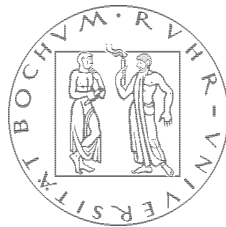


Nachbarn-Statistik des diskreten Spektrums klassisch chaotischer Quantensysteme

Diplomarbeit

von

Dirk Engel



Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Physik und Astronomie

Lehrstuhl für Theoretische Physik I

(Plasma- und Atomphysik)

1995

Vorwort

Die Beschäftigung mit der Fragestellung des Quantenchaos geht auf die späten 70er und die frühen 80er Jahre zurück. Neben der Semiklassik ist die Untersuchung statistisch-spektraler Eigenschaften klassisch chaotischer Quantensysteme eine Methode, die seitdem gewisse Teilergebnisse der Quantenchaos-Theorie hervorgebracht hat. Insbesondere ist es mit Hilfe der Nachbarn-Statistik möglich geworden, ein echtes Kriterium zu finden, klassisch reguläre von klassisch ergodischen Systemen quantenmechanisch zu unterscheiden. Dazu wurde vorwiegend die Nachbarn-Statistik des *nächsten Nachbarn* herangezogen, weil diese besonders einfach und maximal lokal ist. In der vorliegenden Diplomarbeit geht es um eine mögliche Verallgemeinerung einiger Resultate auf Nachbarn-Statistiken höherer Ordnungen. Die Integralgleichung, welche dazu den Ausgangspunkt bildet, wurde in der Vergangenheit von vielen Autoren zu Adhoc-Zwecken herangezogen.

Hinsichtlich einer Formulierung höherer Nachbarn-Statistiken hatte Prof. Hasegawa 1989 die verallgemeinerten Poisson-Verteilungen vorgeschlagen. Mit Ausnahme der Dissertation [18] blieb allerdings eine Veröffentlichung dieses Ansatzes (vermutlich aufgrund empirischer Mängel) aus. Obwohl – im rechten Licht betrachtet – klar wird, warum dieser Versuch fehlschlagen mußte, war Prof. Hasegawas Ansatz wichtig für diese Arbeit.

Die numerisch-empirische Grundlage der Untersuchung bilden die Daten einer numerischen Lösung der Schrödinger-Gleichung des Wasserstoff-Atoms im starken Magnetfeld, die von Dr. Main zur Verfügung gestellt wurden. Mit rund 1000 Energieniveaus für jeden m^π -Unterraum ist der Stichprobenumfang recht hoch und läßt eine signifikante Statistik erwarten. Alle numerischen und graphischen Arbeiten wurden mit Maple V Release 3 für IRIX durchgeführt.

Bochum, im Februar 1995

Dirk Engel

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Nachbarn-Statistik und Quantenchaos	7
2.1	Lokalität und Entfaltung	7
2.2	Abstandsverteilung des nächsten Nachbarn	8
2.3	Integrable und ergodische Systeme	8
2.4	Übergangsbereich zwischen Integrabilität und Ergodizität	10
2.5	Abstandsverteilung des k-ten Nachbarn	13
2.5.1	Allgemeine Eigenschaften	13
2.5.2	Verallgemeinerte Poisson-Verteilung	14
3	Formulierung der Nachbarn-Statistik höherer Ordnung	17
3.1	Ableitung aus der gemeinsamen Dichte	17
3.2	Bedingte Pseudodichte	18
3.3	Integralgleichung der Nachbarn-Statistik	19
3.4	Differentialgleichung der Nachbarn-Statistik	20
3.5	Allgemeine Lösung	21
3.5.1	Nullte Ordnung	21
3.5.2	Höhere Ordnungen	22
3.6	Normierung	23
3.7	Spezialfälle	25
3.8	Entfaltung	26
3.9	Potenz-Ansatz für die bedingte Pseudodichte	28
3.10	Vergleich mit der GOE-Theorie	29
4	Wasserstoff-Atom im Magnetfeld	32
4.1	Hamilton-Funktion und skalierte Energie	32
4.2	Diskretes Spektrum und klassische Dynamik	33
4.3	Ergodischer Bereich	34
4.4	Fast-ergodischer Bereich	38
4.5	Übergangsbereich	38
4.6	Fast-regulärer Bereich	41
4.7	Zusammenfassung der empirischen Ergebnisse	46
5	Rückblick und abschließende Bemerkungen	47
A	Gaußsches orthogonales Ensemble	48

B	Bedingte Wahrscheinlichkeit	50
C	Bedingte Dichte	52
D	Lineare Differentialgleichungen erster Ordnung	54

Symbolverzeichnis

(x_i) Entfaltetes diskretes Spektrum	8
$\theta(x)$ Heaviside-Funktion	7
$N(x)$ Stufenfunktion des Spektrums	7
$\bar{N}(x)$ Globaler Anteil von $N(x)$	7
$N_0(x)$ Lokaler Anteil von $N(x)$	7
$P(x)$ Abstandsverteilung des nächsten Nachbarn	8
$P_{\text{poi}}(x)$ Poisson-Verteilung (nullter Ordnung)	8
$P_{\text{wig}}(x)$ Wigner-Verteilung	9
$F(x)$ Umgebungswahrscheinlichkeit (nullter Ordnung)	10
$\mu(x)$ Bedingte Pseudodichte (nullter Ordnung)	11
$P_{\text{bro}}(q, x)$ Brody-Verteilung	12
$P_k(x)$ Abstandsverteilung k-ter Ordnung	13
$F_k(x)$ Umgebungswahrscheinlichkeit k-ter Ordnung	13
$E_k(x)$ Lückenwahrscheinlichkeit k-ter Ordnung	13
$P_{\text{poi},k}(x)$ Poisson-Verteilung k-ter Ordnung	14
$P_{\text{vpoi},k}(x)$ Verallgemeinerte Poisson-Verteilung k-ter Ordnung	15
$\mu_k(x)$ Bedingte Pseudodichte k-ter Ordnung	19
$L_k(x)$ Linearer Term der Differentialgleichung k-ter Ordnung	21
$\varphi_k(x)$ Stammfunktion der bedingten Pseudodichte k-ter Ordnung	22
$Q_k(q_k, x)$ Verallgemeinerte Brody-Verteilung k-ter Ordnung	29
$P_{\text{goe},k}(x)$ GOE-Abstandsverteilung k-ter Ordnung	49

Kapitel 1

Einleitung

In der Quantenchaos-Theorie geht es um quantenmechanische Systeme, deren Zustände¹ sich nicht *eindeutig* durch Quantenzahlen beschreiben lassen. In solchen Systemen gibt keine *vollständige* Menge unabhängiger, paarweise kommutierender Operatoren. Für das dem quantenmechanischen System zugeordnete klassische System² bedeutet dies die Nicht-Integrabilität seiner Bewegungsgleichungen und damit klassisches Chaos. Die Trajektorien im Phasenraum werden gewissermaßen nicht mehr durch hinreichend viele Konstanten der Bewegung auf reguläre Torus-Bahnen „gezwungen“.

Im Rahmen der Quantenchaos-Theorie stellt man sich nun die Frage, inwiefern sich klassisches Chaos in der Hilbertraum-Beschreibung des entsprechenden Quantensystems wiederfindet. Man sucht insbesondere nach universellen (d. h. systemunabhängigen) Charakteristika in quantenmechanischen Systemen, anhand derer eine Unterscheidung zwischen klassisch integrablen (regulären) und klassisch ergodischen³ (irregulären) Systemen möglich ist. Bei dieser Suche bietet sich das Spektrum des Hamilton-Operators an, weil es viele Informationen über das Quantensystem enthält. Da nun aber die Lage jedes einzelnen Spektralwertes von der jeweiligen Gestalt des Hamilton-Operators abhängt und in diesem Sinne nicht universell ist, konzentriert man sich auf die *statistischen* Eigenschaften des Spektrums.

Dem diskreten Spektrum des Hamilton-Operators entsprechen klassisch die gebundenen Zustände des Systems: Es besteht genau aus den Energie-Eigenwerten. Die Nachbarn-Statistik nullter Ordnung beschreibt die Abstandsverteilung zwischen benachbarten Eigenwerten – also die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, daß der nächste⁴ Nachbar zu einem gegebenen Eigenwert in einem bestimmten Abstand liegt. Man nennt diese Wahrscheinlichkeitsdichte auch einfach *Abstandsverteilung nullter Ordnung*⁵. Entsprechend gibt es eine *Abstandsverteilung er-*

¹Es werden nur reine Zustände betrachtet, d. h. Zustände mit dem speziellen Zustandsoperator $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. $|\Psi\rangle$ heißt Zustandsvektor oder einfach Zustand.

²Diese Zuordnung besteht hier einfach in der Ersetzung der Orts- und Impulsoperatoren im Hamilton-Operator durch die entsprechenden kartesischen Variablen in der Hamilton-Funktion. Semiklassische Methoden sind nicht notwendig.

³Mit „ergodisch“ ist immer die Ergodizität auf der (ganzen) Energieschale gemeint.

⁴Gemeint ist immer der nächste Nachbar in aufsteigender Richtung.

⁵Ein anderer Name ist „Abstandsverteilung des nächsten Nachbarn“.

ster Ordnung, die die Abstandswahrscheinlichkeit von einem Eigenwert zum Nachbarn des benachbarten Eigenwertes erfaßt. Höhere Ordnungen charakterisieren Korrelationen von längerer Reichweite.

Es hat sich nun gezeigt, daß in konservativen, gebundenen Systemen die Nachbarn-Statistik nullter Ordnung ein geeignetes Instrument ist, klassisch integrable von klassisch ergodischen Quantensystemen zu unterscheiden. Sie nimmt also in dem einen bzw. anderen Fall eine jeweils charakteristische Form⁶ an.

In dieser Arbeit soll die Frage untersucht werden, inwiefern sich die universellen Eigenschaften der Nachbarn-Statistik nullter Ordnung auch für höhere Ordnungen verallgemeinern lassen; insbesondere deshalb, weil damit Korrelationen längerer Reichweite erfaßt werden können.

⁶Für integrable Systeme muß diese Aussage jedoch eingeschränkt werden, da sie nur für sogenannte „generische Systeme“ gilt.

Kapitel 2

Nachbarn-Statistik und Quantenchaos

2.1 Lokalität und Entfaltung

Das diskrete Spektrum des Hamilton-Operators ist – dimensionslos betrachtet – eine nach unten beschränkte Folge reeller Zahlen. Für die untere Grenze sei im folgenden (o. B. d. A.) der Nullpunkt gewählt, so daß das diskrete Spektrum durch eine nicht negative Folge reeller Zahlen $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ darstellt werden kann. Semiklassischen Argumente¹ führen zu der Annahme, daß nur *lokale* Strukturen, wie die Abstandsverteilung des nächsten Nachbarn, Universalität zeigen können. Globale, also systemspezifische Eigenschaften werden darum in einer Prozedur, die *Entfaltung* genannt wird, aus dem Spektrum eliminiert. Die Stufenfunktion

$$N(x) = \sum_{i \in \mathbb{N}} \Theta(x - x_i) \quad (2.1)$$

des entfalteten Spektrums (x_i) ist nach der Entfaltung bis auf lokale Fluktuationen eine Einheitsgerade². Die lokalen statistischen Eigenschaften sind dann an jeder Stelle diesselben. Eine Folge dieser Homogenität ist, daß der Abstand zwischen benachbarten Eigenwerten im Mittel gleich 1 ist – zum übernächsten Nachbarn ist er gleich 2, usw.

In einem nicht entfaltenen Spektrum hat die mittlere Stufenfunktion $\bar{N}(x)$ eine systemspezifische Gestalt, die mehr oder weniger von der einer Einheitsgeraden abweicht. Die Zerlegung

$$N(x) = \bar{N}(x) + N_0(x) \quad (2.2)$$

in einen lokalen (universellen) Anteil $N_0(x)$ und einen globalen (individuellen, systemspezifischen) Anteil $\bar{N}(x)$ ermöglicht die Entfaltung des Spektrums

¹Was Semiklassik eigentlich ist und um welche Argumente es sich dabei handelt, ist für diese Arbeit nicht relevant und bleibt deshalb unerwähnt. Siehe dazu [4] und M. Berry, „Some quantum-to-classical asymptotics“ in [9], S. 250–303. Zur allgemeinen Problematik des semiklassischen Limes siehe [2].

²Zum Problem der Entfaltung siehe [10].

vermöge

$$x_i \mapsto \bar{x}_i := \bar{N}(x_i). \quad (2.3)$$

Die Folge (\bar{x}_i) ist entfaltet ($\langle \bar{x}_i - \bar{x}_{i-1} \rangle = 1$), enthält aber noch alle lokalen Fluktuationen. Der globale Anteil $\bar{N}(x)$ der Stufenfunktion kann für viele Systeme auf semiklassischem Wege³ berechnet werden.

Bei der Suche nach universellen Eigenschaften klassisch chaotischer Quantensysteme ist es sinnvoll, von einem bereits entfaltetem Spektrum auszugehen. So sei im folgenden mit $(x_i) \subset \mathbb{R}^+$ das entfaltete, diskrete Spektrum des Hamilton-Operators bezeichnet.

2.2 Abstandsverteilung des nächsten Nachbarn

Die Abstandsverteilung⁴ nullter Ordnung $P(x)$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, daß von einem gegebenen Eigenwert aus der nächste Nachbar (in aufsteigender Richtung) in der Entfernung x liegt. $P(x)$ muß zwei Bedingungen erfüllen; nämlich erstens die *Normierungsbedingung* (2.4), weil es sich um eine Wahrscheinlichkeitsdichte handelt und zweitens die *Entfaltungsbedingung* (2.5), da das Spektrum als bereits entfaltet angesehen werden soll:

$$\int_0^\infty P(x) dx = 1, \quad (2.4)$$

$$\int_0^\infty x P(x) dx = 1. \quad (2.5)$$

Die Funktion $P(x)$ ist von besonderer Wichtigkeit für die Nachbarn-Statistik, weil sie ein direktes Maß für die Abstandswahrscheinlichkeit ist und weil sie der Verteilung entspricht, die beim Auszählen diskreter Spektren unmittelbar vorliegt. Dabei ist aber zu beachten, daß es sich eigentlich nicht um eine Abstandsverteilung des *nächsten* Nachbarn, sondern des *rechten* Nachbarn handelt: Das Spektrum muß in *aufsteigender* Richtung bis zum jeweils nachfolgenden Niveau ausgezählt werden.

2.3 Integrale und ergodische Systeme

Für fast alle integrierbaren Systeme hat $P(x)$ die Gestalt einer Exponentialverteilung oder *Poisson-Verteilung* nullter Ordnung⁵:

$$P_{\text{poi}}(x) := \exp(-x). \quad (2.6)$$

³Siehe z. B. O. Bohigas, „Random matrices and chaotic dynamics“ in [9], S. 87–199.

⁴Der Begriff „Verteilung“ hat in der mathematischen Literatur die Bedeutung eines Bildmaßes bzgl. einer Zufallsvariablen. Wenn nicht explizit darauf hingewiesen wird, soll hier – wie in der physikalischen Literatur üblich – der Begriff synonym mit „Wahrscheinlichkeitsdichte“ gebraucht werden.

⁵In der Mathematik versteht man unter „Poisson-Verteilung“ eigentlich eine diskrete Verteilung auf \mathbb{N} . Demgegenüber ist hier die Rolle von Parameter und Variable vertauscht: Die Ordnung k der Verteilung (hier $k = 0$) ist dann nicht bloß ein Parameter, sondern die eigentliche Variable mit Werten aus \mathbb{N} . Siehe Gleichung (2.23) für $k > 0$.

Dabei wird angenommen, daß die Niveaus statistisch unabhängig (mit mittlerem Abstand 1) verteilt sind. Der Beweis dieser Voraussetzung⁶ ist allerdings nicht für alle integrierbaren Systeme möglich: Beim harmonischen Oszillator beispielsweise ist die Bedingung wegen der verschwindenden Krümmung der Energieschale nicht erfüllt⁷.

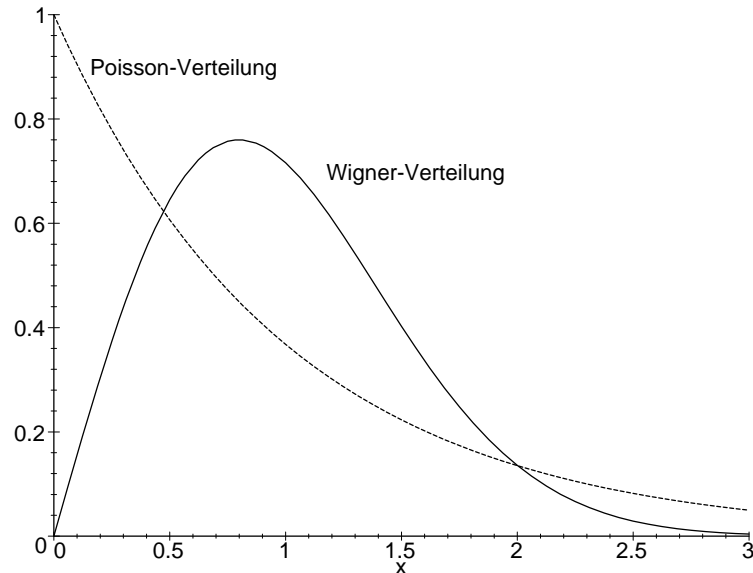


Abbildung 2.1: Poisson-Verteilung $P_{\text{poi}}(x)$ und Wigner-Verteilung $P_{\text{wig}}(x)$

In gebundenen ergodischen Systemen, die eine antiunitäre Symmetrie (z. B. Bewegungsumkehr-Symmetrie⁸) und einen ganzzahligen Gesamtdrehimpuls besitzen, ist die spektrale Nachbarn-Statistik $P(x)$ jedoch eine ganz andere. Übereinstimmend stellt man für diese Klasse von Systemen fest, daß die diskreten Spektralwerte eine Abstandswahrscheinlichkeit besitzen, die man als *Wigner-Verteilung* bezeichnet:

$$P_{\text{wig}}(x) := \frac{\pi}{2} x \exp\left(-\frac{\pi}{4} x^2\right). \quad (2.7)$$

Eine mathematisch strenge und physikalisch befriedigende Ableitung dieser Wahrscheinlichkeitsdichte gibt es bis heute nicht. Mit Hilfe der Zufallsmatrizen-Theorie⁹, die Ensembles von Matrizen verschiedener Symmetrieklassen mit zu-

⁶Siehe [10], Kap. 5.

⁷Die Nullmenge solcher Systeme ist in diesem Sinne nicht „generisch“.

⁸In der Literatur wird die Bewegungsumkehr-Symmetrie häufig „Zeitumkehr-Symmetrie“ genannt. Das ist allerdings eine äußerst irreführende Bezeichnung, die hier vermieden werden soll. Siehe dazu [2].

