
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	Grundlagen	25
4.2	Potentialformulierung der Maxwell-Gleichungen	29
4.3	Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes	35
5	Die Klein-Gordon-Gleichung	48
5.1	Grundlagen	48
5.2	Quantentheorie des Klein-Gordon-Feldes	63
6	Zweite Quantisierung	74
7	Skalare Quantenelektrodynamik des planaren Graphen	75
8	Numerische Simulation der skalaren Quantenelektrodynamik auf einem Tetraeder	85

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

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

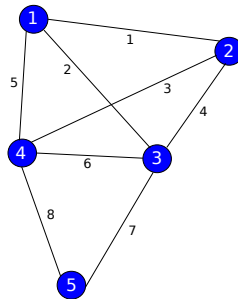


Abbildung 1.1: Beispiel eines Graphen.

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.

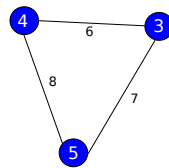


Abbildung 1.2: Teilgraph des Beispielgraphs.

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.

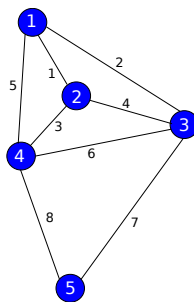


Abbildung 1.3: Planare Darstellung des Beispielgraphen aus Abbildung 1.1 nach Verschieben der Ecke 2.

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

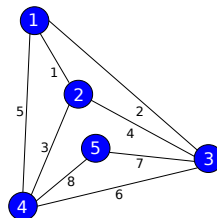


Abbildung 1.4: Alternative planare Darstellung desselben Graphen.

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.

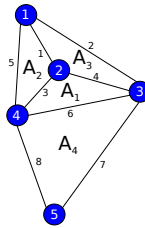


Abbildung 1.5: Planare Darstellung des Beispielgraphen mit Flächen A_1, \dots, A_4 .

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.

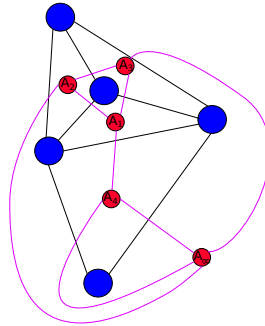


Abbildung 1.6: Dualer Graph des Beispielgraphen (rote Knoten: Flächen, blaue Knoten: Ecken des Ausgangsgraphen).

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:

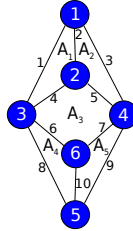


Abbildung 1.7: Beispielgraph 2: planares Netz (kein konvexer Polyeder).

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.

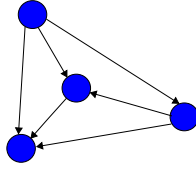


Abbildung 1.8: Graph mit Orientierung: jede Kante erhält eine Richtung (Pfeilspitze).

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 $p_D(e) = A_j$.

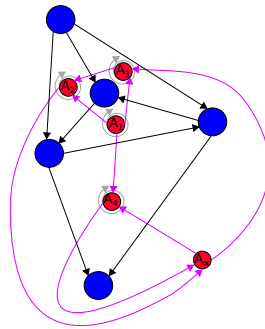


Abbildung 1.9: Orientierung in einem planaren Netz (blau) und die daraus abgeleitete duale Orientierung (rot).

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: $\operatorname{Bild}(\operatorname{grad}) = \ker(\operatorname{div}_D)$. 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: $\operatorname{Bild}(\operatorname{div}_D)$ 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:*

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

Beweis. Wegen dem diskreten de Rham-Komplex gilt:

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

Mit der Hilbertraum-Zerlegung

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

und der linearen Algebra-Identität

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

folgt unmittelbar die Helmholtz-Zerlegung:

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

\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 $I(e)$.

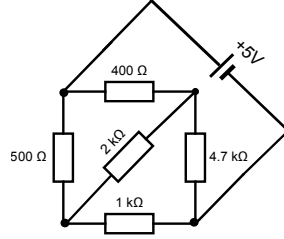


Abbildung 3.1: Beispiel eines elektrischen Netzwerks.

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:

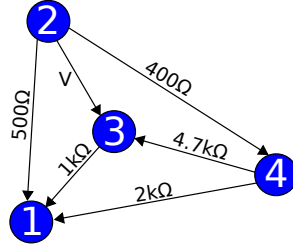


Abbildung 3.2: Beispiel: elektrischer Stromkreis als Graph.

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. Ab diesem Punkt sei, sofern nicht anders angegeben, jedes planares Netz stillschweigend als orientiertes planares Netz verstanden.

Kapitel 4

Die Maxwell-Gleichungen

4.1 Grundlagen

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 $b_0 \in \operatorname{Bild}(\operatorname{div}_D)$ 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 bekömmlichere Form gebracht werden.

4.2 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 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

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

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 (4.6) 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

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

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

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

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.

Als Nächstes 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 existiert 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 (4.9) um:

$$U(u'' + Lu) = 0$$

$$(Uu)'' + ULu = 0$$

$$(Uu)'' + ULU^\dagger \cdot Uu = 0,$$

wobei wir $v := Uu$ setzen und somit

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

Die allgemeine Lösung von (4.13) erhält man komponentenweise für alle $n \geq 1$:

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

wobei R_n das entsprechende Diagonalelement von R ist. Durch Umschreiben in Matrixform und Rücktransformation mit U^\dagger erhält man das Resultat (4.12). \square

Satz 4.4. *Sei G ein planares Netz, $r > 0$, a_0, e_0 Kantenfunktionen, $\mu > 0$ eine Flächenfunktion auf G und $\epsilon > 0$. Dann existiert eine Kurve $a \in C^2(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$, sodass für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt:*

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

und die Anfangsbedingungen

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

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

erfüllt sind.

Beweis. Es bleibt zu zeigen, dass die lineare Abbildung $L : \mathfrak{K} \rightarrow \mathfrak{K}$, definiert durch

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

positiv semidefinit ist:

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

\square

Wenn $\epsilon > 0$ keine Konstante, sondern eine Kantenfunktion ist, kann ebenfalls eine Lösung konstruiert werden. Hierzu transformieren wir ((4.14) in eine Differentialgleichung erster Ordnung:

$$(4.17) \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a(t) \\ u(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ u(t) \end{pmatrix}$$

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

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

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 (4.5) konstruiert werden.

Zum Abschluss geben wir eine weitere alternative Darstellung der Maxwell-Gleichungen, nämlich die **Hamiltonsche Formulierung der Maxwell-Theorie**. Diese orientiert sich an der Gesamtenergie aus dem Energieerhaltungssatz 4.1. Allerdings ergibt sich in der Potentialdarstellung der Maxwell-Gleichungen (Gleichung (4.7)) zunächst ein Problem: das Skalarpotential ϕ tritt nur linear über seine zeitliche Ableitung auf.

Die Lösung besteht darin, das Skalarpotential durch eine geeignete Eichtransformation vollständig zu eliminieren. Dies ist möglich, da es stets eine Transformation gibt, die jedes Paar (ϕ, a) von Potentialen in eines mit $\phi \equiv 0$ überführt. Um jedoch zu verhindern, dass das Skalarpotential erneut eingeführt werden kann, muss die Eichfreiheit zusätzlich eingeschränkt werden. Diese Einschränkung nennt man *Eichfixierung*. Im vorliegenden Fall spricht man von der **Hamilton-Eichung**.

Das verbleibende Vektorpotential a ist in dieser Fixierung immer noch nicht eindeutig bestimmt. Genau die Eichtransformationen, die nach Definition 4.4 zu einem in der Zeit konstanten ξ gehören, entsprechen dieser Eichung.

Definition 4.6 (Hamilton Eichung). *Sei a das Vektorpotential, $\xi \in \mathfrak{E}$ und $r > 0$ wie in Definition 4.3. Die **Hamilton Eichtransformation** γ_ξ ist definiert durch*

$$(4.19) \quad \gamma_\xi(a) = a + r \operatorname{grad}(\xi)$$

Im Rahmen der hamiltonschen Formulierung der Maxwell-Gleichungen bezeichnen wir mit dem Begriff Eichtransformation stets die Hamilton- Eichtransformation.

Theorem 4.7. *Sei G ein planares Netz, $r > 0$, $\epsilon > 0$ positive Kantenfunktionen, $a, \pi, j \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K})$ zeitabhängige Funktionen und $\mu > 0$ eine Flächenfunktion. Dann heißt*

$$(4.20) \quad H(\pi, a) = \frac{1}{2} \langle \frac{\pi}{\epsilon}, \pi \rangle_{\mathfrak{K}} + \frac{1}{2} \left\langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \frac{\operatorname{div}_D(r^{-1}a)}{\mu} \right\rangle_{\mathfrak{F}} - \langle a, j \rangle_{\mathfrak{K}}$$

*die **Hamiltonfunktion der Maxwell-Gleichungen**.*

Dann gilt: das Vektorpotential a ist eine Lösung von (4.7), wobei $\pi = -\epsilon e$ der **kanonisch konjugierte Impuls** ist (e das elektrische Feld nach Definition 4.3), genau dann, wenn

$$(4.21) \quad a'(t) = \frac{\partial H}{\partial \pi},$$

$$(4.22) \quad \pi'(t) = -\frac{\partial H}{\partial a}.$$

Beweis. Ein Einsetzen von (4.20) in die HamiltonGleichungen liefert:

Zunächst aus

$$a'(t) = \frac{\partial H}{\partial \pi}$$

resultiert unmittelbar

$$(4.23) \quad a'(t) = \frac{\pi}{\epsilon},$$

was gerade die Identität des kanonischen Impulses $\pi = \epsilon a'$ ist. Da nach Definition $e = -a'$ gilt, folgt daraus die gewohnte Beziehung $\pi = -\epsilon e$.

Analog ergibt das Einsetzen in

$$\pi'(t) = -\frac{\partial H}{\partial a},$$

die Gleichung

$$(4.24) \quad \pi'(t) = r^{-1} \operatorname{grad}_D \left(\frac{1}{\mu} \operatorname{div}_D (r^{-1} a(t)) \right) + j.$$

Kombiniert man diese Beziehung mit (4.23), so erhält man

$$(4.25) \quad r^{-1} \operatorname{grad}_D \left(\frac{1}{\mu} \operatorname{div}_D (r^{-1} a(t)) \right) = \epsilon a''(t) - j,$$

was exakt der Potentialgleichung (4.7) entspricht. \square

Wenn wir (4.20) mit dem Energieerhaltungssatz 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.

4.3 Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes

Anfang des 20. Jahrhunderts wurde zur Erklärung verschiedener Phänomene, die mit den damals etablierten Theorien nicht erklärbar waren, die Quantentheorie entwickelt.

Die klassischen Theorien beschreiben Kurven, Kräfte und Felder, während in der Quantenmechanik Zustandsvektoren, Operatoren und Distributionen die entsprechenden Rollen übernehmen. Die messbaren Größen bleiben identisch, nur die mathematischen Strukturen zu ihrer Beschreibung werden komplexer.

In diesem Abschnitt formulieren wir eine Quantentheorie der Maxwell-Gleichungen auf planaren Netzen. Ausgangspunkt ist die Hamiltonsche Formulierung der Theorie (Theorem 4.7).

