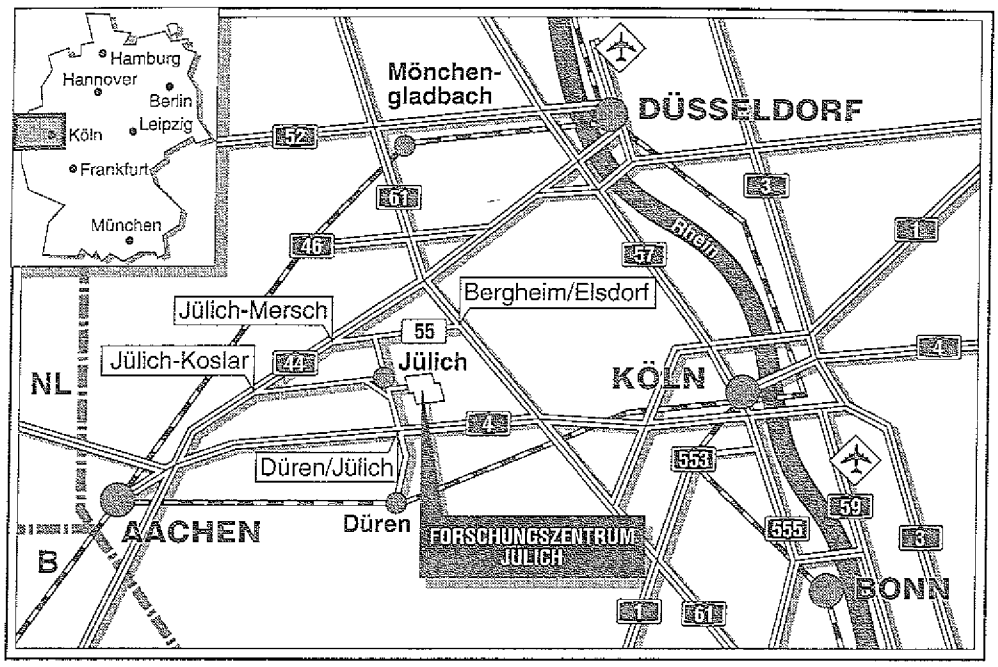
FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH

Institut für Festkörperforschung

Quantenzustände eines klassisch chaotischen Billards

Peter Scherer



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2554
ISSN 0366-0885
Institut für Festkörperforschung Jül-2554
D 38 (Diss. Universität Köln)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
Postfach 1913 · D-5170 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

Quantenzustände eines klassisch chaotischen Billards

Peter Scherer

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Vor 1925 war die Bestimmung der Eigenschaften eines quantisierten Systems aus den Eigenschaften des korrespondierenden klassischen Systems ein zentrales Problem der noch jungen Quantentheorie und der Chemie. Das Bohrsche Korrespondenzprinzip diente dabei als Wegweiser zu den Gesetzen der Quantenmechanik. Das ursprüngliche Problem, einen Weg zu finden, wie man eine Matrix- oder Wellengleichung aus dem klassischen Hamiltonian erhält, konnte nur teilweise gelöst werden. Aus der klassischen Formulierung erhält man zwar eine quantentheoretische, aber es ist noch weitgehend ungeklärt, ob auch eine allgemeine Beziehung zwischen den Lösungen der quantenmechanischen Gleichungen und denen der klassischen Mechanik existiert.

Für separable Systeme, deren Bewegung sowohl in der klassischen als auch in der Quantenmechanik durch eine zeitunabhängige Transformation in unabhängige eindimensionale Bewegungen überführt werden kann, kennt man eine asymptotische Beziehung zwischen den Lösungen. Das ist das Gebiet der WKB–Theorie. Die WKB–Lösungen erhält man durch eine *semiklassische* Näherung der quantenmechanischen Lösungen.

Man unterscheidet in der Quantenmechanik im allgemeinen drei Klassen von Näherungsverfahren:

- Störungsverfahren
- Variationsverfahren
- semiklassische Näherungen

Die *Störungstheorie* liefert Reihenentwicklungen der interessierenden Größen nach Potenzen einer Variable, die charakterisiert, wie das reale System sich von einem idealisierten System, dessen Lösungen exakt bekannt sind, unterscheidet.

Variationsverfahren suchen aus einer vorgegebenen Klasse von Test–Lösungen diejenigen heraus, die die besten Abschätzungen erlauben.

Semiklassische Näherungsverfahren führen zu Ausdrücken für Wellenfunktionen, Energieniveaus, Streuquerschnitten etc., deren analytische Form im Grenzfall $\hbar \to 0$ korrekt ist[1].

Viele quantenmechanische Funktionen verhalten sich singulär in $\hbar$ für $\hbar \to 0$. Damit ist es nicht möglich, sie im Sinne der Störungstheorie als Potenzreihen in $\hbar$ zu entwickeln, derart, daß die führenden Terme mit den Werten, die die klassische Mechanik liefert, übereinstimmen.

Das Problem der semiklassischen Approximation entspricht in Analogie der Beschreibung der Lichtausbreitung in der Näherung der geometrischen Optik durch Lichtstrahlen (Hamiltonsche kanonische Gleichungen) oder Wellenfronten (Hamilton-Jakobi-Gleichung). Die geometrische Optik ist eine gute Näherung, wenn die Wellenlängen der elektromagnetischen Wellen klein gegenüber den charakteristischen Längen der streuenden Objekte sind.

In dieser Arbeit interessieren wir uns für einen speziellen Aspekt des semiklassischen Grenzwertes. Wir untersuchen die Näherung an einem Hamiltonschen System, das klassisch vollständig chaotisch ist [20].

Chaos bedeutet die exponentielle Empfindlichkeit der klassischen Lösungen in einem beschränkten Gebiet des Phasenraumes bezüglich der Wahl der Anfangsbedingungen. Anfänglich eng benachbarte Trajektorien laufen exponentiell schnell auseinander. Unter dem Fluß werden Bereiche des Phasenraumes gestreckt und gefaltet, was zur Ergodizität und zum mischenden Verhalten der Dynamik des Systems führt [34].

Alle chaotischen Phänomene beziehen sich auf das Langzeitverhalten der Dynamik, sodaß im semiklassischen Grenzfall zwei unabhängige Grenzwerte, $\hbar \to 0$ und $t \to 0$, gleichzeitig ausgeführt werden müssen. Beide Grenzwerte sind nicht vertauschbar, das Langzeitverhalten von Quantensystemen unterscheidet

[1] $\hbar$ ist nicht dimensionslos, es hat die Dimension einer Wirkung. '$\hbar$' steht hier stellvertretend für einen semiklassischen Parameter, d.i. eine dimensionslose Kombination physikalischer Größen mit $\hbar$ im Zähler.

sich fundamental vom Langzeitverhalten klassischer Systeme [12].

Das Energiespektrum gebundener Systeme ist verknüpft mit den stationären Zuständen. In den Spektren schlägt sich also der Langzeitlimes solcher Systeme nieder. Verbindet man das mit dem semiklassischen Limes, so kann man hoffen, Beziehungen zum klassischen Chaos zu erhalten. Die Intuition ist, daß den stationären Zuständen der Quantenmechanik klassische stationäre Objekte entsprechen. Für einen Zustand mit Energie E sind das die invarianten Mengen mit Energie E im Phasenraum, also bei vollständig chaotischen Systemen einerseits die gesamte Energieschale $H(\mathrm{p}, \mathrm{q}) = E$, andererseits die periodischen Orbits in ihr.

In Hamiltonschen chaotischen Systemen wird die Energieschale von fast allen klassischen Trajektorien in ihr vollständig ausgeschöpft und ist in diesem Sinne eine generische invariante Menge im Phasenraum; die Menge der periodischen Bahnen besitzt dagegen das Maß Null. Unter der Annahme, daß die Energieschale das zu den Quantenzuständen korrespondierende klassische invariante Objekt ist, kann man die mittlere Spektraldichte des Quantensystems vorhersagen.

Dabei ist der Beitrag der periodischen Orbits nicht berücksichtigt, der nicht vernachlässigt werden kann, weil es, auch für feste Energie, unendlich viele (instabile) periodische Orbits gibt, die vermutlich sogar überall dicht liegen. Es gibt starke Hinweise darauf, daß die instabilen periodischen Orbits sowohl kollektive als auch individuelle Beiträge zum Verhalten von Quantenzuständen liefern [48].

Beide Beiträge findet man in der semiklassischen Theorie der periodischen Orbits wieder, die in den grundlegenden Arbeiten von M. C. Gutzwiller [42, 43, 44, 45] und Balian und Bloch [8, 9] entwickelt wurde. Die Autoren leiten einen semiklassischen Ausdruck für die Spur der quantenmechanischen Greenschen Funktion her. Die Spur hängt direkt zusammen mit der quantenmechanischen Zustandsdichte, liefert also Aussagen über das Energiespektrum. Ausgangspunkt für die semiklassischen Rechnungen ist die Pfad–Integral–Darstellung der Greenschen Funktion. Diese vereinfacht sich in semiklassischer Näherung zu einer einfachen Summe über Beiträge klassisch erlaubter Bahnen. Die Spurbildung führt auf zwei Beiträge. Der eine ist eine Summe über klassische periodische Orbits, während der zweite sich als Mittelung über die Energieschale herausstellt, indem im Grenzwert kleiner Zeiten Beiträge aller klassischen Bahnen aufintegriert werden, die sich nicht weit von ihrem Anfangspunkt entfernen. Letzterer gibt einen Ausdruck für die

mittlere Spektraldichte, während die Summe über periodische Orbits die Singularitäten des Spektrums reproduziert, also die Berechnung individueller Eigenwerte in semiklassischer Näherung ermöglicht.

Obwohl die semiklassische Näherung von Gutzwiller zu einer extremen Vereinfachung der Darstellung des Propagators führt, indem sie ein kompliziertes Funktionalintegral durch eine Summe über periodische Orbits ersetzt, steht man nun einem anderen Problem, diesmal der klassischen Mechanik, gegenüber, nämlich der Berechnung periodischer Orbits, deren Längen und Instabilitäten. Im Gegensatz zu integrablen Systemen, bei denen die Anzahl der periodischen Orbits nur mit einem Potenzgesetz wächst, steigt bei chaotischen Systemen die Zahl der Orbits mit Längen kleiner als eine vorgegebene Schranke exponentiell an. Das führt zu großen Schwierigkeiten bei der Anwendung der semiklassischen Theorie, die entweder darauf beruhen, daß es unmöglich ist, eine genügend große Anzahl von periodischen Orbits numerisch zu bestimmen, oder darauf, daß die Gutzwillersche Summe im physikalisch interessanten Bereich der komplexen Energieebene nicht absolut konvergiert.

A. Voros konnte eine Darstellung der Spurformel als logarithmische Ableitung nach der Energie eines unendlichen Produktes über Beiträge periodischer Orbits angeben. Diese unendlichen Produkte haben eine formale Ähnlichkeit mit der Produktdarstellung der Riemannschen Zetafunktion aus der Zahlentheorie und werden als *dynamische Zetafunktionen* bezeichnet [65].

P. Cvitanović nutzte die Beobachtung aus, daß in vielen chaotischen dynamischen Systemen eine Hierarchie auf der Menge der periodischen Orbits existiert, um für die dynamischen Zetafunktionen eine analytische Fortsetzung in den Bereich außerhalb der absoluten Konvergenz des unendlichen Produktes anzugeben. Diese beruht auf einer auch der physikalischen Intuition zugänglichen Umordnung der Summenglieder des ausmultiplizierten Produktes.

Stellt man fest, daß die Skaleneigenschaften von langen periodischen Orbits im wesentlichen bestimmt werden durch die Eigenschaften weniger Grundorbits, dann kann man die Zetafunktion als Summe darstellen, deren führender Term Beiträge dieser fundamentalen Orbits enthält. Alle weiteren Summenterme sind Korrekturen, die messen, wie gut die Beiträge von längeren Orbits schon durch kürzere approximiert werden können. Die Korrekturterme werden auch als *Krümmungen* bezeichnet. Ist die Voraussetzung erfüllt, daß es eine solche

Hierarchie für die periodischen Orbits gibt, dann erwartet man ein exponentielles Abfallen der Krümmungskorrekturen und damit eine hochkonvergente Entwicklung der dynamischen Zetafunktionen (cycle expansion) [3, 4, 24, 25].

In Kapitel 2 beschreiben wir kurz den Weg der Ableitung der allgemeinen Spurformel. Wir folgen aber nicht dem von Gutzwiller angegebenen Weg über die Entwicklung des Wirkungsintegrals in der Pfad–Integral–Darstellung des Propagators. Stattdessen benutzen wir ein Argument von W. H. Miller [57]. Er stellt einen Zusammenhang zwischen quantenmechanischen unitären Transformationen und den kanonischen Transformationen der klassischen Mechanik her.

Außerdem zeigen wir den Übergang von der Summe über periodische Orbits zu der Darstellung durch dynamische Zetafunktionen, und in Anhang A geben wir deren Summenentwicklung (cycle expansion) nach P. Cvitanović an.

In Kapitel 3 behandeln wir einen Vertreter aus einer speziellen Klasse von hyperbolischen dynamischen Systemen, den sogenannten Billards. Dabei handelt es sich um die Dynamik von Punktteilchen, die sich in einem Gebiet, das von harten Wänden begrenzt wird, frei bewegen und an diesen Wänden elastisch reflektiert werden. Sind diese Wände in dem Aufenthaltsbereich der Teilchen überall konvex gekrümmt (Sinai–Billards), dann ist dieses Billard ein vollständig chaotisches hyperbolisches System [20].

Wir untersuchen einige Eigenschaften der klassischen Dynamik des sogenannten Drei–Scheiben–Billards mit besonderem Schwerpunkt auf den periodischen Orbits. Bei diesem Billard bestehen die Begrenzungswände in der Ebene aus drei harten Scheiben mit gleichem Radius, deren Mittelpunkte auf den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks angeordnet sind. Je nachdem ob sich die Scheiben berühren oder nicht, haben wir es mit einem gebundenen oder einem Streusystem zu tun. Der Vorteil solcher Billards ist, daß sich die klassische Dynamik auf elementare Strahlengeometrie reduziert und die quantenmechanischen Resultate durch Lösen der Helmholtz–Gleichung mit Dirichlet–Randbedingung an den Wänden erhalten werden können.

In Kapitel 4 wird für das gebundene Drei–Scheiben–System die semiklassische Theorie der periodischen Orbits angewendet, um individuelle Eigenwerte zu bestimmen. Dabei benutzen wir die Methode der cycle expansion von P. Cvitanović zur Berechnung von Nullstellen der dynamischen Zetafunktionen. Diese Nullstellen sind die Polstellen der semiklassisch entwickelten Zustandsdichte. Sie liefern

also Näherungen für die Lage der Eigenwerte des Systems. Die Ergebnisse werden verglichen mit den exakten quantenmechanischen Resultaten. Die Nullstellen der Zetafunktion liegen im allgemeinen nicht auf der reellen Achse, sondern besitzen einen kleinen Imaginärteil. Wir geben eine reelle Funktion an, deren Nullstellen semiklassische Näherungen für die (reellen) Eigenwerte des gebundenen Systems sind [13, 18, 70], und testen das am Modellsystem.

Kapitel 5 behandelt das offene Drei-Scheiben-Billard in semiklassischer Näherung. Die cycle expansion liefert bei diesem Streusystem eine hochkonvergente Entwicklung [26], die es gestattet, mit wenigen periodischen Orbits des Systems eine große Zahl von semiklassischen Resonanzen zu berechnen, die mit den exakten Resonanzen sehr gut übereinstimmen.

Kapitel 2

Semiklassische Entwicklung der Greenschen Funktion

2.1 Einleitung

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit dem Zusammenhang zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik für den Fall, daß die klassischen Bewegungsgleichungen nicht integrabel sind.

Ein klassisches System mit N Freiheitsgraden ist integrabel, wenn N Konstanten der Bewegung auf dem Phasenraum existieren. Trajektorien verlaufen in einer N–dimensionalen Mannigfaltigkeit des $2N$–dimensionalen Phasenraums. Diese Mannigfaltigkeiten sind N–Tori [2]. Die verallgemeinerte Quantisierungsbedingung von Einstein, Brillouin und Keller fordert, daß das Wirkungsintegral entlang der topologisch irreduziblen Loops dieser Tori quantisiert.

In nichtintegrablen Systemen mit mehr als einem Freiheitsgrad gibt es im allgemeinen Gebiete im Phasenraum, wo keine Tori existieren. Dort erkunden die Trajektorien über große Zeiten einen Bereich mit einer Dimension größer als N. Diese Bahnen sind überwiegend instabil und verhalten sich stochastisch. Ein extremes Beispiel sind die *ergodischen* Systeme. Sie besitzen keine Tori, und fast alle Trajektorien erkunden die Nachbarschaft eines jeden Punktes der $(2N-1)$–dimensionalen Fläche konstanter Energie im Phasenraum.

Durch Anwendung von Näherungsverfahren hofft man, den Übergang von der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik auf der Ebene der Lösungen beider Theorien zu verstehen. Die semiklassische Approximation der Greenschen Funk-

tion ist Thema dieses Kapitels. Wir wollen den Weg der Ableitung der Gutzwillerschen Spurformel unter Einbeziehung der von Miller angegebenen semiklassischen Approximation unitärer Transformationen erläutern. Danach zeigen wir den Zusammenhang mit der quantenmechanischen Zustandsdichte. Wir gehen von der Summe über periodische Orbits über zu dynamischen Zetafunktionen.

2.2 Semiklassische Approximation des Propagators

Die Wellenfunktion $\psi(q)$ eines nichtrelativistischen Teilchens ohne Spin in einer Dimension erfüllt die Schrödinger–Gleichung

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \,. \tag{2.1}$$

Der Hamilton–Operator sei die Summe aus dem Operator $\hat{T}$ der kinetischen Energie und dem der potentiellen Energie $\hat{V}$. $\hat{V}$ sei nicht explizit zeitabhängig.

Die zeitabhängige Greensche Funktion K (Propagator) erfüllt in Ortsdarstellung die Gleichung

$$(\hat{H} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\, K(q'', q'; t) = 0 \tag{2.2a}$$

$$\lim_{t\to 0} K(q'', q'; t) = \delta(q'' - q') \,. \tag{2.2b}$$

Als Ausgangspunkt für seine Ableitung einer semiklassischen Näherung des quantenmechanischen Propagators nimmt M. C. Gutzwiller die Pfad–Integral–Darstellung von K, die von Feynman im Jahre 1948 angegeben wurde [35, 67].

Der Integrand des Pfad–Integrals hat den Betrag 1, seine Phase ist gegeben durch $iR/\hbar$, wo R die klassische Wirkung (Hamiltonsche Prinzipalfunktion) eines Pfades ist, der q' und q'' in der Zeit t verbindet. Man beachte, daß die Menge dieser Pfade wesentlich mächtiger ist als die Menge der unter den Randbedingungen gegebenen Lösungen zu den klassischen Hamiltonschen Gleichungen.

Die Phase des Integrals ändert sich stark, wenn $\hbar$ klein ist im Vergleich zur Wirkung R. Daher werden sich im allgemeinen die Beiträge von benachbarten Pfaden gegenseitig wegmitteln. Das gilt allerdings nicht für Pfade in der Nähe eines solchen, dessen Phasenbeitrag R stationär ist. Hier interferieren die Phasen konstruktiv. Diese stationären Pfade sind gerade die klassischen Bahnen, die sich

als Lösungen der Hamiltonschen kanonischen Gleichungen ergeben. Aufgrund der Pfad-Integral–Darstellung ist es plausibel, daß man im semiklassischen Limes für $K(q'', q'; t)$ eine Darstellung als Summe über klassisch erlaubte Bahnen erhält [42, 43, 44, 45].

Wir wollen nun erläutern, wie sich das ergibt. Dazu folgen wir einem Argument von Miller, der eine Methode zur semiklassischen Approximation unitärer Transformationen einführt [56, 57].

Zunächst stellt man fest, daß die Wirkung

$$R(q'', q'; t) = \int_0^t L(\dot{q}, q, t')dt' = \int_0^t dt' \left(p(t')\dot{q}(t') - H[p(t'), q(t')]\right) \tag{2.3}$$

die Erzeugende $F_1(q, Q)$ der Dynamischen Transformation der klassischen Mechanik ist. Die Dynamische Transformation ist diejenige kanonische Transformation, die die unitäre Zeitevolution der verallgemeinerten Koordinaten (p, q) gemäß den klassischen Bewegungsgleichungen vermittelt, also

$$p(q, Q) = \frac{\partial F_1(q, Q)}{\partial q}\ ; \qquad P(q, Q) = -\frac{\partial F_1(q, Q)}{\partial Q}\ , \tag{2.4}$$

bzw., wenn wir setzen $(P, Q) := (p', q')$ und $(p, q) := (p'', q'')$ (das sind die Koordinaten der Anfangs– und Endpunkte),

$$p''(q'', q', t) = \frac{\partial R(q'', q'; t)}{\partial q''}\ ; \qquad p'(q'', q', t) = -\frac{\partial R(q'', q'; t)}{\partial q'}\ . \tag{2.5}$$

Aus der klassischen Mechanik ist bekannt [40], daß die Funktion $F_1(q, Q, t)$ die Transformation von Koordinaten (p, q) auf einen Satz 'neuer' Koordinaten (P, Q) erzeugt vermöge:

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} \qquad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} \tag{2.6}$$

2.2.1 Semiklassische Quantisierung kanonischer Transformationen

Sei $\langle q|Q\rangle$ die Übergangsamplitude für den Übergang von einem Satz 'alter' Quantenzahlen zu einem Satz 'neuer' Quantenzahlen. Diese Amplitude ist eine komplexe Funktion. Sie kann dargestellt werden als

$$\langle q|Q\rangle \;=\; A_1(q, Q)\exp(\frac{i}{\hbar}f_1(q, Q)) \tag{2.7}$$

Für die Funktionen A_1 und f_1 sucht man nun semiklassische Ausdrücke. Dazu macht man zwei wesentliche Annahmen [56, 57]:

- Transformationen zwischen kanonisch konjugierten Variablen haben die Form[1]

$$\langle q|p\rangle = (2\pi i\hbar)^{-\frac{1}{2}} \exp(\frac{i}{\hbar}qp) \tag{2.8}$$

- Integrationen werden in der Näherung der stationären Phase[2] ausgeführt

Die Amplituden und Phasen des Ausdrucks (2.7) und entsprechender Ausdrücke für die drei anderen möglichen Übergangsamplituden setzt man ein in Identitäten der Form

$$\langle q|Q\rangle = \int dp\, \langle q|p\rangle\langle p|Q\rangle \tag{2.9a}$$

$$\langle q|Q\rangle = \int dP\, \langle q|P\rangle\langle P|Q\rangle\,. \tag{2.9b}$$

Unter Benutzung von (2.8) und in der Näherung der stationären Phase (siehe Fußnote 2) findet man, daß f_1 dieselben Gleichungen wie die klassische Erzeugende F_1 erfüllt. Den Transformationsgleichungen (2.4) entspricht je eine Bedingung der stationären Phase. Miller zeigt ausführlich, daß die formale Analogie zu den Erzeugenden der klassischen Mechanik komplett ist. Daher ist $f_1 = F_1 = R$. Für die Amplitude $A_1(q,Q)$ erhält man aus diesen Rechnungen den Ausdruck

$$A_1(q,Q) = \left(\frac{\partial^2 F_1(q,Q)/\partial q\partial Q}{-2\pi i\hbar}\right)^{1/2}\,. \tag{2.10}$$

Der semiklassische Grenzwert der unitären Übergangsamplitude zwischen den Koordinaten q und Q lautet dann

$$\langle q|Q\rangle = \left(-\frac{\partial^2 F_1(q,Q)/\partial q\partial Q}{2\pi i\hbar}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}F_1(q,Q)\right)\,. \tag{2.11}$$

[1] Die Funktion $\langle q|p\rangle$ ist bis auf einen konstanten Phasenfaktor eindeutig bestimmt, wenn man Normierung der Impuls– und Ortseigenzustände auf Deltafunktionen fordert [29]. Diese Phase wird hier – im Unterschied zur üblichen Konvention – $\exp(-i\pi/2)$ gesetzt, um den entsprechenden Vorfaktor in der Näherung der stationären Phase zu kompensieren.

[2] Wir benötigen bei den folgenden Rechnungen die Näherung eines Integrals mit oszillierendem Phasenfaktor:

$$\int dx\, f(x)\exp(i\Phi(x)/\hbar) \approx f(x_0)\left(\frac{2\pi i\hbar}{\Phi''(x_0)}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\Phi(x_0)}{\hbar}\right)$$

wobei x_0 der Punkt der stationären Phase ist, d.h. $\Phi'(x_0) = 0$.

Quantenmechanisch liefern alle Impulse p einen Beitrag zur Übergangsamplitude $\langle q|Q\rangle = \int dp\ \langle q|p\rangle\langle p|Q\rangle$. Semiklassisch dagegen wird das Integral über p in stationärer Phase ausgewertet, was dazu führt, daß nur bestimmte Werte von p eine Rolle spielen, nämlich diejenigen, die aufgrund der klassischen Bewegungsgleichungen bei vorgegebenen q und Q möglich sind.

Hat das System nicht, wie bisher angenommen, einen, sondern N Freiheitsgrade, dann werden aus q und Q N-dimensionale Koordinatenvektoren $\mathbf{q}$ und $\mathbf{Q}$. Die zweiten partiellen Ableitung von F_1 in Gleichung (2.11) werden durch die Funktionaldeterminante von F_1 ersetzt.

Außerdem besitzt die Funktion $\mathbf{p}(\mathbf{q},\mathbf{Q})$ im allgemeinen mehr als einen Punkt stationärer Phase. Dann ergibt die Näherung eine Summe über alle diese stationären Punkte. Für ein System mit N Freiheitsgraden gilt im semiklassischen Limes

$$\langle \mathbf{q}|\mathbf{Q}\rangle = \sum_{\substack{\text{klassische}\\ \text{Bahnen}}} \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{-N/2}} \det\left[\left(-\frac{\partial^2 F_1(\mathbf{q},\mathbf{Q})}{\partial q_i \partial Q_j}\right)\right]^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}F_1(\mathbf{q},\mathbf{Q})\right) . \tag{2.12}$$

F_1 ist identisch mit der Hamiltonschen Prinzipalfunktion $R(q'',q';t)$, falls man $(P,Q) := (p',q')$ und $(p,q) := (p'',q'')$ wählt.

$|q'\rangle$ und $|q''\rangle$ sind die Schrödingerschen Ortseigenzustände des Hamiltonians zur Zeit $t=0$. Der Zustandsvektor $|Q\rangle$ ist der Heisenberg– Zustand

$$|Q\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,|q'\rangle\ , \tag{2.13}$$

d.h. der zeitentwickelte Zustand $|q'\rangle$ zur Zeit t. Dann ist die Übergangsamplitude

$$\langle q|Q\rangle = \langle q''|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|q'\rangle \tag{2.14}$$

ein Matrixelement des Propagators K in Ortsdarstellung:

$$K(q'',q';t) = \langle q''|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|q'\rangle\ , \tag{2.15}$$

und für diese Amplitude hat man eine semiklassische Näherung gefunden. Für den semiklassischen Propagator erhält man als Konsequenz aus diesen Betrachtungen den folgenden Ausdruck [42, 43, 44, 45]:

$$K^{SC}(\mathbf{q}'',\mathbf{q}';t) = \sum_{\substack{\text{klassische}\\ \text{Bahnen}}} \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{N/2}} \sqrt{C}\ \exp(\frac{i}{\hbar}R(\mathbf{q}'',\mathbf{q}';t))\ . \tag{2.16}$$

Mit C bezeichnen wir hier und im weiteren die sogenannte Van-Vleck–Determinante $\det(-\partial^2 R/\partial q'\partial q'')$ [61].

2.2.2 Diskussion der Phase von $K^{sc}(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; t)$

Entlang einer klassischen Bahn gibt es Punkte, an denen die Matrix der zweiten Ableitungen von R nach den Anfangs– und Endkoordinaten der Bahn singulär wird. Das sieht man ein, wenn man $p' = -\partial R/\partial q'$ benutzt. Damit hat man nämlich

$$-\frac{\partial^2 R}{\partial q'' \partial q'} = \frac{\delta p'}{\delta q''}\,, \tag{2.17}$$

und wenn bei Variation des Anfangsimpulses p' die Variation der Koordinate q'' null ist, dann ist offenbar $-\partial^2 R/\partial q'' \partial q'$ singulär.

Solche Punkte nennt man *konjugierte Punkte.* Für kleine Zeiten ist obige Matrix positiv definit, bei Variationen des Anfangsimpulses defokussieren die Trajektorien. An konjugierten Punkten ändern benachbarte Trajektorien ihr Verhalten, sie fokussieren. Das schlägt sich nieder im Eigenwertspektrum der Matrix. An jedem konjugierten Punkt der Bahn wechselt ein Eigenwert sein Vorzeichen (Morse–Theorem [58]).

Sei n die Zahl der negativen Eigenwerte von $-\partial^2 R/\partial q'' \partial q'$ entlang einer klassischen Bahn. n zählt die konjugierten Punkte. Man kann also in Gleichung (2.16) den Betrag der Determinante nehmen, jeder Vorzeichenwechsel eines Eigenwertes bedeutet dann aber einen zusätzlichen Faktor $(-1)^{1/2} = exp(-i\pi/2)$, den man in der Phase von K^{sc} korrigieren muß. Das ist ein kumulativer Prozeß entlang der Bahn. Man erhält

$$K^{sc} = \sum_{\substack{\text{klassische}\\ \text{Bahnen}}} \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{N/2}} \sqrt{|C|}\, \exp(i(\frac{R}{\hbar} - n\frac{\pi}{2}))\,. \tag{2.18}$$

Diesen Phasenverlust an einem konjugierten Punkt kann man in Analogie sehen zur Phasenverschiebung einer Welle, die an einem losen Ende reflektiert wird, z.B. an einer weichen Wand (endliche Potentialschwelle). Eine Reflexion am festen Ende, bzw. an einer harten Wand, produziert dagegen einen Phasensprung von π.

Die physikalische Interpretation von Gleichung (2.18) ist die folgende. Jede klassische Bahn trägt eine Welle mit der Phase $R/\hbar$, korrigiert um eine konstante Phasenverschiebung $n\pi/2$. Das Amplitudenquadrat der Welle ist die Jakobimatrix $\partial p'(q'', q')/\partial q''$. Diese ist proportional zur Dichte derjenigen klassischen Bahnen, die in q'' enden, von q' mit verschiedenen Impulsen p' starten, und dafür die Zeit t benötigen.

2.3 Der semiklassische Propagator als Funktion der Energie

Statt der Zeit t als unabhängigem Parameter soll nun die Energie E als Parameter eingeführt werden, d.h. die Rolle des zeitabhängigen Propagators $K(q'', q'; t)$ übernimmt nun die Greensche Funktion $G(q'', q'; E)$

$$G(q'', q'; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt\, K(q'', q'; t)\, e^{iEt/\hbar} \,. \tag{2.19}$$

$G(q'', q'; E)$ ist eine Laplace–Transformierte von $K(q'', q'; t)$. Dieselbe Beziehung fordern wir auch für die semiklassischen Näherungen G^{sc} und K^{sc}:

$$G^{sc}(q'', q'; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt\, K^{sc}(q'', q'; t)\, e^{iEt/\hbar} \,. \tag{2.20}$$

Man führt nun für das Integral in (2.20) nach Einsetzen des Resultates (2.18) eine Näherung in stationärer Phase aus[3].

Die Bedingung für die Zeiten t_0, bei denen die Phase stationär ist, lautet

$$\frac{\partial}{\partial t}(R(q'', q'; t) + Et) = \frac{\partial R}{\partial t} + E = 0 \,. \tag{2.21}$$

t_0 ist die Zeit, in der das System von q' nach q'' auf der Energieschale $E = const$ entlang einer stationären Bahn gelangt.

Der Übergang von dem unabhängigen Parameter t zur Energie E wird also wieder durch eine Legendre–Transformation vermittelt, die sich aus (2.21) ergibt. Wir definieren

$$S(q'', q'; E) := R(q'', q'; t) + Et \,. \tag{2.22}$$

Dieses S ist die klassische Wirkungsfunktion auf der Energieschale[4] $H(p, q) = E$.

---

[3] An dieser Stelle ist wichtig zu bemerken, daß eine stationäre Phasennäherung nicht gemacht werden kann, wenn q' und q'' sehr nah benachbart sind; denn in diesem Fall gibt es eine direkte Bahn, für die die Zeit t_0 sehr klein ist. Die Determinante C ist dann eine stark variierende Funktion von Anfangs– und Endpunkt [14], im Gegensatz zur Voraussetzung der stationären Phasennäherung, wonach sie konstant sein sollte.

[4]

$$R+Et = \int_0^t L\, dt' + E\int_0^t dt' = \int_0^t (L+H)dt' = 2\int_0^t T dt' = \int_0^t p\dot{q} dt' = \int_{q'}^{q''} p\, dq = S(q'', q'; E)$$

Dabei ist $H(p, q)$ die klassische Hamiltonsche Funktion, $L(q, \dot{q}, t)$ die Lagrange–Funktion und $T = p^2/2m$ die kinetische Energie.

Der Term $\sqrt{|C|/(\partial^2 R/\partial t^2)}$ ist proportional zur Amplitude der stationären Phasennäherung des Integrals. Wie Gutzwiller zeigt, kann er allein durch S ausgedrückt werden [48]. Es ergibt sich

$$\frac{C}{\partial^2 R/\partial t^2} = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial q''} & \frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial q'' \partial E} & \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \end{bmatrix} . \tag{2.23}$$

Die $(N+1)$–reihige Determinante auf der rechten Seite nennen wir im folgenden D.

Für die semiklassische Greensche Funktion erhält man das Endergebnis[5].

$$G^{sc}(\mathrm{q}'', \mathrm{q}'; E) = \sum_{\substack{\text{klassische} \\ \text{Bahnen}}} \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{(N+1)/2}} \sqrt{|D|} \exp(\frac{i}{\hbar} S(\mathrm{q}'', \mathrm{q}'; E) - i\sigma\frac{\pi}{2}) \tag{2.24}$$

2.4 Die allgemeine Spur–Formel

In vielen Anwendungen tragen K^{sc} und G^{sc} mehr Informationen als man benötigt. Ist man z.B. nur an der Lage der Energieniveaus interessiert, dann kann man ein Raumintegral von G auswerten, wobei die Koordinate $q = q' = q''$ den gesamten Konfigurationsraum überdeckt [45].

Wir schreiben die semiklassische Version der Spur der Greenschen Funktion hin

$$\mathrm{Tr}\, G^{sc}(\mathrm{q}, \mathrm{q}; E) = \int d^N q \; G^{sc}(\mathrm{q}, \mathrm{q}; E) \, . \tag{2.25}$$

Unter dem Integral stehen also die einzelnen Summenglieder aus Gleichung (2.24), die jeweils von den klassischen Bahnen herrühren, die den Anfangspunkt q' und q'' verbinden. Hier fallen aber q' und q'' zusammen; denn integriert wird die Koordinate $q = q' = q''$ über den Konfigurationsraum.

Zunächst muß man bemerken, daß im Integral (2.25) zwei verschiedene Klassen von Bahnen einen Beitrag liefern:

- Bahnen, die im Grenzübergang $q' \to q''$ die beiden Punkte direkt verbinden
- Bahnen, die sich weit von q' entfernen, bis sie wieder zurückkehren.

[5] Eine ausführliche Diskussion der Phasenkorrekturen findet man zum Beispiel in [14, 64, 22].

Für die erste Klasse ist keine stationäre Phasennäherung möglich. Man erhält also zwei verschiedene Anteile der semiklassischen Spur:

$$\mathrm{Tr}\, G^{sc}(E) = g_0(E) + g_{po}(E)\,. \tag{2.26}$$

Wie in [14] gezeigt wird, liefert die Integration über die direkten Bahnen in (2.25) in führender Ordnung in $\hbar$ die Thomas–Fermi–Formel für die mittlere Zustandsdichte, falls der Hamilton–Operator gegeben ist durch $H(\mathrm{p},\mathrm{q}) = \mathrm{p}^2/2m + V(\mathrm{q})$. Genauer:

$$-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\, g_0(E) \simeq \rho_{TF}(E) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{N/2} \int\limits_R d\mathrm{q}\, \frac{(E - V(\mathrm{q}))^{N/2-1}}{\Gamma(N/2)}\,. \tag{2.27}$$

R ist dabei die Region des Konfigurationsraumes, wo $E > V(\mathrm{q})$ ist, und N ist die Zahl der Freiheitsgrade.

In diesem Term spiegelt sich die Annahme, daß unter semiklassischen Bedingungen jeder Quantenzustand ein Volumen h^N des klassischen Phasenraumes einnimmt[6].

Wir kommen nun zur zweiten Klasse von Bahnen. Im allgemeinen stimmen Anfangs– und Endimpuls dieser Bahnen nicht überein. Welche Bahnen aber werden ausgezeichnet, wenn wir das Integral (2.25) wiederum in stationärer Phase ausführen? Nach Einsetzen von (2.24) liest man ab, daß die Bedingung für eine stationäre Phase das Verschwinden der ersten Ableitung von $S(q,q;E)$ nach q ist, also

$$\left.\frac{\partial S(q'',q';E)}{\partial q''}\right|_{q''=q} + \left.\frac{\partial S(q'',q';E)}{\partial q'}\right|_{q'=q} = p'' - p' = 0\,. \tag{2.28}$$

Das bedeutet, daß diejenigen Bahnen den Hauptbeitrag zur Spur der semiklassischen Greenschen Funktion liefern, bei denen zusätzlich zu Anfangs- und Endpunkt auch noch Anfangs- und Endimpuls übereinstimmen. Das sind gerade die *klassischen periodischen Orbits.* Die Summe über Bahnen reduziert sich also auf eine Summe über periodische Bahnen.

Zur Bestimmung der Amplitude dieser stationären Phasennäherung nach Gutzwiller führt man in der Nähe eines periodischen Orbits ein spezielles Koordinatensystem[7] ein mit den Eigenschaften

[6] Für eine genaue Diskussion des Terms g_0 siehe [6, 7, 14, 10].

[7] Wir beschränken uns ab hier auf ein System mit zwei Freiheitsgraden.

- eine Koordinate q_1 verläuft in Richtung des Orbits und
- eine Koordinate q_2 verläuft senkrecht zur Richtung des Orbits.

Man entwickelt die Wirkung $S(q, q; E)$ in diesem Koordinatensystem in der Nähe eines periodischen Orbits. Die Koordinate q splittet in zwei Anteile $q = q_1 + \delta q$, wo q_1 die Koordinate in Richtung des Orbits und δq eine kleine Abweichung senkrecht dazu bezeichne.

Das Spurintegral wird wiederum in stationärer Phase ausgewertet. Die Koordinaten sind so gewählt, daß man im Integral über die Umgebung eines periodischen Orbits – und nur eine solche Umgebung liefert überhaupt nennenswerte Beiträge, wie wir aufgrund der Phasenbedingung (2.28) wissen – zuerst die Integration transversal zum Orbit in stationärer Phase ausführen kann. Die zweite Integration längs der Bahn ist dann sehr einfach auszuführen, da der Integrand in seinen wesentlichen Teilen von der Koordinate q_1 längs der Bahn unabhängig ist.

Für jeden periodischen Orbit erhält man nach Ausführen des transversalen Integrationsanteils in stationärer Phase eine Amplitude der Form $|\det(\mathbf{M} - \mathbf{1})|^{-1/2}$. Dabei ist $\mathbf{M}$ die Stabilitätsmatrix der Bewegung transversal zum Orbits (siehe Anhang C.1). Übrig bleibt dann noch das Integral über die Zeit längs des Orbits; das ergibt seine Periode T [48].

Die semiklassische Spurformel [44] als Summe über periodische Orbits lautet dann:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Tr} G^{sc}(\mathbf{q}, \mathbf{q}; E) &= g_0(E) + g_{po}(E) && (2.29a)\\
&= g_0(E) + \frac{1}{i\hbar} \sum_p T_p \frac{e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}}{|\det(\mathbf{M}_p - \mathbf{1})|^{1/2}} && (2.29b)\\
&= g_0(E) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{ppo} \sum_{r=1}^{\infty} T_p \frac{e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)r}}{|\det(\mathbf{M}_p^r - \mathbf{1})|^{1/2}} \,. && (2.29c)
\end{aligned}$$

Ist ein periodischer Orbit nicht als Mehrfachdurchlauf eines kürzeren Orbits darstellbar, dann bezeichnet man ihn als *primperiodischen Orbits* (abgekürzt 'ppo'). Jeder Orbit ist entweder selbst primperiodisch oder ein Mehrfachdurchlauf eines solchen. Die Periode T_p ist definiert als die kürzeste Rückkehrzeit des Orbits p, also als die Periode des zugehörigen primperiodischen Orbits.

In (2.29) wurde das ausgenutzt, um die Summe über die periodischen Orbits in eine Doppelsumme über die primperiodischen Orbits und alle ihre Mehrfachdurchläufe umzuformen. Dabei ist noch folgendes zu beachten: Wird ein

primperiodischer Orbit r-mal durchlaufen, dann ist die Wirkung das r-fache der Wirkung des Orbits. Ebenso wird die Zahl ν der konjugierten Punkte mit r multipliziert, da jeder dieser Punkte r-mal passiert wird. Außerdem muß die Stabilitätsmatrix zur r-ten Potenz erhoben werden.

2.5 Die Zustandsdichte eines gebundenen Systems

Zwischen der quantenmechanischen Zustandsdichte

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

und dem Propagator $G(\mathsf{q}, \mathsf{q}'; E)$ zur Schrödingergleichung $(E - \hat{H})\psi(\mathsf{q}) = 0$ mit

$$(E - \hat{H})G(\mathsf{q}, \mathsf{q}'; E) = \delta(\mathsf{q} - \mathsf{q}')$$

besteht ein Zusammenhang, der hier abgeleitet werden soll.

$\hat{H}$ besitze ein vollständiges diskretes Spektrum mit normierten Energieeigenzuständen $\psi_n(\mathsf{q}) = \langle \mathsf{q}|n\rangle$ in Ortsdarstellung. Sind alle Eigenwerte $E_n \neq 0$, dann ist

$$\begin{aligned} G(\mathsf{q}, \mathsf{q}'; E) &= \langle \mathsf{q}|\frac{1}{E - \hat{H}}|\mathsf{q}'\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \langle \mathsf{q}|n\rangle\langle n|\frac{1}{E - \hat{H}}|n'\rangle\langle n'|\mathsf{q}'\rangle \\ &= \sum_n \langle \mathsf{q}|n\rangle \frac{1}{E - E_n}\langle n|\mathsf{q}'\rangle \\ &= \sum_n \frac{\psi_n(\mathsf{q})\psi_n^*(\mathsf{q}')}{E - E_n} \,. \end{aligned} \tag{2.30}$$

Alle Eigenwerte von $\hat{H}$ sind reell. $G(E)$ ist eine analytische Funktion in der komplexen E-Ebene ausgenommen an den Eigenwerten E_n des Hamiltonoperators auf der reellen Achse. Dort besitzt G Pole erster Ordnung. Umgekehrt liefern die Pole von G die diskreten Eigenwerte von $\hat{H}$.

Bezeichnet man

$$G^+(\mathsf{q}, \mathsf{q}'; E) := \lim_{\epsilon \to 0} G(\mathsf{q}, \mathsf{q}'; E + i\epsilon)$$

und benutzt die Identität

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{x\pm i\epsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)\,,$$

wo $\mathcal{P}\frac{1}{x}$ der Cauchy'sche Hauptwert von $\frac{1}{x}$ ist, so folgt

$$G^+(\mathrm{q},\mathrm{q}';E) = \sum_n \psi_n^*(\mathrm{q})\psi_n(\mathrm{q}')\left[\mathcal{P}\frac{1}{E-E_n} - i\pi\delta(E-E_n)\right]\,.$$

Mittelung über den Ortsraum liefert

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,G^+(\mathrm{q},\mathrm{q};E) &= \int d\mathrm{q}\; G^+(\mathrm{q},\mathrm{q};E)\\ &= \sum_n\left(\mathcal{P}\frac{1}{E-E_n} - i\pi\delta(E-E_n)\right)\,,\end{aligned}$$

und damit

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E-E_n) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,G^+(\mathrm{q},\mathrm{q};E)\,. \tag{2.31}$$

Die semiklassische Approximation der Zustandsdichte kann dann als Summe zweier Beiträge geschrieben werden, wie wir im letzten Abschnitt gesehen haben:

$$\rho(E) = \rho_0(E) + \rho_{po}(E)\,. \tag{2.32}$$

Ist $N_0(E)$ die mittlere Zustandsdichte des Systems, dann erhält man ρ_0 durch Ableiten nach der Energie:

$$\rho_0(E) = \frac{\partial}{\partial E}N_0(E)\,. \tag{2.33}$$

Der zweite Term in (2.32) ergibt sich aus (2.29) und ist eine Summe über alle verschiedenen primperiodischen Orbits und ihre Mehrfachdurchläufe

$$\rho_{po}(E) = \mathrm{Re}\,\frac{1}{\pi\hbar}\sum_p\sum_{r=1}^{\infty} T_p\frac{e^{i(S_p(E)/\hbar-\nu_p\pi/2)r}}{|\det(\mathrm{M}_p^r-\mathbb{1})|^{1/2}}\,. \tag{2.34}$$

Dabei bezeichnet p die verschiedenen primperiodischen Orbits. T_p und S_p sind deren Periode und Wirkung, ν_p ist der zugehörige Maslov-Index und M_p die Stabilitätsmatrix senkrecht zum Orbit.

2.6 Dynamische Zetafunktionen

Man kann (2.34) umschreiben als logarithmische Ableitung eines unendlichen Produktes [73]. Das soll hier für den Fall eines vollständig chaotischen Hamiltonschen Systems mit zwei Freiheitsgraden gezeigt werden.

Die Linearisierung des Flusses senkrecht zu den periodischen Orbits sei durch eine (2×2)-Matrix mit reellen Eigenwerten Λ_p und $1/\Lambda_p$ mit $|\Lambda_p| \geq 1$ dargestellt (Anhang C.1). Dann hat man zunächst

$$\begin{aligned} |\det(\mathrm{M}_p^r - 1)|^{\frac{1}{2}} &= |\det \operatorname{diag}(\Lambda_p^r - 1, \frac{1}{\Lambda_p^r} - 1)|^{\frac{1}{2}} = |\Lambda_p^r - 1|^{\frac{1}{2}} |1 - \frac{1}{\Lambda_p^r}|^{\frac{1}{2}} \\ &= |\Lambda_p|^{\frac{r}{2}} (1 - \frac{1}{\Lambda_p^r}) , \end{aligned}$$

und (2.34) wird zu

$$\begin{aligned} \rho_{po}(E) &= \mathrm{Re} \frac{1}{\pi\hbar} \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} T_p \frac{e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2) r}}{|\Lambda_p|^{\frac{r}{2}} (1 - \frac{1}{\Lambda_p^r})} \\ &= \mathrm{Re} \frac{1}{\pi\hbar} \sum_p \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} T_p \left(|\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)} \right)^r \\ &= \mathrm{Re} \frac{1}{\pi\hbar} \sum_p \sum_{j=0}^{\infty} T_p \frac{|\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}}{1 - |\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}} \qquad (2.35) \\ &= -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \sum_p \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial E} \ln \left(1 - |\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)} \right) \qquad (2.36) \\ &= -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \frac{\partial}{\partial E} \ln Z(E) . \qquad (2.37) \end{aligned}$$

$Z(E)$ ist die Selberg-Zetafunktion

$$\begin{aligned} Z(E) &= \prod_{j=0}^{\infty} \prod_p \left(1 - |\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)} \right) \qquad (2.38) \\ &= \prod_{j=0}^{\infty} \prod_p \left(1 - t_p^{(j)} \right) . \qquad (2.39) \end{aligned}$$

Dabei haben wir den Beitrag des periodischen Orbits p zum j-ten Teilprodukt abgekürzt durch

$$t_p^{(j)} = \frac{e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}}{|\Lambda_p|^{1/2} \Lambda_p{}^j} . \qquad (2.40)$$

Ein invers unendliches Produkt über die periodischen Orbits wird als *dynamische Zetafunktion*[8] $\zeta_j(E)$ bezeichnet [65]:

$$\zeta_j^{-1}(E) := \prod_p (1 - t_p^{(j)}) \,. \tag{2.41}$$

[8]Diese Bezeichnung wurde gewählt wegen der formalen Analogie zur *Riemannschen Zetafunktion* [66], die ein Produkt über alle Primzahlen ist:

$$\zeta_R^{-1}(s) = \left(\sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}\right)^{-1} = \prod_{\text{Primzahlen } p} (1 - e^{-sp}) \,.$$

In der dynamischen Zetafunktion übernehmen die primperiodischen Orbits die Rolle der Primzahlen (vgl. auch [12]).

