
Eine Spielmodell des Elektromagnetismus auf planaren Graphen

Author:
Oliver SKOČEK

Inhaltsverzeichnis

1	Planare Graphen	4
2	Funktionenräume und Operatoren	10
3	Das Poisson Problem	14
4	Die Maxwell-Gleichungen	20
5	Potentialformulierung der Maxwellgleichungen	23
6	Kanonische Quantisierung des elektromagnetischen Feldes	28
7	Die Klein-Gordongleichung	43
8	Kanonische Quantisierung des Klein-Gordon Feldes	55
9	Zweite Quantisierung der Klein-Gordongleichung	63
10	Skalare Quantenelektrodynamik des planaren Graphen	64
11	Numerische Simulation der skalaren Quantenelektrodynamik auf einem Tetraeder	72

Einführung

Die Absicht dieser Arbeit ist es ausgehend von der Theorie elektrischer Netzwerke eine Theorie elektromagnetischer Phänomene in der Ebene zu entwickeln. Dabei soll kein Kontinuumsübergang gemacht werden sondern allein mit planaren Graphen gearbeitet werden. Zu diesem Zwecke werden einige grundlegende Begriffe der Graphentheorie eingeführt. Darauf aufbauend werden dann im zweiten Kapitel Funktionenräume auf diesen Graphen definiert und analog zur mehrdimensionalen Analysis wird eine Theorie mit Analogien zum gewohnten Gradienten, der Divergenz und dem Rotor vorgestellt. Abgeschlossen wird diese Theorie durch ein zum de Rham Komplex analoges Theorem.

Im dritten Kapitel wird dann ein verallgemeinertes Poissonproblem vorgestellt, dass direkt verwendet werden kann um Widerstandsnetzwerke zu lösen. Dies zeigt, dass viele Analogien zwischen dem Problem der Widerstandsnetzwerke und dem Poissonproblem der Elektrostatik existieren.

Im vierten Kapitel wird dann eine Version der Maxwell-Gleichungen auf planaren Graphen vorgestellt und zwei wichtige Eigenschaften, Energieerhaltung und Ladungserhaltung behandelt. Im darauffolgenden Kapitel werden die Maxwellgleichungen in Potentialformulierung vorgestellt und ihre Symmetrie die Eichtransformation vorgestellt. Im Kapitel "kanonische Quantisierung" wird dann der Sprung von einer klassischen Theorie in eine Quantentheorie gemacht und die Schrödingergleichung elektromagnetischer Felder konstruiert.

Abgeschlossen wird das Kapitel mit der Einführung von Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren und der Photoneninterpretation der Anregungen des freien Feldes.

Im siebtem Kapitel wird die klassische Klein-Gordon Theorie, also der Theorie um die Klein-Gordon Gleichung mit einem externen elektromagnetischen Feld vorgestellt und anschließend im nächsten Kapitel quantisiert, mitsamt Teilcheninterpretation. Diese Teilchen sind wie im Fall des Photons Bosonen und haben nicht allzuviel mit den Elektronen gemeinsam. Jedoch haben sie Masse, was wie gezeigt wird dazu führt, dass wir einen Ortsoperator konstruieren können.

Im neunten Kapitel wird parallel zur kanonischen Quantisierung des Klein-Gordon Feldes die analoge zweite Quantisierung und damit verbundene

Rechtfertigung der Teilcheninterpretation

In den letzten Kapiteln konstruieren wir einen Hilbertraum auf dem wir eine Theorie der Quantenelektrodynamik auf planaren Graphen formulieren können und diskutieren numerische Simulationen auf einem Spezialfall.

Kapitel 1

Planare Graphen

Ein Graph besteht aus Ecken V und Kanten E . Die Ecken und Kanten stehen in Beziehung zueinander. Man sagt eine Kante *verbindet* zwei Ecken. Wir wollen nur solche Graphen betrachten, deren Kanten jeweils zwei unterschiedliche Ecken verbinden.

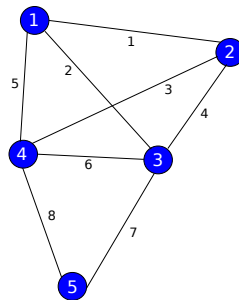


Abbildung 1.1: Beispiel Graph.

Die Beziehung zwischen Ecken und Kanten kann durch eine Matrix dargestellt werden. Der vertikale Index der Matrix steht für die Kanten und der horizontale Index steht für die Ecken. Die Matrix ist Eins falls die Kante die Ecke mit einer anderen Ecke verbindet und sonst Null. Diese Matrix nennt man die **Inzidenzmatrix** des Graphen.

Als Beispiel betrachte die Inzidenzmatrix des Graphen in Abbildung 2.1.

1	1	0	0	0
1	0	1	0	0
0	1	0	1	0
0	1	1	0	0
1	0	0	1	0
0	0	1	1	0
0	0	1	0	1
0	0	0	1	1

Im Grunde interessieren wir uns nicht für die spezielle Realisierung von Ecken und Kanten, sondern für die Verbindungsstruktur, die genau durch die Inzidenzmatrix festgelegt wird. Dies legt folgende Definition nahe.

Definition 1.1. Ein **Graph** ist eine Matrix (Inzidenzmatrix) deren Zeilen-summe zwei ist. Zwei Graphen mit Inzidenzmatrizen X und Y sind gleich falls man X aus Y durch Vertauschung von Zeilen und Spalten erhalten kann.

Bemerkung 1.2. Alternativ kann ein Graph auch durch eine Adjazenzmatrix definiert werden. Eine solche Matrix ist quadratisch und beide Indizes stehen für die Ecken des Graphen. Die Adjazenzmatrix gibt an wie viele Kanten ein gegebenes Paar von Ecken verbindet. Als Beispiel die Adjazenzmatrix unseres Beispielgraphen.

$$\begin{array}{ccccc} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

Manchmal ist es notwendig über Teile von Graphen zu sprechen. Hierzu dient das Konzept des Teilgraphen. Ein Teilgraph eines Graphen G ist ein Graph, den man durch entfernen von Ecken und Kanten aus G erhält. Bedenke dabei, dass mit jeder Ecke auch alle diese Ecke verbindenden Kanten entfernt werden müssen.

Definition 1.3. Sei G ein Graph mit Inzidenzmatrix X und H ein Graph mit Inzidenzmatrix Y , dann ist G ein **Teilgraph** von H , falls man die Matrix X durch entfernen von Zeilen oder Spalten aus der Matrix Y erhalten kann.

Betrachten wir hierzu einen Teilgraph des Beispielgraphen.

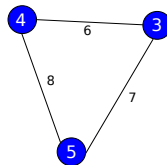


Abbildung 1.2: Teilgraph des Beispielgraphs.

Die zugehörige Inzidenzmatrix erhalten wir indem wir die ersten beiden Spalten entfernen und anschließend alle Zeilen, deren Summe ungleich zwei ist. Das Resultat ergibt dann für kannten 4, 7 und 8 folgende Inzidenz mit den Ecken 3, 4 und 5.

$$\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{array}$$

Eine spezielle Art von Teilgraph erhält man, wenn man eine Teilmenge U der Ecken fixiert und alle Kanten aus dem Graphen entfernt, die eine nicht in der Teilmenge U enthaltene Ecke verbinden. Man nennt so einen Graphen durch die Menge U **induzierten Teilgraph**. Der Teilgraph in Abbildung 2.2 ist ein solches Beispiel. Es ist der durch $U = \{3, 4, 5\}$ induzierte Teilgraph des Beispielgraphen.

Definition 1.4. Sei G ein Graph und n eine natürliche Zahl, dann nennt man eine Folge von Ecken (x_0, x_1, \dots, x_n) für die gilt, dass aufeinander folgende Ecken immer durch eine Kante verbunden sind, einen **Pfad** auf G . Falls $x_0 = x_n$ gilt, nennt man dies einen **geschlossenen Pfad**. Falls zusätzlich bis auf x_0 und x_n keine Ecke mehrfach vorkommt, nennt man den Pfad **einfach geschlossen**.

Man nennt G **zusammenhängend**, falls man von jeder Ecke von G jede andere Ecke über einen Pfad erreichen kann. Sei weiters $k \in \mathbb{N}$, dann sagt man ein Graph ist **k -fach zusammenhängend**, falls man $k - 1$ beliebige Kanten entfernen könnte und der resultierende Graph immer noch zusammenhängend wäre.

Alle Graphen werden von hier an als zusammenhängend angenommen. Allgemein lässt sich jeder Graph als Ansammlung von zusammenhängenden Teilgraphen darstellen, wodurch diese Annahme im Sinne einer Vereinfachung gerechtfertigt wird.

Definition 1.5. Ein Graph hat eine **planare Darstellung** wenn man den Graph auf einem Blatt Papier zeichnen kann, indem man für jede Ecke einen Punkt zeichnet und für jede Kante einen Strich zwischen den Eck-Punkten, die sie verbinden soll, ohne das sich dabei zwei Striche kreuzen.

Der Graph aus Abbildung 2.1 hat eine planare Darstellung. Um dies zu sehen muss man nur die Position von Ecke Nummer 2 verändern.

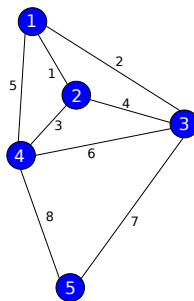


Abbildung 1.3: Beispiel Graph (planar).

Im Allgemeinen gibt es mehrere Wege wie ein bestimmter Graph gezeichnet werden kann. Es gibt sogar für ein und denselben Graphen oft mehrere planare Darstellungen.

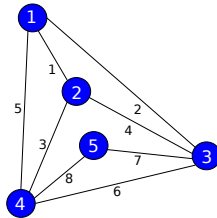


Abbildung 1.4: Beispiel Graph (planar) alternativ.

Es ist also zusätzliche Information notwendig um eine planare Darstellung eindeutig festzulegen. Diese zusätzliche Information kann über die Flächen aus denen sich die planare Darstellung zusammensetzt gegeben werden.

Definition 1.6. Sei G ein Graph, dann nennt man G einen **Zyklus** oder **zyklisch**, falls jede Ecke von G mit genau zwei Kanten verbunden ist.

Betrachten wir eine der planaren Darstellungen des Beispielgraphen. Eine **Fläche** ist hier ein Zyklus, der keine Ecke einschließt.

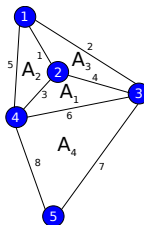


Abbildung 1.5: Beispiel Graph (planar) mit Flächen.

Bemerkung 1.7. Sei G ein Graph und $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ eine Menge von zyklischen induzierten Teilgraphen, sodass jede Kante von G in maximal zwei der Zyklen vorkommt und jede Ecke von G in mindestens einem der Zyklen vorkommt, dann gibt es eine eindeutige planare Darstellung des Graphen G , dessen Flächen genau die $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ sind.

Definition 1.8. Ein planarer Graph $G = (g, f)$ ist ein Graph g und eine Menge f von Zyklen aus g wie in Bemerkung 1.6. beschrieben. Sei weiters e eine Kante von g , dann sagt man e liegt am **Rand** des Graphen wenn e genau einmal in einer Fläche vorkommt. Der Teilgraph, der genau die am Rand liegenden Kanten enthält nennt man den **Rand des Graphen**.

Die in Bemerkung 1.6. beschriebene Struktur legt ein mit planaren Graphen eng verknüpftes Konzept nahe. Jede Kante des Graphen ist entweder ein Bindeglied zwischen zwei Flächen oder es liegt am Rand des Graphen. Die am Rand liegenden Kanten können wiederum als Bindeglied mit der den Graphen umgebenden Fläche, genannt A_∞ , angesehen werden und somit haben wir das Konzept des dualen Graphen entdeckt.

Definition 1.9. Es sei G ein planarer Graph, dann kann man einen neuen Graphen, den **dualen Graph** G^D , konstruieren, dessen Kanten mit denen von G übereinstimmen, aber dessen Ecken die Flächen von G zusammen mit der umgebenden Fläche sind, also $V = \{A_1, A_2, \dots, A_n, A_\infty\}$. Für eine gegebene Kante e und Ecke des dualen Graphen $v \in V$ ist die Inzidenzmatrix Eins falls e die Fläche v begrenzt und sonst Null.

Betrachte den dualen Graph des planaren Graphen aus Abbildung 1.5. Beachte die doppelte Kante zwischen Ecke A_4 und Ecke A_∞ .

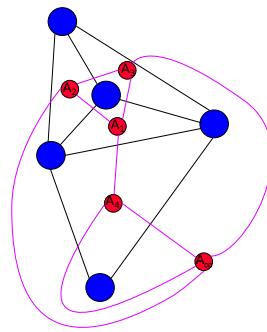


Abbildung 1.6: Dualer Graph des Beispielgraphen.

Die blauen Ecken symbolisieren die Ecken des Ausgangsgraphen, während die roten Ecken die Ecken des dualen Graphen darstellen. Die Platzierung von A_∞ ist beliebig gewählt. Offensichtlich bestimmt diese Wahl, welcher der Ecken des Ausgangsgraphen die umgebende Fläche des dualen Graphen darstellt.

Bemerkung 1.10. Der duale Graph G^D ist immer auch fast ein planarer Graph, denn jede Ecke von G kann mit einem Zyklus in G^D identifiziert werden, somit bleibt aber offen welche dieser Zyklen, die umgebende Fläche ist. Dies ist insbesondere von Bedeutung wenn man den dualen Graphen des dualen Graphen, den so genannten **bidualen Graphen** bildet. Um eine eindeutige Zuordnung zu erzwingen muss immer einer der Ecken ausgezeichnet werden oder man verzichtet auf die planare Darstellung und arbeitet mit konvexen Polyedern.

Bislang wurden nur "ungerichtete Graphen" behandelt, also solche deren Kanten keine ausgezeichnete Beziehung mit der einen oder der anderen durch

sie verbundenen Ecke haben. Graphen, deren Kanten eine solche Orientierung aufweisen, nennt man "gerichtete Graphen" und eine Adjazenzmatrix ist ein praktisches Weg um solche Strukturen zu beschreiben. Im Gegensatz zur Adjazenzmatrix eines ungerichteten Graphen wird im gerichteten Fall, einfach die Forderung nach Symmetrie der Matrix weggelassen.

Definition 1.11. Jeder planare Graph kann mit einer **Orientierung** ausgestattet werden, dies ist eine Funktion, die jeder Kante eine der Ecken zuordnet, die durch sie verbunden wird. Man stelle sich vor jede Kante ist ein Pfeil und die Orientierung gibt an auf welche Ecke sie zeigt. Man unterscheidet entsprechend eine **Spitzenfunktion** $x \mapsto p(x)$, welche die Ecke zuordnet, die an der Pfeilspitze liegt und die **Schaftfunktion** $x \mapsto q(x)$, welche die andere Ecke zuordnet.

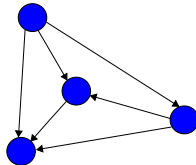


Abbildung 1.7: Graph mit Orientierung.

Zu einem gegebenen Graph gibt es $2^{|E|}$ Möglichkeiten, wobei E die Kantenmenge ist, einen gegebenen Graph mit einer Orientierung auszustatten und ihn hierdurch zu einem gerichteten Graphen zu erheben.

Bemerkung 1.12. Jede Orientierung auf einem planaren Graph G , bestimmt eindeutig eine zu ihr **duale Orientierung** auf dem dualen Graph. Sei hierzu A eine Fläche des planaren Graphen G , also ein induzierter Teilgraph, der ein Zyklus ist, und e eine Kante des Graphen, die auch in A liegt, dann setzen wir die Spitzenfunktion p_D der dualen Orientierung $p_D(e) = A$, falls e im planaren Graph G im Uhrzeigersinn bezüglich zu A orientiert ist.

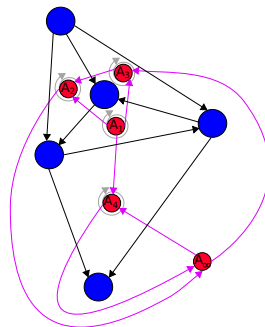


Abbildung 1.8: Orientierung und duale Orientierung.

Kapitel 2

Funktionenräume und Operatoren

Im letzten Kapitel wurden Graphen mit zusätzlicher Struktur beschrieben, nämlich planare Graphen und das Konzept des dualen Graphen. In diesem Kapitel sollen die drei Arten von Funktionen auf planaren Graphen und Operatoren, die diese Funktionen aufeinander abbilden vorgestellt werden.

Definition 2.1. Sei G ein planarer Graph und G^D sein dualer Graph, des weiteren sei V die Menge der Ecken, E die Menge der Kanten und A die Menge der Flächen (inklusive umgebende Fläche), dann unterscheiden wir drei verschiedene (endlichdimensionale) Funktionenräume auf dieser Struktur, den Raum der Kantenfunktionen $\mathfrak{K} = \{f|f : E \rightarrow \mathbb{R}\}$, den Raum der Eckfunktionen $\mathfrak{E} = \{f|f : V \rightarrow \mathbb{R}\}$ und den Raum der Flächenfunktionen $\mathfrak{F} = \{f|f : A \rightarrow \mathbb{R}\}$. Die analogen komplexen Funktionenräume werden abgekürzt als $\mathfrak{F}_{\mathbb{C}}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}$ und $\mathfrak{K}_{\mathbb{C}}$.

Es gibt eine natürliche Beziehung zwischen diesen drei Räumen.

Definition 2.2. Sei G ein Graph, $f \in \mathfrak{E}(G)$ eine Eckfunktion auf G , seien weiters p und q die Spitzefunktion und Schaftfunktion einer Orientierung auf G , dann nennt man $\text{grad}(f) \in \mathfrak{K}(G)$ definiert durch

$$\text{grad}(f)(e) = f(p(e)) - f(q(e))$$

für eine beliebige Kante e den Gradienten von f .

Definition 2.3. Sei G ein Graph, $f \in \mathfrak{K}(G)$ eine Kantenfunktion auf G , seien weiters p und q die Spitzefunktion und Schaftfunktion einer Orientierung auf G , dann nennt man $\text{div}(f) \in \mathfrak{E}(G)$, definiert durch:

$$\text{div}(f)(x) = \sum_{\acute{e} \in E, q(\acute{e})=x} f(\acute{e}) - \sum_{e \in E, p(e)=x} f(e)$$

für eine beliebige Ecke x die Divergenz von f .

Der Gradient hebt eine Eckfunktion auf die Kanten, und die Divergenz eine Kantenfunktion auf die Ecken. Der Graph G und der duale Graph G_D haben dieselben Kantenfunktionen, daher bildet dieser Raum eine Verbindung zwischen Gradient und Divergenz des Graphen und des dualen Graphen. Der Gradient und die Divergenz des dualen Graphen werden durch grad_D respektive div_D symbolisiert. Falls eine Kantenfunktion als Fluss interpretiert wird, entspricht die Divergenz der Kantenfunktion dem Nettofluss von den Ecken weg.

Satz 2.1. *Sei G ein planarer Graph mit Orientierung, dann sind der Gradient und die Divergenz lineare Operatoren und es gilt:*

$$\text{div} = -\text{grad}^T$$

wobei sich die Adjunktion auf das Standardskalarprodukt bezieht.

Beweis. Sei $u \in \mathfrak{E}(G)$ und $v \in \mathfrak{K}$, dann schreiben wir das Skalarprodukt:

$$\begin{aligned} \langle v, \text{grad}(u) \rangle_{\mathfrak{K}} &= \sum_{x \in E} v(x) * (u(p(x)) - u(q(x))) = \\ &= \sum_{x \in E} v(x) * u(p(x)) - \sum_{x \in V} v(x) * u(q(x)) = \\ &= \sum_{e \in V} u(e) * \sum_{j \in E, p(j)=e} v(j) - \sum_{e \in V} u(e) * \sum_{j \in E, q(j)=e} v(j) = \\ &= -\langle \text{div}(v), u \rangle_{\mathfrak{E}} \end{aligned}$$

□

Definition 2.4. *Sei G ein planarer Graph mit Orientierung und $f \in \mathfrak{K}(G)$, $(x_i)_{i=1}^n$ ein Pfad auf G , $(e_i)_{i=1}^{n-1}$ die Folge der Kanten, die für jedes $1 \leq i \leq n-1$ x_i und x_{i+1} verbinden und es sei σ_i für jedes $1 \leq i \leq n-1$ gleich -1 falls $p(e_i) = x_i$ ist und sonst $+1$, dann nennt man die Summe*

$$\sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i f(e_i)$$

die **Pfadsumme**.

Satz 2.2. *Sei G ein planarer Graph mit Orientierung, $f \in \mathfrak{K}(G)$ sodass $\text{div}_D(f) = 0$, dann gilt dass für jeden geschlossenen Pfad in G die Pfadsumme gleich Null ist.*

Beweis. Zu allererst reicht es einfach geschlossene Pfade zu betrachten. Diese Einschränkung ist zulässig weil sich für alle anderen geschlossenen Pfade die Pfadsumme sich als Summe solcher einfach geschlossenen Pfade schreiben lässt.

Jeder einfach geschlossene Pfad zerteilt den Graph in zwei Teilgraphen, sodass die Vereinigung der Teilgraphen ganz G ist und der Durchschnitt nur den geschlossenen Pfad enthält. Jener Teilgraph, der keinen Teil des Randes von G enthält ist der innere Graph.

Sei $f \in \mathfrak{K}(G)$, dann gilt für jeden Zyklus in G , dass falls er als Pfad gegen den Uhrzeigersinn orientiert geschrieben wird, die Pfadsumme gleich dem Wert von div_D ist.

Sei nun $(x_i)_{i=1}$ ein einfach geschlossener Pfad, dann können wir die Pfadsumme als Summe über alle Zyklen des zugehörigen inneren Graphen schreiben, da die Pfade über die Zyklen immer als gegen den Uhrzeigersinn orientiert angenommen werden, heben sich alle Kantenwerte auf, die nicht zum Pfad $(x_i)_{i=1}$ gehören. Da $\text{div}_D(f) = 0$ ist, ist somit auch die Pfadsumme gleich Null. \square

Es besteht eine Analogie der hier definierten Operatoren zu den Differentialoperatoren der Vektoranalysis. Interessanterweise entspricht die duale Divergenz der Rotation. Die Analogie untermauernd kann man folgendes Theorem formulieren.

