

Streuung an einem eindimensionalen,
zeitlich periodischen Potentialtopf

Diplomarbeit von
Peter Gerwinski

Essen, im November 1992

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
2	Klassische Beschreibung	7
2.1	Das System	7
2.2	Die POINCARÉ-Abbildung	12
2.3	Die Verweilzeit im Streuzentrum	14
3	Quantenmechanische Beschreibung	16
3.1	Der FLOQUET-Operator	16
3.2	Die Quasienergie-Darstellung der S-Matrix	24
3.3	Kopplung an quasigebundene Zustände	33
4	Beschreibung durch Phasenraumdichtefunktionen	38
4.1	Die WIGNER- und die HUSIMI-Darstellung	38
4.2	Tunneln in die Stabilitätsinsel	42
5	Ergänzungen und Ausblicke	47
5.1	Verallgemeinerung des Potentials	47
5.2	Abschwächung der Periodizitätsforderung	51
5.3	Der klassische Limes	53
5.4	Ein analytisch lösbares Modell	53

Abbildungsverzeichnis

1.1	Doppelpendel	4
2.1	Das Potential $V(x) = -1/\cosh^2 x$	7
2.2	Trajektorien in Abhängigkeit von p_{ein} für $\lambda = 1$, $x_{\text{ein}} = -4.9$	9
2.3	p_{aus} als Funktion von p_{ein} für $\lambda = 1$	10
2.4	p_{aus} als Funktion von p_{ein} für $\lambda = 3$	11
2.5	POINCARÉ-Schnitte	12
2.6	POINCARÉ-Schnitte bei Streuung	13
2.7	Verhalten der Verweilrate für große t bei $E = 0.1$	15
3.1	Zeitentwicklung im nicht resonanten Fall, Ortsdarstellung	20
3.2	Zeitentwicklung im nicht resonanten Fall, Impulsdarstellung	21
3.3	Zeitentwicklung im resonanten Fall, Ortsdarstellung	22
3.4	Zeitentwicklung im resonanten Fall, Impulsdarstellung	23
3.5	$S(\Theta)$ für $\lambda = 1$, – dynamische Resonanzen	28
3.6	$S(\Theta)$ für $\lambda = 3$, – ERICSON-Fluktuationen	29
3.7	Θ -Autokorrelationsfunktion des Reflexionskoeffizienten für $\lambda = 3$	30
3.8	Θ -Autokorrelationsfunktion des Reflexionskoeffizienten für $\lambda = 1$	31
3.9	Der Übergang zwischen $\lambda = 1$ und $\lambda = 3$	32
3.10	Vergleich von $S^-(\Theta)$ mit $E_k + n \cdot 2\pi\hbar$	34
3.11	Reflexionskoeffizient als Funktion von Θ und λ für $\hbar = 0.05$	35
3.12	Reflexionskoeffizient als Funktion von Θ und \hbar für $\lambda = 1$	36
4.1	HUSIMI-Funktion im nicht resonanten Fall	40
4.2	HUSIMI-Funktion im resonanten Fall	41
4.3	Tunneln in die Stabilitätsinsel bei $t = 60$	42
4.4	Vergleich von $S^-(\Theta)$ mit $I(\Theta)$ für $\lambda = 1$	43
4.5	Vergleich von $S^-(\Theta)$ mit $I(\Theta)$ für $\lambda = 0.5$	44
4.6	Vergleich von $I(\Theta)$ mit $E_k + n \cdot 2\pi\hbar$	45
4.7	I als Funktion von Θ und λ für $\hbar = 0.05$	46
4.8	I als Funktion von Θ und \hbar für $\lambda = 1$	46
5.1	Verschiedene verwendete Potentiale $V(x)$	48
5.2	Stabilitätsinsel und Reflexionskoeffizient für verschiedene α	49
5.3	Reflexionskoeffizient und Tunnelrate in Abhängigkeit von α	50
5.4	Stabilitätsinsel und Reflexionskoeffizient bei gestörter Periodizität	52

Kapitel 1

Einführung

Ein wichtiges Ziel der Physik war es immer, die Wirklichkeit durch ein mathematisches Modell zu beschreiben und auf diese Weise vorhersagbar zu machen. So war es von grundlegender Bedeutung, als Sir ISAAC NEWTON vor über 300 Jahren erkannte, daß die Himmelsmechanik und die erfaßbare Alltagswirklichkeit von denselben Naturgesetzen bestimmt werden [1]. Aus diesen Gesetzen hat sich inzwischen die *NEWTONsche* oder *klassische Mechanik* als eine in sich geschlossene Theorie entwickelt, innerhalb derer das Verhalten jedes physikalischen Systems durch Lösen eines Differentialgleichungssystems und Kenntnis eines Anfangszustandes im Prinzip für alle Zeiten vorhersagbar ist.

HENRI POINCARÉ war um 1890 der erste, der eine Grenze dieser Vorhersagbarkeit erkannte, nämlich die stets mit einem Fehler behaftete Kenntnis des Anfangszustandes (siehe z. B. [2, § 23]). Die auf den ersten Blick selbstverständlich erscheinende Annahme, daß ein kleiner Fehler auch nur kleine Abweichungen in der Vorhersage bewirken würde, erwies sich als unhaltbar: In den meisten Systemen kann es vorkommen, daß Fehler in den Anfangsbedingungen im Laufe der Zeit exponentiell anwachsen; die Wachstumsrate bezeichnet man als *LYAPUNOV-Exponent*. Auf diese Weise werden Vorhersagen nur für sehr kurze Zeiten möglich. Funktionen, die einen Anfangszustand auf einen Endzustand abbilden, sind in solchen Fällen *Fraktale*, das heißt, sie weisen auf beliebig kleinen Intervallen noch Strukturen auf. Die Abbildungen 2.3 und 2.4 zeigen solche Fraktale und illustrieren, daß nur für ganz bestimmte Anfangszustände des zugrundeliegenden physikalischen Vorgangs – Streuung an einem eindimensionalen, zeitlich periodischen Potentialtopf – sinnvolle Voraussagen des Endzustands möglich sind.

Ein System, das sich derartig verhält, bezeichnen wir als (*klassisch*) *chaotisch*; ein System, für welches – durch das Vorhandensein hinreichend vieler *Bewegungsintegrale* – chaotisches Verhalten von vorneherein ausgeschlossen werden kann, heißt *integrabel*. Ein typisches Beispiel für ein integrables System ist ein Pendel – ein *harmonischer Oszillator*. Das ausgesprochen regelmäßige Verhalten eines Pendels ist seit Jahrhunderten Voraussetzung für den Bau von Pendeluhren. Wenn wir allerdings ein Pendel an einem anderen Pendel befestigen, erhalten wir bereits ein chaotisches System, ein sogenanntes *Doppelpendel*. Wenn ein Doppelpendel in geeigneter Weise angestoßen wird, beschreibt das Ende eine sehr unregelmäßige und nicht exakt vorhersagbare Bahn.

Mittlerweile haben genauere experimentelle Befunde gezeigt, daß die klassische Me-

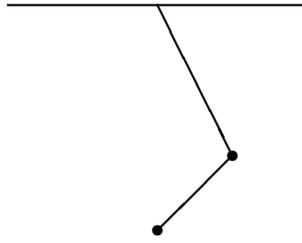


Abbildung 1.1: Doppelpendel

chanik die Wirklichkeit nur unvollkommen abbildet: In der Welt der Atome und Elementarteilchen zum Beispiel scheinen ganz andere Naturgesetze zu herrschen. So verliert etwa die einfache Aussage, daß sich ein Teilchen an einem ganz bestimmten Ort befindet, in diesem Zusammenhang ihre Bedeutung, da Ort und Impuls nicht gleichzeitig als exakte Werte existieren; stattdessen sind beide Größen bereits von der Natur mit Fehlern ausgestattet, deren Produkt stets größer oder gleich einer Naturkonstanten ist, nämlich der Hälfte des *PLANCKschen Wirkungsquantums* \hbar . Diese sog. *HEISENBERGsche Unschärferelation* hat nur deswegen keine unmittelbaren Auswirkungen auf unseren Alltag, weil \hbar sehr klein ist. Prinzipiell gilt jedoch: Ein ruhendes Teilchen (mit dem scharf definierten Impuls Null) *hat keinen Ort*, sondern es verteilt sich gleichmäßig über den gesamten Raum, und umgekehrt hat ein Teilchen, das sich an einem scharf definierten Ort befindet, *keine Geschwindigkeit* – oder jede Geschwindigkeit gleichzeitig.

Das Problem des Zusammenhangs zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik ist bis heute noch nicht vollständig gelöst. Insbesondere bestehen Schwierigkeiten bei der Übertragung des klassischen Konzepts des Chaos in die Quantentheorie.

Seit längerer Zeit sind quantenmechanische Phänomene bekannt, die die Bezeichnung „chaotisch“ rechtfertigen können: In bestimmten atomaren Streusystemen kann es vorkommen, daß die Elemente der *S-Matrix* in einer charakteristischen, aber unvorhersagbaren Weise fluktuieren (siehe Abb. 3.6). Dieses Phänomen bezeichnet man als *ERICSON-Fluktuationen* [3, 4]. Zur Behandlung von solchen „chaotischen“ Matrizen wurde die *Zufallsmatrix-Theorie* entwickelt [5, Kap. 4].

Die Entdeckung irregulären Verhaltens in quantenmechanischen Systemen allein genügt jedoch nicht, um das Problem der Charakterisierung eines *Quantenchaos* zu lösen. Was fehlt, ist der Übergang zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Beschreibung desselben chaotischen Systems. Gesucht werden quantenmechanische Eigenschaften eines Systems, anhand derer es sich als klassisch chaotisch bzw. nicht chaotisch ausweist.

In dieser Arbeit soll eine Korrespondenz zwischen einer rein klassischen und einer rein quantenmechanischen Eigenschaft analytisch begründet und numerisch nachgewiesen werden. Das zugrundeliegende System ist ein eindimensionales *Streusystem*, das unter bestimmten Voraussetzungen chaotisches Verhalten aufweist. Ein solches Verhalten bezeichnet man als *irreguläre Streuung*.

Die Betrachtung des exponentiellen Anwachsens von Fehlern über einen langen Zeit-

raum hinweg ist nur für solche Systeme sinnvoll, die auch über einen langen Zeitraum hinweg beobachtet werden können. In *Streusystemen* hingegen betrachtet man ein Teilchen, das sich zunächst auf ein Streuzentrum – hier: einen zeitlich periodischen Potentialtopf – zubewegt, dort gestreut wird und nach einer gewissen Zeit das Streuzentrum wieder verläßt. Man kann zeigen, daß für solche *endlichen* Wechselwirkungszeiten der Endzustand stetig vom Anfangszustand abhängen muß. Aus diesem Grunde war man bis 1986 der Ansicht, daß der Begriff des Chaos nur für *gebundene* Systeme einen Sinn ergäbe, in denen das Teilchen stets der Wechselwirkung ausgesetzt bleibt. Dann jedoch stellten B. ECKHARDT und C. JUNG fest, daß in bestimmten Streusystemen beliebig lange Verweilzeiten im Streuzentrum vorkommen können, so daß eine empfindliche Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen wie in gebundenen Systemen wieder möglich wird, und sie definierten auf diese Weise erstmalig den Begriff der *irregulären Streuung* [6].

1988 stellten R. BLÜMEL und U. SMILANSKY einen Zusammenhang zwischen klassischer irregulärer Streuung und gewissen quantenmechanischen Eigenschaften eines Streusystems fest [7, 8]: mit semiklassischen Argumenten konnten R. BLÜMEL und U. SMILANSKY die ERICSON-Fluktuationen aus dem Verhalten der Verweilzeit eines klassischen Partikels im Streuzentrum herleiten. Sie bezeichneten die ERICSON-Fluktuationen als einen „Fingerabdruck“ des klassischen Chaos in der quantenmechanischen Beschreibung“ [8]. In den gleichen Arbeiten wiesen sie nach, daß die S-Matrix eines klassisch chaotischen Streusystems eine Zufallsmatrix aus dem *DYSONSchen orthogonalen Ensemble* ist.

Die in den oben erwähnten und in weiteren Arbeiten [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16] betrachteten Systeme haben gemeinsam, daß das klassische Chaos vollständig ist, d. h. es existiert kein Bereich im *Phasenraum*, in dem sich das System noch regulär verhält. Man erkennt diese Eigenschaft auch daran, daß die Verweilrate im Streuzentrum exponentiell abfällt [16]. Erst in neuester Zeit werden auch Systeme betrachtet, bei denen noch *Stabilitätsbereiche* im Phasenraum existieren und demzufolge die Verweilrate nur algebraisch abfällt [17, 18], wobei allerdings Aussagen über den vollständig chaotischen Fall im Vordergrund stehen.

Eine weitere Gemeinsamkeit aller o. a. Arbeiten ist, daß sie Systeme mit zwei Freiheitsgraden und einem zeitunabhängigen Potential behandeln. Diese Vereinfachungen gegenüber einem „realistischen“ System sind notwendig, um eine numerische Berechnung des Systems überhaupt möglich zu machen.

Das in dieser Arbeit betrachtete System ist ein Streusystem mit nur einem Freiheitsgrad und einem zeitlich periodischen Potential. Damit nehmen wir auf der einen Seite eine weitere Vereinfachung, auf der anderen Seite eine Verallgemeinerung vor und beleuchten somit andere Teilaspekte der Wirklichkeit als bisherige Arbeiten.

Ziel dieser Arbeit ist es, auch für den klassisch nicht vollständig chaotischen Fall einen quantenmechanischen „Fingerabdruck“ zu finden und den physikalischen Mechanismus zu untersuchen, durch den er zustandekommt.

In Kapitel 2 werden einige grundlegende klassische Eigenschaften des Systems und die numerische Vorgehensweise vorgestellt. Die empfindliche Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen – das Kriterium für irreguläre Streuung – wird überprüft. Speziell wird numerisch gezeigt, daß der Ausgangsimpuls p_{aus} als Funktion des Eingangsimpulses p_{ein} ein Fraktal ist. Es wird die für uns wesentliche Eigenschaft des Systems vorgestellt, daß in

Abhängigkeit von einem Parameter λ entweder eine *Stabilitätsinsel* im Phasenraum oder vollständiges Chaos vorliegt. Das exponentielle bzw. algebraische Abfallen der Verweilrate im Streuzentrum für lange Zeiten, anhand dessen sich beide Fälle unterscheiden lassen, wird numerisch überprüft.

Für beide Fälle wird in Kapitel 3 eine quantenmechanische Untersuchung durchgeführt. Für den vollständig chaotischen Fall wird die Aussage von R. BLÜMEL und U. SMILANSKY, daß die Reflexionskoeffizienten ERICSON-Fluktuationen aufweisen, für unser zeitabhängiges System bestätigt. Für den Fall mit einer Stabilitätsinsel werden die von P. ŠEBA entdeckten *dynamischen Resonanzen* [19, 20], eine regelmäßige Struktur von Maxima in den Reflexionskoeffizienten, nachgewiesen. In erster Ordnung Störungstheorie wird eine Formel hergeleitet, welche die relative Lage der Maxima und ihre Abhängigkeit von λ und \hbar richtig vorhersagt.

In Kapitel 4 wird mit Hilfe der quantenmechanischen Phasenraumdichtefunktion nach K. HUSIMI [21] ein unmittelbarer Zusammenhang zwischen dem Vorhandensein der Stabilitätsinsel und dem Auftreten der dynamischen Resonanzen numerisch belegt. Es wird gezeigt, daß es sich bei dem physikalischen Mechanismus, der zu den dynamischen Resonanzen führt, um ein „Tunneln“ der Wellenfunktion im Phasenraum zwischen der Stabilitätsinsel und dem chaotischen Bereich handelt.

In Kapitel 5 schließlich werden Verallgemeinerungen vorgenommen, die der besseren Übersicht halber in den vorherigen Kapiteln unerwähnt blieben. Des weiteren werden offene Fragen und Ansätze zur Weiterführung der Untersuchungen diskutiert.

Kapitel 2

Klassische Beschreibung

2.1 Das System

In dieser Arbeit betrachten wir ein System, das durch die folgende HAMILTONfunktion beschrieben wird:

$$H(p, x, t) = \frac{1}{2}p^2 + \lambda V(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n) \quad (2.1)$$

mit dem Potential

$$V(x) = -\frac{1}{\cosh^2 x}. \quad (2.2)$$

Es handelt sich um ein Teilchen der Masse 1, das sich entlang einer eindimensionalen Schiene bewegen kann. In zeitlich periodischen Abständen erfährt das Teilchen einen Kraftstoß, einen *Kick*, dessen Stärke und Richtung vom Ort abhängen. Ein derartiger Kick wird durch ein zeitabhängiges Potential der Gestalt $V(x) \cdot \delta(t)$ beschrieben. Wir wollen $V(x)$ unverändert lassen und führen daher die *Kickstärke* λ als einen reellen Vorfaktor zu $V(x)$ in die Gleichung ein. Die Kickperiode kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf eins gesetzt werden.

Das Potential $V(x)$ ist attraktiv:

$$V(x) \leq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad (2.3)$$

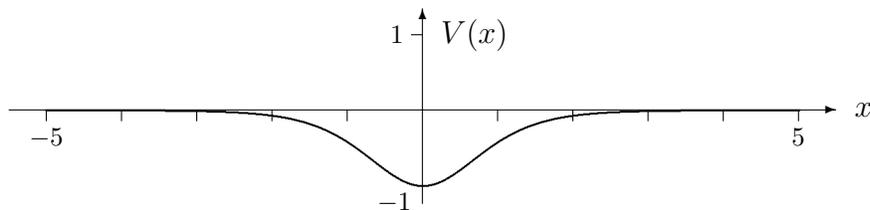


Abbildung 2.1: Das Potential $V(x) = -1/\cosh^2 x$

symmetrisch zum Nullpunkt:

$$V(x) = V(-x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.4)$$

und kurzreichweitig:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^n V(x) = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (2.5)$$

Die Eigenschaft der Kurzreichweitigkeit erlaubt es uns, in „weiter Entfernung“ vom Nullpunkt das Potential zu vernachlässigen. Wir können daher ein- und auslaufende Teilchen als freie Teilchen mit konstantem Impuls p_{ein} bzw. p_{aus} behandeln. Genaugenommen definieren wir p_{ein} und p_{aus} als die asymptotischen Impulse für $t \rightarrow \pm\infty$:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |p(t) - p_{\text{ein}}| = 0, \quad (2.6)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |p(t) - p_{\text{aus}}| = 0. \quad (2.7)$$

Es ist weiterhin nützlich, eine asymptotische Anfangs- und End-Ortskoordinate zu definieren:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |x(t) - (x_{\text{ein}} + t \cdot p_{\text{ein}})| = 0, \quad (2.8)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |x(t) - (x_{\text{aus}} + t \cdot p_{\text{aus}})| = 0. \quad (2.9)$$

x_{aus} ist demnach der Ort, an dem ein freies Teilchen zur Zeit $t = 0$ gestartet worden sein müßte, damit es für $t \rightarrow \infty$ die gleiche Bewegung vollführt wie das gestreute Teilchen. Analog ist x_{ein} der Ort, an dem das Teilchen zur Zeit $t = 0$ bei Abwesenheit des Potentials eintreffen würde.

Wegen der Zeitabhängigkeit des Potentials sind x_{ein} und x_{aus} zur vollständigen Beschreibung des Anfangs- bzw. Endzustandes notwendig. Aufgrund der Zeitperiodizität ist jedoch x_{ein} äquivalent zu $x_{\text{ein}} + np_{\text{ein}}$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Es genügt daher für festgehaltenes p_{ein} , sich bei Untersuchungen des Systems auf ein Intervall $[x_{\text{ein}}, x_{\text{ein}} + p_{\text{ein}})$ zu beschränken.

Das Verhalten eines Teilchens mit der HAMILTONfunktion 2.1 läßt sich folgendermaßen beschreiben: Zwischen zwei Kicks handelt es sich um ein freies Teilchen, das sich mit konstantem Impuls bewegt; „während“ des – unendlich kurzen – Kicks ändert sich der Impuls schlagartig, ohne daß das Teilchen die Zeit hätte, seinen Ort zu verändern. Es bietet sich daher an, das System zu den ausgezeichneten Zeitpunkten jeweils unmittelbar vor dem n -ten Kick zu betrachten. Wenn wir mit x_n und p_n den Ort bzw. den Impuls des Teilchens vor dem n -ten Kick bezeichnen, wird die Dynamik des Systems durch die folgende Abbildung beschrieben:

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - \lambda V'(x_n), \\ x_{n+1} &= x_n + p_{n+1}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die Trajektorie eines Teilchens mit Anfangskoordinate $x_{\text{ein}} = x_0$ und Anfangsimpuls $p_{\text{ein}} = p_0$ erhalten wir, indem wir für $n \in \mathbb{N}_0$ iterativ die folgenden Schritte ausführen:

1. Wir berechnen p_{n+1} und tragen die Strecke $(x_n, p_n) - (x_n, p_{n+1})$ in das Phasenraumdiagramm ein.
2. Wir berechnen x_{n+1} und tragen die Strecke $(x_n, p_{n+1}) - (x_{n+1}, p_{n+1})$ ebenfalls ein.

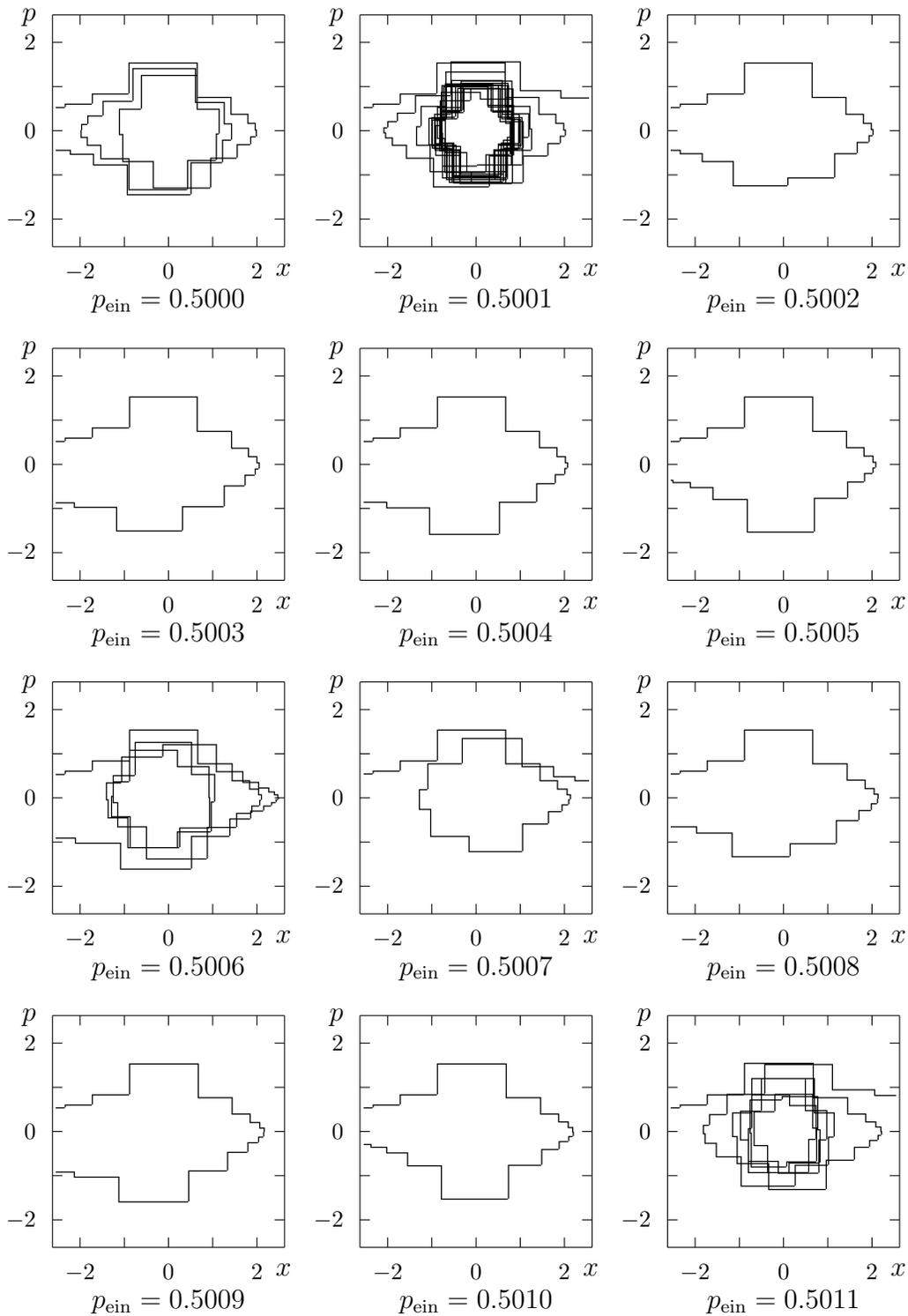


Abbildung 2.2: Trajektorien in Abhängigkeit von p_{ein} für $\lambda = 1$, $x_{\text{ein}} = -4.9$. Bereits kleinste Änderungen des Anfangsimpulses p_{ein} bewirken ein völlig unterschiedliches Verhalten des gestreuten Partikels. Dies ist das Kriterium für irreguläre Streuung.

