

Gleichmäßige Näherung
für
semiklassische Spektren
mit Hilfe
katastrophentheoretischer
Beugungsintegrale

DIPLOMARBEIT

vorgelegt von
Thomas Bartsch
aus
Essen



Ruhr-Universität Bochum
Fakultät für Physik und Astronomie
Institut für Theoretische Physik,
insbesondere Plasma- und Atomphysik

September 1998

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 1.1 | Motivation und Problemstellung | 1 |
| 1.2 | Aufbau der Arbeit | 4 |
| 2 | Grundlagen | 5 |
| 2.1 | Hamiltonsche Mechanik | 5 |
| 2.2 | Poincaré–Schnitte und periodische Bahnen | 7 |
| 2.3 | Die Gutzwillersche Spurformel | 10 |
| 3 | Das diamagnetische Keplerproblem | 20 |
| 3.1 | Die Hamiltonfunktion | 20 |
| 3.2 | Die betrachtete Bifurkation | 22 |
| 4 | Normalformtheorie und Bifurkationen | 31 |
| 4.1 | Birkhoff–Gustavson–Normalform | 31 |
| 4.2 | Die Normalform der Wirkungsfunktion | 37 |
| 4.3 | Generische Bifurkationen | 37 |
| 4.4 | Folgen von Bifurkationen | 40 |
| 5 | Gleichmäßige Näherung | 48 |
| 5.1 | Herleitung der gleichmäßigen Näherung | 48 |
| 5.2 | Die lokale Näherung | 55 |
| 5.3 | Die gleichmäßige Näherung | 58 |
| 6 | Einfluß von Geisterbahnen | 66 |
| 6.1 | Auftreten von Geisterbahnen in der Spurformel | 66 |
| 6.2 | Analyse eines Quantenspektrums | 68 |
| 7 | Zusammenfassung und Ausblick | 71 |
| A | Semiparabolische Koordinaten | 72 |
| B | Komplexe Wurzeln | 74 |

| | |
|------------------------------------------------|-----------|
| C Das Beugungsintegral | 75 |
| C.1 Ausführung der Winkelintegration | 75 |
| C.2 Numerische Auswertung | 75 |
| Literaturverzeichnis | 77 |
| Danksagung | 82 |

Verzeichnis der Abbildungen

| | | |
|-----|----------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.1 | Definition der Poincaré–Abbildung. | 7 |
| 2.2 | Hyperbolischer und elliptischer Fixpunkt. | 8 |
| 3.1 | Die Ballon–Bahn in semiparabolischen und zylindrischen Ko- ordinaten. | 23 |
| 3.2 | Spur der Monodromiematrix der Ballon–Bahn. | 23 |
| 3.3 | Reelle Satellitenbahnen. | 24 |
| 3.4 | Verlauf der Geisterbahnen bei $\tilde{E} = -0.343 > \tilde{E}'_c$ | 25 |
| 3.5 | Verlauf der Geisterbahnen bei $\tilde{E} = -0.344 < \tilde{E}'_c$ | 26 |
| 3.6 | Wirkungsdifferenzen der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. | 28 |
| 3.7 | Periodendauern der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. | 29 |
| 3.8 | $\text{Tr } M - 2$ der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. | 30 |
| 4.1 | Island–Chain–Bifurkation. | 39 |
| 4.2 | Touch–And–Go–Bifurkation. | 40 |
| 4.3 | Bifurkationsschema der Bahnen mit festen σ | 43 |
| 4.4 | Bifurkationsszenarien der Normalform 3. Ordnung. | 44 |
| 4.5 | Bifurkationsszenario der modifizierten Normalform. | 46 |
| 5.1 | Wirkungsdifferenzen der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. | 56 |
| 5.2 | $\text{Tr } M - 2$ der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. | 57 |
| 5.3 | Lokale Näherung der Zustandsdichte. | 59 |
| 5.4 | Numerisch bestimmte Parameter der Normalform. | 64 |
| 5.5 | Gleichmäßige Näherung der Zustandsdichte. | 65 |
| 6.1 | Frequenzen im Quantenspektrum. | 69 |
| A.1 | Koordinatenlinien für semiparabolische Koordinaten. | 73 |

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation und Problemstellung

Als in den ersten Jahrzehnten dieses Jahrhunderts die Quantentheorie entwickelt wurde, gingen die ersten Quantisierungsvorschriften von einer klassischen Beschreibung der mechanischen Systeme aus. Die von Bohr und Sommerfeld vorgeschlagene Quantisierung der Wirkungsvariablen wurde 1917 von Einstein ([Ein17]) in größtmöglicher Allgemeinheit angegeben¹. Gleichzeitig wies Einstein auch schon darauf hin, daß das Verfahren eine Blätterung des Phasenraumes in invariante Tori bzw. die Existenz hinreichend vieler Konstanten der Bewegung voraussetzt und daß die meisten mechanischen Systeme diese Bedingung nicht erfüllen.

Nach der Entwicklung der Quantenmechanik durch Schrödinger, Heisenberg und andere standen dann Verfahren zur Verfügung, die das Verhalten atomarer Systeme mit hoher Präzision zu beschreiben gestatteten und die von der klassischen Mechanik unabhängig waren. Die von Einstein aufgeworfene Frage nach Quantisierungsvorschriften für klassisch chaotische Systeme blieb daher offen.

Sie wurde erst fünfzig Jahre später von Gutzwiller wieder aufgegriffen, der, ausgehend vom Feynmanschen Pfadintegralformalismus, einen semiklassischen Ausdruck für die Greensche Funktion eines quantenmechanischen Systems ableitete und mit dessen Hilfe die quantenmechanische Zustandsdichte als unendliche Summe über die periodischen Bahnen des klassischen Systems darstellte. Diese *Gutzwillersche Spurformel* ist der einzige bekannte allgemeine Ansatz, die Eigenenergien eines Quantensystems semiklassisch zu bestimmen. Da sie klassische Bahnen verwendet, erlaubt sie einen tieferen Einblick in die Dynamik eines Systems, als eine quantenmechanische Bestimmung der Energieeigenwerte es könnte.

Die Herleitung der Spurformel setzt voraus, daß alle periodischen Bah-

¹abgesehen von einer Phasenkorrektur, die Keller ([Kel58]) auf Grundlage der voll entwickelten Quantenmechanik 1958 anbrachte

nen im Phasenraum isoliert liegen. Daher ist sie am besten zur Beschreibung vollständig hyperbolischer Systeme geeignet. In solchen Fällen gestattet sie die Bestimmung einzelner Energieniveaus, wie es z.B. von Gutzwiller ([Gut82]) für das anisotrope Keplerproblem durchgeführt wurde.

In Systemen mit gemischt regulär-chaotischer Dynamik versagt die Gutzwillersche Spurformel, wenn Bifurkationen der periodischen Bahnen auftreten; die Beiträge der an der Bifurkation beteiligten Bahnen divergieren dort. Dies ist darin begründet, daß die Bahnen in der Nähe der Bifurkation nicht mehr als voneinander isoliert betrachtet werden können. Daher haben Ozorio de Almeida und Hannay ([Alm87]) einen kollektiven Beitrag aller an der Bifurkation beteiligten Bahnen zur Zustandsdichte berechnet. Die von ihnen vorgeschlagene Formel liefert an der Stelle der Bifurkation endliche Werte, geht aber in großer Entfernung von der Bifurkation nicht in die Gutzwillersche Spurformel über.

Sieber und Schomerus haben deshalb die Näherung von Ozorio de Almeida und Hannay weiter verbessert und für alle elementaren Bifurkationstypen, die in Hamiltonschen Systemen mit zwei Freiheitsgraden generisch auftreten, eine gleichmäßige Näherung für die Zustandsdichte angegeben, die asymptotisch mit der Gutzwillerschen Formel übereinstimmt ([Sie96], [Sch97a], [Sie98]). Auch diese Arbeiten sind jedoch in zweierlei Hinsicht ergänzungsbedürftig:

- Periodische Bahnen durchlaufen i.a. mehrere Bifurkationen nacheinander. Wenn der Abstand zwischen den Bifurkationen klein ist, muß man eine gleichmäßige Näherung konstruieren, die alle an den verschiedenen Bifurkationen beteiligten Bahnen kollektiv berücksichtigt. Auf diesen Umstand wiesen Schomerus und Haake ([Sch97b], [Sch97c]) sowie Main und Wunner ([Mai97a], [Mai98a]) hin.
- In Bifurkationen können periodische Bahnen entstehen oder verschwinden. Läßt man für Koordinaten und Impulse des klassischen Systems statt reeller auch komplexe Werte zu, so stellt man jedoch fest, daß reelle periodische Bahnen vor ihrem Entstehen Vorläufer im komplexifizierten Phasenraum besitzen. Wie Kuś, Haake und Delande ([Kuś93]), Main und Wunner ([Mai97a], [Mai98a]) und Schomerus ([Sch97d]) zeigen konnten, kann man die Genauigkeit der Gutzwillerschen Spurformel in vielen Fällen wesentlich verbessern, wenn man Beiträge einiger dieser komplexen Bahnen berücksichtigt.

In dieser Arbeit werden wir ein kompliziertes Bifurkationsszenario behandeln, an dem verschiedene reelle und komplexe Bahnen beteiligt sind. Als Beispielsystem dient dabei das Wasserstoffatom im homogenen Magnetfeld. Dieses System hat für die Untersuchung von Effekten des Quantenchaos große Bedeutung gewonnen, da es als einfaches physikalisches System sowohl experimentellen als auch theoretischen Untersuchungen zugänglich ist. Es

zeigt einen Übergang von regulärer zu chaotischer Dynamik ([Has89]) und ist daher ein geeignetes Objekt, um die oben umrissenen Probleme gemischt regulär-chaotischer Dynamik zu studieren.

Wir untersuchen die Periodenvervierfachung der sogenannten *Ballon-Bahn*. Obwohl diese Bahn eine der kürzesten periodischen Bahnen im diamagnetischen Keplerproblem ist und die Periodenvervierfachung die einfachste Bifurkation bildet, bei der sich ein Verschwinden zweier reeller Satellitenbahnen beobachten läßt, kann man diesen Fall mit den von Sieber und Schomerus angegebenen gleichmäßigen Näherungen schon nicht mehr behandeln, da in unmittelbarer Nähe eine zweite Bifurkation auftritt. An dieser zweiten Bifurkation sind keine reellen, sondern ausschließlich komplexe Bahnen beteiligt. Ein solcher Fall ist in der Literatur bisher nicht beschrieben worden, es zeigt sich jedoch, daß diese „Geisterbifurkation“ in die Betrachtung einbezogen werden muß, damit die Konstruktion der gleichmäßigen Näherung gelingt. Darüber hinaus werden wir Gründe anführen, die erwarten lassen, daß man mit dem Einfluß solcher rein komplexen Bifurkationen auf gleichmäßige Näherungen auch in anderen Systemen in vielen Fällen zu rechnen hat.

Ein wesentlicher Schritt in dem von Main und Wunner ([Mai97a]) sowie Sieber und Schomerus ([Sie98]) entwickelten katastrophentheoretischen Verfahren zur Konstruktion gleichmäßiger Näherungen ist die Wahl einer geeigneten Ansatzfunktion für das Beugungsintegral. In den bisherigen Arbeiten von Main und Wunner konnte jeweils eine der als „elementare Katastrophen“ bekannten einfachen Funktionen verwendet werden, in unserem Fall ist dies jedoch nicht möglich. Wir verwenden eine als *Normalformtheorie* bezeichnete Technik, um eine Ansatzfunktion für das behandelte Beispiel zu konstruieren. Dabei müssen wir im Vergleich zu den Arbeiten von Sieber und Schomerus eine höhere Ordnung der Normalformentwicklung berücksichtigen, um die Abfolge der beiden Bifurkationen beschreiben zu können.

Durch Anpassung weniger freier Parameter der Normalform an numerisch ermittelte klassische Daten der beteiligten periodischen Bahnen erhalten wir eine Beschreibung der Struktur des Phasenraumes in der Nähe der betrachteten Bifurkationen. Wir sehen die Parameter zunächst als Konstanten an und bestimmen sie so, daß die Normalform das Verhalten der Bahn Daten global möglichst gut reproduziert. Dies liefert eine *lokale Näherung* für die Zustandsdichte, die am Ort der Bifurkationen endlich ist, asymptotisch aber nicht in die Gutzwillersche Spurformel übergeht. Um dieses Verhalten zu verbessern, machen wir die Parameter der Normalform dann energieabhängig und gewinnen so eine *gleichmäßige Näherung* für die Zustandsdichte, die die Gutzwillersche Spurformel in einiger Entfernung von den Bifurkationen exakt reproduziert.

Schließlich untersuchen wir anhand eines quantenmechanischen Spektrums die Frage, ob in einiger Entfernung von den Bifurkationen auch eine der in der Geisterbifurkation entstandenen komplexen Bahnen einen Beitrag

zum Spektrum leistet.

1.2 Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit hat folgenden Aufbau:

- Das 2. Kapitel stellt einige Tatsachen der klassischen Mechanik zusammen und führt in die Gutzwillersche Theorie ein, die die Grundlage der Arbeit bildet.
- Das 3. Kapitel ist dem Beispielsystem gewidmet: Es erläutert die Hamiltonfunktion für das Wasserstoffatom im homogenen Magnetfeld und beschreibt die zu untersuchende Folge von Bifurkationen.
- Im 4. Kapitel behandeln wir die Normalformtheorie, die eine analytische Beschreibung von Bifurkationen ermöglicht, und entwickeln die Normalform für die hier vorliegende Bifurkation.
- Im 5. Kapitel wird die gleichmäßige Näherung für die Zustandsdichte hergeleitet und für das behandelte Beispiel ausgewertet.
- Im 6. Kapitel analysieren wir ein quantenmechanisch berechnetes Spektrum, um festzustellen, welche der beobachteten komplexen Bahnen in der Gutzwillerschen Spurformel zu berücksichtigen sind.
- Das 7. Kapitel faßt die Ergebnisse zusammen und weist auf noch offene Fragen hin.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Hamiltonsche Mechanik

In diesem Abschnitt stellen wir für den späteren Gebrauch einige Grundlagen der Hamiltonschen Mechanik zusammen. Einzelheiten finden sich in dem Lehrbuch von Goldstein ([Gol76]).

In der Hamiltonschen Formulierung der klassischen Mechanik wird der Zustand eines Systems mit n Freiheitsgraden charakterisiert durch n Koordinaten \vec{q} und n Impulse \vec{p} . Die Dynamik des Systems wird beschrieben durch die Hamiltonfunktion $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$, die im allgemeinen von Koordinaten, Impulsen und der Zeit t abhängt.

Die bei gegebenen Anfangsbedingungen $(\vec{q}(t_1), \vec{p}(t_1))$ durchlaufene Phasenraumbahn $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ ist bestimmt durch ein Variationsprinzip, das sogenannte *Hamiltonsche Prinzip*

$$\delta \int_{(\vec{q}(t_1), t_1)}^{(\vec{q}(t_2), t_2)} \vec{p} \cdot d\vec{q} - H dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (\vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - H) dt = 0. \quad (2.1)$$

Dabei sind die Zeiten t_1 und t_2 sowie Anfangs- und Endort $\vec{q}(t_1)$ und $\vec{q}(t_2)$ vorgegeben, und Koordinaten und Impulse sind unabhängig voneinander zu variieren.

Aus dem Hamiltonschen Prinzip folgen die *Hamiltonschen Bewegungsgleichungen*

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}. \quad (2.2)$$

Geht man zu neuen Koordinaten und Impulsen \hat{q}, \hat{p} , einem neuen „Zeit“-Parameter \hat{t} und einer neuen Hamiltonfunktion \hat{H} über, dann folgt aus dem Hamiltonschen Prinzip, daß auch für die neuen Größen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (2.2) gelten, wenn die 1-Form $\vec{p} \cdot d\vec{q} - H dt$ sich nur um ein totales Differential $d\mathcal{F}$ ändert, das die Variation des Integrals nicht beeinflußt, oder mit einer Konstanten multipliziert wird.

Im ersten Fall, der von Goldstein als verallgemeinerte kanonische Transformation bezeichnet wird, heißt die Funktion \mathcal{F} mit

$$d\mathcal{F} = \hat{\vec{p}} \cdot d\hat{\vec{q}} - \hat{H} d\hat{t} - (\vec{p} \cdot d\vec{q} - H dt) \quad (2.3)$$

die *erzeugende Funktion* der Transformation¹.

Die Funktion \mathcal{F} läßt sich in Abhängigkeit von verschiedenen Koordinatensätzen darstellen. Drücken wir $\mathcal{F} = \mathcal{F}_1(\vec{q}, \hat{\vec{q}}, t)$ durch alte und neue Koordinaten und den alten Zeitparameter aus, so sprechen wir von einer Erzeugenden vom Typ \mathcal{F}_1 . Aus der erzeugenden Funktion folgen die Transformationsgleichungen zu

$$\begin{aligned} \hat{\vec{p}} &= \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \hat{\vec{q}}}, & \vec{p} &= -\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \vec{q}}, \\ \hat{H} &= \frac{dt}{d\hat{t}} \left(H - \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial t} \right) & & \\ &= H - \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial t} & \text{falls } \hat{t} = t. & \end{aligned} \quad (2.4)$$

Diese Darstellung ist jedoch nicht für alle Transformationen verwendbar. Insbesondere besitzt die identische Transformation keine Erzeugende vom Typ \mathcal{F}_1 , da in diesem Fall \vec{q} und $\hat{\vec{q}} = \vec{q}$ kein System von $2n$ unabhängigen Phasenraumkoordinaten bilden. Wir können aber durch eine Legendretransformation bezüglich $\hat{\vec{q}}$ zu einer Erzeugenden

$$\mathcal{F}_2(\vec{q}, \hat{\vec{p}}, t) = \mathcal{F}_1 - \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{q}}$$

übergehen. Mit dieser Form der erzeugenden Funktion lauten die Transformationsgleichungen

$$\begin{aligned} \hat{\vec{q}} &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \hat{\vec{p}}}, & \vec{p} &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \vec{q}}, \\ \hat{H} &= \frac{dt}{d\hat{t}} \left(H - \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t} \right) & & \\ &= H - \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t} & \text{falls } \hat{t} = t. & \end{aligned} \quad (2.5)$$

Insbesondere wird die identische Transformation erzeugt durch die Funktion

$$\mathcal{F}_2 = -\hat{\vec{p}} \cdot \vec{q} \quad (2.6)$$

Von großer Bedeutung in semiklassischen Theorien ist die Wirkungsfunktion

$$S(\vec{q}' \vec{q}, E) = \int_{\vec{q}}^{\vec{q}'} \vec{p} \cdot d\vec{q}. \quad (2.7)$$

¹Diese Definition der erzeugenden Funktion unterscheidet sich von der von Goldstein benutzten durch ihr Vorzeichen.

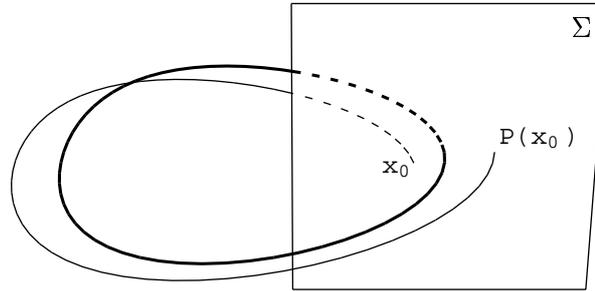


Abbildung 2.1: Definition der Poincaré-Abbildung. Die periodische Bahn (fett) entspricht einem Fixpunkt der Abbildung!

Das Integral ist hier über eine klassische Bahn von \vec{q} nach \vec{q}' mit der Energie E zu berechnen.

Für die Wirkungsfunktion gilt nach ihrer Definition

$$\vec{p}' = \frac{\partial S}{\partial \vec{q}'}, \quad \vec{p} = -\frac{\partial S}{\partial \vec{q}}. \quad (2.8)$$

Ein Vergleich mit (2.4) zeigt, daß wir S als erzeugende Funktion vom Typ \mathcal{F}_1 für eine kanonische Transformation vom Anfangszustand (\vec{q}, \vec{p}) in den Endzustand (\vec{q}', \vec{p}') auffassen können. Entsprechend können wir ihre Legendre-Transformierte

$$\hat{S}(\vec{p}', \vec{q}, E) = S - \vec{p}' \cdot \vec{q}' \quad (2.9)$$

als Erzeugende vom Typ \mathcal{F}_2 ansehen.

2.2 Poincaré-Schnitte und periodische Bahnen

In der Gutzwillerschen Theorie der Zustandsdichte spielen periodische Bahnen klassischer mechanischer Systeme die entscheidende Rolle. Daher werden wir uns in diesem Abschnitt mit der Beschreibung periodischer Bahnen in Hamiltonschen Systemen mit zwei Freiheitsgraden befassen.

Dazu legen wir eine Ebene Σ im Phasenraum fest, die ganz in einer Energiefläche liegt und in der wir kanonische Koordinaten (y, p_y) einführen können. Sie wird als *Poincarésche Schnittebene* bezeichnet. Von jedem Punkt $x_0 \in \Sigma$ geht eine Bahn des mechanischen Systems aus, die die Ebene Σ im allgemeinen in einem Punkt $P(x_0)$ wieder schneidet. Durch diese Vorschrift ist die *Poincaré-Abbildung* P der Schnittebene Σ in sich definiert (siehe Abb. 2.1).

Jeder Startpunkt $x_0 \in \Sigma$ definiert nun eine Folge $(x_0, x_1 = P(x_0), x_2 = P(x_1), \dots)$. Wenn durch x_0 eine periodische Bahn verläuft, dann kann sie die Ebene Σ nur in endlich vielen Punkten schneiden, bevor sie sich wiederholt. Es gibt also ein n mit $x_n = x_0$. Statt P betrachten wir nun die n -te

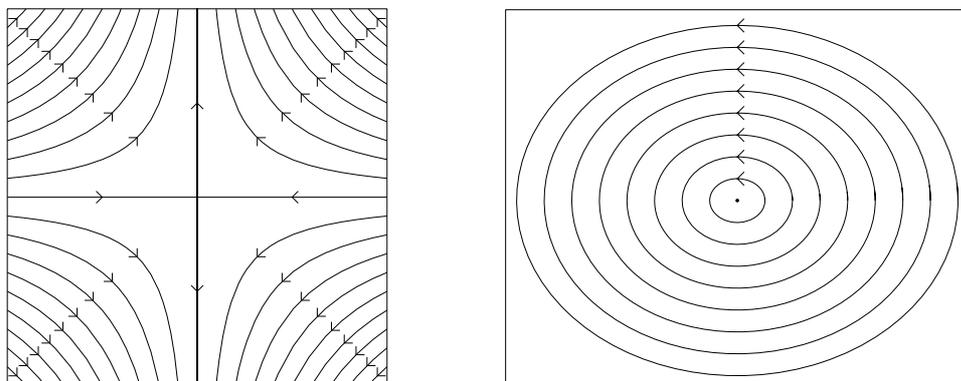


Abbildung 2.2: Hyperbolischer (links) und elliptischer (rechts) Fixpunkt.

Potenz von P ; damit können wir annehmen, daß x_0 Fixpunkt der Poincaré–Abbildung ist: $x_0 = P(x_0)$.

Wir wählen unser Koordinatensystem jetzt so, daß $x_0 = 0$ ist; die periodische Bahn soll die Schnittebene also im Ursprung schneiden. In der Nähe des Ursprungs können wir die Poincaré–Abbildung dann linear approximieren:

$$\begin{pmatrix} y' \\ p'_y \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} y \\ p_y \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} y \\ p_y \end{pmatrix} + \mathcal{O}((y + p_y)^2) . \quad (2.10)$$

Die 2×2 –Matix M heißt die *Monodromiematrix* der periodischen Bahn.

Als Folgerung aus dem Liouvilleschen Satz über die Erhaltung des Phasenvolumens ergibt sich, daß die Poincaré–Abbildung P flächentreu ist. Die Matrix M ist demnach *symplektisch* (vgl. [Arn88a, Abschnitt 8.6]); das bedeutet insbesondere, daß der Kehrwert und das konjugiert Komplexe eines Eigenwertes wieder Eigenwerte sind. In höherdimensionalen Systemen treten Eigenwerte der Monodromiematrix daher im allgemeinen in Vierergruppen $\lambda, \lambda^*, 1/\lambda, 1/\lambda^*$ auf. In unserem Fall hat M jedoch nur zwei Eigenwerte. Diese müssen daher entweder reell und Kehrwerte voneinander sein, oder sie liegen auf dem Einheitskreis und sind zueinander konjugiert komplex.

- Im ersten Fall sind die Eigenvektoren der Monodromiematrix reell. Einer der Eigenwerte ist dem Betrag nach größer als 1, Punkte des entsprechenden Eigenraumes entfernen sich durch die Poincaré–Abbildung von Ursprung (instabile Richtung), während Punkte des anderen Eigenraumes sich an den Ursprung annähern (stabile Richtung). Ein Phasenportrait der Poincaré–Abbildung sieht in der Nähe des Ursprungs aus wie Abb. 2.2 (links), man spricht deshalb von einem *hyperbolischen Fixpunkt*, wenn die Eigenwerte positiv sind, und von einem *invers hyperbolischen Fixpunkt*, wenn sie negativ sind. Dem Phasenportrait kann man entnehmen, daß sich die meisten Bahnen, die in

der Nähe der periodischen Bahn starten, mit der Zeit in die instabile Richtung von ihr entfernen; die periodische Bahn ist also instabil.

Man kann die Eigenwerte durch eine positive reelle Zahl u ausdrücken als $\lambda_{1,2} = e^{\pm u}$ im Falle eines hyperbolischen Fixpunktes und als $\lambda_{1,2} = -e^{\pm u}$ im Falle eines invers hyperbolischen Fixpunktes. Der Wert $L = u/T$ heißt dann der *Liapunov-Exponent* der instabilen periodischen Bahn.

- Im zweiten Fall sind die Eigenwerte gegeben durch $\lambda_{1,2} = e^{\pm i\varphi}$ mit einem reellen Winkel φ . Die Monodromiematrix beschreibt eine Drehung um den Ursprung um den Winkel φ ; wie man dem Phasenportrait Abb. 2.2 (rechts) entnimmt, ist die periodische Bahn in diesem Fall stabil.

Um die Stabilitätseigenschaften der periodischen Bahn in allen Fällen einheitlich zu beschreiben, kann man die Spur der Monodromiematrix

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr} M &= \lambda_1 + \lambda_2 \\ &= \begin{cases} 2 \cosh u & \text{für einen hyperbolischen Fixpunkt} \\ -2 \cosh u & \text{für einen invers hyperbolischen Fixpunkt} \\ 2 \cos \varphi & \text{für einen elliptischen Fixpunkt} \end{cases} \quad (2.11) \end{aligned}$$

verwenden. Wie man diesen Ausdrücken entnimmt, ist $|\operatorname{Tr} M| < 2$ genau dann, wenn die Bahn stabil ist.

Wie in der Bifurkationstheorie gezeigt wird², können stabile periodische Bahnen bei einer Variation der Energie mit anderen periodischen Bahnen kollidieren, die dabei entstehen oder verschwinden. Genauer tritt eine Kollision mit Bahnen der m -fachen Periode bei solchen Energien ein, bei denen der Stabilitätswinkel $\varphi = 2\pi \frac{n}{m}$ ein rationales Vielfaches von 2π mit teilerfremden natürlichen Zahlen n und m ist. Man spricht dann von einer *Periodenver- m -fachung*.

