Statistische Behandlung Hamiltonscher Vielteilchensysteme mit chaotischer Dynamik

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität
Bonn

vorgelegt von
Michael Pröbsting
aus
Bonn

Bonn 1998

Angefertigt
mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Bonn

Referent:	Prof. Dr. K. Dietz
Korreferent:	Prof. Dr. V. Rittenberg
Tag der Promotion:	

Kapitel 1

Einleitung

Vielteilchensysteme sind eine alte, wegen ihrer Komplexität aber bis heute aktuelle Herausforderung für die theoretische Physik. Mit Hilfe der statistischen Mechanik können ihnen, wenn die Anzahl ihrer Teilchen makroskopische Größenordnungen erreicht, thermische Gleichgewichtszustände zugewiesen werden, die nur davon abhängen, welche makroskopischen Randbedingungen sie erfüllen. Diese Gleichgewichtszustände sind mathematisch wohldefiniert, wenn auch die explizite Berechnung der Werte von Observablen des Systems in der Praxis (in Abhängigkeit des konkreten Systems) sehr schwer bzw. undurchführbar sein kann.
Eine wichtige und für viele Systeme bisher ungelöste Frage ist die folgende. Wie gelangen die Vielteilchensysteme in ihren Gleichgewichtszustand ? In jüngster Zeit sind viele Publikationen erschienen [16] [18] [20] [21], die sich mit dieser Frage bzw. genauer mit dem Problem auseinandersetzen, den Zuwachs der Entropie eines Vielteilchensystems nachzuvollziehen, das sich in Kontakt mit einem Wärmereservoir befindet. Die Herausforderung liegt für die Autoren darin, den Entropiezuwachs quantitativ aus den Lösungen der Bewegungsgleichungen der betrachteten Modellsysteme zu bestimmen. Die Modelle der zitierten Publikationen beschreiben klassische , dissipative Systeme. Die dissipativen Terme in den Bewegungsgleichungen entstehen durch Annahmen über den Energieaustausch zwischen dem System und dem Reservoir, die zu Nebenbedingungen an die dynamischen Gleichungen führen und das Auftreten dissipativer Terme zur Folge haben. Zentral ist die Existenz der dissipativen Kräfte für die in den Publikationen zu findenden Entropiedefinitionen. Denn für alle Definitionen gilt : Entropiezuwächse in den betrachteten Modellen gibt es nur, weil dissipative Kräfte vorhanden sind. Hamiltonsche Systeme haben bezüglich dieser Definitionen zeitlich

konstante Entropie.
Wir richten in Kapitel 2 einen Schwerpunkt unserer Arbeit auf die Untersuchung klassischer, Hamiltonscher Vielteilchensysteme. Explizit werden wir für sie den folgenden Sachverhalt nachweisen. *Klassische Hamiltonsche Vielteilchensysteme können im Langzeitlimes durch eine Mastergleichung beschrieben werden.* Wir werden nur mit Hilfe der Lösungen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen an Hand eines Modellsystems eine Mastergleichung konstruieren. Diese konkrete Mastergleichung gilt zwar nur für das spezielle Modell, die zur Ableitung verwendete Methodik kann aber auf andere klassische Vielteilchensysteme unverändert übertragen werden. Der entscheidende Punkt, der unser Resultat für Vielteilchensysteme allgemeingültig macht, ist die zugrundeliegende chaotische Dynamik in Vielteilchensystemen, die es erlaubt, die numerisch erzielten Lösungen der Bewegungsgleichungen und damit die physikalischen Größen des Systems im Langzeitlimes als Zufallsvariable zu interpretieren. Für die physikalische Größen können wir stationäre Verteilungen gewinnen, gegen die die Lösung der abgeleiteten Mastergleichung konvergiert.
Die stationären Verteilungen erweisen sich als Verteilungen eines thermischen Gleichgewichtszustands eines kanonischen Ensembles. Diese Identifikation erlaubt uns, an unserem Modellsystem eine Temperaturbestimmung vorzunehmen. Sie erlaubt außerdem die Anwendung der aus der klassischen Thermodynamik bekannten Definition für die Entropie auf unser Modell. Für die so definierte Entropie unseres Systems bestimmen und diskutieren wir ihre Abhängigkeit von ihren 'makroskopischen' Variablen und zeigen, daß sie die Postulate der Thermodynamik erfüllt. Zum Abschluß des Kapitels diskutieren wir, ob in unserem Modell Phasenübergänge möglich sind. Wir entwerfen ein Szenario, in dem wir durch die Steuerung eines Parameters das Potential im Modellsystem so variieren, daß die Trajektorien des Systems in Abhängigkeit des Parameters erheblich verändert werden. Bei der Analyse der stationären Verteilungen von physikalischen Größen des Systems zeigen sich Indizien eines Phasenübergangs.
Der zweite Teil der Arbeit beschäftigt sich in Kapitel 3 mit *quantenmechanischen* Vielteilchensystemen. Ziel ist die Durchführung analoger Rechnungen. Dazu erweisen sich rein quantenmechanische Systeme als ungeeignet, weil ihre Dynamik keine chaotischen Eigenschaften aufweist.

Wir haben deshalb klassisch quantenmechanische Systeme untersucht, also Quantensysteme, die an ein klassisches System gekoppelt sind. Für das klassische System wählen wir Modelle, in denen wir chaotische Dynamik vorfinden. Auf diese Weise wird über die Kopplung chaotische Dynamik im Quantensystem erzeugt und eine Interpretation seiner Observablen als Zufallsvariablen, ganz analog zu Kapitel 2, ermöglicht. Für diese Zufallsvariablen finden wir schon für die einfachsten Modelle von Quantensystemen (bei uns : Teilchen im Kasten) stationäre Verteilungen der Observablen. Diese stationären Verteilungen beschreiben, und dies ist das zentrale Resultat des Kapitels, Makrozustände von Vielteilchensystemen. Diesen Sachverhalt beweisen wir an Hand eines Modells eines Vielteilchenquantensystems mit Hilfe von geeignet definierten Interferenzfunktionen.

Kapitel 2

Klassische, Hamiltonsche Vielteilchensysteme

Gegenstand dieses Kapitels sind klassische, Hamiltonsche Vielteilchensysteme. Die Gesamtheit der Teilchen unterteilen wir in zwei Untersysteme, ein Reservoir, dem die meisten Teilchen angehören und dessen Eigenschaften für uns nur von untergeordnetem Interesse sind, und ein kleineres System, das im Mittelpunkt unserer Untersuchungen steht.
Das Interesse an klassischen Vielteilchensystemen (in Kontakt mit einem Wärmereservoir) ist gerade in jüngster Zeit gewachsen. Die in der Literatur untersuchten Modelle [16] [18] [19] [17] sind allerdings alle dissipativ. Die verfolgten Ziele sind vielfältig. Einerseits ist die Gewinnung von Bewegungsgleichungen für die dynamischen Variablen des Systems allein (ohne die Variablen des Reservoirs) eine Frage von großer Bedeutung. Sie wird in der Regel durch spezielle Randbedingungen gelöst, deren Folge das Auftreten dissipativer sowie stochastischer Kräfte in den dynamischen Gleichungen des Systems ist [21]. Ein anderes Ziel ist die Definition der Entropie [16] [20] für das System sowie der Nachweis steigender Entropie im Verlauf der Zeit. Die gegebene Entropiedefinition führt nur für dissipative Systeme zu steigenden Entropiewerten, für Hamiltonsche Systeme ist der Entropiezuwachs null. Eine genauere Diskussion der in der Literatur zu findenden Resultate wird im nächsten Abschnitt 2.1 vorgenommen.
Unsere Vielteilchensysteme sind dagegen Hamiltonsch. Den folgenden Sachverhalt wollen wir als ein Hauptziel dieser Arbeit zeigen

- Unter geeigneten Randbedingungen, nämlich, das das Vielteilchensystem isoliert ist und damit seine Energie konstant bleibt, kann ein (beliebiges) Untersystem im Langzeitlimes durch eine Mastergleichung beschrieben werden. Die Mastergleichung entsteht nach Durchführung mathematisch wohldefinierter Schritte, die von den Lösungen der Hamiltonschen Gleichungen des Gesamtsystems ausgehen und auf eine eindeutig bestimmte Mastergleichung führen.

Analysieren wir die Zielvorstellung. Gegeben haben wir das klassische Vielteilchensystem, seine Hamiltonfunktion und nach Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen als Anfangswertproblem (mit vorgegebenen Anfangswerten) die Trajektorien $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$. Diese Trajektorien $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ befinden sich auf einer Mannigfaltigkeit M_E im Phasenraum des Vielteilchensystems. M_E ist gekennzeichnet durch die Energie E, die durch die Anfangsbedingungen für das System definiert ist. Es gilt $M_E \equiv \{(\vec{q}, \vec{p}) | H(\vec{q}, \vec{p}) = E\}$. Eine beliebig ausgewählte Trajektorie füllt mit wachsender Zeit M_E aus (genauer : sie kommt jedem Punkt aus M_E beliebig nahe). Im Gegensatz zu dissipativen Systemen gibt es keine Attraktoren, ein Limes $\lim_{t\to\infty} q(t)$ oder $\lim_{t\to\infty} p(t)$ existiert nicht.
Ganz andere Eigenschaften besitzen die Lösungen von Mastergleichungen. Die allgemeine Form der Mastergleichung lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x,t) = \int dx' \left\{ w(x' \to x) W(x',t) - w(x \to x') \, W(x,t) \right\} \quad . \qquad (2.1)$$

Dabei notiert x eine (kontinuierliche) Zufallsvariable, $W(x,t)$ die Verteilung von x und $w(x \to x')$ die Übergangswahrscheinlichkeit, daß die Zufallsvariable nach dem Wert x den Wert x' annimmt. Die Mastergleichung beschreibt also die zeitliche Evolution der Verteilung einer Zufallsvariable. Sie ist zu einer Anfangsverteilung $W(x, t = 0)$ als Anfangswertproblem zu lösen. Ihre besondere Eigenschaft ist, daß ihre Lösung $W(x,t)$ im Langzeitlimes $t \to \infty$ gegen eine stationäre Verteilung konvergiert. Der Limes $\lim_{t\to\infty} W(x,t)$ existiert und ist sogar unabhängig von der Anfangsverteilung, bestimmt allein durch die Übergangswahrscheinlichkeit $w(x \to x')$.
Um eine Mastergleichung aus den Lösungen der Hamiltonschen Gleichungen zu konstruieren, realisieren wir in diesem Kapitel die folgenden Schritte :

(0) Numerische Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen eines Vielteilchensystems (das verwendete Modell wird in Abschnitt 2.2 vorgestellt) zu einer fest vorgegebenen Anfangsbedingung. Damit haben wir eine Trajektorie $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ im Phasenraum gewonnen.

(1) Auswahl einer "Zufallsvariablen" $F(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$. Bei uns wird F die Energie eines Untersystems mit fester Teilchenzahl n sein. Korrekterweise ist die Energie eines Hamiltonschen (Teil-) Systems keine Zufallsvariable im mathematischen Sinn, denn nach Angabe der Anfangsbedingungen ist sie zu jeder Zeit eindeutig festgelegt. Unsere Analyse wird zeigen, daß die Energie eines Untersystems Eigenschaften besitzt, die typisch für Zufallsvariablen sind. Dazu muß die Energie über ausreichend lange Zeitintervalle betrachtet werden (in diesem Sinne ist der oben verwendete Begriff 'Langzeitlimes' zu verstehen).

(2) Nachweis der Existenz und Bestimmung einer stationären Verteilung der 'Zufallsvariablen' Energie sowie ihres stationären Erwartungswertes mit Hilfe der Lösung der Hamiltonschen Gleichungen. Dieser Schritt stellt einmal die Motivation dar, eine Mastergleichung für das System zu suchen, andererseits liefert er mit den Erwartungswerten und der Verteilung Resultate, die wir mit den Lösungen der noch zu definierenden Mastergleichung vergleichen können.

(3) Numerische Bestimmung der die Mastergleichung definierenden Größe (die Übergangswahrscheinlichkeit $w(E \rightarrow E'))$ und Definition der Anfangsverteilung.

(4) Lösung der Mastergleichung als Anfangswertproblem : Bestimmung der stationären Verteilung $\lim_{t\rightarrow\infty} W(E,t)$ und des Energiemittelwertes $\overline{E}$. Vergleich mit den in Schritt (2) gewonnenen Resultaten.

Die Schritte (0) bis (4) werden wir in den Abschnitten 2.3 und 2.4 erfolgreich durchführen und damit das oben angesprochene Ziel erreichen. Die folgenden Abschnitte widmen sich Fragestellungen, die sich einerseits auf die (stochastische) Natur der Kräfte Γ_i konzentrieren, mit der die Reservoirteilchen auf die Teilchen des betrachteten Untersystems wirken, andererseits auf die speziell aus Schritt (2) bzw. (4) erhaltene Verteilung beziehen. Abschnitt 2.5 beschäftigt sich mit den Kräften auf die Teilchen des Untersystems. In der Literatur wird von ihnen häufig angenommen, daß sie delta "white noise"- korreliert sind (siehe z.B. [21]). Mit Hilfe der aus Schritt (0) gewonnenen Daten (die Trajektorie $(\vec{q}(t), \vec{p}(t)))$ sind wir in der Lage, diese Annahme für unser spezielles Vielteilchensystem zu prüfen.

Die in Schritt (2) bzw. (4) gewonnene Verteilung entpuppt sich bei näherer Analyse als die eines thermischen Gleichgewichtszustands. Diese Erkenntnis ist der Hintergrund für die in den Abschnitten 2.6 und 2.7 durchgeführten Untersuchungen. Die Herausforderungen sind die Festlegung einer Temperatur für das System, die Bestimmung der Entropie (sowie thermodynamischer Potentiale wie die innere Energie) und die Diskussion der Möglichkeit eines Phasenübergangs in unserem Modell.

2.1 Bekannte Modelle von Systemen in Kontakt mit Reservoiren

In der Literatur haben klassische Systeme in Kontakt mit Reservoiren in jüngster Zeit hohe Beachtung gefunden. Es wird dort nach geeigneten Möglichkeiten gesucht, die dynamischen Gleichungen für die Reservoirvariablen nicht explizit zu lösen, sondern bei der Lösung der dynamischen Gleichungen des Systems den Einfluß des Reservoirs durch geeignete Randbedingungen zu berücksichtigen.
In [16][20] werden klassische Vielteilchensysteme in einem äußeren, konstanten (Kraft-) Feld $\vec{E}$ analysiert. Der Einfluß des Wärmereservoirs wird durch eine Nebenbedingung quantitativ erfaßt : die Energie

$$H_0 = \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{p}_j^2}{2m} + \phi(\vec{q}_1, ..., \vec{q}_N) \tag{2.2}$$

der Teilchen ist eine Erhaltungsgröße. Diese Nebenbedingung ist verantwortlich für das Auftreten dissipativer Kräfte in den Bewegungsgleichungen des Systems, die lauten

$$\begin{aligned} \dot{\vec{q}}_j &= \frac{\partial H_0}{\partial \vec{p}_j} \\ \dot{\vec{p}}_j &= -\frac{\partial H_0}{\partial \vec{q}_j} - \vec{E} - \alpha \vec{p}_j \ . \end{aligned} \tag{2.3}$$

$\alpha \vec{p}_j$ ist gerade die (dissipative) Kraft, die notwendig ist, die Energie H_0 konstant zu halten (genauer gesagt ist aus dieser Bedingung α zu bestimmen, siehe [21]). Physikalische Systeme, die mit diesem Modell beschrieben werden sollen, sind Elektronen in einem Metall bei angelegter, äußerer Spannung oder Teilchen in einer Flüssigkeit.

Ein weiteres Ziel der Autoren ist die Definition einer Entropie für das System, die in unmittelbarem Zusammenhang mit den dynamischen Gleichungen steht und eine Diskussion des Entropiezuwachses. Die Entropie wird mit dem Fluß S des Systems in Verbindung gebracht. Bilden also X die Anfangswerte der dynamischen Systemvariablen, so ist $S^t(X)$ die Lösung der Bewegungsgleichung zur Zeit t. $f_t(X)$ bezeichnet die folgende Jacobi - Determinante

$$f_t(X) = \left| \frac{dS^{-t}(X)}{dX} \right| . \tag{2.4}$$

Mit dieser Notation wird die Entropie S als

$$S(t) = -k \int dX \, f_t(X) \, ln f_t(X) \tag{2.5}$$

definiert. Eine Relation für die Energiezuwächse ergibt sich sofort aus (2.5) durch Differentiation nach t. Man erhält

$$\frac{d}{dt} S(t) = k \int dX \, f_t(X) \, (\nabla_X \dot{X}) \, dX \tag{2.6}$$

mit $(\nabla_X \dot{X}) = -\alpha$. Die Existenz der dissipativen Kraft ist demnach notwendig, um dem System Entropiezuwächse zuordnen zu können. Hamiltonsche Systeme haben nach dieser Definition konstante Entropie.
Ein anderes Modell wird in [21] untersucht. Hier besteht das System aus n klassischen Teilchen in einem Potential $U(\vec{x})$, auf das nichtkonservative Kräfte, stochastische "white noise" Kräfte $\Gamma_i(t)$ und dissipative Kräfte wirken. Sowohl die "white noise" Kräfte $\Gamma_i(t)$ als auch die dissipativen Kräfte sind Ausdruck des Einflusses des Reservoirs. Denn durch die Kopplung an das Reservoir gibt es einerseits einen Energiefluß aus dem n-Teilchensystem (deshalb die Existenz der Reibungskräfte), andererseits einen Energiefluß in das System (deshalb die Existenz der stochastischen Kräfte $\Gamma_i(t)$). Die beiden Kräfte sind natürlich nicht unabhängig voneinander, es wird angenommen, daß ihr Zusammenhang durch das Fluktuations-Dissipations-Theorem geregelt ist. Es lautet hier

$$< \Gamma_i(t) \Gamma_j(t') >= 2\gamma T \delta_{ij} \delta(t - t'), \tag{2.7}$$

wobei γ die Reibungskraftkonstante ist. Das Fluktuations-Dissipations-Theorem wird zur Temperaturdefinition verwendet. In der Tat kann gezeigt werden, daß die stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung,

die diesem Problem zugeordnet ist, eine Boltzmann-Verteilung mit genau der Temperatur T des Fluktuations-Dissipations-Theorems ist. Für einfache Fälle kann die Gültigkeit des Fluktuations-Dissipations-Theorems explizit nachgewiesen werden [22][23].
Mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\vec{x}, \vec{p}, t)$ wird in [21] die Entropie definiert. $P(\vec{x}, \vec{p}, t)$ ist die eindeutige Lösung der Fokker-Planck-Gleichung zu einer gegebenen Anfangsverteilung $P(\vec{x}, \vec{p}, t_0)$. Die Entropie wird definiert als

$$S(t) = -k \int \prod_i d^3x_i\, d^3p_i P(\vec{x}, \vec{p}, t) ln P(\vec{x}, \vec{p}, t), \tag{2.8}$$

der Entropiezuwachs ist

$$T\frac{d}{dt}S(t) = \gamma \sum_i \int dx\, dv \frac{(mv_i\, P_{stat} + T\partial_{v_i} P_{stat})^2}{m^2 P_{stat}} \geq 0. \tag{2.9}$$

Wieder ist der Entropiezuwachs an die Voraussetzung der Existenz dissipativer Kräfte geknüpft, ein rein Hamiltonsches System besitzt bzgl. dieses Entropiebegriffs konstante Entropie.
Gemeinsam ist diesen Modellen, daß auf die Lösung der Beweguns-gleichungen des Gesamtsystems verzichtet wird, die Wirkung des Reservoirs durch Nebenbedingungen (konstante kinetische Energie bzw. Fluktuations-Dissipations-Theorem) eingebracht wird. Zur Bestimmung der Entropie muß über den gesamten Phasenraum des Systems integriert werden, d.h. zur Entropiebestimmung ist entweder die Lösung der Systembewegungsgleichung für alle möglichen Anfangswerte oder die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung erforderlich. Entropiezuwächse gibt es in diesen Modellen aufgrund der Existenz dissipativer Kräfte.

