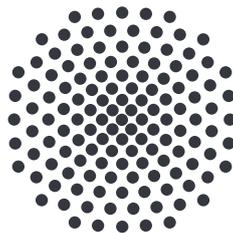


Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung auf die Abstandsverteilung der Exzitonenzustände in Kupferoxydul

Bachelorarbeit von
Marco Schönleber

02.03.2022

Prüfer: Prof. Dr. Jörg Main



Institut für Theoretische Physik I
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Aufbau der Arbeit	6
2	Theorie	7
2.1	Exzitonen in Kupferoxydul	7
2.1.1	Wasserstoffartiges Modell	7
2.1.2	Kupferoxydul	8
2.1.3	Einfluss der Bandstruktur	9
2.2	Semiklassische Dynamik	12
2.2.1	Klassische Dynamik	12
2.2.2	Semiklassische Theorien	13
2.2.3	Skalierung	14
2.3	Quantenchaos	15
2.3.1	Niveauabstoßung	15
2.3.2	Levelstatistik	17
2.3.3	Poisson- und GOE-Statistik	19
2.3.4	Brody-Verteilung	20
3	Methoden	23
3.1	Numerische Diagonalisierung des Hamiltonian	23
3.2	Klassifizierung der Zustände	24
4	Ergebnisse	27
4.1	Visualisierung der skalierten Spektren	27
4.2	Levelstatistik	35
5	Zusammenfassung und Ausblick	45
A	Materialkonstanten	47
B	Exziton-Hartree-Einheiten	49
	Literatur	51

1 Einleitung

In der Festkörperphysik werden die Energien der Elektronen durch Bänder beschrieben. Dabei ist es möglich, ein einzelnes Elektron so anzuregen, dass es vom Valenzins Leitungsband übergeht. Die entstehende Coulombwechselwirkung zwischen dem im Valenzband verbliebenen Loch und dem angeregten Elektron führt zur Ausbildung wasserstoffartiger, gebundener Zustände, die als Exzitonen bezeichnet werden [1].

Die in den 1930er Jahren theoretisch beschriebenen Zustände [2–4] konnten in den 1950er Jahren zum ersten Mal nachgewiesen werden [5]. Das dabei verwendete Kupferoxydul (Cu_2O) stellt ein besonders interessantes Material zur Untersuchung von Exzitonen dar. Nicht nur war es das erste Material in dem Exzitonen nachgewiesen wurden, in der jüngeren Vergangenheit konnten auch Zustände sehr hoher Hauptquantenzahlen experimentell aufgelöst werden [6]. Die theoretische Beschreibung der Exzitonen für diesen Festkörper ist folglich von gesteigertem Interesse. Diese ist im Vergleich zum Wasserstoffatom jedoch deutlich komplexer, da der Kristall nur eine O_h -Symmetrie besitzt. Es müssen also sowohl die Bandstruktur als auch die Interaktion zwischen den Zuständen die aus unterschiedlichen Bändern gebildet werden in die Berechnung der Spektren einfließen, wodurch chaotische Strukturen ermöglicht werden.

In vorangegangenen Arbeiten [7–10] wurde bereits untersucht, wie sich die Verteilung der Zustände unter Einfluss von äußeren elektrischen und magnetischen Feldern verhält. Dabei konnte gezeigt werden, dass die Verteilung der Abstände einem Muster folgt, das aus der theoretischen Beschreibung des Quantenchaos bekannt ist. Hierfür wurden skalierte Spektren unter Variation eines Kontrollparameters untersucht, der die Stärke der angelegten Felder bestimmt.

Vor kurzem wurde zudem untersucht, welchen Einfluss die Wechselwirkung der über unterschiedliche Bänder bestimmten Exzitonenserien auf die Spektren im Vergleich zur semiklassisch bestimmten Dynamik haben [11]. Hierbei wurde zur Skalierung ein Kontrollparameter eingeführt, der die Stärke der Ankopplung zwischen den Exziton-Serien reguliert, die aus Elektronen aus dem niedrigsten Leitungsband und den beiden über einen Quasispin beschriebenen Valenzbändern gebildet werden.

In der vorliegenden Arbeit wird nun untersucht, welchen Einfluss diese skalierte Spin-Bahn-Kopplung auf die Levelstatistik der Exzitonenzustände hat. Hierbei wird sowohl der

entstehende Einfluss auf das Spektrum visualisiert als auch mit statistischen Methoden analysiert. Dabei wird die Nächster-Nachbar-Verteilung des Spektrums in Abhängigkeit von einem Kontrollparameter mithilfe einer Brody-Verteilung gefittet, welche einen Übergang von Poisson-Statistik zu GOE-Statistik beschreibt. Hierdurch wird untersucht, wie sehr das Spektrum auf reguläres oder chaotisches Verhalten hindeutet.

1.1 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 werden zunächst die theoretischen Grundlagen für diese Arbeit erklärt. Dabei wird in Abschnitt 2.1 zunächst eine einfache Theorie für Exzitonen hergeleitet, gefolgt von den zusätzlichen Betrachtungen, die für Exzitonen in Kupferoxydul notwendig sind. Danach wird in Abschnitt 2.2 eine Einführung in die klassische Dynamik und ihren Übergang zur Semiklassik gegeben, welche in der Einführung einer Skalierung mündet. In Abschnitt 2.3 wird dann ein Überblick über die theoretischen Grundlagen des Quantenchaos gegeben, wobei die in der Arbeit verwendeten statistischen Methoden motiviert und erklärt werden.

Im folgenden Kapitel 3 werden die verwendeten numerischen Methoden zur Berechnung der Exzitonenzustände erklärt und gezeigt, wie diese ihren zugehörigen irreduziblen Darstellungen zugeordnet werden können.

Danach werden in Kapitel 4 die im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Resultate präsentiert. Dabei wird in Abschnitt 4.1 zuerst eine Visualisierung der Spektren in Abhängigkeit vom Kontrollparameter betrachtet um die wechselwirkende Beziehung zwischen den Spektren der beiden Serien zu erläutern. In Abschnitt 4.2 werden dann durch statistische Analysen gewonnene Nächster-Nachbar-Verteilungen betrachtet, wodurch Rückschlüsse auf die gegeneinander wirkenden regulären und chaotischen Verhaltensweisen gewonnen werden können.

Am Ende wird in Kapitel 5 dann noch eine Zusammenfassung der Resultate und ein Ausblick geliefert.

2 Theorie

In den folgenden Abschnitten werden die in der Arbeit verwendeten Theorien und mathematischen Methoden näher erläutert. Diese können in drei Abschnitte eingeteilt werden. In Abschnitt 2.1 wird dabei auf die Theorie der Exzitonen in Kupferoxydul eingegangen, in Abschnitt 2.2 werden die Methoden der klassischen und semiklassischen Dynamik erläutert und eine Skalierung eingeführt und in Abschnitt 2.3 werden die für die Betrachtung der quantenmechanischen Spektren relevanten statistischen Methoden erklärt.

2.1 Exzitonen in Kupferoxydul

2.1.1 Wasserstoffartiges Modell

Exzitonen beschreiben eine Klasse gebundener Zustände im Halbleiter, die durch die Einbeziehung der Coulomb-Wechselwirkung zwischen einem Elektron im Leitungsband und einem Loch im Valenzband erklärt werden können [1]. Eine einfache und dennoch gute Betrachtungsweise für Exzitonen in Halbleitern ist dabei, von parabolischen Bändern und weit ausgedehnten Exzitonen mit großem Bahnradius auszugehen. Die mit dieser vereinfachenden Annahme berechneten Zustände werden auch als Wannier- beziehungsweise Mott-Wannier-Exzitonen bezeichnet. Das resultierende Problem ähnelt dann dem des Wasserstoffatoms mit einer zusätzlichen, konstanten Energieverschiebung durch die Bandlücke E_g , einer materialabhängigen dielektrischen Konstanten ε und den durch die Bandkrümmung bestimmten effektiven Massen m_e des Elektrons und m_h des Lochs. Folglich kann der Hamiltonoperator der Exzitonen durch

$$H = E_g + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \quad (2.1)$$

ausgedrückt werden, wobei \mathbf{r}_e und \mathbf{r}_h die Ortskoordinaten von Elektron und Loch bezeichnen. Die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators (2.1) können durch das Einführen

von Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h, & \mathbf{R} &= (m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h) / (m_e + m_h), \\ \mathbf{p} &= (m_h \mathbf{p}_e - m_e \mathbf{p}_h) / (m_e + m_h), & \mathbf{P} &= \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_h, \\ M &= m_e + m_h, & \mu &= m_e m_h / M \end{aligned} \quad (2.2)$$

mit dem entsprechenden Hamiltonoperator

$$H = E_g + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{\mathbf{P}^2}{2M} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}|} \quad (2.3)$$

unter Vernachlässigung der Schwerpunktbewegung mit Hilfe einer Rydberg-Serie

$$E_n = E_g - \frac{Ry_{exc}}{n^2}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (2.4)$$

berechnet werden. Die exzitonische Rydberg-Energie weicht hierbei von der vom Wasserstoffatom bekannten aufgrund der geänderten effektiven Masse und der im Material präsenten dielektrischen Konstanten ab und wird durch

$$Ry_{exc} = Ry_\infty \frac{\mu}{m_0 \epsilon^2} \quad (2.5)$$

beschrieben, wobei m_0 die freie Elektronenmasse bezeichnet. Im Folgenden werden ausschließlich Exzitonen in Kupferoxydul betrachtet. In diesem ist der einfache Zusammenhang nur noch näherungsweise gültig und die tatsächliche Verteilung der Zustände folgt einer komplizierteren Beschreibung.

2.1.2 Kupferoxydul

Bei Kupferoxydul (Cu_2O) handelt es sich um einen rötlichen Kristall, in dem in den 1950er Jahren zum ersten Mal Exzitonen nachgewiesen werden konnten [5]. Seine kubische Gitterstruktur setzt sich zusammen aus einem kubisch flächenzentrierten (fcc) Gitter der Kupferatome und einem dazu um $1/4$ der Raumdiagonale verschobenen kubisch raumzentrierten (bcc) Gitter der Sauerstoffatome [12]. Die Symmetrie des Kristalls wird damit durch die Raumgruppe O_h beschrieben. Zwei der möglichen Elementarzellen sind in Abbildung 2.1 dargestellt. In der elektronischen Betrachtung handelt es sich bei Kupferoxydul um einen direkten Halbleiter, dessen Bandstruktur um den Gammapunkt schematisch in Abbildung 2.2 dargestellt ist. Sowohl Leitungs- als auch Valenzband sind dort mehrfach entartet, was mit Hilfe der Gruppentheorie genauer erklärt werden kann. Für diese Arbeit sind spezifisch die Exzitonen interessant, die durch Elektronen im untersten Leitungsband und Löcher in den beiden Zweigen des Valenzbandes liegen

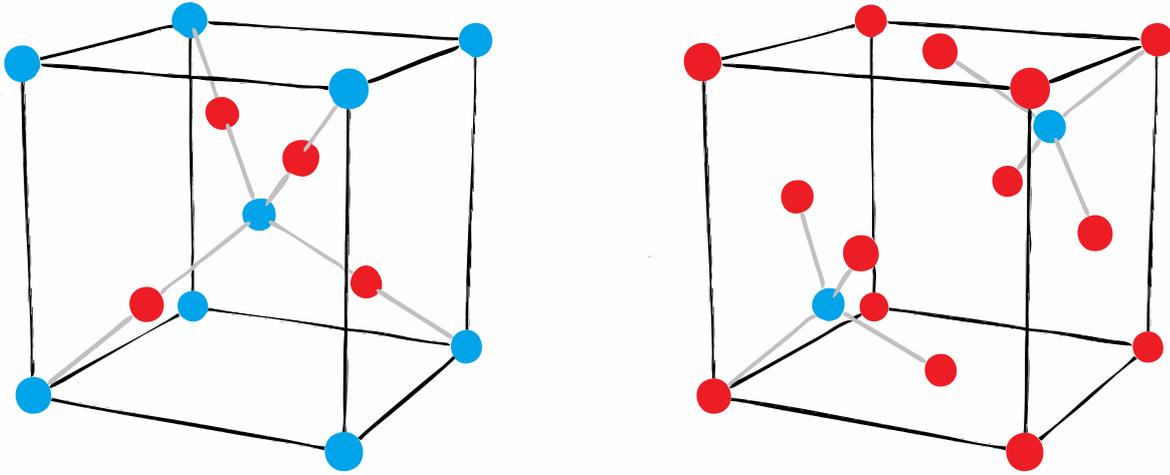


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung von zwei möglichen Elementarzellen des Kupferoxyduls. Die Sauerstoffatome (blau) liegen dabei in einem bcc-Gitter vor, die Kupferatome (rot) in einem um $1/4$ der Raumdiagonale dazu verschobenen fcc-Gitter.

gebildet werden. Dabei spricht man von der grünen respektive gelben Serie, benannt nach der Farbe des Lichts das zur entsprechenden Anregung führt.

Die Symmetrie der Bänder, beschrieben durch ihre irreduziblen Darstellungen Γ_i^\pm , liefert einen wichtigen Beitrag zur Klassifizierung der Zustände. Durch seine relativ große Rydberg-Energie von etwa 100 meV und der damit verbundenen Auflösung der Zustände bildet Kupferoxydul einen der wichtigsten Stoffe in der experimentellen Untersuchung von Exzitonen [12].