⁹Die für diese Arbeit wichtigen Ergebnisse und Definitionen sind im Anhang A kurz zusammengefaßt. Zum ausführlichen Studium siehe [16].

fallsverteilten Elementen beschreibt, ist eine exakte Herleitung der Wigner-Verteilung möglich. Jedoch bleibt eine solche Beschreibung des quantenmechanischen Hamilton-Operators – physikalisch gesehen – ein Adhoc-Modell.

Besonders auffallend ist, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte für kleine Abstände im klassisch ergodischen Fall beliebig klein wird ($P_{\text{wig}}(0) = 0$), wohingegen klassisch reguläre Systeme sich genau gegenteilig verhalten ($P_{\text{poi}}(0) = 1$). Man spricht in diesem Zusammenhang von einer „Niveau-Abstoßung“ durch klassische Irregularität im Phasenraum (Abb. 2.1.).

2.4 Übergangsbereich zwischen Integrität und Ergodizität

Neben der Zufallsmatrizen-Theorie gibt es einen weiteren Ansatz, der die Gestalt der Abstandsverteilung im klassisch ergodischen Fall wiederzugeben vermag. Er hängt direkt zusammen mit der Exponentialverteilung unabhängiger Energieniveaus und mit der *Brody-Verteilung*. Die Brody-Verteilung ist eine einparametrische Familie von Verteilungen, die die Poisson- und die Wigner-Verteilung stetig ineinander überführt.

Zum Verständnis dieses Ansatzes sind einige mathematische Vorbemerkungen zu machen: $P(x) dx$ ist die „Wahrscheinlichkeit“¹⁰ dafür, daß ein Intervall, welches bei einem Niveau beginnt (im folgenden liege dort der Nullpunkt $x = 0$), in seinem Innern $]0, x[$ keinen Eigenwert enthält *und* sich im Intervall $[x, x + dx]$ das nächste Niveau befindet. Wegen der angenommenen Homogenität des Spektrums ist die spezielle Wahl des Nullpunktes in einem der Eigenwerte beliebig. Das „nullte“ Niveau in $x = 0$ habe den Namen x_0 – alle weiteren mögen x_k mit $k > 0$ heißen. $P(x) dx$ hat die logische Struktur einer Verbundwahrscheinlichkeit, d. h. einer Wahrscheinlichkeit, die aus zwei mit dem logischen „Und“ verbundenen Ereignissen (Aussagen) besteht¹¹: einmal, daß $x_1 \notin]0, x[$, wobei $x_0 = 0$ ist *und* zum zweiten, daß $x_1 \in [x, x + dx]$. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß für $x_0 = 0$ kein Eigenwert in $]0, x[$ liegt, heiße *Umgebungswahrscheinlichkeit nullter Ordnung* $F(x)$ ¹². Für $F(x)$ gilt

$$F(x) = 1 - \int_0^x P(x) dx = \int_x^\infty P(x) dx, \quad (2.8)$$

denn die Aussage „kein Niveau in $]0, x[$ “ ist äquivalent zu „nächster Nachbar irgendwo in $[x, \infty[$ “. Weil nun aber $P(x) dx$ eine Verbundwahrscheinlichkeit darstellt und jede Verbundwahrscheinlichkeit gleich dem Produkt¹³ aus der zu-

¹⁰Die hier verwendete Schreibweise möge der mathematisch strenge Leser im Sinne der Nicht-Standard-Analysis auffassen.

¹¹Genaugenommen sind es drei Aussagen, die in Konjunktion zueinander stehen. Die ersten beiden mögen aber zu einer zusammengefaßt sein.

¹² $F(x)$ hat in der Literatur keine besondere Bezeichnung. Der hier gewählte Name soll ausdrücken, daß es sich um die Wahrscheinlichkeit dafür handelt, daß in der Umgebung (in aufsteigender Richtung) eines Niveaus (bei $x = 0$) der Länge x kein (nullte Ordnung) weiteres liegt Niveau liegt.

¹³Siehe dazu Anhang B, insbesondere Gleichung (B.2).

gehörigen bedingten Wahrscheinlichkeit und der Wahrscheinlichkeit der Bedingung ist, ergibt sich die für alles Weitere grundlegende Integralgleichung

$$P(x) = \mu(x) F(x) = \mu(x) \int_x^\infty P(x) dx. \quad (2.9)$$

Sie legt $P(x)$ fest, falls $\mu(x)$ gegeben ist. Mit der Gleichung (2.9) wird also die Abstandsverteilung des nächsten Nachbarn auf eine Funktion $\mu(x)$ zurückgeführt, die im folgenden als *bedingte Pseudodichte* bezeichnet werden soll. $\mu(x) dx$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Niveau (nämlich x_1) im Intervall $[x, x + dx]$ liegt, unter der *Bedingung*, daß am Nullpunkt ebenfalls eines ist ($x_0 = 0$) und kein weiteres sich dazwischen, also in $]0, x[$, befindet. $\mu(x)$ ist keine gewöhnliche Wahrscheinlichkeitsdichte wie z. B. $P(x)$, weil die Variable x auch in der Bedingung enthalten ist! Deshalb wurde hier auch der Name „Pseudodichte“ für $\mu(x)$ gewählt.

Die Tatsache, daß es sich bei $\mu(x) dx$ um eine bedingte Wahrscheinlichkeit im obigen Sinne handelt, ist von größter Wichtigkeit, weil nur damit ein Verständnis der grundlegenden Gleichung (2.9) möglich wird. Üblicherweise wird in der Literatur¹⁴ die bedingende Aussage „keine Niveau in $]0, x[$ “ nicht erwähnt. Dies ist aber nur bei unabhängigen Energieniveaus richtig, weil hier die bedingte Wahrscheinlichkeit identisch ist mit der unbedingten¹⁵. Für den Fall sich gegenseitig abstoßender Eigenwerte ist aber gerade diese Voraussetzung nicht erfüllt! In dem zusammenfassenden Aufsatz [6] von O. Bohigas und M.-J. Giannoni aus dem Jahre 1983 ist eine wahrscheinlichkeitslogisch exakte Formulierung von $\mu(x) dx$ zu finden.

Die Grundgleichung (2.9) für $P(x)$ kann nun durch Differentiation in eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung überführt werden:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dx}(x) &= \frac{d\mu}{dx}(x) \underbrace{\int_x^\infty P(y) dy}_{= \frac{P(x)}{\mu(x)}} - \mu(x) P(x) \\ &= \left[\frac{d\mu}{dx}(x) \frac{1}{\mu(x)} - \mu(x) \right] P(x). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die allgemeine Lösung dieser Differentialgleichung¹⁶ ist somit durch

$$P(x) = C \mu(x) \exp \left(- \int_0^x \mu(y) dy \right) \quad (2.11)$$

gegeben, wobei C eine Normierungskonstante¹⁷ ist.

Die Poisson-Verteilung (2.6) erhält man daraus für $\mu(x) = \text{const}$, was einer Folge unkorrelierter Energieniveaus entspricht, unter Zuhilfenahme der Normierungsbedingung (2.4) und der Entfaltungsbedingung (2.5):

$$\mu(x) = \text{const} \quad \Rightarrow \quad P(x) = \exp(-x) = P_{\text{poi}}(x). \quad (2.12)$$

¹⁴Z. B. in [11] und [10]. Wenn hier von „bedingter Dichte“ die Rede ist, dann nur aufgrund des einen Teiles der Bedingung, daß bei $x = 0$ ein Niveau zu finden ist.

¹⁵Das heißt, daß die Bedingung weggelassen werden kann. Siehe Anhang B, Gleichung (B.3).

¹⁶Die Rechnung wird im Kap. 3.5 in größerer Allgemeinheit und Breite durchgeführt.

¹⁷Normierung $\int P(x) dx = 1$ ergibt $C = 1$ für alle integrierbaren $\mu(x)$.

Ganz analog kann die Wigner-Verteilung (2.7) angesehen werden, als eine Abstandsverteilung mit linearer bedingter Pseudodichte $\mu(x) \sim x$:

$$\mu(x) \sim x \quad \Rightarrow \quad P(x) = \frac{\pi}{2} x \exp\left(-\frac{\pi}{4} x^2\right) = P_{\text{wig}}(x). \quad (2.13)$$

Es liegt nun der Schluß nahe, durch einen Ansatz $\mu(x) \sim x^q$ für $q \in [0, 1]$ den Übergangsbereich nicht-integrabler, nicht-ergodischer Systeme zu beschreiben. Genau dies leistet die Brody-Verteilung¹⁸. Sie ist der Versuch, den Übergang von klassisch integrablen zu klassisch ergodischen Quantensystemen durch eine systemunabhängige Eigenschaft des diskreten Spektrums zu charakterisieren. Der Exponent q der bedingten Pseudodichte soll auf universelle Weise den Grad der Irregularität des klassisch analogen Systems ausdrücken:

$$P_{\text{bro}}(q, x) := \alpha (q+1) x^q \exp\left(-\alpha x^{q+1}\right), \quad \alpha := \left[\Gamma\left(\frac{q+2}{q+1}\right)\right]^{q+1} \quad (2.14)$$

Obwohl Brody 1973 seine Verteilungsfamilie auf rein empirischem Wege gewonnen hatte, wissen wir heute, daß sie eine normierte und entfaltete spezielle Lösung von (2.11) darstellt:

$$\mu(x) \sim x^q \quad \Rightarrow \quad P(x) = P_{\text{bro}}(q, x). \quad (2.15)$$

Neben der Brody-Verteilung gibt es im wesentlichen zwei weitere Ansätze, die ebenfalls den Anspruch erheben, die Poisson-Verteilung in die Wigner-Verteilung stetig zu überführen. Berry und Robnik¹⁹ gehen bei ihrem semiklassischen Ansatz davon aus, daß das Spektrum eine unabhängige Überlagerung eines regulären und eines irregulären Anteiles ist. Der Parameter der *Berry-Robnik-Verteilung* drückt das Verhältnis der Liouville-Maße des einen (integrablen) und des anderen (ergodischen) Bereiches im Phasenraum aus. Aufgrund der semiklassischen Annahmen stimmt diese Verteilung allerdings im (besonders interessanten) Bereich kleiner Energie-Abstände nicht mit der Empirie überein.

Hasegawa schlägt eine zweiparametrische Verteilung²⁰ zur Beschreibung des Überganges vor. Sie geht von einer stochastischen Differentialgleichung für den Abstand benachbarter Energieniveaus in einer „fiktiven Zeitkoordinate“ aus, die die lineare Überlagerung zweier Rauschkkräfte beschreibt. Jede Rauschkraft für sich betrachtet, ergibt in stationärer (also insbesondere zeitunabhängiger) Lösung eine Poisson- bzw. Wigner-Statistik. Der Überlagerungsparameter der Rauschkkräfte in der *Hasegawa-Verteilung* entspricht analog dem Parameter in der Berry-Robnik- bzw. der Brody-Verteilung. Zusätzlich kommt allerdings noch ein weiterer Parameter hinzu, der die mittleren Abstände der *einzelnen* Rauschkomponenten berücksichtigt. Die Ableitung der Verteilung wird von Hasegawa entweder ad hoc durchgeführt²¹ oder ausgehend von der sogenannten Niveau-Dynamik²² mit Hilfe einer Transformation der „dynamischen Gleichungen“ in eine stochastische Differentialgleichung²³. Die Hasegawa-Verteilung

¹⁸Siehe [7].

¹⁹Siehe [5].

²⁰Siehe [11].

²¹So in [11]. Es ist bemerkenswert, daß dort die Integralgleichung (2.9) den Ausgangspunkt bildet.

²²Zur Niveau-Dynamik im allgemeinen siehe [10].

²³Gemeint ist [12].

zeigt wie die Brody-Verteilung eine gute Übereinstimmung mit der Empirie – muß aber auf einen zweiten Parameter zurückgreifen und einige Adhoc-Annahmen machen.

2.5 Abstandsverteilung des k-ten Nachbarn

2.5.1 Allgemeine Eigenschaften

Es stellt sich nun die Frage, ob und inwieweit eine Verallgemeinerung der Nachbarn-Statistik des nächsten Nachbarn auf höhere Ordnungen, d. h. auf Verteilungen, die den übernächsten und weitere Nachbarn erfassen, möglich ist. Wie oben bereits erwähnt wurde, gibt es semiklassische Argumente dafür, daß besonders *lokale* Eigenschaften wie die Nächste-Nachbarn-Statistik universell sind. Eine *Nachbarn-Statistik k-ter Ordnung* beschreibt die Abstandswahrscheinlichkeit eines Niveaus zu einem gegebenen Eigenwert im Ursprung, wenn dazwischen noch weitere k Niveaus zu finden sind. Mit steigender Ordnung $k \in \mathbb{N}$ nimmt also die Lokalität ab. Die *Abstandsverteilung k-ter Ordnung* $P_k(x) dx$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Intervall $[0, x]$ mit einem Eigenwert am Anfang ($x_0 = 0$) genau k Niveaus im Inneren $]0, x[$ enthält und sich ein weiteres Niveau (nämlich x_{k+1}) im infinitesimalen Intervall $[x, x + dx]$ befindet. Diese Definition ist ganz analog zu derjenigen von $P(x)$. Insbesondere gilt natürlich $P(x) = P_0(x)$. Entsprechend kann eine *Umgebungswahrscheinlichkeit k-ter Ordnung* $F_k(x)$ definiert werden: $F_k(x)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß $]0, x[$ k Niveaus (x_1, \dots, x_k) enthält, wenn am Intervallanfang das nullte Niveau $x_0 = 0$ liegt. Die dritte Funktion, die in diesem Zusammenhang von Bedeutung ist (uns aber nur am Rande interessiert), ist die *Lückenwahrscheinlichkeit k-ter Ordnung* $E_k(x)$, welche einfach die Wahrscheinlichkeit ausdrückt, daß ein beliebiges – nicht notwendigerweise bei einem Eigenwert beginnendes – Intervall k Niveaus enthält.

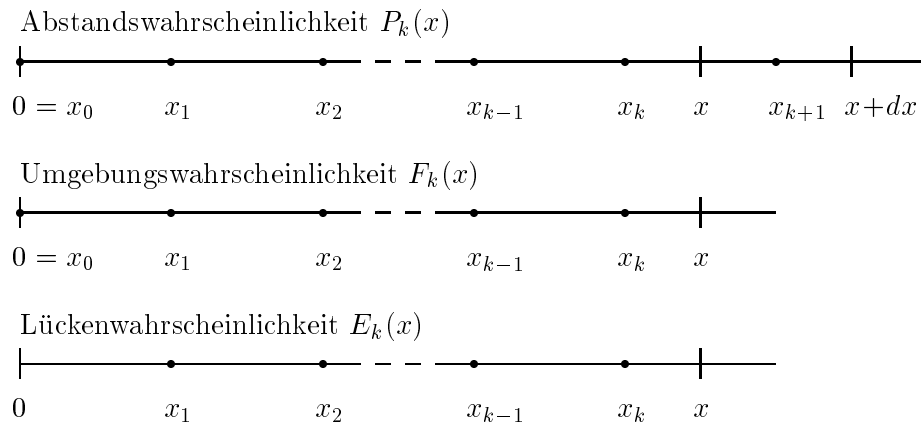


Abbildung 2.2: Vergleich von $P_k(x)$, $F_k(x)$ und $E_k(x)$

Nur $P_k(x)$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte; $F_k(x)$ und $E_k(x)$ hingegen sind die Wahrscheinlichkeiten von Aussagen, welche x als Parameter enthalten²⁴ – was natürlich ein großer Unterschied ist. Es sind nun einige analytische Forderungen an $P_k(x)$, $F_k(x)$ und $E_k(x)$ zu stellen, damit sie den wahrscheinlichkeitslogischen Ansprüchen genügen können²⁵. Zunächst einmal sollten alle Wahrscheinlichkeiten im Unendlichen verschwinden:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} P_k(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} F_k(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} E_k(x) = 0 \quad \forall k \in \mathbb{N}. \quad (2.16)$$

Die drei Funktionen sind nicht unabhängig voneinander, sondern gehen durch Integration auseinander hervor:

$$F_k(x) = \int_x^\infty [P_k(y) - P_{k-1}(y)] dy \quad \forall k \in \mathbb{N}, \quad (2.17)$$

$$E_k(x) = \int_x^\infty [F_k(y) - F_{k-1}(y)] dy \quad \forall k \in \mathbb{N}, \quad (2.18)$$

wobei $P_{-1}(x) := 0$ und $F_{-1}(x) := 0$ vereinbart sein soll. Durch Differentiation ergeben sich dann die dazu äquivalenten Gleichungen

$$P_k(x) = -\frac{d}{dx} \left(\sum_{i=0}^k F_k(x) \right), \quad F_k(x) = -\frac{d}{dx} \left(\sum_{i=0}^k E_k(x) \right). \quad (2.19)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $P_k(x)$ muß wie $P(x)$ normiert und entfaltet sein. Die Verallgemeinerung auf höhere Ordnungen von (2.4) und (2.5) haben die Gestalt

$$\int_0^\infty P_k(x) dx = 1 \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (2.20)$$

$$\int_0^\infty x P_k(x) dx = k + 1 \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (2.21)$$

Weil $F_k(x)$ und $E_k(x)$ Wahrscheinlichkeiten darstellen, müssen die diskreten Normierungsbedingungen

$$\sum_{k=0}^\infty F_k(x) = \sum_{k=0}^\infty E_k(x) = 1 \quad \forall x \in \mathbb{R}^+ \quad (2.22)$$

gefordert werden: Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß in der rechten Umgebung eines Niveaus ($F_k(x)$) bzw. in einer Lücke ($E_k(x)$) irgendeine Anzahl $k \in \mathbb{N}$ von Eigenwerten ist, soll gleich 1 sein.

2.5.2 Verallgemeinerte Poisson-Verteilung

Die *Poisson-Verteilung k-ter Ordnung* ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Abstände voneinander unabhängig verteilter Niveaus. Eine einfache Rechnung führt auf

$$P_{\text{poi},k}(x) := \frac{1}{k!} x^k \exp(-x). \quad (2.23)$$

²⁴Siehe Abb. 2.2.

²⁵Siehe dazu z. B. [16], Kap. 5.1 oder [11], Kap. IV.1.

Diese Verteilungsfamilie ist entfaltet (2.21) und normiert (2.20). Die Umgebungs- und Lückenwahrscheinlichkeit haben in diesem elementaren Fall exakt dieselbe Form. Für $k = 0$ gilt insbesondere $P_{\text{poi},0}(x) = P_{\text{poi}}(x) = \exp(-x)$.

Auf Hasegawa geht der Vorschlag zurück²⁶, die Nachbarn-Statistik k -ter Ordnung durch eine *verallgemeinerte Poisson-Verteilung* zu beschreiben. Die Verallgemeinerung gegenüber der gewöhnlichen Poisson-Verteilung besteht darin, daß die Variable x durch ein Integral $f(x) := \int_0^x m(y) dy$ ersetzt wird, das für $m(x) = 1$ wieder in x übergeht. Die verallgemeinerte Poisson-Verteilung erfüllt alle wahrscheinlichkeitslogisch notwendigen Bedingungen, welche a priori zu stellen sind und ist – nach Konstruktion – für $m(x) = 1$ identisch mit der gewöhnlichen Poisson-Verteilung (2.23):

$$P_{\text{vpoi},k}(x) := \frac{r_k m(r_k x)}{k!} f(r_k x)^k \exp(-f(r_k x)) \quad (2.24)$$

mit $f(x) = \int_0^x m(y) dy$.

