

# Semiklassische Quantisierung der Todakette

Von der Universität Bayreuth  
zur Erlangung des Grades eines  
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

**Frank Göhmann**

geboren am 13.7.63 in Bremen

|                      |                         |
|----------------------|-------------------------|
| 1. Gutachter:        | Prof. Dr. F. G. Mertens |
| 2. Gutachter:        | Prof. Dr. W. Pesch      |
| Tag der Einreichung: | 19.10.93                |
| Tag des Kolloquiums: | 3.12.93                 |



# Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1      | Prolog im Himmel . . . . .   | 1         |
| 1.2      | Modell und Gliederung der Arbeit . . . . .   | 1         |
| <b>2</b> | <b>Spurquantisierung</b>   | <b>3</b>  |
| 2.1      | Semiklassische Quantisierungsformeln . . . . .   | 3         |
| 2.2      | Skalensymmetrie der Todakette . . . . .  | 13        |
| 2.3      | Dispersion der $N$ -cnoidal-wave-Lösung . . . . .  | 14        |
| 2.4      | Eigenschaften der 1-cnoidal-wave-Lösung inklusive einiger neuer Formulierungen ihrer Dispersionsrelation . . . . . | 18        |
| 2.5      | Das lineare Stabilitätsproblem der 1-cnoidal-wave-Lösung . . . . .   | 23        |
| 2.6      | Semiklassische Quantisierung — der allgemeine Fall . . . . .   | 26        |
| 2.7      | Semiklassische Quantisierung im harmonischen Limes . . . . .   | 27        |
| 2.8      | Solitonlimes der 1-cnoidal-wave-Lösung . . . . .   | 30        |
| 2.9      | Semiklassische Dispersionsrelationen des Solitons . . . . .  | 34        |
| <b>3</b> | <b>Kohärente Phononen als Variationsansatz für die Todakette</b>   | <b>39</b> |
| 3.1      | Vorrede . . . . .  | 39        |
| 3.2      | Variationsprinzip . . . . .  | 39        |
| 3.3      | Kohärente Zustände . . . . .   | 40        |
| 3.4      | Effektive Lagrangefunktion . . . . .   | 41        |
| 3.5      | Deutung . . . . .  | 43        |
| 3.6      | Effektives Potential für beliebige Nächste-Nachbar-Wechselwirkung . . . . .  | 44        |
| <b>4</b> | <b>Zusammenfassung</b>   | <b>46</b> |
|          | <b>Anhang A: Einheiten und Skalierung</b>  | <b>49</b> |
|          | <b>Anhang B: Klassische Lösung des quasiperiodischen <math>N</math>-Teilchenproblems</b>                           | <b>50</b> |
| B.1      | Spektralproblem, $r$ -Matrix und Bewegungsintegrale . . . . .  | 51        |
| B.2      | Die kanonische Transformation von Kac und van Moerbeke . . . . .   | 54        |
| B.3      | Algebraisch-geometrische Integration . . . . .   | 58        |
|          | <b>Anhang C: Semiklassische Formel für die Spur des Propagators</b>  | <b>64</b> |
| C.1      | Semiklassischer Propagator . . . . .   | 64        |
| C.2      | Hamilton-Jacobi-Formalismus . . . . .  | 66        |
| C.3      | Noethertheorem . . . . .   | 67        |
| C.4      | Zeitumkehrsymmetrie . . . . .  | 69        |
| C.5      | Das lineare Stabilitätsproblem . . . . .   | 71        |
| C.6      | Forminvarianz der Spur unter Koordinatentransformationen . . . . .   | 74        |
| C.7      | Auswertung der Spur in SPA I . . . . .   | 74        |
| C.8      | Auswertung der Spur in SPA II . . . . .  | 76        |

|  |           |
|--|-----------|
| C.9 Verallgemeinerte Dynamik . . . . .   | 78        |
| C.10 Auswertung der Spur in SPA III . . . . .  | 80        |
| C.11 Anmerkungen . . . . .   | 83        |
| <b>Anhang D: Thetafunktionen</b>   | <b>84</b> |
| <b>Anhang E: Tensorschreibweise</b>  | <b>88</b> |
| <b>Anhang F: Der Propagator eines freien Teilchens auf einem Ring</b>  | <b>90</b> |
| <b>Anhang G: Eine alternative Form der Bestimmungsgleichungen für <math>\omega_2(0)</math><br/>und <math>\kappa</math></b> | <b>91</b> |
| <b>Anhang H: Symmetrien der Dispersionsrelation des linearen Stabilitäts-<br/>problems</b>                                 | <b>92</b> |
| <b>Anhang I: Die Dispersionsrelation des linearen Stabilitätsproblems im<br/>harmonischen Limes</b>                        | <b>94</b> |
| <b>Anhang J: Die Dispersionsrelation des linearen Stabilitätsproblems im<br/>Solitonlimes</b>                              | <b>95</b> |

# 1 Einleitung

## 1.1 Prolog im Himmel

*Und Stürme brausen um die Wette,  
Vom Meer aufs Land, vom Land aufs Meer,  
Und bilden wütend eine Kette*

*(Goethe, Faust I)*

## 1.2 Modell und Gliederung der Arbeit

Die Todakette ist ein eindimensionales System gleicher Teilchen mit exponentieller Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn. Sie wurde 1967 von M. Toda erfunden [72, 74] und ist seitdem das wichtigste eindimensionale Modellsystem zur Untersuchung anharmonischer Gitterschwingungen.

Ihre besondere Bedeutung verdankt die Todakette der Tatsache, daß sie integrabel ist. Die Integrabilität des klassischen Systems wurde 1974 zeitgleich von Flaschka, Hénon und Manakov bewiesen [25, 38, 53]. Flaschka und Manakov benutzten für ihren Beweis den Lax-Formalismus, der es gleichzeitig gestattete, das Modell im Rahmen einer diskreten Version der inversen Streutheorie zu behandeln, und so das Anfangswertproblem der unendlichen Kette für im Unendlichen hinreichend schnell verschwindende relative Auslenkungen zu lösen.

Entscheidender Schritt auf dem Weg der Integration der Todakette unter periodischen Randbedingungen war die Einführung neuer kanonischer Variabler durch Kac und van Moerbeke [43, 44], die nachfolgend die Konstruktion von Wirkungs-Winkel-Variablen [27, 75] und die Lösung des Anfangswertproblems im Rahmen algebraisch geometrischer Integration ermöglichten [17, 18, 48].

Die Integrabilität des quantenmechanischen Systems wurde von Olshanetsky und Perelomov bewiesen [61]. Ein erster wichtiger Schritt zur Lösung des unendlichen Systems bestand in der Behandlung der unendlichen Todakette im Rahmen des asymptotischen Betheansatzes durch Sutherland [70]. Zunächst war jedoch nicht zu erwarten gewesen, daß dieses Ergebnis, wie sich später herausstellte [69, 28], im thermodynamischen Limes exakt sein würde.

Eine erste Lösung des periodischen 3- und 4-Teilchen-Problems geht auf Gutzwiller zurück [35, 36]. Gutzwiller gelang es, die kanonische Transformation von Kac und van Moerbeke in die Quantenmechanik zu übertragen. Seine Ergebnisse wurden von Sklyanin [69] nach Vorarbeiten von Gaudin [29] mit Hilfe der Quanten-Inversen-Spektral-Methode (QISM) auf beliebige Teilchenzahlen verallgemeinert. Sklyanin konnte auch zeigen, wie man im thermodynamischen Limes die Ergebnisse des asymptotischen Betheansatzes reproduziert.

Mit Kenntnis der Wirkungs-Winkel-Variablen ist ein integrables Modell auch „semiklassisch exakt gelöst“, in dem Sinne, daß man das EBK-Quantisierungsverfahren<sup>1</sup> auf

---

<sup>1</sup>Nach Einstein, Brillouin und Keller.

es anwenden kann [7]. Die EBK-Näherung für die Todakette ist in den letzten Jahren intensiv untersucht worden [28, 41, 54, 55, 56]. Man verspricht sich von einer besseren Kenntnis semiklassischer Näherungen generelle Einblicke in die unterschiedliche Struktur von Spektren, die zu klassisch regulären bzw. irregulären Bewegungen gehören.

Die exakte Lösung des endlichen quantenmechanischen Todaproblems durch Gutzwiller bzw. Sklyanin liefert keineswegs eine einfache explizite Gleichung für das Spektrum des Modells. Der numerische Aufwand zur Berechnung der Energieeigenwerte bleibt hoch. Es wurden bislang nur die 3- und 4-Teilchen-Kette untersucht [28]. Matsuyama zog es sogar vor, exakte numerische Eigenwerte zum Vergleich mit den semiklassischen für Ketten bis zur Länge  $N = 6$  direkt aus der Schrödingergleichung zu berechnen [54, 55]. Auch die Anwendung der EBK-Näherung erfordert relativ hohen numerischen Aufwand, da die Hamiltonfunktion der Todakette nicht explizit als Funktion der Wirkungsvariablen bekannt ist.

Diese Arbeit entstand aus dem Wunsch heraus, einfache und effektive Formeln für das Spektrum der periodischen  $N$ -Teilchen-Kette und für die Dispersionsrelationen der elementaren Anregungen im thermodynamischen Limes herzuleiten. Dazu wurden zwei verschiedene Wege beschritten, die die Kapitel 2 und 3 dieser Arbeit ausmachen.

In Kapitel 2 wird ausgenutzt, daß die EBK-Näherung für die Zustandsdichte durch eine sogenannte Spurformel, in der über alle periodischen Bahnen des Systems summiert wird, ausgedrückt werden kann [7]. Aus dieser Spurformel lassen sich vergleichsweise einfache semiklassische Quantisierungsbedingungen herleiten [34, 59, 16, 64], in denen jede Familie klassisch periodischer Bahnen bestimmte Beiträge zum Spektrum liefert. Für eine dieser Familien, die Familie der 1-cnoidal-wave-Lösungen, die in einem speziellen Grenzfall auch das bekannte Todasoliton beinhaltet, lassen sich die klassischen Daten, die in die semiklassische Quantisierungsformel eingehen, berechnen. Es zeigt sich jedoch, daß man so für die  $N$ -Teilchen-Kette keine brauchbare semiklassische Näherung erhält, die jenseits des harmonischen Grenzfalls gültig wäre (s. Kapitel 2.7). Im Solitonlimes hingegen, der den thermodynamischen Limes einschließt, erhält man eine semiklassische Dispersionsrelation des Todasolitons, die in erstaunlicher Übereinstimmung mit den Betheansatzergebnissen ist (Kapitel 2.9).

Das zweite Kapitel dieser Arbeit ist nicht der erste Versuch, semiklassische Methoden der in [34, 59, 16] beschriebenen Art auf die Todakette anzuwenden. In der Tat versuchte bereits 1976 Shirafuji [67], inspiriert durch den Erfolg des Verfahrens bei der semiklassischen Quantisierung des Sine-Gordon-Breathers durch Dasha, Hasslacher und Neveu [16], deren Vorgehen auf die  $N$ -Teilchen-Todakette zu übertragen. Shirafujis Arbeit enthält jedoch gleich mehrere Fehler bei der Berechnung der klassischen Eingangsdaten. Diese werden in den Unterkapiteln 2.4 und 2.5 sukzessive erläutert.

In Kapitel 3 wird eine intuitivere semiklassische Näherung auf die Todakette angewendet. Mit kohärenten Phononen als Variationsansatz in der zeitabhängigen Schrödingergleichung, erhält man eine effektive klassische Dynamik, die sich von der ursprünglichen nur durch eine Renormierung der Parameter unterscheidet. Das der Todakette entsprechende effektive Modell ist wieder eine Todakette [30, 14]. Insbesondere ist ein Soliton mit renormierten Parametern Lösung der effektiven Bewegungsgleichungen. Die

Dispersionsrelation dieses „Quantensolitons“ ist allerdings in ungleich schlechterer Übereinstimmung mit dem Betheansatzergebnis als die semiklassische Dispersionsrelation aus Kapitel 2.

Um den Haupttext dieser Arbeit möglichst kurz und für mit der Materie Vertraute übersichtlich zu gestalten, sind alle grundlegenden Überlegungen zu Einheiten und Skalierung, zum Modell und zur Riemannschen Thetafunktion in die Anhänge A, B und D verbannt. Diese Anhänge fassen aus der Literatur bekannte, zum Verständnis des Haupttextes notwendige Kenntnisse in einheitlicher Notation zusammen. Im Haupttext selber wird auf Fragen der Notation nicht eingegangen. Die Anhänge sind umfangreich und in der Absicht geschrieben, dem Leser einen vollständigen Einstieg in die im Haupttext behandelten Fragen zu ermöglichen. Diese Arbeit sollte ohne Zuhilfenahme zusätzlicher Literatur lesbar sein. Besonderer Wert wurde auf eine ausführliche Beschreibung des Modells und der Integration der Bewegungsgleichungen unter periodischen Randbedingungen gelegt (Anhang B).

Der Anhang C enthält eine detaillierte Herleitung einer semiklassischen Spurformel für den Propagator und eine knappe Darstellung der dazu erforderlichen Kenntnisse aus der klassischen Mechanik. Die entsprechende Herleitung von Dashen, Hasslacher und Neveu (Anhang A in [16]) wird kritisch beleuchtet. Es stellt sich heraus, daß diese Herleitung fehlerhaft ist und daß sich auch das Resultat auf subtile Weise vom korrekten unterscheidet.

Die Anhänge E bis J enthalten technische Details von Rechnungen, auf die im Haupttext Bezug genommen wird, sowie ergänzende Informationen.

## 2 Spurquantisierung

### 2.1 Semiklassische Quantisierungsformeln

Die bekannte WKB-Methode [50, 6] zur Konstruktion einer semiklassischen Näherung für die Eigenzustände der stationären Schrödingergleichung und die aus ihr resultierende Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung sind in ihren Anwendungen auf separable Systeme beschränkt [7]. Die Bohr-Sommerfeld-Bedingung läßt sich auf integrable Systeme verallgemeinern, jedoch nicht darüber hinaus. Sie heißt dann EBK-Bedingung und das Verfahren Torusquantisierung. Es ist in jüngerer Zeit von verschiedenen Autoren [28, 54, 55, 56, 41] erfolgreich und erschöpfend auf die periodische Toda-Kette angewendet worden und aus diesem Grund nicht Gegenstand dieser Arbeit. Zudem ist nicht klar, auf welche Weise die Torusquantisierung im thermodynamischen Limes, dem in dieser Arbeit besonderes Interesse gilt, nutzbar wäre.

Im Gegensatz zu den Eigenzuständen des zeitunabhängigen Problems läßt sich der semiklassische Propagator der vollen Schrödingergleichung für beliebige Systeme semiklassisch nähern [24, 31, 6, 66]. Er folgt asymptotisch für kleine  $\hbar$  aus der Pfadintegraldarstellung des vollen Propagators (s. Anhang C). Der semiklassische Propagator enthält die vollständige Information über die semiklassischen Wellenfunktionen und das semiklassische Spektrum des betrachteten Systems. In der Regel ist es jedoch unmöglich, die

klassischen Daten, die ihn bestimmen, zu berechnen. Hinreichend einfache Ausnahmen bilden beispielsweise kugelsymmetrische Potentialprobleme, insbesondere das Coulombpotential [31, 32]. Für die Behandlung komplexerer Systeme liegt es nahe, ausgehend vom semiklassischen Propagator semiklassische Näherungen für einfachere Größen herzuleiten, in deren Berechnung leichter zugängliche klassische Daten eingehen.

Das erste und auch das mindeste, was man in der Regel für ein quantenmechanisches System berechnen will, sind seine Energieniveaus. Die exakten Energieniveaus<sup>2</sup> sind die Pole der Resolvente

$$g(\varepsilon) := \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dT \operatorname{tr} \left( e^{-\frac{i}{\hbar}(H-\varepsilon)T} \Theta(T) \right) = \sum_n \frac{1}{\varepsilon - E_n} \quad . \quad (2.1)$$

$H$  ist in diesem Ausdruck der (zeitunabhängige) Hamiltonoperator des Systems,  $\Theta(T)$  die Heavyside-Funktion. Das Integral existiert, falls  $\Im(\varepsilon) > 0$ , und läßt sich analytisch in die ganze komplexe Ebene mit Ausnahme der Pole bei  $\varepsilon_j$  fortsetzen. Aus (2.1) erhält man die Zustandsdichte als

$$\rho(\varepsilon) := -\frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \Im(g(\varepsilon + i\gamma)) = \sum_n \delta(\varepsilon - E_n) \quad . \quad (2.2)$$

Die semiklassischen Näherungsformeln, die in diesem Kapitel erörtert werden, sind Näherungen für  $g(\varepsilon)$ ,  $\rho(\varepsilon)$  oder näherungsweise Bestimmungsgleichungen für die Orte der Pole der Resolvente  $g(\varepsilon)$ , sogenannte Quantisierungsbedingungen. In der Literatur der letzten 20 Jahre wurden solche Formeln in erstaunlicher Vielfalt und auf noch einmal vielfältigere Art und Weise hergeleitet. Alle diese Formeln haben zwei wichtige Gemeinsamkeiten: Zum einen ist es möglich, sie durch Einsetzen des semiklassischen Propagators (C.6) in die Gleichung (2.1) herzuleiten. Zum anderen handelt es sich bei den semiklassischen Ausdrücken für  $g(\varepsilon)$  und  $\rho(\varepsilon)$  in jedem Fall um Summen über alle klassischen periodischen Bahnen. Weil sich diese Gleichungen aus der Auswertung der Spur in Gleichung (2.1) ergeben, werden sie häufig Spurformeln genannt.

Diese Spurformeln sind noch immer Gegenstand aktueller Forschung, vor allem deshalb, weil sie für nichtintegrale Systeme pathologisch sind. Die Summen über alle periodischen Bahnen sind in der Regel nur für hinreichend großen Imaginärteil von  $\varepsilon$  konvergent, und die Frage, wie sie sich analytisch auf die reelle Achse fortsetzen lassen, ist noch offen [4]. In neuester Zeit gibt es allerdings vielversprechende Ansätze, die auf eine baldige Klärung dieser Frage hoffen lassen [5, 45]. Eng mit ihr verbunden ist die weitere Frage, wie sich klassisch chaotisches Verhalten dynamischer Systeme im Rahmen der Quantenmechanik äußert. Diese Frage war in den letzten Jahren für viele Forscher der Antrieb, sich mit semiklassischer Quantisierung zu beschäftigen. Sie führte auf eine intensive Beschäftigung mit einfachsten nichtautonomen Systemen und zweidimensionalen Quantenbilliards [3, 22]. Ihr gegenüber trat die Beschäftigung mit integralen oder

---

<sup>2</sup>Mit Blick auf die Anwendung auf die Todakette wird angenommen, daß das betrachtete System nur gebundene Zustände besitzt.

teilintegrablen Systemen in den Hintergrund. Das wichtige Problem der allgemeinen Behandlung von Symmetrien im Rahmen des semiklassischen Formalismus beispielsweise wurde erst in den letzten vier Jahren sukzessive gelöst [65, 13, 12].

Die ersten Spurformeln, die für integrable und nichtintegrable Systeme gleichermaßen gültig sein sollten, und aus ihnen resultierende Quantisierungsbedingungen stammen von Gutzwiller. Sie finden sich in seinen grundlegenden Arbeiten [33, 34], in denen erstmals die Bedeutung der periodischen Bahnen für semiklassische Spektren gezeigt wurde. Später wurden die Gutzwillerschen Quantisierungsbedingungen von Miller [59] verallgemeinert. Gutzwiller berechnete zuerst die semiklassische Greensche Funktion, also die Fouriertransformierte des avancierten Propagators, und sodann deren Spur. In die Gutzwillersche Spurformel gehen neben der reduzierten Wirkung die Stabilitätsexponenten der periodischen Bahnen (s. Anhang C.5) als bestimmende Größen ein.

Eine auf den ersten Blick deutlich anders anmutende Spurformel geht auf Berry und Tabor [7] zurück. Ausgangspunkt für deren Herleitung waren die EBK-Bedingungen. Die einzelnen Summanden in dieser „topologischen Summe“ sind neben der reduzierten Wirkung durch die lokale Geometrie der Energiehyperfläche an Punkten eines topologischen Gitters sowie durch die Geometrie der invarianten Tori bestimmt. In einer späteren Herleitung [8] zeigen Berry und Tabor, wie man dieselbe Formel als Spur der semiklassischen Greenschen Funktion erhält. Die Qualität der Formel von Berry und Tabor wurde durch Beispiele eindrucksvoll belegt [7]. Leider sind aber die Eingangsdaten für die topologische Summe im allgemeinen analytisch schwer zugänglich. Daß die Formel von Berry und Tabor äquivalent zu einer modifizierten Form der Gutzwillerschen Spurformel ist, wurde erst in jüngerer Zeit von Creagh und Littlejohn gezeigt [13]. Diese Autoren knüpften an das Vorgehen Gutzwillers an und erweiterten dessen Spurformel auf den Fall beliebiger Symmetrien im Phasenraum.

Im Hinblick auf feldtheoretische Anwendungen entwickelten Dashen, Hasslacher und Neveu [15, 16, 64] eine weitere Variante einer semiklassischen Spurformel. Ihre Formel ist ein semiklassischer Ausdruck für die Spur des Propagators in (2.1). Dashen, Hasslacher und Neveu versuchten erstmals eine allgemeine Behandlung von Symmetrien im Rahmen des semiklassischen Formalismus. Wie in dieser Arbeit gezeigt wird, ist ihr Ergebnis jedoch nicht zu dem von Creagh und Littlejohn äquivalent und in Details fehlerhaft. Unter Verwendung der von Creagh und Littlejohn entwickelten Methoden lassen sich diese Fehler korrigieren. Der Herleitung einer korrekten Form der Spurformel von Dashen, Hasslacher und Neveu ist der Anhang C dieser Arbeit gewidmet. In diesem Unterkapitel wird gezeigt, daß die Resolvente, die aus der korrekten Formel für die Spur des Propagators folgt, gleich der von Creagh und Littlejohn ist. Das Ergebnis ist also auch äquivalent zu dem von Berry und Tabor.

Hier wird gezeigt, daß sich ausgehend von der Formel für den semiklassischen Propagator an die Arbeiten verschiedener Autoren anknüpfen läßt, die zu verschiedenen semiklassischen Quantisierungsbedingungen kommen. Insbesondere stimmt die Formel, die Rajaraman [64] in Anlehnung an Dashen, Hasslacher und Neveu angibt, nicht mit der Millerschen Formel [59] überein. Grund dafür ist eine unterschiedliche Art der Auswertung des Zeitintegrals in (2.1). Generelle Kritik an der Verwendung semiklassischer

Quantisierungsformeln, die sich auf Familien periodischer Bahnen einer bestimmten Topologie stützen, übte Berry [7, 8]. In [46] geben Keating und Berry ein eindrucksvolles Beispiel für die Probleme dieser zusätzlichen Näherung. Die Ergebnisse dieser Arbeit bestätigen diese Kritik (s. Kapitel 2.7).

Ausgangspunkt für die nun folgende Diskussion verschiedener semiklassischer Quantisierungsbedingungen für die Todakette ist die in Anhang C hergeleitete Formel für die Spur des Propagators

$$\mathrm{tr} \left( e^{-\frac{i}{\hbar}HT} \right) = \sum_n \Delta_{1n} \Delta_{2n} \exp(i(S_n/\hbar - \theta_n)) \quad . \quad (2.3)$$

Die Summe erstreckt sich über alle periodischen Bahnen mit Periode  $T$ . Bahnen, die unter Zeitumkehr ineinander übergehen, werden dabei in dieser Arbeit identifiziert (s. Anhang C). Alle Größen auf der rechten Seite sind durch die klassische Bewegung des Systems bestimmt. Ihre Bedeutung im einzelnen ist:

- (i)  $\Delta_{1n}$  ist ein Faktor, der durch die kontinuierlichen Symmetrien des Systems bestimmt ist. Er ist für alle Systeme einer Symmetrieklasse derselbe. Für eindimensionale Gittersysteme unter periodischen Randbedingungen ist er im Anhang C hergeleitet:

$$\Delta_{1n} = \frac{L\tau}{\pi i \hbar} \left| \frac{N}{T} \frac{dE_n(T)}{dT} \right|^{\frac{1}{2}} \quad . \quad (2.4)$$

$E_n(T)$  ist die Energie der  $n$ -ten periodischen Bahn mit Periode  $T$  im Schwerpunktsystem.  $\tau$  ist die Basisperiode der gegebenen periodischen Bahn (s.u.),  $T = m\tau$ ,  $m \in \mathbf{N}$ .  $N$  ist die Teilchenzahl,  $L$  die Länge des Systems.

- (ii)  $\Delta_{2n}$  beschreibt die Fluktuationen um die gegebene periodische Bahn mit Periode  $T$ . Dieser Faktor läßt sich entweder durch eine reduzierte Poincaréabbildung  $\mathcal{M}$  oder durch die Stabilitätsexponenten der Bahn  $\eta_{nj}$  ausdrücken (s. Anhang C).

$$\Delta_{2n} = e^{-i\pi\mu_n/2} |\det(\mathcal{M} - \mathbf{1})|^{-\frac{1}{2}} = e^{-i\pi\mu_n/2} \prod_{j=1}^{N-2} |2 \sin(\eta_{nj}/2)|^{-1} \quad . \quad (2.5)$$

Die Phasen  $\mu_n$  sind ebenfalls im Anhang C erklärt.

- (iii)  $S_n$  ist die Wirkung einer periodischen Bahn mit Periode  $T$ .
- (iv)  $\theta_n$  ist ein diskreter Phasenfaktor, der die kritischen Punkte auf der gegebenen periodischen Bahn entsprechend ihrer Vielfachheit zählt.

Für ein in Zeit und Ort translationsinvariantes eindimensionales System der Länge  $L$  sei  $\bar{S}(T)$  die Wirkung einer periodischen Bahn im Schwerpunktsystem. Die Bahn ist im ortsfesten System periodisch mit Periode  $T$ , wenn die Geschwindigkeit des Schwerpunktes ein ganzzahliges Vielfaches von  $L/T$  ist. Der zugehörige Schwerpunktimпульs ist

$P = NlL/T$ ,  $l \in \mathbf{Z}$ , und die Wirkung der Schwerpunktbewegung  $S_{cm} = Nl^2L^2/2T$ . Da sich die Schwerpunktbewegung immer separieren läßt, ist die gesamte Wirkung

$$S = \frac{Nl^2L^2}{2T} + \bar{S}(T) \quad . \quad (2.6)$$

Im allgemeinen ist die Periode  $T$  ein Vielfaches einer Basisperiode  $\tau$ ,  $T = m\tau$ ,  $m \in \mathbf{N}$ , da zu jeder periodischen Bahn mit Periode  $\tau$  auch die mehrmals durchlaufene Bahn periodisch ist. Es gilt

$$\bar{S}(T) = \int_0^{m\tau} dt L(t) = \int_0^{m\tau} dt L(t + \tau) =: mS(\tau) \quad . \quad (2.7)$$

Die auf der rechten Seite dieser Gleichung definierte Wirkung  $S(\tau)$  ist die Wirkung eines einzigen Umlaufs im Schwerpunktsystem. Es erweist sich nun als sinnvoll, den Index  $n$  in (2.3) durch das Tripel  $lmn$  zu ersetzen und die Periode  $T$  durch  $m\tau$ . Die Summen über  $l$  und  $m$  sind mit den Symmetrien des Systems verknüpft und lassen sich explizit ausführen. Die Wirkung  $S_n(T)$  geht über in

$$S_{lmn}(\tau) = \frac{Nl^2L^2}{2m\tau} + mS_n(\tau) \quad , \quad (2.8)$$

wobei der undefinierte Index  $n$  die nicht symmetriebedingten Entartungen der Bahn zählt.

Da die Summe auf der rechten Seite von Gleichung (2.3) mit  $lmn$  anstelle von  $n$  nur über die Wirkung der Schwerpunktbewegung von  $l$  abhängt, läßt sich die Summation über  $l$  trivial ausführen. Die Spur des semiklassischen Propagators faktorisiert in einen Anteil, der die exakte Schwerpunktbewegung beschreibt, und einen Anteil im Schwerpunktsystem. Die Berechnung des Propagators der Schwerpunktbewegung, der für die Todakette der Propagator eines freien Teilchens mit Masse  $N$  ist, ist im Anhang F beschrieben. Nach Ausführung der Summation über  $l$  bzw. Resummation erhält man

$$\begin{aligned} \text{tr} \left( e^{-\frac{i}{\hbar}HT} \right) &= \sum_{mn} \sqrt{\frac{2}{m\pi i\hbar} \left| \frac{dE_n}{d\tau} \right|} \tau \Delta_{2mn} \theta_3 \left( 0 \left| -\frac{2\pi\hbar m\tau}{ML^2} \right. \right) \exp \left( \frac{im}{\hbar} (S_n(\tau) - \hbar\theta_n) \right) \\ &= \sum_{lmn} \sqrt{\frac{2}{m\pi i\hbar} \left| \frac{dE_n}{d\tau} \right|} \tau \Delta_{2mn} \exp \left( \frac{im}{\hbar} (S_n(\tau) - E_l\tau - \hbar\theta_n) \right) \quad . \quad (2.9) \end{aligned}$$

Im Hinblick auf die weitere Auswertung wurde hier auf der rechten Seite  $T = m\tau$  eingesetzt. Wenn eine Bahn mit Basisperiode  $\tau$   $m$ -mal durchlaufen wird, dann auch jeder kritische Punkt auf dieser Bahn. Deshalb hat der Phasenfaktor  $\theta_{mn}$  einer solchen Bahn die Gestalt  $\theta_{mn} = m\theta_n$ . Die  $E_l$  auf der rechten Seite von Gleichung (2.9) sind die Energieniveaus der Schwerpunktbewegung (s. Anhang F),

$$E_l = \frac{2\pi^2\hbar^2 l^2}{NL^2} \quad , \quad l \in \mathbf{Z} \quad . \quad (2.10)$$

Bislang wurde die Summation über  $m$  nicht genauer spezifiziert. Zur Auswertung des Integrals über  $T$  in (2.1) ist das jedoch notwendig. Welche Werte die Basisperiode  $\tau$  annimmt, hängt von der speziellen Familie periodischer Bahnen ab, die man betrachtet. Für die in diesem Kapitel betrachteten 1-cnoidal-wave-Lösungen der Todabewegungsgleichungen (s.u.) variiert die Periode eines Umlaufs zwischen Null und einer maximalen Periode  $\tau_h$ , die im harmonischen Grenzfall angenommen wird. Zu jedem  $T$  gibt es daher ein minimales  $m_0 \in \mathbf{N}$  mit der Eigenschaft  $T/m_0 \leq \tau_h$ .  $\tau = T/m_0$  ist zu gegebenem  $T$  die größte Basisperiode. Jede Bahn mit  $\tau = T/m$ ,  $m \geq m_0$ , ist periodisch mit Periode  $T$ .

$$(j-1)\tau_h \leq T \leq j\tau_h \quad \Rightarrow \quad m_0 = j \quad , \quad (2.11)$$

und zwar für alle natürlichen  $j$ . Der Integrand in (2.1) ist eine Summe von Termen der Form  $f_{lmn}(\tau)$ . Es vertauscht mit der Summe über  $l$  und  $n$ , nicht jedoch mit der Summe über  $m$ , da die untere Summationsgrenze von der Periode abhängt. Es gilt

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dT \sum_{m=m_0(T)}^\infty f_{lmn}(\tau) &= \sum_{j=1}^\infty \int_{(j-1)\tau_h}^{j\tau_h} dT \sum_{m=m_0(T)}^\infty f_{lmn}(\tau) \\ &= \sum_{j=1}^\infty \sum_{m=j}^\infty \int_{(j-1)\tau_h/m}^{j\tau_h/m} d\tau m f_{lmn}(\tau) \\ &= \sum_{m=1}^\infty \sum_{j=1}^m \int_{(j-1)\tau_h/m}^{j\tau_h/m} d\tau m f_{lmn}(\tau) \\ &= \sum_{m=1}^\infty \int_0^{\tau_h} d\tau m f_{lmn}(\tau) \quad . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Im allgemeinen Fall erhält man analog ein Integral mit Grenzen  $a$ ,  $b$ , die jeweils von  $n$  abhängen. Für die Resolvente (2.1) ergibt sich somit

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \sum_{l=-\infty}^\infty \sum_{m=1}^\infty \int_a^b d\tau \sqrt{\frac{2m}{\pi i\hbar} \left| \frac{dE_n}{d\tau} \right|} \tau \Delta_{2mn} \exp\left(\frac{im}{\hbar} (S_n(\tau) + (\varepsilon - E_l)\tau - \hbar\theta_n)\right). \quad (2.13)$$

Konsistent mit der Herleitung des semiklassische Propagators aus der Pfadintegraldarstellung ist eine Auswertung des Integrals über die Basisperiode  $\tau$  in SPA<sup>3</sup>. In der Literatur gibt es dazu zwei Versionen. Die erste führt auf die Formel für die Zustandsdichte von Creagh und Littlejohn [13] und sukzessive auf die Quantisierungsbedingungen von Gutzwiller [34] und Miller [59]. Die zweite führt auf die von Rajaraman [64] bzw. Shirafuji [67] angegebene Quantisierungsbedingung.

Zuerst die Herleitung der Formel von Creagh und Littlejohn: Der Faktor im Integral, der vor der Exponentialfunktion steht, enthält  $\hbar$  nur als Vorfaktor. Er ist deswegen für

---

<sup>3</sup>Stationäre-Phasen-Näherung

$\hbar \rightarrow 0+$  eine langsam variierende Funktion von  $\tau$ . Die Stationaritätsbedingung für die Phase der Exponentialfunktion lautet

$$\frac{dS_n}{d\tau} = \frac{\partial S_n}{\partial \tau} = -E_n(\tau) = -\varepsilon + E_l \quad (2.14)$$

$$\Leftrightarrow \varepsilon = E_n(\tau) + E_l \quad . \quad (2.15)$$

Die Tatsache, daß totale und partielle Zeitableitung der Wirkung übereinstimmen, gilt allgemein auf periodischen Bahnen (s. Kapitel 2.4). Gleichung (2.15) bestimmt  $\tau$  als Funktion von  $\varepsilon$ . Es wird hier angenommen, daß (2.15) im Intervall  $[a, b]$  genau eine Lösung hat. Da die wesentlichen Beiträge zum Integral (2.13) für  $\hbar \rightarrow 0+$  aus der Nähe des stationären Punktes  $\tau(\varepsilon)$  stammen, kann man die Grenzen  $a$  und  $b$  durch  $-\infty$  und  $\infty$  ersetzen. Schließlich ergibt sich für (2.13) in SPA

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{i\hbar} \sum_n \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} e^{i\pi\nu_n/2} \tau_n(\varepsilon) \Delta_{2mn} \exp\left(\frac{im}{\hbar} (S_n(\tau_n(\varepsilon)) + (\varepsilon - E_l)\tau_n(\varepsilon) - \hbar\theta_n)\right) \quad . \quad (2.16)$$

Dabei ist  $\nu_n = \frac{1}{2} \left( \text{sign}\left(\frac{dE_n}{d\tau}\right) - 1 \right)$ .  $\nu_n$  hängt offensichtlich nicht von  $m$  ab. Für die 1-cnoidal-wave-Lösung der Todabewegungsgleichung wächst die Energie mit abnehmender Periode, und  $\nu$  ist gleich minus Eins. Wegen (2.7) sollten auch die in Anhang C.7 definierten Phasen  $\mu_n$  nicht von  $m$  abhängen. Setzt man  $\sigma_n = \mu_n - \nu_n$  und führt die Abkürzung  $W_{ln}(\varepsilon) := S_n(\tau_n(\varepsilon)) + (\varepsilon - E_l)\tau_n(\varepsilon) - \hbar\theta_n$  ein, so folgt mit (2.2) die Zustandsdichte

$$\rho_{osz}(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\hbar} \sum_n \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\tau_n(\varepsilon)}{|\det(\mathcal{M} - \mathbb{1})|^{\frac{1}{2}}} \cos\left(\frac{m}{\hbar} W_{ln}(\varepsilon) - \frac{\pi}{2}\sigma_n\right) \quad . \quad (2.17)$$

Diese Zustandsdichte wurde  $\rho_{osz}$  genannt, da eine genauere Betrachtung zeigt, daß die Gleichung (2.17) nur den oszillierenden Anteil der Zustandsdichte beschreibt [6]. Um die vollständige semiklassische Zustandsdichte zu erhalten, muß man die mittlere oder Thomas-Fermi-Zustandsdichte

$$\rho_{TF}(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int dpdq \delta(\varepsilon - H(p, q)) \quad (2.18)$$

hinzuaddieren. Dieser Anteil kommt von Pfaden verschwindender Länge, für die die hier verwendete Form des semiklassischen Propagators (C.6) keine gültige Näherung mehr ist [6].

Die Gleichung (2.17) für den oszillierenden Anteil der Zustandsdichte stimmt mit der von Creagh und Littlejohn angegebenen [13] überein. Die Summe über  $n$  ist eine Summe über Familien periodischer Bahnen, im Falle der periodischen Todakette also über die Ein-, Zwei-, Drei-, Multi-cnoidal-wave-Lösungen mit verschiedenen Wellenzahlen. Für jede dieser Familien tragen die Summen über  $l$  und  $m$  der Orts- bzw. Zeittranslations-symmetrie Rechnung. Der Faktor Zwei vor den Summen rührt von der Zeitumkehrsymmetrie her. Die Summe über  $l$  ist trivial. Wegen (2.15) reproduziert sie das um die

Energieeigenwerte der Schwerpunktbewegung verschobene Spektrum. Im folgenden wird die Summe über  $l$  in (2.13) bis (2.17) weggelassen und  $E_l = 0$  gesetzt. Auf diese Weise erhält man  $g(\varepsilon)$  und  $\rho_{osz}(\varepsilon)$  im Schwerpunktsystem. Die Summen (2.16) und (2.17) lassen sich glätten, indem man zu  $\varepsilon$  einen kleinen positiven Imaginärteil hinzuaddiert. Die dazu erforderlichen technischen Details werden hier nicht erläutert (s. [7]).

Die Formel (2.16) im Schwerpunktsystem stimmt mit der ursprünglich von Gutzwiller angegebenen Formel [34] überein. Aus dieser erhält Gutzwiller für ein zweidimensionales System nach eingehender Diskussion der verschiedenen Phasen in (2.16) die Quantisierungsbedingung

$$S_n + \varepsilon\tau_n = (2\pi j + \eta_n/2)\hbar \quad . \quad (2.19)$$

$j \in \mathbf{Z}$  ist eine Quantenzahl.  $\tau_n(\varepsilon)$  folgt aus (2.15) mit  $E_l = 0$ . Man beachte, daß die beiden Gleichungen (2.15) und (2.19) nicht für alle  $j \in \mathbf{Z}$  eine Lösung besitzen müssen.  $\eta_n$  ist der Stabilitätsexponent der  $n$ -ten Familie periodischer Bahnen, d.h. der Stabilitätsexponent für einen einzigen Umlauf bei mehrfach durchlaufenen Bahnen. Aus der allgemeinen Lösung des linearen Stabilitätsproblems in Anhang C.5 ersieht man, daß der Stabilitätsexponent  $\eta_{mn}$  für eine Bahn mit Periode  $T = m\tau$  mit dem Stabilitätsexponenten für einen Umlauf  $\eta_n$  gemäß  $\eta_{mn} = m\eta_n$  zusammenhängt. Es muß betont werden, daß die Formel (2.19) von Gutzwiller keineswegs streng hergeleitet wurde, sondern auf eine recht intuitive Art und Weise. Die periodische Drei-Teilchen-Todakette ist im Schwerpunktsystem ein zweidimensionales System. Auf sie sollte daher die Gleichung (2.19) anwendbar sein. Eine Verallgemeinerung auf Systeme mit  $N$  Freiheitsgraden erhält man etwa, wenn man den Stabilitätsexponenten der  $n$ -ten Familie periodischer Bahnen  $\eta_n$  durch die entsprechende Summe von Stabilitätsexponenten ersetzt.

Im folgenden wird der Kürze halber auch der Index  $n$  ignoriert. Die herzuleitenden Formeln gelten dann im Schwerpunktsystem und beschreiben den Beitrag einer bestimmten Familie periodischer Bahnen zu  $g(\varepsilon)$ . Setzt man für  $\Delta_{2m}$  den Ausdruck (C.89),

$$\Delta_{2m} = \prod_{j=1}^{N-2} \frac{1}{2i \sin(m\eta_j/2)} = \sum_{k \in \mathbf{N}_0^{N-2}} \exp\left(\frac{im}{\hbar} \xi_k\right) \quad , \quad (2.20)$$

in Gleichung (2.16) ein und definiert

$$\xi_k := - \sum_{j=1}^{N-2} (k_j + 1/2)\hbar\eta_j \quad , \quad (2.21)$$

so läßt sich (2.16) als geometrische Reihe aufsummieren, und für  $g(\varepsilon)$  ergibt sich

$$g(\varepsilon) = \frac{2\tau e^{i\pi\nu/2}}{i\hbar} \sum_k \frac{1}{1 - \exp(i(S + \varepsilon\tau + \xi_k - \hbar\theta)/\hbar)} \quad . \quad (2.22)$$

Die Pole dieser Funktion sind durch die Bedingung

$$(m + v)2\pi\hbar = S + \varepsilon\tau + \xi_k \quad (2.23)$$

bestimmt. Dabei ist  $v = \theta/2\pi$  und  $m$  ganzzahlig. Das ist die Quantisierungsbedingung von Miller [59]. Sie stellt eine Verallgemeinerung der Gutzwillerschen Bedingung (2.19) dar und liefert im Gegensatz zu dieser den korrekten harmonischen Limes aus der Quantisierung der 1-cnoidal-wave-Lösung der Todakette (s. Kapitel 2.7).