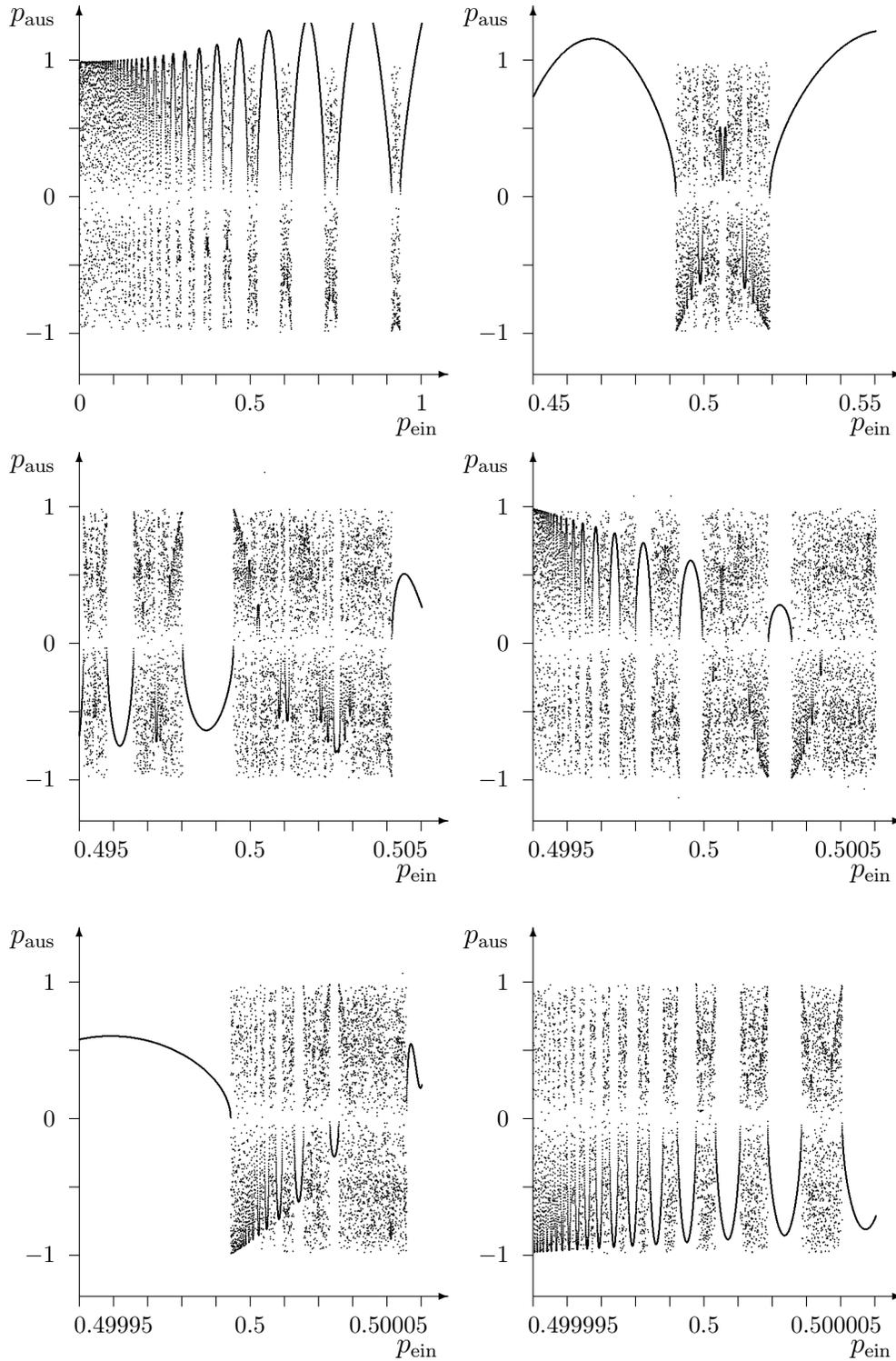


Abbildung 2.3: p_{aus} als Funktion von p_{ein} für $\lambda = 1$

Jedes Diagramm stellt jeweils die 10-fache Ausschnittsvergrößerung des vorhergehenden dar. Die Funktion ist ein Fraktal: Trotz der Vergrößerung werden die Strukturen nicht zu einer klaren Linie, sondern es treten immer feinere Strukturen zutage.

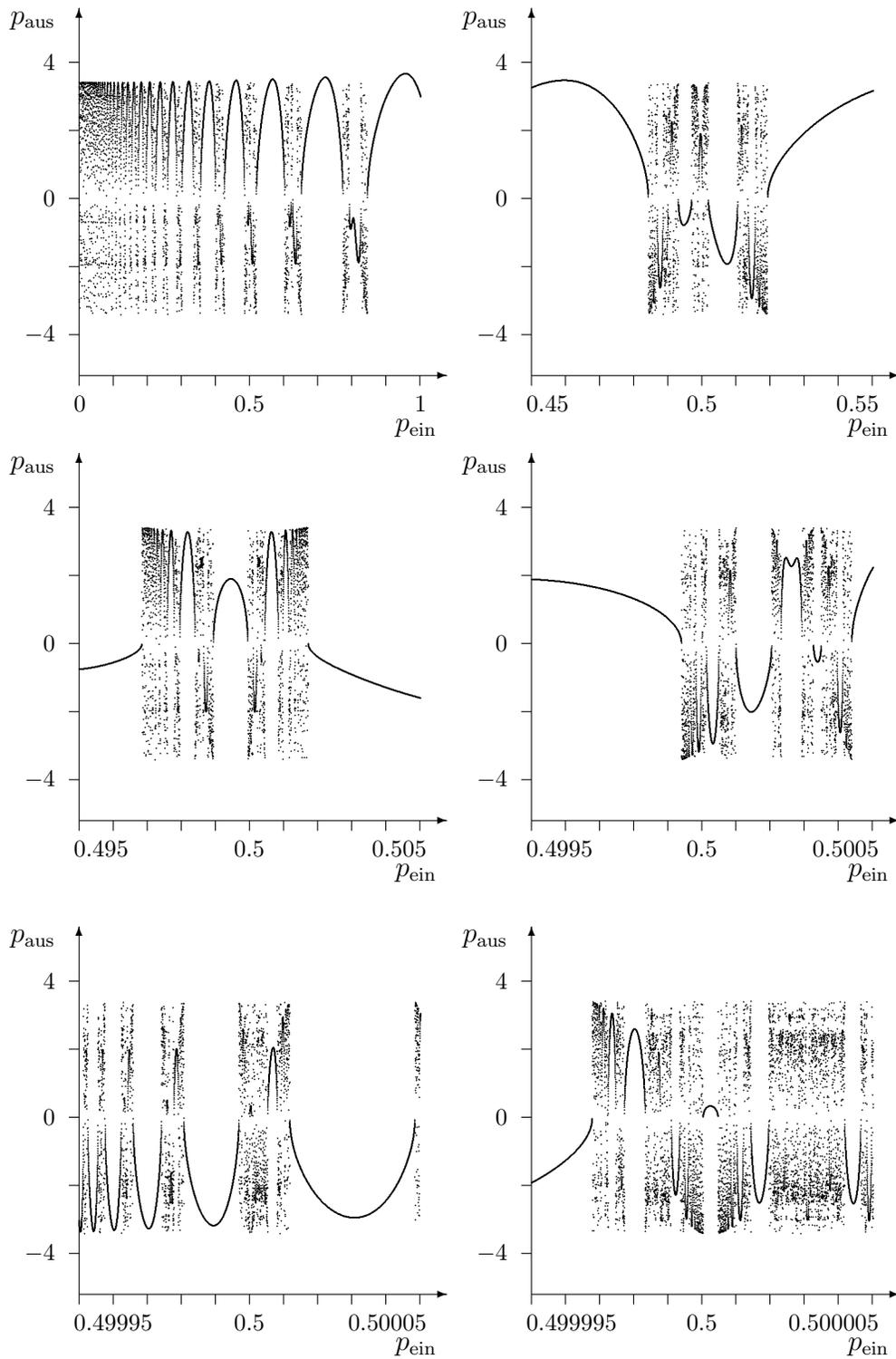


Abbildung 2.4: p_{aus} als Funktion von p_{ein} für $\lambda = 3$

Jedes Diagramm stellt wiederum eine 10-fache Ausschnittvergrößerung des vorhergehenden dar, und die Struktur ist fraktal.

Wir können die Iteration beenden, sobald sich das Teilchen wieder in einem kräftefreien Bereich befindet und vom Streuzentrum weg bewegt.

Abb. 2.2 zeigt auf diese Weise berechnete Trajektorien des Systems für unterschiedliche Anfangsimpulse p_{ein} bei festgehaltener Anfangskoordinate $x_{\text{ein}} = -5$. Es fällt auf, daß bereits kleinste Änderungen des Anfangsimpulses ein völlig unterschiedliches Verhalten des Systems bewirken. Dies ist das von B. ECKHARDT und C. JUNG im Jahre 1986 aufgestellte Kriterium für *irreguläre Streuung* [6].

Wir können dieses anschaulich unterschiedliche Verhalten quantitativ beschreiben, indem wir z. B. den Impuls p_{aus} des auslaufenden Teilchens als Funktion des Impulses p_{ein} des einlaufenden Teilchens bei festgehaltener Anfangskoordinate x_{ein} auftragen. Diese Funktion ist fraktal, d. h. sie weist bei beliebiger Vergrößerung noch Strukturen auf. Abb. 2.3 und 2.4 zeigen den Graphen der Funktion für $\lambda = 1$ bzw. $\lambda = 3$ auf immer kleiner werdenden Intervallen; ein Diagramm stellt jeweils einen Ausschnitt des vorhergehenden in zehnfacher Vergrößerung dar. Man kann sich gut vorstellen, daß sich die Strukturen bis zu unendlicher Vergrößerung fortsetzen.

2.2 Die POINCARÉ-Abbildung

Die Gleichungen 2.10 beschreiben eine Abbildung, die einen Punkt (x_n, p_n) im Phasenraum auf den nächsten Punkt (x_{n+1}, p_{n+1}) eine Periode später abbildet. Um einen Überblick über die Eigenschaften dieser Abbildung zu erhalten, insbesondere die Stabilität von Trajektorien mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen (x_0, p_0) , können wir die Abbildung auf viele Teilchen mit zufällig gewählten Anfangsbedingungen iterativ anwenden und die erhaltenen Punkte in ein Phasenraumdiagramm eintragen. Wir erhalten einen Graphen (Abb. 2.5), der wie ein POINCARÉ-Schnitt aussieht.

In der Tat können wir den Phasenraum als POINCARÉ-Schnitt in einen erweiterten Phasenraum einbetten, indem wir den Zeitpunkt innerhalb einer Periode als neue Winkelva-

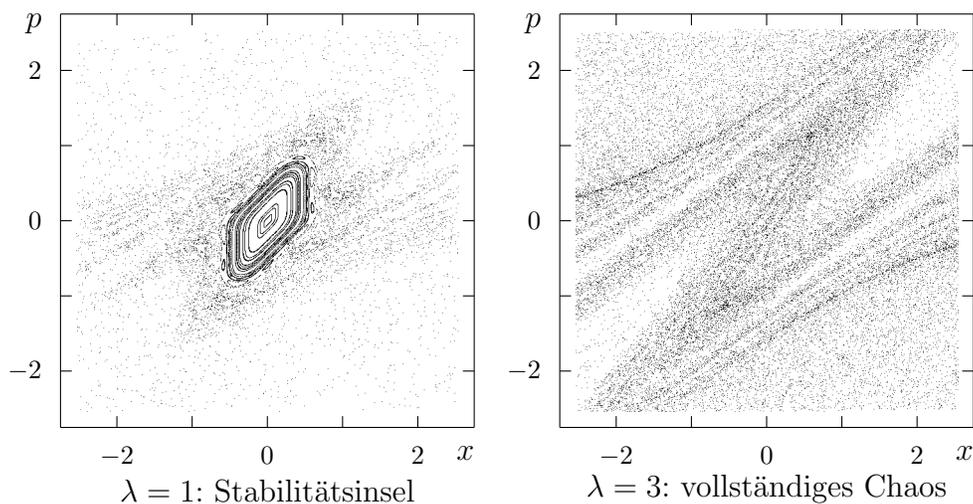


Abbildung 2.5: POINCARÉ-Schnitte

riable einführen, wie es von K. YAJIMA [22] und J. S. HOWLAND [23] allgemein durchgeführt wurde. Das Potential hängt dann nur noch von dieser Winkelvariablen ab und nicht mehr von der formalen Zeit. Das System wird so zu einem zweidimensionalen, zeitunabhängigen Streusystem, dessen Phasenraum ein vierdimensionaler Torus ist. Im Sinne dieser Einbettung handelt es sich bei den Gleichungen 2.10 um eine POINCARÉ-Abbildung, so daß wir das *KAM-Theorem* (KOLMOGOROV, ARNOLD, MOSER) und den zugehörigen Formalismus anwenden können [24].

In Abb. 2.5 erkennen wir für $\lambda = 1$ geschlossene Kurven innerhalb eines chaotischen Bereichs. Es handelt sich hierbei um *KAM-Tori*, welche auf eine reguläre Dynamik in der Umgebung des Nullpunktes hinweisen und den Fixpunkt im Nullpunkt des Phasenraums als *elliptischen Fixpunkt* der POINCARÉ-Abbildung ausweisen. Dieser Bereich mit regulärer Dynamik wird im folgenden als *Stabilitätsinsel* bezeichnet.

Für $\lambda = 3$ ist die Stabilitätsinsel verschwunden, und der Nullpunkt ist ein *hyperbolischer* Fixpunkt. Dieser Fall wird im folgenden als *vollständig chaotischer Fall* bezeichnet, auch wenn möglicherweise noch elliptische periodische Punkte existieren.

Die Stabilitätsinsel ist durch einen äußersten KAM-Torus scharf begrenzt. Da KAM-Tori für die Trajektorien klassischer Teilchen unpassierbar sind, erscheint die Stabilitätsinsel als ein „Loch im Phasenraum“, wenn wir Partikel von außerhalb einfallen lassen. Im vollständig chaotischen Fall hingegen kann jeder Punkt im Phasenraum von Teilchen erreicht werden, die mit geeigneten Anfangsbedingungen außerhalb der Stabilitätsinsel gestartet wurden.

Abb. 2.6 illustriert dieses Phänomen. Für einen fest gewählten Anfangsimpuls p_{ein} wurden Teilchen mit Anfangskordinaten x_{ein} aus einem Intervall der Länge p_{ein} durchgerechnet. Im Fall $\lambda = 1$ tritt die Stabilitätsinsel als Bereich hervor, in den keines der Teilchen eindringen konnte. Der „chaotische Bereich“ um die Stabilitätsinsel herum hingegen wurde selbst bei nur einem Anfangsimpuls p_{ein} weitgehend ausgefüllt.

Im Fall $\lambda = 3$ wird ebenfalls ein „chaotischer Bereich“ des Phasenraums von den Trajektorien weitgehend ausgefüllt, es bleibt aber kein „Loch“ im Zentrum frei.

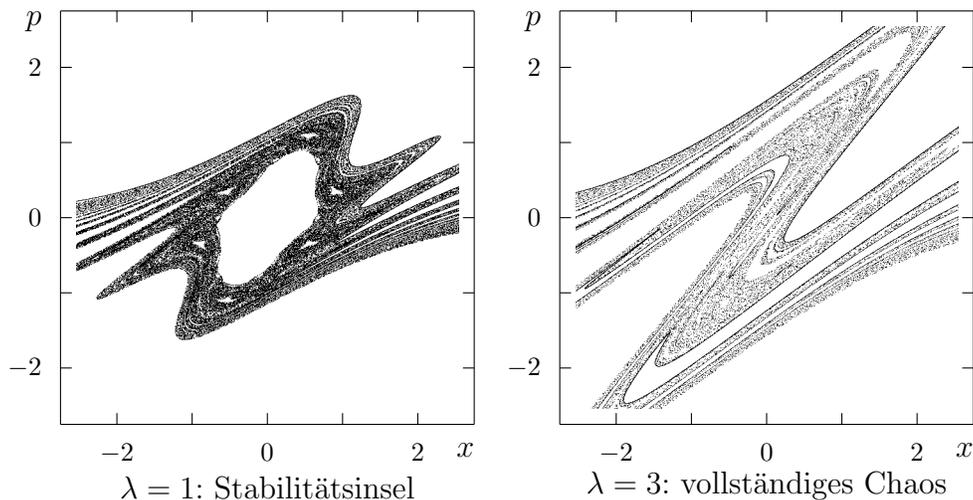


Abbildung 2.6: POINCARÉ-Schnitte bei Streuung

2.3 Die Verweilzeit im Streuzentrum

In einem Computereperiment starten wir ein Teilchen an einem Ort x_0 in „weiter Entfernung“ vom Streuzentrum und berechnen seine Zeitentwicklung so lange, bis es sich wieder „weit genug“ vom Streuzentrum entfernt hat. Wenn es darum geht, die Verweilzeit Δt im Streuzentrum zu definieren, so ist der erste Gedanke, einfach die Anzahl n der Iterationen zu nehmen. Diese Definition unterliegt jedoch einer gewissen Willkür, da die Ausdehnung des Streuzentrums nicht von Natur aus festliegt, sondern ebenfalls nur mit einer gewissen Willkür definiert werden kann. Im folgenden wird eine Definition der Verweilzeit Δt im Streuzentrum gegeben, die von der Definition der Ausdehnung des Streuzentrums unabhängig ist.

Zu diesem Zwecke legen wir zunächst x_0 auf einen Ort fest, an dem die Wirkung des Potentials vernachlässigt werden kann. In diesem Fall dürfen wir x_0 mit dem in Gleichung 2.8 definierten x_{ein} gleichsetzen und ebenso p_0 mit p_{ein} :

$$x_{\text{ein}} = x_0, \quad p_{\text{ein}} = p_0. \quad (2.11)$$

Wir wählen nun die Abbruchbedingung für unsere Iterationen derart, daß am Ende des Experiments wieder näherungsweise ein freies Teilchen vorliegt, so daß der Impuls p_n gleich dem asymptotischen Impuls p_{aus} ist:

$$p_{\text{aus}} = p_n. \quad (2.12)$$

Die durch Gleichung 2.9 definierte Endkoordinate ist nun derjenige Ort, an dem ein freies Teilchen n Perioden vorher gestartet worden sein müßte, um zum Zeitpunkt $t = n$ an der Stelle x_n einzutreffen:

$$x_{\text{aus}} = x_n - np_n. \quad (2.13)$$

Wie haben nun die willkürlichen Anfangs- und Endkoordinaten und -impulse x_0 , p_0 , x_n und p_n auf die von den willkürlichen Start- und Abbruchbedingungen unabhängigen Größen x_{ein} , p_{ein} , x_{aus} und p_{aus} umgerechnet. Mit Hilfe dieser Größen können wir nun eine Ein- und Austrittszeit definieren:

$$t_{\text{ein}} := -\frac{x_{\text{ein}}}{p_{\text{ein}}}, \quad t_{\text{aus}} := -\frac{x_{\text{aus}}}{p_{\text{aus}}}. \quad (2.14)$$

Die Differenz dieser Zeiten liefert uns eine von der Wahl der Start- und Abbruchbedingungen unabhängige Definition der Verweilzeit Δt :

$$\begin{aligned} \Delta t &:= t_{\text{aus}} - t_{\text{ein}} = \frac{x_{\text{ein}}}{p_{\text{ein}}} - \frac{x_{\text{aus}}}{p_{\text{aus}}} \\ &= \frac{x_0}{p_0} - \frac{x_n - np_n}{p_n} = \frac{x_0}{p_0} - \frac{x_n}{p_n} + n. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Eine für die Charakterisierung des Systems und für semiklassische Untersuchungen wichtige Größe ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(E, t)$, ein Teilchen mit der Energie E zu finden, dessen Verweilzeit Δt im Streuzentrum eine vorgegebene Zeit t übersteigt. Diese Größe wird im folgenden als *Verweilrate* bezeichnet.

Für ein vollständig chaotisches System fällt die Verweilrate für festgehaltenes E bei langen Zeiten t exponentiell mit t ab [16]:

$$P(E, t) \sim e^{-\kappa t}. \quad (2.16)$$

In den hier betrachteten Systemen gibt es für nicht zu große λ einen elliptischen Fixpunkt und eine Stabilitätsinsel, was zu einem algebraischen Abfallen führt [25, 26]:

$$P(E, t) \sim t^{-\gamma}. \quad (2.17)$$

Abbildung 2.7 liefert einen numerischen Beleg für die Gültigkeit der Gleichungen 2.16 und 2.17 für unser System.

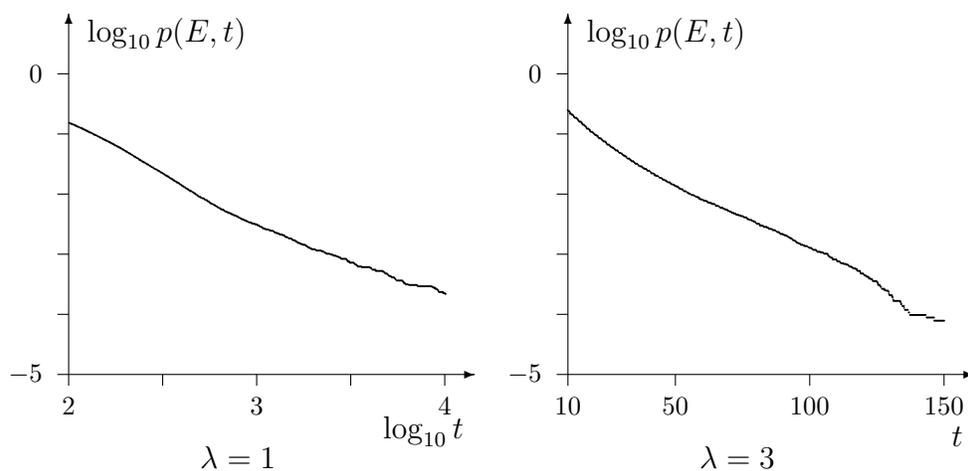


Abbildung 2.7: Verhalten der Verweilrate für große t bei $E = 0.1$. Man beachte die unterschiedliche Skalierung der t -Achse für $\lambda = 1$ und $\lambda = 3$.

