

Semiklassik jenseits periodischer Bahnen

Vom Fachbereich Physik
der Universität-GH Essen
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Dissertation

von
Peter Gerwinski
aus Essen

Essen, im Juni 1997

(Presto, sotto voce e legato)

The first system of music consists of two staves. The upper staff is in bass clef with a key signature of three flats (B-flat, E-flat, A-flat). It features a melodic line of eighth notes, grouped in pairs and then in groups of four, all under a single slur. The lower staff is also in bass clef with the same key signature, playing a rhythmic accompaniment of eighth notes in a similar grouped pattern.

The second system of music also consists of two staves. The upper staff continues the melodic line from the first system, ending with a fermata. The lower staff continues the accompaniment. The system concludes with a double bar line. Below the double bar line, the dynamic marking *ff* is written. To the right of the double bar line, there is a vertical line with a 'Ped.' marking below it and an asterisk (*) to its right.

Frédéric Chopin (1839)

Semiklassik jenseits periodischer Bahnen

Vom Fachbereich Physik
der Universität-GH Essen
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Dissertation

von

Peter Gerwinski

aus Essen

Hauptberichter: Prof. Dr. Fritz Haake

Mitberichter: Prof. Dr. Joachim Krug

Disputation: 4. Juni 1997

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Der gekickte Kreisel	7
2.1	Stroboskopische Abbildung	7
2.2	Koordinatensysteme auf der Kugeloberfläche	12
2.3	Floquet-Operator	18
3	Semiklassik in der Asymptotik der Wignerschen d-Funktion	21
3.1	Klassische Rotation als Randwertproblem	22
3.2	Die Wignersche d -Funktion	26
3.3	WKB-Approximation	29
3.4	Airy-Approximation	34
3.5	Semiklassische Spektren	42
3.6	Gleichförmige Approximation	45
3.7	Oszillator-Approximation	47
4	Kohärente Zustände als Basis des Zustandsraums	56
4.1	Kohärente Drehimpulszustände	56
4.2	Der Floquet-Operator des gekickten Kreisels in der Basis kohärenter Zustände	59
4.3	Semiklassische Näherung	61
4.4	Semiklassisches Spektrum	66
4.5	Bemerkungen zur Numerik	73
4.6	Sattelpunkt-Näherung 2. Ordnung	74

5	Dynamisches Tunneln	82
5.1	Symmetrien	82
5.2	Husimi-Funktion auf der Kugeloberfläche	85
5.3	Reguläre und chaotische Eigenzustände	86
5.4	Semiklassische Näherung regulärer Eigenzustände	89
5.5	Dynamisches Tunneln	93
5.6	Chaosunterstütztes Tunneln	100
6	Zusammenfassung und offene Fragen	112
A	Der gekickte Kreisel als Lagrangesches System	115
B	Quasimatrizen	120
C	Algorithmen zur Wignerschen d-Funktion	125
C.1	Exakte Berechnung der Wignerschen d -Funktion	126
C.2	WKB-Approximation	128
C.3	Airy-Approximation	130
C.4	Gleichförmige Approximation	132
C.5	Oszillator-Approximation	134

Kapitel 1

Einleitung

Zu Beginn dieses Jahrhunderts schien es, als sei die Physik zu einem Endpunkt gelangt. Der heute als *klassische Mechanik* bezeichnete Zweig der Physik war mit den Formalismen von Lagrange, Hamilton und Jacobi zu einer in sich geschlossenen Theorie herangereift, die im Prinzip die Behandlung jedes mechanischen Systems ermöglichte.

Mittlerweile wissen wir, daß die klassische Mechanik nur eine Näherung der tatsächlich in der Natur ablaufenden Vorgänge liefert. Unsere Welt gehorcht vielmehr – nach aktuellem Stand der Erkenntnis – den Gesetzen der *Quantenmechanik*. Trotzdem liefert die klassische Mechanik in den meisten Fällen eine erstaunlich genaue Beschreibung der Wirklichkeit. Dies liegt daran, daß die Quantenmechanik das Plancksche Wirkungs- oder Drehimpulsquantum \hbar als Parameter enthält und daß der numerische Wert dieses Parameters, gemessen an den Maßstäben unserer Alltagserfahrung, überaus klein ist.

Phänomene, bei denen der Drehimpuls von der Größenordnung \hbar ist, müssen quantenmechanisch behandelt werden, während Systeme, deren Drehimpuls groß verglichen mit \hbar ist, durch die wesentlich einfacheren Gesetze der klassischen Mechanik beschrieben werden können. Man sagt, die klassische Mechanik sei als der Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ in der Quantenmechanik enthalten.

In der Pionierzeit der Quantenmechanik wurde vielfach versucht, diese aus der klassischen Mechanik durch zusätzliche Postulate zu gewinnen [1]. Ein Beispiel hierfür ist das Bohrsche Postulat der Drehimpulsquantelung, das die aus der modernen Quantenmechanik bekannte Struktur des Spektrums der Drehimpulsoperatoren qualitativ richtig widerspiegelt. Man erhält auch eine vernünftige Näherung an eine quantenmecha-

nische Wellenfunktion, wenn man eine Wahrscheinlichkeitswelle mit der klassischen Wirkung als Phase entlang einer klassischen Bahn lokalisiert (siehe zum Beispiel [2], Kapitel VII). Dies sind *semiklassische Quantisierungsregeln*, die motivieren, daß die klassische Mechanik tatsächlich als Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ aus der Quantenmechanik hervorgeht.

In den letzten Jahrzehnten stellte sich heraus, daß der Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$ nicht so unproblematisch vonstatten geht, wie man lange Zeit gehofft hatte. Insbesondere gibt es klassische Systeme, deren Eigenschaften denen eines beliebigen Quantensystems krass zu widersprechen scheinen: *chaotische Systeme*.

Chaotische Systeme wurden erstmalig gegen Ende des letzten Jahrhunderts von Poincaré identifiziert (siehe zum Beispiel [3]). Sie zeichnen sich dadurch aus, daß kleine Abweichungen in den Anfangsbedingungen exponentiell anwachsen und auf diese Weise langfristige Vorhersagen unmöglich machen. Während in regulären Systemen kontinuierliche Scharen periodischer Bahnen existieren, treten periodische Bahnen in chaotischen Systemen höchstens isoliert auf. Die oben angesprochenen semiklassischen Quantisierungsregeln funktionieren nur für reguläre Systeme und versagen für chaotische.

Im Jahre 1970 gelang es Gutzwiller, diesen Mangel zu beheben [4, 5], indem er die nach ihm benannte *Spurformel* veröffentlichte: Jede isolierte periodische Bahn leistet einen Beitrag zu der Spur eines iterierten *semiklassischen Propagators*; die Kenntnis aller dieser Spuren bedeutet die Kenntnis des Spektrums des Propagators und somit der gesamten quantenmechanischen Information. Die konkrete Anwendung der Gutzwillerschen Spurformel auf ein physikalisches Modell ist bisher allerdings nur in Ausnahmefällen gelungen, bei denen die Semiklassik bereits exakt ist. Hierbei handelt es sich um Varianten der „Katzenabbildung“ („cat map“) [6] sowie um Billards auf Flächen mit konstanter negativer Krümmung [7].

Ein wesentliches Hindernis bei der Anwendung der Gutzwillerschen Spurformel ist die *exponentielle Proliferation* der periodischen Bahnen: mit der Periodenlänge wächst die Zahl der periodischen Bahnen mindestens exponentiell an. Hierdurch wird bereits in Frage gestellt, ob eine unendliche Summe über alle diese Bahnen überhaupt noch konvergieren kann. Aber selbst wenn es – wie in manchen Systemen der Fall – gelingt, Konvergenz durch Resummationstechniken aufrechtzuerhalten, sieht man sich immer noch dem Problem gegenüber, genügend Bahnen zu finden.

Darüberhinaus gibt es starke Hinweise darauf, daß die in den klassischen periodischen Bahnen enthaltene Information gar nicht ausreicht

und es notwendig ist, zusätzliche Beiträge sogenannter *Geisterbahnen* [8] sowie *kollektive Beiträge* periodischer Bahnen in der Spurformel zu berücksichtigen. (Geisterbahnen werden in dieser Arbeit ab Kapitel 3 behandelt; kollektive Beiträge sind Gegenstand aktueller Forschung von H. Schomerus und M. Sieber [9].)

In dieser Arbeit sollen alternative Möglichkeiten untersucht werden, den semiklassischen Limes in einem Quantensystem auszuführen, dessen klassisches Gegenstück chaotisch ist. Das behandelte Modell ist der *geklickte Kreisel*, der in Kapitel 2 vorgestellt wird.

In Kapitel 3 wird gezeigt, wie sich im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ klassische Eigenschaften in der Quantenmechanik des Systems, beschrieben durch die *Wignersche d -Funktion*, wiederfinden lassen.

Kapitel 4 zeigt, wie eine spezielle Klasse von Zuständen, *kohärente Zustände*, eingesetzt werden können, um im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ klassische Größen in der Quantenmechanik wiederzufinden und umgekehrt ein vollständiges semiklassisches Spektrum aus der Kenntnis endlich vieler Geisterbahnen zu extrahieren.

In Kapitel 5 wird ein Ansatz zu einer Verallgemeinerung der kohärenten Zustände auf allgemeinere *Wellenpakete* vorgestellt. Es wird gezeigt, wie sich mit Hilfe dieser Wellenpakete eine semiklassische Näherung für den *regulären* Anteil des Spektrums gewinnen läßt, und schließlich wird diese Methode auf das Phänomen des *dynamischen Tunnelns* angewandt.

Kapitel 2

Der gekickte Kreisel

In diesem Kapitel wird das Modellsystem des *gekickten Kreisels* vorgestellt. Klassische und quantenmechanische Eigenschaften des Systems werden aufgelistet, wobei quantenmechanische Rechentchniken bis zum nächsten Kapitel zurückgestellt werden.

2.1 Stroboskopische Abbildung

Mit „gekickter Kreisel“ [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16] wird eine Klasse von Systemen bezeichnet, deren Zustandsvariable ein dreidimensionaler Drehimpulsvektor (bzw. Drehimpulsvektoroperator im quantenmechanischen Fall) ist, der zeitlich periodisch räumlichen Drehungen unterworfen wird.

In dieser Arbeit werden zwei Arten von räumlicher Drehung betrachtet:

1. Drehung um einen festen Winkel (im folgenden: *Rotation*) und
2. Drehung proportional zu einer Komponente des Vektors (im folgenden: *Torsion*).

Die innerhalb einer Zeitperiode ausgeführten Rotationen und Torsionen definieren eine Abbildung, die das System um eine Zeitperiode propagieren läßt. Dies ist die *stroboskopische Abbildung*, die die komplette Information über die Dynamik des Systems enthält.

Ein einfaches Beispiel für einen gekickten Kreisel ist die folgende Abbildungsvorschrift:

1. Rotation um den Winkel $\beta = \pi/2$ um die y -Achse,

2. Torsion proportional zu einer *Kickstärke* k um die z -Achse.

Wenn $J_x^{(n)}, J_y^{(n)}, J_z^{(n)}$ die Komponenten eines klassischen Drehimpulses zum Zeitpunkt n bezeichnen (n ist eine ganze Zahl; die Periodendauer wird der Einfachheit halber gleich 1 gesetzt), so lauten die Komponenten zum Zeitpunkt $n + 1$:

$$\begin{aligned} J_x^{(n+1)} &= J_z^{(n)} \cos(kJ_x^{(n)}) + J_y^{(n)} \sin(kJ_x^{(n)}), \\ J_y^{(n+1)} &= -J_z^{(n)} \sin(kJ_x^{(n)}) + J_y^{(n)} \cos(kJ_x^{(n)}), \\ J_z^{(n+1)} &= -J_x^{(n)}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Dieser spezielle gekickte Kreisel ist bereits Gegenstand intensiver klassischer und quantenmechanischer Untersuchungen gewesen [8, 14, 15] und wird auch in Kapitel 4 dieser Arbeit eine besondere Rolle spielen.

Die Bezeichnung „Kreisel“ ist hier lediglich als Metapher für die Dynamik eines Drehimpulsvektors zu verstehen, der in einem homogenen Kraftfeld präzidiert und darf nicht überinterpretiert werden. Man kann sich beispielsweise die Präzession eines magnetischen Moments (Spin) in einem zeitlich veränderlichen Magnetfeld vorstellen. Keineswegs hingegen trifft die Vorstellung einer rotierenden Masse zu, die den Drehimpuls erzeugt. (Der Vollständigkeit halber wird in Anhang A vorgeführt, wie sich der gekickte Kreisel mit Hilfe einer kanonischen Transformation auf die – kompliziertere – Dynamik eines mechanischen Drehimpulses abbilden läßt.)

Die Vorstellung einer zeitlich kontinuierlichen Rotation und einer instantanen Torsion ist nicht notwendig; der umgekehrte Fall stellt eine völlig äquivalente Beschreibung dar. In einer experimentellen Realisierung des gekickten Kreisels wurden zum Beispiel kleine magnetische Kristalle mit einer Vorzugsebene leichter Magnetisierbarkeit untersucht [17]. Diese Eigenschaft des Materials sorgte für eine kontinuierliche Torsion, während ein äußeres, zeitlich periodisches Magnetfeld den Rotationsanteil hervorrief (nicht instantan, sondern sinusförmig moduliert, was jedoch keinen wesentlichen Unterschied für das prinzipielle Verhalten ausmacht).

Aufgrund der Konstruktion der Dynamik aus räumlichen Drehungen ist die Länge J des Drehimpulsvektor eine Konstante der Bewegung. Die durch zwei Winkel beschreibbare Richtung des Drehimpulsvektors im Raum legt somit den Zustand des Systems vollständig fest; der Phasenraum ist effektiv zweidimensional und entspricht topologisch der Oberfläche einer Kugel.

Über die Kickstärke k kann der nichtlineare Anteil der stroboskopischen Abbildung kontrolliert und somit ein Übergang zwischen klassisch regulärem und chaotischen Verhalten studiert werden. Für $k \lesssim 2$ ist das System nahezu integrabel, für $k \gtrsim 6$ vom Chaos dominiert, dazwischen liegt ein gemischtes Regime vor, bei dem es von den Anfangsbedingungen abhängt, ob sich das System regulär oder chaotisch verhalten wird.

Um diesen Übergang zu beobachten, ist es nützlich, die stroboskopische Abbildung iterativ auf einen Satz von Anfangsbedingungen anzuwenden und die erhaltenen Punkte im Phasenraum graphisch darzustellen. Die auf diese Weise entstandene *Phasenraumportraits* des gekickten Kreisels für verschiedene Kickparameter k sind in Abb. 2.1 und 2.2 dargestellt. Die Anfangsbedingungen wurden mit Hilfe eines Zufallsgenerators gewählt. (Diese zufällige Wahl wird uns im nächsten Abschnitt eine bessere Interpretation der erhaltenen Grafiken ermöglichen, als es eine regelmäßige Verteilung von Anfangspunkten leisten könnte.)

Der Phasenraum des gekickten Kreisels ist infolge der konstanten Länge J des Drehimpulsvektors die Oberfläche einer Kugel; gezeigt werden die beiden Halbkugeln $J_z \leq 0$ und $J_z \geq 0$ in senkrechter Projektion. Eine hohe Symmetrie der Phasenraumportraits ist unverkennbar: Das Bild jeder Halbkugel scheint um seinen Mittelpunkt punktsymmetrisch zu sein, und die Bilder beider Halbkugeln sind einander sehr ähnlich. Bei genauerer Betrachtung erkennt man – besonders gut für $k = 3$ – feine Unterschiede, die im nächsten Abschnitt in einer anderen Koordinatendarstellung näher diskutiert werden sollen.

Die Phasenraumportraits werden auch als *Poincaré-Schnitte* bezeichnet. Die Bezeichnung „Schnitt“ rührt daher, daß ein Poincaré-Schnitt ursprünglich als Schnitt im Phasenraum eines autonomen Systems definiert wurde; eine Trajektorie hinterläßt in diesem Schnitt einen Punkt, wenn sie die Schnitt-Hyperfläche mit einer vorgegebenen Orientierung (z. B. mit positivem Skalarprodukt mit der Flächennormalen) schneidet. Den vorliegenden Fall eines zeitlich periodischen Systems führt man auf den autonomen Fall zurück, indem man die Zeit als zusätzliche, zyklische Ortskoordinate mit der Energie als konjugiertem Impuls einführt [18, 19]. Der Schnitt in diesem erweiterten Phasenraum markiert gerade einen Zeitpunkt innerhalb einer Periode.

Die beschriebene Konstruktion erlaubt es uns, Sätze wie z. B. das Kol'mogorov-Arnol'd-Moser-Theorem (KAM-Theorem), die ursprünglich für den autonomen Fall formuliert wurden, auf die vorliegende Situation anzuwenden.

In den Poincaré-Schnitten fallen mehrere Bereiche auf, in denen Scharen geschlossener Kurven zu sehen sind. Dies sind Bereiche regulären

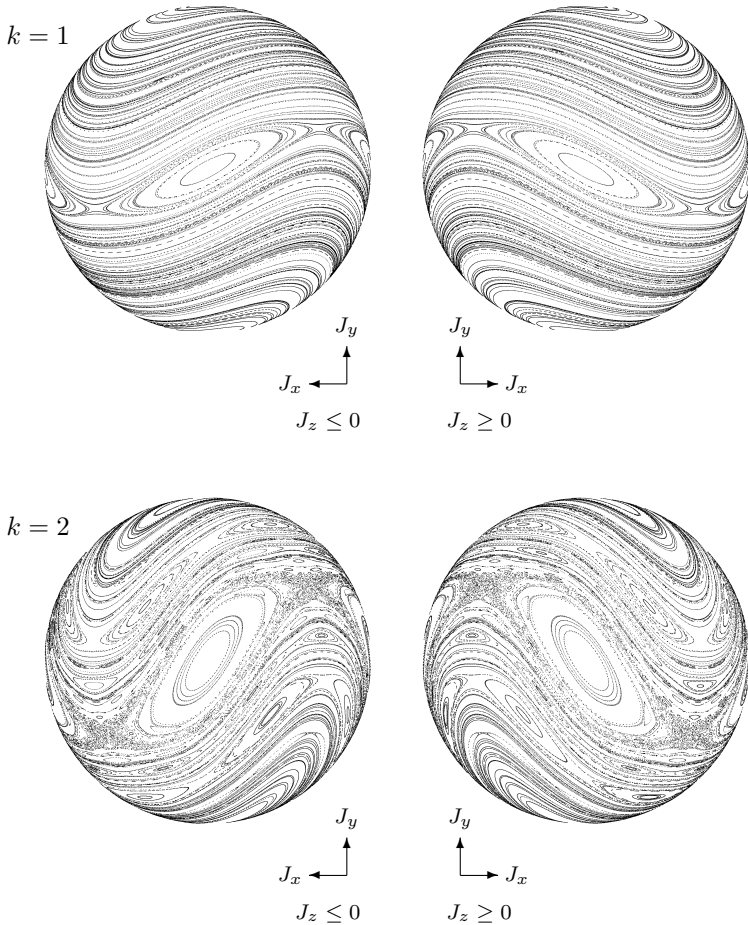


Abbildung 2.1: Phasenraumportraits des gekickten Kreisels in kartesischen Koordinaten für $k = 1$ und $k = 2$. Für $k = 1$ ist das System in guter Näherung *regulär* oder auch *integrabel*. Der Phasenraum wird dominiert von *Kol'mogorov-Arnol'd-Moser-Tori* (KAM-Tori). Wir erkennen einen elliptischen und einen hyperbolischen Periode-4-Orbit in der Mitte ($J_x = J_y = 0$). Chaotische Bereiche in der Nähe des hyperbolischen Orbits sind zu klein, um sichtbar zu werden.

Für $k = 2$ ist der Phasenraum immer noch von KAM-Tori dominiert, es treten aber vereinzelt chaotische Bereiche in Erscheinung. Dies wird als der *nahezu integrable* Fall bezeichnet.

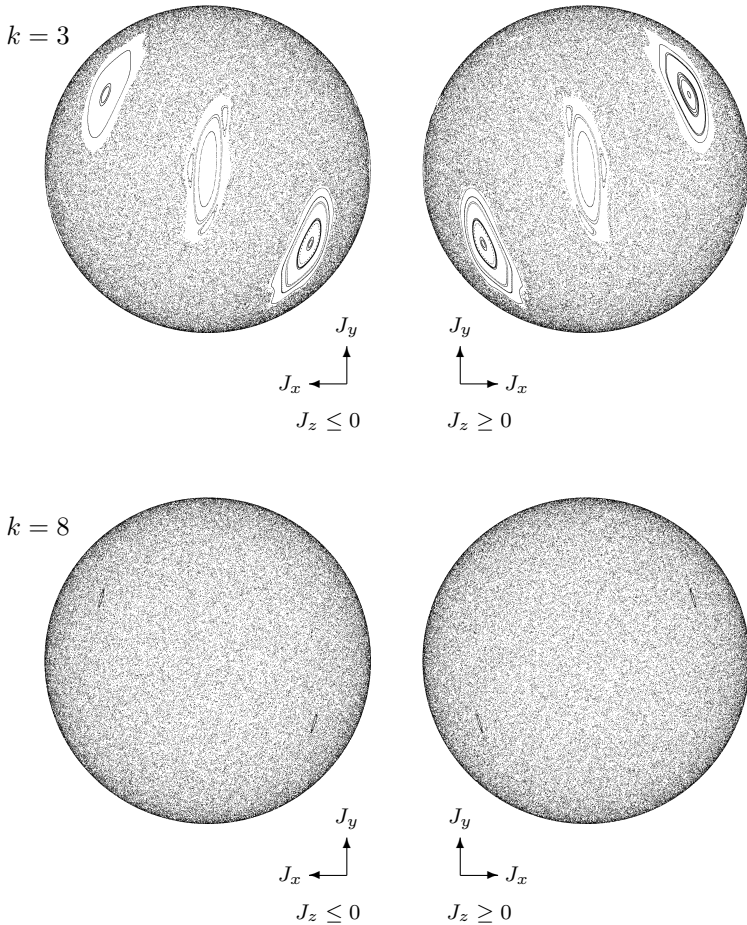


Abbildung 2.2: Phasenraumportraits des gekickten Kreisels in kartesischen Koordinaten für $k = 3$ und $k = 8$. Der Fall $k = 3$ ist ein Beispiel für das *gemischte Regime*, in dem mehrere große Stabilitätsinseln in einem ansonsten chaotischen Phasenraum existieren. Man beachte, daß die im Bild unteren Inseln (ein Periode-2-Orbit) zueinander perfekt symmetrisch erscheinen, die oberen (zwei Fixpunkte) jedoch nur in bezug auf ihre Form. Die beiden mittleren Inseln gehören zusammen mit zwei weiteren Inseln auf dem Äquator (kaum erkennbar) zu einem Periode-4-Orbit.

Für $k = 8$ sind die Bereiche regulärer Dynamik vernachlässigbar klein; wir bezeichnen dies als das *vollständig chaotische Regime*.

klassischen Verhaltens, die im folgenden als *Stabilitätsinseln* bezeichnet werden. Die Kurvenscharen kommen durch das Vorhandensein einer lokalen Erhaltungsgröße der Bewegung zustande: Ein Wert dieser lokalen Konstanten der Bewegung definiert einen *KAM-Torus*, den ein klassisches Teilchen nicht verlassen oder überqueren kann. Ein auf dem Torus gestartetes Teilchen wird diesen im Zuge seiner Zeitentwicklung komplett füllen; im Poincaré-Schnitt erscheint uns der KAM-Torus als geschlossene Kurve. KAM-Tori liegen innerhalb der Stabilitätsinseln dicht, so daß jede innerhalb einer Insel gestartete Trajektorie eine solche geschlossene Kurve erzeugt.

Außerhalb der Stabilitätsinseln ist das System *chaotisch*. Innerhalb des chaotischen Bereichs gibt es keine Konstanten der Bewegung, die sich als analytische Funktionen der Zustandsvariablen schreiben ließen. Für den gekickten Kreisel gilt, daß ein im chaotischen Bereich gestartetes Teilchen im Laufe der Zeit jedem Punkt des chaotischen Bereichs beliebig nahe kommt. (Dies ist in vielen – nicht in allen – chaotischen Systemen ebenfalls der Fall.)

Werden zwei Teilchen mit eng benachbarten Anfangsbedingungen im chaotischen Bereich gestartet, pflanzen sich diese kleinen Abweichungen exponentiell anwachsend fort (siehe Abb. 2.3), so daß nach wenigen Iterationen (35 in Abb. 2.3) die Information über den Anfangszustand vollständig verlorengegangen ist. Der Exponent, mit dem das Wachstum stattfindet, heißt *Lyapunov-Exponent*.

Die empfindliche Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen wird auch offensichtlich, wenn man beispielsweise die y -Komponente des Drehimpulses nach n Iterationen als Funktion der anfänglichen y -Komponente aufträgt (Abb. 2.4). Der Funktionsgraph ähnelt für große n einem Fraktal, auch wenn die Funktion für endliches n immer stetig bleiben muß. Echte Fraktale findet man in Situationen, in denen auch unendlich lange Zeiten eine Rolle spielen, beispielsweise in chaotischen (*irregulären*) Streusystemen [20, 21], bei denen die Verweilzeit im Streuzentrum divergieren kann.

2.2 Koordinatensysteme auf der Kugeloberfläche

Die kartesischen Komponenten J_x, J_y, J_z des Drehimpulsvektors eignen sich hervorragend zur Beschreibung und numerischen Handhabung der klassischen stroboskopischen Abbildung, da in dieser Darstellung keinerlei Koordinatensingularität auftritt. Für die analytische Handhabung

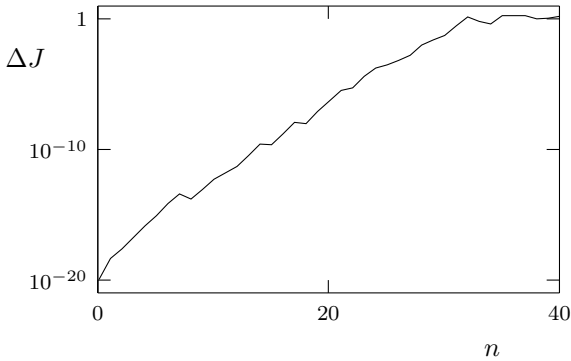


Abbildung 2.3: Exponentielles Anwachsen von Abweichungen in den Anfangsbedingungen. Für $k = 8$ wurden zwei Trajektorien mit nahezu identischen Anfangsbedingungen $\Delta J = |\vec{J}_2 - \vec{J}_1| = 10^{-20}$ gestartet. Nach etwa $n = 35$ Zeitschritten ist dieser Fehler bis zur Größenordnung des maximal möglichen Fehlers von 2 angewachsen. (Man beachte die logarithmische Skala der y -Achse.) In diesem Sinne ist die Information über die Anfangsbedingungen völlig verlorengegangen.

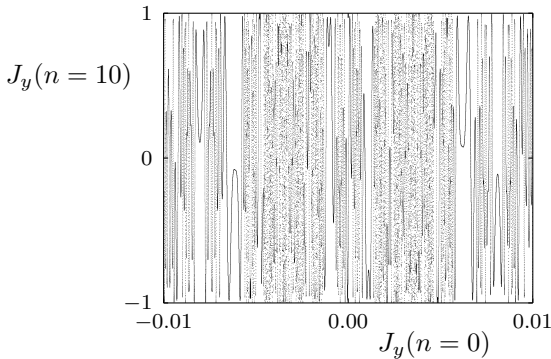


Abbildung 2.4: Empfindliche Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen. Obwohl die Drehimpulskomponenten als Funktion der Anfangsbedingungen nach endlicher Zeit n stetig sein müssen, erinnert der Funktionsgraph von $J_y(n = 10)$ an ein Fraktal.

von Begriffen wie der *Wirkung* sowie zur quantenmechanischen Formulierung ist es hingegen oft sinnvoller, zu *Polarkoordinaten* bzw. zur *stereographischen Projektion* überzugehen.

Durch Einführen von Polarkoordinaten φ, θ ,

$$\begin{aligned} J_x &= J \sin \theta \cos \varphi, \\ J_y &= J \sin \theta \sin \varphi, \\ J_z &= J \cos \theta \end{aligned} \tag{2.2}$$

können wir die Kugeloberfläche auf das Rechteck $0 \leq \varphi < 2\pi$, $0 \leq \theta < \pi$ mit in φ periodischen Randbedingungen abbilden. Diese Abbildungsvorschrift ist die von Weltkarten her bekannte Mercator-Abbildung.

Die Abbildungen 2.5 und 2.6 zeigen dieselben Poincaré-Szenarien wie Abb. 2.1 und 2.2, nur diesmal in Mercator-Darstellung. Wie dort, sind auch hier einige Symmetrien erkennbar. Um das Verständnis der klassischen Eigenschaften des gekickten Kreisels zu erweitern, werden diese Symmetrien im folgenden für den Fall $k = 3$ näher diskutiert.

Wie bereits im letzten Abschnitt erwähnt, wurden die Anfangsbedingungen zufällig anstatt regelmäßig ausgewählt. In den Bildern erkennbare Regelmäßigkeiten sind daher kein numerisches Artefakt, sondern sie müssen einen physikalischen Ursprung haben.

In der linken und rechten Hälfte erkennen wir jeweils zwei Stabilitätsinseln mit geschlossenen Strukturen, den KAM-Tori. Alle vier Inseln haben dieselbe Form, was auf zwei Systemsymmetrien schließen läßt, die im folgenden näher betrachtet werden sollen.

Die beiden linken Inseln sind zueinander perfekt punktsymmetrisch, d. h., nicht nur ihre äußere Form, sondern auch die in ihnen enthaltenen KAM-Tori genügen der Symmetrie. Bei zufällig ausgewählten Anfangsbedingungen kann dies nur dann der Fall sein, wenn zueinander symmetrische Strukturen in beiden Inseln zu nur einer Trajektorie eines Teilchens gehören, das demnach also zwischen beiden Inseln hin- und herspringt. Da keine weiteren Inseln mit derselben Struktur existieren, können wir hiermit dieses Paar von Inseln als zu einer stabilen periodischen Bahn der Länge 2 (Periode-2-Orbit) gehörig identifizieren. (Instabile periodische Bahnen sind in Poincaré-Schnitten nicht sichtbar.) Wenn man darüberhinaus das Bild während seiner Entstehung beobachtet, sieht man die Strukturen in diesen beiden Inseln stets gleichzeitig entstehen, was die Interpretation denkbar eindeutig macht.

Die Strukturen innerhalb der beiden rechten Inseln sind nicht zueinander symmetrisch. Diese Inseln sind demnach klassisch voneinander getrennt und gehören zu voneinander unabhängigen, aber zueinander

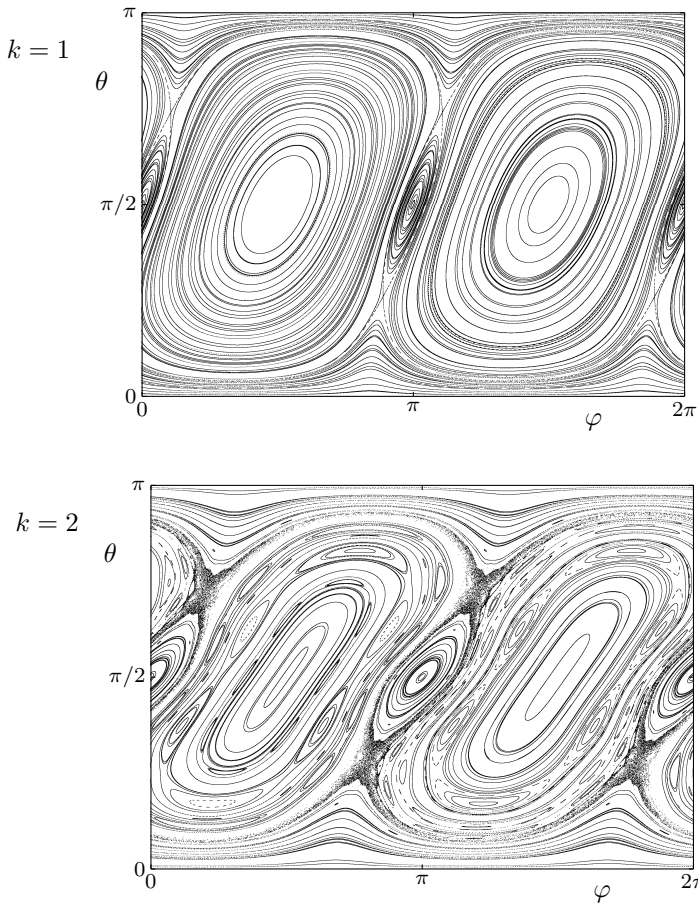


Abbildung 2.5: Phasenraumportrait des gekickten Kreisels in Polarkoordinaten für $k = 1$ und $k = 2$. Für $k = 1$ sind die winzigen Bereiche chaotischen Verhaltens in dieser Mercator-Darstellung deutlicher zu erkennen als in der Draufsicht (Abb. 2.1).

Für $k = 2$ lassen die Strukturen zwei elliptische Fixpunkte erkennen, die von jeweils zwei elliptischen und zwei hyperbolischen Periode-3-Orbits begleitet werden.

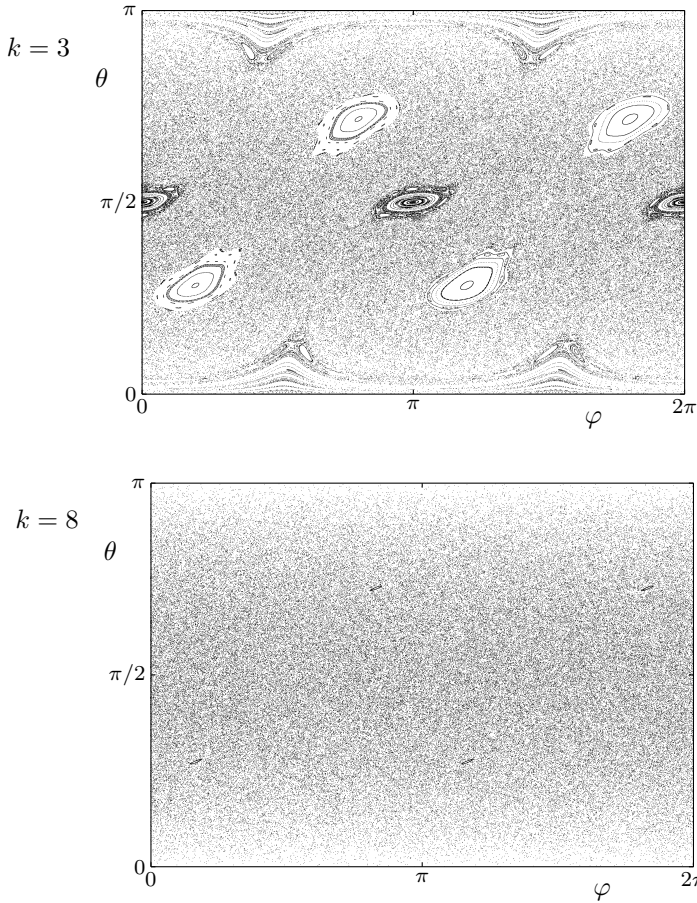


Abbildung 2.6: Phasenraumportrait des gekickten Kreisels in Polarkoordinaten für $k = 3$ und $k = 8$. Für $k = 3$ sehen wir auf der linken Seite einen elliptischen Periode-2-Orbit, auf der rechten hingegen zwei getrennte Fixpunkte, zu erkennen an den unterschiedlichen Strukturen im Inneren der Stabilitätsinseln. Die – scheinbar sieben, in Wirklichkeit vier – Inseln am Äquator ($\theta = 0$) und den Polen ($\theta = 0$ bzw. π) gehören zu einem Periode-4-Orbit. Weitere periodische Bahnen – insbesondere die hyperbolischen – sind nicht erkennbar. Für $k = 8$ ist das System vollständig chaotisch. (Bei genauem Hinsehen lassen sich vier winzige Inseln eines Periode-4-Orbits erkennen.)

symmetrischen stabilen Fixpunkten (periodischen Bahnen der Länge 1). Die Symmetrie rührt daher, daß die Achsen für die Rotation und die Torsion aufeinander senkrecht stehen; sie verschwindet, sobald man die Torsion mit einer zusätzlichen linearen Drehung um die z -Achse verbindet und damit die Rotation effektiv um eine schräge Achse ausführt.

Eine weitere Symmetrie verbindet den Periode-2-Orbit mit den beiden Fixpunkten. Bei Rotation um den Winkel π um die z -Achse – in Abb. 2.6 äußert sie sich als Translation um den Betrag π entlang der φ -Achse – werden der Periode-2-Orbit und die Fixpunkte aufeinander abgebildet. Diese Symmetrie ist damit verbunden, daß der Drehwinkel um die y -Achse gerade $\pi/2$ beträgt: In diesem Spezialfall existiert für jede periodische Bahn der Abbildung eine weitere periodische Bahn doppelter Länge auf der bzgl. der z -Achse „anderen Seite“ der Phasenraumkugel.

Desweiteren fällt eine Struktur am Äquator $\theta = \pi/2$ bzw. $z = 0$ auf, die in der Parallelprojektion, Abb. 2.2, nicht sichtbar war. Diese zwei Inseln (man beachte die Periodizität in φ) gehören zusammen mit den an den beiden Polen $z = \pm 1$ gelegenen Inseln zu einer stabilen periodischen Bahn der Länge 4.

Wenn man das Phasenraumportrait in Gedanken schert, so daß die beiden Inseln des Periode-2-Orbits senkrecht übereinander liegen, wird jede Insel in sich achsensymmetrisch bezüglich einer in Abb. 2.6 vertikalen Achse; die Kugel wird symmetrisch bzgl. der y - z -Ebene. Dies ist eine Auswirkung der Zeitumkehrinvarianz des Systems: Wenn wir die Dynamik rückwärts laufen lassen, erhalten wir das ursprüngliche System mit negativen Drehwinkeln, indem wir Rotation und Torsion vertauschen und somit den Zeitpunkt des Beginns einer Periode verschieben. Zeitumkehrinvarianz wird beispielsweise gebrochen, wenn man eine dritte Rotation um die x -Achse einführt, da es bei drei nicht-kommutierenden Drehungen sehr wohl auf die Reihenfolge ankommt.

Eine weitere gebräuchliche Beschreibung von Punkten auf einer Kugeloberfläche ist die *stereographische Projektion*, die insbesondere in Kapitel 4 eine wesentliche Rolle spielen wird.

Die stereographische Projektion der Kugel auf eine Ebene erlaubt es, jeden Punkt des Phasenraums durch eine einzige komplexe Zahl γ darzustellen,

$$\gamma = \frac{J_x + iJ_y}{1 + J_z} = e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2}. \quad (2.3)$$

Bei dieser Abbildungsvorschrift wird jeder Punkt der Kugeloberfläche vom Punkt $x = 0, y = 0, z = -1$ aus auf die Ebene $z = 1$ projiziert. Die Ebene berührt die Kugel in ihrem Nullpunkt im Punkt $x = 0,$

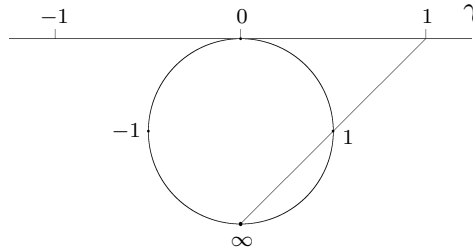


Abbildung 2.7: Stereographische Projektion. Jeder Punkt der Kugeloberfläche wird vom Projektionszentrum $x = 0, y = 0, z = -1$ aus auf eine komplexe Zahlenebene projiziert, die die Kugel im Punkt $x = 0, y = 0, z = 1$ berührt. Der Äquator der Kugel wird auf den komplexen Einheitskreis abgebildet, der Berührungspunkt auf den Nullpunkt, das Projektionszentrum auf den „unendlich fernen Punkt“.

$y = 0, z = 1$ der Kugel; der Äquator der Kugel wird auf den Einheitskreis in der komplexen Zahlenebene abgebildet, das Projektionszentrum auf den „unendlich fernen Punkt“ (siehe Abb. 2.7).

In dieser Darstellung erscheinen Rotationen der Kugel als (*gebrochen*) *lineare Transformationen* (auch *konforme Abbildungen* oder *holomorphe Automorphismen der Riemannschen Zahlenkugel* genannt [22]), d. h. als Transformationen $\gamma \mapsto \Gamma = f(\gamma)$ der Gestalt

$$\Gamma = \frac{a\gamma + b}{c\gamma + d} \quad \text{mit } a, b, c, d \text{ komplex, } ad - bc \neq 0. \quad (2.4)$$

Insbesondere entspricht

$$\Gamma = \frac{1 + \gamma}{1 - \gamma} \quad (2.5)$$

einer Vierteldrehung um die y -Achse.

Drehungen – auch Torsionen – um die z -Achse machen sich in einer Änderung der komplexen Phase bemerkbar, so daß wir die spezielle Abbildungsvorschrift (2.1) in stereographischer Projektion notieren können,

$$\Gamma = \frac{1 + \gamma}{1 - \gamma} \exp\left(-ik \frac{\gamma + \gamma^*}{1 + \gamma\gamma^*}\right). \quad (2.6)$$

2.3 Floquet-Operator

Im quantenmechanischen Fall ist der Drehimpulsvektor als Vektoroperator zu verstehen, der im Sinne des Heisenbergbildes den momentanen

Zustand des Systems beschreibt. Das quantenmechanische Analogon der stroboskopischen Abbildung (2.1) ist der unitäre Zeitentwicklungsoperator über eine Periode, der *Floquet-Operator* F .

Zur Vereinfachung der Notation wählen wir \hbar als Maßeinheit für den Drehimpuls, um mit einem effektiven $\hbar_{\text{eff}} = 1$ arbeiten zu können. Das Quadrat \vec{J}^2 des Drehimpulsvektors genügt dann quantenmechanisch der Bedingung $\vec{J}^2 = j(j+1)$.

Der uns in dieser Arbeit besonders interessierende semiklassische Grenzfall wird normalerweise mit $\hbar \rightarrow 0$ notiert. Da wir den Drehimpuls in Einheiten von \hbar messen, entspricht der semiklassische Grenzfall nun der Situation $j \rightarrow \infty$, also Drehimpulsen, denen gegenüber das Plancksche Drehimpulsquantum $\hbar_{\text{eff}} = 1$ vernachlässigbar klein ist.

Wir können nun den Floquet-Operator für das bereits behandelte Beispiel von jeweils einer einzigen Rotation und einer Torsion in diesen Einheiten notieren,

$$F = e^{-i\frac{k}{2j+1}J_z^2} e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}. \quad (2.7)$$

Ein Operator der Gestalt $\exp(-i\beta J_y)$ bewirkt eine Rotation des Drehimpulsvektors um den Winkel β um die y -Achse und wird daher als *Rotationsoperator* bezeichnet. Ein Operator der Gestalt $\exp(-i\frac{\beta}{2j+1}J_z^2)$ bewirkt eine Torsion um die z -Achse und heißt *Torsionsoperator*.

Der Nenner $2j+1$ ist die asymptotische Form von $2\sqrt{j(j+1)}$ im semiklassischen Grenzfall $j \gg 1$. Obwohl der Summand 1 in diesem Grenzfall zunächst unwesentlich erscheint, muß er in der Asymptotik mit berücksichtigt werden; sein Fehlen würde sich quantenmechanisch in einem semiklassisch nicht erklärbaren Phasenfaktor bemerkbar machen [14, 16].

Der unitäre Floquet-Operator enthält die vollständige Information über das System. Seine Eigenfunktionen sind die stationären Zustände, die sich innerhalb einer Periode nur um einen Phasenfaktor vom Betrag 1, ihren Eigenwert, ändern. Die komplexen Phasen der Eigenwerte, die *Eigenphasen* oder auch *Quasienergien*, bilden zusammen das *Floquet-Spektrum* des gekickten Kreisels, das sich bereits seit einiger Zeit als Musterbeispiel für *Quantenchaos* bewährt hat: In der Klasse der gekickten Kreisel lassen sich Systeme finden, die die Vorhersagen der Zufallmatrixtheorie mit phantastischer Genauigkeit erfüllen. Als Beispiel sei hier nur genannt, daß die Verteilungsfunktionen der Nächste-Nachbar-Abstände von Eigenphasen des gekickten Kreisels sogar den winzigen Unterschied zwischen der Wigner-Verteilung und den exakten COE/CUE/CSE-Vorhersagen erkennen lassen [23].

Die im letzten Abschnitt angesprochenen, in den Poincaré-Schnitten erkennbaren Symmetrien des Systems haben Konsequenzen für das Floquet-Spektrum. Diese wurden bereits von F. Haake, M. Kuš und R. Scharf eingehend untersucht [11, 10, 12], daher sei an dieser Stelle nur auf zwei Punkte hingewiesen:

- In Abwesenheit von Zeitumkehrsymmetrie genügt das Floquet-Spektrum den statistischen Eigenschaften der CUE-Universalitätsklasse (*circular unitary ensemble*) von Zufallsmatrizen. Im vorliegenden Fall mit Zeitumkehrsymmetrie hingegen muß das System in die COE (*circular orthogonal ensemble*; ganzzahlige j) oder CSE-Universalitätsklasse (*circular symplectic ensemble*; halbzahlige j ; wird in dieser Arbeit nicht betrachtet) eingeordnet werden.
- Die anderen genannten Symmetrien führen zu Entartungen, denen zufolge das Floquet-Spektrum in mehrere Teilspektren aufspaltet. Eine Untersuchung statistischer Eigenschaften erfolgt dann jeweils nur mit den Teilspektren.