Die Entfaltung wird durch eine geeignete Wahl der Konstanten r_k erreicht, die sich unmittelbar aus (2.21) durch die Substitution $\xi := r_k x$ ergibt:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x \frac{r_k m(r_k x)}{k!} f(r_k x)^k \exp(-f(r_k x)) dx &= k + 1, \\ \int_0^\infty \xi \frac{m(\xi)}{k!} f(\xi)^k \exp(-f(\xi)) d\xi &= (k + 1) r_k. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Also ist

$$r_k = \frac{1}{(k + 1)!} \int_0^\infty x m(x) f(x)^k \exp(-f(x)) dx. \quad (2.26)$$

Die Wahl der Funktion $m(x)$, die entscheidend das Aussehen der Verteilung bestimmt, ist zunächst nicht festgelegt. Hasegawa hat selbst den „Yukawa-Gewichtsfaktor“

$$m(x) = \frac{|x|}{\sqrt{\lambda^2 + x^2}} \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{R}^+ \quad (2.27)$$

vorgeschlagen, der für $\lambda \rightarrow 0$ in $m(x) = 1$ und für $\lambda \rightarrow \infty$ asymptotisch in $m(x) \sim x$ übergeht. In nullter Ordnung erhält man somit eine Funktion, welche die Poisson-Verteilung ($\lambda = 0$) stetig in die Wigner-Verteilung ($\lambda \rightarrow \infty$) überführt.

Es ist bemerkenswert, daß die verallgemeinerte Poisson-Verteilung in nullter Ordnung gerade die Lösung der Integralgleichung (2.9) ist, wenn für die bedingte Pseudodichte $\mu(x)$ der Gewichtsfaktor $r_0 m(r_0 x)$ eingesetzt wird. Die Verteilung in nullter Ordnung lautet

$$P_{\text{vpoi},0}(y) = r_0 m(r_0 y) \exp(-f(r_0 y)). \quad (2.28)$$

²⁶Siehe [18]. Wie oben bereits gesagt wurde, ist dieser allerdings nie von ihm selbst veröffentlicht worden.

Eine einfache Integration liefert dann

$$\begin{aligned}
\int_x^\infty P_{\text{vpoi},0}(y) dy &= 1 - \int_0^x P_{\text{vpoi},0}(y) dy \\
&= 1 + \exp(-f(y)) \Big|_0^{r_0 x} \\
&= 1 + \exp(-f(r_0 x)) - 1 \\
&= \frac{P_{\text{vpoi},0}(x)}{r_0 m(r_0 x)}. \tag{2.29}
\end{aligned}$$

Die Gleichung (2.29) ist identisch mit der Integralgleichung (2.9), wenn

$$\mu(x) = r_0 m(r_0 x) \tag{2.30}$$

gewählt wird. Weil nun aber (2.9) mit dem naheliegenden Ansatz $\mu(x) \sim x$ zur Brody-Verteilung (2.14) führt, ist die verallgemeinerte Poisson-Verteilung mit dem „Brody-Gewichtsfaktor“

$$m(x) = r_k (r_k)^q \quad \text{mit} \quad \lambda \in \mathbb{R}^+ \tag{2.31}$$

eine interessante Verallgemeinerung der Brody-Verteilung auf beliebige Ordnungen $k \in \mathbb{N}$. Wird in (2.9) jedoch der Yukawa-Gewichtsfaktor (2.27) eingesetzt, so erhält man eine Verteilung, die schon in nullter Ordnung sehr viel weniger mit numerisch-empirischen Daten übereinstimmt als die Brody-Verteilung²⁷.

Nach dem oben Gesagten ist eine Zurückführung der verallgemeinerten Poisson-Verteilung auf einfachere Adhoc-Prinzipien nur in nullter Ordnung mit Hilfe der bedingten Pseudodichte und der Grundgleichung (2.9) möglich. Das Ziel dieser Arbeit wird es nun sein, die Grundgleichung (2.9) auf eine entsprechende Integralgleichung k-ter Ordnungen zu verallgemeinern. Deren Lösung sollte Hasegawas verallgemeinerte Poisson-Verteilung enthalten, falls diese eine adäquate Darstellung der Nachbarn-Statistik k-ter Ordnung bei gegebener bedingter Pseudodichte ist. Ganz analog zu den (exakten) höheren Poisson-Verteilungen wird eine solche Gleichung die „höheren Wigner-Verteilungen“ beschreiben, welche gewissermaßen die ergodischen Gegenstücke zum integrierbaren Fall bilden. Die Wigner-Verteilung ist deshalb so interessant, weil die meisten empirischen Untersuchungen gezeigt haben, daß klassisch ergodische Quantensysteme einen besonders hohen Grad an Universalität in der Nachbarn-Statistik aufweisen.

²⁷ In [13] haben Hönig und Wintgen diese Verteilung mit dem diskreten Spektrum des Wasserstoffatoms im starken homogenen Magnetfeld verglichen. Die Ergebnisse waren im Vergleich zur Brody-Verteilung so schlecht, daß sie nicht weiter berücksichtigt wurden. Die höheren Ordnungen der verallgemeinerten Poisson-Verteilung mit Yukawa-Gewichtsfaktor wurden in [18] untersucht – mit ähnlichen Resultaten.

Kapitel 3

Formulierung der Nachbarn-Statistik höherer Ordnung

3.1 Ableitung aus der gemeinsamen Dichte

Die Nachbarnstatistik k -ter Ordnung läßt sich mathematisch aus der Verbundwahrscheinlichkeitsdichte der einzelnen Eigenwerte durch Integration gewinnen. Sei dazu eine Folge $(x_i)_{i=1,\dots,n}$ auf \mathbb{R}^+ gegeben. Die gemeinsame Dichte¹ aller n Zahlen sei $p_n(x_1, \dots, x_n)$. Dann ist

$$A_k(x, x_1, \dots, x_k) = \binom{n}{k} \int_x^\infty \cdots \int_x^\infty p_n(x_1, \dots, x_n) dx_{k+1} \cdots dx_n \quad (3.1)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, daß k der insgesamt n Zahlen ($k \leq n$) in dem Intervall $[0, x]$ an den Stellen $(x_i)_{i=1,\dots,k}$ liegen. Um ein Modell nicht endlich vieler, sondern unendlich vieler Zahlen zu formulieren, muß der Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ durchgeführt werden. Dazu ist eine Skalentransformation aller Zufallsvariablen $x_i \mapsto \alpha_n x_i$ notwendig. Der Faktor² α_n bewirkt eine von n abhängige „Vergrößerung“ der Skala, so daß sich im Grenzübergang ein mittlerer Abstand von 1 einstellen kann:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_n = 0. \quad (3.2)$$

Für die skalentransformierte Wahrscheinlichkeitsdichte kann nun der Grenzübergang durchgeführt werden:

$$B_k(x, x_1, \dots, x_k) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\alpha_n)^k A_k(\alpha_n x, \alpha_n x_1, \dots, \alpha_n x_k). \quad (3.3)$$

$B_k(x, x_1, \dots, x_k)$ ist also die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, daß von unendlich vielen nicht negativen reellen Zahlen k Stück an den Stellen (x_i) im Intervall $[0, x]$ liegen. Wenn nun aber die genauen Positionen nicht relevant sind, können

¹Die Funktion wird auch Verbunddichte oder n -Punkt-Dichte genannt.

²Auf die genaue Form wird hier verzichtet. In der GOE-Theorie ist z. B. $\alpha_n \sim 1/\sqrt{n}$; siehe dazu [16].

diese durch Integration über $[0, x]$ eliminiert werden. Man erhält so die weiter oben bereits definierte Lückenwahrscheinlichkeit $E_k(x)$ ³:

$$E_k(x) = \int_0^x \cdots \int_0^x B_k(x, x_1, \dots, x_k) dx_1 \cdots dx_k \quad (3.4)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, daß im Intervall $[0, x]$ an *irgendeiner* Stelle k Zahlen liegen. Falls die Zahlenfolge homogen ist, kann die Aussage verallgemeinert werden auf Intervalle $[x_0, x_0 + x]$, die nicht bei 0, sondern an einer beliebigen Stelle $x_0 \geq 0$ beginnen. Analog ist die Umgebungswahrscheinlichkeit $F_k(x)$ ⁴ definiert:

$$F_k(x) = C_k \int_0^x \cdots \int_0^x B_{k+1}(x, 0, x_2, \dots, x_{k+1}) dx_2 \cdots dx_{k+1} \\ \text{mit } C_k = (k+1). \quad (3.5)$$

Hier wird also $x_1 = 0$ in $B_{k+1}(x, x_1, x_2, \dots, x_{k+1})$ festgelegt und über die restlichen k Variablen x_2, \dots, x_{k+1} integriert. Die Wahrscheinlichkeit bezieht sich demnach auf ein Unter-Ensemble von Zufallsfolgen $(x_i)_{i=1, \dots, k+1}$ mit $x_j = 0$ für ein $j \in \{1, \dots, k+1\}$. Dabei berücksichtigt der Faktor C_k die kombinatorischen Möglichkeiten, ein x_j auszuwählen. Zur Abstandsverteilung $P_k(x)$ ⁵ gelangt man schließlich, indem zwei der $k+2$ Werte (0 und x) festgelegt werden und über die anderen k Variablen aus $[0, x]$ integriert wird:

$$P_k(x) = \tilde{C}_k \int_0^x \cdots \int_0^x B_{k+2}(x, 0, x, x_3, \dots, x_{k+2}) dx_3 \cdots dx_{k+2} \\ \text{mit } \tilde{C}_k = (k+1)(k+2). \quad (3.6)$$

3.2 Bedingte Pseudodichte

Die in Gleichung (2.9) definierte Funktion $\mu(x)$ soll nun auf höhere Ordnungen verallgemeinert werden. $\mu(x) dx$ ist ja die Wahrscheinlichkeit dafür, daß an der Stelle x ein Niveau liegt unter der Bedingung, daß bei $x = 0$ ebenfalls eines liegt *und* dazwischen kein weiteres. Die wichtige Grundgleichung (2.9) ist – so gesehen – die Definition der bedingten Pseudodichte $\mu(x)$ für den nächsten Nachbarn. In der Literatur wird sie oft als „bedingte Dichte“ bezeichnet. In der Mathematik versteht man aber unter einer bedingten Dichte⁶ eine Funktion, die insbesondere normiert ist – was für $\mu(x)$ sicher nicht zutrifft.

Die bedingte Pseudodichte $\mu(x)$ kann mit Hilfe der in Kap. (3.1) definierten Funktion $B_k(x, x_1, \dots, x_k)$ geschrieben werden als

$$\mu(x) = \frac{P(x)}{F(x)} = \frac{B_2(x, 0, x)}{B_1(x, 0)}. \quad (3.7)$$

Es gibt zwar ein gewisse Ähnlichkeit mit der Relation (C.8), aber der entscheidende Unterschied liegt im Zähler von (3.7). Dort steht die freie Variable

³Siehe S. 13.

⁴Siehe S. 13.

⁵Siehe S. 13.

⁶Siehe Anhang C, insbesondere Gleichung (C.10).

x als erstes *und* drittes Argument; in (C.8) dagegen sind die beiden Argumente der gemeinsamen Dichte unabhängig. Das heißt: x bestimmt sowohl die Verbundaussage als auch die bedingende Aussage vollständig, was in einer bedingten Dichte nicht der Fall ist. Darum gilt eine zu (C.10) analoge Aussage $\int \mu(x) dx = 1$ nicht!

In k -ter Ordnung läßt sich ganz analog die bedingte Pseudodichte $\mu_k(x)$ definieren als

$$\mu_k(x) := \frac{P_k(x)}{F_k(x)}, \quad (3.8)$$

wobei die Funktionen $P_k(x)$ und $F_k(x)$ wieder gemäß (3.6) bzw. (3.5) auf die gemeinsame Dichte zurückgeführt werden können. Es ist $\mu_k(x) dx$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Niveau in $[x, x + dx]$ liegt, unter der Bedingung, daß bei $x = 0$ ebenfalls ein Niveau ist und sich im Innern $]0, x[$ des Intervalls genau k Stück befinden.

3.3 Integralgleichung der Nachbarn-Statistik

Mit Hilfe der bedingten Pseudodichte k -ter Ordnung ist es nun möglich, die Aussage der Gleichung (2.9) für alle Ordnungen $k \in \mathbb{N}$ zu formulieren. Wenn $F_k(x)$ die Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß sich *genau* k Niveaus im Intervall $]0, x[$ befinden, dann stellt der Ausdruck $\sum_{i=0}^k F_i(x)$ die Wahrscheinlichkeit dafür dar⁷, daß k , $k - 1$ oder weniger Eigenwerte in $]0, x[$ sind. Dieser Sachverhalt ist aber gleichbedeutend mit der Aussage, daß das $(k+1)$ -te Niveau irgendwo außerhalb des Intervalls, also in $[x, \infty[$ liegt. Dabei sei wieder vorausgesetzt, daß ein Niveau bei $x = 0$ liegt. Es ergibt sich so unmittelbar die Relation

$$\sum_{i=0}^k F_i(x) = \int_x^\infty P_k(y) dy. \quad (3.9)$$

Mit der Definition der bedingten Pseudodichte (3.8) erhält man daraus – die an dieser Stelle zum ersten Mal formulierte – Verallgemeinerung der Grundgleichung (2.9) für höhere Ordnungen:

$$\boxed{\sum_{i=0}^k \frac{P_i(x)}{\mu_i(x)} = \int_x^\infty P_k(y) dy \quad \forall k \in \mathbb{N}.} \quad (3.10)$$

(3.10) ist eine Integralgleichung für die Abstandsverteilung $P_k(x)$ bei vorgegebener bedingter Pseudodichte $\mu_k(x)$. In die Gleichung k -ter Ordnung gehen – wie auch zu erwarten war – alle Lösungen niedrigerer Ordnungen ($k - 1$, usw.) ein. Für $k = 0$ reduziert sie sich auf

$$\frac{P_0(x)}{\mu_0(x)} = \int_x^\infty P_0(y) dy, \quad (3.11)$$

⁷Sei (Ω, \mathcal{A}, P) ein W -Raum (siehe Anhang B). Für zwei disjunktive Ereignisse $A, B \in \mathcal{A}$ ($A \cap B = \emptyset$) gilt die Summenformel $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$.

was identisch ist mit der Gleichung (2.9).

Die Relation (2.17), die den allgemeinen Zusammenhang zwischen $P_k(x)$ und $F_k(x)$ formuliert, ist äquivalent zu (3.10). Eine Ausführung der Iteration von (2.17) ergibt unmittelbar

$$\begin{aligned}
\int_x^\infty P_k(x) dx &= \frac{P_k(x)}{\mu_k(x)} + \int_x^\infty P_{k-1}(y) dy & (3.12) \\
&= \frac{P_k(x)}{\mu_k(x)} + \frac{P_{k-1}(x)}{\mu_{k-1}(x)} + \int_x^\infty P_{k-2}(y) dy \\
&= \frac{P_k(x)}{\mu_k(x)} + \frac{P_{k-1}(x)}{\mu_{k-1}(x)} + \dots + \frac{P_1(x)}{\mu_1(x)} + \int_x^\infty P_0(y) dy \\
&= \frac{P_k(x)}{\mu_k(x)} + \frac{P_{k-1}(x)}{\mu_{k-1}(x)} + \dots + \frac{P_1(x)}{\mu_1(x)} + \frac{P_0(x)}{\mu_0(x)}.
\end{aligned}$$

Es ist also

$$\frac{P_k(x)}{\mu_k(x)} = \int_x^\infty P_k(y) dy - \int_x^\infty P_{k-1}(y) dy \quad (3.13)$$

die „offenen Fassung“ der geschlossenen Integralgleichung (3.10). Letztere ist natürlich nur dann von Nutzen, wenn mit Hilfe geeigneter Ansätze die bedingte Pseudodichte $\mu_k(x)$ vorgegeben wird. Eine solche Adhoc-Vorgabe ist aber für die Statistik des nächsten Nachbarn erfolgreich durchgeführt worden. Mit ihr gelangt man zur Wigner-, Exponential- bzw. Brody-Verteilung.

Die Gleichung (3.10) bildet den Kern dieser Arbeit. Alles Weitere wird hieraus abgeleitet werden. Zu ihrer Formulierung war es notwendig, die zentrale Bedeutung der bedingten Pseudodichte zu verstehen. Im folgenden wird es darum gehen, die allgemeinste Lösung von (3.10) zu berechnen, welche allen wahrscheinlichkeitslogischen Anforderungen einer höheren Nachbarn-Statistik genügt. Doch zunächst ist eine weitere Umformung notwendig.

3.4 Differentialgleichung der Nachbarn-Statistik

Die Integralgleichung (3.13) für $P_k(x)$ kann auf einfache Weise in eine lineare Differentialgleichung umgewandelt werden. Für die erste Ableitung der k-ten Abstandsverteilung gilt:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx} P_k(x) &= \frac{d}{dx} \left[\mu_k(x) \int_x^\infty P_k(y) dy - \mu_k(x) \int_x^\infty P_{k-1}(y) dy \right] \\
&= \mu'_k(x) \int_x^\infty P_k(y) dy + \mu_k(x) [P_k(y)] \Big|_x^\infty \\
&\quad - \mu'_k(x) \int_x^\infty P_{k-1}(y) dy - \mu_k(x) [P_{k-1}(y)] \Big|_x^\infty & (3.14)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \mu'_k(x) \left(\frac{P_k(x)}{\mu_k(x)} + \int_x^\infty P_{k-1}(y) dy \right) - \mu_k(x) P_k(x) \\
&\quad - \mu'_k(x) \int_x^\infty P_{k-1}(y) dy + \mu_k(x) P_{k-1}(x) & (3.15)
\end{aligned}$$

$$= \frac{\mu'_k(x)}{\mu_k(x)} P_k(x) - \mu_k(x) P_k(x) + \mu_k(x) P_{k-1}(x). \quad (3.16)$$

Dabei sei $\mu'(x)$ die erste Ableitung von $\mu(x)$. In (3.14) wurde nach (2.16) vorausgesetzt, daß $P_k(x)$ im Unendlichen verschwindet. Zum zweiten Schritt (3.15) gelangt man durch Einsetzen der Gleichung (3.13), so daß schließlich die Terme mit $\int_x^\infty P_{k-1}(y) dy$ wegfallen. Die letzte Gleichung (3.16) ist eine lineare, inhomogene Differentialgleichung erster Ordnung:

$$\boxed{\frac{d}{dx}P_k(x) = \left[\frac{\mu'_k(x)}{\mu_k(x)} - \mu_k(x) \right] P_k(x) + \mu_k(x) P_{k-1}(x) \quad \forall k \in \mathbb{N}.} \quad (3.17)$$

Die Inhomogenität (der Ordnung k) enthält dabei gerade die Abstandsverteilung der Ordnung $k - 1$. Für $k = 0$ sei wieder $P_{-1}(x) = 0$ vereinbart, so daß (3.17) in

$$\frac{d}{dx}P_0(x) = \left[\frac{\mu'_0(x)}{\mu_0(x)} - \mu_0(x) \right] P_0(x) \quad (3.18)$$

übergeht. In nullter Ordnung ist (3.17) also wieder identisch mit der homogenen Differentialgleichung (2.10), deren Lösung für $\mu(x) \sim x^q$ gerade die Brody-Verteilung (bzw. für $q = 0$ die Poisson-Verteilung und für $q = 1$ die Wigner-Verteilung) ist.

