
**Semiklassische Behandlung harmonischer
Potentiale in zwei Dimensionen:
Die Rolle der diskreten und
kontinuierlichen Symmetrie**

von

Roland Doll

Diplomarbeit
vorgelegt der
Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Augsburg

10.10.2004
Institut für Physik
Lehrstuhl für Theoretische Physik I
Universität Augsburg

Erstgutachter: Herr Prof. Dr. Gert-Ludwig Ingold
Zweitgutachter: Herr Priv.-Doz. Dr. Karl-Heinz Höck

Symmetrie, ob man ihre Bedeutung weit oder eng fasst, ist eine Idee, vermöge derer der Mensch durch die Jahrtausende seiner Geschichte versucht hat, Ordnung, Schönheit und Vollkommenheit zu begreifen und zu schaffen.

Hermann Weyl

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Übersicht	1
2	Die Gutzwillersche Spurformel	3
2.1	Ein Weg zur Spurformel	4
2.2	Der inkommensurable zweidimensionale harmonischer Oszillator	10
3	Eine Spurformel für Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien	15
3.1	Periodische Orbits und kontinuierliche Symmetrien	15
3.2	Eine verallgemeinerte Spurformel	17
3.3	Zusammenfassung	22
3.4	Beispiele und Ausblick	22
4	Orbitfamilien und Reduktion diskreter Symmetrien	25
4.1	Die Projektion	26
4.2	Reduktion des oszillierenden Anteils	27
4.2.1	Semiklassische Näherung im reduzierten Phasenraum	27
4.2.2	Die reduzierte Zustandsdichte	29
4.2.3	Zusammenfassung	31
4.2.4	Rekonstruktion	32
4.3	Reduktion des stetigen Anteils	34
4.4	Symmetriereduktion des inkommensurablen harmonischen Oszillators	35
4.4.1	Reduktion auf irreduzible Darstellungen der Spiegelsymmetrie	36
4.4.2	Rekonstruktion der vollen Zustandsdichte	43
5	Der kommensurable zweidimensionale harmonische Oszillator	45
5.1	Der isotrope harmonische Oszillator	46
5.1.1	Parametrisierung der periodischen Orbits	47
5.1.2	Die Zustandsdichte	50
5.2	Der anisotrope harmonische Oszillator	57
5.2.1	Quantenmechanik des anisotropen Oszillators	57
5.2.2	Klassifikation periodischer Orbits	59
5.2.3	Die Orbit-Familie des anisotropen Oszillators	60
5.2.4	Diskrete Entartung der Orbit-Familie	65
5.2.5	Reduzierte Zustandsdichten	68
5.2.6	Rekonstruktion der vollen Zustandsdichte und Diskussion	71
5.2.7	Reduktion der Beiträge isolierten Orbits	75
6	Der inkommensurable zweidimensionale Halboszillator	81
7	Zusammenfassung und Ausblick	87

A	Semiklassische Näherungen und Indizes	89
A.1	Semiklassische Näherung	89
A.2	Phasenindizes	92
A.2.1	Der Morse-Index	92
A.2.2	Der Maslov-Index	94
A.2.3	Periodische Orbits und Phasenindex	95
A.3	Der Phasenindex der Gutzwillerschen Spurfomel	96
A.3.1	Berechnung in lokalen Koordinaten des Orbits	97
A.3.2	Berechnung ohne Benutzung lokaler Koordinaten	100
B	Klassische Mechanik und symplektische Geometrie: Eine kurze Übersicht	103
C	Die Monodromie-Matrix	107
D	Berechnung exakter Zustandsdichten	111
D.1	Allgemeine Vorgehensweise	111
D.2	Der zweidimensionale harmonische Oszillator	111
D.2.1	Irrationales Frequenzverhältnis	112
D.2.2	Rationales Frequenzverhältnis	113
D.3	Der zweidimensionale harmonische Halboszillator	116
E	Verschiedenes	119
E.1	Methode der stationären Phase	119
E.2	Inverse Laplace-Transformation	120
E.3	Fourier-Darstellung eines δ -Kamms	120
	Literaturverzeichnis	123
	Danksagung	129

Kapitel 1

Einleitung und Übersicht

Die Quantenmechanik ist seit ihrer Entwicklung in den 20er Jahren des 20. Jahrhunderts eine der erfolgreichsten Theorien der modernen Wissenschaft. Sie legt den Grundstein für eine tiefe Einsicht in eine Unzahl an Phänomenen, die den klassischen Methoden nicht zugänglich sind. Sie zeichnet sich dadurch aus, Vorgänge in atomaren und subatomaren Bereichen richtig zu beschreiben und bringt gerade deshalb einige Merkmale mit sich, die der Vorstellung des Menschen in seinem Alltag widersprechen.

Die Quantenmechanik erlaubt oft lediglich Wahrscheinlichkeitsprognosen über den Wert einer Messgröße wie beispielsweise den Ort, an dem sich ein Objekt befinden wird. Sie ist daher nicht mehr bezüglich jeder Fragestellung deterministisch. Berechnen wir den Erwartungswert der Messgröße, so stellt sich heraus, dass dieser den bekannten Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik gehorcht, sofern er eine klassische Entsprechung besitzt (Ehrenfest'sches Theorem). Die Streuung der Messergebnisse vom Erwartungswert nach mehrfacher Wiederholung der quantenmechanischen Messung sind in der Regel für makroskopische mechanische Systeme nahezu unmessbar klein. Diese zeichnen sich oft durch eine Überlagerung vieler Quantenzustände mit großen Quantenzahlen aus. Für den makroskopischen Grenzfall folgt somit der deterministische Charakter der klassischen Mechanik aus der Quantenphysik, eine Verbindung, die als Bohrsches Korrespondenz-Prinzip bekannt ist.

Häufig sind konkrete geometrische Vorstellungen von Bewegungen und Strukturen gute Leitbilder für den Weg zu einer Lösung einer mechanischen Problemstellung und können helfen, ein Gefühl für den vorliegenden Sachverhalt zu bekommen. Im Allgemeinen erleichtert die Gegenwart einer Symmetrie diesen Prozess, denn sie lässt es zu, die Vorgänge und Formen leichter zu strukturieren und zu ordnen. Vielleicht empfinden wir gerade deshalb Objekte ausgezeichneter Symmetrie als besonders schön und vollendet.

Wir leiten Vorstellungen gerne aus der uns gewohnten Umgebung, der makroskopischen Welt ab, die von Natur aus für die Erfahrung des Menschen besonders zugänglich ist. Es ist interessant, auch in der Quantenmechanik neben der abstrakten Beschreibung mit Hilfe von Zuständen und Operatoren des Hilbertraums eine derartige Vorstellung zu entwickeln. Einfache Systeme wie zum Beispiel der harmonische Oszillator lassen sich mit den üblichen Methoden der Quantenmechanik knapp und sehr effektiv beschreiben. Auch Symmetrien können durch kommutierende Operatoren und Entartungen oft auf einfache Weise formal charakterisiert werden. Wir sollten uns deshalb bewusst sein, dass wir die Nähe zur Anschaulichkeit vielleicht nur auf Kosten einer im mathematischen Sinne effizienten Berechnung erlangen.

Ein Ausgangspunkt dazu bietet nach Feynman die Darstellung des quantenmechanischen Propagators als Pfadintegral: Der Operator, der die Entwicklung eines Quantenzustands innerhalb einer gegebenen Zeitdauer beispielsweise vom Ort A zum Ort B beschreibt, kann als Funktionalintegral über alle (insbesondere auch nicht-klassischen)

Wege von A nach B ausgedrückt werden. In der semiklassischen Näherung dieser Darstellung, welche sich formal durch den Limes des Planckschen Wirkungsquants $\hbar \rightarrow 0$ erreichen lässt, liefern gerade die Wege den dominanten Beitrag zum Pfadintegral, die durch die Gesetze der klassischen Mechanik beschrieben werden. Wir erhalten dadurch eine Verbindung zur klassischen Beschreibung des Systems und so eventuell einen größeren Bezug zur Anschaulichkeit.

Zur Charakterisierung eines quantenmechanischen Systems interessiert uns hier die Verteilung der Eigenenergien, d.h. die quantenmechanische Zustandsdichte. Für die Berechnung dieser Größe im semiklassischen Limes wenden wir den Formalismus periodischer Orbits nach Gutzwiller und dessen Erweiterungen an, die auf der semiklassischen Darstellung des Propagators aufbauen. Wir möchten dabei die Rolle der Symmetrie aufzeigen und diskutieren Systeme in zwei Dimensionen mit harmonischem Potential: den harmonischen Oszillator und den harmonischen Halboszillator. Sie zeichnen sich zum einen als fundamentale Modelle in der Physik aus, so dass es von prinzipiellem Interesse ist, sie auch im Rahmen der Semiklassik zu behandeln. Zum anderen scheint nach unserem Wissen insbesondere die Zustandsdichte des harmonischen Oszillators mit beliebigen kommensurablen Frequenzen im Rahmen semiklassischer Näherung nicht vollständig verstanden zu sein. Eine entsprechende Berechnung war in der Literatur nicht zu finden.

Die Arbeit gliedert sich nun wie folgt: Im folgenden zweiten Kapitel wird zunächst eine Einführung gegeben, wie sich die Zustandsdichte mit Hilfe der sogenannten Gutzwillerschen Spurformel in Größen klassischer periodischer Orbits ausdrücken lässt. Je nach Vorkenntnissen empfiehlt es sich, bereits vorab den ersten Abschnitt von Anhang A zu lesen, in dem einige Grundlagen semiklassischer Überlegungen dargestellt sind. Für die weiteren Anhänge finden sich entsprechende Referenzen im laufenden Text.

Das dritte Kapitel widmet sich der Erweiterung der Gutzwillerschen Theorie nach Creagh für Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien durch gruppentheoretische Betrachtungen. Anschließend untersuchen wir, wie sich das Auftreten einer diskreten Symmetrie auf die vorher dargestellten Spurformeln auswirkt. Dazu wird das in der Literatur bekannte Reduktionsverfahren diskreter Symmetrie auf den Fall einer zusätzlich wirkenden kontinuierlichen Symmetriegruppe verallgemeinert.

Die beiden Kapitel fünf und sechs behandeln schließlich konkret den harmonischen Oszillator und den Halboszillator als explizite Anwendung für die in den vorherigen Kapiteln allgemein entwickelten Formalismen.

Kapitel 2

Die Gutzwillersche Spurformel

Im Vergleich zur Quantenmechanik ist die sogenannte Chaos-Theorie eine etwas jüngere Disziplin. Obwohl im 17. Jahrhundert von Leibnitz und im 19. Jahrhundert von Poincaré die Grundsteine gelegt wurden, ist sie erst in den letzten Jahrzehnten in Mode gekommen, als die Wissenschaft zu erkennen begann, dass chaotische Erscheinungen in der Natur weit verbreitet sind. Ein anerkanntes Kennzeichen für ein chaotisches System ist die ungewöhnlich sensitive Abhängigkeit von seinen Anfangsbedingungen oder genauer: bereits eine infinitesimal kleine Störung vorgegebener Anfangsbedingungen wächst in ihrer zeitlichen Entwicklung mindestens exponentiell und verändert damit den Endzustand des Systems in gewisser Weise unvorhersehbar.

Obwohl beide Disziplinen einen Charakter der Unbestimmtheit miteinander gemein haben, könnte man ihr gegenseitiges Zusammenspiel in gewisser Weise als feindschaftlich interpretieren: Die Quantenmechanik kann als eine lineare Theorie angesehen werden, aber für gewöhnlich ist gerade die Nichtlinearität für ein chaotisches Verhalten wesentlich. Wir könnten so leicht versucht sein zu glauben, dass in einem quantenmechanischen System überhaupt kein Chaos auftreten kann. Dabei entsteht die Frage, was geschieht, wenn wir ein klassisches chaotisches System auf atomare Ebene verkleinern. Können wir weiter chaotisches Verhalten beobachten und wodurch lässt es sich eventuell beschreiben?

Schon 1917 wurde von Einstein ein Artikel veröffentlicht [1], der diesen Aspekt anschnitt, aber jedoch fast vier Jahrzehnte lang scheinbar unbeachtet blieb [2]. Einsteins Vorstellung, im Rahmen der sogenannten „alten Quantentheorie“ vor 1926 von Bohr und Sommerfeld eine Quantisierung für klassische Systeme zu finden, ist recht einfach. Er schrieb dem klassischen Phasenraum integrierbarer, regulärer Systeme eine geometrische Struktur zu, die den Verlauf klassischer Trajektorien auf die Oberfläche von Tori bindet. Die Aussage, dass in der Natur nur solche Trajektorien auftreten werden, die auf Tori liegen, deren Querschnitte einen Flächeninhalt von einem ganzzahligen Vielfachen der Plank-Konstante h aufweisen, ist heute als EBK-Quantisierung¹ bekannt. Einstein erkannte, dass dieses Verfahren für nichtintegrierbare Systeme und in Gegenwart chaotischen Verhaltens keine direkte Anwendung findet, da es keine natürliche Faltung des Phasenraums in Tori gibt, auf der die Trajektorien verlaufen.

Ende der 60er Jahre fand Gutzwiller in einer Reihe von theoretischen Arbeiten [3, 4, 5] eine Antwort zu diesem Problem. Der Titel der letzten Veröffentlichung [6] dieser Reihe lautet „Periodic Orbits and Classical Quantization Conditions“ und er verrät bereits, wer die Hauptrolle in seinem Ergebnis spielt: Gutzwiller fand einen allgemeinen Weg, das Energiespektrum eines quantenmechanischen Systems näherungsweise in Größen periodischer Orbits des klassischen Partners zu berechnen. Seine Formel ist als Gutzwillersche Spurformel bekannt. Sie findet einen weiten Anwendungsbereich, insbesondere

¹nach Einstein, Brillouin und Keller

bei Systemen mit klassisch chaotischem Verhalten. Solche Systeme zeigen im Allgemeinen die Eigenschaft, dass ihre periodischen Orbits im Phasenraum bezüglich ihrer klassischen Wirkung hinreichend isoliert voneinander liegen. Dies ist ein wesentliches Kriterium für die Gültigkeit der Spurformel. Sie kann jedoch auch für reguläre Systeme anwendbar sein, wenn die Orbits diese Eigenschaft erfüllen.

Getreu der Bemerkung von Gutzwiller

„The trace formula is not a formula, it is an idea“

versuchen wir nun, einen Eindruck über die Ideen zu geben, die hinter der Spurformel stecken. Diese Kenntnis ist für das Verständnis der Formel und für viele Argumente, die wir in dieser Arbeit verwenden, sehr wichtig.

2.1 Ein Weg zur Spurformel

Im Folgenden soll ein Weg skizziert werden, wie sich die Gutzwillersche Spurformel herleiten lässt. Wir nutzen dies zugleich als Einführung in die relevanten Größen, die wir in dieser Arbeit verwenden. Es wird zum großen Teil auf ausführliche Rechnungen verzichtet, sofern sie nicht wesentlich für die Zusammenhänge sind. Dazu sei auf die spezielle Literatur [6, 7, 8, 9] verwiesen.

Wir wollen mit Hilfe semiklassischer Näherungen einen Ausdruck für das Spektrum der Eigenenergien E_n eines Hamilton-Operators \hat{H} erhalten. Ein Überblick über das Thema „semiklassische Näherung“, so wie wir es hier verstehen, findet sich im ersten Teil des Anhangs A. Wir gehen im Folgenden stets von einem diskreten Spektrum mit positiven Eigenwerten aus und kennzeichnen quantenmechanische Operatoren mit einem Hut. Die Größe, durch die wir das Energiespektrum beschreiben, ist die Zustandsdichte $g(E)$. Sie ist definiert als Summe über Delta-Funktionen

$$g(E) = \sum_n \delta(E - E_n).$$

Der Summationsindex n steht symbolisch für einen vollständigen Satz aus Quantenzahlen. Es wird also über alle Eigenwerte einschließlich möglicher Entartungen summiert.

Wir interessieren uns nun für einen semiklassischen Ausdruck der Zustandsdichte $g(E)$. Sei ein zeitunabhängiger Hamilton-Operator $\hat{H} = H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})$ eines d -dimensionalen Systems in der Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + V(\hat{\mathbf{q}})$$

gegeben.² Die Zeitentwicklung einer Wellenfunktion $|\psi(t')\rangle$ vom Zeitpunkt t' zum Zeitpunkt $t \geq t'$ ist im Schrödingerbild durch den Propagator $\hat{K}(t - t')$ gegeben:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{K}(t - t') |\psi(t')\rangle, \quad \hat{K}(t - t') = \exp\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t - t')\right).$$

²Die Überlegungen lassen sich zum großen Teil auch auf zeitabhängige Hamilton-Operatoren verallgemeinern. Die spezielle Wahl der Form des Hamilton-Operators bedeutet ebenfalls eine Einschränkung, die sich aufweiten lässt. Sie ist aber für unsere Zwecke absolut ausreichend. Weiterhin wird für die Masse m stets $m = 1$ gesetzt.

Wir setzen im Folgenden $t' = 0$ und schreiben für die Ortsdarstellung $\langle \mathbf{q} | \hat{K}(t) | \mathbf{q}' \rangle = K(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$. Der Propagator erfüllt die Halbgruppeneigenschaft

$$K(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) = \int_{\mathbb{R}^d} K(\mathbf{q}, \mathbf{q}'', t - t'') K(\mathbf{q}'', \mathbf{q}', t'') d^d q''.$$

Er lässt sich nach Feynman als Funktionalintegral über alle Wege $\mathbf{q}(\tau)$, $0 \leq \tau \leq t$, darstellen, die die Randbedingungen $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}'$ und $\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}$ erfüllen:

$$K(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} R[\mathbf{q}(t)]\right) \mathcal{D}[\mathbf{q}(\tau)], \quad \text{mit } R[\mathbf{q}(\tau)] = \int_0^t L(\mathbf{q}(\tau), \dot{\mathbf{q}}(\tau)) d\tau.$$

Das Funktional $R[\mathbf{q}(\tau)]$ ist das Integral der Lagrange-Funktion L entlang des Weges $\mathbf{q}(\tau)$ und ordnet so jedem Weg eine Wirkung zu.

Im semiklassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$, beziehungsweise für $R[\mathbf{q}(\tau)] \gg \hbar$ ist der Integrand des Funktionalintegrals im Allgemeinen stark oszillierend. Den dominanten Beitrag geben stationäre Punkte der Wirkung, bei denen die erste Variation der Wirkung $\delta R[\mathbf{q}(\tau)]$ verschwindet. Dies sind nach dem Hamiltonschem Prinzip gerade die *klassischen* Pfade, die in der Zeit t von \mathbf{q}' zu \mathbf{q} führen und die wir mit j nummerieren wollen. Die Wirkung eines solchen Pfades bezeichnen wir mit $R_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$. Es stellt sich als praktisch heraus, $R[\mathbf{q}(\tau)]$ um die klassischen Pfade zu entwickeln. Im Rahmen der semiklassischen Näherung brechen wir die Entwicklung jedoch bereits nach der zweiten Variation der Wirkung ab und werten das Integral aus.

Diese näherungsweise Berechnung von Integralen mit stark oszillierenden Integranden wird allgemein als Methode der stationären Phase bezeichnet. Sie ist ein wichtiges Näherungsverfahren der Semiklassik und wird in Anhang E.1 dargestellt.

Die Auswertung des Integrals ergibt einen semiklassischen Ausdruck $K_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$ für den quantenmechanischen Propagator. Er wird als Van Vleck-Propagator bezeichnet und ist eine Summe über alle klassischen Orbits „ko“ von \mathbf{q}' nach \mathbf{q} :

$$K_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) = \sum_{j \in \{\text{ko}\}} \sqrt{\frac{|A_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)|}{(2\pi i \hbar)^d}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} R_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) - i m_j \frac{\pi}{2}\right). \quad (2.1)$$

Die Amplitude $A_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$ lässt sich durch semiklassische Auswertung der Halbgruppeneigenschaft des Propagators berechnen [10]. Sie ist die Determinante der sogenannten Van Vleck-Morette-Matrix,

$$A_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) = \det\left(-\frac{\partial^2 R_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}'}\right).$$

Die Zahl m_j zählt die Anzahl der Vorzeichenwechsel der Eigenwerte dieser Matrix entlang des Pfades j , die durch Falten der Funktion R_j entstehen. Sie wird als Morse-Index bezeichnet. Die für semiklassische Näherungen typischen Indizes werden insbesondere unter geometrischen Gesichtspunkten ausführlicher in Anhang A besprochen.

Wir betrachten nun die retardierte Greensche Funktion $\hat{G}_r(t)$. Sie ist mit der Heaviside-Funktion $\Theta(t)$ kausal definiert als

$$\hat{G}_r(t) = \hat{K}(t)\Theta(t)$$

und erfüllt die Schrödinger-Gleichung für eine deltaförmige Störung

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \hat{G}_r(t) = i\hbar \delta(t), \quad \text{mit } \hat{G}_r(t) = 0 \text{ für } t < 0.$$

Als Lösung dieser Gleichung nach einer Fourier-Transformation

$$\hat{G}_r(t) = \frac{i\hbar}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} \hat{G}_r(E) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) dE$$

finden wir die energieabhängige Greensche Funktion $\hat{G}_r(E) = (E - \hat{H})^{-1}$. Sie spielt im Folgenden eine wichtige Rolle, denn sie ermöglicht es, die Verbindung zur Zustandsdichte $g(E)$ herzustellen. Um die Konvergenz der Fourier-Transformation zu sichern und die Randbedingung für $\hat{G}_r(t)$ zu befriedigen, müssen wir die Pole von $\hat{G}_r(E)$ von der reellen Achse in die negative imaginäre Halbebene verschieben. Äquivalent dazu geben wir der Energie einen kleinen positiven imaginären Anteil $i\epsilon$ mit $\epsilon \in \mathbb{R}^+$. Wir erhalten in Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} G_r(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E + i\epsilon) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} G_r(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E + i\epsilon)t\right) dt \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} K(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E + i\epsilon)t\right) dt. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Aufgrund der Dirac-Identität

$$i\pi\delta(E - E_n) = \mathcal{CH} \left(\frac{1}{E - E_n} \right) - \frac{1}{E + i\epsilon - E_n}$$

mit dem reellen Cauchy-Hauptwert \mathcal{CH} steht die Zustandsdichte im Zusammenhang mit der Spur der energieabhängigen Greenschen Funktion $\hat{G}_r(E + i\epsilon)$:

$$g(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} \left(\text{Tr} \hat{G}_r(E + i\epsilon) \right).$$

Wir werden den Index r und den Parameter ϵ zugunsten einfacherer Notation im Folgenden stets unterdrücken und denken uns die Energie E etwas ins Komplexe verschoben. Wir schreiben deshalb stets

$$g(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\text{Im}E \rightarrow 0^+} \text{Im} \left(\text{Tr} \hat{G}(E) \right). \quad (2.3)$$

Der Weg, eine semiklassische Näherung für die Zustandsdichte zu finden, ist nun klar. Wir setzen den semiklassische Van Vleck-Propagator (2.1) in die Fourier-Transformation (2.2) ein und erhalten mit (2.3) einen Ausdruck für die Zustandsdichte. Die wesentliche Überlegung besteht darin, die dabei anfallenden Integrale in semiklassischer Näherung auszuwerten.

Im ersten Schritt erhalten wir die semiklassische Greensche Funktion

$$G_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} K_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}Et\right) dt. \quad (2.4)$$

Im Rahmen der Näherung an stationärer Phase lässt sich zwischen zwei Arten von Beiträgen unterscheiden:

- Langzeit-Pfade

Wir erhalten für jeden klassischen Pfad j einen Beitrag durch stationäre Phasen bei Zeitpunkten $t = T_j > 0$ mit der Bedingung

$$\left. \frac{\partial (R_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) + Et)}{\partial t} \right|_{t=T_j} = 0.$$

Unter der Voraussetzung, dass T_j hinreichend groß ist und der stationäre Bereich innerhalb des Integrationsbereichs liegt, lässt sich die übliche Näherung an stationärer Phase anwenden. Es tragen alle klassischen Pfade von \mathbf{q}' nach \mathbf{q} bei, für die jedoch nicht wie vorher die Zeitdauer, sondern nun die Energie E vorgegeben ist. Wir bezeichnen den Beitrag mit $G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$. Mit der klassischen reduzierten Wirkung $S_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = R_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', T_j) + ET_j = \int_j \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ finden wir

$$G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{j \in \{\text{ko}\}} \sqrt{\frac{|D_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)|}{(2\pi i\hbar)^{d-1}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) - i\mu_j \frac{\pi}{2}\right),$$

wobei

$$D_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}'} & \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q}' \partial E} \\ \frac{\partial^2 S_j}{\partial \mathbf{q} \partial E} & \frac{\partial^2 S_j}{\partial E^2} \end{pmatrix}.$$

Der Index μ_j zählt jetzt die Zahl der Vorzeichenwechsel der Amplitude entlang der Pfade j zur Energie E .

- Kurzzeit-Pfade

Für infinitesimale Zeiten $t \rightarrow 0$, sozusagen für Pfade der Länge „Null“ erhalten wir im Rahmen der semiklassischen Näherung an der unteren Integrationsgrenze in (2.4) einen Randbeitrag. Er beruht auf dem singulären Verhalten des Propagators in diesem Limes und lässt sich durch eine Kurzzeit-Näherung ($\dot{\mathbf{q}} \approx (\mathbf{q} - \mathbf{q}')/t$, $V(\mathbf{q}) \approx \text{const.}$) des Van Vleck-Propagators bestimmen. Mit der Hankel-Funktion erster Art $H^{(1)}$ lautet dieser Beitrag

$$G_{\text{skl}}^{\text{kurz}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \frac{1}{2i\hbar^2} \left(\frac{\sqrt{2(E-V)}}{2\pi\hbar |\mathbf{q} - \mathbf{q}'|} \right)^{\frac{d-2}{2}} H_{\frac{d-2}{2}}^{(1)} \left(\sqrt{2(E-V)} |\mathbf{q} - \mathbf{q}'| \right).$$

Der zweite Schritt besteht darin, die Spur der Greenschen Funktion

$$G_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) + G_{\text{skl}}^{\text{kurz}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$$

zu berechnen und sie mittels der Dirac-Identität als Zustandsdichte auszudrücken. Die semiklassische Zustandsdichte besteht also aus zwei Summanden. Den Anteil, der durch den Beitrag der Kurzzeit-Pfade entsteht, bezeichnen wir mit $\bar{g}(E)$. Er lässt sich als stetigen Beitrag zur Zustandsdichte identifizieren, wie er sich aus einer klassischen Thomas-Fermi-Näherung ergeben würde. Er beschreibt somit das grobe Verhalten der Zustandsdichte, insbesondere für hohe Energien.

Den interessanteren Anteil gibt die Green-Funktion der Langzeit-Pfade. Die Integrale für die Spurbildung

$$\text{Tr } G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(E) = \int_{\mathbb{R}^d} G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}' = \mathbf{q}, E) d^d q$$

werden wieder in semiklassischer Näherung ausgewertet. Die Tatsache, dass gerade hier nur Punkte stationärer Phase berücksichtigt werden, gibt die entscheidende Bedingung dafür, dass nur periodische Orbits zur Gutzwillerschen Spurformel beitragen: Die Bedingung für eine Extremalstelle der Phase lautet

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

Es liefern also solche Orbits den dominanten Beitrag zur Spur, die bei \mathbf{q} mit dem gleichen Anfangs- und Endimpuls \mathbf{p} starten und enden, kurz, die periodisch sind.

Wir dürfen nun einen entscheidenden Punkt nicht übersehen, der uns im Kapitel 3 wieder begegnen wird. Wir sollten uns fragen, unter welchen Umständen die Methode der stationären Phase überhaupt anwendbar ist. Sie ist es sicherlich nicht, wenn keine stationären Punkte auffindbar sind oder diese Punkte nicht hinreichend voneinander isoliert liegen. Dieser Fall tritt hier bereits ein und dies lässt sich sehr leicht einsehen, wenn wir die Integrationen für die Spur in einem dem Orbit angepassten Koordinatensystem durchführen. Wir definieren an jedem Punkt entlang des Orbits ein lokales Koordinatensystem derart, dass die erste Komponente $q_{||}$ stets tangential in Richtung des Orbits zeigt und die restlichen $d-1$ Komponenten \mathbf{q}_{\perp} transversal dazu stehen. Es ist klar, dass entlang der Richtung $q_{||}$ des Orbits *kein* Extremum der Phase auftritt, da die Wirkung auf der klassischen Trajektorie konstant bleibt. Das entsprechende Integral $\int dq_{||}$ ist deshalb *exakt* auszuführen. Nur für die übrigen transversalen Richtungen \mathbf{q}_{\perp} wenden wir die semiklassische Näherung an, was jedoch auch nur dann gerechtfertigt ist, wenn die auftretenden Orbits im Phasenraum bezüglich ihrer Wirkung hinreichend getrennt voneinander liegen. Dies ist eine entscheidende Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Spurformel, die typischerweise für chaotische Systeme, aber auch für gewisse reguläre Systeme erfüllt ist. Die Gegenwart einer kontinuierlichen Symmetrie lässt Orbits im Allgemeinen entarten und es treten weitere Richtungen auf, die exakt zu integrieren sind. Derartige Verallgemeinerungen der Spurformel, wie wir sie im Folgenden benötigen, betrachten wir getrennt von dieser Diskussion in Kapitel 3.

Um die Spur in einem lokalen Koordinatensystem des Orbits j tatsächlich berechnen zu können, muss die in der Greenschen Funktion $G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$ auftretende Amplitude D_j in den lokalen Koordinaten des Orbits ausgedrückt werden. Eine entsprechende Rechnung liefert

$$D_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = (-1)^d \frac{1}{\dot{q}_{||} \dot{q}'_{||}} \det \left(\frac{\partial \mathbf{p}'_{\perp}}{\partial \mathbf{q}_{\perp}} \right).$$

Das lokale Koordinatensystem hängt zwar vom Orbit j ab, einen entsprechenden Index unterdrücken wir jedoch zugunsten der Lesbarkeit.

In semiklassischer Näherung erhalten wir nun für die Spur eine Summe über alle klassischen periodischen Orbits „po“. Ihre reduzierten Wirkungen $\oint_j \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ bezeichnen

wir mit $S_j(E)$. Es gilt

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(E) &= \frac{(2\pi i \hbar)^{\frac{1-d}{2}}}{i \hbar} \sum_{j \in \{\text{po}\}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_j(E) - i \mu_j \frac{\pi}{2}\right) \\ &\quad \times \oint \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \frac{1}{|\dot{q}_{\parallel}|} \left| (-1)^d \det\left(\frac{\partial \mathbf{p}'_{\perp}}{\partial \mathbf{q}_{\perp}}\right) \right|^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i}{2\hbar} \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{W}_j \mathbf{q}_{\perp}\right) d^{d-1} q_{\perp} dq_{\parallel} \end{aligned} \quad (2.5)$$

mit der zweiten Ableitung \mathbf{W}_j der Wirkung entlang den Richtungen transversal zum klassischen Orbit

$$\mathbf{W}_j = \left(\frac{\partial^2 S_j((q_{\parallel}, \mathbf{q}_{\perp}), (q'_{\parallel} = q_{\parallel}, \mathbf{q}'_{\perp} = \mathbf{q}_{\perp}), E)}{\partial \mathbf{q}_{\perp} \partial \mathbf{q}_{\perp}} \right)_{\mathbf{q}_{\perp}=0}. \quad (2.6)$$

Die Menge $\{\text{po}\}$ der periodischen Orbits besteht aus allen primitiv periodischen Orbits $\{\text{ppo}\}$ sowie deren Wiederholungen $r \in \mathbb{N}$. Es ist geschickter, die Summation über alle periodischen Orbits entsprechend aufzuteilen:

$$\sum_{j \in \{\text{po}\}} \rightarrow \sum_{j \in \{\text{ppo}\}} \sum_{r=1}^{\infty}.$$

Die Wirkung eines primitiv periodischen Orbits addiert sich bei mehrfachen Wiederholungen einfach auf, wir schreiben deshalb $S_j \rightarrow r S_j$.

Das äußere Integral in (2.5), das *einmal* um den Orbit läuft und exakt ausgeführt wird, liefert stets die *primitive* Periode T_j des Orbits:

$$\oint_j \frac{dq_{\parallel}}{|\dot{q}_{\parallel}|} = \oint_j dt = T_j.$$

Das innere Integral über die transversalen Komponenten ergibt einen für die stationäre Phasennäherung typischen Phasenbeitrag $-\nu_j \pi/2$ mit einer Zahl ν_j , die die negativen Eigenwerte von \mathbf{W}_j zählt. Wir erhalten insgesamt eine Amplitude der Form

$$\frac{(2\pi i \hbar)^{\frac{d-1}{2}}}{i \hbar (2\pi i \hbar)^{\frac{d-1}{2}}} \left| (-1)^d \det\left(\frac{\partial \mathbf{p}'_{\perp}}{\partial \mathbf{q}_{\perp}}\right) (\det \mathbf{W}_j)^{-1} \right|^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{i \hbar} \left| \det(\tilde{\mathbf{M}}_j^r - \mathbf{I}) \right|^{-\frac{1}{2}}.$$

Sie besteht aus der $2(d-1) \times 2(d-1)$ Einheitsmatrix \mathbf{I} und der Stabilitätsmatrix $\tilde{\mathbf{M}}$, welche die Abweichung $(\delta \mathbf{q}_{\perp}, \delta \mathbf{p}_{\perp})$ vom Orbit nach r Wiederholungen bei einer kleinen Variation $(\delta \mathbf{q}'_{\perp}, \delta \mathbf{p}'_{\perp})$ zu Beginn beschreibt. Sie ist die Linearisierung einer entsprechenden Poincaré-Abbildung. Eine ausführlichere Beschreibung der Stabilitätsmatrix geben wir in Anhang C.

Die Spur lautet also:

$$\text{Tr } G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(E) = \frac{1}{i \hbar} \sum_{j \in \{\text{ppo}\}} T_j \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\exp(ir S_j(E)/\hbar - i(\mu_{j,r} + \nu_{j,r})\pi/2)}{\left| \det(\tilde{\mathbf{M}}_j^r - \mathbf{I}) \right|^{1/2}}.$$

Alle eingehenden Größen, wie die Wirkung, die Periode und die Stabilität sind klassischer Natur und Invarianten klassischer periodischer Orbits.

Nun sind wir an unserem Ziel angelangt: Die semiklassische Zustandsdichte $g(E)$ ist als Summe zweier Anteile zu verstehen. Sie besteht zum einen aus dem stetigen Thomas–Fermi–Anteil $\bar{g}(E)$ als Beitrag der Kurzzeit–Pfade und zum anderen aus einem oszillatorischen Anteil in Größen periodischer Orbits, den wir mit $\delta g(E)$ bezeichnen wollen. Dieser Ausdruck für $\delta g(E)$ wird als Gutzwillersche Spurformel bezeichnet und lautet

$$\begin{aligned} \delta g(E) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\text{Im} E \rightarrow 0^+} \text{Im} \left(\text{Tr} G_{\text{skl}}^{\text{lang}}(E) \right) \\ &= \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{j \in \{\text{ppo}\}} T_j \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\cos(r S_j(E)/\hbar - \sigma_{j,r} \pi/2)}{\left| \det \left(\tilde{M}_j^r - \mathbf{I} \right) \right|^{1/2}}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Es wird über alle primitiv periodischen Orbits „ppo“ und deren Wiederholungen r summiert. Der Index $\sigma_{j,r}$ sammelt alle Phasenbeiträge der semiklassischen Näherungen auf und ist die Summe der beiden Anteile $\mu_{j,r}$ und $\nu_{j,r}$, die wir oben besprochen haben.

2.2 Der inkommensurable zweidimensionale harmonischer Oszillator

Die Anwendung der Gutzwillerschen Spurformel lässt sich gut am Beispiel des zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit irrationalem Frequenzverhältnis demonstrieren [11]. Der harmonische Oszillator ist für die Physik von besonderer Bedeutung und es lohnt sich, seine Zustandsdichte auch im Zusammenhang klassischer periodischer Orbits zu verstehen. Wir werden diese Ergebnisse in den folgenden Kapiteln weiter verwenden. Die exakte quantenmechanische Zustandsdichte kann aus der Zustandssumme berechnet werden und ist in Anhang D.2.1 ausgeführt. Dies liefert eine Vergleichsmöglichkeit für das semiklassische Ergebnis.

Der Hamilton–Operator für den harmonischen Oszillator in zwei Dimensionen lautet

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + V(\hat{q}_1, \hat{q}_2), \quad V(\hat{q}_1, \hat{q}_2) = \frac{1}{2} (\omega_1^2 \hat{q}_1^2 + \omega_2^2 \hat{q}_2^2). \quad (2.8)$$

Seine klassische Entsprechung ist die Hamilton–Funktion

$$H = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + V(q_1, q_2), \quad V(q_1, q_2) = \frac{1}{2} (\omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2). \quad (2.9)$$

Sie kann in kartesischen Koordinaten separiert werden

$$H = \sum_{i=1}^2 H_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2).$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen führen für $i = 1, 2$ auf die bekannten Ausdrücke $\ddot{q}_i(t) = -\omega_i^2 q_i(t)$. Mit den Anfangsbedingungen $q_{i,0}$ und $p_{i,0}$ zur Zeit $t = 0$ gilt

$$q_i(t) = q_{i,0} \cos(\omega_i t) + \frac{p_{i,0}}{\omega_i} \sin(\omega_i t), \quad i = 1, 2.$$

Die Lösung lautet also

$$\begin{pmatrix} q_1(t) \\ q_2(t) \\ p_1(t) \\ p_2(t) \end{pmatrix} = X(t) \begin{pmatrix} q_{1,0} \\ q_{2,0} \\ p_{1,0} \\ p_{2,0} \end{pmatrix}$$

mit der Matrizante

$$X(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t) & 0 & \frac{1}{\omega_1} \sin(\omega_1 t) & 0 \\ 0 & \cos(\omega_2 t) & 0 & \frac{1}{\omega_2} \sin(\omega_2 t) \\ -\omega_1 \sin(\omega_1 t) & 0 & \cos(\omega_1 t) & 0 \\ 0 & -\omega_2 \sin(\omega_2 t) & 0 & \cos(\omega_2 t) \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Die Energien $H_i(q_i, p_i) = E_i$ der Moden sind unabhängige Erhaltungsgrößen des Oszillators. Der Phasenraum dieses konservativen Systems mit der Gesamtenergie $E = E_1 + E_2$ hat damit die Struktur eines 2-Torus [12], für den Wirkungs- und Winkelvariablen ein natürliches Koordinatensystem bilden. Die einzigen periodischen Orbits für inkommensurable Frequenzen sind die beiden primitiven Schleifen des Torus. Ihre Projektion auf den Konfigurationsraum $\{(q_1, q_2)\}$ sind die beiden Librationen entlang den Achsen q_1 und q_2 . Alle anderen Trajektorien winden sich um den 2-Torus, schließen sich jedoch nie und liegen deshalb dicht auf dem Torus.

Die Periodendauern sind $T_i = 2\pi/\omega_i$. Die Monodromiematrix M_1 der q_1 -Mode ist die Lösungsmatrix $X(t)$ nach einer Periode T_1 ,

$$M_1 = X(T_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \frac{1}{\omega_2} \sin(2\pi\omega_2/\omega_1) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\omega_2 \sin(2\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \cos(2\pi\omega_2/\omega_1) \end{pmatrix}.$$

Ohne die beiden trivialen Eigenwerte ist die Stabilitätsmatrix \tilde{M}_1 (siehe dazu auch Anhang C):

$$\tilde{M}_1 = \begin{pmatrix} \cos(2\pi\omega_2/\omega_1) & \frac{1}{\omega_2} \sin(2\pi\omega_2/\omega_1) \\ -\omega_2 \sin(2\pi\omega_2/\omega_1) & \cos(2\pi\omega_2/\omega_1) \end{pmatrix}.$$

Entsprechend ergibt sich für die q_2 -Mode,

$$\tilde{M}_2 = \begin{pmatrix} \cos(2\pi\omega_1/\omega_2) & \frac{1}{\omega_1} \sin(2\pi\omega_1/\omega_2) \\ -\omega_1 \sin(2\pi\omega_1/\omega_2) & \cos(2\pi\omega_1/\omega_2) \end{pmatrix}.$$

Die Stabilitätsmatrizen nach $r \in \mathbb{N}$ Wiederholungen \tilde{M}_1^r und \tilde{M}_2^r erhalten wir durch Ersetzen von 2π durch $2\pi r$. Die Eigenwerte von \tilde{M}_1^r sind $\exp(\pm ir 2\pi\omega_2/\omega_1)$ und zugehörige elliptische Orbits somit stabil. Mit der 2×2 Einheitsmatrix I gilt

$$\det(\tilde{M}_1^r - I) = 4 \sin^2\left(r\pi \frac{\omega_2}{\omega_1}\right),$$

und analog

$$\det(\tilde{M}_2^r - I) = 4 \sin^2\left(r\pi \frac{\omega_1}{\omega_2}\right).$$

Da wir von irrationalen Frequenzverhältnissen ausgehen, müssen wir für kein $r \in \mathbb{N}$ ein Verschwinden der beiden Determinanten befürchten. Die Amplituden der Gutzwillerschen Spurformel bleiben damit endlich. Setzen wir beide Determinanten in die Formel (2.7) ein, haben wir bis jetzt folgenden Ausdruck für den oszillierenden Anteil der Zustandsdichte gefunden:

$$\begin{aligned} \delta g(E) &= \frac{1}{\hbar\pi} \frac{2\pi}{\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\cos(rS_1/\hbar - \sigma_{1,r}\pi/2)}{2|\sin(r\pi\omega_2/\omega_1)|} \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\pi} \frac{2\pi}{\omega_2} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\cos(rS_2/\hbar - \sigma_{2,r}\pi/2)}{2|\sin(r\pi\omega_1/\omega_2)|}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Nun bestimmen wir die (reduzierte) Wirkung S_i eines primitiv-periodischen Orbits und den Phasenindex $\sigma_{i,r} = \mu_{i,r} + \nu_{i,r}$. Die Wirkung lautet

$$S_i = \int p_i dq_i = \frac{2\pi E}{\omega_i}, \quad i \in \{1, 2\}. \quad (2.12)$$

Der Phasenindex kann mit den Ausführungen für stabile Orbits in Anhang A.3.1 auf Seite 97 berechnet werden: Mit den dortigen Bezeichnungen wählen wir für die q_1 -Mode $\mathbf{e}_0 = (0, 0, 0, 1)$. Der Flussvektor des Hamiltonschen Systems am Startpunkt sei $\mathbf{f}_0 = (1, 0, 0, 0)$. Somit gilt für die Matrix $U_q(t)$ aus (A.4):

$$U_q(t) = \begin{pmatrix} 0 & \cos(\omega_1 t) \\ \frac{1}{\omega_2} \sin(\omega_1 t) & 0 \end{pmatrix}.$$

Der Anteil $\mu_{1,r}$ des Phasenindex ist durch die Anzahl der Vorzeichenwechsel der Determinante von $U_q(t)$ innerhalb des Zeitraums $(0, rT_1)$ bestimmt:

$$\mu_{1,r} = \# \{ \det U_q(t) = 0 \mid 0 < t < rT_1 \} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} &= \# \{ \sin(\omega_2 t) \cos(\omega_1 t) = 0 \mid 0 < t < rT_1 \} \\ &= \# \{ \cos(t) = 0 \mid 0 < t < 2\pi r \} + \# \{ \sin(\omega_2 t / \omega_1) = 0 \mid 0 < t < 2\pi r \} \\ &= 2r + \# \{ \sin(t) = 0 \mid 0 < t < 2\pi r \omega_2 / \omega_1 \} \\ &= 2r + \left[2r \frac{\omega_2}{\omega_1} \right]_{\text{int}}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

mit der Gauß-Klammer $[\cdot]_{\text{int}}$. Sie liefert den ganzzahligen Anteil ihres Arguments:

$$[x + y]_{\text{int}} = x, \quad x \in \mathbb{Z}, y \in [0, 1).$$

Den Anteil $\nu_{1,r}$ berechnen wir mit Hilfe des Vorzeichens der Größe W aus (A.6). Wegen $\text{Tr} \tilde{M}_1^r - 2 < 0$ gilt mit dem oberen rechten Element $B = \frac{1}{\omega_2} \sin(2\pi r \omega_2 / \omega_1)$ von \tilde{M}_1^r :

$$W = \frac{\text{Tr} \tilde{M}_1^r - 2}{B} = \frac{2(\cos(2\pi r \omega_2 / \omega_1) - 1)}{B} = \begin{cases} < 0 & \text{falls } B > 0, \\ > 0 & \text{falls } B < 0. \end{cases}$$

Daraus folgt

$$\nu_{1,r} \begin{cases} 1 & \text{falls } W < 0 \Leftrightarrow [2r\omega_2/\omega_1]_{\text{int}} \text{ gerade,} \\ 0 & \text{falls } W > 0 \Leftrightarrow [2r\omega_2/\omega_1]_{\text{int}} \text{ ungerade} \end{cases} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} (-1)^{[2r\omega_2/\omega_1]_{\text{int}}} \quad (2.15)$$

und wir finden für den Phasenindex

$$\begin{aligned}\sigma_{1,r} &= \mu_{1,r} + \nu_{1,r} = 2r + \left[2r \frac{\omega_2}{\omega_1} \right]_{\text{int}} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} (-1)^{[2r\omega_2/\omega_1]_{\text{int}}} 2r + 1 + 2 \left[r \frac{\omega_2}{\omega_1} \right]_{\text{int}} \\ &= 2r + 1 + 2 \left[r \frac{\omega_2}{\omega_1} \right]_{\text{int}}.\end{aligned}\quad (2.16)$$

Analoge Rechnung für die q_2 -Mode mit $\mathbf{e}_0 = (0, 0, 1, 0)$, $\mathbf{f}_0 = (0, 1, 0, 0)$ und $B = \frac{1}{\omega_1} \sin(2\pi r \omega_1 / \omega_2)$ ergibt

$$\sigma_{2,r} = 2r + 1 + 2 \left[r \frac{\omega_1}{\omega_2} \right]_{\text{int}}.\quad (2.17)$$

Der Phasenindex für unstabile, hyperbolische Orbits kann als Windungszahl gesehen werden [13, 14]. Eine Windungszahl ist proportional zur Anzahl r der Wiederholungen, denn sie verhält sich additiv, wenn Orbits hintereinander gefügt werden. Dies ist im vorliegenden Fall stabiler Orbits offensichtlich nicht der Fall: Nur der jeweils erste Summand von $\sigma_{i,r}$ skaliert direkt mit r . Tatsächlich besteht der Phasenindex hier aus einer Summe einer Windungszahl und einem Term, der sich vollständig auf den elliptischen Block der Monodromiematrix $X(T_i)$ zurückführen lässt.³

Setzen wir die Wirkungen (2.12) und die Phasenindizes (2.16) und (2.17) in den Ausdruck (2.11) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned}\delta g(E) &= \frac{1}{\hbar\pi} \frac{\pi}{\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi r E / \hbar\omega_1 - (r + [r\omega_2/\omega_1]_{\text{int}}) \pi)}{(-1)^{[r\omega_2/\omega_1]_{\text{int}}} \sin(r\pi\omega_2/\omega_1)} \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\pi} \frac{\pi}{\omega_2} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi r E / \hbar\omega_2 - (r + [r\omega_1/\omega_2]_{\text{int}}) \pi)}{(-1)^{[r\omega_1/\omega_2]_{\text{int}}} \sin(r\pi\omega_1/\omega_2)} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\omega_2/\omega_1)} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar\omega_1}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\omega_2} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\omega_1/\omega_2)} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar\omega_2}\right).\end{aligned}\quad (2.18)$$

Die Pole dieses oszillierenden Anteils liefern bereits die Positionen der (semiklassisch genäherten) Eigenenergien. Der stetige Untergrund der Dichte, der Thomas–Fermi-Anteil $\bar{g}(E)$, kann mit Hilfe einer inversen Laplace–Transformation \mathcal{L}^{-1} der klassischen Zustandssumme $Z_{\text{kl}}(\beta)$ berechnet werden [8, 16]:

$$\begin{aligned}Z_{\text{kl}}(\beta) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \exp(-\beta H(\mathbf{q}, \mathbf{p})) \, d^2q d^2p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\beta \frac{1}{2} (p_1^2 + \omega_1^2 q_1^2 + p_2^2 + \omega_2^2 q_2^2)\right) \, dq_1 dq_2 dp_1 dp_2 \\ &= \frac{1}{\beta^2 \hbar^2 \omega_1 \omega_2}.\end{aligned}$$

³Siehe dazu die Formel von Sugita und Muratore–Ginanneschi (A.7) in Anhang A.3.2, speziell für den inkommensurablen Oszillator auch [15].

Der Thomas–Fermi–Anteil lautet also

$$\bar{g}(E) = \frac{1}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} \mathcal{L}_E^{-1} [1/\beta^2] = \frac{E}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} \quad (2.19)$$

und wir finden für die gesamte semiklassische Zustandsdichte

$$\begin{aligned} g(E) &= \bar{g}(E) + \delta g(E) \\ &= \frac{E}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} + \frac{1}{\hbar \omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi \omega_2 / \omega_1)} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar \omega_1}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar \omega_2} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi \omega_1 / \omega_2)} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar \omega_2}\right). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Das Resultat stimmt mit der exakten Zustandsdichte überein, vergleiche (D.3) in Anhang D.2.1. Dies ist eine Besonderheit des harmonischen Oszillators, welche sich auch in drei und höheren Dimensionen bestätigt [11]. Im Allgemeinen lässt sich für ein integrables System im besten Fall ein Spektrum erwarten, wie es sich aus einer EBK–Quantisierung ergeben würde [17, 18, 19]. Jedoch selbst wenn die EBK–Quantisierung exakt sein sollte, können im Resultat der Gutzwiller–Formel zusätzliche Fehler auftreten: Sie entstehen durch die Näherungen an stationären Phasen, die beim Übergang vom zeitabhängigen semiklassischen Propagator zur energieabhängigen Green–Funktion sowie deren Spur–Bildung durchgeführt werden. Dies tritt beispielsweise beim zweidimensionalen rechtwinkligen Billard auf: Bereits Gutzwiller bemerkte [3, 5], dass in zwei Dimensionen die semiklassische energieabhängige Green–Funktion eines freien Teilchens nur mit der asymptotischen Form des exakten Resultats übereinstimmt.⁴

⁴Im Gegensatz zu einer und drei Dimensionen [8].

Kapitel 3

Eine Spurformel für Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien

3.1 Periodische Orbits und kontinuierliche Symmetrien

Warum ist es wichtig, sich im Rahmen semiklassischer Näherungen und Spurformeln mit Symmetrien zu beschäftigen? Die bisher betrachteten Näherungen bauen ganz entscheidend auf der Gültigkeit der Auswertung von Integralen an stationären Phasen auf. Diese geht in Gegenwart kontinuierlicher Symmetrie im Allgemeinen verloren: Orbits treten meist nicht mehr isoliert auf, sondern können zu Orbit-Familien entarten: Die Symmetrie in Form einer Lie-Gruppe definiert eine Abbildung im klassischen Phasenraum, die einen gegebenen klassischen Orbit auf einen anderen, infinitesimal benachbarten Orbit stetig abbildet, der die gleichen klassischen Eigenschaften besitzt. Insbesondere weist er die selbe Wirkung auf. Semiklassische Näherungen, die die Existenz isolierter Extremalstellen der Wirkung entlang gewisser Richtungen relativ zum Orbit voraussetzen, schlagen deshalb fehl. Ein Beispiel tritt bereits bei der Herleitung der gewöhnlichen Gutzwiller-Formel für isolierte Orbits auf: Das Spurintegral der Green-Funktion wird in der Richtung des Orbits exakt ausgeführt, weil die Wirkung entlang klassischer Trajektorien konstant bleibt. Diese Richtung entspricht gerade dem Phasenfluss, der durch das Hamiltonsche Vektorfeld der Hamilton-Funktion erzeugt wird.