Vor kurzem ist es uns am gekickten Kreisel erstmalig gelungen, ein vollständiges Floquet-Spektrum semiklassisch zu berechnen [15]; die genaue Methode wird in Kapitel 4 vorgestellt und weiterentwickelt werden. Für ein tieferes Verständnis sowie für numerische Berechnungen hat sich jedoch eine andere Methode als fruchtbarer erwiesen [16], auf die im folgenden Kapitel 3 eingegangen wird. Das Prinzip ist bei beiden Methoden dasselbe: Der Floquet-Operator wird in einer geeigneten Basis dargestellt, die Entwicklungskoeffizienten werden unter Zuhilfenahme nicht-periodischer klassischer Bahnen sowie von *Geisterbahnen* mit komplexer Wirkung semiklassisch berechnet; anschließend wird das Spektrum durch numerisches Lösen einer Eigenwertgleichung gewonnen.

Kapitel 3

Semiklassik in der Asymptotik der Wignerschen d -Funktion

In diesem Kapitel wird eine quantenmechanische Beschreibung des gekickten Kreisels in der Basis von Drehimpuls-Eigenzuständen explizit ausgeführt. Dabei tritt die *Wignersche d -Funktion* in Erscheinung. Die seit langem bekannte Asymptotik der Wignerschen d -Funktion wird neu hergeleitet und mit klassischen Bahnen in Verbindung gebracht.

Die Schreibweise $|j, m\rangle$ bezeichnet in dieser Arbeit stets einen gemeinsamen Eigenzustand der Drehimpulsoperatoren J^2 und J_z ,

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad (3.1)$$

$$J_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle. \quad (3.2)$$

Für festes j bilden die $2j+1$ Zustände $|j, -j\rangle, \dots, |j, j\rangle$ eine Orthonormalbasis des n -dimensionalen komplexen Hilbert-Raums des gekickten Kreisels.

3.1 Klassische Rotation als Randwertproblem

Während in der klassischen Mechanik alle drei kartesischen Komponenten eines Drehimpulses und sein Betrag gleichzeitig bestimmt sein können, läßt die quantenmechanische Unschärfe neben dem Betrag höchstens noch eine Komponente zu. Natürlich hindert uns niemand daran, auch in der klassischen Beschreibung zwei Drehimpulskomponenten unbestimmt zu lassen und die Gesamtheit aller klassischen Zustände zum Drehimpuls der Länge $J = j + \frac{1}{2}$ mit z -Komponente m zu betrachten. $J = j + \frac{1}{2}$ ist hierbei die asymptotische Form von $\sqrt{j(j+1)}$ im semiklassischen Grenzfall $j \gg \hbar_{\text{eff}} = 1$. Die Gesamtheit dieser Zustände beschreibt einen Kreis im Phasenraum, also einen Kreis $K(j, m)$ auf einer Kugeloberfläche, der das klassische Analogon zu einem quantenmechanischen Drehimpuls-Eigenzustand $|j, m\rangle$ darstellt.

Unser Ziel ist die Darstellung des Floquet-Operators F in der Basis der $|j, m\rangle$ -Zustände. Ein Matricelement $\langle j, m' | F | j, m \rangle$ bezeichnet die Übergangsamplitude vom Zustand $|j, m\rangle$ in den Zustand $|j, m'\rangle$. Das klassische Analogon ist die Fragestellung nach dem Übergang von dem Kreis $K(j, m)$ zu dem Kreis $K(j, m')$ unter Anwendung der stroboskopischen Abbildung (2.1). Die quantenmechanische Phase eines solchen Matricelements setzt sich aus den *Wirkungen* der zum Übergang beitragenden klassischen Bahnen zusammen. Insgesamt führt uns dies auf das folgende *Randwertproblem* [16]:

Welche Drehimpulsvektoren des Kreises $K(j, m)$ werden unter der stroboskopischen Abbildung (2.1) auf den Kreis $K(j, m')$ abgebildet, und welche Wirkung S haben diese klassischen Bahnen?

Abbildung 3.1 zeigt eine graphische Veranschaulichung der Lösungen des Randwertproblems. In Hinblick auf eine bessere Sichtbarkeit des dreidimensionalen Sachverhalts wurden die Kreise auf der Kugeloberfläche vom Kugelmittelpunkt ausgehend zu Kegelmänteln ergänzt. (Dieselben Kegelmäntel erhält man auch, wenn man jeden zu einem Zustand gehörenden Drehimpulsvektor durch einen vom Kugelmittelpunkt ausgehenden Pfeil veranschaulicht.)

Der Anfangszustand ist ein zur z -Achse rotationssymmetrischer Kreis $K(j, m)$ mit scharfer z -Komponente m des Drehimpulsvektors. Die gewünschten Endzustände liegen auf dem zur z' -Achse symmetrischen Kreis $K(j, m')$ auf der Kugeloberfläche, und sie haben eine scharfe

z' -Komponente m' des Drehimpulsvektors. Die z' -Achse ist dabei durch Anwendung der stroboskopischen Abbildung (2.1) aus der z -Achse hervorgegangen. Jeder Schnittpunkt beider Kreise stellt eine Lösung des Randwertproblems dar; die offen gelassenen Azimutwinkel φ und φ' bezüglich der jeweiligen Symmetrieachse können aus dem Schnitt abgelesen werden. Je nach Wahl von m und m' gibt es (a) zwei, (b) eine doppelte oder auch (c) gar keine reelle Lösung für den Azimutwinkel φ derjenigen Anfangszustände, die auf den vorgegebenen Endzustand abgebildet werden.

Läßt man auch komplexe Azimutwinkel φ zu, so schneiden sich die Kreise auch in Situation (c), nur eben für rein imaginäre Azimutwinkel. Solche „komplexifizierten Trajektorien“ oder *Geisterbahnen* [8] werden in den folgenden Abschnitten die semiklassische Basis für quantenmechanische Übergänge im klassisch verbotenen Bereich liefern.

Für einen späteren Vergleich mit dem quantenmechanischen Matrixelement soll im folgenden die Wirkung S für klassische Trajektorien von $K(j, m)$ nach $K(j, m')$ berechnet werden.

Da die Torsion um die z -Achse einen zur z -Achse rotationssymmetrischen Kreis auf sich selbst abbildet, beschränken wir uns zunächst auf die lineare Rotation um einen allgemeinen Winkel β um die y -Achse.

In den in Abschnitt 2.2 eingeführten Polarkoordinaten lautet die Rotationsabbildung:

$$\begin{aligned}\cos \theta' &= \cos \theta \cos \beta - \sin \theta \cos \varphi \sin \beta, \\ \sin \theta' \cos \varphi' &= \cos \theta \sin \beta + \sin \theta \cos \varphi \cos \beta, \\ \sin \theta' \sin \varphi' &= \sin \theta \sin \varphi.\end{aligned}\tag{3.3}$$

Ein Kreis $K(j, m)$ wird durch $m = j \cos \theta$ (φ beliebig) beschrieben. Durch Lösen des Randwertproblems werden bis zu zwei klassische Bahnen zwischen Anfangs- und Endkreis festgelegt. Die noch fehlenden Anfangskoordinaten, die Azimutwinkel φ_{\pm} dieser Bahnen, lauten

$$\varphi_{\pm} = \pm \arccos \frac{m \cos \beta - m'}{\sin \beta \sqrt{J^2 - m^2}},\tag{3.4}$$

und für die φ' -Koordinaten der Endpunkte im gedrehten Koordinatensystem ergibt sich

$$\varphi'_{\pm} = \pm \arccos \frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta \sqrt{J^2 - m'^2}}.\tag{3.5}$$

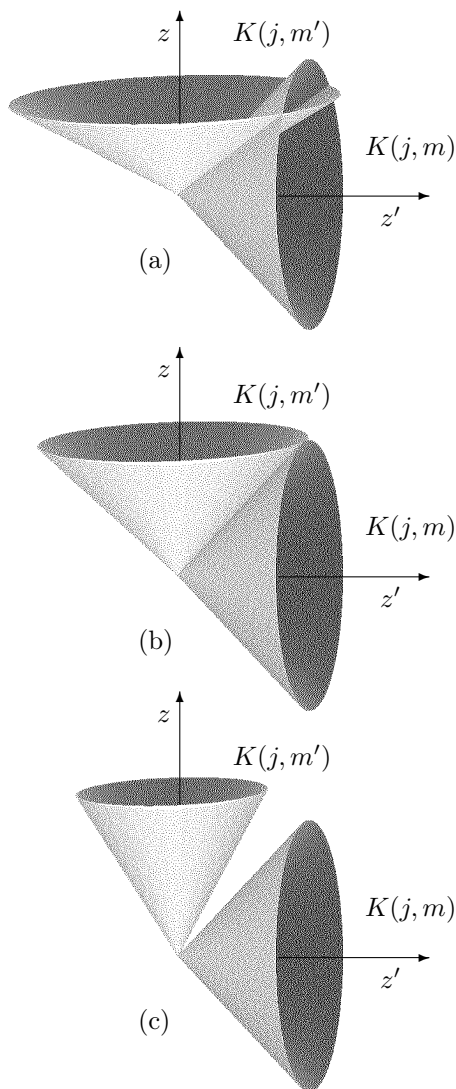


Abbildung 3.1: Klassische Rotation als Randwertproblem. Für jedes Wertepaar (m, m') entspricht die Lösung des Randwertproblems dem Schnitt zweier Kreise $K(j, m)$ und $K(j, m')$ auf der Kugeloberfläche. (Der besseren Sichtbarkeit halber wurden die Kreise vom Kugelmittelpunkt ausgehend zu Kegelmänteln ergänzt.) Es gibt drei typische Situationen mit (a) zwei, (b) einer doppelten oder (c) gar keiner reellen Lösung. In Situation (a) heißt der Übergang von m zu m' *klassisch erlaubt*, in (c) *klassisch verboten*.

Klassisch erlaubte Übergänge liegen vor, wenn die Argumente des Arcuscosinus im Intervall $[-1, 1]$ liegen. Dies ist genau dann der Fall, wenn

$$J^2 \sin^2 \beta - m^2 - m'^2 + 2mm' \cos \beta \geq 0 \quad (3.6)$$

ist. Diese Ungleichung beschreibt in der m - m' -Ebene das Gebiet einer Ellipse; im Spezialfall $\beta = \pi/2$ wird die Ellipse zu einem Kreis.

Die Rotation ist eine kanonische Transformation und hat als solche eine erzeugende Funktion S_0 , gleichbedeutend einer reduzierten Wirkung, die von den zu φ und φ' konjugierten Variablen m und m' abhängt:

$$\begin{aligned} S_0(m', m) &= \frac{m}{J} \arccos \frac{m \cos \beta - m'}{\sin \beta \sqrt{J^2 - m^2}} \\ &\quad - \frac{m'}{J} \arccos \frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta \sqrt{J^2 - m'^2}} \\ &\quad + \arccos \frac{m'm - J^2 \cos \beta}{\sqrt{(J^2 - m'^2)(J^2 - m^2)}}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Durch Ableiten nach m und m' prüfen wir leicht nach, daß S_0 in der Tat die Bahn von θ, φ_+ nach θ', φ'_+ erzeugt:

$$J \frac{\partial S_0}{\partial m} = \arccos \frac{m \cos \beta - m'}{\sin \beta \sqrt{J^2 - m^2}} = \varphi_+, \quad (3.8)$$

$$-J \frac{\partial S_0}{\partial m'} = \arccos \frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta \sqrt{J^2 - m'^2}} = \varphi'_+. \quad (3.9)$$

Die erzeugende Funktion für die Bahn von θ, φ_- nach θ', φ'_- ist durch $-S_0$ gegeben.

Der Torsionsanteil der stroboskopischen Abbildung beeinflusst nur den Azimutwinkel φ ,

$$\varphi'' = \varphi' + \frac{km'}{J}. \quad (3.10)$$

so daß wir die Torsion als zusätzlichen Summanden in der Wirkung berücksichtigen können,

$$S_k(m', m) = S_0(m', m) - \frac{1}{2} \frac{km'^2}{J}. \quad (3.11)$$

Im folgenden Abschnitt wird das quantenmechanische Analogon der Betrachtungen zur Rotation, Matrixelemente des Floquet-Operators in

der $|j, m\rangle$ -Basis, beschrieben. Obwohl zunächst keine Ansatzpunkte zu einer Verbindung klassischer und quantenmechanischer Größen offensichtlich werden, wird uns im übernächsten Abschnitt eine semiklassische Näherung wieder auf die Wirkung S_0 der Rotation führen.

3.2 Die Wignersche d -Funktion

In der $|j, m\rangle$ -Basis von J_z -Eigenzuständen ist der Torsionsanteil $\exp(-ikJ_z^2/(2j+1))$ des Floquet-Operators (2.7) eine Diagonalmatrix. Der Rotationsanteil $\exp(-i\beta J_y)$ hingegen wird durch eine vollbesetzte reelle Matrix

$$\langle j, m' | e^{-i\beta J_y} | j, m \rangle \equiv d_{m', m}^j(\beta) \quad (3.12)$$

beschrieben; $d_{m', m}^j(\beta)$ heißt *Wignersche d -Funktion*. (Oft wird $d_{m', m}^j(\beta)$ auch kurz als *Wigner-Funktion* bezeichnet, was aber zu Verwechslungsgefahr mit der ebenfalls als *Wigner-Funktion* bezeichneten Wignerschen Quasiwahrscheinlichkeitsdichte eines quantenmechanischen Zustandes im Phasenraum führt.)

Von der Wignerschen d -Funktion sind einige Eigenschaften bekannt [24]. Für uns wichtig sind die speziellen Werte

$$d_{m, j}^j(\beta) = \left(\tan \frac{\beta}{2}\right)^{j-m} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j} \sqrt{\binom{2j}{j-m}} \quad (3.13)$$

und unter diesen insbesondere

$$d_{j, j}^j(\beta) = \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j}, \quad (3.14)$$

$$d_{-j, j}^j(\beta) = \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2j}, \quad (3.15)$$

die Symmetrieeigenschaften

$$\begin{aligned} d_{m', m}^j(\beta) &= (-1)^{m'-m} d_{m, m'}^j(\beta) \\ &= d_{-m, -m'}^j(\beta) \\ &= (-1)^{m'-m} d_{m', m}^j(-\beta) \\ &= (-1)^{j-m} d_{-m', m}^j(\pi - \beta) \end{aligned} \quad (3.16)$$

und schließlich die Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} \frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta} d_{m',m}^j(\beta) \\ = f(\pm m') d_{m' \mp 1, m}^j(\beta) + f(\mp m') d_{m' \pm 1, m}^j(\beta), \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{m \cos \beta - m'}{\sin \beta} d_{m',m}^j(\beta) \\ = f(\pm m) d_{m', m \mp 1}^j(\beta) + f(\mp m) d_{m', m \pm 1}^j(\beta) \end{aligned} \quad (3.18)$$

mit

$$f(m) = \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}. \quad (3.19)$$

Alle diese Eigenschaften lassen sich auf entsprechende Eigenschaften von J_y zurückführen, wenn man J_y durch die Leiteroperatoren $J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$ mit den Eigenschaften

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (3.20)$$

ausdrückt.

Die Ausnutzung der Eigenschaften (3.15)–(3.18) erlaubt eine effektive und genaue numerische Berechnung von $d_{m,m'}^j(\beta)$ und damit auch des Floquet-Operators des gekickten Kreisels. Abbildung 3.2 zeigt die Absolutbeträge der Matrixelemente in Abhängigkeit von m und m' für $j = 50$ – also eine 101×101 -Matrix – und $\beta = \pi/2$ bzw. $\beta = 1$.

Obwohl wir bisher rein quantenmechanisch gerechnet haben, spiegeln sich bereits klassische Gesetzmäßigkeiten in der Matrix wider. Man erkennt deutlich einen elliptischen Bereich, in dem die Matrixelemente – insbesondere am Rand – am größten sind und in Abhängigkeit von m und m' oszillieren. Dies ist der durch (3.6) gegebene Bereich klassisch erlaubter Übergänge zwischen dem Kreis der Anfangszustände mit Drehimpuls- z -Komponente m zum Kreis der Endzustände mit z' -Komponente m' . Außerhalb des klassisch erlaubten Bereichs fallen die Matrixelemente zum Rand hin exponentiell ab. Die den drei Szenarien aus Abb. 3.1 entsprechenden Punkte für $\beta = \pi/2$ sind innerhalb der Matrix eingezeichnet.

Es ist wichtig, während der Anwendung der Rekursionsformeln (3.17), (3.18) darauf zu achten, von dem richtigen Startpunkt auszugehen, um sich auf einem stabilen Zweig zu befinden; befindet man sich auf einem instabilen Zweig, so wachsen numerische Fehler exponentiell an und verfälschen bei größeren j die ansonsten exakten Matrixelemente. Der Wechsel vom abfallenden zum anwachsenden Zweig vollzieht sich

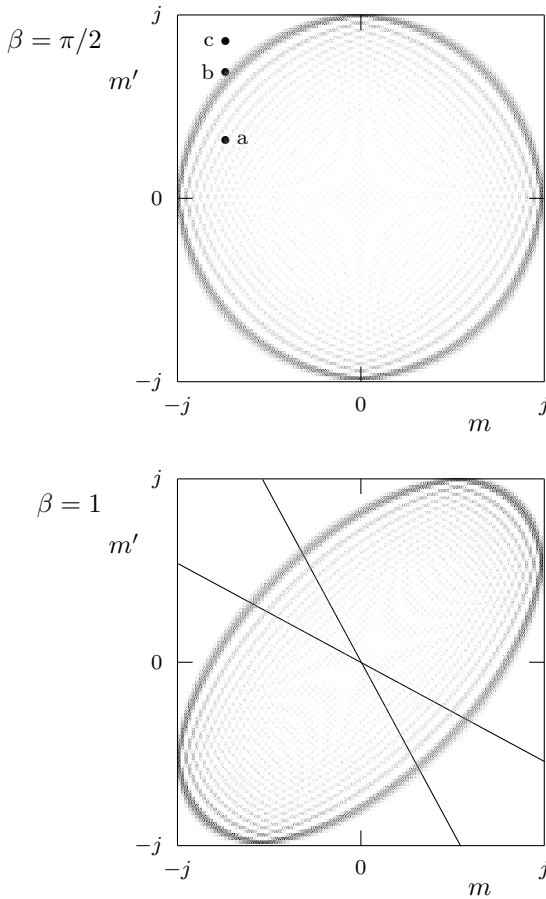


Abbildung 3.2: Matrix des Floquet-Operators. Die Absolutbeträge der Matrixelemente $\langle m'|F|m\rangle$ für $j = 50$ sind durch Grauschattierung dargestellt; dunkle Punkte entsprechen betragsmäßig großen Matrixelementen. Man erkennt den elliptischen Bereich *klassisch erlaubter* Übergänge. Innerhalb dieses Bereichs oszillieren die Matrixelemente mit m und m' ; außerhalb fallen sie zum Rand hin exponentiell ab.

Für $\beta = \pi/2$ ist die Ellipse ein Kreis. Die eingezeichneten Punkte a, b und c entsprechen qualitativ den Szenarien (a), (b) und (c) aus Abb. 3.1.

Für $\beta = 1$ sind die „Einzugsbereiche“ der vier Startpunkte $d_{\pm j, \pm j}^j(\beta)$ durch Linien $m' = -m \cos \beta$ und $m' \cos \beta = -m$ gekennzeichnet. Bei der Anwendung der Rekursionsformeln (3.17), (3.18) führt ein Überschreiten dieser Linien zu exponentiell anwachsenden Fehlern.

bei $m' + m \cos \beta = 0$ und bei $m' \cos \beta + m = 0$. In Abb. 3.2 sind diese Grenzen der *Einzugsbereiche* der vier Startpunkte für $\beta = 1$ durch Linien gekennzeichnet, die während der Rekursion nicht überschritten werden dürfen.

Multiplikation der auf diese Weise erhaltenen Matrix mit der Diagonalmatrix des Torsionsanteils $\exp(-i\frac{k}{2j+1}J_z)$ liefert den kompletten Floquet-Operator als komplexe, unitäre $(2j+1) \times (2j+1)$ -Matrix, der die vollständige Information über das System enthält. Insbesondere lassen sich durch numerisches Diagonalisieren die exakten Eigenphasen ermitteln, die zur Kontrolle der Qualität der in den nächsten Abschnitten zu diskutierenden semiklassischen Näherungsverfahren benötigt werden.

Die auf diese Weise gewonnenen Eigenphasen stimmen im übrigen, wie es sein muß, mit den auf gänzlich anderem Wege von R. Scharf [12] ermittelten Eigenphasen des gekickten Kreisels überein. Ansonsten bleibt noch zu erwähnen, daß sich allein aus der Rotationsmatrix $d_{m',m}^j(\beta)$ für $\beta = \pi/2$ und Diagonalmatrizen nicht nur der bisher behandelte, sondern im Prinzip jeder beliebige gekickte Kresel d. h., jede beliebige Kombination von Rotations- und Torsionsoperatoren, durch geschickte Hintereinanderausführung zusammensetzen läßt.

3.3 WKB-Approximation

In diesem Abschnitt soll ein im semiklassischen Grenzfall $j \gg \hbar_{\text{eff}} = 1$ näherungsweise gültiger geschlossener Ausdruck für die Wignersche d -Funktion hergeleitet werden. Dabei werden wir automatisch auf die klassische Wirkung S_0 , Gleichung (3.7), geführt.

Unter Ausnutzung von $f(-m') = f(m' + 1)$ schreiben wir die Rekursionsformel (3.17) in der Gestalt

$$\frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta} d_{m',m}^j = f(m') d_{m'-1,m}^j + f(m' + 1) d_{m'+1,m}^j, \quad (3.21)$$

wobei wir uns auf das obere Vorzeichen beschränken – das untere erhalten wir dann durch Anwendung der Symmetrierelationen (3.16). Für $j \gg 1$ und $-j \leq m, m' \leq j$ fassen wir nun m' als kontinuierliche Variable, genaugenommen als *Ortskoordinate* eines Teilchens auf. f ist eine langsam veränderliche Funktion von m' , so daß wir $f(m')$ und $f(m' + 1)$ durch $f(m' + \frac{1}{2}) \mp \frac{1}{2} f'(m' + \frac{1}{2})$ annähern können.

Wir drücken nun die Indices $m' \pm 1$ durch einen Verschiebungsoperator $\exp(\pm \frac{\partial}{\partial m'})$ mit der Eigenschaft $\exp(\pm \frac{\partial}{\partial m'}) d_{m',m}^j = d_{m' \pm 1, m}^j$ aus. Es

ergibt sich

$$\begin{aligned}
\frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta} d_{m',m}^j &\approx f(m' + \tfrac{1}{2}) \left(e^{\frac{\partial}{\partial m'}} + e^{-\frac{\partial}{\partial m'}} \right) d_{m',m}^j \\
&+ \tfrac{1}{2} f'(m + \tfrac{1}{2}) \left(e^{\frac{\partial}{\partial m'}} - e^{-\frac{\partial}{\partial m'}} \right) d_{m',m}^j \\
&= \sqrt{J^2 - m'^2} \cosh\left(\frac{\partial}{\partial m'}\right) d_{m',m}^j \\
&+ \frac{im'}{2\sqrt{J^2 - m'^2}} \sinh\left(\frac{\partial}{\partial m'}\right) d_{m',m}^j. \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Als nächstes führen wir einen zur „Ortskoordinate“ m' konjugierten Impulsoperator $\hat{\varphi} = -i\frac{\partial}{\partial m'}$ ein, der auf die „Wellenfunktion“ $d_{m',m}^j$ wirkt. Wir erhalten eine Gleichung,

$$\begin{aligned}
&\underbrace{\left(\sqrt{J^2 - m'^2} \cos \hat{\varphi} + \frac{im'}{2\sqrt{J^2 - m'^2}} \sin \hat{\varphi} + m' \frac{\cos \beta}{\sin \beta} \right)}_{\hat{H}} \underbrace{d_{m',m}^j}_{\psi} \\
&\approx \underbrace{\frac{m}{\sin \beta}}_E \underbrace{d_{m',m}^j}_{\psi}, \quad (3.23)
\end{aligned}$$

deren formale Ähnlichkeit mit einer zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung die Vorstellung eines quantenmechanischen Teilchens mit der Energie $E = m/\sin \beta$ motiviert, das durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sqrt{J^2 - m'^2} \cos \hat{\varphi} + \frac{im'}{2\sqrt{J^2 - m'^2}} \sin \hat{\varphi} + m' \frac{\cos \beta}{\sin \beta} \quad (3.24)$$

beschrieben wird. Die Dynamik dieses „Teilchens“ wollen wir nun semi-klassisch beschreiben, um die Asymptotik der Wignerschen d -Funktion für große j zu gewinnen.

Zur klassischen Beschreibung fassen wir den Hamilton-Operator (3.24) als Hamilton-Funktion auf. Bei vorgegebener „Energie“ $E = m/\sin \beta = H$ ergibt sich dann – unter Vernachlässigung von $\sin \varphi$, welches einen Vorfaktor der Größenordnung $1/J$ trägt –

$$\varphi = \arccos \frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta \sqrt{J^2 - m'^2}}, \quad (3.25)$$

also gerade der Azimutwinkel (3.5), der sich als Lösung des klassischen Randwertproblems ergibt. Diese klassische Bahn führt uns über die Methode von Wentzel, Kramers und Brillouin (WKB) (siehe zum

Beispiel [2], § 46) zu einer semiklassischen „Wellenfunktion“, also einer semiklassischen Näherung für die Wignersche d -Funktion.

Bei der WKB-Methode wird, üblicherweise für Hamilton-Operatoren der Gestalt $H = p^2/(2m) + V(x)$, der Ansatz $\psi(x) = A(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x)\right)$ mit reellen Funktionen $A(x)$ und $S(x)$ in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung $H\psi = E\psi$ eingesetzt. Unter Vernachlässigung von Beiträgen zweiter Ordnung in \hbar stellt sich dann $S(x)$ als der zeitunabhängige (*reduzierte*) Anteil der klassischen Wirkung heraus. (Derselbe Ansatz in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung eingesetzt liefert bis auf Korrekturen zweiter Ordnung in \hbar die volle Wirkungsfunktion für S sowie – exakt – eine Kontinuitätsgleichung für A .) Von der WKB-Methode ist bekannt, daß sie für die klassisch erlaubte Situation $E \gg V(x)$, aber auch für klassisch verbotene Bereiche mit $E \ll V(x)$ gute Ergebnisse liefert und am *klassischen Umkehrpunkt* $E = V(x)$ divergiert.

Zur Durchführung der Approximation für die Wignersche d -Funktion setzen wir den WKB-Ansatz

$$\psi(m') = d_{m',m}^j = A(m') e^{iJS(m')} \quad (3.26)$$

mit reellen Funktionen $A(m')$ und $S(m')$ in die „Schrödinger-Gleichung“ (3.23) ein; die Operatoren $\cos \hat{\varphi} = \cos\left(i \frac{\partial}{\partial m'}\right)$ und $\sin \hat{\varphi} = \sin\left(i \frac{\partial}{\partial m'}\right)$ werden als Potenzreihen behandelt. In jedem Summanden werden nur diejenigen Terme mit den beiden höchsten Potenzen von $J \gg 1$ mitgenommen, so daß wir einen geschlossenen Ausdruck erhalten,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^{2n}}{\partial m'^{2n}} A(m') e^{iJS(m')} \\ & \approx (-1)^n \left(A \dot{S}^{2n} J^{2n} \right. \\ & \quad - 2in \dot{A} \dot{S}^{2n-1} J^{2n-1} \\ & \quad \left. - in(2n-1) A \dot{S}^{2n-2} \ddot{S} J^{2n-1} \right) e^{iJS}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

wobei Punkte Ableitungen nach m' bezeichnen. Hierdurch ergibt sich

$$\begin{aligned} & \cos\left(i \frac{\partial}{\partial m'}\right) A(m') e^{iJS(m')} \\ & \approx \left(A \left(1 + \frac{1}{2} i J A \dot{S} \right) \cos(J\dot{S}) + i \dot{A} \sin(J\dot{S}) \right) e^{iJS} \end{aligned} \quad (3.28)$$

sowie

$$\begin{aligned} & \sin\left(i \frac{\partial}{\partial m'}\right) A(m') e^{iJS(m')} \\ & \approx \left(A \left(-1 + \frac{1}{2} i J A \dot{S} \right) \sin(J\dot{S}) - i \dot{A} \cos(J\dot{S}) \right) e^{iJS}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Dies führt auf die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} & \frac{m - m' \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m'^2} \sin \beta} A \\ & \approx \left(A + \frac{1}{2} \frac{m'}{J^2 - m'^2} \dot{A} \right) \cos(J\dot{S}) - \frac{1}{4} \frac{m' J \ddot{S}}{J^2 - m'^2} A \sin(J\dot{S}) \\ & + i \left(\dot{A} - \frac{1}{2} \frac{m'}{J^2 - m'^2} A \right) \sin(J\dot{S}) + \frac{1}{2} i J \ddot{S} A \cos(J\dot{S}). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Der Imaginärteil dieser Gleichung hat die Lösung

$$A(m') \approx \left(\sin \beta \sqrt{J^2 - m'^2} \sin(J\dot{S}) \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.31)$$

Im Realteil von (3.30) vernachlässigen wir den Term mit \dot{A} , der einen Vorfaktor der relativen Größenordnung $1/J$ hat. Hierdurch wird es uns möglich, A herauszukürzen, und durch Substitution von $Y = \cos(J\dot{S})$ erhalten wir die lineare Differentialgleichung

$$\frac{m - m' \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m'^2} \sin \beta} \approx Y - \frac{1}{4} \frac{m'}{J^2 - m'^2} \dot{Y} \quad (3.32)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$Y = \cos(J\dot{S}) = \frac{m - m' \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m'^2} \sin \beta} + C \exp(4J^2 \ln m' - 2m'^2). \quad (3.33)$$

Für $C = 0$ ergibt sich

$$\cos(J\dot{S}) = \frac{m - m' \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m'^2} \sin \beta} = \cos \varphi, \quad (3.34)$$

wobei φ der klassische Impuls unseres „Teilchens“ mit der Hamilton-Funktion (3.24) und somit gerade der Azimutwinkel (3.5) ist, der sich aus der Lösung des Randwertproblems ergibt. Dieses – als Resultat eines WKB-Ansatzes nicht unbedingt überraschende – Ergebnis erlaubt es uns, das Integral JS von (3.34) bezüglich m' sofort hinzuschreiben; wir können die gesuchte Funktion $S(m')$ mit der klassischen Wirkung S_0 der Rotation (3.7) identifizieren.

Die Wirkung S_0 ist reell für klassisch erlaubte bzw. imaginär für klassisch verbotene Lösungen des Randwertproblems.

Durch Zusammensetzung von $A(m')$ und $S(m')$ erhalten wir schließlich die WKB-Näherung für die Wignersche d -Funktion,

$$d_{m',m}^j \text{WKB} \sim \left(\sqrt{J^2 - m'^2} \sin \varphi \right)^{-\frac{1}{2}} e^{i(JS_0 + \alpha)}, \quad (3.35)$$

mit einer noch zu bestimmenden Phasenverschiebung α .

Wir haben bis jetzt nur das obere Vorzeichen der Rekursionsformel (3.17) betrachtet und auch nur eine (positive) Lösung des Randwertproblems erhalten. Im klassischen Bild eines „Teilchens“ mit der Hamilton-Funktion (3.24) entspricht dies einem von rechts nach links laufenden Teilchen. Um auch der anderen (negative) Lösung des Randwertproblems Rechnung zu tragen, beziehen wir jetzt das untere Vorzeichen der Rekursionsformel (3.17) mit ein. Durch Anwendung der Symmetrieverhältnisse (3.16) werden wir auf die erzeugende Funktion $-S_0$ der negativen Lösung des Randwertproblems geführt und erhalten bis auf dieses Vorzeichen wieder das Ergebnis (3.35). Beide Beiträge $\exp(\pm iJS_0 + \alpha)$ überlagern sich im klassisch erlaubten Bereich zu

$$d_{m',m}^j \text{WKB} \sim (-1)^j \left(\sqrt{J^2 - m'^2} \sin \varphi \right)^{-\frac{1}{2}} \cos(JS_0 + \alpha). \quad (3.36)$$

(Die Koeffizienten, die den Vorfaktor $(-1)^j$ verursachen, müssen so gewählt werden, daß die Startbedingungen (3.15) erfüllt sind.) Die Proportionalitätskonstante bestimmen wir aus der Normierungsbedingung, so daß wir mit wenigen Umformungen als Resultat dieses Abschnittes das Ergebnis

$$d_{m',m}^j \text{WKB} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(-1)^j \cos(JS_0 + \alpha)}{\sqrt[4]{J^2 \sin^2 \beta - m^2 - m'^2 + 2mm' \cos \beta}} \quad (3.37)$$

für den klassisch erlaubten Bereich erhalten.

Wir können dieses Ergebnis auch in der *Van-Vleck'schen Form* schreiben [5],

$$d_{m',m}^j \text{WKB} = (-1)^j \sqrt{\frac{2J}{\pi} \left| \frac{\partial^2 S_0}{\partial m \partial m'} \right|} \cos(JS_0 + \alpha). \quad (3.38)$$

Die Näherung $d_{m',m}^j \text{WKB}$ des quantenmechanischen Ausdrucks $d_{m',m}^j$ ist somit bis auf die Phasenverschiebung α vollständig durch die klassische Wirkung S_0 und den Drehimpuls $J = j + \frac{1}{2}$ bestimmt. Die Quantenzahl j ist an die Stelle des Kehrwertes des Planckschen Wirkungsquantums \hbar getreten, welches wir als Maßeinheit für den Drehimpuls verwendet haben.

Im klassisch verbotenen Bereich ist nur jeweils die exponentiell abfallende Lösung physikalisch sinnvoll, und wir erhalten

$$d_{m',m}^j \text{WKB} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \frac{(-1)^j e^{-J|S_0|}}{\sqrt[4]{-J^2 \sin^2 \beta + m^2 + m'^2 - 2mm' \cos \beta}}. \quad (3.39)$$

In beiden Fällen tritt der Ausdruck $J^2 \sin^2 \beta - m^2 - m'^2 + 2mm' \cos \beta$ im Nenner auf. Ein Vergleich mit (3.6) ergibt, daß die WKB-Näherung auf der Grenze zwischen klassisch erlaubtem und klassisch verbotenen Bereich, am *klassischen Umkehrpunkt*, divergiert. Die Behandlung dieses Grenzbereichs wird Gegenstand des nächsten Abschnitts sein, wobei gleichzeitig die Phasenverschiebung α bestimmt werden wird.

3.4 Airy-Approximation

Einen klassischen Umkehrpunkt in Reinkultur können wir am besten anhand eines Teilchens beobachten, das unter dem Einfluß einer konstanten Kraft bis zum Stillstand abgebremst und in entgegengesetzter Richtung wieder beschleunigt wird. Am *klassischen Umkehrpunkt* ist die Energie des Teilchens gerade gleich seinem Potential, $E = V(x)$. Es gibt einen klassisch erlaubten Bereich $E > V(x)$, den das Teilchen zweimal mit unterschiedlichem Vorzeichen der Geschwindigkeit besucht, sowie einen klassisch verbotenen Bereich $E < V(x)$, in den das klassische Teilchen nicht eindringt.

Die quantenmechanischen stationären Zustände dieses Problems sind reskalierte Bessel-Funktionen von gebrochener Ordnung $\pm \frac{1}{3}$, die sogenannten *Airy-Funktionen* (siehe Abb. 3.3). Anschaulich vermitteln Airy-Funktionen zwischen trigonometrischen Funktionen und abfallenden (Funktion Ai) bzw. ansteigenden Exponentialfunktionen (Funktion Bi).

Wir können die Airy-Funktionen Ai und Bi als linear unabhängige reellwertige Lösungen der *Airyschen Differentialgleichung*

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x) = x f(x) \tag{3.40}$$

definieren, deren allgemeine Lösung somit

$$f(x) = c_1 \text{Ai}(x) + c_2 \text{Bi}(x) \tag{3.41}$$

lautet.

Für ein Teilchen der Energie Null im Potential $V(x) = ax$ erhalten wir die Airy-Funktionen als Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung,

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} g(x) = ax g(x). \tag{3.42}$$

Wir können die physikalisch sinnvolle Lösung

$$g(x) \sim \text{Ai}(\sqrt[3]{2a} x) \tag{3.43}$$

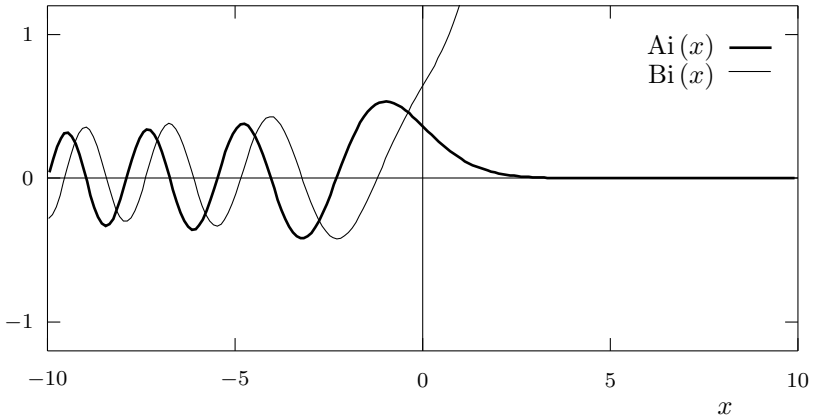


Abbildung 3.3: Die Airy-Funktionen Ai und Bi . $Ai(x)$ ist die stationäre Wellenfunktion eines quantenmechanischen Teilchens mit dem Potential $V(x) = x$, also unter dem Einfluß einer konstanten Kraft. Rechts vom klassischen Umkehrpunkt $x = 0$ fällt die Wellenfunktion exponentiell ab; links davon lassen die Oszillationen eine gleichmäßig beschleunigte Bewegung erkennen. $Bi(x)$ ist eine unphysikalische Lösung derselben Schrödinger-Gleichung.

als ein aus dem Unendlichen eingestreutes Teilchen interpretieren, das immer langsamer wird (die Oszillationsperiode wird größer), am klassischen Umkehrpunkt exponentiell abfallend in den verbotenen Bereich eindringt, um schließlich wieder ins Unendliche zurückreflektiert zu werden. (Die reelle Funktion Ai können wir uns aus zwei in entgegengesetzte Richtungen laufenden ebenen Wellen zusammengesetzt denken.) Die Funktion Bi ist ebenfalls eine stationäre Lösung der Schrödinger-Gleichung (3.42), allerdings eine unphysikalische.

Wir wiederholen nun die Betrachtungen des letzten Abschnitts in der Nähe des klassischen Umkehrpunkts. Wiederum drücken wir $d_{m' \pm 1, m}^j$ durch einen Verschiebungsoperator $\exp(-i\hat{\varphi})$ aus, was uns auf die „kinetische Energie“ $\cos \hat{\varphi}$ führt, die am klassischen Umkehrpunkt Null wird. Anders als im letzten Abschnitt genügt es uns nun, $\cos \hat{\varphi}$ um den klassischen Umkehrpunkt zu entwickeln,

$$d_{m' \pm 1, m}^j = e^{\mp i\varphi} d_{m', m}^j \approx \left(1 \pm \frac{\partial}{\partial m'} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial m'^2}\right) d_{m', m}^j. \quad (3.44)$$

Stattdessen gewinnt die langsam veränderliche Funktion $f(m')$ gegenüber $\cos \hat{\varphi}$ an Bedeutung. Wir müssen daher $f(m')$ genauer betrachten

und bis zur zweiten Ordnung entwickeln,

$$\begin{aligned}
 f(m+1) &\approx f(m+\frac{1}{2}) + \frac{1}{2}f'(m+\frac{1}{2}) + \frac{1}{8}f''(m+\frac{1}{2}) \\
 &= \frac{1}{2}\sqrt{J^2 - m^2} - \frac{1}{4}m(J^2 - m^2)^{-\frac{1}{2}} \\
 &\quad - \frac{1}{16}J^2(J^2 - m^2)^{-\frac{3}{2}}, \tag{3.45}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f(m) &\approx f(m+\frac{1}{2}) - \frac{1}{2}f'(m+\frac{1}{2}) + \frac{1}{8}f''(m+\frac{1}{2}) \\
 &= \frac{1}{2}\sqrt{J^2 - m^2} + \frac{1}{4}m(J^2 - m^2)^{-\frac{1}{2}} \\
 &\quad - \frac{1}{16}J^2(J^2 - m^2)^{-\frac{3}{2}}. \tag{3.46}
 \end{aligned}$$

Einsetzen in die Rekursionsformel (3.21) und Mitnehmen von Beiträgen bis einschließlich zweiter Ordnung führt uns auf

$$\begin{aligned}
 \frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta} d_{m',m}^j &\approx \left(\frac{1}{2}\sqrt{J^2 - m'^2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial m'^2} \right) \right. \\
 &\quad - \frac{1}{2}m'(J^2 - m'^2)^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial m'} \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2}J^2(J^2 - m'^2)^{-\frac{3}{2}} \right) d_{m',m}^j. \tag{3.47}
 \end{aligned}$$

Substitution von

$$g(m') = \sqrt{f(m' + \frac{1}{2})} d_{m',m}^j \tag{3.48}$$

und Vernachlässigen von Beiträgen zweiter Ordnung in Ableitungen von f führt uns auf die Differentialgleichung

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial m'^2} g(m') = \left(\frac{m - m' \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m'^2} \sin \beta} - 1 \right) g(m'). \tag{3.49}$$

Die Klammer verschwindet gerade am klassischen Umkehrpunkt $m' = m_t$, der sich aus der Ellipsengleichung (3.6) ergibt,

$$J^2 \sin^2 \beta - m^2 - m_t^2 + 2mm_t \cos \beta = 0. \tag{3.50}$$

Entwicklung um den klassischen Umkehrpunkt führt uns auf die stationäre Schrödinger-Gleichung eines einer konstanten Kraft ausgesetzten Teilchens mit dem Potential $V(m') = a(m' - m_t)$, wobei

$$\begin{aligned}
 a &= \frac{1}{\sin \beta} \left(\frac{m_t(m - m_t \cos \beta)}{(J^2 - m_t^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{\cos \beta}{\sqrt{J^2 - m_t^2}} \right) \\
 &= (\sin \beta)^{-1} (J^2 - m_t^2)^{-\frac{3}{2}} (mm_t - J^2 \cos \beta). \tag{3.51}
 \end{aligned}$$

Wir können nun die Lösung aus (3.43) übernehmen und erhalten

$$d_{m',m}^j \text{Airy} \sim \sqrt{2} (J^2 - m'^2)^{-\frac{1}{4}} \text{Ai} \left(\sqrt[3]{2a} (m' - m_t) \right). \quad (3.52)$$

Wegen $m' \approx m_t$ ist der Faktor vor der Airy-Funktion in guter Näherung konstant und kann in eine Proportionalitätskonstante miteinbezogen werden,

$$d_{m',m}^j \text{Airy} = D \cdot \text{Ai} \left(\sqrt[3]{2a} (m' - m_t) \right). \quad (3.53)$$

Es bleibt nun, die Proportionalitätskonstante D durch Vergleich mit der WKB-Näherung (3.37) aus dem letzten Abschnitt zu ermitteln. Hierbei wird gleichzeitig die Phasenverschiebung α berechnet, die in (3.35) offen gelassen werden mußte.