Kapitel 3

Quantenmechanische Beschreibung

3.1 Der FLOQUET-Operator

Die klassische Dynamik unseres Systems wird durch die Gleichungen 2.10 in einer gut handhabbaren Weise vollständig beschrieben. Wünschenswert wäre eine äquivalente Abbildung für den quantenmechanischen Fall, die ebenfalls einen Zustand unmittelbar vor einem Kick in einen Zustand unmittelbar vor dem nächsten Kick überführt. Diese Abbildung ist durch den Zeitentwicklungsoperator über eine Periode, den sog. *FLOQUET-Operator* F , gegeben. In diesem Abschnitt soll F auf eine mathematisch akzeptable Weise konstruiert werden, und es wird ein einfaches Verfahren beschrieben, auf welche Weise F numerisch auf eine in Ortsdarstellung vorliegende Wellenfunktion angewendet werden kann.

In der quantenmechanischen Beschreibung des Systems wird aus der HAMILTONfunktion (Gleichung 2.1) der HAMILTONoperator

$$H(t) = \frac{1}{2}p^2 + \lambda V(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n). \quad (3.1)$$

Wir interessieren uns nun für Lösungen $\psi(x, t)$ der zeitabhängigen SCHRÖDINGERGleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(t) \psi(x, t). \quad (3.2)$$

Wir betrachten nun den *Zeitentwicklungsoperator* $U(t, t')$, der zu einer für den Zeitpunkt t' gegebenen Anfangsbedingung $|\psi_0\rangle$ eine Lösung $|\psi(t)\rangle$ der SCHRÖDINGERGleichung 3.2 liefert. Der FLOQUET-Operator ist definiert als der Zeitentwicklungsoperator, genommen über eine Periode:

$$F = U(1, 0). \quad (3.3)$$

Speziell für das durch den HAMILTONoperator 3.1 beschriebene System überführt der FLOQUET-Operator einen Zustand $|\psi_n\rangle$ unmittelbar vor einem Kick in den Zustand $|\psi_{n+1}\rangle$ unmittelbar vor dem nächsten Kick. Somit ist F das quantenmechanische Äquivalent der POINCARÉ-Abbildung (Gleichung 2.10):

$$|\psi_{n+1}\rangle = F |\psi_n\rangle. \quad (3.4)$$

Iterative Anwendung von F liefert uns daher ein stroboskopisches Bild von der Zeitentwicklung des Anfangszustandes $|\psi_0\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = F^n |\psi_0\rangle. \quad (3.5)$$

Die physikalische Anschauung erlaubt uns, den FLOQUET-Operator eines gekickten Systems in das Produkt zweier Operatoren F_p und F_x zu zerlegen. F_p beschreibt die freie Zeitentwicklung der Wellenfunktion zwischen zwei Kicks, während F_x die Wellenfunktion vom Zustand unmittelbar vor in den Zustand unmittelbar nach einem Kick überführt [5, § 2.10]:

$$F = F_p \cdot F_x = e^{-\frac{i}{2\hbar}p^2} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda V(x)}. \quad (3.6)$$

Allein schon wegen der zentralen Rolle, welche der FLOQUET-Operator in dieser Arbeit spielt, soll Gleichung 3.6 im folgenden mit den Methoden der mathematischen Physik hergeleitet werden.

Der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t')$ ist definiert als die Lösung der Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t') = H(t)U(t, t') \quad (3.7)$$

mit der Anfangsbedingung

$$U(t', t') = 1. \quad (3.8)$$

Aus dieser Definition ergeben sich folgende Eigenschaften von U :

1. Zwei „zusammenstoßende“ Zeitentwicklungen können auch durch eine einzige Zeitentwicklung ausgedrückt werden (CHAPMAN-KOLMOGOROFF-Gleichung):

$$U(t, t') U(t', t'') = U(t, t''). \quad (3.9)$$

2. U ist unitär:

$$U(t, t')^* = U(t, t')^{-1} \quad \forall t, t'. \quad (3.10)$$

3. U ist stetig in t und t' .

Man kann zeigen [27, Bd. II, Theorem X.69f], daß für unseren Fall mit $H(t) = H_0 + \lambda V(x)f(t)$ mit selbstadjungiertem H_0 und beschränktem $V(x)$ der Zeitentwicklungsoperator U die folgende Gestalt hat:

$$U(t, t') = e^{-\frac{i}{\hbar}tH_0} \tilde{U}(t, t') e^{\frac{i}{\hbar}t'H_0}, \quad (3.11)$$

wobei \tilde{U} die *DYSON-Entwicklung* von V ist:

$$\tilde{U}(t, t') = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \lambda V(x) \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n f(t_1) f(t_2) \cdots f(t_n). \quad (3.12)$$

Der zeitabhängige Anteil $f(t)$ des HAMILTONoperators (Gleichung 3.1) lautet in unserem Fall:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n). \quad (3.13)$$

Einsetzen von 3.13 in die DYSON-Entwicklung (Gleichung 3.12) und Einsetzen von $t = 1$ und $t' = 0$ liefert zunächst:

$$\tilde{U}(1, 0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \lambda V(x)\right)^n \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \delta(t_1) \delta(t_2) \cdots \delta(t_n). \quad (3.14)$$

Wenn wir sämtliche Integrale auf der rechten Seite auf das gesamte Intervall ausdehnen, so wird der gesamte Ausdruck $n!$ -mal so groß. Man kann dies mit Hilfe von vollständiger Induktion beweisen [28] oder sich vor Augen führen, daß es sich bei dem in Gleichung 3.14 auftretenden Mehrfachintegral um den zeitgeordneten Anteil eines symmetrischen Mehrfachintegrals handelt [29, § 90], und wenn wir n Zeiten aus dem gesamten Intervall wählen, sind diese gerade mit der Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{n!}$ zeitgeordnet:

$$\begin{aligned} & \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \delta(t_1) \delta(t_2) \cdots \delta(t_n) \\ &= \frac{1}{n!} \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 \cdots \int_0^1 dt_n \delta(t_1) \delta(t_2) \cdots \delta(t_n) = \frac{1}{n!}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Wir erhalten somit:

$$\tilde{U}(1, 0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(-\frac{i}{\hbar} \lambda V(x)\right)^n}{n!} = e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda V(x)}. \quad (3.16)$$

Durch Einsetzen in Gleichung 3.11 können wir nun den FLOQUET-Operator eines mit Periode 1 mit dem Potential $V(x)$ gekickten Systems angeben:

$$F = U(1, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} 1 \cdot H_0} \tilde{U}(1, 0) e^{\frac{i}{\hbar} 0 \cdot H_0} = e^{-\frac{i}{2\hbar} p^2} e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda V(x)}. \quad (3.17)$$

Damit ist Gleichung 3.6 bewiesen.

Um die Dynamik des quantenmechanischen Systems zu untersuchen, benötigen wir den FLOQUET-Operator in einer speziellen Darstellung. Unter Ausnutzung der Diagonalgestalt von F_p in Impuls- und von F_x in Ortsdarstellung

$$\langle p | F_p | p' \rangle = e^{-\frac{i}{2\hbar} p^2} \delta(p - p'), \quad (3.18)$$

$$\langle x | F_x | x' \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda V(x)} \delta(x - x'), \quad (3.19)$$

können wir die Iterationsformel 3.4 wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned}
\langle x | \psi_{n+1} \rangle &= \langle x | F | \psi_n \rangle \\
&= \langle x | F_p F_x | \psi_n \rangle \\
&= \int dx' \int dx'' \int dp' \int dp'' \langle x | p' \rangle \langle p' | F_p | p'' \rangle \langle p'' | x' \rangle \langle x' | F_x | x'' \rangle \langle x'' | \psi_n \rangle \\
&= \int dx' \int dx'' \int dp' \int dp'' e^{\frac{i}{\hbar} p' x} e^{-\frac{i}{2\hbar} p'^2} \delta(p' - p'') \\
&\quad \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} p'' x'} e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda V(x')} \delta(x' - x'') \langle x'' | \psi_n \rangle \\
&= \int dx' \int dp' e^{\frac{i}{\hbar} p' x} e^{-\frac{i}{2\hbar} p'^2} e^{-\frac{i}{\hbar} p' x'} e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda V(x')} \langle x' | \psi_n \rangle. \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Wir erhalten auf diese Weise eine Vorschrift, wie F auf eine in Ortsdarstellung vorliegende Wellenfunktion angewendet wird. Wir können diese Vorschrift in folgende Schritte zerlegen:

1. FOURIERtransformation von der Orts- in die Impulsdarstellung,
2. punktweise Multiplikation mit $\langle p | F_p | p \rangle$,
3. FOURIER-Rücktransformation von der Impuls- in die Ortsdarstellung,
4. punktweise Multiplikation mit $\langle x | F_x | x \rangle$.

Die Untersuchung der Dynamik des Systems erfolgt nun analog zur Vorgehensweise im klassischen Fall: Wir präparieren einen geeigneten Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ und wenden wiederholt den FLOQUET-Operator an, so lange, bis sich das Teilchen wieder außerhalb des Streuzentrums befindet. Dies ist quantenmechanisch so zu verstehen, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Streuzentrum ein vorher gewähltes kleines $\varepsilon > 0$ unterschreitet. Wenn $\Delta > 0$ eine obere Abschätzung für den Radius des Streuzentrums ist, lautet die Abbruchbedingung also:

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} dx |\langle x | \psi_n \rangle|^2 < \varepsilon. \tag{3.21}$$

Als Anfangszustand präparieren wir „beinahe eine Impulseigenfunktion“, nämlich ein GAUSSSches Wellenpaket

$$\langle x | \psi_0 \rangle \sim e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{(x-x_0)^2}{\Delta x^2}} \tag{3.22}$$

mit sehr großer Ortsunschärfe Δx . Wir können nicht wirklich eine Impulseigenfunktion präparieren, da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zu Beginn des Experiments im Streuzentrum verschwinden muß.

In den Abbildungen 3.1 bis 3.4 sind zwei numerische Streuexperimente dargestellt. Sie unterscheiden sich durch verschiedene Mittelwerte des Impulses des am Anfang präparierten GAUSSSchen Wellenpakets. Es handelt sich um zwei typische Fälle, die im folgenden

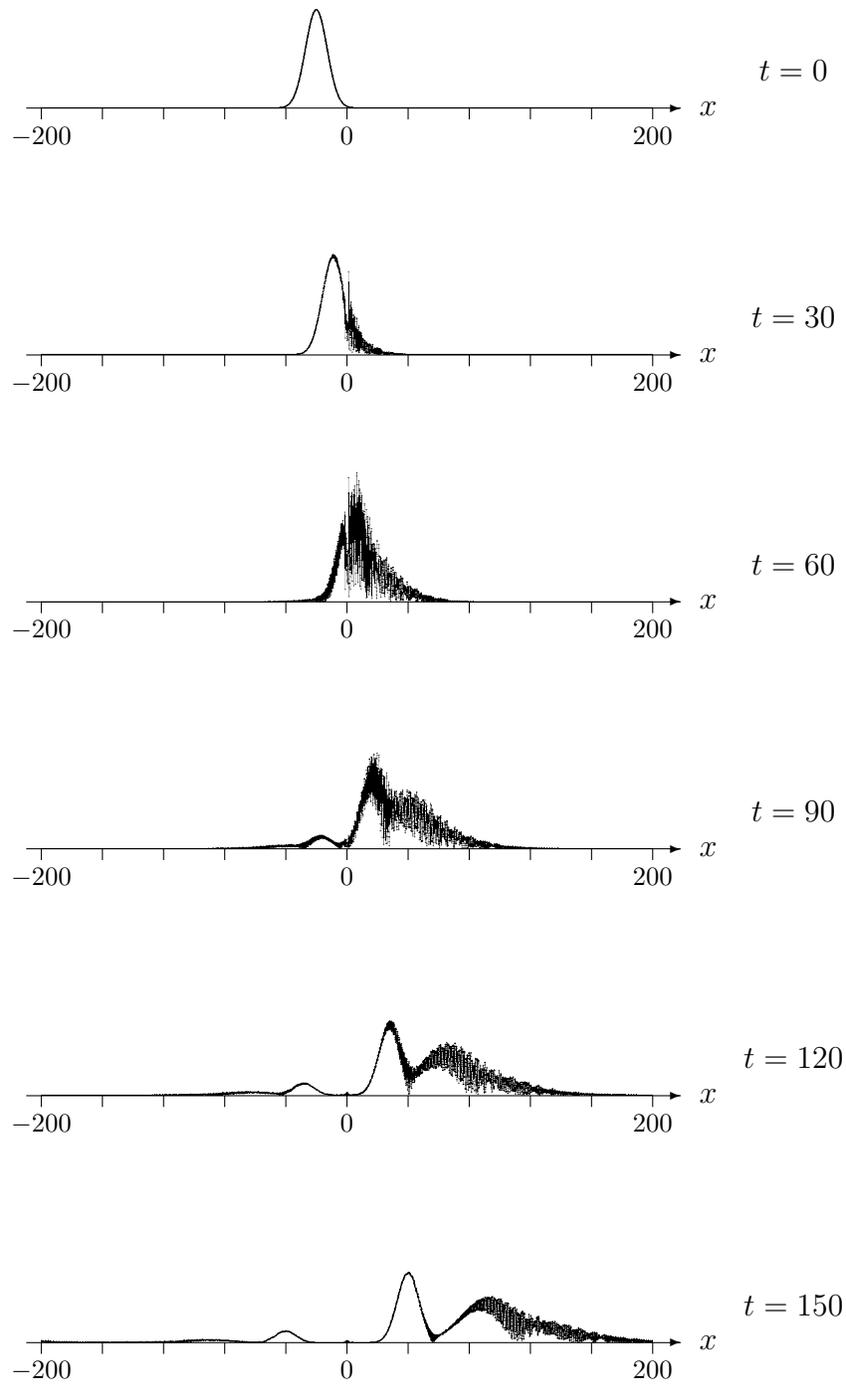


Abbildung 3.1: Zeitentwicklung im nicht resonanten Fall, Ortsdarstellung
 Die Rechnung wurde mit $\lambda = 1$ und $\hbar = 0.05$ durchgeführt. Falls nicht anders angegeben, ist dies in allen Beispielen der Fall.

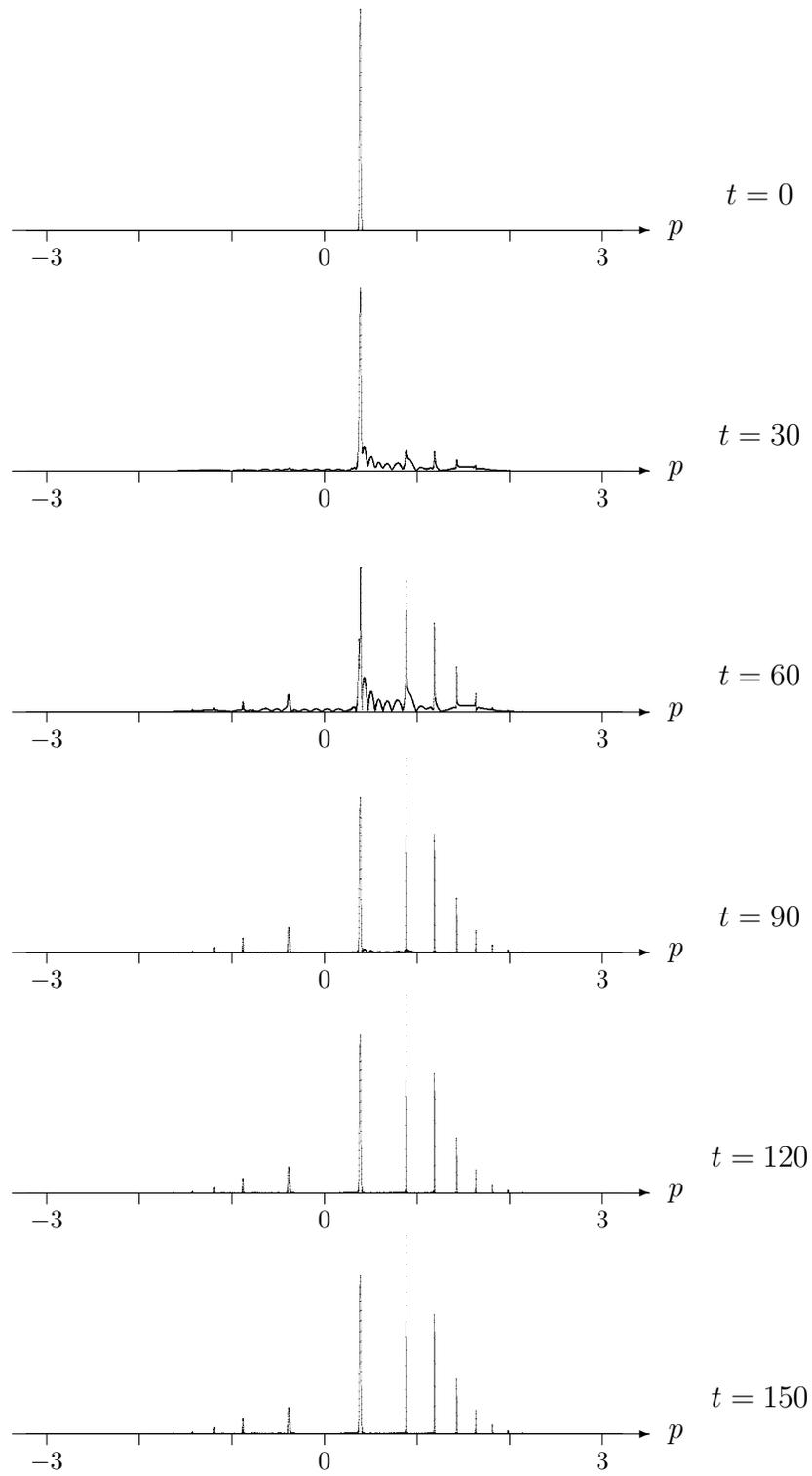


Abbildung 3.2: Zeitentwicklung im nicht resonanten Fall, Impulsdarstellung

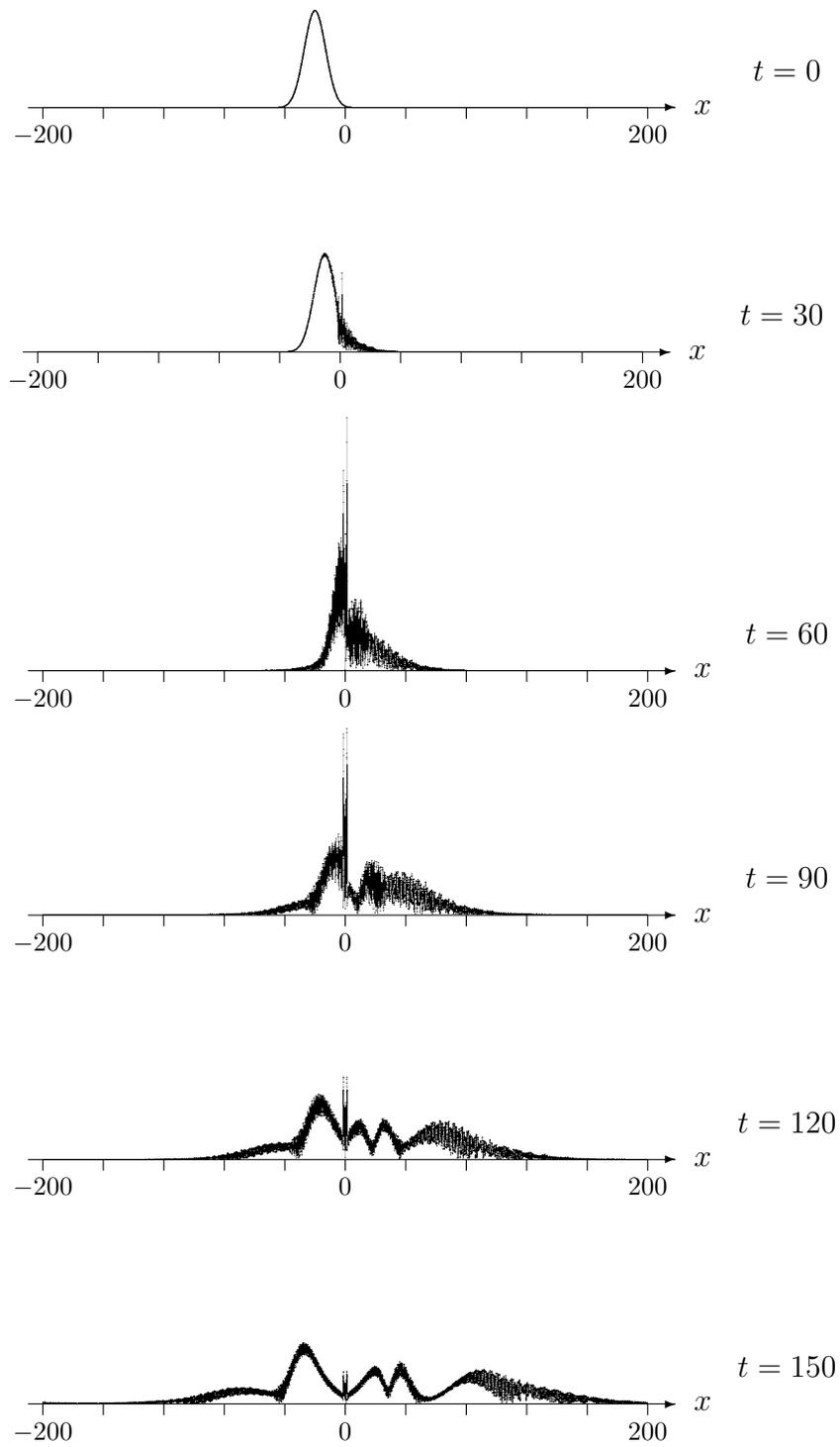


Abbildung 3.3: Zeitentwicklung im resonanten Fall, Ortsdarstellung

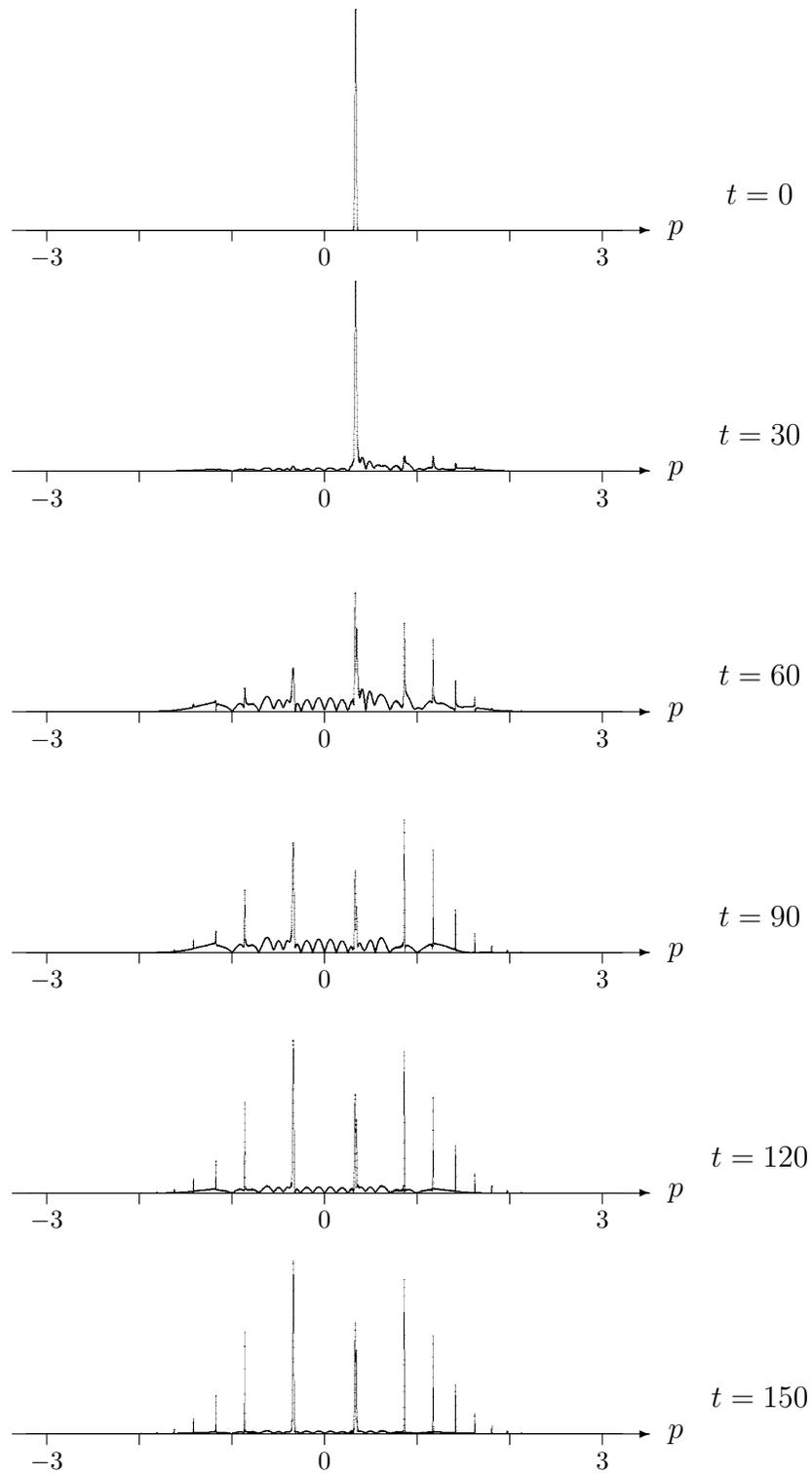


Abbildung 3.4: Zeitentwicklung im resonanten Fall, Impulsdarstellung

als *nicht resonant* bzw. *resonant* bezeichnet werden. Aufgetragen ist der Absolutbetrag der Wellenfunktion in Orts- und Impulsdarstellung.

