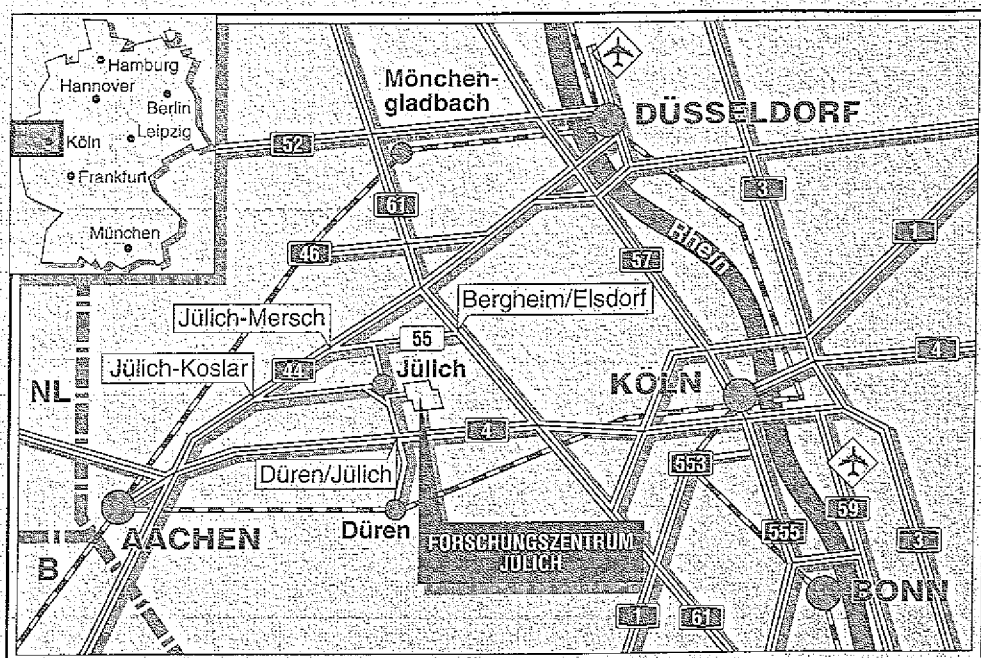


Institut für Festkörperforschung

**Holonomieeffekte in klassischen
Hamiltonschen Systemen,
insbesondere mit ergodischer
schneller Dynamik**

Christian Schroer



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3020

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Jüli-3020

D38 (Diss. Universität Köln)

Zu beziehen durch : Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

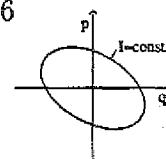
Telefon : 02461/61-6102 · Telefax : 02461/61-6103 · Telex : 833556-70 kfa d

**Holonomieeffekte in klassischen
Hamiltonschen Systemen,
insbesondere mit ergodischer
schneller Dynamik**

Christian Schroer

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Übersicht	5
1.1	Einleitung	5
1.2	Übersicht	11
2	Faserbündel, Zusammenhänge und Holonomie	13
2.1	Bündel, Faserbündel und Prinzipalbündel	13
2.2	Zusammenhänge	18
2.3	Holonomie	24
3	Die Berryphase	27
3.1	Das quantenmechanische Adiabatenprinzip	27
3.2	Herleitung der Berryphase und Interpretation	30
3.3	Das Auftreten der Berryphase	34
3.3.1	Notwendige Bedingungen	34
3.3.2	Die Rolle degenerierter Energieeigenwerte	35
4	Klassische Hamiltonsche Systeme	39
4.1	Allgemeine Eigenschaften Hamiltonscher Flüsse	39
4.1.1	Koordinatenfreie Darstellung Hamiltonscher Flüsse	40
4.1.2	Darstellung in nichtkanonischen Koordinaten	42
4.2	Klassische Slow-Fast-Systeme	43
4.2.1	Definition	44
4.2.2	Das Slow-Fast-System als Verallgemeinerung nichtautonomer Systeme	45
4.3	Integrable Hamiltonsche Systeme	46



4.3.1	Winkel-Wirkungs-Variable	47
4.3.2	Adiabatentheorie integrierbarer Systeme	50
4.4	Ergodische Systeme	54
4.4.1	Charakterisierung ergodischer Dynamik	56
4.4.2	Adiabatentheorie ergodischer Systeme	58
5	Integrable Slow-Fast-Systeme und Hannaywinkel	63
5.1	Winkel-Wirkungs-Variablen und adiabatische Näherung	64
5.2	Dynamik adiabatischer Slow-Fast-Systeme	67
5.2.1	Dynamik der langsamen Freiheitsgrade	67
5.2.2	Dynamik der schnellen Freiheitsgrade: Der Hannaywinkel	69
6	Semiklassik	75
6.1	Klassische Korrespondenz: Berryphase $\Leftrightarrow$ Hannaywinkel	76
6.2	Semiklassik ergodischer Systeme	80
7	Ergodische Slow-Fast-Systeme	85
7.1	Nichtkanonische Variablen und adiabatische Näherung	86
7.2	Dynamik der langsamen Freiheitsgrade	89
7.3	Chaotische Dynamik und adiabatischer Tempus	89
8	Zusammenfassung	95
A	Integrable Systeme	101
A.1	Eine Identität	101
A.2	Mittelung von $C_{i\alpha}$	102
A.3	Slow-Fast-Systeme und Hamiltonsches Variationsprinzip	102
A.4	Transformationseigenschaften unter Umeichung	104
B	Ergodische Slow-Fast-Systeme	107
B.1	Eine Identität	107
B.2	Kanonischer Isomorphismus des schnellen Teilsystems für $Q = \text{const.}$	108
B.3	Zeitabhängigkeit von θ	108
B.4	Koordinatenunabhängigkeit des geometrischen Tempus	109

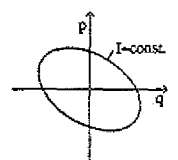
INHALTSVERZEICHNIS

3

C Adiabaten­theorie ergodischer Systeme 111

C.1 Beweis des Adiabaten­theorems 111

C.2 Mittelungssatz für Observable 127



Kapitel 1

Einleitung und Übersicht

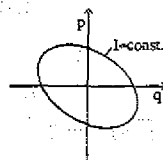
1.1 Einleitung

Die Entdeckung der adiabatischen Phase und deren erste systematische Behandlung durch M. BERRY im Jahre 1983 führte zu einer stürmischen Entwicklung in vielen Bereichen der theoretischen Physik. Dieser Effekt, der seit der Entwicklung der quantenmechanischen Adiabatentheorie Ende der zwanziger Jahre übersehen worden war, erwies sich als fundamental und konnte in fast allen Theorien — von der klassischen Mechanik bis zu den modernen Feldtheorien — nachgewiesen werden.

M. BERRY untersuchte nichtentartete Eigenzustände von Quantensystemen, die von mehreren äußeren, langsam veränderlichen Parametern abhängen. Die *adiabatisch* langsame Veränderung der Parameter hat zur Folge, daß das System, ist es einmal in einem solchen Eigenzustand des Hamiltonoperators präpariert, der Veränderung dieses Zustands folgt, ohne Übergänge in andere Quantenzustände zu erleiden. Dieses Ergebnis, das *Adiabatentheorem der Quantenmechanik*, wurde bereits im Jahre 1928 von M. BORN und V. FOCK aufgestellt. Jedoch machten die Autoren keine Aussagen über die *Phase* des Quantenzustands. M. BERRY betrachtete die zeitliche Entwicklung der Phase eines solchen Systems, wenn äußere Parameter eine geschlossene Bahn im Parameterraum durchlaufen.¹ Dabei entdeckte er, daß sich die Phase des Endzustandes aus zwei Teilen zusammensetzt: Der bekannten *dynamischen* Phase $-\frac{1}{\hbar} \int dt E_n(t)$ und einer *geometrischen* Phase γ_n , die auch *Berryphase* genannt wird. Letztere hängt *nicht* von der Geschwindigkeit der Parameterveränderung ab, sondern nur von der Schleife, die von den Parametern durchlaufen wird.

Noch vor der Veröffentlichung dieser Ergebnisse in [B84] beschäftigte sich B. SIMON mit der Berryschen Phase und erkannte das generelle mathematische Konzept, das diesem von BERRY selbst als „remarkable and rather mysterious“ [B84] bezeichneten Effekt zugrunde liegt. Die adiabatische Entwicklung induziert auf dem Faserbündel, das durch

¹Der Grund hierfür ist der folgende: Der Vergleich der Phasen von Zuständen, die zu unterschiedlichen Parametersätzen gehören, bedarf einer zusätzlichen Konstruktion [SB88], da zu unterschiedlichen Parametersätzen die Phasen der Basiszustände weitgehend frei gewählt werden dürfen. Vergleicht man jedoch die Phasen bei *gleichen* Parametern vor und nach Durchlaufen einer *Schleife* im Parameterraum, so ist die Phase eindeutig festgelegt, da jedesmal dasselbe Basissystem benutzt wird.



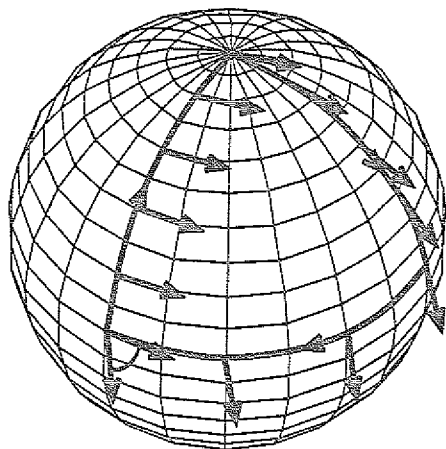


Abbildung 1.1: Ein auf der Kugel parallelverschobener Tangentialvektor wird beim Durchlaufen einer geschlossenen Kurve i. a. *nicht* auf sich selbst abgebildet, im Gegensatz zur Parallelverschiebung in einem euklidischen Raum. Vielmehr wird er um das Integral der Krümmung der von der Kurve eingeschlossenen Fläche gedreht. Im Fall der Kugel ist der Drehwinkel gerade gleich dem von der Kurve eingeschlossenen Raumwinkel Ω .

den Unterraum des Quantenzustands über dem Parameterraum aufgespannt wird, einen Zusammenhang, dessen Holonomie sich durch die Berryphase ausdrückt. Dieses sehr abstrakte Konzept wird im folgenden ausführlich erklärt. Ein sehr anschauliches Analogon der Berryphase ist die effektive Drehung eines Tangentenvektors, der auf einer gekrümmten Mannigfaltigkeit entlang einer geschlossenen Schleife parallelverschoben wird (siehe Abb. 1.1).

Obwohl die Adiabathentheorie der Quantenmechanik bereits im Jahre 1928 detailliert untersucht worden war, blieb die Berryphase über 50 Jahre unentdeckt. In [BF28] und [F28] hatten M. BORN und V. FOCK bereits alle Formeln angegeben, die für die Berryphase relevant sind. Die Phase war bei ihren Betrachtungen jedoch nicht von Bedeutung gewesen, da sie die Möglichkeit des Zurückkehrens zu den Ausgangsparametern nicht diskutierten.

Dennoch sind bereits einige Beispiele und verwandte Phänomene seit längerem bekannt. In der Optik wurden 1956 von S. PANCHARATNAM Interferenzphänomene beschrieben [P75], die sich in analoger Weise als Holonomie der Phase kohärenten Lichtes über der Poincarésphäre interpretieren lassen. 1959 entdeckten Y. AHARONOV und D. BOHM die erste quantenmechanische geometrische Phase, die Aharonov-Bohm-Phase, die ein geladenes Quantenteilchen beim „Umfliegen“ eines magnetischen Flusses erhält [AB59].

Bei der Beschreibung molekularer Quantensysteme entdeckten G. HERZBERG und H. LONGUET-HIGGINS, daß die elektronische Born-Oppenheimer-Wellenfunktion, wenn die Konfiguration der Atomrümpfe einen Punkt degenerierter elektronischer Zustände umläuft, einem Vorzeichenwechsel unterliegt, wenn sie sich zu allen Zeiten glatt und reell entwickeln soll [HL63]. C. A. MEAD und D. G. TRUHLAR betrachteten die Ergebnisse von HERZBERG und LONGUET-HIGGINS in allgemeinerem Zusammenhang und zeigten, daß der Vorzeichenwechsel der elektronischen Wellenfunktion durch einen solchen der Atomrumpfwellenfunktionen kompensiert werden kann, wenn man einen zusätzlichen Vektorpotentialterm in den Hamiltonoperator der langsamen Freiheitsgrade aufnimmt [MT79]. Da die Gesamtwellenfunktion eine eindeutige Funktion der Gesamtkonfigurationsraumkoordinaten sein muß, ist dieser Vektorpotentialterm im langsamen Hamiltonian zwingend und fehlte in der Theorie von BORN und OPPENHEIMER. Wegen einer Analogie zum Aharonov-Bohm-Effekt, nannte MEAD dieses Phänomen in späteren Arbeiten *molekularer Aharonov-Bohm-Effekt* [M80a, M80b]. Da beim molekularen Aharonov-Bohm-

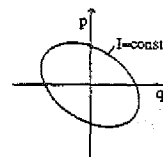
Effekt eine direkte Analogie zu magnetischen Kräften besteht, hat BERRY den Begriff *geometrischer Magnetismus* geprägt, der heute gebräuchlicher ist [BR93a].

Nach der denkwürdigen Veröffentlichung von BERRY 1984 konnte das Konzept der geometrischen Phasen unter allgemeineren Bedingungen gefunden und auf andere Theorien übertragen werden. Im Rahmen der Quantenmechanik wurde ein geometrischer Effekt für entartete Zustände von F. WILCZEK und A. ZEE hergeleitet [WZ84], und Y. AHARONOV und J. ANANDAN führten geometrische Phasen in nichtautonomen Systemen ein, für die eine Schleife im Parameterraum in beliebiger, endlicher Zeit durchlaufen wird [AA87]. Eine weitere, auf der Arbeit von S. PANCHARATNAM basierende Verallgemeinerung, die während der zeitlichen Entwicklung des Systems quantenmechanische Messungen zuläßt, stammt von J. SAMUEL und R. BHANDARI [SB88].

In diversen Experimenten konnte eine Berryphase gemessen werden. A. TOMITA und R. CHIAO wiesen sie in der Drehung der Polarisationsrichtung von Licht in einem spiralförmig gewundenen optischen Leiter nach [TC86], und bei Neutronenexperimenten von T. BITTER und D. DUBBERS sowie von H. WEINFURTER und G. BADUREK tritt die Berryphase als zusätzliche Rotation der Neutronenspins in einem schwachveränderlichen Magnetfeld auf [BD87, WB90]. Die erste experimentelle Bestätigung des Auftretens von Berryphasen in Molekülen wurde von G. DELACRÉTAZ et al. am Spektrum von Na_3 -Clustern gefunden. Dabei wurde die Herzberg-Longuet-Higgins'sche Phase in Form einer halbzahligen Quantisierung der Pseudorotationen des Clusters nachgewiesen [DGWZ86].

J. HANNAY beschrieb 1985 eine zur Berryphase analoge *klassische* Größe in adiabatisch veränderten integrablen klassischen Systemen, die heute allgemein als *Hannaywinkel* bekannt ist [H85]. Wie in der Quantenmechanik gibt es für integrable klassische Systeme ein Adiabatentheorem, das besagt, daß bei beliebig langsamer Veränderung des klassischen Hamiltonians $H(p, q, t)$ eine Trajektorie zu jedem Zeitpunkt auf dem Torus des autonomen Hamiltonians $H(p, q, t = \text{const.})$ verläuft, der die Wirkungen $I = \oint p dq$ des Anfangswertes besitzt. Die Wirkung ist also eine adiabatische Erhaltungsgröße, die durch die Anfangsbedingungen bestimmt ist [A80, N76]. Wie im quantenmechanischen Fall macht auch hier das Adiabatentheorem keine Aussage über den *Ort auf dem Torus* (gemessen durch Winkelvariablen), an dem sich das System nach adiabatischer Entwicklung befindet. Beim Durchlaufen einer Schleife im Parameterraum — so zeigte HANNAY — kehrt das klassische System auf den Torus zurück, auf dem es gestartet wurde, befindet sich jedoch nicht an dem Ort, der durch den *dynamischen Winkel* $\Delta\theta_{\text{dyn}} = \int dt \omega(t)$ bestimmt ist, sondern ist um einen *geometrischen Winkel* $\Delta\theta_{\text{geo}}$ verschoben. Dieser hängt, ebenso wie die Berryphase, nur von der Schleife im Parameterraum ab und nicht von der Geschwindigkeit, mit der die Schleife durchlaufen wird. Den Zusammenhang mit der quantenmechanischen Berryphase hat BERRY in [B85] durch semiklassische Betrachtungen hergestellt, so daß sich der Hannaywinkel tatsächlich als klassischer Grenzfall der Berryphase interpretieren läßt. Eine mathematisch präzisere Untersuchung und Verallgemeinerung des Hannaywinkels wurde von S. GOLIN et al. in [GKM89] durchgeführt.

Die Interpretation des Hannaywinkels als Holonomie eines Zusammenhangs auf einem Prinzipalbündels ist ohne Weiteres möglich. Dabei stellt der Torus die Faser und der Parameterraum die Basis des Bündels dar. Der Zusammenhang auf diesem Bündel wird durch die adiabatische Entwicklung vermittelt, dessen Holonomie gerade der Hannaywinkel ist.



Einige Verallgemeinerungen des Hannaywinkels wurden zum Teil in Analogie zum quantenmechanischen Fall versucht. So wurde zum Beispiel ein zur Aharonov-Anandan-Phase analoger nichtadiabatischer Winkel von BERRY und HANNAY hergeleitet [BH88], der jedoch nur in sehr seltenen Fällen existiert, da die Integrabilität eines nichtautonomen Systems verlangt wird.

Eine analoge Theorie zu der von BORN und OPPENHEIMER [BO27] kann mit Hilfe des klassischen Adiabaten-theorems auch für integrable klassische Systeme mit stark getrennten Zeitskalen (*Slow-Fast-Systeme*) entwickelt werden. Dabei separieren die schnellen und langsamen Freiheitsgrade im adiabatischen Limes und können getrennt integriert werden. Die schnellen Freiheitsgrade, ausgedrückt in instantanen Winkel-Wirkungs-Variablen, entwickeln sich zeitlich wie folgt: Bei adiabatisch konstanten Wirkungen werden die Winkel zusätzlich zu den dynamischen Winkeln $\Delta\theta_{\text{dyn}}$ um die Hannaywinkel verschoben. Die langsamen Freiheitsgrade verspüren eine gemittelte effektive Kraft von den schnellen Freiheitsgraden, die Born-Oppenheimer-Potentialkraft. In diversen Veröffentlichungen zu diesem Thema wird, neben der Born-Oppenheimer-Potentialkraft, eine *geometrisch magnetische* Kraft postuliert [GT87, B89, K90, BR93a, BR93b].

Während die geometrischen Effekte in der Quantenmechanik für eine sehr große Klasse von Hamiltonoperatoren erklärt werden können, kann der Hannaywinkel nur für die nicht generischen integrablen klassischen Systeme erklärt werden. Verallgemeinerungen auf allgemeine klassische Hamiltonsche Systeme scheitern bereits daran, daß für sie kein Adiabatentheorem existiert. Das liegt daran, daß ihre Bewegung nicht quasiperiodisch auf Tori, sondern im allgemeinen sehr kompliziert verläuft. Daher können wesentliche Mittelungsschritte nicht durchgeführt werden.

Ist das Hamiltonsche System jedoch *ergodisch* auf der Energieschale, d. h. füllt diese im Laufe der Zeit für fast alle Startwerte gleichmäßig dicht, so kann eine adiabatische Invariante gefunden werden. Der einzige vom mathematischen Standpunkt aus befriedigende Beweis eines Adiabaten-theorems für ergodische Systeme, der in der physikalischen Literatur jedoch weitgehend unbeachtet geblieben ist, wurde 1961 von T. KAZUGA geführt [K61]. Dieses Adiabatentheorem besagt, daß das in einer beschränkten Energieschale eingeschlossene Phasenraumvolumen im adiabatischen Limes erhalten bleibt. Das bedeutet, daß sich das System zu jedem Zeitpunkt auf der instantanen Energieschale bewegt, die das Anfangsphasenraumvolumen einschließt. Wie die anderen Adiabaten-theoreme macht es aber keine Aussagen darüber, wie sich das System auf der Energieschale bewegt. S. GOLIN et al. argumentierten nun, daß es wegen der *sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsdaten* eines ergodischen Systems keinen von den Anfangsbedingungen glatt abhängenden geometrischen Effekt in den Koordinaten geben kann [GKM89].

Dennoch haben J. ROBBINS und M. BERRY 1992 versucht, mit Hilfe des semiklassischen Übergangs der quantenmechanischen geometrischen 2-Form einen geometrischen Effekt in klassischen ergodischen Systemen herzuleiten [RB92], konnten jedoch für die gefundene klassische 2-Form zunächst keine Interpretation finden. Wie in dieser Arbeit gezeigt wird, beschreibt die 2-Form von ROBBINS und BERRY *nicht* den gewünschten Holonomieeffekt, da beim semiklassischen Übergang eine unzulässige Vertauschung festgehaltener Größen in den Differentialen gemacht wurde. Eine korrigierte Herleitung im Rahmen dieses semiklassischen Zugangs scheint jedoch nicht möglich zu sein, da die korrigierte 2-Form aufgrund einer Vertauschung des adiabatischen und des semiklassischen Limes identisch

verschwindet.

In zwei Folgeartikeln greifen BERRY und ROBBINS die in [RB92] berechnete 2-Form auf und interpretieren sie im Rahmen klassischer Systeme mit stark getrennten Zeitskalen (*Slow-Fast-Systeme*) [BR93a, BR93b]. Neben einem geometrischen Magnetismus finden sie [BR93b] in niedrigdimensionalen ergodischen Hamiltonschen Systemen eine Reibungskraft, die Energie der langsamen Freiheitsgrade irreversibel auf die schnellen Freiheitsgrade überträgt.

Über die Dynamik der schnellen Freiheitsgrade eines ergodischen Slow-Fast-Systems ist bis heute nicht viel bekannt, wie J. ROBBINS in einer aktuellen Veröffentlichung schreibt [R94]:

„Whether the classical 2-form describes an anholonomy in adiabatically cycled chaotic systems is an open question.“

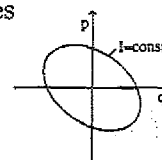
In dieser Arbeit werden *klassische* Slow-Fast-Systeme betrachtet, die bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden entweder eine *integrable* oder *ergodische* schnelle Dynamik besitzen. Eine Separation der schnellen von der langsamen Dynamik gelingt im adiabatischen Limes unter Benutzung geeigneter Koordinaten.

Im integrablen Fall werden die schnellen Freiheitsgrade in instantanen Winkel-Wirkungs-Variablen dargestellt. Obwohl die Winkel-Wirkungs-Variablen bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden kanonisch konjugiert sind, bilden sie zusammen mit den ursprünglichen Koordinaten der langsamen Freiheitsgrade *kein* kanonisches Koordinatensystem. Die Bewegungsgleichungen lassen sich daher in den neuen Koordinaten nicht mit Hilfe des kanonischen Formalismus aufstellen, sondern werden aus den symplektischen Eigenschaften Hamiltonscher Flüsse abgeleitet. Diese Methode wurde schon 1990 von J. KOILLER [K90] in diesem Zusammenhang angewendet.

Die langsame Bewegung wird im adiabatischen Limes autonom, und die Wechselwirkung mit den schnellen Freiheitsgraden kann durch eine effektive Born-Oppenheimer-Potentialkraft beschrieben werden. Im Gegensatz zu vielen Aussagen in der Literatur [GT87, B89, K90, BR93a, BR93b], gibt es neben dieser Potentialkraft *keine* weiteren Kräfte, die von den schnellen auf die langsamen Freiheitsgrade wirken. Der vielfach untersuchte geometrische Magnetismus tritt *nicht* auf. Die Bewegung der schnellen Freiheitsgrade verläuft im adiabatischen Limes wie folgt: Die Wirkungen sind adiabatische Invariante und bleiben zeitlich unverändert, während sich die Winkel, wie bei den Hannayschen Betrachtungen, aus einem dynamischen und geometrischen Teil zusammensetzen [H85, K90].

Im Fall ergodischer schneller Dynamik existieren keine globalen kanonischen Koordinaten der schnellen Freiheitsgrade bei festgehaltenen langsamen, in denen die Bewegung im adiabatischen Limes separiert. Daher muß auf die kanonische Struktur ganz verzichtet und die Bewegung in geeigneten nichtkanonischen Koordinaten dargestellt werden.

Die langsame Dynamik hat dieselben Eigenschaften, wie im integrablen Fall: Die langsamen Freiheitsgrade bewegen sich nach autonomen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, in denen sich die Wechselwirkung mit den schnellen Freiheitsgraden durch ein zusätzliches



Born-Oppenheimer-Potential ausdrückt. Auch für Slow-Fast-Systeme mit ergodischen schnellen Freiheitsgraden wird in der Literatur der geometrische Magnetismus postuliert [BR93a, BR93b], der auch in diesem Fall *nicht* auftritt. In [BR93b] wird zusätzlich eine *deterministische Reibungskraft* deduziert, die den langsamen Freiheitsgraden irreversibel Energie entzieht und auf die schnellen Freiheitsgrade überträgt. Da die Bewegung der langsamen Freiheitsgrade im adiabatischen Limes explizit autonom und Hamiltonsch ist, kann auch eine solche Reibungskraft nicht auftreten.

In dieser Arbeit wird erstmals ein glatter geometrischer Effekt in den ergodischen schnellen Freiheitsgraden identifiziert, der als eine Art Zeitverschiebung interpretierbar ist. Beim Durchlaufen einer Schleife im Raum der langsamen Koordinaten liegt der Endpunkt einer Trajektorie im adiabatischen Limes auf derselben Energieschale, auf der sie gestartet wurde. Der Endzustand auf der Energieschale ist natürlich i. a. ein anderer als der Anfangszustand und hängt, wegen der möglichen sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsdaten, im adiabatischen Limes nicht glatt von den Anfangswerten ab (siehe [GKM89]).

Da sich im integrablen Fall die geometrischen Effekte am besten in den zu den adiabatischen Erhaltungsgrößen konjugierten Variablen, den Winkeln, messen lassen, liegt es nahe, die zum adiabatisch invarianten Phasenraumvolumen konjugierte Größe zu untersuchen. Diese Größe mißt, im Fall festgehaltener langsamer Freiheitsgrade, die Zeit, die das System entlang der Trajektorie verbracht hat, und wird daher im folgenden als *Tempus* bezeichnet. Im Fall veränderlicher langsamer Freiheitsgrade ist die Interpretation des Tempus als „Zeit“ nicht möglich, da seine Bewegung nicht ausschließlich proportional zur Zeit ist.

Integriert man die Zeitableitung des *Tempus* entlang einer beliebigen Trajektorie, bei der die langsamen Konfigurationen nach sehr langer Zeit wieder an ihren Ausgangswerten sind, so zerfällt der Tempus auf natürliche Weise in zwei Teile: Der erste ist der *dynamische* Tempus, der die Zeit entlang der Trajektorie mißt. Der zweite, *geometrische* Teil hängt nur vom Weg im langsamen Konfigurationsraum ab und hat eine zum Hannaywinkel analoge Struktur. Da sowohl die Zeit als auch der Tempus entlang einer Trajektorie gemessen werden kann, ist der geometrische Tempus im Prinzip observabel, zu seiner Bestimmung muß die Trajektorie jedoch zu allen Zeiten beobachtet werden.

Die Interpretation als Holonomie eines Zusammenhangs auf einem Prinzipalbündel ist auch in diesem Fall nicht schwierig. Als Basis des Bündels dient der langsame Konfigurationsraum, während die Faser durch die reelle Tempusachse gegeben ist. Der Zusammenhang auf diesem Faserbündel wird durch die ergodische Dynamik auf der Energieschale bestimmt. Die Holonomie des Zusammenhangs drückt sich in einer Verschiebung auf der Tempusachse aus, die gerade dem geometrischen Tempus entspricht.

Um ergodische Slow-Fast-Systeme überhaupt im Rahmen der Adiabaten Theorie behandeln zu können, mußte das Adiabatentheorem von T. KAZUGA auf den Slow-Fast-Fall verallgemeinert werden. Diese Verallgemeinerung wird ebenfalls in dieser Arbeit vollzogen und ein allgemeines Adiabatentheorem bewiesen. Zudem wird ein Mittelungssatz für Observablen formuliert.

Zur Illustration des Hannaywinkels wird in dieser Arbeit die adiabatische Entwicklung des verallgemeinerten harmonischen Oszillators graphisch dargestellt (siehe Abschnitt 6.1).

In der rechten unteren Ecke jeder ungeraden Seite ist eine von 66 Momentaufnahmen eines Torus dieses Systems gezeigt, der sich unter adiabatischer Entwicklung der Parameter entlang einer Schleife im Parameterraum verformt. Nach Durchlaufen der Schleife stimmt der Endtorus mit dem Ausgangstoros überein (vergleiche Seiten 1 und 131). Der geometrische Winkel $\Delta\theta_{\text{geo}}$ dieses Systems wird, von der p -Achse aus gemessen, in jede Momentaufnahme des Systems eingezeichnet. Nach Durchlaufen der Schleife kehrt die Bewegung des Systems zwar auf den Ausgangstoros zurück, jedoch ist die Trajektorie um einen endlichen Hannaywinkel $\Delta\theta_{\text{geo}}$ verschoben.

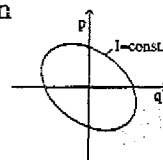
1.2 Übersicht

Zunächst werden in Kapitel 2 die differentialgeometrischen Grundlagen eingeführt, die für das Verständnis von Holonomieeffekten aus mathematischer Sicht benötigt werden. Die Differentialgeometrie bietet einen großen Rahmen, in den sich die dynamischen Systeme, die in den folgenden Kapiteln untersucht werden, einordnen lassen. Dadurch können die quantenmechanischen und klassischen Dynamiken, die sehr unterschiedliche Phasenräume und Bewegungsgleichungen besitzen, mit gleichen Mitteln untersucht und ähnliche Effekte systematisch behandelt werden. Dieses Kapitel ist stark an die entsprechenden Kapitel in [CdWD91] und [vW78] angelehnt, und alle Definitionen und mathematischen Sätze sind [CdWD91] direkt entnommen.

Wegen der relativ einfachen Darstellung quantenmechanischer Holonomieeffekte im Vergleich zu den klassischen bietet sich ihre Untersuchung als Einführung an. Dies entspricht auch der historischen Entwicklung. Daher werden in Kapitel 3 Quantensysteme untersucht, die sich unter dem Einfluß äußerer Parameter adiabatisch entwickeln. Zunächst wird das quantenmechanische Adiabatentheorem eingeführt und diskutiert, warum die Holonomieeffekte in der Quantenmechanik erst verhältnismäßig spät entdeckt wurden. Dabei dienen insbesondere die Originalarbeiten von BORN und FOCK [F28, BF28] als Ausgangspunkt. Anschließend wird die quantenmechanische Berryphase nach [B84] hergeleitet und in den mathematischen Rahmen von Kapitel 2 eingeordnet. Auf die notwendigen Bedingungen für das Auftreten der Berryphase und typische Beobachtungssituationen wird zum Abschluß des Kapitels eingegangen [RB92, B84].

Da der Zugang zu den klassischen Holonomieeffekten etwas aufwendiger ist, werden zunächst in Kapitel 4 einige Vorbetrachtungen angestellt und Definitionen gegeben. Nachdem die klassische Hamiltonsche Mechanik koordinatenfrei und in beliebigen nichtkanonischen Koordinaten formuliert wurde (nach [A80]), werden klassische autonome Slow-Fast-Systeme definiert, da sich eine mathematisch und physikalisch befriedigende Herleitung von Holonomieeffekten nur im Rahmen der Behandlung solcher Systeme durchführen läßt. Abschließend werden die beiden Klassen von Systemen vorgestellt, die im Rahmen der klassischen Adiabaten Theorie behandelt werden können: Die *Liouville-integrierbaren* [N76] und die auf der Energieschale *ergodischen* [K61] Systeme.

Nach diesen Vorbereitungen werden in Kapitel 5 die klassischen Slow-Fast-Systeme mit integrierbarer schneller Dynamik untersucht (nach [K90]). In den Bewegungsgleichungen der langsamen Freiheitsgrade, die im adiabatischen Limes vollständig von den schnellen



separieren, tritt neben der effektiven Born-Oppenheimer-Potentialkraft *keine* zusätzliche magnetische Kraft auf, was im Widerspruch zu bisherigen Veröffentlichungen steht [GT87, B89, K90, BR93a, BR93b]. Es wird gezeigt, daß sich die Terme, die zum geometrischen Magnetismus führen würden, in den Bewegungsgleichungen *exakt* kompensieren. Dies ist ein wichtiges, wenn auch nicht das zentrale Ergebnis dieser Arbeit. Bis heute wurde diese Kompensation aus diversen Gründen, die in dieser Arbeit geschildert werden, nicht entdeckt. Im Gegensatz dazu ist die Dynamik der schnellen Freiheitsgrade seit langem bekannt: Die adiabatische Entwicklung führt zu einer geometrischen Verschiebung der Winkelkoordinaten um den Hannaywinkel [H85], die zusätzlich zur dynamischen Verschiebung auftritt [H85, K90].

Für integrable Systeme wird im ersten Teil von Kapitel 6 der Zusammenhang zwischen den quantenmechanischen und den klassischen Holonomieeffekten im Rahmen der Semiklassik dargestellt (nach [B85]). Im zweiten Teil wird die Untersuchung des semiklassischen Limes der Berryphase für klassisch ergodische Hamiltonsche Systeme vorgeführt, wie sie von J. ROBBINS und M. BERRY in [RB92] gemacht wurde. Es wird gezeigt, daß die von diesen Autoren angegebene klassische 2-Form aufgrund einer unzulässigen Vertauschung festgehaltener Größen bei der Differentialbildung keine klassische Holonomie beschreibt, und eine Korrektur im Rahmen dieses Formalismus erscheint nicht möglich.

Kapitel 7 enthält die eigentliche Hauptaussage dieser Arbeit: Es wird die adiabatische Entwicklung von Slow-Fast-Systemen untersucht, deren schnelle Freiheitsgrade *ergodisch* sind. Mit Hilfe rein klassischer Betrachtungen im Rahmen des symplektischen Formalismus Hamiltonscher Systeme [A80, K90] wird in den schnellen Freiheitsgraden ein Holonomieeffekt, der *geometrische Tempus*, hergeleitet. Dieser ist vollkommen analog zum Hannaywinkel im integrablen Fall, seine Beobachtung ist jedoch etwas schwieriger. Ebenso wie die Slow-Fast-Systeme mit integrablen schnellen Freiheitsgraden zeigen auch die mit ergodischen Freiheitsgraden *keinen* geometrischen Magnetismus neben der Born-Oppenheimer-Potentialkraft. Im Widerspruch dazu stehen die Arbeiten [BR93a] und [BR93b], nach denen sogar Reibungskräfte in Hamiltonschen Systemen auftreten können. Diese Arbeiten werden ebenfalls widerlegt.

Kapitel 8 faßt die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen.

Der Anhang ist dreigeteilt: Anhänge A und B enthalten einige Nebenrechnungen, die den Lesefluß von Kapitel 5 und 7 stark gestört hätten, auf die jedoch im Rahmen einer ausführlichen Darstellung nicht verzichtet werden kann. Anhang C enthält den ausführlichen Beweis des Adiabatentheorem für ergodische Slow-Fast-Systeme, der auf [K61] und [N76, GKM89] aufbaut. Ferner wird ein Mittelungssatz für Observablen aufgestellt, der die Mittelung der Bewegungsgleichungen in Kapitel 7 ermöglicht. Wegen der aufwendigen Beweisführung klassischer Adiabatentheoreme wurden die Aussagen des Anhang C nicht im Hauptteil gemacht, da sie den Lesefluß der Arbeit stark beeinträchtigt hätten.

Kapitel 2

Faserbündel, Zusammenhänge und Holonomie

Elemente der Differentialgeometrie, wie Bündelstrukturen und Zusammenhänge auf denselben, sind in der theoretischen Physik, besonders in der Feldtheorie, von großer Bedeutung. Obwohl sie auch der Theorie der dynamischen Systeme zugrunde liegen, sind sie in dieser Disziplin weniger populär.

Um jedoch die geometrischen Effekte (Holonomieeffekte) in dynamischen Systemen, wie Berryphasen und Hannaywinkel, verstehen zu können, sind die Begriffe des *Faser-* und *Prinzipalbündels*, eines *Zusammenhangs* auf dem Prinzipalbündel und dessen *Holonomie* von großer Bedeutung.

In den folgenden drei Abschnitten werden diese Begriffe anhand von Beispielen eingeführt. Dabei wird zugunsten der Anschaulichkeit auf eine mathematisch exakte Darstellung verzichtet.¹ Dennoch ist es unumgänglich, einige „trockene“ mathematische Definitionen und Sätze zu formulieren. Dieses Kapitel basiert auf [CdWD91] und [vW78].

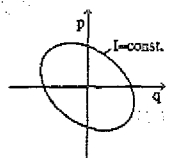
2.1 Bündel, Faserbündel und Prinzipalbündel

Bündel sind eine Verallgemeinerung von topologischen Produkten. Mit zusätzlichen Strukturen ausgestattet, werden sie zu Faserbündeln und Prinzipalbündeln.

In der Topologie ist man bemüht, komplizierte topologische Strukturen auf einfachere zurückzuführen. So kann zum Beispiel ein Zylinder als topologisches Produkt der 1-Sphäre S^1 mit einem Linienelement $I \subset \mathbb{R}$ dargestellt werden (siehe Abbildung 2.1). Die Topologie des Zylinders wird dann zur Produkttopologie.

Eine solche Zurückführung z. B. der Möbiusschleife auf ein topologisches Produkt einfacherer topologischer Räume ist nicht möglich. Sie sieht zwar lokal dem Zylinder sehr ähnlich, jedoch gibt es durch die „Verdrillung“ der Schleife keine Möglichkeit, sie global

¹ Eine exakte mathematische Formulierung ist zum Beispiel in [CdWD91] oder [vW78] zu finden.



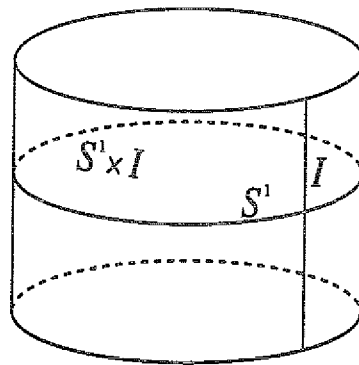
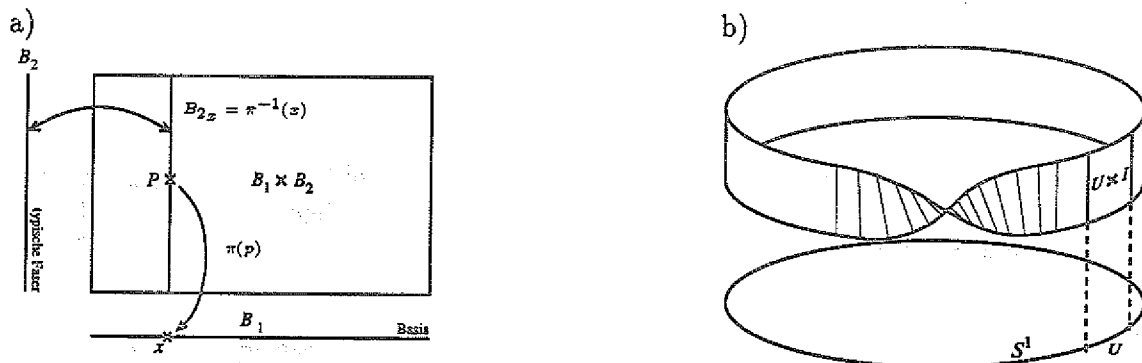
Abbildung 2.1: Der Zylinder als topologisches Produkt der S^1 mit $I \subset \mathbb{R}$.

Abbildung 2.2: a) Triviales Produktbündel. b) Möbiusschleife als Beispiel eines nichttrivialen Bündels.

durch ein topologisches Produkt darzustellen (Abbildung 2.2 b)). Die nötige Verallgemeinerung der Produktbildung liefert der Bündelbegriff.

Ein *Bündel* ist ein Tripel (E, B, π) bestehend aus den topologischen Räumen E und B und einer stetigen, surjektiven Abbildung $\pi : E \rightarrow B$. B heißt die *Basis* und π *Projektion*. Die Urbildmenge $\pi^{-1}(x)$ ($x \in B$) der Projektion heißt die *Faser* F_x am Punkte $x \in B$. Im folgenden sollen nur solche Bündel betrachtet werden, deren Fasern sich für alle $x \in B$ umkehrbar stetig (homöomorph) auf einen Raum F , die *typische Faser*, abbilden lassen (siehe Abbildung 2.2a).

Ein kartesisches Produkt zweier topologischer Räume $(B_2 \times B_1, B_1, \pi)$ heißt *triviales Bündel*, wobei π definiert ist durch $\pi(x_2, x_1) = x_1$ für $x_1 \in B_1$ und $x_2 \in B_2$ (siehe Abbildung 2.2a). Der Zylinder ist also ein triviales Bündel, während die Möbiusschleife (Abbildung 2.2b) kein triviales Bündel ist. Lokal ist die Möbiusschleife jedoch als Produkt von $U \subset S^1$ und I darstellbar, ist also lokal trivial. Dies gilt für alle Bündel.

Eine Abbildung $f : B \rightarrow E$, die jedem Basispunkt $x \in B$ ein Element der Faser F_x zuordnet, nennt man einen *Schnitt* durch das Bündel (E, B, π) . Damit f ein Schnitt ist, muß $\pi \circ f = \text{id}_B$ gelten, d. h. jedem $x \in B$ darf nur genau ein Punkt auf der Faser F_x zugeordnet sein (siehe Abbildung 2.3). Beispiele für Schnitte findet man in der Physik sehr häufig. Betrachte zum Beispiel das Bündel $(\mathbb{R} \times \mathcal{M}, \mathcal{M}, \pi)$ über einer

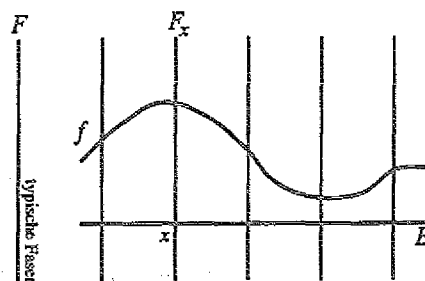


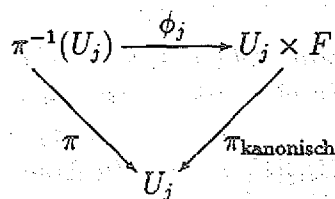
Abbildung 2.3: Schnitt durch ein Bündel.

Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$, das $\mathbb{R}$ als typische Faser besitzt. Eine Funktion $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ kann als Schnitt durch dieses Bündel interpretiert werden. Eine skalare Potentialfunktion über der Konfigurationsmannigfaltigkeit ist zum Beispiel ein solcher Schnitt.

In der Physik betrachtet man typischerweise Bündel, deren typische Faser F eine zusätzliche Struktur hat, die durch eine Gruppe G von Homöomorphismen der Faser F auf sich erklärt ist. Das Quadrupel (E, B, π, G) nennt man ein *Faserbündel*. Genauer gesagt definiert man Faserbündel wie folgt [CdWD91]:

Def. 2.1 (Faserbündel) Ein Faserbündel (E, B, π, G) ist ein Bündel (E, B, π) mit einer typischen Faser F , einer Homöomorphiegruppe $\rho(G)$ von F auf sich² und einer offenen Überdeckung der Basis B durch eine Familie offener Mengen $\{U_j | j \in J\}$, so daß gilt:

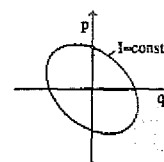
1. Das Bündel ist lokal trivial, d. h. ist lokal homöomorph zu einem Produktbündel: $\pi^{-1}(U_j)$ ist homöomorph zum topologischen Produkt $U_j \times F$ für alle $j \in J$. Sei $p \in E$ ein Punkt des Bündels mit $\pi(p) \in U_j$. Die Homöomorphie $\phi_j : \pi^{-1}(U_j) \rightarrow U_j \times F$ hat dann die Form $\phi_j(p) = (\pi(p), \hat{\phi}_j(p))$, und die Tupel $\{U_j, \phi_j\}$ heißen lokale Trivialisierungen des Bündels. Dabei bildet $\hat{\phi}_j(p)$ den Punkt p auf die typische Faser F ab.



2. Die trivialen Unterbündel, definiert auf den offenen Mengen U_j , hängen wie folgt zusammen: Für jedes $x \in U_j \cap U_k$ und alle $j, k \in J$ ist die Homöomorphie $\hat{\phi}_{k|x} \circ \hat{\phi}_{j|x}^{-1} : F \rightarrow F$ ein Element der Strukturgruppe $\rho(G)$.³ Falls G aus nur einem Element besteht, ist das Bündel trivialisierbar.

² $\rho(G)$ ist eine treue Realisierung der Gruppe G auf der typischen Faser F .

³Dies stellt eine Einschränkung der lokalen Trivialisierungen dar. Falls nämlich G nicht transitiv auf der typischen Faser wirkt, könnte es Homöomorphismen $\hat{\phi}_{k|x} \circ \hat{\phi}_{j|x}^{-1}$ geben, die kein Element der Strukturgruppe sind.



3. Die induzierten Abbildungen $g_{jk} : U_j \cap U_k \rightarrow \rho(G)$ gegeben durch $g_{jk}(x) = \hat{\phi}_{j|x} \circ \hat{\phi}_{k|x}^{-1}$ sind dann stetig und erfüllen die Bedingung

$$g_{jk}(x)g_{ki}(x) = g_{ji}(x), \quad (i, j, k \in J)$$

Die lokalen Trivialisierungen $\hat{\phi}_{i|x}$ legen die Koordinaten eines Punktes auf der Faser am Punkt x fest, wenn man ein Koordinatensystem auf der typischen Faser gegeben hat. Die lokalen Trivialisierungen werden auch *Eichungen* genannt, und die induzierten Abbildungen g_{ij} heißen *Eichtransformationen*.

Häufig werden Abbildungen von einem Faserbündel (E_1, B_1, π_1, G_1) auf ein anderes (E_2, B_2, π_2, G_2) betrachtet, die die Bündelstruktur des ersten Bündels auf das zweite abbilden. Solche Abbildungen, die mit der Bündelstruktur beider Bündel kompatibel sind, nennt man *Bündelmorphismen* und werden durch zwei Abbildungen $\{F, f\}$ mit $F : E_1 \rightarrow E_2$, $f : B_1 \rightarrow B_2$ bestimmt, für die das nebenstehende Diagramm kommutativ ist. Ist F vorgegeben, so ist f , falls es existiert, eindeutig durch F bestimmt.

$$\begin{array}{ccc} E_1 & \xrightarrow{F} & E_2 \\ \pi_1 \downarrow & & \downarrow \pi_2 \\ B_1 & \xrightarrow{f} & B_2 \end{array}$$

Das Faserbündel heißt *differenzierbares C^k Faserbündel*, falls E und B C^k -Mannigfaltigkeiten sind, π eine C^k -Funktion und G eine Liegruppe ist. Ferner muß sich auf der Überdeckung $\{U_j | j \in J\}$ von B ein C^k -Atlas erklären lassen.

Nicht alle Koordinaten auf der C^k -Mannigfaltigkeit E sind mit der Bündelstruktur vereinbar. Seien E und B Mannigfaltigkeiten der Dimension $n+p$ bzw. n , dann definiert die Karte (U, ϕ) *Bündelkoordinaten* auf E , falls $\phi : U \rightarrow \mathbb{R}^{n+p}$ ein Bündelmorphismus ist, und $\mathbb{R}^{n+p}$ die natürliche Produktbündelstruktur $\mathbb{R}^{n+p} = \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p$ besitzt. Da die typische Faser nicht notwendig homöomorph zum $\mathbb{R}^p$ ist, bedarf es im allgemeinen eines Atlanten, um $\pi^{-1}(U_j)$ durch Koordinaten zu parametrisieren.

Als Beispiel für ein C^k -Faserbündel sei das *Tangentialbündel* gegeben, das in der Differentialgeometrie oder in der Lagrange'schen Mechanik von großer Bedeutung ist. Es läßt sich wie folgt konstruieren: Sei $T(X^n)$ der Raum der Paare (x, v_x) für alle x aus der C^{k+1} -Mannigfaltigkeit X^n und alle v_x Vektoren aus dem Tangentialraum $T_x(X^n)$. Dann bildet $(T(X^n), X^n, \pi, GL(n, \mathbb{R}))$ ein C^k -Faserbündel, wobei die Faser am Punkte $x \in X^n$ durch $T_x(X^n)$ gegeben ist, die isomorph zum $\mathbb{R}^n$ als typischer Faser ist. Die Projektion ist durch $\pi : (x, v_x) \mapsto x$ definiert, und die offene Überdeckung von X^n wird durch $\{U_i | \{U_i, \psi_i\} \text{ ist ein Atlas von } X^n\}$ gegeben. Die Homöomorphie ϕ_j ist durch $(\pi, d\psi_j \circ \pi_2)$ mit $\pi_2(x, v_x) = v_x$ bestimmt, wobei $d\psi(v_x)$ die Koordinaten von v_x bezüglich der Karte (U_j, ψ_j) sind.⁴ Die Koordinatendarstellung

$$(\psi_j \circ \pi, d\psi_j \circ \pi_2) : \pi^{-1}(U_j) \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$$

bezüglich der Karte (U_j, ψ) bildet eine Bündelkoordinatendarstellung. Die Strukturgruppe G ist die der linearen Automorphismen $GL(n, \mathbb{R})$ des $\mathbb{R}^n$.⁵ Es ist

$$d\psi_{1|x} \circ d\psi_{2|x}^{-1} \in GL(n, \mathbb{R}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

⁴Hier und im folgenden wird die linearisierte Abbildung einer Abbildung $f : X \rightarrow Y$ zwischen zwei Mannigfaltigkeiten X und Y mit $df : T(X) \rightarrow T(Y)$ bezeichnet.

⁵ $GL(n, \mathbb{R})$ ist eine Liegruppe.

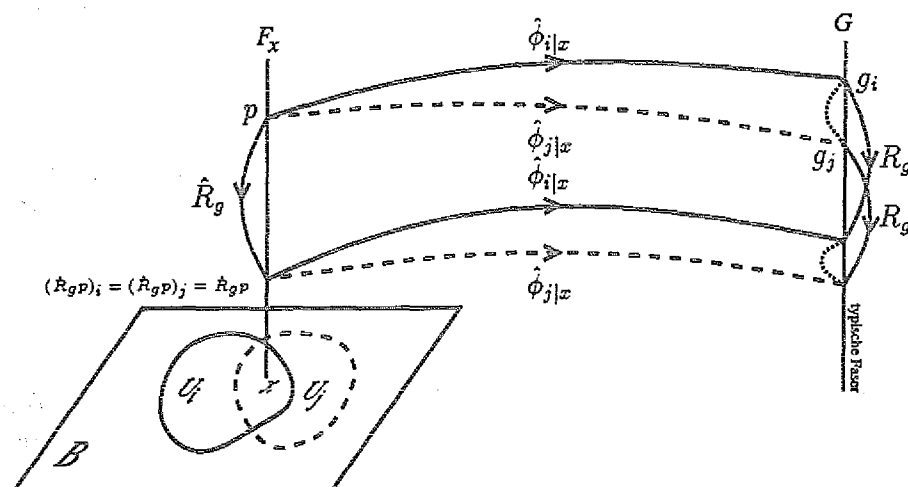


Abbildung 2.4: Operation der Gruppe G von rechts auf einer Faser F_x

die Koordinatentransformationsvorschrift, mit der Koordinaten des Tangentialraums am Punkte x von der Karte 2 in die Karte 1 umgerechnet werden.

Der Phasenraum eines mechanischen Systems in Lagrange'scher Darstellung ist ein Tangentialbündel auf der Konfigurationsmannigfaltigkeit. Die verallgemeinerten Koordinaten und deren Geschwindigkeiten sind zulässige Bündelkoordinaten. Der Phasenraum eines Hamiltonschen Systems läßt sich analog als Kotangentialbündel über der Konfigurationsmannigfaltigkeit beschreiben. Als Faser dient der zum $\mathbb{R}^n$ isomorphe Dualraum $T_x^*(X^n)$. Die Koordinaten q auf der Konfigurationsmannigfaltigkeit und deren konjugierte Impulse p im Kotangentialraum bilden hier die Bündelkoordinaten. Alle übrigen Konstruktionen für das Tangentialbündel können übernommen werden.

Ist die Strukturgruppe G des Faserbündels isomorph⁶ zur typischen Faser F und wirken die Elemente von G auf Elemente der Faser von links, so spricht man von einem *Prinzipalbündel*.

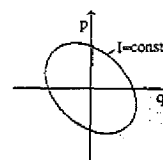
Als einfaches Beispiel für ein Prinzipalbündel betrachte das Bündel, das die Phasen $e^{i\phi}$ komplexer Zahlen $z = re^{i\phi}$ mit der Strukturgruppe $U(1)$ über dem $\mathbb{R}^2$ bilden: $(\{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \times \mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2, \pi, U(1))$. Phasendrehungen sind Elemente der Strukturgruppe $U(1)$. Die Operation von links ist erklärt durch $(g_\psi, e^{i\phi}) \in G \times \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \mapsto e^{i\psi} e^{i\phi} = e^{i(\psi+\phi)} \in \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$.

Unter dem Wechsel der lokalen Trivialisierung von (U_i, ϕ_i) nach (U_j, ϕ_j) ($i \neq j$) transformiert sich das Bild $\hat{\phi}_{i|\pi(p)}(p) \in F$ eines Punktes $p \in F_{\pi(p)}$ durch Linksmultiplikation mit $g_{ji}(\pi(p)) = \hat{\phi}_{j|\pi(p)} \circ \hat{\phi}_{i|\pi(p)}^{-1}$ in das Bild $\hat{\phi}_{j|\pi(p)}(p) \in F$ (siehe Abbildung 2.4):

$$\hat{\phi}_{j|\pi(p)}(p) = g_{ji}(\pi(p))\hat{\phi}_{i|\pi(p)}(p) \quad (2.1)$$

Möchte man durch Anwendung von Elementen der Gruppe G auf die typische Faser

⁶Isomorph bedeutet bijektiv abbildbar auf...



des Prinzipalbündels Verschiebungen auf allen Fasern des Prinzipalbündels induzieren, die mit der Faserbündelstruktur (Def. 2.1) vereinbar sind, so ist dies *nicht* durch Linksmultiplikation zu erreichen, da G i. a. nicht kommutativ ist und daher für allgemeines $g \in G$

$$g\hat{\phi}_{j|\pi(p)} \neq g_{ji}(\pi(p))g\hat{\phi}_{j|\pi(p)}$$

gilt. Dieses Problem läßt sich umgehen, wenn man statt der Operation von links die von rechts benutzt, um Punkte auf den Fasern des Prinzipalbündels aufeinander abzubilden.