Die Nachbarn-Statistik höherer Ordnung unterscheidet sich also von derjenigen nullter Ordnung durch einen zusätzlichen (inhomogenen) Term. Dieser verbindet die verschiedenen Ordnungen untereinander. Eine konsistente Nachbarn-Statistik bis zur Ordnung k beginnt also mit der Lösung nullter Ordnung, die dann als Inhomogenität in die Gleichung für die erste Ordnung eingeht. Die Lösung erster Ordnung bestimmt ihrerseits wieder die Gleichung für die zweite Ordnung, usw. Für jede Ordnung k ist die bedingte Pseudodichte $\mu_k(x)$ geeignet zu wählen.

3.5 Allgemeine Lösung

3.5.1 Nullte Ordnung

Sei per definitionem

$$L_k(x) := \frac{\mu'_k(x)}{\mu_k(x)} - \mu_k(x) \quad (3.19)$$

der lineare Teil der Gleichung. Die Differentialgleichung für $k = 0$

$$\frac{d}{dx}P_0(x) = L_0(x) P_0(x) \quad (3.20)$$

kann durch Trennung der Variablen⁸ gelöst werden. Sie nimmt dann die Form

$$P_0(x) = K_a \exp\left(\int_a^x L_0(y) dy\right) \quad \text{mit} \quad K_a := P_0(a) \quad (3.21)$$

⁸Siehe Anhang D.

an, wobei der Punkt $a \in \mathbb{R}^+$ noch geeignet zu wählen ist. Durchführung der Integration führt auf

$$\begin{aligned} \exp\left(\int_a^x L_0(y) dy\right) &= \exp\left(\int_a^x \frac{\mu_0'(y)}{\mu_0(y)} - \mu_0(y) dy\right) \\ &= \frac{\mu_0(x)}{\mu_0(a)} \exp\left(-\int_a^x \mu_0(y) dy\right). \end{aligned} \quad (3.22)$$

In der allgemeinen Lösung für die nullte Ordnung

$$P_0(x) = \frac{c_0}{\mu_0(a)} \mu_0(x) \exp\left(-\int_a^x \mu_0(y) dy\right) \quad (3.23)$$

muß der Punkt a festgelegt werden. Man wählt hier $a = 0$, weil $P_0(0)$ als bekannt angesehen werden kann. Denn für ein Poisson-Spektrum ist $P_0(0) = 1$ und sonst gilt $P_0(0) = 0$. Die eindimensionale Lösungsschar wird von der Konstanten c_0 aufgespannt. Weil nun aber

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{K_a}{\mu_0(a)} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{P_0(a)}{\mu_0(a)} = \text{const} =: c_0 \quad (3.24)$$

in jedem Falle gilt, kann die Abstandsverteilung nullter Ordnung geschrieben werden als

$$P_0(x) = c_0 \mu_0(x) \exp\left(-\int_0^x \mu_0(y) dy\right). \quad (3.25)$$

Die Konstante c_0 wird später durch die Normierung noch festgelegt. In (3.24) wurde die asymptotische Gleichheit (bis auf eine Konstante) von $\mu_0(x)$ und $P_0(x)$ für $x \rightarrow 0$ vorausgesetzt. Die bedingte Pseudodichte muß integrierbar sein, so daß

$$\varphi_0(x) := \int_0^x \mu_0(y) dy \quad (3.26)$$

wohldefiniert ist.

3.5.2 Höhere Ordnungen

Für $k > 0$ kommt zur homogenen Gleichung ein zweiter Term hinzu, der den Zusammenhang zwischen den Ordnungen gewährleistet:

$$\frac{d}{dx} P_k(x) = L_k(x) P_k(x) + \mu_k(x) P_{k-1}(x). \quad (3.27)$$

Aufgrund der affin-linearen Struktur der Gleichung besteht die allgemeine Lösung von (3.27) aus Summe der allgemeinen Lösung der homogenen Gleichung, welche die gleiche Gestalt hat wie die Lösung nullter Ordnung (3.25) und einer partikulären Lösung der vollen inhomogenen Gleichung. Die partikuläre Lösung wird durch Variation der Konstanten⁹ aus der allgemeinen Lösung der homogenen Gleichung gewonnen. Sei wieder

$$\varphi_k(x) := \int_0^x \mu_k(y) dy \quad (3.28)$$

⁹Siehe Anhang D.

für $k > 0$ definiert. Damit hat die allgemeine Lösung von (3.27) die Gestalt

$$P_k(x) = c_k \mu_k(x) \exp(-\varphi_k(x)) + \int_0^x \mu_k(y) P_{k-1}(y) \exp\left(\int_y^x L_k(z) dz\right) dy. \quad (3.29)$$

Weil nun aber wie in (3.22)

$$\exp\left(\int_y^x L_k(z) dz\right) = \frac{\mu_k(x)}{\mu_k(y)} \exp\left(-\int_y^x \mu_k(z) dz\right) \quad (3.30)$$

gilt und wegen der Additivität der Integration die Umformung

$$\begin{aligned} -\int_y^x \mu_k(z) dz &= -\int_0^x \mu_k(z) dz + \int_0^y \mu_k(z) dz \\ &= -\varphi_k(x) + \varphi_k(y) \end{aligned} \quad (3.31)$$

möglich ist, nimmt die allgemeine Lösung der inhomogenen Gleichung in k -ter Ordnung die einfache Form

$$P_k(x) = \mu_k(x) \exp(-\varphi_k(x)) \left[c_k + \int_0^x P_{k-1}(y) \exp(\varphi_k(y)) dy \right] \quad (3.32)$$

an. Mit der Vereinbarung $P_{-1}(x) = 0$ kann (3.32) auch auf $k = 0$ erweitert werden, weil dann der inhomogene Term in (3.27) verschwindet.

3.6 Normierung

Jede Abstandsverteilung k -ter Ordnung, die der Grundgleichung (3.10) mit gegebener bedingter Pseudodichte $\mu_k(x)$ genügt, sollte die Form (3.32) haben. Die Normierungsbedingungen (2.20) für jede Ordnung k erlauben es nun, die Konstanten c_k festzulegen.

Die nullte Ordnung kann direkt abgehandelt werden. Es ist

$$\int_0^\infty \mu_0(x) \exp(-\varphi_0(x)) dx = \exp(-y) \Big|_0^\infty = 1 \quad (3.33)$$

für alle integrierbaren Funktionen $\mu_0(x)$ mit uneigentlich gegen Unendlich¹⁰ konvergierendem Integral

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \varphi_0(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \int_0^x \mu_0(x) dx = \infty. \quad (3.34)$$

Also ist hier

$$c_0 = 1 \quad (3.35)$$

zu wählen. Für $k > 0$ kann die Relation (3.9) herangezogen werden. Diese sollte insbesondere an der Stelle $x = 0$ erfüllt werden, weshalb

$$\sum_{i=0}^k F_i(0) = \int_0^\infty P_k(y) dy = 1 \quad (3.36)$$

¹⁰Man kann also sagen, daß die bedingte Pseudodichte nicht nur nicht normiert ist (wie jede bedingte Dichte), sondern das Gegenteil muß sogar *gefordert* werden!

zu fordern ist. Die Umgebungswahrscheinlichkeit $F_k(x)$ ist nun aber per definitionem bis auf den Faktor $\mu_k(x)$ identisch mit der Abstandsverteilung $P_k(x)$:

$$F_k(x) = \exp(-\varphi_k(x)) \left[c_k + \int_0^x P_{k-1}(y) \exp(\varphi_k(y)) dy \right]. \quad (3.37)$$

Im Nullpunkt ist also gerade

$$F_k(0) = c_k \quad \forall k > 0, \quad (3.38)$$

so daß die Normierungsbedingung (2.20) die spezielle Form

$$\sum_{i=0}^k c_i = 1 \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (3.39)$$

annimmt. Aus Gleichung (3.38) folgt aber auch, daß die Konstanten c_k nicht negativ sein können, weil andernfalls aufgrund der angenommenen Stetigkeit von $F_k(x)$ eine Zahl $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ existieren würde mit $F_k(\varepsilon) < 0$. Dies widerspräche aber der Interpretation von $F_k(x)$ als *Umgebungswahrscheinlichkeit*. Weil nun $c_0 = 1$ ist und $c_k \geq 0$ für alle $k > 0$ gefordert werden muß, ist die Normierungsbedingung (3.39) nur zu erfüllen, falls

$$c_k = 0 \quad \forall k > 0 \quad (3.40)$$

angenommen wird. Nur mit dieser speziellen Wahl der Konstanten $c_k = \delta_{0k}$ ergibt sich für jede Ordnung k eine wohldefinierte Abstandsverteilung, die bei gegebener bedingter Pseudodichte $\mu_k(x)$ genau festliegt. Diese Verteilungsfamilie soll im folgenden einfach $P_k(x)$ genannt werden, denn alle Überlegungen wurden ohne Beschränkungen der Allgemeinheit¹¹ gemacht. Mit der bereits bekannten nullten Ordnung

$$P_0(x) = \mu_0(x) \exp(-\varphi_0(x)) \quad (3.41)$$

erhält man nun für $k > 0$ die allgemeine, normierte Form einer Abstandsverteilung bei gegebener bedingter Pseudodichte

$$P_k(x) = \mu_k(x) \exp(-\varphi_k(x)) \int_0^x P_{k-1}(y) \exp(\varphi_k(y)) dy. \quad (3.42)$$

Die nullte Ordnung (3.41) ist natürlich wieder identisch mit (2.11), denn für $k = 0$ geht (3.10) in (2.9) über. Für $k > 0$ sind die Verteilungen $P_k(x)$ bei gegebener bedingter Pseudodichte die adäquaten Pendanten höherer Ordnung unter Berücksichtigung der niedrigeren Ordnungen; denn in (3.42) wird $P_{k-1}(y)$ (also die nächstniedrigere Ordnung) integriert.

¹¹Eine ganz andere Frage ist sicherlich, ob es sinnvoll ist, von der bedingten Pseudodichte auszugehen.

3.7 Spezialfälle

Im Poisson-Fall einer Folge unkorreliert verteilter Niveaus ist $\mu_k(x) = 1$. $P_k(x)$ sollte dann in die *Poisson-Verteilung* $P_{\text{poi},k}(x)$ (2.23) übergehen. Für $k = 0$ gilt dies sicherlich, denn

$$\mu_0(x) = 1 \Rightarrow P_0(x) = \exp(-x) = P_{\text{poi},0}(x). \quad (3.43)$$

Aber auch für $k > 0$ ist leicht einzusehen, daß

$$\begin{aligned} \mu_k(x) = 1 \Rightarrow P_k(x) &= \exp(-x) \int_0^x P_{k-1}(y) \exp(y) dy \\ &= \exp(-x) \int_0^x \exp(-y) \frac{y^{k-1}}{(k-1)!} \exp(y) dy \\ &= \exp(-x) \frac{x^k}{k!} \\ &= P_{\text{poi},k}(x). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Der etwas allgemeinere Fall, daß die bedingte Pseudodichte eine zwar beliebige, aber von der Ordnung k unabhängige integrierbare Funktion $\mu_k(x) = \mu(x)$ (mit $\lim_{x \rightarrow \infty} \varphi_k(x) = \infty$) ist, führt auf die nicht-entfaltbare *verallgemeinerte Poisson-Verteilung*. Sie ist bis auf die Entfaltung identisch mit der verallgemeinerte Poisson-Verteilung $P_{\text{vpoi},k}(x)$, welche Hasegawa¹² zur Lösung des Problems höherer Nachbarn-Statistiken vorgeschlagen hatte. Sei zunächst für alle $k \in \mathbb{N}$ definiert:

$$\begin{aligned} \mu_k(x) &:= \mu(x) \quad \text{und} \\ \varphi(x) &:= \int_0^x \mu(y) dy = \int_0^x \mu_k(y) dy = \varphi_k(x). \end{aligned} \quad (3.45)$$

In nullter Ordnung ist dann

$$P_0(x) = \mu(x) \exp(-\varphi(x)) = P_{\text{vpoi},0}(x). \quad (3.46)$$

Bis auf eine Substitution $\eta := \varphi(x)$ ist für $k > 0$ die Rechnung identisch mit derjenigen für den Poisson-Fall:

$$\begin{aligned} P_k(x) &= \mu(x) \exp(-\varphi(x)) \int_0^x P_{k-1}(y) \exp(\varphi(y)) dy \\ &= \mu(x) \exp(\varphi(-x)) \int_0^x \mu(y) \exp(-\varphi(y)) \frac{\varphi(y)^{k-1}}{(k-1)!} \exp(\varphi(y)) dy \\ &= \mu(x) \exp(\varphi(-x)) \frac{1}{k!} [\eta^k] \Big|_{\varphi(0)}^{\varphi(x)} \\ &= \mu(x) \exp(-\varphi(x)) \frac{\varphi(x)^k}{k!} \\ &=: \tilde{P}_{\text{vpoi},k}(x). \end{aligned} \quad (3.47)$$

Die nicht-entfaltbare verallgemeinerte Poisson-Verteilung $\tilde{P}_{\text{vpoi},k}(x)$ ist genau dann mit der verallgemeinerten Poisson-Verteilung Hasegawas $P_{\text{vpoi},k}(x)$ identisch, wenn von der Entfaltung durch eine geeignete Wahl der Skalenfaktoren

¹²Siehe Kap. 2.5.2, insbesondere Definition (2.24).

r_k abgesehen wird¹³. Falls nämlich die Skalierung in die Wahl der bedingten Pseudodichte eingeht¹⁴, ist diese wegen der im allgemeinen unterschiedlichen Skalenfaktoren r_k nicht mehr unabhängig von k . Aber unter Nicht-Berücksichtigung der Entfaltungsbedingung (2.21) für jede Ordnung liegt hier gerade die verallgemeinerte Poisson-Verteilung vor. Sie ist zwar eine spezielle Lösung der Integralgleichung (3.10), kann aber nicht *simultan* in jeder Ordnung entfaltet werden. Insofern stellt sie keine konsistente Verallgemeinerung der Nachbarn-Statistik nullter Ordnung dar – zumindest keine, in der der Gewichtungsfaktor die bedingte Pseudodichte repräsentiert.

3.8 Entfaltung

Die Entfaltung der Abstandsverteilung $P_k(x)$

$$\int_0^\infty x P_k(x) dx = k + 1 \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (3.48)$$

muß durch eine geeignete Wahl der bedingten Pseudodichte $\mu_k(x)$ erreicht werden. In (2.25) wurde die Entfaltung der verallgemeinerten Poisson-Verteilung durch eine Skalierung und anschließender Variablensubstitution ermöglicht. Die Substitution führte auf einen geschlossenen Ausdruck für den Skalierungsfaktor (2.26). Weil aber in $P_k(x)$ auch $P_{k-1}(x)$ enthalten ist (und damit alle niedrigeren Ordnungen), kann eine solche Substitution nicht mehr durchgeführt werden. Eine zur Entfaltung (3.48) äquivalente Bedingung für die bedingte Pseudodichte $\mu_k(x)$ kann deshalb auf diese Art nicht formuliert werden.

Es soll hier untersucht werden, was die Entfaltung einer beliebigen Abstandsverteilung $P_k(x)$ für die Umgebungswahrscheinlichkeit $F_k(x)$ und die Lückenwahrscheinlichkeit $E_k(x)$ bedeutet. Dazu werden die Gleichungen (2.17) und (2.18) herangezogen. Für $k = 0$ gilt

$$F_0(0) = \int_0^x P_0(y) dy = 1 = \int_0^x P_0(y) dy + F_0(x), \quad (3.49)$$

woraus folgt, daß

$$\begin{aligned} 1 = \int_0^\infty y P_0(y) dy &= \lim_{x \rightarrow \infty} \left[y(1 - F_0(y)) \Big|_0^x - \int_0^x (1 - F_0(y)) dy \right] \\ &= \lim_{x \rightarrow \infty} \left[y F_0(y) \Big|_0^x + \int_0^x F_0(y) dy \right] \\ &= \lim_{x \rightarrow \infty} x F_0(x) + \int_0^\infty F_0(y) dy \\ &= \int_0^\infty F_0(y) dy. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Die Entfaltung von $P_0(x)$ ist also gleichbedeutend mit der Normierung von $F_0(x)$, falls

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x F_0(x) = 0. \quad (3.51)$$

¹³Dieser wurde in (2.26) explizit berechnet. Das Ergebnis ist im allgemeinen von k abhängig.

¹⁴Dort heißt sie „Gewichtungsfaktor“.

Für die Lückenwahrscheinlichkeit $E_0(x)$ bedeutet dies

$$1 = \int_0^{\infty} F_0(y) dy = E_0(0). \quad (3.52)$$

Eine ganz ähnliche Rechnung ist für die höheren Ordnungen möglich. Die Entfaltungsbedingung kann hier formuliert werden als ($k > 0$)

$$\int_0^{\infty} y (P_k(y) - P_{k-1}(y)) dy = 1. \quad (3.53)$$

Nun ist aber

$$\begin{aligned} F_k(0) &= \int_0^{\infty} (P_k(y) - P_{k-1}(y)) dy = 1 - 1 = 0 \\ &= \int_0^x (P_k(y) - P_{k-1}(y)) dy + F_k(x), \end{aligned} \quad (3.54)$$

so daß die Integration ausgeführt werden kann:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{\infty} y (P_k(y) - P_{k-1}(y)) dy \\ &= \lim_{x \rightarrow \infty} \left[y F_k(y) \Big|_0^x + \int_0^x F_k(y) dy \right] \\ &= \int_0^{\infty} F_k(y) dy. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Auch hier muß wieder vorausgesetzt werden, daß für alle $k \in N$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x F_k(x) = 0 \quad (3.56)$$

gilt. Diese Bedingung ist stärker als (2.16), in der gefordert wird, daß die Umgebungswahrscheinlichkeit im Unendlichen verschwindet. Für $P_k(x)$ ist aufgrund des exponentiellen Abfalls gegen Unendlich die Bedingung (3.56) erfüllt. Es wurde also gezeigt, daß die Differenz der Erwartungswerte für den Abstand in der Ordnung k und $k - 1$ gleich dem Integral der Umgebungswahrscheinlichkeit ist. Die Normierung der Umgebungswahrscheinlichkeit kann nun ihrerseits wieder durch die Lückenwahrscheinlichkeit $E_k(x)$ ausgedrückt werden. Denn aus

$$1 = \int_0^{\infty} F_k(x) dx = \sum_{i=0}^k E_i(0) \quad \forall k > 1 \quad (3.57)$$

und

$$E_0(0) = 1 \quad (3.58)$$

folgt

$$E_k(0) = 0 \quad \forall k > 1. \quad (3.59)$$

Zusammenfassend kann also gesagt werden, daß die Nachbarn-Statistik entfaltet ist, wenn eine der drei äquivalenten Bedingungen für alle $k \in \mathbb{N}$ erfüllt ist

$$(i) \quad \int_0^\infty x P_k(x) dx = k + 1 \quad (3.60)$$

$$(ii) \quad \int_0^\infty F_k(x) dx = 1 \quad (3.61)$$

$$(iii) \quad E_k(0) = \delta_{0k} \quad (3.62)$$

Die zweite Bedingung ist aber nicht mit der Normierung einer Wahrscheinlichkeitsdichte (C.4) zu verwechseln, denn $F_k(x)$ ist keine Dichte. Für die dritte Bedingung ist eine anschauliche Interpretation naheliegend: Mit Wahrscheinlichkeit 1 liegt in einem beliebig kleinen Intervall kein Niveau und mit Wahrscheinlichkeit 0 sind ein oder mehr Niveaus enthalten.

