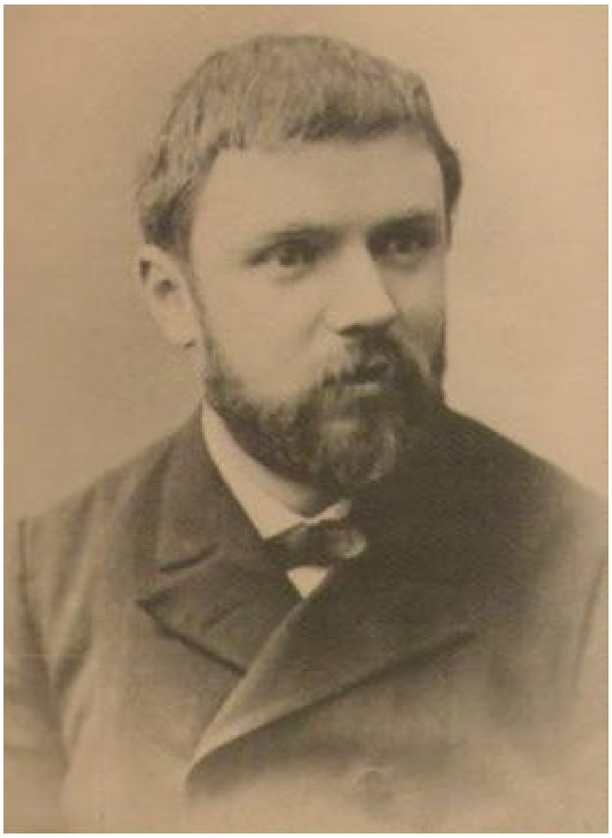
# Hamiltonsche Dynamik

Eine Einführung
mit Ausblicken auf die Quantenmechanik

*The analysis of 2-degree of freedom Hamiltonian systems is currently beyond the capability of modern science.*

Vladimir Igorevich Arnol'd



*When one tries to depict the figure formed by these two curves and their infinity of intersections, each of which corresponds to a doubly asymptotic solution, these intersections form a kind of net, web or infinitely tight mesh . . . One is struck by the complexity of this figure that I am not even attempting to draw.*

Henri Poincaré

---

*Diese Einführung ist hervorgegangen aus Notizen, die im Verlaufe mehrerer Vorlesungen über Hamiltonsche Systeme entstanden sind.*
*Den Hörern dieser Vorlesungen in Marburg (im Wintersemester 1995/96), München (im Wintersemester 1999/2000) und Oldenburg (im Wintersemester 2006/07 und im Sommersemester 2008) ein herzliches Dankeschön für ihre kritischen Anmerkungen und hilfreichen Kommentare!*

# Inhaltsverzeichnis

# I Reguläres und chaotisches Verhalten Hamiltonscher Systeme

## I.1 Definition und einfache Eigenschaften Hamiltonscher Systeme

Unter einen *dynamischen System* versteht man ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen der Form

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \equiv \dot{x} = f(x,t) \; , \tag{I.1.1}$$

wobei $x = x(t) \in \mathbb{R}^n$ eine vektorwertige Funktion einer unabhängigen Variablen $t$ ist, die allgemein als *Evolutionsparameter* bezeichnet und in vielen Anwendungsbeispielen mit der Zeit identifiziert wird. Die glatte Funktion $f : U \to \mathbb{R}^n$ ist dementsprechend auf einer Untermenge $U$ von $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ definiert.
*Hamiltonsche Systeme* sind spezielle dynamische Systeme. Sie „leben" in einem *Phasenraum* $\Gamma$ gerader Dimension $2n$, wobei $n$ als „Zahl der Freiheitsgrade" bezeichnet wird. In geeigneten („kanonischen") Koordinaten,

$$p = (p_1, \ldots, p_n) \qquad \text{— den „Impulskoordinaten"}$$

$$q = (q_1, \ldots, q_n) \qquad \text{— den „Ortskoordinaten"} \; ,$$

wird ein Hamiltonsches System mit Hilfe einer *Hamiltonschen Funktion* $H(p,q)$ beschrieben:

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} \\ \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \; . \end{aligned} \tag{I.1.2}$$

■ **Beispiel:** Der harmonische Oszillator

Die aus der theoretischen Mechanik bekannte Hamiltonfunktion eines eindimensionalen Oszillators mit Masse $m$ und Kreisfrequenz $\omega_0$,

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 q^2 \; , \tag{I.1.3}$$

liefert ein Hamiltonsches System mit einem Freiheitsgrad, $n = 1$:

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega_0^2 q \\ \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \; ; \end{aligned} \tag{I.1.4}$$

daraus erhält man sofort die bekannte Schwingungsgleichung $\ddot{q} = -\omega_0^2 q$.

Angesichts der Tatsache, dass dieses Beispiel *sehr* einfach ist, mag die auf V.I. Arnold zurückgehende Aussage, dass die strenge Untersuchung Hamiltonscher Systeme mit zwei Freiheitsgraden jenseits der Leistungsfähigkeit der modernen Mathematik liegt, sehr überraschend erscheinen. ■

Es soll darauf hingewiesen werden, dass die obige Definition Hamiltonscher Systeme nicht auf Systeme mit einer mechanischen Realisierung beschränkt ist, d.h. nicht auf Hamiltonfunktionen vom Typ „kinetische plus potentielle Energie“. Benötigt wird einfach irgendeine (glatte) Funktion, die von $2n$ Variablen $p$ und $q$ abhängt. Die Unterscheidung dieser Variablen in „Impulse“ und „Orte“ wird dann lediglich durch das Minuszeichen in den Hamiltonschen Gleichungen (**I**.1.2) bedingt.
Vorläufig wird nun vorausgesetzt, dass $H(p,q)$ nicht explizit von der Zeit abhängt; das zugehörige Hamiltonsche System heißt dann *autonom*. Das ist jedoch *keine* Einschränkung: Hat man zunächst eine zeitabhängige Hamiltonfunktion $H(p,q,t)$, betrachtet man die neue Funktion

$$\mathcal{H}(p,p_0,q,q_0) \equiv p_0 + H(p,q,q_0)\ , \tag{I.1.5}$$

in der die Zeit $t$, also die Evolutionsvariable, durch eine Koordinate $q_0$ ersetzt wurde, zu der ein („kanonisch konjugierter“) Impuls $p_0$ gehört. Die so konstruierte zeitunabhängige Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$ ist also auf einem $2(n+1)$-dimensionalen „erweiterten Phasenraum“ definiert; die zugehörigen Hamiltonschen Gleichungen lauten nun

$$\begin{aligned}
\dot{p} &= -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q} \\
\dot{p}_0 &= -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial q_0} = -\frac{\partial H}{\partial q_0} \\
\dot{q} &= \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p} = \frac{\partial H}{\partial p} \\
\dot{q}_0 &= \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_0} = 1\ .
\end{aligned} \tag{I.1.6}$$

Die letzte dieser Gleichungen besitzt die Lösung $q_0 = t + t_0$, so dass die Hilfskoordinate $q_0$ (bis auf eine Integrationskonstante $t_0$) nachträglich wieder mit der Zeit identifiziert werden kann. Damit entsprechen dann die erste und dritte Gleichung dieses „autonomisierten“ Systems genau den Hamiltonschen Gleichungen für die ursprüngliche Funktion $H(p,q,t)$ und liefern somit auch die gleichen Trajektorien, die nun allerdings in den erweiterten Phasenraum eingebettet sind.
Es ist konzeptionell wichtig und sehr weittragend, Hamiltonsche Syteme (differential-) geometrisch zu betrachten: Geometrisch gesehen beschreiben die Hamiltonschen Gleichungen einen *Fluß* im Phasenraum $\Gamma$. Denn an jeden Punkt $\xi = (p,q)$ von $\Gamma$ ist ein $2n$-dimensionaler „Geschwindigkeitsvektor“

$$\dot{\xi} = \begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial H(p,q)}{\partial q} \\ \frac{\partial H(p,q)}{\partial p} \end{pmatrix} \tag{I.1.7}$$

angeheftet, der angibt, wie schnell das System durch diesen Punkt des Phasenraums „fließt“. Dieses Hamiltonsche Vektorfeld erzeugt den Hamiltonschen Fluß $\Phi^t$,

$$\Phi^t\big(\xi(0)\big) = \xi(t) \qquad \text{oder} \qquad \Phi^t \ : \ \xi(0) \to \xi(t) \ . \tag{I.1.8}$$

Das besagt folgendes: Die Lösungskurven der Hamiltonschen Gleichungen (die „Bahnen“, „Trajektorien“ oder „Orbits“), die sich aus einem Anfangswert $\xi(0)$ ergeben, liegen überall tangential zu den Vektoren $\dot{\xi}$ und werden mit der Geschwindigkeit durchlaufen, die die Vektorlänge angibt. Durch $\Phi^t$ wird *jeder* Phasenraumpunkt $\xi(0)$, indem man ihn als Anfangswert der Hamiltonschen Gleichungen zum Zeitpunkt $t = 0$ auffaßt, in denjenigen Punkt $\xi(t)$ abgebildet, der sich daraus durch Lösung dieser Gleichungen nach der Zeit $t$ ergibt. Betrachtet man diese Konstruktion zunächst nur für einen Zeitpunkt $t$, erhält man eine Abbildung von $\Gamma$ auf sich selbst. Die Gesamtheit dieser Abbildungen für alle Zeiten $t$ bildet den Fluß.

> *Ein Hamiltonsches System zu „lösen“ bedeutet daher, sich einen quantitativen Überblick über den* gesamten *von $H$ erzeugten Fluß zu verschaffen und nicht etwa nur, eine einzelne Bahn zu einem einzelnen Anfangspunkt zu finden!*

Gegenüber allgemeinen dynamischen Systemen besitzen Hamiltonsche Systeme eine große Besonderheit. Um diese zu finden, wird nun eine geschlossene Kurve $\gamma$ in $\Gamma$ betrachtet und deren Verhalten im Hamiltonschen Fluß untersucht.
Genauer: Die Kurve entspricht einer Abbildung

$$\gamma \ : \ [0,1] \to \Gamma \ , \qquad \gamma(0) = \gamma(1) \ ; \tag{I.1.9}$$

weiterhin liefert die im Fluß transportierte Kurve gemäß

$$f(s,\tau) = \Phi^\tau\big(\gamma(s)\big) \tag{I.1.10}$$

einen „Schlauch“ im Phasenraum, wie in Abbildung **I**.1 skizziert. Ziel der folgenden Überlegungen ist es, die beiden Linienintegrale

$$\oint_\gamma p\,\mathrm{d}q \qquad \text{und} \qquad \oint_{\Phi^t\gamma} p\,\mathrm{d}q \tag{I.1.11}$$

über die Startkurve $\gamma$ und über ihr Bild $\Phi^t\gamma$ miteinander zu vergleichen.
Nun ist $\gamma$ der Rand einer Fläche $c$, also $\gamma = \partial c$. Gemäß dem Stokesschen Satz gilt daher

$$\oint_\gamma p\,\mathrm{d}q = \oint_{\partial c} p\,\mathrm{d}q = \int_c \mathrm{d}(p\,\mathrm{d}q) = \int_c \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q \ . \tag{I.1.12}$$

Die an dieser Stelle auftretende 2-Form $\omega^2 = \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$ ist für die Theorie Hamiltonscher Systeme von fundamentaler Bedeutung, wie noch sichtbar werden wird.
Um zunächst die hier verwendete allgemeine Formulierung des Stokesschen Satzes zu verstehen und Zutrauen zu Differentialformen zu gewinnen, erinnere man sich an die spezielle, für Vektorfelder $\vec{A}$ auf dem $\mathbb{R}^3$ gültige Formel

$$\oint_\gamma \vec{A} \cdot \mathrm{d}\vec{r} = \int_c (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot \mathrm{d}\vec{f} \ , \tag{I.1.13}$$

Abbildung **I**.1: Der Transport der geschlossenen Kurve $\gamma$ im Hamiltonschen Fluß $\Phi^\tau$ liefert einen Schlauch, parametrisiert durch $f(s,\tau) = \Phi^\tau\big(\gamma(s)\big)$. Die Tangentialvektoren $\xi = \partial f/\partial s$ zeigen um den Schlauch herum, die Tangentialvektoren $\eta = \partial f/\partial \tau$ dagegen in Flußrichtung.

wobei wieder $\gamma = \partial c$ vorausgesetzt wird und $\mathrm{d}\vec{f}$ die (orientierten) Flächenelemente von $c$ sind. Nun ist das Kreuzprodukt „$\times$“, das ja eine antisymmetrische, bilineare Abbildung $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ darstellt, eine Spezialität des $\mathbb{R}^3$. Daher kann zwar die linke Seite dieser Gleichung (**I**.1.13) sofort auch für Vektorfelder im $\mathbb{R}^n$ ausgewertet werden, nicht jedoch die rechte. Für eine solche Verallgemeinerung benötigt man das Dachprodukt „$\wedge$“:

Für $a, b \in \mathbb{R}^n$ ist

$$\begin{aligned} a \wedge b &\equiv (a_1 b_2 - a_2 b_1) + (a_1 b_3 - a_3 b_1) + \cdots \\ &= \sum_{i<j} (a_i b_j - a_j b_i) \; . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.1.14)$$

Damit ist das Dachprodukt eine antisymmetrische Bilinear*form*, d.h. eine antisymmetrische Abbildung $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Da aus $n$ Elementen $\binom{n}{2}$ Paare $(i,j)$ gebildet werden können, besteht $a \wedge b$ aus $\binom{n}{2}$ Summanden. Für $n = 3$ ergeben sich somit gerade 3 Summanden, die wieder als Komponenten eines Vektors im $\mathbb{R}^3$ aufgefaßt werden können; diese Tatsache ermöglicht die Konstruktion des Kreuzproduktes. Für allgemeines $n$ hat man jedoch keine solche Möglichkeit.
Der Stokessche Satz in der Form (**I**.1.12) leistet ebenso wie der Spezialfall (**I**.1.13) eine Umwandlung eines Linienintegrals in ein Flächenintegral, wobei aber nun, da die explizite Benutzung des Kreuzproduktes vermieden wird, die Randkurve $\gamma$ auch in einen höherdimensionalen Raum als den $\mathbb{R}^3$ eingebettet sein kann. Bei dieser Umwandlung tauchen keine gewöhnlichen Formen (d.h. Abbildungen $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$) auf, sondern *Differentialformen*, mit denen sich nach einiger Übung recht leicht umgehen läßt. Für die Zwecke dieser Einführung sind nur wenige Grundregeln wichtig:

1. Jede differentielle 1-Form $\omega^1$ auf dem $\mathbb{R}^n$ besitzt eine eindeutige Darstellung
$$\omega^1 = \sum_{i=1}^{n} A_i(x)\,\mathrm{d}x_i \qquad (\mathbf{I}.1.15)$$
mit glatten Koeffizientenfunktionen $A_i(x)$.
2. Die „Basisformen“ $\mathrm{d}x_i$ wirken bei Anwendung auf ein $\xi \in \mathbb{R}^n$ derart, dass sie dessen $i$-te Komponente liefern:
$$\mathrm{d}x_i(\xi) = \xi_i\ . \qquad (\mathbf{I}.1.16)$$
3. Das „äußere Produkt“ $\omega_1 \wedge \omega_2$ zweier differentieller 1-Formen $\omega_1$ und $\omega_2$ ist die 2-Form, die für $\xi, \eta \in \mathbb{R}^n$ durch
$$(\omega_1 \wedge \omega_2)(\xi, \eta) = \omega_1(\xi)\omega_2(\eta) - \omega_2(\xi)\omega_1(\eta) \qquad (\mathbf{I}.1.17)$$
gegeben wird.
4. Die „äußere Ableitung“ $\mathrm{d}(A_i\mathrm{d}x_i)$ einer 1-Form $A_i\mathrm{d}x_i$ ist die 2-Form, die aus dem äußeren Produkt der Differentiale $\mathrm{d}A_i$ und $\mathrm{d}x_i$ gebildet wird:
$$\mathrm{d}(A_i\mathrm{d}x_i) = \mathrm{d}A_i \wedge \mathrm{d}x_i\ . \qquad (\mathbf{I}.1.18)$$

Die vertraute Formel (**I**.1.13) übersetzt sich damit nun wie folgt in die Formensprache:

$$\begin{aligned}
\oint_\gamma \vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{r} &= \sum_{i=1}^{3} \oint_{\partial c} A_i\,\mathrm{d}x_i \\
&= \sum_{i=1}^{3} \int_c \mathrm{d}(A_i\,\mathrm{d}x_i) \\
&= \sum_{i=1}^{3} \int_c \mathrm{d}A_i \wedge \mathrm{d}x_i \\
&= \int_c \left(\frac{\partial A_1}{\partial x_1}\mathrm{d}x_1 + \frac{\partial A_1}{\partial x_2}\mathrm{d}x_2 + \frac{\partial A_1}{\partial x_3}\mathrm{d}x_3\right) \wedge \mathrm{d}x_1 + \cdots \\
&= \int_c \left(-\frac{\partial A_1}{\partial x_2}\mathrm{d}x_1 \wedge \mathrm{d}x_2 + \frac{\partial A_1}{\partial x_3}\mathrm{d}x_3 \wedge \mathrm{d}x_1\right) + \cdots \\
&= \int_c (\vec{\nabla}\times\vec{A})\cdot\mathrm{d}\vec{f}\,. \qquad (\mathbf{I}.1.19)
\end{aligned}$$

Noch einmal: In der ersten Zeile wurde nur die Definition des Skalarproduktes „·“ verwendet, in der zweiten die allgemeine Form des Satzes von Stokes, die den Randoperator auf den Integranden abwälzt. Die dritte Zeile entspricht der Definition der äußeren Ableitung der differentiellen 1-Formen $A_i\,\mathrm{d}x_i$; in der vierten Zeile werden die Differentiale

$\mathrm{d}A_i$ konkret ausgeschrieben. In der fünften Zeile wird die Antisymmetrie des Dachproduktes ausgenutzt; in der letzten Zeile werden schließlich die verbleibenden Terme so zusammengefaßt, dass sich der gewohnte Ausdruck ergibt. Dabei muß offenbar der Vektor $(\mathrm{d}x_2 \wedge \mathrm{d}x_3,\, \mathrm{d}x_3 \wedge \mathrm{d}x_1,\, \mathrm{d}x_1 \wedge \mathrm{d}x_2)^{\mathrm{t}}$ mit dem Vektor $\mathrm{d}\vec{f}$ des differentiellen Flächenelementes identifiziert werden. Das aber ist evident: Gemäß den Eigenschaften (**I**.1.16) und (**I**.1.17) liefert die Anwendung dieser Zusammenfassung von drei 2-Formen auf zwei Vektoren $\vec{\xi}$, $\vec{\eta}$ nämlich sofort

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}x_2 \wedge \mathrm{d}x_3 \\ \mathrm{d}x_3 \wedge \mathrm{d}x_1 \\ \mathrm{d}x_1 \wedge \mathrm{d}x_2 \end{pmatrix} (\vec{\xi}, \vec{\eta}) = \begin{pmatrix} \xi_2\eta_3 - \xi_3\eta_2 \\ \xi_3\eta_1 - \xi_1\eta_3 \\ \xi_1\eta_2 - \xi_2\eta_1 \end{pmatrix} , \tag{I.1.20}$$

also das Kreuzprodukt $\vec{\xi} \times \vec{\eta}$, dessen Betrag bekanntlich den Fächeninhalt des von $\vec{\xi}$ und $\vec{\eta}$ aufgespannten Parallelogramms angibt.
Mit diesem Rüstzeug geht es nun zurück zum Vergleich der beiden Linienintegrale (**I**.1.11). Um $\gamma$ und $\Phi^t\gamma$ zu verbinden, betrachtet man den Schlauch $S$, der von der im Fluß transportierten Kurve $\gamma$ gemäß der Konstruktion (**I**.1.10) für $0 \le \tau \le t$ überstrichen wird, und bildet das Integral der 2-Form $\omega^2 = \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$ über $S$. Dazu müssen die Tangentialvektoren

$$\xi = \frac{\partial f}{\partial s} \qquad \text{und} \qquad \eta = \frac{\partial f}{\partial \tau} \tag{I.1.21}$$

in $\omega^2$ eingesetzt werden:

$$\int_S \omega^2 \equiv \int_0^1 \mathrm{d}s \int_0^t \mathrm{d}\tau\ \omega^2\big(\eta(s,\tau), \xi(s,\tau)\big) \ . \tag{I.1.22}$$

Der entscheidende Punkt ist nun, dass $\eta$ per Konstruktion ein Element des Hamiltonschen Vektorfeldes ist (siehe dazu noch einmal Abbildung **I**.1):

$$\eta = \begin{pmatrix} -\frac{\partial H}{\partial q} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix} . \tag{I.1.23}$$

Damit erhält man sofort

$$\begin{aligned} \omega^2(\eta, \xi) &= \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q(\eta, \xi) \\ &= -\frac{\partial H}{\partial q}\xi_q - \frac{\partial H}{\partial p}\xi_p \\ &= -\mathrm{d}H(\xi) \ . \end{aligned} \tag{I.1.24}$$