Diese Bedingung an den Winkel φ läßt sich mit Hilfe von (2.11) umformulieren als eine Bedingung an die Spur: Eine Periodenver- m -fachung tritt ein, wenn

$$\operatorname{Tr} M = \begin{cases} 2 & : m = 1 \\ -2 & : m = 2 \\ -1 & : m = 3 \\ 0 & : m = 4 \\ \dots & \end{cases} \quad (2.12)$$

²vgl. dazu [May70] oder [Mao92]; ein Beispiel werden wir in Kapitel 4 untersuchen

Schließlich wollen wir für den späteren Gebrauch noch berechnen, wie sich die Monodromiematrix M durch die erzeugende Funktion $\hat{S}(y, p'_y)$ der Poincaré–Abbildung ausdrücken läßt:

Unter Verwendung vektorwertiger Differentiale kann man die Definition von M schreiben als

$$d \begin{pmatrix} y' \\ p'_y \end{pmatrix} = M \cdot d \begin{pmatrix} y \\ p_y \end{pmatrix} .$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} d \begin{pmatrix} y' \\ p'_y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial y'}{\partial y} \right|_{p'_y} & \left. \frac{\partial y'}{\partial p'_y} \right|_y \\ \left. \frac{\partial p'_y}{\partial y} \right|_{p'_y} & \left. \frac{\partial p'_y}{\partial p'_y} \right|_y \end{pmatrix} \cdot d \begin{pmatrix} y \\ p'_y \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} & -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'^2_y} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot d \begin{pmatrix} y \\ p'_y \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.13)$$

und entsprechend

$$d \begin{pmatrix} y \\ p_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} & -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \end{pmatrix} \cdot d \begin{pmatrix} y \\ p'_y \end{pmatrix} . \quad (2.14)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} M &= \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} & -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'^2_y} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} & -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} + \left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'^2_y} & \left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'^2_y} \\ -\left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} & -\left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right)^{-1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.15)$$

und insbesondere

$$\text{Tr } M = -\left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right)^{-1} \left\{ 1 + \left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right)^2 - \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'^2_y} \right\} . \quad (2.16)$$

2.3 Die Gutzwillersche Spurformel

Die Gutzwillersche Spurformel bietet eine Möglichkeit, für klassisch chaotische Systeme die quantenmechanische Zustandsdichte

$$d(E) = \sum_j \delta(E - E_j) , \quad (2.17)$$

wobei die E_j die Eigenenergien des Systems sind, näherungsweise semiklassisch zu bestimmen. Sie wurde in den sechziger Jahren von Martin Gutzwiller entwickelt (siehe dazu [Gut67]–[Gut71], insbesondere die letzte dieser Arbeiten, und [Gut90]).

Um einen quantenmechanischen Ausdruck für die Zustandsdichte eines nicht explizit zeitabhängigen Systems zu gewinnen, gehen wir aus von dem zeitabhängigen Propagator $K(\vec{x}'t', \vec{x}t)$ des Systems, der definiert ist als die Lösung der Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta'K + V(\vec{x}')K = i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}K \quad (2.18)$$

mit der Anfangsbedingung

$$K(\vec{x}', t' = t, \vec{x}, t) = \delta(\vec{x}' - \vec{x}). \quad (2.19)$$

Der Propagator beschreibt also die zeitliche Entwicklung eines Teilchens, das zur Zeit t am Ort \vec{x} startet. Durch ein vollständiges Orthonormalsystem (ψ_j) von Eigenfunktionen des Hamiltonoperators \hat{H} , also

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_j &= E_j\psi_j, \\ \int d^n x \psi_{j'}^* \psi_j &= \delta_{jj'}, \\ \sum_j \psi_j(\vec{x}')\psi_j^*(\vec{x}) &= \delta(\vec{x}' - \vec{x}), \end{aligned}$$

läßt er sich darstellen als

$$K(\vec{x}'t', \vec{x}t) = \sum_j \psi_j(\vec{x}')\psi_j^*(\vec{x}) \exp\left\{-i\frac{E_j t'}{\hbar}\right\}. \quad (2.20)$$

Durch eine Fouriertransformation kann man zu einer energieabhängigen Darstellung übergehen und erhält die *Greensche Funktion*

$$\begin{aligned} G(\vec{x}'\vec{x}, E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt K(\vec{x}'t, \vec{x}0) \exp\left\{i\frac{Et}{\hbar}\right\} \\ &= \sum_j \frac{\psi_j(\vec{x}')\psi_j^*(\vec{x})}{E - E_j}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Die Greensche Funktion hat Polstellen bei den Energieeigenwerten des Systems, über deren Interpretation je nach den gewünschten Randbedingungen zu entscheiden ist. Wir arbeiten gemäß (2.21) mit einer retardierten Greenschen Funktion und haben deshalb zu setzen

$$\frac{1}{E - E_j} := \frac{1}{E - E_j + i0} = \mathcal{P}\frac{1}{E - E_j} - i\pi\delta(E - E_j).$$

Damit folgt

$$\Im G(\vec{x}'\vec{x}, E) = -\pi \sum_j \psi_j(\vec{x}') \psi_j^*(\vec{x}) \delta(E - E_j),$$

und wenn wir die Spur der Greenschen Funktion

$$\text{Tr } G := \int d^n x G(\vec{x}\vec{x}, E)$$

bilden, erhalten wir für die Zustandsdichte

$$d(E) = \sum_j \delta(E - E_j) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr } G. \quad (2.22)$$

Grundlage der semiklassischen Näherung ist ein Verfahren, das es ermöglicht, Integrale der Form

$$\mathcal{I} = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x f(x) \exp \left\{ i \frac{S(x)}{\hbar} \right\} \quad (2.23)$$

für kleine \hbar näherungsweise auszuwerten, die *Methode der stationären Phase*.

Der Exponentialfaktor im Integranden wird für kleine \hbar sehr schnell oszillieren, während wir die Amplitudenfunktion f als vergleichsweise langsam veränderlich voraussetzen. Wenn \hbar so klein wird, daß wir f über eine Periode der Exponentialfunktion als konstant ansehen können, dann können wir f vor das Integral ziehen, und das Integral der Exponentialfunktion über eine Periode liefert Null.

Wir erwarten nennenswerte Beiträge zum Integral daher nur von Umgebungen derjenigen Punkte, in denen die Phase S in erster Näherung konstant ist, also von den *stationären Punkten* x_0 mit

$$\nabla S|_{x_0} = 0.$$

Wir entwickeln die Phase um die stationären Punkte in eine Taylorreihe zweiter Ordnung

$$S(x) \approx S(x_0) + \frac{1}{2} \delta x \cdot H(x_0) \cdot \delta x$$

mit $\delta x = x - x_0$ und der Hesseschen Matrix $H(x_0) = \left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_{x=x_0}$. Damit erhalten wir

$$\mathcal{I} \approx \sum_{\nabla S|_{x_0}=0} f(x_0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(x_0) \right\} \int d^n \delta x \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \delta x \cdot H(x_0) \cdot \delta x \right\}. \quad (2.24)$$

Dabei konnten wir das Integrationsgebiet wieder auf ganz \mathbb{R}^n ausdehnen, da die quadratische Funktion in der Phase außer x_0 keine stationären Punkte besitzt.

Das verbleibende Integral ist für $n = 1$ ein Fresnel-Integral

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp \left\{ \frac{i\lambda}{2\hbar} \xi^2 \right\} &:= \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \int_{-\Xi}^{+\Xi} d\xi \exp \left\{ \frac{i\lambda}{2\hbar} \xi^2 \right\} \\ &= \frac{(2\pi i\hbar)^{1/2}}{\sqrt{|\lambda|}} \underbrace{\exp \left\{ i\frac{\pi}{4} (\text{sign } \lambda - 1) \right\}}_{= \begin{cases} 1 & : \lambda > 0 \\ \exp \left\{ -i\frac{\pi}{2} \right\} & : \lambda < 0 \end{cases}} . \end{aligned}$$

Für $n > 1$ können wir ausnutzen, daß die Matrix $H(x_0)$ symmetrisch und reell ist und sich daher durch eine orthogonale Koordinatentransformation diagonalisieren läßt. Führen wir diese Transformation durch, so zerfällt das Integral in (2.24) in ein Produkt von n eindimensionalen Fresnel-Integralen, in denen der Parameter λ Eigenwert von $H(x_0)$ ist. Berücksichtigen wir weiter, daß das Produkt der Eigenwerte einer diagonalisierbaren Matrix gleich ihrer Determinante ist, erhalten wir als Stationäre-Phase-Näherung

$$\mathcal{I} \approx \sum_{\nabla S|_{x_0=0}} f(x_0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(x_0) \right\} \frac{(2\pi i\hbar)^{n/2}}{|\det H(x_0)|^{1/2}} \exp \left\{ -i\frac{\pi}{2} k(x_0) \right\}, \quad (2.25)$$

wobei $k(x_0)$ die Anzahl der negativen Eigenwerte von $H(x_0)$ ist.

Von den gemachten Näherungen können wir intuitiv erwarten, daß sie um so besser sind, je kleiner \hbar ist; und tatsächlich läßt sich zeigen ([Sir71]), daß die Methode der stationären Phase den führenden Term einer asymptotischen Entwicklung in \hbar liefert, d.h. daß der Fehler der Näherung im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ um $\mathcal{O}(\hbar)$ kleiner ist als der Näherungswert.

Wir benutzen nun die Feynmansche Pfadintegraldarstellung des Propagators ([Fey48])

$$K(\vec{x}'t', \vec{x}t) = \int \mathcal{D}(\vec{x}(t)) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt L(\vec{x}(t), \dot{\vec{x}}(t), t) \right\} \quad (2.26)$$

mit der klassischen Lagrangefunktion L .

Die Phase der Exponentialfunktion ist gegeben durch das Integral

$$R(\vec{x}'t', \vec{x}t) := \int_t^{t'} dt L(\vec{x}(t), \dot{\vec{x}}(t), t)$$

Übertragen wir nun im semiklassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ die Methode der stationären Phase formal auf das Pfadintegral, so erhalten wir die Stationaritätsbedingung

$$\delta \int_t^{t'} dt L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = 0,$$

die nach dem Hamiltonschen Prinzip (in Lagrange-Formulierung) gerade die klassischen Bahnen des Systems kennzeichnet.

Der semiklassische Propagator ist also gegeben durch die *Van-Vleck-Formel* ([VV128])

$$K_{skl}(\vec{x}'t', \vec{x}t) = (2\pi i\hbar)^{-n/2} \sum_{\text{klass. Traj.}} \sqrt{|C|} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} R(\vec{x}'t', \vec{x}t) - i\frac{\pi}{2}\kappa \right\}. \quad (2.27)$$

Dabei ist die Summe zu erstrecken über alle klassischen Trajektorien von $(\vec{x}t)$ nach $(\vec{x}'t')$,

$$\begin{aligned} C &= \det \frac{\partial^2 R}{\partial \vec{x}' \partial \vec{x}} \\ &= \det \left(-\frac{\partial \vec{p}}{\partial \vec{x}'} \right) \quad \text{mit } \vec{p} = -\frac{\partial R}{\partial \vec{x}} \text{ Anfangsimpuls} \\ &= \frac{1}{\det \left(-\frac{\partial \vec{x}'}{\partial \vec{p}} \right)} \end{aligned}$$

ist ein Maß für die Teilchendichte, die sich zur Zeit t' am Endort \vec{x}' ergibt, wenn ein Ensemble klassischer Teilchen zur Zeit t am festgelegten Ort \vec{x} , aber mit gemäß der Unschärferelation völlig unbestimmtem Impuls startet. Wie zu erwarten, ist die Amplitude der Wellenfunktion der Wurzel aus der Teilchendichte proportional.

κ ist schließlich die Zahl der negativen Eigenwerte der zweiten Variation von R nach $\vec{x}(t)$. Nach einem Satz von Morse ist dies gleich der Zahl von Punkten auf der klassischen Bahn, in denen die Bahn eine Kaustik berührt, also $C = \infty$ ist.

Durch eine Fouriertransformation analog zu (2.21) erhalten wir nun die semiklassische Greensche Funktion

$$G_{skl}(\vec{x}'\vec{x}, E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt K_{skl}(\vec{x}'t, \vec{x}0) \exp \left\{ i\frac{Et}{\hbar} \right\}, \quad (2.28)$$

wobei das Integral in Stationäre-Phase-Näherung auszuführen ist. Setzen wir den semiklassischen Propagator (2.27) hier ein, so lautet die Phase im Integranden $R(\vec{x}'t, \vec{x}0) + Et$, die Stationaritätsbedingung ist also

$$E = -\frac{\partial R}{\partial t}.$$

Diese Bedingung wählt gerade diejenigen klassischen Trajektorien aus K_{skl} aus, deren Energie E ist.

Für G_{skl} erhalten wir also eine Summe über alle klassischen Bahnen von \vec{x} nach \vec{x}' , die in beliebiger Zeit, aber mit der Energie E durchlaufen werden:

$$G_{skl}(\vec{x}'\vec{x}, E) = \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{(n+1)/2}} \sum_{\text{klass. Traj.}} \sqrt{|D|} \exp \left\{ i \left(\frac{S}{\hbar} - \mu \frac{\pi}{2} \right) \right\}. \quad (2.29)$$

Dabei ist

$$S(\vec{x}'\vec{x}, E) = R(\vec{x}'t, \vec{x}0) + Et = \int \vec{p} \cdot d\vec{x}$$

die Wirkung entlang der Trajektorie,

$$\begin{aligned} D &= \frac{C}{\left. \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \right|_{\text{sP}}} \\ &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial \vec{x}' \partial \vec{x}} & \frac{\partial^2 S}{\partial \vec{x}' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial \vec{x}} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und

$$\mu = \begin{cases} \kappa & : \left. \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \right|_{\text{sP}} > 0 \\ \kappa + 1 & : \left. \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \right|_{\text{sP}} < 0 \end{cases}$$

sind die Teilchendichte und die Zahl der berührten Kaustiken, die sich analog zu C und κ ergeben, wenn man die Berechnung auf die Energiefläche einschränkt. Die Darstellung von D als $(n+1)$ -reihige Determinante ergibt sich, wenn man die auftretenden Ableitungen von R durch Ableitungen von S ausdrückt.

Zur Bestimmung der Zustandsdichte müssen wir nun die Spur der semiklassischen Greenschen Funktion bestimmen. Dazu bilden wir in G_{skl} den Grenzwert für $\vec{x}' \rightarrow \vec{x}$ und integrieren dann über \vec{x} . Wenn \vec{x}' sehr nahe bei \vec{x} liegt, ist immer ein direkter Weg klassisch möglich, außerdem gibt es in der Regel indirekte Wege, die die Umgebung des Startpunktes verlassen und dann wieder dorthin zurückkehren.

Da die Länge des direkten Weges im Grenzfall $\vec{x}' \rightarrow \vec{x}$ nicht groß ist gegen die de-Broglie-Wellenlänge des Teilchens, läßt dieser Beitrag sich nicht semiklassisch beschreiben. Man kann jedoch das Potential $V(\vec{x})$ in einem hinreichend kleinen Raumbereich als konstant ansehen und die Berechnung dieses Summanden damit auf die quantenmechanische Beschreibung der Bewegung eines freien Teilchens zurückführen. Damit kann man die Berechnung analytisch durchführen und erhält als Beitrag des direkten Weges zur Zustandsdichte

$$\begin{aligned} \bar{d}(E) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n x d^n p \delta \left(E - \frac{\vec{p}^2}{2m} - V(\vec{x}) \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \frac{d}{dE} \underbrace{\int d^n x d^n p \Theta \left(E - \frac{\vec{p}^2}{2m} - V(\vec{x}) \right)}_{\text{klassisch zugängliches Phasenvolumen}} \end{aligned} \quad (2.30)$$

mit der Heavysidefunktion Θ . Dieser Ausdruck ist als *Weylsche Zustandsdichte* bekannt und gibt das aus der statistischen Mechanik bekannte Ergebnis wieder, daß im Mittel ein Quantenzustand auf das Phasenvolumen $(2\pi\hbar)^n$ entfällt.

In die Weylsche Zustandsdichte gehen keine individuellen Eigenschaften der Dynamik eines konkreten Systems ein. Sie beschreibt daher ein für alle Systeme gültiges Verhalten der mittleren Zustandsdichte, während die übrigen Bahnen charakteristische Variationen der Zustandsdichte verursachen.

Die Beiträge der indirekten Wege sind nach (2.22) und (2.29) gegeben durch

$$d'(E) = -\frac{1}{\pi} \Im \int d^n x \sum \frac{2\pi}{(2\pi i \hbar)^{(n+1)/2}} \sqrt{|D|} \exp \left\{ i \frac{S(\vec{x}\vec{x}, E)}{\hbar} - i \frac{\pi}{2} \mu \right\} . \quad (2.31)$$

Dabei erstreckt sich die Summe über alle geschlossenen Wege von \vec{x} nach \vec{x} . Wir führen das Integral mit der Methode der stationären Phase aus. Die Stationaritätsbedingung lautet hier

$$0 = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} S(\vec{x}\vec{x}, E) = \left. \frac{\partial S}{\partial \vec{x}} \right|_{\vec{x}'=\vec{x}} + \left. \frac{\partial S}{\partial \vec{x}'} \right|_{\vec{x}'=\vec{x}} ,$$

also

$$\vec{p} = \vec{p}' .$$

Es tragen also diejenigen Wege zur Zustandsdichte bei, die nicht nur im Ortsraum geschlossen, sondern sogar periodisch sind.

Um den Beitrag einer periodischen Bahn genauer zu bestimmen, führen wir ein spezielles Koordinatensystem (x_1, \dots, x_n) ein, so daß x_1 entlang der Bahn läuft, x_2, \dots, x_n transversal dazu. Damit gilt auf der periodischen Bahn

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \dot{\vec{x}} = (\dot{x}_1, 0, 0, \dots) .$$

Mit dieser Beziehung folgt, wenn man die Hamilton–Jacobi–Gleichung

$$H \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{x}'}, \vec{x}' \right) = E$$

nach x_j ableitet,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x'_1} = 0 \quad \forall j = 1 \dots n .$$

Analog kann man zeigen

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 S}{\partial x_1 \partial x'_j} &= 0 \quad \forall j = 1 \dots n , \\ \frac{\partial^2 S}{\partial x'_1 \partial E} &= \frac{1}{\dot{x}_1} , \quad \frac{\partial^2 S}{\partial x_1 \partial E} = -\frac{1}{\dot{x}_1} . \end{aligned}$$

Damit gilt für die Amplitude D

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{\dot{x}'_1} \\ 0 & & & & & * \\ \vdots & \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x'_j} \right)_{i,j=2\dots n} & & & & \vdots \\ 0 & & & & & * \\ -\frac{1}{\dot{x}'_1} & * & * & \cdots & * & * \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

$$= \frac{1}{\dot{x}'_1 \dot{x}'_1} \widetilde{\det} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x'_j} \right).$$

Hier zeigt die Tilde an, daß i und j nur von 2 bis n laufen.

Die Wirkung $S(\vec{x}\vec{x}, E)$ hängt von x_1 nicht ab. Entwickelt man sie um einen Punkt \vec{x}_0 auf der periodischen Bahn, so erhält man

$$S(\vec{x}\vec{x}, E) = S(\vec{x}_0\vec{x}_0, E) + \frac{1}{2} \widetilde{\sum}_{ij} A_{ij} \delta x_i \delta x_j + \mathcal{O}(\delta x^3)$$

mit $\delta \vec{x} = \vec{x} - \vec{x}_0$ und

$$A_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial x'_i \partial x'_j} + 2 \frac{\partial^2 S}{\partial x'_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Setzt man dies in (2.31) ein, so lassen sich die Integrale über $\delta x_2 \dots \delta x_n$ als Fresnel-Integrale ausführen. Mit der Beziehung

$$\frac{\widetilde{\det} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x'_j} \right)}{\widetilde{\det} (A_{ij})} = \frac{1}{\det(M-1)},$$

die die auftretenden Amplituden mit der Monodromiematrix M der periodischen Bahn verknüpft und die man nachweisen kann, indem man die Einträge der Monodromiematrix wie in Kapitel 2.2 durch die zweiten Ableitungen von S ausdrückt, erhalten wir

$$d'(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \Re \sum_{\text{pB}} \oint dx_1 \frac{1}{\dot{x}'_1} \frac{1}{\sqrt{|\det(M-1)|}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\vec{x}_0\vec{x}_0, E) - i \frac{\pi}{2} \mu - i \frac{\pi}{2} \lambda \right\}. \quad (2.33)$$

Die Summe erstreckt sich hier über alle periodischen Bahnen des Systems, die bei der Energie E existieren, λ ist die Zahl der negativen Eigenwerte, die bei der Integration auftreten.

Da S und M nicht von x_1 abhängen, können wir das Integral $\oint \frac{dx_1}{\dot{x}'_1}$ sofort ausführen, es liefert die zum Durchlaufen der Bahn benötigte Zeit. Wir haben allerdings zu beachten, daß sich die ursprüngliche Integration

einmal über den Ortsraum erstreckte; wenn unsere periodische Bahn sich durch mehrfache Wiederholung einer primitiven periodischen Bahn ergibt, liefert das Integral deshalb nur die Periodendauer der primitiven Bahn.

Damit erhalten wir schließlich die *Gutzwillersche Spurformel*

$$d'(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \Re \sum_{\text{pB}} \frac{T_0}{\sqrt{|\det(M-1)|}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S - i \frac{\pi}{2} \nu \right\}. \quad (2.34)$$

Wenn man ein System mit zwei Freiheitsgraden betrachtet, kann man außerdem schreiben $\det(M-1) = \text{Tr } M - 2$, wie man anhand der in Kapitel 2.2 bestimmten möglichen Paare von Eigenwerten von M leicht überprüfen kann.

Damit ist die quantenmechanische Zustandssumme durch die Wirkungen S , die Monodromiematrizen M , die primitiven Perioden T_0 und die sogenannten Maslov-Indizes $\nu = \mu + \lambda$ der klassischen periodischen Bahnen ausgedrückt. Die Berechnung dieses Ausdruckes kann ausschließlich mit Hilfsmitteln der klassischen Mechanik erfolgen.

Wir haben die Spurformel abgeleitet, ohne dabei die Konvergenz der auftretenden Reihenentwicklungen zu untersuchen. Tatsächlich ist die Anwendbarkeit der Endformel aus zwei Gründen eingeschränkt:

- In chaotischen Systemen nimmt die Anzahl periodischer Bahnen mit wachsender Periode T_0 exponentiell zu, so daß die Reihe (2.34) im allgemeinen divergiert. Man behilft sich hier, indem man nur Bahnen mit einer Periodendauer unterhalb einer maximalen Periode T_{max} berücksichtigt.

Da in linearer Näherung gilt $S(E) \approx S(E_0) + T \cdot (E - E_0)$, bewirkt jede Bahn eine Oszillation der Zustandsdichte mit der Frequenz T/\hbar . Das Abschneiden bei T_{max} entspricht daher einer Mittelung der Zustandsdichte über Energieintervalle der Breite T_{max}/\hbar . Diese Mittelung macht die Reihe (2.34) endlich, verhindert aber, daß einzelne Energieniveaus im Spektrum aufgelöst werden können.

Techniken, die diese Einschränkung zu umgehen erlauben und einzelne Energieeigenwerte semiklassisch zugänglich machen, sind Gegenstand aktueller Forschung. Beispiele, die auf verschiedene Klassen von Systemen anwendbar sind, sind das Verfahren der *cycle expansion* für Systeme, deren periodische Bahnen durch einen symbolischen Code charakterisiert werden können ([Cvi89], [Art90]), und Verfahren auf Grundlage der harmonischen Inversion für skalierende Systeme ([Mai98b]).

- Wir haben in der Herleitung vorausgesetzt, daß die periodischen Bahnen im Phasenraum isoliert liegen, so daß die Stationäre-Phase-Entwicklung um jede Bahn einzeln durchgeführt werden kann. Dies ist in der Nähe einer Bifurkation, in der verschiedene Bahnen kollidieren, nicht der Fall, so daß die Spurformel hier versagt. Wie in Kapitel

2.2 bemerkt, ist bei einer Periodenver- m -fachung die m -te Potenz der Monodromiematrix einer Bahn gleich der Einheitsmatrix, so daß der Nenner in (2.34) verschwindet. Ein Verfahren, um die dadurch verursachte Divergenz der Spurformel zu beseitigen, soll in dieser Arbeit untersucht werden.

Kapitel 3

Das diamagnetische Keplerproblem

3.1 Die Hamiltonfunktion

Zur Beschreibung des Wasserstoffatoms im äußeren homogenen Magnetfeld nehmen wir den Atomkern als unendlich schwer an und betrachten das Elektron als strukturlose Punktladung, die sich im Coulomb-Feld des Kerns und unter dem Einfluß der Lorentzkraft bewegt. Die Hamiltonfunktion des Problems lautet also in atomaren Einheiten¹

$$H = \frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A})^2 - \frac{1}{r} \quad (3.1)$$

mit dem Vektorpotential in symmetrischer Eichung

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{x}$$

und $r = |\vec{x}|$.

Wir wählen die Richtung des Magnetfeldes als z -Richtung und bezeichnen seine Stärke mit γ :

$$\vec{B} = \gamma \vec{e}_z .$$

Damit lautet die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2} + \frac{\gamma}{2} L_z + \frac{\gamma^2}{8} (x^2 + y^2) - \frac{1}{r} , \quad (3.2)$$

¹Das bedeutet: Wir messen Massen in Einheiten der Elektronenmasse $m_e = 9.1095 \cdot 10^{-31}$ kg, Ladungen in Einheiten der Elektronenladung $e = 1.6022 \cdot 10^{-19}$ C, Längen in Bohrschen Radien $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5.2918 \cdot 10^{-11}$ m und Energien in Hartree $1\text{Ht} = \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 27.212\text{eV}$. Aus diesen Festlegungen folgt, daß Wirkungen in Einheiten von \hbar und Magnetfelder in Einheiten von $B_0 = \frac{m_e^2 e^3}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = 2,3505 \cdot 10^5$ T zu messen sind.

wobei $L_z = \vec{e}_z \cdot (\vec{x} \times \vec{p})$ der Drehimpuls in z -Richtung ist.

Für das diamagnetische Keplerproblem ist die Energie $E = H$ Konstante der Bewegung. Die Dynamik des Systems hängt also von den beiden Parametern E und γ ab. Wir können die Situation jedoch vereinfachen durch die *Skalierung*

$$\begin{aligned} \vec{x} \mapsto \tilde{\vec{x}} &= \gamma^{2/3} \vec{x} & \vec{p} \mapsto \tilde{\vec{p}} &= \gamma^{-1/3} \vec{p} \\ H \mapsto \tilde{H} &= \gamma^{-2/3} H & t \mapsto \tilde{t} &= \gamma t \\ S \mapsto \tilde{S} &= \gamma^{1/3} S \end{aligned} \quad (3.3)$$

Bei dieser Transformation wird das Integral des Hamiltonschen Prinzips (2.1) mit $\gamma^{1/3}$ multipliziert, die Variationsbedingung und damit die Dynamik des Systems werden also nicht beeinflusst.

Ausgedrückt durch die neuen Größen hat die Hamiltonfunktion die Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \frac{\tilde{\vec{p}}^2}{2} + \frac{\tilde{L}_z}{2} + \frac{1}{8} (\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) - \frac{1}{\tilde{r}} \\ &= \tilde{E} = \gamma^{-2/3} E, \end{aligned} \quad (3.4)$$

hängt also nur noch von dem einen Parameter \tilde{E} ab.

Wir gehen nun über zu *semiparabolischen Koordinaten* $\mu = \sqrt{\tilde{r} + \tilde{z}}$, $\nu = \sqrt{\tilde{r} - \tilde{z}}$ und dem Azimutwinkel φ um die z -Achse. In diesen Koordinaten erhalten wir als Hamiltonfunktion

$$\tilde{H} = \frac{p_\mu^2 + p_\nu^2}{2(\mu^2 + \nu^2)} + \frac{\tilde{L}_z}{2\mu^2\nu^2} + \frac{\tilde{L}_z}{2} + \frac{1}{8}\mu^2\nu^2 - \frac{2}{\mu^2 + \nu^2}. \quad (3.5)$$

Da das betrachtete System rotationssymmetrisch um die Richtung des Feldes ist, ist $p_\varphi = \tilde{L}_z$ Konstante der Bewegung. Wir beschränken uns hier auf die Untersuchung von Bahnen mit $\tilde{L}_z = 0$.