2.1.3 Einfluss der Bandstruktur

Das einfache, wasserstoffartige Modell aus Gleichung (2.1) ist nicht ausreichend, um die Exzitonzustände in Kupferoxydul genau zu beschreiben. Die tatsächlichen Messergebnisse weichen deutlich von der einfachen Rydberg-Serie ab, die aus dieser Beschreibung folgen würde [6]. Hierfür gibt es verschiedene Gründe. Zum einen ist der Einfluss der nicht-parabolischen, mehrfach entarteten Valenzbänder zu nennen, welche dazu führen, dass die im einfachen Modell implizierte $SO(4)$ -Symmetrie und damit verbundene Erhaltung von Bahndrehimpuls und Runge-Lenz-Vektor nur näherungsweise gültig ist und das System durch andere Quantenzahlen charakterisiert werden muss [12]. Zum anderen werden verschiedene Effekte wie die Austauschwechselwirkung von Elektronen- und Lochspin ignoriert oder auch der Fakt außer acht gelassen, dass der exzitronische Bohr-Radius nicht groß genug ist, um für den Grundzustand die Mott-Wannier-Näherung

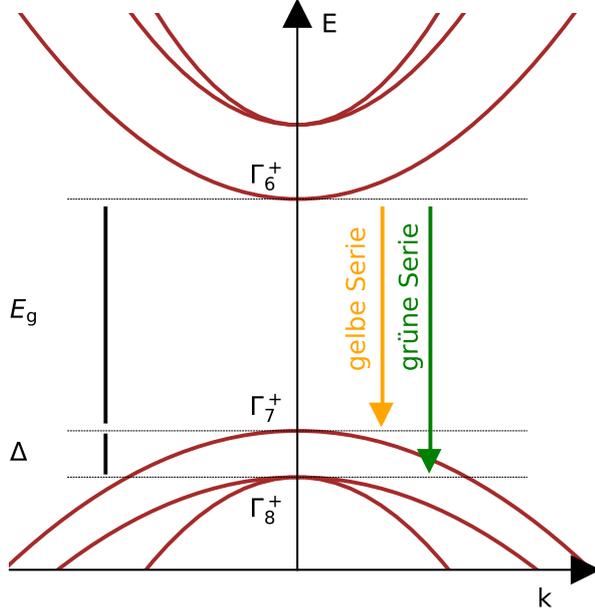


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Bänder um den Gammapunkt mit den zugehörigen Symmetrien Γ_i^+ der beteiligten Bänder. Bandlücke E_g , Spin-Bahn-Kopplung Δ und die für diese Arbeit relevanten Serien sind vermerkt.

der großen Bahnradien im Verhältnis zur Gitterkonstante annehmen zu können. Das in den folgenden Betrachtungen angenommene Modell beinhaltet nur den ersten genannten Punkt, um eine Skalierungseigenschaft zu behalten, die für die weitere Analyse wichtig ist. Auf diese wird in Abschnitt 2.2 noch genauer eingegangen. Das verwendete Modell beinhaltet also die komplexe Bandstruktur, wodurch die gelbe und grüne Serie nicht mehr ungestört voneinander betrachtet werden können, sondern als untereinander wechselwirkend betrachtet werden müssen. Wird der Hamiltonoperator der Exzitonen weiterhin durch eine Gleichung der Form

$$H = E_g + V(r) + H_{\text{kin}}(\mathbf{p}, \mathbf{I}, \mathbf{S}_h) + H_{\text{so}}(\mathbf{I}, \mathbf{S}_h) \quad (2.6)$$

beschrieben, so können die einzelnen Terme mit dem einfachen Modell identifiziert werden. Zur Charakterisierung der Valenzbandstruktur wurde dabei ein Quasispin \mathbf{I} eingeführt, dessen Komponenten durch die korrespondierenden Spinmatrizen für $I = 1$ gegeben sind. Respektive gilt für die Komponenten des Lochspins dasselbe für $S_h = \frac{1}{2}$. Die potentielle Energie bleibt wie zuvor die Coulombwechselwirkung und wird in Relativkoordinaten durch

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \quad (2.7)$$

mit den bereits zuvor aufgeführten Größen und $r = |\mathbf{r}|$ beschrieben. Die kinetische Energie, zusammengesetzt aus der kinetischen Energie von Loch und Elektron, lässt sich

durch die Gleichung

$$\begin{aligned}
 H_{\text{kin}}(\mathbf{p}, \mathbf{I}, \mathbf{S}_h) = & \frac{1}{2\hbar^2 m_0} \{ \hbar^2 (\gamma'_1 + 4\gamma_2) \mathbf{p}^2 + 2(\eta_1 + 2\eta_2) \mathbf{p}^2 (\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h) - 6\gamma_2 [p_1^2 I_1^2 + \text{c.p.}] \\
 & - 12\eta_2 [p_1^2 I_1 S_{h1} + \text{c.p.}] - 12\gamma_3 [\{p_1, p_2\} \{I_1, I_2\} + \text{c.p.}] \\
 & - 12\eta_3 [\{p_1, p_2\} (I_1 S_{h2} + I_2 S_{h1}) + \text{c.p.}] \},
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

beschreiben [12], wobei hier der Einfluss der komplexen Bandstruktur in den Hamiltonian eingeht. Dabei gilt $\{a, b\} = \frac{1}{2}(ab + ba)$ und c.p. kennzeichnet die zyklische Permutation der Komponenten von \mathbf{p}_h , \mathbf{I} und \mathbf{S}_h . Die materialspezifischen Luttinger-Parameter γ_i und η_i beschreiben die mittlere effektive Masse des Lochs und die Aufspaltung und Krümmung der Bänder durch die zugrundeliegende Symmetrie [12]. Das unterste Leitungsband kann hingegen durch eine Parabel approximiert werden, wobei nur eine Änderung der effektiven Masse in den kinetischen Term eingeht. Der letzte Term

$$H_{\text{so}} = \frac{2}{3} \Delta \left(1 + \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h \right) \tag{2.9}$$

beschreibt die Energieaufspaltung zwischen gelber und grüner Serie, welche durch die Spin-Bahn-Kopplungskonstante Δ beschrieben wird. H_{so} führt zu einer neuen Quantenzahl J , die den effektiven Lochspin beschreibt und über $J = I + S_h$ die gelbe ($J = \frac{1}{2}$) und grüne ($J = \frac{3}{2}$) Serie voneinander unterscheidet. J ist dabei allerdings nur unter Vernachlässigung der komplexen Bandstruktur eine gute Quantenzahl. Die tatsächliche Serie weicht dann von der einfachen Rydbergserie ab, was durch eine effektive Quantenzahl n_{eff} beschrieben wird, die in Exziton-Hartree-Einheiten (vgl. Anhang B) durch

$$n_{\text{eff}}^2 = \frac{1}{2(E_g - E)} \tag{2.10}$$

definiert werden kann. Unter Einbeziehung der Spin-Bahn-Kopplung lassen sich die Lochzustände über die irreduziblen Darstellungen Γ_i^\pm der O_h -Gruppe beschreiben. Die Gesamtsymmetrie der Exzitonenzustände

$$\Gamma_{\text{exc}} = \Gamma_{\text{env}} \otimes \Gamma_{\text{v}} \tag{2.11}$$

setzt sich dann aus der Symmetrie des Valenzbandes Γ_{v} und der der einhüllenden Funktion Γ_{env} zusammen [12]. Die entstehenden Blöcke können über die sechs irreduziblen Darstellungen $\Gamma_6^\pm, \Gamma_7^\pm$ und Γ_8^\pm klassifiziert werden, wobei keine Wechselwirkung zwischen den einzelnen Blöcken herrscht [11].

2.2 Semiklassische Dynamik

Die klassische Physik liefert, im Gegensatz zur Quantentheorie, fundamental deterministische Bewegungsgleichungen und Messergebnisse. Trotzdem kann es zu scheinbar zufälligen Ergebnissen kommen, wenn die von den klassischen Teilchen gewählten Bahnen stark von der Anfangsbedingung abhängen. Eine kleine Änderung in diesen führt dann zu einem komplett anderen Resultat. Dieses Verhalten eines Systems wird chaotisch genannt. Bekannte Beispiele hierzu sind das Doppelpendel oder auch der in der Populärwissenschaft oft genannte Schmetterlingseffekt. Die Methoden, die in der klassischen Mechanik zur Behandlung solcher Probleme entwickelt wurden, lassen sich über eine semiklassische Beschreibung der Quantenmechanik auch auf Probleme anwenden, die eigentlich von fundamentaler Quantennatur sind. Im Folgenden wird eine kurze Einführung in die Methoden der klassischen Chaostheorie gegeben, welche über die Semiklassik dann mit den in der Arbeit verwendeten Methoden des Quantenchaos verbunden wird.

2.2.1 Klassische Dynamik

Die Trajektorien von Teilchen in der klassischen Mechanik können in konservativen Systemen über die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (2.12)$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (2.13)$$

ausgedrückt werden, wobei $H = T + V$ mit kinetischer Energie T und potentieller Energie V gilt und die Orts- und Impulskoordinaten mit q respektive p bezeichnet werden [13]. Ist ein solches System integrabel, die Anzahl der Erhaltungsgrößen entspricht also der Anzahl der Freiheitsgrade, so wird die Bewegung auf eine über diese Erhaltungsgrößen definierte Mannigfaltigkeit eingeschränkt, wodurch die Bewegung nicht chaotisch sein kann. Integrale Systeme können dann über eine kanonische Transformation in Wirkungs- und Winkelvariablen $(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta})$ dargestellt werden. Für diese gilt

$$H(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta}) = H(\mathbf{I}), \quad (2.14)$$

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_i} \mathbf{p}d\mathbf{q} = \text{const.}, \quad (2.15)$$

$$\omega_i = \frac{\partial H}{\partial I_i}, \quad (2.16)$$

$$\theta_i = \omega_i t + c_i, \quad (2.17)$$

wodurch die Bewegung auf einen n -dimensionalen Torus mit den Eigenfrequenzen ω_i reduziert wird. Ein möglicher Weg von einer geordneten zu einer chaotischen Dynamik ist dann, ein dafür geeignetes System in einen solchen Teil und einen Störterm zu zerlegen, wobei die Stabilität der Tori bezüglich eines Einschaltens dieses betrachtet wird. Zur Betrachtung eines solchen Übergangs von regulärer zu chaotischer Dynamik wird das Bild betrachtet, das entsteht, wenn man die Schnittpunkte der Trajektorien mit einer im Phasenraum liegenden Hyperfläche bildet. Diese auch als Poincaré-Abbildung bezeichnete Methode zeigt dann, wie unter Variation eines die Störung steuernden Kontrollparameters ein Übergang von regulärer zu chaotischer Dynamik stattfindet, wobei dieser graduell verläuft und im Übergangsbereich auch gemischt regulär-chaotische Strukturen im Phasenraum auftreten können [13].

2.2.2 Semiklassische Theorien

Der Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik der auch als Semiklassik bezeichnet wird, findet nun über einen Ansatz statt, der nach Einstein, Brillouin und Keller als EBK-Quantisierung bezeichnet wird. Die Idee ist dabei, die Wirkung

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_i} \mathbf{p} d\mathbf{r} \quad (2.18)$$

die beim durchlaufen einer elementaren, geschlossenen Kurve C_i angesammelt wird mit

$$\mathbf{I} = \hbar \left(\mathbf{n} + \frac{\boldsymbol{\alpha}}{4} \right) \quad (2.19)$$

zu quantisieren [13]. Dabei beschreibt der Vektor \mathbf{n} für jeden Zustand einen Satz Quantenzahlen und $\boldsymbol{\alpha}$ den Maslov-Index, welcher die Reflexionen innerhalb von C_i zählt. Die semiklassisch quantisierten Energieeigenwerte sind dann über die Gleichung

$$E_{\mathbf{n}} = H \left(\hbar \left(\mathbf{n} + \frac{\boldsymbol{\alpha}}{4} \right) \right) \quad (2.20)$$

bestimmt. Diese Methode ist allerdings nicht immer ausreichend, um die Zustandsdichte im System zu bestimmen, da die betrachteten Systeme nicht immer integrabel sein müssen. Eine bessere Beschreibung liefert die Gutzwiller-Spurformel, welche sich über

$$\rho(E) = \tilde{\rho}(E) + \text{Re} \sum_{\text{PPO}} \sum_{l=1}^{\infty} A_{\text{PPO},l}(E) e^{\frac{i l S_{\text{PPO}}(E)}{\hbar}} \quad (2.21)$$

beschreiben lässt [11]. Dabei beschreibt der Thomas-Fermi-Term $\tilde{\rho}(E)$ die mittlere Zustandsdichte und die Summen laufen über die einzelnen primitiven periodischen Orbits und deren Wiederholungen. Die Amplitude $A_{\text{PPO},l}(E)$ beinhaltet dabei die von den Orbits und ihren Umgebungen abhängigen Informationen. Die selbe Form der Gleichung mit anderen Amplituden lässt sich auch auf integrabel Systeme anwenden und wird dann als Berry-Tabor-Formel bezeichnet.

2.2.3 Skalierung

Die Anwendung der Spurformel ist besonders für solche Systeme elegant, die eine klassische Skalierungseigenschaft aufweisen, da dann die klassischen Orbits unabhängig von einem äußeren Skalierungsparameter ω betrachtet werden können, wodurch die Phasenraumstruktur gleich bleibt. Die Wirkung S_{PPO} beim Durchlaufen eines primitiven periodischen Orbits in entsprechend skalierten Koordinaten $\tilde{\mathbf{r}}$ und $\tilde{\mathbf{p}}$ lässt sich dann durch

$$S_{\text{PPO}} = \oint_{\text{PPO}} \mathbf{p} d\mathbf{r} = \omega \oint_{\text{PPO}} \tilde{\mathbf{p}} d\tilde{\mathbf{r}} = \omega \tilde{S}_{\text{PPO}} \quad (2.22)$$

darstellen, wodurch die skalierte Wirkung \tilde{S}_{PPO} unabhängig von ω wird. In Quantensystemen wird folglich der Skalierungsparameter quantisiert, wodurch die Spurformeln durch

$$\rho(\omega) = \tilde{\rho}(\omega) + \text{Re} \sum_{\text{PPO}} \sum_{l=1}^{\infty} A_{\text{PPO},l} e^{\frac{i l \tilde{S}_{\text{PPO}} \omega}{\hbar}} \quad (2.23)$$

ausgedrückt werden können [11]. Da in der vorliegenden Arbeit eine quantenmechanische Betrachtung von Spektren erfolgt, die in anderen Arbeiten semiklassisch analysiert wurden, wurde auch hier mit einem skalierten System gearbeitet. Die Skalierung des mit dem Hamiltonian (2.6) beschriebenen System soll im Folgenden kurz erläutert werden. Der Hamiltonian des Systems kann relativ einfach skaliert werden, indem der nur zu einer konstanten Energieverschiebung führende Bandlücke E_g und der Spin-Bahn-Kopplungsterm H_{SO} in Gleichung (2.6) ignoriert werden. Die verbleibenden Terme (2.7) und (2.8) lassen sich dann mit der effektiven Quantenzahl n_{eff} vereinfacht als

$$H|\Psi\rangle = \left[\frac{1}{2} \mathbf{p}^2 + \mathbf{p} L \mathbf{p} - \frac{1}{r} \right] |\Psi\rangle = -\frac{1}{2n_{\text{eff}}^2} |\Psi\rangle \quad (2.24)$$

darstellen. Dabei kann ein linearer, hermitescher Operator L verwendet werden, der die volle Information aus dem kinetischen Term (2.8) beinhaltet, da in diesem \mathbf{p} nur in quadratischer Ordnung auftaucht. Mit der Skalierung $\tilde{\mathbf{p}} = n_{\text{eff}} \mathbf{p}$, $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} / n_{\text{eff}}^2$ bleibt somit nur noch die Gleichung

$$\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{p}}^2 + \tilde{\mathbf{p}} L \tilde{\mathbf{p}} - \frac{1}{\tilde{r}} = -\frac{1}{2} \quad (2.25)$$