Es wird davon ausgegangen, dass der Leser mit den Grundlagen der Theorie über Symmetrien in der Quantenmechanik und klassischen Mechanik vertraut ist, so wie sie sich beispielsweise in [20, 21, 22, 23, 12] findet. Eine Symmetrie sei durch die Existenz einer endlichen Anzahl von Operatoren des Hilbert-Raums definiert, die eine Lie-Algebra bezüglich des Kommutators bilden und mit dem Hamilton-Operator \hat{H} vertauschen. Die Operatoren werden als infinitesimale Generatoren der zugehörigen Lie-Gruppe aufgefasst. Betrachten wir diesen Sachverhalt vom Blickwinkel der klassischen Mechanik: Der $2d$ -dimensionale Phasenraum $\mathcal{P} = \mathbb{R}^{2d}$ lässt sich durch die kartesischen Koordinaten $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ beschreiben. In \mathcal{P} wirke eine Lie-Gruppe \mathcal{G} als eine Gruppe symplektischer Diffeomorphismen, d.h. als eine Gruppe stetig differenzierbarer Abbildungen (mit stetig differenzierbaren Inversen), die die natürliche symplektische 2-Form $\Omega^2 = d\Omega^1$ des Phasenraums erhalten. Wir verwenden hier und im Folgenden die Bezeichnungen aus Anhang B auf Seite 103.

Die Abbildungen wirken als kanonische Transformationen und lassen die Form der Hamiltonschen Gleichungen invariant. Jede einparametrische Untergruppe $g^{\theta_i} \subset \mathcal{G}$ definiere einen Phasenfluss $g^{\theta_i} \mathbf{x}$ in \mathcal{P} mit dem zugehörigen Hamiltonschen Vektorfeld

$$\mathbf{X}_i = \left. \frac{d}{d\theta_i} \right|_{\theta_i=0} g^{\theta_i}(\mathbf{x}) \in T\mathcal{P}_{\mathbf{x}}, \quad (3.1)$$

das durch die Hamiltonschen Funktionen

$$F_i : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}, \quad F_i(\mathbf{x}) = \Omega^1(\mathbf{X}_i), \quad \mathbf{X}_i \in T\mathcal{P}_{\mathbf{x}}$$

induziert wird. Sei für die Parameter $\theta_i = 0$ die Identität (das neutrale Element) der Lie-Gruppe fixiert. Dann sind die Vektoren \mathbf{X}_i Elemente des Tangentialraums an der Identität der Lie-Gruppe und bilden die Lie-Algebra der Gruppe. Entsprechend bilden die Hamiltonschen Funktionen F_i eine Lie-Algebra mit der Poisson-Klammer $\{\cdot, \cdot\}$. Sie sind nach dem Noether-Theorem Erhaltungsgrößen des Systems. Wir notieren die Funktionen $F_i(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ zusammenfassend als Vektor $\mathbf{F} = (F_1, F_2, \dots, F_k)$. Sie sollen neben der Hamiltonfunktion $H =: F_0$ die einzigen Erhaltungsgrößen sein. Im Falle einer abelschen Symmetriegruppe sind die Erhaltungsgrößen voneinander unabhängig und kommutieren paarweise:

$$\{F_i, F_j\} = 0, \quad i, j = 0, 1, \dots, k.$$

In diesem Fall lässt sich die Zahl der freien Koordinaten des $2d$ -dimensionalen Phasenraums \mathcal{P} um die insgesamt $k + 1$ Erhaltungsgrößen vollständig reduzieren [12]. Doch viele physikalisch bedeutende Symmetriegruppen sind nicht-abelsch, zum Beispiel die Drehgruppe $O(3)$ im dreidimensionalen Konfigurationsraum. Ihre Generatoren, im Falle der $O(3)$ die Komponenten des dreidimensionalen Drehimpulsvektors, kommutieren nicht. Zwar gibt eine räumliche Symmetrie des Systems oft die Erhaltungsgrößen vor, im Allgemeinen können jedoch erste Integrale des Systems auch auf Symmetriegruppen beruhen, für die sich keine direkte anschauliche Interpretation anbietet. Es kann also zunächst durchaus eine schwierige Aufgabe sein, die vollständige Symmetrie zu identifizieren. Wir gehen davon aus, dass dies bereits gelungen ist.

Man betrachte nun den Phasenfluss $g^{\theta_i} = J dF_i$ entlang dem Hamiltonschen Vektorfeld dF_i , parametrisiert durch den kontinuierlichen Parameter θ_i . J bezeichnet die $2d \times 2d$ symplektische Einheitsmatrix. Da F_i und H kommutieren, sind g^{θ_i} und der Fluss g^t der Hamilton-Funktion H voneinander unabhängig. So wird jedes g^{θ_i} eine Symmetrieoperation für den Hamiltonschen Fluss im Phasenraum. Falls auch die ersten Integrale untereinander kommutieren, können die zugeordneten Phasenflüsse global unabhängig voneinander wirken. Das einfachste Beispiel ist sicherlich der Fall $k = 1$, da jedes erste Integral mit sich selbst kommutiert. Dies liegt beispielsweise in einem zweidimensionalen Kreis-Billard vor; die zweite Erhaltungsgröße neben der Energie ist der Drehimpuls. Er generiert um die Achse des Drehimpulses eine Rotation im Konfigurationsraum, die das System und die Form der Hamiltonschen Gleichungen invariant lässt. Sie wird üblicherweise mit einem Drehwinkel $\theta \in [0, 2\pi)$ parametrisiert.

Für ein dreidimensionales kugelsymmetrisches System können die Symmetrieoperationen zum Beispiel durch drei Euler-Winkel parametrisiert werden. Im Unterschied zur ebenen axialen Symmetrie ist die dreidimensionale Drehgruppe jedoch nicht-abelsch, so dass die zu den Erhaltungsgrößen gehörenden Phasenflüsse nicht global unabhängig wirken können.

Die Parametrisierung der Symmetriegruppe lässt sich durch den Vektor $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$ ausdrücken. Wir bekommen so eine Abbildung $g^{\boldsymbol{\theta}}$, die durch Hintereinanderausführung der Einzeloperationen definiert ist:

$$g^{\boldsymbol{\theta}} \equiv g^{\theta_k} g^{\theta_{k-1}} \dots g^{\theta_1}.$$

Falls die Phasenflüsse kommutieren, spielt die Reihenfolge der Anordnung keine Rolle. Durch $g^{\boldsymbol{\theta}}$ wird ein gegebener Orbit γ_0 im Phasenraum auf einen entsprechenden, durch

den Wert von θ charakterisierten Orbit abgebildet:

$$\gamma_{\theta} = g^{\theta} \gamma_0.$$

Werden für jeden Parameter θ_i jeweils alle möglichen Werte der zugehörigen Definitionsmenge D_i der Parametrisierung zugelassen, entsteht als Bild eine ganze Orbit-Familie. Diese wollen wir mit Γ bezeichnen:

$$\Gamma = \left\{ g^{\theta} \gamma_0 \mid \theta_i \in D_i, \quad i = 1, \dots, k \right\}.$$

Dabei können wir natürlich von einem beliebigen Vertreter γ_0 der Familie ausgehen. Legen wir jedoch einen erzeugenden Orbit fest, dann ist ein Punkt der Menge Γ durch Wahl von θ sowie der Zeit t gegeben (t ist der natürliche Parameter für die Position auf dem Orbit $g^{\theta} \gamma_0$). Die Zahlen $(t, \theta_1, \dots, \theta_k)$ bilden also ein natürliches Koordinatensystem der Orbitfamilie Γ . Für eine gegebene diskrete Anzahl Orbits, die in ihrer Periode und Wirkung verschieden sind, erhalten wir eine diskrete Anzahl diesbezüglich verschiedener Orbit-Familien.

3.2 Eine verallgemeinerte Spurformel

Wie können wir nun vorgehen, wenn die semiklassische Näherung der Spur der Green-Funktion innerhalb einer Orbit-Familie nicht anwendbar ist? Der einfachste Ausweg besteht darin, die Integrale für eben diese „Richtungen“ nicht mehr näherungsweise, sondern nun exakt auszuführen. Das erscheint brauchbar, wenn die Symmetriegruppe des Systems bekannt ist. Denn dann lässt sich das Integral über den Bereich, der von einer Orbit-Familie eingenommen wird, in ein entsprechendes Integral über die Gruppenparameter überführen. Dabei kommt in natürlicher Weise das zugehörige Maß für ein Integral über eine Gruppe, das sogenannte Haar-Maß, ins Spiel. Im Wesentlichen bleibt aber die Form der Gutzwillerschen Spurformel auch für Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien bestehen, wenn auch die auftretenden Größen in einen allgemeineren Rahmen zu fassen sind.

Für eine ausführliche Herleitung einer solchen verallgemeinerten Spurformel sei auf [19, 24, 25] verwiesen. Im Folgenden sollen die wichtigsten Schritte skizziert werden. Wir beschränken die Rechnung dabei auf den Fall abelscher Symmetrien. Die Diskussion lässt sich auf nicht-abelsche Symmetrien (in nichttrivialer Weise) verallgemeinern, liefert aber für das Resultat im Wesentlichen nur einen zusätzlich auftretenden Faktor. Die Rechnungen sind hierzu jedoch wesentlich komplexer, weil diese Art von Symmetrien keine einfache Einschränkung von unabhängigen Variablen erlaubt: Die Orbit-Familie bildet im Phasenraum eine Mannigfaltigkeit, deren Dimension größer oder gleich $k + 1$ ist. Die Gleichheit gilt notwendig nur für abelsche Gruppen. Denn nur kommutierende erste Integrale erlauben eine volle Reduktion der freien Variablen des Systems um die Anzahl der Erhaltungsgrößen. Für nicht-abelsche Gruppen bildet die Orbit-Familie möglicherweise eine Hyperfläche, deren Dimension größer als $(k + 1)$ ist, weil die durch die ersten Integrale erzeugten Phasenflüsse nicht global frei wirken können. Diese Tatsache muss bei einer Integration über eine entsprechende Orbitfamilie mit in Betracht gezogen werden und lässt die Rechnungen entsprechend aufwendig werden. Sie erfordern die allgemeine Theorie der Reduktion symplektischer Mannigfaltigkeiten und der

coadjungierten Darstellung von Lie-Gruppen, so wie sie sich zum Beispiel in [26, 12] findet. Durch die Ausführung wäre hier nicht viel gewonnen, denn die Struktur und die wesentlichen Ideen werden schon bei der Diskussion abelscher Symmetrien deutlich, und darauf soll es uns ankommen.

Wir können also davon ausgehen, dass der Anteil der zur Orbit-Familie gehörenden Phasenraumvariablen, über die wir bei der Spurbildung der Green-Funktion integrieren, sicher genau $(k + 1)$ -dimensional ist. Sei nun im Folgenden ein klassischer Orbit gegeben. Wir wählen lokale Koordinaten $(q_{||}, \mathbf{q}_{\perp})$ des Orbits, $q_{||}$ zeigt in jedem Punkt der Trajektorie in Richtung des Phasenflusses der Hamilton-Funktion und \mathbf{q}_{\perp} sind die Vektoren senkrecht zu dieser Richtung. Der Orbit ist also durch $\mathbf{q}_{\perp} = 0$ festgelegt. Die Auswertung des Integrals für die $(d - 1)$ transversalen Komponenten \mathbf{q}_{\perp} mit der Methode der stationären Phase führt zu der Bedingung, gerade die klassischen *periodischen* Orbits in Betracht zu ziehen. Diese Methode können wir nun nur mehr für $(d - 1 - k)$ Komponenten anwenden, da die Wirkung entlang k Komponenten von \mathbf{q}_{\perp} konstant bleibt. Die Bedingung stationärer Phase liefert nun Orbits, für die im Allgemeinen nur $d - k$ transversale Anfangs- und Endimpulse übereinstimmen. Wir nennen diese Orbits *quasiperiodisch*, da sie durch eine zusätzliche Symmetrie-Operation geschlossen werden können. Wir schreiben für das auszuführende Integral nun:

$$\int_{\mathbb{R}^d} d^d q = \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \int_{\mathbb{R}} dq_{||} d^{d-1} q_{\perp} \rightarrow \int_{\mathbb{R}^{d-1-k}} \int_{\mathcal{G}} \int_{\mathbb{R}} dq_{||} d^k \mu(g) d^{d-1-k} q_{\perp}. \quad (3.2)$$

Dabei bezeichnet das k -dimensionale Maß $\mu(g)$ das so genannte Haar-Maß der Lie-Gruppe \mathcal{G} . Die Integration läuft über alle Gruppenelemente g . Bei der praktischen Berechnung des Gruppen-Integrals werden wir im Allgemeinen auf eine geeignete Parametrisierung der Gruppe zurückgreifen. Dies führt (ähnlich dem Übergang von kartesischen zu sphärischen Koordinaten) zu einem zusätzlichen Dichtefaktor im Integral für die euklidischen Parameter nach dem Prinzip

$$\left(\begin{array}{c} \text{invariantes} \\ \text{Volumenelement} \\ \text{der Gruppe} \end{array} \right) = (\text{Dichte}) \times \left(\begin{array}{c} \text{euklidisches} \\ \text{Volumenelement} \end{array} \right).$$

Die Integration der übrigen Komponenten von \mathbf{q}_{\perp} , die durch die Symmetriegruppe nicht erreicht werden, wird nach wie vor mit einer Näherung an stationären Phasen durchgeführt.¹ Dieser Anteil kann wie in der Gutzwiller-Formel behandelt werden: Er liefert eine Stabilitätsmatrix, die die Linearisierung einer Poincaré-Abbildung darstellt. Diese Abbildung enthält nun jedoch nur die Stabilität für die Komponenten des Orbits, die durch die Symmetrie nicht „abgedeckt“ werden.

Wir sind bis jetzt immer von der semiklassischen Green-Funktion $G_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$ in Ortsdarstellung ausgegangen. Dies führte bei der Berechnung der Zustandsdichte zu einem d -dimensionalen Spur-Integral über die Variablen des Ortsraums. Abhängig von der Dimension der Lie-Gruppe entsteht jedoch dadurch eventuell ein Problem: Falls

¹Diese Näherung ist nicht für Kurzzeit-Trajektorien anwendbar. Sie liefern den stetigen Thomas-Fermi-Beitrag zur Zustandsdichte, der durch die Existenz von Symmetrien nicht verändert wird [19], und wie üblich berechnet werden kann. Im Folgenden soll uns ausschließlich der oszillierende Anteil der Zustandsdichte interessieren.

die Dimension hinreichend groß ist, ist es möglich, dass einige Parameter der Gruppe und gewisse übrige transversale q_{\perp} Koordinaten den gleichen Raumbereich beschreiben und sich deswegen die Integrationen in (3.2) überlappen (d.h. bestimmte Raumbereiche in der Integration fälschlicherweise mehrfach berücksichtigt werden). Es sollten also folgende Fälle unterschieden werden: Falls $k + 1 \leq d$, kann die Integration über die Gruppe formal als entsprechender Teil der $(d - 1)$ -dimensionalen Integration über die transversalen Komponenten gesehen werden (nur eben exakt und nicht näherungsweise). Anschließend wird über eventuell übrige transversale Komponenten näherungsweise integriert. Im Grenzfall $k + 1 = d$ nimmt das Gruppenintegral vollständig den Platz der transversalen Integration ein. Betrachten wir als Beispiel das zweidimensionale Kreisbillard: Die Integration über die q_{\parallel} Komponente entlang des Orbits ist nach wie vor eindimensional und wird exakt ausgeführt; diese führt uns zur entsprechenden Periode des Orbits. Die Integration über die übrige Dimension wird durch die Integration über den Gruppenparameter (den Drehwinkel ϕ) abgedeckt. Die Spur wird hier also exakt berechnet, eine Stabilitätsmatrix tritt in der Spur-Formel nicht mehr auf.

Falls nun aber $k + 1 > d$, entsteht oben beschriebenes Problem. Es ist aus diesem Grund einfacher, von vornherein eine gemischte Darstellung der Greenschen Funktion zu benutzen:

$$G(\mathbf{p}, \mathbf{q}', E) = \left\langle \mathbf{p} \left| \frac{1}{E - \hat{H}} \right| \mathbf{q}' \right\rangle.$$

Eine semiklassische Näherung dieser Darstellung ergibt sich analog zu den Betrachtungen, die zum Van Vleck-Propagator führen und lautet [19]:

$$G_{\text{skl}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}', E) = \frac{(2\pi i \hbar)^{(1-2d)/2}}{i \hbar} \sum_{j \in \{\text{ko}\}} |\mathcal{D}_j|^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} (S_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) - i \mu_j \frac{\pi}{2} \right) \quad (3.3)$$

mit

$$\mathcal{D}_j = \det \left(\frac{\partial(\mathbf{p}', t)}{\partial(\mathbf{p}, E)} \Big|_{\mathbf{q}'} \right). \quad (3.4)$$

Dieser Ausdruck ist konsistent mit der entsprechenden Ortsdarstellung, es wird über alle klassischen Orbits „ko“ summiert, die im Ortsraum bei \mathbf{q}' starten und im Impulsraum bei \mathbf{p} enden. Wir bilden die Spur von (3.3), indem wir über \mathbf{p} und \mathbf{q}' integrieren; das Integral erstreckt sich jetzt über $2d$ statt vorher nur d Variablen. Damit ist es auch für $k + 1 > d$ möglich, die zur Richtung des Orbits und der Symmetrieparameter gehörenden Integrationsvariablen abzuspalten und in ein Integral der Form $\int dq_{\parallel} d^k \mu(g)$ zu transformieren. Für die Spur finden wir mit $S_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) - \mathbf{p} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{q}') = S_j(\mathbf{p}, \mathbf{q}', E)$:

$$\text{Tr } G_{\text{skl}}(E) = \frac{(2\pi i \hbar)^{(1-2d)/2}}{i \hbar} \sum_{j \in \{\text{ko}\}} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} |\mathcal{D}_j|^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_j(\mathbf{p}, \mathbf{q}', E) - i \mu_j \frac{\pi}{2} \right) d^d p d^d q'. \quad (3.5)$$

Die Variablen $(\mathbf{p}, \mathbf{q}')$ werden nun zu einem neuen Vektor zusammengefasst, der aus zwei Anteilen $\boldsymbol{\eta}$ und $\boldsymbol{\zeta}$ besteht. Die $k + 1$ Komponenten von $\boldsymbol{\eta}$ sollen die Variablen von $(\mathbf{p}, \mathbf{q}')$ bezeichnen, die zur Integration entlang des Orbits ($\eta_{\parallel} = q_{\parallel}$) und über die Symmetriegruppe gehören. Die anderen $2d - k - 1$ Komponenten werden mit $\boldsymbol{\zeta}$ bezeichnet. (3.5)

nimmt in der neuen Notation nun folgende Form an:

$$\frac{(2\pi i\hbar)^{(1-2d)/2}}{i\hbar} \sum_{j \in \{\text{ko}\}} \int \int |\mathcal{D}_j|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_j(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\zeta}, E) - i\mu_j \frac{\pi}{2}\right) d^{2d-k-1}\zeta d^{k+1}\eta. \quad (3.6)$$

Das Integral über $\boldsymbol{\zeta}$ wird wieder mit Hilfe der Methode der stationären Phase ausgewertet; die Bedingung lautet

$$\frac{\partial S_j}{\partial \boldsymbol{\zeta}} = 0.$$

Dies führt zu quasiperiodischen Orbits wie wir sie oben angesprochen haben. Für einen gegebenen Vertreter einer Familie Γ liefern die übrigen $\boldsymbol{\eta}$ Komponenten die Integration über diese Familie. Die klassische Wirkung aller Orbits innerhalb einer Familie ist gleich und wird mit S_Γ bezeichnet. Auf diese Weise lässt sich folgender Ausdruck finden:

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl}}(E) &= \frac{(2\pi i\hbar)^{-k/2}}{i\hbar} \sum_{\Gamma \in \{\text{fpo}\}} \int_{\mathbb{R}^{k+1}} \left[|\mathcal{D}|^{1/2} \left| \det \left(\frac{\partial^2 S_\Gamma}{\partial \boldsymbol{\zeta} \partial \boldsymbol{\zeta}} \right) \right|^{-1/2} \right. \\ &\quad \left. \times \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_\Gamma - i\sigma_\Gamma \frac{\pi}{2}\right) \right] d^{k+1}\eta, \end{aligned} \quad (3.7)$$

wobei sich die Summe über alle Familien von periodischen Orbits „fpo“ erstreckt und σ_Γ den Maslov–Index analog zur Gutzwiller–Formel bezeichnet. Die Summation über mehrfache Wiederholungen primitiver Orbits ist hier implizit in der Summation über Γ enthalten.

Mit einigen trickreichen Determinanten–Umformungen und der mehrfachen Benutzung der Kettenregel kann gezeigt werden [19, 24], dass sich die Integration in (3.7) formal zu einer Integration entlang des Orbit sowie einer Integration über das Haar–Maß der Symmetriegruppe \mathcal{G} transformieren lässt. Dabei entsteht ein Transformationsfaktor K_Γ , der nur invariante Größen der Orbit–Familie und der Symmetriegruppe enthält. Das Ergebnis für die Spur der Green–Funktion ist

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl}}(E) &= \frac{(2\pi i\hbar)^{-k/2}}{i\hbar} \sum_{\Gamma \in \{\text{fpo}\}} |K_\Gamma|^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_\Gamma - i\sigma_\Gamma \frac{\pi}{2}\right) \int_{\mathcal{G}} \int_0^{T_{\text{p},\Gamma}} dt d\mu(g) \\ &= \frac{(2\pi i\hbar)^{-k/2}}{i\hbar} \sum_{\Gamma \in \{\text{fpo}\}} \frac{T_{\text{p},\Gamma} V_\Gamma}{|K_\Gamma|^{1/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_\Gamma - i\sigma_\Gamma \frac{\pi}{2}\right). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Es ergibt sich somit ein $(k+1)$ –dimensionales Volumenintegral in Größen der natürlichen Parametrisierung $(t, \boldsymbol{\theta})$ der Familie Γ . Die Integration über t liefert die primitive Periode $T_{\text{p},\Gamma}$ der Orbits in Γ . Der Index „p“ wurde gewählt, um die primitive Periode von der Periode T_Γ mehrfacher Wiederholungen zu unterscheiden. Die Integration über das Haar–Maß der Symmetriegruppe ergibt ein Volumen, das wir mit V_Γ bezeichnen.

Die Größe K_Γ ist ein Produkt aus drei Faktoren:

$$K_\Gamma = Q \det W_\Gamma \det(\tilde{M}_\Gamma - \mathbf{I}). \quad (3.9)$$

Der Ausdruck $\det(\tilde{M}_\Gamma - I)$ ist uns bereits aus der gewöhnlichen Spur-Formel bekannt. Die $2(d - k - 1) \times 2(d - k - 1)$ -Matrix \tilde{M}_Γ gibt die Linearisierung einer Poincaré-Abbildung an. Der Unterschied zur Stabilitätsmatrix der Gutzwiller-Formel ist folgender: Durch die Methode der stationären Phasen werden (im vollen Phasenraum gesehen) nur mehr quasiperiodische Orbits bedingt. Dies bedeutet, dass zwar eine zeitliche Entwicklung eines Punktes in Γ für eine Periode T_Γ zu keinem geschlossenen Orbit führt, eine anschließende Symmetrieoperation g^{θ_Γ} den Orbit jedoch schließen kann. So lässt sich in natürlicher Weise eine verallgemeinerte Periode $(T_\Gamma, \theta_\Gamma)$ definieren. Der Ausdruck „quasiperiodisch“ bedeutet hier also „geschlossen bis auf Symmetrie“. Die Stabilitätsmatrix eines solchen quasiperiodischen Orbits gibt nur die Stabilität für die Komponenten des Phasenraums an, die nicht der zeitlichen Entwicklung entlang des Orbits und der Richtung von Symmetrieoperationen entsprechen. Wir können uns (zumindest für abelsche Symmetrien) von vornherein die Entwicklung des Systems in einem durch die Konstanten der Bewegung reduzierten $(2d - k - 1)$ -dimensionalen Phasenraum vorstellen. Quasiperiodische Orbits des Phasenraums werden in dieser Weise zu echt periodischen Orbits im symmetrie-reduzierten Phasenraum. Für diese wird eine Poincaré-Abbildung wie üblich auf einer transversalen Schnittfläche durch Festlegung beliebiger Anfangsparameter (t_0, θ_0) definiert. Die Poincaré-Abbildung wirkt somit auf $2(d - k - 1)$ -dimensionalen Flächen im (vollen) Phasenraum. Ihre Linearisierung ist \tilde{M} . Beide Sichtweisen, also die Zeitentwicklung des Orbits mit anschließender Rückführung durch Symmetrie-Operation (in der Literatur als „reduced surface of section mapping“ bezeichnet) und eine entsprechende Poincaré-Abbildung im reduzierten Phasenraum („surface of section mapping in reduced phase space“) sind gleichwertig.

Der mittlere Faktor in (3.9) ist durch die symmetrische Matrix

$$W = \left(\frac{\partial \theta_\Gamma(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \right) \quad (3.10)$$

bestimmt. Die Parameter $\theta_\Gamma = (\theta_{\Gamma,1}, \dots, \theta_{\Gamma,k})$, ausgedrückt durch die ersten Integrale \mathbf{F} , geben die zusätzlich erforderliche Symmetrie-Operation an, um einen Orbit aus der Familie Γ nach der zeitlichen Periode T_Γ im vollen Phasenraum zu schließen. $\det W$ ist also ein Maß dafür, inwieweit periodische Orbits des reduzierten Phasenraums auch im vollen Phasenraum periodisch sind oder ihren Anfangspunkt nach der entsprechenden Anzahl von Wiederholungen verfehlen.

Es bleibt, den Faktor Q in (3.9) anzusprechen. Dieser hängt von der Kommutativität der vorgegebenen Symmetriegruppe ab. Wir sind bis jetzt von einer abelschen Gruppe ausgegangen. Für diesen Fall tritt Q nicht auf, ist also identisch 1. Für nicht-abelsche Gruppen können die Argumente, die zu (3.8) geführt haben, verallgemeinert werden: Es muss berücksichtigt werden, dass die Orbit-Familien Hyperflächen bilden, die im Allgemeinen eine größere Dimension als $k + 1$ haben und die Freiheitsgrade des Systems deshalb nicht einfach um die Anzahl der Konstanten reduziert werden können. Es ergibt sich jedoch eine Spurformel in analoger Weise mit dem zusätzlichen Faktor Q , der die Wahl der Basis der Gruppe und deren Normierung widerspiegelt [24, 27]. Für Systeme, deren Erhaltungsgrößen F_1, F_2 und F_3 eine $SU(2)$ oder $SO(3)$ Algebra bilden, ist $Q = (F_1^2 + F_2^2 + F_3^2)^{-1}$ [24, 27]. Q entspricht hier also dem Inversen des Casimir-Operators der Gruppe. Sind die F_i Drehimpulse, dann entspricht $1/\sqrt{Q}$ dem Betrag des Gesamtdrehimpulses.

Schließlich sollte bemerkt werden, dass der Fall auftreten kann, bei dem die Symmetriegruppe \mathcal{G} im Phasenraum entartet wirkt. Damit ist Folgendes gemeint: Die k -dimensionale Gruppe \mathcal{G} wirkt auf den zugänglichen Phasenraum, das heißt die $2d - 1$ -dimensionale Energie-Hyperfläche. Falls nun $k > 2d - 1$, dann können die infinitesimalen Generatoren auf der Hyperfläche nicht mehr unabhängig und damit „lokal frei“ wirken. Das bedeutet: Zu \mathcal{G} existiert eine kontinuierliche Untergruppe \mathcal{N} der Dimension $k' < k$, die einen gegebenen Orbit γ_0 in sich selbst abbildet. Wir bezeichnen \mathcal{N} als Isotropiegruppe von \mathcal{G} . Dieser Fall tritt zum Beispiel für den isotropen Oszillator mit $d > 1$ auf; die zugehörige Symmetriegruppe ist $U(d)$ und besitzt Dimension d^2 . In solchen Fällen können verschiedene Orbits einer Familie nicht eindeutig durch Gruppenelemente $g \in \mathcal{G}$ gekennzeichnet werden, sondern vielmehr durch Nebenklassen $g\mathcal{N}$. Die Orbits gehören zu $(k - k')$ -parametrischen Familien. Auf \mathcal{G}/\mathcal{N} lässt sich ein zugehöriges Haar-Maß $\tilde{\mu}$ definieren, das die Integration über die Gruppe liefert. Es resultiert eine Spurformel, die die gleiche Form wie (3.8) besitzt, aber über Orbit-Familien bezüglich der Gruppe \mathcal{G}/\mathcal{N} summiert wird.

3.3 Zusammenfassung

Wir schreiben abschließend die Spur der semiklassischen Green-Funktion (3.8) explizit als Summe über Familien aus primitiv periodischen Orbits (abkürzend mit „fppo“ bezeichnet) und ihren Wiederholungen r . Wir erhalten

$$\mathrm{Tr} G_{\mathrm{skl}}(E) = \frac{(2\pi i\hbar)^{-k/2}}{i\hbar} \sum_{\Gamma \in \{\mathrm{fppo}\}} \frac{T_{\Gamma} V_{\Gamma}}{|Q|^{1/2}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} r S_{\Gamma} - i\sigma_{\Gamma,r} \frac{\pi}{2}\right)}{\left|\det W_{\Gamma,r} \det\left(\tilde{M}_{\Gamma}^r - \mathbf{I}\right)\right|^{1/2}}. \quad (3.11)$$

Die semiklassische Näherung für den oszillierenden Anteil der Zustandsdichte lautet dann

$$\begin{aligned} \delta g(E) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\mathrm{Im}(E) \rightarrow 0^+} \mathrm{Im}(\mathrm{Tr} G_{\mathrm{skl}}(E)) \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^{-k/2}}{\pi\hbar} \sum_{\Gamma \in \{\mathrm{fppo}\}} \frac{T_{\Gamma} V_{\Gamma}}{|Q|^{1/2}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\cos(r S_{\Gamma}(E)/\hbar - \sigma_{\Gamma,r} \pi/2 - k\pi/4)}{\left|\det W_{\Gamma,r} \det\left(\tilde{M}_{\Gamma}^r - \mathbf{I}\right)\right|^{1/2}}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

3.4 Beispiele und Ausblick

Eine Anwendung für die Formel (3.12) ist beispielsweise das zweidimensionale Kreisbillard (in der $x - y$ -Ebene). Neben der Energie ist der Drehimpuls $F_1 = L_z = xp_x - yp_y$ eine Erhaltungsgröße des Systems, das deswegen integrabel ist. Bahnen im Inneren des Kreises verlaufen geradlinig und werden nach dem Prinzip „Einfallswinkel = Ausfallswinkel“ an der Berandung reflektiert. Periodische Bahnen lassen sich (in zweidimensionalen Billards allgemein) durch die Zahl N der Ecken und eine Windungszahl w charakterisieren; der Polarwinkel der Reflexionspunkte überstreicht in einer Periode den Wert $2\pi w$. Diese Zuordnung ist jedoch nicht eindeutig: Zu einem Paar (N, w) können mehrere verschiedene Bahnen existieren. Die Erhaltungsgröße L_z erzeugt eine Rotation,

gegenüber der das System invariant bleibt: Es liegt die (kontinuierliche) Symmetriegruppe $U(1)$ vor. Die Kreissymmetrie erzeugt aus einem gegebenen periodischen Orbit (zum Beispiel dem $(2, 1)$ -Orbit entlang des Durchmessers) eine Familie unendlich vieler entarteter Bahnen. Ist die Symmetriegruppe richtig erkannt, liefert die verallgemeinerte Spurformel (3.11) mit einigen rein geometrischen Überlegungen wie der Anzahl der Reflektionspunkte und Länge eines Orbits ein Resultat, wie es beispielsweise Reimann et al. in [28] bestätigt wird: Die Zustandsdichte wurde in diesem Fall direkt über eine dem Problem angepasste Näherung der semiklassischen Green-Funktion ohne explizite Betrachtung von Symmetriegruppen berechnet.

Weitere Beispiele von Billards mit kontinuierlicher Symmetrie sind das gleichschenklige Dreieck oder das Rechteck. Bei diesen Systemen ist der Symmetrieparameter periodischer Bahnen durch den Ort des Startpunkts entlang einer Seite der Berandung gegeben. Weitere Einzelheiten finden sich in [8]. Beide Systeme wurden hier erwähnt, weil sie eine Besonderheit aufweisen: Sie besitzen eine diskrete Symmetrie der Berandung. Beispielsweise lässt jede Drehung des Dreiecks um Vielfache von $2\pi/3$ die Orbits im Billard invariant, oder anders ausgedrückt: Die Orbits im System sind im Allgemeinen zusätzlich 3-fach (diskret) entartet. Eine α_Γ -fache diskrete Entartung berücksichtigt man in (3.12) durch Ersetzen von V_Γ durch V_Γ/α_Γ .

Eine weitere, jedoch höchst nicht-triviale Anwendung der Spurformel ergibt sich für den zweidimensionalen isotropen harmonischen Oszillator. Die Orbit-Familien werden durch die vierdimensionale Symmetriegruppe $U(2)$ erzeugt [27]. Diese nicht-abelsche Gruppe wirkt im Phasenraum auf der dreidimensionalen Energie-Hyperfläche lokal abhängig; dadurch müssen alle auf Seite 21 erwähnten Hinweise für nicht-abelsche, entartet-wirkende Gruppen berücksichtigt werden. Insbesondere ist die Bestimmung des Phasenindex $\sigma_{\Gamma,r}$ keine leichte Aufgabe; tatsächlich fehlt bis heute eine allgemeine Methode zur Berechnung der Phasenindizes für Systeme mit höher-dimensionalen, nicht-abelschen Symmetrien. Weitere Anmerkungen dazu können im Anhang A.3.2 gefunden werden. Wir widmen dem isotropen Oszillator auf Seite 45 ein eigenes Kapitel. Dort wollen wir auch erstmals versuchen, die Zustandsdichte des anisotropen Oszillators mit beliebigem rationalen Frequenzverhältniss innerhalb der semiklassischen Näherungen zu berechnen. Wir werden feststellen, dass wir uns dabei auch mit der Frage beschäftigen müssen, wie mit Systemen umzugehen ist, die außer einer kontinuierlichen Symmetrie eine zusätzliche diskrete Symmetrie besitzen.

Kapitel 4

Orbitfamilien und Reduktion diskreter Symmetrien

In den vorherigen Kapiteln haben wir semiklassische Näherungen der Zustandsdichte für Systeme mit sowohl rein isolierten periodischen Orbits als auch für Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien und ihren Orbit-Familien betrachtet. In der Praxis treten jedoch oft Fälle auf, bei denen eine zusätzliche, diskrete Symmetrie vorhanden ist: Dies kann zum Beispiel die Symmetrie sein, die die Berandung eines Billards vorgibt, wie etwa in zwei Dimensionen bei einem Quadrat Drehungen um $\pi/2$. Das Auftreten einer diskreten Symmetrie muss natürlich nicht immer so anschaulich sein, wie in diesem Beispiel. Insbesondere schränken wir die Wirkung der Symmetrie nicht auf den Ortsraum ein, sondern erlauben den gesamten Phasenraum.

Aus einer diskreten Symmetrie lässt sich im Allgemeinen nicht wie bei einer kontinuierlichen Symmetrie die Erhaltung einer physikalischen Größe folgern und damit die Dimension des Phasenraums reduzieren. Sie lässt es jedoch zu, die volle Dynamik auf ein Teilstück des Phasenraums zu beschränken, da sich die Dynamik außerhalb durch Symmetrie fortsetzen lässt. Es stellt sich die Frage, auf welche Weise sich die semiklassische Zustandsdichte eines Systems mit diskreter Symmetrie entsprechend reduzieren lässt.

Wir werden dazu in diesem Kapitel eine Verallgemeinerung der bis jetzt betrachteten semiklassischen Spurformeln herleiten. Wir folgen dabei Robbins [29], Lauritzen [30] und Seligman et al. [31]. Die Diskussion in der Literatur beschränkt sich jedoch auf die Gutzwillersche Formel und daher auf isolierte Orbits. Wir verallgemeinern nun die Theorie auf Systeme, bei denen Orbit-Familien auftreten.

Das Vorgehen ist wie folgt: Das Auftreten einer Symmetrie des Hamilton-Operators \hat{H} erlaubt die Zerlegung des Hilbert-Raums in invariante Unterräume, die zu irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe gehören. Das gilt sowohl für diskrete als auch kontinuierliche Gruppen. Wir betrachten die Projektion auf die Unterräume der diskreten Symmetrie. Die dazu nötige Notation führen wir im ersten Abschnitt 4.1 des Kapitels ein.

Im zweiten Abschnitt behandeln wir zunächst den oszillierenden Anteil der Zustandsdichte. Wir projizieren dazu die energieabhängige Green-Funktion und erhalten entsprechend reduzierte Funktionen, die sich semiklassisch nähern lassen. Sie liefern Spurformeln für Dichten, die zu den jeweiligen irreduziblen Darstellungen gehören. Sie werden im Folgenden meist einfach als reduzierte Zustandsdichten bezeichnet. Wir zeigen anschließend, dass der oszillierende Anteil der vollen Zustandsdichte durch Summation der reduzierten Dichten rekonstruiert werden kann.

Im dritten Abschnitt reduzieren wir den stetigen Thomas-Fermi-Anteil der Zustandsdichte. Wir berechnen dabei die Projektionen auf die Unterräume mit Hilfe der Wigner-Transformation des Projektionsoperators.

In letzten Abschnitt 4.4 demonstrieren wir schließlich die Anwendung der Formeln für

den inkommensurablen Oszillator. Wir finden eine vollständige Zerlegung der Zustandsdichte bezüglich der irreduziblen Darstellungen der Spiegelsymmetrie. Die Reduktion wird sich anschaulich durch das Auftreten zweier unterschiedlicher Typen des selben periodischen Orbits verstehen lassen.

Der Nutzen des allgemeinen Resultats, der Reduktion ganzer Orbitfamilien, wird erst im nächsten Kapitel sichtbar werden, in dem wir uns mit dem zweidimensionalen Oszillator mit rationalem Frequenzverhältnis beschäftigen: Er bietet eine natürliche und anschauliche Anwendung für ein System mit sowohl kontinuierlicher als auch diskreter Symmetrie.

4.1 Die Projektion

Wir gehen von einer diskreten Symmetriegruppe \mathcal{C} aus, die den Hamilton-Operator \hat{H} des Systems invariant lässt. Die Gruppe bestehe aus Elementen $c \in \mathcal{C}$, deren Wirkung im Hilbert-Raum durch unitäre Operatoren $\hat{U}(c)$ dargestellt werden können. Es gilt

$$\hat{H} = \hat{U}(c)\hat{H}\hat{U}^\dagger(c), \quad c \in \mathcal{C}.$$

Im Folgenden wird mit „ e “ die Identität der Gruppe bezeichnet. Wir nehmen weiter an, dass die Gruppe im klassischen Phasenraum \mathcal{P} wie eine kanonische Transformation wirkt und mit dem Hamiltonschen Fluss $JdH(t)$ vertauscht. Das bedeutet

$$JdH(t) = c(JdH(t))c^{-1}, \quad c \in \mathcal{C}.$$

Die Gruppe \mathcal{C} erlaubt eine Zerlegung des quantenmechanischen Hilbert-Raums \mathcal{H} in Unterräume \mathcal{H}_λ , die unter der Wirkung von \mathcal{C} invariant sind:

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda} \mathcal{H}_\lambda.$$

Der Hamilton-Operator \hat{H} kann auf die jeweiligen Unterräume eingeschränkt werden und lässt sich damit blockdiagonalisieren [20, 21, 32]. Wir können schreiben

$$\hat{H} = \bigoplus_{\lambda} \hat{H}_\lambda,$$

wobei \hat{H}_λ die Einschränkung von \hat{H} auf den λ -ten Block bedeutet. Ein invarianter Unterraum kann im Allgemeinen weiter in invariante Unterräume niedriger Dimension zerlegt werden. Dies führt schließlich auf eine Zerlegung von \mathcal{H} in Unterräume, die nicht weiter reduziert werden können. Die Einschränkung von $\hat{U}(c)$ auf einen solchen Raum definiert eine irreduzible, unitäre Darstellung von \mathcal{C} . Die Anzahl der irreduziblen Darstellungen einer diskreten Gruppe ist abzählbar und durch die Anzahl der Konjugationsklassen bestimmt [23], wir nummerieren diese mit der ganzen Zahl $\lambda \in \mathbb{N}_0$. Die orthogonale Projektion auf den irreduziblen Unterraum λ ist gegeben durch den Operator [22]:

$$\hat{P}_\lambda = \frac{d_\lambda}{|\mathcal{C}|} \sum_{c \in \mathcal{C}} \chi_\lambda^*(c) \hat{U}(c). \quad (4.1)$$

Die Summe läuft über alle Gruppenelemente, $\chi_\lambda(c)$ gibt den Charakter der Konjugationsgruppe des jeweiligen Elements in der λ -ten irreduziblen Darstellung an. d_λ ist die Dimension der irreduziblen Darstellung und $|\mathcal{C}|$ die Gruppenordnung.

4.2 Reduktion des oszillierenden Anteils

4.2.1 Semiklassische Näherung im reduzierten Phasenraum

Wir betrachten die Projektion der energieabhängigen Green-Funktion $\hat{G}(E) = (E - \hat{H})^{-1}$ auf einen irreduziblen Unterraum von \mathcal{C} . Die auf die λ -te irreduzible Darstellung von \mathcal{C} reduzierte Green-Funktion lautet dann

$$\hat{G}_\lambda(E) = \hat{P}_\lambda(E - \hat{H})^{-1}\hat{P}_\lambda = \hat{P}_\lambda(E - \hat{H})^{-1}. \quad (4.2)$$

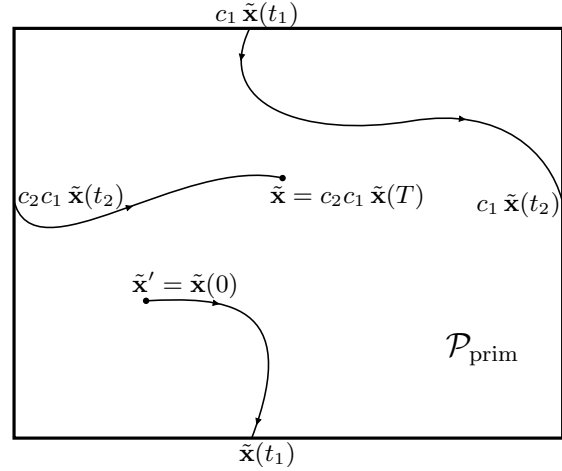
Dabei wurde ausgenutzt, dass \hat{P} mit \hat{H} vertauscht und außerdem die Eigenschaft $\hat{P}^2 = \hat{P}$ eines Projektionsoperators erfüllt.

Es ist nun möglich, für die reduzierte Green-Funktion die üblichen semiklassischen Näherungen durchzuführen, analog zur Vorgehensweise, wie sie in den Kapiteln 2 und 3 vorgestellt wurde. Dies liefert einen entsprechenden Ausdruck, der jedoch mit Vorfaktoren modifiziert werden muss, die sich aus (4.1) ergeben [29, 31, 33]. Wir arbeiten mit der Green-Funktion in gemischter Darstellung, also in Orts- und Impulskoordinaten. Diese Darstellung ist vorteilhaft, wenn nach Reduktion weitere, insbesondere nicht-abelsche kontinuierliche Symmetrien vorhanden sind (siehe Seite 19). Aus (4.2) folgt mit (3.3) für die semiklassische Näherung der reduzierten Green-Funktion:

$$\begin{aligned} G_{\text{skl},\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{q}', E) &= \frac{d_\lambda}{|\mathcal{C}|} \sum_{c \in \mathcal{C}} \chi_\lambda^*(c) G_{\text{skl}}(c \mathbf{p}, \mathbf{q}', E) \\ &= \frac{(2\pi i \hbar)^{(1-2d)/2}}{i \hbar} \frac{d_\lambda}{|\mathcal{C}|} \sum_{\substack{j \in \{\text{ko}\} \\ \mathbf{q}' \rightarrow c \mathbf{p} \\ c \in \mathcal{C}}} \left[\chi_\lambda^*(c) |\mathcal{D}_j|^{1/2} \right. \\ &\quad \left. \times \exp \left(\frac{i}{\hbar} (S_j(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) - i \mu_j \frac{\pi}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Die Summe läuft über klassische Orbits „ko“, die bei Energie E vom Anfangsort \mathbf{q} zu Endimpulsen $c \mathbf{p}$, $c \in \mathcal{C}$, laufen. Neben dem gewohnten Orbit $\mathbf{q}' \rightarrow \mathbf{p}$ treten also explizit alle Orbits mit Impulsen $c \mathbf{p}$ am Ende auf, die durch Symmetrie miteinander in Beziehung stehen. Wir können die weiteren Überlegungen auf einen beliebigen Orbit dieser Menge beschränken, denn nach Voraussetzung erhält die Symmetriegruppe die symplektische Form $\mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ und damit die in (4.3) auftretenden Größen. Es ist deshalb sinnvoll, den Phasenraum \mathcal{P} auf einen symmetrie-reduzierten Phasenraum \mathcal{P}_{red} einzuschränken und (4.3) in den Koordinaten von \mathcal{P}_{red} auszudrücken. Zur Konstruktion von \mathcal{P}_{red} betrachten wir eine Teilmenge $\mathcal{P}_{\text{prim}} \subset \mathcal{P}$ des Phasenraums mit der Eigenschaft, dass unter der Wirkung aller Gruppenelemente von \mathcal{C} auf $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ der gesamte Phasenraum überdeckt wird. Die Überdeckung soll (bis auf Randpunkte von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$) disjunkt sein. Wir nennen $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ dann eine primitive Einheitszelle des Phasenraums. Der Begriff ist in Analogie zum Begriff der Einheitszelle gewählt, wie er in der Festkörperphysik Verwendung findet. Innerhalb einer primitiven Einheitszelle können keine zwei verschiedenen Punkte durch nichttriviale Symmetrioperation aufeinander abgebildet werden. Durch Identifikation von Punkten auf dem Rand von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$, die bezüglich von Symmetrioperationen aus \mathcal{C} in Beziehung stehen, also durch Zusammenheften von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ an diesen Punkten,

Abbildung 4.1: Eine Trajektorie in der primitiven Einheitszelle. Sie startet im Punkt $\tilde{\mathbf{x}}'$ und stößt zum Zeitpunkt t_1 an die untere Berandung. Von dort aus springt die Trajektorie zum Symmetriepunkt $c_1 \tilde{\mathbf{x}}(t_1)$, der zum Beispiel auf der oberen Berandung liegt und entwickelt sich von dort aus weiter. Zur Zeit $t = t_2$ springt sie ein weiteres mal bis sie schließlich bei $t = T$ zum Endpunkt $\tilde{\mathbf{x}}$ angelangt ist. Sie hat insgesamt die Symmetrieoperation $c_2 c_1$ aufgesammelt.



erzeugen wir den symmetrie-reduzierten Raum \mathcal{P}_{red} mit Koordinaten $(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}})$. Er ist ein eigener Phasenraum für sich, denn er erbt die symplektische Form $d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}$ von \mathcal{P} .

Orbits des vollen Phasenraums können auf Orbits des reduzierten Raums abgebildet werden und andersherum: Sei ein Orbit in \mathcal{P} vom Punkt $\mathbf{x}(t=0) = \mathbf{x}' = (\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ zum Punkt $\mathbf{x}(t=T) = \mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ vorgegeben. Wir können die Lage der primitiven Einheitszelle so wählen, dass der Anfangspunkt in ihr liegt. Der Endpunkt der Trajektorie liegt im Allgemeinen außerhalb, ist jedoch durch eine entsprechende Symmetrieoperation c_e mit einem Punkt $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathcal{P}_{\text{prim}}$ verbunden:

$$\tilde{\mathbf{x}} = c_e \mathbf{x}. \quad (4.4)$$

Lassen wir nun $\mathbf{x}(t)$ und ebenso die zugehörige Trajektorie $\tilde{\mathbf{x}}(t)$ der Einheitszelle zeitlich entwickeln. Die beiden Trajektorien stimmen anfangs überein. Nach einer gewissen Zeit können die Trajektorien an den Rand von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ stoßen. Sei dies zur Zeit t_1 zum ersten Mal der Fall. Während sich der Orbit $\mathbf{x}(t)$ in \mathcal{P} stetig weiterentwickelt, springt der Randpunkt $\tilde{\mathbf{x}}(t_1)$ zu dem ihm symmetrischen Punkt $c_1 \tilde{\mathbf{x}}(t_1)$, $c_1 \in \mathcal{C}$, der ebenfalls auf dem Rand von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ liegt. Die zeitliche Entwicklung innerhalb von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ geht dann vom zweiten Randpunkt aus weiter, bis zur Zeit t_2 wieder ein Randpunkt erreicht wird, und so weiter. Der Vorgang wird in Abbildung 4.2.1 veranschaulicht. Die Orbits sind in $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ also unstetig und werden erst durch die Identifikation dieser Punkte bei der Faltung zu \mathcal{P}_{red} stetig. Die Abbildung von Randpunkt zu Randpunkt ist in zwei Fällen trivial ($c_1 = e$): Zum einen, wenn der Randpunkt ein stationärer Punkt des Systems ist. Das bedeutet jedoch, dass er bereits als Startpunkt gewählt wurde, denn ein stationärer Phasenraumpunkt wird nicht von einer Trajektorie gekreuzt. Der andere, interessantere Fall tritt auf, wenn Orbits existieren, die komplett auf dem Rand der Einheitszelle liegen. Diese müssen bei der Symmetrie-Reduktion besonders behandelt werden. Wir werden im folgenden Abschnitt darauf zurückkommen. Schließlich ist zur Zeit T der Endpunkt der Trajektorie des vollen Phasenraums erreicht. Die Sprünge der projizierten Trajektorie bis zur Zeit T können durch eine Funktion $c(T)$ aufgesammelt werden: Fixieren wir $c(0) = e$ und nehmen an, dass zur Zeit t_k der k te Randkontakt

mit Symmetrie c_k vorliegt. Dann gilt mit der Heavside–(Stufen)Funktion $\Theta(t)$:

$$\begin{aligned} c(t) &= \Theta(t_1 - t) e \\ &\quad + \Theta(t - t_1)\Theta(t_2 - t) c_1 e \\ &\quad + \Theta(t - t_2)\Theta(t_3 - t) c_2 c_1 e + \dots \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die Funktion $c(t)$ ist stückweise konstant und macht nur dann Sprünge, wenn ein Randpunkt von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ erreicht ist. In $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ bekommen wir:

$$\tilde{\mathbf{x}}(T) = c(T)\mathbf{x}(T).$$

Das Gruppenelement $c(T)$ gibt also gerade die Symmetrieoperation c_e aus (4.4) an, die den Endpunkt der Trajektorie $\mathbf{x}(t)$ und den Endpunkt der auf $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ projizierten Trajektorie $\tilde{\mathbf{x}}(t)$ verbindet. Ein vorgegebener Orbit in \mathcal{P} lässt sich auf diese Weise auf einen Orbit in $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ (beziehungsweise in \mathcal{P}_{red}) abbilden. Die Umkehrung der Projektion ist nicht eindeutig, denn durch die Festlegung eines Orbits $\tilde{\mathbf{x}}' \rightarrow \tilde{\mathbf{x}}$ in \mathcal{P}_{red} werden alle Orbits im vollen Phasenraum ausgezeichnet, die bei $\tilde{\mathbf{x}}(0)$ starten und bei Punkten $c\tilde{\mathbf{x}}(T)$, ($c \in \mathcal{C}$), enden. Die Summe in (4.3) kann deswegen auch als Summe über Orbits in \mathcal{P}_{red} von $\tilde{\mathbf{q}}'$ zu $\tilde{\mathbf{p}}$ geschrieben werden. Größen wie die klassische Wirkung und die Van Vleck–Determinante bleiben wegen der Erhaltung der Form $\mathbf{p}\cdot\mathbf{dq}$ unter kanonischer Transformation invariant [29, 12] und können in $\tilde{\mathbf{x}}$ Koordinaten geschrieben werden. Wir erhalten

$$\begin{aligned} G_{\text{skl},\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{q}', E) &= \frac{(2\pi i\hbar)^{(1-2d)/2}}{i\hbar} \frac{d_\lambda}{|\mathcal{C}|} \sum_{\substack{j \in \{\text{ko}\} \\ \tilde{\mathbf{q}}' \rightarrow \tilde{\mathbf{p}}} } \left[\chi_\lambda^*(c(T_j)) \left| \tilde{\mathcal{D}}_j \right|^{1/2} \right. \\ &\quad \left. \times \exp \left(\frac{i}{\hbar} (S_j(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{q}}', E) - \tilde{\mathbf{p}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}) - i\mu_j \pi/2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.6)$$

4.2.2 Die reduzierte Zustandsdichte

Nun können wir ausgehend von (4.6) die Spur der Green–Funktion bilden, um einen Ausdruck für die reduzierte Zustandsdichte zu gewinnen. Dazu integrieren wir über \mathbf{p} und \mathbf{q}' , genau wie in (3.5). Der Integrationsbereich erstreckt sich über den gesamten Phasenraum \mathcal{P} . Da die Größen in (4.6) nur von Koordinaten des reduzierten Phasenraums abhängen, können wir den Integrationsbereich auf $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ einschränken und das Integral mit der Gruppenordnung multiplizieren ($\mathcal{P}_{\text{prim}}$ ist eine disjunkte Überdeckung von \mathcal{P}). Die Näherung an stationären Phasen liefert eine Bedingung für quasiperiodische Orbits, wie sie in Kapitel 3 besprochen wurden, nun allerdings für Orbits in \mathcal{P}_{red} . Die Auswertung des Integrals kann analog wie in den Gleichungen (3.3) bis (3.11) erfolgen und ergibt mit den dortigen Bezeichnungen

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl},\lambda}(E) &= \frac{(2\pi i\hbar)^{-k/2}}{i\hbar} d_\lambda \sum_{\tilde{\Gamma} \in \{\text{fppo}\}_{\text{red}}} \frac{T_{\tilde{\Gamma}} V_{\tilde{\Gamma}}}{|Q|^{1/2} |\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}|} \\ &\quad \times \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\chi_\lambda^*(c_{\tilde{\Gamma},r}) \exp \left(\frac{i}{\hbar} r S_{\tilde{\Gamma}} - i\sigma_{\tilde{\Gamma},r} \frac{\pi}{2} \right)}{\left| \det W_{\tilde{\Gamma},r} \det \left(\tilde{M}_{\tilde{\Gamma}}^r - \mathbf{I} \right) \right|^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Zu dieser Gleichung sind noch einige Bemerkungen notwendig: Die erste Summe erstreckt sich über alle Familien $\tilde{\Gamma}$ von primitiv periodischen Orbits im reduzierten Phasenraum, die zweite Summe zählt die Wiederholungen r der primitiven Periode $T_{\tilde{\Gamma}}$. Ein periodischer Orbit in \mathcal{P}_{red} mit primitiver Periode $T_{\tilde{\Gamma}}$ ist in \mathcal{P} im Allgemeinen nicht periodisch, die Anfangs- und Endpunkte stehen jedoch durch diskrete Symmetrie miteinander in Verbindung. Bei genügender Anzahl von Wiederholungen des primitiv periodischen Orbits schliesst sich auch der Orbit in \mathcal{P} : der periodische Orbit in \mathcal{P}_{red} ist also ein Teilstück eines periodischen Orbits des vollen Phasenraums. Tatsächlich ist die Stückelung zeitlich äquidistant, denn der Hamiltonsche Fluss, parametrisiert durch die Zeit, vertauscht mit den Operationen der Symmetriegruppe. Wir werden dies im Abschnitt 4.2.4 über die Rekonstruktion der vollen Zustandsdichte genauer begründen.