Die aus der Hamiltonfunktion (3.5) folgenden Bewegungsgleichungen sind numerisch nur schwer behandelbar, da das Coulomb-Potential für $r = 0$ singularär wird. Um diese Singularität zu beseitigen, führen wir einen neuen Bahnparameter τ durch die Vorschrift

$$dt = 2r d\tau = (\mu^2 + \nu^2) d\tau$$

ein. Wie aus dem Hamiltonschen Prinzip (2.1) folgt, müssen wir gleichzeitig $\tilde{H} \frac{dt}{d\tau} = 2r \tilde{H}$ als neue Hamiltonfunktion wählen. Eine Neugruppierung der auftretenden Terme ergibt die endgültige Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = \frac{p_\mu^2 + p_\nu^2}{2} - \tilde{E} (\mu^2 + \nu^2) + \frac{1}{8}\mu^2\nu^2 (\mu^2 + \nu^2) \equiv 2. \quad (3.6)$$

In dieser neuen Hamiltonfunktion tritt die skalierte Energie \tilde{E} als Parameter auf; ihr Funktionswert ist hingegen fest vorgegeben und ist gleich 2 zu wählen.

Aus dieser Hamiltonfunktion folgen die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
 \mu' &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\mu} = p_\mu \\
 \nu' &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\nu} = p_\nu \\
 p'_\mu &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mu} = 2\tilde{E}\mu - \frac{1}{4}\mu\nu^2 (2\mu^2 + \nu^2) \\
 p'_\nu &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \nu} = 2\tilde{E}\nu - \frac{1}{4}\mu^2\nu (\mu^2 + 2\nu^2)
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Hier bezeichnet der Strich die Ableitung nach τ .

Diese Bewegungsgleichungen sind frei von Singularitäten und lassen sich daher einfach numerisch integrieren. Wir verwenden hierzu das Prädiktor–Korrektor–Verfahren 6. Ordnung nach Adams und Bashforth (vgl. [Sch88]).

3.2 Die betrachtete Bifurkation

Das diamagnetische Keplerproblem, das durch die Hamiltonfunktion (3.6) beschrieben wird, zeigt einen Übergang zwischen regulärer Dynamik bei stark negativer skaliertes Energie $\tilde{E} \rightarrow -\infty$ und chaotische Dynamik bei $\tilde{E} \approx 0$ und darüber (siehe dazu [Has89]). Dementsprechend existieren bei $\tilde{E} \rightarrow -\infty$ nur drei periodische Bahnen, während die Zahl periodische Bahnen bei höherer skaliertes Energie exponentiell zunimmt.

Unter den periodischen Bahnen, die bei jeder skaliertes Energie existieren, ist eine zum Magnetfeld parallele Bahn. Dies ist eine reine Coulomb–Bahn, da bei einer Bewegung parallel zum Feld keine Lorentzkraft auftritt. Diese Bahn ist für kleine skaliertes Energie stabil und wird für $\tilde{E} \nearrow 0$ unendlich oft instabil und wieder stabil (vgl. [Win87]).

Zum ersten Mal wird die zum Magnetfeld parallele Bahn bei $\tilde{E} = -0.391$ instabil. In dieser Bifurkation entstehen eine stabile und eine instabile periodische Bahn. Die stabile Bahn wird wegen ihrer Aussehens als *Ballon–Bahn* oder mit einem von Eckhardt und Wintgen ([Eck90]) entwickelten symbolischen Code als „0–“ bezeichnet. Sie ist in Abb. 3.1 dargestellt.

Wie in Kapitel 2.2 erläutert, wird die Stabilität der periodischen Bahn von der Spur ihrer Monodromiematrix bestimmt. Wie man in Abb. 3.2 erkennt, ist diese gleich 2, wenn die Bahn entsteht und nimmt dann monoton ab. Bei $\tilde{E} = -0.291$ ist die Spur gleich -2 , und die Bahn wird instabil. Dazwischen treten alle in Kapitel 2.2 beschriebenen Periodenvervielfachungen auf. Wir betrachten hier die Periodenvervierfachung, die nach (2.12) in der Nullstelle der Spur bei $\tilde{E}_c = -0.342025$ eintritt.

Für $\tilde{E} > \tilde{E}_c$ existieren zwei reelle Satellitenbahnen, von denen eine stabil, die andere instabil ist. Sie sind in Abb. 3.3 dargestellt. Wenn man beachtet, daß wegen der Symmetrie der semiparabolischen Koordinaten (vgl. Anhang A) zwei Perioden der Ballon–Bahn abgebildet sind, so erkennt man, daß die Satellitenbahnen erwartungsgemäß die vierfache Periode haben. Vergleicht man die Bahnverläufe bei verschiedenen Energien, so ist weiterhin zu sehen,

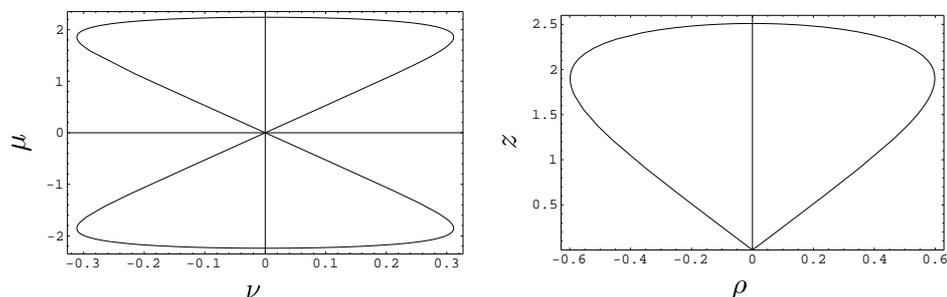


Abbildung 3.1: Die Ballon-Bahn in semiparabolischen (links) und zylindrischen (rechts) Koordinaten.

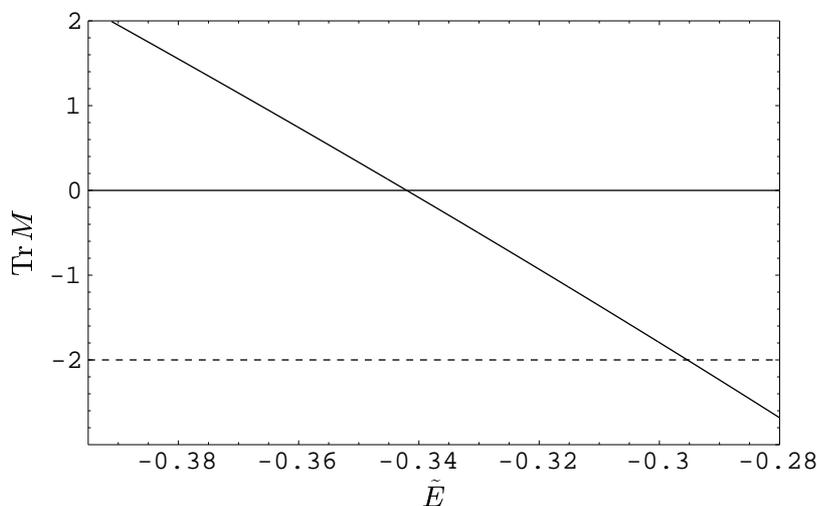


Abbildung 3.2: Spur der Monodromiematrix der Ballon-Bahn.

daß die Satellitenbahnen der zentralen Bahn für $\tilde{E} \searrow \tilde{E}_c$ immer ähnlicher werden und für $\tilde{E} = \tilde{E}_c$ schließlich mit ihr kollidieren.

Für $\tilde{E} < \tilde{E}_c$ existieren diese Satellitenbahnen nicht mehr. Läßt man jedoch zu, daß alle Koordinaten und Impulse auch komplexe Werte annehmen dürfen, so kann man auch in diesem komplexifizierten Phasenraum nach periodischen Lösungen der Bewegungsgleichungen (3.7), sogenannten *Geisterbahnen*, suchen. Es stellt sich dann heraus, daß unterhalb von \tilde{E}_c zwei Geisterbahnen existieren, die man als Vorgänger der reellen Satellitenbahnen ansehen kann und von denen wiederum eine stabil, die andere instabil ist.

Da die Hamiltonfunktion (3.6) reell ist, ist mit jeder gefundenen Geisterbahn auch die konjugiert komplexe Bahn Lösung der Bewegungsgleichungen (3.7); Geisterbahnen treten deshalb in der Regel paarweise auf. In unserem

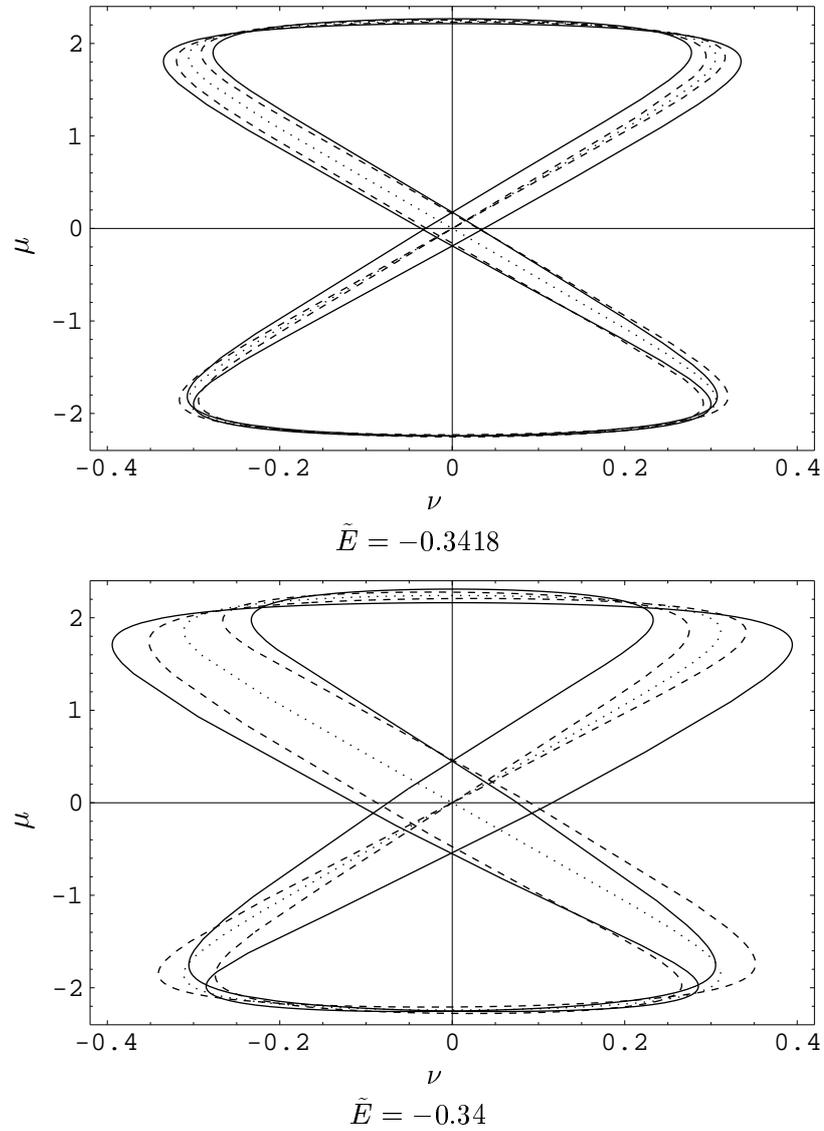


Abbildung 3.3: Reelle Satellitenbahnen bei der Periodenvervierfachung der Ballon-Bahn. ausgezogen: stabil, gestrichelt: instabil. Zum Vergleich: punktiert: Ballon-Bahn.

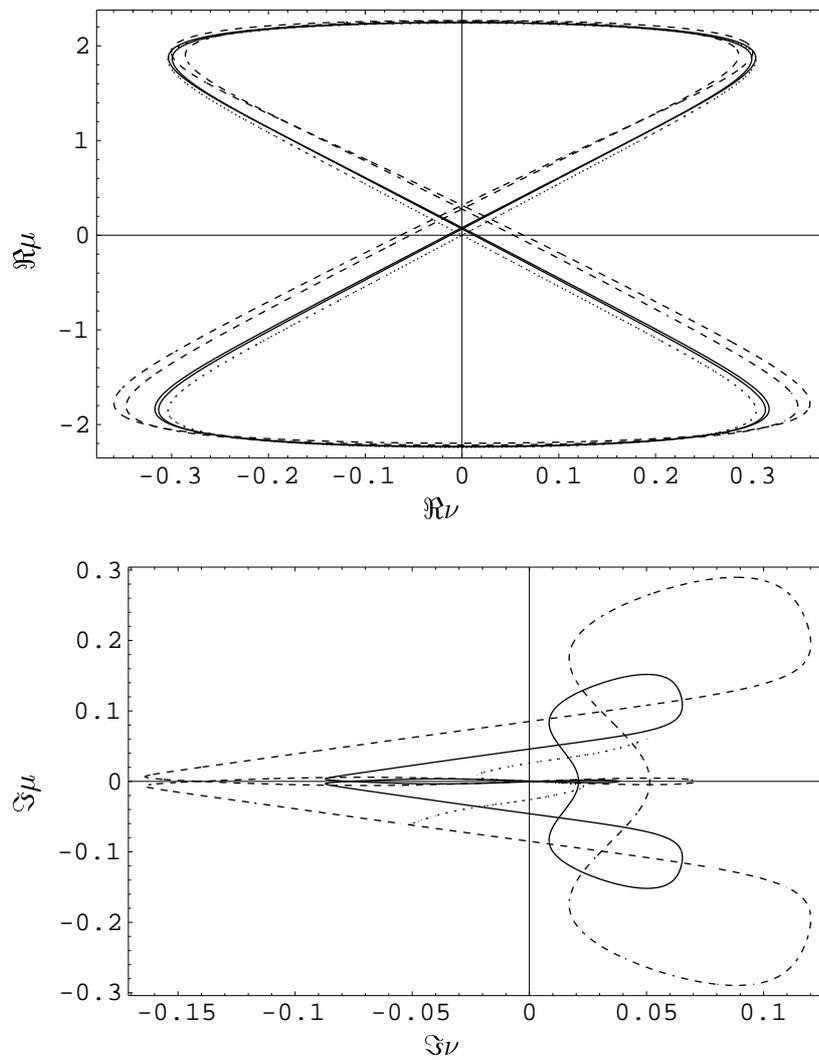


Abbildung 3.4: Verlauf der Geisterbahnen bei $\tilde{E} = -0.343 > \tilde{E}'_c$. Durchgezogen: stabile Geisterbahn, gestrichelt: äußere Bahn, punktiert: instabile Geisterbahn.

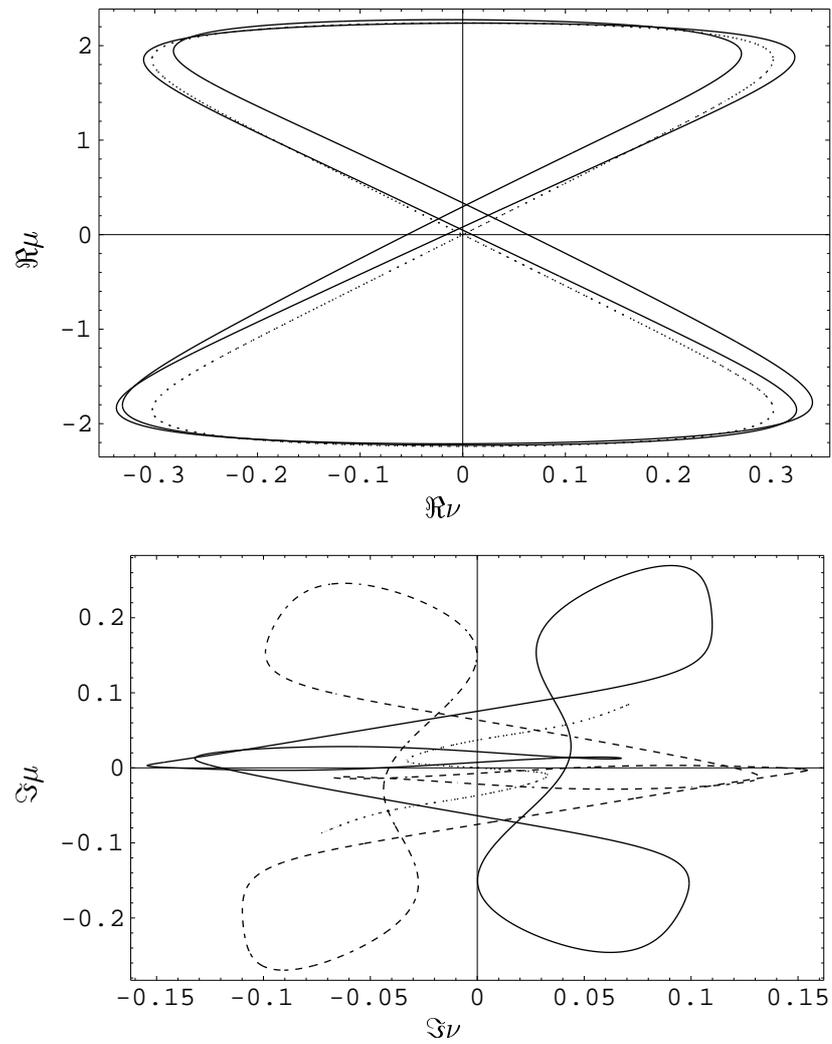


Abbildung 3.5: Verlauf der Geisterbahnen bei $\tilde{E} = -0.344 < \tilde{E}'_c$. Durchgezogen und gestrichelt: asymmetrische Bahnen, punktiert: instabile Geisterbahn.

Fall stellt sich jedoch heraus, daß die konjugiert komplexe einer Geisterbahn jeweils mit der Ausgangsbahn übereinstimmt, wobei nur der Anfangspunkt, von dem aus die Bahn durchlaufen wird, um eine halbe Periode zu verschoben ist. Unsere beiden Geisterbahnen haben deshalb keine konjugiert komplexen Partner. Weiterhin folgt, daß die Wirkungen und Periodendauern der Geisterbahnen bei Komplexkonjugation in sich übergehen, also reell sein müssen.

Damit sind alle an der Periodenvervierfachung unmittelbar beteiligten Bahnen beschrieben. Nur wenig unterhalb von \tilde{E}_c , bei $\tilde{E}'_c = -0.343605$, tritt jedoch eine weitere Bifurkation auf, an der nur Geisterbahnen beteiligt sind. Hier kollidiert nämlich die stabile Geisterbahn mit einer weiteren komplexen Bahn, die ebenfalls durch Komplexkonjugation in sich übergeht und die ich im weiteren die äußere Bahn nennen werde, und die beiden Bahnen verlieren diese Konjugationssymmetrie. Es entsteht ein Paar zueinander konjugiert komplexer Geisterbahnen, die asymmetrische Bahnen heißen sollen.

Eine entsprechende Bifurkation, in der die instabile Geisterbahn ihre Konjugationssymmetrie verlieren würde, tritt oberhalb einer skalierten Energie von $\tilde{E} = -0.4$ nicht auf.

Abb. 3.4 und 3.5 zeigen den Verlauf aller an der Bifurkation beteiligten Geisterbahnen.

Für alle betrachteten Bahnen wurden die Wirkung, die Periodendauer und die Stabilitätsparameter in Abhängigkeit von der skalierten Energie numerisch bestimmt. Abb. 3.6–3.8 zeigen die Ergebnisse. Da bei \tilde{E}_c eine Periodenvervierfachung vorliegt, sind in allen Diagrammen die Daten für vier Umläufe um die zentrale Ballon-Bahn aufgetragen. Abb. 3.6 zeigt statt der Wirkung selbst die Differenz zwischen der Wirkung einer Satellitenbahn und der vierfachen Wirkung der Ballon-Bahn, da zur Bestimmung einer gleichmäßigen Näherung für die Zustandsdichte diese Differenz benötigt wird.

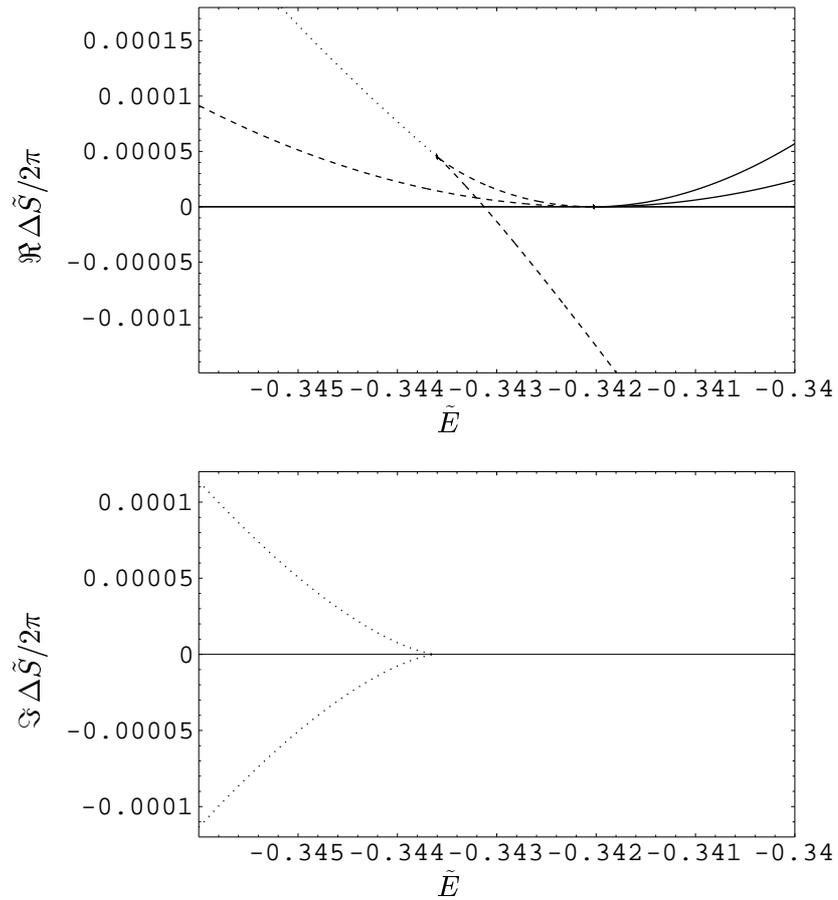


Abbildung 3.6: Wirkungsdifferenzen, bezogen auf die vierfache Wirkung der Ballon-Bahn, der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. Ausgezogen: reelle Bahnen, gestrichelt: Geisterbahnen mit reeller Wirkung, punktiert: Geisterbahnen mit komplexer Wirkung

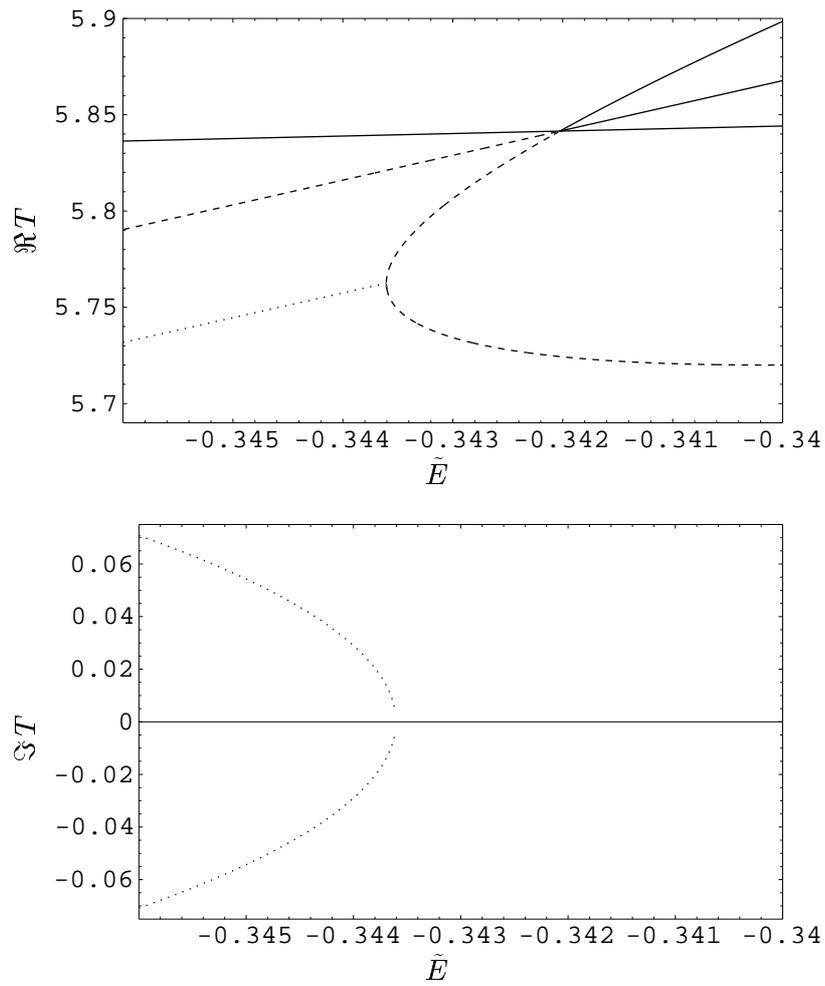
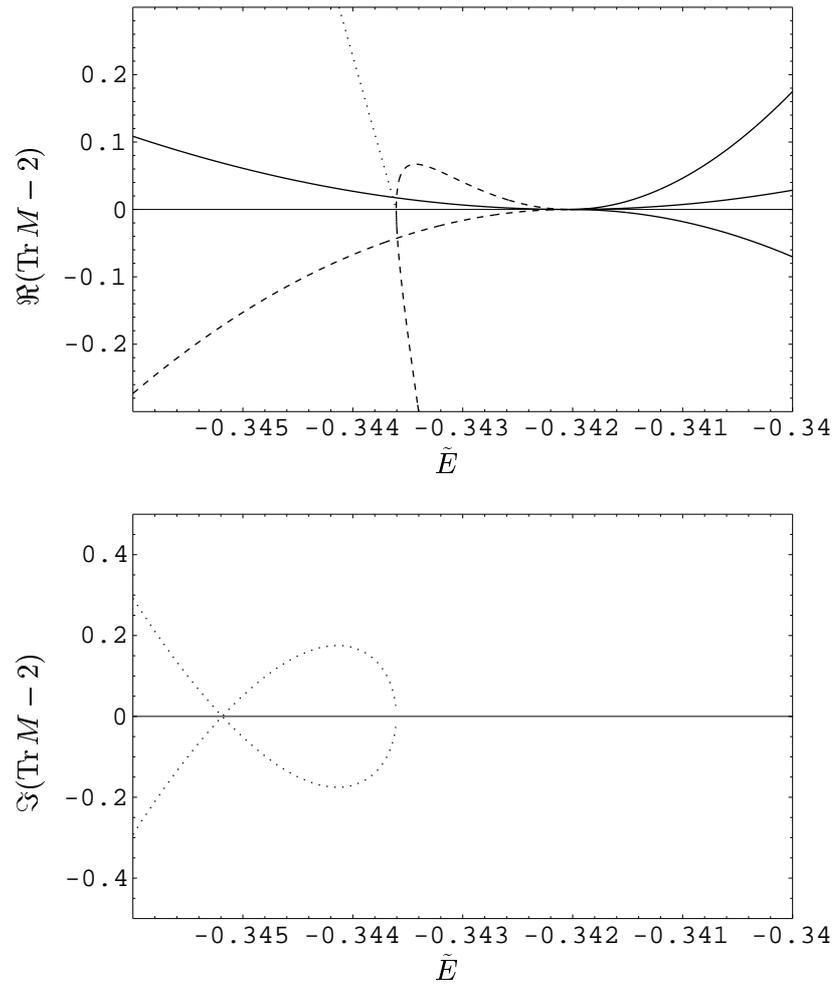


Abbildung 3.7: Periodendauern der an der Bifurkation beteiligten Bahnen.

