

Hanns Ruder und  
Wolfgang Schweizer

# Atomare Strukturen und Quantenchaos

Mit Supercomputern, den modernen Forschungsinstrumenten des theoretischen Physikers, lassen sich Informationen gewinnen, graphisch aufbereiten und visualisieren, die uns experimentelle Apparaturen nicht zu liefern vermögen. Ein aktuelles Beispiel ist die Darstellung elektronischer Zustände in Atomen.

Wissenschaftliche Forschung produziert heute eine Vielzahl an Daten und Informationen, deren Analyse eine Darstellung erfordert, die dem menschlichen Denken angepaßt ist. Der Mensch als „Augentier“ erfaßt optisch aufbereitete, komplexe Datenstrukturen und ist in der Lage, ähnliche Informationen zu erkennen und einzuordnen. Pädagogisch bietet die Visualisierung wissenschaftlicher Erkenntnisse dem Lernenden einen einprägsamen und stimulierenden Zugang zur Verarbeitung des Neuen, noch Unbekannten. Ein gutes Beispiel ist die Mikrowelt der Atome.

Der große Physiker und Positivist Ernst Mach hat sich Ende des 19. Jahrhunderts lange gewehrt, die Existenz von Atomen anzuerkennen. Es wird berichtet (z. B. in dem Buch „Weltreich der Physik“ von Armin Hermann), daß von ihm jede Diskussion über Atome mit der Frage beendet wurde „Ham's ans g'sehn?“.

Inzwischen zweifelt (hoffentlich) niemand mehr an der Existenz von Atomen, und auch zu der Frage, wie sie „aussehen“, gibt es ideenreiche Anstrengungen sowohl auf der experimentellen als auch auf der theoretischen Seite. Wobei „aussehen“ hier nicht bedeutet, daß man sie etwa in einem Lichtmikroskop einfach betrachten könnte. Atome sind einige tausendmal kleiner als die Lichtwellenlänge und demzufolge mit optischen Methoden prinzipiell räumlich nicht auflösbar. „Aussehen“ heißt hier, daß die einzelnen Atome unter bestimmten experimentellen Bedingungen, wie in einem Elektronenmikroskop oder einem Rastertunnelmikroskop, in Erscheinung treten, bei dem letztgenannten als dreidimensionale Hügellandschaft oder als mehr oder weniger geordnete, erbsenähnliche Gebilde [1] (Abbildung 1).

## Visualisierung von Atomen

Für den theoretischen Physiker stellt sich die Situation etwas einfacher dar: Durch numeri-

sche Lösung der Schrödinger-Gleichung mit Hilfe moderner Supercomputer lassen sich die Eigenschaften zumindest der leichteren Atome mit nahezu beliebiger Genauigkeit berechnen. Das Ergebnis solcher Rechnungen sind Energien, Wellenfunktionen und weitere spezifische Eigenschaften des Atoms. Nun ist die Wellenfunktion ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, das Elektron an einem bestimmten Ort anzutreffen. Das heißt man kann sich das Betragsquadrat der Wellenfunktion als eine den Atomkern umgebende dreidimensionale Wolke vorstellen, deren Dichte proportional zur Wahrscheinlichkeit ist, das Elektron an der jeweiligen Stelle anzutreffen. Stellt man sich vor, daß diese nebelartige Struktur leuchtet, dann kann man berechnen, wie diese Elektronenwolke für einen sich an einem beliebigen Ort befindlichen Beobachter aussieht, indem man die Intensitäten längs der verschiedenen Sehstrahlen (Abbildung 2) aufintegriert.

Berücksichtigt man zusätzlich noch eine Selbstabsorption des „Nebels“, so kann man durch Variation des Absorptionsparameters unterschiedlich tief in das Objekt hineinblicken. Die so gewonnenen Bilder lassen sich dann Helligkeits- oder farbcodiert auf einem hochauflösenden Graphikschirm darstellen und zeigen, wie ein Atom „aussieht“ (Abbildung 3). Zusätzlich kann man die Atome drehen und so einen echten dreidimensionalen Eindruck von der Struktur des Atoms vermitteln. (Es ist geplant, Videobänder und Filme für Demonstrationszwecke allgemein zugänglich zu machen.)

Richtet man das Supermikroskop nicht nur auf statische Objekte, sondern auch auf dynamische Vorgänge, so erschließen sich dem Betrachter physikalisch neue Welten. So wurden z. B. mit Hilfe von Filmsequenzen, in denen man die Wirkung eines anwachsenden Magnetfeldes auf die Form des Atoms direkt verfolgen kann, neue Einsichten in die Physik kompakter Objekte gewonnen (Abb. 4).

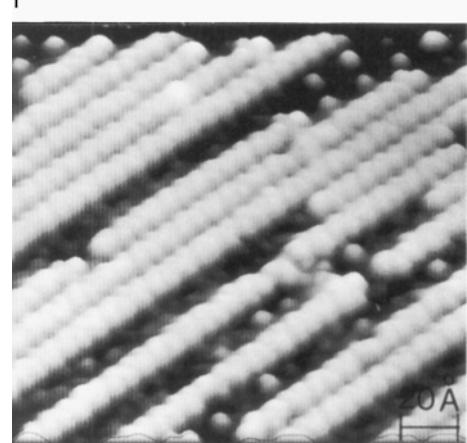


Abb. 1. Rastertunnelmikroskop-Aufnahme einer Si(110)-Oberfläche. Die Ortsauflösung dieser Methode erlaubt es, atomare Strukturen der obersten Atomlage direkt darzustellen. (Foto: H. Neddermeyer, Bochum).

Besonders eindrucksvoll in ihren komplexen Strukturen sind dabei die hochangeregten Rydberg-Zustände [2] im Magnetfeld, zu deren Darstellung auf einem Supercomputer, der Cray 2 des Rechenzentrums der Universität Stuttgart, die tausend niedrigsten Eigenwerte und deren Eigenvektoren aus Matrizen mit über hundertsiebzig Millionen von Null verschiedenen Matrixelementen berechnet wurden (Abbildung 5). In diesen Zuständen mit Hauptquantenzahlen um 50 bis 100 wird aus dem Wasserstoffatom ein zartes und bizarres Gebilde voll künstlerischer Ästhetik mit Bindungsenergien von wenigen Millielektronenvolt und räumlichen Ausdehnungen in Magnetfeldrichtung bis zu einigen tausendstel Millimetern, also vergleichbar der Größe einer weißen Blutkörperchen.