Theorem 2.5 (Der de Rham Komplex). *Die Operatoren grad , div , grad_D und div_D erfüllen folgende exakte Sequenzen, daher das Bild der Abbildungen entspricht dem Kern der nachfolgenden Abbildung. Beachte, dass \mathbb{R} in den Formeln für die dem entsprechenden Raum zugehörigen konstanten Funktionen steht.*

$$(2.1) \quad \mathbb{R} \longrightarrow \mathfrak{E}(G) \xrightarrow{\text{grad}} \mathfrak{K}(G) \xrightarrow{\text{div}_D} \mathfrak{F}(G)/\mathbb{R} \longrightarrow 0$$

$$(2.2) \quad \mathbb{R} \longrightarrow \mathfrak{F}(G) \xrightarrow{\text{grad}_D} \mathfrak{K}(G) \xrightarrow{\text{div}} \mathfrak{E}(G)/\mathbb{R} \longrightarrow 0$$

Beweis de Rham Komplex. Es genügt Gleichung 2.1 in Theorem 2.4 zu beweisen, da 2.2 durch Anwendung von 2.1 auf den dualen Graphen folgt.

Erste zu beweisende Aussage: Der Kern von grad ist genau der Raum der konstanten Eckfunktionen.

Da G zusammenhängend ist und da grad an einer Kante nur Null sein kann wenn beide Ecken, welche die Kante verbindet, den selben Wert haben, ist $\text{grad}(f)$ genau dann Null wenn f konstant ist.

Zweite zu beweisende Aussage: Das Bild von grad ist genau der Kern von div_D .

Sei a ein Zyklus von G , und $(x_i)_{i=1}^k$ ein Pfad der die Ecken des Zyklus gegen den Uhrzeigersinn durchläuft und $f \in \mathfrak{E}$, dann gilt:

$$\operatorname{div}_D(\operatorname{grad}(f)) = \sum_{i=1}^{k-1} \sigma_i * \overbrace{\sigma_i * (f(x_{(i+1) \bmod k}) - f(x_{i \bmod k}))}^{\operatorname{grad}}$$

Da ja $k \bmod k = 0$ gilt, kommt in der Summe jeder Wert von f genau einmal mit positiven und einmal mit negativen Vorzeichen vor. Daher die Summe ist gleich Null.

Es fehlt noch zu zeigen, dass jedes Element im Kern von div_D auch im Bild von grad ist.

Sei f eine Kantenfunktion, sodass gilt $\operatorname{div}_D(f) = 0$, dann gilt wegen dem Satz 2.2, dass für beliebige Ecken $a, b \in V$ gilt, dass die Pfadsummen für alle Pfade, die in a starten und in b enden, gleich sind.

Wählen wir nun eine beliebige Ecke x_0 , weil G zusammenhängend ist, können wir von x_0 zu jeder Ecke in G einen Pfad bilden um $F \in (E)(G)$ zu definieren, sodass für jede Ecke x $F(x)$ gleich der Pfadsumme eines Pfades von x_0 nach x hat. Dies ist ja eindeutig. Es gilt nun $\operatorname{grad}(F) = f$.

Die letzte zu beweisende Aussage: Das Bild von div_D ist genau das orthogonale Komplement der konstanten Flächenfunktionen.

Wegen des Satzes 2.1 und der ersten Aussage in diesem Beweis folgt die Aussage. \square

Kapitel 3

Das Poisson Problem

Ein klassisches Problem der Theorie elektrischer Netzwerke sowie der Elektrostatik ist das (verallgemeinerte) Poissonproblem. Dieses Problem wird hier in einigen seiner Facetten vorgestellt und basierend auf der bisher behandelten Graphentheorie formuliert und gelöst.

Das verallgemeinerte Poisson Problem Sei G ein Graph, ∂ eine Teilmenge der Ecken, r eine positive Kantenfunktion und f und g Eckfunktionen, dann wird eine Eckfunktion u gesucht sodass gilt:

$$(3.1) \quad -\operatorname{div}(r * \operatorname{grad}(u))(x) = f(x) \text{ falls } x \notin \partial$$

$$(3.2) \quad u(x) = g(x) \text{ falls } x \in \partial$$

Die Bedingung 3.2 ist motiviert durch Randwertprobleme aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen.

Definition 3.1. Sei G ein planarer Graph mit Orientierung, r eine positive Kantenfunktion, dann nennt man Δ_r , definiert durch

$$\Delta_r(u) = -\operatorname{div}(r * \operatorname{grad}(u)) \text{ falls } u \in \mathfrak{E}(G)$$

den *r -gewichteten Laplace Operator*

Die Formulierung für elektrische Netzwerke Gegeben ein Netzwerk(Graph) bestehend aus Spannungsquellen, Stromquellen und linearen Komponenten (elektrische Widerstände), finde die elektrische Spannung zwischen beliebigen zwei Punkten im Netzwerk, und für jeden Leiter im Netzwerk, den durchfließenden elektrischen Strom.



Abbildung 3.1: Beispiel Stromkreis.

Die Formulierung in der Elektrostatik Sei Ω eine offene Teilmenge des \mathbb{R}^3 mit glatten Rand $\partial\Omega$ und ρ die elektrische Ladungsdichte in Ω . Gesucht ist das Potential $\phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ sodass:

$$(3.3) \quad \Delta\phi(x) = \rho(x) \text{ falls } x \in \Omega$$

$$(3.4) \quad \phi(x) = 0 \text{ falls } x \in \partial\Omega$$

Physikalisch wird Ω ein Hohlraum in einem guten elektrischen Leiter, wie etwa einem Metall, sein, da ein Solcher das Potential am Rand des Hohlraumes auf einen konstanten Wert zwingt.

Die Elektrostatik lebt im \mathbb{R}^3 , daher ist die bisher entwickelte Theorie nur in Grenzfällen anwendbar. Dieser Spezialfall tritt ein falls ρ und Ω o.B.d.A entlang der z-Achse konstant sind, daher das Problem effektiv zwei Dimensional wird. Für genau diesen Fall wird eine Theorie der zweidimensionalen Maxwell-Gleichungen im nächsten Kapitel entwickelt.

Satz 3.1. *Sei G ein Graph, r eine positive Kantenfunktion und Δ_r der r -gewichtete Laplace Operator, dann gilt:*

- *Die Form der Matrix Δ_r ist unabhängig von der gewählten Orientierung auf G .*
- *Δ_r ist symmetrisch.*
- *Δ_r ist positiv semidefinit.*
- *Der Kern von Δ_r ist der Raum der konstanten Eckfunktionen.*

Beweis. Seien p_0 und p_1 Orientierungen auf G und grad_0 und grad_1 die zugehörigen Gradienten, dann gilt:

$$\text{grad}_0 = D * \text{grad}_1$$

wobei D eine Diagonalmatrix ist, deren Einträge ± 1 sind. Wegen Satz 2.1 folgt die erste Aussage.

Die zweite Aussage folgt direkt aus der Definition von Δ_r und Satz 2.1. Seien hierzu u und $v \in \mathfrak{E}$, dann gilt:

$$\langle u, \Delta_r(v) \rangle_{\mathfrak{E}} = \langle \sqrt{r} * \text{grad}(u), \sqrt{r} * \text{grad}(v) \rangle_{\mathfrak{K}}$$

Analog zeigt man die dritte Aussage, indem man $u = v$ setzt.

$$\langle \sqrt{r} * \text{grad}(u), \sqrt{r} * \text{grad}(u) \rangle_{\mathfrak{K}} \geq 0$$

Die letzte Aussage: $u \in \text{kern}(\Delta_r)$ gilt genau dann wenn für jedes $v \in \mathfrak{E}$

$$\langle v, \Delta_r(u) \rangle_{\mathfrak{E}} = 0$$

also genau dann wenn

$$\langle \sqrt{r} * \text{grad}(u), \sqrt{r} * \text{grad}(v) \rangle_{\mathfrak{K}} = 0$$

Da $r > 0$ gilt, ist dies equivalent zu der Aussage $u \in \text{kern}(\text{grad})$. Der Gradient ist genau dann Null wenn u konstant ist, da unser Graph zusammenhängend ist. \square

In der kontinuierlichen Theorie des Poissonproblems sind Sobolevräume und die Poincare Ungleichung von zentraler Bedeutung. Ein Analogon gibt es natürlich auch in der diskreten oder graphischen Theorie.

Satz 3.2 (Poincare Ungleichung). *Sei G ein Graph, ∂ eine Teilmenge der Ecken, $r > 0$ eine Kantenfunktion und $u \in \mathfrak{E}$, sodass $u|_{\partial} = 0$ dann gilt:*

$$\langle u, u \rangle_{\mathfrak{E}} \leq \frac{|V|}{\min_{e \in E} r(e)} \langle u, \Delta_r(u) \rangle_{\mathfrak{E}}$$

Beweis. Sei $x \in \partial^c$ und $(x_i)_{i=1}^n$ ein Pfad von ∂ nach x , dann gilt für die Pfadsumme:

$$\begin{aligned} u(x)^2 &= \left(\sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i * \text{grad}(u)(e_i) \right)^2 \leq \\ & \left(\max_{e \in E} \frac{\sum_{s=1}^{n-1} \sqrt{r}(e_s)}{\sqrt{r}(e)} \right)^2 * \left(\sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i * \frac{\sqrt{r}(e_i)}{\sum_{s=1}^{n-1} \sqrt{r}(e_s)} \text{grad}(u)(e_i) \right)^2 \end{aligned}$$

Wende die Jensen Ungleichung an und fasse zusammen:

$$\begin{aligned} u(x)^2 &\leq \left(\max_{e \in E} \frac{\sum_{s=1}^{n-1} \sqrt{r}(e_s)}{\sqrt{r}(e)} \right)^2 * \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{\sqrt{r}(e_i)}{\sum_{s=1}^{n-1} \sqrt{r}(e_s)} \text{grad}(u)(e_i) \right)^2 = \\ & \left(\max_{e \in E} \frac{1}{r(e)} \right) * \sum_{i=1}^{n-1} (\sqrt{r} \text{grad}(u)(e_i))^2 \leq \left(\max_{e \in E} \frac{1}{r(e)} \right) * \sum_{k \in E} (\sqrt{r}(k) \text{grad}(u)(k))^2 = \end{aligned}$$

$$\left(\max_{e \in E} \frac{1}{r(e)}\right) * \langle \sqrt{r} \text{grad}(u), \sqrt{r} \text{grad}(u) \rangle_{\mathfrak{R}} = \left(\max_{e \in E} \frac{1}{r(e)}\right) * \langle u, \Delta_r(u) \rangle_{\mathfrak{E}}$$

Summieren wir nun über V :

$$\langle u, u \rangle_{\mathfrak{E}} \leq \frac{|V|}{\min_{e \in E} r(e)} \langle u, \Delta_r(u) \rangle_{\mathfrak{E}}$$

□

Es wurde nun genug Vorarbeit geleistet um das zentrale Existenz Theorem dieses Kapitels zu beweisen.

Theorem 3.2. *Sei G ein Graph, r eine Kantenfunktion, ∂ eine Teilmenge der Ecken und f sowie g Eckfunktionen, dann ist das Poissonproblem eindeutig lösbar falls ∂ nicht leer ist. Wenn ∂ jedoch leer ist gibt es nur eine Lösung wenn f im orthogonalen Komplement der konstanten Funktionen liegt.*

Beweis. Falls ∂ leer ist, folgt da der Kern von Δ_r durch die konstanten Funktionen gebildet wird und weil die Abbildung symmetrisch ist, dass der Bildraum das orthogonale Komplement der konstanten Funktionen ist.

Falls aber ∂ nicht leer ist, aber $\partial \neq V$ ist, sollen gilt:

Sei A die Untermatrix die man durch streichen der zu ∂ gehörenden Zeilen und Spalten erhält.

Zwei alternative Wege die Trivialität des Kernes von A zu zeigen:

1. Alternative: Die Poincare Ungleichung zeigt bereits, dass der Kern trivial sein muss.

2. Alternative: Sei x ein Element von $\text{kern}(A)$, daher $A(x) = 0$. Wir können ein Element \hat{x} von \mathfrak{E} konstruieren, sodass \hat{x} an den Ecken die zu ∂ gehören Null gesetzt wird und sonst den Wert annimmt den x an der entsprechenden Ecke hat. Es gilt dann:

$$\Delta_r(\hat{x})|_{E-\partial} = 0$$

und somit

$$\langle \sqrt{r} * \text{grad}(\hat{x}), \sqrt{r} * \text{grad}(\hat{x}) \rangle_{\mathfrak{R}} = \langle \hat{x}, \Delta_r(\hat{x}) \rangle_{\mathfrak{E}} = 0$$

Damit muss aber \hat{x} zum Kern von Δ_r gehören, also eine konstante Funktion sein. Die einzige Möglichkeit wie \hat{x} eine konstante Funktion ist, ist wenn es identisch Null ist. Es wurde somit gezeigt, dass der Kern von A trivial ist und somit A invertierbar ist.

Das Setzen der Randbedingung entspricht aber genau dem Streichen dieser Zeilen sowie Spalten und der Konstruktion einer zugehörigen im Allgemeinen von Null verschiedenen Inhomogenität.

Der Fall $\partial = V$ ist trivialerweise erfüllt. \square

Wandeln wir zur Untermauerung der theoretischen Arbeit an einem Beispiel den elektrischen Stromkreis in Abbildung 3.1 in einen Graphen in dem bisher entwickelten Formalismus um.



Abbildung 3.2: Beispiel Stromkreis (Graph).

An den elektrischen Widerständen jeder Kante können wir in Abbildung 3.2 die Korrespondenz zu Abbildung 3.1 erkennen. Die Kehrwerte der Widerstände entsprechen der Kantenfunktion r und $\partial = \{2, 3\}$, $g(2) = 5$, $g(3) = 0$ und $f \equiv 0$. Das V steht für die Spannungsquelle beziehungsweise die Randbedingung.

$$\Delta_r = \text{grad}^T * r * \text{grad} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \frac{1}{500} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{1000} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2000} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4700} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{400} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{500} + \frac{1}{1000} + \frac{1}{2000} & -\frac{1}{500} & -\frac{1}{1000} & -\frac{1}{2000} \\ -\frac{1}{500} & \frac{1}{500} + V + \frac{1}{400} & -V & -\frac{1}{400} \\ -\frac{1}{1000} & -V & \frac{1}{1000} + V + \frac{1}{4700} & -\frac{1}{4700} \\ -\frac{1}{2000} & -\frac{1}{400} & -\frac{1}{4700} & \frac{1}{400} + \frac{1}{4700} + \frac{1}{2000} \end{pmatrix}$$

Anschließend wendet man die Randbedingung an, daher man setzt die zweite Komponente des gesuchten Vektors 5 und die Dritte Komponente 0, dies entspricht dem streichen der mit V markierten Ecken und bilden der passenden Inhomogenität.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{500} + \frac{1}{1000} + \frac{1}{2000} & -\frac{1}{500} & -\frac{1}{1000} & \frac{5}{500} \\ -\frac{1}{500} & \frac{1}{500} + V + \frac{1}{400} & -V & 0 \\ -\frac{1}{1000} & -V & \frac{1}{1000} + V + \frac{1}{4700} & 0 \\ -\frac{1}{2000} & -\frac{1}{400} & -\frac{1}{4700} & \frac{1}{400} + \frac{1}{4700} + \frac{1}{2000} \end{array} \right)$$

Dies entspricht genau der Matrixgleichung, die man mit den gebräuchlichen Methoden in der Physik zu diesem Problem erhält.

Die Lösung des Poissonproblems ermöglicht es uns ein weiteres Analogon zu einem Theorem der klassischen Vektoranalysis zu formulieren.

Folgerung 3.3 (Helmoltz Zerlegung). *Sei G ein planarer Graph mit Orientierung dann gilt:*

$$\mathfrak{K}(G) = \text{im}(\text{grad}) \bigoplus \text{im}(\text{grad}_D)$$

Beweis. Eine Anwendung des de’Rham Komplexes und etwas elementare lineare Algebra liefert:

$$\mathfrak{K}(G) = \text{kern}(\text{div}_D) \bigoplus \text{kern}(\text{div}_D)^\perp = \text{Bild}(\text{grad}) \bigoplus \text{kern}(\text{div}_D)^\perp$$

Die Abbildung div_D ist ein Isomorphismus zwischen $\text{kern}(\text{div}_D)^\perp$ und $\text{Bild}(\text{div}_D)$. Wir wissen auch bereits wegen des Theorems 3.2 dass der Laplace Operator des dualen Graphen $\Delta_D = \text{div}_D \circ \text{grad}_D$ ein Isomorphismus zwischen $\mathfrak{F}(G)$ und $\text{Bild}(\text{div}_D)$. In Kombination zeigt dies, dass grad_D ein Isomorphismus zwischen $\mathfrak{F}(G)$ und $\text{kern}(\text{div}_D)^\perp$ ist. \square

Kapitel 4

Die Maxwell-Gleichungen

Die Elektrodynamik beschreibt elektromagnetische Phänomene als durch Felder vermittelte Wechselwirkung von Materie. Diese Felder gehorchen vier Gleichungen, Maxwell-Gleichungen, die im neunzehnten Jahrhundert durch den Schotten James Clerk Maxwell formuliert wurden. Diese partiellen Differentialgleichungen beschreiben wie sich elektromagnetische Felder in Abhängigkeit eines Materiestrom zeitlich entwickeln. Die Diskretisierung jener Differentialgleichungen führt im zweidimensionalen Fall zu einer Variante der Maxwell-Gleichungen für planare Graphen.

Definition 4.1. Sei G ein planarer Graph, $r > 0$, $\epsilon > 0$, e_0 Kantenfunktionen, $j \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$ eine Kurve, $\mu > 0$ und b_0 Flächenfunktionen und q_0 eine Eckfunktion, dann nennt man eine Kurve $e \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$, eine Kurve $b \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{F})$ und eine Kurve $e \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$, sodass für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt:

$$(4.1) \quad \operatorname{div}(r * \epsilon * e(t)) = q(t)$$

$$(4.2) \quad \operatorname{div}_D(r^{-1} * e(t)) = -b'(t)$$

$$(4.3) \quad -r^{-1} * \operatorname{grad}_D(b(t)/\mu) = \epsilon * e'(t) + j(t)$$

und die Anfangsbedingungen

$$(4.4) \quad e(0) = e_0$$

$$(4.5) \quad b(0) = b_0$$

$$(4.6) \quad q(0) = q_0$$

erfüllt sind, eine Lösung der Maxwell-Gleichungen.

Bemerkung 4.2. (4.1) nennt man das Gaußsche Gesetz und beschreibt wie das elektrische Feld e mit seinen Quellen den elektrischen Ladungen zusammenhängt. Betrachtet man es von der Perspektive eines Flußes ist die elektrische Ladung der Nettofluß aus der Ecke.

(4.2) nennt man das Faradaysche Gesetz und es beschreibt die zeitliche Änderung des magnetischen Feldes b in Abhängigkeit des elektrischen Feldes. Die Kantenfunktion r ist die Länge der Kante. ϵ und μ sind der elektrische und der magnetische Leitwert, respektive. Diese beiden Funktionen geben an wie gut die Kanten das Feld durchlassen.

(4.3) nennt man das Amperesche Gesetz und beschreibt analog zum Faradayschen Gesetz wie die zeitliche Änderung des elektrischen Feldes vom magnetischen Feld, aber auch vom elektrischen Strom j abhängig ist. Wenn wir das Ohmsche Gesetz $j(t) = \sigma e(t)$ annehmen, verhält sich der elektrische Strom hier wie ein Reibungsterm. Wir werden sehen, dass dies tatsächlich für Energieverlust ins Wärmebad verantwortlich ist.

Aus den Maxwell-Gleichungen ergeben sich die Erhaltungsgrößen elektrische Ladung und Energie. Die Energie teilt sich in magnetische und elektrische Energie, die über die Zeit innereinander umgewandelt werden.

Satz 4.1. Energieerhaltung Sei G ein planarer Graph, $r > 0$, $\epsilon > 0$, e_0 Kantenfunktionen, $\mu > 0$ und b_0 Flächenfunktionen, q_0 eine Eckfunktion und $e : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{K}(G)$ das elektrische Feld und $b : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{F}(G)$ das magnetische Feld. Lösungen der Maxwell-Gleichungen, dann nennt man

$$(4.7) \quad E = \frac{1}{2} \left(\sum_{a \in f} b(a)^2 / \mu(a) + \sum_{k \in E} \epsilon(k) * e(k)^2 \right)$$

die **Energie** und solange der elektrische Strom $j \equiv 0$ gilt, bleibt die Energie unverändert.

Beweis. Sei e und b wie in der Voraussetzung des Satzes dann gilt für die Ableitung der magnetischen Energie:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{a \in f} b(a)^2 / \mu(a) \right)' &= \sum_{a \in f} 2 * b(a) * b(a)' / \mu(a) = - \sum_{a \in f} 2 * b(a) * \operatorname{div}_D(r^{-1} * e)(a) / \mu(a) = \\ &= -2 * \langle b / \mu, \operatorname{div}_D(r^{-1} * e) \rangle_{\mathfrak{F}} \end{aligned}$$

und für die Ableitung der elektrischen Energie:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k \in E} \epsilon(k) * e(k)^2 \right)' &= \sum_{k \in E} 2 * \epsilon(k) * e(k) * e(k)' = \\ &= - \sum_{k \in E} 2 * e(k) * (r^{-1} * \operatorname{grad}_D(b / \mu) + j)(k) = -2 * \langle e, (r^{-1} * \operatorname{grad}_D(b / \mu) + j) \rangle_{\mathfrak{K}} = \\ &= 2 * (\langle \operatorname{div}_D(r^{-1} * e), b / \mu \rangle_{\mathfrak{F}} - \langle e, j \rangle_{\mathfrak{K}}) \end{aligned}$$

Fassen wir zusammen:

$$E' = -\langle e, j \rangle_{\mathfrak{K}}$$

□

Satz 4.2. Kontinuitätsgesetz Sei G ein planarer Graph, $r > 0$, $\epsilon > 0$, e_0 Kantenfunktionen, $\mu > 0$ und b_0 Flächenfunktionen, q_0 eine Eckfunktion und $e : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{K}(G)$ das elektrische Feld und $b : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{F}(G)$ das magnetische Feld Lösungen der Maxwell-Gleichungen, dann gilt das Kontinuitätsgesetz:

$$q' = -\operatorname{div}(r * j)$$

Dies zeigt, dass die Gesamtladung erhalten bleibt.

