

Kapitel 6

Fallstudie: Getriebener anharmonischer Oszillator

Der angetriebene *harmonische* Oszillator ist sowohl klassisch wie auch quantenmechanisch detailliert untersucht und gut verstanden. Die klassische und die quantenmechanische Dynamik stehen in direkter Korrespondenz zueinander (vgl. Abschnitt 3.1).

Im Gegensatz dazu ist der angetriebene *anharmonische* Oszillator noch in vielen Zügen unverstanden. Es existieren z.B. bis heute nur recht wenige quantenmechanische Studien. Besser verstanden ist die klassische Dynamik. Ein typisches Beispiel ist die Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}p^2 + V(q) - f(t)q \\ &= \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 q^2) + \frac{1}{4}\beta q^4 - f(t)q \end{aligned} \quad (6.1)$$

mit harmonischem Antrieb

$$f(t) = f_0 \cos \omega t. \quad (6.2)$$

Die klassische Bewegungsgleichung lautet

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q + \beta q^3 = f_0 \cos \omega t. \quad (6.3)$$

Diese Gleichung ist bekannt als die reibungsfreie Duffing-Gleichung (die von dem deutschen Ingenieur Georg Duffing¹ untersuchte Gleichung enthält zusätzlich einen Reibungsterm $2\gamma\dot{q}$). Der in dieser Gleichung auftretende quartische Term im Potential

$$V(q) = \frac{1}{2}\omega_0^2 q^2 + \frac{1}{4}\beta q^4 \quad (6.4)$$

kann verstanden werden als Beginn einer Taylor-Reihe eines allgemeinen symmetrischen Potentials. Das Potential (6.4) kann ein anharmonisches Potential mit einem Minimum

¹G. Duffing: *Erzwungene Schwingung bei veränderlicher Eigenfrequenz und ihre technische Bedeutung* (Vieweg, 1918)

darstellen (für $\omega_0^2 \geq 0$) oder ein Doppelminimum-Potential (für $\omega_0^2 < 0$). Durch den zusätzlichen linearen Term $f(t)q$ wird das Minimum (oder die Minima) zu negativen ($f(t) > 0$) oder positiven ($f(t) < 0$) q -Werten verschoben und oszilliert für den periodischen Fall (6.2) zwischen diesen Fällen hin und her.

6.1 Chaotische Dynamik

Während der Duffing-Oszillator anfangs Anharmonizitätseffekte modellierte (meist nur untersucht für relativ schwache Anharmonizität), ist er heute eines der paradigmatischen Systeme zum Studium klassisch chaotischer Dynamik und in noch jüngerer Zeit zur Untersuchung von Quantenchaos. Da hier grundsätzlich andere Phänomene auftreten als in den bisher diskutierten Systemen werden in den folgenden Abschnitten kurz die für das folgende wesentlichen Aspekte chaotischer Dynamik angesprochen.

6.1.1 Klassisches Chaos

Chaotische Dynamik in klassischen Systemen (wir beschränken uns hier auf sogenannte Hamiltonsche Systeme ohne Dissipation) ist inzwischen ein wohlverstandenes Gebiet, zu dem eine Vielzahl von Textbüchern existieren².

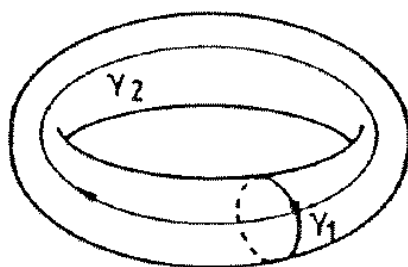


Abbildung 6.1: Invarianter 2-Torus.

Zunächst nennt man ein System mit d Freiheitsgraden \vec{q} *integrabel*, wenn d unabhängige Erhaltungsgrößen existieren, die paarweise verschwindende Poisson-Klammern haben. Unter diesen Bedingungen ist die klassische Trajektorie im $2d$ -dimensionalen Phasenraum (\vec{p}, \vec{q}) auf eine d -dimensionale Untermenge beschränkt, von der man zeigen kann, dass sie die Topologie eines d -dimensionalen Torus besitzt. Man nennt einen solchen Torus *invariant* (invariant unter der Zeitevolution). Auf einem solchen d -Torus existieren d fundamentale Zyklen γ_k mit d Frequenzen ω_k , wie illustriert in Abbildung 6.1 für $d = 2$. Wenn alle Frequenzverhältnisse ω_k/ω_j rational sind, ist jede Bahn auf diesem Torus periodisch. Der gesamte $2d$ -dimensionale Phasenraum ist mit ineinandergeschachtelten Tori

²Einen kurzen Abriß findet man in H. J. Korsch, H.-J. Jodl, T. Hartmann *Chaos on the PC*, Kap. 2.2 (Springer, 2008)

ausgefüllt, deren fundamentale Frequenzen variieren. Eine abzählbare Teilmenge dieser Tori trägt periodische Bahnen.

Sehr wichtig ist jetzt die Tatsache, dass integrable Systeme sehr(!) selten sind. Bekannte Ausnahmen sind alle zeitunabhängigen Systeme mit einem Freiheitsgrad (die Energie ist erhalten), zweidimensionale rotationssymmetrische Systeme (Erhaltung von Energie und Drehimpuls) und d -dimensionale harmonische Oszillatoren. Auch der allgemeine harmonische Oszillator mit zeitperiodischen Parametern ist integrabel. Typische Systeme sind *nicht* integrabel.

Eine kleine Störung $H = H_0 + \varepsilon H_1$ eines integrablen Systems H_0 zerstört typischerweise die Integrabilität, d.h. die Existenz eines vollständigen Satzes von d Erhaltungsgrößen. Damit ist zunächst der Existenz der invarianten Tori die Grundlage entzogen. Um so überraschender ist es, dass gezeigt werden kann, dass dennoch bei genügend kleiner Störung fast alle invarianten Tori erhalten bleiben, wenn auch deformiert. Dies ist die Aussage des berühmten KAM-Theorems (Kolmogoroff, Arnold und Moser), hier formuliert für $d = 2$ (ω_1 sei die kleinere der beiden Frequenzen):

Alle Tori mit hinreichend irrationalem Frequenzverhältnis ω_1/ω_2 , d.h. solche mit

$$\left| \frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{m}{n} \right| > \frac{K(\varepsilon)}{n^{2.5}} \quad \text{für alle natürlichen Zahlen } n, m \quad (6.5)$$

bleiben invariant. Dabei gilt $K(\varepsilon) \rightarrow 0$ mit $\varepsilon \rightarrow 0$.

Tori, die diese Bedingung *nicht* erfüllen, werden in der Regel zerstört, also insbesondere die rationalen m/n und mit ihnen eine Umgebung, deren Größe mit wachsendem Nenner n abnimmt (vgl. Gl. (6.5)). Von den periodischen Bahnen eines zerstörten m/n -Torus bleiben in der Regel isolierte stabile und instabile periodische Bahnen übrig.

Die Struktur der Dynamik eines solchen Systems kann man sehr anschaulich durch sogenannte *Poincaré Schnitte* darstellen, bei denen man die Bahn nur an den (gerichteten) Durchstoßpunkten durch eine festgelegte Schnittebene im Phasenraum registriert. Die Bahn reduziert sich dann auf eine Folge solcher Durchstoßpunkte und die Dynamik auf eine (meist flächentreue) Abbildung der Schnittebene auf sich selbst – die *Poincaré Abbildung*, die jedem Durchstoßpunkt den darauf folgenden zuordnet. Ein invarianter Torus erscheint in einem solchen Schnitt als eine oder zwei geschlossene Kurven (*invariante Kurven*) und ein zerstörter rationaler m/n -periodischer Torus zerfällt in eine Kette von n Stabilitätsinseln, die die stabilen periodischen Bahnen umgeben. Zwischen diesen Inseln finden sich die instabilen Bahnen. Im Bild der Poincaré Abbildung erscheinen die periodischen Bahnen als stabile (elliptische) oder instabile (hyperbolische) *Fixpunkte*. In der Umgebung der hyperbolischen Fixpunkte ist das Verhalten sehr kompliziert, und es entwickelt sich hier zuerst die chaotische Dynamik. Die Abbildung 6.2 illustriert dieses Szenario schematisch für Zonen mit Ketten von drei und fünf elliptischen Fixpunkten.

Mit wachsender Störung zerfallen immer mehr der invarianten Tori und man beobachtet eine wachsende Menge von Bahnen, die *nicht* mehr auf Tori beschränkt bleiben, sondern höherdimensionale Bereiche des Phasenraums füllen. Solche Bahnen sind *chaotisch* im Gegensatz zu den *regulären* Bahnen auf einem invarianten Torus.

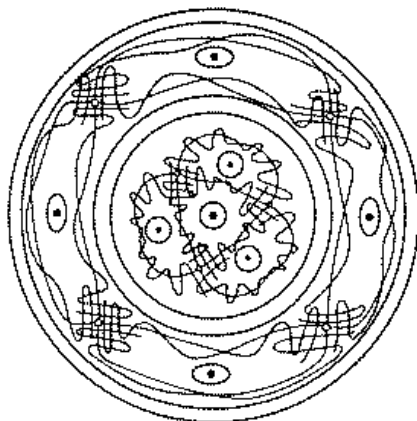


Abbildung 6.2: Zerstörte invariante Zonen mit Ketten von drei und fünf elliptischen Fixpunkten.

Für den niedrigdimensionalen Fall hier trennen die invarianten Tori im Phasenraum einen Innenraum von einem Außenraum³. Da sich Phasenbahnen nicht schneiden können, bleiben chaotische Komponenten zwischen invarianten Tori eingeschlossen, falls diese existieren.

Der Zerfall der Tori setzt sich mit wachsenden Werten des Störparameters ε fort, bis schließlich nur noch wenige (oder keine) Stabilitätsbereiche übrigbleiben, die in den Poincaré Schnitten wie Inseln in einem chaotischen See erscheinen.

Am stabilsten gegen die Störung sind Tori mit sehr irrationalem Frequenzverhältnis, das sich also sehr schlecht durch rationale Zahlen approximieren läßt. Da die beste rationale Approximation durch einen Kettenbruch $x = a_0 + 1/(a_1 + 1/(a_2 + 1/(a_3 \dots)))$ mit natürlichen Zahlen a_k geliefert wird, sind folglich die ‘irrationalsten’ Zahlen solche, bei denen die Kettenbruchentwicklung am schlechtesten konvergiert, also auf einer Folge von $a_k = 1$, $k > k_0$ endet. Die bekannteste dieser Zahlen ist $x^* = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.61803$.

Abschließend soll noch kurz ein quantitatives Maß für die Chaotizität einer klassischen Bahn beschrieben werden. Ein solches Maß erhält man durch den *Lyapunov Exponenten*. Eine chaotische Bahn hängt empfindlich von den Anfangsbedingungen ab: Anfangs eng benachbarte Bahnen entfernen sich für lange Zeiten exponentiell voneinander, und der Abstand Δ wächst wie

$$\Delta(t) \sim e^{\lambda t}. \quad (6.6)$$

Reguläre Bahnen entfernen sich weitaus schwächer als exponential voneinander (z.B. linear) und haben folglich $\lambda = 0$.

³In einem $2d$ -dimensionalen Raum trennt eine geschlossene d -dimensionale Mannigfaltigkeit den Raum in ein Inneres und Äußeres nur für $d \leq 2$.

6.1.2 Quantenchaos

Die eventuelle Existenz einer chaotischen Dynamik in Quantensystemen ist noch umstritten. Hier gibt es einerseits die einfache Argumentation, dass die Quantendynamik zu linearen Zeitevolutionsgleichungen führt, die folglich nicht chaotisch sind. Das sieht man sofort, indem man einen Zustandsvektor in einer zeitunabhängigen, orthonormierten Basis entwickelt

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n'} c_{n'}(t)|n'\rangle. \quad (6.7)$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung und Projektion auf die $|n\rangle$ liefert

$$i\hbar\dot{c}_n = \sum_{n'\geq 1} \langle n|H|n'\rangle c_{n'} \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.8)$$

also ein lineares System von Differentialgleichungen. Dies System ist (falls man es bei n_{\max} abschneidet) äquivalent zu einem klassischen harmonischen Oszillator mit n_{\max} Freiheitsgraden und folglich nicht chaotisch.

Probleme gibt es hier im semiklassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$. In diesem Limes geht das erforderliche n_{\max} gegen unendlich. Weiterhin kommutiert der Langzeitlimes (in dem das klassische Chaos definiert ist) nicht mit dem semiklassischen Grenzfall, d.h. es ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \neq \lim_{\hbar \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow \infty}. \quad (6.9)$$

Zur Zeit versteht man unter *Quantenchaos* das Studium der klassisch – quantenmechanischen Korrespondenz für Systeme, die klassisch chaotisch sind⁴. Hier dienen Quantensysteme in starken Laserfeldern als wertvolle und interessante Modellsysteme sowohl für die numerische Simulation als auch experimentelle Untersuchungen und deren theoretische Analyse.

6.2 Der getriebene quartische Oszillator

Im folgenden sei ein einfacher Fall betrachtet, der jedoch wesentliche allgemeine Eigenschaften der Dynamik enthält: ein harmonisch angetriebener quartischer Oszillator

$$H = H_0 - f_0 \cos(\omega t) q = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{4}\beta q^4 - f_0 \cos(\omega t) q \quad (6.10)$$

(also $\omega_0^2 = 0$ in Gl. (6.1)). Weiterhin kann man Zeit- und Ortseinheiten wählen, in denen $\omega = 1$ und $\beta = 1$ gilt. Die Periode ist dann also $T = 2\pi$. Die klassische Dynamik hängt nur noch von dem einem Parameter f_0 ab, und in der Quantendynamik tritt als weiterer Parameter ein effektives \hbar auf, das wegen der gewählten Einheiten dann natürlich von

⁴siehe auch die Textbücher M. C. Gutzwiller: *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, 1990); F. Haake *Quantum Signatures of Chaos* (Springer, 2001); L. E. Reichl *The Transition to Chaos* (Springer, New York 1992)

den realen Werten der Systemparameter (z.B. von der Frequenz ω) abhängt und deshalb variierbar ist.