3.9 Potenz-Ansatz für die bedingte Pseudodichte

Die Brody-Verteilung $P_{\text{bro}}(q, x)$ (2.14) ist eine statistisch signifikante¹⁵, universelle Beschreibung des Übergangsbereichs zwischen Integrität und Ergodizität. Das Charakteristische an dieser Verteilung ist das Potenz-Gesetz-Verhalten¹⁶ für kleine Abstände:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{P_{\text{bro}}(q, x)}{x^q} = \text{const.} \quad (3.63)$$

Die Brody-Verteilung konvergiert also wie x^q gegen Null. Es ist gerade der Potenz-Ansatz $\mu_0(x) \sim x^q$ für die bedingte Pseudodichte, welcher – in $P_0(x)$ eingesetzt – diese Asymptotik der Brody-Verteilung erzeugt:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{P_0(x)}{\mu_0(x)} = \lim_{x \rightarrow 0} \exp(-\varphi_0(x)) = 1. \quad (3.64)$$

Im weiteren Verlauf der Arbeit soll es um die Anwendung dieses Adhoc-Prinzips auf Verteilungen höherer Ordnung, also auf $P_k(x)$ für $k > 0$, gehen.

Die bedingte Pseudodichte wird für jede Ordnung k eine andere sein. Sei q_k der Exponent im Potenz-Ansatz für die k -te Ordnung. Es gelte also

$$\begin{aligned} \mu_k(x) &:= \rho_k (\rho_k x)^{q_k} \quad \text{und} \\ \varphi_k(x) &= \int_0^x \mu_k(y) dy = \frac{1}{q_k + 1} (\rho_k x)^{q_k + 1}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Die Abstandsverteilung mit dieser speziellen Wahl für die bedingte Pseudodichte stellt eine Verallgemeinerung der Brody-Verteilung auf höhere Ordnungen dar

¹⁵Siehe z. B. [13]. Es muß allerdings gesagt werden, daß in speziellen Systemen die Signifikanz z. B. durch Bifurkationen klassisch periodischer Bahnen gestört sein kann.

¹⁶Es handelt sich dabei um die mathematische Formulierung der metaphorischen Sprechweise von der Niveau-Abstoßung. Der Exponent im Potenz-Gesetz entspricht – so gesehen – der „Ordnung“ der Abstoßung. Die Wigner-Verteilung ist charakterisiert durch ihre „lineare Niveau-Abstoßung“, d. h. $q = 1$.

und heie $Q_k(q_k, x)$:

$$\begin{aligned} Q_0(q_0, x) &= \rho_0 (\rho_0 x)^{q_0} \exp\left(-\frac{1}{q_0 + 1} (\rho_0 x)^{q_0+1}\right) \\ Q_k(P_k, x) &= \rho_k (\rho_k x)^{q_k} \exp\left(-\frac{1}{q_k + 1} (\rho_k x)^{q_k+1}\right) \\ &\quad \cdot \int_0^x Q_{k-1}(y) \exp\left(\frac{1}{q_k + 1} (\rho_k y)^{q_k+1}\right) dy \quad \forall k > 0. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Mit Hilfe der Skalenfaktoren ρ_k wird das diskrete Spektrum in jeder Ordnung entfaltet. Nur fr ρ_0 kann eine geschlossene Formel angegeben werden. Aus dem zur Entfaltung äquivalenten Kriterium (3.61) folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty F_0(x) dx = \int_0^\infty \exp(-\varphi_0(x)) dx \\ \rho_0 &= \int_0^\infty \exp\left(-\frac{1}{q_0 + 1} (\rho_0 x)^{q_0+1}\right) \rho_0 dx \\ &= \int_0^\infty \exp\left(-\frac{1}{q_0 + 1} y^{q_0+1}\right) dy. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Die Substitution $y := \rho_0 x$ fhrt hier zu einer Elimination der gesuchten Variablen ρ_0 aus dem Integral auf der rechten Seite. So etwas ist fr $k > 0$ aufgrund der Inhomogenitt nicht mehr mglich. Wegen

$$Q_0(0, x) = P_{\text{poi}}(x), \quad Q_0(1, x) = P_{\text{wig}}(x) \quad (3.68)$$

durchluft der Exponent q_0 sinnvollerweise die Werte zwischen 0 und 1. Fr die Ordnungen $k > 0$ sind hhere Exponenten in den Spektren klassisch ergodischer Systeme a priori nicht auszuschieen. In Kapitel 4 soll berprft werden, inwieweit die Verteilungsfamilie $Q_k(q_k, x)$ mit den Daten des Wasserstoff-Atoms im starken, homogenen Magnetfeld kompatibel ist.

3.10 Vergleich mit der GOE-Theorie

Es bietet sich ein Vergleich zwischen der Theorie des Gauschen orthogonalen Ensembles¹⁷ und des oben gemachten Ansatzes an. Beide beanspruchen, das diskrete Spektrum klassisch ergodischer Systeme (der GOE-Symmetrieklasse) zu beschreiben. Die Abstandsverteilungen k -ter Ordnung $P_{\text{goe}, k}(x)$, die aus den Axiomen der GOE-Theorie berechnet werden kann¹⁸, zeigt asymptotisch fr $x \rightarrow 0$ ein charakteristisches Verhalten: Die Funktion in der Ordnung k ist bis auf eine Konstante asymptotisch gleich x^α mit

$$\alpha = k + \frac{(k+1)(k+2)}{2}. \quad (3.69)$$

Man kann α in Analogie zum Wigner- und Poisson-Fall als den „Grad der Niveau-Abstoung“ bezeichnen. Die Wigner-Verteilung ($k = 0$) zeigt eine lineare Abstoung ($\alpha = 1$). In erster Ordnung ($k = 1$) ist $\alpha = 4$ und zweiter Ordnung ($k = 2$) ist $\alpha = 8$.

¹⁷Siehe Anhang A.

¹⁸Die sehr komplizierte Rechnung kann in [16] nachgelesen werden.

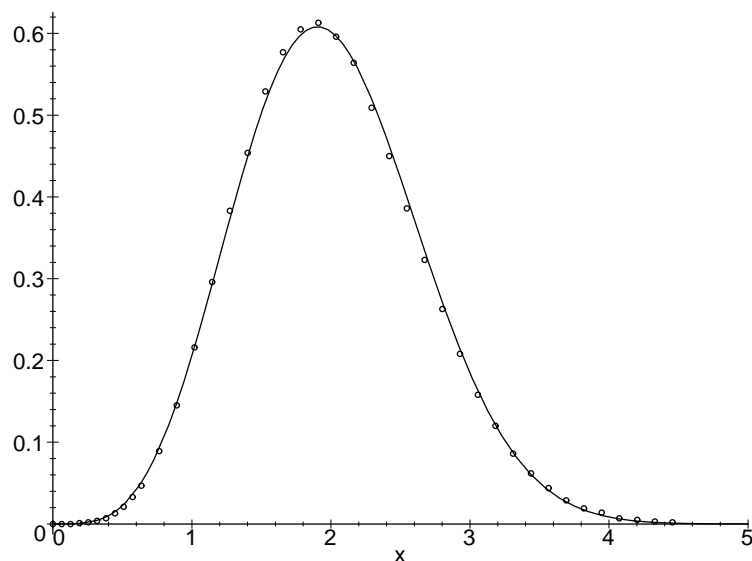


Abbildung 3.1: Datenpunkte (o) der GOE-Verteilung $P_{\text{goe},1}(x)$ aus [14] und Graph von $Q_1(1,72, x)$ als beste Approximation.

Das asymptotische Verhalten kann nun mit $Q_k(q_k, x)$ verglichen werden. Es stellt sich die Frage nach denjenigen Werten für q_k , welche genau eine solche Asymptotik in den Verteilungen erzeugen. Sei α_k der asymptotische Exponent in der k -ten Ordnung, also

$$Q_k(q_k, x) \sim x^{\alpha_k} \quad \text{asymptotisch für } x \rightarrow 0. \quad (3.70)$$

Aus

$$Q_{k+1}(q_{k+1}, x) = \mu_{k+1}(x) \exp(-\varphi_{k+1}(x)) \cdot \int_0^x Q_k(q_k, y) \exp(\varphi_{k+1}(y)) dy \quad (3.71)$$

folgt unter Berücksichtigung der Integration sofort, daß

$$\alpha_{k+1} = q_{k+1} + \alpha_k + 1, \quad (3.72)$$

weil $\mu_{k+1}(x) \sim x^{q_{k+1}}$. Einsetzen der GOE-Regel für den Exponenten $\alpha_k = k + (k+1)(k+2)/2$ ergibt

$$\begin{aligned} q_{k+1} &= \alpha_{k+1} - \alpha_k - 1 \\ &= k + 1 + \frac{(k+2)(k+3)}{2} - \left[k + \frac{(k+1)(k+2)}{2} \right] - 1 \\ &= k + 2. \end{aligned} \quad (3.73)$$

In nullter Ordnung erzeugt $q_0 = 1$ die Wigner-Verteilung mit $\alpha_0 = 1$. Folglich kann mit

$$q_k = k + 1 \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (3.74)$$

die GOE-Asymptotik für $x \rightarrow 0$ generiert werden.

Der Wert eines solchen Vergleichs mit der GOE-Theorie ist aber wohl eher mathematischer Natur. Denn die Asymptotik kleiner Abstände ist empirisch – insbesondere für höhere Ordnungen – alles andere als signifikant aus den Histogrammen bestimmbar.

Ein direkter, globaler Vergleich der beiden Abstandsverteilungen $Q_k(q_k, x)$ und $P_{\text{goe},k}(x)$ ist aufgrund der numerischen Komplexität höherer GOE-Verteilungen sehr schwierig. In [14] wird ein Verfahren angegeben, $P_{\text{goe},1}(x)$ zu berechnen. Die dort abgedruckten Datenpunkte sollen nun mit $Q_1(q_1, x)$ bei festem $q_0 = 1$ verglichen werden. Die Wahl $q_0 = 1$ ist naheliegend, weil sie exakt auf die Wigner-Verteilung führt, die ja identisch ist mit der GOE-Verteilung nullter Ordnung $P_{\text{goe},0}(x) = Q_0(1, x) = P_{\text{wig}}(x)$. In der Abb. 3.1 sind die einzelnen Datenpunkte von $P_{\text{goe},1}(x)$ und die beste Näherung $Q_1(1,72, x)$ mit $\rho_1 = 0,7251$ eingezeichnet. Obwohl insgesamt die GOE-Verteilung recht gut reproduziert werden kann, sind kleinere Abweichungen zu erkennen. Die Wahl des Parameters $q_1 = 1,72$ ist kleiner, als der aus dem asymptotischen Verhalten geschlossene Wert 2.

Kapitel 4

Wasserstoff-Atom im Magnetfeld

4.1 Hamilton-Funktion und skalierte Energie

Die Hamilton-Funktion des Wasserstoffatoms im Magnetfeld¹ in zylindrischen Koordinaten (ρ, ϕ, z) ist

$$H(p_\rho, p_\phi, p_z, \rho, z) = \frac{1}{2m_e} \left(p_\rho^2 + \frac{p_\phi^2}{\rho^2} + p_z^2 \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{1}{2} m_e \omega^2 \rho^2 + \omega p_\phi. \quad (4.1)$$

Dabei ist $\omega = \omega_c/2 = eB/(2m_e)$ die halbe Zyklotron-Frequenz, m_e die reduzierte Masse des Elektrons und B die Magnetfeldstärke. Das Magnetfeld sei parallel zur z-Achse orientiert. Ersetzt man in (4.1) die kanonischen Variablen durch die entsprechenden quantenmechanischen Operatoren, so ergibt sich der Hamilton-Operator des zugehörigen Quantensystems.

Bei sehr hohen Magnetfeldstärken zeigt das klassische System Chaos: Es bestimmen dann gleichermaßen das zylindersymmetrische Magnetfeld und das sphärische Coulomb-Feld des Atomkerns die Dynamik des Elektrons. In diesem Bereich hat das dreidimensionale Problem nur noch zwei kontinuierliche Erhaltungsgrößen bzw. Symmetrien. Die Energie ist wegen der Zeit-Translationsinvarianz und die z-Komponente des Drehimpulses wegen der Rotationssymmetrie um die z-Achse erhalten. Neben diesen beiden kontinuierlichen Symmetrien existiert noch eine weitere diskrete Symmetrie: die der z-Parität (Invarianz unter Raum-Spiegelung an der x-y-Ebene). Die Magnetfeldstärke B wird in Einheiten der sogenannten kritischen Feldstärke B_0 gemessen. Letztere ist dadurch definiert, daß für $B = B_0$ die Oszillator-Energie $\hbar\omega$ gerade so groß ist wie die Rydberg-Energie $R = \hbar^2/(2m_e a_0^2)$, also

$$\gamma = \frac{B}{B_0} = \frac{\hbar\omega}{R}. \quad (4.2)$$

¹Es handelt sich dabei um das Kepler-System mit einem zusätzlichen diamagnetischen Term ($\sim \omega^2$). Deshalb spricht man auch vom diamagnetischen Kepler-Problem (kurz DKP). Der paramagnetische Term ($\sim \omega$) spielt eine untergeordnete Rolle, weil er nur eine Verschiebung des Spektrums bewirkt (Zeeman-Effekt).

Es ist also $B_0 = \hbar/(ea_0^2)$ mit dem Bohrschen Radius $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$. Die dimensionslose Größe γ wird Feldstärkeparameter genannt und charakterisiert das Magnetfeld.

Die Hamilton-Funktion (4.1) besitzt eine wichtige Skalierungseigenschaft². Wird eine Skalentransformation

$$\tilde{\mathbf{x}} := \gamma^{\frac{2}{3}} \mathbf{x} \quad \tilde{\mathbf{p}} := \gamma^{-\frac{1}{3}} \mathbf{p} \quad (4.3)$$

durchgeführt und die transformierten Variablen in die Hamilton-Funktion eingesetzt, so kann der Faktor $\gamma^{-2/3}$ ausgeklammert werden:

$$H(p_\rho, p_\phi, p_z, \rho, z) = \gamma^{-\frac{2}{3}} H(\tilde{p}_\rho, \tilde{p}_\phi, \tilde{p}_z, \tilde{\rho}, \tilde{z}). \quad (4.4)$$

Eine Skalierung der Hamilton-Funktion und der Energie

$$\tilde{H} := \gamma^{-\frac{2}{3}} H \quad \varepsilon := \gamma^{-\frac{2}{3}} E \quad (4.5)$$

führt auf ein klassisches System, welches den Feldstärkeparameter γ nicht mehr explizit enthält. Die klassische Dynamik hängt dann nur noch von der skalierten Energie ε ab. Dies ist ein sehr wichtiger Sachverhalt, weil andernfalls zwei unabhängige Parameter (Energie und Magnetfeldstärke) den Übergang zwischen Regularität und Ergodizität bestimmen würden. Das Spektrum des analogen Quantensystems wird nun bei solchen Energien und Feldstärken untersucht, bei denen $\varepsilon = \gamma^{-2/3} E$ gerade konstant ist. Dies klassische Dynamik fest ist für alle Kombinationen konstanter skalierten Energie dieselbe. Insbesondere kann auf diese Weise der Grad der Irregularität im Phasenraum als invariant angesehen werden.

4.2 Diskretes Spektrum und klassische Dynamik

Die Datenbasis der Untersuchung stammt aus einer numerischen Lösung der Schrödinger-Gleichung des diamagnetischen Kepler-Problems bei konstanter skalierten Energie von Main³. Wegen der Rotations- und Spiegelsymmetrie existieren zwei „gute Quantenzahlen“: die magnetische Quantenzahl m und die z-Parität π . Für jeden m^π -Unterraum wird zu vorgegebener skalierten Energie ein Spektrum aus rund 1000 Niveaus berechnet. Die Spektren bestehen aus den Werten für $\gamma^{-2/3} = \varepsilon/E$, so daß eine explizite Entfaltung nicht mehr notwendig ist⁴. In jedem Unterraum wird die Statistik getrennt durchgeführt und die sich ergebenden Verteilungen anschließend zu einer Stichprobe zusammengefaßt. Mit Hilfe der Methode kleinster quadratischer Abweichungen werden die Histogramme jeder Stichprobe durch geeignete „verallgemeinerte Brody-Verteilungen“ $Q_k(q_k, x)$ approximiert.

²Siehe [11] und [8].

³Siehe [15].

⁴In guter Näherung gilt dann $\tilde{N}(x) \approx x$ für den globalen Teil der Stufenfunktion. Siehe dazu [13].

Der Phasenraum des diamagnetischen Kepler-Problems ist für $\varepsilon = -0,1$ ergodisch und für $\varepsilon = -0,6$ fast-regulär⁵. Im folgenden werden die Spektren solcher Systeme untersucht, deren skalierte Energie zwischen diesen beiden Werten liegt.

4.3 Ergodischer Bereich

Für $\varepsilon = -0,1$ ist eine Anwendbarkeit der GOE-Theorie zu erwarten: Alle Phasenraum-Tori sind durch die diamagnetische Störung des Kepler-Systems zerstört. Das System (4.1) ist im nicht-konventionellen Sinne⁶ invariant gegenüber Bewegungsumkehr und hat einen ganzzahligen Gesamtdrehimpuls. Damit liegt die Symmetrieklasse des GO-Ensembles⁷ vor.

Die Abstandsverteilung des nächsten Nachbarn sollte exakt durch die Wigner-Verteilung $Q_k(1, x) = P_{\text{wig}}(x)$ beschrieben werden können. Der linearen Niveau-Abstoßung entsprechend ist hier $\mu_0(x) \sim x$. Abb. 4.1 zeigt die Übereinstimmung zwischen dem Histogramm nullter Ordnung und $P_{\text{wig}}(x)$ für $\varepsilon = -0,1$.