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems ist, wie bekannt, ein Strahl in einem komplexen Hilbertraum \mathfrak{H} typischerweise repräsentiert durch einen Vektor $\psi \in \mathfrak{H}$ mit Norm $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle} = 1$.

Definition 4.8. Sei G ein planares Netz und $r > 0$ eine Kantenfunktion. Der **Hilbertraum der quantisierten Maxwell-Theorie** ist definiert als Raum der quadratintegrierbaren, komplexwertigen Funktionen auf $\mathfrak{K}(G)$:

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

bezüglich des Lebesgue-Maßes λ . Das Skalarprodukt ist gegeben durch

$$\langle \phi, \psi \rangle_{\mathfrak{H}} = \int_{\mathfrak{K}(G)} \overline{\phi(x)} \psi(x) d\lambda(x).$$

Als Nächstes soll die Schrödingergleichung für das elektromagnetische Feld formuliert werden. Eine Betrachtung der Hamiltonfunktion (4.20) zeigt, dass das Problem äquivalent zur Bewegung von $|E|$ Punktmassen mit Massen $\epsilon(k)$ für jedes $k \in E$ in einem geeigneten Potential ist.

Definition 4.9. Sei G ein planares Netz. Gegeben seien positive Kantenfunktionen $r, \epsilon : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$, eine positive Flächenfunktion $\mu : F \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ sowie eine stetige Kurve selbstadjungierter Operatoren $\hat{j} : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(\mathfrak{H}(G))$, welche die externe Stromdichte beschreibt.

Sei weiter der **Hermite-Polynomraum der Maxwell theorie** definiert als

$$(4.26) \quad \mathfrak{D} = \text{span}\left\{ (a \mapsto a^\alpha e^{-\frac{\|a\|^2}{2}}) : \alpha \in \mathbb{N}^E \right\} \subseteq \mathfrak{H}(G),$$

Der **(zeitabhängige) Hamiltonoperator** $\hat{H}(t) : \mathfrak{D} \rightarrow \mathfrak{H}(G)$ des elektromagnetischen Feldes ist definiert durch ¹

$$(4.27) \quad \hat{H}(t) = - \sum_{k \in E} \frac{1}{2\epsilon(k)} \frac{\partial^2}{\partial a_k^2} + \frac{1}{2} \left\langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \frac{\operatorname{div}_D(r^{-1}a)}{\mu} \right\rangle_{\mathfrak{F}} - \langle a, \hat{j}(t) \rangle_{\mathfrak{K}},$$

wobei $a = (a_k)_{k \in E}$ die Kantenvariablen (das Vektorpotential) bezeichnet.

Für $\psi_0 \in \mathfrak{D}$ heißt eine stetig differenzierbare Abbildung $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{D}$ eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung, wenn sie die Gleichung

$$(4.28) \quad i \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{H}(t) \psi(t),$$

für alle $t \in \mathbb{R}$ erfüllt und die Anfangsbedingung $\psi(0) = \psi_0$ gilt.

Meßgrößen werden in der Quantenmechanik durch selbstadjungierte Operatoren dargestellt. Feldgrößen wie die elektrische Feldstärke e , das magnetische Feld b , das Vektorpotential a oder der zugehörige konjugierte Impuls π werden entsprechend durch operatorwertige Eck-, Kanten- und Flächenfunktionen beschrieben. Diese Operatoren sind in der Regel nur auf einem Teilraum eines (unendlichdimensionalen) komplexen Hilbertraums definiert und unbeschränkt, also nicht stetig.

Definition 4.10. Sei G ein planares Netz und $r, \epsilon : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ positive Kantenfunktionen, sowie $\mu : F \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Flächenfunktion.

Für jedes $k \in E$ bezeichnen wir mit

$$(4.29) \quad \hat{a}_k : \psi \mapsto (a \mapsto a_k \psi(a)),$$

$$(4.30) \quad \hat{\pi}_k : \psi \mapsto (a \mapsto -i \frac{\partial \psi}{\partial a_k}(a))$$

den Vektorpotentialoperator $\hat{a} = (\hat{a}_k)_{k \in E}$ und den konjugierten Impulsoperator $\hat{\pi} = (\hat{\pi}_k)_{k \in E}$.

Die **elektrischen und magnetischen Feldoperatoren** sind dann gegeben durch

$$(4.31) \quad \hat{e}_k = -\frac{\hat{\pi}_k}{\epsilon(k)},$$

$$(4.32) \quad \hat{b} = \operatorname{div}_D(r^{-1}\hat{a}).$$

¹Der Definitionsbereich $D(\hat{H}) = \mathfrak{D}$ ist eine dichte Teilmenge von $\mathfrak{H}(G)$, invariant unter den Operatoren $\partial_{a_k}^2$ und Multiplikation mit polynomiellen Kantenfunktionen.

Bemerkung 4.11. Der Hermite- Polynomraum \mathfrak{D} ist dicht in \mathfrak{H} und invariant unter \hat{a}, \hat{e} und \hat{H} .

Hierbei bezeichnet a_k den Wert der Kantenfunktion a an der Kante $k \in E$, und $\frac{\partial}{\partial a_k}$ die Ableitung nach demselben Argument. Die Definitionsbereiche sind für jedes $k \in E$ gegeben durch

$$(4.33) \quad D(\hat{\pi}_k) = H^1(\mathfrak{K}(G), \mathbb{C}; \lambda), \quad D(\hat{a}_k) = \{\phi \in \mathfrak{H} : a_k \phi \in \mathfrak{H}\}.$$

Für jedes Kantenpaar $e, e' \in E$ gilt die sogenannte **Vertauschungsrelation**:

$$(4.34) \quad [\hat{a}(e), \hat{\pi}(e')] = i \delta_{e,e'}.$$

Dabei werden die Definitionsbereiche der Operatoren zunächst nicht berücksichtigt; insbesondere wurde nicht überprüft, ob die entsprechenden Kompositionen dicht definiert sind.

Die möglichen Ergebnisse einer Messung einer mit einem selbstadjungierten Operator $\hat{\Omega}$ verknüpften physikalischen Größe sind die Spektralwerte von $\hat{\Omega}$. Wäre $\hat{\Omega}$ ein Operator auf einem endlichdimensionalen Hilbertraum, so entsprächen diese Spektralwerte genau den Eigenwerten, und der Betrag des größten Eigenwerts wäre identisch mit der Operatornorm. In der Quantentheorie muss ein Operator jedoch alle möglichen Werte der Größe, die er beschreibt, als Spektralwerte besitzen. Da insbesondere Größen wie das elektrische Feld unbeschränkt sein können, müssen auch die zugehörigen Operatoren unbeschränkt sein. Dies bedingt, dass der zugrunde liegende Hilbertraum notwendig unendlichdimensional ist und viele der in der Theorie auftretenden Operatoren unstetig sind.

Interpretation

- Jedes Element $\psi \in \mathfrak{H}$ beschreibt einen möglichen Zustand des quantisierten elektromagnetischen Feldes.
- Jeder klassischen Observablen Ω ist ein selbstadjungierter Operator $\hat{\Omega}$ auf \mathfrak{H} zugeordnet.
- Messergebnisse entsprechen zufälligen Spektralwerten von $\hat{\Omega}$; der Erwartungswert eines solchen Messvorgangs ist gegeben durch

$$\frac{\langle \psi, \hat{\Omega} \psi \rangle_{\mathfrak{H}}}{\langle \psi, \psi \rangle_{\mathfrak{H}}}.$$

Widmen wir uns dem Korrespondenzprinzip zwischen klassischer und quantenmechanischer Theorie. Wir zeigen, dass die Erwartungswerte der Feldoperatoren (4.31)–(4.32) die diskreten Maxwell-Gleichungen (4.2) erfüllen.

Theorem 4.12 (Ehrenfest-Theorem). *Sei G ein planares Netz, $r, \epsilon : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ positive Kantenfunktionen, $\mu : F \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Flächenfunktion und $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{H}(G)$ eine Lösung der Schrödingergleichung (5.32).*

Dann gelten die Erwartungswertgleichungen:

$$(4.35) \quad \epsilon \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = -r^{-1} \text{grad}_D \left(\frac{\langle \psi, \hat{b}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}}{\mu} \right) - \langle \psi, \hat{j}\psi \rangle_{\mathfrak{H}},$$

$$(4.36) \quad \langle \psi, \hat{b}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = -\text{div}_D \left(r^{-1} \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \right).$$

wobei die Feldoperatoren durch (4.31)–(4.32) gegeben sind.

Beweisskizze. Wir starten mit der linken Seite von (4.35), wenden die Produktregel der Differentiation an und formen um:

$$\begin{aligned} \epsilon \langle \psi, \hat{e}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} &= -\langle \psi, \hat{\pi}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} \\ &= -(\langle \psi', \hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, \hat{\pi}\psi' \rangle_{\mathfrak{H}}) \\ &= \langle i\hat{H}\psi, \hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, \hat{\pi}i\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= i(\langle \psi, \hat{\pi}\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} - \langle \hat{H}\psi, \hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}) \\ &= i(\langle \psi, \hat{\pi}\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} - \langle \psi, \hat{H}\hat{\pi}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}) \\ &= -r^{-1} \text{grad}_D \left(\frac{\langle \psi, \text{div}_D(r^{-1}\hat{a})\psi \rangle_{\mathfrak{H}}}{\mu} \right) - \langle \psi, \hat{j}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= -r^{-1} \text{grad}_D \left(\frac{\langle \psi, \hat{b}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}}{\mu} \right) - \langle \psi, \hat{j}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} (4.32). \end{aligned}$$

Nun zeigen wir (4.36) indem wir ausgehend von der Definition (4.32) 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:

$$\begin{aligned} \langle \psi, \hat{a}\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} &= (\langle \psi', \hat{a}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} + \langle \psi, \hat{a}\psi' \rangle_{\mathfrak{H}}) \\ &= i(\langle \psi, \hat{H}\hat{a}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} - \langle \psi, \hat{a}\hat{H}\psi \rangle_{\mathfrak{H}}) \\ &= i\langle \psi, [\hat{H}, \hat{a}]\psi \rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= i\left\langle \psi, \left[\frac{1}{2\epsilon} \hat{\pi}^2, \hat{a} \right] \psi \right\rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= \left\langle \psi, \frac{\hat{\pi}}{\epsilon} \psi \right\rangle_{\mathfrak{H}} \\ &= -\langle \psi, \hat{e}\psi \rangle_{\mathfrak{H}} (4.31). \end{aligned}$$

Am Ende haben wir die kanonischen Vertauschungsrelationen und die Rechenregeln des Kommutators verwendet. Wir setzen den erhaltenen Ausdruck nun in (4.37) ein und erhalten das gesuchte Resultat (4.36). \square

Die Gleichungen (4.35)–(4.36) stellen somit eine Quantisierung der diskreten Maxwell-Gleichungen (4.1) dar.

Bislang fehlt noch die Bestätigung, dass die Schrödingergleichung (5.32) Lösungen besitzt und der Hamiltonoperator \hat{H} selbstadjungiert ist im Sinne der Theorie unbeschränkter linearer Operatoren. Dies wollen wir für den vereinfachten Fall $\epsilon \equiv 1$, $\mu \equiv 1$ und zeitunabhängigem $\hat{j} \equiv 0$ nachholen.