Eine dritte semiklassische Quantisierungsbedingung folgern Shirafuji [67] bzw. Rajaraman [64] aus der Gleichung (2.13), indem sie eine andere Stationaritätsbedingung für die Phase benutzen. Dabei folgen diese Autoren der Vorgehensweise von Dashen, Hasslacher und Neveu [16]. Mit (2.20) und (2.21) lautet (2.13)

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k \sum_{m=1}^{\infty} \int_a^b d\tau \sqrt{\frac{2m}{\pi i\hbar} \left| \frac{dE}{d\tau} \right|} \tau \exp\left(\frac{im}{\hbar} (S + \varepsilon\tau + \xi_k - \hbar\theta)\right). \quad (2.24)$$

Die oben genannten Autoren werten das Zeitintegral in (2.24) aus, indem sie  $\xi_k$  in die Stationaritätsbedingung mit einbeziehen. Sie lautet dann

$$\varepsilon = E(\tau) - \frac{d\xi_k(\tau)}{d\tau} \quad (2.25)$$

Unter Verwendung der geometrischen Summenformel ergibt sich wieder eine Gleichung der Form (2.22):

$$g(\varepsilon) = \sum_k \frac{\alpha_k}{1 - \exp(i(S + \varepsilon\tau + \xi_k - \hbar\theta)/\hbar)} \quad (2.26)$$

Wenn die  $\alpha_k$  an den entsprechenden Stellen nicht verschwinden und auch keine zusätzlichen Pole liefern, sind die Pole dieser Version von  $g(\varepsilon)$  wieder durch die Gleichung (2.23) bestimmt. Setzt man (2.25) in (2.23), so folgt

$$(m + v)2\pi\hbar = S + E\tau + \left(1 - \tau \frac{d}{d\tau}\right) \xi_k \quad (2.27)$$

Die Gleichungen (2.23) und (2.25) bzw. (2.27) und (2.25) sind die semiklassischen Quantisierungsformeln von Shirafuji und Rajaraman. Verwendet man die üblichen Regeln zur Auswertung von Integralen in SPA, so ergibt sich  $\alpha_k$  bis auf Phasenfaktoren zu

$$\alpha_k = 2\tau \left| 1 - \frac{d^2\xi_k}{d\tau^2} \bigg/ \frac{dE}{d\tau} \right|^{-\frac{1}{2}} \quad (2.28)$$

Sowohl bei Shirafuji [67] als auch bei Rajaraman [64] fehlt der Term in den Betragsstrichen. Bei Shirafuji geht diese Tatsache vermutlich auf den Irrtum zurück, die Stabilitätsexponenten hingen nur linear von  $\tau$  ab. In der Arbeit von Dashen, Hasslacher und Neveu stellt sich das Problem nicht in gleicher Weise. Sie betrachten die semiklassische Quantisierung des Sine-Gordon-Breathers, für den die Wirkung proportional zur Summe der Stabilitätsexponenten  $\xi_k$  ist, so daß die semiklassische Quantisierungsprozedur in ihrem Fall nur zu einer Renormierung der Kopplung führt.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden die beiden Paare semiklassischer Quantisierungsbedingungen (2.25), (2.27) bzw. (2.15), (2.23) diskutiert. Die Eingangsdaten für beide Paare sind dieselben. Sie werden in den Unterkapiteln 2.4 und 2.5 für eine spezielle Familie periodischer Lösungen der Todabewegungsgleichungen, die 1-cnoidal-wave-Lösungen, hergeleitet. Ein Vergleich beider Paare im harmonischen Limes wird in Kapitel 2.7 vorgenommen. Im Solitonlimes konnte leider nur das Paar (2.25), (2.27) berücksichtigt werden. Die Beschränkung auf die 1-cnoidal-wave-Lösungen ist eine zusätzliche Näherung. Diese Lösungen entsprechen jedoch den höchst entarteten, eindimensionalen Tori im Phasenraum, von denen behauptet worden ist, sie seien von besonderer Relevanz für das semiklassische Spektrum [76].

Ausgangspunkt für die Überlegungen, die zu dieser Arbeit führten, waren die Gleichungen (2.25) und (2.27). Deshalb seien hier noch einmal alle Argumente für diese Gleichungen aufgezählt:

- (i) Sie bieten eine befriedigende physikalische Interpretationsmöglichkeit: Mit  $\tau$  als Funktion der Quantenzahlen  $m$  und  $k$  aus der Quantisierungsbedingung (2.27) folgen die Energieniveaus aus (2.25). Eine makroskopische Anregung, beschrieben durch die Energie  $E$ , wird gleichzeitig mit den Fluktuationen um sie herum quantisiert. Die Fluktuationen werden durch die Ableitungen der Stabilitätsexponenten nach der Periode beschrieben und gehen deshalb für  $E \rightarrow 0$  gegen die harmonischen Frequenzen kleiner Schwingungen um die Ruhelage des Systems. Aus diesem Grunde kann man die Fluktuationen als Phononen in Anwesenheit einer makroskopischen Anregung, eines Solitons beispielsweise, betrachten. Unter der Quantenzahl  $m$  stellt man sich die Quantenzahl der makroskopischen Anregung vor, unter den Quantenzahlen  $k$  die Besetzungszahlen der Phononen.
- (ii) Die Formeln (2.25) und (2.27) lassen sich auf Systeme mit unendlich vielen Freiheitsgraden verallgemeinern. Mit  $k = 0$  liefern sie das exakte Massenspektrum des Sine-Gordon-Modells [16, 51, 52].
- (iii) Mit dem Bild aus (i) lassen die Formeln (2.25), (2.27) eine Identifikation von Teilen des Spektrums eines Modells mit bestimmten klassischen Anregungen zu.
- (iv) Für die Zweiteilchen-Todakette sind (2.25) und (2.27) äquivalent zu den Bohr-Sommerfeld-Bedingungen.
- (v) Im Falle der Todakette liefern die Gleichungen (2.25) und (2.27) den korrekten harmonischen Limes.
- (vi) Sie bieten die Möglichkeit, eine semiklassische Dispersionsrelation des Todasolitons zu definieren, die den korrekten klassischen Limes  $\hbar = 0$  liefert und für endliche  $\hbar$  in hervorragender Übereinstimmung mit den exakten quantenmechanischen Ergebnissen ist.

- (vii) Im Gegensatz zu den Gleichungen (2.15), (2.19), aus denen sich im Prinzip ebenfalls eine semiklassische Dispersionsrelation des Todasolitons herleiten ließe, ist bei Verwendung von (2.25), (2.27) eine Renormierungsprozedur bekannt.

Die unter (iv) bis (vii) aufgelisteten Punkte sind Ergebnisse dieser Arbeit und werden in den folgenden Unterkapiteln im einzelnen diskutiert. Dort werden für eine spezielle Familie periodischer Lösungen der Todabewegungsgleichungen, die 1-cnoidal-wave-Lösungen, die zur Auswertung von (2.25) und (2.27) benötigten Eingangsdaten berechnet. Die Gleichungen (2.25) und (2.27) liefern dann die diesen Lösungen entsprechenden Energieniveaus.

Eine semiklassische Dispersionsrelation des Todasolitons erhält man durch die folgenden Überlegungen: Es gibt einen Limes, in dem gleichzeitig die Anzahl der Teilchen  $N$ , die die Todakette konstituieren, gegen unendlich geht und eine spezielle 1-cnoidal-wave-Lösung gegen die Ein-Soliton-Lösung. Dieser Limes ist in Kapitel 2.8 genauer beschrieben und wird in dieser Arbeit Solitonlimes genannt. Er läßt sich auch in den Gleichungen (2.25), (2.27) durchführen, wenn man von (2.25) die Vakuumenergie  $\varepsilon_o$  abzieht, (2.27) durch  $N$  teilt und in beiden Gleichungen  $k = 0$  setzt. Die Gleichungen (2.25) und (2.27) sind die Quantisierungsbedingungen einer makroskopischen Anregung in Abwesenheit von Phononen. Aber selbst, wenn keine Phononen angeregt sind, verändert die Nullpunktbewegung der Kette die Energie der makroskopischen Anregung, im Solitonlimes also die Energie des Solitons. Welche Bedeutung hat nun der Solitonlimes in Gleichung (2.25)? Durch Vergleich mit dem harmonischen Limes wird sich herausstellen, daß  $v$  für die 1-cnoidal-wave-Lösung gleich  $1/2$  ist.  $2\pi\hbar v/N$  verschwindet also im Solitonlimes. Da die Quantenzahl  $m$  keiner Beschränkung unterworfen ist, verschwindet der Term  $p_m = m2\pi\hbar/N$  jedoch nicht. Er geht vielmehr in eine kontinuierliche Variable  $p$  über, die man als semiklassisch korrigierten Solitonimpuls interpretieren kann. Denn auf der einen Seite ist  $p_m$  der Impuls eines freien Teilchens unter periodischen Randbedingungen in Einheiten der reziproken Gitterkonstanten, auf der anderen Seite nimmt die rechte Seite der Gleichung (2.25) im Solitonlimes die Form  $p_{cl}(\alpha) + \hbar\Delta p(\alpha)$  an.  $p_{cl}$  ist dabei der klassische Solitonimpuls als Funktion des Solitonparameters  $\alpha$ . Analog nimmt die Gleichung (2.25) im Solitonlimes die Form  $\varepsilon - \varepsilon_o = E(\alpha) + \hbar\Delta E(\alpha)$  an. Im klassischen Limes  $\hbar = 0$  geht der Solitonlimes der Gleichungen (2.25) und (2.27) also in die Dispersionskurve  $E = E(p)$  des klassischen Todasolitons über. Deshalb liegt es nahe, die Terme  $\Delta p(\alpha)$  und  $\Delta E(\alpha)$  als semiklassische Korrekturen zur Dispersionsrelation des Todasolitons aufzufassen.

## 2.2 Skalensymmetrie der Todakette

Die Todakette zeigt eine Skalensymmetrie, die nirgendwo in der Standardliteratur erwähnt ist, sich jedoch als sehr nützlich bei der Behandlung der Randbedingungen erweist.

Es sei

$$W(x) := e^{-x} + x - 1 \tag{2.29}$$

das Todapotentia. Betrachte  $N$  Teilchen, die mit ihren nächsten Nachbarn via  $W(x)$  wechselwirken und deren Auslenkungen aus ihren Ruhelagen in dimensionslosen Einheiten (s. Anhang A) durch Koordinaten  $q_n$ ,  $n = 1, \dots, N$ , beschrieben seien. Die Kette sei quasiperiodisch geschlossen, es gelte also  $q_{N+1} := q_1 + \Delta l$ , wobei  $\Delta l$  die von außen aufgezwungene Längenänderung bezeichne. Die relativen Abstände zweier benachbarter Teilchen seien mit  $r_n$  bezeichnet:  $r_n := q_{n+1} - q_n$ . Dann gilt

$$\Delta l = \sum_{n=1}^N r_n \quad , \quad (2.30)$$

und die Lagrangefunktion des Systems lautet

$$L = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{\dot{q}_n^2}{2} - W(r_n) \right\} \quad . \quad (2.31)$$

Die Lagrangefunktion hängt parametrisch von  $\Delta l$  ab. Im Gleichgewicht sind alle relativen Abstände  $r_n$  konstant und gleich,  $r_n = \Delta l/N$ . Die Gleichgewichtsenergie der Kette hat als Funktion von  $\Delta l$  ein Minimum bei  $\Delta l = 0$ .

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß  $\Delta l$  *keine* dynamische Variable ist. Es ist deshalb irreführend, sich die Todakette in 2 Dimensionen eingebettet vorzustellen, etwa als Kette aus  $N$  Massen, die mit nichtlinearen Federn mit Potential (2.29) zu einem Kreis verbunden auf einem Tisch liegen. Ein solches System zeigte eine Mode, bei der sich die ganze Kette periodisch ausdehnte und zusammenzöge, und würde *nicht* durch die Lagrangefunktion (2.31) beschrieben.

Betrachte nun die von einem reellen Parameter  $\sigma$  abhängige Transformation

$$\begin{aligned} t' &= e^{\sigma/2} t \quad , \\ q'_n(t') &= q_n(t) + n\sigma \quad . \end{aligned} \quad (2.32)$$

Diese Transformation läßt die Bewegungsgleichungen forminvariant, da

$$\begin{aligned} L(q_n(t), \dot{q}_n(t), \Delta l) &= e^\sigma L(q'_n(t'), \dot{q}'_n(t'), \Delta l') + \Delta l' e^\sigma - \Delta l - N(e^\sigma - 1) \quad , \\ \Delta l' &:= \Delta l + N\sigma \quad . \end{aligned} \quad (2.33)$$

Lösungen der Bewegungsgleichungen zu  $L(\Delta l)$  gehen über in Lösungen der Bewegungsgleichungen zu  $L(\Delta l')$ . Diese Tatsache wird sich im folgenden häufig als nützlich erweisen.

### 2.3 Dispersion der $N$ -cnoidal-wave-Lösung

Das zu (2.31) gehörige Anfangswertproblem ist mit Methoden aus der inversen Spektraltheorie und der klassischen Theorie hyperelliptischer Riemannflächen in den 70er Jahren gelöst worden [43, 44, 17, 18, 27, 48]. Eine ausführliche Darstellung der Lösung findet

sich in Anhang B. Es ist bemerkenswert, daß sich alle Lösungen mit Hilfe einer einzigen Klasse von Funktionen beschreiben lassen, den Riemannschen Thetafunktionen (s. Anhang D). Abgesehen von einer trivialen gleichzeitigen Verschiebung in allen Koordinaten haben die Lösungen in einem Schwerpunktsystem die Form

$$q_n(t) = nd + \ln \left( \frac{\theta(nk - \nu t + \gamma|B)}{\theta((n+1)k - \nu t + \gamma|B)} \right) \quad , \quad (2.34)$$

wobei  $\theta(z|B)$  eine  $g$ -dimensionale Riemannsche Thetafunktion ist.  $B$  ist eine Riemannmatrix mit  $\Re(B) = 0$ .  $k$  und  $\nu$  sind die  $g$ -dimensionalen reellen Vektoren der Wellenzahlen und Frequenzen.  $\gamma$  ist ein konstanter Phasenvektor und  $d$  eine weitere Konstante.

Die durch (2.34) beschriebene Lösung der Todabewegungsgleichungen heißt  $g$ -cnoidal-wave-Lösung. Sie ist charakterisiert durch Angabe der Parameter  $g, B, k, \nu, \gamma, d$ , die sich bei der Herleitung von (2.34) aus den Anfangsbedingungen  $q_n(0), p_n(0)$  ergeben. In Analogie zur harmonischen Kette ist es wünschenswert, einen Typ von Anfangsbedingungen zu betrachten, bei dem man nicht die Anfangsorte und -geschwindigkeiten der einzelnen Massen vorgibt, sondern die „Amplituden“ bestimmter Moden und deren „Phasen“. Es ist klar, daß  $2N$  reelle Parameter unabhängig wählbar sind, da man im Schwerpunktsystem  $2N - 1$  unabhängige Anfangswerte der Bewegung wählen kann und als zusätzlichen Parameter die äußere Länge  $\Delta l$  hat. Um festzustellen, welche Parameter die Bedeutung der Amplituden und Phasen annehmen, betrachte den Limes  $B_{jj} \rightarrow i\infty$ ,  $j = 1, \dots, g$ , der Lösung (2.34). Mit  $\varepsilon_j := \exp(i\pi B_{jj})$  folgt  $\varepsilon_j \rightarrow 0$  und

$$q_n(t) = nd + 4 \sum_{j=1}^g \varepsilon_j \sin(\pi k_j) \sin(2\pi((n+1/2)k_j - \nu_j t + \gamma_j)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad . \quad (2.35)$$

In diesem Limes nimmt  $q_n(t)$  die Gestalt einer harmonischen Anregung an. Man weiß hier allerdings noch nicht, daß  $\nu_j$  und  $k_j$  durch die harmonische Dispersionsrelation  $\nu_j = \sin(\pi k_j)/\pi$  verknüpft sind. Das wird sich erst später zeigen. Wenn alle  $\varepsilon_j$  verschwinden, ruht die Kette, und es ist  $r_n = d$ , folglich  $d = \Delta l/N$ . Die  $\varepsilon_j$  (bzw.  $B_{jj}$ ) spielen also die Rolle der Amplituden und die  $\gamma_j$  die Rolle der Phasen. Für gegebenes  $g$  sind die übrigen Parameter durch die  $B_{jj}$  und  $\gamma_j$  bestimmt. Sie genügen einer Gleichung, die Dispersionsrelation genannt sei. Die Dispersionsrelation für die Multi-cnoidal-wave-Lösungen wurde von Dubrovin hergeleitet [20, 21]. Da dessen Herleitung jedoch nicht über die physikalische Bedeutung aller Parameter in der Dispersionsrelation Aufschluß gibt, wird sie im folgenden noch einmal ausführlich diskutiert.

Es sei  $A$  definiert als  $A := e^{-d}$ , und

$$f_n := -d_t^2 \ln(\theta(\varphi_n)) + A\theta(\varphi_{n+1})\theta(\varphi_{n-1})/\theta^2(\varphi_n) \quad , \quad (2.36)$$

wobei  $\varphi_n := nk - \nu t + \gamma$ . Setzt man die Lösung (2.34) wieder in die aus (2.31) folgenden Bewegungsgleichungen ein, so ergibt sich  $f_{n+1} - f_n = 0$ . Nach Dubrovin [20, 21] folgt hieraus, daß alle  $f_n$  den gleichen Wert  $f$  haben. Damit ist (2.36) äquivalent zu

$$e^{-(q_n - q_{n-1})} - 1 = d_t^2 \ln(\theta(\varphi_n)) + f - 1 \quad . \quad (2.37)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung kann man die Bedeutung der Konstanten  $f$  verstehen. Die linke Seite ist gleich der Kraft, die auf die  $n$ -te Feder der Todakette ausgeübt wird. Nach Anhang B sind alle Frequenzen  $\nu_j$  reell (modulo Perioden). Also ist  $d_t \ln(\theta(\varphi_n))$  beschränkt, und als zeitgemittelte Kraft auf die  $n$ -te Feder erhält man

$$p = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \left( e^{-(q_n - q_{n-1})} - 1 \right) = f - 1 \quad . \quad (2.38)$$

Diese Größe wird im Zusammenhang mit der Todakette als Druck bezeichnet [74].  $p$  ist jedoch eine rein mechanisch definierte, keine thermodynamische Größe, und kann sowohl positive als auch negative Werte annehmen.

Die gesuchte Dispersionsbeziehung für die  $g$ -cnoidal-wave-Lösung folgt aus (2.36) mit  $f$  anstelle von  $f_n$  durch Eliminieren der Zeit- und Ortsabhängigkeit. Mit  $z$  anstelle von  $\varphi_n$ , der Abkürzung (D.9) aus Anhang D für die partiellen Ableitungen und der Konvention, über doppelt auftretende Indizes zu summieren, folgt aus (2.36)

$$f\theta^2(z) + \nu_i \nu_j \theta(z) \theta_{ij}(z) - \nu_i \nu_j \theta_i(z) \theta_j(z) - A\theta(z+k)\theta(z-k) = 0 \quad . \quad (2.39)$$

Definiere den infinitesimalen Verschiebungsoperator  $T_z := \nu_j \frac{\partial}{\partial z_j}$  und den endlichen Verschiebungsoperator  $S_z$  durch  $S_z f(z) = f(z+k)$ . Der zu  $S_z$  inverse Operator ist dann gegeben durch  $S_z^{-1} f(z) = f(z-k)$  und (2.39) läßt sich in der Form

$$(f + T_{z^1}^2 - T_{z^1} T_{z^2} - A S_{z^1} S_{z^2}^{-1}) \theta(z^1) \theta(z^2) |_{z^1=z^2} = 0 \quad (2.40)$$

schreiben. Führe nun neue Koordinaten ein,

$$\begin{pmatrix} w^1 \\ w^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z^1 \\ z^2 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} z^1 \\ z^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w^1 \\ w^2 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.41)$$

In diesen Koordinaten geht (2.40) über in die Gleichung

$$(f + 2T_{w^1} T_{w^2} + 2T_{w^2}^2 - A S_{w^2}^2) \theta \left( \frac{w^1 + w^2}{2} \right) \theta \left( \frac{w^1 - w^2}{2} \right) \Big|_{w^2=0} = 0 \quad . \quad (2.42)$$

Benutze nun das Additionstheorem (D.10). Für die Riemannsche Thetafunktion nimmt es folgende Gestalt an

$$\theta(z+w)\theta(z-w) = \sum_{2\delta \in (Z_2)^g} \hat{\theta}[\delta](2z) \hat{\theta}[\delta](2w) \quad . \quad (2.43)$$

$\hat{\theta}[\delta](z)$  ist für alle  $\delta \in \frac{1}{2}(Z_2)^g$  eine gerade Funktion (Lemma D.2). Aus dieser Tatsache folgt  $T_z \hat{\theta}[\delta](z) |_{z=0} = 0$ . Und (2.42) impliziert

$$\sum_{2\delta \in (Z_2)^g} \hat{\theta}[\delta](w^1) (f + 2T_{w^2}^2 - A S_{w^2}^2) \hat{\theta}[\delta](w^2) |_{w^2=0} = 0 \quad . \quad (2.44)$$

Da die Funktionen  $\hat{\theta}[\delta](w)$  linear unabhängig sind [20], folgt

$$(f + 2T_w^2 - AS_w^2)\hat{\theta}[\delta](w)|_{w=0} = 0 \quad , \quad (2.45)$$

oder in der ursprünglichen Notation

$$f\hat{\theta}[\delta] + 2\nu_i\nu_j\hat{\theta}_{ij}[\delta] - A\hat{\theta}[\delta](2k) = 0 \quad . \quad (2.46)$$

Diese Gleichung ist die gesuchte Dispersionsrelation. Sie verknüpft die beiden äußeren Parameter  $A, f$  und die Frequenzen  $\nu_j$ , die Wellenzahlen  $k_j$  sowie die Elemente der Riemannmatrix  $B$  miteinander. Die Phasen  $\gamma_j$  kommen in (2.46) nicht vor und können deshalb beliebig gewählt werden. Die Wahl der Wellenzahlen  $k_j$  ist durch die quasiperiodischen Randbedingungen eingeschränkt. Aus  $q_{n+N} - q_n = \Delta l$  folgt mit (2.34)

$$\ln \left( \frac{\theta(\varphi_{n+N})\theta(\varphi_{n+1})}{\theta(\varphi_{n+1+N})\theta(\varphi_n)} \right) = \Delta l - Nd \quad . \quad (2.47)$$

Diese Gleichung ist erfüllt, genau dann, wenn  $Nk$  eine Periode der Riemannschen Thetafunktion ist,  $Nk = j + Bl$ ,  $j, l \in \mathbf{Z}^g$ , und  $\Delta l = Nd$ . Nach Anhang B ist  $k$  reell modulo Perioden. Deshalb kann man sich auf  $k_j = m_j/N$  beschränken, wobei  $m_j$  eine der Zahlen  $1, \dots, N$  ist. Mit Blick auf den harmonischen Limes (2.35) wird in dieser Arbeit weiter davon ausgegangen, daß alle  $m_j$  paarweise verschieden sind und daß  $m_j = N$  nicht vorkommt. Nur unter diesen Bedingungen ist (2.35) eine Überlagerung *unabhängiger* harmonischer Anregungen. Sie garantieren ferner, daß das lineare Stabilitätsproblem der 1-cnoidal-wave-Lösung (s.u.) die richtige Anzahl linear unabhängiger Lösungen hat, und damit garantieren sie auch die richtige Anzahl von Quantenzahlen für die semi-klassische Quantisierungsprozedur (s.u.). Die Forderung, daß alle  $k_j$  verschieden sind, begrenzt zudem, konsistent mit der Lösung des Anfangswertproblems in Anhang B, die maximale Anzahl der in (2.34) „superponierten“ cnoidal waves auf  $N - 1$ . Es wird außerdem davon ausgegangen, daß die  $\gamma_j$  reell gewählt werden können. Das garantiert, daß die Lösungen  $q_n(t)$  im harmonischen Limes (2.35) reell sind. Die in dieser Arbeit verwendeten Arbeitshypothesen über die Struktur der Lösungen der Todabewegungsgleichungen sind in der folgenden Vermutung zusammengefaßt. Sie werden durch alle betrachteten speziellen Beispiele bestätigt.

**Vermutung:** *Alle physikalischen (d.h. reellen) Lösungen der Todabewegungsgleichungen lassen sich in der Form (2.34) darstellen mit reellen Parametern  $iB, k, \nu, \gamma, d, f$ , die durch die Dispersionsrelation (2.46) verknüpft sind.*

Fast alle Teile dieser Vermutung konnten bewiesen werden. Was zu zeigen (oder zu widerlegen) bleibt ist, daß  $\gamma$  reell gewählt werden kann und daß alle  $k_j$  verschieden und ungleich Null sein müssen.

Betrachte nun das Skalenverhalten der Dispersionsrelation (2.46). Aus (2.38) folgt, daß  $f$  unter einer Skalentransformation (2.32) in  $f' = e^{-\sigma} f$  übergeht. Mit Blick auf (2.34) und (2.46) kann man die Skalentransformation (2.32) als Transformation der Größen in

der Dispersionsrelation ansehen:  $\nu$  geht über in  $\nu' = e^{-\sigma/2}\nu$  und  $A$  in  $A' = e^{-\sigma}A$ . D.h. unter einer Skalentransformation (2.32) wird die ganze Gleichung (2.46) mit  $e^{-\sigma}$  multipliziert.  $B$  bleibt invariant unter dieser Transformation. Man kann  $\sigma$  so wählen, daß entweder  $f = 1$  oder  $A = 1$ , d.h. daß entweder der Druck verschwindet,  $p = 0$ , oder die Kettenlänge konstant bleibt,  $\Delta l = 0$ . Allgemeiner gestattet es die Skalentransformation (2.32), zwischen den Randbedingungen beliebig vorgegebenen Drucks und beliebig vorgegebener Länge hin und her zu transformieren. Es genügt deshalb, (2.46) auf einen der Fälle  $f = 1$  oder  $A = 1$  zu beschränken. In Anlehnung an Toda [74], dessen weit verbreitetes Buch die Lesegewohnheiten der meisten Leser dieser Arbeit geprägt haben dürfte, sei  $f = 1$  als Ausgangspunkt für weitere Überlegungen gewählt. Die Dispersionsrelation (2.46) lautet dann

$$\hat{\theta}[\delta] + 2\nu_i\nu_j\hat{\theta}_{ij}[\delta] - A\hat{\theta}[\delta](2k) = 0 \quad . \quad (2.48)$$

Die Länge, die aus (2.48) folgt, sei mit  $\Delta l_o$  bezeichnet, für die Frequenzen bei Druck Null sei die Bezeichnung  $\nu$  beibehalten. Dann folgen mit Hilfe einer Skalentransformation mit  $\sigma = (\Delta l - \Delta l_o)/N$  der Druck und die Frequenz als Funktion der Länge  $\Delta l$ .

$$p(\Delta l) = \exp(-(\Delta l - \Delta l_o)/N) - 1 \quad , \quad (2.49)$$

$$\nu(\Delta l) = \exp(-(\Delta l - \Delta l_o)/2N)\nu \quad . \quad (2.50)$$

In dieser Notation ist also  $\nu = \nu(\Delta l_o)$ .

Für  $g = 1$  ist (2.48) ein System zweier Gleichungen in den zwei Unbekannten  $\nu$  und  $A$ . Für  $g = 2$  sind vier Unbekannte  $\nu_1, \nu_2, A$  und  $B_{12}$  aus vier Gleichungen zu bestimmen. Für  $g \geq 3$  übersteigt die Anzahl der Gleichungen die der Unbekannten. Die überzähligen Gleichungen bilden einen Satz von Identitäten in den Parametern. Der Fall  $g = 3$  wurde von Hirota und Ito [40] numerisch untersucht. Sie benutzten jedoch eine andere Form der Dispersionsrelation (2.48), die für analytische Rechnungen ungeeignet erscheint.

Im Rahmen dieser Arbeit werden nur die Fälle  $g = 1, 2$  betrachtet. Im nächsten Unterabschnitt wird gezeigt, wie (2.48) für  $g = 1$  in die bekannte Dispersionsrelation [74] der 1-cnoidal-wave Lösung übergeht. Im übernächsten wird dann gezeigt, wie sich aus dem Fall  $g = 2$  die Dispersionsbeziehung für das lineare Stabilitätsproblem der 1-cnoidal-wave-Lösung ergibt.

Abschließend sei angemerkt, daß die Gleichung (2.39), aufgefaßt als Differentialgleichung für eine zu bestimmende Funktion  $\theta$ , mit der sogenannten Hirotaschen Form der Todabewegungsgleichungen [39] übereinstimmt.

## 2.4 Eigenschaften der 1-cnoidal-wave-Lösung inklusive einiger neuer Formulierungen ihrer Dispersionsrelation

Die 1-cnoidal-wave-Lösung ist die spezielle Lösung der Todabewegungsgleichungen, die sich aus (2.34) und (2.48) für  $g = 1$  ergibt. Sie ist historisch insofern von Bedeutung, als sie zur Entdeckung des Todapentials führte. Toda suchte nach einem Wechselwirkungspotential für eine 1-d Kette gleicher Massen, das spezielle Lösungen der Bewegungsgleichungen in Form elliptischer Funktionen liefern sollte [72].

Für die Bestimmung der semiklassischen Energieniveaus, die der 1-cnoidal-wave-Lösung entsprechen, werden gemäß der Gleichungen (2.25), (2.27) die Dispersionsrelation, die Energie  $E$  und die Wirkung pro Periode  $S$  der 1-cnoidal-wave-Lösung benötigt. Diese Größen sind bekannt [74, 73, 67]. Es gibt jedoch gute Gründe dafür, sie an dieser Stelle erneut herzuleiten: Zur Herleitung der Dispersionsrelation wird hier die allgemeine Formel (2.48) benutzt. Das ist zum einen ein Test für (2.48), zum anderen erhält man eine Reihe bisher nicht bekannter Ausdrücke für die Dispersionsrelation in Form rationaler Funktionen von Thetafunktionen, die durch ihre Einfachheit und durch ihre Nützlichkeit bei numerischen Berechnungen bestehen. Die erneute Berechnung der Energie und Wirkung pro Periode ist notwendig, weil an dieser Stelle in einem früheren Versuch zur Gutzwiller-Quantisierung der periodischen Toda-Kette [67] Fehler bezüglich der Randbedingungen gemacht wurden (s.u.).

Für  $g = 1$  nimmt der Parameter  $\delta$  in (2.48) die Werte  $0, \frac{1}{2}$  an. In Matrixschreibweise lautet (2.48) somit

$$\begin{pmatrix} \hat{\theta}_3(2k) & -2\hat{\theta}_3'' \\ \hat{\theta}_2(2k) & -2\hat{\theta}_2'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ \nu^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\theta}_3 \\ \hat{\theta}_2 \end{pmatrix} . \quad (2.51)$$

$\nu^2$  und  $A$  sind also durch

$$\nu^2 = -\frac{1}{2} \frac{\hat{\theta}_3 \hat{\theta}_2(2k) - \hat{\theta}_2 \hat{\theta}_3(2k)}{\hat{\theta}_3'' \hat{\theta}_2(2k) - \hat{\theta}_2'' \hat{\theta}_3(2k)} , \quad (2.52)$$

$$A = \frac{\hat{\theta}_3'' \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_2'' \hat{\theta}_3}{\hat{\theta}_3'' \hat{\theta}_2(2k) - \hat{\theta}_2'' \hat{\theta}_3(2k)} \quad (2.53)$$

gegeben. Um zu sehen, daß der Ausdruck für  $\nu^2$  mit dem von Toda angegebenen übereinstimmt, muß man zunächst mit Hilfe des Additionstheorems (D.10) und der Formel (D.5) von Thetafunktionen mit Parameter  $2B$  zu Thetafunktionen mit Parameter  $B$  übergehen. (D.10) und (D.5) implizieren

$$\theta_1(z+w)\theta_1(z-w) = \hat{\theta}_3(2z)\hat{\theta}_2(2w) - \hat{\theta}_2(2z)\hat{\theta}_3(2w) , \quad (2.54)$$

$$\theta_4(z+w)\theta_4(z-w) = \hat{\theta}_3(2z)\hat{\theta}_3(2w) - \hat{\theta}_2(2z)\hat{\theta}_2(2w) . \quad (2.55)$$

Mit  $w = z = 0$  in der letzten Gleichung folgt

$$\theta_4^2 = \hat{\theta}_3^2 - \hat{\theta}_2^2 . \quad (2.56)$$

Leitet man (2.54) und (2.55) an der Stelle  $w = z = 0$  nach  $z$  ab, so ergibt sich, unter Berücksichtigung, daß  $\theta_1(z)$  ungerade und  $\theta_4(z)$  gerade ist,

$$\theta_1^2 = 2(\hat{\theta}_3'' \hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_2'' \hat{\theta}_3) , \quad \theta_4 \theta_4'' = 2(\hat{\theta}_3'' \hat{\theta}_3 - \hat{\theta}_2'' \hat{\theta}_2) . \quad (2.57)$$

$w = 0$  in (2.54) und (2.55) führt auf

$$\begin{pmatrix} \theta_1^2(z) \\ \theta_4^2(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -\hat{\theta}_2/\hat{\theta}_3 & \hat{\theta}_3/\hat{\theta}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\theta}_2(2z)\hat{\theta}_3 \\ \hat{\theta}_3(2z)\hat{\theta}_2 \end{pmatrix} . \quad (2.58)$$

Invertiert man diese Gleichung und setzt das Ergebnis in (2.52) ein, so erhält man unter Benutzung von (2.56) und (2.57)

$$\nu^2 = \frac{\theta_1^2(k)\theta_4^2}{\theta_4^2(k)\theta_1^2 - \theta_1^2(k)\theta_4\theta_4''} . \quad (2.59)$$

Das ist eine alternative Form der Dispersionsrelation für  $\nu$ . Lemma D.4, die Definition der Jacobi-elliptischen Funktion  $\text{sn}$  (D.13) und die Beziehungen [78, 37]

$$\frac{\theta_4''}{\theta_4} = 8\pi^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{i\pi B(2n+1)}}{(1 - e^{i\pi B(2n+1)})^2} = 4K(K - E) \quad (2.60)$$

führen schließlich auf die bekannte von Toda angegebene Form [74] der Dispersionsrelation für  $\nu$ :

$$(2K\nu)^{-2} = \text{sn}^{-2}(2Kk) - 1 + E/K . \quad (2.61)$$

$K$  und  $E$  sind dabei die vollständigen elliptischen Integrale erster und zweiter Art.

Gleichung (2.54) kann man zur Herleitung einer Form der Dispersionsrelation benutzen, in der nur die Funktion  $\theta_1(z)$  und ihre Ableitungen vorkommen. Der Zähler des Bruchs auf der rechten Seite von (2.52) stimmt mit (2.54) an der Stelle  $z = 0, w = k$  überein, der Nenner mit der zweiten Ableitung von (2.54) an der Stelle  $z = 0, w = k$ . Es gilt also

$$\nu^{-2} = -d_k^2 \ln(\theta_1(k)) . \quad (2.62)$$

D.h.  $\nu^{-2}$  stimmt bis auf eine Konstante mit der Weierstraßschen  $\wp$ -Funktion überein.

Toda [73, 74] benutzt eine Größe

$$C = \left( \frac{\theta_4(k)}{\theta_4} \right)^2 \left[ 1 - \left( 1 - \frac{E}{K} \right) \text{sn}^2(2Kk) \right] , \quad (2.63)$$

um den Druck  $p$  für  $\Delta l = 0$  als  $p(\Delta l = 0) = C - 1$  auszudrücken. Ein Vergleich mit (2.49) zeigt, daß also  $A = 1/C$  sein muß. Das ist leicht bewiesen. Denn einerseits folgt aus der ersten der Gleichungen (2.57) und der ersten der Gleichungen (2.58), daß

$$\nu^2/A = \theta_1^2(k)/\theta_1'^2 , \quad (2.64)$$

andererseits impliziert (2.61), daß

$$C\nu^2 = (\theta_4(k)/2K\theta_4)^2 \text{sn}^2(2Kk) . \quad (2.65)$$

Mit (D.13) und der Beziehung  $2K = \pi\theta_3^2$  folgt aus diesen beiden Gleichungen, daß  $A = 1/C$ .

Mit Blick auf (2.50) gibt (2.64) für die Dispersionsrelation für  $\nu$  bei fester Länge,

$$\nu(\Delta l) = e^{-\Delta l/2N} \theta_1(k)/\theta_1' \quad . \quad (2.66)$$

Hier wurde für die Wurzel aus der rechten Seite von (2.64) das positive Vorzeichen gewählt, damit  $\nu(\Delta l)$  für  $0 \leq k \leq 1$  positiv ist. Aus (2.66) ersieht man, daß die Schallgeschwindigkeit bei fester Länge durch den Ausdruck  $\exp(-\Delta l/2N)$  gegeben ist.

Die Energie  $E$  und Wirkung pro Periode  $S$  der 1-cnoidal-wave-Lösung wurden von T. Shirafuji [67] berechnet. Das von ihm verwendete Wechselwirkungspotential unterscheidet sich jedoch von dem in dieser Arbeit verwendeten (2.29) dadurch, daß er den attraktiven Anteil der Wechselwirkung wegläßt. Es lautet also  $W_{sh} = e^{-x} - 1$ . Diese Wahl des Potentials führt zwar auf dieselben Bewegungsgleichungen, aber für gleiche Lösungen auf andere Werte der Energie und Wirkung pro Periode. Das physikalische Bild hinter dieser Wahl ist das eines Gases von Teilchen mit repulsiver Wechselwirkung. Dementsprechend gibt es keine natürliche Gitterkonstante. Die potentielle Energie der ruhenden Kette wird minimal für  $\Delta l \rightarrow \infty$ . Im folgenden sei das Zeitmittel einer Größe über eine Periode  $\tau(\Delta l) := 1/\nu(\Delta l)$  der Bewegung durch spitze Klammern gekennzeichnet,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{\tau(\Delta l)} \int_0^{\tau(\Delta l)} dt f(t) \quad . \quad (2.67)$$

Wenn man den Druck  $p_{sh}$ , der sich für Shirafujis Wahl des Potentials ergibt, analog zu (2.38) als  $p_{sh} = \langle -W'_{sh}(r_n) \rangle$  definiert, ist diese Größe immer größer als Null. Ein Vergleich mit (2.38) zeigt, daß eine Lösung der Bewegungsgleichungen zu  $p = 0$  auf  $p_{sh} = 1$  führt.

Die kinetische Energie der Todakette sei nun mit  $T$  bezeichnet, die potentielle Energie mit  $V$ . Dann ist  $E = \langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$  und  $S = \tau(\Delta l)\langle L \rangle = \tau(\Delta l)(\langle T \rangle - \langle V \rangle)$ . Aus (2.38) folgt

$$\langle V \rangle = \sum_{n=1}^N \langle W(r_n) \rangle = \Delta l + Np \quad . \quad (2.68)$$

Zur Berechnung von  $\langle T \rangle$  benutze die Geschwindigkeiten  $\dot{q}_n$ , wie sie sich aus (2.34) ergeben, und die Reihenentwicklung (D.16) für die logarithmische Ableitung von  $\theta_3(z)$ . Dann folgt  $\langle T \rangle = a/\tau^2(\Delta l)$ , wobei  $a$  gemäß

$$a := N(2\pi)^2 \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{csch}^2(i\pi Bn) \sin^2(\pi nk) \quad (2.69)$$

definiert ist. Für  $p = 0$  heißt das

$$E = a/\tau^2 + \Delta l_o \quad , \quad S = a/\tau - \tau\Delta l_o \quad . \quad (2.70)$$

Und für  $\Delta l = 0$  ergibt sich mit  $p$  aus (2.49)

$$E = a/\tau^2(0) + Np = a/\tau^2(0) + N(e^{\Delta l_o/N} - 1) \quad , \quad (2.71)$$

$$S = a/\tau(0) - N\tau(0)p = a/\tau(0) - N\tau(0)(e^{\Delta l_o/N} - 1) \quad . \quad (2.72)$$

Im Rahmen der semiklassischen Quantisierung macht es zunächst nur Sinn, das System mit Randbedingung  $\Delta l = 0$  zu betrachten, da die klassische und die quantenmechanische Bedingung für das Verschwinden des Drucks verschieden sind. Der Grund dafür liegt darin, daß die quantenmechanischen Nullpunktfluktuationen einen zusätzlichen Druck verursachen. Das klassische System zu  $p = 0$  läßt sich zwar formal semiklassisch quantisieren, aber die physikalische Bedeutung der Ergebnisse ist unklar. Shirafuji geht in seiner Arbeit zur semiklassischen Quantisierung jedoch von der 1-cnoidal-wave-Lösung zu  $p = 0$  ( $p_{sh} = 1$ ) aus. Seine Ergebnisse können daher nicht sinnvoll sein. Darüber hinaus ist die von ihm verwendete Stationaritätsbedingung (Gleichung (26) in seiner Arbeit), die zur Auswertung des Zeitintegrals in Gleichung (2.1) benötigt wird, falsch (s.u.).

Im Rahmen der Hamilton-Jacobi-Theorie wird die Wirkung  $S$  als Funktion von Anfangs- und Endpunkt  $q, q'$  einer gegebenen Bahn, sowie als Funktion der Zeit  $T$ , die benötigt wird, um von  $q$  nach  $q'$  zu gelangen, aufgefaßt (s. Anhang C). Im Fall der oben berechneten Wirkung pro Periode stimmen  $q$  und  $q'$  überein, und  $T$  ist die Periode der Bewegung. Daß die Bahn periodisch ist bedeutet ferner, daß auch die Impulse  $p, p'$  an Anfangs- und Endpunkt der Bahn übereinstimmen. Im folgenden sei der gemeinsame Anfangs- und Endpunkt der betrachteten Bahnen mit  $q^* := q = q'$  bezeichnet.

Betrachte zuerst den für die semiklassische Quantisierung relevanten Fall  $\Delta l = 0$ . Dann ist  $T = \tau(0)$  und  $S = S(q^*(\tau(0)), q^*(\tau(0)), \tau(0))$ , und es gilt

$$\frac{dS}{d\tau(0)} = \left( \frac{\partial S}{\partial q} + \frac{\partial S}{\partial q'} \right) \frac{dq^*}{d\tau(0)} + \frac{\partial S}{\partial \tau(0)} = \frac{\partial S}{\partial \tau(0)} = -E \quad , \quad (2.73)$$

wobei die zweite Gleichung aus der Periodizität folgt [34] und die dritte aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung. Einsetzen der Gleichungen (2.71), (2.72) liefert

$$\nu^2 = \frac{d\Delta l_o}{da} \quad . \quad (2.74)$$

Diese Gleichung ist eine Verträglichkeitsbedingung für  $E$  und  $S$ , die nach Konstruktion erfüllt ist. Sie wurde zur Probe der Ausdrücke (2.71), (2.72) erfolgreich numerisch getestet. Man kann sie auch als alternative Form der Dispersionsrelation (2.52) ansehen.

Im Fall  $p = 0$  ( $p_{sh} = 1$ ) gilt die Gleichung (2.73) für Shirafujis Wahl des Potentials nicht mehr. Denn dann hängt die Lagrangefunktion zusätzlich über  $\Delta l_o$  von  $\tau$  ab, und man erhält

$$\frac{dS}{d\tau} = \frac{\partial S}{\partial \Delta l_o} \frac{d\Delta l_o}{d\tau} + \frac{\partial S}{\partial \tau} = \frac{\partial S}{\partial \Delta l_o} \frac{d\Delta l_o}{d\tau} - E \quad . \quad (2.75)$$

Für die in dieser Arbeit verwendete Wahl des Wechselwirkungspotentials (2.29) verschwindet der zusätzliche Term, denn

$$\frac{\partial S}{\partial \Delta l_o} = \tau \left\langle \frac{\partial L}{\partial \Delta l_o} \right\rangle = \tau \langle e^{-(q_1 + \Delta l_o - q_N)} - 1 \rangle = \tau p = 0 \quad . \quad (2.76)$$

Für Shirafujis Wahl ergibt sich hingegen

$$\frac{\partial S_{sh}}{\partial \Delta l_o} = \tau \left\langle \frac{\partial L_{sh}}{\partial \Delta l_o} \right\rangle = \tau \langle e^{-(q_1 + \Delta l_o - q_N)} \rangle = \tau p_{sh} = \tau \quad . \quad (2.77)$$

Setzt man (2.76) und (2.70) in (2.75), so erhält man wiederum die Verträglichkeitsbedingung (2.74) und genauso, wenn man die aus Shirafujis Wahl des Wechselwirkungspotentials folgende Energie  $E_{sh} = a/\tau^2$  und die Wirkung pro Periode  $S_{sh} = a/\tau$  zusammen mit (2.77) in (2.75) einsetzt. Diese Überlegungen zeigen, daß Shirafujis Stationaritätsbedingung für die Phase (Gleichung (26) in [67]) falsch ist.