Die der Wigner-Verteilung entsprechende Verteilung für die erste Ordnung sollte durch $Q_1(q_1, x)$ beschrieben werden. Durch Minimierung der quadratischen Abweichung wird der freie Parameter q_1 bestimmt. Man erhält so einen Wert von $q_1 = 2$. Wie in der Abb. 4.2 zu sehen ist, liegt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der theoretischen Verteilung $Q_1(2, x)$ und dem Histogramm vor. Es gilt also für die bedingte Pseudodichte in erster Ordnung

$$\mu_1(x) = \rho_1 (\rho_1 x)^2. \quad (4.6)$$

Der Parameter ρ_1 liegt durch die Entfaltungsbedingung fest. Für $q_1 = 2$ erhält man $\rho_1 = 0,71$. Dieser Exponent ist identisch mit demjenigen, der aus einem asymptotischen Vergleich mit der entsprechenden GOE-Verteilung in Kap. 3.10 berechnet wurde. $q_1 = 2$ ruft eine quartische Niveau-Abstoßung ($\alpha_k = 4$) hervor.

In der zweiten Ordnung liefert $q_2 = 2,8$ (mit $\rho_2 = 0,485$) die beste Übereinstimmung mit dem Histogramm der DKP-Daten für $\varepsilon = -0,1$ (Abb 4.3). Der Exponent der Niveau-Abstoßung ist also $\alpha_2 = 2,8 + 4 + 1 = 7,8$. Die GOE-Abstandsverteilung hätte einen Wert $\alpha = 8$ erwarten lassen. A priori spricht allerdings nichts gegen rationale Werte für den Exponenten der bedingten Pseudodichte bzw. der Niveau-Abstoßung.

⁵Die Dynamik wird vollständig durch Phasenraum-Tori dominiert. Wirkliche Integrabilität liegt aber nur für ein verschwindendes Magnetfeld vor: Eine beliebig kleine diamagnetische Störung ändert die Phasenraum-Struktur völlig. Weil das ungestörte Kepler-System periodisch ist, stehen alle Torus-Frequenzen in einem rationalen Verhältnis zueinander, so daß die KAM-Theorie nicht anwendbar ist. Siehe [11] und [8].

⁶Das soll heißen: Es existiert eine antiunitäre Symmetrie (kombinierte Bewegungsumkehr mit Raumspeglung an der x-y-Ebene). Siehe [10].

⁷Siehe Anhang A.

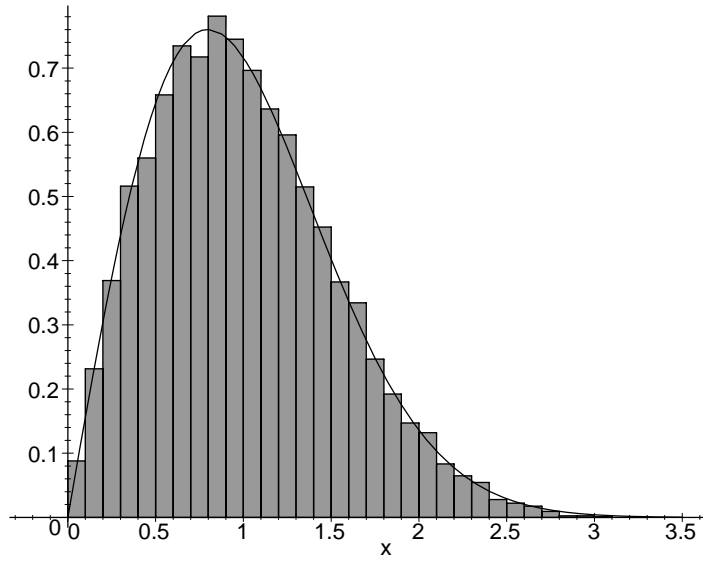


Abbildung 4.1: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 0$ bei $\varepsilon = -0,1$ und Wignerverteilung $P_{\text{wig}}(x) = Q_0(1, x)$.

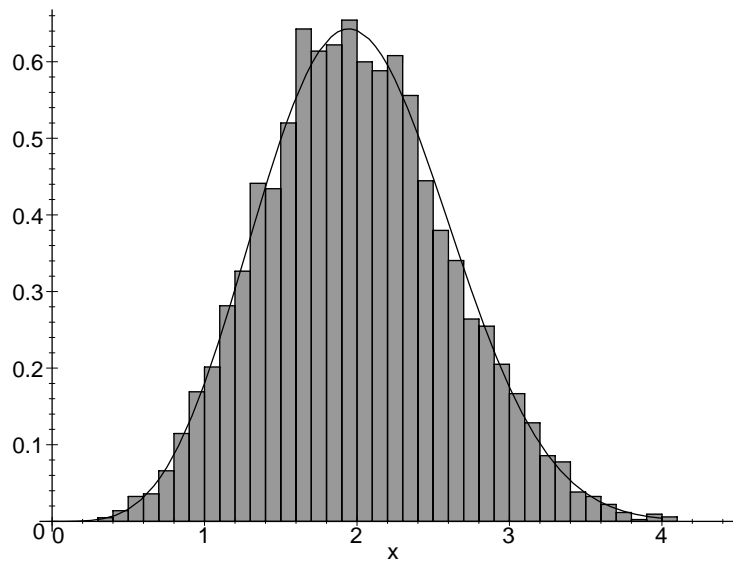


Abbildung 4.2: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 1$ bei $\varepsilon = -0,1$ und Graph der Verteilung $Q_1(2, x)$ als beste Approximation.

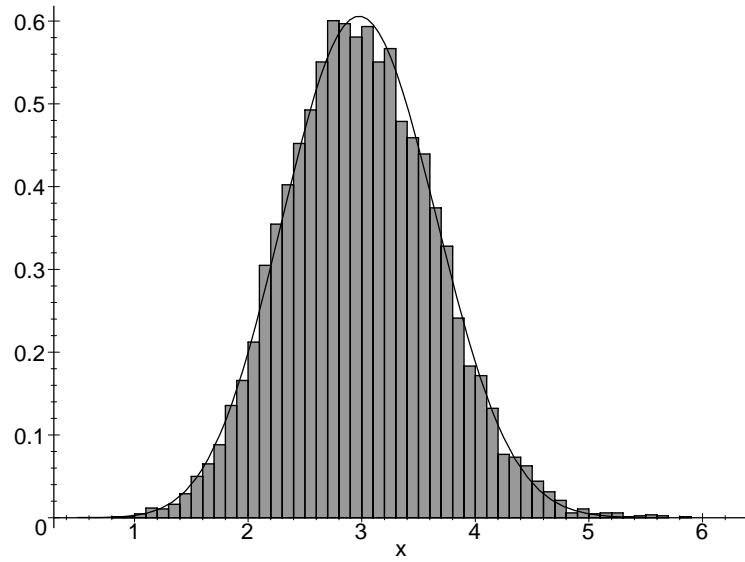


Abbildung 4.3: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 2$ bei $\varepsilon = -0,1$ und Graph der Verteilung $Q_2(2,8, x)$ als beste Approximation.

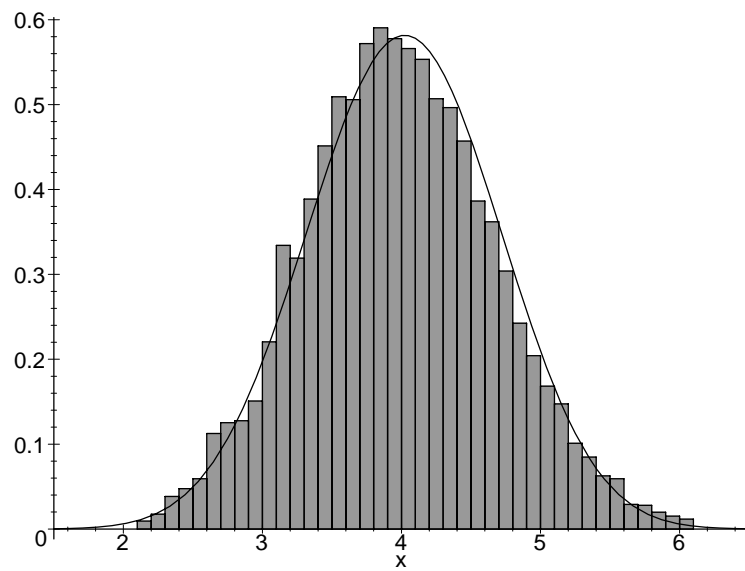


Abbildung 4.4: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 3$ bei $\varepsilon = -0,1$ und Graph der Verteilung $Q_3(3,7, x)$ als beste Approximation.

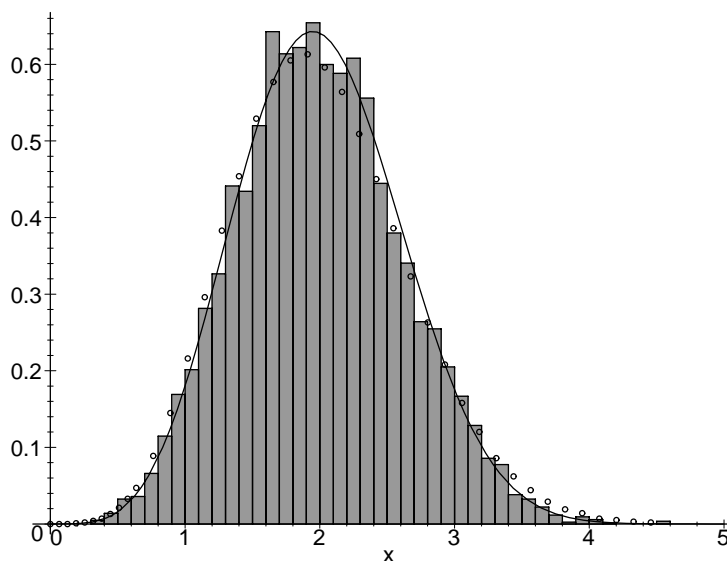


Abbildung 4.5: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 0$ bei $\varepsilon = -0,1$, Datenpunkte (o) der GOE-Verteilung $P_{\text{goe},1}(x)$ und Graph der Verteilung $Q_1(2, x)$ als beste Approximation an das Histogramm. Die verallgemeinerte Brody-Verteilung mit quadratischer bedingter Pseudochichte $\mu_1(x) \sim x^2$ stimmt etwas besser mit dem Histogramm überein als die GOE-Verteilung.

Weil der numerische Aufwand zur Berechnung der Verteilungen wegen der geschachtelten Integration mit zunehmender Ordnung recht hoch wird, muß für $k = 3$ zunächst die Verteilung $Q_2(2,8, x)$ durch ein Tschebyscheff-Polynom approximiert werden. Die Integration erfolgt dann über das Polynom. In der Abb. 4.4 ist das Histogramm mit der Verteilung für $q_3 = 3,7$ und $\rho_3 = 0,355$ dargestellt. Zu erkennen ist eine leichte Verschiebung des Histogramms zu kleineren Werten, was mit der numerischen Ungenauigkeit bei der Berechnung von $Q_2(2,8, x)$ und mit der nicht exakten Entfaltung des Spektrums erklärt werden könnte. Auch hier hätte das asymptotische Verhalten der GOE-Verteilung einen größeren Exponenten (4 statt 3,7) erwarten lassen. Es ist $\alpha_3 = 3,7 + 7,8 + 1 = 12,5$.

Da die Ergebnisse der GOE-Theorie für $\varepsilon = -0,1$ anwendbar sein sollten, stellt sich die Frage, inwieweit die GOE-Verteilung $P_{\text{goe},1}(x)$ mit dem Histogramm für diese skalierte Energie übereinstimmt. Insbesondere bietet sich ein Vergleich mit der oben vorgeschlagenen Verteilung $Q_1(2, x)$ als beste Approximation an. Im Kapitel 3.10 wurde bereits festgestellt, daß $Q_1(1,72, x)$ eine recht gute Näherung für $P_{\text{goe},1}(x)$ darstellt. In der Abb. 4.5 sind neben dem Histogramm die Datenpunkte⁸ von $P_{\text{goe},1}(x)$ und die beste Approximation an

⁸Siehe [14].

das Histogramm, $Q_1(2, x)$, eingezeichnet. Die Übereinstimmung mit dem Histogramm von $Q_1(2, x)$ ist etwas besser als diejenige der GOE-Verteilung. Die Unterschiede beider Verteilungen sind zwar nicht sehr groß, jedoch sichtbar. Durch den Exponenten der bedingten Pseudodichte ausgedrückt, kann die Differenz quantifiziert werden: Im einen Fall hat der Exponent q_1 den Wert 2 und im anderen (GOE-Fall) näherungsweise den oben bestimmten Wert 1,72.

4.4 Fast-ergodischer Bereich

Bei der skalierten Energie $\varepsilon = -0,2$ sind im Phasenraum des Wasserstoff-Atoms im Magnetfeld reguläre Bereiche vorhanden⁹. Der Regel gemäß, daß klassische Regularität sich in einer schwächeren Niveau-Abstoßung α_k ausdrückt, sollten die Verteilungen $Q_k(q_k, x)$ mit kleineren Werten für q_k als bei $\varepsilon = -0,1$ die Abstände der Niveaus beschreiben.

In der Abb. 4.6 ist die Verteilung für $q_0 = 0,73$ zu sehen. Diese ist wegen $P_{\text{bro}}(q_k, x) = Q_0(q_k, x)$ identisch mit der Brody-Verteilung mit gleichem Parameter. Es ist bereits zu erkennen, daß kleine Abweichungen vorhanden sind, insgesamt aber noch eine gute Anpassung möglich ist. Die Abstandsverteilungen höherer Ordnung stimmen gut mit den theoretischen Verteilungen $Q_k(q_k, x)$ für geeignet gewählte q_k überein. In den Abb. 4.7, 4.8 und 4.9 sind die jeweils besten Ergebnisse für die nächsten drei Ordnungen zu sehen. Die Parameter sind – wie erwartet – etwas kleiner als im ergodischen Bereich ($\varepsilon = -0,1$): Es ist $q_1 = 1,3$ mit $\rho_1 = 0,76$, $q_2 = 1,6$ mit $\rho_1 = 0,545$ und $q_3 = 2,2$ mit $\rho_2 = 0,41$. Die leichten Unregelmäßigkeiten der Histogramme jeweils auf der linken Seite neben dem Maximum lassen auf nicht-universelle Einflüsse beim Übergang zum regulären Bereich schließen. Trotzdem stimmen die Verteilungen für $k > 0$ eher besser mit dem Histogramm überein als für $k = 0$. Wegen des numerischen Aufwands, mußten auch hier alle Verteilungen für $k > 0$ durch geeignete Tschebyscheff-Polynome approximiert werden.

4.5 Übergangsbereich

Für die skalierten Energien $\varepsilon = -0,3$ und $\varepsilon = -0,4$ existieren reguläre und irreguläre Bahnen nebeneinander. Die Histogramme für die Verteilungen nullter Ordnung können mit Hilfe der Brody-Verteilung recht gut wiedergegeben werden (Abb. 4.10 und Abb. 4.12). Aber bereits in der ersten Ordnung sind deutliche Abweichungen zu sehen (Abb. 4.10 und Abb. 4.12). Für $\varepsilon = -0,3$ sind sie besonders groß, weil dort systemspezifische Bifurkationen periodischer Bahnen das Bild verfälschen¹⁰. In diesem Zusammenhang ist auch die Wahl des Exponenten $q_1 = 0,4$ (gegenüber $q_0 = 0,41$) zu verstehen, die der Regel „höhere

⁹In [11] und [8] werden die Poincaré-Schnitte zu vorgegebener skaliertes Energie in semi-parabolischen Koordinaten berechnet. Man sieht dort, daß bei $\varepsilon = -0,2$ reguläre Bereiche um einen elliptischen Fixpunkt herum existieren, welcher einer periodischen Bahn senkrecht zum Magnetfeld zugeordnet werden kann.

¹⁰In [13] wird dies für die Δ_3 -Statistik, die Korrelationen längerer Reichweite erfaßt, ebenfalls festgestellt. Zur klassischen Dynamik bei $\varepsilon = -0,3$ siehe dort.

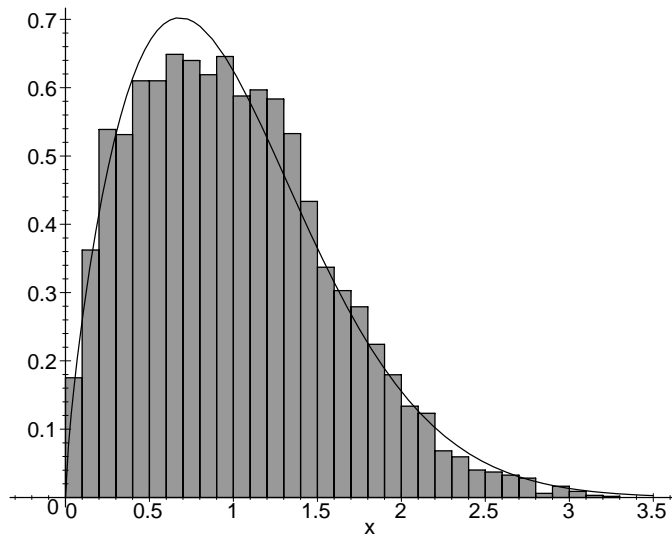


Abbildung 4.6: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 0$ bei $\varepsilon = -0,2$ und Graph der Brody-Verteilung $P_{\text{bro}}(0,73, x) = Q_0(0,73, x)$ als beste Approximation.

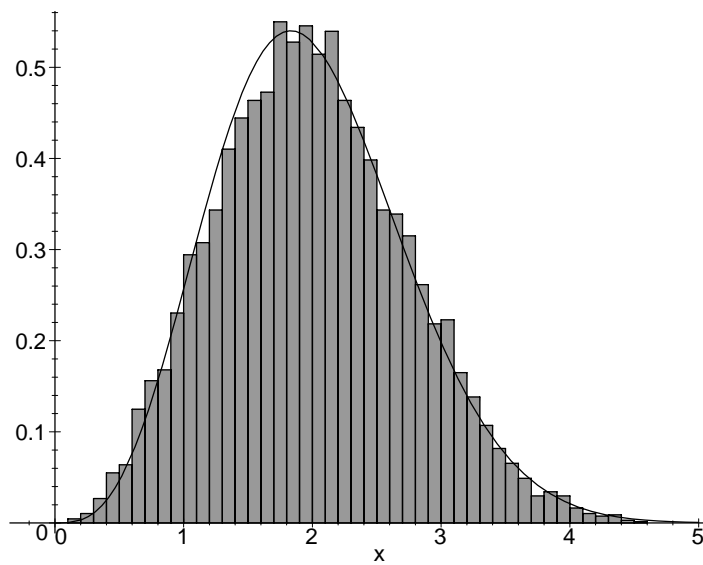


Abbildung 4.7: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 1$ bei $\varepsilon = -0,2$ und Graph der Verteilung $Q_1(1,3, x)$ als beste Approximation.