Hier werden *nur* allgemeine Eigenschaften von Differentialformen benutzt: Von der ersten zur zweiten Zeile gelangt man durch Anwendung der Vorschrift (**I**.1.16) und die Definition (**I**.1.17) des äußeren Produktes, von der zweiten zur dritten erneut durch Anwendung der Vorschrift (**I**.1.16). Nun ist weiter $\Phi^\tau\gamma$ für alle $\tau$ eine geschlossene Kurve, also

$$\int_0^1 \mathrm{d}s\ \omega^2(\eta, \xi) = -\oint_{\Phi^\tau\gamma} \mathrm{d}H = 0 \tag{I.1.25}$$

und daher auch

$$\int_S \omega^2 = 0 \; . \tag{I.1.26}$$

Das Verschwinden dieses Flächenintegrals ist somit eine unmittelbare Konsequenz der Form der Hamiltonschen Gleichungen. Man beachte, wie das relative Minuszeichen zwischen den $p$- und den $q$-Komponenten der Hamiltonschen Gleichungen mit der Auswertung von $\mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$ zusammenwirkt, um in (**I**.1.24) das Differential $-\mathrm{d}H$ zu liefern.
Nun betrachtet man den Vollzylinder $Z = \Phi^\tau c$ mit $0 \le \tau \le t$, der durch den Transport der „Deckelfläche“ $c$, deren Berandung die Kurve $\gamma$ darstellt, im Fluß entsteht. Der Rand dieses Zylinders ist die orientierte Fläche $\partial Z = \Phi^t c - c + S$.
Da $\omega^2 = \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$ geschlossen ist, also $\mathrm{d}\omega^2 = 0$, liefert der Stokessche Satz sofort

$$\begin{aligned} 0 &= \int_Z \mathrm{d}\omega^2 \\ &= \int_{\partial Z} \omega^2 \\ &= \left( \int_{\Phi^t c} - \int_c + \int_S \right) \omega^2 \\ &= \int_{\Phi^t c} \omega^2 - \int_c \omega^2 \; , \end{aligned} \tag{I.1.27}$$

wobei das Ergebnis (**I**.1.26) für das Flächenintegral über den Schlauch $S$ benutzt wurde. Wendet man schließlich noch den Stokesschen Satz gemäß (**I**.1.12) auf die beiden verbleibenden Integrale über die Deckelfächen an, erhält man das zentrale Resultat

$$\oint_\gamma p \, \mathrm{d}q = \oint_{\Phi^t \gamma} p \, \mathrm{d}q \; . \tag{I.1.28}$$

Zur Veranschaulichung betrachte man ein infinitesimales Flächenelement $\Delta p \, \Delta q$ in $\Gamma$ und transportiere es mit dem Hamiltonschen Fluß $\Phi^t$: Die Identität (**I**.1.28) besagt, dass bei diesem Transport die Größe

$$\Delta p \cdot \Delta q = \sum_{i=1}^n \Delta p_i \, \Delta q_i \; , \tag{I.1.29}$$

also die Summe der $n$ Projektionen des Flächenelementes auf die $p_i$-$q_i$-Koordinatenebenen, invariant bleibt.
Die oben gewonnene Gleichung

$$\int_{\Phi^t c} \omega^2 = \int_c \omega^2 \tag{I.1.30}$$

bedeutet in der Sprache der Mathematik, dass die 2-Form $\omega^2 = \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$ eine *Integralinvariante* des Hamiltonschen Flusses $\Phi^t$ ist. Es läßt sich nun leicht zeigen, dass ebenso auch alle äußeren Potenzen $(\omega^2)^2 = \omega^2 \wedge \omega^2$, $(\omega^2)^3 = \omega^2 \wedge \omega^2 \wedge \omega^2$, ... Integralinvarianten des Hamiltonschen Flusses bilden. Insbesondere entspricht die „letzte“ nichttriviale Invariante $(\omega^2)^n$ dem „Volumenelement“ $\mathrm{d}^n p \, \mathrm{d}^n q$ des Phasenraumes, so dass man den aus der Mechanik bekannten Satz von Liouville zurückerhält:

*Der Hamiltonsche Fluß ist volumenerhaltend.*

Dieser Satz ist offenbar lediglich eine einfache Konsequenz der Integralinvarianz der grundlegenden Form $\omega^2 = \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$. Die Wichtigkeit dieser Form, die auch als *fundamentale 2-Form* bezeichnet wird, wird durch die folgende Definition unterstrichen:

*Eine Abbildung $g : \Gamma \to \Gamma$ heißt* kanonisch*, wenn sie $\omega^2 = \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$ als Integralinvariante besitzt. Eine kanonische Abbildung wird auch als* kanonische Transformation *bezeichnet.*

Damit entspricht die Zeitentwicklung eines Hamiltonschen Systems, also der Fluß $\Phi^t$, einer Ein-Parameter-Schar kanonischer Transformationen. Mit $\omega^2$ ist jede der Formen $(\omega^2)^2, (\omega^2)^3, \ldots, (\omega^2)^n$ ebenfalls eine Integralinvariante jeder kanonischen Transformation; insbesondere erhält jede kanonische Transformation das Phasenraumvolumen.

## I.2 Integrable Hamiltonsche Systeme; Wirkungs- und Winkelvariable

Um zu verstehen, was ein Hamiltonsches System „chaotisch“ machen kann, ist es unverzichtbar, zuvor die integrablen (lösbaren) Hamiltonschen Systeme genau zu charakterisieren.
Ein Hamiltonsches System zu lösen heißt, den gesamten Fluß für beliebige Zeiten explizit anzugeben. Der Prozeß der „Lösung“ eines integrablen Hamiltonschen Systems besteht in der expliziten Konstruktion einer kanonischen Transformation auf einen neuen Satz von „Impulsen“ und „Orten“,

$$p, q \longleftrightarrow I, \vartheta \quad , \qquad (\mathbf{I}.2.1)$$

nämlich auf sogenannte *Wirkungsvariable* $I = (I_1, \ldots, I_n)$ und dazu kanonisch konjugierte *Winkelvariable* $\vartheta = (\vartheta_1, \ldots, \vartheta_n)$, die dadurch ausgezeichnet sind, dass in ihnen der von der Hamiltionfunktion $H$ erzeugte Fluß eine überaus einfache Gestalt hat:

$$\Phi_H^t : \begin{cases} I(t) & = & I(0) \\ \vartheta(t) & = & \vartheta(0) + \omega(I)\, t\ . \end{cases} \qquad (\mathbf{I}.2.2)$$

Die Wirkungsvariablen werden also im Fluß nicht geändert und sind daher „Erhaltungsgrößen“, während die Winkelvariablen mit konstanten (aber wirkungsabhängigen) Raten anwachsen. Da ja $I, \vartheta$ wieder kanonische Koordinaten sind und der Fluß (**I**.2.2) die Lösung der in diesen Koordinaten ausgedrückten Hamiltonschen Gleichungen darstellt, verlangt das, dass die Hamiltonfunktion nach Umrechnung auf die neuen Koordinaten nur noch von $I$, nicht jedoch von $\vartheta$ abhängt: Dann nämlich hat man sofort

$$\begin{aligned} \dot{I} &= 0 &&= -\frac{\partial H(I)}{\partial \vartheta} \\ \dot{\vartheta} &= \omega(I) &&\equiv \frac{\partial H(I)}{\partial I}\ . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.3)$$

Abbildung **I**.2: Lösung eines integrablen Hamiltonschen Systems: Zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ wird eine kanonische Transformation von den gegebenen Impuls- und Ortsvariablen $p, q$ auf Wirkungs- und Winkelvariable $I, \vartheta$ vorgenommen, in denen der Fluß die triviale Gestalt (**I**.2.2) besitzt; zu einem beliebigen Zeitpunkt $t$ wird diese Transformation wieder invertiert.

Falls eine Transformation mit derartigen Eigenschaften gefunden werden kann, wird die Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems selbst für beliebig lange Evolutionsdauern $t$ sehr einfach, wie Abbildung **I**.2 in schematischer Weise zeigt: Man transformiert zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ auf Wirkungs- und Winkelvariable, hat in diesen Variablen die triviale Entwicklung (**I**.2.2) und transformiert zu einem beliebigen Zeitpunkt $t$ wieder zurück in das ursprüngliche Koordinatensystem. Es muß dann also keine Evolutionsgleichung mehr gelöst werden; die eigentliche Aufgabe besteht vielmehr in der Konstruktion der benötigten kanonischen Transformation.
Zur Vorbereitung dieses Programms wird nun die „Wechselwirkung" zweier verschiedener Hamiltonscher Flüsse $\Phi_F$ und $\Phi_G$ untersucht, also von zwei Flüssen, die von zwei verschiedenen Hamiltonschen Funktionen $F(p, q)$ und $G(p, q)$ in $\Gamma$ erzeugt werden. Im einfachsten Fall „vertauschen" diese beiden Flüsse, so dass

$$\Phi_G^{t_2} \circ \Phi_F^{t_1} = \Phi_F^{t_1} \circ \Phi_G^{t_2} \,, \qquad (\mathbf{I}.2.4)$$

was besagt, dass die beiden Abbildungssequenzen

$$\xi(0) \xrightarrow{\Phi_F^{t_1}} \xi(t_1) \xrightarrow{\Phi_G^{t_2}} \xi(t_1 + t_2)$$

und

$$\xi(0) \xrightarrow{\Phi_G^{t_2}} \widetilde{\xi}(t_2) \xrightarrow{\Phi_F^{t_1}} \widetilde{\xi}(t_1 + t_2)$$

für jeden Anfangspunkt $\xi(0)$ und alle Zeiten $t_1$ und $t_2$ zum gleichen Resultat führen. Das ist jedoch im allgemeinen *nicht* der Fall, wie Abbildung **I**.3 verdeutlicht.

Abbildung **I**.3: Verfolgung eines Anfangspunktes $\xi_0 = \xi(0)$ in zwei verschiedenen Flüssen: Folgt man erst dem von $F$ erzeugten Fluß $\Phi_F$ für eine Zeit $t_1$ und dann dem von $G$ erzeugten Fluß $\Phi_G$ für eine Zeit $t_2$, erhält man entsprechend der Sequenz $\xi_0 \longrightarrow \xi_{10} \longrightarrow \xi_{12}$ den Endpunkt $\xi_{12}$. Kehrt man die Reihenfolge der Flüsse um, wobei jedoch die „Mitschwimmzeiten" ungeändert bleiben, erhält man die Sequenz $\xi_0 \longrightarrow \widetilde{\xi}_{20} \longrightarrow \widetilde{\xi}_{21}$ mit dem Endpunkt $\widetilde{\xi}_{21}$, der im allgemeinen nicht mit $\xi_{12}$ übereinstimmt.

Um nun den „Grad der Nichtvertauschbarkeit" der beiden Flüsse zu quantifizieren, wird die Differenz der Endpunkte berechnet, wobei die Bezeichnungen der Abbildung **I**.3 verwendet werden: Zunächst gelten nach dem Mittelwertsatz mit geeigneten Stützstellen $\eta$, $\overline{\eta}$, $\zeta$, und $\overline{\zeta}$ die Beziehungen

$$\xi_{12} = \xi_0 + t_1 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} F(\eta) + t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} G(\overline{\zeta}) \tag{I.2.5}$$

sowie

$$\widetilde{\xi}_{21} = \xi_0 + t_1 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} F(\overline{\eta}) + t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} G(\zeta) \; ; \tag{I.2.6}$$

daher hat man sofort

$$\xi_{12} - \widetilde{\xi}_{21} = t_1 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} \Big( F(\eta) - F(\overline{\eta}) \Big) + t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} \Big( G(\overline{\zeta}) - G(\zeta) \Big) \, . \tag{I.2.7}$$

Für kleine Flußzeiten $t_1$ und $t_2$, die beide von gleicher Größenordnung $\mathcal{O}(t)$ sein sollen, hat man weiterhin

$$\overline{\eta} - \eta = t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} G(\xi_0) + \mathcal{O}(t^2) \tag{I.2.8}$$

und

$$\overline{\zeta} - \zeta = t_1 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} F(\xi_0) + \mathcal{O}(t^2) \; ; \tag{I.2.9}$$

das führt auf die Entwicklungen

$$\begin{aligned} F(\overline{\eta}) - F(\eta) &= (\overline{\eta} - \eta) \begin{pmatrix} \partial_p \\ \partial_q \end{pmatrix} F(\xi_0) + \mathcal{O}\big((\overline{\eta} - \eta)^2\big) \\ &= t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q G \\ \partial_p G \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_p F \\ \partial_q F \end{pmatrix} + \mathcal{O}(t^2) \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.10)$$

und ebenso

$$G(\overline{\zeta}) - G(\zeta) = t_1 \begin{pmatrix} -\partial_q F \\ \partial_p F \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_p G \\ \partial_q G \end{pmatrix} + \mathcal{O}(t^2) \, , \qquad (\mathbf{I}.2.11)$$

wobei hier und im folgenden alle Ableitungen der Funktionen $F$ und $G$ am Startpunkt $\xi_0$ ausgewertet werden. Einsetzen dieser Entwicklungen in die Differenz (**I**.2.7) liefert dann unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung $\mathcal{O}(t^3)$ die gesuchte Beziehung

$$\begin{aligned} \xi_{12} - \widetilde{\xi}_{21} &= t_1 t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} \left[ - \begin{pmatrix} -\partial_q G \\ \partial_p G \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_p F \\ \partial_q F \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\partial_q F \\ \partial_p F \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_p G \\ \partial_q G \end{pmatrix} \right] \\ &= -2 t_1 t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} \Big[ \partial_p G \, \partial_q F - \partial_q G \, \partial_p F \Big] \\ &\equiv -2 t_1 t_2 \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} \big\{ F, G \big\} \, . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.12)$$

In der letzten Zeile dieser Umformung wurde das Symbol

$$\begin{aligned} \big\{ F, G \big\} &\equiv \partial_p G \, \partial_q F - \partial_q G \, \partial_p F \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left( \frac{\partial G}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.13)$$

eingeführt; das ist genau die aus der theoretischen Mechanik bekannte *Poissonklammer* der Funktionen $F$ und $G$. Das Resultat (**I**.2.12) besagt also, dass für infinitesimale Flußzeiten, für die die Vernachlässigung der höheren Terme der Entwicklungen gerechtfertigt ist, der „Grad der Nichtvertauschbarkeit" der beiden Flüsse $\Phi_F$ und $\Phi_G$ von der Poissonklammer $\big\{ F, G \big\}$ bestimmt wird. Diese Aussage gilt auch für beliebig große Flußzeiten:

> *Zwei Hamiltonsche Flüsse $\Phi_F$ und $\Phi_G$ kommutieren genau dann, wenn die Poissonklammer $\big\{ F, G \big\}$ der flußerzeugenden Funktionen verschwindet.*

Die Poissonklammer besitzt einige charakteristische algebraische Eigenschaften: Sie ist *bilinear*, d.h. linear in beiden Argumenten,

$$\begin{aligned} \big\{ aF + bG, H \big\} &= a\big\{ F, H \big\} + b\big\{ G, H \big\} \\ \big\{ F, aG + bH \big\} &= a\big\{ F, G \big\} + b\big\{ F, H \big\} \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.14)$$

für differenzierbare Funktionen $F(p, q)$, $G(p, q)$ und $H(p, q)$ sowie reelle Zahlen $a$ und $b$; weiterhin *schiefsymmetrisch*,

$$\big\{ F, G \big\} = -\big\{ G, F \big\} \, , \qquad (\mathbf{I}.2.15)$$

und es gilt die *Jacobi-Identität*

$$\Big\{\{F,G\},H\Big\}+\Big\{\{G,H\},F\Big\}+\Big\{\{H,F\},G\Big\}=0\,. \qquad (\mathbf{I}.2.16)$$

Für die Zwecke dieser Einführung noch wichtiger ist jedoch ihre geometrische Interpretation: Es gilt nämlich die Darstellung

$$\big\{F,G\big\}=\begin{pmatrix}-\partial_q G\\ \partial_p G\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\partial_p F\\ \partial_q F\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}\dot p\\ \dot q\end{pmatrix}_G\cdot\begin{pmatrix}\partial_p F\\ \partial_q F\end{pmatrix}\,. \qquad (\mathbf{I}.2.17)$$

Nun ist $\big(\partial_p F,\,\partial_q F\big)^{\mathrm t}$ der übliche Gradient der Funktion $F(p,q)$, wogegen der erste Faktor $\big(-\partial_q G,\,\partial_p G\big)^{\mathrm t}\equiv\big(\dot p,\,\dot q\big)^{\mathrm t}_G$ dieses Skalarproduktes ein Tangentialvektor des von $G(p,q)$ erzeugten Flusses ist. Da das Skalarprodukt die Projektion des Gradientenvektors auf den Flußvektor liefert und damit die Ableitung von $F(p,q)$ in Flußrichtung, ergibt sich eine sehr anschauliche Deutung:

> *Die Poissonklammer $\big\{F,G\big\}$ beschreibt die Ableitung der Funktion $F$ in Richtung des von der Funktion $G$ erzeugten Hamiltonschen Flusses.*

Eine Gleichung $\big\{F,G\big\}=0$ besagt also, dass $F$ in dem von $G$ erzeugten Fluß erhalten ist; wegen der Antisymmetrie der Poissonklammer gilt eine entsprechende Aussage auch, wenn die Rollen der beiden Funktionen vertauscht werden.
Aus der theoretischen Mechanik ist bekannt, dass Erhaltungsgrößen für die Lösung eines Hamiltonschen Systems herausragende Bedeutung besitzen. Das folgende Paradebeispiel ist typisch:

■ **Beispiel:** Ein Teilchen in einem zentralsymmetrischen Potentialfeld

Für ein Teilchen der Masse $m$ in einem dreidimensionalen Potential $V$, das nur vom Abstand vom Ursprung abhängt, besitzt die Hamiltonfunktion die Form

$$H(p,q)=\frac{1}{2m}(p_1^2+p_2^2+p_3^3)+V(q_1^2+q_2^2+q_3^2)\,. \qquad (\mathbf{I}.2.18)$$

Die Komponenten des Drehimpulses des Teilchens bezüglich des Potentialzentrums werden gegeben durch

$$L_3=q_1p_2-q_2p_1 \qquad \text{usw. zyklisch}\,; \qquad (\mathbf{I}.2.19)$$

das Quadrat des Drehimpulses lautet

$$L^2=L_1^2+L_2^2+L_3^3\,. \qquad (\mathbf{I}.2.20)$$

Definiert man nun

$$F_1=H, \qquad F_2=L^2, \qquad F_3=L_3\,, \qquad (\mathbf{I}.2.21)$$

so gelten für dieses Funktionensystem die „Vertauschungsrelationen“

$$\big\{F_\mu,F_\nu\big\}=0 \qquad (\mu,\nu=1,2,3)\,. \qquad (\mathbf{I}.2.22)$$

Die beiden Relationen $\{L^2, H\} = 0$ und $\{L_3, H\} = 0$ drücken die bekannte Tatsache aus, dass für ein zentralsymmetrisches Potential das Quadrat des Drehimpulses sowie seine 3-Komponente „Konstanten der Bewegung" sind, also durch das „Mitschwimmen" in dem von $H$ erzeugen Fluß nicht geändert werden. Die weitere Relation $\{L_3, L^2\} = 0$ besagt zudem, dass $L_3$ auch in dem von $L^2$ erzeugten Fluß erhalten bleibt (und umgekehrt). Man hat also ein System vom drei kommutierenden Flüssen auf dem 6-dimensionalen Phasenraum $\Gamma$ des mechanischen Systems; mehr als drei miteinander kommutierende Flüsse kann es offenbar nicht geben. Die Existenz dieses maximalen Systems ist gleichbedeutend mit der Integrabilität des durch die Funktion (**I**.2.18) definierten Hamiltonschen Systems.
Es ist keinesweges zwingend, $L_3$ als eine der drei flußerzeugenden Funktionen vor den beiden anderen Drehimpulskomponenten auszuzeichnen: Da ja $\{L_i, H\} = 0$ und $\{L_i, L^2\} = 0$ für $i = 1, 2, 3$, ist *jede* Drehimpulskomponente sowohl in dem von $H$ als auch in dem von $L^2$ erzeugten Fluß erhalten; man findet also ein maximales System kommutierender Flüsse auch dann, wenn man anstelle von $F_3 = L_3$ für das System (**I**.2.21) eine der gleichberechtigten Möglichkeiten $F_3 = L_1$ oder $F_3 = L_2$ wählt. Es ist jedoch *nicht* möglich, ein „maximales System kommutierender Flüsse" zu konstruieren, das mehr als eine Drehimpulskomponente enthält: Unter Verwendung der „fundamentalen Poissonklammer"

$$\{q_j, p_k\} = \sum_{i=1}^{3} \left( \frac{\partial p_k}{\partial p_i} \frac{\partial q_j}{\partial q_i} - \frac{\partial p_k}{\partial q_i} \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \right) = \delta_{j,k} \qquad (\mathbf{I}.2.23)$$

sowie der leicht zu beweisenden „Produktregel"

$$\{F, GH\} = G\{F, H\} + \{F, G\}H \qquad (\mathbf{I}.2.24)$$

findet man nämlich sofort

$$\begin{aligned} \{L_1, L_2\} &= \{q_2p_3 - q_3p_2, q_3p_1 - q_1p_3\} \\ &= \{q_2p_3, q_3p_1\} - \{q_2p_3, q_1p_3\} - \{q_3p_2, q_3p_1\} + \{q_3p_2, q_1p_3\} \\ &= q_2\{p_3, q_3p_1\} - \quad 0 \quad - \quad 0 \quad + \{q_3, q_1p_3\}p_2 \\ &= q_2\{p_3, q_3\}p_1 + q_1\{q_3, p_3\}p_2 \\ &= -q_2p_1 + q_1p_2 \\ &= L_3 \ , \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.25)$$

und daraus bei zyklischer Vertauschung der Komponenten schließlich

$$\{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k \qquad (\mathbf{I}.2.26)$$

mit dem bekannten Levi-Civita-Symbol $\epsilon_{ijk}$: Die von zwei verschiedenen Drehimpulskomponenten erzeugten Flüsse kommutieren daher nicht. Da die Poissonklammer $\{p_i, p_j\}$ zweier verschiedener kanonischer Impulskoordinaten immer verschwinden muß, kann man diesen Sachverhalt auch wie folgt ausdrücken:

*Es ist nicht möglich, zwei verschiedene Drehimpulskomponenten gleichzeitig als kanonische Impulskoordinaten zu verwenden.*

Die formale Verwandtschaft dieser Beziehungen mit den entsprechenden, viel besser bekannten Kommutatorrelationen der Quantenmechanik ist offensichtlich. ■

Der an diesem vertrauten Beispiel sichtbar werdende Zusammenhang zwischen der Integrabilität eines Hamiltonschen Systems sowie der Existenz eines maximalen Systems kommutierender Flüsse gilt ganz allgemein:

> *Ein Hamiltonsches System mit* $n$ *Freiheitsgraden, d.h. mit einem Phasenraum der Dimension* $2n$*, ist genau dann integrabel, wenn es* $n$ *unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen* $F_1, \ldots, F_n$ *besitzt.*

Dabei bedeutet *Unabhängigkeit* der Erhaltungsgrößen, dass die $n$ Hamiltonschen Vektorfelder, die von den $F_\nu$ erzeugt werden, (fast) überall linear unabhängig sind; *Vertauschbarkeit* verlangt, dass ihre Poissonklammern überall verschwinden:

$$\big\{F_\mu, F_\nu\big\} = 0 \qquad (\mu, \nu = 1, \ldots, n)\ . \tag{I.2.27}$$

Man spricht dann von „$n$ Konstanten der Bewegung in Involution“. Für ein mechanisches System, das durch eine Hamiltonfunktion $H(p, q)$ beschrieben wird, die die Gesamtenergie des Systems angibt, ist natürlich $H(p, q)$ selbst eine der Funktionen $F_\nu(p, q)$.
Die Existenz von $n$ unabhängigen Erhaltungsgrößen bedeutet aus geometrischer Sicht, dass jede Bahn $\xi(t) = \Phi_H^t\big(\xi(0)\big)$ auf einer lediglich $n$-dimensionalen Untermenge des $2n$-dimensionalen Phasenraumes liegt. Diese Untermenge wird durch Bedingungen der Form

$$F_\nu\big(\xi(t)\big) = f_\nu \qquad (\nu = 1, \ldots, n) \tag{I.2.28}$$

charakterisiert. Von zentraler Bedeutung ist nun die Erkenntnis, dass diese Untermenge, unabhängig von der genauen Gestalt des zugrundeliegenden (integrablen) Systems, eine universelle Topologie besitzt:

> *Falls keine Bahnen bezüglich einer oder mehrerer Variablen ins Unendliche laufen, wie es für ein freies Teilchen der Fall wäre, ist die durch die Werte der* $n$ *Erhaltungsgrößen spezifizierte Untermannigfaltigkeit des Phasenraums* immer *ein* $n$*-Torus. Eine Lösungskurve des Systems bleibt an ihren Torus „gebunden“ und „umspinnt“ ihn.*

Diese Aussage wird häufig als *Arnold-Liouville-Theorem* bezeichnet; Abbildung **I**.4 verdeutlicht den Fall $n = 2$.
Zwar kann dieses Theorem hier nicht vollständig bewiesen werden, aber es läßt sich dennoch „anschaulich“ verstehen: Die Normalenvektoren $N_\mu(\xi)$ auf den Konstanzflächen $F_\mu = f_\mu$ werden bekanntlich an jeder Stelle $\xi$ durch die Gradienten der Erhaltungsgrößen geliefert,

$$N_\mu(\xi) = \begin{pmatrix} \partial_p \\ \partial_q \end{pmatrix} F_\mu(\xi)\ . \tag{I.2.29}$$

Abbildung **I**.4: Die invarianten Mannigfaltigkeiten eines Hamiltonschen Systems mit 2 Freiheitsgraden sind 2-Tori. Eine Trajektorie, die auf einem solchen Torus startet, bleibt für alle Zeiten auf ihm; der Torus ist also invariant unter dem Hamiltonschen Fluß. Man beachte, dass der 2-Torus in einen vierdimensionalen Phasenraum eingebettet ist.

Andererseits erzeugt jede Erhaltungsgröße einen Hamiltonschen Fluß mit den Tangentialvektoren

$$T_\nu(\xi) = \begin{pmatrix} -\partial_q \\ \partial_p \end{pmatrix} F_\nu(\xi) \; . \qquad (\mathbf{I}.2.30)$$

Die Involutionsgleichungen $\{F_\mu, F_\nu\} = 0$ besagen nun gemäß der Deutung (**I**.2.17), dass

$$T_\nu(\xi) \perp N_\mu(\xi) \qquad (\mu, \nu = 1, \ldots, n) \; , \qquad (\mathbf{I}.2.31)$$

dass also die $n$ Vektorfelder $T_\nu$ überall senkrecht auf den $n$ Normalenvektoren $N_\mu$ einer „Bindungsmannigfaltigkeit“ stehen und daher *tangential* an dieser Mannigfaltigkeit liegen. Die einzige $n$-Mannigfaltigkeit, die sich durch $n$ linear unabhängige Tangentialvektorfelder singularitätenfrei „kämmen“ läßt, ist jedoch ein $n$-Torus.

Um nun endlich ein integrables Hamiltonsches System zu lösen, müssen geeignete Kombinationen der Erhaltungsgrößen angegeben werden, die die Tori bestmöglich spezifizieren (nämlich die Wirkungsvariablen), sowie geeignete Koordinaten auf jedem Torus (nämlich die Winkelvariablen). Man kann dazu einer einfachen Idee folgen: Auf jedem durch einen Satz $\{f\}$ spezifizierten Torus $T(\{f\})$ wird ein Punkt $\xi_0$ als Nullpunkt der Koordinaten willkürlich festgelegt. Jeder andere Punkt $\xi$ auf diesem Torus ist dann durch eine geeignete Verschiebung längs der Flüsse, die von den Erhaltungsgrößen erzeugt werden, zu erreichen:

$$\xi = \Phi_{F_1}^{\tau_1} \circ \cdots \circ \Phi_{F_n}^{\tau_n}(\xi_0) \; . \qquad (\mathbf{I}.2.32)$$

Da die Flüsse vertauschen, liefern sie ein geschlossenes Netz, so dass die „Flußzeiten“ $\tau_\nu$ eindeutig sind und sich daher als Koordinaten eignen, sofern mehrfache Umläufe um den

Torus durch passendes „Aufschneiden“ verboten werden: Die Flußlinien der $\Phi_{F_\nu}$ laufen nämlich im allgemeinen *nicht* in sich selbst zurück. Nimmt man das in Kauf, kann man eine Transformation von den alten $p, q$-Koordinaten auf das neue $F, \tau$-System vornehmen:

$$p, q \longleftrightarrow F, \tau \quad . \tag{I.2.33}$$

Die so gewonnenen Koordinaten sind jedoch an den Schnitten unstetig und außerdem willkürlich, da die Natur der Erhaltungsgrößen $F_\nu$ nicht spezifiziert worden ist. (Man erinnere sich an das Beispiel des Teilchens im Zentralpotential: Trifft man dort anstelle von $F_3 = L_3$ die gleichberechtigte Wahl $F_3 = L_2$, ergeben sich andere Koordinatenlinien!) Jeder andere Satz erhaltener Größen

$$I_i(p, q) = I_i\big(F_1(p, q), \cdots, F_n(p, q)\big) \tag{I.2.34}$$

ist ebenso zulässig, sofern die Unabhängigkeit der $I_i$ durch das Nichtverschwinden der Funktionaldeterminante des Wechsels, also durch

$$\left|\frac{\partial I_i}{\partial F_\nu}\right| \neq 0 \tag{I.2.35}$$

gewährleistet wird. Einen besonders zweckmäßigen Satz von Erhaltungsgrößen bilden die Integralinvarianten

$$I_i(F) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i} p(F, q)\,\mathrm{d}q\ , \tag{I.2.36}$$

wobei jeweils um einen der $n$ topologisch unabhängigen Basiszyklen des betrachteten $n$-Torus integriert wird; in der Abbildung **I**.5 sind zwei Basiszyklen eines 2-Torus skizziert. Mit dem Argument, das bereits in Abschnitt **I**.1 zum Beweis der Identität (**I**.1.28) benutzt wurde, kann auch gezeigt werden, dass sich diese Größen (**I**.2.36) bei einer stetigen Deformation der $\gamma_i$ nicht ändern, sofern diese Wege bei der Verformung stets auf ihrem Torus bleiben. Diese Größen sind daher wohldefiniert und kennzeichnen den jeweiligen Torus, für den sie berechnet werden; sie heißen *Wirkungsvariable*.
Betrachtet man nun die von diesen Wirkungsvariablen erzeugten Hamiltonschen Flüsse, so besitzen die Bahnen $\xi(\vartheta_i) = \Phi_{I_i}^{\vartheta_i}(\xi_0)$, wie noch gezeigt werden wird, die entscheidend wichtige Eigenschaft, in sich zurückzulaufen:

$$\xi(\vartheta_i + 2\pi) = \xi(\vartheta_i) \tag{I.2.37}$$

oder

$$\Phi_{I_i}^{\vartheta_i + 2\pi} = \Phi_{I_i}^{\vartheta_i} \ . \tag{I.2.38}$$

Diese Bahnkurven sind daher topologisch äquivalent zu den $\gamma_i$. Auf diese Weise werden jedem Punkt auf dem Torus die „Flußzeiten“ $\vartheta = (\vartheta_1, \ldots, \vartheta_n)$ als Koordinaten zugeordnet; diese sind modulo $2\pi$ eindeutig und heißen *Winkelvariablen*. Die „alten“ Impulse und Orte $p$ und $q$, ausgedrückt durch die neuen Variablen $I$ und $\vartheta$, also die Funktionen $p = p(I, \vartheta)$ und $q = q(I, \vartheta)$, sind damit $2\pi$-periodisch in allen Winkeln $\vartheta_i$.

Abbildung **I**.5: Zwei unabhängige Basiszyklen eines 2-Torus. Diese Basiszyklen liefern die Integrationswege $\gamma_i$ für die Berechnung der Wirkungsvariablen (**I**.2.36). Bei einer stetigen Deformation der Basiszyklen *auf* dem Torus bleiben die Wirkungsintegrale unverändert.

Die Beziehungen $I_i = I_i(F_1, \ldots, F_n)$ lassen sich aufgrund der Voraussetzung (**I**.2.35) nach den $F_\nu$ auflösen, insbesondere also nach „der“ Hamiltonfunktion $H$, die ja unter den $F_\nu$ vorkommt:

$$H = H(I_1, \cdots, I_n) \; . \tag{I.2.39}$$

Die Möglichkeit einer solchen Darstellung, die schon am Anfang dieses Abschnitts gefordert worden war, ist somit charakteristisch für integrable Systeme; sie führt sofort auf die Bewegungsgleichungen (**I**.2.3) und damit auf den sehr einfachen Fluß (**I**.2.2). Allgemeiner gilt nun für die Ableitung einer Funktion $G(I, \vartheta)$ in Richtung des von $H(I)$ erzeugten Flusses die Beziehung

$$\begin{aligned} \dot{G}_H &= \{G, H\} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left( \frac{\partial H}{\partial I_i} \frac{\partial G}{\partial \vartheta_i} - \frac{\partial H}{\partial \vartheta_i} \frac{\partial G}{\partial I_i} \right) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial H}{\partial I_i} \frac{\partial G}{\partial \vartheta_i} \; , \end{aligned} \tag{I.2.40}$$

da ja $H$ von den $\vartheta_i$ nicht abhängt. Insbesondere für $G = \vartheta_i$ erhält man sofort die Gleichung

$$\dot{\vartheta}_i = \frac{\partial H}{\partial I_i} \equiv \omega_i(I_1, \cdots, I_n) \; , \tag{I.2.41}$$

die die Wachstumsraten $\omega_i(I)$ der Winkelvariablen festlegt, also die konstanten Frequenzen, mit denen die Trajektorien ihren jeweiligen Torus umspinnen. Selbstverständlich gelten auch die Gleichungen

$$0 = \dot{I}_i = -\frac{\partial H(I)}{\partial \vartheta_i} \; , \tag{I.2.42}$$

die die Konstanz der Wirkungsvariablen unter der Zeitentwicklung ausdrücken, also die Tatsache, dass die Trajektorien immer an ihren Torus gebunden sind.
Es bleibt nun die Aufgabe, die Transformation $(p,q) \longleftrightarrow (I,\vartheta)$, deren Existenz für integrable Systeme gesichert ist, explizit zu konstruieren. Dazu betrachtet man die sogenannte *Wirkungsfunktion*

$$S(I,q) = \int_{q_0}^{q} p(I,\widetilde{q})\,\mathrm{d}\widetilde{q}\,, \qquad (\mathbf{I}.2.43)$$

wobei hier die Umkehrung des Systems (**I**.2.36), also der Beziehungen $I = I(F)$, in die Funktionen $p = p(F,q)$, die die Lage der Tori im Phasenraum angeben, eingesetzt wurde. Dieses Wegintegral (**I**.2.43) hängt für topologisch äquivalente Wege nur von Anfangs- und Endpunkt ab; man hat daher sofort

$$p(I,q) = \frac{\partial S(I,q)}{\partial q}\,. \qquad (\mathbf{I}.2.44)$$

Darüber hinaus gelten auch die Beziehungen

$$\vartheta(I,q) = \frac{\partial S(I,q)}{\partial I}\,, \qquad (\mathbf{I}.2.45)$$

so dass diese beiden Gleichungen (**I**.2.44) und (**I**.2.45) die gesuchte Transformation eindeutig festlegen: Kenntnis der Funktion (**I**.2.43) erlaubt es, das System von den „alten" Koordinaten $p$, $q$ auf die Wirkungs- und Winkelvariablen $I$, $\vartheta$ umzurechnen und diesen Variablenwechsel auch wieder zu invertieren; $S(I,q)$ wird daher als *erzeugende Funktion* dieser kanonischen Transformation bezeichnet.
Anstatt die wichtigen Beziehungen (**I**.2.45) konstruktiv zu beweisen, soll hier „rückwärts" gezeigt werden, dass die durch diese Gleichung *definierten* Variablen $\vartheta = (\vartheta_1,\ldots,\vartheta_n)$ genau die Eigenschaften haben, die die Laufzeitparameter der Flüsse $\Phi_{I_i}$ auszeichnen: Zunächst erhält man offensichtlich für einen Weg, der nach $n$ Umläufen um den Torus in Richtung des Basiszykels $\gamma_i$ zum Startpunkt $q_0$ zurückkehrt, aus den Definitionen (**I**.2.43) und (**I**.2.36) die Identität

$$S(I,q_0) = n\,2\pi I_i\,; \qquad (\mathbf{I}.2.46)$$

die Transformationsgleichung (**I**.2.45) liefert dann sofort

$$\vartheta_i(I,q_0) = n\,2\pi\,, \qquad (\mathbf{I}.2.47)$$

also die Eindeutigkeit der Winkelvariablen modulo $2\pi$. Weiterhin wird $\vartheta_i$ durch den Fluß $\Phi_{I_j}$ mit $j \neq i$ nicht geändert, aber durch $\Phi_{I_i}$ mit der konstanten Rate 1: Diese Änderung wird gegeben durch die Richtungsableitung

$$\big\{\vartheta_i, I_j\big\} = \sum_{\alpha=1}^{n}\left(\frac{\partial I_j}{\partial p_\alpha}\frac{\partial \vartheta_i}{\partial q_\alpha} - \frac{\partial I_j}{\partial q_\alpha}\frac{\partial \vartheta_i}{\partial p_\alpha}\right)\,. \qquad (\mathbf{I}.2.48)$$

Da nun $I = I(p,q)$ und $\vartheta = \vartheta\big(I(p,q),q\big)$, hat man weiter

$$\begin{aligned}
\big\{\vartheta_i, I_j\big\} &= \sum_{\alpha=1}^{n}\left[\frac{\partial I_j}{\partial p_\alpha}\left(\sum_{\beta=1}^{n}\frac{\partial\vartheta_i}{\partial I_\beta}\frac{\partial I_\beta}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial\vartheta_i}{\partial q_\alpha}\right)-\sum_{\beta=1}^{n}\frac{\partial I_j}{\partial q_\alpha}\frac{\partial\vartheta_i}{\partial I_\beta}\frac{\partial I_\beta}{\partial p_\alpha}\right]\\
&= \sum_{\beta=1}^{n}\frac{\partial\vartheta_i}{\partial I_\beta}\big\{I_\beta, I_j\big\}+\sum_{\alpha=1}^{n}\frac{\partial I_j}{\partial p_\alpha}\frac{\partial\vartheta_i}{\partial q_\alpha}\;. \qquad (\mathbf{I}.2.49)
\end{aligned}$$

Da die Wirkungsvariablen Erhaltungsgrößen in Involution sind, gilt $\big\{I_\beta, I_j\big\} = 0$ für alle $\beta, j = 1,\ldots,n$. Setzt man jetzt also die Gültigkeit der Transformationsgleichung (**I**.2.45) voraus, folgt sofort

$$\begin{aligned}
\big\{\vartheta_i, I_j\big\} &= \sum_{\alpha=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p_\alpha}I_j(p,q)\;\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial I_i}S(I,q)\right)\\
&= \sum_{\alpha=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p_\alpha}I_j(p,q)\;\frac{\partial}{\partial I_i}p_\alpha(I,q)\\
&= \delta_{i,j}\;; \qquad (\mathbf{I}.2.50)
\end{aligned}$$

das ist die Behauptung: Die durch die Gleichung (**I**.2.45) eingeführte Größe $\vartheta_i$ ist der korrekte Flußparameter zu $\Phi_{I_i}$.[1] Im zweiten Schritt dieser Umformung wurde die Reihenfolge der unmittelbar auf $S(I,q)$ wirkenden partiellen Ableitungen vertauscht und dann die erste Transformationsgleichung (**I**.2.44) ausgenutzt.

Für die konkrete Berechnung der erzeugenden Funktion (**I**.2.43) ist es offenbar notwendig, dass zwei Typen von Operationen beliebig genau durchgeführt werden können:

- Die Inversion eines Funktionensystems, das auch noch von einem Parametersatz $\alpha = (\alpha_1,\ldots,\alpha_n)$ abhängen darf, also die Ermittlung der Umkehrfunktion

  $$x = g(y|\alpha)\;,$$

  wenn

  $$y = f(x|\alpha)$$

  gegeben ist $\big(x = (x_1,\cdots,x_n);\; y = (y_1,\cdots,y_n)\,\big)$.

- Die Berechnung von bestimmten oder unbestimmten Wegintegralen entlang vorgegebener Wegstücke $\gamma$ von $x_0$ nach $x_1$,

  $$S_\gamma(x_0;x_1|\alpha) = \int_\gamma \mathrm{d}x\, f(x|\alpha)\;.$$

[1] Genau darin besteht der Inhalt der Aussage, dass $\vartheta_i$ „kanonisch konjugiert“ zu $I_i$ ist; die Poissonklammer (**I**.2.50) ist daher „fundamental“ in dem gleichen Sinne wie ihr Gegenstück (**I**.2.23).

Das ist meist nicht mit Hilfe elementarer oder spezieller Funktionen möglich. Es würde aber genügen, wenn diese Aufgaben in jedem vorgegebenen endlichen Bereich von $\Gamma$ mit jeder geforderten Genauigkeit numerisch bewältigt werden könnten.
Gewissermaßen im Vorbeigehen, nämlich durch die Angabe der ersten Transformationsgleichung (**I**.2.44), wurde auch gezeigt, dass die Wirkungsfunktion $S(I,q)$, die die kanonische Transformation $(p,q) \longleftrightarrow (I,\vartheta)$ erzeugt, einer partiellen Differentialgleichung gehorcht, die sich dadurch ergibt, dass in der ursprünglichen Hamiltonfunktion $H(p,q)$ die Impulse gemäß der Gleichung (**I**.2.44) durch die Ableitungen der Wirkungsfunktion ausgedrückt werden; man erhält dann den konstanten Wert, den die Hamiltonfunktion für die betrachtete Wirkung annimmt:

$$H\left(\frac{\partial S(I,q)}{\partial q}, q\right) = \text{const.} = H(I) \ . \tag{I.2.51}$$

Diese Gleichung wird als *Hamilton-Jacobi-Gleichung* bezeichnet. Ihre konzeptionelle Bedeutung besteht darin, dass ihre Lösung mit der vorher als Wegintegral eingeführten Wirkungsfunktion (**I**.2.43) übereinstimmt, diese Wirkungsfunktion also auch durch Lösung dieser Gleichung (**I**.2.51) bestimmt werden kann:

> *Die Hamilton-Jacobi-Gleichung ist eine partielle Differentialgleichung für die Wirkungsfunktion, also für die Erzeugende der kanonischen Transformation auf Wirkungs- und Winkelvariable.*

■ **Beispiel:** Der harmonische Oszillator

Die schon aus Abschnitt **I**.1 bekannte Hamiltonfunktion des hamonischen Oszillators,

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 q^2 \ ,$$

führt auf die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega_0^2 q \\ \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \ , \end{aligned}$$

die sich elementar lösen lassen: Ableitung der zweiten Gleichung und Einsetzen der ersten ergibt die Schwingungsgleichung

$$\ddot{q} = -\omega_0^2 q \tag{I.2.52}$$

mit der bekannten Lösung

$$q(t) = A\sin(\omega_0 t + \vartheta_0) \ , \tag{I.2.53}$$

wobei die Amplitude $A$ und die Phase $\vartheta_0$ als Integrationskonstanten auftreten.