2.2 Unser Modell

Für den Rest des Kapitels wollen wir klassische, Hamitonsche Systeme betrachten. Als Modell schlagen wir ein System aus $n + N$ miteinander wechselwirkende Teilchen in einer Falle (x^4-Oszillator) vor. n wahllos aus diesem System herausgegriffene Teilchen sehen wir als Subsystem an, die restlichen N Teilchen bilden das Reservoir. Der Hamiltonian des Systems lautet

$$H = \sum_{i=1}^{N+n} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{4} b\, q_i^4 + \frac{1}{2} a\, q_i^2 \right) + \sum_{i=1}^{N+n} \alpha q_i\, q_{i+1} \tag{2.10}$$

mit $q_{N+n+1} \equiv q_1$.
Für die folgende Diskussion wollen wir die Summanden des Hamiltonians auf zwei Arten zusammenfassen. In beiden Zerlegungsvarianten bezeichnen wir die Phasenraumvariablen des Systems mit $(\vec{p},\vec{q}) = (p_1,...,p_n,q_1,...,q_n)$, die Phasenraumvariablen des Reservoirs mit $(\vec{P},\vec{Q}) = (P_1,...,P_N,Q_1,...,Q_N)$. Erstens zerlegen wir H in einen Systemhamiltonian H_{Sys}, einen Reservoirhamiltonian H_R und ein Potential V, das nur die Wechselwirkung zwischen den System - und den Reservoirteilchen beschreibt. Mit diesen Bezeichnungen lautet H

$$H = H_{Sys}(\vec{p},\vec{q}) + H_R(\vec{P},\vec{Q}) + V(\vec{q},\vec{Q}). \tag{2.11}$$

mit

$$\begin{aligned}
H_{Sys}(\vec{p},\vec{q}) &= \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{4}b\,q_i^4 + \frac{1}{2}a\,q_i^2\right) + \sum_{i=1}^{n-1}\alpha q_i\,q_{i+1},\\
H_R(\vec{P},\vec{Q}) &= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{4}b\,Q_i^4 + \frac{1}{2}a\,Q_i^2\right) + \sum_{i=1}^{N-1}\alpha Q_i\,Q_{i+1},\\
V(\vec{q},\vec{Q}) &= \alpha q_n\,Q_1 + \alpha q_1\,Q_N.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

In der zweiten Variante fassen wir die Teilchenwechselwirkung in einen Potentialterm $W(\vec{q},\vec{Q})$ zusammen, die dem System bzw. dem Reservoir zugeordneten Hamiltonian heißen h_0 bzw. H_0. Dann ist

$$H = h_0(\vec{p},\vec{q}) + H_0(\vec{P},\vec{Q}) + W(\vec{q},\vec{Q}) \tag{2.13}$$

mit

$$\begin{aligned}
h_0(\vec{p},\vec{q}) &= \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{4}b\,q_i^4 + \frac{1}{2}a\,q_i^2\right),\\
H_0(\vec{P},\vec{Q}) &= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{4}b\,Q_i^4 + \frac{1}{2}a\,Q_i^2\right),\\
W(\vec{q},\vec{Q}) &= \sum_{i=1}^{n-1}\alpha q_i\,q_{i+1} + \sum_{i=1}^{N-1}\alpha Q_i\,Q_{i+1} + \alpha q_n\,Q_1 + \alpha q_1\,Q_N.
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Die (für wechselwirkende Teilchen in einer Falle unrealistische) Wechselwirkung haben wir aus Gründen einer effizienten numerischen Behandlung so gewählt. Sie ermöglicht uns die Simulation von Systemen mit bis zu 1000 Teilchen.
Die Bewegungsgleichungen des Gesamtsystems lauten

$$\begin{aligned}
\dot{q}_i &= \frac{p_i}{m}\\
\dot{p}_i &= -b\,q_i^3 - a\,q_i - \alpha\,(q_{i+1} + q_{i-1})
\end{aligned} \tag{2.15}$$

mit $p_{i+n} = P_i$, $q_{i+n} = Q_i$ und $q_{n+N+1} = q_1$. Seine einzige nichttriviale Erhaltungsgröße ist die Gesamtenergie H, die durch die Anfangsbedingungen festgelegt ist. Eine Trajektorie $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ verläuft auf der oben definierten Mannigfaltigkeit M_E.

2.3 Energieverteilung im Subsystem

Unser Ziel ist die Definition einer Mastergleichung am Beispiel unseres speziellen Modells, mit der das Vielteilchensystem im Langzeitlimes beschrieben werden kann. Die abgeleitete Mastergleichung gilt dann natürlich nur für unser verwendetes System, die Aussage jedoch, klassische Vielteilchensysteme können im Langzeitlimes durch eine Mastergleichung erfaßt werden, und die von uns hier vorgestellte Methodik sind aber allgemein gültig.

2.3.1 Lösung der Bewegungsgleichungen

Wir beginnen unsere Ableitung mit Schritt (0). Betrachtet wird ein Vielteilchensystem aus $n + N = 1000$ Teilchen mit dem Hamiltonian (2.10). Für die 1000 Teilchen werden Anfangswerte ausgewählt und mit ihnen die Bewegungsgleichung (2.15) integriert (die verwendeten Parameter sind in den Figure Caption 2.1 aufgeführt). Eine Zeitlänge T_0 - sie beträgt in etwa $\frac{1}{20}$ der Periodenlänge der Oszillationen eines (freien) Teilchens in der Falle - geben wir fest vor, die Integrationszeit beträgt $T = 10^6 T_0$, was in etwa $100ps$ entspricht. Auf diese Weise gewinnen wir eine Trajektorie $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ im Phasenraum des Gesamtsystems und speichern als Daten die Teilmenge

$$\Omega = \left\{ (\vec{q}(nT_0), \vec{p}(nT_0)) | n = 0, 1, ..., 10^6 \right\} \tag{2.16}$$

des Phasenraums ab. Schritt (0) unseres Programms ist damit durchgeführt.

2.3.2 Energie als Zufallsvariable

Wir kommen zu Schritt (1) und haben eine Zufallsvariable festzulegen. Es wird bei uns die Energie $h_0(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ des Subsystems sein (natürlich können wir auch H_{Sys} verwenden, die Verteilung von h_0 wird sich in den späteren Abschnitten aber besser auf eine thermische Verteilung zurückführen lassen). Wie oben diskutiert ist $h_0(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ keine Zufallsvariable. Denn die Lösung $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ von (2.10) ist nach Festlegung der Anfangswerte eindeutig bestimmt und deshalb ist auch h_0 eindeutig festgelegt.

Dennoch können wir die Energien $h_0(\vec{q}(nT_0), \vec{p}(nT_0))$ (ab jetzt schreiben wir kurz $E(nT_0)$ oder E) zu unseren gespeicherten Daten Ω als eine Folge von Zufallsvariablen interpretieren. Um diesen Sachverhalt plausibel zu machen, entwickeln wir die folgenden Argumente. Zunächst ist festzustellen, daß sich unser System durch eine extrem chaotische Dynamik auszeichnet. Die Lösungen sind hochempfindlich gegenüber kleinsten Variationen der Anfangsbedingungen oder auch, und dies ist für uns von viel größerem Interesse, gegenüber Rundungsfehlern (und damit der Rechengenauigkeit) in den numerischen Simulationen. Um diese Tatsache zu illustrieren, haben wir in einem Computerexperiment die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (2.10) mit exakt denselben Anfangsbedingungen einmal mit der Genauigkeit "doppelt genau", einmal mit der Genauigkeit "vierfach genau" integriert. Aus beiden Lösungen haben wir jeweils die q-Koordinate des 700. Teilchens ausgewählt, die Differenz $y(t) = q_{700}^{(dg)}(t) - q_{700}^{(vg)}(t)$ (die Abkürzung (dg) steht für "doppelt genau", die Abkürzung (vg) für "vierfach genau") bestimmt und in Abb. 2.1 als Funktion der Zeit aufgetragen.

Wir erkennen schon ab $t \approx 300T_0$ eine Abweichung von $y(t)$ von null, bis $t = 1000T_0$ haben die Oszillationen von $y(t)$ längst die Größe der Oszillationen von $q_{700}^{(dg)}(t)$ bzw. $q_{700}^{(vg)}(t)$ erreicht. Spätestens von $t = 1000T_0$ müssen wir von zwei völlig verschiedenen Trajektorien reden, obwohl dasselbe Anfangswertproblem gelöst worden ist. Das bedeutet, daß die gespeicherten Datenmengen $\Omega^{(dg)}$ und $\Omega^{(vg)}$ praktisch völlig verschiedene Mengen sind (deutlich über 99 Prozent der Daten stimmen nicht überein). Führt man dieselbe Rechnung auf einem anderen Computer durch, erhält man dasselbe Resultat; nicht einmal die mit gleicher Genauigkeit, aber auf verschiedenen Computern berechneten Trajektorien stimmen überein. Ab $t \approx 1000T_0$ liegen auch hier völlig unterschiedliche Trajektorien vor. Wir schließen daraus : keine der so erhaltenen Trajektorien ist die wahre Lösung des Anfangswertproblems.

Eine erfreuliche Tatsache muß aber hervorgehoben werden : trotz aller Rundungsfehler bei der Bestimmung der Teilchentrajektorien bleibt die Gesamtenergie H des Systems über die gesamte Integrationszeit bemer-

kenswert konstant (die relative Schwankung ist kleiner als 10^{-6} !). Die Teilchentrajektorien in Ω, obwohl nicht die wahren, liegen also auf M_E. Was sind unsere abgespeicherten Daten Ω (wir nehmen von jetzt an $\Omega = \Omega^{(dg)}$) wert ? Im Langzeitlimes - und der beginnt für unser System offensichtlich schon ab $t = 1000T_0$ - erhalten wir keine Information über die wahre Bahn der Teilchen. Schuld daran sind Rundungsfehler während der Rechnung. Diese Rundngsfehler stellen eine Art zufälliges Element dar (sie hängen ja von der jeweils verwendeten Genauigkeit und vom eingesetzten Computer ab), die man auch interpretieren kann als Auswirkung einer ganz kleinen (zunächst einmal unerwünschten) Zufallskraft. Die stark chaotische Dynamik in unserem System bewirkt dann die mit wachsender Zeit exponentielle Verstärkung der Wirkung der Zufallskraft. In diesem Sinne können wir unsere Daten Ω tatsächlich als Folge von Zufallsvariablen deuten, und die Energie $E = h_0$ des Untersystems ist dann als Funktion von Zufallsvariablen wie jede andere Funktion auch eine Zufallsvariable. Wichtig ist hier auch die oben gemachte Feststellung, daß sich die numerisch erzielte Lösung über die gesamte Integrationszeit auf der Mannigfaltigkeit M_E befindet.
Als weiteres Argument für die Interpretation der Subsystemenergie E als Zufallsvariable führen wir ihre zeitliche Evolution an. In Abb. 2.2 ist E als Funktion der Zeit für ein Zeitintervall $t \in [3000T_0, 30000T_0]$ zu sehen. Starke Energiefluktuationen sind zu erkennen, der zeitliche Verlauf ähnelt dem einer Brownschen Bewegung, die Stetigkeit von E als Funktion von t ist nicht zu erkennen. Die Ursache für die letzte Aussage ist in Wahl der Größe des Zeitintervalls zu suchen, auf dem E dargestellt wird. Eine kleineres Intervall der Länge bis zu $t = 1000T_0$ bringt die Stetigkeit von E wieder ans Licht. Eine eingehende Analyse der Rolle der Zeitintervallängen (und damit der Zeitskala) erfolgt im Anschluß an die jetzt durchzuführende Diskussion der Korrelation der Zufallsvariable E.
Die Korrelationsfunktion liefert Informationen darüber, ab welchen Zeitpunkt τ (wenn überhaupt) die Zufallsvariable $E(t+\tau)$ stochastisch unabhängig von $E(t)$ ist. Sie lautet

$$G(\tau) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left(E(t') - \bar{E}\right) \left(E(t'+\tau) - \bar{E}\right) dt'. \tag{2.17}$$

$\bar{E}$ bezeichnet den Energiemittelwert in dem Intervall $[0, T]$. In Abb. 2.3 ist die Korrelationsfunktion für das System aufgetragen. Wir beobach-

ten einen raschen Abfall gegen null. Schon nach einigen hundert Zeiteinheiten ist keine Korrelation zwischen den um diese Zeit getrennten Energiewerten meßbar. Diese Zeit beträgt etwa 10-20 Perioden der freien Oszillation. Definieren wir die Zeitlänge $T_1 = 1000T_0$, so kann die Folge $(E(nT_1))$ als Folge stochastisch unabhängiger Zufallsvariabler angesehen werden.
Diskutieren wir die Rolle der Zeitskala für unser System. Auffällig ist, daß sich die Zeit bis zum Abfall der Korrelation auf null und die Zeit, bis zu der zwei mit verschiedener Genauigkeit berechnete Lösungen nicht mehr übereinstimmen, zumindestens größenordnungsmäßig decken. Die Frage, welche Information die (numerischen) Daten Ω bei der Integration des Anfangswertproblems (2.10) haben, ist eine Frage der Zeitskala : für Integrationslängen $t << T_1$ erhalten wir in guter Approximation die wirkliche Lösung von (2.15), für $t >> T_1$ hat die numerisch gewonnene Trajektorie mit der wirklichen nichts mehr zu tun, kann dagegen angemessen durch eine Zufallsvariable angesehen werden. Die Interpretation als Zufallsvariable wird unterstützt durch die Eigenschaft der numerischen Lösung, sich über die von uns verwendeten Integrationszeiten immer auf M_E zu befinden. Es sei betont, daß die genaue Zeit T_1, die wir ermittelt haben, modellabhängig ist, daß aber für jedes klassische Vielteilchensystem mit ausreichend chaotischer Dynamik eine solche Zeit T_1 existiert, so daß die oben gemachten Aussagen in exakt dergleichen Weise auf das jeweils untersuchte System zutreffen. Denn für jedes chaotische System werden Rundungsfehler in den Rechnungen dazu führen, daß ab einem für das System charakteristischen Zeitpunkt die numerisch gewonnene Trajektorie nichts mehr mit der wirklichen Trajektorie zu tun hat. Mit diesem Resultat haben wir Schritt (1) abgeschlossen und mit $E = h_0$ und den Daten Ω eine Zufallsvariable gewonnen.

2.3.3 Stationäre Verteilung

Besitzt E eine stationäre Verteilung ? Ein Indiz dafür sind konstante Mittelwerte. Aus unseren Daten bestimmen wir zeitabhängige Mittelwerte der Energie E mit Hilfe der Formel

$$< E >_T (t) = \frac{1}{2T} \int_{t-T}^{t+T} dt' E(t'). \tag{2.18}$$

Konstante Energiemittelwerte bedeuten, daß $< E >_T (t) = const$ gilt, also $< E >_T (t)$ weder von der Mittelungsdauer T noch von t abhängt.

Natürlich besteht bei zu kleiner Wahl von T immer eine Abhängigkeit von T (und damit auch von t). Konstante Mittelwerte können wir nach den bisher erzielten Resultaten erst für Mittelungsdauern $T >> T_1$ erwarten. Dies wird in den Abbildungen 2.4 deutlich. Abb. 2.4.1 zeigt noch einmal einen zeitlichen Ausschnitt der Energiefluktuationen. Die Abb. 2.4.2 bis 2.4.4 stellen die zeitliche Evolution der nach (2.18) bestimmten Energiemittelwerte. Die Mittelungsdauer erhöht sich sukzessive von $T = 100T_0$ in Abb. 2.4.2 bis $T = 3000T_0$ in Abb. 2.4.4 (die jeweiligen Mittelungsdauern sind im Bild zu erkennen). Wir beobachten mit wachsender Mittelungsdauer einen deutlichen Rückgang der Schwankungen (von Abb. 2.4.1 bis 2.4.4), bis wir bei Mittelungsdauern von $T = 3000T_0$ praktisch keine zeitliche Abhängigkeit der Mittelwerte mehr feststellen können. Wir werten dieses Resultat als starkes Indiz für die Bildung eines stationären Zustands im System.
Wie sieht die Energieverteilung im Subsystem aus ? Ist sie stationär ? Zu ihrer Bestimmung gehen wir wie folgt vor. Wir wählen ein Zeitintervall, dessen Länge mindestens so groß wie die zur Gewinnung zeitunabhängiger Energiemittelwerte minimal benötigte Mittelungsdauer ist, bestimmen innerhalb dieses Zeitintervalls die minimal und maximal angenommene Energie des Systems (E_{min} und E_{max}), unterteilen das Energieintervall $[E_{min}, E_{max}]$ in 1000 äquidistante Teilintervalle der Länge dE und bestimmen die absolute Häufigkeit $h(E)$, mit der $E(t)$ in dem Intervall $[E - \frac{1}{2}dE, E + \frac{1}{2}dE]$ liegt (Grundgesamtheit ist Ω). Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Energie aus dem Intervall $[E - \frac{1}{2}dE, E + \frac{1}{2}dE]$ beträgt

$$P(E) = \frac{h(E)}{\overline{N}\, dE}, \tag{2.19}$$

$\overline{N}$ ist die Anzahl der Energiepunkte innerhalb des Zeitintervalls. Wir haben zunächst $\overline{N} = 10^5$ (also ist die Länge des Zeitintervalls $t = 10^5 T_0$) gewählt und mehrere Verteilungen nach (2.19) berechnet. Sie sind jeweils innerhalb der Fehlergrenzen identisch. Es liegt eine stationäre Verteilung für die Energie vor.
In Abb. 2.5 haben wir die nach (2.19) bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(E)$ gegen E für $\overline{N} = 10^6$ aufgetragen. Wir erkennen eine Verteilung, die sich um ein Maximum konzentriert.
Mit Hilfe der Verteilung aus Abb. 2.5 bestimmen wir den Energieerwartungswert $\overline{E} = \int E\, P(E)\, dE$ numerisch zu $\overline{E} = 24.81$. Dieser Erwar-

tungswert (der natürlich mit dem zeitlichen Mittelwert aus Abb. 2.4.4 übereinstimmt) und die Verteilung aus Abb. 2.5 sind die Resultate, die die Lösung der jetzt aufzustellenden Mastergleichung zu reproduzieren hat.
Am Ende dieses Abschnitts sei bemerkt, daß sowohl der Erwartungswert $\overline{E}$ als auch die stationäre Verteilung $P(E)$ invariant bleiben, wenn wir den Datensatz Ω durch einen Datensatz Ω' austauschen, dessen Trajektorie mit anderer Genauigkeit oder auf einem anderen Computer berechnet worden ist. Dieses Resultat können wir als weitere Stütze für die Interpretation unserer Daten als Werte einer Zufallsvariablen ansehen.

2.4 Die Mastergleichung

In diesem Abschnitt erfolgt die Konstruktion der Mastergleichung (Schritt (3)), mathematisch der anspruchvollste Schritt. Die Mastergleichung soll aufgestellt werden bzgl. der Zufallsvariable $E = h_0$ des Subsystems, sie lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} W(E,t) = \int dE' \left\{ w(E' \to E) W(E',t) - w(E \to E')\, W(E,t) \right\} \ . \tag{2.20}$$

In Schritt (4) ist (2.20) zu lösen für eine noch zu definierende Anfangsverteilung $W(E, t = 0)$ und der Limes $\lim_{t\to\infty} W(E,t)$ mit der stationären Verteilung aus Abb. 2.5 zu vergleichen. Unser klassisches Vielteilchensystem kann dann im Langzeitlimes durch die Mastergleichung beschrieben werden, wenn $\lim_{t\to\infty} W(E,t) = P(E)$ gilt. Natürlich gilt dann auch $\lim_{t\to\infty} \int E\, W(E,t)\, dE = \int E\, P(E)\, dE = < E >$).
Das nichttriviale Problem bei der Konstruktion der Mastergleichung ist die Bestimmung der Übergangswahrscheinlichkeit $w(E \to E')$. Durch die Festlegung von $w(E \to E')$ ist die Mastergleichung wohldefiniert, seine Lösung strebt im Langzeitlimes eine nur von $w(E \to E')$ abhängige stationäre Verteilung an.