Im nicht resonanten Fall erkennen wir in der Ortsdarstellung (Abb. 3.1), wie sich ein Wellenpaket von links nach rechts bewegt. Am Streuzentrum bei $x = 0$ ändert das Wellenpaket seine Form, und nach Passieren des Streuzentrums sieht man zwei große nach rechts laufende und zwei wesentlich kleinere nach links laufende Wellenzüge.

Wenn wir das Bild mit der Impulsdarstellung (Abb. 3.2) vergleichen, können wir die Wellenpakete als scharfe Maxima erkennen. Der schnellere nach rechts laufende Anteil erweist sich als Überlagerung von sechs in der Impulsdarstellung sichtbaren Wellenpaketen. Die nach links laufenden Wellenpakete bestehen aus vier erkennbaren Anteilen, deren Impulse gerade symmetrisch zu den positiven Impulsmaxima liegen. Interessant ist, daß die breite Verteilung des Impulses, die während des Streuprozesses vorliegt, am Ende des Experiments wieder verschwunden ist. Es sieht so aus, als ob sich der Impuls nur in diskreten Portionen ändern könne. Dieses Phänomen wird im nächsten Abschnitt näher untersucht werden.

In Ortsdarstellung des resonanten Falls (Abb. 3.3) ist der hervorstechendste Unterschied zum nicht resonanten Fall eine zeitweise sehr hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Streuzentrum bei $x = 0$. Das Maximum liegt bei $t = 60$; danach nimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit allmählich wieder ab. Für $t = 150$ befindet sich noch ein deutlich erkennbarer Anteil im Streuzentrum. Wenn wir die das Streuzentrum verlassenden Wellenzüge betrachten, erkennen wir, daß diesmal der größere Anteil nach links reflektiert wird.

Die Impulsdarstellung im resonanten Fall (Abb. 3.4) zeigt wieder scharfe Maxima. Wir können sechs Wellenpakete ausmachen, die das Streuzentrum nach rechts verlassen; fünf werden reflektiert. Die Lagen der Maxima sind wieder symmetrisch zum Nullpunkt angeordnet. Der noch im Streuzentrum befindliche Anteil der Aufenthaltswahrscheinlichkeit zeigt sich in der Impulsdarstellung als eine sehr breite, aber flache Verteilung.

3.2 Die Quasienergie-Darstellung der S-Matrix

Sowohl in der klassischen als auch in der Quantenmechanik sind Erhaltungsgrößen stets mit Symmetrien verknüpft. Im Falle der Energieerhaltung ist die zugehörige Symmetrie die Invarianz gegenüber einer Verschiebung des Zeitnullpunkts. Da wir ein System mit einer expliziten Zeitabhängigkeit des HAMILTONoperators betrachten, können wir mit der Energie als Erhaltungsgröße nicht rechnen. Da aber in unserem Fall die Zeitabhängigkeit von periodischer Form ist, gibt es noch diskrete Zeittranslationen, die den HAMILTONoperator invariant lassen, so daß wir einen diskreten „Rest“ der Energieerhaltung vorfinden. Diese Erhaltungsgröße wird als *freie Quasienergie* bezeichnet und soll in diesem Abschnitt definiert werden.

Für genauere Betrachtungen benötigen wir die vom zeitunabhängigen auf den zeitlich periodischen Fall verallgemeinerte *S-Matrix*. Wir betrachten zunächst die Dynamik in weiter Entfernung vom Streuzentrum. Wegen seiner kurzen Reichweite können wir das Potential $V(x)$ hier vernachlässigen, so daß die Dynamik durch den *freien HAMILTON-*

operator H_0 beschrieben wird:

$$H_0(t) = \frac{1}{2}p^2. \quad (3.23)$$

Der *freie Zeitentwicklungsoperator* $U_0(t, t')$ kann sofort aus Gleichung 3.11 abgelesen werden, indem wir $V(x) = 0$ und damit $\tilde{U} = 1$ setzen:

$$U_0(t, t') = e^{-\frac{i}{2\hbar}(t-t')p^2}. \quad (3.24)$$

Auf die gleiche Weise erhalten wir den *freien FLOQUET-Operator* aus Gleichung 3.6:

$$F_0 = e^{-\frac{i}{2\hbar}p^2}. \quad (3.25)$$

Wir wollen nun die *Wellen-* oder *MØLLER-Operatoren* Ω_{\pm} definieren, die zwischen den allein durch H_0 beschreibbaren ein- und auslaufenden Teilchen und einem Teilchen im Streuzentrum vermitteln: Ω_+ soll ein freies einlaufendes Teilchen auf eine Lösung der SCHRÖDINGERGleichung 3.2 abbilden, und Ω_- soll dasselbe für ein auslaufendes freies Teilchen bewirken. In der zeitunabhängigen Streutheorie könnten wir die MØLLER-Operatoren als Grenzwert von $U(t, 0)U_0(0, t)$ für $t \rightarrow \mp\infty$ definieren [30, § 6.3]. Für zeitabhängige Systeme ist die Existenz dieses Grenzwerts nicht gesichert. K. YAJIMA [22] und J. S. HOWLAND [23] haben jedoch gezeigt, daß im zeitlich periodischen Fall $V(x, t) = V(x)f(t)$ mit $f(t) = f(t+1)$ und beschränktem $V(x)$ der folgende Grenzwert existiert:

$$\Omega_{\pm} = \lim_{n \rightarrow \mp\infty} F_0^{-n} F^n P, \quad (3.26)$$

wobei P der Projektor auf denjenigen Teilraum \mathcal{H}_a des Hilbertraums ist, in dem der FLOQUET-Operator F *absolutstetig* ist [31, §§ 95–97].

Unmittelbar aus der Definition erkennen wir folgende Eigenschaften der MØLLER-Operatoren:

1. Für die MØLLER-Operatoren und dem FLOQUET-Operator gilt die Beziehung:

$$\Omega_{\pm} F = \lim_{n \rightarrow \mp\infty} F_0^{-n} F^n P F = \lim_{n \rightarrow \mp\infty} F_0 F_0^{-(n+1)} F^{n+1} P = F_0 \Omega_{\pm}. \quad (3.27)$$

2. Da F_0 und F als spezielle Zeitentwicklungsoperatoren unitär sind, gilt 3.27 auch für den HERMITESCH konjugierten FLOQUET-Operator:

$$\Omega_{\pm} F^* = \lim_{n \rightarrow \mp\infty} F_0^{-n} F^n P F^{-1} = \lim_{n \rightarrow \mp\infty} F_0^{-1} F_0^{-(n-1)} F^{n-1} P = F^* \Omega_{\pm}. \quad (3.28)$$

3. Ω_{\pm} sind partiell isometrisch [23, Theorem 4(a)], d. h.. für alle Wellenfunktionen $|\psi\rangle$ aus dem Teilraum \mathcal{H}_a gilt:

$$\|\Omega_{\pm} |\psi\rangle\| = \|\psi\rangle\|. \quad (3.29)$$

Wir setzen nun die MØLLER-Operatoren so zusammen, daß sie ein einlaufendes freies Teilchen auf ein auslaufendes freies Teilchen abbilden und erhalten so die *S-Matrix*

$$S = \Omega_-^* \Omega_+. \quad (3.30)$$

Das auf diese Weise definierte S ist unitär auf \mathcal{H}_a [23, Theorem 4(d)]

$$S^*S = SS^* = 1 \quad (3.31)$$

und kommutiert mit dem freien FLOQUET-Operator F_0 [31, § 97, Satz 7]:

$$SF_0 = F_0S. \quad (3.32)$$

Wir wollen nun untersuchen, auf welche Weise sich die Energie durch einen Streuprozess ändern kann. Wir betrachten hierfür einen einlaufenden Zustand, der durch die S-Matrix mit einem auslaufenden Zustand verknüpft ist:

$$|\psi_{\text{aus}}\rangle = S|\psi_{\text{ein}}\rangle. \quad (3.33)$$

Die ein- und auslaufenden Zustände sind Eigenzustände von H_0 . Somit haben sie scharf definierte Energien:

$$F_0|\psi_{\text{ein}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0}|\psi_{\text{ein}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{ein}}}|\psi_{\text{ein}}\rangle, \quad (3.34)$$

$$F_0|\psi_{\text{aus}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0}|\psi_{\text{aus}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{aus}}}|\psi_{\text{aus}}\rangle. \quad (3.35)$$

Um herauszufinden, wie E_{aus} mit E_{ein} zusammenhängt, lassen wir S auf Gleichung 3.34 wirken:

$$SF_0|\psi_{\text{ein}}\rangle = Se^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{ein}}}|\psi_{\text{ein}}\rangle. \quad (3.36)$$

Da S mit F_0 kommutiert, folgt:

$$F_0|\psi_{\text{aus}}\rangle = F_0S|\psi_{\text{ein}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{ein}}}S|\psi_{\text{ein}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{ein}}}|\psi_{\text{aus}}\rangle. \quad (3.37)$$

Wir haben nun Gleichung 3.35 mit E_{ein} anstelle von E_{aus} erhalten. Damit beide Gleichungen erfüllt sind, muß also gelten:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{aus}}} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{ein}}}, \quad (3.38)$$

und somit gilt zwischen der Energie des einlaufenden und des gestreuten Teilchens die Beziehung:

$$E_{\text{aus}} = E_{\text{ein}} + n \cdot 2\pi\hbar, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (3.39)$$

Wir haben hiermit gezeigt, daß ein Energieaustausch zwischen dem Teilchen und dem Streuzentrum nur in diskreten Portionen von $2\pi\hbar$ möglich ist – die Energie ist sozusagen bis auf ein ganzzahliges Vielfaches von $2\pi\hbar$ erhalten. Diese auf ein Intervall beschränkte Erhaltungsgröße bezeichnen wir als die *freie Quasienergie* Θ :

$$\begin{aligned} \Theta &= E \bmod 2\pi\hbar, \\ E &= \Theta + n \cdot 2\pi\hbar \quad \text{mit } n \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

(Wenn im folgenden einfach von der *Quasienergie* die Rede ist, dann ist damit stets die *freie Quasienergie* gemeint.) Die diskrete Quantenzahl n bezeichnen wir als *Kanal*. Ein

Streuprozess kann verschiedene Kanäle n miteinander koppeln, aber die Quasienergie Θ ist vor und nach dem Streuprozess dieselbe. (Während des Streuprozesses selbst ist Θ gar nicht definiert.)

Wir können nun eine Basis konstruieren, in der die S-Matrix eine leicht handhabbare Gestalt annimmt. Mit der Schreibweise

$$|\Theta, n, \pm\rangle \quad (3.41)$$

wird ein Eigenzustand von H_0 mit der Quasienergie Θ und dem Kanal n bezeichnet, also ein freies Teilchen mit der kinetischen Energie $E = \Theta + n \cdot 2\pi\hbar$. Die Quantenzahlen $n \in \mathbb{Z}$ und $\Theta \in [0, 2\pi\hbar)$ liegen hierdurch eindeutig fest. Beim dritten Index steht „+“ für ein nach rechts und „-“ für ein nach links laufendes Teilchen.

Aufgrund der Quasienergieerhaltung ist S diagonal bzgl. Θ :

$$\langle \Theta, n, \pm | S | \Theta', n', \pm \rangle = S_{nn'}^{\pm}(\Theta) \delta(\Theta - \Theta'). \quad (3.42)$$

Für festgehaltenes Θ ist $S_{nn'}^{\pm}(\Theta)$ eine unendlichdimensionale diskrete Matrix bzgl. der Kanalquantenzahl n . Da das Potential $V(x)$ symmetrisch zum Nullpunkt vorausgesetzt ist, gilt:

$$\langle \Theta, n, + | S | \Theta', n', + \rangle = \langle \Theta, n, - | S | \Theta', n', - \rangle \quad \text{und} \quad (3.43)$$

$$\langle \Theta, n, - | S | \Theta', n', + \rangle = \langle \Theta, n, + | S | \Theta', n', - \rangle. \quad (3.44)$$

Wir können daher die S-Matrix in einen Transmissionsanteil S^+ und einen Reflexionsanteil S^- zerlegen:

$$S = S^+ + S^-. \quad (3.45)$$

Für einen Streuprozess bei der Quasienergie Θ bezeichnet also $S_{nn'}^+(\Theta)$ den Transmissionskoeffizienten vom Kanal n' in den Kanal n , und $S_{nn'}^-(\Theta)$ bezeichnet den Reflexionskoeffizienten für denselben Übergang.

Die numerische Berechnung von Elementen der S-Matrix erfolgt folgendermaßen: Wir präparieren einen Anfangszustand $|\psi_{\text{ein}}\rangle$ mit scharf definierter Energie E_{ein} und willkürlichem Kanal $n_{\text{ein}} = 0$, so daß $\Theta = E_{\text{ein}}$ ist. Nun wenden wir iterativ solange den FLOQUET-Operator an, bis die Abbruchbedingung 3.21 erfüllt ist und wir einen Endzustand $|\psi_{\text{aus}}\rangle$ erhalten. Dieser Endzustand hat nicht mehr dieselbe Energie wie der Anfangszustand, aber immer noch dasselbe Θ , so daß wir mehrere diskrete Ausgangsenergien $E_{\text{aus}} = E_{\text{ein}} + n_{\text{aus}} \cdot 2\pi\hbar$ für verschiedene Kanäle $n_{\text{aus}} \in \mathbb{Z}$ beobachten können. In der Impulsdarstellung (Abb. 3.2 und 3.4) können wir diese Ausgangskanäle an scharfen Maxima erkennen. Wenn wir numerisch über die Maxima integrieren, können wir das Quadrat des Absolutbetrages der Matrixelemente $S_{nn'}^{\pm}(\Theta)$ direkt bestimmen.

Die Abbildungen 3.5 und 3.6 zeigen den Absolutbetrag der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten zwischen einem Eingangskanal und verschiedenen Ausgangskanälen in Abhängigkeit von Θ für $\lambda = 1$ und $\lambda = 3$.

Für $\lambda = 1$ (Abb. 3.5) erkennen wir eine regelmäßige Struktur von Maxima in den Reflexionskoeffizienten und von Minima in den Transmissionskoeffizienten, die in allen

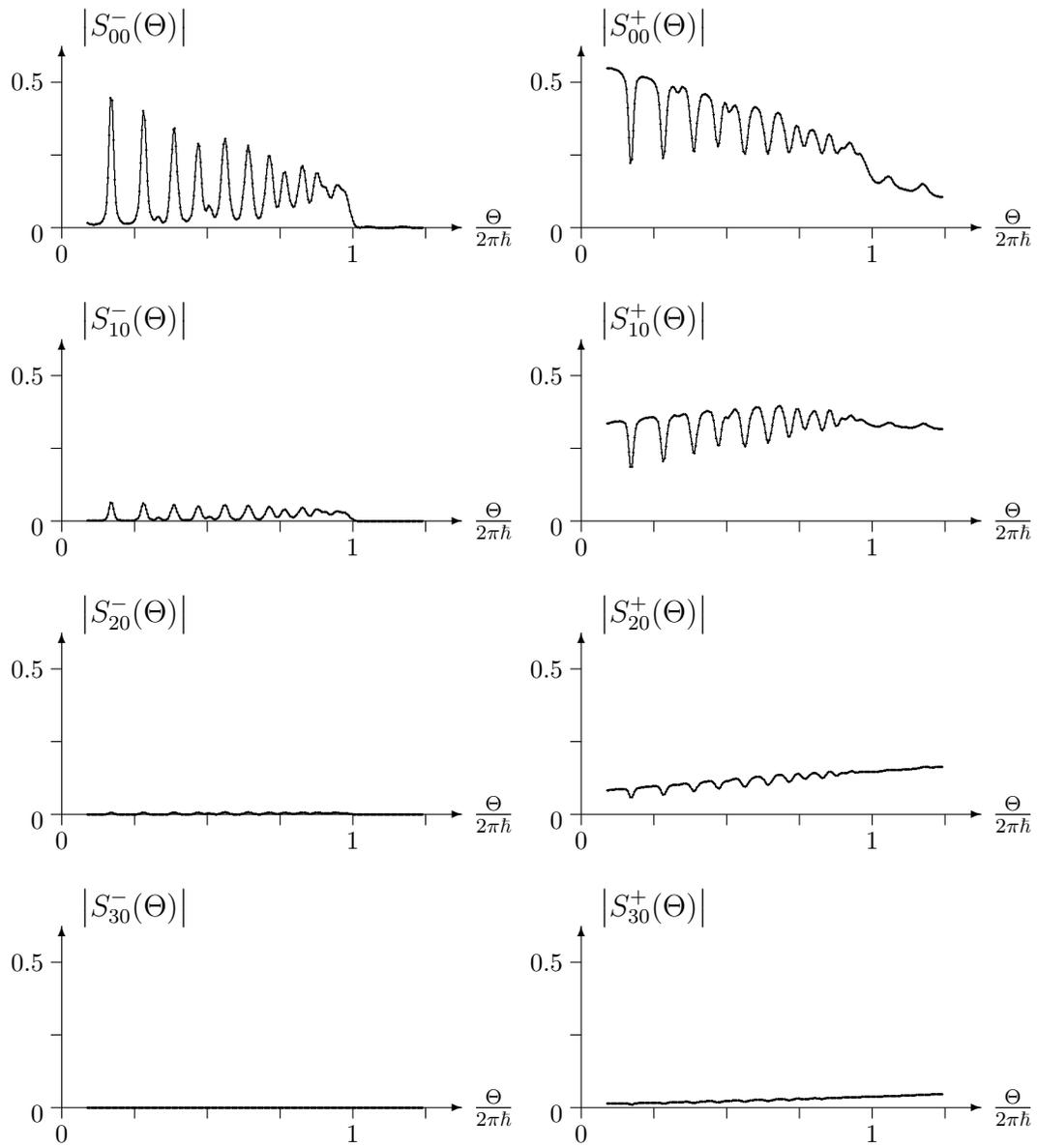


Abbildung 3.5: $S(\Theta)$ für $\lambda = 1, -$ dynamische Resonanzen

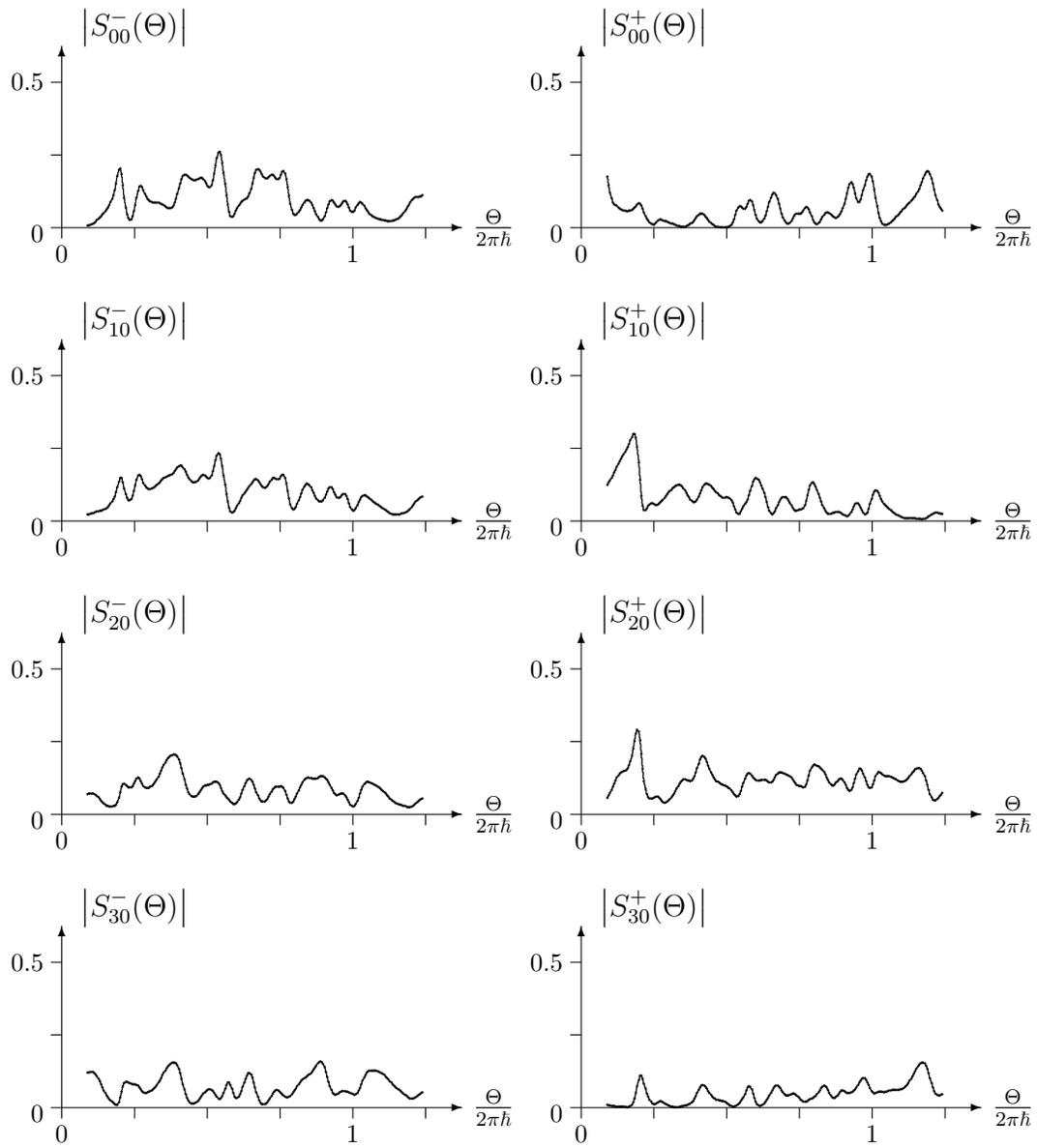


Abbildung 3.6: $S(\Theta)$ für $\lambda = 3$, – ERICSON-Fluktuationen

Kanälen bei den gleichen Θ auftreten. Diese Struktur wird als *dynamische Resonanzen* bezeichnet und wurde erstmalig von P. ŠEBA beobachtet [19]. Jedes Maximum im Reflexionskoeffizienten wird als eine *Resonanz* bezeichnet. Die zu einem Maximum gehörenden Quasienergie Θ kennzeichnet den *resonanten Fall*; der Fall außerhalb der Maxima heißt der *nicht resonante Fall*. Abb. 3.1 bis 3.4 zeigen die Zeitentwicklung eines Wellenpakets im ersten Minimum bzw. Maximum des Reflexionskoeffizienten $S_{00}^-(\Theta)$.

