
Von elektrischen Netzwerken
zur diskreten
Quantenelektrodynamik

Inhaltsverzeichnis

1	Graphen und Netze	4
2	Funktionenräume und Operatoren	14
3	Das Poisson Problem	19
4	Die Maxwell-Gleichungen	25
4.1	Potentialformulierung der Maxwell-Gleichungen	29
4.2	Kanonische Quantisierung des elektromagnetischen Feldes . .	33
4.2.1	Photonen - die Teilcheninterpretation	43
5	Die Klein-Gordongleichung	48
5.1	Kanonische Quantisierung des Klein-Gordon Feldes	59
5.1.1	Teilchen und Antiteilchen	65
5.2	Zweite Quantisierung der Klein-Gordongleichung	67
6	Skalare Quantenelektrodynamik des planaren Graphen	68
7	Numerische Simulation der skalaren Quantenelektrodynamik auf einem Tetraeder	78

Einführung

Zu Beginn (Kapitel 1) werden zentrale Begriffe aus der Graphentheorie und aus der diskreten Geometrie eingeführt – insbesondere die Definitionen von planaren Graphen, Netzen, Teilgraphen sowie der dualen Graphstruktur. Diese baulichen Grundlagen ermöglichen, in Kapitel 2 Funktionenräume auf Graphen zu definieren (\mathfrak{E} , \mathfrak{K} , \mathfrak{F}) und die diskreten Äquivalente des Gradienten, der Divergenz und des Rotors zu konstruieren. Die algebraische Struktur dieser Operatoren wird in einem diskreten de Rham-Komplex geklärt.

Kapitel 3 behandelt das verallgemeinerte Poissonproblem auf Graphen, wobei der mit gewichteten Laplaceoperatoren ausgestattete Netzwerkansatz die Brücke zwischen der klassischen Theorie der Widerstandsnetzwerke und der Elektrostatik schlägt.

In Kapitel 4 und 5 werden die diskreten Maxwell-Gleichungen auf Netzen eingeführt, Energie- und Ladungserhaltungssätze hergeleitet sowie die Potentialformulierung und die zugrundeliegenden Eichtransformationen erarbeitet.

Kapitel 6 ist der kanonischen Quantisierung gewidmet: Die Operatorstruktur der quantisierten elektromagnetischen Felder wird aufgebaut, die Schrödinger-Gleichung und der Fockraum konstruiert. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sowie die Photoneninterpretation der Feldquanten werden herausgearbeitet.

Kapitel 7 und 8 führen eine diskrete Klein-Gordon-Theorie ein, quantisieren sie und entwickeln explizit die Teilchen- bzw. Antiteilcheninterpretation des Feldes als massive Bosonen in Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld. Die Möglichkeit der Ortsoperator-Konstruktion wird diskutiert und die charakteristischen Unterschiede zu den Photonen werden herausgestellt.

Kapitel 9 entwickelt analog die zweite Quantisierung und rechtfertigt die Fockraumstruktur für das Klein-Gordon-Feld auch auf Netzen.

Im abschließenden Kapitel 10 werden das elektromagnetische Feld und das komplexe Materiefeld zur skalaren Quantenelektrodynamik auf Netzen zusammengeführt. Der entsprechende Hilbertraum wird konstruiert, die Eichstruktur detailliert analysiert und die Selbstadjungiertheit des Hamiltonoperators sichergestellt. Abschließend werden numerische Simulationen und algorithmische Aspekte für diskrete Modelle diskutiert.

Kapitel 1

Graphen und Netze

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Begriffe einer diskreten Theorie von Flächen eingeführt, die für die Ziele dieser Arbeit benötigt werden. Unter Flächen verstehen wir zweidimensionale Mannigfaltigkeiten. Allerdings werden wir im Folgenden nicht mit kontinuierlichen Strukturen arbeiten, sondern uns auf eine diskrete Näherung beschränken, die wir Netze nennen. Ein Netz kann als ein Graph mit zusätzlicher Struktur aufgefasst werden, der es erlaubt, viele Eigenschaften kontinuierlicher Flächen in diskreter Form zu erfassen.

Wir beginnen daher mit dem Begriff des Graphen.

Definition 1.1 (Graph). *Ein Graph $G = (V, E)$ besteht aus einer Menge von Ecken V und einer Menge von Kanten $E \subseteq V \times V$. Jede Kante verbindet genau zwei verschiedene Ecken.*

Zwei Graphen $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$ sind gleich, falls es eine Bijektion

$$\phi : V_1 \rightarrow V_2$$

gibt mit

$$E_2 = \{(\phi(x), \phi(y)) : (x, y) \in E_1\}$$

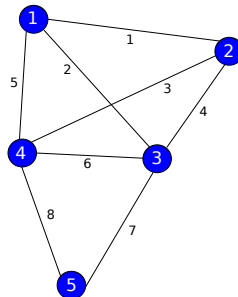


Abbildung 1.1: Beispiel eines Graphen.

Die Beziehungen zwischen Ecken und Kanten lassen sich auch durch Matrizen darstellen.

Die Inzidenzmatrix

Die Inzidenzmatrix eines Graphen ist eine Matrix, deren Zeilen den Kanten und deren Spalten den Ecken entsprechen. Ein Eintrag ist 1, falls die betreffende Kante die entsprechende Ecke verbindet, und 0 sonst.

Als Beispiel betrachte die Inzidenzmatrix des Graphen in Abbildung 1.1.

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

Für unsere Zwecke ist nicht die konkrete geometrische Anordnung der Ecken und Kanten entscheidend, sondern lediglich ihre Verbindungsstruktur, die sich vollständig durch die Inzidenzmatrix beschreiben lässt. Dies motiviert die folgende Definition.

Definition 1.2 (Graph über Inzidenzmatrizen). *Ein Graph ist eine $n \times k$ -Matrix (Inzidenzmatrix) I , deren jede Zeile genau zwei Einträge gleich 1 enthält (Zeilensumme = 2).*

Zwei Graphen mit Inzidenzmatrizen X und Y sind gleich falls man X aus Y durch Vertauschung von Zeilen und Spalten erhalten kann.

Dabei gilt:

$$V = \{i : 1 \leq i \leq k\}, E = \{(i, j) : I_{m,i} = 1, I_{m,j} = 1, 1 \leq i, j \leq k, 1 \leq m \leq n\}.$$

Bemerkung 1.3 (Adjazenzmatrix). *Alternativ kann ein Graph durch eine **Adjazenzmatrix** beschrieben werden. Diese ist quadratisch, und die Einträge geben die Anzahl der Kanten zwischen zwei Ecken an. Für unseren Beispielfgraphen ergibt sich:*

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

Es ist leicht zu sehen, dass man aus jeder Inzidenzmatrix die zugehörige Adjazenzmatrix und umgekehrt konstruieren kann.

Teilgraphen

Oft ist es notwendig über Teile von Graphen zu sprechen.

Definition 1.4 (Teilgraph). Sei G ein Graph mit Inzidenzmatrix X und H ein Graph mit Inzidenzmatrix Y . Dann ist G ein **Teilgraph** von H , falls X durch Entfernen von Zeilen und Spalten aus Y entsteht.

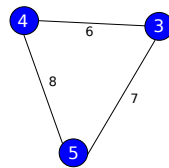


Abbildung 1.2: Teilgraph des Beispielgraphs.

Die zugehörige Inzidenzmatrix entsteht, indem man die ersten beiden Spalten entfernt und anschließend alle Zeilen eliminiert, deren Summe ungleich zwei ist. Das Resultat für die Kanten 4, 7, 8 und die Ecken 3, 4, 5 lautet:

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

Definition 1.5 (Induzierter Teilgraph). Sei $U \subseteq V$ eine Teilmenge der Ecken eines Graphen $G = (V, E)$. Der durch U **induzierte Teilgraph** von G ist der Graph, der aus den Ecken U und genau den Kanten besteht, welche ausschließlich Ecken aus U verbinden.

Das Beispiel in Abbildung 1.2 ist der von $U = 3, 4, 5$ induzierte Teilgraph.

Definition 1.6 (Pfad und Zusammenhang). Ein **Pfad** in einem Graphen G ist eine endliche Folge von Ecken (x_0, x_1, \dots, x_n) mit der Eigenschaft, dass jeweils $(x_i, x_{i+1}) \in E$ gilt.

- Gilt zusätzlich $x_0 = x_n$, so spricht man von einem **geschlossenen Pfad**.
- Ist der Pfad geschlossen und treten außer $x_0 = x_n$ keine Ecken mehrfach auf, so heißt er **einfach geschlossen**.

Ein Graph G heißt **zusammenhängend**, wenn es zu je zwei Ecken $u, v \in V$ einen Pfad von u nach v gibt.

Sei $k \in \mathbb{N}$. Ein Graph heißt ***k-fach zusammenhängend***, wenn man $k - 1$ beliebige Ecken entfernen kann und der verbleibende Graph immer noch zusammenhängend ist.

Von nun an betrachten wir ausschließlich zusammenhängende Graphen. Dies ist keine Einschränkung, da sich jeder (endliche) Graph in disjunkte zusammenhängende Komponenten zerlegen lässt; man kann sich daher in der Untersuchung stets auf eine einzelne Komponente beschränken.

Definition 1.7 (Planarer Graph). Ein Graph G heißt ***planar***, wenn es eine Einbettung von G in die Ebene gibt, d.h. eine Darstellung, bei der

1. die Ecken durch paarweise verschiedene Punkte dargestellt werden,
2. die Kanten durch nicht schneidende Linienzüge zwischen den entsprechenden Punkten dargestellt werden,
3. keine Kante durch eine Ecke verläuft, die nicht ihr Endpunkt ist.

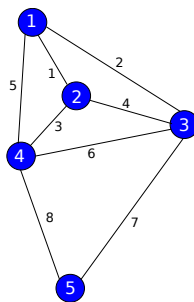


Abbildung 1.3: Planare Darstellung des Beispielgraphen aus Abbildung 1.1 nach Verschieben der Ecke 2.

Im Allgemeinen gibt es mehrere Möglichkeiten, einen Graphen planar darzustellen. Ein und derselbe Graph kann also verschiedene planare Darstellungen besitzen.

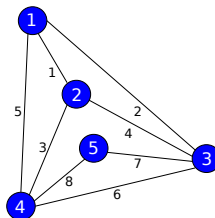


Abbildung 1.4: Alternative planare Darstellung desselben Graphen.

Um eine planare Darstellung eindeutig festzulegen, benötigt man zusätzliche Information, die man in Form der entstehenden Flächen beschreiben kann.

Definition 1.8 (Kreisgraph). *Ein zusammenhängender Graph G heißt Kreis (oder kreisartig), wenn jede Ecke mit genau zwei Kanten verbunden ist.*

Betrachten wir eine der planaren Darstellungen des Beispielgraphen. Die Kreise A_1, \dots, A_4 sind hier die Flächen.

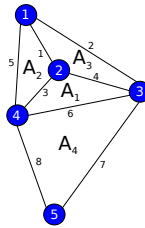


Abbildung 1.5: Planare Darstellung des Beispielgraphen mit Flächen A_1, \dots, A_4 .

Wir wollen uns im Folgenden mit Graphen beschäftigen, die geschlossene Flächen beschreiben. Zu diesem Zweck führen wir das mit planaren Graphen eng verwandte Konzept des Netzes ein.

Definition 1.9 (Netz). *Sei $g = (V, E)$ ein Graph und $f = \{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ eine Menge von kreisartigen induzierten Teilgraphen von g , die man **Flächen** bezeichnet werden.*

*Dann heißt $G = (g, f)$ ein **Netz**, wenn gilt:*

1. *jede Ecke $v \in V$ liegt in mindestens einer Fläche,*
2. *jede Kante $e \in E$ liegt in genau zwei Flächen,*
3. *Für je zwei Flächen $A_i, A_j \in f$ liegt höchstens eine Kante gleichzeitig in beiden.*

Bemerkung 1.10. *Jedes Netz ist per Definition automatisch zusammenhängend.*

Außerdem gilt: Ein Netz $G = ((V, E), f)$ ist genau dann planar, wenn es eine Anordnung A_1, \dots, A_n der Flächen gibt, so dass der induzierte Teilgraph des Durchschnitts des durch $\bigcup_{i=1}^{k-1} V(A_i)$ induzierte Teilgraphen mit A_k für alle $n \geq k > 1$ zusammenhängend ist.

Dies bedeutet anschaulich: man kann G zeichnen, indem man zunächst A_1 einbettet und dann sukzessive A_2, A_3, \dots hinzufügt, ohne dabei eine neue eingeschlossene Fläche zu erzeugen, die nicht selbst zu f gehört. Dies schließt Konfigurationen wie solche auf einem Torus aus.