Abbildung 3.8: $\text{Tr } M - 2$ der an der Bifurkation beteiligten Bahnen.

Kapitel 4

Normalformtheorie und Bifurkationen

4.1 Birkhoff–Gustavson–Normalform

Wie wir gesehen haben, versagt die Gutzwillersche Spurformel (2.34) in der Nähe von Bifurkationen, wenn die periodischen Bahnen des klassischen Systems nicht als voneinander isoliert betrachtet werden können. Um das Problem zu lösen, benötigen wir also ein Verfahren, das es ermöglicht, die Struktur des Phasenraumes in der Nähe einer periodischen Bahn genauer zu beschreiben. Dies leistet die Normalformtheorie. Eine Beschreibung des Verfahrens findet sich in [Arn88a, Anhang 7] und [Alm88, Kapitel 2.5 und 4.2].

Wir führen die Normalformtransformation hier nur für Systeme mit zwei Freiheitsgraden durch, obwohl die wichtigsten Schritte des Verfahrens auch auf höherdimensionale Systeme anwendbar sind. Wie in Kapitel 2.2 bereits bemerkt, zeigen nur stabile periodische Bahnen Bifurkationen; wir werden daher nur diesen Fall betrachten.

Als ersten Schritt führen wir in einer Umgebung der betrachteten periodischen Bahn ein kanonisches Koordinatensystem $(\vartheta, p_\vartheta, q, p)$ mit folgenden Eigenschaften ein (vgl. [Arn88b, Chapter 7.4, Proposition 1]):

- Die Koordinate ϑ läuft entlang der periodischen Bahn, die Koordinate q senkrecht dazu, so daß die Phasenraumpunkte auf der periodischen Bahn gekennzeichnet sind durch $q = 0$ und $p = 0$.
- ϑ nimmt Werte zwischen 0 und 2π an, und auf der periodischen Bahn gilt bei geeigneter Wahl des Zeitnullpunktes

$$\vartheta = \frac{2\pi}{T}t,$$

wobei T die Periodendauer der periodischen Bahn ist.

- Für alle Anfangsbedingungen in der Umgebung und $0 \leq t \leq T$ ist die Funktion $\vartheta(t)$ invertierbar.

Wir schränken die Betrachtung nun auf eine dreidimensionale Energiefläche zu einer festen Energie E ein und drücken q und p als Funktionen von ϑ aus.

Das Integral des Hamiltonschen Prinzips (2.1) läßt sich umformen gemäß

$$\begin{aligned} \int \vec{p} \cdot d\vec{q} - H dt &= \int p dq + p_\vartheta d\vartheta - H dt \\ &= \int p dq - p_\vartheta d(-\vartheta) - Et. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Der letzte Summand in diesem Ausdruck ist eine Konstante, die zur Variation des Integrals nicht beiträgt, daher gilt für die Bahn des Systems:

$$\delta \int p dq - p_\vartheta d(-\vartheta) = \delta \int \vec{p} \cdot d\vec{q} - H dt = 0. \quad (4.2)$$

Nach dem Hamiltonschen Prinzip bedeutet dies:

Die Bewegung senkrecht zur zentralen periodischen Bahn wird beschrieben durch Hamiltonsche Bewegungsgleichungen mit der „Zeit“-Koordinaten $-\vartheta$ und der Hamiltonfunktion p_ϑ .

p_ϑ ist dabei mit Hilfe der Gleichung

$$H(\vartheta, p_\vartheta, q, p) = E$$

als Funktion der Koordinaten q, p , der Zeit ϑ und der Energie E des ursprünglichen Systems, die hier als Parameter auftritt, auszudrücken. Nach der Konstruktion des Koordinatensystems ist p_ϑ 2π -periodisch in ϑ .

Durch dieses als *isoenergetische Reduktion* bezeichnete Verfahren ist es also gelungen, die Dynamik eines autonomen Hamiltonschen Systems mit zwei Freiheitsgraden in der Nähe einer periodischen Bahn auf diejenige eines Systems mit einem Freiheitsgrad und 2π -periodischer Zeitabhängigkeit zurückzuführen. Die Hamiltonfunktion dieses Systems bezeichnen wir im folgenden mit Φ , Koordinate und Impuls mit q bzw. p .

Der Punkt $p = q = 0$ entspricht der periodischen Bahn des Ausgangssystems und bildet daher eine Gleichgewichtslage des reduzierten Systems. Wir entwickeln die Hamiltonfunktion um diesen Punkt in eine Taylorreihe bezüglich p und q und in eine Fourierreihe bezüglich ϑ :

$$\Phi(p, q, \vartheta) = \frac{\omega}{2}(p^2 + q^2) + \sum_{\alpha+\beta=3}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \Phi_{\alpha\beta l} p^\alpha q^\beta \exp(il\vartheta). \quad (4.3)$$

Für die weitere Vereinfachung ist es zweckmäßig, von p und q auf die Koordinaten

$$z = p + iq \quad z^* = p - iq$$

überzugehen. Diese Transformation ist nicht kanonisch, z und z^* erfüllen jedoch Hamiltonsche Bewegungsgleichungen mit z als Koordinate, z^* als Impuls und der neuen Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned}
\phi &= -2i\Phi \\
&= -i\omega z z^* + \sum_{\alpha+\beta=3}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \phi_{\alpha\beta l} z^{\alpha} z^{*\beta} \exp(il\vartheta) \\
&= \sum_{\alpha+\beta=2}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \phi_{\alpha\beta l} z^{\alpha} z^{*\beta} \exp(il\vartheta) .
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Von Birkhoff ([Bir27, Kapitel 3]) und Gustavson ([Gus66]) wurde ein Verfahren entwickelt, mit dem sich die Terme niedriger Ordnung in p und q in dieser Reihe systematisch durch kanonische Transformationen beseitigen lassen. Um die Terme der Ordnung $\alpha + \beta = k$ zu beseitigen, verwenden wir eine Transformation mit der erzeugenden Funktion

$$\mathcal{F}_2(Z^*, z, \vartheta) = -z Z^* - \sum_{\alpha+\beta=k}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \mathcal{F}_{\alpha\beta l} z^{\alpha} Z^{*\beta} \exp(il\vartheta) \tag{4.5}$$

mit

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta l} = -\frac{i\phi_{\alpha\beta l}}{\omega(\alpha - \beta) - l} , \tag{4.6}$$

also die Transformation

$$\begin{aligned}
Z &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial Z^*} = z \left(1 + \sum \beta \mathcal{F}_{\alpha\beta l} z^{\alpha-1} Z^{*\beta-1} \exp(il\vartheta) \right) \\
z^* &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial z} = Z^* \left(1 + \sum \alpha \mathcal{F}_{\alpha\beta l} z^{\alpha-1} Z^{*\beta-1} \exp(il\vartheta) \right) ,
\end{aligned} \tag{4.7}$$

wenn die neuen Koordinaten mit Z, Z^* bezeichnet werden.

Aus diesen Transformationsgleichungen folgt

$$\begin{aligned}
z &= \frac{Z}{1 + \sum \beta \mathcal{F}_{\alpha\beta l} z^{\alpha-1} Z^{*\beta-1} \exp(il\vartheta)} \\
&= Z - \sum \beta \mathcal{F}_{\alpha\beta l} z^{\alpha-1} Z Z^{*\beta-1} \exp(il\vartheta) + \dots
\end{aligned} \tag{4.8}$$

und damit

$$z z^* = Z Z^* + \sum (\alpha - \beta) \mathcal{F}_{\alpha\beta l} Z^{\alpha} Z^{*\beta} \exp(il\vartheta) + \dots , \tag{4.9}$$

wobei die Punkte jeweils für Terme von höherer Ordnung als k stehen.

Für die neue Hamiltonfunktion erhält man

$$\begin{aligned}
\phi' &= \phi - \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t} \\
&= -i\omega zz^* + \text{Terme der Ordnung } < k \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha+\beta=k \\ l}} \left\{ \phi_{\alpha\beta l} z^\alpha z^{*\beta} + il\mathcal{F}_{\alpha\beta l} z^\alpha Z^\beta \right\} \exp(il\vartheta) \\
&\quad + \text{Terme höherer Ordnung} \\
&= -i\omega ZZ^* - i\omega \sum (\alpha - \beta) \mathcal{F}_{\alpha\beta l} Z^\alpha Z^{*\beta} \exp(il\vartheta) \\
&\quad + \text{Terme der Ordnung } < k \\
&\quad + \sum \{ \phi_{\alpha\beta l} + il\mathcal{F}_{\alpha\beta l} \} Z^\alpha Z^{*\beta} \exp(il\vartheta) \\
&\quad + \text{Terme höherer Ordnung} \\
&= -i\omega ZZ^* + \text{Terme der Ordnung } < k \\
&\quad - i \sum \{ (\omega(\alpha - \beta) - l) \mathcal{F}_{\alpha\beta l} + i\phi_{\alpha\beta l} \} Z^\alpha Z^{*\beta} \exp(il\vartheta) \\
&\quad + \text{Terme höherer Ordnung} .
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Die Summanden von Ordnung kleiner als k in der Entwicklung (4.4) bleiben bei der Transformation also unverändert, während wegen (4.6) der Term $(\alpha\beta l)$ in (4.5) gerade den Term $(\alpha\beta l)$ in der Entwicklung der Hamiltonfunktion beseitigt.

Selbstverständlich dürfen in die Summe in (4.5) nur solche Terme einbezogen werden, für die der Nenner in (4.6) von Null verschieden ist. Die *resonanten Terme*, für die $\omega(\alpha - \beta) - l = 0$ ist, können daher aus der Entwicklung (4.4) nicht beseitigt werden.

Für irrationale ω sind nur die Terme mit $\alpha = \beta$ und $l = 0$ resonant, die Hamiltonfunktion (4.4) kann also auf die Form

$$\phi = -i\omega zz^* + \phi_2 (zz^*)^2 + \cdots + \phi_k (zz^*)^{[k/2]} + \mathcal{O}((z + z^*)^{k+1}) \tag{4.11}$$

mit beliebig großem k gebracht werden.

Für rationale ω treten weitere resonante Terme auf, die Normalform wird also komplizierter als in (4.11). Diese zusätzlichen Terme müssen wir auch beibehalten, wenn wir das Verhalten des Systems in der Nähe einer Resonanz diskutieren wollen.

Sei also jetzt $\omega \approx \frac{n}{m}$ mit teilerfremden natürlichen Zahlen n und m . Die Resonanzbedingung $\omega(\alpha - \beta) - l = 0$ lautet dann

$$n(\alpha - \beta) = ml , \tag{4.12}$$

es treten also auch zeitabhängige resonante Terme mit $l \neq 0$ auf. Diese Zeitabhängigkeit läßt sich jedoch beseitigen durch Übergang in ein rotierendes

Koordinatensystem, also durch die Transformation

$$Z = z \exp(in\vartheta/m) \quad Z^* = z^* \exp(-in\vartheta/m), \quad (4.13)$$

die erzeugt wird durch

$$\mathcal{F}_2 = -Z^* z \exp(in\vartheta/m).$$

Die resonanten Terme transformieren sich dabei wie

$$\begin{aligned} z^\alpha z^{*\beta} \exp(il\vartheta) &= Z^\alpha \exp(-in\vartheta\alpha/m) Z^{*\beta} \exp(in\vartheta\beta/m) \exp(il\vartheta) \\ &= Z^\alpha Z^{*\beta} \exp(-i\{n(\alpha - \beta) - ml\}\vartheta/m) \\ &= Z^\alpha Z^{*\beta}. \end{aligned}$$

Demnach werden alle resonanten Terme zeitunabhängig, während die nicht-resonanten Terme eine Zeitabhängigkeit mit der Periode $2k\pi$ bekommen.

Die Hamiltonfunktion selbst transformiert sich wie

$$\begin{aligned} \phi' &= \phi - \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t} \\ &= \phi + i \frac{n}{m} Z^* z \exp(int/m) \\ &= \phi + i \frac{n}{m} Z Z^* \\ &= -i \left(\omega - \frac{n}{m} \right) Z Z^* + \phi_2(Z Z^*)^2 + \dots \\ &\quad + \text{weitere resonante Terme} \\ &\quad + \text{nichtresonante Terme höherer Ordnung.} \end{aligned}$$

Im harmonischen Anteil der Hamiltonfunktion wird also die Frequenz ω ersetzt durch einen kleinen Parameter $2\varepsilon = \omega - \frac{n}{m}$, der den Abstand von der Resonanz mißt.

Da es uns nur auf eine lokale Beschreibung des Systems in der Nähe der Gleichgewichtslage $z = z^* = 0$ ankommt, können wir die Normalformtransformation bei einem geeigneten k abbrechen und die verbleibenden Terme höherer Ordnung vernachlässigen. Wir erhalten dann eine „idealisierte“ Hamiltonfunktion, die die tatsächliche Hamiltonfunktion in der Nähe der Gleichgewichtslage quantitativ gut annähert.

Zum Schluß der Normalformtransformation gehen wir wieder zu den ursprünglichen reellen Koordinaten p und q oder zu *kanonischen Polarkoordinaten* I und ϕ mit

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2I} \cos \varphi, & q &= \sqrt{2I} \sin \varphi, \\ z &= \sqrt{2I} \exp(i\varphi), & z^* &= \sqrt{2I} \exp(-i\varphi), \\ I &= \frac{1}{2}(p^2 + q^2) = \frac{1}{2}zz^* \end{aligned} \quad (4.14)$$

über.

Wir erhalten auf diese Weise eine Auswahl der „wesentlichen“ Terme niedriger Ordnung in der Hamiltonfunktion, die das Verhalten des Systems in der Nähe der periodischen Bahn bestimmen.

Gemäß der Resonanzbedingung (4.12) und da n und m teilerfremd sind, ist für alle resonanten Terme $\alpha - \beta = rm$ mit $r \in \mathbb{Z}$ ein Vielfaches von m . Ein resonanter Term hat also die Gestalt

$$\begin{aligned} z^\alpha z^{*\beta} &= \left(\sqrt{2I}\right)^{\alpha+\beta} \exp\{i(\alpha - \beta)\varphi\} \\ &= \left(\sqrt{2I}\right)^k \exp\{irm\varphi\} \end{aligned}$$

und ist $\frac{2\pi}{m}$ -periodisch in φ . Außerdem erfüllen alle resonanten Terme die Bedingungen

$$\begin{aligned} |rm| &= |\alpha - \beta| \leq \alpha + \beta = k, \\ \alpha &= \frac{1}{2}(k + rm) \in \mathbb{Z}, \\ \beta &= \frac{1}{2}(k - rm) \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die reelle Normalform die Gestalt

$$\Phi = \sum_k c_k I^k + \sum_k \sum_{\substack{0 < rm \leq k \\ k \pm rm \text{ gerade}}} \sqrt{I}^k \left[d_k \cos(rm\varphi) + d'_k \sin(rm\varphi) \right]. \quad (4.15)$$

Da die so erhaltene Hamiltonfunktion von der Zeitkoordinaten ϑ unabhängig ist, ist sie Konstante der Bewegung. Alle die Punkte, die eine Bahn mit vorgegebener Anfangsbedingung erreichen kann, sind also durch eine Niveaulinie der Hamiltonfunktion gegeben. Ein Konturplot der Hamiltonfunktion zeigt daher Linien, die man auch in einer Poincaré-Schnittebene des Ausgangssystems erkennen wird.

Als Beispiel und um die in Kapitel 3.2 dargestellte Bifurkation beschreiben zu können, behandeln wir hier eine Resonanz vierter Ordnung, dh. mit $m = 4$. Bei einer Entwicklung der Hamiltonfunktion bis in 6. Ordnung erweisen sich folgende Terme als resonant:

$$\begin{aligned} \phi &= -i \left(\omega - \frac{n}{4} \right) z z^* && \text{Ordnung 2} \\ &+ \phi_2 (z z^*)^2 + \phi_{4,0,n} z^4 + \phi_{0,4,-n} z^{*4} && 4 \\ &+ \phi_3 (z z^*)^3 + \phi_{5,1,n} z^5 z^* + \phi_{1,5,-n} z z^{*5}. && 6 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die reelle Normalform der Hamiltonfunktion ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \Phi &= \varepsilon I \\ &+ aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) + b'I^2 \sin(4\varphi) \\ &+ cI^3 + dI^3 \cos(4\varphi) + eI^3 \sin(4\varphi) \end{aligned} \quad (4.17)$$

mit $\varepsilon = \frac{1}{2}(\omega - \frac{n}{4})$ und geeigneten reellen Koeffizienten a, b, b', c, d, e .

Die Bedeutung dieser Terme werden wir in den folgenden Abschnitten diskutieren.

4.2 Die Normalform der Wirkungsfunktion

Durch Integration der Bewegungsgleichungen bis zu Termen der benötigten Ordnung erhält man eine Normalform für die erzeugende Funktion $\hat{S}(I', \varphi)$ der Poincaré–Abbildung für m Umläufe um die zentrale periodische Bahn. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{S}(I', \varphi) &= -I'\varphi - \Phi(I', \varphi) + S_0(E) \\ &= -I'\varphi - \varepsilon I' + \mathcal{O}(I'^2) + S_0(E).\end{aligned}\quad (4.18)$$

Dabei ist Φ eine Funktion, die die Gestalt der Normalform (4.15) hat.

Der führende Term dieser Entwicklung beschreibt für $\varepsilon = 0$ die identische Abbildung. Dem entspricht die Tatsache, daß die Monodromiematrix der m -fach wiederholten zentralen Bahn in der Resonanz gleich der Einheitsmatrix ist.

Wir können demnach annehmen, daß die Größe $\hat{S} + I'\varphi$ mit geeigneten Koeffizienten durch die Normalform gegeben ist.

Periodische Bahnen des Ausgangssystems entsprechen Fixpunkten der Poincaré–Abbildung, die gegeben sind durch die Beziehungen

$$\begin{aligned}I &= -\frac{\partial \hat{S}}{\partial \varphi} = I' - \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} \stackrel{!}{=} I' \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = 0, \\ \varphi' &= -\frac{\partial \hat{S}}{\partial I'} = \varphi' - \frac{\partial \Phi}{\partial I'} \stackrel{!}{=} \varphi \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \Phi}{\partial I'} = 0.\end{aligned}\quad (4.19)$$

Demnach entsprechen periodische Bahnen stationären Punkten der Normalform.

In diesen stationären Punkten ist außerdem $\hat{S} + I'\varphi = \hat{S} + I\varphi' = S$ gleich der Wirkung der periodischen Bahn. Diese Tatsache erklärt auch, warum in (4.18) der Summand $S_0(E)$, die m -fache Wirkung der zentralen Bahn, hinzugefügt wurde, obwohl er die von \hat{S} erzeugte Transformation nicht beeinflusst.

4.3 Generische Bifurkationen

In niedrigster Ordnung lautet die Normalform (4.17)

$$\Phi = \varepsilon I = \frac{\varepsilon}{2}(p^2 + q^2).\quad (4.20)$$

Dies ist die Hamiltonfunktion eines harmonischen Oszillators, sie beschreibt, wie Bahnen, die in der Nähe der zentralen periodischen Bahn starten, sich

mit der Frequenz $\omega + \varepsilon$, bzw. im rotierenden Koordinatensystem mit der Frequenz ε , um diese Bahn herumwinden.

In zweiter Ordnung in I treten in der Normalform winkelabhängige Terme auf. Für beliebige Resonanzen beschreibt die niedrigste Ordnung der Normalformentwicklung, in der solche nichttrivialen Terme auftreten, die von Mayer ([May70]) klassifizierten generischen Bifurkationen des Systems, dh. diejenigen Bifurkationen, mit deren Auftreten man zu rechnen hat, wenn man einen einzigen Parameter eines Systems mit zwei Freiheitsgraden und ohne spezielle Symmetrien variiert.

Wie Mayer zeigte, gibt es für jede Ordnung m der Resonanz nur eine, oder im Fall $m = 4$ ausnahmsweise zwei, Möglichkeiten, wie die Bifurkation erfolgt. Für $m = 4$ wollen wir diese Möglichkeiten untersuchen.

Die Normalform (4.17) lautet bis zu zweiter Ordnung in I

$$\Phi = \varepsilon I + aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) + b'I^2 \sin(4\varphi) . \quad (4.21)$$

Durch geeignete Wahl einer Bezugsrichtung für den Winkel φ , also die Transformation $\varphi \mapsto \varphi + \varphi_0$, kann man den zu $\sin(4\varphi)$ proportionalen Term eliminieren, wir können also $b' = 0$ setzen. Damit nimmt die Normalform die Gestalt

$$\Phi = \varepsilon I + aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) \quad (4.22)$$

an.

Um die periodischen Bahnen unseres Systems zu finden, müssen wir die stationären Punkte dieser Normalform bestimmen. Die zentrale Bahn, um die herum wir entwickelt haben, liegt bei $I = 0$ und macht sich nicht als stationärer Punkt bemerkbar, da die Transformation (4.14) auf Polarkoordinaten in diesem Punkt singulär wird.

Für $I \neq 0$ haben wir die Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = -4bI^2 \sin(4\varphi) , \\ 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \Phi}{\partial I} = \varepsilon + 2aI + 2bI \cos(4\varphi) . \end{aligned} \quad (4.23)$$

Aus der ersten dieser Gleichungen folgt $\sin(4\varphi) = 0$, also $\cos(4\varphi) = \sigma = \pm 1$. Die zweite Gleichung liefert dann

$$I_\sigma = -\frac{\varepsilon}{2(a + \sigma b)} . \quad (4.24)$$

Zu jeder Wahl von σ gehören vier verschiedene Winkel φ , $0 \leq \varphi < 2\pi$, mit $\sin(4\varphi) = 0$ und $\cos(4\varphi) = \sigma$, also vier verschiedene stationäre Punkte im Poincaréschnitt. Diese stationären Punkte gehören alle zu derselben periodischen Bahn, die die vierfache Periode hat wie die zentrale Bahn.

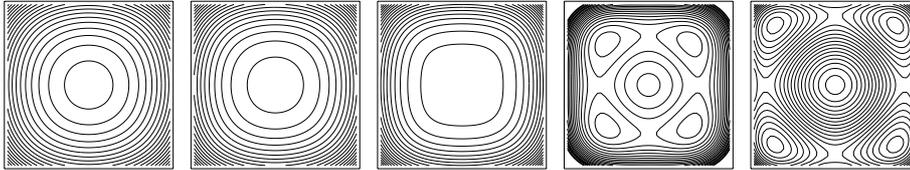


Abbildung 4.1: Konturplots der Normalform (4.22) für den Fall der Island-Chain-Bifurkation. Mittleres Bild: $\varepsilon = 0$, links davon $\varepsilon < 0$, rechts $\varepsilon > 0$.

Für reelle periodische Bahnen ist $I = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$ immer positiv reell. Wenn wir in (4.24) eine negative Lösung für I_σ erhalten, zeigt das also an, daß wir es mit einer komplexen periodischen Bahn zu tun haben. Die Wirkung der jeweiligen Bahn, die wir nach Kapitel 4.2 mit dem stationären Wert $\Phi(I_\sigma)$ der Normalform identifizieren können, ist reell, falls I_σ reell ist; ein negativ reelles I_σ bedeutet also eine komplexe Bahn mit reeller Wirkung.

Wir haben nun zwei Fälle zu unterscheiden:

- $|a| > |b|$: Island-Chain-Bifurkation

In diesem Fall haben $a + b$ und $a - b$ gleiches Vorzeichen, nämlich das Vorzeichen von a . Für $\text{sign } \varepsilon = -\text{sign } a$ sind beide Lösungen I_σ aus (4.24) positiv, für $\text{sign } \varepsilon = \text{sign } a$ sind sie negativ. Daher liegen auf einer Seite der Resonanz zwei reelle Satellitenbahnen vor, von denen eine stabil und die andere instabil ist. Für $\varepsilon \rightarrow 0$ ziehen sie sich auf die zentrale Bahn zusammen und erscheinen auf der anderen Seite der Resonanz als komplexe Bahnen wieder.

Abb. 4.1 zeigt eine Folge von Konturplots der Normalform für verschiedene ε , die wir als Folge von Poincaréschnitten auffassen. Man erkennt für $\varepsilon < 0$ einen einzigen elliptischen Fixpunkt in der Mitte des Bildes, der der zentralen stabilen Bahn entspricht. Für $\varepsilon > 0$ treten zusätzlich je vier elliptische und hyperbolische Fixpunkte auf, die der stabilen bzw. der instabilen Satellitenbahn entsprechen. Wegen des Aussehens dieser Abbildung nennt man die hier vorliegende Bifurkation *Island-Chain-Bifurkation*. Eine solche Bifurkation liegt in dem in Kapitel 3.2 beschriebenen Beispiel bei der Energie E_c vor.

- $|a| < |b|$: Touch-and-Go-Bifurkation

In diesem Fall haben $a + b$ und $a - b$ unterschiedliche Vorzeichen. Für jedes ε ist also genau eine der beiden Satellitenbahnen reell. Geht ε durch 0, so wird die bislang reelle Bahn komplex, während gleichzeitig die bislang komplexe Bahn reell wird.

Abb. 4.2 zeigt eine Folge von Konturplots für diesen Fall. Für alle ε ist der zentrale elliptische Fixpunkt von vier hyperbolischen Fixpunkten umgeben, die anzeigen, daß jeweils eine instabile reelle Satellitenbahn existiert. Die Fixpunkte liegen für $\varepsilon > 0$ bei anderen Winkeln als bei

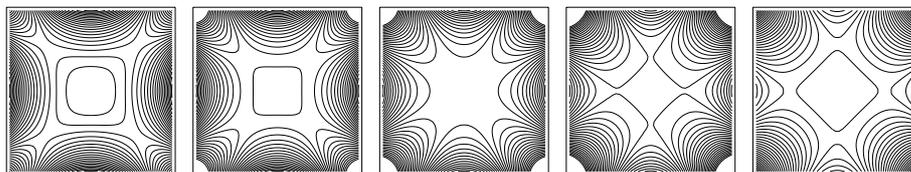


Abbildung 4.2: Wie 4.1 für den Fall der Touch-and-Go-Bifurkation.

$\varepsilon < 0$, es handelt sich also um die Bahn mit anderem σ . Die hier dargestellte Bifurkation nennt man *Touch-and-Go-Bifurkation*.

4.4 Folgen von Bifurkationen

Bei der Untersuchung spezieller Hamiltonscher Systeme beobachtet man häufig, daß die von Mayer klassifizierten generischen Bifurkationen in organisierten Folgen auftreten. Beispiele für solche Folgen wurden von Mao und Delos ([Mao92]) für das diamagnetische Keplerproblem beschrieben. Auch in den hier zu behandelnden Beispiel aus Kapitel 3.2 tritt eine Folge von zwei Bifurkationen auf. Wie Sadovskii, Shaw und Delos zeigten ([Sad95], [Sad96]), kann man diese Folgen analytisch beschreiben, wenn man höhere Terme der Normalformentwicklung berücksichtigt.

Wir benutzen also im folgenden alle Terme der Entwicklung (4.17) bis einschließlich dritter Ordnung in I , wobei wir den b' -Term wie oben durch geeignete Wahl einer Bezugsrichtung für φ eliminieren können:

$$\Phi = \varepsilon I + aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) + cI^3 + dI^3 \cos(4\varphi) + eI^3 \sin(4\varphi). \quad (4.25)$$

Diese Normalform kann durch kanonische Transformationen weiter vereinfacht werden, wobei die Transformationen nur bis zu Termen der Ordnung I^3 durchgeführt werden müssen, da höhere Terme ohnehin vernachlässigt worden sind.

