Apl.-Prof. Dr. Jörg Main, Universität Stuttgart

Nichtlineare Dynamik

Stuttgart, 2014 / 2015

Revision: 30. November 2015

Für Hinweise auf Druckfehler und Kommentare jeder Art sind wir dankbar.¹

¹Marcel Klett, Henri Menke, Michael Schmid, Jan Schnabel, henrimenke@gmail.com

Inhaltsverzeichnis

1 Dissipative Systeme 1

- 1.1 Einleitung 1
- 1.2 Experimente und einfache Modelle zum deterministischen Chaos 2
- 1.3 Mathematische Modelle zum deterministischen Chaos 7
 - 1.3.1 Bernoulli-Verschiebung 8
 - 1.3.2 Logistische Abbildung 10
- 1.4 Intermittenzroute zum Chaos 21
- 1.5 Seltsame Attraktoren in dissipativen Systemen 23
 - 1.5.1 Die Kolmogorov-Entropie 26
 - 1.5.2 Charakterisierung des Attraktors durch ein gemessenes Signal 28
 - 1.5.3 Bilder seltsamer Attraktoren und fraktaler Grenzen 31
- 1.6 Der Übergang von Quasiperiodizität zum Chaos 32
 - 1.6.1 Die Landau-Route zur Turbulenz 33
 - 1.6.2 Die Ruelle-Takens-Newhouse-Route zum Chaos: 33
 - 1.6.3 Universelles Verhalten beim Übergang von Quasiperiodizität zum Chaos 34

2 Konservative Systeme 43

- 2.1 Klassisches Chaos 43
 - 2.1.1 Wirkungs- und Winkelvariablen 44
 - 2.1.2 Die Bewegung im Phasenraum, Poincaré-Schnitte 47
 - 2.1.3 Das Wasserstoffatom im Magnetfeld 48
 - 2.1.4 Klassische Störungstheorie für Hamiltonsche Systeme mit *N* Freiheitsgraden 52
 - 2.1.5 Das Schicksal der resonanten Tori 56
 - 2.1.6 Stabilität klassischer Bahnen, Monodromiematrix 60
- 2.2 Semiklassische Theorien 65
 - 2.2.1 WKB Methode 66
 - 2.2.2 Torusquantisierung 68
 - 2.2.3 EBK-Quantisierung (Einstein, Brioullin, Keller) 76
 - 2.2.4 Spurformel 81
 - 2.2.5 Anwendung der Gutzwiller-Spurformel 88

3 Quantenchaos 91

- 3.1 Chaos in klassischen Systemen und Quantensystemen 91
- 3.2 Theorie der Zufallsmatrizen (Random Matrix Theory) 97
 - 3.2.1 Systeme mit Zeitumkehrinvarianz [H, T] = 0 97
 - 3.2.2 Systeme ohne Zeitumkehrinvarianz (antiunitäre Symmetrie) 100
 - 3.2.3 Systeme mit Zeitumkehrinvarianz [H, T] = 0 und $T^2 = -1$ (Kramers-Entartung) 102
- 3.3 Weitere Methoden 105
 - 3.3.1 Number Variance 105
 - 3.3.2 Spektrale Steifheit 105

- A Zur Hausdorff-Dimension 107
- B Berechnung der Monodromiematrix 109

Dissipative Systeme

1.1 Einleitung

Der Begriff *Chaos* leitet sich aus dem griechischen ab und hatte in der Antike verschiedene Bedeutungen:

- ▶ Der unendlich leere Raum, der vor aller Zeit existierte.
- ▶ Rohe, ungeformte Masse, in die der Schöpfer der Welt Ordnung und Harmonie bringt.

Heute verwenden wir den Begirff weniger spirituell. Man bezeichnet so einen Zustand der Unordnung und Irregularität.

Wie erzeugen wir aber Chaos? Eine Möglichkeit ist durch einen Zufallsprozess. Die Ordnung eines neuen, sortierten Kartenspiels wird zerstört durch "mischen". Dies ist äquivalent zu einer zufälligen Änderung der Reihenfolge. Zufallszahlen haben ebenfalls keine Ordnung im Sinne, dass sie nicht geordnet sind (im Gegensatz zu, z.B. $x_n = 2^n$). Ein weiterer Zufallsprozess ist das Rauschen. Darunter versteht man eine Funktion ohne reguläre Strukturen (z.B. Verstärkerrauschen, erzeugt durch zufällige thermische Prozesse).

Für uns fallen Zufallsprozesse in die Kategorie *nicht deterministisches Chaos*. In diesem Skript wollen wir uns jedoch mit dem *deterministischen Chaos* beschäftigen. Determinismus bedeutet, dass es eine Vorschrift (Differentialgleichung ohne iterative Abbildung) gibt nach der sich das Verhalten des Systems aus gegebenen Anfangsbedingungen berechnen lässt. Die naive (und falsche) Annahme hierbei ist, dass deterministische Gesetze in einem regulären Verhalten resultieren. Ein Gegenbeispiel lieferte Poincaré 1892 mit dem Dreikörperproblem.

Definition Als deterministisches Chaos bezeichnet man die Unordnung und Irregularität bei Systemen, die deterministischen Gesetzen (ohne Zufallseinwirkung) gehorchen.

► *Beispiel* Es folgen Beispiele für nichtlineare Systeme mit (möglicherweise) deterministischem Chaos.

- Getriebenes Pendel
- ► Flüssigkeiten beim Einsetzen der Turbulenz (Meteorologie)
- Laser
- Nichtlineare optische Systeme
- Chemische Reaktionen
- ► Klassische Vielteilchensysteme (z.B. Dreikörperproblem)
- ▶ Teilchenbeschleuniger

► Modelle zur Populationsdynamik

Die Irregularität beruht auf der Eigenschaft nichtlinearer Systeme anfänglich benachbarte Bahnen exponentiell schnell zu separieren. Die Anfangsbedingungen lassen sich nicht beliebig genau angeben. Für das Verhalten nichtlinearer Systeme ist in der Regel nur eine Kurzzeit- und keine Langzeitvorhersage möglich. Dies bezeichnet man nach Lorentz (1963) als Schmetterlingseffekt.

- *Fragen:* Kann man z.B. aus den Differentialgleichungen vorhersagen, ob ein System deterministisches Chaos zeigt oder nicht?
 - ▶ Gibt es quantitative Maße für die Chaotizität eines Systems bzw. einer Bewegung? ⊸

Eine Mindmap zur Klassifikation von Systemen, die deterministisches Chaos zeigen findet sich in Abbildung 1.

Dissipative Systeme Ein dissipatives System ist abhängig von (mindestens) einem externen Kontrollparameter r. Es gibt verschiedene Wege ins Chaos, die dann universell sind für jeweils eine Vielzahl experimentell realisierbarer Systeme.

Klassifikation dieser Wege:

- Bifurkationen, Periodenverdopplungen
- Intermittenz (reguläre und chaotische Intermittenz)
- ► Seltsame Attraktoren

Konservative Systeme Chaos ist möglich in nicht integrablen Hamiltonschen Systemen. Das KAM-Theorem erklärt die Koexistenz regulärer und chaotischer Strukturen im Phasenraum. Die Frage nach dem Verhalten von Quantensystemen, deren klassischer Grenzfall Chaos zeigt führt auf das Quantenchaos.

1.2 Experimente und einfache Modelle zum deterministischen Chaos

1. Das getriebene Pendel

$$\ddot{\theta} + 2\gamma \dot{\theta} + \frac{g}{\ell} \sin \theta = \alpha \sin \omega t.$$

2. Das Rayleigh-Bénard-System in einer Zelle. Lorentz-Modell (3D):

$$\dot{\boldsymbol{x}} = f(\boldsymbol{x})$$



▶ 1 Klassifikation von Systemen, die deterministisches Chaos zeigen.

3. Getriebene chemische Reaktionen: Die Belousov-Zhabotionsky-Reaktion, vereinfacht

$$A + B \rightleftharpoons C$$

Differentialgleichung für die Konzentrationen:

$$\dot{c}_A_B = f_A(c_A, c_b, c_C).$$

Diese ist nichtlinear durch Produkte der Konzentrationen, z.B. $c_A \cdot c_B$.

4. Hamiltonsche Systeme: Hénon-Heiles-System

$$H = \underbrace{\frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2)}_{\text{Harmonischer Oszillator}} + \underbrace{q_1^2q_2 - \frac{1}{3}q_2^3}_{\text{Nichtlinearer Komplungsterm}}$$

In der Poincaré-Abbildung entsprechen reguläre Strukturen der Integrabilität. Stochastische Strukturen deuten auf Chaos hin.

Das Rayleigh-Bénard-System in einer Zelle



Flüssigkeitsschicht zwischen zwei Platten mit unterschiedlichen Temperaturen im Gravitationsfeld. Die Flüssigkeit hat eine endliche Viskosität. Ein weiterer Anstieg von δT resultiert in chaotischer Bewegung (Turbulenz).

Konvektionsrollen.

Eine Flüssigkeit befindet sich zwischen zwei Platten im Gravitationsfeld. Der Abstand zwischen den beiden Platten ist *h*. Die obere Platte wird auf konstanter Temperatur *T* gehalten, die untere Platte wird geheizt mit $T + \delta T$. Die Konvektionsrollen, die bei zu starkem Heizen auftreten sind Indikator für ein reguläres Verhalten.

Wir können das System theoretisch beschreiben. Uns interessiert im wesentlichen das Geschwindigkeitsfeld der Flüssigkeit v(x, t). Die Ausgangsgleichungen sind

► Navier-Stokes-Gleichung für die Strömung:

$$\varrho \frac{\mathrm{d} \boldsymbol{v}}{\mathrm{d} t} = \boldsymbol{F} - \nabla \boldsymbol{p} + \mu \nabla^2 \boldsymbol{v}$$

mit der Dichte ϱ und der Viskosität μ . Für die Kraft F nehmen wir die Gravitationskraft $\varrho g \boldsymbol{e}_z$ an.

► Wärmeleitungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \kappa \nabla^2 T$$

mit der Wärmekapazität κ .

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) = 0$$

mit den Randbedingungen $T(x, y, z = h, t) = T_0$ und $T(x, y, z, z = 0, t) = T_0 + \delta T$.

Was können wir tun um das System zu vereinfachen?

- Translationsinvarianz in *y*-Richtung ($v_y = 0$).
- ► Die auftretenden Koeffizienten hängen nicht von der Temperatur ab, mit Ausnahme der Dichte $\rho = \bar{\rho}(1 2\delta T)$.

Damit können wir die Kontinuitätsgleichung schreiben als

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

mit $u = v_x \equiv -\partial_z \psi$ und $w = v_z \equiv \partial_x \psi$. Hier $\psi(x, z.t)$ ist lediglich eine weitere Funktion, die die obigen Bedingungen erfüllt.

Dann brauchen wir einen Ansatz für das Temperaturfeld:

$$T(x,z,t) = T_0 + \delta T - \frac{\delta T}{h}z + \Theta(x,z,t).$$

Das bedeutet, dass sich für $\Theta = 0$ ein lineares Temperaturprofil ausbildet. Das bedeutet, dass Θ die Abweichung davon angibt.

Damit folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}\nabla^{2}\psi = -\det\frac{\partial(\psi,\nabla^{2}\psi)}{\partial(x,z)} + \nu\left(\frac{\partial^{4}}{\partial x^{4}} + \frac{\partial^{4}}{\partial z^{4}}\right)\psi + ga\frac{\partial\Theta}{\partial x}$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\Theta = -\det\frac{\partial(\psi,\Theta)}{\partial(x,z)} + \frac{\delta T}{h}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \kappa\nabla^{2}\Theta$$

mit der kinematischen Viskosität $v = \mu/\bar{\varrho}$.

Als Vereinfachung nehmen wir folgende Randbedingungen an

$$\Theta(0,0,t) = \Theta(0,h,t) = \psi(0,0,t) = \nabla^2 \psi(0,0,t) = \nabla^2 \psi(0,h,t) = 0.$$

Dies erlaubt eine Fourierentwicklung der Ortsabhängigkeit von ψ und Θ . Die Berücksichtigung nur der niedrigsten Terme liefert den Ansatz

$$\frac{a}{1+a^2}\frac{1}{\kappa}\psi = \sqrt{2} X(t) \sin\left(\frac{\pi a}{h}\right) \sin\left(\frac{\pi}{h}z\right)$$
$$\frac{\pi R}{R_c \delta T}\Theta = \sqrt{2} Y(t) \cos\left(\frac{\pi a}{h}\right) \sin\left(\frac{\pi}{h}z\right) - Z(t) \sin\left(\frac{2\pi}{h}z\right)$$

mit der Rayleigh-Zahl $R \equiv gah^3 \delta T/\kappa v$, dem Verhältnis der Längen in der Zelle a und $R_c = \pi^4 (1 + a^2)^3/a^2$. Einsetzen und Vernachlässigung höherer Harmonischer liefert das *Lorenz-Modell*

$$\dot{X} = -\sigma X + \sigma Y \qquad \qquad \sigma = \frac{v}{\kappa} \qquad (Prandl-Zahl)$$

$$\dot{Y} = rX - Y - XZ \qquad \text{mit} \qquad r = \frac{4}{1 + a^2}$$

$$\dot{Z} = XY - bZ \qquad \qquad b = \frac{R}{R_C} \sim \delta T$$

wobei der Punkt hier die Ableitung nach $\tau = \pi^2 (1 + a^2) \kappa t / h^2$ ist. Dies sind drei gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung. Sie lassen sich auch zu einem Vektor zusammenfassen $\dot{x} = F(x)$.

1. Schritt: Wir suchen nach stationären Lösungen. Mathematisch gesehen sind dies die Fixpunkte F(x) = 0 der Gleichung. Wir finden drei Fixpunkte

$$\mathbf{x}_{1} = 0$$
, $\mathbf{x}_{2,3} = \begin{pmatrix} \pm \sqrt{b(r-1)} \\ \pm \sqrt{b(r-1)} \\ r-1 \end{pmatrix}$

2. Schritt: Als nächstes muss die Differentialgleichung um die Fixpunkte linearisiert werden um Stabilität der gefundenen stationären Lösungen zu untersuchen. Es zeigt sich:

- 1. $\boldsymbol{x}_1 = 0$ ist ein stabiler Fixpunkt ($\lambda_i < 0$) für 0 < r < 1. Dies entspricht einer reinen Wärmeleitung.
- 2. Die Linearisierung der Lorenzgleichung um die Fixpunkt $x_{2,3}$ ist reell für r > 1.

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_i}\Big|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_{2,3}} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\sigma & \sigma & 0\\ 1 & -1 & -c\\ c & c & -b \end{pmatrix}}_{\mathcal{A}}$$

mit $c \equiv \pm \sqrt{b(r-1)}$. Die Eigenwerte von \mathcal{A} sind gegeben durch das charakteristische Polynom $\chi(\lambda)$:

$$\chi(\lambda) = \det(\mathcal{A} - \lambda \mathbb{1}) = \dots = -[\lambda^3 + (\sigma + b + 1)\lambda^2 + b(\sigma + r)\lambda + 2b\sigma(r - 1)].$$

Man erhält die Eigenwerte als Nullstellen von $\chi(\lambda) = 0$ (vgl. Abbildung 2):

 $r < 1 : \lambda_{1,2} < 0, \lambda_3 > 0$: instabile Fixpunkte ($\boldsymbol{x}_{2,3}$) (aber $\boldsymbol{x}_1 = 0$ ist stabil)

r = 0: $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = -b$, $\lambda_3 = -(\sigma + 1)$: marginal stabiler Fixpunkt

 $1 < r < r_1$: drei reelle Nullstellen, $\lambda_{1,2,3} < 0$: stabile Fixpunkte ($\mathbf{x}_{2,3}$) Konvektion (stationäres Geschwin-

digkeitsfeld)



 \blacktriangleright 2 Illustration zu den verschiedenen Fällen von
 r und den zugehörigen Nullstellen des charakteristischen Polynoms.

 $r_1 < r < r_C$: Eine reelle Nullstelle $\lambda < 0$, zwei komplexe Nullstellen $\lambda_{2,3}$ mit Re $\lambda_{2,3} < 0$. Dabei ist $\mathbf{x}_{2,3}$ weiterhin ein stabiler Fixpunkt (Konvektion).

 $r = r_{C}$: $\lambda_{1} < 0$, $\lambda_{2,3} = \pm i\omega$ mit $\omega \in \mathbb{R}$: Hopf-Bifurkation

 $r > r_C$: $\lambda_1 < 0$, $\lambda_{2,3}$ sind komplex mit Re $\lambda_{2,3} > 0$. Die Fixpunkte $\boldsymbol{x}_{2,3}$ werden instabil.

In der Hopf-Bifurkation entstehen zwei stabile Grenzzyklen (stabile periodische Bahnen) gegen die das System für $t \to \infty$ strebt. Daraus resultiert eine periodische Änderung der Konvektionsrollen.

Ein weiterer Anstieg der Temperaturdifferen
z $(r\gg r_C)$ führt zu turbulenter Strömung (Chaos).

1.3 Mathematische Modelle zum deterministischen Chaos: Abbildungen (Maps)

Sei $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ und f eine Funktion $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N, \mathbf{x} \mapsto \mathbf{y} = f(\mathbf{x})$. Sei $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^N$ ein Startpunkt, so erzeugt die Abbildung f eine Folge von Punkten

$$x_{n+1} = f(x_n)$$
, $n = 0, 1, 2, ...$

▶ *Beispiel* 1. Stückweise lineare eindimensionale Abbildung (Bernoulli-Shift):

$$x_{n+1} = 2x_n \bmod 1$$

2. Zweidimensionale Bäcker-Transformation:

$$x_{n+1} = 2x_n \mod 1$$

 $y_{n+1} = \left(ay_n + \frac{1}{2}[2x_n]\right), \quad a \le \frac{1}{2}$



> 3 Skizze der Bernoulli-Abbildung. Man erkennt die Streckung und Faltung des Einheitsintervalls.

3. Eindimensionale quadratische Abbildung (logistische Abbildung)

$$x_{n+1} = r x_n (1 - x_n)$$
, $x_n \in [0, 1], 0 < r \le 4$

4. Hénon-Abbildung

$$x_{n+1} = 1 - ax_n^2 + y_n$$

$$y_{n+1} = bx_n, \quad |b| < 1$$

5. Chivikov-Abbildung

$$P_{n+1} = P_n - k \sin \Theta_n$$

$$\Theta_{n+1} = \Theta_n + P_{n+1}$$

1.3.1 Bernoulli-Verschiebung

Die Vorschrift lautet

$$x_{n+1} = 2x_n \bmod 1.$$

Dies ist eine Abbildung $[0,1) \rightarrow [0,1)$ (siehe Abbildung 3).

Die Vorschift f(x) ist eine Verschiebung der (0, 1)-Folge in binärer Zahlendarstellung. Dies wird Bernoulli-Shift genannt.

$$x_n = 0.0111000101\dots$$

 $x_{n+1} = 0.111000101\dots$

Die Eigenschaften dieser Abbildung sind

- x_0 ist eine rationale Zahl $\Rightarrow x_n$ ist eine periodische Folge
- ▶ x_0 ist irrational \Rightarrow Die Folge x_n ist ergodisch, d.h. die x_n kommen jedem Wert in [0,1) beliebig oft beliebig nahe.



▶ 4 Histogramm einer Trajektorie.

▶ Sensitive Abhängigkeit der Folge vom Anfangswert *x*₀.

Betrachte die Folge x_n mit Anfangswerten x_0 , $x_0 + \varepsilon$ mit $\varepsilon \in [2^{-N}, 2^{-N+1}]$. Nach N Iterationen unterscheiden sich die Folgen vollständig. Dies entspricht einer Fehlerverstärkung um den Faktor 2 bei jeder Iteration (Streckung). Der Fehler wächst also exponentiell mit der Zahl der Iterationen.

Definition Der Liapunovexponent ist definiert durch:

$$\frac{\varepsilon}{x_0 - x_0} + \varepsilon \quad \stackrel{n \ lterationen}{\Longrightarrow} \quad \frac{\varepsilon e^{n\lambda(x_0)}}{f^n(x_0)} \quad \frac{f^n(x_0 + \varepsilon)}{f^n(x_0 + \varepsilon)}$$

wobei

$$f^{n+1}(x) = f(f^n(x))$$

Damit folgt die Definition des Liapunovexponenten:

$$\begin{split} \lambda(x_0) &= \lim_{n \to \infty} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{n} \ln \left| \frac{f^n(x_0 + \varepsilon) - f^n(x_0)}{\varepsilon} \right| \\ &= \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \ln \left| \frac{\mathrm{d} f^n(x_0)}{\mathrm{d} x_0} \right| \\ &= \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \ln \left| \prod_{i=0}^{n-1} f'(x_i) \right| \end{split}$$

Dieser ist ein Maß für die Fehlerverstärkung (Instabilität). Diese findet statt bei $\lambda > 0$.

Definition Die invariante Dichte bestimmt die Dichte einer Iterierten für eine Abbildung $x_{n+1} = f(x_n)$. Betrachte dazu ein Histogramm, wie es etwa in Abbildung 4 zu sehen ist, für eine "typische" (nicht periodische, ergodische) Trajektorie. Der Limes für $\Delta x \to 0$ und $N \to \infty$ liefert die invariante Dichte $\varrho(x)$ mit der Normierung $\int \varrho(x) dx = 1$. Das invariante Maß oder die invariante Dichte ist definiert als

$$\varrho_{x_0}(x) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} \delta(x - f^i(x_0))$$
$$\varrho(x) = \int dy \ \varrho(y) \ \delta(x - f(y))$$



▶ 5 Graph der logistischen Abbildung.

Hängt ϱ nicht von x_0 ab, so heißt das System ergodisch.

1.3.2 Logistische Abbildung

Die Vorschrift lautet

$$x_{n+1} = f_r(x_n) = r x_n (1 - x_n)$$

mit dem Kontrollparameter r unter der Einschränkung $0 < r \le 4$. Die nullte Iterierte der logistischen Abbildung ist in Abbildung 5 zu sehen.

Dies ist ein mathematisches Modell für

- den gedämpften, getriebenen Oszillator
- ▶ Populationsdynamik in einem abgeschlossenen Lebensraum.

Welche Eigenschaften hat die logistische Abbildung? Dazu diskutieren wir die Fixpunkte $f_r(x_0) = x_0$ und die periodischen *n*-Zyklen $f_r^n(x_0) = x_0$.

1. Die Fixpunkte (also die 1-Zyklen) erhalten wir als Lösungen der Gleichung

$$rx_0(1-x_0) = x_0 \implies x_0 = 0$$
 oder $x_0 = 1 - \frac{1}{r} > 0$ für $r > 1$

Der Fixpunkt ist stabil, falls $|f'_r(x_0)| = |r(1 - 2x_0)| < 1$, sonst ist er instabil. Da $|f'_r(x_0 = 0)| = r$ und damit $x_0 = 0$ handelt es sich hier um einen stabilen Fixpunkt für 0 < r < 1 und einen instabilen Fixpunkt für r > 1. Mit $|f'_r(x_0 = 1 - 1/r)| = |2 - r|$ folgt $x_0 = 1 - 1/r$, was stabil ist für $1 < r < r_1 = 3$ und instabil für r > 3.

2. Die Fixpunkte des 2-Zyklus sind $f_r(f_r(x_0)) = x_0$, also

$$x_1 = rx_0(1 - x_0)$$

$$x_2 = rx_1(1 - x_1) = r^2 x_0(1 - x_0)(1 - rx_0(1 - x_0)) = x_0$$

×

Wir müssen die Lösungen x_0 von $r^3x^4 - 2r^3x^3 + r^2(r+1)x^2 + (1-r^2)x = 0$ finden. Diese Lösungen sind

$$x_1 = 0$$
, $x_2 = 1 - \frac{1}{r}$, $x_{3,4} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2r} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2r}\right)^2 - \frac{r+1}{r^2}}$

Was passiert bei $r = r_1 = 3$? Es findet eine Periodenverdopplung statt. Der 1-Zyklus wird instabil und ein stabiler 2-Zyklus entsteht. Dies drückt sich in einer *Heugabelbi-furkation* aus.

Eine Fortsetzung dieses Schema zeigt, dass eine weitere Periodenverdopplung bei $r = r_2 \approx 3.45$ stattfindet. Dieses Mal wird der 2-Zyklus instabil und ein stabiler 4-Zyklus entsteht. Die sich daraus ergebende Verallgemeinerung ist:

1. Für $r_{n-1} < r < r_n$ existiert ein stabiler 2^{n-1} -Zyklus mit den Elementen $x_0, x_1, \ldots, x_{2^{n-1}-1}$ und es gilt

$$f_r(x_i) = x_{i+1}$$
, $f_r^{2^{n-1}}(x_i) = x_i$, $\left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_0} f_r^{2^{n-1}}(x_0) \right| = \left| \prod_i f_r'(x_i) \right| < 1$

- 2. Bei $r = r_n$ werden alle Punkte des 2^{n-1} -Zyklus gleichzeitig durch eine Gabelbifurkation instabil. Die Bifurkation tritt in $f_r^{2^n} = f_r^{2^{n-1}} \circ f_r^{2^{n-1}}$ auf und führt zu einem stabilen 2^n -Zyklus im Bereich $r_n < r < r_{n+1}$.
- *Zusammenfassung der numerischen Resultate:* 1. Es gibt einen periodischen Bereich ($r < r_{\infty} = \lim_{n \to \infty} r_n$). In diesem Bereich ist der Liapunov-Exponent stets kleiner als Null. Die r_n skalieren wie $r_n = r_{\infty} c\delta^{-n}$ für $n \gg 1$ mit

$$r_{\infty} \approx 3.569\,945$$
, $\delta = 4.669\,201\,609\,1$.

Das δ hat auch den Namen Feigenbaumkonstante.

Die Abstände d_n zwischen x = 1/2 und dem nächstliegenden Punkt in einem 2^n -Zyklus haben konstante Verhältnisse:

$$\frac{d_n}{d_{n+1}} = -\alpha$$
 für $n \gg 1$ mit $\alpha = 2.502\,907\,875\,0$

Das α ist eine weitere Feigenbaumkonstante.

2. Chaotischer Bereich ($r > r_{\infty}$). Hier ist der Liapunov-Exponent meist größer als Null. Die chaotischen Bereiche wachsen durch inverse Bifurkationen zusammen bis bei r = 4 die Iterationen über das ganze Intervall [0, 1) verteilt sind. Die r-Fenster, in denen kein Chaos auftritt ($\lambda < 0$) werden durch periodische p-Zyklen charakterisiert (p = 3, 5, 6, ...), bei denen sukzessive Bifurkationen auftreten:

$$p, 2p, 2^2p, \ldots$$
 (Verdopplungen)

aber auch

 $p, 3p, 3^2p, \ldots$ (Verdreifachungen)

außerdem Vervierfachungen $4^n p$, usw.

-0



▶ 6 Die Abstände d_n der am dichtesten bei x = 1/2 liegenden Fixpunkte für superstabile 2^N -Zyklen (schematisch). Von [1].

Definition *Ein* 2^{*n*}*-Superzyklus* (*superstabiler Zyklus*) *ist definiert durch*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_0} f_{R_n}^{2^n}(x_0) = \prod_i f_{R_n}'(x_i) = 0 \implies \boxed{\lambda \to -\infty}.$$

Bei der logistischen Abbildung enthält der Superzyklus immer den Wert $x_0 = 1/2$ (f'(x) = 0 gilt nur bei x = 1/2). Die Abstände d_n sind definiert durch

$$d_n = f_{R_n}^{2^{n-1}}\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}$$

bei Superzyklus $r = R_n$. Die Superzyklen und Abstände d_n sind hierbei in Abbildung 6 schematisch visualisiert.

Der erste Superzyklus tritt auf bei $R_0 = 2$:

$$f_{R_0}(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}(1-\mathbf{x})$$

Eine kleine Störung $x = 1/2 + \varepsilon$ führt zu

$$f_{R_0}(x) = (1+2\varepsilon)\left(\frac{1}{2}-\varepsilon\right) = \frac{1}{2}-2\varepsilon^2.$$

Das Konvergenzverhalten lässt sich nicht mehr durch einen Liapunovexponent beschreiben, da $\lambda \rightarrow -\infty$. Man spricht von *Superkonvergenz*. Weitere Superzyklen findet man bei $R_1 = 1 + \sqrt{5} = 3.236$ und $R_2 = 3.4985$. Die R_n skalieren wie die r_n der Bifurkationspunkte mit einem etwas anderen Vorfaktor aber sie haben denselben Grenzwert r_{∞} :

$$R_n = r_\infty - c' \delta^{-n}$$

Wiederholung zur Logistischen Abbildung: Die Abbildungsvorschrift lautet

$$x_{n+1} = f_r(x_n) = r x_n (1 - x_n)$$

wobei $0 < r \le 4$ und $f_r : [0, 1] \to [0, 1]$.

Die Eigenschaften dieser Abbildung sind:

- 1. Der periodische Bereich tritt auf bei $0 < r < r_{\infty} = 3.5699456$.
 - Eine Periodenverdopplung findet über eine Gabelbifurkation statt (Feigenbaumszenario)
 - Skalierungseigenschaften
 - a) Bifurkationspunkte des 2^{*n*}-Zyklus: $r_n = r_\infty c\delta^{-n}$ (für $n \gg 1$)
 - b) "Superzyklen" sind definiert durch

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_0} f_{R_n}^{2^n}(x_0) = \prod_i f_{R_n}'(x_i) = 0$$

mit den Abständen

$$d_n = f_{R_n}^{2^{n-1}}\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}$$
, $R_n = r_\infty - c'\delta^{-n}$, $\frac{d_n}{d_{n+1}} = -\alpha$ für $n \gg 1$

mit den Feigenbaumkonstanten

$$\alpha = 2.5029..., \delta = 4.6692...$$

2. Der chaotische Bereich befindet sich bei $r_{\infty} < r \leq 4$

Die Abstände sind gegeben durch

$$d_n = f_{R_n}^{2^{n-1}}\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}.$$

Diese Form ist eher unhandlich und wir führen eine Koordinatentransformation (Verschiebung) durch.

$$x \to x - \frac{1}{2}$$
, $f \to f - \frac{1}{2}$

Damit lautet die Abbildungsvorschrift

$$x_{n+1} = f_r(x_n) = r\left(\frac{1}{4} - x_n^2\right) - \frac{1}{2}$$

wobei $f : [-1/2, 1/2] \rightarrow [-1/2, 1/2]$. Damit haben wir x = 1/2 nach x = 0 verschoben, sodass die Abstände d_n nun wie folgt geschrieben werden können

$$d_n = f_{R_n}^{2^{n-1}}(0)$$

-0

Skalierungsverhalten (Selbstähnlichkeit)

Aus den numerischen Ergebnissen haben wir bereits ein bestimmtes Saklierungsverhalten beobachtet, welches auf die Feigenbaumkonstanten α und δ führt. Es gibt ein α , so dass

$$-\alpha f_{R_{n+1}}^{2^n} \left(\frac{x}{-\alpha}\right) \stackrel{=\text{ für } n \gg 1}{\Rightarrow} f_{R_n}^{2^{n-1}}(x)$$
$$\stackrel{x=0}{\Rightarrow} -\alpha d_{n+1} \approx d_n$$
$$\Rightarrow \frac{d_n}{d_{n+1}} \approx -\alpha.$$

Reskalierung führt auf

$$\lim_{n\to\infty}(-\alpha)^n f_{R_{n+1}}^{2^n}\left(\frac{x}{(-\alpha)^n}\right)\equiv g_1(x).$$

Verallgemeinerung diese Prinzips ergibt

$$-\alpha f_{R_{n+i}}^{2^n}\left(\frac{x}{-\alpha}\right) \approx f_{R_{n-1+i}}^{2^{n-1}}(x),$$

$$\implies \lim_{n \to \infty} (-\alpha)^n f_{R_{n+i}}^{2^n}\left(\frac{x}{(-\alpha)^n}\right) \equiv g_i(x).$$

Es gilt dann

$$g_{i-1}(x) = -\alpha g_i\left(g_i\left(\frac{x}{-\alpha}\right)\right) \equiv Tg_i(x)$$

mit dem Verdopplungsoperator T.