$\chi_\lambda(c_{\tilde{\Gamma}})$ ist der Charakter des Gruppenelements, das alle Symmetrioperationen bei Randkontakten von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ für einen Orbit aus $\tilde{\Gamma}$ aufammelt. Wiederholungen r der primitiven Periode müssen explizit berücksichtigt werden.

Die Spurformel enthält eine $2(d - k - 1)$ -dimensionale Stabilitätsmatrix $\tilde{M}_{\tilde{\Gamma}}$, vorausgesetzt, eine eventuell in \mathcal{P}_{red} wirkende kontinuierliche Symmetriegruppe füllt nicht den gesamten reduzierten Phasenraum aus und es werden Richtungen in stationärer Phasennäherung integriert. Die Stabilitätsmatrix eines gegebenen Orbits im reduzierten Phasenraum unterscheidet sich jedoch von der Stabilitätsmatrix $\tilde{m}_{\tilde{\Gamma}}$ der zugehörigen (im Allgemeinen nicht geschlossenen) Trajektorie im vollen Phasenraum [30], denn die Symmetrioperation $c_{\tilde{\Gamma},r}$, die den Orbit von \mathcal{P} auf $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ projiziert, muss miteinbezogen werden. Als Bezeichnung wurde ein Kleinbuchstabe gewählt, denn $\tilde{m}_{\tilde{\Gamma}}$ entspricht nicht einer Stabilität eines geschlossenen Orbits in \mathcal{P} . Berücksichtigen wir die zusätzliche Symmetrietransformation durch ihre entsprechende Linearisierung $\tilde{L}_{c_{\tilde{\Gamma},r}}$, dann stehen beide Stabilitätsmatrizen auf folgende Weise zueinander in Beziehung:

$$\tilde{M}_{\tilde{\Gamma}}^r = \tilde{L}_{c_{\tilde{\Gamma},r}} \tilde{m}_{\tilde{\Gamma}}^r = \begin{pmatrix} \frac{\partial(c_{\tilde{\Gamma},r}, \mathbf{q}_\perp)}{\partial \mathbf{q}_\perp} & 0 \\ 0 & \frac{\partial(c_{\tilde{\Gamma},r}, \mathbf{p}_\perp)}{\partial \mathbf{p}_\perp} \end{pmatrix} \tilde{m}_{\tilde{\Gamma}}^r. \quad (4.8)$$

Die Komponenten $(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{p}_\perp)$ von (\mathbf{q}, \mathbf{p}) kennzeichnen hier Richtungen „senkrecht“ zur Orbit-Familie, also die Richtungen, die in stationärer Phasennäherung integriert werden. $\tilde{L}_{c_{\tilde{\Gamma},r}}$ ist die Untermatrix einer Darstellung $L_{c_{\tilde{\Gamma},r}}$ des Gruppenelementes $c_{\tilde{\Gamma},r}$ und wirkt in dem Unterraum $\{(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{p}_\perp)\}$ des Phasenraums. Sie trägt daher wie die Stabilitätsmatrix ein Tilde.¹

Im Vergleich zur Spurformel (3.12) tritt in (4.7) noch eine zusätzliche Größe auf: Ein Faktor $|\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}|$, der für eine korrekte Behandlung von Randorbits sorgt. Orbits, die auf Rändern der primitiven Einheitszelle liegen, stellen sich in unterschiedlicher Weise als problematisch heraus: Der Integrationsbereich des Spur-Integrals wurde auf die Einheitszelle eingeschränkt und das Integral mit der Anzahl der Gruppenelemente multipliziert. Üblicherweise wird für eine Familie $\tilde{\Gamma}$, bei der Richtungen „senkrecht“ zur Familie in zweiter Ordnung der Wirkung integriert werden, der Integrationsbereich dieser Integration ins Unendliche ausgedehnt. Ränder können dabei ignoriert werden, wenn

¹Beachte den Unterschied: Ein Tilde bei Matrix-Darstellungen $\tilde{L}_{c_{\tilde{\Gamma},r}}$ bedeutet die Einschränkung der Darstellung auf den für die Stabilität relevanten Unterraum, während ein Tilde im Index wie für die Orbitfamilie $\tilde{\Gamma}$ die Symmetriereduktion von Γ auf den reduzierten Phasenraums kennzeichnet.

der Abstand zwischen Orbit und Rand makroskopisch ist. Dies ist im Allgemeinen der Fall. In der Einheitszelle liegen jedoch Ränder vor, die es im vollen Phasenraum nicht gibt. Diese Ränder sind Symmetrieflächen in \mathcal{P} , also Oberflächen, die punktweise durch eine Untergruppe $\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}} \subset \mathcal{C}$ invariant bleiben. Liegt eine Orbitfamilie auf einer derartigen Fläche, ist das obige Integrationsverfahren für die primitive Einheitszelle nicht gerechtfertigt. Wir können jedoch speziell für diese Orbits eine Einheitszelle wählen, die nur die Symmetrie berücksichtigt, die die Orbits nicht invariant lässt, also bezüglich $\mathcal{C}/\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}$ definiert ist.² Unter der Wirkung von $\mathcal{C}/\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}$ überdeckt dieser Bereich den gesamten Phasenraum, so dass das Ergebnis der Integrale insgesamt um die Gruppenordnung $|N_{\tilde{\Gamma}}|$ reduziert wird [29].

Ein zweites Problem betrifft die Behandlung der Stabilität der Randorbits. Sie können andere Stabilitäten aufweisen, als wenn der Rand nicht vorhanden wäre. Dies lässt sich folgendermaßen verstehen: Denken wir uns einen Randorbit um eine infinitesimale Größe ϵ von der Symmetrieoberfläche in die primitive Einheitszelle verschoben. Kennzeichnen wir den verschobenen Endpunkt des Orbits durch $\tilde{\mathbf{x}}_\epsilon$. Dann ist die linearisierte Poincaré-Abbildung zwischen Anfangs- und Endpunkt wohldefiniert. Bei der zeitlichen Entwicklung zwischen den Punkten sammelt der Orbit gewisse Symmetrieeoperationen auf, die durch $c_{\tilde{\Gamma},r}$ berücksichtigt werden. Ist der Endpunkt erreicht, dann ist es jetzt zusätzlich möglich, mit Symmetrieeoperationen $n \in N_{\tilde{\Gamma}}$ den Endpunkt auf die Punkte $n \tilde{\mathbf{x}}_\epsilon$ abzubilden, denn diese fallen im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ wieder zusammen. Genau diese Symmetrieeoperation muss analog zu (4.8) *zusätzlich* in die Stabilitätsmatrix mit eingehen. Insgesamt wird die Stabilitätsmatrix $\tilde{m}_{\tilde{\Gamma}}^r$ also mit $\tilde{L}_n \tilde{L}_{c_{\tilde{\Gamma},r}}$, $n \in N_{\tilde{\Gamma}}$, modifiziert.

4.2.3 Zusammenfassung

Wir können nun zusammenfassend versuchen, die Überlegungen für Randorbits in der Spurformel (4.7) explizit auszudrücken. Alle durch Randorbits in die Formel eingehende Größen werden ausgeschrieben, insbesondere oben angesprochene Symmetrieeoperationen n . Dadurch lässt sich die Operation $c_{\tilde{\Gamma},r}$ für mehrfache Wiederholungen der primitiven Periode einfach als Produkt $c_{\tilde{\Gamma}}^r$ schreiben.

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl},\lambda}(E) &= \frac{(2\pi i \hbar)^{-k/2} d_\lambda}{i \hbar} \sum_{\tilde{\Gamma} \in \{\text{fppo}\}_{\text{red}}} \frac{T_{\tilde{\Gamma}} V_{\tilde{\Gamma}}}{|Q|^{1/2} |\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}|} \\ &\times \sum_{n \in \mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\chi_\lambda^*(n c_{\tilde{\Gamma}}^r) \exp\left(\frac{i}{\hbar} r S_{\tilde{\Gamma}} - i \sigma_{\tilde{\Gamma},r} \frac{\pi}{2}\right)}{\left| \det W_{\tilde{\Gamma},r} \det \left(\tilde{L}_n \tilde{M}_{\tilde{\Gamma}}^r - \text{I} \right) \right|^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

mit

$$\tilde{M}_{\tilde{\Gamma}} = \tilde{L}_{c_{\tilde{\Gamma}}} \tilde{m}_{\tilde{\Gamma}}$$

und

$$\tilde{L}_c = \begin{pmatrix} \frac{\partial(c \mathbf{q}_\perp)}{\partial \mathbf{q}_\perp} & 0 \\ 0 & \frac{\partial(c \mathbf{p}_\perp)}{\partial \mathbf{p}_\perp} \end{pmatrix}, \quad c \in \mathcal{C}.$$

²Der Übergang zu Nebenklassen ist nicht neu. Ein analoges Vorgehen wurde bereits für kontinuierliche Symmetrien beim Auftreten entartender wirkender Gruppen benutzt. Die entsprechenden Untergruppen wurden dort Isotropiegruppen genannt, siehe Seite 22.

4.2.4 Rekonstruktion

Es stellt sich die Frage, wie sich die volle oszillierende Zustandsdichte $\delta g(E)$ aus den reduzierten Dichten $\delta g_\lambda(E)$ rekonstruieren lässt. Wegen der Vollständigkeit des Projektionsoperators, $\sum_\lambda \hat{P}_\lambda = \hat{I}$, gilt für die Spur der Green-Funktion:

$$\sum_\lambda \text{Tr } \hat{G}_\lambda(E) = \text{Tr } \hat{G}(E). \quad (4.10)$$

Wir wenden die Summation auf die entsprechenden semiklassischen Ausdrücke (4.9) an. Hierbei lässt sich die Orthogonalität der Gruppencharaktere ausnutzen, wenn wir die Summation über die irreduziblen Darstellungen mit den Summationen in (4.9) vertauschen: Für zwei Gruppenelemente c_i, c_j mit ihren Konjugationsklassen $\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j$ gilt [23]:

$$\sum_\lambda d_\lambda \chi_\lambda(c_i) \chi_\lambda^*(c_j) = \frac{|\mathcal{C}|}{|\mathcal{C}_i|} \delta_{c_i, c_j}$$

Setzen wir nun $c_j = e$. Im Hinblick auf unsere späteren Anwendungen nehmen wir vereinfachend an, \mathcal{C} sei abelsch. Dann ist $\chi_\lambda^*(e) = 1$ für alle λ , denn jede irreduzible Darstellung ist eindimensional, $d_\lambda = 1$. Außerdem bildet jedes Gruppenelement seine eigene Konjugationsklasse und es ist $|\mathcal{C}_i| = 1$. Ein Vergleich mit (4.9) zeigt, dass jeweils nur der Term zur Summe (4.10) beiträgt, für den es ein r gibt mit:

$$n c_\Gamma^r = e. \quad (4.11)$$

Diese Bedingung bedeutet gerade, dass sich die primitiven Orbits aus der Familie $\tilde{\Gamma}$ des reduzierten Phasenraums nach r Wiederholungen auch im vollen Phasenraum \mathcal{P} schließen sollen. Denn die Operation $n c_\Gamma^r$ verbindet ja gerade Anfangs- und Endpunkt einer entsprechenden Trajektorie in \mathcal{P} . Zur Summe tragen also nur periodische Orbits des vollen Phasenraums bei, so wie wir es auch erwarten würden. Die Zahl r kann natürlich für verschiedene primitive Familien $\tilde{\Gamma}$ unterschiedlich sein. Wir wählen r so, dass es jeweils die kleinste Zahl ist, die die Bedingung (4.11) erfüllt. Dann sind die erzeugten periodischen Orbits in \mathcal{P} primitiv. Die zugehörigen Familien bezeichnen wir mit Γ .³ Die Stabilitätsmatrix in (4.9) geht dann ebenfalls in einen entsprechenden Ausdruck über:

$$L_n \tilde{M}_\Gamma^r = L_n \underbrace{L_{c_\Gamma^r}}_{=L_e=I} \tilde{m}_\Gamma^r = \tilde{m}_\Gamma^r.$$

\tilde{m}_Γ^r ist gerade die Stabilitätsmatrix für einen primitiv periodischen Orbit im vollen Phasenraum \mathcal{P} . Wir hatten diese mit \tilde{M}_Γ bezeichnet.

$$\tilde{m}_\Gamma^r = \tilde{M}_\Gamma.$$

Im reduzierten Phasenraum wirkt die gleiche kontinuierliche Symmetriegruppe wie im vollen Phasenraum, deswegen ist

$$V_\Gamma = V_\Gamma,$$

³Beachte, dass Γ nun kein Tilde $\tilde{}$ mehr trägt.

außerdem folgt aus der Definition des reduzierten Raums

$$rS_{\tilde{\Gamma}} = S_{\Gamma}.$$

Auch der Maslov-Index $\sigma_{\tilde{\Gamma},r}$ der r -ten Wiederholung eines Orbits aus $\tilde{\Gamma}$ ist gerade der Index des zugehörigen primitiven Orbits aus Γ ,

$$\sigma_{\tilde{\Gamma},r} = \sigma_{\Gamma,1},$$

denn er ist eine topologische Eigenschaft des primitiv periodischen Orbits in \mathcal{P} , die nicht vom speziellen Startpunkt der Trajektorie und damit einer speziellen Wahl der Einheitszelle abhängen darf.

Es stellt sich insbesondere noch die Frage, wie wir die Summe über alle Familien primitiv periodischer Orbits aus \mathcal{P}_{red} (siehe (4.9)) in eine Summe über alle Familien primitiv periodischer Orbits aus \mathcal{P} umschreiben können. Dies ist nicht ohne weiteres möglich. Wir müssen beachten, dass bei der Projektion auf den reduzierten Raum gewisse unterschiedliche Familien aus \mathcal{P} auf nur jeweils eine Familie in \mathcal{P}_{red} abgebildet worden sein können, einfach weil die Projektion nicht eineindeutig ist. Die projizierte Familie wird in der zugehörigen Summe in (4.9) nur einfach gezählt. Deswegen läuft die entsprechende Summe also nicht über alle Familien des vollen Phasenraums, sondern nur über solche, die sich bezüglich der diskreten Symmetrie voneinander unterscheiden. Damit haben wir bis jetzt erhalten:

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl}}(E) &= \sum_{\lambda} \text{Tr } G_{\text{skl},\lambda}(E) \\ &= \frac{(2\pi i\hbar)^{-k/2}}{i\hbar} \sum_{\substack{\Gamma \in \{\text{fppo}\} \\ \text{Sym. verschieden}}} \frac{|\mathcal{C}|T_{\tilde{\Gamma}}V_{\Gamma}}{|Q|^{1/2}|\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}|} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}kS_{\Gamma} - i\sigma_{\Gamma,k}\frac{\pi}{2}\right)}{\left|\det W_{\Gamma,k} \det\left(\tilde{M}_{\Gamma}^r - \mathbf{I}\right)\right|^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Alle Familien Γ , die auf *eine* Familie $\tilde{\Gamma}$ abgebildet wurden, und *nicht* mehrfach gezählt werden, würden in gleicher Weise zur Zustandsdichte beitragen. Die Summation lässt sich deswegen auf alle Familien ausdehnen, wenn wir gleichzeitig die Summe durch die Anzahl der jeweiligen Familien teilen. Diese Anzahl erhalten wir so: Sei ein Orbit aus Γ gegeben. Dann sei \mathcal{H}_{Γ} die Untergruppe von \mathcal{C} , die den Orbit invariant lässt. Dies muss nicht notwendig punktweise sein, wir wollen nur durch Anwenden von \mathcal{H}_{Γ} auf den Orbit wieder den selben Orbit erhalten. \mathcal{H}_{Γ} muss von $\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}$ unterschieden werden, denn $\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}$ ist die Gruppe, die den Orbit punktweise invariant lässt. $\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}$ ist also eine Untergruppe von \mathcal{H}_{Γ} .

Die Anzahl der Familien ist dann einfach $|\mathcal{C}|/|\mathcal{H}_{\Gamma}|$ und damit

$$\sum_{\substack{\Gamma \in \{\text{fppo}\} \\ \text{Sym. verschieden}}} \frac{|\mathcal{C}|T_{\tilde{\Gamma}}}{|\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}|} = \sum_{\Gamma \in \{\text{fppo}\}} \frac{|\mathcal{H}_{\Gamma}|T_{\tilde{\Gamma}}}{|\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}|}.$$

Jetzt wird klar, dass sich auch die primitive Periode $T_{\tilde{\Gamma}}$, die wir bis jetzt außen vor gelassen haben, entsprechend umschreiben lässt. Man muss sich nur die Bedeutung

der Gruppe $\mathcal{H}_\Gamma/\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}$ überlegen: Die Gruppe bildet jeden Punkt eines Orbits aus Γ auf einen echt verschiedenen Punkt des selben Orbits ab. Das Bild kann jedoch nicht in der selben Einheitszelle wie der Ursprungspunkt liegen, denn die Zelle ist primitiv. Das Bild liegt also außerhalb, und zwar gerade auf dem nächsten der Teilstücke, aus denen der Orbit zusammengesetzt ist. Insgesamt ist die Orbitfamilie in r Teile zerlegt worden, da nach r Durchläufen eines Orbits aus $\tilde{\Gamma}$ die primitive Periode von Γ erreicht ist. Also ist $|\mathcal{H}_\Gamma|/|\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}| = r$ und damit

$$\frac{|\mathcal{H}_\Gamma|T_{\tilde{\Gamma}}}{|\mathcal{N}_{\tilde{\Gamma}}|} = rT_{\tilde{\Gamma}} = T_\Gamma.$$

Die Summation über alle irreduziblen Darstellungen führt uns also tatsächlich zurück auf die Spurformel (3.11) für den oszillierenden Anteil der vollen Zustandsdichte

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl}}(E) &= \sum_\lambda \text{Tr } G_{\text{skl},\lambda}(E) \\ &= \frac{(2\pi i\hbar)^{-k/2}}{i\hbar} \sum_{\Gamma \in \{\text{fpp}\}} \frac{T_\Gamma V_\Gamma}{|Q|^{1/2}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}kS_\Gamma - i\sigma_{\Gamma,k}\frac{\pi}{2}\right)}{\left|\det W_{\Gamma,k} \det\left(\tilde{M}_\Gamma^r - I\right)\right|^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Dieses Ergebnis lässt sich insbesondere dann ausnutzen, falls wir uns für die volle Zustandsdichte eines Systems interessieren, die Klassifikation der periodischen Orbits hinsichtlich ihrer kontinuierlichen Symmetrie jedoch im diskret reduzierten Phasenraum leichter fällt.

Wir kommen darauf beim kommensurablen harmonischen Oszillator zurück. Zunächst leiten wir die Reduktion des stetigen Anteils der Zustandsdichte her und demonstrieren anschließend die Reduktion bezüglich diskreter Symmetrie am inkommensurablen harmonischen Oszillator.

4.3 Reduktion des stetigen Anteils

Die semiklassische Näherung der Zustandsdichte ergibt gewöhnlich eine Summe aus einem stetigen Anteil $\bar{g}(E)$, der aus Beiträgen von Orbits der „Länge 0“ resultiert, und eines oszillierenden Anteils $\delta g(E)$ von Beiträgen klassischer periodischer Orbits. Der stetige Anteil kann mit der klassischen Zustandsdichte, dem sogenannten Thomas–Fermi–Beitrag identifiziert werden [7, 8]. Wir wollen nun auch diesen Beitrag auf die irreduziblen Darstellungen reduzieren und fassen ihn als führenden Term einer asymptotischen Entwicklung der Zustandsdichte in \hbar auf, die meist als Weyl–Entwicklung bezeichnet wird. Dazu führen wir zunächst die Wigner–Transformierte A_W eines Operators \hat{A} ein:

$$A_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \int_{\mathbb{R}^d} \langle \mathbf{q} + \mathbf{q}'/2 | \hat{A} | \mathbf{q} - \mathbf{q}'/2 \rangle \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}'/\hbar) d^d q'. \quad (4.14)$$

Ist der Operator \hat{A} eine Funktion $A(\hat{\mathbf{q}})$ des Ortsoperator $\hat{\mathbf{q}}$ oder $A(\hat{\mathbf{p}})$ des Impulsoperators $\hat{\mathbf{p}}$ allein, so entspricht die Wigner–Transformierte A_W der klassischen Funktion $A(\mathbf{q})$ bzw. $A(\mathbf{p})$ [34]. Die Wigner–Transformierte H_W eines Hamilton–Operators von der Form $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2 + V(\hat{\mathbf{q}})$ stimmt also mit der klassischen Hamilton–Funktion überein, wovon wir im Folgenden ausgehen.

Die Spurbildung eines Operators \hat{A} lässt sich als Integration der Wigner–Transformierten über den $2d$ –dimensionalen Phasenraum schreiben [34]:

$$\mathrm{Tr} \hat{A} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \, d^d q d^d p.$$

Für zwei Operatoren gilt

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}) B_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \, d^d q d^d p.$$

Die Zustandsdichte $g(E)$ können wir durch inverser Laplace–Transformation der Zustandssumme, d.h. der Spur $Z(\beta)$ des Operators $\exp(-\beta\hat{H})$ berechnen, siehe Anhang D. Wir erhalten eine reduzierte Zustandsdichte, wenn wir erst mit Hilfe des Projektionsoperators \hat{P}_λ aus (4.1) die Projektion von $\exp(-\beta\hat{H})$ auf den invarianten Unterraum der irreduziblen Darstellung λ betrachten und danach die inverse Laplace–Transformation durchführen [35]:

$$\begin{aligned} Z_\lambda(\beta) &= \frac{d_\lambda}{|\mathcal{C}|} \sum_{c \in \mathcal{C}} \chi_\lambda^*(c) \mathrm{Tr} \left(\hat{U}(c) \exp(-\beta\hat{H}) \right), \\ g_\lambda(E) &= \mathcal{L}_E^{-1} [Z_\lambda(\beta)]. \end{aligned}$$

Die Spur auf der rechten Seite der ersten Gleichung bilden wir in der Wigner–Darstellung.

Die Wigner–Transformierte von $\exp(-\beta\hat{H})$ stimmt im Allgemeinen jedoch nicht mit $\exp(-\beta H_W)$ überein. Es gilt die Entwicklung [36]:

$$\begin{aligned} \left[\exp(-\beta\hat{H}) \right]_W &= \exp(-\beta H_W) \left[1 + \hbar^2 \left(-\frac{\beta^2}{8} \nabla^2 V + \frac{\beta^3}{24} ((\mathbf{p} \cdot \nabla)^2 V + (\nabla V)^2) \right) \right. \\ &\quad \left. + O(\hbar^4) \right]. \end{aligned}$$

Uns interessiert nur der führende Term, der den stetigen Thomas–Fermi–Anteil liefert. Wir setzen also näherungsweise

$$\left[\exp(-\beta\hat{H}) \right]_W \approx \exp(-\beta H_W)$$

und erhalten die reduzierten, klassischen Zustandssummen

$$Z_{\mathrm{kl}\lambda}(\beta) = \frac{d_\lambda}{|\mathcal{C}|} \sum_{c \in \mathcal{C}} \chi_\lambda^*(c) \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} U_W(c, \mathbf{q}, \mathbf{p}) \exp(-\beta H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p})) \, d^d q d^d p. \quad (4.15)$$

Insbesondere für das neutrale Element der Gruppe ist $\hat{U}(e)$ die Identität und $U_W(e) \equiv 1$. Alle anderen Wigner–Transformationen sind natürlich von der Gruppe selbst abhängig und müssen für den konkreten Fall berechnet werden.

4.4 Symmetriereduktion des inkommensurablen harmonischen Oszillators

Der zweidimensionale harmonische Oszillator, ob kommensurabel oder inkommensurabel, besitzt stets eine diskrete Symmetrie: Das Potential und damit die Hamilton–Funktion ist invariant unter Raumspiegelung, siehe (2.9):

$$V(-q_1, q_2) = V(q_1, -q_2) = V(q_1, q_2).$$

Wir betrachten im Folgenden den inkommensurablen Fall.

$\mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_2$	$e \times e$	$s \times e$	$e \times s$	$s \times s$
$\chi_{(0,0)}$	1	1	1	1
$\chi_{(1,0)}$	1	-1	1	-1
$\chi_{(0,1)}$	1	1	-1	-1
$\chi_{(1,1)}$	1	-1	-1	1

Tabelle 4.1: Charaktertabelle für die Produktgruppe $\mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_2$.

4.4.1 Reduktion auf irreduzible Darstellungen der Spiegelsymmetrie

Die Spiegelung entlang der Achsen des Ortsraums wird jeweils durch die zyklische Gruppe $\mathcal{C}_2 = \{e, s\}$ erzeugt, wobei e das neutrale Element und s die Spiegelung bezeichnet. Insgesamt liegt also die Produktgruppe

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_2 = \{(e \times e), (s \times e), (e \times s), (s \times s)\}.$$

vor. Das Element $(e \times s)$ bedeutet im Ortsraum zum Beispiel eine Spiegelung der q_1 -Koordinate an der q_2 -Achse während die q_2 -Koordinate selbst unverändert bleibt. Die nichttriviale Darstellung dieses Elements im vierdimensionalen Phasenraum lässt sich als 4×4 -Matrix schreiben, ihre Wirkung lautet

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -q_1 \\ q_2 \\ -p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}.$$

Die Gruppe ist abelsch, deswegen sind alle irreduziblen Darstellungen eindimensional [22]. Jedes der vier Elemente bildet seine eigene Klasse, somit existieren 4 irreduzible Darstellungen, die wir mit dem Tupel (λ_1, λ_2) , $\lambda_i \in \{0, 1\}$, nummerieren. In Tabelle 4.1 sind die Charaktere der Gruppenelemente für die einzelnen Darstellung aufgelistet.

Die Symmetrie teilt den Phasenraum \mathcal{P} in vier Teile auf. Wir wählen als primitive Einheitszelle $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ den Bereich mit positiven Ortskoordinaten $\{(q_1 \geq 0, q_2 \geq 0, \mathbf{p})\}$ wie in Abbildung 4.2 dargestellt.

Betrachten wir nun die Spurformel (4.9). Es liegt keine kontinuierliche Symmetrie vor, deswegen ist $k = 0$ und $V_{\Gamma} = Q = \det W_{\Gamma,r} = 1$. Es existieren zwei primitiv-periodische Orbits, die Librationen entlang den (positiven) Koordinatenachsen q_i . Wir bezeichnen die beiden reduzierten Librationen mit \tilde{q}_1 und \tilde{q}_2 . Ihre primitiven Perioden $T_{\tilde{q}_i} = \pi/\omega_i$ sind jeweils halb so groß wie die des vollen Oszillators, da nur die Bewegung im rechten oberen Quadranten des Ortsraums berücksichtigt wird.

Sehen wir uns den Beitrag der \tilde{q}_1 -Mode genauer an. Sei die Anfangsbedingung beispielsweise so gewählt, dass sich der Oszillator im Potentialminimum mit dem Impuls $(p_{1,0}, p_{2,0}) = (\sqrt{2E}, 0)$ befindet. Nach der reduzierten Periode π/ω_1 „stößt“ der Oszillator wieder an der q_2 -Achse mit $(p_1, p_2) = (-\sqrt{2E}, 0)$ an. Der volle Oszillator würde seinen Weg in der negativen q_1 -Halbebene fortsetzen. Diese Bewegung ist symmetrisch zu einer weiteren Wiederholung des reduzierten Orbits in $\mathcal{P}_{\text{prim}}$. Die Punkte (q_1, q_2, p_1, p_2) und $(-q_1, q_2, -p_1, p_2)$ des Phasenraums werden also miteinander identifiziert. Das zugehörige Gruppenelement ist $(e \times s)$. Weiterhin liegt der Orbit auf dem Rand der Einheitszelle, die Gruppenelemente $(e \times e)$ und $(s \times e)$ lassen den Orbit invariant. Mit den

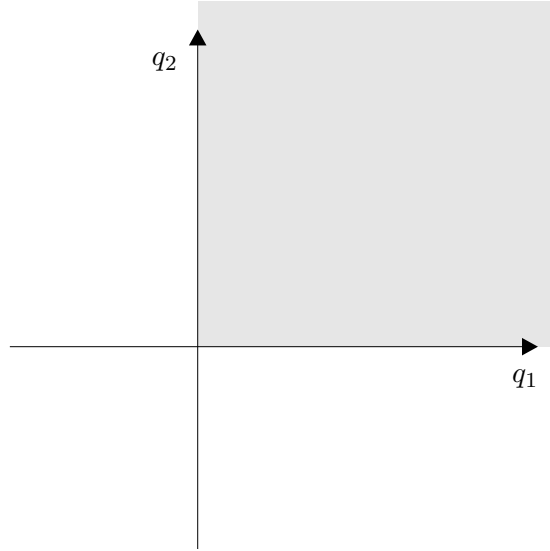


Abbildung 4.2: Die primitive Einheitszelle bezüglich der Spiegelsymmetrie für den harmonischen Oszillator im Ortsraum, grau gekennzeichnet

Bezeichnungen aus (4.9) haben wir gefunden:

$$\begin{aligned} c_{\tilde{q}_1}^r &= (e \times s), \\ \mathcal{N}_{\tilde{q}_1} &= \{(e \times e), (s \times e)\}. \end{aligned}$$

Die Wirkung des Orbits für eine primitive Periode entspricht der Wirkung einer halben Periode des vollen Oszillators (siehe Kapitel 2.2):

$$S_{\tilde{q}_1} = \frac{\pi E}{\omega_1}.$$

Aus (4.9) erhalten wir

$$\text{Tr } G_{\text{skl},(\lambda_1,\lambda_2)}^{(\tilde{q}_1)}(E) = \frac{\pi}{2i\hbar\omega_1} \sum_{n \in \mathcal{N}_{\tilde{q}_1}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\chi_{(\lambda_1,\lambda_2)}^*(n(e \times s)^r)}{|\det(L_n \tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r - \mathbf{I})|^{1/2}} \exp\left(ir \frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - i\sigma_{\tilde{q}_1,n,r} \frac{\pi}{2}\right).$$

Aus der Matrizable $X(t)$ des vollen Oszillators (2.10) erhalten wir durch Spiegelung mit $(e \times s)$ jeweils nach der reduzierten Periode $T_{\tilde{q}_1}$ die Matrizable im reduzierten Phasenraum:

$$X_{\text{red}}(t) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Big|_{\left[t \frac{\omega_1}{\pi}\right]_{\text{int}}} X(t) \quad (4.16)$$

Die Matrizable $X(t)$ des vollen Oszillators nach der halben Periodendauer lautet

$$m_{\tilde{q}_1} = X\left(\frac{\pi}{\omega_1}\right) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \frac{1}{\omega_2} \sin(\pi\omega_2/\omega_1) \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -\omega_2 \sin(\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \cos(\pi\omega_2/\omega_1) \end{pmatrix}.$$

Im reduzierten Phasenraum gilt daher für die Monodromiematrix

$$\begin{aligned}
 M_{\tilde{q}_1} &= X_{\text{red}} \left(\frac{\pi}{\omega_1} \right) = L_{(e \times s)} m_{\tilde{q}_1} \\
 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \frac{1}{\omega_2} \sin(\pi\omega_2/\omega_1) \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -\omega_2 \sin(\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \cos(\pi\omega_2/\omega_1) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \frac{1}{\omega_2} \sin(\pi\omega_2/\omega_1) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\omega_2 \sin(\pi\omega_2/\omega_1) & 0 & \cos(\pi\omega_2/\omega_1) \end{pmatrix}. \tag{4.17}
 \end{aligned}$$

Die Monodromiematrix $M_{\tilde{q}_1}^r$ für die r -te Wiederholung ergibt sich durch Ersetzen von π durch $r\pi$ in (4.17). Sie kann wie üblich um die zwei trivialen Eigenwerte reduziert werden, die Variationen entlang des Flusses und der Energie entsprechen. Eigenvektoren sind offensichtlich die q_1 - und p_1 -Achse des Phasenraums. Die reduzierte Matrix $\tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r$, wie sie in der Formel (4.9) auftritt, ist damit die Reduktion von $M_{\tilde{q}_1}^r$ auf den Unterraum $\{(q_2, p_2)\}$ und lautet

$$\tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r = \begin{pmatrix} \cos(\pi r \omega_2 / \omega_1) & \frac{1}{\omega_2} \sin(\pi r \omega_2 / \omega_1) \\ -\omega_2 \sin(\pi r \omega_2 / \omega_1) & \cos(\pi r \omega_2 / \omega_1) \end{pmatrix}.$$

Da der betrachtete Orbit auf dem Rand der primitiven Einheitszelle liegt und deswegen die Untergruppe $\mathcal{N}_{\tilde{q}_1}$, die den Orbit invariant lässt, nicht-trivial ist, haben wir zwei unterschiedliche Stabilitäten zu unterscheiden: Die Monodromiematrix muss mit den Wirkungen der Elemente n aus $\mathcal{N}_{\tilde{q}_1}$ modifiziert werden. Die zugehörigen Matrizen L_n und ihre Reduktion \tilde{L}_n auf den für die Stabilität relevanten Unterraum $\{(q_2, p_2)\}$ lauten

$$L_{(e \times e)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \tilde{L}_{(e \times e)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und

$$L_{(s \times e)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \longrightarrow \tilde{L}_{(s \times e)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Daraus lassen sich die zugehörigen Amplituden der Spurformel gewinnen, zum einen

$$\det \left(\tilde{L}_{(e \times e)} \tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r - \mathbf{I} \right) = \det \left(\tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r - \mathbf{I} \right) = 4 \sin^2 \left(r\pi \frac{\omega_2}{2\omega_1} \right) \tag{4.19a}$$

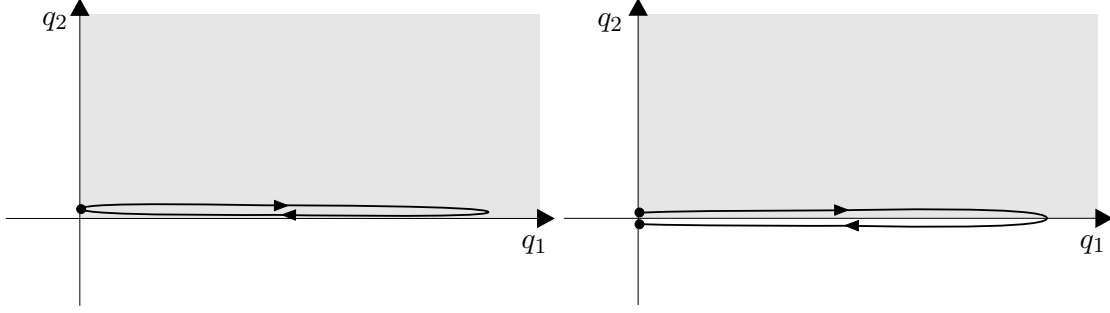


Abbildung 4.3: Qualitative Zeichnung der Libration entlang der q_1 -Achse am Rand der primitiven Einheitszelle, leicht aufgeweitet und in die Einheitszelle hinein verschoben gezeichnet. Es müssen zwei Typen von Trajektorien unterschieden werden. Links: Ein zum neutralen Element $(e \times e) \in \mathcal{N}_{\tilde{q}_1}$ gehörender Orbit, der sich nach der primitiven Periode π/ω_1 schließt. Rechts: Ein nicht geschlossener Orbit, der am Spiegelpunkt des Startpunktes endet, hervorgerufen durch die Wirkung von $(s \times e)$.

und zum anderen

$$\det \left(\tilde{L}_{(s \times e)} \tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r - \mathbf{I} \right) = \det \left(\tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r + \mathbf{I} \right) = 4 \cos^2 \left(r\pi \frac{\omega_2}{2\omega_1} \right). \quad (4.19b)$$

Abbildung 4.3 zeigt qualitativ die zwei unterschiedlichen Typen von Orbits. Beide Typen laufen exakt entlang der q_1 -Achse, verschiebt man den Startpunkt jedoch um eine kleine Größe ϵ in die primitive Einheitszelle hinein, erkennt man, warum die Orbits unterschiedliche Stabilitäten besitzen: Die Trajektorie, die zu $n = (e \times e)$ gehört, läuft nach einer primitiven Periode wieder zum (verschobenen) Startpunkt zurück, während die zu $n = (s \times e)$ gehörende Trajektorie beim Spiegelpunkt bezüglich der q_1 -Achse außerhalb der primitiven Einheitszelle endet. Letztere ist also nicht geschlossen, sie schließt sich erst nach zwei Wiederholungen. Im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ unterscheiden sich jedoch beide Typen von Trajektorien im Phasenraum nicht mehr, weisen aber dennoch unterschiedliche Stabilitäten auf.

Zusammen mit den Charakteren laut Tabelle 4.1 nimmt die Spurformel nun folgende Form an:

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl},(\lambda_1, \lambda_2)}^{(\tilde{q}_1)}(E) &= \frac{\pi}{2i\hbar\omega_1} \left[\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r\lambda_2}}{2|\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)|} \exp \left(ir \frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - i\sigma_{\tilde{q}_1, (e \times e), r} \frac{\pi}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\lambda_1} (-1)^{r\lambda_2}}{2|\cos(r\pi\omega_2/2\omega_1)|} \exp \left(ir \frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - i\sigma_{\tilde{q}_1, (s \times e), r} \frac{\pi}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Die Berechnung der Phasenindizes verläuft analog zum vollen Oszillator, siehe Kapitel 2.2. Für die Bestimmung des ersten Anteils $\mu_{\tilde{q}_1, n, r}$ wählen wir wieder $\mathbf{e}_0 = (0, 0, 0, 1)$ und $\mathbf{f}_0 = (1, 0, 0,)$ und lassen die Vektoren zum einen durch die Matrix $L_{(e \times e)} X_{\text{red}}(t)$ und zum anderen durch $L_{(s \times e)} X_{\text{red}}(t)$ propagieren. Wie in Anhang A.3.1 beschrieben, bilden wir daraus die Matrizen

$$U_{q, n}(t) = \begin{pmatrix} (L_n X_{\text{red}}(t) \mathbf{e}_0)_1 & (L_n X_{\text{red}}(t) \mathbf{f}_0)_1 \\ (L_n X_{\text{red}}(t) \mathbf{e}_0)_2 & (L_n X_{\text{red}}(t) \mathbf{f}_0)_2 \end{pmatrix}, \quad n \in \mathcal{N}_{\tilde{q}_1}.$$

Für $n = (e \times e)$ erhalten wir

$$U_{q,(e \times e)}(t) = \begin{pmatrix} 0 & (-1)^{\lfloor t \frac{\omega_1}{\pi} \rfloor_{\text{int}}} \cos(\omega_1 t) \\ \frac{1}{\omega_2} \sin(\omega_2 t) & 0 \end{pmatrix}$$

und daraus

$$\begin{aligned} \mu_{\tilde{q}_1,(e \times e),r} &= \# \{ \det U_{q,(e \times e)}(t) = 0 \mid 0 < t < r\pi/\omega_1 \} \\ &= r + \left[r \frac{\omega_2}{\omega_1} \right]_{\text{int}} \end{aligned}$$

Analog ergibt sich für $n = (s \times e)$ ebenfalls

$$\mu_{\tilde{q}_1,(s \times e),r} = r + \left[r \frac{\omega_2}{\omega_1} \right]_{\text{int}}.$$

Der zweite Anteil des Phasenindex bestimmt sich durch das Vorzeichen der Größe

$$W_n = \frac{\text{Tr} \left(L_n \tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r \right) - 2}{B_n}$$

mit dem oberen rechten Element B_n von $L_n \tilde{M}_{\tilde{q}_1}^r$. Für $n = (e \times e)$ haben wir $B_{(e \times e)} = \frac{1}{\omega_2} \sin(\pi r \omega_2 / \omega_1)$ und

$$W_{(e \times e)} = \frac{2(\cos(\pi r \omega_2 / \omega_1) - 1)}{\frac{1}{\omega_2} \sin(\pi r \omega_2 / \omega_1)} \begin{cases} < 0 & \text{falls } [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ gerade,} \\ > 0 & \text{falls } [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ ungerade.} \end{cases}$$

Daher ist genau wie in (2.15)

$$\nu_{\tilde{q}_1,(e \times e),r} = \begin{cases} 1 & \text{falls } W_{(e \times e)} < 0 \Leftrightarrow [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ gerade,} \\ 0 & \text{falls } W_{(e \times e)} > 0 \Leftrightarrow [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ ungerade} \end{cases} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} (-1)^{[r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}}}.$$

Für $n = (s \times e)$ ist $B_{(s \times e)} = -\frac{1}{\omega_2} \sin(\pi r \omega_2 / \omega_1)$ und

$$W_{(s \times e)} = \frac{2(\cos(\pi r \omega_2 / \omega_1) + 1)}{\frac{1}{\omega_2} \sin(\pi r \omega_2 / \omega_1)} \begin{cases} < 0 & \text{falls } [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ ungerade,} \\ > 0 & \text{falls } [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ gerade.} \end{cases}$$

Hier ist also gerade umgekehrt

$$\nu_{\tilde{q}_1,(s \times e),r} = \begin{cases} 1 & \text{falls } W_{(s \times e)} < 0 \Leftrightarrow [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ ungerade,} \\ 0 & \text{falls } W_{(s \times e)} > 0 \Leftrightarrow [r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}} \text{ gerade} \end{cases} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} (-1)^{[r \omega_2 / \omega_1]_{\text{int}}}.$$

Die Phasenindizes der zwei Stabilitäten sind demnach verschieden und lauten

$$\sigma_{\tilde{q}_1,(e \times e),r} = \mu_{\tilde{q}_1,(e \times e),r} + \nu_{\tilde{q}_1,(e \times e),r} = r + 1 + 2 \left[r \frac{\omega_2}{2\omega_1} \right]_{\text{int}}$$

und

$$\sigma_{\tilde{q}_1, (s \times e), r} = \mu_{\tilde{q}_1, (s \times e), r} + \nu_{\tilde{q}_1, (s \times e), r} = r + 2 \left[r \frac{\omega_2}{2\omega_1} + \frac{1}{2} \right]_{\text{int}}.$$

Setzen wir diese Ausdrücke schließlich in (4.20) ein, haben wir den Beitrag der q_1 -Mode des harmonischen Oszillators bezüglich der irreduziblen Darstellung (λ_1, λ_2) gefunden:

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\text{skl}, (\lambda_1, \lambda_2)}^{(\tilde{q}_1)}(E) &= \frac{\pi}{4i\hbar\omega_1} \left[\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r\lambda_2}}{\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \exp\left(ir \frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - i(r+1)\frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\lambda_1+r\lambda_2}}{\cos(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \exp\left(ir \frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - ir \frac{\pi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Das Ergebnis lässt sich leicht auf die q_2 -Mode übertragen. Insgesamt ist der reduzierte, oszillierende Anteil der Zustandsdichte

$$\begin{aligned} \delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}(E) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\text{Im}(E) \rightarrow 0^+} \text{Im} \left(\text{Tr } G_{\text{skl}, (\lambda_1, \lambda_2)}^{(\tilde{q}_1)}(E) + \text{Tr } G_{\text{skl}, (\lambda_1, \lambda_2)}^{(\tilde{q}_2)}(E) \right) \\ &= \frac{1}{4\hbar\omega_1} \left[\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r\lambda_2}}{\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \sin\left(r \frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - r \frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\lambda_1+r\lambda_2}}{\cos(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \cos\left(r \frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - r \frac{\pi}{2}\right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{4\hbar\omega_2} \left[\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r\lambda_1}}{\sin(r\pi\omega_1/2\omega_2)} \sin\left(r \frac{\pi E}{\hbar\omega_2} - r \frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\lambda_2+r\lambda_1}}{\cos(r\pi\omega_1/2\omega_2)} \cos\left(r \frac{\pi E}{\hbar\omega_2} - r \frac{\pi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Beschäftigen wir uns nun noch mit der Reduktion des stetigen Anteils, siehe Abschnitt 4.3. Im Hilbert-Raum wirkt die Gruppe \mathcal{C} durch Operatoren $\hat{U}(c)$ auf Zustände ψ in der Ortsbasis wie folgt:

$$\begin{aligned} \langle q_1, q_2 | \hat{U}(e \times e) | \psi \rangle &= \langle (e \times e)^{-1}(q_1, q_2) | \psi \rangle = \psi(q_1, q_2) \\ \langle q_1, q_2 | \hat{U}(s \times e) | \psi \rangle &= \langle (s \times e)^{-1}(q_1, q_2) | \psi \rangle = \psi(q_1, -q_2) \\ \langle q_1, q_2 | \hat{U}(e \times s) | \psi \rangle &= \langle (e \times s)^{-1}(q_1, q_2) | \psi \rangle = \psi(-q_1, q_2) \\ \langle q_1, q_2 | \hat{U}(s \times s) | \psi \rangle &= \langle (s \times s)^{-1}(q_1, q_2) | \psi \rangle = \psi(-q_1, -q_2) \end{aligned}$$

Die Wigner-Transformationen (4.14) sind also sehr einfach zu berechnen, beispielsweise für $\hat{U}(s \times e)$:

$$\begin{aligned} U_{\text{W}}(s \times e) &= \int_{\mathbb{R}^2} \langle \mathbf{q} + \mathbf{q}'/2 | \hat{U}(s \times e) | \mathbf{q} - \mathbf{q}'/2 \rangle \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}'/\hbar) d^2 q' \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left\langle q_1 + \frac{q'_1}{2}, q_2 + \frac{q'_2}{2} \left| q_1 - \frac{q'_1}{2}, -q_2 + \frac{q'_2}{2} \right\rangle \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}'/\hbar) dq'_1 dq'_2 \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \delta(q_2) \exp(-ip_2 q'_2/\hbar) dq'_2 \\ &= \pi \hbar \delta(q_2) \delta(p_2). \end{aligned}$$

Analog ist

$$\begin{aligned} U_W(e \times e) &= 1, \\ U_W(e \times s) &= \pi \hbar \delta(q_1) \delta(p_1), \\ U_W(s \times s) &= \pi^2 \hbar^2 \delta(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Wir erhalten daraus mit (4.15) und Tabelle 4.1 die reduzierten klassischen Zustandssummen

$$\begin{aligned} Z_{\text{kl},(0,0)}(\beta) &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\hbar^2 \beta^2 \omega_1 \omega_2} + \frac{1}{2\hbar \beta \omega_1} + \frac{1}{2\hbar \beta \omega_2} + \frac{1}{4} \right), \\ Z_{\text{kl},(1,0)}(\beta) &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\hbar^2 \beta^2 \omega_1 \omega_2} - \frac{1}{2\hbar \beta \omega_1} + \frac{1}{2\hbar \beta \omega_2} - \frac{1}{4} \right), \\ Z_{\text{kl},(0,1)}(\beta) &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\hbar^2 \beta^2 \omega_1 \omega_2} + \frac{1}{2\hbar \beta \omega_1} - \frac{1}{2\hbar \beta \omega_2} - \frac{1}{4} \right), \\ Z_{\text{kl},(1,1)}(\beta) &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\hbar^2 \beta^2 \omega_1 \omega_2} - \frac{1}{2\hbar \beta \omega_1} - \frac{1}{2\hbar \beta \omega_2} + \frac{1}{4} \right) \end{aligned}$$

und durch inverse Laplace–Transformation die reduzierten Thomas–Fermi–Beiträge

$$\bar{g}_{(0,0)}(E) = \frac{1}{4} \left(\frac{E}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} + \frac{1}{2\hbar \omega_1} + \frac{1}{2\hbar \omega_2} + \frac{1}{4} \delta^+(E) \right), \quad (4.24a)$$

$$\bar{g}_{(1,0)}(E) = \frac{1}{4} \left(\frac{E}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} - \frac{1}{2\hbar \omega_1} + \frac{1}{2\hbar \omega_2} - \frac{1}{4} \delta^+(E) \right), \quad (4.24b)$$

$$\bar{g}_{(0,1)}(E) = \frac{1}{4} \left(\frac{E}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} + \frac{1}{2\hbar \omega_1} - \frac{1}{2\hbar \omega_2} - \frac{1}{4} \delta^+(E) \right), \quad (4.24c)$$

$$\bar{g}_{(1,1)}(E) = \frac{1}{4} \left(\frac{E}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} - \frac{1}{2\hbar \omega_1} - \frac{1}{2\hbar \omega_2} + \frac{1}{4} \delta^+(E) \right). \quad (4.24d)$$

Die Funktionen $\delta^+(E)$ sind rechtsseitige Delta–Funktionen, die sich mit der Heaviside–Funktion $\theta(E)$ beispielsweise durch den Grenzwert

$$\delta^+(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\epsilon} (\theta(E) - \theta(E - \epsilon))$$

definieren lassen [37]. Sie tragen zum Spektrum in den Zustandsdichten für $E > 0$ selbst zwar nicht bei, korrigieren aber die ersten Integrale der Dichten um einen konstanten additiven Anteil.