Die Ähnlichkeit der Airy-Funktionen mit trigonometrischen Funktionen und der Exponentialfunktion manifestiert sich in der Asymptotik der Airy-Funktionen für betragsmäßig große Argumente [25],

$$\text{Ai}(x) \approx \frac{1}{2} \pi^{-\frac{1}{2}} x^{-\frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right), \quad x > 0, \quad (3.54)$$

$$\text{Ai}(x) \approx \pi^{-\frac{1}{2}} (-x)^{-\frac{1}{4}} \cos \left(\frac{2}{3} (-x)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right), \quad x < 0. \quad (3.55)$$

Die Asymptotik (3.55) ermöglicht es uns, die Proportionalitätskonstante D mit dem Vorfaktor der WKB-Approximation (3.37) zu vergleichen. Aus

$$D \cdot \pi^{-\frac{1}{2}} (-x)^{-\frac{1}{4}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} A \quad (3.56)$$

mit

$$x = \sqrt[3]{2a} (m' - m_t) \quad (3.57)$$

und

$$A = (J^2 \sin^2 \beta - m^2 - m'^2 + 2mm' \cos \beta)^{-\frac{1}{4}} \quad (3.58)$$

erhalten wir

$$D = \sqrt{2} A \sqrt[4]{x}. \quad (3.59)$$

Zur Berechnung der Phasenverschiebung α vergleichen wir die Argumente der Cosinusfunktionen in der WKB-Approximation und in der asymptotischen Airy-Approximation,

$$\frac{2}{3} (-x)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \approx \int_{m_t}^{m'} dm'' J\varphi(m'') + \alpha, \quad (3.60)$$

wobei

$$J\varphi(m'') = \arccos \frac{m - m'' \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m''^2 \sin \beta}}. \quad (3.61)$$

Am klassischen Umkehrpunkt $m'' = m_t$ wird das Argument des Arcuscosinus zu Eins. Wir entwickeln den Arcuscosinus um diesem Punkt in eine Reihe,

$$\arccos y = \sqrt{2} \sqrt{1-y} + \mathcal{O}((1-y)^{\frac{3}{2}}), \quad (3.62)$$

und erhalten eine Näherung für die rechte Seite von (3.60),

$$\begin{aligned} & \int_{m_t}^{m'} dm'' J\varphi(m'') + \alpha \\ & \approx \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\sin \beta}} \frac{\sqrt{J^2 \cos \beta - mm_t}}{(J^2 - m_t^2)^{\frac{3}{4}}} (m' - m_t)^{\frac{3}{2}} + \alpha. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Für die linke Seite ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{2}{3}(-x)^{\frac{3}{2}} &= \frac{2}{3} \sqrt{-2a} (m' - m_t)^{\frac{3}{2}} \\ &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\sin \beta}} \frac{J^2 \cos \beta - mm_t}{(J^2 - m_t^2)^{\frac{3}{2}}} (m' - m_t)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

so daß wir aus (3.60) den Wert $\alpha = -\frac{\pi}{4}$ ablesen können. Damit sind sowohl die WKB- als auch die Airy-Näherung für die Wignersche d -Funktion vollständig bestimmt.

Abbildung 3.4 zeigt für $j = 100$ und $\beta = 1$ eine Zeile $m = 10$ der Wignerschen d -Matrix, einerseits exakt, andererseits durch die WKB- und die Airy-Approximation genähert. Man erkennt, daß die WKB-Approximation außer in der Nähe des Umkehrpunkts gute Ergebnisse liefert, während die Airy-Approximation gerade in der Nähe des Umkehrpunkts gültig wird. Man erkennt auch, daß es einen Überlappungsbereich gibt, in dem beide Näherungen weitgehend übereinstimmen, was – wie oben gezeigt – für die Bestimmung der Phasenverschiebung α notwendig ist.

In Abb. 3.5 ist der absolute Fehler beider Approximationen in Abhängigkeit von m' aufgetragen. (Wegen der Oszillationen der Wignerschen d -Funktion im klassisch erlaubten Bereich gibt es dort oft sehr kleine Funktionswerte, weshalb die Betrachtung relativer Fehler nicht sinnvoll ist.) Obwohl jede Approximation für sich in ihrem jeweiligen Gültigkeitsbereich gut ist, erreicht die Kombination beider Methoden

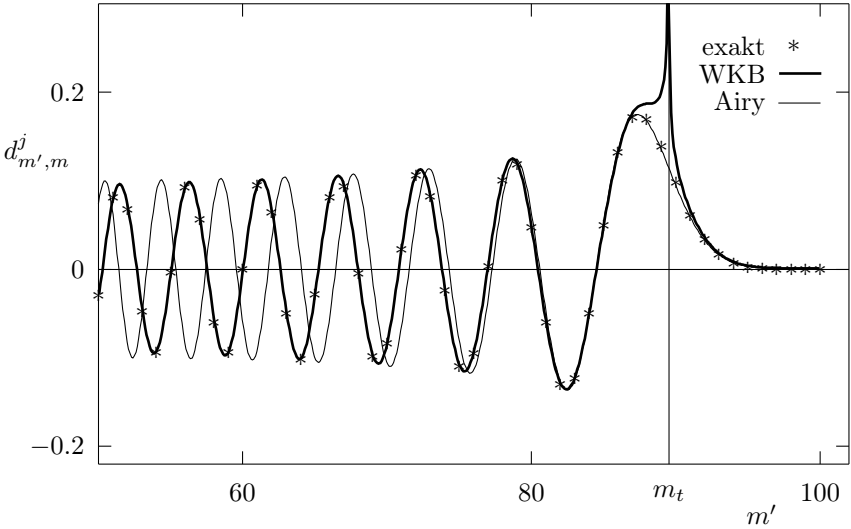


Abbildung 3.4: WKB- und Airy-Approximation. Für $j = 100$, $\beta = 1$ und $m = 10$ wird die Wignersche d -Funktion einerseits durch die WKB-, andererseits durch die Airy-Näherung approximiert. Außer in der Nähe des klassischen Umkehrpunkts $m_t \approx 89.551$ liefert die WKB-Methode eine gute Näherung. In der Nähe des Umkehrpunkts divergiert die WKB-Lösung; stattdessen wird die Airy-Approximation gültig.

im oben angesprochenen Überlappungsbereich einen maximalen Fehler von 0.0041 (für ein Matrixelement der Größe 0.050) in diesem Beispiel und begrenzt somit die Anwendbarkeit dieser Approximationsmethode. (Eine *gleichförmige Approximation*, die dieses Problem löst, wird in Abschnitt 3.6 behandelt werden, ist aber bereits in Abb. 3.5 eingezeichnet.)

Dieses *Übergangsbereich* betrifft den gesamten Übergangsbereich zwischen WKB- und Airy-Approximation. In Abb. 3.6 ist in der linken Bildhälfte der Bereich am Rande des klassisch erlaubten Gebietes in der m - m' -Ebene dargestellt, in dem die Airy-Approximation der WKB-Approximation überlegen ist; in der rechten Bildhälfte schließt sich eine Graustufendarstellung des (absoluten) Fehlers der kombinierten WKB-Airy-Approximation gegenüber der exakten Wignerschen d -Funktion an. Man erkennt, daß der Fehler im Übergangsbereich am größten ist: Hier befinden wir uns zu nahe am Rande des klassisch erlaubten Gebiets, als daß die WKB-Approximation gut wäre, aber doch zu weit entfernt, als daß die Airy-Approximation greifen würde.

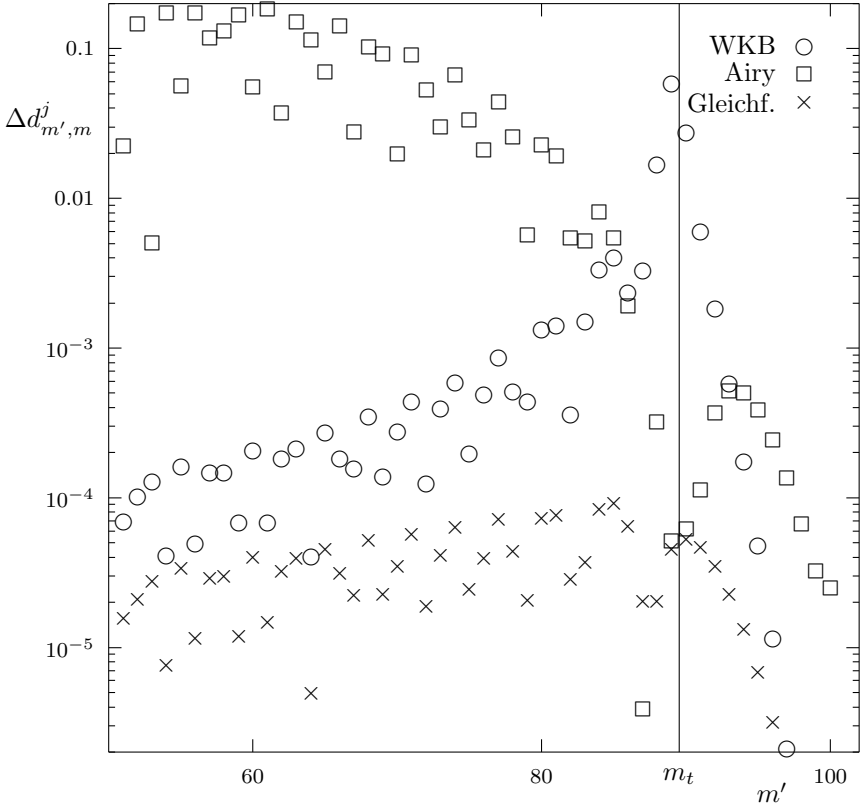


Abbildung 3.5: Fehler der WKB- und Airy-Approximation. Der absolute Fehler der Näherungen ist in Abhängigkeit von m' aufgetragen; die Parameter sind $j = 100$, $\beta = 1$ und $m = 10$ wie in Abb. 3.4. (Wegen der Oszillationen im klassisch erlaubten Bereich ist es nicht sinnvoll, relative Fehler zu betrachten.) Bei Kombination beider Methoden entsteht im Übergangsbereich ein relativ hoher maximaler Fehler, in diesem Fall 0.0041 bei $m' = 85$ (für ein Matrixelement der Größe 0.050), was der Anwendbarkeit der Approximationen Grenzen setzt. Die *gleichförmige Approximation*, die diesen Mangel behebt, wird in Abschnitt 3.6 behandelt.

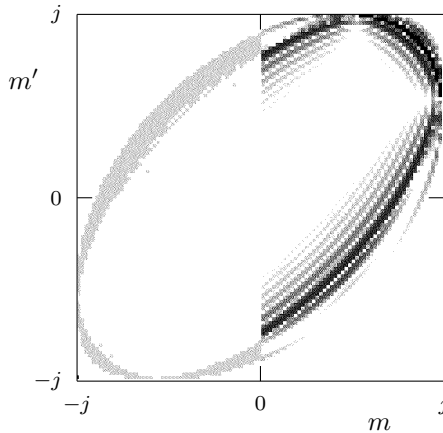


Abbildung 3.6: Aufteilung und Fehler der kombinierten WKB-Airy-Approximation. Linke Hälfte: Bereiche innerhalb der Wignerschen d -Matrix, in denen die Airy-Approximation der WKB-Approximation überlegen ist, sind dunkel schattiert. Die Parameter sind $j = 50$ und $\beta = 1$. Rechte Hälfte: Absoluter Fehler der kombinierten WKB-Airy-Approximation; dunkle Punkte entsprechen großen Fehlern.

Eine Abschätzung für die Relevanz der Airy-Approximation und des Übergangsproblems können wir erhalten, indem wir die Matrixelemente zählen, auf welche die Airy-Approximation Anwendung findet. Abbildung 3.7 zeigt den Anteil dieser Matrixelemente als Funktion von j für $\beta = 1$. Der Anteil fällt in etwa wie $1/\sqrt{j}$ ab. Da die Gesamtzahl $(2j+1)^2$ der Matrixelemente quadratisch mit j zunimmt, steigt die Anzahl der Airy-approximierten Matrixelemente mit j wie $j^{3/2}$ an.

Auf der anderen Seite besitzt die Airy-Approximation in der Nähe des Randes des elliptischen klassisch erlaubten Bereichs Gültigkeit, dessen Umfang proportional zu j ist. Da die Airysche Differentialgleichung durch eine Näherung erster Ordnung in $m' - m_t$ aus Gleichung (3.49) gewonnen wurde, hat die Airy-Approximation eine konstante „Reichweite“ $m' - m_t \lesssim konst.$ Aus diesem Grunde liefert die Airy-Approximation – grob abgeschätzt – nur für $j \cdot konst.$ Matrixelemente eine sinnvolle Näherung.

Es ist daher zu erwarten, daß sich das Übergangsproblem mit wachsendem j immer stärker bemerkbar machen wird.

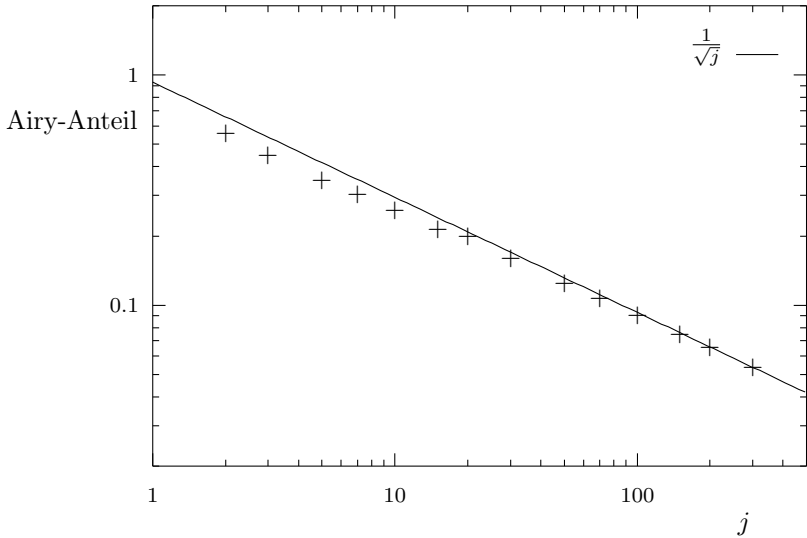


Abbildung 3.7: Anteil der Airy-genäherten Matrixelemente als Funktion von j für $\beta = 1$. Der Anteil derjenigen Matrixelemente, für welche die Airy-Approximation der WKB-Approximation vorzuziehen ist, ist etwas weniger als $1/\sqrt{j}$.

3.5 Semiklassische Spektren

Um den vollen Floquet-Operator des gekickten Kreisels zu erhalten, müssen wir noch den Torsionsanteil – den *Kick* – berücksichtigen. Quantenmechanisch exakt äußert sich der Kick in einer komplexen Phase,

$$\begin{aligned}
 \langle j, m' | F | j, m \rangle &= \langle j, m' | e^{-i\frac{k}{2j+1}J_z^2} e^{-i\beta J_y} | j, m \rangle \\
 &= e^{-i\frac{k}{2j+1}m'^2} d_{m',m}^j(\beta).
 \end{aligned}
 \tag{3.65}$$

Dieselbe komplexe Phase entsteht, wenn in der WKB-Näherung der Wignerschen d -Funktion (3.35) die Wirkung S_0 der Rotation (3.7) durch die volle Wirkung von Rotation und Torsion (3.11) ersetzt wird. Die Beiträge $\mp \frac{1}{2} \frac{km'^2}{J}$ eines nach rechts bzw. nach links laufenden Teilchens (beide Vorzeichen der Rekursionsformel) überlagern sich dann nicht mehr zu einem reellen Cosinus, sondern es bleibt eine komplexe Phase $\exp(-i\frac{k}{2j+1}m'^2)$ übrig.

Somit läßt sich der Kick bereits in WKB-Näherung exakt ausführen, und wir erhalten zusammen mit der WKB- und Airy-Approximation

der Wignerschen d -Funktion eine komplette semiklassische Matrix des Floquet-Operators des gekickten Kreisels.

Die Matrix des Floquet-Operators enthält die gesamte quantenmechanische Information; insbesondere können wir durch numerisches Diagonalisieren ein semiklassisches Spektrum extrahieren, das wir mit dem exakten Spektrum vergleichen können. Abbildung 3.8 zeigt diesen Vergleich für $j = 5$, $\beta = 1$ und $k = 8$, zum einen für eine reine WKB-Näherung, zum anderen für die Kombination von WKB- und Airy-Näherung.

Die exakten Eigenwerte λ des Floquet-Operators liegen infolge der Unitarität des Operators auf dem komplexen Einheitskreis. Die WKB-genäherten Eigenwerte liegen zum Teil weit vom Einheitskreis entfernt; der Phasenfehler

$$\Delta\varphi = \sqrt{\frac{1}{2j+1} \sum_{i=1}^{2j+1} (\varphi_i - \varphi_i^{\text{exakt}})^2} \quad (3.66)$$

(Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung) beträgt für dieses Beispiel 19.8% des mittleren Abstands $2\pi/(2j+1)$ und ermöglicht noch eine eindeutige Zuordnung der genäherten Eigenwerte zu ihren exakten Gegenstücken.

Zieht man die Airy-Approximation für den Rand des klassisch erlaubten Bereichs hinzu, sinkt der relative Phasenfehler auf 0.84%, so daß die WKB-Airy-Kombination für dieses Beispiel als gute Näherung betrachtet werden kann.

Betrachtet man die Fehler in Abhängigkeit von der Quantenzahl j , so kann man aufgrund der Natur der semiklassischen Näherung erwarten, daß der absolute Fehler für $j \rightarrow \infty$ wie $1/j$ verschwindet. Da der mittlere Abstand der Eigenwerte auf dem Einheitskreis $2\pi/(2j+1)$ ist, können wir also höchstens einen bzgl. j konstanten relativen Fehler erhoffen. Abbildung 3.9 stellt den relativen Phasenfehler der WKB- und der kombinierten WKB-Airy-Approximation in Abhängigkeit von j dar. Man erkennt, daß die reine WKB-Approximation für große j ihren Nutzen verliert; der relative Fehler erreicht die Größenordnung 1. Kombination mit der Airy-Approximation für den Rand des klassisch erlaubten Bereichs liefert eine drastische Verbesserung der Approximation. Obwohl der Anteil der betroffenen Matrixelemente wie $1/\sqrt{j}$ verschwindet (siehe Abb. 3.7), beeinflusst also der für diese wenigen Matrixelemente geltende Näherungsfehler die Qualität der Approximation entscheidend.

Für die kombinierte WKB-Airy-Approximation bleibt der Fehler bis $j = 500$ zwar unterhalb von 10%, steigt aber für $j \rightarrow \infty$ systematisch

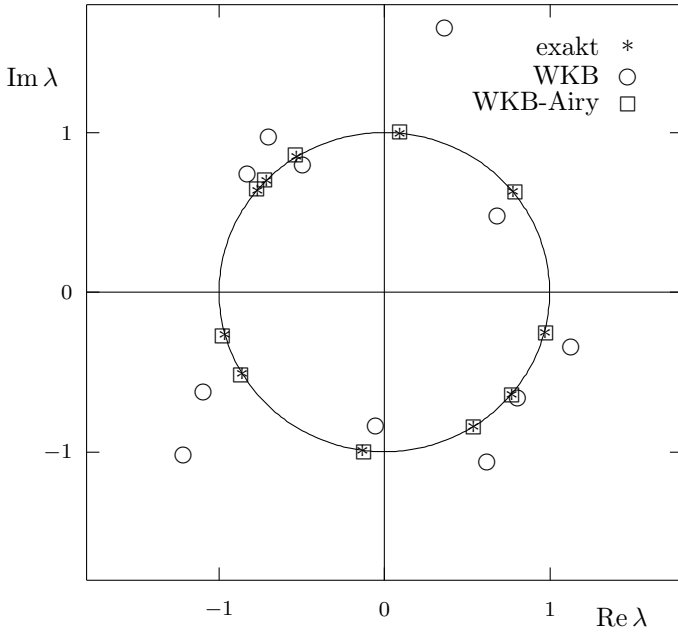


Abbildung 3.8: Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels: exakt, WKB- und WKB-Airy-Näherung. Die elf Eigenwerte λ des Floquet-Operators für $j = 5$, $\beta = 1$ und $k = 8$ wurden zum einen exakt, zum anderen mit der WKB- und Airy-Approximation berechnet. Die exakten Eigenwerte liegen infolge der Unitarität von F auf dem komplexen Einheitskreis. Das reine WKB-Ergebnis hat einen relativen Phasenfehler von 19.8%, d. h., die Phasen lassen sich noch auflösen; unter Miteinbeziehung der Airy-Approximation sinkt der relative Fehler auf 0.83%.

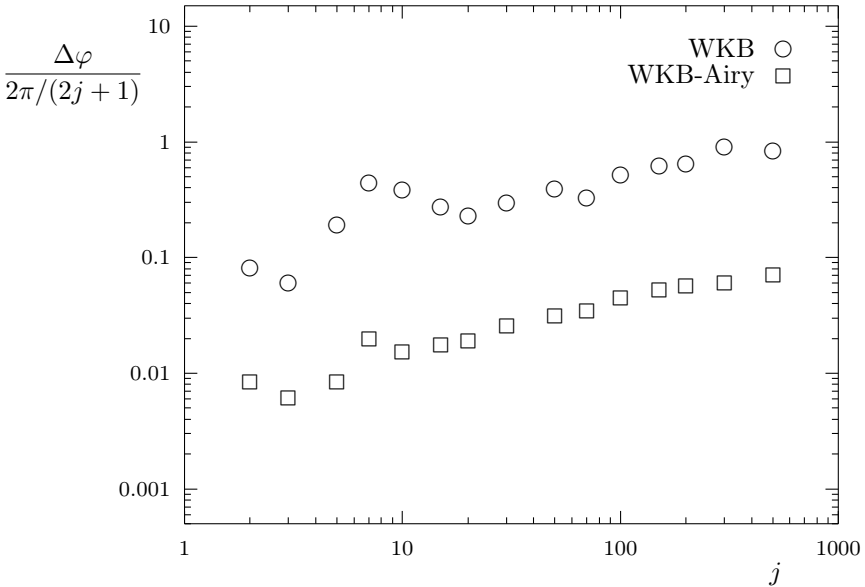


Abbildung 3.9: Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = 1$, $k = 8$: WKB- und WKB-Airy-Näherung. Für große j erreicht der relative Phasenfehler der reinen WKB-Approximation die Größenordnung 1, so daß die Phasen sich nicht mehr auflösen lassen. Der relative Fehler der kombinierten WKB-Airy-Approximation bleibt bis $j = 500$ zwar unter 10 %, steigt aber für $j \rightarrow \infty$ systematisch an.

an. Damit ist klar, daß auch diese Methode im semiklassischen Limes letztlich versagt, so daß weitere Verfeinerungen notwendig werden. Die Ursache für das Ansteigen des relativen Fehlers mit j ist das im letzten Abschnitt angesprochene Übergangsproblem, das im nächsten Abschnitt durch Entwicklung der *gleichförmigen Approximation* angegangen werden wird.

3.6 Gleichförmige Approximation

Bei der Bestimmung des Vorfaktors der Airy-Approximation (3.53) und der Phasenverschiebung α der WKB-Approximation (3.37) haben wir bereits die Asymptotik (3.54), (3.55) der Airy-Funktion Ai kennengelernt; desweiteren wurde das Argument JS des Cosinus in der WKB-Approximation mit dem Argument x von Ai in der Airy-Approximation

in Verbindung gebracht.

Es liegt nun nahe, die WKB-Approximation mit einer Airy-Funktion anstelle des Cosinus neu zu formulieren, so daß die asymptotische Form erhalten bleibt und sich in der Nähe des klassischen Umkehrpunktes m_t die Airy-Approximation ergibt.

In der Airy-Approximation (3.53) drücken wir im klassisch erlaubten Bereich das Argument x (3.57) gemäß Gleichung (3.60) näherungsweise durch die klassische Wirkung S_0 (3.7) aus,

$$\lambda = -\left(\frac{3}{2} \int_{m_t}^{m'} dm'' J\varphi(m'')\right)^{\frac{2}{3}} = -\left(\frac{3}{2} J(\pi - S_0(m', m))\right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.67)$$

und erhalten unmittelbar die *gleichförmige Approximation* der Wigner-schen d -Funktion,

$$d_{m',m}^{j \text{ Gl}} = \sqrt{2} A \sqrt[4]{-\lambda} \text{Ai}(\lambda), \quad (3.68)$$

wobei A der WKB-Vorfaktor (3.58) ist.

Analog erhalten wir für den klassisch verbotenen Bereich das Argument

$$\lambda = \left(\frac{3}{2} i J S_0(m', m)\right)^{\frac{2}{3}}, \quad (3.69)$$

das sich am klassischen Umkehrpunkt $m' = m_t$ mit $\lambda = 0$ stetig an (3.67) anschließt. Da die Wirkung S_0 im klassisch verbotenen Bereich rein imaginär ist, ist λ dort reell. Man beachte weiterhin, daß sich die Divergenz des WKB-Vorfaktors A am klassischen Umkehrpunkt mit dem Nulldurchgang von λ zu einem endlichen Wert weghebt.

Alternativ können wir die gleichförmige Approximation auch herleiten, indem wir (3.68) als *gleichförmigen WKB-Ansatz* in die Rekursionsformel (3.17) einsetzen. Dies führt zu denselben Funktionen A und S wie der gewöhnliche WKB-Ansatz (3.26), nur daß die Lösung auch am klassischen Umkehrpunkt ihre Gültigkeit behält. Diese Methode funktioniert allgemein als verbesserte WKB-Näherung [26, §§ 10.4.111–116]

In Abschnitt 3.4 wurde in Abbildung 3.5 (S. 40) bereits der Fehler der gleichförmigen Approximation eingezeichnet. Es zeigt sich, daß die Näherung nicht nur im Übergangsbereich, sondern global deutlich verbessert wird. Offensichtlich ist der gleichförmige Ansatz (3.68) zur Approximation quantenmechanischer Probleme prinzipiell geeigneter als der Standard-WKB-Ansatz.

Voraussetzung für das Funktionieren der gleichförmigen Approximation – wie bereits der Airy-Approximation – ist, daß sich nur ein einzelner klassischer Umkehrpunkt in der Nähe befindet, so daß die Annäherung durch eine „schiefe Ebene“ sinnvoll ist. Abbildung 3.10 illustriert, wie der Fehler aller bisher eingeführten Approximationen einschließlich der gleichförmigen Approximation in der Nähe eines *doppelten Umkehrpunktes* anwächst. (Dies ist für den ungenerischen Fall $\beta = \pi/2$ besonders gut sichtbar.) Bevor wir uns weiterer numerischer Auswertung und Interpretation der Ergebnisse zuwenden, wollen wir mit dem folgenden Abschnitt diese Lücke schließen, indem wir die *Oszillator-Approximation* für speziell diesen Fall entwickeln.

3.7 Oszillator-Approximation

Die Grenze des klassisch erlaubten Gebiets in der m - m' -Ebene ist durch die Ellipsengleichung (3.50) gegeben. Für vier Wertepaare (m', m) ist m' eine doppelte Nullstelle der Gleichung; hier fallen jeweils zwei klassische Umkehrpunkte zusammen. Die Näherung der Rekursionsformel der Wignerschen d -Funktion durch die Schrödinger-Gleichung der schiefen Ebene kann an diesen Stellen keine sinnvollen Ergebnisse liefern; stattdessen werden wir auf den harmonischen Oszillator geführt.

Ein klassisches Teilchen in einem harmonischen Oszillatorpotential führt eine Schwingbewegung zwischen zwei Umkehrpunkten aus. Je geringer die Energie, desto geringer ist die Amplitude der Schwingung und desto näher kommen sich die Umkehrpunkte. Ein Teilchen mit der Energie Null, das im harmonischen Oszillatorpotential ruht, befindet sich auf einem doppelten klassischen Umkehrpunkt.

So, wie wir im letzten Abschnitt die Airy-Funktionen als stationäre Zustände der schiefen Ebene erhielten, werden wir nun die niedrigsten Eigenzustände des harmonischen Oszillators zur Approximation der Wignerschen d -Funktion heranziehen.

Im folgenden bezeichnen wir mit

$$\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi), \quad (3.70)$$

Lösungen der Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators zur Frequenz 1,

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2\right) \psi_n(\xi) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \psi_n(\xi). \quad (3.71)$$

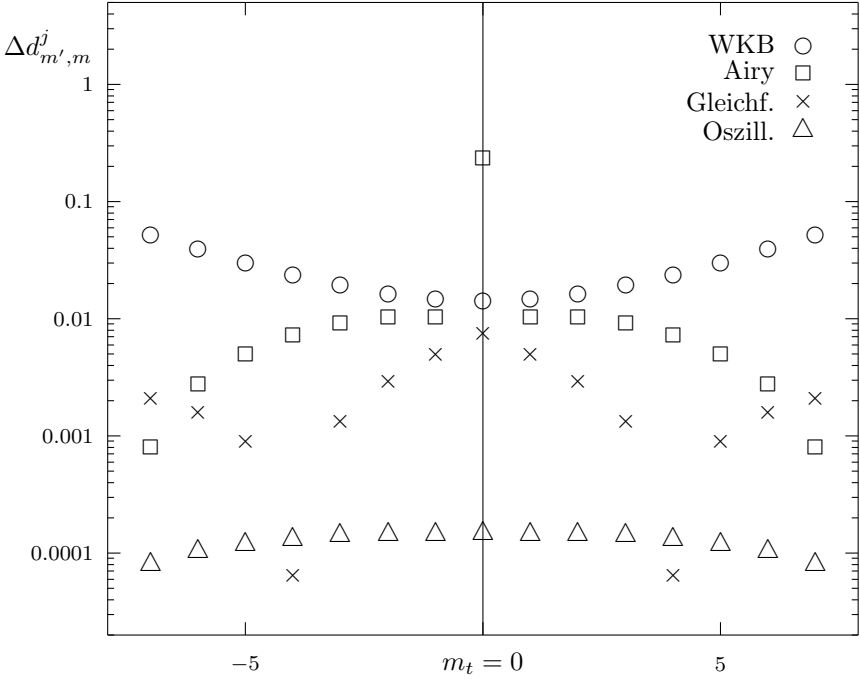


Abbildung 3.10: Approximationsfehler am doppelten Umkehrpunkt. Für $j = 100$ und $\beta = \pi/2$ liegt bei $m = j$, $m' = 0$ ein *doppelter klassischer Umkehrpunkt*, an dem sowohl WKB- und Airy- als auch die gleichförmige Approximation ungenau werden; die absoluten Fehler aller drei Approximationen steigen bei $m = 0$ bis auf ca. 0.01 an, was die Qualität semiklassischer Spektren zwar nicht wesentlich, aber doch merklich herabsetzt. Dies motiviert die Einführung der *Oszillator-Approximation* speziell für diese Situation.

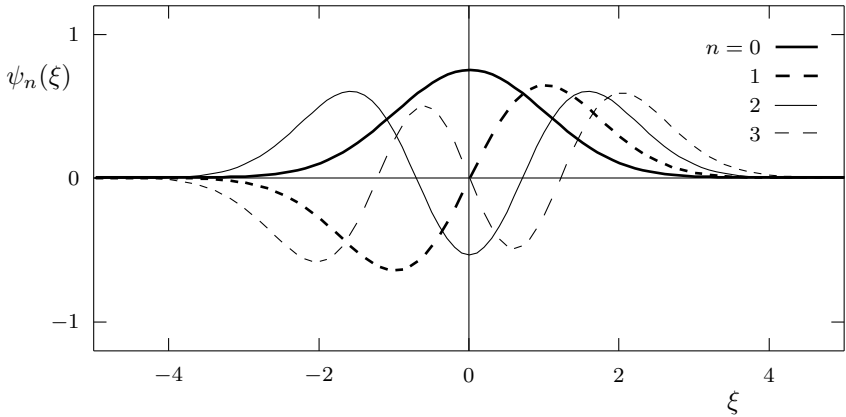


Abbildung 3.11: Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators zur Frequenz 1

Hierbei sind

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (3.72)$$

oder auch

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_{n+1}(\xi) &= 2\xi H_n(\xi) - 2(n-1)H_{n-1}(\xi) \end{aligned} \quad (3.73)$$

die Hermiteschen Polynome. Abbildung 3.11 zeigt die Graphen der ersten vier Eigenfunktionen $\psi_0(\xi)$ bis $\psi_3(\xi)$.

Für die Oszillator-Näherung der Wignerschen d -Funktion entwickeln wir, wie schon in Abschnitt 3.4, die „kinetische Energie“ $\cos \hat{\varphi}$ um den klassischen Umkehrpunkt. Es genügt an dieser Stelle, nur die nullte Näherung $f(m' + \frac{1}{2})$ der Koeffizienten $f(m')$ und $f(m' + 1)$ mitzunehmen. (Für genauere Betrachtungen siehe [27].) Wir erhalten auf diese Weise eine vereinfachte Version von Gleichung (3.47),

$$\frac{m - m' \cos \beta}{\sin \beta} d_{m',m}^j \approx \left(\frac{1}{2} \sqrt{J^2 - m'^2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial m'^2} \right) \right) d_{m',m}^j. \quad (3.74)$$

Dies läßt sich umformen zu

$$\left(m - J + \frac{(m' - J \cos \beta)^2}{2J \sin^2 \beta} \right) d_{m',m}^j = \frac{1}{2} J \sin^2 \beta \frac{\partial^2}{\partial m'^2} d_{m',m}^j. \quad (3.75)$$

Substitution von

$$\xi = \frac{m' - J \cos \beta}{\sqrt{J} \sin \beta} \quad (3.76)$$

führt auf die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators (3.71) mit $n = J - m - \frac{1}{2} = j - m$, und wir können die Oszillator-Näherung der Wignerschen d -Funktion für doppelte klassische Umkehrpunkte aus (3.70) ablesen,

$$d_{m',m}^j \text{Osz} = \sqrt[4]{J} \sqrt{\sin \beta} \psi_{j-m}(\xi). \quad (3.77)$$

In Abb. 3.10 (S. 48) wurde der Fehler der Oszillator-Approximation in der Nähe eines doppelten Umkehrpunktes bereits eingezeichnet. Die Verbesserung gegenüber allen anderen Approximationen ist klar erkennbar. Entfernt man sich vom doppelten Umkehrpunkt, beispielsweise indem man $m < j$ anstelle von $m = j$ wählt, verliert die Oszillator-Approximation schnell an Genauigkeit.

Abbildung 3.12 zeigt die Aufteilung der Matrix in die Gültigkeitsbereiche der verschiedenen Näherungen. Für den Spezialfall $\beta = \pi/2$ ist die Bedeutung der Oszillator-Approximation am größten; wenn man sich von $\beta = \pi/2$ entfernt, findet die Oszillator-Approximation auf immer weniger Matrixelemente Anwendung.

Bei der Anwendung der gleichförmigen Approximation und der Oszillator-Approximation zur Berechnung semiklassischer Spektren (Abb. 3.13 und 3.14) stellen wir fest, daß die gleichförmige Approximation in der Tat ausreicht, die Eigenphasen auch für $j \rightarrow \infty$ aufzulösen; der relative Fehler ist unabhängig von j . Durch Hinzunahme der Oszillator-Approximation wird der relative Fehler weiter verringert, bleibt jedoch unabhängig von j . Die Oszillator-Approximation macht sich für $\beta = \pi/2$ (Abb. 3.14) stärker bemerkbar als für $\beta = 1$; dies ist konsistent mit der Beobachtung, daß für $\beta = \pi/2$ besonders viele Matrixelemente durch die Oszillator-Approximation besser genähert werden als durch die gleichförmige Approximation.

Da der Torsionsteil des Floquet-Operators bereits in WKB-Näherung exakt berechnet wurde, sollte man annehmen, daß der Torsions- oder Kickparameter k die Qualität der Approximation nur unwesentlich beeinflusst. Um so erstaunlicher ist stattdessen die Beobachtung, daß für $k = 2$ (siehe Abb. 3.15) der relative Phasenfehler der gleichförmigen Approximation für $j \rightarrow \infty$ anwächst und im zugänglichen j -Bereich auch nicht sättigt.

Eine Betrachtung der Abhängigkeit der Qualität der Approximation von k bei festgehaltenem $j = 100$ (siehe Abb. 3.16) zeigt ein Maximum

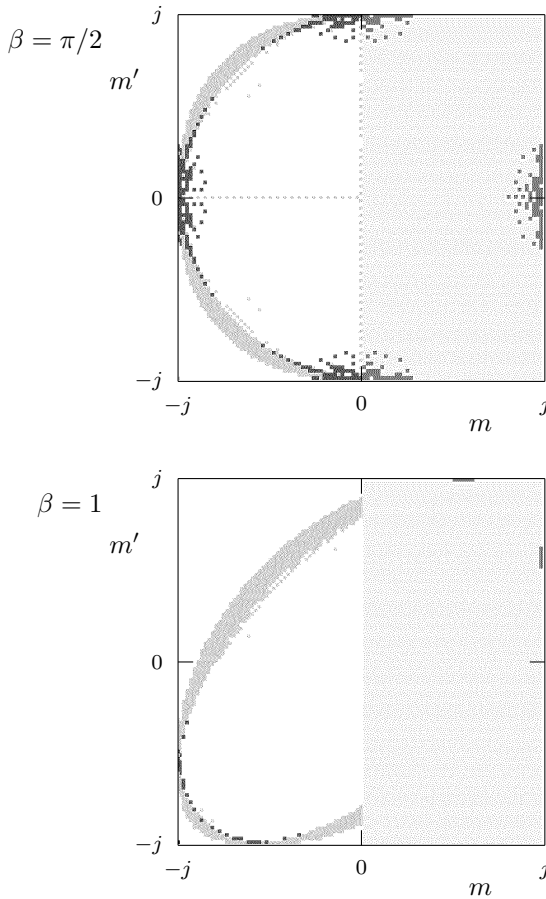


Abbildung 3.12: Gültigkeitsbereiche der Approximationsmethoden. In den linken Hälften ist die Aufteilung der WKB- (weiß), Airy- (grau) und Oszillator-Näherungsmethoden (schwarz) auf die Matrixelemente dargestellt, in den rechten Hälften die Aufteilung zwischen der gleichförmigen Approximation (hellgrau) und der Oszillator-Approximation (dunkelgrau).

Für den Spezialfall $\beta = \pi/2$ sind die Bereiche, in denen die Oszillator-Näherung Anwendung findet, relativ groß; wenn man sich von $\beta = \pi/2$ entfernt, werden sie schnell kleiner.

Für $\beta = \pi/2$ erkennt man horizontale und vertikale Linien $m' = 0$ bzw. $m = 0$, entlang derer die Airy-Approximation auch tief im klassisch erlaubten Bereich der WKB-Approximation überlegen scheint. Diese sind ein numerisches Artefakt und resultieren daher, daß die exakten Matrixelemente dort genau Null sind.

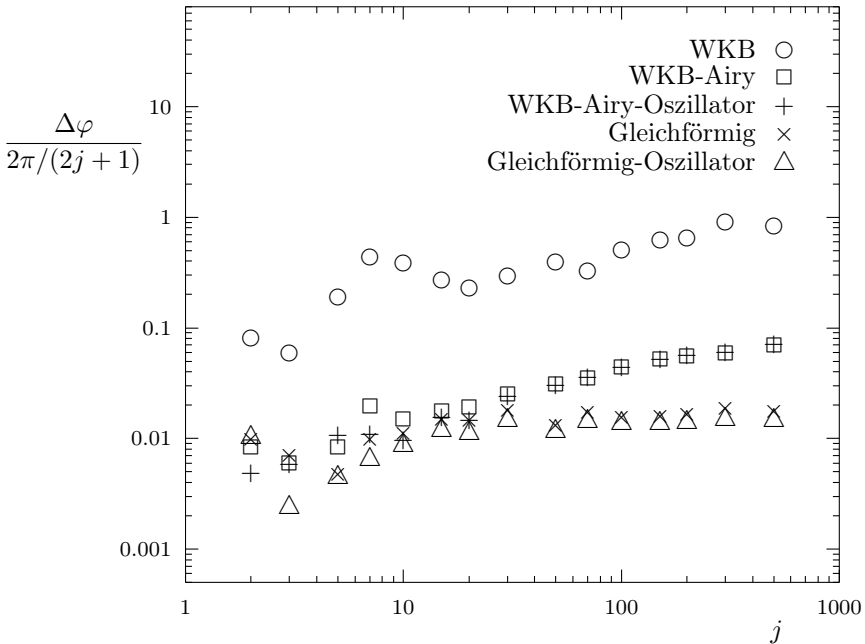


Abbildung 3.13: Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = 1, k = 8$. Der relative Fehler der gleichförmigen Approximation ist bzgl. j weitgehend konstant; insofern ist diese Näherungsmethode auch im semiklassischen Limes $j \rightarrow \infty$ noch sinnvoll. Die Oszillator-Approximation für doppelte Umkehrpunkte verbessert die Ergebnis der gleichförmigen Approximation geringfügig.

des relativen Phasenfehlers der gleichförmigen Approximation bei $k \approx 2$, während die Näherung für $k = 0$ und für $k > 6$ gute Ergebnisse liefert.

Für Ansätze zu einer intuitiven Erklärung sei bemerkt, daß der Rotationsanteil auch für $k \rightarrow \infty$ nicht vernachlässigt werden darf, so daß hierdurch kein Erklärungsansatz zur Verfügung steht. Dies liegt daran, daß die Wignersche d -Funktion und alle betrachteten Approximationen rein reelle Funktionen sind, während sich die Torsion in Gestalt von komplexen Phasenfaktoren bemerkbar macht, wobei die Phase proportional zum Quadrat der Quantenzahl m' ist. Man kann höchstens spekulieren, daß sich die Approximationsfehler für große $k \gtrsim 6$ gewissermaßen herausmitteln; dies liefert jedoch keine Erklärung für das gute Funktionieren der Approximation bei $k = 0$.

Systematische Untersuchungen zur Qualität semiklassischer Approxi-

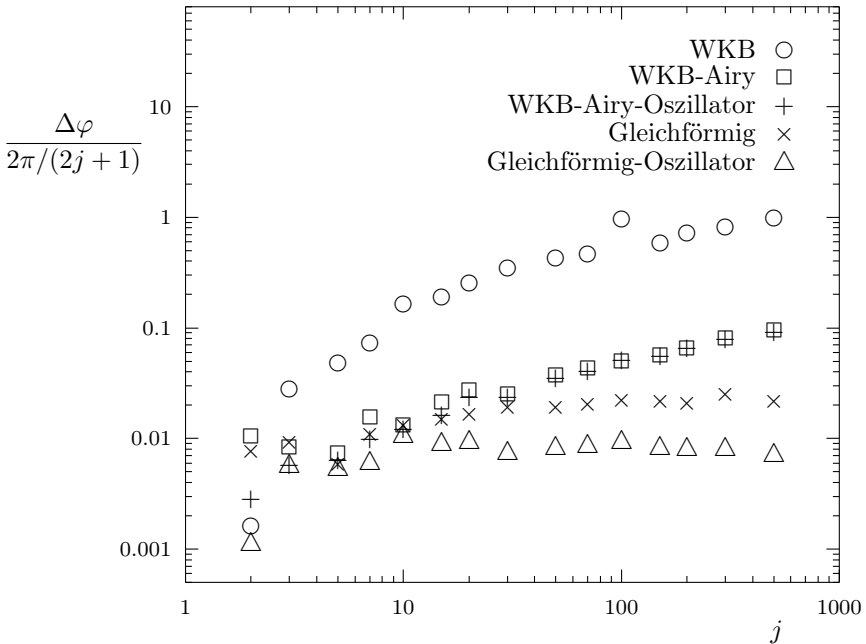


Abbildung 3.14: Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = \pi/2$, $k = 8$. Die Approximationen liefern qualitativ ähnliche Ergebnisse wie für $\beta = 1$; die Verbesserung durch Hinzunahme der Oszillator-Approximation macht sich jedoch für $\beta = \pi/2$ besonders stark bemerkbar.

mationen insbesondere in Systemen mit gemischtem Phasenraum – was in unserem Modell bei $k \approx 2$ der Fall ist – sind Gegenstand aktueller Forschung von H. Schomerus und M. Sieber [9]. In diesen Untersuchungen werden Bifurkationen periodischer Bahnen anhand ihrer *Kodimensionen* klassifiziert; ein Analogon für die in dieser Arbeit vorliegende Situation wäre das systematische Fortführen gleichförmiger Approximationen auf Umkehrpunkte höherer Ordnung. Das nächste Ziel wäre demnach eine Verfeinerung der gleichförmigen Approximation in Hinblick auf doppelte Umkehrpunkte. Da die Umkehrpunkte durch eine Gleichung zweiten Grades (3.50) definiert sind, die keine Umkehrpunkte höherer Ordnung zulässt, ist damit zu rechnen, daß eine derartige Verfeinerung bereits exakt wäre. In diesem Sinne wurde die Semiklassik in der Asymptotik der Wignerschen d -Funktion in diesem Kapitel erschöpfend behandelt.

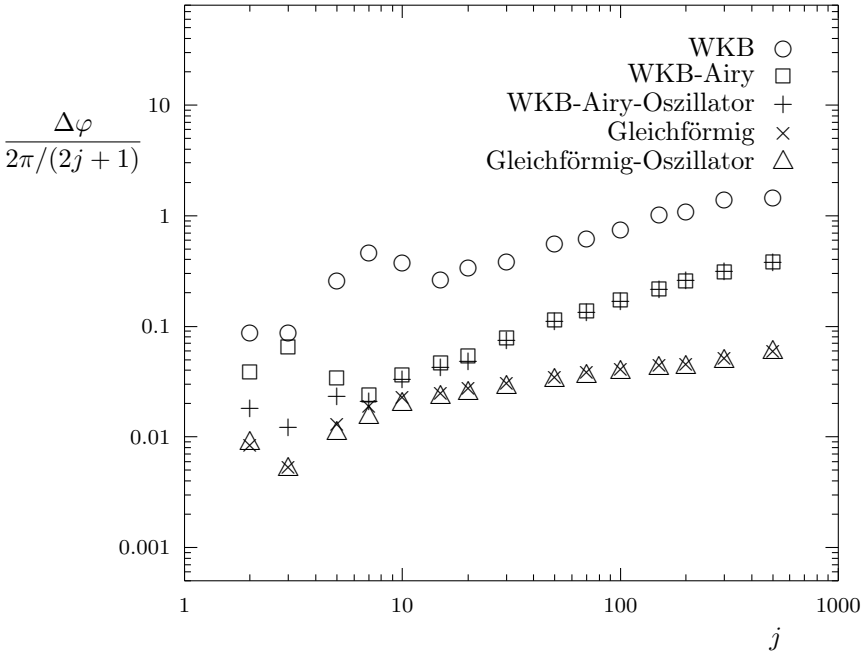


Abbildung 3.15: Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = 1$, $k = 2$. Obwohl der von k abhängige Torsionsteil des Floquet-Operators exakt berechnet wurde, beobachten wir für bestimmte Werte von k ein Ansteigen des relativen Fehlers mit wachsendem j selbst für die gleichförmige Approximation.