BEWEIS

$$\begin{split} g_{i-1}(x) &= \lim_{n \to \infty} (-\alpha)^n f_{R_{n+i-1}}^{2^n} \left(\frac{x}{(-\alpha)^n} \right) \\ &= \lim_{n \to \infty} (-\alpha) (-\alpha)^{n-1} \underbrace{f_{R_{n-1+i}}^{2^{n-1}}}_{f_{R_{n-1+i}}^{2^{n-1}}} \left(-\frac{1}{\alpha} \frac{x}{(-\alpha)^{n-1}} \right) \\ &\stackrel{m=n-1}{=} \lim_{m \to \infty} (-\alpha) (-\alpha)^m f_{R_{m+i}}^{2^m} \left(\frac{1}{(-\alpha)^m} \underbrace{(-\alpha)^m f_{R_{m+i}}^{2^m} \left(-\frac{1}{\alpha} \frac{x}{(-\alpha)^m} \right)}_{-g_i(x/-\alpha)} \right) \\ &= -\alpha g_i \left(g_i \left(\frac{x}{-\alpha} \right) \right) \end{split}$$

Für $i \to \infty$ erhalten wir

$$g_i(x) = Tg_i(x)$$

 $i \to \infty$: $g(x) = Tg(x)$

 $g(x) = \lim_{i \to \infty} g_i(x)$ ist Lösung der Funktionalgleichung.

$$g(x) = Tg(x) = -\alpha g\left(g\left(\frac{x}{-\alpha}\right)\right)$$

Die Lösung der Funktionalgleichung liefert die Feigenbaumkonstante α

$$x = 0 \implies g(0) = -\alpha g(g(0)) \implies \alpha = -\frac{g(0)}{g(g(0))}$$

Beachte, dass mit g(x) auch $\mu g(x/\mu)$ Lösung der Funktionalgleichung ist. Setzen wir o.B.d.A. g(0) = 1, führt dies auf

$$\Rightarrow \alpha = -\frac{1}{g(1)}$$

Lösungsansatz: Taylorreihe für g(x) und Koeffizientenvergleich. Ein grober Ansatz ist

$$g(x) = 1 + bx^{2}$$

$$\implies -\alpha g\left(g\left(-\frac{x}{\alpha}\right)\right) = -\alpha(1+b) - \frac{2b^{2}}{\alpha}x^{2} + \mathcal{O}(x^{4})$$
$$\stackrel{!}{=} 1 + bx^{2}$$

Koeffizientenvergleich:

$$-\alpha(1+b) = 1 \tag{(*)}$$

$$-\frac{2b^2}{\alpha} = b \tag{**}$$

Aus (**) folgt

$$2b = -\alpha$$

Einsetzen in (*)

$$-\alpha \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right) = 1$$
$$\alpha^2 - 2\alpha - 2 = 0$$
$$\alpha = 1 \pm \sqrt{3} = 2.73$$

Genauer: Siehe Mathematica-Skript.

$$\alpha = 2.502\,907\,875\,1$$

$$g(x) = 1 - 1.527\,63\,x^2 + 0.104\,815\,x^4 + 0.026\,705\,7\,x^6 + \dots$$

Den Wert für die Feigenbaumkonstante δ erhalten wir mittels des Skalierungsverhältnisses

$$R_n - R_\infty \sim \delta^{-n}$$
 für $n \gg 1$

Entwicklung von $f_R(x)$ um $f_{R_{\infty}}(x)$

$$f_R(x) = f_{R_\infty}(x) + (R - R_\infty)\delta f(x) + \dots$$

Entwicklung von $Tf_R(x)$:

$$Tf_R = Tf_{R_{\infty}} + (R - R_{\infty})L_{f_{R_{\infty}}}\delta f$$

wobei $L_{f_{R_{\infty}}}$ die Linearisierung des Verdopplungsoperators ist und $\delta f \equiv \partial f_R(x) / \partial R|_{R_{\infty}}$. Die Linearisierung von *T* ist

$$L_f \delta f = -\alpha \{ (f + \delta f) [(f + \delta f) (-x/\alpha)] - f [f(-x/\alpha)] \}$$

= -\alpha \{ f' [f(-x/\alpha)] \delta f + \delta f [f(-x/\alpha)] \}.

Damit folgt für *n*-faches Anwenden von *T*

$$T^{n}f_{R} = \underbrace{T^{n}f_{R_{\infty}}}_{\underbrace{n-\infty}} + (R-R_{\infty}) \underbrace{L_{T^{n-1}f_{R_{\infty}}} \dots L_{T}f_{R_{\infty}} \delta f}_{\underbrace{n-\infty}} + \mathcal{O}[(\delta f)^{2}].$$

Entwicklung von $\delta f(x)$ nach den Eigenfunktionen von L_g :

$$L_{g}\varphi_{\nu} = \lambda_{\nu}\varphi_{\nu}, \quad \delta f = \sum_{\nu} c_{\nu}\varphi_{\nu}$$
$$\implies L_{g}^{n}\delta f = \sum_{\nu} c_{\nu}\lambda_{\nu}^{n}\varphi_{\nu} \xrightarrow{n\gg1} c_{1}\lambda_{1}^{n}\varphi_{1}$$

wobei λ_1 der größte Eigenwert ist. Damit und mit $\delta = \lambda_1$ und $h(x) = \varphi_1$:

$$T^{n} f_{R_{n}}(0) \approx g(0) + (R_{n} - R_{\infty}) \delta^{n} c_{1} h(0)$$
$$\implies R_{n} - R_{\infty} = -\frac{1}{c_{1} h(0)} \delta^{-n}$$

Also ist die Feigenbaumkonstante δ gegeben als größter Eigenwert der Eigenwertgleichung

$$L_g h(x) = \delta h(x) = -\alpha \left\{ g' \left[g\left(-\frac{x}{\alpha}\right) \right] h\left(-\frac{x}{\alpha}\right) + h \left[g\left(-\frac{x}{\alpha}\right) \right] \right\}$$

Universalität beim Feigenbaumszenario

Abbildung $x_{n+1} = f_r(x_n)$ mit einem Maximum bei $x_0 = 0$ und eine negative Schwarzsche Ableitung

$$rac{f'''}{f'} - rac{3}{2} \left(rac{f'''}{f'}
ight)^2 < 0,$$

Es gibt eine Selbstähnlichkeit in der Umgebung des Maximums in jeder Stufe der Periodenverdopplung bei geeigneter Reskalierung:

$$-\alpha f_r\left(f_r\left(-\frac{x}{\alpha}\right)\right) \equiv Tf_r(x) \approx f_r(x)$$

Aus dieser Selbstähnlichkeit folgt

$$\lim_{i\to\infty}\lim_{n\to\infty}f_{r=R_{n+i}}(x)\equiv g(x)$$

Diese Funktion g(x) ist eine universelle Funktion (unabhängig von f_r) und Lösung der Funktionalgleichung

$$Tg(x) = -\alpha g\left(g\left(-\frac{x}{\alpha}\right)\right) = g(x)$$

Der Ansatz mit einer Taylorreihe liefert $\alpha = 2.5029...$ Die Feigenbaumkonstante ist der größte Eigenwerte der linearisierten Eigenwertgleichung

$$L_g h(x) = \delta h(x)$$

mit

$$\delta = 4.6692\ldots$$

Der Feigenbaumattraktor Bisher haben wir betrachtet

$$r < r_{\infty} = \lim_{n \to \infty} R_n = 3.569\,945\,6$$

Die Folge $x_i = f(x_{i-1})$ nähert sich einem periodischen 2^n -Zyklus (periodische Bahn). Was passiert beim Erreichen des Wertes $r = r_{\infty}$? Die Bahnlänge geht gegen unendlich, also ist die Folge nicht mehr periodisch. Die Folge $x_i = f_{r_{\infty}}(x_{i-1})$ läuft gegen einen *Attraktor*.

Hinweis: Der Liapunov-Exponent λ wird $\lambda = 0$ für $\gamma = \gamma_{\infty}$. Der Feigenbaumattraktor ist kein "seltsamer Attraktor".

Der Feigenbaumattraktor zeigt Selbstähnlichkeit.

Zur Konstruktion:

 $r < r_1$: Ein Fixpunkt im Intervall [0, 2/3].

 $r_1 < r < r_2$: Zwei Fixpunkte in zwei Intervallen.

 $r_n < r < r_{n+1}$: 2^{*n*} Fixpunkte in 2^{*n*} Intervallen.

Im Limes $n \rightarrow \infty$ bildet der Feigenbaumattraktor ein Fraktal.

Exkurs Betrachten wir die Begriffe *Fraktal* und *fraktale Dimension* (Hausdorffdimension) einmal näher. Fraktale sind Gebilde, die im Allgemeinen keine ganzzahlige sondern eine gebrochene Dimension (Hausdorff-Dimension) besitzen und zudem einen hohen Grad von Selbstähnlichkeit und Skaleninvarianz aufweisen.

Die Dimension einer Menge ist z.B.

- Punktmenge: D = 0,
- ▶ Linie: *D* = 1,
- ▶ Fläche: *D* = 2,
- Volumen: D = 3.

Auch wenn sie intuitiv wirken stellt sich die Frage, wie man auf diese Werte kommt. Betrachte eine Punktmenge in *d* Dimensionen und überdecke sie mit *d*-dimensionalen Kugeln mit Durchmesser ε . Sei $N(\varepsilon)$ die Anzahl der zur Überdeckung notwendigen Kugeln. Es gilt:

$$N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-D}$$
 für $\varepsilon \to 0$



▶ 7 Abbildungsvorschift der Cantormenge: Mit jeder Iteration wird aus dem Intervall das mittlere Drittel herausgenommen.



▶ 8 Die Kochsche Schneeflocke.

Definition Die Größe

$$D = -\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln \varepsilon}$$

heißt Hausdorffdimension der Menge.

► *Beispiel* 1. Die Cantormenge (Abbildung 7). Die Überdeckung in Stufe *n* ergibt sich aus 2^n Intervallen mit der Länge $\varepsilon_n = (1/3)^n$.

$$N(\varepsilon_n) = 2^n, \quad \varepsilon_n = \left(\frac{1}{3}\right)^n$$
$$\implies D = -\lim_{n \to \infty} \frac{\ln N(\varepsilon_n)}{\ln \varepsilon_n}$$
$$= -\lim_{n \to \infty} \frac{n \ln 2}{n \ln 1/3}$$
$$= \frac{\ln 2}{\ln 3} \approx 0.6309$$

2. Kochsche Kurve (Abbildung 8) Für die n-te Iteration gilt

$$\ell_n = 3\left(\frac{4}{3}\right)^{n-1}.$$

 \bowtie



▶ 9 Modifizierte Cantor-Menge.

Die Überdeckung in Stufe *n* ist durch $3 \cdot 4^n$ Intervalle der Länge $\varepsilon_n = (1/3)^n$.

$$N(\varepsilon_n) = 3 \cdot 4^n , \quad \varepsilon_n = \left(\frac{1}{3}\right)^n$$

$$\implies D = -\lim_{n \to \infty} \frac{\ln(3 \cdot 4^n)}{n \ln 1/3}$$

$$= \frac{\ln 4}{\ln 3} \approx 1.2619$$

Zurück zum Feigenbaumattraktor: In der Stufe *n*, also für $r_n < r < r_{n+1}$ finden wir 2^n Fixpunkte in 2^n Intervallen. Nehmen wir an, dass die Intervalle wie die d_n skalieren:

$$\frac{d_n}{d_{n+1}} = -\alpha$$

$$\Rightarrow \epsilon_n \sim \frac{1}{\alpha^n} , \quad N(\epsilon_n) = 2^n$$

$$\Rightarrow D \simeq -\lim_{n \to \infty} \frac{\ln N(\epsilon_n)}{\ln \epsilon_n} = \frac{\ln 2}{\ln \alpha} = 0.7555$$

Genauer finden wir

$$\varepsilon_{n+1} \approx \left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha^2}\right)\right]\varepsilon_n$$
$$\implies D \simeq -\frac{\ln 2}{\ln\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha^2}\right)\right]} = 0.5439$$

Der Feigenbaumattraktor ist ein Fraktal mit Hausdorffdimension D = 0.548. Der Feigenbaumattraktor ist ein "dünnes Fraktal", d.h. das Fraktal hat das Maß $\mu = 0$ (Nullmenge).

Für den Bereich $r > r_{\infty}$ herrscht sensitive Parameterabhängigkeit. Das bedeutet, dass periodische und chaotische Gebiete eng miteinander verwoben sind. Parameterbereiche mit Liapunov-Exponent $\lambda > 0$ bilden ein "fettes Fraktal", d.h. das Fraktal hat ein Maß $\mu > 0$ und die Hausdorffdimension D = 1.

▶ *Beispiel* Beispiel für ein "fettes Fraktal" (Abbildung 9):

$$\ell_n = \left(1 - \frac{1}{3^n}\right)\ell_{n-1}$$
$$\varepsilon_n = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{3^n}\right)\varepsilon_{n-1}$$

Für die Überdeckung in Stufe *n* haben wir 2^n Intervalle der Länge ε_n .

$$D = -\lim_{n \to \infty} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln \varepsilon_n} = -\lim_{n \to \infty} \frac{n \ln 2}{n \ln 1/2} = 1$$
$$\mu = \lim_{n \to \infty} \ell_n = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{3^n} \right) = 0.5601 > 0$$

Frage: Wie entstehen die stabilen p-Zyklen im chaotischen Bereich? Tangentenbifurkation.

- ▶ *p*-Zyklen entstehen "aus dem Nichts".
- ► Jeder *p*-Zyklus durchläuft nach der Entstehung ein vollständiges Feigenbaumszenario mit Periodenverdopplungen bei $r^{(p)} = r_n^{(p)}$.

$$r_n^{(p)} = r_\infty - c \delta^{-n}$$

Superzyklen bei $r = R_n^{(p)}$.

$$R_n = r_{\infty} - c' \delta^{-n}$$
$$\frac{d_n}{d_{n+1}} = -\alpha \qquad \lambda \le 0$$

Logistische Abbildung bei r = 4

$$f_4(x) = 4x(1-x), \quad f_4: [0,1] \to [0,1]$$

zeigt ergodisches Verhalten (kein Attraktor). Man kann sich dies klarmachen, wenn man substituiert:

$$x_n = \frac{1}{2} [1 - \cos(2\pi y_n)] \equiv h(y_n)$$

Damit erhält man

 \Rightarrow

$$x_{n+1} = \frac{1}{2} [1 - \cos(2\pi y_{n+1})] = 4x_n (1 - x_n) = [1 - \cos(2\pi y_n)] [1 + \cos(2\pi y_n)]$$
$$= \frac{1}{2} [1 - \cos(4\pi y_n)] = \frac{1}{2} [1 - \cos(2\pi y_{n+1})]$$
$$y_{n+1} = 2y_n \mod 1$$

Dies ist der bekannte Bernoulli-Shift. Dieser ist eine ergodische Folge in [0, 1]. Die invariante Dichte ist konstant

$$\varrho(\gamma) = 1$$

für die Bernoulli-Abbildung. Die invariante Dichte der Logistischen Abbildung berechnet sich per Definition aus

$$\varrho(x) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \delta(x - \underbrace{x_n}_{h(x)})$$
$$= \int_0^1 dy \underbrace{\varrho(y)}_{=1} \underbrace{\delta(x - h(y))}_{\sum_n \frac{1}{|h'(y_n)|}}$$

mit den Lösungen y_n der Gleichung $\cos(2\pi y_n) = 1 - 2x$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{2}{|\sin(2\pi y_1)|} \quad \text{mit } y_1 = \frac{1}{2\pi} \arccos(1 - 2x)$$
$$= \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x(1 - x)}}$$

Somit zeigt sich, dass eine konstante invariante Dichte, wie sie etwa die Bernoulli-Abbildung besitzt, nicht zwangsweise mit chaotischen verhalten einhergeht.

1.4 Intermittenzroute zum Chaos

Als *Intermittenz* bezeichnet man die Unterbrechung einer periodischen Bewegung durch chaotische Phasen. Mit Intermittenzroute bezeichnet man die Zunahme der chaotischen Phasen bei Variation eines Kontrollparameters bis schließlich die Bewegung vollkommen chaotisch wird. Man unterscheidet zwischen drei verschiedenen Typen von Intermittenz je nach Typ der verantwortlichen Bifurkation (nach Pomeau und Manneville, 1980):

Typ I: Tangentenbifurkation,

Typ II: Hopf-Bifurkation,

Typ III: Inverse Periodenverdopplung (Gabelbifurkation).

Typ I Ein Beispiel wäre die logistische Abbildung beim Verschwinden des p = 3-Zyklus bei $r = r_c = 1 + \sqrt{8} \approx 3.83$.

$$\bar{x}_{n+1} = \varepsilon + \bar{x}_n + \mu \bar{x}_n^2$$



Frage: Wie lang sind die nicht chaotischen (laminaren) Phasen, oder genauer was ist die Zahl der Iterationsschritte einer laminaren Phase?

Antwort:

$$\begin{array}{c} x_{n+1} = x_n + \varepsilon + \mu x_n^2 \\ \underbrace{x_{n+1} - x_n}_{(*)} = \varepsilon + \mu x_n^2 , \quad \mu > 0 \end{array}$$

Dabei ist (*) klein für Iterationen innerhalb des Tunnels dx.

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n} = \varepsilon + \mu x^2$$
$$\implies \int \frac{\mathrm{d}x}{\varepsilon + \mu x^2} = \int \mathrm{d}n$$
$$\implies n \sim \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{\varepsilon + \mu x^2} = \frac{\pi}{\sqrt{\mu\varepsilon}}$$
$$\implies \boxed{n \sim \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}}$$

Dies ist die Zahl der Iterationsschritte einer laminaren Phase.

Laminares Signal: monoton wachsend



Typ II Wie bereits erwähnt tritt die Intermittenz in der Hopf-Bifurkation auf. Betrachte eine zweidimensionale Abbildung in der Umgebung der Hopf-Bifurkation

$$r_{n+1} = (1 + \varepsilon)r_n + \mu r_n^3, \quad \mu > 0$$

$$\vartheta_{n+1} = \vartheta_n + \Omega$$

$$r_{n+1} - r_n = \varepsilon r_n + \mu r_n^3$$

$$\frac{dr}{dn} = \varepsilon r + \mu r^3$$

$$n \sim \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{\varepsilon r + \mu r^3} \sim \frac{1}{\varepsilon}$$

$$x_{n+1}$$

$$\varepsilon < 0$$

$$x_n$$

Laminares Signal: Spiralen



Typ III Hier tritt die Intermittenz bei der inversen Periodenverdopplung auf (Gabelbifurkation).

$$\begin{split} x_{n+1} &= -(1+\varepsilon)x_n - \mu x_n^3 , \quad \mu > 0 \\ \left| \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n} \right| &= c |x| + \mu |x|^3 \\ \stackrel{\text{siehe Typ II}}{\Longrightarrow} n \sim \frac{1}{\varepsilon} \end{split}$$



Laminares Signal: alternierend wachsend



1.5 Seltsame Attraktoren in dissipativen Systemen

Die Beschreibung dynamischer Systeme erfolgt durch diskrete Abbildungen oder kontinuierliche Flüsse. Ein kontinuierlicher Fluss ist definiert durch ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung.

 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

Dissipativ heißt, ein beliebiges Volumenelement, das durch eine Fläche *S* im Phasenraum $\{x\}$ umschlossen wird, sich im Laufe der Zeit auf Null zusammen zieht.

Divergenztheorem

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = \int_V \mathrm{d}^n x \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial x_i}\right)$$

für dissipative Systeme gilt

▶ *Beispiel* Ein Beispiel für einen dissipativen Fluss ist das Lorenzmodell.

$$\dot{X} = -\sigma X + \sigma Y$$
$$\dot{Y} = -XZ + rX - Y$$
$$\dot{Z} = XY - bZ$$

Man kann dies in Matrixschreibweise überführen

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x})$$

div $\mathbf{F} = -(\sigma + 1 + b) < 0$
 $\implies V(t) = V_0 e^{-(\sigma + 1 + b)t}$

Die Lösung für $t \to \infty$ kann ein stabiler Fixpunkt sein, aber für bestimmte Parameter (z.B. $r = 28, \sigma = 10, b = 8/3$), existieren keine stabilen Fixpunkte, die Bahnen sind chaotisch.

Wie verträgt sich das chaotische Verhalten mit der Forderung eines für $t \to \infty$ verschwindenden Volumens? Die Bahn läuft gegen einen sogenannten *seltsamen Attraktor*.

Zum Begriff:

- Attraktor: Alle Bahnen in einem beschränkten Gebiet des Phasenraumes werden für hinreichend lange Zeiten zum Attraktor hingezogen.
- **Seltsam:** Auf dem Attraktor gibt es eine sensitive Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen, d.h. trotz Volumenkontraktion müssen die Längen nicht in alle Richtungen abnehmen. Anfänglich infinitesimal benachbarte Punkte entfernen sich exponentiell voneinander auf dem Attraktor.

Eigenschaften: Alle bisher gefundenen seltsamen Attraktoren in dissipativen Systemen haben eine gebrochene Hausdorffdimension, sind also Fraktale.

Die notwendigen Bedingungen für das Auftreten eines seltsamen Attraktors sind:

- > Streckung des Volumenelements in mindestens einer Dimension,
- ▶ Abnahme des Volumens, Schrumpfung in den anderen Dimensionen,
- ▶ Beschränkung des Gebiets (erlaubten Phasenraumbereichs), Faltungsprozess.



Erinnerung: Der Bernoulli-Shift $x_{n+1} = 2x_n \mod 1$ führt zu einer Streckung und Faltung des Einheitsintervalls.

Für eine Abnahme des Volumens brauchen wir mehr als eine Dimension. Dies haben wir bei der Bäcker-Transformation kennen gelernt:

$$f: [0,1) \times [0,1) \to [0,1) \times [0,1)$$
$$x_{n+1} = 2x_n \mod 1$$
$$y_{n+1} = \begin{cases} ay_n & \text{für } 0 \le x_n < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} + ay_n & \text{für } \frac{1}{2} < x_n < 1 \end{cases}$$

Für Punktmengen

$$x_{n+1} = f(x_n)$$

zeigt sich dissipatives Verhalten, sofern die Determinante der Jacobi-Matrix

$$\left|\det\left(\frac{\partial f(x_i)}{\partial x_j}\right)\right| < 1$$

ist. Anschaulich bedeutet dies, dass für jeden Iterationsschritt das Volumen schrumpft. Die Bäcker-Transformation ist dissipativ für a < 1/2 (Stauchung in γ -Richtung).



Nach *n*-Iterationen ist das Volumen $V_n = (2a)^n$, also eine Überdeckung durch Flächen a^{2n} mit Kantenlänge $\varepsilon_n = a$. Die Anzahl der Überdeckungen ist $N(n) = V_n/a^{2n} = (2a)^n/a^{2n} = (2/a)^n$. Damit ergibt sich die Hausdorffdimension

$$D = -\lim_{n \to \infty} \frac{\ln N(n)}{\ln \varepsilon_n}$$
$$= -\lim_{n \to \infty} \frac{n \ln(2/a)}{n \ln a}$$
$$= 1 - \frac{\ln 2}{\ln a}$$
$$= 1 + \frac{\ln 2}{|\ln a|}$$

also gilt 1 < D < 2 für 0 < a < 1/2. Im Limes $n \rightarrow \infty$ ergibt sich ein seltsamer Attraktor. \neg

Beispiel Ein weiteres Beispiel ist die dissipative Hénon-Abbildung.

$$x_{n+1} = 1 - ax_n^2 + y_n$$
$$y_{n+1} = bx_n$$

Die Abbildung kontrahiert die Fläche, d.h. ist dissipativ für |b| < 1.

1.5.1 Die Kolmogorov-Entropie

Wir kennen den Begriff der Entropie aus der statistischen Mechanik

$$S \sim \sum_{i} P_i \ln P_i$$

wobei P_i die Wahrscheinlichkeit das System im Zustand $\{P_i\}$ oder genauer in der Phasenraumzelle *i* zu finden ist. Die Entropie *S* misst (nach Shanon) die zusätzliche Information, welche benötigt wird, um das System in einem bestimmten Zustand *i* zu lokalisieren.

▶ *Beispiel* Adiabatische Gasexpansion.



Die Entropie steigt an, sofern die Box nicht mehr unterteilt ist, da die Unkenntnis über das System anwächst. Als die Atome auf eine Hälfte des Volumens beschränkt waren, wussten wir mehr über die Position der Atome als nachher. D.h. Informationsverlust ist die Folge. ◄

Wir übertragen den Entropiebegriff auf die Dynamik eines seltsamen Attraktors. Dazu betrachten wir eine Trajektorie auf dem Attraktor

$$\boldsymbol{x}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ \vdots \\ x_d(t) \end{pmatrix}.$$

Unterteile den *d*-dimensionalen Phasenraum in Kästchen der Größe ℓ^d . Diskretisiere den Zeitablauf durch endliche Zeitschritte τ mit $t_n = n\tau$. $P_{i_0,...,i_n}$ ist hierbei die Wahrscheinlichkeit, dass $\mathbf{x}(t = 0)$ in Kästchen i_0 ist, $\mathbf{x}(t = \tau)$ in Kästchen i_1, \ldots und $\mathbf{x}(t = n\tau)$ in Kästchen i_n . Die Größe

$$K_n = -\sum_{i_0\dots i_n} P_{i_0\dots i_n} \ln P_{i_0\dots i_n}$$

ist dann proportional zur Information, die man braucht, um das System auf einer speziellen Trajektorie $i_0 \dots i_n$ mit der Genauigkeit ℓ zu lokalisieren. $K_{n+1} - K_n$ ist die Information, die

man zur Vorhersage braucht in welchem Kästchen i_{n+1} das System zur Zeit t_{n+1} sein wird, wenn es zur Zeit t_n in den Kästchen $i_0 \dots i_n$ war. Dabei ist $i_0 \dots i_n$ kein exakter Bahnverlauf. Umgekehrt entspricht dies einem Informationsverlust über die Trajektorie beim Zeitschritt von t_n nach t_{n+1} .

Definition *Die Kolmogorov-Entropie (K-Entropie) ist die mittlere Rate des Informationsverlustes.*

$$K = \lim_{\tau \to 0} \lim_{\ell \to 0} \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N\tau} \sum_{n=0}^{N-1} (K_{n+1} - K_n)$$

= $-\lim_{\tau \to 0} \lim_{\ell \to 0} \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N\tau} \sum_{i_0 \dots i_N} P_{i_0 \dots i_N} \ln P_{i_0 \dots i_N}$

Beachte, dass die Grenzwerte nicht vertauschbar sind!

1. Reguläre Bewegung: Anfänglich benachbarte Bahnen bewegen sich benachbart (kein Informationsverlust).

$$P_{i_0 i_1} = 1 \cdot P_{i_0} = P_{i_0} \rightarrow -\sum_{i_0 \dots i_N} P_{i_0 \dots i_N} \ln P_{i_0 \dots i_N}$$

ist unabhängig von *N* und somit K = 0.

2. Chaotische Bewegung: Anfänglich benachbarte Punkte werden exponentiell voneinander getrennt.

$$P_{i_0i_1} = e^{-\lambda \tau} \cdot P_{i_0}$$

$$P_{i_0...i_N} = e^{-\lambda N \tau} \cdot P_{i_0} , \quad \text{mit } P_{i_0} = 1 \text{ für } i_0, 0 \text{ sonst}$$

$$e^{\lambda N \tau} \rightarrow -\sum_{i_0...i_N} \underbrace{P_{i_0...i_N}}_{e^{-\lambda N \tau}} \underbrace{\ln P_{i_0...i_N}}_{-\lambda N \tau} = N\lambda\tau$$

$$\implies K = \lambda$$

Die Verbindung von *K* mit dem Liapunovexponenten ist:

- ► Ein-dimensionale Abbildung: *K* ist gleich dem (positiven) Liapunovexponenten λ
- ► *d*-dimensionale Abbildung: *K* ist die gemittelte Summe der positiven Liapunovexponenten:

$$K = \int \mathrm{d}^d x \ \varrho(\boldsymbol{x}) \sum_i \lambda_i^+(\boldsymbol{x})$$

wobei $\varrho(\mathbf{x})$ die invariante Dichte auf dem Attraktor ist.

Χ

3. Stochastische (zufällige) Bewegung: Anfänglich benachbarte Punkte sind mit gleicher Wahrscheinlichkeit über alle erlaubten Kästchen verteilt.

$$P_{i_0} = 1 \text{ für ein } i_0, 0 \text{ sonst}$$

$$P_{i_0i_1} = \frac{\ell^d}{V} \ll 1$$

$$\implies -\sum_{i_0...i_N} \underbrace{P_{i_0...i_N}}_{\ell^d/V} \underbrace{\ln P_{i_0...i_N}}_{\ln \ell^d/V} \sim \ln \frac{1}{\ell}$$

$$\stackrel{\ell \to 0}{\Longrightarrow} K \to \infty$$

Die *K*-Entropie bestimmt die mittlere Zeit T_m , für die man den Zustand eines Systems vorhersagen kann. Ein Intervall ℓ wächst nach n Zeitschritten zu $L \sim \ell \exp(\lambda n)$. Ist L > 1, so können wir die Trajektorie nicht mehr lokalisieren, d.h. genaue Vorhersagen sind nur für Zeiten $n < T_m$ möglich. Somit können wir schreiben

$$L \sim \ell e^{\lambda T_m} \implies T_m \sim \frac{1}{\lambda} \ln\left(\frac{1}{\ell}\right)$$
$$\boxed{T_m \sim \frac{1}{K} \ln\left(\frac{1}{\ell}\right)}$$

 ℓ ist die Genauigkeit der Lokalisierung des Anfangszustandes. Im letzten Schritt haben wir den Liapunov-Exponent λ mit der Kolmogorov-Entropie ersetzt und so T_m auf höhere Dimensionen generalisiert. Wichtig ist hierbei, dass T_m von ℓ nur logarithmisch beeinflusst wird.

Wie wir sehen werden, stellt die Kolmogorov-Entropie eine fundamentale Größe dar, mit der wir chaotisches Verhalten charakterisieren können. Ein Attraktor mit positiver Kolmogorov-Entropie kann somit als seltsamer Attraktor definiert werden.

1.5.2 Charakterisierung des Attraktors durch ein gemessenes Signal

Frage: Können wir aus der Messung des Zeitsignals einer chaotischen Trajektorie $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), ...)$ auf Eigenschaften des Attraktors (Fraktale Dimension, *K*-Entropie) schließen?

Betrachte dazu die Diskretisierung der Trajektorie $\mathbf{x}(t = 0), \mathbf{x}(t = \tau), \dots, \mathbf{x}(t = N\tau)$ auf dem seltsamen Attraktor und die Aufteilung des Phasenraumes in Zellen mit Kantenlänge ℓ . Dann ist

$$P_i = \lim_{N \to \infty} \frac{N_i}{N}$$

die Wahrscheinlichkeit die Trajektorie in Zelle *i* zu finden mit N_i der Zahl der Punkte $\mathbf{x}(t = j\tau)$ in Kästchen *i* ($i = 1, ..., M(\ell)$).

Es ist nützlich die Begriffe der Dimension und Entropie zu verallgemeinern.

1. Verallgemeinerte Dimension D_q :

$$D_q = \lim_{\ell \to 0} \frac{1}{q-1} \frac{\ln\left(\sum_{i=1}^{M(\ell)} P_i^q\right)}{\ln \ell}, \quad q = 0, 1, 2, \dots$$

• Im Spezialfall q = 0 erhalten wir wieder die Hausdorff-Dimension

$$D_0 = -\lim_{\ell \to 0} \frac{\ln M(\ell)}{\ln \ell}$$

Für q = 1 müssen wir den Vorfaktor speziell behandeln

$$D_1 = \lim_{\ell \to 0} \frac{S(\ell)}{\ln \ell} , \quad \text{mit } S(\ell) = -\sum_{i=1}^{M(\ell)} P_i \ln P_i$$

Dies bezeichnen wir als Informationsdimension.

• D_2 , also für q = 2 heißt *Korrelationsdimension*.

Es lässt sich zeigen, dass

$$D_{q'} \le D_q$$
 für $q' > q$

2. Verallgemeinerte Entropie K_q :

$$K_{q} = -\lim_{\ell \to 0} \lim_{n \to \infty} \frac{1}{q-1} \frac{1}{n} \ln \sum_{i_{0} \dots i_{n}} P_{i_{1} \dots i_{n}}^{q}$$

Der Limes $\lim_{q \to 1} K_q = K_1 = K$ liefert die K-Entropie.

Die Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten aus einer chaotischen Trajektorie (und damit die Berechnug der D_q und K_q) ist im Prinzip möglich, aber sehr aufwändig. Wir suchen einen "einfacheren" Weg, dazu betrachte nur Kästchen, in denen wirklich Punkte des Attraktors liegen. Ersetze hierzu die gleichmäßig verteilten Kästchen in $\sum_i P_i^q$ durch die Summe über nicht gleichmäßig verteilte Kästchen um Punkte x_j der Zeitreihe, die z.B. durch eine Abbildung $x_{j+1} = f(\mathbf{x}_j)$ generiert werden.

$$\sum_{i} P_{i}^{q} = \sum_{i} \left[\int_{\text{Kästchen}} \varrho(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}^{d} \mathbf{x} \right]^{q}$$

$$\approx \sum_{i} \left[\varrho(x_{i}) \ell^{d} \right]^{q}$$

$$= \sum_{i} \varrho(x_{i}) \ell^{d} \left[\varrho(x_{i}) \ell^{d} \right]^{q-1}$$

$$\approx \int \varrho(x) \, \mathrm{d}^{d} \mathbf{x} \, \tilde{P}(x)^{q-1}$$

$$\approx \frac{1}{N} \sum_{j} \left[\tilde{P}[f^{j}(x_{0})] \right]^{q-1}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i} \tilde{P}_{j}^{q-1}$$

Dabei ist x_i ein Element im Kästchen i und

$$\tilde{P}[f^j(x_o)] \equiv \tilde{P}(x_i) \equiv \tilde{P}_i$$

ist die Wahrscheinlichkeit die Trajektorie in einem Kästchen der Größe ℓ um die Trajektorie $x_j = f^j(x_0)$ zu finden.