Für $\lambda = 3$ (Abb. 3.6) beobachten wir eine unregelmäßige Struktur von Fluktuationen. Es handelt sich um *ERICSON-Fluktuationen*, welche dadurch definiert sind, daß die Autokorrelationsfunktion eine LORENTZ-Funktion ist. R. BLÜMEL und U. SMILANSKY haben in [7] mit semiklassischen Methoden gezeigt, daß das Fehlen einer Stabilitätsinsel im Phasenraum ein hinreichendes Kriterium für das Auftreten von ERICSON-Fluktuationen ist. Genauer haben sie gezeigt, daß das Quadrat des Absolutbetrages der Θ -Autokorrelationsfunktion der S-Matrix

$$C_{nn'}^\pm(\Theta) := \langle S_{nn'}^{\pm*}(\Theta') S_{nn'}^\pm(\Theta' + \Theta) \rangle_{\Theta'} \quad (3.46)$$

in diesem Fall eine LORENTZfunktion ist:

$$|C_{nn'\pm}|^2 = \frac{\kappa}{\kappa + (\Theta/\hbar)^2}. \quad (3.47)$$

κ ist hierbei die Zerfallskonstante der klassischen Verweilrate $P(E, t)$, hat also dieselbe Bedeutung wie in Gleichung 2.16. Abb. 3.7 zeigt die zu Abb. 3.6 korrespondierende,

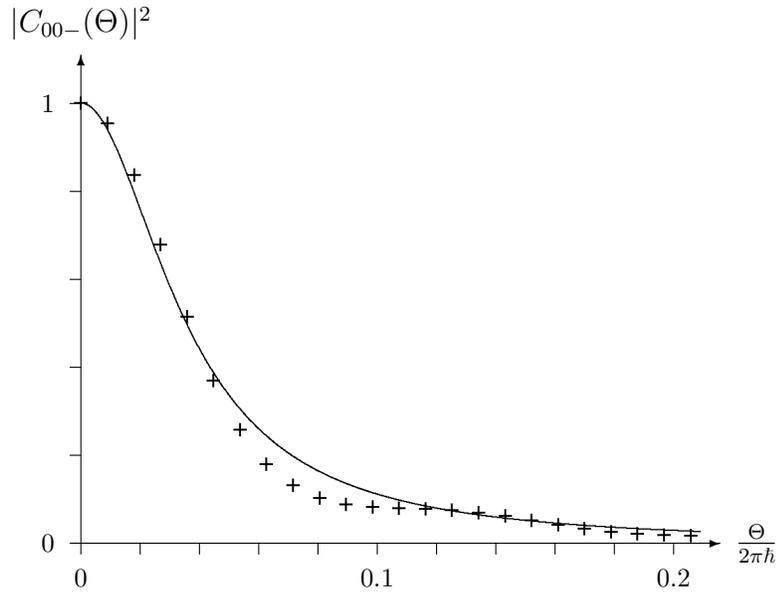


Abbildung 3.7: Θ -Autokorrelationsfunktion des Reflexionskoeffizienten für $\lambda = 3$

Die Kreuze zeigen die numerisch ermittelte Funktion $|C_{00}^-(\Theta)|^2$. Die durchgezogene Linie ist die von R. BLÜMEL und U. SMILANSKY [7, 8] vorhergesagte LORENTZfunktion (siehe Gl. 3.47). κ hat den Wert 0.055, entnommen aus der Steigung der Ausgleichsgeraden in Abb. 2.7 für $\lambda = 3$.

numerisch berechnete Θ -Autokorrelationsfunktion $|C_{00-}(\Theta)|^2$ im Vergleich zu der durch Gleichung 3.47 gegebenen Funktion.

Wenn wir auch für den Fall mit $\lambda = 1$ die Θ -Autokorrelationsfunktion berechnen (siehe Abb. 3.8), erhalten wir keine LORENTZfunktion, sondern die dynamischen Resonanzen machen sich in Gestalt von Maxima bemerkbar, deren Abstand dem mittleren Abstand der Resonanzen entspricht.

Wenn in Abb. 3.5 und 3.6 auch $\Theta \geq 2\pi\hbar$ dargestellt ist, müssen wir gedanklich $2\pi\hbar$ von Θ subtrahieren und gleichzeitig den Eingangskanal n_{ein} und die Ausgangskanäle n_{aus} um 1 erhöhen, so daß wir hier in Wirklichkeit Teile einer zweiten Spalte der S-Matrix sehen. Sobald dieser Punkt erreicht ist, existiert ein tiefer liegender Ausgangskanal $n_{\text{aus}} = 0$ (nicht dargestellt), ein „Bremskanal“, der denjenigen Anteil des austretenden Teilchens enthält, für den $E_{\text{aus}} = E_{\text{ein}} - 2\pi\hbar$ ist und das Teilchen abgebremst wird. Die Tatsache, daß dieser Kanal ab „ $\Theta \geq 2\pi\hbar$ “ schlagartig „offen“ ist, erklärt auch das gleichzeitige Abfallen der Matrixelemente in den meisten dargestellten Kanälen in Abb. 3.5.

Abb. 3.9 zeigt den Übergang zwischen $\lambda = 1$ und $\lambda = 3$, wobei das klassische Phasenraumportrait dem quantenmechanischen Reflexionskoeffizienten $S_{00}^-(\Theta)$ gegenübergestellt wird. Man erkennt, daß gleichzeitig mit dem Verschwinden der Stabilitätsinsel auch die dynamischen Resonanzen verschwinden, indem sie sich zu ERICSON-Fluktuationen überlagern. Wie bereits erwähnt, haben R. BLÜMEL und U. SMILANSKY nachgewiesen, daß ein vollständiges klassisches Chaos zu ERICSON-Fluktuationen korrespondiert. Die Abbildung liefert ein numerisches Indiz für eine ebensolche Korrespondenz zwischen der klassischen

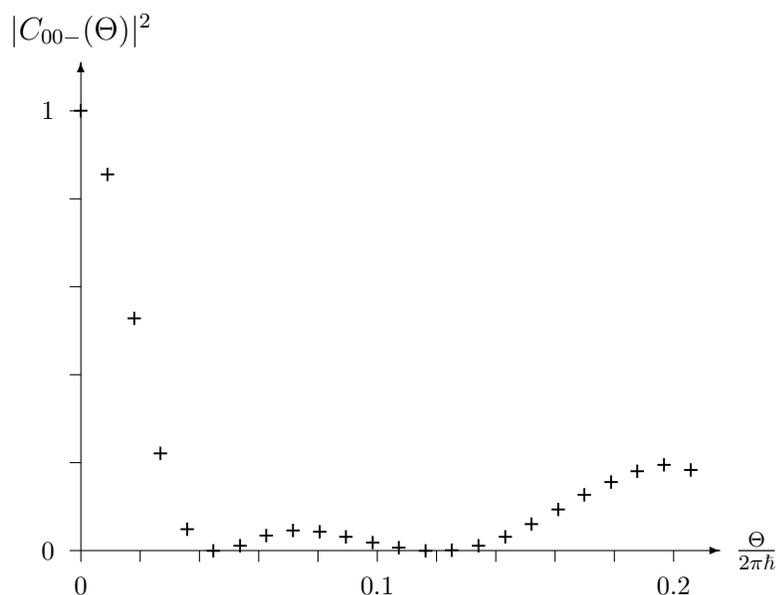


Abbildung 3.8: Θ -Autokorrelationsfunktion des Reflexionskoeffizienten für $\lambda = 1$ $C_{00-}(\Theta)$ wurde aus den auch Abb. 3.5 zugrundeliegenden Daten gemäß Gl. 3.46 numerisch berechnet. Die dynamischen Resonanzen machen sich in Gestalt von Maxima bemerkbar.

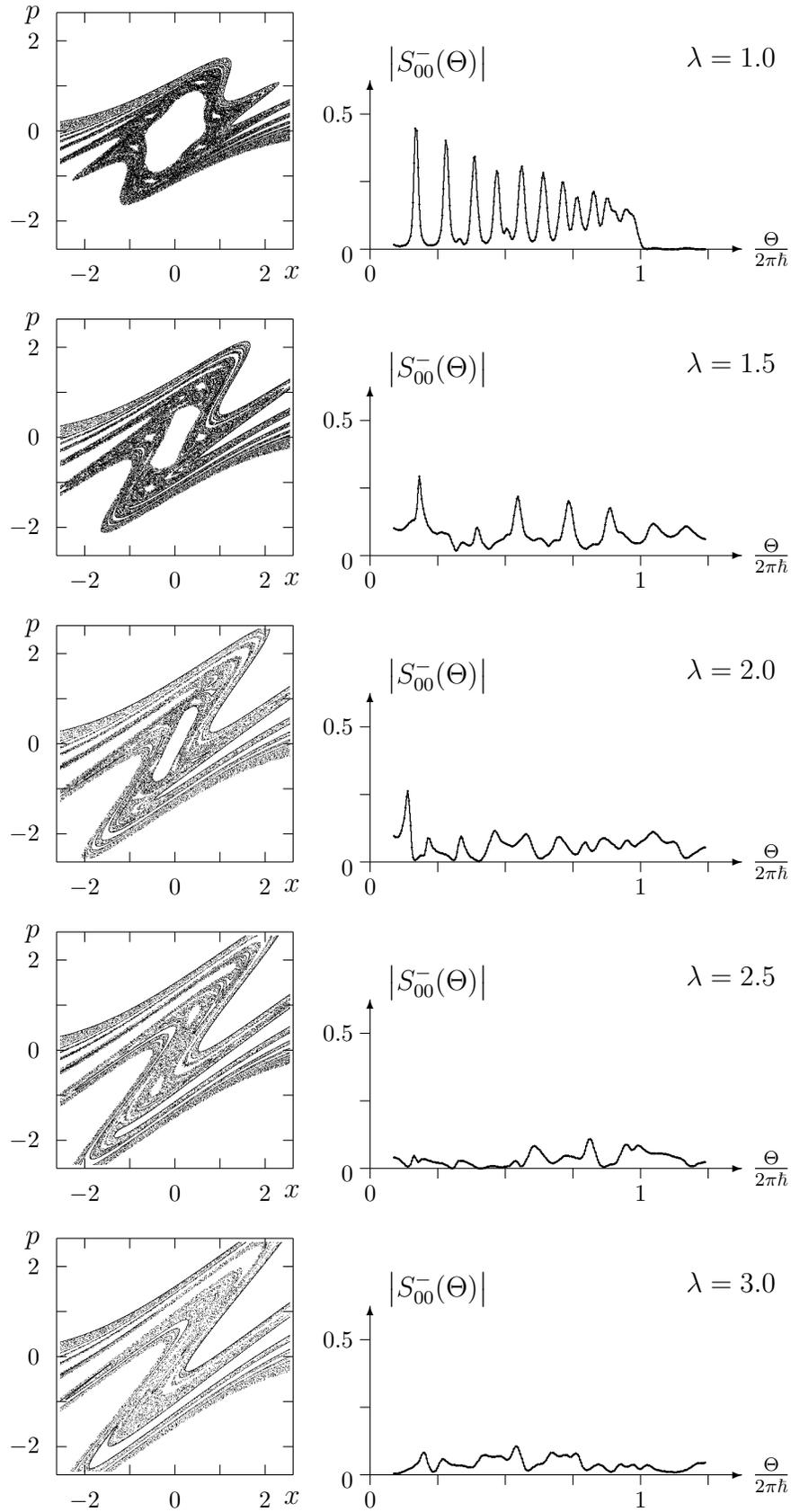


Abbildung 3.9: Der Übergang zwischen $\lambda = 1$ und $\lambda = 3$

Gleichzeitig mit dem Verschwinden der Stabilitätsinsel verschwinden auch die dynamischen Resonanzen, indem sie sich zu ERICSON-Fluktuationen überlagern.

Stabilitätsinsel und dem quantenmechanischen Phänomen der dynamischen Resonanzen.

3.3 Kopplung an quasigebundene Zustände

In diesem Abschnitt sollen die Quasienergien, bei denen Resonanz auftritt, in erster Ordnung Störungstheorie berechnet werden. Ausgangspunkt für die Konstruktion des „ungestörten“ Systems ist die Stabilitätsinsel, in der quasigebundene Zustände existieren. Ein Streuzustand, der dieselbe Quasienergie wie ein quasigebundener Zustand, aber einen anderen Kanal hat, kann an den quasigebundenen Zustand koppeln, wodurch es zu Resonanz kommt.

Zur Illustration der Grundidee vergleichen wir unser System zunächst einmal mit dem durch den folgenden zeitunabhängigen HAMILTONoperator beschriebenen System:

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}p^2 + \lambda V(x) \quad \text{mit} \quad V(x) = -\frac{1}{\cosh^2 x}. \quad (3.48)$$

Das Energiespektrum dieses Systems ist für positive Energien kontinuierlich und für negative Energien diskret. Die negativen Energieeigenwerte E_k dieses Systems sind exakt berechenbar [32, § 23] und gegeben durch:

$$E_k = -\frac{1}{8}\hbar^2 \left(-(1 + 2k) + \sqrt{1 + \frac{8\lambda}{\hbar^2}} \right)^2 \quad (3.49)$$

mit

$$k \in \mathbb{N}, \quad k < s, \quad s = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{8\lambda}{\hbar^2}} \right). \quad (3.50)$$

Wir können nun „intuitiv“ diese Energieniveaus als Näherung für diejenigen Energien verwenden, die ein quasigebundenes Teilchen innerhalb der Stabilitätsinsel unseres zeitabhängigen Systems annehmen darf. Da die Energie nur „bis auf ein ganzzahliges Vielfaches von $2\pi\hbar$ erhalten“ ist, können Streuzustände mit positiver Quasienergie Θ an die quasigebundenen Zustände koppeln, wenn E von einem der E_k gerade ein ganzzahliges Vielfaches von $2\pi\hbar$ entfernt liegt. Wenn also die Kopplung an quasigebundene Zustände innerhalb der Stabilitätsinsel tatsächlich die Ursache für die dynamischen Resonanzen ist und wenn die oben vorgenommene Näherung berechtigt ist, so sind die Resonanzen ungefähr bei folgenden Quasienergien zu erwarten:

$$\Theta = E_k + n \cdot 2\pi\hbar \quad \text{mit} \quad k \in \mathbb{N}, \quad k < s, \quad (3.51)$$

wobei $n \in \mathbb{Z}$ so gewählt werden muß, daß $\Theta \in [0, 2\pi\hbar)$ erfüllt ist. n ist dadurch in Abhängigkeit von k eindeutig festgelegt.

Abb. 3.10 zeigt den numerisch berechneten Gesamt-Reflexionskoeffizienten für $\lambda = 1$, also die Summe aller für Abb. 3.5 berechneten Kanäle. Wenn wir Gleichung 3.51 für alle zulässigen k auswerten, erhalten wir sinnvolle Werte für Θ z. B. bei $n = 1$ und bei $n = 2$. Ein direkter Vergleich dieser Quasienergien mit den Resonanzen ergibt zunächst zwar keine gute Übereinstimmung, der Abstand zwischen zwei Maxima wird jedoch weitgehend

richtig vorhergesagt. Wir können die deutlich ausgeprägten Maxima als zu $n = 1$ gehörig identifizieren und die schwächeren Maxima als zu $n = 2$ gehörig, wobei die meisten der schwächeren Maxima von den stärkeren überlagert werden. Genaugenommen sieht man nur vier zu $n = 2$ gehörige Maxima, nämlich etwa bei $\Theta/(2\pi\hbar) = 0.26, 0.40, 1.04$ und 1.14 .

Eine einfache Verschiebung der aus Gleichung 3.51 gewonnenen Energien (formal: nicht ganzzahlige n) läßt diese näherungsweise richtige Vorhersage der Abstände deutlicher hervortreten. Für $n = 1$ werden im mittleren Θ -Bereich mehrere Maxima in guter Näherung getroffen; bei Annäherung an $\Theta/(2\pi\hbar) = 1$ stimmt die Näherung nicht mehr. Die sichtbaren zu $n = 2$ gehörenden Maxima werden verhältnismäßig gut vorhergesagt. Es scheint so, als läge das erste schwächere Maximum genau unter dem ersten starken Maximum bei $\Theta/(2\pi\hbar) \approx 0.14$.

Abb. 3.11 zeigt den numerisch berechneten Gesamt-Reflexionskoeffizienten für $\hbar = 0.05$ in Abhängigkeit von λ und Θ . Der Funktionswert ist qualitativ durch die Dichte der Bildpunkte dargestellt. Die durchgezogenen Linien zeigen die durch Gleichung 3.51 beschriebenen Quasienergien für $k \in \mathbb{N}$, $k < s$ und $n = 1$ als Funktion von λ . Die gestrichelten Linien zeigen dasselbe für $n = 2$. Offensichtlich sind die Resonanz-Quasienergien gegenüber den durch Gleichung 3.51 gegebenen Quasienergien zwar verschoben, zeigen

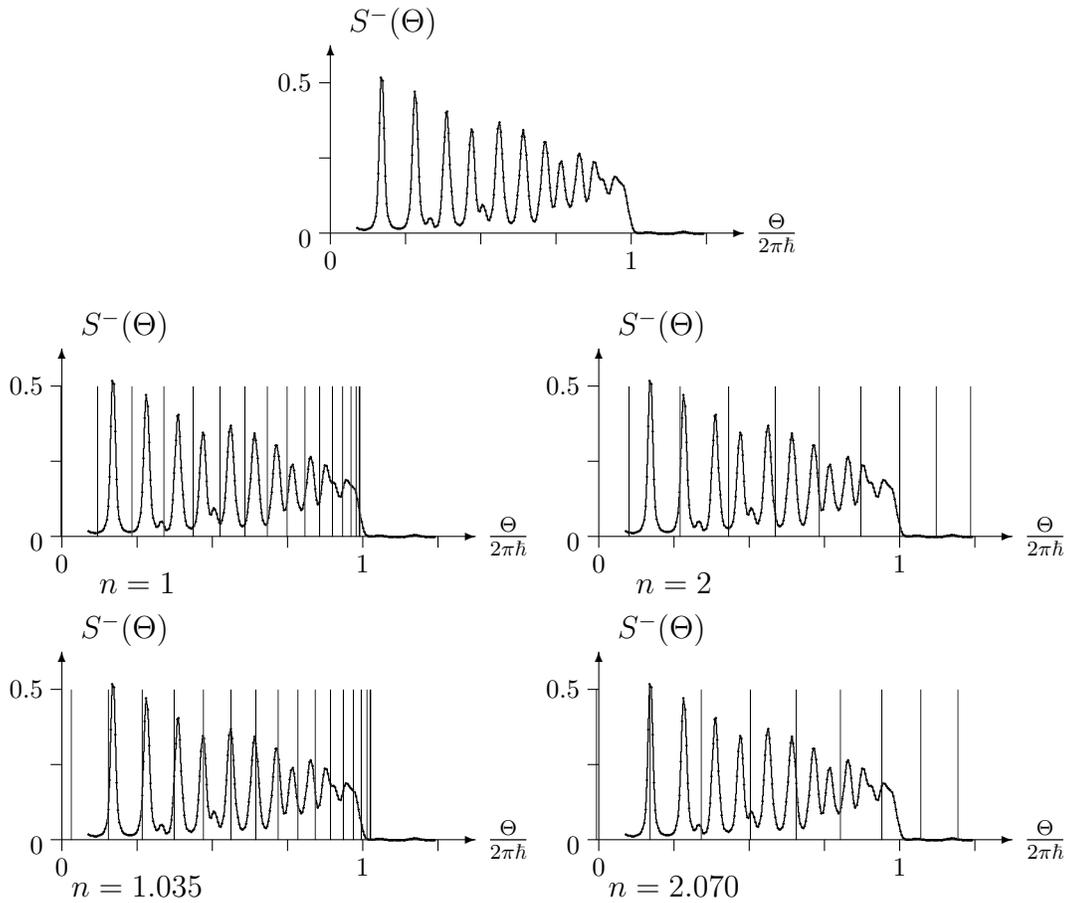


Abbildung 3.10: Vergleich von $S^-(\Theta)$ mit $E_k + n \cdot 2\pi\hbar$

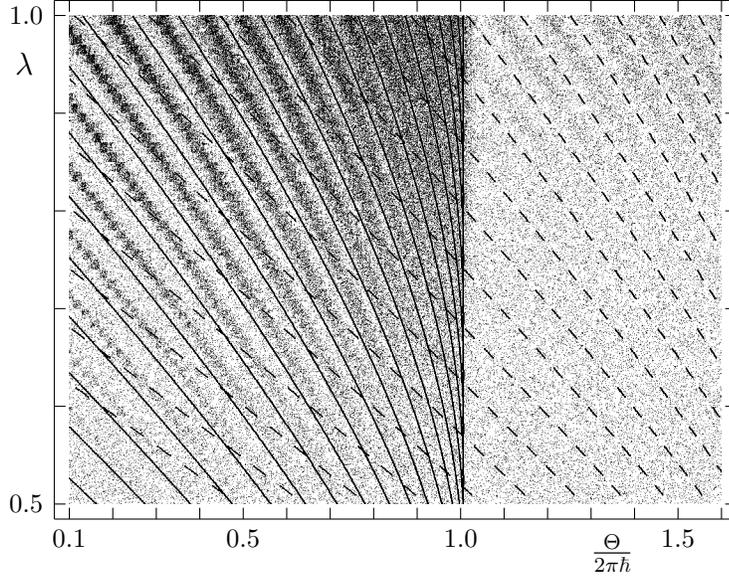


Abbildung 3.11: Reflexionskoeffizient als Funktion von Θ und λ für $\hbar = 0.05$

aber dieselbe Abhängigkeit von λ .

Abb. 3.12 zeigt ebenfalls den Gesamt-Reflexionskoeffizienten im Vergleich zu den verschobenen Energieniveaus mit $n = 1$ (durchgezogen) und $n = 2$ (gestrichelt), nur diesmal für festgehaltenes $\lambda = 1$ in Abhängigkeit von \hbar und Θ . Auch hier wiederum wird die Abhängigkeit von einem Parameter – in diesem Fall \hbar – richtig beschrieben.