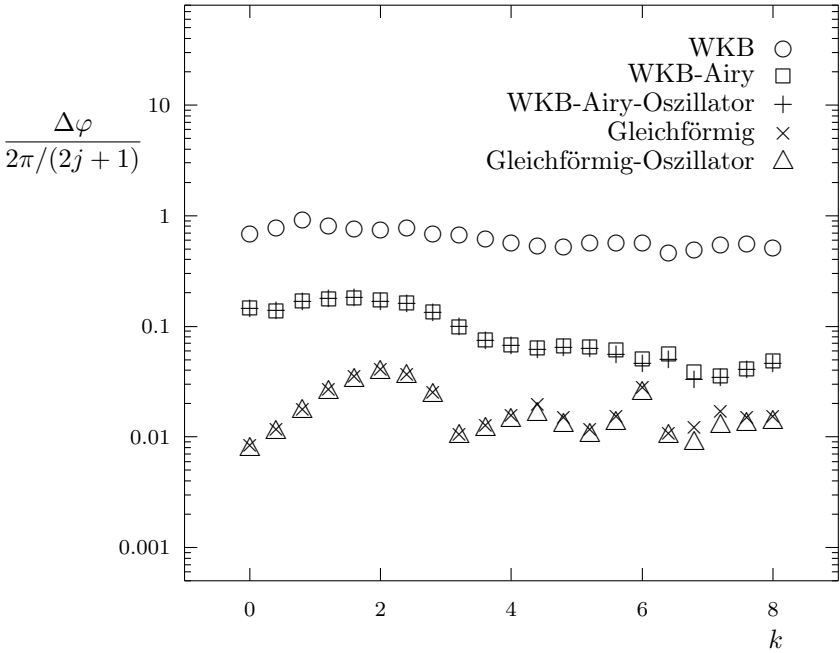


Abbildung 3.16: Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von k für $\beta = 1$, $j = 100$. Die gleichförmige Approximation liefert für $k = 0$ und für $k > 6$ gute Ergebnisse, bei $k \approx 2$ deutlich schlechtere, die aber immer noch im Bereich weniger Prozent des mittleren Abstands $2\pi/(2j + 1)$ liegen.

Kapitel 4

Kohärente Zustände als Basis des Zustandsraums

In diesem Kapitel sollen *kohärente Zustände*, d. h. Zustände mit gerichtetem Drehimpulsvektor und minimalem Unschärfeprodukt, als Basis des Hilbertraums des gekickten Kreisels verwendet werden. Der Floquet-Operator wird in einer nicht nicht-orthogonalen Basis kohärenter Zustände dargestellt, und es wird eine semiklassische Approximation dieser Darstellung hergeleitet. Durch numerische Diagonalisierung wird ein vollständiges semiklassisches Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels extrahiert.

4.1 Kohärente Drehimpulszustände

Aus Kapitel 3 kennen wir die Standardbasis des Hilbert-Raums eines Drehimpulssystems, die gemeinsamen Eigenzustände $|j, m\rangle$ der Operatoren J^2 und J_z mit den durch (3.1) und (3.2) beschriebenen Eigenschaften. Zwei dieser Zustände kann man als „besonders klassisch“ bezeichnen: Der Zustand $|j, j\rangle$ entspricht – soweit die quantenmechanische Unschärfe dies zulässt – einem in z -Richtung zeigenden klassischen Drehimpulsvektor, der Zustand $|j, -j\rangle$ einem in $(-z)$ -Richtung zeigenden Drehimpulsvektor.

Wir verwenden nun die aus Abschnitt 2.3 bekannten quantenmechanischen Rotationsoperatoren, um den Zustand $|j, j\rangle$ in eine beliebige

Richtung (φ, θ) zu drehen,

$$|\varphi, \theta\rangle \equiv e^{-i\varphi J_z} e^{-i\theta J_y} e^{i\varphi J_z} |j, j\rangle, \quad (4.1)$$

und haben hiermit einen *kohärenten Drehimpulszustand* definiert [28, 29].

Es ist oft sinnvoll, die Ausrichtung des Drehimpulses, wie in Abschnitt 2.2 vorgeführt, durch eine einzige komplexe Zahl $\gamma = e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2}$ (stereographische Projektion) darzustellen. Indem man J_y durch die Leiteroperatoren $J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$ mit den in (3.20) angegebenen Eigenschaften ausdrückt und in der $|j, m\rangle$ -Basis rechnet, kann man zeigen, daß

$$|\gamma\rangle \equiv (1 + \gamma\gamma^*)^{-j} \sum_{n=0}^{2j} \gamma^n \sqrt{\binom{2j}{n}} |j, j-n\rangle \quad (4.2)$$

denselben Zustand wie (4.1) darstellt, $|\gamma \equiv e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2}\rangle = |\varphi, \theta\rangle$ [14]. Wir werden daher beide Gleichungen (4.1) und (4.2) gleichermaßen als Definition eines kohärenten (Drehimpuls-) Zustandes auffassen.

Der Nenner $1 + \gamma\gamma^*$ ist ein *geometrischer Vorfaktor*, der von der Flächenverzerrung der stereographischen Projektion herrührt und dem wir beim Rechnen in diesem Koordinatensystem noch öfter begegnen werden.

Die Bezeichnung der Zustände $|\varphi, \theta\rangle$ oder $|\gamma\rangle$ als „kohärente Zustände“ ist dadurch gerechtfertigt, daß diese Zustände mit den *kohärenten Zuständen des harmonischen Oszillators*, die u. a. in der Quantenoptik Anwendung finden, einige charakteristische Eigenschaften gemeinsam haben:

Minimale Unschärfe: Gemäß ihrer Konstruktion als gedrehter $|j, j\rangle$ -Zustand haben kohärente Drehimpulszustände minimale Unschärfe in den Komponenten des Drehimpulses [28]. (Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators entstehen durch Verschiebung aus dem Grundzustand und haben minimales Produkt von Orts- und Impulsunschärfe.)

Vollständigkeit: Es ist möglich, den Eins-Operator $\mathbb{1}$ durch ein Integral über Projektoren auf kohärente Zustände darzustellen,

$$\int_{\mathbb{C}} \frac{d^2\gamma}{(1 + \gamma\gamma^*)^2} |\gamma\rangle \langle\gamma| = \mathbb{1}. \quad (4.3)$$

Man kann dies durch Anwendung der Definition (4.2) und summandweises Integrieren auf die Vollständigkeit der $|j, m\rangle$ -Basis zurückführen.

Aus (4.3) erkennt man auch unmittelbar, wie sich *jeder* Zustand im Hilbert-Raum des gekickten Kreisels durch ein Integral über kohärente Zustände darstellen läßt.

Nicht-Orthogonalität: Ebenfalls durch Anwendung der Definition (4.2) erkennt man, daß das Skalarprodukt zweier kohärenter Zustände,

$$\langle \Gamma | \gamma \rangle = \left(\frac{(1 + \Gamma^* \gamma)^2}{(1 + \Gamma \Gamma^*)(1 + \gamma \gamma^*)} \right)^j, \quad (4.4)$$

bei hinreichend verschiedenen γ und Γ für große j zwar sehr schnell sehr klein, aber nicht automatisch Null wird. Tatsächlich verschwindet $\langle \Gamma | \gamma \rangle$ nur dann, wenn sich die Punkte γ und Γ auf der Kugeloberfläche genau gegenüber liegen.

Normierung: Anhand von (4.4) sieht man sofort, daß kohärente Zustände auf 1 normiert sind,

$$\langle \gamma | \gamma \rangle = 1. \quad (4.5)$$

Aufgrund dieser Eigenschaften bezeichnet man die Menge aller kohärenten Zustände auch oft als ein *überevllständiges System*.

Obwohl kohärente Zustände nicht zueinander orthogonal sind, sind sie doch paarweise linear unabhängig. Es ist eine der elementarsten Aussagen der linearen Algebra, daß n linear unabhängige Vektoren in einem n -dimensionalen Vektorraum stets eine *Basis* bilden. Es genügt daher, $n = 2j + 1$ kohärente Zustände zu wählen, um eine (Vektorraum-) Basis des Hilbertraums des gekickten Kreisels zu erhalten.

Anstatt nun die *Matrix* des Floquet-Operators F in einer nicht-orthogonalen *Basis* kohärenter Zustände zu bestimmen, vereinfachen wir uns die Rechnung, indem wir für jedes Paar $|\Gamma\rangle, |\gamma\rangle$ kohärenter Zustände das Skalarprodukt $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ berechnen – gerade so, wie wir es auch bei einer orthogonalen Basis tun würden. Wie in Anhang B gezeigt wird, erhalten wir dann die Eigenwerte von F durch Lösen der *verallgemeinerten Eigenwertgleichung*

$$\sum_{l=1}^n \langle \gamma_k | F | \gamma_l \rangle \psi_l = \lambda \sum_{l=1}^n \langle \gamma_k | \gamma_l \rangle \psi_l \quad (k = 1, \dots, n). \quad (4.6)$$

Da die Skalarprodukte $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ die vollständige Information über den Operator F enthalten, bezeichnen wir $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ als ein *Quasimatrixelement* von F .

(Eine alternative Methode zur Ermittlung des Spektrums eines Operators aus seinen Quasimatrixelementen beruht auf der Übereivollständigkeit des Systems der kohärenten Zustände. Bei Verwendung von mehr als $2j+1$ kohärenten Zuständen liefert die direkte Diagonalisierung der Quasimatrix eine Näherung an die Eigenwerte des Operators. Diese Methode wurde von K. Życzkowski entwickelt und wird in [15] näher beschrieben.)

In den folgenden Abschnitten soll das Quasimatrixelement $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ des Floquet-Operators des gekickten Kreisels quantenmechanisch und semiklassisch berechnet werden.

4.2 Der Floquet-Operator des gekickten Kreisels in der Basis kohärenter Zustände

Zur Berechnung des Quasimatrixelements $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ des Floquet-Operators

$$F = e^{-i\frac{\pi}{2}J_y} e^{-i\frac{k}{2j+1}J_z^2} \quad (4.7)$$

zwischen zwei kohärenten Zuständen betrachten wir die beiden Teile $\exp(-i\frac{\pi}{2}J_y)$ (Rotation) und $\exp(-i\frac{k}{2j+1}J_z^2)$ (Torsion) getrennt.

Da kohärente Zustände durch die Anwendung spezieller Rotationsoperatoren auf den Zustand $|j, j\rangle$ entstehen, ist klar, daß eine weitere Rotation im wesentlichen wieder einen kohärenten Zustand liefern muß; genaugenommen muß die Rotation eines kohärenten Zustands $|\gamma\rangle$ bis auf einen Phasenfaktor χ denjenigen kohärenten Zustand liefern, dessen Stützpunkt im Phasenraum durch die Rotation aus γ hervorgeht.

In unserem Falle einer Vierteldrehung um die y -Achse liefert uns die lineare Transformation (2.5) den Punkt $(1 + \gamma)/(1 - \gamma)$ als Bild von γ . Demnach ist also

$$e^{-i\frac{\pi}{2}J_y} |\gamma\rangle = \chi \left| \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right\rangle. \quad (4.8)$$

Zur Bestimmung des Phasenfaktors χ multiplizieren wir Gleichung (4.8) von links mit $\langle j, j |$. Unter Verwendung der aus dem letzten Kapitel bekannten speziellen Werte der Wignerschen d -Funktion (3.13)

erhalten wir

$$\begin{aligned}
& \langle j, j | e^{-i\frac{\pi}{2}J_y} | \gamma \rangle \\
&= \sum_{m=-j}^j \langle j, m | d_{m,j}^j \left(-\frac{\pi}{2}\right) (1 + \gamma\gamma^*)^{-j} \sum_{n=0}^{2j} \gamma^n \sqrt{\binom{2j}{n}} | j, j-n \rangle \\
&= (2 \cdot (1 + \gamma\gamma^*))^{-j} \sum_{m=0}^{2j} \sum_{n=0}^{2j} \gamma^n \sqrt{\binom{2j}{n}} \sqrt{\binom{2j}{m}} \langle j, j-m | j, j-n \rangle \\
&= \left(\frac{(1 + \gamma)^2}{2 \cdot (1 + \gamma\gamma^*)} \right)^j. \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Andererseits ist

$$\langle j, j | \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \rangle = \left(\frac{(1 + \gamma)^2}{2 \cdot (1 + \gamma\gamma^*)} \right)^j \left(\frac{1 - \gamma^*}{1 - \gamma} \right)^j, \tag{4.10}$$

womit wir den Phasenfaktor $\chi = ((1 - \gamma)/(1 - \gamma^*))^j$ bestimmen könnten. Wir können somit das Bild eines kohärenten Zustands unter einer Rotation um die y -Achse um den Winkel $\pi/2$ angeben als

$$e^{-i\frac{\pi}{2}J_y} | \gamma \rangle = \left(\frac{1 - \gamma}{1 - \gamma^*} \right)^j \left| \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right\rangle. \tag{4.11}$$

Zur Handhabung der nichtlinearen Torsion entwickeln wir den bereits rotierten kohärenten Zustand $|\gamma\rangle$ in der $|j, m\rangle$ -Basis, in welcher die Matrix des Torsionsoperators diagonal ist. Multiplikation von links mit einem anderen kohärenten Zustand $\langle \Gamma |$ führt dann unmittelbar auf das gesuchte Quasimatrixelement des Floquet-Operators zwischen zwei kohärenten Zuständen,

$$\begin{aligned}
\langle \Gamma | F | \gamma \rangle &= \left(\frac{1-\gamma}{1-\gamma^*} \right)^j \langle \Gamma | e^{-i\frac{k}{2j+1}J_z^2} \left| \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right\rangle \\
&= \left(\frac{(1 - \gamma)^2}{2 \cdot (1 + \Gamma\Gamma^*)(1 + \gamma\gamma^*)} \exp\left(\frac{-ikj}{2j+1}\right) \right)^j \\
&\quad \cdot \sum_{n=0}^{2j} \binom{2j}{n} \left(\Gamma^* \frac{1 + \gamma}{1 - \gamma} \exp\left(\frac{2ikj}{2j+1}\right) \right)^n \exp\left(\frac{-ikn^2}{2j+1}\right). \tag{4.12}
\end{aligned}$$

Wir können nun eine aus $2j + 1$ kohärenten Zuständen $|\gamma_1\rangle, \dots, |\gamma_{2j+1}\rangle$ bestehende Basis (im Sinne von Anhang B) wählen, die Quasimatrix $\langle \gamma_m | F | \gamma_n \rangle$ von F berechnen und das verallgemeinerte Eigenwertproblem (4.6) numerisch lösen. Wenn wir dies tun, reproduzieren wir

das exakte Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels, das wir bereits in Kapitel 3 auf anderem Wege ausgerechnet haben.

4.3 Semiklassische Näherung

Wir sind an einer semiklassischen Näherung $j \gg \hbar_{\text{eff}} = 1$ für das Quasimatrixelement (4.12) des Floquet-Operators des gekickten Kreisels interessiert, die es uns ermöglichen soll, durch Lösen der verallgemeinerten Eigenwertgleichung (4.6) ein semiklassisches Spektrum zu ermitteln. Unsere Vorgehensweise besteht darin, das quantenmechanische Quasimatrixelement $\langle \Gamma|F|\gamma \rangle$, Gleichung (4.12), durch ein Integral auszudrücken, welches wir dann mit Hilfe einer Sattelpunkt-Approximation näherungsweise lösen. In dem resultierenden Ausdruck werden wir dann im nächsten Abschnitt – ähnlich wie bei der WKB-Approximation der Wigner-schen d -Funktion in Kapitel 3 – eine erzeugende Funktion der klassischen Abbildung wiederfinden.

Wir leiten zunächst aus dem Gauß-Integral $\int dt \exp(\alpha t^2 + \beta t)$ die Identität

$$e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}} = \sqrt{-\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\alpha t^2 + \beta t} \quad (4.13)$$

her und setzen

$$\alpha := -\frac{2j+1}{4k}, \quad \beta := n \cdot \sqrt{-i}, \quad (4.14)$$

so daß $-\frac{\beta^2}{4\alpha} = -\frac{ikn^2}{2j+1}$ ist. (In [14] wurde mit $\beta = n$ und rein imaginärem α gerechnet. Die Wahl von $\beta = n \cdot \sqrt{i}$ sorgt für einen negativen Realteil von α und somit für die Konvergenz des Integrals in (4.13), die ansonsten weitere Betrachtungen notwendig machen würde.)

Mit Hilfe dieser Integraldarstellung können wir den Term $\exp(-i\frac{kn^2}{2j+1})$ im Quasimatrixelement (4.12) durch ein Gauß-Integral ausdrücken,

$$\exp\left(-\frac{ikn^2}{2j+1}\right) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi k}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(-\frac{2j+1}{4k}t^2\right) \left(e^{\sqrt{-i}t}\right)^n. \quad (4.15)$$

Einsetzen in das Quasimatrixelement (4.12) erlaubt uns, die endliche Summe über n auszuführen, und wir erhalten – bisher noch exakt –

$$\begin{aligned} \langle \Gamma | F | \gamma \rangle &= \left(\frac{(1 - \gamma)^2}{2 \cdot (1 + \Gamma \Gamma^*) (1 + \gamma \gamma^*)} \exp\left(\frac{-ikj}{2j+1}\right) \right)^j \\ &\cdot \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi k}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{jV(j,t)} \end{aligned} \quad (4.16)$$

mit

$$V(j,t) = -\frac{2j+1}{4kj} t^2 + 2 \ln(1 + v(t)) \quad (4.17)$$

und

$$v(t) = \Gamma^* \frac{1 + \gamma}{1 - \gamma} \exp\left(\sqrt{-i} t + \frac{2ikj}{2j+1}\right). \quad (4.18)$$

Der nächste Schritt besteht in einer Sattelpunkt-Approximation des Integrals im Grenzfall $j \gg 1$. Da die wesentlichen numerischen Probleme dieses Kapitels während der Durchführung der Sattelpunkt-Näherung entstehen und außerdem in Abschnitt 4.6 eine Verfeinerung dieser Approximation vorgenommen werden wird, soll an dieser Stelle eine kurze Herleitung der Sattelpunkt-Methode gegeben werden.

Zur Approximation eines Integrals der Gestalt $\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(jV(t))$ kann man auf die Idee kommen, den Exponenten $jV(t)$ des Integranden um ein lokales Maximum bei $t = t_0$ zu entwickeln. Bei Entwicklung bis zur zweiten Ordnung ersetzt man folglich den Integranden durch eine Gauß-Funktion und kann das Integral analytisch ausführen.

Die Idee bei der Sattelpunkt-Integration besteht nun darin, auch komplexe t_0 zuzulassen. Aus dem reellen Maximum des Integranden wird dann ein komplexer Sattelpunkt des Betrags des Integranden, daher die Namensgebung. Man kann zeigen, daß man unter gewissen Voraussetzungen den Integrationsweg so deformieren kann, daß er durch den Sattelpunkt – oder eventuell auch mehrere – läuft, ohne daß sich der Wert des Integrals ändert [30]. In der Nähe des komplexen Sattelpunkts funktioniert die Approximation des Integranden durch eine Gauß-Funktion besonders gut.

Für $j \rightarrow \infty$ wird das Maximum immer schärfer; das gesamte Integral läßt sich dann in guter Näherung durch das komplexe Gauß-Integral ersetzen. Wenn es mehrere Sattelpunkte t_0 entlang des Integrationsweges gibt, addieren sich deren Beiträge, wobei allerdings derjenige Sattel

mit größtem Realteil $\operatorname{Re} V(t_0)$ gegenüber den anderen exponentiell dominiert.

Zur konkreten Herleitung einer approximativen Formel für das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(jV(t))$ entwickeln wir den Exponenten $jV(t)$ des Integranden um einen komplexen Sattelpunkt t_0 mit den Eigenschaften $V'(t_0) = 0$ und $\operatorname{Re} V''(t_0) < 0$ und schreiben $\exp(jV(t))$ als ein Produkt dreier Exponentialfunktionen,

$$\begin{aligned} e^{jV(t)} &= \exp(jV(t_0)) \\ &\cdot \exp\left(\frac{1}{2!}jV''(t_0)(t-t_0)^2\right) \\ &\cdot \exp\left(\frac{1}{3!}jV'''(t_0)(t-t_0)^3\right) \\ &\quad + \frac{1}{4!}jV''''(t_0)(t-t_0)^4 + \dots \end{aligned} \quad (4.19)$$

Die dritte dieser Exponentialfunktionen wird nun ihrerseits in ihre Potenzreihe um den Nullpunkt entwickelt. Wenn wir nun über die reelle Achse integrieren,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{jV(t)} &= e^{jV(t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(\frac{1}{2}jV''(t_0)(t-t_0)^2\right) \\ &\cdot \left(1 + \frac{1}{3!}jV'''(t_0)(t-t_0)^3 + \frac{1}{4!}jV''''(t_0)(t-t_0)^4 + \dots \right. \\ &\quad + \frac{1}{2!}\left(\frac{1}{3!}jV'''(t_0)(t-t_0)^3 + \frac{1}{4!}jV''''(t_0)(t-t_0)^4 + \dots\right)^2 \\ &\quad \left. + \frac{1}{3!}(\dots)^3 + \dots\right) \end{aligned} \quad (4.20)$$

tragen nur Terme mit geraden Potenzen von $t-t_0$ bei, und jede Integration über einen Ausdruck der Gestalt $\exp\left(\frac{1}{2}jV''(t_0)(t-t_0)^2\right)(t-t_0)^{2n}$ erzeugt einen Faktor $j^{-(2n+1)/2}$, der mit den in den einzelnen Termen enthaltenen Potenzen von j konkurriert. In führender Ordnung in $1/j$ brauchen wir von den Summanden der Entwicklung (4.20) nur die Eins mitzunehmen, so daß wir nach Ausführen des Integrals die geläufige Formel einer Sattelpunkt-Approximation erster Ordnung erhalten,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{jV(t)} = e^{jV(t_0)} \sqrt{\frac{\pi}{-\frac{1}{2}jV''(t_0)}} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{j}\right)\right). \quad (4.21)$$

Wenn es mehrere Sattelpunkte t_0 gibt, liefert jeder von ihnen einen Beitrag der Gestalt (4.21). Da der Beitrag des führenden Sattels die aller

anderen exponentiell überwiegt, ändert es zwar nichts an der Ordnung der Approximation, alle Beiträge mitzunehmen, aber für kleine j können sich solche „exponentiell kleinen“ Korrekturen durchaus in der Größenordnung der führenden Ordnung bewegen. Wir notieren daher

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{jV(t)} = \sum_{\text{Sättel}} e^{jV(t_0)} \sqrt{\frac{\pi}{-\frac{1}{2}jV''(t_0)}} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{j}\right)\right). \quad (4.22)$$

Nach diesen allgemeinen Betrachtungen zur Sattelpunkt-Approximation wollen wir deren Ergebnis (4.22) auf unser konkretes Problem des Quasimatrixelements $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ in der Integraldarstellung (4.16) anwenden.

Im vorliegenden Fall ist der Exponent $V(j, t)$ (4.17) noch schwach von j abhängig. Vor der Durchführung der Sattelpunkt-Approximation entwickeln wir daher $V(j, t)$ in eine Laurent-Reihe um $j = \infty$,

$$V(j, t) = V_0(t) + \frac{1}{j}V_1(t) + \frac{1}{j^2}V_2(t) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{j^3}\right) \quad (4.23)$$

wobei

$$V_0(t) = \frac{1}{2k}t^2 + 2 \ln(1 + v(t)), \quad (4.24)$$

$$V_1(t) = -\frac{1}{4k}t^2 - ik \frac{v(t)}{1 + v(t)}, \quad (4.25)$$

$$V_2(t) = k^2 \frac{v(t)}{(1 + v(t))^2} - ik \frac{v(t)}{1 + v(t)}. \quad (4.26)$$

$V_0(t)$ wird durch seinen Wert $V_0(t_0)$ am Sattelpunkt ersetzt und vor das Integral gezogen. Der Beitrag von $V_2(t)$ ist in zweiter Ordnung in $1/j$ und wird bis auf weiteres vernachlässigt. Anwendung der Sattelpunkt-Näherung auf das verbleibende Integral $\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(jV_1(t))$ führt uns auf die Sattelpunktbedingung

$$V_1'(t_0) = -\frac{1}{k}t_0 + \frac{2\sqrt{-i}v(t_0)}{1 + v(t_0)} = 0, \quad (4.27)$$

also

$$t_0 = 2k\sqrt{-i} \frac{v(t_0)}{1 + v(t_0)}. \quad (4.28)$$

Zusammen mit der Definition (4.18) von $v(t)$ können wir diese Gleichung in t_0 zu einer Gleichung in $v \equiv v(t_0)$ umschreiben,

$$v = \Gamma^* \frac{1 + \gamma}{1 - \gamma} \exp\left(ik \frac{1 - v}{1 + v}\right). \quad (4.29)$$

Um nun das semiklassische Quasimatrixelement zu berechnen, setzen wir die Integraldarstellung (4.16) unter Berücksichtigung der Entwicklung (4.23) in die allgemeine Formel (4.22) der Sattelpunkt-Approximation ein. Mit

$$e^{jV_1(t_0)} = \exp\left(2ikj \frac{v^2}{(1+v)^2}\right) (1+v)^{2j} \quad (4.30)$$

und

$$-\frac{1}{2}jV_1''(t_0) = \frac{j}{2k} + ij \frac{v}{(1+v)^2}. \quad (4.31)$$

erhalten wir das semiklassische Quasimatrixelement des Floquet-Operators des gekickten Kreisels zwischen zwei kohärenten Zuständen,

$$\begin{aligned} & \langle \Gamma | F | \gamma \rangle^{\text{sk}} \\ &= \sum_{\text{Sättel}} \left(\frac{(1-\gamma)^2 (1+v)^2}{2 \cdot (1+\Gamma\Gamma^*) (1+\gamma\gamma^*)} \exp\left(\frac{-ikj}{2j+1}\right) \right)^j \\ & \quad \cdot \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi k}} e^{jV_0(t_0)} e^{V_1(t_0)} \sqrt{\frac{\pi}{-\frac{1}{2}jV_0''(t_0)}} \\ &= \sum_{\text{Sättel}} \left(\frac{(1-\gamma)^2 (1+v)^2}{2 \cdot (1+\Gamma\Gamma^*) (1+\gamma\gamma^*)} \exp\left(\frac{-ikj}{2j+1}\right) \right)^j \\ & \quad \cdot \exp\left(\frac{4ikj^2}{2j+1} \frac{v^2}{(1+v)^2}\right) \left(1 + \frac{4ikj}{2j+1} \frac{v}{(1+v)^2}\right)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Um dieses Ergebnis semiklassisch zu interpretieren, wollen wir es einmal für die Situation betrachten, daß Γ das Bild von γ unter der klassischen Abbildung (2.6) ist. In diesem Spezialfall können wir die Sattelpunktbedingung (4.29) umschreiben zu

$$v = \Gamma\Gamma^* \exp\left(ik \frac{\gamma + \gamma^*}{1 + \gamma\gamma^*}\right) \exp\left(ik \frac{1-v}{1+v}\right). \quad (4.33)$$

Man kann sich nun leicht davon überzeugen, daß $v = \Gamma\Gamma^*$ in diesem Fall die Sattelpunktgleichung löst: Wenn wir nun auf der rechten Seite erst $\Gamma\Gamma^*$ für v einsetzen und anschließend Γ mit Hilfe der klassischen Abbildung (2.6) durch γ ausdrücken, heben sich die beiden Exponentialfunktionen weg, und wir verbleiben mit $v = \Gamma\Gamma^*$ als Lösung. In diesem Sinne können wir positive reelle Lösungen v der Sattelpunktgleichung (4.29) mit klassischen Bahnen von γ nach Γ identifizieren.

Da sowohl Γ als auch γ als Stützpunkte der kohärenten Basiszustände vorgegeben sind, besteht kein Grund mehr, weshalb Lösungen der transzendenten, komplexen Sattelpunktgleichung (4.29) reell sein sollten; die Lösungen stellen sich im allgemeinen als komplex heraus. Dies entspricht der Situation in Kapitel 3, als sich komplexe Lösungen des klassischen Randwertproblems als quantenmechanisch relevant herausstellten. Auch hier können wir eine komplexe Lösung v der Sattelpunktgleichung (4.29) als *Geisterbahn* von γ nach Γ interpretieren.

Wenn wir nun das eigentliche Quasimatrixelement (4.32) unter der Voraussetzung $v = \Gamma\Gamma^*$ betrachten, können wir es in der Form

$$\langle \Gamma | F | \gamma \rangle^{\text{sk}} = \sum_{\text{Sättel}} \sqrt{\frac{\partial^2 W(\Gamma^*, \gamma)}{\partial \Gamma^* \partial \gamma}} e^{(2j+1)W(\Gamma^*, \gamma)} \cdot ((1 + \Gamma\Gamma^*)(1 + \gamma\gamma^*))^{-j} \quad (4.34)$$

mit

$$W(\Gamma^*, \gamma) = \ln(1 - \gamma) + \ln(1 + v) + ik \frac{v^2}{(1 + v)^2} + C \quad (4.35)$$

und

$$C = -\frac{1}{4}ik - \frac{1}{2} \ln 2 \quad (4.36)$$

schreiben.

Die Funktion $W(\Gamma^*, \gamma)$ stellt sich als *erzeugende Funktion* der klassischen Abbildung (2.6) heraus, wenn man Γ und Γ^* sowie γ und γ^* als unabhängige Variablen auffaßt,

$$\frac{\partial W(\Gamma^*, \gamma)}{\partial \Gamma^*} = \frac{\Gamma}{1 + \Gamma\Gamma^*}, \quad (4.37)$$

$$\frac{\partial W(\Gamma^*, \gamma)}{\partial \gamma^*} = \frac{\gamma^*}{1 + \gamma\gamma^*}. \quad (4.38)$$

Somit ist das genäherte Quasimatrixelement (4.32) vollständig durch die komplexe Fortsetzung einer erzeugenden Funktion der klassischen Abbildung bestimmt und darf in diesem Sinne als semiklassische Näherung bezeichnet werden.

4.4 Semiklassisches Spektrum

Die weitere Vorgehensweise besteht nun darin, eine Basis aus kohärenten Zuständen zu wählen, die semiklassischen Quasimatrixelemente gemäß

Gleichung (4.32) zu bestimmen und durch Lösen des verallgemeinerten Eigenwertproblems (4.6) ein semiklassisches Spektrum zu extrahieren. Hierbei stößt man allerdings auf erhebliche Schwierigkeiten, die mit den Voraussetzungen zur Gültigkeit der Sattelpunkt-Näherung zusammenhängen.

Das Hauptproblem besteht darin, daß sich die komplexifizierten Integrationswege und Sattelpunkte nicht in geschlossener Form angeben lassen. Während die numerische Bestimmung der Sattelpunkte v aus der transzendenten Gleichung (4.29) noch mit Standardverfahren möglich ist, läßt sich nicht mehr ohne weiteres feststellen, welche Lösungen v in die Näherung eingehen und welche ausgeschlossen werden müssen. Stattdessen ist es notwendig, die Integrationswege in der komplexen t -Ebene für jedes Quasimatrixelement einzeln numerisch zu konstruieren. Im folgenden werden hierzu zwei Verfahren beschrieben.

Abbildung 4.1 illustriert die Funktionsweise der bekanntesten Methode, von jedem Sattel ausgehend *Wege des steilsten Abstiegs* bzgl. der *Höhenfunktion* $|\exp(jV(t))|$ zu suchen. Diese Wege haben eine konstante komplexe Phase $j \operatorname{Im} V(t)$ und enden entweder im Unendlichen oder an einer Nullstelle von $|\exp(jV(t))|$, also einer negativen Polstelle von $V(t)$. Wenn man die Werte $\pm\infty$ mit zu den Nullstellen zählt, ist jeder Sattelpunkt durch die Integrationswege mit genau zwei Nullstellen verbunden. Durch Zusammensetzen lassen sich dann Integrationswege konstruieren, auf denen abwechselnd Nullstellen und Sättel liegen. Wenn es gelingt, auf diese Weise einen Integrationsweg von $-\infty$ nach $+\infty$ zu finden, liefern alle beteiligten Sättel einen Beitrag zur Sattelpunkt-Näherung des Quasimatrixelements. Alle anderen Sättel müssen ausgeschlossen werden, weil diese sonst das Ergebnis der Approximation wesentlich verfälschen.

Durch die Gestalt der Funktion $\exp(jV(t))$ und die hohe Anzahl $(2j + 1)^2$ von Quasimatrixelementen kommt es in der Praxis vor, daß sich die von verschiedenen Sätteln ausgehenden Integrationswege nahe kommen, so daß es numerisch oft problematisch ist zu entscheiden, welcher Sattel mit welcher Nullstelle verbunden ist. Aufgrund dieses Problems hat sich das Verfahren des steilsten Abstiegs nur bis $j \approx 15$ als stabil genug erwiesen, um alle $(2j + 1)^2$ Quasimatrixelemente approximativ zu berechnen; darüberhinaus ist es aufgrund des hohen Aufwands an Rechenzeit für Untersuchungen des Grenzfalles $j \rightarrow \infty$ kaum geeignet.

Aus diesem Grunde wurde noch ein weiteres, vereinfachtes Verfahren entwickelt, welches nur den führenden Sattel identifiziert. Bei diesem *Höhenverfahren* läßt man die Forderung des steilsten Abstiegs fallen

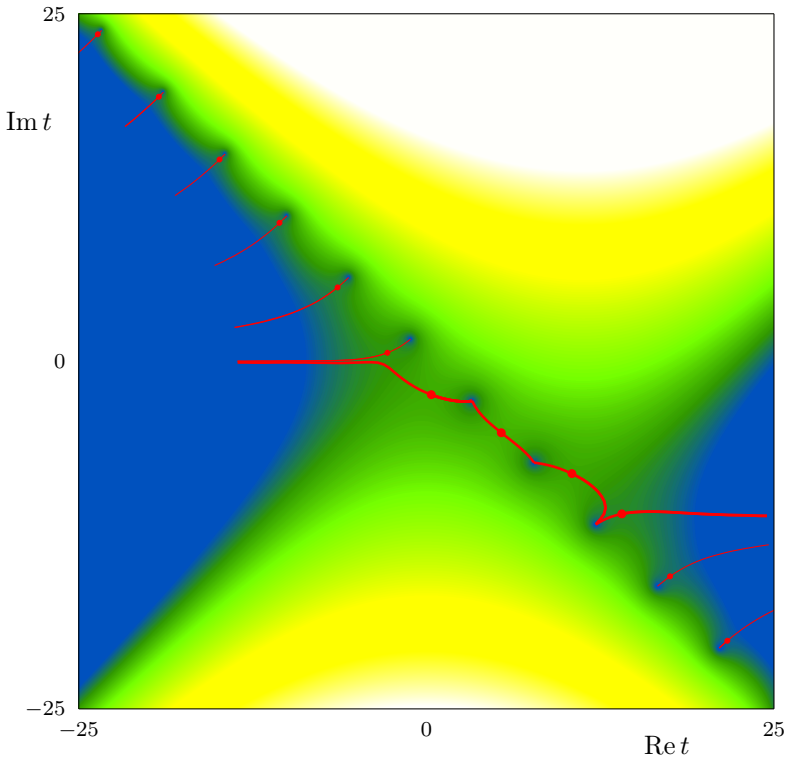


Abbildung 4.1: Integrationswege steilsten Abstiegs. Die Funktion $|\exp(jV(t))|$ ist in der komplexen t -Ebene farbig dargestellt. Die Skala verläuft von blau ($< 10^{-10}$) über grün ($\approx 10^{10}$) und gelb ($\approx 10^{30}$ bis weiß ($> 10^{50}$). Jeder Sattelpunkt ist durch Wege steilsten Abstiegs bzgl. $|\exp(jV(t))|$ mit zwei Nullstellen dieser Funktion (einschließlich $\pm\infty$) verbunden. Durch Zusammensetzen entsteht ein Integrationsweg (dicke Linien) von $-\infty$ nach $+\infty$ über abwechselnd Nullstellen und Sattelpunkte (große Punkte). Sattelpunkte, die nicht auf diesem Integrationsweg liegen (kleine Punkte und dünne Linien) müssen aus der in der Sattelpunkt-Approximation auszuführenden Summe ausgeschlossen werden.

und verlangt lediglich, daß die Höhe $|\exp(jV(t))|$ entlang des Integrationswegs nirgendwo die Höhe $|\exp(jV(t_0))|$ am Sattelpunkt übersteigt. (Strenggenommen müßte der Integrationsweg in einer ε -Umgebung von t_0 (mit $\varepsilon > 0$) dem steilsten Abstieg folgen; dies ist aber für die numerische Konstruktion nicht relevant.)

Die numerisch konstruierten Integrationswege verlaufen vom Sattelpunkt ausgehend in positiver und negativer Richtung des Realteils von t , solange bis ein Punkt erreicht wird, an dem $|\exp(jV(t))|$ größer wird als $|\exp(jV(t_0))|$. Danach folgt der Weg solange einer *Höhenlinie* $|\exp(jV(t))| = konst.$, bis sich der Weg entweder in der ursprünglichen Richtung fortsetzen läßt oder bis die Höhenlinie parallel zur imaginären t -Achse wird. Letzteres wird als Zeichen dafür gewertet, daß sich der Weg nicht bis ins Unendliche fortsetzen läßt, ohne die Höhe $|\exp(jV(t_0))|$ des Sattelpunktes zu überschreiten, an dem der Weg startete. Wenn auf diese Weise von einem Sattel ausgehend in beiden Richtungen Wege bis ins Unendliche konstruiert werden können, stellen diese zusammen einen gültigen Integrationsweg dar, und der Sattel ist als der führende Sattel identifiziert.

Infolge der Natur der Funktion $V(t)$ sind auch bei diesem Verfahren Irrtümer letztlich nicht auszuschließen. In Abb. 4.2 liegen die „verbotenen“ Sättel in der oberen Bildhälfte sämtlich höher als der führende Sattel, sind aber durch eine noch höhere Barriere von $t \rightarrow +\infty$ getrennt. Es gibt Fälle, in denen diese Barriere nur unwesentlich höher als der Sattel ist und infolge der endlichen Schrittweite des Verfahrens übersprungen wird.

Durch sorgfältige Wahl numerischer Parameter (Schrittweiten, Abbruchkriterien, etc.) ermöglicht es das Höhenverfahren, semiklassische Quasimatrizen bis $j \approx 150$ zu berechnen. (Bei $(2j + 1)^2 = 90601$ Quasimatrixelementen entspricht dies einer Zuverlässigkeit von etwa 99.9994%, die aber eben für größere j nicht mehr ausreicht.) Bei größeren j werden einzelne Matrixelemente falsch approximiert, was die Berechnung eines semiklassischen Spektrums sofort unmöglich macht.

In Abb. 4.3 sind die semiklassischen Spektren, die in einer Basis kohärenter Zustände mit Hilfe des Verfahrens des steilsten Abstiegs (alle Sättel) bzw. des Höhenverfahrens (führender Sattel) den exakten Eigenwerten gegenübergestellt. Der Beitrag des führenden Sattels genügt bereits, um das Spektrum aufzulösen. Da $j = 5$ relativ klein ist, bringt das Miteinbeziehen der bzgl. j exponentiell kleinen Korrekturen der restlichen Sättel eine wesentliche Verbesserung.

Die Abhängigkeit des relativen Phasenfehlers des semiklassischen

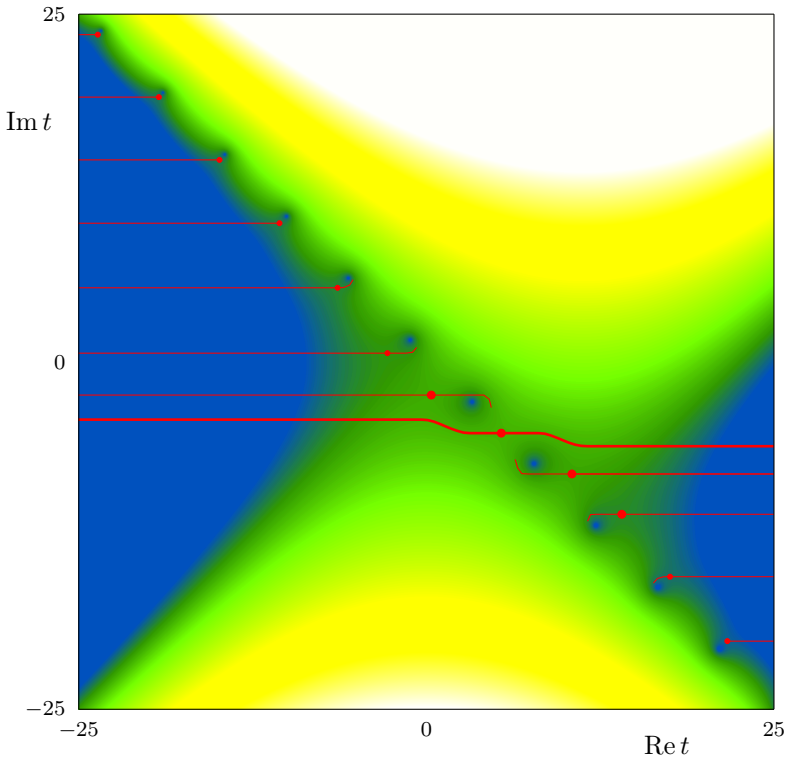


Abbildung 4.2: Integrationswege nach dem Höhenverfahren. Die Funktion $|\exp(jV(t))|$ ist in der komplexen t -Ebene auf dieselbe Weise wie in Abb. 4.1 farbig dargestellt. Von jedem Sattelpunkt ausgehend werden absteigende Wege in positiver und negativer Richtung von $\text{Re } t$ konstruiert. Derjenige Sattel, dessen absteigende Wege $-\infty$ mit $+\infty$ verbinden, ist der führende Sattel in der semiklassischen Approximation.

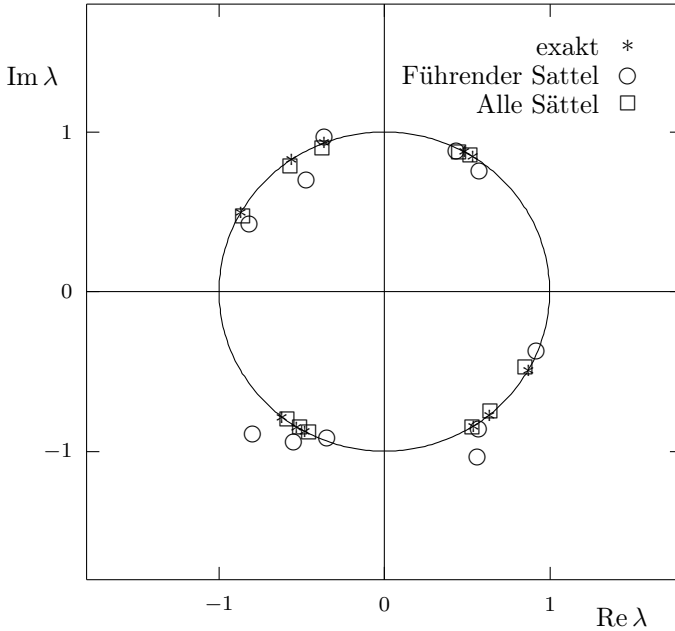


Abbildung 4.3: Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels: exakt bzw. semiklassisch mit kohärenten Zuständen für $j = 5$, $k = 8$, $\beta = \pi/2$. Das Verfahren des steilsten Abstiegs erlaubt für kleine j , alle Sättel zu identifizieren. Das Höhenverfahren identifiziert nur den führenden Sattel und ist daher ungenauer, läßt sich aber auch bei größeren j noch anwenden.

Spektrums von j ist in Abb. 4.4 dargestellt. Man erkennt deutlich, wie die relative Wichtigkeit des führenden Sattels mit wachsendem j zunimmt; ab etwa $j = 30$ erreicht das allein mit den Beiträgen der führenden Sättel berechnete semiklassische Spektrum die Genauigkeit des für kleinere j mit allen Sätteln berechneten Spektrums.