## 2.5 Das lineare Stabilitätsproblem der 1-cnoidal-wave-Lösung

Die Kenntnis der Zwei-cnoidal-wave-Lösung versetzt einen in die Lage, das lineare Stabilitätsproblem der 1-cnoidal-wave-Lösung (s. Anhang C.5) auf einfache Weise zu lösen. Dazu muß man die Zwei-cnoidal-wave-Lösung in erster Ordnung in der Amplitude einer der beiden cnoidal-waves entwickeln.

Die Riemannmatrix  $B$  der Zwei-cnoidal-wave-Lösung ist eine  $2 \times 2$ -Matrix und  $\varphi_n$  ein zweidimensionaler Vektor mit Komponenten  $\varphi_n^j = nk_j - \nu_j t + \gamma_j$ ,  $j = 1, 2$ . Es sei  $\varepsilon := \exp(i\pi B_{22})$  und  $\kappa := B_{12}$ . Mit diesen Abkürzungen erhält man durch Entwickeln der Thetafunktionen in (2.34) in erster Ordnung in  $\varepsilon$ :

$$\begin{aligned} q_n(t) &= nd + \ln \left( \frac{\theta_3(\varphi_n^1)}{\theta_3(\varphi_{n+1}^1)} \right) \\ &+ \varepsilon \left\{ e^{2\pi i \varphi_n^2} \left( \frac{\theta_3(\varphi_n^1 + \kappa)}{\theta_3(\varphi_n^1)} - \frac{e^{2\pi i k_2} \theta_3(\varphi_{n+1}^1 + \kappa)}{\theta_3(\varphi_{n+1}^1)} \right) + \text{c.c.} \right\} \quad ; \end{aligned} \quad (2.78)$$

c.c. bedeutet hier das komplex Konjugierte des vorstehenden Terms. Es sei daran erinnert, daß  $iB$ ,  $k$ ,  $\nu$  und  $\gamma$  reell sind.

Die Gleichung (2.78) wurde bereits von Shirafuji hergeleitet [67]. Ihm war jedoch die Dispersionsrelation der Zwei-cnoidal-wave-Lösung unbekannt. Um zu zeigen, daß der Term in den geschweiften Klammern in der Tat eine Lösung des linearen Stabilitätsproblems ist, muß man zeigen, daß die Parameter  $\nu_1$  und  $d$  in (2.78) in erster Ordnung nicht von  $\varepsilon$  abhängen. Dazu hat man auch die Dispersionsrelation (2.48) in  $\varepsilon$  zu entwickeln. Die Dispersionsrelation der Zwei-cnoidal-wave-Lösung ist nicht mehr linear in den vier

abhängigen Parametern  $\nu_1, \nu_2, \kappa, A$ , sondern eine in  $\kappa$  transzendente Gleichung. Mit den Abkürzungen  $\delta^1 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \delta^2 := \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \delta^3 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}, \delta^4 := \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$  lautet (2.48) ausgeschrieben

$$\begin{pmatrix} \hat{\theta}[\delta^1](2k) - 2\hat{\theta}_{11}[\delta^1] - 4\hat{\theta}_{12}[\delta^1] - 2\hat{\theta}_{22}[\delta^1] \\ \hat{\theta}[\delta^2](2k) - 2\hat{\theta}_{11}[\delta^2] - 4\hat{\theta}_{12}[\delta^2] - 2\hat{\theta}_{22}[\delta^2] \\ \hat{\theta}[\delta^3](2k) - 2\hat{\theta}_{11}[\delta^3] - 4\hat{\theta}_{12}[\delta^3] - 2\hat{\theta}_{22}[\delta^3] \\ \hat{\theta}[\delta^4](2k) - 2\hat{\theta}_{11}[\delta^4] - 4\hat{\theta}_{12}[\delta^4] - 2\hat{\theta}_{22}[\delta^4] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ \nu_1^2 \\ \nu_1\nu_2 \\ \nu_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\theta}[\delta^1] \\ \hat{\theta}[\delta^2] \\ \hat{\theta}[\delta^3] \\ \hat{\theta}[\delta^4] \end{pmatrix}. \quad (2.79)$$

Entwickelt man die Thetafunktionen in den ersten beiden Zeilen der Matrix auf der linken Seite dieser Gleichung nach  $\varepsilon$ , so erhält man  $\hat{\theta}[\delta_i](z) = \hat{\theta}[\delta_i^i](z_1) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ . Daraus folgt, daß das obere linke Viertel der Matrix bis auf Terme der Ordnung  $\varepsilon^2$  mit der  $2 \times 2$ -Matrix in Gleichung (2.51) übereinstimmt und daß das obere rechte Viertel von der Ordnung  $\varepsilon^2$  ist. D.h.  $A$  und  $\nu_1$  gehorchen in erster Ordnung in  $\varepsilon$  der Dispersionsrelation der 1-cnoidal-wave-Lösung, und der Term in geschweiften Klammern in Gleichung (2.78) ist eine Lösung des linearen Stabilitätsproblems.

Entwickeln der beiden unteren Zeilen der Matrix in Gleichung (2.79) liefert die Dispersionsrelation des linearen Stabilitätsproblems der 1-cnoidal-wave-Lösung. Für gegebenes  $A$  und  $\nu_1$ , zum Beispiel aus Gleichung (2.51), erhält man  $\nu_2$  und  $\kappa$  als Funktion von  $k_1, k_2$  und  $B_{11}$ . Um Faktoren  $\pi$  zu vermeiden, setze  $q_2 := 2\pi k_2, \omega_2 := 2\pi\nu_2$ . Dann ergeben sich die beiden Gleichungen

$$A(e^{iq_2}\hat{\theta}_j(2k_1 + \kappa) + e^{-iq_2}\hat{\theta}_j(2k_1 - \kappa)) - 4\nu_1^2\hat{\theta}_j''(\kappa) - 4i\nu_1\omega_2\hat{\theta}_j'(\kappa) + \omega_2^2\hat{\theta}_j(\kappa) = 2\hat{\theta}_j(\kappa), \quad (2.80)$$

$j = 2, 3$ . Diese Gleichungen lassen sich nach  $\omega_2$  auflösen:

$$\begin{aligned} \omega_2 &= 2i\nu_1 d_\kappa \ln(\hat{\theta}_j(\kappa)) \\ &\pm \left[ 2 - A \left( \frac{e^{iq_2}\hat{\theta}_j(2k_1 + \kappa)}{\hat{\theta}_j(\kappa)} + \frac{e^{-iq_2}\hat{\theta}_j(2k_1 - \kappa)}{\hat{\theta}_j(\kappa)} \right) + 4\nu_1^2 d_\kappa^2 \ln(\hat{\theta}_j(\kappa)) \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (2.81)$$

$j = 2, 3$ . Die Differenz dieser beiden Gleichungen ist eine implizite Bestimmungsgleichung für  $\kappa$ . Im harmonischen Limes, sowie im Solitonlimes, die in den nachfolgenden Unterabschnitten diskutiert werden, ist es möglich, diese Gleichungen nach  $\kappa$  aufzulösen. Im allgemeinen Fall konnte  $\kappa$  als Funktion von  $B_{11}, k_1$  und  $k_2$  jedoch nur numerisch bestimmt werden. Kennt man  $\kappa$ , so ergibt sich  $\omega_2$  aus einer der beiden Gleichungen (2.81).  $\omega_2$  ist die Frequenz eines Phonons als Funktion der Wellenzahl  $q_2$  in Anwesenheit einer cnoidal-wave mit Amplitude  $B_{11}$  und Wellenzahl  $k_1$ . Wählt man  $j = 3$  in Gleichung (2.81) und als Vorzeichen der Wurzel Plus, so sieht man leicht, daß diese Gleichung im Limes  $\exp(i\pi B_{11}) \rightarrow 0+$  in die bekannte phononische Dispersionsrelation  $\omega_2 = 2|\sin(q_2/2)|$  übergeht, und zwar unabhängig von  $\kappa$ , solange  $\kappa$  nur beschränkt ist. Im nächsten Unterabschnitt wird der harmonische Limes im Detail betrachtet.

Wie im vorangegangenen Unterabschnitt lassen sich die Thetafunktionen mit Parameter  $2B$  mit Hilfe des Additionstheorems (D.10) umschreiben in Thetafunktionen mit

Parameter  $B$ . Auf diese Weise kann man sich der Quadratwurzel in Gleichung (2.81) entledigen. Das Resultat findet sich in Anhang G. Anders als im vorangegangenen Unterabschnitt ist die Vereinfachung gegenüber (2.81) vergleichsweise gering. Man erhält zwar mit Gleichung (G.11) einen sehr schönen Ausdruck für  $\omega_2(0)$  als Funktion von  $B_{11}$ ,  $k_1$  und  $\kappa$ , die Bestimmungsgleichung (G.10) für  $\kappa$  als Funktion von  $k_1$  und  $B_{11}$  ist jedoch unhandlich. Die Gleichungen (G.10) und (G.11) dürften vor allem für die numerische Auswertung des linearen Stabilitätsproblems von Nutzen sein. Für die analytische Auswertung der Dispersion des linearen Stabilitätsproblems im harmonischen Limes und im Solitonlimes in Kapitel 2.7 und 2.8 wurden die Gleichungen (2.81) benutzt.

Die Gleichungen (2.81) ergeben entsprechend der Konvention aus Kapitel 2.2 die Phononenfrequenz  $\omega_2$  für verschwindenden Druck.  $\omega_2(0)$ , die zugehörige Frequenz für verschwindende Ausdehnung  $\Delta l = 0$ , ergibt sich aus  $\omega_2$  durch Division durch  $\sqrt{A}$ . Daraus ersieht man, daß  $\kappa$  unabhängig von den Randbedingungen ist. Dasselbe gilt für die Stabilitätsexponenten, die sich nach Anhang C.5 zu

$$\eta = \omega_2 \tau_1 = \omega_2 / \nu_1 = \omega_2(0) / \nu_1(0) \quad (2.82)$$

ergeben.

Bedenkt man, daß die Lösungen des linearen Stabilitätsproblems, die durch die geschweiften Klammern in Gleichung (2.78) gegeben sind, linear superponierbar sind und daß  $\gamma_2$  frei wählbar ist, so sieht man, daß der erste Term,

$$\delta q_n(t) = e^{i(q_2 n - \omega_2 t)} \left( \frac{\theta_3(\varphi_n^1 + \kappa)}{\theta_3(\varphi_n^1)} - \frac{e^{iq_2} \theta_3(\varphi_{n+1}^1 + \kappa)}{\theta_3(\varphi_{n+1}^1)} \right), \quad (2.83)$$

in den geschweiften Klammern in (2.81) und sein komplex Konjugiertes das lineare Stabilitätsproblem unabhängig lösen.

Für jeden Wert von  $q_2 = 2\pi j/N$ ,  $j = 1, \dots, N-1$ ,  $q_2 \neq 2\pi k_1$  erhält man einen Stabilitätsexponenten  $\eta_j$ , wie man explizit im harmonischen und im Solitonlimes sehen kann. Da das komplex Konjugierte der Gleichung (2.83) eine linear unabhängige Lösung des linearen Stabilitätsproblems liefert, erhält man aus (2.81) und (2.83) insgesamt  $2N-4$  linear unabhängige Lösungen. Es ist leicht zu sehen, daß (2.81) mit  $q_2 = 0$  für alle Werte von  $k_1$  und  $B_{11}$  durch  $\omega_2 = \kappa = 0$  gelöst wird. Die rechte Seite von (2.83) verschwindet aber, wenn  $q_2 = \omega_2 = \kappa = 0$  ist, und man erhält keine zusätzliche nichttriviale Lösung des linearen Stabilitätsproblems. Eine analoge Aussage gilt für  $k_1 = k_2$ . Eine ausführlichere Diskussion der Struktur der Lösungen der (2.81), (2.83) des linearen Stabilitätsproblems wurde als Anhang H in diese Arbeit aufgenommen.

Der Vollständigkeit halber seien hier noch zwei Paare von Lösungen für verschwindende Stabilitätsexponenten angegeben. Nach Anhang C.5 hängen sie mit den Translationssymmetrien in Ort und Zeit zusammen. Das eine ist durch die Translationsmode  $q_n(t) = c_1 + c_2 t$  gegeben, das andere ergibt sich durch Ableiten der 1-cnoidal-wave-Lösung nach den zwei unabhängigen kontinuierlichen Parametern  $\gamma_1$  bzw.  $B_{11}$ .

Im Prinzip kann man das in diesem Unterkapitel vorgestellte Verfahren auch zur Lösung des linearen Stabilitätsproblems der Mehr-cnoidal-wave-Lösungen verwenden.

Die Dispersionsrelationen, die man dann analog zu (2.81) erhält, werden jedoch genau wie die vollen Dispersionsrelationen (2.48) mit wachsender Zahl der cnoidal-waves immer komplizierter und sind einer analytischen Behandlung nach heutigen Kenntnissen kaum zugänglich [57]. Es sei außerdem angemerkt, daß das Verfahren zur Lösung des linearen Stabilitätsproblems der  $(N - 1)$ -cnoidal-wave-Lösung der  $N$ -Teilchenkette prinzipiell nicht geeignet ist, da für die  $N$ -Teilchenkette keine  $N$ -cnoidal-wave-Lösung existiert.

## 2.6 Semiklassische Quantisierung — der allgemeine Fall

In den beiden vorangegangenen Unterkapiteln wurden fast alle zur Auswertung der semiklassischen Quantisierungsformeln benötigten Eingangsdaten berechnet. Energie und Wirkung der 1-cnoidal-wave-Lösung sind durch die Gleichungen (2.71) und (2.72) gegeben. Die Stabilitätsexponenten folgen aus (2.81) und (2.82). Zu bestimmen bleibt einzig der topologische Index  $\nu$  auf der rechten Seite der Gleichungen (2.27) bzw. (2.23). Er ergibt sich durch Vergleich mit dem harmonischen Limes im nächsten Unterabschnitt zu  $\nu = 1/2$ .

Alle Größen, die in die semiklassischen Quantisierungsbedingungen aus Kapitel 2.1 eingehen, liegen als Funktionen des Parameters  $B_{11}$  und nicht als Funktionen der Basisperiode  $\tau(0)$  vor. Der Zusammenhang zwischen  $\tau(0)$  und  $B_{11}$  ist durch die Dispersionsrelation (2.66) gegeben. Zur numerischen Auswertung der semiklassischen Quantisierungsformeln (2.25), (2.27) beispielsweise löst man (2.27) nach  $B_{11}$  auf.  $B_{11}$  ergibt sich so in Abhängigkeit der Quantenzahlen  $m$  und  $k$ . Die Energieniveaus folgen durch Einsetzen von  $B_{11}$  als Funktion der Quantenzahlen in Gleichung (2.25).

Den einfachsten Spezialfall sowohl von (2.15), (2.23) als auch von (2.25), (2.27) erhält man für  $N = 2$ . Dann gibt es keine Beiträge, die von Stabilitätsexponenten herrühren, und die semiklassischen Quantisierungsbedingungen lauten

$$\varepsilon = E \quad , \quad (m + 1/2)2\pi\hbar = S + E\tau(0) \quad . \quad (2.84)$$

Das sind die EBK-Bedingungen für ein eindimensionales System, denn die rechte Seite dieser Gleichung ist gleich dem Wirkungsintegral  $J$ .

$$J = \oint pdq = \int_0^{\tau(0)} dt \dot{q}^2 = 2\langle T \rangle = 2a\nu(0) = S + E\tau(0) \quad . \quad (2.85)$$

Im nächsten Unterabschnitt wird gezeigt, daß die semiklassischen Quantisierungsbedingungen (2.25), (2.27) für  $N > 2$  nicht mehr mit den EBK-Bedingungen übereinstimmen.

Es wurde in dieser Arbeit auf eine numerische Untersuchung der Gleichungen (2.25), (2.27) verzichtet. Die wesentlichen Eigenschaften dieser Gleichungen lassen sich in zwei analytisch zugänglichen Grenzfällen, dem harmonischen Limes und dem Solitonlimes diskutieren. Diese Diskussion erfolgt in den nächsten drei Unterabschnitten.

## 2.7 Semiklassische Quantisierung im harmonischen Limes

Dieser Unterabschnitt ist der Betrachtung des harmonischen Limes der semiklassischen Quantisierungsbedingungen (2.25) und (2.27) gewidmet. Nach Anhang A ist der harmonische Limes im Einheitensystem dieser Arbeit gleichbedeutend mit dem Limes  $\hbar \rightarrow 0+$ . Im folgenden werden die semiklassischen Quantisierungsbedingungen bis zur zweiten Ordnung in  $\hbar$  aufgelöst. Die Betrachtung wird für das 3-Teilchensystem vorgenommen, da sich die Formeln dann etwas kompakter schreiben lassen und die Verallgemeinerung auf  $N$  Teilchen evident ist. Für das 3-Teilchensystem gibt es nur einen einzigen nicht verschwindenden Stabilitätsexponenten, und es ist

$$\xi = -\hbar(m + 1/2)\omega_2(0)/\nu_1(0) \quad . \quad (2.86)$$

Damit lassen sich die semiklassischen Quantisierungsbedingungen (2.25) und (2.27) in eine Form bringen, die für die Durchführung des harmonischen Limes geeignet ist:

$$\varepsilon = -S\nu_1(0) + (n + v)\hbar\omega_1(0) + (m + 1/2)\hbar\omega_2(0) \quad , \quad (2.87)$$

$$E + S\nu_1(0) = (n + v)\hbar\omega_1(0) + (m + 1/2)\hbar\omega_1(0)\frac{d\omega_2(0)}{d\omega_1(0)} \quad . \quad (2.88)$$

Hier wurde die Bezeichnung  $\omega_1(0) := 2\pi\nu_1(0)$  eingeführt. Gleichung (2.88) bestimmt den Parameter  $B_{11}$  als Funktion von  $\hbar$ , sowie als Funktion der Quantenzahlen  $m$  und  $n$ .  $E + S\nu_1(0) = a\nu_1^2(0)$  ist für alle endlichen  $B_{11}$  positiv. Wenn  $\hbar$  bei festem  $m$  und  $n$  gegen  $0+$  geht, muß deshalb notwendig  $B_{11}$  gegen  $i\infty$  gehen. In diesem Grenzfall werden nun alle für (2.87) und (2.88) benötigten Eingangsdaten in der jeweils benötigten Ordnung berechnet. Dabei finden die Formeln (D.14) bis (D.16) Verwendung.

Geeigneter Entwicklungsparameter für die verschiedenen Größen ist  $\delta := \exp(2\pi i B_{11})$ . Für  $\nu(0)$  ergibt sich direkt aus der Definition

$$\nu(0) = \frac{1}{\pi} \sin(\pi k) + \frac{4}{\pi} \sin^3(\pi k)\delta + \frac{12}{\pi} \sin^3(\pi k)\delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3) \quad . \quad (2.89)$$

$\nu^{-2}$  folgt durch nochmaliges Ableiten aus der Reihendarstellung (D.14) zu

$$\nu^{-2} = \frac{\pi^2}{\sin^2(\pi k)} - 8\pi^2 \cos(2\pi k)\delta - 8\pi^2(\cos(2\pi k) + 2\cos(4\pi k))\delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3) \quad . \quad (2.90)$$

Mit Gleichung (2.64) und (2.66) folgt daraus

$$1/A = 1 + 16 \sin^4(\pi k)\delta + 96 \sin^4(\pi k)\delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3) \quad . \quad (2.91)$$

Den harmonischen Limes von  $a$  liest man wieder direkt aus der Definition (2.69) ab,

$$a = 16\pi^2 N \sin^2(\pi k)\delta + 32\pi^2 N(3 \sin^2(\pi k) - 2 \sin^4(\pi k))\delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3) \quad . \quad (2.92)$$

(2.89), (2.91) und (2.92) implizieren nun

$$E = 32N \sin^4(\pi k) \delta + \mathcal{O}(\delta^2) \quad , \quad (2.93)$$

$$S\nu_1(0) = 64N \sin^6(\pi k) \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3) \quad . \quad (2.94)$$

Die Untersuchung der Dispersion des linearen Stabilitätsproblems (2.81) ist etwas aufwendiger. Die dazu benötigten Entwicklungen der Thetafunktionen bis zur Ordnung  $\delta$  sind in Anhang I aufgelistet. Für  $\kappa$  ergibt sich in führender Ordnung

$$\text{th}(-\pi i \kappa) = \frac{\sin(\pi k_1) \sin(\pi k_2)}{1 + \cos(\pi k_1) \cos(\pi k_2)} \quad , \quad (2.95)$$

$$\Leftrightarrow -i\kappa = \frac{1}{\pi} \ln \left( \left| \frac{\sin(\pi(k_1 + k_2))}{\sin(\pi(k_1 - k_2))} \right| \right) \quad . \quad (2.96)$$

Da  $\kappa$  in der Entwicklung von  $\omega_2(0)$  erst in der ersten Ordnung in  $\delta$  vorkommt, werden die  $\mathcal{O}(\delta)$ -Korrekturen zu  $\kappa$  zur Berechnung von  $\omega_2(0)$  in erster Ordnung in  $\delta$  nicht benötigt. Setzt man  $\kappa$  aus Gleichung (2.95) wieder in die Gleichung (2.81) (für  $j = 3$ ) ein, so folgt

$$\omega_2(0) = \frac{1}{\pi} \sin(\pi k_2) + \mathcal{O}(\delta^2) \quad . \quad (2.97)$$

In erster Ordnung in  $\delta$  gibt es keine Korrekturen zu  $\omega_2(0)$ . Diese Tatsache wurde für die 3-Teilchenkette auch numerisch verifiziert. (2.97) impliziert, daß

$$\frac{d\omega_2(0)}{d\omega_1(0)} = \mathcal{O}(\delta) \quad . \quad (2.98)$$

Da die rechte Seite der Gleichung (2.88) linear in  $\hbar$  ist und die linke Seite in niedrigster Ordnung linear in  $\delta$ , hängt  $\delta$  in niedrigster Ordnung linear von  $\hbar$  ab. (2.87) lautet somit in niedrigster Ordnung

$$\varepsilon = (n + v)\hbar 2 \sin(\pi k_1) + (m + 1/2)\hbar 2 \sin(\pi k_2) + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad . \quad (2.99)$$

Durch Vergleich mit der harmonischen 3-Teilchenkette folgt  $v = 1/2$ . Wegen (2.97) liefert  $\omega_2(0)$  in Gleichung (2.87) keine Korrekturen der Ordnung  $\hbar$ . Unter Berücksichtigung von (2.89), (2.93), (2.94) und (2.98) ergibt sich  $\delta$  als Funktion von  $\hbar$  in niedrigster Ordnung zu

$$\delta = \frac{n + 1/2}{16N} \sin^{-3}(\pi k_1) \hbar \quad . \quad (2.100)$$

Mit (2.89) und (2.94) folgen daraus die  $\mathcal{O}(\hbar^2)$ -Korrekturen zu  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon = (2n + 1)\hbar \sin(\pi k_1) + (2m + 1)\hbar \sin(\pi k_2) + \frac{(2n + 1)^2 \hbar^2}{16N} + \mathcal{O}(\hbar^3) \quad . \quad (2.101)$$

Für beliebige Teilchenzahlen hat man hier den zweiten Term auf der rechten Seite durch eine entsprechende Summe zu ersetzen. Die Terme erster Ordnung in  $\hbar$  geben dann das Spektrum im harmonischen Limes in korrekter Weise wieder.

Für  $N = 2$  entfällt der zweite Term in Gleichung (2.101), und es ist  $k_1 = 1/2$ . Die Grundzustandsenergie ergibt sich also zu

$$\varepsilon = \hbar + \frac{\hbar^2}{32} + \mathcal{O}(\hbar^3) \quad , \quad (2.102)$$

in Übereinstimmung mit dem von Fowler und Frahm angegebenen Ergebnis der EBK-Näherung [28]. Für  $N > 2$  kann das Ergebnis (2.101) nicht mehr mit dem EBK-Resultat übereinstimmen. Es ist gezeigt worden [56], daß die EBK-Quantisierung mit den diskreten Symmetrien der  $N$ -Teilchen-Todakette verträglich ist. Diese führen für  $N = 3$  dazu, daß die Energieniveaus symmetrisch in den Quantenzahlen  $m$  und  $n$  sind, eine Bedingung, die Gleichung (2.101) offensichtlich verletzt. Hier offenbart sich die Asymmetrie des ganzen Quantisierungsverfahrens.

Die Interpretation der Gleichung (2.101) ist, daß außer der Grundmode, um die herum entwickelt wurde, alle anderen Moden nur in harmonischer Näherung behandelt werden. Einzig die Grundmode, die durch  $k_1$  charakterisiert ist, erfährt eine  $\mathcal{O}(\hbar^2)$ -Korrektur. Da sie in (2.101) willkürlich ist, repräsentiert (2.101) je nach Wahl der Grundmode ein anderes Spektrum. Diese Situation ist äußerst unbefriedigend. Sie läßt sich bereinigen, indem man (2.101) *ad hoc* symmetrisch ergänzt, im 3-Teilchen-Fall beispielsweise durch Hinzuaddieren eines Terms  $(2m+1)^2\hbar^2/16N$ . Dann ist nicht nur die Symmetrie richtig berücksichtigt, sondern auch, im Falle dreier Teilchen zumindest, die Übereinstimmung mit den exakten Ergebnissen für die niedrigliegenden Energieniveaus erstaunlich gut.

Mit denselben Konventionen wie oben folgt aus den Millerschen Quantisierungsbedingungen

$$\varepsilon = E = (n+v)\hbar\omega_1(0) + (m+1/2)\hbar\omega_2(0) - S\nu(0) \quad . \quad (2.103)$$

Löst man diese Gleichung in niedrigster Ordnung nach  $\delta$  als Funktion von  $\hbar$  auf und setzt das Ergebnis wieder ein, so ergibt sich

$$\varepsilon = (2n+1)\hbar \sin(\pi k_1) + (2m+1)\hbar \sin(\pi k_2) + \frac{((2n+1)^2 - (2m+1)^2)\hbar^2}{16N} + \mathcal{O}(\hbar^3) \quad . \quad (2.104)$$

Hier wurde benutzt, daß für die 3-Teilchen-Kette  $\sin(\pi k_1) = \sin(\pi k_2)$  ist. Diese Gleichung weist dieselben Unzulänglichkeiten auf wie Gleichung (2.101).

Zusammenfassend muß man konstatieren, daß die semiklassischen Quantisierungsbedingungen, wie sie in Kapitel 2.1 hergeleitet wurden, für die  $N$ -Teilchen-Todakette keine brauchbare Näherung darstellen, die über die harmonische Näherung hinausginge. Einziger Hoffnungsschimmer ist die *ad hoc* eingeführte symmetrisierte Form der Gleichung (2.101). Im Solitonlimes sind die Verhältnisse allerdings günstiger. Die ersten Korrekturen zur semiklassischen Dispersionsrelation sind nicht von der Ordnung  $\hbar^2$ , sondern

von der Ordnung  $\hbar$ . Im übernächsten Unterabschnitt wird sich herausstellen, daß die semiklassische Dispersionsrelation des Solitons, die man im Solitonlimes der Gleichungen (2.25) und (2.27) erhält, in guter Übereinstimmung mit den Betheansatzergebnissen ist.

## 2.8 Solitonlimes der 1-cnoidal-wave-Lösung

Im Sprachgebrauch dieser Arbeit ist ein Soliton eine Anregung, die es nur auf der unendlich langen Kette gibt. Es gehört zum diskreten Teil des Spektrums der inversen Streutheorie [26, 53, 23], die nur für unendlich ausgedehnte Systeme Sinn macht. Andere Autoren, darunter auch Toda [73], sprechen von einem „Soliton unter periodischen Randbedingungen“ und meinen damit eine 1-cnoidal-wave-Lösung mit einem einzigen Buckel ( $k = 1/N$ ). Diese Bezeichnung scheint problematisch. Denn je nach Wert des Parameters  $B$  hat eine solche 1-cnoidal-wave-Lösung mehr phononischen oder mehr solitonischen Charakter, wie von Boyd [10] am Beispiel der KdV-Gleichung gezeigt wurde. Es gibt kein klares Unterscheidungskriterium zwischen Phononen und Solitonen auf der periodischen Kette.

Das Soliton erhält man als Grenzfall einer 1-cnoidal-wave-Lösung, wenn man den äußeren Parameter Teilchenzahl gegen unendlich gehen läßt und gleichzeitig den inneren Parameter  $B$  auf definierte Art und Weise gegen Null. Dieser Grenzfall heißt Solitonlimes. Man setzt

$$i\pi/B = \alpha N \quad , \quad (2.105)$$

wobei  $\alpha > 0$  ein neuer freier Parameter ist, der Solitonparameter. Damit sich das Soliton nach Durchführung des Limes im Endlichen befindet, hat man die Phase  $\gamma$  in  $\varphi_n$  gemäß

$$\gamma \rightarrow 1/2 + \gamma/\alpha N \quad (2.106)$$

zu ersetzen. Das entspricht einer Ersetzung von  $\theta_3(z|B)$  durch  $\theta_4(z|B)$  in den Gleichungen (2.34) und (2.78).

Alle für die semiklassische Quantisierung relevanten Größen lassen sich im Solitonlimes berechnen. Die semiklassischen Quantisierungsbedingungen (2.25) und (2.27) gehen auf die in Kapitel 2.1 beschriebene Weise gegen die semiklassisch korrigierte Dispersionsrelation des Solitons. Es sei aber daran erinnert, daß die periodische Kette im Solitonlimes nicht vollständig äquivalent zur unendlichen Kette, die ein Soliton trägt, ist [73]. Beispielsweise ist der Gesamtimpuls der Kette mit einer cnoidal-wave nach Konstruktion der Lösungen (2.34), die ja im Schwerpunktsystem berechnet wurden, gleich Null. Folglich verschwindet er auch im Solitonlimes. Der Gesamtimpuls der unendlichen Kette mit einem Soliton ist hingegen ungleich Null [74]. Ein anderes Beispiel für diese Inäquivalenz ist die Gesamtausdehnung der Kette. Bei verschwindendem Druck ist sie für die 1-cnoidal-wave-Lösung immer größer als Null:  $\Delta l_o > 0$ . Ein Soliton auf der unendlichen Kette komprimiert diese jedoch [74]. Unterschiede der soeben beschriebenen Art können immer dann auftreten, wenn die entsprechende Größe durch Summation

über alle Teilchen berechnet wird. Sie sind dann Ausdruck der Tatsache, daß die 1-cnoidal-wave-Lösung nicht gleichmäßig gegen die Solitonlösung der unendlichen Kette konvergiert und deshalb nicht unbedingt alle Limites vertauschen.

Die quantenmechanische Behandlung der Todakette im Rahmen der QISM [69] oder des Betheansatzes [70, 58] geht von periodischen Randbedingungen aus. Das entsprechende klassische Vergleichssystem ist deshalb die periodische Kette im thermodynamischen Limes, nicht die unendliche Kette. Insbesondere ist die quantenmechanische Dispersionskurve des Solitons aus dem Betheansatz [58] mit der semiklassischen Dispersionskurve der 1-cnoidal-wave-Lösung im Solitonlimes zu vergleichen.

Es werden nun alle zur Berechnung der semiklassischen Dispersionsrelation benötigten Größen bis zur jeweils benötigten Ordnung in  $1/N$  im Solitonlimes berechnet. Dazu bedient man sich durchgängig der Gaußreihendarstellungen (D.11) für die Thetafunktionen bzw. der entsprechenden Reihen (D.19) bis (D.22) für deren logarithmische Ableitungen. Ein Teil der Ergebnisse wurde bereits 1970 von Toda [73] erzielt, ein anderer Teil wird hier erstmals hergeleitet. Insbesondere ist die Behandlung des linearen Stabilitätsproblems im Solitonlimes neu.

Betrachte zunächst die Dispersionsrelationen der 1-cnoidal-wave-Lösung. Im Solitonlimes (2.105), (2.106) gehen die Gleichungen (2.62) und (2.66) mit Hilfe von (D.19), (D.11) in

$$N\nu = \frac{\text{sh}(\alpha)}{\alpha} \left( 1 - \frac{\text{sh}^2(\alpha)}{\alpha N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right) , \quad (2.107)$$

$$N\nu(0) = \frac{\text{sh}(\alpha)}{\alpha} \left( 1 - \frac{\alpha}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right) \quad (2.108)$$

über. Die Gleichungen (2.64) und (2.66) implizieren damit

$$A = 1 - 2(\text{sh}^2(\alpha) - \alpha^2)/\alpha N + \mathcal{O}(1/N^2) . \quad (2.109)$$

Aus dieser Gleichung folgt  $\Delta l_o$  im Solitonlimes:

$$\Delta l_o = -N \ln(A) \longrightarrow 2(\text{sh}^2(\alpha) - \alpha^2)/\alpha . \quad (2.110)$$

$\Delta l_o$  ist für alle positiven  $\alpha$  größer als Null. Wegen (2.107) and (2.108) ist die Phase  $\varphi_n$  der 1-cnoidal-wave-Lösungen in beiden Fällen von der Form

$$\varphi_n = 1/2 + (n\alpha - \text{sh}(\alpha)t + \gamma)/\alpha N + \mathcal{O}(1/N^2) . \quad (2.111)$$

Setzt man nun  $\phi_n := n\alpha - \text{sh}(\alpha)t + \gamma$ , so ergibt sich unter Verwendung von (D.11) der Solitonlimes der 1-cnoidal-wave-Lösung zu

$$q_n(t) = -\alpha + \ln \left( \frac{1 + e^{-2\phi_n}}{1 + e^{-2\phi_{n+1}}} \right) . \quad (2.112)$$

Das ist die bekannte Solitonlösung der unendlichen Todakette. (2.112) gilt für beliebiges  $n$ , sowohl für verschwindenden Druck als auch für verschwindende Längenänderung,  $\Delta l = 0$ . Das Soliton (2.112) übt auf die  $n$ -te Feder die Kraft

$$e^{-(q_{n+1}-q_n)} - 1 = \text{sh}^2(\alpha) \text{sech}^2(\phi_{n+1}) \quad (2.113)$$

aus. Dies ist die wohl bekannteste Darstellung des Todasolitons [74].

Als nächstes werden Energie und Wirkung pro Teilchen im Solitonlimes berechnet. Sie ergeben sich aus den Gleichungen (2.69) bis (2.72) und stimmen für  $p = 0$  und  $\Delta l = 0$  überein. Die Reihe für  $a$ , (2.69), geht im Solitonlimes in ein Integral über,

$$a/N^2 \rightarrow 4\pi \int_0^\infty dx \text{csch}^2(\pi x/\alpha) \sin^2(x) = 2(\alpha^2 \text{cth}(\alpha) - \alpha) \quad . \quad (2.114)$$

Mit  $\Delta l_o$  aus (2.110) und  $\nu$  und  $\nu(0)$  aus (2.107), (2.108) implizieren (2.70) bis (2.72)

$$E = 2(\text{ch}(\alpha)\text{sh}(\alpha) - \alpha) \quad , \quad (2.115)$$

$$S/N = 2\alpha \text{ch}(\alpha) - 4\text{sh}(\alpha) + 2\alpha^2/\text{sh}(\alpha) \quad . \quad (2.116)$$

Diese Größen kann man auch unter Benutzung von (2.112) und (2.113) für das Soliton auf der unendlichen Kette berechnen. Das Ergebnis ist dasselbe, aber das ist ein Zufall. Da zur Berechnung von  $E$  und  $S/N$  eine Summe über alle Teilchen auszuführen ist, wäre es a priori nicht entscheidbar gewesen, ob beide Ergebnisse übereinstimmen. Betrachtet man die Todakette als Gasmodell mit dem Wechselwirkungspotential  $W_{sh} = e^{-x} - 1$  (vgl. Kapitel 2.4), so bleiben die Bewegungsgleichungen unverändert und das Soliton (2.112) ist eine Lösung der Bewegungsgleichungen der unendlichen Kette. In diesem Fall stimmen aber die Energie aus dem Solitonlimes und die direkt für die unendliche Kette berechnete Energie nicht mehr überein. Die Differenz der beiden Energien beträgt  $2\text{sh}^2(\alpha)/\alpha$ .

Im Solitonlimes läßt sich die Verträglichkeitsbedingung (2.74) direkt verifizieren. (2.107), (2.110) und (2.114) implizieren

$$(N\nu)^2 = \frac{d\Delta l_o}{d(a/N^2)} \rightarrow \frac{d(\text{sh}^2(\alpha) - \alpha^2)/\alpha}{d(\alpha^2 \text{cth}(\alpha) - \alpha)} = \frac{\text{sh}^2(\alpha)}{\alpha^2} \quad . \quad (2.117)$$

Nach Kapitel 2.3 folgt daraus, daß im Solitonlimes die Gleichung  $dS/d\tau = -E$  erfüllt ist, eine Tatsache, die man auch unter Ausnutzung der Dispersionsrelationen (2.107), (2.108) aus (2.115) und (2.116) folgern kann.

Zur Berechnung der Summe der Stabilitätsexponenten in (2.25) und (2.27) benötigt man  $\omega_2$  aus einer der Gleichungen (2.81) inklusive der  $1/N$ -Korrekturen im Solitonlimes. Die erforderlichen Rechnungen sind langwierig, aber elementar. Als erstes benötigt man die Kopplung  $\kappa$  in führender Ordnung. Man erhält sie aus der Differenz der beiden Gleichungen (2.81) im Solitonlimes. Es sei

$$\kappa_1 := 2i\alpha N\kappa \quad . \quad (2.118)$$

Setzt man für alle logarithmischen Ableitungen und alle Quotienten der Thetafunktionen in der Differenz der Gleichungen (2.81) die Reihenentwicklungen (D.20) und (D.21) aus Anhang D ein, so sieht man, daß die führenden Terme der Gleichung für  $\kappa_1$  von der Ordnung  $\exp(-\alpha N/2)$  sind <sup>4</sup>. In dieser führenden Ordnung läßt sich die Gleichung nach  $\kappa_1$  auflösen mit dem Ergebnis

$$e^{-i\kappa_1} = 1 - \frac{(e^{2\alpha} - 1)(e^{iq_2} - 1)}{(e^{\alpha+iq_2/2} - 1)^2} . \quad (2.119)$$

Das heißt,  $\kappa_1$  stimmt mit der Phasenverschiebung, die ein „nichtlineares Phonon“ <sup>5</sup> durch Streuung an einem Soliton erfährt, überein [71]. Der Logarithmus der Gleichung (2.119) wird eindeutig, wenn man fordert, daß  $\kappa_1$  als Funktion von  $q_2$  für  $0 \leq q_2 \leq 2\pi$  stetig ist und für  $\alpha \rightarrow 0+$  im Intervall  $(0, 2\pi]$  verschwindet. Er ergibt sich zu

$$\tan(\kappa_1/4) = -\text{th}(\alpha/2) \cot(q_2/4) \quad , \quad 0 \leq q_2 \leq 2\pi \quad . \quad (2.120)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung kann man nun  $\omega_2$  bis zur Ordnung  $1/N$  berechnen. Setzt man sie zusammen mit (2.107), (2.109) und (2.118) in eine der beiden Gleichungen (2.81), so folgt

$$\omega_2 = 2 \sin(q_2/2) + \frac{1}{N} \left[ \kappa_1 \left( \cos(q_2/2) - \frac{\text{sh}(\alpha)}{\alpha} \right) - \frac{2\text{sh}^2(\alpha)}{\alpha} \sin(q_2/2) \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) . \quad (2.121)$$

Im Solitonlimes geht  $\omega_2$  als Funktion von  $q_2$  also gegen die harmonische Dispersion. Der Grund dafür ist, daß das Soliton die Kette nur lokal stört. Die  $1/N$ -Korrekturen zu  $\omega_2$  enthalten die semiklassischen Korrekturen zur Energie und zum Impuls des Solitons. Sie werden im nächsten Unterabschnitt zur Bestimmung der semiklassischen Dispersionsrelation benötigt.

Mit (2.111) und (2.118) erhält man schließlich aus (2.83) die Lösungen des linearen Stabilitätsproblems im Solitonlimes. Sie lauten

$$\delta q_n(t) = e^{i(nq_2 - \omega_2 t - \kappa_1/2)} \left[ \frac{1 + e^{-2\phi_n + i\kappa_1}}{1 + e^{-2\phi_n}} - \frac{e^{iq_2}(1 + e^{-2\phi_{n+1} + i\kappa_1})}{1 + e^{-2\phi_{n+1}}} \right] . \quad (2.122)$$

$\omega_2$  ist hier mit  $q_2$  durch die harmonische Dispersion  $\omega_2 = 2 \sin(q_2/2)$  verknüpft. Es war bloß eine Frage hinreichender Ausdauer, (2.122) durch direktes Einsetzen in die Bewegungsgleichungen des linearen Stabilitätsproblems des Solitons zu verifizieren. Da die Lösung des linearen Stabilitätsproblems  $\delta q_n(t)$  eine lokale Größe ist, sollte die Betrachtung der unendlichen Kette mit einem Soliton dasselbe Ergebnis liefern. Das ist

---

<sup>4</sup>Eine Auflistung der Thetafunktionen in der Differenz der beiden Gleichungen (2.81) in führender Ordnung ist in Anhang J gegeben.

<sup>5</sup>So bezeichnen Theodorakopoulos und Mertens eine Lösung des linearen Stabilitätsproblems des Solitons.

in der Tat der Fall. Die Gleichungen (2.120) und (2.122) bekommt man auf einfachere Art, wenn man die in [71] geschilderten Methoden benutzt. Man erhält auf diese Weise jedoch nicht die für die semiklassische Quantisierung essentiellen  $1/N$ -Korrekturen zu  $\omega_2$ .

## 2.9 Semiklassische Dispersionsrelationen des Solitons

Nach den Vorarbeiten des vorangegangenen Kapitels läßt sich nun der Solitonlimes in den Gleichungen (2.25) und (2.27) durchführen. Wie weiter oben erläutert, ist zunächst nur die Behandlung des Systems bei fester Länge sinnvoll, da sich die klassische und die quantenmechanische Bedingung für das Verschwinden des Drucks unterscheiden. Es sei zuerst der Fall  $\Delta l = 0$  betrachtet. Die semiklassische Vakuumenergie ist

$$\varepsilon_o = \sum_{q_2} \hbar \sin(q_2/2) \quad . \quad (2.123)$$

Die Anregungsenergien des Solitons relativ zum Vakuum erhält man, wenn man  $\varepsilon_o$  von der Energiegleichung (2.25) abzieht und anschließend den Solitonlimes durchführt. Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung (2.25) gibt dann die klassische Solitonenergie (2.115) und der zweite Term semiklassische Korrekturen. Teilt man die Gleichung (2.27) durch  $N$ , so kann man sie, wie in Kapitel 2.1 beschrieben, als Impulsgleichung auffassen. Für den ersten Term auf der rechten Seite folgt mit (2.116), (2.115) und (2.108) im Solitonlimes:

$$(S + E\tau(0))/N \rightarrow p_{kl} = 4(\alpha \operatorname{ch}(\alpha) - \operatorname{sh}(\alpha)) \quad . \quad (2.124)$$

Das ist der klassische Solitonimpuls [58]. Der zweite Term gibt wiederum semiklassische Korrekturen.