Die klassischen Hamiltonschen Gleichungen lauten dann

$$\dot{q} = p \quad ; \quad \dot{p} = -q^3 + f_0 \cos t \quad (6.11)$$

und liefern durch numerische Lösung die Bahn $(p(t), q(t))$ im zweidimensionalen Phasenraum bei gegebenen Anfangsbedingungen $(p_0, q_0) = (p(0), q(0))$. Reduziert man die Information auf die Zeiten $t = nT$ (eine stroboskopische Poincaré Abbildung), so erhält man die Folge (p_n, q_n) , $n = 0, 1, \dots$. Diese Abbildung ist flächentreu.

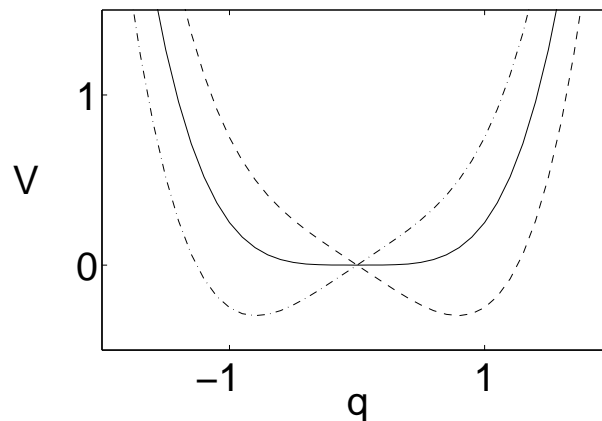


Abbildung 6.3: Zeitabhängiges Potential $V(q, t) = V(q, t + T)$ des periodisch getriebenen quartischen Oszillators für $t = 0$ (---), $t = T/4$ (—) und $t = T/2$ (- · -).

Es ist instruktiv, sich zunächst einmal das Zeitverhalten des Potentials anzusehen. Bild 6.3 zeigt $V(q, t)$ für $t = 0$, $t = T/4$ und $t = T/2$. Zu den Zeiten $(n + 1/2)T/2$ ist das Potential rein quartisch, für $t = nT/2$ haben wir ein Minimum bei $q_{\min} = \pm \sqrt[3]{f_0}$ mit $V_{\min} = -3f_0^{4/3}/4$. Das Minimum 'schaukelt' zwischen diesen Werten hin und her. Dabei ist die Geschwindigkeit dieser Schaukelbewegung in den Extremalpositionen Null und beim Durchgang durch den symmetrischen $q^4/4$ -Fall maximal, d.h. im Zeitmittel finden wir häufiger den Extremalfall.

Für $f_0 = 0$, d.h. im zeitunabhängigen Fall, nimmt die Frequenz der klassischen Bahn mit wachsender Energie E zu (für den Fall eines Kastenpotentials ist die Frequenz proportional zu \sqrt{E}), und geht mit E gegen Null. Durch die zeitabhängige Störung mit $\omega = 1$ wird hauptsächlich die 1:1 resonante Bahn mit Frequenz eins zerstört. Es bleibt wie oben beschrieben eine stabile periodische Bahn übrig, sowie eine instabile Bahn, die im Poincaré Schnitt als elliptische oder hyperbolische Fixpunkte erscheinen. Mit wachsender Feldamplitude wird die Dynamik in der Umgebung des hyperbolischen Fixpunktes zunehmend chaotisch. Im folgenden untersuchen wir detailliert den Fall $f_0 = 0.5$.

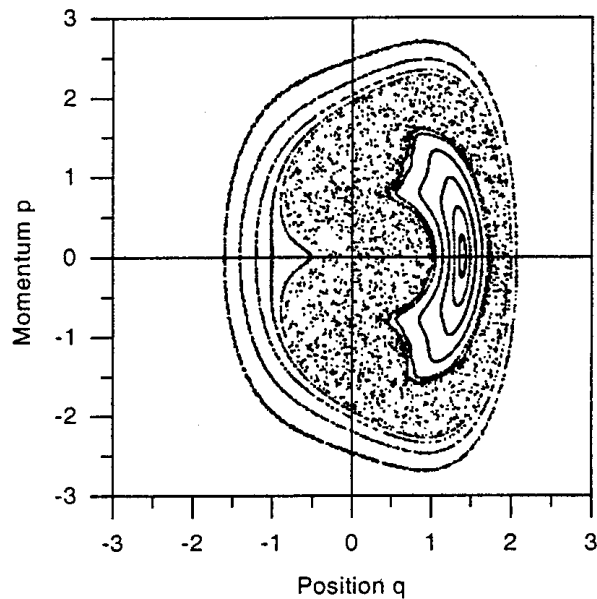


Abbildung 6.4: Stroboskopischer Poincaré Schnitt für einen klassischen getriebenen anharmonischen Oszillator.

Abbildung 6.4 zeigt gleichzeitig einige Bahnen im Phasenraum für $f_0 = 0.5$ und verschiedene Anfangsbedingungen. Man beobachtet im wesentlichen drei unterschiedliche Bereiche:

- (1) Eine Stabilitätsinsel, in deren Zentrum sich eine periodische Bahn mit Periode T befindet. Diese periodische Bahn erscheint als Fixpunkt der Poincaré Abbildung. Sie ist stabil, d.h. benachbarte Bahnen bleiben in der Nachbarschaft. Der Stabilitätsbereich, die ‘Stabilitätsinsel’ hat eine Phasenraumfläche von $A_I = 2.25$.
- (2) Ein ausgedehnter chaotischer Bereich mit einer Fläche von $A_C = 7.85$. In diesem Bereich entfernen sich benachbarte Bahnen exponentiell wie $\exp(\lambda t) = \exp(n\lambda T)$ mit einem Lyapunov Exponenten, den man numerisch als $\lambda \approx 0.041$ bestimmt. Pro Periode T nimmt der Abstand also um einen Faktor $\exp \lambda \approx 1.3$ zu.
- (3) Im Außenbereich ist die Bewegung wieder (fast) regulär. Dies läßt sich qualitativ verstehen, weil hier die interne Frequenz im zeitunabhängigen Potential groß wird gegenüber der Antriebsfrequenz.

In den folgenden Abschnitten soll die Quantendynamik dieses Systems näher analysiert werden. Dabei soll hier besonders herausgearbeitet werden, ob und wie sich die klassische chaotische Dynamik im Quantenfall manifestiert. Die numerischen Rechnungen wurden für zwei Werte des Wirkungsquantums durchgeführt, $\hbar = 0.05$ und $\hbar = 0.015$.

6.2.1 Wellenpaketdynamik

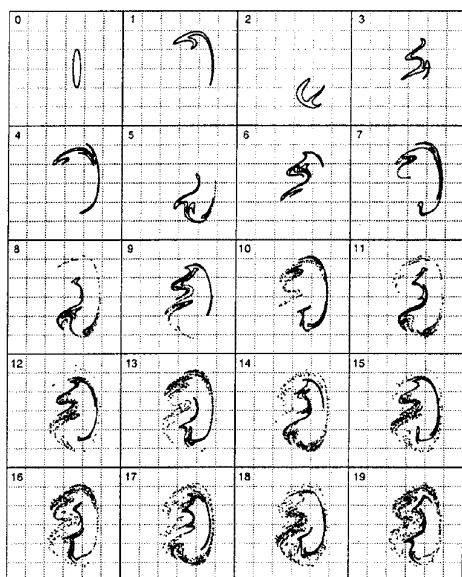


Abbildung 6.5: Zeitliches Verhalten eines klassischen Ensembles von Teilchen für die ersten 20 Perioden. Dargestellt ist der Bereich $[-3 : 3]$ mit q auf der Abszisse und p auf der Ordinate.

Um das Zeitverhalten eines Wellenpakets zu studieren, können wir ein Wellenpaket minimaler Unschärfe, d.h. einen kohärenten Zustand (2.35), lokalisiert bei (p_0, q_0) zeitpropagieren⁵. Der squeezing Parameter $s = 5$ (vgl. Gl. 2.51) ist an den Grundzustand der Stabilitätsinsel angepasst.

Zunächst wieder zur klassischen Dynamik. Hier entspricht ein solches Wellenpaket einer klassischen Dichteverteilung im Phasenraum, die anfangs der Gaußverteilung der Husimidichte des Anfangszustandes entspricht (vgl. Abschnitt 2.3.1). Diese Dichteverteilung kann man durch ein Ensemble klassischer Teilchen darstellen, das man in der Zeit propagiert. Eine weitere Möglichkeit ist die Propagation einer einzelnen Höhenlinie der Anfangsdichtefunktion (nach dem Theorem von Liouville ist die Dichte zeitlich invariant und Höhenlinien bilden sich auf Höhenlinien ab). Solch eine Propagation ist in Abbildung 6.5 dargestellt. Die Anfangsverteilung ist eine Ellipse als Höhenlinie der Husimidichte lokalisiert bei $(p_0, q_0) = (0, 0.6)$ im chaotischen Bereich. Als Anfangsensemble wurden 2000 Teilchen auf einer Ellipse verteilt. Dargestellt sind die ersten 20 Perioden. Man erkennt, dass die Verteilung schnell Struktur gewinnt. Die Länge L der Konturlinie wächst näherungsweise wie der Lyapunov Exponent:

$$L_n = L_0 e^{n\lambda T} \quad (6.12)$$

d.h. in unserem Fall wächst die Länge im Mittel um den Faktor 1.3 pro Periode. Dabei bleibt wegen der Flächentreue die eingeschlossene Fläche konstant, was nur möglich ist, wenn die Kurve immer mehr gefaltet wird. Im Langzeitlimes liegt die Kurve dicht in dem chaotischen Gebiet.

⁵Die Abbildungen 6.5 bis 6.10 wurden der Diplomarbeit von H. Wiescher, Univ. Kaiserslautern 1995 entnommen,

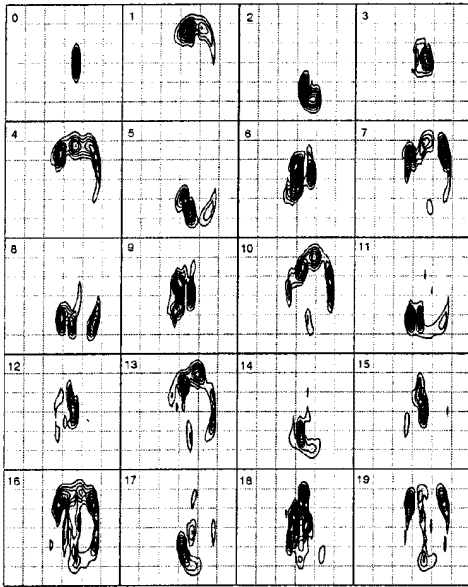


Abbildung 6.6: Konturplots der ersten 20 Husimiverteilungen zu Zeiten $t_n = nT$ ($\hbar = 0.05$). Dargestellt ist der Bereich $[-3 : 3]$ mit q auf der Abszisse und p auf der Ordinate. Bild 0 zeigt den kohärenten Anfangszustand bei $(p_0, q_0) = (0, 0.6)$ mit squeezing-Parameter $s = 5$.

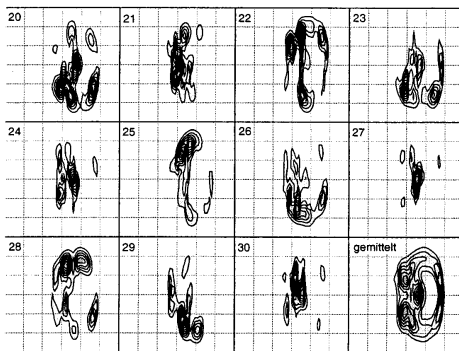


Abbildung 6.7: Husimiverteilungen der Perioden 20-30 ($\hbar = 0.05$). Das letzte Bild zeigt die über die Perioden 20-120 gemittelte Verteilungen. Dunkle Bereiche stehen für hohe Werte der Verteilung.

Die quantenmechanische Zeitevolution der Husimidichte zur Zeit $t_n = nT$

$$\rho_n(p, q, p_0, q_0) = \rho_n(p, q, p_0, q_0; t_n) = |\langle p, q | \psi(t_n) \rangle|^2 \quad (6.13)$$

zeigen die Abbildungen 6.6 und 6.7 bis zur Periode 30 ($\hbar = 0.05$). Ein Vergleich mit Abbildung 6.5 zeigt zunächst einmal die Ähnlichkeit mit der klassischen Dynamik. Das Wellenpaket bewegt sich um die klassische Stabilitätsinsel herum und respektiert offensichtlich die klassischen invarianten Kurven, d.h. wie das klassische Ensemble bleibt es innerhalb des chaotischen Bereichs. Dabei oszilliert es um die klassische Stabilitätsinsel mit einer Periode von etwa $3T$. Nach jeweils drei Perioden erscheint es wieder in der Nähe des Startpunktes. Das sieht man quantitativ in der Rekurrenzwahrscheinlichkeit (Betragsquadrat der Autokorrelation)

$$P_R(t) = |C(t, 0)|^2 = \left| \int \psi^*(x, t_0) \psi(x, t) dx \right|^2 \quad (6.14)$$

und ihrer Fouriertransformierten in Abbildung 6.8. Die gleiche Periode findet man auch in der klassischen Dynamik.