übrig, in der n_{eff} nicht mehr explizit auftaucht und nur noch die Rolle eines Skalierungsparameters spielt. Der Spin-Bahn-Kopplungsterm H_{SO} skaliert allerdings nicht auf diese Weise, weshalb eine skalierte Spin-Bahn-Kopplungskonstante

$$\Delta \rightarrow \tilde{\Delta} = \frac{n_0^2}{n_{\text{eff}}^2} \Delta \quad (2.26)$$

eingeführt wird [11], durch die die Skalierungseigenschaft auch für den gesamten Hamiltonian erhalten bleibt. Der skalierte Spin-Bahn-Kopplungsterm lautet dann

$$\tilde{H}_{\text{so}} = \frac{2}{3} \frac{n_0^2}{n_{\text{eff}}^2} \Delta \left(1 + \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}_h \right). \quad (2.27)$$

Der konstante Parameter n_0 kontrolliert dabei die Stärke der skalierten Spin-Bahn-Kopplung wobei die tatsächlichen Lösungen des unskalierten Hamiltonians durch $n_{\text{eff}} = n_0$ erhalten werden können. Über den Parameter n_0 kann somit effektiv gesteuert werden, wie stark die Spektren von grüner und gelber Serie korreliert sind, womit n_0 vergleichbar zu den äußeren Feldern in [7–9] als ein Kontrollparameter für die Stärke einer nichtlinearen Störung dient.

2.3 Quantenchaos

Eine Betrachtung der Chaotizität quantenmechanischer Systeme kann auch losgelöst von den korrespondierenden klassischen Trajektorien erfolgen. Ein fundamentales Problem hierbei ist allerdings, dass die Schrödingergleichung, welche die der Quantenmechanik zugrundeliegende Dynamik beschreibt, nur eine lineare Gleichung für die Wellenfunktionen darstellt. Es können also keine nichtlinearen und damit potentiell chaotischen Effekte auftreten, wenn man die Methoden aus Abschnitt 2.1 einfach auf die Schrödingergleichung anstatt der Hamiltonschen Gleichungen anwendet [13]. Die fundamentale Idee zur Untersuchung von Quantenchaos liegt stattdessen in der Analyse des Spektrums, einer Verteilung, die jedem System zugeordnet werden kann. Ein Hinweis auf die Chaotizität ist dann, die Kopplung der Zustände des Spektrums untereinander zu untersuchen. Sind die einzelnen Zustände untereinander gekoppelt, so stoßen sich die Level unter Variation eines Kontrollparameters ab, wodurch eine andere Levelverteilungsstatistik entsteht als bei ungekoppelten und damit klassisch regulären Systemen. Die Essenz liegt also darin, die Abstandsverteilung der Zustände

$$P(\Delta E_i) = P(E_{i+1} - E_i) \quad (2.28)$$

unabhängig vom System zu betrachten. Die zugrundeliegenden Ideen und Methoden werden in den folgenden Abschnitten erläutert [13, 14].

2.3.1 Niveauabstoßung

Wird ein einfacher, zweidimensionaler Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

angenommen um die Charakteristiken des Abstands zwischen den entsprechenden Energieeigenwerten zu untersuchen, so sieht man, dass diese in drei verschiedene Klassen unterteilt werden können. Hierzu werden die Energieeigenwerte

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} (H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{\Delta} \quad (2.30)$$

mit

$$\Delta = \frac{1}{4} (H_{11} - H_{22})^2 + |H_{12}|^2 \quad (2.31)$$

betrachtet. Die erste Möglichkeit wird durch den Fall keinerlei Wechselwirkung zwischen den Zuständen, also verschwindenden Nebendiagonaleinträge

$$H_{12} = 0 \quad (2.32)$$

beschrieben. Damit reicht ein einzelner Kontrollparameter λ , um eine Niveaufkreuzung der Zustände

$$E_+ = H_{11}(\lambda), \quad E_- = H_{22}(\lambda) \quad (2.33)$$

zu ermöglichen.

Der zweite Fall wird durch eine reelle Matrix mit $H_{12} \neq 0$ beschrieben. Da eine Niveaufkreuzung nur dann auftritt, wenn

$$\Delta = \frac{1}{4} (H_{11} - H_{22})^2 + H_{12}^2 \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.34)$$

gilt, folgt, dass im Allgemeinen zwei Parameter $\lambda_{1,2}$ benötigt werden um diese zu erreichen. Wird im dritten Fall die allgemeinste Form der Matrix mit komplexen Einträgen gewählt, so ergibt sich die Funktion

$$\Delta = \frac{1}{4} (H_{11} - H_{22})^2 + (\operatorname{Re} H_{12})^2 + (\operatorname{Im} H_{12})^2 \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.35)$$

welche sogar drei Parameter $\lambda_{1,2,3}$ benötigt, um im allgemeinen Fall eine Niveaufkreuzung zu erreichen. Die Charakteristik einer solchen vermiedenen Kreuzung ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Assoziiert man die Anzahl der benötigten Kontrollparameter mit der Wahrscheinlichkeit für Niveaufkreuzungen [13, 14], so scheint es logisch, dass die entsprechenden Matrizen für unterschiedlich starke Niveaufabstoßungen stehen. Diese Idee soll später mit der Theorie der Zufallsmatrizen noch untermauert werden.

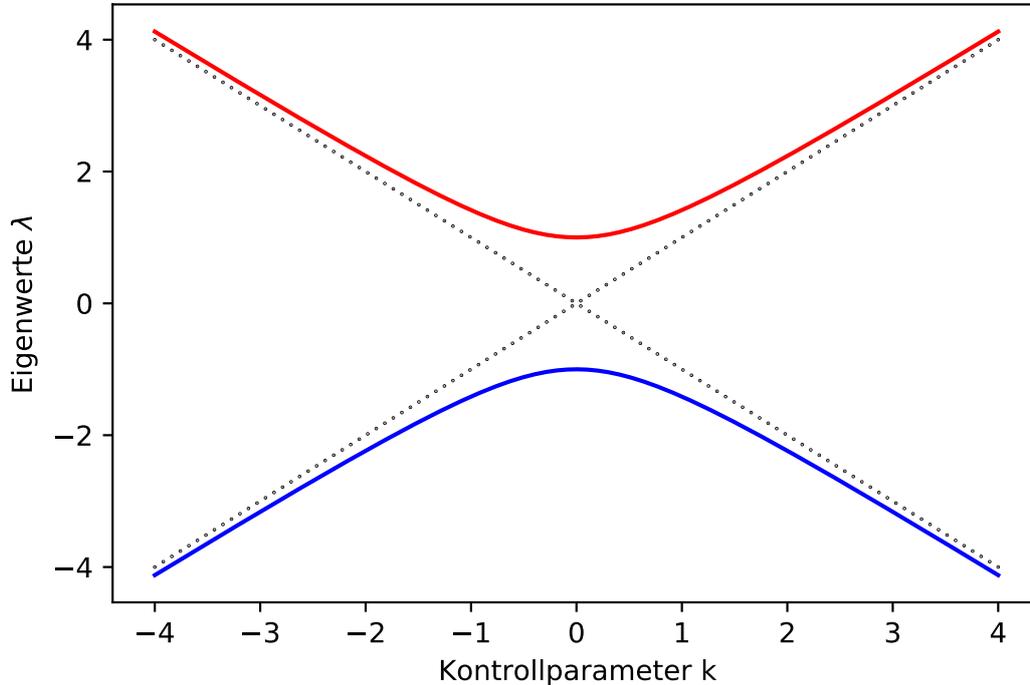


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Niveauabstoßung der Eigenwerte λ einer symmetrischen, reellen Matrix unter Variation eines Kontrollparameters k

2.3.2 Levelstatistik

Wird nicht nur eine einzelne Kreuzung zweier Zustände sondern ein ganzes System betrachtet, so muss ein größerer Teil des Spektrums auf seine Abstandsverteilung hin untersucht werden. Wie im vorangegangenen Abschnitt 2.3.1 gezeigt, ist die fundamentale Idee hierzu, die Kopplung der Zustände des Spektrums untereinander zu untersuchen. Sind die einzelnen Zustände untereinander gekoppelt, so stoßen sich die Level unter Variation eines Kontrollparameters ab, wodurch eine andere Levelverteilungsstatistik entsteht als bei ungekoppelten und damit klassisch regulären Systemen [13, 14]. Da bei den meisten Systemen die mittlere Zustandsdichte von der Energie abhängt, muss das Spektrum zur universellen Untersuchung zuerst entfaltet werden. Hierzu wird die Stufenfunktion der Anzahl der Zustände bis zu einer bestimmten Energie E

$$N(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \Theta(E - E_n) \quad (2.36)$$

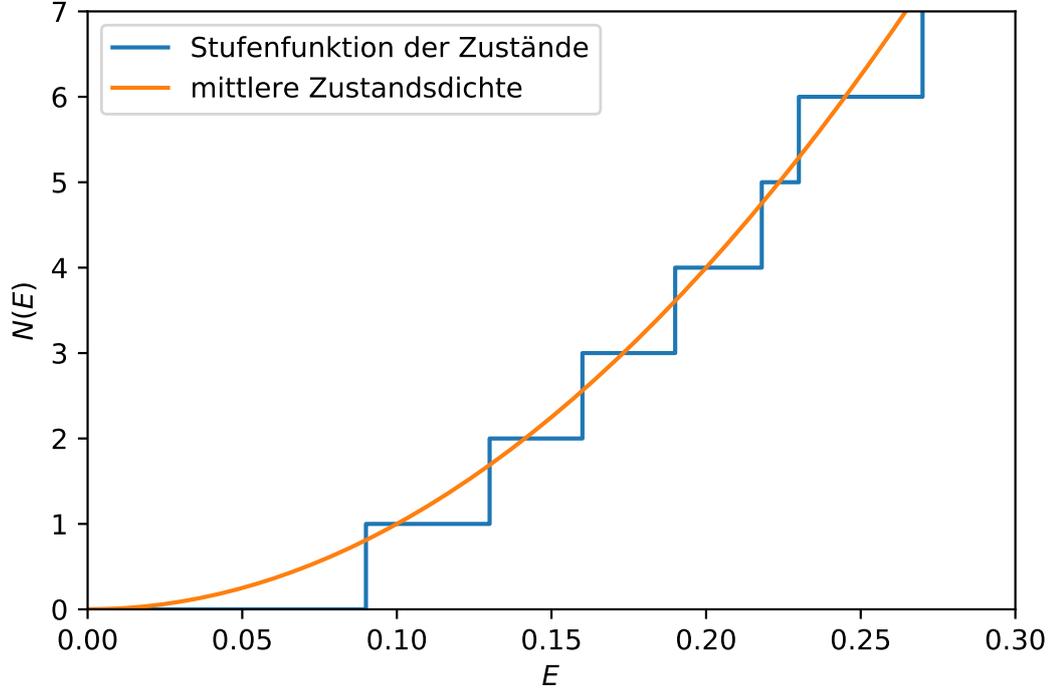


Abbildung 2.4: Beispielhafte Entfaltung eines Spektrums. Die Zustände folgen einer im Mittel quadratischen Zustandsdichte, fluktuieren allerdings und müssen mit einem entsprechenden Fit entfaltet werden.

in einen mittleren Anteil $\bar{N}(E)$ und einen fluktuierenden Anteil $N_{\text{fl}}(E)$ zerlegt, so dass

$$N(E) = \bar{N}(E) + N_{\text{fl}}(E) \quad (2.37)$$

gilt. Da der mittlere Anteil kein universelles Verhalten zeigt, sondern gerade von der mittleren Zustandsdichte und damit der Energie abhängt, soll er aus der Betrachtung eliminiert werden. Hierzu wird das Spektrum entfaltet. Dabei wird die mittlere Zustandsdichte entweder über das semiklassische Phasenraumvolumen $(2\pi\hbar)^d$ der einzelnen Zustände und die statistische Beziehung

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d q \, d^d p \Theta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \quad (2.38)$$

oder einfacher als empirische Interpolation der Stufenfunktion gewählt. Dieser Prozess ist zur Veranschaulichung in Abbildung 2.4 dargestellt.

Die Entfaltung der Zustände erfolgt dann über die Beziehung

$$x_i = \bar{N}(E_i) \quad (2.39)$$

mit der korrespondierenden Abstandsverteilung

$$P(s_i) = P(x_{i+1} - x_i), \quad (2.40)$$

wodurch die Abstandsverteilung unabhängig von der mittleren Zustandsdichte nur noch die fluktuierenden Anteile enthält [14]. Die Abstandsverteilung erfüllt dann nicht nur die Normierungsbedingung

$$\int_0^\infty P(s)ds = 1 \quad (2.41)$$

sondern hat auch unabhängig vom betrachteten System den fixierten Erwartungswert

$$\int_0^\infty sP(s)ds = 1, \quad (2.42)$$

wodurch unterschiedlichste Systeme auf der selben Skala anhand ihrer sonstigen Charakteristik auf Chaotizität hin bewertet werden können.

2.3.3 Poisson- und GOE-Statistik

Dieser Abschnitt orientiert sich an Referenz [14].