Im folgenden werden die semiklassischen Korrekturterme berechnet. Aus (2.108) erhält man

$$d_{\tau(0)} = \frac{\operatorname{sh}^2(\alpha)}{\operatorname{sh}(\alpha) - \alpha \operatorname{ch}(\alpha)} \frac{d_\alpha}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad , \quad (2.125)$$

und ferner aus (2.109) und (2.121)

$$\omega_2(0) = \frac{\omega_2}{\sqrt{A}} = 2 \sin(q_2/2) + \frac{1}{N} \left[ \kappa_1 \left( \cos(q_2/2) - \frac{\operatorname{sh}(\alpha)}{\alpha} \right) - 2\alpha \sin(q_2/2) \right] \quad . \quad (2.126)$$

Damit ergibt sich

$$d_{\tau(0)}\xi + \hbar \sum_{q_2} \sin(q_2/2) = -(\hbar/2)d_{\tau(0)} \sum_{q_2} (\omega_2(0) - 2 \sin(q_2/2))/\nu_1(0) \quad (2.127)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{\hbar}{4\pi} \frac{\operatorname{sh}^2(\alpha)}{\operatorname{sh}(\alpha) - \alpha \operatorname{ch}(\alpha)} d_\alpha \sum_{q_2} \frac{2\pi}{N} \left[ \kappa_1 \left( \frac{\alpha \cos(q_2/2)}{\operatorname{sh}(\alpha)} - 1 \right) \right. \\ &\quad \left. - 2\frac{\alpha^2}{\operatorname{sh}(\alpha)} \sin(q_2/2) \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \quad . \quad (2.128) \end{aligned}$$

$\kappa_1$  ist dabei durch Gleichung (2.120) gegeben. Kürzt man die Summe auf der rechten Seite von (2.127) mit  $\Sigma$  ab und bezeichnet ihre Ableitung nach  $\alpha$  mit einem Strich, so ergibt sich für die Impulskorrektur

$$(1 - \tau(0)d_{\tau(0)})\xi/N = -\frac{\hbar}{4\pi}\Sigma + \frac{\hbar}{4\pi}\frac{\alpha\text{sh}(\alpha)}{\text{sh}(\alpha) - \alpha\text{ch}(\alpha)}\Sigma' + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) . \quad (2.129)$$

Im Solitonlimes gehen die Summen  $\Sigma$  und  $\Sigma'$  in Integrale über  $q_2$  mit Integrationsgrenzen 0 und  $2\pi$  über. Das Volumenelement ist  $dq_2 = 2\pi/N$ . Mit Hilfe der Beziehungen

$$\frac{\partial\kappa_1}{\partial\alpha} \Big/ \frac{\partial\kappa_1}{\partial q_2} = -\frac{2\sin(q_2/2)}{\text{sh}(\alpha)} , \quad \frac{\partial\kappa_1}{\partial q_2} = \frac{\text{sh}(\alpha)}{\text{ch}(\alpha) - \cos(q_2/2)} , \quad (2.130)$$

die man direkt aus (2.120) erhält, läßt sich  $\Sigma'$  im Solitonlimes berechnen. Dazu ist eine partielle Integration erforderlich. Schließlich ergibt sich

$$\Sigma' = 8 \left( \frac{\alpha}{\text{sh}(\alpha)} - d_\alpha \frac{\alpha^2}{\text{sh}(\alpha)} \right) = -\frac{8\alpha(\text{sh}(\alpha) - \alpha\text{ch}(\alpha))}{\text{sh}^2(\alpha)} . \quad (2.131)$$

$\Sigma$  folgt aus dieser Gleichung per Integration über  $\alpha$ . Eine Betrachtung der ursprünglichen Integraldarstellung von  $\Sigma$  zeigt, daß die Integrationskonstante gleich Null ist. Faßt man alle Teilergebnisse zusammen, so erhält man die Korrekturterme

$$-d_{\tau(0)}\xi - \hbar \sum_{q_2} \sin(q_2/2) = -\frac{2\hbar\alpha}{\pi} =: \hbar\Delta E , \quad (2.132)$$

$$(1 - \tau(0)d_{\tau(0)})\xi/N = -\frac{2\hbar}{\pi} \int_0^\alpha dx \frac{x}{\text{sh}(x)} =: \hbar\Delta p \quad (2.133)$$

und damit die semiklassische Dispersionsrelation des Solitons.

$$\varepsilon = E - \frac{2\hbar\alpha}{\pi} , \quad (2.134)$$

$$p = p_{kl} - \frac{2\hbar}{\pi} \int_0^\alpha dx \frac{x}{\text{sh}(x)} . \quad (2.135)$$

Diese Gleichungen sind eines der wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit.  $E$  und  $p_{kl}$  sind durch die Gleichungen (2.115) und (2.124) bestimmt. Abbildung 1 zeigt den Vergleich zwischen semiklassischer Dispersionsrelation, Dispersionsrelation aus dem Betheansatz, klassischem Ergebnis und dem Ergebnis, das das in Kapitel 3 beschriebene Variationsverfahren liefert. Numerisch sind das Betheansatzergebnis und das semiklassische Ergebnis selbst für  $\hbar = 1$  kaum zu unterscheiden. Unterschiede machen sich erst bemerkbar, wenn man  $\hbar$  noch eine Größenordnung größer wählt (Abbildung 2), also weit jenseits des Bereichs, in dem man gute Übereinstimmung erwartet hätte.

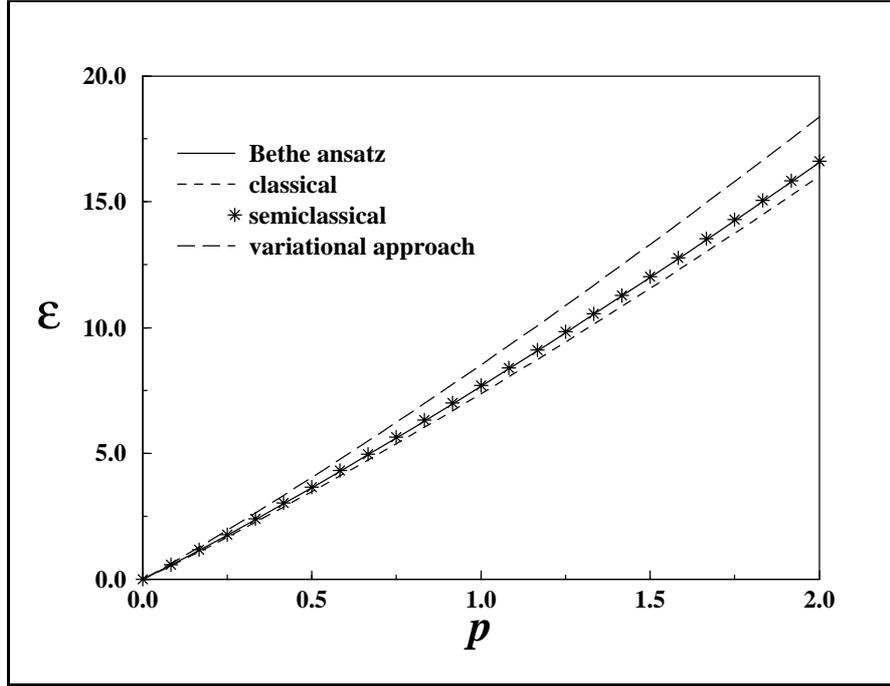


Abbildung 1: Vergleich der verschiedenen Ergebnisse für die Dispersionsrelation  $\varepsilon(p)$  eines Solitons für feste Länge  $\Delta l = 0$  und  $\hbar = 1$ .  $\varepsilon$  in Einheiten von  $\hbar/2$  und  $p$  in Einheiten von  $\pi\hbar$ .

Die gute Übereinstimmung der Ergebnisse (2.134), (2.135) mit dem Betheansatz stützt das in Kapitel 2.1 beschriebene intuitive Konzept des Solitons als Teilchenanregung über dem Vakuum. Insbesondere ist das hier verwendete Konzept des semiklassischen Solitonimpulses mit dem Betheansatz verträglich. Diese Tatsache ist auch für die Interpretation der Betheansatzergebnisse von Bedeutung, da auch im Betheansatz der Impuls phänomenologisch durch Analogie mit dem  $\delta$ -Funktions-Bosegas definiert ist.

Die Verallgemeinerung des oben erzielten Ergebnisses auf den Fall beliebiger Gitterkonstante  $d = \Delta l/N$  ist einfach. Nach (2.66) gilt für die Dispersion der 1-cnoidal-wave-Lösung

$$\nu(\Delta l) = e^{-d/2}\nu(0) \quad . \quad (2.136)$$

Die Energie ergibt sich nach (2.68) ff zu

$$\begin{aligned} E(\Delta l) &= a\nu^2(\Delta l) + \Delta l + Np \\ &= e^{-d} \left( a\nu^2(0) + N(e^{\Delta l_0/N} - 1) \right) + N \left( e^{-d} + d - 1 \right) \\ &= e^{-d}E(0) + E_o \quad , \end{aligned} \quad (2.137)$$

wobei hier die Energie (2.71) für  $\Delta l = 0$  mit  $E(0)$  bezeichnet wurde und  $E_o := N(e^{-d} + d - 1)$  die klassische Grundzustandsenergie meint. (2.136) impliziert, daß

$$d_{\tau(\Delta l)} = e^{-d/2}d_{\tau(0)} \quad , \quad \tau(\Delta l)d_{\tau(\Delta l)} = \tau(0)d_{\tau(0)} \quad . \quad (2.138)$$

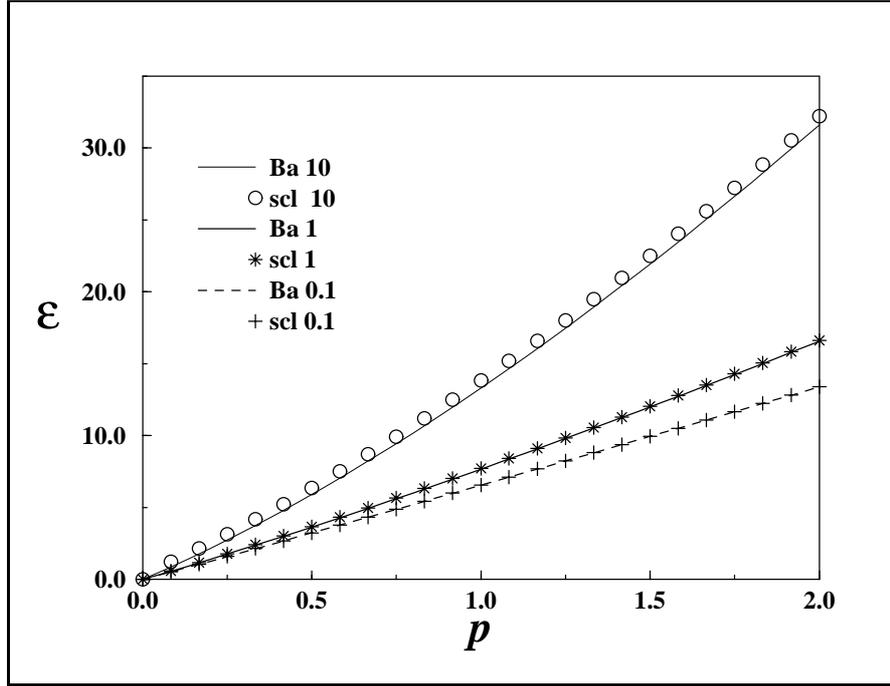


Abbildung 2: Semiklassische Dispersionsrelation (scl) und Dispersionsrelation aus dem Betheansatz (BA) für  $\hbar = 0, 1; 1; 10$ .  $\varepsilon$  in Einheiten von  $\hbar/2$  und  $p$  in Einheiten von  $\pi\hbar$ .

Da  $\xi$  wegen (2.82) invariant unter Skalentransformationen ist, folgt

$$\varepsilon = e^{-d} E(0) + E_o - e^{-d/2} d_{\tau(0)} \xi \quad . \quad (2.139)$$

Die richtige Renormierung im Solitonlimit erhält man also durch die Ersetzung

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon - E_o - e^{-d/2} \varepsilon_o \quad . \quad (2.140)$$

Mit der zweiten der Gleichungen (2.138) folgt, daß der Korrekturterm auf der rechten Seite der Gleichung (2.27) invariant unter Skalentransformationen bleibt. Für den ersten Term ergibt sich (s. Gleichung (2.68) ff):

$$\begin{aligned} S(\Delta l) + E(\Delta l)\tau(\Delta l) &= 2a\nu(\Delta l) = e^{-d/2} 2a\nu(0) \\ &= e^{-d/2} (S(0) + E(0)\tau(0)) \quad . \end{aligned} \quad (2.141)$$

Zusammenfassend ergibt sich schließlich die semiklassisch korrigierte Dispersionsrelation für beliebige Gitterkonstante  $d$  zu

$$\varepsilon = e^{-d} E + e^{-d/2} \hbar \Delta E \quad , \quad (2.142)$$

$$p = e^{-d/2} p_{kl} + \hbar \Delta p \quad , \quad (2.143)$$

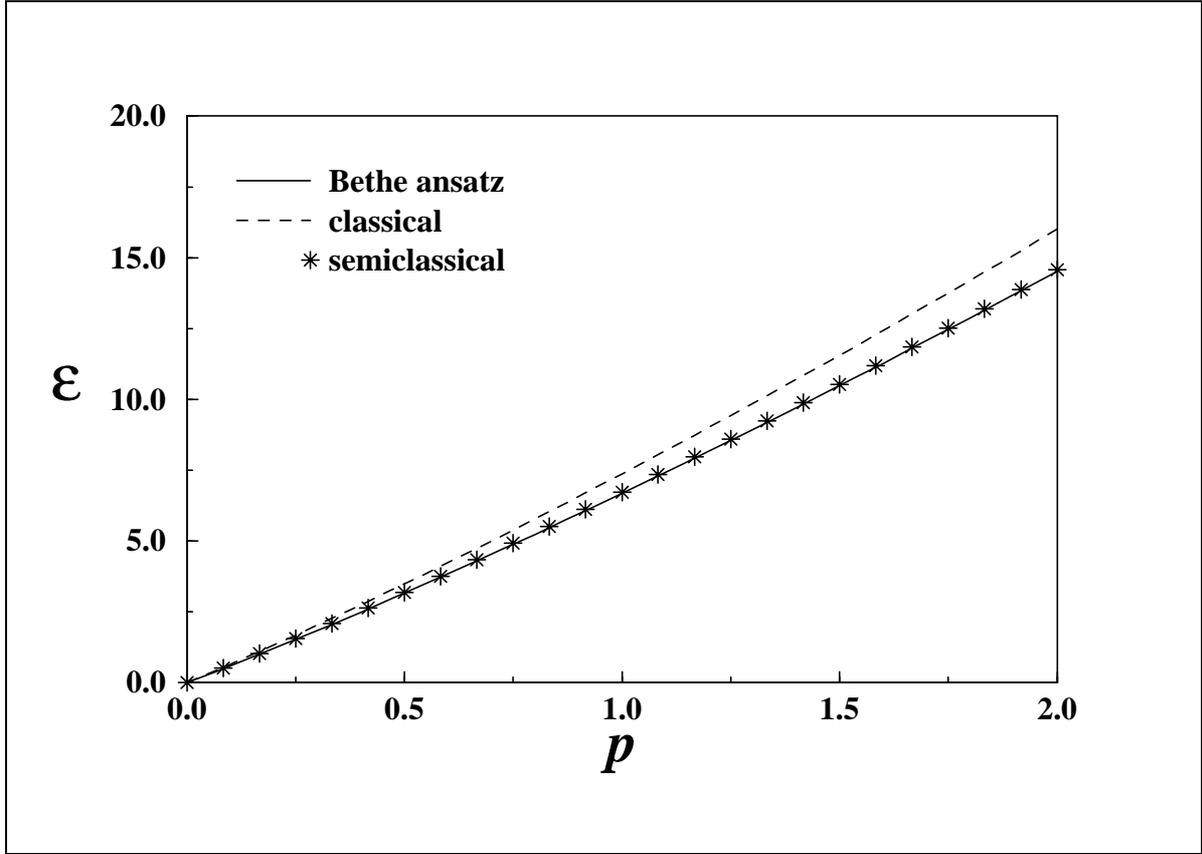


Abbildung 3: Vergleich der verschiedenen Ergebnisse für die Dispersionsrelation  $\varepsilon(p)$  eines Solitons für Druck Null und  $\hbar = 1$ .  $\varepsilon$  in Einheiten von  $\hbar/2$  und  $p$  in Einheiten von  $\pi\hbar$ . Das Ergebnis des Variationsansatzes stimmt in diesem Fall mit dem klassischen überein.

wobei wie oben  $E$  und  $p_{kl}$  die klassische Solitonenergie und den klassischen Solitonimpuls gemäß Gleichung (2.115) und (2.124) bezeichnen und  $\Delta E$  und  $\Delta p$  die Korrekturen nach Gleichung (2.132) und (2.133).

Nun läßt sich auch die semiklassische Dispersionsrelation für verschwindenden Druck angeben. Nach (2.142), (2.143) ist das Vakuum durch  $\varepsilon = p = 0$  charakterisiert. Aus (2.140) liest man damit die Grundzustandsenergie pro Teilchen im thermodynamischen Limes ab,

$$\varepsilon_o/N = e^{-d} + d - 1 + \frac{2\hbar}{\pi} e^{-d/2} \quad . \quad (2.144)$$

Die Gitterkonstante für verschwindenden Druck folgt nun aus der Forderung, daß  $\varepsilon_o/N$  minimal sei. Mit  $g := \hbar/2\pi$  ergibt sie sich zu

$$d_o = -\ln\left(1 + 2g^2 - 2g\sqrt{1 + g^2}\right) = \hbar/\pi + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad . \quad (2.145)$$

In führender Ordnung in  $\hbar$  stimmt diese Gitterkonstante mit dem entsprechenden Ergebnis aus dem Variationsansatz (Kapitel 3.5) überein.

## 3 Kohärente Phononen als Variationsansatz für die Todakette

### 3.1 Vorrede

In diesem Kapitel wird die Todakete in einer weiteren semiklassischen Näherung behandelt. Es wird angenommen, die Kette sei zu einem Zeitpunkt  $t = 0$  in einem kohärenten Zustand. Die Zeitentwicklung dieses Zustandes wird unter der Annahme betrachtet, daß er ein kohärenter Zustand bleibt. Diese Einschränkung wird erreicht, indem das Wirkungsfunktional, das die Schrödingergleichung erzeugt, nur bezüglich der eingeschränkten Funktionenklasse der kohärenten Zustände variiert wird. Die Zeitentwicklung wird dann durch eine effektive klassische Dynamik beschrieben, deren Lagrangefunktion sich von der ursprünglichen nur durch eine Renormierung der Gitterkonstanten unterscheidet. Insbesondere gibt es deshalb eine Ein-Soliton-Lösung, die mit der klassischen Ein-Soliton-Lösung verglichen wird.

Die Güte der mit einem Variationsverfahren erzielten Näherung hängt stark von den gewählten Testfunktionen ab. Die Testfunktionen sind ein unvermeidbar intuitives Element des Verfahrens. Die Tragweite von Variationsverfahren ist a priori in der Regel schwer abzuschätzen. Die Erfahrung zeigt jedoch, daß sie häufig bessere Ergebnisse beispielsweise für Grundzustandsenergien liefern als stärker systematische Zugänge. In diesem Kapitel sind es kohärente Zustände, die im Rahmen des zeitabhängigen Variationsverfahrens als Testfunktionen Verwendung finden, weil sie im harmonischen Grenzfall<sup>6</sup> exakte Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung sind.

Im Gegensatz zum vorangegangenen Kapitel und auch im Gegensatz zur vollen quantenmechanischen Behandlung des Systems [69] treten Solitonen auf der quantenmechanischen Todakette im Rahmen der hier verwendeten Näherung als dynamische Objekte, nicht als stationäre Zustände, in Erscheinung: Ein Soliton beschreibt die Bewegung der Schwerpunkte Gaußscher Wellenpakete.

### 3.2 Variationsprinzip

Es sei  $H$  der Hamiltonoperator eines beliebigen mechanischen Systems. Das Lagrangefunktional  $L$  und das Wirkungsfunktional  $S$  für eine Wellenfunktion  $\Psi$  seien definiert durch

$$L := \int dx \Psi^*(x, t)(i\hbar\partial_t - H)\Psi(x, t) \quad , \quad (3.1)$$

---

<sup>6</sup> $\hbar \rightarrow 0+$  in den hier verwendeten Einheiten (s. Anhang A).

$$S := \int_0^T dt L \quad . \quad (3.2)$$

Die Schrödinger-Gleichung inklusive Normierungsbedingung ergibt sich als Funktionalableitung von  $S$  bezüglich  $\Psi^*(x, t)$  unter der Nebenbedingung

$$\int dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \quad . \quad (3.3)$$

$\Psi$  und  $\Psi^*$  werden dabei als unabhängige Felder aufgefaßt. Die Funktionalableitung von  $S$  bezüglich  $\Psi(x, t)$  liefert die zur Schrödinger-Gleichung adjungierte Gleichung.

Durch Einschränkung der Wellenfunktion  $\Psi$  auf eine bestimmte Form lassen sich mit Hilfe des Variationsprinzips verschiedene Arten von Näherungslösungen der Schrödinger-Gleichung herleiten [47]. Diese Lösungen erfüllen nicht die volle Schrödinger-Gleichung, sondern die Gleichung, die aus (3.2) durch Variation bezüglich der eingeschränkten Klasse von Wellenfunktionen folgt. Wichtigstes Beispiel für eine Einschränkung ist die zeitabhängige Hartree-Fock-Näherung, die man erhält, indem man für ein Vielteilchensystem die volle Vielteilchenwellenfunktion durch ein Produkt von Einteilchenwellenfunktionen ersetzt.

Der hier verwendete Variationsansatz mit kohärenten Zuständen ist von der Form

$$\Psi(x, t) = \Psi(x, \alpha(t)) \quad . \quad (3.4)$$

$\alpha$  ist ein Vektor von Parametern, deren optimales Zeitverhalten im oben beschriebenen Sinne die Dynamik der Wellenfunktion  $\Psi(x, t)$  näherungsweise bestimmt. Die Funktionalableitung von  $S$  bezüglich  $\alpha_n(t)$  liefert für  $\alpha_n(t)$  die effektiven Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L_{eff}}{\partial \dot{\alpha}_n} - \frac{\partial L_{eff}}{\partial \alpha_n} = 0 \quad . \quad (3.5)$$

Dabei folgt die effektive Lagrange-Funktion  $L_{eff}(\dot{\alpha}, \alpha)$  aus (3.1) durch Einsetzen des Ansatzes (3.4). Wegen der Zeitableitung unter dem Integral in (3.1) hängt  $L$  nicht allein von  $\alpha_n$ , sondern auch von  $\dot{\alpha}_n$  ab. Die Gleichungen (3.5) haben die Form von Lagrange-Gleichungen für ein klassisches mechanisches System von Punktteilchen mit Koordinaten  $\alpha_n$  und Geschwindigkeiten  $\dot{\alpha}_n$ .

### 3.3 Kohärente Zustände

Kohärente Zustände entstehen durch gleichzeitige Verschiebung von Eigenzuständen der der Todakette im harmonischen Grenzfall entsprechenden eindimensionalen harmonischen Kette im Orts- und im Impulsraum. Diese Verschiebung wird durch Anwendung des unitären Operators

$$A := \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \sum_{n=1}^N (\xi_n p_n - \pi_n x_n) \right\} = \exp \left\{ \sum_k (\beta_k b_k^+ - \beta_k^* b_k) \right\} \quad (3.6)$$

erreicht.  $b_k$  und  $b_k^+$  sind hier die in üblicher Weise definierten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Phononen, die den Hamiltonoperator der harmonischen Kette im Schwerpunktsystem diagonalisieren. Es ist

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} \left( \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar}} q_n + \sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega_k}} i p_n \right) \quad , \quad (3.7)$$

$k_j = j2\pi/N$ ,  $j = 1, \dots, N-1$ ,  $\omega_k = 2|\sin(k/2)|$  und  $b_k^+ = (b_k)^+$ .  $b_k$  und  $b_k^+$  gehorchen bosonischen Vertauschungsrelationen:

$$[b_q, b_k^+] = \delta_{q,k} \quad , \quad [b_q, b_k] = [b_q^+, b_k^+] = 0 \quad . \quad (3.8)$$

$q_n$  und  $p_n$  als Funktion von  $b_k, b_k^+$  erhält man durch Umkehr der Gleichung (3.7) und der zu ihr adjungierten Gleichung,

$$p_n = -\frac{i}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}} (b_k - b_{-k}^+) \quad , \quad q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} (b_k + b_{-k}^+) \quad . \quad (3.9)$$

Die Beziehung zwischen  $\pi_n$  und  $\xi_n$  auf der einen Seite und  $\beta_k$  und  $\beta_k^*$  auf der anderen in Gleichung (3.6) ist dieselbe wie zwischen  $p_n, q_n$  und  $b_k, b_k^+$ .

Es sei  $|0\rangle$  der Grundzustand der harmonischen Kette. Zur Vereinfachung und in leichter Einschränkung der Allgemeinheit sei unter einem kohärenten Zustand hinfort der Zustand  $|\beta\rangle := A|0\rangle$  verstanden. Der so definierte Zustand hat die folgenden elementaren Eigenschaften:

$$(i) \quad b_k |\beta\rangle = \beta_k |\beta\rangle \quad , \quad \langle \beta | \beta \rangle = 1 \quad . \quad (3.10)$$

$$(ii) \quad \langle \beta | p_n | \beta \rangle = \pi_n \quad , \quad \langle \beta | q_n | \beta \rangle = \xi_n \quad . \quad (3.11)$$

(iii) Falls  $\pi_n$  und  $\xi_n$  die klassische Bewegungsgleichung der harmonischen Kette für Impuls und Ort lösen, ist der Zustand  $\exp(-iE_0 t/\hbar)|\beta\rangle$  Lösung der Schrödinger-Gleichung der harmonischen Kette, wobei  $E_0$  die Grundzustandsenergie der harmonischen Kette bezeichnet.

$$E_0 = \hbar \operatorname{ctg}(\pi/2N) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{2N\hbar}{\pi} \quad . \quad (3.12)$$

### 3.4 Effektive Lagrangefunktion

In diesem Kapitel wird als Bezugspunkt für die Teilchenkoordinaten nicht ihre Ruhelage für verschwindende Kettenausdehnung, sondern ihre von außen aufgeprägte Ruhelage  $nd$  verwendet (s. Kapitel 2). Im Vergleich zum vorangegangenen Kapitel ist also die Ersetzung  $q_n \rightarrow q_n + nd$  vorgenommen worden. Der Hamiltonoperator lautet damit

$$H = \sum_{n=1}^N \left( \frac{p_n^2}{2} + e^{-d} \left( e^{-(q_{n+1}-q_n)} - 1 \right) \right) \quad (3.13)$$

mit  $q_{N+1} = q_1$ . Die Normierung wurde so gewählt, daß die klassische Grundzustandsenergie für jedes  $d$  verschwindet. Die Berechnung der einzelnen Beiträge zur effektiven Lagrangefunktion ist elementar. Zunächst berechnet man beispielsweise die Kommutatoren

$$[p_n, A] = A\pi_n \quad , \quad [q_n, A] = A\xi_n \quad . \quad (3.14)$$

Mit deren Hilfe folgt

$$\begin{aligned} \langle \beta | p_n^2 | \beta \rangle &= \langle 0 | A^+ p_n A A^+ p_n A | 0 \rangle = \langle 0 | (\pi_n + p_n)^2 | 0 \rangle \\ &= \pi_n^2 + \langle 0 | p_n^2 | 0 \rangle = \pi_n^2 + E_0/N \quad . \end{aligned} \quad (3.15)$$

Der gemischte Term verschwindet in der dritten Gleichung, da der Grundzustand keinen Impuls trägt. Die vierte Gleichung folgt aus dem Virialsatz und der Translations-symmetrie. Die verbliebenen Terme wertet man am einfachsten unter Verwendung der Baker-Kempe-Hausdorff-Formel aus [30]. Sie lautet

$$e^{R+S} = e^R e^S e^{-\frac{1}{2}[R,S]} \quad , \quad \text{falls } [R, [R, S]] = [S, [R, S]] = 0 \quad . \quad (3.16)$$

Setzt man

$$\alpha_{nk} := (e^{ik} - 1) e^{ikn} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \quad (3.17)$$

$$R_n := \sum_k \alpha_{nk} b_{-k}^+ \quad , \quad S_n = \sum_k \alpha_{nk} b_k \quad , \quad (3.18)$$

so ergibt sich

$$q_{n+1} - q_n = R_n + S_n \quad . \quad (3.19)$$

Für den Kommutator zwischen  $R_n$  und  $S_n$  gilt mit (3.9)

$$[R_n, S_n] = -\frac{1}{N} \sum_k |e^{ik} - 1|^2 \frac{\hbar}{2\omega_k} = -\frac{E_0}{N} \quad , \quad (3.20)$$

und es folgt mit (3.10) und (3.16)

$$\langle \beta | e^{-(q_{n+1}-q_n)} | \beta \rangle = \langle \beta | e^{-R_n} e^{-S_n} | \beta \rangle e^{E_0/2N} = e^{E_0/2N} e^{-(\xi_{n+1}-\xi_n)} \quad . \quad (3.21)$$

Um den Erwartungswert der Zeitableitung zu berechnen, setzt man zweckmäßig

$$B := \frac{1}{i\hbar} \sum_{n=1}^N \xi_n p_n \quad , \quad C := -\frac{1}{i\hbar} \sum_{n=1}^N \pi_n q_n \quad . \quad (3.22)$$

Dann ist

$$[B, C] = \frac{1}{i\hbar} \sum_{n=1}^N \xi_n \pi_n \quad , \quad (3.23)$$

und es folgt

$$\partial_t A = \dot{B}A + A\dot{C} - \frac{1}{2}A\partial_t[B, C] \quad . \quad (3.24)$$

Da  $\dot{C}$  linear in  $q_n$  ist, erhält man  $\langle 0|\dot{C}|0\rangle = 0$  und somit mit (3.11), (3.22) und (3.23)

$$\langle \beta|i\hbar\partial_t|\beta\rangle = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (\dot{\xi}_n \pi_n - \xi_n \dot{\pi}_n) \quad . \quad (3.25)$$

Mit (3.15), (3.21) und (3.25) ergibt sich nun die effektive Lagrangefunktion in den Variablen  $\pi_n$  und  $\xi_n$ . Aus ihr folgt die Bewegungsgleichung  $\dot{\xi}_n = \pi_n$ , mit deren Hilfe sich  $\pi_n$  eliminieren läßt. Unter Vernachlässigung einer totalen Zeitableitung folgt schließlich die effektive Lagrangefunktion in den Koordinaten  $\xi_n$  allein:

$$L_{eff} = \sum_{n=1}^N \left( \frac{\dot{\xi}_n^2}{2} - e^{-d+E_0/2N} \left( e^{-(\xi_{n+1}-\xi_n)} - 1 \right) \right) \quad . \quad (3.26)$$

### 3.5 Deutung

Die effektive Lagrangefunktion ist wiederum die Lagrangefunktion einer Todakette. Sie unterscheidet sich von der Lagrangefunktion des zu (3.13) gehörigen klassischen Systems nur durch den Faktor  $\exp(E_0/2N)$  vor der potentiellen Energie. Dieser Faktor enthält folglich alle Quantenkorrekturen. Mit Blick auf Gleichung (3.12) sieht man, daß die Korrekturen für  $\hbar \rightarrow 0+$  verschwinden. Diese Tatsache rechtfertigt den Gebrauch kohärenter Zustände als Testfunktionen.

Die Konstanten in (3.26) wurden so gewählt, daß die potentielle Energie der ruhenden Kette verschwindet. Deshalb ist der thermodynamische Limes  $N \rightarrow \infty$  sinnvoll. Man erhält die unendlich ausgedehnte Todakette und als eine spezielle Lösung der effektiven Bewegungsgleichungen das wohlbekannte Todasoliton. Im Vergleich zur klassischen Solitonenlösung mit denselben unrenormierten Parametern ist es verbreitert.

Die physikalische Interpretation der Quantenkorrekturen ist einfach: Die Nullpunktfuktuationen der Teilchen verursachen einen Quantendruck, der gerade so stark ist, als wäre die entsprechende klassische Kette um ein Stück  $E_0/2N$  pro Gitterkonstante komprimiert. Analog zum klassischen Fall wird hier unter dem Druck der Erwartungswert der Kraft auf eine Feder verstanden (vgl. Kapitel 2.3).

$$\begin{aligned} p &= \langle 0| -V(q_{n+1} - q_n + d)|0\rangle = \langle 0|(e^{-d-(q_{n+1}-q_n)} - 1)|0\rangle \\ &= \langle 0|e^{-R_n} e^{-S_n}|0\rangle e^{-d-E_0/2N} - 1 = e^{-d-E_0/2N} - 1 \quad . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Ohne äußeren Druck stellt sich also die Gitterkonstante

$$d = E_0/2N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \hbar/\pi \quad (3.28)$$

ein. Dieses Ergebnis stimmt in erster Ordnung in  $\hbar$  mit dem in Kapitel 2.9 erzielten überein.

Aufschluß über die Güte des Variationsansatzes gibt die Diskussion der Dispersionskurven  $E = E(p)$  des Solitons in Kapitel 2.9. Es zeigt sich, daß die Dispersionskurven aus dem Variationsverfahren eine deutlich schlechtere Näherung bieten als die aus dem im vorangegangenen Kapitel diskutierten semiklassischen Verfahren. Im voll quantenmechanischen Bereich,  $\hbar = 1$ , ist für feste Länge,  $d = 0$ , die klassische Dispersionskurve näher an der aus dem Betheansatz als diejenige, die aus dem Variationsverfahren folgt. Für kleine  $\hbar$  werden alle drei Kurven ununterscheidbar. Im Fall verschwindenden Drucks stimmen klassische und Variationsansatzkurve überein <sup>7</sup>.

Die Tatsache, daß das effektive Potential in (3.26) wieder das Todapotentiale ist, ist nicht trivial. Der Fall beliebiger Nächster-Nachbar-Wechselwirkung ist im nächsten Unterabschnitt behandelt. Es zeigt sich, daß sich die Form des Potentials im allgemeinen ändert.

Es bleibt zu bemerken, daß die effektive Lagrangefunktion (3.26) schon von Dancz und Rice [14] hergeleitet wurde. Ihr Zugang, der von den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen ausgeht, ist jedoch ungleich umständlicher.

### 3.6 Effektives Potential für beliebige Nächste-Nachbar-Wechselwirkung

Um das effektive Potential für beliebige Nächste-Nachbar-Wechselwirkung zu bestimmen, wird zunächst der Erwartungswert eines Monoms in den relativen Auslenkungen einer Feder im kohärenten Zustand  $|\beta\rangle$  berechnet. Mit (3.14) ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle\beta|(q_{n+1} - q_n)^m|\beta\rangle &= \langle 0|(q_{n+1} - q_n + \xi_{n+1} - \xi_n)^m|0\rangle \\ &= \sum_{j=0}^m \binom{m}{j} \langle 0|(q_{n+1} - q_n)^j|0\rangle (\xi_{n+1} - \xi_n)^{m-j} \quad . \end{aligned} \quad (3.29)$$

Zu berechnen bleibt der Erwartungswert

$$\langle 0|(q_{n+1} - q_n)^j|0\rangle = \sum_{k_1, \dots, k_j} \alpha_{k_1} \cdot \dots \cdot \alpha_{k_j} \langle 0|B_{k_1} \cdot \dots \cdot B_{k_j}|0\rangle \quad (3.30)$$

mit  $B_{k_i} := b_{k_i} + b_{-k_i}^+$  und  $\alpha_{k_i}$  gemäß (3.17). Da für ungerades  $j$  das Produkt der Operatoren auf der rechten Seite von (3.30) eine Summe aus Produkten einer ungeraden Anzahl von Erzeugern und Vernichtern ist, verschwindet  $\langle 0|B_{k_1} \cdot \dots \cdot B_{k_j}|0\rangle$  für ungerades  $j$ . Für gerades  $j = 2l$  folgt mit Hilfe des Wickschen Theorems

$$\langle 0|B_{k_1} \cdot \dots \cdot B_{k_{2l}}|0\rangle = \frac{1}{2^l l!} \sum_{P \in S^{2l}} \langle 0|B_{k_{P_1}} B_{k_{P_2}}|0\rangle \cdot \dots \cdot \langle 0|B_{k_{P_{2l-1}}} B_{k_{P_{2l}}}|0\rangle \quad . \quad (3.31)$$

---

<sup>7</sup>Es sei daran erinnert, daß der Solitonimpuls in dieser Arbeit in Einheiten von reziproken Gitterkonstanten gemessen wird.

Die Summation auf der rechten Seite erstreckt sich über alle Permutationen der  $2l$  Indizes. Nun ist

$$\langle 0|B_{k_{P(2i-1)}}B_{k_{P2i}}|0\rangle = \delta_{k_{P(2i-1)}, -k_{P2i}} \quad (3.32)$$

und damit

$$\begin{aligned} \langle 0|(q_{n+1} - q_n)^{2l}|0\rangle &= \frac{1}{2^l l!} \sum_{P \in S^{2l}} \sum_{k_1, \dots, k_{2l}} \alpha_{k_1} \cdot \dots \cdot \alpha_{k_{2l}} \delta_{k_{P1}, -k_{P2}} \cdot \dots \cdot \delta_{k_{P(2l-1)}, -k_{P2l}} \\ &= \frac{(2l)!}{2^l l!} \left( \sum_k |\alpha_k|^2 \right)^l = (2l)! (E_0/2N)^l / l! \quad . \end{aligned} \quad (3.33)$$

Mit dieser Gleichung folgt aus (3.29) für ein Potential  $V(x) = x^m$ :

$$V_{eff}(x) = \sum_{l=0}^{[m/2]} \binom{m}{2l} \frac{(2l)!}{2^l l!} (E_0/N)^l x^{m-2l} = \left( -i\sqrt{E_0/N} \right)^m He_m \left( ix\sqrt{N/E_0} \right) \quad . \quad (3.34)$$

Dabei ist  $He_m$  das  $m$ -te Hermite-Polynom [1]. Unter Verwendung zweier weiterer Formeln für Hermite-Polynome [1],

$$He_m(x) = 2^{-m/2} H_m(x/\sqrt{2}) \quad , \quad (3.35)$$

$$H_m(x) = \frac{e^{x^2} 2^{m+1}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dy e^{-y^2} y^m \cos(2xy - m\pi/2) \quad , \quad (3.36)$$

erhält man

$$\left( -i\sqrt{E_0/N} \right)^m He_m \left( ix\sqrt{N/E_0} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E_0/N}} \int_{-\infty}^\infty dx y^m e^{-N(x-y)^2/2E_0} \quad . \quad (3.37)$$

Und damit für jedes Potential, das sich gleichmäßig durch Polynome approximieren läßt,

$$V_{eff}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E_0/N}} \int_{-\infty}^\infty dy V(y) e^{-N(x-y)^2/2E_0} \quad . \quad (3.38)$$

Man erhält das effektive Potential im allgemeinen Fall also durch Faltung des nackten Potentials mit einer Gaußfunktion. Dabei ändert sich im allgemeinen dessen Form. Das Todapotentiale und das harmonische Potential bilden hier Ausnahmen. Mit Hilfe der Gleichung (3.38) reproduziert man ohne Mühe das Ergebnis (3.21) für das Todapotentiale (vgl. [14]). Im klassischen Limes geht der Kern der Faltung in (3.38) gegen eine Deltafunktion und das effektive Potential gegen das nackte.

## 4 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zwei unterschiedliche semiklassische Näherungsverfahren auf die Todakette angewendet.

In Kapitel 2 wurden semiklassische Quantisierungsformeln diskutiert, die aus der semiklassischen Spurformel für den Propagator folgen. In diesem Formalismus liefert jede Familie klassisch periodischer Bahnen ein komplettes Spektrum. Komplet ist es in dem Sinne, daß die Quantisierungsbedingungen für jede Familie im harmonischen Limes das komplette Spektrum der harmonischen Kette geben. Jenseits des harmonischen Limes, in Ordnung  $\hbar^2$ , stimmen diese Spektren jedoch nicht mehr überein, so daß jedem exakten Energieniveau nicht ein semiklassisches entspricht, sondern ein ganzes Cluster. Außerdem wird die Entartung der exakten Energieniveaus aufgehoben. Die semiklassischen Quantisierungsformeln aus Kapitel 2.1 brechen die diskreten Symmetrien der Todakette. Hier begegnet man einer Schwierigkeit, auf die wiederholt von Berry hingewiesen wurde [7, 8, 46]. Man kann im allgemeinen *nicht* davon ausgehen, daß jeder Pol in einem Summanden einer Spurformel, der von einer bestimmten Familie periodischer Bahnen herrührt, auch ein Pol der Summe ist. Bestimmte Familien periodischer Bahnen entsprechen nicht unbedingt bestimmten Teilen des Spektrums. Vielmehr tragen Familien verschiedener Topologie auf komplizierte Weise kollektiv zum Spektrum bei [46]. Um so erstaunlicher ist es, daß man im Solitonlimes aus dem Beitrag einer einzigen Familie eine semiklassische Dispersionsrelation des Solitons gewinnt, die in sehr guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen des Betheansatzes ist. Die Frage, warum das so ist, konnte nicht beantwortet werden und bleibt von Interesse für weitere Forschungen. Wie häufig, ist es vermutlich der thermodynamische Limes, der die Struktur des Problems vereinfacht.

Eine Möglichkeit, bessere Ergebnisse für die Spektren der N-Teilchen-Ketten zu erzielen, ist die Auswertung der vollen Formel (2.17). Dazu hat man jedoch Wirkung, Energie und Stabilitätsexponenten für höhere cnoidal-wave-Lösungen zu berechnen. Aller Voraussicht nach sind die technischen Schwierigkeiten dabei mindestens so groß wie bei einer direkten Auswertung der EBK-Bedingungen.

Bei der Berechnung der klassischen Eingangsdaten für die semiklassische Quantisierung wurde eine Reihe neuer Ergebnisse erzielt, die von grundsätzlicher Bedeutung für das Modell sind. Dazu gehören die einheitliche Behandlung der Randbedingungen mit Hilfe der Skalensymmetrie in den Kapiteln 2.2 bis 2.4, die neuen und einfacheren Formeln für die Dispersion der 1-cnoidal-wave-Lösung in Kapitel 2.4, sowie die vollständige Behandlung des linearen Stabilitätsproblems der 1-cnoidal-wave-Lösung und des Solitons in den Kapiteln 2.5 und 2.8.