Abbildung 4.8: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 2$ bei $\varepsilon = -0,2$ und Graph der Verteilung $Q_2(1,6, x)$ als beste Approximation.

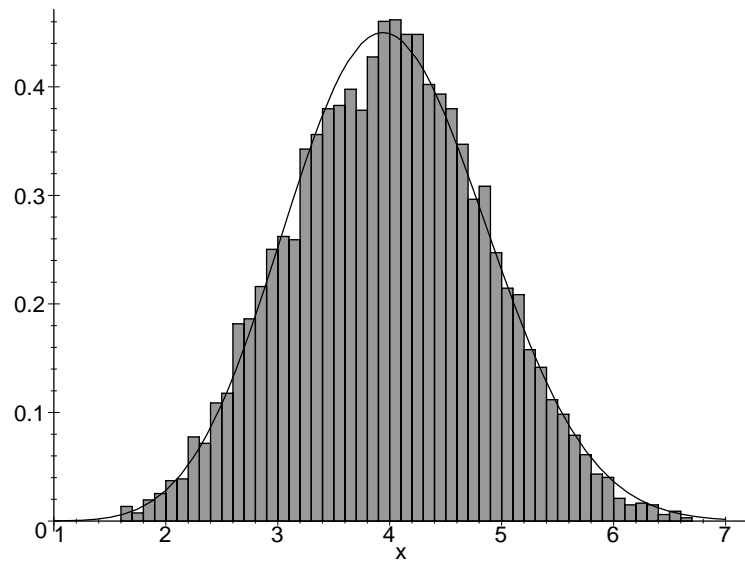


Abbildung 4.9: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 3$ bei $\varepsilon = -0,2$ und Graph der Verteilung $Q_3(2,2, x)$ als beste Approximation.

Ordnung heißt größerer Exponent“ völlig entgegenläuft. Bei der skalierten Energie $\varepsilon = -0,4$ ist in der ersten Ordnung die Übereinstimmung mit $Q_1(q_1, x)$ nur mäßig. Zum Vergleich sind in den Abb. 4.12 und 4.13 die Poisson-Verteilungen nullter bzw. erster Ordnung und die Wigner-Verteilung bzw. $Q_1(2, x)$ eingezeichnet. Man sieht in der Abb. 4.13, daß die Verteilung für $\varepsilon = -0,4$, die in nullter Ordnung (Abb. 4.12) schon recht poissonsch verlaufen ist, sich in der ersten Ordnung sehr viel mehr von der Poisson-Verteilung entfernt ist. In den noch höheren Ordnungen $k > 1$ werden die Abweichungen größer und von einer theoretischen Reproduzierbarkeit der Histogramme ist auch näherungsweise nicht mehr gegeben. Um die Begründung dafür einzusehen, muß das Verhalten des diamagnetischen Kepler-Systems bei noch niedrigeren skalierten Energien betrachtet werden.

4.6 Fast-regulärer Bereich

Für $\varepsilon < -0,5$ sind im Phasenraum des Wasserstoff-Atoms im Magnetfeld kaum noch irreguläre Bereiche vorhanden¹¹. Wenn das reine (störungsfreie) Kepler-System generisch ist in dem Sinne, daß die Energie-Niveaus unabhängig verteilt sind und wenn der Übergang zu diesem Grenzfall stetig verläuft, dann sollte im fast-regulären Bereich eine Poisson-Verteilung k -ter Ordnung vorliegen. Daß dem aber nicht so ist, kann den Abb. 4.14 bis 4.17 entnommen werden. Für $\varepsilon = -0,6$ und $k = 1$ (Abb. 4.17) gleicht die Verteilung eher der zum Vergleich eingezeichneten „Wigner-Verteilung erster Ordnung“ $Q_1(2, x)$ als der Poisson-Verteilung $Q_1(0, x) = x \exp(-x)$.

¹¹Siehe [11] und [8].

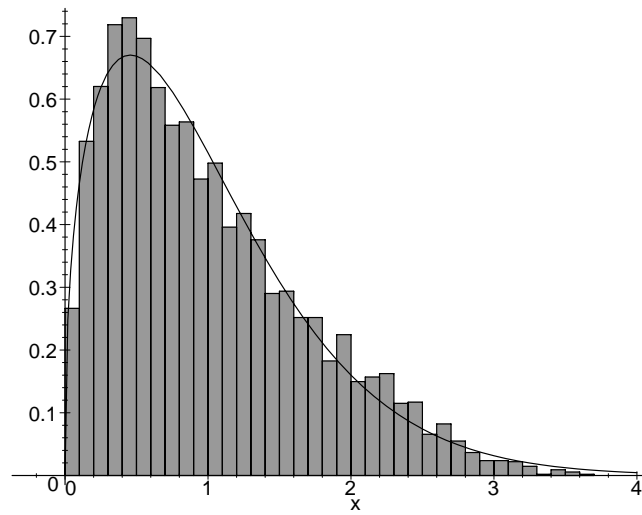


Abbildung 4.10: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 0$ bei $\varepsilon = -0,3$ und Graph der Brody-Verteilung $P_{\text{bro}}(0,41, x) = Q_0(0,41, x)$ als beste Approximation. Man erkennt zwar den Übergang zur Poisson-Verteilung, aber die Übereinstimmung ist bereits schlechter als im ergodischen Bereich.

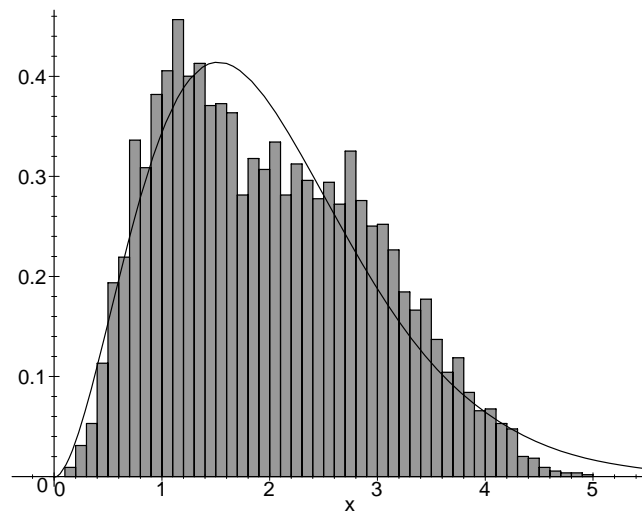


Abbildung 4.11: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 1$ bei $\varepsilon = -0,3$ und Graph der Verteilung $Q_1(0,4, x)$ als beste Approximation. Die Übereinstimmung ist noch schlechter als für $k = 0$.

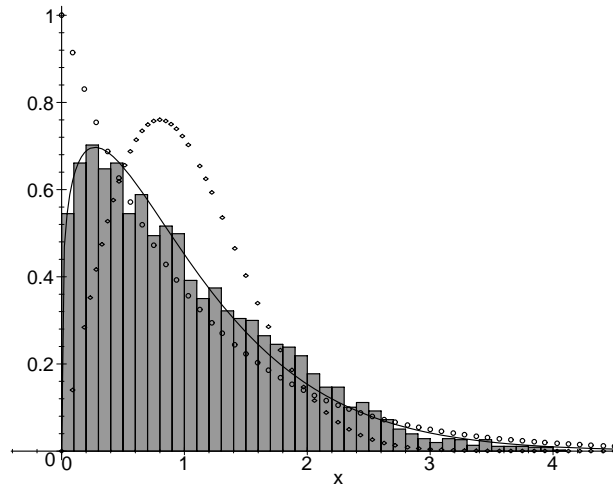


Abbildung 4.12: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 0$ bei $\varepsilon = -0,4$ und Graph der Brody-Verteilung $P_{\text{bro}}(0,23, x) = Q_0(0,23, x)$ als beste Approximation. Zum Vergleich: Poisson-Verteilung $Q_0(0, x)$ (\circ) und Wigner-Verteilung $Q_0(1, x)$ (\diamond). Die Tendenz zur Poisson-Verteilung ist für $k = 0$ sichtbar.

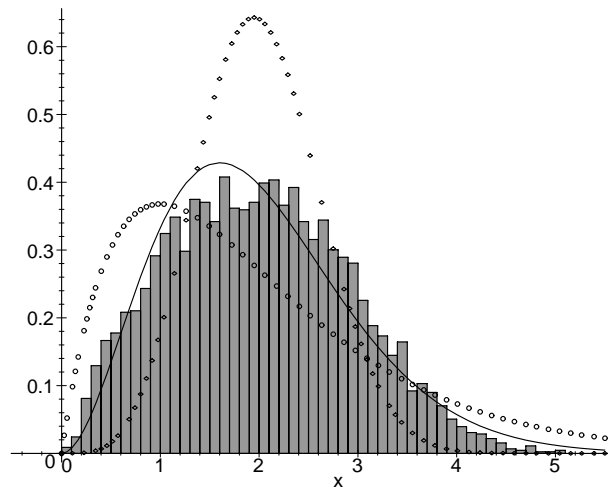


Abbildung 4.13: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 1$ bei $\varepsilon = -0,4$ und Graph der Verteilung $Q_1(0,7, x)$ als beste Approximation. Zum Vergleich: Poisson-Verteilung $Q_1(0, x)$ (\circ) und $Q_1(2, x)$ (\diamond). Für $k = 1$ treten bereits größere Abweichungen auf.

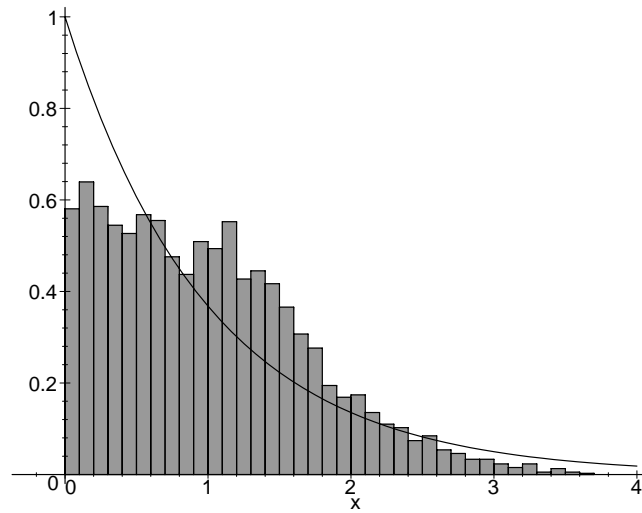


Abbildung 4.14: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 0$ bei $\varepsilon = -0,5$ und zum Vergleich der Graph der Poisson-Verteilung $Q_0(0, x)$. Die Tendenz zum exponentiellen Verlauf bricht im fast-regulären Bereich zusammen.

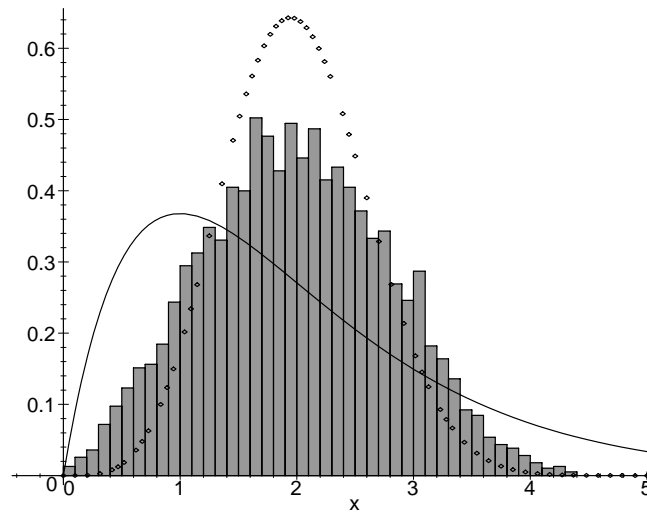


Abbildung 4.15: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 1$ bei $\varepsilon = -0,5$ und zum Vergleich der Graph der Poisson-Verteilung $Q_1(0, x)$. Zur Gegenüberstellung: obige Verteilung des ergodischen Bereichs $Q_1(2, x)$ (\diamond). Alle Ähnlichkeiten mit der zu erwartenden Poisson-Verteilung sind verschwunden.

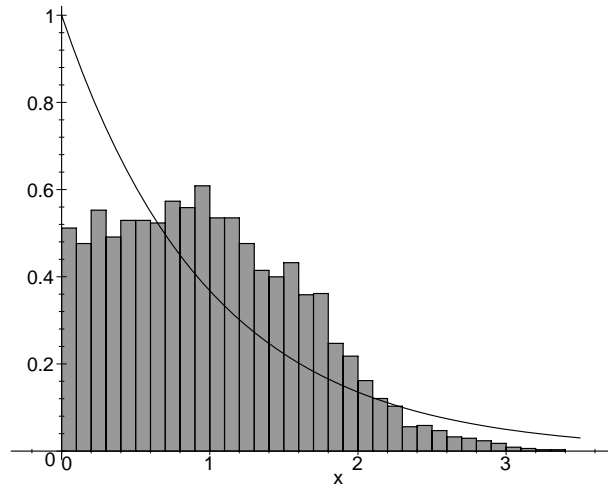


Abbildung 4.16: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 0$ bei $\varepsilon = -0,6$ und zum Vergleich der Graph der Poisson-Verteilung $Q_0(0, x)$. Auch für $\varepsilon = -0,6$ liegt keine Poisson-Verteilung vor.

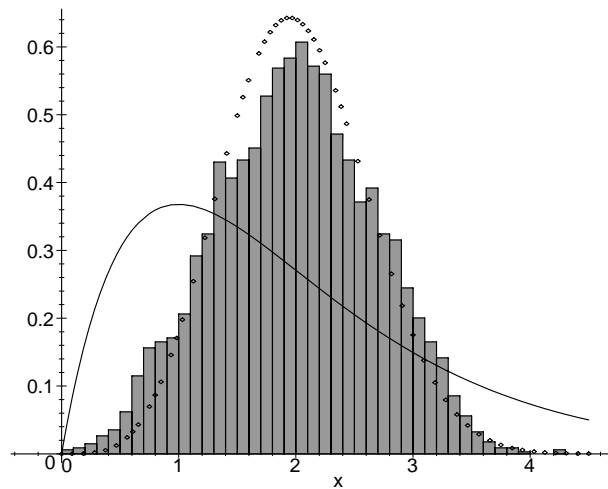


Abbildung 4.17: Histogramm der Abstandsverteilung für $k = 1$ bei $\varepsilon = -0,6$ und zum Vergleich der Graph der Poisson-Verteilung $Q_1(0, x)$. Zum Gegenüberstellung: obige Verteilung des ergodischen Bereichs $Q_1(2, x)$ (\diamond). Die Verteilung gleicht eher derjenigen einer ergodischen Dynamik als der einer fast-regulären, obwohl die hier vorliegende Dynamik als fast vollständig regulär zu betrachten ist.

4.7 Zusammenfassung der empirischen Ergebnisse

Das diamagnetische Kepler-System zeigt – insbesondere in den höheren Ordnungen $k > 0$ – keinen stetigen Übergang zum Poisson-Spektrum. Es handelt sich hier also nicht um „soft chaos“ im eigentlichen Sinne. Im Zwischenbereich $\varepsilon = -0,3$ und $\varepsilon = -0,4$ sind entsprechend mäßige Übereinstimmungen zwischen den berechneten Histogrammen und den theoretischen Verteilungen $Q_k(q_k, x)$ zu sehen. Dagegen können im fast-ergodischen ($\varepsilon = -0,2$) und besonders im ergodischen Bereich ($\varepsilon = -0,1$) die empirisch-numerischen Daten des Wasserstoff-Atoms im Magnetfeld gut reproduziert werden. Hier liegt – nicht nur in nullter Ordnung – universelles Verhalten vor. Der Potenz-Ansatz für die bedingte Pseudodichte $\mu_k(x) \sim x^{q_k}$, der in nullter Ordnung mit $q_0 = 1$ auf die Wigner-Verteilung führt, beschreibt das System in adäquater Weise. Die Exponenten q_k des ergodischen Systems ($\varepsilon = -0,1$) haben etwas kleinere Werte, als ein Vergleich mit dem asymptotischen Verhalten der GOE-Verteilungen $P_{\text{goe},k}(x)$ für $x \rightarrow 0$ zu erwarten gewesen wäre. Die Exponenten für $\varepsilon = -0,2$ sind etwas kleiner als für $\varepsilon = -0,1$, was den Übergang vom fast-ergodischen zum ergodischen Bereich charakterisiert. In der Tab. 4.1 sind die Werte für die oben gewählten Exponenten der bedingten Pseudodichte q_k , die damit festliegenden Entfaltungparameter ρ_k und die asymptotischen Exponenten kleiner Abstände α_k (Grad der Niveau-Abstoßung) noch einmal zusammenfassend aufgeführt.

ε	k	q_k	ρ_k	α_k
-0,1	0	1	1,25	1
-0,1	1	2	0,71	4
-0,1	2	2,8	0,485	7,8
-0,1	3	3,7	0,355	12,5
-0,2	0	0,73	1,22	0,73
-0,2	1	1,3	0,76	2,03
-0,2	2	1,6	0,545	4,63
-0,2	3	2,2	0,41	7,83
-0,3	0	0,41	1,16	0,41
-0,3	1	0,40	0,86	1,81
-0,4	0	0,23	1,11	0,23
-0,4	1	0,70	0,83	1,93

Tabelle 4.1: Beste Wahl der Parameter beim Wasserstoff-Atom im Magnetfeld: Für jede skalierte Energie ε wird in jeder Ordnung k der am besten approximierende Exponent der bedingten Quasidichte q_k ermittelt. Der Entfaltungparameter ρ_k und der Exponent der Niveau-Abstoßung α_k liegen dann fest.

Kapitel 5

Rückblick und abschließende Bemerkungen

Von der Integralgleichung (2.9) für die Nachbarn-Statistik nullter Ordnung ausgehend, wurde deren Verallgemeinerung (3.10) auf beliebige Ordnungen k formuliert. Dazu war es notwendig, die Funktion $\mu(x)$ in adäquater Weise – nämlich als bedingte Pseudodichte – zu verstehen und $\mu_k(x) = P_k(x)/F_k(x)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ zu definieren. So war es möglich, die allgemeine, normierte Lösung der Integralgleichung (3.10) zu berechnen. Sie hängt ausschließlich von der speziellen Wahl der bedingten Pseudodichte ab. Die verallgemeinerten Poisson-Verteilungen sind als nicht entfaltbare, spezielle Lösungen mit $\mu_k(x) = \mu(x)$ in der allgemeinen Lösung enthalten.