Theorem 4.13. *Sei G ein planares Netz, $\epsilon \equiv 1$, $\mu \equiv 1$ und $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion. Dann existiert eine unitäre Abbildung $\hat{U} : \mathfrak{H}(G) \rightarrow \mathfrak{H}(G)$ und Frequenzen $(\omega_j)_{j=1}^{|F|-1} \subset \mathbb{R}_{>0}$, sodass für den Hamiltonoperator \hat{H} aus (4.27) mit $\hat{j} \equiv 0$ gilt:*

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

Dabei sind die einmodigen Hamiltonoperatoren durch

$$(4.39) \quad \hat{h}_j = \begin{cases} -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial a_j^2} & \text{falls } j \leq |V| - 1, \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial a_j^2} + \frac{1}{2} \omega_j^2 a_j^2 & \text{sonst,} \end{cases}$$

definiert. Insbesondere kommutieren alle Moden:

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

Beweis. Der Hamiltonoperator lässt sich zerlegen in:

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

wobei der kinetische Teil

$$\hat{T} = -\frac{1}{2} \sum_{k \in E} \frac{\partial^2}{\partial a_k^2}$$

und der Potentialteil durch

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \left\langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \operatorname{div}_D(r^{-1}a) \right\rangle_{\mathfrak{F}}$$

gegeben ist (4.27). Beachte, dass \mathfrak{D} invariant unter \hat{T} und \hat{V} ist.

Wir formen \hat{V} um:

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

wobei $Q = -r^{-1} \text{grad}_D \text{div}_D r^{-1} : \mathfrak{K} \rightarrow \mathfrak{K}$.

Q ist positiv semidefinit und symmetrisch. Nach der Helmholtz-Zerlegung (2.10) hat $\ker Q = \ker \text{div}_D r^{-1} = \text{Bild}(r \text{grad})$ die Dimension $|V| - 1$. Das orthogonale Komplement ist dementsprechend $|F| - 1$ -dimensional.²

Nach dem Spektralsatz für kompakte, selbstadjungierte Operatoren auf endlichdimensionalen Räumen existiert eine orthogonale Matrix $U \in \mathbb{R}^{|E| \times |E|}$ und eine Diagonalmatrix $R = \text{diag}(0, \dots, 0, \omega_1^2, \dots, \omega_{|F|-1}^2)$ mit:

$$Q = U^T R U.$$

Einsetzen in \hat{V} ergibt:

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

Wir definieren die Frequenzen durch $\omega_j^2 = R_{|V|-1+j}$ für $1 \leq j \leq |F| - 1$ (4.39) und konstruieren den unitären Operator $\hat{U} : \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}$ durch

$$(\hat{U}\phi)(a) = \phi(U(a)), \quad \phi \in \mathfrak{H}, \quad a \in \mathfrak{K}.$$

Da U orthogonal ist, folgt durch den Transformationssatz für Integrale die Unitarität und die Adjungierte ist gegeben durch:

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

Für den kinetischen Energie Operator gilt durch Kettenregel:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2}{\partial a_k^2} \phi(U(a)) &= \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial a_k} \frac{\partial}{\partial a_k} \phi(U(a)) = \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial a_k} \left(\sum_{j=1}^N U_{j,k} \frac{\partial}{\partial a_j} \phi \right) (U(a)) \\ &= \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N U_{i,k} U_{j,k} \frac{\partial^2}{\partial a_j' \partial a_i'} \phi \right) (U(a)) \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial a_j' \partial a_i'} \right) \phi(U(a)) \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial a_i'^2} \right) \phi(U(a)) \end{aligned}$$

²Der eulersche Polyedersatz $|V| + |F| - |E| = 2$ folgt hieraus für zusammenhängende Netze.

und somit

$$\hat{U}^\dagger \Delta \hat{U} = \Delta',$$

wobei Δ' der Laplace Operator in den transformierten Koordinaten $a' = U(a)$ ist.

Für den Potentialteil erhalten wir analog:

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger \hat{V} \hat{U} \phi(a') &= \hat{U}^\dagger \left(\frac{1}{2} \left\langle a, Q(a) \right\rangle_{\mathfrak{R}} \right) \phi(U(a)) \\ &= \frac{1}{2} \left\langle U^T(a'), QU^T(a') \right\rangle_{\mathfrak{R}} \phi(a') \\ &= \frac{1}{2} \left\langle a', UQU^T a' \right\rangle_{\mathfrak{R}} \phi(a') \\ &= \frac{1}{2} \left\langle a', Ra' \right\rangle_{\mathfrak{R}} \phi(a') \\ &= \sum_{j=|V|}^{|E|} \frac{1}{2} \omega_{j-|V|+1}^2 a_j'^2 \phi(a'). \end{aligned}$$

Zusammen ergibt sich somit (4.38). \square

Wir haben gezeigt, dass sich der Hamiltonoperator (4.38) durch die unitäre Transformation \hat{U} in eine Summe unabhängiger harmonischer Oszillatoren zerlegen lässt:

$$\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = -\frac{1}{2} \Delta' + \sum_{j=1}^{|F|-1} \frac{1}{2} \omega_j^2 a_{j+|V|-1}^2.$$

Als nächstes werden wir die Spektraleigenschaften dieser Oszillatoren und ihre physikalische Interpretation als elektromagnetische Wellen erarbeiten.

Der elektrische Feldoperator \hat{e} transformiert unter \hat{U} analog zum Vektorpotential Operator \hat{a} :

$$(4.40) \quad \hat{a} \mapsto \hat{a}' = \hat{U} \hat{a} \hat{U}^\dagger = U \hat{a}$$

$$(4.41) \quad \hat{e} \mapsto \hat{e}' = \hat{U} \hat{e} \hat{U}^\dagger = U \hat{e}$$

Die orthogonale Matrix U zerlegt den Konfigurationsraum $\mathfrak{R}(G)$ der Helmholtzzerlegung entsprechend in einen $(|V|-1)$ -dimensionalen Teilraum $A = \ker Q = \ker = \text{Bild}(r\text{grad})$ (Eichfreiheitsgrade) und sein orthogonales Komplement $B = A^\perp$ der Dimension $(|F|-1)$. Auf A verschwindet das Potential $\hat{V}|_A = 0$, während auf B die Dynamik die eines harmonischen Oszillators mit Frequenzen $\{\omega_j\}_{j=1}^{|F|-1}$ ist.

Jeder der $(|F|-1)$ Oszillatoren besitzt ein diskretes Spektrum $E_n = \hbar \omega_j (n +$

$1/2$), $n \in \mathbb{N}_0$. Diese Normalmoden korrespondieren exakt mit den im Netz fortpflanzenden elektromagnetischen Wirbelfeldern, da B nach der Helmholtz-Zerlegung (2.10) präzise der Raum der divergenzfreien Felder ist.

Die Komponenten des Raumes A , also die entsprechenden Projektionen von \hat{a} und der konjugierten Impulse $\hat{\pi}$ und damit auch des elektrischen Feldoperators \hat{e} , weisen im Sinne der Quantentheorie eine besondere Struktur auf. Die A -Komponenten der Operatoren \hat{a} sind keine Messgrößen, sondern reine Eichvariablen, während \hat{e} eine beobachtbare Größe ist. Das Feld \hat{e} müsste sich daher prinzipiell beliebig genau bestimmen lassen, ohne dabei Information über eine andere Messgröße zu verlieren.

Entsprechend gilt, dass es analog zur Quantenmechanik, wo es keinen Zustandsvektor mit exakt bestimmtem Impuls gibt in unserer Quantenfeldtheorie keinen Zustandsvektor gibt, der einem exakt ladungsfreien Raum im Sinne von

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

entspricht. Die zugehörigen Zustände wären uneigentliche Elemente des Hilbertraums \mathfrak{H} . Da wir jedoch Zustände mit ladungsfreiem Raum beschreiben wollen und Bewegungen eines Wellenpakets entlang von Raumrichtungen aus dem A -Raum zwar Energie tragen, aber nicht direkt messbar sind, führen wir zu diesem Zweck einen reduzierten Hilbertraum ein.

Definition 4.14. *Sei G ein planares Netz und $r > 0$ eine Kantenfunktion. Der **Hilbertraum der ladungsfreien Maxwell-Theorie** ist*

$$\mathfrak{H}_{\text{frei}} = L^2(\mathbb{R}^{|F|-1}, \mathbb{C}; \lambda),$$

wobei $\mathbb{R}^{|F|-1}$ mit $B = \operatorname{Bild}(\frac{1}{r} \operatorname{grad}_D)$ über die orthonormale Basis $\{b_k\}_{k=1}^{|F|-1}$:

$$b_k = U^T e_{k+|V|-1}, \quad \{e_k\}_{k=1}^{|E|} \text{ Standardbasis von } \mathfrak{K}.$$

identifiziert wird.

Das Skalarprodukt ist wie gewohnt

$$\langle \phi, \psi \rangle_{\mathfrak{H}_{\text{frei}}} = \int_{\mathbb{R}^{|F|-1}} \overline{\phi(a)} \psi(a) d\lambda.$$

Der **freie Hermite-Polynomraum** ist

$$(4.43) \quad \mathfrak{D}_{\text{frei}} = \operatorname{span}\{a \mapsto a^\alpha e^{-\frac{\|a\|^2}{2}} : \alpha \in \mathbb{N}^{|F|-1}\} \subseteq \mathfrak{H}_{\text{frei}},$$

Der **freie Hamiltonoperator** ist die Summe der eindimensionalen harmonischen Oszillatoren aus 4.39

$$(4.44) \quad \hat{H}_{\text{frei}} = \sum_{j=1}^{|F|-1} \hat{h}_j, \quad \hat{h}_j = \frac{1}{2}(\hat{\pi}_j^2 + \omega_j^2 \hat{a}_j^2),$$

mit $\hat{\pi}_j = -i\partial_{a_j}$.

Im Folgenden lösen wir nach Dirac'scher Tradition den quantenmechanischen harmonischen Oszillator. Nach Theorem 4.13 reduziert sich der Hamiltonoperator des freien elektromagnetischen Feldes auf unabhängige harmonische Oszillatoren. Konkret existiert für jeden Eigenwert ω_j der Matrix Q . Von nun an schreiben wir vereinfacht ω statt ω_j .

Definition 4.15 (Vernichtungsoperator). Sei $\Omega = \text{span}\{a \mapsto a^n e^{-\frac{a^2}{2}} : n \in \mathbb{N}_0\} \subseteq L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}; \lambda)$ der Hermite-Polynomraum auf \mathbb{R} . Der **Vernichtungsoperator** der Frequenz $\omega > 0$ ist der lineare Operator $\hat{a}_\omega : \Omega \rightarrow \Omega$ definiert durch

$$(4.45) \quad \hat{a}_\omega = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(\hat{a} + \frac{i}{\omega} \hat{\pi} \right) = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(a + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dq} \right).$$

Halten wir zunächst einige wichtige Eigenschaften des Vernichtungsoperators fest.

Satz 4.5. Der Operator \hat{a}_ω aus Definition 4.15 ist ein dicht definierter linearer Operator auf $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}; \lambda)$, und der Kern des Operators ist eindimensional.