Die Operation der Gruppe G von rechts auf einer Faser des Prinzipalbündels wird durch

$$(\hat{R}_g p)_j = \hat{\phi}_{j|x}^{-1}(R_g \hat{\phi}_{j|x}(p)) = \hat{\phi}_{j|x}^{-1}(\hat{\phi}_{j|x}(p)g), \quad p \in \pi^{-1}(U_j) \quad (2.2)$$

zunächst nur auf $\pi^{-1}(U_j)$ definiert. Da diese Operation von rechts mit dem Wechsel der lokalen Trivialisierung vertauschbar ist, ist sie von $j \in J$ unabhängig und auf dem ganzen Prinzipalbündel eindeutig erklärt [CdWD91]. $\hat{R}_g$ operiert auf der Faser F_x so, daß das Diagramm in Abbildung 2.4 kommutativ ist. Die gestrichelte Abbildung von G nach G ist durch $g_{ij}(x) = \hat{\phi}_{i|x} \circ \hat{\phi}_{j|x}^{-1}$ gegeben. Anschaulich bedeutet das, daß $\hat{R}_g$ auf der Faser F_x so wirkt, wie g selbst von rechts auf der typischen Faser G . $\hat{R}_g$ spielt bei der Konstruktion eines Zusammenhangs eine wesentliche Rolle und wird im nächsten Abschnitt benutzt.

Zum Abschluß dieses Abschnitts wird noch der Begriff der *Reduzierbarkeit* eines Prinzipalbündels eingeführt, der von besonderer Bedeutung bei der Vereinfachung der Beschreibung dynamischer Systeme ist (siehe zum Beispiel Kapitel 3 und 5). Ein Prinzipalbündel (E, B, π, G) heißt auf das Prinzipalbündel (E', B, π', G') *reduzierbar*, wenn G' eine Untergruppe von G und E' eine Untermannigfaltigkeit von E ist, so daß die Injektion $f: E' \rightarrow E$ ein Bündelmorphismus ist, der mit der Rechtsoperation von G' kommutiert:

$$\pi f(p) = \pi' p, \quad (p \in E') \quad (2.3)$$

$$f(\hat{R}_g p) = \hat{R}_g f(p), \quad (p \in E', g \in G') \quad (2.4)$$

Dabei bleibt die Basis des Prinzipalbündels unverändert.

Da es keinen kanonischen Isomorphismus zwischen der Faser an einem Basispunkt und der typischen Faser gibt, ist es nicht möglich, ohne zusätzliche Struktur Punkte auf zwei Fasern zu unterschiedlichen Basispunkten zu vergleichen. Es wird ein sogenannter *Zusammenhang* benötigt, der im folgenden Abschnitt eingeführt wird. Ein Zusammenhang ist die abstrakte Struktur, die die Vorschrift zur Parallelverschiebung entlang einer Kurve C auf einer gekrümmten Mannigfaltigkeit verallgemeinert.

2.2 Zusammenhänge

Im vorherigen Abschnitt wurden Prinzipalbündel eingeführt, die durch die Gruppeneigenschaft der typischen Faser bereits sehr viel Struktur haben. Dennoch wurde nichts darüber ausgesagt, wie sich zwei Punkte auf verschiedenen Fasern vergleichen lassen. Da es keine kanonische Art und Weise gibt, in der dieser Vergleich angestellt werden kann, muß eine Abbildung zwischen den Fasern zusätzlich zur vorhandenen Prinzipalbündelstruktur eingeführt werden.

$$4. \sigma_{\hat{R}_g p} = d\hat{R}_g \sigma_p \text{ mit } g \in G.$$

Bedingung 4 beschreibt die Verträglichkeit des Zusammenhangs mit der Operation der Gruppe G von rechts, die, wie bereits erwähnt, den zunächst scheinbar für jedes $p \in F_x = \pi^{-1}(x)$ frei wählbaren Zusammenhang stark einschränkt. $d\hat{R}_g$ ist dabei die linearisierte Abbildung von $\hat{R}_g$.

Sei $C : I \subset \mathbb{R} \rightarrow X$ vermöge $t \mapsto C(t)$ eine Kurve in X , die durch den Basispunkt x_0 führt, und $p_0 \in G_{x_0}$. Die Parallelverschiebung von p_0 entlang der Kurve C ist durch die Kurve $\hat{C}_{p_0} : I \subset \mathbb{R} \rightarrow P$, $x \mapsto \hat{C}$ gegeben, die durch

$$\frac{d\hat{C}_{p_0}(t)}{dt} = \sigma_p \frac{dC(t)}{dt}, \quad \hat{C}_{p_0}(0) = p_0, \quad \hat{C}(t) = p. \quad (2.5)$$

bestimmt ist. Die Lage der Kurve $\hat{C}_{p_0}$ ist dabei unabhängig von der Parametrisierung von C .

Da σ_p linear ist, ist das Bild von $T_x(X)$ unter σ_p am Punkt p ein vektorieller Unterraum von $T_p(P)$, der mit $H_p \equiv \sigma_p(T_x(X))$ bezeichnet wird und *horizontaler Vektorraum* am Punkte p heißt. Wegen der Eigenschaft 2 aus Def. 2.2 ist H_p isomorph zu $T_x(X)$ und hat daher die Dimension der Basis. Der Vektorraum $T_p(P)$ läßt sich als direkte Summe aus dem horizontalen Vektorraum H_p und dem Tangentialraum $T_p(G_x)$ zusammensetzen, der *vertikaler Vektorraum* V_p heißt:

$$\begin{aligned} T_p(P) &= H_p \oplus V_p \\ v &= v_H + v_V, \quad v_H \in H_p, v_V \in V_p \end{aligned}$$

Die Operation $\hat{R}_g$ legt durch $v_V(p) := \left. \frac{d(\hat{R}_{g(s)p})}{ds} \right|_{s=0}$ einen kanonischen Isomorphismus $\mathcal{I}$ zwischen der Liealgebra $\mathcal{G}$ der Gruppe G und V_p fest. Dabei wird $\hat{g} = \left. \frac{\partial g}{\partial s} \right|_{s=0} \in \mathcal{G}$ auf ein Element $v_V \in V_p$ abgebildet.⁷

Es ist möglich einen Zusammenhang mit Hilfe einer liealgebrawertigen 1-Form über P

$$\omega_p : T_p(P) \rightarrow \mathcal{G} \quad (2.6)$$

einzuführen, die folgende Eigenschaften erfüllen muß [CdWD91]:

1. $\omega_p(u) = \hat{u}$ für u aus dem vertikalen Vektorraum V_p . $\hat{u} = \mathcal{I}^{-1}u$ ist das Liealgebraelement, das über den kanonischen Isomorphismus mit u zusammenhängt.
2. ω_p erfüllt die C^k -Eigenschaft, d. h. ist k mal stetig differenzierbar bezüglich $p \in P$.
3. ω_p ist verträglich mit der Operation von rechts: $\omega_{\hat{R}_g p}(d\hat{R}_g v) = \text{Ad}_{g^{-1}} \omega_p(v)$.⁸

⁷Der kanonische Isomorphismus ist von großer Bedeutung, da ohne ihn kein Vergleich der Tangentialräume V_p zu verschiedenen Punkten $p \in P$ möglich wäre.

⁸ $\text{Ad}_g : \mathcal{G} \rightarrow \mathcal{G}$ ist definiert durch $\text{Ad}_g v = d(L_g R_g^{-1}) v$ und definiert für $g \in G$ die *adjungierte Darstellung* der Gruppe G über der Liealgebra: $\text{Ad} : G \rightarrow L(\mathcal{G}, \mathcal{G})$, $\text{Ad} : g \mapsto \text{Ad}_g$, wobei mit $L(\mathcal{G}, \mathcal{G})$ die linearen Automorphismen der Liealgebra bezeichnet wird.

Die Wirkung von ω_p auf allgemeine Vektoren des Tangentialraums $T_p(P)$ legt wie folgt einen Zusammenhang fest: Der Kern von ω_p hat die Dimension der Basis und legt durch $H_p = \text{Kern}(\omega_p) = \{v \in T_p(P) \mid \omega_p(v) = 0\}$ den horizontalen Vektorraum eines Zusammenhangs σ_p fest. Die Eigenschaften 1. bis 3. garantieren, daß die horizontalen Vektorräume H_p zu verschiedenen p zu ein und demselben Zusammenhang σ_p passen.

Diese Variante einen Zusammenhang zu definieren, bringt gegenüber σ_p im Grunde nichts neues. Sie ermöglicht jedoch die Konstruktion eines Zusammenhangs derart, daß die Bedingung der Verträglichkeit mit der Operation der Gruppe G von rechts „automatisch“ erfüllt wird. Dadurch spart man sich einerseits das Überprüfen der Bedingung 4 bzw. 3., andererseits braucht der Zusammenhang nur auf einem glatten Schnitt des Prinzipalbündels definiert zu werden. Der Nachteil dieser Konstruktion ist jedoch, daß man glatte Schnitte i. a. nicht global definieren kann.

Diese Konstruktion, die in der Physik gebräuchlich ist, geht nun so: Durch eine liealgebrawertige 1-Form $\bar{\omega} : T_x(X) \rightarrow \mathcal{G}$ und einen differenzierbaren Schnitt $f : X \rightarrow P$ wird ω_p für $p = f(x)$ gegeben durch

$$\omega_{f(x)}(v) = \bar{\omega}_x(d\pi v) + \hat{v}', \quad (2.7)$$

wobei $v' = v - (df \circ d\pi)v$ und $\hat{v}' = \mathcal{I}^{-1}v'$ ist. Dabei sei noch einmal daran erinnert, daß die linearisierten Abbildungen mit $d\pi$ notiert werden. Für Punkte $p \neq f(x)$ einer Faser des Prinzipalbündels kann ω_p über ihr Transformationsverhalten unter der Operation von rechts definiert werden:

$$\omega_p(v) = \text{Ad}_{g^{-1}} \omega_{f(x)}(d\hat{R}_g^{-1} v), \text{ wenn } p = \hat{R}_g f(x). \quad (2.8)$$

Daß ω_p die obigen Bedingungen erfüllt, ist sehr leicht nachzuprüfen.

Hat man andererseits ω_p gegeben und möchte $\bar{\omega}_x$ bestimmen, so kann dies mit Hilfe von

$$\bar{\omega} : u \in T_x(X) \mapsto \bar{\omega}_x(u) = (f^* \omega)_x(u) := \omega_{f(x)}(df u) \quad (2.9)$$

erreicht werden.

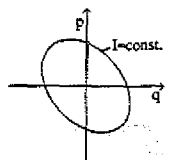
Zur Veranschaulichung betrachte das Prinzipalbündel $(\{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \times \mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2, \pi, U(1))$ aus Abschnitt 2.1. $\hat{R}_{g(s)}(x, \varphi) = e^{i\varphi} g(s)$, so daß sich der kanonische Isomorphismus zu $v_V(\dot{g}) = e^{i\varphi} \dot{g}$ für $\dot{g} \in \mathcal{G}$ ermittelt. Um jetzt einen Zusammenhang zu definieren, wählt man einen differenzierbaren Schnitt f , so daß jedem Ort $x \in \mathbb{R}^2$ eine Phase $e^{i\varphi_0(x)}$ ($x \in \mathbb{R}^2$) zugeordnet wird:

$$f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2 \times \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}, \quad x \mapsto (x, e^{i\varphi_0(x)}) \quad (2.10)$$

Mit Hilfe der $\mathcal{U}(1)$ -wertigen 1-Form $\bar{\omega} \equiv -iA_x dx : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathcal{U}(1)$,⁹ ergibt sich der Zusammenhang gemäß (2.7) auf dem Schnitt f zu

$$\begin{aligned} \omega_{f(x)}(v) &= -iA_x dx(d\pi v) + \hat{v}' \\ &= -iA_x dx(v_x) + id\varphi(d\hat{R}_{\varphi_0}^{-1} v) - i \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} dx(v_x), \end{aligned} \quad (2.11)$$

⁹ $\mathcal{U}(1)$ ist die Liealgebra von $U(1)$, die mittels des kanonischen Isomorphismus $v_V(p) = \frac{d(\hat{R}_{g(s)} p)}{ds} \big|_{s=0}$ auf V_p abgebildet wird.



wobei sich die letzte Gleichheit wie folgt berechnet: Das Liealgebraelement $\hat{v}' \in \mathcal{U}(1)$, das auf kanonische Weise zum vertikalen Vektor $v' \in V_{x,\varphi}$ gehört, wird durch $\hat{v}' = e^{-i\varphi_0} v'$ berechnet, und für v' gilt nach Definition:

$$\begin{aligned} v' &= v - (df \circ d\pi)v \\ &= \underbrace{\text{id}_{T_{\varphi_0}}(v) + dx(v)}_{=v} - ie^{i\varphi_0} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} dx(v_x) + dx(v_x) \\ &= e^{i\varphi_0} i \left[d\varphi(d\hat{R}_{\varphi_0}^{-1} v) - \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} dx(v_x) \right]. \end{aligned}$$

Für beliebige Punkte φ auf der Faser wird ω_φ durch die Operation von rechts erklärt (2.8):

$$\omega_\varphi(v) = \text{Ad}_{-\psi} \omega_{\varphi_0}(d\hat{R}_\psi^{-1} v) = -ie^{-i\psi} \omega_{\varphi_0}(d\hat{R}_\psi^{-1} v) ie^{i\psi} = \omega_{\varphi_0}(d\hat{R}_\psi^{-1} v)$$

($e^{i\varphi} = e^{i\varphi_0} e^{i\psi}$). Der Horizontalraum H_φ ist durch $\omega_\varphi(v_H) = 0$ charakterisiert, so daß

$$H_\varphi = \left\{ v \in \mathbb{R}^2 \times T_\varphi(U(1)_x) \mid d\varphi(d\hat{R}_\varphi^{-1} v) = A_x dx(v_x) + \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} dx(v_x) \right\}. \quad (2.12)$$

Somit ermittelt sich $\sigma_{x,\varphi}$, geschrieben als $T_{x,\varphi}(\{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \times \mathbb{R}^2)$ -wertige 1-Form über $T_x(\mathbb{R}^2)$, zu

$$\sigma_{x,\varphi}(v_x) = \begin{pmatrix} d\hat{R}_\varphi \left[A_x + \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right] dx(v_x) \\ dx(v_x) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

für alle $v_x \in T_x(\mathbb{R}^2)$. Der Zusammenhang bildet einen Punkt p_1 zum Basispunkt $x_1 \in \mathbb{R}^2$ entlang einer Kurve C in einen Punkt p_2 zum Basispunkt $x_2 \in \mathbb{R}^2$ ab: Sei $\hat{\phi}_x : U_x(1) \rightarrow U(1)$ zum Beispiel definiert durch $\hat{\phi}_x(p) := e^{i\psi(x)} \pi_2(p)$ mit $\psi(x) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ glatt. Dann ist

$$d\hat{R}_\varphi \left[A_x + \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right] dx(v_x) = i \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + A_x + \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right) e^{i(\psi(x) + \varphi(x))} dx(v_x), \quad (2.14)$$

so daß Integration

$$\hat{\phi}_{x_2}(p_2) = \hat{\phi}_{x_1}(p_1) e^{i[\psi(x_2) - \psi(x_1) + \int_C (A_x + \frac{\partial \varphi_0}{\partial x}) dx]} \quad (2.15)$$

liefert. Das Vektorpotential A induziert also zusammen mit dem Schnitt φ_0 im Prinzipalbündel $(\{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \times \mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2, \pi, U(1))$ einen Zusammenhang. Auf die physikalischen Implikationen dieses Zusammenhangs wird in Abschnitt 3.2 gesondert eingegangen.

Mit Hilfe des Begriffs der *Assoziiertheit* eines Faserbündels (E, X, π, F, G) mit typischer Faser F und Strukturgruppe G zu einem Prinzipalbündel (P, X, π, G) läßt sich, mit Hilfe eines Zusammenhangs auf dem Prinzipalbündel, eine Parallelverschiebung auf dem Faserbündel erklären.

Das Faserbündel (E, X, π, F, G) bzw. das Prinzipalbündel (P, X, π, G) habe bezüglich derselben Überdeckung $\{U_i, i \in J\}$ die lokalen Trivialisierungen $\phi_i : \pi^{-1}(U_i) \rightarrow U_i \times F$ und $\hat{\phi}_i : \pi^{-1}(U_i) \rightarrow F$ bzw. $\Phi_i : \pi^{-1}(U_i) \rightarrow U_i \times G$ und $\hat{\Phi}_i : \pi^{-1}(U_i) \rightarrow G$. Sei ferner $\rho(G)$ die Darstellung der Gruppe G auf der typischen Faser F . Dann heißt das

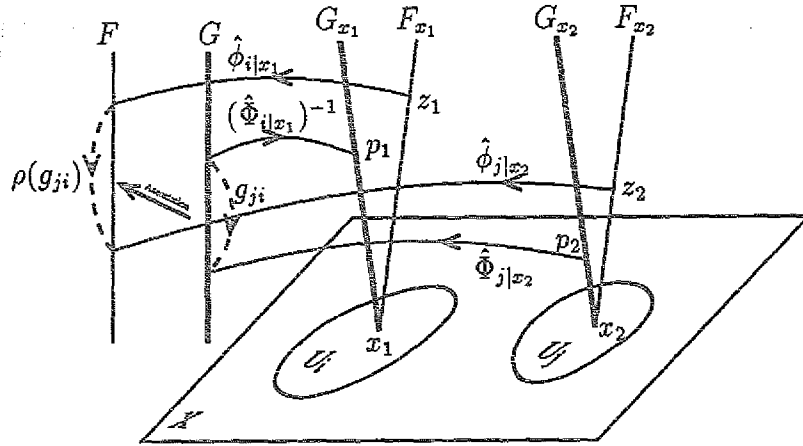


Abbildung 2.6: Die Assoziation eines Faserbündels zu einem Prinzipalbündel ermöglicht es, eine Parallelverschiebung auf dem Faserbündel zu erklären, wenn auf dem Prinzipalbündel ein Schnitt gegeben ist. Diese Abbildung veranschaulicht die Parallelverschiebungskonstruktion, die durch (2.16) definiert wird.

Faserbündel zum Prinzipalbündel *assoziiert*, falls zu den lokalen Trivialisierungen (U_i, Φ_i) des Prinzipalbündels lokale Trivialisierungen (U_i, ϕ_i) existieren, für die gilt [CdWD91]:

$$g_{ij} = \hat{\Phi}_{i|x} \circ \hat{\Phi}_{j|x}^{-1}, \quad \rho(g_{ij}) = \hat{\phi}_{i|x} \circ \hat{\phi}_{j|x}^{-1}$$

Die *Parallelverschiebung* eines Punktes $z_1 \in E$ mit Basispunkt $x_1 = \pi(z_1) \in X$ entlang einer Kurve C , die in einem Punkt $x_2 \in X$ endet, ist gegeben durch

$$\hat{\phi}_j(z_2) = \rho(\hat{\Phi}_j(p_2) \circ (\hat{\Phi}_i(p_1))^{-1}) \hat{\phi}_i(z_1), \quad (2.16)$$

wobei $p_2 \in P$ die Parallelverschiebung von $p_1 \in P$ mit $\pi(p_1) = x_1$ gemäß eines auf dem Prinzipalbündel erklärten Zusammenhangs ist (siehe Abbildung 2.6). Die Parallelverschiebung (2.16) ist unabhängig von der Wahl von p_1 und den lokalen Trivialisierungen (U_μ, ϕ_μ) und (U_μ, Φ_μ) ($\mu \in J$) [CdWD91].

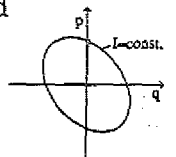
Zur Illustration betrachte das Faserbündel $(\mathbb{C} \times \mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2, \pi, U(1))$, das mit der Darstellung $\rho(e^{i\psi})z = e^{i\psi}z$ ($e^{i\psi} \in U(1)$) der Gruppe $U(1)$ zum Prinzipalbündel $(\{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \times \mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2, \pi, U(1))$ assoziiert ist. Wegen Def. 2.1 2 sind auf dem Faserbündel nur solche lokalen Trivialisierungen zugelassen, die durch ein Element von $\rho(U(1))$ aus einander hervorgehen.

Sei nun $\hat{\Phi}_x(p) := e^{i\psi(x)}\pi_2(p)$ eine Trivialisierung des Prinzipalbündels. Dann ist die assoziierte Trivialisierung durch $\hat{\phi}_x(z) := e^{i\psi(x)}z$ gegeben. Mit dem durch (2.13) definierten Zusammenhang erhält man die Parallelverschiebung entlang der Kurve C

$$\hat{\phi}_{x_2}(z_2) = \rho(e^{i[\psi(x_2) - \psi(x_1) + \int_C (A_x + \frac{\partial \varphi_0}{\partial x}) dx]}) \hat{\phi}_{x_1}(z_1), \quad (2.17)$$

d. h. die Zahl z bleibt betraglich unverändert und erhält eine zusätzliche Phase.

Als zweites Beispiel betrachte ein dynamisches System, das den n -dimensionalen Phasenraum M besitzt. Das triviale Bündel $(M \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G)$ mit der Zeitachse als Basis und



der typischen Faser M bildet mit der Strukturgruppe G der Diffeomorphismen auf M ein Faserbündel, das zum Prinzipalbündel $(G \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G)$ assoziiert ist. Mit Hilfe eines Zusammenhangs auf dem Prinzipalbündel der Diffeomorphismen wird auf dem Faserbündel ein Paralleltransport erklärt.

Die Elemente der Liealgebra $\mathcal{G}$ der Diffeomorphismen G sind die zugehörigen Vektorfelder $v \in \mathcal{G}$. Mit Hilfe der liealgebrawertigen 1-Form ω kann gemäß (2.6) auf $(G \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G)$ ein Zusammenhang erklärt werden. Sei $v(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{G}$ eine glatte liealgebrawertige Funktion über der Zeitachse. Definiere

$$\omega_{(\Phi, t)} = \text{Ad}_{\Phi^{-1}} \left[d\hat{R}_{\Phi}^{-1} - v(t)dt \right], \quad (2.18)$$

wobei $\Phi \in G_t$ ein Diffeomorphismus zum Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ ist. $\sigma_{(\Phi, t)}$ ist dann durch

$$\sigma_{(\Phi, t)} = \left(\frac{d\hat{R}_{\Phi} v(t)dt}{dt} \right) \quad (2.19)$$

gegeben, da der Kern von $\omega_{(\Phi, t)}$ den Horizontalraum H am Ort der Identität festlegt, der mit Hilfe von $d\hat{R}_{\Phi}$ in den Horizontalraum $H_{(\Phi, t)}$ an den Punkt (Φ, t) abgebildet wird.

Die Zeitentwicklung eines Diffeomorphismus ist somit gemäß (2.5) durch die Differentialgleichung

$$\frac{d\Phi_t}{dt} = d\hat{R}_{\Phi} v(t) \quad (2.20)$$

bestimmt.

Betrachte nun einen beliebigen Punkt des Phasenraums $x_0 \in M$ zum Zeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}$. Gemäß (2.16) ist eine Vorschrift für die Parallelverschiebung von (x_0, t_0) entlang der Zeitachse erklärt durch

$$\hat{\phi}(x, t) = \Phi_{t-t_0} \hat{\phi}(x_0, t_0), \quad (2.21)$$

da die Darstellung ρ per Definition von G der Identität entspricht, und $\Phi_{t-t_0} := \Phi_t \Phi_{t_0}^{-1}$.

Wählt man auf dem Faserbündel $(M \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G)$ die Trivialisierung $(\mathbb{R}, \hat{\phi})$, wobei $\hat{\phi}$ vom Basispunkt $t \in \mathbb{R}$ unabhängig ist (man wählt zu allen Zeiten dasselbe Koordinatensystem), und so läßt sich die durch den obigen Zusammenhang erklärte Parallelverschiebung durch die folgende Differentialgleichung beschreiben ($y = \hat{\phi}(z) \in M$):

$$\frac{dy}{dt} = v(y, t) \quad (2.22)$$

Die Parallelverschiebung durch das Vektorfeld v ist also äquivalent zum Anfangswertproblem (2.22) zum Anfangswert (y_0, t) .

2.3 Holonomie

Für verschiedene Punkte $x_1 \neq x_2 \in X$ der Basis eines Prinzipalbündels (P, X, π, G) können die Koordinaten auf den zugehörigen Fasern nahezu beliebig gewählt werden,

sie müssen lediglich so gewählt sein, daß sie Unterkoordinaten eines stetig differenzierbaren Bündelkoordinatensystems auf der Mannigfaltigkeit P bilden. Die Festlegung der Koordinaten auf den Fasern des Bündels geschieht durch *Eichung*.

Ein Zusammenhang auf dem Prinzipalbündel legt eindeutig fest, wie ein Punkt $p_1 \in P$ ($\pi(p_1) = x_1$) in einen Punkt $p_2 \in P$ ($\pi(p_2) = x_2 \neq x_1$) entlang einer Kurve C parallelverschoben wird. Durch geeignete Eichung können den beiden Punkten jedoch unabhängig von einander beliebige Koordinaten zugewiesen werden, also zum Beispiel auch dieselben Koordinaten.

Wird der Punkt jedoch entlang einer geschlossenen Kurve (*Schleife, Zyklus*) parallelverschoben, so liegen Anfangs- und Endpunkt auf derselben Faser $G_{x_1=x_2}$. Die Eichung ermöglicht zwar die freie Wahl des Koordinatensystems auf der Faser, jedoch werden dadurch gleichzeitig die Koordinaten beider Punkte festgelegt.

Durch jeden Zyklus C wird ein Diffeomorphismus $C : G_x \rightarrow G_x$ der Faser G_x auf sich erzeugt, der mit der Rechtsoperation von G kommutiert. Die Inverse Abbildung C^{-1} ist gerade durch den Paralleltransport entlang der Kurve C in entgegengesetzter Richtung gegeben.

Betrachte nun die Menge $\mathcal{C}_x$ aller Zyklen, die von einem Basispunkt $x \in X$ ausgehen. Die durch den Paralleltransport entlang dieser Zyklen erzeugten Abbildungen $C : G_x \rightarrow G_x$ bilden mit dem hintereinander ausgeführten Paralleltransport entlang zweier Zyklen C_1 und C_2 eine Gruppe, die sogenannte *Holonomiegruppe* $\mathcal{H}$. Die Untergruppe, die alle Zyklen enthält, die in X 0-homotop sind,¹⁰ nennt man die *eingeschränkte Holonomiegruppe* $\mathcal{H}_0$.

Die Holonomiegruppe $\mathcal{H}$ am Punkte $x \in X$ kann mit einer Untergruppe der Strukturgruppe G identifiziert werden: Durch Paralleltransport des Punktes $p \in P$ ($\pi(p) = x$) entlang eines Zyklus gelangt man an den Punkt $C(p) \in G_x$, so daß ein $a \in G$ existiert, mit $C(p) = \hat{R}_a p$. Falls nun $a_1, a_2 \in G$ zu den Zyklen C_1 und C_2 gehören, gehört $a_1 a_2 \in G$ zum Zyklus $C_1 C_2$, da $\hat{R}_{a_1} \hat{R}_{a_2} = \hat{R}_{a_1 a_2}$. $\square$

Betrachte als Beispiel das Prinzipalbündel $(\{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \times \mathbb{R}^2, \pi, U(1))$, auf dem ein Zusammenhang durch ein Vektorpotential A_x und einen Schnitt $f : x \in \mathbb{R}^2 \mapsto (x, e^{i\varphi_0}) \in \mathbb{R}^2 \times \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$ erklärt ist (siehe Abschnitt 2.2).

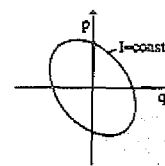
Entlang einer beliebigen (nichtgeschlossenen) Kurve C , die die Punkte x_1 und x_2 der Basis verbindet, hängt die Phasendifferenz gemäß (2.15) von der Eichung $\hat{\phi}_x(p) = e^{i\psi(x)p}$ ab. Ein Wechsel der ortsabhängigen Referenzphase $\psi(x)$ ist durch *Umeichung* möglich:

$$A'_x = A_x + \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

addiert $\varphi(x)$ zur Phase $\psi(x)$. Durch geeignete Wahl von $\varphi(x)$ läßt sich die Phasendifferenz beliebig einstellen:

$$\hat{\phi}_{x_2}(p_2) = \hat{\phi}_{x_1}(p_1) e^{i[\psi(x_2) - \psi(x_1) - \varphi(x_2) + \varphi(x_1) + \int_C (A_x + \frac{\partial \varphi}{\partial x}) dx]} \quad (2.23)$$

¹⁰0-homotop: Zusammenziehbar auf einen Punkt.



Entlang eines Zyklus C jedoch verschwinden die Beiträge, die durch φ und ψ zustande kommen. Die Phasendifferenz wird eindeutig:

$$\hat{\phi}_{x_2=x_1}(p_2) = \hat{\phi}_{x_1}(p_1) e^{i \oint_C A_x dx} \quad (2.24)$$

$e^{i \oint_C A_x dx}$ ist ein Element der Holonomiegruppe $\mathcal{H}$ und gleichzeitig der Strukturgruppe $U(1)$.

Schneidet man in die Basis $\mathbb{R}^2$ des obigen Prinzipalbündels ein „Loch“, so hängt die Basis $\mathcal{M}^2 \subset \mathbb{R}^2$ *nicht* einfach zusammen. Das einen Zusammenhang definierende Vektorpotential A_x sei nun so gewählt, daß $\text{rot } A_x \equiv 0$ überall in $\mathcal{M}^2$, und $\oint_C dx A_x = \text{const.} \neq 0$ für alle Kurven C gilt, die das „Loch“ einfach in positivem Sinn umschließen, d. h. nicht 0-homotop in $\mathcal{M}^2$ sind.

Wegen $\text{rot } A_x \equiv 0$ besteht die eingeschränkte Holonomiegruppe $\mathcal{H}_0$ nur aus der Identität, die trivialerweise eine Untergruppe der Strukturgruppe $U(1)$ bildet. Die Holonomiegruppe $\mathcal{H}$ selbst wird durch das Element $e^{i \oint_C dx A_x}$ erzeugt, ist also, falls $e^{i \oint_C dx A_x}$ eine Einheitswurzel ist, eine endliche Untergruppe der $U(1)$. Ist $e^{i \oint_C dx A_x}$ keine Einheitswurzel, liegt die Holonomiegruppe $\mathcal{H}$ in der Strukturgruppe $U(1)$ dicht.

Kapitel 3

Die Berryphase

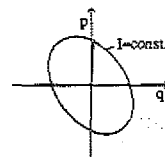
Sowohl in der Quanten- als auch in der klassischen Mechanik sind, seit der Entdeckung der geometrischen Berryphase im Jahre 1983 [B84], Holonomieeffekte unter diversen Bedingungen gefunden worden. Die *Berryphase* ist wegen der relativen Einfachheit der mathematischen Hintergründe als einführendes Beispiel für Holonomieeffekte in dynamischen Systemen besonders geeignet, und wird daher in diesem Abschnitt vorgestellt und in den mathematischen Rahmen von Kapitel 2 eingeordnet.

Abschnitt 3.1 beschreibt zunächst die quantenmechanische Adiabatentheorie vor der Entdeckung der Berryphase. Es wird gezeigt, warum M. BORN und V. FOCK bei der Ableitung des Adiabatentheorems Holonomieeffekte außer Acht gelassen haben. In Abschnitt 3.2 wird die Adiabatentheorie auf Quantensysteme angewendet, die von einem Satz adiabatisch veränderter Parameter abhängen. In solchen Systemen ist bei Durchlaufen eines Zyklus im Parameterraum das Auftreten einer Berryphase möglich, die der Originalarbeit von M. BERRY folgend hergeleitet wird [B84]. Anschließend werden die notwendigen Bedingungen und typische Beobachtungssituationen für das Auftreten von Berryphasen diskutiert.

3.1 Das quantenmechanische Adiabatenprinzip

In vielen physikalischen Situationen lassen sich äußere Einflüsse auf das betrachtete System durch äußere Parameter beschreiben. Dabei wird angenommen, daß der Einfluß des Systems selbst auf die „Außenwelt“ nur vernachlässigbar schwach ist. Die zeitliche Entwicklung der äußeren Parameter wird dann von „außen“ vorgegeben und nicht durch die Dynamik des betrachteten Systems mitbestimmt. Sind die äußeren Parameter zeitlich konstant, so ist das System *autonom*, während man im Fall veränderlicher Parameter von einem *nichtautonomen* System spricht.

Im allgemeinen ist die Berechnung der Dynamik eines nichtautonomen Systems, im Vergleich zu demselben System bei festgehaltenen äußeren Parametern, sehr schwierig. Häufig werden nämlich durch die zeitliche Veränderung innere Symmetrien des Systems gebrochen, so daß die entsprechenden Konstanten der Bewegung nicht mehr existieren.



Ist jedoch die äußere Veränderung im Vergleich zur inneren Dynamik des Systems sehr langsam (*adiabatische Näherung*), so vereinfacht sich die quantenmechanische Dynamik dieses nichtautonomen Systems und läßt sich mit kontrollierbarem Fehler durch das Lösen von autonomen Systemen bestimmen. Den mathematischen Hintergrund dieser Näherung liefert das *quantenmechanische Adiabatentheorem*, das bereits Ende der zwanziger Jahre im wesentlichen von M. BORN und V. FOCK entwickelt wurde [B26, F28, BF28].¹ Da die adiabatische Dynamik quantenmechanischer Systeme bei der Berryschen Herleitung der geometrischen Phase eine fundamentale Rolle spielt, wird auf sie an dieser Stelle ausführlich eingegangen.

Betrachte ein gebundenes quantenmechanisches System mit Hamiltonoperator $\hat{H}(\tau)$, der von einem äußeren Parameter $\tau \in [0, 1]$ abhängt. Zu festem $\tau \in [0, 1]$ betrachte die gebundenen Zustände des Systems $|\nu, \tau\rangle$ zum Eigenwert $E_\nu(\tau)$, die die stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H}(\tau)|\nu, \tau\rangle = E_\nu(\tau)|\nu, \tau\rangle \quad (3.1)$$

erfüllen. Die zeitliche Entwicklung eines solchen Zustands bei festem τ ergibt sich zu

$$|\nu, \tau(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_\nu(\tau)t} |\nu, \tau(0)\rangle, \quad (3.2)$$

d. h. bis auf die *dynamische* Phase $e^{-\frac{i}{\hbar} E_\nu(\tau)t}$ ändert sich am Zustand des Systems nichts, falls es in einem Eigenzustand zum Hamiltonoperator präpariert ist.

Die Zeitentwicklung eines beliebigen Zustands $|\psi\rangle$ kann nun durch Entwicklung von $|\psi\rangle$ nach den Eigenzuständen $|\nu, \tau\rangle$ gemäß

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\nu e^{-\frac{i}{\hbar} E_\nu(\tau)t} |\nu, \tau(0)\rangle \langle \nu, \tau(0) | \psi(0) \rangle \quad (3.3)$$

berechnet werden, so daß das allgemeine Schrödingerproblem für festes τ gelöst ist.

Diese Lösung gestaltet sich dadurch verhältnismäßig einfach, daß das autonome System zeitlich translationsinvariant ist. Variiert man jedoch den Parameter τ als Funktion der Zeit, so verliert das System diese Symmetrie und eine Lösung nach dem obigen Verfahren ist nicht mehr möglich.

Ist jedoch die zeitliche Veränderung des Hamiltonoperators hinreichend langsam und das System in einem Zustand ν , dessen Eigenwert E_ν vom Rest des Spektrums während der ganzen Entwicklung bis auf vereinzelte Zeitpunkte hinreichend weit entfernt ist, so bleibt das System zu jedem Zeitpunkt im ν -ten Eigenzustand zum *instantanen* Hamiltonoperator $\hat{H}(t/T)$. Etwas mathematischer lautet dieses Adiabatentheorem wie folgt:²

Satz 3.1 (Adiabatentheorem (M. BORN und V. FOCK 1928)) Sei $\hat{H} : \tau \in [0, 1] \mapsto \hat{H}(\tau)$ ein parameterabhängiger Hamiltonoperator, wobei sich τ zeitlich gemäß $\tau = t/T$

¹BORN und FOCK betrachteten nur Quantensysteme, deren gesamtes Spektrum diskret und nur in Ausnahmefällen entartet ist. Eine Erweiterung des Adiabatentheorems auf Quantensysteme mit einem Spektrum, das fern vom betrachteten Quantenzustand beliebig entartet oder kontinuierlich sein kann, wurde 1950 von T. KATO veröffentlicht [K50]. Sie spielt für die folgenden Betrachtungen keine wesentliche Rolle.

²Für eine ausführliche Darstellung siehe [BF28].

verändert. Zum Zeitpunkt $t = 0$ befinde sich das Quantensystem im Eigenzustand $|\nu, \tau(0)\rangle$ zum Hamiltonian $\hat{H}(0)$ mit Eigenwert $E_\nu(0)$. Sind die Matrizenelemente $\langle \mu, \tau | \frac{\partial}{\partial \tau} | \nu, \tau \rangle$ für alle $\tau \in [0, 1]$ absolut beschränkt, und ist der ν -te Eigenzustand nur zu bestimmten Zeitpunkten τ_0 mit anderen Zuständen entartet, so daß

$$\frac{1}{\left| \frac{dE_\mu}{d\tau} - \frac{dE_\nu}{d\tau} \right|} < \frac{A}{|\tau - \tau_0|^r}, \quad \mu \neq \nu \quad (3.4)$$

gilt, wobei A und r geeignete von τ unabhängige Konstante sind, so sind die Matrixelemente $c_{\mu\nu}$ des Zeitentwicklungsoperators dargestellt in der instantanen Basis $|\nu, \tau\rangle$ zu jedem Zeitpunkt von der Form

$$c_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \mathcal{O}\left(T^{-\frac{1}{r+1}}\right), \quad (3.5)$$

d. h. das System ist im adiabatischen Limes $T \rightarrow \infty$ zu jedem Zeitpunkt im instantanen Eigenzustand zum Hamiltonoperator $\hat{H}(\tau)$.

Das Adiabatentheorem 3.1 besagt, daß für sehr große T das System nach Vollendung der adiabatischen Entwicklung mit der Wahrscheinlichkeit $|c_{\mu\nu}|^2 = \mathcal{O}\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right)$ in einen Zustand mit anderer Quantenzahl $\mu \neq \nu$ übergegangen ist. Ebenfalls ist nach (3.5) die Wahrscheinlichkeit im Zustand zur Quantenzahl ν zu verharren $|c_{\nu\nu}|^2 = 1 - \mathcal{O}\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right)$. Im Limes $T \rightarrow \infty$ bleibt das System also für alle τ in einem Zustand, der sich nur durch eine Phase von $|\nu, \tau\rangle$ unterscheidet.

Die Zeitentwicklung des Zustands $|\nu, 0\rangle$ unter der Schrödingerschen Dynamik ist

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H}(t/T) |\psi\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |\nu, 0\rangle. \quad (3.6)$$

Unter adiabatischer Entwicklung kann $|\psi\rangle$ nach Satz 3.1 in der Form $|\psi\rangle = e^{i\gamma_\nu(t)} |\nu, t/T\rangle$ dargestellt werden, so daß, eingesetzt in (3.6)

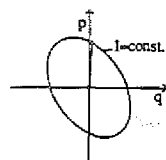
$$\frac{d}{dt} \gamma_\nu = -\frac{1}{\hbar} E_\nu(t/T) + i \left\langle \nu, t/T \left| \frac{d}{dt} \right| \nu, t/T \right\rangle \quad (3.7)$$

folgt.

Über diese Phase machten M. BORN und V. FOCK aus dem folgenden Grund keine Aussage:³ Der Zustand $|\nu, \tau\rangle$ ist für jedes τ nur bis auf eine beliebige, stetig differenzierbare Phase $\gamma_\nu^{(0)}(\tau)$ bestimmt. Der Wert γ_ν der Phase hängt stark von der Wahl der Phase $\gamma_\nu^{(0)}(\tau)$ der Basisfunktionen ab und kann durch geeignete Wahl der $|\nu, \tau\rangle$ jeden beliebigen Wert annehmen. Eine solche Umeichung der Phase nehmen BORN und FOCK vor und wählten die Phasen der Basisfunktionen gerade so, daß der Term $\left\langle \nu, t/T \left| \frac{d}{dt} \right| \nu, t/T \right\rangle$ für alle τ verschwindet ([BF28] (3)).

Dieser Term kann i. a. nur über einem 1-dimensionalen Parameterraum (der Zeitachse) weggeegicht werden. In höherdimensionalen Parameterräumen ist dies i. a. nicht möglich,

³In [F28] wird die Phase ausführlich diskutiert.



da Bündel über mehrdimensionalen Basisräumen nichttriviale Holonomiegruppen besitzen können. Die aufgrund dieses Terms zusätzlich auftretenden Holonomieeffekte wurden daher von BORN und FOCK übersehen und erst ab 1983 systematisch untersucht [B84].

In der Sprache von Kapitel 2 kann die quantenmechanische Dynamik wie folgt formuliert werden: Auf einem Hilbertraum operiere der Hamiltonoperator $\hat{H}(\tau)$, der mit Hilfe der Schrödingergleichung (3.6) einen Fluß auf dem Hilbertraum definiert. Betrachte nun das Prinzipalbündel $(\{U\} \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, \{U\})$ der unitären Transformationen des Hilbertraums über der Zeitachse. Durch die Schrödingergleichung wird auf diesem Prinzipalbündel ein Zusammenhang definiert, der durch

$$\sigma_{(U,t)} = \left(d\hat{R}_U \left(\frac{-i}{\hbar} \hat{H}(\tau) \right) \frac{dt}{dt} \right), \quad (3.8)$$

gegeben ist.⁴ Die einzelnen Fasern hängen gemäß

$$\hat{\Phi}_t(U(t)) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(\tau) d\tau} \hat{\Phi}_0(U(0)) \quad (3.9)$$

zusammen, wobei $(\mathbb{R}, \Phi_t)$ eine Trivialisierung (Eichung) des Prinzipalbündels darstellt. Da die Basis dieses Prinzipalbündels eindimensional ist, gibt es nur die triviale Holonomie $\mathcal{H} = \{\text{id}\}$.

Im adiabatischen Limes ($T \rightarrow \infty$) kann der Zusammenhang (3.8) durch

$$\sigma_{(U,t)}^{\text{ad}} = \left(d\hat{R}_U \left(\sum_{\nu} |\nu, \tau\rangle \left(-\frac{i}{\hbar} E_{\nu}(\tau) - \frac{1}{T} \left\langle \nu, \tau \left| \frac{d}{d\tau} \right| \nu, \tau \right\rangle \right) \langle \nu, \tau| \right) \frac{dt}{dt} \right) \quad (3.10)$$

dargestellt werden. Beschränkt man sich nun bei der Betrachtung auf einen eindimensionalen Eigenraum, der durch $|\nu, \tau\rangle$ aufgespannt wird, so kann das Prinzipalbündel $(\{U\} \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, \{U\})$ auf $(U(1) \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, U(1))$ reduziert werden (siehe Abschnitt 2.2). Der Zusammenhang (3.10) führt nicht aus dem Unterraum heraus, der durch $|\nu, \tau\rangle$ aufgespannt wird, so daß der auf $(U(1) \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, U(1))$ reduzierte Zusammenhang der quantenmechanischen Bewegung entspricht.

Betrachtet man also speziell einen Eigenzustand $|\nu, \tau\rangle$ zum instantanen Hamiltonoperator $\hat{H}(\tau)$, so reicht es aus, den Zusammenhang

$$\sigma_{(\gamma,t)}^{(1)} = \left(d\hat{R}_{\gamma} \left(-\frac{i}{\hbar} E_{\nu}(\tau) - \frac{1}{T} \left\langle \nu, \tau \left| \frac{d}{d\tau} \right| \nu, \tau \right\rangle \right) \frac{dt}{dt} \right) \quad (3.11)$$

auf dem Prinzipalbündel $(U(1) \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, U(1))$ zu untersuchen.

3.2 Herleitung der Berryphase und Interpretation

Häufig ist die Zeitabhängigkeit des Quantensystems über die zeitliche Veränderung eines k -dimensionalen Parametersatzes $Q \in \mathcal{M}_Q^k \subset \mathbb{R}^k$ realisiert. Der Hamiltonoperator $\hat{H}(Q)$

⁴ $\sigma_{(U,t)}$ ist hier eine $T_{(U,t)}(\{U\} \times \mathbb{R})$ -wertige 1-Form.

ist dann eine Funktion des Parametersatzes $Q \in \mathcal{M}_Q^k$, der sich zeitlich entlang einer Kurve

$$C : [0, 1] \rightarrow \mathcal{M}_Q^k, \quad \tau \mapsto Q(\tau), \quad (\tau = t/T) \quad (3.12)$$

im Parameterraum entwickelt. Im Limes $T \rightarrow \infty$ wird die Kurve C adiabatisch langsam durchlaufen und das Adiabatentheorem 3.1 kann angewendet werden.

Für diesen Fall untersuchte M. BERRY die Dynamik eines Quantensystems, wobei er als Anfangswert einen nichtentarteten Eigenzustand $|\nu, Q(0)\rangle$ des instantanen Hamiltonoperators $\hat{H}(Q(0))$ wählte [B84]. Der Ansatz $|\psi\rangle = e^{i\gamma_\nu(t)}|\nu, Q(t/T)\rangle$ für die adiabatische Dynamik wird in die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}(Q(t/T))|\psi\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |\nu, Q(0)\rangle \quad (3.13)$$

eingesetzt und führt auf die Bewegungsgleichung für die Phase γ_ν

$$\frac{d}{dt}\gamma_\nu = -\frac{1}{\hbar}E_\nu(Q(t/T)) + i\left\langle \nu, Q(t/T) \left| \frac{\partial}{\partial Q} \right| \nu, Q(t/T) \right\rangle \frac{1}{T} \frac{dQ}{d\tau}, \quad (3.14)$$

wobei die Eigenzustände $|\nu, Q\rangle$ stetig differenzierbar auf $\mathcal{M}_Q^k$ sind, und die Phase dieser Zustände willkürlich gewählt werden kann⁵. Die Phase γ_ν läßt sich leicht integrieren gemäß

$$\begin{aligned} \gamma_\nu &= -\frac{1}{\hbar} \int dt E_\nu(Q(t/T)) + i \int dt \left\langle \nu, Q(t/T) \left| \frac{\partial}{\partial Q} \right| \nu, Q(t/T) \right\rangle \frac{1}{T} \frac{dQ}{d\tau} \\ &= \underbrace{-\frac{1}{\hbar} \int dt E_\nu(Q(t/T))}_{=: \gamma_{\nu_{\text{dyn}}}} + i \underbrace{\int_C dQ \left\langle \nu, Q \left| \frac{\partial}{\partial Q} \right| \nu, Q \right\rangle}_{=: \gamma_{\nu_{\text{geo}}}} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Das erste Integral $\gamma_{\nu_{\text{dyn}}}$ ist der gewohnte *dynamische* Anteil der Phase. Das zweite Integral $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}$ (*geometrische Phase*) ist nicht explizit zeitabhängig, sondern hängt nur von der Kurve C im Parameterraum und der Quantenzahl ν ab. Wegen der Freiheit der Phase bei der Wahl der Basiszustände $|\nu, Q\rangle$ ist die Phase $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}$ für nichtgeschlossene Kurven C nicht eindeutig bestimmt, und ihrem absoluten Wert kommt physikalisch keine Bedeutung zu.

Anders ist die Situation jedoch im Fall geschlossener Kurven C . $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}$ ist in diesem Fall durch

$$\gamma_{\nu_{\text{geo}}} = i \oint_C dQ \left\langle \nu, Q \left| \frac{\partial}{\partial Q} \right| \nu, Q \right\rangle \quad (3.16)$$

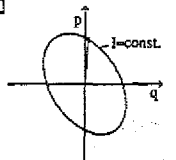
bestimmt, wobei Umeichungen

$$|\nu, Q\rangle \mapsto e^{i\varphi(Q)}|\nu, Q\rangle \quad (3.17)$$

⁵Daß der zweite Term rechts in (3.14) eine reelle Größe ist, folgt aus der Normierung des Zustands $|\nu, Q\rangle$:

$$0 = \frac{d}{dt} \langle \nu, Q | \nu, Q \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \nu, Q | \right) |\nu, Q\rangle + \langle \nu, Q | \left(\frac{d}{dt} |\nu, Q\rangle \right)$$

Mit $\langle 1|2\rangle = \overline{\langle 2|1\rangle}$ folgt, daß $\langle \nu, Q | \left(\frac{d}{dt} |\nu, Q\rangle \right)$ unter komplexer Konjugation das Vorzeichen wechselt und somit rein imaginär ist. $\square$



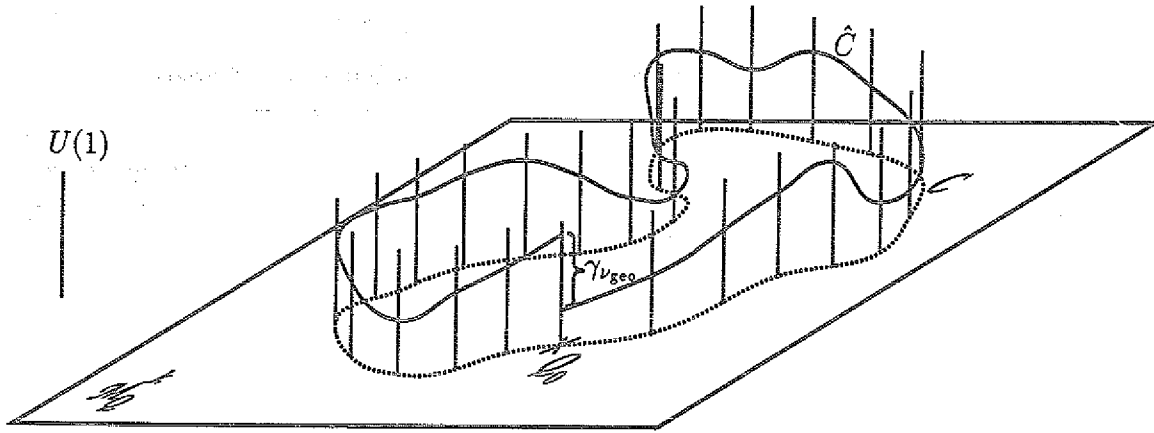


Abbildung 3.1: Nichtverschwindende Phase $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}$ für eine Schleife im Parameterraum.

den Wert von $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}$ in (3.16) wegen

$$\forall \varphi(Q) \in C^1(\mathcal{M}_Q^k): \oint_C dQ \frac{\partial \varphi}{\partial Q} \equiv 0$$

nicht beeinflussen. Für geschlossenen Kurven C ist $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}$ *eichinvariant*. Diese Größe wird nach ihrem Entdecker *Berryphase* genannt.

Zur mathematischen Interpretation dieser Phase betrachte das $U(1)$ -Prinzipalbündel $(U(1) \times \mathcal{M}_Q^k, \mathcal{M}_Q^k, \pi, U(1))$ der Phasen des ν -ten Quantenzustands, auf dem sich durch die adiabatische Dynamik des Quantenzustands auf natürliche Weise der Zusammenhang

$$\sigma_{(\gamma, Q)} = \left(d\hat{R}_\gamma \left(i \langle \nu, Q | \frac{\partial}{\partial Q} | \nu, Q \rangle \right) dQ \right) \quad (3.18)$$

definieren läßt. Die Phasen $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}(Q_0, C)$ für alle geschlossenen Kurven C , die am Punkte Q_0 starten und enden, bilden die Holonomiegruppe $\mathcal{H}$ des Zusammenhangs (3.18) am Orte Q_0 (Abbildung 3.1).

Bezeichnet man mit H_ν den durch den Zustand $|\nu, Q\rangle$ aufgespannten 1-dimensionalen Hilbertraum, so bildet $(H_\nu \times \mathcal{M}_Q^k, \mathcal{M}_Q^k, \pi, U(1))$ ein zum obigen Prinzipalbündel assoziiertes Faserbündel. Der Zusammenhang $\sigma_{(\gamma, Q)}$ induziert auf diesem Faserbündel gemäß (2.16) aus Abschnitt 2.2 eine Parallelverschiebungsvorschrift, die bei „Verschiebung“ des Quantensystems entlang einer Kurve C im Parameterraum die Phase des Quantenzustands festlegt. Ist die Holonomiegruppe des Prinzipalbündels nichttrivial, dann führt eine Parallelverschiebung entlang einer Schleife C im Parameterraum zu einem Zustand, der sich um die Berryphase $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}$ vom Ausgangszustand unterscheidet.

Zum Abschluß dieses Abschnitts wird noch ein Beispiel für eine nichtverschwindende Berryphase gegeben [B84], das mit dem Aharonov-Bohm-Effekt verwandt ist. Betrachte ein in einem Kasten eingeschlossenes geladenes Teilchen ($e = 1$). Der Kasten wird, wie in

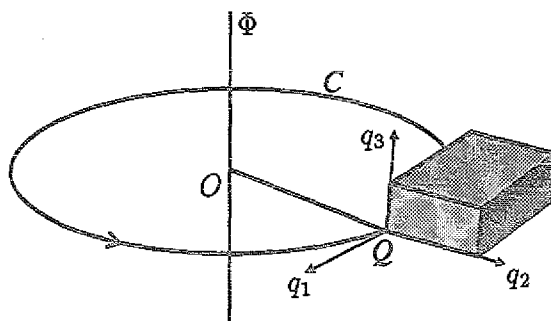


Abbildung 3.2: Wird ein geladenes quantenmechanisches Teilchen in einem Kasten um einen magnetischen Fluß Φ herumgeführt, so erhält die Wellenfunktion nach Umlaufen des Flußes eine Berryphase, die $\Phi/\hbar$ entspricht.

Abbildung 3.2 dargestellt, auf der Kurve C um einen linienförmigen magnetischen Fluß Φ herumgeführt. Außerhalb der Flußlinie Φ soll das magnetische Feld verschwinden, so daß zwar die Rotation des Vektorfeldes $A(Q)$ im Außenraum ($\text{rot } A = 0$), jedoch A selbst nicht überall verschwindet, da

$$\Phi = \oint_C dQ A(Q). \quad (3.19)$$

Mit $Q \in \mathbb{R}^3$ seien die kartesischen Koordinaten eines Referenzpunktes des Kastens benannt, während $q \in \mathbb{R}^3$ die Lage eines Punktes bezüglich dieses Referenzpunktes beschreibt.

Bei *abgeschaltetem* magnetischem Fluß Φ , ist eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators in Ortsdarstellung (von O aus gemessen) durch

$$\psi_\nu(q, Q) := e^{i\varphi(Q)} \psi_\nu(q) = \langle Q + q | \nu, Q \rangle \quad (3.20)$$

gegeben, wobei $\varphi(Q) \in C^1(\mathcal{M}_Q^k)$ eine auf $\mathcal{M}_Q^k$ glatte Phase und $\psi_\nu(q)$ eine reelle Lösung der stationären Schrödingergleichung des Teilchens im Kasten bezüglich der Relativkoordinaten q ist.

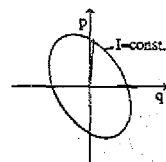
Bei eingeschaltetem magnetischen Feld kommt zur feldfreien Lösung (3.20) lediglich ein zusätzlicher Phasenterm hinzu, so daß die Wellenfunktion in Ortsdarstellung

$$\langle Q + q | \nu, Q \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \int_Q^{Q+q} dq' A(q')} \psi_\nu(q, Q) \quad (3.21)$$

lautet. $\langle Q + q | \nu, Q \rangle$ ist eine eindeutige, glatte Funktion des Ortes, da das Integral, wegen $\text{rot } A = 0$, nicht vom Weg abhängt.⁶ Die Berrysche 1-Form ermittelt sich zu

$$\begin{aligned} i \left\langle \nu, Q \left| \frac{\partial}{\partial Q} \right| \nu, Q \right\rangle &= i \int d^3q \bar{\psi}_\nu(q, Q) \left\{ -\frac{i}{\hbar} A(Q) \psi_\nu(q, Q) + \frac{\partial}{\partial Q} \psi_\nu(q, Q) \right\} \\ &= \frac{1}{\hbar} A(Q) - \frac{\partial \varphi}{\partial Q}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

⁶Die eingeschränkte Holonomiegruppe $\mathcal{H}_0$ ist trivial (siehe Abschnitt 2.3).