Definition 1.11 (Planares Netz, Außenfläche). Sei $G = (g, f)$ ein Netz und g planar. Dann heißt G ein **planares Netz**. Ist $f = A_1, \dots, A_n$ eine Flächenmenge wie in der Bemerkung, so heißen A_1, \dots, A_{n-1} die Innenflächen, und die verbleibende Fläche A_n , auch A_∞ genannt, die Außenfläche. Eine Kante e heißt Randkante, wenn sie zu A_∞ gehört. Der induzierte Teilgraph A_∞ wird der Rand des Netzes genannt.

Die in der Definition eines Netzes enthaltene Struktur legt ein weiteres Konzept nahe: Jede Kante des Netzes verbindet genau zwei Flächen. Dadurch ergibt sich der duale Graph.

Definition 1.12 (Dualer Graph). Sei $G = (g, f)$ ein Netz. Der **duale Graph** G^D ist der Graph mit

- Ecken f (den Flächen von G),
- Kanten: Zwei Flächen A_i, A_j sind durch eine Kante verbunden, wenn sie im Netz G eine gemeinsame Kante haben.

Betrachte den dualen Graph des planaren Graphen aus Abbildung 1.5.

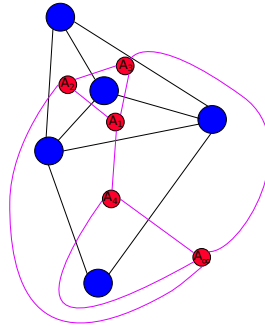


Abbildung 1.6: Dualer Graph des Beispielgraphen (rote Knoten: Flächen, blaue Knoten: Ecken des Ausgangsgraphen).

Die Platzierung der Außenfläche A_∞ im Dualgraphen ist beliebig. Diese Wahl bestimmt, welche Ecke des Ausgangsgraphen die Umrandung von A_∞ darstellt.

Im Beispielgraph aus Abbildung 1.1 besitzt die planare Darstellung zwar Flächen, doch der duale Graph enthält zwischen A_4 und A_∞ zweimal eine

Kante. Somit ist der Dual kein einfacher Graph im hier betrachteten Sinn, und der Ausgangsgraph bildet kein Netz im strengen Sinne.

Wir betrachten deshalb den Beispielgraph 2:

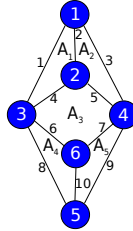


Abbildung 1.7: Beispielgraph 2: planares Netz (kein konvexer Polyeder).

Dies ist ein planares Netz, und sein Dualgraph ist gleich zum Ausgangsgraphen selbst.

Satz 1.1. *Ist G ein (planares) Netz, so ist auch der duale Graph G^D ein Netz. Zudem gilt: Der duale Graph des dualen Graphen ist gleich G , d.h.*

$$(G^D)^D = G$$

Beweis. Zunächst zeigen wir, dass der duale Graph G^D selbst ein Netz ist.

1. G^D ist ein Graph. Nach Definition 1.8 (Punkt 2 und 3) hat jede Kante von G genau zwei benachbarte Flächen. Damit ist $g^D = (f, E)$ mit f als Menge der Flächen von G und E als Menge der gemeinsamen Kanten dieser Flächen wohldefiniert und erfüllt die Voraussetzungen eines Graphen.

2. Konstruktion der Flächen von G^D . Sei $x \in V(G)$ eine Ecke des Ausgangsgraphen. Die Menge

$$\{A \in f : x \in A\}$$

der Flächen von G , die x enthalten, bildet im Dualgraph einen kreisartigen induzierten Teilgraphen. Diesen nennen wir $\mathbb{F}(x)$. Jedem $x \in V(G)$ können wir also eindeutig einen Kreisgraphen $\mathbb{F}(x)$ in G^D zuordnen. Wir setzen daher

$$f(G^D) := \{\mathbb{F}(x) : x \in V(G)\}.$$

3. Überprüfung der Bedingungen aus Definition 1.9.

1. Jede Ecke $A \in V(G^D)$ ist eine Fläche von G . Da jede Fläche in G zumindest eine Ecke des Graphen G enthält, liegt A in mindestens einer Fläche $\mathbb{F}(x) \in f(G^D)$.

2. Jede Kante $e \in E(G^D)$ entspricht einer gemeinsamen Kante zweier Flächen $A_i, A_j \in f$ im Ausgangsgraphen G . Diese Kante verbindet damit genau zwei Flächen in G^D , also ist die Bedingung erfüllt.
3. Zwei Flächen $\mathbb{F}(x), \mathbb{F}(y) \in f(G^D)$ teilen genau dann eine Kante, wenn x und y im Ausgangsgraphen durch eine Kante verbunden sind. Da es im ursprünglichen Graphen zwischen zwei Ecken höchstens eine Kante gibt, gilt dieselbe Einschränkung für G^D .

Damit sind alle Bedingungen für G^D als Netz erfüllt.

4. *Rückkehr zum Ausgangsgraphen.* Schließlich folgt, dass die Ecken von G über die Abbildung $x \mapsto \mathbb{F}(x)$ eindeutig mit den Flächen von $(G^D)^D$ übereinstimmen. Da die Kantenstruktur in beiden Richtungen erhalten bleibt, gilt

$$(G^D)^D = G.$$

□

Bislang wurden nur ungerichtete Graphen betrachtet, d.h. Kanten verbinden jeweils zwei Ecken ohne bevorzugte Richtung.

Erlaubt man Kanten eine ausgezeichnete Richtung, so spricht man von einem gerichteten Graphen.

Eine bequeme Darstellungsweise bietet die Adjazenzmatrix:

- Im ungerichteten Fall ist sie symmetrisch,
- im gerichteten Fall entfällt diese Symmetriebedingung.

Definition 1.13 (Orientierung von Kanten). *Jeder Graph $G = (V, E)$ kann mit einer Orientierung ausgestattet werden. Eine **Orientierung** ist eine Abbildung, die jeder Kante eine ihrer beiden Endpunkte zuordnet. Anschaulich stellt man sich jede Kante als Pfeil vor, der auf eine ihrer beiden Ecken zeigt.*

- Die dadurch definierte Funktion $p : E \rightarrow V$ heißt **Spitzenfunktion** und ordnet jeder Kante ihre Endecke zu.
- Die komplementäre Funktion $q : E \rightarrow V$ heißt **Schaftfunktion** und ordnet ihr die Anfangsecke zu.

Ein Graph mit Orientierung heißt **gerichteter Graph** und ein Netz $G = (g, f)$ ist ein **gerichtetes Netz**, falls g ein gerichteter Graph ist.

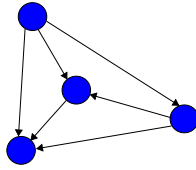


Abbildung 1.8: Graph mit Orientierung: jede Kante erhält eine Richtung (Pfeilspitze).

Bemerkung 1.14 (Anzahl der Orientierungen). *Ein Graph mit $|E|$ Kanten besitzt genau $2^{|E|}$ verschiedene Orientierungen, da jede Kante unabhängig in eine von zwei Richtungen orientiert werden kann.*

Bemerkung 1.15 (Orientierung von Flächen). *Jede Fläche (d.h. jeder Kreisgraph) kann in zwei Richtungen durchlaufen werden: im Uhrzeigersinn oder gegen den Uhrzeigersinn.*

Ist den Kanten eines Kreises eine Orientierung gegeben, so heißt die Fläche im Uhrzeigersinn orientiert, wenn beim Umlaufen der Fläche im Uhrzeigersinn die Pfeilrichtungen jeweils mitlaufen, d.h. die Spitzenfunktion jeder Kante auf die nächste Ecke des Umlaufs zeigt.

In einem Netz genügt es, eine einzelne Fläche im Uhrzeigersinn zu orientieren: die Orientierung der Kanten erzwingt dann konsistent die Orientierung aller benachbarten Flächen, da angrenzende Flächen an gemeinsamen Kanten stets entgegengesetzte Kantenrichtungen besitzen müssen, um jeweils im gewählten Umlaufsinn orientiert zu sein.

Bemerkung 1.16 (Duale Orientierung). *Jede Orientierung auf einem Netz G induziert eindeutig eine duale Orientierung auf dem Dualgraphen G^D .*

Sei $e \in E$ eine Kante von G , und seien A_i, A_j die beiden Flächen, die durch e begrenzt werden. Ist e im Uhrzeigersinn orientiert bezüglich A_i , so setzen wir die Spitzenfunktion des Duals $p_D(e) = A_i$, andernfalls $p_D(e) = A_j$.

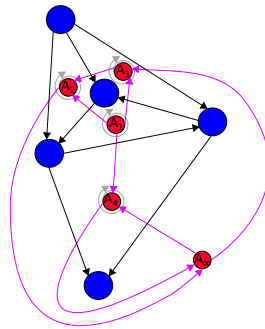


Abbildung 1.9: Orientierung in einem planaren Netz (blau) und die daraus abgeleitete duale Orientierung (rot).

Kapitel 2

Funktionenräume und Operatoren

Im letzten Kapitel wurden Graphen mit zusätzlicher Struktur eingeführt, nämlich *Netze* und das Konzept des *dualen Graphen*. In diesem Kapitel betrachten wir Funktionen auf diesen Netzen sowie die Operatoren, die zwischen den verschiedenen Funktionenräumen wirken.

Definition 2.1. Sei $G = (V, E, F)$ ein Netz, wobei V die Menge der Ecken, E die Menge der Kanten und F die Menge der Flächen sei. Dann definieren wir drei reelle, endlichdimensionale Funktionenräume:

$$\mathfrak{E}(G) = \{f \mid f : V \rightarrow \mathbb{R}\}, \quad \mathfrak{K}(G) = \{f \mid f : E \rightarrow \mathbb{R}\}, \quad \mathfrak{F}(G) = \{f \mid f : F \rightarrow \mathbb{R}\}.$$

Die analogen komplexwertigen Räume werden durch $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$, $\mathfrak{K}_{\mathbb{C}}(G)$ und $\mathfrak{F}_{\mathbb{C}}(G)$ bezeichnet.

Bemerkung 2.2. Bemerkung: Die Räume der Eck- und Kantenfunktionen lassen sich bereits auf allgemeinen Graphen definieren. Der Flächenfunktionsraum $\mathfrak{F}(G)$ setzt jedoch die Netzstruktur voraus.

Es gibt eine natürliche Beziehung zwischen diesen drei Räumen.

Definition 2.3 (Gradient). Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit einer Orientierung. Seien $p, q : E \rightarrow V$ die Spitzen- bzw. Schaftfunktion, die jeder Kante ihre End- bzw. Anfangsecke zuordnen. Für $f \in \mathfrak{E}(G)$ definieren wir den Gradienten

$$\text{grad}(f) \in \mathfrak{K}(G), \quad \text{grad}(f)(e) = f(p(e)) - f(q(e)).$$

Definition 2.4 (Divergenz). Sei $G = (V, E)$ ein orientierter Graph, $v \in \mathfrak{K}(G)$. Dann ist die Divergenz definiert als Funktion $\text{div}(v) \in \mathfrak{E}(G)$:

$$\text{div}(v)(x) = \sum_{\substack{e \in E \\ q(e)=x}} v(e) - \sum_{\substack{e \in E \\ p(e)=x}} v(e).$$

Sie misst den Nettofluss von x weg.

Der Gradient hebt Funktionen von den Ecken auf die Kanten, während die Divergenz Kantenfunktionen auf Eckfunktionen abbildet. Da G und sein Dual G^D dieselbe Kantenmenge besitzen, bilden die Kantenfunktionen die Brücke zwischen den Operatoren auf G und jenen auf G^D . Wir schreiben grad_D und div_D für die entsprechenden Operatoren auf dem Dualgraphen.

Satz 2.1. *Sei G ein gerichteter Graph. Der Gradient und die Divergenz sind lineare Operatoren und es gilt*

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

bezüglich des Standardskalarprodukts.

Beweis. Seien $u \in \mathfrak{E}(G)$ und $v \in \mathfrak{K}(G)$. Dann gilt:

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

Damit folgt die Aussage. \square

Definition 2.5 (Pfadsumme). *Sei $G = (V, E)$ ein gerichteter Graph, $f \in \mathfrak{K}(G)$, und sei $\gamma = (x_1, \dots, x_n)$ ein Pfad in G . Für die dazugehörigen Kanten (e_1, \dots, e_{n-1}) definieren wir Vorzeichen*

$$\sigma_i = \begin{cases} -1, & p(e_i) = x_i, \\ +1, & q(e_i) = x_i, \end{cases}$$

und setzen

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

als die Pfadsumme.