Ab $j \gtrsim 20$ wird das Verfahren des steilsten Abstiegs, ab $j \gtrsim 200$ auch das Höhenverfahren instabil. Bis $j \lesssim 30$ ist es mit dem Verfahren des steilsten Abstiegs noch möglich, das Spektrum aufzulösen, aber der durch einzelne falsch approximierten Quasimatrixelemente hervorgerufene Fehler überwiegt bereits die durch das Mitnehmen aller Sättel gewonnene Genauigkeit, so daß das Höhenverfahren bessere Ergebnisse liefert. Bei $j = 200$ kann für das Höhenverfahren ein winziger Anstieg des relativen Fehlers beobachtet werden, der bereits auf die falsche Approximation einzelner Matrixelemente zurückzuführen ist; bei größeren j steigt der

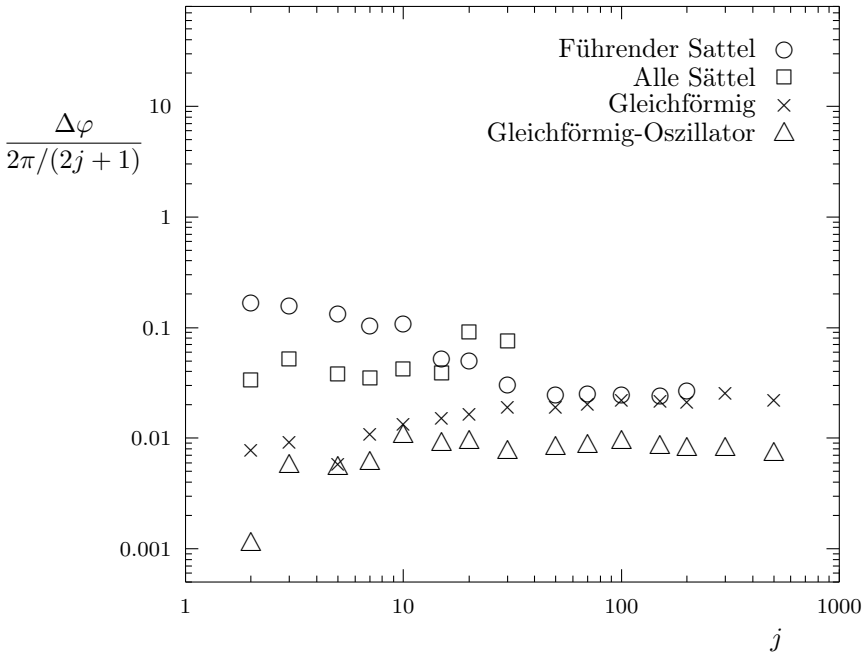


Abbildung 4.4: Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = \pi/2$, $k = 8$. Durch zwei Verfahren, die alle Sättel (steilster Abstieg) bzw. nur den führenden Sattel (Höhenverfahren) berücksichtigen, wird der gesamte j -Bereich abgedeckt. Die relative Wichtigkeit des führenden Sattels nimmt mit wachsendem j zu, während das Verfahren des steilsten Abstiegs instabil wird. Für große j beträgt der semiklassische Fehler etwa 3% des mittleren Abstands $2\pi/(2j+1)$. Ab $j = 200$ wird auch das Höhenverfahren instabil; der winzige Anstieg des relativen Fehlers bei $j = 200$ liegt bereits an fehlerhaft approximierten Quasimatrixelementen. Zum Vergleich sind die Ergebnisse der gleichförmigen Approximation (Kapitel 3) mit eingezeichnet.

relative Fehler schlagartig auf einen Wert > 1 an und erlaubt es nicht mehr, das Spektrum aufzulösen.

Desweiteren ist in Abb. 4.4 zum Vergleich das Ergebnis von Kapitel 3, der relative Phasenfehler der gleichförmigen Approximation ohne bzw. mit Oszillator-Korrektur in der $|j, m\rangle$ -Basis, dargestellt.

4.5 Bemerkungen zur Numerik

Zur Lösung des verallgemeinerten Eigenwertproblems (4.6) stellt uns die numerische Mathematik eine Auswahl von Standardalgorithmen zur Verfügung, zum Beispiel den in dieser Arbeit verwendeten *Q-Z-Algorithmus* oder die *Cholesky-Zerlegung* der Matrix (A_{kl}) [31]. Beide Verfahren haben sich für das vorliegende Problem als wesentlich stabiler erwiesen als das Invertieren der Matrix (A_{kl}) oder eine Orthonormalisierung der aus kohärenten Zuständen bestehenden Basis.

Vor der Ausführung der Summe im exakten Quasimatricxelement $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$, Gleichung (4.12) müssen die Summanden der Größe nach sortiert und vom kleinsten zum größten aufsummiert werden. Andernfalls gehen die kleinen Beiträge infolge numerischer Fehler verloren, was sich in den Eigenwerten als relativer Fehler in der Größenordnung 10^{-3} bemerkbar macht.

Die Suche nach den Integrationswegen sowohl nach dem Höhenverfahren als auch – in noch stärkerem Maße – nach dem Verfahren des steilsten Abstiegs ist extrem rechenaufwendig. Gegenüber der Rechenzeit, die zum Aufstellen der semiklassisch approximierten Matrix benötigt wird, kann das Diagonalisieren der Matrix vernachlässigt werden. Dies gilt für alle betrachteten j , obwohl die für die Suche nach Integrationswegen benötigte Rechenzeit wie j^2 , die der Diagonalisierung mindestens wie j^3 wächst. (Für die quantenmechanisch exakte Matrix existieren keine derartigen Probleme.)

Für hinreichend genaue numerische Ergebnisse für die Eigenwerte ist es außerdem notwendig, die kohärenten Zustände möglichst gleichmäßig auf der Kugeloberfläche anzuordnen. Bei einer rein zufälligen Verteilung kommen sich die Punkte gelegentlich nahe, so daß die kohärenten Zustände „fast linear abhängig“ werden. Dies führt zu großen Zwischenergebnissen während der numerischen Diagonalisierung, welche die Auslöschung kleinerer, wichtiger Beiträge und letztlich falsche Eigenwerte zur Folge

haben. Tatsächlich ist es so, daß sich bereits harmlos wirkende Abweichungen von einer gleichmäßigen Verteilung deutlich auf die Qualität des Ergebnisses auswirken. Zum Beispiel scheiterte der Versuch, kohärente Zustände auf periodischen Bahnen zu plazieren und diese als Basis zu verwenden, an dieser Hürde.

Um eine möglichst gleichmäßige Verteilung von Punkten auf einer Kugeloberfläche zu erzielen, wurden diese zunächst zufällig verteilt, dann mit einem abstoßenden Coulomb-Potential versehen, um sich unter dem Einfluß allmählich stärker werdender Reibung auf der Kugeloberfläche bis hin zu einem Gleichgewichtszustand zu bewegen. Abb. 4.5 illustriert das Ergebnis für 101 Punkte, also mögliche Mittelpunkte von kohärenten Zuständen einer Basis für $j = 50$. Zum Vergleich ist auch eine zufällige Verteilung von 101 Punkten auf einer Kugeloberfläche dargestellt.

Als Maß für die Qualität der gleichmäßigen Verteilung dient die Abstandsverteilung nächster Nachbarn. Abb. 4.6 zeigt ein Histogramm für $n = 5000$ Punkte. Die „nächsten Nachbarn“ eines Punktes sind hierbei definiert als die bis zu sechs nächstgelegenen Punkte, deren Abstand weniger als das $\sqrt{2}$ fache des Abstandes zum allernächsten Nachbarn beträgt. (Ein ähnliches Bild ergibt sich, wenn nur der jeweils allernächste Nachbar betrachtet wird.) Während bei zufälliger Verteilung beliebig kleine nächste-Nachbar-Abstände auftreten, ist der nächste-Nachbar-Abstand der gleichmäßigen Verteilung relativ scharf um einen Wert verteilt, der beinahe den theoretisch größtmöglichen Wert von $\sqrt{4\pi/n} \approx 0.05$ erreicht.

Am Rande sei hier das Kuriosum bemerkt, daß sich acht Punkte nicht wie die Ecken eines Würfels auf der Kugel anordnen – selbst dann nicht, wenn sie in der Nähe dieser Positionen gestartet wurden. Dies liegt daran, daß die Abstände zwischen den Eckpunkten eines Würfels auf der Kugeloberfläche nicht maximal sind; durch „Verdrehen“ des Würfels wächst der Abstand zwischen den Ecken.

4.6 Sattelpunkt-Näherung 2. Ordnung

Wie in Abschnitt 4.3 gezeigt wurde, liefert die Sattelpunkt-Methode eine Approximation der Ordnung $1/j$ eines Integrals der Gestalt $\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(jV(t))$ und damit für jedes einzelne Quasimatrixelement des Floquet-Operators. Wie man sich störungstheoretisch leicht überlegen kann, macht sich dies in einer Approximation derselben Ordnung $1/j$ in den Eigenwerten bemerkbar.

Da der mittlere Abstand $2\pi/(2j + 1)$ der Eigenwerte des unitären

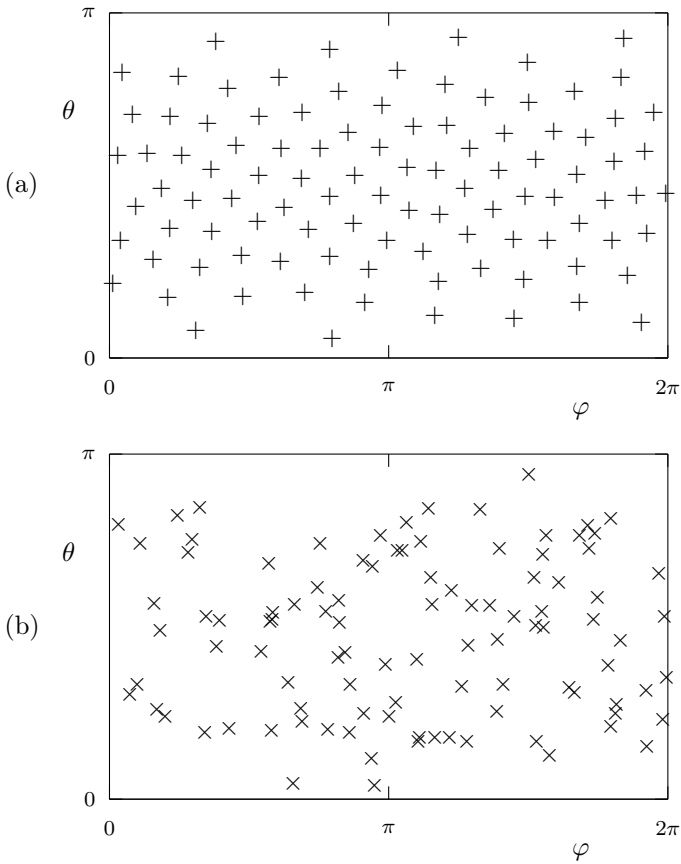


Abbildung 4.5: Verteilung von Punkten auf einer Kugeloberfläche. Möglichst gleichmäßige (a) und zufällige (b) Verteilung von 101 Punkten auf einer Kugeloberfläche. Die Punktdichte am Äquator ist infolge der Verzerrung der Mercator-Abbildung nur scheinbar größer als an den Polen. Bei zufälliger Verteilung (b) kommen sich die Punkte teilweise sehr nah, was die Verwertbarkeit als Stützpunkte einer Basis kohärenter Zustände herabsetzt.

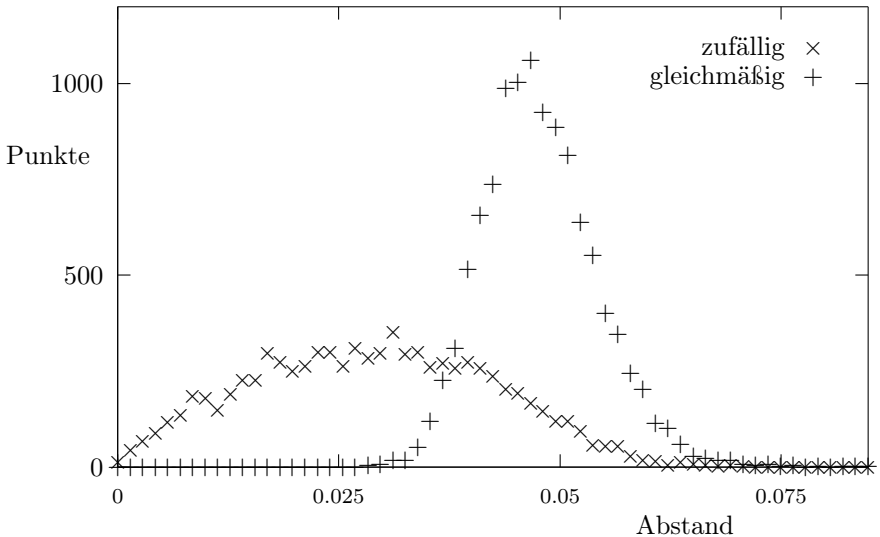


Abbildung 4.6: Histogramm der Abstände nächster Nachbarn für Verteilungen von $n = 5000$ Punkten auf einer Kugeloberfläche. Bei zufällig verteilten Punkten treten beliebig kleine nächste-Nachbar-Abstände auf, während die nächste-Nachbar-Abstände der gleichmäßig verteilten Punkte relativ scharf um einen Wert verteilt liegen, der beinahe den theoretisch größtmöglichen Wert von $\sqrt{4\pi/n} \approx 0.05$ erreicht.

Operators F auf dem Einheitskreis ebenfalls wie $1/j$ verschwindet, ist nicht von vorneherein klar, daß die Näherung genügt, das Spektrum aufzulösen; stattdessen kommt es noch auf die Größe der Korrekturterme höherer, nicht berücksichtigter Ordnung an. Numerisch wurde ein relativer Fehler von etwa 3% festgestellt, es ist daher zu erwarten, daß der Vorfaktor $\alpha(\Gamma, \gamma)$ in derselben Größenordnung liegt.

In diesem Abschnitt soll der zu $1/j^2$ proportionale Korrekturterm durch eine Sattelpunkt-Näherung zweiter Ordnung berechnet und damit das numerische Ergebnis von 3% für den relativen Fehler begründet werden.

Die Sattelpunkt-Approximationsformel (4.21) für ein Integral der Gestalt $\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(jV(t))$ wurde in Abschnitt 4.3 aus der Entwicklung (4.20) des Integranden hergeleitet, indem Beiträge erster Ordnung mitgenommen wurden. Wenn wir wiederum berücksichtigen, daß jede Integration über $\exp(\frac{1}{2}jV''(t_0)(t - t_0)^2)(t - t_0)^{2n}$ einen Faktor $j^{-(2n+1)/2}$

erzeugt, gilt in zweiter Ordnung in $1/j$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{jV(t)} &\approx \sum_{\text{Sättel}} e^{jV(t_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{1}{2}jV''(t_0)(t-t_0)^2} \\ &\cdot \left(1 + \frac{1}{4!}jV''''(t_0)(t-t_0)^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{3!}jV'''(t_0)(t-t_0)^3 \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Durch Ausintegrieren erhalten wir die Sattelpunkt-Approximationsformel zweiter Ordnung,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{jV(t)} = \sum_{\text{Sättel}} e^{jV(t_0)} \sqrt{\frac{\pi}{-\frac{1}{2}jV''(t_0)}} \left(1 + \frac{1}{j}\alpha_0 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{j^2}\right) \right) \quad (4.40)$$

mit

$$\alpha_0 = \frac{1}{j} \left(\frac{1}{8} \frac{V''''(t_0)}{V''(t_0)^2} - \frac{5}{24} \frac{V'''(t_0)^2}{V''(t_0)^3} \right). \quad (4.41)$$

Bei der Anwendung auf das semiklassische Quasimatrixelement des Floquet-Operators des gekickten Kreisels müssen wir diesmal von der Entwicklung des Exponenten $V(j, t)$ (4.23) auch den Beitrag $\frac{1}{j}V_2(t)$ mitnehmen, den wir durch seinen Wert am Sattelpunkt ersetzen und vor das Integral ziehen. Dies führt uns auf

$$\begin{aligned} &\langle \Gamma | F | \gamma \rangle^{\text{sk II}} \\ &= \sum_{\text{Sättel}} \left(\frac{(1-\gamma)^2(1+v)^2}{2 \cdot (1+\Gamma\Gamma^*)(1+\gamma\gamma^*)} \exp\left(\frac{-ikj}{2j+1}\right) \right)^j \\ &\quad \cdot \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi k}} e^{jV_0(t_0)} e^{V_1(t_0)} e^{\frac{1}{j}V_2(t_0)} \sqrt{\frac{\pi}{-\frac{1}{2}jV_0''(t_0)}} \left(1 + \frac{1}{j}\alpha_0 \right) \\ &= \sum_{\text{Sättel}} \left(\frac{(1-\gamma)^2(1+v)^2}{2 \cdot (1+\Gamma\Gamma^*)(1+\gamma\gamma^*)} \exp\left(\frac{-ikj}{2j+1}\right) \right)^j \\ &\quad \cdot \exp\left(\frac{4ikj^2}{2j+1} \frac{v^2}{(1+v)^2}\right) \left(1 + \frac{4ikj}{2j+1} \frac{v}{(1+v)^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot \left(1 + \frac{1}{j}\alpha(\Gamma, \gamma) \right) \end{aligned} \quad (4.42)$$

mit

$$\alpha(\Gamma, \gamma) \approx V_2 + \alpha_0 = V_2 + \frac{1}{8} \frac{V_1''''}{V_1''^2} - \frac{5}{24} \frac{V_1''''^2}{V_1'''^3}. \quad (4.43)$$

Hierbei ist V_2 wie in (4.26),

$$V_2 = k^2 \frac{v}{(1+v)^2} - ik \frac{v}{1+v}. \quad (4.44)$$

Mit den Abkürzungen

$$w = \sqrt{-i}, \quad W = \frac{v}{1+v} = \frac{t_0}{2kw} \quad (4.45)$$

lassen sich die in $\alpha(\Gamma, \gamma)$ enthaltenen Terme als Polynome in W ausdrücken,

$$V'' = -\frac{1}{k} + 2(W - W^2)w^2, \quad (4.46)$$

$$V''' = 2(W - 3W^2 + 2W^3)w^3, \quad (4.47)$$

$$V'''' = 2(W - 7W^2 + 12W^3 - 6W^4)w^4. \quad (4.48)$$

Man kann nun die Approximation zweiter Ordnung zur Berechnung semiklassischer Spektren verwenden, deren absoluter Phasenfehler sich wie $1/j^2$ verhält und deren relativer Phasenfehler demnach für $j \rightarrow \infty$ wie $1/j$ verschwindet. Abbildung 4.7 zeigt, daß dies in der Tat der Fall ist und wir somit eine Näherung gefunden haben, die im Grenzfall $j \rightarrow \infty$ nicht nur ihre Gültigkeit behält, sondern sogar an relativer Genauigkeit gewinnt.

Es stellt sich nun heraus, daß der Korrekturterm $\alpha(\Gamma, \gamma)$ effektiv kaum von Γ und γ abhängt. Abbildung 4.8 zeigt Werte von $\alpha(\Gamma, \gamma)$ für 1490 verschiedene Paare (Γ, γ) ; die Werte häufen sich in der Nähe von $\alpha(\Gamma, \gamma) = -0.1 - 0.06i$. Um diese scharfe Verteilung quantitativ zu erfassen, wird in Abb. 4.9 ein Histogramm des Real- und Imaginärteils von $\alpha(\Gamma, \gamma)$ gezeigt.

Die scharfe Verteilung des Korrekturfaktors $\alpha(\Gamma, \gamma)$ motiviert es, diesen zur Berechnung der Approximation zweiter Ordnung durch seinen Mittelwert zu ersetzen. Wie in Abb. 4.7 erkennbar, bleibt der relative Phasenfehler der Approximation 2. Ordnung hierbei praktisch derselbe; für große j treten Abweichungen auf, bei denen aber das Ergebnis mit gemitteltem $\alpha(\Gamma, \gamma)$ sowohl schlechter als auch besser sein kann als das Ergebnis mit exaktem $\alpha(\Gamma, \gamma)$.

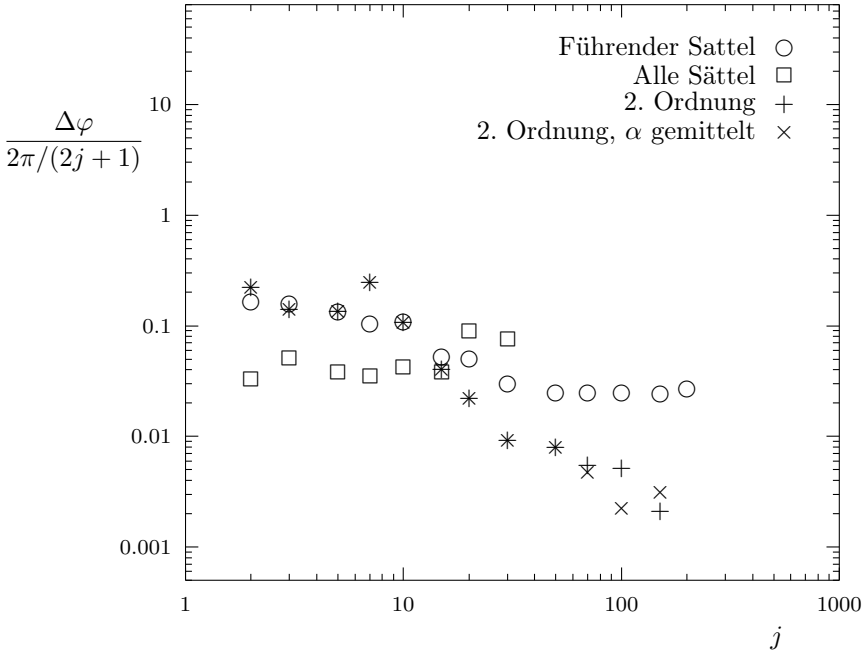


Abbildung 4.7: Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in zweiter Ordnung Sattelpunkt-Näherung in Abhängigkeit von j für $\beta = \pi/2$, $k = 8$. In zweiter Ordnung Sattelpunkt-Näherung verschwindet der absolute Fehler für $j \rightarrow \infty$ wie $1/j^2$, der relative Fehler wie $1/j$. Dies wird erst in dem Bereich $j \gtrsim 20$ sichtbar, in dem die Korrektur zweiter Ordnung nicht mehr von den fehlenden Beiträgen mehrerer Sättel verborgen wird. Wird der Korrekturterm $\alpha(\Gamma, \gamma)$ durch seinen Mittelwert ersetzt, ändert sich der relative Phasenfehler nicht wesentlich.

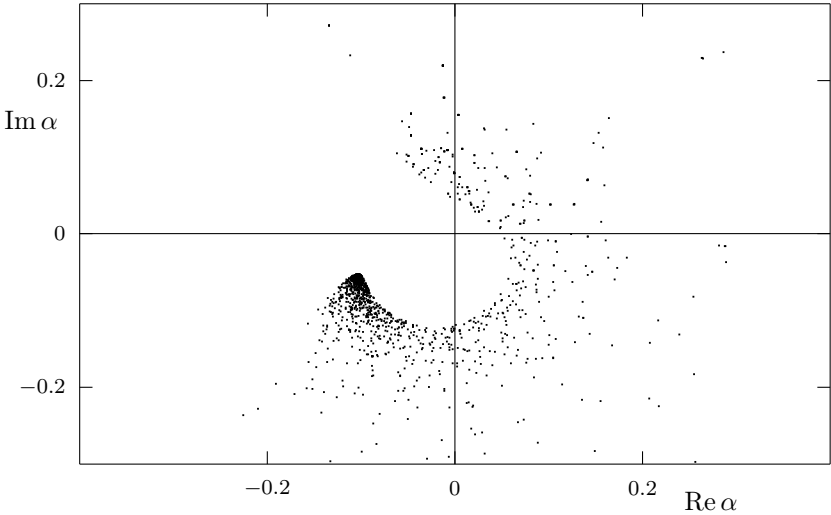


Abbildung 4.8: Der Korrekturfaktor $\alpha(\Gamma, \gamma)$. Der komplexe Korrekturfaktor $\alpha(\Gamma, \gamma)$ wurde für 1490 verschiedene Paare (Γ, γ) berechnet. In der Nähe von $-0.1 - 0.06i$ häufen sich die Werte.

Wenn wir nun $\alpha \equiv \alpha(\Gamma, \gamma)$ als konstant voraussetzen, besteht der Unterschied zwischen dem semiklassischen Quasimatrixelement erster Ordnung $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle^{\text{sk}}$ und zweiter Ordnung $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle^{\text{sk II}}$ nur noch in einer Multiplikation mit der Konstanten $1 + \alpha/j$. Durch Anwendung der Störungstheorie können wir diese Abweichung in den Quasimatrixelementen in eine Abweichung in den Eigenwerten umrechnen; die komplexe Phase $\arg(1 + \alpha/j) \approx \text{Im } \alpha/j$ des Korrekturfaktors ist in erster Ordnung Störungstheorie der Abweichung in den Eigenphasen gleichzusetzen. Wir können daher aus dem Mittelwert -0.065 (oder aus dem wahrscheinlichsten Wert -0.067) des Imaginärteils von $\alpha(\Gamma, \gamma)$ auf eine absolute Phasenkorrektur zweiter Ordnung Sattelpunkt-Näherung von $0.065/j$ schließen. Wenn wir höhere Ordnungen der Sattelpunkt-Näherung vernachlässigen, ist dies gerade der absolute Phasenfehler der Sattelpunkt-Näherung erster Ordnung. Umrechnung auf einen relativen Fehler ergibt den Wert $(0.065/j)/(2\pi/(2j+1)) \approx 0.021$, also etwas weniger als die 3%, die wir als relativen Fehler der Sattelpunkt-Näherung numerisch festgestellt hatten (siehe Abb. 4.4 oder 4.7).

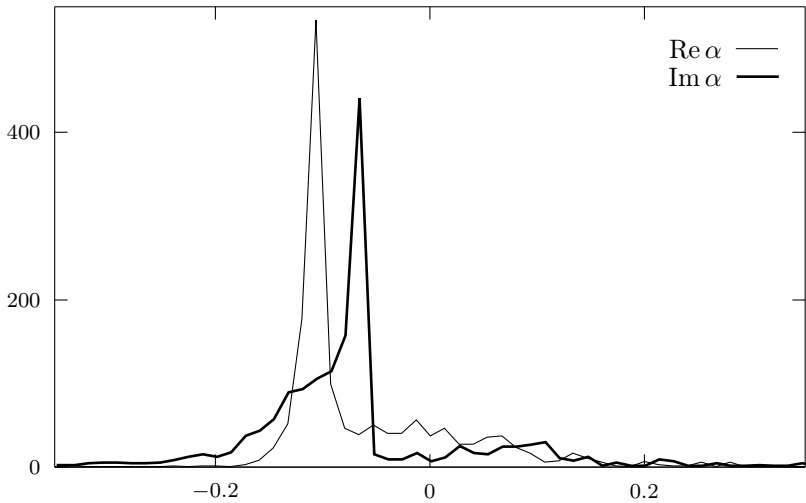


Abbildung 4.9: Histogramm von Real- und Imaginärteil des Korrekturfaktors $\alpha(\Gamma, \gamma)$. Sowohl Real- als auch Imaginärteil des Korrekturterms $\alpha(\Gamma, \gamma)$ sind relativ scharf um ihre wahrscheinlichsten Werte -0.107 bzw. -0.067 verteilt.

Damit wurde ein Verfahren vorgestellt, Quasimatrixelemente des Floquet-Operators in einer aus kohärenten Zuständen bestehenden Basis quantenmechanisch und semiklassisch zu berechnen. Das Verfahren ist stabil bis $j \lesssim 15$ (Verfahren des steilsten Abstiegs) bzw. $j \lesssim 150$ (Höhenverfahren) und läßt sich auf höhere Ordnungen in $1/j$ verallgemeinern. Der Approximationsfehler erster Ordnung wurde durch Betrachtung der zweiten Ordnung abgeschätzt.

Kapitel 5

Dynamisches Tunneln

In diesem Kapitel werden einige Hilfsmittel vorgestellt, die es uns erlauben, quantenmechanische Eigenschaften und Strukturen im Phasenraum des gekickten Kreisels einander zuzuordnen. Es wird eine semiklassische Methode zur Bestimmung *regulärer Eigenzustände* entwickelt und auf das Phänomen des *dynamischen Tunnelns* angewendet. Hierbei wird allgemein gezeigt und am Beispiel des gekickten Kreisels numerisch belegt, wie sich das Fehlen von Symmetrieentartungen auf *chaosunterstütztes Tunneln* auswirkt.

5.1 Symmetrien

Um die Symmetrien besser kontrollieren und beobachten zu können, betrachten wir in diesem Kapitel einen leicht modifizierten gekickten Kreisel, bei dem der Drehimpuls in jeder Periode vier Drehungen unterzogen wird:

1. Rotation um den Winkel $\beta/2$ um die y -Achse,
2. Torsion proportional zur Kickstärke k um die z -Achse.
3. Rotation um den Winkel k' um die z -Achse,
4. Rotation um den Winkel $\beta/2$ um die y -Achse,

Die beiden Drehungen um die z -Achse sind miteinander vertauschbar. Indem wir die Rotation um die y -Achse aufgeteilt und somit die z -Torsion in die Mitte der Periode gelegt haben, wird die Zeitumkehrsymmetrie

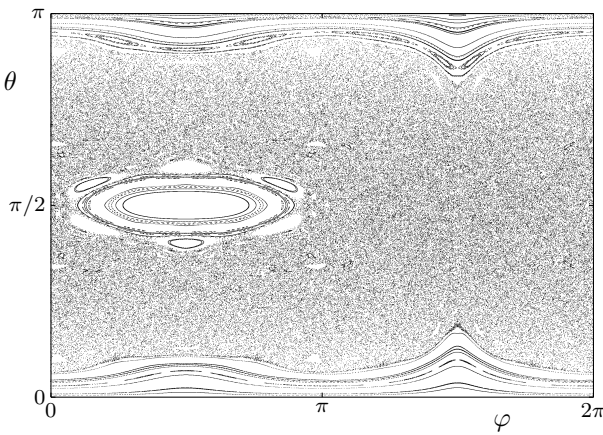


Abbildung 5.1: Phasenraumportrait des gekickten Kreisel für $\beta = 1$, $k = 3.5$, $k' = 0$. Die mit $k' = 0$ zusammenhängende Symmetrie bzgl. der φ -Achse bei $\theta = \pi/2$ schlägt sich quantenmechanisch im Floquet-Spektrum in Gestalt von Paaren beinahe-entarteter Eigenphasen nieder. Der „instantane Kick“ (Torsion) findet hier – im Gegensatz zu Abb. 2.5 und 2.6 – in der Mitte einer Zeitperiode statt; ansonsten wäre die mit $k' = 0$ zusammenhängende Symmetrie nicht in dieser Weise erkennbar.

des betrachteten gekickten Kreisel offenbar: Wenn wir die Drehungen in der umgekehrten Reihenfolge anwenden, erhalten wir einen anderen gekickten Kreisel desselben Typs mit anderen (negativen) Parametern β , k und k' . (Dies wäre z. B. nicht mehr der Fall, wenn man eine dritte Drehung um die x -Achse hinzunähme.)

Die hinzugenommene lineare Drehung um die z -Achse ließe sich im Prinzip mit der Rotation um die y -Achse zu einer Rotation um eine schräge Achse zusammenziehen. Die Eigenschaft $k' = 0$ ist somit äquivalent zu der Eigenschaft, daß Rotations- und Torsionsachse aufeinander senkrecht stehen.

Abbildung 5.1 und 5.2 zeigen Phasenraumportraits (Poincaré-Schnitte) des gekickten Kreisel für $\beta = 1$, $k = 3.5$ und $k' = 0$ bzw. $k' = 1$. Dies ist ein Parameterbereich, in dem der Phasenraum Bereiche sowohl regulärer als auch chaotischer Dynamik enthält – der Fall, der uns in diesem Kapitel interessieren wird.

Für $k' = 0$ existieren zwei zueinander symmetrische elliptische Fixpunkte in der Nähe der Pole, umgeben von großen Stabilitätsinseln. Ein weiterer elliptischer Fixpunkt befindet sich am Äquator. Der gesamte Poincaré-Schnitt ist symmetrisch zur Horizontalen $\theta = \pi/2$ und zur y - z -Ebene, die sich uns in der Mercator-Projektion als zwei senkrechte Geraden bei $\varphi = \pi/2$ und bei $\varphi = 3\pi/2$ präsentiert.

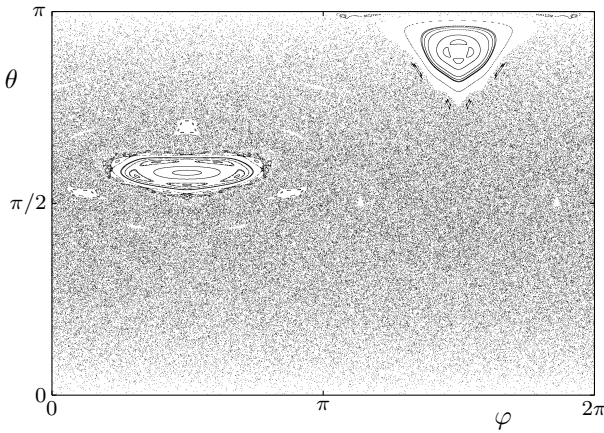


Abbildung 5.2: Phasenraumportrait des gekickten Kreisels für $\beta = 1$, $k = 3.5$, $k' = 1$. Die einzige noch vorhandene Symmetrie ist die Zeitumkehrsymmetrie – im Bild sichtbar als Achsensymmetrie bzgl. zweier vertikaler Achsen bei $\varphi = \pi/2$ und bei $\varphi = 3\pi/2$ (räumlich: y - z -Ebene). Quantenmechanisch verschwinden für $k' \neq 0$ die symmetriebedingten Beinahe-Entartungen im Floquet-Spektrum.

Für $k' = 1$ erkennen wir zwei große, zueinander nicht symmetrische Stabilitätsinseln mit jeweils einem elliptischen Fixpunkt. Die Symmetrie des Poincaré-Schnitts bzgl. der horizontalen Achse $\theta = \pi/2$ ist verschwunden; diese Symmetrie kann somit der durch $k' = 0$ hervorgerufenen Symmetrie zugeordnet werden, daß Rotations- und Torsionsachse aufeinander senkrecht standen. Die Symmetrie bzgl. der y - z -Ebene ist weiterhin vorhanden; hierbei handelt es sich um eine Auswirkung der Zeitumkehrsymmetrie.

Die quantenmechanische Beschreibung des Systems geschieht durch einen Floquet-Operator der Gestalt

$$F = e^{-i\frac{\beta}{2}J_y} e^{-i\left(\frac{k}{2j+1}J_z^2 + k'J_z\right)} e^{-i\frac{\beta}{2}J_y}. \quad (5.1)$$

Die Verteilung der y -Drehung auf zwei Operatoren $\exp\left(\frac{\beta}{2}J_y\right)$ wirkt sich nicht auf das Spektrum, wohl jedoch auf die Eigenfunktionen aus.

5.2 Husimi-Funktion auf der Kugeloberfläche

Wir haben kohärente Zustände kennengelernt als solche quantenmechanische Zustände, die – im Rahmen der Unschärferelation – einer bestimmten Ausrichtung des Drehimpulsvektors entsprechen. Da der Phasenraum des gekickten Kreisels die Menge aller möglichen Ausrichtungen des Drehimpulsvektors ist, entspricht der kohärente Zustand somit einem Punkt im Phasenraum. Unter Berücksichtigung der Unschärfe sollte man eher von einer lokalisierten Wolke im Phasenraum sprechen; diese Wolke soll nun im Sinne einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion definiert und dabei auf beliebige quantenmechanische Zustände verallgemeinert werden.

Gegeben sei ein quantenmechanischer Zustand $|\psi\rangle$ sowie ein Punkt γ im Phasenraum. Die Wahrscheinlichkeitsdichte nach Husimi (Husimi-Funktion), den Zustand $|\psi\rangle$ im Phasenraumpunkt γ zu finden, ist definiert als die auf den Phasenraum normierte Übergangswahrscheinlichkeit von $|\psi\rangle$ zu einem im Punkt γ lokalisierten kohärenten Zustand $|\gamma\rangle$,

$$\rho_H(\psi, \gamma) \equiv |\langle \gamma | \psi \rangle|^2. \quad (5.2)$$

Die Betrachtung als Wahrscheinlichkeitsdichte wird durch die Eigenschaften gerechtfertigt, daß ρ_H überall positiv und normiert ist,

$$\int_{\text{Phasenraum}} d\gamma \rho_H(\psi, \gamma) \equiv \int_{\mathbb{C}} \frac{d\gamma}{(1 + \gamma\gamma^*)^2} \langle \psi | \gamma \rangle \langle \gamma | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (5.3)$$

Die Darstellung eines quantenmechanischen Zustands durch seine Husimi-Funktion ist bis auf einen komplexen Phasenfaktor eindeutig: Wie wir durch Einschieben einer Eins in der Standardbasis $|j, m\rangle$ erkennen, ist die Funktion $\langle \gamma | \psi \rangle$ ein Polynom auf der Riemannschen Zahlenkugel,

$$\langle \gamma | \psi \rangle = (1 + \gamma\gamma^*)^{-j} \sum_{n=0}^{2j} \gamma^{*n} \sqrt{\binom{2j}{n}} \langle j, j - n | \psi \rangle. \quad (5.4)$$

Durch die Betragbildung geht ein gemeinsamer Phasenfaktor verloren; davon abgesehen sind die $2j + 1$ Entwicklungskoeffizienten $\langle j, m | \psi \rangle$ und damit der Zustand $|\psi\rangle$ durch die $2j$ Nullstellen der Husimi-Funktion eindeutig bestimmt. Es ist sogar möglich – und Gegenstand aktueller Forschung [32] –, die Dynamik eines Systems nur anhand der Dynamik dieser Nullstellen zu studieren.

In Systemen mit flachem Phasenraum, z.B. solchen mit einer Hamilton-Funktion der Gestalt $H = p^2/(2m) + V(x, t)$, unterliegen die kohärenten Zustände einer gewissen Willkür, nämlich der Wahl einer Oszillatorfrequenz, d. h. des Umrechnungsfaktors zwischen Ort und Impuls bei der Verteilung der Unschärfe auf beide Größen. In unserem System besteht eine solche Wahlfreiheit nicht; kohärente Zustände auf der Kugel und damit auch die Husimi-Funktion sind eindeutig definiert.

Die Husimi-Funktion ist nicht die einzige Möglichkeit, quantenmechanische Größen im Phasenraum darzustellen. Sehr bekannt ist auch die Quasiwahrscheinlichkeitsdichte nach Wigner (Wigner-Funktion). Es besteht ein enger Zusammenhang zwischen der Husimi- und der Wigner-Funktion [33]: Die Husimi-Funktion geht durch Faltung mit einer Gaußfunktion aus der Wigner-Funktion hervor. Da die Wigner-Funktion auch negative Werte annehmen kann und darüberhinaus auf der Längenskala \hbar oszilliert (Husimi-Funktion: $\sqrt{\hbar}$), erweist sich die Husimi-Funktion in unserem Zusammenhang als zweckmäßiger.

5.3 Reguläre und chaotische Eigenzustände

Bei einer Untersuchung der Eigenzustände des Floquet-Operators des gekickten Kreisels mit Hilfe der Husimi-Funktion stellt sich heraus, daß sich klassische Strukturen im Phasenraumportrait in den Husimi-Funktionen der Eigenzustände widerspiegeln [34, 35].

Abbildung 5.3 und 5.4 zeigen Husimi-Funktionen typischer Eigenzustände des gekickten Kreisels für $j = 50$, $\beta = 1$, $k = 3.5$ und $k' = 1$, also für den generischen Fall ohne Symmetrien; im Phasenraum existieren sowohl Bereiche regulärer als auch chaotischer Dynamik (Abb. 5.2). Beim Vergleich der Husimi-Funktionen mit dem Poincaré-Schnitt stellt sich heraus, daß die Eigenzustände in zwei Klassen eingeordnet werden können: Solche Zustände, deren Husimi-Funktionen nur innerhalb der Inseln lokalisiert sind und solche, deren Husimi-Funktionen die Stabilitätsinseln gewissermaßen aussparen. Derartige Minima der Husimi-Funktion infolge von Stabilitätsinseln werden in der Literatur auch als „Narben“ („scars“) bezeichnet [35].

Die Form der regulären Zustände (im Sinne der Lokalisierung ihrer Husimi-Funktion) folgt den KAM-Tori der klassischen regulären Dynamik. Die Zustände können Kreis- oder Ringform haben, was eine Analogie zur semiklassischen Quantisierungsregel nach Bohr und Sommerfeld [2, § 48] darstellt, bei welcher die von einer geschlossenen Trajektorie eingeschlossene Fläche im Phasenraum gleich einer Konstanten plus

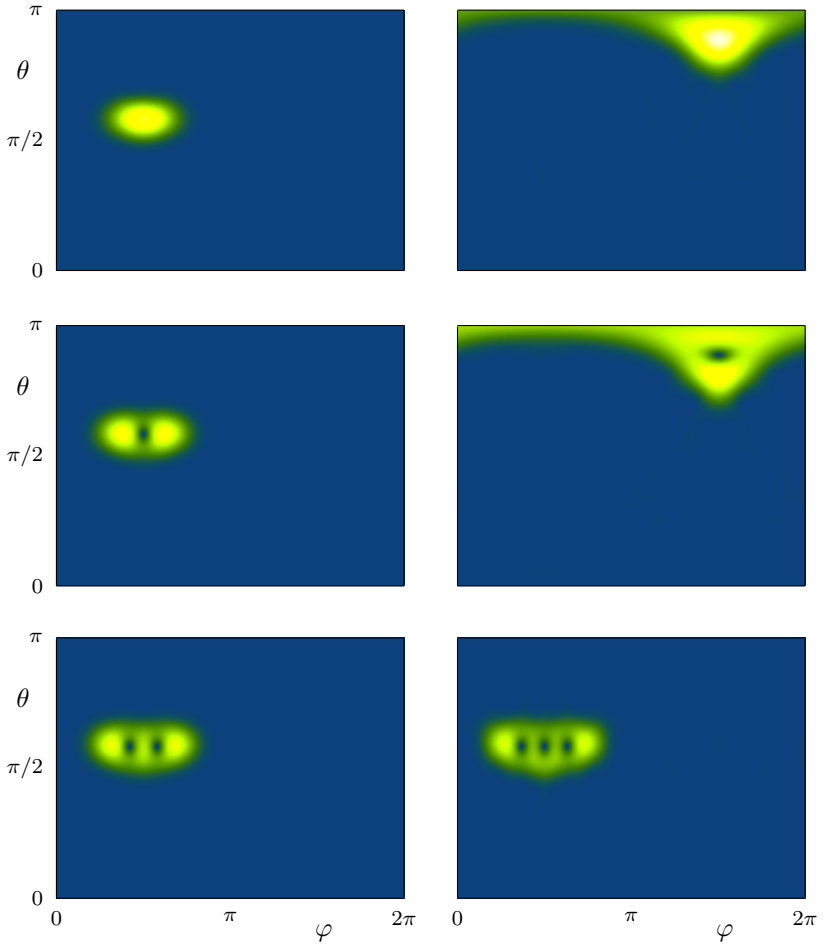


Abbildung 5.3: Reguläre Eigenzustände des gekickten Kreisels für $j = 50$, $\beta = 1$, $k = 3.5$, $k' = 1$ (asymmetrischer Fall). Die Husimi-Funktionen der Eigenzustände im Phasenraum sind gemäß der Farbskala von blau (0) über grün ($1/3$) und gelb ($2/3$) bis weiß (1) dargestellt. Die Husimi-Funktionen *regulärer* Eigenfunktionen zeigen starke Lokalisation innerhalb der klassischen Stabilitätsinseln (vgl. Abb. 5.2). Anhand der Anzahl ihrer Nullstellen innerhalb der Stabilitätsinseln lassen sich die Eigenzustände als *Grundzustände* (obere Reihe) bzw. *angeregte Zustände* (mittlere und untere Reihe) klassifizieren.