Integriert man (3.22) entlang einer Kurve C , die den Fluß umschließt, so folgt:

$$\gamma_{\nu_{\text{geo}}}(C) = \frac{1}{\hbar} \oint_C dQ A(Q) - \oint_C dQ \frac{\partial \varphi}{\partial Q} = \frac{\Phi}{\hbar} \quad (3.23)$$

Das zweite Integral verschwindet für jede Wahl der Eichung $\varphi(Q)$ identisch, da es ein Ringintegral über eine exakte 1-Form ist. Die Berryphase stimmt mit der Aharonov-Bohm-Phase überein und hängt in diesem speziellen Beispiel nicht von der Quantenzahl ν ab. Wie in Abschnitt 6.1 gezeigt wird, ist dies der Grund dafür, daß dieser Effekt klassisch nicht beobachtbar ist.

3.3 Das Auftreten der Berryphase

3.3.1 Notwendige Bedingungen

Aus den vorhergehenden beiden Abschnitten geht hervor, daß die Dimension k des Parameterraums $\mathcal{M}_Q^k$ für das Auftreten einer nichttrivialen Holonomie von Bedeutung ist. So kann zum Beispiel für $k = 1$ keine nichttriviale Holonomie auftreten, was dazu führte, daß M. BORN und V. FOCK die Holonomieeffekte bei der adiabatischen Entwicklung eines Quantensystems übersahen. Damit eine nichttriviale Holonomie auftreten kann, muß die Dimension k mindestens zwei betragen.

Ferner darf das System nicht gegen *antiunitäre*⁷ Transformationen $\hat{T}$ invariant sein [RB92], da die eingeschränkte Holonomiegruppe ansonsten trivial ist, und die Berryphase identisch verschwindet. Zum Beweis betrachte ein System, das die antiunitäre Symmetrie $\hat{T}$ besitzt. Der Hamiltonoperator $\hat{H}$ kommutiert mit $\hat{T}$ und Erwartungswerte gehen in ihr Komplex-Konjugiertes über:

$$\hat{H}\hat{T} = \hat{T}\hat{H}, \quad \langle \hat{T}\phi | \hat{T}\psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle \quad (3.24)$$

Somit geht das Matrixelement $\langle \nu, Q | d\nu, Q \rangle$ ($|d\nu, Q\rangle := dQ \frac{\partial}{\partial Q} |\nu, Q\rangle$), das im Fall der Existenz einer nichtverschwindenden Berryphase selber nicht verschwinden darf, unter der antiunitären Transformation in das Konjugiert-Komplexe über:

$$\langle \hat{T}\nu, Q | \hat{T}d\nu, Q \rangle = \langle d\nu, Q | \nu, Q \rangle \quad (3.25)$$

Da der Erwartungswert $\langle \nu, Q | d\nu, Q \rangle$ rein imaginär ist (siehe Fußnote auf Seite 31), wechselt er unter komplexer Konjugation sein Vorzeichen; es ist nämlich

$$\langle d\nu, Q | \nu, Q \rangle = -\langle \nu, Q | d\nu, Q \rangle. \quad (3.26)$$

⁷Antiunitäre Transformationen sind solche, die sich durch Hintereinanderausführung der komplexen Konjugation $\hat{K}$ und einer unitären Transformation $\hat{U}$ darstellen lassen:

$$\hat{T} = \hat{U}\hat{K}$$

Der Zeitumkehroperator $\hat{T}$ ist ein spezieller antiunitärer Operator, der in Ortsdarstellung durch $\hat{T} = \hat{K}$ bestimmt ist [S68].

Die Kommutativität des Hamiltonoperators mit $\hat{T}$ impliziert, daß eine unitäre Transformation $\hat{U}$ existiert, die den komplex konjugierten Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{K} \hat{H} \hat{K}$ gemäß $\hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger = \hat{H}$ auf den ursprünglichen abbildet. Ist $\hat{H}$ nicht rein reell, gibt es im allgemeinen keine solche unitäre Transformation $\hat{U}$ [S68]. Ist $\hat{H}$ reell, so können die Eigenzustände $|\nu, Q\rangle$ rein reell gewählt werden, so daß

$$\langle \hat{T}\nu, Q | \hat{T} d\nu, Q \rangle = \langle \nu, Q | d\nu, Q \rangle. \quad (3.27)$$

In Kombination mit (3.25) und (3.26) folgt somit unmittelbar $\langle \nu, Q | d\nu, Q \rangle \equiv 0$ und somit das Verschwinden der Berryphase. $\square$

In einem System mit dem Standardhamiltonian der Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x, Q), \quad V(x, Q) \text{ reell} \quad (3.28)$$

kann unter keinen Umständen in einem einfach zusammenhängenden Konfigurationsraum eine Berryphase auftreten. Anders ist das für komplexe Hamiltonians $\hat{H} \neq \hat{K} \hat{H} \hat{K}$. In Gegenwart eines magnetischen Flusses Φ zum Beispiel (siehe Abschnitt 3.2) ist der Hamiltonian komplex und somit nicht mehr invariant unter der antiunitären komplexen Konjugation $\hat{K}$.

3.3.2 Die Rolle degenerierter Energieeigenwerte

Der Energieeigenwert des betrachteten Zustands ν kann für bestimmte Parametereinstellungen $Q^* \in \mathcal{M}_Q^k$ mit einem anderen zusammenfallen, d. h. der Zustand ν ist an der Stelle Q^* bezüglich der Energie entartet. Solche Entartungspunkte im Parameterraum spielen bei der Entstehung einer Berryphase eine entscheidende Rolle, sind aber nicht ausschließlich für das Auftreten von Berryphasen verantwortlich [B84].

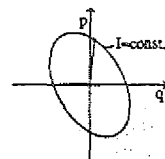
Um dies zu zeigen, muß der Ausdruck (3.16) für die Berryphase umgeformt werden. Das Linienintegral über die Berrysche 1-Form $dQ \langle \nu, Q | \frac{\partial}{\partial Q} | \nu, Q \rangle$ entlang der Kurve C kann mit Hilfe des Stokes'schen Satzes⁸ in ein Flächenintegral des äußeren Differentials der 1-Form über eine von der Kurve C berandeten Fläche A umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \gamma_{\nu_{\text{geo}}} &= i \oint_C \langle \nu, Q | dQ | \nu, Q \rangle \\ &= i \int_{\delta A=C} d \langle \nu, Q | d\nu, Q \rangle \\ &= i \int_{\delta A=C} \langle d\nu, Q | \wedge | \nu, Q \rangle \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$= i \int_{\delta A=C} \sum_{\mu \neq \nu} \langle d\nu, Q | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | d\nu, Q \rangle, \quad (3.30)$$

wobei der Zustand $\frac{\partial}{\partial Q} | \nu, Q \rangle dQ$ mit $| d\nu, Q \rangle$ abgekürzt wurde. Im letzten Schritt wurde $\hat{\mathbb{I}} = \sum_{\mu} | \mu, Q \rangle \langle \mu, Q |$ eingefügt. Der Summand für $\nu = \mu$ verschwindet dabei, da beide Terme

⁸Für die Anwendbarkeit des Stokes'schen Satzes muß die Kurve C in $\mathcal{M}_Q^k$ 0-homotop sein, d. h. sich stetig auf einen Punkt zusammenziehen lassen.



bis auf ein Vorzeichen übereinstimmen (3.26). Durch partielles Ableiten von $\hat{H}(Q)^9$ läßt sich durch kurze Rechnung die Identität

$$\langle \mu, Q | d\nu, Q \rangle = \frac{\langle \mu, Q | (dQ \frac{\partial \hat{H}}{\partial Q}) | \nu, Q \rangle}{E_\nu - E_\mu}, \quad \mu \neq \nu \quad (3.31)$$

herleiten, die *unabhängig* von der Wahl der Darstellung des Hamiltonoperators gilt. Daher ist die Schreibweise $d\hat{H} := dQ \frac{\partial \hat{H}}{\partial Q}$ gerechtfertigt. Die Identität (3.31) in (3.30) eingesetzt, ergibt

$$\gamma_{\text{geo}} = i \int_{\delta A=C} \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle \nu, Q | (d\hat{H}) | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | (d\hat{H}) | \nu, Q \rangle}{(E_\nu(Q) - E_\mu(Q))^2} \quad (3.32)$$

$$= - \int_{\delta A=C} \mathbf{V}_\nu, \quad \mathbf{V}_\nu = -i \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle \nu, Q | (d\hat{H}) | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | (d\hat{H}) | \nu, Q \rangle}{(E_\nu(Q) - E_\mu(Q))^2}, \quad (3.33)$$

wobei $\mathbf{V}_\nu$ als *Berrysche 2-Form* bezeichnet wird.

Aus (3.32) geht hervor, daß Quantenzustände $|\mu, Q\rangle$ mit Energieeigenwerten $E_\mu(Q) \approx E_\nu(Q)$ stärker zu (3.32) beitragen als entfernt gelegene Eigenzustände. Falls die Kurve C in der Nähe eines Punktes Q^* entarteter Eigenzustände $|\nu, Q^*\rangle$ und $|\mu, Q^*\rangle$ ($E_\nu(Q^*) = E_\mu(Q^*)$) verläuft, trägt praktisch nur das Matricelement mit den Zuständen ν und μ zur Berryphase bei. In linearer Näherung kann das Quantensystem auf ein Zweiniveausystem mit allgemeinem Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} Z & X - iY \\ X + iY & -Z \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} = Q \in \mathcal{M}_Q^3 \subset \mathbb{R}^3 \quad (3.34)$$

reduziert werden. Die Energieeigenwerte des Zweiniveausystems wurden o. B. d. A. symmetrisch um Null gelegt: $E_+ = -E_- = \frac{1}{2}\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2} = \frac{1}{2}|Q|$. Offensichtlich sind die Eigenwerte von $\hat{H}$ ausschließlich bei $Q^* = 0$ entartet, so daß die drei Parameter X , Y und Z gleichzeitig verschwinden müssen. Damit zufällig ein solcher Entartungspunkt auftritt, müssen mindestens drei Parameter variiert werden, falls keine zusätzliche Symmetrie vorliegt. Man sagt auch, ein Entartungspunkt einer hermiteschen 2×2 -Matrix habe die *Kodimension* drei. Höhere Entartungsgrade haben noch höhere Kodimension (z. B. dreifache Entartung hat Kodimension acht).

Durch die Parametrisierung (3.34) des Hamiltonoperators gilt für $d\hat{H}$

$$d\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{\sigma} dQ, \quad (3.35)$$

wobei $\hat{\sigma}$ der vektorielle Operator der Paulischen Spinmatrizen ist. Eine einfache, aber längere Rechnung liefert den Ausdruck für die Berryphase (siehe [B84]):

$$\gamma_{\pm \text{geo}} = \pm \int_{\delta A=C} d^2Q \frac{Q}{2|Q|^3} = \pm \frac{1}{2} \Omega(C) \quad (3.36)$$

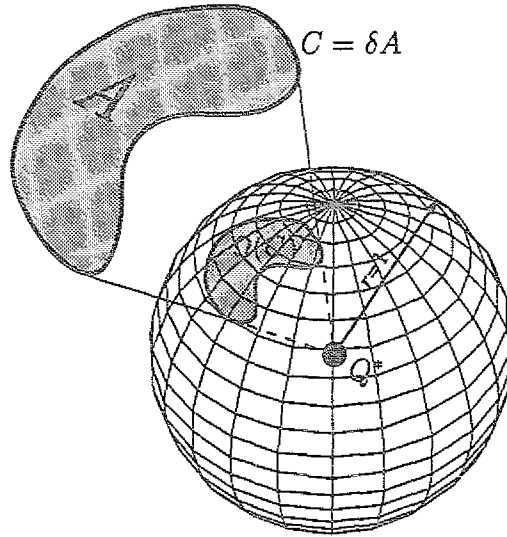


Abbildung 3.3: Für das Zweiniveausystem ist die Berryphase durch den halben Raumwinkel $\Omega(C)$ bestimmt, der durch die Kurve C vom Entartungspunkt Q^* aus aufgespannt wird.

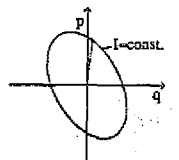
Die Berryphase ist gerade die Hälfte des durch die Kurve C vom Entartungspunkt aus gesehen aufgespannten Raumwinkels $\Omega(C)$ (siehe Abbildung 3.3).

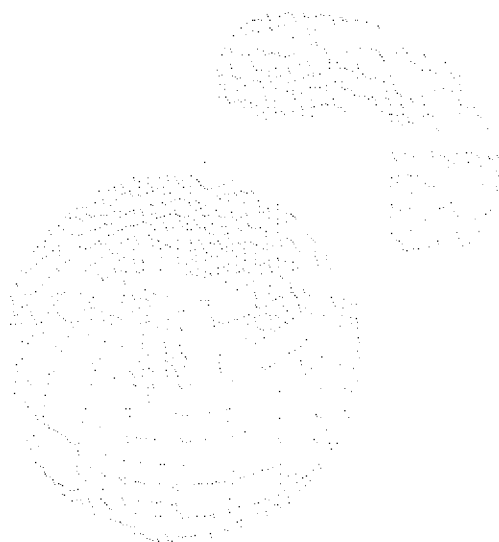
Das hier betrachtete Zweiniveausystem beschreibt ein Spinsystem mit $S = \frac{1}{2}$ ($\hat{H}_{1/2} = -\frac{1}{2}\mu\hat{\sigma}B$). Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, zum Beispiel Neutronen [BD87, WB90], können in einem langsam veränderlichen äußeren Magnetfeld B eine Berryphase erhalten. In diesem Fall ist die Berryphase eine Folge der Existenz des Entartungspunktes.

HERZBERG und LONGUET-HIGGINS haben in molekularen Systemen mit mehr als zwei Atomen mit Hilfe der obigen Betrachtungen den Vorzeichenwechsel der elektronischen Wellenfunktion erklärt, wenn im Parameterraum ein Punkt Q^* degenerierter Eigenwerte in der reellen Ebene $Y = 0$ umlaufen wird [HL63]. Der Raumwinkel, der von der Kurve aufgespannt wird, beträgt 2π , so daß die Phasendifferenz gerade π beträgt. Dieser Vorzeichenwechsel äußert sich zum Beispiel in der halbzahligen Quantisierung der Pseudorotationen eines Na_3 -Clusters [DGWZ86].

In vielen konkreten experimentellen Situationen sind die degenerierten Punkte für die Existenz von Berryphasen verantwortlich. Allerdings sind sie nicht die einzigen Quellen der Berryschen 2-Form V_ν , denn auch im Parameterraum verteilte Ströme können sie erzeugen, wie es für den Aharonov-Bohm-Effekt der Fall ist (beim Aharonov-Bohm-Effekt hängen die Energieeigenwerte gar nicht von den externen Parametern ab).

⁹ $\hat{H}(Q)$ wirkt hier für alle Q auf einem Q -unabhängigen Hilbertraum.





Die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, ist durch die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, bestimmt.

Die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, ist durch die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, bestimmt.

Die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, ist durch die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, bestimmt.

Die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, ist durch die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, bestimmt.

Die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, ist durch die Anzahl der Teilchen, die in der Berryphase enthalten sind, bestimmt.

Kapitel 4

Klassische Hamiltonsche Systeme

Im letzten Kapitel ließ sich die quantenmechanische Berryphase mit verhältnismäßig wenig Aufwand berechnen. Die Herleitung klassischer Holonomieeffekte erweist sich jedoch als etwas schwieriger, so daß einige Vorbereitungen getroffen werden müssen.

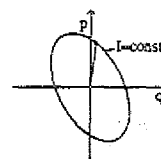
Daher wird in diesem Kapitel der Hamiltonsche Formalismus koordinatenfrei und in nichtkanonischen Koordinaten dargestellt, da sich eine mathematisch korrekte Konstruktion geometrischer Effekte dadurch stark vereinfacht (Abschnitt 4.1). In Abschnitt 4.2 werden klassische Slow-Fast-Systeme eingeführt, die einerseits eine Verallgemeinerung der nichtautonomen Hamiltonschen Systeme darstellen und andererseits die mathematische Herleitung ebenfalls erleichtern.

Im Gegensatz zur Berryphase ist die Herleitung klassischer Holonomieeffekte nur für zwei eingeschränkte Klassen Hamiltonscher Systeme möglich, für die Adiabatentheoreme formuliert werden können, nämlich nur für *Liouville-integrable* (Abschnitt 4.3) und auf der Energieschale *ergodische* (Abschnitt 4.4).

4.1 Allgemeine Eigenschaften Hamiltonscher Flüsse

In den beiden Abschnitten 4.1.1 und 4.1.2 werden klassische Hamiltonsche Systeme von einem abstrakten mathematischen Standpunkt aus betrachtet. Dabei wird die diesen Systemen zugrundeliegende symplektische Struktur besonders hervorgehoben. Abschnitt 4.1.1 beschreibt die klassische Mechanik koordinatenfrei, und in Abschnitt 4.1.2 werden die klassischen Bewegungsgleichungen in beliebigen Koordinaten angegeben. Beide Abschnitte sind stark an Kapitel 8 und 9 von [A80] angelehnt.

Hier wurde bewußt auf die übliche Darstellung der klassischen Mechanik im Rahmen des kanonischen Formalismus verzichtet, da sich dieser Zugang im folgenden (Kapitel 5 und 7) als unzureichend erweist.



4.1.1 Koordinatenfreie Darstellung Hamiltonscher Flüsse

Ein Hamiltonscher Fluß Φ_t ist eine einparametrische Gruppe von Diffeomorphismen auf einer glatten $2n$ -dimensionalen Mannigfaltigkeit M ($n \in \mathbb{N}$), die durch zwei mathematische Objekte eindeutig charakterisiert wird:

1. Eine symplektische 2-Form $\omega^2 \in \Lambda^2(M)$, die parametrisch von $t \in \mathbb{R}$ abhängen kann.

Def. 4.1 (Symplektische 2-Form) eine 2-Form $\omega^2 \in \Lambda^2(M)$ heißt symplektisch, wenn folgende Eigenschaften auf M erfüllt sind:

$$d\omega^2 = 0 \quad (\text{Geschlossenheit}) \quad (4.1)$$

und

$$\forall 0 \neq \eta \in T(M), \exists \xi \in T(M) : \omega^2(\eta, \xi) \neq 0 \quad (\text{nicht degeneriert}). \quad (4.2)$$

Ist auf M eine symplektische 2-Form erklärt, so heißt das Paar (M, ω^2) symplektische Mannigfaltigkeit.

2. Eine hinreichend oft stetig differenzierbare Hamiltonfunktion $H \in C^m(M \times \mathbb{R})$ ($2 \leq m \in \mathbb{N}$).

Mit folgender Konstruktion wird der Fluß Φ_t konstruiert: Auf dem erweiterten Phasenraum $\hat{M} := M \times \mathbb{R} = \{(z, t) | z \in M, t \in \mathbb{R}\}$ wird die 2-Form $\gamma^2 \in \Lambda^2(\hat{M})$ durch

$$\gamma^2 := \omega^2 - dH \wedge dt \quad (4.3)$$

definiert, die wegen der ungeraden Dimension von $\hat{M}$ nach Konstruktion den Rang $2n$ besitzt. Das den Fluß Φ_t festlegende Vektorfeld $v \in T(\hat{M})$ ist dadurch definiert, daß

$$\forall (z, t) \in \hat{M}, \exists \underbrace{v \in T_z(M)}_{=: \hat{v}}, \forall \eta \in T_{(z,t)}(\hat{M}) : \gamma^2 \left(\underbrace{\begin{bmatrix} v \\ 1 \end{bmatrix}}_{=: \hat{v}}, \eta \right) = 0. \quad (4.4)$$

v ist durch (4.4) eindeutig bestimmt. Die 1 in der Zeitkomponente von $\hat{v}$ ergibt sich dadurch, daß $\dot{t} = 1$ gelten soll, d. h. daß sich der Parameter gleichförmig und in Einheiten der Zeit verändert¹ (Abbildung 4.1). Diese Definition ist koordinatenunabhängig, insbesondere auch unabhängig von der Parametrisierung der Zeitachse.

Für praktische Rechnungen ist die Bestimmung von v mit Hilfe von (4.4) schlecht geeignet, da v nur implizit daraus hervorgeht. Die symplektische 2-Form erzeugt jedoch durch

$$\forall \eta, \xi \in T(M) : \omega_\xi^1(\eta) = \omega^2(\eta, \xi) \quad (4.5)$$

¹Würde man eine schlechte Uhr bei der Beobachtung des Hamiltonschen Flusses benutzen, würde $\dot{t}$ von 1 abweichen.

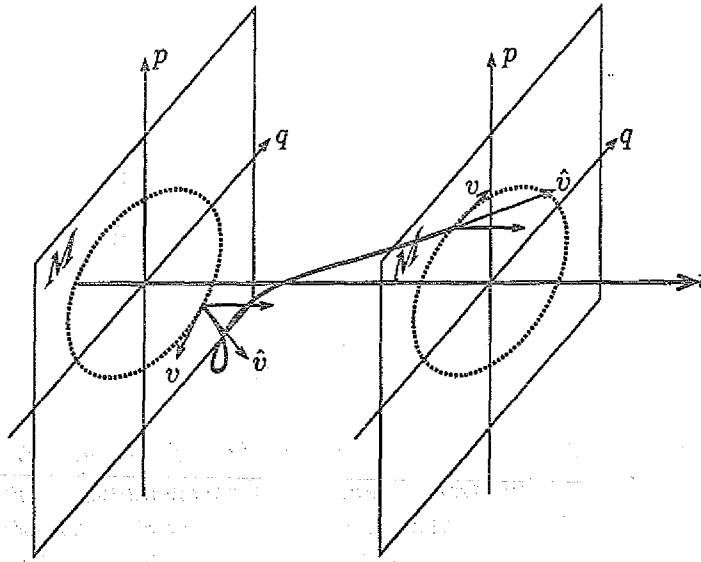


Abbildung 4.1: Hamiltonscher Fluß über dem erweiterten Phasenraum. Man beachte die typische Bündelstruktur des erweiterten Phasenraums.

einen Isomorphismus vom Tangentialraum auf den Kotangentialraum, bei dem jedem Vektor $\xi \in T(M)$ genau eine 1-Form ω_ξ^1 gemäß (4.5) zugeordnet wird. Die Umkehrung $\mathcal{I} : T^*(M) \rightarrow T(M)$ dieser Abbildung erfüllt die Gleichung

$$\forall \omega^1 \in T^*(M), \forall \eta \in T(M) : \omega^2(\eta, \mathcal{I}\omega^1) = \omega^1(\eta), \quad (4.6)$$

mit Hilfe derer die 1-Form dH auf das Hamiltonsche Vektorfeld v abgebildet wird² gemäß

$$v = \mathcal{I}dH. \quad (4.7)$$

Hat man $\mathcal{I}$ aus ω^2 bestimmt, so können die Bewegungsgleichungen in den gegebenen Koordinaten für jeden Hamiltonian explizit angegeben werden (siehe nächsten Abschnitt). Die Definition des Vektorfeldes nach (4.7) ist im Gegensatz zu (4.4) *nicht* unabhängig von der Wahl des Zeitparameters. (Das Differential von H ist in (4.7) bei festgehaltenem t zu bilden.)

Die Hamiltonschen Vektorfelder bilden eine Lieunteralgebra $\mathcal{G}_H$ aller glatten Vektorfelder $\mathcal{G}$ auf M . Das Lieprodukt wird durch die symplektische 2-Form ω^2 gemäß

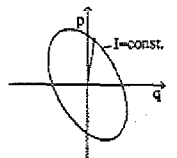
$$\forall v, w : (v, w) = \mathcal{I}d[\omega^2(v, w)] \quad (4.8)$$

vermittelt und ist bilinear, antisymmetrisch und erfüllt die Jacobiidentität. Mit Hilfe des Isomorphismus $\mathcal{I}$ kann ein Lieprodukt auf den glatten Phasenraumfunktionen $F, G \in C^m(M)$ erklärt werden:

²Es ist nämlich

$$\gamma^2(\cdot, \hat{v}) = \omega^2(\cdot, v) - dH(\cdot) = \omega^2(\cdot, \mathcal{I}dH) - dH(\cdot) = 0,$$

wobei die letzte Gleichheit wegen (4.6) gilt.



Def. 4.2 (Poissonklammer)

$$\{F, G\} = \omega^2(\mathcal{I}dF, \mathcal{I}dG) = dF(\mathcal{I}dG), \quad (4.9)$$

wobei die letzte Gleichheit wegen (4.6) gilt.

Diese Definition der Poissonklammer ist koordinatenunabhängig.

Die zeitliche Änderung einer Funktion $F \in C^m(\hat{M})$ am Punkte $(z, t) \in \hat{M}$ unter dem Fluß der Hamiltonfunktion H ist koordinatenfrei gegeben durch

$$\dot{F} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (4.10)$$

Die klassische Mechanik läßt sich völlig koordinatenfrei schreiben. Für praktische Rechnungen ist man jedoch auf eine feste Wahl von Phasenraumkoordinaten angewiesen. Wegen der besonders einfachen Struktur von ω^2 in kanonischen Variablen, benutzt man daher meistens letztere. Für manche Zwecke sind kanonische Variablen jedoch ungeeignet und man muß auf nichtkanonische zurückgreifen. Wie sich das Vektorfeld v in diesen Variablen darstellt wird im folgenden Abschnitt 4.1.2 dargestellt.

Die Hamiltonschen Flüsse bilden eine Untergruppe $G_H(M)$ aller Diffeomorphismen G auf dem Phasenraum M , die durch die Lieunteralgebra $\mathcal{G}_H$ der Hamiltonschen Vektorfelder (4.7) erzeugt wird. Das Prinzipalbündel $(G \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G)$ der Diffeomorphismen über der Zeitachse kann auf das Prinzipalbündel $(G_H(M) \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G_H(M))$ reduziert werden. Ein Hamiltonsches Vektorfeld $\mathcal{I}dH$ definiert gemäß (2.19) auf $(G \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G)$ einen Zusammenhang, der mit dieser Reduktion auf die Hamiltonschen Flüsse kompatibel ist, und somit auch auf dem reduzierten Bündel einen Zusammenhang erklärt. Auf dem assoziierten Faserbündel $(M \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G_H)$ kann ein Zustand $(z_0, t_0) \in M \times \mathbb{R}$ gemäß dieses Zusammenhangs parallelverschoben werden, was der zeitlichen Entwicklung dieses Zustands unter $\mathcal{I}dH$ entspricht (siehe Abschnitt 2.2 S. 24).

4.1.2 Darstellung in nichtkanonischen Koordinaten

Die Größen ω^2 , $\mathcal{I}$ und H sind in Abschnitt 4.1.1 koordinatenfrei definiert worden. Möchte man jedoch konkrete Rechnungen durchführen, oder ist darauf angewiesen, bestimmte Teile der Dynamik voneinander zu trennen, muß man mit konkreten Koordinaten rechnen.

Der Übergang von der Lagrangeschen zur Hamiltonschen Mechanik liefert auf natürliche Weise Phasenraumkoordinaten (p, q) , in denen sich die symplektische 2-Form ω^2 gemäß

$$\omega^2 = \delta_{ij} dp^i \wedge dq^j \quad (4.11)$$

darstellt, wobei über die Indizes i und j , die von 1 bis n laufen, summiert wurde. An einem beliebigen Phasenraumpunkt $(p, q) \in M$ ist ω^2 daher

$$\omega_{(p,q)}^2 = \begin{bmatrix} 0 & E_n \\ -E_n & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.12)$$

wobei E_n die n -dimensionale Einheitsmatrix ist. Die Definitionsgleichung (4.6) für den Isomorphismus $\mathcal{I}$ drückt sich in lokalen Koordinaten ξ wie folgt aus:

$$\omega_{ij}^2 \mathcal{I}^{jk} \eta^i \omega_k^1 = \omega_i^1 \eta^i, \quad (4.13)$$

wobei η^i die Komponenten eines beliebigen Tangentialvektors und ω_i^1 die Komponenten einer beliebigen 1-Form sind (die Summation läuft im Gegensatz zu (4.11) von 1 bis $2n$. Hochgestellte Indizes indizieren Vektorkomponenten, während tiefgestellte Komponenten bzgl. der dualen Basis indizieren). Daraus folgt $\omega_{ij}^2 \mathcal{I}^{jk} = \delta_i^k$, so daß, unter Benutzung der Antisymmetrie von ω_{ij}^2 , $\mathcal{I}^{ij}$ die Inverse von ω_{ij}^2 ist. Im Fall kanonischer Koordinaten ist dies

$$\mathcal{I} = \begin{bmatrix} 0 & -E_n \\ E_n & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.14)$$

und das Vektorfeld $\mathcal{I}dH$ führt zu den kanonischen Gleichungen:

$$\begin{bmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{bmatrix} = \mathcal{I} \begin{bmatrix} \partial_p H \\ \partial_q H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\partial_q H \\ \partial_p H \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Die Struktur der Gleichungen ist in kanonischen Koordinaten besonders einfach und wird daher vorwiegend benutzt, zumal sich kanonische Koordinaten auf natürliche Weise aus dem Lagrangeformalismus ergeben.

Drückt sich ω^2 in einem Satz ξ von Koordinaten wie in (4.11) aus, so spricht man *kanonischen Koordinaten*. Für kanonische Variable erfüllen die Poissonklammern die Gleichungen

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad \{p_i, p_j\} = \{q_i, q_j\} = 0 \quad (4.16)$$

Gilt (4.11) oder (4.16) für die Koordinaten ξ *nicht*, so heißen ξ *nichtkanonische Koordinaten*. Transformationen, die zwischen kanonischen Koordinaten vermitteln, nennt man *kanonisch*. Beschränkt man sich, wie es in der Literatur üblich ist, auf kanonische Transformationen, so bleibt die kanonische Struktur der Bewegungsgleichungen erhalten.

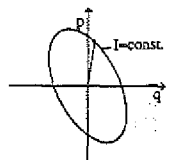
In beliebigen nichtkanonischen Koordinaten ξ drückt sich die symplektische 2-Form lokal in einer komplizierteren symplektischen Matrix aus, und auch der kanonische Isomorphismus $\mathcal{I}$ hat nicht mehr die einfache Gestalt (4.14). Die Bewegungsgleichungen ergeben sich gemäß (4.7) zu

$$\frac{d\xi^i}{dt} = \mathcal{I}^{ij} \frac{\partial H}{\partial \xi^j} \quad (4.17)$$

und können i. a. sehr kompliziert ausfallen (siehe zum Beispiel Abschnitt 7.1). Dennoch kann es von Vorteil sein, solche Koordinaten zu benutzen, da sich nicht immer kanonische Koordinaten finden lassen, in denen sich die Bewegung geeignet darstellen läßt.

4.2 Klassische Slow-Fast-Systeme

Bei den Betrachtungen zu quantenmechanischen Systemen in Kapitel 3 waren äußere Einflüsse auf das zu untersuchende Hamiltonsche System durch externe Parameter modelliert worden, deren Bewegung *nicht* durch das System selbst beeinflusst sondern von außen fest vorgegeben wurde.



Im allgemeinen jedoch, ist das betrachtete System nur ein Teil eines größeren Systems, dessen Dynamik sehr wohl durch die Bewegung des Teilsystems beeinflusst werden kann. Ob dieser Einfluß im Einzelfall vernachlässigt werden kann, hängt von der geeigneten Teilung des größeren Systems ab.

Im folgenden werden sogenannte *Slow-Fast-Systeme* untersucht, in denen eine natürliche Trennung der Freiheitsgrade in schnelle und langsame vorliegt. Für solche Systeme kann die schnelle und langsame Dynamik im adiabatischen Limes tatsächlich voneinander separiert werden, vorausgesetzt die schnelle Dynamik ist bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden entweder integrabel oder ergodisch. Die langsamen Bewegungsgleichungen können dann unabhängig vom schnellen Teilsystem gelöst und als externe Parameter in die schnelle Dynamik eingesetzt werden.

Slow-Fast-Systeme stellen also eine Verallgemeinerung der parametrisch getriebenen nicht-autonomen Systeme dar und liefern gleichzeitig eine Rechtfertigung für die Abgrenzung des schnellen Systems vom „Rest der Welt“. Ferner hat Ihre Untersuchung noch einen praktischen Grund: Mit Hilfe nichtkanonischer Transformationen können die Bewegungsgleichungen in einer für die Adiabatentheoreme notwendigen Form dargestellt werden, so daß alle notwendigen mathematischen Voraussetzungen mühelos überprüft werden können.

Eine Definition der Slow-Fast-Systeme wird in Abschnitt 4.2.1 gemacht, und in 4.2.2 wird gezeigt, daß sich jedes nichtautonome System als Slow-Fast-System formulieren läßt.

4.2.1 Definition

Betrachte ein autonomes Hamiltonsches System — auch das ist natürlich eine Idealisierung —, dessen Freiheitsgrade sich auf natürliche Weise in k langsame und n schnelle aufteilen. Die langsamen bzw. die schnellen Freiheitsgrade seien durch kanonische Koordinaten P und Q bzw. p und q parametrisiert, so daß die symplektische 2-Form ω^2 in (P, Q, p, q) die Form

$$\omega^2 = dP \wedge dQ + dp \wedge dq \quad (4.18)$$

hat. Da die Bewegung für alle Zeiten als beschränkt vorausgesetzt wird, kann der Phasenraum M als kompakte Teilmenge des $\mathbb{R}^{2(k+n)}$ betrachtet werden. Der Phasenraum M ist als Produkt der Räume $\mathcal{M}_P^k$, $\mathcal{M}_Q^k$, $\mathcal{M}_p^n$ und $\mathcal{M}_q^n$ darstellbar, wobei $P \in \mathcal{M}_P^k$, $Q \in \mathcal{M}_Q^k$, $p \in \mathcal{M}_p^n$ und $q \in \mathcal{M}_q^n$.

Die autonome Hamiltonfunktion habe in diesen Koordinaten die spezielle Form

$$H(P, Q, p, q) := H_1(P, Q) + H_2(p, q, Q), \quad (4.19)$$

die viele physikalische Situationen modelliert. In der quantenmechanischen Theorie molekularer Systeme ist dieser Typ von Hamiltonian als *Born-Oppenheimer-Hamiltonian* bekannt [BO27], und auch die Theorie fester Körper basiert auf diesem Typ von Hamiltonfunktionen [M81a]. Aber auch klassisch wurde dieser Typ von Hamiltonian bereits für den Fall untersucht, daß die Dynamik der p und q für festgehaltene P und Q integrabel ist [GT87, K90].

In (4.19) steckt noch keine Bedingung, die zur Trennung der Zeitskalen der schnellen und langsamen Freiheitsgrade führt. Diese muß zusätzlich eingeführt werden und kann zum Beispiel dadurch realisiert werden, daß für die Hamiltonfunktion H_1 die sehr allgemeine Form

$$H_1(P, Q) = \frac{1}{2} \varepsilon^2 \Xi_{\alpha\beta}(Q) P_\alpha P_\beta + \Phi(Q) \quad (4.20)$$

gewählt wird, wobei ε der adiabatische Kleinheitsparameter, Ξ eine von den Orten Q abhängige *Inverse-Masse-Matrix* und Φ ein von den Orten abhängiges Potential darstellt.

Weitere Annahmen über die Dynamik der schnellen Freiheitsgrade werden erst in den Kapiteln 5 und 7 gemacht. Im nächsten Abschnitt 4.2.2 wird ein anderer Typ von Hamiltonian H_1 vorgestellt, mit dem sich beliebige nichtautonome Systeme modellieren lassen.

4.2.2 Das Slow-Fast-System als Verallgemeinerung nichtautonomer Systeme

Betrachte ein nichtautonomes Hamiltonsches System $H(p, q, Q)$, wobei die p und q kanonische Koordinaten der n Freiheitsgrade und $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ k externe Parameter sind, die sich im Verhältnis zu p und q adiabatisch langsam bewegen. Die äußeren Parameter Q seien als Funktion der Zeit durch

$$C: \tau \in [0, 1] \mapsto Q(\tau) \in \mathcal{M}_Q^k \quad (4.21)$$

und $\tau = \varepsilon t$ parametrisiert (t echte Zeit), wobei C eine zweimal stetig differenzierbare Kurve in $\mathcal{M}_Q^k$ darstellt. Im adiabatischen Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ geht die zeitliche Ableitung von $Q(\varepsilon t)$ gleichmäßig gegen null.

Um die langsamen Q mit in die Dynamik eines erweiterten Hamiltonschen Slow-Fast-Systems einzubeziehen, definiert man ein Vektorfeld $v(Q)$ auf $\mathcal{M}_Q^k$, so daß eine Lösung von

$$\frac{\partial Q}{\partial \tau} = v(Q) \quad (4.22)$$

unter geeigneten Anfangsbedingungen mit C übereinstimmt.³ Setzt man für $H_1(P, Q)$ in (4.19)

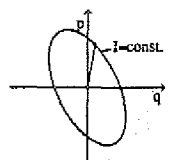
$$H_1(P, Q) := \varepsilon P_\alpha v_\alpha(Q), \quad (4.23)$$

so reproduziert die daraus abgeleitete Hamiltonsche Dynamik für Q die von außen vorgegebene Parameterveränderung entlang der Kurve C , falls das System mit geeignetem Anfangswert gestartet wurde. Die langsame Dynamik des neuen Slow-Fast-Systems ist durch

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H_1}{\partial P_\alpha} = \varepsilon v_\alpha(Q) \quad (4.24)$$

$$\dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H_1}{\partial Q_\alpha} - \frac{\partial H_2}{\partial Q_\alpha} \quad (4.25)$$

³Es kann natürlich vorkommen, daß ein Punkt von C mehrmals besucht wird. In einem solchen Fall gibt es natürlich kein Vektorfeld $v(Q)$ das die Kurve C reproduziert. Die Kurve C muß in einem solchen Fall in eindeutige Teilkurven zerlegt und v für jede Teilkurve konstruiert werden.



gegeben, wobei sich Gleichung (4.24) problemlos integrieren läßt:

$$Q(t) = Q_{(0)} + \int_0^t dt \, \varepsilon v(Q) \quad (4.26)$$

Die P -Dynamik nimmt keinen Einfluß auf die übrigen Freiheitsgrade und hat hier keine besondere Bedeutung.

Somit lassen sich nichtautonome Systeme auf Slow-Fast-Systeme vom Typ (4.19) abbilden, so daß alle im folgenden für Slow-Fast-Systeme getroffenen Aussagen auch auf nichtautonome Systeme übertragen werden können.

4.3 Integrable Hamiltonsche Systeme

Klassische Liouville-integrable Hamiltonsche Systeme sind dadurch charakterisiert, daß es zu jedem der n Freiheitsgrade eine Erhaltungsgröße gibt, so daß die Bewegung, außer für singuläre Startwerte, auf einer n -dimensionalen Untermannigfaltigkeit verläuft, die aus topologischen Gründen ein n -Torus ist. Die Bewegung auf diesem n -Torus, der durch die Anfangsbedingungen festgelegt ist, ist für fast alle Anfangsbedingungen quasiperiodisch und ergodisch.

Autonome Hamiltonsche Systeme mit einem Freiheitsgrad sind immer integrabel, da die Energie in diesem Fall das erste Integral der Bewegung ist. Der integrable Fall ist hier generisch. Anders ist das für Systeme mit $n > 1$ Freiheitsgraden: Die Wahrscheinlichkeit, aus der Menge aller Systeme mit Hamiltonians $H \in C^2(M)$ ein integrables herauszugreifen, verschwindet [MM74]. Für fast alle Hamiltonschen Systeme mit mehr als einem Freiheitsgrad existieren außer der Energie keine weiteren Erhaltungsgrößen. Daher treffen die in diesem Abschnitt gemachten Aussagen in Strenge für nahezu kein in der Natur vorkommendes System zu. Dennoch ist die Untersuchung integrierbarer Systeme von hohem praktischem Nutzen, da sie die einzige Klasse von Systemen darstellen, für die die Dynamik explizit angegeben werden kann. Mit Hilfe störungstheoretischer Methoden (KAM) lassen sich dann auch quasiintegrable Systeme behandeln.

Um die quasiperiodische Bewegung auf n -Tori hervorzuheben, eignen sich besondere kanonische Koordinaten, die *Winkel-Wirkungs-Variablen*. Die Konstruktion dieser Koordinaten wird in Abschnitt 4.3.1 skizziert. Die Lösung (Integration) eines integrablen Systems besteht dann darin, eine kanonische Transformation auf Winkel-Wirkungs-Variablen zu finden und die einfache Dynamik der Winkel-Wirkungs-Variablen in die Inverse dieser Transformation einzusetzen, um somit die Dynamik in den ursprünglichen Koordinaten zu berechnen.

Während in der Quantenmechanik ein Adiabatementheorem für generische Systeme existiert, gibt es in der klassischen Mechanik nur für die verschwindend kleine Klasse integrierbarer und ergodischer⁴ Systeme ein Adiabatementheorem. Das Adiabatementheorem für integrable Systeme von A. NEISHTADT wird mit einigen Erweiterungen in Abschnitt 4.3.2 formuliert.

⁴Ergodische Systeme werden in Abschnitt 4.4 behandelt.

4.3.1 Winkel-Wirkungs-Variable

In diesem Abschnitt werden, in Anlehnung an [A80] und [AA89], Liouville-integrierte Hamiltonsche Systeme in Winkel-Wirkungs-Variablen dargestellt. Die Transformation auf Winkel-Wirkungs-Variable wird hier nur skizziert. Für die Details der Konstruktion wird auf obige Literatur verwiesen.

Betrachte dazu ein autonomes Hamiltonsches System mit n Freiheitsgraden, das in den Koordinaten $(p, q) \in M$ durch die symplektische 2-Form $\omega^2 = dp \wedge dq$ und den Hamiltonian $H(p, q)$ charakterisiert ist. Die Bewegung bei vorgegebener Energie sei *beschränkt*, so daß der Phasenraum M als kompakte Teilmenge des $\mathbb{R}^{2n}$ angesehen werden kann. Ferner sei das System Liouville-integrierbar, d. h., daß n global unabhängige Integrale F_i ($i = 1, \dots, n$) existieren, die in Inversion sind, d. h. $\{F_i, F_j\} = 0$ für alle $(i, j = 1, \dots, n)$.

H ist aufgrund der Autonomie selbst eines dieser Integrale der Bewegung. Der zu H gehörende Fluß $\Phi_H^t(p, q)$ ist durch das Vektorfeld $v_H = \mathcal{I}dH$ auf dem $2n$ -dimensionalen Phasenraum M bestimmt. Auch den anderen Integralen der Bewegung können Flüsse $\Phi_{F_i}^t(p, q)$ zugeordnet werden, deren Vektorfelder sich analog durch

$$v_{F_i} = \mathcal{I}dF_i = \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} F_i(q, p, Q), \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \quad (4.27)$$

darstellen lassen. Im Phasenraum M gibt es singuläre Punkte der Vektorfelder der Erhaltungsgrößen, in deren Umgebung die Bewegung möglicher Weise nicht auf n -Tori T^n verläuft.⁵ Daher wird der Phasenraum M auf ein Gebiet $\mathcal{G} \subset M$ eingeschränkt, auf dem

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, \forall (q, p) \in \mathcal{G}: \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{\partial F_i}{\partial p_j} \right)^2 + \left(\frac{\partial F_i}{\partial q_j} \right)^2 \right] \neq 0, \quad (4.28)$$

gilt. Die Vektorfelder sind in $\mathcal{G}$ Singularitätenfrei.⁶

Aufgrund der Unabhängigkeit der Erhaltungsgrößen, sind die Vektorfelder (4.27) überall in $\mathcal{G}$ linear unabhängig. Die n unabhängigen Erhaltungsgrößen zwingen die Bewegung, wegen ihrer vorausgesetzten Beschränktheit, auf eine n -dimensionale, kompakte Untermannigfaltigkeit des Phasenraums $\mathcal{G}$, auf der die Gradienten der F_i senkrecht stehen.⁷ Diese Untermannigfaltigkeit kann mehrere Zusammenhangskomponenten besitzen. Im folgenden wird jedoch immer nur eine solche Zusammenhangskomponente betrachtet. Die Vektorfelder (4.27) liegen im Tangentialbündel dieser Untermannigfaltigkeit und die zugehörigen Flüsse kommutieren wegen $\{F_i, F_j\} = 0$ ($i, j = 1, \dots, n$).

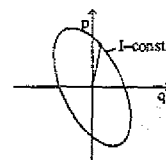
Die Untermannigfaltigkeit ist somit zusammenhängend, kompakt und glatt, und die Gruppe $\mathbb{R}^n$, realisiert durch die Flüsse, die durch (4.27) erzeugt werden, wirkt auf ihr glatt und transitiv.⁸ Daher hat die Mannigfaltigkeit die topologische Struktur eines n -Torus [AA89]. Dieser ist invariant unter dem Hamiltonschen Fluß Φ_H^t und durch die

⁵Die Bewegung verläuft dort entweder auf einem Torus kleinerer Dimension oder auf einer Separatrix. Über diese Bereiche des Phasenraums werden im folgenden keine Aussagen gemacht.

⁶Eine analoge Bedingung gibt es auch im Fall ergodischer Dynamik [siehe (4.62)].

⁷Dabei wurde die Metrik $g_{ij} = \delta_{ij}$ auf M zugrundegelegt.

⁸Eine Gruppe wirkt auf einer Mannigfaltigkeit *transitiv*, wenn es zu je zwei beliebigen Punkten der Mannigfaltigkeit ein Gruppenelement gibt, das den einen in den anderen abbildet.



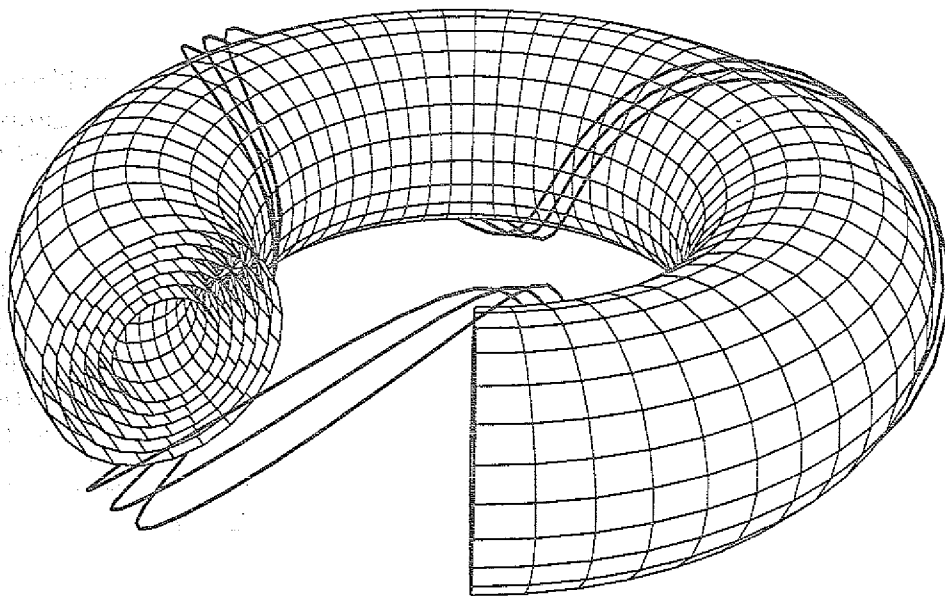


Abbildung 4.2: Stratifizierung des Phasenraums eines Liouville-integrablen Hamiltonschen Systems durch n -Tori.

Anfangsbedingungen eindeutig festgelegt. Das gesamte Gebiet $\mathcal{G}$ ist wie in Abb. 4.2 durch solche Tori stratifiziert.

Zur Konstruktion eines geeigneten kanonischen Koordinatensystems für das die kanonischen „Impulse“ Erhaltungsgrößen sind und die dazu konjugierten „Orte“ sich periodisch entwickeln, werden die topologischen Eigenschaften der n -Tori ausgenutzt.

Die Homologiegruppe der eindimensionalen Zyklen auf dem n -Torus, der durch die Integrale F der Bewegung charakterisiert ist, hat die Dimension n ([CdWD91] S. 226), so daß n funktional unabhängige Größen

$$I_i(F, Q) := \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i(F, Q)} p dq \quad (4.29)$$

durch Integration über die n fundamentalen unabhängigen Zyklen $\gamma_i(F)$ definiert werden können. Die Größen I_i ($i = 1, \dots, n$) sind eindeutig bestimmt, da $p dq$ auf $T^n(I)$ geschlossen ist,⁹ d. h.:

$$\forall (\xi, \eta \in T(T^n(I))) : d(p dq)(\xi, \eta) = dp \wedge dq(\xi, \eta) = 0. \quad (4.30)$$

Die letzte Gleichheit gilt, da sich jeder Tangentialvektor von $T^n(I)$ als Linearkombination der v_{F_i} darstellen läßt und wegen $\{F_i, F_j\} = 0$ das Lieprodukt (4.8) $dp \wedge dq(v_{F_i}, v_{F_j})$ für alle $i, j = 1, \dots, n$ verschwindet.

Die n Größen $I_i(F)$ sind alle funktional voneinander unabhängig, und es gilt

$$\det \left(\frac{\partial I_i}{\partial F_j} \right) \neq 0 \text{ auf } \mathcal{G}. \quad (4.31)$$

⁹ $p dq$ ist ein Element der Kohomologie des Torus.

Wegen (4.31) läßt sich F in einer Umgebung eines Torus nach I auflösen, so daß der Torus statt durch einen Satz F durch die Größen I vollständig bestimmt ist, und es gilt

$$\{I_i, I_j\} = \frac{\partial I_i}{\partial F_k} \frac{\partial I_j}{\partial F_l} \underbrace{\{F_k, F_l\}}_{\equiv 0} = 0. \quad (4.32)$$

Ferner sind die I Integrale der Bewegung, da sie sich als Funktion der alten Integrale schreiben lassen. Sie werden im folgenden als die neuen kanonischen „Impulse“ benutzt und *Wirkungskoordinaten* genannt.

Die zugehörigen n Flüsse $\Phi_{I_i}^{t_i}$, die durch die Vektorfelder $v_{I_i} := \mathcal{I}dI_i$ ($i = 1, \dots, n$) definiert sind, kommutieren aufgrund von (4.32), so daß es zu je zwei Punkten $\xi_1, \xi_2 \in T^n(I)$ Zahlen $\theta_i \in \mathbb{R}$ ($i = 1, \dots, n$) gibt, so daß

$$\xi_2 = \Phi_{I_n}^{\theta_n} \circ \dots \circ \Phi_{I_1}^{\theta_1} \xi_1 \quad (4.33)$$

gilt.¹⁰ Mit einem festen Referenzpunkt $\xi_0 \in T^n(I)$ können die θ als Koordinaten auf dem Torus verwendet werden.

Die Flüsse $\Phi_{I_i}^{\theta_i}$ sind jedoch noch nicht eindeutig festgelegt, da noch offen ist, wie stark der Punkt ξ pro θ_i unter dem Fluß verschoben wird. Diese Freiheit läßt sich dazu nutzen, die $\Phi_{I_i}^{\theta_i}$ so zu wählen, daß θ und I kanonische Koordinaten bilden. An jedem Punkt ξ des Torus $T^n(I)$ wird daher definiert:

$$d\theta_i(\xi)(v_{I_j}(\xi)) = \delta_{ij}, \quad (4.34)$$

d. h. die $d\theta_i$ bilden an jedem Punkt $\xi \in M$ das zu den v_{I_i} *reziproke* Gitter (duale Basis). Mit (4.9) aus Abschnitt 4.1.1 gilt damit für die Poissonklammer $\{\theta_i, I_j\} = \delta_{ij}$ ($i, j = 1, \dots, n$). Die Poissonklammer $\{\theta_i, \theta_j\}$ hingegen verschwindet identisch

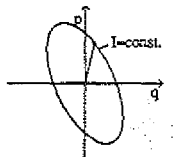
$$\{\theta^i, \theta^j\} = d\theta_i(\mathcal{I}d\theta_j) = 0, \quad (4.35)$$

da $\mathcal{I}d\theta_j$ keine Tangentialkomponente zum Torus $T^n(I)$ hat, d. h. $\mathcal{I}d\theta_j \perp v_{I_i}$ für alle $i, j = 1, \dots, n$. Die θ , die *Winkelkoordinaten* genannt werden, bilden zu den I kanonisch konjugierte Koordinaten auf dem Torus. Gehen die Referenzpunkte ξ_0 auf allen Tori durch eine glatte Funktion von I auseinander hervor, so bilden die I und θ ein Koordinatensystem auf $\mathcal{G}$, das als *Winkel-Wirkungs-Koordinatensystem* bezeichnet wird. Daß θ_i , wie ein Winkel, tatsächlich nach 2π in sich zurückläuft, wurde hier nicht gezeigt und es wird auf die Literatur verwiesen [AA89].

Die Bewegung des Systems in den neuen Winkel-Wirkungs-Variablen stellt sich besonders einfach dar: Die Hamiltonfunktion H ist eines der n Integrale F_i der Bewegung, und kann wegen (4.31) in der Umgebung von $T^n(I)$ nach I aufgelöst werden, so daß H eine reine Funktion von I ist:

$$H = H(I) \quad (4.36)$$

¹⁰Auch durch $\Phi_{I_n}^{\theta_n} \circ \dots \circ \Phi_{I_1}^{\theta_1}$ wirkt die Gruppe $\mathbb{R}^n$ transitiv auf $T^n(I)$.



Da (I, θ) den kanonischen Vertauschungsrelationen (4.16) genügt, drückt sich in ihnen der Hamiltonsche Fluß durch die kanonischen Bewegungsgleichungen aus:

$$\left. \begin{aligned} \dot{I} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta} \equiv 0 \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H}{\partial I} =: \omega^i(I, Q) \end{aligned} \right\} \quad (4.37)$$

Mit Hilfe der Koordinatentransformation $(p, q) \rightarrow (I, \theta)$ kann die Dynamik in den ursprünglichen Koordinaten (p, q) durch $p(I(t), \theta(t), Q)$ und $q(I(t), \theta(t), Q)$ ausgedrückt werden.

4.3.2 Adiabathentheorie integrierbarer Systeme

Wie in der Quantenmechanik (Abschnitt 3.1) gibt es auch in der klassischen Mechanik ein Adiabathentheorem. Allerdings ist die Gültigkeit dieses Theorems auf die sehr spezielle Klasse *integrierbarer* Hamiltonscher Systeme beschränkt. Ein weiteres Theorem dieser Art, das für ergodische Hamiltonsche Systeme gilt, wird in Abschnitt 4.4.2 vorgestellt.

In diesem Abschnitt werden im wesentlichen die Ergebnisse von A. NEISHTADT [N76] vorgestellt, die die adiabatische Entwicklung integrierbarer Systeme mathematisch rigoros beschreiben.¹¹ Neben dem Adiabathentheorem von NEISHTADT wird in Kapitel 5 ein Satz über die Mittelung von Observablen benötigt, der auf S. GOLIN et al. zurückgeht [GKM89]. Dieser wird im folgenden ebenfalls angegeben.