Diese Gebilde sind interessante Studienobjekte für den Übergang von der klassischen Physik zur Quantenmechanik und von fundamentaler Bedeutung für Fragen im Zusammenhang mit dem Quantenchaos. Das klassische System zeigt in diesen Magnetfeld- und

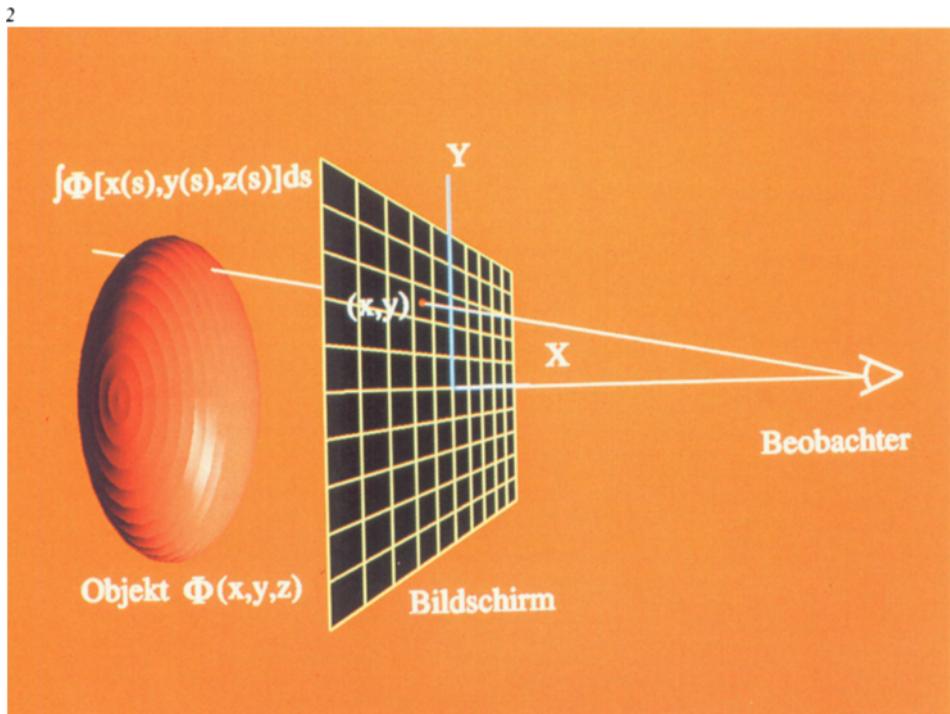


Abb. 2. Schematische Darstellung der Sehstrahl-Integration. Die Wahrscheinlichkeit, ein atomares Elektron an einem bestimmten Ort in der Umgebung des Atoms zu finden, ist durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion bestimmt. Stellen wir uns dies als eine nebelartige, leuchtende Struktur vor, so können wir durch Integration längs eines Sehstrahles ein Abbild des Atoms erzeugen.

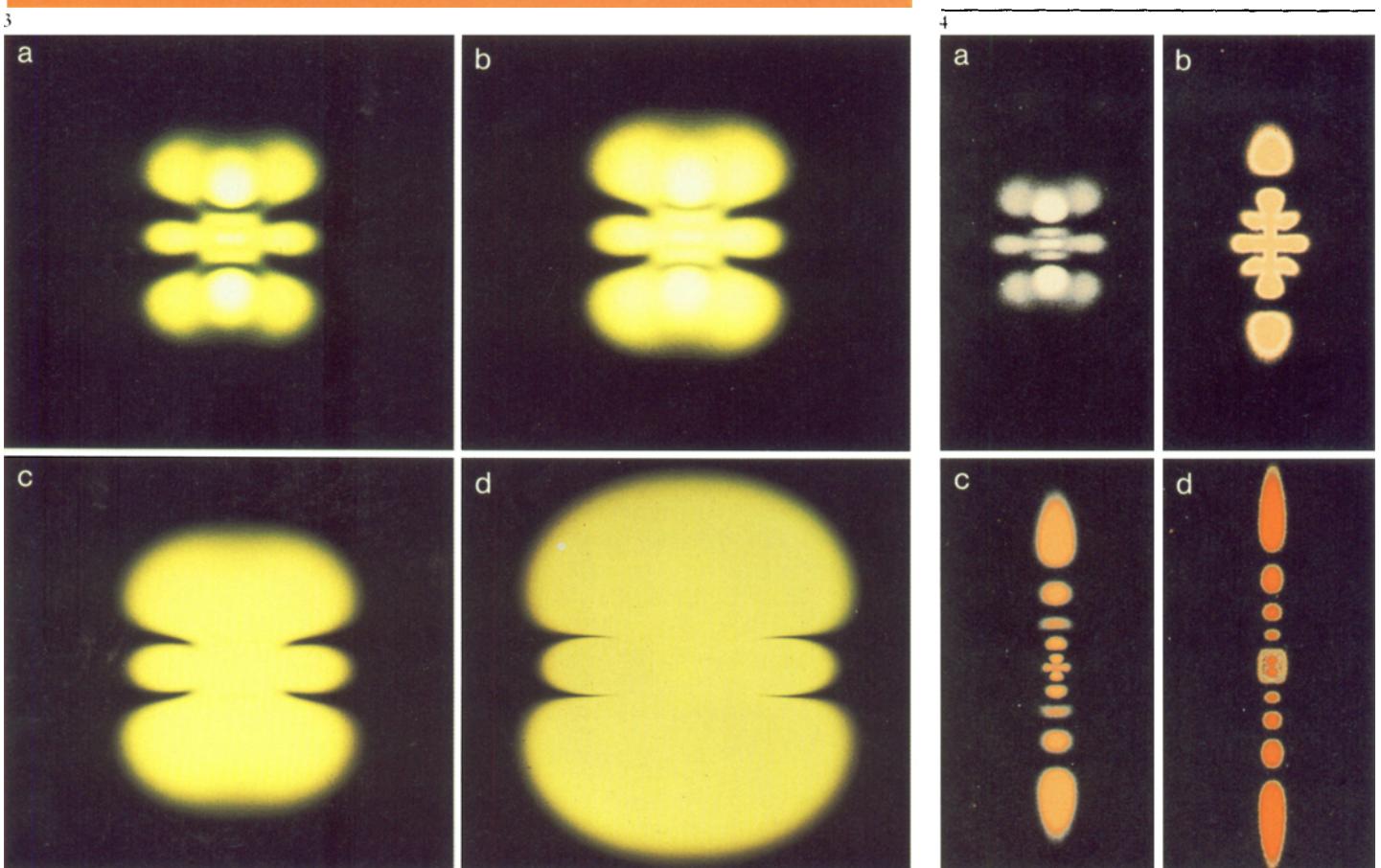


Abb. 4 Die Wirkung eines Magnetfeldes (von a) nach d) anwachsend) auf die Struktur eines Wasserstoffatoms, visualisiert mit Hilfe der Sehstrahlmethode. Durch die zu-

nehmenden Kräfte werden die Atome zu nadelförmigen Gebilden zusammenge schnürt. Zustand  $5d_0$ ; Magnetfelder: 470 T, 4700 T, 23 500 T und 47 000 T. Solche Ma-

gnetheldstärken findet man bei Weißen Zwergen und Neutronensternen.