Beweis. Dividiere (4.3) in Definition 4.1 durch ϵ und dann wende $\operatorname{div}(r * \epsilon * .)$ auf (4.3) an:

$$\operatorname{div}(r * \epsilon * (-\epsilon^{-1} * r^{-1} * \operatorname{grad}_D(b(t)/\mu))) = \operatorname{div}(r * \epsilon * (e' + j/\epsilon))$$

$$0 = \operatorname{div}(r * \epsilon * e)' + \operatorname{div}(r * j)$$

$$0 = q' + \operatorname{div}(r * j)$$

Summieren wir nun die obige Gleichung über alle Ecken, dann heben sich die Beiträge der Kanten in $\operatorname{div}(r * j)$ gegenseitig auf, da jede Kante einmal in dem div -Term der Ecke von der er wegzeigt und einmal im Term der Ecke auf die er zeigt vorkommt. Folglich gilt:

$$\sum_{v \in V} q' = 0$$

□

Die Maxwell-Gleichungen sind ein System gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen und als solches gibt es keine Probleme wegen Existenz und Eindeutigkeit für jeden Zeitpunkt. Dies lässt sich in jedem guten Buch über gewöhnliche Differentialgleichungen nachlesen.

Theorem 4.3. Die Maxwellgleichungen sind eindeutig lösbar, solange die Anfangsbedingung (4.1) erfüllt ist.

Beweis.

□

Kapitel 5

Potentialformulierung der Maxwellgleichungen

Analog zum kontinuierlichen Fall lassen sich die Maxwellgleichungen auf planaren Graphen über Potentiale ausdrücken.

Definition 5.1. Sei G ein planarer Graph mit Orientierung und $r > 0$ eine Kantenfunktion auf G , dann definieren wir eine Transformation T , die Kurven $(\phi, a) \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}) \times C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$ in Felder $(e, b) \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}) \times C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{F})$ überführt, durch

$$(5.1) \quad \begin{pmatrix} b(t) \\ e(t) \end{pmatrix} = T\left(\begin{pmatrix} \phi(t) \\ a(t) \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} \operatorname{div}_D(r^{-1}a(t)) \\ -a'(t) - r \operatorname{grad}(\phi(t)) \end{pmatrix}$$

für alle $t \in \mathbb{R}$. Die Kurven ϕ und a nennt man Potentiale, ersteres ist das Skalarpotential und letzteres das Vektorpotential.

Es ist hierbei zu bedenken, dass div_D nicht surjektiv ist, sondern nur Flächenfunktionen darstellen kann, die orthogonal zu den konstanten Funktionen sind. Dies scheint auf den ersten Blick eine Einschränkung zu sein, aber eine kurze Betrachtung der Maxwellgleichungen zeigt uns, dass der konstante Anteil des Magnetfeldes keine Auswirkung auf das elektrische Feld hat, solange μ konstant ist. Viel wichtiger noch findet die einzige Änderung des Magnetfeldes, die unter Gültigkeit der Maxwellgleichungen passieren darf im orthogonalen Komplement der konstanten Flächenfunktionen statt. Wir fordern nun zusätzlich zu den Maxwellgleichungen, dass das Magnetfeld b für jeden Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ orthogonal zu den konstanten Flächenfunktionen ist:

$$b(t) \in \mathbb{R}^\perp$$

Wenn wir planare Graphen als Polyeder auffassen, ist dies einfach das im dreidimensionalen gültige Gaußsche Gesetz für Magnetfelder.

Die Wahl der Potential Definition kam nicht von ungefähr, sondern aus der Theorie im Kontinuum. Die Definition des Magnetfeldes in (5.1) abgeleitet ergibt durch Einsetzen der Definition des elektrischen Feldes sofort das Faradaysche Gesetz. Nachdem das Gaußsche Gesetz als Definition der elektrischen Ladung gesehen werden kann, reduzieren sich die Maxwellgleichungen in Potentialformulierung auf das Amperesche Gesetz:

$$(5.2) \quad r^{-1} \operatorname{grad}_D(\operatorname{div}_D(r^{-1}a(t))/\mu) = \epsilon * (a'' + r \operatorname{grad}(\phi')) - j(t)$$

Der Vorteil der Potentialdarstellung liegt zum Einen in der Vereinfachung des Gleichungssystems und zum Anderen in der größeren Flexibilität.

Es ist leicht zu sehen, dass die Operation aus Definition 5.1, die Potentiale in Felder umwandelt nicht injektiv ist.

Die Charakterisierung des Kerns dieser linearen Operation führt uns nun zu den so genannten Eichtransformationen.

Definition 5.2. Seien ϕ und a Potentiale wie in Definition 5.1, und $\xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$, dann nennt man die Transformation T definiert durch

$$(5.3) \quad \gamma_\xi \left(\begin{pmatrix} \phi \\ a \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} \phi - \xi' \\ a + r \operatorname{grad}(\xi) \end{pmatrix}$$

die zu ξ gehörende **Eichtransformation**.

Die Potentiale werden immer genau bis auf eine Eichtransformation eindeutig durch die Felder bestimmt.

Satz 5.1. Sei T die lineare Operation aus Definition 5.1, die Potentiale $(\phi, a) \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}) \times C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$ in Felder $(e, b) \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}) \times C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{F})$ überführt, dann gilt:

$$(5.4) \quad \operatorname{kern}(T) = \left\{ \begin{pmatrix} -\xi' \\ r \operatorname{grad}(\xi) \end{pmatrix} \mid \xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}) \right\}$$

Beweis. Wir starten mit der Inklusion (\subset)

Sei $(\phi, a) \in \operatorname{kern}(T)$, dann gilt für alle $t \in \mathbb{R}$

$$0 = \operatorname{div}_D(r^{-1}a(t))$$

Wir wissen wegen dem de'Rham Komplex Theorem, und weil $r > 0$ ist, dass es eine $\chi : \operatorname{Bild}(\operatorname{grad}) \mapsto \mathbb{R}^\perp$ gibt, sodass gilt:

$$x = \operatorname{grad}(\chi(x)) \text{ für alle } x \in \mathfrak{K}(G)$$

Daher können wir für alle $t \in \mathbb{R}$ definieren

$$\xi(t) = \chi(r^{-1}a(t))$$

sodass gilt

$$a = r\text{grad}(\xi)$$

und $\xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$.

Wir setzen den so gewonnenen Ausdruck für a nun ein in

$$0 = -a'(t) - r\text{grad}(\phi(t))$$

und erhalten für alle $t \in \mathbb{R}$

$$0 = \text{grad}(\xi'(t) + \phi(t))$$

Somit gilt die Gleichheit modulo einer Konstante c

$$\phi(t) = -\xi'(t) + c$$

Die Konstante c kann man weil sie im Kern des Gradienten liegt in ξ einziehen.

$$\xi(t) = \chi(r^{-1}a(t)) - c * t$$

Die andere Inklusion (\supset) wird gezeigt indem der Ausdruck in der Mengendefinition (5.4) in T eingesetzt wird. \square

Hiermit wurden die wichtigsten Aspekte der Potentialdarstellung vorgestellt. Dies ist eine Grundvoraussetzung für die Quantisierung der Maxwellgleichungen.

Zum Abschluß dieses Kapitels konstruieren wir eine Lösung der Maxwellgleichungen in Potentialdarstellung (5.2) im stromlosen Fall $j \equiv 0$.

Wegen der Eichinvarianz von (5.2) gibt es immer eine Lösung mit $\phi \equiv 0$, wodurch wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit ϕ aus (5.2) eliminieren können.

Hilfssatz 5.3. *Sei L eine positiv semidefinite lineare Abbildung in $V = \mathbb{R}^n$ ($n \geq 1$), $u_0, v_0 \in V$ und $u \in C^2(\mathbb{R}, V)$, dann ist die Lösung des Anfangswertproblems*

$$(5.5) \quad u'' + Lu = 0$$

$$(5.6) \quad u(0) = u_0$$

$$(5.7) \quad u'(0) = v_0$$

gegeben durch

$$(5.8) \quad u(t) = U^\dagger(\cos(Rt) + 1_{\{0\}}(R))Uu_0 + U^\dagger(\sin(Rt) + 1_{\{0\}}(R)t)Uv_0$$

Wobei U eine orthogonale, R eine Diagonalmatrix in V ist und $L = U^\dagger R^2 U$ gilt.

Beweis. Nach dem Spektralsatz endlichdimensionaler reeler Vektorräume gibt es eine Zerlegung der positiv semidefiniten Matrix L der Form.

$$L = U^\dagger R^2 U$$

Wobei $R \geq 0$ und U eine orthogonale Matrix ist.

Als nächstes formen wir (5.2) um

$$\begin{aligned} U(u'' + Lu) &= 0 \\ (Uu)'' + ULu &= 0 \\ (Uu)'' + ULU^\dagger Uu &= 0 \end{aligned}$$

und setzen $v = Uu$

$$(5.9) \quad v'' + R^2 v = 0$$

Die allgemeine Lösung von (5.9) erhalten wir wenn für jede Komponente $n > 1$

$$v_n(t) = \begin{cases} v_n(0) \cos(R_n t) + v'_n(0) \sin(R_n t) & R_n > 0 \\ v_n(0) + v'_n(0)t & R_n = 0 \end{cases}$$

für $t \in \mathbb{R}$. In Matrixform umgeschrieben erhalten wir (5.8). \square

Satz 5.2. Sei G ein planarer Graph mit Orientierung, $r > 0$, a_0, e_0 Kantenfunktionen, $\mu > 0$ eine Flächenfunktion auf G und $\epsilon > 0$, dann gibt es eine Kurve $a \in C^2(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$, sodass für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt

$$(5.10) \quad a''(t) - r^{-1} \text{grad}_D(\text{div}_D(r^{-1}a(t))/\mu)/\epsilon = 0$$

und die Anfangsbedingung

$$(5.11) \quad a(0) = a_0$$

$$(5.12) \quad a'(0) = e_0$$

erfüllt ist.

Beweis. Es verbleibt zu zeigen, dass die lineare Abbildung L definiert für $u \in \mathfrak{K}$ durch

$$L(u) = -r^{-1} \text{grad}_D(\text{div}_D(r^{-1}u)/\mu)/\epsilon$$

positiv semidefinit ist:

$$\begin{aligned} \langle u, L(u) \rangle_{\mathfrak{K}} &= \langle u, -r^{-1} \text{grad}_D(\text{div}_D(r^{-1}u)/\mu)/\epsilon \rangle_{\mathfrak{K}} = \\ &= \langle r^{-1}u, -\text{grad}_D(\text{div}_D(r^{-1}u)/\mu) \rangle_{\mathfrak{K}}/\epsilon = \\ &= \langle \text{div}_D(r^{-1}u), \text{div}_D(r^{-1}u)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}}/\epsilon \geq 0 \end{aligned}$$

\square

Falls $\epsilon > 0$ nicht konstant ist, können wir auch eine Lösung konstruieren. Hierzu transformieren wir zunächst (5.5) in eine Differentialgleichung erster Ordnung.

$$(5.13) \quad \begin{pmatrix} a \\ u \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ u \end{pmatrix}$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung zu Anfangsbedingungen $a(0) = a_0 \in \mathfrak{K}$ und $u(0) = a'(0) = u_0 \in \mathfrak{K}$ lautet für jedes $t \in \mathbb{R}$

$$(5.14) \quad \begin{pmatrix} a \\ u \end{pmatrix}(t) = e^{\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix}t} \begin{pmatrix} a_0 \\ u_0 \end{pmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix}^n t^n}{n!} \begin{pmatrix} a_0 \\ u_0 \end{pmatrix}$$

Das Matrixexponential kann als Potenzreihe oder mit Hilfe der reellen Jordanschen Normalform der Matrix $M = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix}$ wie im Hilfssatz 5.3 konstruiert werden.

Kapitel 6

Kanonische Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Anfang des zwanzigsten Jahrhunderts wurde zur Erklärung einer Reihe von Phänomenen, die innerhalb der damals etablierten/klassischen physikalischen Theorien nicht erklärbar waren, die Quantentheorie entwickelt. Die Objekte der klassischen Theorien sind Kurven, Kräfte und Felder und in der Quantenmechanik sind es Zustandsvektoren, Operatoren und Distributionen. Die messbaren Größen bleiben dieselben, allerdings werden die mathematischen Objekte, die ihr Verhalten beschreiben etwas komplizierter.

Wir wollen nun den klassischen Weg der Quantisierung einer physikalischen Theorie am Beispiel der Maxwellgleichungen auf planaren Graphen erkunden.

Der Ausgangspunkt dieser so genannten kanonischen Quantisierung ist die Lagrangefunktion der Theorie.

Theorem 6.1. *Sei G ein planarer Graph, $r > 0$, $\epsilon > 0$, Kantenfunktionen, $q \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$, $j \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$, sei weiters $\mu > 0$ eine Flächenfunktion dann sind a und ϕ Lösungen der Maxwellgleichung in Potentialform (5.2), genau dann wenn alle Richtungs-ableitungen des Wirkungsfunktionals verschwinden auf dem Raum der $f_1 \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$ und $f_2 \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$ für die gilt, dass f_1 und ϕ sowie f_2 und a zu den Zeitpunkten r und s übereinstimmen*

$$(6.1) \quad S(f_1, f_2) = \int_r^s L(f_1, f_2, f'_1, f'_2) dt$$

Die Funktion unter dem Integral nennt man die **Lagrangefunktion** der

Maxwellgleichung. Sie ist dabei gegeben durch:

$$L(q_1, q_2, v_1, v_2) = \frac{1}{2}(\langle \epsilon(v_2 + r \operatorname{grad}(q_1)), v_2 + r \operatorname{grad}(q_1) \rangle_{\mathfrak{K}} - \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}q_2), \operatorname{div}_D(r^{-1}q_2)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}}) + \langle q_2, j \rangle_{\mathfrak{K}} - \langle q_1, q \rangle_{\mathfrak{E}}$$

Beweis. Siehe beliebiges Fachbuch zur theoretischen Physik. \square

Im nächsten Schritt wollen wir diese Lagrangefunktion über eine Legendre Transformation in die zugehörige **Hamiltonfunktion** umgewandelt.

Definition 6.2. Sei $f : X \mapsto \mathbb{R}$ eine konvexe Funktion auf einem Skalarproduktraum X , dann ist die **Legendretransformation** f^* definiert durch:

$$(6.2) \quad f^*(y) = \sup_{x \in X} (\langle x, y \rangle - f(x))$$

Jedoch wollen wir zunächst ein nützliches Resultat zeigen mit dessen Hilfe wir eine wohldefinierte Legendretransformation samt Formel erhalten.

Satz 6.1. Sei $f : X \mapsto \mathbb{R}$ eine strikt konvexe stetig differenzierbare Funktion auf einem Skalarproduktraum X , sodass die Abbildung $x \mapsto Df(x)$ invertierbar ist, dann ist die Legendretransformation gegeben durch:

$$(6.3) \quad f^*(y) = \langle (Df)^{-1}(y), y \rangle - f((Df)^{-1}(y))$$

Beweis. Die Funktion $g_y(x) = \langle x, y \rangle - f(x)$ ist streng konkav und hat daher ein eindeutiges Maximum $x_0 \in X$.

$$Dg_y(x_0) = y - Df(x_0) = 0 \Rightarrow x_0 = (Df)^{-1}(y)$$

Eingesetzt in g_y erhalten wir dann

$$f^*(y) = g_y(x_0) = \langle (Df)^{-1}(y), y \rangle - f((Df)^{-1}(y))$$

\square

Um diese Darstellung ausnutzen zu können müssen wir die Lagrangefunktion strikt konvex machen, indem wenn wir das Skalarpotential ϕ aus der Lagrangefunktion entfernen.

Dies ist möglich, da es zu jeder Paarung eines Skalarpotentials und eines Vektorpotentials eine Eichtransformation gibt, die diese in ein Paar umwandelt, dessen Skalarpotential gleich Null ist.

Die resultierende Lagrangefunktion ist gegeben durch

$$(6.4) \quad L(q, v) = \frac{1}{2}(\langle \epsilon v, v \rangle_{\mathfrak{K}} - \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}q), \operatorname{div}_D(r^{-1}q)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}}) + \langle q, j \rangle_{\mathfrak{K}}$$

Das übrige Vektorpotential (hier q) ist immer noch nicht eindeutig bestimmt, und die Eichtransformationen die diese Form der Eichung erhalten sind genau jene, die laut Definition (5.2) zu einem konstanten ξ korrespondieren.

Die Hamiltonfunktion erhalten wir durch eine Anwendung der Legendretransformation auf die Lagrangefunktion (6.4) bezüglich der Variablen v .

$$(6.5) \quad H(\pi, q) = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\pi}{\epsilon}, \pi \right\rangle_{\mathfrak{K}} + \frac{1}{2} \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}q), \operatorname{div}_D(r^{-1}q)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} - \langle q, j \rangle_{\mathfrak{K}}$$

Wenn wir mit (4.7) der Energieerhaltung, Satz (4.1), vergleichen, erkennen wir, dass, die ersten beiden Terme genau die dort proklamierte Gesamtenergie sind und der übrige Term genauso beschaffen scheint um die zeitliche Ableitung nach Satz 4.1 zu kompensieren. Solange j zeitunabhängig ist, und somit auch H nicht explizit von der Zeit abhängt, ist dies auch der Fall.

Mit Hilfe der Euler-Lagrange-Gleichung können wir nun die **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen** herleiten.

Satz 6.2. *Sei G ein planarer Graph, $r > 0$, $\epsilon > 0$, Kantenfunktionen, $j \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$, $\mu > 0$ eine Flächenfunktion dann sind a und ϕ Lösungen der Maxwellgleichung in Potentialform (5.2), genau dann wenn die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen erfüllt sind:*

$$(6.6) \quad q' = \frac{\partial H}{\partial \pi}$$

$$(6.7) \quad \pi' = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Beweis. Siehe beliebiges Fachbuch zur theoretischen Physik. \square

An diesem Punkt entfernen wir uns von der klassischen Theorie und folgen Heisenberg in die Quantenmechanik. Die Kurven π und q aus $C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$ sind von nun an Kurven $\hat{\pi}$ und \hat{q} in einem Raum von Operatoren auf einem Hilbertraum.¹

Definition 6.3. *Sei G ein planarer Graph und $r > 0$ eine Kantenfunktion, dann ist der Hilbertraum unserer Theorie gegeben durch*

$$(6.8) \quad \mathfrak{H} = L^2(\mathfrak{K}(G), \mathbb{C}; \lambda)$$

Der Raum der komplexen Funktionen auf $\mathfrak{K}(G)$ deren Quadrate ein endliches Integral bezüglich dem Maß λ^2 hat.

¹Operator auf einem Hilbertraum bedeutet ein dicht definierter linearer Operator.

² λ wird zu einem späteren Zeitpunkt festgelegt.

Das Skalarprodukt von $\xi, \phi \in \mathfrak{H}$ ist dabei definiert durch:

$$(6.9) \quad \langle \phi, \xi \rangle_{\mathfrak{H}} = \int_{\mathfrak{K}} \overline{\phi}(x) \xi(x) d\lambda(x)$$

Interpretation

- Jedes Element $\psi \in \mathfrak{H}$ stellt einen möglichen Zustand des quantisierten elektromagnetischen Feldes dar.
- Jeder Messgröße Ω des klassischen elektromagnetischen Feldes entspricht ein korrespondierender Operator $\hat{\Omega}$ auf \mathfrak{H} .
- Der Ausgang einer Messung der Größe Ω ist ein zufälliges Element des Spektrums von Ω und der Mittelwert der Messungen ist gleich $\frac{\langle \psi, \hat{\Omega} \psi \rangle_{\mathfrak{H}}}{\langle \psi, \psi \rangle_{\mathfrak{H}}}$.

Widmen wir uns nun der Konstruktion der korrespondierenden Operatoren. Nach Heisenberg wird für jedes Kantenpaar $e, e' \in E$ die kanonische Vertauschungsrelation:

$$(6.10) \quad [\hat{q}(e), \hat{\pi}(e')] = i\delta_{e,e'}$$

gefordert.

Eine mögliche Darstellung dieser Operatoren $\hat{q}(k)$ und $\hat{\pi}(k)$, die (6.10) erfüllt ist gegeben durch:

$$(6.11) \quad \hat{\pi}(k) : (q \mapsto \psi(q)) \mapsto (q \mapsto -i \frac{\partial \psi}{\partial q_k}(q)) \text{ für } k \in E$$

$$(6.12) \quad \hat{q}(k) : (q \mapsto \psi(q)) \mapsto (q \mapsto q_k \psi(q)) \text{ für } k \in E$$

Hierbei ist q_k der Wert der Kantenfunktion q an der Stelle $k \in E$ und $\frac{\partial}{\partial q_k}$ ist die Ableitung nach demselben Wert. Der Definitionsbereich $D(\hat{\pi}(k))$ und $D(\hat{q}(k))$ für $k \in E$ wird zu einem späteren Zeitpunkt festgelegt und bleibt bis dahin eine unbekannte dichte Teilmenge von $\mathfrak{H}(G)$.

Eine kurze Betrachtung der Hamiltonfunktion (6.5) zeigt die Äquivalenz dieses Problems zu der Bewegung von $|E|$ Punktmaßen mit Massen $\epsilon(k)$ für jedes $k \in E$ in einem Potential.

Definition 6.4. Sei G ein planarer Graph, $r > 0$, $\epsilon > 0$, e_0 Kantenfunktionen, \hat{j} eine Kurve selbstadjungierter Operatoren auf $\mathfrak{H}(G)$, $\mu > 0$ und b_0

Flächenfunktionen, dann ist der Hamiltonoperator $\hat{H} : D(\hat{H}) \rightarrow \mathfrak{H}(G)$ des elektromagnetischen Feldes gegeben durch:³

$$(6.13) \quad \hat{H} = - \sum_{k \in E} \frac{1}{2\epsilon(k)} \frac{\partial^2}{\partial q_k^2} + \frac{1}{2} \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}q), \operatorname{div}_D(r^{-1}q)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} - \langle q, \hat{j} \rangle_{\mathfrak{K}}$$

Sei $\psi_0 \in D(\hat{H})$ und $\psi \in C^1(\mathbb{R}, D(\hat{H}))$, sodass:

$$(6.14) \quad \hat{H}\psi(t) = i\psi'(t)$$

für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt und die Anfangsbedingung $\psi(0) = \psi_0$ erfüllt ist, dann nennt man ψ eine Lösung der **Schrödingergleichung** des elektromagnetischen Feldes.