Kapitel 3

Eigenschaften der klassischen Dynamik des Billards

3.1 Einleitung

Billards gehören zur Klasse von hyperbolischen dynamischen Systemen mit Singularitäten. Man versteht darunter die freie Bewegung eines Punktteilchens in einem Gebiet, das stückweise glatte Begrenzungswände besitzt[1]. Das Teilchen soll an den Wänden elastisch reflektiert werden nach dem Gesetz 'Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel'. Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf Billards in der Ebene und bezeichnen die Gesamtheit der reflektierenden Wände mit ∂B.

Zu jedem Zeitpunkt ist der Zustand des Teilchens festgelegt einzig durch seine Position und Bewegungsrichtung; denn die elastische Reflexion erhält die Energie und damit den Betrag der Geschwindigkeit. Die Dynamik reduziert sich also auf elementare Strahlengeometrie.

In diesem Kapitel behandeln wir, nach einer Einführung der wichtigsten Begriffe, ein spezielles chaotisches Billard. Wir beschreiben einige Eigenschaften der klassischen Dynamik des Systems unter besonderer Berücksichtigung der periodischen Bahnen. Durch Änderung eines Parameters kann das System sowohl ein gebundenes, als auch ein Streusystem modellieren.

[1] Für eine allgemeine mathematische Definition von *Billards* siehe z.B. [20]

3.2 Billards

3.2.1 Billard–Abbildung

Sei ∂B die Begrenzung eines Gebietes B in der Ebene. Ein Teilchen bewege sich frei in B und werde elastisch reflektiert, wann immer es auf den Rand ∂B trifft. Zwischen zwei Reflexionen an ∂B bewegt sich das Teilchen auf Geraden. Also ist eine Bahn des Teilchens eindeutig festgelegt, wenn man die Folge der Reflexionsorte und –winkel kennt. Das ursprüngliche dynamische System besitzt einen vierdimensionalen Phasenraum. Da der Betrag des Impulses konstant bleibt, kann man die Dimension um eins erniedrigen. Wir bezeichnen als *Billard–Abbildung* $\mathcal{B}$ die (diskrete) Abbildung der zweidimensionalen Poincaré–Mannigfaltigkeit $\{(q,p) \in \partial B \times S^1\}$ auf sich. Eine Bahn, die man durch Iteration der Billard–Abbildung erhält, ist dann gegeben durch eine Folge von Punkten (q_n, p_n), die jeweils zur n–ten Reflexion gehören, und einer Anfangsbedingung (q_0, p_0). q ist der Ort der Reflexion und p die Richtung des Impulses vor der Reflexion. Es ist[2]:

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \mathcal{B} \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} . \tag{3.1}$$

Jede Bahn, die man durch unendlich viele Iterationen der Billard–Abbildung erhält, fällt in eine von drei Klassen

1. Aus einer endlichen Menge von N Punkten $(q_0, p_0), (q_1, p_1), \cdots, (q_{N-1}, p_{N-1})$ wird jeder Punkt durch $\mathcal{B}$ auf seinen Nachfolger und der letzte wieder auf den ersten abgebildet. Das entspricht einer geschlossenen Bahn der vollen Dynamik nach N Reflexionen. Ein solcher *periodischer Orbit* erfüllt die Gleichung

$$\begin{pmatrix} q_{n+N} \\ p_{n+N} \end{pmatrix} = \mathcal{B}^N \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} . \tag{3.2}$$

   Jeder der N Punkte ist also Fixpunkt der N-ten Iterierten $\mathcal{B}^N$ von $\mathcal{B}$.

2. Die Iterierten des Anfangspunktes bilden einen glatte Kurve auf der Poincaré–Mannigfaltigkeit. Diese nennt man *invariante Kurve*, da sie unter $\mathcal{B}$

[2]Die Abbildung $\mathcal{B}$ ist im allgemeinen nichtlinear und kann in diesem Fall nicht durch eine (2×2)-Matrix dargestellt werden.

wieder auf sich abgebildet wird, obwohl ihre einzelnen Punkte nicht auf sich abgebildet werden.

3. Die Iterierten des Anfangspunktes liegen dicht in einer Fläche der Poincaré–Mannigfaltigkeit. Das geschieht, wenn der Orbit, nicht eingeschränkt durch eine Erhaltungsgröße, sich chaotisch entwickelt.

3.2.2 Stabilität periodischer Orbits eines Billards

Wir wählen einen periodischen Orbit der Periode N mit dem Anfangspunkt (s_0, p_0) und eine Abweichung von dieser Anfangsbedingung $(\delta s_0, \delta p_0)$. Die Stabilitätsmatrix $\mathrm{M}_{(N)}$ ergibt sich als Linearisierung der Billard–Abbildung $\mathcal{B}$. Sie gibt an, wie sich die Abweichung nach N Iterationen der Billard–Abbildung verhält, wenn der Anfangspunkt (s_0, p_0) wieder auf sich abgebildet wird (siehe auch Anhang C.1):

$$\begin{pmatrix} \delta s_N \\ \delta p_N \end{pmatrix} = \mathrm{M}_{(N)} \begin{pmatrix} \delta s_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix} . \tag{3.3}$$

$\mathrm{M}_{(N)}$ ist eine (2×2)-Matrix mit Determinante 1. Die Eigenwerte von $\mathrm{M}_{(N)}$ charakterisieren die Stabilität des periodischen Orbits. Man kann sie durch die Spur dieser Matrix ausdrücken:

$$\Lambda_{\pm} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\,\mathrm{M}_{(N)} \pm \sqrt{(\mathrm{Tr}\,\mathrm{M}_{(N)})^2 - 4}\right) . \tag{3.4}$$

Der Orbit ist

- *stabil*, falls $|\mathrm{Tr}\,\mathrm{M}_{(N)}| < 2$ (Eigenwerte sind komplex konjugiert auf dem Einheitskreis, Abweichungen schwanken um 0 und sind beschränkt.)
- *instabil*, falls $|\mathrm{Tr}\,\mathrm{M}_{(N)}| > 2$ (Eigenwerte sind reell und reziprok zueinander, Abweichungen wachsen exponentiell an.)
- *neutral*, falls $|\mathrm{Tr}\,\mathrm{M}_{(N)}| = 2$ (Eigenwerte sind beide $+1$ oder -1, Abweichungen wachsen nur linear an.)

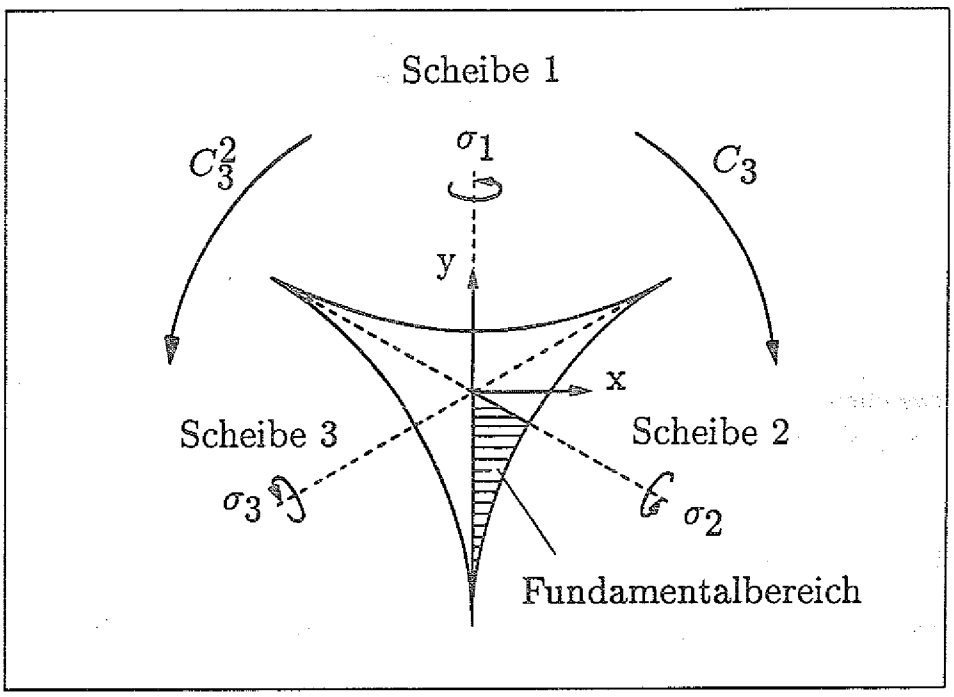


Abbildung 3.1: Geometrie des gebundenen Drei–Scheiben–Billards und die Elemente der Symmetriegruppe C_{3v}. Jeder Teil des Inneren kann mit Hilfe der Symmetrietransformationen auf den Fundamentalbereich abgebildet werden.

3.3 Drei–Scheiben–Billard

In diesem Abschnitt beschreiben wir ein spezielles Billard–System, das uns im folgenden als Modellsystem für unsere quantenmechanischen und semiklassischen Rechnungen dienen soll.

Dieses System besteht aus drei harten Kreisscheiben mit gleichem Radius r in der Ebene, deren Mittelpunkte auf den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks mit Seitenlänge d liegen (siehe Abbildung 3.1). Skalt man die ganze Anordnung mit dem Radius r der Scheiben, dann bleibt als freier Parameter das Verhältnis $d : r$ übrig. Das freie Teilchen werde an den äußeren Wänden der Scheiben elastisch reflektiert. Ist $d : r = 2$, so berühren sich die Scheiben. In diesem Fall interessieren wir uns für die Bewegung des Teilchens im Raum zwischen den Scheiben, wo es für alle Zeiten eingesperrt bleibt. Man spricht in diesem Fall von einem *gebundenen* Billard–System. Ist der Parameter $d : r > 2$, so hat das Teilchen die Möglichkeit, durch die Kanäle zwischen den Scheiben ins Unendliche

Charaktertafel C_{3v}			
	I	$2C_3$	3σ
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Tabelle 3.1: Charaktertafel der Symmetriegruppe C_{3v}

zu entweichen. Dann haben wir es mit einem *Streusystem* zu tun. Aspekte der klassischen Mechanik dieses Systems wurden in [30] untersucht.

3.3.1 Symmetrien

Wir führen in der Ebene der drei Scheiben ein kartesisches Koordinatensystem mit Ursprung im Mittelpunkt des gleichseitigen Dreiecks ein, auf dessen Ecken die Scheiben liegen. Die y-Achse gehe durch den Mittelpunkt der Scheibe 1 (Abbildung 3.1).

Diese Anordnung besitzt C_{3v}-Symmetrie. Die Symmetriegruppe C_{3v} besteht aus 6 Elementen $I, C_3, C_3^2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, die man zu 3 Klassen zusammenfassen kann:

- Klasse 1 besteht aus der Identität I
- Klasse 2 enthält die Symmetrieoperationen C_3 und C_3^2, das sind die *Rotationen* um $\frac{2}{3}\pi$ und $\frac{4}{3}\pi$ um den Ursprung
- Klasse 3 sind die Spiegelungen σ_1, σ_2 und σ_3 an den drei Winkelhalbierenden $x = 0$, $y = -(1/\sqrt{3})x$ und $y = +(1/\sqrt{3})x$

Die Gruppe C_{3v} besitzt drei irreduzible Darstellungen:

- symmetrische Darstellung A_1 (eindimensional)
- antisymmetrische Darstellung A_2 (eindimensional)
- komplexe Darstellung E (zweidimensional)

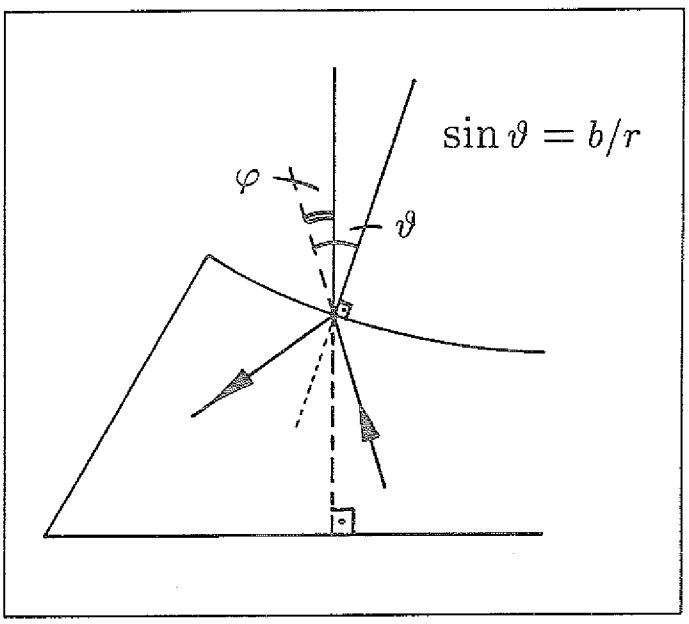


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Koordinaten der Billard–Abbildung auf dem Fundamentalbereich (siehe Fußnote 3).

Aus der vorstehenden Charaktertafel (siehe z.B. [55]) der Gruppe erhält man die Projektionsoperatoren auf die drei Darstellungen:

$$\Pi_{A_1} = \frac{1}{6}(I + C_3 + C_3^2 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \tag{3.5a}$$

$$\Pi_{A_2} = \frac{1}{6}(I + C_3 + C_3^2 - \sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3) \tag{3.5b}$$

$$\Pi_E = \frac{2}{6}(2I - C_3 - C_3^2)\,. \tag{3.5c}$$

3.3.2 Symbolische Dynamik auf der Menge der periodischen Orbits

Die periodischen Orbits eines Billard–Systems sind schneller zu bestimmen als für ein System mit beliebigem stetigen Potential, da die Bewegung zwischen zwei Reflexionen trivial ist. Die Reflexionspunkte werden durch Iteration der Billard–Abbildung[3] bestimmt.

[3] Als Koordinaten der Billard–Abbildung auf dem Fundamentalbereich benutzen wir den Winkel φ der einlaufenden Richtung zur bevorzugten Einfallsrichtung und die tangentiale Kom-

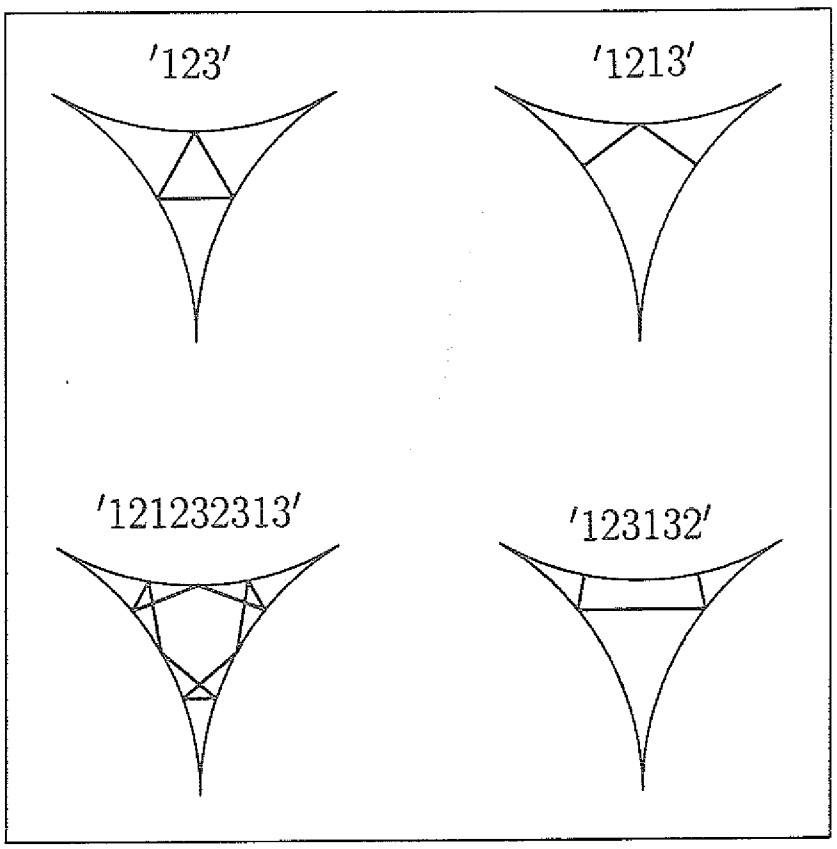


Abbildung 3.3: Vier typische periodische Orbits der vollen Symmetrie des gebundenen Drei-Scheiben-Billards und deren ternäre Symbolsequenzen. (Die Scheiben sind im Uhrzeigersinn durchnumeriert, beginnend bei der oberen.)

Ternäre symbolische Dynamik

Jeden periodischen Orbit des Drei-Scheiben-Billards kann man eindeutig kennzeichnen durch eine Folge von Ziffern aus $\{1, 2, 3\}$. Jede Ziffer entspricht einer Reflexion an der mit dieser Ziffer gekennzeichneten Scheibe. Ist der Orbit periodisch, so wiederholt sich die Folge der Ziffern nach einer gewissen Anzahl von Reflexionen. Die kürzeste der sich wiederholenden Ziffernfolgen ist dann ein 'Name' des Orbits, der bis auf Permutation seiner Elemente eindeutig ist. Diesen 'Namen' bezeichnet man als *Symbolsequenz*. Die Länge einer Sequenz heißt die *Ordnung* oder auch *Periode* des Orbits (bezogen auf die spezielle Wahl der

ponente des (normierten) Impulses vor der Reflexion an der Scheibe. Letztere ist der auf den Scheibenradius r normierte Stoßparameter b, bezogen auf den Mittelpunkt der Scheibe. (siehe Abbildung 3.2)

Symbole). Die Menge aller Symbolsequenzen ist eine *symbolische Dynamik* des Systems. In dem beschriebenen Fall ist sie *ternär*, da sie aus drei Grundsymbolen aufgebaut ist. Die ternäre symbolische Dynamik für das Modellsystem der drei Scheiben ist allerdings nicht *vollständig*, d.h. die Abbildung der Menge der periodischen Orbits auf die Menge der Symbolsequenzen ist nicht surjektiv; denn zu denjenigen Sequenzen, die mindestens zwei aufeinanderfolgende gleiche Symbole besitzen, existiert kein entsprechender periodischer Orbit, da nach jeder Reflexion an einer Scheibe die Bahn zu einer der beiden anderen Scheiben verlaufen muß.

In Abbildung 3.3 sieht man vier typische periodische Orbits des gebundenen Billards. Für jeden Orbit ist die ternäre Symbolsequenz angegeben.

Binäre symbolische Dynamik

Wir fassen jeweils drei aufeinanderfolgende Symbole $\ldots t_a t_b t_c \ldots$ der ternären Dynamik zusammen; diese Teilsequenzen haben entweder die Form $t_a t_b t_a$, d.h. erstes und drittes Symbol sind gleich und beide verschieden von t_b, oder sie haben die Form $t_a t_b t_c$, wobei die t_i paarweise verschieden sind. Man erhält aus der ternären Dynamik eine binäre, wenn man einer solchen Teilfolge das Symbol '0' zuordnet, falls sie zur ersten Klasse gehört, und das Symbol '1', falls sie zur zweiten gehört. Das läßt sich am konkreten Modell anschaulich beschreiben. Ein Teilstück einer Bahn, das von einer Scheibe t_a startet, dann an einer anderen Scheibe t_b reflektiert wird, kann danach entweder zu t_a zurückkehren oder wird zur dritten Scheibe weiterlaufen. Je nachdem wie sich ein Teilstück der Bahn verhält, ordnen wir ihm das Symbol '0' oder '1' zu.

Zwei der periodischen Orbits verhalten sich besonders einfach. Ein Orbit '0' wird immer zwischen zwei Scheiben hin- und zurückreflektiert. Natürlich gibt es insgesamt drei solcher Orbits, die aber durch Elemente der C_{3v}–Symmetriegruppe aufeinander abgebildet werden. Daher identifizieren wir sie als *einen* Orbit '0'. Ein Orbit '1' umrundet den Ursprung des Koordinatensystems, indem er nacheinander an allen drei Scheiben reflektiert wird und sich nach der dritten Reflexion wieder schließt. Es existieren zwei solcher Orbits, die sich in der Durchlaufrichtung unterscheiden. Sie werden durch die Spiegelungen σ_i an den Symmetrielinien aufeinander abgebildet und daher ebenfalls als ein einziger Orbit '1' identifiziert (siehe Abbildung 3.5).

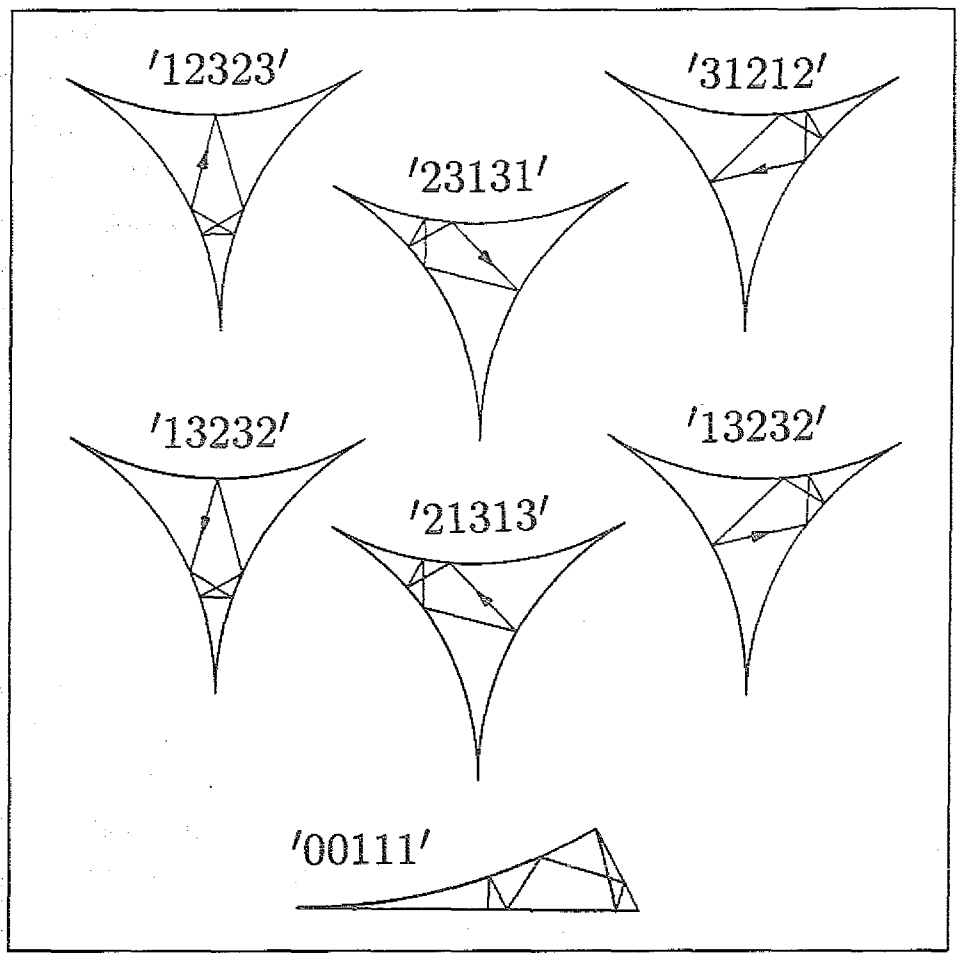


Abbildung 3.4: Schema der sechs periodischen Orbits '12323', 23131', '31212', '13232', '21313' und '13232', sowie des zugehörigen symmetriereduzierten Orbits '00111' auf dem Fundamentalbereich.

In Abbildung 3.4 sind sechs periodische Orbits mit ihren ternären Symbolsequenzen '12323', '23131', '31212', '13232', '21313' und '32121' dargestellt. Sie fallen auf einen Orbit zusammen, wenn man die einzelnen Segmente der Orbits mit Hilfe der C_{3v}–Symmetrietransformationen auf den Fundamentalbereich abbildet (siehe Abbildung 3.1). Das ist der Bereich, der begrenzt wird durch einen Sektor der Kreisscheibe und zwei Segmente der Symmetrieachsen, die als gerade Reflexionswände wirken. Die angegebenen sechs Orbits in der ternären Dynamik gehen durch Anwendung der sechs Gruppenelemente von C_{3v} ineinander über. Rotationen um $2\pi/3$ und $4\pi/3$ werden realisiert durch die Permutationen der drei Scheiben $1 \to 2 \to 3 \to 1$ und $1 \to 3 \to 2 \to 1$. Die Spiegelungen an den

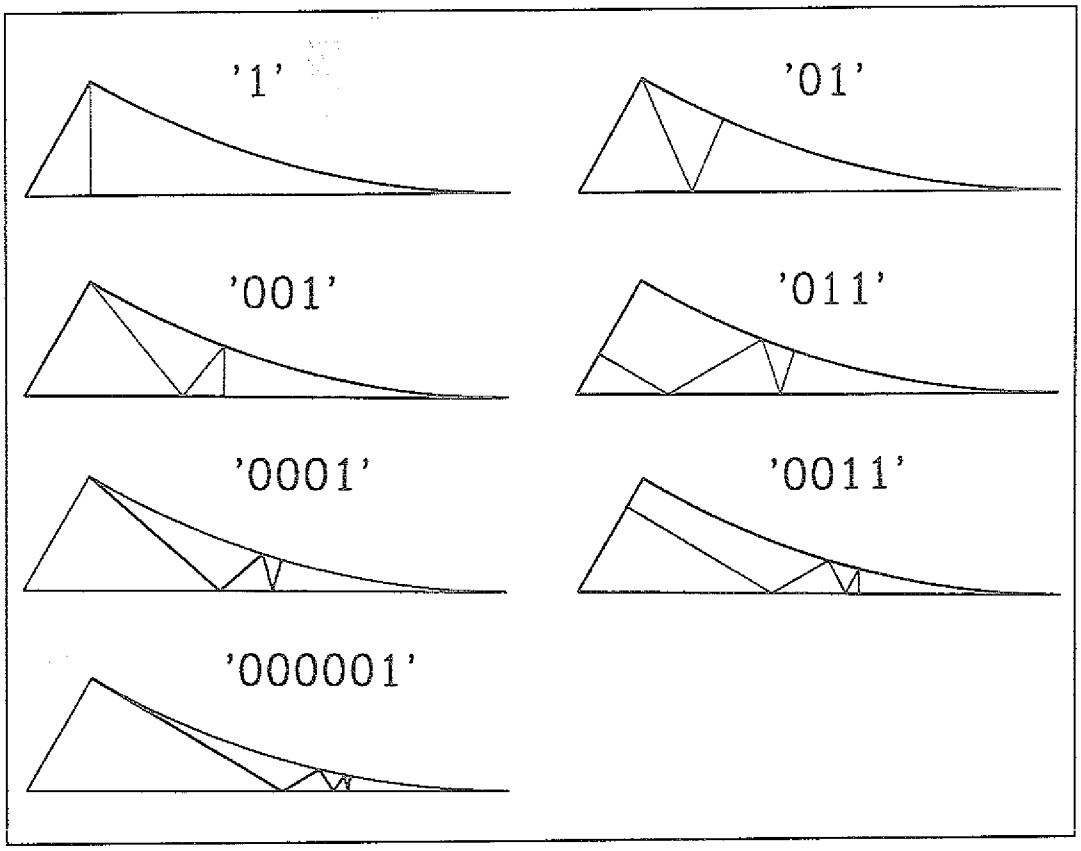


Abbildung 3.5: Beispiele symmetriereduzierter periodischer Orbits des gebundenen Systems und deren binäre Symbolsequenzen.

drei Symmetrieachsen bedeuten ein Vertauschen je zweier Scheiben: σ_1 entspricht $2 \leftrightarrow 3$, σ_2 entspricht $1 \leftrightarrow 3$ und σ_3 entspricht $1 \leftrightarrow 2$. Der Übergang vom System mit voller Symmetrie auf das symmetriereduzierte Billard–System, das auf den Fundamentalbereich eingeschränkt ist, schlägt sich also auf der Ebene der symbolischen Dynamik in einem Übergang vom ternären zum binären *Alphabet*[4] nieder (siehe Abbildung 3.5). Wir haben beschrieben, daß die Geometrie der Bewegung von vornherein bestimmte Sequenzen der symbolischen Dynamik ausschließt, d.h. sie sind nicht durch periodische Orbits realisiert. In der ternären Dynamik sind es unter anderem die Sequenzen mit zwei aufeinanderfolgenden gleichen Symbolen. Das ist eine einfache Ausschlußregel, die global für alle Parameterwerte $d : r$ gilt. Geht man zum symmetriereduzierten System und damit zur binären Dynamik

[4]Mit *Alphabet* bezeichnen wir die Grundmenge der Symbole einer symbolischen Dynamik.

Zahl der Primzykel, $N = 2$			
Ordnung n	M_n	Ordnung n	M_n
1	2	11	186
2	1	12	335
3	2	13	630
4	3	14	1161
5	6	15	2182
6	9	16	4080
7	18	17	7710
8	30	18	14532
9	56	19	27594
10	99	20	52377

Tabelle 3.2: Zahl M_n der Primzykel in Abhängigkeit von der Ordnung n für eine vollständige binäre symbolische Dynamik.

über, so gibt es keine globalen Ausschlußregeln mehr. Die Existenz oder Nichtexistenz der periodischen Orbits hängt nur noch vom Parameter $d : r$ ab, also davon, wie weit das System geöffnet ist.

Primzykel

Die zu einem primitiven periodischen Orbit gehörende kürzeste sich nicht wiederholende Sequenz nennt man ein *Primzykel*. Genauer sollte man sagen, ein Primzykel ist die Klasse aller Permutationen dieser Sequenz. Zum Beispiel ist die Sequenz '1010' kein Primzykel, da sie sich als zweifache Wiederholung von '10' schreiben läßt, der ein Primzykel ist. Man kann sich überlegen, wieviele Primzykeln einer bestimmten Ordnung bei N Symbolen existieren [27].

Insgesamt gibt es N^n verschiedene 'Wörter' der Länge n, die man aus N Symbolen bilden kann. Darin enthalten sind alle M_d Primzykeln, deren Periode d gleich n ist oder n teilt. Jedes d–Zykel tritt in der Menge aller N^n Sequenzen d-mal – mit jeder seiner d Permutationen – auf:

$$N^n = \sum_{d|n} dM_d \,. \tag{3.6}$$

Mit Hilfe der *Möbius–Inversion* [66] kann man diese Gleichung nach M_d auflösen.

Wir invertieren (3.6):

$$M_n = \frac{1}{n} \sum_{d|n} \mu\left(\frac{n}{d}\right) N^d \,. \tag{3.7}$$

Dabei ist μ die *Möbius-Funktion*[5]. Für ein Alphabet mit zwei Symbolen ($N = 2$) erhält man daraus Tabelle 3.2.

3.3.3 Periodische Orbits des gebundenen System

In den Abbildungen 3.3–3.5 sind einige der periodischen Orbits für die volle Symmetrie und eingeschränkt auf den Fundamentalbereich gezeigt. Die ersten vier Orbits der Abbildung 3.5 sind die symmetriereduzierten Versionen der Orbits aus Abbildung 3.3.

In Tabelle F.1 des Tabellenanhangs sind alle (symmetriereduzierten) primperiodischen Orbits bis zur 10. Ordnung der binären Symbolsequenzen mit ihren Daten aufgeführt. Diese Orbits wurden mit Hilfe des in Anhang C.2 beschriebenen mehrdimensionalen Newton–Verfahrens berechnet. Der Radius der Scheiben beträgt hier $r = 3$.

Bei der Anwendung des Newton–Verfahrens zur Bestimmung der Orbits gibt man eine Startfolge von Reflexionspunkten auf den Scheiben gemäß der gewünschten Symbolsequenz vor, mit der Nebenbedingung, daß Anfangs- und Endpunkt übereinstimmen. Die Newton–Folge von Bahnen relaxiert dann gegen den periodischen Orbit mit dieser Symbolsequenz. Allerdings muß man berücksichtigen, daß die Scheiben eine Verbindungsstrecke zwischen zwei Reflexionspunkten abschatten können. Dann existiert dieser Orbit nicht. Überprüft wurde das, indem für alle diese Strecken zusätzlich der senkrechte Abstand zu den Mittelpunkten der drei Scheiben berechnet wurde. Ist einer dieser Abstände kleiner als der Scheibenradius, dann liegt der Orbit im Schatten der Scheibe, existiert also nicht.

[5] Die *Möbius-Funktion* $\mu(n)$ ist definiert [66] als

$$\mu(n) := \begin{cases} 1 & \text{für} \quad n = 1 \\ 0 & \text{wenn} \quad n \text{ durch Quadratzahl teilbar} \\ (-1)^k & \text{wenn} \quad n \quad k \text{ verschiedene Primfaktoren hat} \end{cases} \,. \tag{3.8}$$

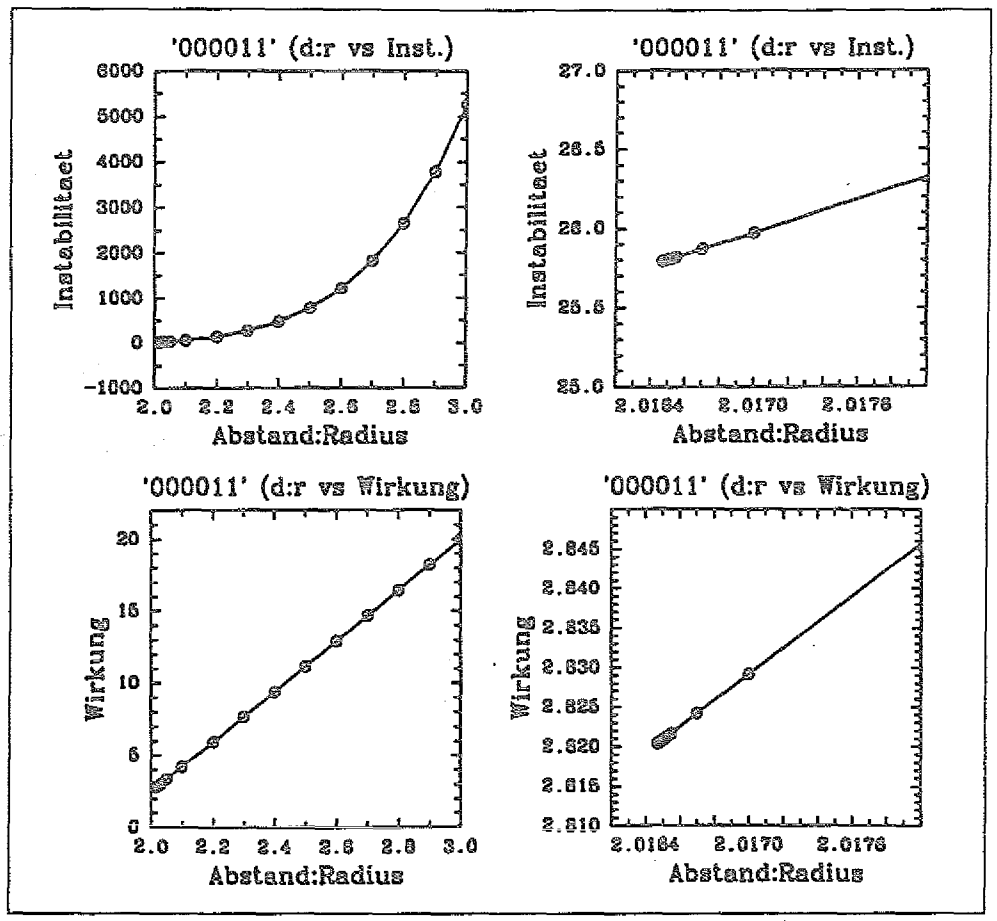


Abbildung 3.6: Daten des Orbits '000011' oberhalb und nahe am kritischen Verhältnis $d : r$ (r=1).

Pruning

Fehlen Orbits zu gewissen Sequenzen einer symbolischen Dynamik, dann nennt man diese Dynamik *beschnitten*[6]. Es stellt sich heraus, daß im gebundenen System bis zur 10. Ordnung für insgesamt 10 binäre Symbolsequenzen die zugehörigen periodischen Orbits nicht existieren.

Der periodische Orbit '0' ist derjenige, der zwischen zwei Scheiben hin- und zurückreflektiert wird. Er liegt also genau auf der Verbindungslinie zwischen den Scheibenmittelpunkten. Im gebundenen System berühren sich aber die Scheiben gerade dort, wo dieser Orbit liegen sollte. Bei Schließen des Systems ($d : r \to 2$)

[6]Im Englischen spricht man von *pruning* (engl. to prune - beschneiden).

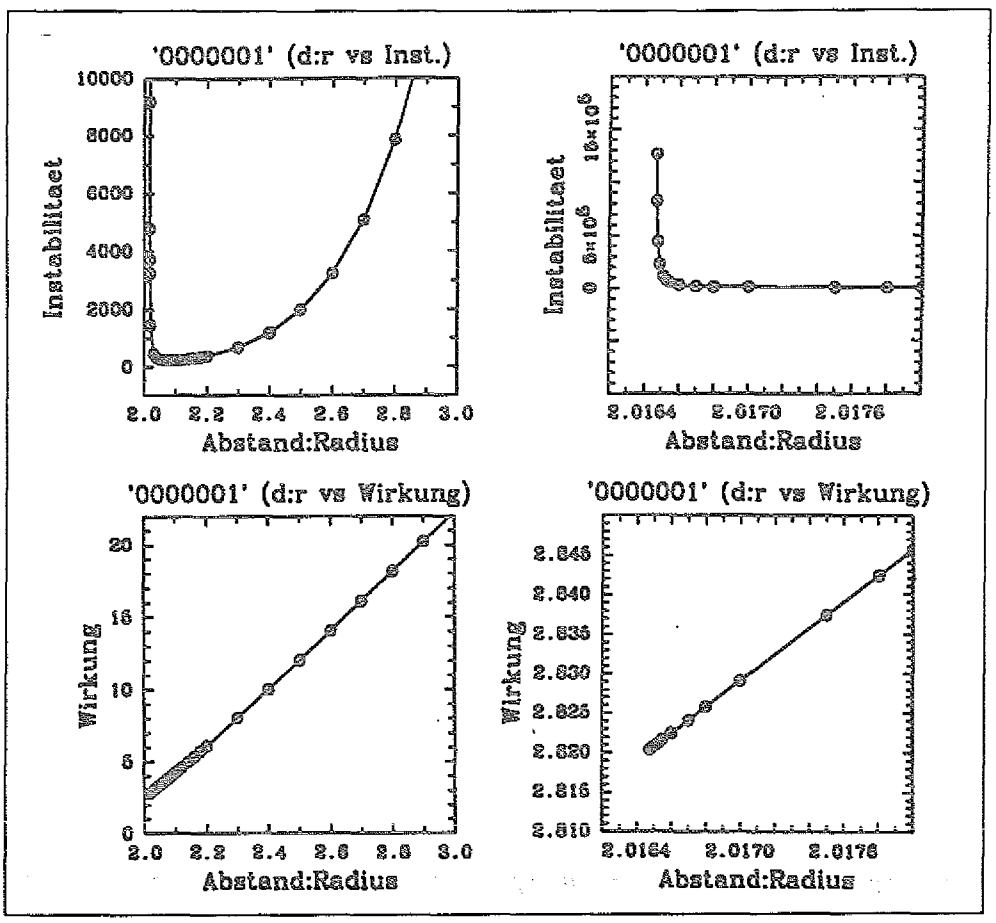


Abbildung 3.7: Daten des Orbits '0000001' oberhalb und nahe am kritischen Verhältnis $d : r$ (r=1).

verschwindet dieser Orbit mit Länge 0 und Instabilität 1.

Der erste Orbit, der aufgrund der Abschattung durch die Scheiben verschwindet, ist '000011'. In der 7. Ordnung fehlen die Orbits '0000001' und '0000011'. Erhöht man die Anzahl der '0'-Symbole am Anfang um jeweils eins, so erhält man die Sequenzen der fehlenden Orbits der 8. bis 10. Ordnung.

Am Beispiel der Orbits '000011' und '0000001' wurde das Verschwinden untersucht. Vergrößert man den Abstand der Scheiben bei festem Radius, dann existieren diese beiden Orbits oberhalb eines kritischen Verhältnisses $d : r$. In den folgenden Abbildungen sind die charakteristischen Größen Instabilität und Länge der beiden Orbits in der Nähe des kritischen Verhältnisses aufgetragen. Am kritischen Verhältnis $d : r = 2.0164693 \pm 0.0000002$ geht die Instabilität der

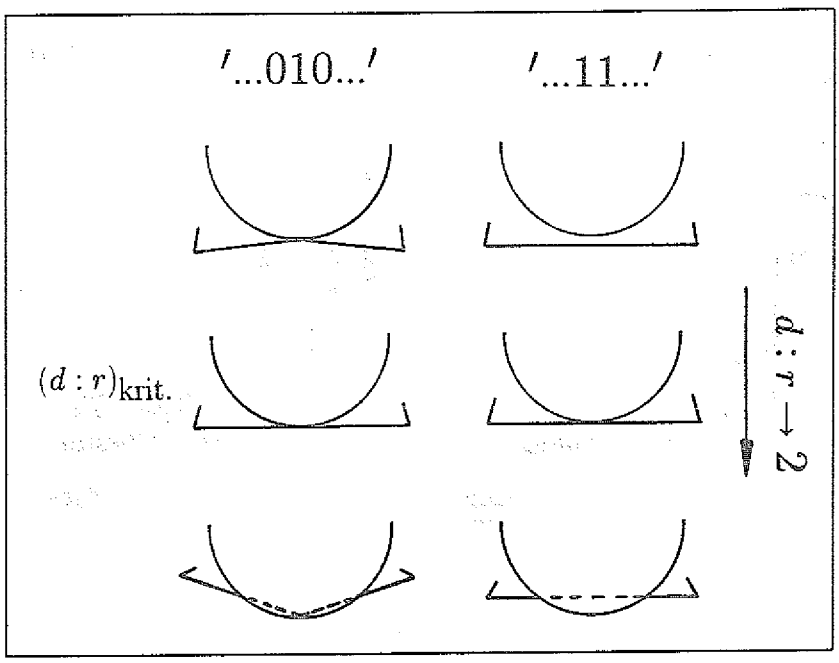


Abbildung 3.8: Schema zum Verständnis des Abschattens. Gezeigt wird das Verhalten von Orbitpaaren '...010...' und '...11...' in der Nähe ihres kritischen Parameters $(d:r)_{krit.}$.

Bahn '0000001' gegen unendlich, die Länge dagegen konvergiert gegen einen endlichen Wert. Der andere Orbit '000011' verhält sich in der Nähe des kritischen Wertes $d:r$ regulär, soll heißen, nicht nur die Länge, sondern auch die Instabilität konvergieren gegen einen endlichen Wert. Die Längen beider Orbits am kritischen Verhältnis sind gleich (siehe Abbildungen 3.6 und 3.7).

Zum Verständnis dieses Mechanismus dient das Schema in Abbildung 3.8. Daran macht man sich klar, wie sich der Orbit '0000001' in der Nähe desjenigen Reflexionspunktes verhält, der zum Symbol '1' gehört. An dieser Stelle wechselt die Bahn von einer Scheibe über eine Reflexion an der zweiten Scheibe zur dritten. Sind die Scheiben weit genug voneinander entfernt, so ist der Reflexionswinkel an dieser Stelle kleiner als $\pi/2$. Je mehr sich das System schließt, um so größer wird dieser Winkel, bis er am kritischen Verhältnis $\pi/2$ erreicht, d.h. der Winkel zwischen einfallender und auslaufender Richtung beträgt dort π; der Orbit streift an dieser Stelle die Scheibe nur noch. Das bedeutet, daß die Instabilität gegen unendlich geht, und die Länge konvergiert gegen den Wert der Bahn, die die Re-

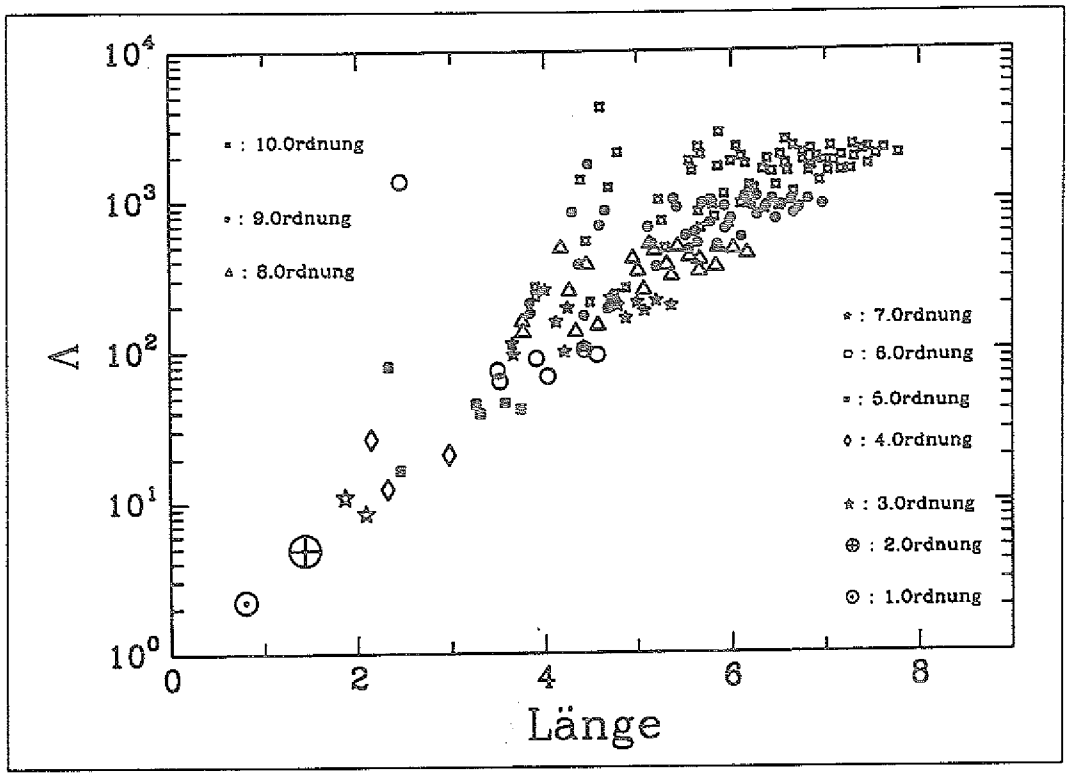


Abbildung 3.9: Länge gegen Instabilität der symmetriereduzierten periodischen Orbits des gebundenen Systems bis zur 10. Ordnung.

flexion an dieser Stelle gerade vermeidet. Das ist der Orbit '000011'. Damit ist auch klar, daß diese Bahn, da sie ja nicht streifend reflektiert wird, sondern an diesem Punkt vorbeiläuft, eine endliche Instabilität auch am kritischen Verhältnis besitzt. Unterhalb dieses Verhältnisses liegen beide Bahnen dann im Schatten derjenigen Scheibe, die oberhalb des kritischen Punktes von der Bahn '0000001' noch gestreift wurde. Dort existieren also beide Bahnen nicht mehr.