Die einzelnen Summanden in (4.24a) bis (4.24d) haben eine anschauliche Bedeutung und treten in dieser Anordnung typischerweise bei Billards auf: Kac beschäftigte sich mit der Frage, ob es möglich ist, allein aus der Kenntnis des Spektrums eines zweidimensionalen Billards auf die Form der Berandung zu schließen [38].⁴ Im Rahmen dieser Arbeit ergab sich mit den Erweiterungen von McKean und Singer [39] sowie Stewartson und Waechter [40] eine Formel für die klassische Zustandssumme $Z_{\text{kl}}(\beta)$ in Abhängigkeit von der vom Billard eingeschlossenen Fläche a und der Länge der Berandung l :

$$Z_{\text{kl}}(\beta) = \frac{a}{2\pi \hbar^2 \beta} - \frac{l}{4\hbar \sqrt{2\pi \beta}} + \frac{1}{12} \oint \kappa(s) ds + \sum_i \frac{\pi^2 - \alpha_i}{24\pi \alpha_i}.$$

⁴Diese Fragestellung formulierte Kac ursprünglich so: „Can you hear the shape of a drum?“

Dabei wird im dritten Anteil über die Krümmung κ entlang der Berandung integriert und im letzten Beitrag über alle Innenwinkel α_i im Billard summiert. Die Herleitung der Formel gilt für Billards, die von allen Seiten durch eine harte Wand begrenzt ist, an der eine Dirichlet-Bedingung zu erfüllen sind; die Berandung braucht nur stückweise stetig sein, die Ecken tragen explizit durch die Winkel α_i bei. Eine inverse Laplace-Transformation liefert

$$\bar{g}(E) = \frac{a}{2\pi\hbar^2} - \frac{l}{4\pi\hbar\sqrt{2E}} + \left(\frac{1}{12} \oint \kappa(s) ds + \sum_i \frac{\pi^2 - \alpha_i}{24\pi\alpha_i} \right) \delta^+(E). \quad (4.25)$$

Hier zeigt sich eine deutliche Ähnlichkeit mit der Dichte (4.24d) zur nicht-trivialen Darstellung (1,1)⁵: Unsere primitive Einheitszelle ist zwar einerseits durch die Ränder $q_1 = 0$, $q_2 = 0$ begrenzt, wird andererseits jedoch bei fester Energie durch ein stetiges attraktives Potential geschlossen. Der zugängliche Phasenraum ist der vierte Teil einer Ellipse mit den Halbachsen $q_{1,\max} = \sqrt{2E}/\omega_1$ und $q_{2,\max} = \sqrt{2E}/\omega_2$. Der Flächeninhalt ist deswegen $a = 2E\pi/4\omega_1\omega_2$ und der zu \hbar^{-2} proportionale Anteil von (4.24d) stimmt tatsächlich mit dem ersten Beitrag in (4.25) überein. Der Vorfaktor der Delta-Funktion ist mit $\kappa = 0$ wegen der geraden Berandung der Achsen und ihrem Zwischenwinkel $\alpha = \pi/2$ ebenfalls gleich. Lediglich der zu \hbar^{-1} proportionale Beitrag durch die Länge der Berandung unterscheidet sich um einen Faktor $\pi/2$, wenn wir als Länge l die Summe der Strecken vom Ursprung bis zu den klassischen Umkehrpunkten $q_{i,\max}$ ansetzen. Folgende Überlegung ist jedoch in diesem Zusammenhang interessant: Wir legen die Startpunkte beider Librationen entlang der positiven Ortsachsen jeweils in den Ursprung. Die klassischen Umkehrpunkte werden dann jeweils nach der Zeit $\pi/2\omega_i$, also nach jeweils einem Viertel der Periodendauer des vollen Oszillators erreicht. Berechnen wir nun die Strecken l_i , die ein Teilchen während dieser Zeitdauer vom Ursprung aus *ohne* Einfluss des Potentials zurücklegen würde, also

$$l_i = \sqrt{2E} \frac{\pi}{2\omega_i}, \quad i = 1, 2,$$

dann erhalten wir in diesem Fall eine Gesamtlänge $l = l_1 + l_2$, die uns auch für den zu \hbar^{-1} proportionalen Anteil in (4.25) den richtigen Vorfaktor liefert. Es scheint hier also ein engerer Zusammenhang mit der verbrachten Zeitdauer der Trajektorie von „Berandung“ zu „Berandung“ zu bestehen.

Es ist unklar, inwieweit dies eine Besonderheit des harmonischen Oszillators ist und ob sich die Überlegung auch für andere Potentiale bestätigt.

4.4.2 Rekonstruktion der vollen Zustandsdichte

Wir wollen nun überprüfen, wie sich im vorliegenden konkreten Fall die volle Zustandsdichte rekonstruieren lässt. Dazu summieren wir die reduzierten Zustandsdichten (4.22) über alle irreduzible Darstellungen auf, so wie es in Abschnitt 4.2.4 beschrieben wurde.

$$\delta g(E) = \sum_{\lambda_1=0}^1 \sum_{\lambda_2=0}^1 \delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}(E).$$

⁵Wir erwarten von der Zustandsdichte dieser Darstellung eine enge Beziehung zur Dichte des Viertel-Oszillators. Der Grund wird in Kapitel 6 einsichtig, wir möchten an dieser Stelle jedoch diesen Aspekt zunächst nicht weiter verfolgen.

Vertauschen wir die Summationen über die λ_i der Darstellungen mit der Summation über die Wiederholungen r der Orbits, verschwinden der zweite und letzte Summand in (4.22). Für die beiden anderen erhalten wir jeweils eine Bedingung für r :

$$\sum_{\lambda_1=0}^1 \sum_{\lambda_2=0}^1 (-1)^{r\lambda_i} = \begin{cases} 4 & r \in 2\mathbb{N}, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad i = 1, 2.$$

Es tragen also nur reduzierte Orbits mit einer geraden Anzahl an Wiederholungen, $r = 2k, k \in \mathbb{N}$, bei. Somit ist

$$\begin{aligned} \delta g(E) &= \frac{1}{\hbar\omega_1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\sin(k\pi\omega_2/\omega_1)} \sin\left(k \frac{2\pi E}{\hbar\omega_1}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\omega_2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\sin(k\pi\omega_1/\omega_2)} \sin\left(k \frac{2\pi E}{\hbar\omega_2}\right) \end{aligned}$$

in Übereinstimmung mit (2.18). Die Summation über die stetigen reduzierten Dichten (4.24a) bis (4.24d) ergibt ebenfalls den richtigen Beitrag $E/\hbar^2\omega_1\omega_2$.

Kapitel 5

Der kommensurable zweidimensionale harmonische Oszillator

Der Hamilton-Operator für den harmonischen Oszillator in zwei Dimensionen lautet

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}_1^2 + \omega_1^2 \hat{q}_1^2) + \frac{1}{2} (\hat{p}_2^2 + \omega_2^2 \hat{q}_2^2). \quad (5.1)$$

Wir haben in Kapitel 2 gesehen, dass für irrationale Frequenzverhältnisse die Zustandsdichte mit Hilfe der Gutzwillerschen Spurformel exakt berechnet werden kann: Die einzigen klassischen periodischen Orbits, die zu berücksichtigen waren, sind die beiden isolierten Librationen entlang der Koordinatenachsen mit den primitiven Perioden $2\pi/\omega_i$.

Sind die Frequenzen kommensurabel, können wir schreiben

$$\omega_i = \frac{\omega}{\rho_i}$$

wobei ρ_1 und ρ_2 natürliche Zahlen sind, die wir relativ prim zueinander wählen. Damit gilt also $\omega_1/\omega_2 = \rho_2/\rho_1$.

Die Lösung der Bewegungsgleichungen für die klassische Hamilton-Funktion

$$H = \sum_{i=1}^2 H_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \left(p_i^2 + \frac{\omega^2}{\rho_i^2} q_i^2 \right) \quad (5.2)$$

lautet

$$\begin{pmatrix} q_1(t) \\ q_2(t) \\ p_1(t) \\ p_2(t) \end{pmatrix} = X(t) \begin{pmatrix} q_{1,0} \\ q_{2,0} \\ p_{1,0} \\ p_{2,0} \end{pmatrix},$$

mit der Lösungsmatrix

$$X(t) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\omega}{\rho_1} t) & 0 & \frac{\rho_1}{\omega} \sin(\frac{\omega}{\rho_1} t) & 0 \\ 0 & \cos(\frac{\omega}{\rho_2} t) & 0 & \frac{\rho_2}{\omega} \sin(\frac{\omega}{\rho_2} t) \\ -\frac{\omega}{\rho_1} \sin(\frac{\omega}{\rho_1} t) & 0 & \cos(\frac{\omega}{\rho_1} t) & 0 \\ 0 & -\frac{\omega}{\rho_2} \sin(\frac{\omega}{\rho_2} t) & 0 & \cos(\frac{\omega}{\rho_2} t) \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Offensichtlich gilt $X(0) = X(2\pi\rho_1\rho_2/\omega) = I$ und damit führt die Propagation eines beliebigen Startpunktes im Phasenraum \mathcal{P} zu einem geschlossenen Orbit, der sich in der Projektion von \mathcal{P} auf den Ortsraum (q_1, q_2) durch eine Lissajous-Figur äußert. Die primitive Periode dieser Lissajous-Figur ist also $2\pi\rho_1\rho_2/\omega$, bis auf die beiden entarteten Fälle, die Librationen entlang der Achsen des Konfigurationsraums. Sie besitzen nach wie vor die primitiven Perioden $2\pi\rho_i/\omega$.

Im folgenden ersten Abschnitt betrachten wir zunächst den isotropen Oszillator ($\rho_1 = \rho_2 = 1$), bei dem sowohl die primitive Periode als auch die klassische Wirkung aller Orbits gleich sind. Wir werden sehen, dass die Orbits stetig ineinander abgebildet werden können und deshalb zu einer Familie entartet sind [27]. Die Identifizierung der zugehörigen Symmetriegruppe erlaubt die Berechnung der semiklassischen Zustandsdichte mit Hilfe der Spurformel für Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien aus Kapitel 3. Aufbauend auf diesen Ergebnissen geben wir im zweiten Abschnitt die Herleitung der semiklassischen Zustandsdichte für den Fall eines allgemeinen, rationalen Frequenzverhältnisses. Nach unserem Wissen ist die Herleitung einer semiklassischen Zustandsdichte für diesen wichtigen Fall in der Literatur bis jetzt nicht gegeben. Für die Berechnung benötigen wir die Resultate aus Kapitel 4.

5.1 Der isotrope harmonische Oszillator

Zunächst definieren wir wie üblich die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{b}_i^\dagger und \hat{b}_i . Die Einheiten werden so gewählt, dass $\hbar = 1$ gilt.

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_i^\dagger \\ -i\hat{b}_i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{\omega} & -i\frac{1}{\sqrt{\omega}} \\ -i\sqrt{\omega} & \frac{1}{\sqrt{\omega}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{q}_i \\ \hat{p}_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (5.4)$$

Es gelten die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0, \quad i, j \in \{1, 2\}.$$

Die quadratischen Ausdrücke $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$ vertauschen mit dem Hamilton-Operator. Dies erkennt man durch explizites Nachrechnen, oder einfach aus der Überlegung, dass die Quanten der Schwingungsmoden die gleiche Energie haben. Linearkombinationen dieser Größen sind somit ebenfalls Erhaltungsgrößen des Systems und erlauben nach Jordan-Schwinger die Konstruktion einer Lie-Algebra [21]. Betrachten wir dazu folgende Abbildung f von komplexen 2×2 Matrizen S in die bosonischen Operatoren:

$$f : S \longmapsto \sum_{i,j=1}^2 \hat{b}_i^\dagger S_{ij} \hat{b}_j.$$

Die Abbildung erhält die Vertauschungsrelationen beliebiger Matrizen S . Das Bild der Einheitsmatrix $f(\mathbf{I})$ ist offensichtlich der Hamilton-Operator selbst, bis auf einen konstanten additiven Term der Grundzustandsenergie. Wir betrachten die Abbildung J für die drei Pauli-Spin-Matrizen σ_i . Sie sind eine zweidimensionale irreduzible Darstellung der $SU(2)$ und genügen den Vertauschungsrelationen der zugehörigen Lie-Algebra:

$$\frac{1}{2}[\sigma_i, \sigma_j] = i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad i, j, k \in \{1, 2, 3\}.$$

Wir erhalten:

$$\begin{aligned}\hat{J}_1 &:= f(\sigma_1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{b}_1^\dagger & \hat{b}_2^\dagger \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2 + \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_1) \\ \hat{J}_2 &:= f(\sigma_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{b}_1^\dagger & \hat{b}_2^\dagger \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2i} (\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2 - \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_1) \\ \hat{J}_3 &:= f(\sigma_3) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{b}_1^\dagger & \hat{b}_2^\dagger \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1 - \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_2)\end{aligned}$$

\hat{J}_3 entspricht der Differenz der Schwingungsenergien, \hat{J}_2 dem Drehimpuls und \hat{J}_1 wird oft als Korrelation bezeichnet. Diese Operatoren erzeugen eine $SU(2)$ -Algebra und sind Erhaltungsgrößen des Systems:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k, \quad i, j, k \in \{1, 2, 3\}.$$

Die Leiteroperatoren $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ spannen wie üblich den Darstellungsraum auf,

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm,$$

wobei die Zustände innerhalb des Raums durch die Eigenwerte m von \hat{J}_3 gekennzeichnet sind. Der Darstellungsraum selbst wird durch die Eigenwerte $j(j+1)$ des Casimir-Operators nummeriert:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2 &= \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = \hat{J}_3^2 + \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) \\ &= \frac{\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1 + \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_2}{2} \left(\frac{\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1 + \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_2}{2} + 1 \right).\end{aligned}$$

Offensichtlich lassen sich die Eigenzustände $|n_1, n_2\rangle$ des Hamilton-Operators zu den Eigenenergien $E_{n_1, n_2} = \omega(n_1 + n_2 + 1) = \omega(n + 1)$ in der Eigenbasis $|j, m\rangle$ von $\hat{\mathbf{J}}^2$ und \hat{J}_3 ausdrücken, wenn wir $j := (n_1 + n_2)/2$ und $m := (n_1 - n_2)/2$ wählen:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= j(j+1) |j, m\rangle, \\ \hat{J}_3 |j, m\rangle &= m |j, m\rangle.\end{aligned}$$

Da für festes $n_1 + n_2 = n \in \mathbb{N}_0$ die Eigenenergien $n + 1 = 2j + 1$ -fach entartet sind, kann j auch halbzahlig sein. Somit ist nicht etwa $SO(3)$, sondern $SU(2)$ die richtige Lie-Algebra und jede $2j + 1$ -dimensionale Darstellung tritt genau einmal auf.

5.1.1 Parametrisierung der periodischen Orbits

Wir wollen nun mit Hilfe der Symmetriegruppe die klassischen periodischen Orbits des isotropen Oszillators kennzeichnen. Dazu benötigen wir eine bijektive Abbildung von der Symmetriegruppe auf die Orbit-Familie. Da alle Orbits des Systems periodisch sind, genügt die Vorgabe eines auf der 3-dimensionalen Energie-Hyperfläche $\mathcal{E} = \{(q_1, q_2, p_1, p_2) | H = E\} \subset \mathcal{P}$ liegenden Phasenraumpunktes, um den Startpunkt eines periodischen Orbit auszuwählen.

Die Gruppenmannigfaltigkeit der $SU(2)$ ist isomorph zu den Punkten $\{(z_1, z_2) \in \mathbb{C}^2 \mid |z_1|^2 + |z_2|^2 = \text{const.}\}$ einer dreidimensionalen Kugeloberfläche in einem vierdimensionalen Raum [23]. Wir können die $SU(2)$ also eindeutig auf \mathcal{E} abbilden, müssen jedoch beachten, dass alle Startpunkte, die auf einem gegebenen Orbit in \mathcal{E} liegen, wieder den selben Orbit liefern. Dies entspricht einer Symmetrie-Transformation, die den Phasenraumpunkt entlang des Orbits verschiebt (ähnlich einer zeitlichen Entwicklung, die vom Hamilton-Operator erzeugt wird) und damit einer $U(1)$ Symmetrie. Die richtige Symmetrie-Gruppe zur eindeutigen Kennzeichnung der Orbits ist also die zweidimensionale $SU(2)/U(1)$. Die Gruppenmannigfaltigkeit ist isomorph zur Kugeloberfläche im dreidimensionalen Raum.

Die durch $SU(2)/U(1)$ parametrisierten Startpunkte der Orbits können leicht berechnet werden. Dazu betrachten wir die klassischen Entsprechungen oben eingeführter Operatoren gemäß

$$\hat{b}_i^\dagger \rightarrow b_i^*, \quad \hat{b}_i \rightarrow b_i \quad i = 1, 2.$$

Wir erhalten so

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{1}{2} (\omega q_1 q_2 + p_1 p_2 / \omega) \\ J_2 &= \frac{1}{2} (q_1 p_2 - q_2 p_1) \\ J_3 &= \frac{1}{2\omega} (H_1 - H_2) \\ \mathbf{J}^2 &= \frac{H^2}{4\omega^2}. \end{aligned} \tag{5.5}$$

Die klassischen Größen erfüllen äquivalente Vertauschungsrelationen bezüglich der Poisson-Klammer $\{\cdot, \cdot\}$, indem wir den quantenmechanischen Kommutator nach der Regel

$$[\cdot, \cdot] \rightarrow i\{\cdot, \cdot\}$$

ersetzen. Ein Phasenraumpunkt ist durch den komplexen Vektor $\mathbf{b} = (b_1, b_2) \in \mathbb{C} \times \mathbb{C}$ bestimmt. Es gilt

$$\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b} = \frac{H}{\omega}.$$

Offenbar erlaubt die Hamilton-Funktion unitäre Transformationen von \mathbf{b} . Der $U(1)$ -Anteil der unitären Gruppe $U(2) = SU(2) \times U(1)$ entspricht wegen der Erhaltung der Gesamtenergie $H = E$ der zeitlichen Symmetrie. Diese trägt nicht zur Klassifikation der Orbits bei und kann absepariert werden. Der normierte Vektor $\sqrt{\omega/E} \mathbf{b}$ liegt somit auf der Einheitskugel, ganz analog zu einem Zustand $|\chi\rangle$ eines Zwei-Niveau-Systems auf der Blochkugel. Die $SU(2)$ -Symmetrie erlaubt Symmetrietransformationen auf \mathcal{E} , generiert durch J_1 , J_2 und J_3 . In der Darstellung D auf der Blochkugel entspricht dies Drehungen R um drei ausgezeichnete Achsen. Sie werden durch die Pauli-Spin-Matrizen erzeugt und können durch drei Euler-Winkel (α, β, γ) parametrisiert werden. Wir starten mit einem beliebigen Zustand auf der Blochkugel, zum Beispiel $|+\rangle$ (also $\sqrt{\omega/E} \mathbf{b} = (1, 0)$ auf \mathcal{E}). Dann kann jeder beliebige Zustand durch

$$|\chi\rangle = D[R(\gamma, \beta, \alpha)] |+\rangle = \exp\left(-i\frac{\sigma_3}{2}\alpha\right) \exp\left(-i\frac{\sigma_2}{2}\beta\right) \exp\left(-i\frac{\sigma_3}{2}\gamma\right) |+\rangle$$

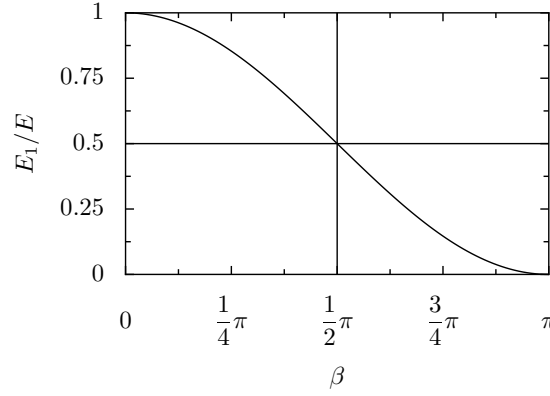


Abbildung 5.1: Der Anteil der Energie der ersten Mode von der Gesamtenergie $E = E_1 + E_2$ in Abhängigkeit vom Polarwinkel β der Blochkugel.

erzeugt werden. Offenbar erzeugt die erste Drehung um γ einen reinen Phasenfaktor $\exp(i\gamma/2)$. Dies entspricht einer Transformation entlang des Orbits, wie bei einer „zeitlichen“ Entwicklung des Zustands um $t = -\gamma/2E$ innerhalb der Untergruppe $U(1)$ von $SU(2)$. Natürlich existiert zu jedem beliebigen Zustand auf der Blochkugel eine Drehung, die den Zustand invariant läßt. Wir können den Phasenfaktor, der durch diese Drehung entsteht, beliebig wählen und setzen $\gamma = 0$. Mit α und β erhalten wir so eine Parametrisierung der Gruppe $SU(2)/U(1)$ und für den Vektor \mathbf{b} explizit

$$\sqrt{\frac{\omega}{E}} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) \exp(-i\alpha/2) \\ \sin(\beta/2) \exp(i\alpha/2) \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

mit $\alpha \in [0, 2\pi)$ und $\beta \in [0, \pi]$. Nach der Definition (5.4) ist dann der Startpunkt des Orbits durch

$$\begin{pmatrix} q_{1,0} \\ q_{2,0} \\ p_{1,0} \\ p_{2,0} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2E}{\omega}} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) \cos(\alpha/2) \\ \sin(\beta/2) \cos(\alpha/2) \\ -\omega \cos(\beta/2) \sin(\alpha/2) \\ \omega \sin(\beta/2) \sin(\alpha/2) \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

gegeben. Für die Energien E_i der Moden gilt am Startpunkt und damit für den gesamten Orbit

$$\begin{aligned} E_1 &= E \cos^2(\beta/2), \\ E_2 &= E \sin^2(\beta/2). \end{aligned}$$

Die Aufteilung der Gesamtenergie E ist also allein durch den Parameter β bestimmt, siehe Abbildung 5.1,

$$J_3 = \frac{E}{2\omega} (\cos^2(\beta/2) - \sin^2(\beta/2)).$$

Vergleichen wir die allgemeine zeitliche Parametrisierung eines beliebigen Orbits

$$\begin{aligned} q_1(t) &= A_1 \cos(\omega t + \varphi_1), \\ q_2(t) &= A_2 \cos(\omega t + \varphi_2), \end{aligned} \quad (5.8)$$

sowie deren Ableitungen mit der Parametrisierung (5.7), dann finden wir

$$\begin{aligned} q_1(t) &= \frac{\sqrt{2E}}{\omega} \cos(\beta/2) \cos(\omega t + \alpha/2), \\ q_2(t) &= \frac{\sqrt{2E}}{\omega} \sin(\beta/2) \cos(\omega t - \alpha/2). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Der Parameter α gibt damit die Phasendifferenz der Schwingungen an und variiert für gegebenes $\beta \notin \{0, \pi\}$ die Korrelation J_1 und den Drehimpuls J_2 des Systems (vergleiche (5.5)):

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{E}{\omega} \cos(\beta/2) \sin(\beta/2) \cos(\alpha), \\ J_2 &= \frac{E}{\omega} \cos(\beta/2) \sin(\beta/2) \sin(\alpha). \end{aligned}$$

Bei $\alpha = \pi$ ändert der Drehimpuls das Vorzeichen. Die in (5.9) für $\alpha \in (0, \pi)$ gegebenen Orbits wiederholen sich für $\alpha \in (\pi, 2\pi)$, die Bahnen werden jedoch in umgekehrtem Sinn durchlaufen. In Abbildung 5.2 ist dies für gleiche Energien $E_1 = E_2$ der Moden veranschaulicht.

Paare gleicher Orbits bilden sich für $\alpha = \pi - \epsilon$ und $\alpha = \pi + \epsilon$ für $\epsilon \in (0, \pi)$. Sie gehen wegen ihrer jeweils verschiedenen Umlaufrichtung explizit in die Spurformel mit ein. Für $\alpha = 0, \pi$ ergeben sich die beiden Librationen durch den Ursprung des Ortsraums, die für $\beta = \pi/2$, also für gleiche Aufteilung der Gesamtenergie auf die Moden, entlang der Diagonalen der Hauptachsen q_1 und q_2 verlaufen. In den Abbildungen 1 und 2 sind entsprechende Orbits und ihre Repräsentation auf der Blochkugel dargestellt.

5.1.2 Die Zustandsdichte

Wenden wir nun die verallgemeinerte Spurformel für kontinuierliche Symmetrien an (siehe (3.11)). Sie lautet:

$$\mathrm{Tr} G_{\mathrm{skl}}(E) = \frac{(2\pi i \hbar)^{-k/2}}{i \hbar} \sum_{\Gamma \in \{\mathrm{fppo}\}} \frac{T_{\Gamma} V_{\Gamma}}{|Q|^{1/2}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} r S_{\Gamma} - i \sigma_{\Gamma, r} \frac{\pi}{2}\right)}{\left| \det W_{\Gamma, r} \det \left(\tilde{M}_{\Gamma}^r - I \right) \right|^{1/2}}. \quad (5.10)$$

Die erste Summe erstreckt sich über alle Familien aus primitiv periodischen Orbits, die zweite Summe über die jeweiligen Wiederholungen. Beim isotropen Oszillator liegt nur eine Orbit-Familie vor. Sie ist zweidimensional, deswegen ist $k = 2$. Die um die Symmetrie reduzierte Stabilitätsmatrix \tilde{M}_{Γ} ist hier leer, da die Integrationen entlang eines Orbits und über die Orbit-Familie den zugänglichen Phasenraum \mathcal{E} vollständig erschöpfen: \mathcal{E} ist dreidimensional, die vollständige Parametrisierung (t, α, β) ebenfalls. Der entsprechende Beitrag von \tilde{M}_{Γ} fällt somit weg. Ebenso ist $\det W_{\Gamma} = 1$, denn alle auftretenden Orbits sind im Phasenraum a priori periodisch und müssen nicht durch (infinitesimale) Symmetrietransformationen geschlossen werden [24, 27]. Somit verbleibt die Größe $Q = \mathbf{J}^{-2} = 4\omega^2/E^2$ (vergleiche (5.5) und Seite 21). Die Wirkung eines Orbits mit r Wiederholungen ist $S = r2\pi E/\omega$. Das Integral über die zeitliche Komponente

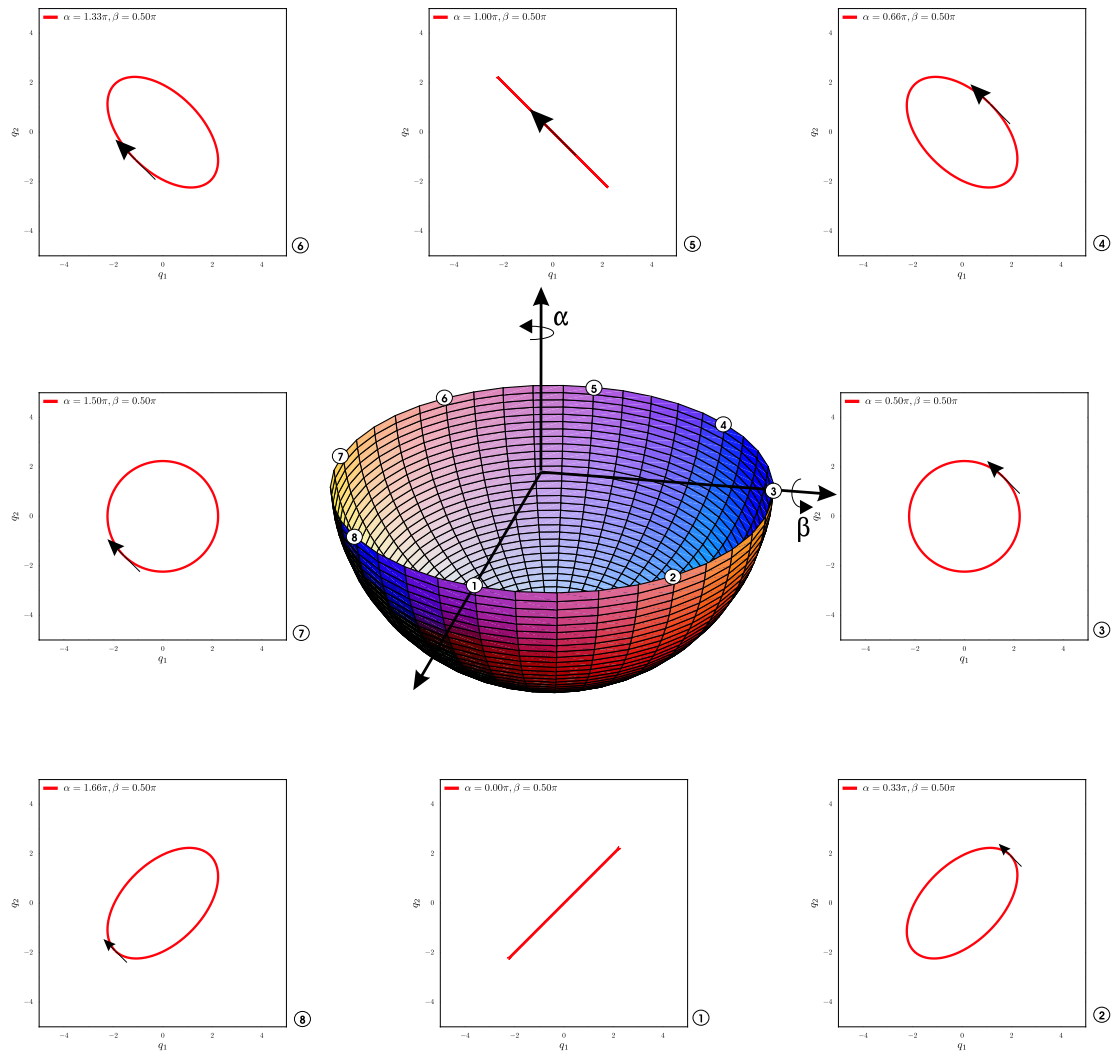


Abbildung 5.2: Untere Hälfte der Blochkugel. Für festes $\beta = \pi/2$ sind entlang des Äquators für die Werte $\alpha = 0, \pi/4, \dots, 7\pi/4$ die zugehörigen Orbits im Ortsraum dargestellt. Für $\alpha = 0, \pi$ entarten sie zu den Librationen entlang den Diagonalen. Die Position und Größe der Pfeile kennzeichnen die Anfangsbedingungen, die Schwingung ① startet bei maximaler Auslenkung mit $(p_{1,0}, p_{2,0}) = (0, 0)$.

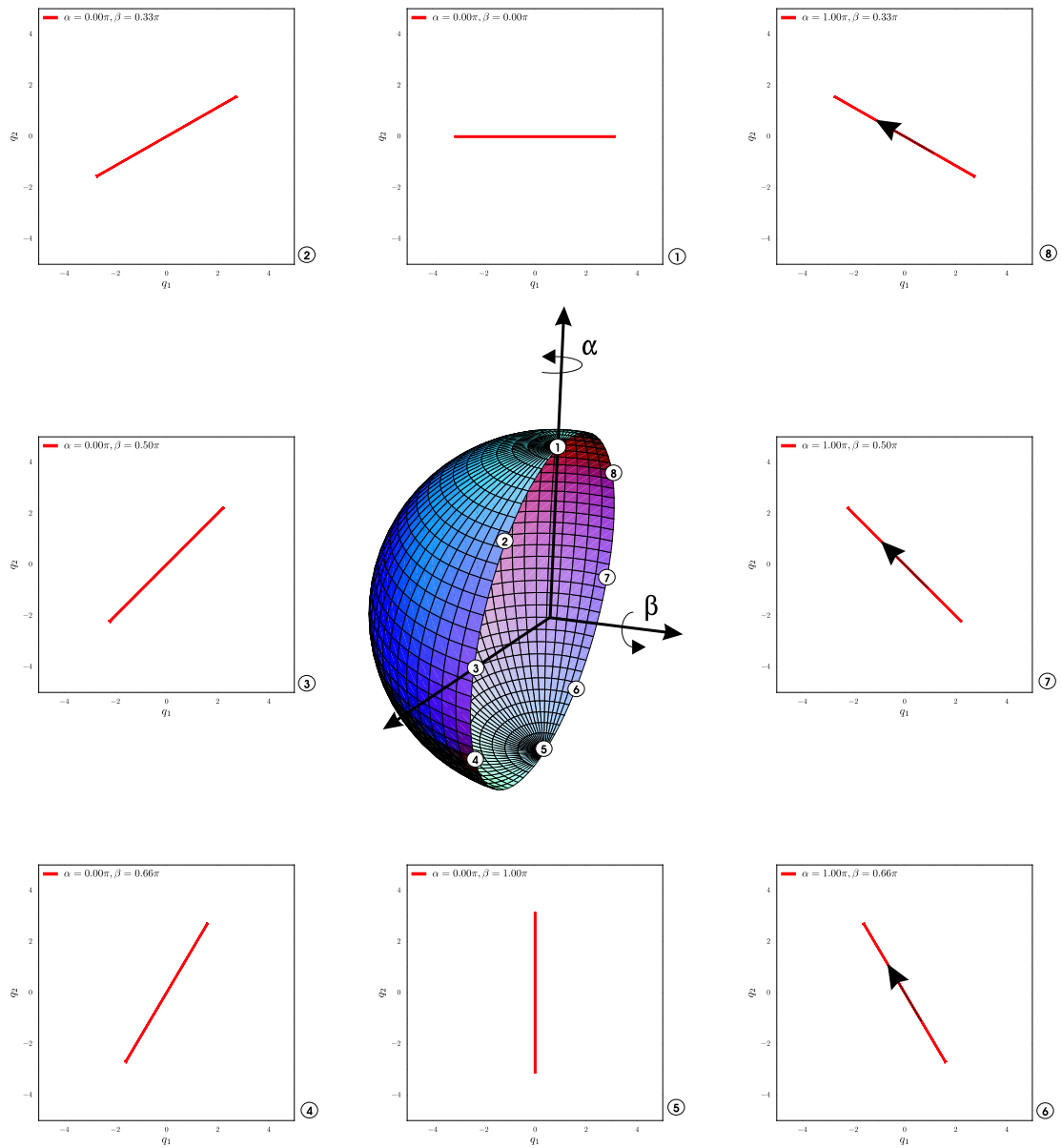


Abbildung 5.3: Repräsentation von Orbits für festes $\alpha = 0$ (d.h. kein Phasenunterschied der Moden) und verschiedener Aufteilung der Gesamtenergie mit $\beta = 0, \pi/4, \dots, 7\pi/4$.

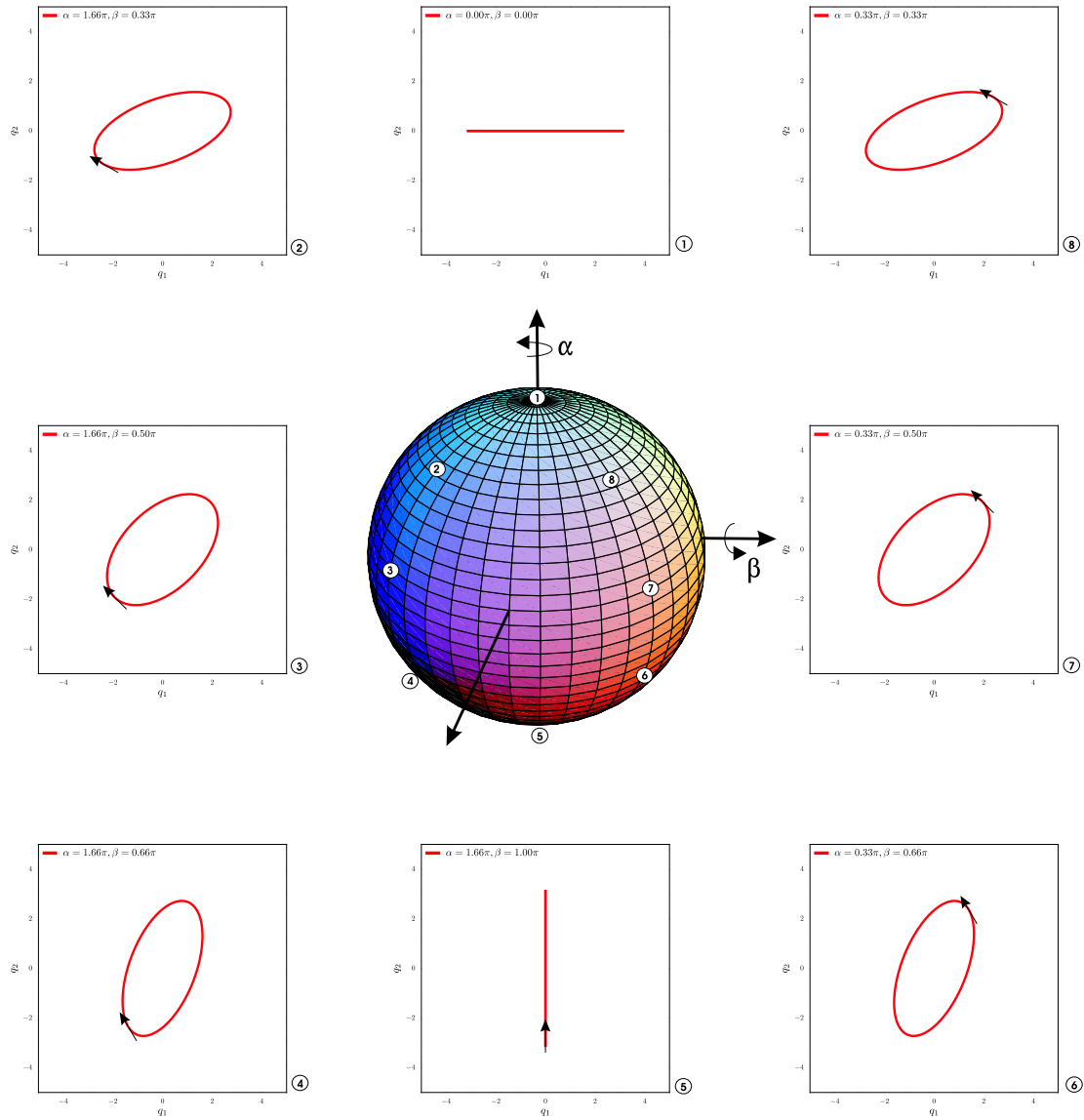


Abbildung 5.4: Unter Variation von β entstehen für $\alpha = 2\pi - \pi/4$ und $\alpha = \pi/4$ im Ortsraum die gleichen Orbits, die jedoch in umgekehrten Sinn durchlaufen werden. Sie entarten für $\beta = 0, \pi$ zu den beiden Librationen entlang den Achsen.

liefert die primitive Periode $T_\Gamma = 2\pi/\omega$, die Integration über die Gruppe ergibt die Kugeloberfläche $V_\Gamma = 4\pi$ der Einheitskugel. Wir erhalten somit

$$\text{Tr } G_{\text{skl}}(E) = \frac{-2\pi E}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{r=1}^{\infty} \exp\left(ir \frac{2\pi E}{\hbar \omega} - i\sigma_r \frac{\pi}{2}\right) \quad (5.11)$$

Es bleibt also übrig, den noch unbekanntem Phasenindex σ_r für die r te Wiederholung eines primitiven Orbits zu bestimmen. Der Phasenindex sorgt für die richtige Phasenlage der einzelnen Beiträge zueinander und ist deswegen ein wesentlicher Bestandteil jeder Spurformel. Leider gibt es nach unserem Wissen zu diesem Zeitpunkt noch keine allgemeine Formel für die Berechnung des Index im Fall entarteter Orbits, insbesondere wenn sie wie hier auf einer nicht-abelschen Symmetrie beruhen. Tatsächlich finden sich nur wenige Veröffentlichungen zu diesem im mathematischen Sinne speziellen, aber für die Physik durchaus wichtigen Fall; am Ende des Anhangs [A.3.2](#) geben wir eine Übersicht. Es wäre für zukünftige Arbeiten von besonderem Interesse, auf diesem äußerst komplexen Gebiet Fortschritte zu erzielen und diese Lücke zu schließen.

Wir werden im Folgenden nicht versuchen, ein allgemeines Verfahren zu entwickeln. Vielmehr werden wir den Phasenindex auf indirektem Weg bestimmen. Die Idee ist, die Symmetrie des isotropen Oszillators derart zu stören, dass die rationalen Tori aufbrechen, auf denen die Orbits im Phasenraum liegen. Unter der Voraussetzung, dass die Symmetrie nicht auf eine Untergruppe, sondern vollständig gebrochen wird, führt eine hinreichend große Störung im Allgemeinen dazu, dass nur periodische Orbits überleben, die voneinander isoliert verlaufen. In diesem Fall ist es möglich, direkt die gewöhnliche Gutzwiller-Formel anzuwenden, weil an stationären Phasen genähert werden kann. Für kleine Störungen ist die Gutzwiller-Formel jedoch meist unbrauchbar, da die Amplituden divergieren. Es besteht jedoch die Möglichkeit, ausgehend von der Spurformel für kontinuierliche Symmetrien, Störungstheorie zu betreiben [\[27\]](#).

Bei Symmetriebrechung und auch bei Bifurkationen kann sich der sonst invariante Phasenindex σ_r ändern [\[15, 25\]](#). Dieses im Allgemeinen äußerst schwer zu handhabende Problem lässt sich jedoch auch ausnutzen. Wir wählen für den isotropen Oszillator eine geeignete Störung, unter der die Frequenzen der Moden inkommensurabel werden. Das System bleibt integrabel, nur die dynamische Symmetrie des isotropen Oszillators wird aufgehoben. Für irrationales Frequenzverhältnis haben wir die Zustandsdichte in [Kapitel 2.2](#) mit Hilfe der Gutzwillerschen Formel berechnet und insbesondere den zugehörigen Phasenindex bestimmt. Wir bezeichnen ihn im Folgenden mit $\sigma_{r,\text{irrat}}$, um Verwechslungen zu vermeiden. Für den Index der q_1 -Schwingungen hatten wir gefunden, siehe [\(2.16\)](#):

$$\sigma_{r,\text{irrat}}\left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right) = 2r + 1 + 2\left[r \frac{\omega_2}{\omega_1}\right]_{\text{int}}.$$

Der Phasenindex σ_r der Orbitfamilie des isotropen Oszillators darf nicht vom speziellen Orbit abhängen, für den wir ihn berechnen [\[24, 33\]](#). Er ist also für alle Orbits einer Familie gleich und wir wählen als Vertreter ebenfalls die Schwingung entlang der q_1 -Achse. Wir erwarten, dass sich der Phasenindex beim Übergang vom isotropen zum inkommensurablen Fall ändert und wir in $\sigma_{r,\text{irrat}}$ nicht einfach $\omega_1 = \omega_2$ setzen dürfen.

Wir machen deshalb den Ansatz

$$\sigma_r = \sigma_{r,\text{irrat}} \left(\frac{\omega_2}{\omega_1} = 1 \right) + \Delta\sigma_r = 4r + 1 + \Delta\sigma_r \quad (5.12)$$

und betreiben nun, von der Hamilton-Funktion H des isotropen Oszillators ausgehend, Störungstheorie erster Ordnung. Wir betrachten für einen kleinen positiven Parameter ϵ

$$H_\epsilon = H + \epsilon H_1$$

mit

$$H = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} (\omega^2 q_1^2 + \omega^2 q_2^2)$$

und

$$H_1 = \frac{1}{2} (\omega^2 q_1^2 - \omega^2 q_2^2).$$

H_ϵ entspricht also der Hamilton-Funktion eines Oszillators mit Frequenzen $\omega\sqrt{1 \pm \epsilon}$. Die Störung wirkt sich in erster Ordnung in der Spurformel für kontinuierliche Symmetrien für eine Orbitfamilie Γ lediglich durch einen Faktor $\mathcal{M}_\Gamma(E, \epsilon)$ aus, der in der Literatur als Modulationsfaktor bezeichnet wird. Er wird von Creagh in [27] bestimmt, indem die Wirkung der Orbits bis zur ersten Ordnung der Störung entwickelt wird. Es gilt

$$\mathcal{M}_\Gamma(E, \epsilon) = \frac{1}{V_\Gamma} \int_{\mathcal{G}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \epsilon F(E, g) \right) d\mu(g),$$

mit

$$F(E, g) = - \oint_{\gamma(g)} H_1 dt, \quad \gamma(g) \in \Gamma.$$

Der Modulationsfaktor ist also ein Mittelwert der Größe $\exp(i\epsilon F(E, g)/\hbar)$ über die Symmetriegruppe \mathcal{G} und geht für ein Verschwinden der Störung $\epsilon \rightarrow 0$ gegen 1. Die Funktion $F(E, g)$ wird durch Integration der Störung H_1 entlang eines durch $g \in \mathcal{G}$ charakterisierten Orbits $\gamma(g)$ der Orbit-Familie bestimmt. Die Orbits $\gamma(g)$ sind in unserem Fall durch die Winkel α und β parametrisiert und in (5.9) gegeben. Wir erhalten

$$\begin{aligned} F(E, \alpha, \beta) &= -\frac{1}{2} \omega^2 \frac{2E}{\omega^2} \int_0^{r\frac{2\pi}{\omega}} \cos^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \cos^2 \left(\omega t + \frac{\alpha}{2} \right) - \sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \cos^2 \left(\omega t - \frac{\alpha}{2} \right) dt \\ &= -\frac{rE\pi}{\omega} \cos \beta \end{aligned}$$

und daraus

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\Gamma(E, \epsilon) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp \left(-\frac{i r \epsilon E \pi}{\hbar \omega} \cos \beta \right) \sin \beta d\alpha d\beta \\ &= \frac{\sin(r\epsilon E \pi / \hbar \omega)}{r\epsilon E \pi / \hbar \omega}. \end{aligned}$$

Extremalstellen von $F(E, \alpha, \beta)$ entsprechen periodischen Orbits des gestörten Systems [27]. Dies sind für $\beta = 0, \pi$ wie erwartet die Librationen entlang der Achsen (vergleiche Abbildung 5.1).

Mit dem Modulationsfaktor $\mathcal{M}_\Gamma(E, \epsilon)$ und dem Ansatz (5.12) für den Phasenindex ergibt sich nun aus (5.11) für das gestörte System

$$\begin{aligned} \text{Tr } G_{\epsilon, \text{skl}}(E) &= \mathcal{M}_\Gamma(E, \epsilon) \text{Tr } G_{\text{skl}}(E) \\ &= \frac{-2\pi E}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{r=1}^{\infty} \exp\left(ir \frac{2\pi E}{\hbar \omega} - i(4r + 1 + \Delta\sigma_r) \frac{\pi}{2}\right) \frac{\sin\left(\frac{r\epsilon E \pi}{\hbar \omega}\right)}{\frac{r\epsilon E \pi}{\hbar \omega}} \\ &= \frac{-1}{\hbar \omega} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r\epsilon} \left[\exp\left(ir \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right) - i(2 + \Delta\sigma_r) \frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. - \exp\left(ir \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \left(1 - \frac{\epsilon}{2}\right) - i(2 + \Delta\sigma_r) \frac{\pi}{2}\right) \right]. \end{aligned}$$

Die zugehörige Dichte lautet

$$\begin{aligned} \delta g_\epsilon(E) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\text{Im}(E) \rightarrow 0^+} \text{Im} \{ \text{Tr } G_{\epsilon, \text{skl}}(E) \} \\ &= \frac{1}{\hbar \omega} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r\pi\epsilon} \left[\sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right) - (2 + \Delta\sigma_r) \frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. - \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \left(1 - \frac{\epsilon}{2}\right) - (2 + \Delta\sigma_r) \frac{\pi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \tag{5.13}$$

Nun wollen wir diese asymptotische Dichte mit dem Ergebnis (2.18) der Gutzwiller-Formel für den inkommensurablen Oszillator vergleichen (siehe Seite 13). Wir setzen dazu in (2.18) $\omega_1 = \omega\sqrt{1+\epsilon}$ und $\omega_2 = \omega\sqrt{1-\epsilon}$ ein. Dies ergibt

$$\begin{aligned} \delta g_{\text{irrat}}(E) &= \frac{1}{\hbar \omega \sqrt{1+\epsilon}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\sqrt{1-\epsilon}/\sqrt{1+\epsilon})} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar \omega \sqrt{1+\epsilon}}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar \omega \sqrt{1-\epsilon}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\sqrt{1+\epsilon}/\sqrt{1-\epsilon})} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar \omega \sqrt{1-\epsilon}}\right). \end{aligned} \tag{5.14}$$

Die Dichten (5.14) und (5.13) können nur in führender Ordnung des Störungsparameters ϵ verglichen werden, da wir $\delta g_\epsilon(E)$ in erster Ordnung Störungstheorie erhalten haben. Wir entwickeln deshalb die Phasen (d.h. die Wirkungen der beiden Orbits) und die Amplituden des Ergebnisses $\delta g_{\text{irrat}}(E)$ der Gutzwiller-Formel. Dabei gilt für die Phasen

$$\frac{1}{\sqrt{1 \pm \epsilon}} \approx 1 \mp \frac{\epsilon}{2}$$

und die Amplituden

$$\frac{1}{\sqrt{1 \pm \epsilon} \sin(r\pi\sqrt{1 \mp \epsilon}/\sqrt{1 \pm \epsilon})} \approx \mp (-1)^r \frac{1}{r\pi\epsilon}.$$

Der Vergleich dieser Entwicklung von $\delta g_{\text{irrat}}(E)$ mit $\delta g_\epsilon(E)$ in (5.13) zeigt eine Übereinstimmung genau dann, wenn $\Delta\sigma_r = -2$ gilt.

Dieses Resultat für $\Delta\sigma_r$ setzen wir in (5.12) ein und erhalten schließlich den Phasenindex für den isotropen Oszillator zu

$$\sigma_r = 4r + 1 - 2 \equiv -1 \pmod{4}.$$

Damit lautet der oszillierende Anteil der Zustandsdichte des isotropen Oszillators mit $G_{\text{skl}}(E)$ aus (5.11)

$$\begin{aligned} \delta g(E) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\text{Im}(E) \rightarrow 0^+} \text{Im}(\text{Tr } G_{\text{skl}}(E)) \\ &= \frac{2E}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{r=1}^{\infty} \cos\left(r \frac{2\pi E}{\hbar\omega}\right). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Der stetige Anteil berechnet sich aus inverser Laplace–Transformation der klassischen Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z_{\text{kl}}(\beta) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \exp(-\beta H(\mathbf{q}, \mathbf{p})) \, d^2q d^2p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\beta \frac{1}{2}(p_1^2 + \omega^2 q_1^2 + p_2^2 + \omega^2 q_2^2)\right) \, dq_1 dq_2 dp_1 dp_2 \\ &= \frac{1}{(\beta^2 \hbar^2 \omega^2)}, \end{aligned}$$

also

$$\bar{g}(E) = \frac{1}{\hbar^2 \omega^2} \mathcal{L}_E^{-1}[1/\beta^2] = \frac{E}{\hbar^2 \omega^2}. \quad (5.16)$$

Die semiklassische Zustandsdichte lautet damit insgesamt

$$\begin{aligned} g(E) &= \bar{g}(E) + \delta g(E) \\ &= \frac{E}{\hbar^2 \omega^2} \left[1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} \cos\left(r \frac{2\pi E}{\hbar\omega}\right) \right]. \end{aligned}$$

Dies stimmt mit dem exakten Ergebnis aus Anhang D.2.2 überein.