5

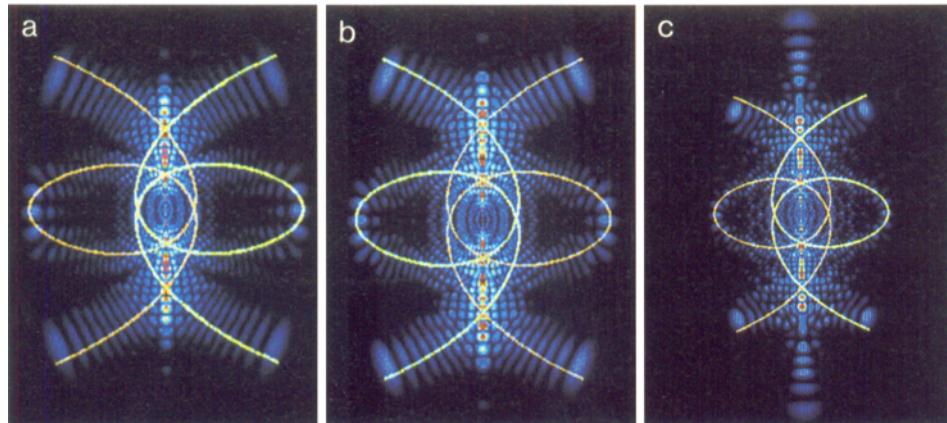


Abb. 5. Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines hochangeregten Elektrons des Wasserstoffatoms in einem äußeren Magnetfeld ( $\approx 6\text{ T}$ , farbcodiert) zusammen mit der Projektion einer ausgewählten Bahn des entsprechenden klassischen Systems. Die Visualisierung solch hochangeregter Zustände ermöglicht es, den semiklassischen Limes des Quantensystems zu untersuchen.

Deutlich erkennt man dominante Strukturen des quantenmechanischen Systems in der Umgebung der klassischen Trajektorie. Solche Strukturen in den quantenmechanischen Wellenfunktionen weisen auf eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in der Umgebung dieser klassischen periodischen Bahn hin und werden auch als Narben bezeichnet.

Energiebereichen einen Übergang von regulärem zu chaotischem Verhalten. Klassische periodische Bahnen werden zunehmend instabil, nichtperiodische Bahnen stochastisch. Semiklassische Vorhersagen lassen jedoch eine Lokalisierung der Elektronenbahnen, das heißt eine Überhöhung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons längs klassischer Bahnen, erwarten. Die Bedeutung einer guten Visualisierung kommt insbesondere hier zum Tragen. Die Computervisualisierung liefert ein farbcodiertes Bild, in dem Lokalisierungen längs klassischer Bahnen als „Narben“ (engl.: scars) in der Struktur erkennbar sind. Während uns die Sehstrahlintegration globale visuelle Eindrücke der atomaren Strukturen vermittelt, erlaubt uns das Studium dieser farbcodierten Bilder, lokale Strukturen zu untersuchen.

### Das klassische System

Eines der einfachsten physikalischen Systeme, das sowohl dem Experiment als auch der numerischen Untersuchung zugänglich ist, ist das Wasserstoffatom. Es war das System, das die Physik aus dem klassischen Käfig befreite und half, die Tür zu einer neuen Welt, der Quantenmechanik, zu öffnen. Im semiklassischen Limes, das heißt für hochangeregte Rydberg-Zustände, erwarten wir nach dem Korrespondenzprinzip, Fingerabdrücke des klassischen Systems auch im quantenmecha-

nischen Bild zu finden. Das zum Wasserstoffatom korrespondierende klassische System ist das Kepler-System, wie wir es aus dem Sonnensystem kennen.

Untersuchen wir die Kepler-Bewegung einer Ladung unter dem Einfluß eines homogenen, zeitlich konstanten äußeren Magnetfeldes in  $z$ -Richtung, so wird die Dynamik von zwei unterschiedlichen Potentialen bestimmt. Das Coulomb-Potential zwischen Elektron und positiv geladenem Atomkern ist sphärisch symmetrisch, das heißt seine Wirkung hängt nur vom Abstand der beiden Ladungen ab und wird umso schwächer, je weiter die Ladungen voneinander entfernt sind. Das äußere Magnetfeld führt zu einem paramagnetischen Beitrag, der proportional zur Magnetfeldstärke ist, sowie zu einem diamagnetischen Potential, das mit dem Quadrat der Magnetfeldstärke und quadratisch mit dem Abstand von der Magnetfeldachse zunimmt. Das diamagnetische Potential ändert sich längs dieser Magnetfeldachse nicht. Um die Bahn eines Elektrons vollständig zu beschreiben, genügt es daher, dessen Abstand von der Magnetfeldachse  $p$  sowie dessen Position parallel zur Magnetfeldachse  $z$  als Funktion der Zeit anzugeben: Das System besitzt also zwei Freiheitsgrade der Bewegung. Der paramagnetische Beitrag zur Gesamtenergie ist konstant. Wir können daher eine Beschreibung wählen, bei der die Dynamik nur von zwei

Kräften bestimmt ist: Der Coulomb-Kraft und der diamagnetischen Kraft. Wesentliche Größen, die das physikalische System kennzeichnen, sind daher die Stärke des Magnetfeldes,  $\gamma = \text{Magnetfeldstärke} \cdot (2,35 \cdot 10^5 \text{ T})^{-1}$  sowie die Gesamtenergie  $E$  ohne paramagnetischen Beitrag.

Das diamagnetische Potential besitzt eine zylindrische, das Coulomb-Potential dagegen eine sphärische Symmetrie. Eine Folge dieser unterschiedlichen, nicht miteinander zu vereinbarenden Symmetrien ist das Auftreten von Chaos. Für ein detailliertes Studium der dynamischen Eigenschaften müßten wir alle möglichen Trajektorien in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke  $\gamma$  sowie der Energie  $E$  untersuchen – ein fürwahr umfangreiches Vorhaben. Die Natur vereinfacht uns unsere Aufgabe jedoch wesentlich. Die qualitativen Eigenschaften des klassischen Systems hängen nur von der skalierten Energie  $\epsilon = \text{Energie} \cdot \gamma^{2/3}$  ab. Es genügt daher, die Dynamik zu unterschiedlichen Werten von  $\epsilon$  zu untersuchen. Durch einfache Längenskalierungen können wir zu den ursprünglichen Einheiten und Parametern zurückkehren.