Im Sinne der vorher entwickelten Theorie ist ein System mit nur einem Freiheitsgrad stets integrabel, da immer eine Erhaltungsgröße existiert, nämlich die durch $H(p, q)$ gegebene Energie $E$. Die Gleichung $H(p, q) = E$, also

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 q^2 = E \tag{I.2.54}$$

oder

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{\frac{2E}{m\omega_0^2}} = 1 \, , \tag{I.2.55}$$

legt die 1-Tori in der $p, q$-Phasenebene fest; dabei handelt es sich offensichtlich um Ellipsen mit den Halbachsen $\Delta p = \sqrt{2mE}$ und $\Delta q = \sqrt{2E/(m\omega_0^2)}$. Auflösen nach $p$ liefert den Impuls in der Form

$$\begin{aligned} p &= \pm\sqrt{2mE - m^2\omega_0^2 q^2} \\ &= \pm m\omega_0 \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2} - q^2} \, , \end{aligned} \tag{I.2.56}$$

wobei das positive (negative) Vorzeichen nach rechts (links) gerichtete Bewegung beschreibt. An den Umkehrpunkten $q_\pm$ ist $p = 0$; daraus erhält man

$$q_\pm = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} \, . \tag{I.2.57}$$

Mit diesen Informationen kann zunächst die Wirkungsvariable $I(E)$ sofort berechnet werden:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2\pi} \oint p \, \mathrm{d}q \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{q_-}^{q_+} \mathrm{d}q \; m\omega_0 \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2} - q^2} \\ &= \frac{1}{\pi} m\omega_0 \, \frac{1}{2}\pi \frac{2E}{m\omega_0^2} \\ &= \frac{E}{\omega_0} \, . \end{aligned} \tag{I.2.58}$$

Umkehrung dieser Beziehung liefert jetzt die durch die Wirkungsvariable ausgedrückte Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators,

$$H(I) = I\omega_0 \, . \tag{I.2.59}$$

Die in der Zeit konstante Rate, mit der die zu $I$ konjugierte Winkelvariable $\vartheta$ ihre Ellipse überstreicht, ist also

$$\dot{\vartheta} = \frac{\partial H}{\partial I} = \omega_0 \, ; \tag{I.2.60}$$

die Tatsache, dass diese Rate wirkungsunabhängig ist, ist eine spezifische Eigenheit des harmonischen Oszillators.
Um schließlich die Winkelvariable selbst angeben zu können, wird die erzeugende Funktion $S(I,q)$ der kanonischen Transformation $(p,q) \longleftrightarrow (I,\vartheta)$ aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung (**I**.2.51) bestimmt:

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2 = I\omega_0 \qquad (\mathbf{I}.2.61)$$

oder

$$\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 = 2mI\omega_0 - m^2\omega_0^2 q^2 \; ; \qquad (\mathbf{I}.2.62)$$

das liefert

$$S(I,q) = m\omega_0 \int_{q_0}^{q} \mathrm{d}\widetilde{q}\, \sqrt{\frac{2I}{m\omega_0} - \widetilde{q}^2} \qquad (\mathbf{I}.2.63)$$

für einen beliebigen Startpunkt $q_0$. Um daraus die Winkelvariable zu bestimmen, braucht dieses Integral nicht berechnet zu werden; gemäß der Transformationsgleichung (**I**.2.45) gilt nämlich

$$\begin{aligned}
\vartheta &= \frac{\partial S}{\partial I} \\
&= \int_{q_0}^{q} \mathrm{d}\widetilde{q}\, \frac{1}{\sqrt{\frac{2I}{m\omega_0} - \widetilde{q}^2}} \\
&= \arcsin\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2I}}q\right) \; ,
\end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.64)$$

wobei im letzten Schritt $q_0 = 0$ gesetzt wurde. Nachdem der 1-Torus des Systems (die betrachtete Ellipse) durch Angabe der Energie $E$ oder der Wirkung $I = E/\omega_0$ festgelegt wurde, kann damit jeder Oszillatorposition $q$ ein Winkel $\vartheta$ zugeordnet werden; die Zeitentwicklung verläuft dann nach dem Schema

$$\begin{aligned}
I &= \text{const.} \\
\vartheta &= \omega_0 t + \vartheta_0 \; .
\end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.65)$$

Zu einem beliebigen Zeitpunkt kann die Transformation (**I**.2.64) wieder invertiert werden und liefert

$$q = \sqrt{\frac{2I}{m\omega_0}} \sin\vartheta \; . \qquad (\mathbf{I}.2.66)$$

Da die Energieerhaltung die Amplitude $A$ der Schwingung bei gegebener Energie $E$ zu

$$A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} = \sqrt{\frac{2I}{m\omega_0}} \qquad (\mathbf{I}.2.67)$$

bestimmt, entspricht diese Lösung (**I**.2.67) genau der schon bekannten Lösung (**I**.2.53). Zwar scheint dieser zweite Lösungsweg deutlich verwickelter zu sein als der direkte erste Weg, er zeichnet sich jedoch dadurch aus, dass die Lösung einer „schwierigen“ Bewegungsgleichung (hier der Schwingungsgleichung (**I**.2.52)) vollständig vermieden werden kann und liefert somit ein elementares Beispiel für das in der Abbildung **I**.2 skizzierte allgemeine Schema. ■

■ **Beispiel:** Das Teilchen im Zentralpotential

Ein sehr illustratives Beispiel für ein integrables System mit zwei Freiheitsgraden liefert ein Teilchen, das sich unter dem Einfluß eines Zentralpotentials $V(r^2)$ in einer Ebene bewegt. Nach den Regeln der klassischen Mechanik lautet die Lagrange-Funktion dieses Systems

$$L = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right) - V(r^2) \; ; \tag{I.2.68}$$

die kanonischen Impulse sind

$$\begin{aligned} p_\varphi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} &= mr^2\dot{\varphi} \\ p_r &= \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} &= m\dot{r} \; . \end{aligned} \tag{I.2.69}$$

Daraus ergibt sich die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2}\right) + V(r^2) \; . \tag{I.2.70}$$

Eine erste Erhaltungsgröße des Systems ist seine Energie $E$. Weiterhin taucht die Koordinate $\varphi$ in der Hamiltonfunktion nicht auf, sie ist also „zyklisch“. Daraus folgt sofort, dass die zu $\varphi$ konjugierte Impulsvariable ebenfalls eine Erhaltungsgröße ist: Man hat

$$\dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0 \tag{I.2.71}$$

und daher

$$p_\varphi = \text{const.} \equiv L \; ; \tag{I.2.72}$$

diese durch die Rotationsinvarianz vermittelte Erhaltungsgröße ist natürlich der Drehimpuls. Man sieht hier ein einfaches Beispiel für einen aus der theoretischen Mechanik bekannten allgemeinen Zusammenhang:

*Der zu einer zyklischen Koordinate gehörige Impuls ist erhalten.*

Abbildung **I**.6: Radialbewegung in einem rotationssymmetrischen Potential $V$: Das Teilchen oszilliert zwischen einem Minimalabstand vom Kraftzentrum $r_{\min}$ und einem Maximalabstand $r_{\max}$.

Damit hat man also für ein solches rotationsinvariantes System mit zwei Freiheitsgraden die für seine Integrabilität benötigten zwei Erhaltungsgrößen gefunden; die invarianten Tori werden durch die beiden Gleichungen $H = E$ und $p_\varphi = L$ festgelegt. Tatsächlich ist es für dieses Beispiel leicht, diese Tori im Phasenraum zu „sehen“: Die radiale Bewegung des Teilchens in dem effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(r^2) = V(r^2) + \frac{L^2}{2mr^2} \qquad (\mathbf{I}.2.73)$$

ist eine Oszillation zwischen einem Minimalabstand vom Zentrum $r_{\min}$ und einem Maximalabstand $r_{\max}$, wie in Abbildung **I**.6 schematisch dargestellt. Trägt man nun wie in Abbildung **I**.7 den Radialimpuls $p_r$ eines Teilchens mit gegebener Energie $E$ und gegebenem Drehimpuls $L$ über der Koordinatenebene auf, ergeben sich sofort die 2-Tori.
Die Berechnung der Wirkungsvariablen führt dann auf

$$I_1 \;=\; \frac{1}{2\pi}\oint p_\varphi \,\mathrm{d}\varphi \;=\; L \qquad (\mathbf{I}.2.74)$$

und

$$\begin{aligned} I_2 \;&=\; \frac{1}{2\pi}\oint p_r \,\mathrm{d}r \\ &=\; \frac{1}{2\pi}\oint \mathrm{d}r\,\sqrt{2mE - 2mV(r^2) - \frac{I_1^2}{r^2}}\;. \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.75)$$

Man beachte, dass die zu $I_1$ kanonisch konjugierte Winkelvariable $\vartheta_1$ im allgemeinen *nicht* mit $\varphi$ übereinstimmt, da ja $\dot\varphi$ im allgemeinen nicht konstant ist.

Abbildung **I**.7: Trägt man den Radialimpuls $p_r$ der in Abbildung **I**.6 skizzierten Oszillationsbewegung über der Koordinatenebene auf, wobei die Bewegung nach außen mit positivem $p_r$, die Bewegung nach innen dagegen mit negativem $p_r$ verbunden ist, erhält man die invarianten 2-Tori des Systems.

Ein einfaches Modellpotential, für das alle vorkommenden Integrale analytisch ausgewertet werden können, ist

$$V(r^2) = \frac{1}{2} m a^2 r^2 + \frac{b^2}{2mr^2} \; . \tag{\textbf{I}.2.76}$$

Für diesen Fall erhält man

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{2\pi} \oint \mathrm{d}r \left( 2mE - m^2 a^2 r^2 - \frac{b^2 + I_1^2}{r^2} \right)^{1/2} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \frac{\mathrm{d}y}{2y} \left( 2mEy - m^2 a^2 y^2 - (b^2 + I_1^2) \right)^{1/2} \; , \end{aligned} \tag{\textbf{I}.2.77}$$

wobei $y = r^2$ und dementsprechend für die Umkehrpunkte

$$y_{\max\,/\,\min} = \frac{E}{ma^2} \pm \sqrt{\left( \frac{E}{ma^2} \right)^2 - \frac{b^2 + I_1^2}{m^2 a^2}} \tag{\textbf{I}.2.78}$$

gesetzt wurde. Daraus ergibt sich nach einiger Rechnung

$$I_2 = \frac{1}{2} \left( \frac{E}{a} - \sqrt{b^2 + I_1^2} \right) \; , \tag{\textbf{I}.2.79}$$

und daraus wiederum durch Auflösen nach der Energie $E$ die durch die Wirkungsvariablen ausgedrückte Hamiltonfunktion:

$$H(I_1, I_2) = 2aI_2 + a\sqrt{b^2 + I_1^2} \; . \tag{\textbf{I}.2.80}$$

Auch *ohne* die zugehörigen Winkelvariablen $\vartheta_1$, $\vartheta_2$ zu berechnen, erhält man dann die beiden Frequenzen, mit denen die Trajektorien ihre Tori umspinnen, aus den Hamiltonschen Gleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\vartheta}_1 &= \frac{\partial H}{\partial I_1} &= \frac{aI_1}{\sqrt{b^2+I_1^2}} \\ \dot{\vartheta}_2 &= \frac{\partial H}{\partial I_2} &= 2a \; . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.81)$$

Um aber die Winkelvariablen selbst bestimmen zu können, wird die Wirkungsfunktion benötigt:

$$\begin{aligned} S(I_1, I_2, \varphi, r) &= \int_{(0,r_0)}^{(\varphi,r)} \left(p_{\varphi'}\mathrm{d}\varphi' + p_{r'}\mathrm{d}r'\right) \\ &= I_1\varphi + \int_{r_0}^{r} \mathrm{d}r' \sqrt{2mE - m^2a^2r'^2 - \frac{b^2+I_1^2}{r'^2}} \; . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.82)$$

Definiert man nun eine Größe $\vartheta$ über die Beziehung

$$r^2 = \frac{E}{ma^2} + \beta \sin\vartheta \; , \qquad (\mathbf{I}.2.83)$$

wobei

$$\beta^2 = \frac{E^2}{m^2a^4} - \frac{b^2+I_1^2}{m^2a^2} \; , \qquad (\mathbf{I}.2.84)$$

so läßt sich der Radialimpuls durch $\vartheta$ ausdrücken:

$$p_r = \frac{ma\beta}{r}\cos\vartheta \; . \qquad (\mathbf{I}.2.85)$$

Die zu $I_2$ kanonisch konjugierte Winkelvariable $\vartheta_2$ erhält man aus der Transformationsgleichung (**I**.2.45) in der Form

$$\vartheta_2 = \frac{\partial S}{\partial I_2} = \frac{\partial S}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial I_2} = \frac{\partial S}{\partial E}\dot{\vartheta}_2 \; ; \qquad (\mathbf{I}.2.86)$$

Einsetzen der benötigten Ableitung der Wirkungsfunktion (**I**.2.82) liefert

$$\begin{aligned} \vartheta_2 &= \int_{r_0}^{r} \frac{m\dot{\vartheta}_2\,\mathrm{d}r'}{\sqrt{2mE - m^2a^2r'^2 - \frac{b^2+I_1^2}{r'^2}}} \\ &= \int_{r_0}^{r} \frac{m\dot{\vartheta}_2\,\mathrm{d}r'}{p_{r'}} \; . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.87)$$

Aus der Definitionsgleichung (**I**.2.83) ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathrm{d}r &= \frac{\beta\cos\vartheta}{2r}\,\mathrm{d}\vartheta \\ &= \frac{p_r}{2ma}\,\mathrm{d}\vartheta \; , \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.2.88)$$

wobei im zweiten Schritt die Beziehung (**I**.2.85) eingesetzt wurde. Damit hat man schließlich

$$\vartheta_2 \;=\; \int_0^{\vartheta(r)} \frac{\dot{\vartheta}_2 \,\mathrm{d}\vartheta}{2a} \;=\; \vartheta(r) \;, \tag{I.2.89}$$

da ja $\dot{\vartheta}_2 = 2a$ gemäß Gleichung (**I**.2.81); die gesuchte Winkelvariable $\vartheta_2$ stimmt also mit der in Gleichung (**I**.2.83) eingeführten Größe $\vartheta$ überein.
Nach gleichem Muster ergibt sich

$$\begin{aligned} \vartheta_1 \;&=\; \frac{\partial S}{\partial I_1} \\ & \varphi + \frac{aI_1}{\sqrt{b^2+I_1^2}} \int_{r_0}^{r} \frac{m\,\mathrm{d}r'}{p_{r'}} - I_1 \int_{r_0}^{r} \frac{\mathrm{d}r'}{r'^2 p_{r'}} \\ & \varphi + \frac{I_1}{\sqrt{b^2+I_1^2}} \frac{\vartheta_2}{2} - \frac{I_1}{2ma} \int_0^{\vartheta_2} \frac{\mathrm{d}\vartheta}{\frac{E}{ma^2} + \beta \sin\vartheta} \;, \end{aligned} \tag{I.2.90}$$

wobei zu berücksichtigen ist, dass auch $E = E(I_1, I_2)$ explizit von $I_1$ abhängt. Die Auswertung des verbleibenden Integrals ergibt dann

$$\vartheta_1 = \varphi + \frac{I_1}{\sqrt{b^2+I_1^2}} \left[ \frac{\vartheta_2}{2} - \arctan\left( \frac{\frac{E}{a}\tan\frac{\vartheta_2}{2} + ma\beta}{\sqrt{b^2+I_1^2}} \right) \right] + \vartheta_0 \;. \tag{I.2.91}$$

Die Bahnen des Systems sind Rosetten um das Kraftzentrum; die Radialkoordinate des Teilchens oszilliert dabei zwischen zwei Abständen $r_{\min}$ und $r_{\max}$. Speziell für $b = 0$ ergibt sich ein isotropes zweidimensionales harmonisches Oszillatorpotential; die Gleichungen (**I**.2.81) erhalten dann die Form

$$\omega_1 = a \tag{I.2.92}$$

für die „Frequenz der Winkeloszillation" und

$$\omega_2 = 2a \tag{I.2.93}$$

für die „Frequenz der Radialoszillation". In diesem besonderen Fall sind die Bahnkurven geschlossene Ellipsen. Der Faktor „2" auf der rechten Seite der Gleichung (**I**.2.93) erklärt sich sofort dadurch, dass ein Teilchen beim Durchlaufen einer solchen Ellipse zweimal die Kreise minimalen bzw. maximalen Abstandes trifft.
Abschließend soll noch einmal betont werden, dass die Möglichkeit der analytischen Berechnung der auftretenden Integrale für die „Integrabilität" des Systems völlig unwesentlich ist; entscheidend ist vielmehr die Existenz zweier miteinander vertauschender Erhaltungsgrößen. ■

## I.3 Störung integrabler Systeme; das KAM-Theorem

Was passiert bei einer „kleinen“ Störung eines integrablen Systems? — Zur Vorbereitung der Antwort auf diese Frage wird nun zunächst ein schwach anharmonischer Oszillator mit einem Freiheitsgrad untersucht, der durch die Hamiltonfunktion

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2 + \varepsilon g q^4 \qquad (\mathbf{I}.3.1)$$

beschrieben wird; dabei ist $g$ eine positive Konstante mit der Dimension (Energie/Länge$^4$) und $\varepsilon > 0$ ein dimensionsloser kleiner „Störparameter“. Für $\varepsilon = 0$ erhält man als „ungestörtes System“ den harmonischen Oszillator

$$H_0(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2 \;, \qquad (\mathbf{I}.3.2)$$

der bereits als Beispiel für ein integrables System behandelt wurde. Die durch seine Wirkungsvariable $I$ ausgedrückte Hamiltonfunktion besitzt gemäß der Gleichung ($\mathbf{I}$.2.59) die Form

$$H_0(I) = I\omega_0 \;, \qquad (\mathbf{I}.3.3)$$

während seine Winkelvariable $\vartheta$ nach Gleichung ($\mathbf{I}$.2.64) durch

$$q = \sqrt{\frac{2I}{m\omega_0}}\sin\vartheta \qquad (\mathbf{I}.3.4)$$

gegeben wird. Gesucht ist nun eine kanonische Transformation $(I,\vartheta) \longleftrightarrow (\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})$ mit der Eigenschaft, dass die volle Hamiltonfunktion ($\mathbf{I}$.3.1) nach Umrechnung auf die neuen Wirkungs- und Winkelvariablen $\widetilde{I}$ und $\widetilde{\vartheta}$ nur noch von $\widetilde{I}$ abhängt. Da die Störung (d.h. der Parameter $\varepsilon$) nur klein sein soll, darf man annehmen, dass $\widetilde{I}$ und $\widetilde{\vartheta}$ nur wenig von $I$ und $\vartheta$ verschieden sind, die Transformation $(I,\vartheta) \longleftrightarrow (\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})$ also in der Nähe der identischen Transformation liegt. Die identische Transformation wird nun generiert von der Funktion

$$S_0(\widetilde{I},\vartheta) = \widetilde{I}\vartheta \;, \qquad (\mathbf{I}.3.5)$$

denn die allgemeinen Transformationsgleichungen ($\mathbf{I}$.2.44) und ($\mathbf{I}$.2.45) erhalten mit dieser Funktion die Form

$$\begin{aligned} I &= \frac{\partial S_0}{\partial \vartheta} = \widetilde{I} \\ \widetilde{\vartheta} &= \frac{\partial S_0}{\partial \widetilde{I}} = \vartheta \;. \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.6)$$

Beschränkt man sich darauf, die gesuchte Transformation in erster Ordnung von $\varepsilon$ zu konstruieren, lautet der Ansatz für ihre erzeugende Funktion daher

$$S(\widetilde{I},\vartheta) = \widetilde{I}\vartheta + \varepsilon S_1(\widetilde{I},\vartheta) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \;, \qquad (\mathbf{I}.3.7)$$

wobei die hier eingeführte Funktion $S_1(\widetilde{I},\vartheta)$ erst später geeignet gewählt werden soll. Die Transformationsgleichungen ergeben dann den Zusammenhang zwischen den alten und den neuen Koordinaten in der Form

$$\begin{aligned} I &= \frac{\partial S}{\partial \vartheta} &= \widetilde{I} + \varepsilon \frac{\partial S_1}{\partial \vartheta} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ \widetilde{\vartheta} &= \frac{\partial S}{\partial \widetilde{I}} &= \vartheta + \varepsilon \frac{\partial S_1}{\partial \widetilde{I}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\ . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.8)$$