2.4.1 Bestimmung der Übergangswahrscheinlichkeit

Unserer Bestimmung von $w(E \to E')$ müssen wir aus Konsistenzgründen die folgende Bedingung auferlegen : $w(E \to E')$ darf nur mit Hilfe der durch die dynamischen Gleichungen (2.15) definierten Trajektorien bzw.

durch unsere Daten Ω festgelegt werden.
Ein natürlicher Ansatz zur Definition der Übergangswahrscheinlichkeit durch die Trajektorien unseres Systems ist der folgende. $M_E^{(S)}$ sei die Mannigfaltigkeit im Phasenraum des Subsystems (deshalb die Kennzeichnung (S)) mit konstanter Energie E - also ganz analog definiert wie M_E -, μ das Maß mit konstanter Dichte auf $M_E^{(S)}$ mit $\mu(M_E^{(S)}) = 1$ und T eine festgewählte Integrationszeit. $S^T(M_E^{(S)})(\vec{P}, \vec{Q})$ sei das Bild von $M_E^{(S)}$ nach einer Evolution der Dauer T, wobei $(\vec{P}, \vec{Q})$ die Anfangswerte der Reservoirteilchen sind. Zu gegebenen $(\vec{P}, \vec{Q})$ können wir eine Wahrscheinlichkeit $P(E \to E')(\vec{P}, \vec{Q})$ durch

$$P^{(T)}(E \to E')(\vec{P}, \vec{Q}) \equiv \frac{\mu\left(S^T(M_E^{(S)})(\vec{P}, \vec{Q}) \cap M_{E'}^{(S)}\right)}{\mu(M_E^{(S)})} \tag{2.21}$$

definieren. Die Übergangswahrscheinlichkeit $w^{(T)}(E \to E')$ erhalten wir aus

$$\begin{aligned} w^{(T)}(E \to E') &= \frac{\int_{\tilde{C}(E, M_E^{(S)})} \prod_i dP_i\, dQ_i\ P^{(T)}(E \to E')(\vec{P}, \vec{Q})}{\int_{\tilde{C}(E, M_E^{(S)})} \prod_i dP_i\, dQ_i} \qquad (2.22) \\ &= \mu\left(S^T(M_E^{(S)}) \cap M_{E'}^{(S)}\right) \qquad (2.23) \end{aligned}$$

$\tilde{C}(E, M_E^{(S)})$ bezeichnet die Menge im Phasenraum nur der Reservoirteilchen, die sich aus den folgenden beiden Bedingungen ergibt : das Gesamtsystem hat die Energie H, das System Werte $(\vec{p}, \vec{q})$ aus $M_E^{(S)}$.
Damit (2.22) eine sinnvolle Ansetzung für die Übergangswahrscheinlichkeit ist, bleibt zu zeigen, daß $w^{(T)}(E \to E')$ unabhängig von der Integrationszeit T ist, falls T genügend groß gewählt ist. Den Begriff 'Langzeitlimes' wollen wir dann so verstanden wissen, daß eine genügend große Integrationszeit T verwendet wird.
Die Definition (2.22) - falls unabhängig von T - ist zwar eine sinnvolle Definition für die Übergangswahrscheinlichkeit $w(E \to E')$, für uns aber wegen der Vielzahl der zu integrierenden Anfangswertprobleme unpraktikabel. Wir suchen deswegen nach einer approximativen Bestimmung von $w^{(T)}(E \to E')$, für die wir nur die Daten Ω zugrundelegen können. Dazu bilden wir im Phasenraum des Subsystems die Mengen

$$\tilde{M}^{(S)}(E) \equiv \{(\vec{q}, \vec{p}) | E \leq h_0(\vec{q}, \vec{p}) \leq E + \Delta E\}\,, \tag{2.24}$$

so daß ihre Vereinigung die Menge

$$\tilde{\Omega}^{(S)} = \left\{(\vec{q},\vec{p})|(\vec{q},\vec{p},\vec{Q},\vec{P}) \in \Omega\right\} \tag{2.25}$$

überdeckt.
Ein wichtiger Punkt bei der Bildung der Mengen $\tilde{M}^{(S)}(E)$ ist die Wahl der Größe von ΔE, die so zu erfolgen hat, daß ΔE viel kleiner als die Varianz der Verteilung $P(E)$ aus Abb. 2.5 ist. Eine derartige Wahl gewährleistet, daß jede in $\tilde{M}^{(S)}(E)$ liegende Energie h_0 mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen wird. Mathematisch ausgedrückt : die Zufallsvariable $E = h_0$ ist auf jedem Intervall $[E, E+\Delta E]$ gleichverteilt. Unter dieser Voraussetzung kann in Definition (2.22) $M_E^{(S)}$ durch $\tilde{M}^{(S)}(E)$ ersetzt werden, falls μ auf natürliche Weise fortgesetzt wird.
Bezüglich unserer $\overline{N} = 10^6$ Daten in Ω definieren wir die folgende Übergangswahrscheinlichkeit

$$\tilde{w}^{(kT_0)}(E \to E') = \frac{\sum_{i=1}^{\overline{N}} \delta_{E,E(iT_0)} \cdot \delta_{E',E((i+k)T_0)}}{\sum_{i=1}^{\overline{N}} \delta_{E,E(iT_0)}} \tag{2.26}$$

$$= \frac{1}{N(\tilde{M}^{(S)}(E))} \sum_{m=1}^{N(\tilde{M}^{(S)}(E))} \delta_{E',E((i_m+k)T_0)} \tag{2.27}$$

kT_0 bezeichnet hier die Integrationszeit, $N(\tilde{M}^{(S)}(E))$ die Anzahl der Elemente in $\tilde{M}^{(S)}(E)$ und die i_m die Stelle des m-ten Elements aus $\tilde{M}^{(S)}(E)$ in den Elementen von $\tilde{\Omega}$. $\delta_{E,E(iT_0)}$ ist das Kronecker - Delta, 1 genau dann, wenn $E(iT_0)$ im Intervall $[E, E+dE)$ liegt.
(2.26) konvergiert tatsächlich für $\overline{N} \to \infty$ gegen (2.22). Hintergrund ist ein Satz aus der Wahrscheinlichkeitstheorie, dem die Monte-Carlo-Methode zugrundeliegt. Er lautet

Satz : $(x_i), i \in N$ sei eine Folge von unabhängigen, gleichverteilten Zufallsvariablen mit Werten in $[a,b]$, $G : [a,b] \to R$ eine beliebige Funktion. Dann konvergiert der Mittelwert $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} G(x_i)$ gegen $\int_a^b G(x)\,dx$.

Bei uns bildet die Energie E' die Folge von Zufallsvariablen, die auf $\tilde{M}^{(S)}(E')$ gleichverteilt ist. Für klein genug gewählte ΔE können wir davon ausgehen, daß die Elemente in $\tilde{M}^{(S)}(E')$ auch unabhängig voneinander sind. Die in (2.26) definierte Übergangswahrscheinlichkeit ist ein Mittelwert und konvergiert nach Satz gegen $\mu\left(S^T(M_E^{(S)}) \cap M_{E'}^{(S)}\right)$, also gegen (2.22). Wir haben demnach eine mathematisch wohlbegründete Vorgehensweise zur Definition der Übergangswahrscheinlichkeit gefunden, falls genügend Daten zur Verfügung stehen.

Damit bleibt zu zeigen, daß die Übergangswahrscheinlichkeit für genügend groß gewählte k nicht mehr von der Integrationszeit kT_0 abhängig ist. Für $k = 100$ bzw. $k = 1000$ haben wir die Übergangswahrscheinlichkeit nach (2.26) bestimmt und in Abb. 2.6.1 bzw. Abb. 2.6.2 dargestellt. Wir sehen deutlich verschiedene Übergangswahrscheinlichkeiten. Für längere Integrationszeiten kT_0 ($k > 1000$) ändert sich $\tilde{w}^{(kT_0)}(E \to E')$ nur noch minimal gegenüber der in Abb. 2.6.2 dargestellten Funktion. Es tritt eine Konvergenz - innerhalb der durch die endliche Anzahl der Daten bedingten Fehlergrenzen - ein. Die für diese Integrationszeiten erhaltenen Übergangswahrscheinlichkeiten $\tilde{w}^{(kT_0)}(E \to E')$ teilen eine bemerkenswerte Eigenschaft. In der Variablen E' besitzen sie ein absolutes Maximum, das unabhängig vom Wert von E immer bei der gleichen Energie E'_{max} liegt (siehe Abb. 2.6.2). E'_{max} fällt sehr genau mit dem in Schritt (2) ermittelten Erwartungswert $\overline{E}$ zusammen.

Übergangswahrscheinlichkeiten mit $k < 1000$ zeigen diese Eigenschaft nicht (siehe Abb. 2.6.1 für das Beispiel $k = 100$). Das Maximum in E' ist eindeutig abhängig von E. Offensichtlich sind bis zu dieser Integrationszeit noch Korrelationen zwischen $E(iT_0)$ und $E((i+k)T_0$ vorhanden, so daß sich die unabhängige Lage des Maximums in E' nicht ausbilden kann. Es ist deshalb kein Zufall, daß wir als ausgezeichnete Integrationszeit $t > T_1 = 1000T_0$ finden. Für Integrationszeiten $t > T_1$ ist also einerseits die Korrelation der Energie des Subsystems zerfallen, andererseits hängt die nach (2.26) definierte Übergangswahrscheinlichkeit nicht mehr bzw. nur noch geringfügig von t ab. Es existiert demnach für die Übergangswahrscheinlichkeit in unserem Modell ein Langzeitlimes, der schon für endliche Integrationszeiten in sehr guter Näherung (dies ist an den minimalen Änderungen von $\tilde{w}^{(kT_0)}(E \to E')$ abzulesen) angenommen wird. Dieses Ergebnis wird für klassische Vielteilchensysteme allgemein gelten, falls eine ausreichend chaotische Dynamik zugrundeliegt.

Wir haben eine integrationszeitunabhängige Übergangswahrscheinlichkeit gewonnen und können damit eine Mastergleichung aufstellen. Zur Lösung der Mastergleichung benötigen wir nur noch eine Anfangsverteilung. Die explizite Wahl der Anfangsverteilung ist von untergeordnetem Interesse, weil wir nach der Verteilung $\lim_{t\to\infty} W(E,t)$ fragen, die nicht von der Wahl der Anfangsverteilung abhängig ist. Wir entscheiden uns für die sehr naheliegende Anfangsverteilung

$$W(E,t) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta E}, & \mathrm{E} \in [E(t=0), E(t=0)+\Delta E) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{2.28}$$

Der Energiemittelwert $\overline{E}$ beginnt bei der Energie, die das Subsystem zur Zeit $t = 0$ hat.
Mit diesen Resultaten haben wir Schritt (3) abgeschlossen. Uns liegt eine aus einer sinnvollen Definition gewonnene Übergangswahrscheinlichkeit vor, die zu einer wohldefinierten Mastergleichung führt. Eine naheliegende Anfangsverteilung liegt uns mit (2.28) ebenfalls vor.

2.4.2 Lösung der Mastergleichung

Mit der Anfangsverteilung (2.28) integrieren wir die Mastergleichung (2.20) als Anfangswertproblem. Um die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Integrationszeit kT_0 zu dokumetieren, haben wir die Mastergleichung für drei verschiedene $\tilde{w}^{(kT_0)}(E \to E')$ ($k = 100$, $k = 1000$ und $k = 3000$) gelöst. Wir gewinnen so für jeden Wert von k einen Mittelwert $\overline{E}^{(k)}$, bestimmt nach

$$\overline{E}^{(k)} = \lim_{t\to\infty} \overline{E}^{(k)}(t) \equiv \lim_{t\to\infty} \int_0^\infty dE\ E\, W^{(k)}(E,t), \tag{2.29}$$

und eine Verteilung

$$\tilde{W}^{(k)}(E) \equiv \lim_{t\to\infty} W^{(k)}(E,t). \tag{2.30}$$

In Abb. 2.7 sind die nach der Gleichung (2.29) berechneten Energiemittelwerte $\overline{E}^{(k)}(t)$ als Funktion der Zeit aufgetragen. Der Wert von k steht an der entsprechenden Kurve. Wir erkennen rasche Konvergenz der $\overline{E}^{(k)}(t)$ für genügend hohe Werte von k ($k = 1000, 3000$) gegen denselben Wert $\overline{E}_0$. Dagegen geht aus Abb. 2.7 nicht hervor, ob $\overline{E}^{(k)}(t)$ für $k = 100$ gegen $\overline{E}_0$ konvergiert, was nach genügend langer Zeit aber geschieht. Für $\overline{E}_0$ lesen wir $\overline{E}_0 \approx 24.72$ ab. $\overline{E}_0$ deckt sich in sehr guter Näherung mit dem in Schritt (2) gefundenen Energiemittelwert $\overline{E} \approx 24.81$.
Wir wollen ebenfalls die Verteilungen $\tilde{W}^{(k)}(E)$ für die großen Werte von k mit der stationären Verteilung aus Abb. 2.5 vergleichen. Bei der Analyse der Lösung $W^{(k)}(E,t)$ als Verteilung von t stellen wir rasche Konvergenz fest. Schon für $t = 500T_0$ - zu der Zeit sind auch die Erwartungswerte konvergiert - verändert sich $W^{(k)}(E,t)$ nicht mehr. Wir können

$\tilde{W}^{(k)}(E) = W^{(k)}(E, t = 500T_0)$ ansetzen. Für den k-Wert $k = 1000$ ist die Verteilung $\tilde{W}^{(1000)}(E)$ in Abb. 2.8 zu erkennen. $\tilde{W}^{(3000)}(E)$ ist praktisch identisch, weshalb wir auf eine graphische Darstellung verzichtet haben.
Ein Vergleich der Abb. 2.5 und 2.8 zeigt uns nahezu gleiche Verteilungen. Die geringfügigen Abweichungen können angesichts der endlichen Zahl der Elemente in Ω auf statistische Fehler zurückgeführt werden.

2.4.3 Fazit

Mit der Identifikation der $\tilde{W}^{(k)}(E)$ aus Abb. 2.8 mit der stationären Verteilung $P(E)$ aus Abb. 2.5 ist ein Hauptziel dieser Arbeit erreicht. Wir haben gezeigt, daß unser klassisches, Hamiltonsches Vielteilchensystem im Langzeitlimes durch eine Mastergleichung beschrieben werden kann. Dieser Satz ist in dem folgenden Sinne zu verstehen. Für Integrationszeiten $t > T_1$ ist die Energie eines Subsystems unseres Modellsystems als Zufallsvariable zu interpretieren, für die sich eine stationäre Verteilung ausbildet. Diese stationäre Verteilung kann als Lösung einer Mastergleichung gewonnen werden. Die zur Integration der Mastergleichung erforderliche Übergangswahrscheinlichkeit kann nach Gleichung (2.26) berechnet werden.
Unser Resultat kann verallgemeinert werden. Für jede andere physikalische Größe in unserem Modell kann seine stationäre Verteilung aus einer Mastergleichung gewonnen werden durch exakt dieselbe Vorgehensweise. Auch die Verallgemeinerung auf beliebige andere klassische, Hamiltonsche Vielteilchensysteme ist möglich. Zur Bestimmung der Mastergleichung für eine gegebene physikalische Größe X sind die folgenden Schritte durchzuführen

(a) Löse die (Hamiltonschen) Bewegungsgleichungen des betrachteten Vielteilchensystems für einen beliebigen Punkt seines Phasenraums als Anfangsbedingung und gewinne aus der Lösung eine Datenmenge Ω.

(b) Bestimme die kritische Integrationszeit T_1 des Systems (Größenordnung genügt). T_1 ist definiert als die Zeit, bis zu der die Korrelation für die Größe X verschwindet, oder als die Zeit, ab der die nach (2.26) definierte Übergangswahrscheinlichkeit $w(X \to X')$ die folgende Eigenschaft aufweist : $w(X \to X')$ weist ein absolutes Maximum in X' unabhängig vom Wert von X aus. T_1 ist eine für das System charakteristische Zeit und existiert, falls die Dynamik im Vielteilchensystem chaotisch ist.

(c) Löse mit Hilfe der Übergangswahrscheinlichkeit (2.26) die Mastergleichung (zu einer beliebig gewählten Anfangsverteilung) und extrahiere die Verteilung $\tilde{W}(E) \equiv \lim_{t\to\infty} W(E,t)$. $\tilde{W}(E)$ ist dann die stationäre Verteilung der physikalischen Größe X.

2.5 Korrelation zwischen den Teilchenkoordinaten

In diesem Abschnitt wollen wir die Korrelation zwischen den Teilchenkoordinaten untersuchen. Motiviert wird die Analyse durch in der Literatur zu findende Annahmen (z.B. [21]) über die stochastischen Eigenschaften der Kräfte $\Gamma_i(t)$ auf ein Vielteilchensystem, die von einem angekoppelten (Wärme-) Reservoir induziert werden. Die wesentliche Annahme ist

$$< \Gamma_i(t)\Gamma_j(t') >= 2\gamma T \delta_{ij} \delta(t-t'), \tag{2.31}$$

wobei T die Temperatur des Wärmereservoirs ist.
Das Ziel unserer Untersuchungen ist eine Antwort auf die Frage, inwieweit die Annahme (2.31) in unserem Modell erfüllt ist. Wir haben unser System aus $n+N$ Teilchen in ein Subsystem mit fester Teilchenzahl n und ein Reservoir bestehend aus den anderen N Teilchen eingeteilt. Die Kräfte der Reservoirteilchen auf die n Teilchen des Subsystems können aus der Zerlegung (2.12) der Hamiltonfunktion abgelesen werden. Bei uns liegen genau zwei Kräfte $\Gamma_1(t)$ und $\Gamma_2(t)$ vor. Sie lauten

$$\begin{aligned} \Gamma_1(t) &= \alpha\, Q_N(t) \\ \Gamma_2(t) &= \alpha\, Q_1(t)\,, \end{aligned} \tag{2.32}$$

wobei $\Gamma_1(t)$ nur auf Teilchen 1 und $\Gamma_2(t)$ nur auf Teilchen n des Subsystems wirkt.
Zur Prüfung von (2.31) ist im wesentlichen die Korrelation zwischen den Teilchenkoordinaten zu ermitteln. Zwei Aspekte werden wir analysieren

1. das zeitliche Verhalten der Korrelation. Welche Breite besitzt der Träger der korrelation $< Q_i(t)\, Q_i(t') >$ um $t = t'$ für $i = 1$ und $i = N$?

2. die gleichzeitige Korrelation $< Q_i(t)\,Q_j(t) >$. Wir werden für die Korrelation zwischen Teilchenkoordinaten mit verschiedenen Indices interessante Ergebnisse erhalten, weshalb wir uns nicht auf die Korrelation $< Q_1(t)\,Q_N(t) >$ beschränken werden.

Konzentrieren wir uns auf das zeitliche Verhalten von $< Q_i(t)\,Q_i(t') >$, das wir mit Hilfe der folgenden Korrelationsfunktion $G_{Q_i}(\tau)$ aus unseren Daten Ω ermitteln

$$G_{Q_i}^{(T)}(\tau) = \frac{1}{T}\int_0^T dt'\,Q_i(t')\,Q_i(t'+\tau). \tag{2.33}$$

$G_{Q_1}^{(T)}(\tau)$ haben wir in Abb. 2.9 gezeichnet. (die Korrelation von Q_N sieht ganz ähnlich aus). Wir erkennen einen raschen Abfall der Korrelation gegen null. Die Zeit bis zum Verschwinden der Korrelation beträgt in etwa so lange wie bei der Korrelation der Energie (vergleiche Abb. 2.3). Dieses Verhalten der Korrelationsfunktion motiviert den Ansatz von Kurchan [21], das Reservoirsignal durch ein "white noise"- Signal zu simulieren.
Die Korrelation bezüglich Teilchenkoordinaten verschiedener Indices werden wir ausführlicher für alle möglichen Indices i, j behandeln. Berechnen werden wir die gleichzeitige Korrelation verschiedener Teilchenkoordinaten mit Hilfe der Formel

$$< Q_i(0)\,Q_j(0) >_T \equiv \frac{1}{T}\int_0^T dt'\;Q_i(t')\,Q_j(t')\,dt'\,. \tag{2.34}$$

und unseren Daten Ω.
Weil wir nur identische Teilchen untersuchen, erwarten wir, daß (2.34) nur von der Differenz $i-j$ der Teilchenindices abhängt. In der Tat zeigen die Matrixelemente $< Q_i(0)\,Q_j(0) >$ dieses Verhalten innerhalb der numerischen Fehlergrenzen. In Abb. 2.10 haben wir $< Q_i(0)\,Q_{i+j}(0) >$ gegen j geplottet. $< Q_i(0)\,Q_{i+j}(0) >$ fällt für wachsende $|j|$ rasch gegen null. Allerdings sind insbesondere die Matrixelemente $< Q_i(0)\,Q_{i+1}(0) >$ bzw. $< Q_i(0)\,Q_{i-1}(0) >$ nicht zu vernachlässigen gegenüber $< Q_i(0)\,Q_i(0) >$. Von delta-korrelierten Koordinaten kann nicht gesprochen werden.
Die auf den ersten Blick überraschend großen Matrixelemente $< Q_i(0)\,Q_{i+1}(0) >$ haben für unser System deutliche Konsequenzen. In Abb. 2.11 ist die Wechselwirkungsenergie $V(\vec{q},\vec{Q})$ (vergleiche (2.12)) als Funktion der Zeit aufgetragen. Klar erkennbar oszilliert $V(\vec{q},\vec{Q})$ nicht

um null, sondern um einen negativen Wert. Bestätigt wird diese Beobachtung in Abb. 2.12, in der der zeitliche Verlauf der Mittelwerte $< V(\vec{q},\vec{Q}) > (t)$, bestimmt nach

$$< V(\vec{q},\vec{Q}) > (t) = \frac{\alpha}{2\tau} \int_{t-\tau}^{t+\tau} \left(q_1(t')\, Q_N(t') + q_n(t')\, Q_1(t') \right)\, dt', \qquad (2.35)$$

dargestellt ist. Wir erhalten wiederum zeitunabhängige Erwartungswerte. Beim Vergleich von (2.35) mit (2.34) fällt sofort die enge Beziehung von $< V(\vec{q},\vec{Q}) >$ mit $< Q_i(0)\, Q_{i+1}(0) >$ auf.
Die Korrelation zwischen den Teilchen benachbarter Indices wird begleitet von einem nichtverschwindenden Mittelwert der Wechselwirkungsenergie. Die Bedeutung der Korrelation und damit des Wechselwirkungsterms für die Dynamik des Systems wollen wir in Abb. 2.13 illustrieren. Wir berechnen dazu die bedingte Wahrscheinlichkeit $W_{i,i+1}(q,q')$, Teilchen i zur Zeit $t = k\,T_0$ am Ort $q_i \in [q, q+dq)$ und Teilchen $i+1$ *zur selben Zeit* am Ort $q_{i+1} \in [q', q'+dq)$ zu finden; als Formel

$$W_{i,i+1}(q,q') \equiv \frac{1}{\overline{N}} \sum_{k=1}^{\overline{N}} \delta_{q_i(t=k\,T_0),q} \delta_{q_{i+1}(t=k\,T_0),q'} \,. \qquad (2.36)$$

