

Die Dirac-Gleichung auf Quantengraphen

Abschlussarbeit im Rahmen der Prüfungen
zum Bachelor-Studiengang Mathematik
der Fernuniversität Hagen

Vorgelegt am 5. Juli 2019
von Oskar Weser
aus Neustadt an der Weinstraße

Erstgutachter: Prof. Dr. Delio Mugnolo
Zweitgutachter: Dr. Joachim Kerner

Ich danke Herrn Prof. Dr. Mugnolo und Herrn Dr. Kerner für die hervorragende Betreuung und meiner Mutter Johanne Scharnick für die aufmerksame Korrektur der Arbeit.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die Dirac-Gleichung des freien Teilchens	2
2.1	Begründung der Gleichung	2
2.2	Spektrum des freien Dirac-Operators	4
2.3	Negative Energien und Zitterbewegung	9
2.4	Lösung der Bewegung in einer Dimension	13
3	Die Dirac-Gleichung auf Quantengraphen	17
3.1	Quantengraphen	17
3.2	Symplektische Formen	19
3.3	Zweidimensionale Spinoren	22
3.4	Vierdimensionale Spinoren	33
3.5	Spektrale Dichte	41
4	Zusammenfassung	51
5	Ausführliche Beweise	52
5.1	Standardgeschwindigkeitsoperator	52
5.2	Lemmata zu symplektischen Formen	56
	Symbole	59
	Literatur	61
	Abbildungsverzeichnis	63

1 Einleitung

In dieser Arbeit soll der Dirac-Operator auf Graphen diskutiert werden. Dafür werden zwei Konzepte benötigt: Die Dirac-Gleichung, die grundlegend die Eigenschaften und Zeitevolution quantenmechanischer, relativistischer Systeme beschreibt und die Modellierung quantenmechanischer Operatoren auf Graphen. Daraus ergibt sich die Gliederung der Arbeit in zwei Teile. Zuerst wird die Dirac-Gleichung des freien Teilchens behandelt und anschließend gezeigt, wie der Dirac-Operator selbstadjungiert auf einem Graphen realisiert werden kann.

Die Dirac-Gleichung wurde 1929 von Paul Dirac entwickelt und ist eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit- und den drei Ortskoordinaten. Durch ihre Invarianz unter Poincarétransformationen erfüllt sie im Gegensatz zur Schrödingergleichung die Bedingungen der speziellen Relativitätstheorie [Dir30]. Interessanterweise sind die Wellenfunktionen (auch Spinoren genannt) zur Beschreibung des dreidimensionalen Anschauungsraumes nicht skalarwertig, sondern Vierervektoren quadratintegrabler Funktionen. Für die Beschreibung eines Systems entlang einer Dimension reduziert sich die Dimension der Spinoren auf Zweivektoren quadratintegrabler Funktionen. Im ersten Teil wird die Dirac-Gleichung physikalisch begründet, für das freie Teilchen gelöst und Interpretationen diskutiert. Neben den Grundgleichungen wird eine direkte Folgerung, die sogenannte Zitterbewegung, ausführlicher dargestellt, um zu begründen, warum später in dieser Arbeit ausschließlich mit Wellenfunktionen positiver Energie gearbeitet wird.

Im zweiten Teil wird der eingeführte Dirac-Operator auf Graphen modelliert. Es ergibt sich als Problem das freie Teilchen, welches entlang der eindimensionalen Kanten eines Graphs propagiert. Dafür müssen Nebenbedingungen an den Knoten konstruiert werden, die zu einer selbstadjungierten Realisierung des Operators führen. Es wird eine von Laplace-Operatoren bekannte Beweistechnik verwendet, die zu einer Vereinfachung des Problems auf die lineare Algebra endlichdimensionaler symplektischer Formen führt [KS99a]. Mit den konstruierten Nebenbedingungen kann u. a. ein *Kirchhoffsches Gesetz* als Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeitsstromdichte formuliert werden. Als finaler Satz wird die spektrale Dichte der Eigenwerte hergeleitet. Der Beweis folgt dabei der Literatur, allerdings ist er etwas rigoroser und ausführlicher geführt [BH03].

2 Die Dirac-Gleichung des freien Teilchens

2.1 Begründung der Gleichung

Dieser Abschnitt ist keine zwingende Herleitung, warum die Dirac-Gleichung genau diese Form haben muss, sondern eine physikalische Begründung und folgt der ursprünglichen Argumentation von Dirac [Dir30]. Für eine explizite Herleitung aus Symmetrieargumenten wird z. B. auf Thaller verwiesen [Tha92, Kapitel 3].

Die Schrödingergleichung des freien Teilchens

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(t, \mathbf{x}) \quad (2.1.1)$$

kann nicht Lorentz-invariant sein, weil es eine inhärente Asymmetrie zwischen Zeit- (erste Ableitung) und Ortskoordinaten (zweite Ableitung) gibt. Mit der klassischen relativistischen Energie-Impuls-Relation

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \quad (2.1.2)$$

und der quantenmechanischen Ersetzung von Energie und Impuls durch

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \quad (2.1.3)$$

kann eine relativistisch gültige, quantenmechanische Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) = \sqrt{-c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \psi(t, \mathbf{x}) \quad (2.1.4)$$

konstruiert werden. Mittels Fouriertransformation ist es aufwändig, aber dennoch möglich die Wurzel aus dem Differentialoperator der Ortskoordinaten zu definieren. Aus diesem

Grund wird Gleichung 2.1.4 in ihrer quadrierten Form

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(t, \mathbf{x}) = (-c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \psi(t, \mathbf{x}) \quad (2.1.5)$$

als sogenannte Klein-Gordon-Gleichung betrachtet. Der alternative Ansatz von Dirac war es, die Wurzel auf der rechten Seite von Gleichung 2.1.4 durch einen Produktansatz der Klein-Gordon-Gleichung (2.1.5)

$$\begin{aligned} -c^2 \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + m^2 c^4 &= \left(c \sum_{i=1}^3 \alpha_i p_i + \beta m c^2 \right)^2 \\ &= \left(-c i \hbar \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} - c i \hbar \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} - c i \hbar \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} + \beta m c^2 \right)^2 \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

zu ziehen. Ausmultiplizieren von 2.1.6 und Koeffizientenvergleich ergibt mit den Antikommutatorklammern $\{\cdot, \cdot\}$ die folgenden Bedingungen

$$\begin{aligned} \{\alpha_i, \alpha_k\} &= 2\delta_{ik} \mathbf{1} \quad i, k = 1, 2, 3 \\ \{\alpha_i, \beta\} &= \mathbf{0} \quad i = 1, 2, 3 \\ \beta^2 &= \mathbf{1} \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

welche durch skalare Größen nicht zu erfüllen sind. Werden α_i und β als quadratische, hermitesche Matrizen angesetzt, so führen die Gleichungen 2.1.7 auf

$$\text{Tr } \alpha_i = \text{Tr } \beta^2 \alpha_i = -\text{Tr } \beta \alpha_i \beta = -\text{Tr } \alpha_i \beta \beta = -\text{Tr } \alpha_i = 0 \quad . \quad (2.1.8)$$

Aus der Bedingung $\alpha_i^2 = 1$ folgt, dass die Eigenwerte von α_i entweder +1 oder -1 betragen. Zusammen mit der Spurbedingung (2.1.8) ergibt sich, dass die Matrizen gerade Dimension besitzen müssen. Die minimale Dimension, in der alle genannten Bedingungen erfüllt werden können, ist vier. Ein möglicher Satz an Matrizen ist mit den Paulimatrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.1.9)$$

gegeben durch

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \beta, \alpha_i \in \mathbb{C}^{4,4}. \quad (2.1.10)$$

Dieser Satz an Matrizen ist die durch Dirac eingeführte Standarddarstellung [Tha92]. Durch Ähnlichkeitstransformation können beliebige andere Matrizen gebildet werden, welche die Bedingungen 2.1.7 erfüllen.

Wenn $\boldsymbol{\alpha} := (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ und $\boldsymbol{\sigma} := (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ als Dreiervektoren von Matrizen definiert werden, so kann die Summe der Impulskomponenten verkürzt mit einem Skalarprodukt geschrieben werden als

$$\sum_{i=1}^3 \alpha_i p_i = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \quad \sum_{i=1}^3 \sigma_i p_i = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \quad . \quad (2.1.11)$$

Damit kann der Dirac-Operator \mathcal{D} als 4×4 Matrix geschrieben werden

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) &= \mathcal{D} \psi(t, \mathbf{x}) \\ &= (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \psi(t, \mathbf{x}) \\ &= (-i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \psi(t, \mathbf{x}) \\ &= \begin{pmatrix} mc^2 \mathbf{1} & -i\hbar c\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\hbar c\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -mc^2 \mathbf{1} \end{pmatrix} \psi(t, \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

wobei die Spinoren ψ Vierervektoren quadratintegrabler Funktionen sind. Die zweimalige Anwendung des Dirac-Operators ergibt wegen $\sigma_i^2 = \mathbf{1}$ und $\nabla mc^2 \mathbf{1} = \mathbf{0}$

$$\mathcal{D}^2 = \begin{pmatrix} m^2 c^4 \mathbf{1} - \hbar^2 c \mathbf{1} \nabla^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & m^2 c^4 \mathbf{1} - \hbar^2 c \mathbf{1} \nabla^2 \end{pmatrix} \quad (2.1.13)$$

die Klein-Gordon-Gleichung 2.1.5 in den Diagonalelementen. Dies ist ein weiterer Grund warum die Dirac-Gleichung als Wurzel der Klein-Gordon-Gleichung interpretiert werden kann.