Ausgangspunkt ist nun die „alte“ Hamiltonfunktion in der gegebenen Form $H(I,\vartheta) = H_0(I) + \varepsilon H_1(I,\vartheta)$; gesucht ist die “neue“ Funktion $H\big(I(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}),\ \vartheta(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})\big)$. Die dazu benötigten Darstellungen $I(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})$ und $\vartheta(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})$ erhält man sofort aus den Transformationsgleichungen (**I**.3.8):

$$\begin{aligned} I(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) &= \widetilde{I} + \varepsilon \frac{\partial S_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})}{\partial \widetilde{\vartheta}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ \vartheta(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) &= \widetilde{\vartheta} - \varepsilon \frac{\partial S_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})}{\partial \widetilde{I}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\ . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.9)$$

Man beachte, dass hier $S_1(\widetilde{I},\vartheta)$ durch $S_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})$ ersetzt worden ist; der dabei auftretende Fehler ist aufgrund der zweiten der beiden Gleichungen (**I**.3.8) nur von der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$. Nun gilt offenbar

$$\begin{aligned} H_0\big(I(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})\big) &= H_0(\widetilde{I}) + \varepsilon \frac{\partial H_0}{\partial \widetilde{I}} \frac{\partial S_1}{\partial \widetilde{\vartheta}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ \varepsilon H_1(I,\vartheta) &= \varepsilon H_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\ , \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.10)$$

so dass

$$H(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) = H_0(\widetilde{I}) + \varepsilon\left(\omega_0(\widetilde{I})\frac{\partial S_1}{\partial \widetilde{\vartheta}} + H_1\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\ , \qquad (\mathbf{I}.3.11)$$

wobei die Hamiltonsche Gleichung $\omega_0(\widetilde{I}) = \partial H_0(\widetilde{I})/\partial \widetilde{I}$ für die ungestörte Oszillationsfrequenz $\omega_0(\widetilde{I})$ benutzt wurde. Die Aufgabe besteht nun darin, $S_1$ so zu wählen, dass der zu $\varepsilon$ proportionale Term nur noch von $\widetilde{I}$, aber nicht mehr von $\widetilde{\vartheta}$ abhängt. Dabei ist wichtig, dass $S_1$ und $H_1$ periodisch von $\widetilde{\vartheta}$ abhängen, also in Fourierreihen entwickelt werden können:

$$\begin{aligned} H_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} h_{1k}(\widetilde{I})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\widetilde{\vartheta}} \\ S_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} s_{1k}(\widetilde{I})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\widetilde{\vartheta}}\ . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.12)$$

Da jedoch der Ausdruck (**I**.3.11) in dem zu $\varepsilon$ proportionalen Term nicht $S_1$, sondern die Ableitung $\partial S_1/\partial \widetilde{\vartheta}$ enthält, und da bei dieser Ableitung die „Nullmode“ der Entwicklung von $S_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})$ verschwindet, also die Fourierkomponente mit dem Index $k = 0$, können zwar die oszillierenden Komponenten von $H_1$ durch entsprechende Wahl der oszillierenden Komponenten von $S_1$ kompensiert werden, nicht jedoch der Mittelwert

$$h_{10}(\widetilde{I}) \equiv \overline{H}_1(\widetilde{I}) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\widetilde{\vartheta}\, H_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) \ . \qquad (\mathbf{I}.3.13)$$

Schreibt man also

$$\widetilde{H}_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) = H_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) - \overline{H}_1(\widetilde{I}) \qquad (\mathbf{I}.3.14)$$

für den oszillierenden Anteil der Störung, so kann $S_1$ derart gewählt werden, dass

$$\frac{\partial S_1}{\partial\widetilde{\vartheta}} = -\frac{\widetilde{H}_1}{\omega_0} \ ; \qquad (\mathbf{I}.3.15)$$

damit erhält man aus dem Ausdruck (**I**.3.11) schließlich eine Hamiltonfunktion, deren $\widetilde{\vartheta}$-Abhängigkeit erst in zweiter Ordnung von $\varepsilon$ auftritt:

$$H(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) = H_0(\widetilde{I}) + \varepsilon\overline{H}_1(\widetilde{I}) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \ . \qquad (\mathbf{I}.3.16)$$

Die neue Hamiltonfunktion ergibt sich also aus der alten durch Addition des Mittelwertes der Störung. Diese Art der kanonischen Störungstheorie geht zurück auf Poincaré[2] und von Zeipel[3]; die Parallele des Resultates (**I**.3.16) zu dem der quantenmechanischen Störungsrechnung erscheint bemerkenswert. Die konkrete Anwendung dieses „Mittelungsprinzips" auf den anharmonischen Oszillator (**I**.3.1) ist nun einfach: Nach Gleichung (**I**.3.4) hat man

$$\varepsilon H_1(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) = \varepsilon g \left(\frac{2\widetilde{I}}{m\omega_0}\right)^2 \sin^4\widetilde{\vartheta} \ ; \qquad (\mathbf{I}.3.17)$$

Mittelung über die Winkelvariable ergibt sofort

$$\begin{aligned} \varepsilon\overline{H}_1(\widetilde{I}) &= \varepsilon g \left(\frac{2\widetilde{I}}{m\omega_0}\right)^2 \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\widetilde{\vartheta}\,\sin^4\widetilde{\vartheta} \\ &= \varepsilon g \left(\frac{2\widetilde{I}}{m\omega_0}\right)^2 \frac{3}{8} \ . \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.18)$$

Damit lautet die neue Hamiltonfunktion

$$H(\widetilde{I}) = \omega_0\widetilde{I} + \varepsilon\,\frac{3g\widetilde{I}^2}{2m^2\omega_0^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \ , \qquad (\mathbf{I}.3.19)$$

[2] Jules Henri Poincaré (1854 - 1912), französischer Mathematiker; bahnbrechende Arbeiten u.a. zur algebraischen Topologie, zur Zahlentheorie, zum $n$-Körper-Problem und zur theoretischen Physik.

[3] Edvard Hugo von Zeipel (1873 - 1959), schwedischer Astronom; Beiträge zur Himmelsmechanik, zur Astrophotographie und zur Theoretischen Astrophysik.

woraus sich durch Ableiten nach der Wirkungsvariablen die Frequenz der anharmonischen Schwingungen ergibt:

$$\omega(\widetilde{I}) = \omega_0 + \varepsilon \, \frac{3g\widetilde{I}}{m^2\omega_0^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \; . \tag{I.3.20}$$

Berücksichtigt man jetzt noch, dass die Amplitude $A$ einer Schwingung gemäß

$$A = \sqrt{\frac{2\widetilde{I}}{m\omega_0}} + \mathcal{O}(\varepsilon) \tag{I.3.21}$$

von der Wirkung abhängt, erhält man schließlich die Frequenz der Schwingung in Abhängigkeit von ihrer Amplitude bei kleiner Anharmonizität:

$$\omega(A) = \omega_0 + \varepsilon \, \frac{3gA^2}{2m\omega_0} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \; . \tag{I.3.22}$$

Klar ist, dass auch der anharmonische Oszillator (**I**.3.1) ein integrables System darstellt, da seine Energie eine Erhaltungsgröße ist; die Transformation auf eine neue, nur noch von einer Wirkungsvariablen abhängige Hamiltonfunktion kann also im Prinzip auch exakt durchgeführt werden.
Die gerade behandelte kanonische Störungstheorie nach Poincaré und von Zeipel soll im folgenden auf ein allgemeines Hamiltonsches System mit $n$ Freiheitsgraden angewandt werden, das allerdings unter dem Einfluß der Störung *nicht* integrabel bleiben muß, also keine $n$ globalen, auf ganz $\Gamma$ definierten Erhaltungsgrößen mehr besitzen muß. Lokal kann man sich immer $n$ Erhaltungsgrößen verschaffen: Man geht aus von der Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H\left(\frac{\partial S(F,q)}{\partial q}, q_0\right) = H(F) \tag{I.3.23}$$

mit den $n$ Anfangsbedingungen

$$\left.\frac{\partial S(F,q)}{\partial q}\right|_{q_0} = F \; . \tag{I.3.24}$$

Nach der Theorie der partiellen Differentialgleichungen ist die Lösung dieser Gleichung lokal, d.h. in einer gewissen Umgebung von $q_0$, möglich und eindeutig; aus der Umkehrung der Beziehungen

$$p = \frac{\partial S(F,q)}{\partial q} \tag{I.3.25}$$

erhält man dann $n$ Funktionen $F_\nu(p,q)$, die auch die Involutionsgleichungen $\left\{F_\mu, F_\nu\right\} = 0$ erfüllen und im allgemeinen unabhängig sind. Wenn man diese Lösungen nun sogar eindeutig auf ganz $\Gamma$ fortsetzen könnte, wären alle Hamiltonschen Systeme integrabel; das in Abbildung **I**.2 skizzierte Lösungsschema wäre generell anwendbar und die Zeitentwicklung aller Hamiltonschen Systeme wäre „im Prinzip einfach“. Das ist allerdings *nicht* der Fall: Das Verhalten eines typischen, also nichtintegrablen Hamiltonschen Systems sieht ganz anders aus.

Um ein Gefühl für die auftretenden Schwierigkeiten zu gewinnen, wird jetzt ein integrables System mit $n$ Freiheitsgraden, das durch eine Hamiltonfunktion $H_0(I)$ gegeben wird, nach dem Vorbild des Oszillators (**I**.3.1) einer kleinen Störung

$$\varepsilon H_1(I,\vartheta) = \varepsilon \sum_k h_{1k}(I)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\vartheta} \qquad (\mathbf{I}.3.26)$$

unterworfen, die zunächst in den Wirkungs- und Winkelvariablen des ungestörten Systems ausgedrückt ist. Aufgrund der Periodizität in den Winkelvariablen kann diese Störung als Fourierreihe geschrieben werden; dabei ist $k\vartheta = k_1\vartheta_1 + \cdots + k_n\vartheta_n$. Gesucht ist nun erneut eine kanonische Transformation $(I,\vartheta) \longleftrightarrow (\widetilde{I},\widetilde{\vartheta})$ mit der Eigenschaft, dass die in den neuen Variablen ausgedrückte volle Hamiltonfunktion

$$H(I,\vartheta) = H_0(I) + \varepsilon H_1(I,\vartheta) \qquad (\mathbf{I}.3.27)$$

nur noch von den neuen Wirkungsvariablen $\widetilde{I}$, nicht jedoch von den zugehörigen Winkelvariablen $\widetilde{\vartheta}$ abhängt. Nach dem bewährten Muster (**I**.3.7) bietet sich für die benötigte Erzeugende ein Potenzreihenansatz in $\varepsilon$ an:

$$S(\widetilde{I},\vartheta) = \widetilde{I}\vartheta + \varepsilon \sum_k s_{1k}(\widetilde{I})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\vartheta} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\;; \qquad (\mathbf{I}.3.28)$$

damit ist die erste Ordnung in $\varepsilon$ leicht zu überblicken. Man hat

$$\begin{aligned} I &= \frac{\partial S}{\partial \vartheta} &= \widetilde{I} + \varepsilon \sum_k \mathrm{i}k\, s_{1k}(\widetilde{I})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\vartheta} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ \widetilde{\vartheta} &= \frac{\partial S}{\partial \widetilde{I}} &= \vartheta + \varepsilon \sum_k \frac{\partial s_{1k}(\widetilde{I})}{\partial \widetilde{I}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\vartheta} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.29)$$

und damit sofort auch

$$\begin{aligned} I(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) &= \widetilde{I} + \varepsilon \sum_k \mathrm{i}k\, s_{1k}(\widetilde{I})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\widetilde{\vartheta}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ \vartheta(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) &= \widetilde{\vartheta} - \varepsilon \sum_k \frac{\partial s_{1k}(\widetilde{I})}{\partial \widetilde{I}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\widetilde{\vartheta}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\,. \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.3.30)$$

Die Umrechnung der Hamiltonfunktion (**I**.3.27) auf die neuen Variablen erfolgt genau wie vor Gleichung (**I**.3.11) und liefert

$$H(\widetilde{I},\widetilde{\vartheta}) = H_0(\widetilde{I}) + \varepsilon h_{10}(\widetilde{I}) + \varepsilon \sum_{k\neq 0} \Big(\omega_0(\widetilde{I})\, \mathrm{i}k\, s_{1k}(\widetilde{I}) + h_{1k}(\widetilde{I})\Big)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\widetilde{\vartheta}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\;, \qquad (\mathbf{I}.3.31)$$

wobei hier die Nullmode der Störung (**I**.3.26) bereits der ungestörten Hamiltonfunktion zugeschlagen und wie üblich $\omega_0(\widetilde{I}) = \partial H_0(\widetilde{I})/\partial\widetilde{I}$ geschrieben wurde. Um nun die in erster Ordnung von $\varepsilon$ auftretenden winkelabhängigen Terme zum Verschwinden zu bringen, müssen die Fourierkoeffizienten der Erzeugenden für $k \neq 0$ offenbar den Beziehungen

$$s_{1k}(\widetilde{I}) = -\mathrm{i}\,\frac{h_{1k}(\widetilde{I})}{k\omega_0(\widetilde{I})} \qquad (\mathbf{I}.3.32)$$

gehorchen. Hier tritt jedoch das *Problem der kleinen Nenner* auf: Es ist ja

$$k\omega_0(\widetilde{I}) = k_1\omega_{0,1}(\widetilde{I}) + \cdots + k_n\omega_{0,n}(\widetilde{I}) \,. \qquad (\mathbf{I}.3.33)$$

Wenn z.B. der Quotient $\omega_{0,1}(\widetilde{I})/\omega_{0,2}(\widetilde{I})$ für eine gewisse Wirkung $\widetilde{I}$ rational wird, also $\omega_{0,1}(\widetilde{I})/\omega_{0,2}(\widetilde{I}) = r/s$ mit teilerfremden ganzen Zahlen $r$, $s$, dann verschwindet der Nenner von $s_{1k}(\widetilde{I})$ für $k_1 = ps$ und $k_2 = -pr$ sowie $k_i = 0$ für $i = 2, \ldots, n$, ohne dass der Zähler ebenfalls verschwinden muß, da ja beliebige Störungen zugelassen sind. Da nun die ungestörten Umlauffrequenzen $\omega_{0,i}(\widetilde{I}) \equiv \omega_i(\widetilde{I})$ stetig mit der Wirkung $\widetilde{I}$ variieren, und da die rationalen Zahlen auf der Zahlengeraden dicht liegen, kann die Fourierreihe, die in der ersten Ordnung der Erzeugenden (**I**.3.28) auftritt, also

$$S_1(\widetilde{I}, \vartheta) = \sum_k s_{1k}(\widetilde{I})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\vartheta} \,, \qquad (\mathbf{I}.3.34)$$

keine stetige Funktion von $\widetilde{I}$ sein, von sehr speziellen Störungen einmal abgesehen. Diese Reihe $S_1(\widetilde{I}, \vartheta)$ kann, wenn überhaupt, nur für Wirkungen $\widetilde{I}$ existieren, für die alle Frequenzverhältnisse $\omega_i(\widetilde{I})/\omega_j(\widetilde{I})$ mit $1 \leq i \neq j \leq n$ irrational sind. Verschwindende Nenner (**I**.3.33) bedeuten aus physikalischer Sicht das Vorhandensein von „Resonanzen" zwischen verschiedenen Bahnen des ungestörten Systems. Diese Bahnen werden durch die Störung gekoppelt, so dass ein neuer Bahntyp entsteht. Damit hat eine „kleine" Störung nicht mehr nur eine kleine Auswirkung, so dass schon die Grundannahme der Poincaré–von Zeipel-Störungsrechnung, also die Annahme, dass sich die benötigte Erzeugende in eine Potenzreihe nach dem kleinen Parameter $\varepsilon$ um die Erzeugende der identischen Transformation herum entwickeln läßt, nicht mehr zutrifft.

Die Frage, was mit den „nichtresonanten" Tori eines integrablen Systems unter dem Einfluß einer kleinen Störung passiert, wird durch ein überaus tiefes mathematisches Resultat beantwortet, das nach seinen Entdeckern Kolmogorow[4], Arnold[5] und Moser[6] als

[4]Andrei Nikolajewitsch Kolmogorow (1903 - 1987), russischer Mathematiker; wesentliche Beiträge u.a. zur Wahrscheinlichkeitstheorie, zur Topologie, zur Theorie der Turbulenz und zur Algorithmischen Komplexitätstheorie. In den Jahren 1953 und 1954 beschrieb er die Vermutung, dass „hinreichend irrationale" Tori integrabler Systeme unter kleinen Störungen erhalten bleiben.

[5]Vladimir Igorevich Arnol'd (geb. 1937), russischer Mathematiker; wichtige Beiträge zur Theorie dynamischer Systeme, zur Katastrophentheorie, zur Topologie, zur algebraischen Geometrie, zur Singularitätentheorie und zur klassischen Mechanik. Schüler von Kolmogorow; gab 1964 einen strengen Beweis des KAM-Theorems für Hamiltonsche Systeme.

[6]Jürgen Moser (1928 - 1999), deutscher Mathematiker; arbeitete vor allem über partielle Differentialgleichungen und die Theorie dynamischer Systeme. Gab 1963 einen strengen Beweis des KAM-Theorems für sogenannte *smooth twist maps*.

*KAM-Theorem* bezeichnet wird. Für den Spezialfall $n = 2$, in dem nur ein einziges Frequenzverhältnis auftritt, macht dieses Theorem unter einigen zusätzlichen technischen Voraussetzungen die folgende Aussage:

> *Wenn das Verhältnis* $\omega_1/\omega_2$ hinreichend irrational *ist, d.h. wenn Zahlen* $c$ *und* $\delta$ *existieren mit der Eigenschaft, dass für alle rationalen Approximanten* $r/s$ *die Ungleichung*
>
> $$\left|\frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{r}{s}\right| \;\geq\; \frac{c}{s^{2+\delta}}$$
>
> *erfüllt wird, und wenn die Störung (d.h.* $\varepsilon$*, und zwar je nach den Werten von* $c$ *und* $\delta$*) hinreichend klein ist, dann existiert ein Torus, den Bahnen des gestörten Systems mit den Frequenzen* $\omega_1$ *und* $\omega_2$ *umspinnen.*

Im Klartext: Wenn die Störstärke $\varepsilon$, von Null anfangend, „hochgedreht" wird, dann wird der 2-Torus in $\Gamma$, der durch Umlauffrequenzen $\omega_1$ und $\omega_2$ mit hinreichend irrationalem Verhältnis $\omega_1/\omega_2$ charakterisiert wird, zwar verformt, bleibt aber bis zu einem kritischen Wert $\varepsilon_c(\omega_1/\omega_2)$, über den das Theorem keine Aussage macht, als glatte, 2-dimensionale invariante Untermannigfaltigkeit in $\Gamma$ erhalten. Analoge Aussagen gelten auch für beliebige $n$.

Zunächst stellt sich nun die Frage, ob hinreichend irrationale Zahlen, wie sie in dem Theorem gefordert werden, überhaupt existieren. Dazu betrachte man das Intervall $(0, 1)$ und schneide um jede rationale, teilerfremde Zahl $r/s$ ein Intervall der Länge $2c/s^{2+\delta}$ heraus. Da es in $(0, 1)$ höchstens $s$ solcher Brüche gibt, haben die herausgeschnittenen Intervalle zusammen höchstens die Länge

$$2c\sum_{s=2}^{\infty}\frac{s}{s^{2+\delta}} \;<\; 2c\int_1^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{x^{1+\delta}} \;=\; -2c\,\frac{x^{-\delta}}{\delta}\bigg|_1^{\infty} \;=\; \frac{2c}{\delta}\,. \qquad (\mathbf{I}.3.35)$$

Für $2c/\delta < 1$ bleibt eine Menge von Zahlen übrig, eine sogenannte „fette Cantormenge", die zwar so durchlöchert ist, dass sie kein noch so kleines Intervall ganz überdeckt, die aber trotzdem ein endliches Maß besitzt. Für kleine $c$ und große $\delta$ bleibt sogar ein beliebig großer Brucheil aller Zahlen zurück; kleine $c$ und große $\delta$ erfordern jedoch kleine $\varepsilon$. Für genügend kleine $\varepsilon$ wird also ein großer Bruchteil aller Tori zwar verbogen, nicht aber zerstört.