Die Text definition für \tilde{P}_j lautet umgesetzt als Formel:

$$\tilde{P}_j = \frac{1}{N} \sum_i \Theta(\ell - |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|) \quad \text{mit} \quad \Theta = \begin{cases} 0 & , x < 0 \\ 1 & , x \ge 0 \end{cases}$$

und $\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_i (t = i\tau)$. Damit:

$$\sum_{i} P_i^{q} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Theta(\ell - |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|) \right)^{q-1} \equiv C_q(\ell)$$

Wichtig ist der Spezialfall q = 2, der als *Korrelationssignal* bezeichnet wird $C_2(\ell) \equiv C(\ell)$. Dieses misst die Wahrscheinlichkeit dafür zwei Punkte auf einem Attraktor in einer Zelle der Größe ℓ zu finden. Hieraus lassen sich bestimmen:

▶ Die Korrelationsdimension D₂

$$D_2 = \lim_{\ell \to 0} \frac{\ln \sum_i P_i^2}{\ln \ell} < D_0$$

untere Grenze für die Hausdorff-Dimension. D_2 ist die Steigung der Kurve bei Auftragung von $\ln C(\ell)$ über $\ln \ell$.

Henon-Abbildung
$$D_2 = 1.21$$

Lorenz-Modell $D_2 = 2.05$

Wiederholung: Wir hatten kennengelernt:

- 1. Verallgemeinerte Dimension D_q
- 2. Verallgemeinerte Entropie K_q

$$K_q = -\lim_{\ell \to 0} \lim_{n \to \infty} \frac{1}{q-1} \frac{1}{n} \ln \sum_{i_0 \dots i_n} P^q_{i_1 \dots i_n}$$

Der Limes $\lim_{q \to 1} K_q = K_1 = K$ liefert die *K*-Entropie.

Außerdem hatten wir $\sum_i P_i^q$ berechnet.

Nun berechnen wir die *K*-Entropie ähnlich zur Berechnung $\sum_i P_i^q$ für D_q :

$$\sum_{i_0\dots i_n} P_{i_1\dots i_n}^{q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \Theta\left(\ell - \sqrt{\sum_{m=0}^{n} (\boldsymbol{x}_{i+m} - \boldsymbol{x}_{j+m})^2} \right) \right]^{q-1} = C_n^q(\ell)$$



▶ 10 Auftragung von $\log C_n^q(\ell)$ über $\log \ell$.

Für den Spezialfall q = 2 ist $C_n^2(\ell) \equiv C_n(\ell)$ die Verallgemeinerung des Korrelationssignals $C(\ell)$. Man beachte, dass $C_{n=0}^q(\ell) = C_q(\ell)$. Die Funktion $C_n^q(\ell)$ lässt sich für jede Trajektorie direkt berechnen. Es ist keine explizite Zellaufteilung des Phasenraumes erforderlich. Es gilt¹:

$$\lim_{\ell \to 0} \lim_{n \to \infty} C_n^q(\ell) = (q-1)D_q \log \ell + n(q-1)K_q$$

Die verallgmeinerte Dimension D_q , sowie die verallgemeinerte Entropie K_q können somit aus experimentell gemessenen Daten bestimmt werden. Tragen wir das Korrelationssignal logarithmisch über log ℓ auf, können die Größen abgelesen werden (siehe Abbildung 10).

1.5.3 Bilder seltsamer Attraktoren und fraktaler Grenzen

Betrachte eine komplexe Funktion $f(z) = z^3 - 1 = 0$. Wir finden drei Nullstellen und zwar bei $z_1 = 0$, $z_2 = e^{2\pi i/3}$, $z_3 = e^{4\pi i/3}$. Verwende das Newtonsche Verfahren zur Bestimmung der Nullstellen

$$f(z) \approx f(z_0) + f'(z_0)(z - z_0) = 0$$

Iteration liefert

$$z_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(z_n)}$$

Die Anwendung auf die gegebene Funktion f(z) liefert uns

$$f(z) = z^{3} - 1$$

$$f'(z) = 3z^{2}$$

$$z_{n+1} = z_{n} - \frac{z_{n}^{3} - 1}{3z_{n}^{2}}$$

Offensichtlich hat die Abbildung drei stabile Fixpunkte bei den Nullstellen von f(z). Nun stellt sich die Frage, auf welchen der drei Fixpunkte die Abbildung konvergiert, bei gegebenem Startwert z_0 . Anders gesagt: Welche Form haben die Attraktionsgebiete der drei Fixpunkte? Eine naive Vorstellung ist in Abbildung 11 dargestellt.

¹ohne Rechnung



▶ 11 Naive Vorstellung der Attraktionsgebiete.

Eine numerische Untersuchung zeigt jedoch, dass die Attraktionsgebiete sehr kompliziert und miteinander verwoben sind, es sind selbstähnliche Strukturen.

Die Grenzen der Attraktionsgebiete rationaler Abbildungen werden als *Julia-Mengen* bezeichnet (Julia, 1918). Julia-Mengen sind normalerweise Fraktale, die Iterierten von Punkten dieser Menge zeigen chaotisches Verhalten.

Ein weiteres Beispiel einer Julia-Menge ist

$$z_{n+1} = f_C(z_n) = z_n^2 + c$$

Ein Fixpunkt ist formal bei $z = \infty$, was die Grenze des Attraktionsgebietes ist. Dieses bildet die Julia-Menge J_c (hängt von c ab).

 $J_c = \text{Rand von } \{ z \mid \lim_{n \to \infty} f_c^n(z) \to \infty \}$

Theorem von Julia und Fatou: Jc ist zusammenhängend genau dann, wenn gilt

Die Mandelbrotmenge ist definiert als

$$M = \{c \mid J_c \text{ ist zusammenhängend}\}\$$
$$= \{c \mid \lim_{n \to \infty} f_c^n(0) \nleftrightarrow \infty\}$$

1.6 Der Übergang von Quasiperiodizität zum Chaos

Frage: Wie ist das Einsetzen von zeitlicher Turbulenz in Flüssigkeiten mit dem Auftreten eines seltsamen Attraktors verbunden?
Wiederholung: Die *Hopf-Bifurkation* erhält man aus der folgenden Differentialgleichung in Polarkoordinaten:

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = -(\Gamma r + r^3) \\ \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \omega$$

$$\Rightarrow \begin{cases} r^2(t) = \frac{\Gamma r_0^2 \mathrm{e}^{-2\Gamma t}}{r_0^2(1 - \mathrm{e}^{-2\Gamma t}) + \Gamma} & \mathrm{mit} \ r_0 = r(t_0) \\ \theta(t) = \omega t & \mathrm{mit} \ \theta(t = 0) = 0 \end{cases}$$

 $\Gamma \ge 0$: Trajektorie läuft zum Ursprung

 $\Gamma < 0$: Grenzzyklus mit Radius $r_{\infty} = \sqrt{-\Gamma}$.

Bei einer Hopf-Bifurkation überquert ein Paar komplex konjugierter Eigenwerte die imaginäre Achse. $\hfill \sim$

1.6.1 Die Landau-Route zur Turbulenz

Das System durchläuft eine Vielzahl von Hopf-Bifurkationen (vgl. Feigenbaumszenario) mit Übergang $\Gamma_i > 0 \rightarrow \Gamma_i < 0$. Jede Hopf-Bifurkation führt eine neue Frequenz mit ω_i in das System ein. Bei unendlich vielen Hopf-Bifurkationen wird im Grenzfall ein kontinuierliches Leistungsspektrum (und damit Chaos) erreicht. Experimente zeigen, dass die Landau-Route zur Turbulenz beim Bénard-Experiment nicht beobachtet wird. Schon nach dem Auftreten von zwei Fundamentalfrequenzen (also schon nach zwei Hopf-Bifurkationen) zeigt das Experiment ein kontinuierliches Leistungsspektrum.

1.6.2 Die Ruelle-Takens-Newhouse-Route zum Chaos:

Theoretische Untersuchungen (1978) zeigen, dass bereits nach drei Hopf-Bifurkationen die reguläre Bewegung instabil werden kann und die Trajektorien können sich dann auf einen seltsamen Attraktor zubewegen. Dies entspricht einem gegenüber der Landau-Route verkürzten Weg zur Turbulenz.

Ein Beweis des Theorems ist mathematisch aufwändig.

- *Bemerkungen:* Es ist kein Chaos möglich vor der dritten Hopf-Bifurkation. Nach der zweiten Hopf-Bifurkation läuft die Trajektorie auf einen Torus (zweidimensionale Mannigfaltigkeit). Auf diesem Torus ist dann Chaos nach dem Poincaré-Bendixon-Theorem verboten.
 - Nach der dritten Hopf-Bifurkation läuft die Bewegung auf einen Dreiertorus. Es wurde gezeigt, dass bestimmte Störungen existieren (die zwar infinitesimal klein sein können, aber gewisse Eigenschaften erfüllen müssen), welche dann die quasiperiodische Bewegung auf einem Dreiertorus in die chaotische Bewegung auf einem seltsamen Attraktor umwandeln.
 - Prinzipiell möglich ist auch das Aufbrechen eines Zweiertorus, z.B. wenn der Dreiertorus direkt nach der Entstehung bereits so instabil ist, dass die dritte inkommensurable Frequenz nicht beobachtet werden kann.

1.6.3 Universelles Verhalten beim Übergang von Quasiperiodizität zum Chaos

Wir untersuchen den Übergang von quasiperiodischer Bewegung auf einem Zweiertorus zu chaotischer Bewegung anhand einer einfachen Poincaréabbildung.

1.6.3.1 Die eindimensionale Kreisabbildung

1. Schritt: Poincaréabbildung für die ungestörte Bewegung auf dem Zweiertorus in Polarkoordinaten (beachte θ = Winkel/ $2\pi \in [0, 1)$).

$$\theta_{n+1} = f(\theta_n) = (\theta_n + \Omega) \mod 1$$

mit der Windungszahl $\Omega = \omega_1/\omega_2$. ω_1 und ω_2 sind die Frequenzen auf dem Zweiertorus.

$$\Omega = \frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{p}{q}$$
 rational: Periodische Bewegung
$$\Omega = \frac{\omega_1}{\omega_2}$$
 irrational: Quasiperiodische Bewegung

2. Schritt: Hinzunahme einer nichtlinearen Störung.

$$\theta_{n+1} = f(\theta_n) = \left(\theta_n + \Omega - \frac{k}{2\pi}\sin(2\pi\theta_n)\right) \bmod 1$$

mit dem Kontrollparameter k, der die Stärke der nichtlinearen Störung bestimmt.

Motivation: Die eindimensionale Kreisabbildung beschreibt als physikalisches System einen getriebenen Rotator für den Fall, dass ein konstantes Drehmoment $\Gamma\Omega$ zu dem antreibenden Moment addiert wird (mit Γ groß).

$$\ddot{\varphi} + \gamma \dot{\varphi} = k f(\varphi) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - nT) + \Gamma \Omega \quad \neg$$

Bestimmte universelle Eigenschaften der Kreisabbildung sind unabhängig von der speziellen Form von $f(\theta)$ (vergleiche Universalität beim Feigenbaumszenario) die Funktion f muss die folgenden Bedingungen erfüllen:

- $f(\theta + 1) = 1 + f(\theta)$ (hier ohne mod 1 zu verstehen)
- ► Für |k| < 1 existieren $f(\theta)$ und ihr Inverses und $f(\theta)$ ist differenzierbar (d.h. $f(\theta)$ ist ein Diffeomorphismus).
- ▶ Bei k = 1 wird $f^{-1}(\theta)$ nicht differenzierbar und für |k| > 1 existiert kein eindeutiges Inverses von $f(\theta)$.

Zur Windungszahl: Für $k \neq 0$, d.h. mit Störung gilt nicht mehr einfach $w = \Omega$. Statt dessen:

$$w = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \left[\underbrace{f^n(\theta_0)}_{ohne \mod 1} - \theta_0 \right]$$

w = p/q rational: Modenkopplung.

w irrational: Quasiperiodische oder chaotische Bewegung.

Zur Verdeutlichung der Modenkopplung: Beobachtung von Huygens (1629–1695) zur Synchronisation zweier Wanduhren (w = 1). Hinweis: Modenkopplung heißt nicht, dass die Trajektorien selbst exakt periodisch sein müssen. Die Kreisabbildung und damit auch die Windungszahl w der Bewegung hängen ab von den zwei Parametern { Ω, k }.

Diskussion des Phasendiagramms der Kreisabbildung:

- ► Arnoldzungen (Bereiche mit Modenkopplung, w = p/q rational) im Gebiet |k| < 1. Für |k| < 1 haben die Gebiete mit und ohne Modenkopplung in der Ω -*k*-Ebene eine endliche Fläche.
- ► Bei k = 1 wandern die Arnoldzungen so aufeinander zu, dass die Bereiche von Ω , in denen keine Modenkopplung auftritt eine selbstähnliche Cantormenge (Fraktal) mit Maß Null ist.
- ► |k| > 1: Chaotisches Verhalten wird möglich. Chaotische und nicht chaotische Gebiete sind in der Ω -*k*-Ebene eng miteinander verwoben.

1.6.3.2 Modenkopplung und Farey-Baum

Frage: Für k fest gegeben, in welchen Ω -Intervallen tritt Modenkopplung auf?

Für einen Zustand mit rationaler Windungszahl w = p/q lässt sich das zugehörige Ω-Intervall $\Omega = \Omega(k)$ aus der Bedingung bestimmen, dass ein stabiler q-Zyklus $f_{\Omega,k}^q(\theta_i^*) = p + \theta_i^*$ mit Elementen $\theta_1^*, \ldots, \theta_q^*$ in der Kreisabbildung auftritt, d.h. es muss gelten

$$\left|f_{\Omega,k}^{\prime q}(\theta_i^*)\right| = \left|\prod_{i=1}^q f_{\Omega,k}^{\prime}(\theta_i^*)\right| = \left|\prod_{i=1}^q 1 - k\cos(2\pi\theta_i^*)\right| < 1$$

► Beispiel

$$w = \frac{p}{q} = \frac{0}{1} = 0$$
$$f_{\Omega,k}(\theta_0) = 0 + \theta_0$$
$$\implies \Omega = \frac{k}{2\pi} \sin(2\pi\theta_0)$$
$$\left| f_{\Omega,k}'(\theta_0) \right| = |1 - k\cos(2\pi\theta_0)| < 1$$

Lösung für k < 1: $|\Omega| < k/(2\pi)$.

Allgemeine Lösung für beliebiges w = p/q (Bak und Bohr, 1984):

► Für $0 < k \le 1$ gehört zu jeder rationalen Windungszahl w = p/q ein endliches Intervall $\Delta\Omega(w = p/q, k)$.

► Für 0 < k < 1 haben die Ω -Intervalle zusammen ein Maß

$$0 < S = \sum_{p,q} \Delta \Omega(w = p/q, k) < 1.$$

► Für k = 1 bilden die Intervalle eine vollständige *Teufelstreppe* (vollständig heißt Maß S(w = p/q, k = 1) = 1).

Die Teufelstreppe ist eine monoton steigende Funktion auf dem Intervall [0,1] wobei zu jedem rationalen Funktionswert p/q eine Stufe endlicher Breite gehört. Die Stufenbreite nimmt mit wachsendem Nenner q ab. Für zwei Windungszahlen w = p/q und w' = p'/q' hat die größte Stufe, die zwischen den beiden Stufen liegt, die Windungszahl (p+p')/(q+q'). Die Stufen der Teufelstreppe lassen sich anhand eines *Farey-Baumes* ordnen, d.h. alle rationalen Zahlen werden nach aufsteigendem Nenner angeordnet, gemäß der Regel, dass die größte rationale Zahl zwischen p/q und p'/q' durch (p + p')/(q + q') gegeben ist.

Der Farey-Baum ordnet die Bereiche, in denen Modenkopplung auftritt, nicht nur für die Kreisabbildung sondern auch eine Vielzahl realer physikalischer Systeme, z.B. getriebenes Pendel, Josephson-Kontakte und System mit Ladungsdichtewellen. Der Übergang von quasiperiodischem in chaotisches Verhalten wird durch zwei Typen von Universalität gekennzeichnet.

1.6.3.3 Lokale Universalität

- ▶ Übergang von quasiperiodischem zu chaotischem Verhalten bei einer speziellen Windungszahl *w*.
- Es zeigen sich enge Parallelen zum Feigenbaum-Szenario. Wir betrachten als Beispiel wieder die Kreisabbildung:

$$\theta_{n+1} = \left(\theta_n + \Omega - \frac{k}{2\pi}\sin(2\pi\theta_n)\right) \mod 1 \equiv f(\theta_n)$$

Um eine spezielle Windungszahl w festzuhalten, müssen zwei Parameter Ω und k, $\Omega(k)$ angepasst werden.

$$w = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \left(f^n(\theta_0) - \theta_0 \right)$$

wählen wir als irrationale Zahl (notwendig für Quasiperiodizität) den sogenannten *Goldenen Schnitt*

$$w^* = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1) = 0.618\,033\,9$$

Abstecher: Der goldene Schnitt

Jede irrationale Zahl lässt sich durch eine Folge von endlichen Kettenbrüchen (also eine Folge rationaler Zahlen) approximieren. Als *goldenen Schnitt* wird diejenige irrationale Zahl bezeichnet, die sich am schlechtesten durch rationale Zahlen approximieren lässt.

$$w^* \equiv \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}}$$
(1.1)

Die sogenannten *Fibonacci-Zahlen* F_n , die durch $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$, $F_0 = F_1 = 1$ definiert sind, liefern über

$$w_n = \frac{F_n}{F_{n+1}} = \frac{F_n}{F_n + F_{n-1}} = \frac{1}{1 + \frac{F_{n-1}}{F_n}} = \frac{1}{\underbrace{1 + \frac{1}{1 + \dots}}_{n \text{ mal}}}$$

eine Folge rationaler Zahlen, die gegen $w^* = \lim_{n \to \infty} w_n$ konvergieren. Im Limes $n \to \infty$ folgt aus (1.1)

$$w^* = \frac{1}{1+w^*} \implies w^*(1+\omega^*) = 1$$

also ist w^* Lösung der Gleichung $w^2 + w - 1 = 0$

$$w^* = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1) = 0.618\,033\,1$$

Geometrische Interpretation: Aufteilung einer Linie der Länge L, sodass

$$w^* = \frac{\ell}{L} = \frac{L - \ell}{\ell}$$

$$\frac{\ell}{0} \qquad \frac{L - \ell}{w^*} \qquad L$$

Lokale Universalität: Der Übergang von Quasiperiodizität zum Chaos bei einer speziellen irrationalen Windungszahl $w = w^* = \lim_{n\to\infty} w_n = \lim_{n\to\infty} F_n/F_{n+1}$ erfordert eine Anpassung von Ω und k, d.h. für jedes k ist $\Omega(k)$ so zu wählen, dass sich die Windungszahl w^* ergibt.

Numerische Resultate für die Kreisabbildung (Shenker, 1982):

(a) Die Parameter $\Omega_n(k)$, welche die Windungszahlen w_n erzeugen, bilden eine geometrische Folge, die sich einer Konstanten nähert gemäß

$$\Omega_n(k) = \Omega_\infty(k) - \operatorname{const} \tilde{\delta}^{-n} \quad \text{wobei} \quad \tilde{\delta} = \begin{cases} -2.618\,033\,9 = -(w^*)^{-1} & \text{für } |k| < 1\\ -2.833\,62 & \text{für } |k| = 1 \end{cases}$$

eine universelle Konstante ist, die jedoch von w^* abhängt.

2014-12-18

-0

(b) Die Abstände d_n von $\theta = 0$ zum nächsten Element eines Zyklus, der zu w_n gehört

$$d_n = f_{\Omega_n}^{F_n}(0) - F_{n-1}$$

haben das Skalenverhalten

$$\lim_{n \to \infty} \frac{d_n}{d_{n+1}} = \tilde{\alpha} \quad \text{mit} \quad \tilde{\alpha} = \begin{cases} -1.61803 = -(w^*)^2 & \text{für } |k| < 1\\ -1.28857 & \text{für } |k| = 1 \end{cases}$$

als universelle Konstante.

(c) Die periodische Funktion

$$\mu(t_j) = \Theta^n(t_j) - t_j, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$
$$\equiv \Theta(j \cdot w_n) \equiv f^j(0)$$

variiert für |k| < 1 und $\Omega_n \rightarrow \Omega_\infty$ stetig mit *t*. Für |k| = 1 wird die Folge unstetig. Dies deutet den Übergang von Quasiperiodizität zum Chaos an.

(d) Das Leistungsspektrum

$$A(\omega) = \frac{1}{F_{n+1}} \sum_{j=0}^{F_{n+1}-1} \mu(t_j) e^{2\pi i \omega t_j}$$

für |k| = 1 und ω zeigt im Limes $n \to \infty$ selbstähnliche Strukturen, d.h. die Hauptstrukturen zwischen zwei aufeinander folgenden Maxima sind im wesentlichen die Gleichen.

Zu (b) Ableitung der zugehörigen Funktionalgleichung. Definiere dazu

$$f_n(x) \equiv \tilde{\alpha}^n f^{(n)}(\tilde{\alpha}^{-n}x) \quad \text{mit } f^{(n)}(x) \equiv f^{F_{n+1}}(x) - F_n$$

Beachte $f_{k,\Omega}^q(0) = p$ für Windungszahl w = p/q. Das Skalenverhalten

$$\lim_{n \to \infty} \frac{d_n}{d_{n+1}} = \tilde{\alpha} \quad \text{mit} \quad d_n = f_{\Omega_n}^{F_n}(0) - F_{n-1}$$

lässt sich schreiben als

$$\lim_{n \to \infty} \tilde{\alpha}^n d_n \sim \lim_{n \to \infty} \tilde{\alpha}^n f^{(n)}(0) = \lim_{n \to \infty} f_n(0) = \text{const}$$

Analog zu Periodenverdopplung: $\{f_n(x)\}$ konvergiert gegen eine universelle Funktion

$$\begin{split} \lim_{n \to \infty} f_n(x) &= f^*(x) \quad \text{mit} \quad f^*(x) \text{ Lösung einer Fixpunktgleichung} \\ f^{(n+1)}(x) &= f^{F_{n+2}}(x) - F_{n+1} = f^{F_{n+1}}[f^{F_n}(x)] - (F_n + F_{n-1}) \\ &= f^{F_{n+1}}[f^{(n-1)}(x) + F_{n-1}] - (F_n + F_{n-1}) \\ &= f^{F_{n+1}}[f^{(n-1)}(x)] - F_n \quad \text{(beachte } f(x+1) = f(x) + 1) \\ &= f^{(n)}[f^{(n-1)}(x)] = f^{(n-1)}[f^{(n)}(x)] \\ f_{n+1}(x) &= \tilde{\alpha}^{n+1} f^{(n+1)}(\tilde{\alpha}^{-(n+1)}x) \\ &= \tilde{\alpha}^{n+1} f^{(n)}[f^{(n-1)}(\tilde{\alpha}^{-(n+1)}x)] \\ &= \tilde{\alpha}^{n+1} f^{(n)}[\tilde{\alpha}^{-(n-1)} f_{n-1}(\tilde{\alpha}^{-2}x)] \\ &= \tilde{\alpha}f_n[\tilde{\alpha}f_{n-1}(\tilde{\alpha}^{-2}x)] \end{split}$$

Grenzfall $n \rightarrow \infty$: $f^*(x)$ ist Lösung der Fixpunktgleichung

$$f^*(x) = \tilde{\alpha} f^*[\tilde{\alpha} f^*(\tilde{\alpha}^{-2} x)]$$

Ansatz für |k| < 1: $\overline{f}^*(x) = x - 1$ ist Lösung. Einsetzen:

$$\begin{aligned} x - 1 &= \tilde{\alpha} \tilde{f}^* \left[\tilde{\alpha} \left(\frac{x}{\tilde{\alpha}^2} - 1 \right) \right] &= x - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\alpha} \\ \implies \tilde{\alpha}^2 + \tilde{\alpha} - 1 &= 0 \\ \implies \tilde{\alpha} &= \begin{cases} -w^* - 1 &= -(w^*)^{-1}, \\ w^* & & \text{für } |k| < 1 \end{aligned}$$

wobei wir $w^* = 1/(1 + w^*)$ verwendet haben. Für k = 1:

$$f(\varepsilon) = \varepsilon + \Omega - \frac{1}{2\pi} \underbrace{\sin(2\pi\varepsilon)}_{\approx 2\pi\varepsilon - \frac{1}{6}(2\pi\varepsilon)^3} \approx \Omega - \frac{2\pi^2}{3}\varepsilon^3$$

der lineare Term in ε verschwindet.

Der Ansatz $f^*(x) = 1 + ax^3 + bx^6 + \dots$ liefert nach einsetzen $\tilde{\alpha} = -1.28857\dots$ für k = 1.

Zu (a), in Analogie zur Periodenverdopplung, sind die δ -Konstanten Eigenwerte der linearen Fixpunkt-Gleichung. Die Lösung ist komplizierter, da die Rekursionsgleichungen von zweiter Ordnung sind, d.h. von f_n und f_{n+1} abhängen.

1.6.3.4 Globale Universalität

Skalenverhalten für diejenigen Ω -Werte, bei denen keine Modenkopplung auftritt (Bereich komplementär zu den Arnold-Zungen). Numerische Resultate (M.H. Jensen, P. Beck, T. Bohr,1984):

▶ Für $k \rightarrow 1$ strebt die Gesamtlänge der Stufen in der Teufelstreppe mit einem Potenzgesetz nach 1.

$$C = 1 - \sum_{p,q} \Delta \Omega\left(\frac{p}{q}, k\right) \sim (1 - k)^{\beta} \text{ mit } \beta = 0.34$$

universeller Exponent für alle $f(\Theta)$ mit einem kubischen Sattelpunkt bei k = 1.

► Bei k = 1 bilden die Ω -Werte, die zu irrationalen Windungszahlen gehören, eine selbstähnliche Cantormenge (vom Maß 0) mit universeller Hausdorff-Dimension $D^* = 0.87$.

Frage: Lassen sich die für die Kreisabbildung diskutierten universellen Eigenschaften wirklich an realen physikalischen Systeme beobachten?

Kriterien für Systeme, das sich analog zur Kreisabbildung verhält:

► Leistungsspektrum zeigt zwei oder drei inkommensurable Frequenzen vor dem Einsetzen von breitbandigem Rauschen. Für geeigneten Schnitt im Phasenraum findet man $\Theta_{n+1} = f(\Theta_n)$ wobei $f(\Theta + 1) = f(\Theta) + 1$ mit $f(\Theta)$ qualitativ wie Kreisabbildung.

- ► Analyse der Zeitreihe der Θ_n zeigt universelle Züge in der Nähe des Übergangs zum Chaos:
 - ► Die Teufelstreppe der Intervalle mit Modenkopplung wird durch einen Farey-Baum angeordnet.
 - Die Bereiche ohne Modenkopplung bilden ein Fraktal mit Hausdorff-Dimension D = 0.87.
 - ► Nichttriviales Skalenverhalten mit $\tilde{\alpha} = -1.289$ für Windungszahl $w^* = (\sqrt{5}-1)/2$.

Experimente mit dynamischem Verhalten der Kreisabbildung:

Das getriebene Pendel:

 $\ddot{\Theta} + \gamma \dot{\Theta} + \sin \Theta = A \cos \omega t + B$

und $t_n = n\tau$ mit $\tau = 2\pi/\omega$

$$\Theta_n = \Theta(t_n) = \Theta(n\tau)$$

- ▶ Elektrische Leitfähigkeit von Barium-Natrium-Niobat
- > Das dynamische Verhalten von Herzzellen

Ausblick

I Dissipative Systeme

II Konservative Systeme

- a) Ziel der klassischen Mechanik seit Newton
 - ▶ Erkenntnisse über Naturgesetze, denen Bewegungen gehorchen
 - Vorhersagen über Bewegungsabläufe

Deterministisches Weltbild: Wir kennen die Kräfte und Zwangbedingungen zwischen den Körpern

- ⇒ Deterministische Bewegungsgleichung
- ⇒ Bewegungsablauf als Lösung der Differentialgleichung bei gegebenen Anfangsbedingungen. "Nur" ein technisches Problem? Nein.

Es gibt deterministisches Chaos auch in konservativen Systemen. Der Unterschied zwischen dissipativen und klassischen Hamiltonsches Systemen ist, dass bei Hamiltonschen Systemen das Phasenraumvolumen erhalten bleibt (Satz von Liouville).

- b) Quantensysteme
 - "Alte" Quantenmechanik: Diskrete Energieniveaus durch Quantisierung klassischer Bahnen (Bohr-Sommerfeld Quantisierungsregel):

$$\oint \boldsymbol{p} \cdot d\boldsymbol{r} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Erfolge: Rydbergserien des Wasserstoffatoms (Bohrsches Atommodell)

Versagen: Schon für den Grundzustand des He-Atoms (Dreikörperproblem)

- ► "Neue" Quantenmechanik: Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ liefert korrekte Ergebnisse, aber ohne jeden Bezug zu klassischen Bahnen oder klassische Dynamik.
- ► "Alte" Quantenmechanik geriet lange Zeit in Vergessenheit. Frage: Gibt es Chaos auch in Quantensystemen?



2.1 Klassisches Chaos

Wir starten mit einer Wiederholung der klassischen Mechanik.

Die Lagrangefunktion lautet

$$L = L(q_i, \dot{q}_i, t) = T - V$$

mit den generalisierten Koordinaten q_i , welche die Zwangsbedingungen beinhalten. Die Euler-Lagrange-Gleichung lautet

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

Dies ist äquivalent zur Hamiltonfunktion und den Hamiltonschen Gleichungen:

$$p_{i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{i}}, \text{ kanonische Impulse}$$

$$H = \sum_{i} p_{i} \dot{q}_{i} - L$$

$$\dot{p}_{i} = -\frac{\partial H}{\partial q_{i}}$$

$$\dot{q}_{i} = \frac{\partial H}{\partial p_{i}}$$

Die Mechanik lässt sich auch symplektisch formulieren. Dazu definieren wir den Phasenraumvektor y = (q, p), der 2N Dimensionen hat. Weiterhin benötigen wir die symplektische Matrix \mathcal{J}

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_{N \times N} & \mathbb{1}_{N \times N} \\ -\mathbb{1}_{N \times N} & \mathbb{O}_{N \times N} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2N \times 2N}$$

womit wir die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen schreiben können als

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\mathcal{J}}\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\gamma}}$$

Für ein System mit N Freiheitsgraden gilt, dass die Bewegungsgleichungen meist "einfach" zu lösen sind, wenn es geeignete Koordinaten gibt, in denen die Hamiltonfunktion eine "einfache" Form annimmt. Eine einfache Hamiltonfunktion wäre zum Beispiel eine, bei der alle Koordinaten zyklisch sind, das heißt H hängt nicht explizit von den Koordinaten ab.

$$H = H(P) \implies P_i = 0 \implies P_i(t) = \alpha_i = \text{const}$$
$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i} = \omega_i = \text{const} \implies Q_i(t) = \omega_i t + \beta_i$$

Für ein geschlossenes System bedeutet dies eine Bewegung auf einem *N*-dimensionalen Torus.

Frage: Wie finden wir die "richtigen" (zyklischen) Variablen?

Diese findet man mittels einer kanonischen Transformation $(p,q) \rightarrow (P,Q)$ über eine erzeugende Funktion, z.B. $F_2 = S(q, P, t)$.

$$p_{i} = \frac{\partial S}{\partial q_{i}}$$

$$Q_{i} = \frac{\partial S}{\partial P_{i}}$$

$$H(\mathbf{P}, \mathbf{Q}, t) = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)}_{= -E \text{ fur } H \text{ zeitunabh.}}$$

Ein geeignetes $S[H = H(\mathbf{P}); \mathbf{P}_i(t) = \text{const}; Q_i(t) = \omega_i t + \beta_i]$ ist Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H\left(\frac{\partial S}{\partial q_i}, \boldsymbol{q}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

welche eine partielle Differentialgleichung ist. Die Hamiltonfunktion heißt integrabel, falls eine globale Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung existiert.

Problem: Die Existenz einer globalen Lösung ist nicht gesichert.

Eine Unterklasse der integrablen Systeme sind die separablen Systeme. H heißt separable in den Koordinaten q_i , wenn die Hamilton-Jacobi-Gleichungen mit dem Separationsansatz

$$S = \sum_{i} S_i(q_i, \alpha_1, \ldots, \alpha_N)$$

in N gewöhnliche Differentialgleichungen

$$H_i\left(\frac{\partial S}{\partial q_i}, q_i\right) = \alpha_i$$

zerfallen, was N Erhaltungsgrößen (Integrale der Bewegung) entspricht. Für die Umlauffrequenz ω_i auf dem Torus gilt im Allgemeinen

$$\omega_i \neq \frac{\partial H}{\partial \alpha_i}$$

2.1.1 Wirkungs- und Winkelvariablen

Die Wahl der α_i ist nicht eindeutig, ebenso $J_i = J_i(\boldsymbol{\alpha})$ bzw. $\alpha_i = \alpha_i(\boldsymbol{J})$. Als physikalisch sinnvoll erweist sich die Umlauffrequenz auf dem Torus

$$\frac{\partial H}{\partial J_i} = \omega_i$$

Die Erzeugende für die kanonische Transformation ist gegeben durch

$$\bar{S}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{J}) = S(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{J}))$$

 $H(\boldsymbol{\alpha}) \rightarrow \bar{H}(\boldsymbol{J})$

Für die Wirkungsvariable gilt

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i \, \mathrm{d}q_i = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\partial S_i(q_i, \boldsymbol{\alpha})}{\partial q_i} \, \mathrm{d}q_i$$

Dies liefert uns einen neuen Satz von N (erhaltenen) Impulsen.