Gemäß den Resultaten bei der Korrelation der Teilchen als Funktion der Indices finden wir innerhalb der numerischen Fehlergrenzen keine Abhängigkeit der $W_{i,i+1}(q,q')$ vom Teilchenindex i. In Abb. 2.13 haben wir deshalb der besseren Statistik wegen die Größe

$$W(q,q') = \frac{1}{n+N} \sum_{i=1}^{n+N} W_{i,i+1}(q,q') \qquad (2.37)$$

als Funktion von q und q' aufgetragen. Wir erkennen zwei ausgeprägte Maxima, die sich um die Werte $(q,q') = (0.5,-0.5)$ bzw. $(q,q') = (-0.5,0.5)$ konzentrieren. $W(q,q')$ ist symmetrisch bzgl. der Ebene $E \equiv \{(q,q',z) | q = q'\}$. Im Bereich $(q > 0, q' > 0)$ und $(q < 0, q' < 0)$ finden wir praktisch keine Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Systems.
Wie lassen sich die Eigenschaften der bedingten Wahrscheinlichkeit $W(q,q')$ erklären ? Verantwortlich für die Korrelation zwischen den Koordinaten kann nur das Wechselwirkungspotential $W(\vec{q},\vec{Q})$ sein, das die Dynamik der Koordinate q_i mit der Koordinate q_{i+1} verknüpft. Betrachten wir deshalb in Abb. 2.14 die Höhenlinien des folgenden Hilfspotentials

$$\overline{V}(x,y) = \frac{1}{4} b\, x^4 + \frac{1}{4} b\, y^4 + \alpha x\, y \,. \qquad (2.38)$$

Wir erkennen durch Vergleich mit Abb. 2.13, das sich $W(q,q')$ an den Höhenlinien von $\overline{V}(x,y)$ orientiert. Die Symmetrie der Höhenlinien ist bestimmt durch den Term $\alpha x\, y$, der ebenfalls die Lage der Maxima auf der Geraden $\overline{g} \equiv \{(x,y)|x = -y\}$ festlegt. Der Zusammenhang von $\overline{V}$ mit $W(\vec{q},\vec{Q})$ ist klar.
Wir finden am Beispiel unseres Systems den folgenden Sachverhalt : die Reservoirsignale können in guter Näherung als "white noise"- Signale angenommen werden. Γ_1, Γ_2 sind in unserem System aber nur deshalb delta-korreliert, weil die Indices der Teilchenkoordinaten, auf die sie sich beziehen, weit genug auseinander liegen ($N-1 = 699$). Für realistische Wechselwirkungen, die Kräfte zwischen jedem Teilchen i und jedem anderen Teilchen j erlauben, sind die Kräfte der Reservoirteilchen auf die Teilchen des Subsystems i.a. nicht delta-korreliert. Nur wenn die Wechselwirkung schwach ist, ist die Annahme delta-korrelierter Kräfte gerechtfertigt.

2.6 Temperatur- und Entropiebestimmung

Wir werden in diesem Abschnitt unserem System eine Temperatur und eine Entropie zuordnen. Die Möglichkeit dazu ergibt sich aus der Tatsache, daß es sich bei der stationären Energieverteilung aus Abb. 2.5 bzw. 2.8 - wie wir im Anschluß zeigen werden - um die Energieverteilung eines thermischen Gleichgewichtszustands handelt. Auf diesen Gleichgewichtszustand können wir die klassische Definition der Entropie oder thermodynamischer Potentiale wie der inneren Energie etc. anwenden.
Betrachten wir die stationäre Verteilung aus Abb. 2.5 bzw. 2.8 genauer. Welche physikalische Verteilung liegt zugrunde ? Die Vermutung. daß es sich um die Verteilung eines thermischen Gleichgewichtszustands handelt, liegt nahe. Untersucht wird ein klassisches Vielteilchensystem (wir meinen jetzt das Subsystem aus n Teilchen) in Kontakt mit einem (Wärme-) Reservoir ; Wärmereservoir deshalb, weil Energie-, aber kein Teilchenaustausch stattfindet. Könnten wir numerische Simulationen für Hamiltonsche Systeme mit Teilchenzahlen n, N durchführen, für die Subsystem und Reservoir als makroskopisch angesehen werden können, so erwarten wir, daß die Energieverteilung im Subsystem aus einer Boltzmannverteilung abgeleitet werden kann. Die Boltzmannverteilung ist ein Charakteristikum für einen thermischen Gleichgewichtszustand eines Sy-

stems in Kontakt mit einem Wärmereservoir.
Für uns stellt sich die Frage, ob sich für unser Subsystem mit der geringen Teilchenzahl $n = 300$ (gering im Vergleich zu makroskopischen Systemen) bereits ein thermischer Gleichgewichtszustand eingestellt hat. Dazu müssen wir zeigen, daß die gewonnene stationäre Verteilung aus Abb. 2.5 aus einer Boltzmannverteilung für ein $n = 300$ Teilchensystem konstruiert werden kann. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\vec{q},\vec{p})$ eines sich im thermischen Gleichgewicht (Temperatur T) befindenden n Teilchensystems ist

$$P(\vec{q},\vec{p}) = \frac{1}{Z}e^{-\beta h_0(\vec{q},\vec{p})}, \tag{2.39}$$

wobei h_0 die Hamiltonfunktion des Systems ist. In unserer Ableitung werden wir für unser Subsystem die Hamiltonfunktion h_0 aus (2.14) verwenden.
Uns interessiert die Energieverteilung $P(E)$ des Systems, die wir aus (2.39) mit Hilfe der folgenden Beziehung ableiten wollen

$$P(E) = \int_{C(E)} \prod_{i=1}^{n} dq_i\, dp_i\; P(\vec{q},\vec{p}). \tag{2.40}$$

Es bedeutet $C(E)$ die Mannigfaltigkeit im Phasenraum, die alle Elemente $(\vec{q},\vec{p})$ mit $h_0(\vec{q},\vec{p}) = E$ umfaßt. Es folgt

$$P(E) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E} \int_{C(E)} \prod_{i=1}^{n} dq_i\, dp_i = vol(C(E))\, P(\vec{q},\vec{p})|_{h_0=E}, \tag{2.41}$$

zu bestimmen ist die Oberfläche der Mannigfaltigkeit $C(E)$. Für sie finden wir bezüglich unseres Systems die folgende Proportionalität zur Energie E

$$\int_{C(E)} \prod_{i=1}^{n} dq_i\, dp_i \sim E^{n\gamma}, \qquad \gamma = \frac{3}{4} \tag{2.42}$$

Die Verifizierung von (2.42) wird durch die Tatsache erleichtert, daß h_0 ein wechselwirkungsfreies System beschreibt : $h_0(\vec{q},\vec{p}) = \sum_i h(q_i,p_i)$. Für die Energieverteilung erhalten wir damit

$$P(E) = \frac{1}{\bar{Z}}E^{n\gamma}\, e^{-\beta E}. \tag{2.43}$$

Verteilung (2.43) wollen wir mit der Verteilung aus Abb. 2.5 vergleichen. Bei uns ist $n = 300$. β bestimmen wir so, daß das Maximum der Verteilung genau mit dem Maximum der Verteilung aus Abb. 2.5 zusammenfällt. (2.43) für die angegebenen Werte von n und γ und den

Wert $\beta = 9.04$ ist in Abb. 2.15 zu sehen. Wir stellen beim Vergleich mit Abb. 2.5 überraschende Übereinstimmung fest. Wir müssen bedenken, daß unser System nur aus $n = 300$ Teilchen besteht ! Trotzdem ist seine Energieverteilung praktisch die eines thermischen Systems.
Aufgrund dieser Übereinstimmung kann dem Parameter β wirklich die Bedeutung einer inversen Temperatur zuerkannt werden. In Abb. 2.15 ist $\beta = 9.04$ gesetzt. Die Zahlenangabe bezieht sich auf atomic units, die Temperatur zu diesem β- Wert beträgt etwa $T \approx 4 \cdot 10^4\,K$.
Nach der Festlegung der Temperatur für das System wollen wir dem Subsystem an Hand seiner Energieverteilung seine Entropie und seine innere Energie zuweisen. Weil sich die stationäre Verteilung der Energie des Subsystems als die eines thermischen Gleichgewichtszustands erweist, werden wir die aus der klassischen Thermodynamik bekannten Definitionen für die Entropie und die innere Energie übernehmen, um mit ihrer Hilfe dem Subsystem Werte für die genannten Größen ausrechnen zu können.
Zu einer gegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung $W(\vec{q},\vec{p})$, definiert auf dem Phasenraum eines klassischen Systems, ist die Entropie definiert durch

$$S = -k \int \prod_{i=1}^{n} dq_i\, dp_i\; W(\vec{q},\vec{p})\, lnW(\vec{q},\vec{p}). \tag{2.44}$$

Wir haben für unser Subsystem nur eine Energieverteilung $P(E)$ gegeben, so daß wir die Entropie aus (2.44) durch $P(E)$ darzustellen haben. Dazu nutzen wir die gerade gezeigte Tatsache, daß sich die stationäre Energieverteilung unseres Subsystems aus einer Boltzmannverteilung $P(\vec{q},\vec{p})$ ableiten läßt. Den Zusammenhang zwischen $P(E)$ und $P(\vec{q},\vec{p})$ weist Gleichung (2.41) aus. Mit Hilfe von (2.41) formen wir (2.44) um zu

$$S = -k \int_0^\infty d\,E\;\; P(E)\, ln\left(\frac{P(E)}{vol(C(E))}\right). \tag{2.45}$$

Die Bestimmung der Entropie für unser Subsystem ist mit (2.45) numerisch durchführbar.
Die innere Energie U ist aus der Thermodynamik durch

$$U = \int \prod_{i=1}^{n} dq_i\, dp_i\;\; h_0(\vec{q},\vec{p})\, P(\vec{q},\vec{p}) \tag{2.46}$$

gegeben. Mit Hilfe von (2.41) gewinnen wir die einfache Gleichung

$$U = \int_0^\infty d\,E\;\; E\, P(E) = \overline{E} \tag{2.47}$$

Wir wollen an dieser Stelle nicht die nach (2.45) und (2.47) bestimmten Werte für S und U für unser Subsystem angeben, die für sich genommen wenig Information erbringen, sondern ihren funktionalen Zusammenhang mit den "makroskopischen" Variablen berechnen und diskutieren. Nach der klassischen Thermodynamik hängt die Entropie von der inneren Energie U, der Teilchenzahl n sowie dem Volumen V ab. Für unser eindimensionales System gibt es kein Volumen, dagegen wird die Größe der Oszillationen der Teilchen durch den Fallenparameter b gesteuert. Also ist

$$S = S(U, n, b) = S_b(U, n). \tag{2.48}$$

Abb. 2.16 zeigt S als Funktion der Teilchenzahl n (b konstant, U die innere Energie der n Teilchen). Zur Bestimmung der Entropie werden die Daten Ω genutzt, das Subsystem wird durch Festlegung von n definiert. Die stationäre Verteilung der Energie des Subsystems wird nach den in Abschnitt 2.2 vorgestellten Methoden berechnet und die Entropie schließlich über (2.45) berechnet. Abb. 2.16 zeigt uns einen linearen Anstieg der Entropie. In Abb. 2.17 erkennen wir ebenfalls einen linearen Anstieg der inneren Energie U mit der Teilchenzahl.
Der lineare Anstieg der inneren Energie mit der Teilchenzahl ist nicht überraschend. Alle Teilchen im Potential sind gleichberechtigt, so daß die Erwartungswerte physikalischer Observablen, wie bei der Korrelation oder der Teilchenwechselwirkungsenergie festgestellt, nicht vom Teilchenindex abhängen. Die Energie verteilt sich gleichmäßig (natürlich nur im zeitlichen Mittel) auf alle Teilchen, was wir in dem linearen Anstieg der inneren Energie wiederfinden.
Das die Entropie ebenfalls linear ansteigt, hängt mit der aus der klassischen Thermodynamik bekannten Eigenschaft der Homogenität der Entropie vom Grad 1 zusammen [24]. Deswegen erfüllt unsere Entropie die Gleichung

$$S_b(U, n) = n\, S_b(\frac{U}{n}, 1). \tag{2.49}$$

Weil die innere Energie U, wie in Abb. 2.17 gesehen, proportional zu n steigt, muß auch die Entropie proportional mit n anwachsen.
Einen interessanteren Zusammenhang finden wir zwischen der Entropie S und dem Parameter b. In Abb. 2.18 ist die Entropie für einige Werte von b (Teilchenzahl konstant : $n = 300$) zu sehen. Wir erkennen einen Abfall der Entropie, der sich für wachsende b deutlich abschwächt. Abb.

2.19 zeigt die dazugehörige innere Energie U, die qualitativ dieselbe Eigenschaft als Funktion von b hat. Der Abfall der inneren Energie ist nach den Postulaten der Thermodynamik zu erwarten, wenn man Abb. 2.18 zur Kenntnis genommen hat. Ein Postulat besagt nämlich $\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{T} > 0$, d.h. ein Anstieg (Abfall) der inneren Energie wird begleitet von einem Anstieg (Abfall) der Entropie und umgekehrt. Die beiden Abbildungen sind deshalb konsistent und es genügt, für die innere Energie U den Zusammenhang mit b zu verstehen.
Analysieren wir dazu den Hamiltonian (2.13). Für diese Gleichung bilden wir für beide Seiten den zeitlichen Mittelwert. Auf der linken Seite steht mit der Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße, unter Mittelwertbildung bleibt sie invariant. Der zeitliche Mittelwert von $< h_0 >$ ist U, von $< H_0 > \frac{N}{n} U$. Es bleibt der zeitliche Mittelwert der Wechselwirkungsenergie $< W >$, der einen negativen, nichtverschwindenden Wert annimmt. Dieser Wert kann mit Hilfe des Mittelwerts aus Abb. 2.12 für $V(\vec{q}, \vec{Q})$ und unter Berücksichtigung der Resultate zu Abb. 2.13 ($W_{i,i+1}(q, q')$ aus (2.36) ist unabhängig von i) auf $< W >= \frac{n+N}{2} < V >$ extrapoliert werden, was sehr gut mit dem numerischen Wert übereinstimmt und die Größenordnung von U erreicht. Tatsächlich ist dieser Term ausschlaggebend für das Verhalten von U bei Variation von b. Während wir die Gesamtenergie konstant gehalten haben, führt eine Verminderung von b zu größeren Teilchenoszillationen und deshalb zu höheren Beträgen von $< W >$. Wegen des negativen Vorzeichens von $< W >$ muß U ansteigen, um die Gesamtenergie konstant zu lassen.
Die Ursache für diesen Zusammenhang zwischen U und b ist in dem Ansatz des Wechselwirkungspotentials zu suchen : je größer der Teilchenabstand, umso größer wird der Betrag der Energie, die sich in $< W >$ speichert. Realistische Wechselwirkungspotentiale zeigen die entgegengesetzte Eigenschaft. Größere Abstände bedeuten kleinere Wechselwirkungsenergien. Für solche Potentiale werden wir natürlich mit fallendem b auch fallende innere Energie U messen.

2.6.1 Phasenübergänge ?

Eine weitere interessante Frage ist, ob sich in unserem Modell (und mit so geringer Teilchenzahl) Phasenübergänge realisieren lassen. Wir untersuchen das folgende Szenario. Indem wir dem Parameter a einen negativen Wert (bisher $a = 0$) zuweisen, entsteht ein Einteilchenpotential

$V_1 \equiv \frac{1}{4}b\,x^4+\frac{1}{2}a\,x^2$ (vergleiche (2.10)) mit zwei Minima, die durch ein lokales Maximum bei $x=0$ voneinander getrennt sind. In der Umgebung von $x=0$ liegt ein Potentialwall vor, dessen Höhe wir mit Hilfe des Parameters a regeln können. Wir wählen die Anfangsbedingungen der Teilchen so, daß sie sich zur Zeit $t=0$ alle im Bereich $x<0$ aufhalten. Wenn wir den Betrag von a immer weiter erhöhen (und damit den Potentialwall verstärken), wird es den Teilchen ab einem bestimmten Wert a_{krit} nicht mehr möglich sein, in den Bereich $x>0$ vorzustoßen. Parameterwerte $a \leq a_{krit}$ sind für uns von besonderem Interesse, weil sich die Dynamik des Vielteilchensystems für diese a besonders stark ändert. Wird durch die Variation des Parameters a (der damit der Ordnungsparameter ist) ein Phasenübergang induziert ?
Rekapitulieren wir, durch welche für uns leicht zu bestimmenden Eigenschaften sich ein Phasenübergang auszeichnet. Mit Blick auf die physikalischen Größen sind zuerst die stärkeren Schwankungen zu nennen. Bestimmte thermodynamische Koeffizienten wie die spezifische Wärmekapazität C divergieren als Folge dieser Schwankungen im Bereich des Phasenübergangs. Zwischen der Varianz $(\Delta U)^2$ der Energieverteilung eines kanonischen Ensembles und der spezifischen Wärmekapazität C gilt der folgende Zusammenhang

$$(\Delta U)^2 = k\,T^2\,C\,. \tag{2.50}$$

Ein divergenter Wert für C führt offensichtlich zu unendlich großen Energieschwankungen. Indem wir für einen Parameterwert a im Bereich von a_{krit} die dynamischen Gleichungen (2.15) lösen, seine stationäre Energieverteilung nach Relation (2.19) bestimmen und mit der aus Abb. 2.5 vergleichen, können wir ein eventuelles Anwachsen der Schwankungen feststellen.
Ein weiteres Indiz für einen Phasenübergang ist ein Anstieg der Korrelationslänge zwischen den Teilchenobservablen verschiedener Indices. Als Beispiel sei hier das Ising - Modell genannt, für das die Korrelationslänge im Bereich des Phasenübergangs divergiert. Wir werden zu diesem Punkt die gleichzeitige Korrelation (2.34) zwischen den Teilchenkoordinaten berechnen, $< Q_i(0)\,Q_j(0) >$ dann gegen $i-j$ auftragen und durch Vergleich mit Abb. 2.10 feststellen, ob die Korrelationslänge angestiegen ist.
Beschreiben wir nun unsere Rechnungen und ihre Resultate. Für die be-

schriebene Anfangsteilchenkonfiguration haben wir das Anfangswertproblem (2.15) gelöst. Der Parameter a ist so gewählt, daß etwa 20 Teilchen genügend hohe Anfangsenergie haben, den Potentialwall zu überwinden (bei Nichtberücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen).
In Abb. 2.20 haben wir die Energieverteilung von $n = 300$ Teilchen (bestimmt nach (2.19)) aufgetragen. Der Vergleich mit Abb. 2.5 zeigt einen deutlichen Anstieg der Energieschwankungen, denn die Schärfe der Konzentration der Verteilung um den Energieerwartungswert hat eindeutig abgenommen, oder anders ausgedrückt, die Varianz der Energieverteilung aus Abb. 2.20 ist deutlich höher. Der Anstieg der Varianz könnte ein Indiz für einen Phasenübergang sein.
Um zu zeigen, daß das Phänomen "starke Schwankungen in den physikalischen Größen" nicht auf die Energie beschränkt bleibt, haben wir die Teilchenzahl im Bereich $x > 0$ berechnet. Abb.2.21 zeigt sie als Funktion der Zeit, Abb. 2.22 die dazugehörigen zeitlichen Mittelwerte für exakt dieselbe Mittelungsdauer wie für die Energiemittelwerte aus Abb. 2.4.4 (für das System aus Abb. 2.4.4 ist die Mittelungsdauer ausreichend, um konstante Teilchenzahlmittelwerte für den Bereich $x > 0$ zu erreichen). Wir erkennen, daß die Fluktuationen so stark sind, daß die Mittelwerte nicht mehr zeitunabhängig sind. Das Phänomen der Zunahme der Schwankungen ist in allen physikalischen Größen feststellbar.
In Abb. 2.23 haben wir die Korrelation $< Q_i(0)\, Q_j(0) >$, berechnet nach (2.34), gegen $i - j$ auftragen. Im Vergleich zu Abb. 2.10 erkennen wir einen deutlichen Anstieg der Korrelation, die sich nicht nur über den nächsten Nachbarn, sondern über bis zu $|j| \approx 10$ Teilchen erstreckt. Auch das Verhalten der Korrelationslänge können wir als Indiz für einen Phasenübergang anführen.
Insgesamt konstatieren wir, daß unser System bei Variation des Parameters a seine Eigenschaften deutlich verändert. Die Art der Änderung (größere Schwankungen, Anstieg der Korrelationslänge) trägt Anzeichen eines Phasenübergangs. Angesichts der kleinen Teilchenzahl in unserem System kann allerdings kaum von einem Phasenübergang gesprochen werden, denn dafür sind die gemessenen Anstiege noch zu klein. bei Erhöhung der Teilchenzahl um einige Größenordnungen ist die Möglichkeit eines Phasenübergangs in unserem Modell durchaus vorhanden. Der Anstieg in den Schwankungen der physikalischen Größen und der Korrelationslänge sind jedenfalls als Indizien dafür zu werten.