2.2 Spektrum des freien Dirac-Operators

2.2.1 Definition des Hilbertraums

Es wird in den folgenden Abschnitten häufig notwendig, die Definition eines Skalarproduktes auf Produkträume von Hilberträumen zu verallgemeinern. Wir beginnen deswegen mit folgendem Satz.

Satz 2.2.1 (Skalarprodukt Produktraum) *Seien \mathcal{H}_i $i = 1 \dots n$ Hilberträume mit Skalarprodukten $\langle \cdot | \cdot \rangle_i$ und der Produktraum $\mathcal{H} = \prod_{i=1}^n \mathcal{H}_i$. Dann ist auf \mathcal{H} ein Skalarprodukt*

definiert durch

$$\langle \psi | \phi \rangle := \sum_{i=1}^n \langle \psi_i | \phi_i \rangle_i, \quad \psi, \phi \in \mathcal{H} \quad . \quad (2.2.1)$$

Der Dirac-Operator \mathcal{D} aus Gleichung 2.1.12 ist ein 4×4 -Matrix-Differentialoperator auf \mathbb{C}^4 wertigen Funktionen von $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Wir wählen deswegen den Hilbertraum

$$\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4) = L^2(\mathbb{R}^3)^4 \quad (2.2.2)$$

als einen Raum komplexwertiger Vierervektoren aus dem Lebesgueraum der quadratintegriblen Funktionen $L^2(\mathbb{R}^3)$. Das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ ist gemäß Satz 2.2.1 komponentenweise definiert durch

$$\langle \psi | \phi \rangle := \sum_{i=1}^4 \langle \psi_i | \phi_i \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{i=1}^4 \overline{\psi_i(\mathbf{x})} \phi_i(\mathbf{x}) d^3x \quad . \quad (2.2.3)$$

Auf diesem Hilbertraum soll der Dirac-Operator mit einem geeigneten Definitionsbereich $\mathfrak{D}(\mathcal{D})$ definiert werden. Mit $\mathfrak{D}(O)$ wird auch in Zukunft der Definitionsbereich eines beliebigen Operators O notiert. Für die auftretenden Differentialoperatoren im Dirac-Operator werden die sogenannten Sobolevräume benötigt.

Definition 2.2.2 (Sobolevräume) *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Menge und $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m) \in \mathbb{N}_0^m$ ein Multiindex. Für $m \in \mathbb{N}_0$ und $1 \leq p \leq \infty$ enthält der Raum $W^{m,p}(\Omega)$ alle Funktionen $f \in L^p(\Omega)$ deren schwache Ableitung $D^\alpha f$ existiert und in $L^p(\Omega)$ liegt. Das heißt für alle Multiindizes α mit $|\alpha|_1 \leq m$ gilt $D^\alpha f \in L^p(\Omega)$.*

Die Sobolevräume auf $L^2(\Omega)$ werden mit $H^m(\Omega) := W^{m,2}(\Omega)$ bezeichnet.

In Satz 2.2.7 wird gezeigt, dass der Dirac-Operator auf

$$\mathfrak{D}(\mathcal{D}) = (H^1(\mathbb{R}^3))^4 \quad (2.2.4)$$

selbstadjungiert ist. Dabei ist H^1 der Sobolevraum der quadratintegriblen, einmal schwach differenzierbaren Funktionen mit quadratintegribler schwacher Ableitung und damit der natürliche Definitionsbereich eines Differentialoperators erster Ordnung.

2.2.2 Transformationen des Dirac-Operators

Um die Selbstadjungiertheit des Dirac-Operators auf $(H^1(\mathbb{R}^3))^4$ zu zeigen, muss er in einer leichter zu analysierenden Form dargestellt werden. Dafür definieren wir die Fouriertransformation \mathcal{F} einer integriblen Funktion.

Definition 2.2.3 Sei $\psi \in L^1(\mathbb{R}^n)$ eine integrierbare Funktion. Die (kontinuierliche) Fourier-Transformierte $\mathcal{F}\psi$ von ψ ist definiert durch

$$(\mathcal{F}\psi)(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \, d^n x \quad (2.2.5)$$

Eine wichtige Eigenschaft der Fouriertransformation ist, die sogenannte Austauschformel für Differentialoperatoren.

Lemma 2.2.4 (Austauschformel für Differentialoperatoren) Sei $\psi \in H^n$ und D^α die schwache Ableitung mit Multiindex α und $|\alpha|_1 \leq n$, dann gilt

$$(\mathcal{F} D^\alpha \psi)(\mathbf{k}) = i^{|\alpha|_1} \mathbf{k}^\alpha \cdot (\mathcal{F}\psi)(\mathbf{k}) \quad . \quad (2.2.6)$$

Beweis. Siehe [Wer07, Lemma V.2.11]. □

Die Fouriertransformation wandelt also Differentialoperatoren und damit insbesondere Impulsoperatoren in Multiplikationsoperatoren um.

$$\mathcal{F} \mathbf{p} \mathcal{F}^{-1} = \mathcal{F} (-i\hbar \nabla) \mathcal{F}^{-1} = (\psi \mapsto \hbar \mathbf{k} \cdot \psi) \stackrel{*}{=} (\psi \mapsto \mathbf{p} \cdot \psi) \quad . \quad (2.2.7)$$

Bei $*$ wurde die De-Broglie Beziehung genutzt. Den ursprünglichen Hilbertraum aus Gleichung 2.2.2 bezeichnen wir deswegen in diesem Kontext als Ortsraum $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)^4$, den fouriertransformierten Raum als Impulsraum $L^2(\mathbb{R}^3, d^3p)^4 := \mathcal{F} L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)^4$ und benutzen die Variablen \mathbf{x} bzw. \mathbf{p} als Argumente für Funktionen im Orts, bzw. Impulsraum. Damit kann der Dirac-Operator transformiert werden zu

$$\mathcal{D}_p(\mathbf{p}) = \mathcal{F} \mathcal{D} \mathcal{F}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} mc^2 \mathbf{1} & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -mc^2 \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad . \quad (2.2.8)$$

Im Impulsraum können nach folgendem Lemma die Eigenwerte gefunden werden.

Lemma 2.2.5 (Diagonalisierung im Impulsraum) Sei $p := \|\mathbf{p}\|$, dann besitzt der Dirac-Operator \mathcal{D}_p aus 2.2.8 für vorgegebenes $p \in \mathbb{R}_+$ die vier Eigenwerte

$$\lambda(p) := \lambda_1(p) = \lambda_2(p) = -\lambda_3(p) = -\lambda_4(p) = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \quad (2.2.9)$$

und wird durch

$$u(\mathbf{p}) = \frac{(mc^2 + \lambda(p)) \mathbf{1} + c\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2\lambda(p)(mc^2 + \lambda(p))}} = a_+(p) \mathbf{1} + a_-(p) \beta \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{p} \quad (2.2.10)$$

unitär transformiert mit

$$a_{\pm}(p) := \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm \frac{mc^2}{\lambda(p)}} . \quad (2.2.11)$$

Beweis. Explizit geschrieben lautet der Dirac-Operator im Impulsraum

$$\mathcal{D}_p(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & cp_z & c(p_x - ip_y) \\ 0 & mc^2 & c(p_x + ip_y) & -cp_z \\ cp_z & c(p_x - ip_y) & -mc^2 & 0 \\ c(p_x + ip_y) & -cp_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} . \quad (2.2.12)$$

Mit $A := mc$ und $\tilde{\mathcal{D}}_p := \mathcal{D}_p/c$ ergibt sich

$$\tilde{\mathcal{D}}_p = \begin{pmatrix} A & 0 & p_z & p_x - ip_y \\ 0 & A & p_x + ip_y & -p_z \\ p_z & p_x - ip_y & -A & 0 \\ p_x + ip_y & -p_z & 0 & -A \end{pmatrix} . \quad (2.2.13)$$

Diese Matrix ist offensichtlich hermitesch und damit unitär diagonalisierbar. Für die Berechnung der Eigenwerte wird die Säkulardeterminante nach der ersten Spalte entwickelt

$$\begin{aligned} \det(\tilde{\mathcal{D}}_p - \mathbf{1}\lambda) &= (A - \lambda) \cdot (-1)^{1+1} \cdot \det \begin{pmatrix} A - \lambda & p_x + ip_y & -p_z \\ p_x - ip_y & -A - \lambda & 0 \\ -p_z & 0 & -A - \lambda \end{pmatrix} \\ &\quad + p_z \cdot (-1)^{3+1} \cdot \det \begin{pmatrix} 0 & p_z & p_x - ip_y \\ A - \lambda & p_x + ip_y & -p_z \\ -p_z & 0 & -A - \lambda \end{pmatrix} \\ &\quad + (p_x + ip_y) \cdot (-1)^{4+1} \cdot \det \begin{pmatrix} 0 & p_z & p_x - ip_y \\ A - \lambda & p_x + ip_y & -p_z \\ p_x - ip_y & -A - \lambda & 0 \end{pmatrix} \\ &= (A - \lambda)(A + \lambda)((A - \lambda)(A + \lambda) + p_z^2 + p_x^2 + p_y^2) \\ &\quad + p_z^2(A^2 - \lambda^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \\ &\quad + (p_x + ip_y)(p_x - ip_y)(+p_z^2 + (A - \lambda)(A + \lambda) + (p_x - ip_y)(p_x + ip_y)) \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

$$\begin{aligned}
&= (A - \lambda)(A + \lambda)((A - \lambda)(A + \lambda) + p^2) \\
&\quad + p_z^2(A^2 - \lambda^2 + p^2) \\
&\quad + (p_x^2 + p_y^2)((A - \lambda)(A + \lambda) + p^2) \\
&= (A^2 - \lambda^2 + p^2)((A^2 - \lambda^2) + p_z^2 + p_x^2 + p_y^2) \\
&= (A^2 + p^2 - \lambda^2)^2 \quad .
\end{aligned}$$

Aus der letzten Zeile von 2.2.14 lassen sich die Lösungen $\pm\sqrt{A^2 + p^2}$ ablesen, welche nach Rücksubstitution von $A = mc$ und Multiplikation mit c die Eigenwerte $\pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$ aus 2.2.9 ergeben. Für die unitäre Transformation 2.2.10 müssen die Eigenvektoren gefunden und dafür das homogene Gleichungssystem mit der Koeffizientenmatrix $\tilde{D}_p \pm \sqrt{A^2 + p^2}$ gelöst werden. Mittels Gram-Schmitt Orthogonalisierung können die Eigenvektoren der zweidimensionalen Eigenräume so gewählt werden, dass sich u ergibt [Tha92]. \square

Für den Beweis der Selbstadjungiertheit von \mathcal{D} auf $H^1(\mathbb{R}^3)$ wird noch ein weiteres Lemma benötigt.