Widmen wir uns nun dem Korrespondenzprinzip zwischen der klassischen und quantenmechanischen Theorie. Wir werden zeigen, dass die durch die Schrödingergleichung vermittelte Dynamik im Mittel mit jener der Maxwellgleichungen übereinstimmt.

Theorem 6.5 (Ehrenfest Theorem). *Sei G ein planarer Graph, $\epsilon > 0$ und $r > 0$ Kantenfunktionen, $\mu > 0$ eine Flächenfunktion und $\psi : \mathbb{R} \mapsto \mathfrak{H}$ eine Lösung der Schrödingergleichung (6.14) auf G , dann gilt:*

$$(6.15) \quad \epsilon \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = -r^{-1} \operatorname{grad}_D(\langle \psi, \hat{b}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}/\mu) - \langle \psi, \hat{j}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}$$

$$(6.16) \quad \langle \psi, \hat{b}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = -\operatorname{div}_D(r^{-1} \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle_{\mathfrak{H}})$$

wobei der elektrische und magnetische Feldoperator gegeben sind durch:

$$(6.17) \quad \hat{e} = \frac{-\hat{\pi}}{\epsilon}$$

$$(6.18) \quad \hat{b} = \operatorname{div}_D(r^{-1}\hat{q})$$

Beweis. Wir starten mit der linken Seite von (6.15), wenden die Produktregel der Differentiation an und formen um:

$$\begin{aligned} \epsilon \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} &= -\langle \psi, \hat{\pi}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = \\ &= -(\langle \psi', \hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, \hat{\pi}\psi' \rangle_{\mathfrak{H}}) = \\ &= \langle i\hat{H}\psi, \hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, \hat{\pi}i\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} = \\ &= i(\langle \psi, \hat{\pi}\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} - \langle \hat{H}\psi, \hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}) = \\ &= i(\langle \psi, \hat{\pi}\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} - \langle \psi, \hat{H}\hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}) = \\ &= -r^{-1} \operatorname{grad}_D(\langle \psi, \operatorname{div}_D(r^{-1}\hat{q})\psi \rangle_{\mathfrak{H}}/\mu) - \langle \psi, \hat{j}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= -r^{-1} \operatorname{grad}_D(\langle \psi, \hat{b}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}/\mu) - \langle \psi, \hat{j}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \end{aligned}$$

³ $D(\hat{H})$ ist eine dichte Teilmenge von $\mathfrak{H}(G)$ die zu einem späteren Zeitpunkt festgelegt wird.

Nun zeigen wir (6.15) indem wir ausgehend von (6.18) die Formel

$$(6.19) \quad \langle \psi, \hat{b}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = \text{div}_D(r^{-1} \langle \psi, \hat{q}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}})$$

ableiten. Anschließend wenden wir wieder die Produktregel auf den Ausdruck $\langle \psi, \hat{q}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}}$ an und formen um

$$\begin{aligned} \langle \psi, \hat{q}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} &= (\langle \psi', \hat{q}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, \hat{q}\psi' \rangle_{\mathfrak{H}}) = \\ &= i(\langle \psi, \hat{H}\hat{q}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} - \langle \psi, \hat{q}\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}) = \\ &= i\langle \psi, [\hat{H}, \hat{q}]\psi \rangle_{\mathfrak{H}} = i\langle \psi, [\frac{1}{2\epsilon}\hat{\pi}^2, \hat{q}]\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\ \langle \psi, \frac{\hat{\pi}}{\epsilon}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} &= -\langle \psi, \hat{e}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \end{aligned}$$

Am Ende haben wir hier die kanonischen Vertauschungsrelationen und die Rechenregeln des Kommutators verwendet. Wir setzen den erhaltenen Ausdruck nun in (6.18) ein und erhalten das gesuchte Resultat. \square

Wir sehen also, dass die Schrödingergleichung (6.14) tatsächlich eine Quantisierung der Maxwellgleichungen (4.1) darstellt.

Bislang haben wir noch keine Bestätigung, dass die Schrödingergleichung (6.14) lösbar ist oder der Hamiltonoperator \hat{H} selbstadjungiert im Sinne der Theorie unbeschränkter linearer Operatoren ist. Dies wollen wir für den Fall $\epsilon \equiv 1$ und $\mu \equiv 1$ nachholen.

Theorem 6.6. *Sei G ein planarer Graph, $\epsilon \equiv 1$ und $r > 0$ Kantenfunktionen, $\mu \equiv 1$ eine Flächenfunktion, dann existiert eine unitäre Abbildung \hat{U} auf \mathfrak{H} und $(\omega_j)_{j=1}^{|f|^{-1}} > 0$ sodass für den Hamiltonoperator \hat{H} (6.13) mit $\hat{j} \equiv 0$ gilt:*

$$(6.20) \quad \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \sum_{j=1}^{|E|} \hat{h}_j$$

Wobei die \hat{h}_j gegeben sind durch:

$$\hat{h}_j = \begin{cases} -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} & j \leq |V| - 1 \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{1}{2} \omega_j^2 x_j^2 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Insbesondere gilt daher:

$$\forall k, n \in \mathbb{N} : [\hat{h}_k, \hat{h}_n] = 0$$

Beweis. Der Hamiltonoperator lässt sich folgendermaßen zerlegen:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

wobei

$$\begin{aligned}\hat{T} &= -\frac{1}{2} \sum_{k \in E} \frac{\partial^2}{\partial q_k^2} \\ \hat{V} &= \frac{1}{2} \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}q), \operatorname{div}_D(r^{-1}q) \rangle_{\mathfrak{K}}\end{aligned}$$

Wir formen nun \hat{V} um

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}q), \operatorname{div}_D(r^{-1}q) \rangle_{\mathfrak{K}} &= \\ \frac{1}{2} \langle q, (-r^{-1} \operatorname{grad}_D \operatorname{div}_D)(r^{-1}q) \rangle_{\mathfrak{K}} &= \end{aligned}$$

und führen einen linearen Operator $Q = -r^{-1} \operatorname{grad}_D \operatorname{div}_D r^{-1}$ ein

$$(6.21) \quad \frac{1}{2} \langle q, Q(q) \rangle_{\mathfrak{K}}$$

Q ist positiv semidefinit und symmetrisch. Die Dimension des Kerns von Q ist nach der Helmholtz Zerlegung (3.3) gleich $|V| - 1$. Das orthogonale Komplement desselben Kerns ist entsprechend $|f| - 1$ dimensional.⁴ Nach dem Spektralsatz linearer Operatoren auf endlich dimensionalen reellen Vektorräumen lässt sich Q schreiben als:

$$Q = U^T R U$$

Wobei die reelle Matrix U orthogonal und R eine nichtnegative Diagonalmatrix mit genau $|f| - 1$ positive Einträgen ist.

Ein wenig umformen von (6.21) liefert dann

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \langle q, Q(q) \rangle_{\mathfrak{K}} &= \\ \frac{1}{2} \langle q, U^T R U(q) \rangle_{\mathfrak{K}} &= \\ \frac{1}{2} \langle U(q), R U(q) \rangle_{\mathfrak{K}} &= \end{aligned}$$

Wir können U und r so wählen, dass die ersten $|V| - 1$ Einträge Null sind und definieren

$$\omega_j^2 = R_{|V|-1+j} \text{ für } 1 \leq j \leq |f| - 1$$

Wir konstruieren nun den unitären Operator \hat{U} . Sei $\phi \in \mathfrak{H}$ und $q \in \mathfrak{K}$

$$\hat{U}(\phi)(q) = \phi(U(q))$$

⁴Der eulersche Polyedersatz ist eine Folgerung der Helmholtz Zerlegung.

Mit Hilfe des Transformationssatzes für Integrale kann gezeigt werden, dass der Operator \hat{U} unitär ist, da U auf \mathfrak{K} unitär ist. Insbesondere ist die adjungierte von \hat{U} somit gegeben durch.

$$\hat{U}^\dagger(\phi)(q) = \phi(U^T(q))$$

Der Nabla-Operator vertauscht mit diesem unitären Operator folgendermaßen:

Sei ϕ hierzu in \mathfrak{H} , $x \in \mathfrak{K}$ Koordinaten und $x' = U(x)$ die transformierten Koordinaten. Wir unterscheiden ∇ , der Nabla-Operator in x -Koordinaten und ∇' den Nabla-Operator in x' -Koordinaten.

$$(6.22) \quad \nabla(\hat{U}\phi)(x) = U^T * (\nabla' \phi)(U(x)) = U^T * \hat{U}(\nabla' \phi)(x)$$

$$(6.23) \quad = \hat{U}(U^T * \nabla' \phi)(x)$$

Der Operator \hat{T} ist der Laplaceoperator und invariant unter orthogonaler Transformation. Wir erhalten somit durch Transformation unter \hat{U} den Laplaceoperator in gestrichenen Koordinaten Δ'

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger \hat{T} \hat{U} &= -\frac{1}{2} \hat{U}^\dagger \Delta \hat{U} \\ &= -\frac{1}{2} \hat{U}^\dagger \nabla^T * \nabla \hat{U} \\ &= -\frac{1}{2} \hat{U}^\dagger \nabla^T \hat{U} * \hat{U}^\dagger \nabla \hat{U} \\ &= -\frac{1}{2} (U^T * \nabla')^T * (U^T * \nabla') \\ &= -\frac{1}{2} \nabla'^T * \nabla' = -\frac{1}{2} \Delta' \end{aligned}$$

Man unterscheidet hierbei das endlichdimensionale Produkt $*$ und dem Produkt zwischen Operatoren auf dem unendlichdimensionalen Hilbertraum \mathfrak{H} , sowie die entsprechende Transponierte T und Adjungierte † .

Für den Operator \hat{V} kann die gesuchte Transformationseigenschaft (6.20) durch einige wenige Umformungen gezeigt werden.

$$\begin{aligned} (\hat{U}^\dagger \hat{V} \hat{U})(\phi)(q) &= \hat{U}^\dagger \left(\frac{1}{2} \langle q, Q(q) \rangle_{\mathfrak{K}} \phi \right)(U(q)) = \\ \hat{U}^\dagger \left(\frac{1}{2} \langle U(q), RU(q) \rangle_{\mathfrak{K}} \phi \right)(U(q)) &= \\ \frac{1}{2} \langle UU^T(q), RUU^T(q) \rangle_{\mathfrak{K}} \phi(UU^T(q)) &= \\ \frac{1}{2} \langle q, Rq \rangle_{\mathfrak{K}} \phi(q) & \end{aligned}$$

□

Wir haben nun gezeigt, dass sich der freie Hamiltonoperator (6.13), zerlegen lässt in eine endliche Summe von linearen Operatoren. Als nächstes werden wir die Eigenschaften dieser Operatoren und insbesondere ihre Spektraleigenschaften erarbeiten.

Die Transformation U zerlegt den Raum der Kantenfunktionen in einen $|V| - 1$ -dimensionalen Teilraum A auf dem das Potential V der Schrödingergleichung konstant ist und in sein orthogonales $|F| - 1$ -dimensionales Komplement B . Als Konsequenz haben wir gesehen ist die Dynamik in Richtung des Raumes A frei und in Richtung des Raums B die eines mehrdimensionalen harmonischen Oszillators.

Der harmonische Oszillator hat $|F| - 1$ reine Frequenzen/Moden in denen er schwingen kann. Jede einzelne dieser Moden kann Energie nur in ganzzahligen Vielfachen seiner Frequenz aufnehmen. Diese Moden korrespondieren zu denen sich im Raum fortpflanzenden elektromagnetischen Wellen. Der Raum B ist nämlich genau der Raum der Wirbelfelder wie wir gleich sehen werden.

Folgerung 6.7. *Sei G , ϵ , r , μ und \hat{U} wie in Theorem 6.6 und zusätzlich sei der Raum frei von elektrischer Ladung*

$$(6.24) \quad \operatorname{div}(r * \epsilon * \hat{e}) = 0$$

dann ist die Lösung der Schrödingergleichung ψ entlang jeder Richtung des gerade definierten Raums A fast überall konstant.

$$(6.25) \quad \forall x \in \mathfrak{K} : \forall y \in A : \psi(x + y) = \psi(x)$$

Die so eingeschränkte Schrödingergleichung hat ein reines Punktspektrum.

Beweis. Sei e eine Kantenfunktion sodass

$$\operatorname{div}(r * \epsilon * e) = 0$$

dies gilt nach dem de Rham Theorem genau dann wenn es ein $\phi \in \mathfrak{F}$ gibt sodass

$$e = \frac{1}{r} \operatorname{grad}_D \phi$$

Ein klassisches Resultat aus der linearen Algebra liefert dann:

$$(\operatorname{kern}(\operatorname{div}_D \frac{1}{r}))^\perp = (\operatorname{kern}(\frac{1}{r} \operatorname{grad}_D)^T)^\perp = \operatorname{Bild}(\frac{1}{r} \operatorname{grad}_D)$$

Damit wurde gezeigt, dass $B = \operatorname{Bild}(\frac{1}{r} \operatorname{grad}_D)$ und $A = \operatorname{kern}(\operatorname{div}(r * .))$

Der elektrische Feldoperator \hat{e} transformiert wegen (6.11) und (6.22) analog zum Vektorpotential Operator \hat{a} :

$$(6.26) \quad \hat{a} \mapsto \hat{a}' = \hat{U}\hat{a}\hat{U}^\dagger = U * \hat{a}$$

$$(6.27) \quad \hat{e} \mapsto \hat{e}' = \hat{U}\hat{e}\hat{U}^\dagger = U * \hat{e}$$

Als nächstes betrachten wir das Produkt $w = \text{div} * r * U^T$. Die ersten $|V| - 1$ Spalten von U^T sind Vektoren aus A und die übrigen Spaltenvektoren sind aus B . Daher ist der Kern der Abbildung w der Raum aller Vektoren aus $\mathbb{R}^{|E|}$ deren letzte $|f| - 1$ Komponenten Null sind.

Als Konsequenz müssen für alle stetig differenzierbaren $\phi \in \mathfrak{H}$ die Richtungsableitungen in Richtungen aus dem Raum B gleich Null sein und damit entlang dieser konstant.

Für allgemeine $\phi \in \mathfrak{H}$ folgt das Resultat aus einem Dichtheitsargument.

Der Rest folgt aus Theorem 6.6. □

Alternativ hätten wir vor der Quantisierung den ladungsfreien Fall

$$(6.28) \quad \text{div}(r * \epsilon * e) = 0$$

annehmen können, der automatisch gegeben wäre durch die zusätzliche Forderung folgender Eichung:

$$(6.29) \quad \text{div}(r * a) = 0$$

Die Transformation U und die Elimination der ersten $|V| - 1$ Koordinaten hätte zu einer Hamiltonfunktion geführt die durch Quantisierung zur gesuchten Schrödingergleichung führt.

Es sei abschließend noch erwähnt, dass die Komponenten des A Raums, also die Projektionen von a und seine kanonischen Impulse e im Sinn der Quantentheorie interessante Eigenschaft aufweisen. Die Komponenten a sind keine Messgrößen, sondern reine Eichvariablen, während e messbar ist. Das Feld e lässt sich daher beliebig genau bestimmen, ohne dabei Information über eine andere Messgröße zu verlieren.

Photonen - die Teilcheninterpretation Wir folgen in diesem Abschnitt Dirac um das Problem des quantenmechanischen harmonischen Oszillators zu lösen. Nach Theorem 6.6 können wir den Hamiltonoperator des freien elektromagnetischen Feldes auf das Problem des harmonischen Oszillators reduzieren. Konkret gibt es zu jedem Eigenwert ω_j von Q (siehe Beweis Theorem 6.6) einen Operator

$$\hat{h}_j = \frac{1}{2}(\hat{\pi}_j^2 + \omega_j^2 \hat{q}^2)$$

⁵ Jeder dieser Operatoren hat die Form eines Hamiltonoperators zu einem eindimensionalen harmonischen Oszillators. Bisher waren wir in Bezug auf die Theorie linearer Operatoren sehr vage, aber dies wollen wir in diesem Unterabschnitt korrigieren.

Definition 6.8. Sei $\Omega = \{q \mapsto p(q)e^{-x^2/2} : p \text{ ist ein komplexes Polynom auf } \mathbb{R}\}$ ein Teilraum des $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}, \lambda)$, wobei λ das Lebesgue Maß ist, und

$$(6.30) \quad \hat{a}_\omega : \Omega \mapsto \Omega$$

ein linearer Operator definiert durch

$$(6.31) \quad \hat{a}_\omega = \sqrt{\frac{\omega}{2}}(\hat{q} + i\frac{\hat{p}}{\omega}) = \sqrt{\frac{\omega}{2}}(q + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq})$$

dann nennen wir \hat{a}_ω den **Vernichtungsoperator** der Mode ω .

Halten wir zunächst einige wichtige Eigenschaften des Vernichtungsoperators fest.

Satz 6.3. Der Operator \hat{a}_ω aus Definition 6.8 ist ein dicht definierter linearer Operator auf $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}, \lambda)$, und der Kern des Operators ist eindimensional.

Des weiteren ist die Adjungierte des Operators gegeben durch

$$(6.32) \quad \hat{a}_\omega^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}}(q - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq})$$

und ebenfalls ein dicht definierter linearer Operator und es gilt:

$$(6.33) \quad [\hat{a}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] = 1$$

Beweis. Sei $f \in \Omega$, dann gibt es ein komplexes Polynom p auf \mathbb{R} , sodass gilt

$$\begin{aligned} \hat{a}_\omega(q \mapsto p(q)e^{-q^2/2}) &= q \mapsto \sqrt{\frac{\omega}{2}}(qp(q)e^{-q^2/2} + \frac{1}{\omega}(\frac{dp}{dq}e^{-q^2/2} - qp(q)e^{-q^2/2})) \\ &= (q \mapsto (\sqrt{\frac{\omega}{2}}(qp(q) + \frac{1}{\omega}(\frac{dp}{dq} - qp(q))))e^{-q^2/2}) \in \Omega \end{aligned}$$

Es folgt, dass \hat{a}_ω eine lineare Abbildung in Ω ist.

Der Beweis für den laut 6.32 adjungierten Operator geht analog.

Ein Beweis, dass Ω dicht in $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}, \lambda)$ liegt findet sich in (Teschl, Mathematical Methods in Quantum Mechanics, Lemma 8.3)

⁵Anstelle von j schreiben wir von hier an ω .

Der Kern des Operators \hat{a}_ω erfüllt folgende Differentialgleichung.

$$f' = -q\omega f$$

Dies ist eine homogene lineare Differentialgleichung und als solche gibt es für jeden Anfangswert $f(0) = c$ mit $c \in \mathbb{R}$ eine eindeutige Lösung gibt. Diese Lösung ist gegeben durch

$$f_c(q) = c * e^{-\omega q^2/2}$$

Zeigen wir nun, daß (6.32) tatsächlich der zu \hat{a}_ω adjungierte Operator ist. Sei $\phi, \psi \in \Omega$, dann verwenden wir partielle Integration um zu zeigen, dass (6.32) auf Ω der Definition der Adjungierten entspricht:

$$\begin{aligned} \langle \phi, \hat{a}_\omega \psi \rangle_{L^2} &= \int_{\mathbb{R}} \bar{\phi}(q) \left(\sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(q\psi + \frac{1}{\omega} \frac{d\psi}{dq}(q) \right) \right) d\lambda(q) \\ &= \int_{\mathbb{R}} \overline{\left(\sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(q\psi - \frac{1}{\omega} \frac{d\psi}{dq}(q) \right) \right)} \phi(q) d\lambda(q) \\ &= \langle \hat{a}_\omega^\dagger \phi, \psi \rangle_{L^2} \end{aligned}$$

Abschließend

$$\begin{aligned} \hat{a}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger &= \frac{\omega}{2} \left(q + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) \left(q - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) = \frac{\omega}{2} \left(q^2 - q \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} q - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dq^2} \right) \\ (6.34) \quad \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega &= \frac{\omega}{2} \left(q - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) \left(q + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) = \frac{\omega}{2} \left(q^2 + q \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} q - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dq^2} \right) \\ [\hat{a}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] &= \frac{d}{dq} q - q \frac{d}{dq} = 1 \end{aligned}$$

□

Den adjungierten Operator \hat{a}_ω^\dagger nennen wir den **Erzeugungsoperator** zur Mode ω .

Wir werden als nächstes den **Teilchenzahloperator**

$$(6.35) \quad \hat{N}_\omega = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega$$

untersuchen

Hilfssatz 6.9. *Der Teilchenzahloperator ist ein dicht definierter linearer Operator und erfüllt folgende Vertauschungsrelationen*

$$(6.36) \quad [\hat{N}_\omega, \hat{a}_\omega] = -\hat{a}_\omega$$

$$(6.37) \quad [\hat{N}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] = \hat{a}_\omega^\dagger$$

Des weiteren gilt die Identität

$$(6.38) \quad \hat{h}_\omega = \omega \left(\hat{N}_\omega + \frac{1}{2} \right)$$

Beweis. Da \hat{a}_ω und \hat{a}_ω^\dagger nach Satz 6.3 lineare Abbildungen in Ω sind, ist \hat{N}_ω ein dicht definierter linearer Operator.