Hilfssatz 2.6 (Stokes). *Sei $G = (g, F)$ ein gerichtetes planares Netz und γ ein geschlossener Pfad, der den Rand von G gegen den Uhrzeigersinn durchläuft, sowie $f \in \mathfrak{K}(G)$. Dann gilt:*

$$(2.1) \quad S_G(\gamma)(f) = \sum_{A \in F(G)} \text{div}_D(f)(A).$$

Beweis. Für jede Fläche $A \in F(G)$ entspricht die Pfadsumme des gegen den Uhrzeigersinn orientierten Randes von A genau dem Wert $\text{div}_D(f)(A)$ nach Definition.

Wir betrachten eine Fläche $A \in F(G)$, die eine gemeinsame Kante $e \in E$ mit dem Rand von G besitzt. Erweitern wir den Pfad γ , indem wir zwischen $p(e)$ und $q(e)$ die übrigen Ecken von A einfügen, sodass der resultierende Pfad γ' weiterhin gegen den Uhrzeigersinn durchlaufen wird. Dann gilt die Zerlegungsformel

$$S_G(\gamma)(f) = S_G(\gamma')(f) + \text{div}_D(f)(A).$$

Da G nur endlich viele Flächen enthält, wiederholen wir diesen Vorgang endlich oft, bis keine Fläche mehr übrig bleibt und erhalten so das gesuchte Resultat. \square

Satz 2.2. *Sei $G = (g, F)$ ein gerichtetes planares Netz und $f \in \mathfrak{K}(G)$ mit $\text{div}_D(f) = 0$. Dann gilt: Jeder geschlossene Pfad in G hat Pfadsumme Null.*

Beweis. Es genügt, einfach geschlossene Pfade zu betrachten, da jeder komplexere geschlossene Pfad sich als Zusammensetzung solcher schreiben lässt. Sei also γ ein einfach geschlossener Pfad in G , der gegen den Uhrzeigersinn durchlaufen wird.

Dieser Pfad zerlegt G in zwei Teilnetze, deren Schnitt genau γ ist. Da G planar ist, bezeichnen wir den Teil, der nicht den äußeren Rand des Gesamtnetzes enthält, als *inneren Graph* H .

Das Teilnetz H ist planar, sein Rand ist durch den Pfad γ gegeben. Daher können wir den Stokes-Hilfssatz anwenden und erhalten:

$$(2.2) \quad S_H(\gamma)(f) = \sum_{A \in F(H)} \text{div}_D(f)(A) = 0.$$

Somit verschwindet die Pfadsumme für jeden einfach geschlossenen Pfad und folglich auch für beliebige geschlossene Pfade. \square

Bemerkung 2.7. *Entscheidend im obigen Argument ist die Planarität des Netzes. Nur im planaren Fall lässt sich jeder einfach geschlossene Pfad als Rand eines wohldefinierten inneren Teilnetzes auffassen, das aus endlich vielen Flächen besteht. Dadurch können diese Flächen sukzessive entfernt werden, wodurch sich die Pfadsumme Schritt für Schritt auf Null reduziert.*

Genau diese Möglichkeit, eingeschlossene Flächen nacheinander "abzutragen", ist die zentrale Idee im Beweis.

In nicht-planaren Situationen (etwa bei Netzen auf einem Torus) ist eine solche Flächen-Elimination im Allgemeinen nicht möglich: Dort existieren geschlossene Pfade, die zwar zusammenziehbar erscheinen, aber kein durch Flächen aufgespanntes Inneres besitzen. In solchen Fällen kann die Pfadsumme auch bei $\operatorname{div}_D(f) = 0$ von Null verschieden sein.

Die hier eingeführten Operatoren grad , div , grad_D und div_D besitzen direkte Analoga zu den klassischen Differentialoperatoren der Vektoranalysis. Insbesondere spielt die duale Divergenz die Rolle der Rotation. Dies führt zur Formulierung eines diskreten Gegenstücks des de Rham-Komplexes.

Theorem 2.8 (Diskreter de Rham-Komplex). *Sei G ein gerichtetes Netz. Dann erfüllen die Operatoren die folgenden exakten Sequenzen:*

$$(2.3) \quad \mathbb{R} \longrightarrow \mathfrak{E}(G) \xrightarrow{\operatorname{grad}} \mathfrak{K}(G) \xrightarrow{\operatorname{div}_D} \mathfrak{F}(G)/\mathbb{R} \longrightarrow 0,$$

$$(2.4) \quad \mathbb{R} \longrightarrow \mathfrak{F}(G) \xrightarrow{\operatorname{grad}_D} \mathfrak{K}(G) \xrightarrow{\operatorname{div}} \mathfrak{E}(G)/\mathbb{R} \longrightarrow 0.$$

Hierbei steht \mathbb{R} jeweils für den eindimensionalen Raum der konstanten Funktionen des entsprechenden Typs.

Beweis. Es genügt, die Exaktheit der Sequenz (2.3) zu zeigen, da (2.4) durch Anwendung desselben Arguments auf den Dualgraphen folgt.

1. Schritt: $\ker(\operatorname{grad})$ besteht aus konstanten Funktionen. Angenommen $f \in \mathfrak{E}(G)$ mit $\operatorname{grad}(f) = 0$. Dann gilt $f(p(e)) = f(q(e))$ für alle Kanten $e \in E$. Da G zusammenhängend ist, folgt, dass f konstant ist.

2. Schritt: $\operatorname{im}(\operatorname{grad}) = \ker(\operatorname{div}_D)$. Zunächst: Für jedes $u \in \mathfrak{E}(G)$ gilt $\operatorname{div}_D(\operatorname{grad}(u)) = 0$. Denn entlang jedes Umlaufs hebt sich die Pfadsumme auf, da jeder Wert von u genau einmal mit positivem und einmal mit negativem Vorzeichen auftritt. Umgekehrt: Sei $f \in \ker(\operatorname{div}_D)$. Dann zeigen die Resultate aus Satz 2.2, dass die Pfadsummen zwischen zwei Ecken nur vom Start- und Endpunkt abhängen, nicht von der Wahl des Pfades. Definiere nun $F \in \mathfrak{E}(G)$ durch

$$F(x) = \text{Pfadsumme von einer fixen Ecke } x_0 \text{ nach } x,$$

die wohldefiniert ist. Dann gilt $\operatorname{grad}(F) = f$.

3. Schritt: $\operatorname{im}(\operatorname{div}_D)$ ist das orthogonale Komplement der konstanten Flächenfunktionen. Dies folgt unmittelbar aus dem adjungierten Zusammenhang $\operatorname{div} = -\operatorname{grad}^\top$: das Bild von div_D besteht genau aus den Flächenfunktionen

mit verschwindendem Skalarprodukt gegenüber allen Konstanten, also aus dem Unterraum $\{g \in \mathfrak{F}(G) : \langle g, \mathbf{1}_F \rangle = 0\}$.

Damit ist die Exaktheit der Sequenz (2.3) gezeigt, und damit auch des gesamten diskreten de Rham-Komplexes. \square

Bemerkung 2.9. *Die beiden Sequenzen (2.3) und (2.4) sind das diskrete Analogon zu den exakten Sequenzen*

$$\mathbb{R} \rightarrow C^\infty(M) \xrightarrow{d} \Omega^1(M) \xrightarrow{d} \Omega^2(M) \rightarrow 0$$

für eine Fläche M . Im Diskreten nehmen die Räume $\mathfrak{E}(G)$, $\mathfrak{K}(G)$ und $\mathfrak{F}(G)$ die Rolle der 0-, 1- und 2-Formen ein, und die Operatoren grad , div , grad_D und div_D entsprechen den äußeren Ableitungen im klassischen de Rham-Komplex.

Ein weiteres zentrales Theorem der Vektoranalysis folgt unmittelbar aus dem diskreten de Rham-Komplex.

Folgerung 2.10 (Helmholtz-Zerlegung). *Sei G ein planares Netz mit Orientierung. Dann gilt:*

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

Beweis. Wegen dem diskreten de Rham-Komplex gilt:

$$\ker(\text{div}_D) = \text{im}(\text{grad}).$$

Mit der Hilbertraum-Zerlegung

$$\mathfrak{K}(G) = \ker(\text{div}_D) \oplus \ker(\text{div}_D)^\perp,$$

und der linearen Algebra-Identität

$$\ker(A)^\perp = \text{im}(A^\top)$$

folgt unmittelbar die Helmholtz-Zerlegung:

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

\square

Kapitel 3

Das Poisson Problem

Ein klassisches Problem der Theorie elektrischer Netzwerke sowie der Elektrostatik ist das (*verallgemeinerte*) *Poisson-Problem*. Dieses Problem wird hier in einigen seiner Facetten vorgestellt und basierend auf den bisher entwickelten graphentheoretischen Methoden formuliert und gelöst.

Das verallgemeinerte Poisson-Problem Sei $G = (V, E)$ ein Graph, $\partial \subseteq V$ eine Teilmenge der Ecken, $r : E \rightarrow (0, \infty)$ eine positive Kantenfunktion sowie $f, g \in \mathfrak{E}(G)$ Eckfunktionen. Eine Funktion $u \in \mathfrak{E}(G)$ heißt **Lösung des verallgemeinerten Poisson-Problems**, falls gilt:

$$(3.1) \quad -\operatorname{div}(r \cdot \operatorname{grad}(u))(x) = f(x), \quad x \in V \setminus \partial,$$

$$(3.2) \quad u(x) = g(x), \quad x \in \partial.$$

Die obige Bedingung ist motiviert durch klassische Randwertprobleme aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen. Um diesen Zusammenhang im diskreten Rahmen präzise auszudrücken, führen wir nun einen gewichteten Laplace-Operator auf Graphen ein.

Definition 3.1 (*r*-gewichteter Laplace-Operator). Sei $G = (V, E)$ ein orientierter Graph und $r : E \rightarrow (0, \infty)$ eine positive Kantenfunktion. Dann definiert man den ***r*-gewichteten Laplace-Operator**

$$\Delta_r : \mathfrak{E}(G) \longrightarrow \mathfrak{E}(G), \quad \Delta_r(u) := -\operatorname{div}(r \cdot \operatorname{grad}(u)).$$

Die Formulierung für elektrische Netzwerke Ein elektrisches Netzwerk lässt sich als Graph $G = (V, E)$ modellieren. Die Ecken V entsprechen den Knoten (Verteilerpunkten) und die Kanten E den Leitern des Netzwerks. Jeder Leiter besitze einen elektrischen Widerstand $R(e) > 0$, dessen Kehrwert $r(e) = 1/R(e)$ als Leitwert der Kante aufgefasst wird.

Das *Poisson-Problem* auf G beschreibt dann die Bestimmung

- der elektrischen Spannung $u(v)$ an jedem Knoten $v \in V$,
- sowie der durch jede Kante $e \in E$ fließenden Stromstärke $I(e)$.

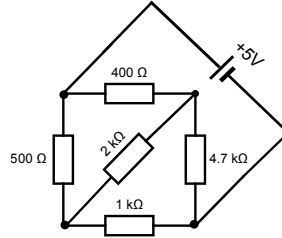


Abbildung 3.1: Beispiel eines elektrischen Netzwerks.

Die Formulierung in der Elektrostatik Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ eine offene Menge mit glattem Rand $\partial\Omega$, und sei $\rho : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine elektrische Ladungsdichte. Gesucht ist ein Potential $\phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, das die Poisson-Gleichung erfüllt:

$$(3.3) \quad \Delta\phi(x) = \rho(x), \quad x \in \Omega,$$

$$(3.4) \quad \phi(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega.$$

Physikalisch lässt sich dies wie folgt interpretieren: Liegt Ω als Hohlraum im Inneren eines guten elektrischen Leiters (z. B. in einem Metall), dann erzwingt die Leitfähigkeit, dass das Potential am Rand konstant ist.

Die klassische Elektrostatik wird im dreidimensionalen Raum \mathbb{R}^3 formuliert. Die hier entwickelte diskrete Theorie ist daher streng genommen nur in Grenzfällen anwendbar. Ein solcher Sonderfall tritt auf, wenn ρ und Ω entlang der z -Achse konstant sind und das Problem sich effektiv auf zwei Dimensionen reduziert. Genau für diesen Fall – eine zweidimensionale Formulierung der Maxwell-Gleichungen – wird im folgenden Kapitel eine Theorie entwickelt.