Das Coulomb-Potential kann am Ursprung beliebig tiefe Werte annehmen, wir sprechen in diesem Fall von einer Singularität. Da die Bewegungsenergie eines Teilchens stets positiv ist, kann ein Elektron klassisch dem Kern beliebig nahe kommen, und die Gesamtenergie kann trotzdem endlich sein. Die Bewegungsenergie, und damit der Impuls des Teilchens, wachsen dabei entsprechend der Abnahme des Coulomb-Potentials an. Diese Eigenschaft erschwert uns die Untersuchungen in doppelter Hinsicht: Zum einen divergieren bei diesem Sturz des Elektrons die numerischen Rechnungen, zum anderen benötigen wir einen beliebig großen Impulsraum zur vollständigen Darstellung der Bewegung des Elektrons. Wählen wir jedoch anstelle der anschaulichen Zylinderkoordinaten  $p$  und  $z$  die unanschaulicheren, aber dem Problem optimal angepaßten semiparabolischen Koordinaten  $v$  und  $\mu$

$$v^2 = \sqrt{p^2 + z^2} - z, \quad \mu^2 = \sqrt{p^2 + z^2} + z,$$

so können wir eine mathematische Beschreibung des physikalischen Systems wählen, bei der keine numerischen Divergenzen auftreten und bei der insbesondere die zugehörigen Impulse endlich und damit die Bewegungen im Phasenraum darstellbar sind. Unter einem Phasenraum verstehen wir dabei den Raum,

der von den Orts- und Impulskoordinaten des Systems aufgespannt wird. Jeder Punkt in diesem Raum gehört zu genau einem Bewegungszustand des physikalischen Systems.

Die Arena der klassischen Dynamik ist daher der Phasenraum, der für physikalische Systeme mit  $f$  Freiheitsgraden durch  $f$  Orts- und  $f$  Impulskoordinaten aufgespannt wird und folglich die Dimension  $2f$  hat. Für konservative Systeme ist die Energie eine Erhaltungsgröße, das heißt die Bewegung ist auf einen Unterraum, die Energieschale mit einer Dimension weniger, eingeschränkt.

Für konservative Systeme mit zwei Freiheitsgraden läuft deren Dynamik für feste Energien auf einer dreidimensionalen Hyperebene (Energieschale) des vierdimensionalen Phasenraums ab. Ein Teilchen bewegt sich durch diesen dreidimensionalen Raum, wie die Spitze der Nadel einer Stickerin. Die Stickarbeit selbst, beispielsweise ein in einen Rahmen gespanntes Bild einer Landschaft, ist zweidimensional. Die stickende Künstlerin erzeugt in dieser Ebene genau an den Stellen des Nadeleinstiches Strukturen, die nach Fertigstellung sich dem Betrachter als zweidimensionales Bild zeigen.

Fixieren wir eine Phasenraum-Koordinate, z. B.  $\mu = 0$ , so wählen wir einen zweidimensionalen Unterraum dieser Energieschale aus, die sogenannte Poincaré-Ebene [3], ähnlich der Stickerei. Die Integration einer Trajektorie des Hamiltonischen Systems (Abbildung 6) erzeugt auf dieser Ebene eine Folge von Schnittpunkten – die Nadelstiche. Da die klassische Dynamik deterministisch ist, liefert uns die Kenntnis eines beliebigen Schnittpunktes eindeutig die gesamte Sequenz, folglich beinhaltet sie Informationen über die zugehörige Trajektorie, und die globale Struktur des betrachteten Hamiltonischen Systems bei fester Energie spiegelt sich in der Struktur des zugehörigen Poincaré-Schnittes wider, ähnlich wie die ursprüngliche Bewegung der Nadel im Raum in der Stickarbeit der Künstlerin. Insbesondere wird eine periodische Bahn die Poincaré-Ebene stets in denselben Punkten schneiden und zu einer endlichen Sequenz von Schnittpunkten führen, während eine nicht-periodische Bahn zu einer unendlich langen Folge von Schnittpunkten führt.

Für ein reguläres System ist die Poincaré-Ebene von einparametrischen Familien von Kurven überdeckt, deren reguläre Strukturen mit zunehmender Irregularität der dynami-

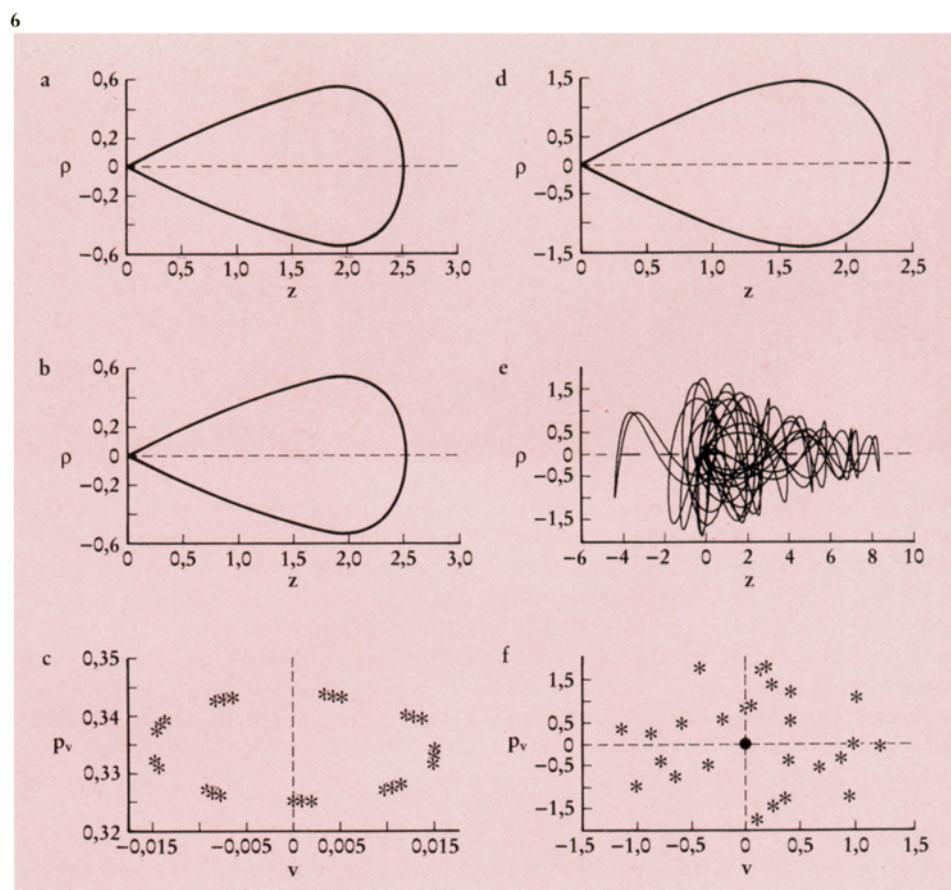


Abb. 6. Linke Spalte: Eine stabile periodische Bahn des Wasserstoffatoms in zylindrischen Koordinaten mit der skalierten Energie  $\epsilon = -0,35$ ; a) zeigt die periodische Bahn, b) eine neue Bahn, deren Anfangsbedingungen geringfügig variiert wurden, und c) den von dieser Bahn erzeugten Poincaré-Schnitt in semiparabolischen Koordinaten (vgl. Abbildung 7). Deutlich sehen wir, daß eine stabile Bahn von einer geringfügigen Variation ihrer Anfangsbedingungen unbeeindruckt bleibt und sich stets in der Umgebung der ursprünglichen periodischen Bahn aufhält. Im Poincaré-Schnitt erzeugt diese variierte stabile Bahn eine (unendliche) Sequenz von Schnittpunkten, die ein reguläres Bild ergeben. Im Mittelpunkt dieser elliptischen Struktur befindet