Ein detaillierter Beweis des KAM-Theorems ginge weit über den Rahmen dieser Einführung hinaus; trotzdem lohnt es sich, die zentralen Schritte des Beweises zu diskutieren. Dazu seien die Wirkungen $I_0$ derart, dass für $\omega_1 = \omega_1(I_0)$ und $\omega_2 = \omega_2(I_0)$ die Irrationalitätsbedingung des KAM-Theorems erfüllt wird. Für die Konvergenz der Fourierreihe (**I**.3.34) mit den Koeffizienten (**I**.3.32) sind nun diejenigen Terme besonders schädlich, für die bei festgehaltenem $\omega_1/\omega_2$ der Betrag des Nenners

$$N(k) = |k_1\omega_1 + k_2\omega_2| = \left|k_1\omega_2\left(\frac{\omega_1}{\omega_2} + \frac{k_2}{k_1}\right)\right| \qquad (\mathbf{I}.3.36)$$

besonders klein wird. Nach Voraussetzung gilt jedoch

$$N(k) \geq \frac{c|\omega_2|}{|k_1|^{1+\delta}} , \tag{I.3.37}$$

so dass der Nenner durch die Irrationalitätsbedingung nach unten begrenzt wird. Diese Bedingung begünstigt daher die Konvergenz der Fourierreihe (**I**.3.34), und zwar umso mehr, je kleiner $\delta$ ist. Faßt man nun die Summationsindizes $k = (k_1, k_2) \neq (0,0)$ als Punkte eines ebenen Quadratgitters auf und arbeitet die Summanden derart ab, dass man quadratweise von innen nach außen fortschreitet, so sieht man schnell, dass zu dem Quadrat, auf dem $(|k_1|, 0)$ liegt, genau $8|k_1|$ Summanden mit $|k_2| \leq |k_1|$ gehören. Es gilt daher

$$\left| \sum_{k\neq 0} s_{1k}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\vartheta} \right| \leq \frac{8}{c|\omega_2|} \sum_{|k_1|=1}^{\infty} |k_1|^{2+\delta} \left( \max_{|k_2|\leq|k_1|} |h_{1k}| \right) . \tag{I.3.38}$$

Diese Reihe kann gegen die harmonische Reihe abgeschätzt werden und konvergiert, falls die Fourierkoeffizienten der Störung derart schnell abfallen, dass

$$|h_{1k}| < D|k_1|^{-(3+\delta+\zeta)} \tag{I.3.39}$$

mit irgendwelchen $D, \zeta > 0$. Das wiederum gilt, wenn die dritten Ableitungen der Störung $H_1(I, \vartheta)$ nach $\vartheta$ hinreichend glatt sind. Daher werden beim Beweis des KAM-Theorems unter anderem solche Differenzierbarkeitsvoraussetzungen benötigt.
Damit ist jedoch noch keine Aussage über die Konvergenz der Potenzreihe (**I**.3.28) nach $\varepsilon$ verbunden. Das Prinzip des Beweises läßt sich nun wie folgt skizzieren: In einem ersten Schritt benutzt man anstelle des Ansatzes (**I**.3.28) die Erzeugende

$$S_{\mathrm{I}}(\widetilde{I}, \vartheta) = \widetilde{I}\vartheta - \mathrm{i}\varepsilon \sum_{k\neq 0} \frac{h_{1k}(\widetilde{I})}{k\omega_0}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\vartheta} \tag{I.3.40}$$

für eine Transformation $(I, \vartheta) \longleftrightarrow (\widetilde{I}, \widetilde{\vartheta})$, wobei hier aber die Frequenzen $\omega_0 = \omega_0(I_0)$ *festgehalten* werden müssen, also bei der Auswertung der Transformationsgleichung $\widetilde{\vartheta} = \partial S_{\mathrm{I}}/\partial \widetilde{I}$ nicht mitdifferenziert werden dürfen. In den neuen Koordinaten hat dann die Hamiltonfunktion in einer $\varepsilon$-Umgebung um die Wirkung $I_0$ des ungestörten Torus die Form

$$H(\widetilde{I}, \widetilde{\vartheta}) = H_0(\widetilde{I}) + \varepsilon h_{10}(\widetilde{I}) + h_{\mathrm{II}}(\widetilde{I}, \widetilde{\vartheta}, \varepsilon) , \tag{I.3.41}$$

wobei die verbliebene Störung wie $\varepsilon^2$ klein wird. Für diese Störung $h_{\mathrm{II}}$ wird dieselbe Prozedur dann mit einer entsprechenden Erzeugenden $S_{\mathrm{II}}$ wiederholt; man erhält eine Störung $h_{\mathrm{IV}}$, die mit $\varepsilon^4$ gegen Null geht. Der nächste Schritt ergibt daraufhin eine Störung, die schon wie $\varepsilon^8$ verschwindet, und so fort. Dieses superkonvergente Iterationsverfahren liefert schließlich den invarianten Torus des gestörten Systems mit den Frequenzen $\omega_0$; der Beweis des KAM-Theorems besteht darin, die Konvergenz des Verfahren gegen einen Lösungstorus des gestörten Systems nachzuweisen.

Dabei ist entscheidend wichtig, dass die Hamiltonfunktion in jedem Schritt durch die Nullmode der jeweiligen Störung modifiziert wird, wie schon das Beispiel (**I**.3.19) des anharmonischen Oszillators gezeigt hatte. Die festzuhaltenden Frequenzen wurden ursprünglich gegeben durch

$$\omega_0(I_0) = \left.\frac{\partial H_0}{\partial I}\right|_{I_0} \quad ; \tag{I.3.42}$$

bei der Berechnung von $S_{\text{II}}$ ist aber, dem Ausdruck (**I**.3.41) entsprechend, von

$$H_{\text{I}}(\widetilde{I}) = H_0(\widetilde{I}) + \varepsilon h_{10}(\widetilde{I}) \tag{I.3.43}$$

als ungestörter Hamiltonfunktion auszugehen. Die dann bei $S_{\text{II}}$ im Nenner auftretenden Frequenzen

$$\omega_{\text{I}}(\widetilde{I}) = \omega_0(\widetilde{I}) + \varepsilon \frac{\partial h_{10}(\widetilde{I})}{\partial \widetilde{I}} \tag{I.3.44}$$

durchliefen also für festgehaltenes $\widetilde{I} = I_0$ mit wachsendem $\varepsilon$ gewisse Intervalle, so dass ihre Verhältnisse irrationale wie rationale Zahlen überstrichen. Das aber darf nicht passieren. Man muß daher, um die Frequenzen bei ihren Werten (**I**.3.42) festzuhalten, die Wirkungen geeignet nachregeln, $I_{\text{I}} = I_0 + \Delta_{\text{I}}$ mit $\Delta_{\text{I}} = \mathcal{O}(\varepsilon)$, so dass

$$\omega_{\text{I}}(I_{\text{I}}) = \omega_0 \ ; \tag{I.3.45}$$

ebenso ist die Änderung der Hamiltonfunktion in jedem weiteren Schritt zu kompensieren. Damit nun die Frequenzen auf eine solche Nachregelung reagieren, benötigt man als weitere Voraussetzung des KAM-Theorems die *Twistbedingung*

$$\det\left(\frac{\partial \omega_0(I)}{\partial I}\right) \; = \; \det\left(\frac{\partial^2 H_0(I)}{\partial I_i \, \partial I_j}\right) \; \neq \; 0 \ . \tag{I.3.46}$$

Man kann den Frequenzen sogar erlauben zu variieren, solange ihr Verhältnis konstant bleibt; dann ist diese Bedingung geeignet anzupassen. Es ist also festzuhalten, dass die noch erhaltenen KAM-Tori zwar durch die gleichen Windungszahlen charakterisiert werden wie die Tori des ungestörten Systems, *nicht* jedoch durch die gleichen Wirkungen.

## I.4 Poincaré-Abbildung und Poincaré-Birkhoff-Fixpunktsatz

Das KAM-Theorem sagt aus, dass „nichtresonante“ Bahnen eines integrablen Hamiltonschen Systems bei kleinen Störungen nur wenig verändert werden. Was aber geschieht mit den „resonanten“ Bahnen?
Diese Frage soll in diesem Abschnitt für Systeme mit $n = 2$ Freiheitsgraden untersucht werden. Den Ausgangspunkt dazu bildet wieder ein integrables System, das in seinen Wirkungs- und Winkelvariablen $I_1$, $I_2$, $\vartheta_1$ und $\vartheta_2$ durch eine Hamiltonfunktion $H_0(I_1, I_2)$

Abbildung **I**.8: Die Poincaré-Abbildung des ungestörten Systems $H_0$: Jeder Punkt auf dem Schnittkreis eines invarianten Torus mit der Poincaré-Ebene $A$ wird durch den Hamiltonschen Fluß stroboskopisch wieder auf diesen Schnittkreis abgebildet.

beschrieben wird. Auch nach dem „Einschalten" einer Störung $\varepsilon H_1(I_1, I_2, \vartheta_1, \vartheta_2)$ soll die Gesamtenergie

$$E = H(I_1, I_2, \vartheta_1, \vartheta_2) \qquad (\mathbf{I}.4.1)$$

festgehalten werden, so dass nur noch drei Variablen $I \equiv I_1$, $\vartheta \equiv \vartheta_1$ und $\vartheta_2$ benötigt werden; $I_2$ ist damit durch die Bedingung (**I**.4.1) bestimmt. Dann wird die durch die Gleichung $\vartheta_2 = 0$ festgelegte $I$-$\vartheta$-Ebene $A$ betrachtet. Führt man in dieser Ebene Polarkoordinaten $r = \sqrt{2I}$, $\vartheta$ ein, so dass $\Delta r \cdot r\Delta\vartheta = \Delta I \cdot \Delta\vartheta$, so wird $A$ durch die Tori des ungestörten Systems $H_0$ in konzentrischen Kreisen geschnitten. Der von $H_0$ generierte Fluß bewegt einen Punkt $\xi = (I, \vartheta)$ aus $A$ in der Zeit $T(I) = 2\pi/\omega_2(I)$ entlang seiner Trajektorie einmal um den Torus herum und wieder in $A$ zurück, wie in Abbildung **I**.8 skizziert; der so erhaltene Bildpunkt $\xi'$ besitzt die gleiche Wirkung $I$ wie sein Urbild $\xi$ — liegt also auf dem gleichen Schnittkreis — und ist gegenüber $\xi$ in der Winkelvariablen $\vartheta$ um $\omega_1(I)T(I) = 2\pi\omega_1(I)/\omega_2(I)$ vorgerückt. Auf diese Weise wird jeder Punkt $\xi$ aus $A$ auf einen Punkt $\xi'$ aus $A$ abgebildet. Diese Konstruktion definiert die zu $H_0$ gehörige *Poincaré-Abbildung* $P_0$:

$$P_0 \,:\, \xi = \begin{pmatrix} I \\ \vartheta \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} I \\ \vartheta + 2\pi\omega(I) \end{pmatrix} , \qquad (\mathbf{I}.4.2)$$

wobei das Frequenzverhältnis

$$\omega(I) \equiv \frac{\omega_1(I)}{\omega_2(I)} \qquad (\mathbf{I}.4.3)$$

als *Windungszahl* bezeichnet wird. Die Schnittkreise der Tori mit $A$ sind invariante Kurven von $P_0$, werden also unter $P_0$ als ganze auf sich selbst abgebildet.

Es wird nun vorausgesetzt, dass der „Twist“ dieser Abbildung $P_0$ nicht verschwindet:

$$\frac{\partial\omega(I)}{\partial I} \neq 0 \, . \tag{I.4.4}$$

Daher „reagiert“ die Windungszahl auf eine Variation von $I$, so dass sich in der Poincaré-Ebene $A$ „rationale“ und „irrationale“ Kreise (also Kreise mit rationaler bzw. irrationaler Windungszahl) abwechseln. Ein irrationaler Kreis wird durch die sukzessiven Bildpunkte $\xi^{(n)} = P_0^n \xi$ (mit $n = 1, 2, 3, \ldots$) jedes beliebigen auf diesem Kreis gelegenen Anfangspunktes $\xi$ schließlich dicht überdeckt. Auf einem Schnittkreis mit rationaler Windungszahl $\omega(I) = r/s$, wobei $r$ und $s$ teilerfremde ganze Zahlen sein sollen, hat dagegen jeder Punkt eine periodische „Bahn“, die sich nach $s$ Umläufen schließt:

$$P_0^s(\vartheta) = \vartheta + 2\pi r \cong \vartheta \, . \tag{I.4.5}$$

Diese Konstruktion wird jetzt auf das gestörte System $H = H_0 + \varepsilon H_1$ übertragen. Die Schnittpunkte der Trajektorien dieses gestörten Systems mit der Ebene $A$ vermitteln eine Poincaré-Abbildung der Form

$$P_\varepsilon \; : \; \xi = \begin{pmatrix} I \\ \vartheta \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} I + \varepsilon f(I, \vartheta, \varepsilon) \\ \vartheta + 2\pi\omega(I) + \varepsilon g(I, \vartheta, \varepsilon) \end{pmatrix} \tag{I.4.6}$$

mit geeigneten Funktionen $f$, $g$. Es ist von entscheidender Bedeutung, dass auch diese Abbildung *flächentreu* ist.[7]

Ein Torus von $H_0$ mit irrationaler Windungszahl $\omega$, der unter der Störung $\varepsilon H_1$ nach KAM erhalten bleibt, erscheint in $A$ als invarianter Kreis $K_0(\omega)$, der sich für $\varepsilon > 0$ zu einer geschlossenen Kurve $K_\varepsilon(\omega)$ verformt, nämlich zur Schnittkurve des deformierten KAM-Torus mit $A$. Diese Schnittkurve $K_\varepsilon(\omega)$ ist invariant unter $P_\varepsilon$ und kann — da der gestörte Torus die gleiche Windungszahl $\omega$ besitzt wie der ungestörte — durch eine neue Winkelvariable $\widetilde{\vartheta}$ so parametrisiert werden, dass die Anwendung von $P_\varepsilon$ auf $K_\varepsilon(\omega)$ erneut nur einem „Winkelvorschub“ von $2\pi\omega$ entspricht:

$$P_\varepsilon(\widetilde{\vartheta}) = \widetilde{\vartheta} + 2\pi\omega \, . \tag{I.4.7}$$

Das ist der *Twistsatz von Moser* für gestörte flächentreue Abbildungen in einer Ebene; er kann auch ohne Rückgriff auf Hamiltonsche Systeme bewiesen werden.

Nun wird jedoch ein Kreis $K_0$ mit einer Wirkung $I_0$ betrachtet, die zu einer *rationalen* Windungszahl $\omega(I_0) = r/s$ gehört. Dann wird die Abbildung $\widetilde{P}_0 = P_0^s \bmod 2\pi r$ konstruiert, die nur noch jeden $s$-ten Durchstoßpunkt der Bahntrajektorie liefert:

$$\widetilde{P}_0 \; : \; \xi = \begin{pmatrix} I \\ \vartheta \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} I \\ \vartheta + 2\pi\big(s\omega(I) - r\big) \end{pmatrix} \tag{I.4.8}$$

$$= \begin{pmatrix} I \\ \vartheta + 2\pi\widetilde{\omega}(I) \end{pmatrix} . \tag{I.4.9}$$

[7] Diese wichtige Tatsache kann mit den Methoden bewiesen werden, die in Abschnitt **I**.1 bereitgestellt wurden: Der Rand eines einfach zusammenhängenden Flächenstückes $F$ in $A$ bildet eine geschlossene Kurve $\gamma$, deren Transport im Hamiltonschen Fluß wie in Abbildung **I**.1 einen Flußschlauch liefert. Der erneute Schnitt dieses Schlauches mit $A$ umgrenzt eine Fläche, deren Inhalt dem von $F$ gleicht — obwohl die Punkte der beliebig gewählten Kurve $\gamma$ im allgemeinen verschiedene Laufzeiten besitzen!

Abbildung **I**.9: Das Wirken der Twistbedingung: Jeder Punkt auf dem Kreis $K_0$ mit der Wirkung $I_0$ ist ein Fixpunkt der Abbildung (**I**.4.9). Ist der Twist positiv, so werden in einer Umgebung $[I_-, I_+]$ von $K_0$ alle Kreise mit $I < I_0$ unter dieser Abbildung im Uhrzeigersinn verschoben, und zwar umso weiter, je kleiner $I$ ist, alle Kreise mit $I > I_0$ jedoch im Gegenuhrzeigersinn. Entlang jeder radialen Linie wächst daher der Drehsinn der ungestörten Abbildung von $I_-$ bis $I_+$ und wechselt bei $I_0$ sein Vorzeichen.

Für $I = I_0$ ist die zugehörige Windungszahl $\widetilde{\omega}(I)$ konstruktionsgemäß Null; *jeder* Punkt von $K_0$ ist also Fixpunkt von $\widetilde{P}_0$. Da der Twist dieser Abbildung aufgrund der Bedingung (**I**.4.4) ungleich Null ist, darf er ohne Beschränkung der Allgemeinheit als positiv vorausgesetzt werden; damit wächst der „Drehsinn“ $\widetilde{P}_0(\vartheta) - \vartheta$, als Funktion von $I$ betrachtet, in einem Intervall $[I_-, I_+]$ um $I_0$ monoton mit $I$, wie in Abbildung **I**.9 verdeutlicht wird. Bewegt man sich also auf irgendeiner radialen Linie von $I_-$ nach $I_+$, ist der Drehsinn zunächst negativ und durchläuft dann eine Nullstelle; auf jeder radialen Linie gibt es somit einen Punkt (nämlich den Schnittpunkt dieser Linie mit $K_0$), der *nicht* senkrecht zu ihr verschoben wird. Diese Eigenschaft ist offenbar stabil unter kleinen Störungen, bleibt also (zumindest für hinreichend kleine $\varepsilon$) auch für die gestörte Abbildung $\widetilde{P}_\varepsilon = P_\varepsilon^s \bmod 2\pi r$ richtig, da $\widetilde{P}_\varepsilon$ bei Vergrößerung von $\varepsilon$ stetig aus $\widetilde{P}_0$ hervorgeht. Es gibt daher auch bei „eingeschalteter“ (kleiner) Störung auf jeder radialen Linie (also für alle Winkel $\vartheta$) genau einen Punkt $(I, \vartheta)$ zwischen $I_-$ und $I_+$ — und damit eine geschlossene Kurve $K$ solcher Punkte —, der unter $\widetilde{P}_\varepsilon$ höchstens in radiale Richtung, nicht jedoch auch azimutal abgebildet wird.

Die Konsequenz dieser einfachen Tatsache wird anhand von Abbildung **I**.10 unmittelbar klar: Da mit $P_\varepsilon$ auch die $s$-fach iterierte Abbildung $\widetilde{P}_\varepsilon$ flächentreu ist, müssen die Kurve $K$ der unter $\widetilde{P}_\varepsilon$ nur in radialer Richtung verschobenen Punkte und ihr Bild $\widetilde{K}$ mindestens zwei Schnittpunkte besitzen; diese Schnittpunkte, die wie in der Skizze als $\xi_E$ und $\xi_H$ bezeichnet werden sollen, sind *Fixpunkte* der Abbildung $\widetilde{P}_\varepsilon$. Tatsächlich hat man damit sogar $2s$ Fixpunkte gefunden: Ist nämlich $\xi_F$ ein Fixpunkt von $\widetilde{P}_\varepsilon$, dann auch $P_\varepsilon^\ell \xi_F$ mit $\ell = 0, 1, \ldots, s-1$.

Abbildung **I**.10: Zum Beweis des Poincaré-Birkhoff-Fixpunktsatzes: Jeder Punkt der geschlossenen Kurve $K$ wird unter $\widetilde{P}_\varepsilon$ nur radial, nicht jedoch in azimutaler Richtung verschoben. Da $\widetilde{P}_\varepsilon$ flächentreu ist, müssen sich $K$ und ihr Bild $\widetilde{K}$ mindestens zweimal schneiden. Die Schnittpunkte $\xi_E$ und $\xi_H$ sind Fixpunkte der gestörten Abbildung $\widetilde{P}_\varepsilon$.

Abbildung **I**.11: Punkte aus einer Umgebung eines Fixpunktes $\xi_E$ bewegen sich bei Iteration um diesen herum; $\xi_E$ ist ein stabiler (elliptischer) Fixpunkt. Fast alle Punkte aus einer Umgebung von $\xi_H$ werden unter Iteration schließlich von $\xi_H$ fortgetrieben; $\xi_H$ ist ein instabiler (hyperbolischer) Fixpunkt.