Die *Winkelvariable* zu den J_i kanonisch konjugierten Koordinaten Q_i ist bei J_i = const durch

$$\theta_i = \omega_i t + \beta_i$$

gegeben, d.h.

$$\theta_i = \frac{\partial S(q_i, J_i)}{\partial J_i}.$$

▶ *Beispiel* 1. Einfachster Fall: Eindimensionale konservative Systeme (integrabel)

$$H = \frac{1}{2}p^2 + V(q) = E = \text{const}$$
$$J = \frac{1}{2\pi} \oint p \, \mathrm{d}q = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{2(E - V(q))} \, \mathrm{d}q$$

Für ein Pendel:

$$H = \frac{p_{\varphi}^2}{2m\ell^2} + mg\ell(1 - \cos\varphi) = E$$
$$J = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{2m\ell^2(E - mg\ell(1 - \cos\varphi))} \,\mathrm{d}\varphi$$

Fallunterscheidung:

- a) E < 0: Es existiert keine Lösung
- b) $0 < E < 2mg\ell$: φ -Bewegung hat zwei Umkehrpunkte gegeben durch $\cos \varphi_{1,2} = 1 E/(2mg\ell)$: Vibration

$$J = \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \sqrt{2m\ell^2(E - mg\ell(1 - \cos\varphi))} \,\mathrm{d}\varphi$$

c) $E > 2mg\ell$: 1 – cos $\varphi = E/(mg\ell) > 2$ Es gibt also keine Umkehrpunkte der φ -Bewegung: Rotation

$$J = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{2m\ell^2(E - mg\ell(1 - \cos\varphi))} \,\mathrm{d}\varphi$$

Veranschaulichung der verschiedenen Bewegungstypen im Phasenportrait erhält man durch Auftragung $p(q) = \pm \sqrt{2(E - V(q))}$

2. Zentralkraftproblem $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} = |\mathbf{r}|)$: In Kugelkoordinaten $(\mathbf{r}, \theta, \varphi)$

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_{\vartheta}^2}{r^2} + \frac{p_{\varphi}^2}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) + V(r) = E$$
$$p_r = \frac{\partial S}{\partial r} , \quad p_{\vartheta} = \frac{\partial S}{\partial \vartheta} , \quad p_{\varphi} = \frac{\partial S}{\partial \varphi}$$

Mit dem Separationsansatz $S = S_r(r) + S_{\vartheta}(\vartheta) + S_{\varphi}(\varphi)$ lautet die Hamilton-Jacobi-Gleichung:

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S}{\partial \phi}\right)^2 \right] \right\} + V(r) = E$$

$$\alpha_{\varphi} = L_Z = \text{const}$$

$$\alpha_r = E = \text{const}$$

Beim Keplerproblem haben wir ein Zentralpotential gegeben durch

$$V(r) = -\frac{k}{r} \stackrel{E<0}{\Longrightarrow} J_r = -(J_{\vartheta} + J_{\varphi}) + k\sqrt{\frac{m}{-2E}}$$

In Wirkungs-Winkel-Variablen erhält man

$$H = E = -\frac{mk^2}{2(J_r + J_{\vartheta} + J_{\varphi})^2}$$

Frequenzen:

$$\omega_r = \omega_{\vartheta} = \omega_{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial J_{(r,\vartheta,\varphi)}} = \frac{mk^2}{(J_r + J_{\vartheta} + J_{\varphi})^3}$$

Dies entspricht einer Entartung der ω und hängt mit den Symmetrien zusammen. Wir erhalten also geschlossene Bahnen, hier die bekannten Keplerellipsen.

$$H = H(J_r, \underbrace{J_{\vartheta} + J_{\varphi}}_{L=|L|}) \implies \omega_{\vartheta} = \omega_{\varphi} \quad O(3)$$
-Symmetrie

Im Allgemeinen ist $\omega_r \neq \omega_{\vartheta}$. Das Keplerproblem besitzt eine höhere Symmetrie (O(4)-Symmetrie) als für ein Zentralkraftproblem zu erwarten wäre.

Separation in verschiedenen Koordinatensystemen (nicht nur Kugelkoordinaten möglich), z.B. Kugelkoordinaten, parabolische Koordinaten (vier Systeme im Ortsraum, sechs Systeme im Impulsraum).



▶ 12 Ein Gebiet mit Grenze $C_1(t = t_1)$ geht über in ein Gebiet mit Grenze $C_2(t = t_2)$.

3. Wasserstoffatom im elektrischen Feld (Stark-Effekt)

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{k}{r} + F \cdot z$$
$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{k}{r} + F \cdot z$$

Eine Separation in Kugelkoordinaten ist nicht möglich, jedoch eine Separation in parabolische Koordinaten gegeben durch

$$\xi = r + z$$
, $\eta = r - z$, φ

Damit und mit m = 1 lautet die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{2}{\xi + \eta} (\xi p_{\xi}^{2} + \eta p_{\eta}^{2}) + \frac{p_{\varphi}^{2}}{2\xi\eta} - \frac{2k}{\xi + \eta} + \frac{F}{2} (\xi - \eta) = E$$

Der Separationsansatz für die Hamilton-Jacobi-Gleichung lautet

$$S = S_{\xi}(\xi) + S_{\eta}(\eta) + S_{\varphi}(\varphi) \qquad \checkmark$$

2.1.2 Die Bewegung im Phasenraum, Poincaré-Schnitte

Aus den Hamiltonschen Gleichungen folgt für autonome Systeme:

- 1. Trajektorien im Phasenraum schneiden sich nicht.
- 2. Ein Gebiet mit Grenze $C_1(t = t_1)$ geht über in ein Gebiet mit Grenze $C_2(t = t_2)$ (vgl. Abbildung 12).
- 3. Das Phasenraumvolumen bleibt konstant (Satz von Liouville)

Das Phasenraumportrait ist 2*N*-dimensional, also nur wirklich sinnvoll für eindimensionale Systeme wie ein Pendel. Besser geeignet zur Analyse von Systemen mit zwei oder mehr Freiheitsgraden sind *Poincaré-Schnitte*. Betrachte die Bewegung eines integrablen Systems (N = 2) in Wirkungs-Winkel-Variablen.

$$\theta_i = \omega_i t + \beta_i$$
 (Tori im Phasenraum)



▶ 13 Wasserstoffatom im Magnetfeld

Die θ_1 -Bewegung ist periodisch mit der Periode $T_1 = 2\pi/\omega_1$. Betrachte (J_2, θ_2) zu den Zeiten $t_n = nT_1$ (Stroboskopische Abbildung).

Für beliebige Systeme ohne Kenntnis von Wirkungs-Winkel-Variablen wählen wir eine Schnittebene Σ (PSOS, Poincaré surface of section) im Phasenraum.

- ▶ Reguläre (integrable) Dynamik: PSOS zeigt (defomierte) Tori.
- ▶ Irreguläre (chaotische) Dynamik: Eine Trajektorie füllt ein flächenhaftes Gebiet im PSOS aus (d.h. weniger als N = 2 Erhaltungsgrößen bzw. Integrale der Bewegung).
- ▶ *Beispiel* Hénon-Heiles-Problem:

$$H = \underbrace{\frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2)}_{\text{2D Harmonischer Oszillator}} + \underbrace{x^2y - \frac{1}{3}y^3}_{\text{Kopplung}} = E$$

Allgemein ist die Dimension des PSOS 2N - 2.

2.1.3 Das Wasserstoffatom im Magnetfeld

Klassisch gesehen bewegt sich das Elektron unter dem Einfluss von zwei Kräften, der Coulomb-Kraft und der Lorentz-Kraft (geschwindigkeitsabhängig):

$$F_C = -\frac{kr}{r^3}$$
$$F_I = -e\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{B}$$

Die Hamilton-Jacobi-Gleichung ist nicht separabel in keinem Koordinatensystem. Das System ist ein Prototyp eines realen physikalischen (Quanten-)Systems mit klassischem Chaos.

Aus der Elektrodynamik ist bekannt:

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$$

mit dem Vektorpotential in symmetrischer Eichung

$$A = \frac{1}{2}B \times r$$

Im Hamiltonformalismus berücksichtigen wir Magnetfelder (Lorentzkraft) durch die minimale Substitution. Die Hamiltonfunktion in atomaren Einheiten¹ lautet

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

= $\frac{1}{2}\mathbf{p}^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \underbrace{(\mathbf{r} \times \mathbf{p})}_{\text{Drehimpuls }L} + \frac{1}{\varrho}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2$
mit $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ = $\frac{1}{2}\mathbf{p}^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2}BL_z + \frac{1}{8}B^2\underbrace{(\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2)}_{\varrho^2} = E$

und hat zwei gekoppelte Freiheitsgrade ϱ und z. Das System ist nicht separabel. Die Hamiltonschen Gleichungen lassen sich nur numerisch lösen. Das Problem ist die Coulomb-Singularität (Beschleunigung divergiert im Ursprung). Abhilfe schafft die Regularisierung der Coulomb-Singularität in semiparabolischen Koordinaten.

 $\mu = \sqrt{r+z}$, $\nu = \sqrt{r-z}$ (φ -Bewegung schon absepariert)

Im Folgenden ist $L_z = 0$.

$$H = \frac{1}{2} \frac{1}{\mu^2 + \nu^2} (p_{\mu}^2 + p_{\nu}^2) - \frac{2}{\mu^2 + \nu^2} + \frac{1}{8} B^2 \mu^2 \nu^2 = E$$

Zusätzlich führt man eine Transformation der Zeit durch

 $dt = 2r d\tau$

Ohne Herleitung erhält man dann

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{1}{2}(p_{\mu}^{2} + p_{\nu}^{2}) - E(\mu^{2} + \nu^{2})}_{\text{2D harm. Osz. (für } E < 0)} + \underbrace{\frac{1}{8}B^{2}\mu^{2}\nu^{2}(\mu^{2} + \nu^{2})}_{\text{Kopplungsterm}} = 2$$

Bemerkung: ► Die Bewegungsgleichungen für $\mu(\tau)$, $\nu(\tau)$, $p_{\mu}(\tau)$ und $p_{\nu}(\tau)$ erhält man aus den Hamiltonschen Gleichungen (ohne Singularitäten).

► Der Kopplungsterm ist groß für große *B* oder $E \neq 0$. Für klassische Bahnen genügt es *B* = 1 zu setzen und allein die Energie *E* zu variieren. \neg

Die Untersuchung der Dynamik im Phasenraum erfolgt über Poincaré-Schnitte. Wähle dazu die Schnittebene $\nu = 0$, damit $\Sigma = {\mu, p_{\mu}}$. Ohne den Kopplungsterm erhalten wir wieder die Keplerellipsen. Jeder Punkt in Σ ist ein Fixpunkt (periodische Bahn).

Frage: Was geschieht beim Einschalten einer nicht-integrablen Störung? PSOS bei $E \leq -0.6$: Torusstrukturen ähnlich wie bei einem integrablen System. Diskussion der Fixpunkte:

- ▶ Elliptische Fixpunkte: Stabile Bahnen (Bahnen parallel und senkrecht zum Magnetfeld)
- ► Hyperbolische Fixpunkte: Instabile Bahnen (fast kreisförmige Bahn)

¹Atomare Einheiten (a.u.): $\hbar = e = m_e = (4\pi\epsilon_0)^{-1} = 1$

Frage: Wie lassen sich die bei schwachen nicht-integrablen Störungen existierenden regulären Strukturen im PSOS erklären? Dies führt uns auf die *klassische Störungstheorie* für das Wasserstoffatom im Magnetfeld ($L_z = 0$).

$$E = E_0 + E_1 \text{ mit } E_0 \ll 0, E_1 \text{ klein (Störung)}$$
$$H = \underbrace{\frac{1}{2}(p_{\mu}^2 + p_{\nu}^2) - E_0(\mu^2 + \nu^2)}_{H_0} \underbrace{-E_1(\mu^2 + \nu^2) + \frac{1}{8}\mu^2\nu^2(\mu^2 + \nu^2)}_{\varepsilon H_1} = 2$$

1. Löse die Hamilton-Jacobi-Gleichung für das ungestörte System $H_0 = 2$:

$$p_{\mu} = \frac{\partial S_{\mu}}{\partial \mu}$$
, $p_{\nu} = \frac{\partial S_{\nu}}{\partial \nu}$, Separationsansatz $S = S_{\mu}(\mu) + S_{\nu}(\nu)$, $\omega \equiv \sqrt{-2E_0}$

Damit

$$\underbrace{\frac{1}{2}\left(\left(\frac{\partial S_{\mu}}{\partial \mu}\right)^{2} + \omega^{2}\mu^{2}\right)}_{\alpha_{\mu}} + \underbrace{\frac{1}{2}\left(\left(\frac{\partial S_{\nu}}{\partial \nu}\right)^{2} + \omega^{2}\nu^{2}\right)}_{\alpha_{\nu}} = 2$$
$$\underbrace{\frac{\partial S_{\mu}}{\partial \mu}}_{\alpha_{\mu}} = \sqrt{2\alpha_{\mu} - \omega^{2}\mu^{2}}$$

Wirkungsvariable:

$$J_1 = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{2\alpha_{\mu} - \omega^2 \mu^2} \, \mathrm{d}\mu = \frac{1}{\pi} \int_{\mu_{\min}}^{\mu_{\max}} \sqrt{2\alpha_{\mu} - \omega^2 \mu^2} \, \mathrm{d}\mu = \frac{\alpha_{\mu}}{\omega}$$
$$J_2 = \frac{\alpha_{\nu}}{\omega}$$

Winkelvariable:

$$\frac{\partial S_{\mu}}{\partial \mu} = \sqrt{2\omega J_1 - \omega^2 \mu^2}$$
$$\theta_1 = \frac{\partial S}{\partial J_1} = \int \frac{1}{\sqrt{2J_1/\omega - \mu^2}} \, \mathrm{d}\mu = \arcsin\left(\sqrt{\frac{\omega}{2J_1}}\mu\right)$$

Damit

$$\mu = \sqrt{2J_1/\omega} \sin \theta_1 \qquad p_\mu = \sqrt{2J_1\omega} \cos \theta_1$$
$$\nu = \sqrt{2J_2/\omega} \sin \theta_2 \qquad p_\nu = \sqrt{2J_2\omega} \cos \theta_2$$
$$H_0 = \omega(J_1 + J_2)$$

Frequenzentartung:

$$\frac{\partial H_0}{\partial J_1} = \frac{\partial H_0}{\partial J_2} = \omega$$

2. Neue Wirkungs-Winkel-Variablen zur Unterteilung in schnelle und langsame Bewegung. Die kanonische Transformation lautet $F_2 = (\theta_1 - \theta_2)\hat{J}_1 + \theta_2\hat{J}_2$

$$J_{1} = J_{1}$$

$$J_{2} = \hat{J}_{2} - \hat{J}_{1}$$

$$\hat{\theta}_{1} = \theta_{1} - \theta_{2}$$

$$\hat{\theta}_{2} = \theta_{2}$$

$$\mu = \sqrt{2\hat{J}_{1}/\omega} \sin(\hat{\theta}_{1} + \hat{\theta}_{2})$$

$$\nu = \sqrt{2(\hat{J}_{2} - \hat{J}_{1})/\omega} \sin\hat{\theta}_{2}$$

$$p_{\mu} = \sqrt{2\hat{J}_{1}/\omega} \cos(\hat{\theta}_{1} + \hat{\theta}_{2})$$

$$p_{\nu} = \sqrt{2(\hat{J}_{1} - \hat{J}_{2})} \cos\hat{\theta}_{2}$$

Damit: $H_0 = \omega \hat{J}_2 = 2$ (Schnelle Bewegung in θ_2 mit Frequenz ω , $\hat{\theta}_1 = \text{const}$).

3. Schreibe die Gesamt-Hamiltonfunktion in den Wirkungs-Winkel-Variablen der ungestörten Bewegung.

$$H = \omega \hat{f}_2 - \left[E_1 - \frac{1}{2} \hat{f}_1 (\hat{f}_2 - \hat{f}_1) \frac{1}{\omega^2} \sin^2(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2) \sin^2 \hat{\theta}_2 \right] \\ \times \frac{2}{\omega} \left[\hat{f}_1 \sin^2(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2) + (\hat{f}_2 - \hat{f}_1) \sin^2 \hat{\theta}_2 \right] = 2$$

Exakt, aber weder $\hat{\theta}_1$ noch $\hat{\theta}_2$ sind zyklisch.

4. Mittelung von *H* über die schnelle Winkel-Variable $\hat{\theta}_2$. Benutze

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^4(x+\alpha) \sin^2 x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2(x+\alpha) \sin^4 x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{16} (1+4\cos^2\alpha)$$
$$H \simeq \omega \hat{f}_2 - \frac{1}{\omega} E_1 \hat{f}_2 + \frac{1}{16\omega^3} (\hat{f}_2 - \hat{f}_1) \hat{f}_1 \hat{f}_2 (1+4\cos^2\hat{\theta}_1) = 2$$

 $\hat{\theta}_2$ zyklisch.

$$H' = H - 2 \simeq -\frac{2}{\omega^2} E_1 + \frac{1}{8\omega^4} \left(\underbrace{\frac{2}{\omega}}_{J_2} - \hat{J}_1 \right) \underbrace{\hat{J}_1}_{J_1} (1 + 4\cos^2 \underbrace{\hat{\theta}_1}_{\theta_1 - \theta_2}) = 0$$

16\overline{2}E_1 = J_1 J_2 (1 + 4\cos^2(\theta_1 - \theta_2)) \simeq \text{const}

Somit haben wir die adiabatische Invariante in Wirkungs-Winkel-Variablen gefunden. Adiabatische Invarianten sind nur innerhalb der Störungsrechnung gültig.

5. Analytischer Poincaré-Schnitt: Einsetzen der ursprünglichen (semiparabolischen) Koordinaten liefert adiabatische Invariante.

$$5(p_{\mu}p_{\nu} + \omega^{2}\mu\nu)^{2} + \omega^{2}(p_{\mu}\nu - p_{\nu}\mu)^{2} = 64\omega^{4}E_{1} = \text{const}$$

PSOS bei v = 0:

$$5(p_{\mu}^2 + \omega^2 \mu^2)p_{\nu}^2 = 64\omega^4 E_1 = \text{const}$$

Benutze: $p_{\nu}\nu^2 = 4 + 2E\mu^2 - p_{\mu}^2$ (aus H = 2)

$$5(p_{\mu}^2 - 2E_0\mu^2)(4 - p_{\mu}^2 + 2E\mu^2) = \text{const}$$

Interpretation der Dynamik im "fast-integrablen" Bereich: Sekularbewegung der Keplerellipsen: "langsame" periodische Bewegung von Drehimpuls $L = r \times p$ und Runge-Lenz-Vektor $A = p \times L - \frac{r}{|r|}$.

2.1.4 Klassische Störungstheorie für Hamiltonsche Systeme mit *N* Freiheitsgraden

Sei $H(J, \theta) = H_0(J) + \varepsilon H_1(J, \theta)$ mit $(J, \theta) \in \mathbb{R}^{2N}$ die Wirkungs-Winkel-Variablen eines integrablen Systems H_0 und εH_1 eine kleine Störung (ε klein).

Ziel: Wir suchen neue Wirkungs-Winkel-Variablen $(\hat{J}, \hat{\theta})$, sodass (bis auf Terme der Ordnung ε^2) die neue Hamiltonfunktion nur von den neuen Wirkungs-Variablen abhängt: $H(J, \theta) \rightarrow \hat{H}(\hat{J}) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$.

Fourierentwicklung der Störung:

$$H_1(\boldsymbol{J},\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\boldsymbol{m}\neq 0} H_{1,\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{J}) e^{i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\theta}} , \quad \text{mit } \boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^N, \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\theta} = \sum_{i=1}^N m_i \theta_i$$

Ansatz für Erzeugende einer kanonischen Transformation:

$$S(\hat{J}, \theta) = \hat{J} \cdot \theta + \varepsilon \sum_{m} S_{m}(\hat{J}) e^{im \cdot \theta} + \mathcal{O}(\varepsilon^{2})$$

Damit:

$$\boldsymbol{J} = \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{\hat{J}} + i\boldsymbol{\varepsilon} \sum_{\boldsymbol{m}} \boldsymbol{m} S_{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{\hat{J}}) e^{i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\theta}} + \mathcal{O}(\boldsymbol{\varepsilon}^2)$$

Die neue Hamiltonfunktion lautet damit:

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{J}) &= H(J(\hat{J},\hat{\theta}),\theta(\hat{J},\hat{\theta})) \\ &= H_0(\hat{J}) + \frac{\partial H_0}{\partial J} \Big|_{\hat{J}} (J-\hat{J}) + \underbrace{\frac{\partial H_0}{\partial \theta}}_{=0} + \varepsilon H_1(\hat{J},\theta) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= H_0(\hat{J}) + i\varepsilon \sum_{m} (m \cdot \omega(\hat{J})) S_m(\hat{J}) e^{im \cdot \theta} + \varepsilon \sum_{m \neq 0} H_{1,m}(\hat{J}) e^{im \cdot \theta} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Die Bedingung, damit \hat{H} unabhängig von $\boldsymbol{\theta}$ ist, führt auf

$$S_{\boldsymbol{m}}(\hat{\boldsymbol{J}}) = \mathrm{i} \frac{H_{1,\boldsymbol{m}}(\hat{\boldsymbol{J}})}{\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}(\hat{\boldsymbol{J}})} \quad \text{für } \boldsymbol{m} \neq 0 \quad (S_0(\hat{\boldsymbol{J}}) = 0)$$

somit

$$S(\hat{J}, \theta) = \hat{J} \cdot \theta + i\epsilon \sum_{m \neq 0} \frac{H_{1,m}(\hat{J})}{m \cdot \omega(\hat{J})} e^{im \cdot \theta}$$

ist die gesuchte Erzeugende für die kanonische Transformation.

$$H(\boldsymbol{J},\boldsymbol{\theta}) = H_0(\boldsymbol{\hat{J}}) + \varepsilon H_1(\boldsymbol{\hat{J}},\boldsymbol{\theta}) \rightarrow \hat{H}(\boldsymbol{\hat{J}}) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Diskussion: \blacktriangleright Die \hat{J} sind (neue) Erhaltungsgrößen des gestörten Systems (bis Ordnung $\varepsilon^2).$

- Die Störungstheorie lässt sich zu höheren Ordnungen in ε fortsetzen. Dabei stellt sich die Frage, ob dann noch alles integrabel ist.
- ► $m \cdot \omega = 0$ entspricht rationalen Frequenzverhältnissen, also Resonanzen. Die einzelnen Terme der Störungsreihe divergieren für resonante Tori. \neg

Die entscheidende Frage lautet: Wann konvergiert die Störungsreihe für einen Torus des Systems $H = H_0 + \varepsilon H_1$ bzw. welche Tori "überleben" die Störung εH_1 und werden nur deformiert?

Die Antwort gibt das *KAM-Theorem* (Kolmogorov 1954, Arnold 1963, Moser 1967). Eine qualitative Formulierung des Theorems wäre, dass fast alle invarianten Tori eine endlich große Störung "überleben" und nur deformiert werden. "Fast alle Tori" sind hier diejenigen, die genügend irrational sind.

Kommen wir zur mathematischen Formulierung, also der Frage nach lokaler Konvergenz der Störungstheorie für einen einzelnen Torus mit Frequenz ω des integrablen Systems H_0 beim Einschalten einer endlichen (kleinen) Störung.

KAM-Theorem (mathematische Formulierung) Der invariante Torus des gestörten Systems $H = H_0 + \varepsilon H_1$ mit denselben Frequenzen $\boldsymbol{\omega}$ (wie der ungestörte Torus) existiert, wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind.

(B1) Lineare Unabhängigkeit oder genügende Nichtlinearität der $\omega(J)$

$$\det \frac{\partial \omega_i}{\partial J_j} = \det \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_i \partial J_j} \neq 0$$

- (B2) Die Störung $H_1(J, \theta)$ ist eine genügend glatte Funktion von J und θ .
- (B3) Die Frequenzen $\boldsymbol{\omega}$ erfüllen die Bedingung der genügenden Irrationalität, d.h. für alle $\boldsymbol{m} \neq 0$ gilt

$$|\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}| \ge \frac{K(\varepsilon, \boldsymbol{\omega}, \sigma)}{|\boldsymbol{m}|^{N-1+\sigma}} \quad mit \ |\boldsymbol{m}| = \sum_{i} |\boldsymbol{m}_{i}|$$

und $\sigma > 0$ und einer Konstante $K(\varepsilon, \omega, \sigma)$ wobei $K \to 0$ für $\varepsilon \to 0$.

Lesweise (B₃): Für jeden irrationalen Torus ($\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega} \neq 0$ für alle $\boldsymbol{m} \neq 0$) gibt es ein endliches $\varepsilon > 0$ für das der Torus die Störung εH_1 "überlebt". Bei zunehmender Stärke der Störung ($K(\varepsilon, \boldsymbol{\omega}, \sigma)$ wächst) wird der Torus jedoch in der Regel zerstört.

Das KAM-Theorem sagt nichts über die rationalen Tori, diese können im Prinzip durch beliebig kleine Störungen zerstört werden.

М

BEWEISSKIZZE Setze

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}_0$$
, $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{\theta}$, $\boldsymbol{\omega} = \frac{\partial H_0}{\partial \boldsymbol{J}}$, $h_{ij} = \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_i \partial J_j}$

Entwicklung der ungestörten Hamiltonfunktion in der Umgebung von J_0 (Störungstheorie in der lokalen Umgebung des Torus mit Wirkungsvariable J_0 und Frequenzen ω):

$$H_0 = \underbrace{H_0(\boldsymbol{J}_0)}_{\equiv n} + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{p} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N h_{ij} p_i p_j + \mathcal{O}(\boldsymbol{p}^3)$$

Frage: Gibt es kanonische Transformationen $(q, p) \rightarrow (Q, P)$, sodass das gestörte System

$$H = n + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{p} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} h_{ij} p_i p_j + \varepsilon \underbrace{\left\{ A(\boldsymbol{q}) + \sum_{\ell=1}^{N} B_{\ell}(\boldsymbol{q}) p_{\ell} \right\}}_{\text{Störung}} + \mathcal{O}(p^3, \varepsilon p^2, \ldots)$$
(2.1)

in der Form

$$H = M(\varepsilon) + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{P} + \mathcal{O}(\boldsymbol{p}^2, \varepsilon^2, \varepsilon \boldsymbol{p}) \implies \dot{\boldsymbol{Q}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{P}} = \boldsymbol{\omega} \implies \boldsymbol{Q}(t) = \boldsymbol{\omega} t$$
(2.2)

geschrieben werden kann. Wir sehen, dass H mit denselben Frequenzen $\boldsymbol{\omega}$ wie in H_0 erscheint und $M(\varepsilon)$ einer von ε nicht aber ($\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}$) abhängigen Konstanten.

Ansatz für kanonische Transformation:

$$F(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P}) = \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{P} + \varepsilon \{\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{q}) + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{q} + X(\boldsymbol{q})\}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} Q_i &= q_i + \varepsilon Y_i(\boldsymbol{q}), \\ p_i &= P_i + \varepsilon \left\{ \sum_{\ell} P_{\ell} \frac{\partial Y_{\ell}}{\partial q_i} + \xi_i + \frac{\partial X}{\partial q_i} \right\}. \end{aligned}$$

Einsetzen von p in (2.1) führt auf

$$H = \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{P} + \underbrace{n + \varepsilon \left[A(\boldsymbol{q}) + \sum_{\ell} \omega_{\ell} \left(\xi_{\ell} + \frac{\partial X}{\partial q_{\ell}} \right) \right]}_{\text{vgl. (2.2): } M(\varepsilon)} + \varepsilon \sum_{\ell} P_{\ell} \underbrace{\left\{ B_{\ell}(\boldsymbol{q}) + \sum_{k} \omega_{k} \frac{\partial Y_{\ell}}{\partial q_{k}} + \sum_{k} h_{\ell k} \left(\xi_{k} + \frac{\partial X}{\partial q_{k}} \right) \right\}}_{\text{vgl. (2.2): } 0} + \mathcal{O}(P^{2}, \varepsilon^{2}).$$

Also besitzt das gestörte System H einen Torus mit den selben Frequenzen ω wie das ungestörte System H_0 , wenn

`

$$A(\boldsymbol{q}) + \sum_{\ell} \omega_{\ell} \left(\xi_{\ell} + \frac{\partial X}{\partial q_{\ell}} \right) = \zeta = \frac{M(\varepsilon) - n}{\varepsilon},$$
$$B_{\ell}(\boldsymbol{q}) + \sum_{k} h_{\ell k} \xi_{k} + \underbrace{\sum_{k} h_{\ell k} \frac{\partial X}{\partial q_{k}}}_{Z_{\ell}(\boldsymbol{q})} + \sum_{k} \omega_{k} \frac{\partial Y_{\ell}}{\partial q_{k}} = 0$$

Im nächsten Schritt folgt eine Fourierentwicklung aller von $q = \theta$ abhängigen Funktionen.

$$A(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{m}} a(\boldsymbol{m}) e^{i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{q}}$$

$$B_{\ell}(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{m}} b_{\ell}(\boldsymbol{m}) e^{i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{q}}$$

$$X(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{m}} x(\boldsymbol{m}) e^{i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{q}} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^{N}$$

$$Y_{\ell}(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{m}} y_{\ell}(\boldsymbol{m}) e^{i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{q}}$$

$$Z_{\ell}(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{m}} z_{\ell}(\boldsymbol{m}) e^{i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{q}}$$

Damit erhalten wir das Gleichungssystem

$$a(0) + \sum_{\ell} \omega_{\ell} \xi_{\ell} = \zeta, \qquad (2.3a)$$

$$a(\boldsymbol{m}) + i(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}) \boldsymbol{x}(\boldsymbol{m}) = 0$$
, $\boldsymbol{m} \neq 0$, (2.3b)

$$b_{\ell}(0) + \sum_{k} h_{\ell k} \xi_{k} + z_{\ell}(0) = 0, \qquad (2.3c)$$

$$b_{\ell}(\boldsymbol{m}) + z_{\ell}(\boldsymbol{m}) + i(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}) y_{\ell}(\boldsymbol{m}) = 0, \quad \boldsymbol{m} \neq 0.$$
(2.3d)

Man erhält $h_{\ell k}$ aus H_0 , die Konstanten ξ_k und ζ sind noch zu bestimmen. Die Koeffizienten $a(\boldsymbol{m}), b_{\ell}(\boldsymbol{m})$ erhält man aus H_1 . Schließlich sollen $x(\boldsymbol{m}), z_{\ell}(\boldsymbol{m})$ und $y_{\ell}(\boldsymbol{m})$ konvergent sein.

Zur Bedingung (B1): det $h_{\ell k} \neq 0$ ist erforderlich zur Bestimmung der Konstanten ξ_k aus Gleichung (2.3c), d.h. es ist ein lineares Gleichungssystem zu lösen.

Zu den Bedingungen (B2) und (B3): Die genügende Glattheit von H_1 ist notwendig um zu garantieren, dass $a(\boldsymbol{m})$ und $b_{\ell}(\boldsymbol{m})$ hinreichend schnell abnehmen, wenn $|\boldsymbol{m}| \to \infty$, sodass man für $X(\boldsymbol{q}), Z_{\ell}(\boldsymbol{q})$ und $Y_{\ell}(\boldsymbol{q})$ konvergente Fourierreihen erhält.

Konkret bedeutet das, wenn A(q) gerade R stetige Ableitungen besitzt, dann (ohne Beweis) $a(m) \rightarrow |m|^{-(N+R+1)}$ für $|m| \rightarrow \infty$.

Aus der Gleichung (2.3b) folgt

$$|x(\boldsymbol{m})| = \left|\frac{\mathrm{i}a(\boldsymbol{m})}{\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}}\right| \xrightarrow{|\boldsymbol{m}| \to \infty} \frac{|\boldsymbol{m}|^{-(N+R+1)}}{|\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}|} \stackrel{(2.3\mathrm{b})}{\leq} \frac{|\boldsymbol{m}|^{\sigma-R-2}}{K(\varepsilon, \boldsymbol{\omega}, \sigma)}$$

Die Reihe ist für X(q) konvergent, wenn

 $R \ge N - 1 + \sigma$ (X stetig)

Notwendige Bedingung an die Glattheit der Störung.

Für N = 2 Freiheitsgrade ist $R \ge 2$ die notwendige Bedingung (Beachte $\sigma > 0$) und $R \ge 3$ die hinreichende Bedingung für die Existenz von KAM-Tori.

Moser (1966) zeigte, dass $R \ge 2N + 2$ die hinreichende Bedingung ist.

Bemerkung zu $\sigma > 0$ in (B₃): Annahme: $\sigma = 0$: $|\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}| \cdot |\boldsymbol{m}|^{N-1} \ge K$.

Für beliebiges $\boldsymbol{\omega}$ und *K* existiert eine rationale Approximation von \boldsymbol{m} , sodass die Ungleichung verletzt wird. Alle $\boldsymbol{\omega}$ liegen dann in Resonanzlücken über die das KAM-Theorem keine Aussage macht.

 $\sigma > 0$: Im Limes $K \to 0$ ($\epsilon \to 0$) erfüllen alle irrationalen Tori die Bedingung (B₃) (sind genügend irrational), aber mit zunehmendem σ steigen die Anforderungen an die Glattheit der Störung (B₂), damit der Torus überlebt.

Zum Wasserstoff-Atom und Hénon-Heiles-System: Die Bedingung (B1) ist nicht erfüllt! DiePSOS zeigen aber trotzdem KAM Tori bei kleinen Störungen.