5.2 Der anisotrope harmonische Oszillator

Wir betrachten nun den rationalen, anisotropen Oszillator. Beginnen wir zunächst mit einem Überblick bekannter quantenmechanischer Resultate.

5.2.1 Quantenmechanik des anisotropen Oszillators

In Analogie zu (5.4) definieren wir

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_i^\dagger \\ -i\hat{b}_i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{\omega/\rho_i} & -i\sqrt{\rho_i/\omega} \\ -i\sqrt{\omega/\rho_i} & \sqrt{\rho_i/\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{q}_i \\ \hat{p}_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (5.17)$$

Offenbar tragen die Quanten der Schwingungsmoden für $\rho_1 \neq \rho_2$ verschiedene Energien, so dass die quadratischen Operatoren $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$ ($i \neq j$) und ihre Linearkombinationen keine

Erhaltungsgrößen mehr sind. Die ebenfalls naheliegenden Operatoren $D_{ij} = (\hat{b}_i^\dagger)^{\rho_i} (\hat{b}_j)^{\rho_j}$ kommutieren zwar mit dem Hamilton–Operator [41], ihr Kommutator $[D_{ij}, D_{kl}]$ ist jedoch ein Operator von im Allgemeinen höherer Ordnung $(\rho_i + \rho_j + \rho_k + \rho_l - 2)$. Die D_{ij} bilden also nur für $\rho_1 = \rho_2 = 1$ eine geschlossene Algebra. Der Grund dafür liegt im Wesentlichen in einer unzureichenden Normierung der Operatoren $(\hat{b}_i^\dagger)^{\rho_i}$ und $(\hat{b}_i)^{\rho_i}$. Es kann gezeigt werden [41], dass folgende transformierte Operatoren mit dem Hamilton–Operator kommutieren und dabei die bosonischen Vertauschungsrelationen erfüllen:

$$\begin{aligned} \hat{b}_i^{\dagger'} &= \left[\frac{\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i}{\rho_i} \right]_{\text{int}}^{1/2} \left(\frac{\hat{b}_i^\dagger}{\sqrt{\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i}} \right)^{\rho_i}, \\ \hat{b}_i' &= \left(\frac{\hat{b}_i}{\sqrt{\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i + 1}} \right)^{\rho_i} \left[\frac{\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i}{\rho_i} \right]_{\text{int}}^{1/2}, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Die Gauß–Klammer der Operatoren $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ ist symbolisch zu verstehen und gewinnt ihre Bedeutung, wenn sie auf Eigenfunktionen wirken. Die entsprechenden Linearkombinationen der transformierten Größen $\hat{b}_i^{\dagger'} \hat{b}_i'$ generieren also eine $SU(2)$ –Algebra analog zum isotropen Oszillator. Dieses (quantenmechanische) Resultat kann insbesondere durch Betrachtung deformierter Versionen gewöhnlicher Lie–Algebren, sogenannter Quanten–Algebren, verstanden werden. Vom mathematischen Standpunkt aus handelt es sich dabei um Hopf–Algebren, in denen Lie–Algebren als Spezialfall enthalten sind. In der Physik wurden sie insbesondere durch die Betrachtung des sogenannten q –deformierten Oszillators bekannt und finden beispielsweise bei der Beschreibung von Spin–Ketten, Anyonen oder in der Quantenoptik Anwendung [42, 43, 44, 45]. Eine gute Einführung in das Gebiet der Quanten–Algebren sowie ausführliche Rechnungen mit Bezug auf den anisotropen Oszillator geben zum Beispiel Bonatsos et al. in [46].

Auch im Fall beliebiger rationaler Frequenzverhältnisse findet sich also eine Realisierung der $SU(2)$ –Algebra. Wie unterscheidet sich diese vom isotropen Oszillator? Betrachten wir dazu nochmals die Energieentartung. Beim isotropen Oszillator ($\rho_1 = \rho_2 = 1$) mit Energien $E_{n_1, n_2} = \omega(n_1 + n_2 + 1) = \omega(2j + 1)$ gehören Zustände gleicher Energie zur selben irreduziblen Darstellung $j \in \mathbb{N}_0/2$ (vergleiche Abschnitt 5.1). Für den anisotropen Oszillator können wir schreiben

$$\lambda_i \equiv n_i \bmod \rho_i, \quad i = 1, 2$$

mit $\lambda_i = 0, 1, \dots, (\rho_i - 1)$. Damit teilen wir die zugehörigen Zustände und Eigenenergien in $\rho_1 \rho_2$ Restklassen ein. Innerhalb einer Klasse nummerieren wir die Energien mit $\tilde{n}_i \in \mathbb{N}_0$:

$$n_i = \tilde{n}_i \rho_i + \lambda_i, \quad i = 1, 2.$$

Es gilt

$$\begin{aligned} E_{n_1, n_2} &= \omega \left(\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2 + \frac{1}{\rho_1} \left(\lambda_1 + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{\rho_2} \left(\lambda_2 + \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= E_{(\lambda_1, \lambda_2), \tilde{n}_1, \tilde{n}_2}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Setzen wir jetzt $j = (\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2)/2$ und $m = (\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2)/2$, haben wir

$$E_{(\lambda_1, \lambda_2), (j)m} = \omega \left(2j + \frac{1}{\rho_1} \left(\lambda_1 + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{\rho_2} \left(\lambda_2 + \frac{1}{2} \right) \right)$$

und finden innerhalb einer gegebenen Klasse (λ_1, λ_2) die bekannte $(2j+1)$ -dimensionale Energieentartung des isotropen Oszillators. Die $SU(2)$ -Symmetrie ist demnach mehrfach realisiert, jede $(2j+1)$ -dimensionale Darstellung der $SU(2)$ tritt für jede Klasse genau einmal, insgesamt also $\rho_1 \rho_2$ -mal auf. Dies ist besonders im Limes irrationaler Frequenzverhältnisse interessant: Jede irrationale Zahl lässt sich durch eine rationale Zahl ρ_2/ρ_1 approximieren. Je genauer diese Näherung ist, desto grösser werden die teilerfremd gewählten Zahlen ρ_1 und ρ_2 und desto grösser die Anzahl der trivialen, eindimensionalen Darstellungen der $SU(2)$. Der Oszillator mit inkommensurablen Frequenzen könnte so als Limes des rationalen Falls mit unendlich vielen trivialen Darstellungen der $SU(2)$ verstanden werden.

5.2.2 Klassifikation periodischer Orbits

Um den Bezug zum klassischen Phasenraum und damit zu der für uns interessanten Entartung der Orbits zu wahren, betrachten wir nun die klassische Entsprechung von (5.17):

$$\begin{pmatrix} z_i \\ w_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_i^* \\ -ib_i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{\omega/\rho_i} & -i\sqrt{\rho_i/\omega} \\ -i\sqrt{\omega/\rho_i} & \sqrt{\rho_i/\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_i \\ p_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (5.20)$$

Die Größen z_i und w_i sind zueinander kanonisch konjugierte, aber komplexe Variablen des klassischen Phasenraums \mathcal{P} :

$$\{z_i, w_j\} = \delta_{ij}, \quad \{z_i, z_j\} = \{w_i, w_j\} = 0, \quad i, j \in \{1, 2\}.$$

Wir können z_i und w_i auch als kanonische Variablen eines komplexen Phasenraums auffassen. Unser Ziel ist es, mittels kanonischer Transformationen innerhalb dieses komplexen Phasenraums die unterschiedlichen Frequenzen der Moden aneinander anzugleichen. Wir bilden also den anisotropen auf einen isotropen Oszillator ab, so dass sich im Bildraum die Resultate für den isotropen Fall aus Abschnitt 5.1 verwenden lassen. Die dem anisotropen Oszillator eigene Symmetrie bleibt auf diese Weise in den Transformationsgleichungen erhalten. Die Form dieser Gleichungen wird uns Aufschluss darüber geben, wie mit dem anisotropen Fall umzugehen ist. Wir werden dabei sehen, dass zusätzlich zur kontinuierlichen $SU(2)$ Symmetrie des isotropen Oszillators eine diskrete Symmetriegruppe auftritt.

Betrachten wir zunächst die Lösungsmatrix $X(t)$ aus (5.3) um zu erkennen, für welche Orbits eine Entartung zu erwarten ist. Offenbar ist sie $2\pi\rho_1\rho_2/\omega$ -periodisch und entartet bei Vielfachen der Periode zur Einheitsmatrix I :

$$X(2\pi r \rho_1 \rho_2 / \omega) = I, \quad r \in \mathbb{N}_0.$$

Dies ist klar, denn eine beliebige Lissajous-Figur im Ortsraum schließt sich gerade nach dieser Zeitdauer. Das Auftreten zweier zweifach entarteter Eigenwerte 1 ist ein

Zeichen für die Existenz kontinuierlicher Symmetrie, wie sie auch beim isotropen Oszillator vorhanden ist. Vorsicht ist jedoch für die Lissajous-Figuren geboten, die zu Librationen entlang der q_1 und q_2 Achsen entarten. Betrachten wir beispielsweise die q_1 -Mode: Sie hat eine primitive Periode von $2\pi\rho_1/\omega$, wird also während einer Periode der Lösungsmatrix ρ_2 -mal durchlaufen. Dies äußert sich in der Lösungsmatrix, die für $t = 2\pi\rho_1(r\rho_2 + r_1)/\omega$, $r_1 = 1, 2, \dots, (\rho_2 - 1)$ den zweifachen Eigenwert 1 aufweist. Dieser parabolische Block entspricht wie gewöhnlich der zur Propagation entlang des Orbits gehörenden Symmetrie. Der zweite Block ist jedoch elliptisch:

$$X(2\pi\rho_1(r\rho_2 + r_1)/\omega) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(2\pi\rho_1\left(r + \frac{r_1}{\rho_2}\right)\right) & 0 & \frac{\rho_2}{\omega} \sin\left(2\pi\rho_1\left(r + \frac{r_1}{\rho_2}\right)\right) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{\omega}{\rho_2} \sin\left(2\pi\rho_1\left(r + \frac{r_1}{\rho_2}\right)\right) & 0 & \cos\left(2\pi\rho_1\left(r + \frac{r_1}{\rho_2}\right)\right) \end{pmatrix}.$$

Offenbar sind also nur die ρ_2 -fachen Wiederholungen der q_1 -Mode innerhalb der Familie allgemeiner Lissajous-Figuren entartet. Alle anderen Wiederholungen liegen von der Familie separiert und müssen für die Spurformel getrennt betrachtet werden. Analoges gilt für die Schwingungen entlang der q_2 -Achse.

Wir erhalten damit eine Aufteilung der Zustandsdichte in drei Anteile: Die Beiträge $\delta g_1^{(1)}(E)$ und $\delta g_2^{(1)}(E)$ der nicht entarteten Librationen entlang der Hauptachsen und den Beitrag $\delta g^{(2)}(E)$ der zu einer Orbit-Familie entarteten Lissajous-Figuren:

$$\delta g(E) = \delta g_1^{(1)}(E) + \delta g_2^{(1)}(E) + \delta g^{(2)}(E). \quad (5.21)$$

Die beiden ersten Summanden sind Beiträge von Orbits elliptischer Stabilität. Die Rechnungen verlaufen daher analog zu denen des irrationalen Oszillators und sollen hier nicht nochmals wiederholt werden. Das Ergebnis lautet (vergleiche Kapitel 2):

$$\delta g_1^{(1)}(E) = \frac{\rho_1}{\hbar\omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_2\mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\rho_1/\rho_2)} \sin\left(r\rho_1 \frac{2\pi E}{\hbar\omega}\right), \quad (5.22a)$$

$$\delta g_2^{(1)}(E) = \frac{\rho_2}{\hbar\omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_1\mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\rho_2/\rho_1)} \sin\left(r\rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar\omega}\right). \quad (5.22b)$$

5.2.3 Die Orbit-Familie des anisotropen Oszillators

Zur Berechnung des letzten Summanden in (5.21) betrachten wir die bereits angesprochene kanonische Transformation des anisotropen Oszillators auf den isotropen Oszillator innerhalb eines komplexen Phasenraums. Wir wollen also versuchen, die Orbit-Familie im anisotropen Fall durch die bekannten Ergebnisse aus Kapitel 5.1 für den isotropen Fall besser zu verstehen. Definieren wir zunächst genauer, was wir unter einem komplexen Phasenraum verstehen: Ein komplexer Phasenraum ist ein Raum, dessen Punkte durch Paare komplexer, bezüglich der Poisson-Klammer $\{\cdot, \cdot\}$ kanonisch konjugierter Variablen (z_i, w_i) gegeben sind. Wir schreiben abkürzend $(\mathbf{z}, \mathbf{w}) =$

(z_1, z_2, w_1, w_2) . Die Poisson-Klammer ist wie im reellen Fall definiert, bezieht sich hier jedoch auf analytische Funktionen $f, g : \mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}$:

$$\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f(\mathbf{z}, \mathbf{w})}{\partial z_i} \frac{\partial g(\mathbf{z}, \mathbf{w})}{\partial w_i} - \frac{\partial f(\mathbf{z}, \mathbf{w})}{\partial w_i} \frac{\partial g(\mathbf{z}, \mathbf{w})}{\partial z_i} \right).$$

Wollen wir sicherstellen, dass wir bei einer Rücktransformation in den reellen Raum wieder rein reelle Variablen $q_i^* = q_i$ und $p_i^* = p_i$ erhalten, müssen wir folgende Bedingungen an die komplexen Variablen stellen:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^* &= i\mathbf{w}, \\ \mathbf{w}^* &= i\mathbf{z}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Unter einer kanonischen Transformation im komplexen Phasenraum verstehen wir eine Abbildung auf neue komplexe und kanonisch konjugierte Variablen $(\tilde{\mathbf{z}}, \tilde{\mathbf{w}})$ mit

$$\{\tilde{z}_i, \tilde{w}_i\} = 1, \quad i = 1, 2. \quad (5.24)$$

Erhält die Transformation zusätzlich die Bedingungen (5.23), nennen wir sie reell kanonisch. Im Allgemeinen beschränken wir uns jedoch nicht darauf. In diesem Sinn lässt sich das Konzept der Punkttransformation im reellen Phasenraum zu dem der konformen Abbildung $\Phi_i(z_i)$ in der komplexen Ebene verallgemeinern:

$$\tilde{z}_i = \Phi_i(z_i), \quad i = 1, 2. \quad (5.25)$$

Die Methode der konformen Abbildung in der Ebene ist aus der Elektrostatik bekannt. Dort wird sie insbesondere dazu benutzt, das elektrische Feld einer gegebenen ebenen Ladungsverteilung zu berechnen, indem die Anordnung auf eine bekannte Ladungsverteilung abgebildet wird.

Die konjugierte Variablen erhalten wir aus (5.24) bis auf eine additive Konstante zu:

$$\tilde{w}_i = \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial z_i} \right)^{-1} w_i, \quad i = 1, 2. \quad (5.26)$$

Eine konforme Abbildung wie (5.25) wirkt im reellen Phasenraum im Allgemeinen weder wie eine Punkttransformation, noch entspricht sie dort einer reellen kanonischen Transformation, wenn die Bedingungen $\tilde{z}_i^* = i\tilde{w}_i$ nicht erfüllt werden [47].

Es ist vorteilhaft, den Oszillator in Wirkungs- und Winkelvariablen I_i und Θ_i darzustellen [12], denn das System ist separabel und deswegen integrierbar. Der klassische Phasenraum für ein kompaktes, einfach zusammenhängendes Gebiet ($H_1 = E_1$ und $H_2 = E_2$) ist topologisch äquivalent zu einem 2-Torus [12] und mit $(I_1, I_2, \Theta_1, \Theta_2)$ erhalten wir eine natürliche Parametrisierung dieses Torus. Die Hamilton-Funktion $H_i = E_i$ einer Mode beschreibt eine Ellipse im Phasenraum (q_i, p_i) mit dem Flächeninhalt $\Delta S_i = 2\pi H_i / \omega_i$. Die konstante Wirkungsvariable I_i ist daher

$$I_i = \frac{\Delta S_i}{2\pi} = \frac{H_i}{\omega_i}, \quad i = 1, 2. \quad (5.27)$$

Die Erzeugende S der kanonischen Transformation auf Wirkungs- und Winkelvariablen ist

$$S = \int_0^{q_1} \sqrt{2I_1\omega_1 - \omega_1^2 s^2} ds + \int_0^{q_2} \sqrt{2I_2\omega_2 - \omega_2^2 s^2} ds$$

und die Wirkungsvariable dadurch bestimmt zu

$$\Theta_i = \frac{\partial S}{\partial I_i} = \arcsin \left(\sqrt{\frac{\omega_i}{2I_i}} q_i \right). \quad (5.28)$$

Dies liefert uns gerade eine Polardarstellung von z_i und w_i , siehe (5.17):

$$\begin{aligned} z_i &= \sqrt{I_i} \exp \left(-i \left(\frac{\pi}{2} - \Theta_i \right) \right), \\ w_i &= -i \sqrt{I_i} \exp \left(i \left(\frac{\pi}{2} - \Theta_i \right) \right). \end{aligned}$$

Mit den Winkeln

$$\vartheta_i = \frac{\pi}{2} - \Theta_i = \arctan \left(\frac{p_i}{\omega_i q_i} \right)$$

gilt dann

$$\begin{aligned} z_i &= \sqrt{I_i} \exp(-i\vartheta_i), \\ w_i &= -i \sqrt{I_i} \exp(i\vartheta_i). \end{aligned}$$

Invertieren dieser Beziehungen ergibt

$$\begin{aligned} I_i &= iz_i w_i, \\ \vartheta_i &= \frac{i}{2} \ln \left(\frac{z_i}{w_i} \right) - \frac{\pi}{4}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Das Ziel ist es nun, die verschiedenen Frequenzen $\omega_i = \omega/\rho_i$ beider Moden jeweils auf die gemeinsame Frequenz ω zu transformieren. Dazu müssen wir die Winkelvariablen entsprechend anpassen. Wir wenden folgende konforme Abbildung an:

$$z_i \mapsto \tilde{z}_i = z_i^{\rho_i}, \quad i = 1, 2. \quad (5.30)$$

Aus der Darstellung in Polarkoordinaten ist unmittelbar ersichtlich, dass die gesamte z_i -Ebene in eine ρ_i -fach überdeckte \tilde{z}_i -Ebene übergeht. Dies entspricht einer Faltung des Phasenraums in jeweils ρ_i Blätter. Betrachten wir die transformierten Variablen genauer: Aus (5.26) erhalten wir die zugehörige konjugierte Variable \tilde{w}_i zu

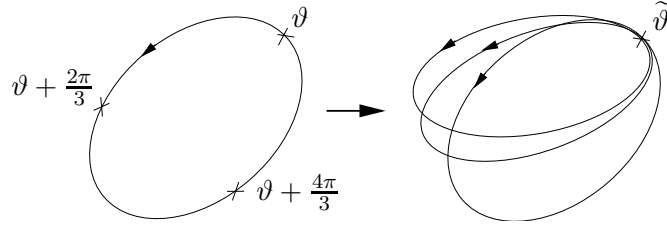
$$\tilde{w}_i = \rho_i^{-1} z_i^{1-\rho_i} w_i, \quad i = 1, 2.$$

Die Transformation ist damit nicht reell, denn (5.23) ist im Allgemeinen nicht erfüllt. Ausgedrückt in Polarkoordinaten sehen wir den Grund: Mit (5.29) finden wir

$$\begin{aligned} \tilde{I}_i &= \frac{I_i}{\rho_i}, \\ \tilde{\vartheta}_i &= \rho_i \vartheta_i + \frac{i}{2} \ln \left(\rho_i I_i^{\rho_i - 1} \right). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Da ϑ_i und I_i reell sind, ist die neue Winkelvariable $\tilde{\vartheta}_i$ komplex. Ihr Imaginärteil ist jedoch eine Funktion, die nur von I_i abhängt und vertauscht deshalb mit \tilde{I}_i bezüglich der Poisson-Klammer. Wir können uns deshalb auf den Realteil von $\tilde{\vartheta}_i$ beschränken.

Abbildung 5.5: Die Transformation (5.32) für $\rho_i = 3$: Eine Phasenraum-Ellipse wird an einem Punkt zu drei Schleifen zusammengeheftet



Dann ist die Transformation sowohl kanonisch als auch reell und für eine Interpretation im klassischen Phasenraum \mathcal{P} zugänglicher. Durch die Transformation

$$\begin{aligned} \tilde{I}_i &= \frac{I_i}{\rho_i}, \\ \tilde{\vartheta}_i &= \operatorname{Re} \left(\rho_i \vartheta_i + \frac{i}{2} \ln \left(\rho_i I_i^{\rho_i - 1} \right) \right) = \rho_i \vartheta_i \end{aligned} \quad (5.32)$$

werden die Winkel $\vartheta_i + 2\pi l_i / \rho_i$, $l_i = 0, 1, \dots, (\rho_i - 1)$ in der z_i -Ebene auf einen Winkel $\tilde{\vartheta}_i \bmod 2\pi$ in der \tilde{z}_i -Ebene abgebildet. Abbildung 5.5 veranschaulicht dies. Die transformierten Phasenraumkoordinaten lauten damit

$$\begin{aligned} \tilde{z}_i &= \left(\frac{I_i}{\rho_i} \right)^{1/2} \exp(-i \rho_i \vartheta_i) \\ &= \left(\frac{z_i z_i^*}{\rho_i} \right)^{1/2} \left(\frac{z_i}{\sqrt{z_i z_i^*}} \right)^{\rho_i}, \quad i = 1, 2. \end{aligned}$$

Die Ähnlichkeit mit (5.18) ist offensichtlich, jedoch deutet schon das Auftreten von Gauß-Klammern in den quantenmechanischen Ausdrücken darauf hin, dass die klassisch gefundenen Variablen \tilde{z}_i nicht direkt zu Operatoren verallgemeinert werden können. Für große Quantenzahlen ist jedoch

$$\left[\frac{\hat{z}_i \hat{z}_i^\dagger}{\rho_i} \right]_{\text{int}} \approx \left(\frac{\hat{z}_i \hat{z}_i^\dagger}{\rho_i} \right)$$

und wir erkennen die Transformation (5.32) als klassischen Limes von (5.18).

Die komplexe Transformation (5.31) bekommt ihre Berechtigung dadurch, dass sie sich zum einen in das allgemeinere Schema der konformen Abbildungen einordnet und zum anderen eine direkte Anwendung für eine quantenmechanische Rechnung bietet: Der komplexe Phasenraum erlaubt analog zum reellen Fall den Übergang zu einem Hilbert-Raum, dem sogenannten Bargmann-Fock-Raum [47].

Wie überträgt sich diese Transformation nun auf die Parametrisierung der periodischen Orbits? Die primitive Periode der Orbits im gefalteten Raum ist per Konstruktion

$$\tilde{T} = \frac{2\pi}{\omega}$$

und die Wirkung aller transformierten Orbits nach (5.32) und (5.27) für alle Orbits

gleich:

$$\begin{aligned}\tilde{S} &= 2\pi \left(\tilde{I}_1 + \tilde{I}_2 \right) = 2\pi \left(\frac{I_1}{\rho_1} + \frac{I_2}{\rho_2} \right) \\ &= 2\pi \frac{E}{\omega}.\end{aligned}$$

Es sollte beachtet werden, dass sich die transformierten Orbits im gefalteten Raum tatsächlich nach der Periode $2\pi/\omega$ schließen. Außerdem gilt mit $\tilde{b}_i = \tilde{z}_i^*$ und $\tilde{\mathbf{b}} = (\tilde{b}_1, \tilde{b}_2)$

$$\tilde{\mathbf{b}}^* \cdot \tilde{\mathbf{b}} = \tilde{b}_1^* \tilde{b}_1 + \tilde{b}_2^* \tilde{b}_2 = \tilde{I}_1 + \tilde{I}_2 = \frac{E}{\omega}.$$

Wir können damit eine zum isotropen Oszillator analoge Abbildung (5.6) von Startpunkten der transformierten Orbits auf (normierte) Blochkugelzustände betrachten und finden

$$\sqrt{\frac{\omega}{E}} \begin{pmatrix} \tilde{b}_1 \\ \tilde{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\tilde{\beta}/2) \exp(-i\tilde{\alpha}/2) \\ \sin(\tilde{\beta}/2) \exp(i\tilde{\alpha}/2) \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Der Blochkugelzustand wird durch die Winkel $\tilde{\alpha} \in [0, 2\pi)$ und $\tilde{\beta} \in [0, \pi]$ parametrisiert. Die Symmetrieoperation im gefalteten Phasenraum wird durch die entsprechenden klassischen Erhaltungsgrößen erzeugt

$$\begin{aligned}\tilde{J}_1 &= \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{\omega} \cos(\tilde{\vartheta}_2 - \tilde{\vartheta}_1), \\ \tilde{J}_2 &= \frac{\sqrt{E_1 E_2}}{\omega} \sin(\tilde{\vartheta}_2 - \tilde{\vartheta}_1), \\ \tilde{J}_3 &= \frac{1}{2\omega} (E_1 - E_2), \\ \tilde{\mathbf{J}}^2 &= \tilde{J}_1^2 + \tilde{J}_2^2 + \tilde{J}_3^2 = \frac{E^2}{4\omega^2}.\end{aligned}$$

Ein Vergleich von Imaginär- und Realteil der ersten Zeile von (5.33) liefert

$$\begin{aligned}\sqrt{E_1} \cos(\tilde{\vartheta}_1) &= \sqrt{E} \cos(\tilde{\beta}/2) \cos(\tilde{\alpha}/2), \\ \sqrt{E_2} \sin(\tilde{\vartheta}_1) &= \sqrt{E} \cos(\tilde{\beta}/2) \sin(-\tilde{\alpha}/2),\end{aligned}$$

und daraus folgt

$$\begin{aligned}E_1 &= E \cos^2(\tilde{\beta}/2), \\ \tilde{\alpha}/2 &= -\tilde{\vartheta}_1.\end{aligned} \quad (5.34a)$$

Analog folgt aus der zweiten Zeile

$$\begin{aligned}E_2 &= E \sin^2(\tilde{\beta}/2), \\ \tilde{\alpha}/2 &= \tilde{\vartheta}_2.\end{aligned} \quad (5.34b)$$

Die Aufteilung der Gesamtenergie E auf die Moden ist nach wie vor vom Parameter $\tilde{\beta}$ allein abhängig, für $\tilde{\beta} \in [0, \pi]$ erhalten wir alle Möglichkeiten.

Um uns ein anschaulicheres Bild zu verschaffen, transformieren wir mit (5.20) und $\vartheta_i = \tilde{\vartheta}_i/\rho_i$ die eben erhaltene Parametrisierung zurück auf den ursprünglichen, rellen Phasenraum \mathcal{P} . Wir erhalten für die Startpunkte der Orbits:

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{\rho_1}{\omega} \sqrt{2E} \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2\rho_1}\right) \cos\left(\frac{\tilde{\beta}}{2}\right), \\ p_1 &= -\sqrt{2E} \sin\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2\rho_1}\right) \cos\left(\frac{\tilde{\beta}}{2}\right), \end{aligned} \quad (5.35a)$$

sowie

$$\begin{aligned} q_2 &= \frac{\rho_2}{\omega} \sqrt{2E} \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2\rho_2}\right) \sin\left(\frac{\tilde{\beta}}{2}\right), \\ p_2 &= \sqrt{2E} \sin\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2\rho_2}\right) \sin\left(\frac{\tilde{\beta}}{2}\right). \end{aligned} \quad (5.35b)$$

Aus diesen Anfangsbedingungen lässt sich die zeitliche Entwicklung im ursprünglichen Orstraum finden (vergleiche (5.8)):

$$\begin{aligned} q_1(t) &= \frac{\rho_1}{\omega} \sqrt{2E} \cos\left(\frac{\tilde{\beta}}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega}{\rho_1}t + \frac{\tilde{\alpha}}{2\rho_1}\right) \\ q_2(t) &= \frac{\rho_2}{\omega} \sqrt{2E} \sin\left(\frac{\tilde{\beta}}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega}{\rho_2}t - \frac{\tilde{\alpha}}{2\rho_2}\right). \end{aligned} \quad (5.36)$$

Im Unterschied zum isotropen Oszillator ist natürlich nicht zu erwarten, dass sich die Orbits nach einer Propagation um $2\pi/\omega$ schließen, denn ihre primitive Periode im Ursprungsraum ist das $\rho_1\rho_2$ -fache. Abbildung 5.6 zeigt dies am Beispiel für $\rho_1/\rho_2 = 3/2$.

5.2.4 Diskrete Entartung der Orbit-Familie

Wir haben bis jetzt eine wichtige Tatsache noch nicht berücksichtigt. Sie macht gerade den Unterschied zwischen der Orbit-Familie des anisotropen Oszillators und der des isotropen Oszillators aus: In der Transformation (5.30) von z_i auf \tilde{z}_i ist eine zusätzliche, diskrete Symmetrie enthalten. \tilde{z}_i bleibt unter Drehungen der z_i -Ebene um die Winkel $2\pi l_i/\rho_i$, $l_i = 0, 1, \dots, (\rho_i - 1)$ invariant:

$$z_i \rightarrow z_i \exp\left(i \frac{2\pi l_i}{\rho_i}\right) \Rightarrow \tilde{z}_i \rightarrow \tilde{z}_i, \quad i = 1, 2.$$

Die Drehungen um Vielfache der Winkel $2\pi/\rho_i$ bilden eine abelsche Symmetriegruppe, die zyklische Gruppe \mathcal{C}_{ρ_i} . Die Drehungen für $i = 1$ und $i = 2$ sind voneinander unabhängig, so dass sich insgesamt die Produktgruppe

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}_{\rho_1} \times \mathcal{C}_{\rho_2}$$

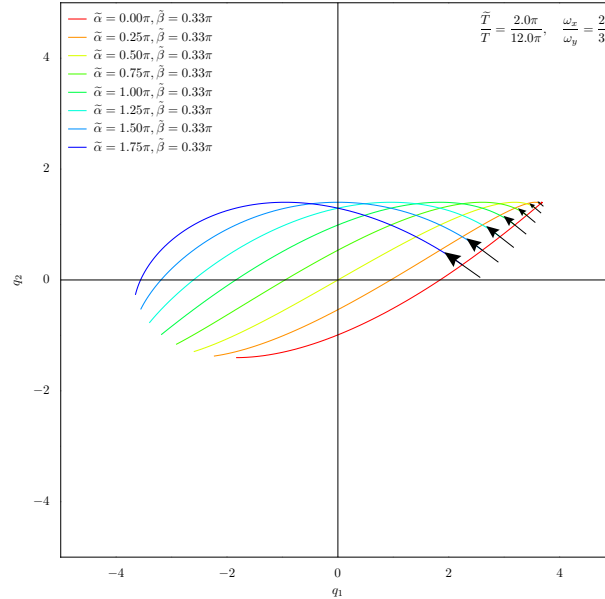


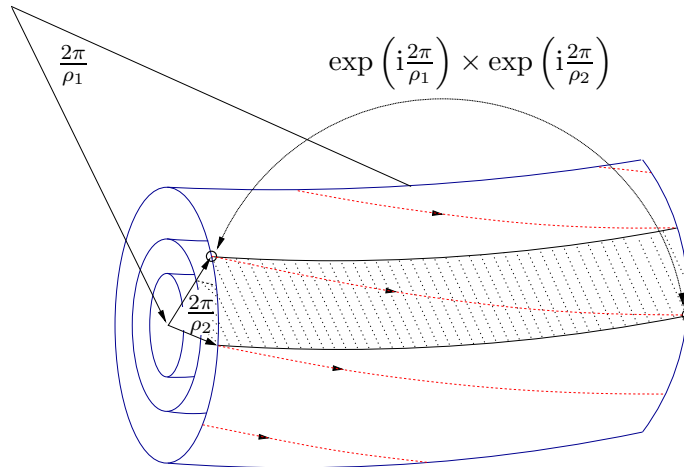
Abbildung 5.6: Orbits nach einer Zeitentwicklung von $\tilde{T} = 2\pi/\omega$ im ursprünglichen Ortsraum für $E_1 = E \cos^2(\pi/6)$ und verschiedene Werte von $\tilde{\alpha}$. Die Startpunkte sind durch Pfeile gekennzeichnet. Ihre Größe und Richtung sind ein Maß für den Betrag und die Richtung des jeweiligen Anfangsimpulses.

aus $\rho_1\rho_2$ Elementen bildet.

Durch die Abbildung des rationalen anisotropen Oszillators auf den isotropen Oszillator haben wir den vollen Phasenraum \mathcal{P} auf einen um die diskrete Symmetrie \mathcal{C} reduzierten Raum $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ eingeschränkt: Der Raum \mathcal{P} wurde in $\rho_1\rho_2$ Blätter aufgeteilt; jeder Punkt innerhalb eines Blattes steht mit einem Punkt auf jedem anderen Blatt durch entsprechende Symmetrieoperation von \mathcal{C} in Beziehung. Wendet man \mathcal{C} auf alle Punkte eines Blattes an, erhält man eine Überdeckung des vollen Phasenraums \mathcal{P} . Diese Überdeckung ist disjunkt, da keine zwei Punkte innerhalb eines gleichen Blattes durch nichttriviale Symmetrieoperationen aus \mathcal{C} aufeinander abgebildet werden können. Damit haben wir genau das durchgeführt, was in Kapitel 4 über die Reduktion bezüglich diskreter Symmetrien allgemein besprochen wurde. Ein beliebig gewähltes, aber festes Blatt dient als primitive Einheitszelle $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ des Phasenraums bezüglich der Symmetrie \mathcal{C} . Durch Identifikation der bezüglich \mathcal{C} in Beziehung stehenden Punkte auf dem Rand von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ erzeugen wir den symmetrie-reduzierten Raum \mathcal{P}_{red} . Diese Faltung ist hier nun sehr anschaulich. Für ein integrables System in 2 Dimensionen bedeutet es, dass wir jeden 2-Torus zu einer vorgegebenen Energieverteilung zunächst in ρ_1 Stücke teilen (siehe Abbildung 5.7). Propagiert man einen Punkt vom Rand eines dieser Schlauchstücke zum anderen, so steht der erreichte Endpunkt durch eine Symmetrieoperation $c_{\text{prim}} \in \mathcal{C}$ mit dem Startpunkt in Verbindung. Die Entwicklung von ϑ_1 um $2\pi/\rho_1$ bedeutet eine zeitliche Entwicklung um $2\pi/\omega$. ϑ_2 ändert sich während dieser Zeit um $2\pi/\rho_2$ und die Operation c_{prim} ist deswegen

$$c_{\text{prim}} := (c_1 \times c_2) := \exp\left(i\frac{2\pi}{\rho_1}\right) \times \exp\left(i\frac{2\pi}{\rho_2}\right).$$

Abbildung 5.7: Ausschnitte von drei ineinander liegenden 2-Tori zu verschiedenen Aufteilungen der Gesamtenergie. Auf dem obersten Torus windet sich ein periodischer Orbit, dargestellt durch die gestrichelten Linien. Die Pfeile geben die Richtung des Hamiltonschen Flusses an. Die Winkelvariable ϑ_1 wurde auf den ρ_1 ten Teil beschränkt, analog die Variable ϑ_2 ; die sich ergebende Fläche (schraffiert) ist die primitive Einheitszelle bei konstanter Energie. Die durch Kreise markierten Anfangs- und Endpunkte eines Teilorbits lassen sich durch Drehung der ϑ_1 Koordinate um $2\pi/\rho_1$ und gleichzeitige Drehung der ϑ_2 Koordinate um $2\pi/\rho_2$ miteinander identifizieren.



Punkte auf dem Torus, die sich in ϑ_1 um $2\pi/\rho_1$ unterscheiden, können miteinander identifiziert werden, analog für ϑ_2 . Das Teilstück des eben betrachteten Orbits liegt deshalb in einer Fläche, deren Randpunkte jeweils miteinander in Beziehung stehen und ist deswegen eine primitive Einheitszelle $\mathcal{P}_{\text{prim}}$. Die Faltung von $\mathcal{P}_{\text{prim}}$ ergibt einen neuen, kleineren 2-Torus, den reduzierten Raum \mathcal{P}_{red} . Dies ist der Phasenraum des isotropen Oszillators.

Zur einfacheren Notation kennzeichnen wir die Gruppenelemente mit $(l_1 \times l_2)$:

$$(l_1 \times l_2) \leftrightarrow \exp\left(i\frac{2\pi l_1}{\rho_1}\right) \times \exp\left(i\frac{2\pi l_2}{\rho_2}\right), \quad l_i = 0, 1, \dots, \rho_i - 1, \quad i = 1, 2.$$

Damit gilt

$$c_{\text{prim}} = (1 \times 1)$$

und für die Gruppenoperation

$$(l_1 \times l_2)(l'_1 \times l'_2) = ((l_1 + l'_1) \bmod \rho_1 \times (l_2 + l'_2) \bmod \rho_2).$$

Wie erwartet ist c_{prim} der Erzeuger der zyklischen Gruppe \mathcal{C} : Jedes Gruppenelement c kann durch ein entsprechendes Vielfaches dargestellt werden.

$$c = c_{\text{prim}}^l = (1 \times 1)^l \leftrightarrow \exp\left(i\frac{2\pi l}{\rho_1}\right) \times \exp\left(i\frac{2\pi l}{\rho_2}\right), \quad l \in \{0, 1, \dots, \rho_1 \rho_2 - 1\}.$$

Die Winkel $\vartheta_i + 2\pi l_i/\rho_i$ in \mathcal{P} wurden durch die Faltung auf einen Winkel $\tilde{\vartheta}_i$ abgebildet. Sie werden sukzessive bei einer zeitlichen Entwicklung des Orbits durchlaufen. Nehmen wir $\rho_1 > \rho_2$ an und ordnen die Elemente von \mathcal{C} entsprechend dieser Vorschrift, dann erhalten wir für die zeitliche Abfolge

$$(0 \times 0) \rightarrow (1 \times 1) \rightarrow \dots \rightarrow (\rho_2 - 1 \times \rho_2 - 1) \rightarrow (\rho_2 \times 0) \rightarrow \dots \rightarrow (\rho_1 - 1 \times \rho_2 - 1).$$

Für $\rho_1 = 3$ und $\rho_2 = 2$ ergibt sich beispielsweise das Schema

$$(0 \times 0) \rightarrow (1 \times 1) \rightarrow (2 \times 0) \rightarrow (0 \times 1) \rightarrow (1 \times 0) \rightarrow (2 \times 1). \quad (5.37)$$

Bis der ursprüngliche Phasenraumpunkt wieder erreicht wird, wird die Gruppe \mathcal{C}_{ρ_1} also ρ_2 -mal und die Gruppe \mathcal{C}_{ρ_2} genau ρ_1 -mal durchlaufen. Jeder Schritt entspricht einer Propagation vom Zeitpunkt t zu $t + \tilde{T} = t + 2\pi/\omega$. Ein Vergleich mit (5.36) zeigt, dass dies jeweils einer Änderung des Parameters $\tilde{\alpha}$ um 4π entspricht (siehe Abbildung 5.8):

$$\tilde{\alpha} \rightarrow \tilde{\alpha} + 4\pi l, \quad l = 0, 1, \dots, (\rho_1\rho_2 - 1).$$

Wir können uns also einen gegebenen, periodischen Orbit im nichtgefalteten Phasenraum als Stückelung von $\rho_1\rho_2$ Teilorbits vorstellen. Die Parametrisierung des Startpunkts eines Teilorbits liegt auf einer Blochkugel. Die Parametrisierungen der Startpunkte verschiedener Teilorbits liegen jedoch außerhalb der jeweiligen Parameter-Bereiche von $\tilde{\alpha}$. Wir können uns deswegen $\rho_1\rho_2$ verschiedene Blochkugeln denken, auf denen die $\rho_1\rho_2$ Startpunkte der Teilorbits parametrisiert liegen. Für den Fall mit $\rho_1 = 3$ und $\rho_2 = 2$ sind die sechs Kugelschalen in Abbildung 5.9 dargestellt und entsprechend der Sequenz (5.37) nummeriert.

5.2.5 Reduzierte Zustandsdichten

Wir können nun sehr leicht die Zustandsdichten betrachten, die zu irreduziblen Darstellungen der diskreten Symmetrie gehören, so wie wir es allgemein in Kapitel 4 ausgeführt haben. Denn für die reduzierten Zustandsdichten lassen sich die Ergebnisse für den isotropen Oszillator verwenden. Wir haben in Kapitel 4 ebenfalls gesehen, dass sich durch Summation über alle irreduziblen Darstellungen die volle Zustandsdichte wiedergewinnen lässt. Dann haben wir unser Ziel erreicht.

Wir benutzen im Folgenden die Ausdrücke (4.9). In diesen treten die Charaktere der irreduziblen Darstellungen für die Gruppenoperationen $(l_1 \times l_2)$ auf. Diese sind hier einfach zu berechnen, denn für zyklische und damit abelsche Gruppen sind alle irreduziblen Darstellungen eindimensional [23]. Kennzeichnen λ_1 und λ_2 die irreduziblen Darstellungen der Gruppen \mathcal{C}_1 und \mathcal{C}_2 dann gilt für die Dimension der Darstellung (λ_1, λ_2) also

$$d_{(\lambda_1, \lambda_2)} = 1.$$

Für die Charaktere der Produktgruppe gilt allgemein [23, 48]:

$$\chi_{(\lambda_1, \lambda_2)}(l_1 \times l_2) = \chi_{\lambda_1}(l_1)\chi_{\lambda_2}(l_2), \quad l_i \in \mathcal{C}_{\rho_i}, i = 1, 2.$$

Mit dieser Beziehung lässt sich eine Charaktertabelle für die Produktgruppe $\mathcal{C}_{\rho_1} \times \mathcal{C}_{\rho_2}$ aufstellen. Sie ist für $\rho_1 = 3$ und $\rho_2 = 2$ in 5.1 abgebildet.

Der Charakter des Gruppenelements

$$(l_1 \times l_2) \leftrightarrow \exp\left(i\frac{2\pi l_1}{\rho_1}\right) \times \exp\left(i\frac{2\pi l_2}{\rho_2}\right)$$

in der Darstellung (λ_1, λ_2) lautet

$$\chi_{(\lambda_1, \lambda_2)}(l_1 \times l_2) = \exp\left(2\pi i \left(\frac{l_1 \lambda_1}{\rho_1} + \frac{l_2 \lambda_2}{\rho_2}\right)\right). \quad (5.38)$$

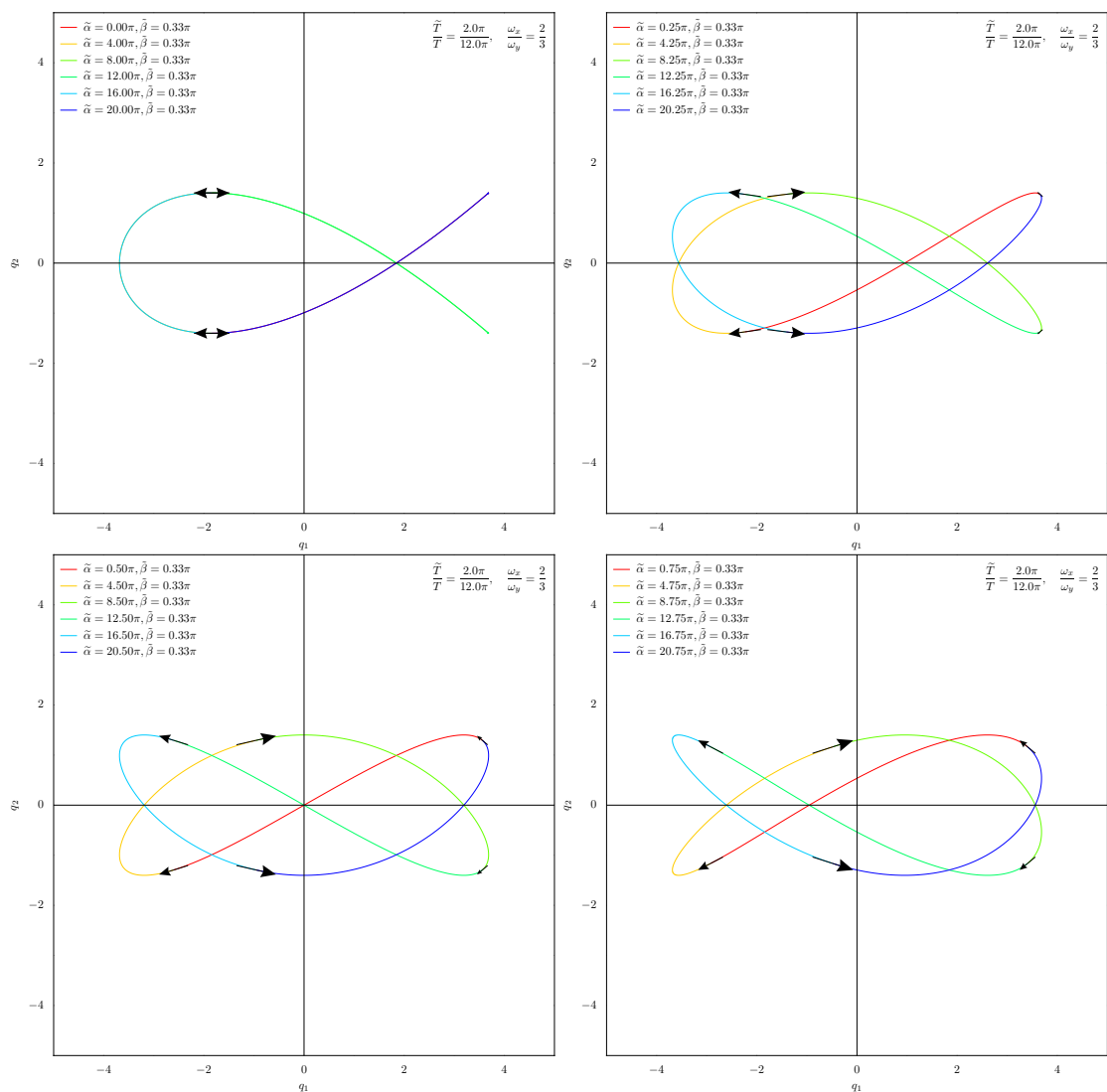


Abbildung 5.8: Trajektorien im ursprünglichen Ortsraum für $\rho_1/\rho_2 = 3/2$ und $E_1 = E \cos^2(\pi/6)$. Die durch $\tilde{\alpha} + 4\pi l$, $l = 0, 1, \dots, 5$ gegebenen Startpunkte werden jeweils über die Zeitdauer $\tilde{T} = 2\pi/\omega$ propagiert. Die Teilorbits setzen sich dann zu einem periodischen Orbit der Periode $T = \rho_1\rho_2\tilde{T}$ zusammen. Oben links: $\tilde{\alpha} = 0$, die Teilorbits überdecken sich, da der Gesamtorbit nach einer halben Periode in sich zurückläuft. Oben rechts: für $\tilde{\alpha} = \pi/4$ ist diese Entartung aufgehoben. Es bildet sich eine vollständige Lissajous-Figur. Unten sind zwei weitere Orbits aus dieser Reihe für $\alpha = \pi/2$ und $\alpha = 3\pi/4$ dargestellt.

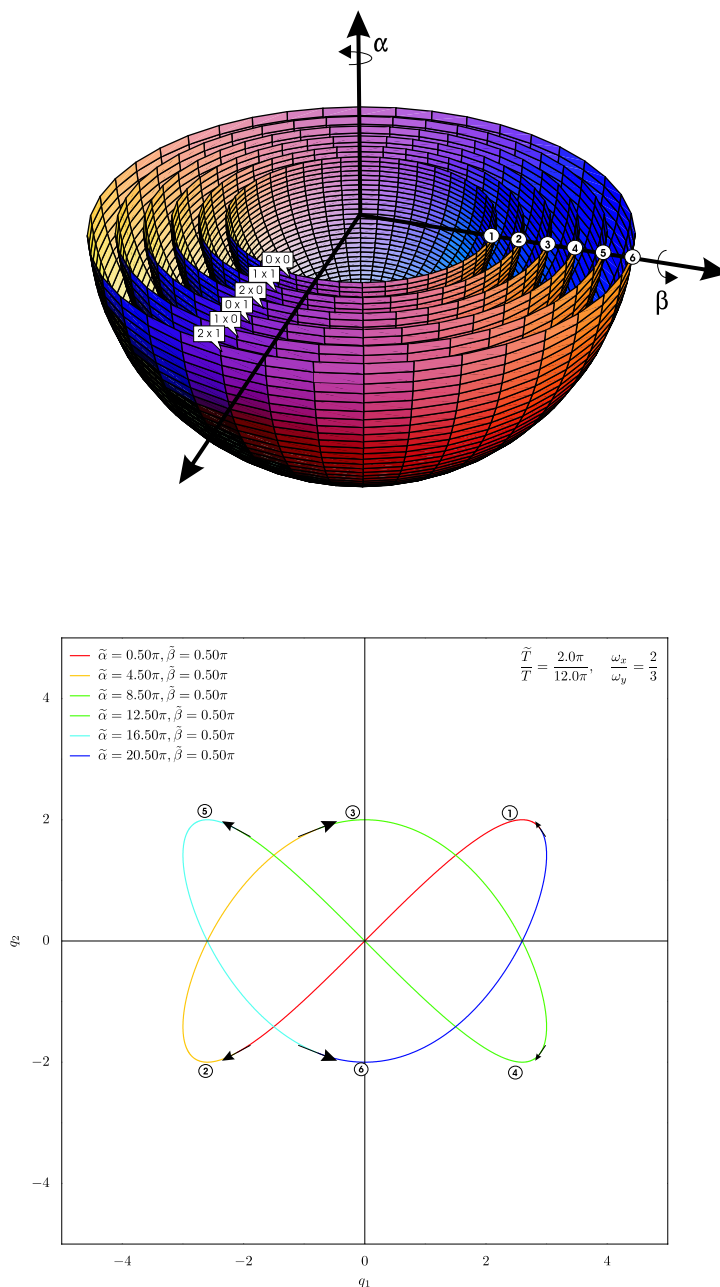


Abbildung 5.9: Sechs ineinander liegende Schalen der Blochkugeln für den Oszillator mit Frequenzverhältnis $3/2$. Sie wurden von innen nach außen entsprechend der Sequenz (5.37) des zeitlichen Durchlaufs der Gruppenelemente nummeriert. Die Punkte ① bis ⑥ kennzeichnen die Teilorbits einer Lissajous-Figur (unten) mit Startpunkten, die durch $\tilde{\beta} = \pi/2$ (also $E_1 = E_2$) und $\tilde{\alpha} = \pi/2$ parametrisiert sind. Der Sprung von Teilorbit zu Teilorbit entspricht einem Sprung von Kugelschale zu Kugelschale.

$\mathcal{C}_3 \times \mathcal{C}_2$	$(e \times e)$	$(c_1 \times e)$	$(c_1^2 \times e)$	$(e \times c_2)$	$(c_1 \times c_2)$	$(c_1^2 \times c_2)$
$\chi_{(0,0)}$	1	1	1	1	1	1
$\chi_{(1,0)}$	1	c_1	c_1^2	1	c_1	c_1^2
$\chi_{(2,0)}$	1	c_1^2	c_1^4	1	c_1^2	c_1^4
$\chi_{(0,1)}$	1	1	1	c_2	c_2	c_2
$\chi_{(1,1)}$	1	c_1	c_1^2	c_2	$c_1 c_2$	$c_1^2 c_2$
$\chi_{(2,1)}$	1	c_1^2	c_1^4	c_2	$c_1^2 c_2$	$c_1^4 c_2$

Tabelle 5.1: Charaktertabelle für die Produktgruppe $\mathcal{C} = \mathcal{C}_3 \times \mathcal{C}_2$. $c_1 = \exp(2\pi i/3)$ und $c_2 = \exp(2\pi i/2)$ sind die Erzeuger der Gruppen \mathcal{C}_3 und \mathcal{C}_2 . Sie stimmen mit ihren Charakteren überein, da die Gruppen abelsch sind. $\chi_{(\lambda_1, \lambda_2)}$ bezeichnet den Charakter des jeweiligen Elements der Produktgruppe in der Darstellung (λ_1, λ_2) .