Es ist wahrscheinlich, daß dieses Szenario auch das Verschwinden der Bahnpaare höherer Ordnung beschreibt, nur bei einem anderen kritischen $d : r$. Für den Orbit '0000011' wurde dieses Verhältnis ebenfalls noch bestimmt. Dieser Orbit verschwindet unterhalb von $d : r = 2.0275029 \pm 0.0000001$.

Außerdem ist es plausibel, daß Orbits mit Symbolsequenzen der Form '...$(0^n)010(0^m)$...' und '...$(0^n)11(0^m)$...' für genügend große n und m auch durch Abschattung verschwinden; denn diese Bahnen müssen sich bei den Reflexionen, die durch die '1'-Symbole gekennzeichnet sind, ähnlich verhalten wie oben be-

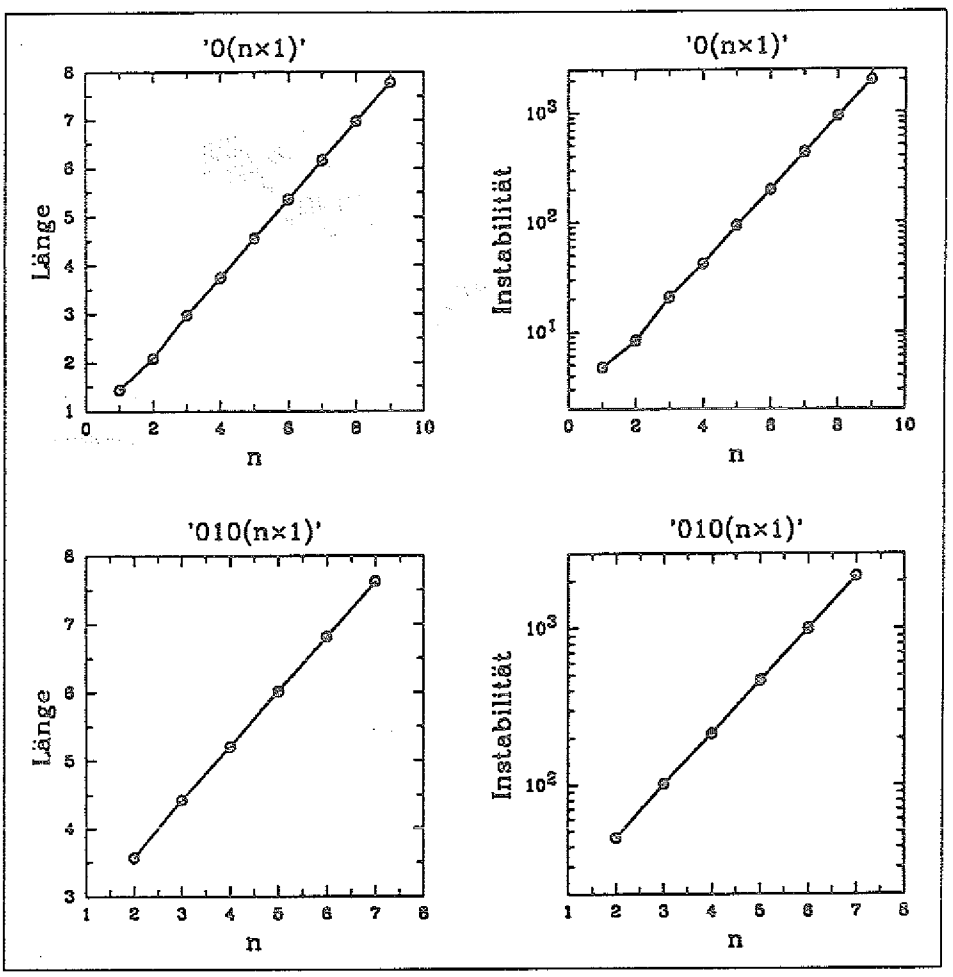


Abbildung 3.10: Daten der Familien $'0(1^n)'$ und $'010(1^n)'$ von periodischen Orbits (Die Instabilität ist logarithmisch gegen n aufgetragen).

schrieben. Auch hier sei auf das Schema in Abbildung 3.8 verwiesen.

Um sich von dem Verhalten von Bahngruppen mit wachsender Ordnung ein Bild zu machen, ist es hilfreich, die Länge der Bahnen gegen ihre Instabilität aufzutragen (Abbildung 3.9). Man stellt fest, daß die Bereiche der periodischen Orbits zu verschiedenen Ordnungen überlappen. Bei fester Länge der Orbits hat die Instabilität offenbar eine untere Schranke, und die ist gegeben durch die Instabilitäten der Orbitfamilie $'0(1^n)'$.

Eine genauere Analyse zeigt, daß man im wesentlichen drei verschiedene Klassen von Orbitfamilien unterscheiden kann, wenn man das Verhalten der Instabilität

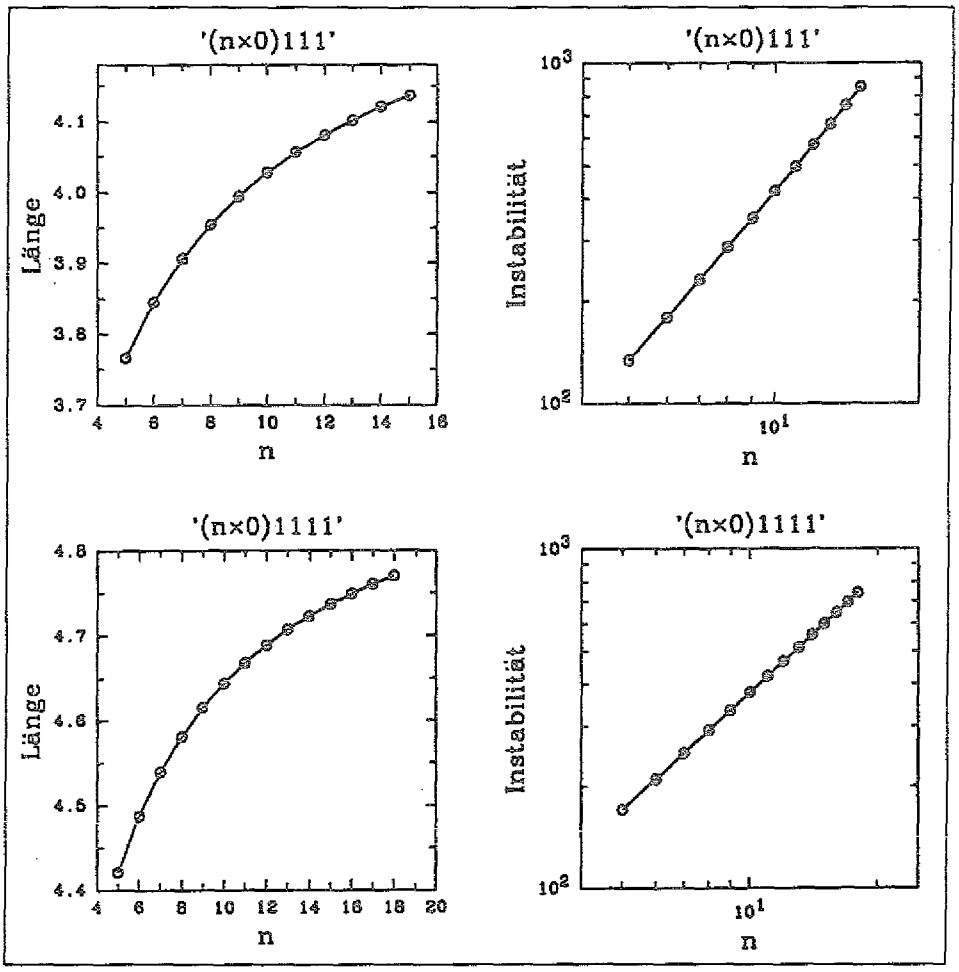


Abbildung 3.11: Daten der Familien $'(0^n)111'$ und $'(0^n)1111'$ von periodischen Orbits (Die Instabilität ist doppeltlogarithmisch gegen n aufgetragen).

der Orbits mit wachsender Ordnung betrachtet.

Faßt man die Bahnen zu Gruppen zusammen, deren Symbolsequenzen die Form $'s(1^n)'$ haben, wobei s eine beliebige kurze Anfangssequenz ist, die von n '1'-Symbolen gefolgt wird, so stellt man fest, daß mit wachsendem n der Logarithmus der Instabilität proportional zur Länge wird, d.h. der Lyapunovexponent ist konstant in der Ordnung. Asymptotisch verhalten sich diese Bahnen wie der Grundorbit '1'. In Abbildung 3.10 sind die Daten zweier solcher Familien, $'0(1^n)'$ und $'010(1^n)'$, aufgetragen. Die Länge der Bahnen und der Logarithmus der Instabilität sind jeweils proportional zur Ordnung.

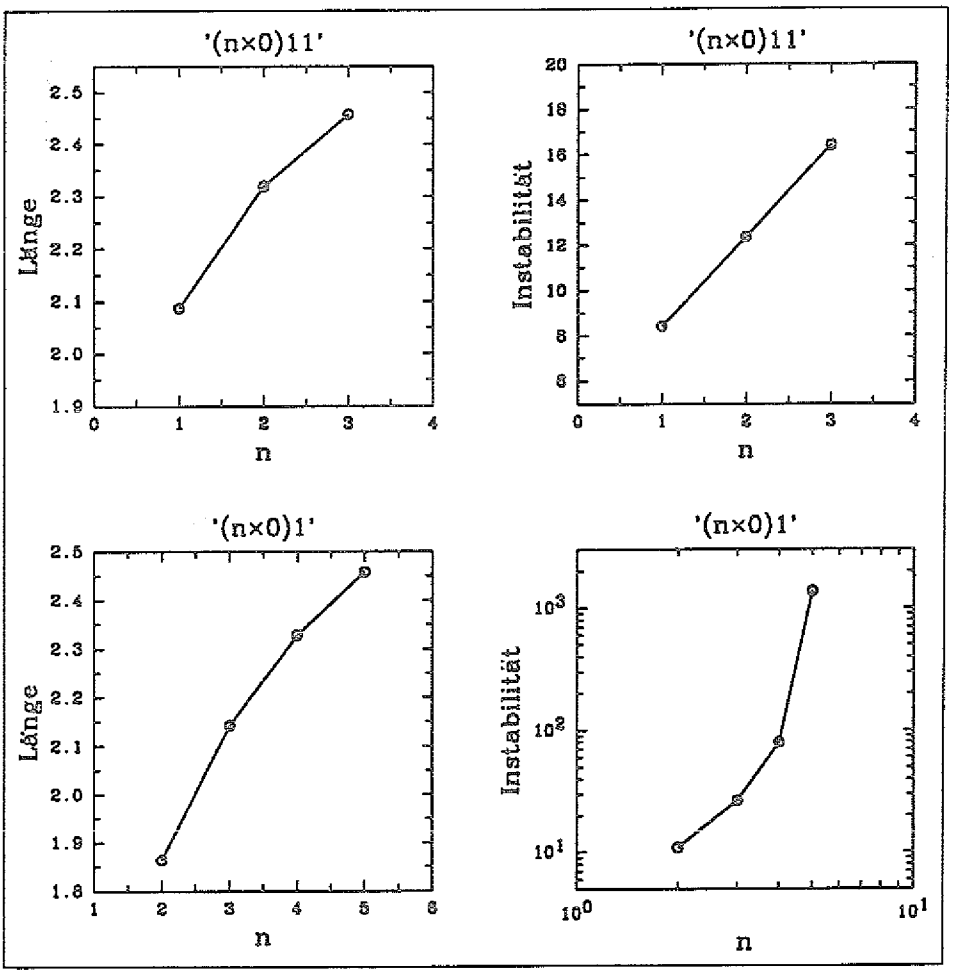


Abbildung 3.12: Daten der Familien $'(0^n)1'$ und $'(0^n)11'$ von periodischen Orbits. Die erste existiert nur bis $n = 5$, die zweite bis $n = 3$.

In Gruppen $'(0^n)s'$ dagegen, in denen die Anzahl der '0'–Symbole zunimmt, nimmt der Lyapunovexponent mit steigender Ordnung des Orbits ab. Der Logarithmus der Instabilität ist proportional zum Logarithmus der Reflexionsordnung, d.h. die Instabilität skalt nur algebraisch mit der Ordnung. Der Längenzuwachs der Bahnen bei einer zusätzlichen Reflexion ist nicht konstant, wie bei den Familien mit wachsender Zahl von '1'–Symbolen, sondern nimmt monoton ab, da diese Bahnen, je mehr '0'–Symbole hinzukommen, immer tiefer in den Kanal zwischen zwei Scheiben eindringen, der Längenzuwachs also gegen null geht (siehe Abbildung 3.11). Die Anzahl der aufeinanderfolgenden Reflexionen zwischen zwei Scheiben kann aber im allgemeinen nicht beliebig erhöht werden. Z.B. existie-

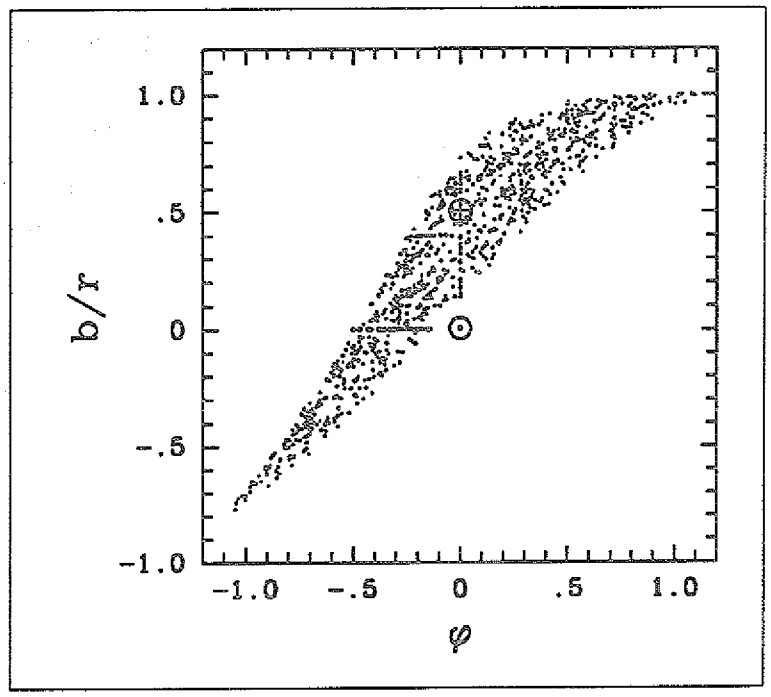


Abbildung 3.13: Alle periodischen Punkte der periodischen Orbits bis zur 10. Ordnung im Phasenraum. Die Lage der Orbits '0' und '1' sind extra gekennzeichnet. '1' hat die Koordinaten $(0, 0.5)$. (Zur Erklärung der Koordinaten siehe Abbildung 3.2)

ren Bahnen der Form '$(0^n)111$' nur bis $n = 18$. Das Verschwinden dieser Bahnen erfolgt nicht aufgrund der Abschattung durch die Scheiben. Vielmehr ist wohl das Verhalten in den Kanälen wesentlich. Vermutlich haben solche Bahnen, wenn sie tief in den Kanal eingedrungen sind, immer weniger Freiheiten für die Veränderung des Reflexionswinkels, wenn noch eine weitere Reflexion hinzukommt. Wahrscheinlich besitzen Familien von Orbits, deren Anzahl von '0'–Symbolen zunimmt, immer nur endlich viele Mitglieder. Diese Familien erkunden das Gebiet des Phasenraumes in der Nähe des Orbits '0', der zwar für das gebundene System nicht existiert, aber bei beliebig kleiner Öffnung des Systems geboren wird. Er ist neutral, sein Eigenwert ist 1. Die Information darüber, ob das System geschlossen ist, steckt also im wesentlichen im Skalenverhalten dieser Orbitfamilien bei relativ hohen Ordnungen.

Eine dritte Möglichkeit dafür, wie sich Familien von Orbits verhalten können, zeigen die Gruppen '$(0^n)1$' und '$(0^m)11$'. Warum diese nur bis $n = 5$ bzw. $m = 3$

existieren und welches der Mechanismus ihres Verschwindens ist, wurde oben schon besprochen. In Abbildung 3.12 sind die Daten beider Familien aufgetragen. Charakteristisch ist, daß die Instabilität der Bahnen $'(0^n)1'$ stärker als exponentiell mit der Ordnung anwächst. Verantwortlich dafür ist die Reflexion, bei der die Trajektorie von einer Scheibe zur dritten wechselt und dabei die zweite Scheibe unter einem Reflexionswinkel, der fast $\pi/2$ beträgt, streift. Diese Reflexion ist sehr instabil. Bei Erhöhung von $n = 5$ auf $n = 6$ schattet die zweite Scheibe dann die Bahn $'0^61'$ ab. Diese Bahn existiert nicht mehr.

Trägt man alle periodischen Punkte der periodischen Orbits bis einschließlich 10. Ordnung in einer Phasenraumdarstellung ein, so erhält man Abbildung 3.13. Besonders markiert ist die Lage der beiden Fixpunkte '0' und '1'. Periodische Punkte, die nah an den Fixpunkt '0' herankommen, gehören zu Trajektorien, die weit in den Kanal zwischen den Scheiben eindringen. Die Abbildung zeigt, daß dieser Fixpunkt isoliert im Phasenraum liegt, seine Umgebung wird durch periodische Bahnen sehr schlecht ausgeschöpft.

3.3.4 Einige Aspekte der klassischen chaotischen Dynamik des Streusystems

Haben die Mittelpunkte der drei Scheiben einen Abstand d, der größer ist als der doppelte Scheibenradius r, so ist das Billardsystem offen. Trajektorien, die für $t \to +\infty$ oder $t \to -\infty$ ins Unendliche entweichen, nennen wir *Streubahnen*. Jede Streubahn, die aus dem asymptotischen Bereich kommt, ist charakterisiert durch die Angabe des Stoßparameters b_i *vor* der Streuung, bezogen auf den Mittelpunkt des Systems, und den Streuwinkel θ_f *nach* der Wechselwirkung mit den Scheiben für $t \to +\infty$. Die funktionale Abhängigkeit beider Größen, also $\theta_f(b_i)$, wird als *Reaktionsfunktion* bezeichnet. Ein einlaufender Strahl von Streubahnen mit definierter Einlaufrichtung und infinitesimaler Variation des Stoßparameters wird immer dann in einen großen Winkelbereich gestreut, wenn er anfangs in der Nähe einer Trajektorie liegt, die eine Scheibe nur streift. Das macht den Prozess des Mehrfachstreuens an den Scheiben instabil und führt dazu, daß die Reaktionsfunktion auf allen Skalen der Variation des Stoßparameters stark oszilliert [69]. Die Menge der Anfangsbedingungen, für die die Reaktionsfunktion nicht definiert ist, ist fraktal. Dieses Verhalten ist typisch für chaotische Streusysteme.

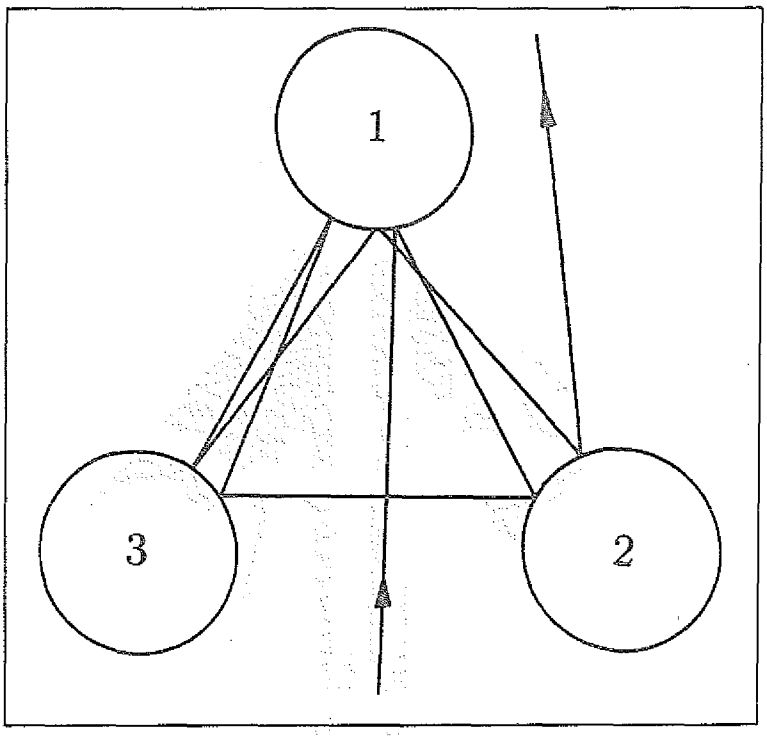


Abbildung 3.14: Typische Streubahn des offenen Drei–Scheiben–Billards.

Ein andere typische Eigenschaft ist die Existenz von unendlich vielen periodischen Orbits, die in der Wechselwirkungsregion gefangen sind. Alle diese Orbits sind instabil. Sie bilden das Grundgerüst der chaotischen Dynamik. Die Menge der periodischen Orbits bildet eine Teilmenge des Phasenraums, von der für große Zeiten $t \to \infty$ alle Streubahnen entweichen. Eine solche Menge nennt man *Repellor*. Die Dynamik auf diesem Repellor ist chaotisch[7].

Zu jedem periodischen Orbit auf dieser invarianten Menge existiert eine stabile und eine instabile invariante Mannigfaltigkeit. Diese sind Trajektorien, die sich dem periodischen Orbit für $t \to +\infty$ bzw. $t \to -\infty$ nähern, ihn aber nie erreichen. Der Unterschied zum gebundenen System ist, daß die instabilen Mannigfaltigkeiten für große Zeiten ins Unendliche laufen. Sie gehören zur Menge der Streubahnen.

[7]Die Dynamik ist nicht nur mischend, sondern besitzt auch die Bernoulli–Eigenschaft [69]. Die Konstruktionsbilder für eine Markovpartition des Phasenraumes und, daraus folgend, einer symbolischen Dynamik, sowie des natürlichen invarianten Maßes auf dem Repellor finden sich auch in [38].

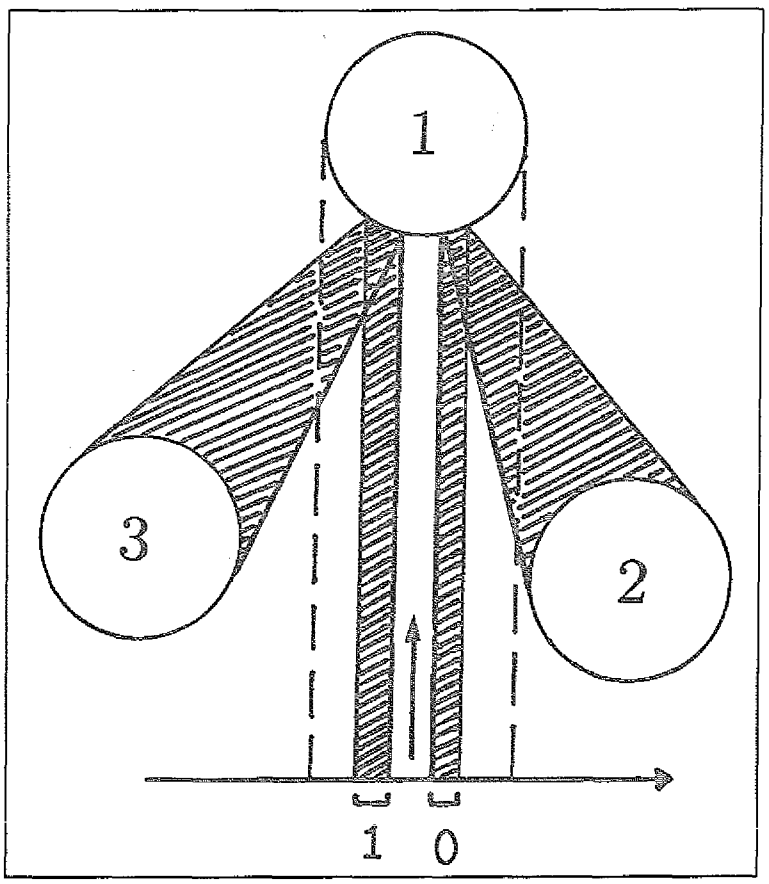


Abbildung 3.15: Konstruktion der Anfangsbedingungen von Trajektorien, die nach Reflexion an Scheibe 1 zu einer der beiden anderen Scheiben gestreut werden.

Streubahnen folgen im Bereich zwischen den Scheiben verschiedenen Segmenten von periodischen Orbits des Systems, bevor sie den Wechselwirkungsbereich wieder verlassen. Sie halten sich um so länger dort auf, je näher sie einer periodischen Bahn kommen. $S(T)$ bezeichne die Menge der Anfangsbedingungen, für die die Verweilzeit größer als T ist. Das Maß $\mu(S(T))$ dieser Menge verhält sich wie

$$\mu(S(T)) \sim \exp(-\gamma T) \,, \tag{3.9}$$

wobei γ die klassische *Entweichrate* des Repellors ist. $S(T)$ ist im Limes $T \to \infty$ eine fraktale Menge[8].

[8]Diese fraktale Menge entsteht in gleicher Weise wie die Cantor–Menge in einer Smale'schen Hufeisen–Konstruktion, nämlich als Schnitt aller Bilder und Urbilder der Menge der Anfangs-

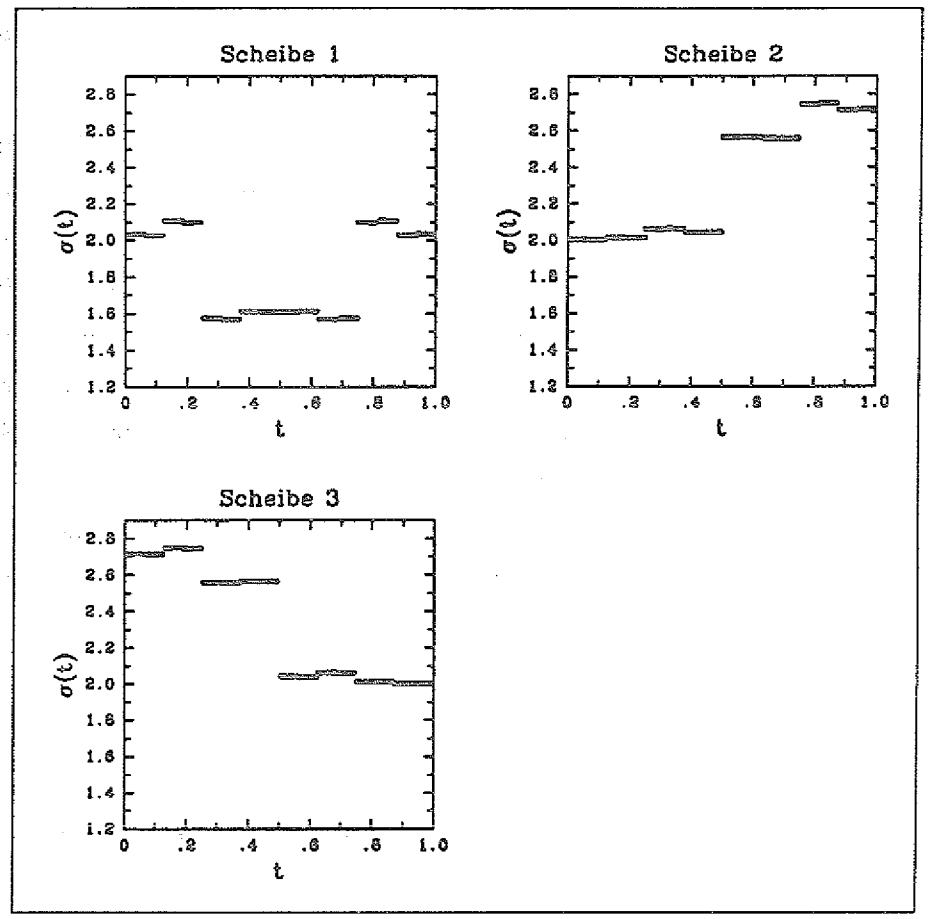


Abbildung 3.16: Skalenfunktionen der (reduzierten) Längen von Streubahnen des Drei–Scheiben–Billards. Es ist festgelegt, an welcher Scheibe die letzte Reflexion stattfindet.

Die Konstruktion eines Schnittes durch diese fraktale Menge ist in Abbildung 3.15 schematisch dargestellt. Die Anfangsbedingungen der Bahnen sind gegeben durch den Stoßparameter, der auf der Achse in Abbildung 3.15 aufgetragen ist. In der Menge dieser Anfangsbedingungen gibt es ein Intervall, von dem alle die Trajektorien starten, die als erstes mit Scheibe 1 kollidieren. In diesem Intervall existieren zwei Teilintervalle mit der Eigenschaft, daß alle Trajektorien aus einem der Intervalle nach der Kollision mit Scheibe 1 entweder *im* Uhrzeigersinn oder *gegen* den Uhrzeigersinn zur nächsten Scheibe reflektiert werden. Das ist

bedingungen von Streubahnen. Das wurde genauer untersucht in [30, 31, 38]. Siehe dazu auch [51].

gekennzeichnet durch die Symbole '0' und '1'. Die Intervallgrenzen sind dann die Anfangsbedingungen der Trajektorien, die bei der zweiten Kollision die Scheibe nur streifen.

In jedem dieser Teilintervalle findet man dann wieder je zwei Intervalle, deren zugehörige Trajektorien drei aufeinanderfolgende Reflexionen machen. Führt man diese Konstruktion ad infinitum weiter, so gelangt man zu einer Intervallschachtelung für die Anfangsbedingungen der Bahnen, die asymptotisch im Streusystem gefangen sind, deren Verweilzeit also unendlich ist. Die Konstruktion dieser Menge ist analog zu derjenigen der gewöhnlichen Cantor–Menge, die entsteht, wenn man ein Ausgangsintervall drittelt, das mittlere Drittel wegfallen läßt und die verbleibenden Intervalle entsprechend behandelt.

Jedem Teilintervall der n–ten Reflexionsordnung kann man dann eindeutig eine Symbolsequenz $(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-1}, \ldots, \varepsilon_1)$ aus Symbolen $\varepsilon \in \{0; 1\}$ zuordnen, die den Weg einer Trajektorie, die in diesem Intervall startet, kodiert. Sei $l(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-1}, \ldots, \varepsilon_1)$ die Länge des Intervalls. Die Skalenfunktion σ dieser Längen ist definiert durch

$$\sigma(\varepsilon_{n+1}, \ldots, \varepsilon_1) = \frac{l(\varepsilon_{n+1}, \varepsilon_n, \ldots, \varepsilon_1)}{l(\varepsilon_n, \ldots, \varepsilon_1)} \,. \tag{3.10}$$

σ gibt die Länge der Tochterintervalle der Reflexionsordnung $n+1$ zu der Länge der Mutterintervalle der Ordnung n an. Die Skalenfunktion wurde in [30] angegeben.

Diese Ergebnisse ergänzend haben wir eine Skalenfunktion für die Differenzen der reduzierten Längen von Streubahnen berechnet. Die *reduzierte Länge* einer Streubahn definieren wir als die Länge der Bahn vom Punkt der ersten bis zum Punkt der letzten Reflexion an den Scheiben. Sie werde mit $L(\varepsilon_n, \ldots, \varepsilon_1)$ bezeichnet. Mit der Symbolsequenz $(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-1}, \ldots, \varepsilon_1)$ $(\varepsilon \in \{0; 1\})$ kodieren wir Streubahnen, die unter einem festen Winkel in das System einlaufen, n–mal reflektiert werden und unter einem festen Winkel wieder auslaufen. Die Bedeutung der Symbole ist oben erklärt.

Man erhält drei Skalenfunktionen, je nachdem an welcher der drei Scheiben die letzte Reflexion stattfindet. Die Scheibe mit der ersten Kollision sei Scheibe 1. Die Skalenfunktion der Differenz dieser Längen wird definiert durch

$$\sigma(\varepsilon_{n+1}, \ldots, \varepsilon_1) = L(\varepsilon_{n+1}, \varepsilon_n, \ldots, \varepsilon_1) - L(\varepsilon_n, \ldots, \varepsilon_1) \,. \tag{3.11}$$

Jeder binären Symbolsequenz der n–ten Reflexionsordnung kann man eine reelle

Zahl $t = 2^{-n} \sum_{k=1}^{n} \varepsilon_k 2^{k-1}$ zuordnen. Man trägt dann $\sigma(t)$ gegen t auf. In Abbildung 3.16 ist eine solche Funktionen gezeigt. Berechnet wurden die Streubahnen bis zur 9. Reflexionsordnung für einen Parameterwert $d : r = 2\sqrt{3} : 0.7$. Die Bahnen laufen parallel zu einer der Symmetrielinien aus dem System aus. Die Form der Skalenfunktionen ändert sich nicht, wenn man einen anderen Einlaufwinkel wählt.

Die Abbildung zeigt, daß die Skalenfunktionen gut genähert wird durch die Annahme, daß der Wert von $\sigma(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-1}, \ldots, \varepsilon_1)$ nur von den letzten beiden Symbolen ε_n und ε_{n-1} abhängt. Diese Beobachtung wurde in [30] auch für die Skalenfunktion (3.10) gemacht.

Kapitel 4

Quantisierung des gebundenen Billards

4.1 Einleitung

Die semiklassischen Rechnungen von Gutzwiller [42, 45, 48] und Balian und Bloch [8, 9] lassen vermuten, daß es eine enge Verbindung zwischen den Eigenwerten eines quantenmechanischen Systems und den periodischen Orbits der zugrundeliegenden klassischen Dynamik gibt.

Für einen geodätischen Fluß auf einer kompakten Riemannschen Mannigfaltigkeit mit konstanter negativer Krümmung ist dieser Zusammenhang zwischen klassischer und quantenmechanischer Dynamik sogar exakt [5]; die quantenmechanischen Eigenwerte sind die Nullstellen eines unendlichen Produktes aus Beiträgen der klassischen periodischen Orbits (Selberg–Zetafunktion).

Es gibt Versuche, die semiklassische Theorie zur Berechnung quantenmechanischer Eigenwerte auch auf klassisch chaotische Systeme anzuwenden. Dabei tauchen zwei große Schwierigkeiten auf. Die Gutzwillersche Spurformel konvergiert nicht für reelle Energien und die Eigenwerte, die man bestimmt, sind nicht reell.

Das erste Problem hat seine Ursache in dem exponentiellen Anwachsen der Zahl der periodischen Orbits mit wachsender Periode bei klassisch chaotischen Systemen. Es kann gelöst werden, indem man die Beiträge langer Orbits exponentiell dämpft. Das führt zu einer Ausschmierung in der Energieauflösung, aber auch dazu, daß die Summe über periodische Orbits absolut konvergiert. Diese Technik

wendeten Sieber und Steiner [68] an auf das Modell eines hyperbolischen Billards. Sie konnten einige der niedrigsten Eigenwerte des chaotischen Billards identifizieren, indem sie die geglättete Spurformel mit einigen 10^6 periodischen Orbits auswerteten.

Eine andere Technik, die cycle expansion, führt zu einer konvergenten Fortsetzung der Summe unterhalb der Halbebene der absoluten Konvergenz. Diese Methode werden wir in unseren Rechnungen anwenden.

Das zweite oben genannte Problem kann gelöst werden, indem man zeigt, daß die Phase, die die Selberg–Zetafunktion entlang der reellen Achse aufnimmt, gegeben ist durch die mittlere integrierte Zustandsdichte des Systems. Da man in vielen Fällen die mittlere Zustandsdichte aufgrund asymptotischer Entwicklung in der Energie angeben kann, ist es in solchen Fällen möglich, durch Multiplikation der Zetafunktion mit dem geeigneten Phasenfaktor eine reelle Funktion zu erhalten, deren Nullstellen die Eigenwerte des Systems sein sollten [13, 18, 70].

In diesem Kapitel wenden wir die semiklassische Theorie periodischer Orbits auf das Modellsystem des gebundenen Drei–Scheiben–Billards an.

Wir zeigen, daß sich aus dem exakten quantenmechanischen Eigenwertspektrum die Daten der periodischen Orbits des klassischen Systems durch Fouriertransformation rekonstruieren lassen.

Danach wenden wir die Methode der cycle expansion an, um aus den Eigenschaften der klassischen chaotischen Dynamik, insbesondere der periodischen Orbits, Eigenwerte des Quantensystems zu erhalten.

Im letzten Teil bestimmen wir Eigenwerte durch Anwendung der Phasenbeziehung für das volle Produkt aus dynamischen Zetafunktionen aus Nullstellen einer reellen Funktion.

4.2 Semiklassischer Limes und Skalenverhalten bei Billards

Die Polstellen der semiklassischen Energiedichte $\rho_{po}(E)$ sind, wie in Abschnitt 2.5 gezeigt wurde, durch die Nullstellen der Selberg–Zetafunktion $Z(E)$ gegeben. Wir führen statt der Energie als neue Variable die Wellenzahl $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ ein. Für ein Billard–System zerfällt das Wirkungsintegral $\int \mathrm{p}\, d\mathrm{q}$ in ein Produkt aus

der Wellenzahl k und einer rein von der Geometrie der Bahn abhängigen Größe L_p, seiner Länge:

$$S_p = \int \mathrm{p}\, d\mathrm{q} = |\mathrm{p}|\, |\mathrm{v}|\, T_p = \hbar k L_p \tag{4.1}$$

mit $p = \hbar k$; denn die Bahngeschwindigkeit, und damit die kinetische Energie, ist eine Konstante der Bewegung. Verwendet man noch $T_p = mL_p/\hbar|k|$, so lautet Gleichung (2.34)

$$\rho_{po}(k) = \frac{m}{\hbar^2|k|}\mathrm{Re}\frac{1}{\pi}\sum_p\sum_{r=1}^{\infty} L_p \frac{e^{i(kL_p-\nu_p\pi/2)r}}{|\det(\mathrm{M}_p^r - 1)|^{1/2}}\,. \tag{4.2}$$

Der semiklassische Anteil der Energiedichte skalt also in einfacher Weise mit $\hbar$. Das gleiche Verhalten gilt auch sowohl für die quantenmechanische Energiedichte wegen

$$\delta(E - E_n) = \frac{m}{\hbar^2|k|}(\delta(k + k_n) + \delta(k - k_n))\,, \tag{4.3}$$

als auch für die mittlere Energiedichte ρ_0 [14]. Der semiklassische Limes ist dann der Grenzwert großer Wellenzahlen k. Wir setzen im folgenden $\hbar^2/2m = 1$, d.h. wir wählen die Skalierung so, daß $E = k^2$ gilt.

Der Maslov–Index ν für Billard–Systeme ist nicht allein bestimmt durch die konjugierten Punkte, ν nimmt außerdem bei jeder Reflexion an den Wänden um 2 zu [22]; denn die energieabhängige Greensche Funktion soll Dirichletsche Randbedingungen an den Wänden erfüllen, was zu einem Phasensprung von π im semiklassischen Ausdruck für jede Reflexion an den Wänden führt [5]. Der Beitrag zum Index, der von konjugierten Punkten herrührt, ist bei einem Billard mit überall konkaven Wänden null; denn konjugierte Punkte würden nur dann existieren, wenn Trajektorien nach einer Reflexion fokussieren. Das ist aber bei solchen Billards nicht der Fall ($\partial\mathrm{q}/\partial\mathrm{p}_0$ wechselt nicht das Vorzeichen entlang einer Bahn). Für das Drei–Scheiben–Billard ist dann $\nu_p = 2n_p$, wobei n_p die Zahl der Reflexionen der Bahn p an den Wänden ist.

4.3 Quantenmechanisches Eigenwertspektrum

Um die Ergebnisse unserer semiklassischen Rechnungen werten zu können, benötigen wir die exakten quantenmechanischen Eigenwerte des Modellsystems vollständig bis zu einer oberen Energie E_{max} respektive Wellenzahl k_{max}.

Die Eigenwerte k_n erhält man aus der Schrödinger–Gleichung

$$(\Delta + k^2)\psi(x,y) = 0 \quad (x,y) \in B \tag{4.4}$$

mit Dirichlet–Randbedingungen

$$\psi(x,y) = 0 \quad \text{für } (x,y) \in \partial B\,. \tag{4.5}$$

Dabei ist B das Gebiet zwischen den sich berührenden Scheiben in der Ebene, und ∂B ist der Rand.

In Anhang D.1 ist die numerische Methode zur Berechnung der Eigenwerte beschrieben, die wir bei unserem Modellsystem benutzt haben.

Wir haben die quantenmechanischen Eigenwerte $E_n = k_n^2$ des gebundenen Billard–Systems ($d : r = 2$) für einen Scheibenradius $r = 3$ bis zu einer maximalen Wellenzahl $k_{max} = 63.2$ berechnet, und zwar getrennt nach den drei irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe C_{3v}. Insgesamt wurden die ersten 281 Eigenwerte bestimmt.

Weyl–Gesetz

Ein Test für die Vollständigkeit der Menge aller Eigenwerte bis zur maximalen Energie ist der Vergleich von $N(E)$ mit dem asymptotischen Gesetz für die mittlere integrierte Zustandsdichte [10].

Die führenden Terme des asymptotischen Gesetzes für ein Billard–System lauten

$$N_0(E) \sim \frac{a}{4\pi}E \mp \frac{l}{4\pi}\sqrt{E} + b \tag{4.6}$$

Der erste Term wird als Weyl–Gesetz bezeichnet. Die Konstante a ist hier die Fläche des Billards. Die weiteren Terme sind Korrekturen[1], in die die Länge l der Begrenzung des Billards und die über diese Länge integrierte Krümmung der Begrenzung eingeht[2]. Das negative bzw. positive Vorzeichen in Gleichung

[1] Die nächst höhere Korrektur wäre bei unserem Modellsystem ein Term, der die spitz zulaufenden Kanäle zwischen benachbarten Scheiben berücksichtigt. Diese Korrektur ist proportional zu $E^{1/4}$ [10].

[2] Besteht die Begrenzung aus glatten Bögen der Länge l_i und ist $\kappa(s)$ die Krümmung dieses Bogens an der Stelle s, dann lautet der dritte Term b genauer

$$b = \frac{1}{2\pi}\sum_i \int_{l_i} \kappa(s)\,ds\,,$$

integriert über den gesamten Rand des Billards [10].

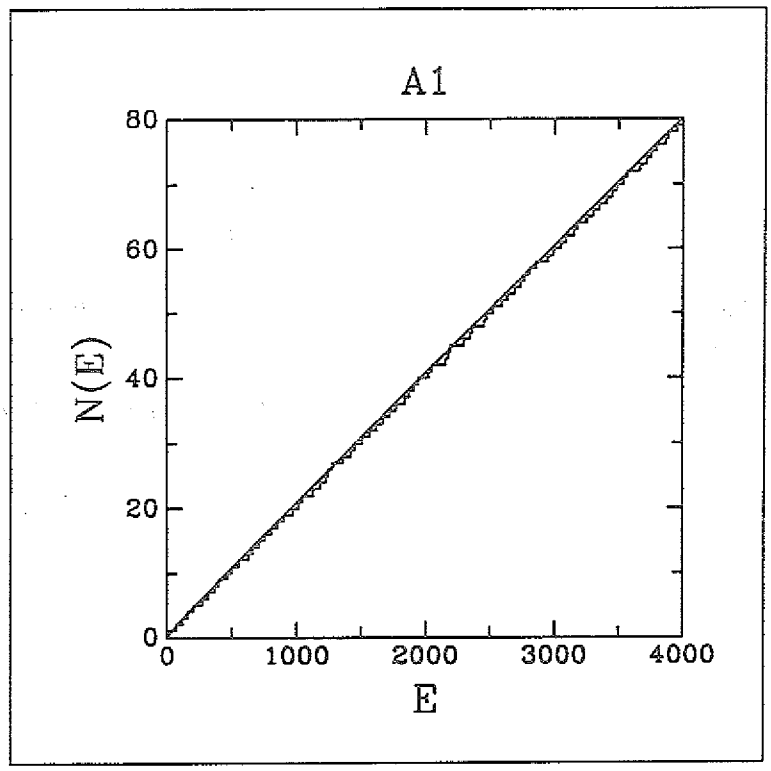


Abbildung 4.1: Integrierte Energiedichte $N(E)$ und das asymptotische Gesetz $N_0(E)$ (glatte Linie) für die A_1–Symmetrie.

(4.6) gilt, falls auf dem Rand Dirichlet– bzw. Neumann–Randbedingungen erfüllt sind. Wenn man das Billard auf den symmetriereduzierten Fundamentalbereich einschränkt, sind die geometrischen Größen a, l und b diejenigen des Fundamentalbereiches, wobei je nach Symmetriedarstellung auf den Symmetrielinien Dirichlet– oder Neumann–Randbedingungen gelten[3].

In Abbildung 4.1 ist die integrierte Energiedichte $N(E)$ im Vergleich mit dem asymptotischen Gesetz (4.6) für die A_1–Symmetrie aufgetragen. Abbildung 4.2 zeigt die Differenz $N(E) - N_0(E)$ bei den Eigenwerten E_n. Man erkennt, daß die

[3] Wir geben hier die asymptotischen Gesetze für den symmetriereduzierten Fall des Drei–Scheiben–Billards an: $N_0(k) = (a/4\pi)\,k^2 - (l/4\pi)\,k + b$ mit

- A_1 : $a = r^2(\sqrt{3} - \pi/2)/6$, $l = r(\pi/6 - \sqrt{3} + 1)$, $b = 1/12$
- A_2 : $a = r^2(\sqrt{3} - \pi/2)/6$, $l = r(\pi/6 + \sqrt{3} - 1)$, $b = 1/12$
- E : $a = r^2(2\sqrt{3} - \pi)$, $l = 2\pi r/3$, $b = 1/3$

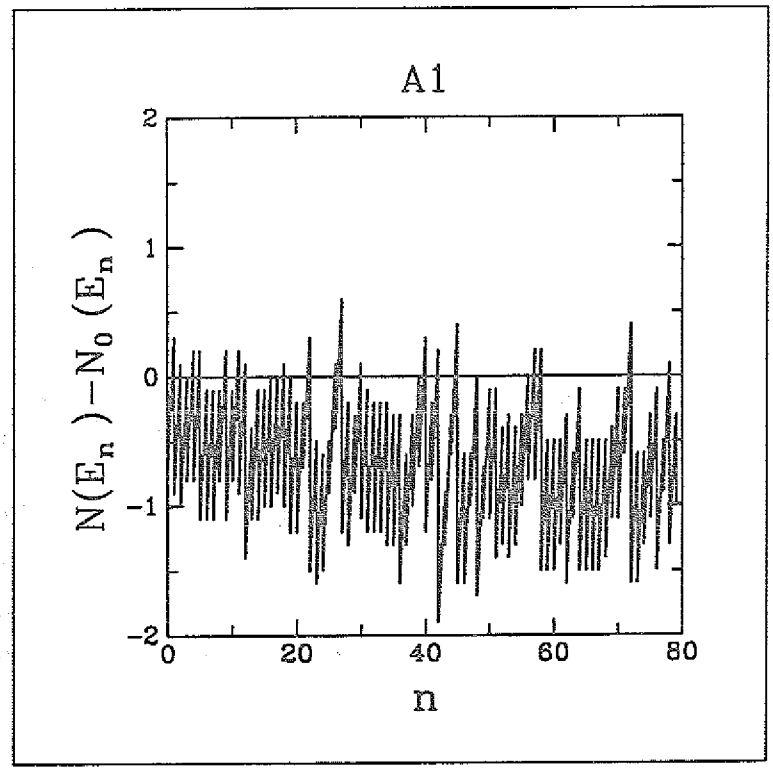


Abbildung 4.2: Abweichung der integrierten Energiedichte $N(E)$ vom asymptotischen Gesetz $N_0(E)$ bei den Eigenwerten E_n für die A_1–Symmetrie.

mittlere Energiedichte (4.6) für die ersten etwa 40 Eigenwerte systematisch um ungefähr 1/2 zu hoch liegt; ab etwa dem 50. Eigenwert werden die Abweichungen größer.