sich der stabile Fixpunkt der ungestörten periodischen Bahn. Rechte Spalte: Eine instabile periodische Bahn in zylindrischen Koordinaten ( $\epsilon = -0,1$ ); d) zeigt die periodische Bahn, e) die durch eine geringfügige Variation der Anfangsbedingungen entstandene neue Bahn, deren Gestalt mit der ursprünglichen Bahn keinerlei Ähnlichkeit mehr aufweist, und f) den zugehörigen Poincaré-Schnitt. Eine instabile Bahn reagiert äußerst empfindlich auf geringste Variationen ihrer Anfangsbedingungen. Schon nach kürzester Zeit hat die neue variierte Bahn jede Ähnlichkeit mit der ursprünglichen verloren. Dies ist ein typisches Kennzeichen von Chaos. Kleine Abweichungen – große Auswirkungen.

schen Bewegung des Hamiltonischen Systems mehr und mehr zerstört werden. Abbildung 7 zeigt zwei Poincaré-Schnitte des diamagnetischen Kepler-Systems bei unterschiedlichen skalierten Energien  $\epsilon$ . Abbildung 7a zeigt drei elliptische und zwei hyperbolische Fixpunkte, während diese reguläre Struktur in Abbildung 7b zerstört ist. Der Fixpunkt der zentralen elliptischen Struktur wird von der ge-

radlinigen periodischen Bahn parallel zum Magnetfeld erzeugt; die anderen beiden elliptischen Strukturen gehören zur geradlinigen Bahn senkrecht zum äußeren Magnetfeld.

Beide Trajektorien sind stabil. Dagegen korrespondiert zu den beiden hyperbolischen Strukturen eine für beliebige skalierte Energien  $\epsilon$  stets instabile, kreisförmige Bahn.

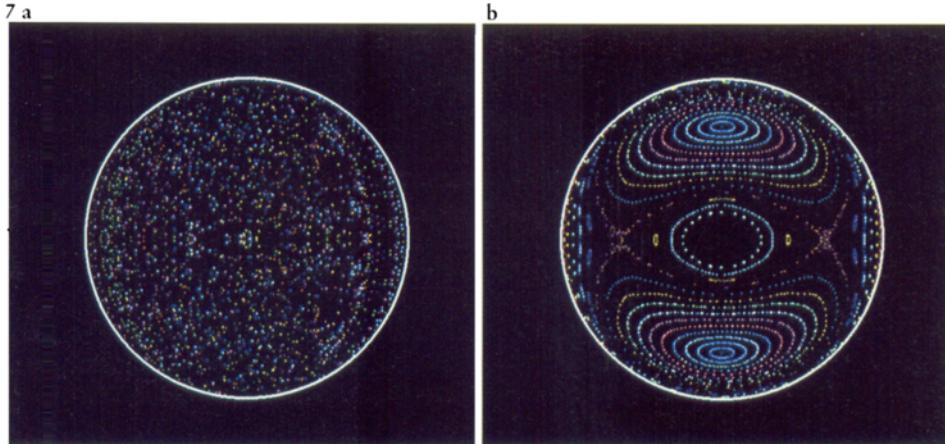
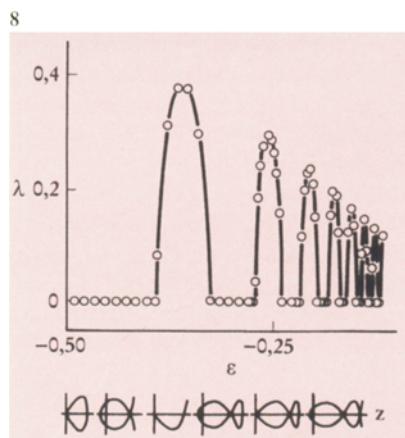


Abb. 7. Zwei Poincaré-Schnitte des klassischen Wasserstoffatoms im Magnetfeld. Hierin bezeichnen  $v$  die Orts- und  $p_v$  die zugehörige Impulskoordinate: Die zweite Ortskoordinate ist identisch Null, ihre Impulskoordinate wird durch die Energie bestimmt. In a) ist die skalierte Energie gerade so gewählt ( $\epsilon = -0,5$ ), daß das physikalische System regulär und in b) irregulär, chaotisch ( $\epsilon = -0,1$ ) ist. Während in a) der Poincaré-Schnitt von regulären Strukturen überdeckt ist, ist die Poincaré-Ebene in b) fast gleichmäßig mit Punkten ausgefüllt. Das Chaos zeigt sich hier als graues langweiliges Einerlei. Im Zentrum der Strukturen des linken Poincaré-Schnittes sitzen die Fixpunkte periodischer Bahnen, und zwar stabiler Bahnen im Zentrum der elliptischen Strukturen und instabiler Bahnen im Zentrum der hyperbolischen Strukturen. Periodische, instabile Trajektorien existieren zwar auch im chaotischen System, die nicht-periodischen Bahnen füllen jedoch den Phasenraum und damit auch die Poincaré-Ebene ergodisch aus.

Abb. 8. Der Liapunow-Exponent  $\lambda$  ist ein Maß für die Geschwindigkeit, mit der sich benachbarte Bahnen exponentiell voneinander entfernen. Ist er positiv, so ist die zugehörige Bahn instabil. Für stabile Bahnen ist er null. Aufgetragen ist der Liapunow-Exponent der Bahn parallel zum Magnet-



feld als Funktion der skalierten Energie  $\epsilon$ . Für  $\epsilon \leq 0$  ist das Elektron gebunden, und damit ist diese klassische Bahn beschränkt und periodisch. Wir beobachten einen kaskadenartigen Wechsel von Stabilität zu Instabilität. Bei jedem dieser Stabilitätswechsel wird eine Tochterbahn durch Bifurkation geboren. Als Beispiele sind einige Töchter im unteren Teil der Abbildung (Magnetfeldachse  $z$  horizontal) dargestellt. Für positive Energien wird das Elektron ionisiert, diese Bahn läuft dann ins Unendliche und ist folglich auch nicht mehr periodisch. Eine geringe Variation der Anfangsbedingungen führt stets zu einem vollständigen Abdriften der varierten Bahn von der ursprünglichen.

