

Arne Beeker

**Klassisches Wasserstoffatom
im zirkular polarisierten
elektrischen Feld**

1995

Theoretische Physik

Klassisches Wasserstoffatom im zirkular polarisierten elektrischen Feld

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster



vorgelegt von
Arne Beeker
aus Dinslaken

— 1995 —

Dekan:	Prof. Dr. F.-K. Holtmeier
Erster Gutachter:	Prof. Dr. P. Eckelt
Zweiter Gutachter:	Prof. Dr. K. Blum
Tag der mündlichen Prüfungen:	
Tag der Promotion:	

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	3
1 Kanonische Formulierungen	6
1.1 Das raumfeste System	6
1.2 Das rotierende System	8
1.3 Das mitbewegte System	11
1.4 Das mitbewegte und rotierende System	13
1.5 Regularisierung der Coulomb-Singularität	14
1.5.1 Regularisierte Zeit	15
1.5.2 Die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation	15
2 Die gebundene Dynamik	19
2.1 Die Coulomb-Singularität	20
2.1.1 Orbits im Konfigurationsraum	21
2.1.2 Die Poincaré-Abbildung	23
2.2 Die Fixpunkte des Flusses	26
2.2.1 Die Lage der Fixpunkte	26
2.2.2 Die Stabilität der Fixpunkte	27
2.3 Die Poincaré-Abbildung	32
2.3.1 Definition der Poincaré-Abbildung	32
2.3.2 Die Trojanerbewegung	36
2.4 Das Silnikov-Phänomen	40
2.4.1 Bestimmung der Eigenräume	42
2.4.2 Der zum Sattel-Fokus homokline Orbit	43
2.4.3 Die lokale Hamilton-Funktion	44
2.4.4 Die Topologie der lokalen Schnittflächen	48
2.4.5 Die lokale Abbildung \mathcal{A}_l	51
2.4.6 Die globale Abbildung \mathcal{A}_g	52
2.4.7 Die Konstruktion des Hufeisens	55
3 Die Streuung	58
3.1 Definition der Streuabbildung	61

3.2	Numerische Bestimmung der Streuabbildung	64
3.3	Die Struktur der Streufunktionen	72
3.3.1	Die horizontale Struktur	72
3.3.2	Die vertikale Struktur	74
3.4	Die Skalierung der horizontalen Struktur	76
3.4.1	Numerische Resultate	77
3.4.2	Erklärung der algebraischen Skalierung	78
4	Skalierung und Zerfall in klassischen Streusystemen	81
4.1	Potentialasymptotik und algebraische Skalierung	82
4.2	Beispiele	87
4.2.1	Das Kicksystem	88
4.2.2	Das Δ -Modell	90
4.2.3	Zirkular bewegtes Zentralpotential	98
4.3	Algebraischer Zerfall von Stoßkomplexen	107
4.3.1	Numerische Resultate für das Kicksystem	107
4.3.2	Heuristische Erklärung des algebraischen Zerfalls	109
4.3.3	Die universelle Δt -Verteilung	110
	Schluß	118
	Literaturverzeichnis	120
	Danksagung	129
	Lebenslauf	131

Einleitung

*Into the woods,
It's time to go,
I hate to leave,
I have to, though.
Into the woods —
It's time, and so
I must begin my journey.*

STEPHEN SONDHEIM, INTO THE WOODS

Das *klassische Wasserstoffatom im zeitabhängigen elektrischen Feld* ist ein dynamisches System, das — neben seiner hervorragenden Bedeutung für die Interpretation von Ionisationsexperimenten — als beispielhaftes Modellsystem für viele Aspekte der Theorie dynamischer Systeme dient. Mitte der siebziger Jahre gaben die Experimente Bayfields und Kochs zur Multiphotonionisation hochangeregter Wasserstoffatome [BaKo74] den Anstoß zu Anstrengungen, die feldstärkenabhängige Ionisationsgrenze auf (semi-)klassischer Basis zu erklären [Cas⁺87, Jen⁺91, Jen92, MoKo92, She93]. Die Anwendung der relativ jungen klassischen Theorie nichtlinearer Systeme (Chaostheorie) erbrachte dabei Resultate, die über einen weiten Parameterbereich gut mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmen [Jen84].

Die Bewegung des Elektrons im Feld des Protons und im äußeren zeitabhängigen elektrischen Feld wird durch die Coulomb-Singularität, durch KAM-Bereiche in der Umgebung stabiler periodischer Orbits und durch das asymptotisch attraktive $1/r$ -Potential geprägt. Der Fall eines *zirkular polarisierten* elektrischen Feldes ist hier von besonderem Interesse, weil durch den Übergang in ein rotierendes Koordinatensystem die beschreibende Hamilton-Funktion ihre explizite Zeitabhängigkeit verliert. Während die Ionisation von Wasserstoffatomen heute relativ gut verstanden ist, klaffen bei der Analyse sowohl der gebundenen als auch der Streudynamik große Lücken. Diese Arbeit dient dazu, durch eine umfassende Behandlung der verschiedenen Darstellungen des Systems, der Chaosmechanis-

men bei der gebundenen Bewegung und der Eigenschaften der Streufunktionen einige dieser Lücken zu schließen.

Der Schwerpunkt meiner Untersuchungen zur *gebundenen Dynamik* des Wasserstoffatoms im zirkular polarisierten elektrischen Feld liegt bei der detaillierten Analyse des sogenannten *Silnikov-Phänomens* [Sil67, Sil70, Dev76]. Silnikov und Devaney haben gezeigt, daß ein Sattel-Fokus-Fixpunkt der Bewegungsgleichungen zusammen mit einem homoklinen Orbit die Existenz einer hyperbolischen invarianten Menge im Phasenraum impliziert, auf der die Dynamik chaotisch ist. In dieser Arbeit werden erstmals bei einem realistischem System die in Devaneys Beweisführung benötigten lokalen Schnittflächen des Flusses und ihre Bilder unter dem Hamiltonschen Fluß konstruiert, und es wird gezeigt, daß die Dynamik auf der invarianten Menge topologisch zu einer Smaleschen Hufeisenabbildung und damit zu einer Shift-Abbildung auf einem Folgenraum konjugiert ist.

Bei der Untersuchung der *Streudynamik* des Elektrons hat man die Komplikation, daß die Kraft auf das Elektron asymptotisch nicht verschwindet, da das zeitperiodische elektrische Feld als ortsunabhängig vorausgesetzt ist. Durch eine als *Beschleunigungseichung* bezeichnete kanonische Transformation behebt man dieses Problem: Im transformierten System bewegt sich das Elektron im Feld des Protons, welches auf einem geschlossenen Weg geführt wird. Dabei ist die Bahn des Protons durch das zeitabhängige elektrische Feld festgelegt; im Falle zirkularer Polarisierung bewegt es sich z.B. gleichförmig auf einer Kreisbahn.

Die Streufunktionen gleichen in ihrer charakteristischen Struktur denen anderer explizit zeitabhängiger, aber auch bestimmter zeitunabhängiger Systeme. Anders als bei hyperbolischem Streuchaos spielen hier parabolisch entweichende Streuorbits eine wichtige Rolle. Es gibt eine fraktale Menge sogenannter *parabolischer Streusingularitäten*, in deren Nähe die Streufunktionen algebraisch skalieren — im Gegensatz zur exponentiellen Skalierung in der Nähe hyperbolischer Streusingularitäten. In dieser Arbeit werden die Skalierungseigenschaften des betrachteten Systems auf die asymptotischen Eigenschaften des Potentials zurückgeführt. Darüberhinaus werden entsprechende Folgerungen für eine große Klasse von Streusystemen gezogen, die in dieser Arbeit genau charakterisiert wird. Dabei wird der Skalierungsexponent, der das Verhalten der Streufunktionen in der Nähe parabolischer Streusingularitäten beschreibt, eindeutig durch das asymptotische Verhalten des Potentials festgelegt.

Die algebraische Skalierung in der Nähe parabolischer Streusingularitäten hat zur Folge, daß auch bei vollständig entwickeltem Chaos [Ble⁺89] für Ensembles von Streutrajektorien kein exponentielles, sondern ein *algebraisches Zerfallsgesetz* beobachtet wird. Die Geschwindigkeit des Zerfalls wird durch den Zerfallsexponenten festgelegt. Es wird gezeigt, daß dieser durch den Kehrwert des Skalierungs-

exponenten der algebraischen Skalierung und folglich letztlich durch das asymptotische Verhalten des Potentials bestimmt wird. Der Beweis und numerische Tests für dieses unerwartete Phänomen bilden den Abschluß dieser Arbeit.

Im ersten Kapitel werden verschiedene kanonische Darstellungen des Wasserstoffatoms im zirkular polarisierten elektrischen Feld vorgestellt. Neben dem ursprünglichen raumfesten System werden die Hamilton-Funktionen des rotierenden Systems und des sogenannten mitbewegten Systems (für das die Wechselwirkung asymptotisch verschwindet) hergeleitet. Darüberhinaus werden zwei Regularisierungsmethoden erläutert, welche die numerischen Schwierigkeiten aufgrund der Coulomb-Singularität beseitigen.

Das zweite Kapitel ist gebundenen Bewegungen des Elektrons gewidmet, die nicht zur Ionisation des Wasserstoffatoms führen. Hier beschäftige ich mich insbesondere mit der Dynamik nahe der Singularität und dem sogenannten Trojanerpunkt, einem stabilen Gleichgewichtspunkt des rotierenden Systems. Bei höheren Feldstärken bifurkiert der Trojanerpunkt zu einem instabilen Sattel-Fokus-Punkt der Bewegungsgleichungen. Zusammen mit einem homoklinen Orbit bildet er die Voraussetzung für das Silnikov-Phänomen.

Im dritten Kapitel untersuche ich Eigenschaften der Elektron-Proton-Streuung im zirkular polarisierten elektrischen Feld. Die horizontale und die vertikale Struktur der Streufunktionen werden dargestellt und durch Eigenschaften der Streutrajektorien erklärt. Die besondere Bedeutung der parabolischen Streusingularitäten für die Struktur der Streufunktionen wird hervorgehoben und die algebraische Skalierung in ihrer Umgebung durch asymptotische Eigenschaften der Wechselwirkung erklärt.

Im vierten Kapitel werden diese Überlegungen auf eine große Klasse von Streusystemen verallgemeinert. Es werden typische Beispielsysteme vorgestellt, um die theoretisch vorausgesagten Skalierungseigenschaften zu überprüfen. Eine einfache heuristische Überlegung legt nahe, daß die algebraische Skalierung der Streufunktionen einen algebraischen Zerfall von Streuensembles zur Folge haben. Bei einem numerisch unproblematischen System wird diese Vermutung anhand großer Streuensembles durch die Analyse der Verteilung der Verzögerungszeiten erhärtet. Den Abschluß der Arbeit bildet ein detaillierter Beweis dieser Hypothese, der auf wenigen Grundeigenschaften der Streufunktionen aufbaut. Die Beweisidee führt auf ein abstraktes Fixpunktproblem, das durch die algebraisch abfallende Verteilung der Verzögerungszeiten gelöst wird.

Kapitel 1

Kanonische Formulierungen

In diesem Kapitel formuliere ich die Hamilton-Funktion und die Bewegungsgleichungen des klassischen Wasserstoffatoms im räumlich homogenen, jedoch zeitabhängigen elektrischen Feld. Für den in dieser Arbeit im Vordergrund stehenden Fall zirkularer Polarisierung werden insgesamt vier verschiedene Variablensätze verwendet, die durch kanonische Transformationen miteinander verknüpft sind. Im Verlauf der Arbeit wird es sich als vorteilhaft erweisen, verschiedene Problemstellungen im jeweils geeigneten Variablensatz zu behandeln.

Außerdem regularisiere ich durch zwei verschiedene Methoden die Coulomb-Singularität des Differentialgleichungssystems, die numerische Berechnungen der Dynamik des Elektrons nahe dem Proton wesentlich erschwert. Damit erhalte ich eine solide Basis, auf der die analytischen und numerischen Untersuchungen der folgenden Kapitel aufbauen können.

1.1 Das raumfeste System

Die Newtonsche Bewegungsgleichung des Wasserstoffatoms im zeitabhängigen elektrischen Feld lautet:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3} + F\mathbf{f}(t) . \quad (1.1)$$

Dabei bezeichnet m die reduzierte Masse des Elektron-Proton-Systems, e die Elementarladung, \mathbf{r} den Ort des Elektrons relativ zum Proton und $F\mathbf{f}(t)$ das elektrische Feld. Für den in dieser Arbeit ausführlich behandelten Fall zirkularer Polarisierung hat man z.B.

$$\mathbf{f}(t) = \mathbf{e}_x \cos \omega t + \mathbf{e}_y \sin \omega t . \quad (1.2)$$

Einstweilen sei die Funktion $\mathbf{f}(t)$ jedoch nicht spezifiziert.

Die Skalierungsoperationen, mit denen man sich einiger Systemparameter entledigen kann, sind bei Anwendung auf die Newtonsche Bewegungsgleichung am übersichtlichsten. Unter den Transformationen

$$\left(\frac{4\pi\epsilon_0 m}{e^2}\right)^{1/3} \mathbf{r} \longmapsto \mathbf{r} \quad (1.3a)$$

$$\left(\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 m^2}\right)^{1/3} F \longmapsto F \quad (1.3b)$$

ergibt sich das skalierte **raumfeste System** zu

$$\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{\mathbf{r}}{r^3} + F \mathbf{f}(t) . \quad (1.4)$$

Die Hamilton-Funktion, die dieses im folgenden mit Σ bezeichnete System beschreibt, lautet

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 - \frac{1}{r} - F \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}(t) . \quad (1.5)$$

H führt auf die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p} \quad (1.6a)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\mathbf{r}}{r^3} + F \mathbf{f}(t) . \quad (1.6b)$$

Es sei nun, wie im Spezialfall (1.2), das elektrische Feld periodisch in der Zeit, d.h. für alle t gelte

$$\mathbf{f}(t) = \mathbf{f}(t + 2\pi/\omega) . \quad (1.7)$$

Dann erweist sich, daß die Abhängigkeit der Dynamik von der Kreisfrequenz ω trivial ist. Skaliert man simultan Zeit, Ort und elektrische Feldstärke gemäß

$$\omega t \longmapsto t \quad (1.8a)$$

$$\omega^{2/3} \mathbf{r} \longmapsto \mathbf{r} \quad (1.8b)$$

$$\omega^{-4/3} F \longmapsto F , \quad (1.8c)$$

so folgt für den Impuls

$$\omega^{-1/3} \mathbf{p} \longmapsto \mathbf{p} \quad (1.9)$$

und für die Hamilton-Funktion

$$\omega^{-2/3} H \longmapsto H . \quad (1.10)$$

Diese neue Hamilton-Funktion hat die gleiche Form wie (1.5), jedoch besitzt $\mathbf{f}(t)$ nun nicht mehr die Periode $2\pi/\omega$, sondern 2π und ist somit unabhängig von ω . Für den Fall der zirkularen Polarisierung ergibt sich z.B. statt (1.2) nach dieser Transformation die Gleichung

$$\mathbf{f}(t) = \mathbf{e}_x \cos t + \mathbf{e}_y \sin t . \quad (1.11)$$

Als einziger Systemparameter verbleibt also die Stärke F des elektrischen Feldes. Im folgenden werde ich jedoch um der Anschaulichkeit willen den Parameter ω meist in den Gleichungen belassen.

1.2 Das rotierende System

In diesem Abschnitt soll die Untersuchung der gebundenen Dynamik für das *zirkular polarisierte elektrische Feld* (1.2) vorbereitet werden. Hier ist der Übergang zu einem mit dem elektrischen Feldvektor mitrotierenden Koordinatensystem sinnvoll, da die explizite Zeitabhängigkeit der Hamilton-Funktion auf diese Weise eliminiert werden kann. Die kanonische Transformation wird generiert durch die folgende Erzeugende vom F_2 -Typ [Gol85]:

$$F_a(\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{p}}, t) = \tilde{\mathbf{p}}^t R(t) \mathbf{r} \quad (1.12)$$

mit der Drehmatrix

$$R(t) = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \sin \omega t & 0 \\ -\sin \omega t & \cos \omega t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \quad (1.13)$$

Die neuen Koordinaten ergeben sich zu

$$\tilde{\mathbf{r}} = R(t) \mathbf{r} \quad (1.14a)$$

$$\tilde{\mathbf{p}} = R(t) \mathbf{p} . \quad (1.14b)$$

Die Hamilton-Funktion \tilde{H} dieses **rotierenden Systems** $\tilde{\Sigma}$ ergibt sich mit $\tilde{H} = H + \partial F_a / \partial t$ zu

$$\tilde{H}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{p}}^2 - \frac{1}{\tilde{r}} - F \tilde{x} - \omega(\tilde{x} \tilde{p}_y - \tilde{y} \tilde{p}_x) . \quad (1.15)$$

Durch den Übergang in das rotierende Koordinatensystem ist es gelungen, die explizit zeitabhängige Hamilton-Funktion H auf die *zeitunabhängige* Hamilton-Funktion \tilde{H} zu transformieren. Der Wert von \tilde{H} ist folglich ein Integral der Bewegung, und in Anlehnung an das entsprechende Integral im eingeschränkten Dreikörperproblem bezeichne ich es als *Jacobi-Integral* C [Cha27, AbMa78].

Es ist erwähnenswert, daß die Hamilton-Funktion \tilde{H} formal mit der Hamilton-Funktion des Wasserstoffatoms im gekreuzten elektromagnetischen Feld übereinstimmt, sofern man den diamagnetischen Term vernachlässigt [GrFa92, RaCh95].

Die kanonischen Bewegungsgleichungen in $\tilde{\Sigma}$ lauten

$$\dot{\tilde{x}} = \tilde{p}_x + \omega \tilde{y} \quad (1.16a)$$

$$\dot{\tilde{y}} = \tilde{p}_y - \omega \tilde{x} \quad (1.16b)$$

$$\dot{\tilde{z}} = \tilde{p}_z \quad (1.16c)$$

$$\dot{\tilde{p}}_x = -\frac{\tilde{x}}{\tilde{r}^3} + \omega \tilde{p}_y + F \quad (1.16d)$$

$$\dot{\tilde{p}}_y = -\frac{\tilde{y}}{\tilde{r}^3} - \omega \tilde{p}_x \quad (1.16e)$$

$$\dot{\tilde{p}}_z = -\frac{\tilde{z}}{\tilde{r}^3} . \quad (1.16f)$$

Im folgenden verwende ich statt der generalisierten Impulse $\tilde{\mathbf{p}}$ häufig die Geschwindigkeiten $\tilde{\mathbf{v}} = \dot{\tilde{\mathbf{r}}}$. Diese stimmen hier nicht wie im raumfesten System Σ mit den Impulsen überein (siehe (1.16a–c)). Unter Verwendung der Geschwindigkeiten lautet das Differentialgleichungssystem wie folgt:

$$\dot{\tilde{x}} = \tilde{v}_x \quad (1.17a)$$

$$\dot{\tilde{y}} = \tilde{v}_y \quad (1.17b)$$

$$\dot{\tilde{z}} = \tilde{v}_z \quad (1.17c)$$

$$\dot{\tilde{v}}_x = -\frac{\tilde{x}}{\tilde{r}^3} + \omega^2 \tilde{x} + 2\omega \tilde{v}_y + F \quad (1.17d)$$

$$\dot{\tilde{v}}_y = -\frac{\tilde{y}}{\tilde{r}^3} + \omega^2 \tilde{y} - 2\omega \tilde{v}_x \quad (1.17e)$$

$$\dot{\tilde{v}}_z = -\frac{\tilde{z}}{\tilde{r}^3} . \quad (1.17f)$$

In den Gleichungen (d) bis (f) bezeichnet der erste Summand jeweils die Coulomb-Kraft zwischen Proton und Elektron, während in den Gleichungen (d) und (e) der zweite Summand jeweils die Zentrifugalkraft und der dritte Summand die Coriolis-Kraft darstellt. Der Term F in Gleichung (d) entspricht der Kraft durch das von außen angelegte elektrische Feld.

Das Jacobi-Integral C als Funktion der Orte und Geschwindigkeiten ergibt sich dann mit (1.15) und (1.16) zu

$$C = T(\tilde{\mathbf{v}}) + U(\tilde{\mathbf{r}}) , \quad (1.18a)$$

wobei der kinetische Anteil gegeben ist durch

$$T(\tilde{\mathbf{v}}) = \frac{1}{2} \left(\tilde{v}_x^2 + \tilde{v}_y^2 + \tilde{v}_z^2 \right) , \quad (1.18b)$$

während sich der Potentialanteil (das „effective potential“ gemäß [FaUz95]) zu

$$U(\tilde{\mathbf{r}}) = -\frac{1}{2}\omega^2\tilde{r}^2 - F\tilde{x} - \frac{1}{\tilde{r}} \quad (1.18c)$$

ergibt. Durch Ableiten des „Potentials“ U kann nur die äußere Kraft $F\tilde{\mathbf{e}}_x$, die Coulomb-Kraft $-\tilde{\mathbf{r}}/\tilde{r}^3$ und die Zentrifugalkraft $\omega^2(\tilde{x}, \tilde{y}, 0)$ bestimmt werden. Die Coriolis-Kraft ist hingegen stets orthogonal zum Geschwindigkeitsvektor und leistet deshalb keine Arbeit. Sie besitzt folglich kein Potential. Trotzdem sieht man leicht, daß die kritischen Punkte des Potentials (d.h. Punkte mit $\nabla U = 0$) auch die Gleichgewichts- oder Fixpunkte des Differentialgleichungssystems (1.17) bestimmen. Für diese gilt ja automatisch $\tilde{\mathbf{v}} = 0$, und somit ist auch die Coriolis-Kraft gleich null. Gleichgewichtspunkten im rotierenden System $\tilde{\Sigma}$ entsprechen Kreisorbits im raumfesten System Σ . In Abschnitt 2.2.2 werde ich mich näher mit der Dynamik in der Nähe der Kreisorbits auseinandersetzen.

Das Jacobi-Integral läßt sich auch als Funktion der Koordinaten des raumfesten Systems Σ darstellen. Mit der Hamilton-Funktion (1.15) und den Transformationsformeln (1.14) ergibt sich

$$C = E - \omega L . \quad (1.19)$$

Dabei bezeichnet E den (zeitabhängigen) Wert der Hamilton-Funktion H (d.h. die Energie in Σ) und L die (ebenfalls zeitabhängige) z -Komponente des Drehimpulses in Σ . Energie und Drehimpuls im raumfesten System sind also durch die Konstante C gekoppelt: Wächst E an, so im gleichen Maße auch L .

Abschließend gehe ich noch auf Symmetrieeigenschaften des Systems $\tilde{\Sigma}$ ein, die in Kapitel 2 Verwendung finden werden. Es soll im folgenden die Reversibilität des durch (1.17) definierten Flusses im rotierenden System $\tilde{\Sigma}$ nachgewiesen werden. Dabei heißt nach [Mos73] ein dynamisches System

$$d\boldsymbol{\pi}/dt = \mathbf{F}(\boldsymbol{\pi}) \quad (1.20)$$

reversibel, wenn es eine lineare Abbildung \mathcal{S} gibt mit

$$\mathcal{S}^2 = \text{id} \quad (1.21a)$$

$$\mathbf{F}(\mathcal{S}\boldsymbol{\pi}) = -\mathcal{S}\mathbf{F}(\boldsymbol{\pi}) . \quad (1.21b)$$

Eine Abbildung \mathcal{S} mit den Eigenschaften (1.21) heißt (*reversible*) *Symmetrie* für das Systems (1.20). Für ein reversibles System ist mit $\boldsymbol{\pi}(t)$ auch $\mathcal{S}\boldsymbol{\pi}(-t)$ eine Lösung, denn es gilt:

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{S}\boldsymbol{\pi}(-t)) = -\mathcal{S}\dot{\boldsymbol{\pi}}(-t) = -\mathcal{S}\mathbf{F}(\boldsymbol{\pi}(-t)) = \mathbf{F}(\mathcal{S}\boldsymbol{\pi}(-t)) . \quad (1.22)$$

Es bezeichne nun speziell

$$\boldsymbol{\pi} = (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, \tilde{v}_x, \tilde{v}_y, \tilde{v}_z) \quad (1.23)$$

den Phasenraumvektor in $\tilde{\Sigma}$. Dann stellt

$$\mathcal{S}_1 : (\tilde{x}, \dots, \tilde{v}_z) \longmapsto (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, -\tilde{v}_x, -\tilde{v}_y, -\tilde{v}_z) \quad (1.24)$$

die Zeitumkehrabbildung und

$$\mathcal{S}_2 : (\tilde{x}, \dots, \tilde{v}_z) \longmapsto (\tilde{x}, -\tilde{y}, \tilde{z}, \tilde{v}_x, -\tilde{v}_y, \tilde{v}_z) \quad (1.25)$$

die Spiegelung an der xz -Ebene dar. Die Komposition von \mathcal{S}_1 und \mathcal{S}_2 ,

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_2 \mathcal{S}_1 : (\tilde{x}, \dots, \tilde{v}_z) \longmapsto (\tilde{x}, -\tilde{y}, \tilde{z}, -\tilde{v}_x, \tilde{v}_y, -\tilde{v}_z) , \quad (1.26)$$

ist eine Symmetrie des Differentialgleichungssystems (1.17), wie man durch Nachprüfen der Forderungen (1.21) leicht bestätigt. (Die Zeitumkehrabbildung \mathcal{S}_1 allein stellt keine reversible Symmetrie des Systems (1.17) dar, da die Impulse in die Hamilton-Funktion (1.15) nicht nur quadratisch eingehen.) Wir werden die hier gefundene Reversibilität des Flusses später verwenden, um eine Symmetrie der Poincaré-Abbildung herzuleiten. Die Reversibilität der Poincaré-Abbildung vereinfacht die Suche nach periodischen Orbits und homoklinen Punkten und verringert den numerischen Aufwand bei der Erstellung von Poincaré-Plots.

1.3 Das mitbewegte System

Es gibt im raumfesten System Σ sowohl gebundene als auch ungebundene Bewegung. Im Falle ungebundener Bewegung hat man in Σ asymptotisch keine geradlinig gleichförmige Bewegung, da die Wechselwirkung für große Abstände nicht verschwindet. Gleichung (1.5) zeigt, daß das Potential, in dem sich das Elektron bewegt, für große r in

$$V_{as}(r) = -F \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}(t) \quad (1.27)$$

übergeht. Die Asymptotik der Streutrajektorien in Σ ist leicht auszurechnen: Es handelt sich z.B. im Falle der zirkularen Polarisierung um Zykloiden in der xy -Ebene, überlagert von einer gleichförmigen Bewegung in z -Richtung. Wie ich im folgenden zeige, ist jedoch auch eine Formulierung möglich, in der sich das Wasserstoffatom im zeitabhängigen elektrischen Feld als „echtes“ Streusystem entpuppt, dessen Wechselwirkung asymptotisch null wird. In Anlehnung an gewisse unitäre Transformationen für das entsprechende quantenmechanische System

[Hen68] realisiere ich dieses Vorhaben durch zwei aufeinanderfolgende kanonische Transformationen. Diese sind übrigens, wie auch schon die Transformation in das rotierende Koordinatensystem, unabhängig von der speziellen Gestalt des Coulomb-Potentials und können somit für beliebige Zentralpotentiale $V(r)$ durchgeführt werden (siehe z.B. Unterabschnitt 4.2.3).

Zunächst wende ich auf die Hamilton-Funktion (1.5) des Systems Σ die kanonische Transformation an, die durch

$$F_{b1}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1, t) = \mathbf{r} \cdot (\mathbf{p}_1 - \mathbf{A}(t)) \quad (1.28)$$

erzeugt wird. Dabei bezeichnet

$$\mathbf{A}(t) = - \int^t F \mathbf{f}(t') dt' \quad (1.29)$$

das Vektorpotential, aus dem sich das äußere elektrische Feld als negative Ableitung nach der Zeit berechnet. Die Ortskoordinate verändert sich durch diese Transformation nicht: $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}$. Der neue generalisierte Impuls ergibt sich zu $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p} + \mathbf{A}(t)$. Die neue Hamilton-Funktion lautet demnach

$$H_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, t) = \frac{1}{2} (\mathbf{p}_1 - \mathbf{A}(t))^2 - \frac{1}{r_1} . \quad (1.30)$$

Diese Transformation stellt nur eine Umeichung der elektromagnetischen Potentiale dar: War in System Σ das Vektorpotential gleich null, so bestimmt das skalare Potential jetzt nur noch die Coulomb-Wechselwirkung $-1/r_1$, aber nicht mehr das äußere zeitabhängige elektrische Feld. Zuweilen sagt man hier auch, das System befinde sich in *Geschwindigkeitseichung* [Wie92b]. Erst durch die nächste Transformation erhält man ein echtes Streusystem. Die Erzeugende

$$F_{b2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}') = (\mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\rho}(t)) \cdot \mathbf{p}' - \frac{1}{2} \int^t \mathbf{A}^2(t') dt' \quad (1.31)$$

mit

$$\boldsymbol{\rho}(t) = \int^t \mathbf{A}(t') dt' \quad (1.32)$$

führt auf die neuen Variablen

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\rho}(t) = \mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}(t) \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p}_1 = \mathbf{p} + \mathbf{A}(t) . \end{aligned} \quad (1.33)$$

Die neue Hamilton-Funktion des **mitbewegten Systems** Σ' lautet:

$$H'(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t) = \frac{1}{2} \mathbf{p}'^2 - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \boldsymbol{\rho}(t)|} . \quad (1.34)$$

Man sagt hier, das System befinde sich in *Beschleunigungseichung* [Wie92b]. Man kann das durch H' beschriebene System offensichtlich interpretieren als ein Elektron, das sich im Feld eines auf dem Weg $\boldsymbol{\rho}(t)$ laufenden Protons bewegt. Für große Abstände r' vom Ursprung sieht das Teilchen lediglich die zeitunabhängige Wechselwirkung $-1/r'$.

Die kanonischen Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{\mathbf{r}}' = \mathbf{p}' \quad (1.35a)$$

$$\dot{\mathbf{p}}' = -\frac{\mathbf{r}' - \boldsymbol{\rho}(t)}{|\mathbf{r}' - \boldsymbol{\rho}(t)|^3} . \quad (1.35b)$$

Im Falle der zirkularen Polarisierung (1.2) bewegt sich das Proton in Σ' auf der Kreisbahn $\boldsymbol{\rho}(t) = F\omega^{-2}\mathbf{f}(t)$, also phasengleich mit dem elektrischen Feldvektor in Σ . Hier ist es wieder wichtig auszurechnen, wie sich das Jacobi-Integral in den gestrichenen Koordinaten darstellt. Ausgehend von (1.19) und den Transformationsformeln (1.33) erhält man nach etwas Rechnen

$$C = E' - \omega L'_z + \frac{F}{2\omega^2} . \quad (1.36)$$

Diese Beziehung wird in den Ausführungen über die Streubewegung häufig Verwendung finden.

1.4 Das mitbewegte und rotierende System

In diesem Abschnitt wird zur Abrundung der verschiedenen Darstellungen unseres Systems die Hamilton-Funktion des mitbewegten Systems Σ' in rotierenden Koordinaten dargestellt. Dazu verwende ich wieder die durch (1.12) generierte kanonische Transformation, die diesmal jedoch die Koordinaten $(\mathbf{r}', \mathbf{p}')$ in die rotierenden Koordinaten $(\tilde{\mathbf{r}}', \tilde{\mathbf{p}}')$ überführt. Die entsprechende Erzeugende heie $F_c(\mathbf{r}', \tilde{\mathbf{p}}')$. Als Hamilton-Funktion des **mitbewegten und rotierenden Systems** $\tilde{\Sigma}'$ ergibt sich

$$\tilde{H}'(\tilde{\mathbf{r}}', \tilde{\mathbf{p}}') = \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{p}}'^2 - \frac{1}{|\tilde{\mathbf{r}}' - F\omega^{-2}\tilde{\mathbf{e}}'_x|} - \omega(\tilde{x}'\tilde{p}'_y - \tilde{y}'\tilde{p}'_x) . \quad (1.37)$$

Da auch \tilde{H}' (wie \tilde{H}) nicht explizit von der Zeit abhängt, ist \tilde{H}' ein Integral der Bewegung. Sein Wert \tilde{E}' ist allerdings keine vom Jacobi-Integral unabhängige Konstante, sondern hängt auf einfache Weise mit C zusammen. Mit Hilfe von $\tilde{E}' = E' - \omega L'_z$ erhält man

$$C = \tilde{E}' + \frac{F}{2\omega^2} . \quad (1.38)$$

Ich führe keine Rechnungen in diesen Koordinaten durch. Das System $\tilde{\Sigma}'$ habe ich lediglich zur Vervollständigung des folgenden Schemas eingeführt:

$$\begin{array}{ccc}
 \Sigma & \xrightarrow{F_a} & \tilde{\Sigma} \\
 F_b \downarrow & & \downarrow F_d \\
 \Sigma' & \xrightarrow{F_c} & \tilde{\Sigma}'
 \end{array} \tag{1.39}$$

Dabei lautet die Erzeugende der noch ausstehenden Transformation zwischen $\tilde{\Sigma}$ und $\tilde{\Sigma}'$:

$$F_d(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}', t) = \left(\tilde{x} + \frac{F}{\omega^2} \right) \tilde{p}'_x + \tilde{y} \left(\tilde{p}'_y - \frac{F}{\omega} \right) + \tilde{z} \tilde{p}'_z - \frac{F}{2\omega^2} t. \tag{1.40}$$

Die Variablen in den beiden rotierenden Koordinatensystemen hängen also durch die folgenden einfachen Gleichungen zusammen:

$$\tilde{\mathbf{r}}' = \tilde{\mathbf{r}} + \frac{F}{\omega^2} \tilde{\mathbf{e}}_x \tag{1.41a}$$

$$\tilde{\mathbf{p}}' = \tilde{\mathbf{p}} + \frac{F}{\omega} \tilde{\mathbf{e}}_y. \tag{1.41b}$$

Es ist einfach, sich die inversen Transformationen zu beschaffen. Insofern kann man (1.39) mit Recht als *kommutatives Diagramm* zwischen den verschiedenen Darstellungen unseres Systems bezeichnen. Es sei nochmals darauf hingewiesen, daß ein Übergang in die rotierenden Systeme $\tilde{\Sigma}$ und $\tilde{\Sigma}'$ natürlich nur dann sinnvoll ist, wenn das äußere elektrische Feld gemäß (1.2) zirkular polarisiert ist.

1.5 Regularisierung der Coulomb-Singularität

Die Coulomb-Singularität, die in jedem der oben eingeführten Systeme auftaucht, kann für numerische Untersuchungen *regularisiert* werden. Orbits, die der Singularität nahekommen, sind beliebig hohen Kräften ausgesetzt, die jede numerische Routine zur Lösung von Differentialgleichungen „sprengen“. Ich stelle hier zwei Methoden der Regularisierung vor. Beide basieren auf der gleichen Idee: Kommt ein Orbit in die Nähe der Singularität, so verlangsamt sich der Ablauf einer „regularisierten Zeit“. Dies hat zur Folge, daß die auftretenden Beschleunigungen kleiner werden. Wählt man die Beziehung zwischen regularisierter und normaler Zeit geeignet, so kann die Singularität des Differentialgleichungssystems behoben werden.

1.5.1 Regularisierte Zeit

Da das rotierende System $\tilde{\Sigma}$ eine zeitunabhängige Hamilton-Funktion besitzt, fällt hier die Regularisierung der Coulomb-Singularität besonders leicht. Falls das Elektron in die Nähe des Protons kommt, können die Koordinaten im raumfesten oder im mitbewegten System bei numerischen Rechnungen gegebenenfalls zunächst auf die Koordinaten in $\tilde{\Sigma}$ umgerechnet werden, bevor regularisiert wird.

Zur Regularisierung des Systems $\tilde{\Sigma}$ geht man von den Differentialgleichungen (1.17) aus. Da Verwechslungen hier nicht möglich sind, werde ich in diesem Abschnitt die Tilden über den Koordinaten weglassen. Nach einem aus der Himmelsmechanik wohlbekannten Verfahren (siehe z.B. [Sch79], Seite 203) führt man die regularisierte Zeit s über die Beziehung $ds = dt/r$ ein. Es folgt:

$$\frac{d}{dt} = \frac{1}{r} \frac{d}{ds} \quad (1.42a)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} = \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{ds^2} - \frac{1}{r^3} \frac{dr}{ds} \frac{d}{ds} . \quad (1.42b)$$

Dann erhält man für die regularisierten Newtonschen Differentialgleichungen:

$$\frac{d^2 x}{ds^2} = \frac{1}{r} \frac{dr}{ds} \frac{dx}{ds} - \frac{x}{r} + \omega^2 r^2 x + 2\omega r \frac{dy}{ds} + Fr^2 \quad (1.43a)$$

$$\frac{d^2 y}{ds^2} = \frac{1}{r} \frac{dr}{ds} \frac{dy}{ds} - \frac{y}{r} + \omega^2 r^2 y - 2\omega r \frac{dx}{ds} \quad (1.43b)$$

$$\frac{d^2 z}{ds^2} = \frac{1}{r} \frac{dr}{ds} \frac{dz}{ds} - \frac{z}{r} \quad (1.43c)$$

mit

$$\frac{dr}{ds} = \frac{1}{r} \left(x \frac{dx}{ds} + y \frac{dy}{ds} \right) . \quad (1.44)$$

Wie man leicht einsieht, führen die Faktoren x/r , y/r , z/r nicht auf Singularitäten. Folglich sind diese Gleichungen Standard-Integrationsverfahren (z.B. dem hier meist verwendeten Runge-Kutta-Fehlberg-Verfahren [EnRe87]) numerisch zugänglich und liegen den meisten numerischen Untersuchungen dieser Arbeit zugrunde.

1.5.2 Die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation

In diesem Abschnitt stelle ich die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation (KS-Transformation) vor, die für Coulomb-Probleme maßgeschneidert ist. Die KS-Transformation, in Verbindung mit einer einfachen Zeittransformation wie im letzten Unterabschnitt, erlaubt es, eine Hamilton-Funktion zu konstruieren, die

rein polynomial ist. Ich beschränke mich darauf, die KS-Transformation für zwei Freiheitsgrade zu behandeln. Da ich in den meisten Rechnungen nur Trajektorien in der xy -Ebene berücksichtige, soll diese relativ einfache Variante der allgemeinen KS-Transformation hier genügen. Die Gleichungen (1.17) zeigen, daß mit Anfangsbedingungen $z(0) = 0$ und $\dot{z}(0) = 0$ eine Trajektorie für alle Zeiten in der xy -Ebene des rotierenden Systems $\tilde{\Sigma}$ (und damit auch des raumfesten Systems Σ) verbleibt. Die allgemeine KS-Transformation findet man in [StSc71], die Darstellung in diesem Abschnitt orientiert sich an den Ausführungen im Anhang von [Kap92].

Die kanonische KS-Transformation in zwei Dimensionen ist durch die Erzeugende vom F_2 -Typ

$$F_{ks}(x, y, p_u, p_v) = \frac{x}{\sqrt{r-y}} p_u + \sqrt{r-y} p_v \quad (1.45)$$

gegeben. Auch die uv -Koordinaten verstehe ich nicht mit Tilden, da sie ausschließlich im rotierenden System Verwendung finden. Man erhält die Transformationsgleichungen zu

$$x = uv \quad (1.46a)$$

$$y = \frac{1}{2}(u^2 - v^2) \quad (1.46b)$$

$$p_x = \frac{up_v + vp_u}{u^2 + v^2} \quad (1.46c)$$

$$p_y = \frac{up_u - vp_v}{u^2 + v^2} , \quad (1.46d)$$

bzw. die inverse Transformation zu

$$u = \frac{x}{\sqrt{r-y}} \quad (1.47a)$$

$$v = \sqrt{r-y} \quad (1.47b)$$

$$p_u = \sqrt{r-y} p_x + \frac{x}{\sqrt{r-y}} p_y \quad (1.47c)$$

$$p_v = \frac{x}{\sqrt{r-y}} p_x - \sqrt{r-y} p_y . \quad (1.47d)$$

Ferner erhält man aus (1.46) die Gleichung

$$u^2 + v^2 = 2r . \quad (1.48)$$

In den vorstehenden Gleichungen muß die Zweideutigkeit der Wurzel beachtet werden. Das hat zur Folge, daß es zu jedem $(x, y, p_x, p_y) \neq \mathbf{0}$ zwei Urbilder $(u^{(1)}, v^{(1)}, p_u^{(1)}, p_v^{(1)})$ und $(u^{(2)}, v^{(2)}, p_u^{(2)}, p_v^{(2)})$ gibt. Für die Interpretation von später gezeigten Orbits im uv -Raum ist es hilfreich, sich die Abbildungseigenschaften der

KS-Transformation vor Augen zu führen: In Abbildung 1.1 sind die vier Quadranten der xy -Ebene und ihre Urbilder in der uv -Ebene dargestellt. So sieht man zum Beispiel, daß eine geschlossene, einmal im Uhrzeigersinn durchlaufene Kurve im uv -Raum auf eine geschlossene Kurve im xy -Raum abgebildet wird, die zweimal gegen den Uhrzeigersinn durchlaufen wird.

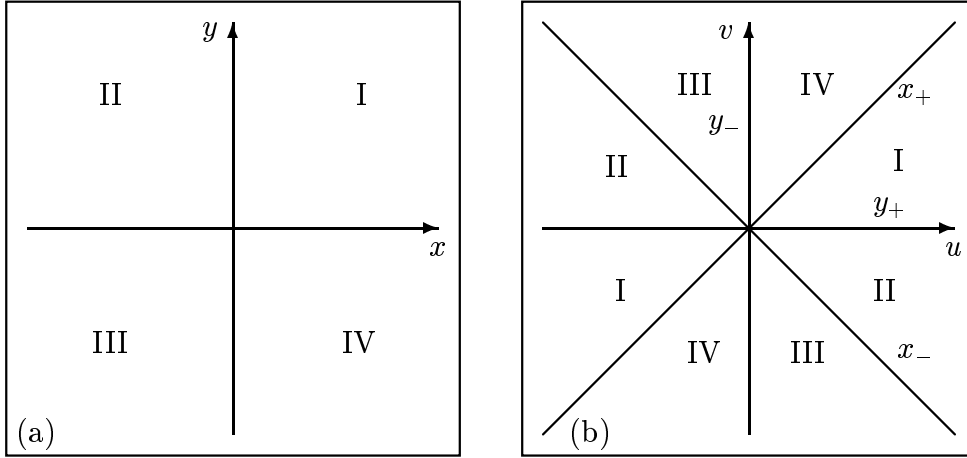


Abbildung 1.1: Abbildungsverhalten der Kustaanheimo-Stiefel-Transformation. (a) xy -Konfigurationsraum mit Bezeichnung der Quadranten. (b) Urbild unter der KS-Transformation: x_{\pm} bezeichnet das Urbild der positiven/negativen x -Achse, analog y_{\pm} .

Die Hamilton-Funktion für die zirkulare Polarisierung im rotierenden Koordinatensystem $\tilde{\Sigma}$ lautet in Abhängigkeit von den KS-Koordinaten:

$$H_{ks}(u, v, p_u, p_v) = \frac{1}{2} \frac{p_u^2 + p_v^2}{u^2 + v^2} - \frac{2}{u^2 + v^2} - Fuv - \frac{\omega}{2} (vp_u - up_v) . \quad (1.49)$$

Da die erzeugende Funktion F_{ks} nicht explizit zeitabhängig ist, ist der Wert von H_{ks} gleich dem Wert von \tilde{H} , d.h. gleich dem Jacobi-Integral C . Um die Hamilton-Funktion zu regularisieren, erweitert man nun den Phasenraum um das kanonische Paar $(t, -C)$. Man bekommt die neue Hamilton-Funktion $H'_{ks} = H_{ks} - C$, die auf jedem Orbit den Wert 0 annimmt. Die Trajektorien werden dabei durch t' parametrisiert, wobei $dt/dt' = \partial H'_{ks}/\partial(-C) = 1$ ist. Geht man zu der neuen Zeitvariablen s über mit

$$ds = \frac{dt'}{2r} , \quad (1.50)$$

so bekommt man die regularisierte Hamilton-Funktion $H''_{ks}(u, v, t, p_u, p_v, -C)$ zu

$$H''_{ks} = H'_{ks} \frac{dt'}{ds} = H'_{ks}(u^2 + v^2) . \quad (1.51)$$

Beachtet man noch, daß sich die kanonischen Gleichungen nicht ändern, wenn man eine Konstante zur Hamilton-Funktion addiert, so folgt schließlich die neue Hamilton-Funktion

$$K_{ks} = \frac{1}{2} (p_u^2 + p_v^2) - (u^2 + v^2) \left(C + Fuv - \frac{\omega}{2} (up_v - vp_u) \right) , \quad (1.52)$$

die auf jedem Orbit den Wert 2 annimmt. Die aus (1.52) gewonnenen kanonischen Differentialgleichungen lauten

$$\frac{du}{ds} = p_u - \omega r v \quad (1.53a)$$

$$\frac{dv}{ds} = p_v + \omega r u \quad (1.53b)$$

$$\frac{dp_u}{ds} = 2Cu + \left(Fv - \frac{\omega}{2} p_v \right) (3u^2 + v^2) + \omega u v p_u \quad (1.53c)$$

$$\frac{dp_v}{ds} = 2Cv + \left(Fu + \frac{\omega}{2} p_u \right) (3v^2 + u^2) + \omega u v p_v \quad (1.53d)$$

$$\frac{dt}{ds} = u^2 + v^2 . \quad (1.53e)$$

Die Hamilton-Funktion K_{ks} ist als Polynom in den generalisierten Koordinaten u, v, p_u und p_v Untersuchungen mit Mitteln der Normalformentheorie [Gus66, DrFi79, Ste91, Eng⁺95] zugänglich. Außerdem, und im Rahmen dieser Arbeit wichtiger, sind die aus K_{ks} gewonnenen kanonischen Bewegungsgleichungen als rein polynomiale Differentialgleichungen numerisch mit relativ geringem Aufwand zu integrieren.

Kapitel 2

Die gebundene Dynamik

Dieses Kapitel ist der „inneren“ Dynamik des Wasserstoffatoms im zirkular polarisierten elektrischen Feld gewidmet, d.h. Bewegungen, bei denen nicht die Ionisation oder die Streudynamik im Vordergrund stehen. Nahezu alle Rechnungen werden in den Koordinaten des rotierenden Systems $\tilde{\Sigma}$ durchgeführt (siehe Abschnitt 1.2). Bei der Diskussion von Bewegungen des Elektrons in der Nähe des Protons werde ich die hierfür angepaßten regularisierten KS-Koordinaten aus Unterabschnitt 1.5.2 verwenden.

Bei schwachen Störungen des Wasserstoffatoms, also im Falle geringer elektrischer Feldstärken F , ist es oft sinnvoll, das Problem in *Winkel-Wirkungs-Variablen* des ungestörten Coulomb-Systems zu formulieren. Dieser Weg wird in einer Vielzahl von Arbeiten besprochen, um den Übergang vom integrablen (und sogar überintegrablen) ungestörten Wasserstoffatomsystem zum schwach gestörten System möglichst einfach beschreiben zu können. Ein weiterer Vorteil ist der enge Zusammenhang zwischen den klassischen Integralen der Bewegung und den Quantenzahlen n, l, m des atomaren Wasserstoffs. Das Wasserstoffatom in einem linear polarisierten elektrischen Feld wird in diesem Sinne z.B. in [LePe79, LeRi85] (eindimensional) und in [Jen⁺91, Ric92] (mehrdimensional) behandelt, während der Fall zirkularer Polarisation in Winkel-Wirkungs-Variablen in [How92] für zwei Dimensionen untersucht wird.

Die Darstellung in Winkel-Wirkungs-Variablen eignet sich vor allem, wenn man sich für das Wasserstoffatom im *schwachen* elektromagnetischen Feld interessiert. In dieser Arbeit werden jedoch vor allem *hohe* Feldstärken betrachtet, für die die Darstellung in Winkel-Wirkungs-Variablen des ungestörten Wasserstoffatoms nur bedingt brauchbar ist. Beim Übergang zu Kontinuumszuständen ist es notwendig, den Koordinatensatz zu wechseln, da die Winkel-Wirkungs-Variablen nur für gebundene Zustände definiert sind. Ferner können zwar Differentialgleichungen in den Winkel-Wirkungs-Variablen explizit aufgestellt werden [How92], jedoch

enthalten diese viele trigonometrische Funktionen, deren Berechnung durch den Computer sehr viel Zeit benötigt. Die numerische Bestimmung von Orbits sollte also ohnehin mit den regularisierten Gleichungen (1.43) bzw. (1.53) durchgeführt werden [Kap94].

Meine Untersuchungen zur gebundenen Dynamik des Wasserstoffatoms im zirkular polarisierten elektrischen Feld sind wie folgt gegliedert: Zunächst wird die Bewegung des Elektrons in der Nähe der Coulomb-Singularität in regularisierten KS-Koordinaten untersucht. Anschließend berechne ich mit Hilfe des Potentials $U(\tilde{x}, \tilde{y})$ aus Gleichung (1.18c) Gleichgewichtspunkte des Flusses im rotierenden System $\tilde{\Sigma}$ und bestimme Phasenraumbereiche unterschiedlicher Dynamik. Die Stabilitätsanalyse der Gleichgewichtspunkte zeigt, daß es überraschenderweise für kleine Feldstärken neben der Bewegung um die Singularität auch eine stabile Bewegung um das Maximum des Potentials $U(\tilde{x}, \tilde{y})$ gibt. Da dieses Phänomen als Effekt einer dominanten Coriolis-Kraft auftritt, werde ich den entsprechenden Gleichgewichtspunkt des Differentialgleichungssystems (1.17) in Anlehnung an ein ähnliches Resultat im eingeschränkten Dreikörperproblem [Cha27, AbMa78] als *Trojanerpunkt* bezeichnen. Die Bewegung in der Nähe des Trojanerpunktes wird mit Hilfe einer Poincaré-Abbildung analysiert. Dabei stellt sich heraus, daß die Poincaré-Abbildung als Folge der Coriolis-Kraft in der Regel nicht stetig ist. Bei größeren Feldstärken wird der Trojanerpunkt instabil, und man erhält im Phasenraum einen Sattel-Fokus-Punkt. Die irreguläre Dynamik, die durch diesen Punkt — zusammen mit einem homoklinen Orbit — erzeugt wird, wird eingehend analysiert (Silnikov-Phänomen). Hier werden zum ersten Mal bei einem realistischen System explizit die beim Beweis der Chaotizität benötigten Poincaré-Flächen konstruiert und die topologische Konjugiertheit der entsprechenden Poincaré-Abbildung mit einer Shift-Abbildung auf einem Folgenraum nachgewiesen.