Die Adjungierte des Operators ist der **Erzeugungsoperator**

$$(4.46) \quad \hat{a}_\omega^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(a - \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} \right)$$

und ist ebenfalls auf Ω definiert und es gilt:

$$(4.47) \quad [\hat{a}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] = 1$$

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

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

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

Der Beweis für den laut 4.46 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.

$$f' = -\omega a f$$

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. Diese Lösung ist gegeben durch

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

Zeigen wir nun, daß (4.46) tatsächlich der zu \hat{a}_ω adjungierte Operator ist. Sei $\phi, \psi \in \Omega$, dann verwenden wir partielle Integration um zu zeigen, dass (4.46) auf Ω der Definition der Adjungierten entspricht:

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

Abschließend berechnen wir den Kommutator

$$\begin{aligned} \hat{a}_\omega \hat{a}_\omega^\dagger &= \frac{\omega}{2} \left(a + \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} \right) \left(a - \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} \right) = \frac{\omega}{2} \left(a^2 - a \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} + \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} a - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{da^2} \right) \\ (4.48) \quad \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega &= \frac{\omega}{2} \left(a - \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} \right) \left(a + \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} \right) = \frac{\omega}{2} \left(a^2 + a \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} - \frac{1}{\omega} \frac{d}{da} a - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{da^2} \right) \\ [\hat{a}_\omega, \hat{a}_\omega^\dagger] &= \frac{d}{da} a - a \frac{d}{da} = 1 \end{aligned}$$

□

Wir untersuchen als Nächstes den **Teilchenzahloperator**

$$(4.49) \quad \hat{N}_\omega = \hat{a}_\omega^\dagger \hat{a}_\omega.$$

Hilfssatz 4.16. *Der Teilchenzahloperator ist ein dicht definierter linearer Operator und erfüllt die Vertauschungsrelationen*

$$(4.50) \quad [\hat{N}_\omega, \hat{a}_\omega] = -\hat{a}_\omega$$

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

Es gilt die Identität:

$$(4.52) \quad \hat{h}_\omega = \omega \left(\hat{N}_\omega + \frac{1}{2} \right)$$

Beweis. Da \hat{a}_ω und \hat{a}_ω^\dagger nach Satz 4.5 lineare Abbildungen auf Ω sind, ist \hat{N}_ω wohldefiniert und da Ω dicht in $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}; \lambda)$ liegt auch dicht definiert.

Kommen wir nun zu den Vertauschungsrelationen (4.50) und (4.51)

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

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

Abschließend gilt nach (4.48)

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

□

Wir interpretieren den Teilchenzahloperator \hat{N}_ω als die Anzahl der Teilchen oder Photonen der Mode ω des elektromagnetischen Feldes. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erzeugen respektive vernichten formal 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 Energieeigenfunktionen.

Um diese Interpretation zu untermauern untersuchen wir den Teilchenzahloperator weiter.

Satz 4.6. *Das Spektrum des Teilchenzahloperator \hat{N}_ω ist die Menge der natürlichen Zahlen mit Null.*

$$(4.53) \quad \sigma(\hat{N}_\omega) = \mathbb{N}^3$$

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

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

³0 ∈ ℕ.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Nach Theorem 4.13 haben wir hiermit gezeigt, dass der Hamiltonoperator des freien elektromagnetischen Feldes ein reines Punktspektrum hat

$$(4.54) \quad \sigma(\hat{H}_{\text{frei}}) = \left\{ \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) : \omega^2 \in \sigma(-r^{-1} \text{grad}_D \text{div}_D r^{-1}), n \in \mathbb{N}, \omega \neq 0 \right\}$$

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

Wir erkennen, dass das freie elektromagnetische Feld seine Energie nur in ganzzahligen Vielfachen einer bestimmten Frequenz aufnehmen oder abgeben kann. Diese diskreten Anregungen einer Feldmode deuten wir als Teilchen. Der Begriff “Teilchen” ist hier jedoch nur in einem engen Sinn zu verstehen: Es handelt sich nicht um punktförmige Objekte, die sich von a nach b bewegen und einen wohldefinierten Ort besitzen, sondern lediglich um Zustände, die die gleiche Diskretheit aufweisen, wie wir sie von Teilchen im klassischen Sinn kennen.

Kapitel 5

Die Klein-Gordon-Gleichung

5.1 Grundlagen

Es verbleibt die Beschreibung von Strom und Ladung, den Quellen des elektromagnetischen Feldes.

In der klassischen Theorie folgt für beide Größen eine Kontinuitätsgleichung direkt aus den Maxwell-Gleichungen.

Es verbleibt jedoch noch Gleichungen zu formulieren, welche die Dynamik von Strom und Ladung selbst in Abhängigkeit vom elektromagnetischen Feldes beschreiben.

Der einfachste Ansatz wäre das Ohmsche Gesetz $j = \sigma e$.

Wir verwenden jedoch eine diskrete Version der Klein-Gordon-Gleichung, um näher an die Quantenelektrodynamik zu kommen.

Zur Formulierung führen wir zunächst den Eichgradienten ein.

Definition 5.1. Sei G ein **planares Netz**, $a \in \mathfrak{K}(G)$ eine Kantenfunktion und $\Phi \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ eine komplexe Eckfunktion.

Der **Eichgradient** ist für jede Kante $e \in E$ definiert durch:

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

Sei weiter $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion.

Dann heißt

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

der a -gewichtete **Eich-Laplace-Operator** an der Ecke $v \in V$.

Bemerkung 5.2. Sei G ein **planares Netz**, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ und $a \in \mathfrak{K}(G)$ Kantenfunktionen. Dann hat der Eichgradient $\text{grad}^{\frac{a}{r}}$ genau dann einen nichttrivialen Kern, wenn

$$(5.3) \quad \frac{a}{r} \in \text{Bild}(\text{grad}).$$

Hilfssatz 5.3. Sei G ein **planares Netz**, $a \in \mathfrak{K}(G)$ eine reelle Kantenfunktion und $\xi \in \mathfrak{E}(G)$ eine reelle Eckfunktion.

Dann gilt für jede komplexe Eckfunktion $\Phi \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ und jede Kante $e \in E$:

$$(5.4) \quad \text{grad}^{a+\text{grad}(\xi)}(e^{i\xi}\Phi)(e) = e^{i\xi(p(e))} \text{grad}^a(\Phi)(e).$$

Beweis. Sei $e \in E$.

Dann gilt:

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

□

Definition 5.4 (Klein-Gordon-Gleichung). Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$, $\phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}(G))$, sowie $\Phi_0, v_0 \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ Anfangsdaten.

Dann heißt $\Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G))$ eine **Lösung der Klein-Gordon-Gleichung**, wenn für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt:

$$(5.5) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi(t) \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi(t) \right) \Phi(t) + \Delta_r^{a(t)} \Phi(t) + m^2 \Phi(t) = 0.$$

Die Anfangsbedingungen lauten:

$$(5.6) \quad \Phi(0) = \Phi_0,$$

$$(5.7) \quad \Phi'(0) = v_0.$$

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

Die Klein-Gordon-Gleichung ist so konstruiert, dass jede Lösung durch Multiplikation mit einer lokalen Phase *erneut* eine Lösung einer Klein-Gordon-Gleichung bleibt.

Diese Transformation beinhaltet die Eichtransformation der Maxwell-Theorie, geht jedoch über diese hinaus. Die erweiterte Eichtransformation ermöglicht die Kopplung des Klein-Gordon-Feldes an die Felder der Maxwell-Theorie.

Definition 5.5 (Erweiterte Eichtransformation). *Seien ϕ , r und a wie in Definition 5.4 gegeben, und sei $\xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}(G))$.*

Dann heißt die Abbildung

$$(5.8) \quad \gamma_\xi \begin{pmatrix} \phi \\ a \\ \Phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi - \xi' \\ a + r \operatorname{grad}(\xi) \\ e^{i\xi} \Phi \end{pmatrix}$$

*die zu ξ gehörende **erweiterte Eichtransformation**.*

Satz 5.1. *Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$, $\phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}(G))$, $\xi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}(G))$, und sei $\Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_\mathbb{C}(G))$ eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung (5.5):*

$$(5.9) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi(t) \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi(t) \right) \Phi(t) + \Delta_r^{a(t)} \Phi(t) + m^2 \Phi(t) = 0.$$

Dann ist auch das durch die erweiterte Eichtransformation (5.8)

$$(5.10) \quad \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{a} \\ \tilde{\Phi} \end{pmatrix} = \gamma_\xi \begin{pmatrix} \phi \\ a \\ \Phi \end{pmatrix}$$

definierte Tripel ebenfalls eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung:

$$(5.11) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\tilde{\phi}(t) \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\tilde{\phi}(t) \right) \tilde{\Phi}(t) + \Delta_r^{\tilde{a}(t)} \tilde{\Phi}(t) + m^2 \tilde{\Phi}(t) = 0.$$

Beweis. Sei $u \in \mathfrak{E}_\mathbb{C}(G)$ eine komplexe Eckfunktion. Dann gilt:

$$\langle u, e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}} = \langle r^{-1} \operatorname{grad} \frac{a}{r} (e^{-i\xi} u), r^{-1} \operatorname{grad} \frac{a}{r} (\Phi) \rangle_{\mathfrak{K}}.$$

Wir erweitern nun den Ausdruck im Skalarprodukt mit $e^{i\xi(p(e))}$ und wenden

Hilfssatz 5.3 an:

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

Damit folgt:

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

Da u beliebig war, gilt somit

$$(5.12) \quad e^{i\xi} \Delta_r^a (\Phi) = \Delta_r^{a+r \operatorname{grad}(\xi)} (e^{i\xi} \Phi).$$

Außerdem zeigt eine direkte Rechnung, dass

$$(5.13) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} - i(\phi - \xi') \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i(\phi - \xi') \right) \tilde{\Phi} = e^{i\xi} \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\phi \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\phi \right) \Phi,$$

wobei $\tilde{\Phi} = e^{i\xi} \Phi$.

Setzt man (5.12) und (5.13) in die Gleichung (5.9) ein, so erhält man unmittelbar die transformierte Gleichung (5.11). Damit ist die Aussage gezeigt. \square

Wir können uns somit, wie bereits in der Maxwell-Theorie getan, ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf den Fall $\phi \equiv 0$ beschränken und werden dies von nun an auch so tun, um eine hamiltonsche Formulierung der Theorie zu erhalten.

Betrachten wir nun einige grundlegende Eigenschaften der Gleichung, insbesondere Erhaltungsgrößen und die physikalische Interpretation der Lösungen.

Satz 5.2 (Kontinuitätsgleichung). *Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$, und sei $\Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G))$ eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung (5.5) mit Anfangsbedingung $\Phi(0) = \Phi_0 \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$.*

Dann erfüllen die Größen Ladungsdichte $q \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}(G))$ und Stromdichte $j \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$ die Kontinuitätsgleichung

$$(5.14) \quad q'(t) + \operatorname{div}(j(t)) = 0.$$

Hierbei sind q und j durch

$$(5.15) \quad q(t) = \Im(\overline{\Phi(t)} \Phi'(t)),$$

$$(5.16) \quad \begin{aligned} j(e, t) &= \operatorname{div}^{-1} \Im(\overline{\Phi(t)} \Delta_r^a(\Phi(t)))(e) \\ &= \Im\left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e), t)} \Phi(q(e), t) e^{i a(e)/r(e)}\right) \end{aligned}$$

definiert.

Beweis. Wir beginnen mit der linken Seite der Kontinuitätsgleichung (5.14).