Der Wert dieser Arbeit liegt nicht zuletzt darin, daß verschiedene Fehler in älteren Arbeiten aufgedeckt und korrigiert wurden. Das betrifft einerseits die Arbeit [67], die bis in jüngste Zeit immer wieder zitiert wurde. Eine systematische Kritik dieser Arbeit, die die Fehler bei der Berechnung der klassischen Eingangsdaten für die semiklassischen Quantisierungsbedingungen aufdeckt, durchzieht die Kapitel 2.2 bis 2.5. Die Fehler in der grundlegenden Arbeit [16] auf der anderen Seite sind ausführlich im Anhang C dis-

kutiert. Dort ist eine vollständige, saubere und neue Herleitung der Spurformel für den semiklassischen Propagator eines in Zeit und Ort translationsinvarianten, eindimensionalen Systems angegeben, in die, im Gegensatz zu anderen aus der Literatur bekannten Formeln, Stabilitätsexponenten als wesentliche Eingangsdaten eingehen. Ein Nebenergebnis, das in diesem Zusammenhang erzielt wurde und das dem Autor dieser Arbeit besondere Freude gemacht hat, ist die einfache Herleitung des Noethertheorems für die klassische Punktmechanik im Rahmen der Hamilton-Jacobi-Theorie in Anhang C.3.

In Kapitel 3 wurde gezeigt, wie ein einfacher zeitabhängiger Variationsansatz auf das intuitiv zufriedenstellende Bild eines „Quantensolitons“ als dynamisches Objekt führt. Der Variationsansatz beschreibt das Modell vermittelt der Dynamik eines effektiven klassischen Modells. Im Falle der Todakette stimmen ursprüngliches und effektives Modell bis auf eine Renormierung der Parameter überein. Diese Eigenschaft zeichnet die Todakette vor anderen nächst-Nachbar-wechselwirkenden Modellen für eindimensionale, anharmonische Gitterschwingungen aus.

## Danksagung

Ich danke den Herren Professoren F.G. Mertens und W. Pesch für die freundliche Betreuung dieser Arbeit und für die Unterstützung jedweder Art, die sie mir während ihrer Entstehungszeit zuteil werden ließen.

Sehr hilfreich für das Gelingen dieser Arbeit waren Diskussionen mit Holger Frahm, Andreas Neuper und Armin Völkel. Holger Frahm stellte mir freundlicherweise seine Programme zur Berechnung der exakten Spektren nach Gutzwiller zur Verfügung. Die Programme, mit denen die Abbildungen 1 bis 3 erzeugt wurden, stammen von Manfred Hader, Andreas Neuper und Armin Völkel. Immer wenn in dieser Arbeit darauf hingewiesen wird, daß bestimmte analytische Ergebnisse numerisch überprüft wurden, geht das auf die freundliche Unterstützung von Andreas Neuper zurück.

Dirk Baranowski möchte ich an dieser Stelle für das Korrekturlesen danken. Astrid Brandt danke ich herzlich dafür, daß sie die Abbildung 4 für mich gezeichnet hat.



## Anhang A: Einheiten und Skalierung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden durchweg dimensionslose Einheiten verwendet. Mit Blick auf eventuelle Anwendungen oder Vergleiche mit anderen Arbeiten seien an dieser Stelle kurz zwei dimensionsbehaftete Parametrisierungen des Todapentials beschrieben:

- (i) Die folgende Wahl der Parameter [58] orientiert sich am harmonischen Limes,

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{\gamma^2} \left( e^{-\gamma(x-l)} + \gamma(x-l) - 1 \right) \quad (\text{A.1})$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}(x-l)^2 - \frac{\gamma m\omega^2}{6}(x-l)^3 + \dots \quad (\text{A.2})$$

$\gamma$  bestimmt den Grad der Anharmonizität des Potentials. Im Grenzfall  $\gamma \rightarrow 0$  geht  $V(x)$  gegen das Potential des harmonischen Oszillators mit Masse  $m$  und Frequenz  $\omega$ . Im stark anharmonischen Grenzfall  $\gamma \rightarrow \infty$  geht  $V(x)$  gegen das Potential harter Stäbe der Länge  $l$ .

- (ii) Weit verbreitet ist die ursprünglich von Toda angegebene Form der Parametrisierung [74]

$$V(x) = a \left( e^{-b(x-l)} + b(x-l) - 1 \right) \quad (\text{A.3})$$

Hier ist  $b$  der Anharmonizitätsparameter und  $a$  die Stärke des Potentials.

Der Vergleich von (i) und (ii) liefert

$$b = \gamma \quad , \quad a = \frac{m\omega^2}{\gamma^2} \quad \Leftrightarrow \quad \omega = b\sqrt{\frac{a}{m}} \quad (\text{A.4})$$

Mit  $x_{N+1} := x_1 + N(l+d)$  und  $r_n := x_{n+1} - x_n$  lautet die Hamiltonfunktion für das quasiperiodische System mit der Parametrisierung (i)

$$H = \frac{m\omega^2}{\gamma^2} \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{\gamma^2}{m^2\omega^2} \frac{p_n^2}{2} + e^{-\gamma(r_n-l)} + \gamma(r_n-l) - 1 \right\} \quad (\text{A.5})$$

Die Hamiltonfunktion wird dimensionslos, wenn man Länge, Impuls und Energie mit den Parametern  $1/\gamma$ ,  $m\omega/\gamma$  und  $m\omega^2/\gamma^2$  skaliert, die ein modellgemäßes Einheitensystem bilden. Die drei mechanischen Basisgrößen Zeit, Länge und Masse sind in diesem Einheitensystem durch Länge, Impuls und Energie ersetzt, aus denen sich die Einheiten beliebiger mechanischer Größen ableiten lassen, z. B.:

$$[t] = \frac{[p][l]}{[E]} = \frac{m\omega}{\gamma^2} \bigg/ \frac{m\omega^2}{\gamma^2} = \frac{1}{\omega} \quad (\text{A.6})$$

Insbesondere ist die Einheit der Wirkung in dem oben angegebenen System

$$[S] = [E][t] = \frac{m\omega}{\gamma^2} \quad . \quad (\text{A.7})$$

$\hbar$  bezogen auf diese Einheit ist ein *dimensionsloser* Parameter.  $\hbar \ll 1$  bedeutet in SI-Einheiten  $1/C := \hbar\gamma^2/m\omega \ll 1$ . Deshalb sind für die Todakette harmonischer und klassischer Limes äquivalent. In [58] wird statt des dimensionslosen Wirkungsquantums  $\hbar$  die dimensionslose Kopplungskonstante  $C$  verwendet. Bei Vergleichen ist  $1/C$  durch  $\hbar$  zu ersetzen.

Die Hamiltonfunktion enthält außerdem die dimensionslosen Längenparameter  $\gamma l$  und  $\gamma d$ .  $\gamma(l+d)$  ist die dimensionslose Gitterkonstante,  $2\pi/\gamma(l+d)$  entsprechend die dimensionslose Gitterkonstante des reziproken Gitters.

## Anhang B: Klassische Lösung des quasiperiodischen $N$ -Teilchenproblems

Die Integration des quasiperiodischen  $N$ -Teilchenproblems für die Todakette läßt sich in drei elementaren Schritten vollziehen.

Der erste besteht in der Konstruktion von  $N$  unabhängigen Poisson-kommutierenden Bewegungsintegralen  $I_n$ . Die Bewegungsintegrale wurden zeitgleich von Hénon [38], Flaschka [25] und Manakov [53] gefunden. Daß sie Poisson-kommutieren, wurde von Manakov [53] gezeigt. Flaschka und Manakov bedienen sich zur Konstruktion der Bewegungsintegrale des Lax-Formalismus. Alternativ kann man die Äquivalenz der Bewegungsgleichungen zu einer „zero curvature condition“ benutzen [69, 23]. Dieser Weg und die damit zusammenhängende  $r$ -Matrix-Methode sind unten skizziert. Er bietet im wesentlichen zwei Vorteile. Zum einen ist ein Teil der Rechnungen nahezu direkt auf den analogen Quantenformalismus [29, 69, 63] übertragbar, zum andern ist er physikalisch durchsichtig, da direkt mit Poissonklammern gerechnet wird.

Der zweite Schritt besteht in einer kanonischen Transformation auf neue Variable  $\mu_i, \nu_j$ . Sie wurde von Kac und van Moerbeke [43, 44, 75] und wenig später von Flaschka und McLaughlin [27] gefunden und führt auf eine Form der Bewegungsgleichungen, die im Rahmen der klassischen Theorie hyperelliptischer Integrale lösbar sind. Der Darstellung Sklyanins folgend, wird unten die kanonische Transformation von Kac und van Moerbeke im Vokabular des  $r$ -Matrix-Formalismus beschrieben.

Der dritte Schritt zur Lösung des quasiperiodischen Problems besteht in der Integration der Bewegungsgleichungen in den neuen Variablen und der Rücktransformation auf die ursprünglichen Variablen. Er wurde von Date und Tanaka [17, 18] sowie Krichever [48] durchgeführt. Einen exzellenten Überblick über die erforderlichen Methoden bietet der Artikel [20] von Dubrovin. Im Abschnitt B.3 ist dieser Teilaspekt des Problems in einiger Ausführlichkeit dargestellt.

## B.1 Spektralproblem, $r$ -Matrix und Bewegungsintegrale

Die Hamiltonfunktion des quasiperiodischen  $N$ -Teilchenproblems lautet

$$H = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{p_n^2}{2} + e^{-(q_{n+1}-q_n)} - 1 \right\} , \quad q_{N+1} = q_1 + \Delta l \quad . \quad (\text{B.1})$$

$\Delta l$  ist der äußere Längenparameter des Systems,  $p_m, q_n$  sind kanonisch konjugierte Variable:

$$\{p_m, p_n\} = \{q_m, q_n\} = 0 \quad , \quad \{p_m, q_n\} = \delta_{mn} \quad , \quad m, n = 1, \dots, N \quad . \quad (\text{B.2})$$

Somit lauten die Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}_n = p_n \quad , \quad (\text{B.3})$$

$$\dot{p}_n = e^{-(q_n - q_{n-1})} - e^{-(q_{n+1} - q_n)} \quad . \quad (\text{B.4})$$

Sie sind äquivalent zur folgenden „zero curvature condition“

$$\partial_t L_n(\lambda) + L_n(\lambda)V_n(\lambda) - V_{n+1}(\lambda)L_n(\lambda) = 0 \quad (\text{B.5})$$

für die Matrizen

$$L_n(t, \lambda) := \begin{pmatrix} \lambda - p_n & -e^{-q_n} \\ e^{q_n} & 0 \end{pmatrix} , \quad V_n(t, \lambda) := \begin{pmatrix} 0 & e^{-q_n} \\ -e^{q_{n-1}} & \lambda \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{B.6})$$

$\lambda$  ist hier ein freier Parameter, der Spektralparameter heißt. Gleichung (B.5) impliziert, daß die beiden linearen Hilfsprobleme

$$\psi_{n+1} = L_n(\lambda)\psi_n \quad , \quad (\text{B.7})$$

$$\partial_t \psi_n = V_n(\lambda)\psi_n \quad (\text{B.8})$$

für  $\psi_n = \begin{pmatrix} \psi_n^1 \\ \psi_n^2 \end{pmatrix}$  gleichzeitig für beliebige Anfangsbedingungen lösbar sind. Die Quasiperiodizität der  $q_n$  überträgt sich auf die Matrizen  $L_n(\lambda)$ . Es sei

$$Q(\Delta l) := \exp(-\Delta l \sigma_z / 2) \quad . \quad (\text{B.9})$$

Dann gilt

$$L_{N+1}(\lambda) = Q(\Delta l)L_1(\lambda)Q^{-1}(\Delta l) \quad . \quad (\text{B.10})$$

Definiere ferner die Matrizen  $T_n(\lambda)$  als geordnete Produkte der Matrizen  $L_n(\lambda)$ :

$$T_n(\lambda) := L_n(\lambda)L_{n-1}(\lambda) \cdots L_1(\lambda)L_N(\lambda) \cdots L_{n+1}(\lambda) \quad , \quad n = 1, \dots, N. \quad (\text{B.11})$$

Die Matrix

$$T_N(\lambda) =: \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix} \quad (\text{B.12})$$

heißt Monodromiematrix. Gleichung (B.6) entnimmt man, daß  $\det(L_n(\lambda)) = 1$  für  $n = 1, \dots, N$ . Daraus ergibt sich, daß auch die Monodromiematrix unimodular ist,

$$\det(T_N(\lambda)) = A(\lambda)D(\lambda) - B(\lambda)C(\lambda) = 1 \quad . \quad (\text{B.13})$$

Außer der Monodromiematrix selbst wird ihre gewichtete Spur benötigt:

$$t(\lambda, \Delta l) := \text{tr}(Q(\Delta l)T_N(\lambda)) = e^{-\Delta l/2}A(\lambda) + e^{\Delta l/2}D(\lambda) \quad . \quad (\text{B.14})$$

Zur Abkürzung sei im folgenden  $T(\lambda) := T_N(\lambda)$ ,  $t(\lambda) := t(\lambda, 0)$ . Die Existenz  $N$  Poisson-kommutierender Bewegungsintegrale  $I_n$  ergibt sich aus der Tatsache, daß sich die Poissonklammern zwischen den Matrixelementen der Matrizen  $L_n(\lambda)$  in folgender Form schreiben lassen:

$$\{L_m(\lambda) \otimes L_n(\mu)\} = [r(\lambda, \mu), L_n(\lambda) \otimes L_n(\mu)]\delta_{mn} \quad . \quad (\text{B.15})$$

Die eckigen Klammern auf der rechten Seite bezeichnen den gewöhnlichen Kommutator zwischen Matrizen. Die Tensorschreibweise ist in Anhang E erklärt. Die Matrix

$$r(\lambda, \mu) := \frac{\mathcal{P}}{\lambda - \mu} \quad (\text{B.16})$$

heißt  $r$ -Matrix.  $\mathcal{P}$  ist der durch

$$\mathcal{P}(\eta \otimes \xi) = (\xi \otimes \eta) \quad (\text{B.17})$$

definierte Permutationsoperator. Die fundamentalen Poissonklammern (B.15) für die Matrizen  $L_n(\lambda)$  implizieren unmittelbar dieselbe Relation für die Monodromiematrix,

$$\{T(\lambda) \otimes T(\mu)\} = [r(\lambda, \mu), T(\lambda) \otimes T(\mu)] \quad . \quad (\text{B.18})$$

Aus dieser Poissonklammerbeziehung für die Monodromiematrix und aus der Tatsache, daß

$$[r(\lambda, \mu), Q(\Delta l) \otimes Q(\Delta l)] = 0 \quad , \quad (\text{B.19})$$

folgt, daß  $t(\lambda, \Delta l)$  für zwei beliebige Werte  $\lambda, \mu$  des Spektralparameters mit sich selbst Poisson-kommutiert,

$$\{t(\lambda, \Delta l), t(\mu, \Delta l)\} = 0 \quad . \quad (\text{B.20})$$

$t(\lambda, \Delta l)$  ist ein Polynom vom Grade  $N$ . Die Asymptotik für große  $\lambda$  ist evident aus den Definitionen (B.6), (B.11), (B.14).  $t(\lambda, \Delta l)$  ist von der Form

$$t(\lambda, \Delta l) = e^{-\Delta l/2} \left( \lambda^N + \sum_{n=1}^N I_n \lambda^{N-n} \right) . \quad (\text{B.21})$$

Die Koeffizienten des Polynoms hängen von den dynamischen Variablen  $p_m, q_n$  und von  $\Delta l$  ab und sind Polynome in den Größen  $p_m, e^{\pm q_n}$ . Da (B.20) für beliebige  $\lambda, \mu$  gilt, folgt

$$\{I_m, I_n\} = 0 \quad , \quad n, m = 1, \dots, N \quad . \quad (\text{B.22})$$

Direktes Nachrechnen ergibt für die ersten beiden Koeffizienten

$$I_1 = - \sum_{n=1}^N p_n = -P \quad , \quad (\text{B.23})$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \sum_{1 \leq n, m \leq N} p_m p_n - \sum_{n=1}^{N-1} e^{-(q_{n+1} - q_n)} - e^{-(q_1 + \Delta l - q_N)} \\ &= \sum_{1 \leq n, m \leq N} p_m p_n - \sum_{n=1}^N e^{-(q_{n+1} - q_n)} \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Durch Vergleich mit (B.1) folgt

$$H = \frac{1}{2} I_1^2 - I_2 - N \quad , \quad (\text{B.25})$$

also auch

$$\{H, I_n\} = 0 \quad , \quad n = 1, \dots, N \quad . \quad (\text{B.26})$$

Die  $I_n$  sind folglich ein Satz von  $N$  Poisson-kommutierenden Bewegungsintegralen. Eine genauere Betrachtung der  $I_n$  zeigt, daß sie von der Form

$$I_n = (-1)^n S_n(p_1, \dots, p_N) + I'_n \quad (\text{B.27})$$

sind. Dabei ist  $S_n$  das  $n$ -te elementare, symmetrische Polynom in den  $p_n$  und  $I'_n$  ein Polynom in den  $p_n$  vom Grade nicht größer als  $n - 1$ . Deshalb sind die  $I_n$  für große  $p_n$  paarweise voneinander unabhängig. Weil alle  $I_n$  Polynome in den  $p_n$  und  $e^{\pm q_n}$  sind, sind sie unabhängig im ganzen Phasenraum mit Ausnahme einer Untermannigfaltigkeit der Dimension kleiner  $N$ . Damit ist die Integrabilität der quasiperiodischen  $N$ -Teilchen-Todakette im Liouvilleschen Sinn [77, 2] gezeigt.

## B.2 Die kanonische Transformation von Kac und van Moerbeke

In den Rechnungen im vorangegangenen Unterabschnitt wurde der äußere Längenparameter  $\Delta l$  explizit mitgenommen, um die Abhängigkeit der Bewegungsintegrale  $I_n$  von  $\Delta l$  zu bestimmen. Zweck dieses Abschnittes ist es, kanonische Variable zur Integration der Bewegungsgleichungen bereitzustellen. Aufgrund der Skalensymmetrie (2.32) des Modells reicht es hier, sich auf den Fall  $\Delta l = 0$  zu beschränken.

Die Variablen  $\mu_i$  von Kac und van Moerbeke sind die Nullstellen des Polynoms  $C(\mu)$ .  $C(\mu)$  besitzt  $N - 1$  verschiedene, reelle Nullstellen. Um dies einzusehen, betrachte das lineare Hilfsproblem (B.7). Eine Lösung mit der Eigenschaft

$$\psi_{N+1} = T(\lambda)\psi_1 = \rho\psi_1 \quad (\text{B.28})$$

heißt Floquetlösung von (B.7). Der komplexe Faktor  $\rho$  heißt Floquetfaktor. Aus der Unimodularität von  $T(\lambda)$  folgt, daß  $\rho$  Lösung der Gleichung

$$\rho^2 - \rho t(\lambda) + 1 = 0 \quad (\text{B.29})$$

ist. Also ist mit  $\rho$  auch  $1/\rho$  Floquetfaktor. Es ist

$$\rho_{\pm} = \frac{t(\lambda) \pm \sqrt{t^2(\lambda) - 4}}{2} \quad (\text{B.30})$$

und  $\rho_+ = 1/\rho_-$ . Eine Lösung von (B.7) ist periodisch in  $n$  mit Periode  $N$ , falls  $\rho = 1$ , antiperiodisch, falls  $\rho = -1$ .

$$\rho(\lambda) = \pm 1 \quad \Leftrightarrow \quad t(\lambda) = \pm 2 \quad . \quad (\text{B.31})$$

Wie im Falle gewöhnlicher Differentialgleichungen ist das 2-d Problem erster Ordnung äquivalent zu einem 1-d linearen Problem zweiter Ordnung. Um das zu sehen, setze  $\psi_n^2$  in die Gleichung für  $\psi_n^1$  ein. Dann ergibt sich

$$\psi_n^1 = (\lambda - p_n)\psi_n^1 - e^{-(q_n - q_{n-1})}\psi_{n-1}^1 \quad . \quad (\text{B.32})$$

Um auf die entsprechende Gleichung von Kac und van Moerbeke zu kommen, die sich aus dem Lax-Formalismus ergibt, setze

$$\varphi_n := e^{q_n/2}\psi_n^1 \quad , \quad a_n := e^{-(q_{n+1} - q_n)/2} \quad , \quad b_n := p_n \quad . \quad (\text{B.33})$$

Dann genügt  $\varphi_n$  der Gleichung zweiter Ordnung

$$a_n\varphi_{n+1} + b_n\varphi_n + a_{n-1}\varphi_{n-1} = \lambda\varphi_n \quad . \quad (\text{B.34})$$

$\varphi$  ist eine periodische bzw. antiperiodische Lösung dieser Gleichung genau dann, wenn  $\psi$  eine periodische bzw. antiperiodische Lösung der Gleichung (B.7) ist, d.h. genau dann, wenn  $t(\lambda) = \pm 2$ . Andererseits ist die Tatsache, daß  $\varphi$  periodische bzw. antiperiodische Lösung der Gleichung (B.34) ist, äquivalent dazu, daß der Vektor  $(\varphi_1, \dots, \varphi_N)^T$  Eigenvektor der Matrix

$$L_{\pm} = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & & \pm a_N \\ a_1 & & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{N-1} \\ \pm a_N & & a_{N-1} & b_N \end{pmatrix} \quad (\text{B.35})$$

ist.  $L_{\pm}$  ist eine Tridiagonalmatrix mit zwei zusätzlichen Einträgen in der rechten oberen und linken unteren Ecke. Da  $L_{\pm}$  symmetrisch ist, sind alle Eigenwerte  $\lambda_j^{\pm}$  und folglich auch alle Nullstellen von  $t(\lambda) \pm 2$  reell.

Betrachte nun die Nullstellen von  $C(\lambda)$ :  $C(\lambda)$  ist ein Polynom  $(N-1)$ -ten Grades in  $\lambda$ , besitzt also  $N-1$  Nullstellen  $\mu_j$ . Es sei  $\chi$  die durch  $\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  eindeutig festgelegte Lösung von (B.7), dann folgt:

$$C(\mu_j) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \chi_{N+1} = \begin{pmatrix} A(\mu_j) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.36})$$

d.h.  $\chi$  ist Floquetlösung von (B.7) genau dann, wenn  $\mu_j$  Nullstelle von  $C(\lambda)$  ist. Es sei nun  $M$  die  $(N-1) \times (N-1)$ -Tridiagonalmatrix, die aus  $L_{\pm}$  durch Streichen der letzten Zeile und der letzten Spalte entsteht. Dann gilt

$$C(\lambda) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \det(M - \lambda) = 0. \quad (\text{B.37})$$

Die  $\mu_j$  sind also identisch mit den Eigenwerten der symmetrischen Matrix  $M$  und deshalb alle reell. In Analogie zur Floquettheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung [11] kann man zeigen [43], daß sich die  $\lambda_j^-, \lambda_k^+, \mu_l$  für gerades bzw. ungerades  $N$  so nummerieren lassen, daß gilt

$$\begin{aligned} \lambda_1^+ < \lambda_1^- \leq \mu_1 \leq \lambda_2^- < \lambda_2^+ \leq \mu_2 \leq \lambda_3^+ < \dots < \lambda_{N-1}^- \leq \mu_{N-1} \leq \lambda_N^- < \lambda_N^+ \quad , \quad \text{bzw.} \\ \lambda_1^- < \lambda_1^+ \leq \mu_1 \leq \lambda_2^+ < \lambda_2^- \leq \mu_2 \leq \lambda_3^- < \dots < \lambda_{N-1}^+ \leq \mu_{N-1} \leq \lambda_N^+ < \lambda_N^- \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Definiere nun die neuen Variablen

$$\rho_j^- := A(\mu_j) \quad , \quad \rho_j^+ := D(\mu_j) \quad . \quad (\text{B.39})$$

Alle Koeffizienten der Polynome  $A(\lambda)$ ,  $D(\lambda)$  sind reell. Da auch die  $\mu_j$  reell sind, sind also die  $\rho_j^{\pm}$  reell. Ferner gilt

$$\rho_j^+ \rho_j^- = A(\mu_j) D(\mu_j) = \det(t(\mu_j)) = 1 \quad . \quad (\text{B.40})$$

$\rho_j^+$  und  $\rho_j^-$  haben also dasselbe Vorzeichen. Mit Hilfe der fundamentalen Poissonklammern (B.18) lassen sich nun leicht die Poissonklammern zwischen den  $\rho_j^+$ ,  $\rho_k^-$  und  $\mu_l$  berechnen. Dazu werden aus den Gleichungen (B.18) die folgenden benötigt [69]:

$$\{A(\mu), A(\lambda)\} = 0 \quad , \quad (\text{B.41})$$

$$\{C(\mu), C(\lambda)\} = 0 \quad , \quad (\text{B.42})$$

$$\{D(\mu), D(\lambda)\} = 0 \quad , \quad (\text{B.43})$$

$$\{C(\mu), A(\lambda)\} = \frac{C(\mu)A(\lambda) - A(\mu)C(\lambda)}{\mu - \lambda} \quad , \quad (\text{B.44})$$

$$\{C(\mu), D(\lambda)\} = -\frac{C(\mu)D(\lambda) - D(\mu)C(\lambda)}{\mu - \lambda} \quad . \quad (\text{B.45})$$

Aus diesen Gleichungen folgt beispielsweise

$$0 = \{\mu_j, C(\mu_k)\} = \{\mu_j, C(\lambda)\}|_{\lambda=\mu_k} + C'(\mu_k)\{\mu_j, \mu_k\} \quad , \quad (\text{B.46})$$

$$\begin{aligned} 0 &= \{C(\mu_j), C(\lambda)\}|_{\lambda=\mu_k} = \{C(\mu), C(\lambda)\}|_{\substack{\mu=\mu_j \\ \lambda=\mu_k}} + C'(\mu_j)\{\mu_j, C(\lambda)\}|_{\lambda=\mu_k} \\ &= C'(\mu_j)\{\mu_j, C(\lambda)\}|_{\lambda=\mu_k} \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

Da außerdem  $C'(\mu_j) \neq 0$ ,  $\Rightarrow \{\mu_j, \mu_k\} = 0$ . Analog berechnet man die anderen Poissonklammern. Es ergibt sich

$$\{\mu_j, \mu_k\} = \{\rho_j^\pm, \rho_k^\pm\} = 0 \quad , \quad (\text{B.48})$$

$$\{\mu_j, \rho_k^\pm\} = \pm \rho_j^\pm \delta_{jk} \quad . \quad (\text{B.49})$$

Die zweite dieser Gleichungen macht es möglich, zu den  $\mu_j$  kanonisch konjugierte Impulse  $\nu_j$  einzuführen,

$$\nu_j := \ln(|\rho_j^-|) \quad . \quad (\text{B.50})$$

Die  $\mu_j, \nu_k$  bilden einen Satz von  $2N - 2$  kanonisch konjugierten Variablen,

$$\{\nu_j, \mu_k\} = \delta_{jk} \quad . \quad (\text{B.51})$$

Dieser Satz wird vervollständigt durch Hinzunahme der Variablen  $Q := q_N$  und  $P$ . Unter Verwendung der Asymptotik

$$C(\lambda) = e^Q \lambda^{N-1} + \mathcal{O}(\lambda^{N-2}) \quad , \quad (\text{B.52})$$

$$A(\lambda) = \lambda^N - P \lambda^{N-1} + \mathcal{O}(\lambda^{N-2}) \quad , \quad (\text{B.53})$$

$$D(\lambda) = \mathcal{O}(\lambda^{N-2}) \quad , \quad (\text{B.54})$$

sowie der Formeln (B.41), (B.44) folgt mühelos, daß

$$\{\mu_j, Q\} = \{\nu_j, Q\} = \{\mu_j, P\} = \{\nu_j, P\} = 0 \quad , \quad (\text{B.55})$$

$$\{P, Q\} = 1 \quad . \quad (\text{B.56})$$

Kac und van Moerbeke [43] zeigen, daß sich die ursprünglichen Variablen und damit alle dynamischen Größen durch  $\mu_j, \nu_k, P, Q$  ausdrücken lassen.

Es ist nun ein Leichtes, die Elemente der Monodromiematrix und damit auch die Erhaltungsgrößen  $I_1, \dots, I_N$  durch die neuen Variablen auszudrücken. Dazu reicht die Kenntnis der Asymptotik (B.52) - (B.54), sowie der  $N-1$  Nullstellen im Falle von  $C$  bzw. von  $N-1$  Werten an den Stellen  $\mu_j$  im Falle von  $A$  und  $D$ . Definiere  $m(\lambda) := e^{-Q}C(\lambda)$ ,  $m'(\lambda) := \partial_\lambda m(\lambda)$ . Mit Hilfe von Lagrangeinterpolation erhält man

$$C(\lambda) = e^Q m(\lambda) = e^Q \prod_{j=1}^{N-1} (\lambda - \mu_j) \quad , \quad (\text{B.57})$$

$$A(\lambda) = \left( \lambda - P + \sum_{j=1}^{N-1} \mu_j \right) m(\lambda) + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\rho_j^- m(\lambda)}{(\lambda - \mu_j) m'(\mu_j)} \quad , \quad (\text{B.58})$$

$$D(\lambda) = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\rho_j^+ m(\lambda)}{(\lambda - \mu_j) m'(\mu_j)} \quad . \quad (\text{B.59})$$

Der entsprechende Ausdruck für  $B(\lambda)$  wird nicht weiter benötigt.  $B(\lambda)$  folgt beispielsweise aus der Unimodularität von  $T(\lambda)$ . Aus (B.58) und (B.59) ergibt sich durch Vergleich mit (B.21), (B.25) die Hamiltonfunktion in den neuen Variablen [27]:

$$H + N = P^2/2 - P \sum_{j=1}^{N-1} \mu_j + \sum_{1 \leq i < j \leq N-1} \mu_i \mu_j + \sum_{j=1}^{N-1} (-1)^{N-1+j} \frac{2\text{ch}(\nu_j)}{m'(\mu_j)} \quad . \quad (\text{B.60})$$

Unter Ausnutzung des Residuensatzes zeigt man die Identität

$$\sum_{1 \leq i < j \leq N-1} \mu_i \mu_j = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\mu_j^N}{m'(\mu_j)} \quad . \quad (\text{B.61})$$

Läßt man nun noch die Teilchenzahl  $N$  auf der linken Seite von (B.60) weg, die keinerlei dynamische Bedeutung hat, und begibt sich ins Schwerpunktsystem,  $P = 0$ , so ergibt sich mit (B.61) (bis auf Vorzeichen) die von van Moerbeke [75] angegebene Form der Hamiltonfunktion

$$H = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\mu_j^N + (-1)^{N-1+j} 2\text{ch}(\nu_j)}{m'(\mu_j)} \quad . \quad (\text{B.62})$$

Für  $\mu_j$  folgt daraus die Bewegungsgleichung

$$\dot{\mu}_j = \frac{\pm\sqrt{t^2(\mu_j) - 4}}{m'(\mu_j)} \quad , \quad j = 1, \dots, N-1 \quad . \quad (\text{B.63})$$

Die Gleichung für  $\nu_j$  ist komplizierter. Da die  $\nu_j$  in (B.63) jedoch nicht mehr vorkommen, wird diese Gleichung nicht benötigt. Für gegebene  $\lambda_j^+$ ,  $\lambda_k^-$  ist (B.63) ein System von  $N-1$  Gleichungen in  $N-1$  Unbekannten  $\mu_j$ .

### B.3 Algebraisch-geometrische Integration

Angenommen man hätte die Bewegungsgleichungen (B.63) gelöst. Dann stünde man vor dem Problem, auf die ursprünglichen dynamischen Variablen  $p_m$ ,  $q_n$  zurückzutransformieren. In Anlehnung an die Lösung der Korteweg-de-Vries-Gleichung unter periodischen Randbedingungen durch Novikov [60], Dubrovin [19] und Its und Matveev [42] gehen Date und Tanaka [17, 18] deshalb anders vor. Sie lösen das Problem der Integration und das der Rücktransformation gleichzeitig. Der erste Schritt auf dem Weg dorthin besteht in der Beobachtung, daß die kanonische Transformation von Kac und van Moerbeke asymmetrisch ist und im Versuch diese Asymmetrie aufzuheben.

Im vorangegangenen Abschnitt war die Variable  $q_N$  ausgezeichnet. Ihre Sonderrolle läßt sich ebensogut einer beliebigen anderen Ortsvariablen  $q_n$  zuordnen, indem man statt des linearen Hilfsproblems (B.7) das entsprechend verschobene Problem

$$\psi_{k+1} = L_{n+k}(\lambda)\psi_k \quad (\text{B.64})$$

betrachtet. Formal stimmt (B.64) mit (B.7) überein. Alle Aussagen über (B.7) gelten auch für (B.64), wenn man die entsprechenden Umnummerierungen vornimmt, d. h. im wesentlichen, wenn man den Index  $N$  im vorangegangenen Abschnitt durch  $n$  ersetzt. Die Monodromiematrix des linearen Hilfsproblems (B.64) ist die Matrix  $T_n(\lambda)$  aus Gleichung (B.11). Ihre Elemente seien mit  $A_n(\lambda), \dots, D_n(\lambda)$  bezeichnet. Wie oben impliziert  $\det(L_n(\lambda)) = 1$ , daß  $\det(T_n(\lambda)) = 1$ . Wegen der Invarianz der Spur eines Produktes von Matrizen unter zyklischen Vertauschungen gilt ferner

$$\text{tr}(T_n(\lambda)) = \text{tr}(T(\lambda)) = t(\lambda) = A_n(\lambda) + D_n(\lambda) \quad . \quad (\text{B.65})$$

Floquetlösungen sind definiert durch

$$T_n(\lambda)\psi_1 = \rho\psi_1 \quad . \quad (\text{B.66})$$

Wie im Falle  $n = N$  erhält man periodische ( $\rho = 1$ ) bzw. antiperiodische ( $\rho = -1$ ) Lösungen genau dann, wenn  $t(\lambda) = \pm 2$ . Die Floquetfaktoren  $\rho_{\pm}$  sind wiederum durch (B.30) gegeben. (B.64) ist äquivalent zu einem 1-d linearen Hilfsproblem, das aus (B.34)

durch die Ersetzungen  $a_k \rightarrow a_{n+k}$ ,  $b_k \rightarrow b_{n+k}$  entsteht.  $\lambda_j^\pm$  ist Lösung von  $t(\lambda) = \pm 2$  genau dann, wenn  $\lambda_j^\pm$  Eigenwert der Matrix

$$L_\pm(n) = \begin{pmatrix} b_{n+1} & a_{n+1} & & \pm a_n \\ a_{n+1} & & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{n-1} \\ \pm a_n & & a_{n-1} & b_n \end{pmatrix} \quad (\text{B.67})$$

ist.  $M(n)$  bezeichne die Matrix, die aus  $L_\pm(n)$  durch Streichen der letzten Zeile und der letzten Spalte entsteht. Mit  $\mu_j(n)$  seien die  $N - 1$  Nullstellen von  $C_n(\lambda)$  bezeichnet. In Analogie zu (B.37) gilt

$$C_n(\lambda) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \det(M(n) - \lambda) = 0 \quad . \quad (\text{B.68})$$

Auch die  $\mu_j(n)$  sind also alle reell. Wie die  $\mu_j$  sind sie gemäß (B.38) auf der reellen Achse angeordnet.

Entscheidend ist nun, daß die Spur einer reellen symmetrischen Matrix invariant unter orthogonalen Transformationen ist. Deshalb gilt

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^N p_j = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^N b_j = \sum_{j=1}^N \mu_j(n) = P - p_n \quad , \quad (\text{B.69})$$

oder im Schwerpunktsystem

$$p_n = - \sum_{j=1}^N \mu_j(n) \quad . \quad (\text{B.70})$$

Es ist daher sinnvoll direkt nach einem Ausdruck für die Bewegung der Summen der  $\mu_j(n)$  zu suchen.

Für das Folgende sind Grundkenntnisse über hyperelliptische Riemannflächen erforderlich. Die unten aufgelisteten Fakten sind dem Artikel [20] von Dubrovin und dem Buch [68] von Siegel entnommen.

Zunächst erweist sich ein Wechsel der Notation als sinnvoll. Die  $\lambda_j^\pm$  seien zusammenfassend als  $\lambda_j$  bezeichnet. Die  $\lambda_j$  sind dann die Nullstellen des Polynoms  $t^2(\lambda) - 4$ . Die einfachen Nullstellen seien der Größe nach durchnummeriert. Ihre Anzahl ist gerade und sei mit  $2g + 2$  bezeichnet.

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{2g+2} \quad . \quad (\text{B.71})$$

Entsprechend seien die doppelten Nullstellen  $\lambda_{2j-1} = \lambda_{2j}$ , ( $j = g + 2, \dots, N$ ) umnummeriert. Für die  $\mu_j(n)$  gelte

$$\begin{aligned} \lambda_{2j} &\leq \mu_j(n) \leq \lambda_{2j+1} \quad , \quad j = 1, \dots, g, \\ \mu_j(n) &= \lambda_{2j} = \lambda_{2j+1} \quad , \quad j = g + 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (\text{B.72})$$

Diese Umnummerierung ist zweifach motiviert. Zum einen braucht man so nicht mehr zwischen gerader und ungerader Teilchenzahl zu unterscheiden, zum anderen tragen nur die  $\mu_j(n)$ , die zwischen zwei einfachen Nullstellen von  $t^2(\lambda) - 4$  liegen, zur Dynamik bei. Denn angenommen, für ein festes  $k$  gelte  $\mu_k = \lambda_{2k} = \lambda_{2k+1}$ . Dann verschwindet für  $j = k$  die rechte Seite von (B.63). Für  $j \neq k$  kürzt sich der Faktor  $(\lambda - \mu_k)^2$  unter der Wurzel (eventuell bis auf das Vorzeichen) gegen den Faktor  $\lambda - \mu_k$  in  $m'(\mu_j)$ . Die Dimension des Gleichungssystems (B.63) wird dadurch um Eins reduziert. Für den Spezialfall  $g = 1$  in (B.72) beispielsweise reduziert sich das System der Bewegungsgleichungen (B.63) auf eine einzige,

$$\dot{\mu}_1 = \pm \sqrt{(\mu_1 - \lambda_1)(\mu_1 - \lambda_2)(\mu_1 - \lambda_3)(\mu_1 - \lambda_4)} \quad , \quad (\text{B.73})$$

die auf ein elliptisches Integral führt. Setze

$$R_1(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda - \lambda_3)(\lambda - \lambda_4) \quad . \quad (\text{B.74})$$

Dann folgt

$$dt = R_1^{-1/2}(\mu_1) d\mu_1 \quad , \quad (\text{B.75})$$

und die Gleichung (B.73) läßt sich auf der Riemannfläche der elliptischen Kurve  $\mu^2 = R_1(\lambda)$  integrieren. Es ergibt sich  $t$  als Funktion von  $\mu_1$ , und die Umkehrfunktion  $\mu_1(t)$  läßt sich durch Jacobielliptische Funktionen ausdrücken.

Eine Verallgemeinerung auf  $g > 1$  macht die Einführung der Riemannfläche  $\mathcal{R}$  der hyperelliptischen Kurve

$$\mu^2 = R_g(\lambda) := \prod_{j=1}^{2g+2} (\lambda - \lambda_j) \quad (\text{B.76})$$

erforderlich. Sie läßt sich realisieren durch Übereinanderlegen zweier längs der Intervalle  $(\lambda_{2j-1}, \lambda_{2j})$ ,  $j = 1, \dots, g+1$ , aufgeschnittener Kopien der komplexen Ebene, die längs der Schnitte kreuzweise verbunden werden. Topologisch ist diese Riemannfläche eine Kugel mit  $g$  Henkeln. Es sei nun ein kanonisches System geschlossener Wege  $\alpha_j, \beta_j$ ,  $j = 1, \dots, g$ , wie folgt konstruiert:  $\alpha_j$  sei der Weg, der auf dem oberen Blatt der Riemannfläche von  $\lambda_{2j}$  nach  $\lambda_{2j+1}$  läuft und auf dem unteren Blatt zurück von  $\lambda_{2j+1}$  nach  $\lambda_{2j}$ .  $\beta_j$  sei ein geschlossener Weg, der den Schnitt  $(\lambda_{2j+1}, \lambda_{2j+2})$ ,  $j = 1, \dots, g$  auf dem oberen Blatt umrundet. Das obere Blatt sei dasjenige, für das  $R_g^{1/2}(\lambda)$  auf  $(\lambda_{2g+2}, \infty)$  positiv ist. Zu einem gegebenen Punkt  $\lambda$  auf dem oberen Blatt sei seine Projektion auf das untere Blatt mit  $\lambda'$  bezeichnet.

Im folgenden werden einige Sätze und Begriffsbildungen im Zusammenhang mit der Riemannfläche  $\mathcal{R}$  benötigt:

- (i) Ein Differential  $\omega$  heißt Abelsches oder auch holomorphes Differential, falls es in einer Umgebung jedes Punktes auf der Riemannfläche  $\mathcal{R}$  in der Form

$$\omega = f(\lambda) d\lambda \quad (\text{B.77})$$

mit einer Funktion  $f(\lambda)$ , die analytisch in ihrem lokalen Parameter  $\lambda$  ist, dargestellt werden kann.

- (ii) Die holomorphen Differentiale auf  $\mathcal{R}$  bilden einen  $g$ -dimensionalen Vektorraum.  
 (iii) Die  $g$  Differentiale

$$\eta_j = \lambda^{j-1} R_g^{-1/2}(\lambda) d\lambda \quad , \quad j = 1, \dots, g, \quad (\text{B.78})$$

sind linear unabhängig, bilden also eine Basis des Vektorraums der holomorphen Differentiale auf  $\mathcal{R}$ .

- (iv) Aus den Differentialen  $\eta_j$  läßt sich eine neue Basis

$$\omega_j = \sum_{k=1}^g c_{jk} \eta_k \quad (\text{B.79})$$

konstruieren, die folgende Normierungsbedingung erfüllt:

$$\oint_{\alpha_k} \omega_j = \delta_{jk} \quad . \quad (\text{B.80})$$

- (v) Konstruiere ferner die Matrix der  $\beta$ -Perioden

$$B_{jk} := \oint_{\beta_k} \omega_j \quad . \quad (\text{B.81})$$

Dann ist  $B$  eine Riemannmatrix (zur Definition s. Anhang D).

- (vi) Es seien  $M, N \in \mathbf{C}^g$ . Dann ist die Menge

$$J(\mathcal{R}) := \mathbf{C}^g / \{N + BM\} \quad (\text{B.82})$$

ein  $2g$  dimensionaler (reeller) Torus, der Jacobivarietät der Riemannschen Fläche  $\mathcal{R}$  heißt (s. Lemma D.1).