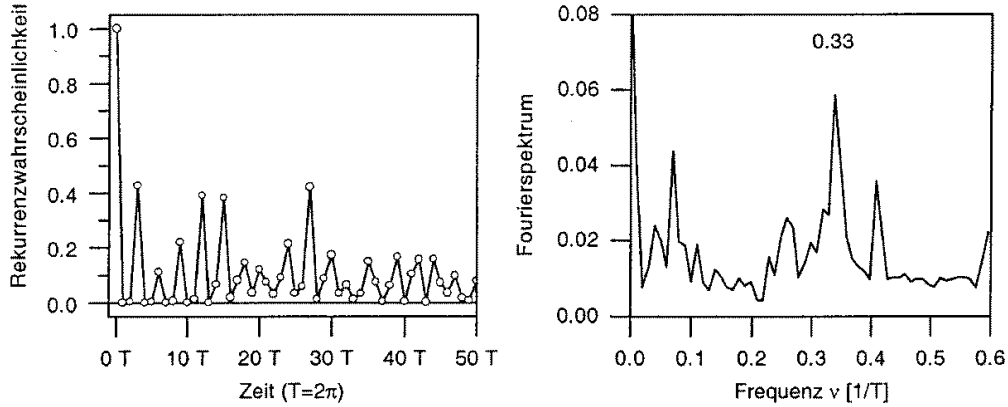


Abbildung 6.8: Rekurrenzwahrscheinlichkeit P_R und Fourierspektrum der Rekurrenzwahrscheinlichkeit des quantenmechanischen Wellenpaketes ($\hbar = 0.05$).

6.2.2 Phasenraumentropie

Klassisch und quantenmechanisch haben wir gesehen, dass sich eine anfangs lokalisierte Dichteverteilung über ein Gebiet des Phasenraums ausbreitet. Ein quantitatives Maß zur Beschreibung einer Lokalisierung oder Delokalisierung einer Wahrscheinlichkeitsdichte ist die sogenannte (informationstheoretische) *Entropie*.

Exkurs: Shannon und Reny Entropie

Es sei

$$\{p_\nu | \nu = 1, \dots, N\} \quad (6.15)$$

eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, d.h. $p_\nu \geq 0$ und $\sum_\nu p_\nu = 1$. Dann ist

$$S = - \sum_{\nu=1}^N p_\nu \ln p_\nu \quad (6.16)$$

die *Shannon Entropie* (oder einfach die *Entropie*) dieser Verteilung. Es gilt

$$0 = S_{\min} \leq S \leq S_{\max} = \ln N, \quad (6.17)$$

wobei die Extremfälle minimaler und maximaler Entropie durch die Verteilungen $p_\nu = \delta_{\nu k}$ bzw. $p_\nu = 1/N$ realisiert werden. Im ersten Fall ist die Verteilung extrem lokalisiert in einem einzelnen Zustand, im zweiten Fall gleichverteilt, also extrem delocalisiert. Man nennt die Verteilung p_ν stärker lokalisiert als p'_ν falls $S_{p_\nu} < S_{p'_\nu}$.

Neben der Shannon Entropie gibt es noch weitere Entropien mit ähnlichen Eigenschaften, z.B. die *Reny Entropien*

$$S^{(\gamma)} = \frac{1}{1-\gamma} \ln \sum_{\nu=1}^N p_\nu^\gamma \quad \text{mit} \quad 1 < \gamma < \infty. \quad (6.18)$$

Dabei gilt

$$S^{(\gamma)} \leq S^{(\gamma')} \quad \text{für } \gamma \geq \gamma' \quad (6.19)$$

und

$$\lim_{\gamma \rightarrow 1} S^{(\gamma)} = S, \quad (6.20)$$

die Shannon Entropie ist also wegen (6.19) größer als die Reny Entropien:

$$S^{(\gamma)} < S. \quad (6.21)$$

Wir beachten weiterhin, dass das sogenannte ‘mittlere inverse Besetzungsverhältnis’ (*‘mean inverse participation ratio’*)

$$\xi = \left(\sum_{\nu} p_{\nu}^2 \right)^{-1}, \quad (6.22)$$

das von manchen Autoren zur Beschreibung der Lokalisierung benutzt wird, direkt mit der Reny Entropie $S^{(2)}$ zusammenhängt:

$$S^{(2)} = \ln \xi. \quad (6.23)$$

Weitere Eigenschaften der Entropie findet man in der Literatur⁶.

Für die hier interessierenden Husimi-Dichten $\rho(p, q)$ mit $\rho(p, q) \geq 0$ und Normierung $\int \rho(p, q) dp dq / 2\pi\hbar = 1$ definiert man analog zu dem diskreten Fall in Gl. (6.16) die *Phasenraumentropie* oder auch *Wehrl Entropie*

$$S = -\frac{1}{2\pi\hbar} \int \rho(p, q) \ln \rho(p, q) dp dq. \quad (6.24)$$

als Maß für die Lokalisierung auf dem Phasenraum. Dabei gilt die Ungleichung

$$1 \leq S. \quad (6.25)$$

Dabei wird die minimale Entropie S_{\min} genau erreicht für ein Wellenpaket minimaler Unschärfe.

In unserem zeitabhängigen Fall, bei dem wir die Zeitevolution eines zur Zeit $t_0 = 0$ bei (p_0, q_0) gestarteten Wellenpakets minimaler Unschärfe zu Zeiten $t_n = nT$ verfolgen, berechnen wir also die Entropie

$$S_{p_0, q_0}(t_n) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \int \rho(p, q; p_0, q_0) \ln \rho(p, q; p_0, q_0) dp dq \quad (6.26)$$

oder auch einfach $S(t_n)$. Abbildung (6.9) zeigt den Zeitverlauf der Phasenraumentropie für das Wellenpaket aus den Abbildungen (6.6) und (6.7) bis zur Zeit $120T$. Wir beobachten das folgende (typische) Verhalten der Entropie:

⁶Siehe z.B. C. Beck, F. Schlögl *Thermodynamics of chaotic systems* (Cambridge University Press 1993) und die dort angegebene Literatur.

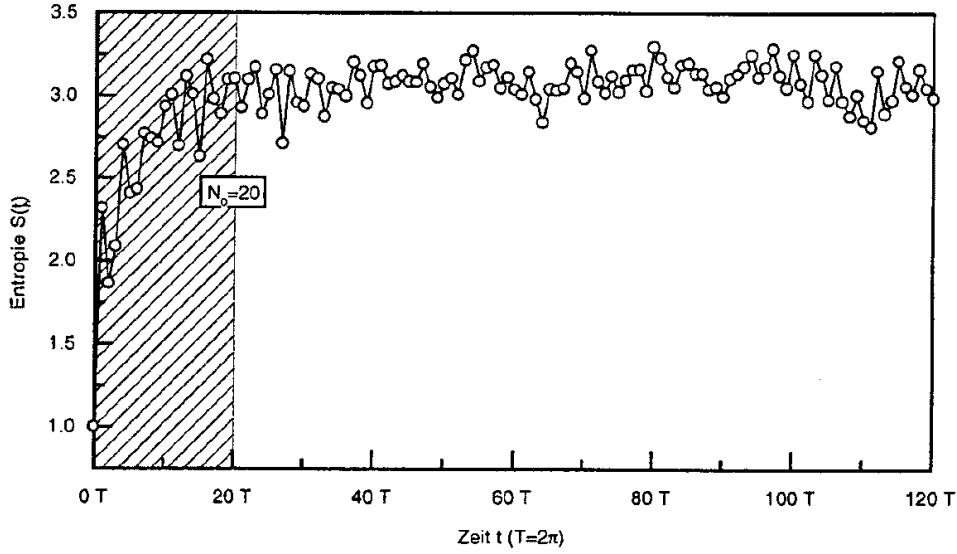


Abbildung 6.9: Zeitverlauf der Phasenraum-Entropie.

- (1) Nach einer ‘Einschwingzeit’ von etwa 20 Perioden fluktuiert die Entropie um einen Mittelwert $\bar{S} \approx 3.11$; sie strebt keinem Grenzwert zu.
- (2) Der quantenmechanische Mittelwert ist kleiner als die Entropie einer Gleichverteilung auf dem klassisch chaotischen Gebiet des Phasenraums:

$$\bar{S} < S_{\text{klass}} = \ln \frac{A_C}{h} = 3.22 \quad (6.27)$$

(mit $h = 2\pi\hbar = 0.314$). Die Differenz $S_{\text{klass}} - \bar{S} = 0.11$ steckt in den quantenmechanischen Fluktuationen.

- (3) Für kleine Zeiten steigt die Entropie von dem Anfangswert $S = 1$ an. Das Wellenpaket wird zunehmend delokalisiert. Man kann abschätzen, dass dies innerhalb der Zeit

$$n^*T = \frac{1}{\lambda} \ln \frac{A_C}{h} = \frac{S_{\text{klass}}}{\lambda} \quad (6.28)$$

geschieht ($\lambda =$ klassischer Lyapunov Exponent). Man nennt diese Zeit die *Log-Zeit* oder *Zaslavky-Zeit*. In unserem Fall liefert (6.28) den Wert $n^*T = 12.5$, in Übereinstimmung mit den numerischen Ergebnissen in Abbildung 6.9.

6.2.3 Langzeitmittelwerte

Mittelt man die Husimiverteilungen über die Zeit, so erhält man im Langzeitgrenzfall

$$\bar{\rho}(p, q, p_0, q_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{1 + N} \sum_{n=0}^N \rho_n(p, q, p_0, q_0). \quad (6.29)$$

Abbildung 6.10 zeigt solche gemittelte Husimiverteilungen für eine Anfangslokalisierung

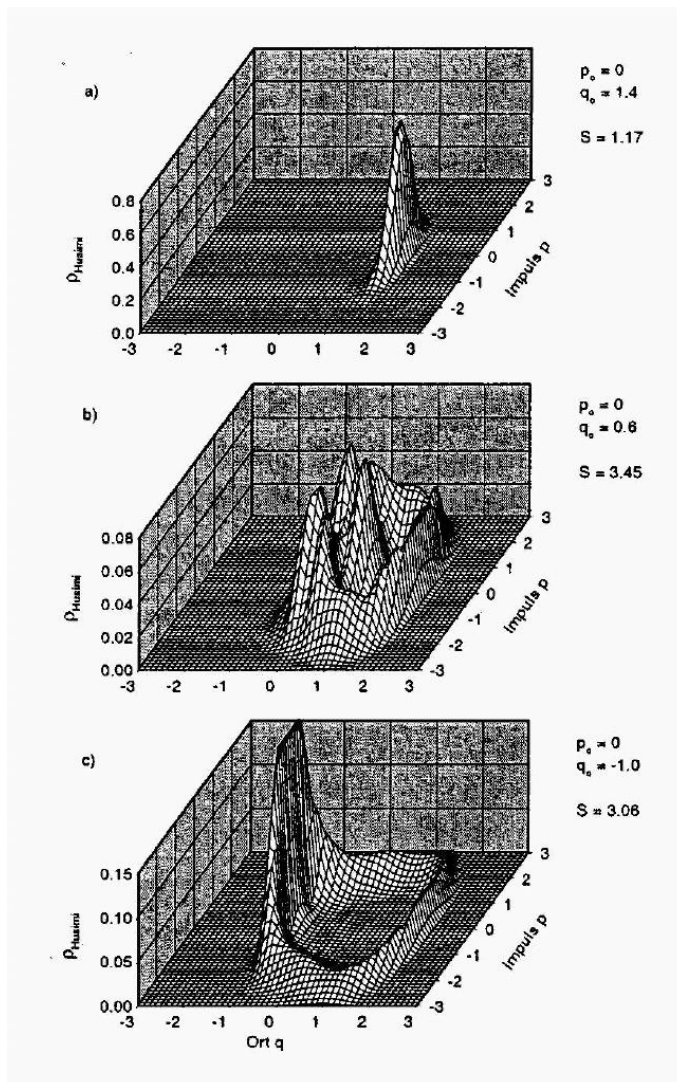


Abbildung 6.10: Gemittelte Husimiverteilungen propagierter Wellenpakete, die anfangs bei (p_0, q_0) im Phasenraum lokalisiert wurden: (a) im Zentrum der Stabilitätsinsel; (b) im chaotischen Bereich; (c) im äußeren regulären Bereich ($\hbar = 0.05$).

(p_0, q_0) in den verschiedenen Bereichen des Phasenraums: (a) im Zentrum der Stabilitätsinsel; (b) im chaotischen Bereich; (c) im äußeren regulären Bereich. Man sieht, dass die quantenmechanischen Verteilungen auf den entsprechenden klassischen Bereichen lokalisiert bleiben. Die drei Maxima der Verteilung im klassisch chaotischen Bereich sind auf Interferenzeffekte zurückzuführen und werden weiter unten näher erklärt. Im äußeren regulären Bereich lokalisiert die Verteilung auf der invarianten Kurve. Das ausgeprägte Maximum ist hier ein klassischer Effekt, der auf eine Vergrößerung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in diesem Bereich zurückzuführen ist, was mit der ausgeprägten 'Nase' der klassischen invarianten Kurve in diesem Bereich zusammenhängt (vgl. Abb. 6.4).