Mit der Definition (5.15) gilt

$$\begin{aligned} q'(t) &= (\Im(\overline{\Phi} \Phi'))' = \left(\frac{\overline{\Phi} \Phi' - \Phi \overline{\Phi}'}{2i} \right)' \\ &= \frac{1}{2i} (\overline{\Phi}' \Phi' + \overline{\Phi} \Phi'' - \Phi' \overline{\Phi}' - \Phi \overline{\Phi}'') = \frac{1}{2i} (\overline{\Phi} \Phi'' - \Phi \overline{\Phi}''). \end{aligned}$$

Mit der Klein-Gordon-Gleichung

$$\Phi'' = -\Delta_r^a(\Phi) - m^2 \Phi$$

erhält man

$$q' = \frac{1}{2i} (\Phi \overline{\Delta_r^a(\Phi)} - \overline{\Phi} \Delta_r^a(\Phi)) = -\Im(\overline{\Phi} \Delta_r^a(\Phi)).$$

Die Ableitung q' liegt im Bild der Divergenz. Nach dem de'Rham Komplex Theorem liegt eine Eckfunktion genau dann im Bild der Divergenz falls die Summe über alle Ecken gleich Null ist. Dies ist leicht zu zeigen

$$\sum_{v \in V} \Im(\overline{\Phi} \Delta_r^a(\Phi)) = \Im(\langle \Phi, \Delta_r^a(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}}) = 0,$$

denn Δ_r^a ist selbstadjungiert und der Erwartungswert daher reell.

Es folgt, dass eine Kantenfunktion $j \in \mathfrak{K}(G)$ existiert mit

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

Wir bestimmen diese explizit. Sei $x \in V$ und definiere $\psi \in \mathfrak{E}(G)$ durch

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

Dann gilt für die Divergenz des Stromes:

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

Damit ergibt sich der gesuchte Ausdruck

$$q'(t) = -\text{div}(j(t)), \quad j(e, t) = \Im \left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e), t)} \Phi(q(e), t) e^{ia(e)/r(e)} \right),$$

und somit die Kontinuitätsgleichung (5.14). \square

Die Ladungsdichte q und der Strom j sind die **Messgrößen** der Klein-Gordon-Theorie, während Φ , analog zu den Potentialen der Maxwell-Theorie, keine direkte beobachtbare Größe ist.

Wir vergewissern uns zunächst, dass die in (5.15) und (5.16) definierten Größen q und j tatsächlich unverändert unter der erweiterten Eichtransformation (Definition 5.5) bleiben.¹

Folgerung 5.6. *Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$, $\Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G))$ und $\xi \in \mathfrak{E}(G)$.*

Dann bleiben die in (5.15) und (5.16) definierten Größen

$$q = \Im(\overline{\Phi} \Phi'), \quad j(e) = \Im \left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e))} \Phi(q(e)) e^{ia(e)/r(e)} \right)$$

nach Anwendung der Transformation γ_{ξ} aus Definition 5.5 unverändert, d. h.

$$\tilde{q} = q, \quad \tilde{j} = j.$$

Beweis. Da ξ zeitlich konstant ist, gilt für die transformierte Funktion $\tilde{\Phi} = e^{i\xi} \Phi$:

$$\tilde{\Phi}' = e^{i\xi} \Phi',$$

¹Da wir hier $\phi \equiv 0$ annehmen, ist ξ zeitlich konstant.

woraus unmittelbar folgt, dass

$$\tilde{q} = \Im(\tilde{\Phi} \tilde{\Phi}') = \Im(e^{i\xi} \overline{\Phi} e^{i\xi} \Phi') = \Im(\overline{\Phi} \Phi') = q.$$

Um zu zeigen, dass auch j unverändert bleibt, genügt es zu prüfen, dass der Ausdruck $\Im(\overline{\Phi} \Delta_r^a(\Phi))$ invariant ist.

Im Beweis von Satz 5.1 (unter Verwendung von Hilfssatz 5.3) wurde gezeigt, dass

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

Nimmt man hier von den Imaginärteil nach Multiplikation mit $\overline{e^{i\xi} \Phi}$, erhält man

$$\Im(\overline{e^{i\xi} \Phi} \Delta_r^{a+r \operatorname{grad}(\xi)}(e^{i\xi} \Phi)) = \Im(\overline{\Phi} \Delta_r^a(\Phi)).$$

Damit folgt, dass $\tilde{j} = j$ gilt und somit beide Größen Eichinvarianz besitzen. \square

Um das Thema Ladung und Strom abzuschließen, betrachten wir nun eine spezielle Transformation, die sogenannte **Ladungskonjugation**, welche die Vorzeichen von Ladung q und Strom j invertiert.

Satz 5.3 (Ladungskonjugation). *Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion und $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$ wie in Definition 5.4.*

Ist $\Phi \in C^2(\mathbb{R}, \mathfrak{C}_{\mathbb{C}}(G))$ eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung

$$(5.17) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi + \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0,$$

so ist auch die komplex konjugierte Funktion $\overline{\Phi}$ eine Lösung der komplex-konjugierten Klein-Gordon-Gleichung

$$(5.18) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \overline{\Phi} + \Delta_r^{-a} \overline{\Phi} + m^2 \overline{\Phi} = 0.$$

Für die in (5.15) und (5.16) definierten Größen gilt:

$$(5.19) \quad q_{\Phi} = -q_{\overline{\Phi}},$$

$$(5.20) \quad j_{\Phi}^a = -j_{\overline{\Phi}}^{-a}.$$

Beweis. Um zu zeigen, dass $\overline{\Phi}$ (5.18) erfüllt, wenden wir die komplexe Konjugation auf die Gleichung (5.17) an.

Da die partiellen Ableitungen linear und reell sind, gilt

$$\overline{\Phi''} = \overline{\Phi''}.$$

Zudem folgt aus der Definition des Eich-Laplace-Operators

$$\overline{\Delta_r^a(\Phi)} = \Delta_r^{-a}(\overline{\Phi}),$$

da die Komplexkonjugation das Vorzeichen der Phasen $e^{ia(e)}$ umkehrt. Eingesetzt in (5.17) ergibt sich sofort Gleichung (5.18).

Für die Inversion von Ladung und Strom genügen einfache Umformungen. Für die in (5.15) definierte Ladung gilt:

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

Für den Strom (5.16) beachten wir, dass Konjugation und Phaseninversion $a \mapsto -a$ bewirkt:

$$\begin{aligned} j_{\overline{\Phi}}^{-a}(e) &= +\Im\left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e))} \overline{\Phi(q(e))} e^{-ia(e)/r(e)}\right) \\ &= -\Im\left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\Phi(p(e))} \Phi(q(e)) e^{ia(e)/r(e)}\right) = -j_{\Phi}^a(e). \end{aligned}$$

Damit gilt $q_{\overline{\Phi}} = -q_{\Phi}$ und $j_{\overline{\Phi}}^{-a} = -j_{\Phi}^a$, womit die Behauptung gezeigt ist. \square

Das Klein-Gordon-Feld besitzt analog zur Maxwell-Theory eine zugehörige **Energiefunktion**, welche das System vollständig beschreibt. Es gilt ein Energieerhaltungssatz, sofern das Eichpotential a zeitunabhängig ist.

Satz 5.4 (Hamiltonsche Formulierung und Energieerhaltung). *Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion, $a \in \mathfrak{K}(G)$, sowie $\Phi_0, v_0 \in \mathfrak{C}_{\mathbb{C}}(G)$ Anfangsdaten.*

Seien ferner $\Phi, \pi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{C}_{\mathbb{C}}(G))$ komplexwertige Eckenfunktionen, wobei wir Real- und Imaginärteil durch

$$(5.21) \quad \Phi = \Phi_R + i \Phi_I,$$

$$(5.22) \quad \pi = \pi_R + i \pi_I$$

bezeichnen.

Die **Hamilton-Funktion** der Klein-Gordon-Theorie ist definiert als²

$$(5.23) \quad H(\Phi, \pi) = \frac{1}{2} \left(\langle \pi, \pi \rangle_{\mathfrak{C}, \mathbb{C}} + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2) \Phi \rangle_{\mathfrak{C}, \mathbb{C}} \right).$$

²Die Skalarprodukte beziehen sich auf die Standardskalarprodukte der komplexen Vektorräume $\mathfrak{C}_{\mathbb{C}}(G)$ und $\mathfrak{K}_{\mathbb{C}}(G)$.

Dann ist Φ genau dann eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung mit Impulsvariable $\pi = \Phi'$, wenn die **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen**

$$(5.24) \quad \frac{1}{2} \Phi' = \frac{\partial H}{\partial \pi},$$

$$(5.25) \quad \frac{1}{2} \pi' = -\frac{\partial H}{\partial \Phi}$$

erfüllt sind.³

Beweis. Einsetzen von (5.23) in (5.24) ergibt durch Wirtinger-Differentiation:

$$(5.26) \quad \frac{\partial H}{\partial \pi} = \frac{1}{2} \pi \quad \implies \quad \Phi' = \pi.$$

Einsetzen in (5.25) liefert:

$$(5.27) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \pi' &= -\frac{\partial H}{\partial \Phi} \\ &= -\frac{1}{2} (\Delta_r^a + m^2) \Phi \end{aligned}$$

$$(5.28) \quad \implies \quad \Phi'' = -(\Delta_r^a + m^2) \Phi.$$

Damit erfüllen die Hamiltonschen Gleichungen exakt die Klein-Gordon-Gleichung (5.5) mit Anfangsdaten $\Phi(0) = \Phi_0$, $\Phi'(0) = v_0$. \square

Folgerung 5.7 (Energieerhaltung). *Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$ eine reelle Zahl, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ eine positive Kantenfunktion, $a \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{K}(G))$, $\Phi_0, v_0 \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ Anfangsdaten und $\Phi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G))$ eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung.*

Setze $\pi = \Phi'$. Dann gilt für die Hamilton-Funktion $H(\Phi, \pi)$ aus (5.23):

$$(5.29) \quad \frac{d}{dt} H(\Phi(t), \pi(t), t) = \frac{\partial H}{\partial t}(\Phi(t), \pi(t), t).$$

Insbesondere folgt daraus:

$$\frac{d}{dt} H(\Phi(t), \pi(t)) = 0,$$

falls das Potential $a(t)$ keine explizite Zeitabhängigkeit besitzt.

³Die Ableitungen sind im Sinne des Wirtinger-Kalküls zu verstehen, d. h. $\partial H / \partial \bar{z}$ behandelt z und \bar{z} als unabhängige Variablen.

Beweis. Sei $t \in \mathbb{R}$. Dann gilt nach der Kettenregel:

$$\frac{d}{dt}H(\Phi(t), \pi(t), t) = \frac{\partial H}{\partial \Phi} \Phi' + \frac{\partial H}{\partial \bar{\Phi}} \bar{\Phi}' + \frac{\partial H}{\partial \pi} \pi' + \frac{\partial H}{\partial \bar{\pi}} \bar{\pi}' + \frac{\partial H}{\partial t}.$$

Verwenden wir nun die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{1}{2} \Phi' = \frac{\partial H}{\partial \bar{\pi}}, \quad \frac{1}{2} \pi' = -\frac{\partial H}{\partial \bar{\Phi}},$$

so folgt

$$\frac{d}{dt}H(\Phi(t), \pi(t), t) = -\frac{1}{2} \pi' \bar{\Phi}' - \frac{1}{2} \bar{\pi}' \Phi' + \frac{1}{2} \Phi' \pi' + \frac{1}{2} \bar{\Phi}' \bar{\pi}' + \frac{\partial H}{\partial t}.$$

Die Kreuzterme heben sich gegenseitig auf, sodass schließlich

$$\frac{d}{dt}H(\Phi(t), \pi(t), t) = \frac{\partial H}{\partial t}(\Phi(t), \pi(t), t)$$

gilt, was die Behauptung zeigt. \square

Abschließend bemerken wir, dass sich die Klein-Gordon-Gleichung in eine Schrödinger-Form umschreiben lässt.