2.1 Die Coulomb-Singularität

Wie in Unterabschnitt 1.5.2 gezeigt wurde, kann die Coulomb-Singularität durch die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation und eine anschließende Zeitskalierung regularisiert werden. Interessiert man sich für Trajektorien, die sich hauptsächlich in der Nähe der Singularität aufhalten, so erweist es sich im Hinblick auf einen engen Zusammenhang des ungestörten Coulomb-Systems mit dem harmonischen Oszillator als sinnvoll, die Berechnung in den regularisierten KS-Koordinaten durchzuführen. Wie ich schon in Unterabschnitt 1.5.2 angekündigt habe, soll bei den folgenden Betrachtungen die Bewegung des Elektrons auf die xy -Ebene eingeschränkt sein.

2.1.1 Orbits im Konfigurationsraum

Betrachtet man Trajektorien, die nahe der Singularität verlaufen, so genügt es, bei der Hamilton-Funktion (1.52) zunächst nur Terme bis zur zweiten Ordnung zu berücksichtigen. Für negatives Jacobi-Integral C gelangt man so zur Hamilton-Funktion eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators der Frequenz $\omega_0 = \sqrt{-2C}$:

$$K_{ks} \approx \frac{1}{2} (p_u^2 + p_v^2) + \frac{1}{2} \omega_0^2 (u^2 + v^2) . \quad (2.1)$$

Führt man die KS-Transformation mit anschließender Regularisierung für das reine Coulomb-Problem (d.h. ohne äußeres Feld und im nichtrotierenden Koordinatensystem) durch, so gelangt man exakt auf diese Hamilton-Funktion. C steht dann wegen $\omega = 0$ nicht nur für das Jacobi-Integral, sondern auch für die Energie des Coulomb-Systems. *In diesem Sinne sind das Coulomb- bzw. Kepler-System und der harmonische Oszillator äquivalent.* Die Kepler-Frequenz $\omega_K = \sqrt{-2C}^3 = \omega_0^3$ unterscheidet sich von der Frequenz der harmonischen Oszillatoren, da die Zeit gemäß $ds = dt/2r$ transformiert wurde. Da im Grenzfall hoher Bindungsenergien die Coulomb-Kraft die anderen Kräfte (Coriolis-, Zentrifugal- und äußere Kraft) dominiert, ist klar, daß dann K_{ks} in die reine Coulomb-Hamilton-Funktion (2.1) übergeht.

In Abbildung 2.1 sind vier Orbits im uv -Konfigurationsraum aufgetragen, die numerisch mit Hilfe der Differentialgleichungen (1.53) bestimmt wurden. Bild (a) zeigt einen Orbit, der bei geringer Störung ($F = 0.01$) und hoher Bindungsenergie ($C = -10$) nahe der Coulomb-Singularität verläuft (maximaler Abstand ca. $r = 0.1$). Man erkennt eine wenig deformierte Ellipse, die im wesentlichen eine Lösung des harmonischen Oszillators darstellt und deren Halbachsen langsam präzedieren. Diese Präzession ist eine Folge der Rotation des Koordinatensystems. Man muß sich allerdings vergegenwärtigen, daß die Rotationsgeschwindigkeit des uv -Systems wegen der Zeittransformation $ds = dt/2r$ eine streng monoton wachsende Funktion des Nullpunktabstands ist. Wie man leicht zeigen kann, ist die Coriolis-Kraft in den KS-Koordinaten u und v stets gegen den Uhrzeigersinn gerichtet — im Gegensatz zur Coriolis-Kraft in den Koordinaten x und y , die im Uhrzeigersinn wirkt.

Erhöht man sukzessive, wie in den Bildern (b) und (c), das Jacobi-Integral C und damit den mittleren Abstand von der Singularität, so verstärkt sich die Präzessionsbewegung. Man erkennt allerdings noch keinen sichtbaren Einfluß der äußeren elektrischen Kraft: Stellt man Orbits des reinen Coulomb-Problems im rotierenden Koordinatensystem und KS-Koordinaten dar, so kommt man zu ganz ähnlichen Resultaten. Erst bei größerem F hat die Präsenz des äußeren elektrischen Feldes signifikante Auswirkungen. Bild (d) zeigt für $F = 1$ einen Orbit, der durch

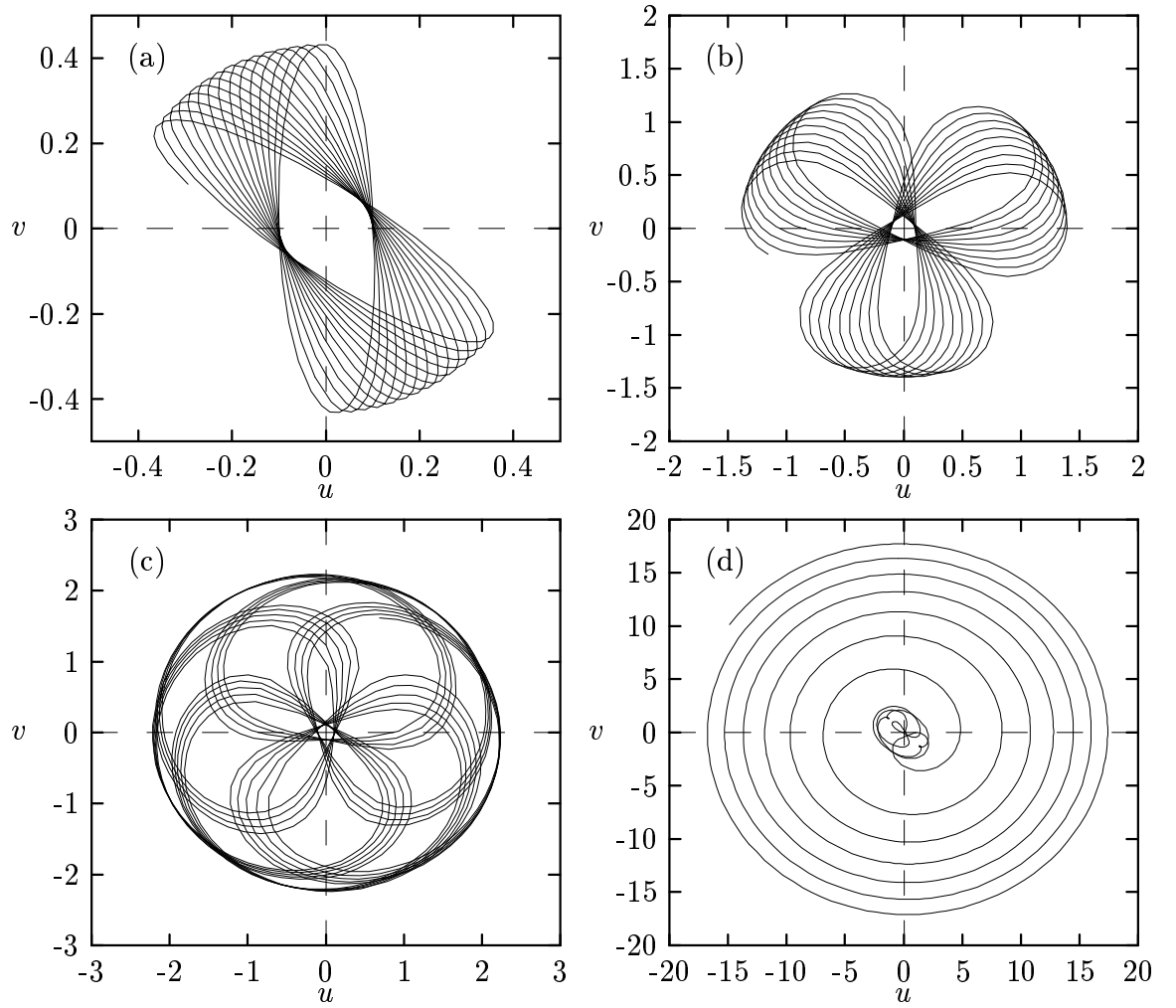


Abbildung 2.1: Trajektorien in der Nähe der Coulomb-Singularität in KS-Koordinaten u und v . Parameter- und Anfangswerte:

- (a) $F = 0.01$, $C = -10$, $u = 0.1$, $v = 0$, $p_u = 0$;
- (b) $F = 0.01$, $C = -0.92$, $u = 0.1$, $v = 0$, $p_u = 0$;
- (c) $F = 0.01$, $C = -0.3$, $u = 0.1$, $v = 0$, $p_u = 0$;
- (d) $F = 1$, $C = -0.3$, $u = 0.1$, $v = 0$, $p_u = 0.5$.

das äußere Feld sogar ionisiert wird.

Geht man zu positivem Jacobi-Integral C über, so sieht man an Gleichung (2.1), daß die um den Ursprung linearisierte Bewegung nun instabil ist. Bei $C = 0$ liegt also eine *Bifurkation* vor, bei der der Gleichgewichtspunkt $(u, v, du/ds, dv/ds) = (0, 0, 0, 0)$ von stabilem Verhalten (Eigenwerte der Jacobi-Matrix $\pm i\omega$ jeweils zweifach entartet) zu instabilem Verhalten (Eigenwerte $\pm\rho$ jeweils zweifach entartet) übergeht. Es hat allerdings wenig Sinn, weitere Eigenschaften aus dem um den Ursprung des Phasenraumes linearisierten System abzuleiten, da man wegen der auf die Hyperfläche $K_{ks} = 2$ eingeschränkten Dynamik nicht beliebig nahe an $(u, v, du/ds, dv/ds) = \mathbf{0}$ herankommt.

2.1.2 Die Poincaré-Abbildung

Einen Überblick über die Dynamik eines Hamilton-Systems zweier Freiheitsgrade erhält man, wenn man eine *Poincaré-Abbildung* einführt. Für festen Systemparameter F und festes Jacobi-Integral C sind die Trajektorien auf die dreidimensionale „Energie“-Mannigfaltigkeit im Phasenraum des System $\tilde{\Sigma}$ eingeschränkt, die durch $\tilde{H} = C$ bzw. $K_{ks} = 2$ gegeben ist. Poincarés Idee war, daß es für ein qualitatives Verständnis der Dynamik genügt, die Schnittpunkte von Trajektorien mit einer zum Fluß transversalen Hyperfläche, der später nach ihm bezeichneten *Poincaré-Fläche* zu betrachten. Die *Poincaré-Abbildung* bildet sukzessive jeden solchen Schnittpunkt auf den ihm folgenden Schnittpunkt ab. Da der Schnitt zwischen der dreidimensionalen Energiehyperfläche mit der dreidimensionalen Poincaré-Fläche (bei Beachtung der Transversalitätsbedingung) eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit ist, reichen bei Festlegung der Energie zwei Koordinatenangaben zur eindeutigen Beschreibung eines Punktes in der Poincaré-Fläche. Die Ebene, die durch die Wahl dieser beiden Koordinaten festgelegt wird, heiße im folgenden *Poincaré-Ebene*.

Zur Untersuchung der Dynamik in der Nähe der Coulomb-Singularität habe ich im $(u, v, du/ds, dv/ds)$ -Raum die Poincaré-Fläche ausgewählt, die durch $v = 0$ und $dv/ds > 0$ charakterisiert ist. Zur Parametrisierung der Poincaré-Fläche eignen sich dann bei festen Werten F und C die Koordinaten u und du/ds . Die Geschwindigkeit dv/ds wird nach Wahl einer Anfangsbedingung $(u, du/ds)$ in der Poincaré-Ebene mit Hilfe der Energiegleichung $K_{ks} = 2$ bestimmt.

In Abbildung 2.2 wurden zwanzig Anfangsbedingungen für die Parameterkombination $F = 0.01$, $C = -10$ je 1000mal unter der Poincaré-Abbildung iteriert (*Poincaré-Plot*). Dabei ergeben sich in der Poincaré-Ebene augenscheinlich ausschließlich invariante Linien. Es sind keine Bereiche irregulärer Dynamik erkennbar. Aufgrund dieser Eigenschaft könnte man schließen, daß neben dem Wert

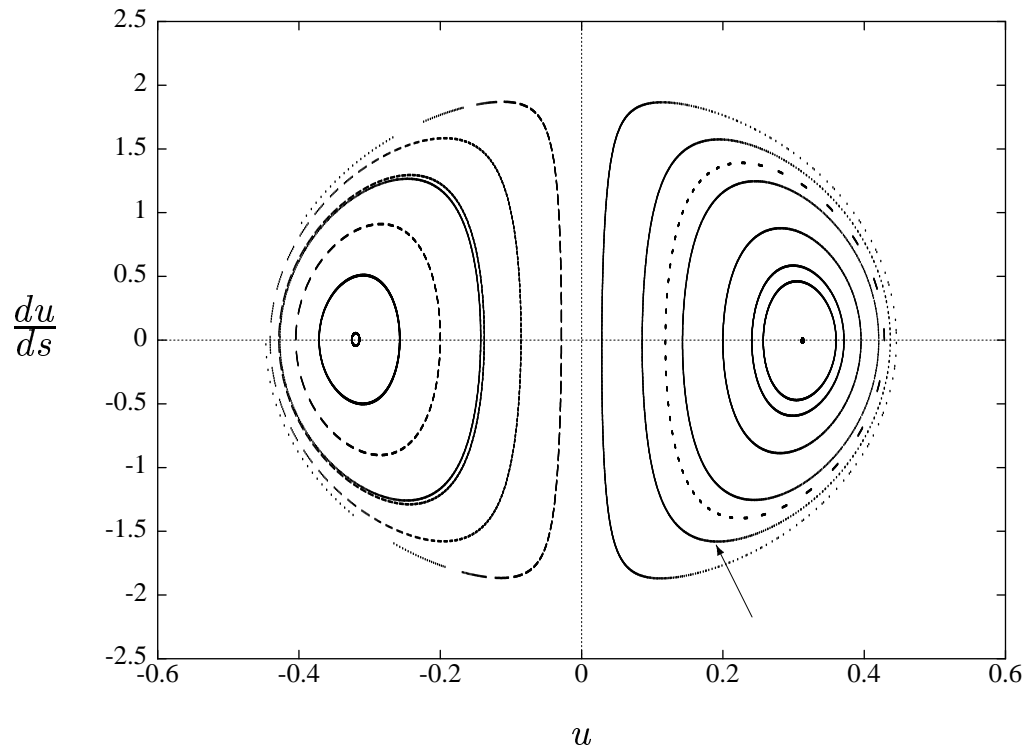


Abbildung 2.2: *Poincaré-Plot in KS-Koordinaten für $F = 0.01$, $C = -10$.*

der Hamilton-Funktion K_{ks} noch ein zweites Integral der Bewegung existiert. Vergleicht man dieses Bild mit einem Poincaré-Plot für $F = 0$, d.h. das reine Coulomb-Problem, so wird man kaum einen Unterschied erkennen. Die Störung durch das äußere elektrische Feld ist also so klein, daß der Wert E der Hamilton-Funktion H des raumfesten Systems Σ in guter Näherung erhalten ist und die invarianten Linien Niveaulinien von E in der Poincaré-Ebene entsprechen. Man nennt eine Funktion der Phasenraumkoordinaten, die unter langsamer Parametervariation annähernd erhalten bleibt, eine *adiabatische Invariante* des Systems ([Sag⁺88], S. 82).

Der Bahn aus Abbildung 2.1 (a) entspricht hier der markierte Orbit im positiven u -Bereich. Der bei $u = 0.1$, $du/ds = 0$ gestartete Orbit beschreibt im Konfigurationsraum eine Ellipse, deren Hauptachsen sehr langsam präzedieren. Ein Bildpunkt der Poincaré-Abbildung liegt also stets sehr nahe bei seinem Urbild. Die invariante Linie wird Punkt für Punkt mit kleiner Schrittweite ausgefüllt. Den beiden Fixpunkten der Poincaré-Abbildung entsprechen einfach geschlossene Orbits im raumfesten System Σ . Bei der hier vorliegenden hohen Bindungsenergie zwischen Proton und Elektron ist außerdem die Coriolis-Kraft im Vergleich zur Coulomb-Kraft vernachlässigbar klein. Dies hat zur Folge, daß der Poincaré-Plot bezüglich der du/ds -Achse nahezu symmetrisch ist.

Die Existenz einer adiabatischen Invarianten ist eine Eigenschaft, die das Coulomb-Problem im zirkular polarisierten elektrischen Feld entscheidend vom viel untersuchten linear polarisierten Fall unterscheidet. Bei linearer Polarisation des elektrischen Feldes hat man schon bei kleinen Feldstärken starke Chaotizität der klassischen Phasenraumstruktur [LeRi85]. Die relativ stabile Regularität bei zirkularer Polarisation wurde mit der Möglichkeit in Zusammenhang gebracht, durch Übergang zu rotierenden Koordinaten ein zeitunabhängiges System zu erhalten [Fu⁺90, Win91]. Dieser Argumentation wurde allerdings in [Nau90a] widersprochen.

Erhöht man den Wert des Jacobi-Integrals C wie in Abbildung 2.3 auf $C = -0.3$, so fallen zwei Unterschiede zum letzten Bild auf. Zum einen ist die Symmetrie

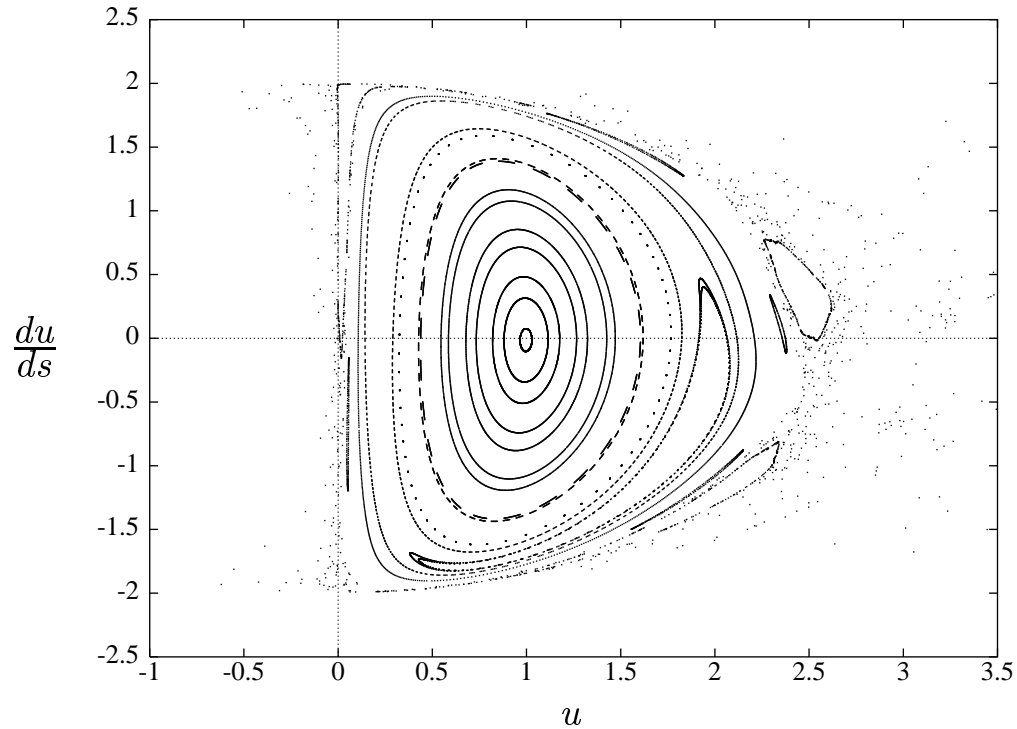


Abbildung 2.3: Wie Abbildung 2.2, jedoch $C = -0.3$.

bezüglich der senkrechten Achse verlorengegangen: Gebundene Bewegung gibt es nur noch für $u > 0$, während Anfangsbedingungen in der Poincaré-Ebene mit $u < 0$ zu ungebundener Bewegung (Ionisation des Elektrons) führen. Orbits, die die Poincaré-Ebene mit $u < 0$ schneiden, laufen (im uv -Raum) im Uhrzeigersinn um die Singularität herum. Die Destabilisierung gerade dieser Orbits läßt sich darauf zurückführen, daß die nun mit der Coulomb-Kraft vergleichbare Coriolis-Kraft (im uv -Raum) stets gegen den Uhrzeigersinn, also gegen ihre Laufrichtung wirkt.

Zum anderen gibt es in diesem Poincaré-Plot nun auch Inselketten gemäß dem Poincaré-Birkhoff-Theorem [LiLi92] und Gebiete irregulärer Bewegung. Ihre Existenz weist darauf hin, daß E keine adiabatische Erhaltungsgröße mehr darstellt, da für den hier vorliegenden höheren Wert des Jacobi-Integrals das äußere elektrische Feld eine relativ starke Störung des reinen Coulomb-Problems darstellt.

Der in Abbildung 2.1 (c) dargestellte quasiperiodische Orbit gehört zu einem der erhaltenen KAM-Tori in Abbildung 2.3, die sich um den Fixpunkt der Poincaré-Abbildung scharen.

2.2 Die Fixpunkte des Flusses

Außer durch die Coulomb-Singularität wird der Phasenraum des rotierenden Systems $\tilde{\Sigma}$ wesentlich durch die Gleichgewichts- oder Fixpunkte $(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{v}})$ des Differentialgleichungssystems (1.17) strukturiert. Einem solchen Fixpunkt entspricht im raumfesten System Σ eine Kreisbahn des Elektrons um das Proton. In diesem Abschnitt werden Positionen und Stabilitätseigenschaften der Fixpunkte bestimmt.

Da in dem verbleibenden Teil dieses Kapitels ausschließlich im rotierenden System $\tilde{\Sigma}$ gerechnet wird, lasse ich die Tilden zur Kennzeichnung der rotierenden Koordinaten im folgenden wieder weg.

2.2.1 Die Lage der Fixpunkte

Da die Coriolis-Kraft für Gleichgewichtspunkte verschwindet und die anderen Kräfte durch Gradientenbildung aus dem in (1.18c) eingeführten Potential

$$U(x, y, z) = -\frac{1}{2}\omega^2 r^2 - Fx - \frac{1}{r} \quad (2.2)$$

hervorgehen, erhält man die Gleichgewichtspunkte aus den Bedingungen $\mathbf{v} = 0$ und $\nabla U(\mathbf{r}) = 0$ (siehe Seite 10). Es folgt sofort $y = z = 0$, während man für die x -Koordinate die kubische Gleichung

$$\omega^2 x^3 + Fx^2 \mp 1 = 0 \quad (2.3)$$

zu lösen hat. Dabei gilt das obere Vorzeichen für $x > 0$ und das untere Vorzeichen für $x < 0$. In Abbildung 2.4 sind die Niveaulinien des Potentials U für $F = 1$ in der xy -Ebene skizziert. Auch hier gilt wieder, daß ein Teilchen in der xy -Ebene verbleibt, falls es mit Anfangsbedingungen $z = 0$ und $v_z = 0$ gestartet wird. Man kann sich die Bewegung des Teilchens im rotierenden Koordinatensystem vorstellen als Bewegung im Potential $U(x, y)$ unter zusätzlicher Berücksichtigung

der Coriolis-Kraft, die das Teilchen bezüglich seiner momentanen Bewegungsrichtung stets nach rechts ablenkt.

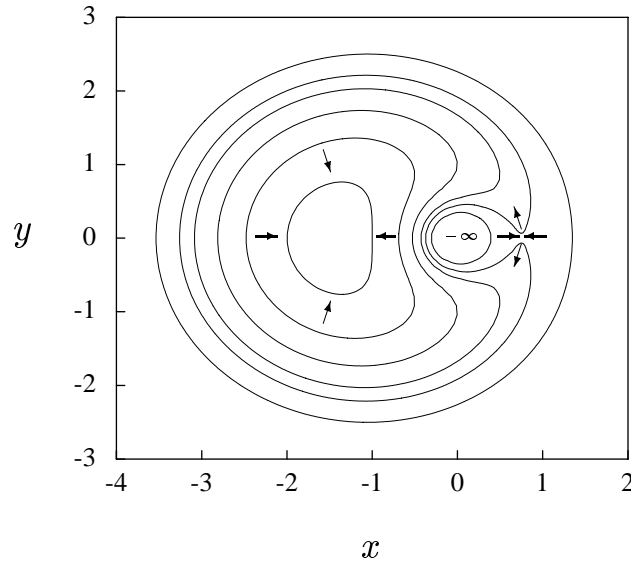


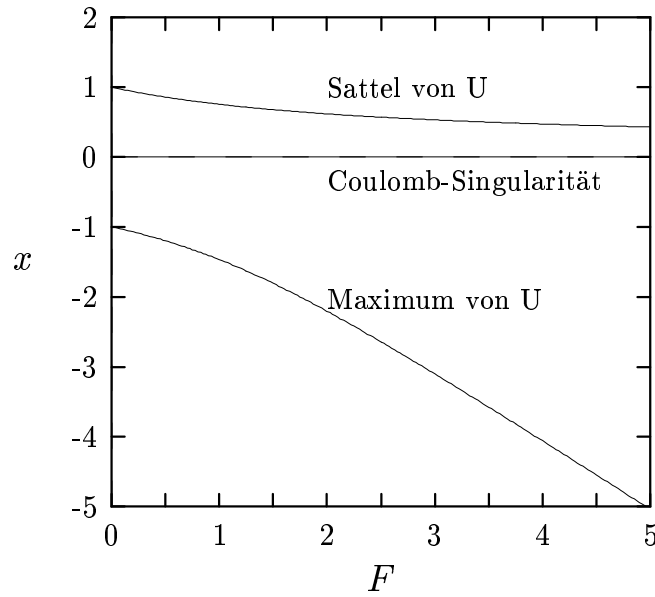
Abbildung 2.4: Das Potential $U(x, y)$ im rotierenden System für $F = 1$. Die Pfeile symbolisieren Gradienten von U .

Für alle positiven Werte von F ergibt sich für $U(x, y)$ die folgende Struktur: Bei $(x, y) = (0, 0)$ liegt die Coulomb-Singularität mit $U \rightarrow -\infty$. Desweiteren gibt es zwei kritische Punkte von U , die durch (2.3) gegeben sind. Einer liegt auf der x -Achse rechts von der Singularität (d.h. $x > 0, y = 0$) und stellt einen Sattelpunkt von U dar. Der andere, ein Maximum von U , liegt auf der x -Achse links von der Singularität (d.h. $x < 0, y = 0$). Da es keine weiteren kritischen Punkte gibt und für große Entfernungen r vom Nullpunkt die repulsive Zentrifugal-Wechselwirkung dominiert ($U \rightarrow -\infty$ für $r \rightarrow \infty$), liegt hier sogar das absolute Maximum von U .

Die Positionen $x(F)$ der kritischen Punkte auf der x -Achse des rotierenden Systems sind in Abbildung 2.5 dargestellt. Im Grenzfall $F \rightarrow 0$ befindet sich das Maximum bei $x = -1$ und der Sattel bei $x = 1$. Im Grenzfall großer F hat man für den Sattel $x \approx 1/\sqrt{F}$, während für das Maximum $x \approx -F$ gilt.

2.2.2 Die Stabilität der Fixpunkte

Würde sich die gesamte Kraft durch Gradientenbildung aus U herleiten, so wäre klar, von welchen Stabilitätstypen die durch die kritischen Punkte von U gege-



Abbildungung 2.5: Die Lage der Gleichgewichtspunkte im rotierenden System in Abhängigkeit von F .

benen Gleichgewichts- oder Fixpunkte $(x, y, v_x, v_y) = (x(F), 0, 0, 0)$ wären: Beim Maximum von U läge ein (hyperbolischer) Sattel des Flusses mit reellen Eigenwerten $\rho_1, -\rho_1, \rho_2$ und $-\rho_2$. Dabei gehören die negativen Eigenwerte zu Orbits, die asymptotisch auf das Maximum herauflaufen, während die positiven Eigenwerte zu vom Maximum hinablaufenden Orbits gehören. Beim Sattelpunkt von U läge hingegen ein Fixpunkt des Flusses, der durch zwei reelle Eigenwerte ρ und $-\rho$ und zwei imaginäre Eigenwerte $i\nu$ und $-i\nu$ ausgezeichnet ist. Die reellen Eigenwerte gehören zur x -Richtung, in der U ein Maximum annimmt, die imaginären Eigenwerte gehören zur y -Richtung, in der U ein Minimum hat. Da im rotierenden Koordinatensystem jedoch die Coriolis-Kraft zu berücksichtigen ist, wird im folgenden die Stabilität der Fixpunkte genauer zu untersuchen sein.

Sei also für festes F ein Gleichgewichtspunkt gegeben, der durch seinen x -Wert $x^* = x^*(F)$ gemäß Gleichung (2.3) eindeutig gegeben ist. Bezeichnet man einen Phasenraumvektor durch $\boldsymbol{\pi} = (x, y, v_x, v_y)^t$ und den Gleichgewichtspunkt durch $\boldsymbol{\pi}^* = (x^*, 0, 0, 0)^t$, so erhält man aus (1.17) das um $\boldsymbol{\pi}^*$ linearisierte Differentialgleichungssystem (siehe auch [AbMa78], Seite 683) als

$$\frac{d}{dt}(\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\pi}^*) = L(\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\pi}^*), \quad (2.4)$$

wobei die Jacobi-Matrix gegeben ist durch

$$L = J \text{ Hess } \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}^*)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \omega^2 + 2|x^*|^{-3} & 0 & 0 & 2\omega \\ 0 & \omega^2 - |x^*|^{-3} & -2\omega & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Dabei bezeichnet J die symplektische Matrix

$$J = \begin{pmatrix} 0_2 & \text{id}_2 \\ -\text{id}_2 & 0_2 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Berechnet man die Eigenwerte λ von L als Nullstellen des charakteristischen Polynoms und setzt man $\omega = 1$ (siehe Abschnitt 1.1), so gelangt man zu

$$\lambda = \pm\sqrt{p \pm \sqrt{q}} \quad (2.7)$$

mit

$$p = \frac{|x^*|^{-3} - 2}{2} \quad (2.8a)$$

$$q = |x^*|^{-3} \left(\frac{9}{4}|x^*|^{-3} - 2 \right). \quad (2.8b)$$

Den vier unterschiedlichen Lösungstypen dieser Gleichung entsprechen vier verschiedene Stabilitätstypen des Gleichgewichtspunktes:

q	$p + \sqrt{q}$	$p - \sqrt{q}$	$\lambda_1, \dots, \lambda_4$	Bezeichnung	Beispiel
> 0	> 0	> 0	$\pm\rho_1, \pm\rho_2$	Sattel	Potentialmaximum
> 0	> 0	< 0	$\pm\rho, \pm i\nu$	Sattel-Zentrum	Potentialsattel
> 0	< 0	< 0	$\pm i\nu_1, \pm i\nu_2$	Zentrum	Potentialminimum
< 0			$\pm\rho \pm i\nu$	Sattel-Fokus	Sattel mit Rotation

In der letzten Spalte der Tabelle findet man zu jedem Stabilitätstyp ein Beispiel. Dabei genügt für die ersten drei Typen eine Hamilton-Funktion, die additiv aus einem kinetischen und einem Potentialanteil zusammengesetzt ist. Ein Sattel-Fokus kann unter diesen Umständen jedoch nicht auftreten. Hier ist zusätzlich noch ein Rotationsanteil notwendig, der sich z.B. aus der Drehung des Koordinatensystems ergibt. Sattel und Sattel-Fokus sind hyperbolische Fixpunkte, d.h. sie besitzen keine Eigenwerte λ mit $\text{Re } \lambda = 0$.

In Abbildung 2.6 sind die Eigenwerte der beiden Gleichgewichtspunkte des Flusses in Abhängigkeit von F aufgetragen. Die Bilder (a) und (b) zeigen die Eigenwerte beim Maximum des Potentials U . Das Resultat ist zunächst überraschend: Man hat für kleine F vier imaginäre Eigenwerte $\pm i\nu_1$ und $\pm i\nu_2$. Das bedeutet, daß beim Potentialmaximum ein Zentrum des Flusses liegt und somit in seiner Umgebung

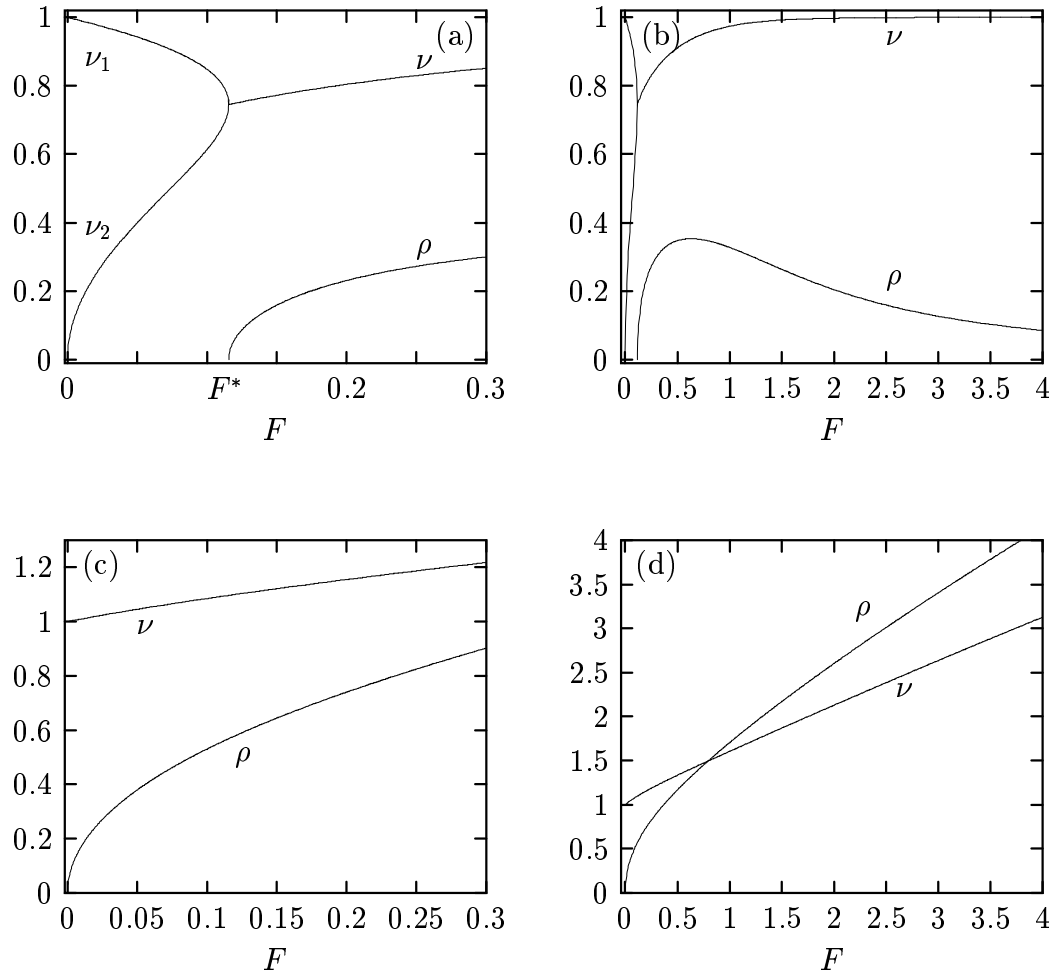


Abbildung 2.6: *Eigenwerte der Gleichgewichtspunkte im rotierenden System $\tilde{\Sigma}$.*

(a) und (b): *Eigenwerte beim Maximum von U mit unterschiedlicher Skalierung der F -Achse.*

(c) und (d): *Eigenwerte beim Sattel von U mit unterschiedlicher Skalierung der F -Achse.*

Die Bedeutung der Bezeichnungen entnehme man dem Text.

die Dynamik linear stabil ist. Dieses zunächst der Anschauung widersprechende Ergebnis wird einsichtig, wenn man sich die Wirkung der Coriolis-Kraft vor Augen führt. Bei kleiner Störung durch das äußere elektrische Feld zwingt die Coriolis-Kraft Teilchen in der Nähe des Maximums auf Orbits, die den Gleichgewichtspunkt im Uhrzeigersinn umrunden.

Man kennt ein ähnliches Phänomen aus der Astronomie: Im *eingeschränkten Dreikörperproblem* [Cha27, MeHa92, Hor89] bewegt sich ein Testkörper im Feld zweier sich umkreisender Himmelskörper der Massen μ und $1 - \mu$. Im mitrotierenden Koordinatensystem hat man, wie im vorliegenden Problem, für den Testkörper ein Potential U , das Gravitations- und Zentrifugalkraft beschreibt. Es gibt fünf Gleichgewichtspunkte, die sogenannten *Lagrange-Punkte*, von denen drei auf der Achse zwischen den Himmelskörpern liegen und zu Sätteln von U korrespondieren, während die anderen beiden Maxima von U entsprechen. Liegt das Massenverhältnis μ im Bereich $0 < \mu < \mu^*$ wobei $\mu^* = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{69}/9)$ die *Routhsche kritische Masse* bezeichnet [MeHa92], so wird die Dynamik nahe den Maxima durch die Coriolis-Kraft stabilisiert. Das bekannteste Beispiel ist das System Sonne–Jupiter. Lagrange selbst rechnete nicht damit, daß die Existenz der Gleichgewichtspunkte reale himmelsmechanische Folgen haben könnte. In unserem Jahrhundert hat man jedoch in der Umgebung der Maxima von U zwei Gruppen von jeweils etwa fünfzehn Asteroiden gefunden, die sogenannten *Trojaner* und *Griechen*, die sich im KAM-Bereich der stabilen Gleichgewichtspunkte bewegen. Die Bewegung um die Maxima wird instabil, wenn μ die Routhsche kritische Masse μ^* überschreitet (wie im viel diskutierten sogenannten *Kopenhagener Problem*, für das die beiden schweren Körper gleiche Massen besitzen).

In Unterabschnitt 2.3.2 werden ein Orbit im Konfigurationsraum und Poincaré-Plots gezeigt, um die Bewegung von Trojanern im hier zu untersuchenden Problem, dem Wasserstoff im zirkular polarisierten elektrischen Feld, zu veranschaulichen. Man findet das stabile Verhalten, wie im astronomischen Analogon, nur für kleine Werte des Störparameters. In Bild 2.6 (a) erkennt man, daß bei einer kritischen Feldstärke von $F^* \approx 0.12$ das Zentrum mit vier imaginären Eigenwerten in einen Sattel-Fokus mit vier komplexen Eigenwerten der Form $\pm\rho \pm i\nu$ übergeht: Mit wachsendem F bewegen sich die Eigenwerte $i\nu_1$ und $i\nu_2$ aufeinander zu und verschmelzen bei $F = F^*$ schließlich im Imaginärteil der Eigenwerte $\pm\rho + i\nu$ des Sattel-Fokus. Gleichzeitig verlassen die Eigenwerte die imaginäre Achse. Entsprechendes gilt für die Eigenwerte in der unteren Halbebene.

Die Realteile $\pm\rho$ der Eigenwerte des Sattel-Fokus drücken die Instabilität des hyperbolischen Gleichgewichtspunktes aus, während die Imaginärteile $\pm\nu$ für die Stärke der Rotation um den Gleichgewichtspunkt stehen. In Abschnitt 2.4 werden diese Aussagen im Zusammenhang mit dem Silnikov-Phänomen präzisiert.

Man kann den Bifurkationspunkt F^* , bei dem das Zentrum in den Sattel-Fokus

übergeht, exakt bestimmen. Dazu genügt es, dasjenige F zu bestimmen, für welches der Radikand q in Gleichung (2.7) null wird. Für die Lage des Gleichgewichtspunktes im Bifurkationspunkt gilt

$$x^*(F^*) = -\frac{\sqrt[3]{9}}{2} = -1.04004 \dots, \quad (2.9)$$

und für den Bifurkationsparameter folgt aus Gleichung (2.3):

$$F^* = \frac{1}{6\sqrt[3]{3}} = 0.11556 \dots \quad (2.10)$$

Die Bilder 2.6 (c) und (d) zeigen die F -Abhängigkeit der Eigenwerte $\pm\rho$ und $\pm i\nu$ des Sattel-Zentrum-Gleichgewichtspunktes, der beim Sattel von U liegt. Dieser für alle F nichthyperbolische Punkt wird umso instabiler, je größer F gewählt ist. Weder liegt eine linear stabile Bewegung vor, noch ist es möglich, über einen transversalen Schnitt invarianter Mannigfaltigkeiten die Existenz einer chaotischen Menge nachzuweisen. Der U -Sattel ist für die Dynamik des Systems also wenig interessant und wird im folgenden nicht weiter untersucht.

2.3 Die Poincaré-Abbildung

Ich führe nun im rotierenden System $\tilde{\Sigma}$ eine weitere Poincaré-Abbildung ein, mit deren Hilfe die Phasenraumstrukturen der gebundenen Bewegung untersucht werden. Die Poincaré-Fläche wird hier nicht wie in Abschnitt 2.1 in den KS-Koordinaten definiert, sondern in den Koordinaten $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{v}_x, \tilde{v}_y$ (deren Tilden im folgenden wieder weggelassen werden). Der Definitionsbereich der Poincaré-Abbildung wird bestimmt und ihre Reversibilität nachgewiesen. Anschließend werden Poincaré-Plots der gesamten gebundenen Dynamik und speziell der Trojanerbewegung diskutiert. Anhand der Trojanerbewegung wird klar, daß der Fluß nicht immer transversal zu der gewählten Poincaré-Fläche ist. Eine Konsequenz ist, daß die Poincaré-Abbildung nicht überall stetig ist.

2.3.1 Definition der Poincaré-Abbildung

Für einen festen Wert C des Jacobi-Integrals wähle ich zur Definition der Poincaré-Abbildung \mathcal{P} eine Poincaré-Fläche Π . Es erweist sich als sinnvoll, diese Wahl so zu treffen, daß die Gleichgewichtspunkte des Flusses in der Poincaré-Fläche liegen. Man legt Π also z.B. durch die Bedingungen $y = 0$ und $v_y > 0$ fest.

Als parametrisierende Koordinaten des Schnittes zwischen Π und der Energiemannigfaltigkeit $\tilde{H} = C$ bieten sich x und v_x an. Aus den Gleichungen (1.18)

kann bei Vorgabe von C , x , y und v_x (und unter Beachtung von $z = 0$ und $v_z = 0$) die Geschwindigkeit v_y berechnet werden:

$$v_y^2 = -v_x^2 + \omega^2 r^2 + 2 \left(C + Fx + \frac{1}{r} \right) . \quad (2.11)$$

Der *dynamisch erlaubte Bereich*, d.h. der Definitionsbereich von \mathcal{P} in der Poincaré-Ebene ergibt sich sofort aus Gleichung (2.11), denn es sind nur solche Punkte (x, v_x) in der Poincaré-Ebene erlaubt, für die v_y reell ist. Die Grenze zwischen erlaubtem und verbotenem Bereich in der Poincaré-Ebene ist folglich durch die Gleichung

$$v_x^2 = \omega^2 x^2 + 2 \left(C + Fx + \frac{1}{|x|} \right) \quad (2.12)$$

bestimmt.

Die Poincaré-Abbildung \mathcal{P} ist reversibel. Dabei heißt nach [Gre⁺81, McK93] eine Abbildung \mathcal{P} der Ebene *reversibel*, wenn es eine differenzierbare Abbildung \mathcal{R} der Ebene gibt mit

$$\mathcal{R}^2 = id \quad (2.13a)$$

$$\det(D\mathcal{R}) < 0 \quad (2.13b)$$

$$\mathcal{P}\mathcal{R}\mathcal{P} = \mathcal{R} . \quad (2.13c)$$

Eine Abbildung \mathcal{R} mit den Eigenschaften (a) und (b) heißt *orientierungsumkehrende Involution*. Zusammen mit (c) nennt man \mathcal{R} eine (*reversible*) *Symmetrie* von \mathcal{P} . Mit Hilfe der Reversibilität des Flusses (Seite 10) wird jetzt gezeigt, daß die vorgestellte Poincaré-Abbildung \mathcal{P} reversibel ist.

Es sei $\pi(t)$ ein Orbit, der zu den Zeiten t_1 und t_2 die Poincaré-Fläche Π schneidet, d.h. $(x(t_1), v_x(t_1))$ und $(x(t_2), v_x(t_2))$ sind zwei aufeinanderfolgende Punkte eines \mathcal{P} -Orbits mit $y(t_i) = 0$ und $v_y(t_i) > 0$. Nun ist wegen der Symmetrie des Flusses unter \mathcal{S} (Gleichung (1.26)) mit $\pi(t)$ auch

$$\pi'(t) = \mathcal{S}\pi(-t) \quad (2.14)$$

ein Orbit des Systems. Bezeichnet man mit $\tau = t_2 - t_1$ die Differenz zwischen den beiden Zeitpunkten t_i und mit Φ_τ die Flußabbildung des rotierenden Systems, so gilt:

$$\pi(t_2) = \Phi_\tau \pi(t_1) \quad (2.15a)$$

$$\pi'(-t_1) = \Phi_\tau \pi'(-t_2) . \quad (2.15b)$$

Mit (2.14) und (2.15) erhält man die beiden Gleichungen

$$\pi'(-t_2) = \mathcal{S}\Phi_\tau\pi(t_1) \quad (2.16a)$$

$$\pi'(-t_2) = \Phi_\tau^{-1}\mathcal{S}\pi(t_1) \quad (2.16b)$$

und damit

$$\mathcal{S}\Phi_\tau = \Phi_\tau^{-1}\mathcal{S} . \quad (2.17)$$

Mit der Poincaré-Abbildung $\mathcal{P} = \Phi_\tau|_\Pi$ (τ hängt hier vom Startpunkt π in der Poincaré-Fläche ab) und

$$\mathcal{R} = \mathcal{S}|_\Pi : (x, v_x) \mapsto (x, -v_x) \quad (2.18)$$

folgt:

$$\mathcal{R}\mathcal{P} = \mathcal{P}^{-1}\mathcal{R} , \quad (2.19)$$

also die dritte Forderung an eine reversible Symmetrie der Poincaré-Abbildung. Man zeigt leicht, daß die beiden anderen Forderungen von (2.13) ebenfalls erfüllt sind. Das Phasenportrait von \mathcal{P} ist symmetrisch zu der zu \mathcal{R} gehörenden *Symmetrielinie*, d.i. die Fixpunktlinie von \mathcal{R} , die durch die x -Achse gegeben ist. Als einfache Folgerung kann bei der numerischen Bestimmung der iterierten Poincaré-Abbildung der Rechenaufwand halbiert werden, da ein an der x -Achse gespiegelter Orbit (bis auf die Bewegungsrichtung) ebenfalls ein erlaubtes Systemverhalten darstellt.

Abbildung 2.7 zeigt eine globale Darstellung der gebundenen Dynamik am Beispiel einer Systemkonfiguration mit kleiner äußerer Feldstärke. Für $F = 0.007$ wurde das Jacobi-Integral so gewählt, daß C gleich dem Potentialwert $U(x^*, 0) = -1.493 \dots$ beim Maximum ist. ($x^* = -1.0023 \dots$ wurde dabei in Abhängigkeit von F aus Gleichung (2.3) berechnet.) Die Geschwindigkeit v_x wurde hier durch $\sqrt{|x|}v_x$ ersetzt, um die in der Nähe der Coulomb-Singularität beliebig hohen Geschwindigkeiten „ins Endliche zu holen“. Der dynamisch erlaubte Bereich ist vom verbotenen Bereich durch durchgezogene Linien abgegrenzt (Gleichung (2.12)).

Der Phasenraum der Poincaré-Abbildung ist in Bereiche unterschiedlichen Verhaltens aufgeteilt: Zum einen zeigt sich in der Nähe der Singularität bei $x = 0$ ein ähnliches Verhalten, wie es für kleines F schon in Abbildung 2.2 in KS-Koordinaten zu sehen war. Die Orbits, die die Singularität im Uhrzeigersinn umkreisen ($x^* < x < 0$), bilden eine Schar von geschlossenen KAM-Tori, die sich um einen Fixpunkt von \mathcal{P} gruppieren. Diese Orbits werden von der gleichfalls im

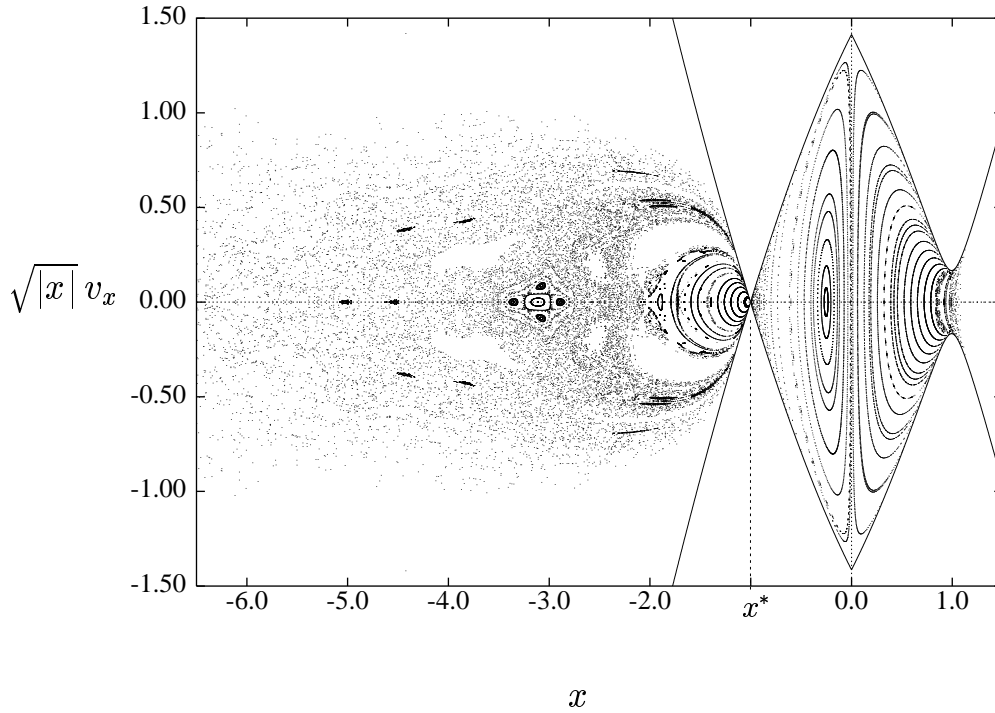


Abbildung 2.7: *Poincaré-Plot für $F = 0.007$ und $C = U(x^*, 0)$.*

Uhrzeigersinn wirkenden Coriolis-Kraft unterstützt. Auf der rechten Seite der Singularität hingegen findet man keinen \mathcal{P} -Fixpunkt und auch keine geschlossenen KAM-Linien. Vielmehr läuft eine typische KAM-Linie in den Rand des erlaubten Bereiches hinein und wird unstetig fortgesetzt, indem man sie an der x -Achse spiegelt. Die zugehörigen Orbits laufen gegen den Uhrzeigersinn und damit gegen die Wirkungsrichtung der Coriolis-Kraft. Im Zusammenhang mit der Bewegung in der Nähe der Trojanerpunkte wird im nächsten Unterabschnitt gezeigt, daß die Unstetigkeit der KAM-Linien auf die Unstetigkeit der Poincaré-Abbildung zurückzuführen ist.