Da die ersten beiden Fälle der Niveauabstoßung, beschrieben durch Gleichung (2.32) und (2.34) in der folgenden Arbeit von besonderem Interesse sein werden, werden die aus diesen hervorgehenden Verteilungen genauer betrachtet. Im Fall der integrierbaren Systeme sind die Eigenwerte direkt aus der Matrix bestimmt und können im Allgemeinen als unkorreliert angenommen werden. Wird eine mittlere Zustandsdichte von ρ angenommen, so lässt sich die Wahrscheinlichkeit dafür den nächsten Zustand im Abstand s bis $s + ds$ von einem fixierten Eigenwert zu finden durch

$$P(s)ds = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \rho \frac{s}{N}\right)^N \rho ds \quad (2.43)$$

beschreiben. Dabei wurde das unbesetzte Intervall $[0, s]$ in N Teilstücke zerteilt. Für eine mittlere Zustandsdichte von $\rho = 1$ ergibt sich für die Abstandsverteilung dann die Poissonverteilung

$$P(s) = e^{-s}. \quad (2.44)$$

Komplizierter wird es, wenn der zweite Fall betrachtet wird. Hierbei wird davon Gebrauch gemacht, dass die Fluktuationen im Spektrum im Rahmen der „random matrix theory“ (RMT) durch Ensembles von Zufallsmatrizen beschrieben werden können, deren Symmetrie mit der des betrachteten Hamiltonoperators übereinstimmt. Angewandt auf

die in Gleichung (2.34) beschriebenen reellen, symmetrischen, 2×2 -Matrizen bedeutet dies, dass die betrachteten Wahrscheinlichkeitsverteilungen invariant unter orthogonalen Transformationen sein müssen. Dies wird mathematisch durch

$$P(H)dH = P(H')dH', \quad H' = OHO^{-1} \quad (2.45)$$

mit orthogonalen Operatoren O beschrieben. Zudem werden die einzelnen Matrixeinträge als voneinander unabhängig vorausgesetzt und die Wahrscheinlichkeitsverteilung normiert, was durch

$$P(H) = P_{11}(H_{11}) P_{22}(H_{22}) P_{12}(H_{12}), \quad (2.46)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(H)dH_{11}dH_{22}dH_{12} = 1 \quad (2.47)$$

ausgedrückt wird. Wird nun die in Gleichung (2.45) geforderte Invarianz unter orthogonalen Transformationen ausgenutzt, so erhält man als Ergebnis

$$P(H) = Ce^{-A \text{Tr} H^2}, \quad (2.48)$$

wobei die Konstanten A und C durch Normierung und Erwartungswert festgelegt sind. Wird aus dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung die Verteilung der Abstände der zugehörigen Eigenwerte ermittelt, so erhält man die Wignerverteilung des Gauß-orthogonalen Ensembles (GOE)

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}. \quad (2.49)$$

Dieses Ergebnis ist auch in der Verallgemeinerung auf höherdimensionale Operatoren gültig.

2.3.4 Brody-Verteilung

Sowohl für die Poisson- als auch die GOE-Statistik existieren folglich exakte Gleichungen zur Beschreibung der Abstandsverteilung. Der Übergang zwischen dieser regulären respektive chaotischen Struktur unter der Variation eines Kontrollparameters ist unklar. Der wahrscheinlich intuitivste Ansatz läuft dabei über die Einführung eines einzelnen Parameters in den Exponenten der entsprechenden Verteilungsfunktion, wobei dessen Randwerte genau den Poisson- beziehungsweise GOE-Verteilungen entsprechen. Die von Brody 1973 [15] vorgeschlagene Variante lässt sich dabei durch

$$P(s) = As^\omega e^{-Bs^{\omega+1}} \quad (2.50)$$

beschreiben, wobei für den zum Anpassen der Funktion ausgewählten Parameter ω

$$\omega \in [0, 1] \quad (2.51)$$

gilt. Dabei entspricht $\omega = 0$ der Poisson- und $\omega = 1$ der GOE-Verteilung. Da die Statistik unabhängig von ω der Normierungsbedingung und der Fixierung ihres Mittelwertes

$$\int_0^\infty P(s) ds = 1, \quad (2.52)$$

$$\int_0^\infty sP(s) ds = 1 \quad (2.53)$$

genügen muss bestimmen sich die beiden verbliebenen Konstanten direkt aus ω über

$$A = (\omega + 1)B, \quad B = \left[\Gamma \left(\frac{\omega + 2}{\omega + 1} \right) \right]^{\omega+1} \quad (2.54)$$

mit der Gammafunktion

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt. \quad (2.55)$$

Der entsprechende Übergang der Verteilungsfunktion von Poisson- zu GOE-Statistik ist in [Abbildung 2.5](#) dargestellt.

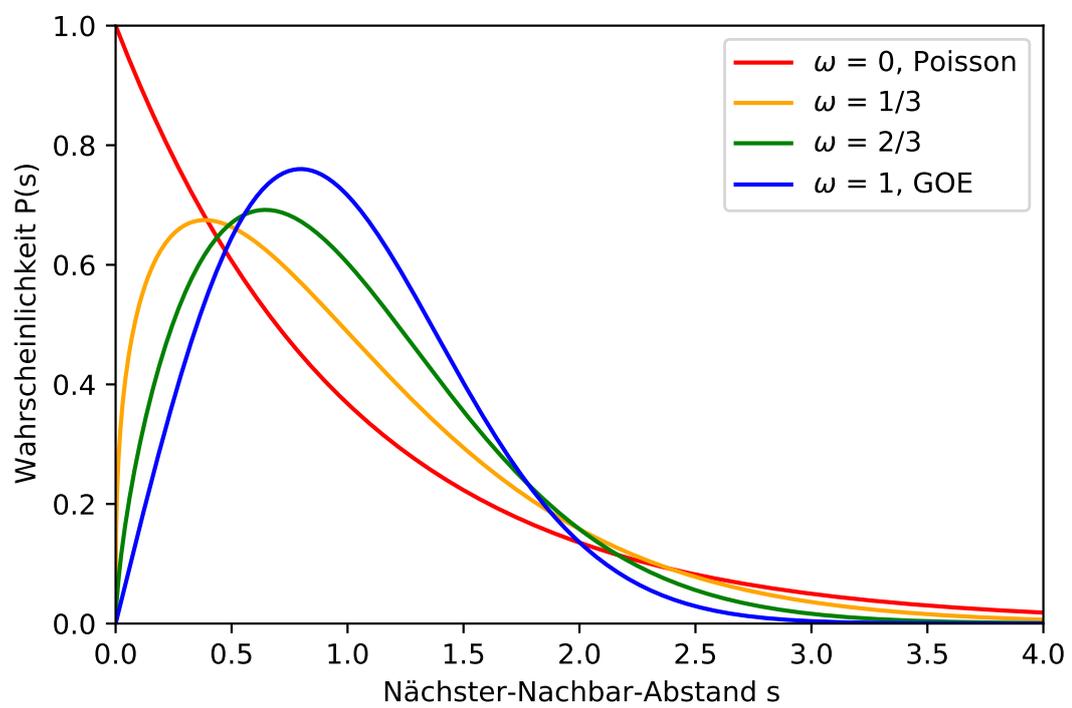


Abbildung 2.5: Brody-Funktionen zwischen den beiden Randwerten Poisson- und GOE-Verteilung.

3 Methoden

Dieses Kapitel orientiert sich in beiden Abschnitten an Referenz [11].

3.1 Numerische Diagonalisierung des Hamiltonian

Zur allgemeinen Berechnung der Energieeigenwerte des Hamiltonoperators wurde ein Set von Basiszuständen der Form

$$|\Pi\rangle = |N, L; (I, S_h), J; F, M_F\rangle \quad (3.1)$$

gewählt, wobei die radiale Quantenzahl $N = n - L - 1$ über die Hauptquantenzahl n und die Bahndrehimpulsquantenzahl L bestimmt ist. Durch die Kopplung $J = I + S_h$ werden die beiden ursprünglichen Quantenzahlen irrelevant, weshalb sie nicht mehr explizit in der Darstellung enthalten sind. Da die Gesamtdrehimpulsquantenzahl $F = J + L$ und ihre z -Komponente M_F in der Approximation sphärischer Symmetrie gute Quantenzahlen sind, sind diese als näherungsweiser Ansatz der Basiszustände sinnvoll. Die möglichen Zustände dieser Form werden dann durch die Einschränkung

$$\begin{aligned} L &= 0, \dots, n - 1, \\ J &= 1/2, 3/2, \\ F &= |L - J|, \dots, L + J, \\ M_F &= -F, \dots, +F \end{aligned} \quad (3.2)$$

klassifiziert. Der Elektronenspin und seine Ankopplung an den Gesamtdrehimpuls werden wie in Abschnitt 2.2 erläutert nicht berücksichtigt und sind dementsprechend gute Quantenzahlen [12]. Da das einfache Modell ohne Einfluss der Bandstruktur über die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms beschrieben wird, bietet es sich an, ein ähnliches Set an Basisfunktionen für die numerischen Näherungen zu verwenden. Für den radialen Teil wurden die Coulomb-Sturm-Funktionen

$$U_{NL}(r) = N_{NL}(2\rho)^L e^{-\rho} L_N^{2L+1}(2\rho) \quad (3.3)$$

gewählt, welche über einen positiven Skalierungsparameter α mit $\rho = \frac{r}{\alpha}$ und die Laguerre-Polynome $L_n^m(x)$ definiert sind [16]. $N_{N,L}$ ist dabei ein Normierungsfaktor. Für den winkelabhängigen Teil wurden die üblichen Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\phi, \theta)$ gewählt. Durch die Wahl maximaler Werte für die Quantenzahlen N und L konnten nun über einen Ansatz der Form

$$|\Psi\rangle = \sum_{\Pi} c_{\Pi} |\Pi\rangle \quad (3.4)$$

die optimalen Parameter c_{Π} bestimmt werden. Da die gewählten Basisfunktionen nicht die Orthogonalitätsrelation erfüllen und die Skalierung in die Rechnung mit einbezogen werden musste, war das generalisierte Eigenwertproblem

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \lambda\mathbf{B}\mathbf{c} \quad (3.5)$$

mit den über ihre Einträge definierten Matrizen

$$A_{\tilde{\Pi}\tilde{\Pi}} = \langle \tilde{\Pi} | \tilde{H} | \tilde{\Pi} \rangle, \quad B_{\tilde{\Pi}\tilde{\Pi}} = \langle \tilde{\Pi} | H_{\text{kin}} | \tilde{\Pi} \rangle \quad (3.6)$$

und dem zugeordneten generalisierten Eigenwert $\lambda = 1/n_{\text{eff}}^2$ zu lösen, wobei mit \tilde{H} der nicht-kinetische Teil des skalierten Hamiltonians bezeichnet wird. Dies geschah mit der LAPACK-Routine DSYGVX [17].

3.2 Klassifizierung der Zustände

Mit der als gute Quantenzahl erhaltenen Parität und Aufgrund der zugrundeliegenden O_h -Symmetrie zerfällt der Raum der Zustände in vier nicht miteinander interagierende Blöcke. Diese werden mit den Äquivalenzklassen

$$\begin{aligned} [1/2] &= \{\dots, -15/2, -7/2, 1/2, 9/2, 17/2, \dots\}, \\ [3/2] &= \{\dots, -13/2, -5/2, 3/2, 11/2, 19/2, \dots\}, \\ [5/2] &= \{\dots, -11/2, -3/2, 5/2, 13/2, 21/2, \dots\}, \\ [7/2] &= \{\dots, -9/2, -1/2, 7/2, 15/2, 23/2, \dots\} \end{aligned} \quad (3.7)$$

von M_F beschrieben. Die Exzitonenzustände können nun über die irreduziblen Darstellungen Γ_i der O_h -Gruppe klassifiziert werden. Hierzu wurden die entstehenden Eigenwerte mit den zugehörigen Symmetrien verglichen [18]. Dabei zeigte sich, dass die Blöcke mit $M_F \in [1/2]$ und $M_F \in [7/2]$ nur Eigenzustände mit Γ_7 - und Γ_8 -Symmetrie enthalten, während die Blöcke mit $M_F \in [3/2]$ und $M_F \in [5/2]$ nur Eigenzustände mit Γ_6 - und

Γ_8 -Symmetrie enthalten. Während die Zustände mit Γ_6 - und Γ_7 -Symmetrie zweifach entartet sind, wobei in jedem ihrer beiden zugeordneten Blöcke jeweils einer der beiden Zustände auftaucht, sind die Zustände mit Γ_8 -Symmetrie vierfach entartet und jeder der vier Blöcke enthält einen dieser Zustände. Wie in Referenz [11] beschrieben wurden die Zustände mit über den Folgenden Algorithmus klassifiziert:

1. Die Eigenwerte werden gemäß ihres Blocks klassifiziert.
2. Die Eigenwerte zweier verschiedener Blöcke werden zusammengefasst und in aufsteigender Reihenfolge sortiert.
3. Sind zwei aufeinanderfolgende Zustände entartet, so wird ihnen Γ_8 -Symmetrie zugeordnet.
4. Abhängig vom Block in dem sie auftauchen werden die verbliebenen Zustände Γ_6 oder Γ_7 zugeordnet.

4 Ergebnisse

Für die in diesem Abschnitt ermittelten Resultate wurden die Eigenwerte des skalierten Systems für verschiedene Parameter n_0 berechnet. Die folgenden Ergebnisse können dabei in zwei Abschnitte unterteilt werden. Im ersten Abschnitt 4.1 wurden für viele n_0 -Parameter einige n_{eff} -Werte berechnet, wodurch der Einfluss des Kontrollparameters auf die Levelverteilung visualisiert wurde. Hierdurch konnten Prognosen bezüglich des Einflusses des Kontrollparameters auf die Levelverteilungsstatistik gemacht werden. Im zweiten Abschnitt 4.2 wurden für einzelne n_0 die n_{eff} -Werte für große Quantenzahlen berechnet und mit statistischen Methoden auf ihre Chaotizität hin untersucht.