- *Schlussbemerkung zum KAM-Theorem:* > Zu jedem irrationalen Torus gibt es ein endliches $\varepsilon > 0$, so dass der Torus die Störung εH_1 überlebt.
 - Bei Zunahme der Störung (ϵ und *K* wachsen) erhalten wir mehr und mehr Tori die (B₃) verletzen und in Resonanzlücken liegen.
 - Das KAM-Theorem macht keine Aussage über das Schicksal der Tori in den Resonanzlücken (Umgebungen der rationalen Tori).
 - Für Systeme mit N = 2 Freiheitsgraden bleibt die Bewegung zwischen zwei KAM-Tori auf dieses Phasenraumgebiet beschränkt. Es gibt kein "Entkommen".



Dies gilt nicht für $N \ge 3$. Man spricht dann von Arnold-Diffusion.

2.1.5 Das Schicksal der resonanten Tori

Sei P die Poincaré-Abbildung

$$\theta_{i+1} = \theta_i + 2\pi \frac{\omega_1}{\omega_2}$$

$$\gamma_{i+1} = \gamma_i,$$

auf die Schnittebene (SOS) eines integrablen Hamiltonschen Systems mit zwei Freiheitsgraden (N = 2). Betrachte die rationale invariante Kurve K_0 aus periodischen Punkten mit Periode n. Die Abbildung $T = P^n$ lässt jeden Punkt auf K_0 unbewegt, d.h. $P^n(K_0) = K_0$. Jeder Punkt von K_0 ist somit ein Fixpunkt. Für ein gestörtes System mit Störung εH_1 gilt

$$H_0 \to H = H_0 + \varepsilon H_1,$$

 $T = P^n \to T_{\varepsilon}$ (Abbildung des gestörten Systems).



▶ 14 *n*-te Iteration der Poincare-Abbildungen für Kreise mit verschiedenen Radien und somit unterschiedlichen Windungszahlen (ungestörtes System).

Poincaré-Birkhoff-Theorem Die Abbildung T_{ε} des gestörten Systems $H = H_0 + \varepsilon H_1$ hat eine gerade Anzahl von Fixpunkten. Die eine Hälfte sind elliptische und die andere Hälfte hyperbolische Fixpunkte.

BEWEIS Wir nehmen an, dass die Hamiltonfunktion in den Wirkungs-Winkel-Variablen ausgedrückt werden kann, wobei der ungestörte Anteil $H_0(J)$ nur noch von den Wirkungsvariablen J abhängt. Die Dynamik der Punkte auf K_0 wird durch eine rationale Windungszahl w = p/q beschrieben. Sei die Windungszahl eine glatte Funktion von den J (Radien der Tori), so existieren nach dem KAM-Theorem zwei invariante Kurven K_+ und K_- , mit irrationaler Windungszahl, die dicht um K_0 liegen und K_0 einschließen. Dabei rotiert die n-te Poincaré-Abbildung $P^n(K_{\pm})$ die Punkte im, bzw. gegen den Uhrzeigersinn, während im Fall K_0 (rationale Windungszahl) immer eine ganze Zahl n gefunden werden kann, sodass ein n Zyklus existiert, für den gilt $P^n(K_0) = K_0$, siehe hierzu Abbildung 14. Für K_+ werden die Punkt im Uhrzeigersinn gedreht, für K_- gegen den Uhrzeigersinn. Betrachte einen Punkt 0 im Inneren und einen von dort ausgehenden Strahl R. Die Schnittpunkte P_{\pm} mit der Kurve K_{\pm} wird im/gegen den Uhrzeigersinn gedreht. Da die Abbildung stetig ist muss es einen Punkt P_0 zwischen P_- und P_+ geben, der nicht rotiert, sondern nur entlang des Strahls Rverschoben wird.

Betrachten wir nun das gestörte System, so überleben nach dem KAM-Theorem K_{\pm} aufgrund ihrer irrationalen Windungszahl, werden jedoch leicht deformiert. Im Gegensatz dazu wird K_0 bereits bei kleinen Störungen zerstört.

Annahme: Die Abbildung T_{ε} ist nicht entartet. Dann ist die Rotationsgeschwindigkeit eine monotone Funktion auf dem Strahl R. Also gibt es für jede Richtung von R nur einen Punkt P_0 der nicht rotiert wird. Die Menge aller dieser Punkte P_0 ist die Kurve K (K ist nicht invariant unter T_{ε} , aber die Punkte werden nicht rotiert sondern nur entlang R verschoben). Da ein Hamiltonsches System den Satz von Liouville erfüllt (auch bei Störungen), gilt Flächentreue für T_{ε} . Die Kurven K und deren Bild $T_{\varepsilon}(K)$ müssen sich somit kreuzen. $T_{\varepsilon}(K)$ ist geschlossen und es folgt, dass es eine gerade Anzahl von Schnittpunkten $K \cap T_{\varepsilon}(K)$ geben muss (Jeder Flächengewinn muss ausgeglichen werden). Diese sind Fixpunkte der Abbildung T_{ε} (keine Rotation und keine Verschiebung entlang R). Siehe hierzu die Kurve T_{ε} in Abbildung 15.



▶ 15 Skizze zum Beweis des Poincaré-Birkhoff-Theorems (mit Störung).

Die Orientierung der Verschiebung alterniert an den Fixpunkten. Unter Berücksichtigung des Drehsinns der Kurven K_{\pm} folgt eine alternierende Abfolge elliptischer und hyperbolischer Fixpunkte.

In einer lokalen Umgebung der elliptischen Fixpunkte gilt: In den Resonanzlücken zwischen den irrationalen Tori sind (sekundäre) KAM-Tori eingebettet. Eine Wiederholung des Spiels KAM- und Poincaré-Birkhoff-Theorem. Tertiäre Torusstrukturen sind eingebettet in Resonanzlücken zwischen den irrationalen Tori der sekundären Torusstrukturen. Eine Fortsetzung des Spiels bis ins Unendliche liefert fraktale Strukturen im Phasenraum, bzw. im PSOS (vgl. Abbildung 16).

In der Umgebung der hyperbolische Fixpunkte gilt: Die Bewegung in der Nähe der hyperbolischen Fixpunkte wird instabil, die Bahnen werden vom hyperbolischen Fixpunkt weggetrieben.

Wichtig: Die stabilen W_s und instabilen Mannigfaltigkeiten W_u

$$W_u = \{ x \in SOS | \lim_{n \to \infty} P^{(n)}(x) = x^* \},\$$

$$W_s = \{ x \in SOS | \lim_{n \to \infty} P^{(n)}(x) = x^* \}$$

können sich nicht selbst schneiden (sonst wären die Trajektorien im Phasenraum für gegebene Anfangsbedingungen nicht eindeutig). W_u und W_s können sich in den sogenannten homoklinen Punkten schneiden (siehe hierzu Abbildung 17). Wir sprechen von homoklinen Punkten, wenn die stabile und die instabile Mannigfaltigkeit sich vom selben Fixpunkt ausgehend schneiden (Abbildung 18).



▶ 16 Tori mit rationalen Frequenzverhältnissen zerfallen in immer kleinere Tori; das Muster der neu erzeugten elliptischen und hyperbolischen Fixpunkte zeigt Selbstähnlichkeit.



▶ 17 W_s ist eine stabile, W_u eine instabile Mannigfaltigkeit, die sich in einem hyperbolischen Fixpunkt schneiden.

Instabilität: Die Bahnen hängen sensitiv von der Anfangsbedingung ab. Aus der Existenz eines homoklinen Punktes folgt, dass es unendlich viele gibt (siehe Abbildung 18). Ähnlich werden die Schnittpunkte zwischen den stabilen und instabilen Mannigfaltigkeiten benachbarter Resonanzen als heterokline Punkte benannt, d.h. die sich schneidenden Mannigfaltigkeiten entstammen aus unterschiedlichen Fixpunkten.

Wir haben bisher den Weg ins Chaos über ein integrables System mit einer Störung betrachtet. Für eine kleine Störung gilt das KAM-Theorem. Nach diesem überleben fast alle Tori, bis auf die Nullmenge der resonanten Tori. Bei Zunahme der Störung verletzen mehr und mehr Tori die Bedingung der genügenden Irrationalität und der Anteil der Resonanzlücken wächst. Nach dem Poincaré-Birkhoff-Theorem zeigt der PSOS eine gerade Zahl von Fixpunkten (elliptisch, hyperbolisch) in den Resonanzlücken (N = 2). Der Phasenraum, bzw. der PSOS bekommt eine fraktale Struktur. Siehe hierzu Abbildung 16. Nimmt die Störung noch weiter zu, entstehen stochastische Gebiete in der Umgebung hyperbolischer Fixpunkte. Die stabilen und instabilen Mannigfaltigkeiten W_s und W_u schneiden sich unendlich oft in den homoklinen oder heteroklinen Punkten. Bei noch weiterer Zunahme der Störung lösen sich immer mehr



▶ 18 Homokline Resonanzen, bzw. Punkte als Schnittpunkte von W_u und W_s .



 \blacktriangleright 19 Zwei Bahnen mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen entfernen sich exponentiell voneinander.

KAM-Tori auf und die stochastischen Gebiete wachsen weiter. Schließlich löst sich der letzte KAM-Torus und es findet ein Übergang zu globaler Stochastizität statt (vollständiges Chaos). Im PSOS sind keine Strukturen mehr zu erkennen. Die höchste Stufe von Chaos wäre dann ein ergodisches Verhalten. Die Dynamik heißt ergodisch, falls fast jede Trajektorie jeden Punkt im Phasenraum beliebig oft beliebig nah kommt. Das Zeitmittel entspricht dann dem Mittel über das Phasenraumvolumen.

2.1.6 Stabilität klassischer Bahnen, Monodromiematrix

Bislang haben wir unter Chaos die Auflösung der Torusstrukturen (Integrale der Bewegung) im Phasenraum verstanden. Ein anderer Zugang erfolgt über die sensitive Abhängigkeit der Bewegung von den Anfangsbedingungen, wie wir sie schon bei den diskreten Abbildungen (Maps) betrachtet haben und führt auf die Unvorhersagbarkeit der Langzeitdynamik instabiler Bahnen.

Gesucht ist eine charakteristische Aussage über $\Delta y(t)$ in Abbildung 19. Eine Idee ist die Linearisierung von $\Delta y(t)$.

$$\Delta \boldsymbol{\gamma}(t) = \mathcal{M}(0,t) \cdot \Delta \boldsymbol{\gamma}(0)$$

mit der Stabilitätsmatrix $\mathcal{M}(0, t) \in \mathbb{R}^{2N \times 2N}$ und dem Phasenraumvektor

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2N}$$
.

Die Trajektorie $\mathbf{y}(t)$ erhalten wir aus den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen.

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \mathcal{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{y}} \quad \text{mit} \quad \mathcal{J} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & 0 \end{bmatrix}$$

Die symplektische Matrix \mathcal{J} hat die Eigenschaften $\mathcal{J}^{-1} = -\mathcal{J} = \mathcal{J}^{\intercal}$ und $\mathcal{J}^{2} = -\mathbb{1}$.

Aus der Hamiltonschen Dynamik und dem Satz von Liouville folgt, dass $\mathcal{M}(0, t)$ eine symplektische Matrix ist.

Einschub zur symplektischen Gruppe: Die reelle symplektische Gruppe $SP_{2N}(\mathbb{R})$ ist die Menge der Matrizen \mathcal{M} mit

$$\mathcal{M}^\intercal \mathcal{J} \mathcal{M} = \mathcal{J}$$
 .

Aus dieser Gleichung ergeben sich einige Eigenschaften:

1. Sei λ Eigenwert von \mathcal{M} , dann ist auch $1/\lambda$ Eigenwert. Beweis:

$$\mathcal{M}x = \lambda x$$

$$\Rightarrow \mathcal{M}^{\mathsf{T}}y = \lambda y$$

$$\Rightarrow (\mathcal{M}^{\mathsf{T}})^{-1}y = \frac{1}{\lambda}y$$

$$\Rightarrow \mathcal{J}\mathcal{M}\mathcal{J}^{-1}y = \frac{1}{\lambda}y$$

$$\Rightarrow -\mathcal{J}\mathcal{M}\mathcal{J}y = \frac{1}{\lambda}y$$

$$\Rightarrow \mathcal{M}(\mathcal{J}y) = \frac{1}{\lambda}(\mathcal{J}y)$$

damit ist $1/\lambda$ Eigenwert von \mathcal{M} mit Eigenvektor $\mathcal{J}\mathcal{Y}$.

2. Es gilt det $\mathcal{M} = +1$. Beweis:

$$\mathcal{M}^{\mathsf{T}} \mathcal{J} \mathcal{M} = \mathcal{J} , \quad \det \mathcal{J} = 1$$
$$\implies \det \mathcal{M}^{\mathsf{T}} = \det \mathcal{M}$$
$$\implies \det \mathcal{M} = \pm 1$$

Aus der vorigen Eigenschaft folgt, dass

$$\det \mathcal{M} = \prod_{i=1}^{N} \lambda_i \cdot \frac{1}{\lambda_i} = +1 .$$

3. Für das charakteristische Polynom gilt

$$\chi(\lambda) = \det(\mathcal{M} - \lambda \mathbb{1}) = \sum_{n=0}^{2N} a_n \lambda^n$$

mit den Koeffizienten $a_{2N} = a_0 = 1$. Für alle anderen Koeffizienten gilt die Beziehung $a_n = a_{2N-n}$. Beweis: Betrachte das Polynom

$$\bar{\chi}(\lambda) = \lambda^{2N} \chi(1/\lambda) = \sum_{n=0}^{2N} a_{2N-n} \lambda^n$$



▶ 20 Auftreten der Eigenwerte symplektischer Matrizen in Dubletts oder Quartetts.

Aus der ersten Eigenschaft folgt $\chi(\lambda)$ und $\bar{\chi}(\lambda)$ haben dieselben Nullstellen, außerdem $a_{2N} = a_0 = 1$, also müssen alle Koeffizienten übereinstimmen. Daraus ergibt sich, dass $a_n = a_{2N-n}$.

Ist \mathcal{M} eine reelle Matrix folgt, dass $\chi(\lambda)$ nur reelle Koeffizienten a_n hat. Ist der Eigenwert λ_i komplex, dann ist $\tilde{\lambda}_i$ ein Eigenwert von \mathcal{M} . Die Eigenwerte treten entweder als Dubletts oder Quartetts auf.

$$\begin{split} \lambda, \bar{\lambda}, \frac{1}{\lambda}, \frac{1}{\bar{\lambda}} \\ \lambda, \frac{1}{\lambda} \text{ reell} \\ \lambda = e^{i\varphi}, \frac{1}{\lambda} = \bar{\lambda} = e^{-i\varphi} \text{ mit } \varphi \in \mathbb{R} \end{split}$$

Zurück zur Linearisierung:

$$\Delta \boldsymbol{\gamma}(t) = \mathcal{M}(0, t) \cdot \Delta \boldsymbol{\gamma}(0)$$

bzw. differentiell

$$\mathcal{M}_{ij}(0,t) = \frac{\partial \gamma_i(t)}{\partial \gamma_i(0)} \,.$$

Damit können wir die Stabilitätsmatrix $\mathcal{M}(0,t)$ aus einem Differentialgleichungssystem bestimmen.

$$\|\mathcal{M}(0,t)\| = \sup |\lambda_i(0,t)|$$

mit dem Liapunov-Exponenten

$$L = \lim_{t \to \infty} \frac{\ln \|\mathcal{M}(0, t)\|}{t} .$$

Ist der Exponent L = 0, so ist die Bahn stabil und der Abstand benachbarter Trajektorien wächst algebraisch. Für L > 0 ist sie instabil und der Abstand benachbarter Trajektorien wächst exponentiell. Für große Zeiten folgt die Unberechenbarkeit der Dynamik.

Für periodische Bahnen ist der Liapunov-Exponent berechenbar aus nur einem Umlauf (t = T), denn es gilt

$$L = \lim_{t \to \infty} \frac{\ln \|\mathcal{M}(0, t)\|}{t}$$
$$= \lim_{n \to \infty} \frac{\ln \|\mathcal{M}(0, nT)\|}{nT}$$
$$= \lim_{n \to \infty} \frac{\ln \|\mathcal{M}(0, T)^n\|}{nT}$$
$$= \frac{n \ln \|\mathcal{M}(0, T)\|}{nT}.$$

Periodische Bahnen

Periodische Bahnen sind Fixpunkte in der Poincaré-Abbildung. In Systemen mit N = 2Freiheitsgraden betrachtet man lokale Koordinaten, z.B. (y, p_y) in der Umgebung eines Fixpunktes, d.h. $(y, p_y) = (0, 0)$ ist Fixpunkt der Abbildung.

$$\begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{n+1} \\ \mathcal{P}_{\mathcal{Y}_{n+1}} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}}_{\mathcal{M}} \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_n \\ \mathcal{P}_{\mathcal{Y}_n} \end{pmatrix} \, .$$

Diese Map ist flächenerhaltend und die Matrix $\mathcal{M} \in \mathbb{R}^{(2N-2) \times (2N-2)}$ heißt *Monodromiematrix* und ist symplektisch.

► *Beispiel* Als Beispiel für die Stabilitätsmatrix dient das Wasserstoffatom im Magnetfeld. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

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

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich in der symplektischen Formulierung aus

$$\boldsymbol{\gamma} = (\mu, \nu, p_{\mu}, p_{\nu}), \quad \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \mathcal{J} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\gamma}}.$$

Die Stabilitätsmatrix lässt sich mittels

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{M} = \mathcal{J}\frac{\partial^2 H}{\partial \boldsymbol{\gamma} \partial \boldsymbol{\gamma}}\mathcal{M}, \quad \mathcal{M}(0) = \mathbb{1}_{4\times 4}.$$

berechnen. Da \mathcal{M} symplektisch ist treten die Eigenwerte in Paaren $(\lambda_i, 1/\lambda_i)$ auf.

Bifurkationen periodischer Bahnen, Normalform- und Katastrophentheorie

Betrachten wir die Linearisierung der Poincaré-Abbildung in der Umgebung der Fixpunkte. Die Fixpunkte entsprechen gerade den periodischen Bahnen. Für N = 2 Freiheitsgrade erhalten wir dann

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}}_{\mathcal{M}} \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}$$

mit der smyplektischen Monodromiematrix \mathcal{M} . Der Fixpunkt liegt bei (0,0). Für das charakteristische Polynom der Monodromiematrix gilt

$$\chi(\lambda) = \lambda^2 - (\operatorname{tr} \mathcal{M})\lambda + \det \mathcal{M}$$
$$= \lambda^2 - (\operatorname{tr} \mathcal{M})\lambda + 1 \stackrel{!}{=} 0.$$

Für die Eigenwerte der Monodromiematrix können verschiedene Fälle auftreten:

1. $\lambda_{1,2} = \pm e^{\pm u}$ mit u > 0. (Invers) hyperbolischer Fixpunkt.

$$\pm e^{u} + e^{-u} = \pm (2\cosh u) \implies \operatorname{tr} \mathcal{M} = \begin{cases} > 2 \\ < -2 \end{cases}$$

2. $\lambda_{1,2} = e^{\pm i\varphi}$ mit $0 < \varphi < \pi$. Elliptischer Fixpunkt.

$$e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} = 2\cos\varphi \implies |\operatorname{tr} \mathcal{M}| < 2$$

3. $\lambda_{1,2}=\pm 1$ mit $|\operatorname{tr} {\mathfrak M}|=2.$ Parabolischer Fixpunkt, der als marginal stabil bezeichnet wird.

Definition Die Windungszahl der Bahn ist definiert als

$$\frac{\varphi}{2\pi}$$
. ×

Sei φ ein rationales Vielfaches von π , also $\varphi = \pi n/m$. Die Monodromiematrix für die Bahn nach m Umläufen ist \mathcal{M}^m , d.h. die Eigenwerte sind $\lambda_1 = \lambda_2 = \pm 1$. Es gibt also zwei Möglichkeiten für die Wahl der Matrix: $\mathcal{M}^m = \mathbb{1}$ oder $\overleftarrow{=}$ Fixpunkte .

$$\begin{bmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \varepsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\varepsilon \\ \varepsilon \end{pmatrix} .$$

In diesem Fall, also dem einer neutralen Bahn reicht eine Linearisierung der Map (Poincaré-Abbildung) nicht mehr zur Beschreibung der Strukturen in der Umgebung der Fixpunkte aus. Es ist erforderlich höhere Terme in der Taylorentwicklung der Abbildung mitzunehmen. Dies führt uns auf die Normalformen. Sehen wir uns zunächst die Standardform an. Der Ausdruck

$$p^2 + aq^2 = \text{const}$$

liefert uns Ellipsen für a > 0 und Hyperbeln für a < 0.

Sei ε ein Kontrollparameter des Systems derart, dass die Resonanz bei $\varepsilon = 0$ auftritt:

$$\varphi(\varepsilon=0)=\pi\frac{n}{m} \implies \lambda^m_{1,2}(\varepsilon=0)=\pm 1 \; .$$

Für das Wasserstoffatom wählt man z.B. $\varepsilon = E - E_b$ mit der Bifurkationsenergie E_b . In Normalform gilt

$$p^2 + \epsilon q^2$$

т	Bifurkationstyp
1	Sattel-Knoten-Bifurkation
2	Periodenverdopplung
3,4	"Touch and go"-Bifurkation
> 5	"Five island chain"- hzw. " <i>m</i> island chain"-Bifurkation

▶ 1 Einige Bifurkationstypen

und daher Entartung bei ε = 0. Eine Berücksichtigung der nächst höheren Terme liefert, z.B.

$$p^2 + \varepsilon q^2 + q^3$$
$$p^2 + \varepsilon q^2 + q^4$$

Die Zahl der Fixpunkte ändert sich beim Nulldurchgang unseres Kontrollparameters ε . Dies bezeichnet man als *Bifurkationen*. Damit bezeichnet man die Entstehung oder das Verschwinden periodischer Bahnen. Die Fixpunkte entstehen und verschwinden immer paarweise. Diese Bifurkationen können in der Normalformtheorie (N = 2, Bahnen ohne besondere Symmetrien) klassifiziert werden.

▶ *Beispiel* Als Beispiel dient wieder einmal das Wasserstoffatom im Magnetfeld. Bei der Bifurkationsenergie von $\tilde{E}_b = -0.011544916$ existiert eine Sattel-Knoten-Bifurkation. Dies entspricht m = 1.

Für eine Trajektorienschar in der Nähe der Bifurkation lassen sich die folgenden Fälle unterscheiden.

- 1. Sattel-Knoten-Bifurkation ↔ Fold-Katastrophe
- 2. Periodenverdopplung \leftrightarrow Cusp-Katastrophe
- 3. Four-island-chain ↔ Butterfly-Katastrophe

Eine systematische Untersuchung und Klassifikation der geometrischen Strukturen nennt man Katastrophentheorie. (Thoms Klassifikation der elementaren Katastrophen). Drei der sieben elementaren Katastrophen sind Fold, Cusp und Butterfly neben swallow tail, elliptic/hyperbolic und parabolic umbilic.

2.2 Semiklassische Theorien

Wir beschäftigen uns zunächst mit der WKB-Quantisierung eindimensionaler Systeme, danach mit der semiklassichen Quantisierung mehrdimensionaler separabler bzw. integrabler Systeme.

2.2.1 WKB Methode

Bei der WKB-Methode (nach Wenzel, Kramer und Brillouin) gehen wir von der Schrödingergleichung für ein eindimensionales System mit Potential V(x) aus.

$$\psi^{\prime\prime}+\frac{2m}{\hbar^2}\bigl(E-V(x)\bigr)\psi=0$$

Wir machen einen Ansatz, bei dem wir in Amplitude und Phase separieren

$$\psi(x) = A(x) e^{iS(x)/\hbar} = e^{i\omega(x)/\hbar}$$

mit $\omega(x) = S(x) + \frac{\hbar}{i} \ln A(x)$. Setzen wir diesen Ansatz ein, so ergibt sich

(I)
$$S'^2 - 2m(E - V(x)) = \hbar^2 \frac{A''}{A}$$

(II) $2A'S' + AS'' = 0$

Was passiert wenn (*) = 0? Die Lösung für (II), welche eine Kontinuitätsgleichung darstellt, ist

$$A = c(S')^{-1/2}$$

Einsetzen in (I) liefert

$$S^{\prime 2}=2m(E-V)+\hbar^2\left[\frac{3}{4}\left(\frac{S^{\prime\prime}}{S^\prime}\right)^2-\frac{1}{2}\frac{S^{\prime\prime\prime}}{S^\prime}\right]\,.$$

Diesen Ausdruck entwickeln wir nach \hbar

$$S = S_0 + \hbar^2 S_1 + \dots$$

$$S \approx S_0: \quad S_0'^2 = 2m(E - V) \quad \text{Hamilton-Jacobi-DGL}$$

$$\implies S_0(x) = \pm \int \sqrt{2m(E - V(x))} \, \mathrm{d}x$$

$$= \pm \int p \, \mathrm{d}x \, .$$

Der Ausdruck unter der Wurzel sollte positiv sein. Daher nennt man V(x) < E den klassisch erlaubten, V(x) > E den klassisch verbotenen Bereich. Das Problem ist, dass $A \sim (S')^{-1/2}$ für S' = 0 divergiert, also an den klassischen Umkehrpunkten p = 0. Daher linearisieren wir das Potential am Umkehrpunkt, bspw. x = a

$$E-V(x)\approx F_0(x-a)\implies p(x)=\sqrt{2mF_0(x-a)},$$

wobei $F_0 \equiv -\partial V / \partial x|_{x=a}$. Setzen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit a = 0 und erhalten

$$\psi^{\prime\prime} + \frac{2mF_0}{\hbar^2} x \psi = 0.$$

Die Lösung dieser Schrödingergleichung ist bekannt, denn sie entspricht der Airy-DGL. In der WKB-Näherung:

$$\int p(x) \, \mathrm{d}x = \int \sqrt{2mF_0 x} \, \mathrm{d}x = \frac{2}{3}\sqrt{2mF_0}x^{3/2} + \alpha$$



▶ 21 Das Problem ist die Anpassung der Wellenfunktion. Die Lösung liegt in der Linearisierung des Potential an den Umkehrpunkten, z.B. x = a.

Im klassisch erlaubten Bereich x > 0 ergibt sich

$$\psi(x) \sim A(x) \cos\left[\frac{2}{3} \frac{\sqrt{2mF_0}}{\hbar} x^{3/2} - \alpha\right].$$

IM Vergleich mit der Airy-Funktion finden wir

$$\psi(x) = c \operatorname{Ai}\left[-\left(\frac{2mF_0}{\hbar}\right)^{1/3} x\right] \,.$$

Dies liefert im Limes $x \rightarrow -\infty$ die asymptotische Lösung

$$\psi(x) = \frac{c'}{(-x)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3} \frac{\sqrt{2mF_0}}{\hbar} x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right] \,.$$

Folglich muss $\alpha = \pi/4$ sein. Innerhalb von den Umkehrpunkten b < x < a (klassische Zone) müssen die Wellenfunktionen aufgrund der Eindeutigkeit übereinstimmen (vgl. Anschlussund Stetigkeitsbedingung)

$$\psi(x) \sim \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{a}p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)$$
$$\stackrel{!}{\sim} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b}^{x}p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)$$
$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar}\int_{b}^{a}p\,dx - \frac{\pi}{2} = n\pi$$
$$\overline{\int_{b}^{a}p\,dx} = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad 0, 1, 2, 3, \dots$$

Dies ist die WKB-Quantisierungsbedingung für gebundene Zustände.

Bemerkung: Um auf die Quantisierungbedingung zu kommen, bedarf es einer kleinen Rechnung, in der wir zunächst die Integrale umschreiben

$$\underbrace{\int_{x}^{a} p(x) dx}_{=S_{1}} = \underbrace{\int_{b}^{a} p(x) dx}_{\equiv S/2} - \underbrace{\int_{b}^{x} p(x) dx}_{=S_{2}}$$
$$\implies S_{1} = \frac{S}{2} - S_{2}.$$

Anschließend können wir den Kosinus der Wellenfunktion umschreiben, d.h.

$$\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{a}p\,\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right) = \cos\left(\frac{S_{1}}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right)$$
$$= \cos\left(\left(\frac{S}{2\hbar} - \frac{\pi}{2}\right) - \left(\frac{S_{2}}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right)\right)$$
$$= \cos\left(\frac{S}{2\hbar} - \frac{\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{S_{2}}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) + \sin\left(\frac{S}{2\hbar} - \frac{\pi}{2}\right)\sin\left(\frac{S_{2}}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right).$$

Da dies mit dem Term

$$\cos\left(\frac{S_2}{\hbar}-\frac{\pi}{4}\right)$$

für alle Werte übereinstimmen muss, müssen die Sinus-Terme verschwinden und der Kosinus-Term gleich 1 sein, was ja gerade der Fall ist, wenn dessen Argumente die Werte πn mit $n \in \mathbb{N}_0$ annehmen. Daraus folgt unmittelbar die Quantisierungsbedingung $S/(2\hbar) - \pi/2 = \pi n$...

2.2.2 Torusquantisierung

Die WKB-Methode ist jedoch nicht anwendbar auf Systeme mit zwei oder mehr Freiheitsgraden. Deshalb widmen wir uns einer alternativen Methode, die *Torusquantisierung*.

2.2.2.1 Im eindimensinalem Fall

Betrachte dazu einen Oszillator im Phasenraum (Vibration, Libration). Die Hamiltonfunktion lautet

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

mit den Bewegungsgleichungen

$$\dot{q} = rac{\partial H}{\partial p}$$
, $\dot{p} = -rac{\partial H}{\partial q}$

Die Hamilton-Jacobi-Gleichung des Systems lautet (vgl. WKB-Methode mit $\hbar \rightarrow 0$)

$$H\left(q,\frac{\mathrm{d}\bar{S}}{\mathrm{d}q}\right)-E=0\;.$$


▶ 22 Phasenportrait eines Oszillators mit den Punkten A und B der *q*-Umkehr und den Punkten C und D der *p*-Umkehr.

Eine Lösung S(q) kann nur bis zu den Stellen bei A und B verwendet werden (siehe Abbildung 22), an denen Singulartitäten/Kaustiken auftreten. Die kanonische Transformation vom Ortsraum in den Impulsraum ist definiert über

$$\bar{S}(p) = S(q) - pq, \quad q = -\frac{\mathrm{d}\bar{S}}{\mathrm{d}p}$$
$$H\left(-\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}p}, p\right) - E = 0.$$

Diese so transformierte Lösung $\bar{S}(p)$ ist singulär bei C und D. Somit starten wir im Zweig ADB und verfolgen S(q) bis kurz vor C und wechseln dann in den Impulsraum. Anschließend verfolgen wir $\bar{S}(p)$ über C hinaus und wechseln dann in den Ortsraum zurück. Dieses Spiel wiederholen wir für einen ganzen Umlauf.

Maslov-Index

$$\operatorname{sign}\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}q}\right) = \begin{cases} +1 & \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}q} > 0\\ -1 & \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}q} < 0 \end{cases}$$

Für die Maslov-Index-Funktion gilt

- $\sigma_q(x)$ ist eine ganze Zahl auf jedem *q*-Zweig.
- ► $\sigma_p(x)$ ist eine ganze Zahl auf jedem *p*-Zweig.
- $\sigma_p(x) = \sigma_q(x) \operatorname{sign}\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}q}\right).$



▶ 23 Für eine Rotation ist $[\sigma] = 0$ und damit auch $\alpha = 0$.

Die Maslov-Index-Funktion dient zur Buchführung über die Phasen der Wellenfunktion beim Bildwechsel. Der *Maslov-Index* ist

$$\alpha \equiv \frac{[\sigma]}{2}$$

wobei $[\sigma]$ die Änderung von σ in einem Umlauf darstellt. Für einen Oszillator (Vibration, Libration) gilt

$$[\sigma] = 4$$
, $\alpha = 2$

und im Fall der Rotation

 $[\sigma]=0\,,\quad \alpha=0\,.$

Definiere die lokale semiklassische Wellenfunktion

$$\psi(q,\mathcal{R}) = \begin{cases} B(q) e^{i[S(q)/\hbar - \sigma_q \pi/4]} & q \in \mathcal{R} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Hierbei entspricht \mathcal{R} einem begrenzten Bereich im *q*-Raum (z.B. ein Zweig). Transformation in den Impulsraum erfolgt durch Fourier-Transformation.

$$\bar{\psi}(p,\bar{\mathcal{R}}) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathcal{R}} \mathrm{d}q \; B(q) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}[S(q)/\hbar - \sigma_q \pi/4 - qp/\hbar]}$$

Der Integrand oszilliert stark in q außer wenn p = dS / dq (stationäre Phase). Berechnen wir also das Integral in stationärer Phasenapproximation.

$$S \approx S_0 + \underbrace{\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}q}}_p (q - q_0) + \frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}^2 S}{\mathrm{d}q^2} (q - q_0)^2$$
$$\bar{\psi}(p, \bar{\mathcal{R}}) = \begin{cases} \bar{\mathcal{B}}(p) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\bar{S}(p)/\hbar - \sigma_p \pi/4]} & p \in \bar{\mathcal{R}} \\ 0 & \mathrm{sonst} \end{cases} \tag{*}$$



▶ 24 Unabhängigen Kurven C₁ und C₂ auf einem Torus.

mit

$$\bar{S}(p) = S(q) - pq$$
, $\bar{B}(p) = \frac{B(q)}{\sqrt{\left|\frac{dp}{dq}\right|}}$, $\sigma_p = \sigma_q - \operatorname{sign}\left(\frac{dp}{dq}\right)$

Somit betrachten wir die Wellenfunktion als Funktion der Phasenraumpunkte x der klassischen Kurven *C*. Im Falle eines Torus sind diese in Abbildung 24 dargestellt. Zusammensetzen der semiklassischen Wellenfunktion einer klassischen Kurve *C* erfolgt gemäß:

- 1. $\psi_q(x) = \psi(q, \mathcal{R})$ auf dem *q*-Zweig
- 2. $\psi_p(x) = \overline{\psi}(p, \overline{R})$ auf dem *p*-Zweig
- 3. ψ , $\overline{\psi}$ transformieren gemäß (*)
- 4. Die geschlossenen Kurven $\psi_q(x)$ und $\psi_p(x)$ müssen eindeutig sein und liefern die globale Wellenfunktion. Daraus erhalten wir die Quantisierungsbedingung.

$$\frac{[S_q]}{\hbar} - [\sigma_q]\frac{\pi}{4} = 2\pi n$$

Definiere die Funktion

 $I \equiv \frac{[S_q]}{2\pi} = \left(n + \frac{\alpha}{4}\right)\hbar, \quad \alpha = \begin{cases} 0 & \text{Rotation} \\ 2 & \text{Vibration (Libration)} \end{cases}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$

was gerade der Torusquantisierung entspricht.