Gegeben sei ein nichtautonomes Hamiltonsches System, dessen Hamiltonian $H(p, q, Q)$ außer von den kanonischen Variablen (p, q) von einem Satz $Q \in \mathcal{M}_Q^k \subset \mathbb{R}^k$ von k Parametern abhängt. Für konstante $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ sei das System Liouville-integrierbar. Die äußeren Parameter sollen sich zeitlich gemäß einer Vorschrift

$$C : \tau \in [0, 1] \mapsto Q(\tau) \in \mathcal{M}_Q^k, \quad \tau := \varepsilon t \quad (4.38)$$

verändern, wobei $\varepsilon = 1/T$ (adiabatischer Kleinheitsparameter) das Inverse der Beobachtungsdauer T und die Kurve C eine stückweise stetig differenzierbare Funktion ist (siehe unten).

Das Adiabathentheorem besagt nun folgendes: Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ bewegt sich das System für fast alle Startwerte auf dem instantanen n -Torus des autonomen Systems $H(p, q, Q(\tau) = \text{const.})$, der die konstante Wirkung I des Ausgangszustands hat. Man sagt, die Wirkung I ist eine *adiabatische Erhaltungsgröße*.

Im folgenden wird das etwas allgemeinere Adiabathentheorem von A. NEISHTADT angegeben, das für sog. *Standardmultiphasensysteme* gilt. Der Zusammenhang zu den obigen Aussagen wird auf den ersten Blick nicht deutlich, so daß eine Übersetzung der exakten mathematischen Aussagen dieses Satzes im Anschluß geliefert wird.

Es seien J Koordinaten einer offenen und beschränkten Teilmenge $G \in \mathbb{R}^m$ und φ die eines Torus T^n ($m \geq n$). Ein System von Differentialgleichungen auf $G \times T^n$ heißt

¹¹Für eine ausführliche mathematische Behandlung siehe zum Beispiel [N76] und [LM88].

Standardmultiphasensystem, wenn gilt:

$$\left. \begin{aligned} \dot{J} &= \varepsilon f(J, \varphi, \varepsilon) \\ \dot{\varphi} &= \omega(J) + \varepsilon g(J, \varphi, \varepsilon) \end{aligned} \right\}, \quad (4.39)$$

wobei $f, g \in C^1(G \times T^n \times \mathbb{R})$ und $f(J, \varphi, 0), \frac{\partial f(J, \varphi, 0)}{\partial J_j} \in C^{n+2}(T^n)$.¹² Sei ferner $G^> \in \mathbb{R}^m$ eine offene und beschränkte Menge, die den Abschluß von G enthält, d. h. $\overline{G} \subset G^>$, so daß $\omega \in C^1(G^>)$ und $\text{rg} \left(\frac{\partial \omega}{\partial J} \right) = n$ für alle $J \in G^>$.

Das zugehörige gemittelte System lautet

$$\dot{\bar{J}} = \varepsilon f_0(\bar{J}), \quad (4.40)$$

wobei $f_0(J) := \frac{1}{(2\pi)^n} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} f(J, \varphi, 0) d\varphi$.

Seien $J(t) = J(t; J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon)$ bzw. $\bar{J}(t) = \bar{J}(t; J^{(0)}, \varepsilon) = \bar{J}(\varepsilon t, J^{(0)})$ Lösungen des Systems (4.39) bzw. (4.40) zu den Anfangsbedingungen $J^{(0)} \in G, \varphi^{(0)} \in T^n$. Betrachte eine beschränkte Menge $U \subset G \times T^n$, für die die Lösungen $\bar{J}(t)$ mit $(J^{(0)}, \varphi^{(0)}) \in U$ im Zeitintervall $[0, T]$ ($T = \frac{1}{\varepsilon}$) wohldefiniert sind, d. h. daß $\bar{J}(t)$ für $t \in [0, T]$ G nicht verläßt.

Der maximale Abstand zwischen den Trajektorien $J(t)$ und $\bar{J}(t)$ im Zeitintervall $[0, T]$ wird gemäß

$$\Delta(J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon) := \max_{t \in [0, T]} |J(t) - \bar{J}(t)|, \quad ((J^{(0)}, \varphi^{(0)}) \in U) \quad (4.41)$$

definiert, falls die Trajektorie $J(t)$ für alle $t \in [0, T]$ in G verläuft, bzw.

$$\Delta(J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon) := \infty, \quad (4.42)$$

falls nicht. In (4.41) wird z. B. die Manhattan-Norm $|J(t) - \bar{J}(t)| := \sum_{i=1}^m |J_i(t) - \bar{J}_i(t)|$ benutzt. Für $\rho > 0$ können die beiden Mengen

$$U(\rho, \varepsilon) := \{(J^{(0)}, \varphi^{(0)}) \in U \mid \Delta(J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon) \leq \rho\}, \quad (4.43)$$

$$D(\rho, \varepsilon) := U \setminus U(\rho, \varepsilon) \quad (4.44)$$

definiert werden, die angeben, für welche Anfangswerte aus U sich die Trajektorien weniger bzw. mehr als ρ voneinander entfernen.

Mit Hilfe obiger Definitionen kann das Adiabatentheorem für Multiphasensysteme wie folgt formuliert werden:

Satz 4.1 (Adiabatentheorem für Multiphasensysteme (A. NEISHTADT [N76]))

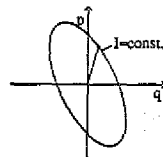
Es gilt:

$$\int_U \Delta(J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon) dJ^{(0)} d\varphi^{(0)} \leq K_1 \sqrt{\varepsilon}, \quad (4.45)$$

$$\forall \varepsilon > 0, \forall c_1 \sqrt{\varepsilon} < \rho < c_2 : \text{meas}(D(\rho, \varepsilon)) < c \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\rho}, \quad (4.46)$$

wobei K_1, c_1, c_2 und c von ε und ρ unabhängige Konstanten sind. Dieses Ergebnis ist optimal.

¹²Häufig werden $f(J, \varphi, 0)$ und $\frac{\partial f(J, \varphi, 0)}{\partial J_j}$ als analytisch vorausgesetzt [LM88], während sich obige Bedingung bis auf $C^{n+1}(T^n)$ abschwächen läßt [GKM89].



Beweis: Siehe zum Beispiel [N76], [LM88] oder [GKM89]. $\square$

Optimalität bedeutet, daß es den obigen sehr allgemeinen Voraussetzungen genügende Systeme gibt, für die die gemittelten Abweichungen (4.45) der Bahnen des gemittelten und des ungemittelten Systems *genau* von der Ordnung $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ sind.

Auf Hamiltonsche Systeme angewendet heißt das: Zunächst muß das Hamiltonsche System für jeden Parameterwert $Q(\varepsilon t)$ auf Winkel-Wirkungs-Variablen transformiert werden. Dies ist eine zeitabhängige kanonische Transformation, so daß sich der Hamiltonian in den neuen Koordinaten (I, θ) gemäß

$$\tilde{H}(I, \theta, Q) = H(p(I, \theta, Q), q(I, \theta, Q), Q) + \left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{q, I} \dot{Q} \quad (4.47)$$

ausdrückt. Dabei ist S eine Erzeugendenfunktion, die die kanonische Transformation auf Winkel-Wirkungs-Variable bewirkt. Die Bewegungsgleichungen in den neuen Koordinaten lauten nun

$$\frac{d}{dt} I_i = - \underbrace{\frac{\partial H}{\partial \theta_i}}_{\equiv 0} - \varepsilon \frac{dQ}{dt} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{q, \theta} \quad (4.48)$$

$$\frac{d}{dt} \theta_i = \frac{\partial H}{\partial I_i} + \varepsilon \frac{dQ}{dt} \frac{\partial}{\partial I_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{q, \theta}. \quad (4.49)$$

Bei dieser Herleitung ist einzuwenden, daß nicht ohne weiteres zu erkennen ist, ob die Ableitungen von S , die hier gebildet werden, global definierte glatte Phasenraumfunktionen sind, da S selbst, wegen $\frac{\partial S}{\partial I} = \theta$, keine global definierte Funktionen des Phasenraums sein kann. Für die Anwendbarkeit von Satz 4.1 ist dies von großer Bedeutung. Daß diese Funktionen in (4.48) und (4.49) wirklich diese Eigenschaft besitzen, wird im folgenden gezeigt. Eine andere Herleitung, die auch in dem sehr viel komplizierteren Fall ergodischer schneller Dynamik anwendbar ist, wird in Kapitel 5 durchgeführt.

Um die partiellen Differentiationen in (4.48) und (4.49) vertauschen zu können, muß $\left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{q, Q}$ durch partielle Ableitungen bei festgehaltenen neuen Koordinaten ausgedrückt werden. Definiere daher $\mathcal{S}(I, \theta, Q) := S(q(I, \theta, Q), I, Q)$. Die partielle Ableitung $\left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q} \right)_{q, Q}$ läßt sich gemäß

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q} \right)_{q, Q} &= \left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{I, \theta} - \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)_{I, Q} \left(\frac{\partial q}{\partial Q} \right)_{I, \theta} \\ &= \frac{\partial S}{\partial Q} - p \frac{\partial q}{\partial Q} \end{aligned} \quad (4.50)$$

umrechnen. Dabei wurde die Eigenschaft $p = \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)_{I, Q}$ der Erzeugendenfunktion benutzt.

Betrachte nun

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q} \right)_{q, \theta} &= \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{\partial S}{\partial Q} - p \frac{\partial q}{\partial Q} \right] \\ &= \underbrace{\frac{\partial}{\partial Q} \left[\frac{\partial S}{\partial \theta} - p \frac{\partial q}{\partial \theta} \right]}_{=0} + \left[\frac{\partial p}{\partial Q} \frac{\partial q}{\partial \theta} - \frac{\partial p}{\partial \theta} \frac{\partial q}{\partial Q} \right]. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Das Verschwinden des ersten Klammerausdrucks ist eine Folge der Eigenschaften von S . Es ist nämlich für festes Q

$$S = \int p dq \implies \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)_{I,Q} = p \frac{\partial q}{\partial \theta} \quad (4.52)$$

([G80] S. 447). Der zweite Klammerausdruck enthält nur noch glatte Funktionen des Phasenraums und wird in Kapitel 5 mit C bezeichnet.

Die zweite partielle Ableitung $\frac{\partial}{\partial I} \left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{q,\theta}$ kann ebenfalls gemäß

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial I} \left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{q,\theta} &= \frac{\partial}{\partial I} \left[\frac{\partial S}{\partial Q} - p \frac{\partial q}{\partial Q} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial Q} \left[\frac{\partial S}{\partial I} - p \frac{\partial q}{\partial I} \right] + \left[\frac{\partial p}{\partial Q} \frac{\partial q}{\partial I} - \frac{\partial p}{\partial I} \frac{\partial q}{\partial Q} \right] \\ &\quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{=\frac{\partial S}{\partial I}=\theta} \\ &= \left[\frac{\partial p}{\partial Q} \frac{\partial q}{\partial I} - \frac{\partial p}{\partial I} \frac{\partial q}{\partial Q} \right] \end{aligned} \quad (4.53)$$

umgeformt werden, wobei $\left(\frac{\partial \theta}{\partial Q} \right)_{I,\theta} \equiv 0$. Dieser Term wird in Kapitel 5 mit B bezeichnet.

Somit sind die in den Bewegungsgleichungen (4.48) und (4.49) vorkommenden Funktionen glatt, so daß die obigen Bedenken bei der Anwendung von Satz 4.1 ausgeräumt sind.

Die n Wirkungen I und die k Parameter Q , deren Dynamik sich wegen (4.38) gemäß

$$\frac{d}{dt} Q = \varepsilon \frac{\partial Q}{\partial \tau} \quad (4.54)$$

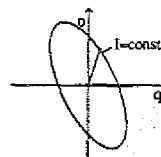
formulieren läßt, bilden die langsamen $n + k =: m \geq n$ Variablen J des Standardmultiphasensystems. Die Winkelvariablen θ sind Koordinaten des n -Torus und bilden die schnellen φ .

Das Adiabatentheorem trifft nun folgende Aussage: Im Mittel über den „zulässigen“ Phasenraum¹³ U ist die maximale Abweichung der Wirkungen I , die sich gemäß (4.48) entwickeln, von der Ausgangswirkung $I^{(0)}$ von der Ordnung $\sqrt{\varepsilon}$, geht also im adiabatischen Limes mit $\varepsilon \rightarrow 0$ gegen null.

Ebenso wie in der Quantenmechanik keine Aussage über die Phase gemacht wurde, wird hier keine Aussage über die Entwicklung der Winkel φ gemacht. Dazu benötigt man einen Satz über die Mittelung von Phasenraumfunktionen, der insbesondere in Kapitel 5 bei der Herleitung des Hannaywinkels von Bedeutung ist.

Dazu betrachtet man Phasenraumfunktionen $\mathcal{A}(J, \varphi, \varepsilon)$ für die dieselben Bedingungen wie für die Funktion f aus (4.39) gelten, nämlich $\mathcal{A} \in C^1(G \times T^n \times \mathbb{R})$ und $\mathcal{A}(J, \bullet, 0), \frac{\partial \mathcal{A}(J, \bullet, 0)}{\partial J_j} \in$

¹³Es ist nur sinnvoll, über adiabatische Eigenschaften zu sprechen, wenn die gemittelte Bewegung auf dem Zeitintervall $[0, T]$ existiert. Daher werden nur Startwerte in U betrachtet (siehe Seite 51).



$C^{n+2}(T^n)$. Dann können für alle $(J^{(0)}, \varphi^{(0)}) \in U$ und alle Zeiten $t \in [0, T]$ die beiden Größen

$$A(t) := \varepsilon \int_0^T dt' \mathcal{A}(J(t'), \varphi(t'), \varepsilon) \quad (4.55)$$

$$\bar{A}(t) := \varepsilon \int_0^T dt' \mathcal{A}_0(\bar{J}(t')) \quad (4.56)$$

definiert werden, wobei $\mathcal{A}_0(J) := \frac{1}{(2\pi)^n} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \mathcal{A}(J, \varphi, 0) d\varphi$ die über φ gemittelte Funktion ist. $A(t)$ ist das zeitliche Mittel über eine Bahn des Multiphasensystems, während $\bar{A}(t)$ das zeitliche Mittel der über φ gemittelten Funktion unter der Zeitentwicklung des gemittelten Systems (4.40) ist.

Die maximale Differenz von $A(t)$ und $\bar{A}(t)$ ist analog zu (4.41) definiert als

$$\hat{\Delta}(J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon) := \max_{t \in [0, T]} |A(t) - \bar{A}(t)| \quad (4.57)$$

und gibt an, wie stark sich die Zeitmittelwerte (4.55) und (4.56) entlang einer Trajektorie mit Anfangswert maximal unterscheiden. Die Menge aller Anfangswerte $(J^{(0)}, \varphi^{(0)}) \in U$, für die $\hat{\Delta}$ größer als eine Konstante $\rho > 0$ ist, wird mit $\hat{D}(\rho, \varepsilon)$ bezeichnet:

$$\hat{D}(\rho, \varepsilon) := \{(J^{(0)}, \varphi^{(0)}) \in U \mid \hat{\Delta}(J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon) > \rho\} \quad (4.58)$$

Ein Theorem zur Mittelung von Phasenraumfunktionen lautet dann:

Satz 4.2 (Mittelung von Phasenraumfunktionen (S. GOLIN et al. [GKM89]))
Für $\varepsilon \geq 0$ und $\rho > 0$ gilt:

$$\int_U \hat{\Delta}(J^{(0)}, \varphi^{(0)}, \varepsilon) dJ^{(0)} d\varphi^{(0)} \leq K_1 \sqrt{\varepsilon}, \quad (4.59)$$

$$\text{meas}(\hat{D}(\rho, \varepsilon)) < c \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\rho}, \quad (4.60)$$

wobei K_1 und c von ε und ρ unabhängige Konstanten sind.

Beweis: siehe [GKM89]. □

Im Abschnitt 4.4.2 werden ähnliche Sätze für ergodische Hamiltonsche Systeme angegeben. Im Gegensatz zu den Ergebnissen für integrable Systeme jedoch, reichen die Ergebnisse aus der Literatur für die Anwendung in Kapitel 7 nicht aus, so daß einige Erweiterungen im Rahmen dieser Arbeit gemacht werden müssen.

4.4 Ergodische Systeme

Im Gegensatz zu den integrablen Hamiltonschen Systemen gibt es für *ergodische* neben der Energie, die die einzige Erhaltungsgröße ist, keine weiteren unabhängigen Erhaltungsgrößen. Dadurch verläuft die Bewegung auf einer $(2n - 1)$ -dimensionalen Fläche

konstanter Energie, der *Energieschale*. *Ergodisch* ist das System nun, wenn *fast jede* Trajektorie — es gibt einige maßtheoretisch unbedeutende Ausnahmen — jedem Punkt der $(2n - 1)$ -dimensionalen Energieschale beliebig nahe kommt (die Energieschale also dicht füllt), wobei das Zeitmittel einer beliebigen Observablen entlang einer solchen Trajektorie durch ein Mittel über die Energieschale mit einem von der Trajektorie *unabhängigen* Maß ersetzt werden kann. L. BOLTZMANN hat den Begriff „ergodisch“ geprägt, der aus den griechischen Wörtern *ergon* (Arbeit) und *odos* (Weg) gebildet ist und etwa „Pfad auf der Energieschale“ heißt [M88a].

Die Ergodizität ermöglicht es, zeitliche Mittelwerte von Observablen, die typischerweise in thermodynamischen Systemen gemessen werden, mit einem geeigneten Ensemblemittel über die Zustände der Energiehyperfläche zu vergleichen. Hier ist das Ensemblemittel das *mikrokanonische*.

Hamiltonsche Systeme mit einem Freiheitsgrad sind sowohl integrabel als auch ergodisch, da in diesem Fall die Energieschale mit dem 1-Torus übereinstimmt. Daher ist die Ergodizität für einen Freiheitsgrad generisch. Für Systeme mit $n \geq 2$ hingegen, sind ergodische Systeme ebenso selten wie integrable. Beim herausgreifen eines beliebigen Hamiltonschen Systems trifft man ein ergodisches mit verschwindender Wahrscheinlichkeit [MM74].

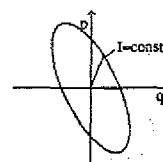
Die Dynamik ergodischer Systeme mit mehr als einem Freiheitsgrad ist i. a. *chaotisch*, d. h. hat möglicherweise positive Lyapunovexponenten. Daher kann die Bewegung *sensitiv von den Anfangsdaten abhängen*, so daß sich eng benachbart startende Trajektorien exponentiell voneinander entfernen. Trotz deterministischer Dynamik sind daher für solche Systeme keine Langzeitprognosen der Bewegung möglich.

In Abschnitt 4.4.1 wird die ergodische Bewegung präziser charakterisiert und einige, im folgenden benötigte Größen definiert, wie das von der Energieschale eingeschlossene Phasenraumvolumen.

Im darauffolgenden Abschnitt 4.4.2 werden nichtautonome Systeme betrachtet, die für festgehaltene äußere Parameter ergodisch sind. Wie für integrable Systeme existiert auch für ergodische ein Adiabatentheorem, das 1961 von T. KAZUGA bewiesen wurde. Die adiabatische Erhaltungsgröße ist das $2n$ -dimensionale Phasenraumvolumen, das von der $(2n - 1)$ -dimensionalen Energieschale eingeschlossen wird. Im adiabatischen Limes verläuft die Bewegung auf den instantanen Energieschalen, die alle das gleiche Phasenraumvolumen einschließen. Über die Bewegung auf der Energieschale wird, wie im integrablen Fall, durch das Adiabatentheorem keine Aussage gemacht.

Die sensitive Abhängigkeit von den Anfangsdaten macht es unmöglich, über den Endzustand der Trajektorie Aussagen zu machen. Wohl aber ist es möglich, eine Aussage über die „Länge“ der Trajektorie in Einheiten einer zeitähnlichen Größe zu machen, in der sich ein zur Berryphase und zum Hannaywinkel analoger Holonomieeffekt zeigt (Kapitel 7).

Analog zum Mittelungssatz 4.2 wird ein Satz bewiesen, der im adiabatischen Limes die Mittelung von Phasenraumfunktionen über das mikrokanonische Ensemble erlaubt, und das Kazugasche Adiabatentheorem wird so verallgemeinert, daß es auf Slow-Fast-Systeme anwendbar ist (siehe Kapitel 7).



4.4.1 Charakterisierung ergodischer Dynamik

Betrachte ein Hamiltonsches System mit n Freiheitsgraden, dessen Hamiltonfunktion $H(p, q)$ nur von den kanonischen Koordinaten p und q abhängt. Ferner sei die Hamiltonfunktion so beschaffen, daß die resultierende Dynamik neben der Energie $E := H(p, q)$ keine weiteren unabhängigen Erhaltungsgrößen zuläßt. Die Bewegung verläuft dann wegen der Energieerhaltung auf einer Energieschale. Ferner komme fast jede Trajektorie¹⁴ jedem Punkt der zugehörigen, beschränkten¹⁵ Energieschale beliebig nahe und zwar so, daß Zeitmittelwerte glatter Observabler $\mathcal{A}(p, q)$ entlang einer solchen Trajektorie (mit Anfangswerten $p^{(0)}$ und $q^{(0)}$) durch geeignete Ensemblemittelwerte über die Energieschale $E = H(p^{(0)}, q^{(0)})$ ersetzt werden können:

$$\forall \mathcal{A} \in C^1(M): \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt \mathcal{A}(p(t, p^{(0)}, q^{(0)}), q(t, p^{(0)}, q^{(0)})) = \int dm_E \mathcal{A}(p, q) \quad (4.61)$$

Hamiltonsche Systeme mit diesen Eigenschaften nennt man *ergodisch* (dm_E ist dabei das *ergodische Maß* auf der Energieschale mit Energie E). Die Ergodizität schließt zum Beispiel die Möglichkeit aus, daß Trajektorien zu Startwerten aus einer Menge, die ein endliches Lebesguemaß besitzt, auf Teilbereiche der Energieschale beschränkt sind.

Damit die betrachtete Energiehyperfläche, festgelegt durch $E = H(p, q)$, eine $(2n - 1)$ -dimensionale glatte Untermannigfaltigkeit des Phasenraums bildet, betrachtet man nur eine offene Teilmenge $\mathcal{G}$ des Phasenraums M , auf der *keine* lokalen Extrema von $H(p, q)$ liegen, d. h.:

$$\forall (p, q) \in \mathcal{G}: \quad \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \right)^2 \right] \neq 0 \quad (4.62)$$

Ist (4.62) nicht erfüllt, so können die Energiehyperflächen entweder zu niedriger dimensionalen Mannigfaltigkeiten degenerieren, oder, wie z. B. im Fall einer Separatrix, in der Umgebung der instabilen Fixpunkte gar keine Mannigfaltigkeit mehr bilden.

Da das Hamiltonsche System nach Voraussetzung in $\mathcal{G}$ keine ins unendliche führenden Trajektorien besitzt, sind die glatten Hyperflächen konstanter Energie

$$S_E := \{(p, q) \in \mathcal{G} \subset M | H(p, q) = E\} \quad (4.63)$$

in sich geschlossen, d. h. haben keinen Rand, und bilden daher selber den Rand einer $2n$ -dimensionalen Untermannigfaltigkeit $I_E := \{(p, q) \in M | H(p, q) < E\}$ des Phasenraums M ,¹⁶ deren Volumen gegeben ist durch

$$\hat{\mathcal{J}}(p, q) := \int_{I_E} d^n p d^n q. \quad (4.64)$$

¹⁴ „fast jede“ ist hier im maßtheoretischen Sinne bzgl. des Lebesguemaßes auf dem Phasenraum M gemeint.

¹⁵ Es sollen solche Energieschalen des Systems ausgeschlossen werden, auf denen Trajektorien ins Unendliche führen.

¹⁶ Hier wurde vorausgesetzt, daß der Phasenraum M einfach zusammenhängt. Anderenfalls ist nicht gewährleistet, daß aus $\delta S_E = 0$, $S_E = \delta I_E$ folgt, da dann die Homologiegruppe von M möglicherweise nichttrivial ist ([CdWD91] S. 222f).

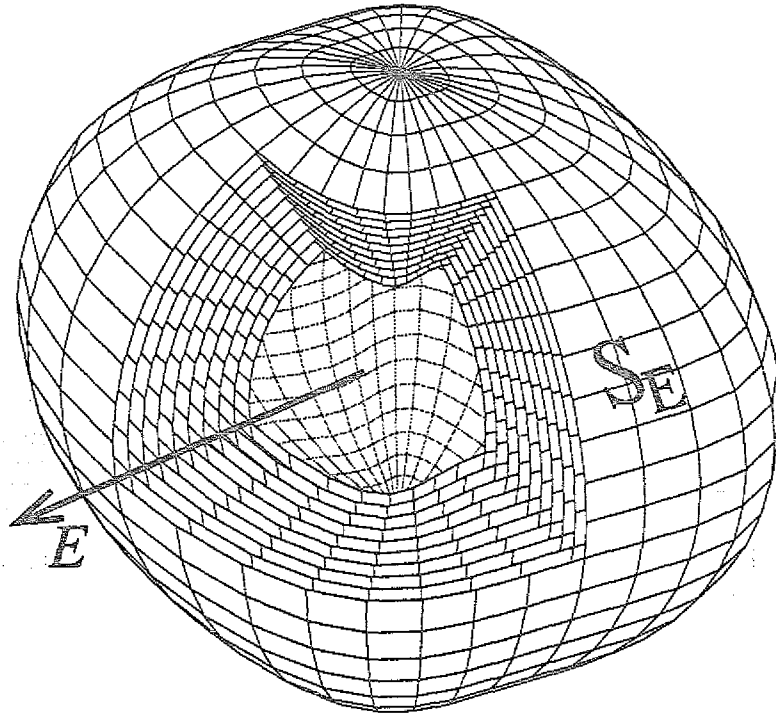


Abbildung 4.3: Der $2n$ -dimensionale Phasenraum ergodischer Systeme ist durch die $(2n-1)$ -dimensionalen Energiehyperflächen stratifiziert.

Im folgenden wird vorausgesetzt, daß I_E bzw. S_E zusammenhängend ist. Falls dies nicht erfüllt sein sollte, wird nur eine Zusammenhangskomponente betrachtet. Bei der Definition von I_E wurde o. B. d. A. angenommen, daß die Energie der von der Energieschale eingeschlossenen Punkte (p, q) niedriger ist als die Energie E . Dadurch ist der Phasenraum, zumindest in $\mathcal{G}$, durch die Energiehyperflächen S_E stratifiziert, ähnlich wie eine Zwiebel durch ihre Schalen (Abbildung 4.3).

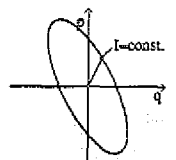
Das Volumen des von einer Energieschale S_E eingeschlossenen Phasenraumteils I_E als Funktion der Energie ist gegeben durch

$$\mathcal{J}(E) := \mathcal{J}(H(p, q)) = \hat{\mathcal{J}}(p, q) = \int_{I_E} d^n p d^n q, \quad (4.65)$$

so daß $\mathcal{J}$ auf einem geeigneten Energieintervall stetig differenzierbar und streng monoton steigend ist. Somit kann $\mathcal{J}(E)$ eindeutig nach E aufgelöst werden, und $E = \mathcal{E}(\mathcal{J})$ ist ebenfalls eine streng monoton steigende, stetig differenzierbare Funktion auf einem geeigneten $\mathcal{J}$ -Intervall.

Wegen (4.62) und der strengen Monotonie folgt für $\hat{\mathcal{J}}(p, q) := \mathcal{J}(H(p, q))$:

$$\forall (p, q) \in \mathcal{G} : \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial p_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial q_i} \right)^2 \right] \neq 0, \quad (4.66)$$



$\hat{\mathcal{J}}$ ist somit ebenso wie die Energie zur eindeutigen Charakterisierung einer Energiehy-perschale $S(\mathcal{J}) := S_E$ geeignet und kann daher anstelle der Energie verwendet werden. Im folgenden wird die Energie E durch das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ ersetzt, da $\mathcal{J}$, im Gegensatz zu E , unter adiabatischer Veränderung der Hamiltonfunktion erhalten bleibt.

4.4.2 Adiabaten-theorie ergodischer Systeme

Wie bereits in Abschnitt 4.3.2 erwähnt, gibt es auch für die ergodischen Hamiltonschen Systeme ein Adiabatentheorem, das in diesem Abschnitt vorgestellt und erweitert wird. Es stammt von T. KAZUGA und wurde 1961 veröffentlicht [K61].

KAZUGA betrachtete ergodische Hamiltonsche Systeme, deren Hamiltonfunktionen H außer von den $2n$ kanonischen Variablen p und q von einem externen Parameter s abhängen ($H = H(p, q, s)$). Dieser entwickelt sich zeitlich gemäß $s = t/T$, wobei $T = 1/\varepsilon$ die Beobachtungsdauer des Systems und ε der adiabatische Kleinheitsparameter ist.

Das Adiabatentheorem besagt, daß die Bewegung im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ (adiabatischer Limes) zu jedem Zeitpunkt t auf der instantanen Energieschale des Systems verläuft ($H(p, q, s = \text{const.})$), die das konstante Phasenraumvolumen $\mathcal{J}^{(0)} = \mathcal{J}(H(p^{(0)}, q^{(0)}, s^{(0)}), s^{(0)})$ des Anfangswertes $(p^{(0)}, q^{(0)})$ einschließt. Das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ ist die einzige adiabatische Invariante.

Das Kazugasche Adiabatentheorem gilt nur für *nichtautonome* Systeme, deren Dynamik nicht auf die Bewegung der langsamen Parameter zurückwirken kann. Da in Kapitel 7 die langsamen Parameter mit in das dynamische System einbezogen werden, und die ergodische Dynamik auf die langsamen Parameter zurückwirken kann, muß das Theorem entsprechend erweitert werden. Diese Erweiterung, die stark an die Arbeiten von KAZUGA, NEISHTADT und GOLIN et al. angelehnt ist [K61, N76, GKM89], wird in Anhang C.1 explizit durchgeführt.

Im folgenden wird das erweiterte Adiabatentheorem für Slow-Fast-Systeme mit ergodischer schneller Dynamik vorgestellt und sein Beweis skizziert. Das Kazugasche Theorem kann ohne weiteres als Spezialfall des erweiterten angesehen werden.

Ausgegangen wird von einem wie in Abschnitt 4.2 definierten Hamiltonschen Slow-Fast-System mit k langsamen und n schnellen Freiheitsgraden, das durch die Hamiltonfunktion

$$H(P, Q, p, q) = H_1(P, Q) + H_2(p, q, Q) \quad (4.67)$$

charakterisiert ist, und dessen schnelle Dynamik bei festgehaltenen $(P, Q) \in \mathcal{M}_P^k \times \mathcal{M}_Q^k$ für geeignet gewählte Energien, wie in Abschnitt 4.4.1 beschrieben, auf einer $(2n - 1)$ -dimensionalen Energiehyperfläche des schnellen Teilsystems ergodisch ist.

Zu jedem festen (P, Q) gibt es nach den Ausführungen des vorherigen Abschnitts ein $\mathcal{J}$ -Intervall, in dem die Energieschalen wohldefiniert sind. Im folgenden wird vorausgesetzt, daß für alle $(P, Q) \in \mathcal{M}_P^k \times \mathcal{M}_Q^k$ ein gemeinsames $\mathcal{J}$ -Intervall $(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$ existiert, für das $(2n - 1)$ -dimensionale Energieschalen existieren. Bei der Untersuchung der adiabatischen Eigenschaften des Systems wird daher der schnelle Phasenraum auf

$$\mathcal{G}_Q = \bigcup_{\mathcal{J} \in (\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)} S(\mathcal{J}, Q) = \{(p, q) \in M \mid \mathcal{J}_1^* < \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q) < \mathcal{J}_2^*\} \quad (4.68)$$

beschränkt.¹⁷

Betrachte die Bewegungsgleichungen des Slow-Fast-Systems

$$\frac{dP}{d\tau} = -\frac{\partial H}{\partial Q}(P, Q, p, q), \quad \frac{dQ}{d\tau} = \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q), \quad (4.69)$$

$$\frac{dp}{d\tau} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_2}{\partial q}, \quad \frac{dq}{d\tau} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_2}{\partial p} \quad (4.70)$$

auf der Menge $D := \{(P, Q, p, q) | P \in \mathcal{M}_P^k, Q \in \mathcal{M}_Q^k, (p, q) \in \mathcal{G}_Q\}$, wobei hier die Trennung der Zeitskalen des Systems „künstlich“ durch Einfügen von ε in (4.70) erreicht wurde. Die Hamiltonfunktion $H(P, Q, p, q)$ muß zweimal stetig differenzierbar sein (weitere, eher technische Bedingungen an das System sind in Anhang C.1 aufgeführt). Es ist $\tau = \varepsilon t$ die Zeit gemessen auf der für die langsamen Freiheitsgrade charakteristischen Zeitskala. Der Beobachtungszeitraum ist auf dieser Skala das konstante τ -Intervall $[a, b]$.

Mittelt man das System (4.69, 4.70) über die Energieschale $S(\mathcal{J}, Q) := S_{E(\mathcal{J}, Q), Q}$, so erhält man die gemittelten Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\bar{P}}{d\tau} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{Q}}(\bar{P}, \bar{Q}, \bar{\mathcal{J}}), \quad \frac{d\bar{Q}}{d\tau} = \frac{\partial H_1}{\partial \bar{P}}(\bar{P}, \bar{Q}), \quad (4.71)$$

$$\frac{d\bar{\mathcal{J}}}{d\tau} = 0, \quad (4.72)$$

wobei $\bar{\cdot} := \int_{S(\mathcal{J}, Q)} \cdot dm_{\mathcal{J}, Q}$ ist. (4.72) ist notwendige Bedingung für die adiabatische Invarianz des Phasenraumvolumens $\mathcal{J}$ (siehe Satz C.1 auf Seite 114 und (C.14) auf Seite 120). Der Kürze halber werden im folgenden die langsamen Freiheitsgrade durch $J := (P, Q)$ abgekürzt.

Zu gegebenen Startwerten $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D$ wird die maximale Abweichung der gemittelten $(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}^{(0)})$ von der ursprünglichen Bahn $(J(\tau), \mathcal{J}(\tau))$ durch

$$\Delta_J(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) = \max_{\tau \in [a, b]} |J(\tau) - \bar{J}(\tau)|$$

$$\Delta_{\mathcal{J}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) = \max_{\tau \in [a, b]} |\mathcal{J}(\tau) - \hat{\mathcal{J}}(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)})|$$

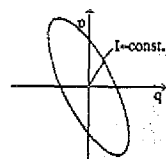
definiert, falls die Bahn in D bis zum Zeitpunkt $\tau = b$ fortgesetzt werden kann. Andernfalls setzt man

$$\Delta_J(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) = \infty$$

$$\Delta_{\mathcal{J}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) = \infty.$$

Dabei ist $J(\tau) = (P(\tau), Q(\tau))$ der zu den Anfangswerten $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)})$ gehörende Zustand des langsamen Teilsystems zum Zeitpunkt τ , der sich durch Integration von (4.69, 4.70) ergibt.

¹⁷Beachte, daß die in Abschnitt 4.4.1 eingeführten Größen hier wegen der Form (4.67) der Hamiltonfunktion von $Q \in \mathcal{M}_Q^k$, nicht aber von $P \in \mathcal{M}_P^k$ abhängen. Somit ist $S(\mathcal{J}) = S(\mathcal{J}, Q)$, usw.



Die Menge

$$L(a, b, \varepsilon, \delta) = \left\{ (J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D \mid \Delta_J(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) + \Delta_{\mathcal{J}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) < \delta \right\} \quad (4.73)$$

enthält alle die Startwerte in D , für die $\Delta_J + \Delta_{\mathcal{J}}$ kleiner als eine vorgegebene kleine Zahl $\delta > 0$ ist.

Bezeichnet man mit $D^{(0)}(a, b, \rho)$ die Menge der Startwerte in D , für die das gemittelte System (4.71, 4.72) auf dem ganzen Zeitintervall $[a, b]$ eine Lösung in D besitzt, die zu allen Zeiten $\tau \in [a, b]$ vom Rand von D den Abstand $\rho > 0$ hat, so kann das Adiabatentheorem für ergodische Slow-Fast-Systeme wie folgt formuliert werden:

Satz 4.3 (Adiabatentheorem für autonome Slow-Fast-Systeme) *Unter den obigen Voraussetzungen gilt*

$$\mu_{(2n+2k)} \left[D^{(0)}(a, b, \rho) - L(a, b, \varepsilon, \delta) \right] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (4.74)$$

für alle $\rho > 0$ und $\delta > 0$. $\mu_{(2n+2k)}$ ist dabei das Lebesguemaß des $\mathbb{R}^{(2n+2k)}$.

Der Satz besagt, daß im adiabatischen Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ das Lebesguemaß der Menge der Startwerte in $D^{(0)}(a, b, \rho)$, für die der Abstand zwischen der gemittelten und ursprünglichen Trajektorie größer als eine beliebige positive Zahl δ ist, für alle $\delta > 0$ verschwindet. D. h. für $\mu_{(2n+2k)}$ -fast alle Startwerte in $D^{(0)}(a, b, \rho)$ konvergiert das gemittelte System (4.71, 4.72) gegen das ursprüngliche (4.69, 4.70), so daß im adiabatischen Limes anstelle des ursprünglichen das einfachere gemittelte betrachtet werden darf. Dies geht natürlich auf Kosten der Kenntnis der schnellen Bewegung. Ebenso wie die anderen Adiabatentheoreme, macht Satz 4.3 keine Aussage über den Verbleib der Trajektorie auf der instantanen Energieschale.

Zu den $2k$ langsamen Koordinaten $J = (P, Q)$ des Systems gesellt sich das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ als weitere langsame Koordinate. Die Nomenklatur wurde hier in Analogie zum integrablen Fall gewählt.

Der Beweis des Satzes besteht nun darin, zunächst für ein genügend eingeschränktes Teilintervall der Beobachtungszeit $[a', b'] \subset [a, b]$ die Existenz beider Trajektorien zu zeigen und deren Abstand im Mittel über $D^{(0)}(a', b', \rho)$ abzuschätzen. Diese Abschätzung ist technisch recht aufwendig, und es wird daher auf Anhang C.1 verwiesen.

Eine Erweiterung der Aussage auf das gesamte Beobachtungsintervall gelingt durch ein „bootstrap“-Argument, das etwa wie folgt funktioniert: Man nimmt an, das Adiabatentheorem sei maximal für ein Intervall $[a, \beta]$ mit $\beta < b$ zu erfüllen. Ebenfalls gibt man ein zweites Zeitintervall $[\alpha'', \beta'']$ ($a < \alpha'' < \beta$, $\beta < \beta'' \leq b$) vor, für das der Adiabatenatz für eine bestimmte Menge von Startwerten $D^{(0)}(\alpha'', \beta'', \rho)$ erfüllbar ist. Nun wird gezeigt, daß der Schnitt dieser Menge mit der Bildmenge von $D^{(0)}(a, b, \rho)$ im adiabatischen Limes maßtheoretisch gegen die Bildmenge von $D^{(0)}(a, b, \rho)$ konvergiert, so daß das Adiabatentheorem für fast alle Startwerte aus $D^{(0)}(a, b, \rho)$ bis zum Zeitpunkt $\beta'' > \beta$ ausgedehnt werden kann. Dies steht jedoch im Widerspruch zur Annahme, das Adiabatentheorem

gelte maximal auf dem Zeitintervall $[a, \beta]$. Der Beweis des Adiabaten-theorems ist ausführlich im Anhang C.1 durchgeführt.

Eine wichtige Erweiterung des Adiabaten-satzes 4.3, insbesondere in Hinblick auf Kapitel 7, stellt der Mittelungssatz für Observablen $\mathcal{A}(J, p, q)$ dar, der im adiabatischen Limes die Ersetzung des Zeitmittels von $\mathcal{A}(J, p, q)$ entlang einer Trajektorie von (4.69, 4.70) durch das Zeitmittel der über die instantane Energieschale gemittelten Observablen $\bar{\mathcal{A}}(\bar{J}, \bar{\mathcal{J}})$ entlang der Trajektorie des gemittelten Systems erlaubt.

Sei $\mathcal{A}(J, p, q) \in C^1(D)$ und

$$A(\tau) := \int_a^\tau \mathcal{A}(J(\tau'), p(\tau'), q(\tau')) d\tau' \quad (4.75)$$

$$\bar{A}(\tau) := \int_a^\tau \langle \mathcal{A} \rangle(\bar{J}(\tau'), \bar{\mathcal{J}}(\tau')) d\tau', \quad (4.76)$$

wobei $\langle \bullet \rangle = \int_{S(J, Q)} \bullet dm_{J, Q}$ ist. Dann wird die maximale Differenz dieser beiden Zeitmittelwerte auf dem Zeitintervall $[a, b]$ mit

$$\hat{\Delta}_{\mathcal{A}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) := \max_{a \leq \tau \leq b} |A(\tau) - \bar{A}(\tau)| \quad (4.77)$$

bezeichnet. Die Menge der Startwerte, für die $\hat{\Delta}_{\mathcal{A}} + \Delta_J + \Delta_{\mathcal{J}} < \delta$, ist

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\mathcal{A}}(a, b, \varepsilon, \delta) := \{ & (J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D \mid \hat{\Delta}_{\mathcal{A}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) \\ & + \Delta_J(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) + \Delta_{\mathcal{J}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) < \delta \}, \end{aligned} \quad (4.78)$$

so daß der folgende Mittelungssatz formuliert werden kann:

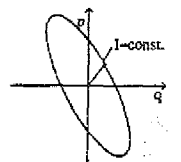
Satz 4.4 (Mittelung von Observablen in ergodischen Slow-Fast-Systemen)

Unter in diesem Abschnitt gemachten Voraussetzungen gilt

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho) - \hat{L}_{\mathcal{A}}(a, b, \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (4.79)$$

für alle $\rho > 0$ und alle $\delta > 0$.

Der Beweis dieses Satzes ist dem des Adiabaten-theorems ähnlich und wird in Anhang C.2 explizit durchgeführt.



Die Hamilton-Funktion H ist eine Funktion auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$, die die Energie des Systems darstellt. Sie ist durch die Gleichung

$$H(q, p) = \frac{1}{2} p^2 + V(q)$$

beschrieben, wobei $V(q)$ das Potenzial darstellt. Die Hamilton-Funktion ist eine Funktion auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$, die die Energie des Systems darstellt.

Die Hamilton-Funktion ist eine Funktion auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$, die die Energie des Systems darstellt.

Kapitel 5

Integrable Slow-Fast-Systeme und Hannaywinkel

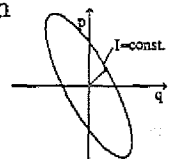
Nach den etwas längeren vorbereitenden Betrachtungen von Kapitel 4 ist es jetzt möglich, die geometrischen Effekte in klassischen Systemen zu untersuchen. Dieses Kapitel dient der ausführlichen Herleitung der geometrischen Effekte in Slow-Fast-Systemen, deren schnelles Teilsystem Liouville-integabel ist. Die Ergebnisse dieses Abschnitts, die die schnelle Dynamik betreffen, sind nicht neu [H85, K90]. Ebenso ist das Verfahren zur Konstruktion der Bewegungsgleichungen in diesem Zusammenhang schon von J. KOILER verwendet worden [K90].

Kurz nach der Entdeckung der quantenmechanischen Holonomieeffekte durch M. BERRY fand J. HANNAY einen analogen Effekt in klassisch integrablen Hamiltonschen Systemen [H85]. Die adiabatische Bewegung definiert über dem Parameterraum einen Zusammenhang, der sich in der Konstanz der Wirkungen ausdrückt und möglicher Weise eine nichttriviale Holonomie in den Winkeln besitzt. Die Holonomie äußert sich in einer Verschiebung auf dem Torus, die durch eine Differenz in den Winkelkoordinaten, den sogenannten *Hannaywinkeln*, beschrieben werden kann.

Da die ursprüngliche Darstellung der Hannaywinkel [H85] und alternative Herleitungen (z. B. [B85]) für eine Verallgemeinerung auf nichtintegrable System nicht geeignet sind, wird hier eine neue Herleitung in Anlehnung an [K90] vorgestellt. Diese wird in Kapitel 7 so verallgemeinert, daß sie auch in ergodischen Hamiltonschen Systemen angewendet werden kann.

Im adiabatischen Limes können die Kräfte, die von den schnellen auf die langsamen Freiheitsgrade wirken, über den n -Torus gemittelt werden. Die resultierende effektive Kraft, die nur von den adiabatisch invarianten Wirkungen des n -Torus abhängt, ist ausschließlich eine Born-Oppenheimer-Potentialkraft. Neben dieser tritt *kein* geometrischer Magnetismus auf, wie es vielfach in der Literatur behauptet wird [GT87, B89, K90, BR93a, BR93b].

In Abschnitt 5.1 werden die Bewegungsgleichungen des Slow-Fast-Systems in instantanen Winkel-Wirkungs-Variablen ausgedrückt, so daß das Adiabatentheorem 4.1 von A. NEISHTADT angewendet werden kann, und dadurch die schnellen von den langsamen



Freiheitsgraden separiert werden. In den Abschnitt 5.2.1 wird die adiabatische Dynamik der langsamen Freiheitsgrade ausführlich beschrieben und die dazu widersprüchlichen Ergebnisse in der Literatur kritisiert. Abschnitt 5.2.2 behandelt die adiabatische Dynamik der schnellen Freiheitsgrade ausführlich.

5.1 Instantane Winkel-Wirkungs-Variablen und adiabatische Näherung

Betrachte ein Slow-Fast-System der Form (4.18,4.19), das wie in Abschnitt 4.2.1 definiert ist, und dessen schnelle Freiheitsgrade (p, q) bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden (P, Q) ein Liouville-integrables System bilden.

Obwohl die schnelle Bewegung bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden integrabel ist, ist die Dynamik des gesamten Slow-Fast-Systems, das sich frei gemäß der aus (4.18,4.19) resultierenden Bewegungsgleichungen entwickelt, i. a. nicht integrabel und damit seine Lösung sehr kompliziert.

Eine Näherungslösung kann für den Fall gefunden werden, daß die Zeitskalen der schnellen und langsamen Bewegung sehr stark getrennt sind. Die Trennung der Zeitskalen wird, wie in Abschnitt 4.2.1 beschrieben, durch Einführen eines Kleinheitsparameters ε erreicht. Die Näherungslösung ergibt sich durch Mittelung der Bewegungsgleichungen über die schnelle Bewegung, die zu einer Entkopplung von schnellem und langsamem Teil führt.

Dies setzt jedoch voraus, daß das Adiabatentheorem 4.1 anwendbar ist. Im allgemeinen haben die Bewegungsgleichungen in den Variablen (P, Q, p, q) nicht die für Satz 4.1 notwendige Gestalt

$$\dot{J} = \varepsilon f(J, \varphi, \varepsilon), \quad \dot{\varphi} = \omega(J) + \varepsilon g(J, \varphi, \varepsilon). \quad (5.1)$$

Dabei sind J Koordinaten des $\mathbb{R}^m$ und φ Winkel auf einem n -Torus T^n ($m \geq n$). Die Gestalt (5.1) der Bewegungsgleichungen erhält man dadurch, daß die integrablen schnellen Freiheitsgrade für festgehaltene langsame Freiheitsgrade in Winkel-Wirkungs-Variablen dargestellt werden. Die Wirkungen zusammen mit den langsamen Freiheitsgraden bilden dann die $m = 2k + n$ langsamen J , und die n Winkel θ sind mit den φ aus (5.1) identisch.

Wie man bei festen Q das schnelle Teilsystem auf Winkel-Wirkungs-Variable bringt, ist in Abschnitt 4.3.1 skizziert worden. Dazu muß im folgenden vorausgesetzt werden, daß die schnellen Variablen p und q für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ genügend oft stetig differenzierbare Funktionen der Winkel-Wirkungs-Variable I und θ sind. Genauer muß gelten: $p_i(I, \theta, Q), q_i(I, \theta, Q) \in C^{n+3}(T^n)$, $p_i(\theta, \theta, \theta), q_i(\theta, \theta, \theta) \in C^2(\mathbb{R}^n \times \mathcal{M}_Q^k)$ (der „merkwürdige“ Grad $n + 3$ der Differenzierbarkeit nach θ ergibt sich aus den Voraussetzungen des Adiabatentheorems 4.1).

Um das System der Form

$$\omega^2 = dP \wedge dQ + dp \wedge dq \quad (5.2)$$

$$H(P, Q, p, q) = H_1(P, Q) + H_2(p, q, Q) \quad (5.3)$$

5.1. WINKEL-WIRKUNGS-VARIABLEN UND ADIABATISCHE NÄHERUNG 65

in den Koordinaten (P, Q, I, θ) auszudrücken, muß sowohl die symplektische 2-Form ω^2 als auch die Hamiltonfunktion $H(P, Q, p, q)$ in den neuen Koordinaten ausgedrückt werden.

Für letztere gilt

$$H(P, Q, I) = H_1(P, Q) + H_2(I, Q) \quad (5.4)$$

und hängt gemäß (4.36) *nicht* von den Winkeln θ ab.

Zur Umrechnung von ω^2 wird die Summationskonvention benutzt, d. h. über zwei gleiche Indizes wird summiert. Dabei ist zu beachten, daß griechische Indizes von 1 bis k und römische von 1 bis n laufen. Die symplektische 2-Form ω^2 transformiert sich gemäß

$$\omega^2 = \delta_{\alpha\beta} dP_\alpha \wedge dQ_\beta + \delta_{ij} dp_i \wedge dq_j \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} &= \delta_{\alpha\beta} dP_\alpha \wedge dQ_\beta + \delta_{ij} dI_i \wedge d\theta_j + \\ &\quad \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial I_i} - \frac{\partial p}{\partial I_i} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right] dQ_\alpha \wedge dI_i + \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial \theta_i} - \frac{\partial p}{\partial \theta_i} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right] dQ_\alpha \wedge d\theta_i + \\ &\quad \sum_{\alpha < \beta} \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial Q_\beta} - \frac{\partial p}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right] dQ_\alpha \wedge dQ_\beta. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Die hier durchgeführte Koordinatentransformation¹ ist *nicht* kanonisch, weil die kanonische Struktur (4.18) der 2-Form ω^2 nicht erhalten bleibt. Dies liegt daran, daß die neuen Koordinaten I und θ neben den p und q von den langsamen Orten Q abhängen. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen haben nicht die kanonische Form, sondern müssen gemäß $\mathcal{I}dH$ berechnet werden. Der kanonische Isomorphismus ist gemäß $\omega_{ij}^2 \mathcal{I}^{jk} = \delta_i^k$ (siehe Seite 43) gegeben und führt auf die Bewegungsgleichungen

$$\dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} + C_{i\alpha} \frac{\partial H}{\partial I_i} + F_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial P_\beta} + \underbrace{[C_{i\alpha} B_{i\beta} - B_{i\alpha} C_{i\beta}]}_{\stackrel{(1)}{=} -F_{\alpha\beta}} \frac{\partial H}{\partial P_\beta}$$

$$= -\frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} + C_{i\alpha} \frac{\partial H}{\partial I_i} \quad (5.7)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \quad (5.8)$$

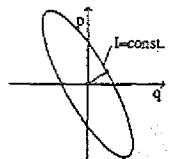
$$\dot{I}_i = -C_{i\alpha} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \quad (5.9)$$

$$\dot{\theta}_i = \underbrace{\frac{\partial H}{\partial I_i}}_{=: \omega_i} + B_{i\alpha} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha}. \quad (5.10)$$

Die Gleichheit (1) wird in Anhang A.1 gezeigt. Es wurden die folgenden Abkürzungen benutzt:

$$F_{\alpha\beta} = \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial Q_\beta} - \frac{\partial p}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right], \quad (5.11)$$

¹J. KOILLER hat diese Transformation in [K90] durchgeführt. Siehe auch S. 69.



$$B_{i\beta} = \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q}{\partial I_i} - \frac{\partial p}{\partial I_i} \frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right], \quad (5.12)$$

$$C_{i\beta} = \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q}{\partial \theta_i} - \frac{\partial p}{\partial \theta_i} \frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right]. \quad (5.13)$$

Diese Bewegungsgleichungen enthalten noch *keine* Näherungen, sondern beschreiben die Bewegung exakt. Bei festgehaltenen Q und P ergeben sich die Bewegungsgleichungen (4.37) für die schnelle Dynamik.

Für eine Diskussion der Diskrepanz zwischen dem obigen Ergebnis und denen von E. GOZZI und W. D. THACKER [GT87], J. KOILLER [K90] und M. BERRY und J. ROBBINS [BR93b] siehe Abschnitt 5.2.1.

Als nächstes wird die Slow-Fast-Eigenschaft des Systems ausgenutzt und die Anwendbarkeit von Satz 4.1 auf das Multiphasensystem (5.7, 5.8, 5.9, 5.10) gezeigt.

Die Trennung der Zeitskalen des Slow-Fast-Systems wird dadurch erreicht, daß im langsamen Hamiltonian (4.20)

$$H_1(P, Q) = \frac{1}{2} \varepsilon^2 \Xi_{\alpha\beta}(Q) P_\alpha P_\beta + \Phi(Q) \quad (5.14)$$

der adiabatische Kleinheitsparameter ε beliebig klein gemacht wird. Nach der Substitution $\hat{P} = \varepsilon P$ lauten die Bewegungsgleichungen (5.7, 5.8, 5.9, 5.10):

$$\dot{\hat{P}}_\alpha = -\varepsilon \frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} + \varepsilon C_{i\alpha} \frac{\partial H}{\partial I_i} \quad (5.15)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \varepsilon \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\beta \quad (5.16)$$

$$\dot{I}_i = -\varepsilon C_{i\alpha} \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\beta \quad (5.17)$$

$$\dot{\theta}_i = \omega_i(I, Q) + \varepsilon B_{i\alpha} \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\beta, \quad (5.18)$$

die die Struktur (5.1) eines Multiphasensystems haben. Dabei werden $\hat{P}$, Q und I zu den langsamen J zusammengefaßt, und die θ werden mit φ identifiziert. Trivialer Weise ist die Zahl m der langsamen Koordinaten größer als die Zahl der schnellen, d. h. $m = 2k + n > n$.

Die Voraussetzungen für Theorem 4.2 aus Abschnitt 4.3.2 werden vom obigen System erfüllt, vorausgesetzt $\text{rg} \left(\frac{\partial \omega(I, Q)}{\partial (I, Q)} \right) = n$ gilt überall auf einer offenen, beschränkten Menge $G \supset \in \mathbb{R}^{2k+n}$, die $\mathcal{M}_P^k \times \mathcal{M}_Q^k \times \mathcal{M}_I^n$ enthält.

Das über die schnellen Koordinaten gemittelte System lautet unter Berücksichtigung von $\langle C_{i\alpha} \rangle_{I, Q} \equiv 0$ (siehe Anhang A.2)

$$\dot{\hat{P}}_\alpha = -\varepsilon \frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} \quad (5.19)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \varepsilon \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\beta \quad (5.20)$$

$$\dot{I}_i = 0 \quad (5.21)$$

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \langle B_{i\alpha} \rangle_{I, Q} \hat{Q}_\alpha, \quad (5.22)$$

wobei die Ableitungen von $H(P, Q, I)$ wegen ihrer Unabhängigkeit von θ aus den Mittelungen herausgezogen wurden.² (5.21) ist notwendige Bedingung für die adiabatische Invarianz der Wirkungen. $\langle \bullet \rangle_{I, Q}$ ist die Mittelung über den n -Torus $T^n(I)$ und wird durch

$$\langle \bullet \rangle_{I, Q} := \frac{1}{(2\pi)^n} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \bullet d\theta_1 \dots d\theta_n \quad (5.23)$$

definiert.