Für genauere Untersuchungen ist es sinnvoll, zu einer Darstellung durch FOURIERREIHEN überzugehen. Wir betrachten einen allgemeinen zeitlich periodischen HAMILTONOPERATOR mit Periode 1:

$$H = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda V(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{-i2\pi n t}. \quad (3.52)$$

In unserem Fall mit einer unendlichen Summe von δ -Funktionen sind alle Koeffizienten $a_n = 1$. Wir verwenden nun den FLOQUET-ANSATZ zur Bestimmung von Lösungen der mit diesem H gebildeten SCHRÖDINGERGLEICHUNG $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t)$:

$$\psi(x, t) = u(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \Theta t} \quad (3.53)$$

mit einer zeitlich periodischen Funktion $u(x, t)$ mit Periode 1:

$$u(x, t) = u(x, t + 1). \quad (3.54)$$

Als FOURIERREIHE geschrieben lautet der Ansatz:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(x) e^{-i2\pi n t} e^{-\frac{i}{\hbar} \Theta t}. \quad (3.55)$$

Wir betrachten also eine Wellenfunktion $\psi(x, t)$ mit scharfer Quasienergie Θ , aber mit einer beliebigen, ortsabhängigen Überlagerung von Kanälen n . Einsetzen in die SCHRÖDIN-

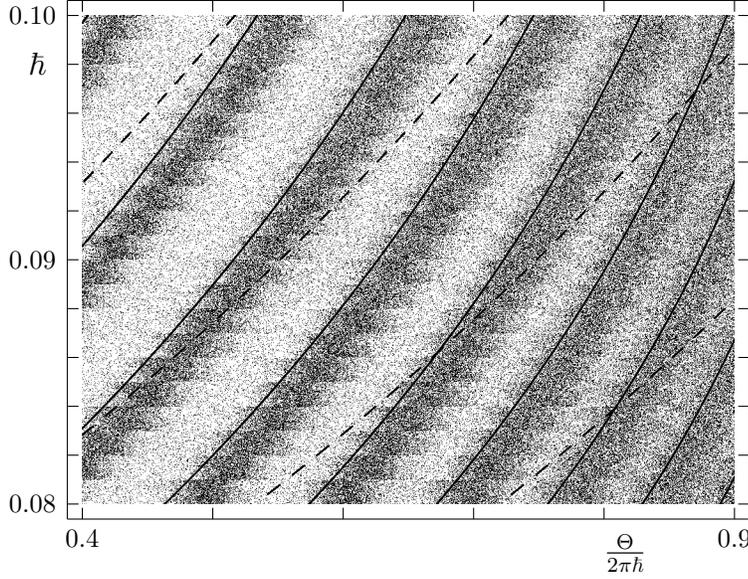


Abbildung 3.12: Reflexionskoeffizient als Funktion von Θ und \hbar für $\lambda = 1$

GERgleichung und Division durch $e^{-\frac{i}{\hbar}\Theta t}$ ergibt:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\Theta + n \cdot 2\pi\hbar) u_n(x) e^{-i2\pi n t} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n''(x) e^{-i2\pi n t} + \lambda V(x) \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m e^{-i2\pi m t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(x) e^{-i2\pi n t} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n''(x) e^{-i2\pi n t} + \lambda V(x) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} u_l(x) a_{k-l} e^{-i2\pi k t}. \tag{3.56}
\end{aligned}$$

Durch Koeffizientenvergleich bzgl. $e^{-i2\pi n t}$ erhalten wir

$$u_n''(x) = 2(\Theta + n \cdot 2\pi\hbar) u_n(x) - 2\lambda V(x) \sum_{l=-\infty}^{\infty} u_l(x) a_{n-l} \quad \forall n \in \mathbb{Z}. \tag{3.57}$$

Gleichung 3.57 ist die Darstellung der SCHRÖDINGERgleichung in der unendlich großen, diskreten Basis aller Kanäle zu einer festen Quasienergie.

Wir wollen nun die allein durch den Diagonalteil $n = l$ von Gleichung 3.57 beschriebene Dynamik als eine ungestörte Dynamik auffassen, die durch den Nichtdiagonalteil gestört wird. In der ungestörten Dynamik ist dann nach Konstruktion jeder Kanal n von den anderen entkoppelt und hat die folgende zeitunabhängige SCHRÖDINGERgleichung

$$\left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + a_n \lambda V(x) \right) u_n(x) = (\Theta + n \cdot 2\pi\hbar) u_n(x). \tag{3.58}$$

Wenn $V(x)$ durch V_0 nach oben beschränkt ist, ist Gleichung 3.58 lösbar für $\Theta + n \cdot 2\pi\hbar > V_0$ oder für $\Theta + n \cdot 2\pi\hbar = E_{kn}$, wobei $E_{kn} < V_0$ die zu dem zeitunabhängigen Potential $a_n \lambda V(x)$ gehörigen diskreten Energieniveaus durchläuft. Im Spezialfall mit $a_n = 1$ und $V(x) = -1/(\cosh^2 x)$ ist $V_0 = 0$ handelt es sich gerade um die in Gleichung 3.49 angegebenen E_k mit $k \in \mathbb{N}$, $k < s$. Die der Gleichung 3.51 zugrundeliegende „intuitive“ Näherung

entspricht hier also dem ungestörten Fall. Da der Diagonalanteil der Störung nach Konstruktion verschwindet, handelt es sich gleichzeitig um die Näherung erster Ordnung. Es bleibt noch zu zeigen, daß der Einfluß der Korrekturterme zweiter und höherer Ordnung „nicht zu groß“ ist.

In jedem Fall, in dem diskrete Eigenwerte E_{kn} existieren, sind diese eingebettet in das kontinuierliche Spektrum $\Theta + n \cdot 2\pi\hbar > V_0$ von Kanälen mit kleinerem n . In der Resolvente

$$R(\zeta) = (H - \zeta)^{-1} \quad \text{für } \zeta \in \mathbb{C} \quad (3.59)$$

und in der S-Matrix

$$S(\Theta) = 1 - 2\pi i T(\Theta) \quad \text{mit} \quad T(\Theta) = V - VR(\Theta)V \quad (3.60)$$

[33, §§ 14, 30] erscheinen solche Eigenwerte als Pole.

J. S. HOWLAND [34, 35] hat die S-Matrix in die komplexe Ebene fortgesetzt und gezeigt, daß bei eingeschalteter Störung die Pole die reelle Achse verlassen und auf das „unphysikalische Blatt“ wandern. Bei nicht zu starker Störung ist zu erwarten, daß sich die Pole noch in der Nähe der reellen Achse befinden. Anstelle einer Singularität verbleibt auf der reellen Achse ein Maximum des Matrixelements – eine Resonanz.

In unserem Fall sind alle Koeffizienten $a_n = 1$, so daß wir die Störung nicht von vorneherein als klein gegenüber dem ungestörten Term erkennen können. Wenn wir jedoch das numerische Resultat (Abb. 3.5) betrachten, stellen wir fest, daß in der S-Matrix – zumindest in der berechneten Spalte – die Diagonale dominiert und daß die Matrixelemente außerhalb der Diagonalen rasch abfallen, so daß höhere Kanäle nicht allzu stark besetzt werden. Damit ist erklärt, wieso die Resonanzen bei nicht zu starker Kickstärke λ in der Nähe der durch Gleichung 3.51 gegebenen Quasienergien bleiben.

Wenn wir λ erhöhen, werden zunehmend auch höhere Kanäle besetzt (siehe Abb. 3.6), der Einfluß der Störung wird stärker, die komplexen Pole der S-Matrix wandern in weite Entfernung von der reellen Achse, so daß sich die Resonanzen auf der reellen Achse zu ERICSON-Fluktuationen überlagern.

Kapitel 4

Beschreibung durch Phasenraumdichtefunktionen

4.1 Die WIGNER- und die HUSIMI-Darstellung

In Kapitel 2 wurde gezeigt, wie sich das Phasenraumportait des Systems bei Variation der Kickstärke λ verändert: Für kleine λ beobachten wir eine Stabilitätsinsel, die für größere λ verschwindet.

In Kapitel 3 wurden die quantenmechanischen Auswirkungen einer Änderung von λ untersucht: Für kleine λ treten dynamische Resonanzen in der S-Matrix auf, für große λ erhalten wir ERICSON-Fluktuationen.

Wie bereits erwähnt, haben R. BLÜMEL und U. SMILANSKY nachgewiesen, daß das Fehlen einer Stabilitätsinsel tatsächlich Ursache der ERICSON-Fluktuationen ist. Wesentlich war in diesem Zusammenhang das exponentielle Abfallen der Verweilrate eines klassischen Partikels im Streuzentrum.

Um das Bild zu vervollständigen, müssen wir noch einen direkten Zusammenhang zwischen dem Vorhandensein einer Stabilitätsinsel im Phasenraum und dem Auftreten der dynamischen Resonanzen in der S-Matrix finden. In Abschnitt 3.3 wurden bereits quasigebundene Zustände innerhalb der Stabilitätsinsel zur näherungsweisen Berechnung der Resonanz-Quasienergien herangezogen. In diesem Kapitel soll numerisch belegt werden, daß diese quasigebundenen Zustände während eines Streuprozesses tatsächlich besetzt werden und daß dies in direktem Zusammenhang mit den dynamischen Resonanzen steht.

Wenn wir einen Zusammenhang zwischen quasigebundenen quantenmechanischen Zuständen und der Stabilitätsinsel herstellen wollen, müssen wir zuerst eine Methode entwickeln, wie wir den quantenmechanischen Zustand in den Phasenraum einordnen. Naturgemäß ist es nicht möglich, einen quantenmechanischen Zustand durch einen Punkt im Phasenraum zu charakterisieren, da sein Ort und Impuls niemals gleichzeitig scharf definiert sein können. Bestenfalls können wir eine Verteilungsfunktion im Phasenraum angeben, ein quantenmechanisches Analogon einer klassischen Wahrscheinlichkeitsdichte.

Das bekannteste Beispiel einer solchen quantenmechanischen Phasenraumdichtefunktion ist die *WIGNER-Funktion* [21, § 2.1].

Im eindimensionalen Fall lautet die WIGNER-Funktion eines Zustandes $|\psi\rangle$:

$$\rho_W(x, p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int d\xi \langle x - \frac{\xi}{2} | \psi \rangle \langle \psi | x + \frac{\xi}{2} \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} p \xi\right). \quad (4.1)$$

Die WIGNER-Funktion ist im Phasenraum normiert:

$$\int dx \int dp \rho_W(x, p) = 1, \quad (4.2)$$

aber sie nimmt sowohl positive als auch negative Werte an und ist daher nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretierbar.

Ein anderer Ansatz zur Definition einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion im Phasenraum geht über ein Wellenpaket $|\varphi_{xp}\rangle$ mit minimalem Produkt aus Orts- und Impulsunschärfe:

$$\langle x' | \varphi_{xp} \rangle = (2\pi\Delta x^2)^{-1/4} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x' - \frac{(x' - x)^2}{2\Delta x^2}\right) \quad (4.3)$$

mit

$$\Delta x = \sqrt{\hbar/2}, \quad \Delta p = \sqrt{\hbar/2}, \quad (4.4)$$

so daß

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2. \quad (4.5)$$

Ein Analogon zur klassischen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion können wir nun durch die Übergangswahrscheinlichkeit des Zustandes $|\psi\rangle$ nach $|\varphi_{xp}\rangle$ definieren:

$$\rho_H(x, p) = (2\pi\hbar)^{-1} |\langle \varphi_{xp} | \psi \rangle|^2, \quad (4.6)$$

und wir erhalten die Phasenraumdichtefunktion nach K. HUSIMI – kurz: *HUSIMI-Funktion* – des Zustandes $|\psi\rangle$ [21, § 2.2].

Wie die WIGNER-Funktion, ist auch die HUSIMI-Funktion im Phasenraum normiert:

$$\int dx \int dp \rho_H(x, p) = 1. \quad (4.7)$$

Nach Konstruktion ist $\rho_H(x, p)$ im gesamten Phasenraum positiv und erfüllt somit alle Kriterien, die uns eine Interpretation als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion erlauben.

Anhand der HUSIMI-Funktion können wir nun den „Weg eines quantenmechanischen Teilchens durch den Phasenraum“ verfolgen. Insbesondere interessiert uns die Rolle, welche die Stabilitätsinsel für das quantenmechanische Teilchen spielt.

Abb. 4.1 zeigt die Zeitentwicklung der HUSIMI-Funktion eines Streuexperiments im nicht resonanten Fall. Es handelt sich um dasselbe Streuexperiment, das auch Abb. 3.1 und 3.2 zugrundeliegt. Der Funktionswert wird durch die Dichte der Bildpunkte dargestellt. Die Abbildung zeigt nicht das gesamte Orts- und Impulsfenster, sondern nur das Streuzentrum. Die Wellenpakete mit großer Orts- und kleiner Impulsunschärfe erscheinen in dieser Darstellung als sehr langgezogene ellipsenförmige Verteilungen, von denen wir nur einen kleinen Ausschnitt sehen können. Wir beobachten ein von links einlaufendes Wellenpaket, welches im Laufe des Streuprozesses den klassisch chaotischen Teil

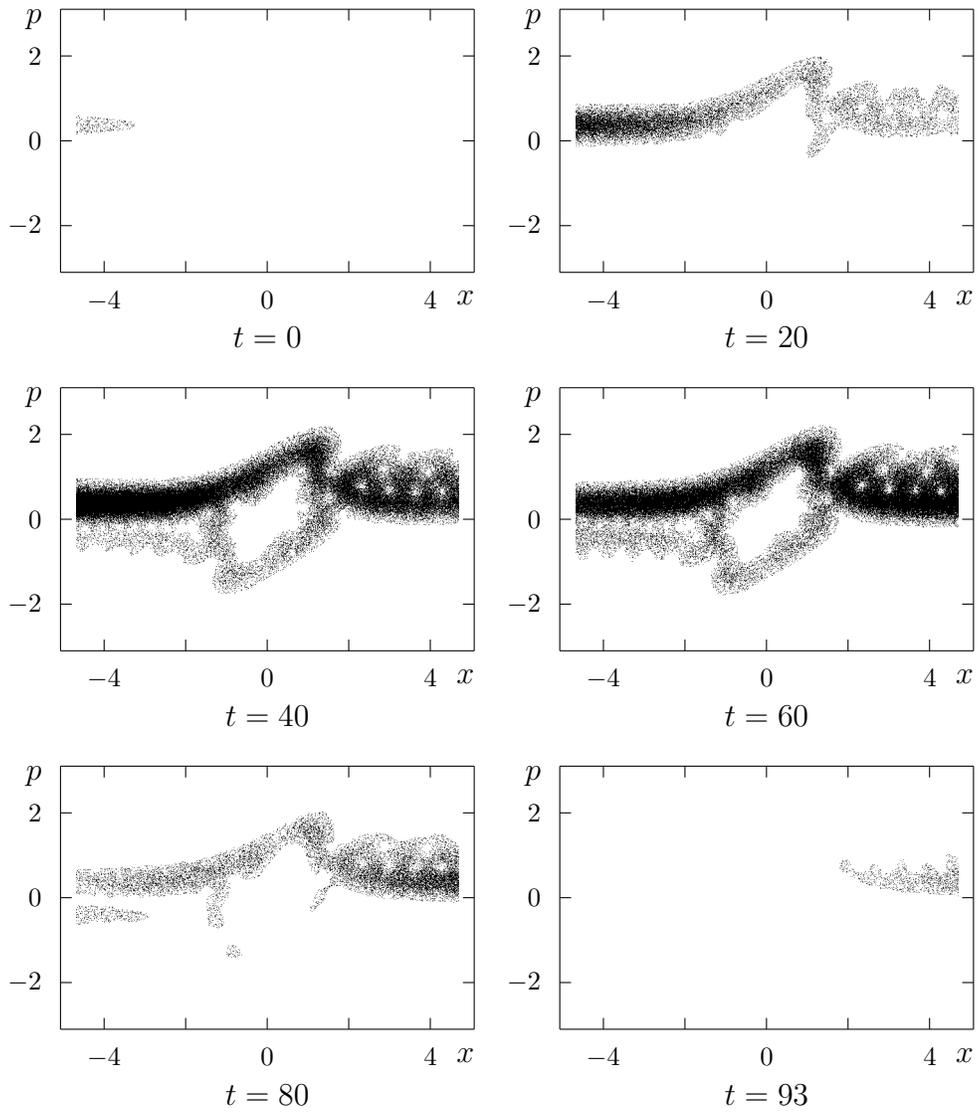


Abbildung 4.1: HUSIMI-Funktion im nicht resonanten Fall

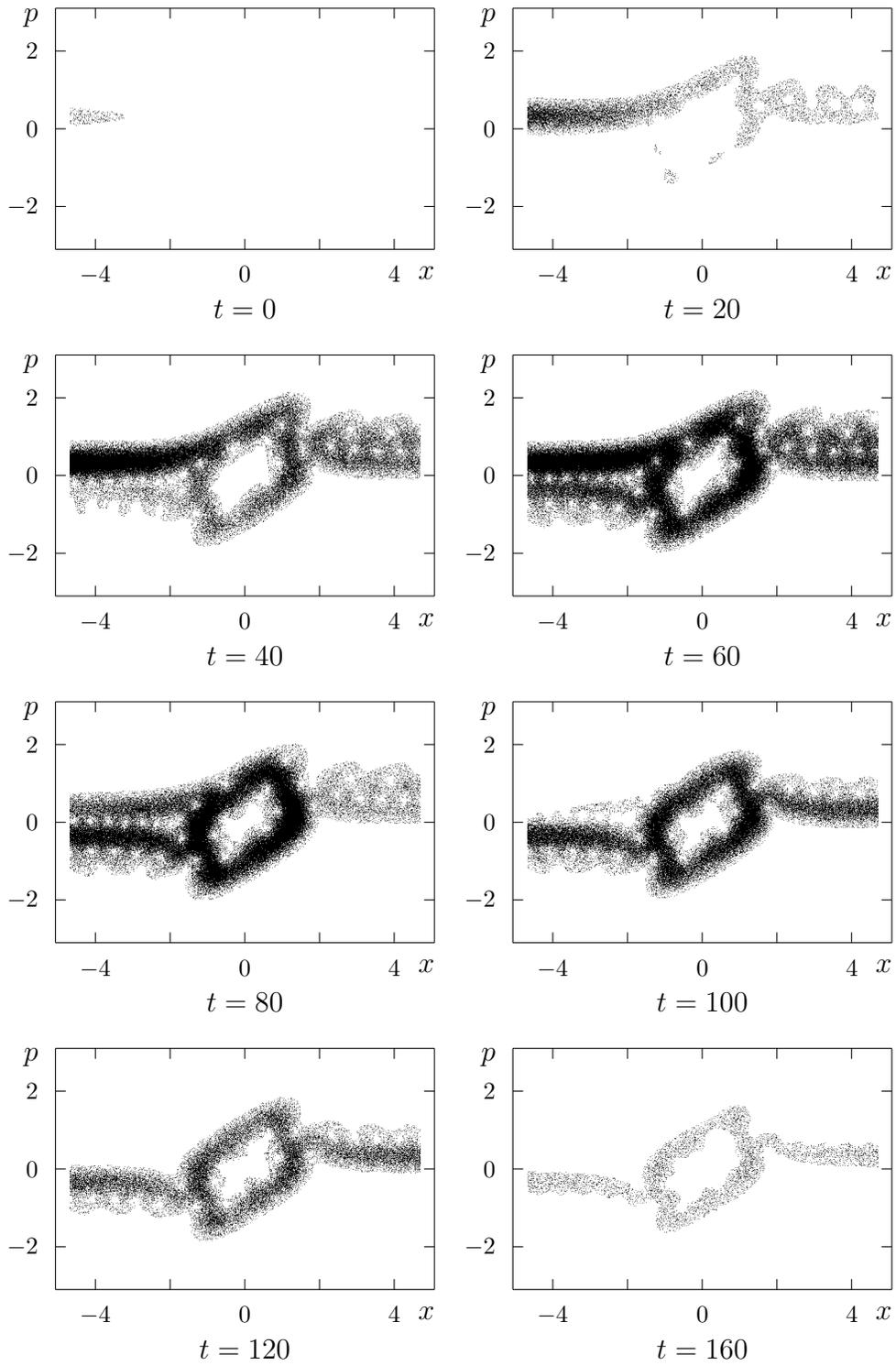


Abbildung 4.2: HUSIMI-Funktion im resonanten Fall

des Phasenraums einnimmt. Der Bereich der klassischen Stabilitätsinsel scheint auch vom quantenmechanischen Partikel nicht erreicht zu werden und tritt als „Loch“ im Nullpunkt deutlich hervor.

Abb. 4.2 zeigt die Zeitentwicklung der Husimi-Funktion für den resonanten Fall wie in Abb. 3.3 und 3.4. Bereits für $t = 20$ erkennt man, daß die Wellenfunktion hier stärker als im nicht resonanten Fall dazu tendiert, ein Orbit um die Stabilitätsinsel herum zu besetzen. Für $t = 60$ befindet sich ein großer Anteil der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in diesem Orbit. Das „Loch“ im Nullpunkt ist wesentlich kleiner als im nicht resonanten Fall. Wie wir noch sehen werden, befindet sich das Orbit zum Teil innerhalb der klassischen Stabilitätsinsel. Für $t = 80$ ist erkennbar, daß der größte Teil des Wellenpakets nach links reflektiert wird. Für größere t beobachten wir, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Orbit allmählich abnimmt und die Wellenfunktion gleichmäßig nach rechts und links abgestrahlt wird.

4.2 Tunneln in die Stabilitätsinsel

Die Darstellung eines Zustandes über eine Phasenraumdichtefunktion ermöglicht es uns, die Kopplung zwischen dem Streuzustand und gebundenen Zuständen näher zu betrachten.

Im Phasenraum stellen sich die gebundenen Zustände als geschlossene Kurven inner-

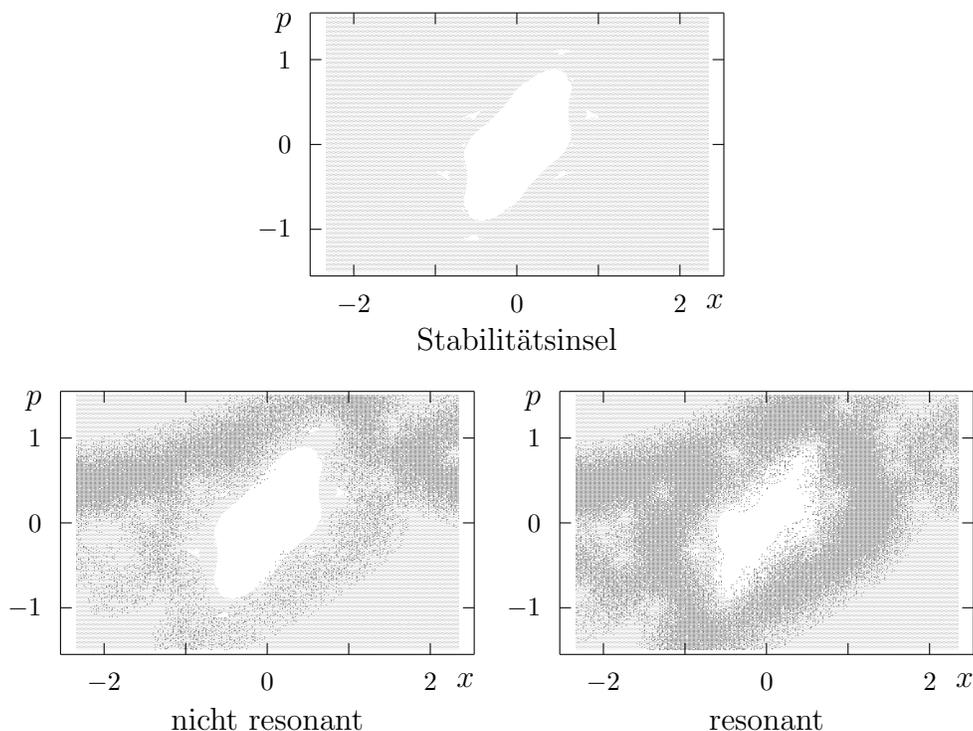


Abbildung 4.3: Tunneln in die Stabilitätsinsel bei $t = 60$

halb der Stabilitätsinsel dar. Ein klassisches Teilchen kann nicht von außen in die Stabilitätsinsel eindringen, weil es die KAM-Tori nicht durchdringen kann. Wir können dies ausnutzen, um die genaue Form der Stabilitätsinsel numerisch zu ermitteln: Wir lassen von weit außerhalb klassische Teilchen auf das Streuzentrum zufliegen und variieren den Anfangsort und -Impuls über einen sehr breiten Bereich, so daß der betrachtete Ausschnitt des Phasenraums im Rahmen des grafischen Auflösungsvermögens durch die Trajektorien ganz ausgefüllt wäre, wenn es sich um freie Teilchen handeln würde. Wenn wir nun das Potential wirken lassen, bleibt ein Bereich im Phasenraum frei, nämlich gerade die Stabilitätsinsel.

Für ein quantenmechanisches Teilchen stellen, allein schon wegen der Unschärfe, die KAM-Tori in der Stabilitätsinsel keine unüberwindlichen Hindernisse dar. Bestenfalls nimmt die Wahrscheinlichkeit ab, das Teilchen im Inneren der Insel anzutreffen. Analog zum Überwinden einer klassisch undurchdringlichen Potentialbarriere im Ortsraum können wir hier von einem *Tunneln* der Wellenfunktion im Phasenraum durch die KAM-Tori in die Stabilitätsinsel sprechen.