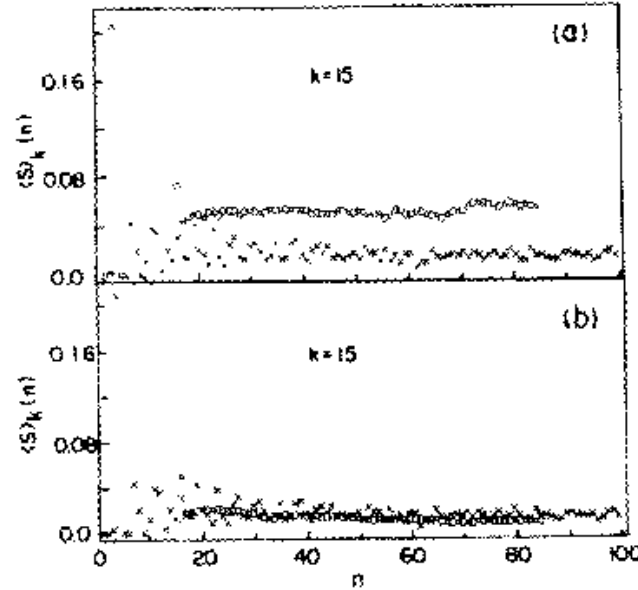


Abbildung 6.11: (a) Klassische (x) und quantenmechanische (o) Rekurrenzwahrscheinlichkeiten $\langle S \rangle_k(n)$ als Funktion der Zeit $t = nT$ für ein Wellenpaket im chaotischen Bereich ($\hbar = 0.015$). Die Werte wurden geglättet durch Mittelung über ein Zeitfenster $\pm k = \pm 15$ Perioden. (b) Wie (a), jedoch mit 10% zufälligem 'Rauschen' in der Feldamplitude f_0 .

6.2.4 Kohärenzzerstörung

Wenn man die quantenmechanische Rekurrenzwahrscheinlichkeit (6.14) mit der entsprechenden klassischen Größe

$$P_R^{\text{klass}} = \frac{1}{h} \int \rho_0(p, q) \rho_n(p, q) dp dq \quad (6.30)$$

vergleicht, so findet man bemerkenswerte Unterschiede: Die quantenmechanischen Werte sind wesentlich größer! Abbildung 6.11 zeigt in Teilbild (a) einen Vergleich. Um die Fluktuationen zu glätten, sind fenstergemittelte Größen

$$\langle S \rangle_k(n) = \frac{1}{2k+1} \sum_{n'=n-k}^{n+k} P_R(n') \quad (6.31)$$

dargestellt mit $k = 15$ (hier wurde $\hbar = 0.015$ gewählt). Der Unterschied zwischen Klassik und Quantenmechanik (Faktor 2.8!) beruht auf der Kohärenz der quantenmechanischen Zeitevolution in einem periodischen Feld $t \rightarrow t+T$ mit zusätzlichen Symmetrien wie Zeitumkehrinvarianz $t \rightarrow -t$ und $t \rightarrow t+T/2$ kombiniert mit $q \rightarrow -q$. Wenn man in einem numerischen Experiment diese Symmetrie zerstört, so sollte der Effekt verschwinden. Das ist in der Tat der Fall, wie in Abbildung 6.11 (b) demonstriert. Dabei wurde jeweils nach

einer Periode der Wert der Feldamplitude f_0 zufällig in einem Intervall $f_0 \pm 10\%$ geändert. Man beobachtet jetzt eine Koinzidenz von Klassik und Quantendynamik⁷.

6.3 Quasienergiezustände

In diesem Abschnitt sollen die Eigenschaften der einzelnen Quasienergiezustände des zeitperiodischen Systems (6.10) untersucht werden⁸ (vgl. Abschnitt 4.1). Von Interesse ist beispielsweise ob und wie sie die klassische Dynamik widerspiegeln. Man berechnet die Quasienergiezustände $|\alpha\rangle$ numerisch nach einer der in Kapitel 5 dargestellten Methoden. Es soll noch einmal darauf hingewiesen werden, dass diese Quasienergiezustände nicht intrinsisch angeordnet sind, wie z.B. die Eigenzustände eines zeitunabhängigen Systems, die sich nach ihren Energieeigenwerten ordnen lassen. Wegen der Brillouin-Zonen-Struktur des Quasienergiespektrums ϵ_α modulo $\hbar\omega$ sagen die Werte der einzelnen ϵ_α nichts über den Quasienergiezustand aus. Zweckmäßig ist eine Numerierung bezüglich eines ausgewählten Erwartungswertes, zum Beispiel dem Erwartungswert des feldfreien Hamilton-Operators \widehat{H}_0

$$\langle\alpha|\widehat{H}_0|\alpha\rangle = \sum_n p_{n\alpha} E_n^0 \quad (6.32)$$

falls man beispielsweise in einer Basisentwicklung nach den Eigenzuständen von \widehat{H}_0 rechnet ($\widehat{H}_0|\varphi_n^0\rangle = E_n^0|\varphi_n^0\rangle$)

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_{n\alpha} |\varphi_n^0\rangle. \quad (6.33)$$

Die

$$p_{n\alpha} = |c_{n\alpha}|^2 \quad (6.34)$$

sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten der feldfreien Zustände.

Wir numerieren also die $|\alpha\rangle$, $\alpha = 0, 1, 2, \dots$ so, dass die $\langle\alpha|\widehat{H}_0|\alpha\rangle$ monoton wachsen. Abbildung 6.12 zeigt den Verlauf dieses Erwartungswertes. Man beobachtet zunächst ein Plateau bis zum Zustand $\alpha = 113$ mit (fast) konstantem Erwartungswert.

Die Anzahl dieser Zustände kann man mit Hilfe der Weylschen Regel abschätzen: Ein Zustand belegt im Mittel eine Phasenraumfläche von $h = 2\pi\hbar$, und damit finden wir die Anzahl der Zustände, die der Phasenraumfläche des klassisch chaotischen Gebietes (einschließlich der Stabilitätsinsel) zuzurechnen sind als $(A_C + A_I)/h = (7.85 + 2.25)/0.094 = 107$ in recht guter Übereinstimmung mit der Plateaugrenze in Abbildung 6.12. Das legt die Vermutung nahe, dass diese Zustände diesem Bereich des Phasenraums zuzuordnen sind. Dies läßt sich weiter erhärten durch das Verhalten der Besetzungswahrscheinlichkeiten (6.34) und der Husimidichten $\rho_\alpha(p, q)$, dargestellt in den Abbildungen 6.13 bis 6.15. Man findet unter den Zuständen 24, die stark lokalisiert sind und die man der Stabilitätsinsel

⁷Weitere Ausführungen dazu in N. Ben-Tal, N. Moiseyev, S. Fishman, H. J. Korsch, Phys. Rev. E47 (1993) 1646.

⁸Siehe N. Ben-Tal, N. Moiseyev, H. J. Korsch. Phys. Rev. A46 (1992) 1669.

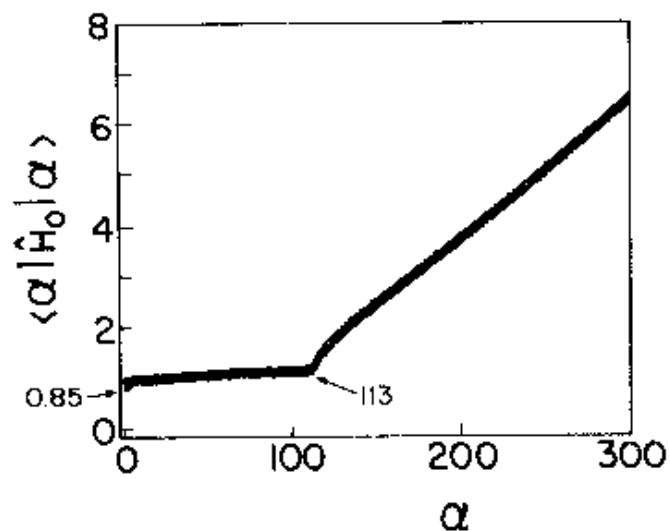


Abbildung 6.12: Erwartungswert $\langle \alpha | \hat{H}_0 | \alpha \rangle$ der Quasienergiezustände $|\alpha\rangle$ zur Zeit $t = nT$ als Funktion von α ($\hbar = 0.015$).

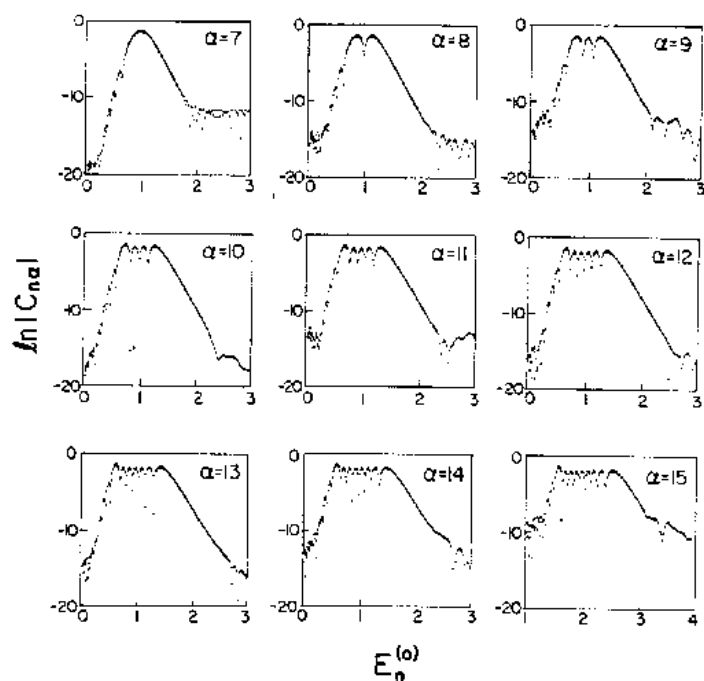


Abbildung 6.13: Verteilung der $c_{n\alpha}$ -Koeffizienten für die Inselzustände ($\hbar = 0.015$).

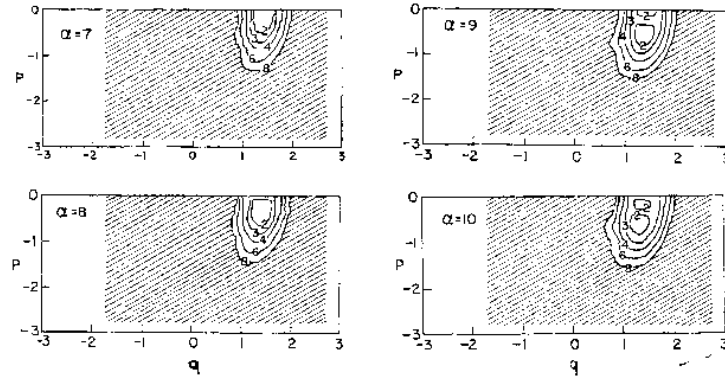


Abbildung 6.14: Husimidichten der Inselzustände (nur die untere Hälfte des Phasenraums ist dargestellt ($\hbar = 0.015$)). In den schraffierten Bereichen ist die Dichte kleiner als 10^{-9} .

zuordnen kann ($A_I/h = 2.25/0.094 = 24$). Die Besetzungszahlen dieser Zustände in Abbildung 6.13 zeigen eine charakteristische Lokalisierung auf einen klar definierten Bereich und Oszillationstrukturen, die mit der Energie zunehmen. Eine Phasenraumdarstellung als Husimidichten zeigt Abbildung 6.14 für die tiefsten dieser Zustände. Hier findet man die Lokalisierung auf der Insel klar belegt. Etwa 80 Zustände im Plateau sind delokalisiert und dem klassisch chaotischen Gebiet zuzuordnen ($A_C/h = 7.85/0.094 = 83$). Die Delokalisierung zeigt sich sowohl in den Besetzungswahrscheinlichkeiten $P_{n\alpha}$ als auch in den Husimidichten. Hier reicht es, ein einziges Beispiel in Abbildung 6.15 zu betrachten, denn alle anderen Zustände sehen fast genauso aus: Die Besetzungswahrscheinlichkeiten erstrecken sich über den gesamten Bereich und fluktuieren um einen Mittelwert. (Man mache sich klar, dass diese Fluktuationen notwendig sind! Wenn alle diese Zustände praktisch gleich sind mit nicht fluktuierenden $P_{n\alpha}$, dann können sie nicht orthogonal sein.) Entsprechend lokalisieren die Phasenraumdichten auf dem chaotischen See.

Als letztes Beispiel sei die Projektion der quantenmechanischen als chaotisch klassifizierten Zustände auf den Ortsraum

$$P(p) = \sum_{\alpha \text{ chaotisch}} \int \rho_{\alpha}(p, q) dp \quad (6.35)$$

mit der entsprechenden klassischen Ortswahrscheinlichkeit, d.h. der Projektion des chaotischen Sees auf die q -Achse, verglichen. Abbildung 6.16 demonstriert die Übereinstimmung.

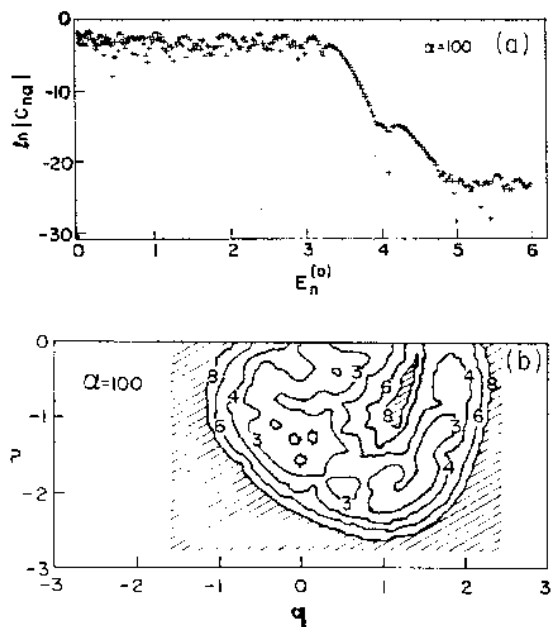


Abbildung 6.15: Typisches Beispiel der $c_{n\alpha}$ -Verteilung und der Husimidichte für einen delokalisierten Quasienergiezustand ($\hbar = 0.015$).