Das Jacobi-Integral C ist hier so gewählt, daß man sich auf der Potentialhöhe des U -Maximums befindet. Dementsprechend laufen die Grenzen des erlaubten Bereichs im Maximum bei $(x^*, 0)$ zusammen: In der Nähe des Maximums ist die Geschwindigkeit durch die Energiebedingung $T = C - U$ beschränkt. Links vom Maximum erkennt man eine Schar von KAM-Orbits, die das (hier stabile) Maximum in der xy -Ebene im Uhrzeigersinn (also mit der Coriolis-Kraft) umrunden. Bei genauerem Hinsehen erweist sich, daß auch diese KAM-Linien an den Grenzen des erlaubten Bereichs unstetig sind.

Außerhalb des regulären Bereichs findet sich ein großes Gebiet irregulärer Dyna-

mik, in dem sich kleinere Inseln regulären Verhaltens behaupten. Das „chaotische Meer“ ist nicht durch einen KAM-Orbit gegen das Kontinuum abgegrenzt, d.h. fast alle Orbits in diesem Bereich sind Teile von Streutrajektorien. Dynamisch ist dieses Gebiet mit dem kleinen irregulären Gebiet verbunden, das sich bei $x \approx 1$ erkennen läßt — ebenfalls ein Effekt der Unstetigkeit der Poincaré-Abbildung \mathcal{P} .

2.3.2 Die Trojanerbewegung

Ich beschreibe nun die Dynamik in der Nähe des U -Maximums für kleine Werte des äußeren elektrischen Feldes. In Unterabschnitt 2.2.2 wurde gezeigt, daß die Bewegung in der Nähe des Maximums durch die Coriolis-Kraft stabilisiert wird, sofern die äußere Kraft nicht zu groß ist. Abbildung 2.8 zeigt das Beispiel eines Orbits, der eine stabile Bewegung in der Nähe des Trojanerpunktes ausführt. Der Orbit gehört zu einer der KAM-Linien in Abbildung 2.7, die rechts der Singularität liegen. Da $C = U(x^*, 0)$ gilt, zeigt Gleichung (1.18a), daß zwar der gesamte Ortsraum dynamisch erlaubt ist, das Maximum selbst allerdings nur für $t \rightarrow \infty$ mit Geschwindigkeit null erreicht werden kann.

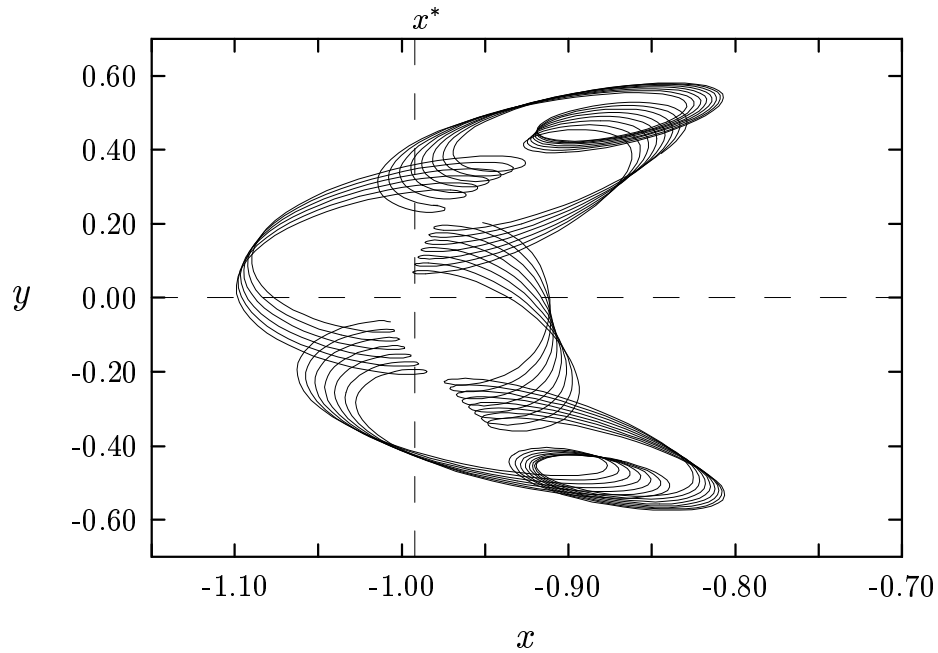


Abbildung 2.8: *Ein Orbit in der Nähe des stabilen U -Maximums für $F = 0.007$ und $C = U(x^*, 0)$.*

Für das hier vorliegende F liegt das U -Maximum bei $x^* = -1.0023 \dots$. Entsprechend der stets nach rechts wirkenden Coriolis-Kraft läuft das Elektron im

Uhrzeigersinn um dieses Maximum herum. Zusätzlich vollführt es, ebenfalls als Folge der Coriolis-Kraft, Schleifen. Aufgrund dieses Phänomens stellt es sich als unmöglich heraus, eine *stetige* Poincaré-Abbildung zu konstruieren. Wie ist das zu verstehen?

Die Poincaré-Fläche Π ist durch $y = 0$, $v_y > 0$ definiert worden. Wegen der Existenz der Schleifen besteht die Möglichkeit, daß ein Orbit die Mannigfaltigkeit Π tangential im Punkt T_1 berührt. Dann ist aber die Poincaré-Abbildung im Urbild $T_0 = \mathcal{P}^{-1}(T_1)$ unstetig. Man betrachte dazu Abbildung 2.9: Es gibt einen

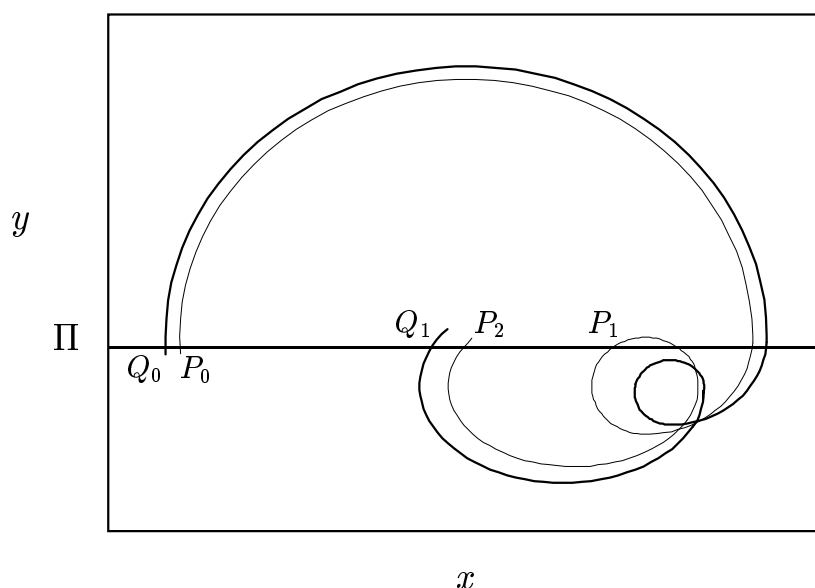


Abbildung 2.9: Zur Unstetigkeit der Poincaré-Abbildung \mathcal{P} : Zwei Orbits (P_i und Q_i) in der Nähe einer Trajektorie, die die Poincaré-Fläche Π tangential berührt.

Punkt P_0 in der Nähe von T_0 , dessen Bild $P_1 = \mathcal{P}(P_0)$ in der Nähe von T_1 liegt, während ein Orbit, der aus einem anderen Punkt Q_0 nahe T_0 entspringt, die Umgebung von T_1 in Π knapp verfehlt und erst in der Nähe von $T_2 = \mathcal{P}^2(T_0)$ und $P_2 = \mathcal{P}^2(P_0)$ seinen nächsten Bildpunkt $Q_1 = \mathcal{P}(Q_0)$ hat.

In Gleichung (2.12) wurde die Grenze zwischen erlaubtem und verbotenem Bereich berechnet als die Menge derjenigen Punkte (x, v_x) in der Poincaré-Ebene, für die $v_y = 0$ ist. Die zugehörigen Orbits berühren folglich die Poincaré-Fläche tangential. Aufgrund der vorausgegangenen Diskussion ist nun klar, daß jeder Punkt auf der Grenze zwischen erlaubtem und verbotenem Bereich eine Unstetigkeitsstelle der Poincaré-Abbildung darstellt.

Als Folge der *Unstetigkeit der Poincaré-Abbildung* kann es vorkommen, daß der

Schnitt erhaltener KAM-Tori mit der Poincaré-Fläche keine geschlossene Linie ergibt, sondern Sprünge aufweist. Dieses Phänomen konnte schon in Abbildung 2.7 beobachtet werden. Ferner hat man bei der Bestimmung von symmetrischen periodischen Punkten [Gre79] zu berücksichtigen, daß Symmetrielinien unter Anwendung der Poincaré-Abbildung auseinandergerissen werden. Bei mehrfacher Iteration kann dies zu äußerst unübersichtlichen Verhältnissen führen.

In den folgenden drei Abbildungen 2.10 bis 2.12 richtet sich das Interesse auf die Frage, wie sich das Phasenportrait von \mathcal{P} in der Nähe des U -Maximums entwickelt, wenn der Parameter F den Bifurkationswert F^* überschreitet, bei

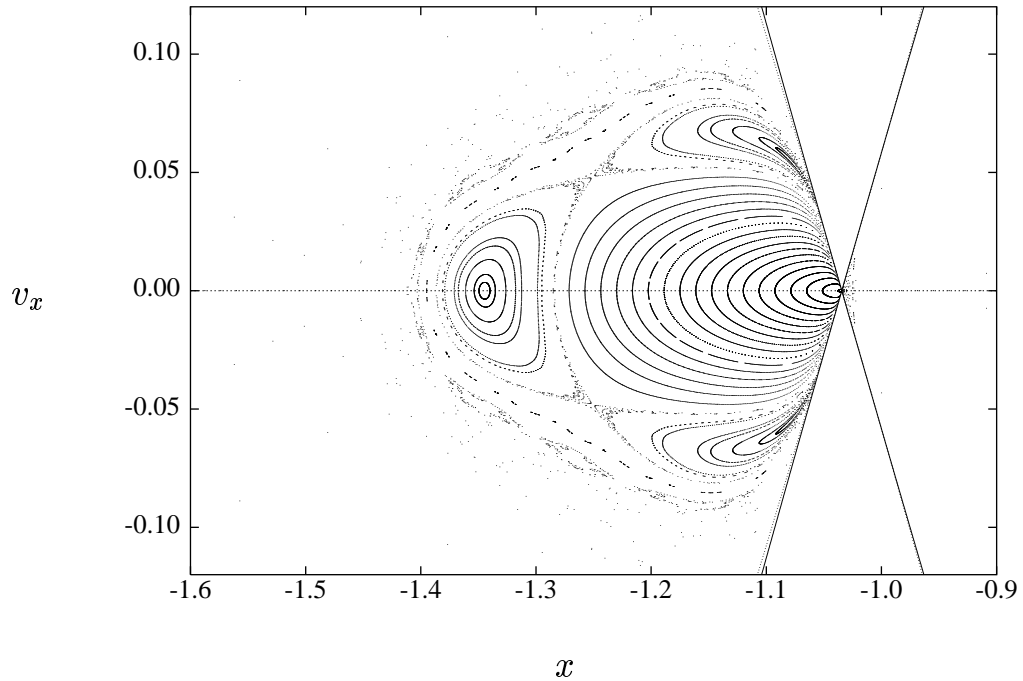


Abbildung 2.10: Wie Abbildung 2.7, jedoch $F = 0.1$.

dem der Fixpunkt sein Stabilitätsverhalten ändert (siehe Gleichung (2.10)). Das Jacobi-Integral wurde, wie in Abbildung 2.7, jeweils auf das U -Niveau des Maximums gesetzt, d.h. $C = U(x^*, 0)$. Es liegt hier *nicht* der oft behandelte Fall vor, daß ein Fixpunkt der Poincaré-Abbildung \mathcal{P} unter Periodenverdopplung instabil wird. Im Gegensatz zu einer Periodenverdopplungsbifurkation läßt sich hier keine Umgebung um den Gleichgewichtspunkt finden, auf der \mathcal{P} überall definiert ist, da der dynamisch verbotene Bereich bis unmittelbar an den Fixpunkt heranreicht.

Abbildung 2.10 zeigt die Verhältnisse für $F = 0.1$, einen Wert etwas unterhalb des Bifurkationswertes F^* . Um einen Bereich von KAM-Linien erstreckt sich eine

dreiperiodische Poincaré-Birkhoff-Kette, deren drei Stabilitätsinseln einen relativ großen Bereich des Phasenraums einnehmen.

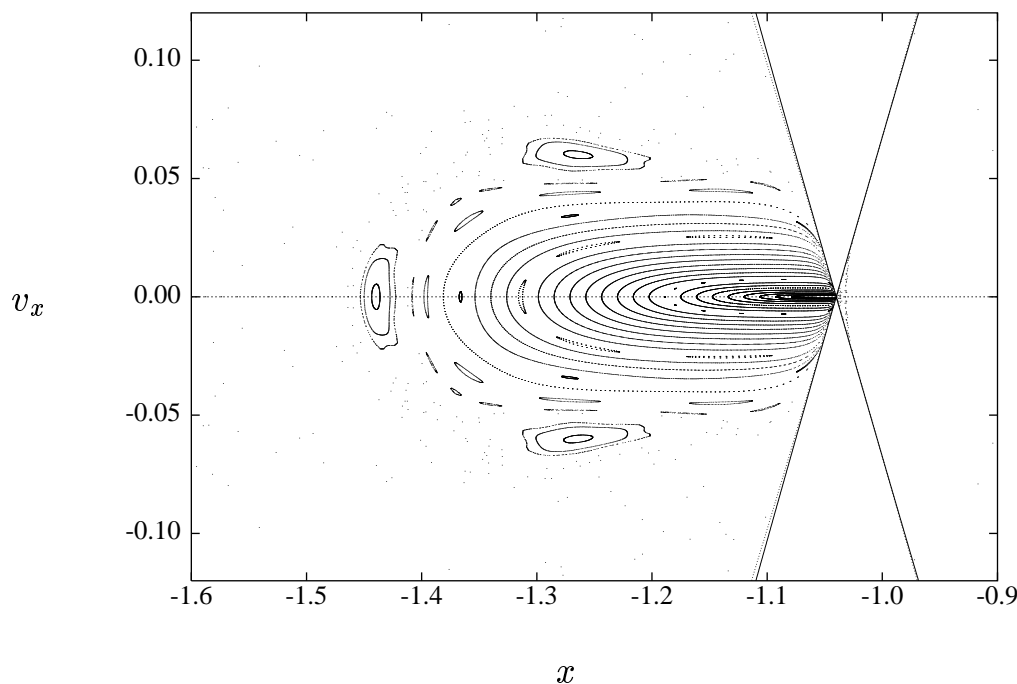


Abbildung 2.11: Wie Abbildung 2.7, jedoch $F = F^* = 0.1156 \dots$

Bei Erhöhung des Parameters F auf den Bifurkationswert F^* (Abbildung 2.11) schnüren sich die inneren KAM-Orbits in der vertikalen Richtung zusammen, während sie in horizontaler Richtung stark auseinandergezogen sind. Dieses Phasenportrait ist offensichtlich ein degenerierter Übergangszustand, bei dem sich der KAM-Bereich vom Gleichgewichtspunkt abkapselt. Weiter außerhalb hat diese lokale Bifurkation zunächst keine dramatischen Auswirkungen: Nach wie vor dominiert die dreiperiodische Birkhoff-Kette, wenn sie auch unter der Parameterveränderung etwas nach außen gewandert ist und ihre Stabilitätsinseln etwas kleiner geworden sind.

Bei weiterer Erhöhung der äußeren elektrischen Feldstärke auf $F = 0.125$ (Abbildung 2.12) zeigen sich die Konsequenzen, die sich aus dem Übergang von der linear stabilen zur linear instabilen Dynamik in der Nähe des Maximums ergeben. Der KAM-Bereich hat sich vom Gleichgewichtspunkt „abgenabelt“ und gruppiert sich nun um einen neu entstandenen Fixpunkt von \mathcal{P} , der einem einfach periodischen Orbit des rotierenden Systems $\tilde{\Sigma}$ entspricht. Außerhalb dieses KAM-Bereichs befindet sich ein Gebiet irregulärer Bewegung, das durch den transversalen Schnitt der invarianten Mannigfaltigkeiten des nun instabilen Gleichgewichtspunktes erzeugt wird. Im nächsten Abschnitt wird dieser Mechanismus *en détail* aufgeklärt.

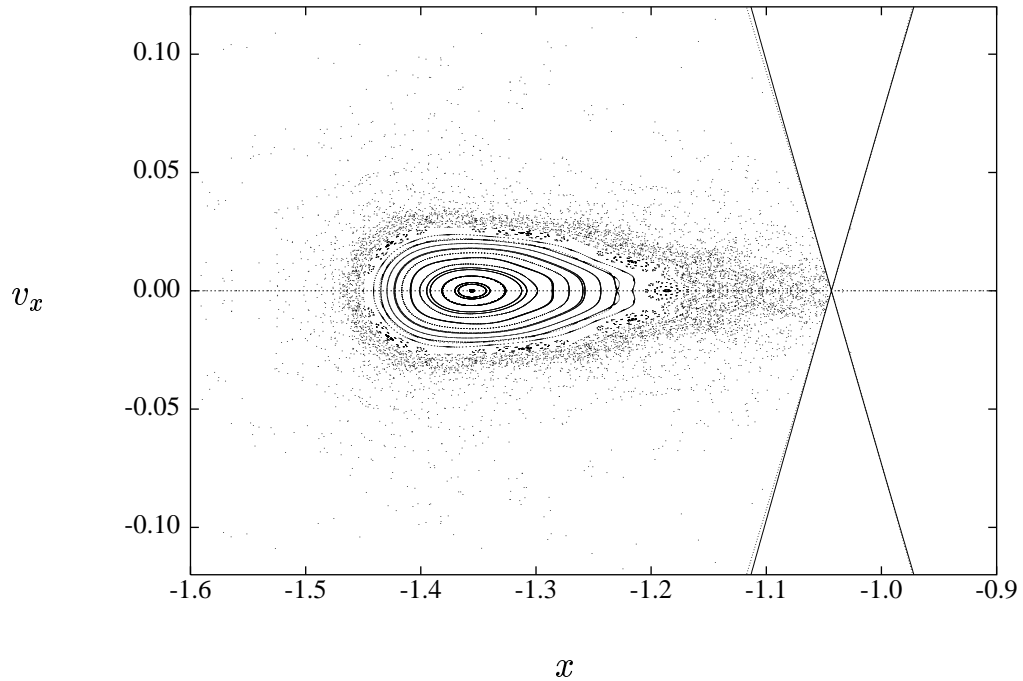


Abbildung 2.12: Wie Abbildung 2.7, jedoch $F = 0.125$.

Bei weiterer Erhöhung von F verschwindet der reguläre Bereich in einer Periodenverdopplungskaskade vollständig und hinterläßt lediglich ein dynamisch mit dem Kontinuum verbundenes Gebiet, in dem keinerlei reguläre Bewegung mehr aufgefunden werden kann.

2.4 Das Silnikov-Phänomen

In Unterabschnitt 2.2.1 wurde gezeigt, daß im rotierenden System $\tilde{\Sigma}$ die Bewegungsgleichungen des H-Atoms im zirkular polarisierten elektrischen Feld zwei Gleichgewichtslösungen besitzen. Eine davon — sie werde mit π^* bezeichnet — ist für kleine äußere Feldstärken linear stabil und geht bei anwachsendem Parameter F in einen hyperbolischen Gleichgewichtspunkt mit Eigenwerten $\pm\rho \pm i\nu$, einen sogenannten *Sattel-Fokus* über (siehe Unterabschnitt 2.2.2). Im folgenden wird nun gezeigt, daß es eine Trajektorie gibt, die sowohl in positiver als auch in negativer Zeitrichtung asymptotisch zu dieser Gleichgewichtslösung ist, die also sowohl in die stabile, als auch in die instabile Mannigfaltigkeit des Gleichgewichtspunktes eingebettet ist. Kurz: Es gibt einen zu π^* *homoklinen Orbit*. Damit sind zwei Voraussetzungen erfüllt, die für eine chaotische Dynamik charakteristisch sind: Zum einen gibt es einen „Streckungs- und Faltungsmechanismus“, der hier

durch die Dynamik nahe dem Sattel-Fokus realisiert ist; zum anderen existiert ein „Wiederkehrmechanismus“, der durch die Existenz des homoklinen Orbits gewährleistet ist.

Für die Iteration von Diffeomorphismen der Ebene ist in einer ähnlichen Situation der Chaosmechanismus wohlverstanden. Smale [Sma65] hat gezeigt, daß es im Falle eines periodischen Sattelpunktes mit einer transversalen homoklinen Verbindung in jeder Umgebung des periodischen Punktes eine invariante Menge gibt, auf der eine Iterierte des Diffeomorphismus topologisch zur Shift-Abbildung auf einem Folgenraum konjugiert ist (siehe auch [GuHo86], Theorem 5.3.5). Die Existenz transversaler homokliner Orbits ist sogar eine generische Eigenschaft von Diffeomorphismen der Ebene [Dev76]; das Smalesche Theorem gilt also nicht nur für exotische Ausnahmefälle. Es läßt sich selbstverständlich auch auf Poincaré-Abbildungen von Vektorfeldern anwenden.

Im hier vorliegenden Fall eines hyperbolischen Gleichgewichtspunktes eines vierdimensionalen Vektorfeldes hat man anders zu argumentieren. Zunächst ist die Existenz eines transversalen homoklinen Orbits hier *nicht* generisch. Dies folgt z.B. aus dem Kupka-Smale-Theorem (siehe z.B. [Wig88], Theorem 1.4.1), kann aber folgendermaßen auch heuristisch verstanden werden: Die stabile und die instabile Mannigfaltigkeit der Gleichgewichtslösung sind zweidimensionale Untermannigfaltigkeiten des vierdimensionalen Phasenraumes. Der Schnitt zweier Ebenen im Vierdimensionalen ist generisch ein Punkt, und so hat auch der Schnitt der beiden invarianten Mannigfaltigkeiten generisch die (topologische) Dimension null. Also kann kein (eindimensionaler) Orbit in diesen Schnitt eingebettet sein. Folglich gibt es im generischen Fall keinen zum Gleichgewichtspunkt homoklinen Orbit.

Beschränkt man sich jedoch, wie im vorliegenden Fall, auf Hamiltonsche Vektorfelder, so ist die Situation eine andere. Die invarianten Mannigfaltigkeiten sind nach wie vor zweidimensional, sind aber nun Untermannigfaltigkeiten der dreidimensionalen Energiehyperfläche (hier: die Hyperfläche $\tilde{H} = C$). Der Schnitt von zweidimensionalen Mannigfaltigkeiten im Dreidimensionalen hat aber generisch die Dimension eins. Anders ausgedrückt: Die Existenz transversaler homokliner Orbits zu hyperbolischen Gleichgewichtspunkten ist eine generische Eigenschaft Hamiltonscher Vektorfelder, und diese Eigenschaft ist strukturell stabil [Rob70].

Silnikov fand als erster Hufeisenabbildungen bei Sattel-Fokus-Punkten von Vektorfeldern, die ähnlich wie beim Smaleschen Theorem in Verbindung mit einem homoklinen Orbit die topologische Konjugiertheit einer Teildynamik des Systems zur Shift-Abbildung auf einem Folgenraum induzieren [Sil67, Sil70]. In den Voraussetzungen seines Theorems werden jedoch gerade Hamiltonsche Vektorfelder ausgeschlossen. Erst Devaney konnte Silnikovs Argumentation auf Hamilton-Systeme erweitern [Dev76]. Das Resultat seiner Arbeit kann in dem folgenden Theorem zusammengefaßt werden:

Theorem (Devaney): *Gegeben sei das vierdimensionale Hamiltonsche Differentialgleichungssystem $\dot{\pi} = \mathbf{F}(\pi)$. Es seien $\pi = \pi^*$ ein Gleichgewichtspunkt vom Sattel-Fokus-Typ des Vektorfeldes \mathbf{F} und Γ ein zu π^* gehörender transversaler homokliner Orbit. Dann gibt es für jede lokale transversale Schnittfläche Σ von Γ und für jede natürliche Zahl N eine kompakte invariante hyperbolische Menge $\Lambda_N \subset \Sigma$, auf der die Poincaré-Abbildung topologisch zu einer Shift-Abbildung auf N Symbolen konjugiert ist.*

Das Ziel dieses Abschnittes ist es, eine der Hufeisenabbildungen, deren Existenz Devaney nachweist, für das vorliegende System explizit zu konstruieren. Meines Wissens wird dieses Vorhaben hier zum ersten Mal für ein realitätsnahes Differentialgleichungssystem durchgeführt. Meine Vorgehensweise lehnt sich dabei im wesentlichen an Wiggins' Darstellung in [Wig88], Seite 275 ff. an.

2.4.1 Bestimmung der Eigenräume

Voraussetzung für eine einfache Darstellung der folgenden Überlegungen ist die Bestimmung der Eigenräume der Jacobi-Matrix L aus (2.5). Bezeichnet man mit λ einen der Eigenwerte $\pm\rho \pm i\nu$ von L , so erhält man aus der Beziehung $(L - \lambda \text{id})\pi = 0$ für den entsprechenden Eigenvektor $\pi = (x, y, v_x, v_y)^t$ die folgenden Beziehungen ($\omega = 1$):

$$\begin{pmatrix} 1 + 2|x^*|^{-3} - \lambda^2 & 2\lambda \\ -2\lambda & 1 - |x^*|^{-3} - \lambda^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.20a)$$

und

$$\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (2.20b)$$

Die durch dieses Gleichungssystem bestimmten vier komplexen Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\lambda = \pm\rho \pm i\nu$ lassen sich als einfache Linearkombinationen von vier reellen Vektoren $\pi_1^u, \pi_2^u, \pi_1^s$ und π_2^s schreiben. Dabei ergeben sich die Eigenvektoren zu $\lambda = \rho \pm i\nu$ als $\pi_1^u \pm i\pi_2^u$, während die Eigenvektoren zu $\lambda = -\rho \pm i\nu$ sich als $\pi_1^s \pm i\pi_2^s$ schreiben. Dabei sind

$$\pi_1^u = (x_1, y_1, v_{1x}, v_{1y})^t \quad (2.21a)$$

$$\pi_2^u = (x_2, y_2, v_{2x}, v_{2y})^t \quad (2.21b)$$

$$\pi_1^s = (x_1, -y_1, -v_{1x}, v_{1y})^t \quad (2.21c)$$

$$\pi_2^s = (-x_2, y_2, v_{2x}, -v_{2y})^t \quad (2.21d)$$

mit reellen Komponenten x_j, y_j, v_{jx} und v_{jy} ($j = 1, 2$). Wählt man die x -Komponente der komplexen Eigenvektoren reell, d.h. $x_2 = 0$, so erhält man mit

Hilfe von (2.20) die anderen Komponenten als Funktionen von x_1 :

$$y_1 = \frac{\rho(\rho^2 + \nu^2 - 1 - 2|x^*|^{-3})}{2(\rho^2 + \nu^2)} x_1 \quad (2.22a)$$

$$v_{1x} = \rho x_1 \quad (2.22b)$$

$$v_{1y} = \frac{1}{2} (\rho^2 - \nu^2 - 1 - 2|x^*|^{-3}) x_1 \quad (2.22c)$$

$$y_2 = \frac{\nu(\rho^2 + \nu^2 + 1 + 2|x^*|^{-3})}{2(\rho^2 + \nu^2)} x_1 \quad (2.22d)$$

$$v_{2x} = \nu x_1 \quad (2.22e)$$

$$v_{2y} = \frac{1}{2} \rho \nu x_1. \quad (2.22f)$$

Der instabile Eigenraum E^u zu den Eigenwerten $\rho \pm i\nu$ und der stabile Eigenraum E^s zu den Eigenwerten $-\rho \pm i\nu$ sind jeweils zweidimensional. Beide Räume lassen sich als lineare Hülle der reellen Vektoren π_j^u und π_j^s ($j = 1, 2$) schreiben:

$$E^u = \text{span}(\pi_1^u, \pi_2^u) \quad (2.23a)$$

$$E^s = \text{span}(\pi_1^s, \pi_2^s). \quad (2.23b)$$

Es sei nun \mathcal{T} die Matrix, die die erzeugenden Vektoren π_j^u und π_j^s ($j = 1, 2$) der Eigenräume auf die Einheitsvektoren e_1, \dots, e_4 abbildet. Die inverse Matrix läßt sich einfach darstellen als

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^{-1} &= (\pi_1^u, \pi_2^u, \pi_1^s, \pi_2^s) \\ &= \begin{pmatrix} x_1 & 0 & x_1 & 0 \\ y_1 & y_2 & -y_1 & y_2 \\ v_{1x} & v_{2x} & -v_{1x} & v_{2x} \\ v_{1y} & v_{2y} & v_{1y} & -v_{2y} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Die Transformationsmatrix \mathcal{T} selbst wurde mit dem Programm MATHEMATICA [Mat93] bestimmt und soll hier nicht aufgeschrieben werden. Die transformierten Koordinaten bezeichne ich mit

$$\zeta = \begin{pmatrix} \zeta^u \\ \zeta^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_1^u \\ \zeta_2^u \\ \zeta_1^s \\ \zeta_2^s \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} x - x^* \\ y \\ v_x \\ v_y \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Dabei sind ζ^u und ζ^s zweidimensionale Vektoren, welche die Komponenten des Phasenraumvektors im instabilen bzw. stabilen Eigenraum darstellen.

2.4.2 Der zum Sattel-Fokus homokline Orbit

Für den von Silnikov und Devaney gefundenen Chaosmechanismus benötigt man neben dem Sattel-Fokus einen transversalen homoklinen Orbit, der den Gleich-

gewichtspunkt mit sich selbst verbindet. Dieser kann mit Hilfe der Poincaré-Abbildung \mathcal{P} und ihrer Symmetrie \mathcal{R} mit großer Genauigkeit bestimmt werden (siehe Unterabschnitt 2.3.1). Dazu betrachte ich zunächst die Schnittlinie des instabilen Eigenraumes E^u mit derjenigen Poincaré-Fläche Π , die durch das Niveau $C = U(x^*, 0)$ des Gleichgewichtspunktes gegeben ist. Die globale instabile Mannigfaltigkeit $W^u \cap \Pi$ in der Poincaré-Fläche ergibt sich durch Vorwärtsiteration eines nahe dem Gleichgewichtspunkt gelegenen kurzen Stücks von $E^u \cap \Pi$. Da der Gleichgewichtspunkt π^* auf der Fixpunktlinie von \mathcal{R} (der x -Achse der Poincaré-Ebene) liegt, ergibt sich die globale stabile Mannigfaltigkeit $W^s \cap \Pi$ gemäß

$$W^s \cap \Pi = \mathcal{R}(W^u \cap \Pi) \quad (2.26)$$

als Spiegelung der instabilen Mannigfaltigkeit $W^u \cap \Pi$ an der x -Achse [Gre⁺81, Bee91]. Aus dieser Tatsache folgt direkt, daß jeder Schnittpunkt von $W^u \cap \Pi$ mit der Symmetrielinie $v_x = 0$ auch auf $W^s \cap \Pi$ liegt und damit ein homokliner Punkt der Poincaré-Abbildung \mathcal{P} ist. Hat man einen solchen Schnittpunkt bestimmt, so ergibt sich daraus der gesamte homokline Orbit Γ durch Vor- und Rückwärtsintegration bis in die Nähe des Gleichgewichtspunktes.

Abbildung 2.13 zeigt für $F = 0.125$ und $C = U(x^*, 0)$ die numerisch bestimmten invarianten Mannigfaltigkeiten in der Poincaré-Ebene. Auf der linken Seite durchstoßen die vom Gleichgewichtspunkt ausgehenden Mannigfaltigkeiten die Symmetrielinie $v_x = 0$ und schneiden sich transversal in einem homoklinen Punkt. Man beachte, daß die invarianten Mannigfaltigkeiten jeweils nur auf einer Seite des Gleichgewichtspunktes bei x^* liegen. Die stabile und die instabile Mannigfaltigkeit bilden nicht wie bei regulären Fixpunkten der Poincaré-Abbildung, die zu einfach periodischen Orbits des Flusses gehören, ein Kreuz in der Poincaré-Ebene.

Der zu dem homoklinen Punkt der Poincaré-Abbildung gehörende homokline Orbit des Differentialgleichungssystems (1.17) wird in Abbildung 2.14 im Ortsraum dargestellt. Für höhere Werte von F ist es durchaus möglich, daß homokline Orbits komplizierterer Gestalt auftreten. Es kann z.B. vorkommen, daß die Bahn um die Coulomb-Singularität herum verläuft, während für $F = 0.125$ die Coriolis-Kraft den homoklinen Orbit stets in der näheren Umgebung des U -Maximums hält.

2.4.3 Die lokale Hamilton-Funktion

Schreibt man die Hamiltonfunktion \tilde{H} des rotierenden Systems als Funktion der in Gleichung (2.25) eingeführten Koordinaten ζ^u und ζ^s und entwickelt man anschließend bis zur zweiten Ordnung, so ergibt sich (unter Weglassen des konstanten Summanden $\tilde{H}(\pi^*)$, der für die Dynamik belanglos ist) als lokale Hamilton-

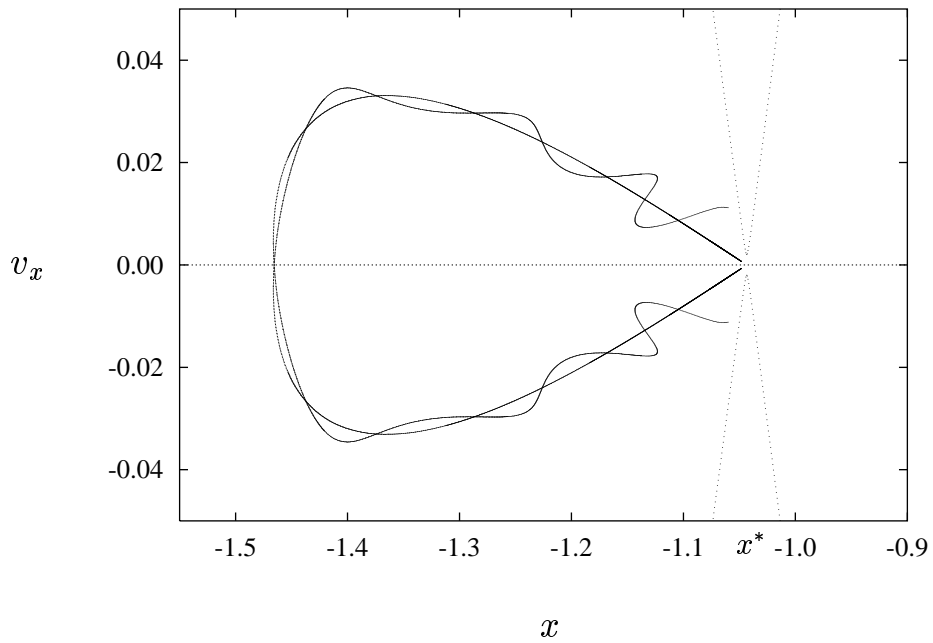


Abbildung 2.13: *Invariante Mannigfaltigkeiten des Sattel-Fokus-Punktes in der Poincaré-Ebene für $F = 0.125$ und $C = U(x^*, 0)$.*

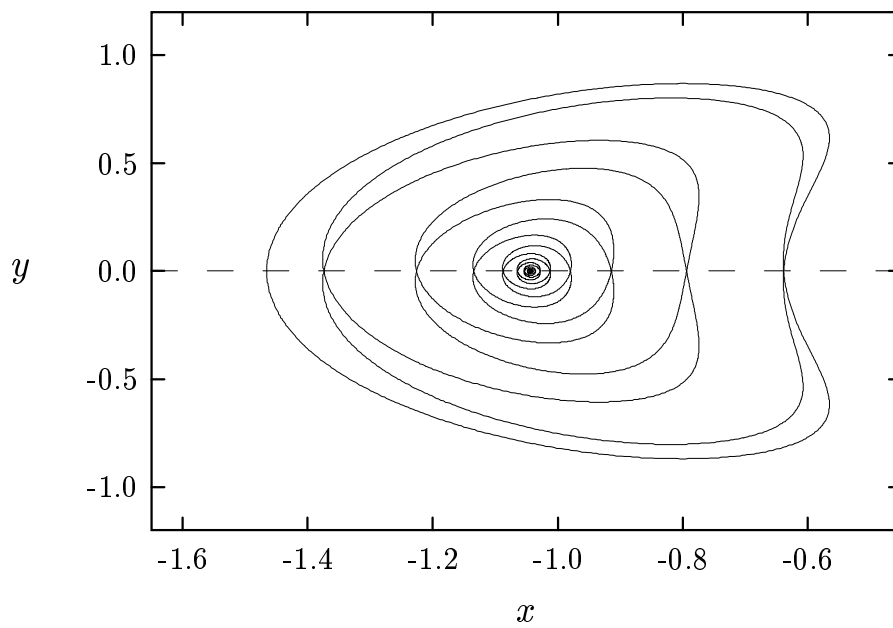


Abbildung 2.14: *Der zum Sattel-Fokus homokline Orbit Γ für $F = 0.125$.*

Funktion in der Umgebung des Sattel-Fokus

$$K(\zeta_1^u, \zeta_2^u, \zeta_1^s, \zeta_2^s) = \rho(\zeta_1^u \zeta_1^s + \zeta_2^u \zeta_2^s) - \nu(\zeta_1^u \zeta_2^s - \zeta_2^u \zeta_1^s) . \quad (2.27)$$

Dabei haben die Koordinaten ζ^u der instabilen Ebene E^u die Bedeutung von generalisierten Orten und die Koordinaten ζ^s der stabilen Ebene E^s die Bedeutung von generalisierten Impulsen.

Die aus (2.27) folgenden kanonischen Bewegungsgleichungen beschreiben die Dynamik in der Nähe des Sattel-Fokus:

$$\dot{\zeta}_1^u = \rho \zeta_1^u + \nu \zeta_2^u \quad (2.28a)$$

$$\dot{\zeta}_2^u = \rho \zeta_2^u - \nu \zeta_1^u \quad (2.28b)$$

$$\dot{\zeta}_1^s = -\rho \zeta_1^s + \nu \zeta_2^s \quad (2.28c)$$

$$\dot{\zeta}_2^s = -\rho \zeta_2^s - \nu \zeta_1^s . \quad (2.28d)$$

Die Bewegungsanteile in instabiler und stabiler Ebene sind entkoppelt. Bei Einführung von Polarkoordinaten in der stabilen bzw. der instabilen Ebene vereinfachen sich die Bewegungsgleichungen weiter. Mit

$$r^u = |\zeta^u| \quad (2.29a)$$

$$\phi^u = \arg(\zeta^u) \quad (2.29b)$$

$$r^s = |\zeta^s| \quad (2.29c)$$

$$\phi^s = \arg(\zeta^s) \quad (2.29d)$$

schreiben sich die Differentialgleichungen (2.28) folgendermaßen:

$$\dot{r}^u = \rho r^u \quad (2.30a)$$

$$\dot{\phi}^u = -\nu \quad (2.30b)$$

$$\dot{r}^s = -\rho r^s \quad (2.30c)$$

$$\dot{\phi}^s = -\nu . \quad (2.30d)$$

Die Lösung ist trivial. Es ergibt sich:

$$r^u(t) = r_0^u e^{\rho t} \quad (2.31a)$$

$$\phi^u(t) = \phi_0^u - \nu t \quad (2.31b)$$

$$r^s(t) = r_0^s e^{-\rho t} \quad (2.31c)$$

$$\phi^s(t) = \phi_0^s - \nu t \quad (2.31d)$$

oder, bei Rücktransformation in die ζ -Koordinaten:

$$\begin{pmatrix} \zeta_1^u \\ \zeta_2^u \end{pmatrix} (t) = e^{\rho t} \begin{pmatrix} \cos \nu t & -\sin \nu t \\ \sin \nu t & \cos \nu t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_{10}^u \\ \zeta_{20}^u \end{pmatrix} \quad (2.32a)$$

$$\begin{pmatrix} \zeta_1^s \\ \zeta_2^s \end{pmatrix} (t) = e^{-\rho t} \begin{pmatrix} \cos \nu t & -\sin \nu t \\ \sin \nu t & \cos \nu t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_{10}^s \\ \zeta_{20}^s \end{pmatrix}. \quad (2.32b)$$

Bei Projektion in die instabile Ebene E^u beschreibt ein Orbit in der Nähe des Gleichgewichtspunktes also eine von innen nach außen und im Uhrzeigersinn laufende, logarithmische Spirale; bei Projektion in die stabile Ebene E^s läuft ein Orbit auf einer Spirale im Uhrzeigersinn von außen nach innen. Dabei kann ρ als Expansions- bzw. Kontraktionskoeffizient aufgefaßt werden, während ν die Rotationsgeschwindigkeit beschreibt.

Abbildung 2.15 zeigt, daß man speziell für den homoklinen Orbit Γ dieses asymptotische Verhalten beobachten kann. Mit Hilfe der Transformationsmatrix \mathcal{T} aus

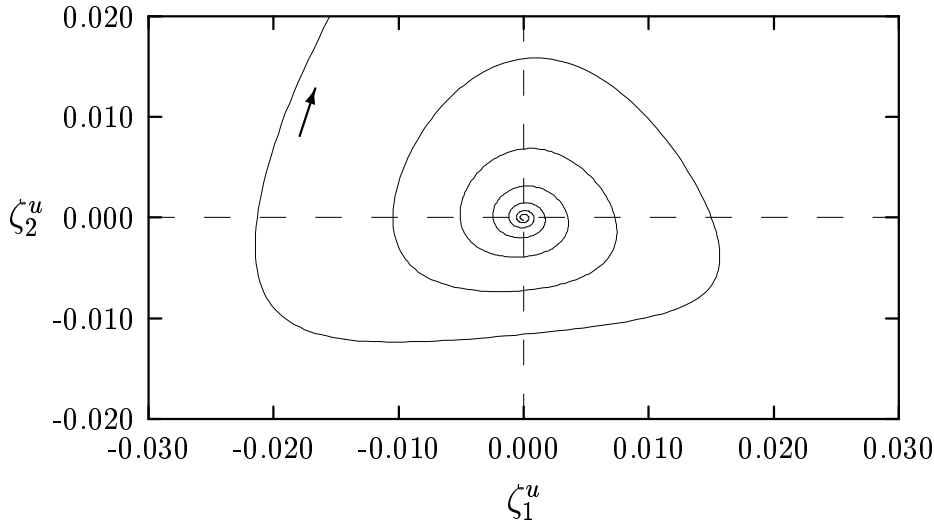


Abbildung 2.15: Der homokline Orbit Γ für $F = 0.125$, projiziert in die instabile Ebene E^u .

Gleichung (2.24) wurden die ζ -Koordinaten des homoklinen Orbits berechnet. Da der Orbit für $t \rightarrow -\infty$ beliebig genau in der instabilen Ebene E^u liegt, gilt hier $r^s = |\zeta^s| \approx 0$, während in E^u die beschriebene spiralförmige Bewegung von innen nach außen zu sehen ist. Für $t \rightarrow +\infty$ erhält man in der stabilen Ebene E^s ein analoges Verhalten mit einem in den Nullpunkt hineinspiralenden Orbit. Die Systemsymmetrie hat zur Folge, daß die Projektion dieses Orbits in die ζ^s -Ebene genau dem an der horizontalen Achse gespiegelten Bild 2.15 gleicht. Ich verzichte deswegen an dieser Stelle auf eine Abbildung des homoklinen Orbits in der stabilen Ebene E^s .

Die Einführung von Polarkoordinaten in den Eigenräumen E^u und E^s ermöglicht auch eine andere, im folgenden sehr nützliche Darstellung des Wertes der lokalen

Hamilton-Funktion (2.27):

$$K(r^u, \phi^u, r^s, \phi^s) = r^u r^s (\rho \cos(\phi^u - \phi^s) - \nu \sin(\phi^u - \phi^s)) . \quad (2.33)$$

Diese Formel ist vor allem dann nützlich, wenn man sich in die Hyperfläche $K = 0$ begibt, in der ja auch der Gleichgewichtspunkt ($r^u = r^s = 0$) und sein homokliner Orbit liegen. Man beachte, daß $(r^u, \phi^u, r^s, \phi^s)$ kein kanonischer Variablensatz ist. Aus (2.33) können also keine kanonischen Differentialgleichungen abgeleitet werden.

2.4.4 Die Topologie der lokalen Schnittflächen

Es werden nun lokale Schnittflächen des Flusses konstruiert, auf denen die Dynamik in der Nähe des homoklinen Orbits untersucht werden soll. Für genügend kleines $\varepsilon > 0$ seien definiert:

$$\Pi^u = \{(\zeta^u, \zeta^s) : r^u = \varepsilon, r^s \leq \varepsilon\} \quad (2.34a)$$

$$\Pi^s = \{(\zeta^u, \zeta^s) : r^s = \varepsilon, r^u \leq \varepsilon\} . \quad (2.34b)$$

Π^u und Π^s sind dreidimensionale Untermannigfaltigkeiten des vierdimensionalen Phasenraumes. Für genügend kleines ε kann der Hamiltonsche Fluß innerhalb einer ε -Umgebung um den Gleichgewichtspunkt durch das linearisierte System (2.28) approximiert werden. Π^u und Π^s sind dann zum Fluß transversale Schnittflächen. Abbildung 2.16 zeigt diese Tatsache schematisch: Hier werden die 2-Vektoren ζ^u und ζ^s jeweils nur durch eine Koordinatenrichtung repräsentiert, die Pfeile geben die Richtung des Flusses an.

Topologisch sind Π^u und Π^s Volltori: $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{R}^2$. Man stelle sich z.B. die Konstruktion von Π^u folgendermaßen vor: Man läßt einen Vollkreis in den ζ^s -Koordinaten mit dem Radius ε einmal um den Kreis $|\zeta^u| = r^u = \varepsilon$ rotieren; dabei durchläuft der Polarwinkel ϕ^u den Bereich $-\pi$ bis π . Das Ergebnis ist für beide Schnittflächen in Abbildung 2.17 skizziert.

Nicht die gesamten Volltori Π^u und Π^s sind dynamisch zugänglich, denn der Wert der Hamilton-Funktion ist ja auf $K = 0$ festgelegt. Es ist also vonnöten, die Schnitte der Tori mit der Energiemannigfaltigkeit des Gleichgewichtspunktes zu betrachten:

$$\Sigma^u = \Pi^u \cap K^{-1}(0) \quad (2.35a)$$

$$\Sigma^s = \Pi^s \cap K^{-1}(0) . \quad (2.35b)$$

Als Schnitte zweier dreidimensionaler Mannigfaltigkeiten im Vierdimensionalen sind Σ^u und Σ^s zweidimensional. Welche Topologie haben diese Mengen?

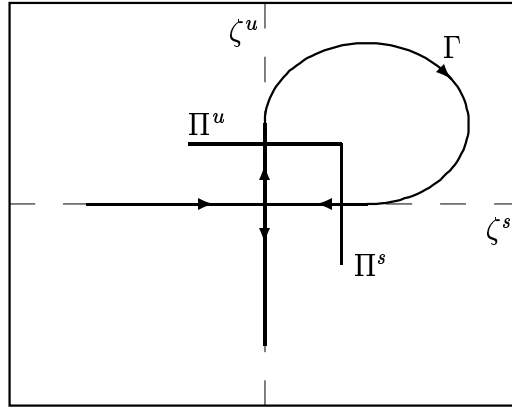


Abbildung 2.16: Schematische Darstellung des homoklinen Orbits Γ und der lokalen Schnittmannigfaltigkeiten Π^u und Π^s . Man beachte, daß ζ^s und ζ^u jeweils zweidimensionale Vektoren bezeichnen.

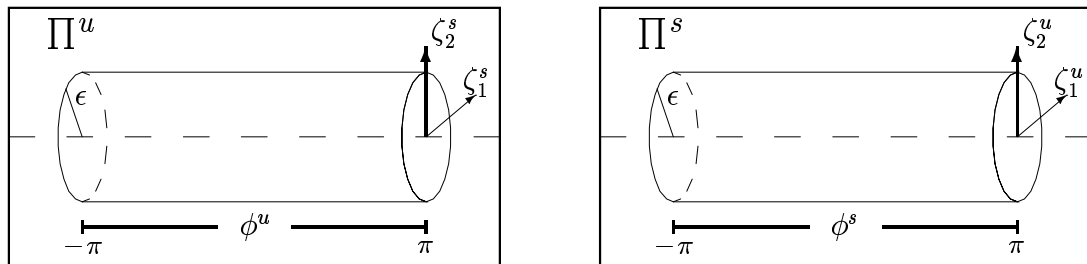


Abbildung 2.17: Topologie der Schnittmannigfaltigkeiten Π^u und Π^s . Die linken und rechten Grundflächen der Vollzylinder sind jeweils zu identifizieren. Für Π^u ist $r^u = \epsilon$, für Π^s ist $r^s = \epsilon$.