4.4 Fouriertransformation der quantenmechanischen Energiedichte

In Kapitel 2 haben wir dargestellt, daß die exakte quantenmechanische Energiedichte $\rho(E) = \sum \delta(E - E_n)$ in semiklassischer Entwicklung als Summe zweier Beiträge geschrieben werden kann, von denen der eine die mittlere Zustandsdichte ρ_0 und der andere eine Summe über Beiträge periodischer Orbits ist. Für ein Billard–System nimmt der letztere die Form (4.2) an. Als Funktion der Wellenzahl k ist dieser Term also eine gewichtete Summe über Exponentialausdrücke

e^{ikrL_p}, wobei L_p die Länge eines primperiodischen Orbits p bezeichnet. r ist die Anzahl der Durchläufe des Orbit.

Die mittlere Zustandsdichte ρ_0 als Funktion der Wellenzahl k ist

$$\rho_0(k) = \frac{1}{2|k|}\frac{dN_0}{dk} . \tag{4.7}$$

N_0 ist die mittlere integrierte Zustandsdichte. Zusammen mit Gleichung (4.2) und der Identität (4.3) erhält man

$$\delta(k+k_n) + \delta(k-k_n) - \frac{dN_0}{dk} = \frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\sum_p\sum_{r=1}^{\infty}(-1)^{rn_p}L_p\frac{e^{ikrL_p}}{|\det(\mathrm{M}_p^r - 1)|^{1/2}} . \tag{4.8}$$

Daraus folgt, daß man bei Fouriertransformation in der Wellenzahl Peaks bei den Längen der periodischen Orbits und deren Vielfachen erwartet. Hat man also das Spektrum der Eigenwerte k_n bestimmt, so kann man die Fouriertransformation der linken Seite von (4.8) ausführen. Um das Fourierintegral konvergent zu machen, multiplizieren wir mit einer Gauss–Funktion $\exp(-k^2t)$, die den Anteil der Eigenwerte zu höheren Energien exponentiell dämpft. Die Transformation der Summe der Deltafunktionen ergibt eine einfache Summe über Anteile der einzelnen Eigenwerte k_n:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \sum_n [\delta(k+k_n) + \delta(k-k_n)]e^{-k^2t-iks} = \sum_n 2\cos(k_n s)\, e^{-k_n^2 t} \tag{4.9}$$

t ist ein Dämpfungsparameter, der frei gewählt werden kann. Je kleiner t ist, umso größer ist die Anzahl von Eigenwerten, die einen Beitrag zur Summe in (4.9) liefern, und umso kleiner ist die Breite der Peaks, die bei den Längen der periodischen Orbits zentriert sind. Letzteres folgt, wenn man die Fouriertransformation der Summe über periodische Orbits in (4.8) mit Dämpfungsterm ausführt; abgesehen von den Gewichtsfaktoren, erhält man für jeden periodischen Orbit Terme der Form $\sqrt{\pi/t}\ \exp(-\frac{(rL_p-s)^2}{4t})$. Diese Gauss–Kurven sind zentriert an den Stellen $s = rL_p$ und ihre Breite ist proportional zu $\sqrt{t}$.

Ohne den Dämpfungsterm würde die Summe in (4.9) für $s \to 0$ divergieren. Mit Dämpfung und für kleine s verhält sie sich wie

$$\lim_{s\to 0}\sum_n 2\cos(k_n s)e^{-k_n^2 t} = \sum_{n\le N_0(1/\sqrt{2t})} 2e^{-k_n^2 t} \simeq \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2 t}\frac{dN_0}{dk}\,dk . \tag{4.10}$$

Bei Fouriertransformation von (4.8) wird dieser Term aber gerade durch den Summanden $-dN_0/dk$ kompensiert[4].

Numerische Ergebnisse zur Fouriertransformation

Wir haben die ersten 281 Eigenwerte des gebundenen Systems für $r = 3$ bestimmt. Der höchste dieser Eigenwerte liegt bei $k \approx 63.2$. Die Auflösung in der Länge der Bahnen ist also von der Größenordnung $2\pi/63 \approx 0.1$.

In der Abbildung 4.3 ist die Fouriertransformierte der Energiedichte (d.i. die Summe in (4.9)) und deren Quadrat aufgetragen. Die periodischen Orbits bis zur 5. Ordnung sind mit Strichen und ihre Mehrfachdurchläufe durch Pfeile markiert. Außerdem sind alle Orbits von höherer als 5. Ordnung mit kleinen Symbolen markiert. Die Längen der Orbits sind hier diejenigen ihrer entsprechenden nichtsymmetriereduzierten Partner, da das Eigenwertspektrum des vollen Systems transformiert wurde. Zum Beispiel besitzt der Orbit '1' eine Länge von 0.8038, während die zugehörigen zwei Orbits der vollen Symmetrie jeweils die dreifache Länge, also 2.4115, haben. Allgemein ist die Länge eines Orbits der vollen Symmetrie das $6/m$–fache der Länge des symmetriereduzierten Orbits, wo m die Multiplizität ist. Orbits mit Multiplizität 6 haben demnach in der vollen Symmetrie dieselbe Länge wie im symmetriereduzierten Fall (für ein Beispiel siehe Abbildung 3.4). Es gibt bis zur 10. Ordnung und noch darüber hinaus Orbits aus dieser Klasse, die Längen im von uns betrachteten Intervall zwischen 0 und 8 besitzen. Außerdem ist das Gewicht dieser Bahnen das sechsfache des symmetriereduzierten Orbits.

Alle Orbits bis zur 5. Ordnung außer '00111' haben Multiplizitäten 2 und 3, gehen also in der vollen Symmetrie mit ihrer drei– bzw. zweifachen Länge ein.

Die Lage von Peaks der Fouriertransformierten, die eindeutig mit der Länge von periodischen Orbits identifiziert werden konnten, ist in Tabelle F.4 eingetragen. Wie die Tabelle zeigt, sind die meisten der Peaks erklärbar durch Orbits von höherer als 5. Ordnung mit Multiplizität 6. Ab einer Länge von etwa 7 kann

[4]Bei endlichen s kann man den Beitrag dieses Summanden abschätzen, wenn man für N_0 die beiden führenden Terme der asymptotischen Entwicklung (4.6), die proportional zu k^2 und k sind, in $\int_{-\infty}^{\infty} dN_0/dk e^{-k^2t-iks}\,dk$ einsetzt. Die beiden Integrale sind proportional zu $\exp(-s^2/8t)/t$ [41] bzw. $\exp(-s^2/4t)$, können also für $s \gg \sqrt{t}$ vernachlässigt werden. In unserem Fall ist $\sqrt{t} \approx 0.02$, während die Länge des kürzesten (symmetriereduzierten) Orbits bei $s \approx 0.8$ liegt (siehe Tabelle F).

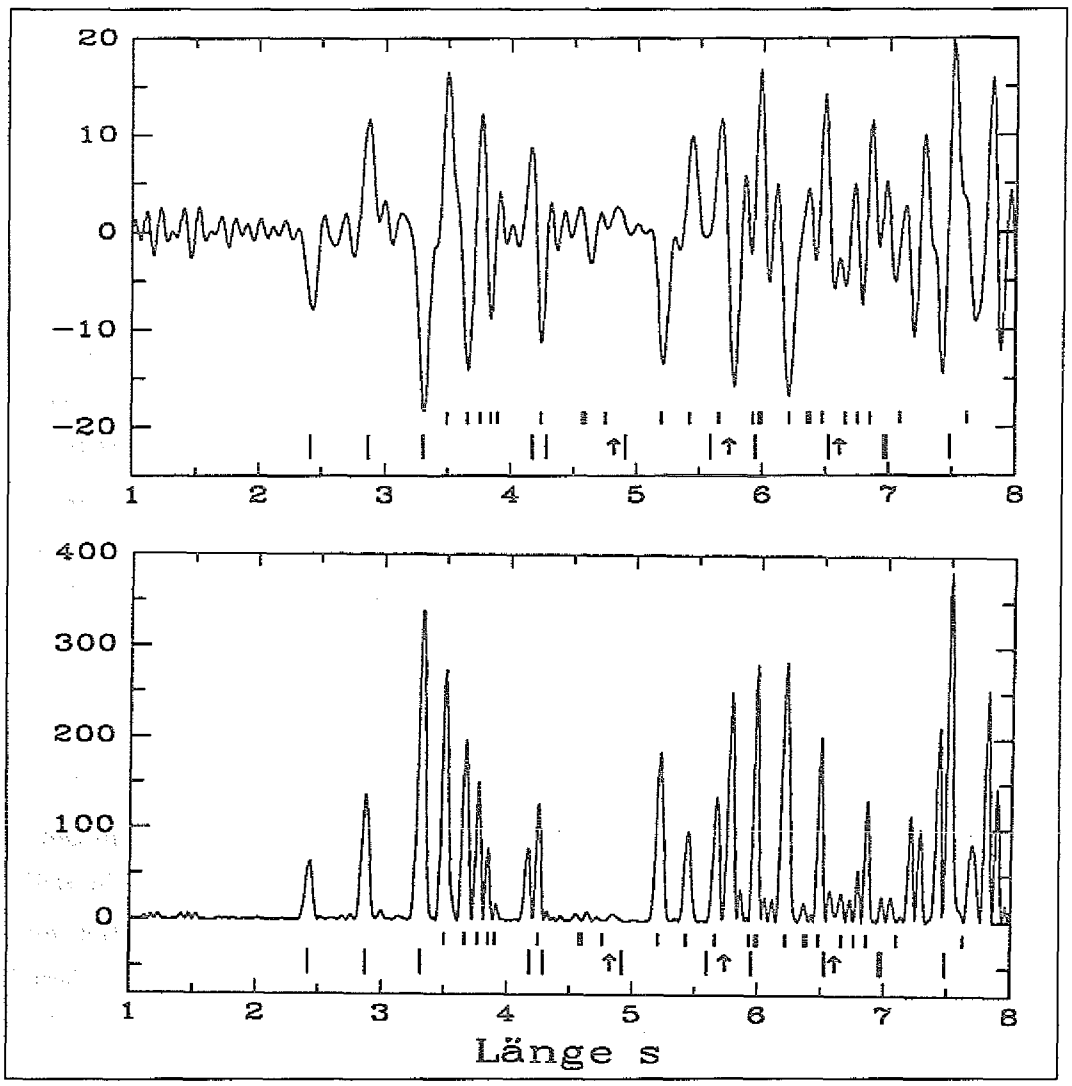


Abbildung 4.3: Fouriertransformation der Energiedichte (oben) und das Quadrat der Fouriertransformierten (unten) ohne Symmetriereduzierung. Längen der per. Orbits sind mit Strichen und deren Mehrfachdurchläufe mit Pfeilen markiert (große Symbole: Orbits bis 5. Ord.; kleine Symbole: Orbits höherer Ord.). Dämpfung $t = 0.0005$

keine eindeutige Zuordnung der Peaks zu Bahnen mehr gemacht werden, da hier die Auflösung zu gering ist.

Das Vorzeichen der Peaks (Abbildung 4.3 oben) stimmt in allen Fällen, mit dem überein, was man aufgrund der Maslov-Phasen in der Summe über periodische Orbits erwartet (siehe dazu Tabelle F.4, Spalte 2 und 7).

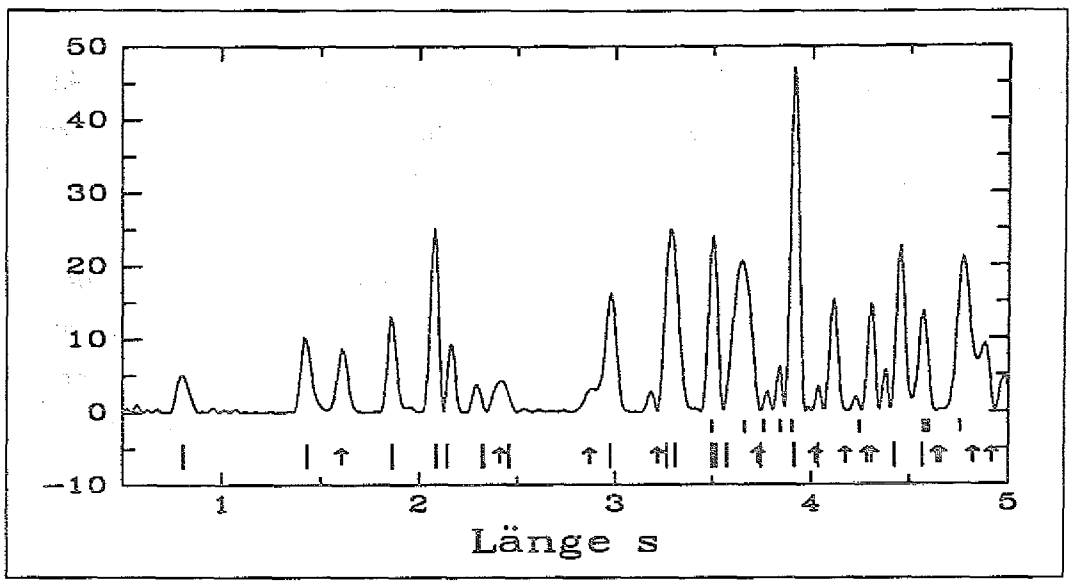


Abbildung 4.4: Quadrat der Fouriertransformierten der Energiedichte für die Symmetrieklasse A_1. Längen der per. Orbits sind mit Strichen und deren Mehrfachdurchläufe mit Pfeilen markiert (große Symbole: Orbits bis 5. Ord.; kleine Symbole: Orbits höherer Ord.). Dämpfung $t = 0.0005$

Jeder Eigenwert gehört zu einer der Symmetrieklassen A_1, A_2 oder E, d.h. zu jeder dieser Klassen existiert ein eigenes Spektrum von Eigenwerten. Umgekehrt liefert die Symmetriereduzierung der Summe über periodische Orbits für jede Klasse eine Summenformel, in die Beiträge der symmetriereduzierten periodischen Orbits eingehen und die formal genau der Gutzwillerschen Spurformel entspricht [63]. Man erwartet bei Transformation der Spektren zu den irreduziblen Darstellungen also dort besonders große Amplituden, wo die Längen der symmetriereduzierten Orbits liegen.

Das ist in der Abbildung 4.4 für die Klasse A_1 belegt. Markiert sind jeweils die Längen der Bahnen bis zur 5. Ordnung und deren Mehrfachdurchläufe, sowie mit kleinen Symbolen die Orbits höherer Ordnung. Die Daten der Bahnen entnimmt man der Tabelle F.1. Der Peak zur kleinsten Länge liegt bei $s = 0.80$. Das ist auf 1% genau die Länge des Orbits '1', die 0.8038 beträgt. Der Peak bei 1.61 gehört zum zweifachen Durchlauf dieses Orbits. Man findet alle Durchläufe von '1' bis zum fünffachen im Fourierspektrum wieder.

4.5 Semiklassische Berechnung der Eigenwerte

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, daß das quantenmechanische Spektrum des Drei–Scheiben–Billards die nach der Gutzwillerschen Spurformel zu erwartenden Informationen über die periodischen Orbits des klassischen Systems enthält, und zwar bis hinunter zu den kürzesten Bahnen.

Wir wollen nun umgekehrt versuchen, aus der semiklassischen Entwicklung (4.2) nach periodischen Orbits die quantenmechanischen Eigenwerte des Systems zu berechnen. Wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, kann man diese Summe in ein Produkt über dynamische Zetafunktionen ζ_j^{-1} umschreiben. Jede dieser unendlich vielen Zetafunktionen ist selbst wieder ein unendliches Produkt über Beiträge $1 - t_p^{(j)}$ der primperiodischen Orbits.

In Anhang A stellen wir eine Methode zur Entwicklung dieser unendlichen Produkte vor, die von P. Cvitanović [23] angegeben wurde (cycle expansion). Im weiteren wird diese Methode zur semiklassischen Berechnung der Eigenwerte des gebundenen Billards herangezogen.

4.5.1 Berechnung der Konvergenzabszisse

Wir zeigen zunächst, daß die reelle Achse, auf der die Eigenwerte des Systems liegen, nicht zum Bereich der absoluten Konvergenz der Summe über periodische Orbits gehört. Die Summe divergiert dort. In Anhang B ist beschrieben, wie man den Imaginärteil der Lage des höchsten Pols in der komplexen Wellenzahlebene bestimmt.

Diese Divergenzstelle wird bestimmt durch das asymptotische Abfallverhalten der Gewichte und das Anwachsen der Zahl der periodischen Orbits mit der Periode. Der Pol liegt dort, wo die Dämpfung durch den aus dem Phasenfaktor resultierenden exponentiellen Term e^{-zT_p} (siehe Gleichung (B.11)) die obigen Beiträge nicht mehr kompensieren kann. z ist dabei der Imaginärteil der komplexen Wellenzahl.

Man berechnet die Divergenzstelle der reellen Summe über Beiträge von periodischen Orbits, indem man sie umformt in die logarithmische Ableitung einer (reellen) Zetafunktion (Gleichung (B.12)). Deren höchste Nullstelle liefert den Imaginärteil der Lage des höchsten Pols der semiklassischen Spurformel und damit die Abszisse ihrer absoluten Konvergenz.

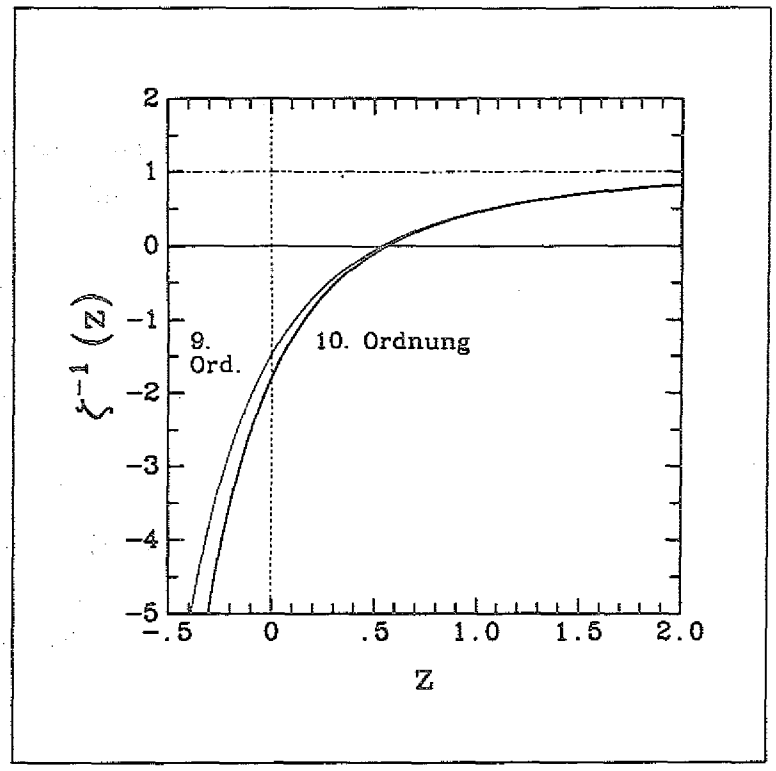


Abbildung 4.5: Höchste Nullstelle der reellen Zetafunktion $\zeta^{-1}(z)$, die die Konvergenzabszisse der Summe über periodische Orbits angibt. Die beiden Linien gehören zur 9. bzw 10. Ordnung cycle expansion.

In Abbildung 4.5 sind die Werte der Zetafunktion in der Nähe ihrer höchsten Nullstelle aufgetragen[5]. Daraus ergibt sich die Lage der Konvergenzabszisse. Sie liegt bei $\operatorname{Im} k = 0.56 \pm 0.02$. Oberhalb der Abszisse konvergiert die semiklassische Summe über periodische Orbits absolut. Die reelle Achse liegt also im Divergenzgebiet der Spurformel.

4.5.2 Cycle expansion von ζ_0^{-1}

In Kapitel 2 wurde gezeigt, wie sich die Gutzwillersche Summe durch eine Zetafunktion $Z(k)$ ausdrücken läßt. Es ist

$$Z(k) = \prod_{j=0}^{\infty} \prod_{p} (1 - t_p^{(j)}) = \prod_{j=0}^{\infty} \zeta_j^{-1} \tag{4.11}$$

[5]Die Berechnung der Werte erfolgte durch Anwendung der cycle expansion (Anhang A) unter Berücksichtigung aller periodischen Orbits bis einschließlich zur 10. Ordnung.

mit

$$t_p^{(j)} = (-1)^{n_p} \frac{e^{ikL_p}}{|\Lambda_p|^{1/2}\Lambda_p^j} \tag{4.12}$$

Die cycle expansion (Anhang A) liefert eine analytische Fortsetzung der Zetafunktion, unter Umständen in den physikalisch interessierenden Bereich in der Umgebung der reellen Achse. Aus den Nullstellen der Zetafunktion auf der reellen Achse ergeben sich dann die Eigenwerte des Systems.

In Anhang B wird argumentiert, daß Nullstellen von $Z(k)$ in der Nähe der reellen Achse nur von ζ_0^{-1} herrühren können; denn für alle anderen ζ_j^{-1} mit $j > 0$ liegt die reelle Achse im Bereich der absoluten Konvergenz. Deshalb wollen wir uns zunächst auf die cycle expansion von ζ_0^{-1} beschränken.

In symmetriereduzierter Form existiert auf der Menge der primperiodischen Orbits des Billard–Systems eine binäre symbolische Dynamik. Jeder Orbit p mit dem Gewicht t_p in der vollen Symmetrie gehört zu einer der Symmetrieklassen $2C_3$, 3σ oder I (siehe auch Anhang A.1) und trägt entsprechend einen Faktor $(1-t_p)^2$, $(1-t_p)^3$ oder $(1-t_p)^6$ zur Zetafunktion $1/\zeta$ der vollen Symmetrie bei. Diese zerfällt in drei Anteile, die zu den drei irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe C_{3v} gehören [28]:

$$\zeta = \zeta_{A1}\, \zeta_{A2}\, \zeta_E^2 \,. \tag{4.13}$$

Den Anteil eines jeden Orbits an den drei Faktoren entnimmt man der Zerlegung (siehe Anhang A.1)

$$(1-t_p)^2 = (1-t_p^{1/3})(1-t_p^{1/3})(1+t_p^{1/3}+t_p^{2/3})^2 \tag{4.14a}$$

$$(1-t_p)^3 = (1-t_p^{1/2})(1+t_p^{1/2})(1-(t_p^{1/2})^2)^2 \tag{4.14b}$$

$$(1-t_p)^6 = (1-t_p)(1-t_p)(1-t_p)^4 \,. \tag{4.14c}$$

Die Gewichte auf der rechten Seite sind dann diejenigen des auf den Fundamentalbereich des Billards eingeschränkten Orbits. Die jeweils ersten Faktoren tragen zur Funktion ζ_{A1}, die zweiten zur Funktion ζ_{A2} und die dritten zu ζ_E^2 bei. Wir wollen im weiteren die Gewichte der symmetriereduzierten Orbits mit t_p bezeichnen. Die cycle expansion der drei Faktoren ist in Anhang A.1 angegeben.

Konvergenz der cycle expansion

Es wurde schon beschrieben, daß im gebundenen Drei–Scheiben–Billard pruning existiert, d.h. nicht zu jeder binären Symbolsequenz existiert auch ein entspre-

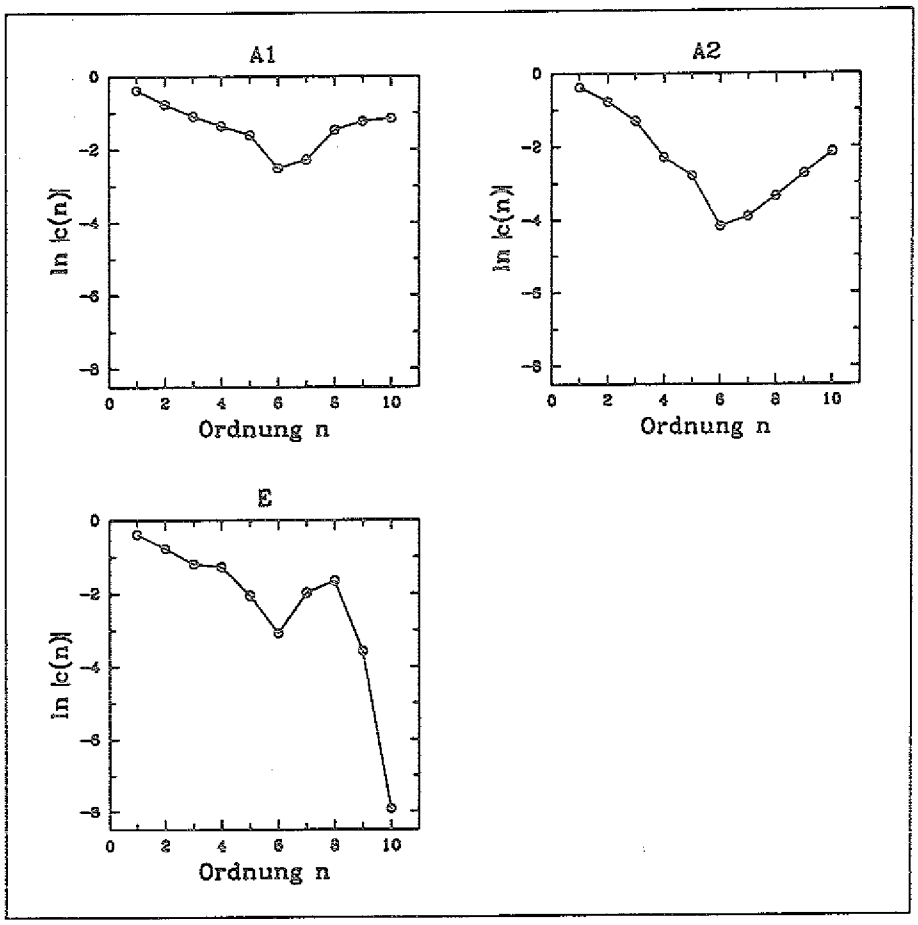


Abbildung 4.6: Natürlicher Logarithmus der Krümmungsterme des gebundenen Billards für die drei Symmetrieklassen A_1, A_2 und E ohne Interpolation des Gewichtes des Orbits '0'.

chender periodischer Orbit. Es fehlt in diesem System einer der beiden fundamentalen Orbits, nämlich der Orbit '0'. Dieser verschwindet mit der Instabilität +1 und einer Länge 0. In der cycle expansion sind alle Terme, die 't_0' enthalten, nicht kompensiert, was zu einer starken Verschlechterung der Konvergenz führt. Als Maß für die Konvergenz der Zetafunktionen betrachten wir den Beitrag aller Orbits einer festen Ordnung und deren Approximation durch kürzere (Krümmungsterme) bei der Energie $E = 0$. Es gehen also keine energieabhängigen Phasenbeiträge ein. Diese Größen sind in der Abbildung 4.6 dargestellt. Die Krümmungen fallen weder exponentiell ab, wie es beim offenen System für das Verhältnis $d : r = 6$ der Fall ist, noch fallen sie überhaupt monoton ab. Hierfür

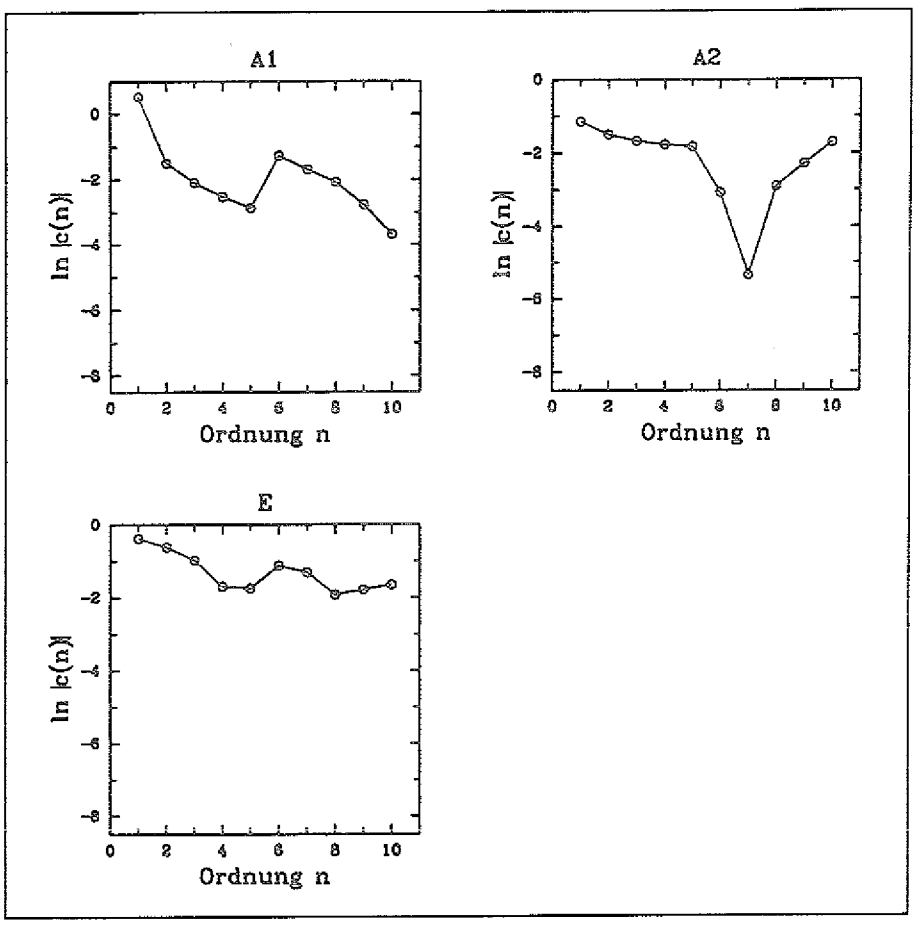


Abbildung 4.7: Natürlicher Logarithmus der Krümmungsterme des gebundenen Billards für die drei Symmetrieklassen A_1, A_2 und E mit Interpolation des Gewichtes des Orbits '0'.

ist das pruning verantwortlich, das, abgesehen vom fehlenden Orbit '0' in der sechsten Ordnung einsetzt. Damit ist nicht zu erwarten, daß die Nullstellen der Zetafunktionen mit wachsender Ordnung der cycle expansion gut konvergieren.

In Abbildung 4.7 sind die Krümmungsterme aufgetragen für den Fall, daß man das Gewicht des fehlenden Orbits '0' interpoliert, d.h. dieser Orbit, der im gebundenen System mit Länge $L = 0$, Instabilität 1 und Maslov–Index 2 eingeht, wurde formal in der cycle expansion berücksichtigt. Im unendlichen Produkt bedeutet das eine Erweiterung mit $1 - t_0 = 2$. Dieses zusätzliche Gewicht macht aus dem Produkt $\prod(1 - t_p)$, bei dem der Beitrag des '0'–Orbits fehlt, wieder ein bezüglich der binären Dynamik vollständiges Produkt. Formal existieren dann wieder zu

jedem längeren Orbit alle entsprechenden Näherungsterme von kürzeren Orbits, da t_0 nicht null ist. Das kann zu einer Verbesserung der Konvergenz der cycle expansion führen [3, 4, 70]. Vergleicht man allerdings die Krümmungsterme im Fall mit und ohne Berücksichtigung des Orbits '0', so stellt man keine Konvergenzverbesserung fest.

Fehlt im Alphabet $\{0,1\}$ der Fixpunkt '0', so kann man ein äquivalentes unendliches Alphabet $\{1,2,3,4,\ldots\}$ einführen, das dann wieder zu einer vollständigen symbolischen Dynamik führt, falls kein weiterer Orbit fehlt [3]. Die Zahl der fundamentalen Orbits in dieser Dynamik ist unendlich. In der binären Dynamik ausgedrückt sind es alle Orbits '$(0^n)1$'. Summiert man alle Beiträge t_{0^n1} dieser Orbits für unser Modell[6] auf, also

$$1/\zeta_{A1} \approx 1 - \sum_{n=0}^{5} t_{0^n1} \,, \tag{4.15}$$

und berechnet die niedrigste Nullstelle dieses Ausdrucks, so erhält man $k = 4.3446 \pm 0.0001$. Die exakte quantenmechanische Rechnung liefert für den niedrigsten Eigenwert der Klasse A_1 den Wert 4.42980 ± 0.00001. Die Familie '$(0^n)1$' bestimmt also den Grundzustand auf 2% genau. Schon der nächst höhere Eigenwert ist mit diesen wenigen Bahnen nicht mehr reproduzierbar. Die weitere Handhabbarkeit der cycle expansion mit diesem dem Problem angepaßteren Alphabet ist allerdings extrem schlecht, da zur konsistenten Berechnung der Krümmungsterme höherer Ordnung noch wesentlich mehr periodische Orbits bestimmt werden müßten. Abgesehen davon nimmt die Zahl der Summenterme der Entwicklung mit wachsender Ordnung so schnell zu, daß selbst die Auswertung auf dem Computer nicht mehr sinnvoll erscheint. Dieser Ansatz wurde nicht weiter verfolgt.

Numerische Ergebnisse zur cycle expansion von ζ_0^{-1}

Wir bestimmen die Nullstellen von $\zeta_0^{-1}(k)$. Das sind die Polstellen des oszillatorischen Anteils $\rho_{po}(k)$ der semiklassischen Näherung zur Energiedichte.

Die Auswertung der cycle expansion für binäres Alphabet ergibt für die niedrigsten Eigenwerte des Systems eine gute Übereinstimmung (bis zu 2% Genauigkeit) mit den quantenmechanisch exakten Werten. Aufgrund des prunings und der

[6] Im Modellsystem existiert diese Familie von Orbits nur bis $n = 5$ (siehe Kapitel 3).

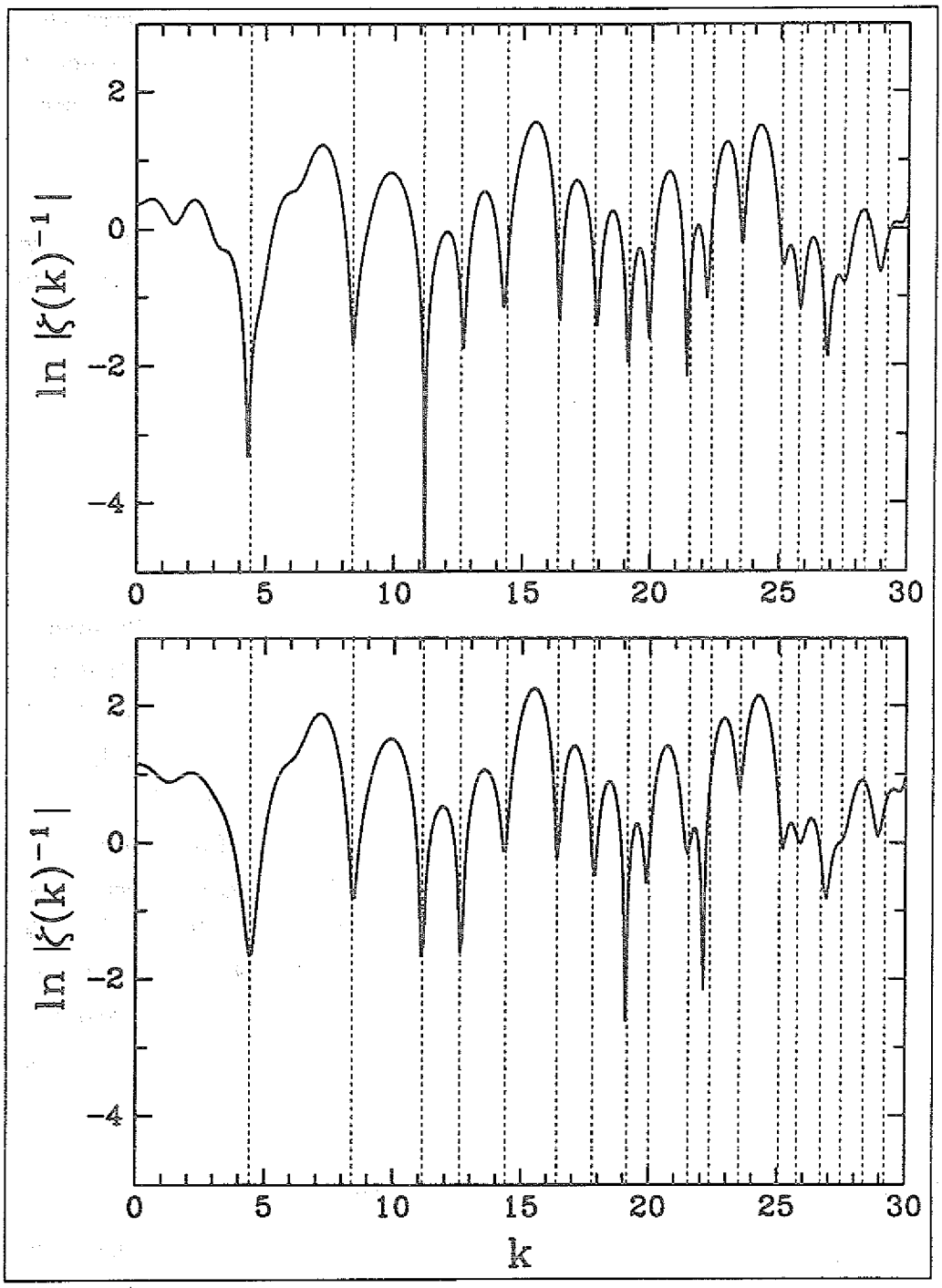


Abbildung 4.8: Lage der Nullstellen von $\zeta_{0,A1}^{-1}$ im Vergleich mit den exakten Eigenwerten (markiert durch gestrichelte Linien) ohne Interpolation des Gewichts von '0' (oben) und mit Interpolation (unten). Aufgetragen ist die 10. Ordnung cycle expansion.

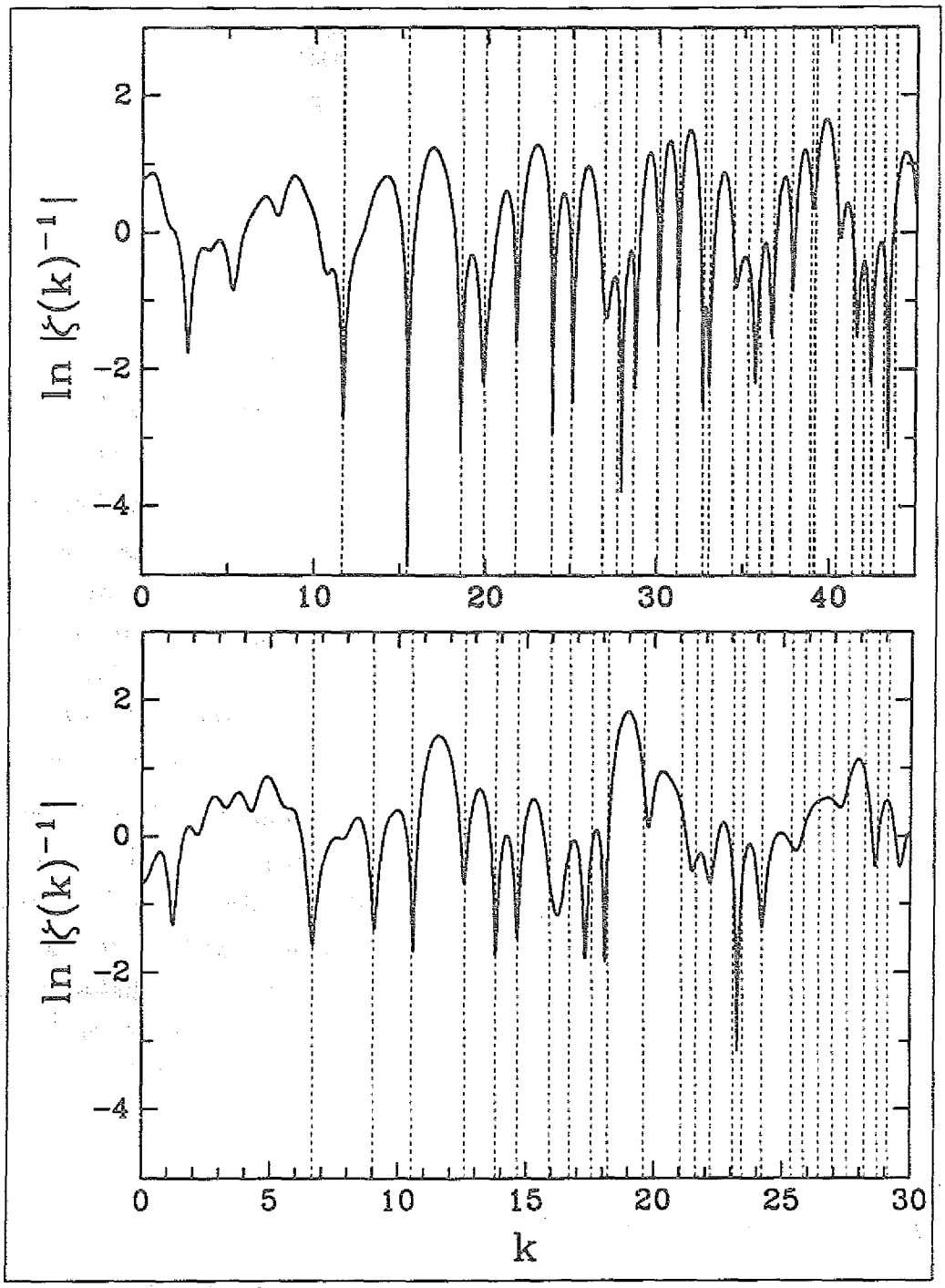


Abbildung 4.9: Lage der Nullstellen von $\zeta_{0,A2}^{-1}$ (oben) und von $\zeta_{0,E}^{-1}$ im Vergleich mit den exakten Eigenwerten (gestrichelte Linien). Aufgetragen ist die 10. Ordnung cycle expansion ohne Interpolation des Gewichts von '0'.

n	*Polstelle*		*Eigenwert*
10	8.41887	−0.05450	8.40956
8	11.19465	0.00249	11.13849
8	12.78268	−0.00186	12.60852
10	14.20972	−0.02364	14.40673

Tabelle 4.1: Vier Polstellen von $\zeta_0(k)$ (Ordnung n der cycle expansion, Real– und Imaginärteil) und exakter quantenmechanischer Eigenwert

dadurch bedingten schlechten Konvergenz stabilisieren die Nullstellen nicht mit wachsender Ordnung, und nach etwa den ersten 15 Eigenwerten (der Klasse A_1) kann man die Nullstellen den exakten Eigenwerten nicht mehr zuordnen.

In den Abbildungen 4.8 und 4.9 ist der natürliche Logarithmus des Absolutbetrages von ζ_0^{-1} jeweils für die Symmetrieklassen A_1, A_2 und E aufgetragen. Die beiden Abbildungen 4.8 unterscheiden sich dadurch, daß in der zweiten das interpolierte Gewicht des fehlenden Orbits '0' berücksichtigt wurde, in der ersten dagegen nicht. Beide Kurven unterscheiden sich qualitativ nicht. Insbesondere ändert sich auch nicht die Lage der Nullstellen der Zetafunktion. Durch gestrichelte Linien gekennzeichnet ist die Lage der exakten Eigenwerte des Systems.

Sucht man nach der Lage der Nullstellen von $\zeta_0^{-1}(k)$ in der komplexen Ebene, so findet man, daß sie nicht exakt auf der reellen Achse liegen. Der Imaginärteil ist allerdings so klein, daß der Betrag der Zetafunktion auf der reellen Achse in der Nähe dieser komplexen Nullstelle ein scharfes Minimum besitzt, dessen Lage wir mit der Lage eines Eigenwertes identifizieren. Für vier Nullstellen haben wir ihre Lage in der komplexen k–Ebene bestimmt (siehe Tabelle 4.1). Einer der Pole liegt oberhalb der reellen Achse. Der Realteil stimmt in allen Fällen innerhalb von etwa 2% mit dem exakten Eigenwert überein.

4.5.3 Die Eulerentwicklung

Die Zetafunktionen ζ_j^{-1} besitzen, im Gegensatz zu $Z(k)$, zusätzliche Polstellen [21], was im allgemeinen zu numerischen Schwierigkeiten bei der Bestimmung der Nullstellen führen kann, wenn man sich auf die Untersuchung einer dieser Funktionen beschränkt. Diese Pole sind ein Artefakt der Aufspaltung von $Z(k)$ in ein Produkt über die ζ_j^{-1}. Zum Beispiel gibt es Abbildungen (siehe [21]), für

die der erste Pol von ζ_0^{-1} durch die erste Nullstelle von ζ_1^{-1} aufgehoben wird. Die folgenden Pole werden aufgehoben durch entsprechende Nullstellen der folgenden ζ_j^{-1} (siehe Abbildung 4.10). Die Reihenfolge des sich gegenseitigen Weghebens von Polstellen und Nullstellen wird im allgemeinen komplizierter sein als in diesem Beispiel von [21]. Die numerischen Schwierigkeiten sollten nicht auftreten, wenn man die volle Funktion $Z(k)$ in der komplexen Ebene untersucht. Das Produkt über unendlich viele ζ_j^{-1} kann mit Hilfe der *Euler-Formel* (siehe Anhang D.2) zunächst in eine Summe[7] umgeschrieben werden:

$$\prod_{j=0}^{\infty}(1 - z^{n_p} t_p \Lambda_p^{-j}) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z^{m n_p} t_p^m \Lambda_p^{-m(m-1)/2}}{\prod_{k=1}^{m}(1 - \Lambda_p^{-k})} \,. \tag{4.16}$$

t_p ist das Gewicht $t_p^{(0)}$ aus (2.40). z ist ein formaler Parameter, der es gestattet, die Summe in eine Potenzreihe in z zu entwickeln (cycle expansion). Die Potenzen von z sind die Symbollängen von periodischen Orbits und Pseudoorbits. In den Koeffizienten der Potenzreihe sind alle Terme von Orbits und Pseudoorbits der entsprechenden Ordnung zusammengefaßt. Zum Schluß wird dann $z = 1$ gesetzt. Für die formale Entwicklung bis zu einer festen Ordnung n ist es wichtig zu bemerken, daß die Zahl m_p der zu berücksichtigenden Terme in der obigen Summe (4.16) für jeden periodischen Orbit der Länge n_p gegeben ist durch $[n/n_p]$, wobei $[x]$ den ganzzahligen Anteil von x bezeichnet. Entwickelt man z.B. bis zur 10. Ordnung, dann sind 10 Terme der Periode-1-Orbits, 5 Terme der Periode-2-Orbits, 3 Terme der Periode-3-Orbits, 2 Terme der Periode-4 -und 5-Orbits und für alle Orbits größerer Länge nur jeweils ein Summenglied relevant. Alle anderen Terme der Summe geben Beiträge zu höheren als der 10. Ordnung. Zur Unterscheidung von der Entwicklung der Zetafunktion ζ_0^{-1} allein bezeichnen wir die cycle expansion der Summe (4.16) als *Eulerentwicklung*.

In der Abbildung 4.11 ist die Eulerentwicklung von $Z(k)$ für die 10. Ordnung längs der reellen Achse aufgetragen. Ein Vergleich mit Abbildung 4.8 zeigt, daß

[7]Zerlegt man die Selberg-Zetafunktion $Z(k)$ in die drei Symmetrieanteile A_1, A_2 und E, dann treten nur Produkte über Faktoren der Form $(1 - t_p)$ oder $(1 + t_p)$ auf, die mit Hilfe der Euler-Formel umgeformt werden können (siehe (4.14)); dazu beachte man für die E-Symmetrie die Zerlegungen

$$\begin{aligned} 1 + t_p + t_p^2 &= (1 - \varepsilon t_p)(1 - \varepsilon^* t_p) \\ 1 - t_p^2 &= (1 - t_p)(1 + t_p) \,, \end{aligned}$$

wobei $\varepsilon := \exp(2\pi i/3)$.