Klassische periodische Bahnen spielen in der semiklassischen Beschreibung der Quantenmechanik eine zentrale Rolle. Von besonderer Faszination erweist sich dabei die periodische Bahn parallel zum Magnetfeld. Untersuchen wir deren Stabilität unter geringfügigsten Veränderungen der Startbedingungen, so sehen wir eine kaskadenartige Abfolge von Stabilitäts- und Instabilitätsbereichen (Abbildung

8). Bei jedem Stabilitätswechsel dieser Bahn erfolgt eine Bifurkation, das heißt eine neue periodische Bahn wird geboren. Diese Tochter ist dabei stabil, wenn die Mutter instabil war und umgekehrt. Als Beispiel ist die Form einiger dieser neuen periodischen Bahnen im unteren Teil der Abbildung 8 in zylindrischen Koordinaten aufgeführt. Wenden wir uns nun dem quantenmechanischen System zu.

## Quantenchaologie

Deterministisches Chaos in klassischen Systemen ist ein wohldefinierter Begriff. Deterministisch bedeutet, daß Vergangenheit und Zukunft durch die Angabe einer Anfangsbedingung des Systems eindeutig festgelegt sind. Sowohl die Präparation eines Systems im Labor (das heißt die Wahl einer geeigneten Anfangsbedingung) als auch die numerische Rechnung auf Großcomputern kann jedoch nie beliebig genau erfolgen. Es stellt sich daher die Frage, ob in Wirklichkeit die Zukunft eines physikalischen Systems vorhersagbar ist oder nicht. Chaos bezeichnet als *terminus technicus* ein Verhalten mit extremer Empfindlichkeit gegenüber der Wahl von Anfangswerten und ist mit dem Auftreten von Nichtlinearitäten verknüpft. Die Quantenmechanik ist dagegen prinzipiell linear und liefert die adäquate Beschreibung von Phänomenen auf mikroskopischer Ebene. Nach der Philosophie des Bohrschen Korrespondenzprinzips erwarten wir jedoch, daß die klassische Physik in der Quantentheorie als Grenzfall hoher Quantenzahlen enthalten ist. Unter dem Quantenchaos-Problem verstehen wir daher die Fragestellung: Können wir aus Eigenschaften des quantenmechanischen Systems ablesen, ob das dazu korrespondierende klassische System regulär oder chaotisch (irregulär) ist.

Deterministisches Chaos in klassischen Systemen ist mit der Untersuchung klassischer Trajektorien verknüpft. Stellen wir uns eine Trajektorie als ein langes Seil vor, so können wir am Seilende beliebig fein wackeln: Wir können Trajektorien und ihr Verhalten unter geringfügigsten Variationen untersuchen. In der Quantenmechanik können wir dagegen Ort und Impuls wegen der Heisenbergschen Unschärferelation nicht gleichzeitig beliebig genau festlegen: An einem quantenmechanischen Seil (so es dieses gäbe) könnten wir sozusagen nicht beliebig fein wackeln. Stabilitätsuntersuchungen im klassischen Sinne sind folglich in der Quantenmechanik auch nicht möglich. Unter Quantenchaologie verstehen wir die Suche nach „Fingerabdrücken“ des klassischen Chaos im Quantensystem. (Eine Reihe faszinierender Artikel zum Thema „Quantenchaos und atomare Systeme“ findet man in [4].) Typische Beispiele sind statistische Untersuchungen der Eigenwerte sowie Wellenfunktions-korrelierter Größen wie Wirkungsquerschnitte oder die Frage nach Lokalisierungen der Aufenthaltswahrscheinlichkeit längs periodischer Bahnen.

Für reguläre Systeme erwarten wir nach der Einstein-Brillouin-Keller-Quantisierungsvorschrift einen ein-eindeutigen Zusammenhang zwischen quantenmechanischem System und klassischen Tori. Unter einem Torus verstehen wir dabei ein geometrisches Gebilde der Dimension  $f$  im klassischen  $2f$ -dimensionalen Phasenraum. Für Systeme mit zwei Freiheitsgraden ( $f = 2$ ) hat ein Torus in geeigneten Koordinaten das Aussehen eines Fahrradreifens, auf dem die klassische Trajektorie ihre Bahnrunden zieht.

In chaotischen klassischen Systemen sind dagegen diese Tori weitestgehend zerstört, und alle periodischen Bahnen tragen zur semiklassischen Beschreibung einer Wellenfunktion des Quantensystems bei. Trotzdem erweist sich das Betragsquadrat der quantenmechanischen Wellenfunktion nicht als ein wildes zerklüftetes Gebirge, vielmehr lassen sich einzelnen Höhenzügen Bahnen zuordnen. Die Höhe dieser Gebirgszüge ist dabei ein Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons. Als Narben der Wellenfunktion bezeichnet man deutlich erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Elektrons längs klassischer, instabiler Bahnen. Ein Ordnungskriterium ist dabei die Wirkung (der längs der Bahn integrierte Impuls) sowie der Grad der Instabilität der klassischen Bahn. Die wichtigsten Trajektorien sind dabei diejenigen mit kleiner Wirkung. Die Vernarbung der Wellenfunktion ist umso deutlicher, je weniger instabil die betrachtete Trajektorie ist. Abbildung 5 zeigt die Lokalisierung strukturähnlicher Wellenfunktionen längs dazu überlagerter klassischer Bahnen. Dabei ist das Magnetfeld für die quantenmechanischen Rechnungen gerade so gewählt, daß die zu 5a) und 5b) gehörende lokalisierende klassische Trajektorie stabil, 5c) dagegen instabil ist. Die Farbcodierung spiegelt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Ortsraum in zylindrischen Koordinaten wider: Sie ist umso höher, je heller der Blauton ist und erreicht für Rot die maximalen Werte.

### Der Quanten-Poincaré-Schnitt

Wie wir gesehen haben, ist die Arena der klassischen Dynamik der Phasenraum, in dem die einzelnen Trajektorien berührungs-frei eingebettet sind. Betrachten wir als Beispiel Paßstraßen im Hochgebirge, die in sich verschlungen mit Tunnels und Brücken vom Tal zum Gipfel führen sollen, ohne sich selbst oder untereinander zu kreuzen. Diese Paßstraßen liefern in der Draufsicht zwar eindeu-

tige Linien, es treten jedoch scheinbare Kreuzungspunkte auf. Die geographischen Längen- und Breitengrade beschreiben eine Paßstraße nicht eindeutig oder mathematisch etwas exakter ein-eindeutig. Erst die Angabe der Höhe und der geographischen Koordinaten ergibt eine ein-eindeutige Wegposition. Ganz ähnlich haben klassische Trajektorien auf den Orts- bzw. Impulsraum projiziert einen eindeutigen Pfad, jedoch gilt nicht die Umkehrung, daß jedem Punkt des Orts- oder des Impulsraumes genau eine Trajektorie zugeordnet werden kann.