Satz 3.1 (Eigenschaften des gewichteten Laplace-Operators). *Sei $G = (V, E)$ ein zusammenhängender Graph, $r : E \rightarrow (0, \infty)$ eine positive Kantenfunktion und Δ_r der r -gewichtete Laplace-Operator. Dann gilt:*

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

Beweis. Seien p_0 und p_1 zwei Orientierungen auf G , und $\text{grad}_0, \text{grad}_1$ die jeweiligen Gradienten. Dann gilt

$$\text{grad}_0 = D \cdot \text{grad}_1,$$

wobei D eine Diagonalmatrix mit Einträgen ± 1 ist. Nach Satz 2.1 folgt somit die Orientierungunabhängigkeit.

Für die Symmetrie sei $u, v \in \mathfrak{E}(G)$. Dann gilt:

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

Dies zeigt die Selbstadjungiertheit und damit die Symmetrie von Δ_r .

Setzt man $u = v$, so erhält man

$$\langle u, \Delta_r(u) \rangle_{\mathfrak{E}} = \langle \sqrt{r} \cdot \text{grad}(u), \sqrt{r} \cdot \text{grad}(u) \rangle_{\mathfrak{K}} \geq 0,$$

woraus die positive Semidefinitheit folgt.

Schließlich: $u \in \ker(\Delta_r)$ genau dann, wenn für alle $v \in \mathfrak{E}(G)$

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

also

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

Dies impliziert $\text{grad}(u) = 0$, weil $r > 0$. Da der Graph G zusammenhängend ist, folgt, dass u konstant sein muss. Somit ist der Kern von Δ_r genau der Raum der konstanten Eckfunktionen. \square

In der kontinuierlichen Theorie des Poisson-Problems spielt die *Poincaré-Ungleichung* eine zentrale Rolle. Im Folgenden formulieren wir ein diskretes Analogon innerhalb der hier entwickelten Graphentheorie:

Satz 3.2 (Diskrete Poincaré-Ungleichung). *Sei $G = (V, E)$ ein Graph, $\partial \subseteq V$ eine nichtleere Teilmenge der Ecken, $r : E \rightarrow (0, \infty)$ eine Kantenfunktion und $u \in \mathfrak{E}(G)$ eine Eckfunktion mit $u|_{\partial} = 0$. 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 $x \in V \setminus \partial$ und (x_1, \dots, x_n) ein Pfad, ohne Schleifen, von einer Ecke in ∂ nach x mit Kanten (e_1, \dots, e_{n-1}) . Dann gilt für die Pfadsumme:

$$u(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \text{grad}(u)(e_i),$$

wobei die Vorzeichen $\sigma_i \in \{\pm 1\}$ durch die Orientierung bestimmt sind.

Quadrieren liefert

$$u(x)^2 = \left(\sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \operatorname{grad}(u)(e_i) \right)^2.$$

Multiplizieren und Dividieren mit den Wurzeln der Kantengewichte ergibt

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

Die Anwendung der Jensen-Ungleichung liefert schließlich

$$u(x)^2 \leq \left(\max_{e \in E} \frac{1}{r(e)} \right) \cdot \sum_{i=1}^{n-1} (\sqrt{r(e_i)} \operatorname{grad}(u)(e_i))^2 \leq \left(\max_{e \in E} \frac{1}{r(e)} \right) \sum_{k \in E} (\sqrt{r(k)} \operatorname{grad}(u)(k))^2.$$

Summiert man nun über alle $x \in V$, so folgt

$$\langle u, u \rangle_{\mathfrak{E}} \leq \frac{|V|}{\min_{e \in E} r(e)} \langle \sqrt{r} \operatorname{grad}(u), \sqrt{r} \operatorname{grad}(u) \rangle_{\mathfrak{K}} = \frac{|V|}{\min_{e \in E} r(e)} \langle u, \Delta_r(u) \rangle_{\mathfrak{E}}.$$

□

Wir haben nun genügend Vorarbeit geleistet, um das zentrale Existenz- und Eindeutigkeitsresultat für das Poisson-Problem im diskreten Rahmen zu formulieren:

Theorem 3.2 (Existenz und Eindeutigkeit der Lösung). *Sei $G = (V, E)$ ein zusammenhängender Graph, $r : E \rightarrow (0, \infty)$ eine Kantenfunktion, $\partial \subseteq V$ eine Teilmenge der Ecken sowie $f, g \in \mathfrak{E}(G)$ Eckfunktionen. Dann gilt:*

1. *Ist $\partial \neq \emptyset$, so besitzt das Poisson-Problem eine eindeutig bestimmte Lösung $u \in \mathfrak{E}(G)$.*
2. *Ist $\partial = \emptyset$, so existiert eine Lösung genau dann, wenn f orthogonal zu allen konstanten Funktionen ist. In diesem Fall ist die Lösung nur bis auf eine additive Konstante bestimmt.*

Beweis. Fall 1: $\partial \neq \emptyset$. In diesem Fall genügt es, den Lösungsraum von $\Delta_r u = f$ zu analysieren. Da der Kern von Δ_r (vgl. Satz 3.1) durch die konstanten Funktionen beschrieben wird und Δ_r symmetrisch ist, ist der Bildraum genau das orthogonale Komplement der konstanten Funktionen. Somit existiert eine Lösung genau dann, wenn $f \perp \mathbf{1}$ gilt. Ist dies erfüllt, so ist die Lösung nur bis auf eine additive Konstante eindeutig.

Fall 2: $\partial \neq \emptyset$ und $\partial \neq V$. Sei A die Untermatrix von Δ_r , die durch Streichen der Zeilen und Spalten zu den Knoten in ∂ entsteht. Wir zeigen, dass $\ker(A) = \{0\}$.

1. Möglichkeit: Die Poincaré-Ungleichung (Satz 3.2) garantiert unmittelbar, dass der Kern trivial ist.

2. Möglichkeit: Sei $x \in \ker(A)$. Definiere eine Erweiterung $\hat{x} \in \mathfrak{E}(G)$, indem $\hat{x}(v) = 0$ für $v \in \partial$ und $\hat{x}(v) = x(v)$ sonst. Dann gilt

$$\Delta_r(\hat{x})|_{V \setminus \partial} = 0,$$

und somit

$$\langle \sqrt{r} \operatorname{grad}(\hat{x}), \sqrt{r} \operatorname{grad}(\hat{x}) \rangle_{\mathfrak{K}} = \langle \hat{x}, \Delta_r(\hat{x}) \rangle_{\mathfrak{E}} = 0.$$

Also ist \hat{x} im Kern von Δ_r . Da dieser ausschließlich aus konstanten Funktionen besteht, muss \hat{x} konstant und wegen $\hat{x}|_{\partial} = 0$ sogar $\hat{x} \equiv 0$ sein. Dies impliziert $x = 0$, also $\ker(A) = \{0\}$. Deshalb ist A invertierbar und das Problem eindeutig lösbar.

Fall 3: $\partial = V$. Dann sind alle Werte von u durch die Randbedingung $u = g$ vorgegeben, und das Problem ist trivial lösbar. \square

Zur Veranschaulichung des zuvor bewiesenen Theorems wandeln wir nun den elektrischen Stromkreis aus Abbildung 3.1 in ein Graphmodell gemäß unserem Formalismus um:

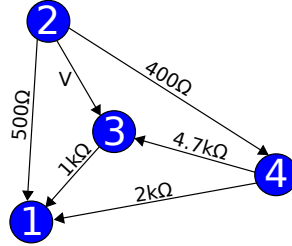


Abbildung 3.2: Beispiel: elektrischer Stromkreis als Graph.

Die Widerstände jeder Kante definieren die Kantenfunktion $R : E \rightarrow (0, \infty)$, deren Kehrwerte $r(e) = 1/R(e)$ die Leitwerte darstellen. Wir wählen die Randknoten $\partial = \{2, 3\}$ mit $g(2) = 5$, $g(3) = 0$ und Inhomogenität $f \equiv 0$. Das Symbol V steht für die Spannungsquelle bzw. die vorgegebene Randbedingung.

Die Laplace-Matrix wird als

$$\Delta_r = \text{grad}^\top \text{diag}(r) \text{grad}$$

berechnet. In unserem Beispiel ergibt dies:

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

Dies vereinfacht sich zu

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

Um die Randbedingungen zu berücksichtigen, setzen wir $u(2) = 5$ und $u(3) = 0$. Dies entspricht dem Streichen der zweiten und dritten Zeilen und Spalten sowie der Bildung einer zugehörigen Inhomogenität. Die reduzierte Gleichung für die verbleibenden Unbekannten lautet also

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{500} + \frac{1}{1000} + \frac{1}{2000} & -\frac{1}{2000} \\ -\frac{1}{2000} & \frac{1}{400} + \frac{1}{4700} + \frac{1}{2000} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(1) \\ u(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{500} \\ \frac{5}{400} \end{pmatrix}.$$

Dies ist exakt die Matrixgleichung, die man auch mit den üblichen Methoden der Netzwerktheorie in der Physik erhält.

Kapitel 4

Die Maxwell-Gleichungen

Die Elektrodynamik beschreibt elektromagnetische Phänomene als durch Felder vermittelte Wechselwirkung von Materie. Diese Felder gehorchen den Maxwell-Gleichungen, die im 19. Jahrhundert von James Clerk Maxwell formuliert wurden. Es handelt sich dabei um partielle Differentialgleichungen, welche die zeitliche Entwicklung elektromagnetischer Felder in Abhängigkeit von Strömen und Ladungen beschreiben.

In diesem Kapitel formulieren wir ein diskretes Analogon der Maxwell-Gleichungen auf Netzen, genauer auf planaren Netzen. Diese Formulierung dient als Grundlage für die folgenden Kapitel. Wir orientieren uns dabei an einer Diskretisierung der klassischen Maxwell-Gleichungen, nehmen jedoch einige Vereinfachungen vor: es wird nicht die konkrete geometrische Einbettung eines Netzes betrachtet, sondern ausschließlich dessen kombinatorische Struktur.

Definition 4.1 (Diskrete Maxwell-Gleichungen). *Sei $G = (g, F)$ ein planares Netz. Wir wählen feste Parameter $r > 0$, $\epsilon > 0$ sowie $\mu > 0$ und Anfangsdaten*

$$e_0 \in \mathfrak{K}(G), \quad b_0 \in \mathfrak{F}(G), \quad q_0 \in \mathfrak{E}(G).$$

Weiter sei $j \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$ eine zeitabhängige Stromfunktion.

Dann heißt ein Tripel

$$e \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G)), \quad b \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{F}(G)), \quad q \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}(G))$$

eine **Lösung der Maxwell-Gleichungen**, falls für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt:

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

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

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

$$(4.4) \quad \sum_{f \in F} b(t)(f) = 0.$$

sowie die Anfangsbedingungen

$$(4.5) \quad e(0) = e_0, \quad b(0) = b_0, \quad q(0) = q_0.$$

Bemerkung 4.2. Die Maxwellgleichungen lassen sich wie folgt zusammenfassen

- **Gaußsches Gesetz** (4.1): Das elektrische Feld e steht in Zusammenhang mit den elektrischen Ladungen q . Aus der Sicht der Flussbilanz stellt q den Nettofluss von Feldlinien aus einer Ecke dar.
- **Faradaysches Gesetz** (4.2): Es beschreibt die zeitliche Änderung des magnetischen Feldes b in Abhängigkeit vom elektrischen Feld e . Die Kantenfunktion r kann hierbei als eine Art "Länge" der Kante interpretiert werden. Die Parameter ϵ und μ sind der elektrische beziehungsweise der magnetische Leitwert und geben an, wie gut das Netz das Feld leitet.
- **Ampèresches Gesetz** (4.3): Dieses Gesetz erklärt, wie sich das elektrische Feld im Zeitverlauf ändert, beeinflusst durch das magnetische Feld und den elektrischen Strom j . Unter Annahme des Ohmschen Gesetzes $j = \sigma e$ wirkt der Strom als Dämpfungsterm.
- **Magnetisches Gaußsches Gesetz** (4.4): Es besagt, dass es keine magnetischen Monopole gibt. Dieses Gesetz folgt direkt aus Faradays Gesetz, sobald die Anfangsbedingung b_0 die Bedingung $\sum_{f \in F} b_0(f) = 0$ bzw. äquivalent $b_0 \in \operatorname{im}(\operatorname{div}_D)$ erfüllt.

Eine direkte Konsequenz der Maxwellgleichungen sind die Erhaltungssätze der elektrischen Energie und der elektrischen Ladung. Die Energie teilt sich in magnetische und elektrische Energie, die über die Zeit ineinander umgewandelt werden.