Kommen wir nun zu den Vertauschungsrelationen (6.36) und (6.37)

$$\hat{N}_\omega \hat{a}_\omega = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega \hat{a}_\omega = (\hat{a}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger - 1) \hat{a}_\omega = \hat{a}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega - \hat{a}_\omega = \hat{a}_\omega \hat{N}_\omega - \hat{a}_\omega$$

$$\hat{N}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger = \hat{a}_\omega^\dagger (\hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega + 1) = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega + \hat{a}_\omega^\dagger = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{N}_\omega + \hat{a}_\omega^\dagger$$

Abschließend gilt nach (6.34)

$$\begin{aligned} \hat{N}_\omega &= \frac{\omega}{2} \left(-\frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dq^2} + q^2 - \frac{1}{\omega} \left[\frac{d}{dq}, q \right] \right) \\ &= \frac{1}{2\omega} \left(-\frac{d^2}{dq^2} + \omega^2 q^2 - \omega \left[\frac{d}{dq}, q \right] \right) = \frac{1}{\omega} \left(\hat{h}_\omega - \frac{\omega}{2} \right) \end{aligned}$$

□

Wir interpretieren nun den Teilchenzahloperator \hat{N}_ω als die Anzahl der Teilchen oder Photonen der Mode ω des elektromagnetischen Feldes. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erzeugen beziehungsweise vernichten entsprechend diese Teilchen. Den Kern des Vernichtungsoperators nennen wir den Vakuumzustand des freien elektromagnetischen Feldes.

Die mit dem Feld assoziierten Teilchen sind also nichts anderes als die zu den Moden des Feldes gehörenden Eigenfunktionen beziehungsweise Energieeigenzustände.

Um diese Interpretation zu untermauern untersuchen wir den Teilchenzahloperator weiter.

Satz 6.4. *Das Spektrum des Teilchenzahloperator \hat{N}_ω ist die Menge der natürlichen Zahlen mit Null.*

$$(6.39) \quad \sigma(\hat{N}_\omega) = \mathbb{N}^6$$

Alle Spektralwerte sind Eigenwerte $\sigma(\hat{N}_\omega) = \sigma_p(\hat{N}_\omega)$ und die Eigenräume sind eindimensional.

Beweis. Nachdem für den Teilchenzahloperator $\hat{N}_\omega = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega \geq 0$ gilt, ist auch $\sigma(\hat{N}_\omega) \geq 0$.

Nach Satz 6.3 ist 0 ein Eigenwert mit $\psi_0 = e^{-\omega x^2/2}$, da für beliebiges $\phi \in \Omega$ gilt

$$\langle \phi, \hat{N}_\omega \psi_0 \rangle_{L^2} = \langle \phi, \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega \psi_0 \rangle_{L^2} = \langle \hat{a}_\omega \phi, \hat{a}_\omega \psi_0 \rangle_{L^2} = 0$$

⁶0 ∈ ℕ.

und somit der Kern von \hat{N}_ω mit dem von \hat{a}_ω übereinstimmt.

Sei λ ein Eigenwert von \hat{N}_ω und ψ der zugehörige Eigenvektor, dann gilt:

$$\hat{N}_\omega \hat{a}_\omega \psi = \hat{a}_\omega \hat{N}_\omega \psi - \hat{a}_\omega \psi = (\lambda - 1) \hat{a}_\omega \psi$$

$$\hat{N}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger \psi = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{N}_\omega \psi + \hat{a}_\omega^\dagger \psi = (\lambda + 1) \hat{a}_\omega^\dagger \psi$$

Es bildet also \hat{a}_ω^\dagger Eigenvektoren zu λ auf Eigenvektoren zu $(\lambda + 1)$ ab und \hat{a}_ω Eigenvektoren zu λ auf Eigenvektoren zu $\lambda - 1$ ab.

Somit haben wir mit ψ_0 und für jedes $k \in \mathbb{N}$ mit $\psi_k = \hat{a}_\omega^k \psi_0$, zu jedem Element von \mathbb{N} einen Eigenvektor konstruiert.

Zeigen wir als nächstes, dass die Eigenräume zu jedem Eigenwert aus \mathbb{N} eindimensional sind. Für den Eigenwert Null wurde bereits gezeigt, dass der zugehörige Eigenraum eindimensional ist. Wir müssen daher zeigen, dass beim Übergang von $n \rightarrow n + 1$ keine Änderung der Dimensionalität des Eigenraums stattfinden kann.

Betrachten wir hierzu $n + 1$ und nehmen an es gibt zugehörige linear unabhängige Eigenvektoren ψ_a und ψ_b .

Nachdem $\hat{a}_\omega \psi_a$ und $\hat{a}_\omega \psi_b$ Eigenvektoren zu n sind müssen diese linear abhängig sein daher gibt es $u_1 \neq 0$ und $u_2 \neq 0$ sodass:

$$u_1 \hat{a}_\omega \psi_a + u_2 \hat{a}_\omega \psi_b = 0$$

Damit ist aber $u_1 \psi_a + u_2 \psi_b$ im Kern von \hat{a}_ω und damit im Kern von \hat{N}_ω . Das einzige Element des Eigenraums zu $n + 1$, das dies erfüllt ist der Nullvektor.

Als nächstes zeigen wir, dass es keine anderen Eigenwerte gibt.

Sei $n < \lambda < n + 1$ mit $n \in \mathbb{N}$ ein Eigenwert. Durch $n + 1$ -maliges anwenden von \hat{a}_ω auf den zugehörigen Eigenvektor erhalten wir einen Eigenvektor zu einem negative Eigenwert, was $\sigma(\hat{N}_\omega)$ widerspricht.

Wir haben bislang gezeigt dass $\sigma_p(\hat{N}_\omega) = \mathbb{N}$ ist. Um zu zeigen, dass dies alle Spektralwerte sind reicht es zu bemerken, dass die Menge der Eigenvektoren von \hat{N}_ω ein Orthogonalsystem bilden, dass den dichten Teilraum $\Omega_\omega = \{q \mapsto p(q)e^{-\omega x^2/2} : p \text{ ist ein komplexes Polynom auf } \mathbb{R}\}$ aufspannt.

Sei hierzu $m > n$, dann sind die Eigenvektoren paarweise orthogonal:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_n, \psi_m \rangle_{L^2} &= \langle \hat{a}_\omega^\dagger{}^n \psi_0, \hat{a}_\omega^\dagger{}^m \psi_0 \rangle_{L^2} = \langle \hat{a}_\omega^\dagger{}^{(n-1)} \psi_0, \hat{a}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger{}^m \psi_0 \rangle_{L^2} \\
&= \langle \hat{a}_\omega^\dagger{}^{(n-1)} \psi_0, (\hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega + 1) \hat{a}_\omega^\dagger{}^{(m-1)} \psi_0 \rangle_{L^2} \\
&= m \langle \hat{a}_\omega^\dagger{}^{(n-1)} \psi_0, \hat{a}_\omega^\dagger{}^{(m-1)} \psi_0 \rangle_{L^2} \\
&= \dots \\
&= m! \langle \hat{a}_\omega^\dagger{}^{(n-m)} \psi_0, \psi_0 \rangle_{L^2} \\
&= m! \langle \hat{a}_\omega^\dagger{}^{(n-m-1)} \psi_0, \hat{a}_\omega \psi_0 \rangle_{L^2} = 0
\end{aligned}$$

Die Wirkung des Erzeugungsoperators auf ein Element $\psi = (q \mapsto p(q)e^{-\omega q^2/2}) \in \Omega_\omega$ ist

$$\hat{a}_\omega^\dagger \psi = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(q - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) \psi = \sqrt{\frac{\omega}{2}} (2qp(q) - \frac{1}{\omega} p'(q)) e^{-\omega q^2/2}$$

Falls $\{(q \mapsto q^k e^{-\omega q^2/2}) : k \leq n\} \subset \text{span}(\{\hat{a}_\omega^\dagger{}^k \psi_0 : k \leq n\})$ für ein $n \in \mathbb{N}$ gilt, dann gilt dies somit auch für $n+1$.

Es gilt offensichtlich für $n=0$ und somit für ganz \mathbb{N} . \square

Nach Theorem 6.6 haben wir hiermit gezeigt, dass der Hamiltonoperator des freien elektromagnetischen Feldes ein reines Punktspektrum hat

$$(6.40) \quad \sigma(\hat{H}) = \left\{ \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) : \omega^2 \in \sigma(-r^{-1} \text{grad}_D \text{div}_D r^{-1}), n \in \mathbb{N}, \omega \neq 0 \right\}$$

und somit nach dem Satz von Stone haben wir die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der zugehörigen Schrödingergleichung zu beliebigen Anfangsbedingungen gezeigt.

Wir sehen, dass das freie elektromagnetische Feld seine Energie nur in ganzzahligen Vielfachen der Frequenz aufnehmen und abgeben kann. Diese Anregungen der Mode des Feldes interpretieren wir als Teilchen. Teilchen ist hier allerdings nur in einem sehr engen Sinn zu verstehen. Es sind nicht punktförmige Dinge die sich von a nach b bewegen, haben keinen definierbaren Ort, sondern lediglich die Diskretität haben sie mit den Teilchen wie wir sie uns denken gemeinsam.

Kapitel 7

Die Klein-Gordongleichung

Es verbleibt die Beschreibung des Stromes und der Ladung, eben der Quellen des elektromagnetischen Feldes. In der klassischen Theorie folgt für die beiden Größen eine Kontinuitätsgleichung direkt aus den Maxwellgleichungen. Es verbleibt Gleichungen anzugeben, welche die Dynamik des Stromes und der Ladung selbst in Abhängigkeit des elektromagnetischen Feldes beschreiben. Der einfachste Weg dies zu bewerkstelligen wäre mit Hilfe des Ohm'schen Gesetzes $j = \sigma e$.

Wir werden hierzu aber eine diskrete Version der Klein-Gordongleichung verwenden um Nahe an die Quantenelektrodynamik zu kommen.

Zunächst definieren wir zu diesem Zweck den so genannten Eichgradienten.

Definition 7.1. Sei G ein planarer Graph, a eine Kantenfunktion und Φ eine komplexe Eckfunktion, dann ist der **Eichgradient** für jede Kante $\tilde{e} \in E$ definiert durch:

$$(7.1) \quad \text{grad}^a(\Phi)(\tilde{e}) = \Phi(p(\tilde{e})) - \Phi(q(\tilde{e}))e^{ia(\tilde{e})}$$

Sei weiters $r > 0$ eine Kantenfunktion und $v \in V$ eine Ecke, dann nennen wir

$$(7.2) \quad \Delta_r^a(\Phi)(v) = (\text{grad}_r^{a\dagger} * r^{-2} * \text{grad}_r^a)(\Phi)(v)$$

den **Eich-Laplace Operator**. Man beachte das sich die Adjunktion \dagger auf das komplexe Skalarprodukt bezieht.

Hilfssatz 7.2. Sei G ein planarer Graph, a eine reelle Kantenfunktion und ξ eine reelle Eckfunktion. Für jede komplexe Eckfunktion Φ gilt dann für jede Kante \tilde{e} .

$$(7.3) \quad \text{grad}^{a+\text{grad}(\xi)}(e^{i\xi}\Phi)(\tilde{e}) = e^{i\xi(p(\tilde{e}))} \text{grad}^a(\Phi)(\tilde{e})$$

Beweis. Sei $\tilde{e} \in E$

$$\begin{aligned} \text{grad}^{a+\text{grad}(\xi)}(e^{i\xi}\Phi)(\tilde{e}) &= e^{i\xi(p(\tilde{e}))}\Phi(p(\tilde{e})) - e^{i\xi(q(\tilde{e}))}\Phi(q(\tilde{e}))e^{i(a+\text{grad}(\xi))(\tilde{e})} \\ &= e^{i\xi(p(\tilde{e}))}(\Phi(p(\tilde{e})) - \Phi(q(\tilde{e}))e^{ia(\tilde{e})}) \\ &= e^{i\xi(p(\tilde{e}))}\text{grad}^a(\Phi)(\tilde{e}) \end{aligned}$$

□

Definition 7.3. Sei G ein planarer Graph, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r > 0$ eine Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{R})$, $\phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$ und Φ_0 sowie v_0 komplexe Eckfunktionen, dann nennt man $\Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}})$ eine Lösung der **Klein-Gordongleichung** falls für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt

$$(7.4) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi\right)\Phi - \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0$$

und die Anfangsbedingung:

$$(7.5) \quad \Phi(0) = \Phi_0$$

$$(7.6) \quad \Phi'(0) = v_0$$

erfüllt ist.

Offensichtlich ist Φ keine Messgröße, und wir werden in Kürze sehen wie sich die Stromdichte und Ladung der Materie aus Φ ableiten.

Die Klein-Gordongleichung ist so konstruiert, dass eine Lösung einer Gleichung durch Multiplikation mit einer lokalen Phase wieder eine Lösung einer Klein-Gordongleichung ist. Diese Transformation lehnt sich an die Eichtransformation der Maxwelltheorie an und erweitert Diese. Die erweiterte Eichtransformation dient zur Kopplung des Klein-Gordon Feldes mit den Feldern der Maxwelltheorie.

Definition 7.4. Seien ϕ , r und a wie in Definition 7.2, und $\xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$, dann nennt man die Transformation T definiert durch

$$(7.7) \quad \gamma_{\xi}\left(\begin{pmatrix} \phi \\ a \\ \Phi \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} \phi - \xi' \\ a + r \text{grad}(\xi) \\ \Phi e^{i\xi} \end{pmatrix}$$

die zu ξ gehörende **erweiterte Eichtransformation**.

Satz 7.1. Sei G ein planarer Graph, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r > 0$ eine Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{R})$, $\phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$, $\xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$ und Φ eine Lösung der zugehörigen Klein-Gordongleichung

$$(7.8) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi\right)\Phi - \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0$$

dann ist auch

$$(7.9) \quad \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{a} \\ \tilde{\Phi} \end{pmatrix} = \gamma_{\xi} \left(\begin{pmatrix} \phi \\ a \\ \Phi \end{pmatrix} \right)$$

Lösung der Klein-Gordongleichung

$$(7.10) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\tilde{\phi} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\tilde{\phi} \right) \tilde{\Phi} - \Delta_r^{\tilde{a}} \tilde{\Phi} + m^2 \tilde{\Phi} = 0$$

Beweis. Sei u eine komplexe Eckfunktion, dann gilt:

$$\begin{aligned} \langle u, e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) \rangle &= \langle r^{-1} \text{grad}_r^{\frac{a}{r}} e^{-i\xi} u, r^{-1} \text{grad}_r^{\frac{a}{r}}(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}} \\ &\quad \langle r^{-1} \text{grad}_r^{\frac{a}{r}} e^{-i\xi} u, r^{-1} \text{grad}_r^{\frac{a}{r}}(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}} \end{aligned}$$

Anschließend erweitern wir den Skalarproduktausdruck mit $e^{i\xi(p(\tilde{e}))}$ und wenden anschließend Hilfssatz 7.2 an

$$\begin{aligned} \langle r^{-1} e^{i\xi(p(\tilde{e}))} \text{grad}_r^{\frac{a}{r}} e^{-i\xi} u, r^{-1} e^{i\xi(p(\tilde{e}))} \text{grad}_r^{\frac{a}{r}}(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}} &= \\ \langle r^{-1} \text{grad}_r^{\frac{a+r\text{grad}\xi}{r}} u, r^{-1} \text{grad}_r^{\frac{a+r\text{grad}\xi}{r}}(e^{i\xi}\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}} &= \langle u, \Delta_r^{a+r\text{grad}\xi}(e^{i\xi}\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}} \end{aligned}$$

Wir haben somit gezeigt:

$$\langle u, e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) - \Delta_r^{a+r\text{grad}\xi}(e^{i\xi}\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}} = 0$$

Nachdem u beliebig war, gilt somit:

$$e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) = \Delta_r^{a+r\text{grad}\xi}(e^{i\xi}\Phi)$$

Es ist eine einfache Übung zu zeigen, dass

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - i(\phi - \xi') \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i(\phi - \xi') \right) \tilde{\Phi} = e^{i\xi} \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi \right) \Phi$$

Damit haben wir gezeigt, dass wir Gleichung 7.10 durch Umformung aus Gleichung 7.8 erhalten. \square

Wir können uns somit, wie bei der Maxwelltheorie ohne Beschränkung der Allgemeinheit, auf den Fall $\phi \equiv 0$ beschränken und werden dies von hier an auch so tun um eine hamiltonsche Formulierung der Theorie zu erhalten.

Betrachten wir nun einige wichtige Eigenschaften dieser Gleichung wie Erhaltensgrößen und Interpretation der Lösungen.

Satz 7.2. *Sei G ein planarer Graph, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r > 0$ eine Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{R})$ und Φ eine Lösung der Klein-Gordongleichung zur Anfangsbedingung $\phi_0 \in \mathfrak{E}$, dann gilt die Kontinuitätsgleichung:*

$$(7.11) \quad q' + \text{div}(j) = 0$$

für die Ladung $q \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$ und die Stromstärke $j \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$

$$(7.12) \quad q = \Im(\bar{\Phi}\Phi')$$

$$(7.13) \quad \begin{aligned} j &= -\operatorname{div}^{-1}\Im(\bar{\Phi}\Delta_r^a(\Phi)) \\ &= -\Im\left(\frac{1}{r(e)^2}\overline{\Phi(p(e))}\phi(q(e))e^{i\frac{a}{r}(e)}\right) \end{aligned}$$

Beweis. Starten wir bei der linken Seite von (7.11)

$$\begin{aligned} q' &= (\Im(\bar{\Phi} * \Phi'))' = \left(\frac{\bar{\Phi} * \Phi' - \Phi * \bar{\Phi}'}{2i}\right)' = \\ &= \frac{1}{2i}((\bar{\Phi}' * \Phi' + \bar{\Phi} * \Phi'') - (\Phi' * \bar{\Phi}' + \Phi * \bar{\Phi}'')) = \\ &= \frac{1}{2i}(\bar{\Phi} * \Phi'' - \Phi * \bar{\Phi}'') = \frac{1}{2i}(\bar{\Phi} * (\Delta_r^a \Phi - m\Phi) - \Phi * (\overline{\Delta_r^a \Phi - m\Phi})) = \\ &= \frac{1}{2i}(\bar{\Phi} * \Delta_r^a \Phi - \Phi * \overline{\Delta_r^a \Phi}) = \Im(\bar{\Phi} * \Delta_r^a(\Phi)) \end{aligned}$$

Der letzte Term muss sich im Bild der Divergenz befinden um die Inverse der Divergenz darauf anzuwenden. Dies ist nach dem de'Rham Komplex Theorem genau dann der Fall wenn die Summe der Eckfunktion über alle Ecken gleich Null ist.¹

$$\sum_{v \in V} \Im(\bar{\Phi} * \Delta_r^a(\Phi)) = \Im\left(\sum_{v \in V} \bar{\Phi} * \Delta_r^a(\Phi)\right) = \Im(\langle \Phi, \Delta_r^a(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}})$$

Der Ausdruck im Imaginärteilkomplex ist der Erwartungswert des selbstadjungierten Eich-Laplace Operators und daher reel.

Damit haben gezeigt, dass sich der Imaginärteil im Bild der Divergenz befindet und somit mit $\operatorname{div}\operatorname{div}^{-1}$ erweitert werden kann. Dies schließt den Fall in dem Δ_r^a einfach ein selbstadjungierter Operator ist ab.

In unserem speziellen Fall können wir die Form in der Δ_r^a gegeben ist nutzen um eine Lösung zu konstruieren.

Sei $x \in V$, dann definieren wir zunächst $\psi \in \mathfrak{E}$ durch

$$\psi(y) = \Phi(x)\delta_{x,y}$$

Wir starten mit dem Ausdruck $\Im(\bar{\Phi}(x) * \Delta_r^a(\Phi)(x))$ für die Divergenz des

¹Hier ist \langle, \rangle immer als das komplexe Skalarprodukt zu verstehen.

Stromes und formen um

$$\begin{aligned}
\Im(\bar{\Phi}(x) * \Delta_r^a(\Phi)(x)) &= \Im(\langle \psi, \Delta_r^a(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}}) = \Im(\langle \text{grad}_{\frac{a}{r}} \psi, \frac{1}{r^2} \text{grad}_{\frac{a}{r}} \Phi \rangle_{\mathfrak{K}}) \\
&= \Im\left(\sum_{\substack{e \in E \\ p(e)=x}} (\overline{\Phi(p(e))}) \frac{1}{r(e)^2} (\Phi(p(e)) - e^{i\frac{a}{r}(e)} \Phi(q(e)))\right) \\
&\quad + \sum_{\substack{e \in E \\ q(e)=x}} (-\overline{\Phi(q(e))}) e^{\frac{-a}{r}} \frac{1}{r(e)^2} (\Phi(p(e)) - e^{i\frac{a}{r}(e)} \Phi(q(e))) \\
&= -\Im\left(\sum_{\substack{e \in E \\ p(e)=x}} \frac{1}{r(e)^2} \overline{\phi(p(e))} \Phi(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)} + \sum_{\substack{e \in E \\ q(e)=x}} \frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(q(e))} \Phi(p(e)) e^{\frac{-a}{r}(e)}\right) \\
&= -\Im\left(\sum_{\substack{e \in E \\ p(e)=x}} \frac{1}{r(e)^2} \overline{\phi(p(e))} \Phi(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)} - \sum_{\substack{e \in E \\ q(e)=x}} \frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e))} \Phi(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)}\right) \\
&= \text{div}\left(\Im\left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e))} \Phi(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)}\right)(x)\right)
\end{aligned}$$

Dies führt uns zum gesuchten Resultat.

$$\begin{aligned}
q' &= \Im(\bar{\Phi} * \Delta_r^a(\Phi)) = \text{div}(\text{div}^{-1}(\Im(\bar{\Phi} * \Delta_r^a(\Phi)))) \\
&= -\text{div}\left(-\Im\left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e))} \Phi(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)}\right)\right)
\end{aligned}$$

□

Die Ladung q und der Strom j sind die Meßgrößen der Klein-Gordon Theorie, während Φ analog zu den Potentialen der Maxwelltheorie nicht messbar ist.

Vergewissern wir uns zunächst, dass die Ladung definiert in 7.12 und der Strom definiert in 7.13 tatsächlich unverändert unter erweiterter Eichtransformation² bleiben.

Folgerung 7.5. *Sei G , $m > 0$, $r > 0$, Φ und a wie in Satz 7.2. Sei weiters $\xi \in \mathfrak{E}$, dann bleibt die Ladung q und der Strom j , definiert in 7.12 und 7.13, nach Anwendung der Transformation γ_ξ unverändert:*

Beweis. q bleibt offensichtlich unverändert nachdem ξ zeitunabhängig ist.