Wählen wir beispielsweise eine Ortskoordinate  $q_n$  ( $n \leq f$ ) zu Null, so ist deren kanonisch konjugierte Impulskoordinate  $p_n$  wegen der Energieerhaltung für konservative Systeme bis auf das Vorzeichen eindeutig durch die Angabe der verbleibenden ( $f-1$ ) Orts- sowie deren kanonisch konjugierten ( $f-1$ ) Impulskoordinaten bestimmt. Beschränken wir uns beispielsweise auf positive Werte von  $p_n$ , so werden durch die  $(2f-2)$  Phasenraumkoordinaten  $(q_1, \dots, q_{n-1}, \dots, q_{n+1}, \dots, q_f; p_1, \dots, p_{n-1}, p_{n+1}, \dots, p_f)$  eine  $(2f-2)$ -dimensionale Hyperebene des Phasenraumes, die bereits erwähnte Poincaré-Ebene  $\Gamma$  [3], aufgespannt.

Den Punkten dieser Poincaré-Ebene lassen sich wie der Energieschale ein-eindeutig Trajektorien im Phasenraum zuordnen. Für das klassische diamagnetische Kepler-Problem läßt sich, wie erwähnt, wegen der Zylindersymmetrie ein Freiheitsgrad abseparieren. Das verbleibende physikalische System besitzt zwei Freiheitsgrade, der Phasenraum ist folglich vierdimensional, die Poincaré-Ebene dagegen zweidimensional. Sie eignet sich daher besonders, globale Eigenschaften des betrachteten Systems darzustellen.

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik hängen die Wellenfunktionen als Lösungen der Schrödinger-Gleichung nicht von kanonisch konjugierten Größen ab. Dies röhrt daher, daß in der Schrödinger-Darstellung der Quantenmechanik kanonisch konjugierte Größen wegen der Heisenbergschen Unschärferelation als Multiplikations- und Differenzionsoperatoren auftreten. Wollen wir Wellenfunktionen ein-eindeutig mit klassischen Bahnen vergleichen, müssen wir daher einen Weg finden, sie auf eine Phasenraum-adäquate Darstellung zu transformieren. Bereits vor 60 Jahren hat Eugene Wigner im Rahmen der Frage nach den Quantenkorrekturen der klassischen statistischen Mechanik [5] dieses Problem gelöst.

Zur Berechnung der Wigner-Funktionen über dem Phasenraum gehen wir von der Wellenfunktion im Ortsraum  $\psi(\vec{q})$  (oder dazu vollkommen äquivalent im Impulsraum) aus. Für das diamagnetische Wasserstoffatom hängt die interessierende Wellenfunktion von zwei Ortsvariablen ab, wir haben also ein dreidimensionales Gebirge, dessen Höhe gerade den Wert der Wellenfunktion beschreibt.

Stellen wir uns statt dessen die Wellenfunktion als eine geschwärzte Glasplatte vor, deren Schwärzungsgrad dem Wert der Wellenfunktion an dem jeweiligen Ort entspricht. Nehmen wir nun eine genau identisch geschwärzte zweite Glasplatte und legen beide Platten aufeinander, so können wir sie gegeneinander verschieben und erhalten ein neues Bild, das von der Verschiebung abhängt. Der gesamte Schwärzungsgrad an einer bestimmten Stelle wird also sowohl von der betrachteten Position auf der (beispielsweise) oberen Platte als auch von deren Verschiebung gegen die untere Platte abhängen. Wir erhalten eine Abbildung, die insgesamt von vier ortsartigen Koordinaten abhängt und die als Korrelationsmatrix,  $\psi^*(\vec{q} + \vec{b}) \cdot \psi(\vec{q} - \vec{b})$ , bezeichnet wird. Dabei bezeichnet der Vektor  $\vec{q}$  den Ort auf der Platte und der Vektor  $\vec{b}$  die Verschiebung der beiden Platten gegeneinander.

Orts- und impulsabhängige Funktionen sind in der Quantenmechanik durch eine Fourier-Transformation verknüpft. Eine Fourier-Transformation bezüglich dem  $f$ -dimensionalen Verschiebungsvektor  $\vec{b}$

$$P_W(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{1}{(h\pi)^f} \int_{-\infty}^{\infty} db_1 \dots$$

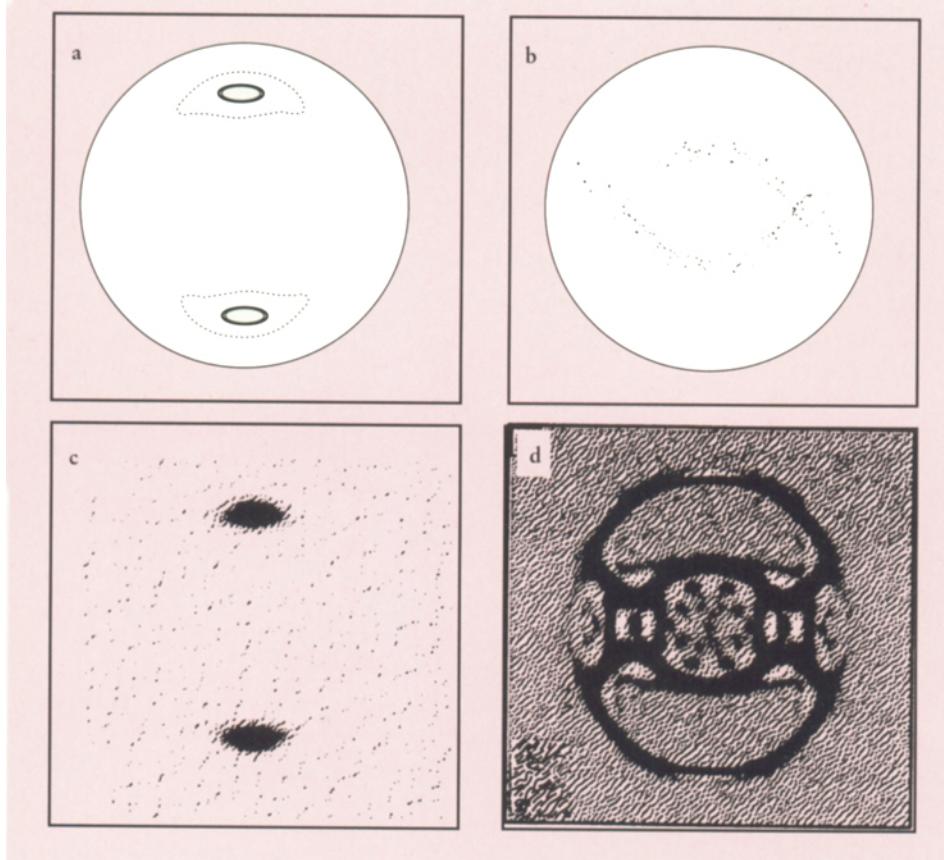
$$\int_{-\infty}^{\infty} db_f \psi^*(\vec{q} + \vec{b}) \psi(\vec{q} - \vec{b}) e^{i \frac{2}{h} \vec{p} \cdot \vec{b}}$$