Lemma 2.2.6 (Darstellung von H^n mittels Fouriertransformation) *Es gilt:*

$$H^m(\mathbb{R}^n) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) : (1 + |k|^2)^{m/2} \mathcal{F} \psi \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \quad (2.2.15)$$

Beweis. Siehe [Wer07, Satz V.2.14]. \square

Daraus ergibt sich der Hauptsatz dieses Kapitels [Tha92].

Satz 2.2.7 (Selbstadjungiertheit und Spektrum von \mathcal{D}) *Der Dirac-Operator \mathcal{D} ist selbstadjungiert mit dem Sobolev-Raum*

$$\mathfrak{D}(\mathcal{D}) = H^1(\mathbb{R}^3)^4 \quad (2.2.16)$$

als Definitionsbereich. Sein Spektrum ist gegeben durch

$$\sigma(\mathcal{D}) = (-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, \infty) \quad . \quad (2.2.17)$$

Beweis. Aus Gleichung 2.2.10 und Lemma 2.2.5 folgt, dass die unitäre Transformation

$$\mathcal{W} := u \mathcal{F} \quad (2.2.18)$$

den Dirac-Operator in einen Multiplikationsoperator mit der Diagonalmatrix

$$(\mathcal{W} \mathcal{D} \mathcal{W}^{-1})(p) = \beta \lambda(p) \quad (2.2.19)$$

umwandelt. Damit folgt, dass \mathcal{D} selbstadjungiert auf

$$\mathfrak{D}(\mathcal{D}) = \mathcal{W}^{-1} \mathfrak{D}(\beta\lambda(\cdot)) = \mathcal{F}^{-1} u^{-1} \mathfrak{D}(\beta\lambda(\cdot)) = \mathcal{F}^{-1} \mathfrak{D}(\beta\lambda(\cdot)) \quad (2.2.20)$$

ist. Dabei wurde die Schreibweise $\beta\lambda(\cdot) := \psi \mapsto \beta\lambda(p)\psi$ verwendet und genutzt, dass u^{-1} als unitäre Transformation den Definitionsbereich eines Multiplikationsoperators unverändert lässt. Die Menge $\mathfrak{D}(\beta\lambda(\cdot))$ kann geschrieben werden als

$$\mathfrak{D}(\beta\lambda(\cdot)) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3p)^4 \mid \sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2} \psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3p)^4\} \quad (2.2.21)$$

Nach Lemma 2.2.6 folgt deswegen

$$\mathcal{F}^{-1} \mathfrak{D}(\beta\lambda(\cdot)) = H^1(\mathbb{R}^3)^4 \quad (2.2.22)$$

Das Spektrum von \mathcal{D} ist durch das Spektrum des Multiplikationsoperators $\beta\lambda$ gegeben, welches dem Bild der Funktionen $\lambda_i(p), i = 1, \dots, 4$ entspricht. \square

2.3 Negative Energien und Zitterbewegung

In diesem Abschnitt werden die Lösungen positiver bzw. negativer Energie und die sogenannte Zitterbewegung diskutiert. Insbesondere wird erklärt, warum später in Kapitel 3 ausschließlich Wellenfunktionen positiver Energie angenommen werden.

2.3.1 Negative Energien

Die oberen beiden Komponenten des diagonalisierten Dirac-Operators $\beta\lambda_i(p)$ im transformierten Raum $\mathcal{W}L^2(\mathbb{R}^3)^4$ gehören zu Wellenfunktionen positiver Energie, während die unteren beiden Komponenten zu Wellenfunktionen negativer Energie gehören. Aus diesem Grund können die Unterräume positiver (\mathcal{H}_{pos}) bzw. negativer (\mathcal{H}_{neg}) Energie für $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3\mathbf{x})$ definiert werden durch

$$\begin{aligned} \psi_{\text{pos}} &= \mathcal{W}^{-1} \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \beta) \mathcal{W} \psi \\ \psi_{\text{neg}} &= \mathcal{W}^{-1} \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \beta) \mathcal{W} \psi \quad . \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

Da die beiden Unterräume zueinander orthogonal stehen, kann $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)^4$ zerlegt werden in

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{pos}} \oplus \mathcal{H}_{\text{neg}} \quad (2.3.2)$$

Die orthogonalen Projektoren in die beiden Räume sind gegeben durch

$$P_{\text{neg}}^{\text{pos}} = \mathcal{W}^{-1} \frac{1}{2} (\mathbf{1} \pm \beta) \mathcal{W} \quad . \quad (2.3.3)$$

Da die Projektoren mit dem Dirac-Operator kommutieren, wird ein System positiver/negativer Energie unter Zeitevolution positiv/negativ bleiben.

$$\begin{aligned} \psi(t) \equiv \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\psi &= P_{\text{pos}}\psi(t) \quad \Leftrightarrow \quad \psi = P_{\text{pos}}\psi \\ \psi(t) \equiv \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\psi &= P_{\text{neg}}\psi(t) \quad \Leftrightarrow \quad \psi = P_{\text{neg}}\psi \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

2.3.2 Zitterbewegung

Die sogenannte „Zitterbewegung“, ein Phänomen, das in der nichtrelativistischen Mechanik nicht auftritt und eine Folge der Mischung positiver und negativer Energiezustände ist, wird in diesem Abschnitt diskutiert.

Der Operator der Geschwindigkeit ergibt sich aus der Zeitableitung des Ortsoperators $\mathbf{x}(t) \equiv \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\mathbf{x}\exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)$. Wenn \mathbf{x} als Standardortsoperator gewählt wird, d. h. als Multiplikationsoperator im Ortsraum, dann ergibt sich der sogenannte *Standardgeschwindigkeitsoperator* als

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}(t)] = c\boldsymbol{\alpha}(t) \quad . \quad (2.3.5)$$

Hierbei wurde der Kommutator formal ausgewertet ohne den Definitionsbereich dieses Operators genauer zu betrachten. Wie im Anhang unter Abschnitt 5.1 bewiesen wird, ist der Ausdruck wohldefiniert und die folgenden Überlegungen auch „mathematisch“ abgesichert.

Die Matrix $c\boldsymbol{\alpha}$ hat mit den Eigenwerten $\{-c, c\}$ ein rein diskretes Spektrum und $c\boldsymbol{\alpha}(t)$ ist unitär äquivalent zu $c\boldsymbol{\alpha}$. Es folgt, dass $\sigma(c\boldsymbol{\alpha}(t)) = \{-c, c\}$ für alle Zeiten t sein muss. Damit ergibt sich das paradoxe Resultat, dass eine Geschwindigkeitsmessung zu einem beliebigen Zeitpunkt nur die beiden Werte $-c$ oder c ergeben kann.

Aufgrund des Korrespondenzprinzips und der aus der klassischen relativistischen Mechanik bekannten Beziehung $\mathbf{v} = c^2\mathbf{p}/E$ wäre a priori $c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1}$ als Geschwindigkeitsoperator zu erwarten gewesen. Dieser Operator ist stetig mit Spektrum $[-c, c]$ und ist, weil mit \mathcal{D} kommutierend, eine Erhaltungsgröße freier Teilchen. Wir bezeichnen $c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1}$ als den *klassischen Geschwindigkeitsoperator*.