Wir beginnen mit einer Transformation auf neue Koordinaten $\hat{I}, \hat{\varphi}$, die erzeugt wird durch die Funktion

$$\mathcal{F}_2 = -\hat{I}\varphi + \frac{e}{8b}\hat{I}^2, \quad (4.26)$$

also

$$\begin{aligned} I &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \varphi} = \hat{I}, \\ \hat{\varphi} &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \hat{I}} = \varphi - \frac{e}{4b}\hat{I}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}\sin(4\varphi) &= \sin(4\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}), \\ \cos(4\varphi) &= \cos(4\hat{\varphi}) - \sin(4\hat{\varphi})\frac{e}{b}\hat{I} + \mathcal{O}(\hat{I}^2)\end{aligned}\quad (4.28)$$

und

$$\begin{aligned}\Phi &= \varepsilon\hat{I} + a\hat{I}^2 + b\hat{I}^2 \left(\cos(4\hat{\varphi}) - \frac{e}{b}\hat{I} \sin(4\hat{\varphi}) \right) \\ &\quad + c\hat{I}^3 + d\hat{I}^3 \cos(4\hat{\varphi}) + e\hat{I}^3 \sin(4\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^4) \\ &= \varepsilon\hat{I} + a\hat{I}^2 + b\hat{I}^2 \cos(4\hat{\varphi}) + c\hat{I}^3 + d\hat{I}^3 \cos(4\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^4)\end{aligned}\quad (4.29)$$

Da wir diese Transformation jederzeit durchführen können, können wir in (4.25) $e = 0$ annehmen und erhalten die Normalform

$$\Phi = \varepsilon I + aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) + cI^3 + dI^3 \cos(4\varphi). \quad (4.30)$$

Diese vereinfachen wir nun weiter durch eine kanonische Transformation mit der Erzeugenden

$$\mathcal{F}_2 = -\hat{I}\varphi - \hat{I}^2 f(\varphi) - \hat{I}^3 g(\varphi) \quad (4.31)$$

mit

$$\begin{aligned}f(\varphi) &= \lambda \sin(4\varphi) \\ g(\varphi) &= 4\lambda^2 (\sin(4\varphi) \cos(4\varphi) - 4\varphi)\end{aligned}\quad (4.32)$$

und einem freien Parameter λ .

Die Transformationgleichungen lauten

$$\begin{aligned}I &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \varphi} = \hat{I} + \hat{I}^2 f'(\varphi) + \hat{I}^3 g'(\varphi), \\ \hat{\varphi} &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \hat{I}} = \varphi + 2\hat{I}f(\varphi) + 3\hat{I}^2 g(\varphi) \\ &= \varphi + 2\hat{I}f(\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^2).\end{aligned}\quad (4.33)$$

Aus diesen Gleichungen folgt weiter

$$\begin{aligned}\varphi &= \hat{\varphi} - 2\hat{I}f(\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^2), \\ \cos(4\varphi) &= \cos\left(4\hat{\varphi} - 8\hat{I}f(\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^2)\right) \\ &= \cos(4\hat{\varphi}) + 8\hat{I}f(\hat{\varphi})\sin(4\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^2), \\ I &= \hat{I} + \hat{I}^2 f'(\hat{\varphi} - 2\hat{I}f(\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^2)) + \hat{I}^3 g'(\hat{\varphi} + \mathcal{O}(\hat{I})) \\ &= \hat{I} + \hat{I}^2 f'(\hat{\varphi}) + \hat{I}^3 [g'(\hat{\varphi}) - 2f(\hat{\varphi})f''(\hat{\varphi})] + \mathcal{O}(\hat{I}^4), \\ I^2 &= \hat{I}^2 + 2\hat{I}^3 f'(\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^4), \\ I^3 &= \hat{I}^3 + \mathcal{O}(\hat{I}^4).\end{aligned}$$

Damit ergibt sich die transformierte Hamiltonfunktion zu

$$\begin{aligned}
\Phi &= \varepsilon \left\{ \hat{I} + \hat{I}^2 f'(\hat{\varphi}) + \hat{I}^3 [g'(\hat{\varphi}) - 2f(\hat{\varphi})f''(\hat{\varphi})] \right\} \\
&\quad + a(\hat{I}^2 + 2\hat{I}^3 f'(\hat{\varphi})) \\
&\quad + b(\hat{I}^2 + 2\hat{I}^3 f'(\hat{\varphi})) (\cos(4\hat{\varphi}) + 8\hat{I}f(\hat{\varphi})\sin(4\hat{\varphi})) \\
&\quad + c\hat{I}^3 + d\hat{I}^3 \cos(4\hat{\varphi}) + \mathcal{O}(\hat{I}^4) \\
&= \varepsilon \hat{I} + \hat{I}^2 (\varepsilon f'(\hat{\varphi}) + a + b \cos(4\hat{\varphi})) \\
&\quad + \hat{I}^3 \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon g'(\hat{\varphi}) - 2\varepsilon f(\hat{\varphi})f''(\hat{\varphi}) \\ + 2af'(\hat{\varphi}) + 8bf(\hat{\varphi})\sin(4\hat{\varphi}) + 2bf'(\hat{\varphi})\cos(4\hat{\varphi}) \\ + c + d\cos(4\hat{\varphi}) \end{array} \right\} \\
&\quad + \mathcal{O}(\hat{I}^4) \\
&\stackrel{(4.32)}{=} \varepsilon \hat{I} + a\hat{I}^2 + (b + 4\lambda\varepsilon)\hat{I}^2 \cos(4\hat{\varphi}) \quad . \quad (4.34) \\
&\quad + (c + 8b\lambda)\hat{I}^3 + (d + 8a\lambda)\hat{I}^3 \cos(4\hat{\varphi}) \\
&\quad + \mathcal{O}(\hat{I}^4)
\end{aligned}$$

Durch die Wahl $\lambda = -\frac{d}{8a}$ können wir erreichen, daß der zu $\hat{I}^3 \cos(4\hat{\varphi})$ proportionale Term entfällt. Mit neuen Bezeichnungen für die Koeffizienten erhalten wir also für die Normalform in 3. Ordnung in I endgültig

$$\Phi = \varepsilon I + aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) + cI^3 . \quad (4.35)$$

Die stationären Punkte dieser Normalform außer dem zentralen stationären Punkt bei $I = 0$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = -4bI^2 \sin(4\varphi) , \\
0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \Phi}{\partial I} = \varepsilon + 2aI + 2bI \cos(4\varphi) + 3cI^2 .
\end{aligned} \quad (4.36)$$

Aus der ersten dieser Gleichungen folgt wieder

$$\begin{aligned}
\sin(4\varphi) &= 0 , \\
\cos(4\varphi) &= \sigma = \pm 1 .
\end{aligned}$$

Die zweite Gleichung

$$\varepsilon + 2(a + \sigma b)I + 3cI^2 = 0$$

hat für festes σ die beiden Lösungen

$$I_{\sigma\pm} = -\varrho_\sigma \pm \sqrt{\zeta + \varrho_\sigma^2} \quad (4.37)$$

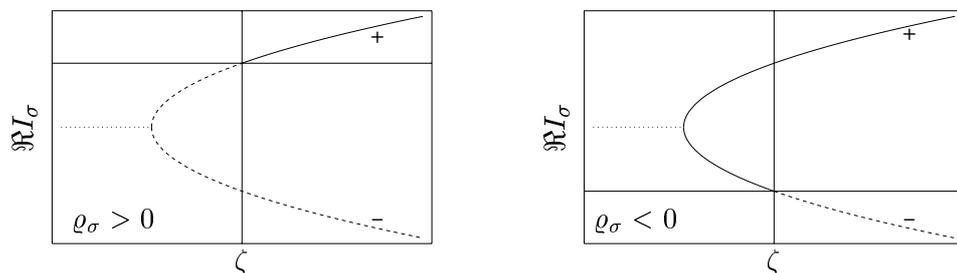


Abbildung 4.3: An der Abhängigkeit $I_\sigma(\zeta)$ werden die Bifurkationen sichtbar. ausgezogen: reelle Bahn; gestrichelt: komplexe Bahn mit reeller Wirkung; punktiert: zwei konjugiert komplexe Bahnen.

mit den Abkürzungen

$$\zeta = -\frac{\varepsilon}{3c} \quad \varrho_\sigma = \frac{a + \sigma b}{3c} \quad (4.38)$$

Wir untersuchen zunächst das Verhalten der beiden Bahnen zu gegebenem σ : Die beiden Lösungen $I_{\sigma\pm}$ sind reell für $\zeta > -\varrho_\sigma^2$, konjugiert komplex zueinander für $\zeta < \varrho_\sigma^2$. Abb. 4.3 zeigt schematisch den Verlauf der Lösungen $I_\sigma(\zeta)$.

- $\varrho_\sigma > 0$

In diesem Fall ist $I_{\sigma-}$ negativ für $\zeta > -\varrho_\sigma^2$; $I_{\sigma+}$ ist negativ für $-\varrho_\sigma^2 < \zeta < 0$ und positiv für $\zeta > 0$.

Für die periodischen Bahnen bedeutet dies:

Die „ $\sigma+$ “-Bahn ist für $\zeta > 0$ reell, zieht sich für $\zeta \rightarrow 0$ auf die zentrale Bahn bei $I = 0$ zusammen und wird für $\zeta < 0$ komplex. Bei $\zeta = -\varrho_\sigma^2$ kollidiert die „ $\sigma+$ “-Bahn mit der bis dahin komplexen „ $\sigma-$ “-Bahn, und beide Bahnen werden zueinander konjugiert komplex.

- $\varrho_\sigma < 0$

In diesem Fall ist $I_{\sigma+}$ positiv für $\zeta > -\varrho_\sigma^2$; $I_{\sigma-}$ ist positiv für $-\varrho_\sigma^2 < \zeta < 0$ und negativ für $\zeta > 0$.

Für die periodischen Bahnen bedeutet dies:

Die „ $\sigma-$ “-Bahn ist für $\zeta > 0$ komplex, zieht sich für $\zeta \rightarrow 0$ auf die zentrale Bahn bei $I = 0$ zusammen und wird für $\zeta < 0$ reell. Bei $\zeta = -\varrho_\sigma^2$ kollidiert die „ $\sigma-$ “-Bahn mit der bis dahin reellen „ $\sigma+$ “-Bahn, und beide Bahnen werden komplex.

Falls $|a| > |b|$ gilt, haben ϱ_+ und ϱ_- gleiches Vorzeichen, ansonsten haben sie verschiedene Vorzeichen. Damit ergeben sich für das Verhalten der vier Satellitenbahnen folgende vier Szenarien, die in Abb. 4.4 schematisch dargestellt sind:

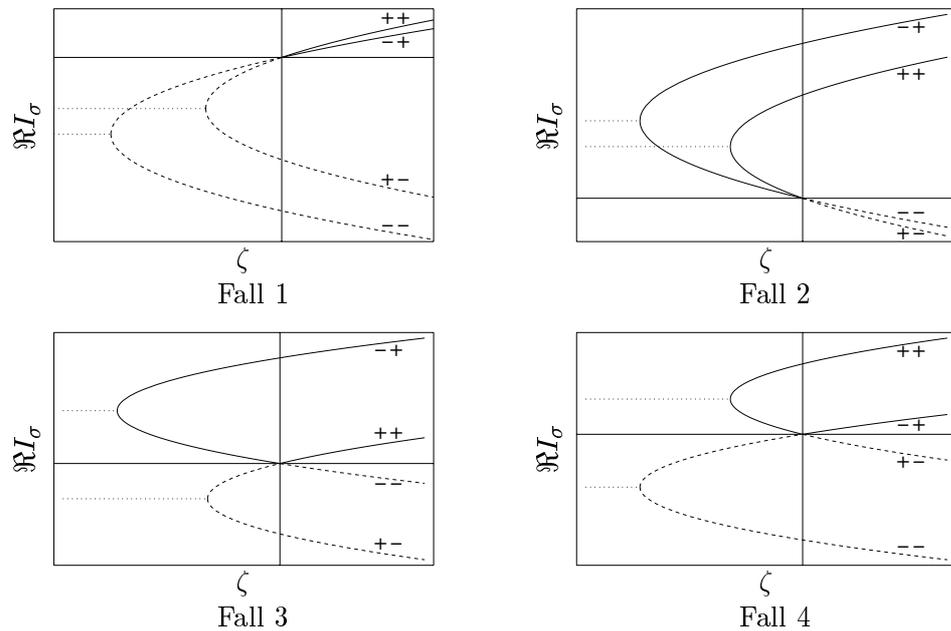


Abbildung 4.4: Wie Abb. 4.3. Durch die Darstellung aller Satellitenbahnen erkennt man die Abfolge der Bifurkationen.

1. $|a| > |b|, \varrho_{\pm} > 0$
 Die Bahnen „++“ und „-+“ sind für $\zeta > 0$ reell. Für $\zeta \rightarrow 0$ ziehen sie sich auf die zentrale Bahn zusammen und werden für $\zeta < 0$ komplex. Diese drei Bahnen bilden bei $\zeta = 0$ also die in Kapitel 4.3 beschriebene Island-Chain-Bifurkation. Bei $\zeta = -\varrho_{\sigma}^2$ kollidiert jeweils die „ $\sigma+$ “-Bahn mit der „ $\sigma-$ “-Bahn, und die beiden Bahnen werden konjugiert komplex zueinander.
2. $|a| > |b|, \varrho_{\pm} < 0$
 Die Bahnen „+-“ und „--“ bilden zusammen mit der zentralen Bahn bei $\zeta = 0$ eine Island-Chain-Bifurkation, wobei die Satellitenbahnen hier allerdings für $\zeta < 0$ reell sind. Bei $\zeta = -\varrho_{\sigma}^2$ kollidiert die reelle „ $\sigma-$ “-Bahn mit der ebenfalls reellen „ $\sigma+$ “-Bahn, und die Bahnen werden konjugiert komplex zueinander.
3. $|a| < |b|, \varrho_- < 0 < \varrho_+$
 Bei $\zeta > 0$ ist die „++“-Bahn reell, die „--“-Bahn komplex. Für $\zeta \rightarrow 0$ ziehen sich die beiden Bahnen auf die zentrale Bahn zusammen und bilden dort eine Touch-and-Go-Bifurkation. Bei $\zeta = -\varrho_+^2$ kollidiert die nun komplexe „++“-Bahn mit der ebenfalls komplexen „+-“-Bahn, und die beiden werden zueinander konjugiert komplex. Ebenso kollidieren die reellen Bahnen „--“ und „-+“ bei $\zeta = -\varrho_-^2$ und werden konjugiert komplex.

4. $|a| < |b|$, $\varrho_+ < 0 < \varrho_-$

Dieser Fall entspricht Fall 3, wobei $\sigma = +1$ und $\sigma = -1$ die Rollen tauschen.

Das unter Fall 1 beschriebene Szenario ist dem Beispiel aus Kapitel 3.2 (vgl. insbesondere Abb. 3.6) bereits recht ähnlich, von den beiden isochronen Bifurkationen tritt in unserem Beispiel allerdings nur eine auf, und die „--“-Bahn hat im Beispiel keine Entsprechung. Dies legt es nahe, noch eine andere Darstellung der Normalform zu wählen.

Wir setzen in (4.34) $\lambda = \frac{d-c}{8(b-c)}$ und führen wieder neue Bezeichnungen ein. Damit erhalten wir die Normalform

$$\Phi = \varepsilon I + aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) + cI^3(1 + \cos(4\varphi)) . \quad (4.39)$$

Die Gleichungen der stationären Punkte lauten hier

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = -4I^2(b + cI) \sin(4\varphi) , \\ 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \Phi}{\partial I} = \varepsilon + 2aI + 2bI \cos(4\varphi) + 3cI^2(1 + \cos(4\varphi)) . \end{aligned} \quad (4.40)$$

Wiederum folgt

$$\begin{aligned} \sin(4\varphi) &= 0 , \\ \cos(4\varphi) &= \sigma = \pm 1 , \end{aligned}$$

und

$$\varepsilon + 2(a + \sigma b)I + 3cI^2(1 + \sigma) = 0 . \quad (4.41)$$

Für $\sigma = +1$ entspricht dies der Gleichung (4.36), liefert also die bekannte Abfolge von Periodenvervierfachung und isochroner Bifurkation. Für $\sigma = -1$ entfällt jedoch der Term dritter Ordnung, und wie bei der Diskussion der Normalform zweiter Ordnung tritt nur die Bahn auf, die an der Periodenvervierfachung unmittelbar beteiligt ist, die „--“-Bahn aus der obigen Diskussion entfällt. Die von der modifizierten Normalform beschriebene Abfolge von Bifurkationen ist Abb. 4.5 dargestellt.

Daß zwei Darstellungen der Normalform, die durch kanonische Transformationen miteinander verknüpft sind, qualitativ unterschiedliches Verhalten zeigen können, liegt daran, daß die Transformationen nur bis auf Terme der Ordnung I^3 richtig ausgeführt wurden. Wenn man die Bestimmung der stationären Punkte direkt an der Normalform (4.30) durchführt, kann man zeigen, daß I_{--} für $c - d \rightarrow 0$ gegen ∞ divergiert, die „--“-Bahn sich also aus dem Gültigkeitsbereich der Normalformentwicklung entfernt.

Genauer liegen die stationären Punkte der neuen Normalform für $\sigma = +1$ bei

$$I_{\pm} = -\frac{a+b}{6c} \pm \sqrt{-\frac{\varepsilon}{6c} + \left(\frac{a+b}{6c}\right)^2}$$

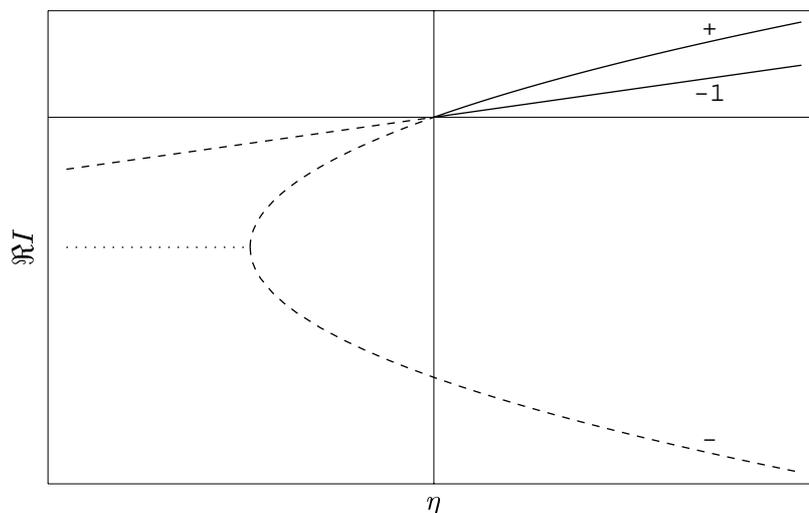


Abbildung 4.5: Das hier betrachtete Bifurkationsszenario der modifizierten Normalform (4.39).

und für $\sigma = -1$ bei

$$I_{-1} = -\frac{\varepsilon}{2(a-b)}.$$

Von nun an nehmen wir $c < 0$ an. Wie man durch eine Diskussion ähnlich der obigen zeigen kann, ist nur in diesem Fall eine Island-Chain-Bifurkation bei $\varepsilon = 0$ möglich, in der reelle Bahnen für $\varepsilon > 0$ auftreten. Dies ist jedoch der Fall, der im Beispiel aus Kapitel 3.2 vorliegt und der uns hier allein interessiert. Unter dieser Voraussetzung kann man schreiben

$$I_{\pm} = -c^{-1/3} \left(\delta \pm \sqrt{\eta + \delta^2} \right) \quad (4.42)$$

mit

$$\begin{aligned} \eta &= -\frac{\varepsilon}{6c^{1/3}}, \\ \delta &= \frac{a+b}{6c^{2/3}}. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Aus der Zerlegung

$$\Phi = \left(\frac{1}{3}I + \frac{a+b}{18c} \right) \frac{\partial \Phi}{\partial I} - 4c^{1/3} (\eta + \delta^2) I + 2\eta\delta \quad \text{für } \cos(4\varphi) = +1,$$

die sich durch Polynomdivision gewinnen läßt, oder durch direktes Einsetzen

erhält man die Wirkungen der periodischen Bahnen zu

$$\begin{aligned}
\Phi_{\pm} &= \Phi(I_{\pm}, \sigma = +1) \\
&= -4c^{1/3} (\eta + \delta^2) I_{\pm} + 2\eta\delta, \\
&= +4 (\eta + \delta^2) \left(\delta \pm \sqrt{\eta + \delta^2} \right) + 2\eta\delta \\
\Phi_{-1} &= \Phi(I_{-1}, \sigma = -1) = -\frac{\varepsilon^2}{4(a-b)}, \\
\Phi_0 &= \Phi(I = 0) = 0.
\end{aligned} \tag{4.44}$$

Außerdem benötigen wir im nächsten Kapitel die Hesse–Determinanten der Wirkung in den stationären Punkten. Dabei können wir prinzipiell ein beliebiges Koordinatensystem zugrunde legen; da aber das Polarkoordinatensystem bei $I = 0$ singulär ist und wir daher keine Hesse–Determinante für die zentrale Bahn bestimmen können, verwenden wir hierfür kartesische Koordinaten.

Mit Hilfe der Transformationgleichungen (4.14) und der Beziehung

$$\cos(4\varphi) = \cos^4 \varphi - 6 \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^4 \varphi$$

können wir die Normalform in kartesischen Koordinaten ausdrücken:

$$\begin{aligned}
\Phi &= \frac{\varepsilon}{2}(p^2 + q^2) + \frac{a}{4}(p^4 + 2p^2q^2 + q^4) \\
&\quad + \frac{b}{4}(p^4 - 6p^2q^2 + q^4) + \frac{c}{4}(p^6 - p^4q^2 - p^2q^4 + q^6). \tag{4.45}
\end{aligned}$$

Für die Hesse–Determinanten gilt dann, wenn Indizes p, q partielle Ableitungen bedeuten:

$$\begin{aligned}
\text{Hess } \Phi &= \Phi_{pp}\Phi_{qq} - \Phi_{pq}\Phi_{qp} \\
&= \left\{ \varepsilon + 3(a-b)p^2 + (a-3b)q^2 + \frac{c}{2}(15p^4 - 6p^2q^2 - q^4) \right\} \times \\
&\quad \left\{ \varepsilon + (a-3b)p^2 + 3(a+b)q^2 - \frac{c}{2}(p^4 + 6p^2q^2 - 15q^4) \right\} \\
&\quad - 4p^2q^2 \left\{ a - 3b - c(p^2 + q^2) \right\}^2
\end{aligned} \tag{4.46}$$

In diesem Ausdruck setzen wir nun $p = q = 0$ für die zentrale Bahn, $\varphi = 0$, also $p = 0, q = \sqrt{2I_{\pm}}$ für $\sigma = +1$ und $\varphi = \frac{\pi}{4}$, also $p = q = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{2I_{-1}} = \sqrt{I_{-1}}$ für $\sigma = -1$. Damit ergeben sich die Hesse–Determinanten der vier periodischen Bahnen zu

$$\begin{aligned}
\text{Hess}_{\pm} &= \left\{ \varepsilon + 2(a-3b)I_{\pm} - 2cI_{\pm}^2 \right\} \left\{ \varepsilon + 6(a+b)I_{\pm} + 30cI_{\pm}^2 \right\}, \\
\text{Hess}_{-1} &= \left\{ \varepsilon + 4aI_{-1} + 4cI_{-1}^2 \right\}^2 - 4I_{-1}^2 \left\{ a - 3b - 2cI_{-1} \right\}^2, \\
\text{Hess}_0 &= \varepsilon^2.
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Kapitel 5

Gleichmäßige Näherung

5.1 Herleitung der gleichmäßigen Näherung

Nachdem wir einen analytischen Ausdruck gefunden haben, mit dem wir die Wirkungen der periodischen Bahnen in der Nähe der untersuchten Bifurkation beschreiben können, haben wir nun den kollektiven Beitrag dieser Bahnen zur quantenmechanischen Zustandsdichte zu bestimmen. Bei der Herleitung der Integraldarstellung (5.10) für die gleichmäßige Näherung lassen wir uns durch das Vorgehen von Sieber ([Sie96, Abschnitt 2]) leiten.

Unser Ausgangspunkt ist die semiklassische Greensche Funktion (2.29), in der wir hier nur den Beitrag einer einzigen klassischen Bahn berücksichtigen:

$$G(\vec{x}'\vec{x}, E) = \frac{1}{i\hbar\sqrt{2\pi i\hbar}} \sqrt{|D|} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\vec{x}'\vec{x}, E) - i\frac{\pi}{2}\nu \right\}. \quad (5.1)$$

Dabei ist S die Wirkung der Bahn, ν ihr Maslov-Index und

$$D = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial \vec{x}' \partial \vec{x}} & \frac{\partial^2 S}{\partial \vec{x}' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial \vec{x}} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{pmatrix}.$$

Wir führen nun wie in Kapitel 4 räumliche Koordinaten (y, z) ein, so daß z entlang der zentralen periodischen Bahn mit jedem Umlauf um 2π zunimmt und y den Abstand von der periodischen Bahn mißt. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \text{Tr } G &= \int d^2 x' d^2 x \delta(\vec{x}' - \vec{x}) G(\vec{x}'\vec{x}, E) \\ &= \frac{1}{i\hbar\sqrt{2\pi i\hbar}} \int d^2 x' d^2 x \delta(z' - z) \delta(y' - y) \sqrt{|D|} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\vec{x}'\vec{x}, E) - i\frac{\pi}{2}\nu \right\} \\ &= \frac{1}{i\hbar m \sqrt{2\pi i\hbar}} \int dy' dz dy \delta(y' - y) \sqrt{|D|} \\ &\quad \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\vec{x}'\vec{x}, E) - i\frac{\pi}{2}\nu \right\} \Bigg|_{z'=z+2\pi m}. \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde die Integration über z' ausgeführt. In der Nähe einer $\frac{n}{m}$ -Resonanz betrachten wir wie bereits in Kapitel 4.2 die m -fache Wiederholung der bifurkierenden Bahn als die zentrale periodische Bahn. Die Integration über z erstreckt sich dann über m primitive Perioden, obwohl sie ursprünglich nur eine umfassen darf. Dies wird durch den Vorfaktor $\frac{1}{m}$ ausgeglichen.