Kapitel 3

Klassich quantenmechanische Systeme

Ziel dieses Kapitels ist es, zu den in Kapitel 2 vorgestellten Simulationen analoge Rechnungen für quantenmechanische Systeme durchzuführen und zu diskutieren. Mit Blick auf die für klassische Vielteilchensysteme erzielten Resultate stellt sich die Frage nach der Existenz stationärer Verteilungen sowie, bei Existenz, einer möglichen Interpretation der Verteilung als thermischen Gleichgewichtszustand.
Ein wichtiges dabei auftretendes Problem ist die Festlegung der Zufallsvariablen. Für die klassischen Vielteilchensysteme ist die Festlegung der Zufallsvariablen aufgrund ihrer chaotischen Dynamik möglich gewesen. Die Dynamik rein quantenmechanischer Systeme wird durch die zeitabhängige Schrödingergleichung beschrieben, die wegen ihrer Linearität keine chaotischen Phänomene zeigt ([2], zur Literatur über "Quantenchaos" sei sei auf [1], [2] und die darin enthaltenen Referenzen verwiesen). Das Fehlen chaotischer Dynamik nimmt uns die Möglichkeit, beispielsweise die Wellenfunktion als "Zufallsfunktion" zu interpretieren.
Geeignetere Systeme für unsere Fragestellungen erscheinen uns deshalb klassisch quantenmechanische Systeme. Unter klassisch quantenmechanischen Systemen wollen wir Systeme verstehen, die aus zwei miteinander gekoppelten Subsystemen bestehen, deren eines Subsystem quantenmechanisch zu behandeln ist, während das andere Subsystem klassisch beschrieben werden kann. Über das klassische Subsystem können wir chaotische Dynamik in dem Gesamtsystem erzeugen. Gespeicherte Erwartungswerte der Observablen des Quantensystems können dann aus den in Kapitel 2 dargelegten Argumenten als Zufallsvariable angesehen werden.
In Abschnitt 3.1 werden wir klassisch quantenmechanische Systeme vor-

stellen und ihre Bewegungsgleichungen diskutieren. Unser Interesse gilt dem quantenmechanischen Subsystem. Aus den Bewegungsgleichungen lesen wir ab, daß die Koordinaten des klassischen Subsystems als zeitabhängige Ordnungsparameter in die Schrödingergleichung des Quantensystems eingehen.

Der entscheidende Punkt für uns ist jetzt, daß die zeitliche Evolution des Ordnungsparameters chaotische Eigenschaften besitzt. Ein sinnvoller Ansatz für die Realisierung chaotischer Eigenschaften des Ordnungsparameters ist die Substitution des klassischen Subsystems durch das Reservoir des Modells aus Kapitel 2. In diesem Fall ist der Ordnungsparameter definiert durch zwei Teilchenkoordinaten Q_1 und Q_N, die die Kopplung zu dem anderen Subsystem herstellen.

In dem in Abschnitt 3.2 untersuchten Modell haben wir eine einfachere Wahl getroffen. Das klassische Subsystem ist ein Teilchen in einem Kasten, das einem periodischen Antrieb ausgesetzt ist. Der periodische Antrieb ist so stark, daß ein Poincaré - Schnitt der klassischen Trajektorie des Teilchens ausgedehnte stochastische Zonen ausweist. Die Anfangswerte des Teilchens sind so gewählt, daß seine Trajektorie in einer stochastischen Zone von großem Ausmaß verläuft. Durch diese Wahl der Anfangswerte liegt im klassischen Subsystem chaotische Dynamik vor. Auf den Ordnungsparameter, in unseren Modellen gegeben durch die Ortskoordinate des Teilchens, überträgt sich die chaotische Dynamik und erlaubt die Interpretation der Wellenfunktion des Quantensystems als Zufallsvariable.

Für das Quantensystem betrachten wir ebenfalls ein Teilchen im Kasten. Seine Wellenfunktion entwickeln wir nach den Eigenfunktionen (des Hamiltonians) des ungestörten Teilchens im Kasten. Die Entwicklungskoeffizienten bzw. ihr Betragsquadrat werden wir dann als Zufallsvariable interpretieren. Wir werden finden, daß sich für diese Zufallsvariablen eine stationäre Verteilung ausbildet. Ihre mathematischen Eigenschaften sind identisch mit denen eines speziellen statistischen Operators.

Die Eigenschaften der stationären Verteilung legen nahe - um zu einer sinnvollen physikalischen Interpretation zu kommen -, das Quantensystem durch (quantenmechanische) Vielteilchensysteme zu realisieren. In Abschnitt 3.3 entwickeln wir deshalb ein Modell eines quantenmechanischen Vielteilchensystems in zweiter Quantisierung. Wir definieren zu dem Modellsystem Interferenzfunktionen, mit deren Hilfe wir nachweisen wollen, daß die stationäre Verteilung des Systems wirklich einem Makrozustand eines Vielteilchensystems entspricht.

3.1 Klassisch quantenmechanische Systeme

In diesem Abschnitt stellen wir klassisch quantenmechanische Systeme vor. Klassisch quantenmechanische Systeme bestehen aus einem klassischen Subsystem und einem Quantensystem, deren Freiheitsgrade miteinander gekoppelt sind. Das Quantensystem wird durch eine Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ beschrieben, das klassische Subsystem durch den Satz seiner Phasenraumvariablen (x',p'). Die von uns diskutierten Systeme werden von dem folgenden Hamiltonian erfaßt

$$H = H_{q.m.}(\hat{p},\hat{x}) + H_{klass}(p',x') + V(\hat{x},x')\,. \tag{3.1}$$

Aus (3.1) können die Bewegungsgleichungen zum Beispiel durch Kombination von Ehrenfest- und Feynman-Hellmann-Theorem abgeleitet werden (eine alternative, aufwendigere Ableitung kann mit Hilfe der Wigner-Verteilung von Operatoren durchgeführt werden, siehe dazu [4]). Sie lauten

$$\begin{aligned}
\frac{dp'}{dt} &= -\frac{\partial H_{klass}}{\partial x'} - \int dx\,\Psi^*(x,x',t)\frac{\partial V(x,x')}{\partial x'}\Psi(x,x',t) \\
\frac{dx'}{dt} &= \frac{\partial H_{klass}}{\partial p'} \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,x',t) &= \left(H_{q.m.}(\hat{p},\hat{x}) + H_{klass} + V(\hat{x},x')\right)\Psi(x,x',t)\,. \qquad (3.2)
\end{aligned}$$

(3.2) sind als die dynamischen Gleichungen eines Anfangswertproblems zu betrachten. Die Anfangswerte werden durch die Angabe eines Phasenraumpunktes (Anfangswerte des klassischen Subsystems) und einer Wellenfunktion (Anfangswert des quantenmechanischen Subsystems) festgelegt.
Unser Interesse gilt dem Quantensystem. Diskutieren wir zunächst einmal, wie die Dynamik des klassischen Subsystems die des Quantensystems beeinflußt. Dazu betrachten wir die Schrödingergleichung aus (3.2). Bei dem von uns gemachten Ansatz (3.1) für den Hamiltonian gehen nur die Ortskoordinaten des klassischen Subsystems in die Schrödingergleichung ein, und zwar als zeitabhängige (Ordnungs-) parameter.

Schrödingergleichungen dieser Art sind bekannt für Quantensysteme, die einem äußeren Feld ausgesetzt sind. Der Ansatz 'Teilchen im äußeren Feld' findet in der Literatur zur Beschreibung der verschiedensten physikalischen Systeme Verwendung [12] [7] [5] [6]. Die zentrale Erweiterung des Ansatzes des klassisch quantenmechanischen Systems ist die Möglichkeit, die Auswirkungen der Dynamik des Quantensystems auf eine klassische, externe Quelle verfolgen zu können.
Die klassischen Ortskoordinaten sind in der Schrödingergleichung des Quantensystems als zeitabhängige Ordnungsparameter aufzufassen. Bezüglich (zeitabhängigen) Ordnungsparametern erweist sich die Dynamik des Quantensystems als hochsensibel (siehe [12] [13] als Beispiele für nichtadiabatische Übergänge induziert durch zeitabhängige Parameter). In unseren Modellen wird die Zeitabhängigkeit des Ordnungsparameters chaotische Eigenschaften haben, wir sprechen auch von chaotischen Ordnungsparametern, so daß dieser Ordnungsparameter im Langzeitlimes wieder als Zufallsvariable angesehen werden kann. Aufgrund der Empfindlichkeit der Dynamik des Quantensystems gegenüber Variationen des Ordnungsparameters ist dann auch die Wellenfunktion als Zufallsfunktion aufzufassen. Jeder aus ihr ermittelte Erwartungswert (zu jeder denkbaren Observable) kann deshalb als Zufallsvariable interpretiert werden.

3.2 Einteilchenquantensysteme

Gegenstand dieses Abschnitts sind klassisch quantenmechanische Systeme, deren Quantensystem von einem Teilchen in einem Potential gebildet wird. Als Modellsystem wählen wir das Teilchen im Kasten, definiert durch den Hamiltonian

$$\hat{H}_{q.m.}(\hat{p},\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq 1 \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}. \tag{3.3}$$

Das Spektrum von $\hat{H}_{q.m.}(\hat{p},\hat{x})$ ist rein diskret, die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ können wir nach den Eigenfunktionen von $\hat{H}_{q.m.}$ entwickeln,

$$\Psi(x,t) = \sum c_\mu(t)\phi_\mu(x). \tag{3.4}$$

Die Entwicklungskoeffizienten $c_\mu(t)$ bzw. ihr Betragsquadrat $|c_\mu(t)|^2$ werden wir als die Zufallsvariablen des Quantensystems interpretieren.

Der Grund, mit Einteilchen- anstelle von Vielteilchensystemen zu beginnen, liegt in der wegen der kleinen Anzahl an Freiheitsgraden geringeren Komplexität des zugrundeliegenden Hilbertraums, ohne daß deswegen zu befürchten ist, daß die Antwort auf die Frage nach der Existenz einer stationären Verteilung für sie eine andere ist. Denn die Struktur der Schrödingergleichung ist unabhängig davon, ob ein Einteilchen- oder ein Vielteilchensystem untersucht wird, es ändern sich "nur" die Zustände des Hilbertraums. Eine stationäre Verteilung der Amplitudenquadrate $|c_\mu(t)|^2$, falls sie existiert, werden wir deshalb auch für ein Einteilchensystem finden, und sie wird dieselben mathematischen Eigenschaften wie die eines Vielteilchensystems haben.
Das klassische Subsystem werden wir im gesamten Kapitel, wie schon erwähnt, durch ein Teilchen in einem Kasten realisieren, das einem äußeren, periodischem Antrieb ausgesetzt ist. Seine Hamiltonfunktion ist

$$H_{klass}(p', x') = \frac{p'^2}{2m} + W(x') + \lambda x' \sin(\omega t), \quad W(x') = \begin{cases} 0, & -0.5 \leq x' \leq 0.5 \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} . \tag{3.5}$$

Der Antrieb ist so stark gewählt, daß sich im Poincaré - Schnitt (siehe Abb. 3.1) neben regulären Trajektorien stochastische Zonen beträchtlicher Ausdehnung zeigen (zur Literatur periodisch getriebener klassischer Systeme sei auf [3] verwiesen). Die genauen Parameter können den Figure Captions zu Abb. 3.1 entnommen werden. In unseren Simulationen werden wir die Anfangswerte des klassischen Subsystems so wählen, daß sie innerhalb einer stochastischen Zone liegen. In Abb. 3.2 ist die Korrelationsfunktion

$$G(\tau) = \lim_{T\to\infty} \int_0^T dt \xi(t)\, \xi(t+\tau). \tag{3.6}$$

bzgl. der Trajektorie gezeichnet, die sich aufgrund der Wahl unserer Anfangswerte ergibt. Wir erkennen einen raschen Abfall der Korrelation auf null, die nach etwa 100 Perioden des äußeren Feldes erreicht wird (von jetzt an bezeichnet T_0 die Periode des Antriebs). Nach den Ergebnissen aus Kapitel 2 können wir deshalb die Ortskoordinate des klassischen Systems nach einigen hundert Perioden des äußeren Feldes als Zufallsvariable ansehen. Dieser Punkt ist für die Interpretation der $|c_\mu(t)|^2$ von entscheidender Bedeutung.
Stellen wir nun unser Modell und die daran durchgeführten Rechnungen vor. Wir bestimmen die Lösung des Anfangswertproblems (3.2), wobei das Quantensystem durch (3.3), das klassische Subsystem durch (3.5)

und das Kopplungspotential $V(\hat{x}, x')$ durch

$$V(\hat{x}, x') = \alpha \hat{x}\, x' \tag{3.7}$$

angesetzt ist (es sei erwähnt, daß sowohl x als auch x' nur auf einem endlichen Intervall, siehe (3.3) und (3.5), definiert sind). Den (unendlich dimensionalen) Hilbertraum des Teilchens im Kasten haben wir auf die 100 Eigenzustände von $H_{q.m.}$ mit der niedrigsten Energie trunkiert. Bezüglich dieser Basis wird die Schrödingergleichung gelöst, die in 100 gekoppelte, gewöhnliche Differentialgleichungen zerfällt. Die Anfangswerte unserer Simulationen sind die folgenden. Das Quantensystem befindet sich zu Beginn ($t = 0$) in seinem Grundzustand, die Anfangswerte des klassischen Subsystems sind diegleichen wie die der Trajektorie, die wir zu Abb. 3.2 berechnet haben. Das durch diese Festlegungen wohldefinierte Anfangswertproblem haben wir bis zu einer Integrationszeit von $T = 5 \cdot 10^5 T_0$ gelöst und nach jeder Periode die Betragsquadrate $|c_\mu(t)|^2$ für alle 100 Zustände abgespeichert.
Die Verteilung der $|c_\mu(t)|^2$ haben wir auf eine gegenüber den Energieverteilungen aus Kapitel 2 modifizierte Weise bestimmt. Interessant ist für uns nicht, wie sich die Werte einer Besetzungswahrscheinlichkeit $|c_\mu(t)|^2$ für ein ausgesuchtes μ verteilen, sondern wie sich die Wellenfunktion des Quantensystems, aufgefaßt als Zufallsfunktion, auf die verschiedenen Eigenfunktionen von $H_{q.m.}$ verteilt. Wir bestimmen deshalb die zeitlichen Mittelwerte der $|c_\mu(t)|^2$,

$$< |c_\mu|^2 >_\tau (t) = \frac{1}{2\tau} \int_{t-\tau}^{t+\tau} |c_\mu(t)|^2 \, dt, \tag{3.8}$$

und untersuchen die Verteilung der $p_\mu^{(\tau)}(t) \equiv < |c_\mu|^2 >_{(\tau)} (t)$ auf Stationärität. Die $p_\mu^{(\tau)}(t)$ sind selbst zu jeder Zeit t Elemente einer Wahrscheinlichkeitsverteilung (denn $\sum_\mu p_\mu^{(\tau)}(t) = 1, p_\mu^{(\tau)}(t) \geq 0$), wie man leicht zeigen kann.
In den Abb. 3.3 haben wir die gemittelten Besetzungszahlen $< |c_\mu|^2 > (t)$ für verschiedene Zeiten t aufgetragen. Die Zeiten t sind jeweils rechts oben in jedes Bild geschrieben. Wir erkennen, daß sich mit wachsender Zeit eine Gleichverteilung herauskristallisiert. Mittelungen nach noch größeren Integrationszeiten verändern die Verteilung nicht mehr. Es existiert also eine stationäre Verteilung für die $< |c_\mu|^2 > (t)$.
Ist die Eigenbasis von $H_{q.m.}$ eine besondere Basis, weil sich die Wellenfunktion auf seinen Eigenfunktionen gleichverteilt ? Sei mit $|\tilde{\phi}_\mu >$ eine

andere Basis des Hilbertraums gegeben, nach der die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ die Entwicklung

$$\Psi(x,t) = \sum_{i=1}^{N} \tilde{c}_\mu(t)\tilde{\phi}_\mu(x) \tag{3.9}$$

hat. Wie sieht die Verteilung der $|\tilde{c}_\mu(t)|^2$ bzw. $< |\tilde{c}_\mu|^2 >_\tau (t)$ aus ?
Wir haben die Schrödingergleichung in der Basis des Operators $\hat{x}$ gelöst ($\hat{x}$ ist ein auf den Definitionsbereich des Kastens (3.3) beschränkter Operator). $\hat{x}$ kommutiert nicht mit $H_{q.m.}$, so daß eine andere Basis vorliegt. Die Integration der Schrödingergleichung (dieselben Anfangsbedingungen wie oben) und die Bildung der gemittelten Besetzungswahrscheinlichkeiten $< |\tilde{c}_\mu|^2 >_\tau (t)$ führt uns nach etwa derselben Zeit wieder auf eine Gleichverteilung !
Aus diesen Resultaten zeichnet sich ein überraschender Sachverhalt ab. Bezüglich der Besetzungswahrscheinlichkeiten $< |c_\mu|^2 >_\tau (t)$ stellt sich eine stationäre Verteilung ein. Diese ist eine Gleichverteilung, unabhängig davon, bezüglich welcher Hilbertraumbasis die Entwicklungskoeffizienten bestimmt werden. Weitere numerische Simulationen zeigen : die sich einstellende stationäre Verteilung ist unabhängig von den Anfangsbedingungen sowohl des Quantensystems als auch des klassischen Subsystems, solange die Dynamik dort chaotisch bleibt.
Zur Diskussion des Ergebnisses wollen wir es mit Verteilungen vergleichen, die entstehen, wenn wir den Ordnungsparameter $x'(t)$ einmal durch ein "white noise"- Signal, einmal durch ein periodisches Signal substituieren. Um die verschiedenen Modelle zu unterscheiden, werden wir unser oben vorgestelltes das "chaotisch" getriebene Quantensystem nennen, das den "white noise" Ordnungsparameter beinhaltene Modell als "white noise "getriebenes Quantensystem und das den periodischen Ordnungsparameter beinhaltene Modell als "periodisch" getriebenes Quantensystem bezeichnen. Die Verteilungen der beiden letztgenannten Modelle lassen sich analytisch bestimmen.
Im Falle des "white noise "getriebenen Quantensystems können stationäre Besetzungswahrscheinlichkeiten für die $< |c_\mu|^2 >_\tau (t)$ mit Hilfe von Standardtechniken [10] für jedes beliebige $H_{q.m.}$ mit diskretem Spektrum und (beliebigen) Kopplungspotentialen der Art $x'\tilde{V}(\hat{x})$ analytisch bestimmt werden, sobald man die Hilbertraumdimension auf eine (end-

liche) natürliche Zahl N begrenzt hat. Als Ergebnis erhält man

$$< |c_\mu|^2 >= \frac{1}{N}, \tag{3.10}$$

also eine Gleichverteilung wie in Abb. 3.3.
Ebenfalls analytisch lassen sich unitäre Transformationen auf eine beliebige andere Hilbertraumbasis durchführen und die Verteilung der dazugehörigen Entwicklungskoeffizienten bzw. ihrer Betragsquadrate bestimmen. Wie für das oben behandelte chaotisch getriebene Quantensystem finden wir immer eine Gleichverteilung.
Im "white noise" getriebenen Quantensystem finden wir also dieselben Eigenschaften der stationären Verteilung vor wie im chaotisch getriebenen Quantensystem. Für beide Modelle existiert keine ausgezeichnete Basis. Unter einer ausgezeichneten Basis verstehen wir eine Basis, die die Selektion eines effektiven Hilbertraums mit kleinerer Dimension zur (nahezu vollständigen) Erfassung der Dynamik des Systems erlaubt.
Anders verhält sich das periodisch getriebene Quantensystem (Periode T). Es ist wohlbekannt [12], daß in diesem Fall eine ausgezeichnete Basis existiert : die Basis der Floquetzustände. Floquetzustände sind die Lösungen des Eigenwertproblems

$$\left(\hat{H}_0 + x'(t)\hat{V} - i\frac{\partial}{\partial t}\right) u_\alpha(x,t) = \epsilon_\alpha u_\alpha(x,t) \tag{3.11}$$

mit

$$u_\alpha(x, t+T) = u_\alpha(x,t) \qquad \forall t, \;\; \omega T = 2\pi. \tag{3.12}$$