Satz 4.1 (Energieerhaltung). Sei $G = (g, F)$ ein planares Netz mit den Parametern $r > 0$, $\epsilon > 0$, $\mu > 0$ und seien $e(t)$ und $b(t)$ Lösungen der Maxwell-Gleichungen ohne Stromfluss, also $j \equiv 0$. Die Energie des Systems sei definiert als

$$E(t) = \frac{1}{2} \left(\sum_{f \in F} \frac{b(f, t)^2}{\mu(f)} + \sum_{k \in E} \epsilon(k) e(k, t)^2 \right).$$

Dann ist $E(t)$ zeitlich konstant, also gilt

$$\frac{d}{dt}E(t) = 0.$$

Beweis. Wir berechnen die Ableitung der Magnetfeldenergie:

$$\frac{d}{dt} \sum_{f \in F} \frac{b(f)^2}{\mu(f)} = 2 \sum_{f \in F} \frac{b(f)b'(f)}{\mu(f)} = 2 \langle b/\mu, b' \rangle_{\mathfrak{F}}.$$

Unter Verwendung von Gleichung (4.2) gilt

$$b' = -\operatorname{div}_D(r^{-1}e),$$

woraus

$$\frac{d}{dt} \sum_{f \in F} \frac{b(f)^2}{\mu(f)} = -2 \langle b/\mu, \operatorname{div}_D(r^{-1}e) \rangle_{\mathfrak{F}}.$$

Analog berechnen wir die zeitliche Ableitung der elektrischen Energie:

$$\frac{d}{dt} \sum_{k \in E} \epsilon(k)e(k)^2 = 2 \sum_{k \in E} \epsilon(k)e(k)e'(k) = 2 \langle \epsilon e, e' \rangle_{\mathfrak{K}}.$$

Mit Gleichung (4.3) erhalten wir

$$e' = -r^{-1} \operatorname{grad}_D \left(\frac{b}{\mu} \right) / \epsilon + j,$$

daher

$$\frac{d}{dt} \sum_{k \in E} \epsilon(k)e(k)^2 = -2 \langle e, r^{-1} \operatorname{grad}_D(b/\mu) \rangle_{\mathfrak{K}} - 2 \langle e, j \rangle_{\mathfrak{K}}.$$

Durch Adjunktion und Satz 2.1 gilt

$$\langle b/\mu, \operatorname{div}_D(r^{-1}e) \rangle_{\mathfrak{F}} = -\langle e, r^{-1} \operatorname{grad}_D(b/\mu) \rangle_{\mathfrak{K}},$$

wodurch sich die Ableitungen der Feldenergien gegenseitig aufheben und einzig der Beitrag des Stroms j verbleibt

$$\frac{d}{dt}E(t) = \langle e, j \rangle_{\mathfrak{K}}.$$

Insbesondere bedeutet dies im stromlosen Fall $j = 0$, dass die Energie erhalten bleibt:

$$\frac{d}{dt}E(t) = 0$$

□

Satz 4.2 (Kontinuitätsgesetz). *Sei $G = (g, F)$ ein planares Netz mit Kantenfunktion $r > 0$, elektrischer Permittivität $\epsilon > 0$ und magnetischer Permeabilität $\mu > 0$. Seien*

$$e : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{K}(G), \quad b : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{F}(G), \quad q : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{E}(G)$$

*Lösungen der diskreten Maxwell-Gleichungen mit Stromfunktion $j : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{K}(G)$. Dann gilt das **Kontinuitätsgesetz***

$$q'(t) = -\operatorname{div}(r j(t)),$$

welches die lokale Erhaltung der elektrischen Ladung ausdrückt. Daraus folgt insbesondere die Erhaltung der Gesamtladung:

$$\sum_{v \in V} q'(t)(v) = 0.$$

Beweis. Wir beginnen mit dem Ampèreschen Gesetz (4.3):

$$-r^{-1} \operatorname{grad}_D \left(\frac{1}{\mu} b(t) \right) = \epsilon e'(t) + j(t).$$

Teilen durch ϵ ergibt

$$-\epsilon^{-1} r^{-1} \operatorname{grad}_D \left(\frac{1}{\mu} b(t) \right) = e'(t) + \epsilon^{-1} j(t).$$

Wenden wir nun den Operator $\operatorname{div}(r\epsilon \cdot)$ an:

$$-\operatorname{div}(\operatorname{grad}_D \left(\frac{1}{\mu} b(t) \right)) = \operatorname{div}(r\epsilon e'(t)) + \operatorname{div}(rj(t)).$$

Der erste Term verschwindet aufgrund des de Rham Komplexes $\operatorname{div} \circ \operatorname{grad}_D = 0$. Somit bleibt

$$0 = \operatorname{div}(r\epsilon e'(t)) + \operatorname{div}(rj(t)).$$

Mit dem gaußschen Gesetz (4.1), also $\operatorname{div}(r\epsilon e(t)) = q(t)$, folgt

$$q'(t) = -\operatorname{div}(rj(t)).$$

Schließlich ergibt die Summation über alle Ecken

$$\sum_{v \in V} q'(t)(v) = -\sum_{v \in V} \operatorname{div}(rj(t))(v) = 0,$$

da jede Kante in den Divergenztermen mit entgegengesetztem Vorzeichen erscheint. Damit ist die Erhaltung der Gesamtladung gezeigt. \square

Die Maxwellgleichungen sind ein System gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen und als solches gibt es keine Probleme wegen Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung für jeden Zeitpunkt. Bevor wir jedoch die Maxwellgleichungen lösen, sollen Diese noch in eine bekömlichere Form gebracht werden.

4.1 Potentialformulierung der Maxwell-Gleichungen

Analog zum kontinuierlichen Fall lassen sich die Maxwell-Gleichungen auf planaren Netzen über Potentiale ausdrücken.

Definition 4.3. Sei G ein planares Netz mit Orientierung und $r > 0$ eine Kantenfunktion auf G . Dann definieren wir eine lineare Transformation

$$T : C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}) \times C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}) \rightarrow C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}) \times C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{F})$$

durch

$$(4.6) \quad T \begin{pmatrix} \phi(t) \\ a(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname{div}_D(r^{-1}a(t)) \\ -a'(t) - r \operatorname{grad}(\phi(t)) \end{pmatrix}$$

für alle $t \in \mathbb{R}$. Die Funktionen ϕ und a heißen **Skalarpotential** bzw. **Vektorpotential**, die über T in die Felder b und e überführt werden.

Es sei angemerkt, dass div_D nicht surjektiv ist, sondern nur Flächenfunktionen abbildet, die orthogonal zu den konstanten Funktionen sind. Diese Eigenschaft entspricht dem magnetischen Gaußschen Gesetz und erlaubt es uns, eine der Maxwellgleichungen bereits durch Wahl der Potentiale zu erfüllen.

Die Definition von b aus (4.9) führt durch Einsetzen in die Definition von e unmittelbar zum Faradayschen Gesetz. Damit sind zwei der vier Maxwellgleichungen automatisch erfüllt.

Das Gaußsche Gesetz in Kombination mit dem Ampèreschen Gesetz koppelt das elektrodynamische Feld an die Größen q (Ladung) und j (Strom). Diese erfüllen nach den Maxwellgleichungen das Kontinuitätsgesetz, deren Dynamik jedoch außerhalb des Systems liegt. Im Folgenden betrachten wir daher den Vereinfachungsfall, in dem j als vorgegebene zeitabhängige Funktion gegeben ist und q sich über das Gaußsche Gesetz definiert.

Daraus reduziert sich die Potentialformulierung der Maxwellgleichungen auf die Gleichung

$$(4.7) \quad r^{-1} \operatorname{grad}_D \left(\frac{1}{\mu} \operatorname{div}_D (r^{-1}a(t)) \right) = \epsilon (a''(t) + r \operatorname{grad}(\phi'(t))) - j(t).$$

Der Vorteil dieser Darstellung liegt in der Vereinfachung des Systems sowie in der größeren Flexibilität.

Es ist leicht zu erkennen, dass die Abbildung T nicht injektiv ist. Die Charakterisierung des Kerns von T führt uns zu den sogenannten Eichtransformationen:

Definition 4.4. Seien ϕ, a Potentiale wie oben und $\xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E})$. Die **Eichtransformation** γ_ξ ist definiert durch

$$(4.8) \quad \gamma_\xi \begin{pmatrix} \phi \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi - \xi' \\ a + r \operatorname{grad}(\xi) \end{pmatrix}.$$

Potentiale sind somit stets nur bis auf eine Eichtransformation eindeutig durch die Felder bestimmt.

Satz 4.3. Sei T wie in Definition 4.3. Dann gilt

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

Beweis. Sei $(\phi, a) \in \operatorname{kern}(T)$. Dann gilt für alle t :

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

Aus dem diskreten de Rham-Komplex wissen wir, dass

$$\ker(\operatorname{div}_D) = \operatorname{im}(\operatorname{grad}),$$

wobei alle Konstantenfunktionen im Kern von grad liegen. Da $r > 0$ ist, folgt daraus direkt, dass für jedes t gilt:

$$r^{-1}a(t) \in \operatorname{im}(\operatorname{grad}),$$

das heißt es existiert $\xi(t) \in \mathfrak{E}$, so dass

$$r^{-1}a(t) = \operatorname{grad}(\xi(t)) \quad \Rightarrow \quad a(t) = r \operatorname{grad}(\xi(t)).$$

Nun setze diesen Ausdruck in die zweite Komponente von $T(\phi, a) = 0$ ein:

$$0 = -a'(t) - r \operatorname{grad}(\phi(t)) = -r \operatorname{grad}(\xi'(t)) - r \operatorname{grad}(\phi(t)) = -r \operatorname{grad}(\xi'(t) + \phi(t)).$$

Da r invertierbar ist und der Kern von grad genau die konstanten Funktionen enthält, folgt:

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

wobei c eine (zeitabhängige) Konstante ist, die wir in ξ absorbieren können:

$$\tilde{\xi}(t) = \xi(t) - \int_0^t c(s) ds$$

Die Gegenrichtung \supseteq folgt unmittelbar durch Einsetzen der Darstellung $(-\xi'(t), r \operatorname{grad}(\xi(t)))$ in T , da dann

$$T \begin{pmatrix} -\xi'(t) \\ r \operatorname{grad}(\xi(t)) \end{pmatrix} = 0.$$

Damit ist der Kern von T vollständig charakterisiert. □

Hiermit wurden die wesentlichen Aspekte der Potentialdarstellung vorgestellt. Diese Darstellung bildet eine Grundvoraussetzung für die Quantisierung der Maxwell-Gleichungen.

Zum Abschluss dieses Kapitels konstruieren wir eine Lösung der Maxwell-Gleichungen in Potentialdarstellung (Gleichung 4.7) im stromlosen Fall $j \equiv 0$.

Aufgrund der Eichinvarianz von (4.7) existiert stets eine Lösung mit $\phi \equiv 0$. Somit können wir ohne Einschränkung der Allgemeinheit das Skalarpotential ϕ aus (4.7) eliminieren.

Hilfssatz 4.5. *Sei $L : V \rightarrow V$ eine positiv semidefinite lineare Abbildung in einem endlichdimensionalen reellen Vektorraum $V = \mathbb{R}^n$, mit $n \geq 1$. Weiter seien $u_0, v_0 \in V$ Anfangsdaten und $u \in C^2(\mathbb{R}, V)$ eine gesuchte Funktion. Dann ist die Lösung des Anfangswertproblems*

$$(4.9) \quad u''(t) + Lu(t) = 0,$$

$$(4.10) \quad u(0) = u_0,$$

$$(4.11) \quad u'(0) = v_0,$$

gegeben durch

$$(4.12) \quad u(t) = U^\dagger((\cos(Rt) + 1_{\{0\}}(R))Uu_0 + (\sin(Rt) + 1_{\{0\}}(R)t)Uv_0),$$

wobei U orthogonal, R eine Diagonalmatrix mit nichtnegativen Einträgen ist und $L = U^\dagger R^2 U$ gilt.

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

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

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

Als nächstes formen wir (4.13) um

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

und setzen $v = Uu$

$$(4.13) \quad v'' + R^2 v = 0$$

Die allgemeine Lösung von (4.17) 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 $t \in \mathbb{R}$ wobei R_n für $n \geq 1$ das entsprechende Diagonalelement von R ist. Durch umschreiben in Matrixform und Rücktransformation durch U erhalten wir unser Resultat (4.16). \square

Satz 4.4. *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*

$$(4.14) \quad a''(t) - r^{-1} \text{grad}_D(\text{div}_D(r^{-1}a(t))/\mu)/\epsilon = 0$$

und die Anfangsbedingung

$$(4.15) \quad a(0) = a_0$$

$$(4.16) \quad a'(0) = e_0$$

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 $\epsilon > 0$ keine Konstante ist sondern eine Kantenfunktion, können wir auch eine Lösung konstruieren. Hierzu transformieren wir zunächst (4.18) in eine Differentialgleichung erster Ordnung.

$$(4.17) \quad \begin{pmatrix} a \\ u \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ u \end{pmatrix}$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung zu Anfangsbedingungen $a(0) = a_0 \in \mathfrak{K}$ und $u(0) = u_0 \in \mathfrak{K}$ lautet für jedes $t \in \mathbb{R}$

$$(4.18) \quad \begin{pmatrix} a \\ u \end{pmatrix}(t) = e^{\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix}t} \begin{pmatrix} a_0 \\ u_0 \end{pmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix}^n t^n}{n!} \begin{pmatrix} a_0 \\ u_0 \end{pmatrix}$$

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 4.5 konstruiert werden.