Die beiden Bewegungsgleichungen (5.19) und (5.20) sind wegen der Konstanz der Wirkungen I vollständig von (5.21) und (5.22) entkoppelt. Für vorgegebene Wirkungen $I^{(0)}$ können sie daher unabhängig von der schnellen Dynamik integriert werden.

Mit gegebener Lösung von (5.19, 5.20) können anschließend auch die schnellen Bewegungsgleichungen gelöst werden. Die Lösung des gemittelten Slow-Fast-Systems ist sehr viel einfacher als die des ursprünglichen.

5.2 Dynamik adiabatischer Slow-Fast-Systeme

Mit Hilfe des Adiabatentheorems 4.1 und des Mittelungssatzes 4.2 für Observablen aus Abschnitt 4.3.2 können die Abweichungen abgeschätzt werden, die eine Trajektorie des gemittelten Systems (5.19, 5.20, 5.21, 5.22) gegenüber einer des ursprünglichen Systems (5.15, 5.16, 5.17, 5.18) zu den gleichen Anfangsbedingungen $(P^{(0)}, Q^{(0)}, I^{(0)}, \theta^{(0)}) \in D^{(0)}$ hat. Nach einer Zeit $T \sim \frac{1}{\varepsilon}$ weicht jede Koordinate im Mittel über alle Anfangswerte in $D^{(0)}$ um einen Betrag der Ordnung $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ ab. Im adiabatischen Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ verschwindet für fast alle Trajektorien diese Diskrepanz zwischen gemittelter und nichtgemittelter Dynamik.

Da die Aussage maßtheoretischer Natur ist, gibt es keine Aussage über den Verbleib einzelner Trajektorien. So könnte eine Menge von Startwerten von verschwindendem Lebesguemaß existieren, für die sich die Trajektorien aufgrund von Resonanzen sehr viel stärker voneinander entfernen, als es die meisten Trajektorien tun. Diese werden aber in einer realistischen Meßsituation nicht beobachtet und sollen daher im Weiteren nicht betrachtet zu werden.

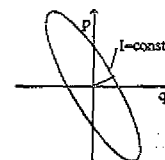
Die beiden folgenden Abschnitte befassen sich mit der getrennten Lösung der langsamen bzw. schnellen Bewegungsgleichungen.

5.2.1 Dynamik der langsamen Freiheitsgrade

Untersucht werden in diesem Abschnitt die Eigenschaften der Dynamik der langsamen Freiheitsgrade im adiabatischen Limes. Die gemittelten Bewegungsgleichungen (5.19, 5.20) lauten

$$\dot{\bar{P}}_\alpha = -\varepsilon \frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} \quad (5.24)$$

²Dies funktioniert nur für Winkel-Wirkungs-Variable.



$$\dot{\bar{Q}}_\alpha = \varepsilon \Xi_{\alpha\beta} \bar{P}_\beta. \quad (5.25)$$

Neben den durch H_1 erzeugten Kräften tritt eine von den schnellen Freiheitsgraden ausgehende effektive Potentialkraft gegeben durch $-\frac{\partial H_2}{\partial \bar{Q}_\alpha}$ auf, die in der Quantenmechanik als Born-Oppenheimer-Kraft bekannt ist.³ Sie ist zum Beispiel in molekularen Systemen für die chemische Bindung verantwortlich.

Mit Hilfe der Umskalierung der Zeit um den Faktor $1/\varepsilon$ wird die Dynamik auf ihrer charakteristischen Zeitskala dargestellt und der Faktor ε fällt aus den Bewegungsgleichungen heraus.

Aus differentialgeometrischer Sicht (Kapitel 2) hat die langsame Bewegung die folgende Struktur: Betrachte das Prinzipalbündel $(G_H(M) \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G_H(M))$ der Hamiltonschen Flüsse $G_H(M)$ des Phasenraums M des Slow-Fast-Systems über der reellen Zeitachse, auf dem durch das adiabatische Vektorfeld $\mathcal{I}dH$, wie es durch (5.19, 5.20, 5.21, 5.22) gegeben ist, der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \sigma_{(\Phi, t)} &: T_t(\mathbb{R}) \rightarrow T_{(\Phi, t)}(G_H \times \mathbb{R}) \\ \sigma_{(\Phi, t)} &= \left(\frac{d\hat{R}_\Phi(\mathcal{I}dH)dt}{dt} \right) \end{aligned} \quad (5.26)$$

erklärt ist (siehe auch Abschnitt 4.1.1). Dabei ist $d\hat{R}_\Phi$ die kanonische linearisierte Abbildung von der Liealgebra $\mathcal{G}_H$ in den Tangentialraum der Liegruppe G_H an der Stelle Φ (siehe Abschnitt 2.2).

Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, ist das langsame Teilsystem zusammen mit den konstanten Wirkungen $I \in \mathcal{M}_I^n$ unabhängig von den Winkeln $\theta \in \mathcal{M}_\theta^n$ lösbar. Das Prinzipalbündel $(G_H(M) \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G_H(M))$ kann somit auf das Unterbündel $(G \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G)$ reduziert werden, wobei die Gruppe $G := G_H(\mathcal{M}_P^k \times \mathcal{M}_Q^k) \times \text{id}_{\mathcal{M}_I^n}$ das direkte Produkt der Hamiltonschen Flüsse $G_H(\mathcal{M}_P^k \times \mathcal{M}_Q^k)$ über dem langsamen Phasenraum und der trivialen Gruppe $\{\text{id}_{\mathcal{M}_I^n}\}$ über dem Raum der Wirkungen $\mathcal{M}_I^n$ ist.

Der Zusammenhang (5.26) ist mit dieser Reduktion kompatibel, denn der reduzierte Zusammenhang ist Hamiltonsch in (P, Q) und konstant in I . Er lautet nämlich

$$\begin{aligned} \sigma_{(\Phi, t)} &: T_t(\mathbb{R}) \rightarrow T_{(\Phi, t)}(G \times \mathbb{R}) \\ \sigma_{(\Phi, t)} &= \left(d\hat{R}_\Phi \begin{bmatrix} \mathcal{I}dH \\ 0 \end{bmatrix} dt \right). \end{aligned} \quad (5.27)$$

In $\begin{bmatrix} \mathcal{I}dH \\ 0 \end{bmatrix}$ ist dabei $\mathcal{I}dH$ ein Element der Liealgebra $\mathcal{G}_H$ und 0 das Liealgebraelement der trivialen Gruppe $\{\text{id}_{\mathcal{M}_I^n}\}$.

Das effektive Vektorfeld

$$\dot{\bar{P}}_\alpha = -\varepsilon \frac{\partial H}{\partial \bar{Q}_\alpha} \quad (5.28)$$

$$\dot{\bar{Q}}_\alpha = \varepsilon \Xi_{\alpha\beta} \bar{P}_\beta \quad (5.29)$$

³Der Differentialquotient $\frac{\partial H_2}{\partial \bar{Q}_\alpha}$ ist dabei bei fester adiabatischer Erhaltungsgröße I zu nehmen.

ist Hamiltonsch, da es durch die symplektische 2-Form

$$\omega^2 = d\hat{P} \wedge dQ \quad (5.30)$$

und die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2} \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\alpha \hat{P}_\beta + \Phi(Q) + H_2(I, Q) \quad (5.31)$$

charakterisiert ist. Dabei wurde die Zeit in Einheiten von $\frac{1}{\epsilon}$ gemessen. Aus (5.30) und (5.31) folgt, daß die langsamen Freiheitsgrade im adiabatischen Limes Hamiltonschen Bewegungsgleichungen genügen, die in keiner Weise Dissipation, d. h. irreversible Übertragung von Energie auf das schnelle Teilsystem, zulassen. Ferner tritt nach den obigen Betrachtungen in den langsamen Freiheitsgraden *kein* geometrischer Magnetismus auf, im Gegensatz zu den früheren Untersuchungen [GT87], [K90] und [BR93b]:

E. GOZZI und W. D. THACKER machen folgenden Ansatz [GT87]: Die schnellen Freiheitsgrade werden auf Winkel-Wirkungs-Gestalt gebracht, wobei sie die in Abschnitt 4.3.2 benutzten Gleichungen (4.48) und (4.49) verwenden. Aus diesen Bewegungsgleichungen leiten sie den effektiven Hamiltonian

$$H(P, Q, I) := H_1(P, Q) + H_2(I, Q) + \left(\frac{\partial S^{(\alpha)}}{\partial Q} \right)_{q, I} (I, \theta, Q) \dot{Q} \quad (5.32)$$

für das Gesamtsystem ab. Diesen Hamiltonian setzen sie *gemittelt* in die Hamiltonsche Variationsgleichung für die langsamen Freiheitsgrade ein. Die Mittelung geschieht hier zu früh, denn dadurch werden Terme vernachlässigt, die den Term, der in [GT87] für den geometrischen Magnetismus verantwortlich ist, exakt kompensieren. Setzt man (5.32) *ungemittelt* in die Variationsgleichung für das Gesamtsystem ein, so erhält man (5.7, 5.8, 5.9, 5.10) als Bewegungsgleichung. Dies ist in Anhang A.3 vorgeführt.

Wie in Abschnitt 5.1 vorgeführt, führt J. KOILLER in [K90] eine nichtkanonische Transformation auf instantane Winkel-Wirkungs-Variable durch. Dabei erhält er jedoch

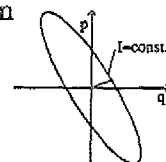
$$\begin{aligned} \omega^2 = & dP \wedge dQ + dI \wedge d\theta + B_{i\alpha} dQ_\alpha \wedge dI_i + C_{i\alpha} dQ_\alpha \wedge d\theta_i \\ & + \underbrace{F_{\alpha\beta} dQ_\alpha \wedge dQ_\beta}_{2 \sum_{\alpha < \beta} F_{\alpha\beta} dQ_\alpha \wedge dQ_\beta} \end{aligned} \quad (5.33)$$

Der letzte Term wurde dabei fälschlicherweise doppelt gezählt, so daß $(2F + [CB - BC]) \frac{\partial H}{\partial P} = F \frac{\partial H}{\partial P}$ in der Bewegungsgleichung für P übrig bleibt. Dieser Term erzeugt scheinbar den geometrischen Magnetismus.

BERRY und ROBBINS erhalten bei ihren Betrachtungen in [BR93a, BR93b] ebenfalls einen geometrischen Magnetismus. Warum das obige Ergebnis nicht mit dem ihren übereinstimmt, wird sowohl in Abschnitt 6.2 als in Abschnitt 7.2 diskutiert.

5.2.2 Dynamik der schnellen Freiheitsgrade: Der Hannaywinkel

Im folgenden wird angenommen, der langsame Teil der Slow-Fast-Bewegung sei, wie in Abschnitt 5.2.1 beschrieben, gelöst. Dann können die schnellen Bewegungsgleichungen



für alle $i = 1, \dots, n$ explizit integriert werden gemäß

$$I_i = I_i^{(0)} \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} \theta_i &= \theta_i^{(0)} + \int_0^t dt' \omega_i(I, Q(t')) + \int_0^t dt' \dot{Q}_\alpha \langle B_{i\alpha} \rangle_{I, Q} \\ &= \theta_i^{(0)} + \underbrace{\int_0^t dt' \omega_i(I, Q(t'))}_{=:\Delta\theta_{\text{dyn}}} + \underbrace{\int_C dQ_\alpha \langle B_{i\alpha} \rangle_{I, Q}}_{=:\Delta\theta_{\text{geo}}(I, C)}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Die Wirkungen I bleiben unter adiabatischer Entwicklung konstant und sind durch die Anfangsbedingungen des Gesamtsystems gegeben:

$$I^{(0)} = I(p^{(0)}, q^{(0)}, Q^{(0)})$$

Die Winkel θ setzen sich aus zwei Teilen zusammen, dem *dynamischen* Anteil $\Delta\theta_{\text{dyn}}$ und einem nicht explizit von der Zeit abhängigen *geometrischen* $\Delta\theta_{\text{geo}}$, der außer von den Konstanten $I^{(0)}$ von der Kurve C parametrisiert durch $Q(t)$ abhängt.

Die schnelle Dynamik der Winkel θ läßt sich *nicht* durch Reduktion des Prinzipalbündels $(G_H(M) \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, \pi, G_H(M))$ isolieren, da sie von den langsamen $Q(t)$ abhängt.

Betrachte vielmehr das Prinzipalbündel $(T^n \times \mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R}, \mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R}, \pi, T^n)$ der n -Torusrotationen über dem um die Zeitachse erweiterten langsamen Konfigurationsraum $\mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R}$. Durch die gegebenen Winkel-Wirkungs-Variablen I, θ ist zu jedem festen I eine Trivialisierung des Bündels definiert, die jedem Punkt p auf dem Bündel gemäß $\hat{\phi}(p) = \theta$ einen Winkel zuordnet. Bezüglich dieser Trivialisierung betrachte den Nullschnitt

$$f : \mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R} \rightarrow T^n \times \mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R}, \quad (Q, t) \mapsto f(Q, t) \text{ mit } \hat{\phi}_{(Q, t)}(f(Q, t)) = 0, \quad (5.36)$$

der zusammen mit der $\mathbb{R}^n$ -wertigen 1-Form

$$\bar{\omega} = -\omega dt - \langle B \rangle_{I, Q} dQ \quad (5.37)$$

auf dem Prinzipalbündel $(T^n \times \mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R}, \mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R}, \pi, T^n)$ einen Zusammenhang definiert (siehe Kapitel 2).

Die Hochhebung einer Kurve C gibt dann das richtige Zeitverhalten der Winkel unter den gemittelten Bewegungsgleichungen (5.19, 5.20, 5.21, 5.22) wieder, falls die Kurve C auf der Basis $\mathcal{M}_Q^k \times \mathbb{R}$ so gewählt ist, daß $(Q(t), t)$ eine zulässige Trajektorie des langsamen Teilsystems beschreibt.

Der Zusammenhang hat jedoch nur bedingt physikalische Relevanz, da nur Hochhebungen von Kurven zu einem physikalischen Ergebnis führen, die einfach über der Zeitachse sind und sich wegen der Adiabatenbedingung in $\mathcal{M}_Q^k$ als Funktion von t nur sehr langsam verändern. Die Holonomiegruppe dieses Zusammenhangs hat keine physikalische Bedeutung.

Interessanter ist jedoch die Interpretation des geometrischen Winkels $\Delta\theta_{\text{geo}}$ im Rahmen der Differentialgeometrie. Betrachte dazu das Prinzipalbündel $(T^n \times \mathcal{M}_Q^k, \mathcal{M}_Q^k, \pi, T^n)$ und einen durch

$$\bar{\omega} = -\langle B_{i\alpha} \rangle_{I, Q} dQ_\alpha \quad (5.38)$$

und

$$f: \mathcal{M}_Q^k \rightarrow T^n \times \mathcal{M}_Q^k, \quad Q \mapsto f(Q) \text{ mit } \hat{\phi}_Q(f(Q)) = 0 \quad (5.39)$$

definierten Zusammenhang, wobei $\hat{\phi}_Q$ eine Trivialisierung des Prinzipalbündels darstellt. Die Hochhebung einer beliebigen Kurve C der Basis parametrisiert durch $Q(t)$ gibt die Dynamik des geometrischen Winkels $\Delta\theta_{\text{geo}}(I, C)$ wieder. Im Gegensatz zu oben hat hier jede stetig differenzierbare Kurve C auf $\mathcal{M}_Q^k$ physikalische Relevanz. Die $\Delta\theta_{\text{geo}}$ „sehen“ nämlich außer der resultierenden Kurve C nichts von der langsamen Dynamik. Da man im Prinzip durch geeignete Wahl der langsamen Hamiltonfunktion jede Kurve C im langsamen Konfigurationsraum erzeugen kann, hat der Zusammenhang (5.38, 5.39) eine direkte physikalische Bedeutung.

Da die Wahl der Winkelkoordinaten über $\mathcal{M}_Q^k$ nicht eindeutig ist, sondern jeder beliebige stetig differenzierbare Schnitt f gemäß $\tilde{\phi}_Q(p) = \hat{\phi}_Q(p) + \hat{\phi}_Q(f(Q))$, $p \in (T^n \times \mathcal{M}_Q^k, \mathcal{M}_Q^k, \pi, T^n)$ eine andere Trivialisierung (ein anderes Winkelkoordinatensystem) auf dem Bündel definiert, hängt der Winkel $\Delta\theta_{\text{geo}}$ für nichtgeschlossene Kurven C von dieser Eichung ab.⁴ Durch eine Umeichung

$$\tilde{\theta}(I, \theta, Q) = \theta + \theta_0(I, Q). \quad (5.40)$$

geht $\Delta\theta_{\text{geo}}$ in

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{\theta}_{\text{geo}}(C) &= \Delta\theta_{\text{geo}}(C) + \hat{\phi}_{Q_1}(f(Q_1)) - \hat{\phi}_{Q_0}(f(Q_0)) \\ &= \Delta\theta_{\text{geo}}(C) + \theta_0(I, Q_1) - \theta_0(I, Q_0) \end{aligned} \quad (5.41)$$

über, wenn Q_0 bzw. Q_1 der Anfangs- bzw. Endpunkt der Kurve C ist. Die den Zusammenhang definierende 1-Form $\tilde{\omega}$ (5.38) transformiert sich unter dieser Umeichung gemäß

$$\tilde{\tilde{\omega}} = \tilde{\omega} + \frac{\partial\theta_0}{\partial Q} dQ_\alpha \quad (5.42)$$

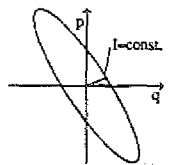
(Anhang A.4).

Aus (5.41) geht hervor, daß $\Delta\theta_{\text{geo}}(C)$ für geschlossene Kurven C (Zyklen) eine von der Eichung unabhängige Größe ist. Dies liegt daran, daß die Winkel zu Anfang und Ende der Entwicklung bezüglich desselben Winkelkoordinatensystems gemessen werden und somit vergleichbar sind. Die Transformation von der Faser $T_{Q_0}^n$ auf sich selbst, die durch die Hochhebung eines Zyklus C erzeugt wird, der bei $Q_0 \in \mathcal{M}_Q^k$ startet und endet, ist ein Element der Holonomiegruppe $\mathcal{H}_{Q_0}$ des Zusammenhangs. Daher ist $\Delta\theta_{\text{geo}}(C)$ als Funktion der Zyklen ein Element der Holonomiegruppe $\mathcal{H}_{Q_0}$, und man bezeichnet die geometrische Winkelverschiebung auch als *Holonomieeffekt*.

J. HANNAY betrachtete als erster $\Delta\theta_{\text{geo}}(C)$ als Funktion der geschlossenen Zyklen C [H85]. Es gilt

$$\begin{aligned} \Delta\theta_{\text{geo}} &= \oint_C dQ_\alpha \langle B_{i\alpha} \rangle_{I,Q} = \oint_C dQ_\alpha \left\langle \frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial I_i} - \frac{\partial p}{\partial I_i} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{I,Q} \\ &= \oint_C dQ_\alpha \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \left\langle p \frac{\partial q}{\partial I_i} \right\rangle_{I,Q} - \oint_C dQ_\alpha \frac{\partial}{\partial I_i} \left\langle p \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{I,Q}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

⁴Im Gegensatz zu den absoluten Phasen in der Quantenmechanik sind die absoluten Winkel observabel, d. h. gemäß $\hat{\phi}_Q^{-1}(\varphi) = p$ kann dem Winkel θ der Zustand p zugeordnet werden.



wobei das erste Integral um einen Zyklus C verschwindet, da $dQ_\alpha \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \left\langle p \frac{\partial q}{\partial I_i} \right\rangle_{I,Q}$ auf $\mathcal{M}_Q^k$ exakt ist. $\Delta\theta_{\text{geo}}$ ist von der Wahl der Eichung unabhängig und wird nach seinem Entdecker auch *Hannaywinkel* genannt.

Über einem einfach zusammenhängenden $\mathcal{M}_Q^k$ kann $\Delta\theta_{\text{geo}}$ mit Hilfe des Stokes'schen Satzes als Flächenintegral über eine geschlossene 2-Form geschrieben werden:

$$\begin{aligned}\Delta\theta_{\text{geo}} &= -\frac{\partial}{\partial I} \oint_C dQ_\alpha \left\langle p \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{I,Q} \\ &= -\frac{\partial}{\partial I} \iint_A dQ_\alpha \wedge dQ_\beta \left\langle \frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right\rangle_{I,Q} \\ &= -\frac{\partial}{\partial I} \iint_A \langle (dp)_{I,\theta} \wedge (dq)_{I,\theta} \rangle_{I,Q} = \frac{\partial}{\partial I} \iint_A W(I, Q)\end{aligned}\quad (5.44)$$

mit

$$W(I, Q) = -\langle (dp)_{I,\theta} \wedge (dq)_{I,\theta} \rangle_{I,Q}. \quad (5.45)$$

Dabei ist A eine Fläche in $\mathcal{M}_Q^k$, die von C berandet wird ($\delta A = C$) und $W(I, Q)$ eine geschlossene 2-Form, die auch *Hannaysche 2-Form* genannt wird. Die Schreibweise $\langle (dp)_{I,\theta} \wedge (dq)_{I,\theta} \rangle_{I,Q}$ für die Hannaysche 2-Form ist etwas irreführend, da sie suggeriert, $(dp)_{I,\theta} \wedge (dq)_{I,\theta}$ habe bereits die Eigenschaft einer nur von $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ abhängigen 2-Form. Dies ist aber nicht der Fall, da der Term noch von der Wahl der Winkelkoordinaten abhängt. Daß jedoch $W(I, Q)$ eine von der Winkelkoordinatenwahl unabhängige 2-Form über $\mathcal{M}_Q^k$ ist, ist in Anhang A.4 gezeigt.

Zusammenfassend können folgende Aussagen über die schnelle Dynamik getroffen werden: Die adiabatische Entwicklung der Winkelkoordinaten setzt sich aus zwei Teilen zusammen. Der *dynamische* Winkel $\Delta\theta_{\text{dyn}} = \int dt \omega(I, Q(t))$ hängt vom zeitlichen Verlauf der langsamen Orte $Q(t)$ ab. Der *geometrische* Winkel jedoch hängt nicht explizit von der Zeit ab, sondern nur von der Kurve C in $\mathcal{M}_Q^k$ (gegeben durch $Q(t)$). Beide Teile sind Funktionen der konstanten Wirkungen I und hängen für nichtgeschlossene Kurven von der Eichung ab. Für geschlossene Kurven C (Zyklen) verschwindet jedoch diese Abhängigkeit.

Zur Illustration betrachte den sogenannten „rotierten Rotor“ [H85, B85]: Ein Massenpunkt bewege sich, wie in Abbildung 5.1 angedeutet, frei gleitend auf einer glatten, geschlossenen Schiene S der Länge l . Diese sei, ausgehend von einem beliebigen aber auf der Schiene festen Punkt r_0 , durch einen Winkel ϕ parametrisiert

$$S : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad \phi \mapsto r(\phi + \varphi), \quad (r(0) = r(2\pi)), \quad (5.46)$$

und sei um den Ursprung frei drehbar, wobei φ den Winkel bezeichnet, der vom Ortsvektor des Punktes r_0 und der x -Achse eingeschlossen wird.

Die Bewegungsgleichungen für den Winkel ϕ können ohne Weiteres mit Hilfe des Lagrangeformalismus aufgestellt werden. Das zugehörige Hamiltonsche System, ausgedrückt in ϕ und dem kanonisch konjugierten Drehimpuls L , besitzt die Hamiltonfunktion

$$H(L, \phi, \varphi) = \frac{L^2}{2mr^2(\phi + \varphi)} - \frac{1}{2}mr^2(\phi + \varphi)\dot{\phi}^2, \quad (5.47)$$

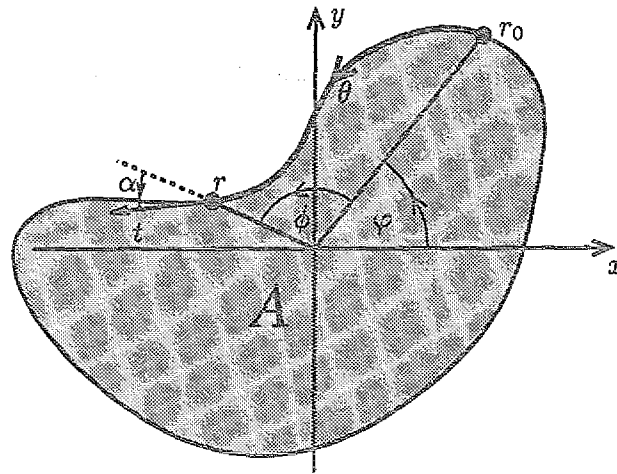


Abbildung 5.1: Schematische Zeichnung des „rotierten Rotors“ (frei nach [B85]).

wobei $\Omega := \dot{\varphi}$ als bekannt und im Verhältnis zur Winkelgeschwindigkeit $\dot{\phi}$ als adiabatisch langsam vorausgesetzt wird.

Bei festem φ bewegt sich der Massenpunkt gleichförmig entlang der Schiene mit der konstanten Geschwindigkeit v . Daher gilt für die Wirkung I der Bahn

$$I = \frac{1}{2\pi} m l v. \quad (5.48)$$

Die Winkelkoordinate θ ist durch die Bogenlänge der Bahn in Einheiten von $\frac{2\pi}{l}$ bestimmt, die von einem *mitrotierenden* Referenzpunkt aus gemessen wird, und kann zum Beispiel durch

$$\theta = \frac{2\pi}{l} \int_{\infty}^{\phi} d\phi' \sqrt{\left(\frac{\partial r}{\partial \phi'}\right)^2 + r^2} \quad (5.49)$$

definiert werden. Dabei wurde r_0 als Referenzpunkt gewählt.

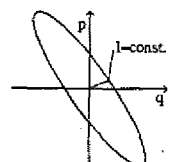
Wird die Schiene nun adiabatisch langsam um den Ursprung gedreht ($\Omega = \dot{\varphi} \ll \dot{\phi}$),⁵ dann bewegt sich der Massenpunkt auf der Schiene gemäß (5.35). Betrachtet man nun den Ort des Massenpunktes nach einem Umlauf der Schiene, erhält man zusätzlich zum *dynamischen* Winkel $\Delta\theta_{\text{dyn}} = \omega t = \frac{v}{l}t$ einen *geometrischen*, der sich wie folgt berechnen läßt:

$$\Delta\theta_{\text{geo}} = -\frac{\partial}{\partial I} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta L \cdot \left(\frac{\partial \phi}{\partial \varphi} \right)_\theta \quad (5.50)$$

Der Drehimpuls ist durch $L = mr^2\dot{\phi}$ charakterisiert, und $\left(\frac{\partial\phi}{\partial\varphi}\right)_\theta = 1$ folgt aus (5.49). Beides in (5.50) eingesetzt ergibt

$$\begin{aligned}\Delta\theta_{\text{geo}} &= -\frac{\partial}{\partial I}\int_0^{2\pi}d\varphi\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}d\theta mr^2\dot{\phi} \\ &= -\frac{\partial}{\partial I}\int_0^{2\pi}d\varphi\frac{1}{l}\int_0^l ds mvr\sin(\alpha)\end{aligned}$$

⁵Es muß $v \neq 0$ gelten, damit die Adiabatenbedingung erfüllt werden kann.



$$= -\frac{\partial}{\partial I} I \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{2\pi}{l^2} \int_0^l ds r(\phi(s, \varphi) + \varphi) \sin(\alpha(\phi(s, \varphi) + \varphi)), \quad (5.51)$$

wobei s das zu θ gehörende Bogenmaß und $\alpha(\phi)$ der Winkel ist, der vom Ortsvektor $r(\phi)$ und der Tangente $t(\phi)$ an die Schiene eingeschlossen wird (siehe Abbildung 5.1). Das zweite Integral ergibt gerade das Doppelte der orientierten Fläche A , die von der Schiene eingeschlossen wird. Diese ist von φ unabhängig, so daß

$$\Delta\theta_{\text{geo}} = -\frac{(2\pi)^2}{l^2} 2A = -8\pi^2 \frac{A}{l^2} \quad (5.52)$$

gilt. Somit ist der Hannaywinkel $\Delta\theta_{\text{geo}}$ immer von null verschieden, wenn die orientierte Fläche innerhalb der Kurve von null verschieden ist. Für einen Kreis ist der Hannaywinkel betragsmäßig maximal und gleich -2π , was man auch intuitiv erwarten würde.

Kapitel 6

Semiklassik

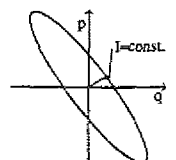
In den beiden Kapiteln 3 und 5 wurden quantenmechanische und klassische Holonomieeffekte in adiabatisch getriebenen Hamiltonschen Systemen untersucht. In diesem Kapitel wird der Zusammenhang zwischen diesen Effekten im klassischen Limes untersucht.

In der Quantenmechanik ist es möglich, die Berryphase für eine sehr allgemeine Klasse von Systemen zu definieren, nämlich alle die, die gebundene nichtentartete Zustände besitzen.¹ Im Gegensatz dazu ist es in der klassischen Mechanik bis heute nur gelungen, Liouville-integrierte Systeme zu behandeln. Dies liegt an der Existenz topologisch gleichbleibender invarianter Untermannigfaltigkeiten des Phasenraums (Tori), auf denen die Bewegung ergodisch verläuft, und somit Zeitmittel durch Ensemblemittel ersetzt werden dürfen.

Eine Möglichkeit, die klassischen Analoga zur Berryphase für nichtintegrierte Systeme zu finden, wäre es, für solche Systeme die Berryphase im klassischen Limes zu betrachten. Dies scheitert jedoch für die generischen chaotischen Systeme daran, daß für sie keine quasiklassischen Quantisierungsregeln bekannt sind, oder, anders ausgedrückt, keine adiabatischen Invarianten existieren. Anders ist das für die ergodischen Hamiltonschen Systeme, für die die Weylsche Quantisierungsbedingung bekannt ist. J. ROBBINS und M. BERRY haben versucht, mit Hilfe dieses Zugangs geometrische Effekte in klassischen ergodischen Systemen zu finden [RB92].

In Abschnitt 6.1 wird die semiklassische Korrespondenz zwischen Berryphase und Hannaywinkel gezeigt. Die Darstellung folgt dabei der aus [B85]. Anschließend wird der quasiklassische Zugang für klassisch ergodische Systeme von ROBBINS und BERRY [RB92] nachvollzogen und gezeigt, daß er nicht auf klassische Holonomieeffekte führt.

¹Durch die diversen Verallgemeinerungen der Berryphase durch andere Autoren (siehe Einführung) ist diese Klasse sogar noch wesentlich erweitert worden.



6.1 Klassische Korrespondenz: Berryphase $\Leftrightarrow$ Hannaywinkel

Betrachte ein mechanisches System mit n Freiheitsgraden, das quantenmechanisch separabel ist, so daß sich der Quantenzustand durch n Energiequantenzahlen ν_i ($i = 1, \dots, n$) der Teilsysteme charakterisieren läßt. Das zugehörige klassische System ist dann Liouville-integrabel. Nach der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingung wird jedem solchen Teilsystem die klassische Wirkung

$$I_i = (\nu_i + \sigma_i)\hbar \quad (6.1)$$

zugeordnet, wobei der Quantenzustand $\psi_{\nu=(\nu_1, \dots, \nu_n)}$ klassisch durch den n -Torus mit den Wirkungen I_i ($i = 1, \dots, n$) ersetzt wird [K58]. Die Zahl σ_i ist dabei durch die Bedingung der Eindeutigkeit der Wellenfunktion gegeben [K58], und spielt für große Quantenzahlen eine immer unwichtigere Rolle, so daß sie im klassischen Limes vernachlässigt werden kann.

Die quasiklassischen Wellenfunktionen werden durch Projektion des Torus auf den Konfigurationsraum gemäß

$$\psi_\nu(q, Q) = \sum_\alpha a_\alpha(q, I, Q) e^{\frac{i}{\hbar} S^{(\alpha)}(q, I, Q)} \quad (6.2)$$

gewonnen.² Da der Torus über dem Konfigurationsraum nicht eindeutig ist, werden mit α die verschiedenen Teilstücke des Torus numeriert, die sich eindeutig auf den Konfigurationsraum projizieren lassen (siehe Abbildung 6.1). $S^{(\alpha)}$ ist dabei die in Abschnitt 4.3.2 diskutierte klassische generierende Funktion der kanonischen Transformation auf instantane Winkel-Wirkungs-Variablen [B85], und a_α^2 die Jacobideterminante der Projektion:

$$a_\alpha^2 = \frac{1}{(2\pi)^n} \det \left(\frac{d\theta_i}{dq_j} \right) \quad (6.3)$$

a_α^2 ist entweder positiv oder negativ, was einem $\frac{\pi}{2}$ -Phasensprung an den Umkehrpunkten der klassischen Bewegung entspricht.

Ausgegangen wird von der Berryphase

$$\gamma_{\nu_{\text{geo}}} = \int_{\delta A=C} d\omega^1(\nu, Q), \quad \omega^1(\nu, Q) := i \langle \nu, Q | d\nu, Q \rangle \quad (6.4)$$

für den ν -ten Eigenzustand zum instantanen Hamiltonoperator $\hat{H}$. Durch Einsetzen der Wellenfunktionen

$$\psi_\nu(q, Q) = \langle q | \nu, Q \rangle$$

(Ortsdarstellung) in die 1-Form $\omega^1(\nu, Q)$ erhält man

$$\omega^1(\nu, Q) = i dQ \int dq \psi_\nu^*(q, Q) \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial Q} \right)_{q, \nu} \quad (6.5)$$

²Die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsbedingung resultiert daraus, daß die Phase der Wellenfunktion $\psi_\nu(q, Q)$ bei einem Umlauf um den Torus in sich übergehen muß. Zur Phase trägt neben dem Term $e^{\frac{i}{\hbar} S^{(\alpha)}}$ auch der Term $a_\alpha(q, I, Q)$ mit Phasensprüngen an den Umkehrpunkten bei, die durch die konstanten σ_i kompensiert werden.

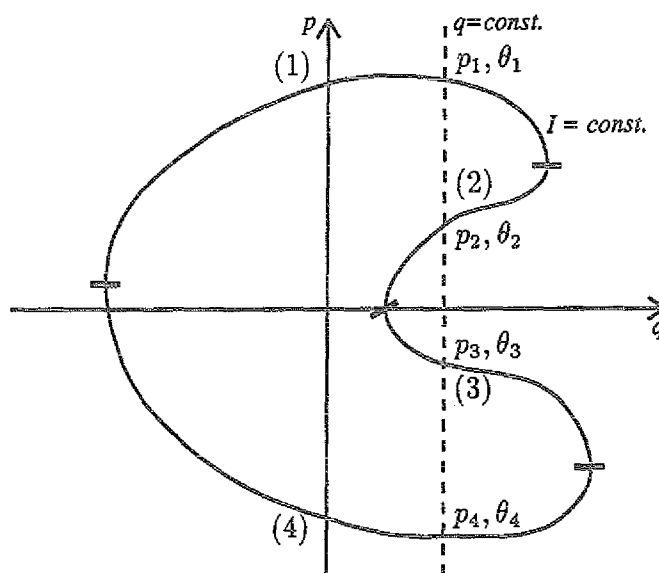


Abbildung 6.1: Aus der über q mehrdeutigen Funktion $S^{(\alpha)}$ wird die über θ eindeutige Funktion $\mathcal{S}$ (nach [B85]).

wobei die unten rechts an der partiellen Ableitung stehenden Größen bei der Bildung dieser festgehalten werden. Setzt man die quasiklassische Formel (6.2) für die Wellenfunktionen in (6.5) ein, so folgt mit (6.3)

$$\omega^1(I, Q) = -\frac{1}{\hbar} dQ \int dq \frac{1}{(2\pi)^n} \sum_{\alpha} \det \left(\frac{d\theta^{\alpha}}{dq} \right) \left(\frac{\partial S^{(\alpha)}}{\partial Q} \right)_{q, I, \alpha} (q, I, Q). \quad (6.6)$$

Dabei wurde benutzt, daß die Integrale über die Produkte verschiedener Äste α wegen schneller Oszillationen im klassischen Limes verschwinden. Die q -Integration zusammen mit der Summation über α kann durch eine Integration über die Winkel θ auf dem Torus ersetzt werden

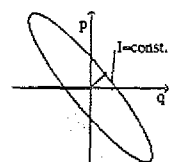
$$\omega^1(I, Q) = -dQ \frac{1}{\hbar(2\pi)^n} \int d\theta \left(\frac{\partial S^{(\alpha)}}{\partial Q} \right)_{q, I, \alpha} (q^{(\alpha)}(I, \theta, Q), I, Q), \quad (6.7)$$

wobei q auf den einzelnen Ästen als Funktion von I , θ und Q aufgefaßt wird. Ebenso kann S als Funktion von I , θ und Q aufgefaßt werden: $\mathcal{S}(I, \theta, Q) := S^{(\alpha)}(q^{(\alpha)}(I, \theta, Q), I, Q)$ (siehe Abbildung 6.1). Für die partielle Ableitung $\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q}$ bei festem q , I und α gilt

$$\left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q} \right)_{q, I, \alpha} = \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q} \right)_{I, \theta} - \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial q} \right)_{I, Q} \left(\frac{\partial q}{\partial Q} \right)_{I, \theta, \alpha} = \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q} \right)_{I, \theta} - p \left(\frac{\partial q}{\partial Q} \right)_{I, \theta}, \quad (6.8)$$

wobei $\frac{\partial S^{(\alpha)}}{\partial q} = p^{(\alpha)}$ nach Definition von S folgt (siehe zum Beispiel [G80]). Damit gilt

$$\omega^1(I, Q) = -dQ \frac{1}{\hbar(2\pi)^n} \int d\theta \left[\left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial Q} \right)_{I, \theta} (I, \theta, Q) - p \left(\frac{\partial q}{\partial Q} \right)_{I, \theta} (I, \theta, Q) \right], \quad (6.9)$$



und äußere Differentiation von ω^1 nach Q bei festgehaltenen I und θ liefert

$$d\omega^1 = \frac{1}{\hbar(2\pi)^n} \int d\theta \left(\frac{\partial p}{\partial Q} \right)_{I,\theta} \left(\frac{\partial q}{\partial Q} \right)_{I,\theta} dQ \wedge dQ \quad (6.10)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \langle (dp)_{I,\theta} \wedge (dq)_{I,\theta} \rangle = -\frac{1}{\hbar} W(I, Q), \quad (6.11)$$

da $\left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)_{I,\theta} (I, \theta, Q) dQ$ exakt ist und das äußere Differential daher identisch verschwindet. (6.11) ist gerade das $-\frac{1}{\hbar}$ -fache der Hannayschen 2-Form (5.45), so daß sich der Hannaywinkel gemäß

$$\Delta\theta_{\text{Hannay}} = -\hbar \frac{\partial}{\partial I} \int_{\delta A=C} d\omega^1 \quad (6.12)$$

berechnet. Ein Vergleich mit der Berryphase $\gamma_{\nu_{\text{geo}}}(C)$ liefert

$$\Delta\theta_{\text{Hannay}} = -\hbar \frac{\partial}{\partial I} \gamma_{\nu_{\text{geo}}}(C) = -\frac{\partial}{\partial \nu} \gamma_{\nu_{\text{geo}}}(C), \quad (6.13)$$

wobei im klassischen Limes $\nu + \sigma = \frac{1}{\hbar} I$ als kontinuierliche Funktion zu betrachten ist.

Für integrable Systeme ist damit der Zusammenhang zwischen den quantenmechanischen und den klassischen Holonomieeffekten hergestellt.

Als Beispiel betrachte den Aharonov-Bohm-Effekt: Aus Formel (6.13) ist sofort ersichtlich, warum der Aharonov-Bohm-Effekt rein quantenmechanischer Natur ist. Damit ein klassischer Effekt sichtbar wird, muß sich die Berryphase als Funktion der Quantenzahl ν ändern. Die Aharonov-Bohm-Phase ist jedoch gerade vom Quantenzustand unabhängig (siehe (3.23) in Abschnitt 3.2).

Als zweites Beispiel soll der vielfach in der Literatur zitierte *verallgemeinerte harmonische Oszillator* betrachtet werden. Das Hamiltonsche System mit einem Freiheitsgrad und kanonischen Variablen p und q , ist durch die Hamiltonfunktion

$$H(p, q, X, Y, Z) = \frac{1}{2} X q^2 + Y q p + \frac{1}{2} Z p^2, \quad (X, Y, Z) \in \mathbb{R}^3, \quad XZ > Y^2 \quad (6.14)$$

charakterisiert. Ist die Bedingung $XZ > Y^2$ erfüllt, so hat das System bei *festen* X , Y und Z klassisch geschlossene Trajektorien und kann mühelos integriert werden. p und q als Funktion der I , θ und $Q = (X, Y, Z)$ sind durch

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{\frac{2\omega I}{Z}} \cos(\theta) - Y \sqrt{\frac{2I}{\omega Z}} \sin(\theta) \\ q &= \sqrt{\frac{2ZI}{\omega}} \sin(\theta) \end{aligned}$$

gegeben, wobei $\omega := \sqrt{XZ - Y^2}$. Die Zeitentwicklung der p und q ergibt sich dann durch einsetzen der Bewegung von I und θ :

$$I = I^{(0)}, \quad \theta = \theta^{(0)} + \omega t \quad (6.15)$$

Der Hannaywinkel $\Delta\theta_{\text{geo}}$ ermittelt sich gemäß (5.44) zu

$$\Delta\theta_{\text{geo}}(C) = \frac{1}{4} \int_{\delta A=C} \frac{1}{\omega^3} (X dY \wedge dZ + Y dZ \wedge dX + Z dX \wedge dY). \quad (6.16)$$

Am rechten unteren Rand jeder ungeraden Seite ist zur Illustration die Entwicklung von $\Delta\theta_{\text{geo}}$ entlang der geschlossenen Bahn

$$C: \alpha \in [0, \dots, 2\pi] \mapsto \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.3 + 1.4 \sin(\alpha) \\ -1.2 \\ 2.3 + 1.4 \cos(\alpha) \end{bmatrix} \quad (6.17)$$

in 66 Schritten dargestellt. Am Ende der Entwicklung ist der Hannaywinkel $\Delta\theta_{\text{geo}} \approx -0.7684$ (siehe auch das Ende von Abschnitt 1.1).

Das zugehörige Quantensystem hat den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (X \hat{q}^2 + Y (\hat{q} \hat{p} + \hat{p} \hat{q}) + Z \hat{p}^2), \quad (6.18)$$

der bei festgehaltenen Parametern Q die stationäre Schrödingergleichung

$$-\frac{Z \hbar^2}{2} \frac{d^2 \psi_\nu}{dq^2} - i \hbar Y q \frac{d \psi_\nu}{dq} + \left(\frac{X q^2}{2} - i \hbar \frac{Y}{2} \right) \psi_\nu = E_\nu \psi_\nu \quad (6.19)$$

liefert. (6.19) hat die normierten Eigenfunktionen

$$\psi_\nu(q, X, Y, Z) = \left(\frac{\omega}{Z \hbar} \right)^{1/4} H_\nu \left(\sqrt{\frac{\omega}{Z \hbar}} q \right) \exp \left[- \left(\frac{\omega}{Z \hbar} + i \frac{Y}{Z \hbar} \right) \frac{q^2}{2} \right] \quad (6.20)$$

mit Eigenwerten $E_\nu = (\nu + \frac{1}{2}) \hbar \omega = (\nu + \frac{1}{2}) \hbar \sqrt{XZ - Y^2}$ zur Lösung, wobei $H_\nu(\xi)$ die Hermitepolynome sind ([S88] S. 47).

Der Mischterm im Hamiltonoperator ermöglicht das Auftreten der Berryphase, da er die antiunitäre Zeitumkehrinvarianz des herkömmlichen harmonischen Oszillators bricht. Daher ist $Y \neq 0$ auf der Kurve im Parameterraum notwendige Bedingung für das Auftreten nichttrivialer Holonomie. In der Energieeigenfunktion drückt sich diese Tatsache dadurch aus, daß ψ_ν für $Y \neq 0$ nicht reell gewählt werden kann.

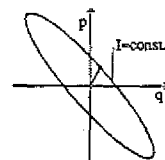
Zur Berechnung der Berryphase setzt man ψ_ν in die Formel (6.4) für die Berrysche 2-Form ein und erhält mit der Substitution $\xi := \sqrt{\frac{\omega}{Z \hbar}} q$

$$\begin{aligned} d\omega^1 &= -d \wedge \int d\xi e^{-\xi^2} H_\nu^2(\xi) \frac{Z \xi^2}{\omega} d\left(\frac{Y}{2Z}\right) \\ &= -d\left(\frac{Z}{\omega}\right) \wedge d\left(\frac{Y}{2Z}\right) \underbrace{\int d\xi e^{-\xi^2} H_\nu^2(\xi) \xi^2}_{=\nu+\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\nu + \frac{1}{2}}{4} \frac{1}{\omega^3} (X dY \wedge dZ + Y dZ \wedge dX + Z dX \wedge dY) \end{aligned} \quad (6.21)$$

und damit die Berryphase

$$\gamma_{\nu_{\text{geo}}} = \frac{\nu + \frac{1}{2}}{4} \int_{\delta A=C} \frac{1}{\omega^3} (X dY \wedge dZ + Y dZ \wedge dX + Z dX \wedge dY) \quad (6.22)$$

Ein Vergleich von (6.16) mit (6.22) unter Berücksichtigung der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingung $I = \hbar(\nu + \frac{1}{2})$, die für den harmonischen Oszillator exakt ist, bestätigt den allgemeinen Zusammenhang (6.13).



6.2 Semiklassik ergodischer Systeme

J. ROBBINS und M. BERRY haben in [RB92] erstmals versucht, sich mit Hilfe quasiklassischer Methoden den bisher unbehandelten nichtintegrablen klassischen Systemen zu nähern. Dabei haben sie die einzige behandelbare Klasse nichtintegrabler Systeme untersucht, nämlich die der ergodischen Hamiltonschen Systeme. In diesem Abschnitt wird diese Arbeit ([RB92]) nachvollzogen und gezeigt, warum die erhaltene 2-Form keine klassische Holonomie beschreibt.³

Betrachtet wird ein quantenmechanisches System mit n Freiheitsgraden und Hamiltonoperator $\hat{H}(Q)$, der von k Parametern $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ abhängt. Das klassische Pendant dieses Systems sei bei festen Parametern Q ergodisch auf der Energieschale (siehe Abschnitt 4.4).

Die Berrysche 2-Form (3.33)

$$\mathbb{V}_\nu = -i \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle \nu, Q | (d\hat{H}) | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | (d\hat{H}) | \nu, Q \rangle}{(E_\nu(Q) - E_\mu(Q))^2} \quad (6.23)$$

wird, wie es im „Quantenchaos“ üblich ist, von ROBBINS und BERRY auf eine zeitabhängige Form gebracht. Der Nenner kann gemäß

$$(E_\nu(Q) - E_\mu(Q))^{-2} = -\frac{1}{\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t} t \cos(\omega_{\nu\mu} t) \quad (6.24)$$

als ein Zeitintegral formuliert werden, wobei $\omega_{\nu\mu} := (E_\nu - E_\mu)/\hbar$ und $e^{-\varepsilon t}$ ein konvergenzerzeugender Term ist. Dies führt auf die Darstellung von $\mathbb{V}_\nu$ als Zeitintegral

$$\mathbb{V}_\nu = \frac{i}{\hbar^2} \sum_{\mu \neq \nu} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t} t \cos(\omega_{\nu\mu} t) \langle \nu, Q | (d\hat{H}) | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | (d\hat{H}) | \nu, Q \rangle. \quad (6.25)$$

Bezeichnet man mit $\hat{U}(t)$ den Zeitentwicklungsoperator $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ des Systems bei festgehaltenen Q und den Heisenbergoperator $\hat{U}^\dagger(t)(d\hat{H})\hat{U}(t)$ mit $(d\hat{H})_t$, so kann der Integrand gemäß

$$\begin{aligned} \cos(\omega_{\nu\mu} t) \langle \nu, Q | (d\hat{H}) | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | (d\hat{H}) | \nu, Q \rangle = \\ \frac{1}{2} [\langle \nu, Q | (d\hat{H})_t | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | (d\hat{H}) | \nu, Q \rangle + \langle \nu, Q | (d\hat{H}) | \mu, Q \rangle \wedge \langle \mu, Q | (d\hat{H})_t | \nu, Q \rangle] \end{aligned} \quad (6.26)$$

umgeschrieben werden. Da der Term im Integranden von (6.25) für $\nu = \mu$ identisch verschwindet, kann er, ohne die 2-Form zu verändern, hinzugefügt werden. Einsetzen von (6.26) in (6.25) und die Ausnutzung der Vollständigkeit $\sum_\mu |\mu, Q\rangle \langle \mu, Q| = \hat{\mathbb{I}}$ führt auf

$$\mathbb{V}_\nu = \frac{i}{2\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t} \langle \nu, Q | (d\hat{H})_t \wedge (d\hat{H}) + (d\hat{H}) \wedge (d\hat{H})_t | \nu, Q \rangle \quad (6.27)$$

$$= \frac{i}{2\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t} \langle \nu, Q | [(d\hat{H})_t, \wedge (d\hat{H})] | \nu, Q \rangle. \quad (6.28)$$

³Die Nomenklatur von [RB92] wurde teilweise durch eine mit dieser Arbeit konsistente ersetzt.

Der Integrand von (6.27) ist der Kommutator des Grassmannproduktes, so daß die Kurzschreibweise (6.28) verwendet werden kann.

Ausgehend von dieser 2-Form führen ROBBINS und BERRY den klassischen Limes im Wigner-Weyl-Formalismus durch. Dieser erlaubt die Herstellung der exakten Korrespondenz von klassischen und quantenmechanischen Observablen. Die klassischen Phasenraumfunktionen $A(q, p)$ können aus den zu quantenmechanischen Observablen gehörenden Operatoren $\hat{A}$ gemäß

$$A(p, q) = \int d^n s \left\langle q + \frac{1}{2}s \left| \hat{A} \right| q - \frac{1}{2}s \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar} p s} \quad (6.29)$$

gewonnen werden.⁴ Die klassische Phasenraumfunktion $A(p, q)$ wird als *Weylsymbol* der Observablen $\hat{A}$ bezeichnet. Das Weylsymbol eines Projektors $\hat{P} = |\psi\rangle\langle\psi|$ des Quantenzustands $|\psi\rangle$ ist eine *Pseudowahrscheinlichkeitsfunktion*⁵ $W_\psi(p, q)$ mit der sich quantenmechanische Erwartungswerte gemäß

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \iint dp dq W_\psi(p, q) A(p, q) \quad (6.30)$$

bilden lassen, wobei $A(p, q)$ das Weylsymbol von $\hat{A}$ ist [W32]. In dieser Weise kann der Erwartungswert im Integranden von (6.28) gemäß

$$\langle \nu, Q | [(\hat{H})_t, \wedge(\hat{H})] | \nu, Q \rangle = \iint dp dq W_{(\nu, Q)}(p, q) \left([(\hat{H})_t, \wedge(\hat{H})] \right)_W(p, q) \quad (6.31)$$

umgeschrieben werden, wobei $\left([(\hat{H})_t, \wedge(\hat{H})] \right)_W$ das wie in (6.29) gebildete Weylsymbol von $[(\hat{H})_t, \wedge(\hat{H})]$ ist.

ROBBINS und BERRY ersetzen nun die Weylsymbole durch ihre klassischen Grenzwerte. Dabei wird die Wignerfunktion $W_{(\nu, Q)}(p, q)$ wegen der Ergodizität des klassischen Systems durch die *mikrokanonische Dichte* ersetzt:

$$W_{(\nu, Q)}(p, q) \longrightarrow \delta(\mathcal{J} - \hat{J}(p, q, Q)) = \frac{1}{\mathcal{J}'(E, Q)} \delta(E - H(p, q, Q)) \quad (6.32)$$

$\mathcal{J}$ ist hier das in Abschnitt 4.4.1 definierte Phasenraumvolumen, das durch die Energieschale eingeschlossen wird. Das $(2n - 1)$ -dimensionale Volumen der Energieschale ist durch $\mathcal{J}'(E, Q) = \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial E}$ gegeben. Ebenfalls in klassischer Näherung wird das noch unbekannte $\mathcal{J}$ durch die Weylsche Quantisierungsbedingung

$$\mathcal{J}(E_\nu) = \nu h^n \quad (6.33)$$

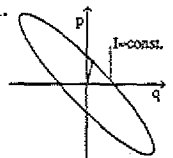
bestimmt, die jedem Quantenzustand das Phasenraumvolumen h^n zuordnet.

⁴(6.29) ist eine spezielle Form der Weylschen Korrespondenzformel

$$A(p, q) = \frac{1}{\hbar} \iint dx dy e^{\frac{i}{\hbar}(xp + yq)} \text{Tr} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(xp + yq)} \hat{A} \right)$$

[G46, M49, B58].

⁵Diese Funktion, auch *Wignerfunktion* genannt, ist wegen der quantenmechanischen Unschärfe keine echte Wahrscheinlichkeitsfunktion: Sie ist zwar überall reell, kann aber auch negative Werte annehmen.



Das Weylsymbol $\left(\left[(d\hat{H})_t, \wedge (d\hat{H}) \right] \right)_W$ geht im quasiklassischen Limes in das $i\hbar$ -fache der Poissonklammer der Symbole $(d\hat{H})_W$ über [RB92]:

$$\left(\left[(d\hat{H})_t, \wedge (d\hat{H}) \right] \right)_W \longrightarrow i\hbar \left\{ ((d\hat{H})_t)_W, \wedge (d\hat{H})_W \right\} \quad (6.34)$$

ROBBINS und BERRY argumentieren nun weiterhin wie folgt [RB92]: Zeitentwickelte Operatoren, wie $(dH)_t$, gehen in Phasenraumfunktionen über, die statt bei (p, q) an der um die Zeit t entlang der klassischen Trajektorie verschobenen Stelle $(p(t), q(t))$ ausgewertet werden. Sie interpretieren das äußere Differential $d\circ$ im klassischen Limes bei festgehaltenen Phasenraumkoordinaten p und q so, daß sie die klassische 2-Form

$$V_{RB92} = -\frac{1}{2\hbar} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \left\{ ((dH)_{p,q})_t, \wedge (dH)_{p,q} \right\} \quad (6.35)$$

erhalten. $(d\circ)_{p,q}$ bedeutet das äußere Differential bei festgehaltenen p und q . ROBBINS und BERRY schreiben in [RB92]:

„(An explication of notation might be helpful at this point: $(dH)_t$, evaluated at z [entspricht in dieser Arbeit (p, q)] and R [entspricht Q], is just $H(z_t, R + dR) - H(z_t, R)$ ‘to first order in dR ’).“

Diese Interpretation des äußeren Differentials ist jedoch nicht richtig, da das bei fester Quantenzahl ν gebildete Differential wegen der Weylschen Quantisierungsbedingung im klassischen Limes in ein Differential bei festgehaltenem Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ und $(2n-1)$ beliebig gewählten Koordinaten auf der Energieschale übergeht.⁶ Um dies zu zeigen, betrachte zunächst den quantenmechanischen Ausdruck

$$d\hat{H} = \frac{\partial}{\partial Q} \sum_\nu |\nu, Q\rangle E_\nu(Q) \langle \nu, Q| dQ, \quad (6.36)$$

wobei $\frac{\partial}{\partial Q}$ hier bei festem Quantenzustand ν gebildet wird. Das Weylsymbol ist

$$\begin{aligned} (dH) &= \int d^n s \sum_\nu \frac{\partial}{\partial Q} \left[\left\langle q + \frac{1}{2}s \middle| \nu, Q \right\rangle E_\nu(Q) \left\langle \nu, Q \middle| q - \frac{1}{2}s \right\rangle \right] e^{\frac{i}{\hbar} p s} dQ \\ &= \sum_\nu \frac{\partial}{\partial Q} \left[E_\nu(Q) \underbrace{\int d^n s \left\langle q + \frac{1}{2}s \middle| \nu, Q \right\rangle \left\langle \nu, Q \middle| q - \frac{1}{2}s \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar} p s}}_{=W_{(\nu, Q)}(p, q)} \right] dQ. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Im klassischen Limes ersetzen ROBBINS und BERRY die Wignerfunktion des Zustands $|\nu, Q\rangle$ gemäß (6.32) [RB92] und die Summation über die Quantenzustände geht wegen der Weylschen Quantisierungsbedingung (6.33) in ein Integral über $\mathcal{J}$ über. Bei der Differentiation $\frac{\partial}{\partial Q}$ wird aufgrund von (6.33) im klassischen Limes $\mathcal{J}$ festgehalten. Daher

⁶Analog dazu wurde in Abschnitt 6.1 mit Hilfe der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingung die Quantenzahl n in die Wirkung I umgerechnet, die bei der Bildung des äußeren Differentials festgehalten wird (siehe auch [B85]).

ist

$$\begin{aligned}
 (dH) &= \int d\mathcal{J} \frac{\partial}{\partial Q} [E(\mathcal{J}, Q) \delta(\mathcal{J} - \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q))] dQ \\
 &= \int d\mathcal{J} \frac{\partial E}{\partial Q}(\mathcal{J}, Q) \delta(\mathcal{J} - \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) \\
 &\quad + \underbrace{\int d\mathcal{J} E(\mathcal{J}, Q) \left(\frac{\partial}{\partial Q} \delta(\mathcal{J} - \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) \right)}_{=0} dQ \\
 &= \left(\frac{\partial E}{\partial Q} \right)_{\mathcal{J}} dQ
 \end{aligned} \tag{6.38}$$

Die 2-Form (6.35) ist daher nicht der klassische Grenzfall der Berryschen 2-Form (6.23), wie es in [RB92] behauptet wird.