Betrachtet man nun die Pfeile in der Skizze **I**.10, die die „Bewegungsrichtung“ der Punkte unter $\widetilde{P}_\varepsilon$ angeben, so sieht man, dass die beiden Fixpunkte $\xi_E$ und $\xi_H$ ihrer Natur nach sehr verschieden sind. Abbildung **I**.11 macht deutlich, dass Punkte aus einer unmittelbaren Umgebung von $\xi_E$ bei fortgesetzter Iteration von $\widetilde{P}_\varepsilon$ lediglich um $\xi_E$ herumwandern; Punkte aus einer Umgebung von $\xi_H$ werden dagegen schließlich von $\xi_H$ fortgetrieben, sofern sie nicht genau auf $\xi_H$ zulaufen. Dieser Unterschied wird mathematisch erfaßt, wenn die Abbildung $\widetilde{P}_\varepsilon$ in einer Umgebung eines solchen Fixpunktes $\xi_F$ linearisiert wird: Man erhält dann eine $2 \times 2$-Matrix $\mathbf{M}$, so dass

$$\widetilde{P}_\varepsilon \xi \approx \xi_F + \mathbf{M} \cdot (\xi - \xi_F) \,, \tag{\textbf{I}.4.10}$$

solange der Abstand von $\xi$ zu $\xi_F$ hinreichend klein ist. Aufgrund der Flächentreue muß die Matrix $\mathbf{M}$ die Determinante $+1$ haben. Ihre Eigenwerte bilden daher *entweder* ein Paar komplex konjugierter Zahlen $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$, $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}$ (mit reellem $\alpha$), die den Betrag eins besitzen, *oder* ein reelles Paar $\lambda$, $1/\lambda$, so dass dann der Betrag des einen dieser Eigenwerte größer als eins und der des anderen kleiner als eins ist. Im ersten Fall hat man einen *stabilen* (oder *elliptischen*) Fixpunkt $\xi_E$; in der linearen Näherung rotiert ein Punkt $\xi$ bei Iteration um $\xi_E$ herum und behält seinen Abstand zu $\xi_E$ bei. Im zweiten Fall liegt ein *instabiler* (oder hyperbolischer) Fixpunkt $\xi_H$ vor. Mit Ausnahme der Punkte im Eigenraum desjenigen Eigenwertes, dessen Betrag kleiner als eins ist und deren Iterierte sich daher $\xi_H$ annähern, laufen nach hinreichend vielen Iterationsschritten alle anfangs nahe bei $\xi_H$ gelegenen Punkte von $\xi_H$ weg.
Diese Befunde zusammengenommen bilden den *Poincaré-Birkhoff-Fixpunktsatz*:[8]

> *Während für ein integrables Hamiltonsches System mit zwei Freiheitsgraden* jeder *Punkt des Schnittkreises eines invarianten Torus mit rationaler Windungszahl $r/s$ und einer Poincaré-Ebene ein Fixpunkt der ungestörten Abbildung $\widetilde{P}_0$ ist, bleibt unter einer kleinen Störung nur eine gerade Zahl $2ks$ (mit $k = 1, 2, 3, \ldots$) von Fixpunkten von $\widetilde{P}_\varepsilon$ übrig. Diese Fixpunkte sind abwechselnd stabil (elliptisch) und instabil (hyperbolisch).*

Die Fixpunktketten, deren Existenz durch diesen Satz garantiert wird, entsprechen offensichtlich periodischen Bahnen des vollen Hamiltonschen Systems, die sich nach $s$ (bzw. $r$) Umläufen in $\vartheta_2$- (bzw. $\vartheta_1$-) Richtung schließen.
Die invarianten Kreise in der Umgebung eines elliptischen Fixpunktes $\xi_E$, an die die Punkte bei fortgesetzter Iteration gebunden bleiben, sind nun wieder Schnittkreise invarianter Tori des vollen Hamiltonschen Systems mit der Poincaré-Ebene; diese neuen, sekundären Tori winden sich um die noch erhaltenen KAM-Tori herum. Nun ist aber die Linearisierung (**I**.4.10) bei $\xi_E$ im allgemeinen nicht exakt; die vernachlässigten Terme bilden eine Störung, die mit abnehmender Entfernung von $\xi_E$ klein wird. Man hat es also mit einer *gestörten* elliptischen Abbildung zu tun, so dass nun der gesamte Gedankengang, wie in Abbildung **I**.12 angedeutet, wiederholt werden kann: Von den in der linearen Näherung gefundenen invarianten Kreisen um $\xi_E$ bleiben bei Betrachtung der exakten Abbildung nur die hinreichend irrationalen übrig; die rationalen zerfallen erneut in hyperbolische und elliptische Fixpunkte — wobei letztere ihrerseits zu tertiären Tori führen. Da diese Argumentationskette offenbar unendlich oft fortgesetzt werden kann, erhält man schließlich eine Struktur im Phasenraum, die sich auf jeder Größenskala qualitativ ähnlich bleibt;

[8]George David Birkhoff (1884 - 1944), amerikanischer Mathematiker; arbeitete über Ergodentheorie, Zahlentheorie, das Dreikörperproblem und den Vierfarbensatz. Suchte weiterhin nach einer einheitlichen Regel zur ästhetischen Bewertung von Kunstwerken.

Abbildung **I**.12: Genese selbstähnlicher Strukturen im Phasenraum eines Hamiltonschen Systems: Die Schnittkreise hinreichend irrationaler Tori eines integrablen Systems mit einer Poincaré-Ebene werden bei einer kleinen Störung nur verformt; die Schnittkreise rationaler Tori zerfallen in Ketten elliptischer und hyperbolischer Fixpunkte. In der Umgebung der elliptischen Fixpunkte hat man gestörte elliptische Poincaré-Abbildungen. Anstelle „rationaler“ Kreise um diese Fixpunkte herum findet man also erneut Ketten elliptischer und hyperbolischer Fixpunkte — und so weiter ad infinitum!

Abbildung **I**.13: Das „Kabel“ als Träger der verbleibenden geordneten Bewegung in einem ursprünglich integrablen System unter dem Einfluß einer Störung: Um die KAM-Tori winden sich sekundäre invariante Tori herum, die elliptische periodische Bahnen umschließen; um diese herum winden sich weitere, tertiäre Tori. Diese Hierarchie setzt sich unendlich fort.

Abbildung **I**.14: Hyperbolischer Fixpunkt $\xi_H$ einer linearisierten Abbildung mit invarianten Hyperbeln sowie stabiler Mannigfaltigkeit $M_+$ und instabiler Mannigfaltigkeit $M_-$.

man trifft also auf das Phänomen der *Selbstähnlichkeit*. Die in Abbildung **I**.13 nur grob skizzierte Hierarchie immer dünnerer, umeinander gewundener Tori trägt dabei den noch verbleibenden Anteil an geordneter Bewegung: Jede Trajektorie, die auf einem Torus beliebiger Hierarchiestufe startet, bleibt für immer an ihn gebunden und in diesem Sinne berechenbar.

## I.5 Hyperbolische Fixpunkte, homokline Punkte und Chaos

Zwar nehmen die invarianten Tori eines gestörten, ursprünglich integrablen Hamiltonschen Systems für kleine Störstärke $\varepsilon$ noch einen endlichen Volumenanteil des Phasenraumes $\Gamma$ ein, füllen ihn aber nicht vollständig aus: Die „Kabelhierarchie“ besitzt Zwischenräume, in denen das Verhalten der Trajektorien *chaotisch* wird. Dieses Chaos geht von den hyperbolischen Fixpunkten aus.

In der um $\xi_H$ linearisierten Abbildung (**I**.4.10) gibt es invariante Kurven — Hyperbeln —, die als ganze unter $\mathbf{M}$ auf sich selbst abgebildet werden. Die Asymptoten dieser invarianten Hyperbeln werden wie in der Skizze **I**.14 mit $H_+$ und $H_-$ bezeichnet; sie bestehen aus allen Punkten, die entweder (im Falle von $H_+$) unter Vorwärtsiteration oder (im Falle von $H_-$) unter Rückwärtsiteration in $\xi_H$ hineinlaufen. Das sind die *stabile* und die *instabile Mannigfaltigkeit* des hyperbolischen Fixpunktes $\xi_H$. Für die lineare Abbildung $\mathbf{M}$ bilden sie die Geraden in Richtung der beiden Eigenvektoren. Es ist ein sehr wichtiges Resultat der Theorie dynamischer Systeme, dass diese Mannigfaltigkeiten in Form glatter Kurven auch für die volle, nichtlineare Abbildung $\widetilde{P}_\varepsilon$ existieren.

Nun interessiert die Frage, wo solche Kurven $H_\pm$ enden; hier zeigt sich ein fundamentaler Unterschied zwischen integrablen und nichtintegrablen Systemen. Bei integrablen Systemen läuft jede dieser Kurven wieder in einen hyperbolischen Fixpunkt zurück; entweder als stabile Mannigfaltikeit in denselben, von dem sie als instabile Mannigfaltigkeit

Abbildung **I**.15: Phasenraumportrait eines schweren Pendels: Stabile und instabile Mannigfaltigkeiten von $\xi_H$ bilden die Separatrix, die Oszillationen und Rotationen trennt.

ausgegangen ist, oder in einen anderen. Die Kurven heißen dann *homoklin* oder *heteroklin*. Ein einfaches Beispiel liefert das in Abbildung **I**.15 dargestellte Phasenraumportrait eines schweren Pendels: Dessen stabile Gleichgewichtslage ergibt einen elliptischen Fixpunkt $\xi_E$; ein hyperbolischer Fixpunkt $\xi_H$ entspricht der instabilen Gleichgewichtslage, bei der das Pendel auf dem Kopf steht. Eine Kurve $H_\pm$ entspricht einer Bewegungsform, bei der ein geringfügig aus dem instabilen Gleichgewicht ausgelenktes Pendel zunächst beschleunigt, dann nach Passieren des Potentialminimums wieder abgebremst wird und auf den instabilen Gleichgewichtspunkt zurückläuft, ohne ihn (in endlicher Zeit) erreichen zu können. Diese Kurve „trennt“ die Oszillationen, bei denen das Pendel die Position des instabilen Gleichgewichtes niemals erreicht, von den Rotationen, bei denen sich das Pendel überschlägt; sie wird daher als *Separatrix* bezeichnet.
In typischen, also nichtintegrablen Systemen findet man jedoch ein vollkommen anderes Verhalten. Die Kurven $H_\pm$ können sich niemals selbst schneiden, da sie unter $\widetilde{P}_\varepsilon$ stetig und umkehrbar eindeutig auf sich selbst abgebildet werden. Dagegen darf z.B. eine instabile Mannigfaltigkeit $H_-$ eines hyperbolischen Fixpunktes $\xi_H$ eine stabile Mannigfaltigkeit $H_+$ des selben oder eines anderen $\xi_H$ schneiden; ein solcher Schnittpunkt heißt *homokliner* oder *heterokliner Punkt*. Im folgenden werden solche homoklinen Punkte betrachtet; außerdem wird vorausgesetzt, dass beide Eigenwerte $\lambda$ und $1/\lambda$ der bei $\xi_H$ linearisierten Abbildung positiv sind. Das bedeutet, dass man nicht eine zwischen den beiden Ästen von $H_\pm$ alternierende Folge von Bildpunkten zu behandeln braucht, sondern sich auf jeweils einen Ast beschränken kann.
Es wird nun eine Situation wie in Abbildung **I**.16 vorausgesetzt, in der $M_+$ und $M_-$ einen homoklinen Punkt $S$ bilden. Nach Definition der Mannigfaltigkeiten $H_\pm$ wird jeder Punkt auf ihnen unter $\widetilde{P}_\varepsilon$ wieder auf einen Punkt aus $H_\pm$ abgebildet, jeder Schnittpunkt $S$ daher wieder auf einen Schnittpunkt $S^{(1)}$. Nun hat die Jacobideterminante von $\widetilde{P}_\varepsilon$ den Wert $+1$, so dass die Abbildung orientierungserhaltend ist. Daher muss, wie in der Dar-

Abbildung **I**.16: Homokliner Punkt $S$, der durch den Schnitt der stabilen und der instabilen Mannigfaltigkeit eines hyperbolischen Fixpunktes $\xi_H$ entsteht. Da die Poincaré-Abbildung $\widetilde{P}_\varepsilon$ orientierungserhaltend ist, ist nicht $\widetilde{S}$, sondern $S^{(1)}$ das Bild von $S$ unter $\widetilde{P}_\varepsilon$. Da die schraffierten Fächen aufeinander abgebildet werden und die Abbildung flächentreu ist, sind die Inhalte dieser schraffierten Flächen gleich.

Abbildung **I**.17: Homoklines Netzwerk (*homoclinic tangle*), das sich bei Fortsetzung der in Abbildung **I**.16 angedeuteten Konstruktion ergibt. Das Verbot der Selbstüberschneidung zwingt die Mannigfaltigkeiten bei Annäherung an $\xi_H$ zu immer größeren Umwegen. Da an den dabei zwangsläufig auftretenden sekundären homoklinen Punkten das gleiche Vernetzungsprinzip gilt, ist die Komplexität des tatsächlich entstehenden Netzwerkes noch *viel* höher; es ist daher nicht wirklich zeichenbar.

stellung **I**.16 angedeutet, zwischen $S$ und seinem Bild $S^{(1)}$ mindestens noch ein weiterer Schnittpunkt $\widetilde{S}$ liegen. Bei Vorwärtsiteration wandern diese Punkte nun entlang $H_+$ auf

Abbildung **I**.18: Änderung des Poincaré-Schnitts eines ursprünglich integrablen Hamiltonschen Systems bei Einschalten einer Störung (schematisch): Die hinreichend irrationalen Tori des ungestörten Systems bleiben als KAM-Tori erhalten. Die rationalen, resonanten Tori (gestrichelt) werden zerstört und in einer Poincaré-Ebene durch Ketten elliptischer sowie hyperbolischer Fixpunkte ersetzt. In der Umgebung der elliptischen Fixpunkte entstehen sekundäre oder höhere Tori der Kabelhierarchie. Die *homoclinic tangles*, die von den hyperbolischen Fixpunkten ausgehen, bedingen chaotische Bewegung um diese Resonanzzonen herum.

$\xi_H$ zu; bei Rückwärtsiteration entlang $H_-$. Wegen der Stetigkeit und der Flächentreue der Abbildung werden dabei die in der Skizze schraffierten Flächen stets auf Flächen gleichen Inhalts abgebildet — wobei sich aber weder $H_+$ noch $H_-$ selbst schneiden dürfen! Das zwingt die Mannigfaltigkeiten, die die Bildpunkte $S^{(\pm n)}$ von $S$ verbinden müssen, bei deren Annäherung an $\xi_H$ zu immer größeren „Ausflügen“ und führt somit zwangsläufig zu sekundären homoklinen Punkten, die ihrerseits ein ebensolches Szenario bedingen, so dass sich insgesamt ein ungeheuer kompliziertes Netzwerk aus $H_+$ und $H_-$ ergibt, das in der englischsprachigen Literatur als *homoclinic tangle* bezeichnet wird und in der Abbildung **I**.17 nur *sehr* schematisch angedeutet werden kann. Die sukzessiven Bilder eines Startpunktes $\xi$ aus einem solchen Netzwerk wandern bei Iteration von $\widetilde{P}_\varepsilon$ scheinbar irregulär — eben chaotisch — umher; die tatsächlich zugrunde liegende Regel — der genaue Verlauf des Netzwerkes — ist zu komplex, um anhand einer endlichen, diskreten Folge von Bildpunkten erkannt werden zu können.

Im Phasenraum des vollen Hamiltonschen Systems findet man daher ein scheinbar irreguläres Gewirr von Trajektorien, die den Raum zwischen den KAM-Tori auffüllen. Diese chaotischen Regionen liegen im Phasenraum dicht, da sie aus allen ehemals rationalen Tori zu $H_0$ entstehen. In ihnen kann eine Trajektorie des Systems an jeden Ort „diffundieren“; man spricht bei dieser eigentlich streng deterministischen, aber stochastisch erscheinenden Bewegungsform von *Arnold-Diffusion*. Für $n = 2$ hat diese Diffusion bei kleinen Störungen keinen großen Effekt, weil jede Trajektorie zwischen benachbarten, erhaltenen

KAM-Tori engesperrt bleibt. Das beruht auf einer speziellen topologischen Eigenschaft des dreidimensionalen Raumes: Ein 2-Torus teil die 3-dimensionale Energieschale $\Gamma(H = E)$ in „Innen“ und „Außen“. Für $n = 3$ gilt das bereits nicht mehr: Ein 3-Torus teilt eine 5-dimensionale Energieschale *nicht* in zwei unzusammenhängende Teile; der chaotische Teil des Phasenraums bleibt daher einfach zusammenhängend und eine Trajektorie in ihm kann trotz der Existenz vieler KAM-Tori jedem Punkt beliebig nahe kommen.
Es bleibt die Frage, wie groß die Störung sein darf, damit das in Abbildung **I**.18 noch einmal schematisch zusammengefasste Nebeneinander von geordneten und chaotischen Bewegungszuständen auftreten kann. Es gibt Hamiltonsche Systeme, die vollständig ergodisch sind, bei denen also keine KAM-Tori mehr existieren (für $n = 2$) oder die erhaltenen Tori das Volumenmaß Null haben (für $n \geq 3$). Für ein gegebenes System kann das numerisch untersucht werden; sehr oft findet man dabei auch für große Störungen noch ein gemischtes Verhalten.
Aus diesen Überlegungen läßt sich nun ein vielleicht überraschendes Fazit ziehen:

> *Das Langzeitverhalten einzelner Trajektorien nichtintegrabler Hamiltonscher Systeme ist* prinzipiell *weder analytisch noch numerisch bestimmbar.*

## I.6 Vorläufiges zum Übergang zur Quantenmechanik

Die Wirkungsvariablen eines Hamiltonschen Systems zeigen ein bemerkenswertes Verhalten bei langsamer Veränderung seiner Parameter: Sie sind *adiabatische Invarianten.*

> *Unter einer* adiabatischen Invarianten *versteht man eine Größe, die bei der Veränderung eines Parameters $\lambda$ in erster Ordnung von $\dot{\lambda}$ konstant bleibt.*

■ **Beispiel:** Das Teilchen im Kasten

Ein Teilchen der Masse $m$ bewege sich in einem eindimensionalen Kastenpotential mit ideal reflektierenden Wänden bei $q = 0$ und $q = a$. Solange die Wände sich nicht bewegen, wird sein Impuls $\pm p_0$ bei jedem Wandstoß invertiert; die Winkelvariable $I$ lautet dann

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p \, \mathrm{d}q = \frac{1}{\pi} p_0 a \,. \qquad (\mathbf{I}.6.1)$$

Bewegt sich die rechte Wand nun mit einer kleinen Geschwindigkeit $v_a \ll p_0/m$ nach rechts, verliert das Teilchen bei jedem Stoß mit dieser Wand im Laborsystem den Impuls $-2mv_a$, da ja die exakte Impulsumkehr in dem mit der Wand mitbewegten Bezugssytem stattfindet. Nach einem Umlauf der Dauer $2ma/p_0$ hat das Teilchen daher den Impuls $p_0 - 2mv_a$; die Wand hat sich in dieser Zeit um $2mv_a a/p_0$ verschoben. Die neue Wirkungsvariable

$$I = \frac{1}{\pi}\big(p_0 - 2mv_a\big)\big(a + 2mv_a a/p_0\big) = \frac{1}{\pi} p_0 a + \mathcal{O}(v_a^2) \qquad (\mathbf{I}.6.2)$$

ist daher in erster Ordnung von $v_a$ identisch mit der alten.

Diese adiabatische Invarianz der Wirkungsvariablen steht in engem Bezug zu der bekannten Invarianz der Entropie $S$ eines idealen Gases bei adiabatischer Änderung seines Volumens $V$. Bei gegebener Temperatur $T$ und gegebenem Druck $P$ des Gases gilt für die Änderung der Energie $E$ bei einer beliebigen quasistatischen Volumenänderung zunächst

$$\mathrm{d}E = T\mathrm{d}S - P\mathrm{d}V \; ; \tag{I.6.3}$$

bei einer adiabatischen Prozeßführung, bei der durch die Wandstöße keine Wärme auf die Gasteilchen übertragen und die daher durch $\mathrm{d}S = 0$ charakterisiert wird, hat man daher lediglich

$$\mathrm{d}E = -P\mathrm{d}V \; . \tag{I.6.4}$$

Für ein ideales, also aus nicht miteinander wechselwirkenden Teilchen bestehendes Gas kann man sich nun zurückziehen auf die Behandlung eines einzigen Teilchens, das sich wie oben zwischen zwei ideal reflektierenden Wänden bei $q = 0$ und $q = a$ bewegen möge, wobei die Volumenänderung durch die langsame Verschiebung der rechten Wand hervorgerufen wird. Ist $v = p_0/m$ die anfängliche Geschwindigkeit des Teilchens, so ist

$$\mathrm{d}E \;=\; mv\,\mathrm{d}v \;=\; mv(-2v_a) \tag{I.6.5}$$

die Änderung seiner kinetischen Energie während der Dauer eines Umlaufes. Die Kraft $F$ auf eine feststehende Wand ergibt sich aus der Impulsänderung $2mv$ pro Zeitintervall $2a/v$ zu

$$F \;=\; \frac{2mv}{2a/v} \;=\; \frac{mv^2}{a} \; . \tag{I.6.6}$$

Die Wand besitze nun die Fläche $A$; der von dem Teilchen ausgeübte Druck ist also $P = F/A$. Da sich die Wand während einer Umlaufzeit $2a/v$ um $da = 2av_a/v$ verschiebt, findet man damit

$$-P\mathrm{d}V \;=\; -\frac{mv^2}{aA}\,\mathrm{d}(Aa) \;=\; -\frac{mv^2}{a}\,\frac{2av_a}{v} \;=\; -2mvv_a \;=\; \mathrm{d}E \; , \tag{I.6.7}$$

so dass die Beziehung (**I**.6.3) in der Tat mit $\mathrm{d}S = 0$ erfüllt wird.
Diese adiabatische Invarianz der Entropie läßt sich sofort auf die adiabatische Invarianz der Wirkungsvariablen des Teilchens zurückführen: Aus der Gleichung (**I**.6.1) erhält man nämlich seine Energie als Funktion der Wirkung $I$ und der „Kastenbreite“ $a$ in der Form

$$E(I,a) = \frac{\pi^2}{2ma^2} I^2 \; . \tag{I.6.8}$$

Das Differential

$$\mathrm{d}E = \left(\frac{\partial E}{\partial I}\right)_a \mathrm{d}I + \left(\frac{\partial E}{\partial a}\right)_I \mathrm{d}a \tag{I.6.9}$$

reduziert sich daher bei vorausgesetzter adiabatischer Invarianz der Wirkung, also für $\mathrm{d}I = 0$, sofort auf

$$\mathrm{d}E \;=\; -\frac{2E}{a}\,\mathrm{d}a \;=\; -\frac{mv^2}{aA}\mathrm{d}(Aa) = -P\mathrm{d}V \; . \tag{I.6.10}$$