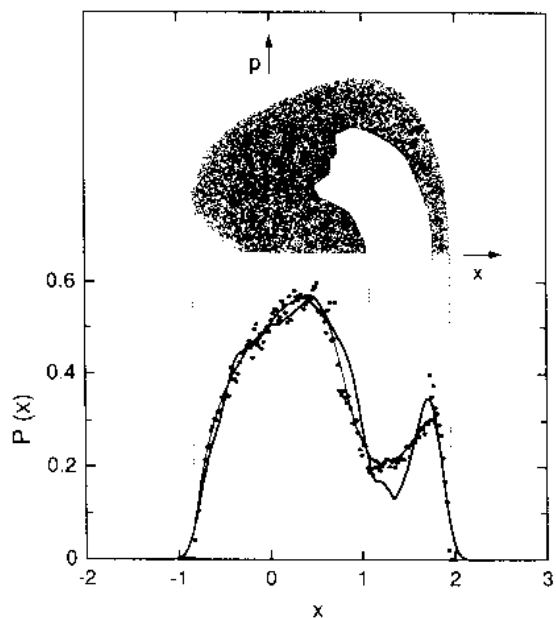


Abbildung 6.16: Quantenmechanische (—) und klassische (··) Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit ($\hbar = 0.015$).

Kapitel 7

Quantenchaos und Zufallsmodelle

Es ist naheliegend, dass *Chaos* und *Zufall* etwas miteinander zu tun haben und in der Chaostheorie der klassischen Dynamik kommt das auch klar zum Ausdruck. Wie oben dargelegt, ist die Rolle des Chaos in der Quantenmechanik noch nicht geklärt. Legitim ist in jedem Fall die Frage, ob quantenmechanische Zustände oder Prozesse mit Zufallsmodellen in Einklang stehen. Solche Modelle (wie z.B. die Theorie der Zufallsmatrizen im folgenden Abschnitt) sind früher schon zur Beschreibung der quantenmechanischen Eigenwertspektren von Systemen mit sehr vielen Freiheitsgraden entwickelt worden. Erst in jüngerer Zeit fanden sie Anwendungen für Systeme mit vergleichsweise wenigen Freiheitsgraden und klassisch chaotischer Dynamik.

7.1 Statistische Modelle

Die Grundidee einer statistischen Beschreibung ist die Annahme, dass bestimmte Eigenschaften eines Systems zufällig sind, d.h. dass sie mit den Erwartungswerten eines Ensembles gleichartiger Systeme mit bestimmten Eigenschaften übereinstimmen.

Hier werden kurz zwei wichtige Ansätze beschrieben, die Theorie der Zufallsmatrizen zur Beschreibung der statistischen Eigenschaften von Eigenwertspektren in 7.1.1 und die Theorie der Zufallsvektoren zur Beschreibung der statistischen Eigenschaften von Zuständen als Zufallsvektoren im Hilbertraum in 7.1.2. Im folgenden Abschnitt 7.2 sollen typische Anwendungen anhand der Modellstudie eines Dipols in einem starken Laserfeld dargestellt werden.

7.1.1 Statistik der Quasienergie–Spektren

In der Theorie der Zufallsmatrizen konstruiert man zunächst ein Ensemble von zufälligen Matrizen mit bestimmten Eigenschaften und beschreibt dann die statistischen Eigenschaften z.B. der Eigenwertspektren dieser Matrizen.

Das Gauß'sche Ensemble Hermitescher Matrizen

Hier folgen wir dem Buch von Haake¹ und stellen zunächst in recht einfacher Weise die Konstruktion eines solchen Ensembles für den Fall von hermiteschen 2×2 -Matrizen dar, deren Matrixelemente Gauß-verteilt sind mit Mittelwert Null. Da jedes Mitglied eines solchen Ensembles durch eine orthogonale Transformation, eine Drehung, wieder in ein Mitglied des Ensembles übergeht, ist das Ensemble invariant gegenüber orthogonalen Transformationen (GOE, das Gauß'sche Orthogonale Ensemble).

Wir betrachten also 2×2 -Matrizen mit Gauß-verteiltern reellen Matrixelementen H_{11} , H_{22} und $H_{12} = H_{21}$. Die gesuchte Wahrscheinlichkeitsdichte ist dann

$$P(\hat{H}) = P(H_{11}, H_{22}, H_{12}) \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dH_{11} dH_{22} dH_{12} P(\hat{H}) = 1. \quad (7.1)$$

Es muß gelten

$$P(\hat{H}') = P(\hat{H}) \quad \text{mit} \quad \hat{H}' = \hat{O}^{-1} \hat{H} \hat{O} \quad (7.2)$$

(Invarianz bei orthogonalen Transformationen) und

$$P(\hat{H}) = P_{11}(H_{11}) P_{22}(H_{22}) P_{12}(H_{12}) \quad (7.3)$$

(unkorrelierte Matrixelemente). Für eine infinitesimale orthogonale Transformation

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} 1 & \theta \\ -\theta & 1 \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

haben wir

$$\begin{aligned} H'_{11} &= H_{11} - 2\theta H_{12} \\ H'_{22} &= H_{22} + 2\theta H_{12} \\ H'_{12} &= H_{12} + \theta(H_{11} - H_{22}). \end{aligned} \quad (7.5)$$

Mit der Entwicklung $f(x + \theta) \approx f(x) + f'(x)\theta = f(x) \left(1 + \frac{d \ln f(x)}{dx} \theta\right)$ findet man

$$\begin{aligned} P(\hat{H}') &= P(\hat{H}) \left[1 + \theta \left\{ -2H_{12} \frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} + 2H_{12} \frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (H_{11} - H_{22}) \frac{d \ln P_{12}}{dH_{12}} \right\} \right]. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Wegen (7.2) für beliebiges θ muß der Term in der geschweiften Klammer verschwinden, d.h. es muß gelten

$$\frac{2}{H_{11} - H_{22}} \left(-\frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} + \frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} \right) + \frac{1}{H_{12}} \frac{d \ln P_{12}}{dH_{12}} = 0 \quad (7.7)$$

¹F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, (Springer, 2001), Kap. 4.

und, da die P_{ij} jeweils *nur* von H_{ij} abhängen,

$$\frac{1}{H_{12}} \frac{d \ln P_{12}}{dH_{12}} = \text{const.} = -4A, \quad (7.8)$$

also

$$P_{12} = e^{-2AH_{12}^2}. \quad (7.9)$$

Danach findet man leicht

$$\frac{d \ln P_{11}}{dH_{11}} + 2AH_{11} = \frac{d \ln P_{22}}{dH_{22}} + 2AH_{22} = \text{const.} = -B \quad (7.10)$$

und damit

$$P(\hat{H}) = Ce^{-A(H_{11}^2 + H_{22}^2 + 2H_{12}^2) - B(H_{11} + H_{22})}. \quad (7.11)$$

Dabei läßt sich durch Wahl des Nullpunktes der Energie $H_{11} = -H_{22}$ erzielen, wodurch der B -Term in (7.11) verschwindet. Die Konstante A fixiert die Einheit der Energie, und C ist schließlich bestimmt durch die Normierung. Die Verteilung ist also eindeutig und läßt sich schreiben als

$$P(\hat{H}) = Ce^{-A \text{Tr}\{\hat{H}^2\}}. \quad (7.12)$$

Diese Verteilung ergibt sich auch für $n \times n$ -Matrizen.

Eigenwertverteilung

Für unsere Überlegungen zur Bestimmung der GOE Eigenwertverteilung betrachten wir zunächst wieder reelle symmetrische 2×2 -Matrizen mit den Eigenwerten

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ H_{11} + H_{22} \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}^2} \right\}. \quad (7.13)$$

Wir benutzen jetzt die Invarianz des Spektrums bei orthogonalen Transformationen

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (7.14)$$

Mit

$$\begin{aligned} H_{11} &= E_+ \cos^2 \theta + E_- \sin^2 \theta \\ H_{22} &= E_+ \sin^2 \theta + E_- \cos^2 \theta \\ H_{12} &= (E_+ - E_-) \cos \theta \sin \theta \end{aligned} \quad (7.15)$$

erhält man die Jacobi-Determinante für die Transformation

$$(E_+, E_-, \theta) \longleftrightarrow (H_{11}, H_{22}, H_{12})$$

als

$$J = \left| \frac{\partial(H_{11}, H_{22}, H_{12})}{\partial(E_+, E_-, \theta)} \right| = E_+ - E_-. \quad (7.16)$$

Damit ergibt sich aus (7.12) die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Eigenwerte als

$$P(E_+, E_-) = C (E_+ - E_-) e^{-A(E_+^2 + E_-^2)}. \quad (7.17)$$

Man kann jetzt hieraus weitere Verteilungen ableiten. Uns interessiert hier eine Größe, die sich zur Untersuchung und Charakterisierung der Spektren besonders nützlich erwiesen hat:

Die Nächste-Nachbar Statistik

Wir suchen die Wahrscheinlichkeit $P(s) ds$ dafür, zwei Eigenwerte mit einem Abstand $s = |E_+ - E_-|$ im Intervall ds zu finden. Mit

$$P(s) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} dE_+ \int_{-\infty}^{+\infty} dE_- \delta(s - (E_+ - E_-)) (E_+ - E_-) e^{-A(E_+^2 + E_-^2)} \quad (7.18)$$

erhält man mit Hilfe einer Variablentransformation $u_{\pm} = E_+ \pm E_-$ mit $du_+ du_- = 2 dE_+ dE_-$

$$P(s) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} du_+ \int_{-\infty}^{+\infty} du_- \delta(s - |u_-|) |u_-| e^{-A(u_+^2 + u_-^2)/2} \sim s e^{-As^2/2}. \quad (7.19)$$

Ähnlich verläuft auch die Herleitung der GOE Abstandsverteilungen benachbarter Eigenwerte im n -dimensionalen Fall und ganz analog für die beiden anderen Ensembles von Interesse, das Gauß'sche unitäre Ensemble (GUE) und das Gauß'sche symplektische Ensemble (GSE) und wir notieren das Endergebnis

$$P(s) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} s e^{-s^2\pi/4} & (\text{GOE}) \\ \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-s^2/4\pi} & (\text{GUE}) \\ \frac{2^{18}}{3^6\pi^3} s^4 e^{-s^2/9\pi} & (\text{GSE}) \end{cases} \quad (7.20)$$

Diese Verteilungen sind normiert gemäß

$$\int_0^{\infty} P(s) ds = 1 \quad \text{und} \quad \langle s \rangle = \int_0^{\infty} s P(s) ds = 1. \quad (7.21)$$

Im Folgenden wird vor allem die sogenannte *Wigner-Verteilung* im GOE-Fall von Bedeutung sein.

Von Interesse ist weiterhin die Abstandsverteilung, die man erhält wenn man als Energieeigenwerte einfach Zufallszahlen wählt. In diesem Fall ergibt sich für die Abstände eine Exponentialverteilung

$$P(s) = e^{-s}, \quad (7.22)$$

die die Normierungen (7.21) erfüllt. Dieses Resultat erhält man leicht durch die folgende Betrachtung: Es sei ein Eigenwert bei E gegeben. Die Wahrscheinlichkeit, einen Eigenwert

in $[E + s, E + s + ds]$ zu finden, sei $g(s)ds$. Dann muss die Wahrscheinlichkeit $P(s)$ für den *nächsten* Nachbarwert bei $E + s$ die Beziehung

$$P(s) = g(s) \left(1 - \int_0^s P(s') ds'\right) = g(s) \int_s^\infty P(s') ds' \quad (7.23)$$

erfüllen, d.h. sie ist das Produkt der Wahrscheinlichkeit für einen Wert im Abstand s , multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit *keinen* Wert zwischen E und $E + s$ zu finden. Differentiation liefert

$$P'(s) = g'(s) \int_s^\infty P(s') ds' - gP = \left(\frac{g'}{g} - g\right)P. \quad (7.24)$$

Integration ergibt

$$P(s) \sim g(s) e^{-\int_0^s g(s') ds'}, \quad (7.25)$$

woraus sich für den homogenen Fall (g unabhängig von s) die Exponentialverteilung (7.22) ergibt.

Ein wesentlicher Unterschied (7.20) und (7.22) besteht in dem Verhalten dieser Verteilungen für kleine Abstände. In der Exponentialverteilung (7.22) sind kleine Abstände sehr häufig, während sie in der Wigner-Verteilung wie $P(s) \sim s$ mit s gegen Null gehen. Dieses Verhalten ist eine Konsequenz der Tatsache, dass die Energieniveaus typischerweise nicht kreuzen (vgl. die Diskussion in Abschnitt 4.2).

7.1.2 Statistik der Vektorkomponenten

Die Theorie der Zufallsvektoren betrachtet Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ mit Norm $|\langle\psi|\psi\rangle| = 1$ in einem N -dimensionalen Hilbertraum als zufällig verteilt. Auf dieser Einheitskugel im N -dimensionalen Raum über den komplexen Zahlen existiert ein eindeutig bestimmtes Maß, das invariant ist gegenüber allen unitären Transformationen. Man definiert jetzt die Eigenschaften von Zufallsvektoren als gleichförmig verteilt bezüglich dieses Maßes und leitet daraus ihre Eigenschaften ab. Eine sehr gute und lesbare Darstellung findet man bei Wothers².