Die Lösung der Schrödingergleichung kann nach den Floquetzuständen (3.11) entwickelt werden

$$\Psi(x,t) = \sum_\alpha b_\alpha u_\alpha(x,t) e^{-i\epsilon_\alpha t}, \tag{3.13}$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten $\{b_\alpha\}$ Konstanten sind und aus den Anfangsbedingungen bestimmt werden können. Für die Besetzungswahrscheinlichkeiten $< |c_\mu|^2 >_\tau (t)$ finden wir im Langzeitlimes (für t und τ, wobei das Verhältnis t zu τ konstant bleibt)

$$< |c_\mu|^2 > (t) = \sum_\alpha |b_\alpha|^2 \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} | < \phi_\mu | u_\alpha(t) > |^2 \, dt. \tag{3.14}$$

Im Unterschied zum chaotisch oder "white noise" getriebenen Quantensystem finden wir im Langzeitlimes keine Gleichverteilung. Die sich

bildende stationäre Verteilung hängt vielmehr von den Anfangsbedingungen und der ausgewählten Basis $|\phi_\mu>$ ab.
Der Vergleich der drei Modelle bringt die Bedeutung des Charakters der zeitlichen Evolution des Ordnungsparameters für die Dynamik im Quantensystem ans Licht. Bei chaotischem Charakter ("white noise"-Signale sind auch Signale mit chaotischer zeitlicher Entwicklung) verteilt sich die Wellenfunktion des Quantensystems über alle Basiselemente des Hilbertraums gleich, unabhängig von den Anfangsbedingungen und der verwendeten Basis. Im Gegensatz dazu finden wir bei periodischem Charakter für das Quantensystem, das mit den Floquetzuständen eine ausgezeichnete Basis besitzt, eine stationäre Verteilung, die abhängig ist von der Anfangsverteilung. Es ist nach den Überlegungen aus Kapitel 2 durchaus plausibel, daß bei periodischem Ordnungsparameter eine andere physikalische Situation vorliegt. Denn eine Interpretation der Wellenfunktion als Zufallsfunktion ist in diesem Fall nicht mehr gerechtfertigt. Offensichtlich muß zur Einstellung der Gleichverteilung der Charakter der zeitlichen Evolution des Ordnungsparameters einen 'Mindeststochastizitätsgrad' überschreiten. Wir werden den Aspekt des 'Mindeststochastizitätsgrads' im nächsten Abschnitt explizit weiterverfolgen.
Als Fazit der bisher durchgeführten Untersuchungen können wir festhalten, daß sich eine stationäre Verteilung der $<|c_\mu|^2>_\tau(t)$ im Langzeitlimes einstellt. Das charakterisierende Merkmal der stationären Verteilung - bei chaotischer Dynamik des Ordnungsparameters - ist die Einstellung einer Gleichverteilung unabhängig von der zugrundeliegenden Hilbertraumbasis. Es stellt sich die Frage nach einer physikalischen Interpretation und einer geeigneten mathematischen Beschreibung des sich in dieser Verteilung ausdrückenden Zustands.
Es ist klar, daß dieser Zustand sich nicht durch eine Wellenfunktion darstellen läßt und damit kein Element des Hilbertraums ist. Dagegen teilt der folgende statistische Operator $\hat{D}_N$ die Eigenschaften der stationären Verteilung

$$\hat{D}_N = \sum_{\mu=1}^{N} |\phi_\mu > \frac{1}{N} < \phi_\mu|. \tag{3.15}$$

$\hat{D}_N$ bleibt formal invariant unter unitären Transformationen der Zustände, insbesondere weist er eine Gleichverteilung bezüglich jeder Hilbertraumbasis aus. Statistische Operatoren wie $\hat{D}_N$, bekannt aus der statistischen Mechanik, beschreiben Makrozustände. Makrozustände sind

Zustände von Vielteilchenquantensystemen, über die die im Sinne der Quatenmechanik vollständige Information nicht zur Verfügung steht. Beispiele für Makrozustände sind thermodynamische Ensemble [11] [24]. Beschreibt die von uns gefundene stationäre Verteilung also einen Makrozustand ? Für Quantensysteme, bestehend aus einem Teilchen, ist die Frage physikalisch nicht sinnvoll. Aus diesem Grund werden wir im folgenden Abschnitt Vielteilchenquantensysteme betrachten. Für sie werden wir die Frage nach der physikalischen Interpretation der stationären Verteilung klären.

3.3 Vielteilchenquantensysteme

In diesem Abschnitt werden wir das Quantensystem durch ein Modell eines Vielteilchensystems mit fester Teilchenzahl realisieren. Das klassische Subsystem wird durch einen Fermi - Beschleuniger modelliert. Die mathematische Beschreibung des Vielteilchensystems erfolgt nach zweiter Quantisierung auf dem Fock - Raum. Wir leiten die Bewegungsgleichungen des Quantensystems auf dem Fock - Raum ab und diskutieren die Bedeutung der durch die begrenzten Computerkapazitäten beschränkten Hilbertraumdimension für die Resultate.
Um die im letzten Abschnitt gestellte Frage, ob hinter der sich bildenden stationären Verteilung der durch (3.15) definierte Makrozustand steckt (wobei $|\phi_\mu>$ dann ein Fock - Raum - Zustand ist), mathematisch korrekt zu beantworten, führen wir einen Interferenzoperator und Interferenzfunktionen ein. Die mathematische Bedingung für die Bildung eines Makrozustands im Langzeitlimes wird dann das Verschwinden der Eigenwerte des Interferenzoperators bzw. der Interferenzfunktionen sein.
Für unser Modell werden wir die zeitliche Evolution spezieller Interferenzfunktionen untersuchen. Eine Diskussion der Abhängigkeit der Resultate vom 'Stochastizitätsgrad' der Dynamik des Ordnungsparameters schließt sich an.

3.3.1 Fock - Raum - Darstellung

Für die Dynamik des Vielteilchensystems werden wir die folgenden Voraussetzungen als gegeben ansehen. Während der Antriebszeit bleibt die Teilchenzahl μ konstant und die Teilchen wechselwirken untereinander nicht. Die (identischen) Teilchen erfüllen die Bose - Einstein - Statistik, sie sind also Bosonen. Zur mathematischen Beschreibung der Dynamik des Vielteilchensystems wählen wir das zweitquantisierte Bild. Den Fock - Raum konstruieren wir wie folgt. Die Teilchen befinden sich in einem Potential $V(x)$ (bei uns wieder der Kasten), der Hamiltonian H_0 für ein Teilchen lautet

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \tag{3.16}$$

Das Eigenwertproblem

$$H_0 \phi_k(x) = \epsilon_k \phi_k(x) \tag{3.17}$$

sei für die m energieärmsten Niveaus gelöst. Der Zustand $|n_1, ..., n_m>$ des Vielteilchensystems ist dann - wie üblich - definiert

$$|n_1, ..., n_m >= \left(a_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(a_m^\dagger\right)^{n_m} |0> . \tag{3.18}$$

Dabei sind die $\{a_i^\dagger\}$ die Erzeugeroperatoren, $\{a_i\}$ die Vernichteroperatoren, festgelegt durch die folgenden Relationen

$$\begin{aligned} a_i|n_1, ..., n_m > &= \sqrt{n_i}|n_1, ..., n_{i-1}, n_i - 1, n_{i+1}, ..., n_m > \\ a_i^\dagger|n_1, ..., n_m > &= \sqrt{n_i + 1}|n_1, ..., n_{i-1}, n_i + 1, n_{i+1}, ..., n_m > \\ \left[a_i, a_j^\dagger\right] &= \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger\right] = 0. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Mit $|0>$ wird das Vakuum notiert, charakterisiert durch $a_i|0>= 0 \forall i$. Die Besetzungszahlzustände $\{|n_1, ..., n_m>\}$ bilden eine Basis des Fock - Raums, seine Dimension beträgt

$$N = \binom{\mu + m - 1}{m - 1} \tag{3.20}$$

Auf dem so definierten Fock - Raum nimmt der Hamiltonian des μ - Teilchensystems die folgende Gestalt an

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \, a_k^\dagger \, a_k + x'(t) \sum_{i,j} V_{ij} \, a_i^\dagger \, a_j = \hat{T} + x'(t)\hat{U}. \tag{3.21}$$

$x'(t)$ ist wie im letzten Abschnitt der klassische Ordnungsparameter. Wir haben nur Einteilchenoperatoren vorliegen, weil die Teilchen untereinander nicht wechselwirken.
Eine Wellenfunktion auf dem Fock - Raum hat die folgende Form

$$|\Psi(t) >= \sum_{\{n_1,...,n_m\}} a_{\{n_1,...,n_m\}}(t)|n_1, ..., n_m > . \tag{3.22}$$

Die Dynamik des μ - Teilchensystems ist gegeben durch die Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)>=\hat{H}|\Psi(t)>. \tag{3.23}$$

Mit Hilfe von (3.22) können wir aus (3.23) ein System von N gekoppelten, gewöhnlichen Differentialgleichungen ableiten

$$i\,\dot{a}_{\{n_1,\ldots,n_m\}}(t)=\sum_{\{n'_1,\ldots,n'_m\}} a_{\{n'_1,\ldots,n'_m\}}(t)\ <n_1,...,n_m|\hat{H}|n'_1,...,n'_m>. \tag{3.24}$$

Für die Matrixelemente $<n_1,...,n_m|\hat{H}|n'_1,...,n'_m>$ gewinnen wir die folgenden Terme

$$\begin{aligned}
<n_1,...,n_m|\hat{H}|n'_1,...,n'_m> &= <n_1,...,n_m|\hat{T}|n'_1,...,n'_m>+x'(t)<n_1,...,n_m|\hat{U}|n'_1,...,n'_m> \\
<n_1,...,n_m|\hat{T}|n'_1,...,n'_m> &= \left(\sum_k \epsilon_k n_k\right)\delta_{n_1,n'1}\cdots\delta_{n_m,n'_m} \\
<n_1,...,n_m|\hat{U}|n'_1,...,n'_m> &= \sum_{i,j} V_{ij}\sqrt{n'_i+1}\sqrt{n'_j}\delta_{n_1,n'1}\cdots\delta_{n_j,n'_j-1}\cdots\delta_{n_i,n'_i+1}\cdots\delta_{n_m,n'_m}.
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Durch die Angabe einer Anfangsverteilung $|\Psi(t=0)>=|n_1^0,...,n_m^0>$ gewinnen wir ein eindeutig lösbares Anfangswertproblem. Formal unterscheidet sich (3.24) nicht von dem Anfangswertproblem (3.2) des getriebenen Einteilchenquantensystems, die dahinterstehende physikalische Realität ist nur eine andere. Aus der formalen Analogie schließen wir, daß wir die für das stochastisch getriebene Quantensystem erzielten Resultate übertragen können. Bei stochastischem Antrieb wird sich für die gemittelten Besetzungszahlen wieder eine Gleichverteilung einstellen. Wichtig ist an dieser Stelle, daß das Einstellen des Gleichgewichtszustands *unabhängig von der Dimension des Fock - Raums* ist. Deshalb wird sich eine Gleichverteilung auch bei Teilchenzahlen μ makroskopischer Größenordnung ($\mu \approx 10^{23}$) und der damit verbundenen hohen Fock - Raum - Dimension einstellen. Bei den begrenzten Computerkapazitäten können wir so hohe Teilchenzahlen natürlich nicht bewältigen. Weil wir aber wissen, daß sich der Gleichgewichtszustand unabhängig von der Fock - Raum - Dimension einstellt, ist die Beschränktheit, die unseren numerischen Berechnungen wegen der kleinen Fock - Raum - Dimension anhaftet, nicht wichtig.

3.3.2 Interferenzfunktionen

Wir wollen mit Hilfe der Interferenzfunktionen ein mathematisches Kriterium entwickeln, das eine objektive Entscheidung über die Frage erlaubt, ob die festgestellte stationäre Verteilung einen Makrozustand beschreibt. Der Definition der Interferenzfunktion sei eine kurze Zusammenfassung der Eigenschaften von Makrozuständen vorangestellt.
Makrozustände charakterisieren Systeme mit großen Teilchenzahlen. Dem Makrozustand wird ein Ensemble von Wellenfunktionen $\{\Psi_\lambda\}$ zugeordnet [11]. Diese Wellenfunktionen $\{\Psi_\lambda\}$ sind Zustände, in denen man das Quantensystem vorfinden kann (Elemente des physikalischen Hilbertraums). Ein Makrozustand wird weiterhin charakterisiert durch Wahrscheinlichkeiten $\{p_\lambda\}$, das System im Zustand $\{\Psi_\lambda\}$ anzutreffen. Mathematisch beschrieben wird er durch den Dichteoperator

$$\hat{D} = \sum_\lambda |\Psi_\lambda > p_\lambda < \Psi_\lambda|. \tag{3.26}$$

Soweit die für uns wichtigen Fakten über Makrozustände. Bei der Definition der folgenden Größen halten wir uns an [15]. Ein <u>reiner Zustand</u> $|\Psi>$ ist eine (beliebige) Wellenfunktion des Vielteilchensystems. Mit Hilfe von (3.22) können wir für den mit dem Zustand $|\Psi>$ assozierten Dichteoperator $\hat{D}$ schreiben

$$\hat{D}_\Psi = |\Psi><\Psi| = \sum_{\{n_1,...,n_m\}} \sum_{\{n'_1,...,n'_m\}} a^*_{\{n_1,...,n_m\}}\, a_{\{n'_1,...,n'_m\}} |n_1,...,n_m><n'_1,...,n'_m|. \tag{3.27}$$

Im Gegensatz dazu hat der Dichteoperator des zu $|\Psi>$ assozierten Makrozustands, in [15] auch klassisches Gemisch genannt, die Gestalt

$$\hat{D}^{(m)}_\Psi = \sum_{\{n_1,...,n_m\}} |n_1,...,n_m> |a_{\{n_1,...,n_m\}}|^2 < n_1,...,n_m| \tag{3.28}$$

(vergleiche mit (3.26)), so daß der Zusammenhang

$$\hat{D}_\Psi = \hat{D}^{(m)}_\Psi + \sum_{\{n_1,...,n_m\}} \sum_{\{n'_1,...,n'_m\}\neq\{n_1,...,n_m\}} a^*_{\{n_1,...,n_m\}}\, a_{\{n'_1,...,n'_m\}} |n_1,...,n_m><n'_1,...,n'_m| \tag{3.29}$$

gilt. Der Differenzoperator $\hat{D}_\Psi - \hat{D}^{(m)}_\Psi$ beschreibt Interferenzphänomene, deswegen werden wir ihn ab jetzt Interferenzoperator nennen.
Um zu zeigen, daß das Vielteilchensystem im Limes großer Zeiten gegen einen Makrozustand konvergiert, muß *das Verschwinden der Eigenwerte*

des Interferenzoperators erwiesen werden. Ein eleganter Weg [15] zur äquivalenten Berechnung von Interferenzfunktionen ist der folgende. Sei $\hat{X}$ ein Operator auf dem Fock - Raum, sein Eigenwertproblem

$$\hat{X}|x_j >= x_j|x_j > \tag{3.30}$$

gelöst. Wir bestimmen die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\hat{X}$ einmal für die Situation des reinen Zustands (Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_p(x_j)$), einmal für die Situation des Makrozustands ($P_m(x_j)$). Die Verteilung des Interferenzterms ergibt sich dann aus der Differenz

$$C(x_j) \equiv P_p(x_j) - P_m(x_j). \tag{3.31}$$

Die Ausdrücke für die Verteilungen $P_p(x_j)$ und $P_m(x_j)$ gewinnen wir, indem wir die Entwicklung (3.22) durch die Eigenfunktionen von $\hat{X}$ darstellen

$$\begin{aligned} |\Psi(t) > &= \sum_{\{n_1,...,n_m\}} a_{\{n_1,...,n_m\}}(t)|n_1, ..., n_m > \\ &= \sum_{\{n_1,...,n_m\},\{x_j\}} a_{\{n_1,...,n_m\}}(t) < x_j|n_1, ..., n_m > |x_j > . \end{aligned} \tag{3.32}$$

Setzen wir (3.32) in $1 =< \Psi|\Psi >$ ein, so erhalten wir

$$1 = \sum_{\{x_j\}} P_p(x_j) \tag{3.33}$$

mit :

$$\begin{aligned} P_p(x_j) &\equiv \sum_{\{n_1,...,n_m\}} \sum_{\{n'_1,...,n'_m\}} a^*_{\{n_1,...,n_m\}} a_{\{n'_1,...,n'_m\}} < x_j|n'_1, ..., n'_m >< n_1, ..., n_m|x_j > \\ &= P_m(x_j) + C(x_j), \\ P_m(x_j) &\equiv \sum_{\{n_1,...,n_m\}} |a_{\{n_1,...,n_m\}}|^2| < x_j|n_1, ..., n_m > |^2 \\ C(x_j) &\equiv \sum_{\{n_1,...,n_m\}} \sum_{\{n_1,...,n_m\}\neq\{n'_1,...,n'_m\}} a^*_{\{n_1,...,n_m\}} a_{\{n'_1,...,n'_m\}} < x_j|n'_1, ..., n'_m > \\ &\qquad < n_1, ..., n_m|x_j > . \end{aligned} \tag{3.34}$$

Der Operator $\hat{X}$ darf bzgl. der Fock - Raum - Basis $\{|n_1, ..., n_m >\}$ nicht diagonal sein, denn sonst ist $C(x_j) = 0$ für alle Eigenwerte, gleichgültig ob ein reiner Zustand oder ein klassisches Gemisch (Makrozustand) vorliegt.

Sind einige Eigenwerte x_j von $\hat{X}$ entartet, so ersetzen wir die Definition $P_p(x_j)$ von oben durch

$$P_p(x) \equiv \sum_{\{n_1,...,n_m\}} \sum_{\{n'_1,...,n'_m\}} \sum_{\{x_j|x_j=x\}} a^*_{\{n_1,...,n_m\}} a_{\{n'_1,...,n'_m\}} < x_j|n'_1,...,n'_m > < n_1,...,n_m|x_j >, \tag{3.35}$$

die Größen $P_m(x_j)$ und $C(x_j)$ werden analog definiert.
Wir verallgemeinern die vorgestellten Definitionen, damit wir sie auf unser Modell und unsere Fragestellung anwenden können. Dabei sind lediglich zwei (einfache) Punkte zu berücksichtigen. Die Wellenfunktion unseres Quantensystems ist zeitabhängig und wir betrachten die Verteilung zeitlich gemittelter Werte. Aus diesen Gründen diskutieren wir die folgenden Interferenzfunktionen

$$< C(x_j) > (t) = \frac{1}{2\tau} \sum_{\{n_1,...,n_m\}} \sum_{\{n'_1,...,n'_m\} \neq \{n_1,...,n_m\}} < x_j|n'_1,...,n'_m >< n_1,...,n_m|x_j > \int_{t-\tau}^{t+\tau} a^*_{\{n_1,...,n_m\}}(t')\, a_{\{n'_1,...,n'_m\}}(t')dt' \tag{3.36}$$

Nach den oben dargelegten Argumenten liegt ein Makrozustand vor, wenn alle denkbaren Interferenzfunktionen verschwinden. Eine hinreichende (und für uns handlichere) Bedingung für das Verschwinden aller Interferenzfunktionen ist die folgende. Für alle $\{n_1,...,n_m\} \neq \{n'_1,...,n'_m\}$ verschwindet

$$\frac{1}{2\tau} \left| \int_{t-\tau}^{t+\tau} a^*_{\{n_1,...,n_m\}}(t')\, a_{\{n'_1,...,n'_m\}}(t')dt' \right|. \tag{3.37}$$

In den vorzustellenden Berechnungen haben wir deshalb die folgende Interferenzfunktion bestimmt

$$< C > (t) = \frac{1}{2\tau} \sum_{\{n_1,...,n_m\}} \sum_{\{n'_1,...,n'_m\} \neq \{n_1,...,n_m\}} \frac{1}{N} \left| \int_{t-\tau}^{t+\tau} a^*_{\{n_1,...,n_m\}}(t')\, a_{\{n'_1,...,n'_m\}}(t')dt' \right|. \tag{3.38}$$

Mit (3.38) haben wir das gesuchte mathematische Kriterium gefunden. Die sich im Quantensystem ausbildende Verteilung beschreibt genau dann einen Makrozustand, wenn die Interferenzfunktion (3.38) verschwindet.