2.2.2.2 Verallgemeinerung auf mehrdimensionale integrable Systeme

Wir verwenden den Ansatz

$$\psi(\boldsymbol{q}) = A(\boldsymbol{q}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}S(\boldsymbol{q})/\hbar}.$$

Dieser führt auf die Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung für $\hbar \to 0$

$$H(\boldsymbol{q}, \nabla_{\boldsymbol{q}} S) - E = 0, \quad \boldsymbol{p} = \nabla_{\boldsymbol{q}} S(\boldsymbol{q}).$$

Die Lösung $S(\mathbf{q})$ kann jedoch nur bis zu den Singularitäten

$$\det \left| \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \right| \to \infty$$

verwendet werden. Analoges Vorgehen erfolgt mit

$$\overline{S}(\boldsymbol{p}) = S(\boldsymbol{q}) - \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q}$$
$$\implies H(-\nabla_{\boldsymbol{p}} \overline{S}, \boldsymbol{p}) - E = 0, \quad \boldsymbol{q} = -\nabla_{\boldsymbol{p}} \overline{S}(\boldsymbol{p}).$$

Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall gibt es keine Garantie, dass fortwährendes Überschreiten von Kaustiken in nicht-separablen Systemen zu einer geschlossenen *N*-dimensionalen Fläche ohne Kanten führt.

Im Folgenden nehmen wir ein separables und integrables System an, d.h. die Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung hat globale Lösungen. Somit ist die *N*-dimensionale Fläche ein invarianter Torus.

Definition des Maslov-Index

Auf dem *q*-Zweig schreiben wir $\sigma_q(\mathbf{x})$, auf dem *p*-Zweig gilt

$$\sigma_{\boldsymbol{p}} = \sigma_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{x}) - \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial p_{\ell}}{\partial q_{m}}\right),$$
$$\operatorname{sgn}\left(\frac{\partial p_{\ell}}{\partial q_{m}}\right) \equiv \sum_{i}^{N} \operatorname{sign}(\lambda_{i}),$$

wobei λ_i die Eigenwerte der Matrix $\partial p_{\ell}/\partial q_m$ sind. Es gibt *N* unabhängige Wege C_k auf dem invarianten Torus, diese entsprechen jedoch keinen physikalischen Bahnen. Ausgedrückt in den Wirkungs-Winkelvariablen erhalten wir

$$I_{k} = \frac{1}{2\pi} [S(\boldsymbol{q})]_{C_{k}} = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_{k}} \boldsymbol{p} \, \mathrm{d}\boldsymbol{q},$$
$$\alpha_{k} = \frac{1}{2} [\sigma_{\boldsymbol{q}}]_{C_{k}},$$

wobei wir alle Größen beliebig wählen, mit Ausnahme eines festen Winkels φ_k . Die Größe α_k entspricht hierbei dem *Maslov-Index*.

Die lokale Wellenfunktion wird definiert als

$$\psi(\boldsymbol{q},R) = \begin{cases} B(\boldsymbol{q}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(S(\boldsymbol{q})/\hbar - \sigma_{\boldsymbol{q}}\pi/4)}, & \boldsymbol{q} \in \mathcal{R} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

und auf dem p-Zweig

$$\begin{split} \overline{\psi}(\boldsymbol{p},R) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N/2}} \int \mathrm{d}^N \boldsymbol{q} \psi(\boldsymbol{q},R) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}/\hbar} \\ &= \begin{cases} \overline{B}(\boldsymbol{p}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\overline{S}(\boldsymbol{p})/\hbar - \sigma_{\boldsymbol{p}}\pi/4)}, & \boldsymbol{p} \in \overline{\mathcal{R}} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \end{split}$$



▶ 25 Reflexion an einer (a) Potentialwand und (b) in der Nähe einer Potentialwand.

Mit den einzelnen Einträgen

$$\overline{S}(\boldsymbol{p}) = S(\boldsymbol{q}) - \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q},$$

$$\overline{B}(\boldsymbol{p}) = B(\boldsymbol{q}) \cdot \left(\left| \det\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j}\right) \right| \right)^{-1/2},$$

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i,$$

$$\sigma_{\boldsymbol{p}} = \sigma_{\boldsymbol{q}} - \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial p_i}{\partial q_j}\right).$$

Anmerkung zu B(*q*)*:* Erfüllt Kontinuitätsgleichung:

$$B(\boldsymbol{q}) = |\Psi(\boldsymbol{q})|^2 = \varrho(\boldsymbol{q}),$$

$$\nabla(\varrho \boldsymbol{v}) = 0, \quad \boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p}}{m},$$

$$\frac{\mathrm{d}\varrho}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho = -\varrho \nabla \cdot \boldsymbol{v}.$$

Die Lösung ist

$$\varrho(\boldsymbol{q}) = \varrho_0(\omega_0) \frac{J(0, \omega_0)}{J(t, \omega_0)},$$
$$J(t, \omega_0) = \left| \det\left(\frac{\partial \boldsymbol{q}(t, \omega_0)}{\partial(t, \omega_0)}\right) \right|,$$

Hierbei beschreibt *t* die Zeit der Bewegung entlang der Bahn und $\omega_0 N - 1$ Koordinaten, welche die Anfangsfläche einer Lagrangschen Mannigfaltigkeit definieren (d.h. die Mannigfaltigkeit senkrecht zur Bahn).

Wie in Abbildung 25 (a) gilt für die Reflexion an einer Potantialwand (Reflexion wie im Eindimensionalem)

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} = 0,$$

wobei dann die Determinante in J verschwindet, woraus die Divergenz von B(q) folgt.

Für das Szenario in Abbildung 25 (b) ist $\partial q/\partial t$ zu keinem Zeitpunkt null, aber die Determinante verschwindet in der Nähe der Potentialwand. Die Kaustik zeigt sich gerade durch det J = 0. Sowie die Divergenz von B(q).

Im Fall N = 1, d.h. im Eindimensionalem gilt

$$J(t) = \frac{\partial q}{\partial t} = p,$$

$$\Rightarrow \varrho(q) = \frac{1}{|p|},$$

$$\Rightarrow B(q) = \frac{1}{\sqrt{|p|}}.$$

Die Fortsetzung der Wellenfunktion an den Kaustiken (durch geeigneten Wechsel zwischen Orts- und Impulsraum) liefert die globale semiklassische Wellenfunktion. Diese muss eine eindeutige Funktion auf den invarianten Torus sein. Insbesondere muss $\psi(\mathbf{q})$ denselben Wert nach ganzzahligem Umlauf entlang jedem der N unabhängigen Wege C_k besitzen. Es folgt die semiklassische Quantisierungsbedingung (Torus- oder EBK-Quantisierung)

$$\frac{1}{\hbar} [S(\boldsymbol{q})]_{C_k} - [\sigma_{\boldsymbol{q}}]_{C_k} \frac{\pi}{4} = 2\pi n_k, \quad n_k \in \mathbb{N}_0, \quad k \in \{1, \dots, N\},$$
$$\implies I_k = \frac{1}{2\pi} [S(\boldsymbol{q})]_{C_k} = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_k} \boldsymbol{p} \cdot d\boldsymbol{q}$$
$$= \hbar \left(n_k + \frac{\alpha_k}{4} \right),$$
$$\alpha_k = \frac{[\sigma_{\boldsymbol{q}}]_{C_k}}{2}.$$

Auf jedem Torus ist die Energie konstant. Klassisch gilt für die Energie $E(I) = E(I_1, ..., I_N)$. Somit folgen die quantisierten semiklassischen Energieeigenwerte

$$E(\boldsymbol{n}) = E\left(\hbar\left(\boldsymbol{n}+\frac{\boldsymbol{\alpha}}{4}\right)\right),$$

wobei der Index n einen Satz von N Quantenzahlen für jeden Zustand beschreibt. Somit zeigt sich, dass nur bestimmte Tori semiklassisch erlaubt/relevant sind.

▶ *Beispiel* Im Folgenden betrachten wir einige Beispiele von separablen Systemen:

1. Zentralkraft-/Coulombpotential: Es gilt die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2M} \left(p_r^2 + \frac{p_{\vartheta}^2}{r^2} + \frac{p_{\varphi}^2}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) + V(r) = 0, \quad V(r) = -\frac{k}{r}.$$

Für diese Art von Problemen bietet sich ein Separationsansatz der From

$$S = S_r(r) + S_{\vartheta}(\vartheta) + S_{\varphi}(\varphi)$$

an. Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{\varphi}}{\partial \varphi} &= p_{\varphi} = L_z, \\ \frac{\partial S_{\vartheta}}{\partial \vartheta} &= \left(L^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} \right)^{1/2} \text{ mit } L^2 = p_{\vartheta}^2 + \frac{p_{\varphi}^2}{\sin^2 \vartheta}, \\ \frac{\partial S_r}{\partial r} &= \left(2ME - \frac{L^2}{r^2} - V \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Die Wirkungsvariablen sind

$$I_{\varphi} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} L_{z} d\varphi = m\hbar \quad \text{Rotation } \alpha_{\varphi} = 0$$

$$I_{\vartheta} = \frac{1}{2\pi} \oint \sqrt{L^{2} - \frac{L_{z}^{2}}{\sin^{2} \vartheta}} d\vartheta = |L| - |m|\hbar$$

$$= \left(\ell + \frac{1}{2} - |m|\right)\hbar, \quad \ell = |m|, |m| + 1, \dots,$$

wobe
imeine ganze Zahl ist und aufgrund der Vibration gilt
 $\alpha_\vartheta=2$ gilt. Weiter erhalten wir

$$\begin{aligned} |L| &= \hbar \left(\ell + \frac{1}{2} \right) \\ L^2 &= \left[\ell (\ell + 1) + \frac{1}{4} \right] \hbar^2 \end{aligned}$$

Die exakte quantenmechanische Rechnung ergibt $L^2 = \ell(\ell + 1)\hbar^2$. Zudem folgt

$$I_r = \frac{1}{2\pi} \oint \left(2ME - \frac{L^2}{r^2} + \frac{2Mk}{r} \right)^{1/2} dr$$
$$= -(I_{\vartheta} + |I_{\varphi}|) + k\sqrt{\frac{M}{2|E|}}$$
$$\stackrel{!}{=} \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \hbar$$

mit $n = n_r + \ell + 1$

$$=\left(n-\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\right)\hbar, \quad n=\ell+1,\ell+2,\ldots$$

Umschreiben der Hamiltonfunktion führt zur Energie (Rydbergformel)

$$H = E = -\frac{Mk^2}{2(I_r + I_{\vartheta} + |I_{\varphi}|)^2} = -\frac{Mk^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

- 2. Starkeffekt
- 3. Kreisbillard

M

- *Bemerkung:* Die Torusquantisierung integrabler, aber nicht-separabler Systeme ist in der Praxis schwierig, da die Berechnung der Integrale $\oint_{C_k} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ die Kenntnis der unabhängigen Wege C_k erfordert.
 - Die Quantisierungsmethode ist nicht anwendbar auf nicht-integrable (chaotische) Systeme (Einstein 1917). Hierbei ist die Integrabilität gerade Voraussetzung für die Torusquantisierung. Es verbleibt jedoch die Frage, wie chaotische Systeme semiklassisch quantisiert werden.

2.2.3 EBK-Quantisierung (Einstein, Brioullin, Keller)

Die EBK-Quantisierung besteht darin, die Winkelvariablen wie folgt anzusetzen

$$I_k = \hbar \left(n_k + \frac{lpha_k}{4} \right), \quad n_k \in \mathbb{N}_0$$

 $E(n_1, \dots, n_k) = H \left(I = \hbar \left(n + \frac{lpha}{4} \right) \right),$

wobei $k \in \{1, ..., N\}$. Es stellt sich noch die Frage, was im klassischen chaotischen System bleibt. Es zeigt sich, dass periodische Bahnen existieren (eventuell instabil). Jedoch gilt es zu beachten, dass die unabhängigen Wege C_k nicht den periodischen Bahnen entsprechen. Zudem existieren auf den quantisierten Tori in der Regel keine periodischen Bahnen, da die Frequenzverhältnisse immer irrational sind. Es existieren jedoch quasi-periodische Bahnen. Dennoch gibt es eine Verbindung zwischen semiklassischer (hier *EKB-Quantisierung*) und periodischen Bahnen klassischer Systeme. Diese beschreibt die *periodic orbit theory*.

Wir betrachten ein integrables System mit N = 2. Die Torusquantisierung liefert das Eigenwertspektrum $E(\mathbf{n})$. Die Zustandsdichte ist durch

$$d(E) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \delta(E - E(n_1, n_2))$$
(2.4)

gegeben. Wir wollen nun eine semiklassische Form finden. Dazu wenden wir die *Poissonsche Summenformel*

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \sum_{M=-\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} f(n) e^{2\pi i M n} dn + \frac{1}{2} f(0)$$

auf Gleichung (2.4) an. Somit erhalten wir

$$d(E) = \underbrace{\sum_{M_1,M_2} \int dn_1 \int dn_2 \delta(E - E(n_1, n_2)) e^{2\pi i (M_1 n_1 + M_2 n_2)}}_{=d^{(2)}(E)} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_M \int dn_1 \delta(E - E(n_1, 0)) e^{2\pi i M n_1} + \frac{1}{2} \sum_M \int dn_2 \delta(E - E(0, n_2)) e^{2\pi i M n_2}}_{\text{semikl. Korrekturen in }\hbar}$$

 $+\frac{1}{4}\delta(E-E(0,0)).$

Hierbei ist der letzte Term uninteressant für Spektren mit E > 0. Die beiden mittleren Terme führen zu semiklassischen Korrekturen höherer Ordnung in \hbar . Den ersten Term nennen wir $d^{(2)}(E)$. Mit

$$n_k = \frac{1}{\hbar}I_k - \frac{\alpha_k}{4}$$

folgt

$$d^{(2)}(E) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{M_1, M_2} e^{-i\frac{\pi}{2}(M_1\alpha_1 + M_2\alpha_2)} \int_{\hbar\alpha_1/4}^{\infty} dI_1 \int_{\hbar\alpha_2/4}^{\infty} dI_2 \delta(E - H(I_1, I_2)) e^{2\pi i (M_1I_1 + M_2I_2)/\hbar}$$

Betrachte den Term für $M_1 = M_2 = 0$, wobei wir eine zusätzliche Integration über ϕ_1 und ϕ_2 einfügen und die unteren Integrationsgrenzen auf Null setzen. Eine Berücksichtigung der korrekten Grenzen führt wieder lediglich auf Korrekturen höherer Ordnung in \hbar .

$$\tilde{d}^{(2)}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \underbrace{\int\limits_{0}^{2\pi} d\phi_1 \int\limits_{0}^{2\pi} d\phi_2 \int\limits_{0}^{\infty} dI_1 \int\limits_{0}^{\infty} dI_2 \,\delta(E - H(I_1, I_2))}_{\text{Gesamter Phasenraum}}$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\boldsymbol{p} \int d\boldsymbol{q} \delta(E - H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})).$$

Dies ist der *Thomas-Fermi-Term* bzw. die mittlere Zustandsdichte. Man erhält ihn, indem man die Summe über Quantenzustände durch Integrale über den Phasenraum geteilt durch \hbar^N ersetzt. Betrachten wir nun den oszillierenden Anteil mit $(M_1 \neq 0 \neq M_2)$. Mit

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{\tau x}{\hbar}} d\tau$$

folgt

$$\begin{split} \delta d(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar^3} \sum_{M_1 \neq 0 \neq M_2} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}M\alpha} \int \mathrm{d}I_1 \int \mathrm{d}I_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(I)} \\ \phi(I) &= \frac{1}{\hbar} \left(2\pi M \cdot I + \tau(E - H(I)) \right). \end{split}$$

Mit der stationären Phase $\nabla \phi(I) = 0$ finden wir

$$2\pi M_i = \omega_i \tau = \tau \omega_i (I_1, I_2), \tag{2.5}$$

wobei

$$\omega_i = \frac{\partial H}{\partial I_i}$$

am Sattelpunkt. Damit zeigt sich

$$\frac{M_1}{M_2}=\frac{\omega_1}{\omega_2}\in\mathbb{Q},$$

d.h. es handelt sich um resonante Tori. Somit tragen nur Tori mit kommensurablen Frequenzen (periodischen Bahnen) zu d(E) bei. Die M_i sind hierbei Umlaufzeiten (und keine Quantenzahlen). Somit ergibt sich

$$\delta d(E) = \frac{1}{4\hbar^2} \sum_{M} e^{-i\frac{\pi}{2}M \cdot \alpha - i\frac{\pi}{4}\sigma_M \neq 0} = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{1}{\tau |k|^{1/2}} e^{\frac{\tau}{\hbar}(2\pi M \cdot I_M + \tau(E - H(I_M)))}.$$

 ${\cal I}_M$ entspricht hier der Wirkung der resonanten Tori (Lösung von Gleichung (2.5)). Weiter haben wir

$$k = \det\left(\frac{\partial^2 H}{\partial I_1 \partial I_2}\right),$$
$$\sigma_M = \sum_{i=1}^2 \operatorname{sign}(\lambda_i),$$

wobei λ_i die Eigenwerte der Hesse-Matrix sind.

Wichtig: Die Summe über die quantisierten EBK-Tori ist

$$d(E) = \sum_{\boldsymbol{n}} \delta(E - E(\boldsymbol{n})).$$

Verwenden wir die Poissonsche Summenformel und die stationäre Phase erhalten wir

$$d(E) = \tilde{d}^{(2)}(E) + \delta d(E).$$

Der erste Term entspricht gerade der mittleren Zustandsdichte im Phasenraum (TF-Term). Der zweite Term beschreibt die periodischen Bahnen auf den resonanten Tori, wobei die Summe $\sum_{M \in \mathbb{Z}^N} \min M \neq 0$ auftritt.

Ausführen der (nicht-trivialen) τ -Integration (mit Stationärer-Phasen-Approximation) liefert die *Berry-Tabor-Formel für integrable Systeme* (1976). Für N = 2 ist

$$d(E) = \tilde{d}^{(2)}(E) + \sum_{M \neq 0} \frac{T_M}{\pi \sqrt{\hbar^3 M_2^3 |d_E''|}} \cos\left(\frac{S_M}{\hbar} - \frac{\pi}{2}\sigma_M - \frac{\pi}{4}\right)$$

mit

$$H(I_1, I_2 = d_E(I_1)) = E.$$

 S_M entspricht hierbei der Wirkung und T_M der Umlaufdauern der periodischen Bahnen (auch für vielfache Umläufe).

2D-Rechteckbillard: Die Hamiltonfunktion des Systems lautet

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x^2 + p_y^2 \right)$$
$$I_j = \frac{1}{2\pi} \oint p_j \, \mathrm{d} x_j = \frac{a_j}{\pi} \cdot p_j$$
$$\implies H = \frac{\pi^2}{2m} \left(\frac{I_1^2}{a_1^2} + \frac{I_2^2}{a_2^2} \right).$$

Der Maslov-Index (unendlich hohe Potentialwände) ist $\alpha_1 = \alpha_2 = 4$. Stellen wir uns das Rechteckbillard vor mit den Kantenlängen a_1 und a_2 und betrachten einen Umlauf mit $a_1 = \text{const}$ oder $a_2 = \text{const}$. Aufgrund der unendlich hohen Potentialwände ist an jeder Wand ein Phasensprung von π nötig, damit an diesen Stellen die Wellenfunktion verschwindet. Wird beachtet, dass $\alpha = [\sigma]/2$ gilt, sowie $\exp(i\pi\sigma/4)$ in der Wellenfunktion auftritt, dann folgt $[\sigma] = 2 \cdot 4$ und somit $\alpha = 4$.

Die exakte Lösung der Schrödingergleichung mit Randbedingungen ist

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\left(\frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2} \right)^2 \right), \quad n_i \in \mathbb{N}.$$

Für die I's finden wir

$$egin{aligned} I_j &= \hbar \left(n_j + rac{lpha_j}{4}
ight), & n_j \in \mathbb{N}_0 \ &= \hbar ilde{n}_j, & ilde{n}_j \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Wir sehen, dass die semiklassische Lösung mit der quantenmechanischen übereinstimmt. Für die Hesse-Matrix gilt

$$rac{\partial^2 H}{\partial I_i \partial I_j} = rac{\pi^2}{m} egin{pmatrix} a_1^{-2} & 0 \ 0 & a_2^{-2} \end{pmatrix}.$$

Somit können wir k zu

$$k=\frac{\pi^4}{(ma_1a_2)^2}$$

berechnen, sowie σ_M = 2. Die stationäre Phase ergibt

$$2\pi M = \tau \omega = \tau \nabla_I H$$
$$= \frac{\pi^2 \tau}{m} \begin{pmatrix} I_1 a_1^{-2} \\ I_2 a_2^{-2} \end{pmatrix}$$
$$\Rightarrow I_j = \frac{2m}{\pi \tau} a_j^2 M_j$$
$$\Rightarrow 2\pi M \cdot I = \frac{4m}{\tau} (a_1^2 M_1^2 + a_2^2 M_2^2)$$
$$\Rightarrow -H\tau = -\frac{2m}{\tau} (a_1^2 M_1^2 + a_2^2 M_2^2)$$

Einsetzen (mit TF-Term) ergibt

$$d^{(2)}(E) = \frac{ma_1a_2}{4\pi^2\hbar^2} \underbrace{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}}}_{=-\mathrm{i}} \sum_{M} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \frac{1}{\tau} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E\tau + \frac{c}{\tau})}$$

mit $c = 2m(a_1^2M_1^2 + a_2^2M_2^2)$. Wir verwenden die stationäre Phase mit $d(\tau) = 1/\tau$ sowie $f(\tau) = E\tau + c/\tau$ und erhalten

$$\begin{aligned} \tau_{1,2} &= \pm \sqrt{\frac{c}{E}},\\ \frac{d(\tau_{1,2})}{\sqrt{|f''(\tau_{1,2})|}} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}[cE]^{1/4}} \end{aligned}$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{1}{\tau} e^{\frac{i}{\hbar} \left(E\tau + \frac{C}{\tau}\right)} \approx \frac{\sqrt{2\pi\hbar}}{\sqrt{2} [Ec]^{1/4}} 2i \sin\left(\frac{2\sqrt{cE}}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right)$$
$$= \frac{2i\sqrt{\pi\hbar}}{(Ec)^{1/4}} \cos\left(\frac{2\sqrt{cE}}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right).$$

Die stationäre Phase gilt nicht für c = 0 (TF-Term $M_1 = M_2 = 0$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \, \frac{1}{\tau} \mathrm{e}^{\mathrm{i}E\tau\hbar} = 2\pi\mathrm{i}.$$

Verwenden wir

$$2\frac{\sqrt{cE}}{\hbar}=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L_{M_1,M_2}=\frac{1}{\hbar}S_{M_1,M_2}(E),$$

wobei L_{M_1,M_2} die Länge und S_{M_1,M_2} die Wirkung der periodischen Bahnen auf dem rationalen Torus mit Umlaufzahlen M_1 und M_2 sind, finden wir für die Zustandsdichte

$$d^{(2)}(E) = \underbrace{\frac{ma_1a_2}{2\pi\hbar^2}}_{=\bar{d}^{(2)}(E)} + \underbrace{\frac{ma_1a_2}{2\pi^{3/2}\hbar^2} \sum_{M\neq 0} \sqrt{\frac{2\hbar}{S_{M_1,M_2}(E)} \cos\left(\frac{1}{\hbar}S_{M_1,M_2}(E) - \frac{\pi}{4}\right)}_{=\delta d(E)}.$$

Der erste Term $\tilde{d}^{(2)}(E)$ entspricht dem TF-Term, der zweite Term hingegen den oszillierenden Periodischen-Orbit-Beiträgen. Die damit gefundene Darstellung von $d^{(2)}(E)$ wird als *Berry-Tabor-Formel* für das Rechteckbillard bezeichnet. Die exakte Lösung, d.h. ohne stationäre Phase für τ ist

$$d^{(2)}(E) = \frac{ma_1a_2}{2\pi\hbar^2} \sum_M \mathcal{J}_0\left(\frac{1}{\hbar}S_{M_1,M_2}(E)\right),\,$$

wobei \mathcal{J}_0 eine Besselfunktion ist.

Bemerkung: Für die isolierten Bahnen in chaotischen Systemen wird die Gutzwiller-Spurformel angewendet. Im Gegensatz dazu werden in der EBK-Quantisierung Bahnscharen behandelt.~

Wiederholung: Im Zuge der semiklassischen Quantisierung integrabler Systeme haben wir die EKB-Torusquantisierung kennen gelernt, diese lautet

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

mit einem vollständigen Satz von Quantenzahlen n. Mit Hilfe der Berry-Tabor-Formel kann die Zustandsdichte integrabler Systeme angegeben werden. Für ein System mit zwei Freiheitsgraden (N = 2) folgt

$$d(E) = \bar{d}(E) + \frac{1}{\pi \hbar^{3/2}} \sum_{M \neq 0} \frac{T_M}{\sqrt{M_2^3 |d''_E|}} \cos\left(\frac{S_M}{\hbar} - \frac{\pi}{2}\sigma_M - \frac{\pi}{4}\right)$$

2015-06-11

mit dem Thomas-Fermi-Term

$$\bar{d}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \iint \mathrm{d}\boldsymbol{q} \,\mathrm{d}\boldsymbol{p} \,\delta\left(E - H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})\right) \,,$$

den Umlaufzahlen $M = (M_1, M_2)$ der periodischen Bahnen auf resonanten Tori: $M_1 : M_2 = \omega_1 : \omega_2$ rational, den Umlaufzeiten der periodischen Bahnen T_M , der Wirkung der periodischen Bahnen S_M und dem Maslov-Index der periodischen Bahnen σ_M . Die Funktion $d_E(I_1)$ ist hierbei definiert durch

$$H(I_1, I_2 = d_E(I_1)) = E.$$

Wichtig ist dabei, dass in der Berry-Tabor-Formel kein vollständiger Satz an Quantenzahlen n_k mit k = 1, ..., N eingeht. Da die Berry-Tabor-Formel nur die semiklassische Zustandsichte für integrable Systeme beschreibt, bleibt die Frage nach einer semiklassischen Theorie, welche die Zustandsdichte für nicht integrable (chaotische) Systeme richtig wiedergibt.

2.2.4 Spurformel

Die *Spurformel* ist in der Lage eine semiklassische Zustandsdichte für nicht integrable (chaotische) Systeme zu liefern. Dazu wollen wir zunächst rein quantenmechanisch vorgehen. Die Zustandsdichte für ein gebundenes Spektrum lautet

$$d(E) = \sum_m c_m \,\delta(E - E_m)\,,$$

dabei beschreibt c_m die Multiplizität, also den Entartungsgrad und E_m die Energieeigenwerte, wobei m nur ein Abzählindex darstellt. Der *Greensche Operator* (retardiert) ist gegeben durch

$$G_E^+ = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n + i\varepsilon},$$

wobei das + für retardiert steht. Der Zusammenhang zwischen quantenmechanischer Zustandsdichte und dem Greenschen Operator liegt in der Relation

$$d(E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\operatorname{tr} G_E^+ \right) \,.$$

BEWEIS Der Beweis hierfür wird mit Hilfe einer kontinuierlichen Basis $|x\rangle$ durchgeführt. Der Greensche Operator in dieser kontinuierlichen Dartsellung ergibt sich zu

$$G_E^+(x, x') = \sum_n \frac{\langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle}{E - E_n + i\varepsilon}$$
$$= \sum_n \frac{\psi_n^*(x)\psi_n(x')}{E - E_n + i\varepsilon}.$$

Bildung der Spur dieses Operators führt auf

$$\operatorname{tr} G_E^+(x, x') = \int \mathrm{d}^3 x G_E^+(x, x)$$
$$= \sum_n \frac{\int |\psi_n(x)|^2 \, \mathrm{d}^3 x}{E - E_n + \mathrm{i}\varepsilon}$$
$$= \sum_n \frac{1}{E - E_n + \mathrm{i}\varepsilon}$$
$$= \sum_n P \frac{1}{E - E_n} - \mathrm{i}\pi \delta(E - E_n)$$

mit dem Cauchy Hauptwert P, der definiert ist als

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} = P\frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \,.$$

Der Imaginärteil der Spur des Greenschen Operators liefert dann genau die Zustandsdichte

$$-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\operatorname{tr} G_E^+(x,x') = \sum_n \delta(E-E_n) = d(E).$$

Die Ausgangsformel für semiklassische Spurformeln ist:

$$G_{E,\text{qm}}^+ \to G_{E,\text{SCL}}^+$$

tr $G_{E,\text{qm}}^+ \to \int d^3 x G_{E,\text{SCL}}^+$

wobei der Index SCL für semi-classical, auf deutsch semiklassisch, steht.

2.2.4.1 Quantenmechanischer und Semiklassischer Propagator

Den quantenmechanischen Greenschen Operator erhält man durch geschickte Umformung des Termes

$$\frac{1}{E - E_n + i\varepsilon} = \frac{1}{E - H + i\varepsilon} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty e^{i(E - H + i\varepsilon)t/\hbar} dt$$

Es ergibt sich daher

$$G_{E,\mathrm{qm}}^+(x,x') = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_0^\infty \mathrm{d}t \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E+\mathrm{i}\varepsilon)t/\hbar} \sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(x') \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$$

und unter Verwendung des Propagators

$$G_{E,\mathrm{qm}}^+(x,x') \equiv \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_0^\infty \mathrm{d}t \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E+\mathrm{i}\varepsilon)t/\hbar} K_{\mathrm{qm}}(x,t,x',t'=0)$$

Mit dem quantenmechanischen Propagator

$$K_{\rm qm}(x,t,x',t'=0) = \sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(x') {\rm e}^{-{\rm i}E_nt/\hbar}$$

2.2.4.2 Feynmansche Pfadintegraldarstellung des quantenmechanischen Propagators

In der Pfadintegraldarstellung lässt sich der quantenmechanische Propagator schreiben als

$$K_{\rm qm}(x,t,x',t') = \int \mathcal{D}[\gamma(\tau)] \mathrm{e}^{\mathrm{i}/\hbar \int_{t'}^t \mathrm{d}\tau L(\dot{y},\gamma,\tau)}$$

Diese Definition enthält neben der Lagrangefunktion $L(\dot{y}, y, \tau)$ auch die Integration über alle Pfade $\mathcal{D}[y(\tau)]$, die den gleichen Anfangspunkt y(t') und Endpunkt y(t) besitzen. Dabei muss beachtet werden, dass auch die nicht klassischen Pfade enthalten sind. Der semiklassische Propagator folgt aus der Berechnung der Feynmanschen Pfadintegrale unter stationärer Phasenapproximation. Die Stationaritätsbedingung lautet dabei

$$\delta \int_{t'}^t \mathrm{d}\tau \, L(\dot{y}, \gamma, \tau) = 0$$

und ist gerade das Hamiltonsche Variationsprinzip, d.h. $y(\tau)$ beschreibt gerade die klassische Bahn.

Die Van-Vleck-Formel ist

$$K_{\rm SCL}(x,t,x',t'=0) = (2\pi \mathrm{i}\hbar)^{N/2} \sum_{\rm SCL} \sqrt{|c|} \mathrm{e}^{\mathrm{i}/\hbar R(x,x',t)-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\kappa}$$

Die Summe \sum_{SCL} läuft dabei über alle klassischen Trajektorien mit Startpunkt x'(0) und Endpunkt x(t). Der Koeffizient c ist gegeben durch

$$c = \det \frac{\partial^2 R}{\partial x \partial x'}$$

wobei die Funktion R(x, x', t) die klassische Lagrangefunktion enthält:

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

Die Variable κ ist die Zahl der negativen Eigenwerte der zweiten Variation von R nach x und entspricht damit der Anzahl der Kaustiken entlang des Weges von x'(0) nach x'(t).