liefert uns die gewünschte, von kanonisch konjugierten Koordinaten abhängige Wigner-Funktion. Die Wigner-Funktion besitzt alle Informationen, die auch die ursprüngliche Wellenfunktion enthielt, sie ist aber nicht einer Wahrscheinlichkeitsinterpretation auf dem Phasenraum zugänglich. Wegen der Unschärferelation würde es auch keinen physikalischen Sinn ergeben, nach der Aufenthalts-wahrscheinlichkeit am Ort  $\vec{p}$  mit dem Impuls  $\vec{p}$  oder umgekehrt zu fragen. Berechnen wir dagegen das Integral der Wigner-Funktion über dem Ortsraum

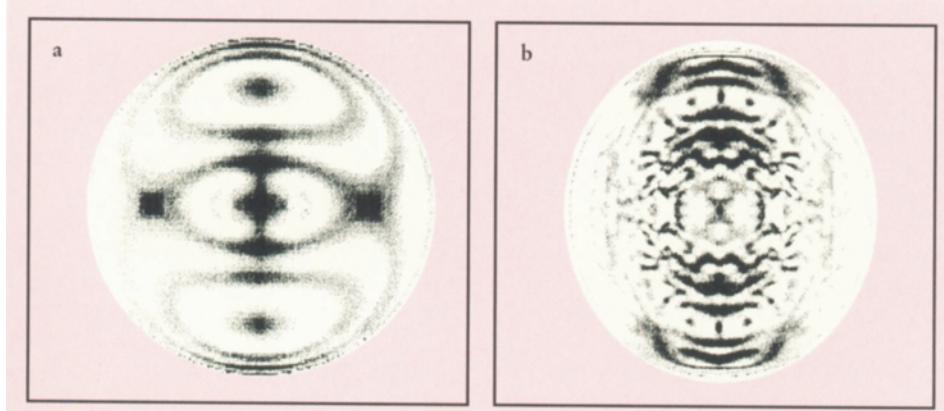
$$\int_{-\infty}^{\infty} d\vec{q} P_W(\vec{q}, \vec{p}) = |\psi(\vec{p})|^2 ,$$

so erhalten wir gerade die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Impulsraum und umge-

9



10



kehrt aus der Integration der Wigner-Funktion über dem Impulsraum

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq P_W(q, p) = |\psi(q)|^2$$

die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Ortsraum. In unserem obigen Beispiel ist diese Wahrscheinlichkeit gerade durch den totalen Schwärzungsgrad der nicht verschobenen Glasplatten an einem bestimmten Ort  $\vec{q}$  bestimmt. Eine Projektion der Wigner-Funktion auf die Poincaré-Ebene ermöglicht es uns, Quanten-Poincaré-Schnitte zu berechnen und diese mit dem klassischen korrespondierenden System zu vergleichen.

Abbildung 9 zeigt zum Vergleich die Wigner-Funktion einer einzelnen Wellenfunktion, projiziert auf die Poincaré-Ebene, sowie den Poincaré-Schnitt einer einzelnen klassischen Trajektorie sowohl im klassisch regulären als auch im irregulären Bereich. Überlagern wir mehrere Wigner-Distributionen, so erhalten wir einen Quanten-Poincaré-Schnitt. Den Vergleich dieser Rechnungen mit dem klassischen Poincaré-Schnitt zeigt Abbildung 10. Die Strukturähnlichkeit ist beeindruckend und dokumentiert eindeutig semiklassische Fingerabdrücke im quantenmechanischen System.

**Abb. 9.** Klassisch zeigen sich reguläre und chaotische Strukturen deutlich im Poincaré-Schnitt. Erweitern wir die nur von Ortskoordinaten abhängigen Wellenfunktionen zu Funktionen, die von den Phasenraumkoordinaten Ort und Impuls abhängig sind, so können wir, ähnlich dem klassischen Vorgehen, Quanten-Poincaré-Schnitte bilden; a) klassischer Poincaré-Schnitt einer stabilen, b) einer instabilen Bahn bei  $\epsilon = -0,5$ ; c) und d) sind die hierzu korrespondierenden Quanten-Poincaré-Schnitte, berechnet aus der Wigner-Funktion einer ausgesuchten Wellenfunktion. Deutlich ist eine Strukturähnlichkeit zwischen klassischem und quantenmechanischem Bild erkennbar.

**Abb. 10.** Analog zu Abbildung 7 zeigen wir hier Quanten-Poincaré-Schnitte, die wir durch Überlagerung der einzelnen Poincaré-Schnitte einer fortlaufenden Sequenz von 5 Wellenfunktionen gewonnen haben. Wie in Abbildung 7 sind die Parameter in a) so gewählt, daß das korrespondierende klassische System regulär ( $\epsilon = -0,5$ ) und in b) irregulär ( $\epsilon = -0,1$ ) ist.

## Literatur

- [1] H. Fuchs, Phys. Bl. 45, 105 (1989).
- [2] D. Kleppner, M. Littmann, M. Zimmermann, Spektrum der Wissenschaft 7, 88 (1981).
- [3] H. G. Schuster, Deterministic Chaos – An Introduction, VCH, Weinheim 1984.
- [4] J.-C. Gay (Hrsg.): CAMP 25 (1991).
- [5] E. P. Wigner, Phys. Rev. 40, 749 (1932).

Prof. Dr. Hanns Ruder; 1967 Promotion in Theoretischer Physik an der Universität Erlangen-Nürnberg, 1973 bis 1982 Professor für Theoretische Physik an der Universität Erlangen-Nürnberg, seit 1982 o. Professor für Theoretische Astrophysik an der Universität Tübingen und seit 1991 zusätzlich Honorarprofessor an der Universität Stuttgart.

Dr. Wolfgang Schweizer; 1985 Promotion in Theoretischer Physik an der Universität Tübingen, 1987 bis 1988 Gastaufenthalt am Department of Mathematics des Royal Holloway and Bedford New College, London, seit 1990 Wissenschaftlicher Assistent am Lehr- und Forschungsbereich Theoretische Astrophysik der Universität Tübingen.

Anschrift: Theoretische Astrophysik der Universität Tübingen, Auf der Morgenstelle 10, 72076 Tübingen.