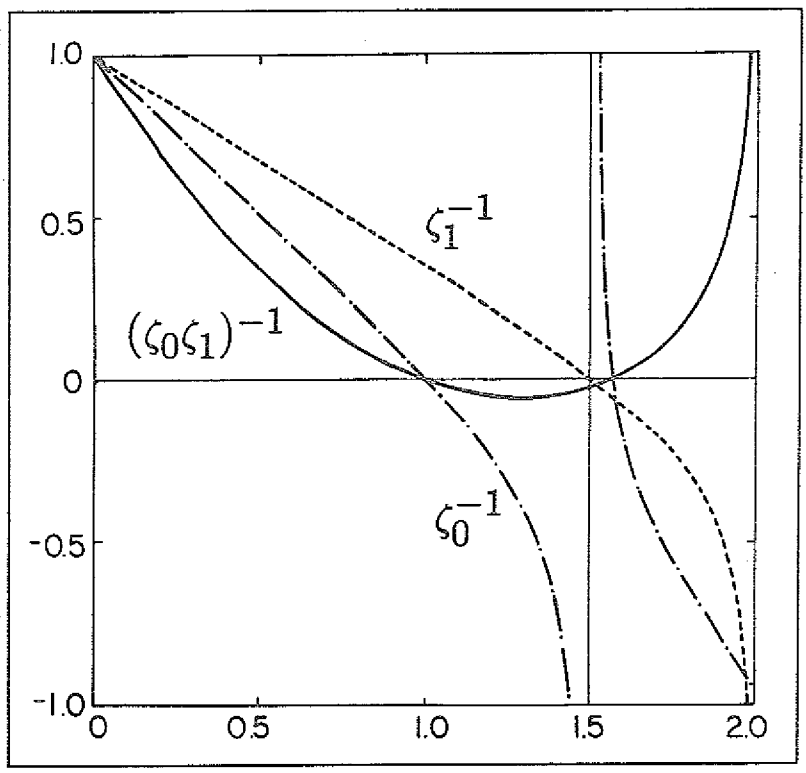


Abbildung 4.10: Zetafunktionen $\zeta_0^{-1}(z)$ und $\zeta_1^{-1}(z)$ (gestrichelte Linie), sowie ihr Produkt (durchgezogene Linie) in Abhängigkeit von z (reell) für eine Modellabbildung [21]. Die Polstelle von ζ_0^{-1} bei $z = 1.5$ wird im Produkt von einer Nullstelle von ζ_1^{-1} aufgehoben.

die Eulerentwicklung bei diesem System bezüglich Konvergenz und Auflösung der Eigenwerte keine Verbesserung gegenüber der Entwicklung von ζ_0^{-1} alleine bringt.

Im folgenden betrachten wir die Phase der Selberg–Zetafunktion auf der reellen Achse. Liegt eine Nullstelle in der Nähe der reellen Achse, so erwartet man, daß die Phase von $Z(k)$, wenn man die Stelle von kleineren zu größeren k's passiert, in dessen Nähe einen Sprung um $\pm\pi$ macht. Das positive Vorzeichen gilt, falls die Nullstelle oberhalb, und das negative, falls sie unterhalb der reellen Achse liegt[8]. In der Abbildungen 4.12 sind die Phasen von $Z(k)$ in Eulerentwicklung

[8]Man betrachte zum Beispiel die Funktion $x - i\varepsilon$ mit einem kleinen positiven ε. Sie besitzt eine Nullstelle bei $i\varepsilon$, also oberhalb der reellen Achse. Die Phase ϕ ist für reelle x gegeben durch $\tan\phi = -\varepsilon/x$. Setzen wir sie für $x \to -\infty$ gleich null, dann wächst sie für größer werdende x monoton an und erreicht im Limes $x \to +\infty$ den Wert $+\pi$. Je kleiner ε, umso

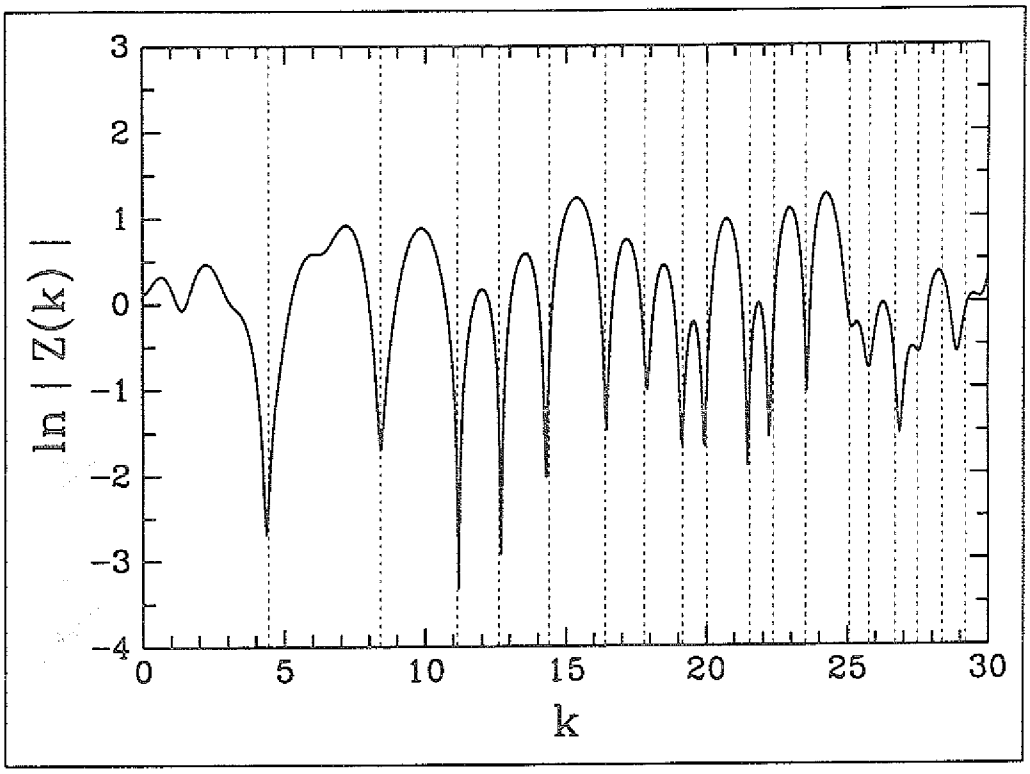


Abbildung 4.11: Lage der Nullstellen von $|Z_{A1}(k)|$ im Vergleich mit den exakten Eigenwerten (gestrichelte Linien) in Eulerentwicklung. Aufgetragen ist die 10. Ordnung cycle expansion.

der Ordnungen 8–10 für die A_1–Symmetrie dargestellt. Dabei wurde die Phase bei $k = 0$ null gesetzt. Abbildung 4.11 zeigt, daß der Betrag der Selberg–Funktion in der Nähe eines Eigenwertes sehr klein wird. Ihre Phase ändert sich dort sehr stark, und zwar in der Größenordnung π (Abbildung 4.12). Das rührt, wie wir oben diskutiert haben, von Nullstellen in der Nähe der reellen Achse her, die aber offenbar teils oberhalb, teils unterhalb der Achse liegen, was daraus hervorgeht, daß die Phasenänderung nicht monoton ist.

kleiner der Bereich um $x = 0$, in dem sich die Phase stark ändert. Im Grenzübergang $\varepsilon \to 0$ ist $\phi(k)$ eine Sprungfunktion mit einem Sprung von π bei $x = 0$. Entsprechend findet man einen Phasensprung von $-\pi$, wenn $\varepsilon < 0$ ist.

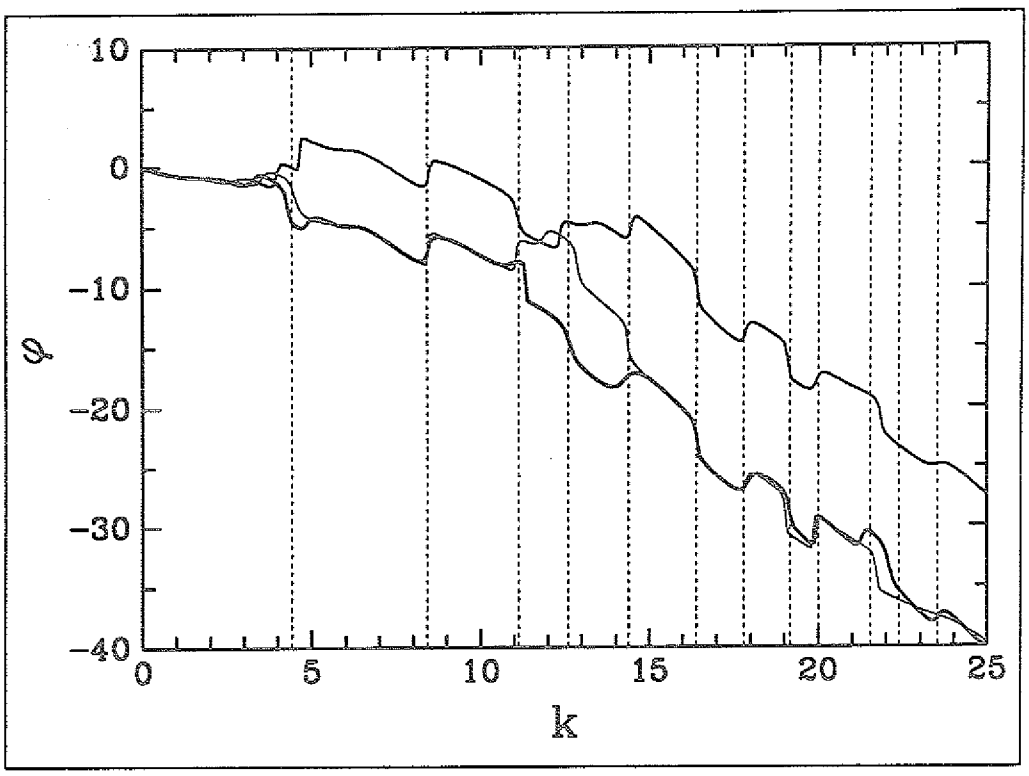


Abbildung 4.12: Phase φ der Selberg-Zetafunktion in Eulerentwicklung der Ordnungen 8-10 (10. Ord.: fette Linie; exakte Eigenwerte: gestrichelte Linien).

4.5.4 Funktionalgleichung für Z(E)

Die semiklassischen Eigenwerte liegen in der Nähe der reellen Achse und sollten, im Grenzwert, daß alle periodischen Orbits in die Entwicklung der Summe (4.16) einbezogen werden, auf die reelle Achse fallen. Schreibt man den Ausdruck (2.33) ebenfalls als logarithmische Ableitung

$$\begin{aligned} \rho_0(E) = \frac{\partial}{\partial E} N_0(E) &= -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \frac{\partial}{\partial E}(-i\pi N_0(E)) \\ &= -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \frac{\partial}{\partial E} \ln(e^{-i\pi N_0(E)}) \,, \end{aligned} \tag{4.17}$$

so kann man die Energiedichte $\rho(E)$ ausdrücken durch

$$\rho(E) = \rho_0(E) + \rho_{po}(E) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \frac{\partial}{\partial E} \ln(Z(E) e^{-i\pi N_0(E)}) \,. \tag{4.18}$$

Durch Integration über die Energie erhält man für die integrierte Energiedichte:

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \ln D(E) \tag{4.19}$$

mit $D(E) := Z(E)e^{-i\pi N_0(E)}$.

Diese Gleichung ist so zu verstehen, daß zur Energie E ein kleiner positiver Imaginärteil addiert wird, um die Deltasingularitäten der Zustandsdichte zu glätten. Geht dieser Imaginärteil gegen null, so erwartet man scharfe Stufen in $N(E)$ an den Stellen der reellen Eigenwerte. $N(E)$ ist dann die Zahl der Energieeigenwerte kleiner E.

Die Spur $g(E)$ der Greenschen Funktion $G(\mathrm{q}, \mathrm{q}'; E)$ ist wegen (2.30) gegeben durch

$$g(E) = \mathrm{Tr}\, G(\mathrm{q}, \mathrm{q}'; E) = \frac{\partial}{\partial E} \ln(\prod_n (E - E_n)) \,. \tag{4.20}$$

In semiklassischer Näherung erhält man für $g(E)$ aus Gleichung (4.18) andererseits

$$g(E) = \frac{\partial}{\partial E} \ln(D(E)) \,. \tag{4.21}$$

Nun ist die Funktionaldeterminante $\prod_n (E - E_n)$ für ein gebundenes System auf der reellen Achse reell, und verlangen wir das wegen (4.20) und (4.21) auch für die semiklassische Näherung, dann sollte also $D(E)$ auf der reellen Achse ebenfalls reell sein. D.h. die integrierte mittlere Zustandsdichte $N_0(E)$ dreht durch den Faktor $\exp(-i\pi N_0)$ die Phase der Selberg-Funktion $Z(E)$, die diese entlang der reellen Achse aufsammelt, wieder zurück, so daß $D(E)$ reell bleibt. Die Nullstellen von $D(E)$ sind gerade die (reellen) Eigenwerte des Systems. Wegen (4.19) wird dann $N(E)$ zur Stufenfunktion mit Sprüngen an den Eigenwerten.

Damit erfüllt $D(E)$ die Funktionalgleichung $D(E) = D^*(E)$ in der komplexen Ebene, und man erhält für die Selberg–Funktion [70]:

$$e^{-i\pi N_0} Z(E) = e^{i\pi N_0} Z^*(E) \,. \tag{4.22}$$

Eine entsprechende Spiegelungseigenschaft existiert auch für die Riemannsche Zetafunktion.

Gleichung (4.22) legt also nahe, daß die Nullstellen von $\mathrm{Re}\,(Z(E)e^{-i\pi N_0(E)})$ semiklassische Näherungen der reellen Eigenwerte des gebundenen Systems sind.

Als Beispiel betrachten wir den Harmonischen Oszillator. Seine Energieeigenwerte liegen bei $n + 1/2$. Die exakte integrierte Energiedichte $N(E)$ ist eine Stufenfunktion mit Sprüngen um 1 an den Eigenwerten. Die mittlere integrierte Energiedichte $N_0(E)$ approximiert N besonders gut, wenn sie an den Stellen der Eigenwerte die Stufenfunktion gerade in halber Höhe einer Stufe schneidet, also

$N_0(E_i) = i + 1/2$. Die Lage der Eigenwerte ergibt sich dann aus den Nullstellen von $\cos(\pi N_0(E)) = \mathrm{Re}\, e^{-i\pi N_0(E)}$ [13].

Im allgemeinen Fall bilden die Nullstellen von $\mathrm{Re}\, e^{-i\pi N_0(E)}$ eine Folge von Energien mit der korrekten spektralen Dichte. Die Selberg–Zetafunktion liefert die semiklassischen Korrekturen zu dieser mittleren Verteilung.

Numerische Ergebnisse

Wir stellen im folgenden die numerischen Ergebnisse für die A_1–Symmetrie vor. In Abschnitt 4.3 haben wir die drei führenden Terme des asymptotischen Gesetzes $N_0(k)$ für die mittlere integrierte Energiedichte angegeben. Wir haben festgestellt, daß diese Näherung bei den ersten etwa 40 Eigenwerten um etwa $c \simeq 1/2$ zu große Werte liefert (Abbildung 4.2). Zieht man von diesem N_0 also die Konstante c ab, so erhält man eine wesentlich bessere Darstellung für die mittlere integrierte Energiedichte in dem unteren Energiebereich bis etwa zum 40. Eigenwert.

Wir haben aufgrund dieser Überlegungen die Nullstellen der Funktion

$$D(k) = \mathrm{Re}\, Z(k)\; e^{-i\pi(N_0(k)-c)} \tag{4.23}$$

verglichen mit den exakten Eigenwerten zur A_1–Symmetrie. N_0 ist hier die aus dem asymptotischen Gesetz berechnete integrierte Dichte und c wurde 1/2 gewählt.

Die Ergebnisse zeigen die Abbildungen 4.13 und 4.14.

$Z(k)$ wurde entwickelt bis zur 3. bzw. 10.Ordnung cycle expansion. Der Orbit '0', der im gebundenen System mit Länge $L = 0$, Instabilität 0 und Maslov–Index 2 eingeht, wurde hier wiederum formal in der cycle expansion berücksichtigt, wie oben beschrieben.

In Abbildung 4.13 wurden nur Orbits bis zur Länge 3 verwendet. Das sind (mit der Extrapolation für den Orbit '0') 5 Orbits. Die ersten 20 Eigenwerte findet man als Nullstellen wieder und die Auflösung ist besser als die mittlere Zustandsdichte des Systems. Die mittlere Zustandsdichte dN_0/dk erhält man aus dem Weyl–Gesetz (Gleichung (4.6) und Fußnote 3). Für die A_1-Symmetrie ergibt sich z.B. $dN_0/dk(k = 25) \approx 1.01$ und $dN_0/dk(k = 40) \approx 1.6$. Die beiden exakten Eigenwerte bei $k = 25.071$ und $k = 25.755$ haben einen Abstand, der

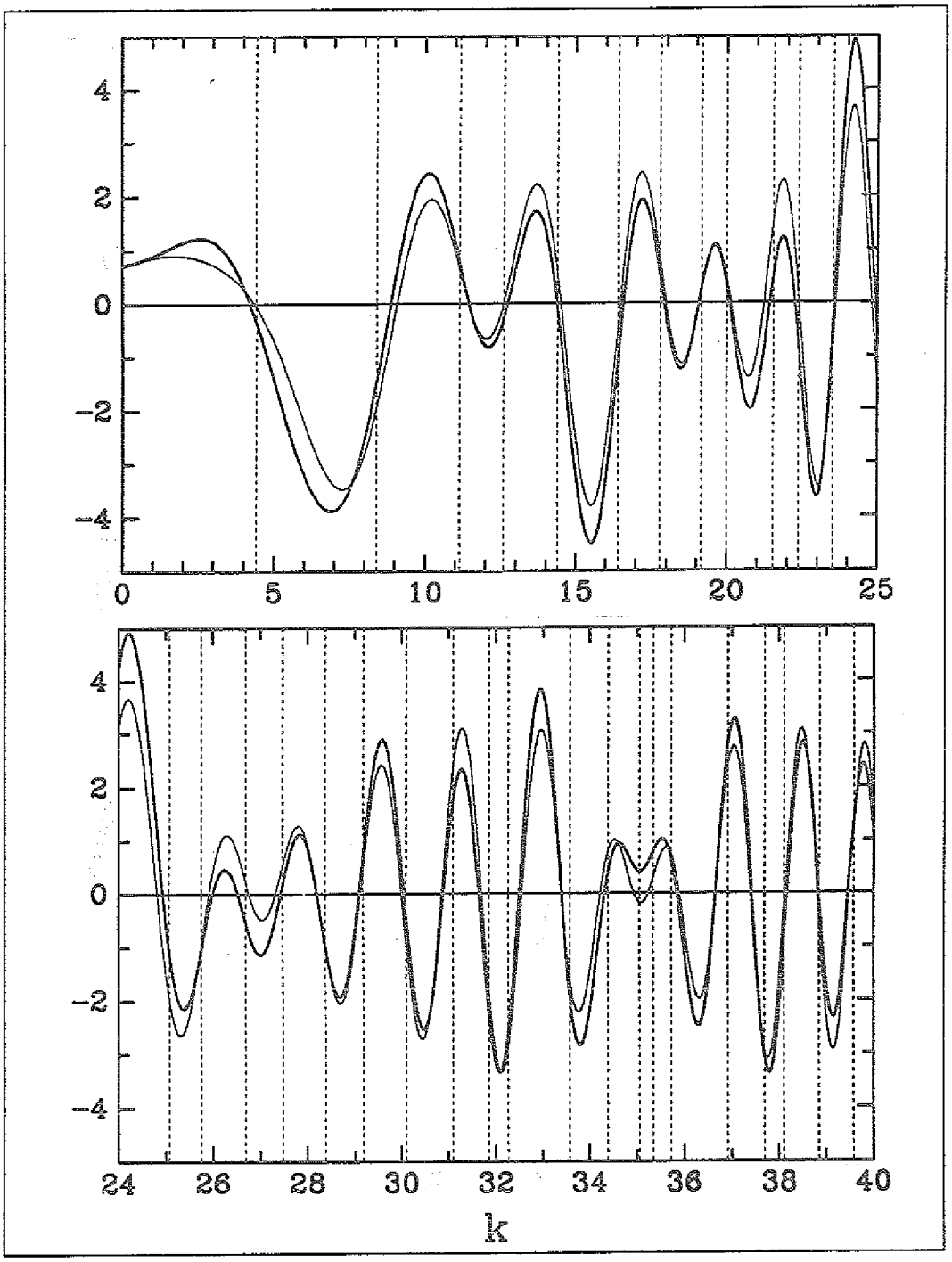


Abbildung 4.13: Cycle expansion in 2. und 3. Ordnung von $\mathrm{Re}(D_{A1}(k))$. Exakte Eigenwerte sind mit gestrichelten Linien markiert. (Oben: $k = 0 - 25$, Unten: $k = 24 - 40$) [70]

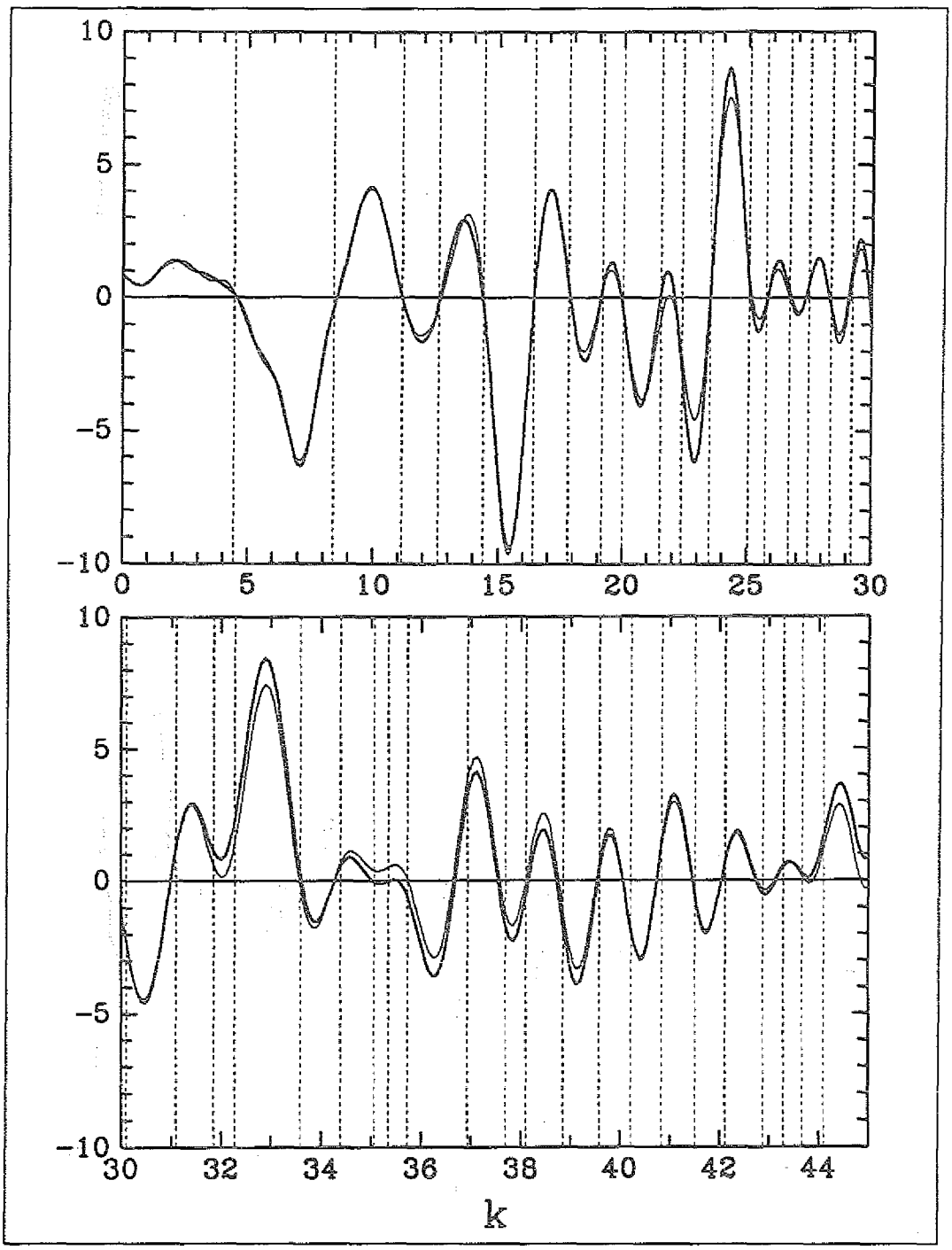


Abbildung 4.14: Cycle expansion in 9. und 10. Ordnung von $\mathrm{Re}\,(D_{A1}(k))$. Exakte Eigenwerte sind mit gestrichelten Linien markiert. (Oben: $k = 0 - 30$, unten: $k = 30 - 45$) [70]

kleiner als die mittlere Dichte ist. Sie sind schon in der semiklassischen Approximation bis zur 3. Ordnung zu identifizieren. Nimmt man mehr Orbits hinzu, erhöht also die Ordnung der cycle expansion, so ändern sich die Amplituden von $\mathrm{Re}\, D(k)$ stark, die Position der Nullstellen ist dagegen stabil. In Bereichen mit kleiner Amplitude kann es allerdings auch zu relativ starken Änderungen der Nullstellen kommen. Das erkennt man z.B. in der Abbildung 4.13 bei zwei Eigenwerten in der Nähe von $k = 35$. Die zu beiden Eigenwerten gehörenden Nullstellen entstehen erst bei Hinzunahme der Orbits 3. Ordnung. Bei Entwicklung bis zur 2. Ordnung ist in der Nähe lediglich ein Minimum, aber kein Nulldurchgang.

Die Abbildungen 4.14 zeigen die Entwicklung in 9. und 10. Ordnung. Die Lage der meisten der niedrigen semiklassischen Eigenwerte hat sich stabilisiert, und die Abweichungen zu den exakten Werten liegt unter 1%. Ab $k = 20$ gibt es allerdings immer wieder Ausnahmen und es gibt sogar sowohl in der 9. als auch in der 10. Ordnung vermiedene Nullstellen (z.B. bei $k \approx 32$). Die Genauigkeit der Approximation wächst also offenbar nicht gleichmäßig mit der Ordnung der Entwicklung. Das ist verständlich; denn die von uns benutzte Näherung für die mittlere integrierte Eigenwertdichte wird bei höheren Energien immer schlechter.

Kapitel 5

Quantenresonanzen bei der Streuung am offenen Billard

5.1 Einleitung

Ausgangspunkt für die semiklassische Behandlung quantenmechanischer Streuprozesse war die Beschreibung der elastischen Streuung von Atomen [36] und inelastischer Streuprozesse bei Molekülen. Eine der ersten Arbeiten, in denen Ergebnisse vorgestellt wurden, die als Auswirkungen der klassischen chaotischen Streuung interpretiert werden konnten, ist die von Rankin und Miller [62]. Die Autoren berechneten numerisch die klassische S–Matrix für eine inelastische lineare Atom–Molekül–Streuung. Sie beobachteten, daß die Abhängigkeit einer Variable nach der Streuung von einer Variable vor der Streuung in einigen Bereichen starke Schwankungen aufweist.

Ein solches Verhalten wurde bis heute in einer Vielzahl von Arbeiten beschrieben, in denen die Autoren die Existenz einer fraktalen unter der klassischen Dynamik invarianten Menge nachweisen und diskutieren. Beispiele findet man in Modellen der Himmelsmechanik [59], bei der Wirbelbewegung in der Hydrodynamik [31], in der elastischen Potentialstreuung [33, 52, 72, 17] und bei chaotischen Billard–Systemen [38, 39, 37].

Gemeinsam ist allen Modellen die Existenz einer hyperbolischen invarianten Menge Λ im Phasenraum, die durch homokline und heterokline Verbindungen von instabilen periodischen Orbits entsteht. Die stabilen Mannigfaltigkeiten der unendlich vielen lokalisierten periodischen Orbits reichen hinein in den asympto-

tischen Bereich der einlaufenden Streubahnen. Sie bewirken, daß eine Teilmenge von Streubahnen mit Maß null existiert, die im Bereich des Streupotentials gefangen bleiben. Bahnen, die in der Nähe der stabilen invarianten Mannigfaltigkeiten starten, verbringen eine lange Zeit in der Potentialregion und folgen dort den periodischen Orbits.

Streuexperimente sind eine wichtige Quelle für Informationen über Quantensysteme. Daher ist es wichtig, die quantenmechanischen Phänomene zu finden, die der chaotischen Streuung in der klassischen Mechanik entsprechen.

Dazu gibt es Untersuchungen zur Phasenverschiebung der quantenmechanischen Streuamplitude bei der elastischen Streuung auf einer zweidimensionalen Fläche mit konstanter negativer Krümmung [47]. Im Rahmen einer semiklassischen Näherung wurde eine Erklärung für die statistischen Eigenschaften der Fluktuationen des Streuquerschnittes als Funktion der Energie gegeben [16]. Ein Vergleich des quantenmechanischen Verhaltens mit dem klassischen und semiklassischen Verhalten für das in dieser Arbeit behandelte Streusystem wird in [38, 39, 37] vorgestellt.

Wir behandeln in diesem Kapitel ein klassisch chaotisches Streusystem in semiklassischer Näherung mit Hilfe der Theorie periodischer Orbits. Wir wenden den Formalismus der dynamischen Zetafunktionen an, um die Pole der S–Matrix in der komplexen Energieebene in semiklassischer Näherung zu berechnen [26]. Verglichen werden diese Ergebnisse mit den quantenmechanisch exakten Rechnungen.

5.2 Semiklassische Approximation der Streuresonanzen

Resonanzen der Streumatrix hängen zusammen mit der Existenz von langlebigen Zuständen eines Streusystems. In der Nähe der Resonanzenergien wird der Streuquerschnitt in Abhängigkeit von der Energie besonders groß. Die Breite der Peaks ist über die Energie–Zeit–Unschärferelation mit der endlichen Lebensdauer der Zustände verknüpft. Die Streuresonanzen sind gegeben durch die Polstellen der S–Matrix in der unteren Hälfte des zweiten Riemannschen Blattes in der komplexen Energieebene. Sie sind charakterisiert durch Real– und Imaginärteil

der Energie

$$E_r = \varepsilon_r - i\frac{\Gamma_r}{2}\,, \tag{5.1}$$

wobei $\Gamma_r > 0$ der Kehrwert der Lebensdauer der Resonanz ist (in der Skalierung $\hbar/2m = 1$).

Für unsere semiklassischen Rechnungen wird es günstig sein, von der Energie $E = k^2$ zur Wellenzahl k als Variable überzugehen. Jedem Pol E_r in der komplexen Energieebene entsprechen zwei Pole k_r und $-k_r^*$ in der komplexen Wellenzahlebene [71], die spiegelsymmetrisch zur imaginären Achse liegen[1].

Verschiedene Autoren haben gezeigt, daß die Spurformel von Gutzwiller nicht nur für gebundene Systeme mit diskretem Spektrum anwendbar ist, sondern auch auf Streuprobleme [56, 9]. W. H. Miller gab eine semiklassische Entwicklung der Streumatrix als Summe von Beiträgen über klassische Streubahnen an [57].

Zur Berechnung der Lage der Streuresonanzen, also der Pole der S–Matrix, benutzen wir hier ein Argument von R. Balian und C. Bloch [9]. Das Streusystem werde eingeschlossen in eine Kugel K mit großem Radius b. Dieses gebundene System besitzt ein diskretes Eigenwertspektrum, und die Zustandsdichte $\rho(E)$ divergiert für $b \to \infty$. Auch die Zustandsdichte $\rho_0(E)$ der Kugel ohne Streupotential divergiert für wachsenden Radius b. Der Grenzwert der Differenz der beiden Dichten

$$d(E) := \lim_{b\to\infty} \left(\rho(E;b) - \rho_0(E;b)\right) \tag{5.2}$$

aber existiert und läßt sich ausdrücken als logarithmische Ableitung der Determinante der Streumatrix nach der Wellenzahl (siehe [9] und Anhang E.1):

$$d(E) = \frac{1}{2\pi i}\,\frac{d}{dE}\,\ln\det S\,. \tag{5.3}$$

Das hat insbesondere zur Folge, daß die Pole der beiden Ausdrücke übereinstimmen, und diese sind die Resonanzen der Streumatrix. Das Problem der Berechnung von semiklassischen Resonanzen ist damit zurückgeführt auf die semiklassische Approximation von $d(E)$.

Ist $G(\mathbf{q},\mathbf{q}';E)$ die Greensche Funktion des Streusystems und $G_0(\mathbf{q},\mathbf{q}';E)$ die freie Greensche Funktion, so bezeichnen wir mit

$$g(E) := \int d^2q\,\left(G(\mathbf{q},\mathbf{q};E) - G_0(\mathbf{q},\mathbf{q};E)\right) \tag{5.4}$$

[1] Ist $k_r = \kappa_r - i\xi_r$ mit $\kappa_r, \xi_r > 0$ eine Polstelle in der Wellenzahlebene, so gilt $\varepsilon_r = \kappa_r^2 - \xi_r^2$ und $\Gamma_r = 4\kappa_r\xi_r$.

die Spur der Differenz von G und G_0. Mit (2.31) gilt

$$d(E) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\, g(E)\,. \tag{5.5}$$

Die Spur von G kann nun semiklassisch mit Hilfe der Spurformel (2.29) approximiert werden. Sie enthält den Term der mittleren Zustandsdichte, der durch die Thomas–Fermi–Verteilung (2.27) gegeben ist, und die Summe über die periodischen Orbits des Streusystems. Die Spur des freien Propagators ist allein durch die Thomas–Fermi–Verteilung gegeben.

Die beiden Anteile, die die mittlere Zustandsdichte liefern, würden, für sich betrachtet, divergieren. Deren Differenz aber ist endlich; denn man erhält wegen (2.27) in zwei Dimensionen für diese Differenz

$$n_0(E) = \frac{1}{4\pi}\int\limits_{K\setminus 3D} d^2q - \frac{1}{4\pi}\int\limits_{K} d^2q\,. \tag{5.6}$$

Dabei seien sowohl das Streusystem als auch das freie System in eine Kugel mit großem Radius b eingeschlossen. Integriert wird über K ohne die drei Scheiben bzw. nur über K. Der Grenzübergang $b \to \infty$ ist, so zeigt sich, trivial, da $n_0(E)$ von b überhaupt unabhängig ist; denn es bleibt nur eine Integration über die Fläche der drei Scheiben übrig. Haben diese den Radius r, dann ist $n_0 = \frac{3}{4}r^2$, also unabhängig von b.

Geht man nun von der Energie zur Wellenzahl über und benutzt die Skalierungseigenschaft (4.1) der Wirkung bei Billard–Systemen, so erhält man direkt aus der Spurformel (2.29) in semiklassischer Approximation

$$d(k) = n_0 + \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\sum_p\sum_{r=1}^{\infty} L_p \frac{e^{ikL_p - i\pi r n_p}}{|\Lambda_p|^{r/2}(1-\Lambda_p^{-r})}\,. \tag{5.7}$$

L_p ist die Länge des periodischen Orbits p, Λ_p seine Instabilität; n_p gibt die Anzahl der Kollisionen des Orbits mit den Scheiben an.

Wegen (5.5) und (5.3) liegen also die Resonanzen der Streumatrix bei den Polstellen von (5.7).

Durch Umformen der Doppelsumme in die logarithmische Ableitung einer Zetafunktion $Z(k)$ folgt für die semiklassische Näherung der Determinante der Streumatrix mit obigen Beziehungen [39]:

$$\frac{1}{2\pi i}\frac{d}{dk}\ln\det S = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{d}{dk}\ln Z(k)\,, \tag{5.8}$$

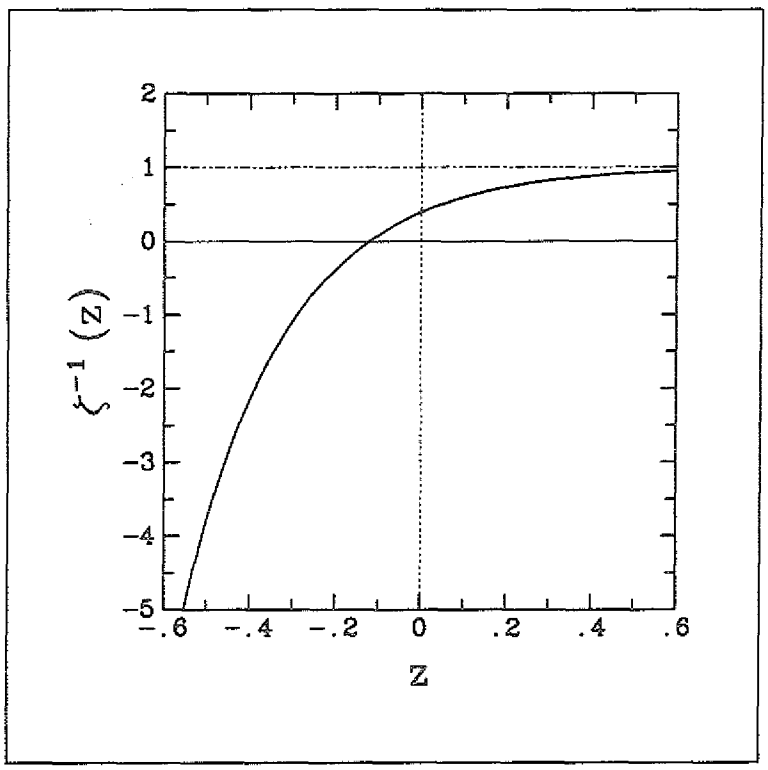


Abbildung 5.1: Höchste Nullstelle der reellen Zetafunktion $\zeta^{-1}(z)$. Ihr Wert gibt die Konvergenzabszisse der Summe über periodische Orbits an. Eingetragen sind die 4. und 5. Ordnung cycle expansion. Die beiden Linien liegen übereinander. Die Nullstelle liegt bei $z_0 = -0.12156 \pm 0.00001$.

wobei $Z(k)$ gegeben ist durch

$$Z(k) = \prod_{j=0}^{\infty} \prod_{p} \left(1 - |\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{ikL_p - n_p \pi}\right) \tag{5.9}$$

$$= \prod_{j=0}^{\infty} \prod_{p} \left(1 - t_p^{(j)}\right) , \tag{5.10}$$

analog zu der Entwicklung (2.38) in Kapitel 2.

5.2.1 Berechnung der Konvergenzabszisse

Die Summe über periodische Orbits ist absolut konvergent für genügend großen Imaginärteil der Wellenzahl k, also in der oberen Wellenzahl–Halbebene

$$\mathrm{Im}\,(k) \geq z_0 \,. \tag{5.11}$$

z_0 ist der größte Imaginärteil von k, für den die Summe über die Absolutbeträge der Summenglieder noch divergiert.

In Anhang B haben wir die Bestimmung der Abszisse z_0 zurückgeführt auf die Berechnung der höchsten Nullstelle einer reellen Zetafunktion $\zeta^{-1}(z)$.

In diesem Kapitel betrachten wir das Billard für einen Parameterwert[2] $d : r = 6 : 1$. Wertet man bei diesem Parameter die Zetafunktion aus[3], so erhält man $z_0 = -0.12156 \pm 0.00001$. Abbildung 5.1 zeigt die Werte der Zetafunktion in der Umgebung ihrer höchsten nichttrivialen Nullstelle.

Lebensdauern der Quantenresonanzen

Der Wert $|z_0|$ gibt eine obere Schranke für die Lebensdauern der Resonanzen. Sei κ_r der Realteil der Lage der Resonanz. Dann gilt

$$\tau_r \leq \frac{1}{2\kappa_r|z_0|} \,. \tag{5.12}$$

Das folgt aus (5.1) und der Bemerkung in Fußnote 1.

In [39] wird gezeigt, daß die Quantenresonanzen eine längere Lebensdauer haben können als die klassische Lebensdauer[4] des Streusystems, wenn die klassische Dynamik chaotisch ist. In klassisch nicht-chaotischen Systemen (Kolmogorov–Sinai–Entropie $h = 0$ [34]) dagegen ist die obere Schranke für die Lebensdauer der Quantenresonanzen gleich der klassischen Lebensdauer.

Die erste dieser Aussagen ist das Quantenanalogon dazu, daß die Entweichrate eines chaotischen Repellors gleich der Summe über alle positiven Lyapunovexponenten vermindert um die Kolmogorov–Sinai–Entropie ist [38].

Die zweite Aussage wollen wir uns an einem simplen Beispiel klarmachen. Wir betrachten ein Streusystem mit einem periodischen Repellor, und zwar das Billardsystem aus zwei gleich großen Scheiben, an denen ein Teilchen elastisch reflektiert wird. In diesem System gibt es einen einzigen instabilen periodischen Orbit, nämlich eine Bahn, die zwischen beiden Scheiben hin- und zurückreflektiert wird.

[2]Das ist der Parameterwert, den auch Gaspard und Rice in den Arbeiten [38, 39, 37] für ihre Rechnungen wählen.

[3]Für die Zetafunktion $\zeta^{-1}(z)$ wurde ihre cycle expansion bis zur 5. Ordnung berechnet.

[4]Die klassische Lebensdauer des Repellors ist gegeben durch den Kehrwert der Entweichrate γ; diese ist das Maß für die exponentielle Abnahme der Zahl der Streubahnen, die sich länger als eine Zeit t im Bereich des Streuzentrums aufhalten.

Diese Bahn ist der Repellor des Systems. Seine klassische Entweichrate γ ist gegeben durch den positiven Lyapunovexponenten λ und die klassische Lebensdauer ist der Kehrwert von λ.

Die semiklassischen Resonanzen ergeben sich aus den Nullstellen von $Z(k) = 1 - (\Lambda_p)^{-j-1/2}\, e^{ikL_p}$. Die Zetafunktion besteht also nur aus einem einzigen Faktor, der die Daten des periodischen Orbits enthält. Mit $k = \kappa - i\xi$ erhält man als Nullstellen

$$\kappa_r = \frac{2\pi n}{L_p}; \quad \xi_r = (j + \frac{1}{2})\, \frac{\ln \Lambda_p}{L_p}\,. \tag{5.13}$$

Damit folgt für die obere Schranke der Lebensdauer aus dem kleinsten ξ_r:

$$\tau \leq \frac{1}{\Gamma_r} = \frac{1}{4\kappa_r \xi_r} = \frac{T_p}{\ln \Lambda_p} \tag{5.14}$$

Der letzte Ausdruck ist aber gerade der inverse Lyapunovexponent λ der periodischen Bahn[5].

5.2.2 Cycle expansion der dynamischen Zetafunktion $\zeta_0^{-1}(k)$

Wir berechnen hier semiklassische Resonanzen des Streusystems, die in der Nähe der reellen Achse liegen. Außerdem beschränken wir uns auf die Resonanzen zur irreduziblen Darstellung A_1 der Symmetriegruppe C_{3v}. Sie sind gegeben durch Nullstellen von $\zeta_0^{-1}(k)$. Wir wenden die Methode der cycle expansion von P. Cvitanović an. Sie liefert für das Streusystem bei den gewählten Parameterwerten eine hochkonvergente Entwicklung [26] des unendlichen Produktes

$$\zeta_0^{-1}(k) = \prod_p (1 - t_p) \tag{5.15}$$

mit

$$t_p = \frac{(-1)^{n_p}}{|\Lambda_p|^{1/2}}\, e^{ikL_p}\,. \tag{5.16}$$

Wir gehen folgendermaßen vor[6]. Zunächst werden die Daten aller primperiodischen Orbits des symmetriereduzierten Systems bis zu einer festen Symbollänge

[5] Man beachte hier die Skalierung $\hbar/2m = 1$; denn damit ist $L_p = 2\kappa_r T_p$. T_p sei die Periode der Bahn.

[6] Einige der in diesem Kapitel vorgestellten numerischen Ergebnisse wurden in Zusammenarbeit mit Dr. B. Eckhardt erstellt.

mit Hilfe des in Anhang C.2 beschriebenen Newton–Verfahrens berechnet. Diese gehen ein in die Entwicklung (A.16) zur A_1–Symmetrie. Es zeigt sich, daß es genügt, bis zur 5. Ordnung in der Reflexionsordnung zu entwickeln, d.h. insgesamt gehen nur 14 primperiodische Orbits in die Rechnungen ein (siehe Tabelle F.2). Mit Hilfe eines numerischen Verfahrens zur Minimierung mehrdimensionaler Funktionen[7] sucht man in der komplexen k–Ebene nach ausgeprägten Minima von $\ln \zeta_0^{-1}$ und identifiziert diese mit den semiklassischen Resonanzen des Streusystems.

Konvergenz der cycle expansion

Wie auch schon in Kapitel 4 beschrieben, wird als Maß für die Konvergenz der cycle expansion das Abfallverhalten der Beträge der Krümmungsterme c_n für $k = 0$ (siehe auch Gleichung (A.2)) betrachtet. In den c_n sind dann nur die Gewichte der Orbits der festen Symbollänge n und deren Approximationen durch die Gewichte kürzerer Orbits enthalten.

In Abbildung 5.2 sind die Logarithmen der Krümmungsbeträge gegen die Ordnung aufgetragen, und zwar getrennt nach den irreduziblen Darstellungen. Man erkennt ein weitgehend exponentielles Abfallen der Krümmungen. Für die uns besonders interessierende Klasse A_1 fallen die ersten fünf Terme über etwa 7 Zehnerpotenzen ab, d.h. die in der cycle expansion der Zetafunktion zusammengefaßten Terme kompensieren sich exponentiell gut.

Ein typischer Term in den Krümmungsbeiträgen enthält einen langen Orbit (ab) und dessen Approximation durch den Pseudoorbit $(a)(b)$. Dieser setzt sich zusammen aus zwei realen kürzeren Orbits (a) und (b), die den langen Orbit beschatten:

$$\begin{aligned} t_{ab} - t_a\, t_b &= t_{ab}(1 - t_a t_b / t_{ab}) \\ &= t_{ab}(1 - e^{-\Delta\mu_{ab}/2 + ik\Delta L_{ab}})\,. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Hierbei wird mit $\mu = \ln \Lambda$ der Stabilitätsexponent der Orbits bezeichnet. Die Stabilitätsexponenten μ und die Phasen sind additiv. Die Differenzen haben wir bezeichnet mit $\Delta\mu_{ab} := \mu_a + \mu_b - \mu_{ab}$ und $\Delta L_{ab} := L_a + L_b - L_{ab}$. Das exponentielle Abfallen der Krümmungen ist eine Konsequenz des exponentiellen Abfallens von $\Delta\mu_{ab}$ und ΔL_{ab}, und das bedeutet, daß ein Pseudoorbit einen längeren Orbit

[7] Methoden dazu und die zugehörigen FORTRAN–Computerprogramme sind beschrieben in [60].