Das Ergebnis einer numerischen Bestimmung von Σ^s ist in Abbildung 2.18 zu sehen. Hier wurden $F = 0.125$ und $\epsilon = 5 \cdot 10^{-3}$ gewählt. Bei der Berechnung von Σ^s wurde nicht die linearisierte Hamilton-Funktion K verwendet, sondern die vollständige Hamilton-Funktion \tilde{H} . Diese wurde zunächst auf die ζ -Koordinaten umgeschrieben, um dann zu jeweils festgehaltenem ϕ^s mit Hilfe eines Programms zur numerischen Nullstellenbestimmung (ζ_1^u, ζ_2^u) -Paare zu finden, die zusammen mit $\zeta_1^s = \epsilon \cos \phi^s$ und $\zeta_2^s = \epsilon \sin \phi^s$ die Energie-Gleichung $\tilde{H} = C^*$ erfüllen, wobei $C^* = \tilde{H}(\pi^*)$ ist. Schließlich waren die gefundenen Wertetripel $(\phi^s, \zeta_1^u, \zeta_2^u)$ noch in geeigneter Reihenfolge einer Graphik-Software zu übergeben, um die vorliegende

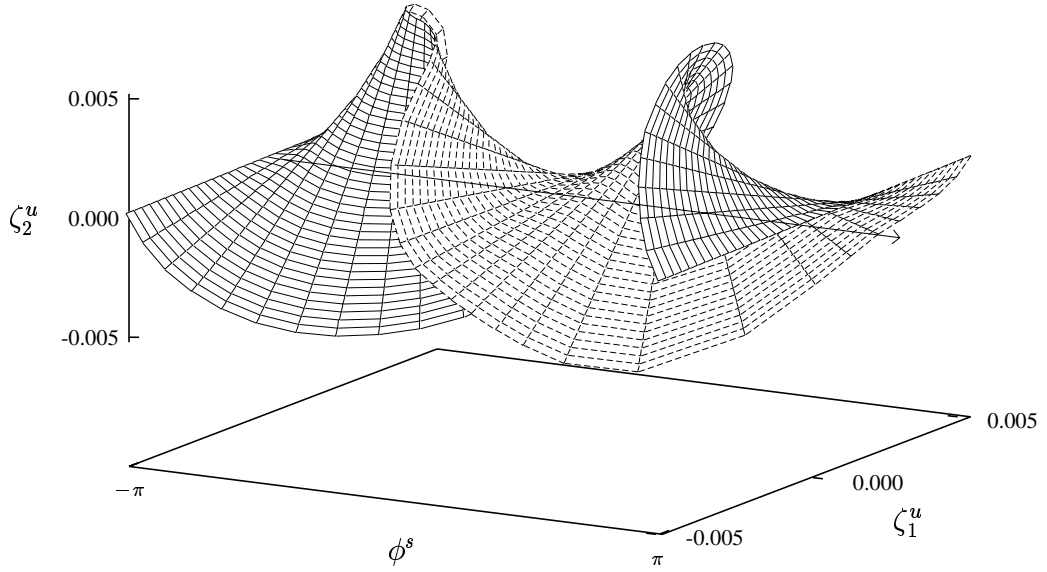


Abbildung 2.18: Die Schnittfläche Σ^s für $F = 0.125$ und $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-3}$.

dreidimensionale Darstellung zu erhalten.

Beachtet man die Identität von $\phi^s = -\pi$ und $\phi^s = \pi$, so kann man das Resultat als Moebius-Band der Breite 2ε interpretieren, das beim Durchlaufen des Winkels ϕ^s eine volle Drehung um die Achse $\zeta^u = 0$ vollführt. Man kann diese Topologie aus der linearisierten Hamilton-Funktion (2.33) in Polarkoordinaten ableiten. Setzt man dort $K = 0$ und kürzt die Radien r^u und r^s , so ergibt sich:

$$\rho \cos(\phi^u - \phi^s) - \nu \sin(\phi^u - \phi^s) = 0 \quad (2.36)$$

und damit

$$\tan(\phi^u - \phi^s) = \frac{\rho}{\nu} . \quad (2.37)$$

Damit erhält man für Σ^s für jeden vorgegebenen ϕ^s -Wert in der ζ^u -Ebene genau eine Richtung, welche durch den ϕ^u -Wert aus Gleichung (2.37) bestimmt wird. Diese Richtung variiert linear mit ϕ^s :

$$\phi^u = \phi^s + \bar{\phi} , \quad (2.38)$$

wobei die Konstante durch $\bar{\phi} = \arctan(\rho/\nu)$ gegeben ist. Für die Schnittfläche Σ^u ergibt sich ein analoges Bild.

Somit genügen zur Kennzeichnung eines Punktes auf den Schnittflächen Σ^u und Σ^s je zwei Koordinaten. Die einfachste Wahl ist, neben positiven Werten für r^u

und r^s auch negative Werte zuzulassen. Damit kann ein Punkt in Σ^u durch die Angabe von (ϕ^u, r^s) und ein Punkt in Σ^s durch die Angabe von (ϕ^s, r^u) spezifiziert werden. Abbildung 2.19 zeigt die zu Rechtecken „ausgerollten“ Schnittflächen Σ^u und Σ^s .

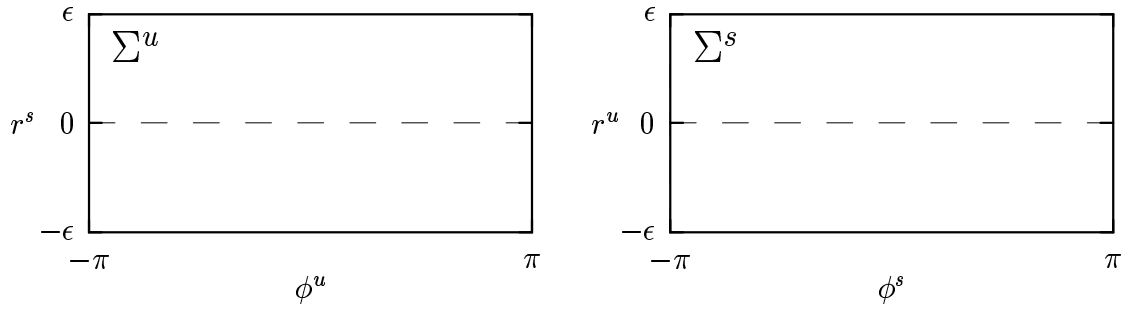


Abbildung 2.19: Die „ausgerollten“ Schnittflächen Σ^u und Σ^s . Für die „Radien“ r^s und r^u sind auch negative Werte zugelassen.

2.4.5 Die lokale Abbildung \mathcal{A}_l

Im folgenden wird eine Poincaré-Abbildung $\mathcal{A} : \mathcal{D}^u \rightarrow \Sigma^u$ auf einem Gebiet $\mathcal{D}^u \subset \Sigma^u$ konstruiert und ihre Dynamik beschrieben. Abbildung 2.16 gibt einen Hinweis, wie dabei vorzugehen ist. Es ist angebracht, die Abbildung \mathcal{A} in zwei Teilabbildungen zu unterteilen,

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_l \circ \mathcal{A}_g, \quad (2.39)$$

wobei die „globale“ Abbildung $\mathcal{A}_g : \mathcal{D}^u \rightarrow \Sigma^s$ ein Gebiet \mathcal{D}^u in Σ^u entlang dem homoklinen Orbit Γ nach Σ^s abbildet und die „lokale“ Abbildung $\mathcal{A}_l : \mathcal{D}^s \rightarrow \Sigma^u$ ein Gebiet \mathcal{D}^s in Σ^s zurück nach Σ^u abbildet.

Zunächst sei das Augenmerk auf die lokale Abbildung \mathcal{A}_l gerichtet. Man betrachte einen Orbit, der zum Zeitpunkt $t = 0$ die Fläche Σ^s schneidet und dort durch die Koordinaten (r_0^u, ϕ_0^s) bestimmt ist. T bezeichne die Flugzeit bis zum Erreichen von Σ^u . Für genügend kleine ε können mit ausreichender Genauigkeit die Lösungen (2.31) der linearisierten Differentialgleichungen verwendet werden. Aus der Schnittbedingung $r^u(T) = r_0^u \exp(\rho T) = \varepsilon$ ergibt sich die Flugzeit als

$$T = \frac{1}{\rho} \log \left(\frac{\varepsilon}{r_0^u} \right). \quad (2.40)$$

Mit der Lösung (2.31) der linearisierten Differentialgleichungen und dem Zusammenhang (2.38) zwischen den Winkelkoordinaten lassen sich die Koordinaten des Orbitschnittpunkts mit Σ^u und damit die lokale Abbildung \mathcal{A}_l berechnen:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_l(r_0^u, \phi_0^s) &= (r^s(T), \phi^u(T)) \\
 &= (r_0^s e^{-\rho T}, \phi_0^u - \nu T) \\
 &= \left(\varepsilon \exp\left(-\frac{\rho}{\rho} \log(\varepsilon/r_0^u)\right), \phi_0^s + \bar{\phi} - \frac{\nu}{\rho} \log(\varepsilon/r_0^u) \right) \\
 &= \left(r_0^u, \phi_0^s + \bar{\phi} - \frac{\nu}{\rho} \log(\varepsilon/r_0^u) \right). \tag{2.41}
 \end{aligned}$$

Folglich geht für $r_0^u \rightarrow 0$ der Winkel ϕ^u in Σ^u gegen unendlich. Eine Kurve in Σ^s , die die Linie $r^u = 0$ transversal schneidet, wird also unter \mathcal{A}_l auf zwei Spiralen in Σ^u abgebildet, die sich beide unendlich oft um den Torus Π^u winden. Abbildung 2.20 zeigt das vorausgesagte Verhalten, wobei hier zur Kontrolle nicht die linearisierten Gleichungen, sondern die Differentialgleichungen (1.17) des vollständigen Systems $\tilde{\Sigma}$ verwendet wurden.

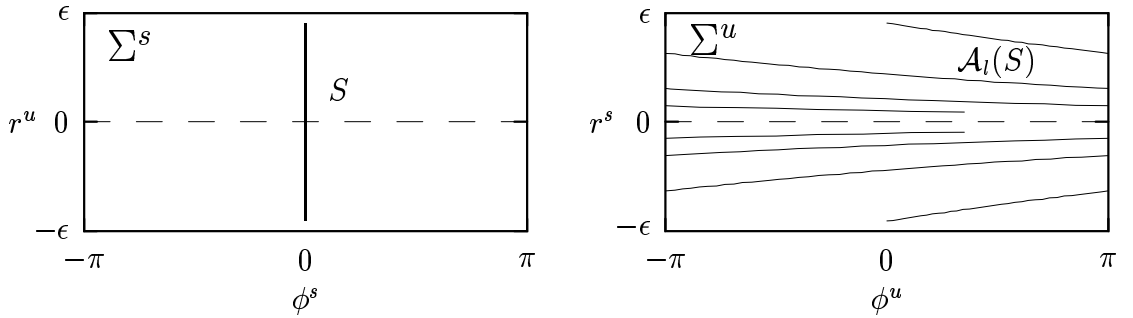


Abbildung 2.20: Das Bild einer Kurve S in Σ^s unter der lokalen Abbildung \mathcal{A}_l . Parameter: $F = 0.125$, $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-3}$, $S = \{(\phi^s, r^u) \in \Sigma^s : \phi^s = 0, |r^u| \leq \varepsilon\}$.

2.4.6 Die globale Abbildung \mathcal{A}_g

Als Hilfsmittel zur Beschreibung der lokalen Abbildung \mathcal{A}_l wurden die in der Nähe des Gleichgewichtspunktes linearisierten Differentialgleichungen verwendet. Zur Beschreibung der „Wiederkehr“, d.h. der globalen Abbildung \mathcal{A}_g , ist es dagegen notwendig, die Kenntnis des homoklinen Orbits Γ auszunutzen. Γ gewährleistet, daß eine Umgebung \mathcal{D}^u von Γ in der Schnittfläche Σ^u mit dem Fluß wieder nach Σ^s zurückgeführt wird. Zur genaueren Beschreibung dieses Vorgangs werden nun die Schnittpunkte des homoklinen Orbits mit den Schnittflächen des Flusses eingeführt:

$$q^u = \Sigma^u \cap \Gamma \tag{2.42a}$$

$$q^s = \Sigma^s \cap \Gamma. \quad (2.42b)$$

Mit diesen Bezeichnungen gilt offensichtlich $\mathcal{A}_g(q^u) = q^s$. Ferner bezeichne man die (eindimensionalen) Schnitte der invarianten Mannigfaltigkeiten mit den Schnittflächen folgendermaßen:

$$\sigma^u = W^u \cap \Sigma^u = \{(r^s, \phi^u) \in \Sigma^u : r^s = 0\} \quad (2.43a)$$

$$\omega^u = W^u \cap \Sigma^s \quad (2.43b)$$

$$\sigma^s = W^s \cap \Sigma^s = \{(r^u, \phi^s) \in \Sigma^s : r^u = 0\} \quad (2.43c)$$

$$\omega^s = W^s \cap \Sigma^u. \quad (2.43d)$$

Die invarianten Mannigfaltigkeiten W^u und W^s schneiden sich generisch transversal im homoklinen Orbit Γ . In den Schnittflächen Σ^u und Σ^s stellt sich dieser Sachverhalt wie in der schematischen Abbildung 2.21 dar. In Σ^u schneiden sich σ^u

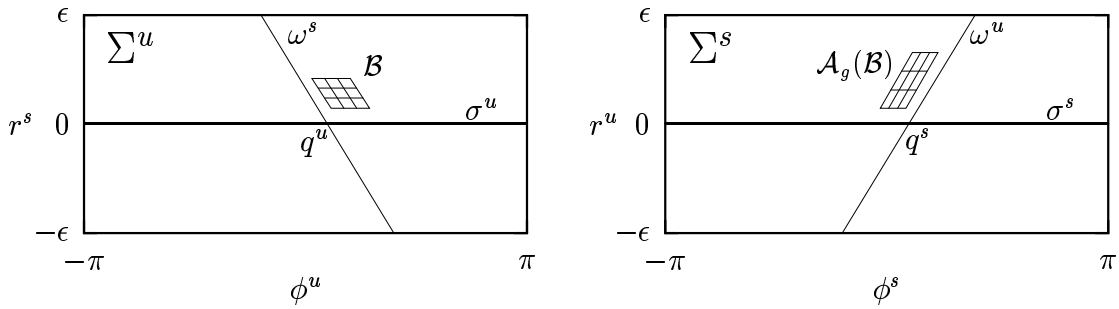


Abbildung 2.21: Die Schnitte $\sigma^{u,s}$ und $\omega^{u,s}$ der invarianten Mannigfaltigkeiten W^u und W^s mit den Schnittflächen Σ^u und Σ^s (schematisch). Zusätzlich ist das Parallelogramm \mathcal{B} und sein Bild unter der globalen Abbildung \mathcal{A}_g skizziert.

(das ist die Achse $r^s = 0$) und ω^s transversal im Punkt q^u . In Σ^s schneiden sich σ^s (das ist die Achse $r^u = 0$) und ω^u transversal im Punkt q^s . Unter der globalen Abbildung \mathcal{A}_g wird ω^s auf σ^s und σ^u auf ω^u abgebildet. Ein Parallelogramm \mathcal{B} in Σ^u , dessen Seiten entlang σ^u und ω^s ausgerichtet sind und das nah genug am homoklinen Orbit q^u liegt, wird also unter \mathcal{A}_g auf ein Parallelogramm $\mathcal{A}_g(\mathcal{B})$ in Σ^s abgebildet, dessen Seiten parallel zu ω^u und σ^s sind und das nahe bei q^s liegt. Ziel ist es, das Bild $\mathcal{A}_g(\mathcal{B})$ unter \mathcal{A}_l zurück nach Σ^u abzubilden und es mit dem Urbildparallelogramm \mathcal{B} zum Schnitt zu bringen. Nach Devaney ergibt sich bei „geeigneter Wahl“ von \mathcal{B} ein typisches Hufeisenszenario.

Eine geeignete Wahl von \mathcal{B} stellt sich im hier vorliegenden Fall als Problem heraus. Zum ersten ist man stets bis zu einem gewissen Grad auf Ausprobieren angewiesen, um ein Parallelogramm zu finden, das die gewünschten Wiederkehr-eigenschaften besitzt. Zum zweiten ist die Instabilität von Bewegungen in der

Nähe des homoklinen Orbits relativ groß. Es ist numerisch nahezu unmöglich, eine Umgebung von q^u entlang dem homoklinen Orbit Γ bis in eine Umgebung von q^s zu integrieren. Die meisten Orbits verfehlen bei numerischer Integration trotz genauestmöglicher Rechnung aufgrund sukzessive sich vergrößernder Rundungsfehler die Schnittfläche Σ^s .

Mit Hilfe von [Ste94] fand ich die folgende Lösung für dieses Problem. Die genaueste Angabe für einen Punkt des homoklinen Orbits liegt konstruktionsbedingt (siehe Unterabschnitt 2.4.2) für die „Mitte“ von Γ in der Poincaré-Fläche Π vor. Statt also in der Nähe des (nicht so genau bekannten) Punktes q^u ein abzubildendes Parallelogramm vorzugeben, habe ich ein Parallelogramm \mathcal{B}' in der Nähe von Γ in Π gewählt und dieses in der Zeit rückwärts bis nach Σ^u und in der Zeit vorwärts bis nach Σ^s integriert. Die globale Abbildung \mathcal{A}_g wird so also in zwei Teilabbildungen aufgeteilt:

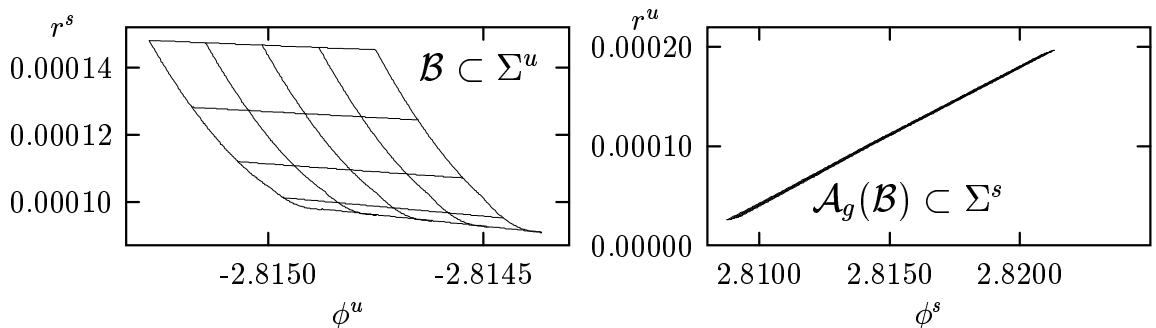
$$\mathcal{A}_g = \mathcal{A}_{g2} \circ \mathcal{A}_{g1} , \quad (2.44)$$

wobei

$$\mathcal{A}_{g1} : \Sigma^u \longrightarrow \Pi \quad (2.45a)$$

$$\mathcal{A}_{g2} : \Pi \longrightarrow \Sigma^s . \quad (2.45b)$$

Das Urbild von \mathcal{B}' unter \mathcal{A}_{g1} nenne ich \mathcal{B} , und \mathcal{B}' kann durch gezieltes Ausprobieren so gewählt werden, daß \mathcal{B} in etwa so aussieht wie gewünscht. Die Abbildung 2.22 zeigt das auf diese Weise gewonnene „Parallelogramm“ \mathcal{B} und sein Bild unter der globalen Abbildung $\mathcal{A}_g(\mathcal{B})$.



Abbildungung 2.22: Das Parallelogramm \mathcal{B} in Σ^u und sein Bild unter der globalen Abbildung \mathcal{A}_g in Σ^s für $F = 0.125$ und $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-3}$.

2.4.7 Die Konstruktion des Hufeisens

Mit der Vorarbeit, die in Unterabschnitt 2.4.5 auf die lokale Abbildung \mathcal{A}_l verwendet wurde, kann nun erschlossen werden, wie das Parallelogramm \mathcal{B} unter Anwendung der vollständigen Poincaré-Abbildung $\mathcal{A} = \mathcal{A}_l \circ \mathcal{A}_g : \Sigma^u \rightarrow \Sigma^u$ abgebildet wird. Das Parallelogramm $\mathcal{A}_g(\mathcal{B})$ in Σ^s liegt nahe der stabilen Mannigfaltigkeit σ^s . Wie in Unterabschnitt 2.4.5 ausgeführt wurde, werden Punkte von $\mathcal{A}_g(\mathcal{B})$ durch \mathcal{A}_l umso weiter in ϕ^u -Richtung um Π^u gewickelt, je näher sie bei der stabilen Mannigfaltigkeit σ^s liegen. Bei geeigneter Wahl von \mathcal{B} ist also zu erwarten, daß $\mathcal{A}(\mathcal{B})$ um Π^u gewickelt wird und dabei, u.U. mehrmals, das Urbild \mathcal{B} schneidet. In der Tat sagt Devaneys Theorem sogar, daß \mathcal{B} so gewählt werden kann, daß jede Anzahl N von transversalen Schnitten zwischen \mathcal{B} und $\mathcal{A}(\mathcal{B})$ möglich ist.

Abbildung 2.23 zeigt die Situation im hier vorliegenden Fall $F = 0.125$ mit der im letzten Abschnitt dargestellten Wahl von \mathcal{B} . Der Schnitt zwischen Urbild und Bild $\mathcal{A}(\mathcal{B}) \cap \mathcal{B}$ besteht aus zwei schmalen, nahezu waagerechten Streifen. Das Parallelogramm \mathcal{B} wird durch die Poincaré-Abbildung \mathcal{A} etwa fünfmal in ϕ^u -Richtung um den Torus Π^u gewickelt; zwei dieser Segmente schneiden das Urbildparallelogramm. Die Wahl von \mathcal{B} ist also gerade so getroffen worden, daß sich die Topologie einer klassischen Hufeisenabbildung ergibt.

In dieser Situation gibt es also eine \mathcal{A} -invariante Cantor-Menge \mathcal{C} im Schnitt $\mathcal{A}(\mathcal{B}) \cap \mathcal{B}$, auf der \mathcal{A} topologisch konjugiert ist zur Shift-Abbildung auf dem Folgenraum über zwei Symbolen. Einfache Folgerungen sind [Wig88]:

- \mathcal{A} besitzt periodische Orbits jeder Periode.
- \mathcal{A} besitzt überabzählbar unendlich viele nichtperiodische Orbits.
- \mathcal{A} besitzt einen auf \mathcal{C} dichten Orbit.

Werden diese drei Kriterien durch ein System simultan erfüllt, so bezeichnet man es häufig auch als *chaotisch* [Dev89].

Aus der Vergrößerung in Abbildung 2.23 (b) läßt sich der Streckungsfaktor der Poincaré-Abbildung \mathcal{A} abschätzen. Die Breite von \mathcal{B} in der ϕ^u -Richtung beträgt ca. $5 \cdot 10^{-4}$, die Breite von $\mathcal{A}(\mathcal{B})$ hingegen etwa $4.5 \cdot 2\pi$. Daraus ergibt sich ein Streckungsfaktor von etwa $5.5 \cdot 10^5$. Die entsprechende Abschätzung in der r^s -Richtung ergibt eine Höhe $4 \cdot 10^{-5}$ für \mathcal{B} und eine Höhe von 10^{-9} für $\mathcal{A}(\mathcal{B})$. Danach ist der Stauchungsfaktor etwa gleich $2.5 \cdot 10^{-5}$. Mittelt man den Streckungsfaktor und das Inverse des Stauchungsfaktors, so gelangt man für den Streckungsfaktor zu einem Wert von etwa 50 000. Infolgedessen ist es nicht verwunderlich, daß die numerischen Probleme so eklatant sind. Die starke Instabilität beruht u.a. auf der

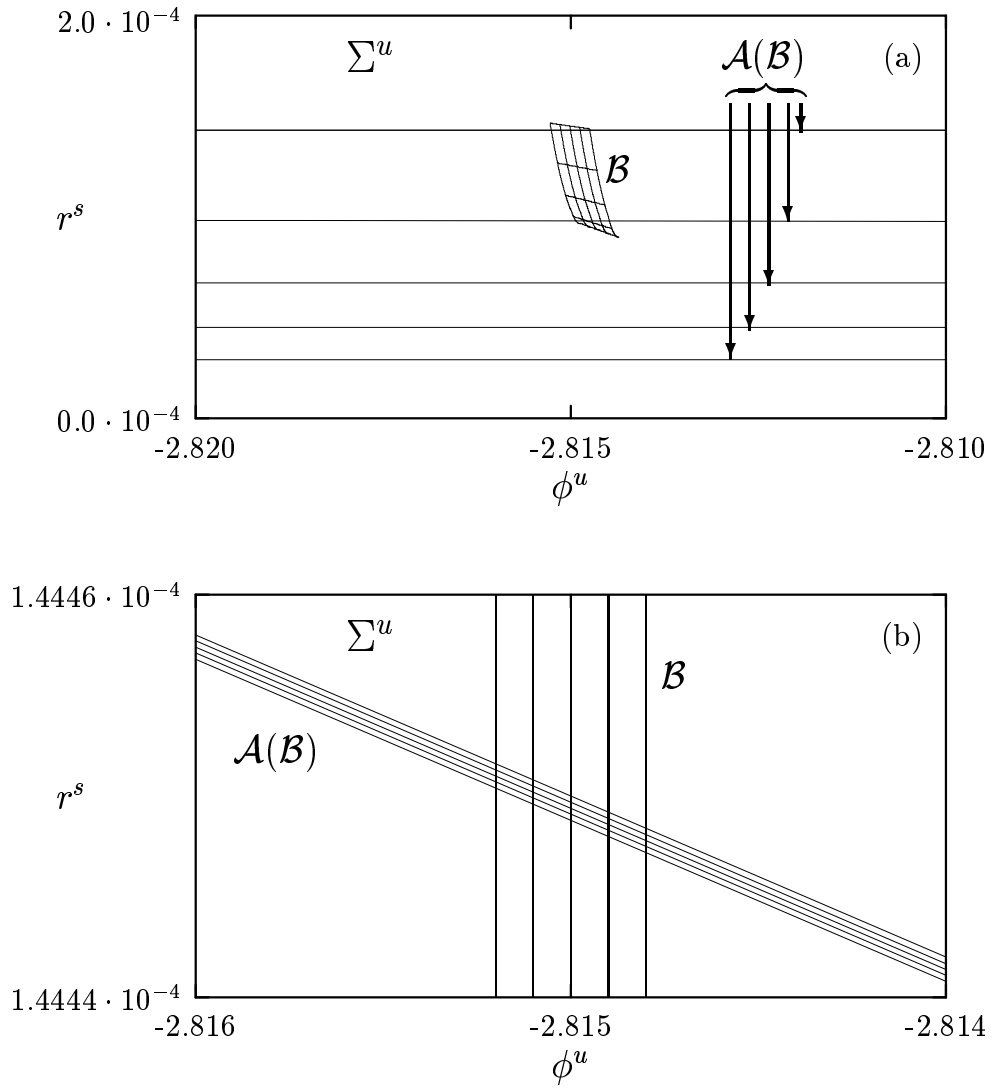


Abbildung 2.23: Das Parallelogramm \mathcal{B} und sein Bild unter der Poincaré-Abbildung \mathcal{A} in Σ^u für $F = 0.125$ und $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-3}$.

- (a) Die fünf nahezu horizontalen Linien sind Segmente des Bildes $\mathcal{A}(\mathcal{B})$, das sich mehrmals um den Torus Π^u windet.
- (b) Die Vergrößerung löst das obere der beiden Segmente von $\mathcal{A}(\mathcal{B}) \cap \mathcal{B}$ auf.

Notwendigkeit, die Schnittmannigfaltigkeiten Π^s und Π^u so klein zu wählen, daß die lokale Abbildung \mathcal{A}_l mit ausreichender Genauigkeit durch den linearisierten Fluß approximiert wird.

Kapitel 3

Die Streuung

Das Schwergewicht der Untersuchungen des 2. Kapitels lag auf der gebundenen Dynamik des Wasserstoffatoms im zirkular polarisierten elektrischen Feld. Informationen über Mikrosysteme werden jedoch oft mittels Streuexperimenten gewonnen.

In Abschnitt 1.3 wurde durch eine kanonische Transformation das raumfeste System Σ in das mitbewegte System Σ' überführt, das durch ein asymptotisch wie $-1/r$ verschwindendes Wechselwirkungspotential ausgezeichnet ist und somit im Gegensatz zu Σ ein echtes Streusystem darstellt (Beschleunigungseichung). Ich werde in Abschnitt 3.1 für Σ' geeignete asymptotisch konstante Streuvariablen einführen und die Streuabbildung analysieren, welche einen vollständigen Satz asymptotischer In-Größen auf einen Satz asymptotischer Out-Größen abbildet.

Die Beschleunigungseichung ist motiviert durch eine unitäre Transformation des analogen Quantensystems, welche von Henneberger angegeben worden ist [Hen68]. Die Elektron-Proton-Streuung im Mikrowellen- oder Laserfeld ist quantenmechanisch auf dieser Grundlage numerisch untersucht [DiFa87] und ansatzweise auch analytisch mittels störungstheoretischer Methoden behandelt worden [Fra⁺90]. Die Aussagekraft klassischer Rechnungen wurde erst später entdeckt. Vor allem Wiesenfeld hat einige Beiträge in dieser Richtung geliefert [Wie90, Wie91, Wie92a, Wie92b], mit denen ich mich später noch kritisch auseinandersetzen werde. Wiesenfelds Verdienst ist die (erstaunlich späte) Anwendung von Konzepten, die anhand von klassisch chaotischen Streusystemen entwickelt worden sind und heute unter den Begriffen *irreguläre* oder *chaotische Streuung* subsumiert werden.

Bei der Untersuchung von Streusystemen interessiert man sich in der Regel für *Streufunktionen*, also funktionale Beziehungen zwischen In-Variablen, die den asymptotischen Anfangszustand eines Systems beschreiben, und Out-Variablen, die den asymptotischen Endzustand nach der Wechselwirkung charakterisieren.

Abschnitt 3.2 ist der numerischen Bestimmung von Streufunktionen für das System Σ' gewidmet. Dabei werden zu verschiedenen In-Energien die Out-Variablen als Funktionen einer Zeitvariablen, welche die einlaufende Asymptote beschreibt, bestimmt.

Die Berechnung von Streufunktionen für klassische Modelle chemischer Prozesse [RaMi71, Got75] hat noch vor der Entdeckung des Konzepts der chaotischen Streuung aufgezeigt, daß unerwartete Phänomene — Cluster von Singularitäten der Streuabbildung oder große Schwankungen von Verzögerungszeiten und Ablenkungswinkeln — neuer theoretischer Erklärungen bedürfen.

Die *fraktale Verteilung der Streusingularitäten* dient seither zur Charakterisierung irregulärer Streuung. Jung und Scholz haben anhand einfacher Modelle die folgende Erklärung für die numerisch gefundene fraktale Struktur der Singularitäten der Streufunktionen geliefert [JuSc87]. Durch transversale homokline oder heterokline Verbindungen von instabilen periodischen Punkten wird eine lokalisierte invariante hyperbolische Menge (*Repulsor*) im Phasenraum erzeugt [Sma65]. Die stabilen Mannigfaltigkeiten des Repulsors reichen bis in den Raum der asymptotischen In-Werte und bilden dort eine fraktale Struktur. Ein Orbit, der auf einer stabilen Mannigfaltigkeit gestartet wird, wird eingefangen — die Streufunktion hat an dieser Stelle eine Singularität, für die die Verzögerungszeit den Wert unendlich erreicht. Singularitäten, die auf den Einfang durch hyperbolische Orbits zurückzuführen sind, werde ich im folgenden als *hyperbolische Singularitäten* bezeichnen.

Zahlreiche Systeme sind auf chaotische Streueigenschaften hin untersucht worden. Hinweise auf physikalische Anwendungen findet man z.B. in dem Übersichtsartikel [OtTé93]. Ott und Tél geben hier Beispiele aus der Himmelsmechanik, Atom- und Kernphysik, Hydrodynamik, Theoretischen Chemie, Dynamik magnetischer Feldlinien und geladener Teilchen in elektromagnetischen Feldern etc. Weitere Literatur und Hinweise auf Anwendungen findet man auch in den Artikeln von Eckhard [Eck88], Smilansky [Smi91] und Blümel [Blü92].

Für zeitabhängige Streusysteme (und andere Systeme, die ich in Kapitel 4 genau definieren werde) treten neben den hyperbolischen noch andere Streusingularitäten auf, deren Existenz nicht auf den Einfang durch eine hyperbolische lokalisierte Menge zurückgeführt werden kann. Da die Energie in zeitperiodischen Systemen keine Konstante der Bewegung ist, sind im Falle eines asymptotisch attraktiven Potentials *parabolisch entweichende Orbits* möglich, d.h. Streuorbits mit asymptotischer Out-Energie $E_{out} = 0$. Für die entsprechenden asymptotischen Anfangsbedingungen hat die Streuabbildung eine, wie ich sie nennen werde, *parabolische Streusingularität*. Falls parabolische Singularitäten existieren, dominieren sie die Gestalt der Streufunktionen; die hyperbolischen Singularitäten verschwinden in der charakteristischen Struktur, die durch die parabolischen Singularitäten

erzeugt wird. Es gelingt dann nur mittels recht aufwendiger Suchverfahren, hyperbolische Singularitäten aufzufinden [See95]. Ich werde die sogenannte *horizontale Struktur* der Streufunktionen, die nahe den parabolischen Streusingularitäten zu finden ist und die für das Verständnis von Skalierungseigenschaften der Streufunktionen notwendig ist, in Abschnitt 3.3 erläutern. Die verschiedenen Generationen der horizontalen Struktur werden durch unterschiedlich weite Kepler-Exkursionen erzeugt. Im gleichen Abschnitt werde ich auch kurz auf die *vertikale Struktur* der Streufunktionen eingehen, deren Generationen durch unterschiedliche Anzahlen von Kepler-Exkursionen unterschieden werden.

Während in der Nähe hyperbolischer Streusingularitäten die Streufunktionen eine exponentielle Skalierung aufweisen, werde ich in Abschnitt 3.4 nachweisen, daß in der Nähe parabolischer Singularitäten die Streufunktionen algebraisch skalieren. Der Skalierungsexponent kann durch Ausnutzung der asymptotischen Potentialeigenschaften bestimmt werden. Bei der Argumentation wird lediglich die asymptotische Gestalt der Wechselwirkung und die Zeitperiodizität des Targets ausgenutzt. Folglich werden die Streufunktionen für alle jene periodisch zeitabhängigen Systeme algebraisch skalieren, welche durch eine asymptotisch attraktive Coulomb-Wechselwirkung beschrieben werden.

An dieser Stelle ist es angebracht, einige Worte über die *Ionisation* von Wasserstoffatomen im Strahlungsfeld, d.h. den photoelektrischen Effekt zu sagen — einen Aspekt des hier betrachteten Systems, den ich in dieser Arbeit nicht berücksichtige, der jedoch in der Literatur eine wichtige Rolle spielt. In der Folge der bahnbrechenden Experimente von Bayfield und Koch [BaKo74] zur Multiphotonenionisation von Wasserstoff sind zahlreiche theoretische und experimentelle Arbeiten erschienen, die dem Aufbrechen der Proton-Elektron-Bindung in starken elektromagnetischen Felder gewidmet waren. An den Experimenten von Bayfield und Koch war neu, daß H-Atome nicht aus dem Grundzustand ionisiert, sondern zuvor auf ein hohes Energie-Niveau ($n \approx 66$) angeregt wurden. Diese sogenannten *Rydberg-Atome* wurden einem starken Mikrowellenfeld ausgesetzt. Schon aus energetischen Gründen waren mindestens 80 Photonen notwendig, um ein Elektron zu ionisieren. Festgestellt wurde die Existenz einer Grenzfeldstärke, oberhalb der Ionisation einsetzte — im Gegensatz zur Einsteinschen Grenzfrequenz beim Photoeffekt [Ein05].

Es gab verschiedene Ansätze, die gemessenen Daten theoretisch zu erklären: Als Übersichtsartikel empfehlen sich [Cas⁺87, Jen⁺91, Jen92, MoKo92, She93]. Die Gültigkeit von Skalierungseigenschaften bei den gemessenen Ionisationskurven, die auf klassischen Ursachen basiert (Abhängigkeit nur von skaliertem Feldstärke $n^4 F$ und skaliertem Frequenz $n^3 \omega$), legt die Anwendung klassischer Theorien nahe

[LePe79, Jen84, LeRi85].

Bei den theoretischen Arbeiten zur Mikrowellenionisation von Rydberg-Atomen stand zunächst der Fall des linear polarisierten (LP) Feldes im Mittelpunkt des Interesses [Cas⁺87, CaMo89, Blü⁺91, Ric92, Ben⁺92, Lai⁺92, Hil⁺92, Ben⁺93]. Etwas später begann man sich für den Fall der zirkularen Polarisation (ZP) zu interessieren [Fu⁺90, How92, GrFa92, Kap92, KaNa93, Zak⁺93, GeZa95, FaUz95]. Diesem Problem gebührt jedoch besondere Beachtung, da wegen der Transformierbarkeit des ZP-Falls in ein zeitunabhängiges Hamiltonsches Differentialgleichungssystem (siehe Abschnitt 1.2) bei der Multiphoton-Ionisation wesentlich höhere Feldstärken erforderlich sind als im LP-Fall [Fu⁺90].

3.1 Definition der Streuabbildung

Die *Streuabbildung* führt einen vollständigen Satz asymptotisch konstanter In-Größen α_{in} in einen vollständigen Satz asymptotisch konstanter Out-Größen α_{out} über. In- und Out-Größen bezeichnet man zusammenfassend als *Streuvariablen*. Für ein Hamiltonsches Streusystem von f Freiheitsgraden besteht ein vollständiger Satz von Streuvariablen aus $2f$ dynamischen Größen, welche die Asymptoten einer Streutrajektorie eindeutig charakterisieren. Vorzugsweise wählt man bei Hamilton-Systemen einen Satz kanonischer Variablen.

In Abschnitt 1.3 habe ich gezeigt, wie man durch kanonische Transformationen das Wasserstoffsystem im zeitabhängigen elektrischen Feld in das Streusystem Σ' mit asymptotischer Coulomb-Wechselwirkung überführen kann. Als Hamilton-Funktion erhält man in Σ' gemäß Gleichung (1.34):

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 - \frac{1}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}(t)|} . \quad (3.1)$$

Hier und im folgenden werden im System Σ' bei allen Größen die Striche weggelassen. $\boldsymbol{\rho}(t)$ ist der (i.a. periodisch durchlaufene) Weg des Protons. Für große r geht H in die zeitunabhängige Hamilton-Funktion des reinen Coulomb-Problems über:

$$H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 - \frac{1}{|\mathbf{r}|} . \quad (3.2)$$

H_0 schreibt sich im Fall ebener Bewegung mit den Polarkoordinaten

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (3.3a)$$

$$\phi = \arg(x, y) \quad (3.3b)$$

$$p_r = \dot{r} \quad (3.3c)$$

$$p_\phi = r^2 \dot{\phi} \quad (3.3d)$$

als

$$H_0(r, \phi, p_r, p_\phi) = \frac{p_r^2}{2} + \frac{p_\phi^2}{2r^2} - \frac{1}{r} . \quad (3.4)$$

Da der Winkel ϕ in H_0 eine zyklische Variable ist, ist neben der Energie auch der konjugierte (Dreh-)Impuls $L = p_\phi$ asymptotisch konstant.

Horstmann hat in seiner Diplomarbeit [Hor89] eine zeitabhängige kanonische Transformation angegeben, welche die Phasenraum-Koordinaten (r, ϕ, p_r, p_ϕ) auf einen Satz von Variablen abbildet, die im Falle asymptotischer Coulomb-Wechselwirkung für $r \rightarrow \infty$ konstant werden. Ich werde seinen Gedankengang nicht im einzelnen nachvollziehen, sondern nur die Ergebnisse referieren, um für Σ' einen vollständigen Satz kanonischer Streuvariablen anzugeben.

Die ungebundene Bewegung unter der H_0 -Dynamik verläuft auf Hyperbeln im Ortsraum. Der minimale Abstand r_0 eines Elektrons der Energie $H_0 = E > 0$ vom Ursprung ergibt sich durch Nullsetzen von p_r in (3.4) als

$$r_0 = \frac{1}{2E} \left(-1 + \sqrt{1 + 2EL^2} \right) . \quad (3.5)$$

Es bezeichne nun τ den Zeitpunkt, zu dem sich das Elektron im Umkehrpunkt $r = r_0$ befindet, und φ den zugehörigen Polarwinkel $\phi(\tau)$. τ und φ lassen sich als Funktionen der Polarkoordinaten r und ϕ , der Energie E , des Drehimpulses L und der Zeit t schreiben ([Gol85], S. 69 und S. 83 ff.):

$$\tau = t \pm \frac{1}{\sqrt{2E}} \int_{r_0}^r \frac{dr'}{\sqrt{1 - \frac{L^2}{2Er'^2} + \frac{1}{Er'}}} \quad (3.6a)$$

$$\varphi = \phi \pm \int_{r_0}^r \frac{dr'}{r'^2 \sqrt{\frac{2E}{L^2} + \frac{2}{L^2 r'} - \frac{1}{r'^2}}} . \quad (3.6b)$$

Das obere Vorzeichen steht dabei jeweils für $t < \tau$, das untere für $t > \tau$. Die Integrale lassen sich explizit berechnen, und bei anschließender Substitution von r_0 ergibt sich:

$$\tau = t \pm \frac{1}{\sqrt{2E}} \left[\sqrt{r^2 + \frac{r}{E} - \frac{L^2}{2E}} - \frac{1}{2E} \log \left(\frac{2E \sqrt{r^2 + \frac{r}{E} - \frac{L^2}{2E}} + 2Er + 1}{\sqrt{1 + 2EL^2}} \right) \right] \quad (3.7a)$$

$$\varphi = \phi \pm \arccos \left(\frac{L^2 - r}{r \sqrt{1 + 2EL^2}} \right) . \quad (3.7b)$$

In [Hor89] wird nun gezeigt, daß die durch diese Gleichungen gegebene zeitabhängige Transformation

$$\Psi_t : (r, \phi, p_r, p_\phi) \longmapsto (E, \varphi, \tau, L) \quad (3.8)$$

kanonisch ist. Das Ziel ist damit erreicht: Man hat einen Satz von asymptotisch konstanten Variablen, die durch eine (zeitabhängige) kanonische Transformation aus den Phasenraumkoordinaten hervorgehen und jede Asymptote der H -Dynamik (also jeden Orbit der H_0 -Dynamik) eindeutig beschreiben.

\mathcal{A} bezeichne den Raum der Streuvariablen. Die Definition der Streuabbildung

$$\begin{aligned} \sigma : \quad \mathcal{A} &\longrightarrow \mathcal{A} \\ (E_{in}, \varphi_{in}, \tau_{in}, L_{in}) &\longmapsto (E_{out}, \varphi_{out}, \tau_{out}, L_{out}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

macht nun keine Schwierigkeiten mehr, wenn man mit $\Phi_{t',t}$ die Flußabbildung in den Koordinaten (3.3) bezeichnet:

$$\sigma = \lim_{t' \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_{t'} \circ \Phi_{t',t} \circ \Psi_t^{-1}. \quad (3.10)$$

Für den im folgenden behandelten Fall zirkularer Streuung weist die Streuabbildung zwei *Symmetrien* auf:

1. Die Konstanz des Jacobi-Integrals unter der H -Dynamik kann ausgenutzt werden, um die asymptotischen Variablen E und L zu verknüpfen. Mit Gleichung (1.36) folgert man:

$$C - \frac{F}{2\omega^2} = E_{in} - \omega L_{in} = E_{out} - \omega L_{out}. \quad (3.11)$$

Damit erübrigt sich die Angabe z.B. des Out-Drehimpulses L_{out} , da er aus E_{in} , L_{in} und E_{out} leicht auszurechnen ist.

2. Die zweite Symmetrie der Streuabbildung ist eine Konsequenz der gleichmäßigen Rotation des durch das kreisende Proton erzeugten Feldes. Eine Änderung der In-Größe φ_{in} um den Winkel ϑ entspricht einer Drehung der In-Hyperbel um ϑ . Eine gleichzeitige Änderung der Zeitvariablen τ_{in} um ϑ/ω hat jedoch zur Folge, daß auch das Potential um den Winkel ϑ gedreht ist. Die Folge ist, daß ein Elektron, das mit den In-Werten $\varphi_{in} + \vartheta$ und $\tau_{in} + \vartheta/\omega$ einfällt, exakt die gleiche Dynamik hat wie ein Elektron mit den In-Werten φ_{in} und τ_{in} — abgesehen von einer Drehung des Koordinatensystems. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann also z.B. der Einfallswinkel φ_{in} gleich null gesetzt werden.

Bei Berücksichtigung der beiden Symmetrien genügt zur vollständigen Beschreibung des Streuprozesses also die Bestimmung der drei Out-Größen E_{out} , τ_{out} und φ_{out} als Funktionen der drei In-Größen E_{in} , τ_{in} und L_{in} (oder C). Man vergleiche dieses Resultat mit dem Fall eines zeitunabhängigen Hamilton-Systems zweier Freiheitsgrade mit schnell abfallendem Potential: Dort genügt es ebenfalls, drei Out-Größen (z.B. den Polarwinkel ϕ_{out} , den Drehimpuls L_{out} und die Verzögerungszeit Δt) als Funktionen dreier In-Größen (z.B. des Polarwinkels ϕ_{in} , des Drehimpulses L_{in} und der Energie E_{in}) zu bestimmen.

3.2 Numerische Bestimmung der Streuabbildung

Die numerische Berechnung der Streuabbildung σ bei gegebenem Systemparameter F gliedert sich in folgende Schritte:

1. Vorgabe des Jacobi-Integrals C und der asymptotischen In-Werte E_{in} und τ_{in} . Der In-Winkel φ_{in} kann aus den oben genannten Gründen gleich null gesetzt werden, und der In-Drehimpuls L_{in} ist Funktion von C und E_{in} : Es gilt mit (3.11): $L_{in} = \frac{1}{\omega}(E_{in} - C + F/2\omega^2)$. Es sei hier noch einmal daran erinnert, daß stets ohne Einschränkung $\omega = 1$ gesetzt werden kann. Zusätzlich wird ein großer Abstand R gewählt, bei dem die Berechnung begonnen werden soll.
2. Umrechnung der asymptotischen In-Werte $(E_{in}, \tau_{in}, \varphi_{in}, L_{in})$ auf die Polarkoordinaten $(r, \phi, p_r, p_\phi, t)$ mit (3.7) und anschließend auf kartesische Koordinaten (x, y, p_x, p_y, t) in Σ' via (3.3).
3. Numerische Integration des Orbits mit den kanonischen Bewegungsgleichungen (1.35) in Σ' . Eine Regularisierung nahe der Coulomb-Singularität stellte sich als unnötig heraus.
4. Die Integration wird abgebrochen, falls für $r > R$ die Coulomb-Energie $H_0(x, y, p_x, p_y)$ größer als null ist. In diesem Fall kann davon ausgegangen werden, daß das Elektron nicht mehr zum Proton zurückkehren wird. Falls bei Überschreiten des Abstands $r = R$ die Coulomb-Energie kleiner als null ist, wird der Orbit weiterintegriert, bis der Radius $r = 2R$ erreicht wird oder das Teilchen umkehrt und zum Proton zurückfällt. Im letzteren Fall wird wieder zunächst bis zum Abbruchradius R weiterintegriert, während im ersteren Fall erneut die Coulomb-Energie als Kriterium verwendet wird, ob bis $r = 3R$ weiterintegriert wird, etc.

5. Nach Abbruch der Integration werden die kartesischen auf Polarkoordinaten und anschließend auf die asymptotischen Out-Werte $(E_{out}, \varphi_{out}, \tau_{out}, L_{out})$ umgerechnet. Die Güte der numerischen Berechnung kann gemäß (3.11) durch den Vergleich von $E_{out} - \omega L_{out}$ mit $C - F/2\omega^2$ kontrolliert werden.

Bei fest vorgegebenen Werten von F und C operiert die Streuabbildung σ also auf einer Untermannigfaltigkeit $\mathcal{A}_{F,C}$ von \mathcal{A} , auf der E_{in} und τ_{in} als Polarkoordinaten jede In-Asymptote eindeutig (bis auf die erwähnten Symmetrien) kennzeichnen. Abbildung 3.1 zeigt eine Übersicht über die Mannigfaltigkeit $\mathcal{A}_{F,C}$ mit $F = 1$ und $C = 0.5$. Für ein Raster von 450×450 asymptotischen Anfangsbedingungen

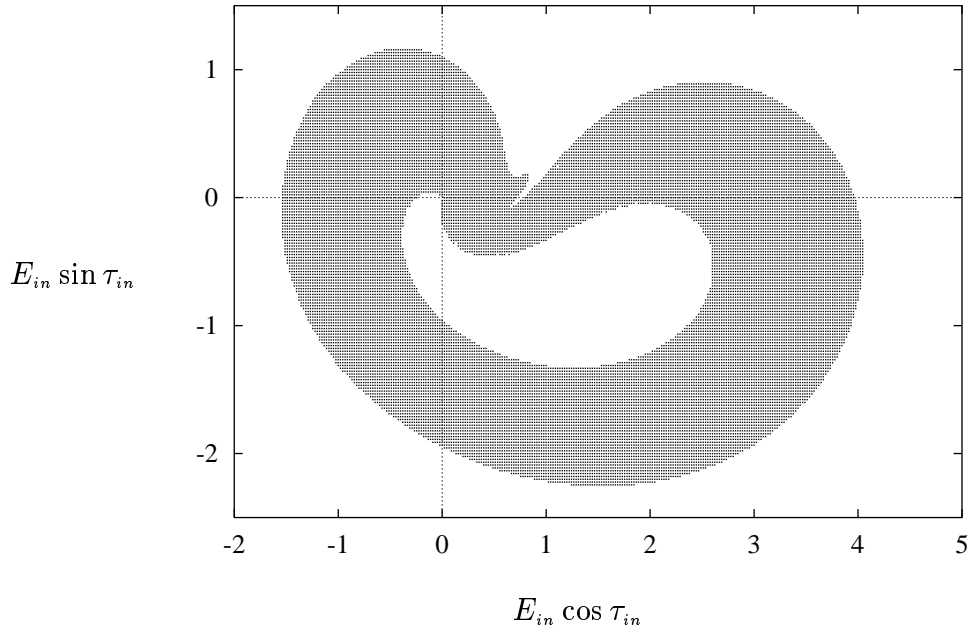


Abbildung 3.1: *Asymptotische Anfangsbedingungen in $\mathcal{A}_{F,C}$ mit $\Delta t \geq 0.01$ für $F = 1$ und $C = 0.5$.*

wurden die zugehörigen Streutrajektorien numerisch integriert. Markiert wurden diejenigen Orbits, für welche die *Verzögerungszeit* $\Delta t = \tau_{out} - \tau_{in}$ den Wert 0.01 überschreitet. Da für Streuorbits des reinen Coulomb-Problems $\Delta t = 0$ gilt, bekommt man so die Menge der Orbits, die sich in ihrem Zeitverhalten signifikant von Hyperbeln des reinen Coulomb-Problems unterscheiden.

Die Abbildung zeigt einen Ring von Orbits mit $\Delta t > 0.01$, während in den weißen Flächen innerhalb und außerhalb des Rings Orbits initialisiert sind, die Bahnen des reinen Coulomb-Problems ähneln. Da für Einfangorbits die Verzögerungszeit Δt gegen unendlich geht, befinden sich alle Singularitäten der Streuabbildung innerhalb des markierten Gebietes. Für eine detailliertere Aufklärung der

Struktur von $\mathcal{A}_{F,C}$ wäre es z.B. möglich, verschiedene Verzögerungszeiten durch verschiedene Farben zu codieren. Alternativ untersuche ich hier verschiedene eindimensionale Untermengen in $\mathcal{A}_{F,C}$ und setze aus den Einzelresultaten — unter Berücksichtigung von Abbildung 3.1 — das Gesamtbild zusammen.