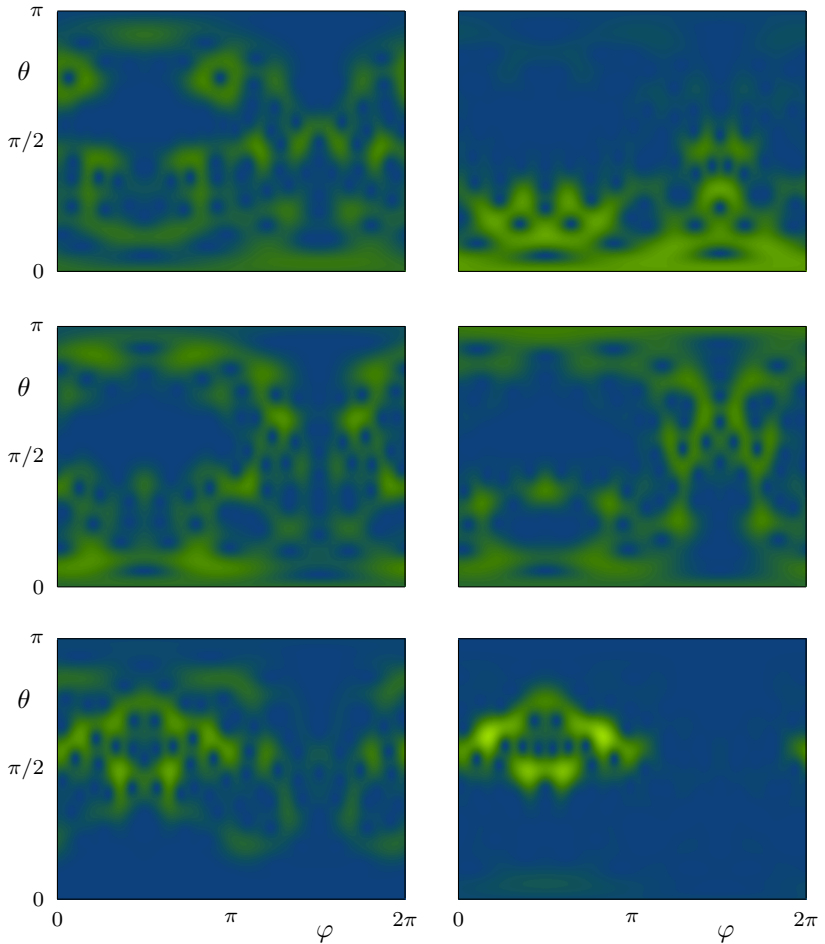


Abbildung 5.4: Chaotische Eigenzustände des gekickten Kreisels für $j = 50$, $\beta = 1$, $k = 3.5$, $k' = 1$ (asymmetrischer Fall). Die Husimi-Funktionen *chaotischer* Eigenfunktionen (Farbdarstellung wie in Abb. 5.3) sind im klassisch chaotischen Bereich lokalisiert und meiden die Stabilitätsinseln (vgl. Abb. 5.2). Manche Zustände (untere Reihe) ordnen sich dabei um die Inseln herum an; diese speziellen chaotischen Zustände heißen auch *Randzustände*.

einem ganzzahligen Vielfachen von \hbar sein muß, damit ein Quantenzustand derselben Energie existiert. Der kleinste „Ring“ entartet zu einem Wellenpaket und stellt den *Grundzustand* innerhalb der Stabilitätsinsel dar. Die anderen Ringe entsprechen *angeregten Zuständen*, geordnet nach dem eingeschlossenen Phasenraumvolumen des zugrundeliegenden KAM-Torus. Man kann zeigen, daß sich dieselbe Ordnung für die angeregten Zustände ergibt, wenn man die Nullstellen der Husimi-Funktion innerhalb des KAM-Torus zählt. Dies ist eine Analogie zum Verhalten angeregter Zustände in gebundenen Systemen in Ortsdarstellung, bei denen die Anzahl der Knoten der Wellenfunktion der Ordnungszahl des angeregten Zustands gemäß seiner Energie entspricht.

Eine Besonderheit stellen die *Randzustände* dar (Abb. 5.4), welche bereits vollständig im chaotischen Bereich lokalisiert sind (und daher hier zu den chaotischen Eigenzuständen gezählt wurden), sich ansonsten aber in jeder Hinsicht wie angeregte reguläre Zustände verhalten. Eine derartige „quantenmechanische Fortsetzung der Regularität in den chaotischen Bereich“ ist auch von anderen Systemen her bekannt [34, 36, 37] und Gegenstand aktueller Forschung.

Im symmetrischen Fall mit $k' = 0$ (Abb. 5.5) weisen auch die Husimi-Funktionen der Eigenzustände dieselben Symmetrien auf. Da die Stabilitätsinseln an den Polen zueinander symmetrisch sind, erwartet man reguläre Zustände innerhalb der Inseln mit zunächst gleichen Eigenwerten, was als *Symmetrieentartung* bezeichnet wird. Im gesamten System hingegen wird die Symmetrieentartung zu einer Beinahe-Entartung aufgehoben, und die Eigenfunktionen bilden eine symmetrische und eine antisymmetrische Überlagerung. In der Husimi-Darstellung erkennt man hiervon nur, daß die regulären Eigenfunktionen stets paarweise auftreten und die zugehörigen Eigenwerte nahezu gleich sind. In Abschnitt 5.5 werden wir in Zusammenhang mit *dynamischem Tunneln* auf diese Aufspaltung symmetrieentarteter Eigenwerte zurückkommen.

5.4 Semiklassische Näherung regulärer Eigenzustände

In diesem Abschnitt wollen wir ein unmittelbares Analogon der Bohr-Sommerfeld-Quantisierung regulärer Systeme für die Bereiche regulären Verhaltens des gekickten Kreisels konstruieren.

Wenn wir die stationäre Wellenfunktion des „Grundzustands“ innerhalb einer der Stabilitätsinseln raten wollen, bietet es sich als erste Idee an, einen kohärenten Zustand an der Stelle des Fixpunkts zu lokalisieren.

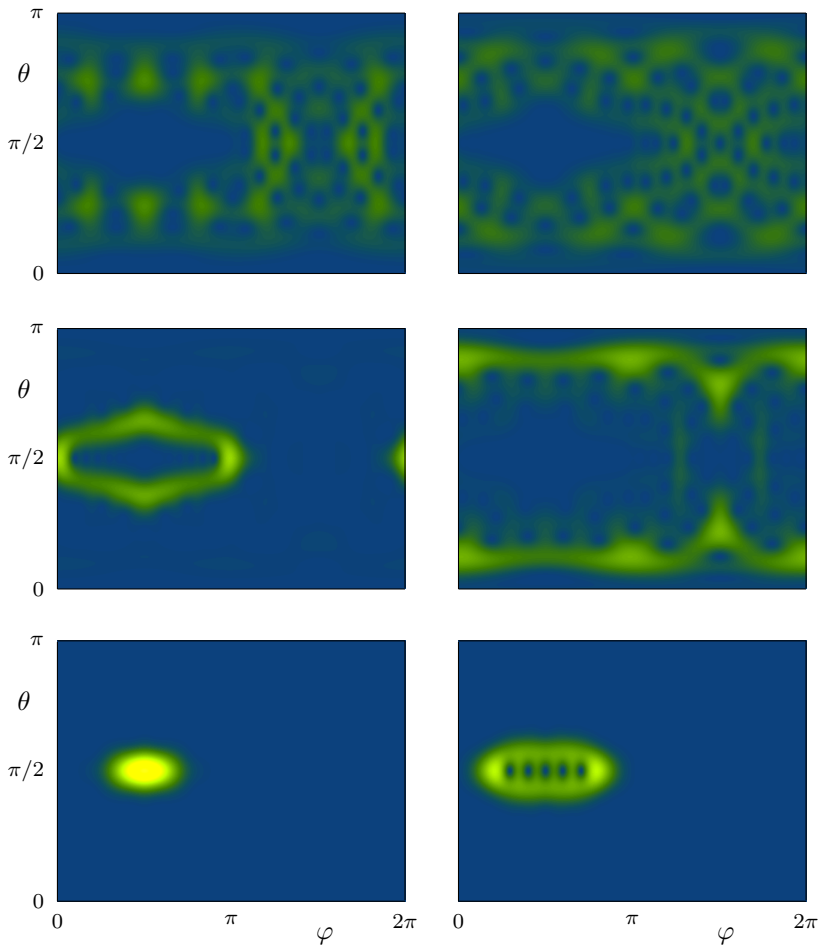


Abbildung 5.5: Reguläre und chaotische Eigenzustände des gekickten Kreisel für $j = 50$, $\beta = 1$, $k = 3.5$, $k' = 0$ (symmetrischer Fall). Die Eigenzustände respektieren Symmetrien des Phasenraums (vgl. Abb. 5.1). Dargestellt sind die Husimi-Funktionen zweier chaotischer Zustände (obere Reihe), zweier Randzustände (mittlere Reihe) und zweier regulärer Zustände, nämlich des Grundzustands (unten links) und des fünften angeregten Zustands (unten rechts) innerhalb der linken Stabilitätsinsel – erkennbar an den fünf Nullstellen innerhalb der Insel.

ren. Wenn man dies tut und anschließend durch iteratives Anwenden des Floquet-Operators die Zeitentwicklung des präparierten Zustands betrachtet, stellt man fest, daß das Wellenpaket die Stabilitätsinsel zwar nicht verläßt, dort aber seine Form verändert, so daß von einem stationären Zustand nicht die Rede sein kann. Dies liegt daran, daß der dem kohärenten Zustand zugrundeliegende $|j, j\rangle$ -Zustand einem „kreisförmigen“ Fleck im Phasenraum entspricht, die Stabilitätsinseln hingegen im allgemeinen „elliptische“ Form haben. Es ist daher zu erwarten, daß eine allgemeinere Klasse von Wellenpaketen, die auch elliptische Form annehmen können, eine bessere Näherung für den Grundzustand innerhalb einer Stabilitätsinsel ermöglicht.

In Systemen mit flachem Phasenraum bezeichnet man Zustände minimalen Unschärfeprodukts, die einen elliptischen Bereich im Phasenraum einnehmen, als *gequetschte Zustände*. Im folgenden soll eine Möglichkeit aufgezeigt werden, gequetschte Zustände für ein Spinsystem zu konstruieren.

Wie bei kohärenten Zuständen, starten wir mit dem Zustand $|j, j\rangle$ der Standardbasis, unterziehen ihn jedoch den folgenden Operationen:

1. Torsion um die x -Achse mit Torsionsparameter λ ,
2. Rotation um die z -Achse um einen Winkel μ ,
3. Drehung um eine schräge Achse, so daß der Schwerpunkt die Polarkoordinaten φ und θ erhält.

In Formeln ausgedrückt, definieren wir einen gequetschten Zustand für ein Spinsystem durch

$$|\varphi, \theta, \lambda, \mu\rangle \equiv e^{-i\varphi J_z} e^{-i\theta J_y} e^{i\varphi J_z} e^{-i\mu J_z} e^{-i\lambda J_x^2} |j, j\rangle. \quad (5.5)$$

Um nun eine semiklassische Näherung für den Grundzustand des gekickten Kreisels innerhalb einer Stabilitätsinsel zu erhalten, lesen wir die Koordinaten φ und θ , den *Quetschparameter* λ sowie die *Quetschrichtung* μ aus den Eigenschaften der Stabilitätsinsel folgendermaßen ab:

1. Durch die klassische Abbildung sind die KAM-Tori innerhalb der Insel definiert und in gut handhabbarer Weise parametrisiert. Wir suchen zunächst denjenigen KAM-Torus, dessen eingeschlossene Fläche im Phasenraum dem Wirkungsquantum $\hbar = 1/j$ entspricht.

2. Der KAM-Torus wird durch eine flächengleiche Ellipse mit kleiner Halbachse a und großer Halbachse b approximiert. Der Schwerpunkt der Ellipse definiert die Koordinaten φ und θ . Dies sind näherungsweise die Koordinaten des Fixpunkts.
3. Der Quetschparameter λ wird aus dem Verhältnis der Halbachsen bestimmt,

$$\lambda = \sqrt{\frac{b}{a} - 1}. \quad (5.6)$$

4. Zur Bestimmung der Quetschrichtung μ drehen wir die Ellipse an den Pol der Phasenraumkugel. Wenn α den Winkel zwischen der großen Achse der am Pol befindlichen Ellipse und der x -Achse bezeichnet, ergibt sich μ durch

$$\mu = \alpha + \arctan \lambda. \quad (5.7)$$

Mit demselben Verfahren können wir auch angeregte Zustände innerhalb der Stabilitätsinseln approximieren, indem wir anstelle des Zustands $|j, j\rangle$ andere Eigenzustände $|j, j-1\rangle, |j, j-2\rangle, \dots, |j, j-n\rangle$ zur Konstruktion des ersten, zweiten, \dots , n -ten angeregten Inselzustands heranziehen. In diesem Fall wählen wir einen KAM-Torus der Fläche $n\hbar = (n+1)/j$, dessen Existenz gleichzeitig ein grobes Kriterium für die Existenz des Eigenzustands liefert.

Bei Iteration des semiklassisch approximierten Eigenzustands mit dem exakten Floquet-Operator bleibt der Zustand näherungsweise stationär und gewinnt lediglich eine komplexe Phase, die Eigenphase. Auf diese Weise ist es möglich, den regulären Teil des Floquet-Spektrums des gekickten Kreisels approximativ zu gewinnen, ohne den Floquet-Operator numerisch diagonalisieren zu müssen, was von hoher praktischer Bedeutung sein kann.

Abbildung 5.6 zeigt das komplette exakte Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels für $j = 10$, $\beta = 1$ und $k' = 1$ als Funktion von k sowie die semiklassisch genäherten Eigenphasen der Grundzustände in beiden Stabilitätsinseln. Bis auf diejenigen Stellen, an denen sich zwei Eigenphasen nahekommen und eine vermiedene Kreuzung eintritt, ermöglicht die Approximation überall eine eindeutige Identifikation der regulären Grundzustände. Bei den vermiedenen Kreuzungen tritt *dynamisches Tunneln* ein, worauf in den nächsten Abschnitten noch näher eingegangen werden wird.

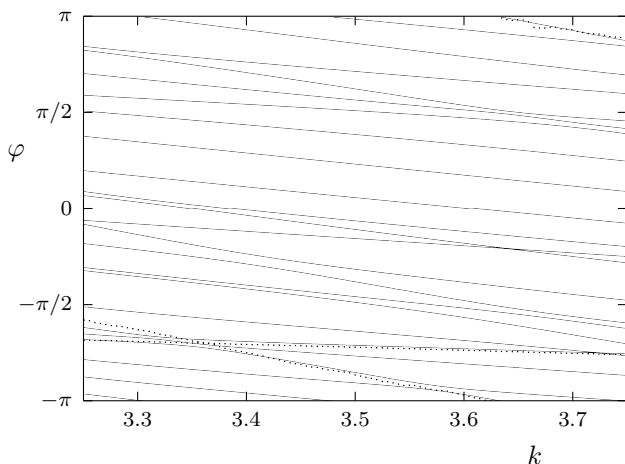


Abbildung 5.6: Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels für $j = 10$, $\beta = 1$ und $k' = 1$ als Funktion von k . Die Kreuzungen zwischen den Linien der Eigenphasen als Funktion von k sind nur scheinbar; in Wirklichkeit handelt es sich um *vermiedene Kreuzungen*. Für die Grundzustände der in beiden Inseln lokalisierten Eigenzustände ist die semiklassische Näherung an die Eigenphase (gepunktete Linie) mit eingezeichnet. Die Näherung ermöglicht – bis auf Parameterwerte mit vermiedenen Kreuzungen – eine eindeutige Identifizierung der regulären Eigenzustände.

In Abb. 5.7 ist der über k gemittelte Fehler der semiklassisch genäherten Grundzustands-Eigenphasen als Funktion der Drehimpulsquantenzahl $j = 1/\hbar$ dargestellt. Obwohl bei der Näherung der Eigenfunktionen nur klassische Eigenschaften des Systems verwendet wurden, ist der relative Fehler der genäherten Eigenphase auch für kleine j klein genug, um den Eigenwert auflösen zu können. Erstaunlicherweise funktioniert die Näherung für kleine j sogar besser als im semiklassischen Grenzfall $j \gg 1$.

5.5 Dynamisches Tunneln

Unter *dynamischem Tunneln* versteht man – grob gesprochen – Tunneln im Phasenraum: Ein quantenmechanisches Wellenpaket wird – im Sinne seiner Husimi-Funktion – in einem Bereich des Phasenraums gestartet; nach einiger Zeit ist es dann ganz oder teilweise in einem anderen, klassisch unzugänglichen Bereich des Phasenraums lokalisiert. In den letzten Jahren wurde dynamisches Tunneln in einer Vielzahl von Modellsyste-

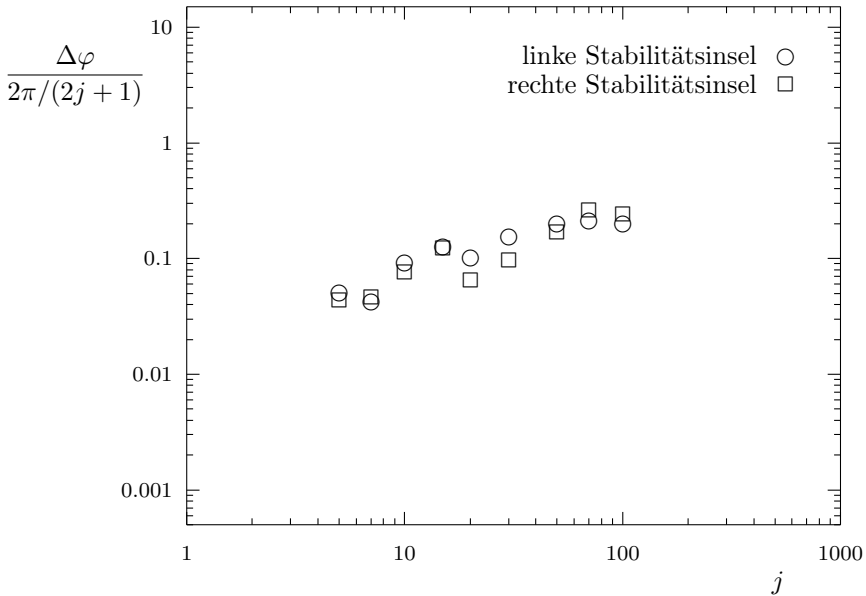


Abbildung 5.7: Fehler der mit Hilfe von gequetschten Zuständen ermittelten Eigenphasen als Funktion von j . Trotz der semiklassischen Natur der Näherung ist der relative Fehler der Eigenphasen für kleine j geringer als im semiklassischen Grenzfall $j \gg 1$.

men untersucht [36, 38, 39].

Für ein besseres Verständnis des dynamischen Tunnelns empfiehlt es sich, vorübergehend ein anderes Modellsystem heranzuziehen. Ein System, in dem sich dynamisches Tunneln besonders anschaulich präsentiert, ist das Ringbillard [36, 40].

Wie in Abb. 5.8 dargestellt, besteht das Ringbillard aus der Fläche zwischen zwei exzentrisch ineinandergeschriebenen Kreisen. Ein innerhalb der Fläche frei beweglicher Partikel kann mit den Wänden elastisch stoßen. Es handelt sich um ein autonomes System mit zwei Freiheitsgraden und Energieerhaltung. Da im allgemeinen keine weiteren Bewegungsintegrale existieren, ist das System in der Lage, chaotische Dynamik auszuführen. Für bestimmte Anfangsbedingungen jedoch (in Abb. 5.8 sind zwei Spezialfälle dargestellt) kann auch reguläres Verhalten eintreten. Unter diesen speziellen Voraussetzungen gibt es eine weitere Erhaltungsgröße (in Abb. 5.8 ist es der Drehimpuls), die es uns erlaubt, das System vollständig durch Winkel- und Wirkungsvariable zu beschreiben.

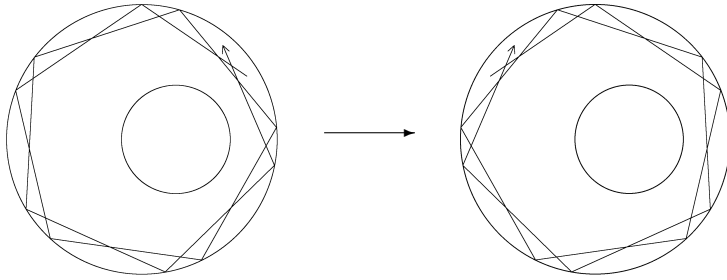


Abbildung 5.8: Klassisch verbotener Übergang im Ringbillard. Die Drehimpulserhaltung verbietet einem klassischen Teilchen, seinen Drehsinn in der dargestellten Weise zu ändern. Quantenmechanisch ist der Übergang möglich und wird als *dynamisches Tunneln* bezeichnet.

Im Phasenraum stellen sich die Bereiche regulären Verhaltens als Stabilitätsinseln dar. In einem Poincaré-Schnitt, in welchem wir den Polarwinkel und den Drehimpuls bzgl. des Mittelpunkts des großen Kreises gegeneinander auftragen, erhalten wir qualitativ das in Abb. 5.9 dargestellte Bild: Für betragsmäßig große Drehimpulse ist die Dynamik regulär, ansonsten chaotisch. (Für genauere Betrachtungen zum Ringbillard sei auf [36] und enthaltene Referenzen verwiesen.)

Es ist nun klar, daß ein wie in Abb. 5.8 (a) umlaufendes Teilchen klassisch diesen Zustand immer beibehalten wird. Quantenmechanisch hingegen „spürt“ das außen umlaufende Teilchen die innere Kreisscheibe und kann in den Zustand (b) übergehen. In Analogie zum klassisch verbotenen Durchgang eines Teilchens durch eine Energiebarriere bezeichnen wir dieses Verhalten als *dynamisches Tunneln*.

Die Anschauung legt nahe, daß auch das quantenmechanische Teilchen seine Bewegungsrichtung nicht spontan umkehrt, sondern vielmehr erst einen – chaotischen – Zwischenzustand annimmt, aus dem es dann mit umgekehrter Drehrichtung wieder als regulär umlaufendes Teilchen hervorgeht. Dies ist das *chaosunterstützte Tunneln*, von dem im nächsten Abschnitt die Rede sein wird. Wir halten außerdem fest, daß nicht nur der Übergang zwischen verschiedenen Stabilitätsinseln, sondern auch zwischen einer Stabilitätsinsel und einem chaotischem Bereich klassisch verboten ist und wir ihn daher ebenfalls in den Begriff *dynamisches Tunneln* einschließen wollen.

Im Phasenraum stellt sich das dynamische Tunnelereignis als ein –

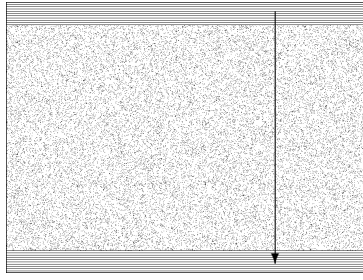


Abbildung 5.9: Dynamisches Tunneln im Phasenraum des Ringbillards (schematisch). Der klassisch verbotene Übergang in Abb. 5.8 entspricht im Phasenraum einem Übergang zwischen zwei Stabilitätsinseln inmitten eines ansonsten chaotischen Bereichs. Die für das klassische Teilchen unüberwindbaren KAM-Tori (in diesem Fall: Linien konstanten Drehimpulses) können quantenmechanisch *durchtunnelt* werden.

klassisch verbotener – Übergang aus einer Stabilitätsinsel in die andere dar. Anstelle einer Energiebarriere sind es hier die KAM-Tori, also Überreste einer zusätzlichen Erhaltungsgröße, die die Dynamik regulär werden läßt, welche für das klassische Teilchen undurchdringlich sind. Im Fall des Ringbillards können wir die in den Inseln vorhandene Erhaltungsgröße als den Drehimpuls identifizieren.

Prinzipiell ist es möglich, durch eine kanonische Transformation die in den Inseln vorhandene Erhaltungsgröße auf die Energie abzubilden. Mit dieser Methode können wir das dynamische Tunneln durch das konventionelle Tunneln eines „effektiven“ Teilchens im Ortsraum beschreiben. In diesem Sinne sind beide Phänomene äquivalent bis auf das Problem, daß es für den chaotischen Teil des Phasenraums keine natürliche Wahl für eine derartige kanonische Transformation gibt.

Das Studium der Husimi-Funktionen der Eigenzustände eines Systems mit dynamischem Tunneln fördert eine weitere Analogie zwischen konventionellem und dynamischem Tunneln zutage: Vom Tunneln zwischen zwei Potentialtöpfen her wissen wir, daß sich in erster Ordnung Störungstheorie die Eigenfunktionen gleicher Energie zweier getrennter Töpfe symmetrisch bzw. antisymmetrisch zu den Eigenfunktionen des Doppeltopfes überlagern, wobei die Energie des symmetrischen Zustands geringfügig niedriger, die des antisymmetrischen geringfügig höher ist als die der Eigenzustände der getrennten Potentialtöpfe. Die Energiedifferenz ΔE bezeichnen wir als *Tunnelaufspaltung*, und sie ist eng mit der Zeit verknüpft, die ein Teilchen benötigt, um von einem Topf in den an-

deren zu tunneln: Die Wellenfunktion $\psi_1(t=0)$ des in einem der beiden Töpfe lokalisierten Teilchens ist eine Überlagerung $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_- + \psi_+)$ zweier Eigenfunktionen des Hamiltonoperators, nämlich ψ_- zum Eigenwert E_- und ψ_+ zum Eigenwert $E_+ = E_- + \Delta E$. Mit diesen Bezeichnungen lautet die Zeitentwicklung der lokalisierten Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}\psi_1(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_-(t) + \psi_+(t)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}\psi_-(0) + e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}\psi_+(0)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}(\psi_-(0) + e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta Et}\psi_+(0)).\end{aligned}\quad (5.8)$$

Nach der Zeit $t = T/2 = \pi\hbar/\Delta E$ ist aus der Überlagerung $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_- + \psi_+)$ beider Eigenfunktionen eine Überlagerung $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_- - \psi_+)$ geworden, und das Teilchen ist nun in dem anderen Potentialtopf lokalisiert. Die Tunnelaufspaltung ΔE ist umgekehrt proportional zur Periodendauer T dieser sog. *Tunneloszillationen*.

Auch im Falle des dynamischen Tunnelns können wir Tunneloszillationen der Husimi-Funktion zwischen zwei klassisch getrennten Bereichen beobachten. Für den gekickten Kreisel mit Symmetrieentartung wurden in Abb. 5.5 bereits paarweise auftretende Eigenfunktionen mit leicht unterschiedlichen Eigenphasen vorgestellt. Analog zum konventionellen Tunneln zwischen zwei Potentialtöpfen besteht ein in einer der beiden Inseln lokalisiertes Wellenpaket aus einer Überlagerung beider Eigenfunktionen und oszilliert im Laufe der Zeit zwischen beiden Inseln hin und her; die Periodendauer T ist umgekehrt proportional zur Phasendifferenz $\Delta\varphi$,

$$T = 2\pi/\Delta\varphi.\quad (5.9)$$

Eine Grenze der Analogie besteht darin, daß wir nicht mehr auf natürliche Weise eine der beiden Eigenfunktionen als „symmetrisch“ und eine als „antisymmetrisch“ identifizieren können: Da die Husimi-Funktion stets reell und positiv ist, erscheint sie bezüglich der für die Entartung verantwortlichen Symmetrie grundsätzlich symmetrisch.

Abgesehen von den durch Symmetrieentartung hervorgerufenen Tunnelereignissen kann es darüberhinaus vorkommen, daß zwei Zustände „zufällig“ zunächst dieselbe Eigenphase besitzen und diese Entartung dann durch dynamisches Tunneln aufgehoben wird. Es ist im System des gekickten Kreisels nicht schwierig, durch geeignete Wahl der Systemparameter β , k und k' Tunneln zwischen einer Stabilitätsinsel und dem chaotischen Bereich zu erreichen. Abbildung 5.10 zeigt die Husimi-Funktionen der jeweils paarweise auftretenden Tunnel-Eigenzustände für

verschiedene Parameterwerte in der Nähe von $\beta = 1$, $k = 3.5$ und $k' = 0$ bzw. $k' = 1$; im gezeigten Beispiel von $j = 50$ genügte es, den Parameter k auf drei Nachkommastellen genau zu justieren.

Um für den Fall des gekickten Kreisels ohne Symmetrieentartung Tunneln zwischen den Stabilitätsinseln zu beobachten, ist ein extrem genaues Justieren der Systemparameter notwendig. (Für $j = 50$ waren es 13 Nachkommastellen des Parameters k .) Um auch diesen Fall mit realistischem numerischem Aufwand studieren zu können, wurde nach einem mehrstufigen Verfahren vorgegangen:

1. Näherungsweise Bestimmung der Eigenphasen beider in den Stabilitätsinseln lokalisierten Grundzustände über einen gewissen Parameterbereich ($3.3 \leq k \leq 3.7$) mit einer gewissen Schrittweite ($\Delta k = 0.01$) mit Hilfe des in Abschnitt 5.4 beschriebenen semiklassischen Verfahrens.
2. Für solche Parameterwerte, bei denen sich beide Eigenphasen nahe kommen, wird mit dem *regula-falsi*-Verfahren der genaue Parameterwert für eine Entartung der beiden semiklassischen Eigenphasen bestimmt.
3. Der in Schritt (2) ermittelte Parameterwert dient nun als Startwert für eine Intervallschachtelung zur Bestimmung der exakten Parameter. Da keine exakte Entartung der Eigenphasen vorliegt, wird an dieser Stelle nicht nach einer Nullstelle in der Differenz der Eigenphasen gesucht, sondern nach demjenigen Parameterwert, bei dem sich zwei Eigenfunktionen als möglichst gleichmäßige Überlagerungen von zwei in den Stabilitätsinseln lokalisierten Wellenpaketen präsentieren. Als „in den Stabilitätsinseln lokalisierte Wellenpakete“ finden in diesem Zusammenhang wiederum die in Abschnitt 5.4 eingeführten semiklassischen Eigenfunktionen Verwendung.

Durch das Voranstellen von Schritt (1) und (2) kann Schritt (3), in dem für jede Iteration eine Matrix diagonalisiert werden muß, enorm abgekürzt werden.

Ein alternatives, auf der Störungstheorie basierendes Verfahren wurde von Petr A. Braun entwickelt [41].

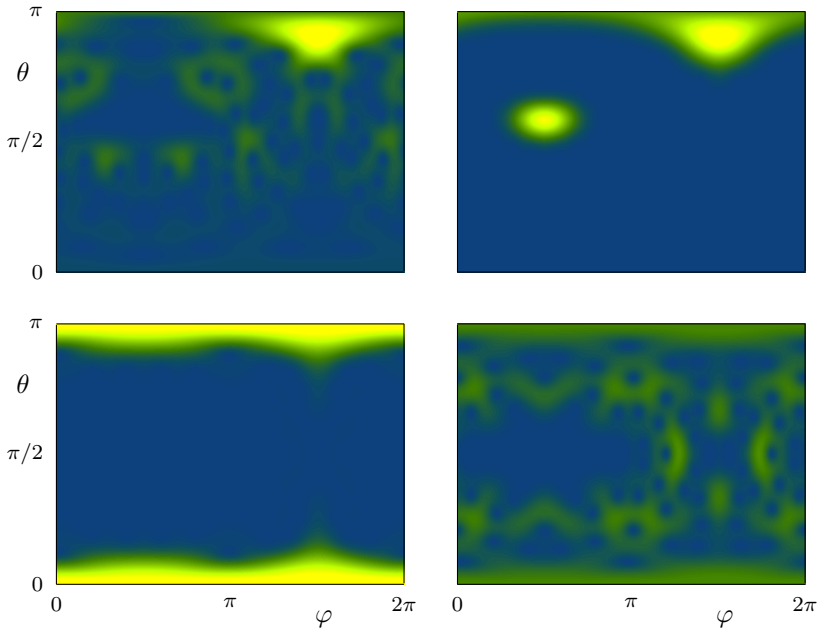


Abbildung 5.10: Dynamisches Tunneln beim gekickten Kreisel. Wenn dynamisches Tunneln eintritt, treten Paare von Eigenzuständen auf, die in allen durch den Tunnelvorgang verbundenen Bereichen lokalisiert sind. Dies können eine Stabilitätsinsel und der chaotische Bereich (oben links) oder auch zwei Stabilitätsinseln sein (oben rechts). Im symmetrischen Fall (untere Reihe) findet dynamisches Tunneln zwischen beiden Stabilitätsinseln immer statt (unten links), und man findet auch Zustände, bei denen Tunneln zwischen beiden Inseln und dem chaotischen Bereich stattfindet (unten rechts).

5.6 Chaosunterstütztes Tunneln

Am Modellsystem des Ringbillards wurde bereits auf die Anschauung hingewiesen, daß ein Partikel von einem Zustand mit großem positivem Drehimpuls nicht direkt in einen Zustand mit großem negativem Drehimpuls übergehen wird, sondern daß der Übergang von einem chaotischen Zwischenzustand vermittelt wird. Tatsächlich haben Doron und Frischat in diesem Modell beobachtet, daß der Tunnelübergang um etliche Größenordnungen schneller erfolgt, wenn gleichzeitig Tunneln zwischen den Stabilitätsinseln und dem chaotischen Bereich stattfindet [36], und somit reproduziert, was von Tomsovic und Mitarbeitern als *chaosunterstütztes Tunneln* bezeichnet wurde [38]. Als anschauliche Erklärung für den beschleunigten Tunnelvorgang wird in diesen Arbeiten angeführt, daß der Transport innerhalb des chaotischen Bereichs auf klassisch erlaubten Wegen erfolgt, so daß insgesamt deutlich kürzere Strecken im Phasenraum durch Tunneln überwunden werden müssen.

In jedes Tunnelereignis zwischen zwei Stabilitätsinseln im System des gekickten Kreisels sind zunächst zwei Eigenzustände involviert. Für eine qualitative Untersuchung des chaosunterstützten Tunnelns benötigen wir ein Maß für die Beteiligung weiterer – chaotischer – Zustände; das chaosunterstützte Tunneln sollte sich dann in einem monotonen Zusammenhang zwischen diesem „Beteiligungsmaß“ Ω und der Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ äußern: Je stärker chaotische Eigenzustände am Tunnelvorgang beteiligt sind und ihn unterstützen, desto schneller finden die Tunneloszillationen statt und desto größer ist demnach die Aufspaltung $\Delta\varphi$ zwischen den Eigenphasen der regulären Tunnel-Eigenzustände.

Als ein sinnvolles Maß kommt hier der – normalerweise kleine – Überlapp des chaotischen Eigenzustands mit den Stabilitätsinseln in Betracht. Eine sinnvolle Definition wäre das Integral der Husimi-Funktion des Zustands über die Stabilitätsinseln [20]. Eine andere sinnvolle Definition ist der Überlapp mit in den Stabilitätsinseln lokalisierten Wellenpaketen ψ_1, ψ_2 . Derartige Wellenpakete können wir mit Hilfe der in Abschnitt 5.4 entwickelten semiklassischen regulären Zustände erzeugen; eine andere Möglichkeit besteht darin, Eigenzustände eines gekickten Kreisels mit geringfügig abweichenden Systemparametern β, k, k' zu verwenden. (Die abgeänderten Parameter sind notwendig, da verschiedene Eigenzustände desselben Floquetoperators untereinander stets orthogonal sind.) Beide Methoden liefern im wesentlichen die gleichen Ergebnisse. Im folgenden werden mit ψ_1 und ψ_2 in den Stabilitätsinseln lokalisierte Wellenpakete bezeichnet, die aus Eigenfunktionen eines „dejustierten“ gekickten

Kreisels zusammengesetzt wurden; als Maß Ω für die Beteiligung eines chaotischen Eigenzustands ψ_* am Tunnelvorgang wird die Euklidische Summe der Übergangswahrscheinlichkeiten von ψ_* zu beiden Wellenpaketen definiert,

$$\Omega^2 \equiv |\langle \psi_1 | \psi_* \rangle|^2 + |\langle \psi_2 | \psi_* \rangle|^2. \quad (5.10)$$

In Abb. 5.11 ist das auf diese Weise definierte Ω gegen die Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ aufgetragen. Jeder Punkt entspricht einem Tunnelereignis mit zwei in beiden Inseln lokalisierten Eigenzuständen ψ_{\pm} , und für jeden Punkt wurde die Beteiligung des quasienergetisch nächstgelegenen Eigenzustands ψ_* zur Berechnung von Ω verwendet.

Im Fall (a) mit Symmetrieentartung ($\beta \approx 1$, $k \approx 3.5$, $k' = 0$) zeigt die wolkenartige Struktur zwar, daß kein einfacher Zusammenhang zwischen dem Überlapp Ω und der Aufspaltung $\Delta\varphi$ besteht, aber man kann grob erkennen, daß eine stärkere Beteiligung Ω des chaotischen Zustands am Tunnelgeschehen mit einer größeren Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ einhergeht. Somit ist das Phänomen des chaosunterstützten Tunnelns beim gekickten Kreisel nicht so klar ausgeprägt wie in anderen Systemen [36], aber die Ergebnisse lassen sich zumindest mit früheren Arbeiten in Einklang bringen.

Für den Fall (b) ohne Symmetrieentartung ($\beta \approx 1$, $k \approx 3.5$, $k' \approx 1$) erkennen wir eine zweite Wolke links neben der bereits vom Fall (a) her bekannten; die Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ ist in der rechten Wolke um drei bis fünf Größenordnungen breiter als in der linken. Diese nur in Abwesenheit der Symmetrieentartung auftretende Aufspaltung der Tunnelereignisse in zwei Klassen soll nun mit Hilfe der Husimi-Funktionen der am Tunneln beteiligten Eigenzustände näher untersucht werden.

In Abb. 5.12 wurde für vier typische Punkte aus Abb. 5.11 (b) jeweils die – optisch gleiche – Husimi-Funktion der beiden Tunnel-Eigenzustände ψ_+ und ψ_- dargestellt sowie diejenige des quasienergetisch nächstgelegenen Eigenzustands ψ_* . Die Anordnung entspricht der Anordnung der Punkte in Abb. 5.11, d. h., die Zustände (a) gehören zu einem Punkt oben in der linken Wolke, usw. In den Situationen (a) und (b) (großer Überlapp des dritten Zustands ψ_* mit den Stabilitätsinseln) erkennen wir, daß ψ_* in der linken Wolke (a) nur mit einer, in der rechten Wolke (b) hingegen mit beiden Stabilitätsinseln überlappt. Dies erklärt das Ausbleiben des ansonsten bei starker Beteiligung eines dritten Zustands zu erwartenden chaosunterstützten Tunnelns: In den der linken Wolke zuzurechnenden Tunnel-Situationen kann ein in der rechten Insel gestartetes Wellenpaket zwar aus der Stabilitätsinsel in den chaotischen

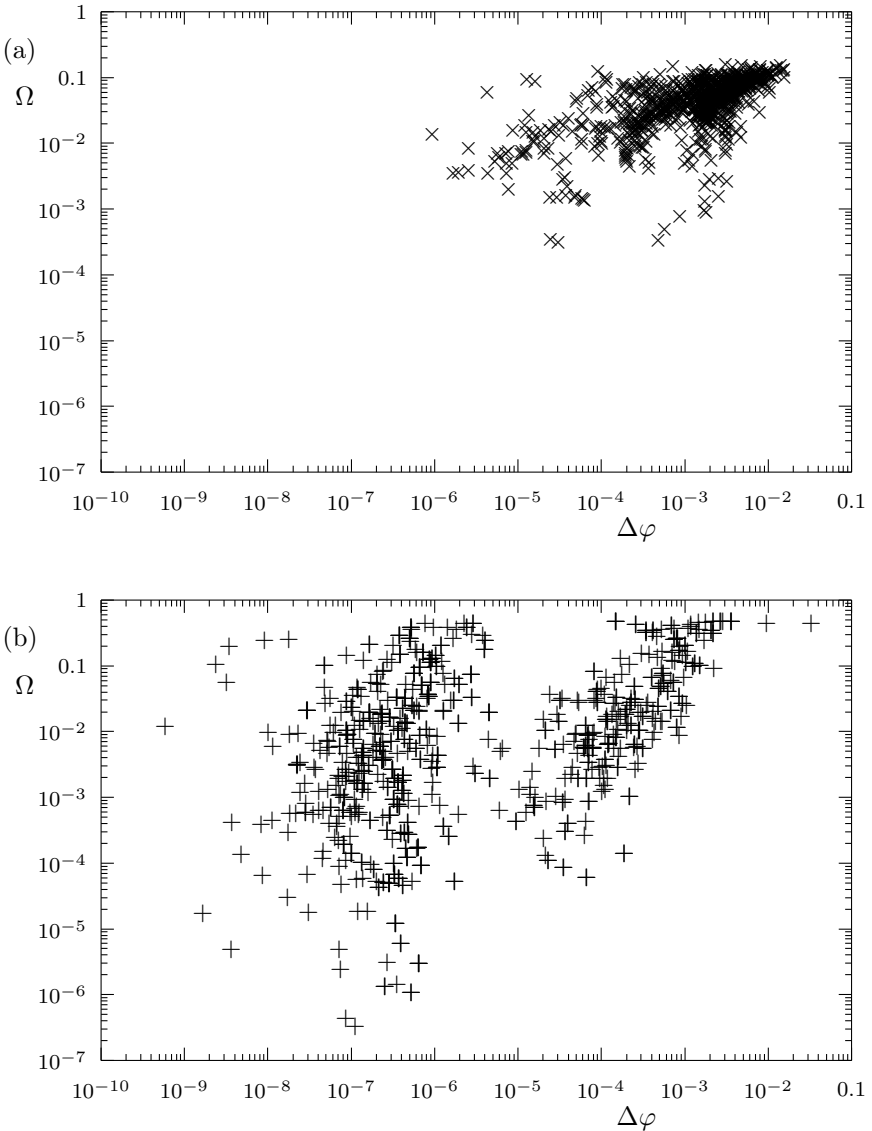


Abbildung 5.11: Vergleich der Beteiligung Ω des chaotischen Zustands ψ_* am Tunnelprozess mit der Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ (a) mit und (b) ohne Symmetriertartung. Jeder Punkt entspricht einem Tunnelereignis mit Systemparametern in der Nähe von $\beta = 1$, $k = 3.5$ und (a) $k' = 0$ bzw. (b) $k' = 1$. Im symmetrischen Fall (a) erkennt man – sehr grob – einen monoton ansteigenden Zusammenhang zwischen der Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ und dem Überlapp Ω .

Bereich tunneln, wo es auf klassisch erlaubten Bahnen bis in unmittelbare Nähe der zweiten Insel gelangen kann, es gibt jedoch keine Verbindung zwischen dem chaotischen Bereich und der linken Stabilitätsinsel, so daß ein Tunneln zwischen beiden Stabilitätsinseln nur auf direktem Wege möglich ist.

In Situation (c) und (d) (kleiner Überlapp zwischen ψ_* und den Stabilitätsinseln) ist zunächst unklar, weshalb sich die Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ (linke bzw. rechte Wolke in Abb. 5.11 (b)) in beiden Situationen um drei Zehnerpotenzen unterscheiden soll. Bei genauem Hinsehen kann man jedoch erkennen, daß der – winzige – Überlapp des Eigenzustands ψ_* mit den Stabilitätsinseln im Fall (c) asymmetrisch und im Fall (d) symmetrisch auf beide Inseln verteilt ist, so daß – wie in Situation (a) und (b) – in Fall (d) chaosunterstütztes Tunneln möglich ist, im Fall (c), in dem praktisch nur eine Insel mit dem chaotischen Bereich verbunden ist, jedoch nicht. Daß sich dieser winzige Überlapp ($\Omega \approx 10^{-4}$) derart drastisch (drei Zehnerpotenzen) auf die Tunnelaufspaltung auswirkt, belegt eindrucksvoll die Relevanz des chaosunterstützten Tunnelns für das dynamische Tunneln.

Der genaue Zusammenhang zwischen Überlapp und Tunnelaufspaltung soll nun im folgenden quantitativ und allgemein untersucht werden.

Wir betrachten einen allgemeinen Floquet-Operator F in dem von den drei Eigenzuständen ψ_+ , ψ_- und ψ_* aufgespannten Unterraum und vernachlässigen die Beteiligung weiterer Zustände am Tunnelvorgang, d. h. wir setzen voraus, daß der Überlapp aller anderen Zustände mit den Stabilitätsinseln verschwindet.

Die Vorgehensweise besteht darin, den Floquet-Operator in diesem dreidimensionalen Unterraum durch eine andere orthonormale Basis ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 zu beschreiben, die aus zwei regulären und einem chaotischen Zustand besteht. Zwar sind ψ_1 , ψ_2 und ψ_3 keine Eigenzustände von F ; der Unterschied zu den Eigenzuständen ψ_+ , ψ_- und ψ_* ist jedoch gering genug, daß wir durch eine Störungsrechnung zweiter Ordnung – ähnlich der Pfadintegralmethode – auf den Zusammenhang zwischen dem Überlapp und der Tunnelaufspaltung schließen können.