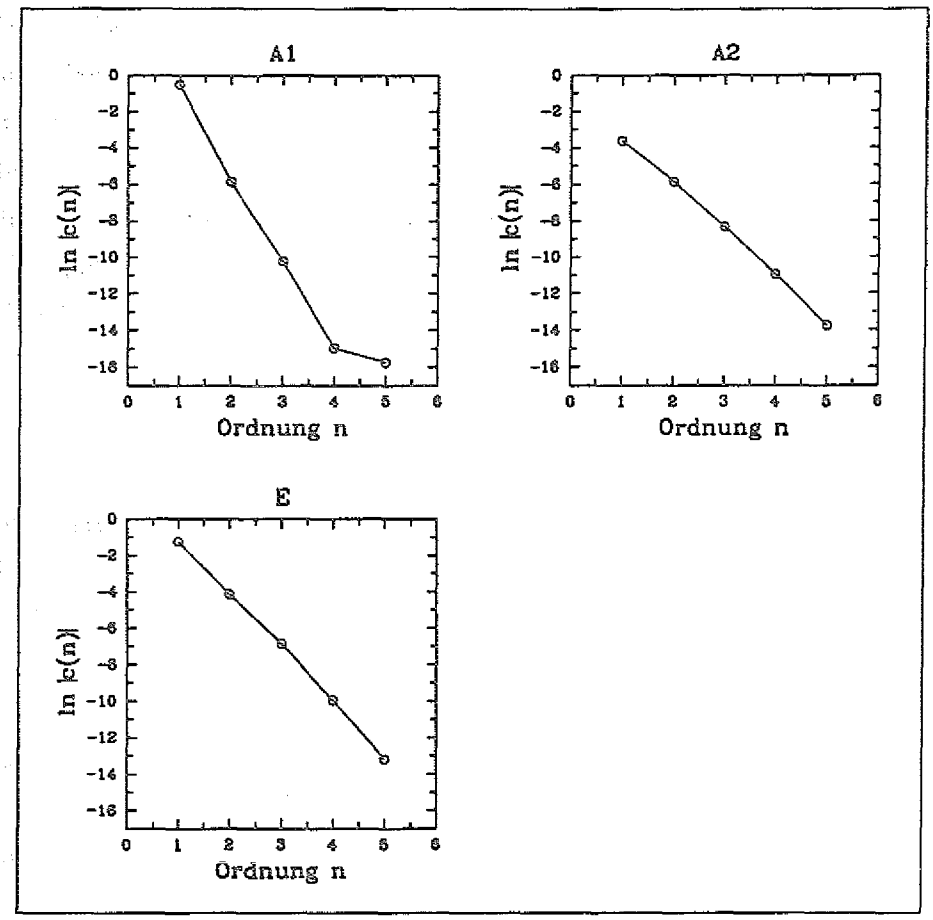


Abbildung 5.2: Natürlicher Logarithmus der Krümmungsterme der cycle expansion für die drei Symmetrieklassen A_1, A_2 und E (d:r = 6:1).

umso besser 'imitiert', je kleiner die Differenzen sind.

Die cycle expansion trägt einer solchen Hierarchie von periodischen Orbits Rechnung, indem sie die Terme der Orbits so umgruppiert, daß die Terme der langen Orbits und die der Schattenbahnen sich in jeder Ordnung möglichst gut kompensieren. In den führenden Term gehen die fundamentalen Orbits ein. Die Korrekturen höherer Ordnung zur Zetafunktion sind die Krümmungsterme.

Numerische Ergebnisse

In Abbildung 5.3 sind Nullstellen der Zetafunktion $\zeta_0^{-1}(k)$ in der komplexen Ebene eingetragen. Sie gehören ausschließlich zur A_1–Symmetrie[8]. Die Lage einer Null-

[8]Hier geht die Zerlegung von $\zeta_0(k)$ in die drei Symmetrieanteile ein. Siehe dazu die Glei-

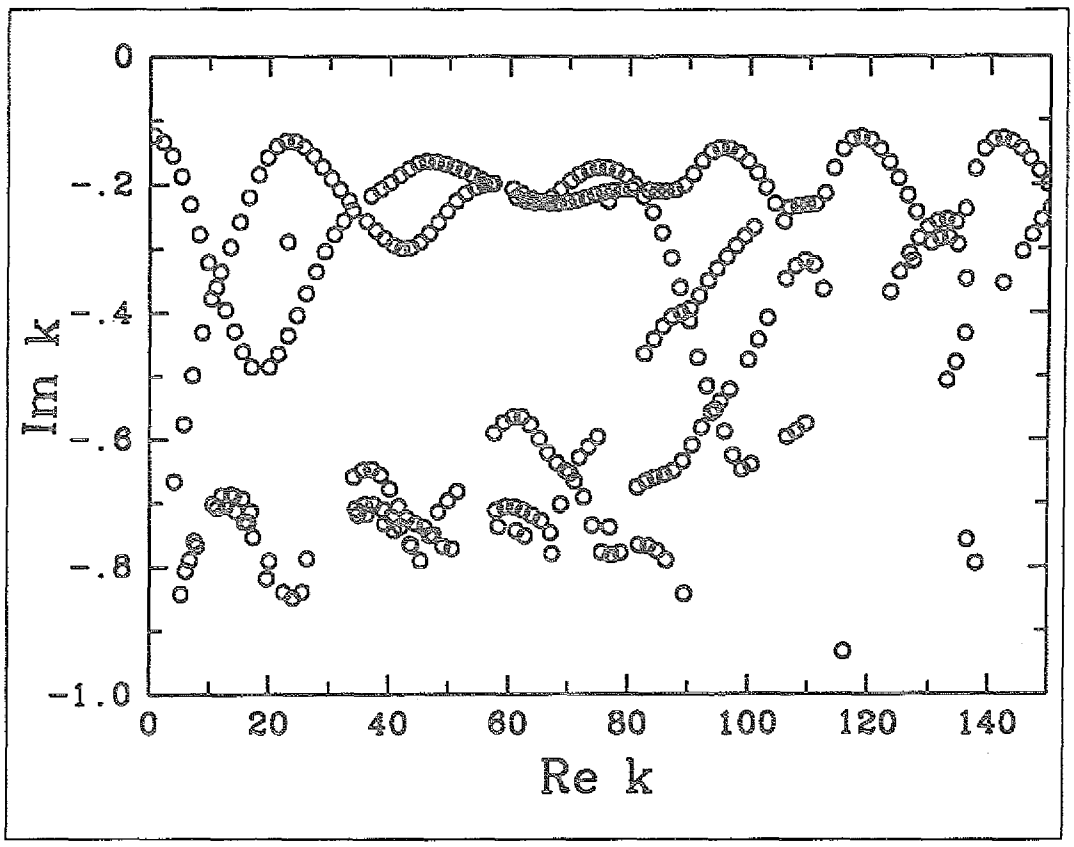


Abbildung 5.3: Nullstellen von $\zeta_0^{-1}(k)$ in der komplexen Wellenzahlebene für die A_1–Symmetrie. $(d : r = 6 : 1)$

stelle ist durch einen Kreis gekennzeichnet.

Abbildung 5.4 zeigt exakte Quantenresonanzen für alle drei irreduziblen Darstellungen[9].

Man erkennt zusammenhängende Strukturen in der Verteilung der Resonanzen, die man qualitativ verstehen kann, wenn man sich die ersten Terme der cycle expansion ansieht. Für die A_1– bzw. A_2–Symmetrie lautet die Entwicklung bis zur ersten Ordnung in den Krümmungen (Anhang A.1):

$$\zeta_0^{-1} = 1 - (t_1 \pm t_0)\,; \tag{5.18}$$

chungen (A.16).

[9]Die quantenmechanischen Resultate erhält man durch Entwicklung der S–Matrix nach Drehimpuls–Eigenfunktionen unter Anwendung des Greenschen Satzes. Diese Methode ist für das Drei–Scheiben–Billard im Detail beschrieben in [37]. Sie entspricht der von Berry [11] zur Bestimmung der quantenmechanischen Eigenwerte des Sinai–Billards angewendeten KKR-Methode.

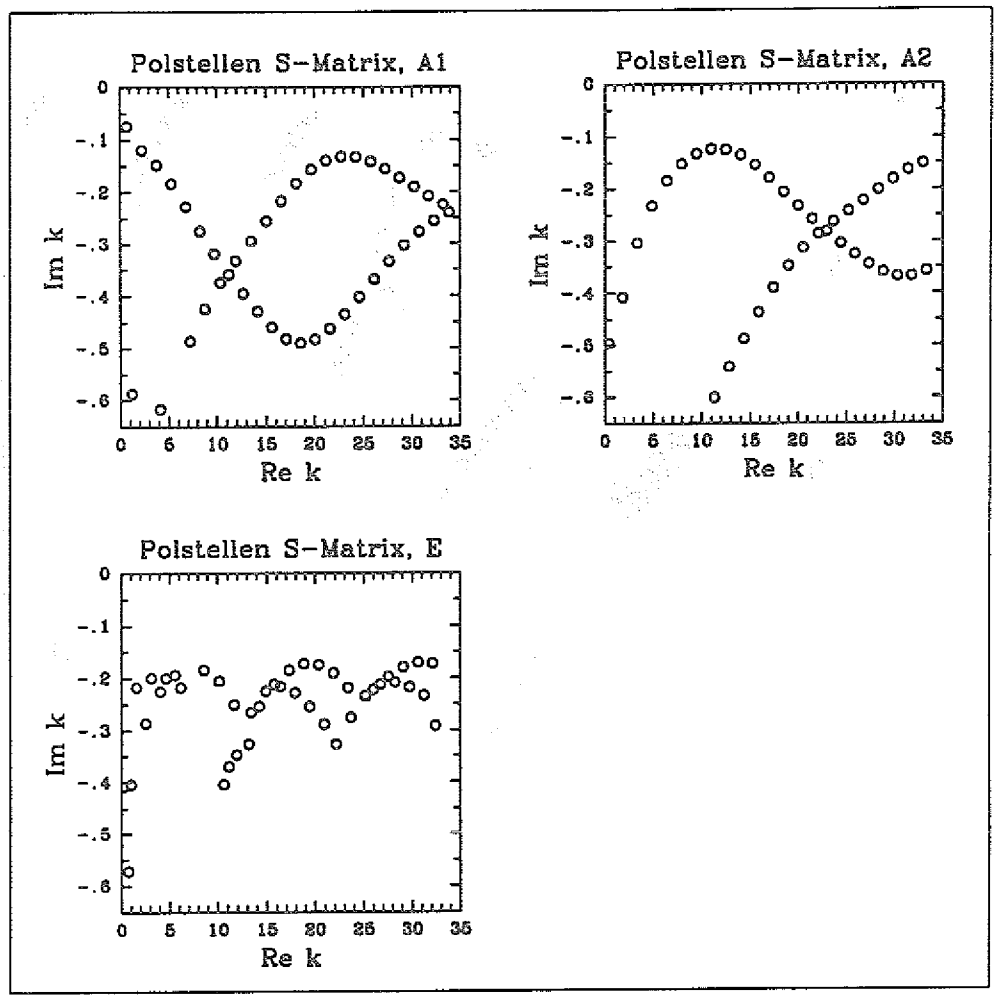


Abbildung 5.4: Lage von Quantenresonanzen für A_1-, A_2- und E-Symmetrie. $(d : r = 6 : 1)$

und für die E–Symmetrie bis zur zweiten Ordnung:

$$\zeta_0^{-1} = 1 + t_1 + (t_1^2 - t_0^2) \,. \tag{5.19}$$

t_0 und t_1 sind die Gewichte der beiden fundamentalen Orbits '0' und '1'. Diese haben die Form

$$t_p = A_p \, e^{i\kappa L_p} \,. \tag{5.20}$$

Dabei ist $A_p = (-1)^{n_p} |\Lambda_p|^{-1/2} e^{\xi L_p}$ und $k = \kappa - i\xi$. Wie wir oben (Gleichung (5.13)) gezeigt haben, würde ein System mit einem einzigen instabilen periodischen Orbit zu einer Kette von Resonanzen mit einem äquidistanten Abstand

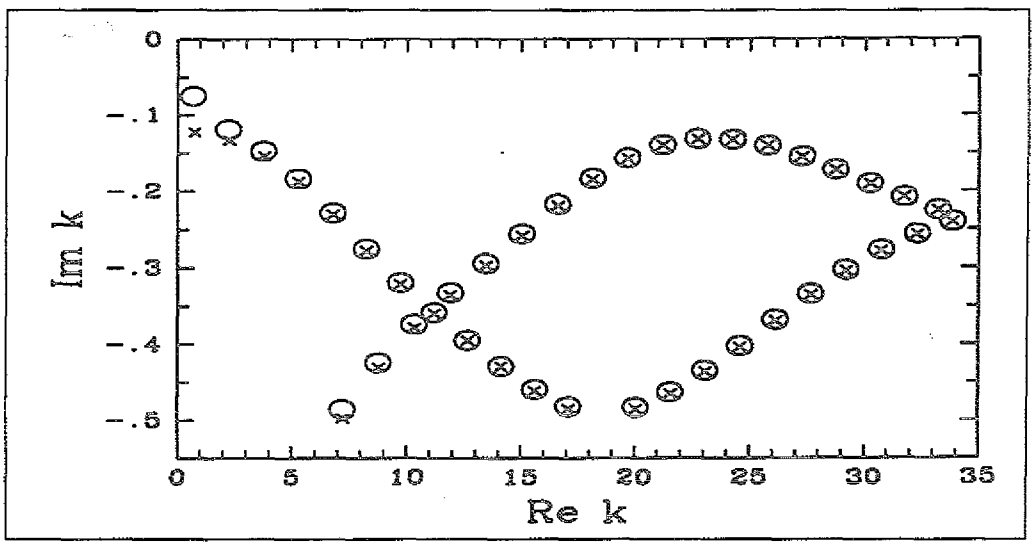


Abbildung 5.5: Nullstellen von $\zeta_0^{-1}(k)$ (Kreuze) im Vergleich mit den Quantenresonanzen (Kreise) für $k = 0 - 35$. (A_1–Symmetrie, $d : r = 6 : 1$)

$2\pi/L_p$ im Realteil κ und einem festen Abstand zur reellen Achse führen.

Gleichung (5.18) zeigt, daß in erster Ordnung cycle expansion für die A_1– und A_2–Symmetrie die Nullstellen von ζ_0^{-1} durch die Nullstellen von $(1-(t_1 \pm t_0))$ gegeben sind. Die Überlagerung von t_0 und t_1 führt zu modulierten Oszillationen im Realteil κ von k mit Frequenzen $\frac{|L_0+L_1|}{4\pi}$ und $\frac{|L_0-L_1|}{4\pi}$. Nullstellen von $(1-(t_0+t_1))$ treten dann in Abständen mit einer großen Frequenz $\frac{|L_0+L_1|}{4\pi}$ auf, während die cosinusartigen Schwingungen der Kette der Nullstellen mit einer kleinen Frequenz $\frac{|L_0-L_1|}{4\pi}$ modulieren.

Für das Modellsystem ($d : r = 6 : 1$) erhält man aus den Daten der beiden Orbits '0' und '1' (Tabelle F.2):

$$\frac{4\pi}{|L_0 + L_1|} \simeq 1.52\,, \qquad \frac{4\pi}{|L_0 - L_1|} \simeq 46.90\,. \tag{5.21}$$

Diese Abschätzung wird anhand der exakten Resonanzen des Systems bestätigt (siehe Tabelle F.3). Die Abstände der Realteile der Resonanzen einer Kette liegen im Mittel bei etwa 1.5 , und zwar im ganzen untersuchten k–Bereich. Aus der Abbildung 5.3 geht hervor, daß die Modulation einer Kette von Resonanzen mit kleinem Real– und Imaginärteil eine Wellenlänge von etwa 45 besitzt. Das stimmt mit dem zweiten Term in (5.21) überein. Bei der E–Symmetrie erwartet

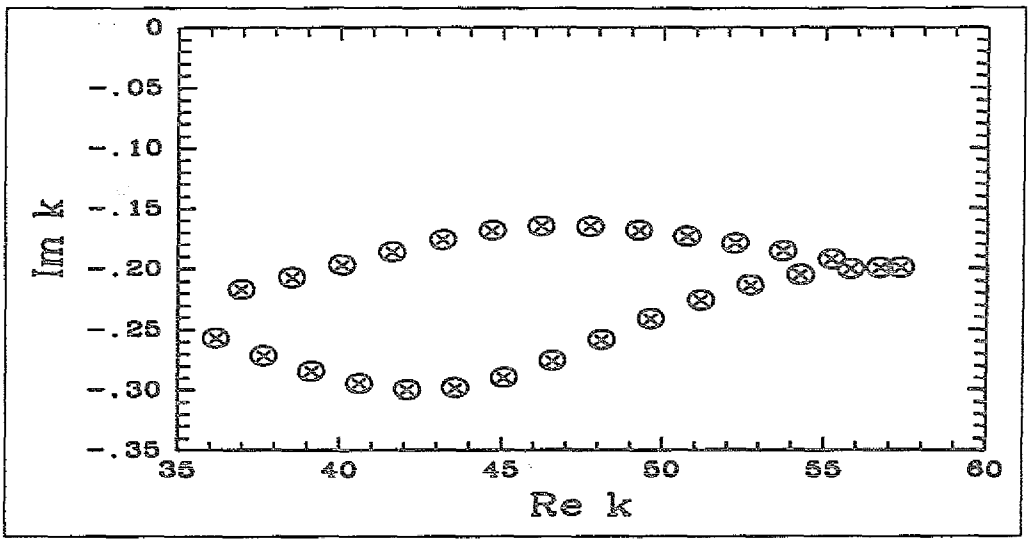


Abbildung 5.6: Nullstellen von $\zeta_0^{-1}(k)$ (Kreuze) im Vergleich mit den Quantenresonanzen (Kreise) für $k = 35 - 60$. (A_1-Symmetrie, $d : r = 6 : 1$)

man wegen des Terms $t_1^2 - t_0^2$ eine Modulation mit einer Wellenlänge von etwa 23.45, das ist die Hälfte des Wertes der beiden anderen Symmetrien. Das ist in Abbildung 5.4 durch die Verteilung der Quantenresonanzen der E-Symmetrie bestätigt. Das Fazit ist: Die Lage der Quantenresonanzen wird dominiert von Beiträgen der beiden fundamentalen Orbits des klassischen Systems.

In den Abbildungen 5.5 – 5.7 sind einige der semiklassischen Resonanzen (Kreuze) zusammen mit der Lage der exakten Quantenresonanzen (Kreise) aufgetragen. Die zugehörigen Daten findet man in Tabelle F.3. Hier sind nur solche Resonanzen aufgeführt, für die sowohl der semiklassische als auch der exakte quantenmechanische Wert bestimmt wurden.

Die Übereinstimmung der Werte ist umso besser, je kleiner der Betrag des Imaginärteils und je größer der Realteil der Resonanz ist (semiklassischer Limes). Ersteres liegt daran, daß die cycle expansion umso besser konvergiert, je näher man der Abszisse der absoluten Konvergenz kommt.

Die Dichte der Resonanzen in der komplexen Ebene erhöht sich bei wachsendem Realteil. Um nah benachbarte Resonanzen bei hohen Realteilen semiklassisch noch auflösen zu können, wird es dann nötig, mehr periodische Orbits in die Entwicklung einzubeziehen, d.h. zu höheren Ordnungen in der cycle expansion

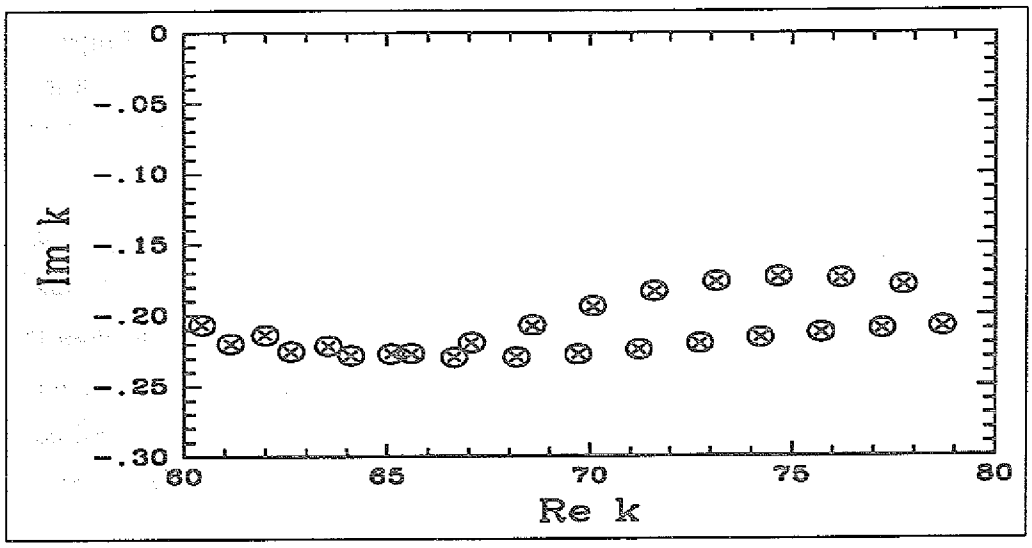


Abbildung 5.7: Nullstellen von $\zeta_0^{-1}(k)$ (Kreuze) im Vergleich mit den Quantenresonanzen (Kreise) für $k = 60 - 80$. (A_1–Symmetrie, $d : r = 6 : 1$)

überzugehen.

In [37] ist beschrieben, wie man die exakten Quantenresonanzen des Billards bestimmt. Aus dem Greenschen Satz erhält man unter Ausnutzung der Randbedingungen für die Wellenfunktion und nach Entwicklung in Drehimpulseigenfunktionen eine Matrixgleichung zur Bestimmung der Normalenableitung der Wellenfunktion auf dem Rand der Scheiben. Die charakteristische Matrix M dieses Gleichungssystems besitzt für reelle Wellenzahlen eine von Null verschiedene Determinante, sodaß das System durch Inversion von M lösbar ist. Die Pole der S–Matrix sind gerade die Stellen in der komplexen Ebene, wo M singulär wird. Man erhält sie also, indem man die Nullstellen der charakteristischen Determinante $\det M(k)$ in der komplexen Ebene bestimmt.

Numerisch berechnet man die Nullstellen von $\det M(k)$, indem man M bei einem endlichen Wert des Drehimpulses abschneidet und von dieser endlichen Matrix die Nullstellen der Determinante bestimmt. Die Konvergenz prüft man durch Erhöhung der Matrixdimension um 10%. Bleibt die Nullstelle dabei numerisch stabil, so hat man genügend viele Drehimpuls–Eigenfunktionen berücksichtigt. Für die hier vorgestellten Ergebnisse wurden dabei Matrizen bis zur Größe 80×80 benutzt. Die Suche nach Nullstellen erfordert dabei einen erheblichen Rechen-

aufwand, da sie in der komplexen k–Ebene lokalisiert werden müssen. Man sucht mittels eines mehrdimensionalen Minimierungsprogramms Minima vom Logarithmus des Absolutbetrages von $\det M$ [60]. Um diese Minima zu finden, muß man für das Suchverfahren einen Startwert angeben, der schon in unmittelbarer Nähe liegt, damit das Verfahren in dieses Minimum hineinläuft.

Die Bestimmung der Resonanzen aus der Suche nach Nullstellen der Zetafunktion erweist sich dagegen als sehr viel weniger aufwendig; denn man führt für jeden Wert k in der komplexen Ebene eine Summe über Beiträge der periodischen Orbits aus, deren Konvergenz aufgrund der cycle expansion gut kontrolliert wird. Diese Summierung erfordert, verglichen mit der Berechnung der Determinante und der Berechnung von Bessel– und Hankelfunktionen, wie sie in den quantenmechanischen Rechnungen benötigt werden, einen erheblich kleineren Rechenaufwand. Bei der Suche nach quantenmechanischen Resonanzen wurden in vielen Fällen die schon semiklassisch berechneten Stellen als Startwerte angesetzt.

5.2.3 Fouriertransformation der Determinante der charakteristischen Matrix

Wir haben den Logarithmus des Betrages der charakteristischen Determinante auf der reellen Achse berechnet, und zwar getrennt nach den drei irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe. Diese Funktionen haben wir fouriertransformiert in der Wellenzahl.

In den Fluktuationen der charakteristischen Matrix M auf der reellen Achse sollten sich die Fluktuationen der S–Matrix widerspiegeln. Wegen (5.3), (5.5) und (5.7) erwartet man bei Fouriertransformation in der Wellenzahl große Beiträge bei den Längen der periodischen Orbits.

Das Ergebnis ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Mit Strichen markiert sind die Längen der acht kürzesten primperiodischen Orbits ($d : r = 6 : 1$) und mit Pfeilen der Zweifachdurchlauf der beiden fundamentalen Orbits sowie des Orbits zweiter Ordnung (Tabelle F.2). Man erkennt deutlich die Peaks bei den vier Gruppen von periodischen Orbits. Außerdem sieht man den raschen Abfall der Höhe der Peaks, was zu erklären ist durch die exponentiell ansteigende Instabilität der Orbits wachsender Ordnung; denn jeder primperiodische Orbit geht in die semiklassische Summe im wesentlichen mit einem Gewicht $L|\Lambda|^{-1/2}$ ein, wo

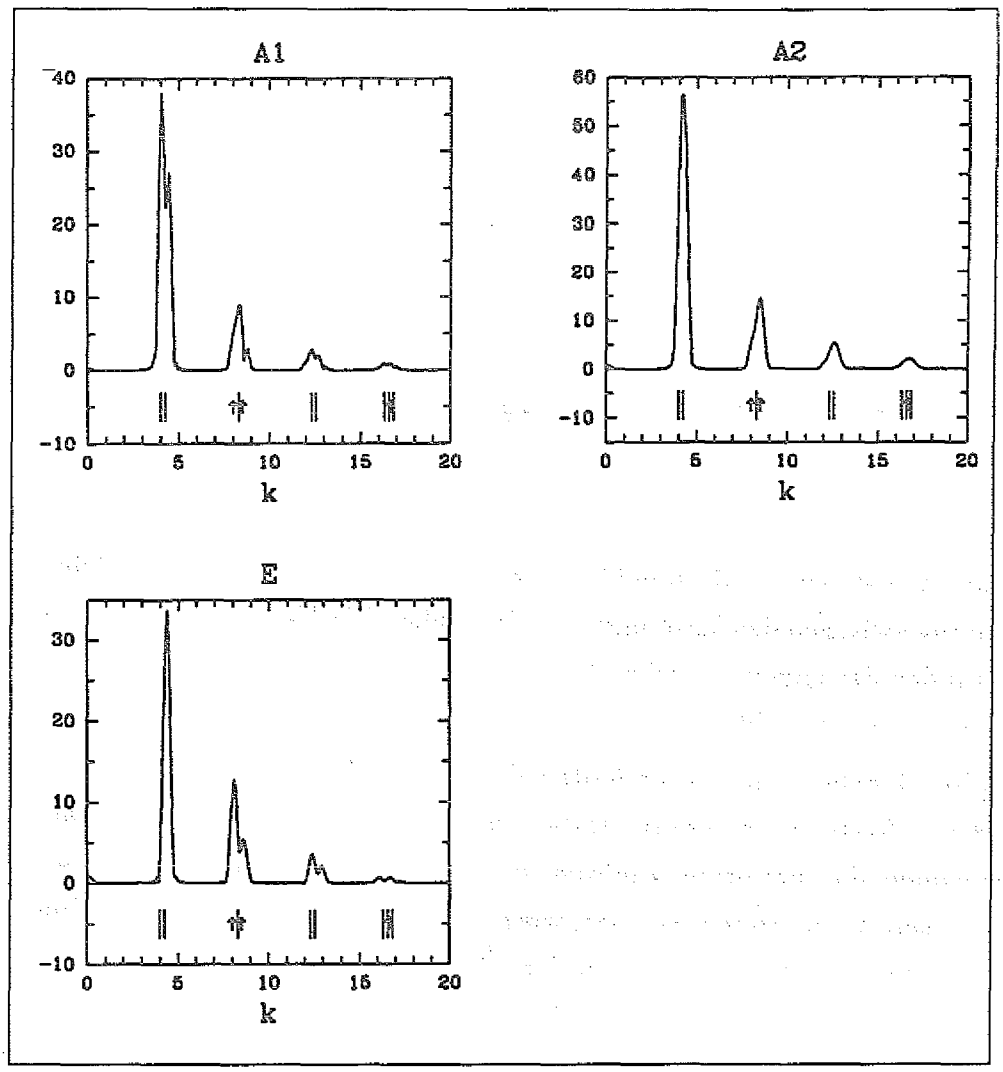


Abbildung 5.8: Fouriertransformation des Logarithmus der Determinante der S–Matrix auf der reellen Achse für die drei Symmetrieklassen.

L seine Länge und Λ seine Instabilität ist.

Die Daten in Abbildung 5.8 sind geglättet, um, auf Kosten der Auflösung, noch den Peak darstellen zu können, der zur vierten Gruppe von Orbits gehört.

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die semiklassische Theorie der periodischen Orbits als Verbindung zwischen den Lösungen der klassischen Mechanik und den Energieeigenzuständen der Quantenmechanik an einem vollständig chaotischen Hamiltonschen System untersucht.

In Kapitel 3 haben wir Eigenschaften der Menge der periodischen Orbits des gebundenen Systems analysiert. Dabei legten wir besonderen Wert darauf, die Mechanismen, die zum pruning führen, zu klären. Auf diese Betrachtungen konnten wir unsere Vermutungen stützen, wie sich das pruning bei höheren Ordnungen auswirkt. Numerisch berechnet wurden für das gebundene System alle existierenden periodischen Orbits bis zur 10. Ordnung.

Ergänzend zu den Ergebnissen aus [30] haben wir für das Streusystem eine Skalenfunktion der reduzierten Längen von klassischen Streubahnen angegeben. Sie ist bestimmt durch die Eigenschaften des chaotischen Repellors dieser Dynamik. Dieser ist der Abschluß der Menge aller (instabilen) periodischen Orbits.

Kapitel 4 behandelte das gebundene Drei–Scheiben–Billard als Quantensystem. Wir haben die ersten etwa 280 Eigenwerte des quantenmechanischen Spektrums, getrennt nach Symmetrieklassen, bestimmt. Aus der Fouriertransformation des Spektrums erhielten wir Daten von mindestens 25 primperiodischen Orbits der zugrundeliegenden klassischen Dynamik. Wir haben außerdem nachgewiesen, daß die Transformation eines Teils des Spektrums, das zu einer der Symmetrieklassen gehört, die Daten der Orbits des symmetriereduzierten Billards reproduziert. Beides steht in enger Beziehung zu der semiklassischen Summe über periodische Orbits.

Umgekehrt haben wir diese Summe angewendet, um aus den klassischen (periodischen) Bahnen individuelle Eigenwerte des Quantensystems zu berechnen. Dabei gingen wir den Weg über die Darstellung der Summe als Produkt von dynamischen Zetafunktionen. Die Nullstellen dieser Funktionen sind die Polstellen der Summe, und diese Polstellen sind semiklassische Näherungen für die Eigenwerte. Wir benutzten die Daten aller (symmetriereduzierten) Orbits bis einschließlich der 10. Reflexionsordnung in der sogenannten cycle expansion der Zetafunktion. Es wurde gezeigt, daß die Konvergenz dieser Entwicklung nicht exponentiell gut ist, sondern wegen des prunings ab der sechsten Ordnung sogar wieder schlechter wird. Die Konvergenz konnte weder durch Interpolation des Gewichtes des fehlenden fundamentalen Orbits noch durch Entwicklung der vollen Selberg–Zetafunktion (Eulerentwicklung) entscheidend verbessert werden. Das ist ein Hinweis darauf, daß die binäre symbolische Dynamik für das gebundene System der komplizierten Hierarchie der periodischen Orbits nicht angepaßt ist. Wir haben gesehen, daß der Grundzustand des Systems von einer einzigen Familie von periodischen Orbits bestimmt wird. Er konnte auf 2% genau aus der Kenntnis von 6 Bahnen berechnet werden.

Wir haben durch Berechnung von Minima des Betrages der dynamischen Zetafunktion ζ_0^{-1} auf der reellen Achse für die A_1– und A_2–Symmetrie etwa 16 und für die E–Symmetrie 6 Eigenwerte des Systems genauer als auf 2% reproduzieren können. Es wurde festgestellt, daß die exakten Nullstellen der Zetafunktion, die zu den Minima gehören, nicht auf der reellen Achse liegen, sondern einen kleinen Imaginärteil besitzen. Die Selberg–Zetafunktion macht auf der reellen Achse in der Nähe einer solchen Nullstelle einen Phasensprung um etwa $\pm\pi$, je nachdem die Nullstelle oberhalb oder unterhalb der reellen Achse liegt. Die Änderung des Betrages der Phase ist im Mittel durch πN_0 gegeben, wo N_0 die mittlere integrierte Zustandsdichte ist.

Wir zeigten, daß die Selberg–Funktion eine Funktionalgleichung erfüllt, die es gestattet, eine reelle Funktion anzugeben, deren Nullstellen die Eigenwerte des Systems sind. Die Idee beruht darauf, daß der Phasenzuwachs der Selberg–Zetafunktion bei den exakten Eigenwerten durch einen Phasenfaktor $\exp(-i\pi N_0)$ kompensiert wird, sodaß $Z\exp(-i\pi N_0)$ reell bleibt [70].

Die Auswertung der reellen Funktion in 10. Ordnung cycle expansion für die A_1–Symmetrie ergab die ersten etwa 35 Eigenwerte mit einer Auflösung, die größer

als die mittlere Zustandsdichte des Systems ist. Bei einer Entwicklung bis zur 3. Ordnung, also bei Berücksichtigung von nur 5 Bahnen, findet man schon die ersten etwa 20 Eigenwerte. Allerdings wurde festgestellt, daß die Genauigkeit der Approximation nicht gleichmäßig mit der Ordnung der cycle expansion wächst. Das hat einerseits seine Ursache in der schlechten Konvergenz der Entwicklung, und hängt andererseits damit zusammen, daß die von uns benutzte Näherung für die mittlere Energiedichte nur im Bereich der ersten etwa 40 Eigenwerte gut ist.

In Kapitel 5 haben wir die semiklassische Approximation der Quantenresonanzen des offenen Drei–Scheiben–Billards behandelt. Wir haben ein Argument von Balian und Bloch [9] zur Berechnung der Quantenresonanzen aufgegriffen und vervollständigt. Es benutzt eine Variante des Theorems von Levinson [71]. In semiklassischer Näherung ergab sich die Lage der Resonanzen als Nullstellen eines unendlichen Produktes dynamischer Zetafunktionen. Zur Bestimmung von Resonanzen mit kleinem Imaginärteil genügte es, die Nullstellen von ζ_0^{-1} in der komplexen Wellenzahlebene zu berechnen. Dies geschah durch Anwendung der cycle expansion bis zur 5. Ordnung für die A_1–Symmetrie. Zunächst konnte nachgewiesen werden, daß die Entwicklung bei dem gewählten Parameterwert $d : r = 6$ in jeder Symmetrieklasse exponentiell gut konvergiert. Wir haben die numerischen Resultate für semiklassisch bestimmte Resonanzen bis etwa $k = 80$ mit den exakten Quantenresonanzen verglichen und fanden eine sehr gute Übereinstimmung der Resultate, die umso besser wurde, je länger die Lebensdauer der Resonanz und je größer deren Energie ist. Außerdem haben wir die Lage von Quantenresonanzen für alle drei Symmetrieklassen bis $k = 35$ sowie die Lage von semiklassischen Resonanzen der A_1–Symmetrie bis $k = 150$ angegeben.

Die Struktur der Verteilung dieser Resonanzen in der komplexen k–Ebene konnte qualitativ semiklassisch erklärt werden als ein Effekt, der im wesentlichen von den Eigenschaften der beiden fundamentalen primperiodischen Orbits des klassischen Systems bestimmt wird.

Weiterhin konnten wir durch Fouriertransformation zeigen, daß sich in den Fluktuationen der quantenmechanischen Streumatrix mit der Energie die klassische Dynamik widerspiegelt. Wir erhielten Peaks bei den Längen der periodischen Orbits des Systems, wie man es aufgrund der Voraussagen der semiklassischen Näherung erwarten kann.

Anhang A

Cycle expansion dynamischer Zetafunktionen

Dynamische Zetafunktionen [23] haben die formale Gestalt

$$1/\zeta = \prod_p (1 - t_p) \,. \tag{A.1}$$

Die t_p sind die Gewichte der primperiodischen Orbits, deren Amplituden durch die Instabilitäten der Orbits und deren Phase durch ihre Wirkung, gemessen in Einheiten von $\hbar$, und durch ein Vielfaches ν_p von $\pi/2$ gegeben sind.

Die Zetafunktion ist eine Mittelung über den gesamten Phasenraum, ausgedrückt durch die den Fluß repräsentierenden instabilen periodischen Orbits. Können diese periodischen Orbits so organisiert werden, daß alle Orbits durch mehrfache Durchläufe einiger weniger kurzer Grundorbits (fundamentale Orbits) beschattet werden, dann läßt sich das obige Produkt so umformen, daß die einzelnen Beiträge hierarchisch geordnet werden können. Das soll heißen, daß man aus dem Produkt über alle (gleichberechtigten) Orbits eine Summe über Terme erhält, deren erster allein durch die Grundorbits bestimmt ist, und deren weitere Terme sich aus Abweichungen der Beiträge längerer Orbits von Beiträgen der Beschattung durch kürzere zusammensetzt [3]. Eine solche Entwicklung bezeichnet man als *cycle expansion*[1]:

$$1/\zeta = 1 - \sum_f t_f - \sum_n c_n \,. \tag{A.2}$$

[1]Wir wollen den englischen Namen als Eigennamen dieser Entwicklung nach Grundorbits verwenden, da er sich auch im Deutschen eingebürgert hat.

t_f sind die Gewichte der fundamentalen Orbits. Die Abweichungsterme der Ordnung n sind mit c_n bezeichnet. Sie werden auch *Krümmungsterme* genannt.

Wir wollen nun angeben, wie man die Gleichung (A.1) benutzt [23]. Mit p bezeichnen wir die Symbolsequenz eines primperiodischen Orbits und mit t_p den Beitrag dieses Orbits zum Produkt in (A.1). Multipliziert man das Produkt formal aus, so erhält man

$$\zeta^{-1} = 1 - \sum_{p_1 p_2 \ldots p_k} t_{p_1+p_2+\ldots+p_k} \tag{A.3}$$

mit

$$t_{p_1+p_2+\ldots+p_k} = (-1)^{k+1} t_{p_1} t_{p_2} \ldots t_{p_k} \,. \tag{A.4}$$

Die Summe läuft über alle verschiedenen sich nicht wiederholenden Kombinationen primperiodischer Orbits. Ist $k > 1$, so nennt man $p_1 + p_2 + \ldots + p_k$ einen *Pseudoorbit*, da er keinem realen Orbit entspricht, sondern formal einem Hintereinanderdurchlauf von k individuellen primperiodischen Orbits. Ein solcher Pseudoorbit beschattet einen Orbit mit der Symbolsequenz $p_1 p_2 \ldots p_k$.

Wir führen nun formal einen Parameter z ein, mit dessen Hilfe die Summenglieder umgeordnet werden. Jeder Term t_p erhält einen Faktor z^{n_p}, wo n_p die Symbollänge des Orbits ist. Für genügend kleines z kann dann die Summe als Potenzreihe in z angesehen werden. Es ist

$$\begin{aligned} \zeta^{-1}(z) &= \prod_p (1 - z^{n_p} t_p) \\ &= 1 - \sum_{p_1 p_2 \ldots p_k} z^{n_{p_1}+n_{p_2}\ldots+n_{p_k}} t_{p_1+p_2+\ldots+p_k} \,. \end{aligned} \tag{A.5}$$

Für kleine z ist diese Reihe konvergent und kann nach Potenzen von z geordnet werden. Dabei werden die Terme aus Orbits und Pseudoorbits umgruppiert zu Gruppen der gleichen Symbollänge. Setzt man nun $z = 1$, so erhält man einen Ausdruck der Form (A.2).

Für eine binäre symbolische Dynamik erhält man durch das formale Umgruppieren zu Termen mit derselben Gesamtsymbollänge die cycle expansion

$$\begin{aligned} 1/\zeta \;=\; & 1 - t_0 - t_1 - [(t_{01} - t_0 t_1)] - [(t_{001} - t_0 t_{01}) + (t_{011} - t_{01} t_1)] \\ & -[(t_{0001} - t_0 t_{001}) + (t_{0111} - t_{011} t_1) \\ & +(t_{0011} - t_{001} t_1 - t_0 t_{011} + t_0 t_{01} t_1)] - \ldots \,. \end{aligned} \tag{A.6}$$

Die Terme in den eckigen Klammern sind die Krümmungskorrekturen. Die Terme in den runden Klammern (*Komplexe*) sind so zu Gruppen zusammengefaßt, daß sie aus einem oder mehreren längeren Orbits und deren Näherungen aus kürzeren Orbits bestehen. Das Gewicht t_{01} des Orbits '01' zum Beispiel wird modelliert durch das Produkt der Gewichte t_0 und t_1. Ist diese Näherung gut, dann erwartet man, daß die Differenz $t_{01} - t_0 t_1$ vom Betrag her klein gegenüber dem Betrag der einzelnen Summanden wird. Entsprechendes gilt für die Krümmungsterme höherer Ordnung.

Die fundamentalen Orbits '0' und '1' haben keine kürzeren Approximanten. Sie sind die Bausteine der Dynamik in dem Sinne, daß alle längeren Orbits näherungsweise aus ihnen zusammengesetzt werden können.

A.1 Faktorisierung der cycle expansion nach Symmetrien

In der semiklassischen Theorie der periodischen Orbits wird das Eigenspektrum eines Systems bestimmt aus dem Verhalten der klassischen Dynamik in der Nähe von periodischen Bahnen. Besitzt das klassische System eine diskrete Symmetrie, dann gibt es periodische Orbits, die durch Anwendung von Symmetrietransformationen der zugehörigen Symmetriegruppe ineinander übergehen, d.h. man kann die Orbits zu Äquivalenzklassen bezüglich der Gruppenoperationen zusammenfassen. Jeder solchen Klasse entspricht ein einziger periodischer Orbit auf dem Fundamentalbereich des Konfigurationsraumes. Dieser Orbit entsteht durch Abbildung aller Segmente eines Repräsentanten einer Klasse auf den Fundamentalbereich mittels der Gruppenoperationen.

Für ein gebundenes System sind die Polstellen der Spur der symmetrieprojezierten Greenschen Funktion

$$g_i(E) = \mathrm{Tr}\,\Pi_i \frac{1}{E - \hat{H}} \tag{A.7}$$

die Energieeigenwerte zur Symmetrieklasse i. Π_i seien die Projektionsoperatoren auf die invarianten Unterräume der irreduziblen Darstellungen der Gruppe[2]. Die semiklassische Entwicklung der Greenschen Funktion, $G^{sc}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; E)$, liefert eine

[2]Für die Gruppe C_{3v} sind die Projektionsoperatoren in Gleichung (3.5) explizit angegeben.

Summe über klassische Trajektorien, die in $\mathbf{q}$ beginnen und in $\mathbf{q}'$ enden. Bei Projektion auf die invarianten Unterräume erhält man eine Summe über eine größere Klasse von Trajektorien, nämlich solche, die in $\mathbf{q}$ beginnen und in $g \cdot \mathbf{q}'$ enden. Letztere sind alle Punkte, die aus $\mathbf{q}'$ durch Elemente g der Symmetriegruppe hervorgehen. Wie in [63] dargestellt wird, kann jeder dieser Trajektorien genau eine Bahn auf dem Fundamentalbereich zugeordnet werden. Damit läßt sich dann die Summe über die klassischen Trajektorien der vollen Symmetrie umschreiben in eine Summe über Orbits auf dem Fundamentalbereich. Ausführen der Spur der symmetriereduzierten Greenschen Funktionen liefert, analog zur Entwicklung in der vollen Symmetrie, eine Summe über primperiodische Orbits auf dem Fundamentalbereich [46, 63, 54].

In der zur rein symmetrischen bzw. antisymmetrischen Darstellung gehörenden Summe über periodische Orbits ergibt sich im Beitrag eines jeden Orbits auf dem Fundamentalbereich ein Phasenfaktor 0 bzw. π bei jeder Reflexion an den Symmetrielinien. Das entspricht der Realisation von Neumann–bzw. Dirichlet–Randbedingungen der Greenschen Funktion auf den Symmetrielinien [46, 54].

Die Symmetrisierung der Entwicklung über periodische Orbits kann auch auf dem Niveau der Zetafunktionen durchgeführt werden. Dieser Zugang ist in den Artikeln von P. Cvitanović und B. Eckhardt [28] sowie in einem Artikel von B. Lauritzen [54] ausgeführt.

Faktorisierung der Zetafunktion bezüglich C_{3v}

Für ein System mit C_{3v}–Symmetrie, wie es das in dieser Arbeit behandelte Drei–Scheiben–Billard ist, wollen wir im folgenden die Symmetriezerlegung der Zetafunktion kurz darstellen. Wir folgen dabei den Ausführungen in [28].

Das gebundene Drei–Scheiben–Billard besitzt die Symmetriegruppe C_{3v}. Diese Gruppe besteht aus sechs Elementen $\{I, C_3, C_3^2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$. Ein Orbit hat die *Multiplizität* m, wenn die maximale Untergruppe von C_{3v}, die ihn invariant läßt, m Elemente besitzt. Zusammen mit diesem Orbit gibt es dann $6/m$ *degenerierte* Orbits; das ist die Klasse der topologisch verschiedenen Orbits mit gleichem Gewicht t_p.

Zum Beispiel hat der Orbit '13' die Multiplizität 2; denn durch die Elemente der maximalen Untergruppe $\{I, \sigma_2\}$ wird er auf sich abgebildet. Die Rotationen C_3 und C_3^2 erzeugen aus ihm aber noch zwei weitere Orbits '32' und '21' mit dersel-

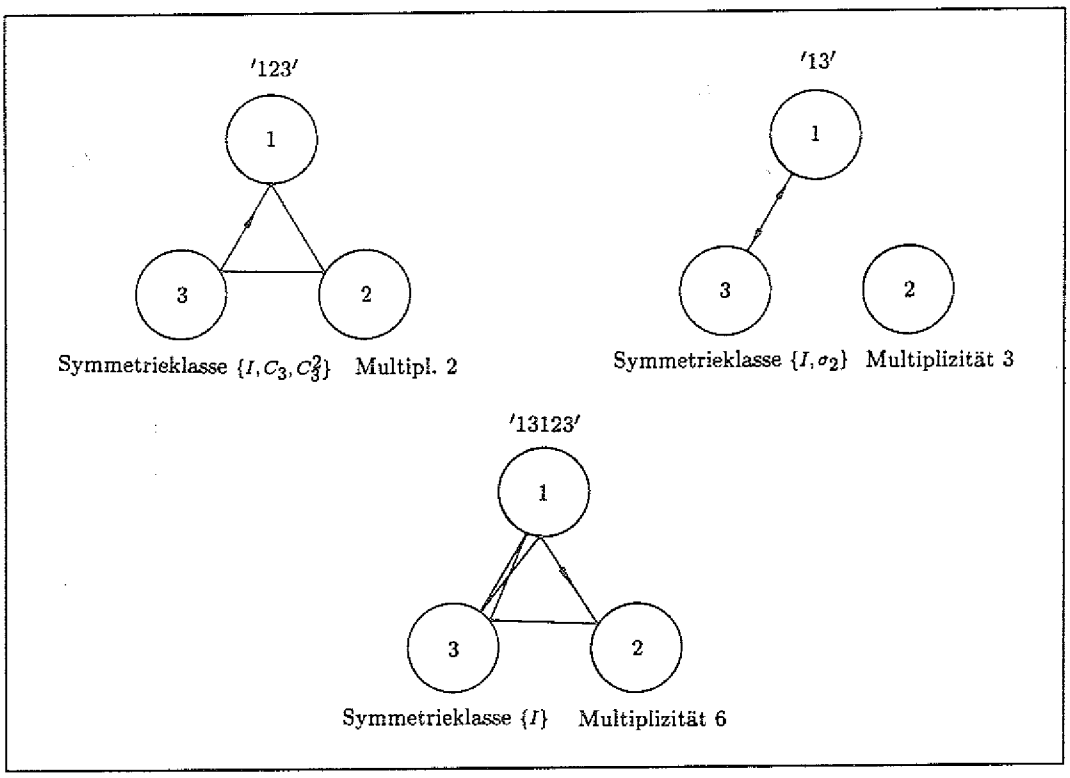


Abbildung A.1: Periodische Orbits des Drei–Scheiben–Billards mit Angabe ihrer Symmetrieklasse und Multiplizität.

ben Eigenschaft. Er ist also 3–fach degeneriert, abgekürzt $d = 3$.

Orbits des Billards können nur die Multiplizitäten 2, 3 oder 6 haben, je nachdem sie zu den Symmetrieklassen $3\sigma := \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$, $2C_3 := \{C_3, C_3^2\}$ oder $I := \{I\}$ gehören. Schränkt man einen Orbit mit dem Gewicht t_p auf den Fundamentalbereich ein, so ist sein symmetriereduziertes Gewicht $t_p^{1/2}$, $t_p^{1/3}$ oder t_p, wenn er zu der Klasse 3σ, $2C_3$ oder I gehört.