4.2 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 4.6. *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 (4.10), genau dann wenn alle Richtungsableitungen des Wirkungsfunktionalen 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*

$$(4.19) \quad S(f_1, f_2) = \int_r^s L(f_1, f_2, f'_1, f'_2) dt$$

Die Funktion unter dem Integral nennt man die **Lagrangefunktion** der Maxwellgleichung. Sie ist dabei gegeben durch:

$$L(g_1, g_2, v_1, v_2) = \frac{1}{2} (\langle \epsilon(v_2 + r \operatorname{grad}(g_1)), v_2 + r \operatorname{grad}(g_1) \rangle_{\mathfrak{K}} - \langle \operatorname{div}_D(r^{-1} g_2), \operatorname{div}_D(r^{-1} g_2) / \mu \rangle_{\mathfrak{F}}) + \langle g_2, j \rangle_{\mathfrak{K}} - \langle g_1, q \rangle_{\mathfrak{E}}$$

Beweis. Siehe beliebiges Fachbuch zur theoretischen Physik. \square

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

Definition 4.7. Sei $f : X \mapsto \mathbb{R}$ eine konvexe Funktion auf einem Skalarproduktraum X , dann ist die **Legendretransformation** f^* definiert durch:

$$(4.20) \quad f^*(y) = \sup_{x \in X} (\langle x, y \rangle - f(x))$$

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

Satz 4.5. 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:

$$(4.21) \quad f^*(y) = \langle (Df)^{-1}(y), y \rangle - f((Df)^{-1}(y))$$

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

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

□

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

$$(4.22) \quad L(a, v) = \frac{1}{2} (\langle \epsilon v, v \rangle_{\mathfrak{K}} - \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \operatorname{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}}) + \langle a, j \rangle_{\mathfrak{K}}$$

Das übrige Vektorpotential a ist immer noch nicht eindeutig bestimmt, und die Eichtransformationen die diese Form der Eichung erhalten sind genau jene, die laut Definition (4.10) zu einem konstanten ξ korrespondieren.

Die Hamiltonfunktion erhalten wir durch eine Anwendung der Legendretransformation auf die Lagrangefunktion (4.26) bezüglich der Variablen v .

$$(4.23) \quad H(\pi, a) = \frac{1}{2} \langle \frac{\pi}{\epsilon}, \pi \rangle_{\mathfrak{K}} + \frac{1}{2} \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \operatorname{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} - \langle a, j \rangle_{\mathfrak{K}}$$

Wenn wir mit (4.8) bei 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 4.6. *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 (4.10), genau dann wenn die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen erfüllt sind:*

$$(4.24) \quad a' = \frac{\partial H}{\partial \pi}$$

$$(4.25) \quad \pi' = -\frac{\partial H}{\partial a}$$

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

$$(4.26) \quad \mathfrak{H} = L^2(\mathfrak{K}(G), \mathbb{C}; \lambda)$$

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

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

$$(4.27) \quad \langle \phi, \xi \rangle_{\mathfrak{H}} = \int_{\mathfrak{K}} \bar{\phi}(x) \xi(x) d\lambda(x)$$

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 selbstadjungierter Operator $\hat{\Omega}$ auf \mathfrak{H} .

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

² λ wird zu einem späteren Zeitpunkt festgelegt.

- 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 so genannte **kanonische Vertauschungsrelation**:

$$(4.28) \quad [\hat{a}(e), \hat{\pi}(e')] = i\delta_{e,e'}$$

gefordert. Es gibt eine mathematisch stärkere Forderung nach Hermann Weyl, welche es erlaubt sogar die Eindeutigkeit bis auf unitäre Transformation dieser Operatoren zu zeigen, jedoch ist dies hier nicht notwendig.

Eine mögliche Darstellung dieser Operatoren \hat{a}_k und $\hat{\pi}_k$, die (4.32) erfüllt ist gegeben durch:

$$(4.29) \quad \hat{\pi}_k : (a \mapsto \psi(a)) \mapsto (a \mapsto -i \frac{\partial \psi}{\partial a_k}(a)) \text{ für } k \in E$$

$$(4.30) \quad \hat{a}_k : (a \mapsto \psi(a)) \mapsto (a \mapsto a_k \psi(a)) \text{ für } k \in E$$

Hierbei ist a_k der Wert der Kantenfunktion a an der Stelle $k \in E$ und $\frac{\partial}{\partial a_k}$ ist die Ableitung nach demselben Wert. Die Definitionsbereiche $D(\hat{\pi}_k)$ und $D(\hat{a}_k)$ für $k \in E$ sind im ersten Fall der Sobolevraum $H^1(\mathfrak{K}(G), \mathbb{C}; \lambda)$ und im zweiten Fall sein Bild unter Fouriertransformation.

Eine kurze Betrachtung der Hamiltonfunktion (4.27) zeigt die Äquivalenz dieses Problems zu der Bewegung von $|E|$ Punktmaßen mit Massen $\epsilon(k)$ für jedes $k \in E$ in einem Potential.

Definition 4.9. 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

$$(4.31) \quad \hat{H} = - \sum_{k \in E} \frac{1}{2\epsilon(k)} \frac{\partial^2}{\partial a_k^2} + \frac{1}{2} \langle \text{div}_D(r^{-1}a), \text{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} - \langle a, \hat{j} \rangle_{\mathfrak{K}}$$

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

$$(4.32) \quad \hat{H}\psi(t) = i\psi'(t)$$

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.

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

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 4.10 (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 (4.36) auf G , dann gilt:*

$$(4.33) \quad \epsilon \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = -r^{-1} \text{grad}_D(\langle \psi, \hat{b}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}/\mu) - \langle \psi, \hat{j}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}$$

$$(4.34) \quad \langle \psi, \hat{b}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = -\text{div}_D(r^{-1} \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle_{\mathfrak{H}})$$

wobei der elektrische und magnetische Feldoperator gegeben sind durch:

$$(4.35) \quad \hat{e} = \frac{-\hat{\pi}}{\epsilon}$$

$$(4.36) \quad \hat{b} = \text{div}_D(r^{-1}\hat{a})$$

Beweis. (Skizze) Wir starten mit der linken Seite von (4.37), wenden die Produktregel der Differentiation an und formen um:

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

Nun zeigen wir (4.38) indem wir ausgehend von (4.40) die Formel

$$(4.37) \quad \langle \psi, \hat{b}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = \text{div}_D(r^{-1} \langle \psi, \hat{a}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}})$$

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

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

Am Ende haben wir hier die kanonischen Vertauschungsrelationen und die Rechenregeln des Kommutators verwendet. Wir setzen den erhaltenen Ausdruck nun in (4.40) ein und erhalten das gesuchte Resultat. \square

Wir sehen also, dass die Schrödingergleichung (4,36) tatsächlich eine Quantisierung der Maxwellgleichungen (4.1) darstellt.

Bislang haben wir noch keine Bestätigung, dass die Schrödingergleichung (4,36) 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 4.11. *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} (4.35) mit $\hat{j} \equiv 0$ gilt:*

$$(4.38) \quad \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \sum_{j=1}^{|E|} \hat{h}_j$$

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

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

Wir formen nun \hat{V} um

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

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

$$(4.39) \quad \frac{1}{2} \langle q, Q(q) \rangle_{\mathfrak{K}}$$

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 (4.43) liefert dann

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

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 $q \in \mathfrak{K}$

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

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.

$$(4.40) \quad \nabla(\hat{U}\phi)(x) = U^T * (\nabla'\phi)(U(x)) = U^T * \hat{U}(\nabla'\phi)(x)$$

$$(4.41) \quad = \hat{U}(U^T * \nabla'\phi)(x)$$

Der Operator \hat{T} ist der Laplaceoperator und invariant unter orthogonaler Transformation. Wir erhalten somit durch Transformation unter \hat{U} den

⁴Der eulersche Polyedersatz ist eine Folgerung der Helmholtz Zerlegung.

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 (4.42) 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 (4.35), 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 4.12. *Sei G, ϵ, r, μ und \hat{U} wie in Theorem 4.11 und zusätzlich sei der Raum frei von elektrischer Ladung*

$$(4.42) \quad \operatorname{div}(r * \epsilon * \hat{e}) = 0$$

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

$$(4.43) \quad \forall x \in \mathfrak{K} : \forall y \in A : \psi(x + y) = \psi(x)$$

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 (4.33) und (4.44) analog zum Vektorpotential Operator \hat{a} :

$$(4.44) \quad \hat{a} \mapsto \hat{a}' = \hat{U} \hat{a} \hat{U}^\dagger = U * \hat{a}$$

$$(4.45) \quad \hat{e} \mapsto \hat{e}' = \hat{U} \hat{e} \hat{U}^\dagger = U * \hat{e}$$

Als nächstes betrachten wir das Produkt $w = \operatorname{div} * r * U^T$. 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 4.11. □

Alternativ hätten wir vor der Quantisierung den ladungsfreien Fall

$$(4.46) \quad \operatorname{div}(r * \epsilon * e) = 0$$

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

$$(4.47) \quad \operatorname{div}(r * a) = 0$$

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.

4.2.1 Photonen - die Teilcheninterpretation

Wir folgen in diesem Abschnitt Dirac um das Problem des quantenmechanischen harmonischen Oszillators zu lösen. Nach Theorem 4.11 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 4.11) einen Operator

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

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 4.13. 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

$$(4.48) \quad \hat{a}_\omega : \Omega \mapsto \Omega$$

ein linearer Operator definiert durch

$$(4.49) \quad \hat{a}_\omega = \sqrt{\frac{\omega}{2}}(\hat{a} + i\frac{\hat{\pi}}{\omega}) = \sqrt{\frac{\omega}{2}}(a + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq})$$

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

⁵Anstelle von j schreiben wir von hier an ω .

Halten wir zunächst einige wichtige Eigenschaften des Vernichtungsoperators fest.

Satz 4.7. *Der Operator \hat{a}_ω aus Definition 4.13 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

$$(4.50) \quad \hat{a}_\omega^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(q - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right)$$

und ebenfalls ein dicht definierter linearer Operator und es gilt:

$$(4.51) \quad [\hat{a}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] = 1$$

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

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

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

Der Beweis für den laut 4.54 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)

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 (4.54) tatsächlich der zu \hat{a}_ω adjungierte Operator ist. Sei $\phi, \psi \in \Omega$, dann verwenden wir partielle Integration um zu zeigen, dass (4.54) auf Ω der Definition der Adjungierten entspricht:

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

Abschließend

$$\begin{aligned}\hat{a}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger &= \frac{\omega}{2} \left(q + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) \left(q - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) = \frac{\omega}{2} \left(q^2 - q \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} q - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dq^2} \right) \\ (4.52) \quad \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega &= \frac{\omega}{2} \left(q - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) \left(q + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right) = \frac{\omega}{2} \left(q^2 + q \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} q - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dq^2} \right) \\ [\hat{a}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] &= \frac{d}{dq} q - q \frac{d}{dq} = 1\end{aligned}$$

□

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

Wir werden als nächstes den **Teilchenzahloperator**

$$(4.53) \quad \hat{N}_\omega = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega$$

untersuchen

Hilfssatz 4.14. *Der Teilchenzahloperator ist ein dicht definierter linearer Operator und erfüllt folgende Vertauschungsrelationen*

$$(4.54) \quad [\hat{N}_\omega, \hat{a}_\omega] = -\hat{a}_\omega$$

$$(4.55) \quad [\hat{N}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] = \hat{a}_\omega^\dagger$$

Des weiteren gilt die Identität

$$(4.56) \quad \hat{h}_\omega = \omega \left(\hat{N}_\omega + \frac{1}{2} \right)$$

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 Energieniveaus.

Um diese Interpretation zu untermauern untersuchen wir den Teilchenzahloperator weiter.

Satz 4.8. *Das Spektrum des Teilchenzahloperator \hat{N}_ω ist die Menge der natürlichen Zahlen mit Null.*

$$(4.57) \quad \sigma(\hat{N}_\omega) = \mathbb{N}^6$$

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

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

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,

⁶ $0 \in \mathbb{N}$.