3.3.3 Numerische Resultate

In unseren numerischen Berechnungen haben wir für das Quantensystem die dynamischen Gleichungen (3.24) gelöst. Das Quantensystem besteht aus $\mu = 10$ Teilchen, die Hilbertraumdimension beträgt $N = 286$. Der Ordnungsparameter $x'(t)$ stammt aus einem klassischen Subsystem, dem folgenden Fermi - Beschleuniger

$$\begin{aligned} H_{klass.}(p', x') &= \frac{p'^2}{2m} + V(x', t) \\ V(x', t) &= \begin{cases} 0, & 0 < x' < b + a\cos(\omega t),\ a < b \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned} \tag{3.39}$$

In Abb. 3.4 ist ein Poincaré - Schnitt für die angesetzten Parameter (siehe Figure Captions 3.4) zu sehen. Wichtig für uns ist die Existenz der großen stochastischen Zone, so daß durch geeignete Wahl der Anfangsbedingungen die Dynamik des Ordnungsparameters chaotisch gemacht wird. In den hier vorgestellten Berechnungen haben wir den Ordnungsparameter $x'(t)$ als äußere Quelle behandelt, die Rückwirkung des Quantensystems auf die Dynamik des klassischen Subsystems also nicht berücksichtigt. Konsequenzen für die untersuchte Fragestellung ergeben sich aus dieser Vereinfachung nicht. Die Integrationszeit beträgt zunächst $T = 1.2 \cdot 10^5 T_0$ (T_0 ist die Periode der Wandvibration des Fermi - Beschleunigers).
In Abb. 3.5 ist die Interferenzfunktion (3.38) als Funktion der Zeit aufgetragen. Wir erkennen einen raschen Abfall von $< C > (t)$ gegen null. Das die Interferenzfunktion in unseren numerischen Berechnungen nicht völlig verschwindet, liegt an den endlichen Mittelungsdauern. Bei längeren Integrationszeiten und längeren Mittelungsdauern verringert sich der Wert der Interferenzfunktion tendentiell immer mehr. Bei $t = 10^5 T_0$ hat sich bereits die Gleichverteilung eingestellt. Wir folgern, daß die stationäre Verteilung wirklich den Makrozustand charakterisiert, der sich durch eine Gleichverteilung auf allen Zuständen auszeichnet.
Inwieweit hängt dieses Resultat vom Charakter der Dynamik des Ordnungsparameters ab ? Gibt es einen 'Mindeststochastizitätsgrad', den die Dynamik des Ordnungsparameters überschreiten muß, um einen Makrozustand zu erzeugen ?
Zur Beantwortung dieser Fragen wollen wir die Trajektorie des klassischen Subsystems, die uns mit der Ortskoordinate unseren Ordnungsparameter liefert, auf die folgenden zwei Arten manipulieren.

1. durch Variation der Anfangsbedingungen des klassischen Subsystems. Die Variation wird an Hand einer Folge von Anfangsbedingungen so vorgenommen, daß ein Übergang aus der stochastischen

Zone in reguläre Phasenraumbereiche stattfindet (siehe Abb. 3.4). Wir haben als regulären Phasenraumbereich die in Abb. 3.4 zu erkennende kleine reguläre Insel gewählt, die sich bei $p \approx 5615, x = 1.0$ an die stochastische Zone anschließt.

2. durch Verminderung der Amplitude a der Wandvibration (siehe (3.39)). Bei Verminderung von a schrumpfen die stochastischen Zonen zugunsten der regulären Bereiche, bis bei einem kritischen Wert a_{krit} keine stochastischen Zonen mehr zu erkennen sind. Durch Verminderung von a vermindern wir offensichtlich den Stochastizitätsgrad der Trajektorien.

Wir variieren zunächst die klassischen Anfangsbedingungen wie unter 1. beschrieben. Das Ergebnis der Variation für die Interferenzfunktion ist in Abb. 3.6 zu sehen. Dargestellt sind zwei Interferenzkurven als Funktion der Zeit, die eine ein System beschreibend, dessen Ordnungsparameter (im folgenden auch Antrieb bezeichnet) stochastischer Natur ist, die andere von einem System stammend, dessen Antrieb regulär, also periodisch ist. Die Anfangsbedingungen liegen ganz dicht beisammen ($p = 5620$ bzw. $p = 5610$, bei unserer Variation sind das die beiden aufeinander fogenden Punkte, bei denen der Übergang zwischen beiden Zonen stattfindet).
Wir sehen, daß im Falle des chaotischen Ordnungsparameters der Interferenzterm verschwindet, während er bei regulärem Antrieb konstant bei etwa 0.017 verharrt. Die Interferenzkurven bzgl. der anderen Anfangsbedingungen sehen, je nach Charakter ihres Antriebs, ganz ähnlich einer der beiden dargestellten Kurven aus, weshalb wir auf ihre Darstellung in Abb. 3.6 verzichtet haben. Insbesondere ist im Falle stochastischen Antriebs bei den Interferenzkurven keinerlei Tendenz zu finden, bei Annäherung der klassischen Anfangsbedingungen an die reguläre Insel langsamer gegen null zu konvergieren.
Das Resultat dieser Berechnungen läßt sich wie folgt zusammenfassen. Nur bei chaotischer Dynamik des Ordnungsparameters verschwindet die Interferenzfunktion und es kommt zur Bildung eines Makrozustands. Ein periodischer Ordnungsparameter beläßt das Quantensystem in einem reinen Zustand.
Variieren wir nun den Parameter a wie unter 2. ausgeführt. Die Anfangswerte des klassischen Subsystems halten wir während der Variation fi-

xiert, sie liegen aber immer in der (schrumpfenden) stochastischen Zone, falls $a > a_{krit}$ (sonst ist keine stochastische Zone existent). Fassen wir jetzt die Interferenzfunktion als Funktion der Wandamplitude auf. Wie verhält er sich wenn die Wandamplitude ständig vermindert wird, bis wir in die Nähe der kritischen Wandamplitude geraten ?
In den Abb. 3.7.1 bis 3.7.4 haben wir für fallende Wandamplituden eine Trajektorie aus der stochastische Zone in einem Poincaré - Plot gezeichnet. Die Trajektorie füllt die Zone bei genügend großer Integrationszeit voll aus, so daß die Bilder die Größe der stochastischen Zone exakt wiedergeben. Das schon beschriebene Schrumpfen dieser Zone ist deutlich zu sehen, bei Wandamplitude $a = 0.021$ ist kaum noch zu erkennen, daß die Zone eine Ausdehnung hat. Für $a = 0.02$ finden wir bereits keine stochastische Zone mehr vor, die Bewegung ist regulär bzw. periodisch. Das mit dem Schrumpfen der stochastischen Zone eine Verminderung des Stochastizitätsgrads einhergeht, kann z.B. an Hand der Korrelationsfunktion festgestellt werden. Die Korrelationslänge wächst für $a \longrightarrow a_{krit}$ rasch an (für $a = 0.03$ ist die Korrelationslänge etwa $500T_0$, für $a = 0.021$ etwa $7 \cdot 10^4 T_0$).
Für die Wandamplituden aus Abb. 3.7 sowie die ("unterkritische") Amplitude $a = 0.020$ haben wir die Interferenzterme als Funktion der Zeit bestimmt. Das Ergebnis ist in Abb. 3.8 dargestellt, die verwendete Wandamplitude ist an die jeweilige Kurve geschrieben. Wir erkennen hier eine deutliche Tendenz : mit fallender Wandamplitude - und damit Verminderung des Stochastizitätsgrades des Antriebs - konvergiert der Interferenzterm langsamer gegen null. Schließlich ist für die Wandamplitude $a = 0.021$ gar nicht mehr zu sagen, ob sie gegen null konvergiert oder nicht. Längere Integrationszeiten sind zur Klärung der Konvergenz notwendig, was bei begrenzter Algorithmusgeschwindigkeit in der numerischen Praxis nur beschränkt verwirklicht werden kann. Aus den durchgeführten numerischen Simulationen haben wir die beiden folgenden Resultate gewonnen. Zu jeder gegebenen (endlichen) Integrationszeit kann eine Wandamplitude gefunden werden, für die die Konvergenzfrage nicht beantwortet werden kann. Oberhalb dieser Wandamplitude konvergieren alle Interferenzfunktionen gegen null. Mit einer weiteren Abbildung wollen wir diesen Aspekt illustrieren. In Abb. 3.9 ist die Integrationszeit bis $t = 4.5 \cdot 10^5 T_0$ und die Berechnung der $< C > (t)$ bis $t = 4 \cdot 10^5 T_0$ ausgedehnt worden. Für die Wandamplitude $a = 0.021$ erkennen wir, daß

ihre Interferenzfunktion doch gegen null konvergiert, für die Amplitude $a = 0.0205$ und $a = 0.0202$ ist dagegen weiterhin unklar, ob Konvergenz gegen null eintritt.

Die folgenden Resultate haben wir in diesem Abschnitt erzielt. Ordnungsparameter mit chaotischer Dynamik induzieren in einem Vielteilchensystem die Bildung eines Makrozustands, der sich ausdrückt in stationären Verteilungen der Observabelen des Quantensystems (in unserem Beispiel der Besetzungswahrscheinlichkeiten $< |c_\mu|^2 > (t)$). Die Betonung in dieser Aussage liegt auf der chaotischen Dynamik des Ordnungsparameters, die notwendige Voraussetzung für die Bildung des Makrozustands ist. Periodische Ordnungsparameter erzeugen keine Makrozustände, sondern belassen das Quantensystem in einem reinen Zustand. Die Frage nach einem 'Mindeststochastizitätsgrad', die der Dynamik des Ordnungsparameters zugrundeliegen muß, um einen Makrozustand herbeizuführen, ist auf numerischem Wege nicht zu beantworten. Aufgrund der so erzielten Resultate lst sich nur sagen, daß die Bildung des Makrozustands (falls sie zustandekommt), mindestens die Zeit in Anspruch nimmt, die der Korrelationslänge des Ordnungsparameters entspricht.

Zum Schluß dieses Kapitels sei der Zusammenhang mit thermischen Ensemblen diskutiert. Die Ergebnisse aus Kapitel 2 motivieren diese Diskussion. Unser gewonnener Makrozustand entspricht keinem Makrozustand der aus der Thermodynamik bekannten Ensemble. Der Grund dafür ist in den (makroskopischen) Randbedingungen zu suchen, die jedem thermischen Ensemble zugrundeliegen und es definieren. Nach Konstruktion unseres Modells kommen die untersuchten klassisch quantenmechanischen Systeme (im letzten Abschnitt ist das klassische Subsystem sogar nur als externe Quelle angesetzt) einem kanonischen Ensemble am nächsten (feste Teilchenzahl und Energieaustausch). Allerdings wird dem klassischen Subsystem von außen in Form eines periodischen Antriebs Energie zu- und abgeführt. Diese (starke) äußere Quelle verhindert die Bildung eines dem kanonischen Ensembles entsprechenden Makrozustands. Um den Makrozustand des kanonischen Ensembles zu gewinnen, ist das klassische Subsystem durch ein nichtintegrables System unbeeinflußt von externen Quellen zu modellieren (z.B. durch das Reservoir des Modells aus Kapitel 2).

Kapitel 4

Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit sind Vielteilchensysteme. Ihr Hauptziel ist, einen Zusammenhang zwischen den Lösungen ihrer dynamischen Gleichungen und den aus der statistischen Mechanik bekannten Begriffen (Verteilung, kanonisches Ensemble, Makrozustände etc.) herzustellen bzw. zu zeigen, wie aus den Lösungen der Bewegungsgleichungen die Größen der statistischen Mechanik resultieren.
Sehr sorgfältig haben wir klassische, Hamiltonsche Vielteilchensysteme analysiert. Es ist uns gelungen, für sie den folgenden Satz nachzuweisen : *Hamiltonsche Vielteilchensysteme können im Langzeitlimes durch eine Mastergleichung beschrieben werden.* Wichtig ist uns, daß die Konstruktion der Mastergleichung allein aufgrund der Lösungen der dynamischen Gleichungen erfolgt ist.
Den Nachweis haben wir in vier Schritten durchgeführt. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen werden als Anfangswertproblem gelöst. Aus der Lösung, einer Trajektorie $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$, gewinnen wir einen Datensatz Ω für die folgenden Untersuchungen. Rundungsfehler bei der numerischen Integration sowie die chaotische Dynamik im System führen dazu, daß die numerisch gewonnene Trajektorie des Datensatzes Ω im 'Langzeitlimes' nicht mehr (auch nur approximativ) mit der wahren Trajektorie identifiziert werden kann. Eine angemessene Interpretation der numerisch erzielten Daten und physikalischen Größen des Systems ist, sie als Zufallsvariablen anzusehen. Dazu betrachtet wir die Rundungsfehler als Auswirkung einer kleinen Zufallskraft, die (unerwünschterweise) in den Hamiltonschen Gleichungen vorhanden ist. Am Beispiel der Energie eines Untersystems können wir zeigen, daß seine physikalischen Größen eine stationäre Verteilung anstreben. Es sind diese Verteilungen, die bei der Behandlung des Vielteilchensystems durch seine Mastergle

chung reproduziert werden können. In diesem Sinne wollen wir auch den oben angeschriebenen Satz verstanden wissen. Für das Aufstellen der Mastergleichung ist die Übergangswahrscheinlichkeit zu definieren. Die Definition muß aufgrund der Lösungen der dynamischen Gleichungen erfolgen. Wir haben eine Definition gewählt, die die Bestimmung einer Übergangswahrscheinlichkeit unter alleiniger Nutzung unseres Datensatzes Ω ermöglicht, die aber für eine unendlich große Menge an Daten gegen eine sinnvolle Definition konvergiert. Mit Hilfe dieser Definition haben wir die Übergangswahrscheinlichkeit bestimmt und können die Lösung der Mastergleichung mit den vorher gefundenen stationären Verteilungen identifizieren.

Eine weitere Untersuchung widmet sich den Eigenschaften der Teilchenkoordinaten (des Reservoirs) bzw. den dazu proportionalen Kräften der Reservoirteilchen auf die Teilchen des betrachteten Untersystems. Die Hypothese, diese Kräfte seien delta - "white noise" - korreliert, können wir für unser Modell nur partiell bestätigen. Das zeitliche Verhalten der Korrelationsfunktion zeigt in der Tat einen raschen Abfall, so daß eine Beschreibung durch "white noise" eine gute Approximation darstellt. Dagegen ist die Korrelation zwischen Kräften verschiedener Indices i.a. nicht zu vernachlässigen (in unserem Modell erstreckt sich die die Korrelation allerdings nur auf wenige "nächste Nachbarn"). Die Ursache für diese Korrelationen können auf die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen zurückgeführt werden.

Die stationäre Verteilung der physikalischen Größen des Systems erweist sich als die Verteilung eines thermischen Gleichgewichtszustands eines kanonischen Ensembles. Diese Erkenntnis versetzt uns in die Lage, dem System eine Temperatur und eine Entropie zuzuweisen. Die Entropie haben wir als Funktion seiner makroskopischen Variablen diskutiert und gefunden, daß sie mit den Postulaten der Thermodynamik in Einklang stehen.

Durch die Variation eines externen Parameters im Fallenpotential haben wir ein Szenario entworfen, in dem möglicherweise in unserem Modell ein Phasenübergang auftritt. Wir beobachten tatsächlich stärkere Schwankungen in den physikalischen Größen und einen Anstieg der Korrelation zwischen den Teilchenkoordinaten verschiedener Indices. Diese Resultate können wir als Indizien für einen Phasenübergang werten.

Der andere Schwerpunkt der Arbeit ist auf die Analyse von Vielteilchenquantensystemen gelegt. Ziel ist, durch analoge Berechnungen stationäre Verteilungen für die Observablen des Quantensystems zu gewinnen und diese im Sinne eines (thermischen) Gleichgewichtszustands zu deuten. Rein quantenmechanische Systeme erweisen sich dazu als ungeeignet, weil bei ihnen keine chaotische Dynamik vorliegt. Als geeignete Modellsysteme haben wir deshalb klassisch quantenmechanische Systeme herangezogen. Über das klassische Subsystem kann dann chaotische Dynamik im Gesamtsystem installiert werden. Die klassischen Koordinaten klassisch quantenmechanischer Systeme gehen in die Schrödingergleichung des Quantensystems als Ordnungsparameter ein. Wir haben in Kapitel 3 explizit gezeigt : *Chaotische Ordnungsparameter induzieren in einem Vielteilchenquantensystem die Bildung eines Makrozustands.* Der Makrozustand zeichnet sich aus durch stationäre Verteilungen der Observablen des Systems. Die Existenz der stationären Verteilungen kann schon an Hand einfachster Quantensysteme (z.B. ein Teilchen im Kasten) gezeigt werden : nach einer gewissen Integrationszeit stellt sich eine Gleichverteilung der Entwicklungskoeffizienten ein (genauer : ihrer Betragsquadrate) - die Koeffizienten können durch Entwicklung nach jeder beliebigen Basis des Hilbertraums gewonnen sein. Für die korrekte physikalische Interpretation sind natürlich Vielteilchensysteme zu betrachten. Für sie haben wir durch die Definition einer speziellen Interferenzfunktion überprüft, daß sich in der Tat ein Makrozustand bildet.