In (4.9) benötigen wir die Charaktere des Gruppenelements $c_{\tilde{\Gamma}}$, das den Endpunkt eines Orbits nach einer Zeitentwicklung um eine reduzierte primitive Periode \tilde{T} mit dem Startpunkt identifiziert. Dies ist gerade $c_{\text{prim}} = (1 \times 1)$. Das Problem mit sogenannten Randorbits tritt hier nicht auf (siehe Kapitel 4.2.2 auf Seite 29), da die Orbit-Familie nicht isoliert auf einer Symmetrieoberfläche liegt. Mit Hilfe der Ergebnisse (5.11) für den isotropen Oszillator erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \text{Tr } G_{\text{skl},(\lambda_1, \lambda_2)}(E) &= \frac{(2\pi i \hbar)^{-k/2}}{i \hbar} \frac{\tilde{T}V}{|Q|^{1/2}} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\chi_{(\lambda_1, \lambda_2)}^*(c_{\text{prim}}^r) \exp\left(\frac{i}{\hbar} r \tilde{S} - i \tilde{\sigma}_r \frac{\pi}{2}\right)}{\left| \det W_{\tilde{\Gamma}, r} \det \left(\tilde{M}_{\tilde{\Gamma}}^r - \mathbf{I} \right) \right|^{1/2}} \\
 &= \frac{-2\pi E}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{r=1}^{\infty} \exp\left(-i 2\pi r \left(\frac{\lambda_1}{\rho_1} + \frac{\lambda_2}{\rho_2}\right)\right) \exp\left(ir \frac{2\pi E}{\hbar \omega} - i \tilde{\sigma}_r \frac{\pi}{2}\right).
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

5.2.6 Rekonstruktion der vollen Zustandsdichte und Diskussion

In Kapitel 4.2.4 wurde gezeigt, dass sich die volle Zustandsdichte durch Summation über alle irreduziblen Darstellungen (re)konstruieren lässt. Summieren wir hier über alle Werte von λ_1 und λ_2 , dann verschwinden alle Terme, in denen r kein ganzzahliges Vielfaches von $\rho_1 \rho_2$ ist:

$$\sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \exp\left(-i 2\pi r \left(\frac{\lambda_1}{\rho_1} + \frac{\lambda_2}{\rho_2}\right)\right) = \begin{cases} \rho_1 \rho_2 & \text{für } r = \rho_1 \rho_2 k, k \in \mathbb{N}, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{5.40}$$

Damit gilt für die volle Zustandsdichte dieser Orbit-Familie:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr } G_{\text{skl}}(E) &= \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \text{Tr } G_{\text{skl},(\lambda_1, \lambda_2)}(E) \\
 &= \frac{-2\pi E \rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(ik \rho_1 \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} - i \sigma_k \frac{\pi}{2}\right).
 \end{aligned} \tag{5.41}$$

Es bleibt schließlich über, den Maslov-Index σ_k der k -ten Wiederholung eines vollständig periodischen Orbits zu bestimmen. Wir gehen dazu von den Ergebnissen aus, die wir für den isotropen Oszillator erhalten haben: Da für gleiche Wiederholung jeder Orbit der Familie den gleichen Index besitzt, betrachten wir wieder einen beliebigen Stellvertreter, beispielsweise die Schwingung entlang der q_1 -Achse. Für den isotropen Oszillator hatten wir für k' Wiederholungen den Index als Limes des Phasenindex des irrationalen Oszillators $\sigma_{k',\text{irrat}}$ mit einer Korrektur von $\Delta\sigma_{k'} = -2$ erkannt, vergleiche 5.12. Hier lautet entsprechend

$$\sigma_{k'} = \sigma_{k',\text{irrat}} \left(\frac{\omega_2}{\omega_1} = \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) + \Delta\sigma_{k'} = 2k' + 1 + 2 \left[k' \frac{\rho_1}{\rho_2} \right]_{\text{int}} - 2.$$

Wir müssen allerdings noch zusätzlich beachten, dass nur die ρ_2 -fachen Wiederholungen dieser Schwingung innerhalb der entarteten Familie der Lissajous-Figuren liegen. Wir setzen deswegen $k' = \rho_2 k$. Damit folgt

$$\sigma_k = 2\rho_2 k + 1 + 2 \left[\rho_2 k \frac{\rho_1}{\rho_2} \right]_{\text{int}} - 2 = 2k(\rho_1 + \rho_2) - 1. \quad (5.42)$$

Analoge Argumentation für die Schwingung entlang der q_2 -Achse liefert das gleiche Ergebnis.

Der zu \hbar^{-2} proportionale Beitrag zur Zustandsdichte durch die Orbit-Familie der Lissajous-Figuren ist mit (5.42) und (5.41) insgesamt also:

$$\begin{aligned} \delta g^{(2)}(E) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{-2\pi E \rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{k=1}^{\infty} \exp \left(ik \rho_1 \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} - i(2k(\rho_1 + \rho_2) - 1) \frac{\pi}{2} \right) \right) \\ &= \frac{2E \rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{k=1}^{\infty} \sin \left(k \rho_1 \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} - k(\rho_1 + \rho_2) \pi + \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \frac{2E \rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k(\rho_1 + \rho_2)} \cos \left(k \rho_1 \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right). \end{aligned}$$

Zusammen mit den zu \hbar^{-1} proportionalen Beiträgen aus (5.21) und (5.22) erhalten wir wegen $\omega_i = \omega/\rho_i$, ($i = 1, 2$) folgenden Ausdruck für den oszillierenden Anteil der Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} \delta g(E) &= \delta g_1^{(1)}(E) + \delta g_2^{(1)}(E) + \delta g^{(2)}(E) \\ &= \frac{1}{\hbar \omega_1} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_2 \mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi \rho_1/\rho_2)} \sin \left(r \rho_1 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar \omega_2} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_1 \mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi \rho_2/\rho_1)} \sin \left(r \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right) \\ &\quad + \frac{2E}{\hbar \omega_1 \hbar \omega_2} \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^{r(\rho_1 + \rho_2)} \cos \left(r \rho_1 \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right). \end{aligned} \quad (5.43)$$

Der stetige Thomas–Fermi–Anteil $\bar{g}(E)$ berechnet sich wie für den isotropen Oszillator (5.16) und lautet

$$\bar{g}(E) = \frac{1}{\hbar\omega_1\hbar\omega_2} \mathcal{L}_E^{-1} [1/\beta^2] = \frac{E}{\hbar\omega_1\hbar\omega_2}.$$

So finden wir schließlich folgende semiklassische Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} g(E) &= \bar{g}(E) + \delta g(E) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega_1} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_2\mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\rho_1/\rho_2)} \sin\left(r\rho_1 \frac{2\pi E}{\hbar\omega}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\omega_2} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_1\mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\rho_2/\rho_1)} \sin\left(r\rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar\omega}\right) \\ &\quad + \frac{E}{\hbar\omega_1\hbar\omega_2} \left[1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^{r(\rho_1+\rho_2)} \cos\left(r\rho_1\rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar\omega}\right) \right]. \end{aligned}$$

Wie für den isotropen Oszillator stimmt auch dieses Ergebnis mit der exakten Zustandsdichte (D.14) überein, die in Anhang D.2.2 berechnet wird.

Die Beiträge $\delta g_1^{(1)}(E)$ und $\delta g_2^{(1)}(E)$ der beiden isoliert liegenden Orbits sowie die Summe

$$\bar{g}(E) + \delta g^{(2)}(E) \tag{5.44}$$

des Thomas–Fermi Anteils und des Beitrags der Orbit–Familie sind für die Frequenzverhältnisse 2/1 und 3/2 in Abbildung 5.10 dargestellt. Offenbar liefert die Summe (5.44) bereits für sich ein Spektrum, in denen alle Energie–Eigenwerte des Hamilton–Operators enthalten sind. Es finden sich jedoch im Allgemeinen auch Peaks unterhalb der Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1\rho_2}.$$

Dies beruht auf der zur Energie linearen Entartung des Spektrums von (5.44). Sie wird (außer für den isotropen Oszillator) durch den Beitrag

$$\delta g^{(1)}(E) := \delta g_1^{(1)}(E) + \delta g_2^{(1)}(E)$$

der isolierten Orbits korrigiert. Durch diese Korrektur verschwinden auch die Energien unterhalb von E_0 .

Betrachten wir nun die einzelnen Beiträge der reduzierten Zustandsdichten (5.39) genauer. Wegen (5.40) ist $k = r/(\rho_1\rho_2)$. Dadurch ergibt sich der Maslov–Index für die reduzierte Orbit–Familie formal aus (5.42) zu

$$\tilde{\sigma}_r = 2r \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1\rho_2} - 1. \tag{5.45}$$

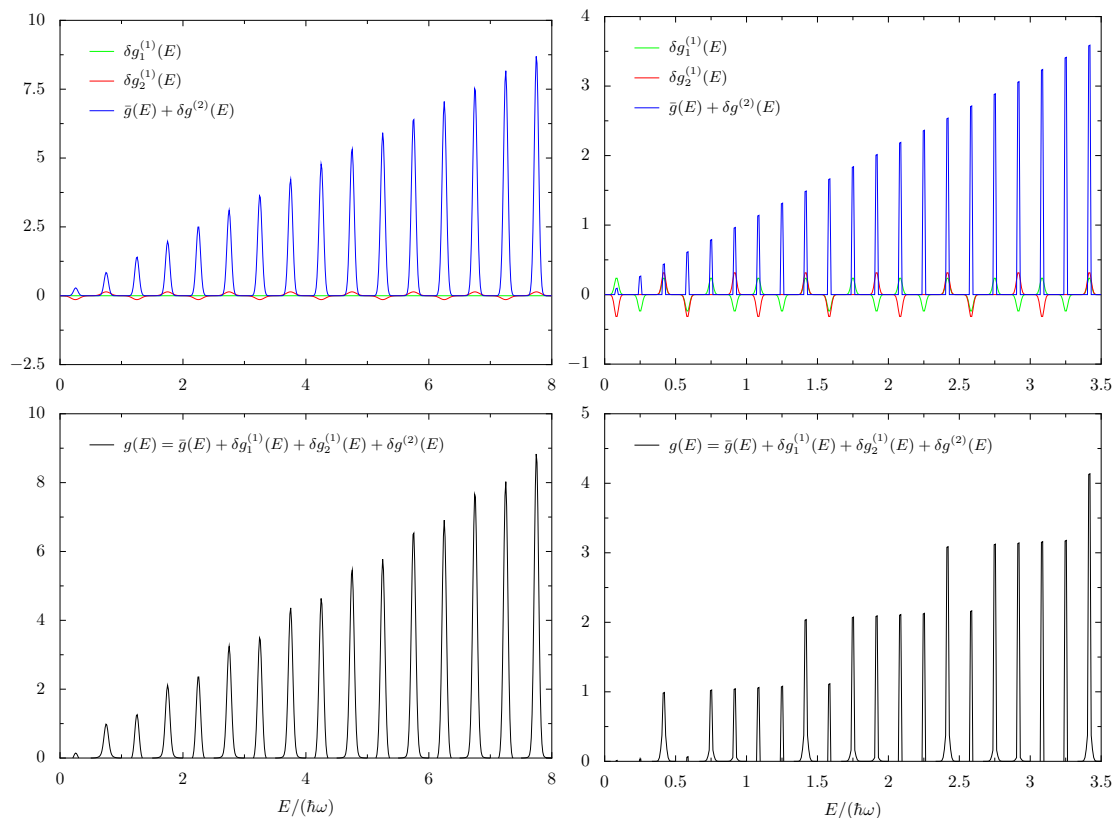


Abbildung 5.10: Semiklassische Zustandsdichten des harmonischen Oszillators. Links: Frequenzverhältnis $\rho_1/\rho_2 = 2/1$. Es wurde über die Beiträge der ersten 80 Wiederholungen des isolierten primitiven Orbits sowie über die ersten 40 Wiederholungen der primitiven Orbit-Familie summiert. Die Amplituden der Summanden wurden bezüglich der Wiederholung r exponentiell $\propto \exp(-\gamma r)$ gedämpft, um die Peaks gaußisch aufzuweiten ($\gamma = 0.1$). Der Term $\delta g_1^{(1)}(E)$ liefert hier keinen Beitrag, da keine natürliche Zahl r im ersten Summanden von (5.43) die Bedingung $r \notin \mathbb{N}$ erfüllt. Rechts: Frequenzverhältnis $\rho_1/\rho_2 = 3/2$. Es wurde über die ersten 600 Wiederholungen der beiden isolierten primitiven Orbits sowie über die ersten 100 Wiederholungen der primitiven Orbit-Familie summiert. Die Terme wurden ebenfalls gaußisch gedämpft ($\gamma = 0.02$). Die Amplitude des Spektrums der Orbitfamilie zusammen mit dem Thomas-Fermi-Anteil zeigt ein lineare Abhängigkeit in der Energie (oben). Die Eigenenergien des kommensurablen Oszillators sind jedoch entartet. Es sind die Beiträge der Librationen, die nicht in der Familie liegen, die das lineare Verhalten korrigieren, so dass erst die Summe aller Dichten für die richtige Entartung der einzelnen Eigenenergien sorgt (unten). Für das Frequenzverhältnis $2/1$ sind beispielsweise die ersten beiden Eigenenergien nicht entartet, die nächsten beiden 2fach entartet und so weiter. Für das $3/2$ Verhältnis sieht man, dass auch Überschneidungen in der Abfolge der Entartung auftreten, das 5te Niveau ist beispielsweise nicht entartet, das 6te Niveau zweifach entartet, das 7te jedoch wieder nicht.

Einsetzen in (5.39) ergibt für die reduzierte Zustandsdichte

$$\begin{aligned}
 g_{(\lambda_1, \lambda_2)}^{(2)}(E) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \frac{-2\pi^2 E}{\pi \hbar^2 \omega^2} \sum_{r=1}^{\infty} \exp \left(-i2\pi r \left(\frac{\lambda_1}{\rho_1} + \frac{\lambda_2}{\rho_2} \right) \right) \exp \left(i r \frac{2\pi E}{\hbar \omega} - i \sigma_r \frac{\pi}{2} \right) \right\} \\
 &= \frac{E}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{r=1}^{\infty} \cos \left(2r\pi \left[\frac{E}{\hbar \omega} - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_2}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right] \right). \quad (5.46)
 \end{aligned}$$

Wie oben addieren wir den stetigen Anteil der Zustandsdichte. Durch die Symmetrie-Reduktion, also die Projektion des vollen Phasenraums auf eine Einheitszelle, wird ein gegebenes Phasenraumvolumen des vollen Phasenraums auf dessen $\rho_1 \rho_2$ ten Teil abgebildet. Der reduzierte Thomas-Fermi Beitrag lautet also

$$\bar{g}_{\text{red}}(E) = \frac{\bar{g}(E)}{\rho_1 \rho_2} = \frac{E}{\hbar^2 \omega^2}. \quad (5.47)$$

$\bar{g}(E)$ lässt sich auf diese Weise zu gleichen Anteilen auf die reduzierten Beiträge (5.46) der Orbit-Familie verteilen. Die Abbildungen 5.11 und 5.12 zeigen, dass wir so für jede Darstellung einen Delta-Kamm erhalten. Daraus lässt sich erkennen, dass sich jede Eigenenergie zu genau einer irreduziblen Darstellung und damit zu einem entsprechenden Teilorbit zuordnen lässt. Außerdem erkennt man eine klare Struktur in den Korrekturen durch $\delta g^{(1)}(E)$ zur jeweiligen Entartung: Jeder irreduziblen Darstellung ist eine feste Korrektur zugeordnet.

5.2.7 Reduktion der Beiträge isolierten Orbits

Es ist zu erwarten, dass sich auch die Zustandsdichte der isolierten Orbits $\delta g^{(1)}(E)$ bezüglich irreduzibler Darstellungen von \mathcal{C} aufteilen lässt. Dies lässt sich am einfachsten so durchführen: Wir haben durch Vergleich erkannt, dass die Zustandsdichte $g(E)$ der semiklassischen Näherung mit dem exakten Ergebnis übereinstimmt, welches mit $g_{\text{exakt}}(E)$ bezeichnet werden soll. Der Anteil $\delta g^{(1)}(E)$ der isolierten Orbits sollte sich also als Differenz der exakten Zustandsdichte und der Summe aus den reduzierten Beiträgen des Thomas-Fermi-Terms und der Orbitfamilie ausdrücken lassen:

$$\delta g^{(1)}(E) = g_{\text{exakt}}(E) - \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \left(\bar{g}_{\text{red}}(E) + \delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}^{(2)}(E) \right). \quad (5.48)$$

Wir verwenden nun jedoch die exakte Zustandsdichte nicht in der Form, wie wir sie aus einer inversen Laplace-Transformation der Zustandssumme erhalten würden (siehe Anhang D.2.2). Stattdessen betrachten wir die Zustandssumme laut ihrer Definition in der Form

$$g_{\text{exakt}}(E) = \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} \delta(E - E_{n_1, n_2})$$

mit den exakten Eigenenergien E_{n_1, n_2} , die wir uns in (5.19) auf Seite 58 überlegt hatten.¹ Wir haben dort gesehen, dass sich das exakte Spektrum direkt in Unterklassen aufteilen

¹Beachte jedoch, dass wir in der Diskussion auf Seite 58 die Einheiten so gewählt hatten, dass $\hbar = 1$ gilt. Hier schreiben wir \hbar explizit aus.

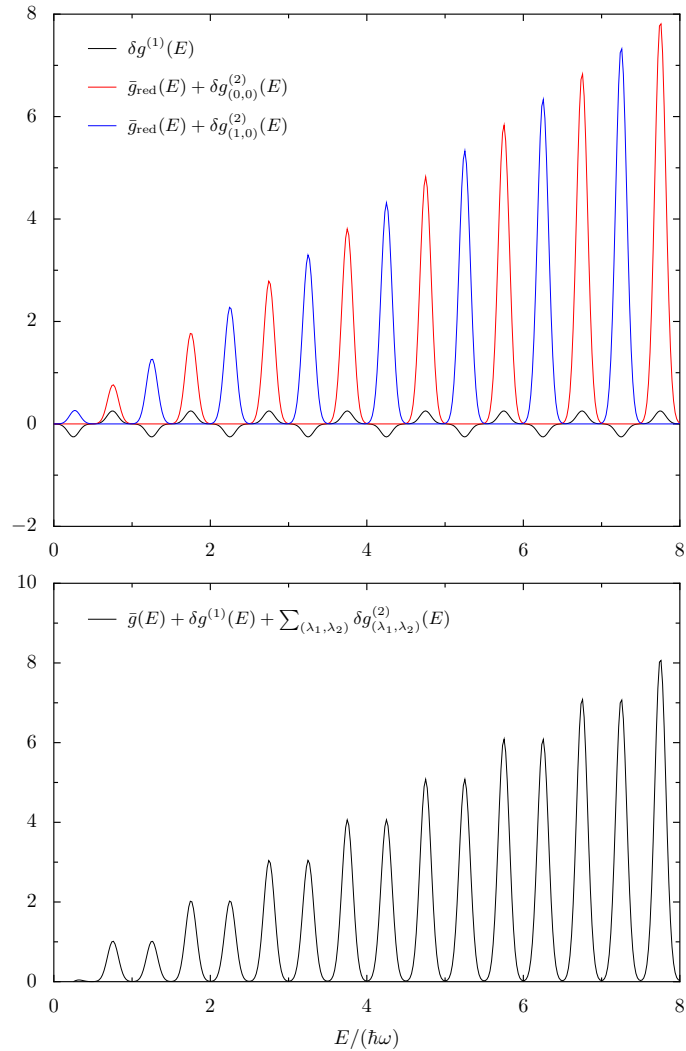


Abbildung 5.11: Semiklassische Zustandsdichte für das Frequenzverhältnis 2/1. Oben: Die Beiträge der isolierten Orbits sowie der reduzierten Zustandsdichten für die einzelnen irreduziblen Darstellungen. Die Graphen wurden wie in Abbildung 5.10 erzeugt. Summation aller Anteile ergibt die volle Zustandsdichte (unten).

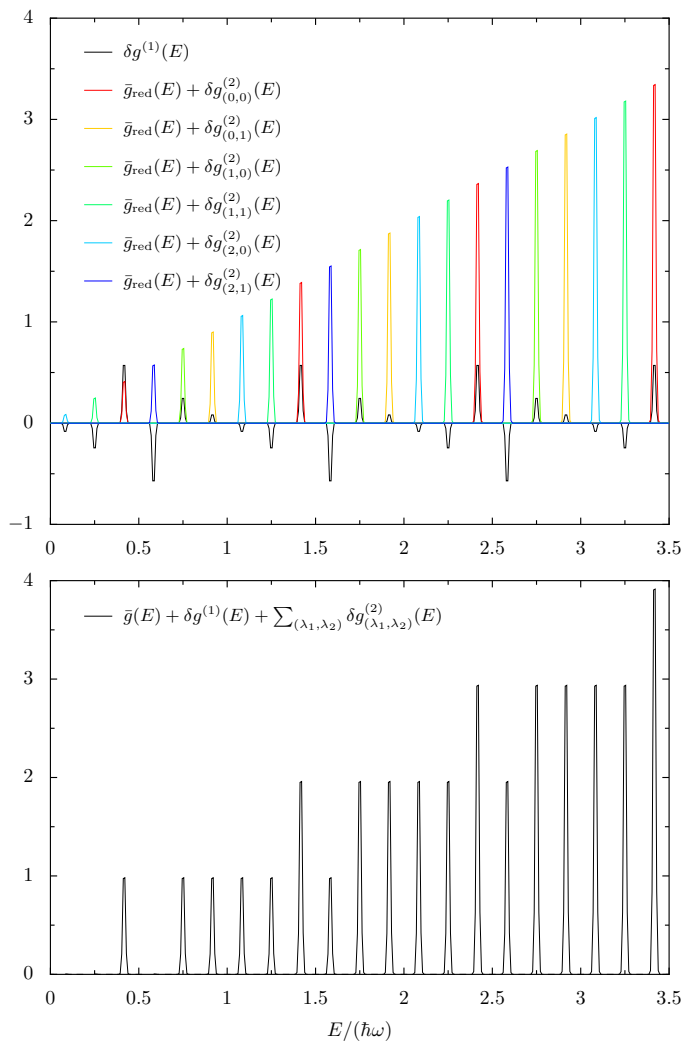


Abbildung 5.12: Semiklassische Zustandsdichte für das Frequenzverhältnis 3/2. Oben: Die Beiträge der isolierten Orbits sowie der reduzierten Zustandsdichten für die einzelnen irreduziblen Darstellungen. Die Graphen wurden wie in Abbildung 5.10 erzeugt. Summation aller Anteile ergibt die volle Zustandsdichte (unten).

lässt:

$$\begin{aligned} \delta g_{\text{exakt}}(E) &= \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \sum_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2=0}^{\infty} \frac{1}{\hbar\omega} \delta \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \tilde{n}_1 - \tilde{n}_2 - \frac{1}{\rho_1} \left(\lambda_1 + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{\rho_2} \left(\lambda_2 + \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{r+1}{\hbar\omega} \delta \left(\frac{E}{\hbar\omega} - r - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_2}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right). \end{aligned} \quad (5.49)$$

Dieses Spektrum liefert natürlich nur Beiträge bei Energien, die größer oder gleich der Grundzustandsenergie E_0 sind, die insbesondere also auf der positiven Energieachse liegen.

Das semiklassische Spektrum der Orbitfamilie ist jedoch als Kamm aus Delta-Funktionen in den negativen Bereich fortgesetzt:

$$\begin{aligned} \bar{g}_{\text{red}}(E) + \delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}^{(2)}(E) &= \frac{E}{\hbar^2 \omega^2} \left[1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} \cos \left(2r\pi \left[\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right] \right) \right] \\ &= \frac{E}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \exp \left(2r\pi i \left[\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right] \right) \\ &= \frac{E}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \delta \left(\frac{E}{\hbar\omega} - r - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right). \end{aligned} \quad (5.50)$$

Dabei wurde die Fourier-Darstellung eines Delta-Kamms benutzt, siehe Anhang E.3.

Um nun einen Vergleich beider Spektren zu ermöglichen, beginnen wir die Summation in (5.49) formal bei $r = -\infty$. Dann erhalten wir für die Zustandsdichte (5.48) der isolierten Orbits

$$\begin{aligned} \delta g^{(1)}(E) &= \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \left(\frac{r+1}{\hbar\omega} - \frac{E}{\hbar^2 \omega^2} \right) \delta \left(\frac{E}{\hbar\omega} - r - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right) \\ &= \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\hbar\omega} \left(1 - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right) \delta \left(\frac{E}{\hbar\omega} - r - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right) \\ &= \frac{2}{\hbar\omega} \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \sum_{r=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right) \cos \left(2r\pi \left[\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right] \right) \\ &\quad + \underbrace{\frac{1}{\hbar\omega} \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \left(1 - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right)}_{=0} \\ &= \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}^{(1)}(E), \end{aligned}$$

mit den reduzierten Beiträgen

$$\delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}^{(1)}(E) = \frac{2}{\hbar\omega} \left(1 - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right) \sum_{r=1}^{\infty} \cos \left(2r\pi \left[\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{\lambda_1}{\rho_1} - \frac{\lambda_1}{\rho_2} - \frac{1}{2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \right] \right).$$

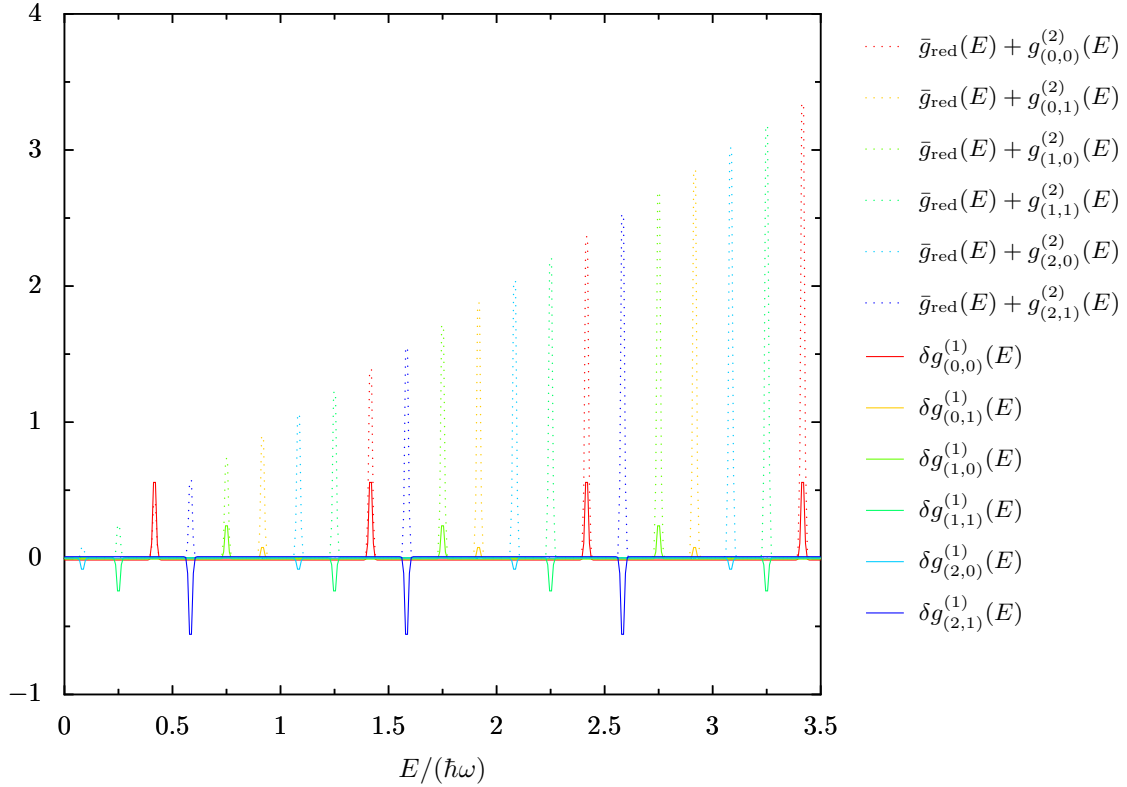


Abbildung 5.13: Semiklassische Zustandsdichte für das Frequenzverhältnis 3/2. Die Beiträge der isolierten Orbits entlang der Hauptachsen q_1 und q_2 sowie die Beiträge der Orbit-Familie aus Lissajous-Figuren (zusammen mit dem stetigen Thomas-Fermi Beitrag) sind vollständig auf die irreduziblen Darstellungen (λ_1, λ_2) aufgeteilt.

Die gesamte Zustandsdichte $g(E)$ lässt sich also schreiben als

$$g(E) = \sum_{\lambda_1=0}^{\rho_1-1} \sum_{\lambda_2=0}^{\rho_2-1} \left(\bar{g}_{\text{red}}(E) + \delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}^{(1)}(E) + g_{(\lambda_1, \lambda_2)}^{(2)}(E) \right),$$

wobei natürlich wie bisher nur der Bereich mit $E > 0$ zu betrachten ist. [Abbildung 5.13](#) zeigt diese Anteile für das Frequenzverhältnis 3/2.

Kapitel 6

Der inkommensurable zweidimensionale Halboszillator

In der Literatur finden sich viele Beispiele für die Anwendung semiklassischer Näherungen bei Systemen, die durch Ränder begrenzt werden, an denen Dirichlet-Bedingungen zu erfüllen sind [49, 7, 8, 50, 51, 52, 53, 54]. Eine derartige Begrenzung entspricht im klassischen Sinne einer harten Wand, an der klassische Trajektorien reflektiert werden.

Meist werden klassische Billards betrachtet, bei denen innerhalb der Berandung ein triviales konstantes Potential vorausgesetzt wird. Wir interessieren uns im Folgenden für die Auswirkungen einer Wand innerhalb eines nicht-trivialen Potentials. Der harmonische Halboszillator bietet hierfür sicherlich ein einfaches Modell und hat den Vorteil, dass sich unsere Ergebnisse für den vollen Oszillator weiter verwenden lassen.

Wir gehen vom inkommensurablen Oszillator in zwei Dimensionen aus, so wie er in Kapitel 2.2 behandelt wurde und führen nun entlang der q_2 -Achse $q_1 = 0$ eine harte Wand ein. Dies entspricht einem positiv unendlichen Potential für $q_1 \leq 0$. Der Hamilton-Operator in Ortsbasis lautet

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + V_1(q_1) \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + V_2(q_2) \right)$$

mit

$$V_1(q_1) = \begin{cases} \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 & q_1 > 0, \\ \infty & q_1 \leq 0, \end{cases} \quad V_2(q_2) = \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2.$$

Seine Eigenfunktionen $\psi_{n_1, n_2}(\mathbf{q}) = \psi_{n_1}^{(1)}(q_1)\psi_{n_2}^{(2)}(q_2)$ lassen sich separieren. Die Eigenfunktionen $\psi_{n_i}^{(i)}(q_i)$ von \hat{H}_i entsprechen denen eines vollen Oszillators, müssen nun jedoch bei $q_1 = 0$ die Dirichlet-Randbedingung $\psi_{n_1}^{(1)}(0) = 0$ erfüllen. Da die Eigenfunktionen des vollen Oszillators definierte Parität aufweisen, werden durch die Randbedingung gerade die Eigenfunktionen des Oszillators ausgezeichnet, die bezüglich q_1 ungerade sind und an der Wand Knoten bilden:

$$\psi_{n_1}^{(1)}(-q_1) = -\psi_{n_1}^{(1)}(q_1).$$

Die bezüglich q_1 geraden Eigenfunktionen des vollen Oszillators fallen also aus dem Spektrum heraus.

Motiviert durch die Ergebnisse der Symmetriereduktion des inkommensurablen Oszillators bezüglich der Spiegelsymmetrie (Abschnitt 4.4, Seite 35 ff.) ist es interessant, die Zustandsdichte des Halboszillators anhand dieser Reduktion zu verstehen. Die Frage ist, wie sich die Antisymmetrie der Eigenfunktionen bezüglich q_1 in der Sprache periodischer Orbits auffassen lässt.

Tatsächlich haben wir den Großteil der dafür nötigen Rechnungen schon für die Herleitung der reduzierten Zustandsdichten $\delta g_{(\lambda_1, \lambda_2)}$ in (4.22) auf Seite 41 durchgeführt. Zur

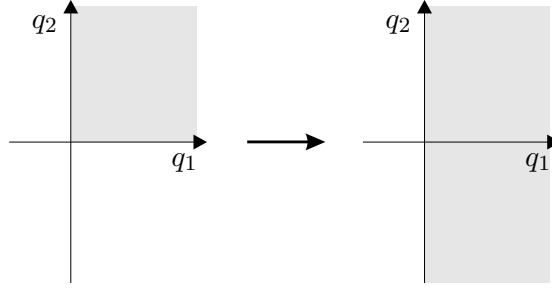


Abbildung 6.1: Vom reduzierten Phasenraum des vollen Oszillators ausgehend (links), lässt sich der volle Phasenraum des Halboszillators (rechts) durch teilweise Summation der irreduziblen Darstellungen konstruieren.

Erinnerung: Die Zustandsdichte des vollen Oszillators wurde auf die vier irreduziblen Darstellungen (λ_1, λ_2) , $\lambda_i = 0, 1$, der Symmetriegruppe $\mathcal{C} = \mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_2$ reduziert, die die Spiegelsymmetrie an den Ebenen (q_1, p_1) und (q_2, p_2) des Phasenraums beschreibt.

Genauso wie wir aus den reduzierten Zustandsdichten die volle Zustandsdichte des Oszillators durch Summation über alle irreduziblen Darstellungen rekonstruiert haben, versuchen wir nun, die volle Zustandsdichte des Halboszillators zu erhalten. Bei $q_1 = 0$ existiert nun jedoch eine reale Wand und keine (fiktive) Berandung der primitiven Einheitszelle. Es ist offensichtlich, dass wir deshalb nur über die Darstellungen zu summieren haben, die zur Spiegelung an der q_1 -Achse gehören. Diese Darstellungen wurden mit der ersten Komponente λ_1 von (λ_1, λ_2) nummeriert. Durch die Summation über λ_1 wird die Reduktion bezüglich der Spiegelsymmetrie zur q_1 -Achse aufgehoben und die Einheitszelle vom positiven Quadranten des Ortsraums auf die rechte Halbebene vergrößert, wie in Abbildung 6.1 veranschaulicht wird.

Für den Beitrag der q_1 -Mode des Halboszillators ergibt sich aus den ersten beiden Summanden in (4.22)

$$\begin{aligned} \delta g_{\lambda_2}^{(q_1)}(E) &:= \sum_{\lambda_1=0}^1 \frac{1}{4\hbar\omega_1} \left[\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r\lambda_2}}{\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \sin\left(r\frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - r\frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\lambda_1+r\lambda_2}}{\cos(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \cos\left(r\frac{\pi E}{\hbar\omega_1} - r\frac{\pi}{2}\right) \right] \\ &= \frac{1}{2\hbar\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r\lambda_2}}{\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \sin\left(r\pi\left(\frac{E}{\hbar\omega_1} - \frac{1}{2}\right)\right). \end{aligned} \quad (6.1a)$$

Aus den beiden anderen Summanden in (4.22) erhalten wir mit der Bedingung

$$\sum_{\lambda_1=0}^1 (-1)^{r\lambda_1} = \begin{cases} 2 & r \in 2\mathbb{N}, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

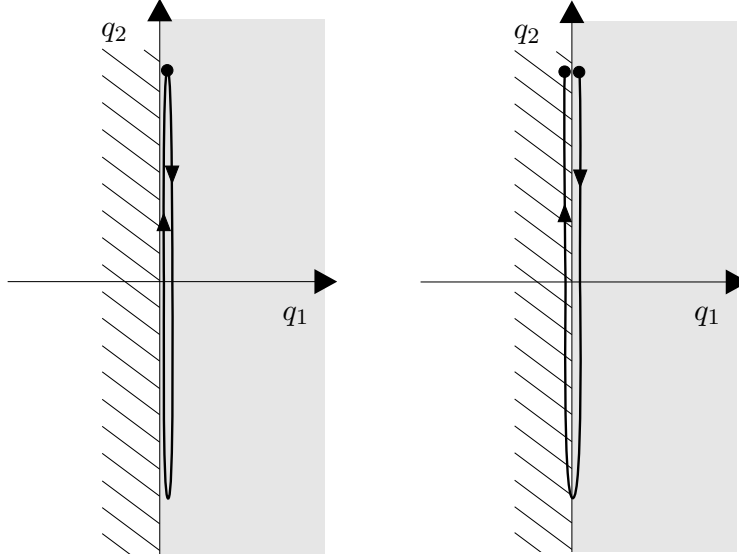


Abbildung 6.2: Die beiden Summanden in (6.1b) sind Beiträge von Librationen und ihren Wiederholungen, die entlang der Wand verlaufen, jedoch unterschiedliche Stabilitäten aufweisen. Verrückt man den Startpunkt leicht in die Einheitszelle, schließen sich die Orbits des ersten Typs wie beim vollen Oszillator nach einer primitiven Periode (links), während sich die Orbits des zweiten Typs (rechts) erst nach zwei primitiven Perioden schließen

den Beitrag

$$\begin{aligned}
\delta g_{\lambda_2}^{(q_2)}(E) &:= \sum_{\lambda_1=0}^1 \frac{1}{4\hbar\omega_2} \left[\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r\lambda_1}}{\sin(r\pi\omega_1/2\omega_2)} \sin\left(r\frac{\pi E}{\hbar\omega_2} - r\frac{\pi}{2}\right) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\lambda_2+r\lambda_1}}{\cos(r\pi\omega_1/2\omega_2)} \cos\left(r\frac{\pi E}{\hbar\omega_2} - r\frac{\pi}{2}\right) \right] \\
&= \frac{1}{2\hbar\omega_2} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\sin(k\pi\omega_1/\omega_2)} \sin\left(2k\frac{\pi E}{\hbar\omega_2} - k\pi\right) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\lambda_2}}{\cos(k\pi\omega_1/\omega_2)} \cos\left(2k\frac{\pi E}{\hbar\omega_2} - k\pi\right) \right]. \tag{6.1b}
\end{aligned}$$

Die beiden Summanden in (6.1b) entstehen durch die Librationen, die entlang der Wand verlaufen. Sie gehören zu zwei Typen des gleichen Orbits, die sich durch ihre Stabilität unterscheiden, siehe Abbildung 6.2. Wir haben in den Kapiteln 4.2.2 und 4.4 besprochen, dass Orbits, die auf dem Rand der primitiven Einheitszelle liegen, dieses Verhalten zeigen, weil eine Untergruppe der Symmetrie existiert, die den Randorbit invariant lässt. Denkt man sich den Anfangspunkt der Libration entlang der Wand leicht in die primitive Einheitszelle verschoben, dann unterscheiden sich die zwei Typen von Orbits durch ihre Endpunkte: Der Orbit des trivialen ersten Typs endet bei seinem Startpunkt, der Orbit des nichttrivialen zweiten Typs endet beim Spiegelpunkt außerhalb der Einheitszelle.

Die Beiträge (6.1a) und (6.1b) hängen noch von λ_2 , der Darstellung der Spiegelung an der q_2 -Achse ab. Entlang der q_2 -Achse verläuft die Wand und wir erwarten, dass keine klassischen Orbits zur Zustandsdichte beitragen dürfen, die die Wand kreuzen. Der zweite Summand in (6.1b), der genau den Beitrag dieser Orbits angibt, muss also von den Beiträgen der Librationen trivialer Stabilität abgezogen werden. Deshalb ist die nicht-triviale Darstellung $\lambda_2 = 1$ zu wählen.

Dies ist auch auf andere Weise zu rechtfertigen: Die Eigenfunktionen $\Psi_n(q_1, q_2)$ des vollen Oszillators zu Eigenenergien E_n sind entweder gerade oder ungerade unter der Spiegelung $q_1 \rightarrow -q_1$. Die Green-Funktion

$$G(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \sum_n \frac{\Psi_n^*(\mathbf{q})\Psi_n(\mathbf{q}')}{E - E_n}$$

besteht demnach aus zwei Anteilen $G = G_+ + G_-$ mit

$$G_+(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \sum_{\substack{n \\ \Psi_n \text{ gerade}}} \frac{\Psi_n^*(\mathbf{q})\Psi_n(\mathbf{q}')}{E - E_n},$$

$$G_-(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \sum_{\substack{n \\ \Psi_n \text{ ungerade}}} \frac{\Psi_n^*(\mathbf{q})\Psi_n(\mathbf{q}')}{E - E_n}.$$

Die beiden Anteile lassen sich schreiben als

$$G_{\pm}((q_1, q_2), (q'_1, q'_2), E) = \frac{1}{2} (G((q_1, q_2), (q'_1, q'_2), E) \pm G((-q_1, q_2), (q'_1, q'_2), E)). \quad (6.2)$$

Berechnen wir näherungsweise die Spur der Green-Funktionen G_{\pm} , so führt die Bedingung stationärer Phasen mit $q_i = q'_i$ für den ersten Summanden in (6.2) zu gewöhnlichen periodischen Orbits. Der zweite Summand führt jedoch zur zunächst seltsamen Bedingung

$$0 = \left(\frac{\partial S((-q_1, q_2), (q'_1, q'_2), E)}{\partial q_1} + \frac{\partial S((-q_1, q_2), (q'_1, q'_2), E)}{\partial q'_1} \right) = -p_1 - p'_1.$$

Die Wirkung S wird also mit $q_1 = -q'_1$ und $q_2 = q'_2$ entlang einer Trajektorie berechnet, die bei (q_1, q_2) mit Impuls (p_1, p_2) beginnt und bei $(-q_1, q_2)$ mit Impuls $(-p_1, p_2)$ endet. Dies ist jedoch genau das, was wir aus obigen Überlegungen der Symmetriereduktion erwarten.

Das Auftreten von Orbits, die an Spiegelpunkten innerhalb klassisch verbotener Bereiche enden, lässt sich übrigens auch direkt im Formalismus der Feynmanschen Pfadintegrale verstehen. Die Auswertung der Pfadintegral-Darstellung des quantenmechanischen Propagators $\hat{K}(t)$ bei Gegenwart einer harten Wand vereinfacht sich mit Hilfe der sogenannten „Methode der Bilder“ [56]; ein entsprechendes Verfahren findet sich in der Elektrostatik, wenn das Potential für Ladungsverteilungen mit leitenden Oberflächen berechnet werden soll. Das Matrixelement $\hat{K}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) = \langle \mathbf{q} | \hat{K}(t) | \mathbf{q}' \rangle$ des Propagators für das System mit Wand lässt sich durch zwei Propagatoren \hat{K}_{ow} des selben Systems ohne Wand ausdrücken:

$$\hat{K}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) = \hat{K}_{\text{ow}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) - \hat{K}_{\text{ow}}(SP(\mathbf{q}), \mathbf{q}', t).$$

Der erste positive Anteil beinhaltet alle Pfade, die von \mathbf{q}' zu \mathbf{q} führen. Davon werden durch den zweiten Anteil die Beiträge aller Pfade abgezogen, die von \mathbf{q}' zum Spiegelpunkt $SP(\mathbf{q})$ von \mathbf{q} bezüglich der Wand führen. In unserem Fall wäre also $SP(\mathbf{q}) = (e \times s) \mathbf{q} = (-q_1, q_2)$.

Mit $\lambda_2 = 1$ in (6.1a) und (6.1b) gilt also

$$\begin{aligned}
\delta g(E) &= \delta g_{\lambda_2=1}^{(q_1)}(E) + \delta g_{\lambda_2=1}^{(q_2)}(E) \\
&= \frac{1}{2\hbar\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \sin\left(r\pi\left(\frac{E}{\hbar\omega_1} - \frac{1}{2}\right)\right) \\
&\quad + \frac{1}{2\hbar\omega_2} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\sin(k\pi\omega_1/\omega_2)} \sin\left(2k\frac{\pi E}{\hbar\omega_2}\right) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\cos(k\pi\omega_1/\omega_2)} \cos\left(2k\frac{\pi E}{\hbar\omega_2}\right) \right] \\
&= \frac{1}{2\hbar\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \sin\left(r\pi\left(\frac{E}{\hbar\omega_1} - \frac{1}{2}\right)\right) \\
&\quad + \frac{1}{\hbar\omega_2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\sin(2k\pi\omega_1/\omega_2)} \sin\left(k\pi\left(\frac{2E}{\hbar\omega_2} - \frac{\omega_1}{\omega_2}\right)\right).
\end{aligned}$$

Die Summation der Darstellungen (0, 1) und (1, 1) der reduzierten Thomas–Fermi–Beiträge (4.24c) und (4.24d) ergibt

$$\bar{g}(E) = \frac{E}{2\hbar^2\omega_1\omega_2} - \frac{1}{4\hbar\omega_2}.$$

Insgesamt stimmt das semiklassische Ergebnis mit dem exakten Resultat aus Anhang D.3 überein.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde der Einfluss der diskreten und kontinuierlichen Symmetrie auf die semiklassische Beschreibung der Zustandsdichte dargestellt. Die Zustandsdichte wurde innerhalb dieses Formalismus für den harmonischen Oszillator und Halboszillator in zwei Dimensionen explizit berechnet.

Dabei haben wir insbesondere die Reduktion der Zustandsdichte auf irreduzible Darstellungen diskreter Symmetrie studiert. Sie erlaubt es, die Dynamik im Phasenraum auf eine Einheitszelle zu beschränken. Wir haben den Einfluss von Rändern der Einheitszelle durch Randorbits betont und im Falle des inkommensurablen Oszillators Zusammenhänge zu klassischen Billards mit harten Wänden erkannt. Die Reduktion hat sich als Möglichkeit herausgestellt, aus den irreduziblen Darstellungen der Spiegelsymmetrie des vollen Oszillators die Zustandsdichte des Halboszillators zu konstruieren. Dieses Verfahren sollte sich auf andere Systeme leicht übertragen lassen.

Ein wesentlicher Beitrag dieser Arbeit war die Bestimmung der semiklassischen Zustandsdichte für den harmonischen Oszillator im Fall eines allgemeinen rationalen Frequenzverhältnisses. Er hat sich als ein System herausgestellt, bei dem diskrete und kontinuierliche Symmetrie zugleich wirken und isolierte vollständig periodische Orbits als auch Familien von Teilorbits existieren. Der anisotrope Oszillator wurde durch eine komplexe kanonische Transformation auf den isotropen Oszillator abgebildet und auf diese Weise die diskrete Symmetrie identifiziert. Es wurde gezeigt, wie mit Hilfe von Symmetriereduktion die klassischen periodischen Orbits des Phasenraums charakterisiert werden können. Insbesondere die Familie von Lissajous-Figuren lässt sich als Zusammensetzung von Familien von Teilorbits sehen, die durch Blochkugelzustände identifiziert werden können. Zudem haben wir die einzelnen Beiträge der (Teil)Orbits zur Position und Entartung der Eigenenergien im Spektrum bestimmt. Die Resultate dieser Arbeit werden zukünftig in Form eines Artikels publiziert [57].

Darüber hinaus wurden (auch in den Anhängen) einige wichtige Aspekte für weiterführende Arbeiten angeschnitten. Die allgemeine Bestimmung des Phasenindex für Spurformeln in Gegenwart kontinuierlicher Symmetrie, insbesondere für das Auftreten entarteter parabolische Blöcke in der Monodromiematrix, ist eine reizvolle, wenngleich auch sehr mathematische Aufgabe. Außerdem sollte es leicht möglich sein, direkt aufbauend auf dieser Arbeit den harmonischen Halboszillator im Falle kommensurabler Frequenzen zu betrachten. Dann ließe sich beispielsweise die Auswirkung einer Kopplung des Halboszillators mit einem oder eventuell mehreren weiteren harmonischen Oszillatoren als Störung einer kontinuierlichen Symmetrie verstehen und untersuchen. Denn eine Kopplung bewirkt effektiv eine Verkippung der harten Wand des Halboszillators [58].

Anhang A

Semiklassische Näherungen und Indizes

In der klassischen Elektrodynamik wird Licht als elektromagnetische Wellen aufgefasst, die den Maxwell'schen Gleichungen gehorchen. Eine erste Näherung der Beschreibung der Lichtausbreitung liefert die geometrische Optik mit Hilfe der Vorstellung von Lichtstrahlen oder Wellenfronten. Diese Näherung beschreibt die physikalischen Phänomene nur dann hinreichend gut, wenn die Wellenlängen im Vergleich zu den betrachteten Größenordnungen genügend klein sind. Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen entspricht dies der asymptotischen Lösung der zugehörigen Differentialgleichungen.

Näherungen dieser Art treten in vielen Bereichen der mathematischen Physik auf und tragen unterschiedliche Namen. In der Quantenmechanik werden entsprechende Zugänge meist unter dem Begriff der „semiklassischen Näherung“ zusammengefasst. Sie liefert eine Brücke zwischen der Quantenmechanik und der klassischen Mechanik. Diese Verbindung gibt oft eine anschauliche und für den Menschen intuitivere Einsicht für quantenmechanische Beschreibungen, da wir mit den Gesetzen der klassischen Mechanik wohl von Natur aus vertrauter sind.

Der Übergang von der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik wird durch den formalen Limes $\hbar \rightarrow 0$ erreicht, in dem wir im Allgemeinen erwarten, dass quantenmechanische Größen in ihre klassischen Entsprechungen übergehen, soweit diese existieren.

Wir wiederholen in diesem Anhang zunächst einige grundlegende Tatsachen. Der erste Abschnitt gibt eine kurze Übersicht über die semiklassische Näherung der Wellenfunktion für kurze Zeiten und ihre Zusammenhänge zur Hamilton–Jacobi–Theorie und den Hamilton'schen Gleichungen. Der zweite Abschnitt beschäftigt sich ausführlicher mit den in semiklassischen Näherungen auftretenden Phasenindizes, ihrer Verbindung zur Topologie und der semiklassischen Quantisierung. Der letzte Abschnitt fasst einige Tatsachen über den Phasenindex der Gutzwillerschen Spurfomel und praktische Methoden zu seiner Berechnung zusammen.