Um zu zeigen, dass j unverändert bleibt reicht es zu zeigen, dass

$$\Im(\bar{\Phi} \Delta_r^a(\Phi))$$

²Da wir annehmen $\phi \equiv 0$ gilt ξ ist konstant.

unverändert bleibt.

Im Beweis von Satz 7.1 haben wir gezeigt, dass

$$e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) = \Delta_r^{a+r\text{grad}\xi}(e^{i\xi}\Phi)$$

woraus das Resultat folgt. \square

Um das Thema Ladung und Strom abzuschließen widmen wir uns kurz einer Transformation, der so genannten Ladungskonjugation, welche die Ladung q und den Strom j invertiert.

Satz 7.3. *Sei G , $m > 0$, $r > 0$ und a wie in Definition 7.3. Wenn Φ eine Lösung der Klein-Gordongleichung*

$$(7.14) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi - \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0$$

ist, dann ist $\bar{\Phi}$ eine Lösung der Klein-Gordongleichung

$$(7.15) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \bar{\Phi} - \Delta_r^{-a} \bar{\Phi} + m^2 \bar{\Phi} = 0$$

und für die Ladung (7.12) und den Strom (7.13) gilt:

$$(7.16) \quad q_{\bar{\Phi}} = -q_{\Phi}$$

$$(7.17) \quad j_{\bar{\Phi}}^a = -j_{\Phi}^{-a}$$

Beweis. Um zu sehen, dass $\bar{\Phi}$ (7.15) erfüllt, wende komplexe Konjugation auf 7.14 an.

(7.16) und (7.17) können durch ein paar einfache Umformungen gezeigt werden.

$$q_{\bar{\Phi}} = \Im(\bar{\Phi}\Phi') = \Im(\overline{\Phi\Phi'}) = -\Im(\Phi\Phi') = -q_{\Phi}$$

$$\begin{aligned} j_{\bar{\Phi}}^{-a} &= -\text{div}^{-1} \Im(\bar{\Phi} \Delta_r^{-a}(\bar{\Phi})) = -\text{div}^{-1} \Im(\overline{\Phi \Delta_r^a(\Phi)}) \\ &= \text{div}^{-1} \Im(\bar{\Phi} \Delta_r^a(\Phi)) = -j_{\Phi}^a \end{aligned}$$

\square

Genauso wie in der Maxwelltheorie gibt es eine Energiefunktion, die das Systems beschreibt. Es gilt hierbei der Energieerhaltungssatz falls a zeitunabhängig ist.

Satz 7.4. Sei G ein planarer Graph $m > 0$ eine reelle Zahl, $r > 0$ eine Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{R})$, Φ_0 sowie v_0 komplexe Eckfunktionen und $\pi, \Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}})$. Weiters schreiben wir Realteil und Imaginärteil als:

$$(7.18) \quad \Phi = \Phi_R + i\Phi_I$$

$$(7.19) \quad \pi = \pi_R + i\pi_I$$

Die Hamiltonfunktion der Klein-Gordontheorie definieren wir dann als:³

$$(7.20) \quad H(\Phi, \pi) = \frac{1}{2}(\langle \pi, \pi \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2)\Phi \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}})$$

Φ ist genau dann eine Lösung der Klein-Gordongleichung sowie $\pi = \Phi'$ wenn die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$(7.21) \quad \frac{1}{2}\Phi' = \frac{\partial H}{\partial \pi}$$

$$(7.22) \quad \frac{1}{2}\pi' = -\frac{\partial H}{\partial \Phi}$$

erfüllt sind.⁴

Beweis. TODO □

Folgerung 7.6. Sei G ein planarer Graph $m > 0$ eine reelle Zahl, $r > 0$ eine Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{R})$, Φ_0 sowie v_0 komplexe Eckfunktionen und $\Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}})$ eine Lösung der Klein-Gordongleichung sowie $\pi = \Phi'$, dann gilt

$$(7.23) \quad \frac{dH(\Phi(t), \pi(t), t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}(\Phi(t), \pi(t), t)$$

Beweis. Sei $t \in \mathbb{R}$, dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{dH(\Phi(t), \pi(t), t)}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \Phi} \Phi' + \frac{\partial H}{\partial \pi} \pi' + \frac{\partial H}{\partial t} = \\ &= -\frac{1}{2}\pi' \overline{\Phi'} - \frac{1}{2}\pi' \Phi' + \frac{1}{2}\Phi' \pi' + \frac{1}{2}\overline{\Phi'} \pi' + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \end{aligned}$$

□

Abschließend soll noch bemerkt, dass sich die Klein-Gordongleichung in einer Schrödingerform schreiben lässt.

³Die Skalarprodukte beziehen sich auf die Standardskalarprodukte der komplexen Vektorräume $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}$ und $\mathfrak{R}_{\mathbb{C}}$.

⁴Ableitungen sind hier im Sinne des Wirtinger Kalküls zu verstehen.

Hilfssatz 7.7. Sei L eine positiv semidefinite lineare Abbildung in $V = \mathbb{C}^n$ ($n \geq 1$), $m > 0$ und $u \in C^2(\mathbb{R}, V)$ eine Lösung der Gleichung

$$(7.24) \quad u'' + Lu + m^2 u = 0$$

dann gibt es einen selbstadjungierten linearen Operator H in V sodass

$$(7.25) \quad \psi = \begin{pmatrix} u \\ (L^{\frac{1}{2}} + i\frac{\partial}{\partial t})u/m \end{pmatrix} \in C^2(\mathbb{R}, V) \times C^1(\mathbb{R}, V)$$

eine Lösung der Schrödingergleichung

$$(7.26) \quad i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

ist und umgekehrt ist die erste Komponente einer Lösung $\psi \in C^2(\mathbb{R}, V) \times C^1(\mathbb{R}, V)$ von (7.26) auch eine Lösung von (7.24).

Beweis. Sei $u \in C^2(\mathbb{R}, V)$, dann starten wir mit (7.24)

$$\begin{aligned} u'' + Lu + m^2 u &= (L^{\frac{1}{2}} - i\frac{\partial}{\partial t})(L^{\frac{1}{2}} + i\frac{\partial}{\partial t})u + m^2 u = 0 \\ ((L^{\frac{1}{2}} - i\frac{\partial}{\partial t})/m)((L^{\frac{1}{2}} + i\frac{\partial}{\partial t})/m)u + u &= 0 \end{aligned}$$

Wir definieren nun $\phi = (L^{\frac{1}{2}} + i\frac{\partial}{\partial t})u/m$ und erhalten

$$((L^{\frac{1}{2}} - i\frac{\partial}{\partial t})/m)\phi + u = 0$$

Dies führt zum Gleichungssystem

$$(7.27) \quad i\frac{\partial u}{\partial t} = -L^{\frac{1}{2}}u + m * \phi$$

$$(7.28) \quad i\frac{\partial \phi}{\partial t} = L^{\frac{1}{2}}\phi + m * u$$

Wir definieren weiters

$$H = \begin{pmatrix} -L^{\frac{1}{2}} & m \\ m & L^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \psi = \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix}$$

und erhalten (7.26).

$$(7.29) \quad i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

H ist selbstadjungiert, da m reel ist und L positiv semidefinit ist.

Sei umgekehrt $\psi = \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix} \in C^2(\mathbb{R}, V) \times C^1(\mathbb{R}, V)$ eine Lösung von (7.29).

Wenden wir zunächst $(L^{\frac{1}{2}} - i\frac{\partial}{\partial t})/m$ auf (7.27) an

$$(L^{\frac{1}{2}} - i\frac{\partial}{\partial t})/m(i\frac{\partial u}{\partial t} + L^{\frac{1}{2}}u) = (L^{\frac{1}{2}} - i\frac{\partial}{\partial t})\phi$$

Anschließend verwenden wir (7.28)

$$L^{\frac{1}{2}}\phi - i\frac{\partial \phi}{\partial t} = -m * u$$

und erhalten das gesuchte Resultat.

$$(Lu + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2})/m = -m * u$$

$$u'' + Lu + m^2u = 0$$

□

Satz 7.5. *Sei G , $m > 0$, $r > 0$ und Φ wie in Definition 7.3 und a , Φ_0 und v_0 Kantenfunktionen, dann gibt es eine Schrödingerform des Anfangswertproblems.*

$$(7.30) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Phi - \Delta_r^a\Phi + m^2\Phi = 0$$

$$(7.31) \quad \Phi(0) = \Phi_0$$

$$(7.32) \quad \Phi'(0) = v_0$$

und eine zugehörige Normerhaltende Zeitentwicklung

$$\psi(t) = e^{-iHt}\psi_0$$

Beweis. Der lineare Operator $L = -\Delta_r^a$ ist nach seiner Konstruktion ein positiv semidefiniter linearer Operator.

Daher können wir Hilfsatz 7.7 anwenden und finden eine äquivalente Schrödingerform und zugehörige Lösung

$$\psi(t) = e^{-iHt}\psi_0$$

□

Da H selbstadjungiert ist bleibt die Norm von ψ unter der Klein-Gordon Zeitentwicklung erhalten.

Dies bedeutet, dass wir eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \bar{\psi}\psi$ definieren können, die nichtnegativ ist und deren Summe $\sum_{v \in V} \rho(v)$ unter der Zeitentwicklung erhalten bleibt. Es gibt daher eine zugehörige Kontinuitätsgleichung.

Als nächstes zeigen wir, dass der Operator H indefinit ist und seine Eigenwerte symmetrisch um Null sind.

Satz 7.6. *Sei L eine positiv semidefinite lineare Abbildung in $V = \mathbb{C}^n$ ($n \geq 1$), und $m > 0$, dann ist das Spektrum des selbstadjungierten lineare Operators*

$$(7.33) \quad H = \begin{pmatrix} -L^{\frac{1}{2}} & m \\ m & L^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

gegeben durch

$$(7.34) \quad \sigma(H) = \{\pm\sqrt{\omega + m^2} : \omega \in \sigma(L)\}$$

Beweis. Sei $u \in V$ und $\omega \in \mathbb{R}$ sodass $Lu = \omega^2 u$. Des weiteren seien $a_{\pm} \in \mathbb{C}$ freie Parameter, die wir im Laufe der Konstruktion der Eigenvektoren

$$v_{\pm} = \begin{pmatrix} u \\ a_{\pm} * u \end{pmatrix}$$

festlegen werden.

Wenden wir die Matrix H auf v_{\pm} an und fordern, dass es sich beim Resultat um einen Eigenvektor handelt, was zu folgendem Gleichungssystem führt

$$\begin{aligned} -\omega + a_{\pm} * m &= \pm\sqrt{\omega^2 + m^2} \\ m + a_{\pm} * \omega &= a_{\pm} \pm \sqrt{\omega^2 + m^2} \end{aligned}$$

Es gibt eine eindeutige Lösung

$$a_{\pm} = \frac{m}{\pm\sqrt{\omega^2 + m^2} - \omega}$$

Durch diese Konstruktion erhalten wir zu jedem Eigenvektor von L zwei Eigenvektoren v_{\pm} von H . Es gilt

$$\langle v_-, v_+ \rangle = 0$$

Im allgemeiner Fall gilt für zwei Eigenvektoren u_1, u_2 von L , falls sie orthogonal sind, dass die vier daraus nach obiger Konstruktion erzeugten Eigenvektoren von H paarweise orthogonal sind. Dies gilt insbesondere auch falls u_1 und u_2 zum selben Eigenwert gehören.

Da L selbstadjungiert ist, erhalten wir eine vollständige Orthogonalbasis $(u_i)_{i=1}^n$ und durch obige Konstruktion erhalten wir ein Orthogonalsystem $(v_{i\pm})_{i=1}^n$ aus $2 * n$ Vektoren und damit eine Orthogonalbasis zu $V \times V$. \square

Untersuchen wir als nächstes die Voraussetzung $m > 0$ im Hilfssatz 7.7 wenn L einen nicht trivialen Kern hat. Betrachte hierzu die Differentialgleichung (7.24) mit $m = 0$

$$(7.35) \quad u'' + Lu = 0$$

und transformiere sie in die analoge Differentialgleichung erster Ordnung

$$(7.36) \quad \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix}$$

Wir werden zeigen, dass es keine lineare Koordinatentransformation gibt, sodass es eine positive hermitesche Form gibt, die unter der Zeitentwicklung unverändert bleibt.

Satz 7.7. *Sei L eine positiv semidefinite lineare Abbildung in $V = \mathbb{C}^n$ ($n \geq 1$) mit nicht trivialem Kern, dann gibt es keine lineare Abbildung J in $V \times V$ sodass*

$$(7.37) \quad A = J^{-1} \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} J = J^{-1} B J$$

ein selbstadjungierter Operator bezüglich einer positiven hermiteschen Form Q ist.

Beweis. Sei Q eine positive hermitesche Form, dann gilt für $\phi, \psi \in V \times V$

$$\begin{aligned} \langle \phi, A\psi \rangle_Q &= \langle \phi, QA\psi \rangle = \langle A^\dagger Q\phi, \psi \rangle \\ &= \langle QQ^{-1}A^\dagger Q\phi, \psi \rangle = \langle Q^{-1}A^\dagger Q\phi, Q\psi \rangle \end{aligned}$$

Es folgt, dass A bezüglich Q genau dann selbstadjungiert ist wenn

$$Q^{-1}A^\dagger Q = A$$

Wir setzen (7.37) in diesen Ausdruck ein und formen um

$$\begin{aligned} QJ^{-1}BJ &= J^\dagger B^\dagger J^{\dagger-1}Q \\ Q^{\frac{1}{2}}J^{-1}BJQ^{-\frac{1}{2}} &= Q^{-\frac{1}{2}}J^\dagger B^\dagger J^{\dagger-1}Q^{\frac{1}{2}} \\ (JQ^{-\frac{1}{2}})^{-1}B(JQ^{-\frac{1}{2}}) &= (JQ^{-\frac{1}{2}})^\dagger B^\dagger (JQ^{-\frac{1}{2}})^{\dagger-1} \end{aligned}$$

Hiermit haben wir gezeigt, dass es ausreicht die Aussage für $Q = \mathbb{I}$ zu beweisen.

Als nächstes zeigen wir, dass für jeden Eigenwert λ von B gilt, dass λ^2 Eigenwert von L ist. Wir verwenden hierfür das charakteristische Polynom.

$$\begin{aligned} p_B(\omega)p_B(-\omega) &= \det(B - \omega)\det(B + \omega) = \det(B^2 - \omega^2) \\ &= \det\left(\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix}^2 - \omega^2\right) = \det\left(\begin{pmatrix} L & 0 \\ 0 & L \end{pmatrix} - \omega^2\right) \\ &= \det(L - \omega^2)^2 = p_L(\omega^2)^2 \end{aligned}$$

Betrachten wir die Faktorisierung $p_B(\omega) = a \prod_{i=1}^{2n} (\omega - x_i)$ und $p_L(\omega) = b \prod_{i=1}^n (\omega - y_i)$, wobei $(x_i)_{i=1}^{2n}$ und $(y_i)_{i=1}^n$ die Eigenwerte von B respektive L sind entsprechend ihrer algebraischen Vielfachheit sind.

Durch Vergleich der linearen Faktoren

$$\begin{aligned} p_B(\omega)p_B(-\omega) &= p_L(\omega^2)^2 \\ a^2 \prod_{i=1}^{2n} (\omega - x_i)^2 &= b^2 \prod_{i=1}^n (\omega^2 - y_i)^2 \\ a^2 \prod_{i=1}^{2n} (\omega - x_i)^2 &= b^2 \prod_{i=1}^n ((\omega - \sqrt{y_i})(\omega + \sqrt{y_i}))^2 \end{aligned}$$

können wir alle Eigenwerte von B mit samt ihrer Vielfachheit mit Eigenwerten von L identifizieren. Insbesondere ist die algebraische Vielfachheit des Eigenwerts Null von B das Doppelte der algebraischen Vielfachheit des Eigenwerts Null von L .

Es gilt aber für die geometrische Vielfachheit

$$\dim(\ker(B)) = \dim(\ker(L))$$

Um dies zu sehen sei $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \in \ker(B)$ und durch Anwendung von B sehen wir

$$\begin{aligned} v_2 &= 0 \\ Lv_1 &= 0 \end{aligned}$$

und können den Kern von B mit dem Kern von L identifizieren.

Die geometrische Vielfachheit ist damit echt kleiner als die algebraische Vielfachheit und somit gibt es keine Ähnlichkeitstransformation die B in eine selbstadjungierte Matrix transformiert. \square

Falls die Voraussetzung $m > 0$ im Hilfssatz 7.7 also nicht erfüllt ist und L einen nicht trivialen Kern hat, gibt es keine Möglichkeit eine Wahrscheinlichkeitsdichte zu definieren, die unter der Klein-Gordon Zeitentwicklung erhalten bleibt. Es gibt auch keine lokal erhaltene Wahrscheinlichkeitsdichte, da eine Kontinuitätsgleichung wegen des de'Rham Komplex bereits globale Erhaltung impliziert.

Kapitel 8

Kanonische Quantisierung des Klein-Gordon Feldes

Wir kommen nun zur Quantisierung der Klein-Gordontheorie. Zunächst definieren wir, wie bereits bei den Maxwellgleichungen, einen Hilbertraum.

Definition 8.1. Sei G ein planarer Graph, dann ist der Hilbertraum unserer Theorie gegeben durch

$$(8.1) \quad \mathfrak{H}(G) = L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C})$$

Der Raum der komplexen Funktionen auf $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ deren Quadrate ein endliches Integral aufweisen.

Das Skalarprodukt auf \mathfrak{H} für $\phi, \xi \in \mathfrak{H}$ ist hier definiert durch:

$$(8.2) \quad \langle \phi, \xi \rangle_{\mathfrak{H}} = \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)} \overline{\phi}(x) \xi(x) d\lambda(x)$$

Als nächstes definieren nun die Feldoperatoren und kurze Betrachtung der Hamiltonfunktion der Klein-Gordontheorie liefert uns dann wie beim elektromagnetischen Feld die zugehörige Schrödingergleichung.

Definition 8.2. Sei G ein planarer Graph, $m > 0$ eine reelle Zahl und $r > 0$ sowie a Kantenfunktionen, dann definieren wir den Klein-Gordon-Feldoperator $\hat{\Phi}$ und dazu konjugierten Impuls $\hat{\pi}_{\Phi}$.

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(j) &= \hat{\Phi}_R(j) + i\hat{\Phi}_I(j) \\ \hat{\pi}_{\Phi}(j) &= \hat{\pi}_{\Phi_R}(j) + i\hat{\pi}_{\Phi_I}(j) \end{aligned}$$

für alle $1 \leq j \leq |V|$. Die selbstadjungierten Operatoren auf der rechten Seite sind dabei definiert durch

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_R(j) : (\Phi \mapsto \psi(\Phi)) &\mapsto (\Phi \mapsto \Phi_{Rj}\psi(\Phi)) \text{ für } j \in V \\ \hat{\Phi}_I(j) : (\Phi \mapsto \psi(\Phi)) &\mapsto (\Phi \mapsto \Phi_{Ij}\psi(\Phi)) \text{ für } j \in V \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\pi}_{\Phi_R}(j) : (\Phi \mapsto \psi(\Phi)) &\mapsto (\Phi \mapsto -i \frac{\partial \psi}{\partial \Phi_{Rj}}(q)) \text{ für } j \in V \\ \hat{\pi}_{\Phi_I}(j) : (\Phi \mapsto \psi(\Phi)) &\mapsto (\Phi \mapsto -i \frac{\partial \psi}{\partial \Phi_{Ij}}(q)) \text{ für } j \in V\end{aligned}$$

wobei Φ_R und Φ_I der Realteil und Imaginärteil der Variablen Φ in der obigen Definition ist.

Der Hamiltonoperator des Klein-Gordon Feldes ist gegeben durch:

$$(8.3) \quad \hat{H} = \frac{1}{2} \left(\sum_{x \in V} (\hat{\pi}_{\Phi_R}^2 + \hat{\pi}_{\Phi_I}^2) + \langle \hat{\Phi}, (\Delta_r^a + m^2) \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} \right)$$

Sei $\psi_0 \in \mathfrak{H}$ und $\psi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{H})$, sodass:

$$(8.4) \quad \hat{H}\psi(t) = i\psi'(t)$$

für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt und die Anfangsbedingung $\psi(0) = \psi_0$ erfüllt ist, dann nennt man ψ eine Lösung der **Schrödingergleichung** des Klein-Gordonfeldes.

Theorem 8.3. Sei G ein planarer Graph, a und $r > 0$ Kantenfunktionen, dann existiert eine unitäre Abbildung \hat{U} auf \mathfrak{H} , $\omega_0 = 0$ und $(\omega_j)_{j=1}^{|V|-1} > 0$ sodass für den Hamiltonoperator des Klein-Gordonfeldes \hat{H} (7.22) gilt:

$$(8.5) \quad \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \sum_{j=0}^{|V|-1} \hat{h}_j$$

Wobei die \hat{h}_j gegeben sind durch:

$$(8.6) \quad \hat{h}_j = \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial a_j^2} - \frac{\partial^2}{\partial b_j^2} + (m + \omega_j)^2 \bar{x}_j x_j \right)$$

und $x_n = a_n + ib_n$ für $1 \leq n \leq |V|$ gilt.

Beweis. Der Hamiltonoperator lässt sich zerlegen als:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

wobei

$$\begin{aligned}\hat{T} &= -\frac{1}{2} \sum_{x \in V} \left(\frac{\partial^2}{\partial \Phi_R(x)^2} + \frac{\partial^2}{\partial \Phi_I(x)^2} \right) \\ \hat{V} &= \frac{1}{2} \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2) \Phi \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}}\end{aligned}$$

Wir verwenden den positiv definiten komplexen linearen Operator

$$Q = \Delta_r^a + m^2$$

Dieser lässt sich nach dem Spektralsatz schreiben als

$$Q = U^\dagger R U$$

wobei U eine unitäre Matrix und R eine nichtnegative Diagonalmatrix ist.

Wie in Theorem 6.6 definieren wir:

$$\hat{U}(\phi)(q) = \phi(U(q))$$

Wir dürfen den Operator \hat{T} als reellen Laplaceoperator interpretieren, der somit invariant unter orthogonaler Transformation ist. Weiters können wir U als orthogonale Transformation auf dem reellen Vektorraum $\mathfrak{E} \times \mathfrak{E}$ interpretieren. Es folgt das \hat{T} invariant unter U ist.