Kapitel 5

Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit war die Untersuchung der Dynamik von klassisch quantenmechanischen Systemen. In der Dynamik dieser Systeme konnten wir nichtlineare, chaotische Effekte nachweisen.
Es ist uns in dieser Arbeit gelungen, die Ergebnisse von Prezhdo und Kisil [4] über die Dynamik der oben beschriebenen Systeme entscheidend weiterzuentwickeln. Wir konnten für die die Subsysteme charakterisierenden Variablen, (x,p) für das klassische, Ψ für das quantenmechanische Subsystem, Bewegungsgleichungen ableiten. Sie sind in Gleichung (3.2) gegeben. Als Anfangswertprobleme sind sie durch die Angabe eines Phasenraumpunktes (x_0, p_0) (Anfangswerte klassisches System) und einer Anfangsverteilung $\phi_0(x)$ eindeutig lösbar. Die abgeleiteten Gleichungen ermöglichen uns die exakte Behandlung der Wirkung des Quantensystems auf die Dynamik des klassischen Subsystems und damit eine entscheidende Erweiterung der Modelle, die in der Literatur zu finden sind. Die Aufgabe einer weiteren Beschränkung motiviert ein Blick auf in der Natur anzutreffende Systeme : die Dynamik in klassischen Subsystemen verläuft in der Regel chaotisch. Der Antrieb auf das Quantensystem wird deshalb stochastischen Charakter haben. Das stochastisch getriebene Quantensystem erweist sich somit als wesentlicher Bestandteil des klassisch quantenmechanischen Systems.
Wir haben die Dynamik des stochastisch getriebenen Quantensystems einer sorgfältigen Analyse unterzogen. Hilfreich dafür ist das Konzept der stochastischen Quantisierung, dem wir die für unsere Untersuchung wichtige Methode der Mittelung von Observablen entliehen haben. Die Antriebe unserer Quantensysteme haben wir durch Signale klassischer Trajektorien realisiert. Signale chaotischer klassischer Trajektorien haben wir als stochastische Quellen erkannt, deren Stochastizitätsgrad zwi-

schen zwei idealen (Grenz -) Prozessen, dem "white noise"- Prozeß und dem periodischem Prozeß antusiedeln ist. Für beide Idealprozesse, eingesetzt als Antriebe eines trunkierten, endlich dimensionalen Quantensystems, können die Mittelungen der quantenmechanischen Observablen analytisch durchgeführt werden. Besonders interessant sind die gemittelten Besetzungszahlen, für die man für "white noise" getriebene Quantensysteme eine Gleichverteilung bzgl. jeder Hilbertraumbasis eine durch den Anfangszustand des Quantensystems und die Floquetzustände bestimmte Verteilung einstellt. Numerisch haben wir die gemittelten Besetzungszahlen der Quantensysteme bestimmt, deren Antrieb von unseren klassischen Signalen stammt. Schon bei moderatem Stochastizitätsgrad der Signale haben wir im Limes großer Zeiten eine Gleichverteilung der gemittelten Besetzungszahlen beobachtet, gleichgültig, bzgl. welcher Basis die Besetzungszahlen berechnet wurden. Wir haben also exakt dieselben Resultate wie für das "white noise" getriebene System gefunden. Der interessante Aspekt dieser Resultate ist der folgende : Makrozustände mikrokanonischer Ensemble haben genau dieselbe Eigenschaft. Die Gemeinsamkeit mit thermischen Ensemblen wird erweitert bei Analyse der Relaxationszeiten. Die Größe der Relaxationszeit fällt monoton als Funktion der Antriebsstärke, wie es von thermischen Systemen bekannt ist. Der dank dieser gemeinsamen Eigenschaften naheliegende Begriff "Gleichgewichtszustand" ist physikalisch nur für Vielteilchensysteme (mit makroskopischer Teilchenzahl) gerechtfertigt. Deshalb haben wir stochastisch getriebene Vielteilchensysteme darauf analysiert, ob der sich einstellende Zustand der Gleichverteilung durch einen (thermischen) Dichteoperator zu beschreiben ist. Dazu haben wir Interferenzfunktionen definiert, deren zeitliches Verhalten uns über diese Frage Aufschluß gibt. Für stochastisch getriebene Vielteilchensysteme konnten wir so verifizieren, daß ein (thermischer) Gleichgewichtszustand angestrebt wird, solange der Stochastizitätsgrad des Antriebs als mindestens moderat zu bezeichnen ist. Die Abhängigkeit dieses Resultats vom Stochastizitätsgrad haben wir in zweierlei Hinsicht untersucht. Eine Variation der klassischen Anfangsbedingungen spielt für das zeitliche Verhalten der Interferenzfunktion, die Konvergenz gegen null, keine Rolle, solange der Antrieb stochastischen Charakter behält. Nur ein Wechsel des Antriebscharakters (von chaotisch zu periodisch), der wegen der Eigenheit der klassischen Phasenraumstruktur schon durch eine geringfügige Variation induziert werden kann, macht sich signifikant bemerkbar. Andere Ergebnisse haben wir erhalten, wenn wir den Stochastizitätsgrad der klassischen Trajektorie durch Variation externer Parameter sukzessiv verändert haben. Wir stellen eine immer langsamere Konvergenz der Interferenzfunktion gegen null fest, ab bestimmten Parameterwerten ist eine Aussage, ob Konvergenz gegen null eintritt, numerisch nicht mehr zu leisten. Wir haben ebenfalls Systeme in Kontakt mit Reservoiren untersucht. Der entscheidende Unterschied der Dynamik solcher Systeme verglichen mit der der bisher untersuchten Modelle liegt in der Erhaltung der Gesamtenergie, die dem System nur beschränkte Energieaufnahme ermöglicht. Wir konnten für Systeme in Kontakt mit Reservoiren ebenfalls einen Gleichgewichtszustand feststellen. Er manifestiert sich in praktisch konstanten Energiemittelwerten und in einer Energieverteilung, die mit der Boltzmann-Verteilung des entsprechenden thermischen Systems nahezu übereinstimmt. Erstaunlicherweise ergab sich diese Übereinstimmung in unseren Simulationen für Systeme mit Teilchenzahlen $n = 300$, also weit entfernt von makroskopischen Größenordnungen. In unseren Modellen messen wir eine starke Korrelation zwischen Teilchen benachbarter Indices. Diese Korrelation findet sich in anderen physikalischen Observablen wie der Wechselwirkungsenergie zwischen den Teilchen wieder, die im zeitlichen Mittelwert einen deutlich von null verschiedenen Wert annimmt. Für Systeme mit nicht zu vernachlässigender Teilchenwechselwirkung können die Reservoirsignale nicht durch delta-korrelierte "white noise"-Antriebe simuliert werden. Aufgrund der Übereinstimmung mit thermischen Systemen konnten wir thermodynamische Potentiale wie die Entropie oder die innere Energie bestimmen. Weitere numerische Resultate lassen darauf schließen, daß sich bereits in so kleinen Systemen Phasenübergänge ereignen können. Die festgestellten stärkeren Schwankungen in physikalischen Größen und die wachsende Korrelation zwischen den Teilchen sind zumindest Merkmale eines Phasenübergangs.

Aus den dynamische Eigenschaften stochastisch getriebener Quantensysteme können wir sofort auf chaotische Eigenschaften im klassisch quantenmechanischen System schließen. Wird das klassische Subsystem durch ein nichtintegrables System realisiert, in dem stochastische Zonen und reguläre Bereiche koexistieren, so kann durch Manipulation der Anfangswerte des klassischen Subsystems der Antrieb auf das Quantensystem periodisch oder stochastisch sein. Diese Abhängigkeit des Antriebs von den Anfangswerten des klassischen Systems macht die Dynamik des Gesamtsystems chaotisch. Die chaotischen Phänomene äußern sich in Unstetigkeitsstellen von Observablen des Quantensystems. Ein anderer interessanter Effekt wird durch die Wirkung des Quantensystems auf die Dynamik des klassischen Subsystems verursacht. Die Phasenraumstruktur des klassischen Subsystems wird durch das Quantensystem selbst und seinen Anfangszustand mitbestimmt. Dieser Effekt äußert sich in Trajektorien, die bei Variationen des Quantensystems und/oder seines Anfangszustands ihren Charakter ändern. Der Effekt wirkt auf das Quantensystem zurück : wir finden neue Unstetigkeitsstellen in Observablen des Quantensystems. Da wir nur die Anfangsbedingungen im Quantensystem geringfügig variieren, die Anfangswerte im klassischen Subsystem hingegen fixieren, können wir von "quantenchaotischen" Effekten sprechen. In diesem Sinne zeigen klassisch quantenmechanische Systeme "Quantenchaos".

Literaturverzeichnis

[1] H. J. Stöckmann, Phys. Bl. 53 (1997), Nr.2, 126

[2] G. Casati, "Chaos in Quantum Dynamics : An Overview", edited by C. A. Nicolaides, C. W. Clark und M. H. Nayfeh, "Atoms in Strong Fields", Plenum Press New York, NATO ASI Series B : Phys. Vol. 212 (1988)
R. Graham, "Quantum Chaos in Quantum Optics : Lectures on the Quantum Dynamics of Classically Chaotic Systems", edited by N. B. Abraham, F. T. Arecchi and L. A. Lugiato, "Instabilities and Chaos in Quantum Optics II", NATO ASI Series B : Phys. Vol. 177 (1987)

[3] B. V. Chirikov, Phys. Rep. 52 (1979), 263

[4] O. V. Prezhdo, V. V. Kisil, Phys. Rev. A56 (1997), 162

[5] M. H. Mittelmann, Phys. Rev. 122 (1961), 122

[6] J. B. Delos, W. R. Thorson und S. K. Knudson, Phys. Rev. A6 (1972), 709
J. B. Delos und W. R. Thorson, Phys. Rev. A6 (1972), 720

[7] T. Baumert, V. Engel, C. Meier und G. Gerber, Chem. Phys. Lett. 200 (1993),5
T. Baumert, V. Engel, C. Meier und G. Gerber, Chem. Phys. Lett. 200 (1993), 488

G. Stock, R. Schneider und W. Domcke, J. Chem. Phys. 90 (1989), 7184

[8] G. Parisi, Y.-S. Wu, Sci. Sinica 24 (1981), 483

[9] P. H. Damgaard, H. Hüffel, Phys. Rep. 152 (1987), 227
G. Parisi, N. Sourlas, Nucl. Phys. B206 (1983), 321
G. Parisi, Nucl. Phys. B180 (1981), 378

[10] C. W. Gardiner, "Handbook of Stochastic Methods", Springer verlag, Heidelberg 1983
H. Risken, "The Fokker-Planck Equation", Springer-Verlag, Heidelberg 1984

[11] R. Balian, "From Microphysics to Macrophysics I", Springer Verlag, Heidelberg 1982

[12] H. P. Breuer, K. Dietz und M. Holthaus, Z. Phys. D8 (1988), 349
H. P. Breuer, K. Dietz und M. Holthaus, Z. Phys. D10 (1988), 13
H. P. Breuer, K. Dietz und M. Holthaus, J. Phys. B24 (1991), 1343
H. P. Breuer, K. Dietz und M. Holthaus, J. Phys. 51 (1990), 709

[13] K. Dietz, L. Jaeger, R. Porath und M. Pröbsting, J. Chem. Phys. 102 (1995), 7124
K. Dietz, M. Pröbsting, L. Jaeger, J. Chem. Phys. 104 (1996), 8943
K. Dietz and M. Pröbsting, e-print archive nucl-th 9712067

[14] H. P. Breuer, K. Dietz und M. Holthaus, Physica D46 (1990), 317

[15] D. F. Walls, G. J. Milburn, "Quantum Optics", Springer - Verlag, Heidelberg 1994

[16] G. Gallavotti, E. G. D. Cohen, Phys. Rev. Lett. 74 (1995), 2694
G. Gallavotti, E. G. D. Cohen, J. Stat. Phys. 80 (1995), 931
G. Gallavotti, Phys. Rev. Lett. 77 (1996), 4334
G. Gallavotti, J. Stat. Phys. 84 (1996), 899

[17] W. G. Hoover, H. A. Posch, Phys. Rev. E 49 (1994), 1913

[18] D. Ruelle, Ann. N. Y. Acad. Sci. 357 (1980), 1
G. Gallavotti and D. Ruelle, Comm. Math. Phys. 190 (1997), 279
D. Ruelle, J. Stat. Phys. 85 (1996), 1
J. Eckmann and D. Ruelle, Rev. Mod. Phys. 57 (1985), 617

[19] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, G. P. Morris, Phys. Rev. Lett. 71 (1993), 2401
D. J. Evans, E. G. D. Cohen, G. P. Morris, Phys. Rev. A 42 (1990), 5990
S. Sarman, D. J. Evans, G. P. Morris, Phys. Rev. A 45 (1992), 2293

[20] N. I. Chernov, G. L. Eyink, J. L. Lebowitz, Y. Sinai, Comm. Math. Phys. 154 (1993), 569
Y. Sinai, Russ. Math. Surveys 27 (1972), 21

[21] J. Kurchan, e-print-archive cond-mat 9709304
L. F. Cugliandolo, D. S. Dean, J. Kurchan, Phys. Rev. Lett. 79 (1997), 2168
L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, L. Peliti, Phys. Rev. E 55 (1997), 3898
J. Kurchan, L. Peliti, M. Sellitto, Europhys. Lett. 39 (1997), 365

[22] K. Lindenberg and B. J. West, "The Nonequilibrium Statistical Mechanics of Open and Closed Systems", VCH Publishers, 1990

[23] G. W. Ford, M. Kac and P. Mazur, J. Math. Phys. 6 (1965), 504

[24] H. B. Callen, "Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics", Second Edition, ISBN 0-471-86256-8, New York

[25] W. Jakubetz, B. Just, J. Manz und H. J. Schreier, J. Phys. Chem. 94 (1990), 2294

Abbildungen

Abb. 2.1 : Die Differenz $y(t)$ der beiden mit verschiedenen Genauigkeiten berechneten Lösungen des Anfangswertproblems (2.15) als Funktion der Zeit. Das Subsystem besteht aus $n = 300$ Teilchen. Die Parameter aus (2.15) haben in unserer Rechnung die folgenden Werte

- $m = 1000$
- $b = 4.0$
- $a = 0$
- $\alpha = 0.5$

Die Daten werden nach Vielfachen der Zeitlänge T_0 bestimmt, $T_0 =$ 3.14a.u.$\approx 10^{-1}$ fs.

Abb. 2.2 : Die Energie $h_0(\vec{p}, \vec{q})$ als Funktion der Zeit t. Sie werden aus den Daten Ω bestimmt.

Abb. 2.3 : Der zeitliche Verlauf der Korrelationsfunktion. Genutzt werden die Daten aus Ω, die Mittelungsdauer T wird zu $T = 10^6\, T_0$ gewählt.

Abb. 2.4 : Die Energiemittelwerte (2.18) als Funktion der Zeit. Die Mittelungsdauern für die einzelnen Abbildungen sind
Abb. 2.4.1 : keine Mittelung
Abb. 2.4.2 : $T = 100 T_0$
Abb. 2.4.3 : $T = 1000 T_0$
Abb. 2.4.4 : $T = 3000 T_0$.

Abb. 2.5 : Die Verteilung der Energie $P(E)$ mit allen Daten aus Ω.

Abb. 2.6 : Die Übergangswahrscheinlichkeit $w(E \rightarrow E')$, bestimmt nach (2.26), mit den Daten aus Ω. Die E- und E'-Achse werden jeweils in 100 Intervalle aufgeteilt. Die folgenden Integrationszeiten kT_0 liegen zugrunde
Abb. 2.6.1 : $k = 100$
Abb. 2.6.2 : $k = 1000$.

Abb. 2.7 : Der zeitliche Verlauf der Energiemittelwerte $\overline{E}^{(k)}(t)$, $k = 100, 1000, 3000$, definiert durch (2.29). Gelöst wird dazu die Mastergleichung (2.20) mit der Anfangsverteilung (2.28) bis zur Zeit $t = 2000T_0$

Abb. 2.8 : Die (konvergierte) Wahrscheinlichkeitsverteilung $W^{(1000)}(E, t = 500T_0)$ als Funktion von E.

Abb. 2.9 : Die zeitliche Korrelation $G_{Q_1}^{(T)}(\tau)$ als Funktion von τ. Gemittelt wird über $T = 10^6 T_0$.

Abb. 2.10 : Die gleichzeitige Korrelation $< Q_i(0)\, Q_{i+j}(0) >$ verschiedener Teilchenkoordinaten. Der Wert von i (für das Resultat unbedeutend) ist $i = 300$.

Abb. 2.11 : Das Wechselwirkungspotential $V(\vec{q}(t), \vec{Q}(t))$ als Funktion der Zeit.

Abb. 2.12 : Der zeitliche Verlauf der Mittelwerte $< V(\vec{q}, \vec{Q}) > (t)$, bestimmt aus den Daten Ω.

Abb. 2.13 : Die bedingte Wahrscheinlichkeit $W(q, q')$, definiert in (2.37). Die q- und q'- Achse werden jeweils in 100 Intervalle unterteilt.

Abb. 2.14 : Die Höhenlinien des in (2.38) definierten Potentials.

Abb. 2.15 : Die Verteilung (2.43) für die Parameter $n = 300, \gamma = 0.75, \beta = 9.04$.

Abb. 2.16 : Die Entropie (2.45) (pro k) als Funktion der Teilchenzahl n. Generiert werden dazu Energieverteilungen $P(E, n)$ zu einer gegebenen Teilchenzahl n (Methode wie in Abb. 2.5).

Abb. 2.17 : Die innere Energie U als Funktion der Teilchenzahl n. U bestimmt sich aus dem Mittelwert der zu Abb. 2.16 erzeugten Energieverteilungen $P(E, n)$.

Abb. 2.18 : Die Entropie (pro k) als Funktion des Fallenparameters b. Analog zu Abb. 2.16 werden Energieverteilungen $P(E, b)$ generiert.

Abb. 2.19 : Die innere Energie U als Funktion des Fallenparameters b. Analog zu Abb. 2.17 wird U aus den Energieverteilungen $P(E, b)$ aus Abb. 2.18 berechnet.

Abb. 2.20 : Die Energieverteilung $P(E)$, gewonnen aus Formel (2.19). Gelöst wird das Anfangswertproblem (2.15) mit den Parametern aus Abb. 2.1 außer $a = -1.3$ und $\alpha = -0.5$.

Abb. 2.21 : Die Teilchenzahl im Bereich $x > 0$ als Funktion der Zeit im Zeitintervall $[20000T_0, 30000T_0]$.

Abb. 2.22 : Die gemittelte Teilchenzahl $< N >$ als Funktion der Zeit. Gemittelt wird analog zu (2.18) über eine Mittelungsdauer von $T = 3000T_0$.

Abb. 2.23 : Die gleichzeitige Korrelation $< Q_i(0)\, Q_{i+j}(0) >$ verschiedener Teilchenkoordinaten. Der Wert von i (für das Resultat unbedeutend) ist $i = 300$, im Unterschied zu Abb. 3.22 hat a den Wert $a = -1.3$.

Abb. 3.1 : Poincaré - Schnitt des getriebenen Teilchens im Kasten (siehe 3.5). Die Hamiltonianparameter sind

- $m = 5000$
- $\lambda = 0.1$
- $\omega = 0.013$

Gelöst werden die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen als Anfangswertproblem für 25 Anfangswerte über 200 Perioden des äußeren Antriebs.

Abb. 3.2 : Die Korrelationsfunktion $G(\tau)$ der Trajektorie aus (3.5) mit den Anfangswerten $x(t=0) = 0.0, p(t=0) = 1201.76$ Funktion der Zeit τ. Gemittelt wird über $T = 10^5 T_0$, $T_0\omega = 2\pi$.

Abb. 3.3 : Die gemittelten Besetzungszahlen des auf $N = 100$ dimensionierten Quantensystems des Teilchens im Kasten. Gelöst wird Anfangswertproblem (3.2) mit den im Text beschriebenen Anfangswerten. Die Teilchenmasse im quantenmechanischen System beträgt $m = 1000$, $\alpha = 0.3$. Als Ordnungsparameter $x'(t)$ wird die Ortskoordinate der Trajektorie aus Abb. 3.2 verwendet. Die Zeit haben wir in Perioden des äußeren Feldes, das das klassische Teilchen (3.5) antreibt, gemessen. In dieser Einheit sind die Zeitpunkte der Mittelung in

Abb. 3.3.1 : $t = 10000$
Abb. 3.3.2 : $t = 60000$
Abb. 3.3.3 : $t = 100000$
Abb. 3.3.4 : $t = 150000$
Das Mittelungsintervall 2τ beträgt 20 Prozent des Zeitpunkts t der Mittelung : $2\tau = 0.2\ t$

Abb. 3.4 : Poincaré - Schnitt für ein Teilchen im Fermi - Beschleuniger, definiert durch H_{klass} aus (3.39). Gewählt werden 40 Anfangswerte, die mit H_{klass} assozierten Hamiltonschen Bewegungsgleichungen werden über 500 Perioden der Wandvibrationsfrequenz $\omega = 2.0$ integriert. Die Parameter des Fermi - Beschleunigers sind

- $a = 1.0$

- $b = 5.0$

Die Teilchenmasse ist $m = 1000$.

Abb. 3.5. : Integration von (3.24) für die Parameter

- $m = 4$
- $\mu = 10$
- $N = 286$

Die Anfangsverteilung ist $|10, 0, 0, 0>$. Das Signal $x'(t)$ liefert eine klassische Trajektorie des Problems (3.39), der Poincaré - Schnitt ist in Abb. 3.4 zu sehen. Aus den Amplituden $a_{n_1,n_2,n_3,n_4}(t)$ wird mit Hilfe von (3.38) die Interferenzfunktion $< C > (t)$ bestimmt und als Funktion von t gezeichnet. Die klassische Anfangsbedingung ist gegeben durch $(x = 1.0, p = 1000)$.

Abb. 3.6. : Interferenzfunktionen als Funktionen der Zeit für verschiedene klassische Anfangsbedingungen. Sie lauten für die eine Kurve $(x = 1.0, p = 5610)$ (chaotische Trajektorie), für die andere Kurve $(x = 1.0, p = 5620)$. Der Impulswert ist an jede Kurve geschrieben.

Abb. 3.7. : Poincaré - Schnitte einer klassischen Trajektorie des Modells (3.39) mit den Anfangsbedingungen $(x = 2.0, p = 1000)$ bei Verminderung der Wandamplitude a. Sie ist in
Abb. 3.7.1. : $a = 0.1$
Abb. 3.7.2. : $a = 0.03$
Abb. 3.7.3. : $a = 0.025$
Abb. 3.7.4. : $a = 0.021$

Abb. 3.8. : Integration von (3.24) mit den Parametern aus Abb. 3.5 und den klassischen Trajektorien aus Abb. 3.7. Die Interferenzfunktion $< C > (t)$ (siehe (3.38)) ist als Funktion der Zeit t aufgetragen. Die Parameter an jeder Kurve ist die die Wandamplitude a, mit der der Stochastizitätsgrad des Antriebs variiert wird.

Abb. 3.9. : Bestimmung der Interferenzfunktion $< C > (t)$ nach (3.38) für eine längere Integrationszeit und andere Wandparameter. Ansonsten alles wie in Abb. 3.8.