Hilfssatz 5.8 (Schrödinger-Form der Klein-Gordon-Gleichung). *Sei L eine positiv semidefinite lineare Abbildung auf $V = \mathbb{C}^n$ ($n \geq 1$), $m > 0$ und $u \in C^2(\mathbb{R}, V)$ eine Lösung der Gleichung*

$$(5.30) \quad u'' + Lu + m^2 u = 0.$$

Dann existiert ein selbstadjungierter linearer Operator H auf $V \oplus V$, sodass

$$(5.31) \quad \psi = \begin{pmatrix} u \\ \frac{1}{m}(L^{1/2} + i\partial_t)u \end{pmatrix} \in C^2(\mathbb{R}, V) \times C^1(\mathbb{R}, V)$$

eine Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$(5.32) \quad i\partial_t \psi = H\psi$$

ist.

Umgekehrt ist die erste Komponente einer Lösung $\psi \in C^2(\mathbb{R}, V) \times C^1(\mathbb{R}, V)$ der Gleichung (5.32) ebenfalls eine Lösung der Gleichung (5.30).

Beweis. Sei $u \in C^2(\mathbb{R}, V)$ Lösung von (5.30), dann starten wir mit

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

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

$$(5.33) \quad i\frac{\partial u}{\partial t} = -L^{\frac{1}{2}}u + m\phi$$

$$(5.34) \quad i\frac{\partial \phi}{\partial t} = L^{\frac{1}{2}}\phi + mu$$

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 (5.32).

$$(5.35) \quad i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

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 (5.32).

Wenden wir zunächst $(L^{\frac{1}{2}} - i\frac{\partial}{\partial t})/m$ auf (5.33) 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 (5.34)

$$L^{\frac{1}{2}}\phi - i\frac{\partial \phi}{\partial t} = -mu$$

und erhalten das gesuchte Resultat.

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

□

Satz 5.5. Sei G ein planeres Netz, $m > 0$, $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$, $a \in \mathfrak{K}(G)$, $\Phi_0, v_0 \in \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$.

Dann existiert selbstadjungierter H auf $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \oplus \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$, sodass die Klein-Gordon-Gleichung mit Anfangsbedingungen

$$(5.36) \quad \partial_t^2 \Phi + \Delta_r^a \Phi + m^2 \Phi = 0,$$

$$(5.37) \quad \Phi(0) = \Phi_0, \quad \Phi'(0) = v_0,$$

äquivalent ist zu

$$i\partial_t \psi(t) = H\psi(t), \quad \psi(0) = \psi_0,$$

wobei ψ_0 aus Φ_0, v_0 via (5.31) konstruiert wird.

Die Lösung ist normerhaltend: $\|\psi(t)\| = \|\psi_0\|$.

Beweis. Der lineare Operator $L = \Delta_r^a : \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \rightarrow \mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ ist positiv semidefinit.

Daher können wir Hilfsatz 5.8 anwenden und finden eine äquivalente Schrödinger-Form mit Lösung

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

wobei ψ_0 aus den Anfangsdaten Φ_0, v_0 via (5.31) konstruiert wird. \square

Wegen der Selbstadjungiertheit von H ist die Zeitentwicklung normerhaltend: $\|\psi(t)\| = \|\psi(0)\|$.

Dies induziert eine nichtnegative Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho = \bar{\psi}\psi, \quad \sum_{v \in V} \rho(v) = \text{konstant},$$

mit zugehöriger Kontinuitätsgleichung.

Der Operator H ist jedoch indefinit mit spektraler Symmetrie um 0.

Satz 5.6. Sei L eine positiv semidefnite lineare Abbildung in $V = \mathbb{C}^n$ ($n \geq 1$), und $m > 0$, dann ist das Spektrum des selbstadjungierten lineare Operators

$$(5.38) \quad H = \begin{pmatrix} -L^{\frac{1}{2}} & m \\ m & L^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

gegeben durch

$$(5.39) \quad \sigma(H) = \{\pm \sqrt{\omega + m^2} : \omega \in \sigma(L)\}$$

Beweis. Sei $u \in V$ und $\omega \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ 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 allgemeinen 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 $2n$ Vektoren und damit eine Orthogonalbasis zu $V \times V$. \square

Untersuchen wir als nächstes die Voraussetzung $m > 0$ im Hilfssatz 5.8 wenn L einen nicht trivialen Kern hat. Betrachte hierzu die Differentialgleichung (5.30) mit $m = 0$

$$(5.40) \quad u'' + Lu = 0$$

und transformiere sie in die analoge Differentialgleichung erster Ordnung

$$(5.41) \quad \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \phi \end{pmatrix}$$

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*

$$(5.42) \quad A = J^{-1} \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ L & 0 \end{pmatrix} J = J^{-1} B J$$

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 (5.42) 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 5.8 nicht erfüllt ist und L einen nicht-trivialen Kern besitzt, existiert keine unter der Klein-Gordon- Zeitentwicklung erhaltene Wahrscheinlichkeitsdichte. Dies ist im Fall der Klein-Gordon-Gleichung genau dann der Fall wenn (siehe 5.2)

$$(5.43) \quad \frac{a}{r} \in \text{Bild}(\text{grad})$$

5.2 Quantentheorie des Klein-Gordon-Feldes

Die Quantisierung der Klein-Gordon-Theorie erfolgt analog zur Maxwell-Theorie. Zunächst definieren wir den zugehörigen Hilbertraum.

Definition 5.9 (Hilbertraum der Klein-Gordon-Theorie). *Sei G ein **planares Netz**. Der **Hilbertraum der quantisierten Klein-Gordon-Theorie** ist der Raum quadratintegrierbarer komplexwertiger Funktionen auf $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$:*

$$\mathfrak{H}_{KG}(G) = L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C}; \lambda),$$

wobei λ das Lebesgue-Maß auf $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ bezeichnet.

Das Skalarprodukt ist gegeben durch

$$(5.44) \quad \langle \phi, \xi \rangle_{\mathfrak{H}} = \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)} \overline{\phi(x)} \xi(x) d\lambda(x)$$

für alle $\phi, \xi \in \mathfrak{H}_{KG}(G)$.

Als Nächstes definieren wir die Feldoperatoren der Klein-Gordon-Theorie. Eine Betrachtung der Hamilton-Funktion der Klein-Gordon-Theorie liefert dann, analog zum elektromagnetischen Feld, die zugehörige Schrödinger-Gleichung.

Definition 5.10 (Feldoperatoren und Hamiltonoperator des Klein-Gordon-Feldes). *Sei G ein **planares Netz**, $m > 0$ eine reelle Zahl, sowie $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ und $a \in \mathfrak{K}(G)$ Kantenfunktionen.*

Der **Hermite-Polynomraum des Klein-Gordon-Feldes** ist definiert als

$$(5.45) \quad \mathfrak{D}_{KG} = \text{span} \left\{ \Phi \mapsto \Phi_R^\alpha \Phi_I^\beta e^{-\frac{\|\Phi_R\|^2 + \|\Phi_I\|^2}{2}} : \alpha, \beta \in \mathbb{N}^V \right\} \subseteq \mathfrak{H}_{KG}(G),$$

wobei $\Phi = \Phi_R + i\Phi_I$ mit $\Phi_R, \Phi_I \in \mathfrak{E}(G)$ und $\alpha = (\alpha_j)_{j \in V}$, $\beta = (\beta_j)_{j \in V}$ multiindizierte Exponenten sind.

Für jede Ecke $j \in V$ sind der Realteil $\hat{\Phi}_R(j) : \mathfrak{D}_{KG} \rightarrow \mathfrak{D}_{KG}$ und Imaginärteil $\hat{\Phi}_I(j) : \mathfrak{D}_{KG} \rightarrow \mathfrak{D}_{KG}$ des **Klein-Gordon-Feldoperators** $\hat{\Phi}(j) = \hat{\Phi}_R(j) + i\hat{\Phi}_I(j)$ definiert durch

$$(5.46) \quad \hat{\Phi}_R(j) : \psi \mapsto (\Phi \mapsto \Phi_R(j)\psi(\Phi))$$

$$(5.47) \quad \hat{\Phi}_I(j) : \psi \mapsto (\Phi \mapsto \Phi_I(j)\psi(\Phi))$$

für alle $\psi \in \mathfrak{D}_{KG}$.

Analog sind die **kanonisch konjugierten Impulsoperatoren** $\hat{\pi}_\Phi(j) = \hat{\pi}_{\Phi_R}(j) + i \hat{\pi}_{\Phi_I}(j)$ definiert durch

$$(5.48) \quad \hat{\pi}_{\Phi_R}(j) : \psi \longmapsto (\Phi \mapsto -i \frac{\partial \psi}{\partial \Phi_R(j)}(q))$$

$$(5.49) \quad \hat{\pi}_{\Phi_I}(j) : \psi \longmapsto (\Phi \mapsto -i \frac{\partial \psi}{\partial \Phi_I(j)}(q))$$

für alle $\psi \in \mathfrak{D}_{\text{KG}}$ und $j \in V$.

Die Operatoren $\hat{\Phi}_R(j), \hat{\Phi}_I(j)$ sind Multiplikationsoperatoren, während $\hat{\pi}_{\Phi_R}(j), \hat{\pi}_{\Phi_I}(j)$ als partielle Ableitungen nach den Feldkomponenten wirken.

Der **Hamiltonoperator des Klein-Gordon-Feldes** $\hat{H}_{\text{KG}} : \mathfrak{D}_{\text{KG}} \mapsto \mathfrak{D}_{\text{KG}}$ definiert durch

$$(5.50) \quad \hat{H}_{\text{KG}} = \frac{1}{2} \left(\sum_{x \in V} (\hat{\pi}_{\Phi_R}(x)^2 + \hat{\pi}_{\Phi_I}(x)^2) + \langle \hat{\Phi}, (\Delta_r^a + m^2) \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} \right).$$

Hierbei wird das Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}}$ komponentenweise auf $\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G)$ verstanden, d. h.

$$\langle \hat{\Phi}, (\Delta_r^a + m^2) \hat{\Phi} \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} = \sum_{x \in V} \overline{\hat{\Phi}(x)} ((\Delta_r^a + m^2) \hat{\Phi})(x).$$

Sei $\psi_0 \in \mathfrak{H}(G)$ gegeben. Eine Abbildung $\psi \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{H}(G))$ heißt **Lösung der Schrödinger-Gleichung des Klein-Gordon-Feldes**, wenn sie die Gleichung

$$(5.51) \quad i \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{H}_{\text{KG}} \psi(t), \quad t \in \mathbb{R},$$

mit der Anfangsbedingung

$$(5.52) \quad \psi(0) = \psi_0$$

erfüllt.