Abb. 4.3 zeigt eine Überlagerung der Stabilitätsinsel mit der HUSIMI-Funktion nach 60 Kicks. Schon im nicht resonanten Fall befindet sich ein sehr kleiner, aber noch erkennbarer Anteil der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des gestreuten Teilchens innerhalb der Stabilitätsinsel. Im resonanten Fall ist dieser Anteil wesentlich größer und im Diagramm bereits deutlich erkennbar.

Zur weiteren Überprüfung des in Kapitel 3 festgestellten Zusammenhangs zwischen dem Vorhandensein einer Stabilitätsinsel und den dynamischen Resonanzen können wir nun das Tunneln der HUSIMI-Funktion in die Stabilitätsinsel in Abhängigkeit von der Quasienergie messen und das Ergebnis mit dem Reflexionskoeffizienten vergleichen. Hierfür benötigen wir ein quantitatives Maß für das Tunneln: Zu dem Zeitpunkt, an dem die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen innerhalb des Streuzentrums anzutreffen, maximal ist,

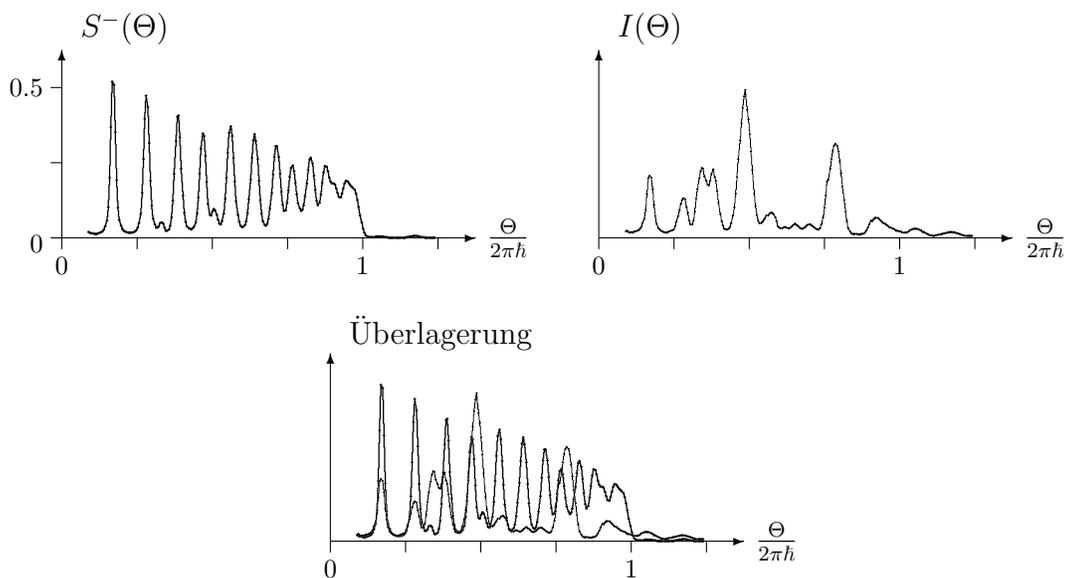


Abbildung 4.4: Vergleich von $S^-(\Theta)$ mit $I(\Theta)$ für $\lambda = 1$

berechnen wir das folgende Integral:

$$I := \iint_{\mathcal{I}} dx dp \rho_H(x, p). \quad (4.8)$$

Wir integrieren hier die HUSIMI-Funktion über die Stabilitätsinsel \mathcal{I} , deren genaue Form wir vorher durch Streuung klassischer Teilchen ermittelt haben, wie am Anfang dieses Abschnittes beschrieben. Wir berechnen also den Anteil der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens, der sich zu diesem Zeitpunkt innerhalb der Stabilitätsinsel befindet.

Abb. 4.4 zeigt den Gesamt-Reflexionskoeffizienten $S^-(\Theta)$ im Vergleich zu $I(\Theta)$ für $\lambda = 1$. Man erkennt eine qualitative Übereinstimmung der Maxima in beiden Kurven. Ein Unterschied besteht darin, daß die zu $n = 2$ gehörigen Maxima (n wie in Gleichung 3.51) bei I stärker hervortreten als bei S^- . Dieser Effekt macht sich bei kleineren λ weniger stark bemerkbar, so daß wir ein eindeutigeres Bild erhalten. Abb. 4.5 zeigt das Bild, das sich bei $\lambda = 0.5$ ergibt.

In Abb. 4.6 wird, nun wieder für $\lambda = 1$, die Tunnelrate $I(\Theta)$ mit den durch Gleichung 3.51 beschriebenen verschobenen Energieniveaus verglichen. Für $n = 1$ ist die näherungsweise richtige Vorhersage der Lage der Maxima weniger offensichtlich als beim Reflexionskoeffizienten in Abb. 3.10. Die Übereinstimmung für $n = 2$ hingegen ist hier wesentlich deutlicher erkennbar, da einige Maxima, die vorher von zu $n = 1$ gehörenden Maxima überlagert wurden, nun hervortreten.

Abbildung 4.7 zeigt I als Funktion von λ und Θ für dasselbe Experiment wie in Abb. 3.11. Abbildung 4.8 zeigt I als Funktion von λ und Θ wie in Abb. 3.12. Die durchgezogenen Linien stehen wieder für die durch Gleichung 3.51 beschriebenen Quasienergien mit $n = 1$, die gestrichelten Linien für diejenigen mit $n = 2$. Die Übereinstimmung zwischen der Tunnelrate I und den verschobenen Energieniveaus in ihrer Abhängigkeit

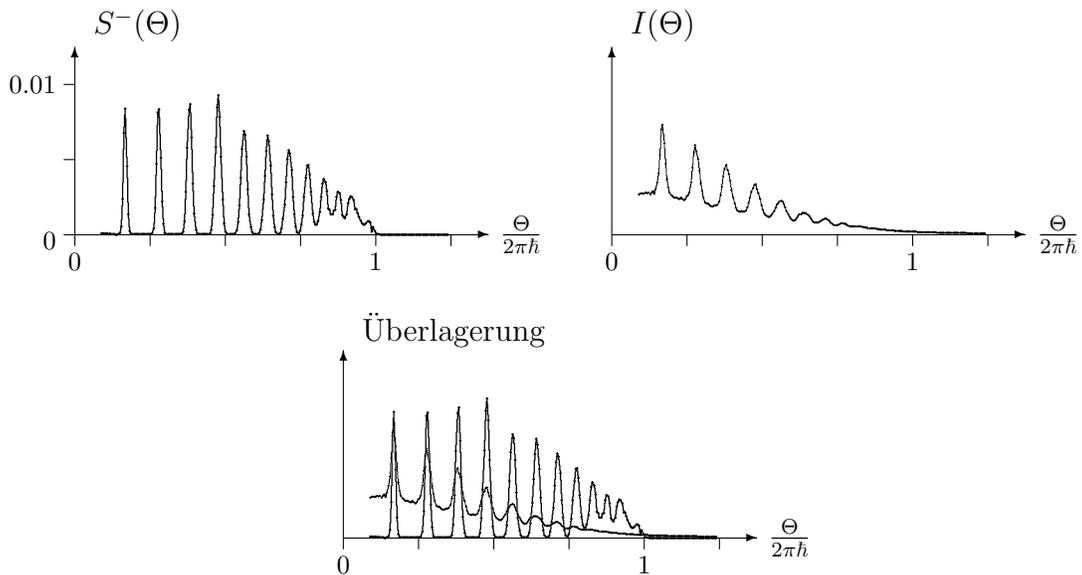


Abbildung 4.5: Vergleich von $S^-(\Theta)$ mit $I(\Theta)$ für $\lambda = 0.5$

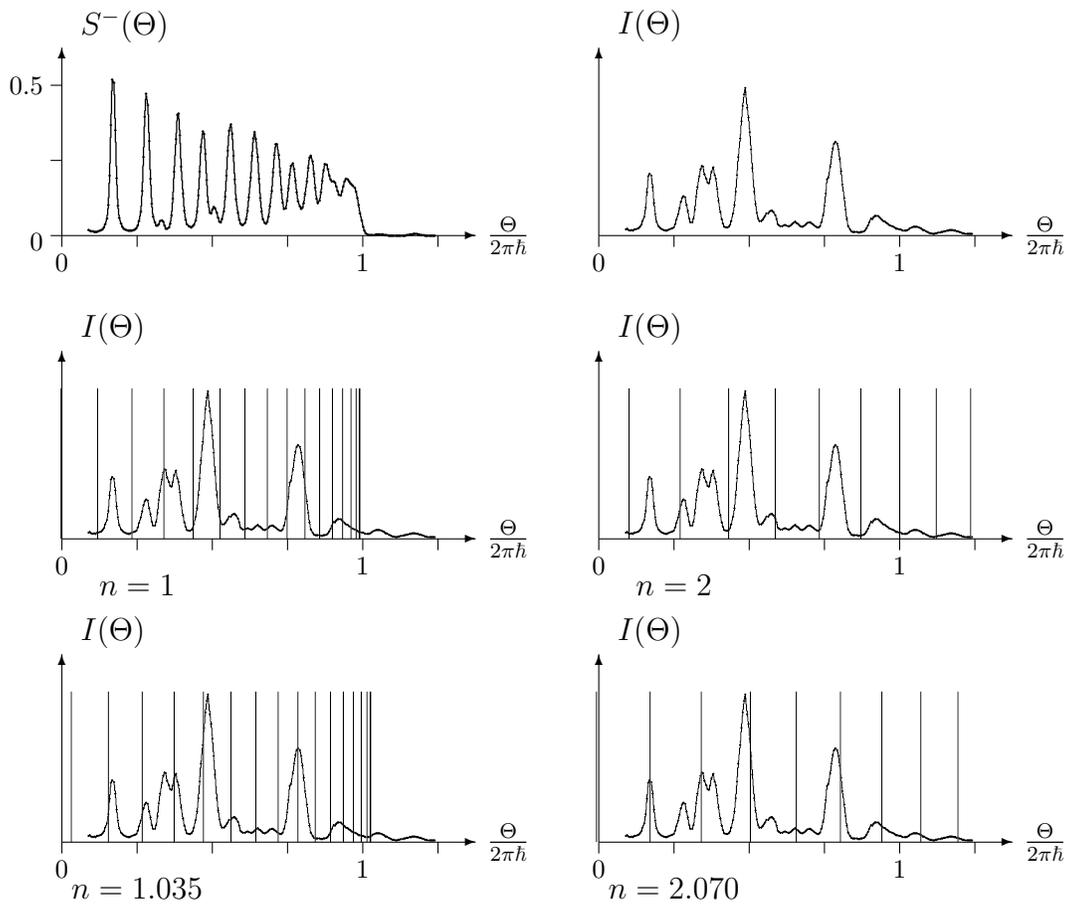


Abbildung 4.6: Vergleich von $I(\Theta)$ mit $E_k + n \cdot 2\pi\hbar$

von den Parametern λ bzw. \hbar ist deutlich erkennbar und belegt den Zusammenhang zwischen den dynamischen Resonanzen und einem Tunneln in die Stabilitätsinsel.

Es sei noch bemerkt, daß sich das Phänomen, daß die zu $n = 2$ gehörenden Resonanzen bei I stärker hervortreten als bei S^- sich auch in Abb. 4.7 und 4.8 reproduziert. Die stärksten Tunnelraten beobachten wir dort, wo sich die zu $n = 1$ und die zu $n = 2$ gehörenden Resonanzlinien schneiden.

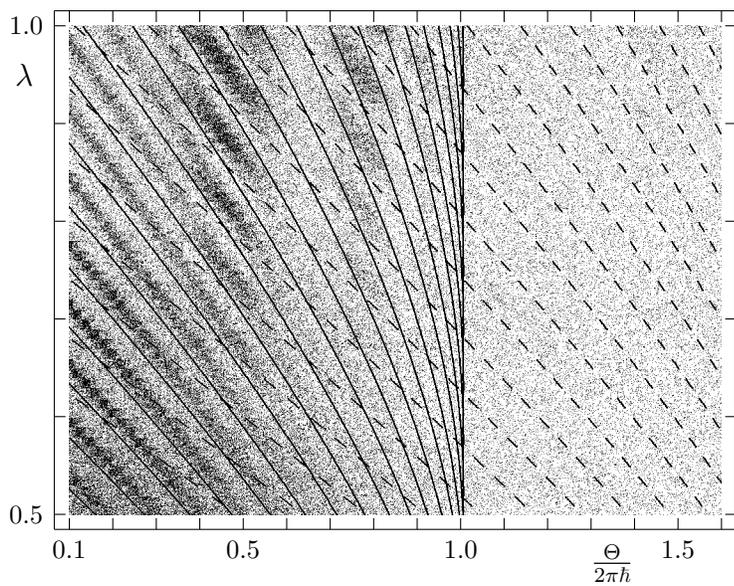


Abbildung 4.7: I als Funktion von Θ und λ für $\hbar = 0.05$

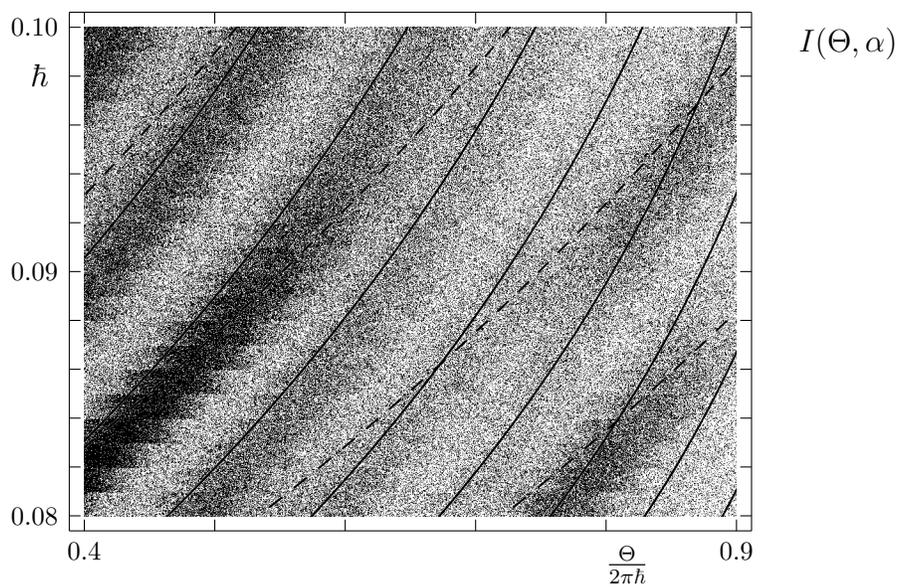


Abbildung 4.8: I als Funktion von Θ und \hbar für $\lambda = 1$

Kapitel 5

Ergänzungen und Ausblicke

5.1 Verallgemeinerung des Potentials

In dieser Arbeit war stets von dem Potential $V(x) = -1/\cosh^2 x$ die Rede. In diesem Abschnitt soll noch eine ganz andere Klasse von Potentialen behandelt werden. Zur Unterscheidung soll daher das bisherige Potential mit $V_M(x)$ (für MORSE) bezeichnet werden.

Als P. ŠEBA die dynamischen Resonanzen entdeckte, verwendete er das folgende Potential:

$$V(x) = V_2(x) := -e^{-x^2}. \quad (5.1)$$

In meinen ersten numerischen Rechnungen verwendete ich die folgende Verallgemeinerung dieses Potentials:

$$V(x) = V_\alpha(x) := -e^{-|x|^\alpha}. \quad (5.2)$$

Dieses Potential geht für $\alpha \rightarrow \infty$ in ein Kastenpotential über (siehe Abb. 5.1):

$$V(x) = V_\infty(x) = \begin{cases} -1 & \text{für } |x| \leq 1, \\ 0 & \text{für } |x| > 1. \end{cases} \quad (5.3)$$

Abb. 5.2 zeigt für verschiedene Werte von α die klassische Stabilitätsinsel im Vergleich mit dem Reflexionskoeffizienten $S_{00}^-(\Theta)$. Die Ähnlichkeit der dynamischen Resonanzen bei $V = V_M$ und $V = V_2$ ist unverkennbar und zeigt, daß es sich bei den dynamischen Resonanzen offensichtlich nicht um eine Besonderheit des Potentials V_M handelt. Wir beobachten auch, daß die kleiner werdende Stabilitätsinsel zu einem allmählichen Verschwinden der dynamischen Resonanzen korrespondiert, wie es auch nach den in dieser Arbeit gefällten Aussagen zu erwarten war.

Wir können nun die Ergebnisse von Abschnitt 3.3 auf $V = V_\alpha$ anwenden und die Kopplung des gestreuten Teilchens an quasigebundene Zustände innerhalb der Stabilitätsinsel untersuchen, um auf diese Weise eine Vorhersage für die Lage der Resonanzen zu finden. Leider gibt es keine Formel, welche die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände in einem zeitunabhängigen Potentialtopf mit $V = V_\alpha$ explizit angäbe. Als Ersatz habe ich daher die Energieniveaus semiklassisch nach BOHR und SOMMERFELD berechnet [32, § 48].