Entscheidend für die explizite Integration der Todabewegungsgleichungen ist nun die Tatsache, daß die  $\mu_j$  und die  $\mu_j(n)$  nicht unabhängig voneinander sind. Es läßt sich eine meromorphe Funktion auf  $\mathcal{R}$  konstruieren, deren Pole die  $\mu_j$  und deren Nullstellen die  $\mu_j(n)$  sind. Nullstellen und Pole einer meromorphen Funktion auf einer Riemannfläche sind durch den Satz von Abel (s.u.) miteinander verknüpft. Betrachte die speziellen, durch

$$\psi_1^\pm := \begin{pmatrix} \frac{\rho_\pm - D}{C} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.83})$$

gegebenen Floquetlösungen des linearen Hilfsproblems (B.7). Es ist

$$\psi_{n+1}^\pm = L_n(\lambda) \dots L_1(\lambda) \psi_1^\pm \quad , \quad (\text{B.84})$$

$$T_{n+1}(\lambda) \psi_{n+1}^\pm = L_n(\lambda) \dots L_1(\lambda) T(\lambda) \psi_1^\pm = \rho_\pm \psi_{n+1}^\pm \quad . \quad (\text{B.85})$$

Die letzte Zeile besagt, daß  $\psi_{k+1}^\pm$  Lösung des verschobenen linearen Hilfsproblems (B.64) ist. Setze

$$\psi_{n+1}^\pm =: \begin{pmatrix} x_{n+1}^\pm \\ y_{n+1}^\pm \end{pmatrix} \quad , \quad L_n(\lambda) \dots L_1(\lambda) =: \begin{pmatrix} \alpha_n & \beta_n \\ \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{B.86})$$

Dann ist

$$y_{n+1}^\pm = \frac{\gamma_n(\rho_\pm - D)}{C} + \delta_n \quad , \quad (\text{B.87})$$

$$y_{n+1}^+ - y_{n+1}^- = \frac{\gamma_n \sqrt{t^2(\lambda) - 4}}{C} \quad . \quad (\text{B.88})$$

Eine kurze direkte Rechnung zeigt, daß

$$y_{n+1}^+ y_{n+1}^- = \frac{C_n(\lambda)}{C(\lambda)} \quad (\text{B.89})$$

und daß  $y_{n+1}^+$  und  $y_{n+1}^-$  für  $\lambda \rightarrow \infty$  die Asymptotik

$$y_{n+1}^+ = e^{q_n - q_N} \lambda^n + \mathcal{O}(\lambda^{n-1}) \quad , \quad (\text{B.90})$$

$$y_{n+1}^- = \lambda^{-n} + \mathcal{O}(\lambda^{-n-1}) \quad , \quad n = 1, \dots, N-1, \quad (\text{B.91})$$

aufweisen. Aus den letzten drei Gleichungen folgern Date und Tanaka [17, 18], daß man  $y_{n+1}^+$  und  $y_{n+1}^-$  als die beiden Zweige einer auf der Riemannfläche  $\mathcal{R}$  meromorphen Funktion  $y_{k+1}(\lambda)$  auffassen kann, die an den Stellen  $\lambda = \mu_j$ ,  $j = 1, \dots, g$ , einfache Pole und an den Stellen  $\lambda = \mu_j(n)$  einfache Nullstellen besitzt. Hinzu kommen ein  $n$ -facher Pol bei  $\lambda = \infty$  auf dem oberen Blatt und eine  $n$ -fache Nullstelle bei  $\lambda = \infty'$  auf dem unteren Blatt.

Um einen Zusammenhang zwischen den Polen und Nullstellen von  $y_{n+1}$  zu erhalten, definiere die Abelabbildung  $A : \mathcal{R} \rightarrow J(\mathcal{R})$  durch

$$A_j(P) = \int_{P_o}^P \omega_j \quad , \quad j = 1, \dots, g. \quad (\text{B.92})$$

Dabei sei  $P_o$  ein fester Punkt auf der Riemannfläche und der Integrationsweg für alle  $k$  derselbe. Wählt man einen anderen Integrationsweg, so ändert sich der Wert von  $A(P)$  höchstens um Perioden. Deshalb ist die Abbildung  $A$  wohldefiniert. Es gelten die beiden folgenden Sätze [20, 68]:

- (i) Eine meromorphe Funktion auf der hyperelliptischen Fläche  $\mathcal{R}$  hat genau soviele Nullstellen  $P_1, \dots, P_n$  wie Pole  $Q_1, \dots, Q_n$ . Dabei sind die Nullstellen und Pole entsprechend ihrer Vielfachheit zu zählen.

- (ii) (Satz von Abel) Die (nicht notwendig verschiedenen) Punkte  $P_1, \dots, P_n, Q_1, \dots, Q_n$  sind genau dann die Nullstellen und Pole einer meromorphen Funktion, wenn auf der Jacobivarietät  $J(\mathcal{R})$  gilt

$$\sum_{j=1}^n A(P_j) - \sum_{j=1}^n A(Q_j) \equiv 0 \quad . \quad (\text{B.93})$$

Das Zeichen „ $\equiv$ “ bedeutet hier Kongruenz modulo Perioden.

Mit  $\omega := (\omega_1, \dots, \omega_g)$  folgt daraus für die Nullstellen  $\mu_j(n)$  und Pole  $\mu_j$  der meromorphen Funktion  $y_{n+1}(\lambda)$

$$\sum_{j=1}^g \int_{\mu_o}^{\mu_j(n)} \omega \equiv n \int_{\infty'}^{\infty} \omega + \sum_{j=1}^g \int_{\mu_o}^{\mu_j} \omega =: \zeta(n, t) \quad . \quad (\text{B.94})$$

D.h. die Punkte  $\mu_j(n) \in \mathcal{R}$ ,  $j = 1, \dots, g$ , sind eine Lösung des Jacobischen Umkehrproblems, das darin besteht, für einen gegebenen Punkt  $\zeta \in J(\mathcal{R})$   $g$  Punkte  $P_1, \dots, P_g \in \mathcal{R}$  zu finden so, daß gilt

$$A(P_j) = \zeta_j \quad , \quad j = 1, \dots, g. \quad (\text{B.95})$$

Die Gleichung (B.94) ist der Schlüssel zur Integration der Bewegungsgleichungen. Denn auf der einen Seite lassen sich die symmetrischen Polynome in den  $\mu_j(n)$ , jetzt wieder aufgefaßt als komplexe Zahlen, explizit durch Riemannsche Thetafunktionen mit Argument  $\zeta$  ausdrücken [20], auf der anderen Seite ist die Bewegungsgleichung für  $\zeta$  als Funktion der Zeit trivial. Es gilt [17, 18, 20]

$$p_n = - \sum_{j=1}^g \mu_j(n) = c - \sum_{j=1}^g c_{jg} \partial_j \ln \left( \frac{\theta(\zeta(n, t) + \gamma_1 | B)}{\theta(\zeta(n+1, t) + \gamma_1 | B)} \right) \quad . \quad (\text{B.96})$$

In  $c \in \mathbf{R}$  und  $\gamma_1 \in \mathbf{C}^g$  sind verschiedene Konstanten zusammengefaßt, die sich zwar explizit angeben lassen, deren genauere Gestalt hier jedoch nicht von Belang ist. Die  $c_{jg}$  sind die Normierungskonstanten aus Gleichung (B.79). Da die Funktion  $R_g(\lambda)$  auf den  $\alpha$ -Zyklen und auf dem Intervall  $(\lambda_{2g+2}, \infty)$  positiv und auf den  $\beta$ -Zyklen negativ ist, folgt aus (B.79) bis (B.81):

$$c_{jk} \in \mathbf{R} \quad , \quad j, k = 1, \dots, g, \quad (\text{B.97})$$

$$\Re(B) = 0 \quad . \quad (\text{B.98})$$

$$k := \int_{\infty'}^{\infty} \omega \in \mathbf{R}^g \text{ (modulo Perioden)}. \quad (\text{B.99})$$

Die Vektoren  $\nu \in \mathbf{R}^g$  seien durch die Koordinaten  $\nu_j := c_{jg}$  definiert.

Die Bewegungsgleichung für  $\zeta(n, t)$  ergibt sich durch Ableiten von (B.94) nach der Zeit:

$$\dot{\zeta}_j = \sum_{k=1}^g \dot{\mu}_k \sum_{l=1}^g c_{jl} \mu_k^{l-1} R_g^{1/2}(\mu_k) \quad . \quad (\text{B.100})$$

Setzt man hier die Bewegungsgleichungen (B.63) für die  $\mu_j$  ein, so erhält man

$$\dot{\zeta}_j = \pm \sum_{l=1}^g c_{jl} \sum_{k=1}^g \frac{\mu_k^{l-1}}{m'(\mu_k)} \quad . \quad (\text{B.101})$$

Mit Hilfe des Residuensatzes zeigt man, daß für  $1 \leq l \leq g$

$$\sum_{k=1}^g \frac{\mu_k^{l-1}}{m'(\mu_k)} = \delta_{lg} \quad . \quad (\text{B.102})$$

Die Komponenten von  $\zeta$  gehorchen also der Bewegungsgleichung

$$\dot{\zeta}_j = \pm c_{jg} = \pm \nu_j \quad , \quad (\text{B.103})$$

und es folgt

$$\zeta(n, t) = \zeta_o + nk \pm \nu t \quad . \quad (\text{B.104})$$

Setze jetzt noch  $\gamma := \zeta_o + \gamma_1$  und wähle o.B.d.A. das Minuszeichen für  $\nu$ , dann folgt

$$p_n = c + d_t \ln \left( \frac{\theta(kn - \nu t + \gamma|B)}{\theta(k(n+1) - \nu t + \gamma|B)} \right) \quad . \quad (\text{B.105})$$

Bislang galten die Erörterungen nur für  $n = 1, \dots, N-1$ . Aus Symmetriegründen gilt (B.105) jedoch auch für  $n = N$ . Ferner muß  $p_{n+N} = p_n$  gelten. Da außerdem  $P = 0$  vorausgesetzt war, folgt  $c = 0$ . Für die Koordinaten ergibt sich endlich

$$q_n = nd + \ln \left( \frac{\theta(kn - \nu t + \gamma|B)}{\theta(k(n+1) - \nu t + \gamma|B)} \right) \quad (\text{B.106})$$

mit  $k, \nu \in \mathbf{R}^g$ ,  $\Re(B) = 0$  und einer zusätzlichen Integrationskonstanten  $d$ . Diese Gleichung ist der Ausgangspunkt für die Rechnungen in Kapitel 2.3.

## Anhang C: Semiklassische Formel für die Spur des Propagators

### C.1 Semiklassischer Propagator

Es ist naheliegend, sich zur Berechnung einer semiklassischen Näherung für die Spur (2.1) des Propagators

$$K(q, q', T) = \langle q | e^{-\frac{i}{\hbar} HT} | q' \rangle = \sum_n \varphi_n^*(q') \varphi_n(q) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n T} \quad , \quad (\text{C.1})$$

der hier durch einen vollständigen Satz von Eigenfunktionen  $\varphi_n$  zu Energien  $E_n$  ausgedrückt ist, zunächst eine semiklassische Näherung für den Propagator selber zu beschaffen. Dies ist vergleichsweise unproblematisch. Ein möglicher Weg dahin, der bereits in den zwanziger Jahren von van Vleck (zitiert in [6]) besprochen wurde, besteht darin, direkt von der Schrödingergleichung auszugehen und dabei eine verallgemeinerte Form des WKB-Ansatzes [50] zu benutzen. Ein anderer möglicher Weg nutzt die Pfadintegraldarstellung

$$K(q, q', T) = \int \mathcal{D}Q e^{\frac{i}{\hbar} S[Q]} \quad (\text{C.2})$$

des Propagators, um eine asymptotische Formel für kleine  $\hbar$  zu entwickeln. In der Pfadintegraldarstellung (C.2) ist  $S[Q]$  das klassische Wirkungsfunktional für einen Pfad  $Q(t; q, q', T)$ , der bei  $q'$  beginnt, bei  $q$  endet und in der Zeit  $T$  durchlaufen wird. Die gewählte Darstellung des Pfades zeigt schon, daß im folgenden Translationsinvarianz in der Zeit angenommen wird. Es wird davon ausgegangen, daß die Lagrange-Funktion  $L$  des Systems nicht explizit zeitabhängig ist. Somit ist das Wirkungsfunktional von der Form

$$S[Q] = \int_0^T dt L(\dot{Q}, Q) \quad . \quad (\text{C.3})$$

Der Grund dafür, explizite Zeitabhängigkeit der Lagrange-Funktion auszuschließen, ist nicht prinzipieller, sondern praktischer Natur. Die Todakette fällt in diese Kategorie, und die auftretenden Formeln lassen sich so etwas kompakter schreiben. Aus (C.3) folgt die klassische Bewegungsgleichung des Systems durch Null-Setzen der Funktionalableitung nach dem Pfad,

$$\frac{\delta S[Q]}{\delta Q(t)} = -\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} + \frac{\partial L}{\partial Q} = 0 \quad . \quad (\text{C.4})$$

Die klassische Bewegungsgleichung ist also gerade die Stationaritätsbedingung für die Phase in (C.2), die für kleine  $\hbar$  ein schnell variierendes Funktional der Pfade  $Q$  ist. Asymptotisch für kleine  $\hbar$  ist der Propagator deshalb durch das Pfadintegralanalogon zur SPA gegeben [24, 66]. Man entwickelt um einen klassischen Pfad und nimmt nur die quadratischen Fluktuationen mit. In der Nähe des klassischen Pfades  $Q$  gilt

$$S[Q + \Delta Q] = S[Q] + \frac{1}{2} \int_0^T dt \int_0^T dt' \frac{\delta^2 S[Q]}{\delta Q(t) \delta Q(t')} \Delta Q(t) \Delta Q(t') + \mathcal{O}(\Delta^3) \quad . \quad (\text{C.5})$$

Man kann sich zumindest heuristisch davon überzeugen, daß die  $\mathcal{O}(\Delta^3)$ -Terme Beiträge höherer Ordnung in  $\hbar$  zu (C.2) liefern [66]. Vernachlässigt man diese Terme, so hat man ein Pfadintegral mit quadratischer Wirkung auszuwerten. Die Methoden dazu sind vielfältig [66] und führen auf die semiklassische Formel

$$K(q, q', T) = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{\frac{N}{2}}} \sum_n \left| \det \left( \frac{\partial^2 S_n}{\partial q \partial q'} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \exp(i(S_n/\hbar - \theta_n)) \quad . \quad (\text{C.6})$$

Die Wirkung  $S_n$  ist in diesem Ausdruck aufzufassen als Funktion von Anfangsort  $q'$ , Endort  $q$  und Laufzeit  $T$  des  $n$ -ten klassischen Pfades (s.u.). Es wird über alle klassischen Pfade summiert, die in der Zeit  $T$  von  $q'$  nach  $q$  führen. Die Exponentialfunktion in (C.6) beschreibt die Möglichkeit quantenmechanischer Interferenzen. Die Determinante in (C.6) ist bis auf Vorzeichen die Dichte der klassischen Pfade, die von  $q'$  ausgehend nach der Zeit  $T$  bei  $q$  eintreffen, also die klassische Antwort auf die Frage, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Teilchen, das mit beliebigem Impuls in der Nähe von  $q'$  startet, nach der Zeit  $T$  in der Nähe von  $q$  ankommt. Wegen der Erhaltung der klassischen Wahrscheinlichkeit gehorcht die Determinante einer Kontinuitätsgleichung [66]. Der Faktor  $\theta_n = v_n\pi/2$  ist ein diskreter Phasenfaktor.  $v_n$  zählt die Anzahl der kritischen Punkte auf dem  $n$ -ten klassischen Pfad entsprechend ihrer Vielfachheit. Ein kritischer Punkt ist ein Punkt, an dem die Dichte der Pfade unendlich wird. Wegen der Kontinuitätsgleichung muß dann die Dimension des Bündels von Pfaden, das ursprünglich  $N$ -dimensional war, an einem kritischen Punkt reduziert sein. Die Anzahl der Dimensionen, um die das Bündel reduziert wird, ist die Vielfachheit des kritischen Punktes. Im allgemeinen bilden die kritischen Punkte Untermannigfaltigkeiten des Konfigurationsraums, die in Analogie zur geometrischen Optik Kaustiken heißen. Die kritischen Punkte der eindimensionalen beschränkten Bewegung im Potential sind die Umkehrpunkte.

Eine instruktive alternative Herleitung der Gleichung (C.6) stammt von Berry und Mount [6]. Sie zerteilen das Zeitintervall  $T$  in gleiche Zeitabschnitte und zerlegen den Propagator in ein „Faltungsprodukt“ von Propagatoren über diese kurzen Zeitintervalle. Dabei wählen sie die Zeitintervalle so kurz, daß die Propagatoren durch ihre Kurzzeitnäherung ersetzt werden können. Anschließend wird die „Faltung“ iterativ in SPA bezüglich kleiner  $\hbar$  ausgeführt.

## C.2 Hamilton-Jacobi-Formalismus

Aus der Lagrangegleichung (C.4) ergeben sich die klassischen Bahnen eindeutig, wenn man Anfangsbedingungen der Form  $\dot{Q}(0) = \dot{q}'$ ,  $Q(0) = q'$  vorgibt. Gibt man hingegen Anfangs- und Endort  $q, q'$ , sowie Flugzeit  $T$  vor, so gibt es im allgemeinen mehrere Bahnen, die diesen Bedingungen genügen. Bei festem  $q, q'$  wird die Bahn jedoch dann eindeutig, wenn man  $T$  hinreichend kurz wählt. Die entsprechende Bahn ist dann ein echtes Minimum des Wirkungsfunktional (C.3) [66]. Kennt man die Lösungen  $Q^n$  von (C.4) für gegebenes  $q, q'$  und  $T$ , so läßt sich mit Hilfe von (C.3) die Wirkung  $S$  als Funktion dieser Größen ausdrücken. Wegen der Mehrdeutigkeit der Bahnen ist jedoch auch  $S$  mehrdeutig. Dieser Tatsache wird im folgenden, wo immer eine Unterscheidung notwendig ist, durch einen Index Rechnung getragen:

$$S_n(q, q', T) := S[Q^n] \quad . \quad (\text{C.7})$$

Die zu den Koordinaten  $Q_j$  kanonisch konjugierten Impulse sind

$$P_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} \quad , \quad (\text{C.8})$$

und die Hamiltonfunktion des Systems ist

$$H(P, Q) = P_j \dot{Q}_j - L \quad . \quad (\text{C.9})$$

Dabei sind die Geschwindigkeiten  $\dot{Q}_j$  mit Hilfe von (C.8) als Funktionen der Impulse  $P_j$  darstellbar. Durch Differenzieren von (C.3) ergeben sich unmittelbar Anfangsimpuls  $p'$  und Endimpuls  $p$  für eine gegebene Bahn.

$$p' = -\frac{\partial S(q, q', T)}{\partial q'} \quad , \quad p = \frac{\partial S(q, q', T)}{\partial q} \quad . \quad (\text{C.10})$$

In diesem Anhang ist mit  $\frac{\partial}{\partial q}$  immer die Ableitung der Wirkung nach dem ersten Argument, mit  $\frac{\partial}{\partial q'}$  die nach dem zweiten Argument gemeint. Da für ein nicht explizit zeitabhängiges System die Hamiltonfunktion längs einer gegebenen Bahn den erhaltenen Wert der Energie annimmt, ergeben sich durch Ableiten von (C.3) nach der Laufzeit  $T$  die beiden Hamilton-Jacobi-Gleichungen

$$\frac{\partial S}{\partial T} + H\left(\frac{\partial S}{\partial q}, q\right) = 0 \quad , \quad \frac{\partial S}{\partial T} + H\left(-\frac{\partial S}{\partial q'}, q'\right) = 0 \quad . \quad (\text{C.11})$$

Die Gleichungen (C.10), (C.11) können alternativ zur Lagrangegleichung dazu benutzt werden, das Anfangswertproblem für ein mechanisches System zu lösen [49].

### C.3 Noethertheorem

Bei der Auswertung der Spur des semiklassischen Propagators spielen Symmetrien eine besondere Rolle. Das Noethertheorem ist eine Aussage darüber, wie kontinuierliche Symmetrien Erhaltungsgrößen der Bewegung implizieren. Es wird hier im Zusammenhang mit der Hamilton-Jacobi-Theorie diskutiert. Um es in voller Allgemeinheit herzuleiten, wird in diesem Unterabschnitt eine explizite Zeitabhängigkeit des betrachteten Systems zugelassen. Das System sei einer beliebigen invertierbaren Transformation der Teilchenkoordinaten  $Q$  sowie der Zeitkoordinate  $t$  unterworfen,

$$\begin{aligned} t &\longrightarrow t' = f(t) \quad , \\ Q(t) &\longrightarrow Q'(t') = F(Q(t), t) \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Für die Wirkung ergibt sich dann

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\dot{Q}(t), Q(t), t) = \int_{t'_1}^{t'_2} dt' L'(\dot{Q}'(t'), Q'(t'), t') \quad . \quad (\text{C.13})$$

Die rechte Gleichung definiert die transformierte Lagrangefunktion  $L'$ , die sich aus  $L$  unter Benutzung der zu (C.12) inversen Transformation und der Substitutionsregel ergibt.

Gleichung (C.13) ist von der Form  $S[Q] = S'[Q']$ . Wenn  $Q(t)$  Lösung der Lagrange-gleichung zu  $L$  ist, ist daher  $Q'(t')$  Lösung der Lagrange-gleichung zu  $L'$ .  $Q'(t')$  beschreibt dieselbe physikalische Bewegung in anderen Koordinaten. Falls jedoch die transformierte Lagrangefunktion mit der ursprünglichen gemäß

$$L'(\dot{Q}'(t'), Q'(t'), t') = L(\dot{Q}(t), Q(t), t) + d_t \Omega(Q'(t'), t') \quad (\text{C.14})$$

zusammenhängt, genügen  $Q(t)$  und  $Q'(t')$  denselben Bewegungsgleichungen, und man kann  $Q'(t')$  als neue physikalische Lösung der Bewegungsgleichungen auffassen<sup>8</sup>.

Betrachte nun statt einer einzelnen Transformation (C.12) eine  $k$ -Parametergruppe von Transformationen mit lokalen Parametern  $\sigma_1, \dots, \sigma_k$ . Es sei  $f = f_\sigma$ ,  $F = F_\sigma$ . Die Gruppenoperation sei durch Hintereinanderausführung von Transformationen, das Eins-Element der Gruppe (die identische Transformation) durch  $\sigma = 0$  gegeben.  $f_\sigma$  und  $F_\sigma$  seien stetig differenzierbar nach den Parametern, so daß in der Nähe der Identität gilt

$$\begin{aligned} t' &= t + \varphi_\alpha(t) \sigma_\alpha + \mathcal{O}(\sigma^2) \quad , \\ Q'(t') &= Q(t) + \phi_\alpha(Q(t), t) \sigma_\alpha + \mathcal{O}(\sigma^2) \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

$\varphi_\alpha$  and  $\phi_\alpha$  sind die infinitesimalen Erzeugenden der Transformation. Falls die Lagrange-funktion unter der durch  $f_\sigma$  und  $F_\sigma$  gegebenen Transformationsgruppe invariant gemäß (C.14) ist, gilt für die Wirkung als Funktion von  $q, q', t_2, t_1$

$$\begin{aligned} &S(q + \phi_\alpha(q, t_2) \sigma_\alpha, q' + \phi_\alpha(q', t_1) \sigma_\alpha, t_2 + \varphi_\alpha(t_2) \sigma_\alpha, t_1 + \varphi_\alpha(t_1) \sigma_\alpha) \\ &+ \Omega(q + \phi_\alpha(q, t_2) \sigma_\alpha, t_2 + \varphi_\alpha(t_2) \sigma_\alpha) - \Omega(q' + \phi_\alpha(q', t_1) \sigma_\alpha, t_1 + \varphi_\alpha(t_1) \sigma_\alpha) \quad (\text{C.16}) \\ &= S(q, q', t_2, t_1) + \mathcal{O}(\sigma^2) \quad . \end{aligned}$$

Es ist klar, daß aufgrund der Symmetrien im allgemeinen viele Bahnen von  $q', t_1$  nach  $q, t_2$  existieren (s.z.B. Kapitel 2.1). Die Wirkung ist deshalb im allgemeinen mehrdeutig. Ein Index  $n$ , der zwischen verschiedenen Ästen der Funktion  $S$  unterscheidet, wurde hier weggelassen. Die Ableitung der rechten Seite von Gleichung (C.16) an der Stelle  $\sigma = 0$  verschwindet. Ableiten der kompletten Gleichung nach  $\sigma$  an der Stelle  $\sigma = 0$  ergibt deshalb mit Hilfe von (C.10) und der zeitabhängigen Version von (C.11):

$$\begin{aligned} J_\alpha &:= \left( p + \frac{\partial \Omega(q, t_2)}{\partial q} \right) \phi_\alpha(q, t_2) + \left( \frac{\partial \Omega(q, t_2)}{\partial t_2} - H(p, q, t_2) \right) \varphi_\alpha(t_2) \\ &= \left( p' + \frac{\partial \Omega(q', t_1)}{\partial q'} \right) \phi_\alpha(q', t_1) + \left( \frac{\partial \Omega(q', t_1)}{\partial t_1} - H(p', q', t_1) \right) \varphi_\alpha(t_1) =: J'_\alpha \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

Da Anfangs- und Endorte und -zeiten beliebig waren, folgt, daß der „Noetherstrom“  $J_\alpha$  längs jeder gegebenen Trajektorie erhalten ist.

---

<sup>8</sup> $\Omega$  wird hier *nicht* als Funktion auch der Ableitungen  $\dot{Q}'(t')$  aufgefaßt, da  $L'$  sonst zweite Zeitableitungen enthielte, was nach Konstruktion ausgeschlossen ist.

Die Todakette ist translationsinvariant in Ort und Zeit. Die Zeittranslation wird infinitesimal erzeugt durch  $\varphi_1(t) = 1$ ,  $\phi_1^i(Q(t), t) = 0$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Sie erfüllt (C.14) mit  $\Omega = 0$ . Mit (C.17) folgt, daß  $H$  erhalten ist. Die Ortstranslation wird erzeugt durch  $\varphi_2(t) = 0$ ,  $\phi_2^i(Q(t), t) = 1$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Auch sie erfüllt (C.14) mit  $\Omega = 0$ . (C.17) impliziert in diesem Falle, daß der Gesamtimpuls  $P = p_1 + \dots + p_N$  erhalten ist.

## C.4 Zeitumkehrsymmetrie

Betrachte zunächst wiederum ein System mit im allgemeinen auch zeitabhängiger Lagrangefunktion. Es sei einer Transformation

$$\begin{aligned} t &\longrightarrow t' = T - t \quad , \\ Q(t) &\longrightarrow Q'(t') = Q(t) \end{aligned} \quad (C.18)$$

unterworfen, wobei für eine gegebene Bahn  $Q(t)$  gelte  $Q(0) = q'$ ,  $Q(T) = q$ . Die Wirkung transformiert sich unter (C.18) gemäß

$$S = \int_0^T dt L(\dot{Q}(t), Q(t), t) = \int_0^T dt L(-\dot{Q}'(t), Q'(t), T - t) \quad , \quad (C.19)$$

und das System ist symmetrisch unter Zeitumkehr, falls für die Lagrangefunktion die Beziehung  $L(-\dot{Q}'(t), Q'(t), T - t) = L(\dot{Q}'(t), Q'(t), t) + d_t \Omega(Q'(t), t)$  mit einer beliebigen Funktion  $\Omega$  gilt. Außer  $Q(t)$  ist dann auch die Bahn  $Q'(t) = Q(T - t)$  Lösung der Bewegungsgleichung. Es ist  $Q'(0) = Q(T) = q$  und  $Q'(T) = Q(0) = q'$ . Insbesondere sind alle Systeme, deren Lagrangefunktion nicht explizit zeitabhängig und quadratisch in den Geschwindigkeiten ist, zeitumkehrinvariant.

In ihrer Herleitung der Spurformel folgern Dashen, Hasslacher und Neveu (Anhang A, [16]) für ein nicht explizit zeitabhängiges und zeitumkehrinvariantes System, daß  $S(q, q', T) = S(q', q, T)$ . Dieser Schluß ist *unzulässig*. Er setzte die Existenz einer eindeutigen Wirkungsfunktion voraus. Die Zeitumkehrinvarianz führt jedoch zu einer Zweideutigkeit der Wirkung zumindest in der Nähe jeder periodischen Bahn. Um das einzusehen, betrachte Abbildung 4. Eine periodische Bahn, die in der Zeit  $T$  von  $O$  nach  $O$  führt, kann im positiven Zeitsinn (+) oder im negativen Zeitsinn (−) durchlaufen werden. Es seien  $A$  und  $B$  zwei Orte in der Nähe von  $O$ . Betrachtung des linearen Stabilitätsproblems (s.u.) zeigt, daß es zu jeder Bahn, die in der Zeit  $T$  durchlaufen wird, also sowohl zur Bahn + als auch zur Bahn −, eine ähnliche Bahn mit Laufzeit  $T$  gibt, die an einem beliebigen Ort in der Nähe von  $O$  beginnt und wieder an einem beliebigen anderen Ort in der Nähe von  $O$  endet. Das heißt, es gibt eine der Bahn + ähnliche Bahn, die bei  $A$  beginnt und bei  $B$  endet, und eine weitere ihr ähnliche Bahn, die bei  $B$  beginnt und bei  $A$  endet. Dasselbe gilt für die Bahn −. Die zwei Bahnen + und − spalten in vier Bahnen  $AB+$ ,  $BA+$ ,  $AB-$ ,  $BA-$  auf. Es gibt also zwei Bahnen, die von einem Punkt  $A$  zu einem Punkt  $B$  führen. Die Wirkung ist dabei für die Bahnen  $AB+$  und  $BA-$  bzw.  $AB-$  und  $BA+$  wegen der Zeitumkehrinvarianz dieselbe.

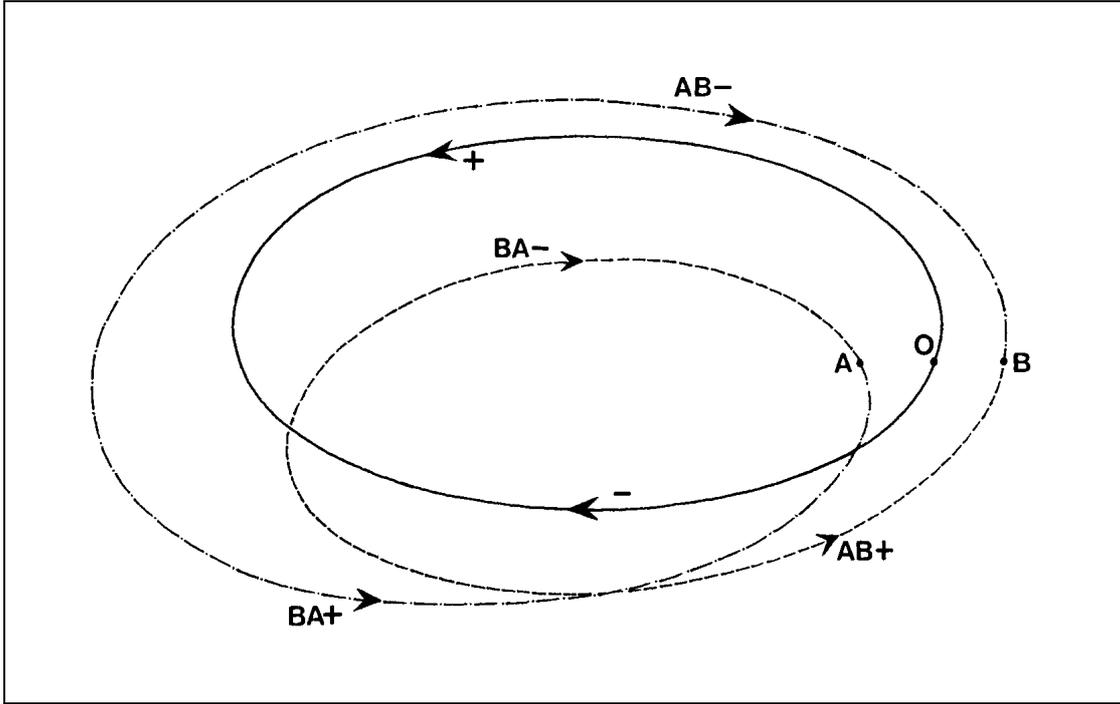


Abbildung 4: Zweideutigkeit der Wirkung aufgrund der Zeitumkehrsymmetrie.

Es seien die zwei Äste der Wirkung eines zeitumkehrinvarianten Systems mit  $S_+$  und  $S_-$  bezeichnet. Dann gilt für ein nicht explizit zeitabhängiges System mit (C.19)

$$S_+(q, q', T) = S_-(q', q, T) \quad . \quad (\text{C.20})$$

Und die Entwicklung der Wirkung um eine gegebene periodische Bahn mit Anfangs- und Endpunkt  $q^*$  bis zu Termen zweiter Ordnung nimmt die Gestalt

$$S_{\pm}(q^* + \delta q, q^* + \delta q', T) = S_{\pm}(q^*, q^*, T) + p_{\pm}(\delta q - \delta q') + \frac{1}{2}(\delta q, \delta q') \begin{pmatrix} A_{\pm} & C_{\pm} \\ C_{\pm}^T & B_{\pm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix} \quad (\text{C.21})$$

an. Mit (C.20) folgt daraus für eine periodische Bahn

$$p_+ = -p_- \quad , \quad \begin{pmatrix} A_+ & C_+ \\ C_+^T & B_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_- & C_-^T \\ C_- & A_- \end{pmatrix} \quad (\text{C.22})$$

Die Matrizen  $A, B, C$ , bei Bedarf mit einem  $+$  bzw. einem  $-$  Zeichen genauer gekennzeichnet, sind dabei gemäß

$$A_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j} \quad , \quad B_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial q'_i \partial q'_j} \quad , \quad C_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q'_j} \quad (\text{C.23})$$

definiert. Sie werden in den folgenden Unterabschnitten benötigt.

## C.5 Das lineare Stabilitätsproblem

In diesen Unterabschnitt wird die Dynamik kleiner Abweichungen  $\delta q(t)$  von einer gegebenen periodischen Bahn  $Q(t)$  untersucht (s. [62]). Durch Entwickeln der Lagrangefunktion (C.4) um die gegebene periodische Bahn ergibt sich in erster Ordnung für  $\delta q(t)$  die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{Q}_i \partial \dot{Q}_j} \delta \dot{q}_j(t) \right) + \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{Q}_i \partial Q_j} \delta q_j(t) \right) - \frac{\partial^2 L}{\partial Q_i \partial \dot{Q}_j} \delta \dot{q}_j(t) - \frac{\partial^2 L}{\partial Q_i \partial Q_j} \delta q_j(t) = 0 \quad . \quad (\text{C.24})$$

Diese Gleichung ist wieder von der Form (C.4), wenn man als Lagrangefunktion des linearen Stabilitätsproblems (LSP) die Funktion

$$L_{sp} := \frac{1}{2} (\delta \dot{q}(t), \delta q(t)) \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{Q} \partial \dot{Q}} & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{Q} \partial Q} \\ \frac{\partial^2 L}{\partial Q \partial \dot{Q}} & \frac{\partial^2 L}{\partial Q \partial Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \dot{q}(t) \\ \delta q(t) \end{pmatrix} \quad (\text{C.25})$$

eingführt. Die Matrix der Ableitungen der ursprünglichen Lagrangefunktion in dieser Gleichung sei zukünftig als  $L_2$  bezeichnet. Auf gewohnte Weise kann man auch die Hamiltonfunktion des LSPs einführen und erhält Hamiltonsche Bewegungsgleichungen der Form

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{p} \\ \delta \dot{q} \end{pmatrix} = H(t) \begin{pmatrix} \delta p \\ \delta q \end{pmatrix} \quad (\text{C.26})$$

mit einer zeitlich periodischen  $2N \times 2N$ -Matrix  $H(t) = H(t + T)$ .

Es sei  $F = F(t)$  eine Fundamentalmatrix der Differentialgleichung (C.26). Dann gelten die folgenden Aussagen:

- (i) Ist  $G = G(t)$  Fundamentalmatrix von (C.26), dann gibt es eine reguläre zeitunabhängige Matrix  $C$ , so daß  $F = GC$ .
- (ii)  $F(t + T)$  ist Fundamentalmatrix, und deshalb gilt  $F(t + T) = F(t)M$ . Die reguläre Matrix  $M$  heißt Monodromiematrix.
- (iii) Da  $M$  regulär ist, sind alle Eigenwerte von  $M$  ungleich Null.
- (iv) Alle Monodromiematrizen sind einander ähnlich. Das heißt, sind  $M_1, M_2$  Monodromiematrizen, dann gibt es eine reguläre Matrix  $C$ , so daß  $M_1 = C^{-1}M_2C$ . Insbesondere haben alle Monodromiematrizen dieselbe Jordansche Normalform, also auch dieselben Eigenwerte und dieselbe Determinante.
- (v) Sei  $K$  eine Matrix, so daß  $M = \exp(TK)$ . Die Eigenwerte  $\mu$  von  $M$  lassen sich dann in der Form  $\mu = \exp(\lambda T)$  darstellen. Die  $\lambda$ 's heißen charakteristische Exponenten des LSPs, die Größen  $\eta := \lambda T$  Stabilitätsexponenten. In Kapitel 2.5 werden die von Null verschiedenen Stabilitätsexponenten für die Ein-cnoidal-wave-Lösung der Todabewegungsgleichungen berechnet.

(vi) Es gilt das Floquettheorem: Jede Fundamentalmatrix  $F$  lässt sich darstellen als

$$F(t) = P(t)e^{TK} \quad , \quad \text{mit } P(t+T) = P(t) \quad . \quad (\text{C.27})$$

Sei  $J$  die Jordansche Normalform von  $K$ :  $K = L JL^{-1}$ . Dann folgt

$$\Phi(t) := F(t)L = P(t)Le^{tJ} =: \Pi(t)e^{tJ} \quad . \quad (\text{C.28})$$

$\Pi(t)$  ist periodisch,  $\Pi(t+T) = \Pi(t)$ . Die Spalten der Matrix  $\Pi$  seien mit  $\Pi_i$  bezeichnet.  $\lambda_1, \dots, \lambda_m$  seien die paarweise verschiedenen Eigenwerte von  $K$  mit Vielfachheiten  $v_1, \dots, v_m$ . Ferner sei  $i = v_1 + \dots + v_{r-1} + k$ ,  $1 \leq k \leq v_r$ . Dann hat die Spalte  $\Phi_i$  von  $\Phi$  die Form

$$\Phi_i = e^{\lambda_r t} \left( \frac{\Pi_{i-k+1}(t)t^{k-1}}{(k-1)!} + \dots + \Pi_{i-1}(t)t + \Pi_i(t) \right) \quad . \quad (\text{C.29})$$

(vii) Für ein nicht explizit zeitabhängiges, hamiltonsches System verschwinden mindestens zwei der charakteristischen Exponenten. Die zugehörigen Lösungen sind von der Form

$$\Phi_1(t) = \Pi_1(t) \quad , \quad \Phi_2(t) = \Pi_1(t)t + \Pi_2(t) \quad . \quad (\text{C.30})$$

(viii) Der Zeitentwicklungsoperator  $U(t)$  der Differentialgleichung (C.26) ist das spezielle Fundamentalsystem für das  $U(0) = \mathbb{I}$  gilt. Für die Anfangsbedingungen  $\delta p(0) = \delta p'$ ,  $\delta q(0) = \delta q'$  ist

$$\begin{pmatrix} \delta p(t) \\ \delta q(t) \end{pmatrix} = U(t) \begin{pmatrix} \delta p' \\ \delta q' \end{pmatrix} \quad (\text{C.31})$$

die eindeutige Lösung der Gleichung (C.26). Wegen  $U(t_1 + t_2) = U(t_1)U(t_2)$  ist  $U(T) =: M$  eine Monodromiematrix des Problems. Mit  $\delta p(T) =: \delta p$ ,  $\delta q(T) =: \delta q$  gilt

$$\begin{pmatrix} \delta p \\ \delta q \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \delta p' \\ \delta q' \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{C.32})$$

Die so definierte spezielle Monodromiematrix des Problems wird im folgenden kurz als die Monodromiematrix bezeichnet.

Es sei  $S_2$  der Term zweiter Ordnung in der Entwicklung der Wirkung  $S(q, q', T)$  um einen Punkt  $q^*$  auf einer gegebenen periodischen Bahn. Mit den Bezeichnungen des Unterabschnittes (C.4) gilt

$$S_2(\delta q, \delta q') = \frac{1}{2}(\delta q, \delta q') \begin{pmatrix} A & C \\ C^T & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{C.33})$$

Dieser Ausdruck ist auf der anderen Seite jedoch die Wirkung für diejenige Lösung des LSPs, die in der Zeit  $T$  von  $\delta q'$  nach  $\delta q$  führt.  $S_2(\delta q, \delta q')$  läßt sich nämlich schreiben als

$$S_2(\delta q, \delta q') = \frac{1}{2}(\delta q, \delta q') \left( \int_0^T dt Q_2^T(t) L_2(t) Q_2(t) \right) \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix}. \quad (\text{C.34})$$

Dabei ist  $Q_2(t)$  gemäß

$$Q_2(t) := \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{Q}}{\partial q} & \frac{\partial \dot{Q}}{\partial q'} \\ \frac{\partial Q}{\partial q} & \frac{\partial Q}{\partial q'} \end{pmatrix} \quad (\text{C.35})$$

definiert. Nach Gleichung (C.25) ist  $S_2$  die Wirkung für die Bahn  $\begin{pmatrix} \delta \dot{q}(t) \\ \delta q(t) \end{pmatrix} = Q_2(t) \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix}$ . Daß diese Bahn eine Lösung der Bewegungsgleichung (C.24) ist, folgt aus der Tatsache, daß die Spalten der Matrix  $Q_2$  Ableitungen der ursprünglichen Bahn  $\begin{pmatrix} \dot{Q} \\ Q \end{pmatrix}$  nach Parametern der Bewegung sind (vergl. [62]). Wegen der Linearität der Bewegungsgleichungen (C.24), werden diese damit auch von den Linearkombinationen  $Q_2(t) \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix}$  gelöst. Es ist

$$Q_2(0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} & \frac{\partial \dot{q}}{\partial q'} \\ 0 & \mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad Q_2(T) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} & \frac{\partial \dot{q}}{\partial q'} \\ \mathbb{I} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.36})$$

Daraus ergibt sich, daß  $\delta q(0) = \delta q'$ ,  $\delta q(T) = \delta q$ .  $Q_2(t)$  ist ein Fundamentalsystem der Bewegungsgleichung (C.24). Denn angenommen, es wäre nicht so. Dann gäbe es einen Eigenvektor  $\begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix} \neq 0$  zum Eigenwert Null, und man hätte  $\delta \dot{q}(0) = \delta q' = 0$  und somit auch  $\delta \dot{q}(T) = \delta q = 0$ , was einen Widerspruch darstellte. Da  $Q_2$  also invertierbar ist, bestimmen die Vektoren  $\begin{pmatrix} \delta \dot{q}(0) \\ \delta q(0) \end{pmatrix}$  und  $\begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix}$  einander gegenseitig. Die Lösung des LSPs zu einer gegebenen Bahn ist deshalb eindeutig.