Als wichtiges Beispiel betrachten wir die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Projektion $|\hat{P}_\nu|\psi\rangle|^2$ eines typischen Zufallsvektors auf einen ν -dimensionalen Unterraum den Wert p hat ($0 \leq p \leq 1$). Genauer: $P(p)dp$ ist die Wahrscheinlichkeit für eine Projektion p im Intervall dp . Für einen zweidimensionalen reellen Raum ist das z.B. die Projektion einer Gleichverteilung von Vektoren $\vec{r}(\phi)$ auf dem Einheitskreis, also $p = \cos^2 \phi$ und

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{2\pi} &= \frac{dp}{2\pi} \left| \frac{d\phi}{dp} \right|^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{dp}{2 \cos \phi \sin \phi} \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{dp}{\sqrt{p(1-p)}}. \end{aligned} \quad (7.26)$$

²W. K. Wothers, Found. of Physics 20 (1990) 1365.

Das läßt sich auf den d -dimensionalen Fall verallgemeinern (wir betrachten einen reellen Hilbertraum) und erhalten für die Projektionen auf einen ν -dimensionalen Unterraum die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_\nu(p) = \frac{\Gamma(\frac{d}{2})}{\Gamma(\frac{\nu}{2})\Gamma(\frac{d-\nu}{2})} p^{\frac{\nu}{2}-1} (1-p)^{\frac{d-\nu}{2}-1} \quad (7.27)$$

mit den Mittelwerten

$$\bar{p} = \frac{\nu}{d} \quad \text{und} \quad \Delta p = \sqrt{\frac{2\nu(d-\nu)}{d^2(d+2)}}. \quad (7.28)$$

Im Limit $d \gg \nu$ ergibt sich eine χ^2 -Verteilung:

$$P_\nu(p) \approx \frac{1}{\bar{p}} \chi_\nu^2\left(\frac{1}{\bar{p}}\right) = \left(\frac{\nu}{2p}\right)^{\frac{\nu}{2}} \frac{p^{\frac{\nu}{2}-1}}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} e^{-\frac{\nu p}{2\bar{p}}}. \quad (7.29)$$

Mit den Spezialfällen für eindimensionale und zweidimensionale Unterräume:

$$P_1(p) = \sqrt{\frac{\bar{p}}{2\pi p}} e^{-p/2\bar{p}}, \quad P_2(p) = \frac{1}{\bar{p}} e^{-p/\bar{p}}. \quad (7.30)$$

In ähnlicher Weise lassen sich Ausdrücke für Erwartungswerte und deren Fluktuationen herleiten.

7.2 Modellstudie: Der angetriebene Rotor

Als Beispiel für die Anwendung der statistischen Überlegungen auf ein Quantensystem mit sehr wenigen Freiheitsgraden betrachten wir einen Rotor, zum Beispiel ein zweiatomiges Molekül mit einem starken Dipolmoment, in einem zeitperiodischen elektrischen Feld. Wir vernachlässigen alle inneren Freiheitsgrade und behandeln es als starren Rotor. In diesem Fall ist der Hamilton-Operator extrem einfach, nämlich

$$H = \frac{J^2}{2I} - f \cos \vartheta \cos \omega t \quad (7.31)$$

(I ist das Trägheitsmoment, J der Drehimpuls und ϑ ist der Winkel zwischen Rotor und Feldrichtung). Dieses Modell hat – wenn wir es noch weiter vereinfachen und planar behandeln – nur einen einzigen Freiheitsgrad. Dieser *getriebene Rotor* ist wegen seiner extremen Einfachheit und seiner interessanten Dynamik häufig als Modellsystem zu verschiedenen Studien herangezogen worden³, auch unter dem Namen *Doppel-Resonanz Modell*. Die Berechtigung dieser Bezeichnung sieht man, wenn man den Wechselwirkungsterm umschreibt als

$$f \cos \vartheta \cos \omega t = \frac{f}{2} (\cos(\vartheta - \omega t) + \cos(\vartheta + \omega t)), \quad (7.32)$$

³Siehe z.B. Bayfield, Abschnitt 8.2a. Hier folgen wir den Arbeiten N. Moiseyev, H. J. Korsch, B. Mirbach, Z. Phys., D29 (1994) 125 und T. Gorin, H. J. Korsch, B. Mirbach, Chem. Phys. 217 (1997) 145.

also als eine Summe eines rechts- und eines linksrotierenden Terms. Wäre nur *einer* dieser Terme vorhanden, dann könnte man durch Transformation auf ein mitrotierendes System die Zeitabhängigkeit beseitigen und das System wäre integrabel. Sind beide Terme vorhanden, ist eine solche Behandlung nur näherungsweise möglich.

Im folgenden verwenden wir Einheiten mit $I = \omega = 1$. Das System ist dann zeitperiodisch mit Periode $T = 2\pi$. Von Bedeutung sind die Symmetrien des Systems:

$$(1) : t \rightarrow -t, J \rightarrow -J \quad (7.33)$$

$$(2) : t \rightarrow t + \pi, \vartheta \rightarrow \vartheta + \pi \quad (7.34)$$

$$(3) : \vartheta \rightarrow -\vartheta, J \rightarrow -J \quad (7.35)$$

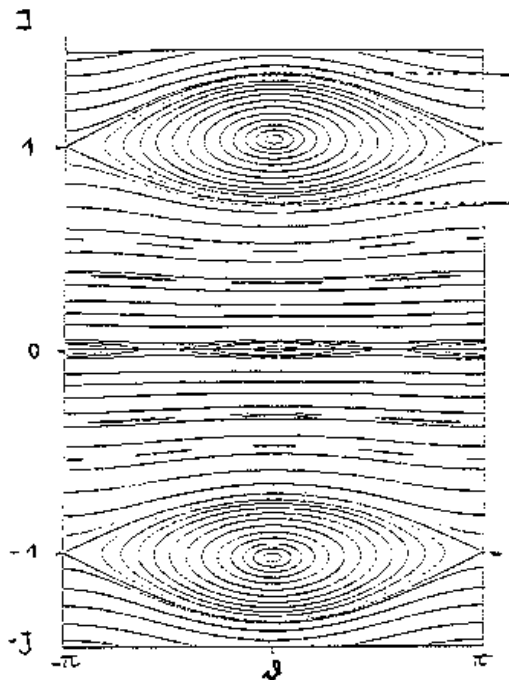


Abbildung 7.1: Stroboskopischer Poincaré-Schnitt für den getriebenen Rotor ($f = 0.05$).

Die klassische Dynamik des Systems (7.31) erschließt sich, wenn man zunächst den Fall eines schwachen Feldes betrachtet, d.h. einen kleinen Wert der Feldamplitude f . Abbildung 7.1 zeigt einen klassischen stroboskopischen Poincaré Schnitt für $f = 0.05$. Man erkennt zwei periodische Bahnen (die beiden 'Resonanzen') bei $(J, \vartheta) \approx (\pm 1, 0)$, bei denen das System synchron mit dem Feld mit der Frequenz $\omega = 1$ rotiert, entweder rechts oder links herum. Diese Bahnen sind stabil und daher umgeben von einer ausgedehnten Stabilitätsinsel, deren Separatrizen die hyperbolischen Fixpunkte $(J, \vartheta) \approx (\pm 1, \pm\pi)$ kreuzen und eine Breite $\Delta J \approx 2\sqrt{2f}$ besitzen. In der Umgebung dieser Separatrix findet man die ersten Anzeichen chaotischer Dynamik. Mit wachsendem f vergrößert sich diese chaotische Schicht und – nach dem Kriterium von Chirikov – haben wir globales Chaos, sobald die Resonanzzonen überlappen, also für $2f > \omega^2 = 1$.

Für die folgenden Untersuchungen wurde ein Wert $f = 1$ gewählt. Der Poincaré Schnitt in Abbildung 7.2 zeigt eine kleine Stabilitätsinsel eingebettet in einen chaotischen See, der umgeben ist von einem Bereich mit (näherungsweise) regulärer Dynamik. (Man beachte, dass wegen der Symmetrie nur der obere Teil des Phasenraums dargestellt ist.) Die quantenmechanischen Rechnungen im folgenden verwenden $\hbar = 0.02$ und in Einheiten von $h = 2\pi\hbar = 0.126$ sind die klassischen Phasenraumflächen des chaotischen Bereichs $A_C = 92h$ und der Stabilitätsinseln $A_S = 4.4h$. Daneben gibt es noch kleinere Stabilitätsinseln, die in der Abbildung nicht sichtbar sind. Am ausgeprägtesten ist eine Kette von drei Inseln (mit symmetrischen Kopien in der unteren Hälfte des Phasenraums) mit einer Fläche von insgesamt $0.02h$. Der maximale klassische Drehimpuls im chaotischen Bereich hat einen Wert $J_{\max} \approx 2.6 = 130\hbar$.

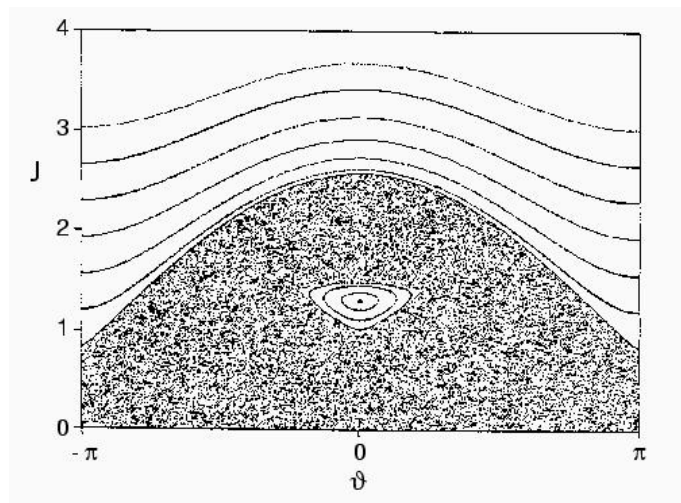


Abbildung 7.2: Stroboskopischer Poincaré-Schnitt für den getriebenen Rotor ($f = 1$).

7.2.1 Chaotische und reguläre Zustände

Berechnet man numerisch die Quasienergiezustände $|\alpha\rangle$ für den getriebenen Rotor ($f = 1$, $\hbar = 0.02$) und ordnet sie wie oben beschrieben nach wachsendem $\langle\alpha|J^2/2|\alpha\rangle$ (siehe Abb. 7.3), so findet man 96 Plateau-Zustände, von denen 92 delokalisiert sind auf dem chaotischen Bereich. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten $p_{\alpha j} = |\langle j|\alpha\rangle|^2$ der freien Rotorzustände sind in Abbildung 7.4 exemplarisch für den Zustand $\alpha = 90$ dargestellt.

Energie–Entropie Diagramme

Man kann jetzt die Quasienergiezustände durchmustern und nach ihren Lokalisierungseigenschaften in der Rotor-Basis oder in den Husimidichten auf dem Phasenraum klassifizieren. Dieses Verfahren ist jedoch zeitraubend und ineffektiv. Als Alternative läßt sich

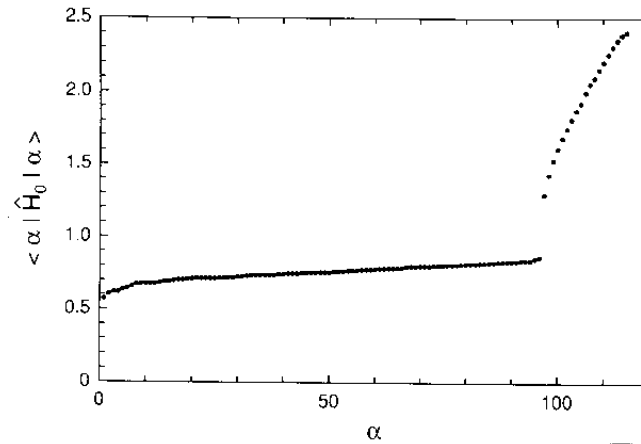


Abbildung 7.3: Erwartungswerte des feldfreien Hamilton-Operators für den getriebenen Rotor ($f = 1$, $\hbar = 0.02$).

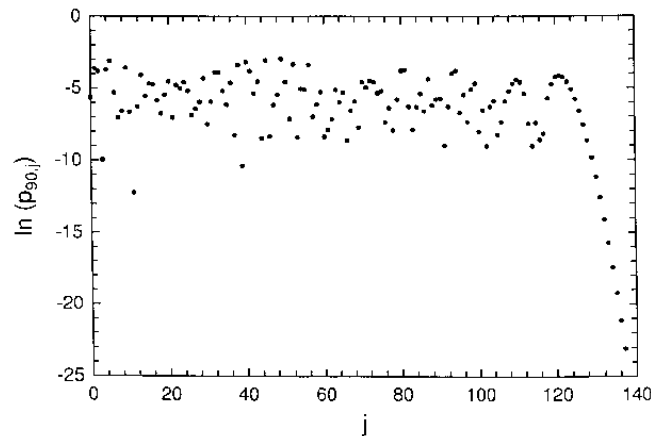


Abbildung 7.4: Besetzungswahrscheinlichkeiten der freien Rotor Zustände für den delokalisierten Quasienergiezustand $\alpha = 90$ des getriebenen Rotors ($f = 1$, $\hbar = 0.02$).

die Lokalisierung quantitativ bestimmen mit Hilfe der Entropie

$$S_\alpha = - \sum_j p_{\alpha j} \ln p_{\alpha j} \quad (7.36)$$

(q Abschnitt 6.2.2). Abbildung 7.5 zeigt ein so genanntes Energie-Entropie Diagramm, in dem eine Größe, die die Ordnung der Zustände charakterisiert (hier der Erwartungswert der Energie) gegen eine Größe, die die Delokalisierung mißt (hier die Entropie (7.36), aufgetragen wird.