Kurz: Die „makroskopische" adiabatische Invarianz der Entropie des Gases kann auf eine „mikroskopische" adiabatische Invarianz zurückgeführt werden, nämlich auf die adiabatische Invarianz der Wirkungsvariablen seiner Konstituenten. ∎

Offenbar ist adiabatische Invarianz für nicht integrable Systeme ein sehr unscharfes Konzept. Geht man erneut aus von einem integrablen System $H_0(I)$, das im Unterschied zu Abschnitt **I**.3 nun einer langsam eingeschalteten Störung $H_1(I,\vartheta)$ unterworfen wird, beschrieben durch eine explizit zeitabhängige Hamiltonfunktion der Form

$$H(I,\vartheta,t) = H_0(I) + \varepsilon(t)H_1(I,\vartheta) \; , \tag{I.6.11}$$

so besitzen die Trajektorien des Systems die Tendenz, ihre anfänglichen Wirkungen zu erhalten. Die Beweisskizze des KAM-Theorems hat jedoch deutlich gemacht, dass die erhaltenen KAM-Tori *nicht* durch die gleichen Wirkungen charakterisiert werden wie die Tori des ungestörten Systems, sondern durch die gleichen Windungszahlen; die Twistbedingung (**I**.3.46) garantiert, dass durch „Nachregeln" der Wirkungen die Windungszahlen konstant gehalten werden können. Beim langsamen Einschalten der Störung $H_1(I,\vartheta)$ mit einer im Laufe der Zeit anwachsenden Störstärke $\varepsilon(t)$ ist die Situation gerade umgekehrt: Damit die Wirkungsvariablen adiabatisch invariant bleiben können, müssen die Trajektorien des Systems ganze Intervalle von Windungszahlen überstreichen und damit neben den erhaltenen KAM-Tori auch chaotische Zonen das Phasenraumes „sehen". Die Frage, ob trotzdem noch eine adiabatische Führung der Systemtrajektorien möglich bleibt oder ob das Chaos die Oberhand gewinnt, ist ebenso interessant wie schwierig.
Adiabatische Invarianten spielten eine große Rolle in der „alten" Quantenmechanik, also der Vorstufe der Quantentheorie, die vor der Entdeckung der Heisenbergschen Matrizenmechanik und der Schrödingerschen Wellenmechanik bekannt war: Nach der *Adiabatenhypothese von Ehrenfest* sind nämlich beim Übergang von der klassischen zur quantenmechanischen Theorie nur solche Größen zu „quantisieren", die sich bei langsamer Änderung der Systemparameter praktisch nicht ändern, so dass keine Übergänge zwischen den diskreten Energieniveaus induziert werden. Das vorhin betrachtete „Teilchen im Kasten" liefert ein einfaches Beispiel für diese „semiklassische Quantisierung": Ersetzt man in seiner Hamiltonfunktion (**I**.6.8) die adiabatische Invariante $I$ gemäß der Vorschrift

$$I \longrightarrow n\hbar \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \tag{I.6.12}$$

durch ganzzahlige Vielfache des Planckschen Wirkungsquantums $\hbar$, so erhält man die korrekten quantenmechanischen Energieeigenwerte

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 \; . \tag{I.6.13}$$

Das berühmte „1. Bohrsche Postulat", demzufolge der Drehimpuls des Elektrons im Wasserstoffatom auf einer erlaubten Bahn ein ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$ sein muß, ist eine weitere Anwendung genau dieser Regel (**I**.6.12), da nämlich der Drehimpuls $L$ mit der Wirkung $I$ übereinstimmt:

$$L \;=\; mv\,r \;=\; \frac{1}{2\pi} mv(2\pi r) \;=\; \frac{1}{2\pi}\oint p\mathrm{d}q \;=\; I \;. \qquad (\mathbf{I}.6.14)$$

Anwendung der Regel führt dann sofort auf die Gleichung

$$2\pi r \;=\; n\,\frac{2\pi\hbar}{mv} \;=\; n\,\frac{h}{p} \;=\; n\lambda \;, \qquad (\mathbf{I}.6.15)$$

wobei $h = 2\pi\hbar$ geschrieben und die de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$ für die Wellenlänge einer Materiewelle, die einem Teilchen mit dem Impuls $p$ zugeordnet ist, ausgenutzt wurde. Die Quantisierungsregel (**I**.6.12) wählt hier somit aus allen klassischen Kreisbahnen genau diejenigen aus, die eine ganze Anzahl $n$ von Wellenlängen tragen können, so dass sich die Wellen nicht durch destruktive Interferenz auslöschen.
Eine ähnliche klassisch-quantenmechanische Entsprechung findet man für den harmonischen Oszillator: Ausgehend von dessen Hamiltonfunktion (**I**.2.59), also von

$$H(I) = I\omega_0 \;,$$

führt nun allerdings die Ersetzung

$$I \longrightarrow (n + 1/2)\hbar \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots) \qquad (\mathbf{I}.6.16)$$

der Wirkungsvariablen durch *halb*zahlige Vielfache von $\hbar$ auf die bekannten Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\omega_0(n + 1/2) \;. \qquad (\mathbf{I}.6.17)$$

Um die Ursache des Unterschiedes zwischen der „ganzzahligen" Quantisierung (**I**.6.12) und der hier angetroffenen „halbzahligen" Quantisierung (**I**.6.16) zu beleuchten und außerdem der Frage nachzugehen, ob eine solche Diskretisierungsvorschrift immer auf die exakten quantenmechanischen Energieniveaus führt, wird nun noch ein weiteres, besonders instruktives Modellsystem behandelt:

■ **Beispiel:** Das Teilchen in der Dreiecksmulde

Ein Teilchen der Masse $m$ bewege sich auf der positiven $q$-Achse unter dem Einfluß einer konstanten rücktreibenden Kraft der Stärke $b$; bei $q = 0$ befinde sich eine harte, ideal reflektierende Wand, wie in Abbildung **I**.19 skizziert. Seine Hamiltonfunktion lautet also

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + bq \qquad \text{für } q \geq 0 \;; \qquad (\mathbf{I}.6.18)$$

bei vorgegebener Energie $E$ besitzt es somit den Impuls

$$p = \pm\sqrt{2m(E - bq)} \qquad (\mathbf{I}.6.19)$$

Abbildung **I**.19: Das Dreieckspotential $V(q) = bq$ für $q \geq 0$ mit einer harten Wand bei $q = 0$. Bei gegebener Energie $E$ oszilliert das Teilchen zwischen den Umkehrpunkten $q_- = 0$ und $q_+ = E/b$.

zwischen den beiden Umkehrpunkten $q_- = 0$ und $q_+ = E/b$. Die Wirkungsvariable ergibt sich daraus zu

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2\pi} 2 \int_0^{E/b} (2m)^{1/2} (E - bq)^{1/2} \, \mathrm{d}q \\ &= \frac{1}{\pi} (2m)^{1/2} (E - bq)^{3/2} \left( -\frac{2}{3b} \right) \Big|_0^{E/b} \\ &= \frac{\sqrt{2m}}{\pi} \frac{2}{3b} E^{3/2} \, , \end{aligned} \qquad (\mathbf{I}.6.20)$$

woraus man wie üblich durch Auflösen nach der Energie die durch die Wirkung ausgedrückte Hamiltonfunktion erhält:

$$H(I) = \left( \frac{b^2}{2m} \right)^{1/3} \left( \frac{3\pi}{2} I \right)^{2/3} \, . \qquad (\mathbf{I}.6.21)$$

Um andererseits die exakten quantenmechanischen Energieeigenwerte angeben zu können, muß die stationäre Schrödingergleichung des Systems gelöst werden:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} + bq \right) \psi(q) = E\psi(q) \qquad \text{für } q \geq 0 \, ; \qquad (\mathbf{I}.6.22)$$

die „harte Wand“ übersetzt sich in die Randbedingung $\psi(0) = 0$. Um diese Gleichung geeignet zu skalieren, wird auf die dimensionslose Variable $x = cq$ übergegangen, wobei der Skalierungsfakor $c$ zunächst noch offen bleiben soll. Das liefert

$$\left( -\frac{\hbar^2 c^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{b}{c} x \right) \psi(x) = E\psi(x) \qquad (\mathbf{I}.6.23)$$

oder

$$\left(-\frac{\hbar^2 c^3}{2mb}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + x\right)\psi(x) = \frac{cE}{b}\psi(x) \tag{I.6.24}$$

für $x \geq 0$. Setzt man also

$$c = \left(\frac{2mb}{\hbar^2}\right)^{1/3} \tag{I.6.25}$$

und

$$\varepsilon = \frac{cE}{b}\ , \tag{I.6.26}$$

so erhält man die skalierte Gleichung

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + x\right)\psi(x) = \varepsilon\psi(x)\ , \tag{I.6.27}$$

die durch die Substitution $z = x - \varepsilon$ schließlich in die wohlbekannte *Airysche Differentialgleichung* übergeht:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - z\right)\psi(z) = 0\ . \tag{I.6.28}$$

Linear unabhängige Lösungen dieser Gleichung sind die Airy-Funktionen $\mathrm{Ai}(z)$ und $\mathrm{Bi}(z)$. Beide Funktionen oszillieren für relle $z < 0$, wogegen ihr asymptotisches Verhalten für große positive $z$ durch

$$\begin{aligned} \mathrm{Ai}(z) &\sim \frac{1}{2}\pi^{-1/2}z^{-1/4}\exp(-2z^{3/2}/3) \\ \mathrm{Bi}(z) &\sim \pi^{-1/2}z^{-1/4}\exp(+2z^{3/2}/3) \end{aligned} \tag{I.6.29}$$

beschrieben wird.[9] Damit scheidet $\mathrm{Bi}(z)$ aus Normierungsgründen für die Konstruktion der gesuchten Eigenzustände aus; man hat also $\psi(z) \propto \mathrm{Ai}(z)$ oder

$$\psi(q) = N\,\mathrm{Ai}(cq - cE/b) \tag{I.6.30}$$

mit einer Konstanten $N$. Die Randbedingung $\psi(0) = 0$ führt dann sofort auf die gesuchten Energieeigenwerte in der Form

$$E_n = \frac{b}{c}z_n = \left(\frac{\hbar^2 b^2}{2m}\right)^{1/3} z_n\ , \tag{I.6.31}$$

wobei $-z_n$ die $n$-te Nullstelle der Airy-Funktion $\mathrm{Ai}(z)$ ist. Für diese Nullstellen existiert die Darstellung

$$z_n = f\left(\frac{3\pi}{2}(n - 1/4)\right) \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \tag{I.6.32}$$

[9] Quelle dieser Weisheiten: Das sehr nützliche *Handbook of Mathematical Functions*, herausgegeben von M. Abramowitz und I. A. Stegun (Dover Publications, New York, 1972).

mit der Funktion

$$f(x) \sim x^{2/3}\left(1 + \frac{5}{48}x^{-2} - \frac{5}{36}x^{-4} + \frac{77125}{82944}x^{-6} + \cdots\right) . \qquad (\mathbf{I}.6.33)$$

Beschränkt man sich auf den führenden Term dieser Entwicklung, erhält man daraus

$$E_n \approx \left(\frac{\hbar^2 b^2}{2m}\right)^{1/3}\left(\frac{3\pi}{2}(n - 1/4)\right)^{2/3} , \qquad (\mathbf{I}.6.34)$$

also genau den Ausdruck, der aus der klassischen Hamiltonfunktion (**I**.6.21) durch die Ersetzung

$$I \longrightarrow (n - 1/4)\hbar \qquad (\mathbf{I}.6.35)$$

hervorgeht. Als Folge der Näherung der Funktion (**I**.6.33) wird dieser Ausdruck erst für große Quantenzahlen $n$ asymptotisch exakt. ■

Die Befunde für die drei bisher betrachteten Modellsysteme werden in der folgenden Tabelle zusammengefaßt, wobei hier die Quantenzahl $n$ stets die Werte $n = 0, 1, 2, \ldots$ annimmt:

| System | $H(I)$ | quantenmechanische Energieniveaus |
|---|---|---|
| harmonischer Oszillator | $I\omega_0$ | $\hbar\omega_0\left(n + 2 \cdot \frac{1}{4}\right)$ |
| Teilchen im Kasten | $\frac{\pi^2}{2ma^2}I^2$ | $\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n + 2 \cdot \frac{2}{4}\right)^2$ |
| Teilchen in Dreiecksmulde | $\left(\frac{b^2}{2m}\right)^{1/3}\left(\frac{3\pi}{2}I\right)^{2/3}$ | $\left(\frac{\hbar^2 b^2}{2m}\right)^{1/3} f\left(\frac{3\pi}{2}\left(n + \frac{2}{4} + \frac{1}{4}\right)\right)$ |

Diese Gegenüberstellung weist darauf hin, dass die richtige Quantisierungsregel für Systeme mit einem Freiheitsgrad, die die drei Fälle (**I**.6.12), (**I**.6.16) und (**I**.6.35) als Spezialfälle enthält, durch die Vorschrift

$$I = \frac{1}{2\pi}\oint p\mathrm{d}q \longrightarrow \hbar(n + \nu/4) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots) \qquad (\mathbf{I}.6.36)$$

gegeben wird, wobei die ganze Zahl $\nu$ durch die Art der Umkehrpunkte der klassischen Bewegung bestimmt wird: Ein „weicher“ Umkehrpunkt liefert einen Beitrag der Größe 1, ein „harter“ einen der Größe 2. Für den harmonischen Oszillator gilt daher $\nu = 1 + 1$, für das Teilchen im Kasten $\nu = 2 + 2$ und für das Teilchen in der Dreiecksmulde $\nu = 2 + 1$.

Diese Ersetzungsvorschrift (**I**.6.36), die in der Quantentheorie im Rahmen der sogenannten WKB-Näherung systematisch begründet wird, liefert allerdings nur in Ausnahmefällen die exakten Energieeigenwerte; im allgemeinen erhält man Näherungsausdrücke, die wie für das Teilchen in der Dreiecksmulde erst im Grenzfall großer Quantenenzahlen $n$ in die exakten Eigenwerte übergehen.
Es stellt sich dann die Frage, ob eine ähnliche Korrespondenz zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik auch für Systeme mit mehreren Freiheitsgraden existiert. Dieser Frage ging Einstein bereits 1917 nach, indem er aufzeigte, dass eine unmittelbare Verallgemeinerung des 1. Bohrschen Postulates nur für integrable Systeme angegeben werden kann. Einstein vermutete die Gültigkeit des folgenden Verfahrens:

- Ausgangspunkt ist die klassische Hamiltonfunktion $H(p_1, \ldots, p_f, q_1, \ldots, q_f)$ eines integrablen Systems mit $f$ Freiheitsgraden. Man führe zunächst die Transformation auf Wirkungs- und Winkelvariable durch, so dass die neue Hamiltonfunktion nur noch von den Wirkungsvariablen abhängt:

  $$H = H(I_1, \ldots, I_f) \; .$$

- Die erlaubten Energieniveaus des korrespondierenden quantenmechanischen Systems ergeben sich, indem man alle Wirkungsvariablen $I_j$ durch diskrete Vielfache $I_{n_j} = n_j\hbar$ des Planckschen Wirkungsquantums ersetzt:

  $$E_{n_1,\ldots,n_f} = H(I_{n_1}, \ldots, I_{n_f}) \; .$$

Heute weiß man, dass diese semiklassische Vorschrift in der Tat für große Quantenzahlen asymptotisch korrekte Resultate liefert, wenn man zusätzlich noch die von den Umkehrpunkten der klassischen Bewegung hervorgerufene Korrektur berücksichtigt:

*Die semiklassische Quantisierung eines integrablen Hamiltonschen Systems mit $f$ Freiheitsgraden geschieht durch die Ersetzung*

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_j} p\mathrm{d}q = \hbar(n_j + \nu_j/4) \qquad (j = 1, \ldots, f) \; , \tag{I.6.37}$$

*wobei $\gamma_j$ einer der $f$ topologisch nicht äquivalenten Basiswege auf dem jeweiligen $f$-Torus ist. Der Maslov-Index $\nu_j = \nu_j(\gamma_j)$ ist eine ganze Zahl; diese gibt an, wieviele Kaustiken der Weg $\gamma_j$ durchläuft.*

Unter einer *Kaustik* versteht man eine Singularität, die auftritt, wenn eine invariante Mannigfaltigkeit aus dem Phasenraum in den Konfigurationsraum projiziert wird, also in den Raum, der nur von den Ortskoordinaten $q_1, \ldots, q_f$ aufgespannt wird. An einer Kaustik wechselt die Anzahl der Urbilder dieser Projektion. Für den Fall eines Systems mit nur einem Freiheitsgrad, für den diese Projektion in Abbildung **I**.20 verdeutlicht wird, entsprechen die Kaustiken den Umkehrpunkten.
Das auf der Regel (**I**.6.37) beruhende semiklassische Verfahren wird in Würdigung der Beiträge von Einstein, Brillouin und Keller als „EBK-Quantisierung“ bezeichnet.

Abbildung **I**.20: Bei der Projektion des invarianten 1-Torus eines Oszillators mit einem Freiheitsgrad aus dem Phasenraum in den Konfigurationsraum, hier also auf die $q$-Achse, wechselt die Zahl der Urbilder an den klassischen Umkehrpunkten. Bei integrablen Systemen mit mehreren Freiheitsgraden entstehen bei der Projektion der invarianten Tori in den Konfigurationsraum analoge Singularitäten, die als Kaustiken bezeichnet werden. Der Maslov-Index $\nu_j$ zählt die Anzahl der Kaustiken, die von einem „Quantisierungspfad" $\gamma_j$ durchlaufen werden.

Die in dieser Regel berücksichtigte „Maslov-Korrektur" ist durchaus wichtig, wie das folgende Beispiel zeigt: Im Jahre 1919 bekam der damals 19-jährige Wolfgang Pauli von Arnold Sommerfeld die Aufgabe, in seiner Doktorarbeit mit den Regeln der damals bekannten „alten" Quantenmechanik zu untersuchen, ob ein $H_2^+$-Ion existieren könne. Hinter dieser Aufgabe stand eine wichtige und spannende Frage: Konnte die damals noch mysteriöse Quantenmechanik die Stabilität der chemischen Bindung erklären? Pauli transformierte also das integrable Zweizentren-Problem auf Wirkungs- und Winkelvariable und kam zu dem Ergebnis, dass $H_2^+$ nicht stabil sein könne, da selbst das niedrigste Energieniveau, das er durch Quantisierung der Wirkungen erhielt, positiv war. — Warum? Pauli kannte natürlich die Maslov-Korrektur nicht, „quantisierte" also in genauer Analogie zum 1. Bohrschen Postulat gemäß der Vorschrift (**I**.6.37) mit $\nu_j = 0$, anstatt die korrekten Maslov-Indizes zu benutzen. Erst im Jahre 1979 wurde gezeigt, dass die Verwendung der korrekten Indizes tatsächlich auf einen Bindungszustand mit negativer Energie führt.
Einsteins Leistung bei der Verallgemeinerung des 1. Bohrschen Postulates bestand nun nicht nur in der Angabe der (zumindest im Prinzip) richtigen Quantisierungsregel, sondern vor allem auch in der Formulierung einer viel weitergehenden Frage: Einstein hatte erkannt, dass diese Art der semiklassischen Quantisierung an die Existenz der invarianten Tori im Phasenraum gebunden ist; er wußte weiterhin aus den Arbeiten von Poincaré, dass diese Tori für typische, also nichtintegrable Systeme nicht unbedingt existieren. Dann aber waren die Regeln der alten Quantentheorie offenkundig nicht mehr anwendbar — wie sollte man nun zu diskreten Energieniveaus gelangen?

Dieses Problem verschwand mit der Entdeckung der Schrödingergleichung und der sich anschließenden systematischen Formulierung der „neuen“ Quantentheorie. Die Diagonalisierung des Hamiltonoperators liefert die Energieeigenwerte eines Quantensystems ohne Rückgriff auf den Phasenraum des korrespondierenden klassischen Systems, also auch ohne dass die Frage, ob dieses Systems integrabel ist, überhaupt eine Rolle spielt. Man darf allerdings vermuten, dass sich ein quantenmechanisches System, dessen klassisches Gegenstück integrabel ist und dessen Eigenzustände im Sinne der EBK-Quantisierung aus den passenden invarianten Tori im klassischen Phasenraum gewonnen werden können, in bestimmter Weise *anders* verhalten muß als ein System, dessen klassisches Pendant vollkommen chaotisch ist. Vor diesem Hintergrund hat die Untersuchung der klassisch-quantenmechanischen Korrespondenz wieder an Bedeutung gewonnen: Was heißt *anders*? — Welche Eigenschaften eines quantenmechanischen Systems lassen sich systematisch anhand klassischer Phasenraumstrukturen verstehen? Für *vollständig* chaotische Systeme, für die im Phasenraum keine invarianten Tori mehr existieren, konnten semiklassische Quantisierungsregeln gefunden werden, die auf den klassischen periodischen Orbits aufbauen; die semiklassische Quantisierung von Systemen mit „gemischtem“ Phasenraum stellt die mathematischen Physiker jedoch immer noch vor erhebliche Probleme.

# Index