Wie wir in Kapitel 2.1 gesehen haben, können wir die Wirkungsfunktion $S(y', z' = z + 2\pi m, y, z)$ als erzeugende Funktion der Poincaré-Abbildung vom Typ \mathcal{F}_1 auffassen. Bei Auftreten einer Resonanz ist jedoch die Poincaré-Abbildung in linearer Näherung gleich der Identität, für die keine \mathcal{F}_1 -Erzeugende existiert. Wir gehen daher zu einer \mathcal{F}_2 -Erzeugenden über, indem wir die Integraldarstellung

$$\delta(y' - y) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p'_y (y - y') \right\}$$

einsetzen und das Integral über y' in Stationäre-Phase-Näherung ausführen. Die Stationaritätsbedingung lautet

$$\frac{\partial S}{\partial y'} - p'_y = 0, \quad (5.2)$$

und man erhält

$$\text{Tr } G = \frac{1}{2\pi i m \hbar^2} \int dy dz dp'_y \sqrt{|D|}|_{\text{SP}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\hat{S} + y p'_y \right) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} \frac{1}{\sqrt{\left| \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2} \right|}}. \quad (5.3)$$

Dabei ist

$$\hat{S}(z' p'_y z y, E) = S(z' y' z y, E) - y' p'_y |_{\text{SP}} \quad (5.4)$$

wegen (5.2) die Legendre-Transformierte von S bezüglich y' und

$$\hat{\nu} = \begin{cases} \nu & : \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2} > 0 \\ \nu + 1 & : \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2} < 0 \end{cases}. \quad (5.5)$$

Als allgemeine Eigenschaft der Legendre-Transformation gilt, wenn u und v je eine der an der Transformation nicht beteiligten Variablen z, z', y und E bezeichnen,

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial u} = \frac{\partial S}{\partial u}, \quad \frac{\partial \hat{S}}{\partial p'_y} = -y'.$$

Daraus folgt für die zweiten Ableitungen

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 S}{\partial u \partial v} &= \frac{\partial}{\partial u} \frac{\partial \hat{S}}{\partial v} \\ &= \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial u \partial v} + \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial v} \frac{\partial p'_y}{\partial u} \Big|_{y'}\end{aligned}\quad (5.6)$$

und

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 S}{\partial u \partial y'} &= \frac{\partial p'_y}{\partial u} \\ &= \frac{\partial}{\partial y'} \frac{\partial \hat{S}}{\partial u} \\ &= \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial u} \frac{\partial p'_y}{\partial y'} = \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial u} \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2}.\end{aligned}\quad (5.7)$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned}D &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial z' \partial z} & \frac{\partial^2 S}{\partial y' \partial z} & \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial z} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial z' \partial y} & \frac{\partial^2 S}{\partial y' \partial y} & \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial y} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial z' \partial E} & \frac{\partial^2 S}{\partial y' \partial E} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial z} + \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial z'} \frac{\partial p'_y}{\partial z} & \frac{\partial p'_y}{\partial z} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E \partial z} + \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial E} \frac{\partial p'_y}{\partial z} \\ \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial z'} \frac{\partial p'_y}{\partial y} & \frac{\partial p'_y}{\partial y} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial E} \frac{\partial p'_y}{\partial y} \\ \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial E} + \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial z'} \frac{\partial p'_y}{\partial E} & \frac{\partial p'_y}{\partial E} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E^2} + \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial E} \frac{\partial p'_y}{\partial E} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Die zweiten Summanden in der ersten und dritten Spalte dieser Matrix sind linear abhängig von der zweiten Spalte und können daher entfallen. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}D &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial z} & \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial z} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E \partial z} \\ \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial y} & \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial y} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E \partial y} \\ \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial E} & \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial E} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E^2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\partial^2 S}{\partial y'^2} \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial z} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial z} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E \partial z} \\ \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial y} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial y} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E \partial y} \\ \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial z' \partial E} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y \partial E} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial E^2} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (5.8)$$

Bezeichnen wir die hier verbleibende Determinante mit \hat{D} , so folgt aus (5.3)

$$\text{Tr } G = \frac{1}{2\pi i m \hbar^2} \int dy dz dp'_y \sqrt{|\hat{D}|} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\hat{S} + yp'_y \right) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} \Big|_{z'=z+2\pi m}.$$

Wie in Kapitel 2.3 gilt wegen unserer Wahl der z -Koordinate entlang der periodischen Bahn

$$\hat{D} = \frac{1}{\dot{z}\dot{z}'} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y}.$$

Damit kann die Integration über z wieder trivial ausgeführt werden und liefert die für einen Umlauf benötigte Zeit. Diese Zeit hängt von den Koordinaten y und p'_y ab und ist von der Periodendauer der zentralen periodischen Bahn im allgemeinen etwas verschieden. Wir schreiben sie daher als $\frac{\partial \hat{S}}{\partial E}(y, p'_y)$:

$$\text{Tr } G = \frac{1}{2\pi i m \hbar^2} \int dy dp'_y \frac{\partial \hat{S}}{\partial E} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right|} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\hat{S} + y p'_y) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\}. \quad (5.9)$$

Für den Beitrag der betrachteten Bahnen zur semiklassischen Zustandsdichte erhalten wir daraus

$$\begin{aligned} d(E) &= -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr } G \\ &= \frac{1}{2\pi^2 m \hbar^2} \Re \int dy dp'_y \frac{\partial \hat{S}}{\partial E} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right|} \\ &\quad \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\hat{S} + y p'_y) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Die hier im Exponenten stehende Funktion

$$f(y, p'_y, E) := \hat{S}(y, p'_y, E) + y p'_y \quad (5.11)$$

müssen wir nun zu bekannten Funktionen in Beziehung setzen. Die einzige Information, die wir über f haben, ist die Verteilung ihrer stationären Punkte: Diese entsprechen nach Kapitel 4.2 den periodischen Bahnen des Systems.

Die Klassifikation reeller Funktionen im Hinblick auf die Verteilung ihrer stationären Punkte ist Aufgabe der mathematischen *Katastrophentheorie* (vgl. [Pos78]). Dort werden zwei Scharen von Funktionen Φ_1 und Φ_2 , die im Ursprung jeweils einen stationären Punkt aufweisen und dort den Wert 0 haben, als äquivalent betrachtet, wenn es eine Schar von Diffeomorphismen $\psi(E)$ gibt, so daß gilt

$$\Phi_2(\vec{x}, E) = \Phi_1(\psi(\vec{x}, E), E). \quad (5.12)$$

Dabei steht E für den (oder die) Scharparameter.

Die in einem gewissen Sinne einfachsten Typen von Funktionen wurden von Thom vollständig bezüglich dieser Äquivalenzrelation klassifiziert; man

bezeichnet sie als die sieben *elementaren Katastrophen*. Jede dieser Klassen wird repräsentiert durch ein Polynom in einer oder zwei Variablen. In den bisherigen Arbeiten von Main und Wunner ([Mai97a], [Mai98a]) ist es gelungen, die fragliche Funktion f durch einen Diffeomorphismus zu einer dieser sieben Standardformen in Beziehung zu setzen.

In unserem Fall gelingt die Identifikation mit einer elementaren Katastrophe nicht. Wir wissen jedoch aus Kapitel 4.2, daß die Normalform die gleichen stationären Punkte aufweist wie die Funktion f und durch eine Koordinatentransformation mit dieser verbunden ist. Deshalb kann uns die Normalform als analytisch bekannter Repräsentant der Äquivalenzklasse dienen. Dies führt auf den Ansatz

$$f(y, p'_y, E) = S_0(E) + \Phi(\psi(y, p'_y, E), E) . \quad (5.13)$$

Dabei ist ψ eine (unbekannte) Koordinatentransformation mit $\psi(0, E) = 0$ und $S_0(E)$ die Wirkung der zentralen periodischen Bahn. Die Möglichkeit, an dieser Stelle die Normalform zu verwenden, bedeutet insbesondere, daß mit der Normalformtheorie ein Verfahren zur Verfügung steht, mit dem man für jede Bifurkation systematisch eine Ansatzfunktion Φ konstruieren kann.

Mit den neuen Koordinaten $(Y, P'_Y) = \psi(y, p'_y)$ und der Jacobi-Matrix $\text{Jac } \psi$ von ψ gilt

$$d(E) = \frac{1}{2\pi^2 m \hbar^2} \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0(E) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} \\ \int dY dP'_Y \frac{\partial \hat{S}}{\partial E} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right|} \frac{1}{|\det \text{Jac } \psi|} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Phi(Y, P'_Y) \right\} .$$

Aus (5.13) folgt durch zweimaliges Ableiten die Matrixgleichung

$$\frac{\partial^2 f}{\partial (y, p'_y)^2} = (\text{Jac } \psi)^T \frac{\partial^2 \Phi}{\partial (Y, P'_Y)^2} \text{Jac } \psi ,$$

also gilt für die Determinanten

$$|\det \text{Jac } \psi| = \sqrt{\frac{|\text{Hess } f|}{|\text{Hess } \Phi|}} . \quad (5.14)$$

Damit ergibt sich die Zustandsdichte schließlich zu

$$d(E) = \frac{1}{2\pi^2 m \hbar^2} \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0(E) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} \\ \int dY dP'_Y \frac{\partial \hat{S}}{\partial E} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right|} \sqrt{\frac{|\text{Hess } \Phi|}{|\text{Hess } f|}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Phi(Y, P'_Y) \right\} . \quad (5.15)$$

Im Integranden des hier verbleibenden Integrals steht im Exponenten die aus dem letzten Kapitel bekannte Normalform, deren Parameter allerdings noch zu bestimmen sind. Hingegen ist der Vorfaktor der Exponentialfunktion

$$X := \frac{\partial \hat{S}}{\partial E} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right|} \sqrt{\frac{|\text{Hess } \Phi|}{|\text{Hess } f|}} \quad (5.16)$$

gänzlich unbekannt. Um das Integral auswerten zu können, müssen wir also einen Zusammenhang der hier auftretenden Terme mit den Bahndaten der klassischen periodischen Bahnen des Systems herstellen. Da diese Bahnen den stationären Punkten der Normalform entsprechen, untersuchen wir also das Verhalten des Vorfaktors in den stationären Punkten des Exponenten.

Aus der Definition (5.11) ergibt sich die Hessesche Matrix von f zu

$$\frac{\partial^2 f}{\partial (y, p'_y)^2} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} - 1 \\ \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} - 1 & \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y{}^2} \end{pmatrix}$$

und damit die Hesse-Determinante

$$\begin{aligned} \text{Hess } f &= \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y{}^2} - \left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} - 1 \right)^2 \\ &= - \left(1 + \left(\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right)^2 - \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p'_y{}^2} \right) + 2 \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y}. \end{aligned}$$

Mit Gleichung (2.16) folgt

$$\text{Hess } f \stackrel{\text{sP}}{=} -(\text{Tr } M - 2) \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \quad (5.17)$$

und

$$\sqrt{\frac{1}{|\text{Hess } f|}} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial y \partial p'_y} \right|} \stackrel{\text{sP}}{=} \frac{1}{\sqrt{|\text{Tr } M - 2|}}. \quad (5.18)$$

Außerdem benutzen wir, daß $\frac{\partial \hat{S}}{\partial E}$ in einem stationären Punkt die Zeit angibt, die auf der entsprechenden periodischen Bahn zwischen Start- und Zielpunkt benötigt wird. Für die zentrale Bahn ist dies die m -fache primitive Periodendauer mT_0 , für die Satellitenbahnen jedoch nur die einfache primitive Periode T_s .

Mit diesen Ergebnissen folgt

$$X \stackrel{\text{sP}}{=} \frac{\{m\}T}{\sqrt{|\text{Tr } M - 2|}} \sqrt{|\text{Hess } \Phi|} \quad (5.19)$$

wobei die Notation $\{m\}$ anzeigen soll, daß der Faktor für Satellitenbahnen wegzulassen ist. Dieser Ausdruck läßt sich berechnen, sobald die Parameter der Normalform Φ bestimmt sind.

Mit Hilfe der Beziehung (5.19) können wir uns davon überzeugen, daß die Integralformel (5.15) in großer Entfernung vom Bifurkationspunkt in die Gutzwillersche Spurformel übergeht: Wenn die Abstände der stationären Punkte voneinander groß sind, wird es wieder möglich, das Integral in der Stationäre-Phase-Näherung auszuwerten.

Wir betrachten zunächst den Beitrag des stationären Punktes bei $Y' = P_Y = 0$, der der zentralen periodischen Bahn entspricht. Wenn wir $\Phi(0) = 0$ und (5.19) benutzen und die Zahl der negativen Eigenwerte der Hesse-Matrix $\left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial (Y', P_Y)^2} \right|_0$ mit λ bezeichnen, ergibt sich dieser Beitrag zu

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi^2 m \hbar^2} \frac{m T_0}{\sqrt{\text{Tr } M_0 - 2}} \sqrt{|\text{Hess } \Phi|_0} \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0 - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} (2\pi i \hbar) \frac{\exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} \lambda \right\}}{\sqrt{|\text{Hess } \Phi|_0}} \\ &= \frac{1}{\pi \hbar} \frac{T_0}{\sqrt{\text{Tr } M_0 - 2}} \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0 - i \frac{\pi}{2} (\hat{\nu} + \lambda - 1) \right\}. \end{aligned}$$

Dies ist gerade der Gutzwiller-Summand der zentralen Bahn, wenn wir $\hat{\nu} + \lambda - 1$ mit dem Maslov-Index der Bahn identifizieren.

Die Satellitenbahnen liefern nur bei solchen Energien Beiträge, bei denen sie reell sind. In diesem Fall entsprechen jeder Satellitenbahn m Fixpunkte der Poincaré-Abbildung, also auch m stationäre Punkte der Normalform, die zusammen den Beitrag

$$\begin{aligned} & m \frac{1}{2\pi^2 m \hbar^2} \frac{T_s}{4\sqrt{\text{Tr } M_s - 2}} \sqrt{|\text{Hess } \Phi|_s} \\ & \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0 - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} (2\pi i \hbar) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Phi_s \right\} \frac{\exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} \lambda' \right\}}{\sqrt{|\text{Hess } \Phi|_s}} \\ &= \frac{1}{\pi \hbar} \frac{T_s}{\sqrt{\text{Tr } M_s - 2}} \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_s - i \frac{\pi}{2} (\hat{\nu} + \lambda' - 1) \right\}. \end{aligned}$$

liefern. Dabei ist die Zahl der negativen Eigenwerte von $\left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial (Y', P_Y)^2} \right|_s$ mit λ' bezeichnet, und wir haben benutzt, daß $S_0(E) + \Phi_s$ nach unserem Ansatz (5.13) gerade die Wirkung $S_s(E)$ der Satellitenbahn ist.

Auch für die Satellitenbahnen erhalten wir also asymptotisch wieder die Gutzwiller-Summanden, wenn $\hat{\nu} + \lambda' - 1$ gerade der Maslov-Index der Satellitenbahn ist. Aus dieser Bedingung kann man schließen, daß man der Normalform nicht nur die Wirkungen der Satellitenbahnen, sondern auch die Änderung des Maslov-Index in der Bifurkation entnehmen kann, indem man die Zahl der negativen Eigenwerte der Hesse-Matrizen für die verschiedenen Bahnen bestimmt.

Nachdem wir uns von der Richtigkeit unserer Integralformel überzeugt haben, werden wir sie in den nächsten Abschnitten auswerten. Dies kann in unterschiedlichen Näherungen geschehen, von denen wir im folgenden zwei darstellen werden.

5.2 Die lokale Näherung

Als einfachste Näherung kann man versuchen, die Parameter a, b, c der Normalform (4.39) so zu wählen, daß die stationären Werte (4.44) die Wirkungen der periodischen Bahnen gut wiedergeben.

Im Sinne der Stationäre-Phase-Näherung kann man weiter annehmen, daß nur der Teil des Integrationsgebietes, in dem die stationären Punkte des Exponenten liegen, einen Beitrag zum Integral liefert. Da wir die gleichmäßige Näherung (5.15) nur für Energien nahe der Bifurkationsenergie benötigen, wo die Stationäre-Phase-Näherung versagt, ist dies eine Umgebung des Ursprungs $I = 0$. Wir können also $\frac{\partial \hat{S}}{\partial E}$ näherungsweise durch seinen Wert im Ursprung, also die Periodendauer mT_0 der zentralen periodischen Bahn, ersetzen. Außerdem können wir versuchen, den Quotienten $\frac{\text{Tr } M - 2}{\text{Hess } \Phi}$ durch eine Konstante k anzunähern. Dies führt auf die Näherung

$$d(E) \approx \frac{1}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{T_0}{\sqrt{|k|}} \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0(E) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} \int dY dP'_Y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Phi(Y, P'_Y) \right\} . \quad (5.20)$$

Damit ist die Zustandsdichte durch das Integral einer bekannten Funktion ausgedrückt, das sich numerisch auswerten läßt (siehe Anhang C).

Für unser Beispiel zeigen die Abb. 5.2 und 5.2, daß die aus der Normalform bestimmten Wirkungen und Hesse-Determinanten zwar qualitativ ähnlich verlaufen wie die tatsächlichen Daten der an der Bifurkation beteiligten Bahnen, aber quantitativ nicht gut mit ihnen übereinstimmen.

Als Parameter ε , der den Abstand von der Bifurkation angibt, wurde dabei die Energiedifferenz

$$\varepsilon = \tilde{E} - \tilde{E}_c \quad (5.21)$$

verwendet. Die Parameter der Normalform wurden so bestimmt, daß die Übereinstimmung mit den numerisch bestimmten Werten global möglichst gut ist. Die gewählten Parameter sind

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= -.029 , \\ \tilde{b} &= .007 , \\ \tilde{c} &= -.052 , \\ \tilde{k} &= 11000 , \end{aligned} \quad (5.22)$$

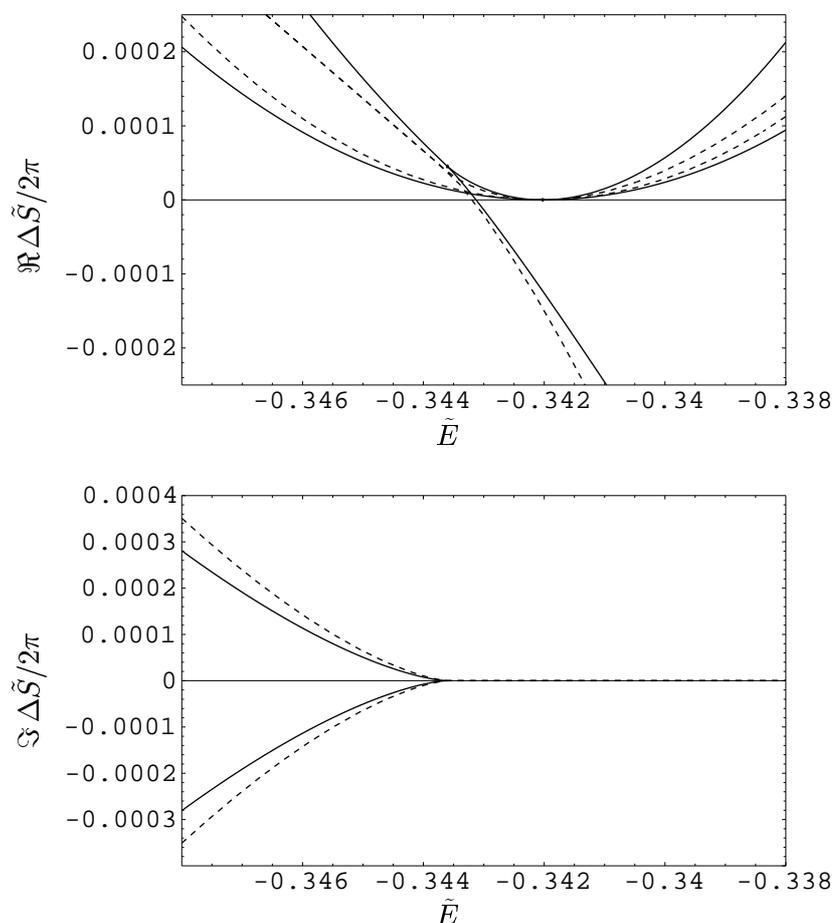


Abbildung 5.1: Wirkungsdifferenzen der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. Ausgezogen: numerisch bestimmte Bahndaten, gestrichelt: stationäre Werte der Normalform nach (4.44).

wobei die Tilde anzeigt, daß die Normalform mit diesen Parametern an die skalierte Wirkung $\tilde{S}/2\pi$ angepaßt wurde.

Um nun tatsächlich Spektren für verschiedene Magnetfeldstärken berechnen zu können, müssen wir gemäß der Skalierungsvorschrift (3.3) die Wirkung $S = 2\pi w \cdot (\tilde{S}/2\pi)$ mit dem Skalierungsparameter $w = \gamma^{-1/3}$ bestimmen. Wie man sich anhand von (4.44) leicht überzeugen kann, kann man dies erreichen, indem man die Parameter der Normalform gemäß

$$\begin{aligned}
 a &= \tilde{a}/2\pi w, \\
 b &= \tilde{b}/2\pi w, \\
 c &= \tilde{c}/4\pi^2 w^2
 \end{aligned}
 \tag{5.23}$$

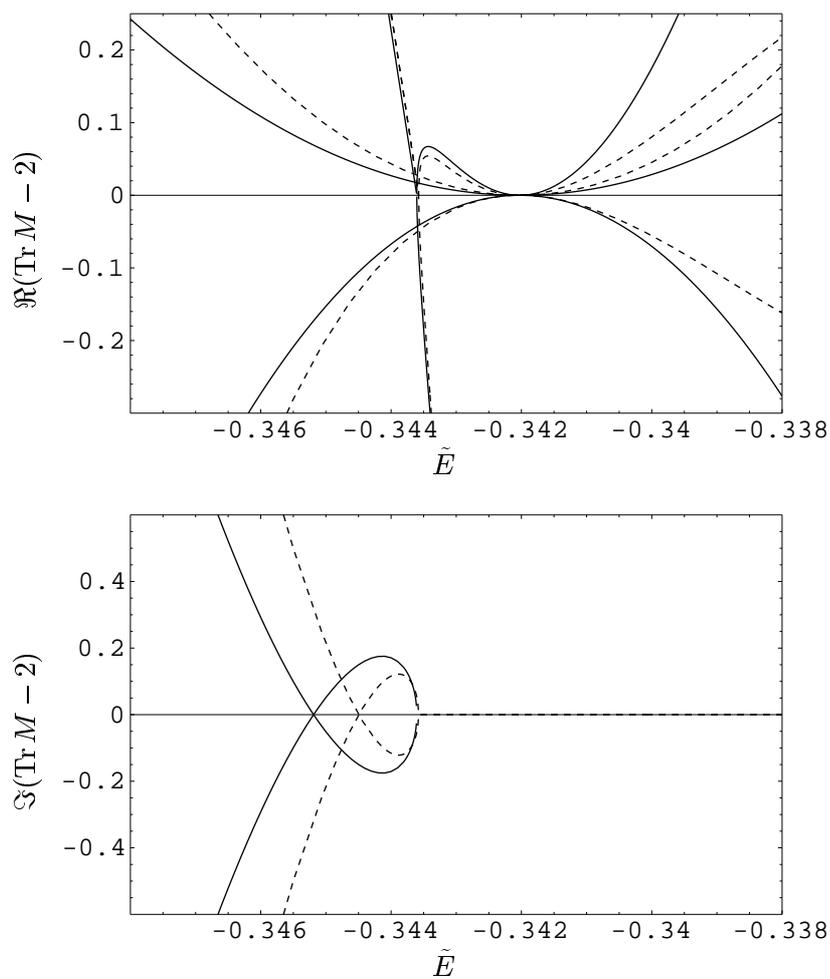


Abbildung 5.2: $\text{Tr} M - 2$ der an der Bifurkation beteiligten Bahnen. Ausgezogen: numerisch bestimmte Spuren, gestrichelt: Hesse-Determinanten der Normalform nach (4.47).

skaliert. Der Parameter ε skaliert nach seiner Definition (5.21) nicht. Eben-
sowenig skaliert k mit dem Magnetfeld, der Faktor 2π in Hess Φ ist jedoch
gemäß

$$k = \tilde{k}/2\pi \quad (5.24)$$

zu berücksichtigen.

Abb. 5.3 zeigt die mit diesen Daten berechnete lokale Näherung, wobei
allerdings statt des Realteils der Betrag des Ausdrucks in (5.20) dargestellt
ist, damit der schnell oszillierende Anteil $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_0(E)\right\}$ entfällt.

Wie zu erwarten war, ist die Näherungslösung am Ort der Bifurkation
zwar endlich, geht aber in einiger Entfernung vom Bifurkationspunkt nicht
in die Gutzwillersche Spurformel über. Hier wirkt sich aus, daß die Anpas-
sung der Normalform an den tatsächlichen Verlauf der Bahnparameter nicht
gut gelingt. Insbesondere die Tatsache, daß die Wirkungen nur schlecht re-
produziert werden können, beeinträchtigt das asymptotische Verhalten der
Lösung, denn die Wirkungen erscheinen asymptotisch als Phasen in den
Summanden der Gutzwillerschen Spurformel, und wenn der Fehler in den
Phasen $w\tilde{S}$ nicht klein ist gegen 2π , können die Interferenzen zwischen den
Beiträgen verschiedener Bahnen nicht mehr richtig wiedergegeben werden.

Darüber hinaus kann man auch in unmittelbarer Nähe der Bifurkation
nicht erwarten, daß diese Näherung den wahren Wert der Zustandsdichte gut
wiedergibt, da die globale Parameteranpassung, wie sie oben durchgeführt
wurde, zu anderen Werten der Parameter führt, als wenn nur die unmittel-
bare Umgebung der Bifurkation berücksichtigt worden wäre.

5.3 Die gleichmäßige Näherung

Um die Güte der Näherung zu verbessern, kann man ausnutzen, daß die Ko-
ordinatentransformation ψ in (5.13) energieabhängig gewählt werden kann.
Dies bedeutet, daß man auch die Parameter a, b, c der Normalform energie-
abhängig werden und für jedes feste $\varepsilon = \tilde{E} - \tilde{E}_c$ so zu bestimmen sind, daß die
Normalform die numerisch bestimmten Wirkungsdifferenzen reproduziert.

Um dies durchzuführen, hat man die Gleichungen (4.44)

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm} &= +4(\eta + \delta^2) \left(\delta \pm \sqrt{\eta + \delta^2} \right) + 2\eta\delta, \\ \Phi_{-1} &= -\frac{\varepsilon^2}{4(a-b)} \end{aligned} \quad (5.25)$$

mit

$$\begin{aligned} \eta &= -\frac{\varepsilon}{6c^{1/3}}, \\ \delta &= \frac{a+b}{6c^{2/3}} \end{aligned} \quad (5.26)$$

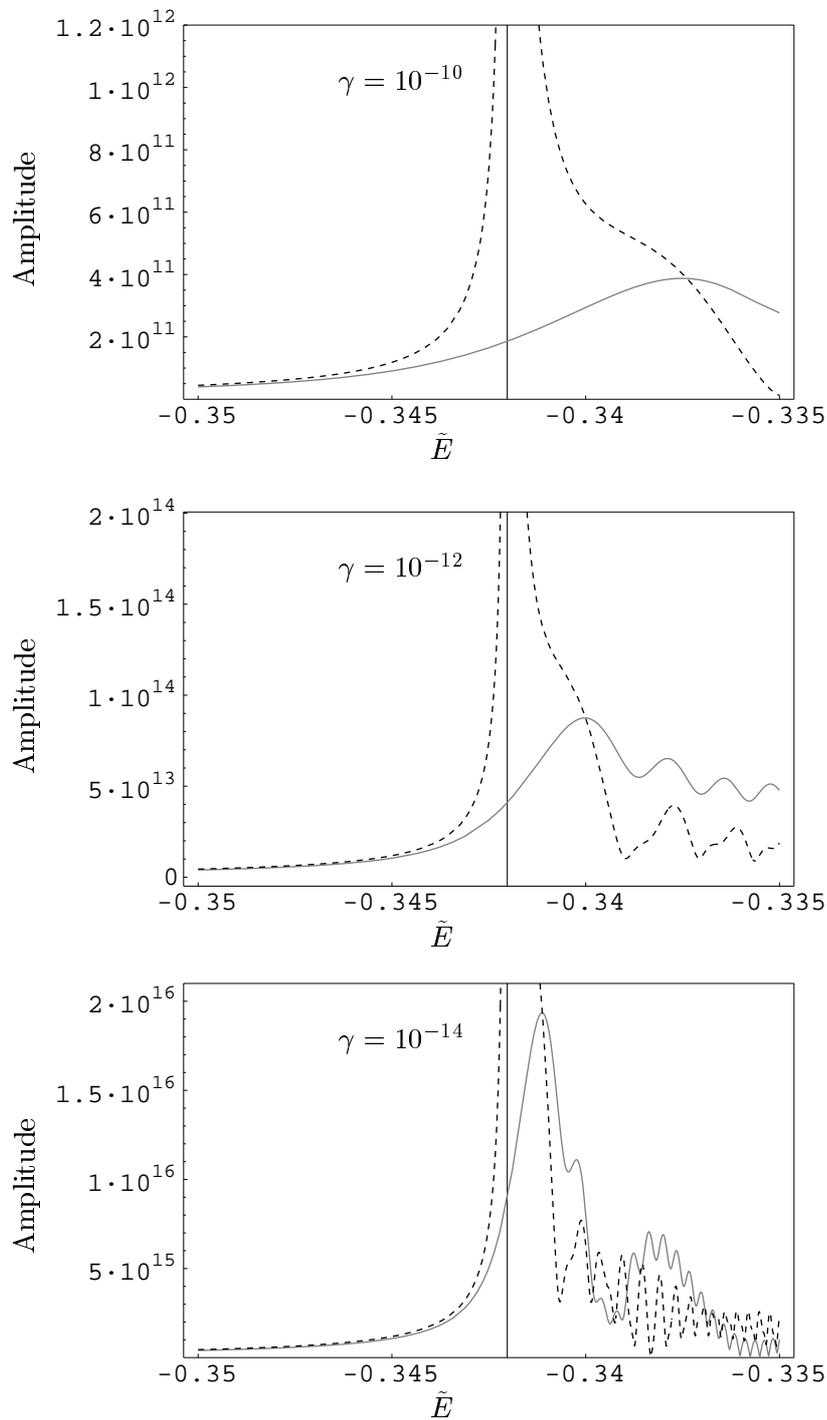


Abbildung 5.3: Beitrag der Bifurkation zur Zustandsdichte in lokaler Näherung. Ausgezogen: lokale Näherung, gestrichelt: Gutzwillersche Spurformel.

nach den Parametern a, b, c aufzulösen.

