).
- [24] J. Main, Dz. Belkic, H. S. Taylor und P. A. Dando. Decimation and harmonic inversion of periodic orbit signals. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 33, 1247 (2000).
- [25] Jacob Fuchs. *Harmonic-Inversion-Analyse exzeptioneller Punkte in Resonanzspektren*. Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2013).
- [26] Peter J. Mohr und Barry N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2002. *Rev. Mod. Phys.* 77, 1–107 (2005).

# Danksagung

Zum Abschluss dieser Arbeit möchte ich allen meinen Dank aussprechen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonders danken möchte ich dabei

- Herrn Professor Dr. Jörg Main für die Möglichkeit, diese Arbeit am 1. Institut für Theoretische Physik anzufertigen, die hervorragende Betreuung meiner Arbeit und die Unterstützung bei allen auftretenden Problemen.
- Patric Rommel, der für die Anfertigung dieser Arbeit eine große Hilfe war.
- Marcel Wagner für das freundliche Bereitstellen seiner Programme.
- Robin Bardakcioglu für die schnelle Hilfe bei technischen Problemen.
- Allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des 1. Institutes für Theoretische Physik der Universität Stuttgart für das gute Arbeitsklima und die unterhaltsamen Kaffeerunden.
- Felix Kogel für die tolle Arbeitsatmosphäre im Büro und seine gesamte fachliche Unterstützung, die maßgeblich zum Erfolg meines Studiums beigetragen hat.
- Meinen Eltern, die mich über das gesamte Studium unterstützt haben und jederzeit für mich da sind.



## Erklärung

Ich versichere,

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

Stuttgart, den 19. August 2018

*Matthias Schmidt*