Zusammenfassend gilt:  $S_2(\delta q, \delta q')$  ist die Wirkung für die eindeutig existierende Trajektorie des LSPs mit  $\delta q(0) = \delta q'$ ,  $\delta q(T) = \delta q$  und Flugzeit  $T$ . Diese Aussage impliziert die im vorangegangenen Unterabschnitt beschriebene Zweideutigkeit der Wirkung aufgrund der Zeitumkehrsymmetrie. In der Nähe einer im „positiven Sinn“ durchlaufenen Bahn gibt es zwei ähnliche Bahnen, eine von  $q^* + \delta q'$  nach  $q^* + \delta q$  und eine von  $q^* + \delta q$  nach  $q^* + \delta q'$ . Dasselbe gilt für die im „negativen Sinn“ durchlaufene Bahn.

Die zu  $\delta q, \delta q'$  gehörigen End- und Anfangsimpulse ergeben sich durch Ableiten von  $S_2$  nach  $\delta q, \delta q'$  zu

$$\begin{pmatrix} \delta p \\ -\delta p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & C \\ C^T & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta q' \end{pmatrix} \quad (\text{C.37})$$

und stimmen mit den Impulsdifferenzen benachbarter Bahnen zu einer periodischen, wie man sie durch Entwicklung von  $S(q, q', T)$  bekommt, überein. Ein Vergleich der Gleichungen (C.32) und (C.37) macht es nun möglich, die Monodromiematrix  $M$  durch die Matrizen  $A, B, C, C^T$  auszudrücken:

$$M = \begin{pmatrix} -A(C^T)^{-1} & C - A(C^T)^{-1}B \\ -(C^T)^{-1} & -(C^T)^{-1}B \end{pmatrix}. \quad (\text{C.38})$$

Hier wurde benutzt, daß die Matrix  $C^T$  nach Voraussetzung invertierbar ist, da ansonsten der semiklassische Propagator (C.6) verschwinden würde.

## C.6 Forminvarianz der Spur unter Koordinatentransformationen

Bei der Auswertung der Spur des semiklassischen Propagators (C.6) im nächsten Unterabschnitt dieses Anhangs kommt einem wesentlich zustatten, daß das entsprechende Integral forminvariant unter Koordinatentransformationen ist. Es sei  $S(q, q')$  die Wirkung für eine gegebene Bahn von  $q$  nach  $q'$ . Betrachte eine Transformation  $q \rightarrow x$ ,  $q = q(x)$ , und setze

$$\bar{S}(x, x') := S(q(x), q(x')) = S(q, q') \quad . \quad (\text{C.39})$$

Dann ist  $\bar{S}(x, x) = S(q, q)$ . Es sei  $J := \partial x / \partial q$  die Jacobimatrix der Transformation. Dann ergibt sich

$$\frac{\partial^2 \bar{S}(x, x)}{\partial x_i \partial x'_j} = \frac{\partial^2 S(q, q')}{\partial q_k \partial q'_l} \frac{\partial q_j(x)}{\partial x_i} \frac{\partial q_l(x')}{\partial x'_j} \Big|_{x=x'} = (J^{-1})_{ik}^T \frac{\partial^2 S(q, q)}{\partial q_k \partial q'_l} J_{lj}^{-1} \quad . \quad (\text{C.40})$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} & \int dx^N \left| \det \left( \frac{\partial^2 \bar{S}(x, x)}{\partial x \partial x'} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \exp(i\bar{S}(x, x)/\hbar) \\ &= \int dq^N \left| \det(J) \right| \left| \det((J^T)^{-1}) \det \left( \frac{\partial^2 S(q, q)}{\partial q \partial q'} \right) \det(J^{-1}) \right|^{\frac{1}{2}} \exp(iS(q, q)/\hbar) \\ &= \int dq^N \left| \det \left( \frac{\partial^2 S(q, q)}{\partial q \partial q'} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \exp(iS(q, q)/\hbar) \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.41})$$

Die semiklassische Spur kann deswegen in jedem beliebigen krummlinigen Koordinatensystem nach derselben Formel berechnet werden.

## C.7 Auswertung der Spur in SPA I

In diesem Unterabschnitt wird die Spur des semiklassischen Propagators in SPA ausgewertet. Diese Näherung ist konsistent mit der Näherung, die bei der Herleitung des semiklassischen Propagators gemacht wurde. Man hat dazu in Gleichung (C.6)  $q = q'$  zu setzen und über den gesamten Konfigurationsraum zu integrieren. Das heißt, es wird über alle geschlossenen Bahnen integriert. Das  $q$ -Integral vertauscht mit der Summe über die verschiedenen Äste der Wirkung. Die diskreten Phasenfaktoren  $\theta_n$  in (C.6) spielen keine Rolle bei der Auswertung des Integrals. Demzufolge bleiben Integrale der Form

$$I = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{\frac{N}{2}}} \int dq^N \left| \det \left( \frac{\partial^2 S(q, q)}{\partial q \partial q'} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \exp(iS(q, q)/\hbar) \quad (\text{C.42})$$

zu berechnen, wobei  $S$  ein beliebiger Ast der Wirkung ist. Die Stationaritätsbedingung für die Wirkung lautet

$$\frac{dS(q, q)}{dq} = p - p' = 0 \quad . \quad (\text{C.43})$$

Die Wirkung ist stationär, wenn die zugehörige Bahn periodisch ist. Das bedeutet aber, daß das semiklassische Spektrum, das sich aus der Spur des Propagators ergibt, allein durch die periodischen Bahnen bestimmt ist. Darauf wurde in diesem Zusammenhang erstmals von Gutzwiller [33, 34] hingewiesen.

Eine technische Schwierigkeit für das weitere Vorgehen ergibt sich aus der Tatsache, daß (C.43) nicht bloß an isolierten Punkten des Konfigurationsraums erfüllt ist. Für eine gegebene periodische Bahn gilt nämlich (C.43) zumindest an jedem Punkt der Bahn.

Es sei nun angenommen, daß es insgesamt  $k$  kontinuierliche Symmetrien der in Unterabschnitt C.3 beschriebenen Art gibt, die Gleichung (C.14) mit  $\Omega = 0$  erfüllen, die Lagrangefunktion also im eigentlichen Sinne invariant lassen. Die Wirkung  $S(q, q)$  hat dann für alle Punkte  $q$ , die aus einem gegebenen Punkt  $q^*$  durch Anwendung der Symmetriegruppe hervorgehen, denselben Wert. Wenn die Gleichung (C.43) für  $q^*$  erfüllt ist, ist sie also auch für die so erzeugte  $k$ -dimensionale Untermannigfaltigkeit  $\Gamma$  des Konfigurationsraums erfüllt.  $\Gamma$  sei im folgenden als Symmetriemannigfaltigkeit der durch  $q^*$  charakterisierten periodischen Bahn bezeichnet. Das Integral (C.42) läßt sich nun in SPA ausführen, indem man die Integration zerlegt in eine Integration über  $\Gamma$  und eine in jedem Punkt  $q^*$  lokal senkrechte dazu. Dabei kommt einem zustatten, daß das Integral, wie im vorangegangenen Unterabschnitt gezeigt, forminvariant unter Koordinatentransformationen ist. Aus diesem Grunde kann man die Symmetriemannigfaltigkeit  $\Gamma$  durch die Gruppenparameter  $\sigma_1, \dots, \sigma_k$  parametrisieren. Die zu  $\sigma_1, \dots, \sigma_k$  lokal senkrechten Koordinaten seien mit  $\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_{N-k}$  bezeichnet. Dann ist das Integral  $I$  in (C.42) von der Form

$$I = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{\frac{N}{2}}} \int_{\Gamma} d\sigma^k \int_{\Gamma^\perp} d\bar{q}^{N-k} \left| \det \left( \frac{\partial^2 S(q, q)}{\partial q \partial q'} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \exp(iS(q, q)/\hbar) \quad , \quad (\text{C.44})$$

wobei  $q = (\sigma, \bar{q})$  ist. Es sei nun

$$G := A + C + C^T + B \quad . \quad (\text{C.45})$$

$G$  ist nach Konstruktion symmetrisch. Da (C.43) auf der gesamten Symmetriemannigfaltigkeit, also für jeden Wert von  $\sigma$ , gilt, gilt dort auch

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \sigma_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial \sigma'_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial \sigma_i \partial q'_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial \sigma'_i \partial q'_j} = 0 \quad . \quad (\text{C.46})$$

$G$  ist also von der Form

$$G = \left( \begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & \bar{G} \end{array} \right) \quad (\text{C.47})$$

mit einer  $(N-k) \times (N-k)$ -Matrix  $\bar{G} = \bar{A} + \bar{B} + \bar{C} + \bar{C}^T$ , von der im folgenden angenommen wird, daß sie regulär ist. Die Entwicklung von  $S$  um die Symmetriemannigfaltigkeit nimmt damit folgende Gestalt an:

$$S = S(q^*, q^*) + \frac{1}{2} \bar{G}_{ij} \delta \bar{q}_i \delta \bar{q}_j + \mathcal{O}(\delta^3) \quad . \quad (\text{C.48})$$

$S(q^*, q^*)$  wird hier aus Gleichung (C.43) bestimmt. Das Integral über  $\Gamma^\perp$  läßt sich nun in SPA ausführen. Für  $I$  ergibt sich

$$I = \exp(i(S(q^*, q^*)/\hbar - \mu\pi/2)) \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{\frac{k}{2}}} \int_{\Gamma} d\sigma^k \left| \frac{\det(C)}{\det(\bar{G})} \right|^{\frac{1}{2}} \quad . \quad (\text{C.49})$$

In dieser Formel ist  $\mu$  die Anzahl der negativen Eigenwerte der Matrix  $\bar{G}$ . Wegen (C.20) und (C.22) stimmt der Ausdruck (C.49) für „rechts-“ und „linksherum“ durchlaufene Bahnen überein. Die Zeitumkehrsymmetrie gibt also einen Faktor 2.

Der Quotient der Determinanten unter dem Integral in (C.49) ist keine Größe, die sich unmittelbar berechnen ließe. Ihn durch leichter berechenbare Größen auszudrücken und das verbliebene Integral über die Symmetriemannigfaltigkeit auszuwerten, ist die Aufgabe der nächsten Unterkapitel.

## C.8 Auswertung der Spur in SPA II

Zur weiteren Auswertung des Quotienten der Determinanten unter dem Integral in (C.49) wird nun zunächst der Anteil der Determinante der Matrix  $C$ , der den im vorangegangenen Unterabschnitt erörterten Symmetrien entspricht, abgespalten. Dabei wird im folgenden mit Blick auf die Anwendungen auf die Todakette angenommen, daß außer der Translationssymmetrie in Zeit und Ort keine weiteren Symmetrien der oben erörterten Art vorliegen. Die zugehörige Symmetriemannigfaltigkeit ist dann zweidimensional und wird durch den Bahnparameter  $\theta$  (die Zeit),  $0 \leq \theta \leq \tau$ , und einen Parameter  $\lambda$ , der die Verschiebung des Schwerpunktes beschreibt,  $0 \leq \lambda \leq L$ , parametrisiert. Für eine gegebene periodische Bahn ist  $\tau$  die Periode eines Umlaufs,  $L$  ist die Gesamtlänge des Systems. Mit den Bezeichnungen des Unterabschnitts C.7 ist  $\sigma = (\theta, \lambda)$  und  $J = (H, P)$ .

Ableiten der ersten der beiden Hamilton-Jacobi-Gleichungen (C.11) nach  $q'_i$  und der zweiten nach  $q_i$  ergibt

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q'_i \partial \theta} = -\frac{\partial^2 S}{\partial q'_i \partial T} = \frac{\partial H}{\partial q'_i} = \frac{\partial p'_i}{\partial T} \quad , \quad (\text{C.50})$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \theta'} = \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial T} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = \frac{\partial p_i}{\partial T} \quad . \quad (\text{C.51})$$

Ferner ergibt sich direkt aus der Definition des Schwerpunktimpulses

$$\frac{\partial S}{\partial \lambda} = P \quad , \quad \frac{\partial S}{\partial \lambda'} = -P \quad . \quad (\text{C.52})$$

Definiert man nun noch  $\bar{p} = \frac{\partial S}{\partial \bar{q}}$ , so läßt sich die Determinante der Matrix  $C^T$  als Jacobideterminante einer Transformation zwischen zwei verschiedenen unabhängigen Sätzen dynamischer Variabler,  $(q, q') \rightarrow (J, \bar{p}', q')$ , schreiben:

$$\det(C^T) = \left[ \frac{\partial(J, \bar{p}', q')}{\partial(\sigma, \bar{q}, q')} \right] = \left[ \frac{\partial(J, \bar{p}')}{\partial(\sigma, \bar{q})} \right]_{q'} . \quad (\text{C.53})$$

Es versteht sich, daß diese Transformation bei fester Flugzeit  $T$  vorgenommen wird, daß also  $H, P, \bar{p}'$  als Funktionen von  $q, q'$  und  $T$  aufgefaßt werden. Im folgenden werden alle auftretenden Determinanten auf diese Weise interpretiert. Diese Idee geht auf Creagh und Littlejohn [13] zurück. Sie bietet eine formal sehr elegante Möglichkeit der Manipulation der interessierenden Größen. Mit Hilfe der Kettenregel folgt aus (C.53)

$$\det(C^T) = \left[ \frac{\partial(J, \bar{p}', q')}{\partial(\sigma, \bar{p}', q')} \right] \left[ \frac{\partial(\sigma, \bar{p}', q')}{\partial(\sigma, \bar{p}', q')} \right] = \left[ \frac{\partial J}{\partial \sigma} \right]_{\bar{p}', q'} \left[ \frac{\partial \bar{p}'}{\partial \bar{q}} \right]_{\sigma, q'} . \quad (\text{C.54})$$

Daraus erhält man

$$|\det(C)| = \left| \left[ \frac{\partial J}{\partial \sigma} \right]_{\bar{p}', q'} \right| |\det(\bar{C}^T)| . \quad (\text{C.55})$$

Völlig analog zu [34] kann man den Quotienten  $\det(\bar{G})/\det(\bar{C}^T)$  zu einer Determinante zusammenfassen.

$$\begin{aligned} \frac{\det(\bar{G})}{\det(\bar{C}^T)} &= \det \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & (\bar{C}^T)^{-1} \end{pmatrix} \det \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -\bar{C} - \bar{A} \\ 0 & \bar{G} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} -\bar{A}(\bar{C}^T)^{-1} - \mathbf{1} & \bar{C} - \bar{A}(\bar{C}^T)^{-1}\bar{B} \\ -(\bar{C}^T)^{-1} & -(\bar{C}^T)^{-1}\bar{B} - \mathbf{1} \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

Von der vorletzten auf die letzte Zeile kommt man durch elementare Umformungen der Determinanten. Läßt man die Einheitsmatrizen in der oberen linken und unteren rechten Ecke der Matrix (C.56) weg, so ist die verbleibende Matrix eine reduzierte Form der Monodromiematrix (C.38). Diese Tatsache läßt sich auch direkt nachrechnen. Die Matrizen  $\bar{A}, \bar{B}, \bar{C}, \bar{C}^T$  lassen sich schreiben als

$$\bar{A} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}} , \quad \bar{B} = -\frac{\partial \bar{p}'}{\partial \bar{q}'} , \quad \bar{C} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{q}'} , \quad \bar{C}^T = -\frac{\partial \bar{p}'}{\partial \bar{q}} . \quad (\text{C.57})$$

$\bar{p}$  und  $\bar{p}'$  sind Funktionen der Anfangs- und Endkoordinaten:

$$\bar{p} = \bar{p}(\sigma, \sigma', \bar{q}, \bar{q}') , \quad \bar{p}' = \bar{p}'(\sigma, \sigma', \bar{q}, \bar{q}') . \quad (\text{C.58})$$

Durch Umkehrung dieser Gleichungen und unter Benutzung des Satzes über implizite Funktionen lassen sich die Einträge der Matrix in (C.56) wie gewünscht zusammenfassen.

$$\frac{\det(\bar{G})}{\det(\bar{C}^T)} = \det(\bar{M} - \mathbf{1}) \quad \text{mit} \quad \bar{M} = \left. \frac{\partial(\bar{p}, \bar{q})}{\partial(\bar{p}', \bar{q}')} \right|_{\sigma, \sigma'} . \quad (\text{C.59})$$

Im folgenden erweisen sich die Abkürzungen  $z := (p, q)$ ,  $z' := (p', q')$ ,  $\bar{z} := (\bar{p}, \bar{q})$  und  $\bar{z}' := (\bar{p}', \bar{q}')$  als sinnvoll. Mit ihrer Hilfe erhält man

$$\det(\bar{M} - \mathbf{1}) = \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}')}{\partial \bar{z}'} \right]_{\sigma, \sigma'} \quad (\text{C.60})$$

und daraus

$$\begin{aligned} \left| \frac{\det(\bar{G})}{\det(C)} \right| &= \left| \left[ \frac{\partial \sigma}{\partial J} \right]_{\bar{z}', \sigma'} \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}')}{\partial \bar{z}'} \right]_{\sigma, \sigma'} \right| = \left| \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma')}{\partial(\bar{z}', \sigma, \sigma')} \right] \left[ \frac{\partial(\bar{z}', \sigma, \sigma')}{\partial(\bar{z}', J, \sigma')} \right] \right| \\ &= \left| \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma')}{\partial(\bar{z}', J, \sigma')} \right] \right| . \end{aligned} \quad (\text{C.61})$$

Um diesen Ausdruck durch berechenbare Größen auszudrücken, bedarf es noch eines weiteren Konzepts, dessen der verallgemeinerten periodischen Bahnen [13]. Es wird im nächsten Unterabschnitt zur Verfügung gestellt.

Zuvor jedoch einige Anmerkungen zu der von Dashen, Hasslacher und Neveu angegebenen Herleitung ihrer Spurformel (Anhang A in [16]): Diese Autoren treffen zunächst Aussagen über die Struktur der Matrix  $C$  ( $= \frac{1}{2}(G - H)$  in ihrer Notation). Diese Matrix sei symmetrisch und blockdiagonal. Sie zerfalle in einen oberen linken Block, der den Symmetrien entspreche, und in einen unteren rechten, der den Richtungen senkrecht zur Symmetriemannigfaltigkeit entspreche. Die Symmetrie folgern sie aus Gleichung (C.22), indem sie unzulässigerweise die Zweideutigkeit der Wirkung aufgrund der Zeitumkehrsymmetrie außer Acht lassen. Es läßt sich leicht zeigen, daß nicht nur dieser Schluß falsch ist, sondern auch die Aussage. Die Matrix  $C$  ist in den verwendeten Koordinaten weder symmetrisch noch blockdiagonal. Aus diesem Grund wird hier eine alternative Herleitung der Spurformel von Dashen, Hasslacher und Neveu versucht. Sie orientiert sich an den von Creagh und Littlejohn [13] entwickelten Methoden. Es wird sich zeigen, daß das Endresultat der von Dashen, Hasslacher und Neveu angegebenen Formel sehr ähnlich ist, jedoch nicht völlig mit ihr übereinstimmt.

## C.9 Verallgemeinerte Dynamik

Betrachte ein mechanisches System mit Hamiltonfunktion  $H$ , für das  $k$  unabhängige untereinander und mit  $H$  Poisson-kommutierende Bewegungsintegrale  $J_1, \dots, J_k$  existieren,

$$\{J_m, J_n\} = 0 \quad , \quad \{H, J_n\} = 0 \quad , \quad n, m = 1, \dots, k. \quad (\text{C.62})$$

Vermittels der Poissonklammern induzieren die Bewegungsintegrale eine verallgemeinerte Dynamik im Phasenraum:

$$\dot{z} = \{J_n, z\} \quad , \quad n = 1, \dots, k. \quad (\text{C.63})$$

Der Punkt bezeichnet in dieser Bewegungsgleichung die Ableitung nach einem Evolutionsparameter  $\Lambda_n$ . Genauso wie man die Dynamik der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen durch einen Fluß  $\phi_T$  im Phasenraum via  $z = \phi_T z'$  beschreiben kann, kann man die verallgemeinerte Dynamik (C.63) durch Flüsse  $\phi_{\Lambda_n}$  beschreiben,  $z = \phi_{\Lambda_n} z'$ . Dabei ist  $z$  der Punkt im Phasenraum, der aus  $z'$  durch Evolution um  $\Lambda_n$  hervorgeht. Wegen (C.62) kommutieren die Flüsse  $\phi_{\Lambda_n}$  untereinander und mit dem Fluß  $\phi_T$  [2, 13]. (C.62) impliziert ferner, daß die Flüsse  $\phi_{\Lambda_n}$  die Hamiltonfunktion invariant lassen. Auf diese Weise erzeugt jedes Bewegungsintegral  $J_n$  eine einparametrische Symmetriegruppe der Hamiltonfunktion im Phasenraum.

Creagh und Littlejohn betrachten nun die Bewegung eines Punktes  $z'$  im Phasenraum unter Einfluß sowohl der Zeitentwicklung  $\phi_T$  als auch der Flüsse  $\phi_{\Lambda_n}$ . Sie beschreiben diese *verallgemeinerte* Dynamik in einem *erweiterten* Phasenraum, in dem Punkte durch Angabe der Phasenraumkoordinate  $z$  und der Werte der Evolutionsparameter  $T, \Lambda = (\Lambda_1, \dots, \Lambda_n)$  charakterisiert sind. Unter Einfluß der Flüsse findet ein Transport

$$(z', 0, 0) \rightarrow (z = \phi_{\Lambda_1} \cdot \dots \cdot \phi_{\Lambda_k} \phi_T z', \Lambda, T) \quad (\text{C.64})$$

statt. Bahnen, die unter der verallgemeinerten Dynamik periodisch sind, heißen verallgemeinerte periodische Bahnen. Im nächsten Unterabschnitt werden Transformationen zwischen verschiedenen alternativen Koordinatensystemen im verallgemeinerten Phasenraum und deren Jacobideterminanten betrachtet.

Creagh und Littlejohn behandeln alle Erhaltungsgrößen gleichberechtigt. Sie erweitern den Phasenraum um so viele Dimensionen, wie es von  $H$  unabhängige Bewegungsintegrale gibt. Im Gegensatz dazu wird hier zwischen Symmetrien, die reinen Koordinatentransformationen entsprechen, und solchen, die allgemeineren kanonischen Transformationen entsprechen, unterschieden. Für die Todakette fällt in die erste Kategorie nur die Erhaltung des Gesamtimpulses  $P$ . Die von  $P$  induzierte Dynamik ist trivial:

$$\begin{aligned} \dot{p}_j = \{P, p_j\} = 0 \quad , \quad \dot{q}_j = \{P, q_j\} = 1 \quad \Rightarrow \\ p_j(t, \Lambda) = p_j(t, 0) \quad , \quad q_j(t, \Lambda) = q_j(t, 0) + \Lambda \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.65})$$

Diese Dynamik entspricht einer reinen Verschiebung des Schwerpunktes mit  $\Lambda$ .

Ziel der hier unternommenen Anstrengung ist die Abspaltung eines Anteils, der die nicht verschwindenden Stabilitätsexponenten der gegebenen periodischen Bahn enthält, von der Determinante auf der rechten Seite der Gleichung (C.61). Auf diese Weise wird eine Quantisierungsformel hergeleitet, in der die Stabilitätsexponenten Quantenkorrekturen zur klassischen Bewegung liefern.

Creagh und Littlejohn behaupten, daß jede Phasenraumsymmetrie und damit jedes Bewegungintegral das Verschwinden eines Paares charakteristischer Exponenten zur Folge hat (s. Anhang D, [13]). Diese Aussage ist abhängig von der Wahl der Phasenraumkoordinaten. Sie ist für die Todakette dann richtig, wenn man das System in Wirkungs-Winkel-Variablen beschreibt. In kartesischen Koordinaten verschwinden nur die Exponenten, die mit Symmetrien des Konfigurationsraums zusammenhängen. Deshalb wird hier nur die von  $P$  und  $H$  erzeugte verallgemeinerte Dynamik betrachtet.

### C.10 Auswertung der Spur in SPA III

Mit Hilfe der im vorangegangenen Unterabschnitt vorgestellten erweiterten Phasenraumkonstruktion läßt sich die Determinante auf der rechten Seite der Gleichung (C.61) umschreiben. Es sei  $\Sigma = (T, \Lambda)$ . Dann folgt

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma')}{\partial(\bar{z}', J, \sigma')} \right]_{\Sigma} &= \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma', \Sigma)}{\partial(\bar{z}', J, \sigma', \Sigma)} \right] \\ &= \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma', \Sigma)}{\partial(\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma', J)} \right] \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma', J)}{\partial(\bar{z}', \sigma, \sigma', J)} \right] \left[ \frac{\partial(\bar{z}', \sigma, \sigma', J)}{\partial(\bar{z}', \Sigma, \sigma', J)} \right] \\ &= \left[ \frac{\partial \Sigma}{\partial J} \right]_{\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma'} \left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}')}{\partial \bar{z}'} \right]_{\sigma, \sigma', J} \left[ \frac{\partial \sigma}{\partial \Sigma} \right]_{\bar{z}', \sigma', J} . \end{aligned} \quad (\text{C.66})$$

Die Jacobideterminanten auf der rechten Seite dieser Gleichung haben alle eine einfache Bedeutung. Betrachte zunächst den Term, der ganz rechts steht. Hält man  $\bar{z}', \sigma'$  und  $J$  fest, so ändert sich  $\sigma$  mit  $\Sigma$  längs der durch  $(\bar{z}', \sigma', J)$  charakterisierten verallgemeinerten periodischen Bahn.

$$\sigma = \phi_{\Lambda} \phi_T \sigma' = \phi_{\Lambda} \phi_T (\lambda', \theta') = (\lambda' + PT/N + \Lambda, \theta' + T) . \quad (\text{C.67})$$

Zur Erinnerung: Es war  $\lambda$  die Schwerpunktkoordinate,  $\theta$  die Zeitkoordinate (s.o.).  $P/N$  ist die Geschwindigkeit des Schwerpunktes. (C.67) impliziert

$$\left[ \frac{\partial \sigma}{\partial \Sigma} \right]_{\bar{z}', \sigma', J} = 1 . \quad (\text{C.68})$$

Die zweite Jacobideterminante auf der rechten Seite von (C.66) läßt sich schreiben als

$$\left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}')}{\partial \bar{z}'} \right]_{\sigma, \sigma', J} = \det(\mathcal{M} - \mathbf{I}) , \quad (\text{C.69})$$

wobei  $\mathcal{M}$  die von Creagh und Littlejohn definierte reduzierte und linearisierte Poincaréabbildung ist. Nach Creagh und Littlejohn stimmen die Eigenwerte von  $\mathcal{M}$  mit den

Eigenwerten der Monodromiematrix überein, die ungleich Eins sind. Deshalb gilt

$$\left[ \frac{\partial(\bar{z} - \bar{z}')}{\partial \bar{z}'} \right]_{\sigma, \sigma', J} = \prod_{j=1}^{N-2} |e^{-i\eta_j} - 1|^2 = \prod_{j=1}^{N-2} 4 \sin^2(\eta_j/2) \quad . \quad (\text{C.70})$$

Die  $\eta_j$  sind die nicht verschwindenden Stabilitätsexponenten der gegebenen periodischen Bahn.

Der Kehrwert der ersten Jacobideterminante auf der rechten Seite von (C.66) läßt sich wie folgt umformen:

$$\left[ \frac{\partial \Sigma}{\partial J} \right]_{\bar{z} - \bar{z}', \sigma, \sigma'} = \frac{\partial(H, P)}{\partial(T, \Lambda)} = \frac{\partial H}{\partial T} \Big|_P \frac{\partial P}{\partial \Lambda} \Big|_T \quad . \quad (\text{C.71})$$

Zur Auswertung des Produkts auf der rechten Seite dieser Gleichung sind zwei Vorüberlegungen erforderlich:

(i) Die Transformation

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t' = t \\ Q(t) &\rightarrow Q'(t') = Q(t) + \lambda e \end{aligned} \quad (\text{C.72})$$

mit  $e_j = 1$ ,  $j = 1, \dots, N$ , erzeugt die Impulserhaltung. Ersetzt man  $\lambda$  durch eine lineare Funktion der Zeit,

$$\lambda \rightarrow \lambda(t) = \lambda' + t(\lambda - \lambda')/T \quad , \quad (\text{C.73})$$

so ändert sich die Lagrangefunktion der Todakette nur um eine totale Zeitableitung. Die Bahn

$$Q'(t) = Q(t) + (\lambda' + t(\lambda - \lambda')/T)e \quad (\text{C.74})$$

ist deshalb eine Lösung der Bewegungsgleichungen, die vollständig innerhalb der Symmetriemannigfaltigkeit verläuft. Diese Bewegung ist trivial. Der gegebenen Bahn ist eine Driftbewegung des Schwerpunktes überlagert. Ergänzt man die Zeitentwicklung um eine  $\Lambda$ -Entwicklung, die die Drift des Schwerpunktes kompensiert, so erhält man eine verallgemeinerte periodische Bahn.

Es sei  $q^*$  ein Punkt auf einer periodischen Bahn mit Periode  $T$ . Dann gibt es nach dem oben Gesagten eine Bahn mit Anfangspunkt  $q^* + \lambda'$ , Endpunkt  $q^*$  und Laufzeit  $T$ , die ganz in der durch  $q^*$  und  $T$  charakterisierten Symmetriemannigfaltigkeit verläuft.  $\bar{p}(q^*, q^* + \lambda', T)$  ist die Komponente des Endimpulses senkrecht zur Symmetriemannigfaltigkeit. Da die Bahn ganz innerhalb der Symmetriemannigfaltigkeit verläuft, verschwindet diese Komponente für jedes  $\lambda'$ , und es folgt

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \lambda'} = -\frac{\partial P}{\partial \bar{q}} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \lambda} = 0 \quad (\text{C.75})$$

und analog

$$\frac{\partial \bar{p}'}{\partial \lambda} = \frac{\partial P}{\partial \bar{q}'} = -\frac{\partial \bar{p}'}{\partial \lambda'} = 0 \quad . \quad (\text{C.76})$$

- (ii) In der Nähe einer durch Anfangs- und Endpunkt  $q^*$  und durch Laufzeit  $T$  festgelegten periodischen Bahn gibt es eine eindeutig festgelegte verallgemeinerte periodische Bahn mit Laufzeit  $T + \delta T$  und unverändertem Schwerpunktimпульс  $P$ . Denn die Gleichung

$$p(q^* + \delta \bar{q} + \delta \lambda, q^* + \delta \bar{q}, T + \delta T) = p'(q^* + \delta \bar{q} + \delta \lambda, q^* + \delta \bar{q}, T + \delta T) \quad (\text{C.77})$$

ist in den ersten beiden Impulskomponenten  $p_\theta = \frac{\partial S}{\partial \theta}$  und  $p_\lambda = P = \frac{\partial S}{\partial \lambda}$  immer in erster Ordnung erfüllt. Für  $P$  ist das klar, da  $P$  eine Erhaltungsgröße ist. Für  $p_\theta$  folgt diese Tatsache aus (C.46) sowie aus (C.50) bis (C.52). Ferner impliziert (C.77) eine eindeutig lösbare Bestimmungsgleichung für  $\delta \bar{q}$  als Funktion von  $\delta T$  und  $\delta \lambda$ :

$$\bar{G} \delta \bar{q} = \left( \frac{\partial \bar{p}'}{\partial T} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial T} \right) \delta T \quad . \quad (\text{C.78})$$

Hier wurden die Gleichungen (C.75) und (C.76) benutzt. Da  $\bar{G}$  invertierbar ist, läßt sich diese Gleichung nach  $\delta \bar{q}$  auflösen.  $\delta \lambda$  folgt dann aus der Bedingung, daß sich der Schwerpunktimпульс nicht ändert,

$$\delta P = \frac{\partial P}{\partial T} \delta T + \frac{\partial P}{\partial \lambda} \delta \lambda = 0 \quad . \quad (\text{C.79})$$

Auch hier wurden die Gleichungen (C.75) und (C.76) verwendet. Ergänzt man die Zeitentwicklung der so bestimmten Bahn um eine  $\Lambda$ -Entwicklung, die gerade die Verschiebung des Schwerpunktes um  $\delta \lambda$  wieder rückgängig macht, so erhält man die oben konstatierte verallgemeinerte periodische Bahn. Wegen (C.65) bleibt nämlich die Periodizitätsbedingung in den Impulsen (C.77) unter  $\Lambda$ -Evolution erhalten.

Betrachte die unter (i) beschriebene verallgemeinerte periodische Bahn. Die Änderung des Schwerpunktimпульс aufgrund der Drift ist

$$\delta P = \frac{N \delta \lambda}{T} = -\frac{N \delta \Lambda}{T} \quad , \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{\partial P}{\partial \Lambda} \right|_T = -\frac{N}{T} \quad . \quad (\text{C.80})$$

Die unter (ii) beschriebene verallgemeinerte periodische Bahn erhält man, wenn man im Schwerpunktsystem zu einer periodischen Bahn mit veränderter Periode  $T + \delta T$  übergeht<sup>9</sup>. Es sei  $E(T)$  die Energie einer periodischen Bahn im Schwerpunktsystem. Dann folgt

$$\left. \frac{\partial H}{\partial T} \right|_P = \frac{dE(T)}{dT} \quad . \quad (\text{C.81})$$

<sup>9</sup>Im ortsfesten Bezugssystem ist die Bewegung dann nicht mehr periodisch.

Mit dieser Gleichung, sowie (C.68), (C.70), (C.71) und (C.80) ist die Determinante (C.66) vollständig durch relativ leicht zugängliche Größen ausgedrückt. Es ergibt sich

$$\left| \frac{\det(C)}{\det(\bar{G})} \right| = \frac{N}{T} \left| \frac{dE(T)}{dT} \right| \prod_{j=1}^{N-2} 4 \sin^2(\eta_j/2) \quad . \quad (\text{C.82})$$

Dieser Ausdruck ist auf der Symmetriemannigfaltigkeit konstant. Folglich ist das Integral in (C.49) trivial, und man erhält als Endergebnis für die Spur des Propagators (C.6):

$$\text{tr} \left( e^{-\frac{i}{\hbar} HT} \right) = \sum_n \Delta_{1n} \Delta_{2n} \exp(i(S_n(T)/\hbar - \theta_n)) \quad , \quad (\text{C.83})$$

wobei  $\Delta_{1n}$  und  $\Delta_{2n}$  gemäß

$$\Delta_{1n} = \frac{L\tau}{\pi i \hbar} \left| \frac{N}{T} \frac{dE_n(T)}{dT} \right|^{\frac{1}{2}} \quad , \quad (\text{C.84})$$

$$\Delta_{2n} = e^{-i\pi\mu_n/2} \prod_{j=1}^{N-2} |2 \sin(\eta_{nj}/2)|^{-1} \quad (\text{C.85})$$

definiert sind. Hier wurde bereits ein Faktor 2 aufgrund der Zeitumkehrsymmetrie berücksichtigt. Die Summe über  $n$  zählt also alle unter Zeitumkehr inäquivalenten periodischen Bahnen.

## C.11 Anmerkungen

Die semiklassische Näherung für die Spur des Propagators von Dashen, Hasslacher und Neveu ist der durch (C.83) bis (C.85) gegebenen zwar ähnlich, weicht jedoch im Detail von ihr ab. Für  $\Delta_1$ <sup>10</sup> geben diese Autoren den Ausdruck

$$\Delta_1 = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{\frac{k}{2}}} \int_{\Gamma} d\sigma \left| \det \left( \frac{\partial^2 S}{\partial \sigma' \partial \sigma} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \quad (\text{C.86})$$

an. Die Matrix unter dem Integral ist gleich

$$\tilde{C} := \left[ \frac{\partial J}{\partial \sigma} \right]_{\bar{q}, q'} \quad (\text{C.87})$$

und stimmt nicht mit der ersten Matrix auf der rechten Seite von (C.55) überein. Wertet man (C.86) aus, so erhält man

$$\Delta_1 = \frac{L\tau}{2\pi i \hbar} \left| \frac{N}{T} \frac{\partial E}{\partial T} \right|^{\frac{1}{2}} \quad . \quad (\text{C.88})$$

---

<sup>10</sup>Der Index  $n$  wird hier unterdrückt.

Dieser Ausdruck ist mit (C.84) zu vergleichen. Die Zwei im Nenner des Vorfaktors stammt daher, daß hier nach Definition die Zeitumkehrsymmetrie nicht eingeschlossen wurde. Der wesentliche Unterschied zwischen (C.88) und (C.84) besteht also darin, daß in (C.88) die partielle Ableitung der Energie als Funktion von  $q, q'$  und  $T$  nach der Periode und in (C.84) die totale Ableitung der Energie nach der Periode steht. Diese beiden Größen stimmen *nicht* überein. Dashen, Hasslacher und Neveu kompensieren in ihrer Arbeit [16] ihren Fehler, indem sie unter Mißachtung ihrer eigenen Formel die totale Ableitung verwenden.

Für  $\Delta_2$  geben Dashen, Hasslacher und Neveu den Ausdruck

$$\Delta_2 = \prod_{j=1}^{N-2} \frac{1}{2i \sin(\eta_j/2)} \quad (\text{C.89})$$

an. Dieser Ausdruck wird auch im zweiten Kapitel dieser Arbeit verwendet. Er findet sich ebenso in den Arbeiten von Gutzwiller [34] und Miller [59]. Um ihn aus (C.85) zu folgern, hat man die Phasen  $\mu_n$  zu diskutieren. Für zweidimensionale Systeme findet sich eine entsprechende Diskussion bei Gutzwiller [34]. Im allgemeinen Fall besteht hier nach Ansicht des Autors dieser Arbeit jedoch noch Klärungsbedarf.

Eine weitere Frage, die untersucht werden müßte, ist die nach dem Verhalten der Stabilitätsexponenten unter Transformationen des Phasenraums. Es ist klar, daß sie nicht unter beliebigen Transformationen invariant sind. Betrachtet man beispielsweise die Dynamik eines integrablen Systems in Wirkungs-Winkel-Variablen, so verschwinden alle Stabilitätsexponenten. Eine Verschiebung einer Winkelvariablen auf dem Torus führt zu einer Verschiebung der gesamten Trajektorie. Eine kleine Veränderung einer der Wirkungsvariablen führt auf einen ähnlichen Torus so, daß die gestörte der ursprünglichen Trajektorie linear in der Zeit vorausläuft. Es wird hier davon ausgegangen, daß die oben verwendeten reinen Konfigurationsraumtransformationen die Stabilitätsexponenten nicht verändern. Diese Annahme wird durch die überzeugenden Ergebnisse der auf ihr beruhenden semiklassischen Quantisierungsprozedur gestützt (s. Kapitel 2).

## Anhang D: Thetafunktionen

In diesem Anhang werden Thetafunktionen eingeführt und klassifiziert. Es werden die gebräuchlichen Notationen beschrieben und zueinander in Beziehung gesetzt. Alle Formeln und Darstellungen, die zum Verständnis der Arbeit erforderlich sind, werden aufgelistet. Als Quellen dienten für mehrdimensionale Thetafunktionen der Artikel [20] von Dubrovin und für Jacobische Thetafunktionen das Buch von Whittaker und Watson [78].

**Definition D.1** *Eine komplexe, symmetrische  $g \times g$ -Matrix  $B$  mit positiv definitem Imaginärteil  $\Im(B)$  heißt Riemannmatrix.*

**Definition D.2** Sei  $B$  eine Riemannmatrix. Eine Riemannsche Thetafunktion  $\theta : \mathbf{C}^g \rightarrow \mathbf{C}$  ist definiert durch die  $g$ -fache Fourierreihe

$$\theta(z|B) := \sum_{n \in \mathbf{Z}^g} \exp \{ \pi i \langle n, Bn \rangle + 2\pi i \langle n, z \rangle \} \quad . \quad (\text{D.1})$$

Die Summation erstreckt sich über alle  $g$ -Tupel ganzer Zahlen. Die spitzen Klammern bezeichnen das euklidische Skalarprodukt:  $\langle x, y \rangle = \sum_{n=1}^g x_n y_n$ . Da  $B$  eine Riemannmatrix ist, ist die Reihe auf der rechten Seite von (D.1) gleichmäßig konvergent auf jeder kompakten Teilmenge von  $\mathbf{C}^g$ . Deshalb ist  $\theta(z|B)$  eine ganze Funktion.

Es sei  $e_1, \dots, e_g$  die kanonische Basis des  $\mathbf{C}^g$ ,  $(e_j)_k = \delta_{jk}$ . Definiere die Vektoren  $f_j := B e_j$ . Dann gilt [20]:

**Lemma D.1** Die Vektoren  $e_1, \dots, e_g, f_1, \dots, f_g$  sind linear unabhängig über den reellen Zahlen.

Das heißt, diese Vektoren bilden eine Basis des  $\mathbf{R}^{2g}$  und spannen ein  $2g$ -dimensionales Gitter auf. Es wird als Periodengitter der Thetafunktion  $\theta(z|B)$  bezeichnet, da die Riemannsche Thetafunktion  $2g$ -fach quasiperiodisch in bezug auf dieses Gitter ist:

$$\theta(z + N + BM|B) = \exp \{ -\pi i \langle M, BM \rangle - 2\pi i \langle M, z \rangle \} \theta(z|B) \quad . \quad (\text{D.2})$$

Eine Verallgemeinerung der Riemannschen Thetafunktionen stellen die Thetafunktionen mit Charakteristik dar. Seien  $\alpha, \beta \in \mathbf{R}^g$  reelle Vektoren mit Komponenten  $\alpha_i, \beta_j$ .

**Definition D.3** Eine Thetafunktion mit Charakteristik  $[\alpha, \beta]$ ,  $\theta[\alpha, \beta] : \mathbf{C}^g \rightarrow \mathbf{C}$ , ist definiert durch die Fourierreihe

$$\theta[\alpha, \beta](z|B) := \sum_{n \in \mathbf{Z}^g} \exp \{ \pi i \langle n + \alpha, B(n + \alpha) \rangle + 2\pi i \langle n + \alpha, z + \beta \rangle \} \quad . \quad (\text{D.3})$$

Die Riemannsche Thetafunktion ergibt sich als Spezialfall  $\theta(z|B) = \theta[0, 0](z|B)$ . Es gilt der Zusammenhang

$$\theta[\alpha, \beta](z|B) = \exp \{ \pi i \langle \alpha, B\alpha \rangle + 2\pi i \langle z + \beta, \alpha \rangle \} \theta(z + \beta + B\alpha|B) \quad . \quad (\text{D.4})$$

Daraus folgt mit (D.2), daß

$$\theta[\alpha + M, \beta + N](z|B) = \exp \{ 2\pi i \langle N, \alpha \rangle \} \theta[\alpha, \beta](z|B) \quad . \quad (\text{D.5})$$

Es reicht deshalb, Charakteristiken  $[\alpha, \beta]$  zu betrachten, bei denen alle  $\alpha_i, \beta_j$  auf das Intervall  $[0, 1]$  beschränkt sind. Die zu (D.2) analoge Formel für das Transformationsverhalten der Thetafunktionen mit Charakteristik unter Verschiebungen um Perioden lautet

$$\theta[\alpha, \beta](z + N + BM|B) = \exp \{ -\pi i \langle M, BM \rangle - 2\pi i (\langle M, z + \beta \rangle - \langle N, \alpha \rangle) \} \theta[\alpha, \beta](z|B) \quad . \quad (\text{D.6})$$

Für Anwendungen ist der Fall, daß alle  $\alpha_i, \beta_j$  entweder gleich 0 oder  $1/2$  sind, besonders wichtig.