Die Zeitableitung des Standardgeschwindigkeitsoperators ist gegeben durch

$$\frac{d}{dt}c\boldsymbol{\alpha}(t) = \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, c\boldsymbol{\alpha}]\exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right) \quad (2.3.6)$$

mit dem Kommutator

$$\begin{aligned} [\mathcal{D}, c\boldsymbol{\alpha}] &= \{\mathcal{D}, c\boldsymbol{\alpha}\} - 2c\boldsymbol{\alpha}\mathcal{D} \\ &= \{c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\boldsymbol{\beta}, c\boldsymbol{\alpha}\} - 2c\boldsymbol{\alpha}\mathcal{D} \\ &= \{c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}, c\boldsymbol{\alpha}\} - 2c\boldsymbol{\alpha}\mathcal{D} \\ &= 2c^2\mathbf{p} - 2c\boldsymbol{\alpha}\mathcal{D} \\ &= -2(c\boldsymbol{\alpha} - c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1})\mathcal{D} \quad . \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

Der Ausdruck $c\boldsymbol{\alpha} - c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1}$ wird mit \mathbf{F} bezeichnet und kann als Differenz zwischen klassischem und Standardgeschwindigkeitsoperator interpretiert werden. Da \mathcal{D} und \mathbf{F} wegen

$$\begin{aligned} [\mathcal{D}, \mathbf{F}] &= [\mathcal{D}, c\boldsymbol{\alpha}] - [\mathcal{D}, c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1}] \\ &= -2\mathbf{F}\mathcal{D} - 0 \\ \Rightarrow \{\mathcal{D}, \mathbf{F}\} &= 0 \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

antikommutieren, folgt

$$[\mathcal{D}, c\boldsymbol{\alpha}] = 2\frac{i}{\hbar}\mathcal{D}\mathbf{F} \quad . \quad (2.3.9)$$

Weiterhin gilt, wegen $\{\mathcal{D}, \mathbf{F}\} = 0$, für die Zeitentwicklung von \mathbf{F}

$$\mathbf{F}(t) = \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\mathbf{F}\exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right) = \exp\left(\frac{2i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\mathbf{F} \quad (2.3.10)$$

und damit

$$\frac{d}{dt}c\boldsymbol{\alpha}(t) = 2\frac{i}{\hbar}\mathcal{D}\exp\left(\frac{2i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\mathbf{F} \quad . \quad (2.3.11)$$

Damit ergibt sich die Zeitentwicklung des Standardgeschwindigkeitsoperators durch

Integration von Gleichung 2.3.11 mit $c\boldsymbol{\alpha}(0) = c\boldsymbol{\alpha}$ als

$$\begin{aligned} c\boldsymbol{\alpha}(t) &= \int_0^t \frac{2i\mathcal{D}}{\hbar} \exp\left(\frac{2i\mathcal{D}t}{\hbar}\right) \mathbf{F} dt \\ &= \mathbf{F}(t) - \mathbf{F}(0) + c\boldsymbol{\alpha} \\ &= c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1} + \mathbf{F}(t) \quad . \end{aligned} \tag{2.3.12}$$

Die Zeitentwicklung des Ortes ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t) &= \int_0^t c\boldsymbol{\alpha}(t) dt \\ &= \int_0^t c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1} + \mathbf{F}(t) dt \\ &= \underbrace{\mathbf{x} + c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1}t}_{\text{klassischer Term}} + \underbrace{\frac{\hbar}{2i\mathcal{D}} \left(\exp\left(\frac{2i\mathcal{D}t}{\hbar}\right) - 1 \right) \mathbf{F}}_{\text{Zitterterm}} \quad . \end{aligned} \tag{2.3.13}$$

Es ergibt sich demnach eine Bewegung proportional zur Zeit gemäß dem klassischen Term mit einer schnellen Oszillation die durch den Zitterterm gegeben ist.

Da \mathbf{F} und \mathcal{D} antikommutieren folgt

$$\mathbf{F}P_{\text{neg}}^{\text{pos}} = P_{\text{pos}}^{\text{neg}}\mathbf{F} \tag{2.3.14}$$

und damit

$$P_{\text{pos}}\mathbf{F}P_{\text{pos}} = P_{\text{neg}}\mathbf{F}P_{\text{neg}} = 0 \quad . \tag{2.3.15}$$

Ist ein System ψ in einem Zustand ausschließlich positiver oder negativer Energie präpariert, so ergibt sich mit

$$\langle \psi(t) | \mathbf{x} \psi(t) \rangle = \langle \psi | \mathbf{x} \psi \rangle + \langle \psi | c^2\mathbf{p}\mathcal{D}^{-1} \psi \rangle t, \quad \psi \in \mathcal{H}_{\text{pos}} \text{ oder } \mathcal{H}_{\text{neg}} \tag{2.3.16}$$

die klassische Bewegung eines Teilchens.

So klar die Zitterbewegung mathematisch hergeleitet werden kann, so problematisch ist sie für die physikalische Interpretation. Aus diesem Grund wurden auch alternative Ortsoperatoren wie z. B.

$$\tilde{\mathbf{x}} := P_{\text{pos}}\mathbf{x}P_{\text{pos}} + P_{\text{neg}}\mathbf{x}P_{\text{neg}} \tag{2.3.17}$$

definiert. Allerdings ergeben sich dadurch andere Probleme in der physikalischen Interpretation [Tha92, Kapitel 1.7]. Zusammenfassend wird im Rahmen dieser Arbeit deswegen angenommen, dass die verwendeten Wellenfunktionen ausschließlich positive Energien besitzen.

2.4 Lösung der Bewegung in einer Dimension

Soll die Dirac-Gleichung des freien Teilchens (2.1.12) eine Bewegung in einer Raumrichtung, z. B. entlang der Kanten eines Graphen, beschreiben, so lautet die Gleichung (o.B.d.A. in x -Richtung)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) &= \mathcal{D} \psi(t, \mathbf{x}) \\ &= (c\alpha_x p_x + \beta mc^2) \psi(t, \mathbf{x}) \quad . \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

Nun gibt es zwei konzeptionell verschiedene Wege den Dirac-Operator auf Graphen zu realisieren. Im historischen Ansatz von Ruedenberg und Scherr für den Schrödingeroperator repräsentierte der Graph ein konkretes Molekül welches durch ein Teilchen im Kasten entlang der Kernverbindungsachse beschrieben wurde [RS53]. Die Ausdehnung des Kastens orthogonal zur Kernverbindungsachse wurde dann so stark verkleinert, dass nur noch die x -Richtung für die Beschreibung des Problems relevant war. Wird dieses Modell auf den Dirac-Operator übertragen, so ergibt sich eine Beschreibung mit vierdimensionalen Spinoren bei denen die Bewegung auf die x -Richtung beschränkt ist.

Wird das Problem von vornherein auf eine Dimension beschränkt und die Bedingungen an α_i und β (2.1.7) aus der ursprünglichen Herleitung nochmals betrachtet, so ergibt sich, dass bei drei oder weniger Matrizen α_i, β nur noch eine Dimension von 2×2 erforderlich ist und die Paulimatrizen 2.1.9 bereits ausreichen, um Gleichung 2.1.7 zu erfüllen.

Die Beschreibung mittels zweidimensionaler Spinoren erleichtert die mathematische Behandlung, weist aber den großen Nachteil auf, dass die physikalische Interpretierbarkeit bestimmter $3 + 1$ Raum-Zeit-Symmetrien nicht mehr gegeben sind [WZ15]. Die Spektren sind dagegen in beiden Fällen gleich, oder wie es bei Bolte und Harrison heißt: „The spectrum is independent of the choice of spinors so the physics of the system cannot distinguish the language used to describe it.“

2.4.1 Vierdimensionale Spinoren

Soll die Dirac-Gleichung (2.1.12) ein System in einer Dimension, z. B. entlang der Kanten eines Graphen, beschreiben, so ergibt sich der Hamiltonian aus Gleichung 2.1.12 als

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) &= \mathcal{D} \psi(t, \mathbf{x}) \\ &= (c\alpha_2 p_y + \beta mc^2) \psi(t, \mathbf{x}) \quad . \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

In Gleichung 2.4.1 wird y statt des kanonischen x als Raumrichtung verwendet, damit sich unter Verwendung von α_2 die gleiche Matrixdarstellung wie in der Literatur [BH03] ergibt. Für positive Energien (vgl. Abschnitt 2.3) ergeben sich die Lösungen der Eigenwertgleichung

$$\mathcal{D} \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.4.3)$$

als

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= \mu_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ i\gamma(k) \end{pmatrix} \exp(ikx) + \mu_\beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -i\gamma(k) \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ikx) \\ &+ \hat{\mu}_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -i\gamma(k) \end{pmatrix} \exp(-ikx) + \hat{\mu}_\beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i\gamma(k) \\ 0 \end{pmatrix} \exp(-ikx) \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

mit $k > 0$ und

$$\gamma(k) := \frac{E - mc^2}{\hbar ck}, \quad E = \sqrt{(\hbar ck)^2 + m^2 c^4} \quad . \quad (2.4.5)$$

Es wurde mit der De-Broglie Beziehung zwischen Impuls p und Wellenzahl k gewechselt.

2.4.2 Zweidimensionale Spinoren

Wenn die Bedingungen an α_i und β (2.1.7) aus der ursprünglichen Herleitung nochmals betrachtet werden, so ergibt sich, dass bei drei oder weniger Matrizen α_i, β nur noch eine Dimension von 2×2 erforderlich ist und die Paulimatrizen 2.1.9 bereits ausreichen, um Gleichung 2.1.7 zu erfüllen. Auch im 2×2 Fall gilt natürlich, dass durch Ähnlichkeitstransformation beliebige andere Matrizen gewählt werden können, die Gleichung 2.1.7 erfüllen. In dieser Arbeit wird analog zu Bolte und Harrison die Darstellung mit den

Paulimatrizen σ_2 und σ_3 gewählt [BH03]

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) &= \mathcal{D} \psi(t, \mathbf{x}) \\ &= (c\sigma_2 p_x + \sigma_3 mc^2) \psi(t, \mathbf{x}) \quad . \end{aligned} \quad (2.4.6)$$

Um die Gleichung ähnlich dem dreidimensionalen Fall zu schreiben, setzen wir im eindimensionalen Fall

$$\alpha := \sigma_2 \quad \beta := \sigma_3 \quad (2.4.7)$$

und können damit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = (c\alpha p_x + \beta mc^2) \psi(t, x) \quad (2.4.8)$$

schreiben. Wieder für positive Energien (vgl. Abschnitt 2.3) ergeben sich die Lösungen der Eigenwertgleichung

$$\mathcal{D} \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.4.9)$$

als

$$\psi_k(x) = \mu(k) \begin{pmatrix} 1 \\ i\gamma(k) \end{pmatrix} \exp(ikx) + \hat{\mu}(k) \begin{pmatrix} 1 \\ -i\gamma(k) \end{pmatrix} \exp(-ikx) \quad . \quad (2.4.10)$$

wobei $\gamma(k)$ und E wie in Gleichung 2.4.5 definiert bzw. durch k parametrisiert sind.