Man erkennt klar die drei Klassen von Zuständen: Vier Zustände ($\alpha = 89, 87, 82, 93$) haben fast die gleiche Energie und relativ kleine, anwachsende Entropie. Dies sind die Inselzustände. Dann gibt es einen regelmäßigen Streifen von Zuständen mit hoher Energie und systematisch fallender Entropie, d.h. zunehmender Lokalisierung in der Rotor-Basis. Diese Zustände sind dem äußeren regulären Bereich zuzurechnen. Die restlichen Zustände erscheinen in einem ungeordneten Haufen mit fast gleicher Energie und hoher Entropie. Dies sind die ‘chaotischen’ Zustände, also die auf dem chaotischen See lokalisierten.

Quasienergie–Statistik

Nachdem wir die Quasienergiezustände als ‘chaotische’ oder ‘regulär’ klassifiziert haben, können wir jetzt versuchen die Annahme zu erhärten, dass die ‘chaotischen’ Zustände sich ‘zufällig’ verhalten. Das heißt zum Beispiel, dass die Abstände der Quasienergien (in der Brillouin-Zone $-\hbar\omega/2 < \epsilon_\alpha < \hbar\omega/2$) wie die einer Zufallsmatrix verteilt sind. Abbildung 7.6 zeigt solche Verteilungen getrennt für die chaotischen und die regulären Quasienergiezustände des getriebenen Rotors für $\hbar = 0.01$. Die Quasienergien wurden so reskaliert, dass ihr mittlerer Abstand den Wert eins hat. Es ist zu beachten, dass diese Statistik getrennt für jede der verschiedenen Symmetrieklassen durchgeführt wird. Die dabei entstehenden Histogramme können superponiert werden.

Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Verteilungen mit einer Wigner-Verteilung im chaotischen und mit einer exponentiellen Verteilung im regulären Fall. Dabei unterstützt die Übereinstimmung der Statistik chaotischer Zustände mit der von Zufallsmatrizen unsere Erwartung. Überraschend erscheint aber im ersten Moment die Exponentialverteilung im regulären Fall, wenn wir uns daran erinnern, dass man eine solche Verteilung für rein zufällig gewählte Zahlen erhält. Eine genauere Überlegung liefert jedoch

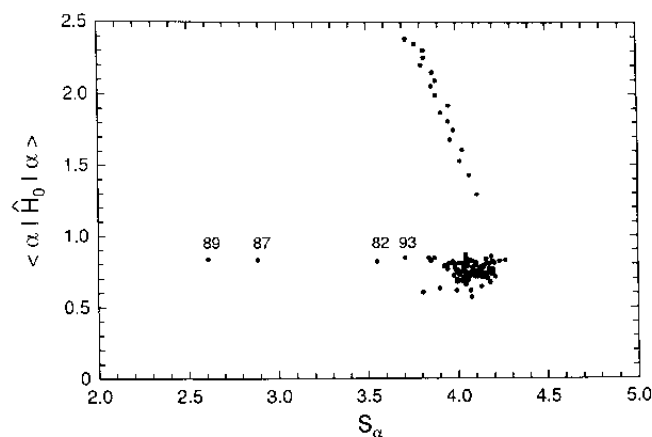


Abbildung 7.5: Energie–Entropie Diagramm der Quasienergiezustände des getriebenen Rotors ($f = 1$, $\hbar = 0.02$).

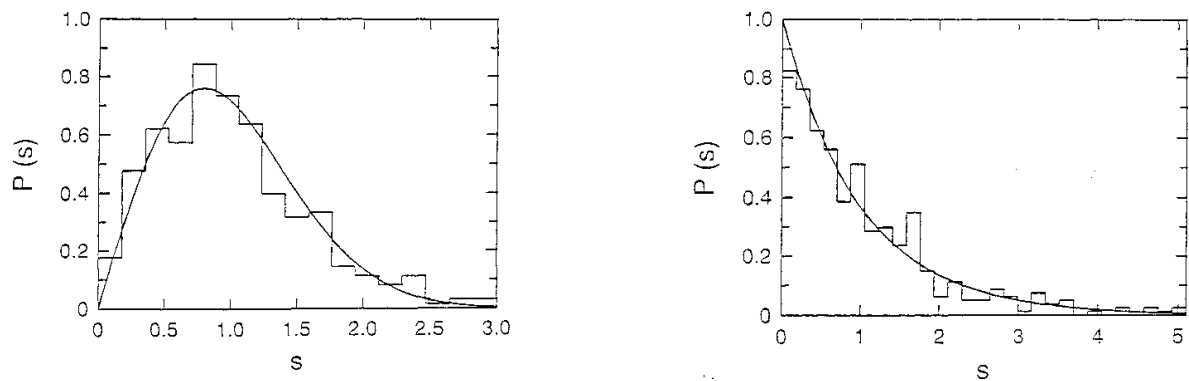


Abbildung 7.6: Nächste-Nachbar Statistik der Quasienergiezustände des getriebenen Rotors ($f = 1$, $\hbar = 0.01$). Das linke Bild zeigt die chaotischen Zustände im Vergleich mit einer Wigner-Verteilung, das rechte die regulären im Vergleich mit einer Poissonverteilung

auch für die regulären Zustände eine exponentielle Verteilung⁴. Weitere Untersuchungen findet man in der Literatur, wie zum Beispiel der Statistik einer Menge von gemischten regulären und chaotischen Zuständen⁵.

⁴Siehe z.B. das oben zitierte Buch von Haake, Kap. 5.

⁵Siehe z.B. T. Gorin, H. J. Korsch, B. Mirbach, Chem. Phys. 217 (1997) 145.

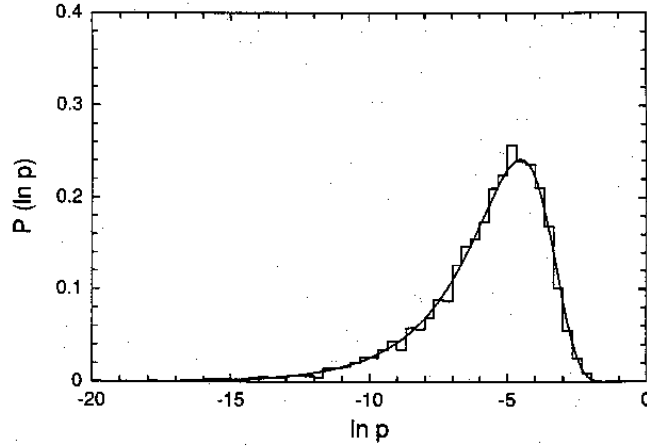


Abbildung 7.7: Statistik der Projektionen $p_{\alpha j}$ der Quasienergiezustände auf die Basis des freien Rotors (Histogramm) im Vergleich mit der Thomas–Porter Verteilung.

Statistik der Besetzungszahlen

Eine weitere Vermutung betrifft die Komponenten eines als chaotisch klassifizierten Quasienergiezustandes in einer typischen Basis, z.B. der Basis des freien Rotors $|j\rangle$. Innerhalb eines ausgedehnten Bereiches fluktuieren die Besetzungswahrscheinlichkeiten $p_{\alpha j} = |\langle j|\alpha\rangle|^2$ scheinbar erratisch um einen Mittelwert (vgl. Abbildung 7.4). Diese Fluktuation scheint für alle ‘chaotischen’ Zustände gleich zu sein.

Wenn wir jetzt die Häufigkeiten aller dieser Projektionen bestimmen, das heißt die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von $p_{\alpha j}$ der Größe p , so erhalten wir ein Histogramm wie in Abbildung 7.7 dargestellt (hier ist $\ln p$ als Variable gewählt). Wir haben $N = 92$ als chaotisch klassifizierte Zustände aus einem orthogonalen Ensemble. Aus der Theorie der Zufallsvektoren in Abschnitt 7.1.2 erwartet man dann eine χ^2_ν -Verteilung mit $d = N$ und $\nu = 1$, also

$$\chi^2_1(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi p N}} e^{-pN/2}, \quad (7.37)$$

eine so genannte *Thomas–Porter Verteilung* mit Mittelwert $\bar{p} = 1/N$ und Varianz $\Delta p = \sqrt{2}/N$.

Der Vergleich in Abbildung 7.7 zeigt, dass diese Verteilung die numerischen Resultate sehr gut wiedergibt. Anzumerken ist, dass man aus einer solchen Statistik den eventuell unbekanntem Wert von N , also die Anzahl der chaotischen Zustände, bestimmen kann. Weitere Details dazu findet man in der Literatur (siehe Fußnote aus Seite 82).

7.2.2 Klassische und Quantendynamik

In diesem Abschnitt soll die Dynamik des getriebenen Rotors untersucht werden. Ein Ziel ist dabei, die Korrespondenz zwischen der klassischen und quantenmechanischen Zeitevo-

lution aufzuzeigen. Weiterhin soll dieses System beispielhaft belegen, dass die chaotische klassische Dynamik mit einer Quantendynamik einhergeht, die sehr gut durch eine Zufallsbewegung des Zustandsvektors im Hilbertraum beschrieben werden kann.

Wir betrachten im folgenden einen Rotor, der sich zur Zeit $t = 0$ im Rotationsgrundzustand befindet, quantenmechanisch also $|\psi(0)\rangle = |j = 0\rangle$. Wir berechnen dann numerisch, z.B. in diesem Fall mit der besonders effizienten (t, t') -Methode, den Zustandsvektor zu Zeiten $t = nT$ und damit die Wahrscheinlichkeiten $p_j(n)$ für Rotationsübergänge $0 \rightarrow j$

$$p_j(n) = |\langle j | \psi(t = nT) \rangle|^2. \quad (7.38)$$

Klassisch propagieren wir entsprechend ein Ensemble von Trajektorien mit Anfangsbedingung $J = 0$ und gleichverteiltem Winkel ϑ .

(Rotations-) Regenbögen

Wir modellieren die klassische Anfangsverteilung durch 8000 ‘Teilchen’, die äquidistant auf der Kurve $J(\vartheta) = 0$ im klassischen Phasenraum verteilt sind. Nach einer Zeitperiode T wird diese Kurve auf die Kurve $(J(T), \vartheta(T))$ abgebildet. Diese Kurve ist in Abbildung 7.8 unter $n = 1$ dargestellt (der Teil der Kurve in der unteren Halbebene kann leicht symmetrisch ergänzt werden). Wir beobachten eine Ausbildung von Faltungen und Tentakeln. Dieser Prozeß setzt sich mit anwachsender Zeit $t = nT$ fort, und die Kurve entwickelt schnell zunehmend komplexere Strukturen. Man sollte sich dazu folgendes klarmachen: (i) Die Kurve ist anfänglich geschlossen (der Phasenraum ist topologisch ein Zylinder) und bleibt geschlossen. (ii) Im Langzeitmittel müssen fast alle Punkte der Anfangsverteilung allen Punkten des chaotischen Bereichs des Phasenraums beliebig nahe kommen. (iii) Daraus ergibt sich, dass die Kurve im Langzeitlimit dicht in dem chaotischen See liegen muß. (iv) Die Länge der Kurve $L(n)$ wächst exponentiell mit der Zeit, genauer wie

$$L_n = L_0 e^{\lambda n} \quad (7.39)$$

mit dem Lyapunov Exponenten λ , der sich numerisch als $\lambda = 1.065$ ergibt.

Wenn wir jetzt die klassischen Rotationsanregungswahrscheinlichkeiten für die Quantenübergänge $j = 0 \rightarrow j$ berechnen, also für unser Ensemble von Teilchen der Anteil von Teilchen zur Zeit nT mit Drehimpulsen im Intervall der Breite \hbar bei $J = j\hbar$, so entsprechen diese Verteilungen (dargestellt im linken Teil von Abbildung 7.8) den Projektionen der iterierten Kurve auf die Drehimpulsachse. Die ausgeprägten Maxima der klassischen Übergangswahrscheinlichkeiten korrespondieren mit den horizontalen Tangenten der iterierten Kurven im rechten Teil. In Analogie zu den optischen Regenbögen bezeichnet man diese Strukturen als *Rotationsregenbögen*⁶

Man kann nun abschätzen, dass die Anzahl dieser Regenbögen mit der Anzahl der Faltungen anwächst, also etwa wie $N_n = e^{n\lambda}$. Da die Anzahl der ΔJ -Boxen endlich ist, findet man nach $n^* \approx \ln(2J_{\max}/\hbar) \approx 5$ Perioden im Mittel ein Regenbogen-Maximum in einer δJ -Box, d.h. die Strukturen können nicht mehr aufgelöst werden.

⁶Mehr über solche Regenbogenstrukturen findet man z.B. in dem Übersichtsartikel H. J. Korsch, A. Ernesti, J. Phys. B25 (1992) 3565.