Der Rest des Beweises ist analog zum Beweis von Theorem 6.6. Der einzige Unterschied ist, dass der Raum A hier leer ist und der Raum B der ganze Raum \mathfrak{E} ist. \square

Die wichtigste lokal erhaltene Größe der Klein-Gordontheorie neben der Gesamtenergie H ist die Ladung $q = \Im(\bar{\Phi}\Phi')$ Durch den Zusammenhang $\pi = \Phi'$ und eine kurze Umformung

$$\begin{aligned} q &= \frac{\bar{\Phi}\pi - \Phi\bar{\pi}}{2 * i} = \frac{(\Phi_R - i * \Phi_I)(\pi_R + i * \pi_I) - (\Phi_R + i * \Phi_I)(\pi_R - i * \pi_I)}{2 * i} \\ &= \Phi_R \pi_I - \Phi_I \pi_R \end{aligned}$$

können wir q als Funktion der reellen Größen Φ_R , Φ_I , π_R und π_I darstellen.

Wir können nun den Ladungsfeldoperator basierend auf der klassischen Theorie erraten.

Definition 8.4. Sei G ein planarer Graph und $\Phi_x = a_x + ib_x$ für $x \in V$ und $a_x, b_x \in \mathbb{R}$ der Klein-Gordon Feldoperator, dann nennen wir

$$(8.7) \quad \hat{q}(x) = \hat{\Phi}_R \hat{\pi}_I - \hat{\Phi}_I \hat{\pi}_R = i(\hat{\Phi}_I(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_R(x)} - \hat{\Phi}_R(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_I(x)})$$

den **Ladungsfeldoperator** des Klein-Gordon Feldes.

Die Summer über alle Knoten liefert den **Gesamtladungsoperator**.

$$(8.8) \quad \hat{Q} = \sum_{x \in V} \hat{q}(x)$$

Es scheint notwendig unsere Vermutung auch via der quantenmechanischen Kontinuitätsgleichung zu belegen. Später werden wir mit Hilfe eines Symmetrie Arguments eine fundierte Herleitung der Form des Ladungsfeldoperators erhalten.

Theorem 8.5. *Sei G ein planarer Graph, $\psi \in \mathfrak{H}(G)$ dann gilt für den Ladungsfeldoperator \hat{q} die Kontinuitätsgleichung*

$$(8.9) \quad \langle \psi, \hat{q}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = \text{div}(\langle \psi, \mathfrak{S}(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(p(e)) \hat{\Phi}(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)} \psi) \rangle_{\mathfrak{H}})$$

Beweis. Wir starten auf der linken Seite von (8.9) und zeigen zuerst das Ehrenfest Theorem für die Klein-Gordon Schrödingergleichung. Sei hierzu x ein Knoten des Graphen und ψ eine Lösung der Schrödingergleichung (8.4).

$$\begin{aligned} \langle \psi, \hat{q}(x)\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} &= \langle \psi', \hat{q}(x)\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, \hat{q}(x)\psi' \rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= \langle -i\hat{H}\psi, \hat{q}(x)\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, -i\hat{q}(x)\hat{H} \rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= i(\langle \psi, \hat{H}\hat{q}(x)\psi \rangle_{\mathfrak{H}} - \langle \psi, \hat{q}(x)\hat{H} \rangle_{\mathfrak{H}}) \\ &= i\langle \psi, [\hat{H}, \hat{q}(x)]\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \end{aligned}$$

Als nächstes betrachten wir den Kommutator $[\hat{H}, \hat{q}(x)]$ aus (8.3) folgt

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{q}(x)] &= \frac{1}{2} \left(\sum_{y \in V} ([\hat{\pi}_{\Phi_R}(y)^2, \hat{q}(x)] + [\hat{\pi}_{\Phi_I}^2(y), \hat{q}(x)]) + [\langle \hat{\Phi}, \Delta_r^a \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}}, \hat{q}(x)] \right. \\ &\quad \left. + m^2 [\langle \hat{\Phi}, \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}}, \hat{q}(x)] \right) \end{aligned}$$

Wegen der Form von \hat{q} verschwindet der Kommutator mit den Ausdrücken $\hat{\pi}_{\Phi_R}(y) + \hat{\pi}_{\Phi_I}(y)^2$, $\hat{\Phi}_R(y)^2 + \hat{\Phi}_I(y)^2$. Dies lässt sich an einem Beispiel illustrieren:

$$\begin{aligned} [\hat{\pi}_{\Phi_R}(y)^2, \hat{q}(x)] &= [\hat{\pi}_{\Phi_R}(y)^2, \hat{\Phi}_R \hat{\pi}_{\Phi_I}] - [\hat{\pi}_{\Phi_R}(y)^2, \hat{\Phi}_I \hat{\pi}_{\Phi_R}] \\ &= -2i\hat{\pi}_{\Phi_R}(y)\hat{\pi}_{\Phi_I}(x)\delta_{x,y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{\pi}_{\Phi_I}(y)^2, \hat{q}(x)] &= [\hat{\pi}_{\Phi_I}(y)^2, \hat{\Phi}_R \hat{\pi}_{\Phi_I}] - [\hat{\pi}_{\Phi_I}(y)^2, \hat{\Phi}_I \hat{\pi}_{\Phi_R}] \\ &= 2i\hat{\pi}_{\Phi_R}(x)\hat{\pi}_{\Phi_I}(y)\delta_{x,y} \end{aligned}$$

Es verbleibt also den dritten Kommutator zu analysieren.

$$\begin{aligned} [\langle \hat{\Phi}, \Delta_r^a \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}}, \hat{q}(x)] &= [\langle \frac{1}{r} \text{grad}^{\frac{a}{r}} \hat{\Phi}, \frac{1}{r} \text{grad}^{\frac{a}{r}} \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{K}, \mathbb{C}}, \hat{q}(x)] \\ &= [\langle \frac{1}{r^2} \hat{\Phi}(p), \hat{\Phi}(p) \rangle_{\mathfrak{K}, \mathbb{C}} \\ &\quad - 2\Re(\langle \frac{1}{r^2} \hat{\Phi}(q) e^{i\frac{a}{r}}, \hat{\Phi}(p) \rangle_{\mathfrak{K}, \mathbb{C}}) \\ &\quad + \langle \frac{1}{r^2} \hat{\Phi}(q), \hat{\Phi}(q) \rangle_{\mathfrak{K}, \mathbb{C}}, \hat{q}(x)] \end{aligned}$$

Zu jedem Glied im ersten Term gibt es ein korrespondierendes Glied im dritten Term, und umgekehrt, sodass wir mit dem selben Argument wie gerade bevor zeigen können, dass der Kommutator der Summe aus erstem und dritten Term identisch Null ist.

Es verbleibt also den zweiten Kommutator zu betrachten.

$$\begin{aligned}
& [\Re(\langle \frac{1}{r^2} \hat{\Phi}(q) e^{i\frac{a}{r}}, \hat{\Phi}(p) \rangle_{\mathbb{R}, \mathbb{C}}), \hat{q}(x)] \\
&= \sum_{e \in E, p(e)=x} [\Re(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x)), \hat{q}(x)] \\
&+ \sum_{e \in E, q(e)=x} [\Re(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(x) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(p(e))), \hat{q}(x)]
\end{aligned}$$

Wir betrachten zuerst die Identitäten:

$$\begin{aligned}
& \Re(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(p(e))) \\
&= \hat{\Phi}_R(q(e))(\hat{\Phi}_R(p(e)) \cos(a(e)) + \hat{\Phi}_I(p(e)) \sin(a(e))) \\
&+ \hat{\Phi}_I(q(e))(\hat{\Phi}_I(p(e)) \cos(a(e)) - \hat{\Phi}_R(p(e)) \sin(a(e)))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(p(e))) \\
&= \hat{\Phi}_R(q(e))(\hat{\Phi}_I(p(e)) \cos(a(e)) - \hat{\Phi}_R(p(e)) \sin(a(e))) \\
&- \hat{\Phi}_I(q(e))(\hat{\Phi}_R(p(e)) \cos(a(e)) + \hat{\Phi}_I(p(e)) \sin(a(e)))
\end{aligned}$$

und starten mit der linken Summe $p(e) = x$:

$$\begin{aligned}
& [\Re(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x)), \hat{q}(x)] \\
&= \hat{\Phi}_R(q(e))([\hat{\Phi}_R(x), \hat{q}(x)] \cos(a(e)) + [\hat{\Phi}_I(x), \hat{q}(x)] \sin(a(e))) \\
&+ \hat{\Phi}_I(q(e))([\hat{\Phi}_I(x), \hat{q}(x)] \cos(a(e)) - [\hat{\Phi}_R(x), \hat{q}(x)] \sin(a(e))) \\
&= \hat{\Phi}_R(q(e))(-i\hat{\Phi}_I(x) \cos(a(e)) + i\hat{\Phi}_R(x) \sin(a(e))) \\
&+ \hat{\Phi}_I(q(e))(i\hat{\Phi}_R(x) \cos(a(e)) + i\hat{\Phi}_I(x) \sin(a(e))) \\
&= -i\Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x))
\end{aligned}$$

als nächstes kommen wir zur rechten Summe $q(e) = x$:

$$\begin{aligned}
& [\Re(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(x) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(p(e))), \hat{q}(p(e))] \\
&= [\hat{\Phi}_R(x), \hat{q}(x)](\hat{\Phi}_R(p(e)) \cos(a(e)) + \hat{\Phi}_I(p(e)) \sin(a(e))) \\
&+ [\hat{\Phi}_I(x), \hat{q}(x)](\hat{\Phi}_I(p(e)) \cos(a(e)) - \hat{\Phi}_R(p(e)) \sin(a(e))) \\
&= -i\hat{\Phi}_I(x)(\hat{\Phi}_R(p(e)) \cos(a(e)) + \hat{\Phi}_I(p(e)) \sin(a(e))) \\
&+ i\hat{\Phi}_R(x)(\hat{\Phi}_I(p(e)) \cos(a(e)) - \hat{\Phi}_R(p(e)) \sin(a(e))) \\
&= i\Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(x) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(p(e)))
\end{aligned}$$

Wir fassen zusammen:

$$\begin{aligned}
\langle \psi, \hat{q}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} &= i\langle \psi, [\hat{H}, \hat{q}(x)]\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\
&= i\langle \psi, [-\sum_{e \in E, p(e)=x} [\Re(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x)), \hat{q}(x)] \\
&- \sum_{e \in E, q(e)=x} [\Re(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(x) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(p(e))), \hat{q}(x)], \hat{q}(x)]\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\
&= i\langle \psi, \sum_{e \in E, p(e)=x} (i\Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x))) \\
&- \sum_{e \in E, q(e)=x} (i\Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x)))\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\
&= \langle \psi, \sum_{e \in E, q(e)=x} \Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x)) \\
&- \sum_{e \in E, p(e)=x} \Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(q(e)) e^{-i\frac{a}{r}(e)} \hat{\Phi}(x))\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\
&= \text{div}(\langle \psi, \Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(p(e)) \hat{\Phi}(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)})\psi \rangle_{\mathfrak{H}})
\end{aligned}$$

□

Teilchen und Antiteilchen Analog zur Schrödingergleichung des elektromagnetischen Feldes, zerfällt der Hamiltonoperator nach Theorem 8.3 in Summanden der Form

$$(8.10) \quad \hat{h}_\omega = \frac{1}{2}(-\frac{\partial^2}{\partial a_\omega^2} - \frac{\partial^2}{\partial b_\omega^2} + (m + \omega)^2 \overline{x_\omega} x_\omega)$$

für jede Mode ω des Eichlaplaceoperators. Es handelt sich hierbei um einen eindimensionalen komplexen harmonischen Oszillator beziehungsweise um

einen zweidimensionalen reellen harmonischen Oszillator.

Wir definieren analog zu Satz 6.3 je einen Vernichtungsoperator für den Realteil a und den Imaginärteil b des Summanden h_ω , wobei $\Phi = a + ib$.

$$\begin{aligned}\hat{r}_\omega &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(a - \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} \right) \\ \hat{s}_\omega &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(b - \frac{1}{\omega} \frac{d}{db} \right)\end{aligned}$$

Wir können den Operator \hat{h}_ω nach Hilfssatz 6.9 schreiben als

$$\hat{h}_\omega = \omega(\hat{r}_\omega^\dagger \hat{r}_\omega + \hat{s}_\omega^\dagger \hat{s}_\omega + 1)$$

Das quantisierte Klein-Gordon Feld lässt sich also durch zwei Arten von Teilchen darstellen. Eine die von \hat{r} vernichtet wird und eine die durch \hat{s} vernichtet wird. Es gibt jedoch eine nützlichere Darstellung in der wir das Feld darstellen können. Hierzu definieren wir aus \hat{r} und \hat{s} zwei neue Vernichtungsoperatoren.

$$(8.11) \quad \hat{A}_\omega = \frac{1}{2}(\hat{r}_\omega + i\hat{s}_\omega)$$

$$(8.12) \quad \hat{B}_\omega = \frac{1}{2}(\hat{r}_\omega - i\hat{s}_\omega)$$

Analog zu \hat{r} \hat{s} erfüllen diese Operatoren die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}[\hat{A}_\omega, \hat{B}_\omega^\dagger] &= 0 \\ [\hat{A}_\omega, \hat{B}_\omega] &= 0 \\ [\hat{A}_\omega, \hat{A}_\omega^\dagger] &= 1 \\ [\hat{B}_\omega, \hat{B}_\omega^\dagger] &= 1\end{aligned}$$

Die Adjungierten \hat{A}^\dagger , \hat{B}^\dagger sind die Erzeugungsoperatoren. Analog zum eindimensionalen Fall definieren wir die Teilchenanzahloperatoren.

$$\begin{aligned}\hat{N}_{\omega+} &= \hat{A}_\omega^\dagger \hat{A}_\omega \\ \hat{N}_{\omega-} &= \hat{B}_\omega^\dagger \hat{B}_\omega\end{aligned}$$

Der Operator \hat{A}_ω^\dagger erhöht die Teilchenzahl $\hat{N}_{\omega+}$ um Eins, während der Operator \hat{A}_ω dieselbe um Eins verringert. Dasselbe gilt für \hat{B}_ω , $\hat{N}_{\omega-}$ und \hat{B}_ω^\dagger .

Wir nennen $\hat{N}_{\omega+}$ den Teilchenanzahloperator und $\hat{N}_{\omega-}$ den Antiteilchenanzahloperator.

Der Grundzustand ψ_0 wird sowohl von \hat{A}_ω als auch von \hat{B}_ω vernichtet.

$$\hat{A}_\omega \psi_0 = \hat{B}_\omega \psi_0 = 0$$

Genauso wie im Fall von \hat{r} und \hat{s} lässt sich der Operator \hat{h}_ω darstellen über die aus \hat{A} und \hat{B} abgeleiteten Teilchenzahloperatoren

$$\hat{h}_\omega = (\hat{N}_{\omega+} + \hat{N}_{\omega-} + 1)\omega$$

Darüberhinaus kann gezeigt werden, dass Teilchen die durch \hat{A}_ω vernichtet werden eine positive Ladung tragen und Teilchen die durch \hat{B}_ω vernichtet werden eine negative Ladung tragen.

Satz 8.1. *Sei G ein planarer Graph und $\hat{N}_{\omega\pm}$ wie oben, dann können wir den Gesamtladungsoperator folgendermaßen schreiben*

$$\hat{Q} = \sum_{\omega} (\hat{N}_{\omega+} - \hat{N}_{\omega-})$$

Insbesondere ist das Spektrum $\sigma(\hat{Q}) = \mathbb{Z}$

Beweis. □

Definition 8.6. *Sei G ein planarer Graph, $x \in \mathfrak{E}(G)$ und $\psi \in \mathfrak{E}$, dann nennen wir*

$$(8.13) \quad U_C(\psi)(x) = \psi(\bar{x})$$

*den **Ladungskonjugationsoperator**.*

Bemerkung 8.7. *Der Ladungskonjugationsoperator ist unitär und selbstadjungiert.*

Satz 8.2. *Sei G ein planarer Graph, $r > 0$, a Kantenfunktionen, $\omega \in \sigma(\Delta_r^a)$ und U_C der Ladungskonjugationsoperator, dann transformieren die Operatoren A_ω , B_ω und $N_{\omega\pm}$ folgendermaßen*

$$(8.14) \quad U_C A_\omega U_C = B_\omega$$

$$(8.15) \quad U_C N_{\omega\pm} U_C = N_{\omega\mp}$$

Kapitel 9

Zweite Quantisierung der Klein-Gordongleichung

Im Kapitel **Die Klein-Gordongleichung** haben wir gesehen, dass wir im Fall $m > 0$ die klassische Klein-Gordontheorie als Schrödingergleichung auf einem Hilbertraum darstellen können.

Wir werden diese Darstellung als die Einteilchenzustände einer quantisierten Klein-Gordontheorie interpretieren. Aus diesem Raum werden wir durch Bildung von Tensorprodukten Mehrteilchenzustände bilden. Die Gesamtheit aller Ein und Mehrteilchenzustände nennen wir dann den Fockraum.

Diese alternative Quantisierung nennen wir die **zweite Quantisierung**.

Schließlich werden wir einen Isomorphismus zwischen dem Hilbertraum des kanonisch quantisierten Klein-Gordon Feldes und dem Fockraum konstruieren der eine Identifikation der Anregungen der quantenmechanischen harmonischen Oszillatoren mit Mehrteilchenzuständen dieser zweiten Quantisierung zulässt.

Die durch den Isomorphismus induzierte Dynamik auf einem n -Teilchenzustand wird genau mit der Dynamik, die man für n freie klassische Klein-Gordonteilchen erwarten würde übereinstimmen.

Kurz gesagt wir werden die Interpretation der Anregungen des Klein-Gordon Feldes als Teilchen voll rechtfertigen.

Kapitel 10

Skalare Quantenelektrodynamik des planaren Graphen

Eine Quantenelektrodynamik beschreibt sowohl die Dynamik der elektromagnetischen Felder als auch die Felder der Quellen, also Ladung und Strom, quantenmechanisch beschreibt.

Um die Klein-Gordontheorie mit der Maxwelltheorie zu verbinden, addieren wir zu 7.20 die ersten beiden Terme von 6.6 hinzu.

$$H(\Phi, \pi_\Phi, a, \pi_a) = \frac{1}{2}(\langle \pi_\Phi, \pi_\Phi \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2)(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \langle \frac{\pi_a}{\epsilon}, \pi_a \rangle_{\mathfrak{K}} + \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \operatorname{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}})$$

Die resultierende Hamiltonfunktion ist invariant unter der erweiterten Eichtransformation (7.7).

An diesem Punkt wenden wir uns dem korrespondierenden quantenmechanischen Problem zu.

Definition 10.1. Sei G ein planarer Graph, $r > 0, \epsilon \in \mathfrak{K}, \mathfrak{H}_{qed}$ ein passender Hilbertraum, dann nennen wir den Operator $\hat{H}_{qed} : D(\hat{H}_{qed}) \subseteq \mathfrak{H}_{qed} \mapsto \mathfrak{H}_{qed}$

$$(10.1) \quad \hat{H}_{qed} = \frac{1}{2} \left(- \sum_{x \in V} \left(\frac{\partial^2}{\partial \Phi_R(x)^2} + \frac{\partial^2}{\partial \Phi_I(x)^2} \right) + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2)(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \right. \\ \left. - \frac{1}{\epsilon} \sum_{e \in E} \frac{\partial^2}{\partial a(e)^2} + \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \operatorname{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} \right)$$

den **Hamiltonoperator der skalaren Quantenelektrodynamik**.

Der Hilbertraum \mathfrak{H}_{qed} bleibt zunächst offen. Um dem Hamiltonoperator \hat{H}_{qed} überhaupt richtig definieren zu können werden wir im Rest dieses Kapitels einen passenden Hilbertraum konstruieren. Bis dahin denken wir $\mathfrak{H}_{qed} \subset F(\mathbb{C}^V \times \mathbb{R}^E, \mathbb{C})$. Wir werden aber die komplexen Komponenten bei Bedarf als zweidimensional karthesisch reel (Φ_R, Φ_I) oder in Polarkoordinaten (ρ, ϕ) schreiben.

Der klassischen erweiterten Eichtransformation entspricht in der Quantenmechanik eine Familie unitärer Abbildungen.

Definition 10.2. Sei G ein planarer Graph, $r > 0 \in \mathfrak{K}$, $\xi \in \mathfrak{E}$ und $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$, dann nennen wir die Familie $\{\hat{U}_\xi\}_{\xi \in \mathfrak{E}}$ definiert durch

$$(10.2) \quad \hat{U}_\xi(\psi)(\Phi, a) = \psi(\Phi e^{i\xi}, a + r \text{grad} \xi)$$

oder in Polarkoordinaten $\Phi = \rho e^{i\phi}$

$$(10.3) \quad \hat{U}_\xi(\psi)(\rho, \phi, a) = \psi(\rho, \phi + \xi, a + r \text{grad} \xi)$$

die **Eichgruppe**.

Es verbleibt nach der vollen Definition von \mathfrak{H}_{qed} zu zeigen, dass die Mitglieder \hat{U}_ξ der Eichgruppe tatsächlich unitär auf \mathfrak{H}_{qed} sind, und wir werden fordern, dass die Eichgruppe stark stetig ist in den Parametern.

Satz 10.1. Sei $\hat{U}_{\{\xi \in \mathfrak{E}\}}$ wie in obiger Definition und $r > 0, \epsilon \in \mathfrak{K}$, dann gilt für alle $\xi \in \mathfrak{E}$ und $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$.

$$(10.4) \quad [\hat{H}_{qed}, \hat{U}_\xi] \psi = 0$$

Die Eichgruppe ist eine Gruppenhomomorphismus von \mathfrak{E} bezüglich $+$ in die linearen Abbildungen auf $C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times \mathfrak{K}, \mathbb{C})$ bezüglich Komposition und der infinitesimale Erzeuger der Eichgruppe kann identifiziert werden als

$$(10.5) \quad \hat{h} = \text{div}(r * \epsilon * \hat{e}) - \hat{q}$$

wobei $\hat{q}(x) = \hat{\Phi}_I \hat{\pi}_R - \hat{\Phi}_R \hat{\pi}_I$ angelehnt an Definition 8.4 und \hat{e} der elektrische Feldstärkeoperator laut (6.17) ist.