Die Beschreibung mittels zweidimensionaler Spinoren kann auch durch eine unitäre Transformation der Gleichung 2.4.2 begründet werden. Seien dafür α und β gemäß Gleichung 2.4.2

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.4.11)$$

und die unitäre Transformation U

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.4.12)$$

Die Transformation von α und β mittels U ergibt die Blockdiagonalmatrizen

$$U\alpha U^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \quad U\beta U^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.4.13)$$

Jeder der zwei 2×2 Blöcke repräsentiert die Beschreibung mittels zweidimensionaler Spinoren gemäß Gleichung 2.4.8. Es muss nochmals betont werden, dass die physikalischen Interpretation von Spin, Teilchen und Antiteilchen, Zeitumkehrinvarianz etc. bei zweidimensionalen Spinoren teilweise nicht mehr gegeben ist [WZ15].

3 Die Dirac-Gleichung auf Quantengraphen

3.1 Quantengraphen

Definition 3.1.1 (Graph) *Wir bezeichnen den Graphen $G = (V, E)$ als das Paar aus einer abzählbaren Menge V von sogenannten Knoten (englisch Vertices) und einer Menge $E \subset \{\{v, w\} : v, w \in V, v \neq w\}$ von sogenannten Kanten (englisch Edges). Wenn $e = \{v, w\} \in E$ so sagen, wir dass v und w durch e verbunden sind und schreiben $v \sim w$.*

Ein Pfad der Länge n ist eine Sequenz von n verbundenen Knoten

$$v_1 \sim v_2 \sim \dots \sim v_{n-1} \sim v_n$$

Ein Graph heißt zusammenhängend, wenn zwei beliebige Knoten durch wenigstens einen Pfad miteinander verbunden sind. Die Valenz oder der Grad eines Knotens v ist definiert durch $\deg(v) := |\{e \in E : v \in e\}|$. Für die Anzahl der Kanten in einem Graphen schreiben wir $B := |E|$.

Unter gewissen Umständen ordnen wir den Kanten eine Richtung zu und behandeln in diesem Fall E als eine Menge von Zweiertupeln. Den Startknoten einer gerichteten Kante $e = (v, w)$ wird mit $p(e) = v$, der Endknoten mit $q(e) = w$ bezeichnet. Ein Graph mit gerichteten Kanten wird als gerichteter Graph bezeichnet.

Definition 3.1.2 (Metrischer Graph) *Wird ein Graph $G = (V, E)$ mit einer Funktion $L : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ ausgestattet, die jeder Kante eine Länge zuordnet, so spricht man von einem metrischen Graphen und schreibt $G = (V, E, L)$.*

Definition 3.1.3 (Adjazenzmatrix) *Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ und $E = \{e_1, \dots, e_m\}$, dann ist die Adjazenzmatrix $N(G) \in \{0, 1\}^{n,n}$ gegeben durch*

$$N_{i,j} := \begin{cases} 1 & \text{wenn } v_i \sim v_j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.1.1)$$

Definition 3.1.4 (Inzidenzmatrix) Sei $G = (V, E)$ ein gerichteter Graph mit $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ und $E = \{e_1, \dots, e_m\}$, dann ist die Inzidenzmatrix $B(G) \in \{0, 1\}^{n, m}$ gegeben durch

$$B_{i,j} := \begin{cases} 1 & \text{wenn } v_i = p(e_j) \\ 0 & \text{wenn } v_i \notin e_j \\ -1 & \text{wenn } v_i = q(e_j) \end{cases} \quad (3.1.2)$$

Definition 3.1.5 (Periodische Pfade [KS99b]) Ein Pfad ist eine Folge verbundener Kanten $(i_1, i_2), (i_2, i_3), \dots$ mit $i_j \in V$. Eine dazu äquivalente Beschreibung ist eine Folge benachbarter Knoten i_1, i_2, \dots sodass $B_{i_m, i_{m+1}} = 1$ ist. Ein Pfad ist periodisch mit Periode n , wenn $(i_n, i_{n+1}) = (i_{n+k}, i_{n+k+1})$ gilt. Der Code eines n -periodischen Pfades ist eine Folge von n Knoten, die den Pfad festlegen. Unter Nutzung der Äquivalenzrelation $i_{m+n} \equiv i_m$ werden dann nur Kanten (i_m, i_{m+1}) betrachtet für die $1 \leq m \leq n$ gilt. Dadurch definiert jeder Code bis auf zyklische Permutationen den gleichen Pfad. Die periodischen Pfade (PP) können weiter eingeteilt werden in

- Irreduzible, periodische Pfade sind PPs, die sich nicht selber schneiden. Damit kann jeder Knoten maximal einmal im Code auftauchen und die Länge des Codes ist durch $|V|$ beschränkt.
- Reduzible, periodische Pfade sind Pfade, deren Code aus den Codes irreduzibler PPs zusammengesetzt ist.
- Primitive, periodische Pfade sind Pfade, deren Code nicht als Wiederholung von Codes anderer Pfade geschrieben werden kann.

In dieser Arbeit werden ausschließlich zusammenhängende Graphen angenommen. Auf den Kanten dieser Graphen soll der eindimensionale Dirac-Operator (2.4.1) mit geeigneten Nebenbedingungen realisiert werden. Dafür muss zunächst ein geeigneter Funktionenraum definiert werden.

Definition 3.1.6 (Quantengraphen) Sei $G = (V, E, L)$ ein gerichteter, metrischer Graph und $n \in \mathbb{N}_+$, so kann jeder Kante ein Intervall $[0, L_e]$ vom Start- zum Endknoten zugeordnet

werden. Damit kann der Hilbertraum folgendermaßen definiert werden

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &:= \bigoplus_{e \in E} L^2([0, L_e])^n \\
\langle \psi | \phi \rangle &:= \sum_{e \in E} \langle \psi | \phi \rangle_e \\
&= \sum_{e \in E} \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} \overline{\psi_i^e(x)} \phi_i^e(x) \, dx, \quad \psi, \phi \in \mathcal{H} \quad .
\end{aligned} \tag{3.1.3}$$

Einen Graphen auf dem analog zu 3.1.3 ein Funktionenraum definiert ist, bezeichnen wir als Quantengraphen und schreiben $\mathcal{H}(V, E, L)$.

Auf einem geeigneten Unterraum von \mathcal{H} soll der eindimensionale Dirac-Operator aus Definition 3.1.6 als selbst-adjungierter Operator realisiert werden. Dabei ist es vorteilhaft zwischen der Beschreibung mittels zweidimensionaler ($n = 2$) und vierdimensionaler Spinoren ($n = 4$) zu wechseln. Wegen Satz 2.2.7 ist zu vermuten, dass der Definitionsbereich $\bigoplus_{e \in E} H^1([0, L_e])^n$ ($n \in \{2, 4\}$) gewählt werden kann. Im Folgenden werden wir zeigen, dass dieser Raum abhängig von den Nebenbedingungen noch weiter eingeschränkt werden muss. Dafür werden symplektische Formen und insbesondere Satz 3.2.9 benötigt, welche im folgenden Abschnitt eingeführt bzw. bewiesen werden. Anschließend wird der Dirac-Operator zuerst mit zweidimensionalen dann mit vierdimensionalen Spinoren auf einem Graphen realisiert.

3.2 Symplektische Formen

In diesem Abschnitt werden symplektische Formen mit den Mitteln der klassischen linearen Algebra eingeführt. Es werden nur die wichtigsten Definitionen und Sätze aufgeführt. Insbesondere Satz 3.2.9 ist für spätere Beweise wichtig. Ausführliche Zwischenschritte und notwendige Lemmata finden sich im Anhang 5.2. Die Beweisideen stammen teilweise aus der Literatur, wurden aber von reellen auf komplexe Räume verallgemeinert und vereinheitlicht.

Definition 3.2.1 (Sesquilinearform) *Sei V ein \mathbb{C} -Vektorraum. Eine lineare Abbildung $\omega: V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ ist eine Sesquilinearform, wenn sie folgende Eigenschaften besitzt.*

1. *Linearität im zweiten Argument*

$$\forall v, w_1, w_2 \in V, a, b \in \mathbb{C}: \omega(v, aw_1 + bw_2) = a\omega(v, w_1) + b\omega(v, w_2) \tag{3.2.1}$$

2. Semilinearität im ersten Argument

$$\forall v_1, v_2, w \in V, a, b \in \mathbb{C}: \omega(av_1 + bv_2, w) = \bar{a}\omega(v, w_1) + \bar{b}\omega(v, w_2) \quad (3.2.2)$$

Definition 3.2.2 (Symplektische Form [EM99]) *Sei V ein \mathbb{C} -Vektorraum. Eine symplektische Form ist eine schiefhermitesche, nicht ausgeartete Sesquilinearform auf V . Das heißt zusätzlich zu den Eigenschaften in Definition 3.2.1 müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:*

1. Schief-Hermitizität

$$\forall v, w \in V: \omega(v, w) = -\overline{\omega(w, v)} \quad (3.2.3)$$

2. Nicht-Ausgeartetheit

$$\forall v \neq 0 \in V: \exists w \in V: \omega(v, w) \neq 0 \quad (3.2.4)$$

Definition 3.2.3 (Symplektischer Vektorraum) *Ein \mathbb{C} -Vektorraum auf dem eine symplektische Form definiert ist, wird als symplektischer (Vektor-)Raum bezeichnet.*

Satz 3.2.4 (Matrixdarstellung symplektischer Formen) *Sei V ein symplektischer Vektorraum endlicher Dimension n und ω eine symplektische Form auf diesem Raum. Sei $B = (v_1, \dots, v_n)$ eine beliebige Basis und Ω die Matrixdarstellung von ω , die sich aus der Wahl von B ergibt. Dann ist Ω schiefhermitesch und invertierbar.*

Beweis.