In die cycle expansion ohne Symmetriereduzierung geht ein Gewicht t_p als Faktor $(1 - t_p)$ so oft ein, wie es degenerierte Orbits mit diesem Gewicht gibt, also d_p-mal. Sei nun $\mathbf{G}_i$ eine Matrixdarstellung eines Gruppenelementes g_i und $t_{\bar{p}} := t_p^{1/n_p}$ das Gewicht eines symmetriereduzierten Orbits ($n_p \in \{3, 2, 1\}$). Die Klasse aller zugehörigen Orbits der vollen Symmetrie erhält man dann durch Abbilden der Teilstrecken im Fundamentalbereich auf das nicht–symmetriereduzierte Innere des Billards mit Hilfe der Symmetrieoperationen der entsprechenden Klasse.

Man kann für eine Klasse degenerierter Orbits schreiben

$$(1-t_p)^{d_p} = \det\left(1 - t_{\bar{p}} \prod_i \mathbf{G}_i\right) . \tag{A.8}$$

Sei nun $\mathbf{G} = \prod \mathbf{G}_i$ zerlegt bezüglich der drei irreduziblen Darstellungen A_1, A_2 und E. Dann ist $\mathbf{G}$ blockdiagonal und die Determinante wird ein Produkt über die drei unabhängigen Darstellungen

$$\det(1 - t\mathbf{G}) = \prod_{\alpha=1}^{3} \det(1 - t\mathbf{G}_{(\alpha)}) . \tag{A.9}$$

Die irreduziblen Darstellungen A_1 und A_2 sind jeweils eindimensional, während E zweidimensional ist. Die Spur von $\mathbf{G}_{(\alpha)}$ nennt man den *Charakter* $\chi(\mathbf{G}_{(\alpha)})$ der Darstellung. Für die eindimensionalen Darstellungen hat man also sofort

$$\det(1 - t\mathbf{G}_{(\alpha)}) = 1 - \chi(\mathbf{G}_{(\alpha)})t . \tag{A.10}$$

E ist zweidimensional und das charakteristische Polynom einer (2×2)-Matrix $\mathbb{A}$ ausgedrückt durch die Spuren ihrer Potenzen ist:

$$\det(1 - x\mathbb{A}) = 1 - \mathrm{Tr}\,(\mathbb{A})x + \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\,(\mathbb{A})^2 - \mathrm{Tr}\,(\mathbb{A}^2)\right) x^2 , \tag{A.11}$$

also

$$\det(1 - t\mathbf{G}_{(\alpha)}) = 1 - \chi(\mathbf{G}_{(\alpha)})t + \frac{1}{2}\left(\chi(\mathbf{G}_{(\alpha)})^2 - \chi(\mathbf{G}^2_{(\alpha)})\right) t^2 . \tag{A.12}$$

Die Projektionsoperatoren auf die irreduziblen Darstellungen und die Charaktertafel sind in Kapitel 3 angegeben. Das Produkt (A.9) faktorisiert dann in drei Anteile, die zu den irreduziblen Darstellungen gehören:

$$\begin{aligned} \det(1 - t\mathbf{G}) &= (1 - \chi(\mathbf{G}_{(A1)})t)\,(1 - \chi(\mathbf{G}_{(A2)})t) \\ &\quad \left(1 - \chi(\mathbf{G}_{(E)})t + \frac{1}{2}(\chi(\mathbf{G}_{(E)})^2 - \chi(\mathbf{G}^2_{(E)}))t^2\right)^2 . \end{aligned} \tag{A.13}$$

Aus der Charaktertafel der Gruppe[3] liest man dann ab, wenn $\mathbf{G} \in 2C_3, 3\sigma$ bzw. I ist:

$$(1-t_p)^2 = (1-t_p^{1/3})(1-t_p^{1/3})(1+t_p^{1/3}+t_p^{2/3})^2 \tag{A.14a}$$

$$(1-t_p)^3 = (1-t_p^{1/2})(1+t_p^{1/2})(1-(t_p^{1/2})^2)^2 \tag{A.14b}$$

$$(1-t_p)^6 = (1-t_p)(1-t_p)(1-t_p)^4 . \tag{A.14c}$$

[3]Siehe Tabelle 3.1 in Kapitel 3.

Die drei Faktoren der Produkte sind die Anteile, die zu den drei irreduziblen Darstellungen gehören. Die Zetafunktion faktorisiert gemäß

$$\zeta = \zeta_{A1}\,\zeta_{A2}\,\zeta_E^2\,, \tag{A.15}$$

und die Gewichte $t_p^{1/3}$, $t_p^{1/2}$ und t_p sind die Gewichte der auf den Fundamentalbereich beschränkten (symmetriereduzierten) Orbits.

Cycle expansion der Faktoren ζ_{A1}, ζ_{A2} und ζ_E

Hier geben wir die Entwicklung der drei Symmetrieanteile von ζ bis zur Ordnung 5 an[4]. Für die drei irreduziblen Darstellungen[5] von C_{3v} erhält man:

$$\begin{aligned}
1/\zeta_{A1} &= (1-t_0)(1-t_1)(1-t_{01})(1-t_{001})(1-t_{011})(1-t_{0001}) \\
&\quad \times (1-t_{0011})(1-t_{0111})\ \ldots \\
&= 1-t_0-t_1-(t_{01}-t_0t_1)-(t_{001}-t_0t_{01})-(t_{011}-t_{01}t_1) \\
&\quad -(t_{0011}-t_{001}t_1-t_0t_{011}+t_0t_{01}t_1)-\ \ldots
\end{aligned} \tag{A.16}$$

$$\begin{aligned}
1/\zeta_{A2} &= (1+t_0)(1-t_1)(1+t_{01})(1-t_{001})(1+t_{011})(1+t_{0001}) \\
&\quad \times (1-t_{0011})(1+t_{0111})\ \ldots \\
&= 1+t_0-t_1+(t_{01}-t_0t_1)-(t_{001}-t_0t_{01})+(t_{011}-t_{01}t_1) \\
&\quad -(t_{0011}-t_{001}t_1-t_0t_{011}+t_0t_{01}t_1)-\ \ldots
\end{aligned} \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
1/\zeta_E &= (1+t_1+t_1^2)(1-t_0^2)(1+t_{001}+t_{001}^2)(1-t_{01}^2)(1+t_{0011}+t_{0011}^2) \\
&\quad \times (1+t_{00001}+t_{00001}^2)(1+t_{01011}+t_{01011}^2)(1-t_{00111})^2\ \ldots \\
&= 1+t_1+(t_1^2-t_0^2)+(t_{001}-t_0^2t_1)+t_{0011}+(t_{001}-t_0^2t_1)t_1-t_{01}^2 \\
&\quad +t_{00001}+t_{01011}-2t_{00111}+(t_{0011}-t_{01}^2)t_1+(t_1^2-t_0^2)t_{001}\ \ldots
\end{aligned} \tag{A.18}$$

[4]Die Entwicklung zu wesentlich höheren Ordnungen als hier angegeben erfordert den Einsatz von Formelmanipulationsprogrammen. In dieser Arbeit wurde die Entwicklung bis zur 10. Ordnung der Krümmungsterme durchgeführt. Die Terme wurden mit Hilfe des Programms `REDUCE` berechnet. Dieses Programm stellt die Summen der Gewichte als `FORTRAN`–Output zur Verfügung. Im `FORTRAN`–Hauptprogramm werden die Variablen mit den entsprechenden Gewichten der Orbits belegt und die Summe wird numerisch ausgewertet.

[5]In der Entwicklung von $1/\zeta_E$ wurden die Terme $(1-t_{011}^2)$, $(1-t_{0111}^2)$ und $(1-t_{0001}^2)$ nicht mitgenommen, da ihre Gewichte erst Orbits der Länge 6 bzw. 8 kompensieren. Die Entwicklung geht hier aber nur bis zur Länge 5.

Anhang B

Konvergenz der Summe über periodische Orbits

Die Funktion $Z(E)$ ist ein unendliches Produkt über dynamische Zetafunktionen $\zeta_j(E)$ (siehe Kapitel 4):

$$Z(E) = \prod_j \zeta_j^{-1}(E) \tag{B.1}$$

mit

$$\zeta_j^{-1} = \prod_p (1 - \frac{e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}}{|\Lambda_p|^{1/2} \Lambda_p{}^j}) \,. \tag{B.2}$$

Wir wollen nun die Konvergenz der Zetafunktionen $\zeta_j(E)$ abschätzen [32]. $Z(E)$ ist abgeleitet aus einer unendlichen Summe über Gewichte von periodischen Orbits (Gleichung (2.35)):

$$\sum_p \sum_{j=0}^{\infty} T_p \frac{|\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}}{1 - |\Lambda_p|^{-\frac{1}{2}} \Lambda_p^{-j} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}} \,. \tag{B.3}$$

Dabei ist Λ_p die Instabilität, T_p die Periode, S_p die Wirkung und ν_p der Maslov-Index des Orbits p.

Es werden zwei Annahmen gemacht, die im allgemeinen für chaotische Systeme erfüllt sind:

- Die Zahl $N(T; dT)$ der periodischen Orbits mit Perioden im Intervall $[T, T+dT]$ wächst exponentiell mit der Periode:

$$N(T; dT) \sim e^{hT}/T \,. \tag{B.4}$$

- Die Eigenwerte Λ wachsen exponentiell mit einer Rate γ:

$$\Lambda \sim e^{\gamma T} . \tag{B.5}$$

h sei die *topologische Entropie* des Systems.

Wir betrachten zunächst die Konvergenz der unendlichen Summe für $j = 0$ in der komplexen Energieebene. Die Summe ist absolut konvergent, wenn die Summe über die Absolutbeträge der Summenglieder konvergiert. Zur Energie E addieren wir einen (kleinen) Imaginärteil ε und entwickeln die Wirkungsfunktion[1] $S(E)$ bis zur ersten Ordnung in ε. Da die Ableitung der Wirkung nach der Energie die Periode der Bahn ist, erhält man $S_p(E + i\varepsilon) = S_p(E) + i\varepsilon T_p$. Für die Summe der Absolutbeträge zu $j = 0$ folgt damit

$$\begin{aligned} \sum_p T_p \left| \frac{|\Lambda_p|^{-1/2} e^{-\varepsilon T_p/\hbar} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}}{1 - |\Lambda_p|^{-1/2} e^{-\varepsilon T_p/\hbar} e^{i(S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2)}} \right| &= \sum_p T_p \left| \frac{g_p e^{-i\alpha_p}}{1 - g_p e^{-i\alpha_p}} \right| \\ &\leq \sum_p T_p \left| \frac{g_p}{1 - g_p} \right| , \end{aligned} \tag{B.6}$$

wobei $g_p := (\Lambda_p)^{-1/2} \exp(-\varepsilon T_p/\hbar)$ und $\alpha_p := S_p(E)/\hbar - \nu_p \pi/2$.

Sind die Beträge aller Eigenwerte Λ_p echt größer eins, dann sind bei festem ε die g_p echt kleiner eins und damit die Faktoren $(1 - g_p)^{-1}$ nach oben beschränkt mit einer positiven oberen Schranke c. Und mit den beiden Annahmen erhält man als Abschätzung für die Summe

$$\begin{aligned} \sum_p T_p \left| \frac{g_p}{1 - g_p} \right| &\leq c \sum_p T_p g_p = c \sum_p T_p \Lambda^{-1/2} e^{-\varepsilon T_p/\hbar} \\ &\approx c \int dT\, T\, \frac{e^{hT}}{T} e^{-\gamma T/2} e^{-\varepsilon T/\hbar} = c \int dT e^{-(\varepsilon/\hbar - h + \gamma/2)T} . \end{aligned} \tag{B.7}$$

Daraus liest man die Konvergenzbedingung ab:

$$\frac{\varepsilon}{\hbar} > h - \frac{\gamma}{2} . \tag{B.8}$$

Die dynamische Zetafunktion ζ_0^{-1} ist die logarithmische Ableitung dieser Summe nach der Energie, d.h. auch für sie gilt dieses Kriterium. Typischerweise ist für gebundene hyperbolische Systeme $h > \gamma/2$ [32]. Die reelle Achse liegt damit

[1] In Hamiltonschen Systemen mit homogenem Potential ist die Wirkungsfunktion $S(E)$ analytisch; denn sie skalt in einfacher Weise mit Potenzen der Energie E [32]. Für Billard-Systeme ist S proportional zu $E^{1/2}$.

also außerhalb des Gebiets der absoluten Konvergenz der Summe. Für Zetafunktionen mit $j > 0$ erwartet man dagegen, daß sie auf der reellen Achse absolut konvergieren, da sie eine zusätzliche Dämpfung durch Λ_p^{-j} erfahren, was zu dem Kriterium

$$\frac{\varepsilon}{\hbar} > h - (j + \frac{1}{2})\gamma \tag{B.9}$$

führt.

Die Konvergenz der Zetafunktionen hat Auswirkungen auf die Lage der Nullstellen. Nur wenn das unendliche Produkt $Z(E)$ aller Zetafunktionen ζ_j^{-1} absolut konvergiert, besitzt es Nullstellen dort, wo auch ihre einzelnen Faktoren Nullstellen besitzen. Dann haben die Nullstellen in der Nähe der reellen Achse ihre Ursache in ζ_0^{-1}, weil die Funktionen zu höheren j dort absolut konvergieren und keine Nullstellen für reelle Energien E aufweisen.

Konkrete Berechnung der Konvergenzabszisse

Der Konvergenzbereich der unendlichen Summe

$$\sum_p T_p \left| \frac{|\Lambda_p|^{-1/2} e^{-\varepsilon T_p/\hbar}}{1 - |\Lambda_p|^{-1/2} e^{-\varepsilon T_p/\hbar}} \right| \tag{B.10}$$

in Abhängigkeit von ε ist nach unten beschränkt durch das größte ε, für das diese Summe divergiert. Für große ε sind alle Summenglieder positiv. Wir schreiben daher zur Ermittlung dieser höchsten Polstelle die Summe ohne Beträge und formen sie um in die logarithmische Ableitung eines unendlichen Produktes. Außerdem führen wir die Variable $z := \varepsilon/\hbar$ ein.

$$\sum_p T_p \frac{|\Lambda_p|^{-1/2} e^{-zT_p}}{1 - |\Lambda_p|^{-1/2} e^{-zT_p}} = \frac{\partial}{\partial z} \log \left[\prod_p (1 - |\Lambda_p|^{-1/2} e^{-zT_p}) \right] . \tag{B.11}$$

Die Berechnung der Divergenzstelle der Summe ist damit zurückgeführt auf die Berechnung der höchsten (nicht-trivialen) Nullstelle[2] der Zetafunktion

$$\zeta^{-1}(z) = \prod_p (1 - |\Lambda_p|^{-1/2} e^{-zT_p}) . \tag{B.12}$$

Diese kann dann z.B. mittels der cycle expansion ausgewertet werden.

[2] Die Zetafunktion (B.12) besitzt im Gebiet der absoluten Konvergenz triviale Nullstellen bei den Nullstellen ihrer einzelnen Faktoren.

Anhang C

Anhang zu Kapitel 3

C.1 Linearisierte Dynamik und Stabilität von Trajektorien

C.1.1 Die Stabilitätsmatrix

Im Rahmen der semiklassischen Quantisierung spielen die klassischen Trajektorien und deren Stabilitätsverhalten die wesentliche Rolle. Die Stabilität einer Trajektorie wird bestimmt durch das Verhalten des Flusses in ihrer Nähe. Wir nehmen nun an, daß es sich um ein Hamiltonsches System handelt und wollen hier eine *Bezugstrajektorie* auszeichnen. Es soll das Verhalten der benachbarten Trajektorien untersucht werden.

Die Anfangsbedingungen seien $(\mathrm{p}_0, \mathrm{q}_0)$, d.h. zur Zeit $t = 0$ sei der Phasenraumpunkt $(\mathrm{p}_0, \mathrm{q}_0)$ ein Element der Bezugstrajektorie $(\mathrm{p}_t, \mathrm{q}_t)$. Eine benachbarte Trajektorie $(\mathrm{p}'_t, \mathrm{q}'_t)$ weiche von dieser in den Anfangsbedingungen um $(\delta\mathrm{p}_0, \delta\mathrm{q}_0)$ ab. Für spätere Zeiten t ist die Abweichung $(\delta\mathrm{p}_t, \delta\mathrm{q}_t)$, mit $\delta\mathrm{q}_t = \mathrm{q}'_t - \mathrm{q}_t$ und $\delta\mathrm{p}_t = \mathrm{p}'_t - \mathrm{p}_t$. Ort q_t und Impuls p_t zur Zeit t hängen jeweils von den Anfangsbedingungen ab: $\mathrm{q}_t = \mathrm{q}(\mathrm{p}_0, \mathrm{q}_0, t)$ und $\mathrm{p}_t = \mathrm{p}(\mathrm{p}_0, \mathrm{q}_0, t)$.

Wir definieren nun die Elemente der *Stabilitätsmatrix* M der Bezugstrajektorie:

$$\mathrm{M} := \begin{pmatrix} \left.\dfrac{\partial \mathrm{p}_t}{\partial \mathrm{p}_0}\right|_{\mathrm{q}_0} & \left.\dfrac{\partial \mathrm{p}_t}{\partial \mathrm{q}_0}\right|_{\mathrm{p}_0} \\ \left.\dfrac{\partial \mathrm{q}_t}{\partial \mathrm{p}_0}\right|_{\mathrm{q}_0} & \left.\dfrac{\partial \mathrm{q}_t}{\partial \mathrm{q}_0}\right|_{\mathrm{p}_0} \end{pmatrix} .$$

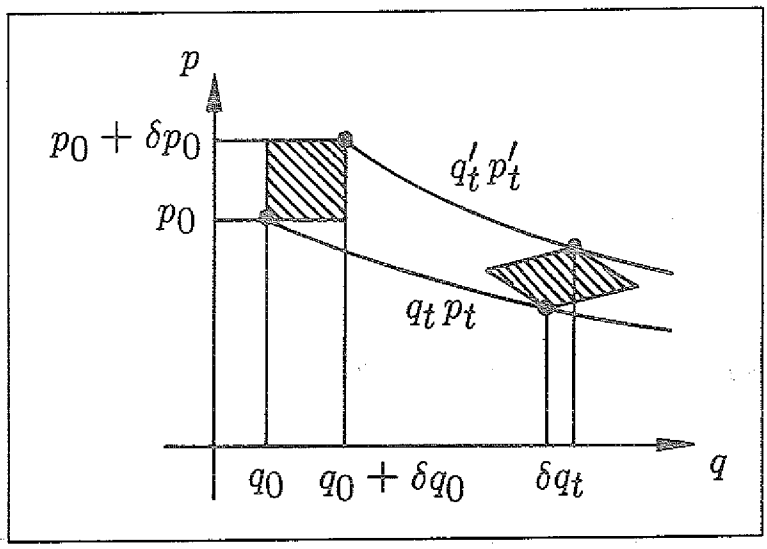


Abbildung C.1: Verhalten eines Phasenraumelementes unter einem Hamiltonschen Fluß [49].

Durch Linearisierung bis zur ersten Ordnung in den Abweichungen $\delta \mathrm{p}_0$ und $\delta \mathrm{q}_0$ der Anfangsbedingungen erhält man

$$\mathrm{p}'_t = \mathrm{p}_t + M_{11}\,\delta \mathrm{p}_0 + M_{12}\,\delta \mathrm{q}_0 + \cdots \tag{C.1a}$$

$$\mathrm{q}'_t = \mathrm{q}_t + M_{21}\,\delta \mathrm{p}_0 + M_{22}\,\delta \mathrm{q}_0 + \cdots , \tag{C.1b}$$

oder als Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} \delta \mathrm{p}_t \\ \delta \mathrm{q}_t \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta \mathrm{p}_0 \\ \delta \mathrm{q}_0 \end{pmatrix} . \tag{C.2}$$

Die Bewegungsgleichungen für die Abweichungen ergeben sich unter Verwendung der Hamiltonschen kanonischen Gleichungen, und falls $H = \mathrm{p}^2/2 + V(\mathrm{q})$ ist, zu

$$\frac{d}{dt}\delta \mathrm{p}_t = \dot{\mathrm{p}}'_t - \dot{\mathrm{p}}_t = -\left.\frac{\partial H}{\partial \mathrm{q}}\right|_{\mathrm{q}'_t} + \left.\frac{\partial H}{\partial \mathrm{q}}\right|_{\mathrm{q}_t} = -\frac{\partial^2 H}{\partial \mathrm{q}^2}\delta \mathrm{q}_t \tag{C.3a}$$

$$\frac{d}{dt}\delta \mathrm{q}_t = \dot{\mathrm{q}}'_t - \dot{\mathrm{q}}_t = \left.\frac{\partial H}{\partial \mathrm{p}}\right|_{\mathrm{p}'_t} - \left.\frac{\partial H}{\partial \mathrm{p}}\right|_{\mathrm{p}_t} = \frac{\partial^2 H}{\partial \mathrm{p}^2}\delta \mathrm{p}_t . \tag{C.3b}$$

Dann folgt

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \delta \mathrm{p}_t \\ \delta \mathrm{q}_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\partial^2 H/\partial \mathrm{q}^2 \\ \partial^2 H/\partial \mathrm{p}^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathrm{p}_t \\ \delta \mathrm{q}_t \end{pmatrix} \tag{C.4a}$$

$$:= \mathrm{K}\begin{pmatrix} \delta \mathrm{p}_t \\ \delta \mathrm{q}_t \end{pmatrix} = \mathrm{KM}\begin{pmatrix} \delta \mathrm{p}_0 \\ \delta \mathrm{q}_0 \end{pmatrix} \tag{C.4b}$$

$$= \frac{d}{dt}\mathrm{M}\begin{pmatrix} \delta \mathrm{p}_0 \\ \delta \mathrm{q}_0 \end{pmatrix}, \tag{C.4c}$$

und daher

$$\frac{d}{dt}\mathrm{M} = \mathrm{KM}. \tag{C.5}$$

$\mathrm{M}(t)$ erhält man dann, indem man (C.5) zusammen mit der Bezugstrajektorie zeitentwickelt, und das mit der Anfangsbedingung $\mathrm{M}(0) = \mathbf{1}$.

Aus der Definition der Stabilitätsmatrix und mit Hilfe der Hamiltonschen Gleichungen folgt nach einiger Rechnung, daß $d(\det \mathrm{M})/dt = 0$ ist. Wegen der Anfangsbedingung ist dann der Wert der Determinante zeitlich konstant gleich 1. D.h. ein Element des Phasenraumes erhält unter der Zeitentwicklung sein Volumen; dies ist das Theorem von Liouville [40].

C.1.2 Stabilität periodischer Orbits

In chaotischen Systemen liegen die periodischen Trajektorien vermutlich überall dicht. Sie bilden das Rückgrat der Dynamik. In jeder Umgebung des Punktes einer Trajektorie liegen unendlich viele Phasenraumpunkte, die zu periodischen Orbits gehören. Die Menge der periodischen Orbits ist aber vom Maß null, d.h. wählt man zufällig eine Anfangsbedingung aus, so wird man in fast allen Fällen auf einer nicht-periodischen Trajektorie landen.

Welche Eigenschaften besitzt die Stabilitätsmatrix periodischer Orbits? Wir denken uns ein System mit zwei Freiheitsgraden. Ein Koordinatensystem sei so gewählt, daß eine Achse lokal in Richtung des Orbits liege und die zweite senkrecht dazu. Dann zerfällt die Stabilitätsmatrix als (4×4)-Matrix in zwei (2×2)-Blöcke auf der Hauptdiagonalen. Der eine Block beschreibt die Bewegung entlang des Orbits und der andere diejenige senkrecht zu ihm. Für die weitere Diskussion ist nur dieser zweite von Bedeutung, den wir im folgenden auch mit M bezeichnen wollen.

Die Stabilitätsmatrix M_p für eine Periode T_p eines periodischen Orbits hängt davon ab, welchen Punkt des Orbits man als Anfangswert gewählt hat. Unabhängig

von der Wahl sind allerdings die Eigenwerte[1]. Diese kann man, da $\det \mathbf{M}_p = 1$ ist, schreiben als

$$\Lambda_\pm = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\,\mathbf{M}_p \pm \sqrt{(\mathrm{Tr}\,\mathbf{M}_p)^2 - 4}\right) . \tag{C.6}$$

Ist $|\mathrm{Tr}\,\mathbf{M}_p| > 2$, dann sind die Eigenwerte reell und können geschrieben werden

$$\Lambda_\pm = e^{\pm\lambda T_p} \tag{C.7}$$

oder

$$\Lambda_\pm = -e^{\pm\lambda T_p} \tag{C.8}$$

mit Lyapunov-Exponent $\lambda > 0$.
Falls $|\mathrm{Tr}\,\mathbf{M}_p| < 2$ ist, so sind die Eigenwerte komplex:

$$\Lambda_\pm = e^{\pm i\omega T_p} . \tag{C.9}$$

In einem vollständig chaotischen System sind alle periodischen Orbits instabil, was den beiden Fällen (C.7) und (C.8) entspricht. Im Fall (C.7) nennt man den Orbit *hyperbolisch*, und wenn (C.8) gilt, nennt man ihn *hyperbolisch mit Spiegelung*. Zu den Eigenwerten $\Lambda_\pm$ im hyperbolischen Fall (Instabilitäten) gehören die Eigenvektoren $\mathbf{v}_\pm$:

$$\mathbf{M}_p\mathbf{v}_\pm = e^{\pm\lambda T_p}\,\mathbf{v}_\pm . \tag{C.10}$$

Die Eigenvektoren spannen Geraden in der gewählten Ebene senkrecht zum Orbit (lokale Poincaré-Ebene) auf, auf die jeder Punkt dieser Geraden nach einer Periode wieder abgebildet wird, wenn er nur nahe genug am Fixpunkt – das ist der Durchstoßpunkt des periodischen Orbits durch die Ebene – startet. Auf der Geraden zu $\mathbf{v}_+$ entfernt er sich exponentiell schnell vom Orbit. Diese Gerade gehört lokal zur *instabilen invarianten Mannigfaltigkeit* des Fixpunktes. Entsprechend gilt für die Richtung $\mathbf{v}_-$, daß sich auf der zugehörigen Geraden alle Punkte exponentiell schnell dem Fixpunkt nähern, weshalb diese Gerade lokal Teil der *stabilen invarianten Mannigfaltigkeit* des Fixpunktes ist. Punkte, die nicht auf einer der beiden Mannigfaltigkeiten liegen, nähern sich diesen asymptotisch für Zeiten $t \to \pm\infty$.

[1] Das ist eine Folgerung aus dem Floquet-Theorem für lineare Differentialgleichungssysteme mit periodischen Koeffizienten (siehe z.B. [19]).

C.2 Numerische Berechnung periodischer Orbits

Gegeben sei eine diskrete Dynamik des $\mathbb{R}^2$ durch eine stetig differenzierbare Abbildung[2] $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$. Die Iteration eines Startpunktes $v_1 = (p_1, q_1)$ unter f liefert eine Folge (p_ν, q_ν) von Punkten im $\mathbb{R}^2$. Eine solche Folge wollen wir im weiteren als *Bahn* bezeichnen.

Ausgezeichnete Bahnen sind dann solche, bei denen der Startpunkt der Iteration nach endlich vielen Iterationsschritten wieder auf sich abgebildet wird. Diese Bahn nennt man einen *periodischen Orbit.* Die Periode dieser Bahn ist die kleinste Anzahl von Iterationen, für die obige Bedingung erfüllt ist.

C.2.1 Das Newtonsche Verfahren im $\mathbb{R}^n$

Es sei eine stetig differenzierbare Abbildung $\mathbf{F} : G \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ (G offen) gegeben. F_i seien die n Komponentenfunktionen und $D\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ die Matrix der partiellen Ableitungen von $\mathbf{F}$.

Wir definieren eine Abbildung $\mathbf{B} := \mathbf{Id} - \mathbf{F}$. Dabei ist $\mathbf{Id}$ die identische Abbildung des $\mathbb{R}^n$. Gesucht wird nun eine Lösung des Gleichungssystems

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\,. \tag{C.11}$$

Eine Lösung ξ von (C.11) ist also ein Fixpunkt der Abbildung $\mathbf{F}$, d.h. $\mathbf{F}(\xi) = \xi$.

Zur Lösung von (C.11) wollen wir das Newtonsche Verfahren benutzen. Dazu geht man aus von einem (grundsätzlich beliebigen) Startpunkt $\mathbf{x}^{(0)}$, der schon möglichst nahe an einer Nullstelle von $\mathbf{B}$ liegen sollte, und bildet die Newton-Folge $(\mathbf{x}^{(m)})$ vermöge der rekursiven Definition

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(m+1)} &:= \mathbf{x}^{(m)} - [D\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(m)})]^{-1}\,\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(m)}) \qquad (m = 0, 1, 2, \cdots) && \text{(C.12a)} \\ &= \mathbf{x}^{(m)} - [1 - D\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)})]^{-1}\,[\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)})]\,. && \text{(C.12b)} \end{aligned}$$

[2] f kann man sich konkret als Abbildung des Phasenraumes auf sich vorstellen, oder als Koordinatendarstellung der Abbildung einer 2-dimensionalen Untermannigfaltigkeit des Phasenraumes (z.B. eine Poincaré-Abbildung eines kontinuierlichen Flusses). Daß die Dimension des Phasenraumes hier 2 gewählt wurde, ist keine Einschränkung der Allgemeinheit für die Anwendung der Methode zur Bestimmung periodischer Orbits, aber gerechtfertigt durch die Modellabbildung, die in dieser Arbeit untersucht wird.

$[D\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(m)})]^{-1}$ bedeutet die zur Ableitung $D\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(m)})$ inverse Matrix. Die Folgen $(\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(m)}))$ und $([D\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(m)})]^{-1})$ konvergieren gegen $\mathbf{B}(\xi)$ bzw. $[D\mathbf{B}(\xi)]^{-1}$, wenn $(\mathbf{x}_m) \to \xi \in G$ geht, und $\mathbf{B}$ stetig differenzierbar auf G ist. Das zweite haben wir vorausgesetzt. Aus (C.12) ergibt sich dann

$$\xi = \xi - [D\mathbf{B}(\xi)]^{-1}\,\mathbf{B}(\xi) \quad \text{oder} \quad \mathbf{B}(\xi) = \mathbf{0}\,. \tag{C.13}$$

Der Grenzwert ξ der Newton-Folge ist also eine Lösung von Gleichung (C.11). In jedem Iterationsschritt i von (C.12) ist das Gleichungssystem $D\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(i)})\,\mathbf{w}^{(i)} = \mathbf{B}(\mathbf{x}^{(i)})$ nach $\mathbf{w}^{(i)}$ aufzulösen. Das nächste Element der Newton-Folge ist dann gegeben durch $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{w}^{(i)}$.

C.2.2 Berechnung periodischer Orbits mit Hilfe des Newtonschen Verfahrens

Wir wollen nun periodische Bahnen der Periode k einer Abbildung

$$f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2, \quad v = (p, q) \to f(v) = (f_p(v), f_q(v))$$

finden. Dazu fassen wir die Koordinaten der Bahnpunkte $(p_1, q_1), \cdots, (p_k, q_k)$ in dieser Reihenfolge zu einem Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2k}$ zusammen und definieren die Abbildung $\mathbf{F} : (\mathbb{R}^2)^k \to (\mathbb{R}^2)^k, \mathbf{x} = (v_1, \cdots, v_k) \to \mathbf{F}(v_1, \cdots, v_k)$ durch

$$\begin{aligned} F_i(v_1, \cdots, v_k) &:= f(v_{i-1}) \qquad (i = 1, \cdots, k \quad \text{zyklisch}) && \text{(C.14a)} \\ &= f \circ P_{i-1}(v_1, \cdots, v_k)\,. && \text{(C.14b)} \end{aligned}$$

Dabei sei $P_j(\mathbf{x}) = v_j$ die Projektion auf den j-ten Teilraum $\mathbb{R}^2$ des direkten Produktes $(\mathbb{R}^2)^k = \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \times \cdots \times \mathbb{R}^2$.

Wenn die Bahn periodisch ist, wird der k-te Punkt der Bahn im $\mathbb{R}^2$ wieder auf den ersten abgebildet. k-Periodizität einer Bahn der Länge k kann man also mit Hilfe der Abbildung $\mathbf{F}$ so formulieren:

- Die Bahn $\mathbf{x} = (v_1, \cdots, v_k)$ ist k-periodisch bezüglich f, wenn $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ gilt.

Also muß man, um periodische Orbits zu finden, nach Fixpunkten der Abbildung $\mathbf{F}$ suchen. Das geschieht dann unter Anwendung des Newtonschen Verfahrens aus Abschnitt C.2.1.

Für die Ableitung $D\mathbf{F}(\mathbf{x})$ von $\mathbf{F}$ folgt mit (C.14):

$$(D\mathbf{F}(\mathbf{x}))_{i,j} = \left(\frac{\partial F_i}{\partial v_j}\right)(\mathbf{x}) = (f'(v_{i-1})\,\delta_{i-1,j})\ . \tag{C.15}$$

$f'(v_i)$ sind jeweils (2×2)-Matrizen. Das zu lösende Gleichungssystem hat damit die folgende Form:

$$\begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & -f'(v_k) \\ -f'(v_1) & \ddots & & 0 \\ & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & 1 & \\ 0 & \cdots & -f'(v_{k-1}) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ \\ w_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 - f(v_k) \\ v_2 - f(v_1) \\ \vdots \\ \\ v_k - f(v_{k-1}) \end{pmatrix} . \tag{C.16}$$

Anhang D

Anhang zu Kapitel 4

D.1 Numerische Berechnung der quantenmechanischen Energieniveaus des gebundenen Billards

Wir bezeichnen mit B den inneren Bereich des zweidimensionalen gebundenen Billards. Das Potential in B ist konstant, und unendlich auf den Rändern. Ein Teilchen bewegt sich innerhalb von B frei und wird an den Rändern ∂B reflektiert. Das korrespondierende quantenmechanische Problem wird beschrieben durch die freie stationäre Schrödinger–Gleichung

$$(\Delta + k^2)\, \psi(x,y) = 0 \quad (x,y) \in B \tag{D.1}$$

mit Dirichlet–Randbedingungen

$$\psi(x,y) = 0 \quad \text{für } (x,y) \in \partial B\,. \tag{D.2}$$

Dabei haben wir $\hbar/2m = 1$ gesetzt, also $E = k^2$.
In der mathematischen Literatur wird eine solche partielle Differentialgleichung als *Helmholtz–Gleichung* bezeichnet [53]. Sie beschreibt unter anderem auch kleine Schwingungen einer an den Rändern ∂B fest eingespannten dünnen Membrane.

Um Gleichung (D.1) unter der Randbedingung (D.2) zu lösen, überführen wir sie in eine Integralgleichung auf dem Rand ∂B. Dazu benutzen wir die folgende

Identität für die Wellenfunktion $\psi(\mathrm{q})$:

$$\oint_{\partial B} ds'\{\psi(\mathrm{q}')\,\mathrm{n}'\cdot\nabla_{q'}G(\mathrm{q},\mathrm{q}')-G(\mathrm{q},\mathrm{q}')\,\mathrm{n}'\cdot\nabla_{q'}\psi(\mathrm{q}')\}=\begin{cases}\psi(\mathrm{q})\ , & \mathrm{q}\in B\setminus\partial B\\ \frac{1}{2}\psi(\mathrm{q}), & \mathrm{q}\in\partial B\\ 0\ , & \mathrm{q}\notin B\end{cases}\ . \tag{D.3}$$

Dabei ist $\mathrm{q}=(x,y)$, $\mathrm{q}'=(x',y')$ und n' ist der nach außen gerichtete Einheitsnormalenvektor an ∂B im Punkt q', ∇ ist der Gradientenoperator, und ds' bezeichnet das Linienelement entlang ∂B. $G(\mathrm{q},\mathrm{q}')$ ist die freie auslaufende Greensche Funktion der inhomogenen Schrödinger–Gleichung

$$(\Delta_q+k^2)\,G(\mathrm{q},\mathrm{q}')=\delta(\mathrm{q}-\mathrm{q}')\ , \tag{D.4}$$

gegeben durch

$$G(\mathrm{q},\mathrm{q}')=-\frac{1}{4}iH_0^{(1)}(k|\mathrm{q}-\mathrm{q}'|)\ . \tag{D.5}$$

$H_0^{(1)}$ ist die Hankel–Funktion nullter Ordnung der ersten Art [1]. Die Identität (D.3) folgt dann aus (D.4) und (D.1) durch Multiplikation von (D.4) mit ψ und von (D.1) mit G, Subtraktion, Integration über B und Anwendung des Greenschen Satzes. Wir definieren die Normalkomponente $u(s)$ des Gradienten von ψ an der Stelle s auf ∂B durch

$$u(s):=\mathrm{n}\cdot\nabla_q\psi(\mathrm{q}(s))\ . \tag{D.6}$$

Nimmt man von (D.3) die Normalenableitung, wobei q auf ∂B liegt, und benutzt die Randbedingung (D.2), so folgt eine Integralgleichung für die Normalenableitung $u(s)$ (Fredholm–Gleichung der zweiten Art):

$$u(s)=2\oint_{\partial B} ds'\,u(s')\mathrm{n}\cdot\nabla_q G(\mathrm{q},\mathrm{q}')\ . \tag{D.7}$$

Wir definieren den Abstand ρ zweier Punkte auf ∂B durch

$$\rho(s,s'):=|\mathrm{q}(s)-\mathrm{q}'(s')| \tag{D.8}$$

und den Winkel $\theta(s,s')$ als den Winkel zwischen der Verbindungsstrecke von $\mathrm{q}'(s')$ nach $\mathrm{q}(s)$ und der Tangente an ∂B bei s. Dann ist

$$\begin{aligned}\mathrm{n}\cdot\nabla_q G &= \frac{\partial G}{\partial\rho}\,\mathrm{n}\cdot\nabla_q\rho\\ &= \frac{\partial G}{\partial\rho}\,\mathrm{n}\cdot\frac{\mathrm{q}(s)-\mathrm{q}'(s')}{\rho(s,s')}=\frac{\partial G}{\partial\rho}\,\sin\theta(s,s')\ ,\end{aligned} \tag{D.9}$$

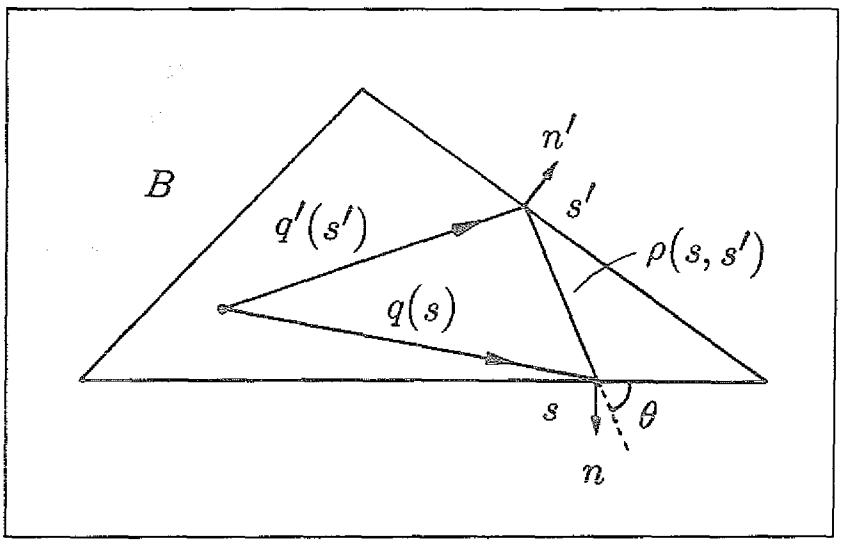


Abbildung D.1: Schema zur Erläuterung der geometrischen Größen, die im Text definiert werden.

also insgesamt

$$u(s) = -\frac{1}{2} ik \oint_{\partial B} ds'\, u(s') \sin\theta(s,s')\, H_1^{(1)}(k\rho(s,s'))\,. \tag{D.10}$$

Das ist eine lineare homogene Integralgleichung für $u(s)$. Sie kann auf jedes gebundene Billard–System angewendet werden [15, 68]. Diese Gleichung kann man durch Diskretisierung der Randes lösen. Dazu teilen wir ∂B in K Segmente und definieren

$$s_m := m\frac{L}{K}, \quad \rho_{lm} := \rho(s_l, s_m), \quad \theta_{lm} := \theta(s_l, s_m), \quad 1 \le (l,m) \le K\,. \tag{D.11}$$

L ist die Länge der Randes ∂B und s_m die diskretisierte Bogenlänge. Die diskretisierte Version der obigen Integralgleichung lautet

$$u(s_l) + \frac{1}{2} ik \sum_{m=1}^{K} \frac{L}{K}\, u(s_m)\, \sin\theta_{lm}\, H_1^{(1)}(k\rho_{lm}) = 0\,. \tag{D.12}$$

Die Eigenwerte erfüllen dann die Bedingung

$$\lim_{K\to\infty} \det M = 0\,, \tag{D.13}$$

wobei die $(K \times K)$-Matrix M gegeben ist durch

$$M_{lm} := \delta_{lm} + \frac{ikL}{2K} \sin\theta_{lm}\, H_1^{(1)}(k\rho_{lm})\,. \tag{D.14}$$

M ist eine nicht-hermitesche komplexe Matrix, die nichtlinear von k abhängt. θ_{lm} und ρ_{lm} sind rein geometrische Größen, in denen die Billard-Geometrie enthalten ist.

Wir gehen nun über zur speziellen Situation des Drei-Scheiben-Billards. Zunächst überlegt man sich, daß $\rho_{ll} = 0$ ist für alle l. Außerdem ist $H_1^{(1)}$ singulär bei 0. Das würde bei der numerischen Berechnung der Matrixelemente M_{ll} zu Schwierigkeiten führen. Man kann diese Terme aber analytisch berechnen, indem man eine Entwicklung der Hankelfunktionen für kleine Argumente benutzt. Liegen zwei Punkte s und s' dicht benachbart auf dem Rand einer Scheibe (mit Radius r), so findet man für deren Abstand

$$\rho(s, s') = 2r \sin\theta(s, s') \ , \tag{D.15}$$

und $\theta(s, s')$ ist die Hälfte des Winkels, den die beiden Punkte mit dem Mittelpunkt der Scheibe einschließen. ρ sei sehr klein; dann kann man die Hankelfunktion für kleines Argument approximieren [1]:

$$H_1^{(1)}(k\rho) = H_1^{(1)}(k\, 2r \sin\theta) \approx -\frac{i}{\pi}\Gamma(1)\ (kr\sin\theta)^{-1} \ . \tag{D.16}$$

Daraus erhält man für ein Matrixelement M_{ll} die Beziehung

$$M_{ll} = 1 + \frac{L}{2\pi r K} \ . \tag{D.17}$$

Zur numerischen Berechnung der Eigenwerte berechnet man die Determinante der Matrix M auf der reellen k-Achse und bestimmt die Stellen, wo der Realteil der Determinante eine Nullstelle hat. Ist dort auch der Imaginärteil klein, so ist diese Stelle ein Kandidat für einen Eigenwert.

Weist das zu untersuchende System Symmetrien auf, wie es z.B. beim Drei-Scheiben-Billard der Fall ist, so kann man die Matrix M zerlegen nach den irreduziblen Darstellungen der zugrundeliegenden Symmetriegruppe. Die Matrix zerfällt dann in Blöcke, und die Nullstellen der Determinante dieser Blockmatrizen ergeben die Menge der Eigenwerte, die zu der jeweiligen irreduziblen Darstellung gehören[1]. Die Matrix M wird blockdiagonalisiert, indem man sie multipliziert mit einer Matrixdarstellung der Projektionsoperatoren auf die irreduziblen Unterräume.

[1] Dabei ist zu beachten, daß eine zweidimensionale Darstellung zweifach entartete Eigenwerte liefert. Das ist z.B. bei der E-Symmetrie der Gruppe C_{3v} der Fall.

Numerisch führt die Symmetriereduzierung des Problems zu einer erheblichen Beschleunigung der Rechnungen. Betrachten wir unserer Modellsystem, so folgt, daß die Anzahl der Zeilen der Blockmatrizen um den Faktor 1/6 kleiner ist als die der Matrix des Systems bei voller Symmetrie.

In unseren Rechnungen haben wir die Determinante durch LU–Zerlegung[2] der Matrix bestimmt. Dieser Algorithmus erfordert eine Rechenzeit, die proportional zu N^3 ist, wo N die Dimension der Matrix bedeutet. Die Verkleinerung der Zeilenzahl um einen Faktor $1/m$ bedeutet demnach eine Beschleunigung in der Rechenzeit um den Faktor $(1/m)^3$.

Zur Berechnung der Eigenwerte haben wir im symmetriereduzierten Fall Matrizen der Größe bis 400×400 benutzt[3]. Die Güte der Konvergenz wurde numerisch überprüft durch Erhöhung der Matrixdimension um 10 %. Waren die Eigenwerte dabei numerisch stabil, so konnte mit der ursprünglichen Matrixdimension weitergerechnet werden.

Diese Methode zur Bestimmung der Eigenwerte wurde zunächst überprüft an einem Billardsystem, das die gleiche Symmetrie besitzt wie das Drei–Scheiben–Billard, dessen Eigenwerte aber analytisch gegeben sind. Es handelt sich um das Innere eines gleichseitigen Dreiecks [50]. Für dieses Modell wurden die ersten etwa 100 Eigenwerte reproduziert. Insbesondere wurde die Symmetriezerlegung der Matrix M an diesem Modell überprüft, bevor das Programm auf das Drei–Scheiben–Billard angewendet wurde.

D.2 Die Eulerformel

Wir geben hier einen Beweis[4] der in Kapitel 4 angegebenen Formel (4.16) an[5]. Wir zeigen, daß für alle x mit $|x| < 1$ gilt:

$$\prod_{k=1}^{\infty}(1+tx^k) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} t^k \frac{x^{\frac{k(k+1)}{2}}}{\prod_{r=1}^{k}(1-x^r)} .$$

[2]Die LU–Zerlegung ist eine Zerlegung der ursprünglichen Matrix in ein Produkt aus einer oberen und unteren Dreiecksmatrix [60].

[3]Diese Rechnungen wurden auf der CRAY X-MP des Forschungszentrums Jülich durchgeführt.

[4]Dabei verwenden wir die Lösung einer Leseraufgabe in *Am. Math. Monthly* 72 (1965), S. 431.

[5]Die Formulierung dieses Anhangs wurde zusammen mit G. Ott erarbeitet.

Dazu betrachten wir die Funktion

$$f(t) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} C_k t^k \qquad \text{mit} \quad C_k = \frac{x^{\frac{k(k+1)}{2}}}{\prod_{r=1}^{k}(1-x^r)}, \quad |x| < 1 .$$

Es gilt die Rekursionsformel:

$$C_{k+1} = \frac{x^{k+1}}{1-x^{k+1}} C_k .$$

Multipliziert man beide Seiten mit $t^{k+1}(1-x^{k+1})$ und summiert über $k \geq 1$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} C_{k+1}\, t^{k+1}(1-x^{k+1}) &= \sum_{k=1}^{\infty} C_k\,(tx)^{k+1} \\ f(t) - f(tx) - C_1 t(1-x) &= tx\,(f(tx)-1) \\ f(t) - f(tx) - tx &= tx\, f(tx) - tx . \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} f(t) &= (1+tx)f(tx) = (1+tx)(1+tx^2)f(tx^2) = \ldots \\ &= \lim_{N\to\infty} \underbrace{f(tx^N)}_{\to f(0)=1} \prod_{k=1}^{N}(1+tx^k) = \prod_{k=1}^{\infty}(1+tx^k) . \end{aligned} \tag{D.18}$$

Ersetzt man t durch $-t_p\Lambda_p$ und x durch Λ_p^{-1}, so erhält man die behauptete Identität:

$$\prod_{k=0}^{\infty}(1-t_p\Lambda_p^{-k}) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty}(-t_p)^k \frac{\Lambda_p^{-\frac{1}{2}k(k-1)}}{\prod_{r=1}^{k}(1-\Lambda_p^{-r})} \tag{D.19}$$

$$= 1 - \frac{t_p}{1-\Lambda_p^{-1}}\left(1 - \frac{t_p\,\Lambda_p^{-1}}{1-\Lambda_p^{-2}}\left(1 - \frac{t_p\,\Lambda_p^{-2}}{1-\Lambda_p^{-3}}\left(1 - \frac{t_p\,\Lambda_p^{-3}}{1-\Lambda_p^{-4}}(1-\ldots)\right)\right)\right) .$$

(Die letzte Umformung ist praktisch bei der Berechnung des Produktes auf einem Computer.)