Dazu definieren wir

$$\begin{aligned}\mathfrak{h}_+ &= \frac{\Phi_+ + \Phi_-}{8} \\ &= \delta \left(\eta + \delta^2 \right) + \frac{1}{2} \eta \delta, \\ \mathfrak{h}_- &= \frac{\Phi_+ - \Phi_-}{8} \\ &= (\eta + \delta^2)^{3/2}.\end{aligned}\tag{5.27}$$

Aus der zweiten Gleichung folgt¹

$$\eta = \mathfrak{h}_-^{2/3} - \delta^2.\tag{5.28}$$

Einsetzen in die erste Gleichung liefert dann

$$\delta^3 - 3\mathfrak{h}_-^{2/3} \delta + 2\mathfrak{h}_+ = 0.\tag{5.29}$$

Dies ist eine kubische Bestimmungsgleichung für δ . Ihre Diskriminante ist

$$\begin{aligned}D &= \mathfrak{h}_+^2 - \mathfrak{h}_-^2 \\ &= \frac{1}{16} \Phi_+ \Phi_-,\end{aligned}\tag{5.30}$$

und ihre Lösungen lauten nach der Cardanischen Lösungsformel

$$\begin{aligned}\delta &= \lambda \sqrt[3]{-\mathfrak{h}_+ - \sqrt{D}} + \lambda^* \sqrt[3]{-\mathfrak{h}_+ + \sqrt{D}} \\ &= \frac{\lambda}{2} \sqrt[3]{-\Phi_+ - \Phi_- - 2\sqrt{\Phi_+ \Phi_-}} + \frac{\lambda^*}{2} \sqrt[3]{-\Phi_+ - \Phi_- + 2\sqrt{\Phi_+ \Phi_-}} \\ &= \frac{\lambda}{2} \sqrt[3]{-\left(\sqrt{\Phi_+} + \sqrt{\Phi_-}\right)^2} + \frac{\lambda^*}{2} \sqrt[3]{-\left(\sqrt{\Phi_+} - \sqrt{\Phi_-}\right)^2} \\ &\quad \text{da } \sqrt{\Phi_+ \Phi_-} = \sqrt{\Phi_+} \sqrt{\Phi_-} \text{ wegen } \Phi_+ > 0\end{aligned}\tag{5.31}$$

mit einer dritten Einheitswurzel

$$\lambda \in \left\{ 1, -\frac{1}{2} \pm i \frac{\sqrt{3}}{2} \right\}$$

Für $D > 0$ ist nur die Lösung mit $\lambda = 1$, für $D < 0$ sind alle Lösungen reell.

¹Damit dies richtig ist, müssen wir $\mathfrak{h}_-^{2/3}$ abweichend von Anhang B so definieren, daß es immer reell wird. Wir definieren also

$$\mathfrak{h}_-^{2/3} := \begin{cases} |\mathfrak{h}_-|^{2/3} & : \mathfrak{h}_- \in \mathbb{R} \\ -|\mathfrak{h}_-|^{2/3} & : \mathfrak{h}_- \in i\mathbb{R} \end{cases}$$

Wie man in Abb. 3.6 erkennt, ist $\Phi_+ > 0$, und es gibt eine Nullstelle $\varepsilon_0 < 0$ von Φ_- , so daß $\Phi_- > 0$ für $\varepsilon < \varepsilon_0$ und $\Phi_- < 0$ für $\varepsilon > \varepsilon_0$. Nach (5.30) ist dann $D > 0$ für $\varepsilon < \varepsilon_0$ und $D < 0$ für $\varepsilon > \varepsilon_0$. Damit also δ reell wird, haben wir $\lambda = 1$ für $\varepsilon < \varepsilon_0$ zu wählen.

Um auch für $\varepsilon > \varepsilon_0$ die richtige Lösung auswählen zu können, fordern wir, daß δ stetig von ε abhängen soll. Dann kann λ sich nur ändern, wenn die Gleichung (5.29) eine doppelte Lösung hat. Dies ist der Fall, wenn $D = 0$, also $\varepsilon = \varepsilon_0$ oder $\varepsilon = 0$ gilt.

Im Bereich $\varepsilon > \varepsilon_0$ untersuchen wir das Verhalten von η in der Nähe von $\varepsilon = 0$. Aus den Wirkungsverläufen der Abb. 3.6 entnehmen wir

$$\begin{aligned}\Phi_+ &= \alpha^2 \varepsilon^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \\ \Phi_- &= -\Gamma - \beta \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\end{aligned}$$

mit positiven Konstanten α, β, Γ . Setzen wir außerdem $\sigma = \text{sign } \varepsilon = \pm 1$, so folgt nacheinander

$$\begin{aligned}\sqrt{\Phi_+} &= \alpha \sigma \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \\ \sqrt{\Phi_-} &= \sqrt{-\Gamma} \sqrt{1 + \frac{\beta}{\Gamma} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)} \\ &\quad \text{da } 1 + \frac{\beta}{\Gamma} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) > 0 \text{ für } \varepsilon \text{ klein} \\ &= \sqrt{-\Gamma} - \frac{\beta}{2\sqrt{-\Gamma}} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &\quad \text{mit } \frac{\sqrt{-\Gamma}}{\Gamma} = \frac{(\sqrt{-\Gamma})^2}{\Gamma \sqrt{-\Gamma}} = -\frac{1}{\sqrt{-\Gamma}}, \\ (\sqrt{\Phi_+} \pm \sqrt{\Phi_-})^2 &= \left(\pm \sqrt{-\Gamma} + \left(\alpha \sigma \mp \frac{\beta}{2\sqrt{-\Gamma}} \right) \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right)^2 \\ &= -\Gamma - \left(\beta - 2\alpha \sigma \sqrt{-\Gamma} \right) \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \\ \sqrt[3]{-\left(\sqrt{\Phi_+} \pm \sqrt{\Phi_-}\right)} &= \sqrt[3]{-\Gamma} \sqrt[3]{1 + \frac{\beta \mp 2\alpha \sigma \sqrt{-\Gamma}}{\Gamma} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)} \\ &= \sqrt[3]{-\Gamma} + \frac{\beta \mp 2\alpha \sigma \sqrt{-\Gamma}}{3\Gamma^{2/3}} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \\ \delta &= \frac{\lambda}{2} \sqrt[3]{-\left(\sqrt{\Phi_+} + \sqrt{\Phi_-}\right)^2} + \frac{\lambda^*}{2} \sqrt[3]{-\left(\sqrt{\Phi_+} - \sqrt{\Phi_-}\right)^2} \\ &= \Re \lambda \sqrt[3]{-\Gamma} + \left(\Re \lambda \frac{\beta}{3\Gamma^{2/3}} - i \Im \lambda \frac{2\alpha \sigma \sqrt{-\Gamma}}{3\Gamma^{2/3}} \right) \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \\ \delta^2 &= (\Re \lambda)^2 \Gamma^{2/3} \\ &\quad + \left((\Re \lambda)^2 \frac{2\beta}{3\Gamma^{1/3}} - \Re \lambda \Im \lambda \frac{4i\alpha \sigma \sqrt{-\Gamma}}{3\Gamma^{1/3}} \right) \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathfrak{h}_-^{2/3} &= \frac{1}{4} (\Phi_+ - \Phi_-)^{2/3} \\
&= \frac{\Gamma^{2/3}}{4} \left(1 + \frac{\beta}{\Gamma} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right)^{2/3} \\
&= \frac{1}{4} \Gamma^{2/3} + \frac{1}{4} \frac{2\beta}{3\Gamma^{1/3}} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) , \\
\eta &= \mathfrak{h}_-^{2/3} - \delta^2 \\
&= \left(\frac{1}{4} - (\Re\lambda)^2 \right) \Gamma^{2/3} \\
&\quad + \left(\left(\frac{1}{4} - (\Re\lambda)^2 \right) \frac{2\beta}{3\Gamma^{1/3}} - \Re\lambda \Im\lambda \frac{4\alpha\sigma\sqrt{\Gamma}}{3\Gamma^{1/3}} \right) \varepsilon \\
&\quad + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\
&\quad \text{da } i\sqrt{-\Gamma} = -\sqrt{\Gamma}
\end{aligned}$$

Vergleichen wir dieses Ergebnis mit der Definition

$$\eta = -\frac{1}{6c^{1/3}} \varepsilon, \quad -\frac{1}{6c^{1/3}} > 0 ,$$

so folgt

$$\begin{aligned}
\Re\lambda &= -\frac{1}{2} , \\
\Im\lambda \frac{2\alpha\sigma}{3\Gamma^{1/3}} &> 0 ;
\end{aligned}$$

und für die richtige Wahl von λ erhalten wir endgültig

$$\lambda = \begin{cases} 1 & : \Phi_- > 0 \\ -\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \text{sign } \varepsilon & : \Phi_- < 0 \end{cases} . \quad (5.32)$$

Mit dieser Festlegung lassen sich δ und η aus (5.29) und (5.28) bestimmen. Weiter gilt nach (4.43) und (5.25)

$$\begin{aligned}
c &= -\left(\frac{\varepsilon}{6\eta} \right)^3 , \\
a + b &= 6c^{2/3} \delta , & a - b &= -\frac{\varepsilon}{4\Phi_{-1}} , \\
a &= 3c^{2/3} \delta - \frac{\varepsilon}{8\Phi_{-1}} , & b &= 3c^{2/3} \delta + \frac{\varepsilon}{8\Phi_{-1}} .
\end{aligned} \quad (5.33)$$

Damit sind die gesuchten Parameter a, b, c bestimmt; es bleibt noch eine geeignete Näherung für den Vorfaktor X im Integranden von (5.15) zu wählen.

Wir nehmen an, daß X nur von I , nicht aber von φ abhängt. Für vier verschiedene I , die den stationären Punkten der Normalform entsprechen,

ist der Wert von X aus (5.19) bekannt. Wir nähern X an durch das Polynom dritten Grades, das zwischen diesen gegebenen Punkten interpoliert. Bezeichnen wir dieses Polynom mit $p(I)$, so erhalten wir als gleichmäßige Näherung für die Zustandsdichte

$$d(E) = \frac{1}{2\pi^2 m \hbar^2} \Re \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0(E) - i \frac{\pi}{2} \hat{\nu} \right\} \int dY' dP_Y p(I) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Phi(Y', P_Y) \right\}, \quad (5.34)$$

also ein Integral bekannter Funktionen.

Mit dieser Wahl ist sichergestellt, daß die Stationäre-Phase-Näherung des verbleibenden Integrals mit der Stationäre-Phase-Näherung des ursprünglichen Integrals (5.15) übereinstimmt. Deshalb geht auch (5.34) in einiger Entfernung von der Bifurkation in die Gutzwillersche Spurformel über. In unmittelbarer Nähe der Bifurkation können wir hingegen, wie in Kapitel 5.2 erläutert, annehmen, daß der Wert des Integrals von einer Umgebung des Ursprungs bestimmt wird. Da unser Interpolationspolynom insbesondere bei $I = 0$ den richtigen Wert annimmt, können wir auch hier mit einem guten Ergebnis rechnen.

Die Berechnung der Parameter a, b, c nach (5.33) wird in der Nähe der Bifurkationen numerisch instabil. Dies hat zwei Gründe:

- Als Eingabedaten für (5.33) werden Wirkungsdifferenzen zwischen der zentralen Bahn und den Satellitenbahnen benötigt. Diese Differenzen werden in der Nähe der Bifurkationen beliebig klein und können daher nur ungenau aus den numerisch bestimmten Wirkungen berechnet werden.
- Der Parameter c ist ausgedrückt durch den Quotienten von η und ε , die in der Bifurkation beide durch Null gehen. Da die Bifurkationsenergie \tilde{E}_c , und damit auch ε , nicht beliebig genau bekannt ist, verschieben sich die Nullstellen von Zähler und Nenner gegeneinander, und der Quotient bekommt eine Polstelle.

Wie Abb. 5.4 zeigt, kann man den Verlauf der Parameter einfach dadurch glätten, daß man kleine Bereiche um die Bifurkationen aus den berechneten Verläufen ausschneidet und durch eine lineare Interpolation ersetzt.

Abb. 5.5 zeigt das Ergebnis der gleichmäßigen Näherung für die gleichen Feldstärken wie Abb. 5.3. Bei $\gamma = 10^{-12}$ und $\gamma = 10^{-14}$ erkennt man, daß die gleichmäßige Näherung in einem Abstand tatsächlich in die Gutzwillersche Spurformel übergeht und daß der asymptotische Bereich für $\gamma = 10^{-14}$ schneller erreicht wird. Bei $\gamma = 10^{-10}$ wird der asymptotische Bereich auf der Seite hoher Energien im dargestellten Bereich noch nicht erreicht. Dieses Verhalten bestätigt, daß die Genauigkeit der semiklassischen Beschreibung mit abnehmendem $\hbar_{\text{eff}} = \gamma^{1/3}$ besser wird.

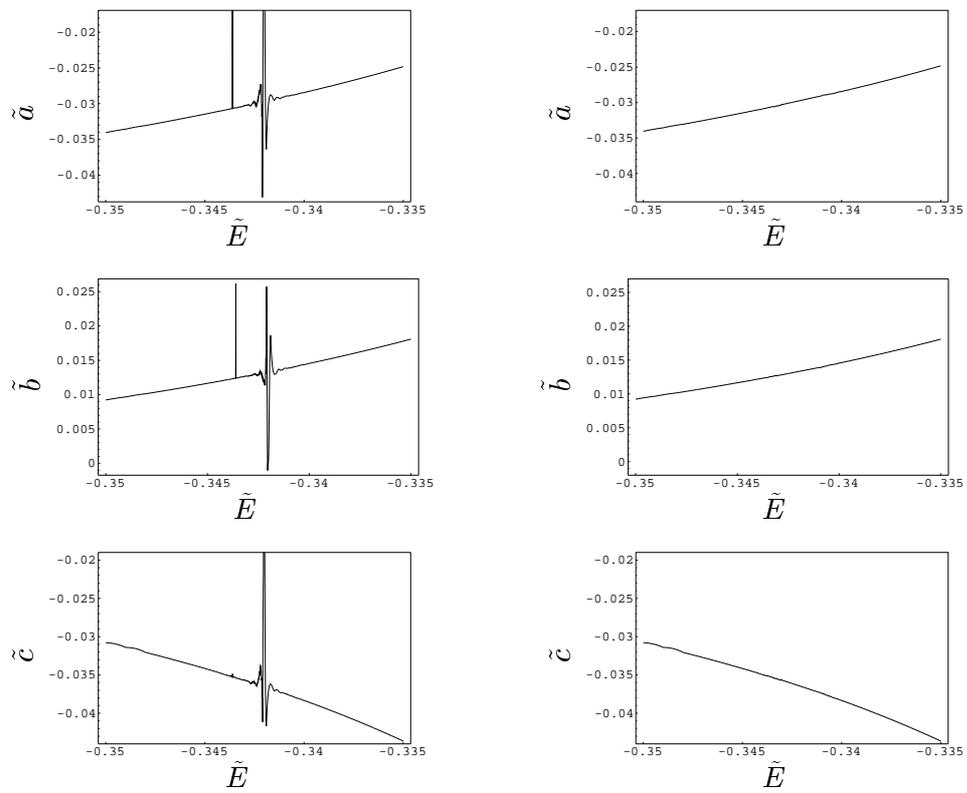


Abbildung 5.4: Numerisch bestimmte Parameter der Normalform. links: ursprünglich, rechts: geglättet.

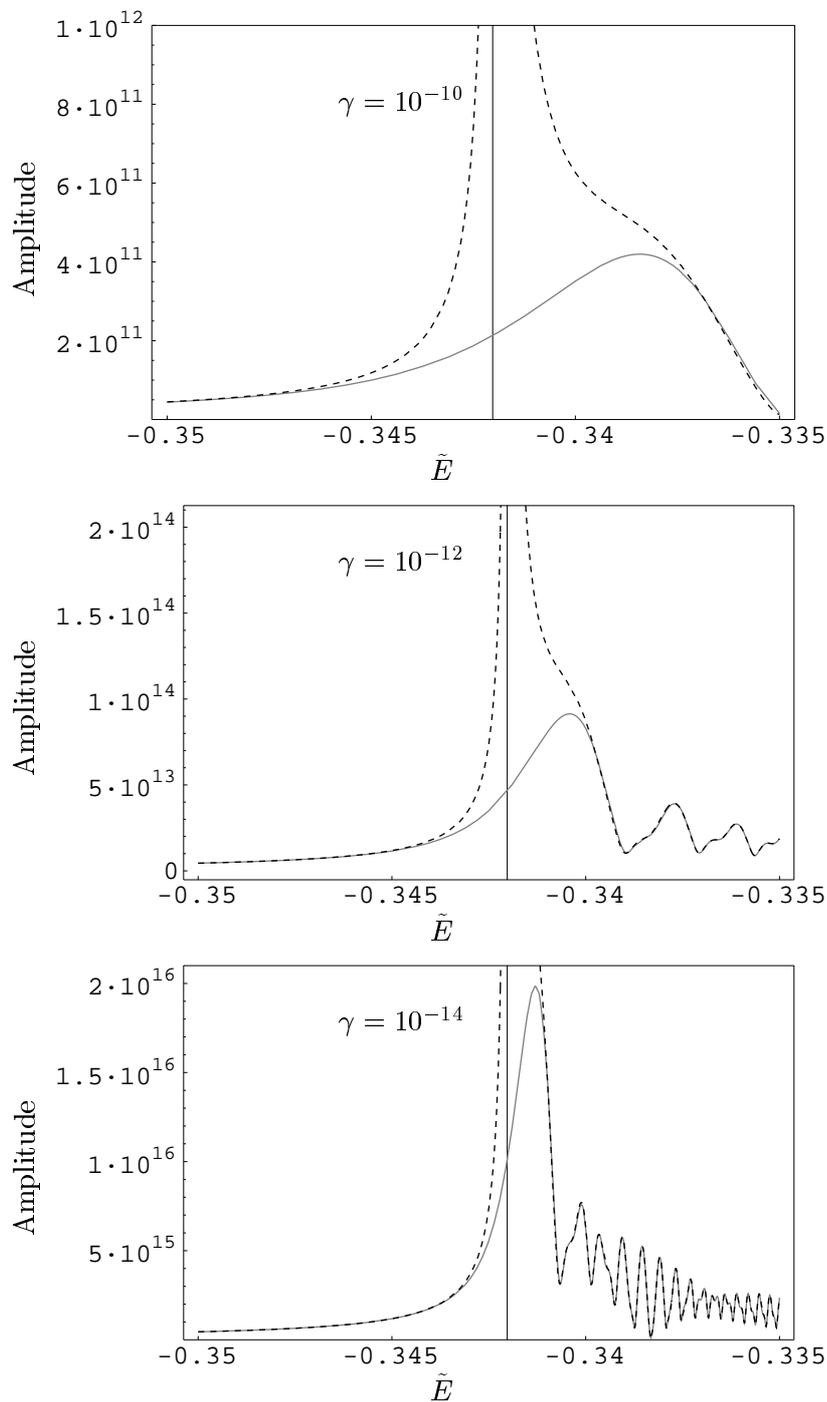


Abbildung 5.5: Beitrag der Bifurkation zur Zustandsdichte in gleichmäßiger Näherung. Ausgezogen: gleichmäßige Näherung, gestrichelt: Gutzwillersche Spurformel.

Kapitel 6

Einfluß von Geisterbahnen

6.1 Auftreten von Geisterbahnen in der Spurformel

Die semiklassische Näherung für die quantenmechanische Zustandsdichte mit Hilfe der Methode der stationären Phase, wie sie in Kapitel 2.3 beschrieben wurde, kann bedingt durch diese Methode nur Beiträge reeller periodische Bahnen berücksichtigen; eventuelle Beiträge von Geisterbahnen, die komplexen stationären Punkten entsprechen, sind ihr unzugänglich.

Wie in Kapitel 2.3 bemerkt wurde, liefert die Methode der stationären Phase den führenden Term einer asymptotischen Entwicklung in \hbar . Balian, Parisi und Voros bemerkten jedoch ([Bal78]), daß für endliche Werte von \hbar auch exponentiell kleine Terme nicht nur im Vergleich zum führenden Term numerisch bedeutsam sein können, sondern sogar dann, wenn man eine vollständige asymptotische Entwicklung in Potenzen von \hbar besitzt. Tatsächlich konnten Kuś, Haake und Delande ([Kuś93]) sowie Main und Wunner ([Mai97a]) numerisch nachweisen, daß sich die Genauigkeit semiklassischer Entwicklungen verbessern läßt, wenn man Beiträge gewisser Geisterbahnen berücksichtigt.

Setzt man in die Gutzwillersche Spurformel (2.34) die Daten einer Geisterbahn mit komplexer Wirkung $S = S' + iS''$ ein, so erhält man aus der Exponentialfunktion einen Faktor

$$\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S'\right\}\exp\left\{-\frac{S''}{\hbar}\right\}.$$

Dieser Faktor divergiert im semiklassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ exponentiell, wenn $S'' < 0$ ist. Dieses Verhalten ist offensichtlich unphysikalisch und widerspricht auch der oben gemachten Aussage, daß die Gutzwillersche Spurformel in ihrer ursprünglichen Form, die nur reelle Bahnen berücksichtigt, den führenden Term einer asymptotischen Entwicklung in \hbar darstellt. Wir kommen also zu dem Schluß, daß nur Geisterbahnen, deren Wirkung einen

6.1. AUFTRETEN VON GEISTERBAHNEN IN DER SPURFORMEL67

positiven Imaginärteil hat, in die Spurformel einbezogen werden dürfen. Der Beitrag dieser Bahnen zur Spurformel wird im Limes $\hbar \rightarrow 0$ exponentiell klein.

Mit dieser Feststellung ist noch keine hinreichende Bedingung angegeben, die zu entscheiden erlaubt, welche komplexen Bahnen in der Gutzwillerschen Spurformel zu berücksichtigen sind. In den bekannten Beispielen ([Kuś93], [Mai97a], [Mai98a]) liegt folgende Situation vor:

Zwei reelle Bahnen laufen in eine Bifurkation ein und verschwinden dort. Auf der anderen Seite der Bifurkation existieren statt dessen zwei zueinander konjugiert komplexe Geisterbahnen, von denen eine, deren Wirkung positiven Imaginärteil hat, in der Spurformel zu berücksichtigen ist. Wenn man sich von der Bifurkation entfernt, nimmt dieser Imaginärteil, der in der Bifurkation selbst Null ist, zu. Dadurch verschwindet der Beitrag der Geisterbahn exponentiell.

Im Falle einer Tangentenbifurkation, bei der keine zentrale Bahn existiert, die auf beiden Seiten der Bifurkation reell ist, läßt sich der Einfluß der Geisterbahn durch einen einfachen Vergleich der gleichmäßigen Näherung mit dem Gutzwiller–Summanden der Geisterbahn nachweisen (vgl. [Kuś93]). Falls jedoch eine reelle zentrale Bahn existiert, überdeckt deren Beitrag den wesentlich kleineren Beitrag der Geisterbahn. Zum Nachweis solcher „versteckten“ Geisterbahnen benötigt man hochauflösende Analyseverfahren ([Mai98a], s.u.).

In unmittelbarer Nähe der Bifurkation ist statt der eigentlichen Spurformel eine gleichmäßige Näherung zu verwenden, die die durch die Bifurkation verursachte Divergenz der Spurformel vermeidet. Daher ist der Beitrag der Geisterbahn erst in einiger Entfernung von der Bifurkation nachweisbar, wenn die gleichmäßige Näherung in ihre asymptotische Form übergegangen ist.

In dem hier behandelten Beispiel hat keine der beiden Bahnen, die durch Bifurkation aus den reellen Satellitenbahnen hervorgehen, eine Wirkung mit positivem Imaginärteil; durch eine zweite Bifurkation im Komplexen entstehen jedoch zwei Bahnen mit echt komplexer Wirkung. Es stellt sich daher die Frage, ob eine dieser beiden Bahnen in der Spurformel zu berücksichtigen ist, obwohl sie nie auf den reellen Phasenraum trifft.

In einfachen Fällen, wenn die gleichmäßige Näherung durch einen katastrophentheoretischen Ansatz analog zu (5.13) auf ein eindimensionales Integral zurückgeführt werden kann, läßt sich der Einfluß von Geisterbahnen durch eine Modifikation der Methode der stationären Phase, die sogenannte *Sattelpunktmethode*, untersuchen. Diese Methode, die dargestellt ist in [Jef56, Section 17.04] und z.B. in [Sch97d] zur Identifikation von Geisterbahnbeiträgen angewandt wird, beruht darauf, den Integrationsweg in der komplexen Ebene so zu deformieren, daß eine Auswertung nach der Methode der stationären Phase möglichst gute Ergebnisse liefert. Dabei werden gegebenenfalls auch komplexe stationäre Punkte berücksichtigt.

Da die Methode auf der Verformung von Integrationswegen beruht, läßt sie sich nicht ohne weiteres auf mehrdimensionale Integrale verallgemeinern. Ein analoges Verfahren, das über den Einfluß komplexer stationärer Punkte auf das asymptotische Verhalten mehrdimensionaler Integrale zu entscheiden gestattet, ist nicht bekannt. Daher können wir in unserem Beispiel die Frage nach dem Einfluß der Geisterbahnen nicht analytisch mit Hilfe der Normalform untersuchen. Wir werden statt dessen ein quantenmechanisch berechnetes Spektrum auf semiklassische Beiträge der Geisterbahnen hin analysieren.

6.2 Analyse eines Quantenspektrums

Das Skalenverhalten (3.3) des diamagnetischen Keplerproblems erlaubt es, Spektren bei fester skaliertener Energie \tilde{E} statt, wie bisher, bei fester Magnetfeldstärke γ zu untersuchen. Wir bestimmen dann eine Zustandsdichte bezüglich des Parameters $w = \gamma^{-1/3}$.

Für diese Zustandsdichte gilt ein der Gutzwillerschen Spurformel (2.34) analoger semiklassischer Ausdruck

$$d^l(E) = \sum_{pB} \mathcal{A}_{pB} e^{i\tilde{S}_{pB} w} \quad (6.1)$$

mit

$$\mathcal{A}_{pB} = \frac{\tilde{S}_0}{\sqrt{|\det(M_{pB} - 1)|}}. \quad (6.2)$$

Diese Darstellung hat den Vorteil, daß jede periodische Bahn eine Modulation der Zustandsdichte beiträgt, deren Amplitude \mathcal{A}_{pB} und Frequenz \tilde{S}_{pB} vom Spektralparameter w nicht abhängen, während die entsprechenden Parameter in der ursprünglichen Spurformel (2.34) energieabhängig sind.