1. Schief-Hermitizität:

$$\Omega_{i,j} = \omega(v_i, v_j) = -\overline{\omega(v_j, v_i)} = -\overline{\Omega_{j,i}} \quad (3.2.5)$$

2. Invertierbarkeit: Sei $v \in V$ und damit

$$\Omega v = \sum_{i=1}^n \omega(v_i, v) v_i \quad . \quad (3.2.6)$$

Nehme für einen Widerspruch an, dass $v \neq 0 \in \ker(\Omega)$. Dann folgt, dass $\omega(v_i, v) = 0$ für alle i ist, da die v_i nach Annahme eine Basis bilden. Da ω nicht ausgeartet ist, folgt der Widerspruch $v = 0$.

□

Wenn im folgenden Abschnitt von einem symplektischen Vektorraum V gesprochen wird, so wird davon ausgegangen, dass dessen symplektische Form als ω mit Matrixdarstellung Ω bezeichnet wird.

Beispiel 3.2.5 Sei $V = \mathbb{C}^{2n}$ und

$$J := \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} . \quad (3.2.7)$$

Dann ist durch

$$\omega(v, w) := \langle v | Jw \rangle \quad (3.2.8)$$

eine symplektische Form definiert. Diese wird auch als kanonische symplektische Form bezeichnet.

Mittels Gram-Schmitt-artiger Orthogonalisierung kann der folgende Satz konstruktiv bewiesen werden.

Satz 3.2.6 (Kanonische Matrixdarstellung [Jag]) Sei $V = \mathbb{C}^{2n}$ ein endlicher, symplektischer Vektorraum gerader Dimension, dann kann eine Basis B so gewählt werden, dass die Matrixdarstellung Ω der symplektischen Form folgende Gestalt erhält

$$\Omega = J = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} . \quad (3.2.9)$$

Definition 3.2.7 (Symplektisches Komplement) Sei V ein symplektischer Vektorraum und $W \subset V$ ein Unterraum von V . Dann ist das symplektische Komplement W^\top definiert durch

$$W^\top := \{v \in V \mid \forall w \in W : \omega(v, w) = 0\} . \quad (3.2.10)$$

Der Unterraum W wird

1. isotrop genannt, wenn $W \subset W^\top$
2. maximal isotrop bzw. lagrangesche genannt, wenn $W = W^\top$.

Definition 3.2.8 Seien $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{C}^{n,n}$ Matrizen und $v, w \in \mathbb{C}^n$. Dann ist der Unterraum $\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})$ von \mathbb{C}^{2n} durch die Lösungen des homogenen Gleichungssystems

$$(\mathbb{A}, \mathbb{B}) \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} = \mathbb{A}v + \mathbb{B}w = 0 \quad (3.2.11)$$

definiert.

Mit diesen Vorarbeiten ergibt sich der Hauptsatz dieses Abschnittes.

Satz 3.2.9 (Lagrangeraum als Gleichungssystem [KS99a]) *Sei $V = \mathbb{C}^{2n}$ und die Basis so gewählt (Satz 3.2.6), dass ω mit $\Omega = J$ die kanonische Matrixdarstellung erhält. Seien $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{C}^{n,n}$, dann ist $\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})$ genau dann ein Lagrangeraum, wenn (\mathbb{A}, \mathbb{B}) vollen Rang besitzt und $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ selbstadjungiert ist.*

Beweis. Sei (\mathbb{A}, \mathbb{B}) eine Matrix mit vollem Rang und $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ selbstadjungiert. Es gilt wegen des Ranges $\dim(\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})) = n$, womit zu zeigen bleibt, dass $\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})$ isotrop ist. Mit $x \in \mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})$ und d^k als der k -ten Spalte von $(A, B)^\dagger$, lässt sich das Gleichungssystem 3.2.11 schreiben als $\forall 1 \leq k \leq n: \langle d^k | x \rangle = 0$. Da die d^k linear unabhängig sind, spannen sie den n -dimensionalen Unterraum $\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})^\perp$ auf. Nach Lemma 5.2.4 muss nur noch gezeigt werden, dass die d^k einen isotropen Raum aufspannen, was auf die Bedingung

$$(A, B)J(A, B)^\dagger = AB^\dagger - BA^\dagger = 0 \quad (3.2.12)$$

führt, die genau dann erfüllt ist, wenn AB^\dagger selbstadjungiert ist. \square

3.3 Zweidimensionale Spinoren

3.3.1 Selbstadjungierte Realisierung auf Graphen

Es soll der größtmögliche Unterraum von $\bigoplus_{e \in E} H^1([0, L_e])^2$ gefunden werden auf dem \mathcal{D} selbstadjungiert definiert werden kann. Das heißt es soll der größtmögliche Unterraum gefunden werden, für den $\langle \phi | \mathcal{D} \psi \rangle = \langle \psi | \mathcal{D} \phi \rangle$ gilt. Wird die symplektische Form ω folgendermaßen definiert

$$\omega(\phi, \psi) = \langle \phi | \mathcal{D} \psi \rangle - \langle \psi | \mathcal{D} \phi \rangle \quad , \quad (3.3.1)$$

so ergibt sich mit der Sprache von Definition 3.2.7, dass ein maximal isotroper Unterraum bzgl. ω gefunden werden soll. Partielle Integration liefert für 3.3.1

$$\omega(\phi, \psi) = \hbar c \sum_{e \in E} \left(\psi_1^e(0) \bar{\phi}_2^e(0) - \psi_1^e(L_e) \bar{\phi}_2^e(L_e) - \psi_2^e(0) \bar{\phi}_1^e(0) + \psi_2^e(L_e) \bar{\phi}_1^e(L_e) \right). \quad (3.3.2)$$

Die symplektische Form hängt also nur noch von den Funktionswerten bei 0 und L_e ab. Um die Notation zu vereinfachen, wird analog zur Literatur die sogenannte „Einsetzungsabbildung“ $[\cdot] \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}^{2m}$ definiert [BH03; KS99a].

Definition 3.3.1 (Einsetzungsabbildung) Sei $E = \{e_1, \dots, e_m\}$ die Menge der Kanten und \mathcal{H} ein Quantengraph aus Definition 3.1.6. Wir definieren:

$$[\cdot]: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}^{4m}$$

$$\psi \mapsto \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}_1 \\ \boldsymbol{\psi}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\psi_1^1(0), \dots, \psi_1^m(0), \psi_1^1(L_1), \dots, \psi_1^m(L_m))^T \\ (-\psi_2^1(0), \dots, -\psi_2^m(0), \psi_2^1(L_1), \dots, \psi_2^m(L_m))^T \end{pmatrix}. \quad (3.3.3)$$

Satz 3.3.2 (Selbstadjungierte Realisierung [BH03]) Der Definitionsbereich $\mathfrak{D}(\mathcal{D})$ mit dem der Dirac-Operators selbstadjungiert auf dem Quantengraphen \mathcal{H} mit Kantenmenge $E = \{e_1, \dots, e_m\}$ realisiert werden kann, ist genau dann maximal gewählt, wenn es zwei Matrizen $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{C}^{2m, 2m}$ gibt, so dass $\mathfrak{D}(\mathcal{D}) = [\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})]^{-1}$ ist, (\mathbb{A}, \mathbb{B}) vollen Rang besitzt und $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ selbstadjungiert ist.

Der Ausdruck $[\cdot]^{-1}$ ist dabei das Urbild, der nicht injektiven Einsetzungsabbildung.

Beweis. Mittels Einsetzungsabbildung und der kanonischen symplektischen Form J (Beispiel 3.2.5) lässt sich Gleichung 3.3.1 schreiben als

$$\omega(\phi, \psi) = \langle [\phi] | J[\psi] \rangle = \left\langle \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}_1 \\ \boldsymbol{\phi}_2 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}_1 \\ \boldsymbol{\psi}_2 \end{pmatrix} \right\rangle. \quad (3.3.4)$$

Um die Lagrangeräume im Funktionenraum \mathcal{H} zu finden, müssen also nur noch die Lagrangeräume bzgl. J in \mathbb{C}^{4m} gefunden werden. Das Urbild von $[\cdot]$ ergibt dann die Menge auf der \mathcal{D} als selbstadjungierter Operator definiert werden kann. Insbesondere kann mit zwei Matrizen $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{C}^{2m, 2m}$ das Gleichungssystem

$$\mathbb{A}\boldsymbol{\psi}_1 + \mathbb{B}\boldsymbol{\psi}_2 = 0 \quad (3.3.5)$$

aufgestellt werden um Satz 3.2.9 anzuwenden. Es folgt dann, dass durch die Lösungen genau dann ein Lagrangeraum aufgespannt wird, wenn $(\mathbb{A}, \mathbb{B}) \in \mathbb{C}^{2m, 4m}$ vollen Rang besitzt und $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ selbstadjungiert ist. \square

3.3.2 Nebenbedingungen und Konnektivität

Eine Beziehung zwischen den Matrizen \mathbb{A}, \mathbb{B} und dem Graphen und seiner Konnektivität wird durch Nebenbedingungen hergestellt, die an den Knoten erfüllt sein müssen. Eine solche Bedingung ist zum Beispiel dadurch gegeben, dass Stetigkeit in der ersten Komponente eines Spinors gefordert wird

$$\forall v \in V: \forall e, e' \in E_v: \psi_1^e(v) = \psi_1^{e'}(v) \quad (3.3.6)$$

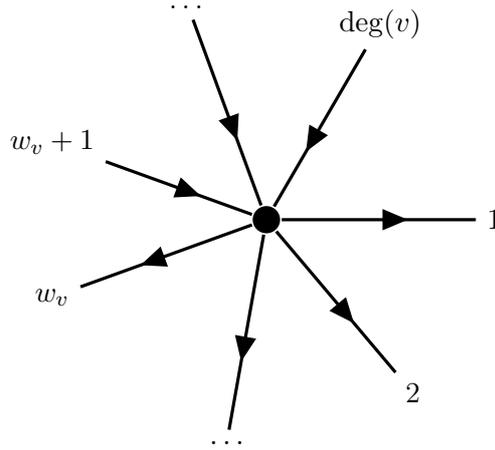


Abbildung 3.1: Ein einzelner Knoten an dem Nebenbedingungen spezifiziert werden sollen.