Die semiklassiche Greensche Funktion ergibt sich nun durch Ersetzung des quantenmechanischen Propagators durch sein semiklassisches Pendant.

$$\begin{aligned} G_{E,\text{SCL}}^{+} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t \mathrm{e}^{\mathrm{i}/\hbar(E+\mathrm{i}\varepsilon)t} K_{\text{SCL}}(x,t,x',t'=0) \\ &= \frac{(2\pi\mathrm{i}\hbar)^{-N/2}}{\mathrm{i}\hbar} \sum_{\text{SCL,E var.}} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t \sqrt{|c|} \mathrm{e}^{\mathrm{i}/\hbar(R(x,x',t)+Et)-\mathrm{i}\kappa\pi/2} \end{aligned}$$

Die Summe $\sum_{\text{SCL,E var.}}$ ist dabei so zu verstehen, dass sie über alle klassische Trajektorien läuft und die Energie *E* dabei variabel ist. Unter der Bedingung der stationären Phase

$$E = -\frac{\partial R}{\partial t}\Big|_{t_0}$$

ergibt sich

$$G_{E,\text{SCL}}^{+} = \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{(N+1)/2}} \sum_{\text{SCL,E fest}} \sqrt{|D|} e^{iS(x,x',E) - i\mu\pi/2}$$

mit der Wirkung entlang der klassischen Bahn

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

und

$$D(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E) = \frac{C}{\left(\frac{\partial^2 R}{\partial t^2}\right)_{t_0}} = \det\left(\frac{\frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}'}}{\frac{\partial^2 S}{\partial E \partial \mathbf{x}}}, \frac{\frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{x}' \partial E}}{\frac{\partial^2 S}{\partial E \partial \mathbf{x}}}\right)$$

sowie.

$$\mu = \begin{cases} \kappa & , \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \big|_{t_0} > 0 \\ \kappa + 1 & , \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \big|_{t_0} < 0 \end{cases}$$

2.2.4.3 Weg zur semiklassischen Zustandsdichte (Gutzwiller-Spurformel)

Die letzten Abschnitte hatten das Ziel eine semiklassische Näherung der Zustandsdichte d(E) zu erhalten, welche ausschließlich von Parametern der klassischen Bahnen abhängt. Die Vorgehensweise hierbei soll im Folgenden nocheinmal skizziert werden.

- 1. Der Ausgangspunkt war der exakte quantenmechanische Propagator, der aus dem Feynmanschen Pfadintegral folgte. In diesen Propagator gehen alle Wege von x' nach x ein, auch diese, die es klassisch nicht geben würde.
- 2. Anwendung der stationären Phasenapproximation auf die Feynmanschen Pfadintegrale. Das Resultat war die van Vleck-Formel, in der alle klassischen Wege von x' nach x eingehen, wobei die Energie variabel bleibt.
- 3. Berechnung der semiklassischen Greenschen Funktion $G_{E,SCL}^+$ über eine Zeitintegration mittels stationärer Phase. In die semiklassische Greensche Funktion gehen alle klassiche Wege von x' nach x ein, diesmal jedoch bei fester Energie E.
- 4. Spurbildung der semiklassischen Greenschen Funktion

$$\operatorname{tr} G_{E,\mathrm{SCL}}^+ = \int \mathrm{d}^N x G_{E,\mathrm{SCL}}^+(x,x), \qquad x = x'.$$

Im Ortsraum geschlossene Wege von x' nach x (Impulse p' und p beliebig). Man erhält zwei Arten von Beiträgen der Greenschen Funktion.

a) $x \rightarrow x'$ Weglänge geht gegen Null. Es ergibt sich der Thomas-Fermi-Term:

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

b) Beiträge von Bahnen (Weglänge größer Null), die am Ort \boldsymbol{x} starten und dorthin zurückkehren.

Im Folgenden soll der Thomas-Fermi-Term etwas genauer untersucht werden. Dazu betrachten wir den Hamiltonoperator

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

und die Greensche Funktion für den Fall $x \approx x'$

$$G(x', x, E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left(\frac{1}{r} + \mathrm{i}k\right)$$

wobei im letzten Schritt eine Taylorentwicklung für kleine r durchgeführt wurde. Mit der Energie

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + V(x)$$

und r = |x - x'| folgt die mittlere Zustandsdichte

$$\bar{d}(E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{tr} \left[\operatorname{Im}(G(x', x, E)) \right] = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \int \mathrm{d}^3 x \sqrt{2m(E - V(x))}$$

Die mittlere Anzahl an Zuständen lautet somit

$$\begin{split} \bar{N}(E) &= \int_{-\infty}^{E} \bar{d}(E') dE' = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{d}(E') \Theta(E - E') dE' \\ &= \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \int d^3x \int_{-\infty}^{\infty} k \Theta(E - H(x, \hbar k)) dE' \\ &= \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \int d^3x \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{m} k^2 dk \Theta(E - H(x, \hbar k)) \\ &= \frac{1}{8\pi^3} \int d^3x \int d^3k \Theta(E - H(x, \hbar k)) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x \int d^3p \Theta(E - H(x, p)) \\ &\rightsquigarrow \bar{d}(E) = \frac{d\bar{N}(E)}{dE} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x \int d^3p \, \delta(E - H(x, p)) \end{split}$$

5. Berechnung der Spur von $G_{E,SCL}^+$ mittels stationärer Phasenapproximation

tr
$$G_{E,\text{SCL}}^+ = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar i)^{(N+1)/2}} \int d^N x \sum_{\text{k. Tj,}} \sqrt{|D|} e^{-iS(x,x,E) - i\mu\pi/2}$$

Stationäre Phase:

$$\left(\frac{\partial S(x, x, E)}{\partial x}\right)_{x_0} = \left(\underbrace{\frac{\partial S(x, x', E)}{\partial x'}}_{=-p'} + \underbrace{\frac{\partial S(x, x', E)}{\partial x}}_{=p}\right)_{x=x'=x_0}$$
$$= -p' + p = 0$$

Hier variieren wir beide Argumente von S(x, x', E) am Start- und Endpunkt der Trajektorie. Somit entspricht -p' den Anfangs- und p den Endimpuls. Somit tragen in der Summe $\sum_{k. Tj}$, nur diejenigen klassischen Trajektorien bei, die die Bedingung x = x'und p = p' erfüllen, also erstreckt sich die Summe über alle periodischen Bahnen. 6. Ausführung der Integration (in der Umgebung der periodischen Bahnen). Dazu wählt man lokale Koordinaten in der Umgebung einer periodischen Bahn

$$\begin{aligned} x = (q, x_{\perp,1}, \dots, x_{\perp,N-1}) = (q, x_{\perp}) \\ \mathrm{d}^{N} x \to \mathrm{d} q \, \mathrm{d}^{N-1} x_{\perp} \end{aligned}$$

Die Integration wird also über die parallel und senkrecht Komponenten der Bahn aufgespalten. In diesen Koordinaten gilt für die Amplitude

$$D = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial x} & \frac{\partial^2 S}{\partial x' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial x} & \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial E} \end{pmatrix}$$
$$= -\frac{\partial^2 S}{\partial E \partial q} \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial q'} \det \frac{\partial^2 S}{\partial x'_{\perp} \partial x'_{\perp}}$$

mit

 $\frac{\partial S}{\partial x} = p$ $\frac{\partial S}{\partial x'} = -p'$ $\frac{\partial S}{\partial E} = t$

folgt

$$D = (-1)^N \frac{1}{\dot{q}\dot{q}'} \det \frac{\partial p'_{\perp}}{\partial x_{\perp}}$$

Die Entwicklung der Wirkung in der Umgebung der periodischen Bahnen führt auf

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

mit

$$W_{ij}(q) = \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_{\perp} \partial x_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial x_{\perp} \partial x_{\perp}'} + \frac{\partial^2 S}{\partial x_{\perp}' \partial x_{\perp}} + \frac{\partial^2 S}{\partial x_{\perp}' \partial x_{\perp}'}\right)_{x_{\perp} = x_{\perp}' = 0}$$

Setzen wir die gefundene Wirkung in tr $G_{E,SCL}^{+}$ ein, so ergeben sich Fresnel-Integrale für jede Ortskoordinate senkrecht zur periodischen Bahn.

$$\operatorname{tr} G_{E,\mathrm{SCL}}^{+} = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathrm{PO}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}/\hbar S_{\mathrm{PO}}(E) - \mathrm{i} \frac{\pi}{2}(\mu + \nu)} \int \mathrm{d}q \sqrt{|D(q)|} \frac{1}{\sqrt{|\det W(q)|}}$$

Den Parameter ν erhält man dabei aus den Eigenwerten der Matrix W(q) und der Summenindex PO ist so zu verstehen, dass über alle periodischen Bahnen summiert wird. Es lässt sich zusätzlich zeigen (mathematisch aufwendig), dass

$$\left|\frac{\det W(q)}{D(q)}\right| = \dot{q}^2 \left|\det M_{\rm PO} - \mathbb{1}\right|$$

gilt. Dabei ist $M_{\rm PO}$ die Monodromiematrix der perdiodischen Bahn. Damit ergibt sich schließlich

$$\operatorname{tr} G_{E,\mathrm{SCL}}^{+} = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathrm{PO}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}/\hbar S_{\mathrm{PO}}(E) - \mathrm{i} \frac{\pi}{2} (\mu + \nu)} \frac{1}{|\det M_{\mathrm{PO}} - \mathbb{1}|} \int \frac{1}{\dot{q}} \, \mathrm{d}q$$

unter Ausnutzung von $\mu + \nu = \sigma_{PO}$ und

$$\int \frac{1}{\dot{q}} \, \mathrm{d}q = \int_{\mathrm{PPO}} \mathrm{d}t = T_{\mathrm{PPO}}$$

erhalten wir das Endergebnis, nämlich die Gutzwiller-Spurformel (M.Gutzwiller 1970)

$$d(E) = \bar{d}(E) + \frac{1}{\pi\hbar} \sum_{PO} \frac{T_{PPO}}{\sqrt{|\det M_{PO} - 1|}} \cos\left(\frac{S_{PO}}{\hbar} - \frac{\pi}{2}\sigma_{PO}\right)$$

Mit:

- ► *T*_{PPO}: Umlaufzeit für einen Umlauf der Bahn (primitive periodische Orbits).
- ► S_{PO} : Klassische Wirkung, $S_{PO} = \oint_{PO} p \, dx$.
- σ_{PO} : Maslov-Index
- ▶ M_{PO} : Monodromiematrix (symplektische $(2N 2) \times (2N 2)$ -Matrix).

Beachte, dass wir nur isolierte periodische Bahnen betrachten, da sonst der Nenner verschwindet und damit die Spurformel divergiert.

Wir wollen nun noch einmal die Monodromiematrix in Erinnerung rufen. Diese ist definiert durch

$$\begin{pmatrix} x_{\perp}(T_{\rm PO}) \\ p_{\perp}(T_{\rm PO}) \end{pmatrix} = M_{\rm PO} \begin{pmatrix} x_{\perp}(0) \\ p_{\perp}(0) \end{pmatrix}$$

und ist symplektisch. Dies bedeutet, dass sowohl λ , als auch $1/\lambda$ Eigenwerte der Monodromiematrix $M_{\rm PO}$ sind.

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2} + V(q) \qquad q = q^{(0)} + \delta q \qquad p = p^{(0)} + \delta p$$
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta p \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{\partial^2 V(q)}{\partial q_i \partial q_j} & 0 \end{pmatrix}}_{\equiv v^{(0)}(t)} \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta p \end{pmatrix}$$

Diagonalisieren von $v^{(0)}(t = T)$ führt auf

(1			• • •	•••)	۱
	÷	1				
	÷	÷	λ			
	÷	÷	÷	$1/\lambda$		
	÷	÷	÷	÷	·.)	

Die Stabilitätsmatrix, die in der Gutzwiller-Spurformel für isolierte periodische Bahnen auftritt, entspricht gerade der Untermatrix, die nicht die trivialen Eigenwerte 1 enthalten.

2.2.5 Anwendung der Gutzwiller-Spurformel

2.2.5.1 Interpretation der Quantenspektren klassisch chaotischer Systeme

Dies ist besonders elegant für Systeme mit klassischer Skalierungseigenschaft.

Wasserstoffatom im Magnetfeld: Die Hamiltonfunktion ist durch

$$H = \frac{1}{2}p^{2} + \frac{1}{8}\gamma^{2}(x^{2} + \gamma^{2}) - \frac{1}{r} = E,$$

$$\gamma = \frac{B}{2.35 \cdot 10^{5} \,\mathrm{T}}$$

gegeben. Es gilt zu beachten, dass die Magnetfeldstärke in atomic units dargestellt ist. Es gilt die klassische Skalierung

$$\boldsymbol{r} \to \tilde{\boldsymbol{r}} \gamma^{2/3},$$

 $\boldsymbol{p} \to \tilde{\boldsymbol{p}} \gamma^{-1/3}.$

Die skalierte Hamiltonfunktion nimmt dann die Form

$$\tilde{H} = H \gamma^{-2/3} = \frac{1}{2} \tilde{p}^2 - \frac{1}{\tilde{r}} + \frac{1}{8} \left(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 \right) = \tilde{E} = E \gamma^{-2/3}.$$

an. Die Wirkung ist

$$S_{\rm PO} = \tilde{S}_{\rm PO} \underbrace{\gamma^{-1/3}}_{=\omega},$$

mit der skalierten Wirkung

$$\tilde{S}_{\rm PO} = \oint \tilde{\boldsymbol{p}} \cdot \mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{r}}.$$

Wir erhalten dann aus der semiklassischen Spurformel für die Zustandsdichte bei fester skalierter Energie $E\gamma^{-2/3}$

$$d_{\text{SCL}}(\omega) = \overline{d}(\omega) + \sum_{\text{PO}} \mathcal{A}_{\text{PO}} \cos\left(\tilde{S}_{\text{PO}}\omega - \frac{\pi}{2}\sigma_{\text{PO}}\right),$$

wobei \tilde{S}_{PO} einer Oszillation mit konstanter Frequenz und Amplitude entspricht. Mittels einer Fouriertransformation in ω erhalten wir das Spektrum

$$\mathcal{F}(\tilde{S}) = \int_{\omega_1}^{\omega_2} d(\omega) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tilde{S}\omega} \,\mathrm{d}\omega.$$

Quantenmechanisch sind die Eigenwerte für $\omega = \gamma^{-1/3}$

$$d_{\rm qm} = \sum_n \delta(\omega - \omega_n).$$

2.2.5.2 Berechnung semiklassischer Spektren mittels klassischer periodischer Bahnen

Die semiklassische Spurformel ist durch

$$d_{\text{SCL}} = \overline{d}(E) + \sum_{\text{PO}} \mathcal{A}_{\text{PO}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}S_{\text{PO}} - \frac{\pi}{2}\sigma_{\text{PO}}\right)$$
$$= \overline{d} + d_{\text{OSC}}$$

gegeben, wobei \mathcal{A}_{PO} eine Amplitude ist. Das Problem, welches sich nun stellt ist, dass es unendlich viele periodische Bahnen gibt, bzw. bereits unendlich viele Repetitionen einer einzigen primitiven periodische Bahn. Daher gilt nun im Folgenden die Annahme, dass es nur eine isolierte instabile primitive periodische Bahn (PPO) (und ihre Repetitionen) gibt. Für ein System mit N = 2 Freiheitsgraden erhalten wir dann

$$d_{\rm OSC} = \frac{T_{\rm PPO}}{\pi\hbar} \operatorname{Re} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(S_{\rm PPO} - \pi\sigma_{\rm PPO}/2)r}}{\sqrt{|\det(M_{\rm PPO}^r - \mathbb{1})|}},$$

wobei M_{PPO} , die symplektische Monodromiematrix, die Eigenwerte $\lambda = e^u$ und $1/\lambda = e^{-u}$ enthält. Die Determinante im Nenner ist demnach

$$\left|\det\left(M_{\text{PPO}}^{r}-\mathbb{1}\right)\right| = (e^{\mu r}-1) (e^{-\mu r}-1)$$
$$= 4 \sinh^{2}\left(\frac{\mu r}{2}\right).$$

Berücksichtigen wir die Wurzel, sowie $\mu r \gg 0$ kann der Nenner wie folgt umgeschrieben werden

$$\sqrt{\left|\det\left(M_{\text{PPO}}^r-1\right)\right|}=2\sinh\left(\frac{\mu r}{2}\right)\approx e^{\frac{ur}{2}}.$$

Damit erhalten wir

$$\sum_{r=1}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(S_{\mathrm{PPO}} - \frac{1}{2}\pi\sigma_{\mathrm{PPO}})r}}{\sqrt{\left|\det\left(M_{\mathrm{PPO}}^{r} - \mathbb{1}\right)\right|}} \approx \sum_{r=1}^{\infty} \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(S_{\mathrm{PPO}} - \frac{\pi}{2}\sigma_{\mathrm{PPO}} - \frac{1}{2}u_{\mathrm{PPO}}\right)}\right]^{r}.$$

Unter Verwendung der geometrischen Reihe

$$\sum_{r=1}^{\infty} z^r = \frac{1}{1-z}$$

die absolut konvergent für $|\boldsymbol{z}|<1$ ist, nimmt der oszillierende Teil der Zustandsdichte die Form

$$d_{\rm OSC} = \frac{T_{\rm PPO}}{\pi\hbar} \operatorname{Re} \left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(S_{\rm PPO} - \frac{\pi}{2}\sigma_{\rm PPO}) - \frac{1}{2}u_{\rm PPO}}}{1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(S_{\rm PPO} - \frac{\pi}{2}\sigma_{\rm PPO}) - \frac{1}{2}u_{\rm PPO}}} \right]$$

an. Verschwindet der Nenner, so haben wir Pole in der Zustandsdichte.

Offene Systeme: • Die Hamiltonfunktion des invertierte harmonische Oszillators ist

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 - \omega_y^2 y^2).$$

Es existiert eine isolierte instabile periodische Bahn entlang der *x*-Achse:

$$d_{\rm OSC}(E) = \frac{1}{\hbar\omega_x} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sinh\left(r\pi\frac{\omega_x}{\omega_y}\right)} \cos\left(\frac{2\pi rE}{\hbar\omega_x}\right).$$

▶ Der Stark Effekt bei E > 0. Die Hamiltonfunktion ist

$$H=\frac{1}{2}\boldsymbol{p}^2-\frac{1}{r}+F\boldsymbol{z}=\boldsymbol{E}>0.$$

Es existiert eine isolierte periodische Bahn entlang der (positiven) *x*-Achse.

Typisch für gebundene chaotische Systeme ist, dass die Anzahl der (primitiven) periodischen Bahnen exponentiell mit der Wirkung wächst

$$\#(\text{PO mit }S_{\text{PO}} < S) \propto \mathrm{e}^{\mu S}$$

wobei μ als eine Art Entropie aufgefasst werden kann ($\mu > 0$).

Zudem ist die Konvergenz der PO-Summe nicht gesichert, denn

 $\mathcal{A}_{PO} \propto e^{-\frac{1}{2}\lambda_{PPO} \mathcal{S}_{PPO}}$

Hier ist $\lambda > 0$ der Liapunov Exponent. Die Spurformel ist jedoch für

$$\lambda > 2\mu$$

absolut konvergent.

Typische Systeme weisen einen Liapunov Exponenten mit $\lambda < 2\mu$ auf, weshalb keine (absolute) Konvergenz der Spurformel auftritt.

Ein einfacher Versuch besteht darin die Bahnsumme abzuschneiden, bspw. bei $S_{PO} < S_{max}$. Damit erhalten wir die Zustandsdichte in niedriger Auflösung. Eventuell ist es dann möglich einzelne semiklassische Eigenwerte zu identifizieren.

Wunsch: Berechnung möglichst vieler und genauer semiklassischer Eigenwerte mittles einer möglichst geringen Anzahl von Bahnen. \neg

Entwicklung verschiedener Resummationstechniken zur Beschleunigung der Konvergenz semiklassischer Spurfomeln. Spezielle Methoden:

- ► Cycle-Expansion (Eckhard und Civitanovic, 1989)
- Pseudo-Orbit Entwicklung (Berry und Keating, 1990)
- Harmonische Inversion (Anwendung nicht linearer Verfahren zur hochauflösenden Signalanalyse)



3.1 Chaos in klassischen Systemen und Quantensystemen

- ► Klassische chaotische Systeme: Bahnen sind instabile Lösungen da nichtlineare Bewegungsleichungen (Liapunov Exponent $\lambda > 0$) auftreten.
- Quantenmechanik: Wellenfunktionen (Zustände) sind Lösungen der Schrödingergleichung (lineare SGL)

$$i\hbar\partial_t\psi(\boldsymbol{x},t) = \hat{H}\psi(\boldsymbol{x},t),$$

wobei der Hamiltonoperator \hat{H} und die zeitliche Ableitung ∂_t lineare Operatoren sind. Hier stellt sich die Frage nach dem Chaos, bzw. was man unter Quantenchaos verstehen kann. Somit suchen wir letztlich eine Definition von Quantenchaos ohne den Rückgriff auf das korrespondierende klassische System.

Beispiele von Spektren (Dargestellt in Abbildung 26):

- Wasserstoffatom im Magnetfeld
- > Poisson: Unkorrelierte, zufällige Ereignisse (z.B. Radioaktiver Zerfall)
- Folge von Primzahlen
- Streuprozess: n +¹⁶⁶ Er, Kernanregungen (Vielteilchensystem mit starker Wechselwirkung)
- Sinai-Billard
- ▶ Nullstellen der Riemannschen Zetafunktion

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = \prod_p \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p^{ns}} \right) = \prod_p \left(1 - p^{-s} \right)^{-1},$$

wobei p nach dem zweiten Gleichheitszeichen das Produkt über alle Primzahlen symbolisiert. Die nichttrivialen Nullstellen liegen auf der Achse s = 1/2 + ix mit $x \in \mathbb{R}$ (Riemannsche Vermutung).

► Uniformes Spektrum (z.B. 1d harmonischer Oszillator)



▶ 26 Segmente verschiedener Spektren mit je 50 Niveaus. Die Pfeilspitzen kennzeichnen das Auftreten von Energienieaus deren Abstand kleiner als 1/4 ist. Von [2].

Hinweis auf Quantenchaos

Wir betrachten die statistische Verteilung von Niveauabständen, wie sie etwa in Abbildung 26 zu sehen ist.. Der Abstand zweier benachbarter Linien

$$s_n = E_{n+1} - E_n$$

führt auf eine Häufigkeitsverteilung P(s), bspw. ein Histogramm. Da die mittlere Zustandsdichte $\overline{d}(E)$ jedoch meist von der Energie abhängt, stellt dies ein Problem dar. Abhilfe schafft die Normierung des Spektrums, bzw. Normierung der Linienabstände auf einen konstanten mittleren Abstand. Dies wird auch als »Entfaltung des Spektrums« bezeichnet.

Entfaltung des Spektrums

Anzahl der Zustände

$$N(E) = \sum_{n} \Theta(E - E_{N}) = \overline{N}(E) + N_{f}(E)$$

mit $N_f(E)$, den fluktuierenden Anteilen und

$$\overline{N}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \mathrm{d}^d q \, \mathrm{d}^d p \, \Theta(E - H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}))$$

im Phasenraum ($H \le E$). Siehe Abbildung 27. Die Entfaltung ist eine Abbildung $x_i = \overline{N}(E_i)$ mit

$$\frac{\overline{\mathrm{d}x_i}}{\mathrm{d}i} = \frac{\mathrm{d}\overline{N}}{\mathrm{d}E}\Big|_{E_i} \cdot \overline{\frac{\mathrm{d}E_i}{\mathrm{d}i}} = \overline{d(E_i)} \cdot \frac{1}{\overline{d(E_i)}} = 1.$$

Statistische Untersuchung der entfalteten Folge x_i .



▶ 27 Anzahl der Zustände über der Energie. In blau ist die mittlere Teilchenanzahl $\overline{N}(E)$ dargestellt. Der Schnittpunkt beider Funktionen bestimmt die neuen Levels (abzulesen an der γ -Achse). Die Werte x_i haben per Konstruktion im Mittel einen Abstand von 1.

Nächste-Nachbar-Verteilung

Häufigkeitsverteilung: P(s) für die Abstände $s_i = x_{i+1} - x_i$ liefert ein Histogramm, in dem wir verschieden starke Ausprägungen von Niveauabstoßungen beobachten.

Nieveauabstoßung als vermiedene Kreuzungen

Wir betrachten den Energie
abstand zwischen zwei Niveaus, beschrieben durch eine hermitesch
e 2×2 MatrixH

$$H = egin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix}.$$

Das System kann von einem oder mehreren externen Kontrollparametern abhängen (z.B. magnetische oder elektrische Felder, Seitenverhältnis eines Rechteckbillard, ...). Die Eigenwerte sind

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

mit

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

Mögliche Fälle:

1. Keine Wechselwirkung zwischen den Zuständen, d.h. $H_{12} = 0$.

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

mit dem Kontrollparameter λ . Es kann eine exakte Niveaukreuzung auftreten (bei geeigneter Wahl eines Kontrollparameters)

2. $H_{12} \neq 0$, aber die Matrix ist reell. Niveaukreuzung falls

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

Typischerweise nur möglich, wenn es n = 2 Kontrollparameter gibt, bspw. λ_1 und λ_2 . 3. $H_{12} \neq 0$ mit komplex hermitescher Matrix

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

Erfordert n = 3 Kontrollparameter, bspw. λ_1 , λ_2 und λ_3 .

Klassisch integrable Systeme: EBK-Torusquantisierung liefert einen vollständigen Satz von Quantenzahlen n

$$E_{\boldsymbol{n}}(\lambda) \approx H\left(\boldsymbol{I} = \hbar\left(\boldsymbol{n} + \frac{\boldsymbol{\alpha}}{4}\right), \lambda\right).$$

Zustände sind durch den vollständigen Satz von Quantenzahlen n beschrieben. Typischerweise genügt die Variation eines Kontrollparameters λ , um die Kreuzung zweier benachbarter Niveaus zu erreichen (Fall (1)). Wir erwarten, dass bei klassisch integrablen Systemen Niveaukreuzungen mit großer Wahrscheinlichkeit auftreten.

Die Fälle (2) und (3): Reell symmetrische, bzw. komplex hermitesche Matrizen lassen sich mittels orthogonalen, bzw. unitären Transformationen diagonalisieren. Erforderliche Anzahl an Kontrollparameter für Niveaukreuzungen

$$n = \begin{cases} 2 & , \text{ orthogonal} \\ 3 & , \text{ unitär} \\ 5 & , \text{ symplektisch} \end{cases}$$

Zeitumkehrinvarianz für n = 2 und n = 5: T, $T^2 = 1$, bzw. T, $T^2 = -1$. Der Grad der Niveauabstoßung ausgedrückt durch die Verteilung P(s) bei kleinen Abständen s hängt von n ab

$$P(s) \propto s^{n-1} = s^{\beta}, \quad \text{für} \quad s \to 0$$

mit $\beta = n - 1$.

BEWEIS Es ist

$$P(s) = \sum_{i} \delta(s - \Delta E_{i}) = \langle \delta(s - \Delta E) \rangle,$$

mit $\langle \bullet \rangle$ der Mittlung über alle ΔE . Für kleine *s* (gegenüber dem mittleren Abstand der Niveaus) ist ΔE gerade

$$\Delta E = \sqrt{\mathbf{x}^2} = (x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2)^{1/2}.$$

Mittelung über alle \boldsymbol{x} (mit geeigneter Gewichtsfunktion $W(\boldsymbol{x})$)

$$P(s) = \int \mathrm{d}^n x W(\boldsymbol{x}) \delta\left(s - \sqrt{\boldsymbol{x}^2}\right).$$

Substitution mit x = sy ergibt

$$P(s) = \int d^{n}(sy)W(sy)\delta\left(s - s\sqrt{y^{2}}\right)$$
$$= s^{n-1} \int d^{n}yW(sy)\delta\left(1 - \sqrt{y^{2}}\right),$$

wobei

$$\lim_{s \to 0} W(s \boldsymbol{y}) = W(0) \neq 0$$

und somit

$$P(s) \propto s^{\beta}$$

mit $\beta = n - 1$.

Somit erhalten wir also

$$P(s) \propto \begin{cases} s & , \text{ orthogonal} \\ s^2 & , \text{ unitär} \\ s^4 & , \text{ symplektisch} \end{cases}$$

für kleine s.

Im Folgenden betrachten wir ein entfaltetes Spektrum

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

und suchen die Nächste-Nachbar-Verteilung P(s) für Abstände

$$s = x_{i+1} - x_i.$$

Wir fragen uns: Findet ein Ereignis bei $x = x_0$ statt, wie groß ist dann die Wahrscheinlichkeit für

- 1. Ein einziges Ereignis (Level) in $[x_0 + s, x_0 + s + ds]$
- 2. Kein Ereignis in $[x_0, x_0 + s]$

Um dieser Frage nachzugehen führen wir folgende Definitionen ein:

- ► g(s) ds: Wahrscheinlichkeit für Ereignis $[x_0 + s, x_0 + s + ds]$ (Homogenität: unabhängig von x_0)
- P(s): Wahrscheinlichkeitsdichte

$$P(s) = g(s) \left(1 - \int_0^s P(s') \, ds' \right) = g(s) \int_s^\infty P(s') \, ds'$$
(3.1)

95

Es ergibt sich somit

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}s} = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}s} \underbrace{\int_{s}^{\infty} P(s') \,\mathrm{d}s'}_{=P/g \text{ aus } (3.1)} - gP = \left(\frac{1}{g} \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}s} - g\right)P$$

Eine Lösung dieser Differentialgleichung lautet

$$P(s) = cg(s)e^{-\int_0^s g(s') \, \mathrm{d}s'}$$

und kann für integrable Systeme berechnet werden.

Integrable Systeme: Ausgehend von der Torusquantisierung lässt sich zeigen, dass g(s) nicht von *s* abhängt, d.h.

$$g(s) = \alpha$$
.

Dies entspricht dem Poisson-Prozess für unabhängige Ereignisse. Für P(s) erhalten wir somit als Lösung

$$P(s) = c \alpha e^{-\alpha s}$$

Die Konstanten c und α werden dabei aus der Normierungsbedingung

$$\int_0^\infty P(s)\,\mathrm{d}s=1$$

und dem mittleren Abstand

$$\bar{s} = \int_0^\infty s P(s) \, \mathrm{d}s = 1$$

gewonnen. Als Endergebnis ergibt sich

$$P(s) = e^{-s},$$

d.h. reguläre Systeme sind poissonverteilt. Für kleine Werte von s gilt

$$P(s) \approx \bar{c}g(s)$$

Chaotische Systeme Für chaotische Systeme verhält sich die Wahrscheinlichkeitsdichte P(s) anders. Für kleine Werte *s* erwarten wir

$$P(s) \approx s^{\beta}, \qquad \beta = \begin{cases} 1 & \text{, Systeme mit Zeitumkehrinvarianz} \\ 2 & \text{, Systeme ohne Zeitumkehrinvarianz} \end{cases}$$

Für Systeme mit Zeitumkehrinvarianz gilt

$$[H, T] = 0$$

mit dem Zeitumkehroperator T (antiunitär). Dieser hat die Eigenschaften

$$T^2 = \mathbb{1},$$

$$T\psi(x,t) = \psi^*(x,t).$$

Vertauscht der Hamiltonoperator mit dem Zeitumkehroperator, so lässt sich der Hamiltonoperator als reelle Matrix darstellen. **BEWEIS** Sei ϕ_i eine beliebige Basis. Wähle eine neue Basis

$$\psi_i = a_i \phi_i + T a_i \psi_i, \qquad a_i \in \mathbb{C}$$

mit

 $T\psi_i = \psi_i \qquad \langle \psi_j \mid \psi_i \rangle = \delta_{ij}$

Für die Matrixelemente gilt dann

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle \Psi_i \mid H \mid \Psi_j \rangle \\ &= \langle T \Psi_i \mid T H \mid \Psi_j \rangle^* \\ &= \langle T \Psi_i \mid H \mid T \Psi_j \rangle^* \\ &= \langle \Psi_i \mid H \mid \Psi_j \rangle^* \\ &= H_{ij}^*. \end{aligned}$$

3.2 Theorie der Zufallsmatrizen (Random Matrix Theory)

Wignersche Vermutung Bei chaotischen Quantensystemen (Systeme ohne Symmetrien, bzw. gute Quantenzahlen, außer eventuell Zeitumkehrinvarianz) wird die Nächste-Nachbar-Verteilung der Niveauabstände beschrieben durch ein Ensemble von Zufallsmatrizen, wobei die Matrixelemente entsprechend bestimmter Verteilungsfunktionen zufällig gewählt werden.

3.2.1 Systeme mit Zeitumkehrinvarianz [H, T] = 0

Um Systeme mit Zeitumkehrinvarianz zu betrachten benötigen wir das *Gaußsche orthogonale Ensemble* (GOE). Im Folgenden betrachten wir den Hamiltonoperator in Form einer reell symmetrischen (2×2) -Matrix

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{pmatrix}$$

mit Matrixelementen H_{ij} , welche Zufallszahlen gemäß des Wahrscheinlichkeitsmaßes $\mathcal{P}(H)$ sind. Dabei haben wir einige Forderungen an dieses Wahrscheinlichkeitsmaß:

- 1. $\iiint \mathcal{P}(H) \, \mathrm{d}H_{11} \, \mathrm{d}H_{12} \, \mathrm{d}H_{22} = 1$
- 2. $\mathcal{P}(H)$ soll invariant unter orthogonalen Transformationen O der Form

$$O = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

sein.