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

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

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} . □

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

$$(4.58) \quad \sigma(\hat{H}) = \{\omega(n + \frac{1}{2}) : \omega^2 \in \sigma(-r^{-1} \operatorname{grad}_D \operatorname{div}_D r^{-1}), n \in \mathbb{N}, \omega \neq 0\}$$

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 5

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 5.1. 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:

$$(5.1) \quad \text{grad}^a(\Phi)(\tilde{e}) = \Phi(p(\tilde{e})) - \Phi(q(\tilde{e}))e^{ia(\tilde{e})}$$

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

$$(5.2) \quad \Delta_r^a(\Phi)(v) = (\text{grad}_r^{a\dagger} * r^{-2} * \text{grad}_r^a)(\Phi)(v)$$

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

Hilfssatz 5.2. 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} .

$$(5.3) \quad \text{grad}^{a+\text{grad}(\xi)}(e^{i\xi}\Phi)(\tilde{e}) = e^{i\xi(p(\tilde{e}))} \text{grad}^a(\Phi)(\tilde{e})$$

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 5.3. 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

$$(5.4) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi\right)\Phi - \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0$$

und die Anfangsbedingung:

$$(5.5) \quad \Phi(0) = \Phi_0$$

$$(5.6) \quad \Phi'(0) = v_0$$

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 5.4. 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

$$(5.7) \quad \gamma_{\xi}\left(\begin{pmatrix} \phi \\ a \\ \Phi \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} \phi - \xi' \\ a + r\text{grad}(\xi) \\ \Phi e^{i\xi} \end{pmatrix}$$

die zu ξ gehörende **erweiterte Eichtransformation**.

Satz 5.1. 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

$$(5.8) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi\right)\Phi - \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0$$

dann ist auch

$$(5.9) \quad \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{a} \\ \tilde{\Phi} \end{pmatrix} = \gamma_{\xi} \left(\begin{pmatrix} \phi \\ a \\ \Phi \end{pmatrix} \right)$$

Lösung der Klein-Gordongleichung

$$(5.10) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\tilde{\phi} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\tilde{\phi} \right) \tilde{\Phi} - \Delta_r^{\tilde{a}} \tilde{\Phi} + m^2 \tilde{\Phi} = 0$$

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 5.2. *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:*

$$(5.11) \quad q' + \text{div}(j) = 0$$

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

$$(5.12) \quad q = \Im(\bar{\Phi}\Phi')$$

$$(5.13) \quad \begin{aligned} j &= -\operatorname{div}^{-1} \Im(\bar{\Phi} \Delta_r^a(\Phi)) \\ &= -\Im\left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e))} \phi(q(e)) e^{i \frac{a}{r}(e)}\right) \end{aligned}$$

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

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

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 5.5. *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 5.3. *Sei G , $m > 0$, $r > 0$ und a wie in Definition 7.3. Wenn Φ eine Lösung der Klein-Gordongleichung*

$$(5.14) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi - \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0$$

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

$$(5.15) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \bar{\Phi} - \Delta_r^{-a} \bar{\Phi} + m^2 \bar{\Phi} = 0$$

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

$$(5.16) \quad q_{\bar{\Phi}} = -q_{\Phi}$$

$$(5.17) \quad j_{\bar{\Phi}}^a = -j_{\Phi}^{-a}$$

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 5.4. 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:

$$(5.18) \quad \Phi = \Phi_R + i\Phi_I$$

$$(5.19) \quad \pi = \pi_R + i\pi_I$$

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

$$(5.20) \quad H(\Phi, \pi) = \frac{1}{2}(\langle \pi, \pi \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2)\Phi \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}})$$

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

$$(5.21) \quad \frac{1}{2}\Phi' = \frac{\partial H}{\partial \pi}$$

$$(5.22) \quad \frac{1}{2}\pi' = -\frac{\partial H}{\partial \Phi}$$

erfüllt sind.⁴

Beweis. TODO □

Folgerung 5.6. 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

$$(5.23) \quad \frac{dH(\Phi(t), \pi(t), t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}(\Phi(t), \pi(t), t)$$

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 5.7. 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

$$(5.24) \quad u'' + Lu + m^2 u = 0$$

dann gibt es einen selbstadjungierten linearen Operator H in V sodass

$$(5.25) \quad \psi = \begin{pmatrix} u \\ (L^{\frac{1}{2}} + i\frac{\partial}{\partial t})u/m \end{pmatrix} \in C^2(\mathbb{R}, V) \times C^1(\mathbb{R}, V)$$

eine Lösung der Schrödingergleichung

$$(5.26) \quad i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

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

$$(5.27) \quad i\frac{\partial u}{\partial t} = -L^{\frac{1}{2}}u + m * \phi$$

$$(5.28) \quad i\frac{\partial \phi}{\partial t} = L^{\frac{1}{2}}\phi + m * u$$

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).

$$(5.29) \quad i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

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 5.5. *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.*

$$(5.30) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Phi - \Delta_r^a\Phi + m^2\Phi = 0$$

$$(5.31) \quad \Phi(0) = \Phi_0$$

$$(5.32) \quad \Phi'(0) = v_0$$

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 5.6. *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*

$$(5.33) \quad H = \begin{pmatrix} -L^{\frac{1}{2}} & m \\ m & L^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

gegeben durch

$$(5.34) \quad \sigma(H) = \{\pm\sqrt{\omega + m^2} : \omega \in \sigma(L)\}$$

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 $m = 0$

$$(5.35) \quad u'' + Lu = 0$$

und transformiere sie in die analoge Differentialgleichung erster Ordnung

$$(5.36) \quad \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix}$$

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

Satz 5.7. *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*

$$(5.37) \quad A = J^{-1} \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} J = J^{-1} B J$$

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.

5.1 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 5.8. Sei G ein planarer Graph, dann ist der Hilbertraum unserer Theorie gegeben durch

$$(5.38) \quad \mathfrak{H}(G) = L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C})$$

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:

$$(5.39) \quad \langle \phi, \xi \rangle_{\mathfrak{H}} = \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)} \overline{\phi(x)} \xi(x) d\lambda(x)$$

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 5.9. 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

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

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:

$$(5.40) \quad \hat{H} = \frac{1}{2} \left(\sum_{x \in V} (\hat{\pi}_{\Phi_R}^2 + \hat{\pi}_{\Phi_I}^2) + \langle \hat{\Phi}, (\Delta_r^a + m^2) \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} \right)$$

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

$$(5.41) \quad \hat{H}\psi(t) = i\psi'(t)$$

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 5.10. *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:*

$$(5.42) \quad \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \sum_{j=0}^{|V|-1} \hat{h}_j$$

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

$$(5.43) \quad \hat{h}_j = \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial a_j^2} - \frac{\partial^2}{\partial b_j^2} + (m + \omega_j)^2 \overline{x_j} x_j \right)$$

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 $q = \Im(\overline{\Phi}\Phi')$ Durch den Zusammenhang $\pi = \Phi'$ und eine kurze Umformung

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

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 5.11. 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

$$(5.44) \quad \hat{q}(x) = \hat{\Phi}_R \hat{\pi}_I - \hat{\Phi}_I \hat{\pi}_R = i(\hat{\Phi}_I(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_R(x)} - \hat{\Phi}_R(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_I(x)})$$

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

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

$$(5.45) \quad \hat{Q} = \sum_{x \in V} \hat{q}(x)$$

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

$$(5.46) \quad \langle \psi, \hat{q}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = \text{div}(\langle \psi, \Im(\frac{1}{r(e)^2} \hat{\Phi}(p(e)) \hat{\Phi}(q(e)) e^{i\frac{a}{r}(e)}) \psi \rangle_{\mathfrak{H}})$$

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.

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

Wir betrachten zuerst die Identitäten:

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

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

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

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

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

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

Wir fassen zusammen:

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

□

5.1.1 Teilchen und Antiteilchen

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

$$(5.47) \quad \hat{h}_\omega = \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial a_\omega^2} - \frac{\partial^2}{\partial b_\omega^2} + (m + \omega)^2 \overline{x_\omega} x_\omega \right)$$

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.

$$(5.48) \quad \hat{A}_\omega = \frac{1}{2}(\hat{r}_\omega + i\hat{s}_\omega)$$

$$(5.49) \quad \hat{B}_\omega = \frac{1}{2}(\hat{r}_\omega - i\hat{s}_\omega)$$

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

$$[\hat{A}_\omega, \hat{B}_\omega^\dagger] = 0$$

$$[\hat{A}_\omega, \hat{B}_\omega] = 0$$

$$[\hat{A}_\omega, \hat{A}_\omega^\dagger] = 1$$

$$[\hat{B}_\omega, \hat{B}_\omega^\dagger] = 1$$

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

$$\hat{N}_{\omega+} = \hat{A}_\omega^\dagger \hat{A}_\omega$$

$$\hat{N}_{\omega-} = \hat{B}_\omega^\dagger \hat{B}_\omega$$

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 $\hat{B}_\omega, \hat{N}_{\omega-}$ 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 5.8. *Sei G ein planarer Graph und $\hat{N}_{\omega\pm}$ wie oben, dann können wir den Gesamtladungsoperator folgendermaßen schreiben*

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

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

Beweis. □

Definition 5.13. Sei G ein planarer Graph, $x \in \mathfrak{E}(G)$ und $\psi \in \mathfrak{E}$, dann nennen wir

$$(5.50) \quad U_C(\psi)(x) = \psi(\bar{x})$$

den **Ladungskonjugationsoperator**.

Bemerkung 5.14. Der Ladungskonjugationsoperator ist unitär und selbstadjungiert.

Satz 5.9. 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

$$(5.51) \quad U_C A_\omega U_C = B_\omega$$

$$(5.52) \quad U_C N_{\omega\pm} U_C = N_{\omega\mp}$$

5.2 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 6

Skalare Quantenelektrodynamik des planaren Graphen

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

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 gehen wir von der klassischen Betrachtung zur quantenmechanischen über indem wir den zugehörigen Hamiltonoperator anschreiben.

Definition 6.1. *Sei G ein planarer Graph, $r > 0, \epsilon \in \mathfrak{K}$, \mathfrak{H}_{qed} ein passender Hilbertraum, dann nennen wir den Operator $\hat{H}_{qed} : D(\hat{H}_{qed}) \subseteq \mathfrak{H}_{qed} \mapsto \mathfrak{H}_{qed}$ definiert durch*

$$(6.1) \quad \hat{H}_{qed} = \frac{1}{2} \left(- \sum_{x \in V} \left(\frac{\partial^2}{\partial \Phi_R(x)^2} + \frac{\partial^2}{\partial \Phi_I(x)^2} \right) + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2)(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \right. \\ \left. - \frac{1}{\epsilon} \sum_{e \in E} \frac{\partial^2}{\partial a(e)^2} + \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \operatorname{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} \right)$$

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 uns ganz allgemein $\mathfrak{H}_{qed} \subset F(\mathbb{C}^V \times \mathbb{R}^E, \mathbb{C})$. Wir werden aber die komplexen Komponenten bei Bedarf als zweidimensional kartesisch reell (Φ_R, Φ_I) oder in Polarkoordinaten (ρ, ϕ) schreiben.

Die klassische erweiterte Eichtransformation (7.7) bildet eine Gruppe und in der Quantenmechanik ist ihre Entsprechung durch eine Darstellung dieser Gruppe im Raum der unitären Abbildungen auf \mathfrak{H}_{qed} gegeben.

Definition 6.2. Sei G ein planarer Graph, $r > 0 \in \mathfrak{R}$, $\xi \in \mathfrak{E}$ und $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$, dann nennen wir die Familie $\{\hat{U}_\xi\}_{\xi \in \mathfrak{E}}$ definiert durch

$$(6.2) \quad \hat{U}_\xi(\psi)(\Phi, a) = \psi(\Phi e^{i\xi}, a + r \text{grad} \xi)$$

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

$$(6.3) \quad \hat{U}_\xi(\psi)(\rho, \phi, a) = \psi(\rho, \phi + \xi, a + r \text{grad} \xi)$$

die **kanonische Darstellung der erweiterte Eichtransformation** oder kurz einfach **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 später sehen, dass die Eichgruppe stark stetig ist in den Parametern.