Indem wir eine Summe der Gestalt

$$\sum_{pB} \mathcal{A}_{pB} e^{i\tilde{S}_{pB} w}$$

an die quantenmechanische Zustandsdichte anpassen, können wir also die Wirkungen \tilde{S}_{pB} der beitragenden Bahnen und ihre semiklassischen Amplituden \mathcal{A}_{pB} identifizieren. Um dies durchzuführen, benutzen wir ein als *harmonische Inversion durch Filter-Diagonalisierung* bezeichnetes numerisches Verfahren. Dieses Verfahren wurde von Wall und Neuhauser ([Wal95]) entwickelt und in einer auf Mandelshtam und Taylor ([Man97]) zurückgehenden Variante von Main *et. al.* ([Mai98b]) auf Probleme der semiklassischen Quantisierung angewandt. Es läßt komplexe Werte für Amplituden und Frequenzen zu und erlaubt es, aus dem gegebenen Signal nur solche Summanden zu extrahieren, deren Frequenz in einem vorgegebenen Intervall liegt.

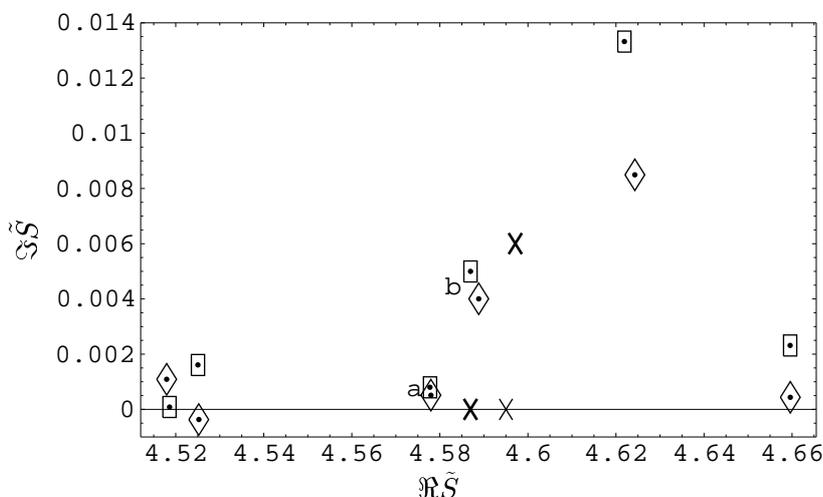


Abbildung 6.1: Vergleich der klassischen Wirkungen mit den Frequenzen des Quantenspektrums. Kreuze: klassische Wirkungen, davon fett: Ballon-Bahn und asymmetrische Geisterbahn, dünn: instabile Geisterbahn; Rechtecke: harmonische Inversion des Intervalls $125 \leq w \leq 209$, Rauten: harmonische Inversion des Intervalls $120 \leq w \leq 200$.

Das uns vorliegende Spektrum umfaßt für eine skalierte Energie $\tilde{E} = -0.38$ die 11735 niedrigsten Eigenwerte im Intervall $0 < w < 210$. In die harmonische Analyse darf der Bereich kleiner w nicht einbezogen werden, da der semiklassische Limes dem Grenzübergang $w \rightarrow \infty$ entspricht und die Darstellung (6.1) demnach für kleine w nicht gilt. Die Untergrenze, bei der man die Analyse beginnt, hat man mit einer gewissen Willkür zu wählen, dabei sollten die Ergebnisse von dieser Wahl nicht abhängen.

Abb. 6.1 zeigt die gefundenen Frequenzen in einem Ausschnitt der komplexen \tilde{S} -Ebene. Die Kreuze bezeichnen die Wirkungen der klassischen Bahnen, Rechtecke und Rauten die in der harmonischen Inversion auftretenden Frequenzen für zwei verschiedene Analyseintervalle.

Im Quantenspektrum zeigt sich eine Reihe von Frequenzen, denen keine der untersuchten Bahnen entspricht, da wir aber nur Bahnen betrachtet haben, die an einer bestimmten Bifurkation beteiligt sind, ist das nicht verwunderlich. Darüber hinaus läßt es jedoch die Genauigkeit der durch die harmonische Inversion gewonnenen Daten nicht zu, den klassischen Bahnen eindeutig entsprechende Frequenzen des Quantenspektrums zuzuordnen.

Sicher erkennbar ist lediglich, daß der instabilen Geisterbahn keine Frequenz entspricht. Da diese Geisterbahn reelle Wirkung hat, war dies zu erwarten. Die Zuordnung der reellen Ballon-Bahn zu einer Frequenz ist hingegen schon nicht mehr klar und läßt sich auch nicht klären, indem man außer den Frequenzen noch die in der harmonischen Analyse bestimmten

Amplituden heranzieht.

Entscheidet man sich, den Punkt a mit der Ballon-Bahn zu identifizieren, dann entspricht der Punkt b der asymmetrischen Geisterbahn, die dann zum Spektrum beiträgt. Identifiziert man jedoch Punkt b mit der Ballon-Bahn¹, dann bleibt im Spektrum keine Frequenz mehr, die der Geisterbahn entsprechen würde. Die Lage der Punkte a und b zueinander legt eine Identifikation mit der Ballon-Bahn und der Geisterbahn nahe, aber dennoch kann die Frage nach dem Einfluß der asymmetrischen Geisterbahn auf das Spektrum mit Hilfe der vorliegenden Daten nicht sicher entschieden werden.

Während also die Identifikation „versteckter“ Geisterbahnen in [Mai97b] und [Mai98a] mit dem beschriebenen Verfahren gelungen ist, reicht die Qualität der hier vorliegenden Daten dazu nicht aus. Die Tatsache, daß die durch harmonische Inversion bestimmten Frequenzen noch merklich davon abhängen, welches w -Intervall zur Analyse herangezogen wurde, zeigt an, daß für eine sichere Bestimmung der Frequenzen die Vorgabe weiterer Eigenwerte nötig ist. Das von Main, Mandelshtam und Taylor verwendete Spektrum ist nur um etwa 15% länger, da die Dichte der Eigenwerte aber etwa linear mit w anwächst, ist der Informationsgehalt in einem Intervall gleicher Länge bei großem w höher.

Außerdem wird die Analyse dadurch erschwert, daß die uns interessierenden Bahnen 2–3mal länger sind als bei Main *et. al.* Da die Anzahl periodischer Bahnen mit ihrer Länge exponentiell anwächst, ist die Dichte der aufzulösenden Frequenzen in diesem Bereich deutlich größer. Hinzu kommt, daß das Verhältnis von Imaginär- zu Realteil der Wirkung unserer asymmetrischen Geisterbahn kleiner ist als in den bisher untersuchten Fällen. Das bedeutet, daß insbesondere eine genaue Bestimmung des Imaginärteils, die die Geisterbahn zu identifizieren gestatten würde, schwierig wird.

Zum anderen scheinen die quantenmechanisch bestimmten Frequenzen aber auch systematisch zu kleineren Realteilen hin von den klassischen Wirkungen abzuweichen. Bei der Auswahl der skalierten Energie, bei der das Spektrum berechnet wurde, war zu berücksichtigen, daß ein genügend großer Abstand von der hier betrachteten Bifurkation und von der Entstehung der Ballon-Bahn bei $\tilde{E} = -0.391$ eingehalten werden mußte, andererseits aber der Imaginärteil in der Wirkung der Geisterbahn nicht so groß werden durfte, daß ihr Beitrag für große w allzu schnell abklingt. Ein eventueller Einfluß der Bifurkationen auf das Frequenzspektrum sollte sich, wie es in [Mai98a] geschehen ist, durch eine harmonische Analyse der gleichmäßigen Näherung nachweisen lassen, die in diesem Fall die gleichen Abweichungen der Frequenzen von den klassischen Wirkungen zeigen muß wie das Quantenspektrum.

¹Der Abstand von a und b zur Ballon-Bahn ist etwa gleich groß, obwohl der Abstand von b in der Grafik wegen unterschiedlicher Maßstäbe an reeller und imaginärer Achse größer erscheint.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde an einem Beispiel gezeigt, daß das von Sieber und Schomerus sowie Main und Wunner entwickelte katastrophentheoretische Verfahren zur Konstruktion gleichmäßiger Näherungen für semiklassische Spektren sich auch auf kompliziertere Folgen von Bifurkationen verallgemeinern läßt. In Fällen, in denen die sieben elementaren Katastrophen keinen geeigneten Ansatz zur Beschreibung der Bifurkationen liefern, kann man mit Hilfe der Normalformtheorie systematisch eine Ansatzfunktion konstruieren; es ist daher zu erwarten, daß sich mit dem Verfahren im Prinzip gleichmäßige Näherungen für beliebige Bifurkationsszenarien bestimmen lassen.

Bei der Konstruktion gleichmäßiger Näherungen sind nicht nur Bifurkationen reeller Bahnen zu berücksichtigen. Der hier diskutierte Fall liefert das erste bekannte Beispiel dafür, daß auch Bifurkationen, an denen ausschließlich Geisterbahnen beteiligt sind, semiklassische Spektren beeinflussen können, wenn sie genügend nahe an reellen Bifurkationen auftreten. Bei der Behandlung der hier verwendeten Normalform in Kapitel 4 zeigte sich, daß eine solche Situation in drei von vier möglichen Fällen auftritt, deshalb scheint es wahrscheinlich, daß dieser Effekt auch bei der Diskussion anderer Bifurkationsszenarien häufig zu beobachten sein wird.

In den bisher bekannten Beispielen hatte es sich gezeigt, daß man die Genauigkeit der Gutzwillerschen Spurformel verbessern kann, wenn man Beiträge all derjenigen Geisterbahnen berücksichtigt, deren Wirkung positiven Imaginärteil hat. In dieser Arbeit wurde untersucht, ob dies auch für Geisterbahnen gilt, die in rein komplexen Bifurkationen entstehen, jedoch konnte diese Frage anhand der vorliegenden numerischen Ergebnisse noch nicht sicher entschieden werden. Hier bleibt also Raum für weitere Untersuchungen. Die numerischen Untersuchungen können mit Hilfe eines umfangreicheren Quantenspektrums verbessert werden, und auch einer Verallgemeinerung der Sattelpunktmethode auf mehrdimensionale Integrale, mit der sich die Frage analytisch angehen ließe, ist anzustreben.

Anhang A

Semiparabolische Koordinaten

Zur Beschreibung des diamagnetischen Keplerproblems verwenden wir semiparabolische Koordinaten (μ, ν, φ) , die definiert sind durch die Beziehungen

$$\begin{aligned}x &= \mu\nu \cos \varphi , \\y &= \mu\nu \sin \varphi , \\z &= \frac{1}{2} (\mu^2 - \nu^2)\end{aligned}\tag{A.1}$$

bzw.

$$\begin{aligned}\mu &= \sqrt{r+z} , & \nu &= \sqrt{r-z} , \\r &= x^2 + y^2 + z^2 = \frac{1}{2} (\mu^2 + \nu^2) , & \varrho &= x^2 + y^2 = \mu\nu .\end{aligned}\tag{A.2}$$

Abb. A.1 zeigt die Koordinatenlinien in der (ϱ, z) -Ebene. Linien mit festen μ oder ν sind Parabeln, die symmetrisch zur z -Achse liegen und ihren Brennpunkt im Ursprung haben. Die semiparabolischen Koordinaten sind für die Behandlung des diamagnetischen Keplerproblems besonders gut geeignet, da sie sowohl einen festen Punkt (den wir mit dem Kernort identifizieren), als auch eine Richtung im Raum (die Richtung des Magnetfeldes) auszeichnen.

Nach ihrer Definition (A.2) können μ und ν nur positive Werte annehmen, während die Hamiltonfunktion (3.6) auch für negative μ, ν definiert ist. Bei der numerischen Behandlung der Bewegungsgleichungen (3.7) lassen wir beliebige reelle Werte für μ und ν zu, haben dann aber Punkte, die sich nur durch das Vorzeichen der Koordinaten unterscheiden, zu identifizieren.

Bei der graphischen Darstellung periodischer Bahnen in Kapitel 3.2 wurden die Bewegungsgleichungen immer so weit integriert, bis der Bahnverlauf sich in diesem erweiterten Koordinatenraum wiederholt. Demnach zeigt ein

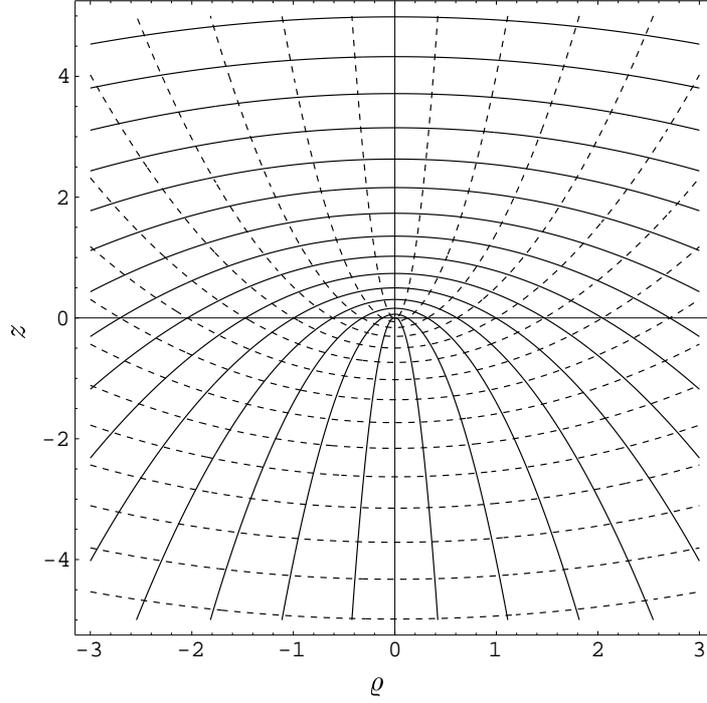


Abbildung A.1: Koordinatenlinien für semiparabolische Koordinaten: μ -Linien ausgezogen, ν -Linien gestrichelt.

solches Diagramm in einigen Fällen mehrere Perioden der Bahn im ursprünglichen Ortsraum.

Die Koordinatentransformation (A.1) wird erzeugt durch die Funktion

$$\mathcal{F}_2 = -p_x \mu \nu \cos \varphi - p_y \mu \nu \sin \varphi - \frac{p_z}{2} (\mu^2 - \nu^2) . \quad (\text{A.3})$$

Daraus folgt als Transformationsgleichung für die Impulse

$$\begin{aligned} p_\mu &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \mu} = p_x \nu \cos \varphi + p_y \nu \sin \varphi + p_z \mu , \\ p_\nu &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \nu} = p_x \mu \cos \varphi + p_y \mu \sin \varphi + p_z \nu , \\ p_\varphi &= -\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \varphi} = -p_x \mu \nu \sin \varphi + p_y \mu \nu \cos \varphi \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

oder umgekehrt

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\nu p_\mu + \mu p_\nu}{\mu^2 + \nu^2} \cos \varphi - \frac{p_\varphi}{\mu \nu} \sin \varphi , \\ p_y &= \frac{\nu p_\mu + \mu p_\nu}{\mu^2 + \nu^2} \sin \varphi + \frac{p_\varphi}{\mu \nu} \cos \varphi , \\ p_z &= \frac{\mu p_\mu - \nu p_\nu}{\mu^2 + \nu^2} . \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Insbesondere gilt

$$\vec{p}^2 = \frac{p_\mu^2 + p_\nu^2}{\mu^2 + \nu^2} + \frac{p_\varphi^2}{\mu^2 \nu^2} . \quad (\text{A.6})$$

Anhang B

Komplexe Wurzeln

Für die Berechnungen der Kapitel 4 und 5 benötigen wir Wurzeln aus komplexen Zahlen. Wegen der Mehrdeutigkeit dieser Funktionen müssen wir einen Zweig auswählen. Wir verwenden in dieser Arbeit Definitionen, die einen Verzweigungsschnitt entlang der negativen reellen Achse besitzen, und definieren für

$$z = r \exp \{i\varphi\} \quad \text{mit } r \geq 0, -\pi < \varphi \leq \pi \quad (\text{B.1})$$

die Quadratwurzel

$$\sqrt{z} := \sqrt{r} \exp \left\{ i \frac{\varphi}{2} \right\} \quad (\text{B.2})$$

und die dritte Wurzel¹

$$\sqrt[3]{z} := \begin{cases} \sqrt[3]{r} \exp \left\{ i \frac{\varphi}{3} \right\} & : -\pi < \varphi < \pi \\ -\sqrt[3]{-z} & : z \in \mathbb{R}^{<0} \end{cases} . \quad (\text{B.3})$$

Außerdem definieren wir

$$z^{k/3} := \left(\sqrt[3]{z} \right)^k . \quad (\text{B.4})$$

Demnach ist insbesondere die Kubikwurzel einer reellen Zahl immer reell, und die Quadratwurzel einer negativen Zahl hat positiven Imaginärteil. Die hier gegebene Definition der dritten Wurzel kommutiert mit der Komplexkonjugation:

$$\sqrt[3]{z^*} = \left(\sqrt[3]{z} \right)^* , \quad (\text{B.5})$$

und für positive reelle Zahlen λ gilt

$$\sqrt[3]{\lambda z} = \lambda \sqrt[3]{z} . \quad (\text{B.6})$$

¹Von dieser Definition weichen wir in einem Spezialfall ab. Siehe dazu die Fußnote auf S. 60

Anhang C

Das Beugungsintegral

C.1 Ausführung der Winkelintegration

Zur Berechnung der Näherungen (5.20) und (5.34) benötigen wir das Integral

$$\int_0^\infty dI \int_0^{2\pi} d\varphi p(I) \exp \left\{ i \left(\varepsilon + aI^2 + bI^2 \cos(4\varphi) + cI^3 (1 + \cos(4\varphi)) \right) \right\} \quad (\text{C.1})$$

mit einem Polynom $p(I)$ höchstens dritten Grades. Dabei wurde $\hbar = 1$ und die Normalform (4.39) eingesetzt und zu kanonischen Polarkoordinaten (4.14) übergegangen. Die Jacobi-Determinante dieser Transformation ist identisch 1.

Mit Hilfe der Integraldarstellung

$$\int_0^{2\pi} dx \exp \{ i\beta \cos x \} = 2\pi J_0(\beta)$$

für die Besselfunktion J_0 , die sich aus [Gra65, 3.338.2] ergibt, läßt sich das Integral über φ ausführen, wir erhalten das eindimensionale Integral

$$2\pi \int_0^\infty dI p(I) J_0 \left((b + cI)I^2 \right) \exp \left\{ i(\varepsilon I + aI^2 + cI^3) \right\} . \quad (\text{C.2})$$

C.2 Numerische Auswertung

Der Integrand in (C.2) oszilliert für $I \rightarrow \infty$ immer schneller, wegen des Polynoms $p(I)$ nimmt jedoch die Amplitude der Oszillationen zu, so daß das Integral im allgemeinen nicht konvergiert. Wir verwenden daher einen konvergenzerzeugenden Faktor:

$$2\pi \int_0^\infty dI p(I) J_0 \left((b + cI)I^2 \right) \exp \left\{ i(\varepsilon I + aI^2 + cI^3) \right\} \exp \{ -\mu I^n \} . \quad (\text{C.3})$$

Dabei ist $n > 0$ ein Parameter, der die genaue Gestalt des konvergenzerzeugenden Faktors bestimmt, und wir suchen für festes n den Grenzwert $\mu \rightarrow 0$.

Bei geeigneter Wahl von n wird das Integral für hinreichend kleine μ einer direkten numerischen Integration mit Hilfe von Standardroutinen zugänglich. Ich habe diese Integration mehrfach wiederholt, wobei der Wert μ in jedem Schritt halbiert wurde, und die erhaltenen Ergebnisse polynomial auf $\mu = 0$ extrapoliert. Für die in dieser Arbeit benötigten Parameterwerte erhalte ich mit $n = 6 \dots 10$ und einer Extrapolationsordnung von 3 oder 4 eine Genauigkeit von 7 bis 8 Stellen im Endergebnis. Dabei bestätigt sich auch, daß das Ergebnis von der Wahl von n unabhängig ist.

Literaturverzeichnis

- [Alm87] A. M. Ozorio de Almeida, J. H. Hannay:
Resonant periodic orbits and the semiclassical energy spectrum.
J. Phys. A **20** (1987), 5873–5883
- [Alm88] A. M. Ozorio de Almeida:
Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization.
Cambridge University Press 1988,
Cambridge, UK
- [Arn88a] V. I. Arnold:
Mathematische Methoden der klassischen Mechanik.
Birkhäuser-Verlag 1988,
Basel, Boston, Berlin
- [Arn88b] V. I. Arnold, V. V. Kozlov, A. I. Neishadt:
Mathematical Aspects of Classical and Celestial Mechanics.
in: V. I. Arnold (ed.):
Dynamical Systems III.
Encyclopedia of Mathematical Sciences, vol. 3
Springer 1988,
Berlin, Heidelberg, New York
- [Art90] R. Artuso, E. Aurell, P. Cvitanović:
Recycling of strange sets: I. Cycle expansions,
II. Applications.
Nonlinearity **3** (1990), 325–360 und 361–386
- [Bal78] R. Balian, G. Parisi, A. Voros:
Discrepancies from Asymptotic Series and Their Relation to
Complex Classical Trajectories.
Phys. Rev. Lett **41** (1978), 1141–1144
- [Bir27] G. D. Birkhoff:
Dynamical Systems.
AMS Colloquium Publications vol. IX,
Providence, RI, 1927, 1966

- [Cvi89] P. Cvitanović, B. Eckhardt:
Periodic–Orbit Quantization of Chaotic Systems
Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 823–826
- [Eck90] B. Eckhardt, D. Wintgen:
Symbolic description of periodic orbits for the quadratic Zeeman effect.
J. Phys. B **23** (1990), 355–363
- [Ein17] A. Einstein:
Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein.
Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19** (1917), 82–92
- [Fey48] R. P. Feynman:
Space–Time Approach to Non–Relativistic Quantum Mechanics.
Rev. Mod. Phys. **20** (1948), 367–387
- [Gol76] H. Goldstein:
Klassische Mechanik.
Akademische Verlagsgesellschaft 1976
Wiesbaden
- [Gra65] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik:
Table of Integrals, Series, and Products.
Academic Press 1965
New York, London
- [Gus66] F. Gustavson:
On Constructing Formal Integrals of a Hamiltonian System near an Equilibrium Point.
Astron. J. **71** (1966), 670–686
- [Gut67] M. Gutzwiller:
Phase–Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom.
J. Math. Phys. **8** (1967), 1979–2000
J. Math. Phys. **10** (1969), 1004–1020
- [Gut70] M. Gutzwiller:
Energy Spectrum According to Classical Mechanics.
J. Math. Phys. **11** (1970), 1791–1806
- [Gut71] M. Gutzwiller:
Periodic Orbits and Classical Quantization Conditions.
J. Math. Phys. **12** (1971), 343–358

- [Gut82] M. C. Gutzwiller:
The Quantization of a Classically Ergodic System.
Physica D **5** (1982), 183–207
- [Gut90] M. Gutzwiller:
Chaos in Classical and Quantum Mechanics.
Springer 1990
Berlin, Heidelberg, New York
- [Has89] H. Hasegawa, M. Robnik, G. Wunner:
Classical and Quantal Chaos in the Diamagnetic Kepler Problem.
Prog. Theor. Phys. Supp. **98** (1989), 198–286
- [Jef56] H. Jeffreys, B. S. Jeffreys:
Methods of Mathematical Physics.
Cambridge University Press 1956
Cambridge, UK
- [Kel58] J. B. Keller:
Corrected Bohr–Sommerfeld Quantum Conditions for Nonseparable Systems.
Ann. Phys. (NY) **4** (1958), 180–188
- [Kuś93] M. Kuś, F. Haake, D. Delande:
Prebifurcation Periodic Ghost Orbits in Semiclassical Quantization.
Phys. Rev. Lett. **71** (1993), 2167–2171
- [May70] K. R. Mayer:
Generic Bifurcation of Periodic Points.
Trans. AMS **149** (1970), 95–107
- [Mao92] J. -M. Mao, J. B. Delos:
Hamiltonian bifurcation theory of closed orbits in the diamagnetic Kepler problem.
Phys. Rev. A **45** (1992), 1746–1761
- [Mai97a] J. Main, G. Wunner:
Hydrogen atom in a magnetic field: Ghost orbits, catastrophes, and uniform semiclassical approximations.
Phys. Rev. A **55** (1997), 1743–1759
- [Mai97b] J. Main, V. A. Mandelshtam, H. S. Taylor:
High resolution quantum recurrence spectra: Beyond the uncertainty principle.
Phys. Rev. Lett. **78** (1997), 4351–4354

- [Mai98a] J. Main, G. Wunner:
Uniform semiclassical approximations for umbilic bifurcation catastrophes.
Phys. Rev. E **57** (1998), 7325–7328
- [Mai98b] J. Main, V. A. Mandelshtam, G. Wunner, H. S. Taylor:
Harmonic inversion as a general method for periodic orbit quantization.
Nonlinearity **11** (1998), 1015–1043
- [Man97] V. A. Mandelshtam, H. S. Taylor:
Harmonic inversion of time signals and its applications.
J. Chem. Phys. **107** (1997), 6756–6769
- [Pos78] T. Poston, I. N. Stewart:
Catastrophe Theory and its Applications.
Pitman 1978
London
- [Sad95] D. A. Sadovskii, J. A. Shaw, J. B. Delos:
Organization of Sequences of Bifurcations of Periodic Orbits.
Phys. Rev. Lett. **75** (1995), 2120–2123
- [Sad96] D. A. Sadovskii, J. B. Delos:
Bifurcation of periodic orbits of Hamiltonian systems: Analysis using normal form theory.
Phys. Rev. E **54** (1996), 2033–2070
- [Sch88] H. R. Schwarz:
Numerische Mathematik.
B. G. Teubner 1993
Stuttgart
- [Sch97a] H. Schomerus, M. Sieber:
Bifurcations of Periodic Orbits and Uniform Approximations.
J. Phys. A **30** (1997), 4537–4562
- [Sch97b] H. Schomerus:
Semiclassical interference of bifurcations.
Europhys. Lett. **38** (1997), 423–428
- [Sch97c] H. Schomerus, F. Haake:
Semiclassical spectra from periodic-orbit clusters in a mixed phase space.
Phys. Rev. Lett. **79** (1997), 1022–1025

- [Sch97d] H. Schomerus:
Periodic orbits near bifurcations of codimension two: Classical mechanics, semiclassics and Stokes transitions.
J. Phys. A **31** (1998), 4167
- [Sie96] M. Sieber:
Uniform approximation for bifurcations of periodic orbits with high repetition numbers.
J. Phys. A **29** (1996), 4715–4732
- [Sie98] M. Sieber, H. Schomerus:
Uniform Approximations for Period-Quadrupling Bifurcations.
J. Phys. A **31** (1998), 165
- [Sir71] L. Sirovich:
Techniques of Asymptotic Analysis.
Springer 1971
New York, Heidelberg, Berlin
- [VV128] J. H. Van Vleck:
The correspondence principle in the statistical interpretation of quantum mechanics.
Proc. Nat. Acad. Sci. USA **14** (1928), 178–188
- [Wal95] M. R. Wall, D. Neuhauser:
Extraction, through filter-diagonalization, of general quantum eigenvalues or classical normal mode frequencies from a small number of residues or a short-time segment of a signal.
J. Chem. Phys. **102** (1995), 8011–8022
- [Win87] D. Wintgen:
Calculation of the Liapunov exponent for periodic orbits of the magnetized hydrogen atom.
J. Phys. B **20** (1987), L511–515

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben. Insbesondere gilt mein Dank

- Prof. Dr. G. Wunner, der mir ein spannendes und herausforderndes Thema stellte, und Prof. Dr. K. Elsässer, der mir ermöglichte, das Thema hier in Bochum zu bearbeiten
- Dr. J. Main, der die Arbeit betreute und für Fragen immer zur Verfügung stand
- Dirk Engel für die Berechnung des benutzten quantenmechanischen Spektrums
- Frau G. Buhr, die sich so sehr um das leibliche und seelische Wohl aller Mitarbeiter kümmert und dabei organisatorische Probleme immer schon gelöst hat
- Michael Schwacke und allen anderen Mitgliedern des Institutes für die vielen interessanten oder lustigen Pausen