Dazu verwende ich im folgenden monoenergetische Elektronenensembles der Energie E_{in} , deren In-Phasen τ_{in} homogen in einem Intervall verteilt sind. In Abbildung 3.1 entspricht dies einem homogen auf einem Kreissegment vom Radius E_{in} verteilten Ensemble. Die Berechnung der Streuabbildung reduziert sich auf die Bestimmung der drei *Streufunctionen* $E_{out}(\tau_{in})$, $\tau_{out}(\tau_{in})$ und $\varphi_{out}(\tau_{in})$.

Die Abbildungen 3.2 bis 3.7 zeigen eine Serie von Streufunctionen für feste Parameterwerte $F = 1$ und $C = 0.5$. Die In-Energie wird sukzessive erniedrigt, über die Stufen $E_{in} = 5.0, 4.0, 3.0, 1.5, 0.5$ und 0.1 , um einen Überblick über das Verhalten der Streuabbildung im Raum $\mathcal{A}_{F,C}$ zu gewinnen. Mit den gewählten Parameterwerten hat man ferner stets $\omega L = E$. Für jedes Bild wurden auf der τ_{in} -Achse 5000 homogen verteilte Anfangsbedingungen bei $r = R = 1000$ gestartet und mit dem Runge-Kutta-Fehlberg-Verfahren [EnRe87] integriert, bis die oben erläuterten Abbruchbedingungen erfüllt waren.

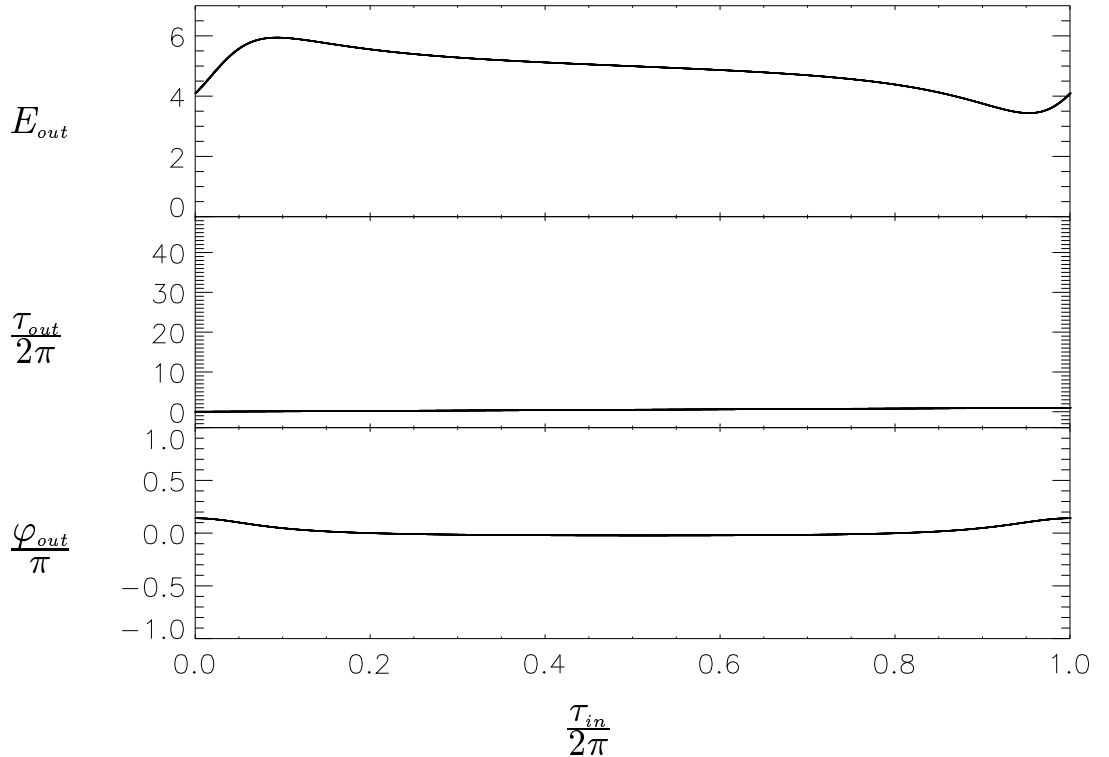


Abbildung 3.2: *Streufunctionen für $F = 1$, $C = 0.5$ und $E_{in} = 5.0$.*

In Abbildung 3.2 ist $E_{in} = 5$ und somit auch $\omega L_{in} = 5$. Aufgrund von Abbildung 3.1 erwartet man, daß ein Elektron dieser Einfallenergie durch das Feld des rotierenden Protons nur schwach beeinflusst wird. Man erhält auch wirklich

reguläre Streufunktionen, die den Streufunktionen für das ungestörte Coulomb-Problem ähneln. Die Streuvariablen $\alpha = (E, \varphi, \tau, L)$ sind ja gerade so gewählt, daß im Falle reiner Coulomb-Streuung $\alpha_{out} = \alpha_{in}$ gilt. Somit bekäme man für das reine Coulomb-Problem als Streufunktionen hier die konstante Funktion $E_{out}(\tau_{in}) = E_{in} = 5$, die identische Funktion $\tau_{out}(\tau_{in}) = \tau_{in}$ und die konstante Funktion $\varphi_{out}(\tau_{in}) = \varphi_{in} = 0$. Tatsächlich schwanken Out-Energie und -Winkel nur schwach um ihre ungestörten Konstanten, während $\tau_{out}(\tau_{in})$ kaum von der identischen Funktion zu unterscheiden ist: Aus Abbildung 3.1 kann man entnehmen, daß τ_{out} hier nie mehr als $\Delta t = 0.01$ von τ_{in} abweicht.

Für die etwas niedrigere Einfallenergie $E_{in} = 4.0$ in Abbildung 3.3 machen sich die Störungen gegenüber reiner Coulomb-Streuung schon wesentlich stärker bemerkbar. Vor allem die Out-Energie schwankt stark und fällt für $\tau_{in}/2\pi \approx 0.97$ nahezu

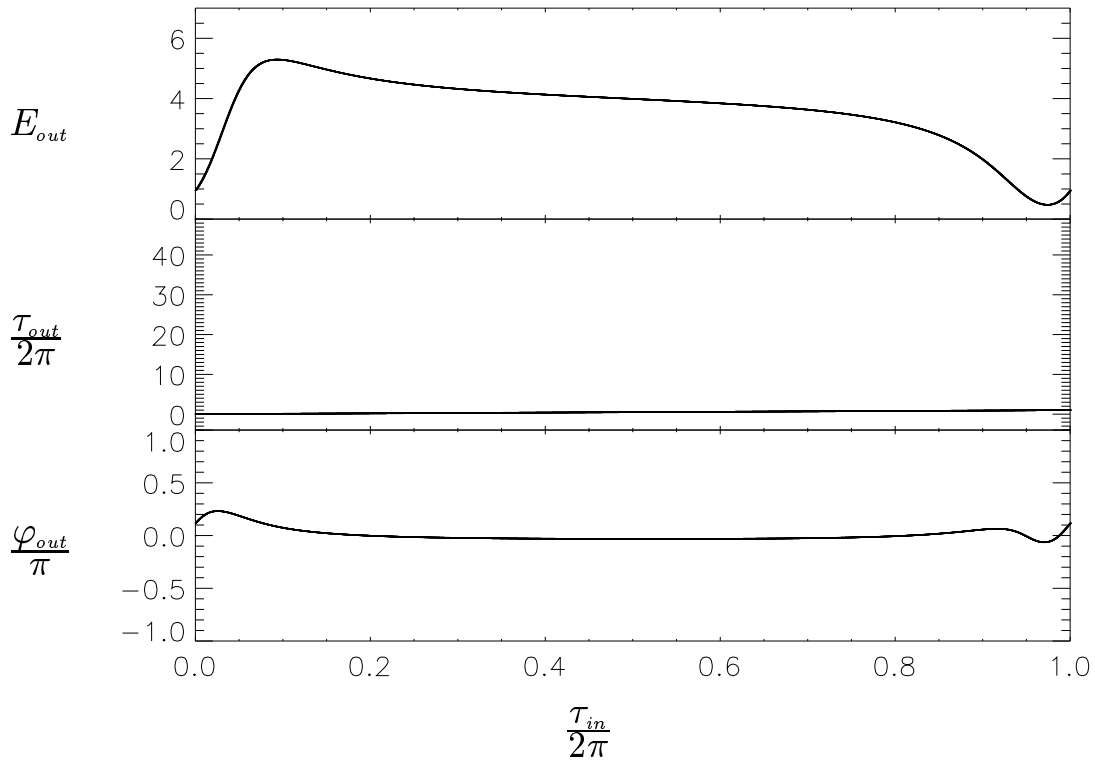


Abbildung 3.3: Wie Abbildung 3.2, jedoch $E_{in} = 4.0$.

auf null ab. Fällt das Elektron also zu einer geeigneten Phase des Protonenumlaufs ein, so wird ihm seine Energie nahezu vollständig entzogen, und es läuft asymptotisch auf einer Parabel aus. Andererseits hat man für $\tau_{in}/2\pi \approx 0.08$ eine Out-Energie von etwa 5.3, d.h. bei Eintreffen zu einer anderen Phase gewinnt das Elektron beim Stoß Energie. Nichtsdestoweniger sind die Streufunktionen nach wie vor regulär: Es gibt keine Streusingularitäten, geschweige denn fraktale Mengen von Streusingularitäten.

Dies ändert sich, wenn man die Einfallenergie weiter auf $E_{in} = 3.0$ erniedrigt (Abbildung 3.4). Im Bereich $0.89 < \tau_{in}/2\pi < 1.05 \pmod{1}$ sind die Streufunktionen nun irregulär. Auf einigen Intervallen erscheinen die Streufunktionen vollständig

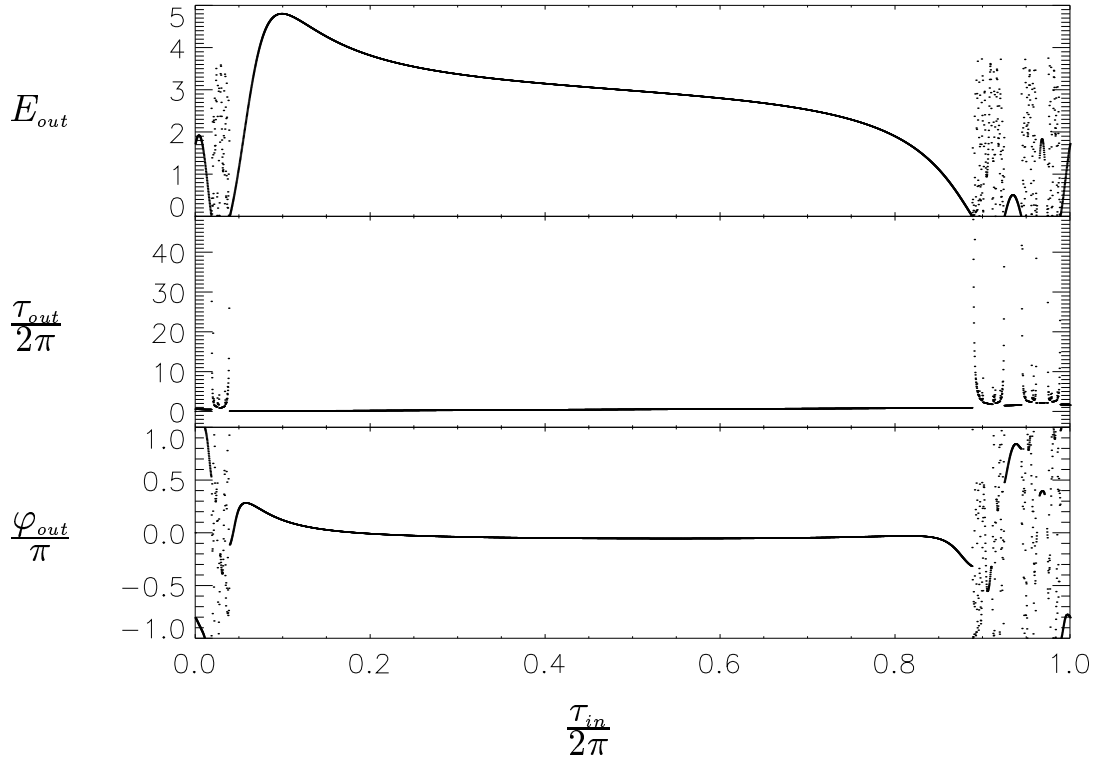
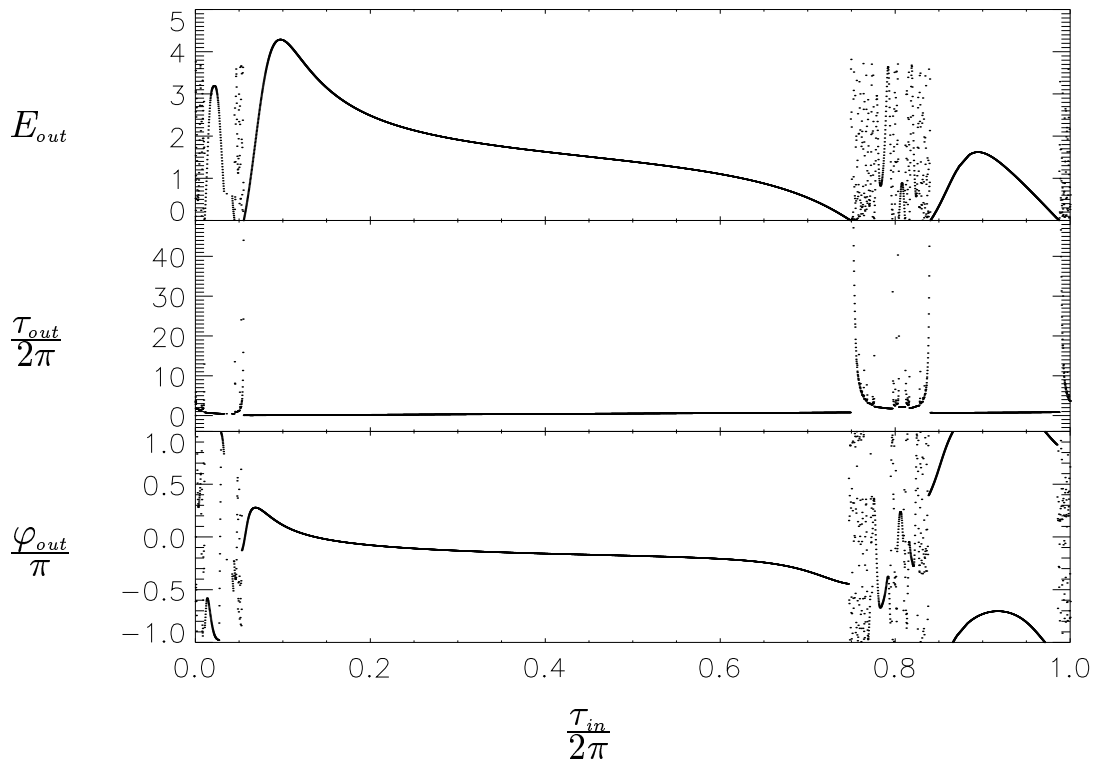
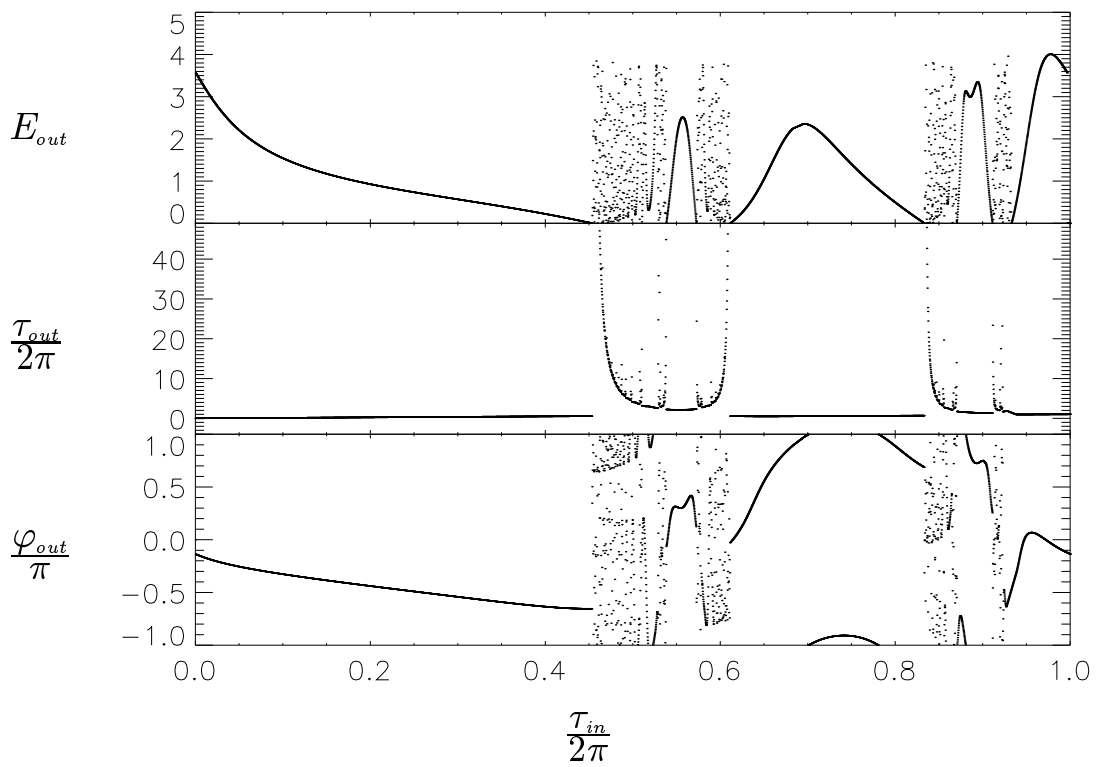


Abbildung 3.4: Wie Abbildung 3.2, jedoch $E_{in} = 3.0$.

unstetig, verwoben damit finden sich jedoch überall reguläre Intervalle. In den irregulären Intervallen schwankt E_{out} in einem Intervall von 0 bis ca. 3.8, τ_{out} geht mit irregulären Schwankungen gegen unendlich, und φ_{out} hat irregulär verteilte Werte im gesamten Intervall $-\pi$ bis π , wobei die Verteilung auf das Intervall jedoch nicht homogen ist.

Senkt man die In-Energie weiter auf $E_{in} = 1.5$ ab (Abbildung 3.5), so wird das zentrale reguläre Intervall schmaler: Es hat in der $\tau_{in}/2\pi$ -Richtung nur noch eine Breite von ca. 0.7, während es sich für $E_{in} = 3.0$ noch über eine Breite von ca. 0.85 erstreckte. Zusätzlich erkennt man ein weiteres relativ großes reguläres Intervall zwischen 0.84 und 0.99.

Bei weiterer Absenkung der Einfallenergie auf $E_{in} = 0.5$ (Abbildung 3.6) bzw. $E_{in} = 0.1$ (Abbildung 3.7) ändert sich nichts Grundsätzliches mehr an den Streufunktionen. Das ganze Bild wird im wesentlichen mit abnehmender Energie zu kleineren τ_{in} -Werten hin verschoben, während gleichzeitig das große reguläre Intervall schmaler und das kleinere reguläre Intervall breiter wird. Selbst bei der sehr kleinen Einfallenergie von $E_{in} = 0.1$, die wegen $\omega L_{in} = E_{in}$ nahezu fron-

Abbildung 3.5: Wie Abbildung 3.2, jedoch $E_{in} = 1.5$.Abbildung 3.6: Wie Abbildung 3.2, jedoch $E_{in} = 0.5$.

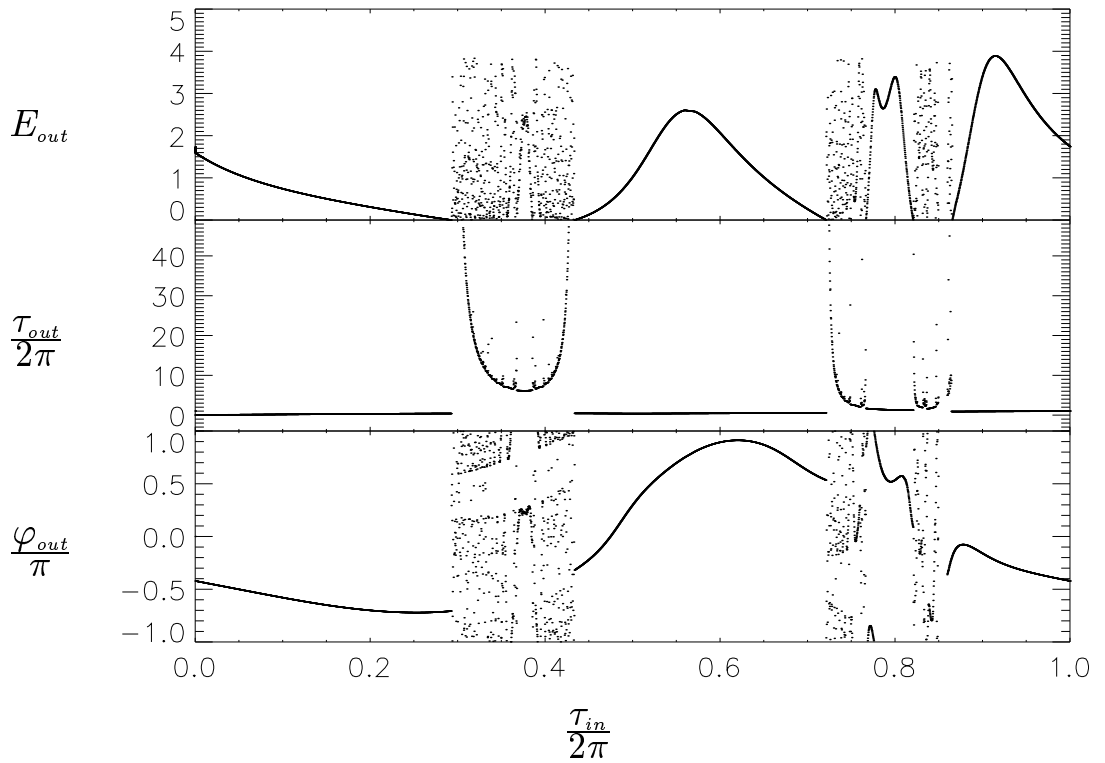


Abbildung 3.7: Wie Abbildung 3.2, jedoch $E_{in} = 0.1$.

talem Einschub entspricht, vergrößern sich die irregulären Bereiche nicht mehr wesentlich.

Bei den Streufunktionen, die irreguläre Intervalle enthalten, fällt die Ausnahmestellung der *parabolisch entweichenden Orbits* (PEO) auf, d.h. der Orbits mit $E_{out} = 0$. Anscheinend wird jedes reguläre Intervall von zwei PEO begrenzt. Ein reguläres Intervall der E_{out} -Funktion besteht typischerweise aus einem „Hügel“, der von zwei ($E_{out} = 0$)-Werten begrenzt wird. Auf der jeweils anderen Seite dieser Werte scheinen die Streufunktionen chaotisch zu sein.

Nach diesem globalen Überblick über das Streuverhalten bei verschiedenen Einfallenergien soll nun die Struktur der irregulären Bereiche genauer untersucht werden. Abbildung 3.8 zeigt einen Ausschnitt der Streufunktionen aus Abbildung 3.6 mit $E_{in} = 0.5$. Vergrößert wurde der Bereich zwischen den beiden regulären Intervallen. Zu erkennen sind vorher nicht aufgelöste reguläre Intervalle (wiederum stets von zwei PEO begrenzt), zwischen denen sich irreguläre Bereiche befinden. Ferner sieht man, daß die kleineren regulären Intervalle sich gegen die beiden PEO-Anfangsbedingungen häufen, welche sich nahe den Rändern des vergrößerten Bereiches befinden. Dabei zeigen die E_{out} - und die φ_{out} -Funktion selbstähnliche Strukturen, während sich bei genauerer Untersuchung für die Funktion $\tau_{out}(\tau_{in})$ ergibt, daß bei Annäherung an die Anfangsbedingung des PEO τ_{out} mit jedem

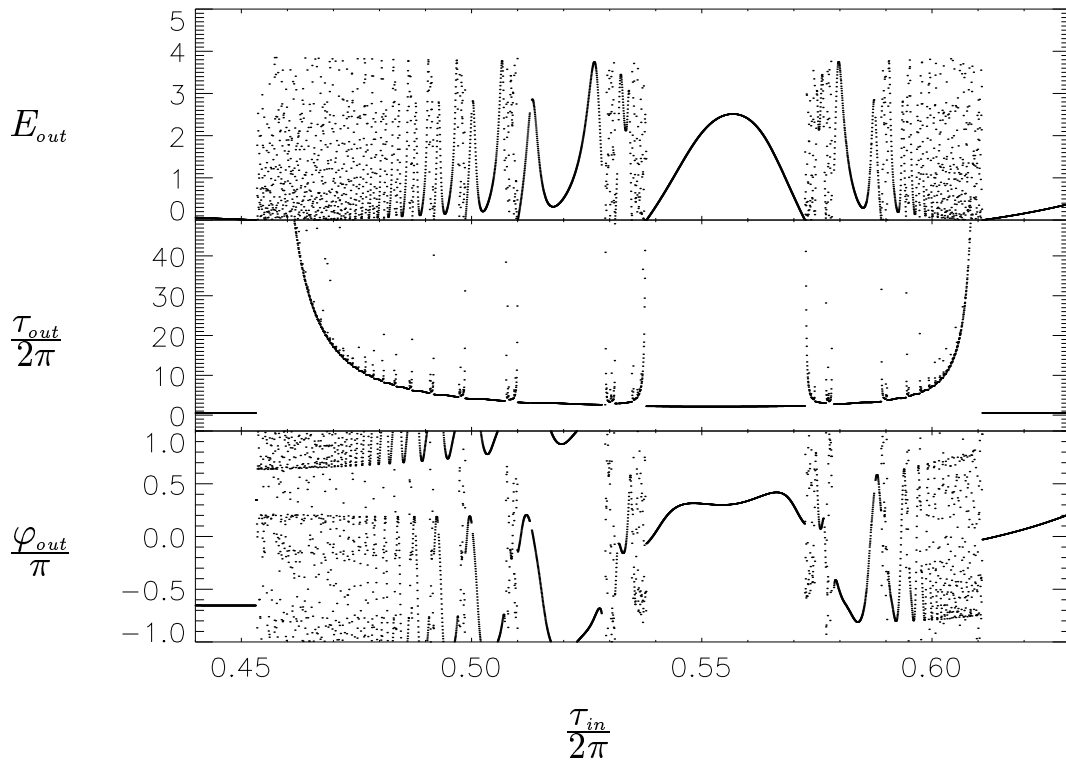


Abbildung 3.8: Vergrößerung eines irregulären Intervalls von Abbildung 3.6.

regulären Intervall um den Wert von etwa 2π anwächst. Diese Beobachtung wird sich als Schlüssel zum Verständnis der Struktur und Skalierung der Streufunktionen erweisen.

Die selbstähnliche Struktur der Streufunktionen wird durch eine weitere Vergrößerung eines Ausschnitts der Streufunktionen für $F = 1$, $C = 0.5$, $E_{in} = 0.5$ illustriert. In Abbildung 3.9 wird eines der irregulären Intervalle aufgelöst, die in Abbildung 3.8 zu sehen sind. Auch auf dieser Ebene zeigt die Abbildung die oben beschriebenen Eigenschaften. Einziger wesentlicher Unterschied ist, daß die niedrigsten τ_{out} -Werte hier nicht ungefähr dem In-Wert τ_{in} gleichen, sondern bei ca. 4π liegen. Die zugehörigen Orbits sind also wesentlich verschieden von Hyperbeln des reinen Coulomb-Problems. In der Nähe von PEO skalieren die Streufunktionen genauso wie auf der niedrigeren Ebene.

Weitere Vergrößerungen von Teilen der Streuabbildung bestätigen diese Beobachtungen. Am linken und am rechten Rand eines jeden regulären Intervalls der Streufunktionen liegt die Anfangsbedingung eines PEO. Auf der einen Seite des PEO sind die Streufunktionen regulär, auf der anderen Seite schwanken sie irregulär. Die asymptotischen Anfangsbedingungen eines PEO stellen stets einen Häufungspunkt von Anfangsbedingungen anderer PEO dar. Im Raum $\mathcal{A}_{F,C}$ ist die Menge der PEO-Anfangsbedingungen eine Cantor-Menge einer fraktalen Dimension zwischen eins und zwei [McD⁺85]. Hält man, wie bei der Bestimmung der

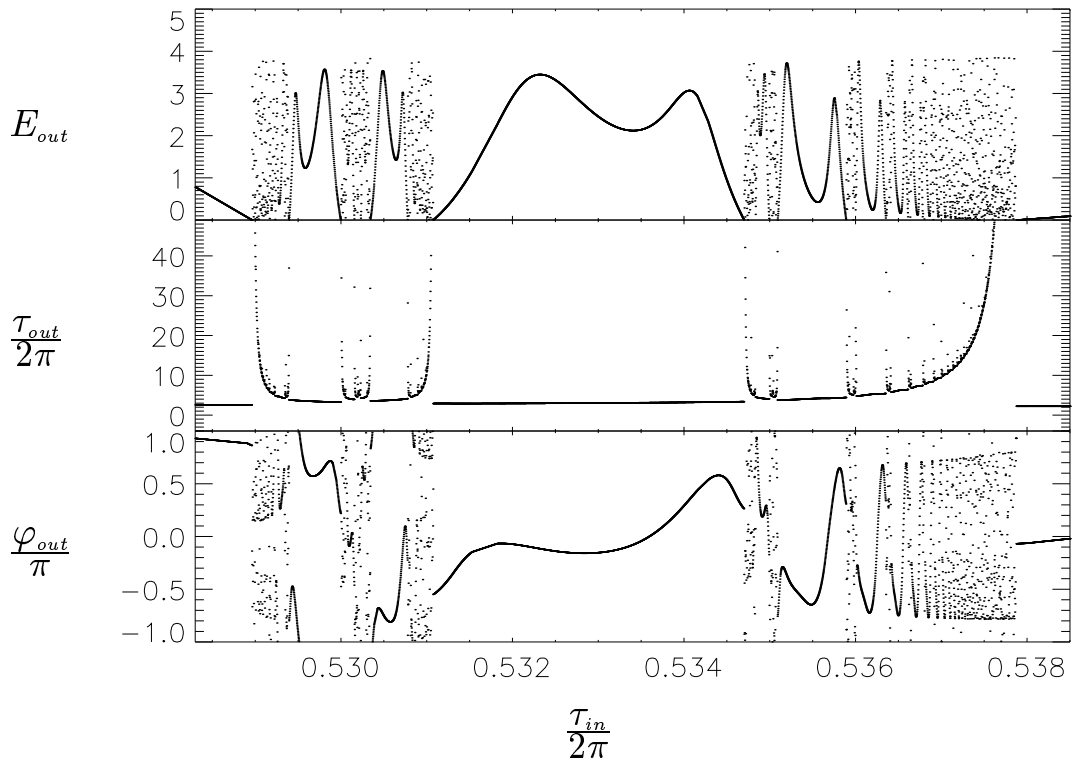


Abbildung 3.9: Vergrößerung eines irregulären Intervalls von Abbildung 3.8.

Streufunctionen, zusätzlich die In-Energie E_{in} fest, so bekommt man ein Fraktal einer Dimension zwischen null und eins.

3.3 Die Struktur der Streufunktionen

In diesem Abschnitt werden die selbstähnlichen Strukturen der Streufunktionen auf zwei unterschiedliche dynamische Aspekte zurückgeführt. Die horizontale Struktur betrifft Skalierungseigenschaften in der Nähe von parabolischen Streusingularitäten und hängt mit der unterschiedlichen *Weite* der Kepler-Exkursionen zusammen. Mit der vertikalen Struktur bezeichnet man dagegen Eigenschaften von Intervallen der Streufunktionen, die auf Orbits unterschiedlicher *Anzahl* von Kepler-Exkursionen zurückgeführt werden können.

3.3.1 Die horizontale Struktur

Ein Ziel dieser Arbeit war es, einen oder mehrere *Ordnungsparameter* zu finden, mit denen möglichst jedes reguläre Intervall im Sinne einer *Symbolischen Dynamik* benannt werden kann. Ein solches Vorhaben ist bisher vollständig nur für einige wenige Systeme geglückt: das Drei-Scheiben-Problem [Eck87], das Drei-

Hügel-Problem [JuRi90] und ein einfaches Gravitationsbillard [Hén88]. Stegemer-ten fand kürzlich erstmals eine vollständige symbolische Repräsentierung eines *attraktiven* Streusystems [Ste95]. Voraussetzung für die Existenz einer Symbolischen Dynamik ist die Hyperbolizität des Systems.

Da das vorliegende System nicht hyperbolisch ist, sondern stabile Orbits enthält, gibt es keine Symbolische Dynamik, mit deren Hilfe die regulären Intervalle eindeutig bezeichnet werden können. Für einige andere Systeme wurden aber Kriterien angegeben, nach denen wichtige Strukturmerkmale unterschieden werden können [EcZi91, KoWi95]. In diesem Sinne werde ich mich zunächst mit der *horizontalen Struktur* [YuGu93] der Streufunktionen beschäftigen.

Dazu betrachte man die vier im Ortsraum dargestellten Streuorbits in Abbildung 3.10. Die asymptotischen Anfangsbedingungen der Orbits liegen in regulären Intervallen, die in Abbildung 3.8 zu sehen sind: Orbit (a) gehört zu einer Anfangsbedingung aus dem großen mittleren Intervall bei $\tau_{in}/2\pi \approx 0.55$, während die Orbits (b), (c) und (d) drei dazu korrespondierende Anfangsbedingungen in links davon liegenden Intervallen besitzen. Dabei nenne ich zwei Anfangsbedingungen zueinander *korrespondierend*, wenn sie auf einander entsprechenden Stellen in ähnlichen regulären Intervallen nahe einer PEO-Anfangsbedingung liegen.

In Abbildung 3.10 bewegt sich das Proton auf einer Kreisbahn vom Radius 1 (hier nicht eingezeichnet). Das Elektron läuft jeweils aus dem dritten Quadranten ein, beschreibt nach Ablenkung durch das Proton eine Schleife (eine sogenannte *Kepler-Exkursion* [YuGu93]) und wird schließlich nach der Rückkehr in den Wechselwirkungsbereich in den zweiten Quadranten gestreut.

Für alle vier Anfangsbedingungen bekommt man Bahnen, die sich wesentlich nur in der Länge der Kepler-Exkursion unterscheiden. Das Elektron kehrt nach der Kepler-Exkursion jeweils zur gleichen Phase des Protons in das Wechselwirkungsgebiet zurück. Zwei reguläre Intervalle unterscheiden sich also durch die Anzahl der Protonenumläufe während der Kepler-Exkursion. Im Grenzfall des PEO, d.h. am Rand des irregulären Bereichs, geht die Anzahl der Protonenumläufe während der Exkursion gegen unendlich.

Die Selbstähnlichkeit der Streufunktionen wird nun verständlich. Nahe dem PEO hat man sehr weite Kepler-Exkursionen. Das Elektron verbringt eine sehr lange Zeit in den weit vom Proton entfernten Regionen. Kleine Änderungen der Anfangsbedingungen verursachen relativ große Änderungen der Exkursionsdauer. Unterscheiden sich zwei Exkursionsdauern um ein Vielfaches $2\pi n/\omega$ der Umlaufperiode des Protons, so ist die weitere Bewegung der betreffenden Orbits nahezu identisch. Folglich gleichen sich auch die asymptotischen Out-Größen E_{out} und φ_{out} , während sich die Out-Phasen τ_{out} lediglich um $2\pi n/\omega$ unterscheiden. Diese Tatsache konnte im letzten Abschnitt schon an den Streufunktionen beobachtet

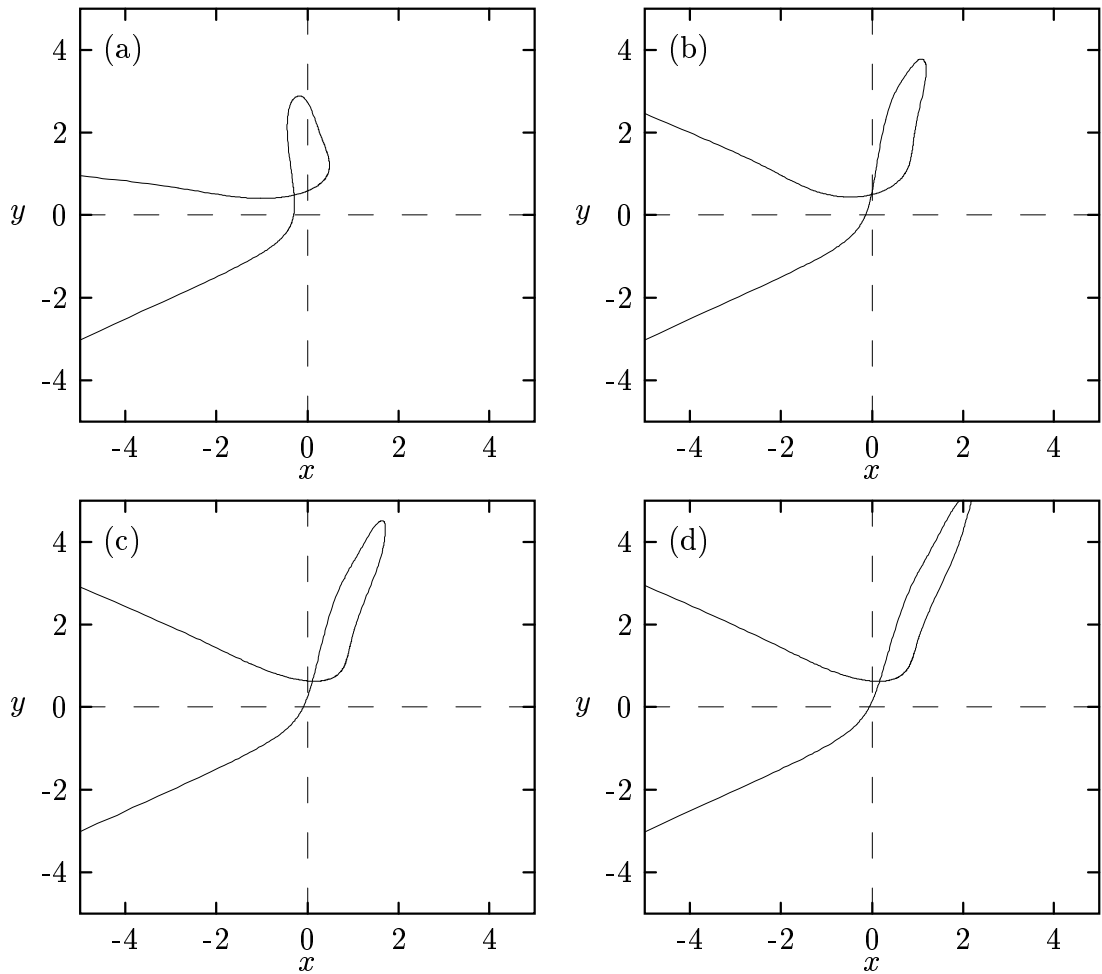


Abbildung 3.10: *Streuorbits im Ortsraum für die Parameterwerte von Abbildung 3.8. (a) $\tau_{in}/2\pi = 0.54$; (b) $\tau_{in}/2\pi = 0.51$; (c) $\tau_{in}/2\pi = 0.499$; (d) $\tau_{in}/2\pi = 0.492$.*

werden. Die Konvergenz der Intervallängen gegen null bei Annäherung an den Rand des irregulären Bereiches (d.h. den PEO) ist durch die steigende Sensibilität der Exkursionsdauer gegenüber Änderungen der Anfangsbedingungen bedingt. Diese Tatsache wird in Abschnitt 3.4 ausgenutzt werden, um die Skalierung der horizontalen Struktur in der Nähe des PEO abzuleiten.

3.3.2 Die vertikale Struktur

Neben der horizontalen Struktur, die auf unterschiedlich weite Kepler-Exkursionen zurückgeführt werden kann, weisen die Streufunktionen auch eine sogenannte *vertikale Struktur* auf. Diese hat ihre Ursache in der Anzahl der Kepler-Exkursionen. Zur Illustration betrachte man noch einmal die Streufunktionen in

Abbildung 3.8 und deren Vergrößerung in Abbildung 3.9: Es ist unverkennbar, daß sich in Abbildung 3.9 nicht nur die Intervalle der horizontalen Struktur nahe den PEO-Anfangsbedingungen ähnlich sind, sondern auch jedes dieser Intervalle seinem „Mutterintervall“ aus Abbildung 3.8 in seinen charakteristischen Eigenschaften gleicht.

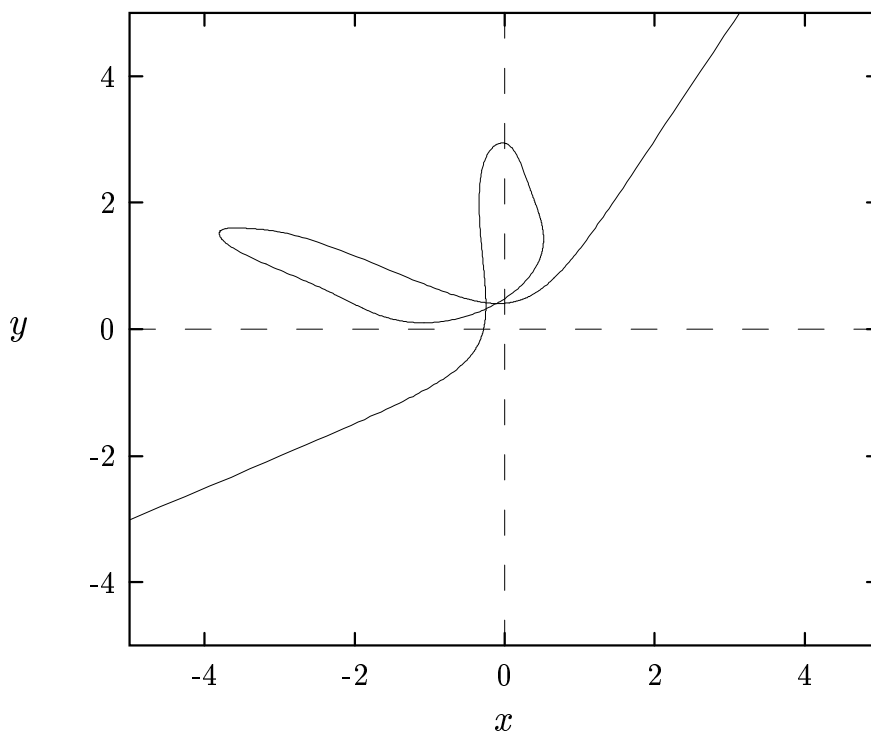


Abbildung 3.11: *Streuorbit mit zwei Kepler-Exkursionen. Parameterwerte wie in Abbildung 3.9 mit $\tau_{in}/2\pi = 0.5326$.*

Eine Streutrajektorie aus einem regulären Intervall von Abbildung 3.8 wurde in Abbildung 3.10 (a) gezeigt. Abbildung 3.11 zeigt einen Orbit, der aus dem zentralen regulären Intervall in der Vergrößerung Abbildung 3.9 stammt. Die erste Kepler-Exkursion sieht bei beiden Orbits nahezu gleich aus. Während der erste Orbit danach sofort in die asymptotische Region entweicht, kehrt der zweite nach einer zweiten Kepler-Exkursion noch einmal zurück, bevor er entweicht. Die Länge der zweiten Exkursion bestimmt, welches von den in Abbildung 3.9 zu erkennenden Subintervallen vorliegt.

Ich bezeichne ein Intervall von Orbits, die genau n Kepler-Exkursionen haben, als Intervall der n -ten *vertikalen Generation*. Diese Einteilung ist nur dann praktikabel, wenn die Exkursionen so weit sind, daß sie eindeutig von anderen Bewegungsformen nahe dem Proton unterschieden werden können.

3.4 Die Skalierung der horizontalen Struktur

Die horizontale Struktur eines irregulären Bereichs der Streufunktionen besteht aus einer biinfiniten Folge von ineinander verwobenen regulären und irregulären Intervallen, deren Breiten und Abstände bei Annäherung an die beiden begrenzenden PEO gegen null gehen. Es liegt nahe, nach Skalierungseigenschaften dieser Folge zu suchen. Ein ähnlicher Fall liegt vor, wenn man sich das Verhalten von Streufunktionen in der Nähe einer hyperbolischen Streusingularität ansieht. In diesem Fall skalieren die Streufunktionen exponentiell mit einem Exponenten, der dem größten Eigenwert des entsprechenden periodischen Orbits entspricht [JuSc88, JuPo89, See90]. Analog führe ich im folgenden die *algebraische Skalierung* der horizontalen Struktur auf das asymptotische Verhalten des Potentials zurück.

An dieser Stelle ist es angebracht, kurz auf die Arbeiten Wiesenfelds einzugehen, der sich in mehreren Artikeln mit der klassischen Coulomb-Streuung im linear polarisierten elektrischen Feld beschäftigt hat [Wie90, Wie91, Wie92a, Wie92b]. Obwohl er als erster die Konzepte der chaotischen Streuung auf diese Systemklasse angewendet hat, übersah er bei der Interpretation der Streufunktionen die Bedeutung der PEO. Er schreibt in [Wie92b]:

The mechanism through which irregular scattering appears in the deflection function is clear: as soon as the deflection curve would dive into bound states (resonances) ... it is reflected back into the $N < 0$ [d.h. $E > 0$ (A.B.)] domain, as the trajectory cycles one time more or one time less nearby a bound unstable periodic orbit.

Wie ich im letzten Abschnitt gezeigt habe, sind lokalisierte periodische Orbits, im Gegensatz zu den PEO, für die Struktur der irregulären Streufunktionen relativ unwichtig. Weiter führt Wiesenfeld aus:

While it is not clear yet whether the inner tori (tightly bound states, elliptic islands), the outer tori (Rydberg states) or both dominate the dynamics at long delays, the exponential scaling is clearly lost after only a few generations in the build-up of the fractal set of discontinuities.

Zum einen ist nach meinen (z.T. noch folgenden) Ausführungen klar, daß die Rydberg-Zustände (so heißen bei Wiesenfeld die weiten Kepler-Exkursionen) bei den langen Verzögerungszeiten dominieren, zum anderen geht die exponentielle Skalierung nicht erst nach einigen Generationen (ein Begriff, den Wiesenfeld

nicht näher erläutert, der aber vermutlich die Anzahl der Kepler-Exkursionen bezeichnet) verloren, sondern es gibt überhaupt keine exponentielle Skalierung.

3.4.1 Numerische Resultate

Ich untersuche zunächst numerisch das Skalierungsverhalten in der Nähe des PEO am linken Rand der Abbildung 3.8 mit $\tau_{in} = \tau_{in}^* \approx 2\pi \cdot 0.453$. Man transformiere die τ_{in} -Variable in der folgenden Weise:

$$\xi = (\tau_{in} - \tau_{in}^*)^{-\kappa} \quad \text{mit} \quad \kappa = 3/2. \quad (3.12)$$

Für $\xi \rightarrow \infty$ folgt also $\tau_{in} \searrow \tau_{in}^*$. Aus Abbildung 3.12 entnimmt man folgende Ei-

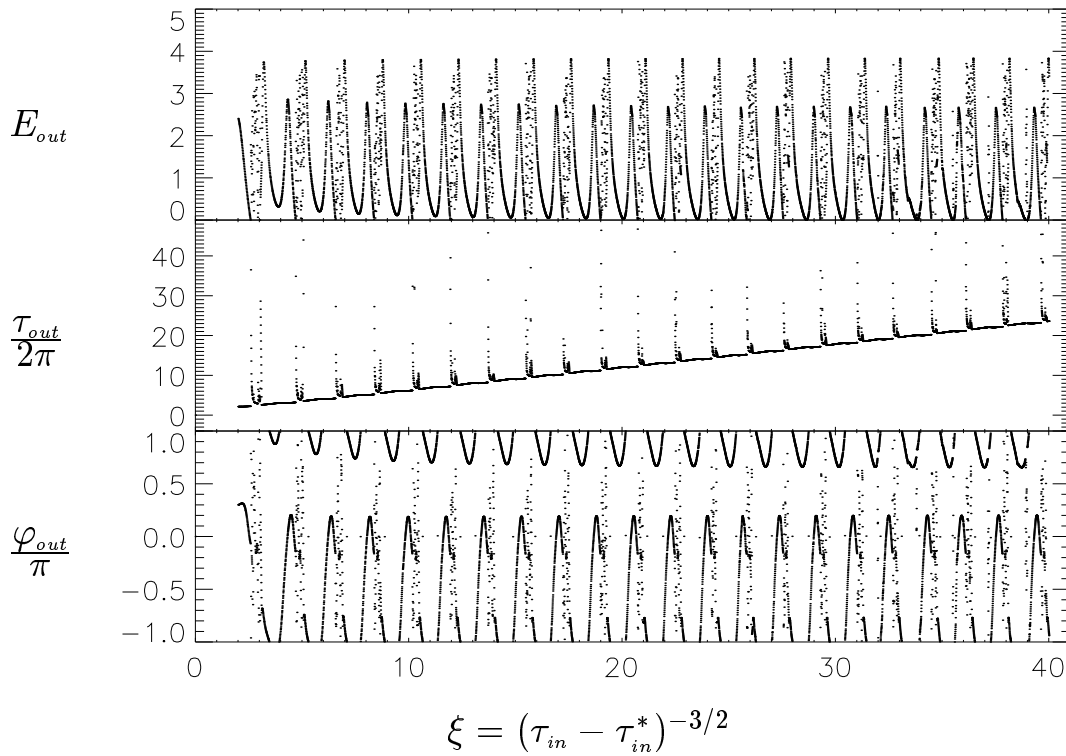


Abbildung 3.12: Streufunktionen für $F = 1$, $C = 0.5$ und $E_{in} = 0.5$ in Abhängigkeit von der skalierten In-Variable ξ .

enschaften der *skalierten Streufunktionen*, d.h. der Out-Größen in Abhängigkeit von der skalierten In-Variablen ξ :

- E_{out} und φ_{out} sind periodische Funktionen von ξ .
- $\tau_{out}(\xi)$ ist die Superposition einer periodischen und einer linearen Funktion.

- τ_{out} wächst mit jedem Periodizitätsintervall um 2π (d.i. eine Umlaufperiode des Protons).