Anhang E

Anhang zu Kapitel 5

E.1 Variante des Theorems von Levinson

Für ein diskretes Spektrum ($E < 0$) ist die Zustandsdichte definiert durch

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) \,. \tag{E.1}$$

Dabei sind E_n die diskreten Energieeigenwerte der stationären Schrödingergleichung. Potentiale $V(\mathbf{q})$, die für große $|\mathbf{q}|$ verschwinden, führen zu einem kontinuierlichen Spektrum des Hamilton-Operators bei positiven Energien. Dann ist (E.1) nicht definiert. Trotzdem kann man die Variationen dieser Größe in Bezug auf das Potential studieren [9].

Das Potential habe eine endliche Reichweite. Das Gebiet, in dem das Potential von null verschieden ist, schließen wir in eine Kugel vom Radius R ein, um die Energieniveaus diskret zu machen. Für wachsendes R divergiert die Zustandsdichte $\rho(E)$ dieses Systems, aber auch die Zustandsdichte $\rho_0(E)$ der leeren Kugel divergiert, und zwar wie R^3. Aber die Differenz $d(E) := \rho(E) - \rho_0(E)$ konvergiert gegen einen Grenzwert, der sich durch die Streumatrix S dieses Potentials ausdrücken läßt. Allgemein gilt für ein beliebiges Potential, das nur in einem endlichen Raumbereich nicht verschwindet [71]:

$$\boxed{d(E) = \frac{1}{2\pi i}\,\mathrm{Tr}\, S^\dagger \frac{dS}{dE} = \frac{1}{2\pi i}\,\mathrm{Tr}\,\frac{d}{dE}\ln S = \frac{1}{2\pi i}\,\frac{d}{dE}\ln\det S \,.} \tag{E.2}$$

Das soll nun aus den Eigenschaften der Streumatrix abgeleitet werden. Dabei richten wir uns nach einem Beweis des Theorems von Levinson in [71].

Wir bezeichnen mit $G_0^{\pm} := (E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon)^{-1}$ die ungestörte Greensche Funktion und mit $G^{\pm} := (E - \hat{H} \pm i\epsilon)^{-1}$ die Greensche Funktion zum Hamilton-Operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$. Die Streumatrix S besitzt folgende Spektraldarstellung

$$S(E) = (1 - G_0^- V)\,(1 - G_0^+ V)^{-1} = Q_-\, Q_+^{-1} \tag{E.3}$$

mit $Q_{\pm} := 1 - G_0^{\pm} V$.

Die Differenz $d(E)$ der Zustandsdichten ist wegen (2.31)

$$\begin{aligned} d(E) &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\int d\mathbf{q}\,[G^+(\mathbf{q},\mathbf{q};E) - G_0^+(\mathbf{q},\mathbf{q};E)] \\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,(G^+ - G_0^+)\,. \end{aligned} \tag{E.4}$$

Benutzen wir

$$\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,(G^+ - G_0^+) = \frac{1}{2i}\mathrm{Tr}\,(G^+ - G_0^+ - (G^- - G_0^-)) \tag{E.5}$$

und schreiben für $G^{\pm}$ die Bornsche Reihe, so folgt

$$\begin{aligned} G^+ - G_0^+ &= (G_0{}^+ G_0{}^+ V G_0^+ + G_0^+ V G_0^+ V G_0^+ + \cdots) - G_0^+ \\ &= (1 + G_0^+ V + (G_0^+ V)^2 + \cdots)\, G_0^+ V G_0^+ \\ &= (1 - G_0^+ V)^{-1}\, G_0^+ V G_0^+ \end{aligned} \tag{E.6}$$

und ebenso $$G^- - G_0{}^- = (1 - G_0^- V)^{-1}\, G_0^- V G_0^-\,. \tag{E.7}$$

Damit also

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,(G^+ - G_0^+) &= \frac{1}{2i}\mathrm{Tr}\,(Q_+^{-1} G_0^+ V G_0^+ - Q_-^{-1} G_0^- V G_0^-) \\ &= \frac{1}{2i}\mathrm{Tr}\,(Q_+^{-1} Q'_+ - Q_-^{-1} Q'_-)\,, \end{aligned} \tag{E.8}$$

wobei

$$\begin{aligned} Q'_{\pm} &:= \frac{dQ_{\pm}}{dE} = \frac{d}{dE}\left(1 - \frac{V}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon}\right) \\ &= \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon}\, V\, \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} = G_0^{\pm} V G_0^{\pm}\,. \end{aligned} \tag{E.9}$$

Damit wird aus (E.8):

$$\begin{aligned} -\,\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,(G^+ - G_0^+) &= \frac{1}{2i}\mathrm{Tr}\,\{Q_+(Q_-^{-1} Q'_- - Q_+^{-1} Q'_+) Q_+^{-1}\} \\ &= \frac{1}{2i}\mathrm{Tr}\,\{Q_+ Q_-^{-1} Q'_- Q_+^{-1} - Q'_+ Q_+^{-1}\}\,. \end{aligned} \tag{E.10}$$

Andererseits erhält man für die Ableitung von S nach der Energie

$$\frac{dS}{dE} = Q'_- Q_+^{-1} + Q_-(Q_-^{-1})' = Q'_- Q_+^{-1} - Q_-(Q_+^{-1} Q'_+ Q_+^{-1}) \,,$$

also

$$\begin{aligned} S^\dagger \frac{dS}{dE} &= S^{-1} \frac{dS}{dE} \\ &= (Q_- Q_+^{-1})^{-1} \{ Q'_- Q_+^{-1} - Q_-(Q_+^{-1} Q'_+ Q_+^{-1}) \} \\ &= Q_+ Q_-^{-1} Q'_- Q_+^{-1} - Q'_+ Q_+^{-1} \,. \end{aligned} \tag{E.11}$$

Fassen wir nun (E.4), (E.10) und (E.11) zusammen, dann erhalten wir (E.2):

$$\begin{aligned} d(E) &= -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\, \mathrm{Tr}\, (G^+ - G_0^+) = \frac{1}{2\pi i} \mathrm{Tr}\, (S^\dagger \frac{dS}{dE}) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \mathrm{Tr} \frac{d}{dE} \ln S(E) \,. \end{aligned} \tag{E.12}$$

Anhang F

Tabellen

F.1 Tabelle der periodischen Orbits des gebundenen Drei–Scheiben–Billards

In Tabelle F.1 sind alle (symmetriereduzierten) primitiven periodischen Orbits bis zur 10. Ordnung der binären Symbolsequenzen mit ihren Daten aufgeführt. Das Abstand–Radius–Verhältnis ist $d : r = 2$, der Scheibenradius beträgt $r = 3$. Diese Orbits wurden mit Hilfe des in Anhang C.2 beschriebenen mehrdimensionalen Newton–Verfahrens berechnet.

Die erste Spalte enthält die Symbolsequenz, die zweite die Multiplizität des Orbits; die dritte Spalte enthält ein $-$ oder $+$, je nachdem der Orbit eine ungerade oder gerade Anzahl von Reflexionen macht[1]. In der vierten bzw. fünften Spalte stehen die Wirkung bzw. Instabilität. Da der Impulsbetrag konstant und auf 1 normiert ist, ist die Wirkung $S = \int p\,dq$ die Länge der Bahn, die sich dann einfach als Summe der Abstände aller aufeinanderfolgender Reflexionspunkte ergibt. Die Instabilität berechnet man durch Iteration der Stabilitätsmatrix (siehe Anhang C.1) über eine Periode und Bestimmung der Eigenwerte.

[1] Diese Einträge hängen mit der Phasenkorrektur in der Summe über periodische Orbits zusammen. Jede Reflexion trägt einen Phasenfaktor $\exp(-i\pi) = -1$ bei. Ist ν (Maslov–Index) die Zahl der Reflexionen des Orbits an den Scheiben, dann beträgt die Phasenkorrektur $(-1)^\nu$.

Periodische Orbits (gebundenes System, symmetriereduziert)					
Symbolsequenz	*Mult.*	*Maslov*	*Wirkung*	*Instabilität*	*Nr.*
1	2	−	0.8038475513	2.154700538379E+00	2
01	3	+	1.4358820915	4.755358945516E+00	3
011	3	−	2.0871794224	8.416767026944E+00	4
001	2	−	1.8641631603	1.087613167666E+01	5
0001	3	+	2.1428487301	2.654306432835E+01	6
0111	3	+	2.9743211269	2.088628374727E+01	7
0011	2	+	2.3197629452	1.237340109464E+01	8
00011	3	−	2.4575123787	1.639739726844E+01	9
01001	3	−	3.2635564804	4.490717389386E+01	10
01111	3	−	3.7431983948	4.190900797128E+01	11
00111	6	−	3.3063893318	3.859379711490E+01	12
00001	2	−	2.3284502029	7.946534701852E+01	13
01011	2	−	3.5716660023	4.582249697835E+01	14
000001	3	+	2.4575538635	1.366076560421E+03	15
000101	6	+	3.4961278439	7.499430069042E+01	17
000111	3	+	3.5177273750	6.341189799116E+01	18
001011	3	+	3.9098653793	8.963440412947E+01	19
010011	3	+	3.9098653793	8.963440412947E+01	20
001111	2	+	4.0318198204	6.834655204136E+01	21
010111	2	+	4.4219951630	1.020454985621E+02	22
011111	3	+	4.5639753342	9.410093948666E+01	23
0000101	3	−	3.6496615410	1.124692108085E+02	26
0001001	3	−	3.9986505508	2.542073790232E+02	27
0000111	6	−	3.6620359421	9.523118382496E+01	28
0001011	2	−	4.1206808090	1.560017794498E+02	29
0010011	6	−	4.2434616089	1.919729338641E+02	30
0100011	2	−	4.1206808090	1.560017794498E+02	31
0100101	2	−	4.7080039978	2.236937142247E+02	32
0001111	3	−	4.2112894058	9.931062527088E+01	33
0010111	3	−	4.7859783173	1.998315566439E+02	34
0100111	3	−	4.7859783173	1.998315566439E+02	35
0101011	3	−	4.9986629486	2.094955787442E+02	36
0110011	3	−	4.4181356430	1.065444883812E+02	37
0011111	2	−	4.8734064102	1.638798363968E+02	38
0101111	6	−	5.2039179802	2.140714438405E+02	39
0110111	2	−	5.0748820305	1.835172724677E+02	40
0111111	3	−	5.3601350784	1.984502230207E+02	41
00001111	2	+	4.3331298828	1.336531566022E+02	42
00000111	3	+	3.7662110329	1.338290806874E+02	43
00011011	6	+	4.5726881027	1.467641790983E+02	44
00000101	6	+	3.7584552765	1.569646283052E+02	45
00001011	3	+	4.2630147934	2.489185640019E+02	46
01000011	3	+	4.2630147934	2.489185640019E+02	47
00011111	3	+	5.0683059692	2.530768842744E+02	48

Periodische Orbits (gebundenes System, symmetriereduziert)					
Symbolsequenz	*Mult.*	*Maslov*	*Wirkung*	*Instabilität*	*Nr.*
00110111	3	+	5.3651480675	3.102998373622E+02	49
01100111	3	+	5.3651480675	3.102998373622E+02	50
00111111	6	+	5.6600828171	3.340716467466E+02	51
00010111	2	+	5.0079669952	3.367633927339E+02	52
01000111	2	+	5.0079669952	3.367633927339E+02	53
01101111	2	+	5.8347396851	3.566141396132E+02	54
00101011	2	+	5.3171501160	3.694849254170E+02	55
00110101	2	+	5.3171501160	3.694849254170E+02	56
00010011	3	+	4.4489312172	3.732905229940E+02	57
00100011	3	+	4.4489312172	3.732905229940E+02	58
01011011	3	+	5.6654825211	3.975557269782E+02	59
00010101	3	+	4.9514212608	4.054461680524E+02	60
00101111	3	+	5.5561118126	4.153786317735E+02	61
01001111	3	+	5.5561118126	4.153786317735E+02	62
01111111	3	+	6.1675863266	4.325290599162E+02	63
00100111	2	+	5.1835827827	4.595987058044E+02	64
01011111	2	+	6.0178794861	4.684230632477E+02	65
01010111	3	+	5.8553056717	4.802543537777E+02	66
00001001	2	+	4.1740875244	4.812792945533E+02	67
00101101	6	+	5.4288191795	4.880195253186E+02	68
00100101	3	+	5.1319494247	5.097471365637E+02	69
000001111	3	−	4.4211006165	1.705609043706E+02	72
000000111	6	−	3.8447189331	1.789666376005E+02	73
000011011	3	−	4.6789116859	1.900824824549E+02	74
000110011	3	−	4.7811174393	2.047945415262E+02	75
000000101	3	−	3.8395276070	2.081646281607E+02	76
000011111	2	−	5.2012100220	3.588715587835E+02	77
010000011	2	−	4.3650603294	3.733857215121E+02	78
000001011	2	−	4.3650603294	3.733857215121E+02	79
011000111	2	−	5.5484957695	4.682805240133E+02	80
000110111	2	−	5.5484957695	4.682805240133E+02	81
000111111	3	−	5.8479957581	5.000805532945E+02	82
010000111	3	−	5.1563940048	5.132526494020E+02	83
000010111	3	−	5.1563940048	5.132526494020E+02	84
001100111	2	−	5.6442561150	5.159540891560E+02	85
011001111	3	−	6.1041011810	5.644622670627E+02	86
001101111	3	−	6.1041011810	5.644622670627E+02	87
010100011	3	−	5.5149240494	5.783222630295E+02	88
000101011	3	−	5.5149240494	5.783222630295E+02	89
001010011	3	−	5.6136569977	6.148099772069E+02	90
001101011	6	−	5.9300756454	6.443136896732E+02	91
000010101	2	−	5.1132140160	6.626769550670E+02	92
001000011	6	−	4.5867414474	6.838443229938E+02	93
000010011	6	−	4.5867414474	6.838443229938E+02	94

Periodische Orbits (gebundenes System, symmetriereduziert)					
Symbolsequenz	*Mult.*	*Maslov*	*Wirkung*	*Instabilität*	*Nr.*
010001111	2	−	5.7731261253	7.054911000534E+02	95
000101111	2	−	5.7731261253	7.054911000534E+02	96
001111111	2	−	6.4719781876	7.409603872560E+02	97
010011011	2	−	5.9919137955	7.488398025233E+02	98
001011011	2	−	5.9919137955	7.488398025233E+02	99
001110111	3	−	6.2744770050	7.880767157585E+02	100
011011111	6	−	6.6592416763	8.122668797133E+02	101
000001001	3	−	4.2967143059	8.395827724436E+02	102
000100011	2	−	4.6496467590	8.588460770695E+02	103
011101111	2	−	6.7200403214	8.845256062421E+02	104
001000111	3	−	5.4226202965	8.936903160019E+02	105
000100111	3	−	5.4226202965	8.936903160019E+02	106
001001111	2	−	5.9247231483	9.041613265794E+02	107
010011111	3	−	6.3756084442	9.139160081757E+02	108
001011111	3	−	6.3756084442	9.139160081757E+02	109
010100111	6	−	6.2126617432	9.167021986122E+02	110
001010111	6	−	6.2126617432	9.167021986122E+02	111
011010111	3	−	6.5329723358	9.200359671890E+02	112
010110111	3	−	6.5329723358	9.200359671890E+02	113
011111111	3	−	6.9697704315	9.264817413309E+02	114
010001011	3	−	5.6851124763	9.537365868205E+02	115
010101111	3	−	6.6347680092	9.950133567880E+02	116
010111111	2	−	6.8170213699	1.000157838195E+03	117
010010011	3	−	5.7775850296	1.003003802638E+03	118
001001011	3	−	5.7775850296	1.003003802638E+03	119
010101011	2	−	6.4364676476	1.007869346356E+03	120
001000101	2	−	5.3858618736	1.012471536202E+03	121
000100101	2	−	5.3858618736	1.012471536202E+03	122
001010101	3	−	6.1421346664	1.050743618618E+03	123
010010111	2	−	6.2712922096	1.055093938752E+03	124
000010001	3	−	4.4695081711	1.753229668404E+03	125
0000001111	2	+	4.4875469208	2.094504735562E+02	128
0000110011	2	+	4.8790035248	2.598379297135E+02	129
0000000101	6	+	3.9022543430	2.657980934370E+02	130
0000000111	3	+	3.9059078693	2.304175709977E+02	131
0000011011	6	+	4.7562551498	2.355907480329E+02	132
0000011111	3	+	5.2972965240	4.788410673796E+02	133
0000001011	3	+	4.4416103363	5.359525904461E+02	134
0100000011	3	+	4.4416103363	5.359525904461E+02	135
0000110111	3	+	5.6738796234	6.520249289612E+02	136
0110000111	3	+	5.6738796234	6.520249289612E+02	137
0000111111	6	+	5.9759349823	6.905674728501E+02	138
0000010111	2	+	5.2623014450	7.296440687755E+02	139
0100000111	2	+	5.2623014450	7.296440687755E+02	140

Periodische Orbits (gebundenes System, symmetriereduziert)					
Symbolsequenz	*Mult.*	*Maslov*	*Wirkung*	*Instabilität*	*Nr.*
0001100111	3	+	5.8207130432	7.699806997887E+02	141
0011000111	3	+	5.8207130432	7.699806997887E+02	142
0001101111	2	+	6.2747058868	8.095754062581E+02	143
0110001111	2	+	6.2747058868	8.095754062581E+02	144
0000101011	2	+	5.6487193108	8.322609871043E+02	145
0101000011	2	+	5.6487193108	8.322609871043E+02	146
0011001111	6	+	6.3577280045	8.621480355952E+02	147
0011011011	2	+	6.5065517426	9.003497747720E+02	148
0001010011	2	+	5.7991514206	9.260255935054E+02	149
0010100011	2	+	5.7991514206	9.260255935054E+02	150
0001101011	3	+	6.0985403061	9.392381437785E+02	151
0000010101	3	+	5.2280020714	1.005342475220E+03	152
0000101111	3	+	5.9189062119	1.090275924619E+03	153
0100001111	3	+	5.9189062119	1.090275924619E+03	154
0001111111	3	+	6.6631765366	1.126698347556E+03	155
0011001011	3	+	6.2425355911	1.190047889720E+03	156
0011010011	3	+	6.2425355911	1.190047889720E+03	157
0000010011	3	+	4.6851387024	1.227815279225E+03	158
0010000011	3	+	4.6851387024	1.227815279225E+03	159
0001110111	6	+	6.4771013260	1.241858850417E+03	160
0001011011	3	+	6.1940574646	1.248908335678E+03	161
0100011011	3	+	6.1940574646	1.248908335678E+03	162
0011011111	3	+	6.9385213852	1.329696355255E+03	163
0110011111	3	+	6.9385213852	1.329696355255E+03	164
0000001001	2	+	4.3870863914	1.386705524188E+03	165
0001010111	3	+	6.4326601028	1.528373368628E+03	166
0101000111	3	+	6.4326601028	1.528373368628E+03	167
0011101111	3	+	7.0296664238	1.535100706762E+03	168
0111001111	3	+	7.0296664238	1.535100706762E+03	169
0101100111	2	+	6.8233294487	1.545924305497E+03	170
0011010111	2	+	6.8233294487	1.545924305497E+03	171
0001011111	2	+	6.5949926376	1.546536889680E+03	172
0100011111	2	+	6.5949926376	1.546536889680E+03	173
0110110111	3	+	7.1637029648	1.556317591216E+03	174
0000100111	2	+	5.5807638168	1.559102192474E+03	175
0010000111	2	+	5.5807638168	1.559102192474E+03	176
0011111111	2	+	7.2721090317	1.573144045101E+03	177
0010011011	3	+	6.3324346542	1.590510330469E+03	178
0100001011	2	+	5.8535690308	1.656370480325E+03	179
0100110111	6	+	6.8558740616	1.674454192038E+03	180
0110010111	6	+	6.8558740616	1.674454192038E+03	181
0110111111	2	+	7.4535646439	1.699567547142E+03	182
0001001111	3	+	6.1489377022	1.724390609858E+03	183
0010001111	3	+	6.1489377022	1.724390609858E+03	184

Periodische Orbits (gebundenes System, symmetriereduziert)					
Symbolsequenz	*Mult.*	*Maslov*	*Wirkung*	*Instabilität*	*Nr.*
0010100111	3	+	6.5719857216	1.736742185547E+03	185
0101011011	6	+	7.0902309418	1.791928703644E+03	186
0001001011	6	+	5.9910774231	1.797528217891E+03	187
0100100011	6	+	5.9910774231	1.797528217891E+03	188
0010101111	2	+	6.9742927551	1.813397066430E+03	189
0101001111	2	+	6.9742927551	1.813397066430E+03	190
0000100101	3	+	5.5530261993	1.815075980517E+03	191
0010000101	3	+	5.5530261993	1.815075980517E+03	192
0010101011	3	+	6.7592525482	1.827936294552E+03	193
0101010011	3	+	6.7592525482	1.827936294552E+03	194
0001010101	6	+	6.3833470345	1.864878247294E+03	195
0101101111	3	+	7.3073167801	1.890888176015E+03	196
0110101111	3	+	7.3073167801	1.890888176015E+03	197
0010110111	2	+	6.9094352722	1.911203703358E+03	198
0110100111	2	+	6.9094352722	1.911203703358E+03	199
0010010011	2	+	6.1029839516	1.941338324293E+03	200
0010111111	3	+	7.1721982956	1.944145353099E+03	201
0100111111	3	+	7.1721982956	1.944145353099E+03	202
0111011111	2	+	7.5389814377	1.970185827138E+03	203
0100010111	3	+	6.5215797424	1.984234391614E+03	204
0111111111	3	+	7.7743921280	2.002371474766E+03	205
0001000111	2	+	5.6694779396	2.009972916171E+03	206
0010011111	6	+	6.7579250336	2.046681281655E+03	207
0000100011	3	+	4.7837533951	2.108291088752E+03	208
0001000011	3	+	4.7837533951	2.108291088752E+03	209
0101110111	3	+	7.3956365585	2.124512511274E+03	210
0101111111	6	+	7.6230511665	2.165850185777E+03	211
0100101011	3	+	6.8475418091	2.172412120993E+03	212
0101001011	3	+	6.8475418091	2.172412120993E+03	213
0101011111	3	+	7.4499764442	2.192020769013E+03	214
0001000101	3	+	5.6436061859	2.244361104504E+03	215
0100101111	2	+	7.0572438240	2.251366572422E+03	216
0010001011	2	+	6.0478315353	2.260699337214E+03	217
0100010011	2	+	6.0478315353	2.260699337214E+03	218
0010010111	3	+	6.6554250717	2.277096131737E+03	219
0100100111	3	+	6.6554250717	2.277096131737E+03	220
1010101011	2	+	7.2917246819	2.290650252324E+03	221
0010010101	2	+	6.5746808052	2.492329156688E+03	222
0001001001	3	+	5.8636341095	2.812283401252E+03	223
0000010001	6	+	4.5967173576	4.193487407663E+03	224
0	3	−	exist. nicht		1
000011	2	+	exist. nicht		16
0000001	2	−	exist. nicht		24
0000011	3	−	exist. nicht		25

Periodische Orbits (gebundenes System, symmetriereduziert)					
Symbolsequenz	*Mult.*	*Maslov*	*Wirkung*	*Instabilität*	*Nr.*
00000001	3	+	exist. nicht		70
00000011	2	+	exist. nicht		71
000000001	2	−	exist. nicht		126
000000011	3	−	exist. nicht		127
0000000001	3	+	exist. nicht		225
0000000011	2	+	exist. nicht		226

F.2 Tabelle der periodischen Orbits des offenen Drei–Scheiben–Billards

In Tabelle F.2 sind alle (symmetriereduzierten) primitiven periodischen Orbits des Streusystems bis zur 5. Ordnung der binären Symbolsequenzen mit ihren Daten aufgeführt. Das Abstand–Radius–Verhältnis ist $d : r = 6$, der Scheibenradius beträgt $r = 1$.

Diese Orbits wurden mit Hilfe des in Anhang C.2 beschriebenen mehrdimensionalen Newton–Verfahrens berechnet. Die Spalteneinträge sind wie in Tabelle F.1.

Periodische Orbits (Streusystem, symmetriereduziert)					
Symbolsequenz	*Mult.*	*Maslov*	*Wirkung*	*Instabilität*	*Nr.*
0	3	−	4.00000000	9.8989795E+00	1
1	2	−	4.26794919	3.7320508E+00	2
01	3	+	8.31652949	1.2409480E+02	3
011	3	−	12.58080774	1.4495451E+03	4
001	2	−	12.32174601	1.2405426E+03	5
0001	3	+	16.32227648	1.2289260E+04	6
0111	3	+	16.84907186	1.7079019E+04	7
0011	2	+	16.58524291	1.4459976E+04	8
00011	3	−	20.58568967	1.4328210E+05	9
01001	3	−	20.63823838	1.5392579E+05	10
01111	3	−	21.11699432	2.0102473E+05	11
00111	6	−	20.85357151	1.7041072E+05	12
00001	2	−	20.32233003	1.2173384E+05	13
01011	2	−	20.89736939	1.7990195E+05	14

F.3 Tabelle einiger semiklassischer und Quantenresonanzen des offenen Drei–Scheiben–Billards

In Tabelle F.3 sind einige semiklassisch berechnete und die entsprechenden exakten quantenmechanischen Resonanzen der S–Matrix des offenen Drei–Scheiben–Billards gegenübergestellt. Außerdem ist der euklidische Abstand der semiklassischen und Quantenresonanzen in der k–Ebene aufgeführt. Alle diese Resonanzen gehören zur A_1–Symmetrieklasse. Die Parameter des Billards sind $d : r = 6$ und Scheibenradius $r = 1$.

Die semiklassischen Resonanzen wurden mittels der cycle expansion bis zur 5. Ordnung in den periodischen Orbits berechnet. Die quantenmechanischen Werte wurden durch Anwendung der KKR–Methode [11] bestimmt.

Resonanzen der S–Matrix				
semiklassisch		quantenmech.		
$\mathrm{Re}\,k$	$\mathrm{Im}\,k$	$\mathrm{Re}\,k$	$\mathrm{Im}\,k$	Abstand
0.758313	−0.122822	0.69800	−0.07497	0.07699
2.274277	−0.133058	2.23960	−0.11880	0.03749
3.787876	−0.154127	3.76270	−0.14756	0.02602
4.151799	−0.665910	4.13165	−0.61702	0.05288
5.296068	−0.186786	5.27569	−0.18325	0.02068
6.793643	−0.229923	6.77669	−0.22750	0.01713
7.225958	−0.497175	7.21528	−0.48562	0.01573
8.276403	−0.277118	8.26114	−0.27492	0.01542
8.780333	−0.430674	8.77248	−0.42410	0.01024
9.747518	−0.320909	9.73452	−0.31880	0.01317
10.344759	−0.377955	10.33819	−0.37371	0.00782
11.213127	−0.359767	11.20210	−0.35823	0.01113
11.913497	−0.335451	11.90760	−0.33223	0.00672
12.677569	−0.395222	12.66760	−0.39467	0.00998
13.482545	−0.296872	13.47692	−0.29412	0.00626
14.143833	−0.429150	14.13370	−0.42883	0.01014
15.047264	−0.257857	15.04170	−0.25552	0.00603
15.613867	−0.460963	15.60372	−0.45928	0.01029
16.602554	−0.218886	16.59706	−0.21700	0.00581
16.630416	−0.730159	16.65768	−0.96417	0.23559
17.089706	−0.484691	17.08077	−0.48157	0.00947

Resonanzen der S–Matrix				
semiklassisch		quantenmech.		
Re k	Im k	Re k	Im k	Abstand
18.146499	−0.184233	18.14113	−0.18281	0.00555
19.680831	−0.157592	19.67565	−0.15653	0.00529
20.068985	−0.484990	20.06349	−0.48257	0.00600
21.208053	−0.140308	21.20307	−0.13958	0.00504
21.573730	−0.464397	21.56904	−0.46246	0.00507
22.729644	−0.132343	22.72484	−0.13187	0.00483
23.087265	−0.436152	23.08278	−0.43453	0.00477
24.245864	−0.133113	24.24120	−0.13284	0.00467
24.608078	−0.403717	24.60406	−0.40205	0.00435
25.756042	−0.141525	25.75156	−0.14130	0.00449
26.135482	−0.369352	26.13183	−0.36786	0.00395
27.259231	−0.155624	27.25478	−0.15554	0.00445
27.669540	−0.335313	27.66613	−0.33398	0.00366
28.755355	−0.172748	28.75097	−0.17266	0.00439
29.209915	−0.304146	29.20670	−0.30301	0.00341
30.245544	−0.190635	30.24131	−0.19051	0.00424
30.755249	−0.277728	30.75226	−0.27683	0.00312
31.731475	−0.208177	31.72740	−0.20802	0.00408
30.245544	−0.190635	30.24131	−0.19051	0.00424
30.755249	−0.277728	30.75226	−0.27683	0.00312
30.245544	−0.190635	30.24131	−0.19051	0.00424
30.755249	−0.277728	30.75226	−0.27683	0.00312
31.731475	−0.208177	31.72740	−0.20802	0.00408
32.303970	−0.256557	32.30112	−0.25587	0.00293
33.214416	−0.225087	33.21053	−0.22492	0.00389
33.854965	−0.240082	33.85224	−0.23957	0.00277
36.174697	−0.256900	36.17111	−0.25678	0.00359
36.961517	−0.216689	36.95905	−0.21637	0.00249
37.653213	−0.271504	37.64973	−0.27138	0.00349
38.515731	−0.206927	38.51334	−0.20665	0.00241
39.131485	−0.284487	39.12811	−0.28433	0.00338
40.068527	−0.196752	40.06616	−0.19651	0.00238
40.610656	−0.294560	40.60739	−0.29432	0.00327
41.617309	−0.185980	41.61496	−0.18579	0.00236
42.092758	−0.299834	42.08967	−0.29950	0.00311
43.159484	−0.175786	43.15714	−0.17564	0.00235
43.580825	−0.298469	43.57795	−0.29804	0.00291
44.693267	−0.168069	44.69090	−0.16798	0.00237
45.078125	−0.290009	45.07550	−0.28954	0.00267
46.217819	−0.164287	46.21542	−0.16424	0.00240
46.586441	−0.275935	46.58404	−0.27548	0.00244
47.733139	−0.164608	47.73071	−0.16459	0.00243
48.105590	−0.258819	48.10338	−0.25838	0.00226

Resonanzen der S–Matrix				
semiklassisch		quantenmech.		
$\mathrm{Re}\,k$	$\mathrm{Im}\,k$	$\mathrm{Re}\,k$	$\mathrm{Im}\,k$	Abstand
49.240036	−0.167995	49.23759	−0.16799	0.00245
49.634033	−0.241422	49.63198	−0.24102	0.00209
50.740036	−0.173102	50.73759	−0.17309	0.00245
51.169509	−0.225962	51.16757	−0.22563	0.00197
52.234863	−0.179040	52.23245	−0.17901	0.00241
52.709777	−0.213700	52.70792	−0.21343	0.00188
53.725936	−0.185431	53.72356	−0.18538	0.00238
54.253128	−0.205111	54.25133	−0.20491	0.00181
55.214218	−0.192147	55.21190	−0.19209	0.00232
55.798568	−0.200263	55.79681	−0.20013	0.00176
56.700332	−0.199114	56.69807	−0.19906	0.00226
57.345565	−0.199058	57.34387	−0.19899	0.00170
60.444061	−0.206486	60.44247	−0.20654	0.00159
61.148971	−0.219945	61.14682	−0.21989	0.00215
61.995727	−0.213762	61.99418	−0.21385	0.00155
62.629318	−0.225425	62.62721	−0.22534	0.00211
63.548431	−0.221380	63.54692	−0.22147	0.00151
64.109100	−0.228434	64.10704	−0.22833	0.00206
65.099838	−0.227080	65.09832	−0.22718	0.00152
65.590011	−0.227051	65.58801	−0.22689	0.00201
66.645523	−0.229657	66.64400	−0.22977	0.00153
67.075759	−0.219745	67.07386	−0.21953	0.00191
68.181518	−0.229615	68.17998	−0.22972	0.00154
68.571228	−0.207612	68.56947	−0.20738	0.00177
69.706390	−0.227680	69.70483	−0.22775	0.00157
70.079071	−0.194410	70.07745	−0.19420	0.00163
71.221054	−0.224300	71.21946	−0.22434	0.00160
71.598373	−0.183562	71.59686	−0.18340	0.00152
72.727523	−0.220135	72.72590	−0.22016	0.00163
73.126449	−0.176558	73.12503	−0.17644	0.00142
74.227844	−0.215984	74.22620	−0.21600	0.00165
74.660614	−0.173572	74.65924	−0.17350	0.00138
75.723617	−0.212461	75.72196	−0.21244	0.00166
76.198715	−0.174424	76.19739	−0.17438	0.00133
77.215942	−0.209880	77.21432	−0.20985	0.00163
77.739303	−0.179050	77.73800	−0.17904	0.00130
78.705642	−0.208329	78.70403	−0.20830	0.00161

F.4 Tabelle zur Fouriertransformation der Energiedichte

In der Tabelle F.4 wird die Lage einiger Peaks der Fouriertransformierten der quantenmechanischen Energiedichte des Systems mit voller Symmetrie mit den Längen der entsprechenden periodischen Orbits verglichen (siehe auch Abbildung 4.3). Die Symbolsequenzen beziehen sich auf den zugehörigen symmetriereduzierten Orbit. Das Vorzeichen in der letzten Spalte ist + bzw. −, je nachdem der Orbit des vollen Systems eine gerade oder ungerade Anzahl von Kollisionen mit den Scheiben macht.

Fouriertransformation der Energiedichte						
Peak	*Amplit.*	*Länge p.o.*	*Instab.*	*Symbolseq.*	*Multipl.*	*Maslov*
2.43	−7.94	2.41154	1.00037E+01	1	2	−
2.87	11.70	2.87176	2.26134E+01	01	3	+
3.32	−18.39	3.30638	2.92257E+01	00111	6	−
3.50	16.58	3.49612	5.27779E+00	000101	6	+
3.66	−14.04	3.66203	4.85220E+01	0000111	6	−
3.77	12.26	3.75845	2.08932E+02	00000101	6	+
3.84	−8.78	3.84471	1.78966E+02	000000111	6	−
4.16	8.81	4.17435	7.59131E+01	011	3	+
4.25	−11.25	4.24346	5.98136E+01	0010011	6	−
4.31	3.07	4.28569	2.67106E+02	0001	3	+
4.55	2.61	4.57268	1.46764E+02	00011011	6	+
4.84	2.64	4.82308	1.00074E+02	2*1	6	+
5.21	−13.57	5.20391	1.92752E+02	0101111	6	−
5.44	9.86	5.42881	4.88019E+02	00101101	6	+
5.55	−0.51	5.59248	1.48269E+02	001	2	−
5.67	11.62	5.66008	3.34071E+02	00111111	6	+
5.91	−2.21	5.93007	6.44313E+02	001101011	6	−
5.98	16.78	5.97593	6.90567E+02	0000111111	6	+
6.21	−16.84	6.21266	9.16702E+02	010100111	6	−
...	...	6.21266	9.16702E+02	001010111	6	−
6.36	4.49	6.35772	8.62148E+02	0011001111	6	+
6.49	14.20	6.47710	1.24185E+03	0001110111	6	+
6.66	−5.55	6.65924	8.12266E+02	011011111	6	−
6.73	4.88	6.75792	2.04668E+03	0010011111	6	+
6.86	11.46	6.85587	1.67445E+03	0100110111	6	+
...	...	6.85587	1.67445E+03	0110010111	6	+
6.98	5.19	6.99225	2.78551E+01	2*000101	6	+
7.51	19.58	7.51691	4.36527E+04	2*00000101	6	+

Literaturverzeichnis

[1] M. Abramowitz und I. A. Stegun, Washington: U. S. National Bureau of Standards, 1964.

[2] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin, 1978.

[3] R. Artuso, E. Aurell, und P. Cvitanović, *Recycling of strange sets: I. Cycle expansions*, Nonlinearity, 3 (1990), S. 325–359.

[4] ——, *Recycling of strange sets: II. Applications*, Nonlinearity, 3 (1990), S. 361–386.

[5] N. L. Balasz und A. Voros, *Chaos on the pseudosphere*, Phys. Rep., 143 (1986), S. 109.

[6] R. Balian und C. Bloch, *Asymptotic evaluation of the Green's function for large quantum numbers*, Ann. Phys. (USA), 63 (1971), S. 592–606.

[7] ——, *Distribution of eigenfrequencies for the wave equation in a finite domain: II. Electromagnetic field. Riemannian spaces*, Ann. Phys. (USA), 64 (1971), S. 271–307.

[8] ——, *Distribution of eigenfrequencies for the wave equation in a finite domain: III. Eigenfrequency density oscillations*, Ann. Phys. (USA), 69 (1972), S. 76–160.

[9] ——, *Solution of the Schrödinger equation in terms of classical paths*, Ann. Phys. (USA), 85 (1974), S. 514–545.

[10] H. P. Baltes und E. R. Hilf, *Spectra of Finite Systems*, BI Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1976.

[11] M. V. BERRY, *Quantizing a classically ergodic system : Sinai's billiard and the KKR method*, Ann. Phys., 131 (1981), S. 163–216.

[12] ——, *Some quantum-to-classical asymptotics,* in: *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches Lecture Notes, North-Holland, 1990.

[13] M. V. BERRY UND J. P. KEATING, *A rule for quantizing chaos*, J. Phys. A, 23 (1990), S. 4839.

[14] M. V. BERRY UND K. E. MOUNT, *Semiclassical approximations in wave mechanics*, Rep. Prog. Phys., 35 (1972), S. 315–397.

[15] M. V. BERRY, F. R. S., UND M. WILKINSON, *Diabolical points in the spectra of triangles*, Proc. R. Soc. Lond. A, 392 (1984), S. 15–43.

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

[17] ——, *A simple model for chaotic scattering: II. Quantum mechanical theory*, Physica, D36 (1989), S. 111.

[18] E. B. BOGOMOLNY, *Semiclassical quantization of multidimensional systems*, Comm. At. Mol. Phys., 25 (1990), S. 67.

[19] F. BRAUER UND J. A. NOHEL, *The qualitative theory of ordinary differential equations*, W. A. Benjamin, inc., Menlo Park, California, 1969.

[20] L. A. BUNIMOVICH, *Dynamical Systems of Hyperbolic Type with Singularities,* in: *Dynamical Systems*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1985.

[21] F. CHRISTIANSEN, G. PALADIN, UND H. H. RUGH, *Determination of correlation spectra in chaotic systems*, Phys. Rev. Lett., 65 (1990), S. 2087–2090.

[22] S. C. CREAGH, J. M. ROBBINS, UND R. G. LITTLEJOHN, *Geometrical properties of Maslov indices in the semiclassical trace formula for the density of states*, Phys. Rev. A, 42 (1990), S. 1907–1912.

[23] P. CVITANOVIĆ, *Invariant measurement of strange sets in terms of cycles*, Phys. Rev. Lett., 61 (1988), S. 2729–2732.

[24] ——, *Periodic orbits as the skeleton of the classical and quantum chaos*, Preprint, 1990.

[25] ——, *Recycling Chaos*, (Preprint), 1990.

[26] P. CVITANOVIĆ UND B. ECKHARDT, *Periodic–orbit quantization of chaotic systems*, Phys. Rev. Lett., 63 (1989), S. 823–826.

[27] ——, *Periodic orbit expansions for classical smooth flows*, J. Phys. A: Math. Gen., 24 (1991), S. L237–L241.

[28] ——, *Symmetry decomposition of chaotic dynamics*, Preprint, 1991.

[29] P. A. M. DIRAC, *The Principles of Quantum Mechanics*, Clarendon Press, Oxford, 1962. 4th Ed.

[30] B. ECKHARDT, *Fractal properties of scattering singularities*, J. Phys. A: Math. Gen., 20 (1987), S. 5971–5979.

[31] ——, *Irregular scattering of vortex pairs*, Europhys. Lett., 5 (2) (1988), S. 107–111.

[32] B. ECKHARDT UND E. AURELL, *Convergence of the semi-classical periodic orbit expansion*, Europhys. Lett., 9 (1989), S. 509–512.

[33] B. ECKHARDT UND C. JUNG, *Regular and irregular potential scattering*, J. Phys. A, 19 (1986), S. L829.

[34] J. P. ECKMANN UND D. RUELLE, *Ergodic theory of chaos and strange attractors*, Rev. Mod. Phys., 57 (1985), S. 617.

[35] R. P. FEYNMAN, *Space–time approach to non–relativistic quantum mechanics*, Rev. Mod. Phys, 20 (1948), S. 367–387.

[36] K. W. FORD UND J. A. WHEELER, *Semiclassical description of scattering*, Ann. Phys. N. Y., 7 (1959), S. 259–287.

[37] P. GASPARD UND S. A. RICE, *Exact quantization of the scattering from a classically chaotic repellor*, J. Chem. Phys., 90 (1989), S. 2255–2262.

[38] ——, *Scattering from a classically chaotic repellor*, J. Chem. Phys., 90 (1989), S. 2225–2241.

[39] ——, *Semiclassical quantization of the scattering from a classically chaotic repellor*, J. Chem. Phys., 90 (1989), S. 2242–2254.

[40] H. GOLDSTEIN, *Klassische Mechanik*, Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden, 1976.

[41] I. GRADSTEIN UND I. RYZHIK, *Summen–, Produkt– und Integraltafeln*, Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt/M, 1981.

[42] M. C. GUTZWILLER, *Phase-integral approximation in the momentum space and the bound states of an atom*, J. Math. Phys., 8 (1967), S. 1979–2000.

[43] ——, *Phase-integral approximation in the momentum space and the bound states of an atom II*, J. Math. Phys., 10 (1969), S. 1004–1020.

[44] ——, *Energy spectrum according to classical mechanics*, J. Math. Phys., 11 (1970), S. 1791–1806.

[45] ——, *Periodic orbits and classical quantization condition*, J. Math. Phys., 12 (1971), S. 343–358.

[46] ——, *The quantization of a classically ergodic system*, Physica, 5D (1982), S. 183–207.

[47] ——, *Stochastic behavior in quantum scattering*, Physica D, 36 (1983), S. 341–355.

[48] ——, *The Semi-Classical Quantization of Chaotic Hamiltonian Systems*, in: *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches Lecture Notes, North-Holland, 1990.

[49] E. J. HELLER, *Wavepacket Dynamics and Quantum Chaology*, in: *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches Lecture Notes, North-Holland, 1990.

[50] C. JUNG, *An exactly soluble three-body problem in one dimension*, Can. J. Phys., 58 (1980), S. 719–728.

[51] C. JUNG UND P. H. RICHTER, *Classical chaotic scattering - periodic orbits, symmetries, multifractal invariant sets*, J. Phys. A: Math. Gen., 23 (1990), S. 2847–2866.

[52] C. JUNG UND H. J. SCHOLZ, *Cantor set structures in the singularities of classical potential scattering*, J. Phys. A, 20 (1987), S. 3607.

[53] J. R. KUTTLER UND V. G. SIGILLITO, *Eigenvalues of the Laplacian in two dimensions*, SIAM Review, 26 (1984), S. 163–193.

[54] B. LAURITZEN, *Discrete symmetries and the periodic-orbit expansions*, Phys. Rev. A, 43 (1991), S. 603–606.

[55] K. MATHIAK UND P. STINGL, *Gruppentheorie*, Vieweg, Braunschweig, 1968.

[56] W. H. MILLER, *Classical-limit Green's funktion (fixed-energy propagator) and classical quantization of nonseperable systems*, J. Chem. Phys., 56 (1972), S. 38–45.

[57] ——, *Classical limit quantum mechanics and the theory of molecular collisions*, Adv. Chem. Phys., 25 (1974), S. 69–177.

[58] M. MORSE, *The calculus of variations in the large*, Am. Math. Soc. Colloquium, Publ. 18 (1934).

[59] J. PETIT UND M. HÉNON, *Satellite encounters*, Ikarus, 66 (1986), S. 536–555.

[60] W. H. PRESS, B. P. FLANNERY, S. A. TEUKOLSKY, UND W. T. VETTERLING, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1986.

[61] J. H. VAN VLECK, *The corresponding principle in the statistical interpretation of quantum mechanics*, Proc. Nat. Ac. Sc. USA, 14 (1928), S. 178–188.

[62] C. C. RANKIN UND W. H. MILLER, *Classical S-matrix for linear reactive collisions of* $H + Cl_2$, Chem. Phys., 55 (1971), S. 3150–3156.

[63] J. M. ROBBINS, *Discrete symmetries in periodic-orbit theory*, Phys. Rev. A, 40 (1989), S. 2128–2136.

[64] ——, *Ph. D. thesis*, University of California, Berkeley, 1989.

[65] D. RUELLE, *Statistical Mechanics, Thermodynamic Formalism*, Addison-Wesley, 1978.

[66] M. R. SCHROEDER, *Number Theory in Science and Communication*, Springer–Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1986.

[67] L. S. SCHULMAN, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley, New York, 1981.

[68] M. SIEBER UND F. STEINER, *Quantum chaos in the hyperbola billiard*, Phys. Lett. A, 148 (1990), S. 415–420.

[69] U. SMILANSKY, *The Classical and Quantum Theory of Chaotic Scattering,* in: *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches Lecture Notes, North-Holland, 1990.

[70] G. TANNER, P. SCHERER, E. B. BOGOMOLNY, B. ECKHARDT, UND D. WINTGEN, *Quantum eigenvalues from classical periodic orbits*, preprint, 1991.

[71] W. THIRRING, *Lehrbuch der Mathematischen Physik, Band 3*, Springer-Verlag, Wien, New York, 1979.

[72] G. TROLL UND U. SMILANSKY, *A simple model for chaotic scattering: I. Classical theory*, Physica, D35 (1989), S. 34.

[73] A. VOROS, *Unstable periodic orbits and semi-classical quantisation*, J. Phys. A: Math. Gen, 21 (1988), S. 685-692.

Herrn **Prof. Dr. Gert Eilenberger** danke ich für die Ermöglichung dieser Arbeit und für die andauernde Unterstützung während ihrer Anfertigung. Er war stets ein motivierender und hilfreicher Ansprechpartner.

Mein besonderer Dank gilt auch Herrn **Dr. Bruno Eckhardt** dafür, daß er mich in das Themengebiet eingeführt hat, sowie für seine geduldige und konsequente Betreuung der Arbeit.

Meinem Freund **Dr. Gerolf Ott** sei herzlich gedankt für viele fruchtbare Diskussionen zu wesentlichen Fragestellungen der Arbeit und für seine stete und freundliche Hilfsbereitschaft bei allen auftretenden Problemen.

Nicht zuletzt danke ich meinen Zimmerkollegen **Dr. Werner Pook, Dr. Martin Janßen, Sebastian Kremer, Ulrich Fastenrath** und **Roland Loosen** für die gute Arbeitsatmosphäre und allen Kollegen des Instituts für die zahlreichen Hilfen, die ich erhalten habe.

FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH

KFA

Jül-2554
November 1991
ISSN 0366-0885