Satz 6.1. Sei $\hat{U}_{\{\xi \in \mathfrak{E}\}}$ wie in obiger Definition und $r > 0, \epsilon \in \mathfrak{R}$, dann gilt für alle $\xi \in \mathfrak{E}$ und $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathfrak{R}(G), \mathbb{C})$.

$$(6.4) \quad [\hat{H}_{qed}, \hat{U}_\xi] \psi = 0$$

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

$$(6.5) \quad \hat{h} = \text{div}(r * \epsilon * \hat{e}) - \hat{q}$$

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 $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times \mathfrak{R}, \mathbb{C})$, $\Phi \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}$, $a \in \mathfrak{R}$ 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

$$(6.6) \quad e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) = \Delta_r^{a+r\text{grad}\xi}(e^{i\xi}\Phi)$$

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

$$(6.7) \quad (\operatorname{div}(r\epsilon\hat{e}))' + \hat{j}_{em} = 0$$

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 , die im Kern von \hat{h} liegen. Hierzu betrachten wir die Beziehung zwischen \hat{h} und der Eichgruppe.

$$(6.8) \quad \hat{U}_\xi = e^{i \sum_{x \in V} \xi(x) * \hat{h}(x)} = \prod_{x \in V} e^{i \xi(x) * \hat{h}(x)}$$

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 stetiges $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$ entlang Kurven der Form

$$(6.9) \quad \{(\Phi e^{i\xi}, a + r \operatorname{grad} \xi) : \xi \in \mathfrak{E}(G)\}$$

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 6.3. *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 Lebesgue 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.

Definition 6.4. Sei G ein planarer Graph, A die Flächen von G , $r > 0 \in \mathfrak{K}(G)$, Q die Pseudoinverse von $r \text{grad}$, $u : \mathfrak{K}(G) \rightarrow \mathbb{R}^{|A|-1}$, sodass $uu^T = 1_{\mathbb{R}^{|A|-1}}$ und $u^T u = P_{\text{kern}(\text{div}_D r)}$ und $v : \mathfrak{K}(G) \rightarrow \mathbb{R}^{|V|-1}$, sodass $vv^T = 1_{\mathbb{R}^{|V|-1}}$ und $v^T v = P_{\text{kern}(\text{div}_D r)}^1$ dann definieren wir eine Abbildung $\gamma : \mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G) \rightarrow \mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1} \times \mathbb{R}^{|V|-1}$ durch

$$(6.10) \quad \gamma(\Phi, a) = (\Phi e^{-iQ(a)}, u(a), v(a))$$

für alle $\Phi \in \mathfrak{E}_\mathbb{C}(G)$ und $a \in \mathfrak{K}(G)$.

Die Abbildung γ induziert eine Abbildung $\Gamma : F(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1} \times \mathbb{R}^{|V|-1}, \mathbb{C}) \rightarrow F(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathfrak{K}(G), \mathbb{C})$ definiert durch.

$$(6.11) \quad \Gamma(f) = f \circ \gamma$$

für alle Funktionen $f \in F(\mathfrak{E}_\mathbb{C}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1} \times \mathbb{R}^{|V|-1}, \mathbb{C})$.

Bemerkung 6.5. Sei G ein planarer Graph, Γ wie in Definition 10.4, dann ist γ ein Diffeomorphismus und es gilt $\int \Gamma(f) d\lambda = \int f d\lambda$.

Beweis. Die Abbildung γ ist offensichtlich stetig differenzierbar, es verbleibt somit zu zeigen, dass dies auch für die Inverse γ^{-1} gilt und dass die Determinante der Ableitung $\det D\gamma$ den Betrag Eins hat.

Sei $x \in \mathbb{R}^{|A|-1}$, $y \in \mathbb{R}^{|V|-1}$ und $\Phi \in \mathfrak{E}_\mathbb{C}$, dann definieren wir

$$\begin{aligned} \gamma^{-1}(\Phi, x, y) &= (\Phi e^{iQ(u^T(x) + v^T(y))}, u^T(x) + v^T(y)) \\ &= (\Phi e^{iQ(v^T(y))}, u^T(x) + v^T(y)) \end{aligned}$$

Es gilt dann für $\Phi \in \mathfrak{E}_\mathbb{C}(G)$ und $a \in \mathfrak{K}(G)$:

$$\begin{aligned} \gamma^{-1} \circ \gamma(\Phi, a) &= \gamma^{-1}(\Phi e^{-iQ(a)}, u(a), v(a)) \\ &= (\Phi e^{-iQ(a)} e^{iQ(v^T v(a))}, u^T u(a) + v^T v(a)) \\ &= (\Phi, a) \end{aligned}$$

Umgekehrt gilt für $x \in \mathbb{R}^{|A|-1}$, $y \in \mathbb{R}^{|V|-1}$ und $\Phi \in \mathfrak{E}_\mathbb{C}$:

$$\begin{aligned} \gamma \circ \gamma^{-1}(\Phi, x, y) &= \gamma(\Phi e^{iQ(v^T(y))}, u^T(x) + v^T(y)) \\ &= (\Phi e^{iQ(v^T(y))} e^{-iQ(v^T(y))}, uu^T(x), vv^T(y)) \\ &= (\Phi, x, y) \end{aligned}$$

¹Die Zeilen von u und v sind einfach orthogonale Basen der entsprechenden Teilräumen.

Sein nun abschließend $f \in F(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1} \times \mathbb{R}^{|V|-1}, \mathbb{C})$

$$\begin{aligned} \int \Gamma(f) d\lambda &= \int \int f(\Phi e^{-iQ(a)}, u(a), v(a)) d\lambda(\Phi) d\lambda(a) \\ &= \int \int f(\Phi, u(a), v(a)) d\lambda(\Phi) d\lambda(a) \\ &= \int \int \int f(\Phi, x, y) d\lambda(\Phi) d\lambda(x) d\lambda(y) = \int f d\lambda \end{aligned}$$

Wir erweitern zuerst mit dem Satz von Fubini auf ein Mehrfachintegral, nutzen dann den Fakt, dass bei konstantem a die Abbildung $\Phi \mapsto \Phi e^{-iQ(a)}$ eine unitäre Abbildung ist. Am Ende stellen wir fest, dass $a \mapsto (u(a), v(a))$ ebenfalls eine unitäre Abbildung ist, da u und v Basen zu zueinander orthogonalen Teilräumen sind welche zusammen den ganzen Raum $\mathfrak{K}(G)$ aufspannen. \square

Satz 6.2. *Sei G ein planarer Graph, Γ wie in Definition 10.4 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 $f \in F(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1}, \mathbb{R})^2$ gibt sodass $\psi = \Gamma(f)$.*

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 $f \in F(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1}, \mathbb{C})$ 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

²Also dass es ein $f \in F(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1} \times \mathbb{R}^{|V|-1}, \mathbb{C})$ gibt sodass f konstant entlang $\mathbb{R}^{|V|-1}$ ist.

Folgerung 6.6. 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

$$(6.12) \quad \mathfrak{T} = r\text{grad}(\{\phi \in \mathfrak{E}(G) : \sum_{x \in V} \phi_x = 0, -\pi \leq \phi < \pi\})$$

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

$$(6.13) \quad f_x(y) = \begin{cases} -1 & y = x, x \neq z \\ 1 & y = z \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

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

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

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

$$(6.14) \quad a_1 = a_0 + 2\pi \sum_{x \in (V - \{z\})} n_x * r\text{grad}(f_x)$$

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 einen weiteren Begriff ein und geben einen damit assoziierten Darstellungssatz mit dem wir den verbleibenden Eichgruppen Freiheitsgrad von (Φ, a) fixieren, nämlich jener bezüglich $\xi \in \text{kern}(r\text{grad})$ beziehungsweise konstantem ξ .

Definition 6.7. Sei G ein planarer Graph, dann definieren wir

$$(6.15) \quad \mathfrak{H}_{sym} = \{\psi \in L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C}) \mid \hat{U}_{\xi} \psi = \psi \forall \xi \in \ker(rgrad)\}$$

Hilfssatz 6.8. Sei G ein planarer Graph und $y \in V$ beliebig, dann gilt $\psi \in \mathfrak{H}_{sym}$ genau dann wenn es ein $f \in L^2(\mathbb{R}^{\{y\}} \times \mathbb{C}^{V-\{y\}}, \mathbb{C})$ gibt sodass für alle $\Phi \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ gilt

$$(6.16) \quad \psi(\Phi) = f(\Phi e^{-i \arg(\Phi)(y)})$$

Beweis. □

Dieser Satz gibt uns eine explizite Konstruktion des Raums der Funktionen $\psi \in L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C})$, die invariant unter globaler Rotation sind, daher unter Rotation jeder Ecke um denselben Winkel. Diese Funktionen lassen sich auch über ein anderes Kriterium identifizieren.

Satz 6.3. Sei G ein planarer Graph, $\Phi = (\rho, \phi)$ eine Polarkoordinatendarstellung, dann gilt $\psi \in \mathfrak{H}_{sym}$ genau dann wenn

$$(6.17) \quad \sum_{x \in V} \frac{\partial}{\partial \phi(x)} \psi = 0$$

Beweis. Betrachten wir zunächst die Abbildung \hat{U}_{ξ} mit $\xi \in \ker(rgrad)$, 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 (10.17) der Erzeuger von \hat{U}_{ξ} ist, folgt die Aussage direkt aus dem Stoneschen Theorem. □

Im Beweis von Satz 10.1 haben wir gesehen, dass $\hat{q}(x) = i \frac{\partial}{\partial \phi(x)}$ und somit handelt es sich bei \mathfrak{H}_{sym} um den Teilraum der Zustände mit Gesamtladung 0.

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

Definition 6.9. Sei G ein planarer Graph, $r > 0 \in \mathfrak{K}$ und $\psi \in L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\operatorname{div} r)), \mathbb{C})$ sowie u wie in Satz 10.2, dann sagen wir $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}^{pre}$ genau dann wenn es ein $\tilde{\psi} \in C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathbb{R}^{|A|-1}, \mathbb{C})$ 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

$$(6.18) \quad \psi(\Phi, a) = \tilde{\psi}(\Phi e^{-iQ(a)}, u(a))$$

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

$$(6.19) \quad \psi(\rho, \phi, a) = \tilde{\psi}(\rho, \phi - Q(a), u(a))$$

Der Hilbertraum der skalaren Quantenelektrodynamik \mathfrak{H}_{qed} ist der topologische Abschluss

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

bezüglich der Metrik des Raums $L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\operatorname{div} r)), \mathbb{C})$ induziert durch das Skalarprodukt

$$(6.20) \quad \langle \phi, \psi \rangle_{qed} := \frac{1}{\lambda(\tau)} \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\operatorname{div} r))} \bar{\phi} \psi d\lambda$$

Bemerkung 6.10. Die Einschränkung auf $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\operatorname{div} r))$ der Funktion ψ ist durch periodische Fortsetzung umkehrbar nach Folgerung 10.6. Entsprechend können wir alle bisher behandelten Operatoren über diese Fortsetzung wie gehabt auf \mathfrak{H}_{qed} definieren.

Mit Hilfe von Bemerkung 10.5 lässt sich das Integral (10.20) als Integral auf dem niedrigdimensionaleren Raum $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times \mathbb{R}^{|A|-1}$ darstellen. Seien ϕ und ψ aus \mathfrak{H}_{qed} und $\tilde{\phi}$ sowie $\tilde{\psi}$ wie in Definition 10.9 dann gilt

$$\begin{aligned} \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\operatorname{div} r))} \bar{\phi} \psi d\lambda &= \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times \mathfrak{K}} \bar{\phi} \psi 1_{\mathfrak{T}} d\lambda \\ &= |\mathfrak{T}| \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times \mathbb{R}^{|A|-1}} \bar{\tilde{\phi}} \tilde{\psi} d\lambda(\phi) d\lambda(x) \end{aligned}$$

weil $\tilde{\phi}$ und $\tilde{\psi}$ entlang y konstant sind und Γ das Integral nicht verändert.

Satz 6.4. Sei $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$ wie in Definition 10.9, 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 (10.5)

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

Nach Satz 10.3 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

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

□

Kommen wir nun zurück zu den Eigenschaften der Eichgruppe.

Satz 6.5. *Sei G ein planarer Graph, $r > 0 \in \mathfrak{K}$, $\xi \in \mathfrak{E}$, $\psi \in \mathfrak{H}_{qed}$, und $\{\hat{U}_\xi\}_{\xi \in \mathfrak{E}}$ wie in Definition 10.2, dann ist $\{\hat{U}_\xi\}_{\xi \in \mathfrak{E}}$ eine stark stetige Darstellung der Gruppe der erweiterten Eichtransformationen im Raum der unitären Operatoren auf \mathfrak{H}_{qed} .*

Beweis. Es verbleibt nach Satz (10.1) zu zeigen, dass für beliebiges $\xi \in \mathfrak{E}$ \hat{U}_ξ unitär ist und die Darstellung stark stetig ist. In Polarkoordinaten handelt es sich bei der Eichgruppe einfach um einen Translationsoperator. Es ist damit leicht zu zeigen, dass die Eigenschaft erfüllt ist. □

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

Theorem 6.11. *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 7

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!