Die Auftragung der Out-Variablen als Funktionen der skalierten In-Phase ξ wurde für mehrere Parameterkombinationen nahe PEO-Anfangsbedingungen aus verschiedenen vertikalen Generationen durchgeführt. Außerdem wurden auch Streufunktionen gegen die skalierte In-Energie $\xi' = (E_{in} - E_{in}^*)^{-\kappa}$ bei festem τ_{in} aufgetragen. Alle diese Experimente führen auf die berichteten Skalierungseigenschaften.

3.4.2 Erklärung der algebraischen Skalierung

Ich führe jetzt die im letzten Abschnitt numerisch nachgewiesene Skalierungseigenschaft der Streufunktionen auf die asymptotische Bewegung des Elektrons im Coulomb-Potential bei weiten Exkursionen zurück. Die Argumentation ist für die Umgebung jeder beliebigen PEO-Anfangsbedingung gültig; für ein anschauliches Beispiel sei wieder auf die Anfangsbedingung τ_{in}^* des PEO am linken Rand von Abbildung 3.8 verwiesen. Man entwickle die Energie $E_1(\tau_{in})$ des Elektrons nach seinem ersten Zusammentreffen mit dem Proton um den Wert τ_{in}^* :

$$E_1(\tau_{in}) = -K_1 (\tau_{in} - \tau_{in}^*) \quad (3.13)$$

mit der Konstanten $K_1 = |E_1'(\tau_{in}^*)| > 0$. Es ergeben sich die folgenden Fälle:

- $\tau_{in} < \tau_{in}^* \implies E_1 > 0 \implies$ Das Elektron entweicht mit $E_{out} = E_1 > 0$. Hier hat man bei den Streufunktionen ein reguläres Verhalten.
- $\tau_{in} = \tau_{in}^* \implies E_1 = 0 \implies$ Das Elektron entweicht mit $E_{out} = E_1 = 0$. Dies entspricht dem PEO.
- $\tau_{in} > \tau_{in}^* \implies E_1 < 0 \implies$ Das Elektron kehrt nach einer bestimmten Wiederkehrzeit T zurück und gehört folglich einer höheren vertikalen Generation an als die anderen beiden Fälle. Hier hat man bei den Streufunktionen irreguläres Verhalten.

Auf der irregulären Seite von τ_{in}^* wird die Wiederkehrzeit T bei einer weiten Exkursion des Elektrons vor allem durch die weit vom Proton entfernten Raumbereiche bestimmt, da das Elektron hier sehr langsam ist. Man kann deshalb zur Berechnung von T in guter Näherung die asymptotische Energiegleichung

$$E_1 = \frac{1}{2}\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2r^2} - \frac{1}{r} \quad (3.14)$$

verwenden. Durch Trennung der Variablen erhält man:

$$T = 2 \int_{t_0}^{\bar{t}} dt = \sqrt{2} \int_{r_0}^{\bar{r}} \left(E_1 - \frac{L^2}{2r^2} + \frac{1}{r} \right)^{-1/2} dr, \quad (3.15)$$

wobei

$$\bar{r} = r(\bar{t}) = \frac{1}{2|E_1|} \left(1 + \sqrt{1 - 2|E_1|L^2} \right) \quad (3.16)$$

den durch $\dot{r} = 0$ bestimmten äußeren Umkehrpunkt des Orbits und $r_0 = r(t_0)$ einen kleinen, aber sonst beliebigen Radius bezeichnen. Das Integral in (3.15) ergibt:

$$T = - \left[\frac{\sqrt{2r - 2|E_1|r^2 - L^2}}{|E_1|} + \frac{1}{\sqrt{2|E_1|^3}} \arcsin \left(\frac{1 - 2|E_1|r}{\sqrt{1 - 2|E_1|L^2}} \right) \right]_{r_0}^{\bar{r}}. \quad (3.17)$$

Setzt man hier Gleichung (3.16) ein, so erhält man für kleine Energien E_1 :

$$T(E_1) = \frac{\pi}{\sqrt{2}} |E_1|^{-3/2}. \quad (3.18)$$

Die Beziehung (3.13) zwischen E_1 und τ_{in} erlaubt nun für $\tau_{in} \approx \tau_{in}^*$ die Aufstellung einer Relation zwischen der Wiederkehrzeit und der In-Phase τ_{in} :

$$T(\tau_{in}) = \frac{\pi}{\sqrt{2K_1^3}} (\tau_{in} - \tau_{in}^*)^{-\kappa} \quad (3.19)$$

mit dem Skalierungsexponenten

$$\kappa = \frac{3}{2}. \quad (3.20)$$

Für $\tau_{in} \rightarrow \tau_{in}^*$ geht die Wiederkehrzeit T also gemäß einem Potenzgesetz mit dem Exponenten $-\kappa$ gegen unendlich. Führt man, wie in Abbildung 3.12, die skalierte In-Variable

$$\xi = (\tau_{in} - \tau_{in}^*)^{-\kappa} \quad (3.21)$$

ein, so geht Gleichung (3.19) über in die lineare Beziehung

$$T(\xi) = K_2 \xi \quad (3.22)$$

mit der Konstanten $K_2 = \pi/\sqrt{2K_1^3}$. Von besonderer Bedeutung sind Paare von Orbits, deren Wiederkehrzeiten T sich um Vielfache von $\Delta T = 2\pi/\omega$ unterscheiden. Solche Orbits kehren zur gleichen Phase des Protons mit (nahezu) gleichen

Bewegungsdaten zurück. Folglich verhalten sie sich in der Zukunft gleich, und sie haben gleiche asymptotische Out-Größen. Die Streufunktionen $E_{out}(\xi)$ und $\varphi_{out}(\xi)$ sind also periodisch mit der Periode $\Delta\xi = 2\pi/K_2\omega$, während die Phase $\tau_{out}(\xi)$ zusätzlich zu dieser Periodizität um den Betrag von $2\pi/\omega$ pro Periode anwächst. Damit bestätigt und erklärt meine theoretische Überlegung die Eigenschaften der skalierten Streufunktionen, die ich aus Abbildung 3.12 abgeleitet habe.

Die hier vorgeführte Erklärung für die algebraische Skalierung der Streufunktionen ist anwendbar für *alle periodisch zeitabhängigen Streusysteme mit asymptotisch attraktiver Coulomb-Wechselwirkung*. Man findet also auf der irregulären Seite jeder PEO-Singularität von Streufunktionen eines jeden solchen Systems eine algebraische Skalierung mit dem Skalierungsexponenten $\kappa = 3/2$.

Unabhängig von meiner allgemeinen Analyse der Skalierungseigenschaften von periodisch zeitabhängigen Systemen, die in [BeEc93] veröffentlicht worden ist und in erweiterter Form im 4. Kapitel dargestellt wird, haben Boyd und McMillan den Mechanismus für die Skalierung bei Kollisionen eines Himmelskörpers mit einem Binärsystem angegeben [BoMcM92]. Yuan und Gu haben dieses Erklärungsmuster für ihre Analyse der Elektronstreuung an He^+ aufgegriffen [YuGu93].

Kapitel 4

Skalierung und Zerfall in klassischen Streusystemen

Die besondere Rolle der parabolischen Singularitätenmenge bei der Streuung in klassischen Streusystemen ist lange Zeit übersehen worden. Parabolische Streusingularitäten treten häufig bei Hamilton-Systemen mit expliziter Zeitabhängigkeit auf. Obwohl die für zeitabhängige Systeme charakteristischen Streufunktionen in einigen Arbeiten abgebildet sind [Jun90, Lu⁺92, Wie92a, Wie92b], finden sich dort keine Hinweise auf die parabolischen Streusingularitäten. Selbst ein Artikel, in dem explizit die chaotische Streuung in zeitabhängigen Hamilton-Systemen behandelt wird [LaGr91], blendet das Charakteristische der zeitabhängigen Streuung durch die Wahl eines asymptotisch repulsiven Potentials aus. In den ersten Arbeiten zu zeitunabhängigen Systemen mit parabolischer Singularitätenmenge (z.B. [Noi⁺86]) findet sich ebenfalls kein Verweis auf die Bedeutung der parabolisch entweichenden Orbits. Erst für spezielle Dreikörperprobleme mit asymptotischer Keplerscher bzw. Coulombscher Wechselwirkung wurde kürzlich auf die Besonderheit parabolischer Streusingularitäten hingewiesen und ihr Einfluß auf die horizontale Skalierung der Streufunktionen untersucht [BoMcM92, BoMcM93, GuYu93, YuGu93].

Die Erklärung für die algebraische Skalierung in der Nähe von PEO-Anfangsbedingungen bei periodisch zeitabhängigen Systemen mit asymptotischer Coulomb-Wechselwirkung wurde von mir im letzten Abschnitt 3.4 geliefert. Im Abschnitt 4.1 zeige ich, daß Streufunktionen einer weitaus größeren Systemklasse ebenfalls algebraisch skalieren. Der die Skalierung charakterisierende Koeffizient ist dabei eindeutig durch die asymptotische Wechselwirkung festgelegt. Anhand einiger typischer Beispiele aus dieser Systemklasse werden in Abschnitt 4.2 die theoretisch vorausgesagten Skalierungseigenschaften verifiziert.

Eine Konsequenz des Verhaltens der Verzögerungszeit Δt in der Nähe parabolischer Singularitäten ist der algebraische Zerfall von temporär gebundenen Stoßkomplexen, obwohl im Phasenraum keine KAM-Strukturen vorliegen. In der Regel zerfallen Systeme mit voll entwickeltem Chaos [Ble⁺89] exponentiell mit der Zeit [Gre⁺86, KoTé90]. Eine algebraische Zerfallsstatistik wird meist mit der Existenz „klebriger“ Tori (engl.: sticky tori) — d.h. KAM- und Cantori — in Zusammenhang gebracht. In der hier untersuchten Systemklasse führt jedoch der Einfluß von KAM-Strukturen auf die Streudynamik zu einem Zerfall, der langsamer als algebraisch ist, während bei voll entwickeltem Chaos ein algebraisches Zerfallsgesetz vorliegt. Ich bin in der Lage, den charakteristischen Zerfallsexponenten auf die Skalierung der Streufunktionen und damit letztlich auf die asymptotischen Eigenschaften des Potentials zurückzuführen.

In Abschnitt 4.3 wird anhand eines (numerisch leichter handhabbaren) Modellsystems ein algebraisches Zerfallsgesetz für Stoßkomplexe nachgewiesen und anschließend auf die Skalierung der Verzögerungszeit in der Nähe parabolischer Streusingularitäten zurückgeführt.

4.1 Potentialasymptotik und algebraische Skalierung

In der Literatur begegnet man häufiger Abbildungen von Streufunktionen, die den in dieser Arbeit gezeigten sehr ähnlich sind. Nach Abschnitt 3.4 ist dies bei periodisch zeitabhängigen Systemen mit asymptotischer Coulomb- bzw. Kepler-Wechselwirkung zu erwarten; siehe z.B. [Hor89, Wie90, Wie91, Wie92a, Wie92b]. Man findet analoge Eigenschaften der Streufunktionen jedoch auch bei periodisch zeitabhängigen Systemen anderer Asymptotik [EcZi91, Jun90, Bee91, Lu⁺92, Bil94, See95] und darüberhinaus auch bei Mehrteilchensystemen mit zeitunabhängiger Hamilton-Funktion [RaMi71, Got75, Noi⁺86, BoMcM92, GuYu93, Han⁺93, KoWi95].

In diesem Abschnitt verallgemeinere ich die Überlegungen von Abschnitt 3.4, um die Skalierung der horizontalen Struktur für die Streufunktionen aller erwähnten Systeme aufzuklären. Es wird sich zeigen, daß die Streufunktionen in der Nähe von parabolisch entweichenden Orbits stets algebraisch skalieren, wobei der Skalierungsexponent eindeutig von der Potentialasymptotik abhängt.

Es sei ein Hamilton-System gegeben, das durch die Hamilton-Funktion H beschrieben werde. Dieses sei durch die folgenden drei Eigenschaften ausgezeichnet:

1. Das System sei *dissoziationsfähig*, d.h. ein Teilsystem (das *Projektile* P) der Masse m sei in der Lage, sich unendlich weit vom Restsystem (dem

Target T) zu entfernen. Die Entfernung zwischen P und T werde durch eine Abstandskoordinate r gemessen. Darüberhinaus sei das Projektil wesentlich leichter als das Target, so daß die Relativbewegung näherungsweise der Projektilbewegung entspricht.

2. Die asymptotische Wechselwirkung zwischen P und T werde durch ein *attraktives Potential* $V_{as}(r)$ beschrieben:

Fall (a): $V_{as}(r) = -V_0 r^{-\beta}$ mit Konstanten $V_0 > 0, \beta \geq 1$

Fall (b): $V_{as}(r) = -V_0 \exp(-br)$ mit Konstanten $V_0 > 0, b > 0$.

3. Wenn P sich parabolisch, d.h. mit Out-Energie $E_{out} = 0$ von T entfernt, verhalte sich für $r \rightarrow \infty$ das Target periodisch mit der Kreisfrequenz ω .

Bemerkungen:

1. Die Coulomb-Streuung im elektrischen Wechselfeld erfüllt (nach dem Übergang in das System Σ') die drei genannten Forderungen: Das Elektron (P) und das kreisende Proton (T) ziehen sich asymptotisch gemäß der Coulomb-Wechselwirkung (Fall (a) mit $\beta = 1$) an. Das Targetsystem verhält sich wegen des von außen aufgeprägten elektrischen Wechselfelds periodisch in der Zeit.
2. Die periodische Zeitabhängigkeit des Targets für $r \rightarrow \infty$ und $E_{out} = 0$ ist nicht notwendig von außen aufgeprägt, sondern kann eine innere Eigenschaft des Systems sein. Ein Beispiel ist die Streuung eines Himmelskörpers (P) an einem Binärsystem (T) [BoMcM92, BoMcM93]. Aufgrund der Konstanz der Gesamtenergie E_g ist die Energie des Binärsystems für jedes parabolische Entweichen des Projektils ($E_{out} = 0$) gleich E_g . Da die Frequenz des Binärsystems nur von seiner Energie E abhängt:

$$\omega(E) = \frac{k}{\sqrt{m}}(2|E|)^{3/2} \quad (4.1)$$

(k = Gravitationskonstante), gibt es für $E_{out} = 0$ eine eindeutig definierte Frequenz $\omega = \omega(E_g)$ des Targets. Ein weiteres Beispiel liefern Handke et al. [Han⁺93, Han94]. Ich stelle ähnliche Systeme in Unterabschnitt 4.2.2 ausführlicher vor.

3. Falls die Hamilton-Funktion einen Zentrifugalanteil

$$V_z(r) = \frac{L^2}{2mr^2} \quad (4.2)$$

enthält, so gelten die folgenden Überlegungen nur, falls die (attraktive) Projektil-Target-Wechselwirkung asymptotisch langsamer abfällt als die

(repulsive) Zentrifugalwechselwirkung. Für den Koeffizienten β muß also gelten: $\beta < 2$. In den nachfolgenden Beispielen arbeite ich anhand eines Systems, das diese Voraussetzung nicht erfüllt, die Unterschiede in Struktur und Skalierung der Streufunktionen heraus (Unterabschnitt 4.2.3).

Man betrachte nun die beiden Größen E_{out} und Δt als Funktionen einer beliebigen In-Variablen α_{in} . Dabei bezeichnet E_{out} die Out-Energie des Projektils P und Δt eine geeignet definierte *Verzögerungszeit*: Δt gibt an, um wieviel länger sich das Projektil im Vergleich zu freier Bewegung (bzw. reiner Coulomb-Streuung im Fall $\beta = 1$) im Bereich der Wechselwirkung aufhält. Die exakte Definition von Δt ist dem jeweiligen System anzupassen. Bei der Coulomb-Streuung in Abschnitt 3.4 hatte ich z.B. $\Delta t = \tau_{out} - \tau_{in}$ gewählt.

Gibt es irreguläre Bereiche, so wird die Struktur der Streufunktionen durch die parabolisch entweichenden Projektilorbits (PEO) mit $E_{out} = 0$ dominiert. α_{in}^* sei nun die asymptotische Anfangsbedingung eines PEO, d.h.

$$E_{out}(\alpha_{in}^*) = 0 . \quad (4.3)$$

Dann verhalten sich die Streufunktionen in der Umgebung von α_{in}^* auf der einen Seite der PEO-Anfangsbedingung regulär und auf der anderen Seite irregulär. O.B.d.A. seien die Streufunktionen z.B. für $\alpha_{in} < \alpha_{in}^*$ regulär und für $\alpha_{in} > \alpha_{in}^*$ irregulär. Die Projektilorbits mit Anfangsbedingungen nahe α_{in}^* verlaufen über weite Strecken in der Nähe des PEO. Ihre Energie E_1 nach der letzten Begegnung von PEO und Target kann, wie in Gleichung (3.13), in Abhängigkeit von der In-Variablen linear approximiert werden:

$$E_1 = -K_1(\alpha_{in} - \alpha_{in}^*) \quad (4.4)$$

mit einer Konstanten $K_1 > 0$. Auf der irregulären Seite von α_{in}^* wird jetzt, wie im Abschnitt 3.4, die Wiederkehrzeit T von Projektilen berechnet, die nach einer weiten Exkursion wieder zum Target zurückfallen. T wird durch die weit vom Target entfernten Bereiche bestimmt, in denen das Projektil sehr langsam wird. Aus der asymptotischen Energiegleichung

$$E_1 = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + V_{as}(r) \quad (4.5)$$

erhält man mittels Trennung der Variablen

$$T = 2 \int_{t_0}^{\bar{t}} dt = \sqrt{2m} \int_{r_0}^{\bar{r}} (E_1 - V_{as}(r))^{-1/2} dr . \quad (4.6)$$

Dabei bezeichnet $\bar{r} = r(\bar{t})$ den äußeren Umkehrpunkt der Exkursion und $r_0 = r(t_0)$ einen kleinen, aber sonst beliebigen Radius.

Fall (a): $V_{as}(r) = V_0 r^{-\beta}$.

Der Umkehrpunkt \bar{r} errechnet sich durch Nullsetzen der kinetischen Energie in der asymptotischen Energiegleichung zu

$$\bar{r} = \left(\frac{V_0}{|E_1|} \right)^{1/\beta} . \quad (4.7)$$

Für die Wiederkehrzeit folgt aus (4.6)

$$T = K_2(\beta) |E_1|^{-(\beta+2)/2\beta} , \quad (4.8)$$

wobei sich die Größe $K_2(\beta)$ mit der Substitution $z = r/\bar{r}$ zu

$$K_2(\beta) = \sqrt{2m} V_0^{1/\beta} \int_{r_0/\bar{r}}^1 \sqrt{\frac{z^\beta}{1 - z^\beta}} dz \quad (4.9)$$

ergibt. K_2 hängt im Grenzfalle kleiner Energie $|E_1|$, d.h. für großes \bar{r} nicht von E_1 ab, da dann die untere Grenze des Integrals gegen null geht. Mit Gleichung (4.4) schreibt sich die Wiederkehrzeit T in Abhängigkeit von der In-Variablen α_{in} folglich als

$$T(\alpha_{in}) = K(\beta) (\alpha_{in} - \alpha_{in}^*)^{-\kappa} , \quad (4.10)$$

wobei $K(\beta) = K_2(\beta) K_1^{-\kappa}$ ist und der Skalierungsexponent κ von dem Exponenten β , der den asymptotischen Potentialverlauf charakterisiert, wie folgt abhängt:

$$\kappa = \kappa(\beta) = \frac{\beta + 2}{2\beta} . \quad (4.11)$$

Die Abbildung 4.1 zeigt die Beziehung zwischen der Potentialasymptotik und dem Skalierungsexponenten $\kappa(\beta)$.

Bemerkungen:

1. Im Fall $\beta = 1$ hat man asymptotisch eine attraktive Coulomb-Wechselwirkung zwischen Projektil und Target. Ohne daß das wegen Berücksichtigung des Zentrifugalanteils etwas kompliziertere Integral (3.17) ausgerechnet werden muß, ergibt sich gemäß (4.11) der Skalierungsexponent zu $\kappa = 3/2$. Dieser stimmt mit dem Exponenten überein, der bereits für die Coulomb-Streuung im elektrischen Wechselfeld ermittelt wurde.
2. Im Grenzfalle $\beta \rightarrow \infty$ ergibt sich $\kappa \rightarrow 1/2$.

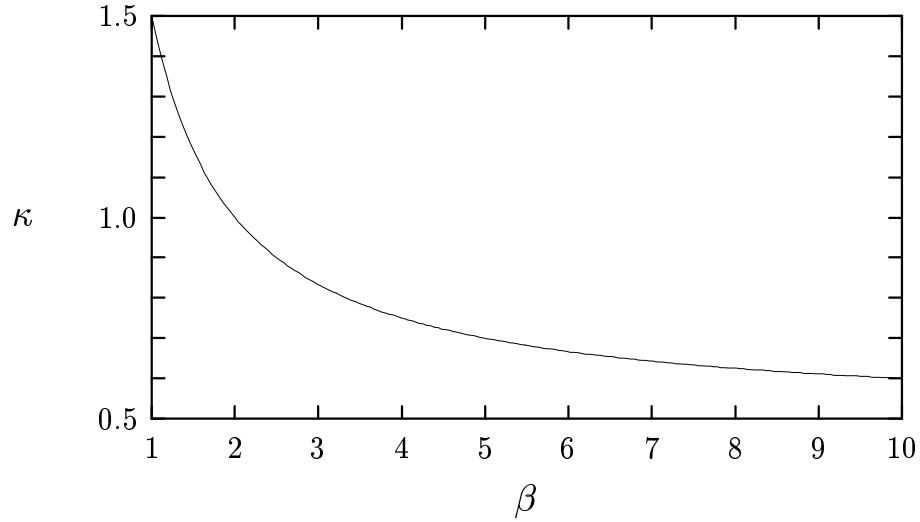


Abbildung 4.1: Skalierungsexponent κ als Funktion des Potentialexponenten β .

Fall (b): $V_{as}(r) = -V_0 \exp(-br)$.

Wie im Fall (a) ergibt sich der Umkehrpunkt \bar{r} durch Nullsetzen des kinetischen Anteils in der asymptotischen Energiegleichung:

$$\bar{r} = \frac{1}{b} \log \left(\frac{V_0}{|E_1|} \right) . \quad (4.12)$$

Substituiert man in (4.6) $z = b(\bar{r} - r)$, so erhält man

$$T = \sqrt{2m} |E_1|^{-1/2} \int_0^{b(\bar{r}-r_0)} \frac{1}{\sqrt{e^z - 1}} dz . \quad (4.13)$$

Für $|E_1| \rightarrow 0$ geht die obere Grenze des Integrals gegen unendlich. Da der Integrand hier exponentiell klein wird, hängt das Integral nur wenig von der Energie E_1 ab. Damit und mit der Approximation (4.4) erhält man

$$T(\alpha_{in}) = K (\alpha_{in} - \alpha_{in}^*)^{-\kappa} \quad (4.14)$$

mit dem (von b unabhängigen) Skalierungsexponenten

$$\kappa = \kappa(\infty) = \frac{1}{2} . \quad (4.15)$$

Der Skalierungsexponent κ im Fall exponentiell abfallender Wechselwirkung zwischen Projektil und Target entspricht also dem Grenzwert $\kappa(\beta \rightarrow \infty)$ für algebraisch abfallendes $V(r)$.

In den beiden Fällen (a) und (b) gilt jetzt gleichermaßen die Überlegung, die ich im Abschnitt 3.4 für den Fall asymptotischer Coulomb-Wechselwirkung angegeben habe: Orbits, deren Wiederkehrzeiten T sich lediglich um Vielfache der inneren Periode $2\pi/\omega$ unterscheiden, haben eine annähernd gleiche Zukunft und deshalb auch gleiche Out-Größen α_{out} . Folglich sind die skalierten Streufunktionen $\alpha_{out}(\xi)$ für große $\xi = (\alpha_{in} - \alpha_{in}^*)^{-\kappa}$ periodisch. Die Verzögerungszeit $\Delta t(\xi)$ wächst mit zunehmender Wiederkehrzeit T und ist folglich die Superposition einer periodischen mit einer linearen Funktion. Dabei wächst Δt in jedem Periodizitätsintervall um den Wert einer inneren Periode $2\pi/\omega$ an.

4.2 Beispiele

Die Theorie der Skalierungseigenschaften der horizontalen Struktur der Streufunktionen bedarf weiterer Beispielsysteme, an denen ihre Voraussagen überprüft werden können. Ich untersuche in diesem Abschnitt die folgenden Systeme, die nach wachsender Anzahl f von Freiheitsgraden aufgeführt sind. Falls die jeweilige Hamilton-Funktion eine explizite Zeitabhängigkeit aufweist, zähle ich diese als halben Freiheitsgrad zu der Anzahl von zueinander konjugierten Variablenpaaren hinzu.

1. **Kicksystem** ($f = 3/2$): Ein Teilchen bewegt sich in einem eindimensionalen Muldenpotential, das lediglich zu den Zeiten $t_n = nT$ δ -impulsförmig eingeschaltet wird [Bee91, BeEc93]. Dieses System von eineinhalb Freiheitsgraden ist eine vereinfachte Version einer Klasse von Systemen mit glatter periodischer Zeitabhängigkeit [Ale81], deren Streuorbits symbolisch von Eckelt und Zienicke beschrieben worden sind [EcZi91].
2. **Δ -Modell** ($f = 2$): Noid, Gray und Rice haben bei ihren numerischen Untersuchungen von molekularen Streuprozessen irreguläre Streufunktionen gefunden [Noi⁺86, Gra⁺86]. Durch die Wahl von Lennard-Jones-Potentialen verschiedener (algebraischer) Asymptotik oder eines Morse-Potentials (mit exponentiellem asymptotischen Abfall) können die Voraussagen des letzten Abschnitts hier an einem System mit zeitunabhängiger Hamilton-Funktion überprüft werden.
3. **Zirkular bewegtes Zentralpotential** ($f = 5/2$): Hier betrachte ich Systeme, die wie das mitbewegte, nichtrotierende System Σ' aus Abschnitt 1.3 durch die gleichförmige Kreisbewegung des Zentrums eines Zentralpotentials $V(r)$ entstehen. $V(r)$ ist hier nicht mehr notwendig asymptotisch ein Coulomb-Potential. Der Übergang in ein rotierendes Koordinatensystem (das dem System $\tilde{\Sigma}'$ aus Abschnitt 1.4 entspricht) zeigt wieder die Existenz

einer Konstanten der Bewegung, des Jacobi-Integrals, das Energie und Drehimpuls verknüpft. Die Beziehung zwischen E und L erlaubt interessante Varianten:

- (a) Bei Wahl eines attraktiven Potentials, das langsamer als das Zentrifugalpotential abfällt (d.h. $\beta < 2$), erwartet man die Existenz von parabolisch entweichenden Orbits (PEO) und in ihrer Nähe algebraische Skalierung der Streufunktionen.
- (b) Bei Wahl eines schneller abfallenden Potentials dominiert für große Entfernungen der Zentrifugalterm. Folglich können PEO nicht existieren, und demnach skalieren die Streufunktionen auch nicht algebraisch. Irreguläre Streufunktionen können hier nur durch den Einfang von Trajektorien auf stabilen Mannigfaltigkeiten von instabilen lokalisierten Orbits zustande kommen. Es gibt also lediglich hyperbolische Streusingularitäten, in deren Nähe die Streufunktionen exponentiell skalieren.
- (c) Es gibt eine Ausnahme: Man kann das Jacobi-Integral $C = E - \omega L$ gleich null wählen, so daß mit der Energie auch stets der Drehimpuls null wird. In diesem Fall sind dann auch für schnell abfallende Potentiale ($E_{out} = 0$)-Orbits möglich, da ja bei verschwindender Energie auch die Zentrifugalabstoßung null wird.

4.2.1 Das Kicksystem

Das System wird durch die folgende explizit zeitabhängige Hamilton-Funktion beschrieben [Bee91]:

$$H(x, p, t) = \frac{1}{2}p^2 + V(x) \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(t - j) , \quad (4.16)$$

wobei das ortsabhängige Potential durch

$$V(x) = -V_0 \frac{1}{\sqrt{1 + x^{2\beta}}} , \quad (4.17)$$

$V_0 > 0$, $\beta > 1$, gegeben ist. Bezeichnet man mit (x_j, p_j) die Werte von Ort und Impuls direkt vor dem j -ten δ -Impuls, so erhält man die zweidimensionale, flächentreue Abbildung

$$x_{j+1} = x_j + p_{j+1} \quad (4.18a)$$

$$p_{j+1} = p_j - V'(x_j) = p_j - \frac{V_0 \beta}{\sqrt{1 + x_j^{2\beta+2}}} . \quad (4.18b)$$

Die Abbildung (4.18) beschreibt auch die erste Näherung eines Euler-Cauchy-Verfahrens [EnRe87] für die Integration eines Teilchenorbits im zeitunabhängigen Potential $V(x)$ im Zeitintervall zwischen j und $j+1$. Im Falle großer $r = |x|$ wird die Näherung sehr gut, und man bekommt folglich näherungsweise die Dynamik eines Teilchens im Potential

$$V_{as}(r) = -V_0 r^{-\beta} . \quad (4.19)$$

Die asymptotische Beschreibung der Teilchenbewegung entspricht also der von Fall (a) der allgemeinen Ausführungen in Abschnitt 4.1. (Eine genauere Begründung für die Ersetzung des Kickpotentials durch $V_{as}(r)$ im asymptotischen Bereich findet man in [Bil94], Abschnitt 1.4.)

Ein Paar kanonisch konjugierter Streuvariablen bekommt man z.B. mit der asymptotischen Energie E und dem Zeitpunkt τ des Nulldurchgangs einer Trajektorie des asymptotischen Systems:

$$E = \frac{1}{2}p^2 \quad (4.20a)$$

$$\tau = t - \frac{x}{p} . \quad (4.20b)$$

Die Streuabbildung σ bildet ein Paar von asymptotischen In-Größen (E_{in}, τ_{in}) auf die entsprechenden Out-Größen (E_{out}, τ_{out}) ab. Jeder Streuorbit hat mindestens einen Nulldurchgang. Streuorbits mit wenigstens zwei Nulldurchgängen nenne ich *komplex*, Orbits mit nur einem Nulldurchgang *einfach*. Als Verzögerungszeit Δt wird die Zeit zwischen dem ersten und dem letzten Nulldurchgang von $x(t)$ definiert. Man hat also $\Delta t = 0$ für einfache Streuung. Die naheliegende Wahl von $\tau_{out} - \tau_{in}$ als Verzögerungszeit stellt sich hier als unangebracht heraus: Da τ_{out} für Orbits mit kleiner Out-Energie kleiner als τ_{in} werden kann und für PEO sogar gegen $-\infty$ geht, erhielte man so z.B. negative Verzögerungszeiten.

Abbildung 4.2 zeigt die Out-Energie E_{out} , die Verzögerungszeit Δt und die Anzahl n der Nulldurchgänge von $x(t)$ als Funktionen der In-Energie E_{in} . Dabei wird $\tau_{in} = 0$ festgehalten, und die Systemparameter sind als $V_0 = 2$ und $\beta = 4$ gewählt. Die regulären Intervalle von $E_{out}(E_{in})$ und $\Delta t(E_{in})$ korrespondieren zu Intervallen konstanter Nulldurchgangszahl n .

An den Rändern jedes regulären Intervalls befinden sich Orbits mit $E_{out} = 0$. Nach den Ausführungen im letzten Abschnitt hat man also in der Nähe jedes PEO einen algebraisch skalierenden Abschnitt der Streufunktionen, wobei sich der Skalierungsexponent mit $\beta = 4$ gemäß (4.11) zu

$$\kappa = \frac{\beta + 2}{2\beta} = \frac{3}{4} \quad (4.21)$$

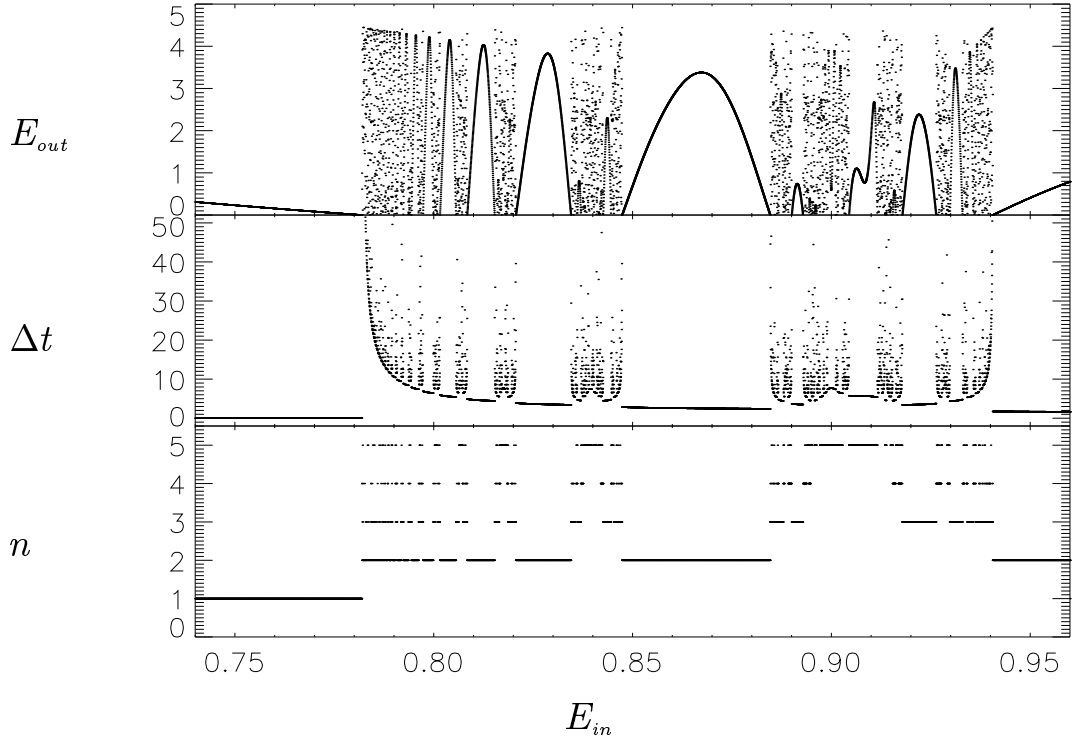


Abbildung 4.2: Streufunktionen für das Kicksystem mit $V_0 = 2$, $\beta = 4$, $\tau_{in} = 0$.

ergibt. Der PEO am linken Rand des Bereichs komplexer Streuorbits in Abbildung 4.2 bei $E_{in} = E_{in}^* = 0.7818\dots$ ist ein guter Kandidat, um die theoretische Voraussage zu bestätigen. Abbildung 4.3 zeigt die Streufunktionen in Abhängigkeit von der skalierten In-Variablen

$$\xi = (E_{in} - E_{in}^*)^{-3/4}. \quad (4.22)$$

Offensichtlich erfüllen die skalierten Streufunktionen alle Voraussagen, die im vorigen Abschnitt gemacht worden sind.

Seegers hat in seiner Doktorarbeit das Kicksystem (4.16) mit einem asymptotisch exponentiell abfallendem Potential $V(x)$ untersucht [See95]. Er konnte sowohl die algebraische Skalierung der horizontalen Struktur mit dem vorausgesagten Skalierungsexponenten $\kappa = 1/2$ bestätigen, als auch die exponentielle Skalierung in der Nähe einer der „versteckten“ hyperbolischen Singularitäten nachweisen.

4.2.2 Das Δ -Modell

Noid, Gray und Rice haben sich in zwei Artikeln mit der Streuung von Helium am Iodmolekül I_2 beschäftigt [Noi⁺86, Gra⁺86]. Als einfaches Modell dient ihnen eine Δ -förmige Anordnung, bei der die Bewegung des He-Atoms auf die Mittelsenkrechte der I_2 -Verbindungsline beschränkt ist und keine Rotationszustände

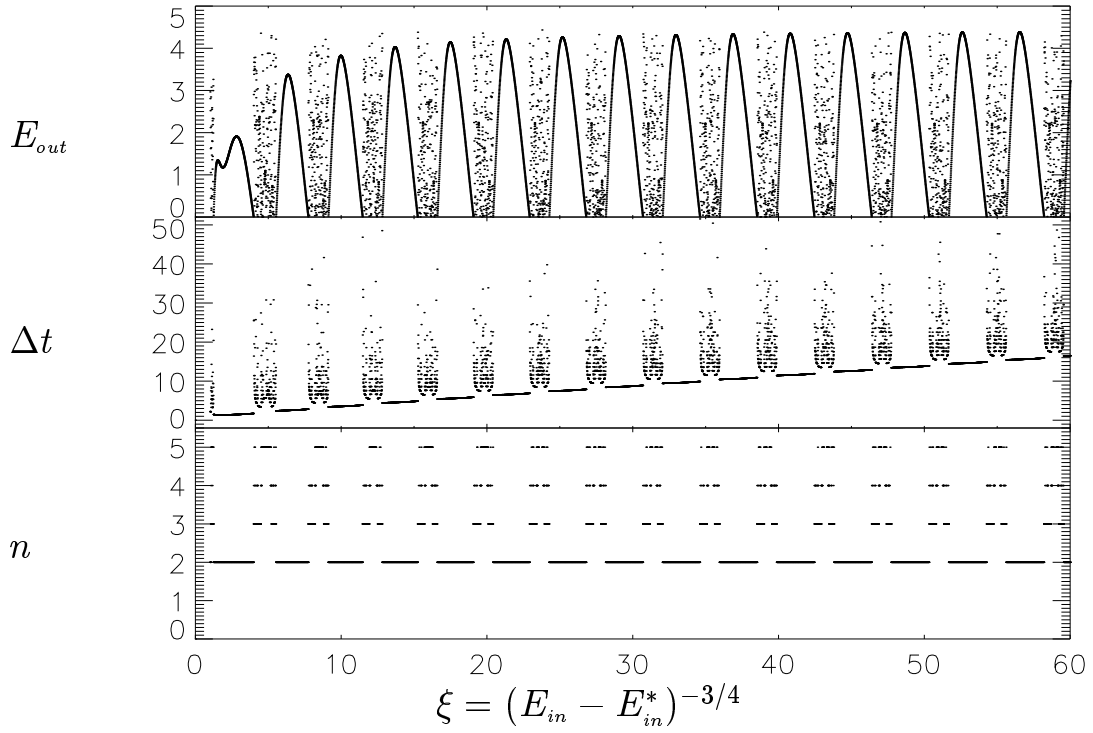


Abbildung 4.3: *Skalierte Streufunktionen für das Kicksystem mit den Parameterwerten von Abbildung 4.2.*

vorliegen. Abbildung 4.4 zeigt die Geometrie des Modells. Hier bezeichnet P das Heliumatom (Projektil) und T die Iodatome (Target).

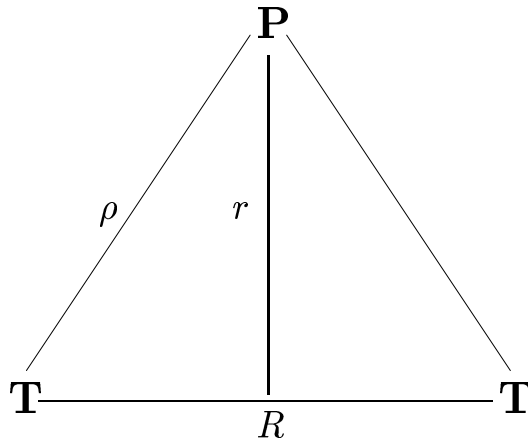


Abbildung 4.4: *Skizze des Δ -Modells.*

Die reduzierte Masse des Targetmoleküls sei mit M und die Masse des Projektils mit m bezeichnet. R sei der Abstand zwischen den beiden Targetatomen, und P sei der zu R konjugierte Impuls. Der Abstand des Projektils vom Targetmolekül

sei mit r und der konjugierte Impuls mit p bezeichnet. Damit lautet die Hamilton-Funktion des Systems:

$$H(R, r, P, p) = \frac{1}{2M}P^2 + \frac{1}{2m}p^2 + V(R, r) \quad (4.23)$$

mit dem Potential

$$V(R, r) = 2V_P(\rho(R, r)) + V_T(R) , \quad (4.24)$$

wobei

$$\rho(R, r) = \sqrt{(R/2)^2 + r^2} \quad (4.25)$$

der Abstand zwischen dem Projektil und den Targetatomen ist. $V_P(\rho)$ bezeichnet die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und einem Targetatom, während $V_T(R)$ das Potential zwischen den beiden Targetatomen darstellt.

Es ist günstig, Skalierungsoperationen durchzuführen, so daß sich (statt zweier gekoppelter Systeme mit jeweils einem Freiheitsgrad) die Hamilton-Funktion *eines* Teilchens mit zwei Freiheitsgraden ergibt. Dazu führt man den reduzierten Massenparameter $\mu = \sqrt{Mm}$ ein und definiert neue Orte und Impulse via

$$(M/m)^{1/4} r \longmapsto r \quad (4.26a)$$

$$(m/M)^{1/4} p \longmapsto p \quad (4.26b)$$

$$(m/M)^{1/4} R \longmapsto R \quad (4.26c)$$

$$(M/m)^{1/4} P \longmapsto P . \quad (4.26d)$$

Für diese neuen Koordinaten gelten Differentialgleichungen, die sich aus der Hamilton-Funktion

$$H(R, r, P, p) = \frac{1}{2\mu} (P^2 + p^2) + V(R, r) \quad (4.27)$$

herleiten. H beschreibt offensichtlich die Dynamik eines Teilchens der Masse μ im zweidimensionalen Potential $V(R, r)$.

Abhängig von der Wahl der Potentiale $V_T(R)$ und $V_P(\rho)$ und der Gesamtenergie sind verschiedene Szenarien von Streuvorgängen denkbar. Schießt man das Projektil P auf das Targetmolekül T-T, dann sind (a) inelastische Streuung von P unter Erhalt der Molekülbindung, (b) Dissoziation des Moleküls oder (c) Einfang von P unter Bildung eines Dreierkomplexes möglich. Ein Einfang des Projektils ist jedoch höchstens auf einer Nullmenge von Anfangsbedingungen möglich [Eck88]. Wird die Gesamtenergie des Systems kleiner als null gewählt, so scheidet auch

die Aufspaltung des Targetmoleküls aus. Unter dieser Voraussetzung bleibt als interessante Möglichkeit die inelastische Streuung des Projektils am Target.

Es wäre nun möglich, wie in der Original-Arbeit, beide Wechselwirkungen durch Morse-Potentiale zu modellieren. Interessiert man sich jedoch nur für inelastische Streuung unter Erhalt der Molekülbindung, so ist es legitim, das intramolekulare Potential $V_T(R)$ harmonisch um den Gleichgewichtsabstand \bar{R} des Target-Moleküls zu approximieren:

$$V_T(R) \approx \frac{1}{2} \mu \omega^2 (R - \bar{R})^2 . \quad (4.28)$$

ω bezeichnet hier die Kreisfrequenz der Eigenschwingungen des Targets. Für die Target-Projektil-Wechselwirkung verwende ich entweder ein (asymptotisch attraktives und exponentiell abfallendes) Morse-Potential

$$V_P(\rho) = D [\exp(-2b(\rho - \bar{\rho})) - 2 \exp(-b(\rho - \bar{\rho}))] \quad (4.29)$$

($D, b, \bar{\rho} > 0$) oder ein (asymptotisch algebraisch wie $-\rho^{-\beta}$ abfallendes) Lennard-Jones-Potential

$$V_P(\rho) = \frac{D}{\alpha - \beta} \left[\beta \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} \right)^\alpha - \alpha \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} \right)^\beta \right] \quad (4.30)$$

($D, \bar{\rho} > 0, \alpha > \beta > 2$). Die Parameter des Systems wurden in [Noi⁺86] so gewählt, daß experimentell ermittelte Eigenschaften des HeI₂-Moleküls möglichst genau mit denen des Modells übereinstimmen. Dabei stellt sich heraus, daß die Kopplung zwischen Transversalbewegung (in R -Richtung) und Longitudinalbewegung (in r -Richtung) äußerst klein ist. Die Streuabbildung zeigt nur bei sehr kleinen Einfallenergien irreguläre Eigenschaften, und der erforderliche numerische Aufwand ist immens. Da ich lediglich Skalierungseigenschaften der Streufunktionen nachweisen möchte, habe ich die Systemparameter auf besser handhabbare Werte gesetzt. Wie sich durch Vergleich mit den Streufunktionen des Originalsystems zeigt, ändert dies nichts an ihren qualitativen Eigenschaften.

Die für die Streubewegung charakteristischen Eigenschaften des Potentials entnimmt man der Abbildung 4.5. Die Abbildung zeigt Verlauf und Höhenlinien des Potentials, wenn das intramolekulare Potential $V_T(R)$ harmonisch genähert und das Potential $V_P(\rho)$ als Morse-Potential gewählt wird.

Die wesentlichen Eigenschaften sind dieselben wie beim Potential der Originalarbeit: Man hat für große r eine Rinne, die in R -Richtung (der *transversalen* Richtung) durch ein quadratisches Minimum und in r -Richtung (der *longitudinalen* Richtung) durch ein asymptotisches Verhalten wie $-\exp(-br)$ ausgezeichnet ist. Für kleine r hat man eine Barriere, die das Teilchen in der Regel nicht

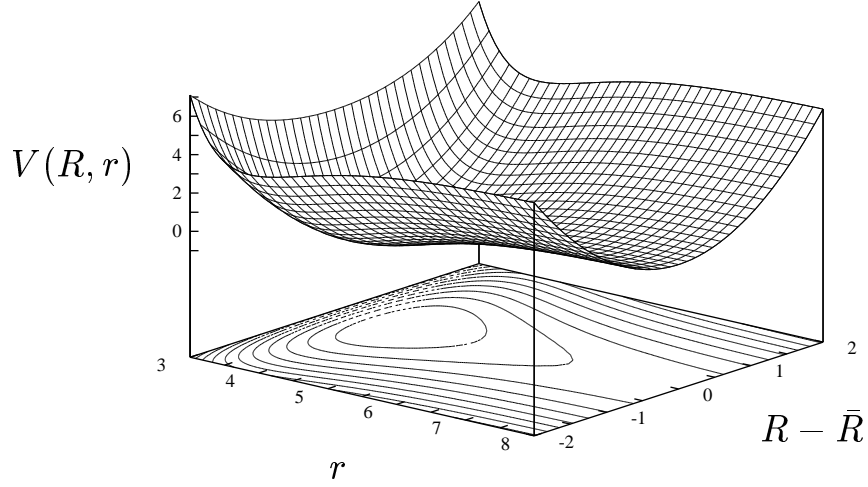


Abbildung 4.5: *Potential $V(R, r)$ des Δ -Modells. $V_P(\rho)$ ist als Morse-Potential gewählt. Parameterwerte: $\omega = 2$, $D = 1$, $\bar{\rho} = 4$, $b = 1$.*

überwinden kann; nur für sehr hohe Energie kann das Projektil durch das Targetmolekül hindurchlaufen. Dazwischen befindet sich ein Potentialminimum, das einer Δ -förmigen Molekülkonfiguration entspricht. Im Falle von Lennard-Jones-Potentialen erhält man ein ähnliches Bild. Der Abfall des Potentials für $r \rightarrow \infty$ ist hier lediglich nicht exponentiell, sondern algebraisch wie $-r^{-\beta}$.

Zur eindeutigen Charakterisierung von Streuasymptoten werden drei Streuvariablen benötigt. Hier erweist es sich als vorteilhaft, daß die Transversalbewegung in harmonischer Näherung betrachtet wird. Die asymptotische Hamilton-Funktion für $r \rightarrow \infty$ lautet:

$$H_{as}(R, r, P, p) = \frac{1}{2\mu}(P^2 + p^2) + \frac{\mu}{2}\omega^2(R - \bar{R})^2. \quad (4.31)$$

Hier sind harmonische Transversal- und Freiteilchen-Longitudinalbewegung entkoppelt. Als Streuvariablen bieten sich an: die *Transversalenergie* (d.i. bis auf Skalierung die Targetenergie)

$$E^t = \frac{1}{2\mu}P^2 + \frac{\mu}{2}\omega^2(R - \bar{R})^2, \quad (4.32)$$

die *Longitudinalenergie* (d.i. bis auf Skalierung die Projektilenergie)

$$E^l = \frac{1}{2\mu}p^2 \quad (4.33)$$

und die Phase Φ des Transversalsystems zu dem Zeitpunkt, an dem die der asymptotische Orbit die Linie $r = 0$ überschreitet. Φ berechnet man folgendermaßen: Ein Orbit des asymptotischen Systems ist gegeben durch

$$r(t) = r_0 \pm \sqrt{\frac{2E^l}{\mu}}(t - t_0) \quad (4.34a)$$

$$R(t) - \bar{R} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E^t}{\mu}} \sin(\omega t + \varphi) . \quad (4.34b)$$

Mit Gleichung (a) läßt sich der Zeitpunkt t^* des Nulldurchgangs $r(t^*) = 0$ bestimmen. Die Phase Φ des Nulldurchgangs bekommt man folglich aus Gleichung (b) als $\Phi = \omega t^* + \varphi$. Die Streuabbildung σ bildet also das Tripel von In-Werten $(E_{in}^t, E_{in}^l, \Phi_{in})$ auf das Tripel von Out-Werten $(E_{out}^t, E_{out}^l, \Phi_{out})$ ab. Dabei sind im asymptotischen Bereich E^t und E^l über die Gesamtenergie $E = E^t + E^l$ miteinander gekoppelt.

Ich nenne Streutrajektorien *einfach*, wenn $r(t)$ genau ein Minimum hat: Das Teilchen läuft in diesem Falle nur auf das Target zu und nach dem Abprallen am Potentialwall wieder zurück. Bei mehr als einem $r(t)$ -Minimum heie die Streuung dagegen *komplex*. Als Komplexittsparameter n bietet sich die Anzahl der relativen Maxima von $r(t)$ (d.i. die Anzahl der Minima minus eins) an. Als Verzgerungszeit Δt eignet sich die Zeitdifferenz zwischen dem ersten und dem letzten $r(t)$ -Minimum. Per definitionem gilt fr einfache Streuorbits $\Delta t = 0$.