Beweis. Starten wir mit dem Kommutator:

Sei $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times \mathfrak{K}, \mathbb{C})$, $\Phi \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}$, $a \in \mathfrak{K}$ und $\xi \in \mathfrak{E}$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{qed} \hat{U}_\xi \psi(\Phi, a) &= \hat{H}_{qed} \psi(\Phi e^{i\xi}, a + r \text{grad} \xi) = \\ &= \left(\frac{1}{2} \left(- \sum_{x \in V} \left(\frac{\partial^2}{\partial \Phi_R(x)^2} + \frac{\partial^2}{\partial \Phi_I(x)^2} \right) + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2)(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{\epsilon} \sum_{e \in E} \frac{\partial^2}{\partial a(e)^2} + \langle \text{div}_D(r^{-1}a), \text{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} \right) \right) \psi(\Phi e^{i\xi}, a + r \text{grad} \xi) \end{aligned}$$

Wegen der Invarianz des Laplace Operators unter euklidischen Transformationen, Theorem 2.5 (de Rham Komplex) und dem Resultat

$$(10.6) \quad e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) = \Delta_r^{a+r\text{grad}\xi}(e^{i\xi}\Phi)$$

aus dem Beweis von Satz 7.1 können wir weiter umformen.

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2} \left(- \sum_{x \in V} \left(\frac{\partial^2}{\partial \Phi_R(x)^2} + \frac{\partial^2}{\partial \Phi_I(x)^2} \right) + \langle e^{i\xi}\Phi, (\Delta_r^{a+r\text{grad}\xi} + m^2)(e^{i\xi}\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{1}{\epsilon} \sum_{e \in E} \frac{\partial^2}{\partial a(e)^2} + \langle \text{div}_D(r^{-1}(a + r\text{grad}\xi)), \text{div}_D(r^{-1}(a + r\text{grad}\xi)) / \mu \rangle_{\mathfrak{F}} \right) \right) \\ & \psi(\Phi e^{i\xi}, a + r\text{grad}\xi) \\ & = \hat{U}_\xi \hat{H}_{qed} \psi(\Phi, a) \end{aligned}$$

Damit kommen wir zu den restlichen Aussagen:

Nach Definition ist die Eichgruppe ein wie oben beschriebener Morphismus. Als Konsequenz können wir \hat{U}_ξ als Produkt nach den Koordinaten von ξ schreiben.

Sei hierzu die $\{e_x\}_{x \in V} \subset \mathfrak{E}(G)$ sodass $e_x(y) = \begin{cases} 1, & y = x \\ 0, & y \neq x \end{cases}$

$$\hat{U}_\xi = \prod_{x \in V} \hat{U}_{\xi(x)e_x}$$

Für jedes $x \in V$ ist $\hat{U}_{\xi(x)e_x}$ eine einparametrische Gruppe und wir können den infinitesimalen Erzeuger berechnen. Hierzu wechseln wir in Polarkoordinaten $\Phi = \rho e^{i\phi}$ und erhalten (10.3).

$$\begin{aligned} \hat{h}(x)\psi(\rho, \phi, a) &= -i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_{\epsilon e_x}(\psi) - \psi}{\epsilon}(\rho, \phi, a) \\ &= -i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(\rho, \phi + e_x * \epsilon, a + r\text{grad}(e_x * \epsilon)) - \psi(\rho, \phi, a)}{\epsilon} \\ &= \left(-i \frac{\partial}{\partial \phi(x)} - \text{div}(-ir \frac{\partial}{\partial a})(x) \right) \psi(\rho, \phi, a) \end{aligned}$$

Die Ableitung nach ϕ lässt sich in karthesischen Koordinaten schreiben als:

$$\frac{\partial}{\partial \phi(x)} = \Phi_R(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_I(x)} - \Phi_I(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_R(x)}$$

somit gilt nach (8.7):

$$\hat{q}(x) = i \frac{\partial}{\partial \phi(x)}$$

und nach (6.17) gilt:

$$\text{div}(-ir \frac{\partial}{\partial a}) = -\text{div}(r\epsilon \hat{e})$$

womit wir zusammenfassend gezeigt haben:

$$\hat{h}(x) = \operatorname{div}(r\epsilon\hat{e})(x) - \hat{q}(x)$$

□

Der Operator \hat{h} steht in enger Verbindung mit dem Gaußschen Gesetz. In der klassischen Maxwelltheorie in Potentialformulierung wird Dieses zu einer Anfangsbedingung. Im Rahmen der Quantisierung der Theorie führt es zum ersten Hinweis bezüglich der Konstruktion von \mathfrak{H}_{qed} .

Wenn wir formal den Regeln der Heisenbergschen Bewegungsgleichung folgen, dann gilt wegen (10.4), dass \hat{h} eine Erhaltungsgröße unter der Dynamik der Schrödingergleichung $i\psi' = \hat{H}_{qed}\psi$ ist. Zusammen mit der Kontinuitätsgleichung der Klein-Gordon Theorie (Theorem 8.5) können wir den Klein-Gordon Strom mit dem elektromagnetischen Strom \hat{j}_{em} laut

$$(10.7) \quad (\operatorname{div}(r\epsilon\hat{e}))' + \hat{j}_{em} = 0$$

identifizieren. Es folgt jedoch nicht, dass $\hat{h} = 0$ ist. Der Wunsch nach der Gültigkeit des Gaußschen Gesetzes führt uns dann zu der Forderung, dass für jedes $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$ gilt $\hat{h}(x)\psi = 0 \forall x \in V$

Wir konstruieren eine allgemeine Darstellung stetig differenzierbarer Funktionen ψ für die im Kern von \hat{h} liegen. Hierzu betrachten wir die Beziehung zwischen \hat{h} und der Eichgruppe.

$$(10.8) \quad \hat{U}_\xi = e^{i \sum_{x \in V} \xi(x) * \hat{h}(x)} = \prod_{x \in V} e^{i \xi(x) * \hat{h}(x)}$$

Es folgt daher für ein stetig differenzierbares ψ ist $\hat{h}\psi = 0$ genau dann wenn $\hat{U}_\xi(x)\psi = \psi$ für beliebiges $\xi \in \mathfrak{E}$ gilt. Daher muss ein $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$ entlang Kurven der Form

$$(10.9) \quad \{(\Phi e^{i\xi}, a + r \operatorname{grad} \xi) : \xi \in \mathfrak{E}(G)\}$$

im Konfigurationsraum $\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G)$ konstant sein.

Eine direkte Konsequenz dieser Beobachtung ist die Unmöglichkeit, dass \mathfrak{H}_{qed} eine von Null verschiedenes Element $f \in L^2(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$ enthält.

Folgerung 10.3. *Sei G ein planarer Graph und $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C}) \cap L^2(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$, sodass $\hat{h}(x)\psi = 0 \forall x \in V$ ist dann gilt $\psi = 0$.*

Beweis. Sei $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C}) \cap L^2(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$ und $\psi > 0$, dann gibt es ein $\epsilon > 0$ sodass $\psi(\Phi, a) > \epsilon$ auf einer Teilmenge U mit Lebsgue Maß $\mu(U) > 0$. Nach (10.9) muss diese Menge unbeschränkt sein solange $\operatorname{grad} \neq 0$. Als Konsequenz müsste gelten $\|\psi\|_{L^2(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})} = \infty$ und daher $\psi \notin L^2(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$. □

Falls ξ im orthogonalen Komplement der konstanten Funktionen liegt, lassen sich die Funktionen ψ , die invariant unter \hat{U}_ξ sind durch einen Darstellungssatz abdecken.

Satz 10.2. *Sei G ein planarer Graph, A die Flächen von G und $\psi \in F(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$, dann ist ψ genau dann invariant unter \hat{U}_ξ für beliebiges $\xi \in \mathfrak{E}(G)$ mit $\sum_{x \in V} \xi(x) = 0$ falls es ein $f \in F(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathbb{C}^{|A|-1}, \mathbb{C})$ gibt sodass für alle $\Phi \in \mathfrak{E}_\mathbb{C}(G)$ und $a \in \mathfrak{K}(G)$ gilt*

$$(10.10) \quad \psi(\Phi, a) = f(\Phi e^{-iQ(a)}, u(a))$$

Wobei Q die Pseudoinverse von $r\text{grad}$ und $u : \mathfrak{K}(G) \rightarrow \mathbb{C}^{|A|-1}$ ist, sodass $uu^T = 1_{\mathbb{C}^{|A|-1}}$ und $u^T u = P_{\text{kern}(\text{div } r)}$.

Beweis. Sei $\psi \in F(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$ für beliebiges $\xi \in \mathfrak{E}(G)$ mit $\sum_{x \in V} \xi(x) = 0$ invariant, dann definieren wir $f \in F(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathbb{C}^{|A|-1}, \mathbb{C})$ durch

$$f(., .) = \psi(., u^T(.))$$

Unter Ausnutzung der Eichinvarianz von ψ gilt dann:

$$\begin{aligned} \psi(\Phi, a) &= \psi(\Phi e^{-iQa}, a - r\text{grad}Qa) = \psi(\Phi e^{-iQa}, P_{\text{kern}(\text{div } r)}a) \\ &= \psi(\Phi e^{-iQa}, u^T u(a)) = f(\Phi e^{-iQa}, u(a)) \end{aligned}$$

Bedenke die Bildmenge von Q ist jene Teilmenge von $\mathfrak{E}(G)$ mit $\sum_{x \in V} \xi(x) = 0$.

Sei umgekehrt $\xi \in \mathfrak{E}(G)$ sodass $\sum_{x \in V} \xi(x) = 0$ dann gilt nach (10.10)

$$\begin{aligned} \psi(\Phi e^{i\xi}, a + r\text{grad}\xi) &= f(\Phi e^{i\xi} e^{-iQ(a+r\text{grad}\xi)}, u(a + r\text{grad}\xi)) \\ &= f(\Phi e^{-iQ(a)}, u(a)) = \psi(\Phi, a) \end{aligned}$$

Dies gilt, weil ja nach Voraussetzung $\text{kern}(u) = \text{Bild}(r\text{grad})$ ist. \square

Folgerung 10.4. *Sei G ein planarer Graph, $r > 0 \in \mathfrak{K}(G)$ und $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$ invariant unter \hat{U}_ξ für beliebiges $\xi \in \mathfrak{E}(G)$, dann ist $\psi : (\Phi, a) \mapsto \psi(\Phi, a)$ periodisch in a auf $\text{Bild}(r\text{grad})$ mit kompakter Periode.*

Beweis. Laut Voraussetzung können wir ψ nach Satz 10.2 als (10.10) darstellen. Betrachte die kompakte Menge

$$(10.11) \quad \mathfrak{T} = r\text{grad}(\{\phi \in \mathfrak{E}(G) : \sum_{x \in V} \phi_x = 0, -\pi \leq \phi < \pi\})$$

Sei $z \in V$, dann definieren wir eine Basis $\{f_x\}_{x \in V}$ von $\mathfrak{E}(G)$ als

$$(10.12) \quad f_x(y) = \begin{cases} -1 & y = x, x \neq z \\ 1 & y = z \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Bemerke, dass $\{f_x\}_{x \in V - \{z\}}$ eine Basis von $\text{Bild}(\text{div } r)$ ist und damit $\{r\text{grad}(f_x)\}_{x \in V - \{z\}}$ eine Basis von $\text{Bild}(r\text{grad})$ ist. Als nächstes betrachten wir die Menge

$$\begin{aligned} \text{Bild}(r\text{grad}) &= r\text{grad}(\{\phi \in \mathfrak{E}(G) : \sum_{x \in V} \phi_x = 0, -\pi \leq \phi < \pi\} \\ &\quad + 2\pi\{\sum_{x \in (V - \{z\})} n_x * f_x : n \in \mathbb{Z}^{V - \{z\}}\}) \\ &= \mathfrak{T} + 2\pi\{\sum_{x \in (V - \{z\})} n_x * r\text{grad}(f_x) : n \in \mathbb{Z}^{V - \{z\}}\} \end{aligned}$$

Sei Q die Pseudoinverse von $r\text{grad}$ und $a_1 \in \text{Bild}(r\text{grad})$, dann gibt es ein $a_0 \in \mathfrak{T}$ und ein $n \in \mathbb{Z}^{V - \{z\}}$, sodass

$$(10.13) \quad a_1 = a_0 + 2\pi \sum_{x \in (V - \{z\})} n_x * r\text{grad}(f_x)$$

damit gilt

$$e^{-iQ(a_1)} = e^{-i(Q(a_0) + 2\pi \sum_{x \in (V - \{z\})} n_x f_x)} = e^{-i(Q(a_0))}$$

□

Dies gibt uns einen Ansatz wie $\mathfrak{H}_{\text{qed}}$ konstruiert werden kann. Das Problem der unendlichen Norm tritt wegen der Unbeschränktheit des Teilraums $\text{Bild}(r\text{grad})$ auf und ψ ist entlang dieser Komponenten periodisch. Die einfachste Lösung ist die Funktionen unter Betrachtung auf unser kompaktes \mathfrak{T} einzuschränken, das für jede periodische Komponente eine volle Periode darstellt.

Bevor wir jedoch endlich $\mathfrak{H}_{\text{qed}}$ definieren, führen wir noch einen weiteren Begriff ein und geben einen damit assoziierten Darstellungssatz mit dem wir den verbleibenden Eichgruppen Freiheitsgrad von ψ fixieren, nämlich jener bezüglich $\xi \in \text{kern}(r\text{grad})^\perp$.

Definition 10.5. Sei G ein planarer Graph, dann definieren wir

$$(10.14) \quad \mathfrak{H}_{\text{sym}} = \{\psi \in F(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C}) \mid \hat{U}_\xi \psi = \psi \forall \xi \in \text{kern}(r\text{grad})^\perp\}$$

Hilfssatz 10.6. Sei G ein planarer Graph, dann gilt $\psi \in \mathfrak{H}_{\text{sym}}$ genau dann wenn es ein $f \in F(\mathbb{R}^{\{y\}} \times \mathbb{C}^{V - \{y\}}, \mathbb{C})$ gibt sodass für alle $\Phi \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ gilt

$$(10.15) \quad \psi(\Phi) = f(\Phi e^{-i \arg(\Phi)(y)})$$

Beweis. Analog zum Beweis von Satz 10.2. □

Dieser Satz gibt uns eine explizite Konstruktion des Raums der Funktionen $\phi \in F(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C})$, die invariant unter globaler Rotation sind, daher unter Rotation jeder Ecke um denselben Winkel. Diese Funktionen lassen sich auch über ein anderes Kriterium identifizieren.

Hilfssatz 10.7. *Sei G ein planarer Graph, dann gilt $\psi \in \mathfrak{H}_{sym}$ genau dann wenn*

$$(10.16) \quad \sum_{x \in V} \frac{\partial}{\partial \phi(x)} \psi = 0$$

Beweis. Betrachten wir zunächst die Abbildung \hat{U}_{ξ} mit $\xi \in \ker(r\text{grad})^{\perp}$, daher ξ ist eine Konstante. Analog zu Satz 10.1 berechnen wir den infinitesimalen Erzeuger zu \hat{U}_{ξ} . Sei hierzu $\psi \in \mathfrak{H}_{sym}$.

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_{\epsilon} \psi(\rho, \phi, a) - \psi(\rho, \phi, a)}{\epsilon} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(\rho, \phi + \epsilon, a) - \psi(\rho, \phi, a)}{\epsilon} \\ &= \sum_{x \in V} \frac{\partial}{\partial \phi(x)} \psi(\rho, \phi, a) \end{aligned}$$

Nachdem die linke Seite von (10.16) der Erzeuger von \hat{U}_{ξ} ist, folgt die Aussage direkt aus dem Stoneschen Theorem. \square

Als nächstes können wir endlich den Hilbertraum der skalaren Quantenelektrodynamik definieren.

Definition 10.8. *Sei G ein planarer Graph, $r > 0 \in \mathfrak{K}$ und $\psi \in L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\text{div } r)), \mathbb{C})$ sowie u wie in Satz 10.2, dann sagen wir $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}^{pre}$ genau dann wenn es ein $\tilde{\psi} \in C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathbb{C}^{|A|-1}, \mathbb{C})$ gibt sodass die Einschränkung von $\tilde{\psi}$ auf die erste Koordinate $\Phi \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}$ Element von \mathfrak{H}_{sym} ist und ψ sich über $\tilde{\psi}$ nach (10.10) darstellen lässt als*

$$(10.17) \quad \psi(\Phi, a) = \tilde{\psi}(\Phi e^{-iQ(a)}, u(a))$$

für beliebige $\Phi \in \mathfrak{E}(G)_{\mathbb{C}}$ und $a \in \mathfrak{T} + \ker(\text{div } r)$ oder in Polarkoordinaten $\Phi = \rho e^{i\phi}$

$$(10.18) \quad \psi(\rho, \phi, a) = \tilde{\psi}(\rho, \phi - Q(a), u(a))$$

Der Hilbertraum der skalaren Quantenelektrodynamik \mathfrak{H}_{qed} ist der topologische Abschluss des Prehilbertraums \mathfrak{H}_{qed}^{pre} bezüglich der Metrik des Raums $L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\text{div } r)), \mathbb{C})$

$$\mathfrak{H}_{qed} = \overline{\mathfrak{H}_{qed}^{pre}}$$

Bemerkung 10.9. *Die Einschränkung auf $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\text{div } r))$ der Funktion ψ ist durch periodische Fortsetzung umkehrbar nach Folgerung 10.4. Entsprechend können wir alle bisher behandelten Operatoren über diese Fortsetzung wie gehabt auf \mathfrak{H}_{qed} definieren.*

Satz 10.3. Sei $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$ wie in Definition 10.6, dann gilt $\hat{h}(x)\psi = 0 \forall x \in V$.

Beweis. Sei $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$, $x \in V$ und berechnen die Ableitung nach ϕ und a . Um die partiellen Ableitungen von ψ und $\tilde{\psi}$ zu unterscheiden, schreiben wir die Variablen als $\tilde{\psi}(\tilde{\rho}, \tilde{\phi}, \tilde{a})$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \phi(x)} \psi(\rho, \phi, a) &= \frac{\partial}{\partial \tilde{\phi}(x)} \tilde{\psi}(\rho, \phi - Q(a), u(a)) \\ \frac{\partial}{\partial a} \psi(\rho, \phi, a) &= -Q^T \frac{\partial}{\partial \tilde{\phi}} \tilde{\psi}(\rho, \phi - Q(a), u(a)) \\ &\quad + u^T \frac{\partial}{\partial \tilde{a}} \tilde{\psi}(\rho, \phi - Q(a), u(a))\end{aligned}$$

Es gilt somit nach Satz 10.4

$$\begin{aligned}\hat{h}(x)\psi(\rho, \phi, a) &= i(\operatorname{div}(r \frac{\partial}{\partial a})(x) - \frac{\partial}{\partial \phi(x)})\psi(\rho, \phi, a) \\ &= i(\operatorname{div}(r(-Q^T \frac{\partial}{\partial \tilde{\phi}} \tilde{\psi} + u^T \frac{\partial}{\partial \tilde{a}} \tilde{\psi}))(x) - \frac{\partial}{\partial \tilde{\phi}(x)} \tilde{\psi})(\rho, \phi - Q(a), u(a)) \\ &= i(P_{\operatorname{Bild}(\operatorname{div} r)} \frac{\partial}{\partial \tilde{\phi}})(x) \tilde{\psi} - \frac{\partial}{\partial \tilde{\phi}(x)} \tilde{\psi}(\rho, \phi - Q(a), u(a)) \\ &= -i(P_{\operatorname{kern}(r\operatorname{grad})} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\rho, \phi, a))(x)\end{aligned}$$

Nach Hilfsatz 10.7 gilt nach Voraussetzung auch

$$\sum_{x \in V} \frac{\partial}{\partial \phi(x)} \psi = 0$$

Weiters liegt ein Vektor $u \in \mathfrak{E}$ genau dann in $\operatorname{kern}(r\operatorname{grad})^\perp$ wenn $\sum_{x \in V} u(x) = 0$ ist. Es folgt daher

$$-i(P_{\operatorname{kern}(r\operatorname{grad})} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\rho, \phi, a))(x) = 0$$

□

Wir können nun das zentrale Theorem dieses Kapitels beweisen, nämlich die Lösbarkeit der Schrödingergleichung der skalaren Quantenelektrodynamik

Theorem 10.10. Sei \hat{H}_{qed} wie in Definition 10.1 und \mathfrak{H}_{qed} wie in 10.6, dann gibt es ein $D(\hat{H}_{qed})$, dicht in \mathfrak{H}_{qed} , sodass $\hat{H}_{qed} : D(\hat{H}_{qed}) \mapsto \mathfrak{H}_{qed}$ ein selbstadjungierter Operator ist.

Beweis.

□

Kapitel 11

Numerische Simulation der skalaren Quantenelektrodynamik auf einem Tetraeder

Abschluss

Es hat mich sehr gefreut diese Arbeit zu schreiben. Ich weiß nicht wirklich ob sie jemals jemandem nützlich sein wird, aber falls ja würde mich das sehr freuen. Im dreidimensionalen ist alles eine Spur komplizierter, aber in einigen Punkten auch wieder nicht. Elektromagnetismus passt halt recht gut zu drei Raumdimensionen. Besonders wichtig war es mir zu zeigen, warum Widerstandsnetzwerke so nett lösbar sind, und aber auch das man von der Intuition von elektrischen Netzwerken die dicht den Raum erfüllen alle elektromagnetischen Phänomene beschreiben kann. Eine Diskretisierung (Finite Differenzen) der Maxwellgleichungen der Ebene entspricht genau den Maxwellgleichungen die im vierten Kapitel entwickelt wurden. Zu diesem Zeitpunkt war ich ursprünglich der Meinung, dass dieses Projekt abgeschlossen ist, aber aus einem Interesse an Quantenfeldtheorie, dass ich parallel entwickelt hatte, entschied ich mich eine skalare Quantenelektrodynamik auf planaren Graphen zu entwickeln.

Es war sehr schön, es hat mich sehr gefreut!