3. Die einzelnen Wahrscheinlichkeitsdichten $\mathcal{P}_{ij}(H_{ij})$ sollen statistisch unabhängig sein, d.h.

$$\mathcal{P}(H) = \mathcal{P}_{11}(H_{11})\mathcal{P}_{12}(H_{12})\mathcal{P}_{22}(H_{22})$$

Wir betrachten nun die zuvor erwähnte orthogonale Transformation für kleine Winkel ϑ

$$O = \begin{pmatrix} 1 & -\vartheta \\ \vartheta & 1 \end{pmatrix} \,.$$

Unter dieser infinitesimalen Transformation soll $\mathcal{P}(H)$ invariant sein, es folgt daher

$$H' = OHO^T$$

und für die einzelnen Elemente

$$H'_{11} = H_{11} - 2\mathcal{9}H_{12} \equiv H_{11} + \Delta H_{11}$$
$$H'_{22} = H_{11} + 2\mathcal{9}H_{12} \equiv H_{22} + \Delta H_{22}$$
$$H'_{12} = H_{12} + \mathcal{9}(H_{11} - H_{22}) \equiv H_{12} + \Delta H_{12}$$

Die Änderung des Wahrscheinlichkeitsmaßes $\Delta \mathcal{P}(H)$

$$\mathcal{P}(H') = \mathcal{P}(H) + \Delta \mathcal{P}(H)$$

muss nach Forderung 2 verschwinden.

$$\begin{split} \Delta \mathcal{P}(H) &= \left(\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_{11}}{\mathrm{d}H_{11}}\Delta H_{11}\right)\mathcal{P}_{22}\mathcal{P}_{12} + \mathcal{P}_{11}\left(\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_{22}}{\mathrm{d}H_{22}}\Delta H_{22}\right)\mathcal{P}_{12} \\ &+ \mathcal{P}_{11}\mathcal{P}_{22}\left(\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_{12}}{\mathrm{d}H_{12}}\Delta H_{12}\right) \end{split}$$

mit

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_{ij}}{\mathrm{d}H_{ij}} = \mathcal{P}_{ij}\frac{\mathrm{d}\ln\mathcal{P}_{ij}}{\mathrm{d}H_{ij}}$$

folgt

$$\Delta \mathcal{P}(H) = -\vartheta \underbrace{\left(2H_{12}\frac{\mathrm{d}\ln\mathcal{P}_{11}}{\mathrm{d}H_{11}} - 2H_{12}\frac{\mathrm{d}\ln\mathcal{P}_{22}}{\mathrm{d}H_{22}} - (H_{11} - H_{22})\frac{\mathrm{d}\ln\mathcal{P}_{12}}{\mathrm{d}H_{12}}\right)}_{=0} \underbrace{\mathcal{P}_{11}\mathcal{P}_{22}\mathcal{P}_{12}}_{=\mathcal{P}}$$

Aus der Bedingung, dass die Klammer verschwinden muss erhalten wir

$$\frac{1}{H_{11} - H_{22}} \left(\frac{d \ln \mathcal{P}_{11}}{d H_{11}} - \frac{d \ln \mathcal{P}_{22}}{d H_{22}} \right) - \frac{1}{2H_{12}} \frac{d \ln \mathcal{P}_{12}}{d H_{12}} = 0$$

Eine Lösung dieser Gleichung wird beschrieben durch die Gaußfunktion

$$\mathcal{P}(H) = c e^{-A(H_{11}^2 + H_{22}^2 + 2H_{12}^2)} = c e^{-A \operatorname{tr} H^2},$$

wobei *c* und *A* Konstanten sind, welche durch die Normierung und den Mittelwert festgelegt werden. Für ein Zwei-Niveau-System ergeben sich zwei Energien E_+ und E_- und somit einen Energieabstand

$$\Delta E = E_+ - E_- \, .$$

Da wir ein (2×2) -Matrix
modell betrachten, lassen sich die Eigenenergien allgemein formulieren

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{12})^2 + 4H_{12}^2}$$

Für beliebigen Winkel ϑ können wir immer eine Transformation finden, sodass für den Hamiltonoperator gilt

$$H = O^{T} \begin{pmatrix} E_{+} & 0\\ 0 & E_{-} \end{pmatrix} O$$
$$H_{11} = E_{+} \cos^{2} \vartheta + E_{-} \sin^{2} \vartheta$$
$$H_{22} = E_{+} \sin^{2} \vartheta + E_{-} \cos^{2} \vartheta$$
$$H_{12} = (E_{+} - E_{-}) \cos \vartheta \sin \vartheta$$

Dabei muss gelten

$$\mathcal{P}(H) dH_{11} dH_{22} dH_{12} = \mathcal{P}(E_+, E_-, \vartheta) dE_+ dE_- d\vartheta$$
$$\mathcal{P}(E_+, E_-, \vartheta) = \mathcal{P}(H) \left| \det \frac{\partial(H_{11}, H_{22}, H_{12})}{\partial(E_+, E_-, \vartheta)} \right|$$
$$= \mathcal{P}(H) |E_+ - E_-|$$
$$= c e^{-A \operatorname{tr} H^2} |E_+ - E_-|$$
$$= c e^{-A(E_+^2 + E_-^2)} |E_+ - E_-| .$$

Mit

$$s = E_+ - E_-$$
, $E_0 = \frac{1}{2}(E_+ + E_-)$

folgt

$$E_{\pm} = E_0 \pm \frac{s}{2}$$

und somit

$$\mathcal{P}(s,E_0) = c \, s \, \mathrm{e}^{-A\left(\frac{1}{2}s^2 + 2E_0^2\right)} \underbrace{\left| \det \frac{\partial(E_+,E_-)}{\partial(s,E_0)} \right|}_{=1}.$$

Mittelung über *E*⁰ führt zu der Verteilung

$$\mathcal{P}(s) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}(s, E_0) \, \mathrm{d}E_0 = s \mathrm{e}^{-\frac{A}{2}s^2} \underbrace{c \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-2E_0^2} \, \mathrm{d}E_0}_{=\tilde{c}}$$
$$= \tilde{c} s \mathrm{e}^{-\frac{A}{2}s^2}$$

Die Konstanten \tilde{c} und A werden nun noch mittels der Normierung

$$\int_0^\infty \mathcal{P}(s)\,\mathrm{d}s=1$$

und dem Erwartungswert

$$\int_0^\infty s\mathcal{P}(s)\,\mathrm{d}s=1$$

bestimmt. Letzten Endes ergibt sich die sogenannte *Wignerverteilung* für ein Gaußsches orthogonales Ensemble (GOE)

$$\mathcal{P}(s) = \frac{\pi}{2} s \, \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}s^2}$$

3.2.2 Systeme ohne Zeitumkehrinvarianz (antiunitäre Symmetrie)

Hierfür ist es sinnvoll das *Gaußsche unitäre Ensemble* (GUE) einzuführen. Der Hamiltonoperator liegt in der Form einer hermiteschen (2×2) -Matrix

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix}$$

vor. Er enthält vier reelle Parameter

$$H_{11}$$
, H_{22} , $\operatorname{Re} H_{12}$, $\operatorname{Im} H_{12}$,

die durch Zufallszahlen gemäß des Wahrscheinlichkeitsmaßes $\mathcal{P}(H)$ festgelegt werden. Wieder haben wir einige Forderungen an unser Wahrscheinlichkeitsmaß:

- 1. Normierung: $\int \mathcal{P}(H) \, dH_{11} \, dH_{22} \, d \operatorname{Re} H_{12} \, d \operatorname{Im} H_{12} = 1$
- 2. $\mathcal{P}(H)$ ist invariant unter unitären Transformationen U mit $U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = \mathbb{1}$
- 3. Statistische Unabhängigkeit: $\mathcal{P}(H) = \mathcal{P}_{11}(H_{11})\mathcal{P}_{22}(H_{22})\mathcal{P}_{12}^{R}(\operatorname{Re} H_{12})\mathcal{P}_{12}^{I}(\operatorname{Im} H_{12})$

Im Folgenden betrachten wir eine infinitesimale unitäre Transformation

$$U = \mathbb{1} - i\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

mit

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z)^T, \quad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$$

Damit folgt:

$$H' = H + dH \quad \text{mit } dH = -\mathrm{i}[\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}, H]$$
$$dH_{11} = -2\varepsilon_x \operatorname{Im} H_{12} - 2\varepsilon_y \operatorname{Re} H_{12}$$
$$dH_{22} = 2\varepsilon_x \operatorname{Im} H_{12} + 2\varepsilon_y \operatorname{Re} H_{12}$$
$$d\operatorname{Re} H_{12} = \varepsilon_y (H_{11} - H_{22}) + 2\varepsilon_z \operatorname{Im} H_1$$
$$d\operatorname{Im} H_{12} = \varepsilon_y (H_{11} - H_{22}) - 2\varepsilon_z \operatorname{Re} H_1$$

Die Änderung des Wahrscheinlichkeitsmaßes unter der infinitesimalen unitären Transformation soll verschwinden

$$\begin{split} \Delta \mathcal{P}(H) &= \left\{ \varepsilon_x \left[-2 \operatorname{Im} H_{12} \left(\frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{11}}{\mathrm{d} H_{11}} - \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{22}}{\mathrm{d} H_{22}} \right) + (H_{11} - H_{22}) \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^I}{\mathrm{d} \operatorname{Im} H_{12}} \right] \\ &+ \varepsilon_y \left[-2 \operatorname{Re} H_{12} \left(\frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{11}}{\mathrm{d} H_{11}} - \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{22}}{\mathrm{d} H_{22}} \right) + (H_{11} - H_{22}) \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^R}{\mathrm{d} \operatorname{Im} H_{12}} \right] \\ &+ \varepsilon_z \left[2 \operatorname{Im} H_{12} \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^R}{\mathrm{d} \operatorname{Re} H_{12}} - 2 \operatorname{Re} H_{12} \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^I}{\mathrm{d} \operatorname{Re} H_{12}} \right] \right\} \mathcal{P}(H) \\ &= 0 \end{split}$$

Aus dieser Bedingung folgt, dass alle Terme der Form $\varepsilon_i \{...\}$ verschwinden müssen. Dies führt auf drei Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{1}{H_{11} - H_{22}} \left(\frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{11}}{\mathrm{d} H_{11}} - \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{22}}{\mathrm{d} H_{22}} \right) &- \frac{1}{2 \operatorname{Im} H_{12}} \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^{I}}{\mathrm{d} \operatorname{Im} H_{12}} = 0, \\ \frac{1}{H_{11} - H_{22}} \left(\frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{11}}{\mathrm{d} H_{11}} - \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{22}}{\mathrm{d} H_{22}} \right) - \frac{1}{2 \operatorname{Im} H_{12}} \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^{R}}{\mathrm{d} \operatorname{Re} H_{12}} = 0, \\ \frac{1}{\operatorname{Re} H_{12}} \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^{R}}{\mathrm{d} \operatorname{Re} H_{12}} - \frac{1}{\operatorname{Im} H_{12}} \frac{\mathrm{d} \ln \mathcal{P}_{12}^{I}}{\mathrm{d} \operatorname{Im} H_{12}} = 0. \end{aligned}$$

Um dieses Gleichungssystem zu lösen, benutzen wir den Ansatz

$$\mathcal{P}(H) = c \, \mathrm{e}^{-A(H_{11}^2 + H_{22}^2 + 2(\operatorname{Re} H_{12})^2 + 2(\operatorname{Im} H_{12})^2)} = c \, \mathrm{e}^{-A\operatorname{tr} H^2}$$

Die Konstante c wird durch die Normierung bestimmt. Wir verbleiben mit der Konstanten A. Die Diagonalisierung von

$$H = \begin{pmatrix} E_+ & 0\\ 0 & E_- \end{pmatrix} = UHU^{\dagger}$$

ist möglich mittels einer unitärer Transformation

$$U = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \sin \vartheta \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}$$

Somit erhalten wir:

$$H_{11} = E_{+}\cos^{2}\vartheta + E_{-}\sin^{2}\vartheta$$
$$H_{11} = E_{+}\sin^{2}\vartheta + E_{-}\cos^{2}\vartheta$$
$$H_{12} = H_{21}^{*} = (E_{+} - E_{-})e^{i\varphi}\cos\vartheta\sin\vartheta$$
$$\det\frac{\partial(H_{11}, H_{22}, \operatorname{Re}H_{12}, \operatorname{Im}H_{12})}{\partial(E_{+}, E_{-}, \vartheta, \varphi)} = (E_{+} - E_{-})^{2}\cos\vartheta\sin\vartheta$$

Mittelung über ϑ führt auf

$$\mathcal{P}(E_+, E_-) = c (E_+ - E_-)^2 e^{-A(E_+^2 + E_-^2)}$$

Mit

$$E_+ = E_0 + \frac{s}{2}, \qquad E_- = E_0 - \frac{s}{2}$$

erhalten wir

$$\mathcal{P}(s) = c' s^2 \operatorname{e}^{-A\frac{s^2}{2}}.$$

Die Konstanten c' und A werden wieder über die Normierung

$$\int_0^\infty \mathcal{P}(s)\,\mathrm{d}s=1$$

und dem Erwartungswert

$$\int_0^\infty s \, \mathcal{P}(s) \, \mathrm{d}s = 1$$

bestimmt. Somit erhalten wir für das Gaußsche unitäre Ensemble (GUE)

$$\mathcal{P}(s) = \frac{32}{\pi^2} \, s^2 \, \mathrm{e}^{-\frac{4}{\pi}s^2}$$

Für kleine Abstände finden wir das Verhalten

$$\mathcal{P}(s) \propto s^2$$
.

3.2.3 Systeme mit Zeitumkehrinvarianz [H, T] = 0 und $T^2 = -1$ (Kramers-Entartung)

Hierfür führen wir das *Gaußsche symplektische Ensemble* (GSE) ein. Dieses besteht aus einem Hamiltonoperator der Form

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix}$$

mit den quarternionischen 2 × 2-Blöcken h_{ij} . Als Basis verwenden wir hierbei die Einheitsmatrix 1 und die Sigma-Matrizen $-i\sigma$. Der Hamiltonoperator H lässt sich durch eine symplektische Transformation auf eine Diagonalform

$$\begin{pmatrix} E_+ \mathbb{1} & 0 \\ 0 & E_- \mathbb{1} \end{pmatrix}$$

bringen (E_+ und E_- sind zweifach entartet). Wieder machen wir den Ansatz

$$P(H) = c e^{-A \operatorname{tr} H^2}$$

um die Verteilungsfunktion zu erhalten. Die einzelnen Schritte wollen wir hierbei nicht diskutieren.

Zusammenfassung

Für alle Wahrscheinlichkeitsdichten $\mathcal{P}(s)$ in den unterschiedlichen Fällen erhalten wir also

$$\mathcal{P}(s) = \begin{cases} e^{-s} &, \text{Poissonverteilung für integrable Systeme} \\ \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2} &, \text{Wignerverteilung für GOE-Statistik} \\ \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi} s^2} &, \text{für GUE-Statistik} \\ \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 e^{-\frac{64}{9\pi} s^2} &, \text{für GSE-Statistik} \end{cases}$$

Die einzelnen Wahrscheinlichkeitsdichten sind in Abbildung 29 dargestellt.



▶ 28 Wahrscheinlichkeitsdichten $\mathcal{P}(s)$ für die Poissonverteilung \mathcal{P}_{P} , GOE-Statistik \mathcal{P}_{GOE} , GUE-Statistik \mathcal{P}_{GSE} .

Beispiele

Eine Vielzahl von verschiedenen System besitzen die obig diskutierten Wahrscheinlichkeitsdichten, bspw.:

- 1. Integrable Systeme: Poissonverteilung
 - ▶ Rechteckbillard mit irrationalen Seitenverhältnissen
 - Kreisbillard
 - ► Wasserstoffatom im Magnetfeld bei Energien $\tilde{E} = E \gamma^{-2/3} < -0.5$
- 2. Systeme mit Zeitumkehrinvarianz [H, T] = 0 und $T^2 = 1$: GOE-Statistik
 - Stadion Billard
 - Sinai Billard (siehe Abbildung 29)
 - ► Wasserstoffatom im Magnetfeld bei Energien $\tilde{E} = -0.13 < E \gamma^{-2/3} < 0$
- 3. Systeme ohne Zeitumkehrivarianz: GUE-Statistik
 - Mikrowellenresonator mit magnetisierten Ferritstreifen
 - Rydberg Exzitonen in starken Magnetfeldern

Mathematisches Modell: Nullstellen der Riemannschen Zetafunktion

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = \prod_{\text{Primzahlen } p} \underbrace{\left(\sum_{m=0}^{\infty} p^{ms}\right)}_{(1-p^{-s})^{-1}}$$

Die Zetafunktion hat folgende Eigenschaften:

- Einfacher Pol bei s = 1 (harmonische Reihe)
- ► Triviale Nullstellen bei s = -2, -4, -6, ...



▶ 29 Spektrale Analyse des Sinai-Billard und GOE-Statistik. Zum Vergleich ist auch die Poisson-Statistik eingezeichnet. Von [3].

- ▶ Nichttriviale Nullstellen im Streifen 0 < Re s < 1
- Riemannsche Vermutung: Re s = 1/2 für alle nichttrivialen Nullstellen

Mit der Substitution s = 1/2 - ix folgt für die Zetafunktion

$$\zeta(x) = \prod_{p} \left(1 - p^{\mathrm{i}x - \frac{1}{2}}\right)^{-1}$$

Man erkennt hierbei eine Analogie zur dynamischen Zetafunktion

$$\zeta(E) = \prod_{\rm PO} (1 - t_{\rm PO}(E))$$

Die Dichte der Nullstellen der Zetafunktion kann nun berechnet werden.

$$\varrho(x) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \ln \zeta(x)$$

$$= \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \sum_{p} \ln\left(1 - p^{\mathrm{i}x - \frac{1}{2}}\right)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \sum_{p} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} p^{m(\mathrm{i}x - \frac{1}{2})}$$

$$= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \sum_{p} \sum_{m=1}^{\infty} \underbrace{i \frac{\ln p}{p^{m/2}}}_{A_{p}} \exp(i \underbrace{m \ln(p) x}_{S_{p}(x)})$$

Hier erkennt man die formale Analogie zur Gutzwiller-Spurformel mit Bahnparametern A_p und $S_p(x)$ gegeben durch Primzahlen p. Bisher ist jedoch kein physikalisches System bekannt, dessen Wirkung durch Primzahlen wiedergegeben wird. Allgemein wird vermutet, dass die Nullstellen sich asymptotisch so verhalten, wie ein GUE-Ensemble der Random-Matrix-Theorie.

Es bleibt jedoch eine offene Frage: Kann ein hermitescher Operator ohne Zeitumkehrinvarianz (bzw. keine Vertauschung mit antiunitären Operatoren) gefunden werden, sodass die Eigenwerte die Riemannschen-Nullstellen wiedergeben.
3.3 Weitere Methoden

Die Nächste-Nachbar-Verteilung beschreibt die lokalen Korrelationen im Spektrum. Weitere Funktionen beschreiben auch mehr global die Fluktuationen und lassen sich mit Aussagen der Random-Matrix-Theorie vergleichen.

3.3.1 Number Variance

Für ein entfaltetes Spektrum, lässt sich der Mittelwert für die Anzahl der Zustände im Intervall [E - L/2, E + L/2] beschreiben durch

$$\left\langle \int_{E-L/2}^{E+L/2} \varrho(E') \, \mathrm{d}E' \right\rangle_E = L$$

Eine charakteristische Größe für die Fluktuationen im Spektrum ist die Varianz der Anzahl der Zustände, sie wird auch *Number Variance* genannt.

$$\Sigma^{2}(L) = \left\langle \left(\int_{E-L/2}^{E+L/2} \varrho(E') \, \mathrm{d}E' - L \right)^{2} \right\rangle_{E}$$

Sie gibt somit die Fluktuationen um L an. Für den Poisson-Prozess, bzw. Random-Matrix-Theorie ergibt sich:

$$\Sigma^{2}(L) = \begin{cases} L &, \text{Poisson} \\ \frac{1}{\pi^{2}} \left[\ln(2\pi L) + \gamma + 1 - \frac{\pi^{2}}{8} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) &, \text{GOE} \\ \frac{1}{\pi^{2}} \left[\ln(2\pi L) + \gamma + 1 \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) &, \text{GUE} \\ \frac{1}{2\pi^{2}} \left[\ln(4\pi L) + \gamma + 1 + \frac{\pi^{2}}{8} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) &, \text{GSE} \end{cases}$$

Dabei ist γ die Euler-Konstante

$$\gamma = \lim_{n \to \infty} \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} - \ln(n) \approx 0.57722$$

Bei der Poisson-Verteilung sind die Fluktuationen der Anzahl der Zustände am Mittelwert *L* gleich \sqrt{L} . Für reguläre, bzw. chaotische Systeme muss für eine Übereinstimmung mit der Number Variance die Länge *L* so gewählt werden, dass *L* nicht zu klein ist, aber auch nicht zu groß $L < \frac{\hbar}{T_{PO}}$, wobei T_{PO} die Periode der kleinsten periodischen Bahn ist.

3.3.2 Spektrale Steifheit

Neben der Number Variance gibt es auch noch weitere (ähnliche) Größen zur Charakterisierung der Fluktuationen. Ein Beispiel ist hierbei die *spektrale Steifheit* (englisch *spectral rigidity*). Sie ist definiert durch

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{L} \left\langle \min\{a,b\} \int_{E-L/2}^{E+L/2} \mathrm{d}\tilde{E} \left[\int_{E_0}^{\tilde{E}} \varrho(E') \, \mathrm{d}E' - (a+b\tilde{E}) \right]^2 \right\rangle_E$$

2015-07-23



▶ 30 Spektrale Analyse des Sinai-Billard und GOE-Vorhersage für die spektrale Steifheit. Zum Vergleich ist auch die Poisson-Vorhersage eingezeichnet. Von [3].

und entspricht einem Vergleich mit einer Geraden mit Steigung und Konstante *a*, *b*. Für den Poisson-Prozess, bzw. der Random-Matrix-Theorie ergibt sich:

$$\Delta_{3}(L) = \begin{cases} L/15 &, \text{Poisson} \\ \frac{1}{\pi^{2}} \left[\ln(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} - \frac{\pi^{2}}{8} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) &, \text{GOE} \\ \frac{1}{\pi^{2}} \left[\ln(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) &, \text{GUE} \\ \frac{1}{2\pi^{2}} \left[\ln(4\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} + \frac{\pi^{2}}{8} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) &, \text{GSE} \end{cases}$$

Die Ergebnisse ähneln dabei denen der Number Variance. Für das Sinai-Billard ist die spektrale Steifheit in Abbildung 30 zu sehen.



Im Unterschied zur Minkowski-Dimension (im Skript als Hausdorff-Dimension bezeichnet) beschränkt sich die Hausdorff-Dimension nicht auf endliche Überdeckungen, wodurch die beiden Größen im Allgemeinen nicht gleich sind. Allerdings stimmen sie in den relevanten Fällen oft überein, weswegen die Minkowski-Dimension oft zur numerischen Approximation der Hausdorff-Dimension verwendet wird.

Wir folgen bei der Behandlung der Hausdorff-Dimension der Herangehensweise in [4]. Den Ausgangspunkt für die Definition des Hausdorff-Dimension bildet dabei das *d*-Dimensionale Hausdorff-Maß.

Definition *Es sei* $E \subseteq \mathbb{R}^n$, $\delta > 0$ *und* s > 0. *Dann definieren wir*

$$\mathcal{H}_{\delta,s}(E) = \inf_{\beta(\delta)} \sum_{U \in \beta(\epsilon)} d(U)^s$$
,

wobei das Infimum über alle abzählbaren Überdeckungen $\beta(\delta) \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ von E mit $d(U) \leq \delta$ für alle $U \in \beta(\delta)$ genommen wird. Dabei ist $d(U) = \sup \{|x - y| : x, y \in U\}$. Das s-dimensionale Hausdorff-Ma β von E ist dann definiert als

Für jedes $\delta > 0$ ist $\beta_Q = \{B_{\delta}(q) : q \in \mathbb{Q}^n\}$ eine abzählbare Überdeckung von \mathbb{R}^n , es existiert also insbesondere immer eine Überdeckung $\beta(\delta)$ wie in der Definition verwendet.

Nach Definition ist $d(U) \ge 0 \ \forall U \subseteq \mathbb{R}^n$, da immer mindestens eine Überdeckung existiert, die den Anforderungen der Definition genügt, ist

$$\forall E \in \mathbb{R}^n, s \ge 0, \delta > 0 : \mathcal{H}_{\delta,s}(E) \ge 0.$$

Beachte, dass $\mathcal{H}_{\delta,s}(E)$ nicht endlich sein muss.

Zudem ist $\mathcal{H}_{\delta,s}(E)$ monoton fallend bezüglich δ , da für $\delta' \geq \delta$ jede Überdeckung $\beta(\delta)$ auch eine Überdeckung $\beta(\delta')$ ist. Damit existiert der Grenzwert und das Hausdorff-Maß ist wohldefiniert.

Bemerkung: Das Hausdorff-Maß stellt ein äußeres Maß dar. Für eine Behandlung der Maßtheoretischen Eigenschaften von \mathcal{H}_s , siehe [5].

Anhand des Hausdorff-Maßes kann nun die Hausdorff-Dimension eingeführt werden. Dies wird durch den folgenden Satz gewährt.

Theorem Für jede Menge $E \in \mathbb{R}^n$ existiert ein eindeutiges $s_0(E) \in [0, \infty)$ für welches gilt:

$$\mathcal{H}_{s}(E) = \begin{cases} 0 & , s > s_{0}(E) \\ \infty & , s < s_{0}(E) \end{cases}$$

Die Zahl $s_0(E)$ *heißt Hausdorff-Dimension von E.*

BEWEIS Es sei

 $s_0 = \inf \left\{ s \ge 0 : \mathcal{H}_s(E) = 0 \right\},\$

insbesondere ist $\mathcal{H}_s(E) > 0$ für alle $s < s_0$. Sei $\delta, r > 0$ und β eine Überdeckung von E so dass $d(U) < \delta$ für alle $U \in \beta$, dann ist

$$\sum_{U\in\beta} d(U)^{s+r} \le \delta^r \sum_{U\in\beta} d(U)^s.$$
(A.1)

Und damit auch

$$\mathcal{H}_{\delta,s+r}(E) \leq \delta^r \mathcal{H}_{\delta,s}(E) \,.$$

Im Grenzwert $\delta \rightarrow 0$ liefert dies

$$0 \le \mathcal{H}_{s+r}(E) \le \lim_{\delta \to 0} \delta^r \mathcal{H}_{\delta,s}(E) \,. \tag{A.2}$$

Falls also $\mathcal{H}_s(E) < \infty$ ist, so ist $\mathcal{H}_{s+r}(E) = 0$ für alle r > 0. Damit erfüllt s_0 dann $\mathcal{H}_s(E) = 0 \Rightarrow s \ge s_0$ und $s > s_0 \Rightarrow \mathcal{H}_s(E) = 0$, da für jedes $s > s_0$ ein $s_0 \le s' < s$ exisitert so dass $\mathcal{H}_{s'}(E) = 0$ ist.

Angenommen, es exisitert ein $s < s_0$ sodass $\mathcal{H}_s(E) < \infty$ ist, so folgt dann, dass auch

$$\mathcal{H}_{\frac{s+s_0}{2}}(E)=0,$$

was im Widerspruch zur Definition von s_0 steht. Also gilt auch

$$s < s_0 \Rightarrow \mathcal{H}_s(E) = \infty,$$

womit die Behauptung folgt.

Bemerkung: Es gibt Mengen mit Hausdorff-Dimension 0, zum Beispiel abzählbare Mengen, nicht aber mit Hausdorff-Dimension ∞ . Dies wird hier nicht explizit gezeigt, es gilt aber $\mathcal{H}_s(E) = 0$ für alle $E \in \mathbb{R}^n$ falls s > n ist.

 \bowtie



Ausgehend von den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen in symplektischer Formulierung können wir die Monodromiematrix berechnen. Die Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{\boldsymbol{y}} = \mathcal{J} \nabla_{\boldsymbol{y}} H,$$

wobei $\gamma = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})^T$ der der Phasenraumvektor ist. Linearisierung der Bewegungsgleichungen ergibt

$$\begin{split} \dot{\boldsymbol{y}} &= \nabla_{\boldsymbol{y}} \otimes \mathcal{J} \left(\nabla_{\boldsymbol{y}} H \right) \big|_{\boldsymbol{y}_0} \boldsymbol{y} \\ &= \mathcal{J} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{y} \partial \boldsymbol{y}} \Big|_{\boldsymbol{y}_0}, \end{split}$$

wobe
i \otimes das dyadische Produkt bezeichnet. Mittels Integration erhalten wir dann die linearisierte Lösung

$$\boldsymbol{\gamma}_{\text{Lin}} = \int_0^T \mathrm{d}t \mathcal{J} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\gamma} \partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}_0}$$

Beachte, dass wir für $\pmb{\gamma}_0$ alle linear unabhängigen Vektoren betrachten müssen, d.h. $\pmb{\gamma}_0$ nimmt die Vektoren

	(1)		$\langle 0 \rangle$		$\langle 0 \rangle$	
	0		1			
$\boldsymbol{\gamma}_0 =$,	0	,,	:	
	:				0	ĺ
	(0)		(:/		(1)	

an. Somit erhalten wir $\gamma_{\text{Lin},i}$ Lösungen (*i* entspricht der Anzahl an linear unabhängigen Vektoren). Die Monodromiematrix setzt sich dann aus den Lösungen zusammen

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_{\mathrm{Lin},1} & \boldsymbol{y}_{\mathrm{Lin},2} & \dots & \boldsymbol{y}_{\mathrm{Lin},i} \end{pmatrix}.$$

Index

— **A** — Attraktor, 17

— B —

Bernoulli-Verschiebung, 8 Berry-Tabor-Formel, 80 Berry-Tabor-Formel für integrable Systeme, 78 Bifurkation, 65

C –
 Cauchy Hauptwert, 82
 Chaos, 1

 deterministisch, 1
 nicht deterministisch, 1

— E — EBK-Quantisierung, 76 EKB-Quantisierung, 76

— F — Farey-Baumes, 36 Feigenbaumkonstante, 11 Fibonacci-Zahlen, 37 Fraktal, 17 fraktale Dimension, 17

— G — Gaußsche orthogonale Ensemble, 97 Gaußsche symplektische Ensemble, 102 Gaußsche unitäre Ensemble, 100 goldener Schnitt, 37 Greenscher Operator, 81

— H — Hausdorffdimension, 18 Heugabelbifurkation, 11 Hopf-Bifurkation, 33

Gutzwiller-Spurformel, 87

— I — Intermittenz, 21 invariante Dichte, 9 invariante Maß, 9

— **J** — Julia-Mengen, 32

— K —

KAM-Theorem, 53 klassische Störungstheorie, 50 Kolmogorov-Entropie, 27 Kontinuitätsgleichung, 5 Korrelationsdimension, 29f. Korrelationssignal, 30

— L —

Liapunovexponent, 9 Logistische Abbildung, 10 Lorenz-Modell, 6

— M — Maslov-Index, 70, 72 Monodromiematrix, 63

— N — Navier-Stokes-Gleichung, 4 Number Variance, 105

— P —

periodic orbit theory, 76 Pfadintegraldarstellung, 83 Pincaré-Schnitt, 47 Poincaré-Birkhoff-Theorem, 56 Poissonsche Summenformel, 76

— Q — Quantenmechanischer Propagator, 82

— **R** — Riemannschen Zetafunktion, 91

— **S** seltsamer Attraktor, 24 spektrale Steifheit, 105 Spurformel, 81 INDEX

Superkonvergenz, 12

- T -

Teufelstreppe, 36 Thomas-Fermi-Term, 77 Torusquantisierung, 68, 71

-v-

Van-Vleck-Formel, 83 Verallgemeinerte Dimension, 29 Verallgemeinerte Entropie, 29 Verallgemeinertes Korrelationssignal, 31

-w-

Wärmeleitungsgleichung, 5 Wignerverteilung, 100 Winkelvariable, 45 Wirkungsvariable, 45 WKB-Quantisierungsbedingung, 67

Literatur

- [1] H. G. Schuster und W. Just. *Deterministic chaos: an introduction*. John Wiley & Sons, 2006.
- [2] C. Dunkl, M. Ismail und R. Wong. Special Functions. Bd. 1. World Scientific, 2000.
- [3] O. Bohigas, M.-J. Giannoni und C. Schmit. "Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws". *Physical Review Letters* 52.1 (1984), S. 1.
- M. M. Dodson und S. Kristensen. "Hausdorff dimension and Diophantine approximation". *Fractal geometry and applications: a jubilee of Benoit Mandelbrot* Part 1 (2004), S. 305-347.
- [5] F. Hausdorff. "Dimension und äußeres Maß". Mathematische Annalen 79.1-2 (1918), S. 157-179.
- [6] V. I. Arnold, V. V. Kozlov und A. I. Neishtadt. *Mathematical aspects of classical and celestial mechanics*. Bd. 3. Springer Science & Business Media, 2007.
- [7] M. C. Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics*. Bd. 1. Springer Science & Business Media, 2013.
- [8] F. Haake. *Quantum signatures of chaos.* Bd. 54. Springer Science & Business Media, 2010.
- [9] A. J. Lichtenberg und M. A. Lieberman. *Regular and stochastic motion*. Bd. 38. Springer Science & Business Media, 2013.
- [10] E. Ott. *Chaos in dynamical systems*. Cambridge university press, 2002.
- [11] H.-J. Stöckmann. Quantum Chaos: An Introduction. Cambridge university press, 2006.
- [12] S. Wimberger. *Nonlinear Dynamics and Quantum Chaos: An Introduction*. Springer, 2014.
- [13] M. Brack und R. K. Bhaduri. Semiclassical physics. Bd. 96. Westview Press, 2003.