Dies kann auch an einfachen Beispielen direkt nachgewiesen werden: Klassische Systeme mit einem Freiheitsgrad sind sowohl Liouville-integrierbar als auch ergodisch. Daher müssen die klassischen 2-Formen (5.45) und (6.35) in diesem Fall übereinstimmen. Im Fall des verallgemeinerten harmonischen Oszillators kann mühelos nachgewiesen werden, daß die beiden 2-Formen *nicht* übereinstimmen. Hingegen „deduzieren“ ROBBINS und BERRY in [RB92] mehrfach die Übereinstimmung, machen aber bei diesen Betrachtungen das Festhalten der falschen Variablen bei der äußeren Differentiation unbewußt rückgängig ([RB92]: Von (B.2) (p, q festgehalten) nach (B.3) (I, θ festgehalten) und (G.3) (bei festem I und θ) wird in (6.11) (festes p und q) eingesetzt).

Hält man statt der kanonischen Koordinaten p und q das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ und weitere beliebige Koordinaten κ auf der Energieschale bei der Bildung des äußeren Differentials fest, so erhält man die 2-Form

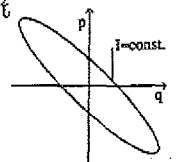
$$V^c = -\frac{1}{2\hbar} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t} \{ ((dH)_{\mathcal{J}})_t, \wedge (dH)_{\mathcal{J}} \}, \tag{6.39}$$

die wegen der Unabhängigkeit der Hamiltonfunktion H von den Koordinaten κ nicht von deren Wahl abhängt. Leider verschwindet diese 2-Form identisch und beschreibt daher ebenfalls keine Holonomie, wie man leicht zeigen kann: H ist eine reine Funktion von $\mathcal{J}$ und den äußeren Parametern Q , d. h. $H = H(\mathcal{J}, Q)$. Da $\mathcal{J}$ eine Konstante der Bewegung bei festem Q ist, ist $(dH)_{\mathcal{J}}$ ebenso eine Konstante der Bewegung und es gilt $((dH)_{\mathcal{J}})_t \equiv (dH)_{\mathcal{J}}$. Nach (4.9) aus Abschnitt 4.1.1 gilt für die Poissonklammer $\{((dH)_{\mathcal{J}})_t, \wedge (dH)_{\mathcal{J}}\}$

$$\{((dH)_{\mathcal{J}})_t, \wedge (dH)_{\mathcal{J}}\} = \frac{\partial((dH)_{\mathcal{J}})}{\partial \mathcal{J}} \frac{\partial \wedge((dH)_{\mathcal{J}})}{\partial \mathcal{J}} \underbrace{\{\mathcal{J}, \mathcal{J}\}}_{\equiv 0}, \tag{6.40}$$

so daß die 2-Form V^c identisch verschwindet. $\square$

Es verbirgt sich somit noch ein weiterer Fehler in dieser Herleitung einer klassischen 2-Form, der möglicherweise darauf beruht, daß der klassische Limes i. a. nicht für unendlich lange Zeiten durchgeführt werden kann, da 'jedes Wellenpaket bis auf ganz seltene Sonderfälle im Lauf der Zeit unbegrenzt „zerfließt“, bis es nach genügend langer Zeit



einen beliebig großen Raumbereich besetzt' ([M81b] S. 195). Damit der klassische Limes jedoch durchgeführt werden kann, 'müssen die Dimensionen des Wellenpaketes im Verhältnis zu den für das Problem charakteristischen Dimensionen klein sein und es im zeitlichen Verlauf auch bleiben' ([M81b] S. 195).

Der Weg über den klassischen Limes der Berryphase scheint also im Rahmen des zeitabhängigen Formalismus in der Quantenmechanik nicht durchführbar zu sein. Im nächsten Kapitel wird daher ein rein klassischer Zugang benutzt, um geometrische Effekte in Slow-Fast-Systemen mit ergodischen schnellen Freiheitsgraden zu berechnen.

Kapitel 7

Ergodische Slow-Fast-Systeme und geometrischer Tempus

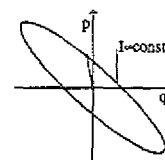
In diesem Kapitel werden Slow-Fast-Systeme mit ergodischen schnellen Freiheitsgraden untersucht und deren adiabatische Bewegungsgleichungen mit Hilfe des in Anhang C.1 bewiesenen Adiabatentheorems hergeleitet (Abschnitt 7.1). Um das schnelle vom langsamen Teilsystem zu entkoppeln, muß die adiabatische Invariante des schnellen Systems, das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$, als Koordinate verwendet werden. Da es unter Umständen sehr schwierig und unpraktisch sein kann, einen symplektischen Atlas¹ zu konstruieren, dessen Karten alle das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ enthalten, wird hier auf die kanonische Struktur der Koordinaten verzichtet. Diese Erleichterung bei der Koordinatenwahl geht allerdings auf Kosten der Einfachheit der Struktur der Bewegungsgleichungen.

Nach Separation der beiden Teilsysteme wird in Abschnitt 7.2 die Dynamik des langsamen Teilsystems untersucht. Auch im Fall ergodischer schneller Dynamik zeigen die langsamen Freiheitsgrade *keinen* geometrischen Magnetismus, und die Bewegungsgleichungen haben dieselbe *Hamiltonsche* Struktur wie die in Abschnitt 5.2.1 beschriebenen. Diese Ergebnisse widersprechen denen von M. BERRY und J. ROBBINS in [BR93b]. Daher folgt eine Diskussion dieser Diskrepanz am Ende von Abschnitt 7.2.

Eine zu Abschnitt 5.2.2 analoge Untersuchung der schnellen Bewegung wird in Abschnitt 7.3 vorgenommen. Diese gestaltet sich jedoch wegen der *sensitiven Abhängigkeit von den Startwerten* komplizierter als im integrablen Fall. Es ist daher prinzipiell nicht möglich, eine Trajektorie über lange Zeiten numerisch zu verfolgen, so daß ein Holonomieeffekt als Verschiebung der schnellen Koordinaten nicht gemessen werden kann.

Statt dessen wird die zum adiabatisch erhaltenen Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ konjugierte Größe, der *Tempus*, entlang einer Trajektorie betrachtet. Der *Tempus* kann jedoch nicht als Koordinate benutzt werden, da er nicht in sich zurückläuft, wie die Winkel im integrablen Fall. Statt dessen kann er entlang einer gegebenen Trajektorie aufintegriert werden. Das Ergebnis dieser Integration setzt sich aus zwei Teilen zusammen, einem *dynamischen* und einem *geometrischen* Teil, die beide nicht von der speziellen Trajektorie auf der Energiehyperschale abhängen, sondern nur vom eingeschlossenen Phasenraumvolumen. Beide

¹Atlas, dessen Karten kanonische Koordinaten haben.



Teile sind glatte Funktionen der Anfangsbedingungen.

Die reelle Tempusachse bildet über dem langsamen Konfigurationsraum ein Prinzipalbündel, auf dem durch die adiabatische Dynamik des Slow-Fast-Systems ein Zusammenhang erklärt ist. Der geometrische Tempus beschreibt die Holonomie dieses Zusammenhangs.

7.1 Bewegungsgleichungen in nichtkanonischen Variablen und adiabatische Näherung

Um eine Entkopplung der schnellen und langsamen Freiheitsgrade des Slow-Fast-Systems zu erreichen, ist es notwendig, das System in Koordinaten darzustellen, die die adiabatischen Invarianten enthalten. In Kapitel 5 mußte das schnelle Teilsystem daher auf instantane Winkel-Wirkungs-Variablen transformiert werden. Im hier betrachteten ergodischen Fall existiert nur eine adiabatische Erhaltungsgröße, das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$, das im folgenden als Koordinate benutzt wird.

Es ist jedoch nicht möglich, auf dem schnellen Phasenraum brauchbare kanonische Koordinaten zu definieren, die $\mathcal{J}$ enthalten, da die zu $\mathcal{J}$ konjugierte Koordinate die Zeit entlang einer Trajektorien mißt und fast keine Trajektorie in sich zurückläuft. Daher werden auf dem schnellen Phasenraum beliebige Koordinaten κ gewählt, von denen eine das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ ist.

Die erste dieser Koordinaten κ_1 wird mit $\mathcal{J}$ identifiziert, so daß gilt:

$$\kappa_1(p, q, Q) := \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q). \quad (7.1)$$

Die anderen bilden beliebige Koordinaten der Energieschale $S(\kappa_1, Q)$. Da im folgenden nur lokale Eigenschaften dieser Koordinaten benutzt werden, müssen keine globalen Koordinatensysteme dieser Art existieren.

Um das Adiabatentheorem für ergodische Systeme (Satz 4.3) anwenden zu können, werden die $\kappa_1 = \mathcal{J}$ auf das Intervall $(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$ beschränkt, für das die Energieschalen für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ wohldefiniert sind (siehe Abschnitt 4.4.2).

Da κ_1 das von $S(\kappa_1, Q)$ eingeschlossene Phasenraumvolumen ist, gilt

$$\forall \kappa_1 \in (\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*) : \int_{\mathcal{J}_1^*}^{\kappa_1} d\kappa'_1 \int_{S(\kappa'_1, Q)} d^{2n-1}\kappa \rho(\kappa, Q) = \kappa_1 - \mathcal{J}_1^*, \quad (7.2)$$

so daß

$$\int_{S(\kappa_1, Q)} dm_{\kappa_1, Q} = \int_{S(\kappa_1, Q)} \rho(\kappa, Q) d^{2n-1}\kappa = 1. \quad (7.3)$$

$\rho(\kappa, Q)$ ist die Dichtefunktion zum $(2n-1)$ -dimensionalen ergodischen Maß $dm_{\kappa_1, Q}$ der Energieschale bezüglich der Koordinaten κ_i ($i = 2, \dots, n$). Unter Koordinatentransformation $\kappa \mapsto \kappa'(\kappa, Q)$ mit $\kappa'_1 = \kappa_1$ transformiert sie sich gemäß

$$\rho'(\kappa', Q) d^{2n-1}\kappa' = \det \left(\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} \right) \rho(\kappa, Q) d^{2n-1}\kappa, \quad (7.4)$$

und das ergodische Mittel über die Energieschale $S(\kappa_1, Q)$ ist

$$\langle \circ \rangle := \int_{S(\kappa_1, Q)} \circ \rho(\kappa, Q) d^{2n-1} \kappa. \quad (7.5)$$

In den hier konstruierten Koordinaten hängt der Hamiltonian H_2 nur noch von κ_1 und Q ab:

$$H_2(\kappa, Q) := \mathcal{E}(\kappa_1, Q) \quad (7.6)$$

In den neuen Koordinaten drückt sich die symplektische 2-Form ω^2 gemäß

$$\begin{aligned} \omega^2 &= dP_\alpha \wedge dQ_\alpha + dp_i \wedge dq_i \\ &= dP_\alpha \wedge dQ_\alpha + \frac{\partial p_i}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_i}{\partial \kappa_j} dQ_\alpha \wedge d\kappa_j + \frac{\partial p_i}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\alpha} d\kappa_j \wedge dQ_\alpha \\ &\quad + \frac{\partial p_i}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\beta} dQ_\alpha \wedge dQ_\beta + \frac{\partial p_i}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_i}{\partial \kappa_k} d\kappa_j \wedge d\kappa_k \\ &= dP_\alpha \wedge dQ_\alpha + \left[\frac{\partial p_i}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_i}{\partial \kappa_j} - \frac{\partial p_i}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\alpha} \right] dQ_\alpha \wedge d\kappa_j \\ &\quad + \sum_{\alpha < \beta} \left[\frac{\partial p_i}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\beta} - \frac{\partial p_i}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_i}{\partial Q_\alpha} \right] dQ_\alpha \wedge dQ_\beta \\ &\quad + \sum_{j < k} \left[\frac{\partial p_i}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_i}{\partial \kappa_k} - \frac{\partial p_i}{\partial \kappa_k} \frac{\partial q_i}{\partial \kappa_j} \right] d\kappa_j \wedge d\kappa_k \end{aligned}$$

aus. Dabei wird dort, wo kein explizites Summenzeichen steht, Summationskonvention benutzt und gleiche griechische bzw. römische Indizes werden von 1 bis k bzw. 1 bis $2n$ summiert.² Im folgenden werden die Abkürzungen

$$F_{\alpha\beta} := \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial Q_\beta} - \frac{\partial p}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right], \quad (7.7)$$

$$B_{ij} := \left[\frac{\partial p}{\partial \kappa_i} \frac{\partial q}{\partial \kappa_j} - \frac{\partial p}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q}{\partial \kappa_i} \right], \quad (7.8)$$

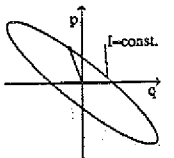
$$C_{i\alpha} := \left[\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial \kappa_i} - \frac{\partial p}{\partial \kappa_i} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right], \quad (7.9)$$

verwendet, die sich von den gleichnamigen Größen (5.11), (5.12) und (5.13) in Abschnitt 5.1 unterscheiden.

Man gewinnt die Bewegungsgleichungen durch Konstruktion des Hamiltonschen Vektorfeldes gemäß $v := \mathcal{I}dH$:

$$\begin{aligned} \dot{P}_\alpha &= -\frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} - \frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{i\alpha} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial \kappa_j} \\ &\quad - \frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{i\alpha} C_{j\beta} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial P_\beta} + F_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial P_\beta} \end{aligned} \quad (7.10)$$

²Hier und im folgenden können römische Indizes, im Gegensatz zu denen in Abschnitt 5.1, Werte zwischen 1 und $2n$ annehmen.



$$\underline{(1)} \quad -\frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} - \frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{i\alpha} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial \kappa_j} \quad (7.11)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \quad (7.12)$$

$$\dot{\kappa}_i = -\frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{j\alpha} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} - \frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial \kappa_j}, \quad (7.13)$$

wobei

$$D := \det(B) = \epsilon_{k_1 l_1 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=1}^n B_{k_\nu l_\nu}. \quad (7.14)$$

Die Gleichheit (1) gilt aufgrund der in Anhang B.1 hergeleiteten Identität, wobei sich die beiden letzten Terme in (7.10) wie in (5.7) aus Abschnitt 5.1 aufheben. Daß (7.11, 7.12, 7.13) die zu (ω^2, H) gehörigen Bewegungsgleichungen sind, läßt sich durch Einsetzen in (4.4) sehr leicht nachprüfen.

Die obige Form der Bewegungsgleichungen ist sehr kompliziert und für konkrete Rechnungen i. a. denkbar ungeeignet. Das wichtige an ihnen ist jedoch, daß alle vorkommenden Funktionen glatte Phasenraumfunktionen sind, wie es im folgenden für die Anwendung des Adiabaten-theorems 4.3 notwendig ist.

Um im folgenden eine Trennung der Zeitskalen schneller und langsamer Freiheitsgrade zu erreichen, wird für $H_1(P, Q)$, ebenso wie in Abschnitt 5.1, die sehr allgemeine Form (4.20) gewählt:

$$H_1(P, Q) = \frac{1}{2} \epsilon^2 \Xi_{\alpha\beta}(Q) P_\alpha P_\beta + \Phi(Q) \quad (7.15)$$

Substituiert man $\hat{P} := \epsilon P$ wie in Abschnitt 5.1 und benutzt (7.15), so folgt für die Bewegungsgleichungen des Gesamtsystems (7.11, 7.12, 7.13)

$$\dot{\hat{P}}_\alpha = -\epsilon \frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} - \epsilon \frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{i\alpha} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial \kappa_1} \quad (7.16)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \epsilon \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\beta \quad (7.17)$$

$$\dot{\kappa}_i = -\epsilon \frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{j\alpha} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\beta - \frac{2n}{D} \epsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial \kappa_j}, \quad (7.18)$$

wobei in (7.16) ausgenutzt wurde, daß H nur von κ_1 und nicht von κ_i ($i = 2, \dots, 2n$) abhängt. Das Ensemblemittel (nach (7.5)) des zweiten Terms in (7.16) und der rechten Seite von (7.18) für $i = 1$ verschwinden nach (C.14) und Satz C.1 in Anhang C.1, so daß das gemittelte System folgenden Bewegungsgleichungen genügt:

$$\dot{\hat{P}}_\alpha = -\epsilon \frac{\partial H}{\partial Q_\alpha} \quad (7.19)$$

$$\dot{Q}_\alpha = \epsilon \Xi_{\alpha\beta} \hat{P}_\beta \quad (7.20)$$

$$\dot{\kappa}_1 = 0. \quad (7.21)$$

Nach Satz 4.4 aus Abschnitt 4.4.2 konvergiert die ursprüngliche Dynamik für $\epsilon \rightarrow 0$ und für fast alle Anfangswerte gegen die gemittelte. Das Verschwinden der rechten Seite in

(7.21) spiegelt die adiabatische Invarianz des Phasenraumvolumens κ_1 wieder (der Beweis der Invarianz wird in Anhang C.1, Satz C.4 erbracht).

Die langsame Dynamik ist vollkommen analog zu der integrierbarer Systeme, so daß die Ergebnisse aus Abschnitt 5.2.1 übernommen werden können. Im folgenden Abschnitt wird ihre Struktur jedoch noch einmal explizit hervorgehoben und mit den Ergebnissen von M. BERRY und J. ROBBINS in [BR93a, BR93b] verglichen. Aspekte der schnellen Dynamik werden im Abschnitt 7.3 untersucht.

7.2 Dynamik der langsamen Freiheitsgrade

Die gemittelten Bewegungsgleichungen (7.19, 7.20) der langsamen Freiheitsgrade können mit Hilfe der Hamiltonfunktion

$$H(P, Q, \kappa_1) = H_1(P, Q) + H_2(\kappa_1, Q) \quad (7.22)$$

und der kanonischen symplektischen 2-Form $\omega^2 = dP \wedge dQ$ aus dem Hamiltonschen Formalismus gewonnen werden, sind also *Hamiltonsche* Bewegungsgleichungen. Daher erhält der resultierende Fluß alle Poincaré-Cartan-Invarianten und ist insbesondere phasenraumvolumenerhaltend, d. h. *nicht* dissipativ.

Wie im integrierbaren Fall äußert sich die schnelle Dynamik im adiabatischen Limes ausschließlich als zusätzliche Born-Oppenheimer-Kraft auf die langsamen Freiheitsgrade

$$- \frac{\partial}{\partial Q} H_2(\kappa_1, Q), \quad (7.23)$$

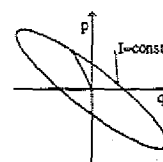
und der mehrfach in der Literatur behandelte³ geometrische Magnetismus tritt *nicht* auf. Letzterer verschwindet sogar schon in den exakten Bewegungsgleichungen des Slow-Fast-Systems, so daß für sein Verschwinden *keine* Näherungen verantwortlich sind.

M. BERRY und J. ROBBINS untersuchen in [BR93b] Hamiltonsche Slow-Fast-Systeme mit ergodischen schnellen Freiheitsgraden. Dabei gehen sie von der unphysikalischen 2-Form V_{RB92} (siehe (6.35) Abschnitt 6.2) aus und interpretieren sie im Rahmen einer Nicht-Hamiltonschen Störungstheorie. Neben dem geometrischen Magnetismus erhalten sie eine *deterministische Reibungskraft* [BR93b], die ebenso wie der geometrische Magnetismus bei einer Behandlung im Rahmen eines Hamiltonschen Formalismus nicht auftreten kann, was durch die Hamiltonsche Struktur der langsamen Bewegungsgleichungen garantiert wird.

7.3 Chaotische Dynamik und adiabatischer Tempus

In den schnellen Freiheitsgraden eines Slow-Fast-Systems (7.16, 7.17, 7.18) soll im adiabatischen Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ eine zu den Hannaywinkeln analoge, glatt von den Anfangsbedingungen abhängende Größe identifiziert werden, die nur von der adiabatischen Invarianz

³[GT87, K90, B89, BR93a, BR93b]



ten κ_1 des Ausgangszustands und dem Zyklus C im langsamen Konfigurationsraum $\mathcal{M}_Q^k$ abhängt.

Im integrablen Fall können die schnellen Freiheitsgrade durch adiabatisch invariante Wirkungen I und die zu ihnen bei festen Q kanonisch konjugierten Winkel θ parametrisiert werden. Die Trennung der Holonomieeffekte von den Einflüssen der lokalen Dynamik am Punkte $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ ist in diesen Koordinaten besonders einfach.

Im ergodischen Fall können keine vergleichbaren Koordinaten κ für die schnelle Dynamik gefunden werden. Zudem hängen die κ wegen des chaotischen Charakters der schnellen Dynamik sensitiv von den Anfangsbedingungen ab, so daß eine Identifikation eines geometrischen Effekts als Verschiebung dieser Variablen aussichtslos ist, wie schon in [GKM89] erwähnt wird. Der Endzustand des Systems hängt i. a. vom Startwert auf der Energieschale und vom genauen Zeitprogramm ab, mit dem C durchlaufen wird.

Wenn man analog zum integrablen Fall vorgeht, so wird man versuchen, die Dynamik der zur adiabatischen Invarianten κ_1 konjugierten Größe θ bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden zu untersuchen. Leider existiert keine global auf $\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n$ definierte solche Größe. Die Eigenschaft, kanonisch konjugiert zu sein, wird aber durch die lokalen Eigenschaften des ersten Differentials (bei festgehaltenen Q) bestimmt (siehe (4.34) in Abschnitt 4.3.1).

Bei festgehaltenem Q kann eine 1-Form ω^1 definiert werden, die die Eigenschaften des ersten Differentials der zu κ_1 lokal kanonisch konjugierten Größe θ besitzt. Es ist, analog zu (4.34) aus Abschnitt 4.3.1, an jedem Phasenraumpunkt $\xi \in \mathcal{G}_Q$:

$$\omega^1(\mathcal{I}d\kappa_i) = \delta_{1i} \quad (7.24)$$

Im Fall festgehaltener Q ist der kanonische Isomorphismus $\mathcal{I}$ lokal (an jedem Punkt $\xi \in \mathcal{G}_Q$) invers zur Matrix B_{ij} der symplektischen 2-Form des schnellen Teilsystems, d. h. es gilt:

$$(\mathcal{I})_{ij}(\xi) = (B_{ij})^{-1}(\xi) = -\frac{2n}{D} \varepsilon_{ijk_2l_2\dots k_nl_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu}, \text{ so daß } (\mathcal{I})_{ij} B_{jk} = \delta_{ik} \quad (7.25)$$

(siehe Anhang B.2). Da Q bei der Konstruktion festgehalten wird, hängt ω^1 nur parametrisch von Q ab und kann daher in der Form

$$\omega^1 = \Theta_i d\kappa_i \quad (7.26)$$

dargestellt werden. Durch Einsetzen von (7.25) in (7.24) folgt an jedem Punkt $\xi \in \mathcal{G}_Q$:

$$\begin{aligned} \Theta_i \frac{-2n}{D} \varepsilon_{ijk_2l_2\dots k_nl_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} &= \delta_{1j} \\ \Leftrightarrow \underbrace{\Theta_i \frac{-2n}{D} \varepsilon_{ijk_2l_2\dots k_nl_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} B_{jm}}_{=\delta_{im}} &= \delta_{1j} B_{jm} \\ \Theta_m &= B_{1m}, \end{aligned} \quad (7.27)$$

wobei die Äquivalenz (1) wegen $\text{rg}(B) = 2n$ gilt.

Das Integral $\theta(t, P^{(0)}, Q^{(0)}, \kappa^{(0)}, t^{(0)}, \varepsilon)$ von ω^1 entlang einer Trajektorie $\hat{C}$ gegeben durch $(P(t), Q(t), \kappa(t))$ mit Anfangswert $(P^{(0)}, Q^{(0)}, \kappa^{(0)})$ zur Zeit $t^{(0)}$ berechnet sich gemäß

$$\theta(t) = \int_{\hat{C}} B_{1i} d\kappa_i = \int_{t^{(0)}}^t dt' B_{1i} \dot{\kappa}_i = \int_{t^{(0)}}^t \omega(\kappa_1, Q) dt' + \int_{t^{(0)}}^t C_{1\alpha} \dot{Q}_\alpha dt', \quad (7.28)$$

wobei die letzte Gleichheit in Anhang B.3 bewiesen wird ($\omega(\kappa_1, Q) := \frac{\partial H_2}{\partial \kappa_1}$). Das Integral (7.28) wird im folgenden als *Tempus* der Trajektorie bezeichnet.

Im adiabatischen Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ kann nach Satz 4.3 aus Abschnitt 4.4.2 das Zeitintegral über eine glatte Phasenraumfunktion durch das Zeitintegral über ihr Ensemblemittel ersetzt werden. Betrachte nun den Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$ ($\tau := \varepsilon t$):

$$\theta(\tau) = \frac{1}{\varepsilon} \int_{\tau^{(0)}}^{\tau} \omega(\kappa_1, Q) d\tau' + \int_{\tau^{(0)}}^{\tau} \langle C_{1\alpha} \rangle_{\kappa_1, Q} \dot{Q}_\alpha dt' \quad (7.29)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{\varepsilon} \int_{\tau^{(0)}}^{\tau} \omega(\kappa_1, Q) d\tau'}_{=: \Delta\theta_{\text{dyn}}} + \underbrace{\int_C \langle C_{1\alpha} \rangle_{\kappa_1, Q} dQ_\alpha}_{=: \Delta\theta_{\text{geo}}} \quad (7.30)$$

$$= \Delta\theta_{\text{dyn}} + \Delta\theta_{\text{geo}} \quad (7.31)$$

C ist die Projektion der Bahn $\hat{C}$ auf $\mathcal{M}_Q^k$. Der Tempus θ hängt nur noch von $\kappa_1^{(0)}$ und der Kurve C ab. Die Abhängigkeiten von den Startwerten auf der Energieschale sind durch die Mittelung weggefallen.

Der Tempus θ zerfällt in zwei Teile, die unterschiedliche Eigenschaften haben: $\Delta\theta_{\text{dyn}}$ ist der *dynamische* Anteil, der sich analog zum dynamischen Winkel proportional zu $\omega(\kappa_1, Q)$ mit der Zeit entwickelt.

Der *geometrische Tempus* $\Delta\theta_{\text{geo}}$ hingegen hängt nicht explizit von der Zeit ab, sondern beschreibt eine Verschiebung aufgrund der Veränderung der Koordinaten p und q als Funktionen der κ_i ($i = 1, \dots, 2n$) und der Q . Sie hängt im adiabatischen Limes nicht von der Wahl der Koordinaten κ_i ($i = 2, \dots, 2n$) auf der Energieschale ab, wie in Anhang B.4 gezeigt wird.

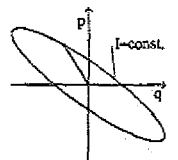
Zur mathematischen Interpretation betrachte das Prinzipalbündel $(\mathbb{R} \times \mathcal{M}_Q^k, \mathcal{M}_Q^k, \pi, \mathbb{R})$, das von der reellen Tempusachse über dem langsamen Konfigurationsraum aufgespannt wird. Durch die adiabatische Dynamik wird auf diesem Prinzipalbündel ein Zusammenhang erklärt, der sich durch die reellwertige 1-Form

$$\bar{\omega} = -\langle C_{1\alpha} \rangle_{\kappa_1, Q} dQ_\alpha \quad (7.32)$$

und einen Schnitt

$$f: \mathcal{M}_Q^k \rightarrow \mathbb{R} \times \mathcal{M}_Q^k, \quad Q \mapsto f(Q) \text{ mit } \hat{\phi}_Q(f(Q)) = 0 \quad (7.33)$$

darstellen läßt. Dabei ist f der Schnitt, der unter der benutzten Trivialisierung $\hat{\phi}$ auf die Null abgebildet wird. Durch die Eichung, die durch f festgelegt wird, wird der Tempus zu Beginn des Durchlaufens der Kurve C für alle langsamen Orte $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ gleich gewählt. Die geometrischen Tempi $\Delta\theta_{\text{geo}}$ entlang einer nichtgeschlossenen Kurve C sind nicht eichinvariant, da für die Faserkomponente von f jede beliebige glatte Funktion der Q gewählt werden kann.



Viel interessanter ist die eichinvariante Holonomie dieses Zusammenhangs. Betrachte geschlossene Kurven C (Zyklen) in $\mathcal{M}_Q^k$, für die $\Delta\theta_{\text{geo}}$ weiter umgeformt werden kann:

$$\begin{aligned}\Delta\theta_{\text{geo}} &= \oint_C \langle C_{1\alpha} \rangle_{\kappa_1, Q} dQ_\alpha \\ &= \underbrace{\oint_C \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \left\langle p \frac{\partial q}{\partial \kappa_1} \right\rangle_{\kappa_1, Q} dQ_\alpha}_{=0} - \oint_C \frac{\partial}{\partial \kappa_1} \left\langle p \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{\kappa_1, Q} dQ_\alpha\end{aligned}\quad (7.34)$$

Das erste Integral verschwindet, da $dQ_\alpha \frac{\partial}{\partial Q_\alpha}(\bullet)$ eine exakte Form auf $\mathcal{M}_Q^k$ ist. Somit bleibt nur das zweite Integral in (7.34) übrig, das vollkommen analog dem Integral über die Hannaysche 1-Form im integrablen Fall ist.

Durch äußere Differentiation nach Q bei festgehaltenen κ und Anwendung des Stokes'schen Satzes für 0-homotope Zyklen in $\mathcal{M}_Q^k$ kann $\Delta\theta_{\text{geo}}$ als Integral über eine 2-Form geschrieben werden:

$$\Delta\theta_{\text{geo}} = \frac{\partial}{\partial \kappa_1} \iint_A \langle dp \wedge dq \rangle_{\kappa_1, Q}. \quad (7.35)$$

Dabei ist A eine von C berandete Fläche in $\mathcal{M}_Q^k$ und $d\bullet = \left(\frac{\partial \bullet}{\partial Q_\alpha}\right)_\kappa dQ_\alpha$. Man beachte, daß der 2-Form-Charakter des Integranden, wie im integrablen Fall, erst durch die Mittelung zustande kommt. Daher ist diese Schreibweise, die in der Literatur weit verbreitet ist, etwas irreführend (siehe auch Seite 72).

Der geometrische Tempus $\Delta\theta_{\text{geo}}$ ist einzeln observabel, da einerseits $\int_C B_{1i} d\kappa_i$ entlang einer Trajektorie gemessen, und andererseits $\Delta\theta_{\text{dyn}}$ durch Integration von $\omega(\kappa_1, Q)$ entlang der Kurve $Q(t)$ über die Zeit aufintegriert werden kann.

Betrachte nun zunächst den Fall festgehaltener langsamer Freiheitsgrade: Bei $Q = \text{const.}$ fällt $\Delta\theta_{\text{geo}}$ weg, und θ entwickelt sich gemäß

$$\theta = \theta^{(0)} + \omega(\kappa_1, Q)(t - t^{(0)}), \quad (7.36)$$

wobei $\theta^{(0)}$ der Ausgangswert von θ zum Zeitpunkt $t^{(0)}$ ist. θ mißt in diesem Fall die Zeit in Einheiten von $\omega(\kappa_1, Q)$, die entlang der Trajektorie verstreicht und kann bei festgehaltenen Q anstelle der Zeit als Parameter benutzt werden. Daher wird für θ der Name „Tempus“ benutzt.

Entwickeln sich die langsamen Freiheitsgrade nun gemäß ihrer Bewegungsgleichungen, so ist der gemessene *Gesamtempus* θ , der sich gemäß $\int dt \langle B_{1i} \dot{\kappa}_i \rangle$ ermittelt, i. a. nicht mehr durch den naiv zu erwartenden *dynamischen Tempus*

$$\Delta\theta_{\text{dyn}} = \int \omega(\kappa_1, Q(t)) dt \quad (7.37)$$

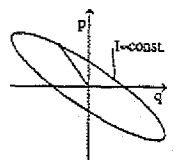
allein bestimmt, sondern erhält einen zusätzlichen, von der Zeit t unabhängigen *geometrischen Anteil* $\Delta\theta_{\text{geo}}$:

$$\theta = \Delta\theta_{\text{dyn}} + \Delta\theta_{\text{geo}} = \int \omega(\kappa_1, Q(t)) dt - \frac{\partial}{\partial \kappa_1} \oint_{\gamma_Q} dQ_\alpha \left\langle p \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{\kappa_1, Q} \quad (7.38)$$

In gewisser Weise mißt der Tempus die Zeit, die das System entlang einer Trajektorie „verspürt“. Der geometrische Tempus führt zu einer Verschiebung des Referenzpunktes $\theta^{(0)}$, so daß sich das System scheinbar um eine Zeit $\Delta\theta_{\text{geo}}/\omega$ weiterentwickelt hat.

Im eindimensionalen Fall stimmen die ergodischen mit den integrablen Systemen überein, und der geometrische Tempus ist bis auf einen konstanten Faktor 2π der Hannaywinkel. In diesem Fall drückt sich die Tempusverschiebung direkt als eine Verschiebung auf dem Torus aus, die, wenn die Anfangsbedingungen und die Kurve C im langsamen Ortsraum bekannt sind, durch einmalige Beobachtung nach Vollendung des Zyklus C gemessen werden kann. Dasselbe gilt natürlich auch für integrable Slow-Fast-Systeme mit beliebiger Anzahl von schnellen Freiheitsgraden.

Für ergodische Systeme mit mehr als einem Freiheitsgrad trifft dies jedoch nicht zu. Wegen der sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsdaten kann die Trajektorie nicht die gesamte Zeit der adiabatischen Entwicklung numerisch verfolgt werden. Hinzu kommt noch, daß durch die adiabatische Näherung die exakten Bewegungsgleichungen nicht mit den gemittelten übereinstimmen, sondern etwas abweichen. Selbst bei perfekter Kenntnis des Startwertes weicht die Bahn nach kurzer Zeit von der mit Hilfe der adiabatischen Näherung berechneten stark ab. Daher ist es nicht möglich, den geometrischen Tempus mit einer Verschiebung auf der Energieschale zu identifizieren. Seine Messung ist nur durch ständige Beobachtung der Trajektorie während der zeitlichen Entwicklung möglich. Dieser Unterschied zu den integrablen Systemen ist prinzipieller Natur [GKM89].



Man betrachte nun ein System $(X, \mathcal{B}, \mu, T)$ mit einem invarianten Maß μ . Sei $\mathcal{A}$ eine σ -Algebra, die μ zerlegt. Dann ist $\mathcal{A}$ eine partielle Zerlegung von $\mathcal{B}$. Man definiert die $\mathcal{A}$ -Konditionierung von μ als das Maß $\mu_{\mathcal{A}}$ auf $\mathcal{A}$, das durch

$$\mu_{\mathcal{A}}(A) = \mu(A)$$
 für alle $A \in \mathcal{A}$ gegeben ist. Man beachte, dass $\mu_{\mathcal{A}}$ nicht unbedingt ein Maß auf $\mathcal{B}$ ist, sondern nur ein Maß auf $\mathcal{A}$. Man kann auch die $\mathcal{A}$ -Konditionierung von μ als das Maß $\mu_{\mathcal{A}}$ auf $\mathcal{B}$ definieren, das durch

$$\mu_{\mathcal{A}}(A) = \mu(A)$$
 für alle $A \in \mathcal{B}$ gegeben ist. Man beachte, dass $\mu_{\mathcal{A}}$ nicht unbedingt ein Maß auf $\mathcal{A}$ ist, sondern nur ein Maß auf $\mathcal{B}$.

Man betrachte nun ein System $(X, \mathcal{B}, \mu, T)$ mit einem invarianten Maß μ . Sei $\mathcal{A}$ eine σ -Algebra, die μ zerlegt. Dann ist $\mathcal{A}$ eine partielle Zerlegung von $\mathcal{B}$. Man definiert die $\mathcal{A}$ -Konditionierung von μ als das Maß $\mu_{\mathcal{A}}$ auf $\mathcal{A}$, das durch

$$\mu_{\mathcal{A}}(A) = \mu(A)$$
 für alle $A \in \mathcal{A}$ gegeben ist. Man beachte, dass $\mu_{\mathcal{A}}$ nicht unbedingt ein Maß auf $\mathcal{B}$ ist, sondern nur ein Maß auf $\mathcal{A}$. Man kann auch die $\mathcal{A}$ -Konditionierung von μ als das Maß $\mu_{\mathcal{A}}$ auf $\mathcal{B}$ definieren, das durch

$$\mu_{\mathcal{A}}(A) = \mu(A)$$
 für alle $A \in \mathcal{B}$ gegeben ist. Man beachte, dass $\mu_{\mathcal{A}}$ nicht unbedingt ein Maß auf $\mathcal{A}$ ist, sondern nur ein Maß auf $\mathcal{B}$.

Kapitel 8

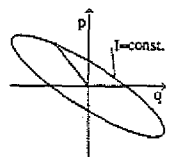
Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden klassische Hamiltonsche Systeme untersucht, deren Dynamik auf zwei stark getrennten Zeitskalen verläuft (Slow-Fast-Systeme). Diese starke Trennung der Zeitskalen ermöglicht näherungsweise eine Separation der schnellen und langsamen Freiheitsgrade, wie in der quantenmechanischen Born-Oppenheimer-Näherung. Jedoch gelingt eine Separation im adiabatischen Limes nicht für alle klassischen Hamiltonschen Slow-Fast-Systeme, sondern nur für solche, deren schnelle Freiheitsgrade entweder eine *Liouville-integrable* oder eine auf der Energieschale *ergodische* Dynamik besitzen. Da gezeigt wurde, daß adiabatisch getriebene *nichtautonome* Systeme mit integrierbarer oder ergodischer Dynamik als Spezialfälle obiger Slow-Fast-Systeme aufgefaßt werden können, beziehen sich alle folgenden Ergebnisse auch auf diese Systeme.

Eine Separation der schnellen und langsamen Dynamik kann nur in geeigneten *nichtkanonischen* Koordinaten durchgeführt werden; die Bewegungsgleichungen wurden daher mit Hilfe des symplektischen Formalismus ermittelt. Neben der Konstruktion geeigneter Koordinaten und der mathematisch exakten Separation der schnellen und langsamen Freiheitsgrade, wurde eine Analyse der Natur sowohl der schnellen als auch der langsamen Dynamik durchgeführt.

Dabei wurden insbesondere die Holonomieeffekte untersucht, die aufgrund der adiabatischen Bewegung in den schnellen Freiheitsgraden entstehen. Dazu wurden zunächst die nötigen differentialgeometrischen Grundlagen, wie Prinzipalbündel, Zusammenhänge und deren Holonomie, vorgestellt [CdWD91, vW78]. Anschließend wurde das bekannteste physikalische Beispiel, die Berryphase, vorgeführt, die bei der adiabatischen Dynamik quantenmechanischer Systeme entsteht [B84].

In den klassischen Slow-Fast-Systemen mit integrierbaren schnellen Freiheitsgraden äußert sich die Holonomie in den seit 1985 bekannten Hannaywinkeln [H85], während ein Holonomieeffekt für ergodische Systeme in der Literatur bis heute nicht bekannt ist [R94]. Seine Herleitung und Interpretation im Rahmen der Differentialgeometrie war Schwerpunkt dieser Arbeit: In der ergodischen schnellen Dynamik wurde ein zu den Hannaywinkeln analoger, glatt von den Anfangsbedingungen abhängender *geometrischer Tempus* gefunden, der als eine Verschiebung einer zeitähnlichen Größe (Tempus) entlang einer generischen Trajektorie interpretiert werden kann.



Für die langsamen Freiheitsgrade wurde gezeigt, daß sich die Wechselwirkung der schnellen und langsamen Freiheitsgrade in der langsamen Dynamik in Form einer effektiven Born-Oppenheimer-Potentialkraft äußert. Der vielfach in der Literatur¹ behauptete geometrische Magnetismus, tritt *nicht* auf; er entsteht, wie gezeigt wurde, durch fehlerhaften Umgang mit der symplektischen Form.

Bei den Untersuchungen wurde von einem Hamiltonschen System mit k langsamen und n schnellen Freiheitsgraden ausgegangen, die durch die kanonischen Koordinaten (P, Q) bzw. (p, q) parametrisiert sind. Als Hamiltonfunktion wurde

$$H(P, Q, p, q) = H_1(P, Q) + H_2(p, q, Q) \quad (8.1)$$

benutzt, die die typische Born-Oppenheimer-Struktur besitzt.

Zunächst wurden Slow-Fast-Systeme mit *integrablen* schnellen Freiheitsgraden betrachtet. Im einzelnen wurden die nachstehenden Untersuchungen durchgeführt und folgende Ergebnisse erhalten:

- Damit die Bewegungsgleichungen des Slow-Fast-Systems die für die Anwendung des klassischen Adiabatentheorems geeignete Struktur eines Multiphasensystems besitzen, wurden die schnellen Freiheitsgrade (p, q) bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden auf Winkel-Wirkungs-Koordinaten (I, θ) transformiert. Diese Transformation ist *nichtkanonisch* (in Bezug auf das Gesamtsystem). Bei der Aufstellung der Bewegungsgleichungen in den neuen Koordinaten wurde deshalb der symplektische Formalismus der Hamiltonschen Mechanik benutzt [K90]. Die schnellen Koordinaten (p, q) sind glatte Funktionen der Winkel-Wirkungs-Variablen (I, θ) und der langsamen Orte Q .
- Auf die so erhaltenen neuen Bewegungsgleichungen wurde das klassische Adiabatentheorem für Multiphasensysteme [N76] angewendet. Im adiabatischen Limes, d. h. dem Limes unendlicher Zeitskalentrennung, kann die langsame von der schnellen Dynamik separiert werden. Das langsame Teilsystem ist autonom und hängt nur von den im adiabatischen Limes konstanten Wirkungen des schnellen Teilsystems ab. Die schnelle Dynamik ist nichtautonom und ermittelt sich durch Integration der schnellen Freiheitsgrade bei *vorgegebener* langsamer Bewegung.
- Im adiabatischen Limes sind die Koordinaten (P, Q) des langsamen Teilsystems *kanonisch* und die Dynamik wird durch die Hamiltonfunktion

$$H(P, Q) = H_1(P, Q) + H_2(I, Q)$$

bestimmt, wobei die Wirkungen I von den Anfangsbedingungen des Gesamtsystems abhängige *adiabatische Invarianten* sind. Die Wechselwirkung der schnellen und langsamen Freiheitsgrade äußert sich in der langsamen Dynamik ausschließlich in der Born-Oppenheimer-Potentialkraft

$$-\frac{\partial}{\partial Q} H_2(I, Q).$$

¹[GT87, B89, K90, BR93a, BR93b]

Weitere von den schnellen Freiheitsgraden ausgehende Kräfte treten *nicht* auf. Insbesondere gibt es in klassischen Hamiltonschen Systemen keinen *geometrischen Magnetismus*, im Gegensatz zu den Aussagen früherer Veröffentlichungen [GT87, B89, K90, BR93a, BR93b], die im Rahmen dieser Arbeit diskutiert und widerlegt wurden.

- Die Dynamik der schnellen Freiheitsgrade wurde nur als Vorbereitung auf den ergodischen Fall nochmals dargestellt. Sie ist in [H85] ausführlich beschrieben.

Ist $C : t \mapsto Q(t)$ eine Kurve, die die zeitliche Entwicklung der langsamen Konfigurationen wiedergibt, so kann das nichtautonome schnelle Teilsystem entlang dieser Kurve integriert werden. Die Wirkungen sind im adiabatischen Limes Konstanten der Bewegung, während sich die Winkelbewegung aus zwei Teilen zusammensetzt [H85]:

1. Dem *dynamischen Winkel*

$$\Delta\theta_{\text{dyn}} = \int_{t_0}^t \omega(I, Q(t')) dt',$$

der als Zeitintegral der instantanen Winkelgeschwindigkeiten $\omega(I, Q) = \frac{\partial H_2}{\partial I}$ vom exakten Zeitprogramm abhängt, mit dem die Kurve $Q(t)$ durchlaufen wird.

2. Dem *geometrischen Winkel*

$$\Delta\theta_{\text{geo}} = \int_C dQ_\alpha \left\langle \frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial I} - \frac{\partial p}{\partial I} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{I, Q},$$

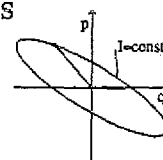
der von der Kurve C abhängt, die durch $Q(t)$ parametrisiert wird, nicht aber vom Zeitprogramm, mit dem sie durchlaufen wird.

Beide Winkeldifferenzen sind für allgemeine nichtgeschlossene Kurven $Q(t)$ von der Wahl der Winkelkoordinaten abhängig.

Für geschlossene Kurven $Q(t)$ jedoch sind sie von der Wahl der Koordinaten unabhängig. Der geometrische Winkel $\Delta\theta_{\text{geo}}$ wird in diesem Fall nach seinem Entdecker *Hannaywinkel* genannt und beschreibt die Holonomie eines Zusammenhangs, den die adiabatische Dynamik auf dem Prinzipalbündel der schnellen Freiheitsgrade über dem langsamen Konfigurationsraum erzeugt.

Für klassische Slow-Fast-Systeme mit *ergodischen* schnellen Freiheitsgraden wurden in dieser Arbeit erstmals systematische Untersuchungen der adiabatischen Dynamik durchgeführt.

Die Frage nach Holonomieeffekten in nichtintegrablen klassischen Systemen konnte seit der Entdeckung der Hannaywinkel für integrable Systeme nicht beantwortet werden. Der einzige Versuch, einen solchen Effekt für nichtintegrable Systeme zu finden, wurde von ROBBINS und BERRY [RB92] mit Hilfe eines semiklassischen Übergangs aus der Quantenmechanik für ergodische Systeme gemacht. Dieser indirekte Zugang wurde in dieser Arbeit kritisiert und es wurde gezeigt, daß er *keine* Holonomieeffekte in klassischen Systemen beschreibt. Auf [RB92] aufbauende Arbeiten von BERRY und ROBBINS



[BR93a, BR93b] behandeln ergodische Slow-Fast-Systeme, jedoch gelingt ihnen aufgrund der falschen Ausgangsgleichungen keine Untersuchung innerhalb des Hamiltonschen Formalismus. Sie gelangen zu unphysikalischen Ergebnissen, wie zum Beispiel einer „deterministischen Reibungskraft“ [BR93b].

Im einzelnen wurden folgende Untersuchungen für *ergodische* Slow-Fast-Systeme durchgeführt und nachstehende Ergebnisse erhalten:

- Da sich die klassische Adiabaten-theorie ergodischer Hamiltonscher Systeme von T. KAZUGA [K61] nur auf nichtautonome Systeme beschränkt, bei denen keine Rückwirkung der schnellen ergodischen Dynamik auf die der langsamen Parameter mit einbezogen wird, mußte die bestehende Adiabaten-theorie für die Anwendbarkeit auf Slow-Fast-Systeme erweitert werden. Es wurde ein auf Slow-Fast-Systeme anwendbares erweitertes Adiabaten-theorem sowie ein Mittelungssatz für Observable, der bei der Herleitung geometrischer Effekte in der schnellen Dynamik benötigt wird, aufgestellt und im Anhang bewiesen. Das neue Adiabaten-theorem besagt, daß das Phasenraumvolumen $\mathcal{J} = \kappa_1$, das von der instantanen Energieschale des schnellen Teilsystems eingeschlossen wird, im adiabatischen Limes erhalten bleibt und daß sich die langsamen Freiheitsgrade nach gemittelten Bewegungsgleichungen entwickeln.
- Um die Separation der schnellen von der langsamen Dynamik eines Slow-Fast-Systems mit ergodischen schnellen Freiheitsgraden zu erreichen, ist eine Transformation der schnellen Koordinaten (p, q) auf Koordinaten (κ) notwendig, von denen eine das adiabatisch erhaltene Phasenraumvolumen $\mathcal{J} = \kappa_1$ ist. Da es i. a. selbst bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden kein solches global definiertes kanonisches Koordinatensystem gibt, wurden die Bewegungsgleichungen in geeigneten *nichtkanonischen* Koordinaten dargestellt. Dabei wurde der symplektische Formalismus Hamiltonscher Systeme benutzt. In den neuen Koordinaten lautet die Hamiltonfunktion

$$H(P, Q, \kappa) = H_1(P, Q) + H_2(\kappa_1, Q) \quad (8.2)$$

und hängt nicht von den übrigen Koordinaten $(\kappa_2, \dots, \kappa_{2n})$ auf der Energieschale des schnellen Systems ab. Dennoch ist die Struktur der Bewegungsgleichungen aufgrund der nichtkanonischen Koordinaten sehr kompliziert. Die schnellen Koordinaten (p, q) sind glatte Funktionen der neuen κ und der langsamen Konfigurationen Q .

- Auf die neuen Bewegungsgleichungen wurde das erweiterte Adiabaten-theorem für ergodische Slow-Fast-Systeme angewendet. Die resultierende langsame Dynamik hat im adiabatischen Limes folgende Eigenschaften: Sie ist ein autonomes, vom konstanten (adiabatisch erhaltenen) Phasenraumvolumen abhängiges Hamiltonsches System mit *kanonischen* Koordinaten (P, Q) , dessen Hamiltonfunktion wie in (8.2) gegeben ist. Die Wechselwirkung der langsamen Freiheitsgrade mit den schnellen äußert sich in der langsamen Dynamik durch eine zusätzliche Potentialkraft

$$-\frac{\partial}{\partial Q} H_2(\kappa_1, Q),$$

die analog zur Born-Oppenheimer-Potentialkraft in quantenmechanischen Systemen ist. Neben dieser Potentialkraft gibt es keine weiteren auf das langsame System wirkenden Kräfte, die ihren Ursprung in der Wechselwirkung mit den schnellen Freiheitsgraden haben. Insbesondere tritt *kein* geometrischer Magnetismus und *keine* „deterministische Reibung“ ([BR93b]) auf, im Gegensatz zu den Ergebnissen von BERRY und ROBBINS in [BR93a, BR93b].

- Die schnelle Dynamik läßt sich aufgrund der sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsdaten nicht über lange Zeit vorausberechnen. Dennoch ist die Identifikation eines Holonomieeffektes in der schnellen Dynamik möglich. Dieser wurde erstmals berechnet, kann jedoch wegen der sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsdaten nicht, wie im integrablen Fall, als Verschiebung des Endzustands auf der Energieschale interpretiert werden, da letzterer von allen Details der Bewegung abhängt. Bei Kenntnis der Bewegung der langsamen Freiheitsgrade in Form einer durch die Zeit parametrisierten Kurve $C : t \mapsto Q(t)$, gelingt jedoch folgende Konstruktion:

In Analogie zum integrablen Fall wurde die zur adiabatischen Invarianten, dem Phasenraumvolumen $\mathcal{J} = \kappa_1$, bei *festgehaltenen* langsamen Freiheitsgraden kanonisch konjugierte Größe untersucht. Diese ist, im Gegensatz zu den Winkeln im integrablen Fall, nicht als Koordinate auf der Energieschale geeignet. Aufgrund ihres *zeitähnlichen* Charakters wurde sie als *Tempus* (θ) bezeichnet.

Da der Tempus zum Phasenraumvolumen kanonisch konjugiert ist, muß sein erstes Differential ω^1 , eine 1-Form über dem Phasenraum, die lokale Bedingung für kanonische Konjugiertheit

$$\forall i = 1, \dots, 2n : \quad \omega^1(\mathcal{I}d\kappa_i) = \delta_{1i}$$

erfüllen und kann aus dieser Bedingung berechnet werden. Die so berechnete 1-Form ω^1 wurde entlang der schnellen Trajektorie des Systems bei vorgegebener langsamer Bewegung $Q(t)$ zum Tempus integriert. Nach dem Mittelungssatz für Observablen konnte dieses Integral im adiabatischen Limes durch ein Integral über die gemittelte 1-Form $\langle \omega^1 \rangle$ ersetzt werden. Der so ermittelte Tempus setzt sich aus zwei Teilen zusammen:

1. Dem *dynamischen Tempus*, der sich gemäß

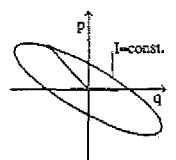
$$\Delta\theta_{\text{dyn}} = \int_{t_0}^t \omega(\kappa_1, Q(t')) dt'$$

ermittelt und die Zeit entlang der Trajektorie in Einheiten des zeitlich veränderlichen Maßstabs $\omega(\kappa_1, Q(t)) = \frac{\partial H_2}{\partial \kappa_1}$ mißt.

2. Dem *geometrischen Tempus*, der durch

$$\Delta\theta_{\text{geo}} = \int_C \left\langle \frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial \kappa_1} - \frac{\partial p}{\partial \kappa_1} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{\kappa_1, Q} dQ_\alpha$$

gegeben ist und *nicht* vom Zeitprogramm der langsamen Bewegung $Q(t)$ abhängt, sondern vollständig durch die Kurve C und das adiabatisch konstante κ_1 bestimmt ist.



Sowohl $\Delta\theta_{\text{dyn}}$ als auch $\Delta\theta_{\text{geo}}$ hängen nicht von der Wahl der Koordinaten auf der Energieschale ab. Für nichtgeschlossene Kurven C hängen $\Delta\theta_{\text{dyn}}$ und $\Delta\theta_{\text{geo}}$ jedoch von den Koordinaten auf der Tempusachse ab.

Für geschlossene Kurven (Zyklen) C verschwindet diese Abhängigkeit von der Eichung des Tempus. $\Delta\theta_{\text{geo}}$ beschreibt in diesem Fall die Holonomie des Zusammenhangs, der von der adiabatischen Dynamik auf dem Prinzipalbündel, das die Tempusachse über dem langsamen Konfigurationsraum aufspannt, erzeugt wird.