4.1 Visualisierung der skalierten Spektren

Die vom Kontrollparameter n_0 abhängigen Spektren sollen in einem ersten Schritt mit denen verglichen werden, die vom wasserstoffartigen Modell vorhergesagt werden. Dabei ist auf die Skalierung zu achten. Hierzu wird noch einmal kurz die Definition

$$n_{\text{eff}}^2 = \frac{1}{2(E_g - E)} \quad (4.1)$$

angeführt. Im wasserstoffartigen Modell folgt die gelbe Serie nun unabhängig von der skalierten Spin-Bahn-Kopplung der Beziehung

$$E_{n,y} = E_g - \frac{1}{2n^2}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (4.2)$$

wodurch die zugehörigen effektiven Quantenzahlen einfach durch

$$n_{\text{eff},y} = n, \quad n \in \mathbb{N} \quad (4.3)$$

beschrieben werden können. Für die Exzitonen der grünen Serie gilt der selbe Zusammenhang, allerdings mit der zusätzlich wirkenden Spin-Bahn-Kopplung, welche inklusive der Skalierung mit

$$E_{n,g} = E_g + \frac{n_0^2}{n_{\text{eff}}^2} \Delta - \frac{1}{2n^2}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (4.4)$$

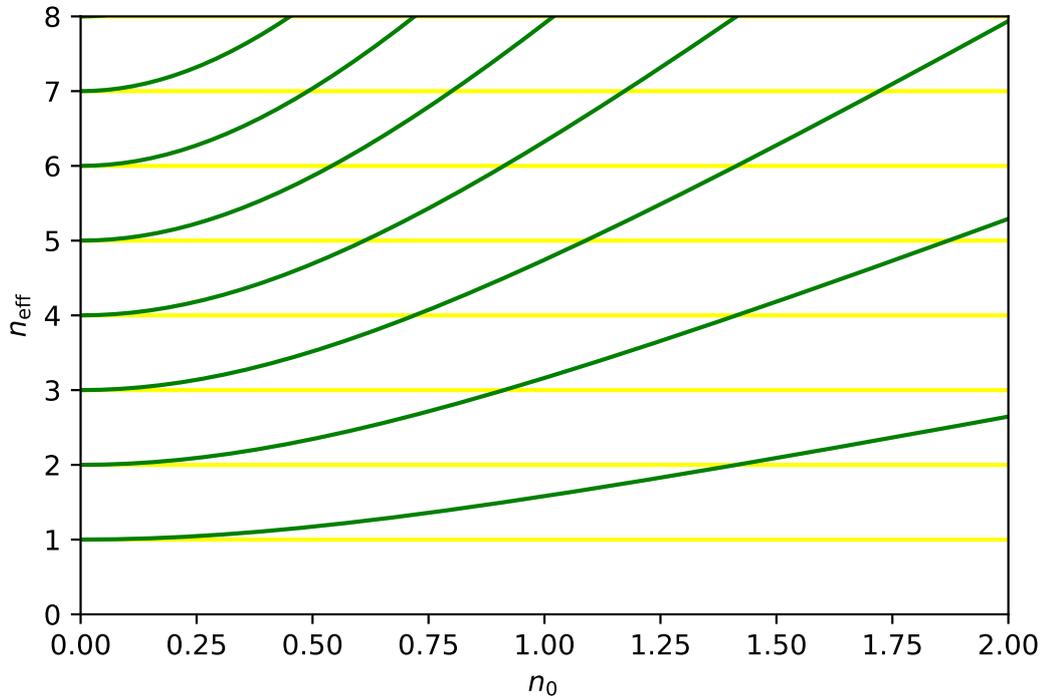


Abbildung 4.1: Dargestellt sind die ersten 14 (entarteten) Zustände für das skalierte, wasserstoffartige Modell. Die Zustände laufen ungestört durcheinander durch, da keine Kopplung zwischen gelber und grüner Serie vorliegt.

angegeben werden kann. Wird nun wieder auf n_{eff} umgestellt, so erhält man die Beziehung

$$n_{\text{eff,g}} = \sqrt{n^2(2\Delta n_0^2 + 1)}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (4.5)$$

Hier wird noch einmal deutlich, dass die effektive Hauptquantenzahl n_{eff} ursprünglich eingeführt wurde, um die Zustände der gelben Serie in Anwesenheit der grünen Serie zu beschreiben [11], während die Betrachtung der grünen Serie durch sie nicht signifikant vereinfacht wird. Werden diese vom wasserstoffartigen Modell vorhergesagten Zustände gegen n_0 aufgetragen, so ergibt sich [Abbildung 4.1](#)

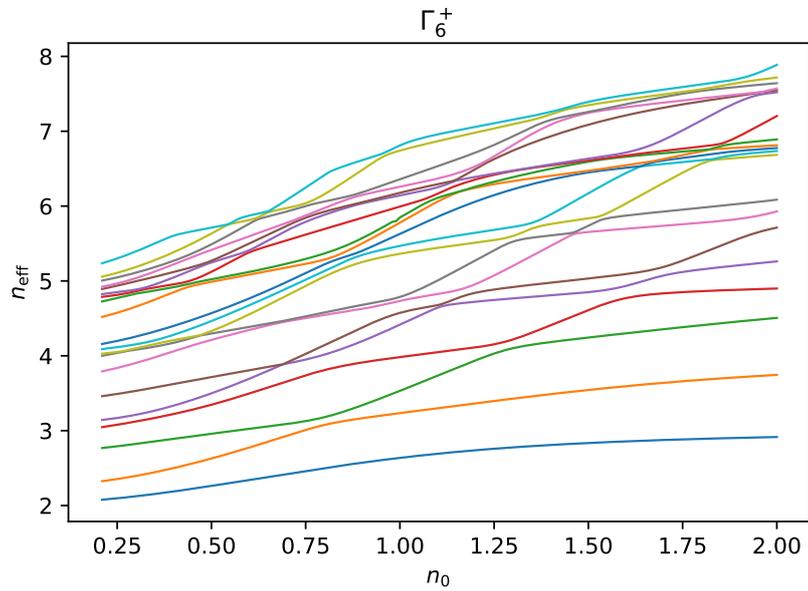


Abbildung 4.2: Dargestellt sind die ersten 20 Zustände für den Unterraum Γ_6^+ . Die vorhergesagte Niveauabstoßung ist an mehreren Punkten zu erkennen.

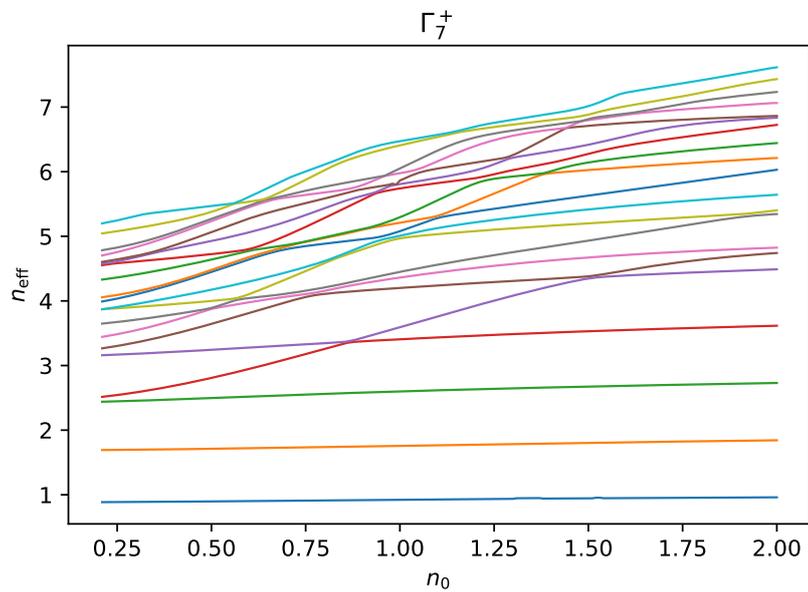


Abbildung 4.3: Dargestellt sind die ersten 20 Zustände für den Unterraum Γ_7^+ . Die vorhergesagte Niveauabstoßung ist an mehreren Punkten zu erkennen.

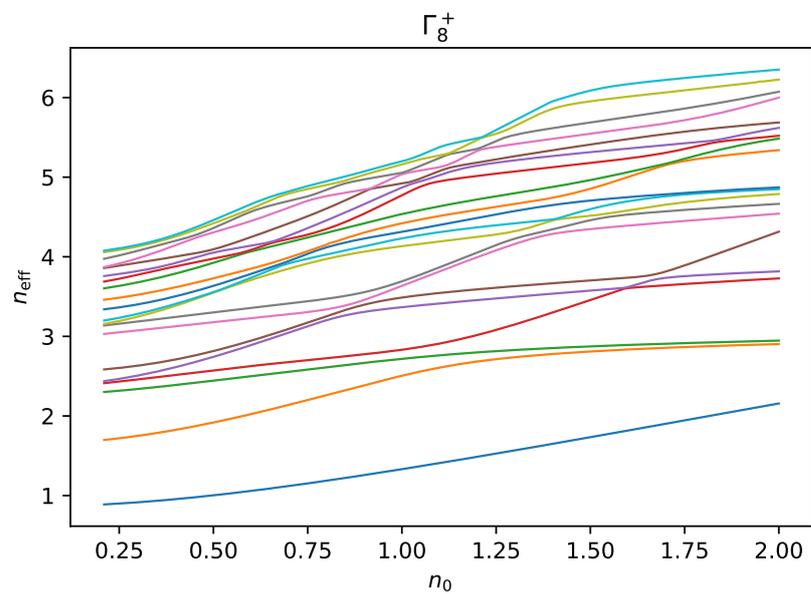


Abbildung 4.4: Dargestellt sind die ersten 20 Zustände für den Unterraum Γ_8^+ . Die vorhergesagte Niveauabstoßung ist an mehreren Punkten zu erkennen.

Mit diesen ungestörten Spektren werden nun die tatsächlich berechneten verglichen. Hierzu wurden die ersten 20 Zustände der Unterräume gerader Parität in einem Bereich von $0,21 < n_0 < 2$ in einem feinen Raster von $\Delta n_0 = 0,01$ berechnet und aufgetragen. Die daraus gewonnenen Verläufe sind in den Abbildungen 4.2 - 4.4 dargestellt. Dabei wurden die einzelnen Unterräume, beschrieben durch ihre irreduziblen Darstellungen Γ_i^\pm , voneinander getrennt betrachtet, da sich bei Zuständen unterschiedlicher Blöcke im Hamiltonoperator keine vermiedenen Kreuzungen beobachten lassen. Wie sich an verschiedenen Punkten in allen drei Diagrammen erkennen lässt, stoßen sich die Eigenwerte voneinander ab. Im betrachteten Bereich sollte gemäß den in Abschnitt 2.2 beschriebenen Ideen eine zumindest teilweise chaotische Struktur in den Nächster-Nachbar-Verteilungen auftauchen. Für kleinere Werte von n_0 wird allerdings ein Zusammenlaufen der Zustände beobachtet, was wiederum mit einer gesteigerten Ordnung assoziiert werden kann. Die so erfolgte Visualisierung der Zustände ist zudem sinnvoll, um das komplexe Modell mit dem ungestörten, wasserstoffartigen Modell zu vergleichen. Hauptaugenmerk liegt dabei darauf zu erkennen, ob sich die vorhandenen Zustände immer noch mit einem gelben beziehungsweise grünen Verlauf identifizieren lassen, oder ob die Kopplung der Terme zu einer gemischten Charakteristik führt. Hierzu wurden Schablonen der Formen (4.3) und (4.5) über die Zustandsverläufe aus den Abbildungen 4.2 - 4.4 gelegt um diese abschnittsweise mit den wasserstoffartigen Verläufen aus Abbildung 4.1 zu identifizieren.

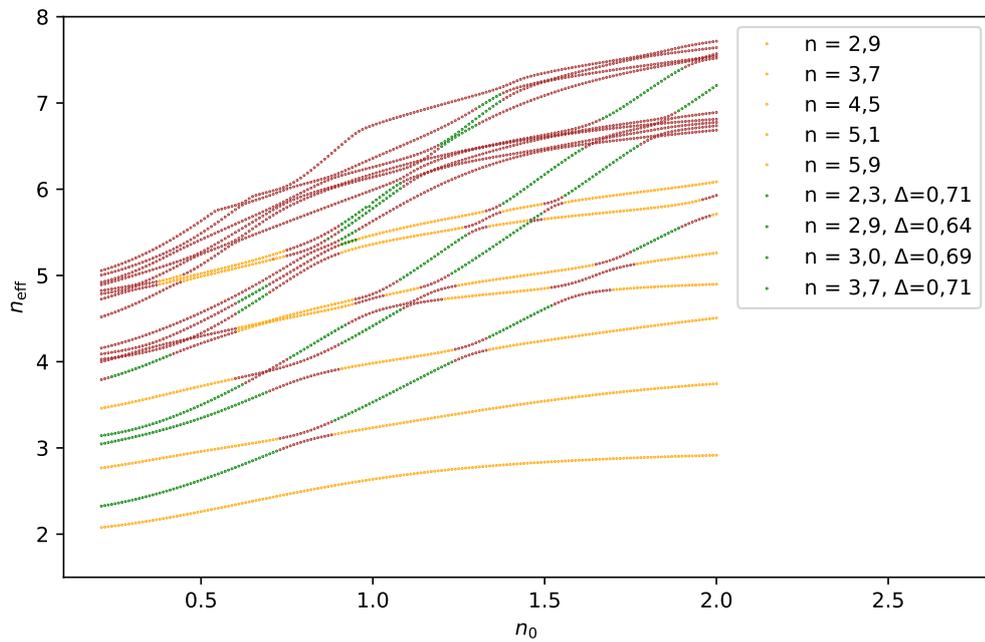


Abbildung 4.5: Dargestellt sind die ersten 20 Zustände für den Unterraum Γ_6^+ und ihre Identifizierung mit den vorhergesagten Verläufen des einfachen Modells. Die gelben Seien wurden dabei anhand ihres Endwertes bei $n_0 = 2$, die grünen Serien durch einen Fit der Form (4.5) klassifiziert. In braun wurden die Punkte markiert, die aufgrund der zu eng liegenden Zustände nicht genau klassifiziert werden konnten und als Mischzustände gewertet werden.