Diese Kontinuitätsbedingung an einem einzelnen Knoten würde bei geeigneter Sortierung zum Beispiel zu einer Matrix \mathbb{A} folgender Gestalt

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ & 1 & -1 & & \\ & & 1 & -1 & \\ & & & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.7)$$

führen. Im Folgenden nehmen wir an, dass die Nebenbedingungen an einem Knoten unabhängig von den anderen Knoten im Graph gestellt werden und wir die Knoten einzeln betrachten können. Das Ziel ist es dann die Matrizen \mathbb{A} und \mathbb{B} aus den Nebenbedingungen an den einzelnen Knoten \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v aufzubauen. Für die weitere Analyse sortieren wir die Menge der Kanten E_v an einem Knoten v wie in Abbildung 3.1 so, dass zuerst die w_v abgehenden und dann die eingehenden Kanten auftauchen. Damit kann der Vektor ψ^v mit den Funktionswerten an v definiert werden als

$$\begin{aligned} \psi^v &:= \begin{pmatrix} \psi_1^v \\ \psi_2^v \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2 \deg(v)} \\ \psi_1^v &:= \left(\psi_1^1(0), \dots, \psi_1^{w_v}(0), \psi_1^{w_v+1}(L_{w_v+1}), \dots, \psi_1^{\deg(v)}(L_{\deg(v)}) \right) \\ \psi_2^v &:= \left(-\psi_2^1(0), \dots, -\psi_2^{w_v}(0), \psi_2^{w_v+1}(L_{w_v+1}), \dots, \psi_2^{\deg(v)}(L_{\deg(v)}) \right) \quad . \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

Die Nebenbedingungen am Knoten v können dann durch Matrizen \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v kodiert werden, so dass

$$\mathbb{A}^v \boldsymbol{\psi}_1^v + \mathbb{B}^v \boldsymbol{\psi}_2^v = 0 \quad (3.3.9)$$

erfüllt sein muss. Der folgende Satz zeigt, dass die Nebenbedingungen an einzelnen Knoten ausreichen, um \mathbb{A} und \mathbb{B} eindeutig zu definieren und dass der Rang und die Selbstadjungiertheit von \mathbb{A} und \mathbb{B} an den einzelnen Matrizen \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v überprüft werden können.

Satz 3.3.3 (Blockweise Nebenbedingungen) *Nehme an, dass die Nebenbedingungen an einem Knoten unabhängig von den anderen Knoten im Graph gestellt werden, diese Nebenbedingungen mittels Matrizen \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v wie in Gleichung 3.3.9 formuliert werden und dass \mathbb{A} zeilenweise aus \mathbb{A}^v gemäß*

$$\mathbb{A} = \left(\begin{array}{cccc} & & \dots & \mathbb{A}^{v_1} & \dots & \left. \vphantom{\begin{matrix} \dots \\ \vdots \\ \dots \end{matrix}} \right\} E_{v_1} \\ & & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ & & \dots & \mathbb{A}^{v_n} & \dots & \left. \vphantom{\begin{matrix} \dots \\ \vdots \\ \dots \end{matrix}} \right\} E_{v_n} \end{array} \right) \quad (3.3.10)$$

aufgebaut wird. Dabei wird \mathbb{A}^v dort mit Nullspalten aufgefüllt, wo Einträge nicht in $\boldsymbol{\psi}^v$ auftauchen. Wenn \mathbb{B} analog aufgebaut wird, dann gilt $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{C}^{2m, 2m}$ und $(\mathbb{A}, \mathbb{B}) \in \mathbb{C}^{2m, 4m}$ besitzt genau dann vollen Rang, wenn $(\mathbb{A}^v, \mathbb{B}^v)$ für alle v vollen Rang besitzt. Außerdem ist $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ genau dann selbstadjungiert, wenn $\mathbb{A}^v(\mathbb{B}^v)^\dagger$ für alle v selbstadjungiert ist.

Beweis. Wegen Lemma 3.3.4 gilt $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{C}^{2m, 2m}$ und kann zeilenweise indiziert durch $E_v, v \in V$ angenommen werden. (Siehe Gleichung 3.3.10)

Aus den unabhängig gestellten Nebenbedingungen und der Konstruktion des Auffüllens mit Nullspalten folgt, dass, wenn eine Spalten in den Zeilen E_v ungleich Null ist, sie in allen anderen Zeilen eine Nullspalte ist. Deswegen kann durch eine orthogonale Transformation R der Basisvektoren eine Blockdiagonalmatrix $\tilde{\mathbb{A}} = R\mathbb{A}R^{-1}$ mit den Blöcken \mathbb{A}^v aufgebaut werden. Da die Nullspalten bei \mathbb{A} und \mathbb{B} an der gleichen Position stehen, werden sie simultan durch R in die Blockdiagonalstruktur $\tilde{\mathbb{A}}$ bzw. $\tilde{\mathbb{B}}$ überführt. Offensichtlich gilt

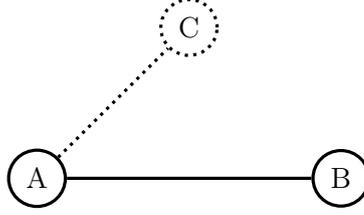


Abbildung 3.2: Einfacher Graph.

$\text{rank}(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \text{rank}(\tilde{\mathbb{A}}, \tilde{\mathbb{B}})$ und $\tilde{\mathbb{A}}\tilde{\mathbb{B}}^\dagger = R\mathbb{A}R^{-1}R\mathbb{B}^\dagger R^{-1} = R\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger R^{-1}$. Der Rang der Matrix $(\tilde{\mathbb{A}}, \tilde{\mathbb{B}})$ kann leicht aus der Blockdiagonalstruktur abgelesen werden und führt auf den ersten Teil der Behauptung. Selbstdjungiertheit von Matrizen bleibt unter orthogonalen Abbildungen erhalten, was den zweiten Teil der Behauptung zeigt. \square

Lemma 3.3.4 (Handschlaglemma) *Sei $G = (V, E)$ ein Graph, dann gilt*

$$\sum_{v \in V} \deg(v) = 2|E| \quad . \quad (3.3.11)$$

Beweis. Wir beweisen die Behauptung durch Induktion über die Anzahl der Kanten. Wir beginnen mit der Knotenmenge von G und genau einer Kante und fügen nacheinander Kanten hinzu, bis wir den Graphen G rekonstruiert haben. Ein Graph aus zwei Knoten A und B (Abbildung 3.2) die durch eine Kante e verbunden sind, erfüllt die behauptete Gleichheit mit $\deg(A) + \deg(B) = 1 + 1 = 2|\{e\}|$. Sei die Behauptung also für m Kanten erfüllt. Wird nun eine Kante zwischen zwei Knoten v und v' hinzugefügt (gestrichelte Linie in Abbildung 3.2) so erhöhen sich $\deg(v)$ und $\deg(v')$ jeweils um Eins. \square

Mittels Satz 3.3.3 kann der Selbstdjungiertheitsbedingung in Gleichung 3.3.2 eine anschauliche physikalische Bedeutung gegeben werden und ein *Kirchhoffsches Gesetz* hergeleitet werden. Die ein- und auslaufenden Wahrscheinlichkeitsstromdichten müssen sich, analog zur Stromstärke und dem *Kirchhoffschen Gesetz* aus der Schaltungstechnik, an jedem Knoten zu Null addieren [Kir45]. Für den Laplace-Operator findet sich dieser Satz bereits im Titel der Veröffentlichung „Kirchhoff’s Rule for Quantum Wires“ von Kostykin und Schrader [KS99a]. Für den Dirac-Operator ist der Satz hier explizit formuliert.

Definition 3.3.5 (Relativistische Wahrscheinlichkeitsstromdichte) *Seien die drei Ortsrichtungen x, y und z mit 1, 2 und 3 notiert. Die relativistische Wahrscheinlichkeitsstromdichte j ist gegeben durch*

$$j_i = -\psi^\dagger c \alpha_i \psi \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad . \quad (3.3.12)$$

Für Herleitung und physikalische Bedeutung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte siehe z. B. [Dir30]. Wenn im eindimensionalen Fall ein α wie in Abschnitt 2.4.2 für die Impulskomponente festgelegt wurde, schreiben wir ohne Index $j = -\psi^\dagger \alpha \psi$.