Für 0-homotope Zyklen C kann der Stokes'sche Satz angewendet und der geometrische Tempus als Integral über eine vom Zyklus C berandeten Fläche A berechnet werden:

$$\Delta\theta_{\text{geo}} = \frac{\partial}{\partial \kappa_1} \iint_A \langle dp \wedge dq \rangle_{\kappa_1, Q}$$

Dabei ist $d\theta = \frac{\partial \theta}{\partial Q} dQ$. Der Integrand $\langle dp \wedge dq \rangle$ ist analog zur Hannayschen 2-Form [H85].

Der geometrische Tempus ist ein meßbarer Holonomieeffekt in der ergodischen schnellen Dynamik von Slow-Fast-Systemen. Seine Messung ist jedoch, im Gegensatz zu der der Hannaywinkel im integrablen Fall, sehr viel aufwendiger, weil dazu die schnelle Trajektorie über den gesamten Zeitraum der adiabatischen Bewegung beobachtet werden muß. Dies liegt an der sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsdaten und ist daher prinzipieller Natur.

Anhang A

Integrable Systeme

A.1 Eine Identität

Der Term

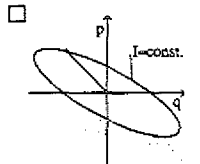
$$[C_{i\alpha}B_{i\beta} - B_{i\alpha}C_{i\beta}]$$

tritt in den Bewegungsgleichungen eines Slow-Fast-Systems mit integrablen schnellen Freiheitsgraden auf (Abschnitt 5.1). Im folgenden wird eine Identität hergeleitet, die diesen Ausdruck vereinfacht.

Nach Definition von B (5.12) und C (5.13) gilt (Summationskonvention)

$$[B_{i\beta}C_{i\alpha} - B_{i\alpha}C_{i\beta}] \quad (A.1)$$

$$\begin{aligned} &= \left[\frac{\partial p_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_k}{\partial I_i} - \frac{\partial p_k}{\partial I_i} \frac{\partial q_k}{\partial Q_\beta} \right] \left[\frac{\partial p_l}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_l}{\partial \theta_i} - \frac{\partial p_l}{\partial \theta_i} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\alpha} \right] - \\ &\quad \left[\frac{\partial p_k}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_k}{\partial I_i} - \frac{\partial p_k}{\partial I_i} \frac{\partial q_k}{\partial Q_\alpha} \right] \left[\frac{\partial p_l}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_l}{\partial \theta_i} - \frac{\partial p_l}{\partial \theta_i} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\beta} \right] \\ &\stackrel{k \leftrightarrow l}{=} \left[\frac{\partial q_k}{\partial I_i} \frac{\partial q_l}{\partial \theta_i} - \frac{\partial q_l}{\partial I_i} \frac{\partial q_k}{\partial \theta_i} \right] \frac{\partial p_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial p_l}{\partial Q_\alpha} - \left[\frac{\partial q_k}{\partial I_i} \frac{\partial p_l}{\partial \theta_i} - \frac{\partial p_l}{\partial I_i} \frac{\partial q_k}{\partial \theta_i} \right] \frac{\partial p_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\alpha} - \\ &\quad \left[\frac{\partial p_k}{\partial I_i} \frac{\partial q_l}{\partial \theta_i} - \frac{\partial q_l}{\partial I_i} \frac{\partial p_k}{\partial \theta_i} \right] \frac{\partial q_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial p_l}{\partial Q_\alpha} + \left[\frac{\partial p_k}{\partial I_i} \frac{\partial p_l}{\partial \theta_i} - \frac{\partial p_l}{\partial I_i} \frac{\partial p_k}{\partial \theta_i} \right] \frac{\partial q_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\alpha} \\ &= \underbrace{\{q_l, q_k\}}_{=0} \frac{\partial p_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial p_l}{\partial Q_\alpha} - \underbrace{\{p_l, q_k\}}_{=-\delta_{kl}} \frac{\partial p_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\alpha} - \\ &\quad \underbrace{\{q_l, p_k\}}_{=\delta_{lk}} \frac{\partial q_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial p_l}{\partial Q_\alpha} + \underbrace{\{p_l, p_k\}}_{=0} \frac{\partial q_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\alpha} \\ &= - \left[\frac{\partial p_k}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_k}{\partial Q_\beta} - \frac{\partial p_k}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_k}{\partial Q_\alpha} \right] = -F_{\alpha\beta} \quad (A.2) \end{aligned}$$



A.2 Mittelung von $C_{i\alpha}$

Es wird gezeigt, daß $C_{i\alpha}$ über den n -Torus $T^n(I)$ gemittelt verschwindet. Dies ist die notwendige Bedingung dafür, daß die Wirkungen I adiabatische Invarianten sind. Es ist:

$$\begin{aligned}
 \langle C_{i\alpha} \rangle &= \left\langle \frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q}{\partial \theta_i} - \frac{\partial p}{\partial \theta_i} \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle \\
 &= \left\langle \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \left(p \frac{\partial q}{\partial \theta_i} \right) \right\rangle - \left\langle \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(p \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right) \right\rangle \\
 &= \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \frac{1}{(2\pi)^n} \int d\theta p \frac{\partial q}{\partial \theta_i} - \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^n} \int d\theta \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(p \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right)}_{=0} \\
 &= \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int d\theta_i p \frac{\partial q}{\partial \theta_i}}_{=I_i} = 0,
 \end{aligned}$$

wobei die letzte Gleichheit gilt, weil die partielle Ableitung nach Q_α bei festem I durchgeführt wird. $\square$

A.3 Slow-Fast-Systeme und Hamiltonsches Variationsprinzip

Betrachte das klassische System (5.2,5.3), für das die n schnellen Freiheitsgrade p, q auf instantane Winkel-Wirkungs-Koordinaten transformiert werden. Die Wirkung einer durch die Zeit parametrisierten Kurve im erweiterten Phasenraum lautet, ausgedrückt in den neuen Koordinaten P, Q, I und θ ,

$$W := \int_{t^{(0)}}^{t^{(1)}} dt \left[P\dot{Q} + I\dot{\theta} - H_1(P, Q) - H_2(I, Q) - \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} (I, \theta, Q) \dot{Q}_\alpha \right], \quad (\text{A.3})$$

wobei S die Q -abhängige Erzeugendenfunktion der kanonischen Transformation vom Variablensatz (p, q) nach (I, θ) ist. Dabei wurde der effektive schnelle Hamiltonian (4.47) in das Wirkungsintegral eingesetzt.

Das Hamiltonsche Variationsprinzip besagt nun, daß die Wirkung entlang den Trajektorien des Systems für feste Anfangs- und Endkonfigurationen $(Q^{(0)}, \theta^{(0)}, t^{(0)})$ und $(Q^{(1)}, \theta^{(1)}, t^{(1)})$ extremal ist, d. h. die erste Variation der Trajektorie verschwindet. Es ist

$$\begin{aligned}
 0 = \delta W &= \int_{t^{(0)}}^{t^{(1)}} dt \left[\delta P \dot{Q} + P \delta \dot{Q} + \delta I \dot{\theta} + I \delta \dot{\theta} - \delta H_1(P, Q) - \delta H_2(I, Q) \right. \\
 &\quad \left. - \delta \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} (I, \theta, Q) \dot{Q}_\alpha - \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} (I, \theta, Q) \delta \dot{Q}_\alpha \right] \quad (\text{A.4})
 \end{aligned}$$

Mit partieller Integration nach der Zeit in den Termen, die die Variation einer Zeitableitung enthalten, folgt

$$0 = \int_{t(0)}^{t(1)} dt \left[\delta P \dot{Q} - \dot{P} \delta Q + \delta I \dot{\theta} - \dot{I} \delta \theta - \delta H_1(P, Q) - \delta H_2(I, Q) - \delta \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} (I, \theta, Q) \dot{Q}_\alpha + \frac{d}{dt} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} (I, \theta, Q) \delta Q_\alpha \right] \right], \quad (\text{A.5})$$

so daß die folgenden Bewegungsgleichungen resultieren (die partiellen Differentiationen, bei denen nicht explizit spezifiziert wird, welche Variablen festgehalten werden, sind bei festgehaltenen neuen Koordinaten zu bilden):

$$\begin{aligned} \dot{P}_\alpha &= -\frac{\partial H_1}{\partial Q_\alpha} - \frac{\partial H_2}{\partial Q_\alpha} + \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial Q_\beta} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} - \frac{\partial}{\partial Q_\alpha} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\beta} \right)_{q,I} \right]}_{=F_{\alpha\beta}} \dot{Q}_\beta \\ &+ \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} \frac{\partial}{\partial I_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\beta} \right)_{q,I} - \frac{\partial}{\partial I_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\beta} \right)_{q,I} \right]}_{=C_{i\alpha}B_{i\beta} - B_{i\alpha}C_{i\beta}} \dot{Q}_\beta \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I}}_{=C_{i\alpha}} \frac{\partial H_2}{\partial I_i} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H_1}{\partial P_\alpha} \quad (\text{A.7})$$

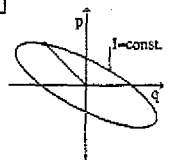
$$\dot{I}_i = -\underbrace{\frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I}}_{=C_{i\alpha}} \dot{Q}_\alpha \quad (\text{A.8})$$

$$\dot{\theta}_i = \frac{\partial H_2}{\partial I_i} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial I_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I}}_{=B_{i\alpha}} \dot{Q}_\alpha, \quad (\text{A.9})$$

denn nach Abschnitt 4.3.2 Gleichung (4.51) und (4.53) gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial I_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} &= B_{i\alpha} \\ \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\frac{\partial S}{\partial Q_\alpha} \right)_{q,I} &= C_{i\alpha} \end{aligned}$$

Mit der Identität aus Anhang A.1 heben die beiden Terme proportional zu $\dot{Q}_\beta$ in (A.6) gerade auf, so daß auch bei dieser alternativen Herleitung der Slow-Fast-Bewegungsgleichungen *kein* geometrischer Magnetismus auftritt. Die Bewegungsgleichungen stimmen mit (5.7,5.8, 5.9,5.10) überein. $\square$



A.4 Transformationseigenschaften unter Umeichung

Es ist zu zeigen, daß sich $\bar{\omega}$ (5.42) unter einer Umeichung der Winkelkoordinaten gemäß

$$\hat{\theta}(\theta, I, Q) = \theta + \theta_0(I, Q) \quad (\text{A.10})$$

wie folgt transformiert:

$$\hat{\omega} = \bar{\omega} + \frac{\partial \theta_0}{\partial Q_\alpha} dQ_\alpha \quad (\text{A.11})$$

Zunächst wird gezeigt, daß $\langle B_{i\alpha} \rangle_{I,Q}$ nicht von der Wahl der Koordinaten abhängt. Unter der Koordinatentransformation (A.10) transformiert sich $B_{i\alpha}$:

$$\begin{aligned} B_{i\alpha} = & \hat{B}_{i\alpha} + \underbrace{\left[\frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_j} \left(\frac{\partial q}{\partial I_i} \right)_{\hat{\theta}} - \left(\frac{\partial p}{\partial I_i} \right)_{\hat{\theta}} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \right] \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\alpha}}_{(1)} \\ & + \underbrace{\hat{C}_{j\alpha} \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial I_i}}_{(2)} + \underbrace{\left[\frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_j} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_k} - \frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_k} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \right] \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial \hat{\theta}_k}{\partial I_i}}_{(3)} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Es bleibt zu zeigen, daß die Terme (1), (2) und (3) bei Mittelung über den n -Torus verschwinden.

Der Term (1) in (A.12) ist eine Komponente der $(n+1)$ -Form

$$\left[\frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_j} \left(\frac{\partial q}{\partial I_i} \right)_{\hat{\theta}} - \left(\frac{\partial p}{\partial I_i} \right)_{\hat{\theta}} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \right] \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\alpha} dQ_\alpha \wedge d\hat{\theta}_1 \wedge \dots \wedge d\hat{\theta}_n, \quad (\text{A.13})$$

über die das n -dimensionale Integral über den Torus ausgeführt wird. Das n -dimensionale Volumenelement für die Mittelung auf dem Torus bei festem Q und I transformiert sich gemäß

$$d\theta_1 \wedge \dots \wedge d\theta_n = d\hat{\theta}_1 \wedge \dots \wedge d\hat{\theta}_n. \quad (\text{A.14})$$

Ferner folgt aus (A.10) für die Differentiale der Winkel

$$d\hat{\theta}_i = \frac{\partial \theta_{0i}}{\partial Q_\alpha} dQ_\alpha + d\theta_i, \quad (\text{A.15})$$

wobei wegen der adiabatischen Erhaltung von I die Abhängigkeit von I weggelassen wurde.¹

Durch Einsetzen von (A.15) in (A.13) und Benutzung von (A.14) gilt dann

$$\begin{aligned} & \underbrace{\left[\frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_j} \left(\frac{\partial q}{\partial I_i} \right)_{\hat{\theta}} - \left(\frac{\partial p}{\partial I_i} \right)_{\hat{\theta}} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \right] \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\alpha} dQ_\alpha \wedge d\hat{\theta}_1 \wedge \dots \wedge d\hat{\theta}_n}_{=-\delta_{ij}} \\ & = \underbrace{\delta_{ij} d\theta_j \wedge d\theta_1 \wedge \dots \wedge d\theta_n}_{\equiv 0} - \underbrace{\delta_{ij} d\hat{\theta}_j \wedge d\hat{\theta}_1 \wedge \dots \wedge d\hat{\theta}_n}_{\equiv 0} \equiv 0, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

¹Dies ist erlaubt, da das Differential nur auf Tangentialvektoren des Phasenraums wirkt, die keine Komponente in I -Richtung besitzen. Es ist daher $dI_i(v) = 0$ für alle Tangentialvektoren v an eine Trajektorie.

wobei die Gleichheiten (1) und (2) wegen des doppelten Vorkommens von $d\theta_j$ bzw. $d\hat{\theta}_j$ gelten.

Der Term (2) verschwindet, da $\frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial I_i} = \frac{\partial \theta_{0j}}{\partial I_i}$ nicht von $\hat{\theta}$ abhängt, so daß

$$\left\langle \hat{C}_{j\alpha} \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial I_i} \right\rangle_{I,Q} = \left\langle \hat{C}_{j\alpha} \right\rangle_{I,Q} \frac{\partial \theta_{0j}}{\partial I_i} \equiv 0, \quad (\text{A.17})$$

da $\langle \hat{C}_{j\alpha} \rangle$ nach Anhang A.2 identisch verschwindet.

Der Term (3) verschwindet, weil

$$\left[\frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_j} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_k} - \frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_k} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \right] \equiv 0$$

wegen der kanonischen Eigenschaft der (p, q) und (θ, I) bei festgehaltenen (P, Q) identisch verschwindet.

Somit ist $\langle B_{i\alpha} \rangle$ invariant unter Eichtransformationen der Form (A.10). Nach (A.15) gilt nun insbesondere

$$\hat{\omega} = \bar{\omega} + \frac{\partial \theta_{0i}}{\partial Q_\alpha} dQ_\alpha, \quad (\text{A.18})$$

was zu beweisen war. $\square$

Die Unabhängigkeit der Hannayschen 2-Form von der Wahl der Winkelkoordinaten (Eichung) kann wie folgt gezeigt werden: Betrachte die Terme

$$\left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right)_\theta, \quad (\text{A.19})$$

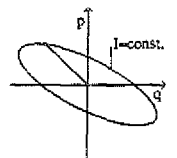
die sich durch die Winkeltransformation (A.10) gemäß

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right)_\theta &= \left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right)_\theta + \underbrace{\left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\beta}}_{=(1)} \\ &\quad + \underbrace{\frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_j} \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right)_\theta \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\alpha}}_{=(2)} + \underbrace{\frac{\partial p}{\partial \hat{\theta}_j} \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\beta}}_{=(3)} \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

transformieren. Sie sind die Komponenten der $(n+2)$ -Form, die, über den n -Torus integriert, zu der gesuchten 2-Form wird. Für den Term (1) gilt zum Beispiel:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} \frac{\partial \hat{\theta}_j}{\partial Q_\beta} dQ_\alpha \wedge dQ_\beta \wedge d\hat{\theta}_1 \wedge \dots \wedge d\hat{\theta}_n \quad (\text{A.21})$$

$$= \left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \frac{\partial q}{\partial \hat{\theta}_j} dQ_\alpha \wedge \underbrace{[d\hat{\theta}_j - d\theta_j]}_{\equiv 0} \wedge d\hat{\theta}_1 \wedge \dots \wedge d\hat{\theta}_n = 0 \quad (\text{A.22})$$



Dabei wurden, wie oben, (A.14) und (A.15) benutzt. Die anderen Terme (2) und (3) verschwinden aus ähnlichem Grund, so daß

$$\left\langle \left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right)_\theta \right\rangle_{I,Q} dQ_\alpha \wedge dQ_\beta = \left\langle \left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right)_\theta \right\rangle_{I,Q} dQ_\alpha \wedge dQ_\beta \quad (\text{A.23})$$

für beliebige Eichtransformationen der Form (A.10) gilt.

Die Hannaysche 2-Form hat somit die eichinvariante Form

$$W(I, Q) = \left\langle \left(\frac{\partial p}{\partial Q_\alpha} \right)_\theta \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\beta} \right)_\theta \right\rangle_{I,Q} dQ_\alpha \wedge dQ_\beta \quad (\text{A.24})$$

was zu beweisen war. □

Anhang B

Ergodische Slow-Fast-Systeme

B.1 Eine Identität

Unter Verwendung der Definitionen (7.7), (7.8) und (7.9) für F , B bzw. C wird der Term

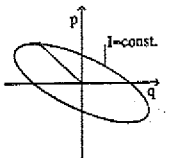
$$-\frac{2n}{D} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{i\alpha} C_{j\beta} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \quad (\text{B.1})$$

ausgewertet, wobei D wie in (7.14) definiert wird. Dabei wird folgende Summationskonvention benutzt: Über zwei gleiche römische, griechische bzw. gotische Indizes wird von 1 bis $2n$, 1 bis k bzw. 1 bis n summiert. Es gilt

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{i\alpha} C_{j\beta} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \\ &= \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \left[\frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_l}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_j} - \frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_j} - \right. \\ & \quad \left. \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_l}{\partial Q_\beta} \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_j} + \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\beta} \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_j} \right] \cdot \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \\ & \stackrel{(1)}{=} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \left[-\frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\beta} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_j} + \frac{\partial q_l}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_m}{\partial Q_\beta} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i} \right] \cdot \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \\ & \stackrel{(2)}{=} -\varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \left[\frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_l}{\partial Q_\beta} - \frac{\partial q_l}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_m}{\partial Q_\beta} \right] \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_j} \cdot \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{m=1}^n \left[\frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_m}{\partial Q_\beta} - \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_m}{\partial Q_\beta} \right] \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \underbrace{\left[\frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_j} - \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i} \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_j} \right]}_{=-B_{ij}} \cdot \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \\ &= \frac{1}{2} F_{\alpha\beta} \cdot \frac{1}{n} D, \end{aligned}$$

wobei Gleichheit (1) gilt, da der ε -Tensor im ersten und letzten Term mit zwei identischen Vektoren $\frac{\partial q_m}{\partial \kappa_i}$ bzw. $\frac{\partial p_m}{\partial \kappa_j}$ kontrahiert wird. Gleichheit (2) folgt mit Vertauschung der Summationsindizes m und l bzw. i und j im zweiten Term. Für (B.1) folgt

$$-\frac{2n}{D} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} C_{i\alpha} C_{j\beta} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} = -\frac{2n}{D} \frac{1}{2} F_{\alpha\beta} \cdot \frac{1}{n} D = -F_{\alpha\beta} \quad (\text{B.2})$$



B.2 Kanonischer Isomorphismus des schnellen Teilsystems für $Q = \text{const.}$

Bei der Konstruktion der zum adiabatisch invarianten Phasenraumvolumen kanonisch konjugierten Größe in Abschnitt 7.3 wird die Inverse der symplektischen Matrix B des schnellen Teilsystems benötigt. Diese ist durch

$$\mathcal{I}_{ij} = -\frac{2n}{D} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \quad (\text{B.3})$$

gegeben, was im folgenden bewiesen wird. Betrachte dazu den folgenden Ausdruck:

$$B_{mi} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \quad (\text{B.4})$$

Zunächst wird gezeigt, daß (B.4) verschwindet, falls $j \neq m$ ist: Angenommen (B.4) verschwinde nicht für $j \neq m$. Da B antisymmetrisch ist, muß m von i verschieden sein. Daher muß m einen Wert in der Menge $\{k_2, l_2, \dots, k_n, l_n\}$ annehmen. O. B. d. A. sei $m = k_2$. Dann ist (über geklammerte Indizes wird *nicht* summiert!)

$$\begin{aligned} B_{(m)i} B_{(m)l_2} \varepsilon_{ij(m)l_2 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=3}^n B_{k_\nu l_\nu} &= -B_{(m)i} B_{(m)l_2} \varepsilon_{l_2 j(m) \dots k_n l_n} \prod_{\nu=3}^n B_{k_\nu l_\nu} \\ &= -B_{(m)i} B_{(m)l_2} \varepsilon_{ij(m)l_2 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=3}^n B_{k_\nu l_\nu}, \end{aligned}$$

d. h. der Term gleich seinem Negativen, was im Widerspruch zur Annahme steht, daß (B.4) nicht verschwindet.

Sei jetzt $m = j$. Dann ist

$$-\frac{2n}{D} \varepsilon_{i(m)k_2 l_2 \dots k_n l_n} B_{(m)i} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} = 1, \quad (\text{B.5})$$

da $D = \varepsilon_{k_1 l_1 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=1}^n B_{k_\nu l_\nu}$. □

B.3 Zeitabhängigkeit von θ

Der Tempus $\theta(t, P^{(0)}, Q^{(0)}, \kappa^{(0)}, t^{(0)}, \varepsilon)$ ist in Kapitel 7.3 als das Zeitintegral

$$\theta = \int dt B_{1i} \dot{\kappa}_i \quad (\text{B.6})$$

definiert. Betrachte im folgenden den Integranden, der sich so umformen läßt, daß θ in einen dynamischen und einen geometrischen Teil zerfällt. Durch Einsetzen von (7.13) für κ_i gilt

$$B_{1i} \dot{\kappa}_i = -\frac{2n}{D} \left[\frac{\partial H}{\partial \kappa_j} + C_{j\alpha} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \right] \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} B_{1i} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{2n}{D} \frac{\partial H}{\partial \kappa_j} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} B_{1i} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \\
 &\quad - \frac{2n}{D} C_{j\alpha} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} B_{1i} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu}, \quad (B.7)
 \end{aligned}$$

wobei sich der erste Term in (B.7) gemäß

$$\underbrace{-\frac{2n}{D} \varepsilon_{i1k_2 l_2 \dots k_n l_n} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} B_{1i}}_{=[B_{-1}]_{i1}} \frac{\partial H}{\partial \kappa_1} = \frac{\partial H}{\partial \kappa_1} \quad (B.8)$$

vereinfacht, da $\frac{\partial H}{\partial \kappa_i} = \frac{\partial H}{\partial \kappa_1} \delta_{1i}$. Im folgenden können römische, griechische bzw. gotische Indizes Werte zwischen 1 und $2n$, 1 und k bzw. 1 und n annehmen. Unter Benutzung der Summationskonvention ergibt der zweite Term

$$\begin{aligned}
 &-\frac{2n}{D} C_{j\alpha} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} B_{1i} \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \\
 &= -\frac{2n}{D} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \left[\frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_j} - \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} \right] \left[\frac{\partial p_l}{\partial \kappa_1} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_i} - \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_i} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_1} \right] \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \\
 &= -\frac{2n}{D} \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \left[\frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_j} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_1} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_i} - \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_1} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_i} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_j} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_i} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_1} + \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_i} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_1} \right] \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \\
 &= \frac{2n}{D} \sum_{m=1}^n \varepsilon_{ijk_2 l_2 \dots k_n l_n} \left[\frac{\partial p_l}{\partial \kappa_1} \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial p_m}{\partial \kappa_j} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_i} + \frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_l}{\partial \kappa_1} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_j} \frac{\partial p_l}{\partial \kappa_i} \right] \prod_{\nu=2}^n B_{k_\nu l_\nu} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \\
 &= \left[-\frac{\partial p_m}{\partial \kappa_1} \frac{\partial q_m}{\partial Q_\alpha} + \frac{\partial p_m}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial q_m}{\partial \kappa_1} \right] \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \\
 &= C_{1\alpha} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha},
 \end{aligned}$$

so daß unmittelbar

$$B_{1i} \dot{\kappa}_i = \omega(\kappa_1, Q) + C_{1\alpha} \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} \quad (B.9)$$

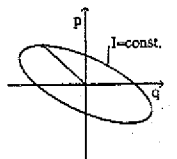
folgt. □

B.4 Koordinatenunabhängigkeit des geometrischen Tempus

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß der geometrische Tempus (7.34) in Abschnitt 7.3 nicht von der Wahl der Koordinaten κ_i ($i = 2, \dots, 2n$) abhängt.

Dazu werden allgemeine Koordinatentransformation T der Form

$$T : \mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n \mapsto \mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n$$



$$T : \begin{cases} \kappa_i \rightarrow \tilde{\kappa}_i(\kappa, Q), & (i = 2, \dots, 2n) \\ \kappa_1 \rightarrow \tilde{\kappa}_1 = \kappa_1 \end{cases}$$

betrachtet. Es ist nun

$$p \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right)_\kappa \rho(\kappa, Q) d^{2n-1} \kappa dQ_\alpha = \\ p \left(\frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right)_{\tilde{\kappa}} \tilde{\rho}(\tilde{\kappa}, Q) d^{2n-1} \tilde{\kappa} dQ_\alpha + p \left(\frac{\partial q}{\partial \tilde{\kappa}_i} \right)_Q \left(\frac{\partial \tilde{\kappa}_i}{\partial Q_\alpha} \right)_\kappa \tilde{\rho}(\tilde{\kappa}, Q) d^{2n-1} \tilde{\kappa} dQ_\alpha \quad (\text{B.10})$$

Ausführlich geschrieben ist der zweite Term in (B.10)

$$p \left(\frac{\partial q}{\partial \tilde{\kappa}_i} \right)_Q \left(\frac{\partial \tilde{\kappa}_i}{\partial Q_\alpha} \right)_\kappa \tilde{\rho}(\tilde{\kappa}, Q) d\tilde{\kappa}_2 \wedge \dots \wedge d\tilde{\kappa}_{2n} \wedge dQ_\alpha \quad (\text{B.11})$$

Die Umrechnung der $(2n - 1)$ -dimensionalen Volumenelemente erfolgt bei festem Q und κ_1 , so daß

$$\rho(\kappa, Q) d^{2n-1} \kappa = \det \left(\frac{\partial(\kappa_2, \dots, \kappa_{2n})}{\partial(\tilde{\kappa}_2, \dots, \tilde{\kappa}_{2n})} \right) \rho(\tilde{\kappa}, Q) d^{2n-1} \tilde{\kappa} = \tilde{\rho}(\tilde{\kappa}, Q) d^{2n-1} \tilde{\kappa}$$

ist (siehe Abschnitt 7.1 (7.4)). Mit Hilfe von

$$d\tilde{\kappa}_i = \left(\frac{\partial \tilde{\kappa}_i}{\partial Q_\alpha} \right)_\kappa dQ_\alpha + \left(\frac{\partial \tilde{\kappa}_i}{\partial \kappa_j} \right)_Q d\kappa_j, \quad (i, j = 2, \dots, 2n) \quad (\text{B.12})$$

(κ_1 konstant) läßt sich (B.11) wie folgt umschreiben:

$$p \left(\frac{\partial q}{\partial \tilde{\kappa}_i} \right)_Q \left(\frac{\partial \tilde{\kappa}_i}{\partial Q_\alpha} \right)_\kappa \tilde{\rho}(\tilde{\kappa}, Q) d\tilde{\kappa}_2 \wedge \dots \wedge d\tilde{\kappa}_{2n} \wedge dQ_\alpha = \\ p \left(\frac{\partial q}{\partial \tilde{\kappa}_i} \right)_Q \tilde{\rho}(\tilde{\kappa}, Q) \underbrace{d\tilde{\kappa}_2 \wedge \dots \wedge d\tilde{\kappa}_{2n} \wedge d\tilde{\kappa}_i}_{\stackrel{(1)}{=} 0} - \\ p \left(\frac{\partial q}{\partial \tilde{\kappa}_i} \right)_Q \left(\frac{\partial \tilde{\kappa}_i}{\partial \kappa_j} \right)_Q \rho(\kappa, Q) \underbrace{d\kappa_2 \wedge \dots \wedge d\kappa_{2n} \wedge d\kappa_j}_{\stackrel{(2)}{=} 0}, \quad (\text{B.13})$$

wobei die Gleichheiten (1) und (2) wegen des doppelten Vorkommens von $d\tilde{\kappa}_i$ bzw. $d\kappa_j$ gelten. $\square$

Der gemittelte Term

$$\left\langle p \frac{\partial q}{\partial Q_\alpha} \right\rangle_{\kappa_1, Q} dQ_\alpha \quad (\text{B.14})$$

hat über dem langsamen Konfigurationsraum $\mathcal{M}_Q^k$ 1-Form-Charakter und ist unabhängig von der Wahl der κ -Koordinaten. Sein äußeres Differential ist die geschlossene 2-Form

$$\langle dp \wedge dq \rangle_{\kappa_1, Q} \quad (\text{B.15})$$

über $\mathcal{M}_Q^k$.

Anhang C

Adiabatentheorie ergodischer autonomer Slow-Fast-Systeme

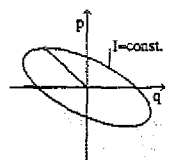
C.1 Beweis des Adiabatentheorems

In diesem Abschnitt wird das Adiabatentheorem von T. KAZUGA [K61], das nur für *nicht-autonome* Systeme bewiesen wurde, so erweitert, daß es auf autonome Slow-Fast-Systeme anwendbar ist. Dazu wird ein Slow-Fast-System mit ergodischen schnellen Freiheitsgraden betrachtet, das wie in Abschnitt 4.2 und 4.4 definiert ist.

Dieser Anhang ist sehr eng an die Herleitung des Adiabatentheorems in [K61] angelehnt und, wie [K61], in drei Teile unterteilt. An einigen Stellen des Beweises von KAZUGA sind Erweiterungen notwendig, deren Grundideen aus der Adiabatentheorie integrierbarer Systeme stammen [GKM89]. Im ersten Teil wird ausschließlich die autonome Hamiltonsche Bewegung der schnellen Freiheitsgrade bei festgehaltenen langsamen Freiheitsgraden (P, Q) untersucht. Neben einigen Definitionen wird eine notwendige Bedingung für die adiabatische Invarianz des Phasenraumvolumens $\mathcal{J}$ hergeleitet. Der zweite Teil umfaßt die Ergodentheorie des schnellen Teilsystems, und es wird eine wichtige funktionentheoretische Näherungsmethode hergeleitet, die im dritten Teil beim Beweis des Adiabatentheorems von großer Bedeutung ist.

Teil I:

Gegeben sei ein Hamiltonsches System (ω^2, H_2) mit kanonischer symplektischer 2-Form $\omega^2 = dp \wedge dq$ und einem von äußeren Parametern $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ abhängenden Hamiltonian $H_2(p, q, Q)$, der auf einer Menge $\overline{\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n \times \mathcal{M}_Q^k}$ ($\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ einfach zusammenhängend, offen und beschränkt) zweimal stetig differenzierbar ist, d. h. $H_2 \in C^2(\overline{\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n \times \mathcal{M}_Q^k})$.



Ferner wird vorausgesetzt, daß überall in einer offenen Menge $K \subset \mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n \times \mathcal{M}_Q^k$

$$\sum_{i=1}^n \left\{ \left(\frac{\partial H_2}{\partial p_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial H_2}{\partial q_i} \right)^2 \right\} \neq 0 \quad (\text{C.1})$$

gilt, so daß für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ in $K_Q := \{(p, q) | (p, q, Q) \in K\}$ kein lokales Extremum von H_2 bzgl. (p, q) existiert (eine exakte Definition von K und K_Q wird weiter unten gegeben). Das Hamiltonsche Vektorfeld hat somit in K keine Singularitäten. Wegen der vorausgesetzten Beschränktheit des Teilphasenraums $\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n$ und der zweimaligen Differenzierbarkeit von H_2 bezüglich p und q besitzen die glatten Hyperflächen konstanter Energie $S_{E,Q}$, definiert durch

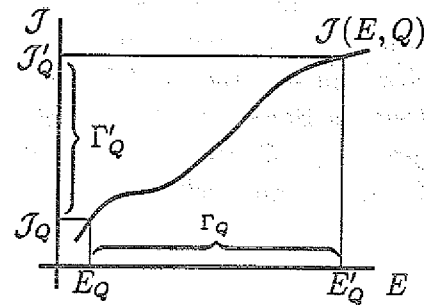
$$S_{E,Q} := \{(p, q) \in K_Q | H_2(p, q, Q) = E, Q \in \mathcal{M}_Q^k\},$$

keinen Rand ($\delta S_{E,Q} = 0$) und bilden daher selber den Rand einer $2n$ -dimensionalen Untermannigfaltigkeit $I_{E,Q} := \{(p, q) \in K_Q | H_2(p, q, Q) < E, Q \in \mathcal{M}_Q^k\}$ ($S_{E,Q} = \delta I_{E,Q}$)¹ von $\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n$, deren Volumen gegeben ist durch

$$\hat{J}(p, q, Q) := \int_{I_{E,Q}} d^n p d^n q. \quad (\text{C.2})$$

Dabei wurde o. B. d. A. angenommen, daß die Energie der von der Energieschale eingeschlossenen Punkte (p, q) kleiner ist als die Energie E . Im folgenden wird die Menge $S_{E,Q}$ als zusammenhängend vorausgesetzt. Ansonsten betrachte man jeweils nur eine Zusammenhangskomponente von $S_{E,Q}$. Für jedes $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ wird die Existenz eines Intervalls $\Gamma_Q := \{E | E_Q < E < E'_Q\}$ mit $-\infty \leq E_Q < E'_Q \leq +\infty$ vorausgesetzt, so daß $S_{E,Q}$, wie oben definiert, existiert, und $K_Q := \bigcup_{E \in \Gamma_Q} S_{E,Q}$. Damit ist $K := \{(p, q, Q) | Q \in \mathcal{M}_Q^k, (p, q) \in K_Q\}$.

Die Punktmenge $\Lambda := \{(E, Q) | Q \in \mathcal{M}_Q^k, E \in \Gamma_Q\}$ ist offen. Das Volumen der Menge $I_{E,Q}$ als Funktion der Energie E und der Koordinate Q ist analog zu (C.2) definiert und mit $\mathcal{J}(E, Q)$ bezeichnet, so daß $\mathcal{J} \in C^1(\Lambda)$ und $\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial E} > 0$ für alle $(E, Q) \in \Lambda$. Mit $\mathcal{J}_Q := \lim_{E \rightarrow E_Q} \mathcal{J}(E, Q)$, $\mathcal{J}'_Q := \lim_{E \rightarrow E'_Q} \mathcal{J}(E, Q)$ kann $\mathcal{J}(E, Q)$ auf Λ eindeutig nach E aufgelöst werden, und $E = \mathcal{E}(\mathcal{J}, Q) \in C^1(\Lambda')$ mit $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathcal{J}} > 0$ auf Λ' ($\Lambda' := \{(\mathcal{J}, Q) | Q \in \mathcal{M}_Q^k, \mathcal{J}_Q < \mathcal{J} < \mathcal{J}'_Q\}$).



Wegen (C.2) folgt für $\hat{J}(p, q, Q) = \mathcal{J}(H_2(p, q, Q), Q) \in C^1(K)$

$$\forall (p, q, Q) \in K : \sum_{i=1}^n \left\{ \left(\frac{\partial \hat{J}}{\partial p_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial \hat{J}}{\partial q_i} \right)^2 \right\} \neq 0. \quad (\text{C.3})$$

$\hat{J}$ legt somit eindeutig eine Energiehyperschale $S_{E,Q}$ fest und kann anstelle der Energie zur Charakterisierung von $S_{E,Q}$ verwendet werden. Die Energiehyperschalen $S_{E,Q}$ stratifizieren K_Q wie eine Zwiebel (siehe Abbildung 4.3 in Abschnitt 4.4.1).

¹Dieses Argument gilt nur, wenn die Homologiegruppe von $\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n$ trivial ist. Für einfach zusammenhängendes $\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n$ ist dies der Fall.

Im weiteren wird angenommen, es existierten zwei Zahlen $\mathcal{J}_1^*$ und $\mathcal{J}_2^*$ unabhängig von Q , so daß für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ $\mathcal{J}_Q < \mathcal{J}_1^* < \mathcal{J}_2^* < \mathcal{J}'_Q$ gilt.

Es wird definiert für $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ und $\mathcal{J}, \mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2 \in (\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$:

- $S(\mathcal{J}, Q) := S_{\mathcal{E}(\mathcal{J}, Q), Q} = \{(p, q) \in K_Q | \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q) = \mathcal{J}\}$
- $I(\mathcal{J}, Q) := I_{\mathcal{E}(\mathcal{J}, Q), Q}$
- $I(\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, Q) := \{(p, q) \in K_Q | \mathcal{J}_1 < \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q) < \mathcal{J}_2\}$

Ferner sei für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ und $\mathcal{J}_1^* < \mathcal{J} < \mathcal{J}_2^*$:

- $\mathcal{G}_Q := I(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*, Q)$
- $G := \{(P, Q) | P \in \mathcal{M}_P^k, Q \in \mathcal{M}_Q^k\} \subset \mathbb{R}^{2k}$
- $D := \{(P, Q, p, q) \in M | P \in \mathcal{M}_P^k, Q \in \mathcal{M}_Q^k, (p, q) \in \mathcal{G}_Q\}$
- $D_2 := \{(p, q, Q) \in K | Q \in \mathcal{M}_Q^k, (p, q) \in \mathcal{G}_Q\}$
- $D_2(\mathcal{J}) := \{(p, q, Q) | Q \in \mathcal{M}_Q^k, (p, q) \in I(\mathcal{J}, Q)\}$
- $W(\mathcal{J}) := \{(p, q, Q) \in K | Q \in \mathcal{M}_Q^k, (p, q) \in S(\mathcal{J}, Q)\}$

D , D_2 und $D_2(\mathcal{J})$ sind offen, $\overline{D}$, $\overline{D_2(\mathcal{J})}$, $W(\mathcal{J})$ und $\overline{D_2}$ kompakt für alle $\mathcal{J}_1^* < \mathcal{J} < \mathcal{J}_2^*$, und $\overline{D_2(\mathcal{J})} = D_2(\mathcal{J}) \cup W(\mathcal{J})$, $\overline{D_2} = D_2 \cup W(\mathcal{J}_1^*) \cup W(\mathcal{J}_2^*)$.

Lemma C.1 ([K61]) *Es existiert ein eindeutiges Maß $m_{\mathcal{J}, Q}$ auf den Borelmengen jeder Energieschale $S(\mathcal{J}, Q)$ ($Q \in \mathcal{M}_Q^k$, $\mathcal{J}_1^* < \mathcal{J} < \mathcal{J}_2^*$), so daß*

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{J}} \int_{I(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}, Q)} f(p, q) dp dq = \int_{S(\mathcal{J}, Q)} f(p, q) dm_{\mathcal{J}, Q}$$

für alle $f(p, q) \in C_0(\mathcal{G}_Q)$.² Die Vervollständigung von $m_{\mathcal{J}, Q}$ sei wieder mit $m_{\mathcal{J}, Q}$ benannt. Dann ist jede auf $\mathcal{G}_Q$ integrable Funktion $f(p, q)$ auch integrabel auf dem Maßraum $(S(\mathcal{J}, Q), m_{\mathcal{J}, Q})$ für fast alle $\mathcal{J}_1^* < \mathcal{J} < \mathcal{J}_2^*$ und

$$\int_{S(\mathcal{J}, Q)} f(p, q) dm_{\mathcal{J}, Q}$$

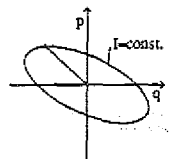
ist integrabel nach $\mathcal{J}$ im Intervall $(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$ mit

$$\int_{I(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*, Q)} f(p, q) dp dq = \int_{\mathcal{J}_1^*}^{\mathcal{J}_2^*} \left(\int_{S(\mathcal{J}, Q)} f(p, q) dm_{\mathcal{J}, Q} \right) d\mathcal{J}.$$

Ferner

$$\int_{S(\mathcal{J}, Q)} dm_{\mathcal{J}, Q} = 1. \quad (\text{C.4})$$

² $C_0(A)$ ist die Menge der stetigen Funktionen mit kompaktem Träger auf A .



Dieses Lemma kann ohne Änderung aus [K61] übernommen werden. $\square$

Nach diesen einführenden Definitionen wird der folgende Satz bewiesen, der besagt, daß die Änderung des Phasenraumvolumens $\mathcal{J}$ als Funktion der Parameter Q im Mittel über die Energieschale verschwindet. Dies ist eine notwendige Bedingung für die adiabatische Invarianz von $\mathcal{J}$ und eine wichtige Voraussetzung für die in Teil II und III gemachten Abschätzungen (siehe Lemma C.7 und Beweis von Lemma C.8).

Satz C.1 Für alle $\mathcal{J}_1^* < \mathcal{J} < \mathcal{J}_2^*$ und alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ gilt

$$\int_{S(\mathcal{J}, Q)} \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q}(p, q, Q) dm_{\mathcal{J}, Q} = 0.$$

Beweis: Sei $\varphi(\mathcal{J})$ eine stetige Funktion mit kompaktem Träger im Intervall $(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$, d. h. $\varphi(\mathcal{J}) \in C_0[(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)]$. Setze

$$\forall \mathcal{J}_1^* < \mathcal{J} < \mathcal{J}_2^* : \quad g(\mathcal{J}) := - \int_{\mathcal{J}}^{\mathcal{J}_2^*} \varphi(\mathcal{J}') d\mathcal{J}'.$$

Dann ist $g(\mathcal{J}) \in C^1[(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)]$, $\frac{dg}{d\mathcal{J}} = \varphi(\mathcal{J})$, und wegen der Kompaktheit des Trägers von $\varphi(\mathcal{J})$ existieren zwei Zahlen $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2$ mit $\mathcal{J}_1^* < \mathcal{J}_1 < \mathcal{J}_2 < \mathcal{J}_2^*$, so daß $g(\mathcal{J}) = 0$ für $\mathcal{J}_2 \leq \mathcal{J} < \mathcal{J}_2^*$ und $g(\mathcal{J}) = g(\mathcal{J}_1)$ für $\mathcal{J}_1^* < \mathcal{J} \leq \mathcal{J}_1$. Die Funktion $f(p, q, Q)$ auf $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times G$ sei definiert durch

$$f(p, q, Q) := \begin{cases} g(\hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) & \text{für } (p, q, Q) \in D_2 \\ 0 & \text{für } \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times G \setminus D_2(\mathcal{J}_2^*) \\ g(\mathcal{J}_1) & \text{für } \overline{D_2(\mathcal{J}_1^*)} \end{cases}.$$

$f(p, q, Q) \in C^1(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times G)$ verschwindet für hinreichend große $|p|^2 + |q|^2$. Nach Lemma C.1 folgt mit den obigen Definitionen von $g(\mathcal{J})$ und $f(p, q, Q)$ für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(p, q, Q) dp dq &= \int_{\mathcal{Q}_Q} g(\hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) dp dq + \int_{I(\mathcal{J}_1^*, Q)} g(\mathcal{J}_1) dp dq \\ &\stackrel{(1)}{=} \int_{\mathcal{J}_1^*}^{\mathcal{J}_2^*} \left(\int_{S(\mathcal{J}, Q)} g(\hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) dm_{\mathcal{J}, Q} \right) d\mathcal{J} + \mathcal{J}_1^* \cdot g(\mathcal{J}_1) \\ &\stackrel{(2)}{=} \int_{\mathcal{J}_1^*}^{\mathcal{J}_2^*} g(\mathcal{J}) d\mathcal{J} + \mathcal{J}_1^* \cdot g(\mathcal{J}_1), \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

wobei die Gleichheit (1) wegen Lemma C.1 und die Gleichheit (2) wegen (C.4) folgt. Es ist für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$

$$\frac{\partial}{\partial Q} \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(p, q, Q) dp dq = 0, \quad (\text{C.6})$$

da (C.5) nicht von Q abhängt. Andererseits ist auch nach Lemma C.1 für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial Q} \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(p, q, Q) dp dq &= \int_{\mathbb{R}^{2n}} \frac{\partial}{\partial Q} f(p, q, Q) dp dq \\ &\stackrel{(1)}{=} \int_{\mathcal{Q}_Q} \frac{\partial g}{\partial \mathcal{J}}(\hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} dp dq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathcal{J}_1^*}^{\mathcal{J}_2^*} \left(\int_{S(\mathcal{J}, Q)} \frac{\partial g}{\partial \mathcal{J}}(\hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} dm_{\mathcal{J}, Q} \right) d\mathcal{J} \\
&= \int_{\mathcal{J}_1^*}^{\mathcal{J}_2^*} \frac{dg}{d\mathcal{J}} \left(\int_{S(\mathcal{J}, Q)} \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} dm_{\mathcal{J}, Q} \right) d\mathcal{J} \\
&= \int_{\mathcal{J}_1^*}^{\mathcal{J}_2^*} \varphi(\mathcal{J}) \left(\int_{S(\mathcal{J}, Q)} \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} dm_{\mathcal{J}, Q} \right) d\mathcal{J}
\end{aligned}$$

für alle Testfunktionen $\varphi(\mathcal{J}) \in C_0[(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)]$. Mit (C.6) folgt unmittelbar die Behauptung. $\square$

Teil II:

In diesem Teil werden, in Analogie zu Teil II von [K61], die ergodischen Eigenschaften des schnellen Teilsystems bei festgehaltenen $(P, Q) \in G$ untersucht. Ferner werden einige funktionentheoretische Aussagen gemacht, die für die Abschätzungen in Teil III von großer Bedeutung sind. Einige Sätze in diesem Abschnitt werden ohne Beweis gegeben, da sie aus [K61] ohne Änderung übernommen werden können.

Def. C.1 (Fluß, Invarianz, Ergodizität [K61])

Eine einparametrische Gruppe $\{\Phi_t | -\infty < t < \infty\}$ von Diffeomorphismen Φ_t heißt Fluß auf dem Maßraum (X, m) . Eine meßbare Funktion $f(\xi)$ ($\xi \in X$) heißt invariant (strikt invariant) unter dem Fluß Φ_t , falls

$$f(\Phi_t(\xi)) = f(\xi)$$

fast überall auf (überall auf) X gilt ($t \in \mathbb{R}$). Ein maßerhaltender Fluß Φ_t auf (X, m) heißt ergodisch (im Sinne von J. V. NEUMANN) dann und nur dann, wenn alle invarianten Funktionen auf (X, m) fast überall konstant sind.

Falls Φ_t meßbar und maßerhaltend ist, existiert eine einparametrische Gruppe $\{\mathcal{U}_t | -\infty < t < \infty\}$ von unitären Transformationen auf den quadratintegrierbaren Funktionen $L^2(X, m)$, so daß

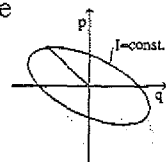
$$\forall f \in L^2(X, m), \forall \xi \in X : (\mathcal{U}_t f)(\xi) = f(\Phi_t(\xi)).$$

$\mathcal{U}_t$ ist als Funktion von t stark stetig (im Sinne der $\|\cdot\|$ -Topologie).

Betrachte nun das Hamiltonsche System

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_2}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H_2}{\partial p}, \quad (C.7)$$

mit $H_2(p, q, Q)$ wie in Teil I definiert und $(p, q, Q) \in K$. Dann existieren die Lösungen $p(t, p^{(0)}, q^{(0)}, Q)$, $q(t, p^{(0)}, q^{(0)}, Q)$ für alle festen $Q \in \mathcal{M}_Q^k$, alle Anfangsbedingungen $(p^{(0)}, q^{(0)}) \in \mathcal{G}_Q$ und alle Zeiten $t \in \mathbb{R}$. Ferner liegt die ganze Bahn auf der Energieschale $S(\mathcal{J}, Q)$, falls $(p^{(0)}, q^{(0)}) \in S(\mathcal{J}, Q)$, da H_2 ein Integral der Bewegung ist (Q fest). Daher bildet das Hamiltonsche System einen meßbaren und maßerhaltenden Fluß $\Phi_t^{(Q)}$ für alle



$Q \in \mathcal{M}_Q^k$ (maßerhaltend wegen des Satzes von Liouville). Da dieser Fluß jede Energieschale $S(\mathcal{J}, Q)$ ($\mathcal{J} \in (\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$) diffeomorph auf sich abbildet, kann man einen Fluß $\Phi_t^{(\mathcal{J}, Q)} := \Phi_t^{(Q)}|_{S(\mathcal{J}, Q)}$ auf $S(\mathcal{J}, Q)$ definieren, der auf $S(\mathcal{J}, Q)$ mit $\Phi_t^{(Q)}$ übereinstimmt. $\Phi_t^{(\mathcal{J}, Q)}$ wirkt dann auf dem Maßraum $(S(\mathcal{J}, Q), m_{\mathcal{J}, Q})$.

Lemma C.2 *Der Fluß $\Phi_t^{(\mathcal{J}, Q)}$ ist auf $(S(\mathcal{J}, Q), m_{\mathcal{J}, Q})$ meßbar und maßerhaltend für alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ und $\mathcal{J} \in [\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*]$ [K61].*

Ferner kann ein meßbarer und maßerhaltender Fluß Φ_t auf D durch die Vorschrift

$$(P, Q, p^{(0)}, q^{(0)}) \rightarrow (P, Q, p(t, p^{(0)}, q^{(0)}, Q), q(t, p^{(0)}, q^{(0)}, Q))$$

definiert werden.

Satz C.2 *Für jedes feste $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ sind die folgenden zwei Aussagen äquivalent (analog zu [K61]):*

1. *Jede unter $\Phi_t^{(Q)}$ invariante Funktion f definiert auf $\mathcal{G}_Q$ ist äquivalent (im Sinne von Lebesgue) einer Funktion $\varphi(H_2(p, q, Q))$, wobei $\varphi(E)$ eine meßbare Funktion von E auf dem Intervall $(\mathcal{E}(\mathcal{J}_1^*, Q), \mathcal{E}(\mathcal{J}_2^*, Q))$ ist.*
2. *Der Fluß $\Phi_t^{(\mathcal{J}, Q)}$ auf dem Maßraum $(S(\mathcal{J}, Q), m_{\mathcal{J}, Q})$ ist ergodisch für fast alle $\mathcal{J} \in (\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$.*

Beweis: [K61] □

Es sei im folgenden vorausgesetzt, daß Aussage 1. von Satz C.2 für fast alle $Q \in \mathcal{M}_Q^k$ erfüllt ist. Ebenso wie eine Funktion $\varphi(E)$ existiert, so daß sich jede invariante Funktion f des Hamiltonschen Flusses durch $\varphi(H_2(p, q, Q))$ ausdrücken läßt, so existiert auch eine auf $(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$ meßbare Funktion $\psi(\mathcal{J})$ ($\mathcal{J} \in (\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$), so daß f äquivalent zu $\psi(\hat{\mathcal{J}}(p, q, Q))$ ist.

Sei nun $v : \overline{G} \rightarrow T(\mathcal{M}_Q^k)$ ein beliebiges C^1 -Vektorfeld.

Lemma C.3 *Sei $f \in L^2(D)$ Φ_t -invariant, dann gilt:*

$$\left\langle f \left| \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} v \right. \right\rangle = \int_D \overline{f(P, Q, p, q)} \frac{d\hat{\mathcal{J}}}{dQ}(p, q, Q) v(P, Q) dp dq dP dQ = 0,$$

d. h. invariante $L^2(D)$ -Funktionen stehen senkrecht auf $\frac{d\hat{\mathcal{J}}}{dQ}(p, q, Q)v(P, Q)$.

Beweis: O. B. d. A. kann angenommen werden, daß $f(P, Q, p, q)$ eine strikt invariante Funktion des Flusses Φ_t ist. Dann ist $f(P, Q, p, q)$ für fast alle $(P, Q) \in G$ eine invariante Funktion von $(p, q) \in \mathcal{G}_Q$ unter dem Fluß $\Phi_t^{(Q)}$, so daß $f(P, Q, p, q)$ äquivalent einer Funktion $\psi_{P, Q}(\hat{\mathcal{J}}(P, Q, p, q))$ ist, wobei $\psi_{P, Q}(\mathcal{J})$ eine meßbare Funktion von $\mathcal{J}$ auf dem Intervall $(\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)$ ist.

Somit folgt

$$\begin{aligned}
 & \int_D \bar{f} \frac{\partial \hat{J}}{\partial Q} v \, dp \, dq \, dP \, dQ \\
 &= \int_G \left(\int_{g_Q} \bar{f} \frac{\partial \hat{J}}{\partial Q} v \, dp \, dq \right) dP \, dQ \\
 &= \int_G v(P, Q) \left[\int_{\mathcal{I}_1^*}^{\mathcal{I}_2^*} \left(\int_{S(\mathcal{I}, Q)} \overline{\psi_{P, Q}(\hat{J})} \frac{\partial \hat{J}}{\partial Q} dm_{\mathcal{I}, Q} \right) d\mathcal{I} \right] dP \, dQ \\
 &= \int_G v(P, Q) \left[\int_{\mathcal{I}_1^*}^{\mathcal{I}_2^*} \overline{\psi_{P, Q}(\mathcal{I})} \underbrace{\left(\int_{S(\mathcal{I}, Q)} \frac{\partial \hat{J}}{\partial Q} dm_{\mathcal{I}, Q} \right)}_{=0} d\mathcal{I} \right] dP \, dQ = 0
 \end{aligned}$$

nach Lemma C.1 und Satz C.1. $\square$

Betrachte jetzt die zum Fluß Φ_t gehörige, einparametrische unitäre Operatorgruppe $\mathcal{U}_t$, die wie in Def. C.1 definiert ist. Nach dem Satz von Stone (siehe zum Beispiel [W76]) existiert ein im $L^2(D)$ dicht definierter, selbstadjungierter Operator A , so daß $\mathcal{U}_t = e^{iAt}$ im Sinne einer Reihenentwicklung ist.³ A heißt dann der *infinitesimale Generator* von $\mathcal{U}_t$, und sein Definitions- bzw. Wertebereich sei mit $\mathcal{D}(A)$ bzw. $\mathcal{R}(A)$ bezeichnet. Eine Funktion f sei auf dem Inneren von D einmal stetig differenzierbar und habe einen kompakten Träger, d. h. $f \in C_0^1(D)$. Es ist $C_0^1(D) \subset L^2(D)$ und $C_0^1(D) \subset C^1(D)$.

Lemma C.4 Für alle $f \in C_0^1(D)$ gilt: $f \in \mathcal{D}(A)$ und

$$Af = -i\{f, H_2\} = i\{H_2, f\},$$

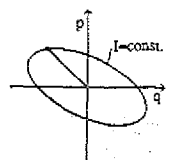
wobei $\{\cdot, \cdot\}$ die Poissonklammer ist [K61].