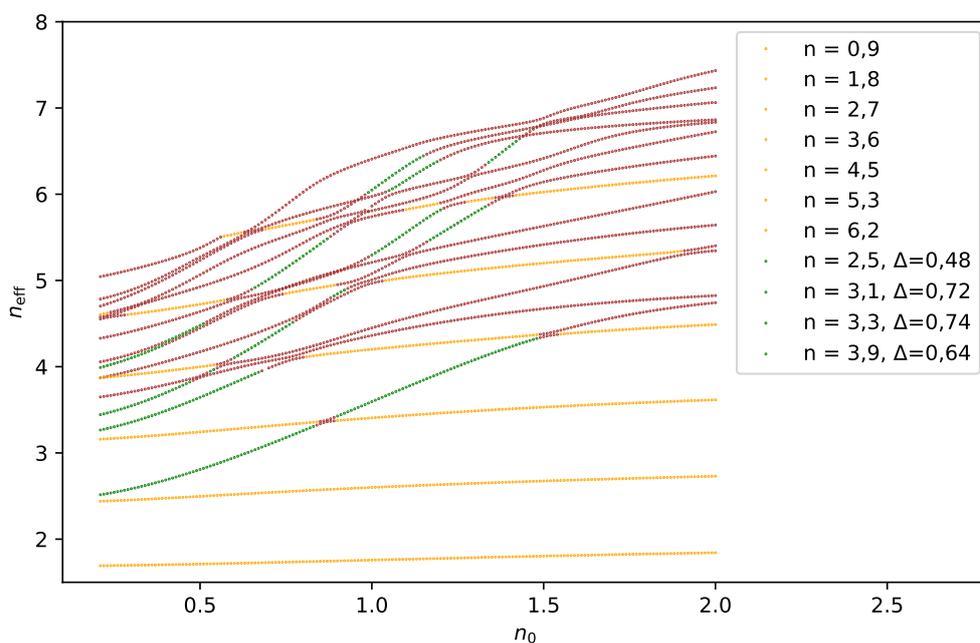


Abbildung 4.6: Dargestellt sind die ersten 20 Zustände für den Unterraum Γ_7^+ und ihre Identifizierung mit den vorhergesagten Verläufen des einfachen Modells. Die gelben Seien wurden dabei anhand ihres Endwertes bei $n_0 = 2$, die grünen Serien durch einen Fit der Form (4.5) klassifiziert. In braun wurden die Punkte markiert, die aufgrund der zu eng liegenden Zustände nicht genau klassifiziert werden konnten und als Mischzustände gewertet werden.

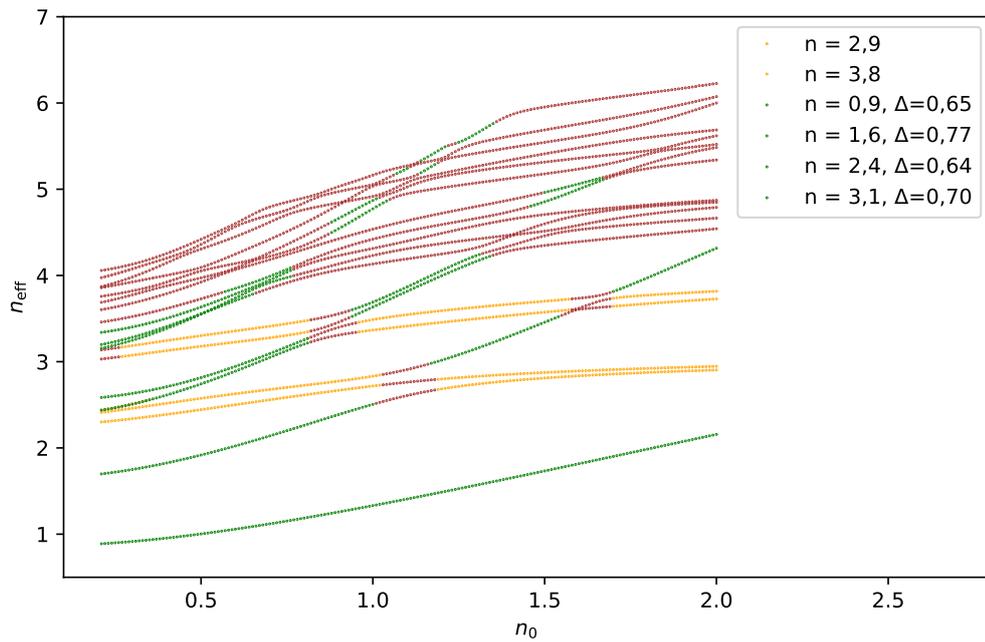


Abbildung 4.7: Dargestellt sind die ersten 20 Zustände für den Unterraum Γ_8^+ und ihre Identifizierung mit den vorhergesagten Verläufen des einfachen Modells. Die gelben Seien wurden dabei anhand ihres Endwertes bei $n_0 = 2$, die grünen Serien durch einen Fit der Form (4.5) klassifiziert. In braun wurden die Punkte markiert, die aufgrund der zu eng liegenden Zustände nicht genau klassifiziert werden konnten und als Mischzustände gewertet werden.

Werden die Zustandsverläufe dementsprechend in gelbe, grüne und gemischte Zustände klassifiziert, so erhält man die Abbildungen 4.5 - 4.7. Dabei wurden n und Δ als Fitparameter verwendet, um die entstehenden Kurven mit den ungestörten Werten

$$n \in \mathbb{N} \quad (4.6)$$

$$\Delta = 0,75 \quad (4.7)$$

vergleichen zu können, wobei Δ in Exziton-Hartree-Einheiten gemessen wird (vgl Anhang B). Als gelbe Serien wurden dabei nicht nur konstante, sondern auch näherungsweise lineare Funktionen identifiziert.

Es ist deutlich zu erkennen, dass im unteren Bereich zwar die meisten Funktionen mit einer Serie identifiziert werden können, ab $n_{\text{eff}} = 4$ die Niveaus jedoch so eng liegen, dass nur noch wenige Abschnitte eindeutig zuordenbar sind. Für die grünen Serien gilt, dass der effektiv wirkende Spin-Bahn-Kopplungsparameter Δ im Allgemeinen unter der theoretischen Größe $\Delta = 0,75$ bleibt.

4.2 Levelstatistik

Zur Untersuchung der skalierten Spektren wurden die Nächster-Nachbar-Verteilungen bei konstantem n_0 untersucht. Dies entspricht wie bereits zuvor beschrieben nicht der tatsächlichen Levelverteilung im Kupferoxydul, welche durch $n_0 = n_{\text{eff}}$ beschrieben wird. Dieser für das Verständnis der folgenden Analyse wichtige Zusammenhang wird mit Abbildung 4.8 verdeutlicht.

Abbildung 4.9 zeigt die in Gleichung (2.36) beschriebene Stufenfunktion des Spektrums für verschiedene Spin-Orbit-Kopplungen n_0 für den Unterraum Γ_6^- , wobei die im skalierten System verwendete Skalierungskonstante n_{eff} die Energie ersetzt. Wie man erkennen kann, folgen die einzelnen Stufenfunktionen einem polynomiellen Zusammenhang.

Dieser kann aus dem vereinfachten, wasserstoffartigen Modell hergeleitet werden. Hierzu wird zusätzlich zu den Gleichungen (4.1) - (4.5) die vom Wasserstoffatom bekannte Entartung von n^2 miteinbezogen. Für die Zustandsdichten ergibt sich die Form

$$N_{y/g}(n_{\text{eff}}) = \sum_{k=0}^{\Omega} k^2 = \frac{1}{6}(2\Omega^3 + 3\Omega^2 + \Omega), \quad (4.8)$$

wobei für den Endwert der Summe Ω für die gelbe Serie

$$\Omega_y = n_{\text{eff}} \quad (4.9)$$

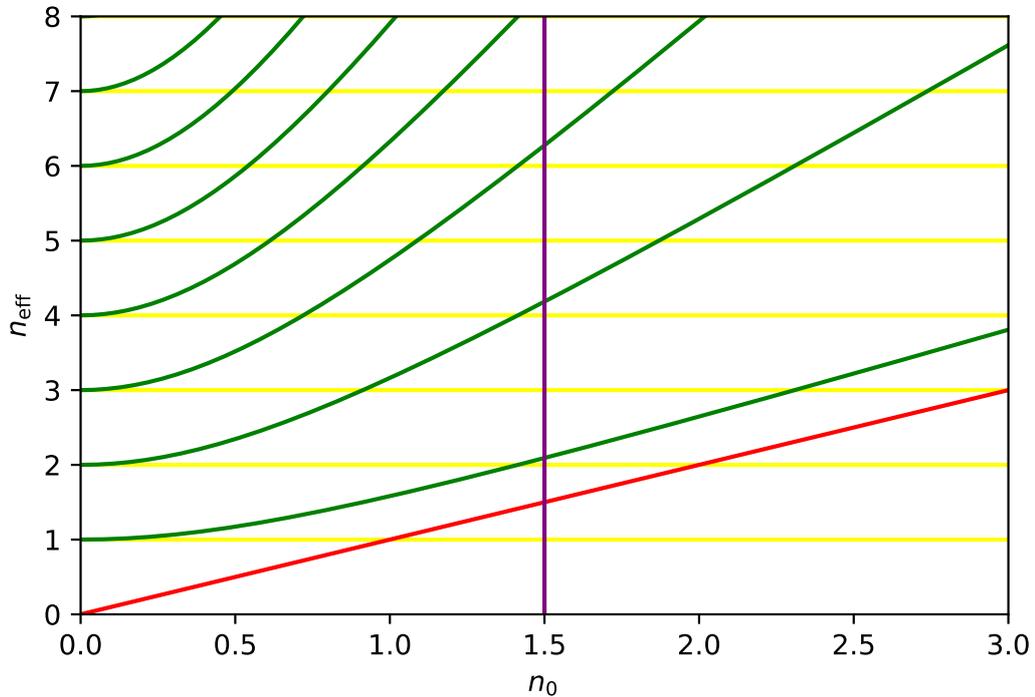


Abbildung 4.8: Verlauf der gelben und grünen Eigenwerte in Abhängigkeit vom Kontrollparameter n_0 . Mit der lilafarbenen Linie ist dabei verdeutlicht, dass die Statistiken für ein konstantes n_0 berechnet wurden. In rot ist als Referenz die tatsächliche Spin-Bahn-Kopplung mit $n_0 = n_{\text{eff}}$ dargestellt.

und für die grüne Serie

$$\Omega_g = \frac{n_{\text{eff}}}{\sqrt{(2\Delta n_0^2 + 1)}} \quad (4.10)$$

gilt. Da unterschiedliche Anteile der grünen und gelben Serie zu den einzelnen Unterräumen beitragen, können diese nicht einfach mit den tatsächlichen Parametern kubischer Fits verglichen werden. Die einzelnen Funktionen folgen allerdings der Form

$$N_{\Gamma_i^\pm}(n_{\text{eff}}) = \alpha_y \cdot N_y(n_{\text{eff}}) + \alpha_g \cdot N_g(n_{\text{eff}}) \quad (4.11)$$

mit vom Unterraum abhängigen Konstanten α , wodurch ein kubischer Ansatz als Fit gerechtfertigt wird. Der Fit für $n_0 = 0,5$ im Unterraum Γ_6^- ist in Abbildung 4.10 in einem kleineren Diagrammausschnitt dargestellt.

Abbildung 4.9 zeigt zudem, dass für größere n_0 zusätzliche Stufen als eine Art Überstruktur auftreten. Die Auswirkungen dieser Anhäufungen an Zuständen im Spektrum auf die Statistik werden später noch genauer betrachtet werden.

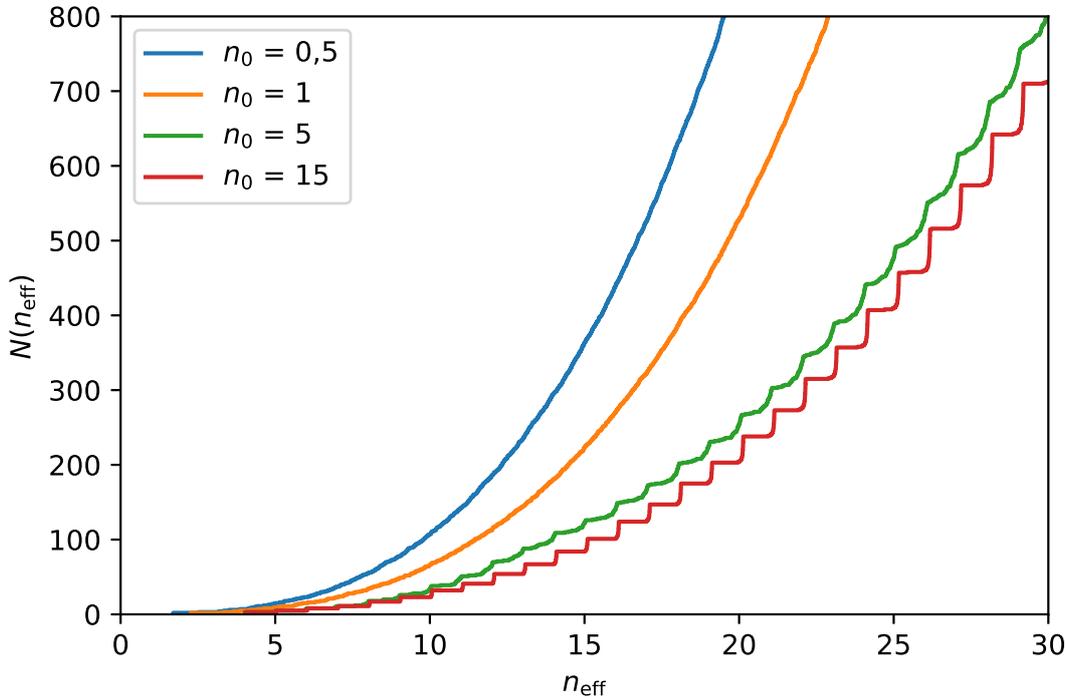


Abbildung 4.9: Stufenfunktionen der Zustände für verschiedene Kontrollparameter n_0 im Unterraum Γ_6^- . Ein kubische Verlauf der mittleren Zustandsdichte mit zunehmender Steigung für kleinere n_0 ist zu erkennen. Die Anhäufung von Zuständen charakterisiert durch die treppenartige Überstruktur für zunehmende n_0 ist gerade am Beispiel $n_0 = 15$ klar beobachtbar.

Das Spektrum kann dann über die in Abschnitt 2.3 beschriebenen Methoden entfaltet werden. Die aus dieser gewonnene Nächster-Nachbar-Verteilung ist als Histogramm exemplarisch für Γ_6^- in Abbildung 4.11 dargestellt.