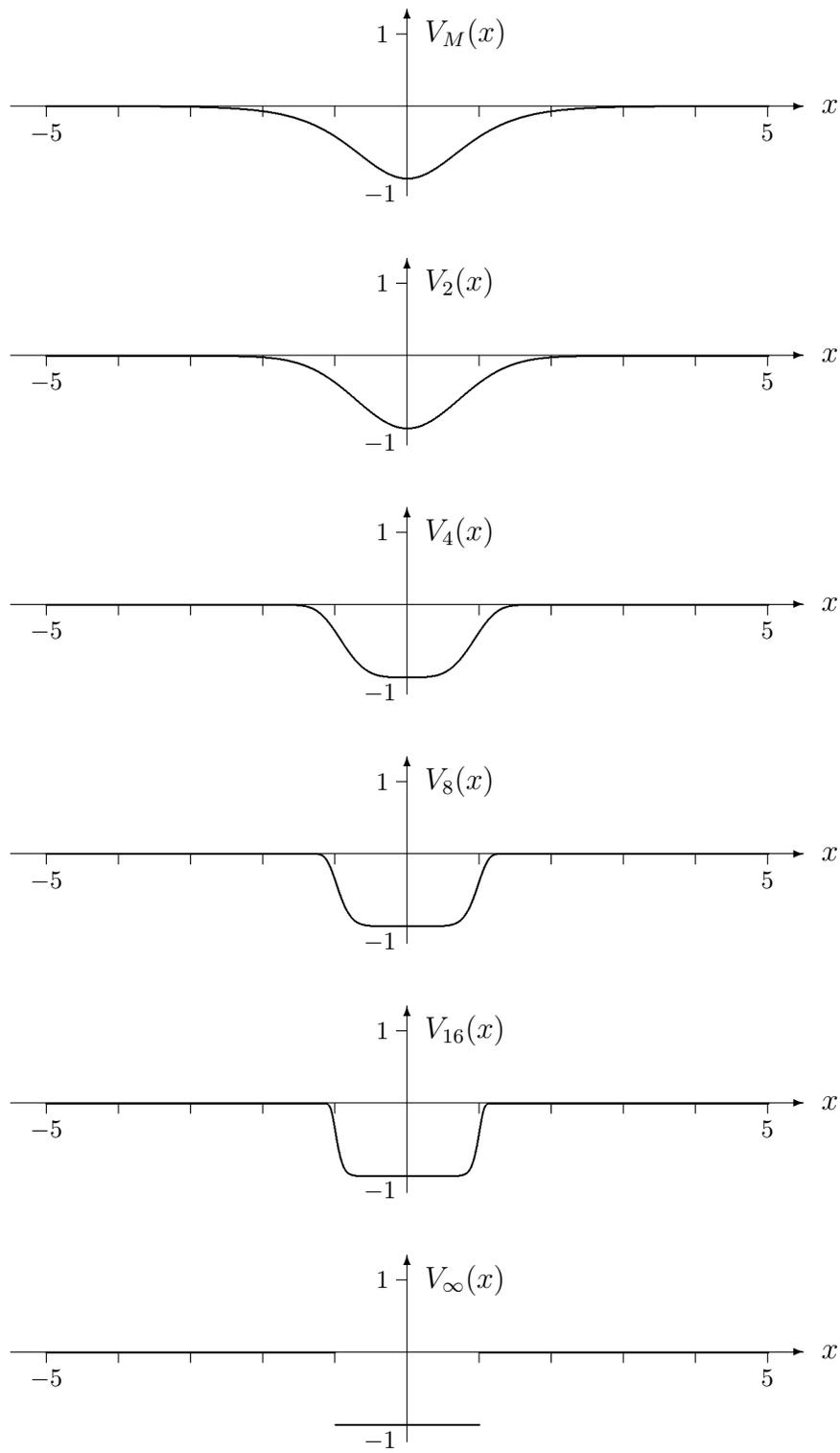


Abbildung 5.1: Verschiedene verwendete Potentiale $V(x)$

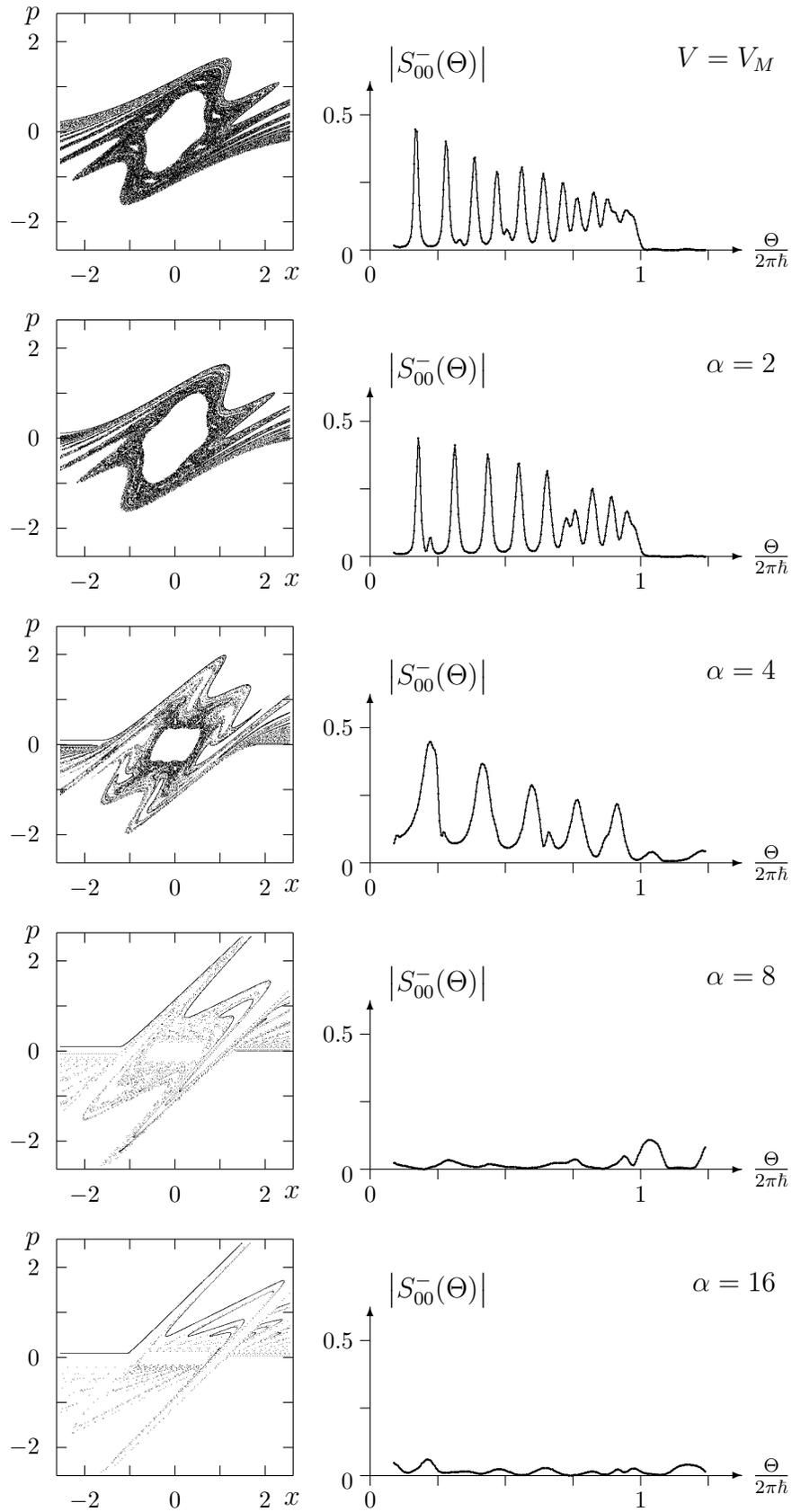


Abbildung 5.2: Stabilitätsinsel und Reflexionskoeffizient für verschiedene α

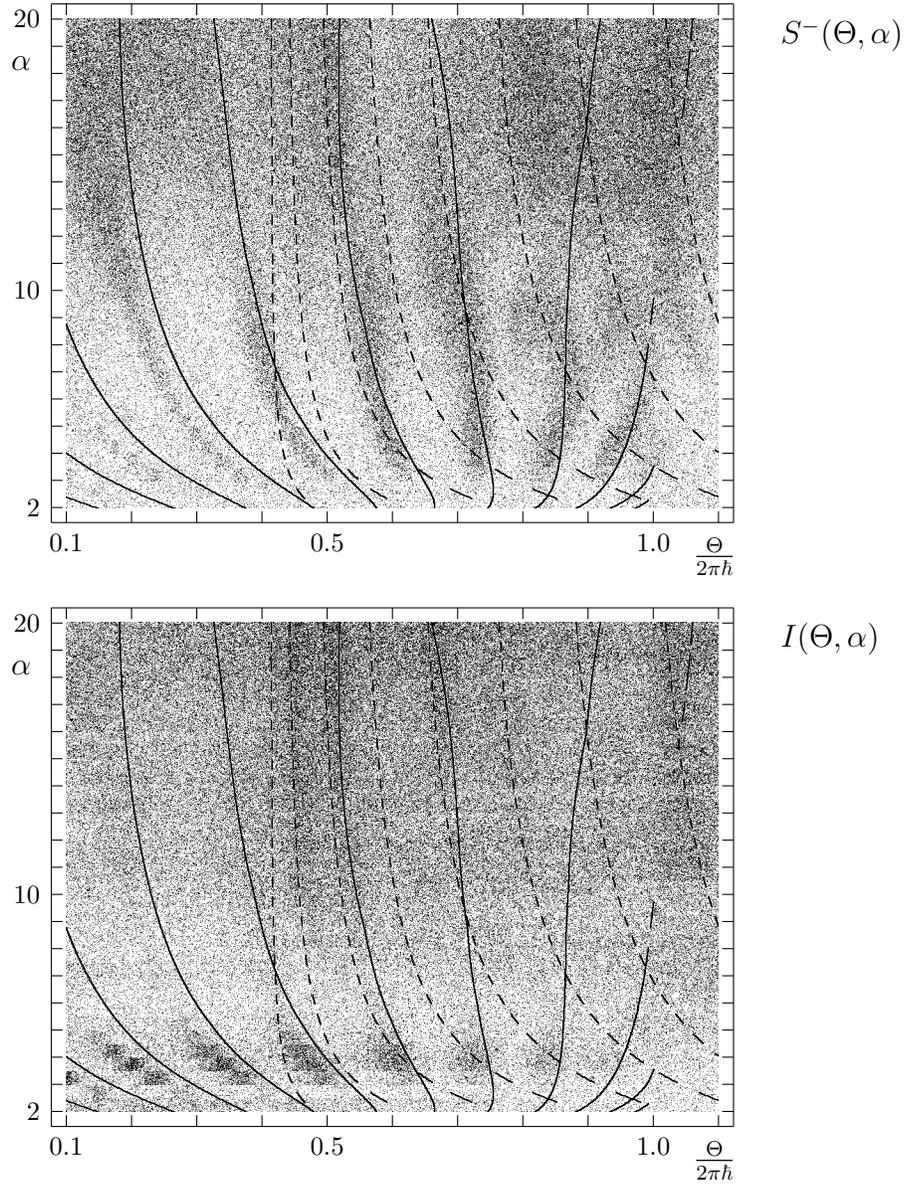


Abbildung 5.3: Reflexionskoeffizient und Tunnelrate in Abhängigkeit von α
 $V = V_\alpha$, $\hbar = 0.05$, $\lambda = 0.5$. Die eingezeichneten verschobenen Energieniveaus sind semi-
klassisch berechnet.

Ein gebundener Zustand mit der Energie E ist nach der BOHR-SOMMERFELDSchen Quantisierungsvorschrift genau dann stationär, wenn die von der geschlossenen klassischen Bahn umschlossene Fläche im Phasenraum ein halbzahliges Vielfaches von $2\pi\hbar$ ist:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(k + \frac{1}{2}\right) \quad \text{mit} \quad k \in \mathbb{N}_0. \quad (5.4)$$

Wir können nun das Integral numerisch berechnen und diejenigen Energien E_k notieren, für welche die Gleichung 5.4 erfüllt ist. Ab diesem Punkt ist es kein Problem mehr, wie in Gleichung 3.51 Vielfache von $2\pi\hbar$ zu addieren und die erhaltenen Quasienergien mit der Lage der Maxima zu vergleichen.

Abb. 5.3 zeigt den Reflexionskoeffizienten und die Tunnelrate in Abhängigkeit von der Quasienergie Θ und dem Parameter α , der die Form des Potentials charakterisiert, wobei die verschobenen semiklassischen Energieniveaus mit eingezeichnet sind. Das Ergebnis ist ähnlich wie in den entsprechenden Abbildungen für $V = V_M$: Die Resonanzen liegen stets in der Nähe der verschobenen Niveaus und folgen ihrem dynamischen Verhalten bei Variation eines Parameters – in diesem Falle α . Wiederum reagiert die Tunnelrate „empfindlicher“ auf Niveaus $E_k + n \cdot 2\pi\hbar$ mit $n > 1$ als der Reflexionskoeffizient, und wiederum beobachten wir die stärksten Tunnelraten dort, wo sich die zu $n = 1$ (durchgezogen) und $n = 2$ (gestrichelt) gehörenden Linien schneiden, wohingegen der Reflexionskoeffizient im Wesentlichen den zu $n = 1$ gehörenden Linien folgt.

5.2 Abschwächung der Periodizitätsforderung

Im letzten Abschnitt wurde eine Verallgemeinerung des Potentials vorgenommen, um sicher zu stellen, daß es sich bei den Ergebnissen dieser Arbeit nicht um eine ganz spezielle Eigenheit eines bestimmten Potentials handelt. Eine mindestens genauso einengende Eigenschaft, die von dem in dieser Arbeit betrachteten System verlangt wird, ist die strenge Periodizität der Kicks. In einem realen physikalischen Experiment wird es sich nicht völlig vermeiden lassen, daß die Periodizität gestört wird.

Aus diesem Grunde habe ich ebenfalls Rechnungen mit einem System vorgenommen, in dem die Periodendauer T mit einem Fehler Δ behaftet ist:

$$T = 1 + \xi \quad \text{mit} \quad \xi \in \left[-\frac{1}{2}\Delta, \frac{1}{2}\Delta\right], \quad (5.5)$$

wobei ξ eine aus dem Intervall $\left[-\frac{1}{2}\Delta, \frac{1}{2}\Delta\right]$ stammende, gleichverteilte Zufallszahl ist. Der Hamiltonoperator des Systems lautet dann

$$H_\Delta(t) = \frac{1}{2}p^2 + \lambda V(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - t_n), \quad (5.6)$$

wobei über die t_n nur vorausgesetzt wird, daß

$$t_{n+1} - t_n \in \left[1 - \frac{1}{2}\Delta, 1 + \frac{1}{2}\Delta\right] \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (5.7)$$

erfüllt ist.

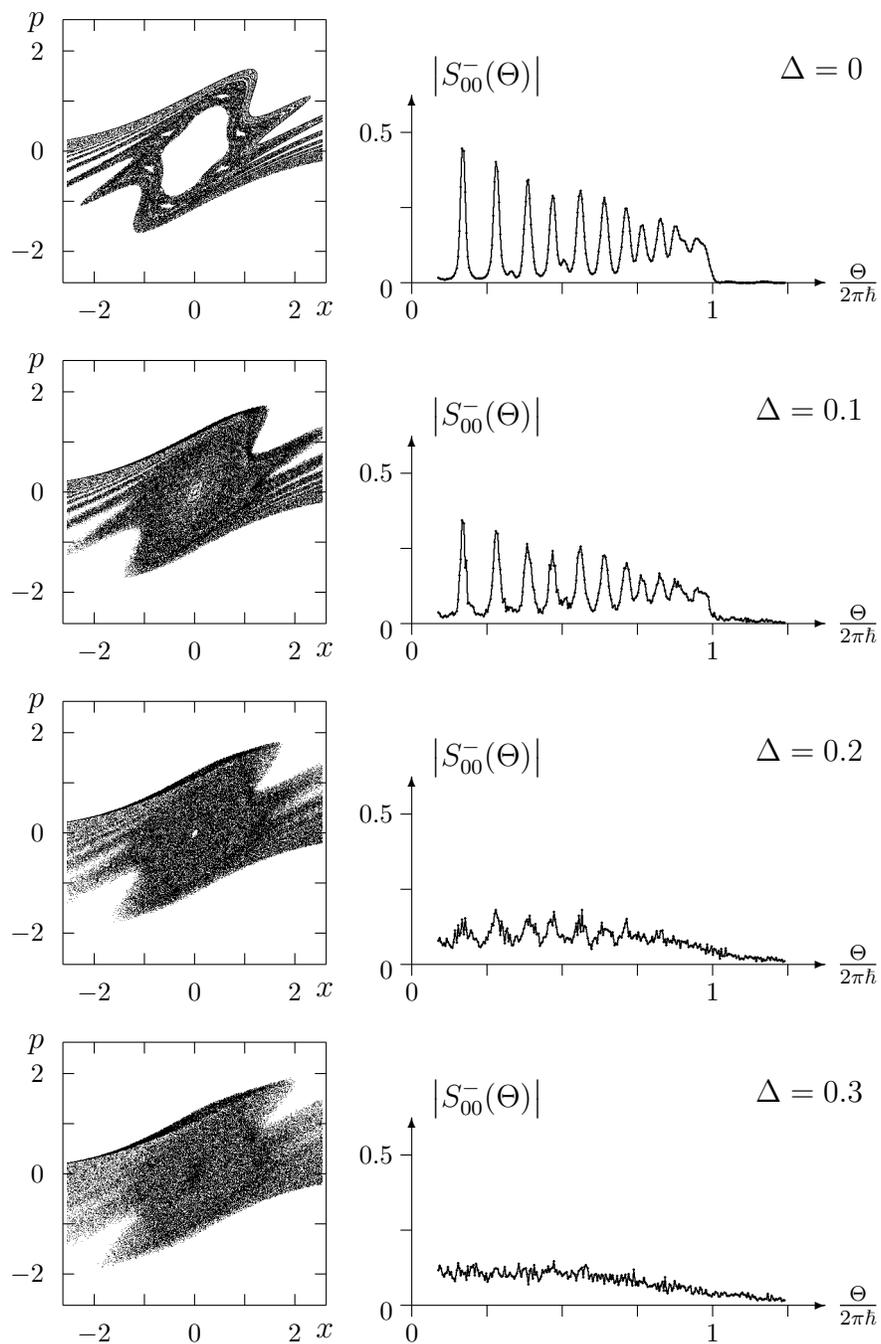


Abbildung 5.4: Stabilitätsinsel und Reflexionskoeffizient bei gestörter Periodizität

Abb. 5.4 zeigt die klassische Stabilitätsinsel im Vergleich mit dem Reflexionskoeffizienten $S_{00}^-(\Theta)$ für verschiedene Δ . Man erkennt, daß bei Störungen der Periodizität bis etwa 10% ($\Delta = 0.1$) die Struktur nur unwesentlich beeinflußt wird. Bei 20% ($\Delta = 0.2$) sind die dynamischen Resonanzen immer noch erkennbar, und erst bei 30% verschwinden die Maxima. Dies gibt Hoffnung, daß die dynamischen Resonanzen auch in einem realen System beobachtet werden können.

5.3 Der klassische Limes

Um den Übergang zwischen klassischem Chaos und Quantenchaos besser zu verstehen, wäre der nächste Schritt der Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$. Leider stoßen wir ziemlich schnell an die Grenzen der Rechenleistung heutiger Computer, da für kleiner werdende \hbar immer mehr Stützstellen zur Speicherung der Wellenfunktion erforderlich werden (siehe Abschnitt 3.1) und der Rechenaufwand schneller als linear mit der Anzahl der Stützstellen wächst.

Ein Ansatz, wie man die Anzahl der Stützstellen reduzieren könnte, liegt in der Verkleinerung des Ortsfensters bei gleichzeitigem Einführen von absorbierenden Randbedingungen [36]. Es würde dann genügen, das Ortsfenster so groß zu wählen, daß es den Anfangszustand – ein ins Streuzentrum laufendes GAUSSsches Wellenpaket – aufnehmen kann. Auslaufende Wellenpakete würden dann am Rand absorbiert, so daß man die Rechnung nicht abbrechen muß, sobald das erste Wellenpaket den Rand erreicht. Ein Nachteil dieser Methode liegt darin, daß es nicht ganz unproblematisch ist, die absorbierten Teile des Wellenpakets nach Kanälen getrennt aufzusummieren.

Eine andere Idee zielt auf eine völlig neue Rechenmethode, die gerade an kleine \hbar angepaßt ist. Man könnte z. B. von vorneherein in der HUSIMI-Darstellung rechnen und die Wellenfunktion als Überlagerung von GAUSS-Paketen handhaben. Es wäre dann möglich, den Anfangs- und Endzustand durch sehr wenige komplexe Zahlen zu charakterisieren, und meine Hoffnung ist, daß sich auch die Zwischenzustände durch eine Summe von hinreichend vielen GAUSS-Paketen gut genug approximieren lassen. Selbst bei 1000 GAUSS-Paketen hätten wir es immer noch mit weniger Zahlen zu tun als bei einer in Gestalt von 2^{16} komplexen Stützstellen vorliegenden Wellenfunktion. Eine Verallgemeinerung auf zwei oder mehr räumliche Dimensionen rückt damit in Reichweite.

5.4 Ein analytisch lösbares Modell

Das in dieser Arbeit betrachtete Modell hat den Nachteil, daß keine analytische Lösung der Schrödingergleichung bekannt ist. Es ist jedoch möglich, daß es ein ausgezeichnetes Potential $V(x)$ gibt, für das eine solche Lösung existiert. Es besteht insbesondere Grund zu der Annahme, daß ein „ δ -förmiger Potentialtopf“ mit

$$V(x) = V_\delta(x) := -\delta(x) \tag{5.8}$$

ein mathematisch exakt berechenbares Modell liefert.

Eine denkbare Verallgemeinerung des Potentials V_δ wäre eine Summe derartiger δ -Potentialtöpfe verschiedener Stärke v_k an verschiedenen Orten x_k :

$$V(x) = - \sum_k v_k \delta(x - x_k). \quad (5.9)$$

Für geeignete x_k und v_k ist es dann möglich, jedes Potential $V(x)$ durch eine solche Summe zu approximieren, insbesondere auch das in dieser Arbeit behandelte Potential $V(x) = -1/\cosh^2 x$. Ein Vergleich beider Modelle würde sicherlich zu einem noch tieferen Verständnis der „Fingerabdrücke“ des klassischen Chaos in der Quantenmechanik beitragen.

Danksagungen

Zum Ende dieser Arbeit möchte ich die Gelegenheit wahrnehmen, einigen Menschen meinen Dank für ihre Unterstützung auszusprechen.

Ich danke Herrn Prof. Dr. HAAKE für die Vergabe dieser Diplomarbeit und die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe.

Ich danke Herrn Dr. habil. ŠEBA, der für mich trotz der großen räumlichen Entfernungen ein ständiger Ansprechpartner war, für zahlreiche Gespräche, in denen er auf jede meiner Fragen einging und für die große Sorgfalt, mit der er meine Ergebnisse überprüfte.

Ich danke Frau Dr. ŠEBA, die während meines Aufenthalts in *Slemeno* so hervorragend für mich mit gekocht hat.

Ich danke dem *Nuclear Physics Institute* der *Czechoslovak Academy of Sciences* für die Einladung zu einem Forschungsaufenthalt in *Řež*.

Ich danke einer unbekanntem Frau aus *Erpeley am Rhein*, die auf der Zugfahrt von *Essen* nach *Prag* ihren Proviant mit mir teilte, weil ich vergessen hatte, Brote einzustecken. Ich gab ihr dafür das Versprechen, sie in meiner Arbeit zu erwähnen.

Ich danke meinen Kollegen DIRK SAHER und HARALD WIEDEMANN für ihre Hilfsbereitschaft und die freundliche Atmosphäre im Büro sowie für einige wertvolle Hinweise bei der Ausformulierung dieser Arbeit.

Ich danke Herrn Prof. Dr. ALBEVERIO, der sich bereit erklärt hat, den Mitbericht zu übernehmen.

Ich danke Herrn Prof. Dr. GRAHAM, der damit einverstanden ist, Herrn HAAKE, welcher sich zu diesem Zeitpunkt auf einem Forschungsaufenthalt in Frankreich befindet, in meiner Abschlußprüfung zu vertreten.

In besonderer Weise danke ich meinen Eltern, die nicht nur in finanzieller Hinsicht alles in ihrer Macht stehende getan haben, damit ich mich ganz auf mein Studium konzentrieren kann.

Ich danke meinem Bruder MARKUS GERWINSKI, der meine Arbeit immer wieder korrektur gelesen hat und der mir neuen Mut machte, als ich es nötig hatte. Ebenso danke ich meinen Freunden ANJA DREWITZ, OLAF KLEIN und THOMAS PAUKA für ihren Beistand.

Und irgendwie danke ich auch meinen Computern TIM (80286-PC) und ESERALDA (80486-PC), welche sich die ganze Zeit über nicht beklagt haben, teilweise über mehrere Wochen hinweg ohne Unterbrechung für mich zu rechnen.

Literaturverzeichnis

- [1] ISAAC NEWTON:
Mathematische Prinzipien der Naturlehre.
Cambridge, 1686
Deutsche Übersetzung: Berlin, 1872
Unveränderter Nachdruck: Herausgegeben von J. Ph. Wolfers, Darmstadt, 1963

- [2] H. POINCARÉ:
Sur le problème des trois corps et les équations de la dynamique.
Acta Mathematica **13** (1890) 1–270
entnommen aus: Œuvres de HENRI POINCARÉ **VII**
Paris 1952

- [3] T. ERICSON:
Fluctuations of nuclear cross sections in the “continuum” region
Phys. Rev. Lett. **5** (1960) 430–431

- [4] T. ERICSON:
A theory of fluctuations in nuclear cross sections
Annals of physics **23** (1963) 390–414

- [5] F. HAAKE:
Quantum signatures of chaos.
1. Auflage, Berlin, Heidelberg 1991

- [6] B. ECKHARDT, C. JUNG:
Regular and irregular potential scattering.
J. Phys. A: Math. Gen. **19** (1986) L829–L833

- [7] R. BLÜMEL, U. SMILANSKY:
Classical irregular scattering and its quantum-mechanical implications.
Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 477–480

- [8] R. BLÜMEL, U. SMILANSKY:
A simple model for chaotic scattering.
Physica D **36** (1989) 111–136

- [9] C. JUNG:
POINCARÉ map for scattering states.
J. Phys. A: Math. Gen. **19** (1986) 1345–1353
- [10] C. JUNG, H. J. SCHOLZ:
Cantor set structures in the singularities of classical potential scattering.
J. Phys. A: Math. Gen. **20** (1987) 3607–3617
- [11] B. ECKHARDT:
Fractal properties of scattering singularities.
J. Phys. A: Math. Gen. **20** (1987) 5971–5979
- [12] P. GASPARD, S. A. RICE:
Semiclassical quantization of the scattering from a classically chaotic repeller.
J. Chem. Phys. **90** (1989) 2242–2254
- [13] P. GASPARD, S. A. RICE:
Exact quantization of the scattering from a classically chaotic repeller.
J. Chem. Phys. **90** (1989) 2255–2262
- [14] S. BLEHER, E. OTT, C. GREBOGI:
Routes to chaotic scattering.
Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 919–922
- [15] R. BLÜMEL, U. SMILANSKY:
Random-matrix description of chaotic scattering: semiclassical approach.
Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 241–244
- [16] CH. JUNG, T. TEL:
Dimension and escape rate of chaotic scattering
from classical and semiclassical cross section data.
J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) 2793–2805
- [17] Y.-C. LAI, R. BLÜMEL, E. OTT, C. GREBOGI:
Quantum manifestations of chaotic scattering.
Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 3491–3494
- [18] R. BLÜMEL, B. DIETZ, C. JUNG, U. SMILANSKY:
On the transition to chaotic scattering.
J. Phys. A: Math. Gen. **25** (1992) 1483–1502
- [19] P. ŠEBA:
Irregular scattering in one-dimensional periodically driven systems.
(1991, unveröffentlicht)
- [20] P. ŠEBA:
Quantum irregular scattering in the presence of a classical stability island.
(1992, unveröffentlicht)

- [21] K. TAKAHASHI:
Distribution functions in classical and quantum mechanics.
Progress of th. phys. supp. **98** (1989) 109–156
- [22] K. YAJIMA:
Scattering theory for SCHRÖDINGER equations with potentials periodic in time.
J. Math. Soc. Japan **29** (1977) 729–743
- [23] J. S. HOWLAND:
Scattering theory for HAMILTONIANS periodic in time.
Indiana University Math. J. **28** (1979) 471–494
- [24] R. GRAHAM:
Chaos und Quantenchaos.
Vorlesung im SS 1992 an der Universität – GH – Essen
- [25] CH. F. F. KARNEY:
Long-time correlations in the stochastic regime.
Physica **8D** (1983) 360–380
- [26] J. D. MEIS, E. OTT:
MARKOV-tree model of intrinsic transport in HAMILTONIAN systems.
Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 2741
- [27] M. REED, B. SIMON:
Methods of modern mathematical physics.
1. Auflage, New York, San Francisco, London 1975
- [28] T. KINOSHITA:
On the interaction of mesons with the electromagnetic field. I.
Progress of Theoretical Physics **5** (1950) 477
- [29] A. S. DAWYDOW:
Quantenmechanik.
7. Auflage, Berlin 1987
- [30] R. G. NEWTON:
Scattering theory of waves and particles.
1. Auflage, New York 1966
- [31] N. I. ACHESER, I. M. GLASMANN:
Theorie der linearen Operatoren im HILBERT-Raum.
8. Auflage, Berlin 1981
- [32] L. D. LANDAU, E. M. LIFSCHITZ:
Lehrbuch der theoretischen Physik, Band III: Quantenmechanik.
8. Auflage, Berlin 1988

- [33] A. MESSIAH:
Quantum mechanics. Vol. II
Amsterdam 1966
- [34] J. S. HOWLAND:
Perturbation of embedded eigenvalues.
Bullet. Am. Math. Soc. **78** (1972) 280–283
- [35] J. S. HOWLAND:
PUISEUX series for resonances at an embedded eigenvalue.
Pacific J. Math. **55** (1974) 157–176
- [36] R. KOSLOFF, D. KOSLOFF:
Absorbing boundaries for wave propagation problems.
Journal of Computational Physics **63** (1986) 363–376