Theorem 5.11. Sei G ein planares Netz, $a \in \mathfrak{K}(G)$ und $r : E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ Kantenfunktionen. Dann existiert eine unitäre Abbildung $\hat{U} : \mathfrak{H}_{\text{KG}}(G) \rightarrow \mathfrak{H}_{\text{KG}}(G)$, nichtnegative Frequenzen $(\omega_j)_{j=0}^{|V|-1} \subset \mathbb{R}_{>0}$, sodass für den Hamiltonoperator \hat{H}_{KG} des Klein-Gordon-Feldes aus Gleichung (5.50) gilt:

$$(5.53) \quad \hat{U}^\dagger \hat{H}_{\text{KG}} \hat{U} = \sum_{j=0}^{|V|-1} \hat{h}_j.$$

Dabei sind die eindimensionalen Modenoperatoren \hat{h}_j gegeben durch

$$(5.54) \quad \hat{h}_j = -2 \frac{\partial^2}{\partial z_j \partial \bar{z}_j} + \frac{1}{2} (m^2 + \omega_j^2) z_j \bar{z}_j$$

Beweis. Der Hamiltonoperator lässt sich zerlegen als:

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

wobei

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

Der zugehörige Eich-Laplace Operator ist positiv definit und lässt sich nach dem Spektralsatz schreiben als

$$\Delta_r^a = U^\dagger R U$$

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

Wie in Theorem 4.13 definieren wir:

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

Nachdem U unitär ist können wir wieder mit Hilfe des Transformationssatzes für Integrale die Unitarität von \hat{U} zeigen und die adjungierte ist gegeben durch

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

Der Rest des Beweises läuft analog zum Beweis von Theorem 4.13. Ein Unterschied ist, dass der $\Delta_r^a + m^2$ positiv ist.

Fangen wir an mit der Invarianz des Laplace Operators unter unitärer Transformation:

$$\begin{aligned}\sum_{x \in V} \frac{\partial}{\partial \bar{\Phi}(x)} \frac{\partial}{\partial \Phi(x)} \phi(U(\Phi)) &= \sum_{x \in V} \frac{\partial}{\partial \bar{\Phi}(x)} \left(\sum_{y \in V} U_{y,x} \frac{\partial}{\partial \Phi'(y)} \phi \right) (U(\Phi)) \\ &= \sum_{x \in V} \left(\sum_{z \in V} \sum_{y \in V} \bar{U}_{z,x} U_{y,x} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\Phi}'(z) \partial \Phi'(y)} \phi \right) (U(a)) \\ &= \left(\sum_{z \in V} \sum_{y \in V} \delta_{y,z} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\Phi}'(z) \partial \Phi'(y)} \right) \phi(U(a)) \\ &= \left(\sum_{y \in V} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\Phi}'(y) \partial \Phi'(y)} \right) \phi(U(a))\end{aligned}$$

Hier haben wir die Kettenregel des Wirtinger Kalküls verwendet.

Der Beweis für potentielle Energie \hat{V} ist komplett analog zu dem Beweis von Theorem 4.13. \square

Die wichtigste lokal erhaltene Größe der Klein-Gordon-Theorie neben der Gesamtenergie H ist die Ladung $q = \Im(\bar{\Phi} \Phi')$.

Durch den Zusammenhang $\pi = \Phi'$ und eine direkte Umformung gilt:

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

Damit lässt sich 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 angeben.

Definition 5.12 (Ladungsfeldoperator und Gesamtladungsoperator). *Sei G ein **planares Netz**. Für $x \in V$ sei $\Phi(x) = \Phi_R(x) + i \Phi_I(x)$ mit $\Phi_R(x), \Phi_I(x) \in \mathbb{R}$ die Zerlegung des Klein-Gordon-Feldoperators.*

Dann heißt

$$\begin{aligned}
 (5.56) \quad \hat{q}(x) &= \hat{\Phi}_R(x) \hat{\pi}_I(x) - \hat{\Phi}_I(x) \hat{\pi}_R(x) \\
 &= i \left(\hat{\Phi}_I(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_R(x)} - \hat{\Phi}_R(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_I(x)} \right)
 \end{aligned}$$

der **Ladungsfeldoperator** am Knoten $x \in V$.

Die Summe über alle Knoten ergibt den **Gesamtladungsoperator**:

$$(5.57) \quad \hat{Q} = \sum_{x \in V} \hat{q}(x).$$

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 5.13. *Sei G ein **planares Netz** und $\psi \in \mathfrak{D}_{\text{KG}} \subset \mathfrak{H}_{\text{KG}}(G)$. Dann gilt für jeden Knoten $x \in V$ und den Ladungsfeldoperator $\hat{q}(x)$ die Kontinuitätsgleichung:*

$$(5.58) \quad \langle \psi(t), \hat{q}(x) \psi(t) \rangle'_{\mathfrak{H}} = -\text{div} \left(\langle \psi(t), \hat{j} \psi(t) \rangle_{\mathfrak{H}} \right)(x),$$

wobei der Stromoperator durch

$$(5.59) \quad \hat{j}(e) = \Im \left(\frac{1}{r(e)^2} \overline{\hat{\Phi}(p(e))} \hat{\Phi}(q(e)) e^{i \frac{a(e)}{r(e)}} \right)$$

definiert ist.

Beweis. Wir starten auf der linken Seite von (5.58) und gehen vom Ehrenfest Theorem der Klein-Gordon Schrödingergleichung aus.

$$(5.60) \quad \langle \psi, \hat{q}(x)\psi \rangle'_{\mathfrak{H}} = i \langle \psi, [\hat{H}, \hat{q}(x)]\psi \rangle_{\mathfrak{H}}$$

Wie im Fall der Maxwell Theorie sei hier kurz eine Skizze des Beweises.⁴
Sei x ein Knoten des Graphen und ψ eine Lösung der Schrödingergleichung 5.51.

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

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

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

Wegen der Form von \hat{q} verschwindet der Kommutator mit den Ausdrücken $\hat{\pi}_{\Phi_R}(y)^2 + \hat{\pi}_{\Phi_I}(y)^2$, $\hat{\Phi}_R(y)^2 + \hat{\Phi}_I(y)^2$. 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.

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

Zu jedem Glied im ersten Term gibt es ein korrespondierendes Glied im dritten Term, und umgekehrt, sodass wir mit dem selben Argument wie gerade

⁴Der volle Beweis ist etwas technischer und kann in "On the Ehrenfest Theorem of quantum mechanics, Gero Friesecke und Mario Koppen, 2009" gefunden werden.

bevor zeigen können, dass der Kommutator der Summe aus erstem und dritten Term identisch Null ist.

Es verbleibt also den zweiten Kommutator zu betrachten.

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

Wir betrachten zuerst die Identitäten:

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

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

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

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

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

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

Wir fassen zusammen:

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

□

Im nächsten Schritt wollen wir, wie in der Maxwell Theorie, Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren als Leiteroperatoren eines mehrdimensionalen harmonischen Oszillators definieren. Wir starten mit den Modenoperatoren (5.54).

$$(5.61) \quad \hat{h}_j = -2 \frac{\partial^2}{\partial \Phi_j \partial \bar{\Phi}_j} + \frac{1}{2} (m^2 + \omega_j^2) \Phi_j \bar{\Phi}_j$$

Es handelt sich hierbei um einen eindimensionalen komplexen harmonischen Oszillator beziehungsweise um einen zweidimensionalen reellen harmonischen Oszillator.

$$(5.62) \quad \hat{h}_j = \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \Phi_{Rj}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \Phi_{Ij}^2} + (m^2 + \omega_j^2) (\Phi_{Rj}^2 + \Phi_{Ij}^2) \right)$$

Wir können analog zu Definition 4.15je einen Vernichtungsoperator für den Realteil Φ_R und den Imaginärteil Φ_I der Summanden h_ω definieren, wobei $\Phi = \Phi_R + i\Phi_I$.

$$\begin{aligned}\hat{r}_j &= \sqrt{\frac{\sqrt{m^2 + \omega_j^2}}{2}} \left(\Phi_{Rj} - \frac{1}{\sqrt{m^2 + \omega_j^2}} \frac{\partial}{\partial \Phi_{Rj}} \right) \\ \hat{s}_j &= \sqrt{\frac{\sqrt{m^2 + \omega_j^2}}{2}} \left(\Phi_{Ij} - \frac{1}{\sqrt{m^2 + \omega_j^2}} \frac{\partial}{\partial \Phi_{Ij}} \right)\end{aligned}$$

Der deutliche Unterschied zum elektromagnetischen Feld ist, dass wir hier für jede Mode ω zwei unterschiedliche Vernichter und Erzeuger haben. Nach Hilfssatz 4.16 lässt sich \hat{h}_j schreiben als

$$\hat{h}_j = \sqrt{m^2 + \omega_j^2} (\hat{r}_j^\dagger \hat{r}_j + \hat{s}_j^\dagger \hat{s}_j + 1)$$

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. Dies sind fast die bekannten Teilchen und Antiteilchen. Es ergeben sich folgende Vertauschungen.

$$\begin{aligned}(5.63) \quad [\hat{r}_i, \hat{s}_j^\dagger] &= 0 \\ [\hat{r}_i, \hat{s}_j] &= 0 \\ [\hat{r}_i, \hat{r}_j^\dagger] &= \delta_{i,j} 1 \\ [\hat{s}_i, \hat{s}_j^\dagger] &= \delta_{i,j} 1\end{aligned}$$

Es gibt jedoch mehrere Möglichkeiten diese Erzeuger und Vernichter Paare zu definieren, sodass sie sowohl 5.63 als auch 5.2 erfüllen.

Bemerkung 5.14. Sei $a, b, c, d \in \mathbb{C}$, dann erfüllen $\hat{u} = a\hat{r} + b\hat{s}$ und $\hat{v} = c\hat{r} + d\hat{s}$ genau dann 5.63 und 5.2 falls

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

eine unitäre Matrix ist.

Wir werden als Vernichter und Erzeuger eine Darstellung wählen, die es auch erlaubt den Ladungsoperator über die Teilchenanzahl zu interpretieren.

$$(5.64) \quad \hat{A}_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{r}_j + i\hat{s}_j) = \frac{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}}{2} \Phi_j - \frac{1}{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}} \frac{\partial}{\partial \Phi_j}$$

$$(5.65) \quad \hat{B}_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{r}_j - i\hat{s}_j) = \frac{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}}{2} \bar{\Phi}_j - \frac{1}{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}} \frac{\partial}{\partial \bar{\Phi}_j}$$

Die Adjungierten $\hat{A}_j^\dagger, \hat{B}_j^\dagger$ sind die Erzeugungsoperatoren. Analog zum eindimensionalen Fall definieren wir die **Teilchenzahloperatoren des Klein-Gordon-Feldes**.

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

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

Wir nennen \hat{N}_{j+} den Teilchenzahloperator und \hat{N}_{j-} den Antiteilchenzahloperator.