Zwar kann man in den Histogrammen durchaus erkennen, dass ein gewisses Maß an Niveauabstoßung abhängig von n_0 herrscht, man sieht allerdings, dass die geringe Zahl an Datenpunkten, die für die einzelnen Kontrollparameter und Unterräume im Bereich 300 – 1000 lag, nicht ausreicht, um sonderlich glatte Histogramme zu erzeugen. Um die Genauigkeit der Auswertung zu verbessern, wurden deshalb die über die Gleichung

$$F(s) = \int_0^s P(s') ds' \quad (4.12)$$

definierten kumulierten Verteilungen betrachtet. Diese Wahl hat zwei Vorteile: Zum einen wurden für die Statistik je nach Unterraum nur 300 Punkte herangezogen, was

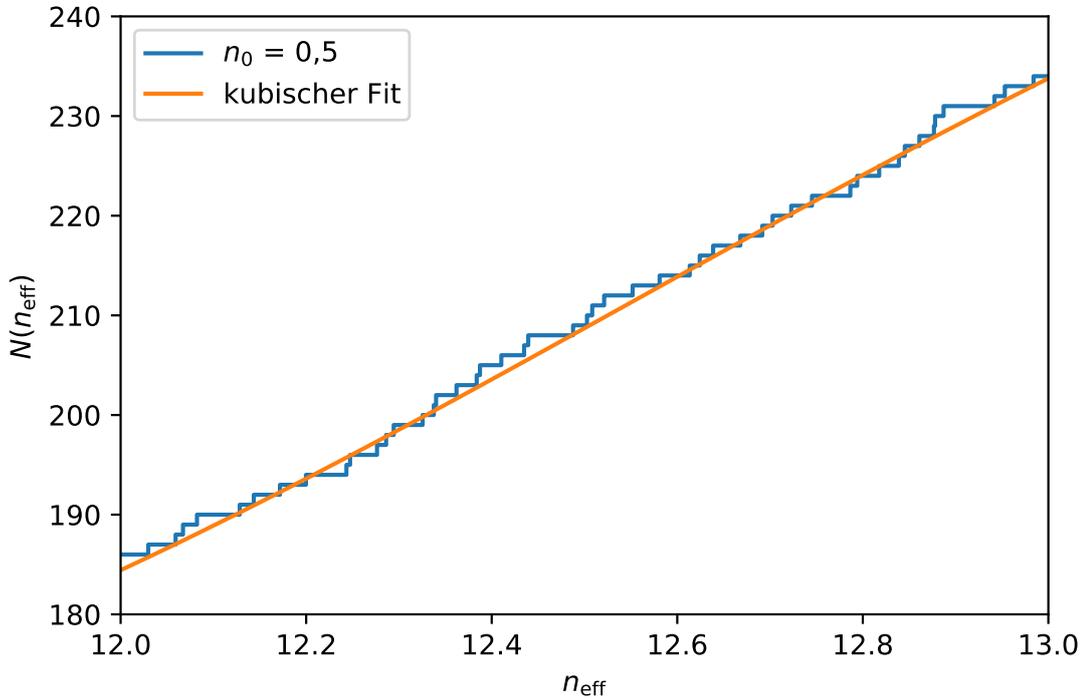


Abbildung 4.10: Stufenfunktion der Zustände für $n_0 = 0,5$ im Unterraum Γ_6^- wie in Abbildung 4.9. Durch den kleineren Beobachtungsbereich wird der Stufencharakter der Funktion verdeutlicht. Der Verlauf des kubischen Fits ist zudem dargestellt.

bei einer Aufteilung in etwa 15 Blöcke im Histogramm eine eher geringe Datenmenge darstellt, wodurch Fluktuationen stark ins Gewicht fallen. In der kumulierten Statistik hingegen taucht jeder Abstand einzeln auf, wodurch ein deutlich klareres Bild entsteht. Zum Anderen ist in der kumulierten Statistik bereits eine Normierung enthalten, wodurch der Fit mit einem Parameter weniger auskommt. Dies ist im Folgenden kurz dargestellt. Für die Brody-Verteilung gilt nach Gleichung (2.50) die Beziehung

$$P(s) = As^\omega e^{-Bs^{\omega+1}}. \quad (4.13)$$

Für die kumulierte Verteilung gilt also

$$F(s) = \int_0^s P(s') ds' = \frac{A}{B(\omega+1)} e^{-Bs^{\omega+1}} - \frac{A}{B(\omega+1)}. \quad (4.14)$$

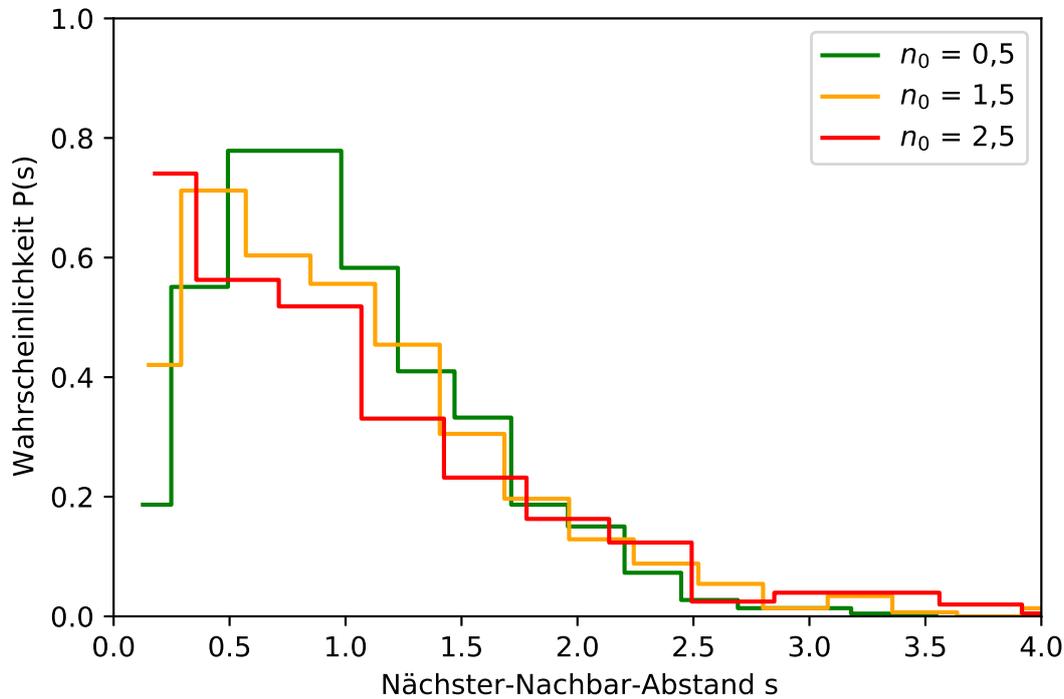


Abbildung 4.11: Histogramme der entfaltenen Nächster-Nachbar-Abstände für drei verschiedene Kontrollparameter n_0 im Unterraum Γ_6^- . Man kann eine mit steigendem n_0 abnehmende Niveauabstoßung erkennen, sie ist allerdings in dieser Darstellung nur schwer zu quantifizieren.

Durch die zusätzlichen Bedingungen der Normierung und der mittleren Abstände

$$\lim_{s \rightarrow \infty} F(s) = 1 \quad (4.15)$$

$$\int_0^{\infty} sP(s)ds = 1, \quad (4.16)$$

folgt, dass mit

$$B = \Gamma((\omega + 2)/(\omega + 1))^{\omega+1} \quad (4.17)$$

$$A = B(\omega + 1) \quad (4.18)$$

die Faktoren durch ω so fest bestimmt sind, dass der Faktor A nicht mehr als Fitparameter auftauchen muss. Mit den genannten Bedingungen gilt dann nur noch

$$F(s) = 1 - e^{-Bs^{\omega+1}}, \quad (4.19)$$

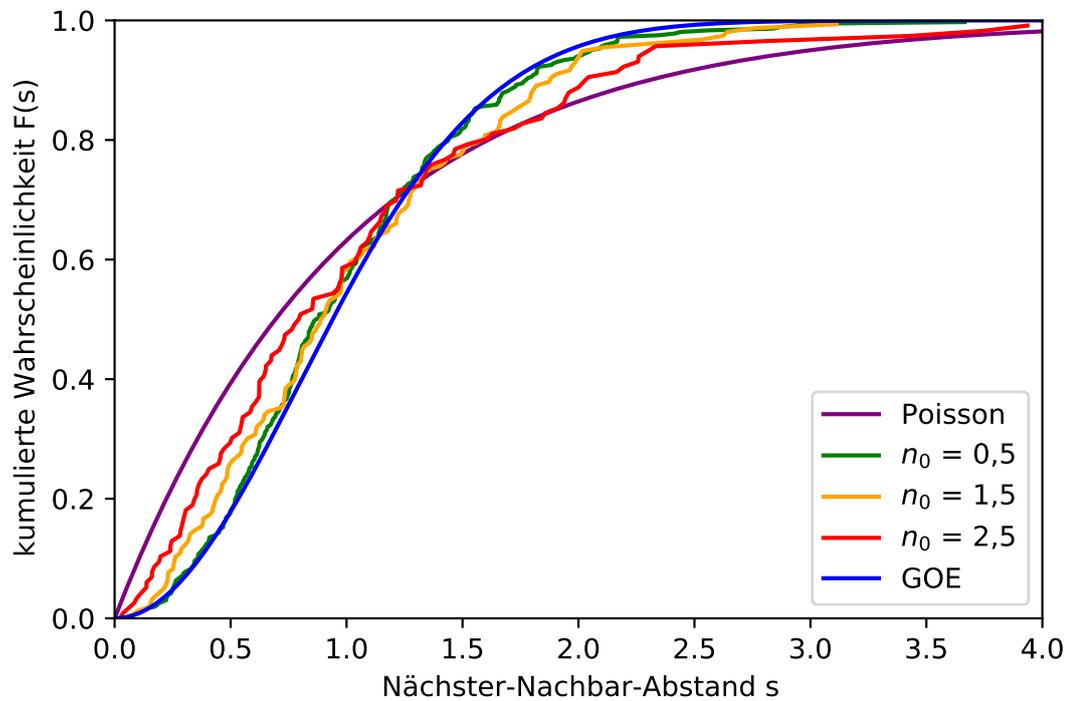


Abbildung 4.12: Kumulierte Histogramme der entfaltenen Nächster-Nachbar-Abstände für drei verschiedene Kontrollparameter n_0 im Unterraum Γ_6^- wie in Abbildung 4.11 und die beiden Verteilungen Poisson und GOE. Eine Bestimmung des Brody-Parameters ist durch die bessere Nutzung der einzelnen Werte als in den einfachen Histogrammen vereinfacht.

wodurch die Analyse deutlich vereinfacht wird. Die kumulierten Verteilungen für die selben Werte wie in Abbildung 4.11 sind in Abbildung 4.12 dargestellt. In diesen sind als Referenz auch Poisson- und GOE-Statistik vermerkt, da in der kumulierten Statistik die visuelle Unterscheidung deutlich unintuitiver ist als in den normalen Histogrammen.

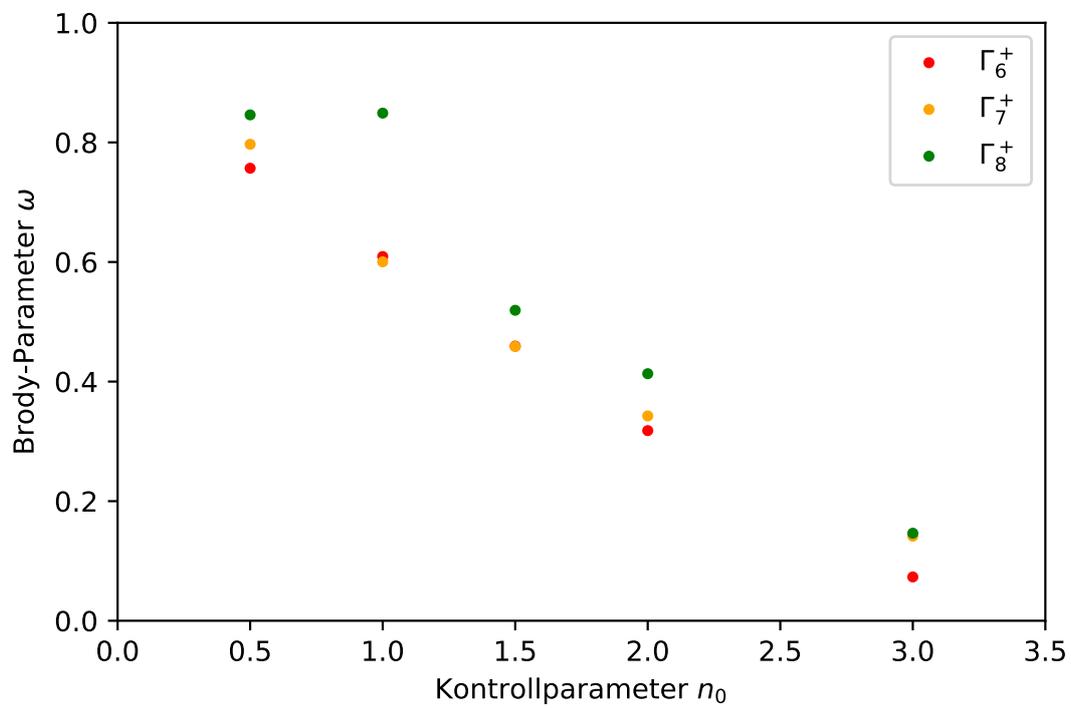


Abbildung 4.13: Brody-Parameter für die Unterräume gerader Parität.