**Definition D.4** Die Charakteristiken  $[\alpha, \beta]$ , für die alle  $\alpha_i, \beta_j$  entweder gleich 0 oder  $1/2$ , sind heißen Halbperioden. Eine Halbperiode heißt gerade, falls  $4\langle \alpha, \beta \rangle = 0 \pmod{2}$ , sonst ungerade.

**Lemma D.2** Die Funktion  $\theta[\alpha, \beta](z|B)$  ist gerade beziehungsweise ungerade, je nachdem, ob  $[\alpha, \beta]$  gerade oder ungerade ist.

Folgende Kurzschreibweisen werden in dieser Arbeit benutzt:

$$\theta[\alpha, \beta](z) := \theta[\alpha, \beta](z|B) \quad , \quad \hat{\theta}[\alpha, \beta](z) := \theta[\alpha, \beta](z|2B) \quad , \quad (\text{D.7})$$

$$\hat{\theta}[\delta](z) := \hat{\theta}[\delta, 0](z) \quad , \quad \hat{\theta}[\delta] := \hat{\theta}[\delta](0) \quad . \quad (\text{D.8})$$

Ableitungen nach dem  $j$ -ten Argument werden mit Index bezeichnet:

$$\theta_{ij\dots}[\alpha, \beta](z) := \frac{\partial}{\partial z_i} \frac{\partial}{\partial z_j} \dots \theta[\alpha, \beta](z) \quad . \quad (\text{D.9})$$

Für eindimensionale Thetafunktionen jedoch wird die Ableitung nach dem Argument mit einem Strich gekennzeichnet. Fehlendes Argument bedeutet immer Argument gleich Null.

Für Thetafunktionen mit Charakteristik gilt folgendes Additionstheorem [20]:

$$\theta[\alpha, \gamma](z+w)\theta[\beta, \varepsilon](z-w) = \sum_{2\delta \in (\mathbb{Z}_2)^g} \hat{\theta}[\frac{\alpha+\beta}{2} + \delta, \gamma + \varepsilon](2z)\hat{\theta}[\frac{\alpha-\beta}{2} + \delta, \gamma - \varepsilon](2w) \quad , \quad (\text{D.10})$$

Die Summation erstreckt sich über alle verschiedenen  $g$ -Vektoren  $\delta$  mit Einträgen 0,  $1/2$ .

Die Fourierdarstellung der Thetafunktionen mit Charakteristik ist nicht die einzig mögliche Darstellung. In der Tat gibt es eine ganze Darstellungstheorie für Thetafunktionen (s. [20] und die dort zitierte Literatur). In dieser Arbeit wird außer von (D.3) von der sogenannten Gaußschen Darstellung Gebrauch gemacht, die man aus (D.3) durch Poissonsummutation [74] erhält.

$$\begin{aligned} \theta[\alpha, \beta](z|B) &= \\ &= (\det(-iB))^{-\frac{1}{2}} \sum_{n \in \mathbb{Z}^g} \exp \{ -\pi i \langle n + \beta + z, B^{-1}(n + \beta + z) \rangle - 2\pi i \langle n, \alpha \rangle \} \\ &= (\det(-iB))^{-\frac{1}{2}} \exp \{ -\pi i \langle z, B^{-1}z \rangle + 2\pi i \langle \alpha, \beta \rangle \} \theta[\beta, -\alpha](-B^{-1}z | -B^{-1}) \quad . \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Die Gaußsche Darstellung ermöglicht auf einfache Weise den Solitonlimes.

Eindimensionale Thetafunktionen mit Halbperioden als Charakteristiken heißen Jacobische Thetafunktionen. Für sie sind die folgenden Abkürzungen gebräuchlich (vgl. [20, 78]):

$$\begin{aligned} \theta_1(z|B) &:= -\theta[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}](z|B) \quad , \quad \theta_2(z|B) := \theta[\frac{1}{2}, 0](z|B) \quad , \\ \theta_3(z|B) &:= \theta[0, 0](z|B) \quad , \quad \theta_4(z|B) := \theta[0, \frac{1}{2}](z|B) \quad . \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Das Periodengitter eindimensionaler Thetafunktionen ist zweidimensional in der komplexen Ebene und wird von den Vektoren 1 und  $B$  aufgespannt. Bei Verschiebung um eine Gitterlänge in 1- bzw.  $B$ -Richtung werden die Jacobischen Thetafunktionen gemäß Gleichung (D.6) mit  $\pm 1$  bzw.  $\pm\mu := \exp\{-\pi iB - 2\pi iz\}$  multipliziert.

|               | $\theta_1(z)$ | $\theta_2(z)$ | $\theta_3(z)$ | $\theta_4(z)$ |
|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| 1-Richtung    | -1            | -1            | 1             | 1             |
| $B$ -Richtung | $-\mu$        | $\mu$         | $\mu$         | $-\mu$        |

**Lemma D.3** *Die Jacobischen Thetafunktionen haben je in jeder Zelle des Gitters genau eine Nullstelle, und zwar in der Reihenfolge  $\theta_1(z), \dots, \theta_4(z)$  an den Stellen  $0, 1/2, 1/2 + B/2, B/2$ .*

**Lemma D.4** *Zwischen den Werten der Jacobischen Thetafunktionen an der Stelle Null besteht der Zusammenhang  $\theta_1'/\theta_2\theta_3\theta_4 = \pi$ .*

Die Jacobischen Thetafunktionen stehen in engem Zusammenhang mit den Jacobi-elliptischen Funktionen. Das sind doppelt periodische, meromorphe Funktionen mit zwei einfachen Polen in jeder Zelle ihres Periodengitters. Die Summe der Residuen der beiden Pole ist gleich Null. Wie aus der oben angegebenen Multiplikatorentabelle ersichtlich, erhält man Funktionen dieses Typs als Quotienten der Jacobischen Thetafunktionen. Die drei gebräuchlichsten Jacobi-elliptischen Funktionen sind gegeben durch

$$\operatorname{sn}(2Kz) = \frac{\theta_3}{\theta_2} \frac{\theta_1(z)}{\theta_4(z)} \quad , \quad \operatorname{cn}(2Kz) = \frac{\theta_4}{\theta_2} \frac{\theta_2(z)}{\theta_4(z)} \quad , \quad \operatorname{dn}(2Kz) = \frac{\theta_4}{\theta_3} \frac{\theta_3(z)}{\theta_4(z)} \quad . \quad (\text{D.13})$$

Dabei ist  $2K := \pi\theta_3^2$ ,  $K$  das vollständige elliptische Integral erster Ordnung.

Zur Berechnung des harmonischen bzw. klassischen Limes werden in dieser Arbeit die folgenden Fourierdarstellungen der logarithmischen Ableitungen der Jacobi-elliptischen Funktionen benötigt (s. [78], S. 489):

$$\frac{\theta_1'(z|B)}{\theta_1(z|B)} = \pi \cot(\pi z) + 4\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi n z)}{e^{-2\pi n i B} - 1} \quad , \quad (\text{D.14})$$

$$\frac{\theta_2'(z|B)}{\theta_2(z|B)} = -\pi \tan(\pi z) + 4\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \sin(2\pi n z)}{e^{-2\pi n i B} - 1} \quad , \quad (\text{D.15})$$

$$\frac{\theta_3'(z|B)}{\theta_3(z|B)} = -2\pi \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \operatorname{csch}(n\pi i B) \sin(2\pi n z) \quad , \quad (\text{D.16})$$

$$\frac{\theta_4'(z|B)}{\theta_4(z|B)} = -2\pi \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{csch}(n\pi i B) \sin(2\pi n z) \quad . \quad (\text{D.17})$$

Darstellungen der logarithmischen Ableitungen, die zur Berechnung des Solitonlimes geeignet sind, leitet man hieraus mit Hilfe von (D.11) her. Aus (D.11) folgt

$$\frac{\theta'[\alpha, \beta](z|B)}{\theta[\alpha, \beta](z|B)} = -\frac{2\pi iz}{B} - \frac{1}{B} \frac{\theta'[\beta, -\alpha](-z/B| - 1/B)}{\theta[\beta, -\alpha](-z/B| - 1/B)} . \quad (\text{D.18})$$

Setzt man hier auf der rechten Seite die Gleichungen (D.14) bis (D.17) ein, so ergibt sich

$$\frac{\theta'_1(z|B)}{\theta_1(z|B)} = \frac{\pi i}{B} \left( -2z + \text{cth}(\pi iz/B) - 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sh}(2n\pi iz/B)}{e^{2n\pi i/B} - 1} \right) , \quad (\text{D.19})$$

$$\frac{\theta'_2(z|B)}{\theta_2(z|B)} = \frac{\pi i}{B} \left( -2z - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \text{csch}(n\pi i/B) \text{sh}(2n\pi iz/B) \right) , \quad (\text{D.20})$$

$$\frac{\theta'_3(z|B)}{\theta_3(z|B)} = \frac{\pi i}{B} \left( -2z - 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \text{csch}(n\pi i/B) \text{sh}(2n\pi iz/B) \right) , \quad (\text{D.21})$$

$$\frac{\theta'_4(z|B)}{\theta_4(z|B)} = \frac{\pi i}{B} \left( -2z + \text{th}(\pi iz/B) - 4 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\text{sh}(2n\pi iz/B)}{e^{2n\pi i/B} - 1} \right) . \quad (\text{D.22})$$

Entsprechende Reihendarstellungen für die zweiten logarithmischen Ableitungen erhält man durch Differenzieren von (D.14) bis (D.17) bzw. (D.19) bis (D.22) nach  $z$ .

Leider gibt es keine einheitliche Konvention für Thetafunktionen. Die hier verwendete Konvention für mehrdimensionale Thetafunktionen stimmt mit der in [74], [9] und [40] verwendeten überein, jedoch nicht mit der Dubrovins [20]. Es bezeichne  $\theta_D$  die von Dubrovin verwendete Form der Thetafunktionen mit Charakteristik. Dann ist  $\theta_D[\alpha, \beta](2\pi iz|2\pi iB) = \theta[\alpha, \beta](z|B)$ . Einen Überblick über die verschiedenen Konventionen bei Jacobischen Thetafunktionen gibt die folgende Tabelle:

|                  | $\theta_1(z B)$               | $\theta_2(z B)$             | $\theta_3(z B)$             | $\theta_4(z B)$             |
|------------------|-------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| Whittaker/Watson | $\vartheta_1(\pi z B)$        | $\vartheta_2(\pi z B)$      | $\vartheta_3(\pi z B)$      | $\vartheta_4(\pi z B)$      |
| Dubrovin         | $-i\theta_1(2\pi iz 2\pi iB)$ | $\theta_2(2\pi iz 2\pi iB)$ | $\theta_3(2\pi iz 2\pi iB)$ | $\theta_4(2\pi iz 2\pi iB)$ |
| Toda             | $\vartheta_1(z B)$            | $\vartheta_2(z B)$          | $\vartheta_3(z B)$          | $\vartheta_0(z B)$          |

## Anhang E: Tensorschreibweise

Um es zu ermöglichen, diese Arbeit ohne Zuhilfenahme anderer Quellen zu lesen, sei hier kurz die in Anhang B verwendete Tensorschreibweise erläutert. Sie ist dem Buch von Fadeev und Takhtajan [23] entnommen.

Setze

$$(A \otimes B)_{ij,kl} = A_{ij} B_{kl} . \quad (\text{E.1})$$

Wenn  $A$  und  $B$   $2 \times 2$ -Matrizen sind, läßt sich damit das Tensorprodukt  $(A \otimes B)$  als  $4 \times 4$ -Matrix mit den Spalten- und Zeilennummern 11, 12, 21, 22, gemäß

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{pmatrix} \quad (\text{E.2})$$

schreiben. Die Poissonklammern zwischen allen Paaren von Einträgen in die  $2 \times 2$ -Matrizen  $A, B$  lassen sich mit Hilfe der Definition

$$\{A \otimes B\}_{ij,kl} = \{A_{ij}, B_{kl}\} \quad (\text{E.3})$$

zusammenfassen, d.h.

$$\{A \otimes B\} = \sum_{n=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial p_n} \otimes \frac{\partial B}{\partial q_n} - \frac{\partial A}{\partial q_n} \otimes \frac{\partial B}{\partial p_n} \right) . \quad (\text{E.4})$$

Die Grundeigenschaften der Poissonklammern nehmen in dieser Notation folgende Gestalt an:

$$\{A \otimes B\} = -\mathcal{P}\{B \otimes A\}\mathcal{P} \quad , \quad (\text{E.5})$$

$$\{A \otimes BC\} = \{A \otimes B\}(\mathbf{1} \otimes C) + (\mathbf{1} \otimes B)\{A \otimes C\} \quad , \quad (\text{E.6})$$

$$\begin{aligned} \{A \otimes \{B \otimes C\}\} &+ \mathcal{P}_{13}\mathcal{P}_{23}\{C \otimes \{A \otimes B\}\}\mathcal{P}_{23}\mathcal{P}_{13} \\ &+ \mathcal{P}_{13}\mathcal{P}_{12}\{B \otimes \{C \otimes A\}\}\mathcal{P}_{12}\mathcal{P}_{13} = 0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

$\mathcal{P}$  ist dabei der für zwei Vektoren  $\eta, \xi \in \mathbf{C}^2$  durch

$$\mathcal{P}(\eta \otimes \xi) := \xi \otimes \eta \quad (\text{E.8})$$

definierte Permutationsoperator. Es folgt

$$\mathcal{P}^2 = \mathbf{1} \quad , \quad \mathcal{P}(A \otimes B) = (B \otimes A)\mathcal{P} \quad . \quad (\text{E.9})$$

$\mathcal{P}$  läßt sich durch Paulimatrizen ausdrücken:

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \sum_{j=1}^3 \sigma_j \otimes \sigma_j \right) \quad . \quad (\text{E.10})$$

In dieser Form kennt man den Permutationoperator von der Beschreibung magnetischer Wechselwirkung. Mit der Konvention (E.2) läßt sich  $\mathcal{P}$  als  $4 \times 4$ -Matrix schreiben,

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{E.11})$$

$\mathcal{P}_{13}, \mathcal{P}_{23}, \mathcal{P}_{12}$  sind analog durch ihre Wirkung auf dreifache Tensorprodukte von Vektoren  $\eta, \xi, \rho$  definiert. Es ist beispielsweise

$$\mathcal{P}_{13}(\eta \otimes \xi \otimes \rho) = \rho \otimes \xi \otimes \eta \quad . \quad (\text{E.12})$$

## Anhang F: Der Propagator eines freien Teilchens auf einem Ring

Betrachte ein freies Teilchen,  $H = p^2/2M$ , auf einem Ring der Länge  $L$ . Die Wellenfunktionen und Energieeigenwerte sind gegeben durch

$$\varphi_l(q) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(\frac{i2\pi l}{L} q\right) \quad , \quad E_l = \frac{2\pi^2 \hbar^2 l^2}{ML^2} \quad , \quad l \in \mathbf{Z} \quad . \quad (\text{F.1})$$

Daraus ergibt sich der Propagator zu

$$\langle q | \exp(-iHt/\hbar) | q' \rangle = \frac{1}{L} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{2\pi^2 \hbar^2 l^2 t}{ML^2}\right) \exp\left(i \frac{2\pi l}{L} (q - q')\right) \quad (\text{F.2})$$

$$= \frac{1}{L} \theta_3\left(\frac{q - q'}{L} \middle| -\frac{2\pi \hbar t}{ML^2}\right) \quad (\text{F.3})$$

$$= \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{M(q - q')^2}{2t}\right) \theta_3\left(\frac{(q - q')ML}{2\pi \hbar t} \middle| \frac{ML^2}{2\pi \hbar t}\right) \quad (\text{F.4})$$

Von der zweiten auf die dritte Zeile kommt man mit Hilfe der Identität (D.11). Die Reihendarstellung (F.2) für die Thetafunktion  $\theta_3(x)$  konvergiert nur, falls  $\Im(t) > 0$ . Der Limes  $\Im(t) \rightarrow 0+$  ist hochgradig pathologisch (s. Kapitel 23 in Schulmans Buch [66]). Schulman schreibt dazu: „The degree of pathology exhibited by this Green’s function is entertaining, especially in view of the elementary nature of this example.“ Das Beispiel zeigt, wie kompliziert unter Umständen Propagatoren selbst einfachster physikalischer Systeme sind. Gleichzeitig zeigt es auch, wie gut semiklassische Näherungen sein können, denn der semiklassische Propagator (C.6) ist in diesem Falle exakt:

Auf dem Ring werden  $q$  und  $q + L$  identifiziert. Eine Bahn, die in der Zeit  $t$  von  $q'$  nach  $q$  führt und dabei den Ring  $l$ -mal umrundet, wobei das Vorzeichen von  $l$  den Laufsinn angibt, hat die Wirkung

$$S_l(q, q', t) = \frac{M(q - q' + lL)^2}{2t} \quad . \quad (\text{F.5})$$

Daraus folgt

$$\frac{\partial^2 S_l}{\partial q \partial q'} = -\frac{M}{t} \quad . \quad (\text{F.6})$$

Da die Bewegung keine Umkehrpunkte aufweist, sind die Phasen  $\theta_l$  in (C.6) gleich Null. Aufsummieren von (C.6) ergibt für den semiklassischen Propagator  $K(q, q', t)$  wiederum das Ergebnis (F.3). Für die Spur ergibt sich

$$\text{tr} \left( e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \right) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_l t} = \theta_3 \left( 0 \left| -\frac{2\pi\hbar t}{ML^2} \right. \right) = \sqrt{\frac{ML^2}{2\pi i \hbar t}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{Ml^2 L^2}{2t}} . \quad (\text{F.7})$$

Diese Gleichungen werden in Kapitel 2.1 zur Behandlung der Schwerpunktbewegung der Todakette benötigt.

## Anhang G: Eine alternative Form der Bestimmungsgleichungen für $\omega_2(0)$ und $\kappa$

Die Gleichungen (2.80), die nach Division durch  $\sqrt{A}$   $\omega_2(0)$  und  $\kappa$  als Funktion von  $q_2, k, B$  bestimmen, sind von der Form

$$a_j \omega_2(0)^2 + b_j \omega_2(0) + c_j = 0 \quad , \quad j = 2, 3 \quad , \quad (\text{G.1})$$

wobei die Koeffizienten durch

$$a_j = \hat{\theta}_j(\kappa) \quad , \quad (\text{G.2})$$

$$b_j = -4i\nu(0)\hat{\theta}'_j(\kappa) \quad , \quad (\text{G.3})$$

$$c_j = e^{iq_2}\hat{\theta}_j(2k + \kappa) + e^{-iq_2}\hat{\theta}_j(2k - \kappa) - 4\nu^2(0)\hat{\theta}''_j(\kappa) - 2\hat{\theta}_j(\kappa)/A \quad (\text{G.4})$$

gegeben sind. Somit ist

$$\omega_2(0) = \frac{c_2 a_3 - c_3 a_2}{a_2 b_3 - a_3 b_2} = -\frac{c_2 b_3 - c_3 b_2}{c_2 a_3 - c_3 a_2} \quad , \quad (\text{G.5})$$

und die Bestimmungsgleichung für  $\kappa$  lautet

$$(c_2 a_3 - c_3 a_2)^2 = -(c_2 b_3 - c_3 b_2)(a_2 b_3 - a_3 b_2) \quad . \quad (\text{G.6})$$

Wie in Kapitel 2.4 lassen sich die Klammern mit Hilfe des Additionstheorems (D.10) durch die Funktion  $\theta_1(z)$  und ihre Ableitungen ausdrücken. Ableiten der Gleichung (2.54) nach  $z$  ergibt beispielsweise

$$\theta'_1(z+w)\theta_1(z-w) + \theta_1(z+w)\theta'_1(z-w) = 2(\hat{\theta}'_3(2z)\hat{\theta}_2(2w) - \hat{\theta}'_2(2z)\hat{\theta}_3(2w)) \quad . \quad (\text{G.7})$$

Mit  $w = z = \kappa/2$  und Gleichung (2.66) folgt daraus

$$a_2 b_3 - a_3 b_2 = -4i\nu(0)(\hat{\theta}'_3(\kappa)\hat{\theta}_2(\kappa) - \hat{\theta}'_2(\kappa)\hat{\theta}_3(\kappa)) = -2i\theta_1(k)\theta_1(\kappa) \quad . \quad (\text{G.8})$$

Analog lassen sich die anderen beiden Klammern in Gleichung (G.6) auswerten. Zur Vereinfachung der nachfolgenden Formeln sei noch

$$\Omega(z) := \theta_1(z)/\theta_1' \quad (\text{G.9})$$

gesetzt. Dann ergeben sich am Ende für  $\kappa$  und  $\omega_2(0)$  die beiden Bestimmungsgleichungen

$$(2\Omega(k)\Omega'(\kappa) - e^{iq_2}\Omega(k+\kappa) - e^{-iq_2}\Omega(k-\kappa))^2 \quad (\text{G.10})$$

$$\begin{aligned} &= 4[\Omega'(k)\Omega(\kappa)(e^{iq_2}\Omega(k+\kappa) - e^{-iq_2}\Omega(k-\kappa)) \\ &\quad - \Omega(k)\Omega(\kappa)(e^{iq_2}\Omega'(k+\kappa) - e^{-iq_2}\Omega'(k-\kappa)) \\ &\quad + \Omega^2(k)\Omega(\kappa)(\Omega''(\kappa) - \Omega'''(0)\Omega(\kappa)) + 2\Omega^2(\kappa)(\Omega''(k)\Omega(k) - \Omega'^2(k))] \quad , \end{aligned}$$

$$\omega_2(0) = \frac{i(2\Omega(k)\Omega'(\kappa) - e^{iq_2}\Omega(k+\kappa) - e^{-iq_2}\Omega(k-\kappa))}{2\Omega(\kappa)} \quad . \quad (\text{G.11})$$

Diese Gleichungen wurden im harmonischen Limes erfolgreich überprüft. Sie sollten für die numerische Bestimmung von  $\kappa$  und  $\omega_2(0)$  besser geeignet sein als die Gleichungen (2.81). Für reelles  $q_2$  und  $k$  sowie rein imaginäres  $B$  und  $\kappa$  sind beide Seiten der Gleichung (G.10) reell und frei von Singularitäten.

## Anhang H: Symmetrien der Dispersionsrelation des linearen Stabilitätsproblems

In diesem Anhang wird bewiesen, daß man sich bei der Suche nach Lösungen der Gleichungen (2.81) auf  $k_2 < k_1$  und  $0 \leq \kappa < B_{11}$  beschränken kann.

Die rechte Seite der Gleichungen (2.81) sei als  $F_j(\kappa, k_1, k_2)$ ,  $j = 2, 3$ , bezeichnet.  $F_j$  hängt außerdem noch von  $B_{11}$  ab.  $\kappa$  als Funktion von  $B_{11}$ ,  $k_1$  und  $k_2$  ergibt sich als Nullstelle der Funktion

$$G(\kappa, k_1, k_2) := F_2(\kappa, k_1, k_2) - F_3(\kappa, k_1, k_2) \quad . \quad (\text{H.1})$$

Es werden nun die Symmetrien der Funktion  $G$  untersucht.

Die Quasiperiodizität (D.6) der Thetafunktionen und Lemma D.2 implizieren

$$\hat{\theta}_j(2k_1) = \hat{\theta}_j(2(1-k_1)) \quad , \quad j = 2, 3 \quad . \quad (\text{H.2})$$

Daraus folgt mit (2.52) und (2.53) für  $\nu_1$  und  $A$  als Funktion von  $k_1$

$$\nu_1(k_1) = \nu_1(1-k_1) \quad , \quad A(k_1) = A(1-k_1) \quad . \quad (\text{H.3})$$

(H.2) und (H.3) implizieren schließlich, daß

$$G(\kappa, k_1, k_2) = G(\kappa, 1 - k_1, 1 - k_2) \quad . \quad (\text{H.4})$$

D.h., die Funktion  $G$  ist punktsymmetrisch um den Punkt  $(k_1, k_2) = (1/2, 1/2)$ . Folglich kann man sich bei der Suche nach Lösungen der Gleichung (2.81) beispielsweise auf  $k_2 < k_1$  beschränken. Es sei noch angemerkt, daß direkt aus der Definition von  $a$  (2.69) folgt, daß  $a(k_1) = a(1 - k_1)$  und deswegen für Energie und Wirkung der 1-cnoidal-wave-Lösung als Funktion von  $k_1$  die Beziehungen

$$E(k_1) = E(1 - k_1) \quad , \quad S(k_1) = S(1 - k_1) \quad (\text{H.5})$$

gelten.

Eine weitere Symmetrie der Funktion  $G$  findet man bei der Untersuchung ihres Verhaltens bei Verschiebung von  $\kappa$  um ganzzahlige Vielfache von  $B_{11}$ . Es sei  $m \in \mathbf{Z}$  und  $B := B_{11}$ . Dann folgt aus (D.6)

$$d_\kappa \ln(\hat{\theta}_i(\kappa - mB)) = i\pi m + d_\kappa \ln(\hat{\theta}_j(\kappa)) \quad , \quad (\text{H.6})$$

$$d_\kappa^2 \ln(\hat{\theta}_i(\kappa - mB)) = d_\kappa^2 \ln(\hat{\theta}_j(\kappa)) \quad , \quad (\text{H.7})$$

$$\frac{\hat{\theta}_i(2k_1 + \kappa - mB)}{\hat{\theta}_i(\kappa - mB)} = \frac{\exp(i2\pi m k_1) \hat{\theta}_j(2k_1 + \kappa)}{\hat{\theta}_j(\kappa)} \quad . \quad (\text{H.8})$$

Wenn  $n$  gerade ist, gelten diese Gleichungen für  $i = j = 2, 3$ , für ungerades  $n$  gelten sie, wenn  $(i, j) = (2, 3), (3, 2)$ . Diese Fallunterscheidung läßt sich in der Bedingung  $(-1)^m = (-1)^{i+j}$  zusammenfassen. (H.6) bis (H.8) implizieren

$$F_j(\kappa - mB, k_1, k_2 - mk_1) = -m2\pi\nu_1 + F_i(\kappa, k_1, k_2) \quad , \quad (-1)^m = (-1)^{i+j} \quad . \quad (\text{H.9})$$

Daraus ergibt sich

$$G(\kappa, k_1, k_2) = (-1)^m G(\kappa - mB, k_1, k_2 - mk_1) \quad . \quad (\text{H.10})$$

Wenn also  $\kappa$  Lösung der Gleichungen (2.81) zu gegebenem  $k_1$  und  $k_2$  ist, dann löst  $\tilde{\kappa} = \kappa - mB$  dieselbe Gleichung mit  $\tilde{k}_1 = k_1$  und  $\tilde{k}_2 = k_2 - mk_1$ . Alle Lösungen von (2.81), die man auf diese Weise mit Hilfe von (H.10) aus einer gegebenen Lösung erzeugt, führen jedoch bis auf einen Faktor auf dieselbe Lösung des linearen Stabilitätsproblems: Mit (H.9) gilt

$$\tilde{\omega}_2 = \omega_2 - m2\pi\nu_1 \quad . \quad (\text{H.11})$$

Spezifiziert man ferner die Lösungen (2.83) durch ihre Parameter in der Form  $\delta q_n(t) = \delta q_n(k_2, \omega_2, \kappa; t)$ , so folgt

$$\delta q_n(k_2 - mk_1, \omega_2 - m2\pi\nu_1, \kappa - mB; t) = \exp(-i\pi m^2 B + i2\pi m \kappa + i2\pi \gamma_1) \delta q_n(k_2, \omega_2, \kappa; t) \quad , \quad (\text{H.12})$$

was die oben getroffene Aussage belegt. Es gibt also zu jeder Lösung der Gleichung (2.81) eine äquivalente Lösung mit der Eigenschaft  $0 \leq \kappa < B$ . Berücksichtigt man noch die Spiegelsymmetrie (H.4), so heißt das, daß man sich bei der numerischen Auswertung der Gleichungen (2.81) auf  $k_1 < k_2$  und das Intervall  $[0, B)$  beschränken kann. Wünschenswert wäre der Beweis etwa der folgenden stärkeren Aussage: Zu jedem Paar  $k_1, k_2$  mit  $k_1 < k_2$  gibt es eine eindeutige Lösung  $\kappa(B)$  der Gleichungen (2.81) im Intervall  $[0, B)$ . Diese Aussage konnte jedoch nur im harmonischen Limes (s. Kapitel 2.7) gezeigt werden.

Zum Schluß noch eine Anmerkung: Für alle  $m, n \in \mathbf{Z}$  gilt trivialerweise

$$G(\kappa, k_1 + m, k_2 + n) = G(\kappa, k_1, k_2) \quad . \quad (\text{H.13})$$

Daraus folgt mit (H.10)

$$G(\kappa, k_1, k_2) = (-1)^N G(\kappa - NB, k_1, k_2) \quad . \quad (\text{H.14})$$

Die Funktion  $G$  ist antiperiodisch in  $\kappa$  mit Periode  $NB$ .

## Anhang I: Die Dispersionsrelation des linearen Stabilitätsproblems im harmonischen Limes

Die logarithmischen Ableitungen und Quotienten der Thetafunktionen in (2.81) lassen sich mit Hilfe der Gleichungen (D.15) und (D.16) im harmonischen Limes entwickeln. Setzt man  $\delta := \exp(2\pi i B)$ , so erhält man bis zu Termen linear in  $\delta$  die Entwicklungen

$$d_\kappa \ln(\hat{\theta}_2(\kappa)) = -\pi \tan(\pi \kappa) \quad , \quad (\text{I.1})$$

$$d_\kappa^2 \ln(\hat{\theta}_2(\kappa)) = -\frac{\pi^2}{\cos^2(\pi \kappa)} \quad , \quad (\text{I.2})$$

$$\frac{\hat{\theta}_2(2k + \kappa)}{\hat{\theta}_2(\kappa)} = \frac{\cos(\pi(2k + \kappa))}{\cos(\pi \kappa)} \quad , \quad (\text{I.3})$$

$$d_\kappa \ln(\hat{\theta}_3(\kappa)) = -4\pi \sin(2\pi \kappa) \delta \quad , \quad (\text{I.4})$$

$$d_\kappa^2 \ln(\hat{\theta}_2(\kappa)) = -8\pi^2 \cos(2\pi \kappa) \delta \quad , \quad (\text{I.5})$$

$$\frac{\hat{\theta}_2(2k + \kappa)}{\hat{\theta}_2(\kappa)} = 1 + 2(\cos(2\pi(2k + \kappa)) - \cos(2\pi \kappa)) \delta \quad . \quad (\text{I.6})$$

Betrachtet man die Gleichungen (2.81) für  $j = 3$  unter der Annahme, daß  $\kappa$  im harmonischen Limes beschränkt bleibt, so folgt mit Hilfe von (I.4) bis (I.6), sowie (2.90) und (2.91) sofort, daß  $\omega_2$  der harmonischen Dispersion  $\omega_2 = 2 \sin(q_2/2)$  genügt. Setzt man dieses Ergebnis wiederum in (2.81) mit  $j = 2$ , so erhält man eine Gleichung, die man

unter Verwendung von (I.1) bis (I.3) in niedrigster Ordnung nach  $\kappa$  auflösen kann. Das Ergebnis ist (2.95). Da  $\kappa$  im harmonischen Limes von der Ordnung 1 ist, kann man  $\kappa$  sodann wieder in die Gleichung (2.81) dividiert durch  $\sqrt{A}$  mit  $j = 3$  einsetzen, um die  $\mathcal{O}(\delta)$ -Korrekturen zu  $\omega_2(0)$  zu bestimmen. Es stellt sich heraus, daß sie verschwinden.

## Anhang J: Die Dispersionsrelation des linearen Stabilitätsproblems im Solitonlimes

Die logarithmischen Ableitungen und Quotienten der Thetafunktionen in (2.81) lassen sich sämtlich mit Hilfe der Gleichungen (D.20) und (D.21) im Solitonlimes entwickeln. Man setzt  $i\pi/B = \alpha N$  und  $k_1 = 1/N$  und entwickelt für große  $N$ . Zur Abkürzung sei  $\varepsilon := \exp(-\alpha N/2)$  und

$$\Delta_+ := 4\text{sh}(\alpha + i\kappa_1/2)\text{sh}(\alpha) \quad , \quad (\text{J.1})$$

$$\Delta_- := 4\text{sh}(\alpha - i\kappa_1/2)\text{sh}(\alpha) \quad . \quad (\text{J.2})$$

Dann ergibt sich

$$d_\kappa \ln(\hat{\theta}_2(\kappa)) = i\kappa_1/2 + 2i\alpha N\varepsilon \sin(\kappa_1/2) \quad , \quad (\text{J.3})$$

$$d_\kappa \ln(\hat{\theta}_3(\kappa)) = i\kappa_1/2 - 2i\alpha N\varepsilon \sin(\kappa_1/2) \quad , \quad (\text{J.4})$$

$$d_\kappa^2 \ln(\hat{\theta}_2(\kappa)) = -\alpha N - 2(\alpha N)^2\varepsilon \cos(\kappa_1/2) \quad , \quad (\text{J.5})$$

$$d_\kappa^2 \ln(\hat{\theta}_3(\kappa)) = -\alpha N + 2(\alpha N)^2\varepsilon \cos(\kappa_1/2) \quad , \quad (\text{J.6})$$

$$\ln\left(\frac{\hat{\theta}_2(\kappa + 2k_1)}{\hat{\theta}_2(\kappa)}\right) = \frac{i\kappa_1}{N} - \frac{2\alpha}{N} - \varepsilon\Delta_- \quad , \quad (\text{J.7})$$

$$\ln\left(\frac{\hat{\theta}_2(\kappa - 2k_1)}{\hat{\theta}_2(\kappa)}\right) = -\frac{i\kappa_1}{N} - \frac{2\alpha}{N} - \varepsilon\Delta_+ \quad , \quad (\text{J.8})$$

$$\ln\left(\frac{\hat{\theta}_3(\kappa + 2k_1)}{\hat{\theta}_3(\kappa)}\right) = \frac{i\kappa_1}{N} - \frac{2\alpha}{N} + \varepsilon\Delta_- \quad , \quad (\text{J.9})$$

$$\ln\left(\frac{\hat{\theta}_3(\kappa - 2k_1)}{\hat{\theta}_3(\kappa)}\right) = -\frac{i\kappa_1}{N} - \frac{2\alpha}{N} + \varepsilon\Delta_+ \quad . \quad (\text{J.10})$$

Setzt man diese Entwicklungen und die Ausdrücke (2.107), (2.109) für  $A$  und  $\nu$  im Solitonlimes in die Differenz der beiden Gleichungen (2.81) ein, so erhält man eine Bestimmungsgleichung für  $\kappa_1$ , deren führende Terme von der Ordnung  $\varepsilon$  sind. In führender Ordnung läßt sich diese Gleichung nach  $\kappa_1$  auflösen. Das Ergebnis ist (2.119). Die führenden Beiträge zu  $\omega_2$  sind dann von der Ordnung 1 und die nächst höheren von der Ordnung  $1/N$ . Für  $\omega_2$  ergibt sich (2.121).

## Literatur

- [1] M. Abramowitz and I. Stegun, editors. *Handbook of Mathematical Functions*, pages 775, 778, 785. Dover Publications, Inc., New York, 8 edition, (1975).
- [2] V. I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer-Verlag, Berlin, 2 edition, (1989).
- [3] M. V. Berry. *Semiclassical Mechanics of Regular and Irregular Motion*, page 171. Les Houches Lectures XXXVI. North-Holland, Amsterdam, (1983).
- [4] M. V. Berry. *Some Quantum-to-classical Asymptotics*, page 251. Les Houches Lectures LII. North-Holland, Amsterdam, (1991).
- [5] M. V. Berry and J. P. Keating. *J. Phys. A*, **23**, 4839, (1990).
- [6] M. V. Berry and K. E. Mount. *Rep. Prog. Phys.*, **35**, 315, (1972).
- [7] M. V. Berry and M. Tabor. *Proc. R. Soc. Lond. A*, **349**, 101, (1976).
- [8] M. V. Berry and M. Tabor. *J. Phys. A*, **10**, 371, (1977).
- [9] J. P. Boyd. *J. Math. Phys.*, **23**, 375, (1982).
- [10] J. P. Boyd. *J. Math. Phys.*, **25**, 3415, (1984).
- [11] E. A. Coddington and N. Levinson. *Theory of Ordinary Differential Equations*, chapter 8. McGRAW-HILL, New York, (1955).
- [12] S. C. Creagh. *J. Phys. A*, **26**, 95, (1993).
- [13] S. C. Creagh and R. G. Littlejohn. *Phys. Rev. A*, **44**, 836, (1991).
- [14] J. Dancz and S. A. Rice. *J. Chem. Phys.*, **76**, 1418, (1977).
- [15] R. F. Dashen, B. Hasslacher, and A. Neveu. *Phys. Rev. D*, **10**, 4114, (1974).
- [16] R. F. Dashen, B. Hasslacher, and A. Neveu. *Phys. Rev. D*, **11**, 3424, (1975).
- [17] E. Date and S. Tanaka. *Prog. Theor. Phys.*, **55**, 457, (1976).
- [18] E. Date and S. Tanaka. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **59**, 107, (1976).
- [19] B. A. Dubrovin. *Functional Anal. Appl.*, **9**, 215, (1975).
- [20] B. A. Dubrovin. *Uspekhi Mat. Nauk*, **36**(2), 11, (1981).
- [21] B. A. Dubrovin. *Sov. Sci. Rev. Sect. C: Math. Phys. Rev.*, **3**, 83, (1982).
- [22] B. Eckhardt. *Phys. Rep.*, **163**, 205, (1987).

- [23] L. D. Fadeev and L. A. Takhtajan. *Hamiltonian Methods in the Theory of Solitons*, page 471. Springer-Verlag, Berlin, (1987).
- [24] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, Inc., (1965).
- [25] H. Flaschka. *Phys. Rev. B*, **9**, 1924, (1974).
- [26] H. Flaschka. *Prog. Theor. Phys.*, **51**, 703, (1974).
- [27] H. Flaschka and D. W. McLaughlin. *Prog. Theor. Phys.*, **55**, 438, (1976).
- [28] M. Fowler and H. Frahm. *Phys. Rev. B*, **39**, 11800, (1989).
- [29] M. Gaudin. *La fonction de l'onde de Bethe pour les modèles exacts de la mécanique statistique*, chapter 14. Masson, Paris, (1983).
- [30] F. Göhmann and F. G. Mertens. *J. Phys. A*, **25**, 649, (1992).
- [31] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, **8**, 1979, (1967).
- [32] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, **10**, 1004, (1969).
- [33] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, **11**, 1791, (1970).
- [34] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, **12**, 343, (1971).
- [35] M. C. Gutzwiller. *Ann. Phys. (N.Y.)*, **124**, 347, (1980).
- [36] M. C. Gutzwiller. *Ann. Phys. (N.Y.)*, **133**, 304, (1981).
- [37] E. R. Hansen. *A table of series and products*. Prentice-Hall, inc., (1975).
- [38] M. Hénon. *Phys. Rev. B*, **9**, 1921, (1974).
- [39] R. Hirota. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **35**, 286, (1973).
- [40] R. Hirota and M. Ito. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **50**, 338, (1981).
- [41] S. Isola, H. Kantz, and R. Livi. *J. Phys. A*, **24**, 3061, (1991).
- [42] A. P. Its and V. B. Matveev. *Teoret. Mat. Fiz.*, **23**, 51, (1975).
- [43] M. Kac and P. van Moerbeke. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **72**, 1627, (1975).
- [44] M. Kac and P. van Moerbeke. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **72**, 2879, (1975).
- [45] J. P. Keating. *Proc. R. Soc. Lond. A*, **436**, 99, (1992).
- [46] J. P. Keating and M. V. Berry. *J. Phys. A*, **20**, L1139, (1987).

- [47] A. K. Kerman and S. E. Koonin. *Ann. Phys. (N.Y.)*, **100**, 332, (1976).
- [48] I. M. Krichever. *Uspekhi Mat. Nauk*, **33**(4), 215, (1978).
- [49] L. D. Landau und E. M. Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik I, Mechanik*. AKADEMIE-VERLAG, Berlin, 11. Auflage, (1984).
- [50] L. D. Landau und E. M. Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik III, Quantenmechanik*. AKADEMIE-VERLAG, Berlin, 7. Auflage, (1985).
- [51] A. Luther. *Phys. Rev. B*, **14**, 2153, (1976).
- [52] A. Luther. *Phys. Rev. B*, **15**, 403, (1977).
- [53] S. V. Manakov. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **67**, 543, (1974).
- [54] A. Matsuyama. *Phys. Lett. A*, **161**, 124, (1991).
- [55] A. Matsuyama. *Ann. Phys. (N.Y.)*, **220**, 300, (1992).
- [56] A. Matsuyama. *Phys. Lett. A*, **177**, 415, (1993).
- [57] V. B. Matveev. persönliche Mitteilung.
- [58] F. G. Mertens. *Z. Phys. B*, **55**, 353, (1984).
- [59] W. H. Miller. *J. Chem. Phys.*, **63**, 996, (1975).
- [60] S. P. Novikov. *Functional Anal. Appl.*, **8**, 236, (1974).
- [61] M. A. Olshanetsky and A. M. Perelomov. *Lett. Math. Phys.*, **2**, 7, (1977).
- [62] L. A. Pars. *A Treatise on Analytical Dynamics*, chapter 23. Heinemann, London, (1965).
- [63] V. Pasquier and M. Gaudin. *J. Phys. A*, **25**, 5243, (1992).
- [64] R. Rajaraman. *Solitons and Instantons*. North-Holland, Amsterdam, (1982).
- [65] J. M. Robbins. *Phys. Rev. A*, **40**, 2128, (1989).
- [66] L. S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration*. John Wiley & Sons, New York, (1981).
- [67] T. Shirafuji. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **59**, 126, (1976).
- [68] C. L. Siegel. *Topics in Complex Function Theory*. WILEY-INTERSCIENCE, New York, (1971).
- [69] E. K. Sklyanin. *Nonlinear Equations in Classical and Quantum Field Theory*, volume 226 of *Lecture Notes in Physics*, page 196. Springer Verlag, Berlin, (1985).

- [70] B. Sutherland. *Rocky Mount. J. Math.*, page 413, (1978).
- [71] N. Theodorakopoulos and F. G. Mertens. *Phys. Rev. B*, **28**, 3512, (1983).
- [72] M. Toda. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **22**, 431, (1967).
- [73] M. Toda. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **45**, 174, (1970).
- [74] M. Toda. *Theory of Nonlinear Lattices*. Springer Verlag, Berlin, second edition, (1989).
- [75] P. van Moerbeke. *Inventiones Math.*, **37**, 45, (1976).
- [76] A. Voros. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, **XXIV**, 31, (1976).
- [77] E. T. Whittaker. *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*. Cambridge University Press, (1937).
- [78] E. T. Whittaker and G. N. Watson. *A course of modern analysis*, chapter 21. Cambridge University Press, fourth edition, (1963).