Der Grundzustand $\psi_{0j} = c e^{-\sqrt{m^2 + \omega_j^2} |\Phi_j|^2 / 2}$ wird sowohl von \hat{A}_j als auch von \hat{B}_j vernichtet.

$$\hat{A}_j \psi_{0j} = \hat{B}_j \psi_{0j} = 0$$

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

Satz 5.8. *Sei G ein planares Netz und $\hat{N}_{\omega\pm}$ wie oben, dann können wir den Gesamtladungsoperator folgendermaßen schreiben*

$$\hat{Q} = \sum_{j=1}^{|V|} (\hat{N}_{j+} - \hat{N}_{j-})$$

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

Beweis. Starten wir mit Definition 5.12 des Gesamtladungsoperators und formen um:

$$\begin{aligned}\hat{Q} &= \sum_{x \in V} \hat{q}(x) = i \sum_{x \in V} \left(\hat{\Phi}_I(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_R(x)} - \hat{\Phi}_R(x) \frac{\partial}{\partial \Phi_I(x)} \right) \\ &= \sum_{x \in V} \left(\frac{\partial}{\partial \Phi_x} \Phi_x - \bar{\Phi}_x \frac{\partial}{\partial \bar{\Phi}_x} - 1 \right) \\ &= \sum_{x \in V} \left(\Phi_x \frac{\partial}{\partial \Phi_x} - \bar{\Phi}_x \frac{\partial}{\partial \bar{\Phi}_x} \right)\end{aligned}$$

Hierbei haben wir die Kommutatoren: $[\hat{\Phi}_I(x), \frac{\partial}{\partial \Phi_I(x)}], [\hat{\Phi}_R(x), \frac{\partial}{\partial \Phi_R(x)}]$ und $[\hat{\Phi}(x), \frac{\partial}{\partial \Phi(x)}]$ verwendet.

Sei $\psi \in \mathfrak{D}_{\text{KG}}$ und betrachten wir das Verhalten des Gesamtladungsoperators unter der unitären Abbildung \hat{U} aus Theorem 5.11.

$$\begin{aligned}\hat{Q}\hat{U}\psi(\Phi) &= \sum_{x \in V} \left(\Phi_x \frac{\partial}{\partial \Phi_x} \psi(U(\Phi)) - \overline{\Phi}_x \frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_x} \psi(U(\Phi)) \right) \\ &= \sum_{x \in V} \left(\sum_{j=1}^{|V|} \Phi_x U_{j,x} \left(\frac{\partial}{\partial \Phi_j} \psi \right)(U(\Phi)) - \sum_{j=1}^{|V|} \overline{\Phi}_x \overline{U}_{j,x} \left(\frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_j} \psi \right)(U(\Phi)) \right)\end{aligned}$$

Dann wenden wir \hat{U}^\dagger an:

$$\begin{aligned}\hat{U}^\dagger \hat{Q} \hat{U} \psi(\Phi) &= \sum_{x \in V} \left(\sum_{j=1}^{|V|} \sum_{k=1}^{|V|} \overline{U}_{k,x} U_{j,x} \Phi_k \frac{\partial}{\partial \Phi_j} \psi(\Phi) - \sum_{j=1}^{|V|} \sum_{k=1}^{|V|} U_{k,x} \overline{U}_{j,x} \overline{\Phi}_k \frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_j} \psi(\Phi) \right) \\ &= \sum_{x \in V} \left(\sum_{j=1}^{|V|} \sum_{k=1}^{|V|} \overline{U}_{k,x} \overline{U}_{x,j}^\dagger \Phi_k \frac{\partial}{\partial \Phi_j} \psi(\Phi) - \sum_{j=1}^{|V|} \sum_{k=1}^{|V|} U_{k,x} U_{x,j}^\dagger \overline{\Phi}_k \frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_j} \psi(\Phi) \right) \\ &= \sum_{k=1}^{|V|} \left(\Phi_k \frac{\partial}{\partial \Phi_k} \psi(\Phi) - \overline{\Phi}_k \frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_k} \psi(\Phi) \right)\end{aligned}$$

Anschließend verwenden wir die Definition der Vernichter und Erzeuger und verwenden die Abkürzung $w_j = \sqrt{m^2 + \omega_j^2}$:

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{|V|} (\hat{N}_{j+} - \hat{N}_{j-}) &= \sum_{j=1}^{|V|} (\hat{A}_j^\dagger \hat{A}_j - \hat{B}_j^\dagger \hat{B}_j) \\ &= \sum_{j=1}^{|V|} \left(\left(\frac{w_j}{4} \Phi_j \overline{\Phi}_j + \frac{1}{2} \Phi_j \frac{\partial}{\partial \Phi_j} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_j} \overline{\Phi}_j - \frac{1}{w_j} \frac{\partial^2}{\partial \Phi_j \partial \overline{\Phi}_j} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{w_j}{4} \overline{\Phi}_j \Phi_j + \frac{1}{2} \overline{\Phi}_j \frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_j} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \Phi_j} \Phi_j - \frac{1}{w_j} \frac{\partial^2}{\partial \overline{\Phi}_j \partial \Phi_j} \right) \right) \\ &= \sum_{j=1}^{|V|} \left(\Phi_j \frac{\partial}{\partial \Phi_j} - \overline{\Phi}_j \frac{\partial}{\partial \overline{\Phi}_j} \right)\end{aligned}$$

Am Ende haben wir den Kommutator $[\hat{\Phi}_j, \frac{\partial}{\partial \Phi_j}]$ verwendet um das Resultat zu erhalten. \square

Definition 5.15. Sei G ein planarer Graph, $x \in \mathfrak{E}(G)$ und $\psi \in \mathfrak{E}$, dann nennen wir

$$(5.66) \quad U_C(\psi)(x) = \psi(\overline{x})$$

den **Ladungskonjugationsoperator**.

Bemerkung 5.16. *Der Ladungskonjugationsoperator ist unitär und selbstadjungiert.*

Satz 5.9. *Sei G ein planares Netz, $r > 0$, a Kantenfunktionen, $1 \leq j \leq |V|$ und U_C der Ladungskonjugationsoperator, dann transformieren die Operatoren A_j , B_j und $N_{j\pm}$ folgendermaßen*

$$(5.67) \quad U_C A_j U_C = B_j$$

$$(5.68) \quad U_C A_j^\dagger U_C = B_j^\dagger$$

$$(5.69) \quad U_C B_j U_C = A_j$$

$$(5.70) \quad U_C B_j^\dagger U_C = A_j^\dagger$$

$$(5.71) \quad U_C N_{j\pm} U_C = N_{j\mp}$$

Beweis. Es genügt zu zeigen, dass $U_C A_j U_C = B_j$

Sei $\psi \in \mathfrak{D}_{KG}$, dann gilt:

$$(5.72) \quad U_C A_j U_C \psi(\Phi) = U_C \left(\frac{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}}{2} \Phi_j - \frac{1}{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}} \frac{\partial}{\partial \bar{\Phi}_j} \right) \psi(\bar{\Phi})$$

$$(5.73) \quad = U_C \left(\frac{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}}{2} \Phi_j - \frac{1}{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}} \frac{\partial}{\partial \Phi_j} \right) \psi(\bar{\Phi})$$

$$(5.74) \quad = \left(\frac{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}}{2} \bar{\Phi}_j - \frac{1}{\sqrt[4]{m^2 + \omega_j^2}} \frac{\partial}{\partial \Phi_j} \right) \psi(\Phi) = B_j \psi(\Phi)$$

□

Kapitel 6

Zweite Quantisierung

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 7

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 7.1. *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*

$$(7.1) \quad \hat{H}_{qed} = \frac{1}{2} \left(- \sum_{x \in V} \left(\frac{\partial^2}{\partial \Phi_R(x)^2} + \frac{\partial^2}{\partial \Phi_I(x)^2} \right) + \langle \Phi, (\Delta_r^a + m^2)(\Phi) \rangle_{\mathfrak{E}, \mathbb{C}} + \right. \\ \left. - \frac{1}{\epsilon} \sum_{e \in E} \frac{\partial^2}{\partial a(e)^2} + \langle \operatorname{div}_D(r^{-1}a), \operatorname{div}_D(r^{-1}a)/\mu \rangle_{\mathfrak{F}} \right)$$

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 7.2. 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

$$(7.2) \quad \hat{U}_\xi(\psi)(\Phi, a) = \psi(\Phi e^{i\xi}, a + r \text{grad} \xi)$$

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

$$(7.3) \quad \hat{U}_\xi(\psi)(\rho, \phi, a) = \psi(\rho, \phi + \xi, a + r \text{grad} \xi)$$

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 7.1. 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 $\psi \in C^1(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G) \times \mathfrak{R}(G), \mathbb{C})$.

$$(7.4) \quad [\hat{H}_{qed}, \hat{U}_\xi] \psi = 0$$

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

$$(7.5) \quad \hat{h} = \text{div}(r * \epsilon * \hat{e}) - \hat{q}$$

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

$$(7.6) \quad e^{i\xi} \Delta_r^a(\Phi) = \Delta_r^{a+r\text{grad}\xi}(e^{i\xi}\Phi)$$

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

$$(7.7) \quad (\operatorname{div}(r\epsilon\hat{e}))' + \hat{j}_{em} = 0$$

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.

$$(7.8) \quad \hat{U}_\xi = e^{i \sum_{x \in V} \xi(x) * \hat{h}(x)} = \prod_{x \in V} e^{i \xi(x) * \hat{h}(x)}$$

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

$$(7.9) \quad \{(\Phi e^{i\xi}, a + r\operatorname{grad}\xi) : \xi \in \mathfrak{E}(G)\}$$

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 7.3. *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 7.4. 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

$$(7.10) \quad \gamma(\Phi, a) = (\Phi e^{-iQ(a)}, u(a), v(a))$$

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.

$$(7.11) \quad \Gamma(f) = f \circ \gamma$$

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

Bemerkung 7.5. 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 7.2. *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 7.6. *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

$$(7.12) \quad \mathfrak{T} = r\text{grad}(\{\phi \in \mathfrak{E}(G) : \sum_{x \in V} \phi_x = 0, -\pi \leq \phi < \pi\})$$

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

$$(7.13) \quad f_x(y) = \begin{cases} -1 & y = x, x \neq z \\ 1 & y = z \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

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

$$(7.14) \quad a_1 = a_0 + 2\pi \sum_{x \in (V - \{z\})} n_x * r\text{grad}(f_x)$$

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 7.7. Sei G ein planarer Graph, dann definieren wir

$$(7.15) \quad \mathfrak{H}_{sym} = \{\psi \in L^2(\mathfrak{E}_{\mathbb{C}}(G), \mathbb{C}) \mid \hat{U}_{\xi} \psi = \psi \forall \xi \in \ker(rgrad)\}$$

Hilfssatz 7.8. 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

$$(7.16) \quad \psi(\Phi) = f(\Phi e^{-i \arg(\Phi)(y)})$$

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

$$(7.17) \quad \sum_{x \in V} \frac{\partial}{\partial \phi(x)} \psi = 0$$

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 7.9. 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

$$(7.18) \quad \psi(\Phi, a) = \tilde{\psi}(\Phi e^{-iQ(a)}, u(a))$$

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

$$(7.19) \quad \psi(\rho, \phi, a) = \tilde{\psi}(\rho, \phi - Q(a), u(a))$$

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

$$(7.20) \quad \langle \phi, \psi \rangle_{qed} := \frac{1}{\lambda(\tau)} \int_{\mathfrak{E}_{\mathbb{C}} \times (\mathfrak{T} + \ker(\operatorname{div} r))} \bar{\phi} \psi d\lambda$$

Bemerkung 7.10. 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 7.4. 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 7.5. *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 7.11. *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 8

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!