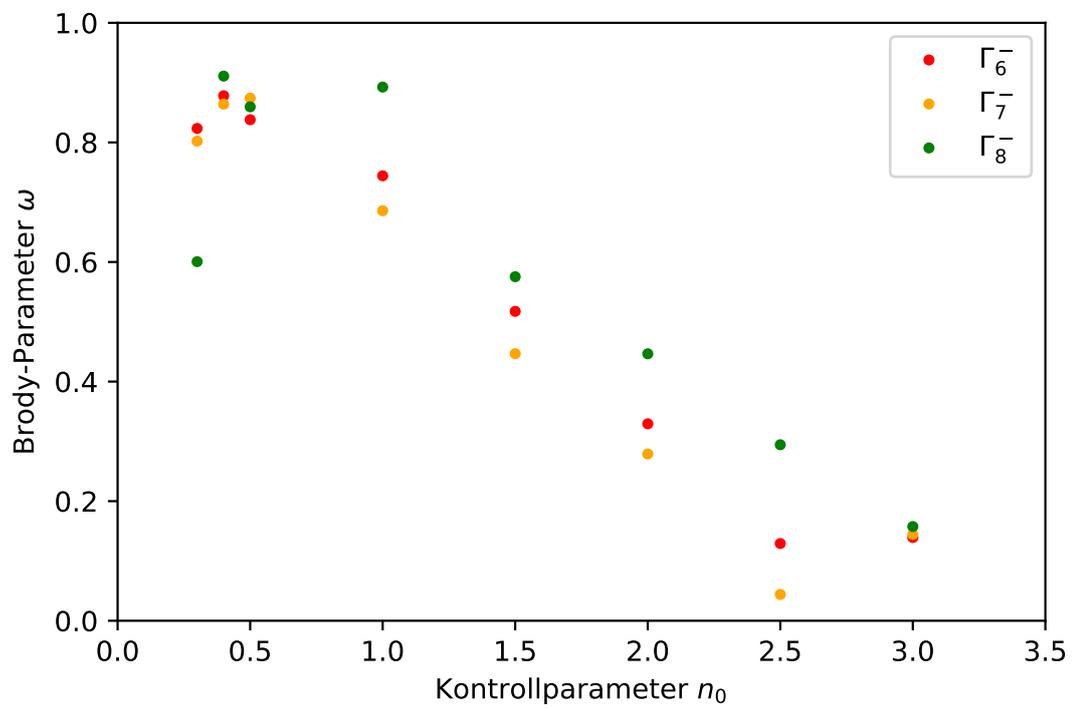


Abbildung 4.14: Brody-Parameter für die Unterräume ungerader Parität.

Wird nun eine kumulierte Brody-Verteilung der Form (4.19) an die Daten angepasst, so kann der Brody-Parameter ω gegen den Kontrollparameter n_0 aufgetragen werden. Dieser in Abbildung 4.13 und 4.14 dargestellte Zusammenhang zeigt, dass sich die durch n_0 definierte Charakteristik in drei Bereiche gliedern lässt.

Für Werte von $n_0 < 0,5$ steigt der Brody-Parameter und damit die Chaotizität steil an. Im Bereich $0,5 < n_0 < 3$ nimmt dann die Ordnung wieder zu und die Nächster-Nachbar-Verteilung bewegt sich von einer GOE-Statistik immer weiter in Richtung Poisson-Statistik. Ab dem Wert $n_0 > 3$ versagt nun die verwendete Theorie. Die Level ziehen sich nun sogar stärker an, als es bei einer Poisson-Verteilung der Fall wäre. Die Gründe für diesen Verlauf sollen im Folgenden kurz erläutert und mit den in Abschnitt 4.1 gegebenen Visualisierungen erklärt werden. Zuerst soll der Bereich $0,5 < n_0 < 3$ betrachtet werden. In diesem folgt der Brody-Parameter klar dem vorausgesagten Zusammenhang, dass mit sinkendem n_0 und damit erhöhter Kopplung der grünen an die gelbe Serie die Chaotizität zunimmt. Die Niveauabstoßung wirkt dann stärker als die in den anderen beiden Bereichen wirkenden ordnenden Faktoren. Diese sind für kleinere respektive größere Werte des Kontrollparameters allerdings unterschiedlicher Natur. Im Bereich $n_0 < 0,5$ wirkt sich aus, dass die beiden Serien für $n_0 = 0$ (keine Spin-Bahn-Kopplung) exakt identisch sind und dementsprechend aus einem Punkt entspringen müssen. Dieser Effekt wirkt stärker als die Niveauabstoßung. Es tritt also trotz höherer Kopplung der beiden Serien keine weitere Erhöhung der Chaotizität auf. Im Bereich $n_0 > 3$ dominiert die Quasientartung der Zustände, die sich in Abbildung 4.9 als übergeordnete Stufenstruktur gezeigt hat, die Niveauabstoßung. Dabei geht es so weit, dass die entstehende Statistik noch geordneter ist als die Poisson-Statistik die aus der Theorie abgeleitet ist, dass die Level unabhängig voneinander verlaufen. Eine mögliche Behandlung dieser Problematik in diesem Bereich wäre zwar die Entfaltung nicht mit einer kubischen Funktion sondern mit einer entsprechend angepassten Treppenfunktion zu vollziehen, doch die zugrunde liegende Idee, die mittlere Zustandsdichte an einem einfachen, integrierbaren Modell zu orientieren, ist dann nicht mehr gegeben.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden quantenmechanische Spektren von Exzitonen in Kupferoxydul unter Einbeziehung der komplexen Bandstruktur berechnet. Dabei wurde untersucht, welchen Einfluss eine Variation der Spin-Bahn-Kopplung zwischen den beiden energetisch niedrigsten Exzitonenserien auf die Nächster-Nachbar-Verteilung im Spektrum hat.

Hierzu wurde die konstante Spin-Bahn-Kopplungskonstante Δ durch eine skalierte Version $\tilde{\Delta} = \Delta n_0^2 / n_{\text{eff}}^2$ ersetzt, wodurch der Abstand zwischen den beiden Serien über einen Kontrollparameter n_0 variiert werden konnte.

Die Spektren der einzelnen Unterräume wurden in Abhängigkeit des Kontrollparameters visualisiert und mit den ungestörten Spektren eines einfachen, wasserstoffartigen Modells verglichen. Dabei konnte gezeigt werden, dass im Bereich $n_0 \in [0,5,3]$ eine klare Niveauabstoßung auftritt, was auf eine korrespondierende, chaotische Dynamik hindeutet.

Dieses Ergebnis wurde durch eine statistische Analyse des Spektrums überprüft. Hierzu wurde die mittlere Zustandsdichte des vereinfachten Modells zur Entfaltung der Spektren verwendet, wodurch Histogramme der Nächster-Nachbar-Verteilung untersucht werden konnten. Hierzu wurden die kumulierten Statistiken mit denen verglichen, die für reguläre respektive chaotische Systeme zu erwarten wären. Um den Anteil der beiden Dynamiken am System abschätzen zu können wurden dazu die ermittelten Statistiken mithilfe von Brody-Verteilungen quantifiziert, wodurch gezeigt werden konnte, dass im genannten Parameterbereich mit steigender Kopplungskonstante n_0 die Regularität des Systems zunimmt.

Für die Bereiche außerhalb dieser Parameter konnte keine quantitative Aussage bestimmt werden, da eine Quasientartung der Zustände so über die Niveauabstoßung dominierte, dass der gewählte Ansatz für die mittlere Zustandsdichte nicht mehr ausreichend war um das System zu entfalten. Ein hierzu erweitertes theoretisches Modell kann von Interesse sein.

A Materialkonstanten

Die verwendeten Konstanten und Materialparameter in dieser Arbeit sind in der folgenden Tabelle A.1 aufgelistet. Dabei lassen sich die Luttinger-Parameter aus den angegebenen Parametern A_i und B_i über

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= -A_1, & \gamma_2 &= \frac{A_2}{6}, & \gamma_3 &= \frac{A_3}{6}, \\ \eta_1 &= -B_1, & \eta_2 &= \frac{B_2}{6}, & \eta_3 &= \frac{B_3}{6} \end{aligned} \tag{A.1}$$

berechnen.

Tabelle A.1: Verwendete Materialkonstanten von Kupferoxydul

Bandlücke	E_g	2,172 08 eV
reduzierte Elektronenmasse	m_e	0,99 m_0
Dielektrizitätskonstante	ε	7,5
Spin-Bahn-Kopplung	Δ	0,131 eV
Valenzbandparameter	A_1	-1,76
	A_2	4,519
	A_3	-2,201
	B_1	0,02
	B_2	-0,022
	B_3	-0,202

B Exziton-Hartree-Einheiten

Werden die in der Atomphysik üblichen Hartree-Einheiten in analoger Weise auf Exzitonen in Kupferoxydul angewandt, so verwendet man die dem Wasserstoffatom entsprechenden Größen

$$\hbar = e = \frac{m_0}{\gamma'_1} = 4\pi\epsilon_0\epsilon = 1 \quad (\text{B.1})$$

$$a_{\text{exc}} = \gamma'_1\epsilon a_0 = 1 \quad (\text{B.2})$$

um die im wasserstoffartigen Modell erhaltenen Gleichungen möglichst weit zu vereinfachen. Für die Umrechnung in SI-Einheiten kann dann mit den aus Anhang A gegebenen Materialparametern $\gamma'_1 = 2,77$ und $\epsilon = 7,5$ die Tabelle B.1 erstellt werden.

Tabelle B.1: Umrechnung von Exziton-Hartree- in SI-Einheiten

Größe	Symbol	Exziton-Hartree-Einheit	SI
Ladung	q	e	$1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Masse	m	m_0/γ'_1	$3,288 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Wirkung	S	\hbar	$1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
Länge	r	a_{exc}	$1,099 \cdot 10^{-9} \text{ m}$
Impuls	p	\hbar/a_{exc}	$9,593 \cdot 10^{-26} \text{ kgm/s}$
Energie	E	E_{exc}	$2,798 \cdot 10^{-20} \text{ J}$
Zeit	t	\hbar/E_{exc}	$3,769 \cdot 10^{-15} \text{ s}$

Relevant hierbei ist spezifisch noch die Spin-Bahn-Kopplungskonstante zu nennen, für die in Exziton-Hartree-Einheiten folglich $\Delta = 0,131 \text{ eV}/2,798 \cdot 10^{-20} \text{ J} = 0,75$ gilt.

Literatur

- [1] Rudolf Gross und Achim Marx. *Festkörperphysik*. 3. Auflage. De Gruyter Studium, 2018.
- [2] J. Frenkel. „On the Transformation of light into Heat in Solids. I“. In: *Phys. Rev.* 37 (1 Jan. 1931), S. 17–44. DOI: [10.1103/PhysRev.37.17](https://doi.org/10.1103/PhysRev.37.17).
- [3] J. Frenkel. „On the Transformation of Light into Heat in Solids. II“. In: *Phys. Rev.* 37 (10 Mai 1931), S. 1276–1294. DOI: [10.1103/PhysRev.37.1276](https://doi.org/10.1103/PhysRev.37.1276).
- [4] Gregory H. Wannier. „The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals“. In: *Phys. Rev.* 52 (3 Aug. 1937), S. 191–197. DOI: [10.1103/PhysRev.52.191](https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.191).
- [5] E. F. Gross. „Optical spectrum of excitons in the crystal lattice“. In: *Il Nuovo Cimento (1955-1965)* 3 (4 1956), S. 672–701. DOI: [10.1007/BF02746069](https://doi.org/10.1007/BF02746069).
- [6] T. Kazimierczuk, D. Fröhlich, S. Scheel, H. Stolz und M. Bayer. „Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu₂O“. In: *Nature* 514 (2014), S. 343–347. DOI: [10.1038/nature13832](https://doi.org/10.1038/nature13832).
- [7] Frank Schweiner, Jörg Main und Günter Wunner. „Magnetoexcitons Break Antiunitary Symmetries“. In: *Phys. Rev. Lett.* 118 (4 Jan. 2017), S. 046401. DOI: [10.1103/PhysRevLett.118.046401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.046401). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.046401>.
- [8] Frank Schweiner, Jörg Main und Günter Wunner. „GOE-GUE-Poisson transitions in the nearest-neighbor spacing distribution of magnetoexcitons“. In: *Phys. Rev. E* 95 (6 Juni 2017), S. 062205. DOI: [10.1103/PhysRevE.95.062205](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.062205). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.95.062205>.
- [9] Frank Schweiner, Patric Rommel, Jörg Main und Günter Wunner. „Exciton-phonon interaction breaking all antiunitary symmetries in external magnetic fields“. In: *Phys. Rev. B* 96 (3 Juli 2017), S. 035207. DOI: [10.1103/PhysRevB.96.035207](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.035207). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.035207>.

- [10] Frank Schweiner, Jeanine Laturner, Jörg Main und Günter Wunner. „Crossover between the Gaussian orthogonal ensemble, the Gaussian unitary ensemble, and Poissonian statistics“. In: *Phys. Rev. E* 96 (5 Nov. 2017), S. 052217. DOI: [10.1103/PhysRevE.96.052217](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.052217). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.96.052217>.
- [11] Moritz Schumacher. „Semiclassical analysis and interpretation of quantum mechanically computed Cu₂O exciton spectra“. Masterarbeit. Universität Stuttgart, 2021.
- [12] Frank Schweiner. „Theory of excitons in cuprous oxide“. Diss. Universität Stuttgart, 2017.
- [13] Sandro Wimberger. *Nonlinear Dynamics and Quantum Chaos: An Introduction*. Graduate Texts in Physics. Springer, Cham, 2014.
- [14] F. Haake. *Quantum Signatures of Chaos*. Fourth Edition. Springer Series in Synergetics. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [15] T.A. Brody. „A statistical measure for the repulsion of energy levels“. In: *Lettere al Nuovo Cimento (1971-1985)* 7 (12 1973), S. 482–484. DOI: [10.1007/BF02727859](https://doi.org/10.1007/BF02727859). URL: <https://doi.org/10.1007/BF02727859>.
- [16] M. A. Caprio, P. Maris und J. P. Vary. „Coulomb-Sturmian basis for the nuclear many-body problem“. In: *Phys. Rev. C* 86 (3 Sep. 2012), S. 034312. DOI: [10.1103/PhysRevC.86.034312](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.86.034312). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.86.034312>.
- [17] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney und D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide*. 3rd Edition. Society for Industrial und Applied Mathematics, 1999.
- [18] Frank Schweiner, Jörg Main, Günter Wunner und Christoph Uihlein. „Even exciton series in Cu₂O“. In: *Phys. Rev. B* 95 (19 Mai 2017), S. 195201. DOI: [10.1103/PhysRevB.95.195201](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.195201). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.195201>.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich meinen Dank an alle richten, die mich unterstützt und mir beim Schreiben dieser Arbeit geholfen haben:

- Prof. Dr. Jörg Main für die Gelegenheit, meine Bachelorarbeit am Institut für Theoretische Physik 1 zu absolvieren und die hervorragende Betreuung dieser,
- Jan Ertl für die Erklärung der verwendeten Methoden und der Hilfe bei Fragen aller Art,
- Patric Rommel und Moritz Schumacher für die Einführung in das Thema und die verwendeten Programme,
- Johannes Reiff für die Systemadministration und die spannenden Debatten beim Mittagessen,
- meiner Familie und meinen Freunden für die Unterstützung die sie mir jederzeit boten.

Erklärung

Ich versichere,

- dass ich diese Masterarbeit selbstständig 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 02.03.2022

Marco Schönleber