Wir notieren die zu den Eigenzuständen ψ_+ , ψ_- , ψ_* gehörenden Eigenphasen φ_+ , φ_- , φ_* in der Form

$$\begin{aligned} F\psi_{\pm} &= e^{i\varphi_{\pm}}\psi_{\pm} & \text{mit} & \quad \varphi_{\pm} = \varphi \pm \frac{1}{2}\Delta\varphi & \quad \text{und} \\ F\psi_* &= e^{i\varphi_*}\psi_*, & \text{mit} & \quad \varphi_* = \varphi + \Delta\varphi_*. \end{aligned} \tag{5.11}$$

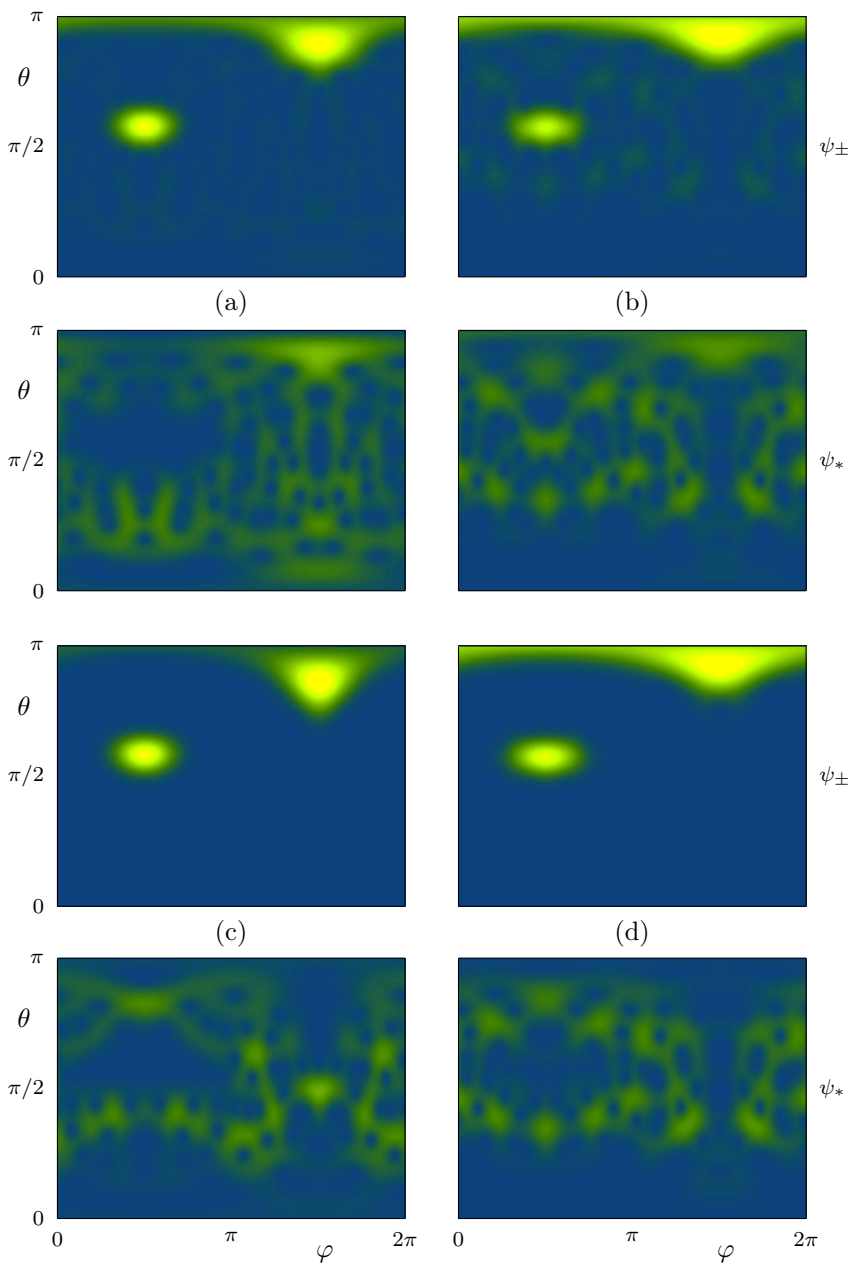


Abbildung 5.12: Chaosunterstütztes Tunneln beim gekickten Kreisel ohne Symmetrieentartung. (Im Text näher erläutert.)

Ohne Einschränkung setzen wir $\Delta\varphi$ und $\Delta\varphi_*$ als positiv voraus. Bei $\Delta\varphi$ handelt es sich um eine Tunnelaufspaltung, während $\Delta\varphi_*$ die Differenz zur nächstgelegenen Eigenphase darstellt und somit von der Größenordnung des mittleren Abstands $2\pi/(2j+1)$ ist. Somit gilt

$$0 < \Delta\varphi \ll \Delta\varphi_* \approx \frac{2\pi}{2j+1} \ll 1. \quad (5.12)$$

Um nun die Eigenzustände durch reguläre und chaotische Zustände ausdrücken zu können, führen wir komplexe Parameter ε_1 und ε_2 ein, so daß

$$\begin{aligned} \psi_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 \pm \psi_2 - (\varepsilon_1 \pm \varepsilon_2)\psi_3) \quad \text{und} \\ \psi_* &= \varepsilon_1\psi_1 + \varepsilon_2\psi_2 + \psi_3. \end{aligned} \quad (5.13)$$

In diesem Ansatz sind die Eigenzustände ψ_{\pm} , ψ_* orthogonal bis auf Korrekturen proportional zu Produkten zweiter Ordnung von ε_1 und ε_2 (im folgenden: zweiter Ordnung in ε). Die Parameter $\varepsilon_{1,2}$ haben die physikalische Bedeutung des Überlapps des annähernd chaotischen Eigenzustands ψ_* mit den Stabilitätsinseln. Von den numerischen Untersuchungen der Husimi-Funktionen der Eigenzustände wissen wir, daß dieser Überlapp klein ist,

$$|\varepsilon_{1,2}| = |\langle \psi_{1,2} | \psi_* \rangle| \ll 1. \quad (5.14)$$

Um nun den Floquet-Operator F in der Basis $\psi_{1,2,3}$ auszudrücken, berechnen wir die Umkehrung von (5.13), wiederum bis auf Korrekturen zweiter Ordnung in ε ,

$$\begin{aligned} \psi_{1,2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ \pm \psi_-) + \frac{1}{2}\varepsilon_{1,2}\psi_*, \\ \psi_3 &= \psi_* - \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon_1(\psi_+ + \psi_-) + \varepsilon_2(\psi_+ - \psi_-)). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Hiermit ist es nun möglich, das Bild der Zustände $\psi_{1,2,3}$ unter dem Floquet-Operator näherungsweise wieder durch $\psi_{1,2,3}$ auszudrücken, und wir haben das Werkzeug beisammen, um Matrixelemente des Floquet-Operators in der orthonormalen Basis ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 berechnen zu können.

Zur Berechnung der Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ betrachten wir nun Matrixelemente von Potenzen des Floquet-Operators zwischen zwei Zuständen aus der Basis ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 . Wegen des Zusammenhangs $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ + \psi_-) + \mathcal{O}(\varepsilon)$ und wegen $F\psi_{\pm} = \exp(i(\varphi \pm \frac{1}{2}\Delta\varphi))$ gilt

$$|(F^n)_{1,2}| \equiv |\langle \psi_2 | F^n | \psi_1 \rangle| = |\sin(\frac{n}{2}\Delta\varphi)| + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (5.16)$$

Da der Floquet-Operator F ein Zeitentwicklungsoperator ist, spielt die natürliche Zahl n hier die Rolle einer Zeit.

Wir wählen nun ein möglichst großes n , das noch die Bedingung $\frac{n}{2}\Delta\varphi \ll 1$ erfüllt, d. h., wir betrachten das System für eine möglichst lange Zeit n , die noch klein gegen die Tunneloszillationsperiode $T = 2\pi/\Delta\varphi$ ist. (Dies ist deswegen möglich, weil $\Delta\varphi$ extrem klein ist; siehe (5.14).) In diesem Fall können wir den Sinus durch sein Argument ersetzen, und wir erhalten

$$\Delta\varphi \approx \frac{2}{n} |\langle \psi_2 | F^n | \psi_1 \rangle|. \quad (5.17)$$

Durch Einschleichen von Eins-Operatoren, aufgelöst in der Basis ψ_1, ψ_2, ψ_3 , können wir $\Delta\varphi$ durch Matrixelemente des nicht-iterierten Floquet-Operators F ausdrücken. (Diese Vorgehensweise entspricht der Pfadintegral-Methode, angewandt auf den diskreten Satz der drei Zustände $\psi_{1,2,3}$.) Mit $\lambda_0 = 1$ und $\lambda_n = 2$ können wir (5.17) umformen zu

$$\Delta\varphi \approx \frac{2}{n} \left| \sum_{\lambda_1=1}^3 \sum_{\lambda_2=1}^3 \cdots \sum_{\lambda_{n-1}=1}^3 \prod_{i=0}^{n-1} \langle \psi_{\lambda_{i-1}} | F | \psi_{\lambda_i} \rangle \right|. \quad (5.18)$$

Diese Summe wird nun durch eine „Niemals-zurück-Approximation“ („never-look-back approximation“ [36]) näherungsweise ausgewertet.

Alle in der Summe (5.18) auftretenden Nichtdiagonalelemente des Floquet-Operators sind von der Größenordnung ε ; alle Diagonalelemente sind näherungsweise gleich Eins. Die Approximation besteht darin, solche Pfade $\psi_1 = \psi_{\lambda_0}, \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_{n-1}}, \psi_{\lambda_n} = \psi_2$ zu vernachlässigen, die an mehreren, getrennten Stellen denselben Zustand ψ_{λ_i} annehmen, was einem Teilchen entspricht, das zwischen zwei Zuständen $\psi_i \neq \psi_j$ hin- und herspringt. Beispiele für zulässige Pfade wären demnach

$$\psi_1, \psi_1, \dots, \psi_1, \psi_2, \psi_2, \dots, \psi_2 \quad \text{oder} \quad (5.19)$$

$$\psi_1, \psi_1, \dots, \psi_1, \psi_3, \psi_3, \dots, \psi_3, \psi_2, \psi_2, \dots, \psi_2; \quad (5.20)$$

unzulässig hingegen wäre ein Pfad des Typs

$$\psi_1, \dots, \psi_1, \psi_3, \dots, \psi_3, \psi_1, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_2. \quad (5.21)$$

Der Pfad (5.21) liefert einen Beitrag zur Summe (5.18), der um zwei Ordnungen in ε kleiner ist als der des Pfads (5.19). Allgemein lassen sich alle unzulässigen Pfade entweder gegenüber (5.19) oder gegenüber (5.20) als um zwei Ordnungen in ε kleiner einordnen und vernachlässigen. Die *Niemals-zurück-Approximation* ist somit eine Näherung von erster Ordnung in ε , und alle zulässigen Pfade sind entweder vom Typ (5.19) (im folgenden: Typ I) oder (5.20) (Typ II).

Da die Diagonalelemente des Floquetoperators bis auf Korrekturen zweiter Ordnung in ε gleich Eins sind,

$$\langle \psi_i | F | \psi_i \rangle = 1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (5.22)$$

liefert jeder Pfad vom Typ I einen Beitrag proportional zu

$$\Delta\varphi^{\text{I}} \sim |\langle \psi_2 | F | \psi_1 \rangle| \quad (5.23)$$

zur Summe (5.18), und jeder Pfad vom Typ II liefert einen Beitrag proportional zu

$$\Delta\varphi^{\text{II}} \sim |\langle \psi_2 | F | \psi_3 \rangle| |\langle \psi_3 | F | \psi_1 \rangle|. \quad (5.24)$$

Wir können daher annehmen, daß die gesamte Summe (5.18), also die Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$, proportional zu einer Linearkombination der Beiträge $\Delta\varphi^{\text{I}}$ und $\Delta\varphi^{\text{II}}$ ist.

Unter Verwendung der Darstellung (5.15) der Basiszustände $\psi_{1,2,3}$ durch Eigenzustände ψ_{\pm} , ψ_* des Floquet-Operators können wir nun die Matrixelemente $\langle \psi_i | F | \psi_j \rangle$ und somit die Beiträge $\Delta\varphi^{\text{I}}$ und $\Delta\varphi^{\text{II}}$ berechnen.

Für $\Delta\varphi^{\text{I}}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} |\langle \psi_2 | F | \psi_1 \rangle| &= \left| \frac{1}{2} \left(e^{i(\varphi + \frac{1}{2}\Delta\varphi)} - e^{i(\varphi - \frac{1}{2}\Delta\varphi)} \right) \right| + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &\approx \frac{1}{2} \left((1 + \frac{1}{2}\Delta\varphi) - (1 - \frac{1}{2}\Delta\varphi) \right) \\ &\sim \Delta\varphi \equiv \Delta\varphi^{\text{I}}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Das Matrixelement des Floquet-Operators F zwischen den Zuständen ψ_1 und ψ_2 repräsentiert also bis auf Korrekturen zweiter Ordnung in ε die Tunnelaufspaltung. Da $\Delta\varphi$ extrem klein ist (5.14), wären diese Korrekturen durchaus von Interesse; da wir aber andererseits $\Delta\varphi^{\text{I}}$ nicht ohne Kenntnis der Tunnelaufspaltung selbst berechnen können, ist eine genauere Approximation an dieser Stelle hinfällig. Gleichung (5.25) enthält somit keine quantitativ relevante Information.

Durch analoge Rechnungen erhalten wir die für $\Delta\varphi^{\text{II}}$ benötigten Matrixelemente,

$$\begin{aligned} |\langle \psi_2 | F | \psi_3 \rangle| &= \left| -e^{\frac{1}{2}i\Delta\varphi}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + e^{-\frac{1}{2}i\Delta\varphi}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + \varepsilon_2 e^{i\Delta\varphi_*} \right| \\ &\approx \left| -\varepsilon_2 + i\varepsilon_2\Delta\varphi_* - i\varepsilon_1\Delta\varphi \right| \\ &\approx \frac{1}{2}|\varepsilon_2| \end{aligned} \quad (5.26)$$

und ebenso

$$|\langle \psi_3 | F | \psi_1 \rangle| \approx \frac{1}{2} |\varepsilon_1|, \quad (5.27)$$

so daß wir den Anteil $\Delta\varphi^{\text{II}}$ zur Tunnelaufspaltung vollständig durch die Überlapps ε_1 und ε_2 ausdrücken können,

$$|\langle \psi_2 | F | \psi_3 \rangle| |\langle \psi_3 | F | \psi_1 \rangle| \approx \frac{1}{4} |\varepsilon_1| |\varepsilon_2| \sim |\varepsilon_1| |\varepsilon_2| \equiv \Delta\varphi^{\text{II}}. \quad (5.28)$$

Der nur durch das Matrixelement $\langle \psi_2 | F | \psi_1 \rangle$ zwischen den beiden in den Inseln lokalisierten Zuständen gegebene Anteil $\Delta\varphi^{\text{I}}$ zur Tunnelaufspaltung wird als *direktes Tunneln* bezeichnet, der durch mehrere Matrixelemente vermittelte Anteil $\Delta\varphi^{\text{II}}$ als *chaosunterstütztes Tunneln*.

Man beachte, daß das Produkt der Überlapps des chaotischen Eigenzustands ψ_* mit den Stabilitätsinseln für den chaosunterstützenden Beitrag $\Delta\varphi^{\text{II}}$ entscheidend ist; es genügt, wenn einer der beiden Überlapps Null ist, um chaosunterstütztes Tunneln zu unterbinden. Dieser Effekt wurde in bisherigen Arbeiten noch nicht beobachtet, weil dort die Tunnelentartung stets mit einer Symmetrie verbunden war, die $|\varepsilon_1| = |\varepsilon_2|$ bewirkte. Das Fehlen einer Symmetrirentartung bringt also den neuen Effekt ans Tageslicht, daß chaosunterstütztes Tunneln ausbleiben kann, obwohl ein chaotischer Zustand am Tunnelprozeß teilnimmt.

In Abb. 5.13 ist der chaosunterstützte Anteil $\Delta\varphi^{\text{II}}$ gegen die totale Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ aufgetragen. Da der chaosunterstützte Anteil den Tunnelprozeß dominiert, ordnen sich die Punkte grob entlang einer Geraden mit Steigung Eins an, was einer ungefähren Proportionalität zwischen $\Delta\varphi^{\text{II}}$ und der totalen Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ Rechnung trägt. In der linken Hälfte des Diagramms nähert sich die Anordnung der Punkte allmählich einer Horizontalen: In diesem Bereich dominiert bereits das durch $\Delta\varphi^{\text{I}}$ beschriebene direkte Tunneln, so daß die tatsächliche Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ weitgehend unabhängig von $\Delta\varphi^{\text{II}}$ wird. Die relativ große Streuung der Punkte macht jedoch weitere Überlegungen zu einer Verbesserung der Rechnung notwendig.

Obwohl die Rechnung nur für drei am Tunnelprozeß beteiligte Zustände durchgeführt wurde, ist es möglich, auch mehr Zustände zu berücksichtigen, indem man die Beiträge der unterstützenden Zustände zur Tunnelaufspaltung aufsummiert. Hierbei wird eine eventuelle Interaktion zwischen den verschiedenen unterstützenden Zuständen vernachlässigt. (Eine auf der Zufallsmatrixtheorie basierende Theorie, die die Anteile vieler unterstützender Zustände quantitativ richtig berücksichtigt, findet

sich in [36].) Abbildung 5.14 zeigt das Ergebnis für vier unterstützende Zustände; die Berücksichtigung weiterer chaosunterstützter Anteile bringt für das betrachtete System keine weitere Verbesserung.

Obwohl die Punkte auch unter Berücksichtigung mehrerer unterstützender chaotischer Zustände immer noch stark streuen, ist klar erkennbar, daß Gleichung (5.28) das chaosunterstützte dynamische Tunneln in Systemen ohne Symmetrieentartung richtig beschreibt.

Damit wurde das Phänomen des dynamischen Tunnelns im System des gekickten Kreisels nachgewiesen, wobei erstmals auf eine Symmetrieentartung verzichtet wurde. Als neuer Effekt, der in Abwesenheit von Symmetrieentartungen auftritt, wurde gezeigt, daß ein chaotischer Zustand am Tunnelprozeß beteiligt sein kann, ohne daß *chaosunterstütztes Tunneln* eintritt. Zur Auffindung der Parameterwerte, bei denen dynamisches Tunneln eintritt, wurde ein semiklassisches Verfahren zur Konstruktion regulärer Eigenfunktionen entwickelt.

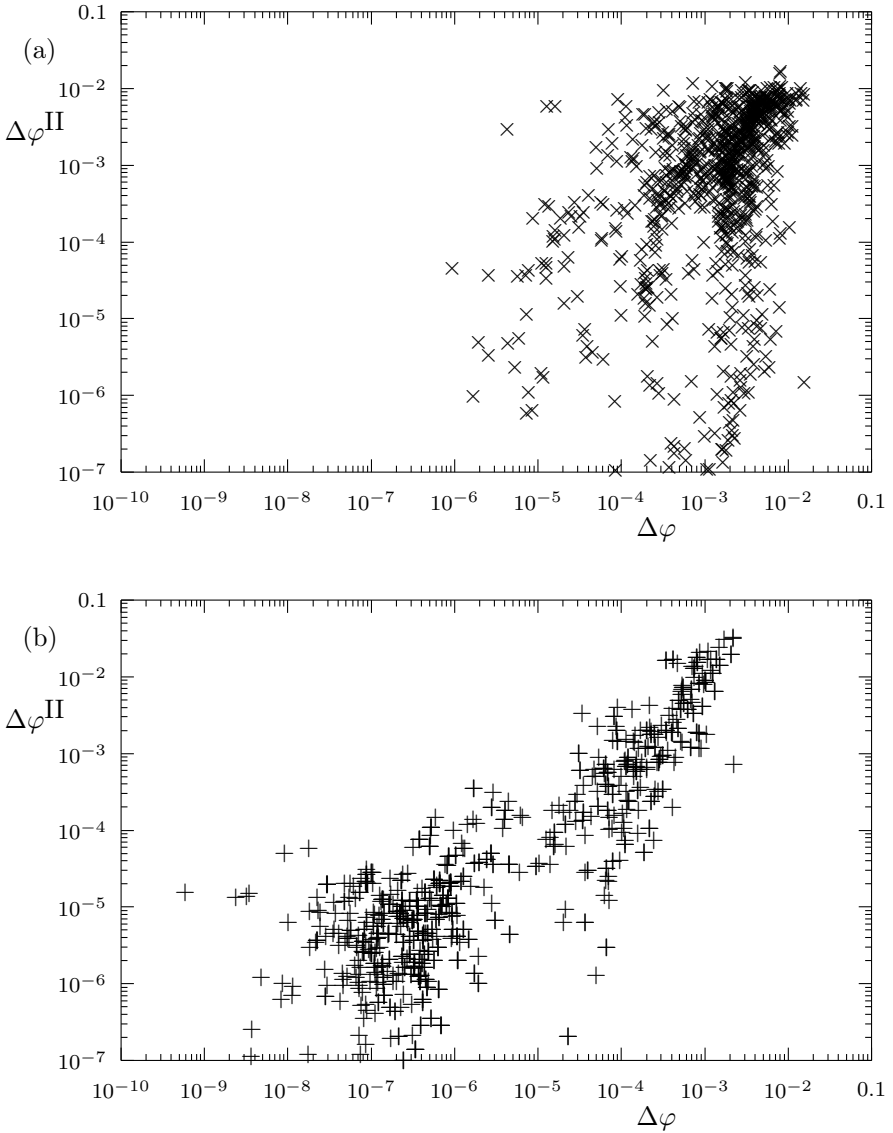


Abbildung 5.13: Beitrag $\Delta\varphi^{\text{II}}$ eines unterstützenden chaotischen Zustands gegen die totale Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$. Im symmetrischen Fall (a) läßt sich ein monotoner Zusammenhang eher errahnen als sehen; hier ist der Beitrag eines einzelnen unterstützenden Zustands offenbar nicht ausschlaggebend für die Gesamt-Tunnelaufspaltung. Im Fall ohne Symmetrieentartung (b) ist der Zusammenhang besser erkennbar.

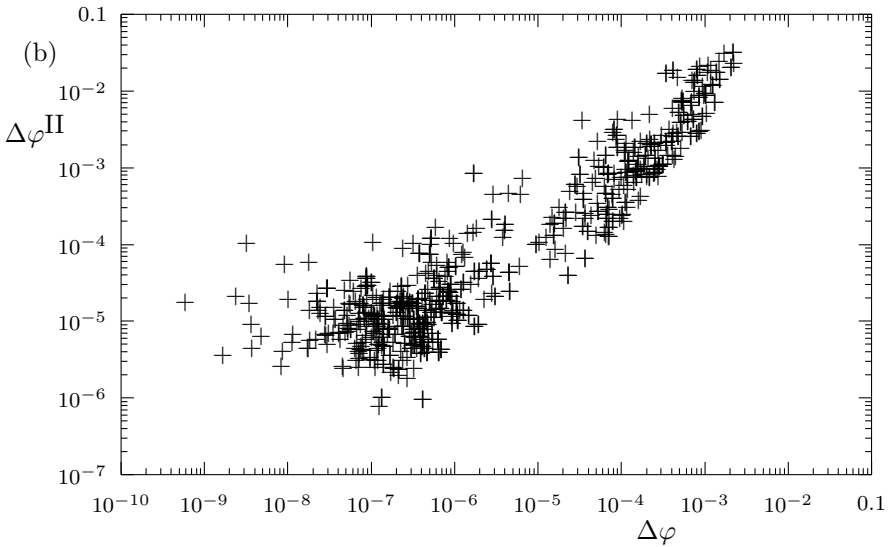
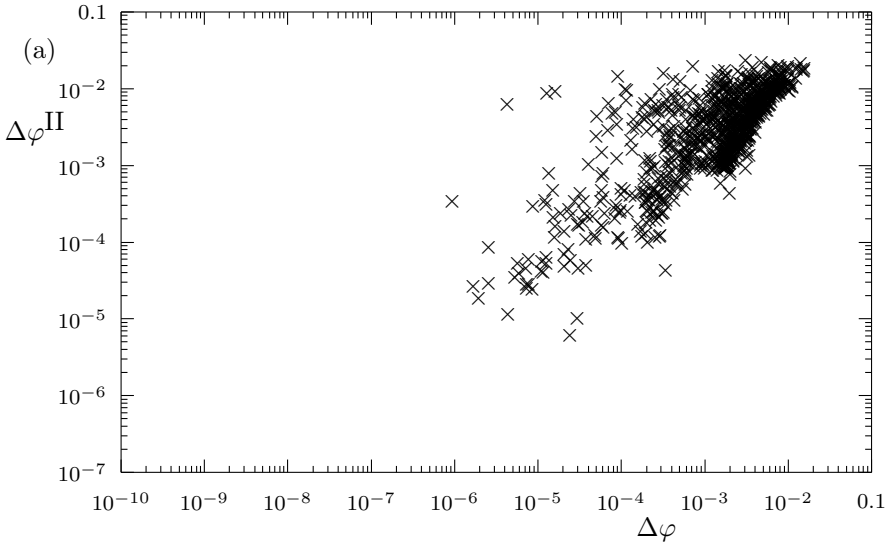


Abbildung 5.14: Gemeinsamer Beitrag $\Delta\varphi^{\text{II}}$ von vier unterstützenden chaotischen Zuständen gegen die totale Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$. Unter Miteinbeziehung mehrerer chaosunterstützter Beiträge wird der monotone Zusammenhang und damit die Relevanz des chaosunterstützten Tunnelns deutlicher erkennbar, als es für nur einen unterstützenden Zustand (Abb. 5.13) der Fall war.

Kapitel 6

Zusammenfassung und offene Fragen

In Kapitel 3 wurde das System des *gekickten Kreisels* in der Basis von Eigenzuständen $|j, m\rangle$ der Drehimpulsoperatoren J^2 und J_z behandelt. Das klassische Analogon eines derartigen Zustands ist ein Kreis auf der Kugeloberfläche des Phasenraums, der allen Drehimpulsvektoren \vec{J} mit gegebenem Betrag $|\vec{J}|^2 = j(j+1)$ und gegebener z -Komponente $J_z = m$ entspricht. Die Matrix des Floquet-Operators des gekickten Kreisels wurde in der $|j, m\rangle$ -Basis sowohl exakt als auch semiklassisch berechnet. Ausgehend vom WKB-Ansatz wurde hierbei die semiklassische Näherung schrittweise verfeinert.

In Kapitel 4 wurde die *Quasimatrix* des Floquet-Operators des gekickten Kreisels in einer nicht-orthogonalen Basis aus *kohärenten Zuständen* aufgestellt und mit Hilfe einer Sattelpunktnäherung approximiert. In dem approximativen Ausdruck für das Quasimatrixelement $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ konnte eine erzeugende Funktion der klassischen Abbildung identifiziert werden, die die Bezeichnung „semiklassische Approximation“ rechtfertigt.

Da es sich bei kohärenten Zuständen um den speziellen Eigenzustand $|j, j\rangle$ von J^2 und J_z handelt, der aus der z -Richtung in eine andere Richtung gedreht wurde, ist es auch hier möglich, den Kreis aller möglichen Drehimpulsvektoren mit gegebener Richtung, Länge und Komponente entlang der gegebenen Richtung als klassisches Analogon des kohärenten Zustands aufzufassen und – wie in Kapitel 3 – das Randwertproblem zu lösen, das sich aus der Dynamik des gekickten Kreisels ergibt. In Kapitel 4 hingegen wurde jeder kohärente Zustand wie ein Punkt

im Phasenraum behandelt; das klassische Analogon wurde dadurch zu einem überbestimmten System, so daß es notwendig wurde, auch komplexe Lösungen (*Geisterbahnen*) der klassischen Bewegungsgleichungen zu betrachten.

Es wäre somit eine natürliche Zusammenführung der Methoden aus Kapitel 3 und 4, kohärente Zustände klassisch als Kreise – und nicht Punkte – im Phasenraum zu beschreiben. Ein Quasimatrixelement $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ des Floquet-Operators würde in diesem Fall genau dann einem Paar klassischer Bahnen entsprechen, wenn sich der propagierte Kreis des kohärenten Zustands $|\gamma\rangle$ mit dem Kreis des kohärenten Zustands $|\Gamma\rangle$ schneidet; ansonsten entspräche es einem Paar von Geisterbahnen. (In Kapitel 4 traten ausschließlich Geisterbahnen auf, weil dort Punkte anstelle von Kreisen auftraten, die sich nicht schneiden, sondern nur in Ausnahmesituationen zusammenfallen.) Ein technisches Problem, dem man sich bei einer solchen Zusammenführung beider Methoden stellen müßte, wäre die klassische Rotation eines Kreises auf der Kugeloberfläche um eine schräge Achse. Die Torsion um die z -Achse würde einen solchen, nicht um die z -Achse rotationssymmetrischen Kreis natürlich verzerren, so daß der Schnitt mit einem anderen Kreis nur noch mit größerem Aufwand berechenbar wäre.

In Kapitel 5 wurde die Untersuchung des chaosunterstützten Tunnelns unter Zuhilfenahme semiklassischer Methoden auf Systeme ohne Symmetrieentartung erweitert. Es wurde eine Erklärung für das Auftreten von Tunnelereignissen gegeben, bei denen ein im chaotischen Bereich lokalisierter Eigenzustand in das Tunneln involviert ist, ohne daß chaosunterstütztes Tunneln eintritt.

Die Erklärung besteht darin, daß bei manchen Tunnelereignissen der unterstützende, chaotische Zustand nur mit einer Stabilitätsinsel verbunden ist anstatt mit beiden. Dies wirft jedoch wiederum die Frage auf, wann und wieso derartige asymmetrische Zustände auftreten. Eine mögliche Ursache ist die unterschiedliche Größe der Stabilitätsinseln: Ein in einer „kleinen“ Stabilitätsinsel lokalisierter Quantenzustand hat bereits allein wegen der quantenmechanischen Unschärfe einen größeren Anteil innerhalb des chaotischen Bereichs als ein in einer „großen“ Stabilitätsinsel lokalisierter Zustand. Hierfür würde zum Beispiel sprechen, daß bei weitem mehr Ereignisse beobachtet wurden, bei denen nur die kleinere Stabilitätsinsel mit dem chaotischen Bereich verbunden war, als dies für die größere Insel der Fall war – obwohl letzteres auch beobachtet wurde.

Ein weiteres Rätsel, das in Zusammenhang mit chaosunterstütztem Tunneln auftritt, besteht darin, daß keine Situation beobachtet wurde, in welcher der unterstützende, chaotische Zustand asymmetrisch mit beiden Stabilitätsinseln überlappen würde: Entweder verteilte sich der dritte Zustand symmetrisch auf beide Inseln mit einem großen Anteil im chaotischen Bereich, oder er beschränkte sich auf nur eine Insel und den chaotischen Bereich.

Die in Zusammenhang mit chaosunterstütztem Tunneln entwickelten semiklassischen Methoden zur Approximation regulärer Eigenzustände bieten Ansätze zu einer Verallgemeinerung in Hinblick auf eine weitere allgemein anwendbare Semiklassik. Die Approximation angeregter regulärer Zustände durch verallgemeinerte *gequetschte Zustände* ist beispielsweise sicherlich zum Studium von *Randzuständen* [36, 37] geeignet.

Es wurde bereits der Versuch unternommen, die Zeitentwicklung eines *gequetschten Zustands* semiklassisch zu untersuchen und zu einer vollständigen Wellenpaketdynamik auszubauen. Die von anderen Arbeiten her bekannten hervorragenden Ergebnisse [42] konnten allerdings bisher auch nicht annähernd erreicht werden. Dies liegt teilweise daran, daß die für Spinsysteme definierten gequetschten Zustände nicht wirklich einer „Ellipse im Phasenraum“ entsprechen, sondern eine leichte S-Form aufweisen. Als alternative Ansätze zu einer Wellenpaketdynamik für Spinsysteme kommen zum einen die „intelligenten Zustände“ (“intelligent states”) infrage [43], bei denen Operatoren der Gestalt $\exp(\lambda J_z^2)$ (ohne i im Exponenten) eine Rolle spielen, zum anderen die *Nullstellendynamik* [32], die quantenmechanische Zustände durch die Nullstellen ihrer Husimi-Funktion beschreibt und Bewegungsgleichungen für diese Nullstellen aufstellt.

Anhang A

Der gekickte Kreisel als Lagrangesches System

Die „typischen“ Hamiltonschen Systeme, denen man als Student in den Kursvorlesungen und auch später in der Literatur begegnet, haben stets eine Hamilton-Funktion der Gestalt

$$H(x, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t). \quad (\text{A.1})$$

Der Ort x und der Impuls p sind hierbei zueinander kanonisch konjugierte Größen, die über eine Lagrange-Funktion miteinander zusammenhängen,

$$p = \frac{\partial L(x, \dot{x}, t)}{\partial \dot{x}}. \quad (\text{A.2})$$

Die Gesamtheit aller Orts- und Impulskomponenten beschreibt im Rahmen der klassischen Mechanik den Zustand des Systems vollständig; der Raum aller möglichen Zustände ist der Phasenraum. Somit ist völlig klar, daß der Phasenraum eines Systems stets eine geradzahlige (Vektorraum-) Dimension haben muß.

Der gekickte Kreisel, dessen dynamische Variable ein dreikomponentiger Drehimpulsvektor ist, erscheint in diesem Lichte wie eine groteske Ausnahme. Es ist zwar möglich, den zunächst dreidimensionalen Phasenraum durch Abspalten einer Erhaltungsgröße, des Betrages des Drehimpulses, auf die zweidimensionale Oberfläche einer Kugel zu reduzieren; hiermit handelt man sich jedoch einen gekrümmten Phasenraum ein, der der Intuition auch weiterhin widerspricht. Die Identifikation zweier Polwinkel mit dem „Ort“ bzw. „Impuls“ eines effektiven Teilchens ist zwar

möglich, bringt jedoch eine unphysikalische Koordinatensingularität an den Polen der Kugel mit sich. Darüberhinaus führt eine Quantisierung derartiger „kanonisch konjugierter Variabler“ – wie in der Quantenoptik wohlbekannt – nicht auf Hermitesche Operatoren.

In diesem Abschnitt soll dieses etwas unbefriedigende Bild auf die gewohnte Struktur von kanonisch konjugierten Orten und Impulsen zurückgeführt werden, die über Gleichung (A.2) zusammenhängen. Der gekickte Kreisel wird sich hierbei als Beispiel für ein System herausstellen, welches sich durch den Formalismus von Hamilton, nicht jedoch durch den von Lagrange beschreiben läßt, und er dokumentiert somit die Notwendigkeit des Schritts der Verbesserung der klassischen Mechanik von Lagrange zu Hamilton.

Wir notieren zunächst die Hamilton-Funktion des gekickten Kreisels, ausgedrückt durch Drehimpulskomponenten,

$$H(\vec{J}, t) = \beta J_y + \frac{k}{2j+1} J_z^2 f(t), \quad (\text{A.3})$$

wobei

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n). \quad (\text{A.4})$$

Mit Hilfe der Poissonklammern

$$\frac{d}{dt} J_i = -\{J_i, H\} \quad \text{für } i = x, y, z \quad (\text{A.5})$$

erhält man aus dieser Hamilton-Funktion die Bewegungsgleichungen für die Drehimpulskomponenten, deren Integration unmittelbar auf die in der Arbeit verwendete stroboskopische Abbildung führt. Mit Hilfe einer *Dyson-Entwicklung* (zeitgeordnetes Produkt von $\exp(-i \int dt H(t))$, [20, 12, 44]) kann man zeigen, daß auch ein Hamilton-Operator der Gestalt (A.3) auf den Floquet-Operator des gekickten Kreisels führt.

Wir identifizieren nun den Drehimpuls \vec{J} mit dem Drehimpuls eines in drei Dimensionen beweglichen Massenpunkts bezüglich des Koordinatenursprungs,

$$\begin{aligned} J_x &= yp_z - zp_y, \\ J_y &= zp_x - xp_z, \\ J_z &= xp_y - yp_x, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

und stellen als erstes fest, daß die Hamilton-Funktion (A.3) des gekickten Kreisels nicht von der Gestalt (A.1) ist, bei der die kinetische Energie

allein durch die Impulse, die potentielle Energie allein durch den Ort bestimmt ist.

Wir betrachten das System zunächst zu einem nicht-ganzzahligen Zeitpunkt, d. h. außerhalb des Kicks. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen der neuen dynamischen Variablen x und p sind für diesen Fall überaus einfach,

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \beta z, & \dot{p}_x &= \beta p_z, \\ \dot{y} &= 0, & \dot{p}_y &= 0, \\ \dot{z} &= -\beta x, & \dot{p}_z &= -\beta p_x, \end{aligned} \tag{A.7}$$

und sie führen auf zwei voneinander entkoppelte Dynamiken für die jeweils drei Orts- und Impulskoordinaten mit insgesamt sechs unabhängigen Anfangsbedingungen,

$$\begin{aligned} x &= x_0 \sin(\omega t + \varphi_1), & p_x &= p_{x,0} \sin(\omega t + \varphi_2), \\ y &= y_0, & p_y &= p_{y,0}, \\ z &= z_0 \cos(\omega t + \varphi_1), & p_z &= p_{z,0} \cos(\omega t + \varphi_2), \end{aligned} \tag{A.8}$$

wobei $\omega^2 = \beta$ ist, während sich die Phase φ_1 (bzw. φ_2) aus dem Polarwinkel des Anfangsortes (Anfangsimpulses) bzgl. des Koordinatenursprungs ergibt. Der aus diesen Lösungen der Bewegungsgleichungen resultierende Drehimpuls $\vec{J} = \vec{x} \times \vec{p}$ folgt der Dynamik des gekickten Kreisels außerhalb des Kicks.

Das Miteinbeziehen des Kicks geschieht am einfachsten durch eine Darstellung von $\delta(t - n)$ durch eine Folge von Rechteck-Funktionen mit abnehmender Breite. Auch hier werden keine Überraschungen zu Tage gefördert, sondern wir können die vollständige Dynamik des gekickten Kreisels reproduzieren und in einen sechsdimensionalen Phasenraum einbetten.

Damit ist das System im Hamilton-Formalismus vollständig beschrieben, wenn auch nicht durch eine Hamilton-Funktion der konventionellen Gestalt (A.1). Es scheint nun klar, daß eine Beschreibung im Lagrange-Formalismus durch Ausführen einer Legendre-Transformation und höchstens der Vollständigkeit halber erfolgt. An dieser Stelle jedoch stoßen wir auf Schwierigkeiten.

Der Zusammenhang zwischen der Hamilton- und der Lagrange-Funktion ist gegeben durch

$$H = \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_i} x_i - L = \sum_i p_i x_i - L \tag{A.9}$$

und somit

$$L = \sum_i p_i x_i - H, \quad (\text{A.10})$$

wobei wir dann „nur noch“ p_i durch $\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ ausdrücken müssen. Ein Blick auf die Hamiltonschen Gleichungen (A.7) zeigt jedoch, daß dies nicht möglich ist: So praktisch die Entkopplung von Orts- und Impulskordinaten auf der einen Seite ist, erscheint es auf dem Hintergrund des Lagrange-Formalismus doch wie eine verdammte Unverschämtheit, daß die Ableitung \dot{x} der einen Ortskomponente x eine andere Ortskomponente z ist, die sich in keiner Weise durch die Impulskomponenten p_x , p_y und p_z ausdrücken läßt.

Einen Ausweg aus diesem Dilemma finden wir in einer kanonischen Transformation, die eine Orts- mit einer Impulskomponente vertauscht, damit die Entkopplung aufhebt und das System für den Lagrange-Formalismus zugänglich macht,

$$\begin{aligned} X &= -p_x, & P_x &= x, \\ Y &= y, & P_y &= p_y, \\ Z &= z, & P_z &= p_z. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Für das transformierte System läßt sich nun die Legendre-Transformation durchführen, und wir erhalten

$$L = \sum_i P_i X_i - H = \frac{1}{\beta} \dot{X} \dot{Z} - \beta X Z + \frac{k}{2j+1} X^2 Y^2 f(t) \quad (\text{A.12})$$

als Lagrange-Funktion des transformierten gekickten Kreisels. Man beachte, daß das durch (A.12) beschriebene System im Sinne des Hamilton-Formalismus äquivalent zu dem in dieser Arbeit behandelten gekickten Kiesel ist, im Sinne des Lagrange-Formalismus jedoch nicht. Es ist vielmehr so, daß die in dieser Arbeit behandelte Drehimpulsdynamik nicht durch den Lagrange-Formalismus beschrieben werden kann; dies wird erst nach Anwendung einer kanonischen Transformation möglich, welche zwar die Hamilton-, nicht jedoch die Lagrange-Funktion invariant läßt.

Es bleibt noch zu überprüfen, in welcher Weise sich die ursprüngliche Drehimpulsdynamik, welche schließlich zentraler Gegenstand dieser Arbeit ist, in der Lagrange-Funktion (A.12) wiederfindet. Durch Anwendung der kanonischen Transformation (A.11) auf die Drehimpulskomponenten erhalten wir die dynamischen Variablen

$$\begin{aligned} J_x &= Y P_z - Z P_y, \\ J_y &= X Z + P_x P_z, \\ J_z &= X Y - P_x P_y, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

bei denen es sich natürlich nicht mehr um die Komponenten eines Drehimpulses eines Teilchens mit den Koordinaten X, Y, Z und den Impulskomponenten P_x, P_y, P_z handelt. Lösen der mit der Lagrange-Funktion (A.12) gebildeten Lagrangeschen Bewegungsgleichungen führt jedoch auf die bekannte Dynamik des gekickten Kreisels für die Größe $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$.

Abschließend sei noch bemerkt, daß die Lagrange-Funktion (A.12) zwar weiterhin nicht auf eine Hamilton-Funktion der Gestalt (A.1) führt, sich aber doch in der Gestalt

$$L = \frac{1}{2} \dot{\vec{X}} \cdot M \cdot \dot{\vec{X}} - V(\vec{X}, t) \quad (\text{A.14})$$

schreiben läßt, wobei M eine Matrix aus verallgemeinerten Massen ist. Somit stellt der transformierte gekickte Kiesel in der Lagrangeschen Theorie keine Ausnahme dar, sondern er wird von der Theorie voll erfaßt.

Anhang B

Quasimatrizen

Die vielleicht attraktivste Eigenschaft des gekickten Kreisels ist, daß sein Hilbert-Raum endlichdimensional ist. Hierdurch wird es möglich, endlich viele kohärente Zustände als Basis zu verwenden, bezüglich derer wir die Matrix des Floquet-Operators aufstellen. Hierbei müssen wir aber vorsichtig sein, denn das, was in der Quantenmechanik üblicherweise als „Matrix eines Operators“ bezeichnet wird, entsteht durch Entwicklung bezüglich einer *Hilbertraumbasis*, eines vollständigen Orthonormalsystems; die „Matrix einer linearen Abbildung“ bezüglich einer (nicht orthonormalen) *Vektorraumbasis* ist im allgemeinen etwas völlig anderes.

Ziel dieses Abschnitts wird es daher sein, das Objekt $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ als *Quasimatrixelement* des Operators F zwischen den kohärenten Zuständen $|\Gamma\rangle$ und $|\gamma\rangle$ auf mathematisch „saubere“ Weise einzuführen und zu zeigen, daß man die Eigenwerte des Operators F als Lösungen der *verallgemeinerten Eigenwertgleichung* (4.6)

$$\sum_{l=1}^n \langle \gamma_k | F | \gamma_l \rangle \psi_l = \lambda \sum_{l=1}^n \langle \gamma_k | \gamma_l \rangle \psi_l \quad (k = 1, \dots, n) \quad (\text{B.1})$$

aus n^2 Quasimatrixelementen extrahieren kann, wobei $n = 2j + 1$ die Dimension des Hilbert-Raums ist.

Ich möchte mich vorsorglich bei allen Physikern, die diesen Anhang lesen, für meine umständliche mathematische Sprache und Pedanterie entschuldigen. Bei Mathematikern, die diesen Anhang lesen, möchte ich mich für meine umständliche physikalische Sprache und Schluderigkeit entschuldigen.

Wir starten mit einer Erinnerung an den Begriff der *Linearkombination*.

Definition 1 Seien $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_k\rangle$ endlich viele Vektoren im \mathbb{C}^n , und seien $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ genausoviele komplexe Zahlen. Dann heißt

$$\sum_{l=1}^k \alpha_l |\psi_l\rangle$$

eine Linearkombination von $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_k\rangle$.

Man beachte, daß explizit eine endliche Summe vorausgesetzt wird; der Wert einer unendlichen Summe (oder gar eines Integrals) von Vektoren mit Koeffizienten wird nicht als Linearkombination bezeichnet.

Definition 2 Sei $\Psi \subseteq \mathbb{C}^n$ eine Menge von Vektoren. Ψ heißt linear unabhängig, wenn für jede Linearkombination $\sum_{l=1}^k \alpha_l |\psi_l\rangle$ von Elementen aus Ψ die Gleichung

$$\sum_{l=1}^k \alpha_l |\psi_l\rangle = 0$$

nur eine einzige Lösung hat, nämlich die, daß alle Koeffizienten $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{C}$ Null sind.

Man sieht sofort, daß eine Menge von orthogonalen Vektoren linear unabhängig ist; die Umkehrung gilt allgemein nicht.

Definition 3 Seien $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_k\rangle$ linear unabhängige Vektoren im \mathbb{C}^n . Wenn sich jeder Vektor des \mathbb{C}^n als Linearkombination von $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_k\rangle$ darstellen läßt, heißen $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_k\rangle$ eine Basis des \mathbb{C}^n .

Es sei daran erinnert, daß man zeigen kann, daß jede Basis des \mathbb{C}^n genau n Vektoren enthält und daß umgekehrt n linear unabhängige Vektoren im \mathbb{C}^n stets eine Basis bilden.

Die Definition der Basis ist verwandt mit derjenigen eines vollständigen Orthonormalsystems in einem Hilbert-Raum. Anstelle der Orthonormalität wird hier die weit schwächere Forderung der linearen Unabhängigkeit gestellt. Während in der Entwicklung eines Vektors nach einem vollständigen Orthonormalsystem auch unendliche Summen und sogar Integrale zugelassen sind, ist jede Entwicklung nach einer Basis eine Linearkombination, also eine endliche Summe.

Die bekannten vollständigen Orthonormalsysteme wichtiger Hilbert-Räume, zum Beispiel die Kugelfunktionen als Hilbertraumbasis von $L^2(S_1)$, sind keine Basen ihrer Hilbert-Räume im Sinne von Definition 3. Die unter Physikern gelegentlich herrschende Begriffsverwirrung rührt wahrscheinlich daher, daß vollständige Orthonormalsysteme in Hilbert-Räumen oft auch als *Hilbertraumbasen* bezeichnet werden, wobei dann im täglichen Sprachgebrauch das Präfix „Hilbertraum-“ häufig weggelassen wird.

Die in dieser Arbeit verwendete Standardbasis $|j, m\rangle$ des \mathbb{C}^n genügt beiden Definitionen, daher funktioniert das Entwickeln eines gegebenen Vektors $|\psi\rangle$ in eine Linearkombination $\sum_{m=-j}^j \psi_m |j, m\rangle$ in gewohnter Weise mit Koeffizienten $\psi_m = \langle j, m|\psi\rangle$. Für allgemeine Basen im Sinne von Definition 3 gilt dies nicht.