Abbildung 4.6 zeigt die Out-Energie E_{out}^l des Projektils, die Verzgerungszeit Δt und den Komplexittsparameter n als Funktionen der In-Phase Φ_{in} . Die Systemparameter sind wie in Abbildung 4.5 gewhlt. Die Projektil-In-Energie ist auf $E_{in}^l = 0.1$ und die Gesamtenergie auf $E = 1.2$ gesetzt (d.h. $E_{in}^t = 1.1$). Das Resultat reproduziert trotz der anders gewhlten Parameter qualitativ erwartungsgem die entsprechenden Diagramme in [Noi⁺86]. Die Struktur der Streufunktionen ist die gleiche wie bei dem im letzten Abschnitt behandelten Kicksystem oder der davor eingehend besprochenen Coulomb-Streuung im zirkular polarisierten elektrischen Feld. Man mache sich aber klar, da man hier keine „von auen“ aufgeprgte Zeitabhngigkeit hat (die Hamilton-Funktion ist nicht explizit zeitabhngig), sondern da die Oszillation des Targets bei weiten Exkursionen des Projektils die Skalierung der Streufunktionen bewirkt.

Den allgemeinen Betrachtungen zur Skalierung von Streufunktionen in der Nhe von parabolisch entweichenden Orbits in Abschnitt 4.1 entnimmt man fr exponentiell abfallende Potentiale den Skalierungsexponenten (4.15) als:

$$\kappa = \kappa(\infty) = \frac{1}{2} . \quad (4.35)$$

Die Skalierung der Streufunktionen in der Nhe des PEO mit $\Phi_{in}^*/2\pi = 0.458 \dots$ zeigt Abbildung 4.7. Fr groe

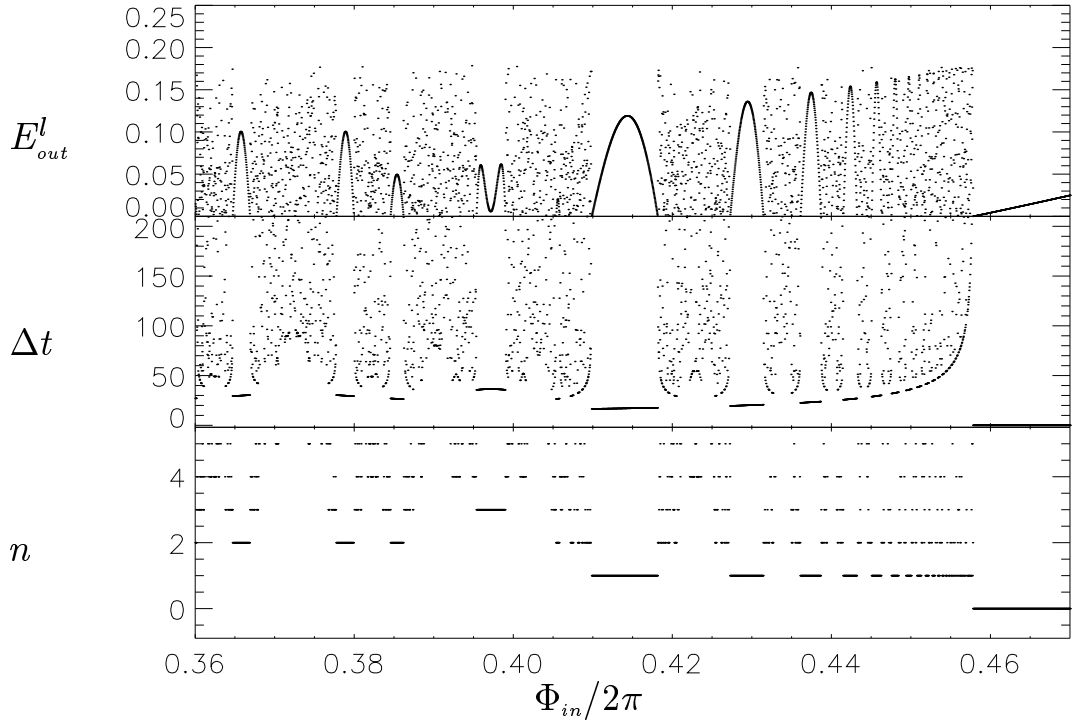


Abbildung 4.6: Streufunktionen für das Δ -Modell. $V_P(\rho)$ Morse-Potential, Systemparameter wie in Abbildung 4.5, $E_{in}^l = 0.1$, $E_{in}^t = 1.1$ und $\mu = \sqrt{2}$.

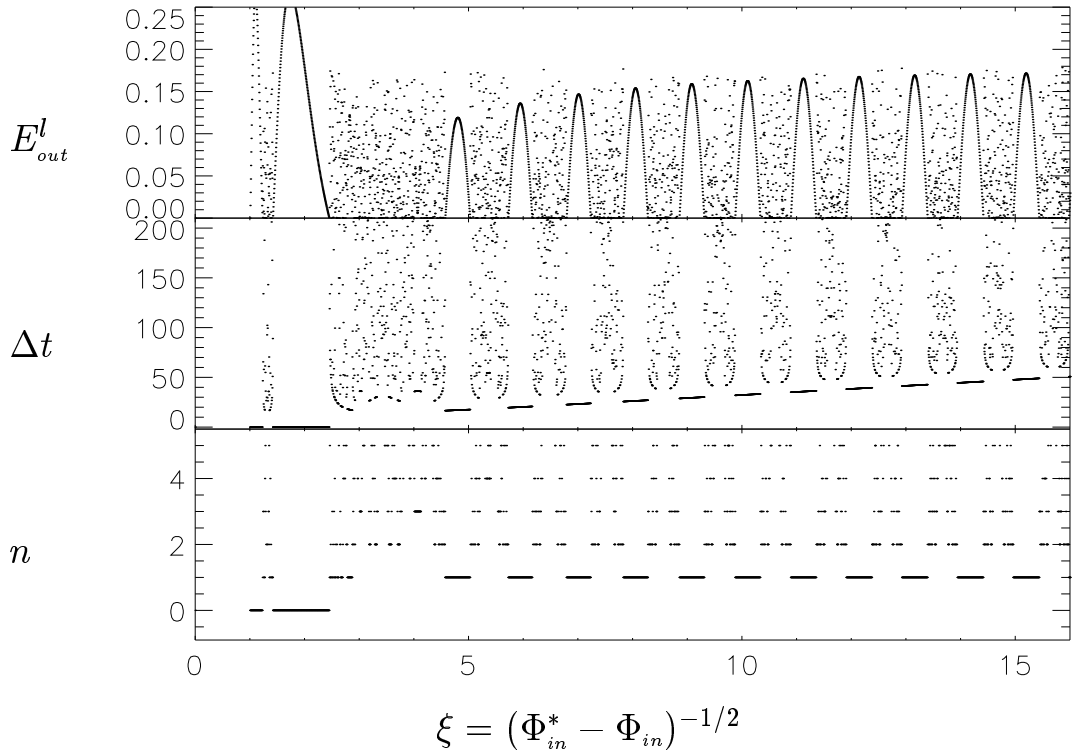


Abbildung 4.7: Skalierte Streufunktionen aus Abbildung 4.6.

$$\xi = (\Phi_{in}^* - \Phi_{in})^{-1/2} \quad (4.36)$$

werden E_{out}^l und n periodische Funktionen von ξ , während Δt die Überlagerung einer periodischen und einer linear wachsenden Funktion ist. In jedem Periodizitätsintervall wächst Δt um den Wert von etwa 3 an; dies stimmt überein mit der Periode des inneren Systems $2\pi/\omega = \pi$.

Wählt man für $V_P(\rho)$ ein Potential vom Lennard-Jones-Typ (4.30) mit $\alpha = 12$ und $\beta = 6$, so erhält man bei ansonsten gleichen Parameterwerten Streufunktionen, die denen für das Morse-Potential sehr ähnlich sind (Abbildung 4.8). Selbst

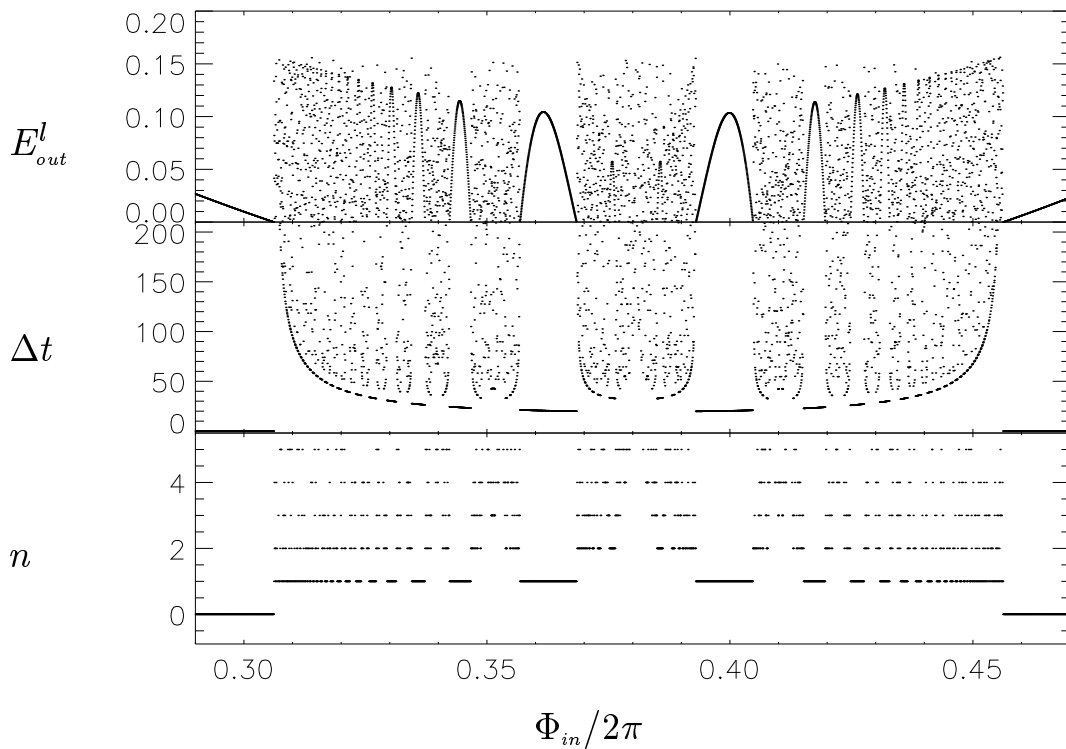


Abbildung 4.8: Streufunktionen für das Δ -Modell. $V_P(\rho)$ ist als 12-6-Lennard-Jones-Potential gewählt. Parameterwerte: $\omega = 2$; $D = 1$, $\bar{\rho} = 4$, $\alpha = 12$, $\beta = 6$; $\mu = \sqrt{2}$, $E_{in}^l = 0.1$, $E_{in}^t = 1.1$.

die Lage des Hauptbereiches komplexer Streuung auf der Φ_{in} -Achse ist nahezu identisch: Im Fall des Morse-Potentials liegt dieser im Φ_{in} -Bereich $[0.291, 0.458]$, im Falle des Lennard-Jones-Potentials im Bereich $[0.306, 0.456]$.

Man erkennt hier wie dort, daß die Anzahl n der $r(t)$ -Maxima die regulären Intervalle gut charakterisiert, wie dies im Fall des Kicksystems die Anzahl n der Nulldurchgänge leistet. Der Grund für diese ähnlichen Eigenschaften ist, daß das Δ -System, genauso wie das Kicksystem, effektiv ein System eines Freiheitsgrades mit Zeitabhängigkeit ist: Das sich in einer Dimension bewegendes Projektil P

befindet sich in einem Potential, das durch die interne Dynamik des Targets zeitabhängig wird.

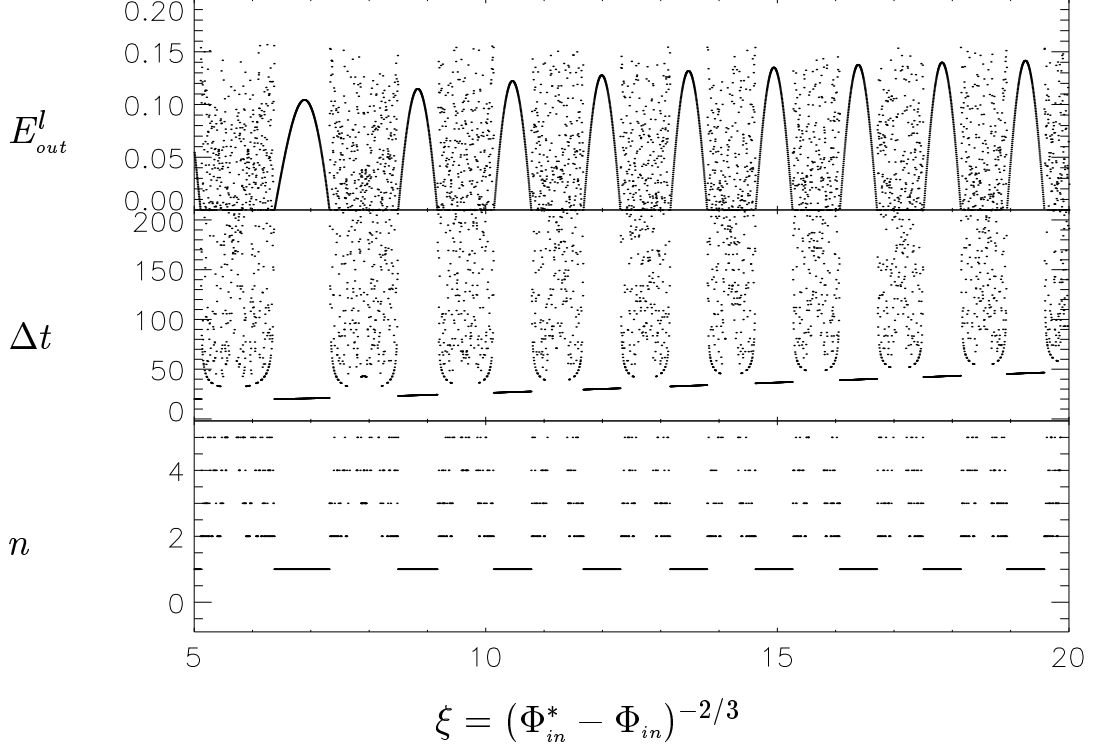


Abbildung 4.9: *Skalierte Streufunktionen aus Abbildung 4.8.*

Abbildung 4.9 zeigt die Streufunktionen im Falle des 12-6-Lennard-Jones-Potentials in Abhängigkeit von der skalierten Streuvariablen $\xi = (\Phi_{in}^* - \Phi_{in})^{-\kappa}$. Der Skalierungsexponent berechnet sich mit $\beta = 6$ gemäß (4.11) zu

$$\kappa = \frac{2}{3} . \quad (4.37)$$

Auch hier sind die vorausgesagte Periodizität der skalierten Streufunktionen und der superponierte lineare Anstieg von $\Delta t(\xi)$ deutlich zu sehen. Δt wächst in jedem Periodizitätsintervall um den Wert von ca. 3 an — in guter Übereinstimmung mit der Eigenperiode π des Targetmoleküls.

4.2.3 Zirkular bewegtes Zentralpotential

In diesem Unterabschnitt wird die Streuung eines Teilchens in einem gleichförmig auf einem Kreis geführten Zentralpotential $V(r)$ untersucht. Der Spezialfall des attraktiven Coulomb-Potentials $V(r) = -1/r$ wurde ausführlich im 3. Kapitel besprochen. Wie im Coulombschen Fall ist es auch hier möglich, die Hamilton-Funktion eines Teilchens, das sich im Potential $V(r)$ und in einem superponierten

ortsunabhängigen rotierenden Feld befindet, durch eine kanonische Transformation auf die Hamilton-Funktion eines Teilchens im zirkular bewegten Potential $V(r)$ zu transformieren. Dabei verwendet man die gleichen Erzeugenden wie in Abschnitt 1.3, wobei man jeweils $-1/r$ durch $V(r)$ zu ersetzen hat. Ich beginne hier jedoch nicht mit dem raumfesten System Σ , sondern gleich mit dem (im Coulomb-Fall so bezeichneten) mitbewegten System Σ' , ohne weiter auf den Ursprung der Hamilton-Funktion Bezug zu nehmen.

Gegeben sei also ein Zentralpotential $V(r)$. Man verschiebe den Nullpunkt des Koordinatensystems um den Vektor $-\rho \mathbf{e}_x$, so daß $V(r) \mapsto V(|\mathbf{r} - \rho \mathbf{e}_x|)$. (Im Coulomb-Fall war $\rho = F/\omega^2$.) Dann lasse man das Potential mit der Kreisfrequenz ω um den Ursprung kreisen. Es ergibt sich die Hamilton-Funktion des im folgenden so bezeichneten *raumfesten Systems*:

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 + V(|\mathbf{r} - \rho(t)|) \quad (4.38a)$$

mit

$$\rho(t) = \rho (\mathbf{e}_x \cos \omega t + \mathbf{e}_y \sin \omega t) \quad (4.38b)$$

(vergleiche mit (1.34)). Im *rotierenden System* (das im Coulomb-Fall mit $\tilde{\Sigma}'$ bezeichnet worden war) wird die Hamilton-Funktion zeitunabhängig:

$$\tilde{H}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{p}}) = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{p}}^2 + V(|\tilde{\mathbf{r}} - \rho \tilde{\mathbf{e}}_x|) - \omega (\tilde{x} \tilde{p}_y - \tilde{y} \tilde{p}_x) . \quad (4.39)$$

Folglich ist der Wert C von \tilde{H} eine Konstante der Bewegung. Ich bezeichne C wieder als *Jacobi-Integral*. Im raumfesten Koordinatensystem vermittelt das Jacobi-Integral eine einfache Beziehung zwischen der Energie und dem Drehimpuls des Teilchens:

$$C = E - \omega L , \quad (4.40)$$

wobei E die Energie des Teilchens und L die z -Komponente des Drehimpulses bezeichnen. Betrachtet man lediglich Bewegungen in der xy -Ebene, so hat man also ein zeitunabhängiges Hamilton-System von zwei Freiheitsgraden. Als anpassungsfähiges und numerisch unproblematisches Potential wähle ich

$$V(r) = -\frac{1}{\sqrt{r^2 + r_0^2}^\beta} . \quad (4.41)$$

Für $r_0 = 0$ und $\beta = 1$ geht das System in den Fall des zirkular bewegten Coulomb-Potentials aus Abschnitt 1.3 über. Für $r_0 > 0$ verschwindet die Singularität bei

$r = 0$, so daß eine Regularisierung der Differentialgleichungen nicht mehr notwendig ist. Ich handle im folgenden die auf Seite 88 aufgeführten Spezialfälle (a), (b) und (c) ab.

Fall (a): $\beta < 2$.

Es wurden numerisch Streufunktionen für das System (4.38) mit Coulomb-artig abfallenden (d.h. $\beta = 1$) Potentialen (4.41) mit $r_0 > 0$ bestimmt. Hier können wieder die in 3.1 eingeführten Streuvariablen (E, L, τ, φ) verwendet werden. Die Resultate unterscheiden sich in keinem wesentlichen Merkmal von den im 3. Kapitel gezeigten Ergebnissen. Ich verzichte daher hier auf eine weitergehende Diskussion.

Fall (b): $\beta > 2, C \neq 0$.

Für $\beta > 2$ fällt das Potential $V(r)$ schneller ab als das Zentrifugalpotential $L^2/2r^2$. Folglich überwiegt asymptotisch der Repulsivanteil des Effektivpotentials, und Orbits mit $E_{out} = 0$ sind nicht möglich. Wie sehen in diesem Fall die Streufunktionen aus?

Das Teilchen bewegt sich im Unterschied zum Coulomb-Fall asymptotisch frei. Als Streuvariablen kann man jetzt die Energie E , den Drehimpuls L , den Winkel $\varphi = \arctan(y/x)$ und den Zeitpunkt τ der größten Annäherung der Asymptote an den Ursprung verwenden. Dabei berechnet sich die Zeitvariable zu:

$$\tau = t - \frac{xp_x + yp_y}{p_x^2 + p_y^2}. \quad (4.42)$$

Die gleichmäßige Rotationsbewegung des Systems erlaubt es wieder, die In-Koordinate φ_{in} gleich null zu setzen. Faßt man das Jacobi-Integral C als festen Parameter des Systems auf, so errechnet sich der Drehimpuls L_{in} mit (4.40) aus E_{in} . Unter diesen Einschränkungen operiert die Streuabbildung σ nur noch auf dem zweidimensionalen Unterraum von asymptotischen Anfangsbedingungen mit den In-Werten (E_{in}, τ_{in}) . Als Bild liefert σ die drei Out-Werte $(E_{out}, \tau_{out}, \varphi_{out})$. Zur Darstellung der Streufunktionen variiert man einen der In-Parameter unter Festhalten des anderen.

Abbildung 4.10 zeigt E_{out} , τ_{out} und φ_{out} als Funktionen der In-Energie E_{in} bei fester In-Zeit τ_{in} . Asymptotisch verhält sich das Potential mit $\beta = 4$ hier wie $-r^{-4}$. Folglich dominiert für große r der abstoßende Zentrifugalterm, und es gibt keine parabolisch entweichenden Orbits. Die Struktur der Streufunktionen legt nichtsdestoweniger nahe, daß es Bereiche irregulärer Streuung gibt.

Offensichtlich existiert eine kritische Out-Energie $E_{out}^* = 0.085 \dots$, die nicht unterschritten wird. Ferner hat man für große In-Energien $E_{in} > E_{in}^* = 0.217 \dots$ nur

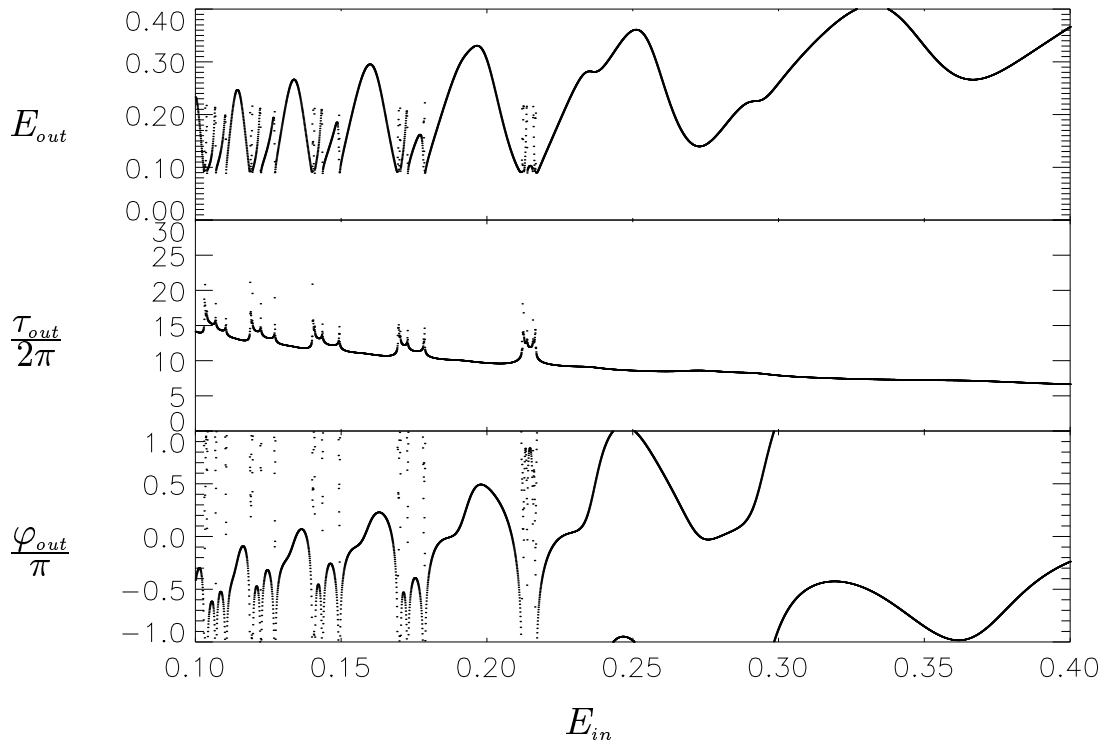


Abbildung 4.10: Streufunktionen für $\omega = 1$, $\rho = 0.02$, $\beta = 4$, $r_0 = \sqrt{0.45}$, $C = -0.90978$ und $\tau_{in} = 0$.

noch reguläre Streuung. Zum Verständnis des hier vorliegenden Chaosmechanismus zeige ich in Abbildung 4.11 den Orbit, der — im Rahmen der verfügbaren Rechengenauigkeit — zur Anfangsbedingung $E_{in} = E_{in}^*$ gehört.

Anscheinend nähert sich dieser Streuorbit an einen instabilen periodischen Orbit an. Nach sieben Umrundungen des Ursprungs entweicht das Teilchen wieder in die asymptotische Region. Eine genauere Approximation des periodischen Orbits stößt hier an numerische Grenzen: Schon die Anfangsbedingung des gezeigten Orbits mußte mit einer Genauigkeit von 10^{-18} bestimmt werden, um das gezeigte Resultat zu erhalten.

Da der Parameter ρ in unserem Beispiel mit 0.02 relativ klein ist, liegt aufgrund der strukturellen Stabilität von instabilen periodischen Orbits die Vermutung nahe, daß dieser Orbit auch im Falle $\rho = 0$ existiert. Für $\rho = 0$ sind E und L Konstanten der Bewegung, und die radiale Bewegung des Teilchens wird durch das Effektivpotential

$$V_{\text{eff}}(r; L) = V(r) + \frac{L^2}{2r^2} \quad (4.43)$$

bestimmt. Abbildung 4.12 zeigt $V_{\text{eff}}(r; L)$ für $L = 0.9915$. Typisch ist das Minimum, in dessen Umgebung man gebundene Bewegung hat. Das weiter außen

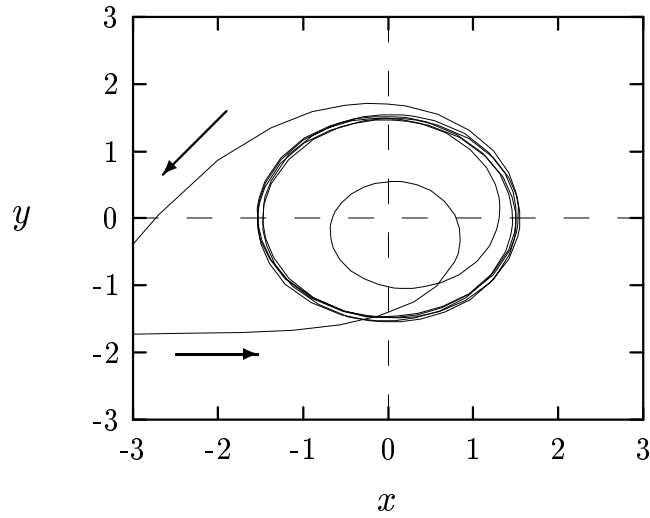


Abbildung 4.11: Streutrajektorie für die Parameterwerte von Abbildung 4.10 und $E_{in} = E_{in}^* = 0.216\,687\,803\,218\,602\,923$.

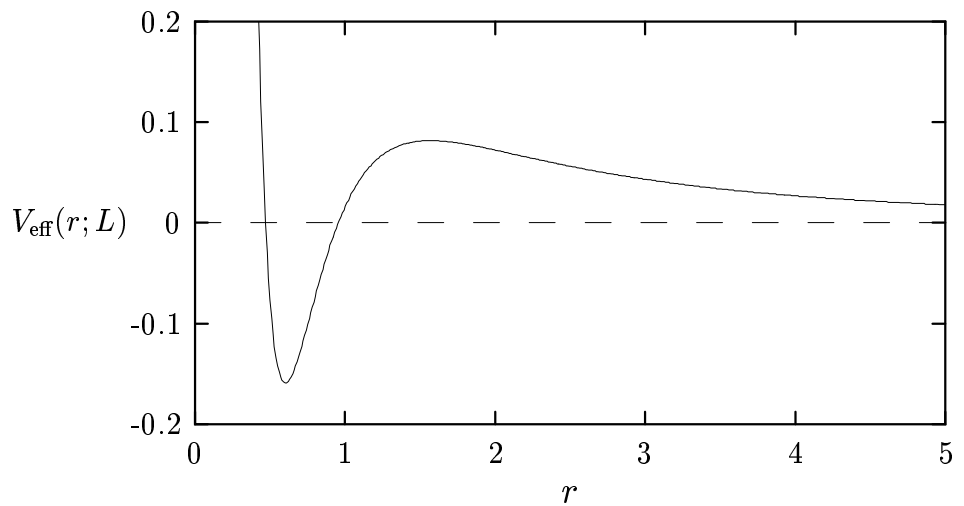


Abbildung 4.12: Effektivpotential $V_{\text{eff}}(r; L)$ für $\rho = 0$, $\beta = 4$, $r_0 = \sqrt{0.45}$ und $L = 0.9915$.

liegende lokale Maximum entspricht dem *Orbiting-Orbit*, einem instabilen periodischen Kreisorbit. Bei der Streuung führen Orbits, die auf der stabilen Mannigfaltigkeit des Orbiting-Orbits verlaufen, zur *Orbiting-Singularität* in der Streuabbildung.

Im ungestörten Fall schließen sich ein Ast der stabilen und ein Ast der instabilen Mannigfaltigkeit zu einem homoklinen Orbit, während die anderen Äste in die asymptotische Region reichen. Wählt man den Parameter ρ größer als null, so schneiden sich stabile und instabile Mannigfaltigkeiten des Orbiting-Orbits transversal. Als Konsequenz ergibt sich eine invariante repulsive chaotische Menge, deren stabile Mannigfaltigkeiten in die asymptotische Region reichen und zu einer fraktalen Menge hyperbolischer Streusingularitäten führen (siehe Einleitung zu Kapitel 3).

Ist nun für das Jacobi-Integral ein Wert C vorgegeben, so muß für den Orbiting-Orbit die Gleichung $C = E(L) - \omega L$ gelten. Dabei ist die Energie $E(L)$ durch den Wert beim Maximum von $V_{\text{eff}}(r; L)$ gegeben. In dem vorhin gezeigten Beispiel war $C = -0.90978$. Numerisch findet man damit $L = 0.9915 \dots$ (dieser Wert wurde auch in Abbildung 4.12 gewählt), während sich der Radius des Orbiting-Orbits in guter Übereinstimmung mit Abbildung 4.11 als $\bar{r} = 1.567 \dots$ ergibt. Man bemerkt, daß die untere Grenze $E_{out}^* \approx 0.085$ der E_{out} -Werte in Abbildung 4.10 etwa mit dem hier berechneten Wert des Potentialmaximums ($E = 0.08172 \dots$) übereinstimmt. Der Störparameter $\rho = 0.02$ ist also groß genug, um deutliche Effekte irregulärer Streuung hervorzurufen, jedoch so klein, daß der untere Grenzwert der Out-Energie noch aus den Eigenschaften des ungestörten Systems bestimmt werden kann.

Die Stabilität des Orbiting-Orbits läßt sich folgendermaßen ermitteln. In der Umgebung des Orbiting-Orbits bewegt sich das Teilchen im Potential

$$V_{\text{eff}}(r; L) \approx \frac{1}{2} V_{\text{eff}}''(\bar{r}; L) (r - \bar{r})^2 ; \quad (4.44)$$

dabei ist $V_{\text{eff}}''(\bar{r}; L) < 0$. Die allgemeine Lösung für die radiale Bewegung des Teilchens in der Umgebung des Orbiting-Orbits lautet also

$$r(t) - \bar{r} = Ae^{\lambda t} + Be^{-\lambda t} \quad (4.45)$$

mit

$$\lambda^2 = |V_{\text{eff}}''(\bar{r}; L)| . \quad (4.46)$$

Man benötigt noch die Periode des (kreisförmigen) Orbiting-Orbits:

$$T = \frac{2\pi\bar{r}^2}{L} . \quad (4.47)$$

Damit bekommt man (unter Vernachlässigung des exponentiell abklingenden Terms in (4.45)) für den Streckungsfaktor pro Orbitperiode:

$$\frac{r(T) - \bar{r}}{r(0) - \bar{r}} = e^{\lambda T} = \exp\left(\frac{2\pi\bar{r}^2}{L} \sqrt{|V_{\text{eff}}''(\bar{r}; L)|}\right). \quad (4.48)$$

In unserem Beispiel ergibt sich für Instabilitätsexponent und Periode des Orbiting-Orbits:

$$\lambda = 0.37 \dots \quad \text{und} \quad T = 15.0 \dots \quad (4.49)$$

Jung und Pott haben beschrieben, wie die Skalierungseigenschaften der chaotischen Streufunktionen durch einen einzigen instabilen periodischen Orbit dominiert werden können [JuPo89]. Detailliert wurde dieses Phänomen auch am Beispiel des Størmer-Problems untersucht [See90]. In Anlehnung an diese Arbeiten zeige ich in Abbildung 4.13 die Streufunktionen aus Abbildung 4.10 in Abhängigkeit von der *logarithmisch* skalierten In-Variable $\xi = -\log(E_{in}^* - E_{in})$, wobei E_{in}^* den kritischen In-Wert bezeichnet, der den Bereich komplexer Streuung von dem unbeschränkten Bereich regulärer Streuung trennt (siehe Abbildung 4.10).

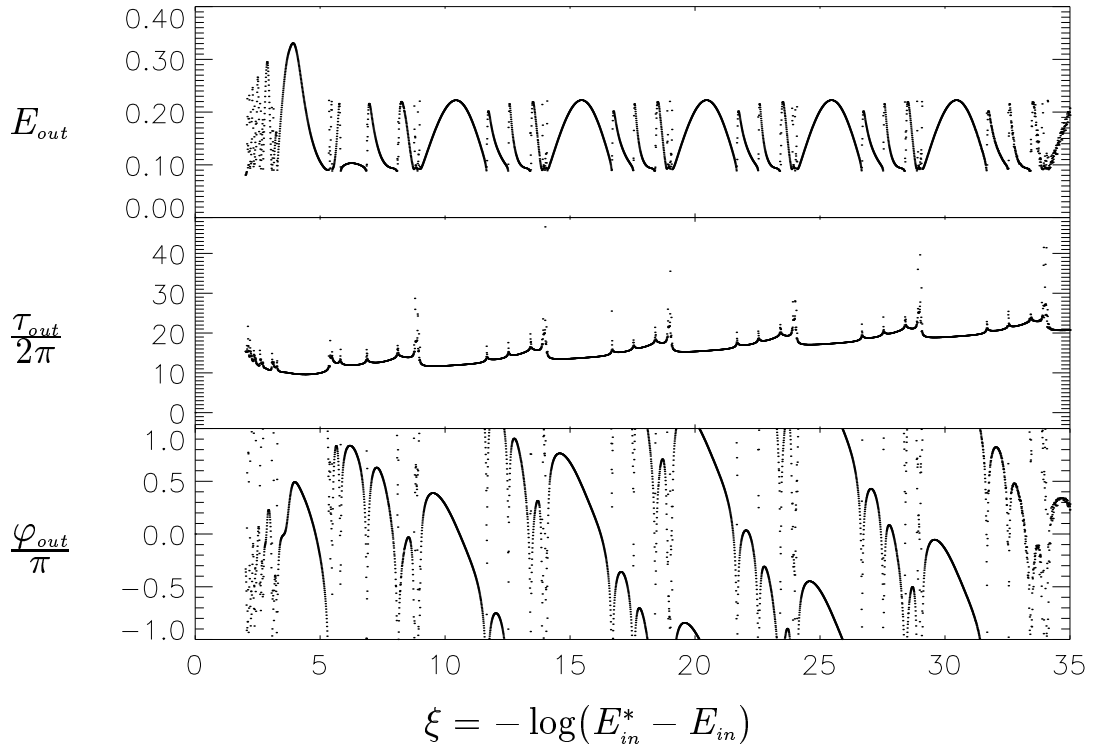


Abbildung 4.13: *Logarithmisch skalierte Streufunktionen aus Abbildung 4.10.*

Man erkennt, daß für große ξ die Out-Größen E_{out} und φ_{out} periodische Funktionen von ξ mit der Periode $\Delta\xi = 5.3 \dots$ sind. Dieser Wert stimmt recht gut mit dem

oben mit Hilfe des ungestörten Systems ($\rho = 0$) bestimmten Logarithmus des Streckungsfaktors (4.48)

$$\lambda T = 5.5 \dots \quad (4.50)$$

überein. Ferner wächst τ_{out} pro ξ -Periode um ca. 14.5 an, was gut mit der Periode T des Orbiting-Orbits übereinstimmt. Die Periodizitätsintervalle unterscheiden sich durch die Anzahl der Umrundungen des Ursprungs in der Nähe des Orbiting-Orbits. Folglich findet sich auch die Instabilität des Orbiting-Orbits in der logarithmischen Skalierung der Streufunktionen wieder.

Die etwas „ausgefranst“ Kurven im Bereich $\xi > 33$ haben ihre Ursache in numerischen Ungenauigkeiten. Dabei muß man sich vergegenwärtigen, daß in diesem Bereich bei der numerischen Integration der Streutrajektorien der Abstand zweier Anfangsbedingungen auf der E_{in} -Achse nur etwa $e^{-34} \approx 10^{-15}$ beträgt. Nur eine wesentlich erhöhte Rechengenauigkeit könnte hier Abhilfe schaffen — sofern man auch E_{in}^* entsprechend genauer bestimmt.

Fall (c): $\beta > 2$, $C = 0$.

Ein interessanter Ausnahmefall liegt vor, wenn man für schnell abfallende Potentiale ($\beta > 2$) das Jacobi-Integral $C = E - \omega L$ gleich null wählt. Für $C \neq 0$ sind parabolisch entweichende Orbits nicht möglich, da die Zentrifugalabstoßung gegen das attraktive Potential asymptotisch die Oberhand gewinnt. Bei der Wahl von $C = 0$ hat man jedoch gerade mit $E = 0$ auch stets $L = 0$; die Zentrifugalabstoßung fällt also für PEO weg (und ermöglicht damit erst ihre Existenz). Die Annahme liegt also nahe, daß im Falle $C = 0$ auch algebraisch skalierende irreguläre Streufunktionen möglich sind.

Man betrachte zum Beispiel die in Abbildung 4.14 gezeigten Streufunktionen. Die Systemparameter sind dieselben wie in den beiden letzten Abbildungen, lediglich das Jacobi-Integral C ist nun gleich null gewählt. Man erkennt sogleich das typische Szenario für das Vorliegen von algebraischer Skalierung. In der Umgebung der PEO bei $E_{in} = 0.03168 \dots$ und $E_{in} = 0.03222 \dots$ häufen sich reguläre Intervalle und parabolische Streusingularitäten. Die Zeitkoordinate τ_{out} wächst mit jedem dieser Intervalle um etwa 2π , d.h. um eine Periode des rotierenden Potentials an.

In Abbildung 4.15 sind die Streufunktionen in Abhängigkeit von der skalierten In-Größe $\xi = (E_{in} - E_{in}^*)^{-\kappa}$ mit $\kappa = 3/4$ (wegen $\beta = 4$ und Gleichung (4.11)) aufgetragen. Zu erkennen ist die wohlbekannte Periodizität der Streufunktionen E_{out} , τ_{out} und φ_{out} in Abhängigkeit von ξ . Die Abwesenheit der Zentrifugalabstoßung für Orbits mit $E \approx 0$ hat also zur Folge, daß die Erklärung für die algebraische Skalierung der Streufunktionen vollständig gültig bleibt. Dabei muß man sich vor

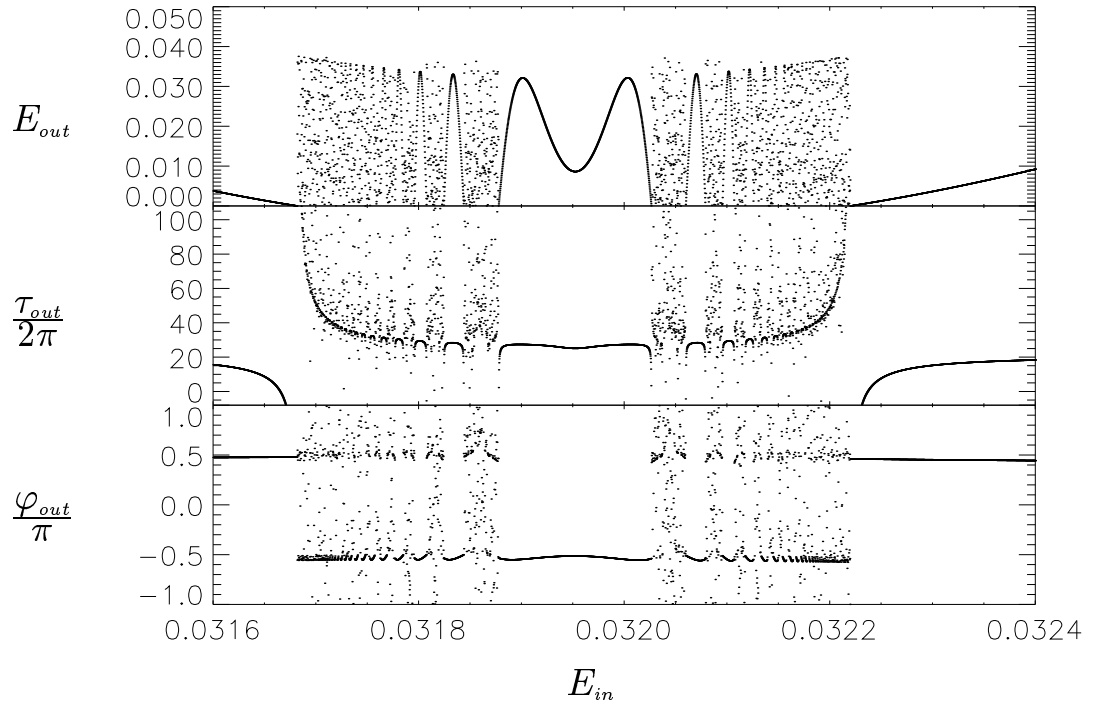
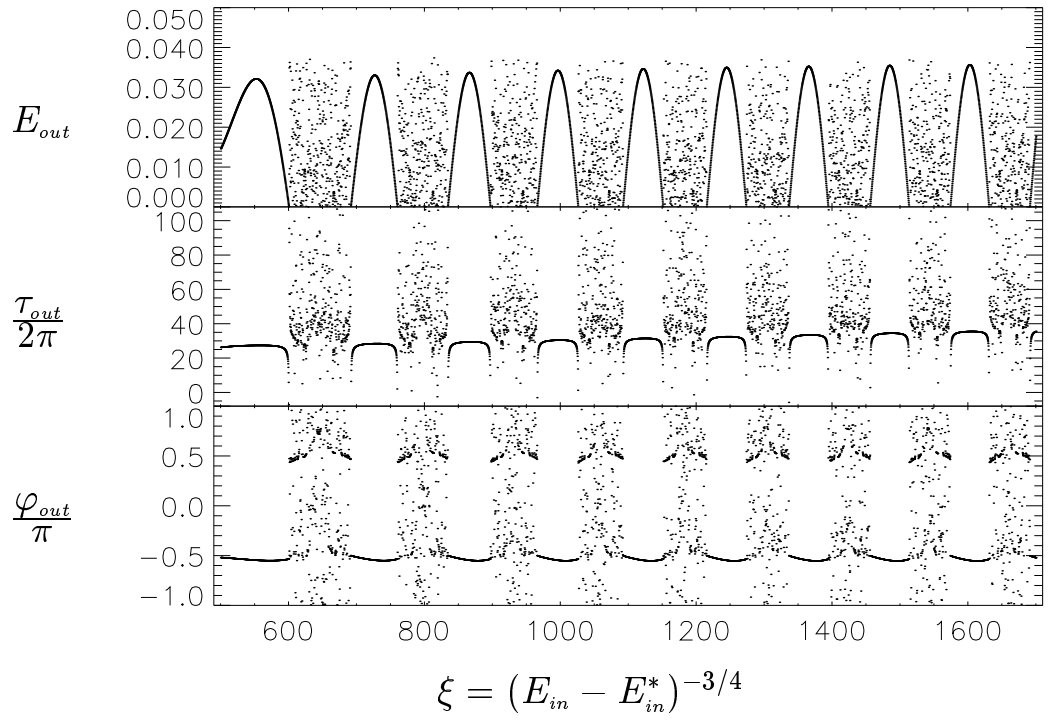
Abbildung 4.14: Wie Abbildung 4.10, jedoch $C = 0$.

Abbildung 4.15: Skalierte Streufunktionen aus Abbildung 4.14.

Augen halten, daß die Bewegung von Teilchen mit $E_{out} > 0$ wegen $L = E/\omega$ asymptotisch nach wie vor durch die Zentrifugalkraft und nicht durch das attraktive Potential dominiert wird. Es existieren neben den PEO auch logarithmisch skalierende Streusingularitäten, die auf dem Einfang von Streutrajektorien durch instabile lokalisierte Orbits beruhen. Andere Abschnitte der Streufunktionen werden, wie in Fall (b), durch diese logarithmische Singularitäten strukturiert. Ich verzichte hier auf eine Darstellung dieses Phänomens, weil gegenüber Fall (b) kein wesentlicher Unterschied vorliegt.

4.3 Algebraischer Zerfall von Stoßkomplexen

Welche Auswirkungen hat die algebraische Skalierung der Streufunktionen auf die Verteilung der Verzögerungszeiten Δt ? Ich diskutiere diese Frage am Beispiel des in Abschnitt 4.2.1 eingeführten Kicksystems. Dieses bietet vor allem den Vorteil, auch sehr große Ensembles von Streuorbits mit relativ geringem Aufwand berechnen zu können. Es ist notwendig, eine Anzahl von Trajektorien in der Größenordnung von 10^6 zu integrieren, um Skalierungseigenschaften der Δt -Verteilung eindeutig nachzuweisen. Die CPU-Zeit auf dem schnellsten zur Verfügung stehenden Rechner, einer VAX 9000-210, beträgt beim Kicksystem für diese Anzahl etwa fünf Stunden, während bei der Coulomb-Streuung im zirkular polarisierten elektrischen Feld mit etwa vierzig Tagen CPU-Zeit zu rechnen ist. Angesichts der Tatsache, daß in der Regel höchstens zehn bis zwanzig Prozent der Rechenleistung einem einzelnen Systembenutzer zur Verfügung stehen, erschien mir dieser Aufwand nicht vertretbar.

4.3.1 Numerische Resultate für das Kicksystem

Beim Kicksystem habe ich in Unterabschnitt 4.2.1 gezeigt, daß die Streuorbits nach der Anzahl n ihrer Nulldurchgänge klassifiziert werden können:

- $n = 1$: *einfache Streuung*. Der Einfluß des streuenden Potentials ist schwach. Die Bewegung des Teilchens ist monoton, d.h. der Orbit hat keinen Umkehrpunkt und genau einen Nulldurchgang.
- $n \geq 2$: *komplexe Streuung*. Der Einfluß des Potentials ist stark. Der Orbit hat mindestens einen Umkehrpunkt, also mindestens zwei Nulldurchgänge.

Ein komplexer Streuorbit ist durch die Tatsache ausgezeichnet, daß er temporär im Streupotential „gebunden“ ist. Man kann die Verzögerungszeit Δt als *Lebensdauer* dieses temporären Streukomplexes ansehen. Aus diesem Grunde wurde Δt

als die Zeitdifferenz zwischen dem ersten und dem letzten Nulldurchgang eines Streuorbits definiert, so daß für einfache Streuorbits, bei denen kein Streukomplex gebildet wird, $\Delta t = 0$ gilt. Das Interesse richtet sich in diesem Abschnitt nicht mehr auf einzelne Trajektorien, sondern auf Ensembles von Streuorbits. Die Verteilung der Verzögerungszeiten im Ensemble wird numerisch bestimmt und auf der Basis der algebraischen Skalierung der Streufunktionen erklärt.

Man betrachte ein Ensemble von $N(0)$ komplexen Streuorbits mit asymptotischen Anfangsbedingungen $(E_{in}^{(i)}, \tau_{in}^{(i)})$, $i = 1, 2, \dots, N(0)$. Für jedes $\Delta t \geq 0$ gibt es $N(\Delta t)$ Orbits mit Verzögerungszeiten größer als Δt . Die Frage ist, auf welche Weise $N(\Delta t)$ mit wachsendem Δt verschwindet. Die Funktion $N(\Delta t)$ kann als *Zerfallsgesetz* interpretiert werden: Definiert man die Zeit des ersten Nulldurchgangs als $t = 0$, so ist $N(\Delta t)$ die Anzahl der Orbits, die zur Zeit $t = \Delta t$ mindestens noch einen Nulldurchgang in der Zukunft besitzen. Anders gesagt ist $N(\Delta t)$ die Anzahl der Teilchen, die zur Zeit $t = \Delta t$ noch in einem temporären Komplex gebunden sind.

In dieser Arbeit wird ein Streukomplex als zerfallen bezeichnet, sobald das Teilchen seinen letzten Nulldurchgang hatte. Zu beachten ist, daß diese Definition von jener anderer Autoren [MeOt85, Din⁺90, Lai⁺92] verschieden ist: Oft werden die Teilchen des Ensembles in einem beschränkten Bereich R des Phasenraumes initialisiert und die Anzahl $N(t)$ derjenigen Teilchen gezählt, die sich zur Zeit t noch in R befinden. Diese Definition würde sich für das Kicksystem (und alle anderen in dieser Arbeit besprochenen Systeme) nicht eignen, denn offensichtlich ist ein Streukomplex noch nicht zerfallen, wenn sich das Teilchen sehr weit vom Streuzentrum entfernt, aber noch einen weiteren Nulldurchgang hat.

Die Berechnung der Δt -Verteilung in Abbildung 4.16 basiert auf einem Ensemble von 10^6 Streutrajektorien. Die Systemparameter sind, wie bei der Bestimmung der Streufunktionen in Abbildung 4.2, durch $V_0 = 2$ und $\beta = 4$ gegeben. Die asymptotischen Anfangsbedingungen $(E_{in}^{(i)}, \tau_{in}^{(i)})$ sind folgendermaßen gewählt: $\tau_{in}^{(i)} = 0$ für alle Orbits und $E_{in}^{(i)}$ gleichmäßig verteilt im Intervall $E_{in}^* < E_{in} < 0.85$. Dabei bezeichnet $E_{in}^* = 0.7818\dots$ wieder die Anfangsbedingung des PEO am linken Rand des Bereiches komplexer Streuung in Abbildung 4.2.