A.1 Semiklassische Näherung

Eine komplexe Wellenfunktion $\psi(\mathbf{q}, t)$ in Ortsbasis lässt sich allgemein durch zwei reelle Funktionen, der Amplitude $A(\mathbf{q}, t)$ und Phase $R(\mathbf{q}, t)$ ausdrücken:

$$\psi(\mathbf{q}, t) = A(\mathbf{q}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} R(\mathbf{q}, t)\right).$$

Die zeitliche Entwicklung dieser Wellenfunktion gemäß der Schrödinger–Gleichung für einen Hamilton–Operator der Form $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2 + V(\hat{\mathbf{q}})$ lautet

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 - V(\mathbf{q})\right) \psi(\mathbf{q}, t) = 0.$$

Setzen wir obigen Ansatz für die Wellenfunktion ein, liefert der Real- und Imaginärteil zwei gekoppelte Differentialgleichungen für die Entwicklung der Phase und der Amplitude

$$\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} \right)^2 + V(\mathbf{q}) - \frac{\hbar^2}{2A} \nabla^2 A = 0, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \left(\frac{\partial A}{\partial \mathbf{q}} \right) \cdot \left(\frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} \right) + \frac{1}{2} A \nabla^2 R = 0. \quad (\text{A.2})$$

Der koppelnde Term der ersten Gleichung ist von zweiter Ordnung in \hbar und deswegen klein im Limes $\hbar \rightarrow 0$. Innerhalb des sogenannten WKB-Ansatzes wird angenommen, dass sich die Amplitude A im Vergleich zur Phase R/\hbar nur langsam ändert, so dass wir diesen Term vernachlässigen. Wir erhalten so mit der Definition

$$\mathbf{p}(\mathbf{q}, t) := \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}, t)$$

die Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{\partial R}{\partial t} + H \left(\mathbf{q}, \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} \right) = 0.$$

Betrachten wir das totale Differential von R ,

$$dR = \frac{\partial R}{\partial t} dt + \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q},$$

und teilen durch dt . Dann erhalten wir für die totale Ableitung nach der Zeit entlang einer zunächst beliebigen Richtung $\dot{\mathbf{q}}$

$$\frac{dR}{dt}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = -H \left(\mathbf{q}, \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} \right) + \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}}.$$

Um diese Gleichung formal zu integrieren, benötigen wir die Änderung von \mathbf{p} entlang $\dot{\mathbf{q}}$. Das totale Differential

$$d\mathbf{p} = d \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} dt + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} d\mathbf{q} = - \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} + \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right) dt + \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} d\mathbf{q}$$

lässt sich wieder durch dt teilen und daraus ergibt sich

$$\dot{\mathbf{p}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \left(\dot{\mathbf{q}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right).$$

Die zeitliche Änderung von \mathbf{p} ist also nicht nur eine Funktion von dem bis jetzt unbestimmten Feld $\dot{\mathbf{q}}$, sondern auch von der zweiten Ableitung von R nach \mathbf{q} mit ihrer ebenfalls unbekanntem Zeitabhängigkeit. Wenn wir jedoch $\dot{\mathbf{q}}$ so wählen, dass die rechte (und damit auch die linke) Seite der Gleichung verschwindet, berechnet sich die Funktion $R(\mathbf{q}, t)$ entlang einer Trajektorie $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$, die durch die Lösung der Hamiltonschen Gleichungen mit der Anfangsbedingung

$$\mathbf{q}' = \mathbf{q}(t'), \quad \mathbf{p}' = \mathbf{p}(t') = \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}', t')$$

gegeben ist. Die Phase $R(\mathbf{q}, t)$ entspricht demnach der klassischen Wirkung

$$\begin{aligned} R(\mathbf{q}, t) &= R(\mathbf{q}', t') + \int_{t'}^t \mathbf{p}(\tau) \cdot \dot{\mathbf{q}}(\tau) - H(\mathbf{q}(\tau), \mathbf{p}(\tau)) \, d\tau \\ &= R(\mathbf{q}', t') + \int_{t'}^t L(\mathbf{q}(\tau), \dot{\mathbf{q}}(\tau)) \, d\tau \\ &=: R(\mathbf{q}', t') + R(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t, t'). \end{aligned}$$

Bei Energieerhaltung $H = E$ können wir $R(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t, t')$ durch die reduzierte Wirkung S ausdrücken:

$$\begin{aligned} R(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t, t') &= \int_{t'}^t \mathbf{p}(\tau) \cdot \dot{\mathbf{q}}(\tau) \, d\tau - E(t - t') = \int_{\mathbf{q}'}^{\mathbf{q}} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} - E(t - t') \\ &=: S(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) - E(t - t'). \end{aligned}$$

Kommen wir nun zur Amplitude $A(\mathbf{q}, t)$ der Wellenfunktion. Sie lässt sich aus einer Kontinuitätsgleichung bestimmen. Denn multiplizieren wir (A.2) mit $2A$ und interpretieren

$$\rho(\mathbf{q}, t) = |A(\mathbf{q}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{q}, t)\psi(\mathbf{q}, t)$$

als Dichte, dann ist (A.2) äquivalent zu

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \cdot \left(\rho \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}} \right) = 0.$$

ρ lässt sich als Dichte von (hypothetischen) Teilchen im Ortsraum auffassen. Sie wird nach obigen Ausführungen entlang einer klassischen Trajektorie propagiert, von der wir zunächst annehmen, dass sie die einzige Lösung ist, die von \mathbf{q}' zu $\mathbf{q}(t)$ führt. Diese Voraussetzung lässt sich erfüllen, wenn die Zeit t hinreichend klein gewählt wird. Betrachten wir ein infinitesimales Volumen $d^d q'$ um den Startpunkt q' zur Zeit t' , dann ist die „Anzahl“ der Teilchen in diesem Volumen gleich $\rho(\mathbf{q}', t') d^d q'$. Folgen wir der Trajektorie bis zur Zeit t zum Ort \mathbf{q} und lassen das Volumenelement entsprechend propagieren, dann ist die Zahl der Teilchen im propagierten Volumen gleich $\rho(\mathbf{q}(t), t) d^d q$. Wegen der Teilchenerhaltung gilt nun

$$\rho(\mathbf{q}', t') d^d q' = \rho(\mathbf{q}(t), t) d^d q = \rho(\mathbf{q}(t), t) \left| \det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}'} \right| d^d q'.$$

Für genügend kurze Zeiten ist die Funktion $R(\mathbf{q}(t), t)$ wohldefiniert (d.h. jedem Argument lässt sich genau ein Funktionswert zuordnen) und die Orientierung des Volumenelementes $d^d q$ bleibt erhalten. Wir haben dadurch insgesamt folgende semiklassische Näherung der Wellenfunktion gefunden:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{skl}}(\mathbf{q}, t) &= \left(\det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}'} \right)^{-\frac{1}{2}} A(\mathbf{q}', t') \exp \left(\frac{i}{\hbar} (R(\mathbf{q}', t') + R(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t, t')) \right) \\ &= \left(\det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}'} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} R(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t, t') \right) \psi(\mathbf{q}', t'). \end{aligned}$$

A.2 Phasenindizes

A.2.1 Der Morse–Index

Betrachten wir nun, wie sich die Kurzzeitnäherung der Wellenfunktion für größere Zeiten verhält. Sei im Folgenden $t' = 0$. Wir konstruieren aus der Anfangsbedingung eine Untermannigfaltigkeit \mathcal{L}' des Phasenraums $\mathcal{P} = \mathbb{R}^{2d}$:

$$\mathcal{L}' = \{(\mathbf{q}', \mathbf{p}') \mid \mathbf{p}' = \frac{\partial R}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}', 0), \quad \mathbf{q}' \in D \subset \mathbb{R}^d\}.$$

Die Mannigfaltigkeit \mathcal{L}' ist Lagrangesch, d.h. sie ist d -dimensional und auf ihr verschwindet die symplektische 2-Form $d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}$. Dies folgt aus der Definition von \mathbf{p}' als Gradient und dem Satz von Stokes. Der Phasenfluss g^t propagiert \mathcal{L}' nach der Zeit t zu einer anderen Mannigfaltigkeit $g^t\mathcal{L}'$ weiter. Sie ist ebenfalls Lagrangesch, denn der Phasenfluss erhält die symplektische Form. Für hinreichend kurze Zeiten t ist die Funktion $\mathbf{p}(\mathbf{q}, t)$ bezüglich \mathbf{q} nicht-singulär: die neue Mannigfaltigkeit kann so wie die alte eindeutig auf den Konfigurationsraum projiziert werden. Dies trifft jedoch für grössere Zeiten im Allgemeinen nicht mehr zu, denn die Mannigfaltigkeit $g^t\mathcal{L}'$ kann Falten bilden und es wird möglich, dass mehrere Punkte $\mathbf{x}_{(j)} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}_{(j)}) \in g^t\mathcal{L}'$ von verschiedenen Blättern der Mannigfaltigkeit auf ein und den selben Punkt \mathbf{q} im Konfigurationsraum projiziert werden, wie in Abbildung A.1 skizziert ist. Wir nehmen an, dass diese Punkte nicht entartet sind, d.h. die Jacobi-Matrix $\partial\mathbf{p}/\partial\mathbf{q}$ der Projektionsabbildung auf den Ortsraum ist an jedem Punkt $\mathbf{x}_{(j)}$ nicht-singulär.

Die Punkte $\mathbf{x}_{(j)}$ entstehen nach der Zeit t aus verschiedenen Punkten $\mathbf{x}'_{(j)} = (\mathbf{q}'_{(j)}, \mathbf{p}'_{(j)})$ der ursprünglichen Mannigfaltigkeit \mathcal{L}' unter der Wirkung des Phasenflusses: Nach der Zeit t erreichen verschiedene klassische Trajektorien, die wir mit j nummerieren, den selben Punkt \mathbf{q} des Ortsraums. Sie starten von verschiedenen Punkten $\mathbf{x}'_{(j)}$ und enden mit verschiedenen Impulsen $\mathbf{p}_{(j)}$. Sie haben deshalb im Allgemeinen verschiedene Wirkungen R_j . Alle Startpunkte $\mathbf{x}'_{(j)}$ liegen auf der ursprünglichen Mannigfaltigkeit und erfüllen die Bedingung, mit der sie konstruiert wurde.

Wir erwarten im Allgemeinen also mehrere Trajektorien j , die zur semiklassischen Wellenfunktion $\psi_{\text{skl}}(\mathbf{q}, t)$ mit verschiedenen Wirkungen R_j beitragen.

Betrachten wir nun eine dieser Trajektorien und gehen von ihrem Startpunkt $\mathbf{x}'_{(j)}$ auf der ursprünglichen Mannigfaltigkeit aus. Für genügend kurze Zeiten τ hat die propagierte Mannigfaltigkeit $g^\tau\mathcal{L}'$ eine wohldefinierte Projektion auf den Ortsraum, insbesondere ist die Projektion von $g^\tau\mathbf{x}'_{(j)}$ nicht entartet. Nun entwickle sich in der Mannigfaltigkeit zu einem kurz darauf folgenden Zeitpunkt $\tau = \tilde{t}$ eine Falte bei $\tilde{\mathbf{x}} := g^{\tilde{t}}\mathbf{x}'_{(j)}$.

Es ist hilfreich, sich diesen Vorgang zunächst nur für einen eindimensionalen Ortsraum oder für eine ausgewählte Komponente des Ortsraums \mathbb{R}^d vorzustellen, und später auf den mehrdimensionalen Fall zu verallgemeinern. Sei diese ausgewählte Richtung zum Beispiel die q_1 -Achse, siehe Abbildung A.1.

Der Startpunkt $q'_{(j)}$ der Trajektorie j sei im Ortsraum durch ein kleines Intervall dq' umgeben. Dieses Intervall entstehe durch die Projektion auf die q_1 -Achse von einem entsprechenden Bereich \mathcal{B}' der Lagrangeschen Mannigfaltigkeit \mathcal{L}' . Nun wird der Bereich \mathcal{B}' zusammen mit der Mannigfaltigkeit propagiert. Zur Zeit \tilde{t} umgibt $\tilde{\mathcal{B}} = g^{\tilde{t}}\mathcal{B}'$ den Faltungspunkt $\tilde{\mathbf{x}} \in g^{\tilde{t}}\mathcal{L}'$. Die Projektion von $\tilde{\mathcal{B}}$ auf die q_1 -Achse ergibt ein Intervall

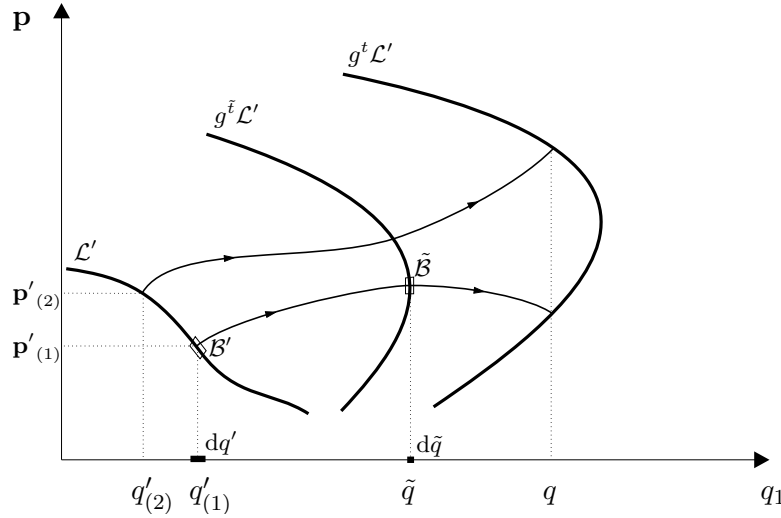


Abbildung A.1: Die Lagrangesche Mannigfaltigkeit \mathcal{L}' der Anfangsbedingung $(\mathbf{q}', \partial R / \partial \mathbf{q})$ wird unter dem Phasenfluss g^τ der Hamilton-Funktion propagiert. Zum Zeitpunkt \tilde{t} entwickelt sich eine Falte bei $q_1 = \tilde{q}$ und die Funktion R bildet zwei Zweige aus.

$d\tilde{q}$. Während der zeitlich stetigen Durchschreitung des Faltungspunktes ändert das projizierte Intervall seine Orientierung und entartet genau wenn die Falte durchschritten wird. Im mehrdimensionalen Fall verschwindet deshalb ein Eigenwert der Jacobi-Matrix $\partial \mathbf{q} / \partial \mathbf{q}'_j$ am Punkt $\tilde{\mathbf{q}}$. Zusätzlich bildet die Funktion R nach der Durchschreitung der Falte mehrere Zweige aus.

Punkte $\tilde{\mathbf{q}}$, bei denen die Projektion auf den Ortsraum entartet, werden Brennpunkte genannt und heißen konjugiert zum Startpunkt \mathbf{q}' . Die Projektion einer Falte bildet im Ortsraum eine Figur, die als Kaustik bezeichnet wird.

Eine Faltung ändert also die Orientierung von Teilen der Lagrangeschen Mannigfaltigkeit gegenüber der ursprünglichen Mannigfaltigkeit. Wir können die Vorzeichenwechsel der Jacobi-Determinante aufsammeln, wenn wir die konjugierten Punkte entlang der Trajektorie j durch eine Zahl m_j zählen:

$$\det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}'} \Big|_{\mathbf{q}'_{(j)}} = \exp(-i\pi m_j) \det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}'} \Big|_{\mathbf{q}'_{(j)}}.$$

Es sollte beachtet werden, dass sich in höheren Dimensionen Falten in mehreren Richtungen ausbilden können und die Brennpunkte deswegen gemäß ihrer Multiplizität gezählt werden müssen. Der Index m_j heißt Morse-Index. Er spielt insbesondere in der so genannten Morse-Theorie der Variationsrechnung eine wichtige Rolle[59, 60]: Betrachtet man die zweite Variation $\delta^2 R$ der Wirkung als eine quadratische Form im Raum der Variationen mit festen Endpunkten, dann ist der Morse-Index gerade die Anzahl der negativen Eigenwerte dieser quadratischen Form [12], vergleiche die Diskussion für die Gutzwillersche Spurformel auf Seite 5.

Wir finden also insgesamt, dass sich die semiklassische Wellenfunktion als eine Summe über klassische Trajektorien j von $\mathbf{q}'_{(j)}$ zu \mathbf{q} mit Wirkungen R_j und Morse-Indizes m_j

schreiben lässt:

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \sum_j \left| \det \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}'} \right|_{\mathbf{q}'(j)}^{-1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} R_j(\mathbf{q}, t, \mathbf{q}'(j), 0) - i \frac{m_j}{2} \pi \right) \psi(\mathbf{q}', 0). \quad (\text{A.3})$$

A.2.2 Der Maslov-Index

Der Morse-Index ist ein Spezialfall des so genannten Maslov-Index. Er ist zunächst allgemein für jede Kurve auf einer n -dimensionalen Lagrangeschen Mannigfaltigkeit \mathcal{L}_e eines $2n$ -dimensionalen Phasenraums $\mathcal{P}_e = \{q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n\}$ definiert. Wir führen hier bewusst eine neue Bezeichnung n für die Dimension ein. Die Projektion von \mathcal{L}_e auf den n -dimensionalen Konfigurationsraum kann singuläre Punkte aufweisen, an denen die Jacobi-Matrix der Projektionsabbildung keinen vollen Rang besitzt. Maslov zeigt, dass die Lagrangesche Mannigfaltigkeit stets durch eine beliebig kleine Rotation, unter der sie Lagrangesch bleibt, in eine sogenannte „allgemeine Position“ gebracht werden kann, unter der folgende Aussagen gelten: die Menge aller singulären Punkte Σ von \mathcal{L}_e besteht aus einer $(n - 1)$ -dimensionalen Mannigfaltigkeit Σ^1 von Punkten, an denen der Rang der Jacobi-Matrix um eins erniedrigt ist mit einer Menge von Randpunkten, die Mannigfaltigkeiten der Dimensionen $n - 3$ und kleiner bilden [61]. Interessant ist nun, dass Σ in \mathcal{L}_e zweiseitig eingebettet ist.¹ Es ist also möglich, an jedem Punkt von \mathcal{L}_e zu sagen, auf welcher Seite relativ zu Σ^1 wir uns befinden.

Betrachten wir nun einen einfach singulären Punkt der Lagrangeschen Mannigfaltigkeit in „allgemeiner Position“. In einer Umgebung dieses Punktes ist die Singularität durch ein Verschwinden von $\partial q_k / \partial p_k$ für ein $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ gekennzeichnet. Verfolgen wir eine Kurve in \mathcal{L}_e , die durch diesen Punkt geht, dann schneidet sie dort die Menge Σ^1 der einfach singulären Punkte. Die Ableitung wechselt dabei das Vorzeichen und wir wechseln beim Durchlauf durch die Kurve von einer Seite von Σ zur anderen. Die wesentliche Voraussetzung dafür ist jedoch, dass Σ von der Kurve stets transversal geschnitten wird. Die Seite, auf der $\partial q_k / \partial p_k$ positiv ist, wird positive Seite genannt.

Der Maslov-Index einer parametrisierbaren Kurve² in \mathcal{L}_e ist nun wie folgt definiert: Die Kurve starte und ende bei zwei nicht-singulären Punkten, also außerhalb von Σ . Entlang der Kurve werden singuläre Punkte durchlaufen, dabei seien die obigen Voraussetzungen erfüllt. Der Maslov-Index ist die Anzahl der Übergänge während dieses Durchlaufs von der negativen Seite von Σ zur positiven Seite minus der Übergänge, die andersherum erfolgen. Er ist eine topologische Eigenschaft der betrachteten Kurve und hängt nicht vom verwendeten Koordinatensystem ab.

Der Maslov-Index und der Morse-Index stehen in folgendem Zusammenhang [61]: Betrachte im $2n = 2(d + 1)$ -dimensionalen erweiterten Phasenraum $\mathcal{P}_e = \{(q_0, p_0, \mathbf{q}, \mathbf{p})\}$ eine $n = (d + 1)$ -dimensionale Mannigfaltigkeit \mathcal{L}_e . Sie wird durch

$$\mathcal{L}_e = \{(\tau, -H(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \mathbf{q}, \mathbf{p}) \mid (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in g^\tau \mathcal{L}', 0 \leq \tau \leq t\}$$

¹Genauer: Es gibt ein zur Mannigfaltigkeit \mathcal{L}_e tangentiales Vektorfeld, das stets senkrecht zu $\Sigma^1 \subset \mathcal{L}_e$ steht.

²Die Parametrisierbarkeit ist wichtig, denn so lässt sich die Kurve orientieren, also eine Richtung des Durchlaufs angeben

definiert und ist Lagrangesch. Eine Trajektorie γ des (gewöhnlichen) Phasenraums kann so als Kurve γ_e in \mathcal{L}_e aufgefasst werden: Der Morse–Index der Trajektorie $\gamma = g^\tau(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ ist gleich dem Maslov–Index der Kurve $\gamma_e = (\tau, -H(g^\tau(\mathbf{q}', \mathbf{p}')), g^\tau(\mathbf{q}', \mathbf{p}'))$.

A.2.3 Periodische Orbits und Phasenindex

Der Index geschlossener Trajektorien ist für semiklassische Näherungen von besonderer Bedeutung, denn periodische Orbits treten bei der semiklassischen Quantisierung wie der Bohr–Sommerfeld– und Einstein–Brillouin–Keller–Quantisierung wie auch der Gutzwillerschen Spurformel in natürlicher Weise auf.

Die Definition des Maslov–Index in seiner ursprünglichen Form, so wie sie oben dargestellt wurde, ist recht abstrakt. Arnold zeigt in [61] die Äquivalenz mit einer Konstruktion, die heute in der physikalischen Literatur gebräuchlicher ist: Entlang einer Kurve γ_e auf einer Lagrangeschen Mannigfaltigkeit \mathcal{L}_e des erweiterten Phasenraums \mathcal{P}_e existiert an jedem Punkt eine Ebene, die tangential zur Mannigfaltigkeit liegt. Es lässt sich zeigen, dass diese Ebenen ebenfalls Lagrangesch sind. Sie sind deshalb Elemente der Menge Λ aller Lagrangeschen Unterräume von \mathcal{P}_e . Jeder Punkt der Kurve bestimmt also ein Element von Λ . Die Menge aller Tangential–Ebenen entlang γ_e bildet auf diese Weise eine Kurve γ_Λ in Λ . Tatsächlich lässt sich für diese Kurve ein Maslov–Index definieren, der mit dem Index der ursprünglichen Kurve γ_e übereinstimmt.

Zunächst führen wir im Phasenraum neben der symplektischen Struktur und dem Skalarprodukt mit der Definition $\mathbf{z} := \mathbf{q} + i\mathbf{p}$ eine komplexe Struktur ein. Transformationen, die die symplektische Struktur und das Skalarprodukt erhalten, lassen auch die komplexe Struktur invariant und sind deshalb unitär [61]. Sie wirken auf Lagrangesche Ebenen wie Drehungen. Ausgehend von einer fixierten Lagrangeschen Ebene, sei dies im Folgenden der Impulsraum $\{(\mathbf{q} = 0, \mathbf{p})\}$, lassen sich also alle anderen Ebenen in Λ durch eine unitäre Transformation erzeugen. Dies ist jedoch keine eindeutige Konstruktion. Zwei unitäre Transformationen, die den Impulsraum auf ein und dieselbe Lagrangesche Ebene abbilden, können sich höchstens durch eine reelle, orthogonale Transformation unterscheiden. Die Determinante einer unitären Transformation ist eine komplexe Zahl vom Betrag 1 und die Determinante einer orthogonalen Transformation hat den Wert ± 1 . Deswegen hängt das *Quadrat* der Determinante der unitären Transformation, die die reelle Ebene auf die Lagrangesche Ebene abbildet nur von der Lage der Lagrangeschen Ebene und nicht von der Wahl der speziellen Transformation ab.

Nun haben wir alle Zutaten, um den Index zu definieren: Gegeben sei eine geschlossene Trajektorie γ des gewöhnlichen Phasenraums \mathcal{P} . Wie am Ende des letzten Abschnitts gezeigt, definiert sie eine Kurve γ_e auf der Lagrangeschen Mannigfaltigkeit \mathcal{P}_e (dem erweiterten Phasenraum). Aus obiger Konstruktion erhalten wir eine Kurve γ_Λ in der Menge der Lagrangeschen Unterräume Λ von \mathcal{P}_e . Der Startpunkt von γ_Λ ist eine Lagrangesche Ebene, die durch eine gewisse Rotation des Impulsraums entsteht. Das Quadrat der Determinante dieser Transformation ist eine komplexe Zahl ζ , die auf dem Einheitskreis liegt und allein durch die Lage der Ebene, d.h. den Startpunkt bestimmt wird. Die tangentiale Ebene rotiert, wenn wir entlang der Kurve laufen und ζ bewegt sich auf dem Einheitskreis. Die Anzahl der Rotationen dieser Zahl um den Ursprung des Einheitskreises ist der Maslov–Index der Kurven γ_Λ und γ_e . Er zählt die Anzahl der nicht–trivialen Schnitte der Tangential–Ebenen mit dem Impulsraum.

Der Vorgang lässt sich für ein eindimensionales, konservatives System leicht veranschaulichen: Wir betrachten im zweidimensionalen Phasenraum $\{(q_1, p_1)\}$ einen geschlossenen Orbit in Form einer Ellipse. An jedem Punkt lässt sich eine Tangente zum Orbit konstruieren. Wir starten an einem Punkt, an der die Tangente senkrecht auf der Impuls-Achse steht. Während eines Durchlaufs durch die Ellipse rotiert die Tangente einmal um sich selbst und steht zweimal tangential zur Impuls-Achse. Der Maslov-Index m der Ellipse ist deshalb zwei.³ Die Phase der semiklassischen Wellenfunktion ändert sich während des Durchlaufs durch die Ellipse also um

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\gamma} p \, dq - m \frac{\pi}{2}.$$

Wir fordern Eindeutigkeit der Wellenfunktion, deshalb gilt

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\gamma} p \, dq - m \frac{\pi}{2} = N 2\pi, \quad N \in \mathbb{N},$$

also

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} p \, dq = \hbar \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

und wir erkennen eine altbekannte Quantierungsbedingung wieder. Diese Art der Quantisierung für ein integrables System wird meist als EBK- oder Torus-Quantisierung bezeichnet: Existieren für ein im Allgemeinen d -dimensionales System neben der Hamilton-Funktion $H = E$ noch $d - 1$ weitere, paarweise bezüglich der Poisson-Klammer kommutierende Erhaltungsgrößen, erzeugen deren Hamiltonsche Phasenflüsse auf der Mannigfaltigkeit zu konstanter Energie $H = E$ zueinander unabhängige Vektorfelder. Ist die Mannigfaltigkeit $H = E$ zusätzlich zusammenhängend, dann hat sie die topologische Struktur eines d -Torus (Satz von Poincaré-Hopf) [12]. Winkel- und Wirkungsvariablen (Θ, \mathbf{I}) bilden ein natürliches Koordinatensystem auf dem Torus. Es existieren d topologisch unabhängige geschlossene Schleifen γ_i , die durch Variation jeweils einer Winkelkoordinate Θ_i bei konstanten Wirkungsvariablen erzeugt werden. Die EBK-Quantisierung lautet dann [8]:

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = \hbar \left(N_i + \frac{m_i}{4} \right), \quad i = 1, 2, \dots, d.$$

A.3 Der Phasenindex der Gutzwillerschen Spurfomel

Beschäftigen wir uns schließlich mit dem Phasenindex σ_r , wie er für die r te Wiederholung eines klassischen periodischen Orbits in der Gutzwillerschen Spurfomel auftritt. Er wird in der Literatur fälschlicherweise meist auch als Maslov-Index bezeichnet, obwohl er mit der ursprünglichen Definition von Maslov im Allgemeinen nicht übereinstimmt. Für integrable Systeme steht σ_r jedoch in engem Zusammenhang mit dem Maslov-Index

³Dem aufmerksamen Leser wird auffallen, daß der Vorgang hier tatsächlich nicht im erweiterten Phasenraum $\{(t, -E, q_1, p_2)\}$, sondern in der Projektion auf $\{(q_1, p_2)\}$ veranschaulicht wird.

der EBK-Quantisierung, wie wir sie oben beschrieben haben [8]. Dieser Zusammenhang lässt sich aus der verallgemeinerten Spurformel für abelsche Symmetrien von Creagh [13] erkennen. Sie kann für ein integrables System unter Benutzung von Wirkungs- und Winkelvariablen in eine Form gebracht werden, die äquivalent zu einer Formel ist, die Berry und Tabor in [17, 18] geben. Die Berry-Tabor-Formel der Zustandsdichte eines integrablen Systems entsteht im Wesentlichen aus der Anwendung der Poissonschen Summationsformel auf die exakte Zustandsdichte und der näherungsweise Auswertung der auftretenden Integrale. Die exakte Zustandsdichte wird dabei allgemein mit einer Form angesetzt, wie man sie aus einer EBK-Quantisierung erhalten würde. Entsprechende Größen wie der Maslov-Index gehen so direkt in die Formel mit ein.

Die in der Literatur veröffentlichten Methoden zur Bestimmung von σ_r lassen sich in zwei vom Ansatz her verschiedene Zugänge einteilen, die wir in den nächsten beiden Abschnitten beschreiben. Es sollte beachtet werden, dass sich Folgendes ausschließlich auf den Phasenindex der gewöhnlichen Gutzwillerschen Spurformel bezieht, die isolierte Orbits voraussetzt. Eine allgemeine Methode zur Bestimmung der Indizes in den verallgemeinerten Spurformel für Symmetrien ist bis jetzt nicht bekannt.

A.3.1 Berechnung in lokalen Koordinaten des Orbits

Die herkömmlichen Methoden [6, 13, 62, 14, 8] benutzen ein lokales Koordinatensystem des betreffenden Orbits und eine Zerlegung des Phasenindex in zwei Anteile, $\sigma_r = \mu_r + \nu_r$. Dieser Weg ist sehr eng mit der Herleitung der Gutzwiller-Formel verknüpft und wird durch die dort auszuwertenden Integrale und deren Näherungen an stationären Phasen motiviert.

Der erste Anteil μ_r ergibt sich auf ähnliche Weise wie der Maslov-Index: Er zählt die konjugierten Punkte entlang des Orbits. Im Unterschied zu oben werden hier jedoch periodische Orbits zu vorgegebener Energie, statt Orbits mit fixierter Periode betrachtet. μ_r ist der Phasenindex der semiklassischen, energieabhängigen Green-Funktion $G_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$. Sie ergibt sich aus einer Laplace-Transformation des semiklassischen Van Vleck-Propagators $K_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$, die näherungsweise an Punkten stationärer Phase durchgeführt wird. μ_r ist deshalb selbst eine Summe aus dem Phasenindex m_r des Van Vleck-Propagators und dem Phasenbeitrag des Fresnel-Integrals der näherungsweise Transformation. Wir haben hier absichtlich den Index des semiklassischen Propagators $K_{\text{skl}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$ mit m_r bezeichnet, denn ein Propagator kann als eine vom Parameter \mathbf{q}' abhängige Wellenfunktion $K_{\text{skl}, \mathbf{q}'}(\mathbf{q}, t)$ aufgefasst werden. Sie erfüllt die Schrödinger-Gleichung und passt sich so in das Schema ein, wie wir es am Anfang dieses Kapitels beschrieben haben. Der Propagator erfüllt die spezielle Anfangsbedingung $K_{\text{skl}, \mathbf{q}'}(\mathbf{q}, 0) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$. Diese Lokalisation im Ortsraum entspricht einer gleichmäßigen Verteilung im Impulsraum. Orbits starten von \mathbf{q}' aus mit verschiedensten Impulsen \mathbf{p}' . Dies ergibt ein fächerartiges Bild, wie in Abbildung A.2 dargestellt. Zu \mathbf{q}' konjugierte Punkte $\tilde{\mathbf{q}}$ entstehen an Orten, an denen die verschiedenen Orbits des Fächers wieder in einem Punkt zusammentreffen, also die Matrix $(\partial \mathbf{q} / \partial \mathbf{p}')$ singulär wird. Diese Matrix ist gerade die Inverse der Van Vleck-Morette-Matrix, die als Amplitude im Van Vleck-Propagator auftritt. Sie divergiert also an konjugierten Punkten, deren Anzahl durch m_j gezählt werden.

Der zweite Beitrag ν_r zum Phasenindex σ_r entsteht, wenn die Spur der semiklas-

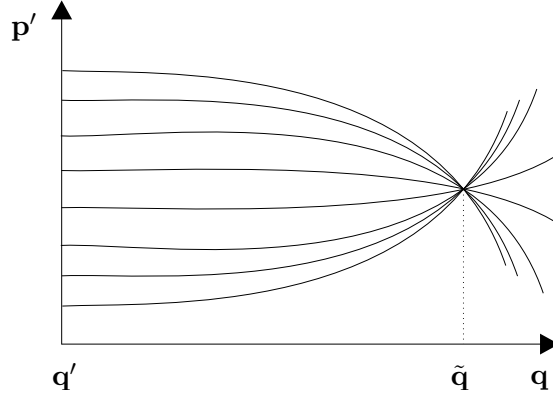


Abbildung A.2: Orbits starten bei \mathbf{q}' mit allen möglichen Impulsen \mathbf{p}' . Sie treffen im Ortsraum bei konjugierten Punkten $\tilde{\mathbf{q}}$ zusammen.

sischen Green-Funktion in lokalen Koordinaten des Orbits gebildet wird. Das Integral für die Koordinate entlang des Orbits wird exakt ausgeführt, alle anderen jedoch näherungsweise an stationären Phasen. Diese liefern Fresnel-Integrale mit den entsprechenden Phasenbeiträgen.

Es lässt sich zeigen [13], dass im Allgemeinen weder μ_r noch ν_r topologische Invarianten des Orbits sind, sondern vielmehr von der Wahl des Startpunktes abhängen können. Diese Eigenschaft besitzt tatsächlich nur die Summe beider Größen, die als Phasenindex in die Spurformel eingeht. Letztlich treten in der Spurformel ausschließlich Größen auf, die kanonische Invarianten eines Orbits darstellen und deswegen auch nicht vom speziellen Koordinatensystem abhängen dürfen, mit denen sie berechnet werden.

Wir geben nun Methoden an, wie sich $\sigma_r = \mu_r + \nu_r$ für ein zweidimensionales System praktisch berechnen lässt. Wir unterscheiden zwei Fälle.

Unstabile Orbits

Ist der Orbit, für den der Index berechnet wird instabil, so kann σ_r als eine Windungszahl gesehen werden [13, 14]. In diesem Fall ist es möglich σ_r als Ganzes zu bestimmen: Wir betrachten zur Zeit $t = 0$ am Startpunkt⁴ $(q_{1,0}, q_{2,0}, p_{1,0}, p_{2,0})$ des Orbits mit Periode T den Eigenvektor $\mathbf{e}_0 := (e_{q_1,0}, e_{q_2,0}, e_{p_1,0}, e_{p_2,0})^\top$ zum unstabilen Eigenwert der Monodromiematrix $M = X(t = T)$, vergleiche Anhang C, sowie den Flussvektor $\mathbf{f}_0 = (\dot{q}_{1,0}, \dot{q}_{2,0}, \dot{p}_{1,0}, \dot{p}_{2,0})^\top$. Diese Vektoren werden nun durch die Lösungsmatrix propagiert:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}(t) &= (e_{q_1}(t), e_{q_2}(t), e_{p_1}(t), e_{p_2}(t))^\top = X(t) \mathbf{e}_0, \\ \mathbf{f}(t) &= (f_{q_1}(t), f_{q_2}(t), f_{p_1}(t), f_{p_2}(t))^\top = X(t) \mathbf{f}_0.\end{aligned}$$

⁴Der Startpunkt darf kein konjugierter Punkt, d.h. insbesondere kein klassischer Umkehrpunkt des Orbits sein.

Aus den Komponenten von $\mathbf{e}(t)$ und $\mathbf{f}(t)$ konstruieren wir folgende 2×2 -Matrizen:

$$U_q(t) = \begin{pmatrix} e_{q_1}(t) & f_{q_1}(t) \\ e_{q_2}(t) & f_{q_2}(t) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

$$U_p(t) = \begin{pmatrix} e_{p_1}(t) & f_{p_1}(t) \\ e_{p_2}(t) & f_{p_2}(t) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Der Index σ_r für die r -fache Wiederholung des Orbits ist dann die Windungszahl folgender Kurve γ , die auf dem Einheitskreis der komplexen Ebene verläuft:

$$\gamma = \left\{ [\det (U_q(t) - iU_p(t))]^2 \in \mathbb{C} \mid 0 \leq t \leq rT \right\}.$$

Stabile Orbits

Für stabile periodische Orbits wie die des inkommensurablen harmonischen Oszillators kann σ_r im Allgemeinen nicht als Windungszahl gesehen werden. Die Anteile μ_r und ν_r müssen getrennt voneinander berechnet werden. Dies gelingt für den Anteil μ_r in ähnlicher Weise wie oben für σ_r im Falle unstabiler Orbits: \mathbf{f}_0 wird analog definiert, für \mathbf{e}_0 definieren wir

$$\mathbf{e}_0 := \begin{cases} (0, 0, -\dot{q}_{2,0}/\dot{q}_{1,0}, 1)^\top, & \text{falls } \dot{q}_{1,0} \neq 0, \\ (0, 0, 1, -\dot{q}_{1,0}/\dot{q}_{2,0})^\top, & \text{falls } \dot{q}_{2,0} \neq 0. \end{cases}$$

Die Vektoren \mathbf{f}_0 und \mathbf{e}_0 werden wieder mit der Lösungsmatrix $X(t)$ propagiert und die Matrix $U_q(t)$ wie in (A.4) definiert. Die Anzahl der Nullstellen von $\det U_q(t)$ während r Wiederholungen des Orbits ohne die triviale Nullstellen am Anfang und Ende gibt μ_r an:

$$\mu_r = \# \{ \det U_q(t) = 0 \mid 0 < t < rT \}.$$

Der zweite Anteil ν_r berücksichtigt die Phasenbeiträge bei der näherungsweise Auswertung der Spur der semiklassischen Green-Funktion. Er zählt die negativen Eigenwerte einer $(d-1) \times (d-1)$ -Matrix W , die bei diesen Näherungen entsteht, siehe 2.6. Schreiben wir die Stabilitätsmatrix \tilde{M} in der Form

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix},$$

dann gilt folgende Identität [13]:

$$\det W = (-1)^d \frac{\det (\tilde{M} - \mathbf{I})}{\det B}.$$

Speziell für ein zweidimensionales System, $d = 2$, entarten die in diesem Fall eindimensionalen Matrizen W und B zu Zahlen W und B , und stimmen mit ihren Determinanten überein. Zudem entspricht $\det (\tilde{M} - \mathbf{I})$ dem charakteristischen Polynom von \tilde{M} zum Eigenwert $\lambda = 1$:

$$\det (\tilde{M} - \lambda \mathbf{I}) = -\lambda^2 + \lambda \operatorname{Tr} (\tilde{M}) - \det \tilde{M}.$$

Da \tilde{M} symplektisch ist, gilt $\det \tilde{M} = 1$ und mit $\lambda = 1$ folgt für ein zweidimensionales System insgesamt

$$W = \frac{\operatorname{Tr} \tilde{M} - 2}{B}. \quad (\text{A.6})$$

Somit ist

$$\nu_r = \begin{cases} 0 & \text{falls } W > 0, \\ 1, & \text{falls } W < 0. \end{cases}$$

A.3.2 Berechnung ohne Benutzung lokaler Koordinaten

Da der Phasenindex σ_r eine topologische Invariante des Orbits darstellt, sollte es grundsätzlich möglich sein, ihn auch ohne Benutzung eines lokalen Koordinatensystems des Orbits zu bestimmen. Dieser alternative Zugang nutzt Ergebnisse der Homotopie–Theorie und liefert eine Formel für σ_r , in der nur invariante Eigenschaften der Stabilitätsmatrix eingehen. Eine sehr gute Einführung in das Gebiet der algebraischen Topologie und Homotopie–Theorie gibt zum Beispiel [63].

Das Vorgehen ist wie folgt: Die Lösungsmatrix $X(t)$ der um eine periodische Lösung der Periode T linearisierten Hamiltonschen Gleichungen ist zu jedem Zeitpunkt symplektisch. Speziell am Startpunkt ist $X(t = 0)$ die $2d \times 2d$ –Einheitsmatrix. Zu jeder Zeit $0 \leq t \leq T$ ist $X(t)$ also ein Element der Menge $SP(2d)$ aller reellen symplektischen Matrizen der Dimension $2d$. Die Menge $SP(2d)$ bildet eine Gruppe unter der üblichen Multiplikation von Matrizen. Die Elemente $X(t)$, $0 \leq t \leq T$, bilden also eine stetige Kurve in dieser Gruppe. Nun stellt sich heraus, dass die Gruppenmannigfaltigkeit der $SP(2d)$ innerhalb der Menge aller $2d \times 2d$ –Matrizen eine einfache, aber nicht–triviale Topologie besitzt: Sie ist das kartesische Produkt eines einfach verbundenen Raums mit einem Kreis [64]. Eine gute Vorstellung von den topologischen Eigenschaften der Mannigfaltigkeit gibt ein einfaches dreidimensionales Objekt, die Menge der inneren Punkte eines 2–Torus, also ohne ihre umgebende Oberfläche. Dieses Objekt ist für $d = 1$ tatsächlich topologisch äquivalent zur symplektischen Gruppenmannigfaltigkeit, es bietet aber auch für höhere Dimensionen eine gutes intuitives Bild. Diese Vorstellung vermittelt einen wesentlichen Aspekt: die Gruppenmannigfaltigkeit besitzt ein „Loch“. Einer geschlossenen Kurve in $SP(2d)$ kann deshalb ein Windungszahl zugeordnet werden, die die Anzahl der Umläufe der Kurve um dieses Loch zählt. Die typischen Eigenschaften sind nun folgende: Zwei Kurven mit den selben Start– und Endpunkten, von der eine in die andere stetig deformiert werden kann, gehören zur selben Homotopie–Klasse; genau dann besitzen sie die gleiche Windungszahl. Einer Kurve, die nur aus einem Punkt besteht, wird die Windungszahl 0 zugeordnet. Falls der Durchlaufsinne einer Kurve umgedreht wird, wechselt die Windungszahl das Vorzeichen. Sie verhält sich außerdem additiv, wenn zwei Kurven am Endpunkt der ersten und am Startpunkt der zweiten zusammengefügt werden. Äquivalent zu all diesen Eigenschaften ist die Aussage: Die fundamentale Gruppe der symplektischen Gruppenmannigfaltigkeit ist die Menge der ganzen Zahlen $(\mathbb{Z}, +)$ unter der Addition.

Littlejohn benutzt diese topologischen Eigenschaften im Rahmen semiklassischer Propagation gaußscher Wellenpakete [65, 66]. Er berechnet die Maslov–Indizes m_i der EBK–Quantisierung aus einer symplektischen Matrix, die das Zerfließen des Wellenpakets beschreibt.

Den Phasenindex σ_r der Gutzwillerschen Spurformel wird innerhalb des oben vorgestellten Formalismus von Sugita [67, 68] und Muratore–Ginanneschi [25] berechnet. Sie geben eine explizite Formel für σ_r an, in der nur Größen der Monodromiematrix M eingehen. Die Eigenwerte dieser symplektischen Matrix bilden stets Zweier- oder Vierer-Gruppen, siehe Anhang C. Als Konsequenz lässt sich die Normalform von M typischerweise⁵ in zugehörige zwei- oder vierdimensionale Blöcke M_i diagonalisieren:

$$M = \begin{pmatrix} M_1 & & & \\ & M_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & M_k \end{pmatrix}.$$

Die Form eines Blockes M_i lässt sich bezüglich seiner Eigenwerte unterscheiden:

- Direkt hyperbolische Blöcke

Eigenwerte $\lambda = \exp(\pm\alpha_i)$, $\alpha_i \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$,

$$M_i = \begin{pmatrix} \exp(\alpha_i) & 0 \\ 0 & \exp(-\alpha_i) \end{pmatrix}.$$

- Invers hyperbolische Blöcke

Eigenwerte $\lambda = -\exp(\pm\alpha_i)$, $\alpha_i \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$,

$$M_i = \begin{pmatrix} -\exp(\alpha_i) & 0 \\ 0 & -\exp(-\alpha_i) \end{pmatrix}.$$

- Elliptische Blöcke

Eigenwerte $\lambda = \exp(\pm i\beta_i)$, $\beta_i \in \mathbb{R} \setminus 2\pi\mathbb{Z}$,

$$M_i = \begin{pmatrix} \cos \beta_i & \sin \beta_i \\ -\sin \beta_i & \cos \beta_i \end{pmatrix}.$$

- Loxodromische Blöcke

Eigenwerte $\lambda = \exp(\pm\alpha_i \pm i\beta_i)$, $\alpha_i \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, $\beta_i \in \mathbb{R} \setminus 2\pi\mathbb{Z}$,

$$M_i = \begin{pmatrix} \exp(\alpha_i) \cos \beta_i & 0 & -\exp(\alpha_i) \sin \beta_i & 0 \\ 0 & \exp(-\alpha_i) \cos \beta_i & 0 & -\exp(-\alpha_i) \sin \beta_i \\ \exp(\alpha_i) \sin \beta_i & 0 & \exp(\alpha_i) \cos \beta_i & 0 \\ 0 & \exp(-\alpha_i) \sin \beta_i & 0 & \exp(-\alpha_i) \cos \beta_i \end{pmatrix}.$$

- Parabolische Blöcke

doppelter Eigenwert $\lambda = 1$,

$$M_i = \begin{pmatrix} 1 & \kappa_i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \kappa_i \in \mathbb{R}.$$

⁵Dies gilt jedoch nicht notwendig [25].

Für ein konservatives System tritt stets ein parabolischer Block in der Monodromiematrix auf, vergleiche Anhang C. Er gehört zur Symmetrie gegen Translation der Zeitkoordinate. Der Beitrag dieses Blockes zum Phasenindex darf im Allgemeinen jedoch nicht berücksichtigt werden. Es lässt sich zeigen, dass er sich gerade mit der Phase des Fresnel-Integrals aufhebt, das wir erhalten, wenn die Laplace-Transformation des Propagators von der Zeit- in die Energiedomäne näherungsweise an stationärer Phase ausgeführt wird [68, 25]. Bezeichnen wir nun mit n_{ell} und n_{ih} die Anzahl der elliptischen und invers hyperbolischen Blöcke der Monodromiematrix und setzen voraus, dass außer dem Energie-Block keine weiteren parabolischen Blöcke auftreten, dann gilt für den Phasenindex der r ten Wiederholung eines primitiven Orbits [68, 25]:

$$\sigma_r = \sum_{i=1}^{n_{\text{ell}}} \left(1 + 2 \left[\frac{r\beta_i}{2\pi} \right]_{\text{int}} \right) + rn_{\text{ih}} + 2rm. \quad (\text{A.7})$$

Die ganze Zahl m entspricht oben beschriebener Windungszahl. Eine Möglichkeit, wie m und die Stabilitätswinkel β_i der elliptischen Blöcke praktisch und eindeutig zu bestimmen sind, geben Pletyukhov und Brack in [15].

Im Falle weiterer, insbesondere entarteter parabolischer Blöcke mit $\kappa_i = 0$ ist Vorsicht geboten. Sie sind typische Kennzeichen kontinuierlicher Symmetrie. Die Bestimmung des Phasenindex für Orbits mit hoher Entartung, wie sie beispielsweise beim kommensurablen harmonischen Oszillator auftreten, ist alles andere als trivial. Tatsächlich fehlt gegenwärtig eine allgemeine Beschreibung, wie mit diesen Fällen umzugehen ist. Das obige Verfahren ist jedoch vielversprechend. Weitere Hinweise könnten die Arbeiten von Muratore-Ginanneschi [25] und dortige Referenzen, sowie von Robbin und Salamon [69], Creagh [70, 24] und Portaluri [71] geben.

Anhang B

Klassische Mechanik und symplektische Geometrie: Eine kurze Übersicht

Wir wiederholen in diesem Abschnitt einige Grundlagen der symplektischen Geometrie des klassischen Phasenraums. Wir gehen von einer d -dimensionalen differenzierbaren Mannigfaltigkeit, dem Konfigurationsraum V des mechanischen Systems aus und parametrisieren Punkte von V durch Koordinaten $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$. Sie werden oft als generalisierte Koordinaten des Ortsraums bezeichnet. Ein Tangentialraum $TV_{\mathbf{q}}$ von V an der Stelle \mathbf{q} hat ebenfalls die Struktur einer d -dimensionalen Mannigfaltigkeit (es ist der Raum der „generalisierten Geschwindigkeiten“ $\dot{\mathbf{q}}$). Eine lineare Abbildung eines Elements von $TV_{\mathbf{q}}$ in die reellen Zahlen wird 1-Form von V an der Stelle \mathbf{q} genannt. Der Raum aller 1-Formen von V an \mathbf{q} ist ein d -dimensionaler Vektorraum, der Cotangentialraum $T^*V_{\mathbf{q}}$ [12]. Nach Wahl einer Basis in $T^*V_{\mathbf{q}}$ lässt sich eine 1-Form durch d Komponenten festlegen, die wir als Vektor \mathbf{p} (Cotangentialvektor) schreiben. Die Vereinigung aller Cotangentialräume von V heißt Cotangentialbündel T^*V . Die $2d$ Zahlen (\mathbf{q}, \mathbf{p}) bilden Koordinaten auf T^*V , da sich durch \mathbf{p} eine 1-Form und durch \mathbf{q} der Tangentialraum $TV_{\mathbf{q}}$ (der den Ursprungsraum dieser 1-Form bildet) eindeutig festlegen lassen. Das Cotangentialbündel T^*V hat die natürliche Struktur einer $2d$ -dimensionalen Mannigfaltigkeit und ist der gewohnte klassische Phasenraum \mathcal{P} . Die 1-Form, charakterisiert durch \mathbf{p} , entsteht in Notation der Lagrange Mechanik durch die Lagrange-Funktion $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ durch $\mathbf{p} = \partial L / \partial \dot{\mathbf{q}}$, d.h. $\mathbf{p} : TV_{\mathbf{q}} \rightarrow \mathbb{R}$.

Halten wir also fest: Durch obige Konstruktion entsteht der Phasenraum \mathcal{P} mit Koordinaten $\mathbf{x} := (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ als Cotangentialbündel des Konfigurationsraums. Er ist eine Mannigfaltigkeit gerader Dimension. Nun lässt sich zeigen, dass ein Cotangentialbündel, und damit der Phasenraum \mathcal{P} , stets eine kanonische 1-Form Ω^1 und eine natürliche symplektische Struktur besitzt. Damit ist folgendes gemeint: Eine symplektische Struktur ist eine 2-Form, die an jedem Punkt \mathbf{x} einer Mannigfaltigkeit mit gerader Dimension definiert ist und besondere Eigenschaften erfüllt. Eine 2-Form ist eine Abbildung $\Omega^2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2)$ zweier Elemente $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2$ des Tangentialraums $T\mathcal{P}_{\mathbf{x}}$ in die reellen Zahlen, die bilinear und total schief-symmetrisch ist:

$$\begin{aligned}\Omega^2(a\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) &= a\Omega^2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2), & a \in \mathbb{R}, \\ \Omega^2(\mathbf{X}_1, a\mathbf{X}_2) &= a\Omega^2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2), & a \in \mathbb{R}, \\ \Omega^2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) &= -\Omega^2(\mathbf{X}_2, \mathbf{X}_1).\end{aligned}$$

Sie heißt symplektisch, wenn sie geschlossen und nichtentartet ist, d.h.

$$\begin{aligned}d\Omega^2 &\equiv 0, \\ \forall \mathbf{X}_1 \neq 0 \exists \mathbf{X}_2 : \Omega^2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) &\neq 0.\end{aligned}$$

In den Koordinaten (\mathbf{q}, \mathbf{p}) entsteht die natürliche symplektische 2-Form durch äußere Differenziation der 1-Form $\Omega^1 = \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = \sum_{i=1}^d p_i dq_i$ und lautet¹

$$\Omega^2 = d\Omega^1 = d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q} = \sum_{i=1}^d dp_i \wedge dq_i.$$

Sie ist geschlossen, da stets $d(d\Omega^1) \equiv 0$ gilt.

Für $\mathcal{P} = \mathbb{R}^{2d}$ ist $T\mathcal{P} = \mathbb{R}^{2d}$ und der Tangentialraum kann mit dem Phasenraum identifiziert werden. Mit der euklidischen Metrik und dem Standard-Skalarprodukt $\mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{q}^2 + \mathbf{p}^2$ können wir jede schiefsymmetrische Bilinearform Ω^2 durch eine schiefsymmetrische Matrix \mathbf{J} darstellen als

$$\Omega^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{J}\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y}.$$

Für die symplektische 2-Form des Phasenraums lautet die Matrix \mathbf{J}

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}$$

und wird als symplektische Einheitsmatrix bezeichnet.² Dabei ist \mathbf{I} die $d \times d$ Einheitsmatrix.