Es ist in endlichdimensionalen Vektorräumen wesentlich leichter, eine Basis im Sinne von Definition 3 zu konstruieren als ein vollständiges Orthonormalsystem. (In unendlichdimensionalen Vektorräumen ist es genau umgekehrt, weshalb Basen im Sinne von Definition 3 dort normalerweise keine Verwendung finden.) Diesen Vorteil können wir sofort ausnutzen, um uns eine Basis aus *kohärenten Zuständen* zusammenzusetzen. Tatsächlich brauchen wir nur n kohärente Zustände zufällig zu wählen; diese sind dann mit Wahrscheinlichkeit 1 linear unabhängig: Selbst wenn wir bereits $n - 1$ linear unabhängige kohärente Zustände vorliegen haben, ist die Wahrscheinlichkeit, bei der Wahl des nächsten und letzten kohärenten Zustands die $(n - 1)$ -dimensionale Hyperfläche aller ihrer Linearkombinationen im n -dimensionalen \mathbb{C}^n durch puren Zufall zu treffen, Null.

Wir wollen nun den Begriff der *Matrix eines Operators* einführen, ohne dabei auf ein Skalarprodukt bezug zu nehmen. Dafür müssen wir zunächst den Begriff des *Operators* selbst definieren:

Definition 4 Sei F eine Abbildung von \mathbb{C}^n in sich. F heißt lineare Abbildung oder Operator auf \mathbb{C}^n , wenn für alle $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathbb{C}^n$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ die Gleichung

$$F(\alpha |\psi\rangle + \beta |\varphi\rangle) = \alpha F |\psi\rangle + \beta F |\varphi\rangle$$

gilt.

Der Floquet-Operator des gekickten Kreisels ist ein Operator gemäß Definition 4.

Definition 5 Seien $|\gamma_1\rangle, \dots, |\gamma_n\rangle$ eine Basis des \mathbb{C}^n , und sei F ein Operator auf \mathbb{C}^n . Seien die Vektoren $F|\gamma_1\rangle, \dots, F|\gamma_n\rangle$ in der γ -Basis eindeutig dargestellt durch

$$F|\gamma_k\rangle = \sum_{l=1}^n F_{kl}|\gamma_l\rangle.$$

Dann heißt

$$(F_{kl}) = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} \\ F_{21} & F_{22} & \cdots & F_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} \end{pmatrix}$$

die Matrix von F bezüglich dieser Basis.

Es ist für diese Arbeit wesentlich, das Objekt

$$\langle \gamma_k | F | \gamma_l \rangle$$

von der Matrix von F wohl zu unterscheiden. Nur, wenn die Basis $|\gamma_1\rangle, \dots, |\gamma_n\rangle$ ein Orthonormalsystem ist, fallen beide Begriffe zusammen. Nichtsdestoweniger enthält $\langle \gamma_k | F | \gamma_l \rangle$ die vollständige Information über den Operator F , und es ist insbesondere möglich, die Eigenwerte daraus zu extrahieren. (Man kann stattdessen auch $\langle \gamma_k | F | \gamma_l \rangle$ durch F_{kl} definieren und somit die Probleme von den Matrixelementen auf das Skalarprodukt verlagern, das sich dann nicht mehr in der Form $\langle \Gamma | \gamma \rangle = \sum_{k=1}^n \Gamma_n^* \gamma_n$ schreiben läßt. Dies ist eine in der Mathematik durchaus übliche Vorgehensweise.)

Wir notieren zu diesem Zwecke die Eigenwertgleichung in koordinatenfreier Darstellung,

$$F|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \tag{B.2}$$

schreiben $|\psi\rangle$ als Linearkombination $\sum_{l=1}^n \psi_l |\gamma_l\rangle$ von Basiselementen und multiplizieren von links mit $\langle \gamma_k |$,

$$\sum_{l=1}^n \underbrace{\langle \gamma_k | F | \gamma_l \rangle}_{B_{kl}} \psi_l = \lambda \sum_{l=1}^n \underbrace{\langle \gamma_k | \gamma_l \rangle}_{A_{kl}} \psi_l. \tag{B.3}$$

Diese Vorgehensweise ist die offensichtliche Verallgemeinerung des von vollständigen Orthonormalsystemen her bekannten „Einschiebens einer

Eins“. (Man beachte den Unterschied zwischen ψ_l und $\langle \gamma_l | \psi \rangle$.) Die verbleibende Gleichung

$$\sum_{l=1}^n B_{kl} \psi_l = \lambda \sum_{l=1}^n A_{kl} \psi_l \quad (\text{B.4})$$

heißt *verallgemeinerte Eigenwertgleichung* für die Matrizen (B_{kl}) und (A_{kl}) . Auch wenn hier zwei Matrizen (A_{kl}) und (B_{kl}) auftauchen, ist $(B_{kl}) = \langle \gamma_k | F | \gamma_l \rangle$ ebensowenig die Matrix des Operators F , wie $(A_{kl}) = \langle \gamma_k | \gamma_l \rangle$ die Einheitsmatrix ist.

Um der in der Quantenmechanik geläufigen Sprechweise entgegenzukommen, wollen wir das Objekt $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ als *Quasimatrixelement des Operators F zwischen den Zuständen $|\Gamma\rangle$ und $|\gamma\rangle$* bezeichnen. (Die Matrix (A_{kl}) heißt in der Mathematik auch *Gramsche Matrix der Vektoren $|\gamma_1\rangle, \dots, |\gamma_n\rangle$* , allerdings ohne die Voraussetzung, daß die Vektoren eine Basis bilden. Man könnte daher (B_{kl}) auch als *Gramsche Matrix der Vektoren $|\gamma_1\rangle, \dots, |\gamma_n\rangle$ bzgl. F* bezeichnen.)

Damit wurde gezeigt, daß sich das Spektrum des Operators F durch Lösen der verallgemeinerten Eigenwertgleichung (B.1) aus den Quasimatrixelementen $\langle \Gamma | F | \gamma \rangle$ ermitteln läßt, daß also in den Quasimatrixelementen von F die vollständige Information über den Operator enthalten ist.

Anhang C

Algorithmen zur Wignerschen d -Funktion

Die in Kapitel 3 beschriebenen Methoden haben sich für exakte und semiklassische Berechnungen im System des gekickten Kreisels als überaus effektiv erwiesen. Für weiterführende Arbeiten in diesem System ist es daher ratsam, sich dieser Methoden zu bedienen.

Aus diesem Grunde sollen in diesem Anhang die Algorithmen, die zur Berechnung der Wignerschen d -Funktion und ihrer semiklassischen Asymptotik verwendet wurden, in einer Pascal-ähnlichen Notation beschrieben werden.

Zur Verdeutlichung der Syntax werden reservierte Wörter **fett** gesetzt, zu definierende Bezeichner *kursiv*. Zur besseren Lesbarkeit der mathematischen Formeln erscheinen außerdem einbuchstabige Variablen in mathematischer Kursivschrift. Kommentare erscheinen in Pascal-Schreibweise (* ... *).

Folgende globale Definitionen werden in diesem Anhang verwendet:

Const

j = Drehimpulsquantenzahl = $1/\hbar$;

$n = 2j + 1$ = Dimension des Hilbertraums;

Type

\mathbb{R} -Matrix = **array** $[-j \dots j, -j \dots j]$ of Real = reelle $n \times n$ -Matrix;

C.1 Exakte Berechnung der Wignerschen d -Funktion

Die folgende Prozedur berechnet die Wignersche d -Matrix für gegebenes j und β aus den Rekursionsformeln (3.17). Es wird zunächst der Rand der Matrix berechnet und anschließend horizontal ins Innere der Matrix vorgestoßen. Auf die Anwendung der Symmetrierelationen (3.16) wird bewußt verzichtet, da diese kaum Gewinn an Einfachheit, Rechengenauigkeit oder Rechengeschwindigkeit mit sich bringen; stattdessen stehen die Symmetrierelationen zur Kontrolle des Ergebnisses zur Verfügung.

Bei der horizontalen Anwendung der Rekursionsformel verläßt die Prozedur für $\beta \neq \pi/2$ in der Nähe von $m' = m = 0$ den stabilen Zweig der Rekursionsformel; in diesem Fall treten bei PC-Genauigkeit (20 Stellen) für $j > 500$ Rechengenauigkeiten auf. Ähnliche Probleme existieren für Werte von β sehr nahe bei $0, \pm\pi, \pm 2\pi, \dots$ bereits für kleinere j . Um diese zu umgehen, setze man die gesuchte Wignersche d -Matrix durch Matrixmultiplikation aus y -Drehungen um $\pm\pi/2$ (Wignersche d -Matrizen für $\beta = \pm\pi/2$) und z -Drehungen um beliebige Winkel (Diagonalmatrizen) zusammen.

Der Zugriff auf die Matrixelemente $d_{m',m}$ sollte über eine Funktion erfolgen, da die Indices m' und m auch Werte außerhalb des zulässigen Bereichs annehmen können. In diesem Fall ist der Wert Null für $d_{m',m}$ einzusetzen.

Eingabe: Drehwinkel β .

Ausgabe: (Exakte) Wignersche d -Matrix.

Procedure *Wigner-d-Matrix* (Var d : \mathbb{R} -Matrix; β : Real);

Var

m, c_m : Integer;

s, c : Real;

Function f (m : Real): Real;

begin (* f *)

$$f := \frac{1}{2} \sqrt{(j+m) \cdot (j-m+1)};$$

end (* f *);

Procedure *Rand-Rekursion* (m' , m , σ : Integer);

begin (* *Rand-Rekursion* *)

$$d_{m'+\sigma,m} := \left(\frac{m-c \cdot m'}{s} \cdot d_{m',m} - f(\sigma m') \cdot d_{m'-\sigma,m} \right) \cdot \frac{1}{f(-\sigma m')};$$

end (* *Rand-Rekursion* *);

Procedure *Innenleben* (m' : Integer);

Var

m , μ : Integer;

begin (* *Innenleben* *)

$\mu := \text{round} (c \cdot m');$

for $m := j$ **downto** $\mu + 1$ **do**

$$d_{m',m-1} := \left(\frac{c \cdot m - m'}{s} \cdot d_{m',m} - f(-m) \cdot d_{m',m+1} \right) \cdot \frac{1}{f(m)};$$

for $m := -j$ **to** $\mu - 2$ **do**

$$d_{m',m+1} := \left(\frac{c \cdot m - m'}{s} \cdot d_{m',m} - f(m) \cdot d_{m',m-1} \right) \cdot \frac{1}{f(-m)};$$

end (* *Innenleben* *);

begin (* *Wigner-d-Matrix* *)

$c := \cos \beta;$

$s := \sin \beta;$

$c_m := \text{round} (j \cdot m);$

$d_{j,j} := (\cos(\beta/2))^{2j}$

$d_{j,-j} := (\sin(\beta/2))^{2j}$

for $m := j$ **downto** c_m **do**

Rand-Rekursion (m , j , -1);

```

for  $m := j$  downto  $-c_m$  do
  Rand-Rekursion (  $m, -j, -1$  );
 $d_{-j,j} := (\sin(\beta/2))^{2j}$ 
 $d_{-j,-j} := (\cos(\beta/2))^{2j}$ 
for  $m := -j$  to  $c_m - 1$  do
  Rand-Rekursion (  $m, j, -1$  );
for  $m := -j$  to  $-c_m - 1$  do
  Rand-Rekursion (  $m, -j, -1$  );
for  $m := -j$  to  $j$  do
  Innenleben (  $m$  );
end (* Wigner- $d$ -Matrix *);

```

C.2 WKB-Approximation

Die folgenden Funktionen berechnen ein Matrixelement der Wignerschen d -Funktion approximativ nach dem WKB-Verfahren. Im Gegensatz zur Berechnung des exakten Matrixelements werden hier die Symmetrieregeln (3.16) mit zur Berechnung herangezogen; Ergebniskontrolle erfolgt durch Vergleich mit dem exakten Matrixelement.

Wenn in der Funktion *WKB-verboten* das Signum einmal innerhalb und zweimal außerhalb der Areafunktion steht, liegt das am gewählten Symmetriezweig der d -Funktion. Durch Wahl eines geeigneten anderen Zweiges ließe sich eine symmetrischere Schreibweise erreichen.

Eingabe: Drehwinkel β (globale Variable), Indices m', m .

Ausgabe: Semiklassisches Matrixelement $d_{m',m}^j$ WKB

Var

β : Real;

Function *WKB-erlaubt* (m', m : Integer; q : Real): Real;

(* $q > 0$ – im klassisch erlaubten Bereich *)

Var

σ, S, J^2 : Real;

```

begin (* WKB-erlaubt *)
  if odd (  $j + m' + m$  ) then
     $\sigma := -1$ 
  else
     $\sigma := 1$ ;
     $J^2 := (j + \frac{1}{2})^2$ ;
     $S := m' \cdot \arccos \left( \frac{m' \cos \beta - m}{\sqrt{J^2 - m'^2} \cdot \sin \beta} \right)$ ;
     $S := S - m \cdot \arccos \left( \frac{m' - m \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m'^2} \cdot \sin \beta} \right)$ ;
     $S := S + (j + \frac{1}{2}) \cdot \arccos \left( \frac{m' \cdot m - J^2 \cos \beta}{\sqrt{(J^2 - m'^2) \cdot (J^2 - m^2)}} \right) - \frac{\pi}{4}$ ;
    WKB-erlaubt :=  $\sigma \cdot \sqrt{2/(\pi \sqrt{q})} \cdot \cos S$ ;
end (* WKB-erlaubt *);

```

Function *WKB-verboten* (m', m : Integer; q : Real): Real;

(* $q < 0$ – im klassisch verbotenen Bereich *)

Var

σ, S, J^2 : Real;

```

begin (* WKB-verboten *)
  if  $|m'| > |m|$  then
    if odd (  $m' - m$  ) then
      WKB-verboten :=  $-$  WKB-verboten (  $m, m', q$  )
    else
      WKB-verboten := WKB-verboten (  $m, m', q$  )
    else if  $m < -m' \cos \beta$  then
      if odd (  $m' - m$  ) then
        WKB-verboten :=  $-$  WKB-verboten (  $-m', -m, q$  )
      else
        WKB-verboten := WKB-verboten (  $-m', -m, q$  )
    else
      begin
        if (  $m' \geq j \cos \beta$  ) and odd (  $j - m$  ) then
           $\sigma := -1$ 
      end

```

```

else
   $\sigma := 1;$ 
   $J^2 := (j + \frac{1}{2})^2;$ 
   $S := \operatorname{sgn}(m' - j \cos \beta) \cdot m' \cdot \operatorname{arcosh} \left( \frac{m - m' \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m'^2} \cdot \sin \beta} \right);$ 
   $S := S + m \cdot \operatorname{arcosh} \left( \operatorname{sgn}(m' - j \cos \beta) \cdot \frac{m' - m \cos \beta}{\sqrt{J^2 - m^2} \cdot \sin \beta} \right);$ 
   $S := S - \operatorname{sgn}(m' - j \cos \beta)$ 
     $\cdot (j + \frac{1}{2}) \cdot \operatorname{arcoth} \left( \frac{m'm - J^2 \cos \beta}{(j + \frac{1}{2})\sqrt{-q}} \right);$ 
  WKB-verboten :=  $\sigma \cdot \sqrt{\frac{1}{2}/(\pi\sqrt{-q})} \cdot e^{-S};$ 
end (* else *);
end (* WKB-verboten *);

```

Function *WKB-Matrixelement* (m' , m : Integer): Real;

Var

q : Real;

begin (* WKB-Matrixelement *)

$q := ((j + \frac{1}{2}) \cdot \sin \beta)^2 - m'^2 - m^2 + 2m'm \cos \beta;$

if $q > 0$ **then**

WKB-Matrixelement := WKB-erlaubt (m' , m , q)

else

WKB-Matrixelement := WKB-verboten (m' , m , q);

end (* WKB-Matrixelement *);

C.3 Airy-Approximation

Die Airy-Approximation der Wignerschen d -Funktion besitzt nur in der Nähe eines klassischen Umkehrpunkts Gültigkeit. Ein Aufruf der Funktion mit „falschen“ Parameterwerten m' , m sollte eine Fehlerbedingung auslösen – unten angedeutet durch die Zuweisung des speziellen Werts „nicht berechenbar“ an den Funktionsrückgabewert.

Die Berechnung der Airy-Funktion $\operatorname{Ai}(x)$ erfolgt nach [26]; die hierfür notwendigen Funktionen und Tabellen werden an dieser Stelle nicht wiedergegeben.

Eingabe: Drehwinkel β (globale Variable), Indices m', m .

Ausgabe: Semiklassisches Matricelement $d_{m',m}^j$ Airy

Function *Airy-Matricelement* (m', m : Integer): Real;

Const

$$\varepsilon = 10^{-15};$$

Var

σ, J, q, x, m_t, a : Real;

begin (* Airy-Matricelement *)

if $|m'| > |m|$ **then**

if odd ($m' - m$) **then**

Airy-Matricelement := - Airy-Matricelement (m, m')

else

Airy-Matricelement := Airy-Matricelement (m, m')

else if $m > -m' \cos \beta$ **then**

if odd ($m' - m$) **then**

Airy-Matricelement := - Airy-Matricelement ($-m', -m$)

else

Airy-Matricelement := Airy-Matricelement ($-m', -m$)

else

begin

if $m' \geq m \cos \beta$ **then**

if $m \geq m' \cos \beta$ **then**

if odd ($m + j$) **then**

$\sigma := -1$

else

$\sigma := 1$

else if odd ($m' - m$) **then**

$\sigma := -1$

else

$\sigma := 1$

else if $m \geq m' \cos \beta$ **then**

$\sigma := 1$

else if odd ($m' + j$) **then**

$\sigma := -1$

else

```

     $\sigma := 1;$ 
     $J := j + \frac{1}{2};$ 
if  $(m \cos \beta)^2 + (J \sin \beta)^2 - m^2 < 0$  then
    Airy-Matrixelement := nicht berechenbar
else
    begin
     $q := ((j + \frac{1}{2}) \cdot \sin \beta)^2 - m'^2 - m^2 + 2m'm \cos \beta;$ 
     $m_t := m \cos \beta + \operatorname{sgn}(m' + j \cos \beta)$ 
     $\cdot \sqrt{(m \cos \beta)^2 + (J \sin \beta)^2 - m^2};$ 
     $a := \frac{2}{\sin \beta} \cdot (J^2 - m_t^2)^{-\frac{3}{2}};$ 
     $a := a \cdot (mm_t - J^2 \cos \beta);$ 
    if  $|a| < \varepsilon$  then
     $x := 0$ 
    else
     $x := \operatorname{sgn}(m' + j \cos \beta) \cdot \sqrt[3]{|a|} \cdot (m' - m_t);$ 
    Airy-Matrixelement :=  $\sigma \sqrt{2} \left( \left| \frac{x}{q} \right| \cdot \frac{J^2 - m'^2}{J^2 - m_t^2} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \operatorname{Ai}(x);$ 
    end (* else *);
    end (* else *);
end (* Airy-Matrixelement *);

```

C.4 Gleichförmige Approximation

Eingabe: Drehwinkel β (globale Variable), Indices m' , m .

Ausgabe: Semiklassisches Matrixelement $d_{m',m}^j \operatorname{Gl}$

Function *Gl-Matrixelement* (m' , m : Integer): Real;

Var

$J, J^2, s, c, m_t^+, m_t^-, a, S_1, S_2, S_3, S, x$: Real;

σ : Integer;

begin (* Gl-Matrixelement *)

$J := j + \frac{1}{2};$

$s := \sin \beta;$

$c := \cos \beta;$

```

if  $|m'| > |m|$  then
  if odd (  $m' - m$  ) then
    Gl-Matrixelement := - Gl-Matrixelement (  $m, m'$  )
  else
    Gl-Matrixelement := Gl-Matrixelement (  $m, m'$  )
else if  $m < 0$  then
  if odd (  $m' - m$  ) then
    Gl-Matrixelement := - Gl-Matrixelement (  $-m', -m$  )
  else
    Gl-Matrixelement := Gl-Matrixelement (  $-m', -m$  )
else
  begin
     $\sigma := 1$ 
    (* Klassische Umkehrpunkte *)
     $m_t^+ := \sqrt{J^2 - m^2} \cdot s + m \cdot c$ ;
     $m_t^- := -\sqrt{J^2 - m^2} \cdot s + m \cdot c$ ;
    if (  $m' < m_t^+$  ) and (  $m_1 > m_t^-$  ) then
      begin
        (* Klassisch erlaubter Bereich *)
         $a := \sqrt{J^2 s^2 - m'^2 - m^2 + 2m'm \cdot c}$ ;
         $S_1 := m' \cdot \left( \frac{\pi}{2} - \arctan \left( \frac{m - m' \cdot c}{a} \right) \right)$ ;
         $S_2 := m \cdot \left( \frac{\pi}{2} - \arctan \left( \frac{-m' + m \cdot c}{a} \right) \right)$ ;
         $S_3 := J \cdot \left( \frac{\pi}{2} - \arctan \left( \frac{m'm - J^2 \cdot c}{J \cdot a} \right) \right)$ ;
        if  $m' < m \cdot c$  then
          (*  $m'$  näher am linken Umkehrpunkt *)
           $S := S_1 - S_2 - S_3 + J \cdot \pi$ 
        else
          begin
            (*  $m'$  näher am rechten Umkehrpunkt *)
            if odd (  $m - j$  ) then
               $\sigma := -1$ ;
               $S := -S_1 + S_2 + S_3 - m \cdot \pi$ ;
            end (* else *);
          end
         $x := -\left(\frac{3}{2}S\right)^{\frac{2}{3}}$ ;
      end (* if *)
  end

```

```

else
  begin
    (* Klassisch verbotener Bereich *)
    
$$S_1 := m' \cdot \operatorname{arcosh} \left( \frac{m - m' \cdot c}{s \cdot \sqrt{J^2 - m'^2}} \right);$$

    
$$S_2 := m \cdot \operatorname{arcosh} \left( \frac{|m' - m \cdot c|}{s \cdot \sqrt{J^2 - m^2}} \right);$$

    
$$S_3 := J \cdot \operatorname{arcosh} \left( \frac{|m'm - J^2 \cdot c|}{\sqrt{(J^2 - m'^2) \cdot (J^2 - m^2)}} \right);$$

    if  $m' > m \cdot c$  then
      begin
        (* Klassisch verbotener Bereich, rechte Seite *)
         $S := S_1 + S_2 - S_3;$ 
        if odd (  $m - j$  ) then
           $\sigma := -1;$ 
        end (* if *)
      end
    else
      (* Klassisch verbotener Bereich, linke Seite *)
       $S := -S_1 + S_2 - S_3;$ 
       $x := \left( \frac{3}{2} S \right)^{\frac{2}{3}};$ 
      end (* else *);
    GI-Matrixelement :=  $\sigma \cdot \sqrt{2}$ 
      
$$\cdot \left( -\frac{x}{J^2 s^2 - m'^2 - m^2 + 2m'm \cdot c} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \operatorname{Ai}(x);$$

      end (* else *);
  end (* GI-Matrixelement *);

```

C.5 Oszillator-Approximation

Die Oszillator-Approximation der Wignerschen d -Funktion besitzt nur in der Nähe doppelter klassischer Umkehrpunkte Gültigkeit. Wie bereits bei der Airy-Approximation in Abschnitt C.3, wird auch hier für „falsche“ Parameterwerte m', m der spezielle Wert „nicht berechenbar“ zurückgegeben.

Eingabe: Drehwinkel β (globale Variable), Indices m', m .

Ausgabe: Semiklassisches Matrixelement $d_{m',m}^j \text{OSZ}$

Function *Osz-Matrixelement* (*m*' , *m*: Integer): Real;

Const

$n_{\max} = 10;$

Function *H* (*n*₀: Integer; *x*: Real): Real;

Var

*H*₀, *H*₁, *H*₂: Real;

n: Integer;

begin (* *H* *)

n := 0;

*H*₀ := 1;

*H*₁ := *H*₀;

*H*₂ := 0;

while *n* < *n*₀ **do**

begin

 inc (*n*); (* *n* := *n* + 1 *)

$H_0 := 2x \cdot H_1 - 2 \cdot (n - 1) \cdot H_2;$

$H_2 := H_1;$

$H_1 := H_0;$

end (* while *);

$H := H_0;$

end (* *H* *);

Function *ψ* (*n*: Integer; *x*: Real): Real;

Var

*N*_{*n*}, *E*, *H*_{*n*}: Real;

begin (* *ψ* *)

$N_n := \sqrt{1/(\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!)};$

$E := e^{-\frac{1}{2}x^2};$

$H_n := H (n, x);$

$\psi := N_n \cdot E \cdot H_n;$

end (* *ψ* *);

```

begin (* Osz-Matrixelement *)
  if  $|m'| > |m|$  then
    if odd (  $m' - m$  ) then
      Osz-Matrixelement := - Osz-Matrixelement (  $m, m'$  )
    else
      Osz-Matrixelement := Osz-Matrixelement (  $m, m'$  )
    else if  $m < m' \cos \beta$  then
      if odd (  $m' - m$  ) then
        Osz-Matrixelement := - Osz-Matrixelement (  $-m', m$  )
      else
        Osz-Matrixelement := Osz-Matrixelement (  $-m', m$  )
      else if  $j - m \leq n_{\max}$  then
        Osz-Matrixelement :=  $((j + \frac{1}{2}) \cdot \sin^2 \beta)^{-\frac{1}{4}}$ 
           $\cdot \psi \left( j - m, \frac{(j + \frac{1}{2}) \cos \beta - m'}{\sqrt{j + \frac{1}{2} \sin \beta}} \right)$ 
      else
        Osz-Matrixelement := nicht berechenbar;
    end (* Osz-Matrixelement *);

```

Literaturverzeichnis

- [1] N. Bohr:
Über die Quantentheorie der Strahlung und die Struktur des Atoms.
Phil. Mag. **30**, 394 (1915)
Entnommen aus: N. Bohr: Das Bohrsche Atommodell.
Stuttgart 1964
A. Sommerfeld:
Atombau und Spektrallinien.
8. Auflage, Braunschweig 1969
- [2] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, L. P. Pitajewski:
Lehrbuch der theoretischen Physik. Band III: Quantenmechanik.
8. Auflage, Berlin 1988
Deutsche Übersetzung von: Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц:
Квантовая механика (нерелятивистская теория).
Moskau 1974
- [3] H. Poincaré:
Sur le problème des trois corps et les équations de la dynamique.
Acta Mathematica **13**, 1 (1890)
Entnommen aus: Œuvres de Henri Poincaré **VII**.
Paris 1952
- [4] M. C. Gutzwiller:
Energy spectrum according to classical mechanics.
J. Math. Phys. **11**, 1791 (1970)
M. C. Gutzwiller:
Periodic orbits and classical quantization conditions.
J. Math. Phys. **12**, 343 (1971)

- [5] M. C. Gutzwiller:
Chaos in classical and quantum mechanics.
New York, Berlin, Heidelberg 1990
- [6] J. P. Keating:
The cat map: quantum mechanics and classical motion.
Nonlinearity **4**, 309 (1994)
S. C. Creagh:
Quantum zeta-function for perturbed cat maps.
Chaos **5**, 477 (1995)
- [7] C. Matthies, F. Steiner:
Selberg's ζ function and the quantization of chaos.
Phys. Rev. A **44**, R7877 (1991)
R. Aurich, C. Matthies, M. Sieber, F. Steiner:
Novel rule for quantizing chaos.
Phys. Rev. Lett. **68**, 1629 (1992)
- [8] M. Kuś, F. Haake, D. Delande:
Prebifurcation periodic ghost orbits in semiclassical quantization.
Phys. Rev. Lett. **71**, 2167 (1993)
F. Haake:
Classical paths and semiclassical ghosts.
Act. Phys. Pol. A **85**, 693 (1994)
- [9] H. Schomerus, M. Sieber:
Bifurcation of periodic orbits and uniform approximations.
Preprint (1997)
- [10] F. Haake:
Quantum signatures of Chaos.
Berlin 1991
- [11] R. Scharf:
Quantenchaos und Symmetrie gekickter Drehimpulsdynamiken.
Dissertation, Essen 1987
- [12] F. Haake, M. Kuś, R. Scharf:
Classical and quantum chaos for a kicked top.
Z. Phys. B **65**, 381 (1987)
- [13] H. Frahm, H. J. Mikeska:
On the dynamics of a quantum system which is classically chaotic.
Z. Phys. B **60**, 117 (1985)

- [14] M. Kuś, F. Haake, B. Eckhardt:
Quantum effects of periodic orbits for the kicked top.
Z. Phys. B **92**, 221 (1993)
- [15] P. Gerwinski, F. Haake, M. Kuś, H. Wiedemann, K. Życzkowski:
Semiclassical spectra without periodic orbits for a kicked top.
Phys. Rev. Lett. **74**, 1562 (1995)
- [16] P. A. Braun, P. Gerwinski, F. Haake, H. Schomerus:
Semiclassics of rotation and torsion.
Z. Phys. B **100**, 115 (1996)
- [17] F. Waldner, D. R. Barberis, H. Yamazaki:
Route to chaos by irregular periods: Simulations of parallel pumping
in ferromagnets.
Phys. Rev. A **31**, 420
- [18] K. Yajima:
Scattering theory for Schrödinger equations with potentials periodic
in time.
J. Math. Soc. Japan **29**, 729 (1977)
- [19] J. S. Howland:
Scattering theory for Hamiltonians periodic in time.
Indiana University Math. J. **28**, 471 (1979)
- [20] P. Gerwinski:
Streuung an einem eindimensionalen,
zeitlich periodischen Potentialtopf.
Diplomarbeit, Essen 1992
- [21] P. Gerwinski, P. Šeba:
Quantum resonances due to classical stability islands.
Phys. Rev. E **50**, 3615 (1994)
- [22] W. Fischer, I. Lieb:
Funktionentheorie.
4. Auflage, Braunschweig 1985
- [23] B. Dietz, K. Życzkowski:
Level-spacing distributions beyond the Wigner surmise.
Z. Phys. B **84**, 157 (1991)

- [24] D. A. Varshalovitch:
Quantum theory of angular momenta.
Singapore 1988
Englische Übersetzung von: Д. А. Варшалович:
Квантовая теория углового момента.
- [25] J. Spanier, K. Oldham:
An atlas of functions.
Washington, New York, London 1987
- [26] M. Abramowitz, I. A. Stegun:
Handbook of mathematical functions.
10. Auflage, New York 1972
- [27] P. A. Braun:
Approximate formulas for the edge portions of the spectrum of tri-
diagonal Hamiltonians: application to rotational spectra of nonrigid
asymmetric molecules.
Opt. Spektrosk. **66**, 57 (1989)
- [28] F. T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore, H. Thomas:
Atomic coherent states in quantum optics.
Phys. Rev. A **6**, 2211 (1972)
- [29] R. Glauber, F. Haake:
Superradiant pulses and directed angular momentum states.
Phys. Rev. A **13**, 357 (1976)
- [30] K. Jänich:
Analysis für Physiker und Ingenieure.
Berlin 1983
- [31] J. Stoer, R. Bulirsch:
Numerische Mathematik 2.
3. Auflage, Berlin, Heidelberg 1990
- [32] P. Leboeuf, A. Voros:
Chaos-revealing multiplicative representation of quantum eigen-
states.
J. Phys. A: Math. Gen. **23**, 1765 (1990)
E. Bogomolny, O. Bohigas, P. Leboeuf:
Distribution of roots of random polynomials.
Phys. Rev. Lett. **68**, 2726 (1992)

- [33] K. Takahashi:
Distribution functions in classical and quantum mechanics.
Prog. Th. Phys. Supp. **98**, 109 (1989)
- [34] O. Bohigas, S. Tomsovic, D. Ullmo:
Dynamical quasidegeneracies and separation of regular and irregular quantum levels.
Phys. Rev. Lett. **64**, 1479 (1990)
- [35] M. Kuś, J. Zakrzewski, K. Życzkowski:
Quantum scars on a sphere.
Phys. Rev. A **43**, 4244 (1991)
- [36] E. Doron, S. D. Frischat:
Semiclassical description of tunneling in mixed systems: Case of the annular billard.
Phys. Rev. Lett. **75**, 3661 (1995)
- [37] O. Bohigas, S. Tomsovic, D. Ullmo:
Manifestations of classical phase space structures in quantum mechanics.
Phys. Rep. **223**, 43 (1993)
R. Utermann, T. Dittrich, P. Hänggi:
Tunneling and the onset of chaos in a driven bistable system.
Phys. Rev. E **49**, 23 (1994)
- [38] O. Bohigas, S. Tomsovic, D. Ullmo:
Classical transport effects on chaotic levels.
Phys. Rev. Lett. **65**, 5 (1990)
- [39] R. Grobe, F. Haake:
Dissipative death of quantum coherences in a spin system.
Z. Phys. B **68**, 503 (1987)
R. Roncaglia, L. Bonci, F. M. Izrailev, B. J. West, P. Grigolini:
Tunneling versus chaos in the kicked Harper model.
Phys. Rev. Lett. **73**, 802 (1994)
G. Casati, R. Graham, I. Guarneri, F. Izrailev:
Tunneling between localized states in classically chaotic systems.
Phys. Lett. A **190**, 159 (1994)
F. Leyvraz, D. Ullmo:
The level splitting distribution in chaos-assisted tunneling.
J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 2529 (1996)

- Nöckel, Stone:
Ray and wave chaos in asymmetric resonant optical cavities.
Nature **385**, 45 (1997)
- [40] O. Bohigas, D. Boosé, R. Egydio de Carvalho, V. Marvulle:
Quantum tunneling and chaotic dynamics.
Nucl. Phys. A **560**, 197 (1993)
- [41] P. A. Braun:
Unveröffentlichte Ergebnisse (1995)
- [42] D. Huber, E. J. Heller:
Generalized Gaussian wave packed dynamics.
J. Chem. Phys. **87**, 5302 (1987)
D. Huber, E. J. Heller, R. G. Littlejohn:
Generalized Gaussian wave packet dynamics, Schrödinger equation,
and stationary phase approximation.
J. Chem. Phys. **89**, 2003 (1988)
P. W. O'Connor, S. Tomsovic, E. J. Heller:
Semiclassical dynamics in the strongly chaotic regime: breaking the
log time barrier.
Physica D **55**, 340 (1992)
M. A. Sepúlveda, S. Tomsovic, E. J. Heller:
Semiclassical propagation: how long can it last?
Phys. Rev. Lett. **69**, 402 (1992)
- [43] C. C. Gerry, R. Grobe:
Intelligent photon states associated with the Holstein-Primahoff rea-
lization of the $SU(1,1)$ Lie algebra.
Quantum and semiclassical optics **9**, 59 (1997)
C. C. Gerry, S. C. Gou, J. Steinbach:
Generation of motional $SU(1,1)$ intelligent states of a trapped ion.
Phys. Rev. A **55**, 630 (1997)
- [44] M. Reed, B. Simon:
Methods of modern mathematical physics, vol. II.
New York, San Francisco, London 1975.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Phasenraumportraits des gekickten Kreisels in kartesischen Koordinaten für $k = 1$ und $k = 2$	10
2.2	Phasenraumportraits des gekickten Kreisels in kartesischen Koordinaten für $k = 3$ und $k = 8$	11
2.3	Exponentielles Anwachsen von Abweichungen in den Anfangsbedingungen	13
2.4	Empfindliche Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen	13
2.5	Phasenraumportrait des gekickten Kreisels in Polarkoordinaten für $k = 1$ und $k = 2$	15
2.6	Phasenraumportrait des gekickten Kreisels in Polarkoordinaten für $k = 3$ und $k = 8$	16
2.7	Stereographische Projektion	18
3.1	Klassische Rotation als Randwertproblem	24
3.2	Matrix des Floquet-Operators	28
3.3	Die Airy-Funktionen A_i und B_i	35
3.4	WKB- und Airy-Approximation	39
3.5	Fehler der WKB- und Airy-Approximation	40
3.6	Aufteilung und Fehler der kombinierten WKB-Airy-Approximation	41
3.7	Anteil der Airy-genäherten Matrixelemente als Funktion von j für $\beta = 1$	42
3.8	Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels: exakt, WKB- und WKB-Airy-Näherung	44
3.9	Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = 1$, $k = 8$: WKB- und WKB-Airy-Näherung	45
3.10	Approximationsfehler am doppelten Umkehrpunkt	48

3.11	Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators zur Frequenz 1	49
3.12	Gültigkeitsbereiche der Approximationsmethoden	51
3.13	Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = 1, k = 8$	52
3.14	Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = \pi/2, k = 8$	53
3.15	Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = 1, k = 2$	54
3.16	Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von k für $\beta = 1, j = 100$	55
4.1	Integrationswege steilsten Abstiegs	68
4.2	Integrationswege nach dem Höhenverfahren	70
4.3	Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels: exakt bzw. semiklassisch mit kohärenten Zuständen für $j = 5, k = 8, \beta = \pi/2$	71
4.4	Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit von j für $\beta = \pi/2, k = 8$	72
4.5	Verteilung von Punkten auf einer Kugeloberfläche	75
4.6	Histogramm der Abstände nächster Nachbarn für Verteilungen von $n = 5000$ Punkten auf einer Kugeloberfläche	76
4.7	Relativer Phasenfehler des Floquet-Spektrums in zweiter Ordnung Sattelpunkt-Näherung in Abhängigkeit von j für $\beta = \pi/2, k = 8$	79
4.8	Der Korrekturfaktor $\alpha(\Gamma, \gamma)$	80
4.9	Histogramm von Real- und Imaginärteil des Korrekturfaktors $\alpha(\Gamma, \gamma)$	81
5.1	Phasenraumportrait des gekickten Kreisels für $\beta = 1, k = 3.5, k' = 0$	83
5.2	Phasenraumportrait des gekickten Kreisels für $\beta = 1, k = 3.5, k' = 1$	84
5.3	Reguläre Eigenzustände des gekickten Kreisels für $j = 50, \beta = 1, k = 3.5, k' = 1$ (asymmetrischer Fall)	87
5.4	Chaotische Eigenzustände des gekickten Kreisels für $j = 50, \beta = 1, k = 3.5, k' = 1$ (asymmetrischer Fall)	88

5.5	Reguläre und chaotische Eigenzustände des gekickten Kreisels für $j = 50$, $\beta = 1$, $k = 3.5$, $k' = 0$ (symmetrischer Fall)	90
5.6	Floquet-Spektrum des gekickten Kreisels für $j = 10$, $\beta = 1$ und $k' = 1$ als Funktion von k	93
5.7	Fehler der mit Hilfe von gequetschten Zuständen ermittelten Eigenphasen als Funktion von j	94
5.8	Klassisch verbotener Übergang im Ringbillard	95
5.9	Dynamisches Tunneln im Phasenraum des Ringbillards (schematisch)	96
5.10	Dynamisches Tunneln beim gekickten Kreisel	99
5.11	Vergleich der Beteiligung Ω des chaotischen Zustands ψ_* am Tunnelprozeß mit der Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$ (a) mit und (b) ohne Symmetrieentartung	102
5.12	Chaosunterstütztes Tunneln beim gekickten Kreisel ohne Symmetrieentartung	104
5.13	Beitrag $\Delta\varphi^{\text{II}}$ eines unterstützenden chaotischen Zustands gegen die totale Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$	110
5.14	Gemeinsamer Beitrag $\Delta\varphi^{\text{II}}$ von vier unterstützenden chaotischen Zuständen gegen die totale Tunnelaufspaltung $\Delta\varphi$	111

Umschlag: Husimi-Funktion eines nicht-chaosunterstützten Tunnel-Eigenzustands des gekickten Kreisels ohne Symmetrieentartung (siehe auch Abb. 5.12, 2. Reihe links)

Danksagungen

Ich danke Prof. F. Haake für die Vergabe des Promotionsthemas sowie für zahlreiche Diskussionen und Anregungen.

Ich danke Prof. J. Krug für die Übernahme des Mitberichts.

Ich danke Prof. H.-F. Döbele für die Übernahme des Vorsitzes in der Disputation.

Ich danke meinen Kollegen für die angenehme Atmosphäre, in der diese Arbeit entstand.

Ein besonderes Dankeschön möchte ich an Frau Sacha richten, die den von uns Physikern verursachten Verwaltungsaufwand stets zuverlässig erledigt hat.

Ich danke Fritz Haake für sein Interesse an meinem EDIT-Programm, für das „Sicherheit und Risiko“-Buch und für eine interessante, auf diese Arbeit bezogene Wette.

Ich danke Joachim Krug für interessante Lehramt-Übungsaufgaben sowie die Beruhigung meiner Nerven im Vorfeld der Disputation.

Ich danke Herrn Döbele für solide Grundlagenvorlesungen und seine Geduld bei der Terminfindung.

Harald Wiedemann verdanke ich einige Auswege aus numerischen Sackgassen sowie umfangreiche Einblicke in die Block-Problemik.

Dirk Saher danke ich für die Einführung in die Wissenschaft des Hutbauens und für interessante Reiseberichte.

Ich danke Dirk und Harald für das sorgfältige Korrekturlesen dieser Arbeit sowie unzählige wertvolle Gespräche und Tips, die mir ein erfolgreiches Arbeiten in der Physik ermöglichten.

Nils Lehmann half mir bei der Einarbeitung in die Sattelpunktmethode weiter.

Carsten Seeger brachte mich auf die entscheidenden Ideen zur Lösung des Problems der Sattelpunktnäherung in zweiter Ordnung.

Ich danke Daniel Braun für eine erlebnisreiche gemeinsame Wanderung durch das Wadi Qilt.

Ich danke Henning Schomerus, daß er Daniel und mich wieder aus dem Wadi Qilt herausgeholt hat. Außerdem danke ich Fabian Schomerus für interessante Stunden im Büro, Ikuyo Schomerus für gelegentliche Rettung vor Fabian und Lisa Schomerus dafür, daß ich sie auch noch kennenlernen durfte.

Ich danke Joachim Weber, daß er sich einen eigenen Gruppenschlüssel besorgt hat.

Christian Viele war es, der die stimmungsvollen Arbeitsgruppen-Weihnachtsfeiern organisiert hat.

Jürgen Vollmer danke ich für hilfreiche Tips zu wissenschaftlichen Veröffentlichungen.

Sven Gnutzmann danke ich für das geduldige Korrigieren unlösbarer Übungsaufgaben.

Ich danke Rüdiger Oberhage, daß er den sechsten und siebten Stock sowie meinen Doktorhut so schön vernetzt hat.

Reinhard Leidl danke ich für interessante Gespräche und nützliche Anlageberatung.

Ich danke Martin Rost für die Übernahme der Lehramt-Musterlösungen im Frühjahr 1997.

Ich danke Karol Życzkowski für die Idee mit der Husimi-Funktion, die mit dem Lyapunov-Exponenten sowie für zahlreiche Sattelpunkte und Gespräche.

Auf Marek Kuś gehen viele wertvolle Rechnungen und Tips zum gekickten Kreisel zurück.

Kapitel 3 und 5 dieser Arbeit entstanden in enger, fruchtbarer Zusammenarbeit mit Petr A. Braun, der mir in der entscheidenden Phase auch über große Entfernung hinweg jedesmal weiterhalf.

Petr Šeba verdanke ich die motivierende Idee, mich mit dynamischem Tunneln zu beschäftigen.

Jonathan Keating, Steven Tomsovic, Eyal Doron und Steffen D. Frischat danke ich für fruchtbare Diskussionen über asymptotische Entwicklungen bzw. dynamisches Tunneln.

Ich danke meiner Verlobten Anja Drewitz, meinem Bruder Markus Gerwinski sowie meinen Eltern Gretel und Erich Gerwinski für unschätzbare tatkräftige und moralische Unterstützung bei dieser Arbeit, damit verbundenen gesellschaftlichen Ereignissen und anderen Dingen.

Ich danke Markus für den inspirierenden Ausgleich durch hervorragende, physikalisch korrekte Literatur.

Ich danke Anja für aufbauende Fach- und Privatgespräche, Nachtschichten bei der Fertigstellung dieser Arbeit sowie ihre unermüdliche Beteiligung an meinen Projekten.

Meinen Eltern verdanke ich Freiheit in erstaunlich gelungener Mischung mit familiärer Geborgenheit, die mir einen optimalen Start in ein selbstverantwortliches Leben ermöglicht hat.

Ich danke den Autoren der GNU-Software, die mir in der zweiten Hälfte dieser Arbeit eine unschätzbare Hilfe war. Insbesondere danke ich Don, Richard, Linus, Juki, Jan-Jaap, Berend, Sven, Abimbola, Alexej, Bill und Frank.

Ich danke Leo, Wolf, Robert, Johannes, Michael, Andreas, Bernhard und Ulrich für solide gemeinsame Arbeit und den herzlichen Empfang im industriellen Berufsleben.

Ich danke allen meinen Freunden, die hier noch nicht erwähnt wurden, für alles, was hier noch nicht erwähnt wurde.

Und schließlich danke ich den Computern Tim, Esmeralda, Natascha[†], Gernot[†], Leos Notebook, AndreaDoria, Agnes und Titanic dafür, daß sie immer alles getan haben, was ich ihnen befohlen hatte – was manchmal sogar das war, was ich wollte.