Analog zur nullten Ordnung wurde dann ein Potenz-Ansatz $\mu_k(x) \sim x^{q_k}$ formuliert, welcher direkt auf eine einparametrische Familie von Verteilungen $Q_k(q_k, x)$ führte. Sie stellt eine Verallgemeinerung der Brody-Verteilung des *nächsten* Nachbarns auf höhere Ordnungen dar. Diese wurde dann mit der GOE-Verteilung für $k = 1$ und den Daten des diamagnetischen Kepler-Problems bei konstanter skaliertener Energie verglichen. Es konnte gezeigt werden, daß im klassisch ergodischen Bereich des Systems die „höheren Wigner-Verteilungen“ gut durch den Potenz-Ansatz für $\mu_k(x)$ reproduziert werden. Hier sollte universelles Verhalten vorliegen, so daß die zu Tage geförderten Ergebnisse auch auf andere ergodische Systeme übertragbar wären.

Die Ergebnisse dieser Arbeit legen aber auch die Approximierbarkeit der GOE-Abstandsverteilungen in den Ordnungen $k > 1$ durch die „verallgemeinerten Brody-Verteilungen“ $Q_k(q_k, x)$ nahe. Die Überprüfung dieses Sachverhalts muß angesichts der numerischen Schwierigkeiten bei der Berechnung von $P_{\text{goe}, k}(x)$ einer weiteren Untersuchung vorbehalten bleiben.

Alle hier gemachten empirischen Aussagen haben einen Adhoc-Charakter: Sie setzen das spezielle Aussehen der bedingten Pseudodichte voraus. Die Frage, ob es sich dabei um eine Potenzfunktion handelt oder nicht, bedarf einer *physikalischen Begründung*. Es steht zu erwarten, daß diese nur für den universellen, ergodischen Bereich möglich ist.

Anhang A

Gaußsches orthogonales Ensemble

In der Zufallsmatrizen-Theorie¹ werden Matrizen betrachtet, deren Elemente zufallsverteilte reelle oder komplexe Zahlen sind. Dabei ist von entscheidender Wichtigkeit, welcher Symmetrieklasse die Matrizen und die Verteilungen ihrer Elemente angehören. Für diese Arbeit ist die orthogonale Symmetrie relevant, weil das untersuchte Beispielsystem eine antiunitäre Symmetrie und einen ganzzahligen Gesamtdrehimpuls besitzt. Auf der Menge der Matrizen einer Symmetrieklasse (z. B. der symmetrischen Matrizen) werden zunächst einmal eine Metrik und ein Maß definiert. Das *Matrizenensemble* ist dann die Wahrscheinlichkeitsdichte der Elemente bezüglich dieses Maßes. Für die Definition eines Ensembles sind die *statistische Unabhängigkeit* der Elemente und die *Invarianz* der Verteilung hinreichend.

Das *Gaußsche orthogonale Ensemble* (kurz GOE) ist definiert auf der Menge aller reellen symmetrischen $n \times n$ -Matrizen $H = H^t$ mit

- (i) einer Wahrscheinlichkeitsdichte $p_{\text{goe}}(H)$, die invariant ist unter orthogonalen Transformationen $H \mapsto H' = A^t H A$ mit $A \in O(n)$, d. h.

$$p_{\text{goe}}(H') dH' = p_{\text{goe}}(H) dH, \quad (\text{A.1})$$

- (ii) $n(n+1)/2$ statistisch unabhängigen Zufallsvariablen $H_{ij} (i \leq j)$, d. h.

$$p_{\text{goe}}(H) = \prod_{1 \leq i \leq j \leq n} f_{ij}(H_{ij}). \quad (\text{A.2})$$

Die Faktorisierungsbedingung (A.2) ist der mathematische Ausdruck der statistischen Unabhängigkeit der einzelnen Matrixelemente². Für das Gaußsche orthogonale Ensemble wird als Metrik auf dem Matrizenraum

$$ds^2 = \sum_{1 \leq i \leq n} (dH_{ii})^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} (dH_{ij})^2, \quad (\text{A.3})$$

¹Siehe die ausführliche Monographie [16] oder O. Bohigas, „Random matrices and chaotic dynamics“ in [9], S. 87–199.

²Siehe auch Anhang B, insbesondere Gleichung (B.1).

und das dadurch induzierte Maß

$$dH = 2^{\frac{n(n-1)}{4}} \prod_{1 \leq i \leq n} dH_{ii} \prod_{1 \leq i < j \leq n} dH_{ij} \quad (\text{A.4})$$

gewählt.

Den anderen Symmetrieklassen können analoge Matrizenensembles³ zugeordnet werden: Das Gaußsche unitäre Ensemble (GUE) ist ein Modell nichtbewegungsumkehrinvarianter Systeme und das Gaußsche symplektische Ensemble (GSE) eines für bewegungsumkehrinvariante Systeme mit halbzahligem Gesamtdrehimpuls ohne zusätzliche räumliche Symmetrien. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $p_{\text{goe}}(H)$ kann nun gezeigt werden⁴, daß sie die allgemeine Form

$$p_{\text{goe}}(H) = K_n \exp\left(-\frac{\text{Sp}(H^2)}{4\sigma^2}\right) \quad (\text{A.5})$$

annimmt. Die einzelnen Matrixelemente H_{ij} sind also Gauß-verteilte Zufallsvariablen, deren Streuung (Wurzel der Varianz) durch die Konstante σ festgelegt wird. K_n ist eine Normierungskonstante.

Durch Diagonalisierung geht daraus die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte (oder gemeinsame Dichte) der Eigenwerte $(x_i)_{i=1,\dots,n}$ hervor:

$$\tilde{p}_{\text{goe}}(x_1, \dots, x_n) = C_n \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \prod_{1 \leq i < j \leq n} |x_i - x_j|. \quad (\text{A.6})$$

C_n ist eine Normierungskonstante, die nur von der Matrizendimension n abhängt. Für die anderen beiden Ensembles (GUE und GSE) erhält man ganz ähnliche Ausdrücke. Von der Verbundwahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{p}_{\text{goe}}(x_1, \dots, x_n)$ ausgehend, werden in der GOE-Theorie alle anderen statistischen Eigenschaften des orthogonalen Ensembles berechnet.

Aus der gemeinsamen Dichte kann durch Integration⁵ die GOE-Abstandsverteilung k -ter Ordnung $P_{\text{goe},k}(x)$ bestimmt werden. In den höheren Ordnungen ($k > 0$) sind die Ausdrücke für $P_{\text{goe},k}(x)$ numerisch und analytisch sehr kompliziert. In nullter Ordnung erhält man die Wigner-Verteilung $P_{\text{wig}}(x)$. Das asymptotische Verhalten für $x \rightarrow 0$ ist gegeben⁶ durch

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{P_{\text{goe},k}(x)}{x^\alpha} = \text{const} \quad \text{mit} \quad \alpha := k + \frac{1}{2}(k+1)(k+2). \quad (\text{A.7})$$

In nullter Ordnung liegt also eine lineare ($\alpha = 1$) und in erster Ordnung eine quartische „Niveau-Abstoßung“ ($\alpha = 4$) vor.

³Siehe z. B. [10].

⁴Siehe [16].

⁵Das Verfahren ist identisch mit dem in Kap. 3.1 vorgestellten mit dem einzigen Unterschied, daß der Definitionsbereich bei $-\infty$ statt bei 0 beginnt, so daß die Integration über ganz \mathbb{R} ausgeführt werden muß. Siehe dazu [16].

⁶Siehe [17].

Anhang B

Bedingte Wahrscheinlichkeit

Ein Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) besteht aus drei Teilen¹: Dem Merkmalraum Ω (Menge der Elementarereignisse); dem Ereignisraum \mathcal{A} , welcher aus Teilmengen von Ω besteht ($\Omega \supset A \in \mathcal{A}$), die gewisse algebraische Eigenschaften haben (\mathcal{A} heißt σ -Algebra auf Ω) und schließlich eine Mengenfunktion $P : \mathcal{A} \rightarrow [0, 1]$, dem Wahrscheinlichkeitsmaß, das ein auf 1 normiertes Maß ($P(\Omega) = 1$) auf \mathcal{A} ist. Ein Ereignis ist also in der Wahrscheinlichkeitstheorie eine Menge $A \in \mathcal{A}$, bestehend aus einem oder mehreren Elementarereignissen (Punkten aus Ω), die alle durch ein logisches (bzw. Mengen-) „Oder“ zu einem (Gesamt-)Ereignis vereinigt werden.

Die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses A ist demnach der Wert $P(A)$, wobei $0 \leq P(A) \leq 1$ gilt. Die mengentheoretische Formulierung der Wahrscheinlichkeit erlaubt es nun, die Konjunktion (Und-Verknüpfung) zweier Ereignisse als Schnittmenge beider Einzelereignisse darzustellen: $P(A \cap B)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß A und B eintreten. Man nennt $P(A \cap B)$ auch *Verbundwahrscheinlichkeit*. Zwei Ereignisse A und B heißen *statistisch unabhängig*, genau dann, wenn

$$P(A \cap B) = P(A)P(B) \tag{B.1}$$

gilt.

In natürlicher Weise läßt sich nun die *bedingte Wahrscheinlichkeit*, also die Wahrscheinlichkeit, daß A eintritt, falls B vorliegt, definieren:

$$P(A|B) := \frac{P(A \cap B)}{P(B)}. \tag{B.2}$$

$P(A|B)$ heißt „Wahrscheinlichkeit von A unter B “. Es ergibt sich damit unmittelbar eine zu (B.1) äquivalente Formulierung der statistischen Unabhängigkeit:

$$P(A|B) = \frac{P(A)P(B)}{P(B)} = P(A), \tag{B.3}$$

falls A unabhängig von B ist. In einem solchen Fall ist also die bedingte Wahrscheinlichkeit identisch mit der unbedingten – die Bedingung hat gewissermaßen keinen Einfluß auf das statistische Verhalten.

¹Siehe z. B. [3].

Die bedingte Wahrscheinlichkeit $P(A|B)$ muß *streng* von der Verbundwahrscheinlichkeit $P(A \cap B)$ unterschieden werden: Die bedingte Wahrscheinlichkeit ist bei fester Bedingung B in der Variablen A wieder ein (gewöhnliches) Wahrscheinlichkeitsmaß – für die Verbundwahrscheinlichkeit gilt dieses allerdings nicht! So ist z. B.

$$P(\Omega|B) = \frac{P(\Omega \cap B)}{P(B)} = \frac{P(B)}{P(B)} = 1, \quad (\text{B.4})$$

jedoch im anderen Falle gilt

$$P(\Omega \cap B) = P(B) \leq 1. \quad (\text{B.5})$$

Anhang C

Bedingte Dichte

Gegeben sei ein Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) . Unter einer *reellen Zufallsvariablen* versteht man eine Borel-meßbare Abbildung¹ $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, die eine statistische Größe (z. B. die zufällige Lage eines Energie-Eigenwertes) modellieren soll. Die *Verteilung* von X ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß X einen Wert aus der Borel-Menge² $B \subset \mathbb{R}$ annimmt:

$$P_X(B) := P(\omega \in \Omega \mid X(\omega) \in B) = P(X \in B) \quad (\text{C.1})$$

Die *gemeinsame Verteilung* zweier Zufallsvariablen X, Y wird analog definiert:

$$P_{X,Y}(B_1 \times B_2) := P(X \in B_1, Y \in B_2) \quad (\text{C.2})$$

Kann man die Verteilung einer Zufallsvariablen X als Integral über eine reelle Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ schreiben, so nennt man diese die *Wahrscheinlichkeitsdichte* von X :

$$P(X \in B) = \int_B f(x) dx. \quad (\text{C.3})$$

Die Normierung einer Wahrscheinlichkeitsdichte heißt, daß

$$P(X \in \Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx. \quad (\text{C.4})$$

gilt. Der einfachen Dichte entsprechend, ist die *gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte*³ für zwei Zufallsvariablen X, Y definiert als eine Funktion $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$P(X \in B_1, Y \in B_2) = \int_{B_2} \int_{B_1} f(x, y) dx dy. \quad (\text{C.5})$$

Die *Marginaldichte* $f_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte von Y , wenn X irgendeinen Werte hat, also

$$f_0(y) := \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dx. \quad (\text{C.6})$$

¹Was die Borel-Meßbarkeit genau bedeutet, ist hier nicht weiter relevant. Siehe [3].

²Borel-Mengen sind bestimmte Teilmengen von \mathbb{R} , nämlich diejenigen, die der Borel-Algebra angehören. Alle Intervalle sind Borel-Mengen. Siehe [3]

³Um das logische „Und“ zu betonen, wird sie auch Verbunddichte genannt.

Die *bedingte Verteilung*⁴ von X unter der Bedingung, daß $Y = y$ ($y \in \mathbb{R}$ sei ein fester Wert) ist die Wahrscheinlichkeit

$$P_{X|Y=y}(B) = P(X \in B | Y = y). \quad (\text{C.7})$$

Mit Hilfe der Marginaldichte und der gemeinsamen Dichte kann man nun die bedingte Verteilung von X unter $Y = y$ in einer anderen Weise ausdrücken. Die *bedingte Dichte*⁵ ist der Quotient

$$f(x|y) := \frac{f(x, y)}{f_0(y)}, \quad (\text{C.8})$$

der eine formale Analogie zur bedingten Wahrscheinlichkeit (B.2) darstellt. Aus dieser Definition ergibt sich schließlich

$$P(X \in B | Y = y) = \int_B f(x|y) dx \quad (\text{C.9})$$

für die bedingte Verteilung, was in gewisser Weise der Gleichung (C.3) entspricht. Man beachte, daß $f(x|y)$ für eine festes $y \in \mathbb{R}$ wieder eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist, also insbesondere

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x|y) dx = \frac{1}{f_0(y)} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dx = 1 \quad (\text{C.10})$$

gilt.

⁴Zur bedingten Wahrscheinlichkeit siehe auch Anhang B. Zur bedingten Verteilung siehe [3], S. 401.

⁵Siehe [3], S. 402.

Anhang D

Lineare Differentialgleichungen erster Ordnung

Die homogene lineare Differentialgleichung¹

$$\frac{dy}{dx} = f(x) y \quad (\text{D.1})$$

kann durch Trennung der Variablen gelöst werden:

$$\frac{dy}{y} = f(x) dx. \quad (\text{D.2})$$

Dann folgt

$$\ln\left(\frac{y}{y_0}\right) = \int_{x_0}^x f(x) dx \quad (\text{D.3})$$

mit $y_0 = y(x_0)$. Die Lösung für diese spezielle Wahl der Anfangsbedingung ist also durch

$$y(x) = y_0 \exp\left(\int_{x_0}^x f(\xi) d\xi\right) = \phi_0(x) \quad (\text{D.4})$$

gegeben. Die allgemeine Lösung von (D.1) ist gerade die Menge aller Vielfachen $c \phi_0(x)$ der speziellen Lösung. Sie ist auch enthalten in der allgemeine Lösung der *inhomogenen* lineare Differentialgleichung

$$\frac{dy}{dx} = f(x) y + g(x). \quad (\text{D.5})$$

Denn diese spannt einen affinen Unterraum zum Vektorraum der homogenen Lösungen auf: Die Lösungsschar von (D.5) hat die Form

$$\phi(x) = c \phi_0(x) + \phi_1(x) \quad (\text{D.6})$$

mit der speziellen Lösung $\phi_1(x)$ der vollen inhomogenen Gleichung und der allgemeinen homogenen Lösung $c \phi_0(x)$. Die spezielle Lösung gewinnt man durch

¹Siehe ergänzend zu diesem Anhang [1], §3.

Variation der Konstanten c . Dazu wird die variierte Lösung $c(x) \phi_0(x)$ in (D.5) eingesetzt, so daß

$$c(x) = \int_{x_0}^x \frac{g(\xi)}{\phi_0(\xi)} d\xi \quad (\text{D.7})$$

zu einer speziellen Lösung führt. Es ergibt sich somit

$$\phi_1(x) = \int_{x_0}^x \exp\left(\int_{\xi}^x f(\zeta) d\zeta\right) g(\xi) d\xi \quad (\text{D.8})$$

mit der Anfangsbedingung $y(x_0) = 0$.

Literaturverzeichnis

- [1] Arnol'd, Vladimir Igorevič. *Ordinary Differential Equations*. Übers. Roger Cooke. Lizenzausg. der 3., russ. Aufl. Berlin: Springer 1992.
- [2] Ballentine, Leslie E. *Quantum Mechanics*. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, 1990.
- [3] Bauer, Heinz. *Wahrscheinlichkeitstheorie*. 4., völlig überarb. u. neugest. Aufl. Berlin: de Gruyter, 1991.
- [4] Berry, M. V. „Quantum chaology“. *Proceedings of the Royal Society of London A* 413 (1987): 183–198.
- [5] Berry, M. V., und Marko Robnik. „Semiclassical level spacings“. *Journal of Physics A: Mathematical and General Physics* 17 (1984): 2413–2421.
- [6] Bohigas, Oriol, und Marie-Joya Giannoni. „Chaotic Motion and Random Matrix Theories“. *Lecture Notes in Physics 209: Mathematical and Computational Methods in Nuclear Physics*. Hg. J. S. Dehasa [u.a]. Berlin: Springer, 1984. 1–99.
- [7] Brody, T. A. „A Statistical Measure for the Repulsion of Energy Levels“. *Lettere al Nuovo Cimento* 7 (1973): 482–484.
- [8] Friedrich, Harald, und Dieter Wintgen. „The Hydrogen Atom in a Uniform Magnetic Field — An Example of Chaos“. *Physics Reports* 183 (1989): 37–79.
- [9] Giannoni, Marie-Joya, A. Voros, und J. Zinn-Justin Hg. *Les Houches Session LII (1989): Chaos et physique quantique / Chaos and Quantum Physics*. Amsterdam: North-Holland, 1991.
- [10] Haake, Fritz. *Quantum Signatures of Chaos*. 2., korrig. Aufl. Berlin: Springer, 1992.
- [11] Hasegawa, Hiroshi, Marko Robnik, und Günter Wunner. „Classical and Quantal Chaos in the Diamagnetic Kepler Problem“. *Progress of Theoretical Physics Supplement* 98 (1989): 198–286.
- [12] Hasegawa, Hiroshi, H. J. Mikeska, und H. Frahm. „Stochastic formulation of energy-level statistics“. *Physical Review A* 38 (1988): 395–399.

- [13] Hönig, A., und Dieter Wintgen. „Spectral properties of strongly perturbed Coulomb systems: Fluctuation properties“. *Physical Review A* 39 (1989): 5642–5657.
- [14] Kahn, Peter B. „Energy Level Spacing Distributions“. *Nuclear Physics* 41 (1963): 159–166.
- [15] Main, Jörg. „Das hochangeregte Wasserstoffatom im Magnetfeld und in gekreuzten magnetischen und elektrischen Feldern“. Diss. Bielefeld , 1991.
- [16] Mehta, Madan Lal. *Random Matrices*. 2., verb. u. erw. Aufl. London: Academic Press, 1991.
- [17] Porter, Charles E. *Statistical Theories of Spectra: Fluctuations*. London: Academic Press, 1965.
- [18] Zeller, Gudrun. „Berechnung von Rydbergzuständen des Wasserstoffatoms in starken Magnetfeldern und Anwendungen in der Quantenchaologie“. Diss. Tübingen, 1990.