Durch die Existenz der 2-Form lässt sich zu jedem Tangentialvektor \mathbf{X}_1 in einem Tangentialraum von \mathcal{P} eine 1-Form $\Omega_{\mathbf{X}_1}^1$ zuordnen:

$$\Omega_{\mathbf{X}_1}^1(\mathbf{X}_2) = \Omega^2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2).$$

Diese Beziehung ist isomorph, so dass sich umgekehrt zu jeder 1-Form ein Tangentialvektor findet. Ist nun auf \mathcal{P} eine reelle Funktion $H(\mathbf{x})$ definiert, ist dH eine 1-Form auf \mathcal{P} , zu der sich in dieser Weise an jedem Punkt \mathbf{x} ein Tangentialvektor zuordnen lässt. Die Funktion H wird Hamilton-Funktion genannt und die Menge der Tangentialvektoren an allen Punkten \mathbf{x} Hamiltonsches Vektorfeld. Die Matrix \mathbf{J} liefert in den Koordinaten (\mathbf{q}, \mathbf{p}) gerade die Abbildung der 1-Form auf den entsprechenden Tangentialvektor:

$$\mathbf{X} = \mathbf{J}dH(\mathbf{x}) \in T\mathcal{P}.$$

Das Hamiltonsche Vektorfeld lässt sich als Erzeuger des Hamiltonschen Flusses $g^t(\mathbf{x}) : \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{P}$ auffassen³, der durch

$$\mathbf{X} = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} g^t(\mathbf{x})$$

¹Die Basis des Cotangentialraums $T^*\mathcal{P}_x$ wird meist geschrieben als $\{dq_1, dq_2, \dots, dq_d, dp_1, dp_2, \dots, dp_d\}$. Äußere Differenziation $df(\mathbf{x})$ einer Funktion (0-Form) $f(\mathbf{x})$ auf \mathcal{P} liefert die 1-Form $\partial_{x_1} f(\mathbf{x}) dx_1 + \dots + \partial_{x_{2d}} f(\mathbf{x}) dx_{2d}$. Die Basis-Formen dx_i geben also die Projektion der Ableitung entlang der i -ten Richtung an. Beispiel: $d(q_1 + q_3) = 1dq_1 + 1dq_3$; diese 1-Form kann nun als Vektor $(1, 0, 1, 0, \dots, 0)$ identifiziert werden. Die äußere Differenziation einer 1-Form ergibt eine 2-Form, usw.

²Oft wird in der Literatur auch die Reihenfolge der Koordinaten vertauscht geschrieben, d.h. (\mathbf{p}, \mathbf{q}) verwendet. Dann muss im Vergleich zu unserer Definition das Vorzeichen von \mathbf{J} vertauscht werden.

³Der Parameter t entspricht der Zeit, falls der Wert der Funktion H die Energie des mechanischen Systems beschreibt. Prinzipiell erzeugt jedoch jede Funktion des Phasenraums einen Fluss, der ebenfalls als Hamiltonisch bezeichnet wird. Die Parametrisierung ist dann im Allgemeinen nicht die Zeit.

definiert ist. In lokalen Koordinaten wird üblicherweise die Richtung des Flusses \mathbf{X} als $(\dot{\mathbf{q}}, \dot{\mathbf{p}})$ geschrieben.

Nun können wir aus obigen Beziehungen sehen, dass der Hamiltonsche Fluss den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\mathbf{X} = \text{Jd}H(\mathbf{x}) \tag{B.1}$$

gehört: Denn in \mathbb{R}^{2d} können wir die 1-Form

$$dH = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot d\mathbf{p}$$

mit dem Vektor

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \end{pmatrix}$$

identifizieren und (B.1) wie gewohnt schreiben als

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \text{I} \\ -\text{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \\ -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \end{pmatrix}.$$

Eine lineare Transformation M des Phasenraums \mathcal{P} in sich selbst heißt symplektisch, wenn sie die symplektische Struktur erhält,

$$(\text{JM}\mathbf{x}) \cdot (M\mathbf{x}) = (\text{J}\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{P},$$

oder äquivalent

$$M^T \text{J} M = \text{J}.$$

Eine Transformation des Phasenraums ist genau dann linear und kanonisch, wenn sie symplektisch ist. Da der Phasenfluss der Hamilton-Funktion die symplektische Struktur in natürlicher Weise invariant lässt, kann seine Linearisierung als symplektische Matrix M geschrieben werden. Wir verwenden diese Tatsache hier meist im Kontext periodischer Orbits und bezeichnen die zugehörige Matrix des Phasenflusses nach einer Periode als Monodromiematrix.

Anhang C

Die Monodromie-Matrix

Im Folgenden soll der allgemeine Zusammenhang zwischen der Monodromie-Matrix M , der Stabilitätsmatrix \tilde{M} und der Stabilität eines periodischen Orbits dargestellt werden.

Gegeben sei zunächst ein allgemeines System aus $2d$ eventuell nichtlinearen Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t); \quad (\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R} \quad (\text{C.1})$$

mit $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_{2d})$ und stetigen Funktionen $f_i : \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Sei nun $\mathbf{x}_{\text{per}}(t)$ eine periodische Lösung dieses Systems, es gelte

$$\mathbf{x}_{\text{per}}(t + T) = \mathbf{x}_{\text{per}}(t)$$

für eine Periodendauer T . Das Vektorfeld \mathbf{f} erzeugt einen Fluss $g(\mathbf{x}, t) : \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ der durch folgende Eigenschaft definiert ist:

$$\left. \frac{dg(\mathbf{x}, t)}{dt} \right|_{t=t_0} = \mathbf{f}(g(\mathbf{x}, t_0)).$$

Die T -periodische Lösung erzeugt also einen periodischen Orbit j , der durch

$$g(\mathbf{x}_{\text{per}}, \cdot) : (\mathbb{R} \bmod T) \rightarrow \mathbb{R}^n$$

parametrisiert wird. Wir wollen nun versuchen, Aussagen über die Stabilität eines solchen Orbits zu erhalten. Von Interesse ist das Verhalten von Trajektorien in der nächsten Umgebung von \mathbf{x}_{per} . Dazu linearisieren wir das System um den periodischen Orbit, betrachten also eine kleine Störung $\delta\mathbf{x}$:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{\text{per}} + \delta\mathbf{x}. \quad (\text{C.2})$$

Dieser Ansatz lässt sich in das System der Differentialgleichungen einsetzen und bis zur ersten Ordnung der Störung zu entwickeln. Wir erhalten ein System aus linearen Differentialgleichungen für die Störung $\delta\mathbf{x}$. Die Lösung beschreibt das Verhalten benachbarter Orbits.

Für physikalische Systeme der klassischen Mechanik ist die zeitliche Entwicklung durch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gegeben:

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \\ -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \end{pmatrix}.$$

Abhängig von der Hamilton-Funktion $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ sind diese $2d$ Differentialgleichungen erster Ordnung im Allgemeinen nichtlinear. Sei \mathbf{x}_{per} nun eine periodische Lösung dieses

Hamiltonschen Systems. Wir setzen (C.2) in die Hamiltonschen Gleichungen ein und entwickeln bis zur erster Ordnung der Störung. Wir erhalten ein System aus $2d$ linearen Hamiltonschen Differentialgleichungen für $\delta\mathbf{x}$ von der Form

$$\frac{d}{dt}\delta\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}} & \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{p}} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{q}} & \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{p}} \end{pmatrix} \Big|_{\mathbf{x}_{\text{per}}} \delta\mathbf{x}.$$

Die Koeffizientenmatrix enthält Ableitungen, die entlang des periodischen Orbits ausgewertet werden und ist deshalb ebenfalls T -periodisch. Nehmen wir eine Hamilton-Funktion der Form

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

an, dann lautet die Linearisierung

$$\frac{d}{dt}\delta\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -V & 0 \end{pmatrix} \delta\mathbf{x}.$$

\mathbf{I} ist die $d \times d$ Einheitsmatrix und

$$V = \frac{\partial^2 V(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}} \Big|_{\mathbf{q}_{\text{per}}}$$

ist die Hesse-Matrix des Potentials entlang der periodischen Lösung.

Sei $\mathbf{X}(t)$ die Lösungsmatrix des linearisierten Systems in deren Spalten $2d$ linear unabhängige Lösungen stehen: $\mathbf{X}(t)$ erfüllt also

$$\frac{d}{dt}\mathbf{X}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}} & \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{p}} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{q}} & \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{p}} \end{pmatrix} \mathbf{X}(t).$$

Mit Hilfe des Satzes von Floquet kann die Matrix $\mathbf{X}(t)$ stets in folgender Form geschrieben werden [72, 73]:

$$\mathbf{X}(t) = \mathbf{F}(t)e^{t\mathbf{K}}; \quad \mathbf{F}(t) = \mathbf{F}(t + T). \quad (\text{C.3})$$

$\mathbf{F}(t)$ und \mathbf{K} sind $2d \times 2d$ Matrizen, \mathbf{K} ist konstant und $\mathbf{F}(t)$ periodisch mit der Periode T . Speziell für $t = 0$ ist $\mathbf{F}(0) = \mathbf{X}(0) = \mathbf{I}$.

Die sogenannte Monodromie-Matrix \mathbf{M} entspricht gerade der Lösungsmatrix $\mathbf{X}(t)$ nach einer Periode, also

$$\mathbf{M} := \mathbf{X}(T) = \mathbf{F}(T)e^{T\mathbf{K}} = e^{T\mathbf{K}}. \quad (\text{C.4})$$

Die Eigenwerte von \mathbf{M} werden wegen diesem Zusammenhang auch oft als Floquet-Vielfache bezeichnet.

\mathbf{M} ist für ein Hamiltonsches System symplektisch (siehe Anhang B). Deswegen gilt: Die Eigenwerte von \mathbf{M} eines Hamiltonschen Systems liegen symmetrisch zur reellen Achse und zum Einheitskreis der komplexen Ebene [12]. Falls also λ Eigenwert von \mathbf{M} ist, dann auch $1/\lambda$. Ist λ komplex, dann sind auch λ^* und $1/\lambda^*$ Eigenwerte. Das bedeutet

$\det M = 1$. Dies ist klar, denn eine symplektische Matrix stellt eine lineare kanonische Transformation dar, die das Phasenraumvolumen erhält (Satz von Liouville).

Der Orbit ist stabil, falls der Betrag aller Eigenwerte kleiner als 1 ist und unstabil, falls mindestens ein Eigenwert einen Betrag größer 1 besitzt. Für eine ausführliche Diskussion speziell in diesem Kontext verweisen wir auf [72, 8, 7].

In einem konservativen System gibt es immer ein Paar von Eigenwerten 1. Sie bilden einen parabolischen Block in der Monodromiematrix: Eine anfängliche Störung entlang des periodischen Orbits bleibt nach einer Periode unverändert. Die Richtung des Phasenflusses ist also ein Eigenvektor zum Eigenwert 1. Verlässt die anfängliche Störung die Hyperebene, die durch konstante Energie festgelegt ist, dann bleibt die Projektion senkrecht auf die Hyperfläche nach einer Periode ebenfalls invariant, weil sich die Energien beider Trajektorien nicht verändern. Die Eigenvektoren zu zwei trivialen Eigenwerten entsprechen somit Variationen in der Zeit und der Energie [7, 62]. Sie tragen nicht zur Information über die Stabilität des Orbits bei. Dies gilt auch für weitere parabolische Blöcke, die im Allgemeinen durch kontinuierliche Symmetrien oder Bifurkationen hervorgerufen werden [25]. Triviale Eigenwerte 1 treten in Hamiltonschen Systemen stets paarweise auf, weil die Dimension des Phasenraums gerade ist und alle anderen Eigenwerte stets Zweier- oder Vierer-Gruppen bilden.

In lokalen Koordinaten des periodischen Orbits lässt sich die Monodromiematrix um die trivialen Eigenwerte der Zeit- und Energievariation leicht reduzieren. Eine entsprechende Basis geben Eckardt und Wintgen in [62].

Ordnen wir eine Basis aus Eigenvektoren von M so an, dass $2k$ Eigenvektoren zu trivialen Eigenwerten am Ende stehen, dann erhalten wir durch Streichen der zugehörigen letzten Zeilen und Spalten von M die sogenannte reduzierte Monodromiematrix \tilde{M} . Sie wird meist Stabilitätsmatrix genannt, denn Ihre Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_{2(d-k)}$ bestimmen die Stabilität des Orbits.

Anhang D

Berechnung exakter Zustandsdichten

D.1 Allgemeine Vorgehensweise

Sei ein Hamilton-Operator \hat{H} mit diskreten und positiven Eigenenergien E_n gegeben. Die Zustandssumme $Z(\beta)$ ist definiert durch

$$Z(\beta) = \text{Tr} \exp(-\beta\hat{H}) = \sum_n \exp(-\beta E_n).$$

Sie ist offensichtlich die Laplace-Transformierte $\mathcal{L}_\beta[g(E)]$ der Zustandsdichte $g(E)$ mit

$$g(E) = \sum_n \delta(E - E_n),$$

denn es gilt

$$\mathcal{L}_\beta[g(E)] = \int_0^\infty \sum_n \delta(E - E_n) \exp(-\beta E) \, dE = Z(\beta).$$

Die Zustandsdichte lässt sich damit durch inverse Laplace-Transformation der Zustandssumme berechnen. Eine Zusammenfassung über die Durchführung der inversen Transformation findet sich in Anhang E.2. Wir wollen im Folgenden diese Beziehung ausnutzen, um für gegebene Zustandssummen die (exakten) Zustandsdichten auszurechnen. Dies ermöglicht einen Vergleich mit den semiklassischen Resultaten dieser Arbeit.

D.2 Der zweidimensionale harmonische Oszillator

Der Hamilton-Operator des zweidimensionalen Oszillators lautet

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}_1^2 + \omega_1^2 \hat{q}_1^2) + \frac{1}{2} (\hat{p}_2^2 + \omega_2^2 \hat{q}_2^2)$$

und die Energieeigenwerte sind

$$E_{n_1, n_2} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right), \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}_0.$$

Die Zustandssumme lautet deshalb

$$\begin{aligned}
 Z(\beta) &= \text{Tr} \left(\exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right) \\
 &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \exp \left(-\beta \hbar \frac{\omega_1}{2} \right) \exp \left(-\beta \hbar \omega_1 n_1 \right) \exp \left(-\beta \hbar \frac{\omega_2}{2} \right) \exp \left(-\beta \hbar \omega_2 n_2 \right) \\
 &= \frac{\exp \left(-\frac{\beta \hbar \omega_1}{2} \right)}{1 - \exp \left(-\beta \hbar \omega_1 \right)} \frac{\exp \left(-\frac{\beta \hbar \omega_2}{2} \right)}{1 - \exp \left(-\beta \hbar \omega_2 \right)} = \frac{1}{2 \sinh \left(\frac{\beta \hbar \omega_1}{2} \right)} \frac{1}{2 \sinh \left(\frac{\beta \hbar \omega_2}{2} \right)} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\frac{\beta \hbar \omega_1}{2} - m \pi i} \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\frac{\beta \hbar \omega_2}{2} - n \pi i} \\
 &= \frac{1}{\hbar \omega_1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\beta - \frac{2m\pi i}{\hbar \omega_1}} \frac{1}{\hbar \omega_2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\beta - \frac{2n\pi i}{\hbar \omega_2}}. \tag{D.1}
 \end{aligned}$$

Aus dieser Form lassen sich die Pole von $Z(\beta)$ und damit von $Z(\beta) \exp(\beta E)$ direkt ablesen. Ein zweifacher Pol ergibt sich stets für $\beta = 0$ und $m, n = 0$. Je nachdem, ob die Frequenzen ω_1 und ω_2 irrationales oder rationales Verhältnis aufweisen, existieren neben den Polen einfacher Ordnung weitere Pole zweifacher Ordnung. Wir betrachten deswegen diese Fälle getrennt.

D.2.1 Irrationales Frequenzverhältnis

Für inkommensurable Frequenzen besitzt (D.1) außer dem Pol $\beta^{(2)} = 0$ keine weiteren Pole zweiter Ordnung. Das Residuum dieses Pols berechnen wir mit der Formel (E.1):

$$\begin{aligned}
 \text{Res} \left(Z(\beta) \exp(\beta E), 0 \right) &= \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\beta^2 Z(\beta) \exp(\beta E) \right) \\
 &= \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{\exp(\beta E)}{\hbar \omega_1 \hbar \omega_2} \left[1 + \sum_{\substack{m, n = -\infty \\ (m, n) \neq (0, 0)}}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} \beta^2}{\left(\beta - \frac{2m\pi i}{\hbar \omega_1} \right) \left(\beta - \frac{2n\pi i}{\hbar \omega_2} \right)} \right] \right) \\
 &= \frac{E}{\hbar \omega_1 \hbar \omega_2}
 \end{aligned}$$

Diesen zu \hbar^{-2} proportionalen und stetigen Beitrag des doppelten Poles bezeichnen wir mit $\bar{g}(E)$. Er entspricht dem klassischen Anteil der Zustandsdichte.

Einfache Pole erhalten wir aus dem ersten Summanden von (D.1) für

$$\beta_1^{(1)}(\tilde{m}) = \frac{2\tilde{m}\pi i}{\hbar \omega_1}, \quad \tilde{m} \in \mathbb{Z} \setminus \{0\},$$

und aus dem zweiten Summanden für

$$\beta_2^{(1)}(\tilde{n}) = \frac{2\tilde{n}\pi i}{\hbar \omega_2}, \quad \tilde{n} \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}.$$

Das Residuum von $\beta_1^{(1)}(\tilde{m})$ lautet

$$\begin{aligned} & \lim_{\beta \rightarrow \beta_1^{(1)}(\tilde{m})} \left(\frac{\exp(\beta E)}{\hbar\omega_1 \hbar\omega_2} \left[\sum_{\substack{m,n=-\infty \\ m \neq \tilde{m}}}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} (\beta - \beta_1^{(1)}(\tilde{m}))}{\left(\beta - \frac{2m\pi i}{\hbar\omega_1}\right) \left(\beta - \frac{2n\pi i}{\hbar\omega_2}\right)} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{m}+n}}{\left(\beta - \frac{2n\pi i}{\hbar\omega_2}\right)} \right] \right) \\ &= \frac{\exp\left(\frac{2\tilde{m}\pi i}{\hbar\omega_1} E\right)}{\hbar\omega_1 \hbar\omega_2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{m}+n}}{\frac{2\pi i}{\hbar} \left(\frac{\tilde{m}}{\omega_1} - \frac{n}{\omega_2}\right)} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega_1} \frac{(-1)^{\tilde{m}}}{\sin(\tilde{m}\pi\omega_2/\omega_1)} \frac{1}{2i} \exp\left(\frac{2\tilde{m}\pi i}{\hbar\omega_1} E\right). \end{aligned}$$

Von der vorletzten zur letzten Zeile wurde die Beziehung

$$\frac{\pi x}{\sin(\pi xy)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\left(y - \frac{n}{x}\right)} \quad (\text{D.2})$$

verwendet. Nun summieren wir über alle Residuen auf und erhalten einen Beitrag, der mit $g_1^{(1)}(E)$ bezeichnet werden soll.

$$\begin{aligned} \delta g_1^{(1)}(E) &= \sum_{\substack{\tilde{m}=-\infty \\ \tilde{m} \neq 0}}^{\infty} \frac{1}{\hbar\omega_1} \frac{(-1)^{\tilde{m}}}{\sin(\tilde{m}\pi\omega_2/\omega_1)} \frac{1}{2i} \exp\left(\frac{2\tilde{m}\pi i}{\hbar\omega_1} E\right) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega_1} \sum_{\tilde{m}=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{m}}}{\sin(\tilde{m}\pi\omega_2/\omega_1)} \sin\left(\tilde{m} \frac{2\pi E}{\hbar\omega_1}\right). \end{aligned}$$

Die Rechnung für die Residuen der Pole $\beta_2^{(1)}(\tilde{n})$ verläuft analog, wir erhalten

$$g_2^{(1)}(E) = \frac{1}{\hbar\omega_2} \sum_{\tilde{n}=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{n}}}{\sin(\tilde{n}\pi\omega_1/\omega_2)} \sin\left(\tilde{n} \frac{2\pi E}{\hbar\omega_2}\right).$$

Die Zustandsdichte lautet insgesamt also

$$\begin{aligned} g(E) &= \bar{g}(E) + g_1^{(1)}(E) + g_2^{(1)}(E) \\ &= \frac{E}{\hbar^2\omega_1\omega_2} + \frac{1}{\hbar\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\omega_2/\omega_1)} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar\omega_1}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\omega_2} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\omega_1/\omega_2)} \sin\left(r \frac{2\pi E}{\hbar\omega_2}\right). \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

D.2.2 Rationales Frequenzverhältnis

Für kommensurable Frequenzen setzen wir $\omega_i = \omega/\rho_i$, ($i = 1, 2$) mit zwei natürlichen und teilerfremden Zahlen ρ_1 und ρ_2 .

Betrachten wir zunächst die Pole $\beta^{(2)}(\tilde{m}, \tilde{n})$ von (D.1) mit zweifacher Ordnung. Sie ergeben sich für Summanden mit $m = \tilde{m}$ und $n = \tilde{n}$, für die gilt:

$$\frac{2\tilde{m}\pi\rho_1}{\hbar\omega} = \beta^{(2)}(\tilde{m}, \tilde{n}) = \frac{2\tilde{n}\pi\rho_2}{\hbar\omega}, \quad (\text{D.4})$$

also für

$$\tilde{m}\rho_1 = \tilde{n}\rho_2. \quad (\text{D.5})$$

Gemäß (E.1) betrachten wir

$$\begin{aligned} \left(\beta - \beta^{(2)}(\tilde{m}, \tilde{n})\right)^2 \exp(\beta E) Z(\beta) &= \exp(\beta E) \frac{\rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} \left(\beta - \frac{2\tilde{m}\pi\rho_1}{\hbar\omega}\right) \left(\beta - \frac{2\tilde{n}\pi\rho_2}{\hbar\omega}\right)}{\left(\beta - \frac{2m\pi\rho_1}{\hbar\omega}\right) \left(\beta - \frac{2n\pi\rho_2}{\hbar\omega}\right)} \\ &= (*) \end{aligned}$$

und setzen abkürzend $f(\beta, x) = \beta - 2x\pi/(\hbar\omega)$. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} (*) &= \exp(\beta E) \frac{\rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \left(\sum_{\substack{m,n=-\infty \\ (m,n) \neq (\tilde{m}, \tilde{n})}}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} f(\beta, \tilde{m}\rho_1) f(\beta, \tilde{n}\rho_2)}{f(\beta, m\rho_1) f(\beta, n\rho_2)} + (-1)^{\tilde{m}+\tilde{n}} \right) \\ &= \exp(\beta E) \frac{\rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \\ &\quad \times \left(\sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq \tilde{n}}}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{m}+n} f(\beta, \tilde{n}\rho_2)}{f(\beta, n\rho_2)} + \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq \tilde{m}}}^{\infty} \frac{(-1)^{m+\tilde{n}} f(\beta, \tilde{m}\rho_1)}{f(\beta, m\rho_1)} + (-1)^{\tilde{m}+\tilde{n}} \right). \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Das Residuum von $\beta^{(2)}(\tilde{m}, \tilde{n})$ berechnet sich aus der Ableitung nach β an der Stelle $\beta^{(2)}(\tilde{m}, \tilde{n})$. Dabei verschwinden die ersten beiden Summen in der letzten Zeile von (D.6) und wir erhalten

$$\text{Res} \left(Z(\beta) \exp(\beta E), \beta^{(2)}(\tilde{m}, \tilde{n}) \right) = \frac{E\rho_1\rho_2}{\hbar^2\omega^2} \exp \left(\pi i \tilde{m} \frac{E\rho_1}{\hbar\omega} + \pi i \tilde{m} \right) \exp \left(\pi i \tilde{n} \frac{E\rho_2}{\hbar\omega} + \pi i \tilde{n} \right). \quad (\text{D.7})$$

Nun können wir alle Residuen von Polen zweiter Ordnung aufsummieren. Die Bedingung (D.5) für einen zweifachen Pol bedeutet

$$\frac{\tilde{m}}{\rho_2} = \frac{\tilde{n}}{\rho_1} = k \Rightarrow (\tilde{m}, \tilde{n}) = (\rho_2 k, \rho_1 k), \quad \text{für } k \in \mathbb{Z},$$

und die Summation von (D.7) über alle k liefert für den zu \hbar^{-2} proportionalen Teil der

Zustandsdichte

$$\begin{aligned}
 g^{(2)}(E) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \operatorname{Res} \left(Z(\beta) \exp(\beta E), \beta^{(2)}(\rho_2 k, \rho_1 k) \right) \\
 &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{E \rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \exp \left(2\pi i k \frac{E \rho_1 \rho_2}{\hbar \omega} \right) \exp(\pi i k (\rho_2 + \rho_1)) \\
 &= \frac{E \rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \left[1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^{r(\rho_1 + \rho_2)} \cos \left(2\pi r \frac{E \rho_1 \rho_2}{\hbar \omega} \right) \right] \\
 &=: \bar{g}(E) + \delta g^{(2)}(E).
 \end{aligned} \tag{D.8}$$

Der erste Summand der vorletzten Zeile ist ein stetiger, linearer Anteil, den wir mit $\bar{g}(E)$ bezeichnen. Dieser Beitrag entspricht der klassischen Zustandsdichte. Der zweite Summand ist oszillatorisch und wird im Folgenden $\delta g^{(2)}(E)$ genannt.

Betrachten wir nun die einfachen Pole von (D.1). Sie liegen für die erste Summe bei

$$\beta_1^{(1)}(\tilde{m}) = \frac{2\tilde{m}\pi i \rho_1}{\hbar \omega}, \quad \tilde{m} \notin \frac{\rho_2}{\rho_1} \mathbb{Z} \tag{D.9}$$

und für die zweite Summe bei

$$\beta_2^{(1)}(\tilde{n}) = \frac{2\tilde{n}\pi i \rho_2}{\hbar \omega}, \quad \tilde{n} \notin \frac{\rho_1}{\rho_2} \mathbb{Z}. \tag{D.10}$$

Die Residuen für die einfachen Pole (D.9) sind dann

$$\begin{aligned}
 &\operatorname{Res} \left(\exp(\beta E) Z(\beta), \beta_1^{(1)}(\tilde{m}) \right) = \\
 &= \lim_{\beta \rightarrow \beta_1^{(1)}(\tilde{m})} \left[\exp(\beta E) \frac{\rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^m (\beta - \beta_1^{(1)}(\tilde{m}))}{\beta - \frac{2m\pi i \rho_1}{\hbar \omega}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\beta - \frac{2n\pi i \rho_2}{\hbar \omega}} \right] \\
 &= \exp \left(\frac{2\tilde{m}\pi i \rho_1}{\hbar \omega} E \right) \frac{\rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} (-1)^{\tilde{m}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(\tilde{m}\rho_1 - n\rho_2) \frac{2\pi i}{\hbar \omega}} \\
 &= \exp \left(\frac{2\tilde{m}\pi i \rho_1}{\hbar \omega} E \right) \frac{\rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} (-1)^{\tilde{m}} \frac{\hbar \omega}{2i} \frac{1}{\rho_2 \sin \left(\tilde{m}\pi \frac{\rho_1}{\rho_2} \right)}.
 \end{aligned} \tag{D.11}$$

Von der vorletzten zur letzten Zeile wurde wieder die Beziehung (D.2) benutzt.

Die Summation über die Residuen aller Pole (D.9) liefert nun einen zu \hbar^{-1} propor-

tionalen Beitrag zur Zustandsdichte:

$$\begin{aligned}
 g_1^{(1)}(E) &= \sum_{\substack{\tilde{m}=-\infty \\ \tilde{m} \neq \frac{\rho_2}{\rho_1} \mathbb{Z}}}^{\infty} \operatorname{Res} \left(\exp(\beta E) Z(\beta), \beta_1^{(1)}(\tilde{m}) \right) = \sum_{\substack{\tilde{m}=-\infty \\ \tilde{m} \neq \rho_2 \mathbb{Z}}}^{\infty} \operatorname{Res} \left(\exp(\beta E) Z(\beta), \beta_1^{(1)}(\tilde{m}) \right) \\
 &= \frac{\rho_1}{\hbar \omega} \sum_{\substack{\tilde{m}=-\infty \\ \tilde{m} \neq \rho_2 \mathbb{Z}}}^{\infty} \frac{(-1)^{\tilde{m}} \exp \left(2\tilde{m} \pi i \frac{E \rho_1}{\hbar \omega} \right)}{2i \sin \left(\tilde{m} \pi \frac{\rho_1}{\rho_2} \right)} \\
 &= \frac{\rho_1}{\hbar \omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_2 \mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin \left(r \pi \frac{\rho_1}{\rho_2} \right)} \sin \left(r \rho_1 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right). \tag{D.12}
 \end{aligned}$$

Eine analoge Rechnung für die Pole (D.10) ergibt einen Beitrag

$$g_2^{(1)}(E) = \frac{\rho_2}{\hbar \omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_1 \mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin \left(r \pi \frac{\rho_2}{\rho_1} \right)} \sin \left(r \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right). \tag{D.13}$$

Insgesamt haben wir für die Zustandsdichte gefunden:

$$\begin{aligned}
 g(E) &= g_1^{(1)}(E) + g_2^{(1)}(E) + g^{(2)}(E) \\
 &= \frac{\rho_1}{\hbar \omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_2 \mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin \left(r \pi \frac{\rho_1}{\rho_2} \right)} \sin \left(r \rho_1 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right) \\
 &\quad + \frac{\rho_2}{\hbar \omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \rho_1 \mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin \left(r \pi \frac{\rho_2}{\rho_1} \right)} \sin \left(r \rho_2 \frac{2\pi E}{\hbar \omega} \right) \\
 &\quad + \frac{E \rho_1 \rho_2}{\hbar^2 \omega^2} \left[1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^{r(\rho_1 + \rho_2)} \cos \left(2\pi r \frac{E \rho_1 \rho_2}{\hbar \omega} \right) \right]. \tag{D.14}
 \end{aligned}$$

Der stetige Anteil $E \rho_1 \rho_2 / (\hbar^2 \omega^2)$ ist der Thomas–Fermi–Beitrag $\bar{g}(E)$, während des Rest dem unstetigen, oszillierenden Beitrag entspricht, den wir mit $\delta g(E)$ bezeichnen.

D.3 Der zweidimensionale harmonische Halboszillator

Die Berechnung der Zustandsdichte für den Halboszillator mit einer Wand bei $q_1 = 0$ im Orstraum verläuft ganz analog zu der des vollen Oszillators. Wir gehen von den Eigenwerten

$$E_{n_1, n_2} = \hbar \omega_1 \left(2n_1 + \frac{3}{2} \right) + \hbar \omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right), \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}_0$$

des Hamilton–Operators aus. Die Zustandssumme lautet

$$Z(\beta) = \frac{\exp(-\beta \hbar \omega_1 / 2)}{2 \hbar \omega_1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\beta - \frac{m \pi i}{\hbar \omega_1}} \frac{1}{\hbar \omega_2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\beta - \frac{n \pi i}{\hbar \omega_2}} \tag{D.15}$$

Für den inkommensurablen Fall besitzt $Z(\beta) \exp(\beta E)$ einen doppelten Pol bei $\beta^{(2)} = 0$ und sonst nur einfache Pole bei $\beta_1^{(1)} = \tilde{m}\pi i/\hbar\omega_1$, $\tilde{m} \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$, bzw. bei $\beta_2^{(1)} = 2\tilde{n}\pi i/\hbar\omega_2$, $\tilde{n} \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$. Aus der Summe der Residuen lässt sich folgende Zustandsdichte berechnen

$$g(E) = \left(\frac{E}{2\hbar^2\omega_1\omega_2} - \frac{1}{4\hbar\omega_2} \right) + \frac{1}{2\hbar\omega_1} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\omega_2/2\omega_1)} \sin \left(r\pi \left(\frac{E}{\hbar\omega_1} - \frac{1}{2} \right) \right) + \frac{1}{\hbar\omega_2} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r2\pi\omega_1/\omega_2)} \sin \left(r\pi \left(\frac{2E}{\hbar\omega_2} - \frac{\omega_1}{\omega_2} \right) \right). \quad (\text{D.16})$$

Für den kommensurablen Fall mit $\omega_i = \omega/\rho_i$ entstehen zusätzliche doppelte Pole, wenn die Summationsindices m und n in (D.15) die Bedingung $(m, n) = (\tilde{m}, \tilde{n})$ mit $\tilde{m}\rho_1 = 2\tilde{n}\rho_2$ erfüllen. Einfache Pole entstehen bei

$$\beta_1^{(1)} = \frac{\tilde{m}\pi i\rho_1}{\hbar\omega}, \quad \text{für } \tilde{m} \in \mathbb{Z} \setminus \frac{2\rho_2}{\rho_1}\mathbb{Z}$$

und bei

$$\beta_2^{(1)} = \frac{2\tilde{n}\pi i\rho_2}{\hbar\omega}, \quad \text{für } \tilde{n} \in \mathbb{Z} \setminus \frac{\rho_1}{2\rho_2}\mathbb{Z}.$$

Summation aller Residuen ergibt die Zustandsdichte für den kommensurablen Halboszillator:

$$g(E) = \left(\frac{E\rho_1\rho_2}{2\hbar^2\omega^2} - \frac{\rho_2}{4\hbar\omega} \right) \left(1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} \cos \left(r\pi \left[\frac{3E\rho_1\rho_2}{\hbar\omega} + \frac{2\rho_1 + \rho_2}{2} \right] \right) \right) + \frac{\rho_1}{2\hbar\omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \frac{2\rho_2}{\rho_1}\mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r\pi\rho_1/2\rho_2)} \sin \left(r\pi \left(\frac{E\rho_1}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \right) + \frac{\rho_2}{\hbar\omega} \sum_{\substack{r=1 \\ r \notin \frac{\rho_1}{2\rho_2}\mathbb{N}}}^{\infty} \frac{(-1)^r}{\sin(r2\pi\rho_2/\rho_1)} \sin \left(r\pi \left(\frac{2E\rho_2}{\hbar\omega} - \frac{\rho_2}{\rho_1} \right) \right).$$

Anhang E

Verschiedenes

E.1 Methode der stationären Phase

Wir betrachten ein Integral I zweier Funktionen $A(\mathbf{q})$ und $\Phi(\mathbf{q}) \in \mathbb{R}$ der Form

$$I = \int_{\mathbb{R}^d} A(\mathbf{q}) \exp(is\Phi(\mathbf{q})) \, d^d q$$

mit einem großen reellen Parameter s . Speziell im Zusammenhang der Semiklassik gilt meist $s = 1/\hbar$ und diese Voraussetzung ist erfüllt. Die Phase des Integranden oszilliert deshalb stark und die Amplitudenfunktion $A(\mathbf{q})$ verändere sich im Vergleich dazu nur langsam. Dann liefern die Punkte $\mathbf{q}_{(j)}$ den dominanten Beitrag zum Wert des Integrals, an denen die Phase stationär wird:

$$\left. \frac{\partial \Phi(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{q}_{(j)}} = 0.$$

Wir entwickeln nun die Phase $\Phi(\mathbf{q})$ an den Punkten $\mathbf{q}_{(j)}$ bis zur zweiten Ordnung. Die symmetrische Hesse-Matrix D der zweiten Ableitung lautet

$$D(\mathbf{q}) = \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}}$$

und wir fordern, dass ihre Determinante an den stationären Punkten nicht verschwindet. Nehmen wir nun an, die Amplitude $A(\mathbf{q})$ variiert an den Punkten $\mathbf{q}_{(j)}$ nur langsam im Vergleich zur Exponentialfunktion, dann erhalten wir folgende Näherung für das Integral

$$I \approx \sum_j A(\mathbf{q}_{(j)}) \exp(is\Phi(\mathbf{q}_{(j)})) \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(is \frac{\mathbf{q} \cdot D(\mathbf{q}_{(j)}) \mathbf{q}}{2}\right) \, d^d q.$$

Nach einer Basistransformation $\mathbf{q} \rightarrow \tilde{\mathbf{q}}$, die die Matrix D in Diagonalform $\text{diag}(D_1, \dots, D_d)$ überführt, bleiben d eindimensionale Fresnel-Integrale über:

$$\int_{\mathbb{R}} \exp\left(is \frac{D_i \tilde{q}^2}{2}\right) \, d\tilde{q} = \sqrt{\frac{2\pi}{|sD_i|}} \exp\left(i \frac{\pi}{4} \text{sign}(sD_i)\right), \quad D_i \in \mathbb{R}, \quad i = 1, \dots, d.$$

Das Integral I lautet für $s > 0$ somit

$$I \approx \sum_j A(\mathbf{q}_{(j)}) \sqrt{\frac{(2\pi i/s)^d}{|\det D(\mathbf{q}_{(j)})|}} \exp\left(is\Phi(\mathbf{q}_{(j)}) - im_j \frac{\pi}{2}\right).$$

Die ganze Zahl m_j zählt hierbei die negativen Eigenwerte von $D(\mathbf{q}_{(j)})$.

E.2 Inverse Laplace–Transformation

Die inverse Laplace–Transformation lässt sich mit Hilfe der komplexen Inversionsformel ausführen [74]:

$$g(E) = \mathcal{L}_E^{-1}[Z(\beta)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} Z(\beta) \exp(\beta E) d\beta, \quad E > 0.$$

Dabei ist $\beta = x + iy \in \mathbb{C}$. Der Integrationsweg verläuft parallel zur imaginären Achse und ist um $\epsilon > a > 0$ in die reelle Halbebene verschoben. a ist durch den Konvergenzbereich der Laplace–Transformierten festgelegt, und zwar so, dass $g(E)$ für $E \rightarrow \infty$ nicht stärker als $\exp(aE)$ gegen unendlich strebt. Praktisch lässt sich das Integral leicht mit Hilfe des Residuensatzes auswerten: Wir wählen ϵ hinreichend groß, so dass alle Singularitäten des Integranden „links“ vom Integrationsweg liegen. Der Integrationsweg wird im Unendlichen durch einen Halbkreis in der negativen reellen Halbebene zur sogenannten „Bromwich–Kurve“ C geschlossen, so dass alle Singularitäten innerhalb dieser Kurve liegen. Voraussetzung dafür ist, dass das Integral entlang des Halbkreises im Unendlichen verschwindet. Der Wert des Integrals ist dann durch die Summe der Residuen der Pole β_k des Integranden $Z(\beta) \exp(\beta E)$ gegeben:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C Z(\beta) \exp(\beta E) d\beta = \sum_k \text{Res}(Z(\beta) \exp(\beta E), \beta_k), \quad E > 0.$$

Das Residuum eines Poles β_k von n -ter Ordnung berechnet sich dabei mit der Formel [74]

$$\text{Res}(Z(\beta) \exp(\beta E), \beta_k) = \lim_{\beta \rightarrow \beta_k} \left[\frac{1}{(n-1)!} \frac{\partial^{n-1}}{\partial \beta^{n-1}} ((\beta - \beta_k)^n Z(\beta) \exp(\beta E)) \right]. \quad (\text{E.1})$$

E.3 Fourier–Darstellung eines δ -Kamms

Mit einem δ -Kamm ist im Folgenden eine Funktion $f(x)$ einer reellen Variablen x gemeint, die sich aus der periodischen Fortsetzung der Dirac’schen Delta–Funktion $\delta(x)$ mit der Periode 1 ergibt:

$$f(x) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} \delta(x - r).$$

Wir interessieren uns für die Fourier–Darstellung dieser periodischen Funktion und betrachten deshalb den Ansatz

$$f(x) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} c_r \exp(2\pi i r x).$$

Die Fourier–Koeffizienten c_r sind gegeben durch

$$c_r = \int_0^1 \exp(-2\pi i r x) (\delta(x) + \delta(x - 1)) dx.$$

Die Integrationsgrenzen liegen jeweils genau auf den Delta-Funktionen, so dass diese jeweils nur zur Hälfte beitragen. Somit ist

$$c_r = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{r=-\infty}^{\infty} \delta(x - r) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i r x).$$

Literaturverzeichnis

- [1] A. EINSTEIN, *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19**, 82 (1917).
- [2] M. C. GUTZWILLER, *Quantum Chaos*, Scientific American **1**, 78 (1992).
- [3] M. C. GUTZWILLER, *Phase-Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom*, J. Math. Phys. **8**, 1979 (1967).
- [4] M. C. GUTZWILLER, *Phase-Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom. II*, J. Math. Phys. **10**, 1004 (1969).
- [5] M. C. GUTZWILLER, *Energy Spectrum According to Classical Mechanics*, J. Math. Phys. **11**, 1791 (1970).
- [6] M. C. GUTZWILLER, *Periodic Orbits and Classical Quantization Conditions*, J. Math. Phys. **12**, 343 (1971).
- [7] M. C. GUTZWILLER, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Interdisciplinary Applied Mathematics, Springer, New York (1990).
- [8] M. BRACK and R. K. BHADURI, *Semiclassical physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1997).
- [9] P. CVITANOVIĆ, R. ARTUSO, et al., *Classical and Quantum Chaos: A cyclist treatise*, URL <http://www.nbi.dk/ChaosBook/> (2003).
- [10] M. S. MARINOV, *Path Integrals in Quantum Theory: An Outlook of the Basic Concepts*, Phys. Rep. **60**, 1 (1980).
- [11] M. BRACK and S. R. JAIN, *Analytical tests of Gutzwiller's trace formula for harmonic-oscillator potentials*, Phys. Rev. A **51**, 3462 (1995).
- [12] V. I. ARNOLD, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Graduate Texts in Mathematics, Springer, New York (1989).
- [13] S. C. CREAGH, J. M. ROBBINS, and R. G. LITTLEJOHN, *Geometrical properties of Maslov indices in the semiclassical trace formula for the density of states*, Phys. Rev. A **42**, 1907 (1990).
- [14] J. M. ROBBINS, *Maslov indices in the Gutzwiller trace formula*, Nonlin. **4**, 343 (1991).
- [15] M. PLETYUKHOV and M. BRACK, *On the canonically invariant calculation of Maslov indices*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 9449 (2003).

- [16] M. ABRAMOWITZ and I. A. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau Of Standards, Washington (1972).
- [17] M. V. BERRY and M. TABOR, *Closed orbits and regular bound spectrum*, Proc. R. Soc. London Ser. A **349** (1976).
- [18] M. V. BERRY and M. TABOR, *Calculating bound spectrum by path summation in action-angle variable*, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 371 (1977).
- [19] S. C. CREAGH and R. G. LITTLEJOHN, *Semiclassical trace formulas in presents of continuous symmetries*, Phys. Rev. A **44**, 836 (1991).
- [20] E. FICK, *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*, AULA-Verlag, Wiesbaden (1988).
- [21] M. CHAICHIAN and R. HAGEDORN, *Symmetries in Quantum Mechanics*, Graduate Student Series in Physics, IOP Publishing Ltd, Bristol (1998).
- [22] M. TINKHAM, *Group Theory and Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1964).
- [23] M. HAMERMESH, *Group Theory and its Applications to Physical Problems*, Dover Publications, New York (1989).
- [24] S. C. CREAGH and R. G. LITTLEJOHN, *Semiclassical trace formula for systems with non-Abelian symmetry*, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 1643 (1992).
- [25] P. MURATORE-GINANNESCHI, *Path integration over closed loops and Gutzwiller's trace formula*, Phys. Rep. **383**, 299 (2003).
- [26] J. E. MARSDEN and R. ABRAHAM, *Foundations of mechanics*, Benjamin/Cummings, London (1981).
- [27] S. C. CREAGH, *Trace Formula for Broken Symmetry*, Ann. Phys. **248**, 60 (1996).
- [28] S. M. REIMANN, M. BRACK, A. G. MAGNER, J. BLASCHKE, and M. V. N. MURTHY, *Circular quantum billiards with a singular magnetic flux line*, Phys. Rev. A **53**, 39 (1996).
- [29] J. M. ROBBINS, *Discrete symmetries in periodic-orbit theory*, Phys. Rev. A **40**, 2128 (1989).
- [30] B. LAURITZEN, *Discrete symmetries and the periodic-orbit expansions*, Phys. Rev. A **43**, 603 (1991).
- [31] T. H. SELIGMAN and H. A. WEIDENMÜLLER, *Semi-classical periodic-orbit theory for chaotic Hamiltonians with discrete symmetries*, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 7915 (1994).
- [32] J. J. SAKURAI, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1985).

-
- [33] S. C. CREAGH, *Semiclassical mechanics of symmetry reduction*, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 95 (1993).
- [34] C. S. BOHUN, R. ILLNER, and P. F. ZWEIFEL, *Some remarks on the Wigner transformation and the Wigner-Poisson system*, Le Matematiche **XLVI**, 429 (1991).
- [35] N. D. WHELAN, *Symmetry decomposition of potentials with channels*, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 533 (1996).
- [36] E. P. WIGNER, *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [37] K. MEYBERG and P. VACHENAUER, *Höhere Mathematik 2*, Springer, Berlin (1999).
- [38] M. KAC, *Can you hear the shape of a drum?*, Amer. Math. Monthly **73**, 1 (1966).
- [39] H. P. MCKEAN and I. M. SINGER, *Curvature and the eigenvalues of the Laplacian*, J. Differential Geometry **1**, 43 (1967).
- [40] K. STEWARTSON and R. T. WAECHTER, *On hearing the shape of a drum: further results*, Proc. Camb. Phil. Soc. **69**, 353 (1971).
- [41] G. ROSENSTEEL and J. P. DRAAYER, *Symmetry algebra of the anisotropic harmonic oscillator with commensurate frequencies*, J. Phys. A: Math. Gen. **22**, 1323 (1989).
- [42] H. GROSSE, S. PALLUA, P. PRESTER, and E. RASCHHOFER, *On a Quantum Group invariant spin chain with nonlocal boundary-conditions*, J. Phys. A **27**, 4761 (1994).
- [43] M. R. UBRIACO, *Anyonic behavior of quantum group gases*, Phys. Rev. E **55**, 291 (1997).
- [44] M. CHAICHIAN, D. ELLINAS, and P. KULISH, *Quantum Algebras as the dynamical symmetry of the deformed Jaynes-Cummings model*, Phys. Rev. Lett. **65**, 980 (1990).
- [45] K. P. MARZLIN, *Atom optics and quantum groups*, Int. J. Theor. Phys. **36**, 841 (1997).
- [46] D. BONATSOS and C. DASKALOYANNIS, *Quantum Groups and Their Applications in Nuclear Physics*, Prog. Part. Nucl. Phys. 537 (1999).
- [47] P. KRAMER, M. MOSHINSKY, and T. H. SELIGMAN, *Complex Extensions of Canonical Transformations and Quantum Mechanics*, in: E. LOEBL (Herausgeber), *Group Theory and its Applications*, Band III, 249, Academic Press, New York (1975).
- [48] M. WÖHLECKE, *Einführung in die Gruppentheorie mit Anwendungen*, Vorlesung an der Universität Osnabrück (1999).

- [49] R. BALIAN and C. BLOCH, *Distribution of eigenfrequencies for wave equation in a finite domain. 1. 3-dimensional problem with smooth boundary surface*, Ann. Phys. **60**, 401 (1970).
- [50] J. STEIN and H. J. STÖCKMANN, *Experimental-Determination of billiard wavefunctions*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2867 (1992).
- [51] M. SCHREIER, K. RICHTER, G.-L. INGOLD, et al., *Transport through cavities with tunnel barriers: a semiclassical analysis*, Europ. Phys. J. B **3**, 387 (1998).
- [52] H. PRIMACK and U. SMILANSKY, *The quantum three-dimensional Sinai billiard - A semiclassical analysis*, Phys. Rep. **327**, 1 (2000).
- [53] M. SIEBER, *Billiard systems in three dimensions: the boundary integral equation and the trace formula*, Nonlin. **11**, 1607 (1998).
- [54] R. SCHÄFER, U. KUHL, M. BARTH, et al., *Spectra and wavefunctions in a ray-splitting Sinai microwave billiard and their semiclassical interpretation*, Found. Phys. **31**, 475 (2001).
- [55] M. C. GUTZWILLER, *The semiclassical quantization of chaotic Hamiltonian systems*, in: M.-J. GIANNONO, A. VOROS, and J. ZINN-JUSTIN (Herausgeber), *Les Houches, Session LII, Chaos and Quantum Physics*, North-Holland, Amsterdam (1989).
- [56] A. AUERBACH and L. S. SCHULMAN, *A Path decomposition expansion proof for the method of images*, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 5993 (1997).
- [57] R. DOLL and G.-L. INGOLD, unveröffentlicht.
- [58] S. FIEDLER, *Semiklassische Beschreibung dissipativer Systeme in beschränkten Geometrien*, Diplomarbeit (1998).
- [59] M. MORSE, *Variational Analysis*, Wiley, New York (1973).
- [60] J. MILNOR, *Morse theory*, Princeton Univ. Pr., New York (1973).
- [61] V. I. ARNOLD, *Characteristic class entering in quantization conditions*, Functional Anal. Appl. **1**, 1 (1967).
- [62] B. ECKHARDT and D. WINTGEN, *Indices in classical Mechanics*, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 4335 (1991).
- [63] A. HATCHER, *Algebraic topology*, Cambridge University Press, Cambridge, URL <http://www.math.cornell.edu/~hatcher> (2002).
- [64] R. G. LITTLEJOHN, *The semiclassical evolution of wave-packets*, Phys. Rep. **138**, 193 (1986).
- [65] R. G. LITTLEJOHN and J. M. ROBBINS, *New way to compute Maslov indices*, Phys. Rev. A: Math. Gen. **36**, 2953 (1987).

- [66] R. G. LITTLEJOHN, *Cyclic Evolution in Quantum Mechanics and the Phases of Bohr–Sommerfeld and Maslov*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2159 (1988).
- [67] A. SUGITA, *Geometrical properties of Maslov indices in periodic-orbit theory*, Phys. Lett. A **266**, 321 (2000).
- [68] A. SUGITA, *Semiclassical trace formulas in terms of phase space path integrals*, Ann. Phys. **288**, 277 (2001).
- [69] J. ROBBIN and D. SALAMON, *The Maslov index for path*, Topology **32**, 827 (1993).
- [70] S. C. CREAGH, *Geometrical Structure in Semiclassical Trace Formulas*, Doktorarbeit, University of California (1991).
- [71] A. PORTALURI, *A formula for the Maslov index of linear autonomous Hamiltonian systems*, arXiv:math.DS/0405153v1 (2004).
- [72] J. GUCKENHEIMER and P. HOLMES, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems and Bifurcations of Vector Fields*, Springer, New York (1983).
- [73] V. A. YAKUBOVICH and V. M. STARZHINSKII, *Linear differential equations with periodic coefficients*, Wiley, New York (1975).
- [74] M. R. SPIEGEL, *Schaum's outline of theory and problems of Laplace transforms*, McGraw-Hill, New York (1992).

Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle ganz herzlich bei Herrn Prof. Dr. Gert-Ludwig Ingold bedanken, der das Thema dieser Arbeit gestellt und die Betreuung übernommen hat. Er hat durch seine ständige Unterstützung und seinen Einsatz diese Arbeit ermöglicht. Ich schätze seine offene und freundliche Art sehr. Mich haben sein Umgang mit der theoretischen Physik und sein Weitblick beeindruckt. Ich danke ihm für die Möglichkeit, an der Tagung der Nobelpreisträger für Physik in Lindau teilzunehmen und für meinen Aufenthalt am Institut für Physik und Chemie IPCMS-GEMME in Strasbourg. Hier gilt mein Dank auch Herrn Prof. Dr. Rudolfo Jalabert und Herrn Dr. Dietmar Weinmann.

Herrn Priv.-Doz. Dr. Karl-Heinz Höck sei sowohl für sein Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Zweitgutachtens als auch für herzliche Gespräche gedankt.

Herrn Prof. Dr. Hänggi danke ich für die Aufnahme an seinem Lehrstuhl während meiner Diplomarbeit und allen Mitarbeitern für die freundschaftliche Atmosphäre.

Ein Dank geht auch an Herrn Dr. Stephen Creagh, der mir aus Nottingham seine Doktorarbeit zukommen lies.

Zu guter Letzt danke ich allen lieben Freunden und ganz besonders meinen Eltern für die Unterstützung in meinem gesamten Studium.