Beweis: Durch bilden der zeitlichen Ableitung bei $t = 0$ von $\mathcal{U}_t f$ und Einsetzen von (C.7) folgt unmittelbar die Behauptung. $\square$

Lemma C.5 Sei L ein selbstadjungierter Operator auf einem abstrakten Hilbertraum $\mathcal{H}$ und $\{V_t | -\infty < t < \infty\}$ sei eine stark stetige einparametrische unitäre Gruppe mit $V_t = e^{iLt}$ auf $\mathcal{H}$. Sei $\mathcal{K} = \{f \in \mathcal{H} | f \in \mathcal{D}(L), Lf = 0\}$ der Kern des Operators L . Dann ist $\mathcal{K}$ ein abgeschlossener Unterraum von $\mathcal{H}$. Sei $\mathcal{K}^\perp$ das orthogonale Komplement von $\mathcal{K}$ in $\mathcal{H}$. Sei $\mathcal{W}$ ein linearer nicht notwendig abgeschlossener Unterraum von $\mathcal{H}$, der unter dem Fluß V_t invariant ist, d. h. $V_t(\mathcal{W}) = \mathcal{W}$ für alle $t \in \mathbb{R}$. Sei ferner $\mathcal{W} \subset \mathcal{D}(L)$ und $\overline{\mathcal{W}} = \mathcal{H}$. Dann ist $L(\mathcal{W}) = \mathcal{K}^\perp$ [K61].

³Hierbei wurde die starke Stetigkeit von $\mathcal{U}_t$ benutzt, denn für A muß gelten:

$$\left\| \frac{\mathcal{U}_t f - f}{it} - Af \right\|_D \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0$$



Beweis: Siehe [K61]. □

Die Menge N der unter $\mathcal{U}_t$ invarianten Funktionen $f \in L^2(D)$ ist

$$N := \{f \in L^2(D) | f = \mathcal{U}_t f, -\infty < t < \infty\} = \{f \in \mathcal{D}(A) | Af = 0\},$$

wobei die Gleichheit zum letzten Ausdruck am leichtesten an der Spektraldarstellung von $\mathcal{U}_t$ und A zu sehen ist. N ist ein abgeschlossener Unterraum des $L^2(D)$.

Lemma C.6 $A[C_0^1(D)]$, das Bild von $C_0^1(D)$ unter A , ist eine dichte Untermenge des orthogonalen Komplements $N^\perp$ von N [K61].

Beweis: Es ist $C_0^1(D)$ dicht in $L^2(D)$ und $C_0^1(D) \subset \mathcal{D}(A)$ nach Lemma C.4. Ferner ist $C_0^1(D)$ invariant unter $\mathcal{U}_t$ ($t \in \mathbb{R}$), da D invariant unter dem diffeomorphen Fluß Φ_t ist. Damit kann Lemma C.5 angewendet werden und es folgt unmittelbar die Behauptung [K61]. □

Lemma C.7 Für alle $\epsilon > 0$, existiert eine Funktion $f_{\mathcal{J}}(P, Q, p, q) \in C_0^1(D)$, so daß

$$\left\| \{H_2, f_{\mathcal{J}}\} - \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} v \right\|_D < \epsilon$$

Beweis: Nach Lemma C.3 steht $\frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} v \in L^2(D)$ auf den invarianten Funktionen senkrecht, d. h. $\frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} v \in N^\perp$. Da $A[C_0^1(D)]$ nach Lemma C.6 in $N^\perp$ dicht liegt, gibt es zu jedem $\epsilon > 0$ eine Funktion $f'_{\mathcal{J}} \in C_0^1(D)$, so daß

$$\left\| Af'_{\mathcal{J}} - \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} v \right\|_D < \epsilon.$$

Setzt man $f_{\mathcal{J}} = if'_{\mathcal{J}}$, so folgt die Behauptung mit Lemma C.4, da $Af_{\mathcal{J}} = i\{H_2, f_{\mathcal{J}}\}$ für $f_{\mathcal{J}} \in C_0^1(D)$ [K61]. □

Die Ersetzung des Terms $\frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q} v$ durch eine Poissonklammer glatter Funktionen $f_{\mathcal{J}}$ ist im allgemeinen nicht möglich. Es gelingt aber eine Approximation durch eine Poissonklammer mit $f_{\mathcal{J}} \in C_0^1(D)$ im Sinne der $L^2(D)$ -Norm, die durch Lemma C.7 garantiert wird. Dieser mathematische „Trick“ erweist sich auch in der Adiabaten­theorie von Multiphasensystemen als sehr nützlich [N76, GKM89].

Teil III:

Es wird im folgenden ein autonomes Slow-Fast-System betrachtet, das wie in Abschnitt 4.2 definiert ist. Die Bewegungsgleichungen lauten

$$\frac{dP}{d\tau} = -\frac{\partial H_1}{\partial Q}(P, Q) - \frac{\partial H_2}{\partial Q}(p, q, Q), \quad \frac{dQ}{d\tau} = \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q), \quad (\text{C.8})$$

$$\frac{dp}{d\tau} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_2}{\partial q}(p, q, Q), \quad \frac{dq}{d\tau} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_2}{\partial p}(p, q, Q), \quad (\text{C.9})$$

und werden auf dem Phasenraum D betrachtet, wobei $H_1 \in C^2(\bar{G})$, und $H_2(p, q, Q) \in C^2(\mathcal{M}_p^n \times \mathcal{M}_q^n \times \mathcal{M}_Q^k)$ Eigenschaften wie in Teil I besitzt. Die Zeit wurde gemäß $\tau = \varepsilon t$ (t echte Zeit) um den adiabatischen Kleinheitsparameter ε umskaliert, und die Trennung der Zeitskalen künstlich vorgegeben.

Der Kürze halber werden die Elemente von $G = \mathcal{M}_P^k \times \mathcal{M}_Q^k$ mit $J := (P, Q)$ und die Hamiltonschen Vektorfelder der langsamen Freiheitsgrade mit $v: \bar{D} \rightarrow T(G)$ bezeichnet. Es ist dann

$$v(P, Q, p, q) := \begin{bmatrix} -\frac{\partial H_1}{\partial Q}(P, Q) - \frac{\partial H_2}{\partial Q}(p, q, Q) \\ \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q) \end{bmatrix}, \quad (\text{C.10})$$

wobei das Vektorfeld der langsamen Orte Q *nicht* von den schnellen (p, q) abhängt.

Wählt man Anfangswerte $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D$, so gibt es eine eindeutige Lösung von (C.8, C.9) in D , die durch den Anfangswert $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D$ bei $\tau = \tau^{(0)} \in [a, b]$ geht. Diese wird so weit wie möglich in beide Richtungen von τ fortgesetzt bis maximal zu den betrachteten Zeitintervallgrenzen a und b . Die Bahn zum Anfangswert $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D$ und $\varepsilon > 0$ wird mit $J(\tau) = J(\tau, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \tau^{(0)}, \varepsilon)$, $p(\tau) = p(\tau, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \tau^{(0)}, \varepsilon)$, $q(\tau) = q(\tau, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \tau^{(0)}, \varepsilon)$ bezeichnet, und existiert entweder auf einem offenen, halboffenen oder geschlossenen Teilintervall von $[a, b]$.

Mittelt man die Bewegung der schnellen Freiheitsgrade über die Energieschale $S(\mathcal{J}, Q)$, so erhält man ein dynamisches System mit Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\bar{P}}{d\tau} = -\frac{\partial H_1}{\partial Q}(\bar{P}, \bar{Q}) - \frac{\partial \bar{H}_2}{\partial Q}(\bar{\mathcal{J}}, \bar{Q}), \quad \frac{d\bar{Q}}{d\tau} = \frac{\partial H_1}{\partial P}(\bar{P}, \bar{Q}) \quad (\text{C.11})$$

$$\frac{d\bar{\mathcal{J}}}{d\tau} = 0, \quad (\text{C.12})$$

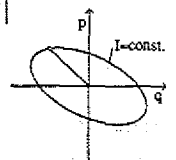
wobei (C.12) wegen (C.14) und Satz C.1 folgt. Dabei ist $\bar{\mathfrak{s}}(\mathcal{J}, J) := \int_{S_{\mathcal{J}, Q}} \mathfrak{s} dm_{\mathcal{J}, Q}$. Analog zu (C.10) werden die gemittelten Hamiltonschen Vektorfelder der langsamen Freiheitsgrade mit $\bar{v}$ abgekürzt:

$$\bar{v}(P, Q, \mathcal{J}) := \begin{bmatrix} -\frac{\partial H_1}{\partial Q}(P, Q) - \frac{\partial \bar{H}_2}{\partial Q}(\mathcal{J}, Q) \\ \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q) \end{bmatrix}$$

Da $\bar{D}$ kompakt ist, existiert eine obere Schranke M , so daß gilt:

$$\forall (J, p, q) \in D: \begin{cases} \left| \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial Q} \frac{\partial H_1}{\partial P} \right| < M, \quad |v| = \sum_{\mu=1}^{2k} |v^\mu| < \frac{M}{2}, \\ |\bar{v}| < \frac{M}{2}, \quad \left| \frac{\partial \bar{v}}{\partial \mathcal{J}} \right| + \sum_{\mu=1}^{2k} \left| \frac{\partial \bar{v}}{\partial J^\mu} \right| < M \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

Sei $G^\rho := \{J \in G \mid U(J, \rho) \subset G\}$ die Menge aller Punkte in G , die mindestens einen Abstand ρ vom Rand von G haben ($U(J, \rho)$ ist die Kugel der Manhattennorm $\sum_{\mu=1}^{2k} |\mathfrak{s}^\mu|$)



mit Mittelpunkt J und Radius ρ). Die Menge F sei gegeben durch $\{(J, \mathcal{J}) \in G \times (\mathcal{J}_1^*, \mathcal{J}_2^*)\}$ und $F^\rho := \{(J, \mathcal{J}) \in F | U(J, \rho) \subset G, \mathcal{J} \in (\mathcal{J}_1^* + \rho, \mathcal{J}_2^* - \rho)\}$. Sei ferner $F^{(0)}(a, b, \rho) := \{(J^{(0)}, \mathcal{J}^{(0)}) \in F | (\bar{J}(\tau, J^{(0)}, \mathcal{J}^{(0)}), \bar{\mathcal{J}}(\tau, J^{(0)}, \mathcal{J}^{(0)})) \in F^\rho, \tau \in [a, b]\}$ die Menge aller Anfangswerte $(J^{(0)}, \mathcal{J}^{(0)}) \in F$, so daß die gemittelte Bahn innerhalb von F^ρ verläuft $((\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) \in F^\rho$ für alle $\tau \in [a, b]$). Wegen der Stetigkeit des Hamiltonschen Flusses ist $F^{(0)}(a, b, \rho)$ offen. Analog wird definiert: $D^\rho := \{(J, p, q) \in D | (J, \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q)) \in F^\rho\}$ und $D^{(0)}(a, b, \rho) := \{(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D | (\bar{J}(\tau, J^{(0)}, \hat{\mathcal{J}}^{(0)}), \bar{\mathcal{J}}(\tau, J^{(0)}, \hat{\mathcal{J}}^{(0)})) \in F^\rho, t \in [a, b]\}$. Wegen der Stetigkeit des Flusses (C.11, C.12) ist die Menge $D^{(0)}(a, b, \rho)$ offen.

Mit diesen Voraussetzungen kann der folgende Satz (in Analogie zu Satz 3 [K61]) formuliert werden:

Satz C.3 Seien a' und b' zwei Zeiten, so daß $a \leq a' < b' \leq b$, $\rho \geq M(b' - a')$, $F^\rho \neq \emptyset$ und $F^{(0)}(a', b', \rho) \neq \emptyset$ erfüllt ist. Dann kann die Lösung mit den Anfangswerten $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D^{(0)}(a', b', \rho)$ in D für jedes $\varepsilon > 0$ auf das Zeitintervall $[a', b']$ ausgedehnt werden.

Beweis: Sei β die kleinste obere Schranke der Zeiten β' , für die eine Lösung $J(\tau), p(\tau), q(\tau)$ in D mit Anfangswerten $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D^{(0)}(a', b', \rho)$ und $\varepsilon > 0$ im Zeitintervall $a' \leq \tau \leq \beta' \leq b'$ existiert. Dann ist $a' < \beta \leq b'$ und die Lösung in D ist für $a' \leq \tau < \beta$ erklärt.

Da die Funktionen v , $\frac{\partial H_2}{\partial p}$ und $\frac{\partial H_2}{\partial q}$ auf dem Kompaktum $\bar{D}$ stetig sind, sind die Funktionen $J(\tau), p(\tau), q(\tau)$ für Anfangswerte in $D^{(0)}(a', b', \rho)$ gleichmäßig stetig auf dem Zeitintervall $a' \leq \tau < \beta$, so daß die Grenzwerte

$$\begin{aligned} J(\tau, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, a', \varepsilon) &\rightarrow J'(\tau \rightarrow \beta - 0) \\ p(\tau, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, a', \varepsilon) &\rightarrow p'(\tau \rightarrow \beta - 0) \\ q(\tau, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, a', \varepsilon) &\rightarrow q'(\tau \rightarrow \beta - 0) \end{aligned}$$

mit $(J', p', q') \in \bar{D}$ existieren.

Es ist nun für $\tau \in [a', \beta)$.

$$\begin{aligned} &\frac{d}{d\tau} \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q) \\ &= \frac{d}{d\tau} \mathcal{J}[H_2(p, q, Q), Q] \\ &= \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial E}[H_2(p, q, Q), Q] \frac{d}{d\tau} H_2(p, q, Q) + \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial Q}[H_2(p, q, Q), Q] \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q) \\ &= \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial E}[H_2(p, q, Q), Q] \frac{\partial H_2}{\partial Q}(p, q, Q) \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q) + \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial Q}[H_2(p, q, Q), Q] \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q) \\ &= \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q}(p, q, Q) \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q), \end{aligned} \tag{C.14}$$

da der Hamiltonian zu allen Zeiten mit sich selbst kommutiert und daher $\frac{d}{d\tau} H_2 = \frac{\partial H_2}{\partial Q} \frac{\partial H_1}{\partial P}$ gilt.

Wegen (C.13) gilt $(\mathcal{J}^{(0)} := \hat{\mathcal{J}}(p^{(0)}, q^{(0)}, Q^{(0)}))$

$$\begin{aligned} |J' - \bar{J}(\beta, J^{(0)}, \mathcal{J}^{(0)})| &= \left| \int_{a'}^{\beta} v(J(\tau), p(\tau), q(\tau)) - \bar{v}(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) d\tau \right| \\ &\leq \int_{a'}^{\beta} [|v(J(\tau), p(\tau), q(\tau))| + |\bar{v}(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau))|] d\tau \\ &\leq M(\beta - a') \leq M(b' - a') \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

$$\begin{aligned} |\mathcal{J}(p', q', Q') - \mathcal{J}^{(0)}| &= \left| \int_{a'}^{\beta} \frac{d}{d\tau} \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q) d\tau \right| \\ &\stackrel{(\text{C.14})}{=} \left| \int_{a'}^{\beta} \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q}(p, q, Q) \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q) d\tau \right| \\ &\leq M(\beta - a') \leq M(b' - a') \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

$$(\text{C.17})$$

Da die gemittelte Bahn in F^ρ liegt und die Lösung von (C.8, C.9) in einer ρ -Umgebung um die gemittelte Bahn liegt, liegt die Lösung nach Definition von F^ρ für alle $t \in [a', \beta]$ in D . Somit existiert die Lösung von (C.8, C.9) auf dem geschlossenen Intervall $a' \leq \tau \leq \beta$.

Falls $a' < \beta < b'$, so kann die Lösung in D für Zeiten $\tau > \beta$ fortgesetzt werden, was der Definition von β widerspricht. Daher muß $\beta = b'$ sein, und es folgt die Behauptung. $\square$

$a \leq a' < b' \leq b$, $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D$ und $\varepsilon > 0$ vorausgesetzt, definiert man die maximale Abweichung der gemittelten von der ursprünglichen Bahn im Zeitintervall $[a', b']$ gemäß

$$\begin{aligned} \Delta_J(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) &:= \max_{a' \leq \tau \leq b'} |J(\tau) - \bar{J}(\tau)| \\ \Delta_{\mathcal{J}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) &:= \max_{a' \leq \tau \leq b'} |\mathcal{J}(\tau) - \hat{\mathcal{J}}(p^{(0)}, q^{(0)}, Q^{(0)})|, \end{aligned}$$

falls die Bahn in D bis b' fortgesetzt werden kann. Anderenfalls setzt man

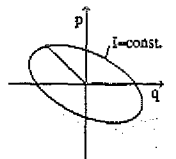
$$\begin{aligned} \Delta_J(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) &:= \infty \\ \Delta_{\mathcal{J}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) &:= \infty. \end{aligned}$$

Die Menge

$$\begin{aligned} L(a', b', \varepsilon, \delta) &= \left\{ (J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D \mid \Delta_J(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) \right. \\ &\quad \left. + \Delta_{\mathcal{J}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) < \delta \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

enthält alle die Startwerte in D , für die $\Delta_J + \Delta_{\mathcal{J}}$ kleiner als eine vorgegebene kleine Zahl $\delta > 0$ ist. $L(a', b', \varepsilon, \delta)$ ist eine offene Menge im $\mathbb{R}^{2n+2k}$, da die Bahnen $J(\tau)$, $p(\tau)$, $q(\tau)$ stetig in D sind.

Das folgende Lemma ist ein Adiabatentheorem für Anfangswerte in $D^{(0)}(a', b', \rho)$ im Zeitintervall $[a', b'] \subset [a, b]$. Die Erweiterung auf das ganze Zeitintervall $[a, b]$ und auf Anfangswerte in $D^{(0)}(a, b, \rho \rightarrow 0)$ wird in Satz C.4, dem eigentlichen Adiabatentheorem, durchgeführt.



Lemma C.8 Seien a' , b' und ρ wie in Satz C.3 definiert. Dann gilt:

$$\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \Delta_J(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) + \Delta_{\mathcal{J}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Ferner verschwindet für jedes feste $\delta > 0$ das Lebesguemaß der Menge $D^{(0)}(a', b', \rho) - L(a', b', \varepsilon, \delta)$ mit $\varepsilon \rightarrow 0$, d. h.

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a', b', \rho) - L(a', b', \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

Beweis: Nach Satz C.3 kann die in $D^{(0)}(a', b', \rho)$ startende Bahn bis $t = b'$ fortgesetzt werden. Die Differenz des gemittelten und des ursprünglichen langsamen Vektorfeldes wird wie folgt bezeichnet:

$$v_{\Delta J}(J, p, q) := v(J, p, q) - \bar{v}(J),$$

so daß per Konstruktion gilt

$$\int_{S(\mathcal{J}, Q)} v_{\Delta J} dm_{\mathcal{J}, Q} = 0.$$

Sei nun $\lambda > 0$. Dann existieren nach Lemma C.7 Funktionen $f^\mu(J, p, q) \in C_0^1(D)$, $f^0(J, p, q) \in C_0^1(D)$ (D offen), so daß für alle $\mu = 1, \dots, 2k$ gilt:

$$\left(\int_D \left| \{H_2, f^0\} - \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial J} \frac{\partial H_1}{\partial P} \right|^2 dp dq dJ \right)^{\frac{1}{2}} < \frac{\lambda \exp \{-M(b' - a')\}}{2\sqrt{\mu_{(2n+2k)}(D)(b' - a')(2k+1)}}, \quad (\text{C.19})$$

$$\left(\int_D |\{H_2, f^\mu\} - v_{\Delta J}^\mu|^2 dp dq dJ \right)^{\frac{1}{2}} < \frac{\lambda \exp \{-M(b' - a')\}}{2\sqrt{\mu_{(2n+2k)}(D)(b' - a')(2k+1)}}. \quad (\text{C.20})$$

Dabei ist $\mu_{(2n+2k)}$ das Lebesguemaß des $\mathbb{R}^{2n+2k}$. Definiert man $g^\mu := v_{\Delta J}^\mu - \{H_2, f^\mu\}$ und $g^0 := \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial J} v - \{H_2, f^0\}$ auf D , dann ist vermöge der Hölderschen Ungleichung [CdWD91]⁴

$$\int_D |g^\mu(p, q, J)| dp dq dJ < \frac{\lambda \exp \{-M(b' - a')\}}{2(b' - a')(2k+1)} \quad (\text{C.21})$$

für $\mu = 0, \dots, 2k$.

Nach (C.14) folgt

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^0(\tau') &:= |\hat{\mathcal{J}}(p(\tau'), q(\tau'), Q(\tau')) - \hat{\mathcal{J}}(p^{(0)}, q^{(0)}, Q^{(0)})| \\ &= \left| \int_{a'}^{\tau'} \frac{d}{d\tau} \hat{\mathcal{J}}(p, q, Q) d\tau \right| = \left| \int_{a'}^{\tau'} \frac{\partial \hat{\mathcal{J}}}{\partial Q}(p, q, Q) \frac{\partial H_1}{\partial P}(P, Q) d\tau \right| \\ &\leq \left| \int_{a'}^{\tau'} g^0(J, p, q) d\tau \right| + \left| \int_{a'}^{\tau'} \{H_2, f^0\}(J, p, q) d\tau \right|, \end{aligned}$$

⁴T. KAZUGA gibt hier als Argument für die Gültigkeit von (C.21) den Satz von Cauchy-Schwarz an, der jedoch in diesem Fall zu schwach ist. Aus der Hölderschen Ungleichung

$$\|fg\|_1 \leq \|f\|_2 \|g\|_2$$

folgt zwar die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung

$$|\langle f|g \rangle|^2 \leq \langle f|f \rangle \langle g|g \rangle,$$

da $|\langle f|g \rangle| = \left| \int fg d\mu \right| \leq \int |fg| d\mu = \|fg\|_1$ aber nicht umgekehrt.

und somit

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathcal{J}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) \\ \leq \int_{a'}^{b'} |g^0(J, p, q)| d\tau + \max_{a' \leq \tau' \leq b'} \left| \int_{a'}^{\tau'} \{H_2, f^0\}(J, p, q) d\tau \right|, \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

da das erste Integral als Funktion der oberen Grenze monoton steigend ist. Analog dazu ist ($\mu = 1, \dots, 2k$)

$$\begin{aligned} |J^\mu(\tau') - \bar{J}^\mu(\tau')| &= \left| \int_{a'}^{\tau'} v^\mu(J(\tau), p(\tau), q(\tau)) - \bar{v}^\mu(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) d\tau \right| \\ &\leq \left| \int_{a'}^{\tau'} \bar{v}^\mu(J(\tau), \mathcal{J}(\tau)) - \bar{v}^\mu(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) d\tau \right| \\ &\quad + \left| \int_{a'}^{\tau'} v_{\Delta J}^\mu(J(\tau), p(\tau), q(\tau)) d\tau \right| \\ &\leq \left| \int_{a'}^{\tau'} \bar{v}^\mu(J(\tau), \mathcal{J}(\tau)) - \bar{v}^\mu(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) d\tau \right| \\ &\quad + \int_{a'}^{\tau'} |g^\mu(J(\tau), p(\tau), q(\tau))| d\tau \\ &\quad + \left| \int_{a'}^{\tau'} \{H_2, f^\mu\}(J(\tau), p(\tau), q(\tau)) d\tau \right| \\ &=: \left| \int_{a'}^{\tau'} \bar{v}^\mu(J(\tau), \mathcal{J}(\tau)) - \bar{v}^\mu(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) d\tau \right| + \mathcal{R}^\mu(\tau'), \end{aligned}$$

wobei die letzte Gleichheit als Definitionsgleichung für $\mathcal{R}^\mu(\tau')$ zu lesen ist. Daher gilt für Δ_J

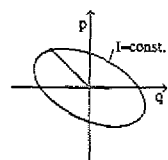
$$\begin{aligned} \Delta_J(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) &\leq \max_{a' \leq \tau' \leq b'} \sum_{\mu=1}^{2k} \left| \int_{a'}^{\tau'} \bar{v}^\mu(J(\tau), \mathcal{J}(\tau)) - \bar{v}^\mu(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) d\tau \right| \\ &\quad + \max_{a' \leq \tau' \leq b'} \sum_{\mu=1}^{2k} \mathcal{R}^\mu(\tau'). \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

Da (C.8, C.9) maßerhaltend ist, ist für alle festen $\varepsilon > 0$ und alle festen Zeiten $\tau \in [a', b']$ die Abbildung

$$\begin{aligned} D^{(0)}(a', b', \rho) &\mapsto V(\tau, \varepsilon) \subset D \\ (J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) &\rightarrow [J(\tau), p(\tau), q(\tau)] \end{aligned}$$

maßerhaltend, wobei die offene Menge $V(\tau, \varepsilon)$ das Bild von $D^{(0)}(a', b', \rho)$ unter (C.8, C.9) ist. Daher ist für alle $\mu = 0, \dots, 2k$

$$\begin{aligned} \int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \left(\int_{a'}^{b'} |g^\mu(J, p, q)| d\tau \right) dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\ = \int_{a'}^{b'} \left(\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} |g^\mu(J, p, q)| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \right) d\tau \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= \int_{a'}^{b'} \left(\int_{V(\tau, \varepsilon)} |g^\mu(J, p, q)| dp dq dJ \right) d\tau \\
&\leq \int_{a'}^{b'} d\tau \int_D |g^\mu(J, p, q)| dp dq dJ, \\
&\leq (b' - a') \int_D |g^\mu(J, p, q)| dp dq dJ,
\end{aligned} \tag{C.24}$$

da $V(\tau, \varepsilon) \subset D$.

Das Zeitverhalten einer Observablen f des Systems (C.8, C.9) entlang einer Bahn, ist gegeben gemäß

$$\varepsilon \frac{d}{d\tau} f(J, p, q) = \{f, H_2\}(J, p, q) + \varepsilon \frac{\partial f}{\partial J}(J, p, q) v(J, p, q)$$

so daß

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{a'}^{\tau'} \{H_2, f\}(J, p, q) d\tau \right| \\
&\leq \varepsilon \left| \int_{a'}^{\tau'} \frac{\partial f}{\partial J}(J, p, q) v(J, p, q) d\tau \right| + \varepsilon \left| \int_{a'}^{\tau'} \frac{d}{d\tau} f(J, p, q) d\tau \right| \\
&\leq \varepsilon \left| \int_{a'}^{\tau'} \frac{\partial f}{\partial J}(J, p, q) v(J, p, q) d\tau \right| \\
&\quad + \varepsilon |f(J(\tau'), p(\tau'), q(\tau')) - f(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)})|
\end{aligned}$$

Da $f \in C_0^1(D)$ und v nach (C.13) beschränkt ist, existiert eine obere Schranke M' für die Beträge $|f|$ und $|(\partial f / \partial J)v|$, so daß

$$\max_{a' \leq \tau' \leq b'} \left| \int_{a'}^{\tau'} \{H_2, f\}(J, p, q) d\tau \right| \leq \varepsilon((b' - a') + 2)M' \tag{C.25}$$

Bilde jetzt

$$\begin{aligned}
&\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} |J(\tau') - \bar{J}(\tau')| + |\mathcal{J}(\tau') - \mathcal{J}^{(0)}| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\
&\leq \sum_{\mu=1}^{2k} \int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \left| \int_{a'}^{\tau'} \bar{v}^\mu(J(\tau), \mathcal{J}(\tau)) - \bar{v}^\mu(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau)) d\tau \right| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\
&\quad + \sum_{\mu=0}^{2k} \int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \mathcal{R}^\mu(\tau') dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)}.
\end{aligned} \tag{C.26}$$

Das Integral über $\mathcal{R}^\mu(\tau')$ kann für alle $\mu = 0, \dots, 2k$ mit Hilfe von (C.24) und (C.25) abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned}
&\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \mathcal{R}^\mu(\tau') dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\
&\leq \int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \left(\int_{a'}^{\tau'} |g^\mu(J, p, q)| d\tau \right) dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\
&\quad + \int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \left| \int_{a'}^{\tau'} \{H_2, f^\mu\}(J, p, q) d\tau \right| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq (b' - a') \frac{\lambda \exp \{-M(b' - a')\}}{2(2k+1)(b' - a')} \\
&\quad + \varepsilon [(b' - a') + 2] M' \mu [D^{(0)}(a', b', \rho)] \\
&\leq \frac{\lambda \exp \{-M(b' - a')\}}{2(2k+1)} + \frac{\lambda \exp \{-M(b' - a')\}}{2(2k+1)} \\
&\leq \frac{\lambda \exp \{-M(b' - a')\}}{(2k+1)},
\end{aligned}$$

für $\varepsilon \leq \lambda \exp \{-M(b' - a')\} / \{2(2k+1)[(b' - a') + 2] M' \mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a', b', \rho)]\}$. Damit kann (C.26) gemäß

$$\begin{aligned}
&\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} |J(\tau') - \bar{J}(\tau')| + |\mathcal{J}(\tau') - \mathcal{J}^{(0)}| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\
&\leq M \int_{a'}^{\tau'} \left(\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} |J(\tau) - \bar{J}(\tau)| + |\mathcal{J}(\tau) - \mathcal{J}^{(0)}| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \right) d\tau \\
&\quad + \lambda \exp \{-M(b' - a')\}
\end{aligned}$$

abgeschätzt werden. Dabei wurde der Term $\bar{v}^\mu(J(\tau), \mathcal{J}(\tau)) - \bar{v}^\mu(\bar{J}(\tau), \bar{\mathcal{J}}(\tau))$ durch $M [|J(\tau) - J^{(0)}| + |\mathcal{J}(\tau) - \mathcal{J}^{(0)}|]$ abgeschätzt. Wegen konstantem $\lambda > 0$ kann das Gronwall'sche Lemma⁵ verwendet werden [GKM89, AMR88], sodaß

$$\begin{aligned}
&\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} |J(\tau') - \bar{J}(\tau')| + |\mathcal{J}(\tau') - \mathcal{J}^{(0)}| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\
&\leq \lambda \exp \{-M(b' - a')\} \exp \{M(b' - a')\} \leq \lambda
\end{aligned} \tag{C.27}$$

für alle $\tau' \in [a', b']$ gilt. Damit verschwindet $\Delta_{\mathcal{J}} + \Delta_J$ im Mittel über alle Anfangswerte in $D^{(0)}(a', b', \rho)$ für $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \Delta_J(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) + \Delta_{\mathcal{J}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0,$$

so daß unmittelbar die Behauptung von Lemma C.8 folgt. $\square$

Mit diesen Vorbereitungen ist es mit Hilfe eines „bootstrap“-Argumentes möglich, das Adiabatentheorem für Slow-Fast-Systeme mit ergodischen schnellen Freiheitsgraden zu beweisen.

⁵Das Gronwall'sche Lemma lautet:

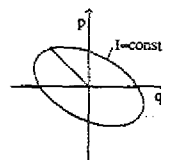
Lemma C.9 (Gronwall'sches Lemma [AMR88]) Seien $f, g : [a, b] \mapsto \mathbb{R}$ stetige nichtnegative Funktionen, $A \geq 0$ konstant, und

$$f(t) \leq A + \int_a^t f(t') g(t') dt'$$

sei für alle $t \in [a, b]$ erfüllt. Dann gilt:

$$f(t) \leq A \exp \left\{ \int_a^t g(t') dt' \right\}$$

für alle $t \in [a, b]$.



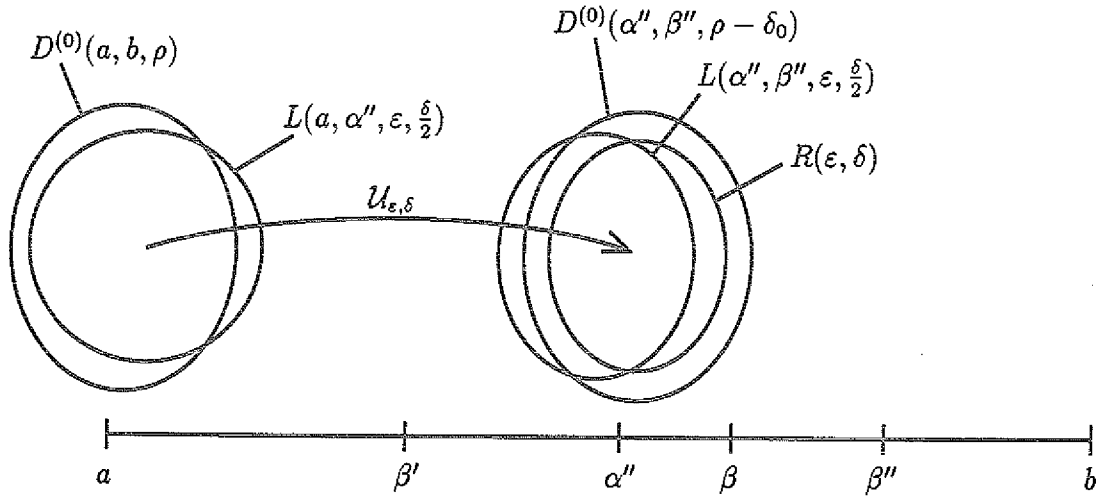


Abbildung C.1: „Bootstrap“-Argument.

Satz C.4 (Adiabatentheorem für autonome Slow-Fast-Systeme)

Unter den in Teil I, II und III gemachten Voraussetzungen gilt

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho) - L(a, b, \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (\text{C.28})$$

für alle $\rho > 0$ und $\delta > 0$.

Beweis: Sei $\rho > 0$ fest. Dann ist nach Lemma C.8 für ein geeignet nahe an a gewähltes β' ($a < \beta' \leq b$)

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho) - L(a, \beta', \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (\text{C.29})$$

für alle $\delta > 0$. Sei β die kleinste obere Schranke von β' , so daß (C.29) erfüllt ist für alle $\delta > 0$ und $a < \beta' < \beta$. Ferner sei $\delta_0 > 0$ fest, so daß $\rho - \delta_0 > 0$. Falls $a < \alpha'' < \beta < \beta'' \leq b$ mit $\beta'' - \alpha''$ genügend klein, so daß Lemma C.8 erfüllt ist, folgt

$$\mu_{(2n+2k)} \left[D^{(0)}(\alpha'', \beta'', \rho - \delta_0) - L\left(\alpha'', \beta'', \varepsilon, \frac{\delta}{2}\right) \right] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (\text{C.30})$$

für alle $\delta > 0$. Nach Def. von β gibt es ein beliebig nahe an β liegendes α'' , so daß $a < \alpha'' < \beta$ und

$$\mu_{(2n+2k)} \left[D^{(0)}(a, b, \rho) - L\left(a, \alpha'', \varepsilon, \frac{\delta}{2}\right) \right] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (\text{C.31})$$

für alle $\delta > 0$. Daher kann für alle $\beta < \beta'' \leq b$ und $\beta'' - \beta$ genügend klein ein α'' mit $a < \alpha'' < \beta$ gefunden werden, so daß (C.30) und (C.31) für alle $\delta > 0$ erfüllt sind. Im folgenden seien α'' und β'' wie oben gegeben. Die an der „bootstrap“-Konstruktion beteiligten Teilmengen des Phasenraums D sind in Abbildung C.1 schematisch dargestellt.

Die Bahnen für Anfangswerte $(J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in L(a, \alpha'', \varepsilon, \frac{\delta}{2})$ können nach Def. von L (siehe Seite 121) in D bis zum Zeitpunkt $\tau = \alpha''$ fortgesetzt werden. Die Abbildung

von $L(a, \alpha'', \varepsilon, \frac{\delta}{2})$ nach D vermittelt durch den Hamiltonschen Fluß, werde mit Φ bezeichnet. Ferner $R(\varepsilon, \delta) := \Phi[D^{(0)}(a, b, \rho) \cap L(a, \alpha'', \varepsilon, \frac{\delta}{2})]$. Dann ist, nach Definition von $L(a, \alpha'', \varepsilon, \frac{\delta}{2})$, für $0 < \delta < \delta_0$, $\varepsilon > 0$

$$R(\varepsilon, \delta) \subset D^{\rho - \frac{\delta_0}{2}} \subset D^{(0)}(\alpha'', \beta'', \rho - \delta_0). \quad (C.32)$$

Die letzte Inklusion gilt zum Beispiel, wenn $M(\beta'' - \alpha'') < \frac{\delta_0}{2}$, wobei die grobe Abschätzung (C.15, C.16) von Seite 121 benutzt wurde. Da die Hamiltonsche Abbildung $\mathcal{U}_{\varepsilon, \delta}$ maßerhaltend ist, ist für $\delta > 0$, $\varepsilon > 0$

$$\mu_{(2n+2k)}[R(\varepsilon, \delta)] = \mu_{(2n+2k)} \left[D^{(0)}(a, b, \rho) \cap L \left(a, \alpha'', \varepsilon, \frac{\delta}{2} \right) \right]. \quad (C.33)$$

Wegen (C.31) und (C.33), gilt für alle $\delta > 0$

$$\mu_{(2n+2k)}[R(\varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho)]. \quad (C.34)$$

Wegen (C.34), (C.30) und (C.32) folgt für alle $0 < \delta < \delta_0$

$$\mu_{(2n+2k)} \left[R(\varepsilon, \delta) \cap L \left(\alpha'', \beta'', \varepsilon, \frac{\delta}{2} \right) \right] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho)].$$

Da die Umkehrung der Hamiltonschen Abbildung ebenfalls maßerhaltend ist, gilt für $0 < \delta < \delta_0$,

$$\mu_{(2n+2k)} \left\{ \mathcal{U}_{\varepsilon, \delta}^{-1} \left[R(\varepsilon, \delta) \cap L \left(\alpha'', \beta'', \varepsilon, \frac{\delta}{2} \right) \right] \right\} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho)],$$

so daß

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho) \cap L(a, \beta'', \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho)],$$

da $D^{(0)}(a, b, \rho) \cap L(a, \beta'', \varepsilon, \delta) \supset \mathcal{U}_{\varepsilon, \delta}^{-1}[R(\varepsilon, \delta) \cap L(\alpha'', \beta'', \varepsilon, \frac{\delta}{2})]$ nach Def. von L und R .

Somit ist

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho) - L(a, \beta'', \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

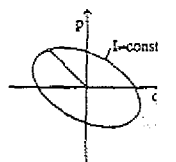
für alle $0 < \delta < \delta_0$ und somit für alle $\delta > 0$, da $L(a, \beta'', \varepsilon, \delta_1) \subset L(a, \beta'', \varepsilon, \delta_2)$ falls $\delta_1 < \delta_2$.

Wenn jetzt aber $\beta < b$ ist, dann existiert nach obigem β'' mit $\beta < \beta'' \leq b$. Dies jedoch widerspricht der Definition von β , so daß $\beta = b$ gelten muß. $\square$

C.2 Mittelungssatz für Observable

Mit Satz C.4 ist gewährleistet, daß ein Slow-Fast-System, das die Voraussetzungen dieses Satzes erfüllt, im adiabatischen Limes das Phasenraumvolumen $\mathcal{J}$ erhält, und daß sich die langsamen Freiheitsgrade nach gemittelten Bewegungsgleichungen entwickeln.

Eine wichtige Erweiterung von Satz C.4 ist der folgende Satz, der es erlaubt, Zeitmittelwerte glatter Phasenraumfunktionen im adiabatischen Limes durch das Zeitmittel des gemittelten Systems zu ersetzen.



Sei $\mathcal{A}(J, p, q) \in C^1(\bar{D})$ und

$$\begin{aligned} A(\tau) &:= \int_a^b \mathcal{A}(J(\tau'), p(\tau'), q(\tau')) d\tau' \\ \bar{A}(\tau) &:= \int_a^b \langle \mathcal{A} \rangle(\bar{J}(\tau'), \bar{\mathcal{J}}(\tau')) d\tau', \end{aligned}$$

wobei $\langle \cdot \rangle := \int_{S(\mathcal{J}, Q)} \cdot dm_{\mathcal{J}, Q}$ ist. Dann wird die maximale Differenz dieser beiden Größen auf dem Zeitintervall $[a, b]$ mit

$$\hat{\Delta}_{\mathcal{A}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) := \max_{a \leq \tau \leq b} |A(\tau) - \bar{A}(\tau)| \quad (\text{C.35})$$

bezeichnet. Die Menge der Startwerte, für die $\hat{\Delta}_{\mathcal{A}} + \Delta_J + \Delta_{\mathcal{J}} \leq \delta$, ist

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\mathcal{A}}(a, b, \varepsilon, \delta) &:= \{ (J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}) \in D \mid \hat{\Delta}_{\mathcal{A}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) \\ &\quad \Delta_J(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) + \Delta_{\mathcal{J}}(a, b, J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) < \delta \}. \end{aligned}$$

Analog zu Lemma C.8 kann zunächst das folgende Lemma formuliert werden:

Lemma C.10 Seien a' , b' und ρ wie in Lemma C.8 definiert. Dann gilt:

$$\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \hat{\Delta}_{\mathcal{A}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (\text{C.36})$$

Ferner verschwindet für jedes feste $\delta > 0$ das Lebesguemaß der Menge $D^{(0)}(a', b', \rho) - \hat{L}(a', b', \varepsilon, \delta)$ mit $\varepsilon \rightarrow 0$, d. h.

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a', b', \rho) - \hat{L}(a', b', \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (\text{C.37})$$

Beweis: Es ist

$$\begin{aligned} A(\tau) - \bar{A}(\tau) &= \int_{a'}^{\tau} [\mathcal{A}(J, p, q) - \langle \mathcal{A} \rangle(\bar{J}, \bar{\mathcal{J}})] d\tau' \\ &= \int_{a'}^{\tau} [\mathcal{A}(J, p, q) - \langle \mathcal{A} \rangle(J, p, q)] d\tau' \\ &\quad + \int_{a'}^{\tau} [\langle \mathcal{A} \rangle(J, p, q) - \langle \mathcal{A} \rangle(\bar{J}, \bar{\mathcal{J}})] d\tau', \end{aligned}$$

so daß

$$\begin{aligned} |A(\tau) - \bar{A}(\tau)| &\leq \left| \int_{a'}^{\tau} \mathcal{A}_{\Delta}(J, p, q) d\tau' \right| \\ &\quad + \left| \int_{a'}^{\tau} [\langle \mathcal{A} \rangle(J, p, q) - \langle \mathcal{A} \rangle(\bar{J}, \bar{\mathcal{J}})] d\tau' \right|, \end{aligned}$$

mit $\mathcal{A}_{\Delta} := \mathcal{A} - \langle \mathcal{A} \rangle$. Sei $\lambda > 0$. Dann existiert nach Lemma C.7 eine Funktion $f_{\mathcal{A}} \in C_0^1(D)$, so daß

$$\left(\int_D |\{H, f_{\mathcal{A}}\} - \mathcal{A}_{\Delta}|^2 dp dq dJ \right)^{\frac{1}{2}} < \frac{\lambda}{3\sqrt{\mu_{(2n+2k)}(D)(b' - a')}}. \quad (\text{C.38})$$

Mit $g_A := \mathcal{A}_\Delta - \{H, f_A\}$ auf D gilt dann

$$\int_D |g_A(J, p, q)| dp dq dJ < \frac{\lambda}{3(b' - a')} \quad (C.39)$$

Somit ist

$$\begin{aligned} |A(\tau) - \bar{A}(\tau)| &\leq \int_{a'}^{b'} |g_A(J, p, q)| d\tau' + \left| \int_{a'}^{\tau} \{H, f_A\}(J, p, q) d\tau' \right| \\ &\quad + \left| \int_{a'}^{\tau} [\langle \mathcal{A} \rangle(J, p, q) - \langle \mathcal{A} \rangle(\bar{J}, \bar{\mathcal{J}})] d\tau' \right| \end{aligned}$$

Da $f_A \in C_0^1(D)$ und $\langle \mathcal{A} \rangle \in C^1(\bar{D})$, existiert eine obere Schranke M' für die Beträge $|f|$, $|(\partial f / \partial J)v|$ und $|\partial \langle \mathcal{A} \rangle / \partial I| + |\partial \langle \mathcal{A} \rangle / \partial \mathcal{J}|$. Das Integral über die zulässigen Anfangswerte ergibt:

$$\begin{aligned} &\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} |A(\tau) - \bar{A}(\tau)| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \\ &\leq (b' - a') \frac{\lambda}{3(b' - a')} + \varepsilon [(b' - a') + 2] M' \mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a', b', \rho)] \\ &\quad + M' \left\{ \int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} [|J(\tau') - \bar{J}(\tau')| + |\mathcal{J}(\tau') - \mathcal{J}^{(0)}|] dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \right\}, \end{aligned}$$

wobei mit $\varepsilon \leq \lambda / \{3 [(b' - a') + 2] M' \mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a', b', \rho)]\}$ und

$$\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} [|J(\tau') - \bar{J}(\tau')| + |\mathcal{J}(\tau') - \mathcal{J}^{(0)}|] dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \leq \frac{\lambda}{3(M' + 1)}, \quad (\tau' \in [a', b']) \quad (C.40)$$

(nach (C.27) für genügend kleines ε) für alle $\tau \in [a', b']$ folgt:

$$\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} |A(\tau) - \bar{A}(\tau)| dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \leq \frac{\lambda}{3} + \frac{\lambda}{3} + \frac{\lambda M'}{3(M' + 1)}. \quad (C.41)$$

Somit folgt unmittelbar der erste Teil der Behauptung

$$\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \hat{\Delta}_{\mathcal{A}}(a', b', J^{(0)}, p^{(0)}, q^{(0)}, \varepsilon) dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \leq \lambda, \quad (C.42)$$

da $M' > 0$ gilt. Der zweite folgt mit (C.40) und (C.41), und es ist

$$\int_{D^{(0)}(a', b', \rho)} \hat{\Delta}_{\mathcal{A}} + \Delta_J + \Delta_{\mathcal{J}} dp^{(0)} dq^{(0)} dJ^{(0)} \leq \lambda, \quad (C.43)$$

□

Satz C.5 (Mittelung von Observablen in ergodischen Slow-Fast-Systemen)

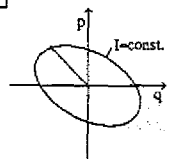
Unter in Abschnitt C.1 gemachten Voraussetzungen gilt

$$\mu_{(2n+2k)}[D^{(0)}(a, b, \rho) - \hat{L}_{\mathcal{A}}(a, b, \varepsilon, \delta)] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad (C.44)$$

für alle $\rho > 0$ und alle $\delta > 0$.

Beweis: Wird analog zum Beweis von Satz C.4 geführt.

□



Es sei $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum, H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

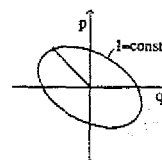
Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Sei H_0 ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H}$ und V ein symmetrischer Operator in $\mathcal{H}$ mit $D(V) \subset D(H_0)$. Dann ist $H_0 + V$ selbstadjungiert, falls V relativ H_0 -kompakt ist.

Literaturverzeichnis

- [AMR88] ABRAHAM, R., MARSDEN, J. E., RATIU, T., *Manifolds, Tensor Analysis, and Applications* (Springer, New York, 1988)
- [AA87] AHARONOV, Y., ANANDAN, J., Phys. Rev. Lett. **57**, 1593-6 (1987)
- [AB59] AHARONOV, Y., BOHM, D., Phys. Rev. **115**, 485-91 (1959)
- [A80] ARNOLD, V. I., *Mathematical Methods in Classical Mechanics* (Springer, New York, 1980)
- [AA89] ARNOLD, V. I., AVEZ, A., *Ergodic Problems of Classical Mechanics* (Addison-Wesley, Redwood City, 1989)
- [B58] BAKER, G. A. JR., Phys. Rev. **109**, 2198-206 (1958)
- [B84] BERRY, M. V., Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 45-57 (1984)
- [B85] BERRY, M. V., J. Phys. A: Math. Gen. **18**, 15-27 (1985)
- [B87] BERRY, M. V., J. Mod. Optics **37**, 1401-7 (1987)
- [B89] BERRY, M. V., *The quantum phase, five years after*, in: [SW89]
- [BH88] BERRY, M. V., HANNAY, J. H., J. Phys. A: Math. Gen. **21**, L325-L331 (1988)
- [BR93a] BERRY, M. V., ROBBINS, J. M., Proc. Roy. Soc. Lond. A-Math. Phys. Sci. **442**, 641-58 (1993)
- [BR93b] BERRY, M. V., ROBBINS, J. M., Proc. Roy. Soc. Lond. A-Math. Phys. Sci. **442**, 659-72 (1993)
- [BD87] BITTER, T., DUBBERS, D., Phys. Rev. Lett. **59**, 251-4 (1987)
- [B26] BORN, M., Zeitschr. f. Phys. **40**, 167-92 (1926)
- [BF28] BORN, M., FOCK, V., Zeitschr. f. Phys. **51**, 165-80 (1928)
- [BO27] BORN, M., OPPENHEIMER, R., Ann. Phys. (Leipzig) **84**, 457-84 (1927)
- [CdWD91] CHOQUET-BRUHAT, Y., DE WITT-MORETTE, C., DILLARD-BLEICK, M., *Analysis, Manifolds and Physics; Part. 1: Basics* (North Holland, Amsterdam, 1991)



- [DGWZ86] DELACRÉTAZ, G., GRANT, E. R., WHETTEN, R. L., WÖSTE, L., ZWANZIGER, J. W., Phys. Rev. Lett. **56**, 2598-601 (1986)
- [F28] FOCK, V., Zeitschr. f. Phys. **49**, 323-38 (1928)
- [G80] GOLDSTEIN, H., *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, 1980)
- [GKM89] GOLIN, S., KNAUF, A., MARMI, S., Commun. Math. Phys. **123**, 95-122 (1989)
- [GT87] GOZZI, E., THACKER, W. D., Phys. Rev. D **35**, 2398-406 (1987)
- [G46] GROENEWOLD, H. J., Physica **12**, 405-60 (1946)
- [H85] HANNAY, J. H., J. Phys. A: Math. Gen. **18**, 221-30 (1985)
- [HL63] HERZBERG, G., LONGUET-HIGGINS, H. C., Discuss. Faraday Soc. **35**, 77-82 (1963)
- [K50] KATO, T., J. Phys. Soc. Jap. **5**, 435 (1950)
- [K61] KAZUGA, T., Proc. Jpn. Acad. Tokyo **37**, 366-82 (1961)
- [K58] KELLER, J. B., Ann. Phys. **4**, 180-8 (1958)
- [K90] KOILLER, J., J. Phys. A: Math. Gen. **23**, L521-L527 (1990)
- [LM88] LOCHAK, P., MEUNIER, C., *Multiphase Averaging for Classical Systems: With Applications to Adiabatic Theorems* (Springer, New York, 1988)
- [M81a] MADELUNG, O., *Introduction to Solid-State Theory* (Springer, Berlin, 1981)
- [MM74] MARKUS, L., MEYER, K. R., Mem. Am. Math. Soc. **144**, 1-52 (1974)
- [M88a] MAYER, D., *Der thermodynamische Formalismus in der Theorie der dynamischen Systeme*, Vorlesungsskript RWTH Aachen (1988)
- [M80a] MEAD, C. A., Chem. Phys. **49**, 23-32 (1980)
- [M80b] MEAD, C. A., Chem. Phys. **49**, 33-8 (1980)
- [MT79] MEAD, C. A., TRUHLAR, D. G., J. Chem. Phys. **70**, 2284-96 (1979)
- [M81b] MESSIAH, A., *Quantenmechanik* Bd. 1 (de Gruyter, Berlin, 1981)
- [M85] MESSIAH, A., *Quantenmechanik* Bd. 2 (de Gruyter, Berlin, 1985)
- [M88b] MONTGOMERY, R., Commun. Math. Phys. **120**, 269-94 (1988)
- [M49] MOYAL, J. E., Proc. Camb. Phil. Soc. **45**, 99-124 (1949)
- [N76] NEISHTADT, A. I., Sov. Phys. Dokl. **21**, 80-2 (1976)

- [P75] PANCHARATNAM, S., *Generalized Theory of Interference, and its Applications* in: Collected Works of S. Pancharatnam (Oxford University Press, Oxford, 1975)
- [R94] ROBBINS, J. M., J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 1179-89 (1994)
- [RB92] ROBBINS, J. M., BERRY, M. V., Proc. R. Soc. Lond. A **436**, 631-61 (1992)
- [SB88] SAMUEL, J., BRANDARI, R., Phys. Rev. Lett. **60**, 2339-42 (1988)
- [S68] SCHIFF, L. I., *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, Auckland, 1968)
- [S88] SCHWABL, F., *Quantenmechanik* (Springer, Berlin, 1988)
- [SW89] SHAPER, A., WILCZEK, F. (eds.), *Geometric phases in physics* (World Scientific, Singapore, 1989)
- [S83] SIMON, B., Phys. Rev. Lett. **51**, 2167-70 (1983)
- [SS76] SMIRNOVITCH, V., SOBALNIKOV, A., *Elliptical Spinors in Hilbert Space* (NL, Diekirch, 1976)
- [TC86] TOMITA, A., CHIAO, R. Y., Phys. Rev. Lett. **57**, 937-40 (1986)
- [W76] WEIDMANN, J., *Lineare Operatoren in Hilberträumen* (Teubner, Stuttgart, 1976)
- [vW78] VON WESTENHOLZ, C., *Differential Forms in Mathematical Physics* (North-Holland, Amsterdam, 1978)
- [W31] WEYL, H., *The Theory of Groups and Quantum Mechanics* (Dover Publications, New York, 1931)
- [W32] WIGNER, E. P., Phys. Rev. **40**, 749-59 (1932)
- [WZ84] WILCZEK, F., ZEE, A., Phys. Rev. Lett. **52**, 2111-4 (1984)
- [WB90] WEINFURTER, H., BADUREK, G., Phys. Rev. Lett. **64**, 1318-21 (1990)

Danksagung

Ich möchte Herrn Prof. Gert Eilenberger ganz herzlich danken für die wahrlich doktorväterliche Betreuung und die „Erziehung“ zu einem kritischen Wissenschaftler, die er mir in den letzten zweieinhalb Jahren hat zuteil werden lassen, insbesondere für die Erkenntnis, daß man mit physikalischer Anschauung abstrakten theoretischen Betrachtungen erst einen Sinn verleihen und durch anschauliche Beispiele in formalen Rechnungen verborgene Fehler aufdecken kann.

Ich danke Herrn Michael Eisele und Herrn Andreas Körner für eine schöne Zeit im gemeinsamen Büro, für viele angeregte Diskussionen, in denen ich sehr viel lernen konnte, aber auch für diverse organisatorische Hilfestellungen, ohne die ab und zu schon mal etwas drunter und drüber gegangen wäre. Bei Herrn Oliver Pfaffenzeller und Herrn Stefan Hunsicker möchte ich mich dafür bedanken, daß sie mir mit stoischer Geduld zu jeder Stunde ihren Computer zwecks Datenübertragung zur Verfügung stellten.

Abschließend möchte ich meiner Freundin Susanne für ihr Verständnis und ihre aufopferungsvolle Fürsorge danken, die sie mir besonders in der Endphase dieser Arbeit geschenkt hat.

QUESTION 1

1. Explain the difference between a *strongly typed* language and a *weakly typed* language. Give examples of each. (10 marks)

A *strongly typed* language is one in which the type of a variable is known at compile time and the compiler enforces strict rules about how variables of different types can be used. Examples of strongly typed languages include C, C++, and Java. A *weakly typed* language is one in which the type of a variable is not known at compile time and the compiler enforces fewer rules about how variables of different types can be used. Examples of weakly typed languages include Perl, Python, and JavaScript.

2. Explain the difference between a *static type* and a *dynamic type*. Give examples of each. (10 marks)

A *static type* is a type that is known at compile time. Examples of static types include `int`, `float`, and `string`. A *dynamic type* is a type that is known at runtime. Examples of dynamic types include `Object`, `Array`, and `String`.

Jül-3020
Januar 1995
ISSN 0944-2952