Es sei $t_0^{(i)}$ der Zeitpunkt des ersten Nulldurchgangs des i -ten Orbits. $N(\Delta t)$ ist die Anzahl der Orbits, die für $t \geq t_0^{(i)} + \Delta t$ noch weitere Nulldurchgänge haben. In einer doppelt-logarithmischen Darstellung von $N(\Delta t)$ erhält man im Grenzfall großer Verzögerungszeiten Δt einen linearen Zusammenhang, d.h.

$$N(\Delta t) \sim (\Delta t)^{-\gamma} \quad \text{mit} \quad \gamma = 1.346\dots, \quad (4.51)$$

wobei γ als Steigung der Ausgleichsgeraden im Bereich $10^2 < \Delta t < 10^4$ berechnet wurde. Dieses Ergebnis ist im folgenden Sinne ungewöhnlich: Für die hier vorlie-

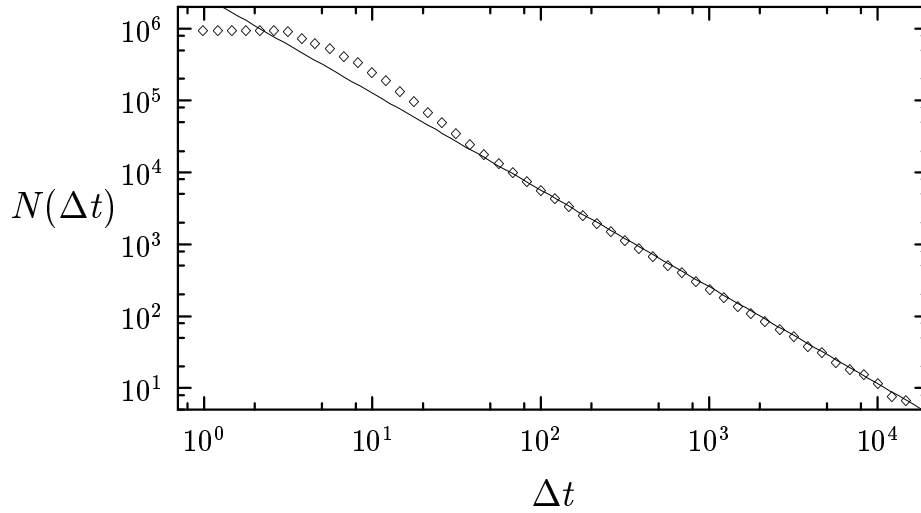


Abbildung 4.16: *Doppelt-logarithmische Darstellung der Anzahl N der zur Zeit Δt noch nicht zerfallenen Streukomplexe beim Kicksystem für $V_0 = 2$ und $\beta = 4$.*

gende Parameterkombination $V_0 = 2$, $\beta = 4$ weist das Kicksystem „vollständig entwickeltes Chaos“ [Ble⁺89] auf, d.h. es gibt keine stabilen periodischen Orbits und keine erhaltenen KAM-Linien. In der Regel zeigt ein System mit voll entwickeltem Chaos eine exponentiell fallende Zerfallsstatistik [Gre⁺86, KoTé90] — im Gegensatz zu dem hier gefundenen algebraischem Abfall.

4.3.2 Heuristische Erklärung des algebraischen Zerfalls

Die folgende einfache Erklärung des algebraischen Zerfallsgesetzes stützt sich auf den in Abschnitt 4.1 angegebenen Zusammenhang (4.10) zwischen der Wiederkehrzeit T und der In-Variable α_{in} in der Umgebung parabolisch entweichender Orbits. Man erinnere sich, daß sich im betrachteten E_{in} -Intervall unendlich viele Subintervalle mit $n = 2$ Nulldurchgängen befinden, die sich gegen die PEO-Anfangsbedingung E_{in}^* häufen. Auf den $(n=2)$ -Intervallen wird die Verzögerungszeit Δt gut durch die Wiederkehrzeit T angenähert, denn die Zeit, die das Teilchen in der Nähe des Nullpunktes verbringt, ist klein gegen die Zeitspanne auf der weitesten Exkursion, während derer das Teilchen umso langsamer wird, je weiter es sich vom Ursprung entfernt. Folglich bekommt man mit (4.10):

$$\Delta t(E_{in}) \sim |E_{in} - E_{in}^*|^{-\kappa} . \quad (4.52)$$

Vernachlässigt man die n -Intervalle mit $n \geq 3$, so kann man annehmen, daß die Relation (4.52) für das gesamte Ensemble gilt. (Im nächsten Unterabschnitt werde ich den allgemeinen Fall untersuchen, ohne diese recht grobe Näherung zu verwenden.) Die Anzahl $N(\Delta t)$ der noch nicht zerfallenen Streukomplexe ist dann proportional zur Länge des Intervalls $E_{in}^* < E_{in} < E_{in}(\Delta t)$; dabei bezeichnet $E_{in}(\Delta t)$ die Umkehrfunktion von (4.52). Es folgt:

$$N(\Delta t) \sim (\Delta t)^{-\gamma} \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{1}{\kappa} = \frac{2\beta}{\beta + 2} \quad (4.53)$$

Für $\beta = 4$ lautet der theoretische Zerfallskoeffizient $\gamma = 4/3$. Dieser stimmt bemerkenswert gut mit dem numerisch ermittelten Zerfallskoeffizienten (4.51) überein.

Auch für andere Parameterkombinationen (V_0, β) konnte das Zerfallsgesetz (4.53) bestätigt werden. Ist die chaotische Dynamik jedoch nicht voll entwickelt (z.B. für $V_0\beta < 6$), so bekommt man weder algebraisch noch exponentiell zerfallende Streukomplexe. Vielmehr ergibt sich eine $N(\Delta t)$ -Kurve, die *langsamer als algebraisch* abfällt: Numerische Untersuchungen zeigen eine konvexe Kurve im $\log(N)$ - $\log(\Delta t)$ -Diagramm. Hier macht sich der Einfluß der „klebrigen“ Tori (engl.: sticky tori) bemerkbar, in deren Nähe der Lyapunov-Exponent auf null fällt: Streutrajektorien, die in die Nähe vom KAM- oder Cantori geraten, werden verzögert und verändern die Statistik zugunsten langer Zerfallszeiten [Kar83, ChSh84, GrKa85, MeOt85, Din⁺90, Lai⁺92].

Noch steht die Frage im Raum, warum die irregulären Intervalle mit $n \geq 3$, die in Abbildung 4.2 doch etwa den gleichen Raum einnehmen wie die $(n=2)$ -Intervalle, die einfache Argumentation nicht beeinträchtigen. Zur Beantwortung dieser Frage kommt man an einer etwas diffizileren Argumentation nicht vorbei.

4.3.3 Die universelle Δt -Verteilung

Ich zeige jetzt, warum das algebraische Zerfallsgesetz (4.53), das aus der Verteilung der Wiederkehrzeiten T abgeleitet wurde, seine Gültigkeit behält, wenn man die irregulären Teilintervalle mit $n \geq 3$ Nulldurchgängen mit einbezieht. Zu diesem Zweck betrachte man die schematische Darstellung der Verzögerungszeit Δt als Funktion der In-Variablen α_{in} in Abbildung 4.17. Dabei wird die Ordinate Δt in Einheiten der Periode $T_0 = 2\pi/\omega$ des Targetsystems gemessen. Am linken Bildrand befindet sich die Anfangsbedingung α_{in}^* des parabolisch entweichenden Orbits. Gegen ihn häufen sich die Periodizitätsintervalle, die ich mit j durchnummeriere. Jedes dieser Intervalle besteht aus einem regulären Anteil, der durch $n = 2$ Nulldurchgänge, d.h. genau eine Exkursion charakterisiert ist, und

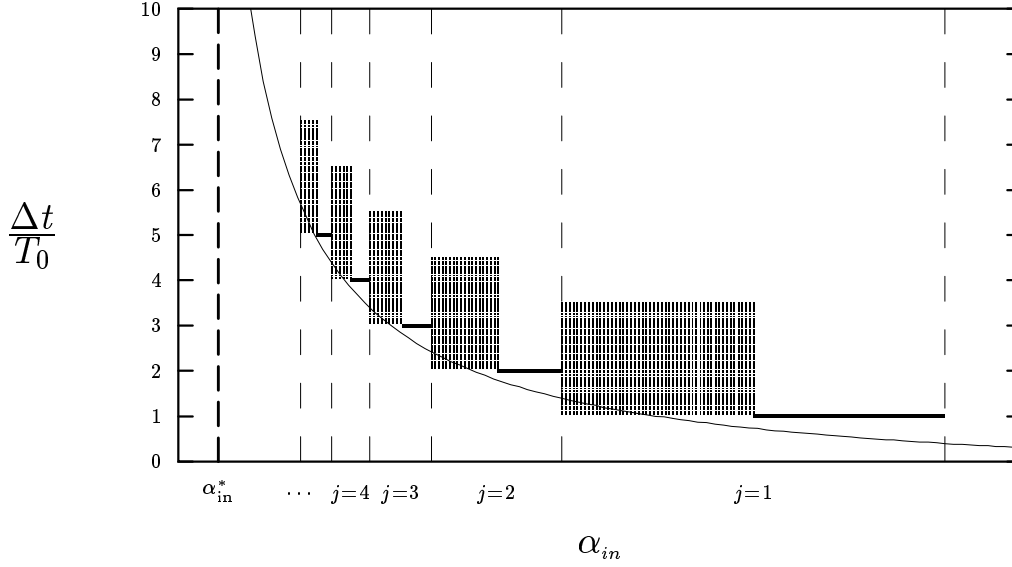


Abbildung 4.17: Skizze zum algebraischen Zerfallsgesetz.

aus einem irregulären Anteil, für den $n \geq 3$ gilt. Für den regulären Anteil des j -ten Intervalls gilt:

$$\Delta t \approx jT_0 = j \cdot \frac{2\pi}{\omega}, \quad (4.54)$$

denn die Verzögerungszeit entspricht näherungsweise der Wiederkehrzeit T der Exkursion, während der das Target j Perioden der Dauer T_0 durchläuft.

Die Δt -Verteilungen auf den j -Intervallen ähneln sich aufgrund der Skalierungseigenschaften in einer Weise, die ich im folgenden genauer beschreibe. Unterschiede findet man lediglich hinsichtlich der mit wachsendem j kleiner werdenden Intervallbreite und der mittleren Höhe von Δt , die mit j anwächst. Mit Gleichung (4.10) hat man für die Wiederkehrzeit T eines Orbits im j -ten Intervall approximativ:

$$T = jT_0 \sim (\alpha_{in} - \alpha_{in}^*)^{-\kappa}. \quad (4.55)$$

Die Funktion $T(\alpha_{in})$ ist zur Verdeutlichung ebenfalls in der Abbildung 4.17 aufgetragen. Mit $\gamma = 1/\kappa$ gilt jetzt approximativ:

$$\alpha_{in} - \alpha_{in}^* \sim T^{-\gamma} \sim j^{-\gamma}. \quad (4.56)$$

Für die Breite b_j des j -ten Intervalls (in Abbildung 4.17 ist das der Abstand zweier senkrechter gestrichelter Linien) ergibt sich also im Grenzfall großer j :

$$b_j \sim j^{-\gamma} - (j+1)^{-\gamma} \approx \gamma j^{-(\gamma+1)}. \quad (4.57)$$

Ich werde nun wie folgt verfahren. Ich nehme für die Verteilung der Verzögerungszeiten auf jedem j -Intervall eine bestimmte Funktion $f_j(\Delta t)$ an. Aufgrund der horizontalen Skalierung in der Nähe des PEO läßt sich jedes $f_j(\Delta t)$ durch einfache Skalierungsoperationen auf eine *universelle Δt -Verteilung* $f(\Delta t)$ zurückführen. Die Gesamtverteilung $F(\Delta t)$ der Verzögerungszeiten ergibt sich durch Summation über die $f_j(\Delta t)$. Aufgrund der vertikalen Struktur der Streufunktionen (siehe Unterabschnitt 3.3.2) ist zu fordern, daß die Gesamtverteilung $F(\Delta t)$ für große Δt das gleiche Zerfallsverhalten zeigt wie jede einzelne der Verteilungen $f_j(\Delta t)$. Abstrakt betrachtet hat man also ein *Fixpunktproblem*: Die Gesamtverteilung $F(\Delta t)$ ist ein Funktional der Universalverteilung $f(\Delta t)$. Gesucht ist eine universelle Verteilung $f(\Delta t)$, deren „Funktionswert“ $F(\Delta t)$ die gleichen Zerfallseigenschaften wie $f(\Delta t)$ aufweist.

Die Verteilung der Verzögerungszeiten auf dem j -ten Intervall sei also durch $f_j(\Delta t)$ gegeben. Hier ist unter $f_j(\Delta t)$ — wie bei der numerisch ermittelten Größe $N(\Delta t)$ — der Anteil der Orbits zu verstehen, deren Wiederkehrzeiten größer als Δt sind. Einige Eigenschaften von $f_j(\Delta t)$ sind unmittelbar klar:

1. $f_j(\Delta t) = c_j = \text{konstant}$ für $\Delta t < jT_0$.
2. $f_j(\Delta t)$ ist eine monoton fallende Funktion.
3. Gemäß Abbildung 4.17 hat $f_j(\Delta t)$ bei $\Delta t = jT_0$ eine Sprungstelle, da in unserer schematischen Darstellung alle regulären Orbits des j -Intervalls (eine Menge vom Maß 1) die Verzögerungszeit $\Delta t = jT_0$ haben.
4. Da außerdem für $t \rightarrow \infty$ nur eine Nullmenge von Streutrajektorien eingefangen wird, gilt $f_j(\Delta t) \rightarrow 0$ für $\Delta t \rightarrow \infty$.

Die Verteilungen $f_j(\Delta t)$ können aufgrund der Skalierungseigenschaften der Funktion $\Delta t(\alpha_{in})$ in einfacher Weise aus der Verteilung $f_1(\Delta t)$ über dem ($j=1$)-Intervall hergeleitet werden. Es gilt:

$$f_j(\Delta t) = \frac{b_j}{b_1} f_1(\Delta t - (j-1)T_0) . \quad (4.58)$$

Durch den Faktor b_j/b_1 wird berücksichtigt, daß die Anzahl der Orbits im j -ten Intervall proportional zur Breite b_j des Intervalls ist. Außerdem trägt man der Tatsache Rechnung, daß die mittlere Höhe des j -ten Intervalls linear mit der Intervallnummer j wächst, indem man statt Δt in die Funktion f_1 den Wert $\Delta t - (j-1)T_0$ einsetzt.

Die Formeln vereinfachen sich noch etwas, wenn man die universelle Verteilung

$$f(\Delta t) = f_1(\Delta t + T_0) \quad (4.59)$$

einführt. Mit den Gleichungen (4.57) und (4.58) ergibt sich:

$$f_j(\Delta t) = j^{-(\gamma+1)} f(\Delta t - jT_0) . \quad (4.60)$$

Die normierte Verteilung hat folgende Eigenschaften:

1. $f(\Delta t) = c = \text{konstant}$ für $\Delta t < 0$. Im folgenden ist $c = 1$ gesetzt.
2. $f(\Delta t)$ ist eine monoton fallende Funktion.
3. Bei $\Delta t = 0$ hat $f(\Delta t)$ eine Sprungstelle.
4. $f(\Delta t) \rightarrow 0$ für $\Delta t \rightarrow \infty$.

Die Gesamtverteilung $F(\Delta t)$ der Verzögerungszeiten ergibt sich durch Summation über die Verteilungen $f_j(\Delta t)$ aller j -Intervalle:

$$F(\Delta t) = \sum_{j=1}^{\infty} f_j(\Delta t) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-(\gamma+1)} f(\Delta t - jT_0) \quad (4.61a)$$

$$\approx \int_1^{\infty} dj j^{-(\gamma+1)} f(\Delta t - jT_0) . \quad (4.61b)$$

Ich bestimme im folgenden für verschiedene universelle Verteilungen $f(\Delta t)$ die Gesamtverteilung $F(\Delta t)$.

Fall (a): Keine Berücksichtigung der irregulären Abschnitte.

Vernachlässigt man die irregulären Anteile der j -Intervalle, so sollte man mit dem hier eingeschlagenen Weg das gleiche Resultat erhalten wie mit der einfachen Argumentation in Unterabschnitt 4.3.2. Die normierte Verteilung lautet hier:

$$f(\Delta t) = \Theta(-\Delta t) , \quad (4.62)$$

wobei Θ die Stufenfunktion bezeichnet. Man erhält:

$$\begin{aligned} F(\Delta t) &= \int_1^{\infty} dj j^{-(\gamma+1)} \Theta(jT_0 - \Delta t) \\ &= \int_{\Delta t/T_0}^{\infty} dj j^{-(\gamma+1)} \\ &= \frac{1}{\gamma} T_0^{\gamma} (\Delta t)^{-\gamma} , \end{aligned} \quad (4.63)$$

also das erwartete Ergebnis.

Fall (b): Linearer Abfall von $f(\Delta t)$ für $\Delta t > 0$, d.h.

$$f(\Delta t) = \begin{cases} 1 & \text{für } \Delta t < 0 \\ b(1 - \Delta t/a) & \text{für } 0 < \Delta t < a \\ 0 & \text{für } \Delta t > a \end{cases}, \quad (4.64)$$

wobei wegen der Eigenschaften 2 und 3 gilt: $0 < b < 1$. Diese Verteilung entspricht der schematischen Darstellung in Abbildung 4.17: Dort ist $b = 0.5$ und $a = 2.5 T_0$. Für die gesamte Δt -Verteilung ergibt sich

$$\begin{aligned} F(\Delta t) &= \int_{\Delta t/T_0}^{\infty} dj j^{-(\gamma+1)} + \int_{\Delta t/T_0}^{(\Delta t+a)/T_0} dj j^{-(\gamma+1)b} \left(1 - \frac{\Delta t - jT_0}{a}\right) \\ &= \frac{T_0^\gamma}{\gamma} \left\{ (\Delta t)^{-\gamma} + \left(-b + \frac{b}{a}\Delta t\right) \left((\Delta t + a)^{-\gamma} - (\Delta t)^{-\gamma}\right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{b\gamma}{a(\gamma-1)} \left((\Delta t + a)^{-(\gamma-1)} - (\Delta t)^{-(\gamma-1)}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Mit $(\Delta t + a)^{-\delta} - (\Delta t)^{-\delta} \approx -a\delta(\Delta t)^{-(\delta+1)}$ für große Δt folgt mit $\delta = \gamma$ bzw. $\delta = \gamma - 1$ näherungsweise:

$$F(\Delta t) = T_0^\gamma \left\{ \frac{(\Delta t)^{-\gamma}}{\gamma} + ab(\Delta t)^{-(\gamma+1)} - b(\Delta t)^{-\gamma} + b(\Delta t)^{-\gamma} \right\} \quad (4.66)$$

und damit für große Δt wieder das Resultat (4.63).

Fall (c): Algebraischer Abfall von $f(\Delta t)$.

Die numerische Untersuchung legt nahe, daß die richtige Wahl der universellen Verteilung $f(\Delta t)$ für große Δt wie $(\Delta t)^{-\gamma}$ verschwinden muß. Ich wähle also:

$$f(\Delta t) = \begin{cases} 1 & \text{für } \Delta t < T_0 \\ b \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma} & \text{für } \Delta t > T_0, \end{cases} \quad (4.67)$$

wobei wieder $0 < b < 1$ wegen der Eigenschaften 2 und 3 gilt. Die Gesamtverteilung hat dann gemäß (4.61) die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} F(\Delta t) &= \int_{\Delta t/T_0-1}^{\infty} dj j^{-(\gamma+1)} + b \int_1^{\Delta t/T_0-1} dj j^{-(\gamma+1)} \left(\frac{\Delta t}{T_0} - j\right)^{-\gamma} \\ &= \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\Delta t}{T_0} - 1\right)^{-\gamma} + b I(\Delta t). \end{aligned} \quad (4.68)$$

Der erste Summand zeigt für große Δt wieder eine $(\Delta t)^{-\gamma}$ -Abhängigkeit. Es bleibt zu zeigen, daß das Integral $I(\Delta t)$ im zweiten Summanden asymptotisch mindestens so schnell wie $(\Delta t)^{-\gamma}$ abfällt. Dazu schreibe ich das Integral $I(\Delta t)$ folgendermaßen:

$$I(\Delta t) = \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma} \int_1^{\Delta t/T_0-1} dj j^{-(\gamma+1)} \left(1 - \frac{jT_0}{\Delta t}\right)^{-\gamma}. \quad (4.69)$$

Anwendung des Binomischen Satzes gibt:

$$\begin{aligned} I(\Delta t) &= \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma} \sum_{\nu=0}^{\infty} \binom{-\gamma}{\nu} \left(-\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\nu} \int_1^{\Delta t/T_0-1} dj j^{\nu-\gamma-1} \\ &= \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma} \sum_{\nu=0}^{\infty} \binom{-\gamma}{\nu} \left(-\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\nu} \frac{1}{\nu-\gamma} \left[\left(\frac{\Delta t}{T_0} - 1\right)^{\nu-\gamma} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Damit folgt im Grenzfall großer Δt :

$$I(\Delta t) \approx \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma} \sum_{\nu=0}^{\infty} \binom{-\gamma}{\nu} \frac{(-1)^\nu}{\nu-\gamma} \left[\left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma} - \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\nu} \right] \quad (4.71)$$

und bei Vernachlässigung aller schneller als $(\Delta t)^{-\gamma}$ verschwindenden Terme:

$$I(\Delta t) \approx \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma} \binom{-\gamma}{0} \frac{1}{\gamma} = \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma}. \quad (4.72)$$

Mit (4.68) ergibt sich also für die Gesamtverteilung der folgende asymptotische Ausdruck:

$$F(\Delta t) \approx \left(\frac{1}{\gamma} + b\right) \left(\frac{\Delta t}{T_0}\right)^{-\gamma}. \quad (4.73)$$

Zur Kontrolle dieser approximativen Rechnung habe ich in Abbildung 4.18 die aus der Summe (4.61a) mit der universellen Verteilung (4.67) numerisch bestimmte Gesamtverteilung $F(\Delta t)$ in doppelt-logarithmischer Darstellung aufgetragen. Der Vergleich mit der Funktion $(\Delta t)^{-\gamma}$ zeigt, daß für große Δt die Gesamtverteilung $F(\Delta t)$ wirklich wie $(\Delta t)^{-\gamma}$ zerfällt.

Die Gesamtverteilung $F(\Delta t)$ geht aus einer universellen Verteilung $f(\Delta t)$ hervor, die dasselbe asymptotische Verhalten für große Verzögerungszeiten aufweist. Sie ist also konsistent mit der selbstähnlichen vertikalen und horizontalen Struktur der Streufunktionen. Ihre Asymptotik stimmt außerdem mit den numerischen Resultaten und deren einfacher Erklärung in Unterabschnitt 4.3.2 überein. Damit ist es äußerst plausibel, daß das algebraische Zerfallsgesetz (4.53) universell für

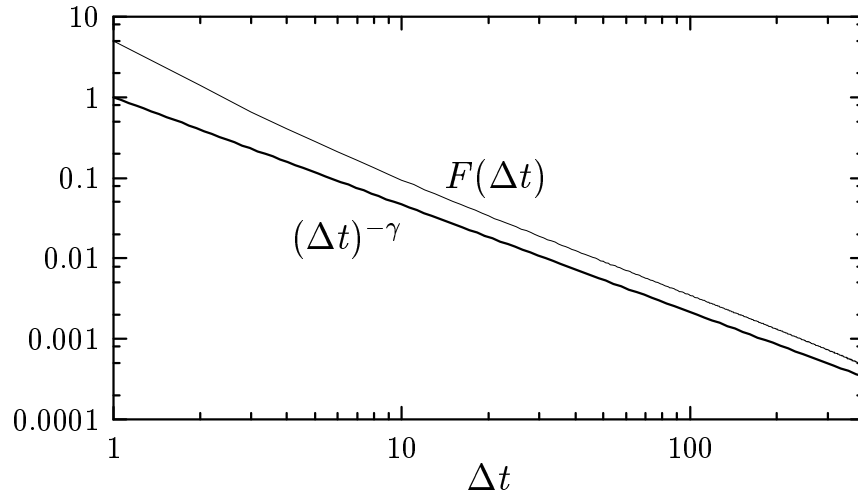


Abbildung 4.18: Mit (4.61a) und (4.67) numerisch berechnete Verteilung $F(\Delta t)$. Parameterwerte: $T_0 = 1$, $b = 0.6$, $\gamma = 4/3$.

Streusysteme gültig ist, deren Streufunktionen durch eine fraktale Menge parabolischer Streusingularitäten strukturiert ist.

Schon Seegers hat in seiner Dissertation [See95] kritisiert, daß Gerwinsky und Šeba für ein exponentiell abfallendes Kickpotential ein exponentielles Zerfallsgesetz angegeben haben [GeŠe94]. Sowohl numerische Untersuchungen als auch semiklassische Überlegungen Seegers zeigen, daß dieses Ergebnis falsch ist.

Kürzlich erschien ein Artikel von Kovács und Wiesenfeld [KoWi95], in dem durch die Einführung einer „diskreten Verzögerungszeit“ (discrete time delay function) eine eigentlich algebraische in eine exponentielle Zerfallsstatistik verwandelt wurde. Dem von den Autoren verwendeten Verfahren entspräche im Kicksystem die Einführung der Anzahl n der Nulldurchgänge statt der Verzögerungszeit Δt . Es ist klar, daß durch diesen „Kunstgriff“ der Beitrag der weiten Exkursionen zur Verzögerungszeit verschwindet. Gerade die weiten Exkursionen spielen jedoch in meiner Erklärung der algebraischen Skalierung und des algebraischen Zerfalls die entscheidende Rolle. Es wäre interessant, das unterschiedliche Verhalten der Funktionen $N(\Delta t)$ und $N(n)$ (die Anzahl der Streuorbits, die mindestens n Nulldurchgänge besitzen) zu vergleichen — im Ansatz habe ich dies in [BeEc93] getan. Unglücklicherweise behaupten aber Kovács und Wiesenfeld, die Diskretisierung habe keine entscheidenden Änderungen für die Statistik der Verzögerungszeit zur Folge. Darüberhinaus wenden sie sogar — trotz des Vorliegens von KAM-Orbits — den thermodynamischen Formalismus für dynamische Systeme [Rue78, Tél90] an. Sie halten den thermodynamischen Formalismus für anwendbar, solange die freie Energie nur für niedrige Generationen (der vertikalen Struktur?) bestimmt

wird. Der dominierende Einfluß der parabolisch entweichenden Orbits gegenüber den Einfangorbits läßt dieses Unterfangen jedoch in meinen Augen als zwecklos erscheinen.

Schluß

*No more questions,
Please.
No more tests.
Comes the day
You say,
„What for?“
Please — no more.*

STEPHEN SONDEHEIM, INTO THE WOODS

Mit dem klassischen Wasserstoffatom im zirkular polarisierten elektrischen Feld wurde in dieser Arbeit ein einfaches System untersucht, dessen Dynamik sich als außerordentlich vielschichtig erwiesen hat. Da die Ionisation von Wasserstoff im Strahlungsfeld relativ gut verstanden ist, wurden Schwerpunkte bei der Analyse der gebundenen Bewegung und Streudynamik gesetzt. Es wurden konsequent die verschiedenen kanonischen Formulierungen des Systems ausgenutzt, durch welche der Koordinatensatz stets an die jeweilige Fragestellung angepaßt werden konnte.

Das wichtigste Resultat bei der Untersuchung der gebundenen Bewegung ist der Nachweis, daß in der Umgebung des Trojanerpunktes bei nicht zu kleiner Feldstärke F die Voraussetzungen für das Silnikov-Phänomen erfüllt sind. Hier konnten explizit die benötigten lokalen Poincaré-Flächen konstruiert werden und die Existenz eines Hufeisens in der entsprechenden Poincaré-Abbildung gezeigt werden.

Bei der Analyse der Streudynamik wurde die Bedeutung der parabolisch entweichenden Orbits für die Struktur der Streufunktionen deutlich herausgestellt. Die beiden Aspekte der selbstähnlichen Struktur der Streufunktionen — horizontale und vertikale Struktur — konnten auf Weite bzw. Anzahl der Kepler-Exkursionen der Streuorbits eines regulären Intervalls der Streufunktionen zurückgeführt werden. Die algebraische Skalierung in der Nähe der parabolischen Streusingularitäten wurde durch die Berechnung der Wiederkehrzeit bei weiten Kepler-Exkursionen überzeugend erklärt.

Die am Wasserstoffatom gewonnenen Resultate wurden auf eine Klasse von Streusystemen verallgemeinert, zu welcher sowohl explizit zeitabhängige Systeme als auch Systeme mit internen Schwingungen gehören. Durch die Berechnung der Wiederkehrzeit bei weiten Exkursionen unter Berücksichtigung der Periodizität des Restsystems konnte nachgewiesen werden, daß die Streufunktionen in der Nähe parabolischer Singularitäten stets algebraisch skalieren. Der Skalierungsexponent κ ließ sich als Funktion des Exponenten β ausdrücken, der die asymptotische Wechselwirkung zwischen Target und Projektil beschreibt.

Die Anwendung dieser Ergebnisse auf die Untersuchung der Statistik von Lebensdauern bei Streuensembles lag nahe. Es konnte nachgewiesen werden, daß man bei Vorliegen parabolischer Streusingularitäten trotz der Abwesenheit von KAM-Strukturen einen algebraischen Zerfall temporärer Streukomplexe findet. Es wurde darauf hingewiesen, daß in einigen aktuellen Arbeiten im Widerspruch dazu von einem exponentiellen Zerfall ausgegangen wird. Meine Arbeit widerlegt entsprechende Aussagen.

Ungeklärt ist nach wie vor die Situation, wenn zusätzlich zu den parabolischen Streusingularitäten KAM-Strukturen zu berücksichtigen sind. Einige vorläufige numerische Experimente deuten darauf hin, daß der Zerfall von Streuensembles dann *langsamer als algebraisch* ist [BeEc93, KoWi95]. Für den Nachweis einer spezifischen Zerfallsfunktion müssen jedoch äußerst lange Verzögerungszeiten und sehr große Streuensembles berücksichtigt werden. Der notwendige numerische Aufwand konnte in dieser Arbeit nicht bewältigt werden.

Es wäre interessant, eine Möglichkeit zu finden, Systeme mit parabolischen Streusingularitäten mit Hilfe des thermodynamischen Formalismus für dynamische Systeme [Tél90, Ste95] zu untersuchen. Bisher ist bei der Anwendung des Formalismus stets die Hyperbolizität des Systems und ein exponentielles Zerfallsverhalten vorausgesetzt worden.

Literaturverzeichnis

- [AbMa78] R. Abraham und J. E. Marsden, *Foundations of Mechanics*, 2. Auflage, Benjamin, Reading, Massachusetts 1978.
- [Ale81] V. M. Alekseev, *Quasirandom oscillations and qualitative questions in celestial mechanics*, Am. Math. Soc. Transl. **116** (1981) 97–169.
- [BaKo74] J. E. Bayfield und P. M. Koch, *Multiphoton ionization of highly excited hydrogen atoms*, Phys. Rev. Lett. **33** (1974) 258–261.
- [Bee91] A. Beeker, *Ein eindimensionales Kicksystem zur Modellierung irregulärer Streuung*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1991.
- [BeEc93] A. Beeker und P. Eckelt, *Scaling and decay in periodically driven scattering systems*, Chaos **3** (1993) 487–494.
- [Ben⁺92] F. Benvenuto, G. Casati und D. L. Shepelyansky, *Stability of Rydberg atoms in a strong laser field*, Phys. Rev. **A 45** (1992) R7670–R7673.
- [Ben⁺93] F. Benvenuto, G. Casati und D. L. Shepelyansky, *Classical stabilization of the hydrogen atom in a monochromatic field*, Phys. Rev. **A 47** (1993) R786–R789.
- [Bil94] E. Billen, *Chaotische Streuung an einem zentralsymmetrischen Kickpotential*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1994.
- [Ble⁺89] S. Bleher, E. Ott und C. Grebogi, *Routes to chaotic scattering*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 919–922 .
- [Blü92] R. Blümel, *Quantum chaotic scattering*, in: D. H. Feng und J.-M. Yuan (Hrsg.), *Directions in Chaos, Vol. 4, Quantum Non-Integrability*, World Scientific, Singapur 1992, S. 397–457.

- [Blü⁺91] R. Blümel, A. Buchleitner, R. Graham, L. Sirko, U. Smilansky und H. Walther, *Dynamical localization in the microwave interaction of Rydberg atoms: The influence of noise*, Phys. Rev. **A 44** (1991) 4521–4540.
- [BoMcM92] P. T. Boyd und S. L. W. McMillan, *Initial-value space structure in irregular gravitational scattering*, Phys. Rev. **A 46** (1992) 6277–6287.
- [BoMcM93] P. T. Boyd und S. L. W. McMillan, *Chaotic scattering in the gravitational three-body problem*, Chaos **3** (1993) 507–524.
- [Cas⁺87] G. Casati, B. V. Chirikov, D. L. Shepelyansky und I. Guarneri, *Relevance of classical chaos in quantum mechanics: The hydrogen atom in a monochromatic field*, Phys. Rep. **154** (1987) 77–123.
- [CaMo89] G. Casati, L. Molinari, “*Quantum chaos*” with time-periodic Hamiltonians, Prog. Theor. Phys. Suppl. **98** (1989) 287–322.
- [Cha27] C. L. Charlière, *Mechanik des Himmels*, Walter de Gruyter, Berlin 1927.
- [Chi91] B. V. Chirikov, *Time-dependent quantum systems*, in: M.-J. Giannoni, A. Voros und J. Zinn-Justin (Hrsg.), *Les Houches, Session LII, 1989, Chaos and Quantum Physics*, Elsevier, Amsterdam 1991, S. 443–554.
- [ChSh84] B. V. Chirikov und D. L. Shepelyansky, *Correlation properties of dynamical chaos in Hamiltonian systems*, Physica **D 13** (1984) 395–400.
- [Dev76] R. L. Devaney, *Homoclinic orbits in Hamiltonian systems*, J. Diff. Eq. **21** (1976) 431–438.
- [Dev89] R. L. Devaney, *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*, 2. Auflage, Addison-Wesley, Redwood City 1989.
- [DiFa87] L. Dimou und F. H. M. Faisal, *New class of resonance in the $e + H^+$ scattering in an excimer laser field*, Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 872–875.
- [Din⁺90] Mingzhou Ding, T. Bountis und E. Ott, *Algebraic escape in higher dimensional Hamiltonian systems*, Phys. Lett. **A 151** (1990) 7025–7040.

- [DrFi79] A. J. Dragt und J. M. Finn, *Normal form for mirror machine Hamiltonians*, J. Math. Phys. **20** (1979) 2649–2660.
- [EcZi91] P. Eckelt und E. Zienicke, *Chaos in one-dimensional collision complexes*, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) 153–173.
- [Eck87] B. Eckhard, *Fractal properties of scattering singularities*, J. Phys. A: Math. Gen. **20** (1987) 5971–5979.
- [Eck88] B. Eckhard, *Irregular scattering*, Physica **D 33** (1988) 89–98.
- [Ein05] A. Einstein, *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt*, Ann. Phys. (Leipzig), 4. Folge, Bd. **17** (1905) 132–148.
- [Eng⁺95] U. M. Engel, B. Stegemerten, P. Eckelt, *Normal form and quasi-integrals for the Hamiltonians of magnetic bottles*, J. Phys. A: Math. Gen. **28** (1995) 1425–1448.
- [EnRe87] G. Engeln-Müllges und F. Reutter, *Formelsammlung zur Numerischen Mathematik mit C-Programmen*, BI Wissenschafts-Verlag, Mannheim 1987, 11.1.5., S. 243.
- [FaUz95] D. Farelly und T. Uzer, *Ionization mechanism of Rydberg atoms in a circularly polarized microwave field*, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 1720–1723.
- [Fra⁺90] A. Franz, H. Klar, J. T. Broad und J. S. Briggs, *Electron-proton scattering in a laser field*, J. Opt. Soc. Am. **B 7**, (1990) 545–553.
- [Fu⁺90] Panming Fu, T. J. Scholz, M. Hetttema und T. J. Gallagher, *Ionization of Rydberg atoms by a circularly polarized microwave field*, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 511–514.
- [GeZa95] R. Gebarowski und J. Zakrzewski, *Ionization of hydrogen atoms by circularly polarized microwaves*, Phys. Rev. **A 51** (1995) 1508–1519.
- [GeŠe94] P. Gerwinsky und P. Šeba, *Quantum resonances due to classical stability islands*, Phys. Rev. **E 50** (1994) 3615–3622.
- [Gol85] H. Goldstein, *Klassische Mechanik*, 8. Auflage, Aula-Verlag, Wiesbaden 1985.
- [Got75] L. Gottdiener, *The multiple collision region in non-reactive atom-diatom collisions*, Mol. Phys. **29** (1975) 1585–1595.

- [GrKa85] P. Grassberger und H. Kantz, *Universal scaling of long-time tails in Hamiltonian systems?*, Phys. Lett. **A 113** (1985) 167–171.
- [Gra⁺86] S. K. Gray, S. A. Rice und D. W. Noid, *Classical mechanics of vibrational predissociation: A model based study of phase space structure and its influence on fragmentation rates*, J. Chem. Phys. **84** (1986) 3745–3752.
- [Gre⁺86] C. Grebogi, E. Ott und J. A. Yorke, *Critical exponent of chaotic transients in nonlinear dynamical systems*, Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 1284–1287.
- [Gre79] J. M. Greene, *A method for determining a stochastic transition*, J. Math. Phys. **20** (1979) 1183–1201.
- [Gre⁺81] J. M. Greene, R. S. MacKay, F. Vivaldi und M. J. Feigenbaum, *Universal behaviour in families of area-preserving maps*, Physica **D 3** (1981) 468–486.
- [GrFa92] J. A. Griffiths und D. Farelly, *Ionization of Rydberg atoms by circularly and elliptically polarized microwave fields*, Phys. Rev. **A 45** (1992) R2678–2681.
- [GuYu93] Yan Gu und Jian-Min Yuan, *Chaotic scattering of electrons with He^+* , Phys. Rev. **A 47** (1993) R2442–R2445.
- [GuHo86] J. Guckenheimer und P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, Springer, New York 1986.
- [Gus66] F. G. Gustavson, *On constructing formal integrals of a Hamiltonian system near an equilibrium point*, Astron. J. **71** (1966) 670–686.
- [Han⁺93] G. Handke, M. Draeger und H. Friedrich, *Classical dynamics of s-wave helium*, Physica **A 197** (1993) 113–129.
- [Han94] G. Handke, *Fractal dimensions in the phase space of two-electron atoms*, Phys. Rev. **A 50** (1994) R3561–R3564.
- [Hen68] W. C. Henneberger, *Perturbation method for atoms in intense light beams*, Phys. Rev. Lett. **21** (1968) 838–841.
- [Hén88] M. Hénon, *Chaotic scattering modelled by an inclined billiard*, Physica **D 33** (1988) 132–156.

- [Hil⁺92] C. F. Hillermeier, R. Blümel und U. Smilansky, *Ionization of H Rydberg atoms: Fractals and power-law decay*, Phys. Rev. **A 45** (1992) 3486–3502.
- [Hor89] R. Horstmann, *Chaotische Streuung im reduzierten Dreikörperproblem*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1989.
- [How92] J. E. Howard, *Stochastic ionization of hydrogen atoms in a circularly polarized microwave field*, Phys. Rev. **A 46** (1992) 364–372.
- [Jen84] R. V. Jensen, *Stochastic ionization of surface-state electrons: Classical theory*, Phys. Rev. **A 30** (1984) 386–397.
- [Jen92] R. V. Jensen, *Quantum chaos*, Nature **355** (1992) 311–318.
- [Jen⁺91] R. V. Jensen, S. M. Susskind, M. M. Sanders, *Chaotic ionization of highly excited hydrogen atoms: Comparison of classical and quantum theory with experiment*, Phys. Rep. **201** (1991) 1–56.
- [Jun90] C. Jung, *Scattering chaos in the harmonically driven Morse system*, Preprint 1990.
- [JuPo89] C. Jung und S. Pott, *Classical cross section for chaotic potential scattering*, J. Phys. A: Math. Gen. **22** (1989) 2925–2938.
- [JuRi90] C. Jung und P. H. Richter, *Classical chaotic scattering — periodic orbits, symmetries, multifractal invariant sets*, J. Phys. A: Math. Gen. **23** (1990) 2847–2866.
- [JuSc87] C. Jung und H. J. Scholz, *Cantor set structures in the singularities of classical potential scattering*, J. Phys. A: Math. Gen. **20** (1987) 3607–3617.
- [JuSc88] C. Jung und H. J. Scholz, *Chaotic scattering off the magnetic dipole*, J. Phys. A: Math. Gen. **21** (1988) 2301–2311.
- [Kap92] P. Kappertz, *A Classical Approach to the Ionization of Hydrogen Atoms in a Circularly Polarized Microwave Field*, Dissertation, Oldenburg 1992.
- [Kap94] P. Kappertz, *private Mitteilung*, 1994.
- [KaNa93] P. Kappertz und M. Nauenberg, *Circularly polarized microwave ionization of hydrogen*, Phys. Rev. **A 47** (1993) 4749–4755.

- [Kar83] C. F. F. Karney, *Long-time correlations in the stochastic regime*, Physica **D 8** (1983) 360–380.
- [KoTé90] Z. Kovács und T. Tél, *Thermodynamics of irregular scattering*, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 1617–1620.
- [KoWi95] Z. Kovács und L. Wiesenfeld, *Chaotic scattering in reactive collisions: A classical analysis*, Phys. Rev. **E 51** (1995) 5476–5494.
- [LaGr91] Ying-Cheng Lai und C. Grebogi, *Chaotic scattering in time-dependent Hamiltonian systems*, Int. J. Bif. Chaos **1** (1991) 667–691.
- [Lai⁺92] Ying-Cheng Lai, C. Grebogi, R. Blümel und Mingzhou Ding, *Algebraic decay and phase-space metamorphoses in microwave ionization of hydrogen Rydberg atoms*, Phys. Rev. **A 45** (1992) 8284–8287.
- [LePe79] J. G. Leopold und I. C. Percival, *Ionisation of highly excited atoms by electric fields III. Microwave ionisation and excitation*, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **12** (1979) 709–721.
- [LeRi85] J. G. Leopold und D. Richards, *The effect of a resonant electric field on a one-dimensional classical hydrogen atom*, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **18** (1985) 3369–3394.
- [LiLi92] A. J. Lichtenberg und M. A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics*, Second Edition, Springer, New York 1992.
- [Lu⁺92] Zi-Min Lu, M. Vallières und Jian-Min Yuan, *Controlling chaotic scattering: Impulsively driven Morse potential*, Phys. Rev. **A 45** (1992) 5512–5523.
- [McK93] R. S. MacKay, *Renormalisation in Area-preserving Maps*, World Scientific, Singapur 1993.
- [Mat93] Mathematica 2.2 for the X Window System, Wolfram Research Inc., Champaign Ill. 1993.
- [McD⁺85] S. W. McDonalds, C. Grebogi, E. Ott und J. A. Yorke, *Fractal basin boundaries*, Physica **D 17** (1985) 125–153.
- [MeOt85] J. D. Meiss und E. Ott, *Markov-tree model of intrinsic transport in Hamiltonian systems*, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 2741–2744.
- [MeHa92] K. R. Meyer und G. R. Hall, *Introduction to Hamiltonian Dynamical Systems and the N-Body Problem*, Springer, New York 1992.

- [MoKo92] L. Moorman und P. M. Koch, *Microwave ionization of Rydberg atoms*, in: D. H. Feng und J.-M. Yuan (Hrsg.), *Directions in Chaos, Vol. 4, Quantum Non-Integrability*, World Scientific, Singapur 1992, S. 143–243.
- [Mos73] J. Moser, *Stable and Random Motion in Dynamical Systems*, Princeton University Press, Princeton, N. J. 1973.
- [Nau90a] M. Nauenberg, *Comment on “Ionization of Rydberg atoms by a circularly polarized microwave field”*, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 2731.
- [Nau90b] M. Nauenberg, *Canonical Kepler map*, Europhys. Lett. **13** (1990) 611–616.
- [Noi⁺86] D. W. Noid, S. K. Gray und S. A. Rice, *Fractal behaviour in classical collisional energy transfer*, J. Chem. Phys. **84** (1986) 2649–2652.
- [OtTé93] E. Ott und T. Tél, *Chaotic scattering: An introduction*, Chaos **3** (1993) 417–426.
- [RaCh95] M. J. Raković und Shih-I Chu, *New integrable systems: hydrogen atom in external fields*, Physica **D 81** (1995) 271–2799.
- [RaMi71] C. C. Rankin und W. H. Miller, *Classical S matrix for linear reactive collisions of H and Cl₂*, J. Chem. Phys. **55** (1971) 3150–3155.
- [Ric92] D. Richards, *The effect of intense high-frequency fields on excited hydrogen atoms*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **25** (1992) 1347–1360.
- [Rob70] R. C. Robinson, *Generic properties of conservative systems I, II*, Amer. J. Math. **92** (1970) 562–603, 897–906.
- [Rue78] D. Ruelle, *Statistical Mechanics, Thermodynamic Formalism*, Addison-Wesley, Reading, Mass. 1978.
- [Sag⁺88] R. Z. Sagdeev, D. A. Usikov und G. M. Zaslavsky, *Nonlinear Physics. From the Pendulum to Turbulence and Chaos*, Harwood Academic Publishers, Chur 1988.
- [Sch79] M. Schneider, *Himmelsmechanik*, B. I. Wissenschaftsverlag, Mannheim 1979.
- [See90] B. Seegers, *Chaotische Streuung im Störmer-Problem*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1990.

- [See95] B. Seegers, *Quantenchaos in eindimensionalen Stoßkomplexen*, Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1995.
- [She93] D. L. Shepelyansky, *Dynamical localization in the hydrogen atom*, in: G. Casati, I. Guarneri und U. Smilansky (Hrsg.), *Proc. of the Int. School of Physics "Enrico Fermi", Course CXIX, Quantum Chaos*, North Holland, Amsterdam 1993, S. 221–229.
- [Sil67] L. P. Silnikov, *The existence of a denumerable set of periodic motions in four-dimensional space in an extended neighbourhood of a saddle-focus*, Soviet Math. Dokl. **8** (1967) 54–58.
- [Sil70] L. P. Silnikov, *A contribution to the problem of the structure of an extended neighbourhood of a rough equilibrium state of a saddle-focus type*, Math. USSR Sb. **10** (1970) 91–102.
- [Sma65] S. Smale, *Diffeomorphisms with many periodic points*, in: *Differential and Combinatorial Topology*, Princeton University Press, Princeton, N. J. 1965.
- [Smi91] U. Smilansky, *The classical and quantum theory of chaotic scattering*, in: M.-J. Giannoni, A. Voros und J. Zinn-Justin (Hrsg.), *Les Houches, Session LII, 1989, Chaos and Quantum Physics*, Elsevier, Amsterdam 1991, S. 371–441.
- [Ste91] B. Stegemerten, *Reguläre und irregulär-chaotische Bewegung in der Penning-Falle*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1991.
- [Ste94] B. Stegemerten, *private Mitteilung*, 1994.
- [Ste95] B. Stegemerten, *Zur Thermodynamik eines attraktiven hyperbolischen Streusystems*, Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1995.
- [StSc71] E. L. Stiefel und G. Scheifele, *Linear and Regular Celestial Mechanics*, Springer, Berlin 1971.
- [Tél90] T. Tél, *Transient Chaos*, in: Hao Bao Lin (Hrsg.), *Directions in Chaos, Vol. 3, Experimental Studies and Characterization of Chaos*, World Scientific, Singapur 1990.
- [Wie90] L. Wiesenfeld, *Irregular classical scattering of an electron in Coulomb and oscillatory electric fields*, Phys. Lett. **A 144** (1990) 467–472.

- [Wie91] L. Wiesenfeld, *Chaotic scattering of electrons: Deflection functions and cross-sections*, Comm. At. Mol. Phys. **25** (1991) 335–344.
- [Wie92a] L. Wiesenfeld, *The Coulomb potential or scattering chaos in a non-generic case*, Acta Physica Polonica **B 23** (1992) 271–296.
- [Wie92b] L. Wiesenfeld, *Chaotic scattering in a driven Coulomb potential: Asymptotic behaviour*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **25** (1992) 4373–4389.
- [Wig88] S. Wiggins, *Global Bifurcations and Chaos. Analytical Methods*, Springer, New York 1988.
- [Win91] D. Wintgen, *Dynamical symmetries of a hydrogen atom in a circularly polarized electromagnetic field*, Z. Phys. **D 18** (1991) 125–126.
- [YuGu93] Jian-Min Yuan und Yan Gu, *Chaotic electronic scattering with He^+* , Chaos **3** (1993) 569–580.
- [Zak⁺93] J. Zakrzewski, D. Delande, J.-C. Gay und K. Rzażewski, *Ionization of highly excited hydrogen atoms by a circularly polarized microwave field*, Phys. Rev. **A 47** (1993) R2468–2471.

Danksagung

Ich danke Herrn Professor Eckelt für die Anregung zu dieser Arbeit und die hervorragende, kritische Betreuung.

Berthold Stegemerten und Martin Engel danke ich für die gute Atmosphäre in Zimmer 421 und für die unermüdliche Nothilfe bei vergessenen AvD-Wochen, Prüfungsbeisitzen, Fensterputzern etc. In Diskussionen verhalf mir Berthold häufig zur Lösung scheinbar verfahrenere Probleme.

Meiner Familie gebührt besonderer Dank für ihre Unterstützung und ihre Geduld während meiner langen Studienzeit.

Ich danke Matthias Davids für *music and laughter*.

Lebenslauf

Name	Arne Beeker
Geburtstag	28. 4. 1965
Geburtsort	Dinslaken
Eltern	Werner Beeker Elfriede Beeker, geb. Timmermann
Familienstand	ledig
Staatsangehörigkeit	deutsch

Schulbildung

1971 – 1975	Grundschule am Weyer Dinslaken
1975 – 1977	Ernst-Barlach-Gymnasium Dinslaken
1977 – 1984	Otto-Hahn-Gymnasium Dinslaken
6. Juni 1984	Abitur in Dinslaken

Wehrdienst

Juli 1984 – Sept. 1985	Grundwehrdienst in Wesel-Hamminkeln
------------------------	-------------------------------------

Studium

Okt. 1985 – Juli 1991	Studium der Diplom-Physik an der WWU Münster
24. Juli 1991	Diplom in Physik an der WWU Münster
April 1993 – Juni 1995	Studium Lehramt Physik und Mathematik für Sek. I/II an der WWU Münster
30. Juni 1995	1. Staatsexamen in Physik und Mathematik für Sek. I/II an der WWU Münster

Tätigkeiten

Sept. 1989 – Juni 1991	Studentische Hilfskraft am Institut für Theoretische Physik I der WWU Münster
Juli 1991 – Okt. 1993	Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Theoretische Physik I der WWU Münster
Nov. 1993 – Juli 1995	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik I der WWU Münster
Aug. 1995 – Dez. 1995	Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Theoretische Physik I der WWU Münster

Dissertation

September 1991	Beginn der Dissertation am Institut für Theoretische Physik I der WWU Münster, Betreuer: Prof. Dr. Eckelt
Dez. 1991 – Okt. 1993	Stipendium der Graduiertenförderung des Landes Nordrhein-Westfalen