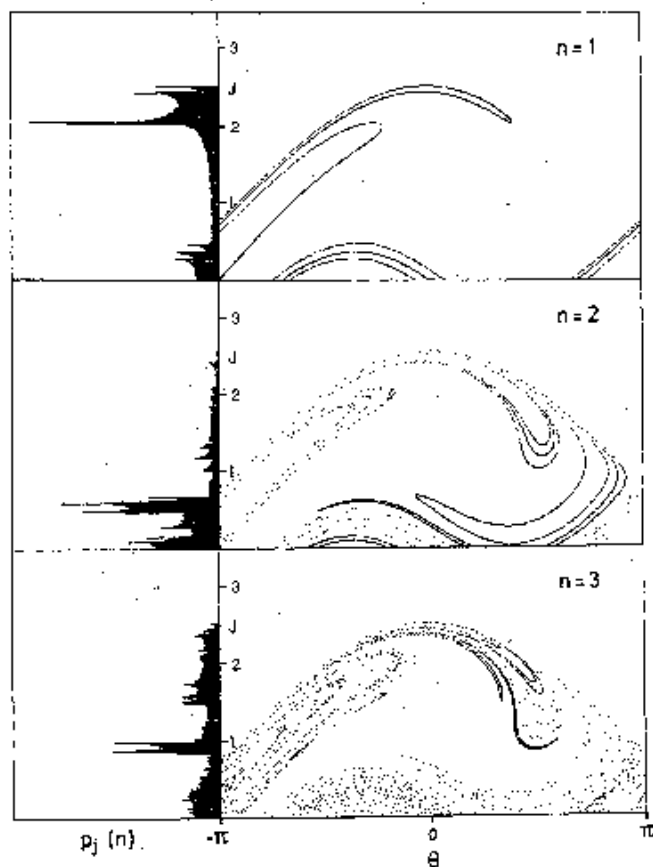


Abbildung 7.8: Klassische Zeitpropagation eines Ensembles von 8000 Teilchen mit Anfangsverteilung längs $J = 0$ und gleichverteiltem Winkel ϑ nach $n = 1, 2$ und 3 Zeitperioden T . Auf der linken Seite sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Drehimpulse J in einem Histogramm mit Boxbreite $\Delta J = \hbar = 0.02$ aufgetragen.

Die quantenmechanischen Anregungswahrscheinlichkeiten $p_j(n)$ für Übergänge aus dem Rotationsgrundzustand $j = 0$ zur Zeit $t = nT$ sind für $n = 1$ und $n = 6$ in Abbildung 7.9 dargestellt. Man beobachtet zunächst eine direkte Korrespondenz zwischen Quantenmechanik und Klassik (die zusätzlichen quantenmechanischen Oszillationen lassen sich auf Interferenzeffekte zurückführen). Nach $n = 6 > n^*$ Perioden sind die Strukturen verschwunden, abgesehen von einem außergewöhnlichen Maximum bei $j \approx 25$, das eine tieferliegende Ursache hat (siehe die in der Fußnote Seite 82 angegebene Literatur). Die quantenmechanischen Oszillationen erscheinen jetzt erratisch, also als quasi zufällige Fluktuationen.

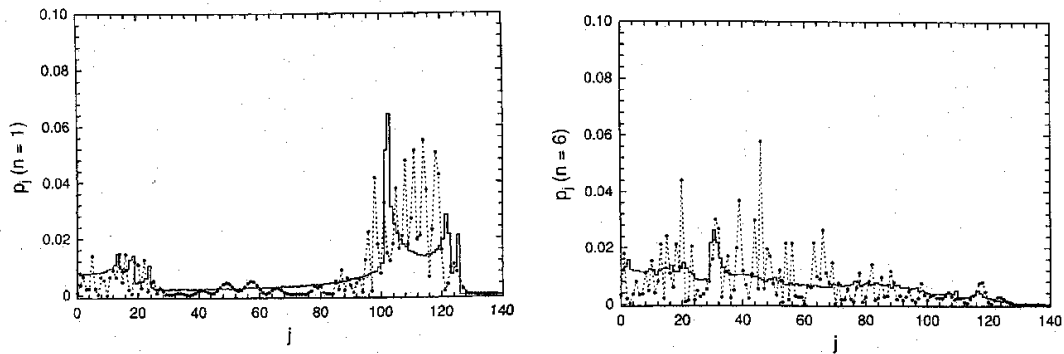


Abbildung 7.9: Quantenmechanische Anregungswahrscheinlichkeit $p_j(n)$ (\bullet) für Übergänge aus dem Rotationsgrundzustand $j = 0$ zur Zeit $t = T$ (linkes Bild) und $t = 6T$ (rechtes Bild).

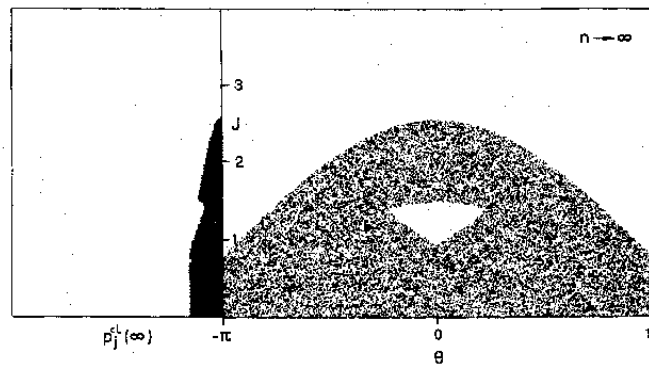


Abbildung 7.10: Klassischer stroboskopischer Poincaré Schnitt einer chaotischen Bahn für lange Zeiten. Links ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Drehimpulses J in einem Histogramm mit Boxbreite $\Delta J = \hbar = 0.02$ aufgetragen.

Anregungswahrscheinlichkeiten: Ein Beispiel für Quantenchaos?

Im Limit langer Zeiten nähert sich die klassische Verteilung immer mehr einer Gleichverteilung (vgl. Abbildung 7.10), während die Fluktuationen der quantenmechanischen $p_j(n)$ sich immer weiter fortsetzen. Bestimmt man zum Beispiel die zeitabhängige quantenmechanische Entropie

$$S(n) = - \sum_j p_j(n) \ln p_j(n), \quad (7.40)$$

die den Grad der Lokalisierung auf der Basis der freien Rotor Zustände mißt, so findet man ein Verhalten, dass für lange Zeiten um einen Mittelwert $\bar{S} = 4.386$ schwankt. Dieser Wert ist merklich kleiner als der klassische Wert von $\bar{S}_{\text{klass}} = 4.776$ (vergl. Abbildung 7.11). Die Differenz $\bar{S}_{\text{klass}} - \bar{S} = 0.39$ kann man theoretisch verstehen im Rahmen des Zufallsvektor Modells: es ist die Entropie, die in den quantenmechanischen Fluktuationen

steckt. Interessanterweise läßt sich ein einfacher Ausdruck dafür herleiten, nämlich $\overline{S}_{\text{klass}} - \overline{S} \approx 1 - c = 0.4112\dots$ (c ist die Euler Konstante). Eine Herleitung findet man in der Literatur (siehe Fußnote Seite 82).

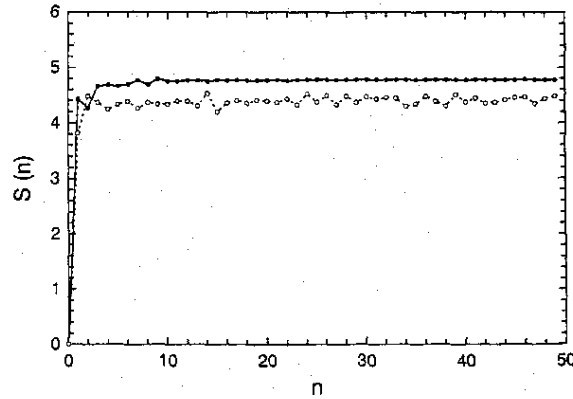


Abbildung 7.11: Zeitabhängigkeit der Entropie $S(n)$ ($- \circ -$) zu Zeiten $t_n = nT$ im Vergleich mit der klassischen Entropie ($- \bullet -$).

Einen interessanten Eindruck von der quantenmechanischen Zeitevolution vermittelt uns Abbildung 7.12. Hier sind die quantenmechanischen Anregungswahrscheinlichkeiten $p_j(n)$ von Rotationenzuständen j zur Zeit $t = nT$ dargestellt (der Anfangswert $p_j(0) = \delta_{j0}$ ist unterdrückt). Der Bereich bis zum maximalen j wird bevölkert und die Größe p der einzelnen $p_j(n)$ variiert sehr stark. Eine Statistik dieser Werte im Vergleich mit der Exponentialverteilung (die Zeitevolution ist unitär, d.h. wir haben hier ein unitäres Ensemble zu betrachten anstelle eines orthogonalen)

$$P(p) = \frac{1}{\bar{p}} e^{-p/\bar{p}} \quad (7.41)$$

in Abbildung 7.13 zeigt sehr gute Übereinstimmung. Dabei ergibt sich $1/\bar{p} = 92$, d.h. die Dimension des ‘chaotischen’ Teilraums des Hilbertraums.

Weitere Details finden sich in der angegebenen Arbeit (Fußnote Seite 82). Zum Abschluß sei noch ein realistischeres Beispiel für eine derartige Zeitevolution gegeben: die Photodissoziation von Wasser. Dabei wird das H_2O Molekül z.B. durch einen Laser angeregt in einen elektronisch angeregten Zustand, aus dem es dissoziieren kann. Wenn man diesen Prozess in einer zeitabhängigen quantenmechanischen Rechnung behandelt, d.h. wenn man eine Wellenfunktion auf einer realistischen mehrdimensionalen Potentialfläche numerisch propagiert⁷, so ergibt sich für die Rekurrenzamplitude $\sqrt{\bar{p}} = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|$ das in Abbildung 7.14 dargestellte Bild. Man findet wie erwartet einen etwa exponentiellen Zerfall überlagert von starken Fluktuationen. Korrigiert man die exponentielle Zeitabhängigkeit heraus, so findet man, dass die Fluktuationen einer Statistik folgen, die

⁷Siehe M. von Dirke, B. Heumann, K. Kuhl, T. Schröder, R. Schinke, J. Chem. Phys. 101 (1994) 2051.

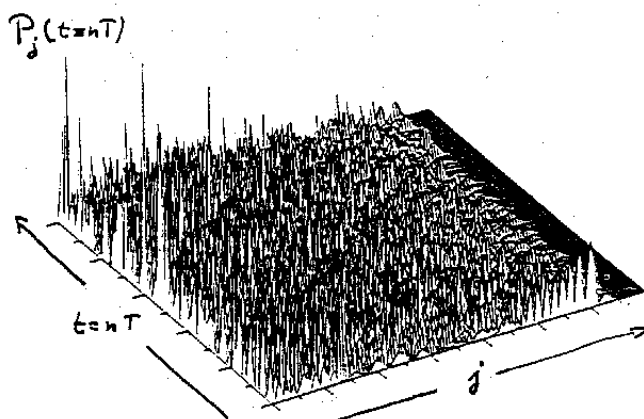


Abbildung 7.12: Darstellung der quantenmechanischen Anregungswahrscheinlichkeiten $p_j(n)$ von Rotationenzuständen j zur Zeit $t = nT$.

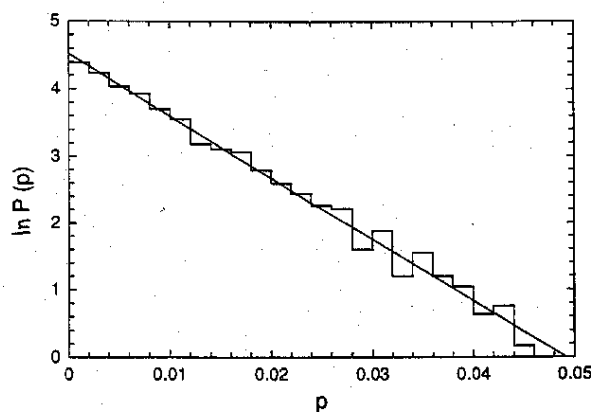


Abbildung 7.13: Statistik der quantenmechanischen Anregungswahrscheinlichkeiten $p_j(n)$ (Histogramm) im Vergleich mit der Exponentialverteilung aus dem Zufallsvektor Modell.

der in [Abbildung 7.13](#) entspricht. Nur bestimmt man hier aus der Steigung eine weitaus größere Dimension des zugrundeliegenden Hilbertraums, nämlich $1/\bar{p} = 1200$.

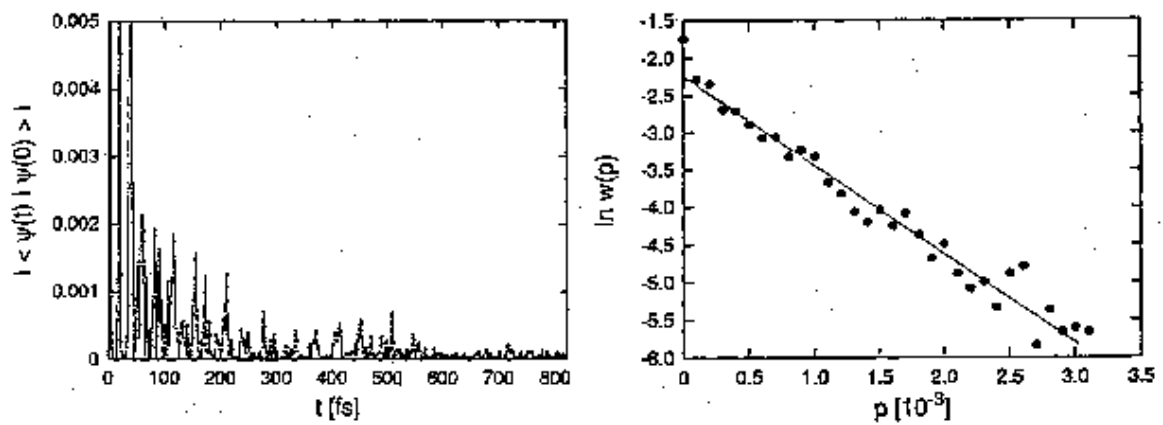


Abbildung 7.14: Rekurrenzamplitude $\sqrt{p} = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|$ der zeitpropagierten Wellenfunktion im B -Zustand des H_2O Moleküls als Funktion der Zeit (linkes Bild). Das rechte Bild zeigt die Statistik der Fluktuationen von p (nach Korrektur des Verlustes durch Dissoziation) im Vergleich mit der Exponentialverteilung aus dem Zufallsvektor Modell.