Satz 3.3.6 (Kirchhoffsches Gesetz) *Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit einem Hilbertraum \mathcal{H} gemäß Satz 3.1.6 auf dem der Dirac-Operator gemäß Satz 3.3.2 selbstadjungiert realisiert ist. Seien \mathbb{A}, \mathbb{B} die Matrizen aus Satz 3.3.2 welche das Gleichungssystem für die notwendigen Nebenbedingungen kodieren. Seien die Nebenbedingungen für jeden Knoten unabhängig von den anderen Knoten wie in Satz 3.3.3 formuliert. Dann gilt mit der Inzidenzmatrix aus Definition 3.1.4 die folgende Kontinuitätsgleichung*

$$\forall v \in V: \sum_{e \in E_v} B_{v,e} j^e(v) = 0 \quad . \quad (3.3.13)$$

Die ein- und auslaufenden Wahrscheinlichkeitsstromdichten an jedem Knoten müssen sich demnach zu null addieren.

Beweis. Wir berechnen die Wahrscheinlichkeitsstromdichte explizit als

$$j = -\psi^\dagger \alpha \psi = -c(\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_2) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = ci(\bar{\psi}_2 \psi_1 - \bar{\psi}_1 \psi_2) \quad (3.3.14)$$

und drücken die integrierte symplektische Form aus Gleichung 3.3.2 mittels j aus. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \omega(\phi, \psi) &= \hbar c \sum_{e \in E} \left(\psi_1^e(0) \bar{\phi}_2^e(0) - \psi_1^e(L_e) \bar{\phi}_2^e(L_e) - \psi_2^e(0) \bar{\phi}_1^e(0) + \psi_2^e(L_e) \bar{\phi}_1^e(L_e) \right) \\ &= \hbar c \sum_{e \in E} \left(\psi_1^e(0) \bar{\phi}_2^e(0) - \psi_2^e(0) \bar{\phi}_1^e(0) - \left(\psi_1^e(L_e) \bar{\phi}_2^e(L_e) + \psi_2^e(L_e) \bar{\phi}_1^e(L_e) \right) \right) \\ &= \hbar c^2 i \sum_{e \in E} (j^e(0) - j^e(L_e)) \\ &= \hbar c^2 i \sum_{e \in E} \sum_{v \in e} B_{v,e} j^e(v) = \hbar c^2 i \sum_{v \in V} \sum_{e \in E_v} B_{v,e} j^e(v) \quad . \end{aligned} \quad (3.3.15)$$

Die geforderte selbstadjungierte Realisierung von \mathcal{D} führt auf

$$\begin{aligned} \hbar c^2 i \sum_{v \in V} \sum_{e \in E_v} B_{v,e} j^e(v) &= 0 \\ \text{Bzw.} \quad \sum_{v \in V} \sum_{e \in E_v} B_{v,e} j^e(v) &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.3.16)$$

Wegen Satz 3.3.3 muss die Nebenbedingung an jedem Knoten einzeln erfüllt sein, woraus

$$\forall v \in V: \sum_{e \in E_v} B_{v,e} J^e(v) = 0 \quad (3.3.17)$$

folgt. □

Im Folgenden sollen konkrete Nebenbedingungen aufgestellt bzw. diskutiert werden. Eine mögliche Nebenbedingung ist dadurch gegeben, dass Stetigkeit gefordert wird und die Spinoren komponentenweise an den Knoten übereinstimmen müssen. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \forall v \in V: \forall e, e' \in E_v: \psi^e(v) &= \psi^{e'}(v) \\ \Leftrightarrow \forall i \in \{1, 2\}: \forall v \in V: \forall e, e' \in E_v: \psi_i^e(v) - \psi_i^{e'}(v) &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.3.18)$$

So intuitiv einleuchtend diese Nebenbedingung erscheint, ist sie bei vielen Graphen doch zu stark, um erfüllt werden zu können, wie das folgende Beispiel 3.3.7 zeigt.

Beispiel 3.3.7 (Kontinuitätsbedingung) *Wir nehmen an, dass $G(V, E, L)$ ein gerichteter Graph mit einem Knoten v ist, der drei ausgehende Kanten besitzt ($\deg(v) = 3$) und wollen zeigen, dass die Kontinuitätsbedingung (Gleichung 3.3.18) nicht erfüllt werden kann, wenn Selbstadjungiertheit gefordert wird. Bei geeigneter Indizierung führt die Kontinuitätsbedingung an diesem Knoten (Gleichung 3.3.18) auf die Matrizen*

$$\begin{aligned} \mathbb{A}^v &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbb{B}^v &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.3.19)$$

mit

$$\mathbb{A}^v \psi_1^v = 0 \quad \text{und} \quad \mathbb{B}^v \psi_2^v = 0 \quad . \quad (3.3.20)$$

Wenn 3.3.20 in ein Gleichungssystem der Form

$$\tilde{\mathbb{A}}^v \psi_1^v + \tilde{\mathbb{B}}^v \psi_2^v = 0 \quad (3.3.21)$$

überführt wird, so müssen $\tilde{\mathbb{A}}^v$ und $\tilde{\mathbb{B}}^v$ aus \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v durch Auffüllen mit Nullzeilen

gebildet werden. In diesem Fall kann $\mathcal{M}(\tilde{\mathbb{A}}^v, \tilde{\mathbb{B}}^v)$ kein Lagrangeraum mehr sein, weil die Dimension zu stark eingeschränkt wird.

Um Satz 3.3.2 zusammen mit Satz 3.3.3 trotzdem anwenden zu können, wird

$$\mathbb{B}_{mod}^v = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.22)$$

gesetzt. Das heißt es wird Gleichheit von genau zwei Spinoren in der zweiten Komponente gefordert. Es ist dabei beliebig von welchen Spinoren Gleichheit gefordert wird. Auf dem Raum $\mathcal{M}(\mathbb{A}^v, \mathbb{B}_{mod}^v)$ könnte dann Satz 3.3.2 zusammen mit Satz 3.3.3 angewendet werden, um eine selbstadjungierte Realisierung des Dirac-Operators auf $[\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B}_{mod})]^{-1}$ zu zeigen. Anschließend müsste der Definitionsbereich geeignet weiter eingeschränkt werden, um die Gleichheit aller Spinoren in der zweiten Komponente sicher zu stellen. Wir werden zeigen, dass der Dirac-Operator auf $[\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B}_{mod})]^{-1}$ nicht selbstadjungiert realisiert werden kann.

Die Matrix

$$\mathbb{A}^v(\mathbb{B}_{mod}^v)^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.23)$$

besitzt nur reelle Einträge und ist genau dann selbstadjungiert, wenn sie symmetrisch ist. Gleichzeitig ist $\mathbb{A}^v(\mathbb{B}_{mod}^v)^\dagger$ als Produkt zweier oberer Dreiecksmatrizen selber eine obere Dreiecksmatrix. Durch die letzte Spalte von $(\mathbb{B}_{mod}^v)^\dagger$ ergibt sich unabhängig von gewählter Position und Vorzeichen ein Nebendiagonalelement ungleich Null. Die Matrix $\mathbb{A}^v(\mathbb{B}_{mod}^v)^\dagger$ kann also nicht reell-symmetrisch bzw. selbstadjungiert sein. Es folgt mit Satz 3.3.3, dass $\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B}_{mod})$ kein Lagrangeraum sein kann.

Eine alternative Nebenbedingung besteht darin Stetigkeit in der ersten und Addition zu Null in der zweiten Komponente zu fordern

$$\forall v \in V: \left(\forall e, e' \in E_v: \psi_1^e(v) = \psi_1^{e'}(v) \right) \wedge \left(\sum_{e \in E_v} B_{v,e} \psi_2^e(v) = 0 \right) . \quad (3.3.24)$$

Analog zu Laplace-Operatoren wird diese Nebenbedingung als *Kirchhoff-Bedingung* bezeichnet, da sich die gleichen Matrizen \mathbb{A} und \mathbb{B} ergeben [vBM13]. Die *Kirchhoff-Bedingung* ist nicht nicht zu verwechseln mit dem *Kirchhoffschen Gesetz* aus Satz 3.3.6. Es kann leicht gezeigt werden, dass mit dieser Wahl von \mathbb{A} und \mathbb{B} die Voraussetzungen an Rang und Selbstadjungiertheit erfüllt sind und Satz 3.3.2 angewendet werden kann, um den

Dirac-Operator selbstadjungiert zu realisieren.

3.3.3 Energieeigenwerte

Mit der *Kirchhoff-Bedingung* aus Gleichung 3.3.24 wurde eine konkrete Wahl für \mathbb{A} und \mathbb{B} angegeben, auf der Satz 3.3.2 angewendet werden kann (es gibt also mindestens eine Nebenbedingung für die der Dirac-Operator selbstadjungiert realisiert werden kann). In diesem Abschnitt wird nun angenommen, dass \mathbb{A} und \mathbb{B} die Voraussetzungen von Satz 3.3.2 erfüllen. Außerdem sollen die Nebenbedingungen an jedem Knoten unabhängig von den anderen Knoten gestellt werden, womit \mathbb{A} und \mathbb{B} blockdiagonal in die Matrizen \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v zerfallen. Wegen Satz 3.3.3 soll dann an jedem Knoten gelten, dass $(\mathbb{A}^v, \mathbb{B}^v)$ vollen Rang besitzt und $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ selbstadjungiert ist. Das Ziel ist es dann, eine Formel für die Energieeigenwerte herzuleiten, ohne auf konkrete Nebenbedingungen wie in Gleichung 3.3.24 zurückzugreifen.

Definition 3.3.8 (Koeffizientenvektoren) *Für einen gegebenen Knoten werden die Koeffizienten der ein- $\vec{\mu}^v$ und auslaufenden Wellen $\vec{\hat{\mu}}^v$ definiert, wobei die gleiche Sortierung wie in Gleichung 3.3.8 und Abbildung 3.1 angenommen wird. Mit der Lösung aus Gleichung 2.4.10 ergibt sich*

$$\vec{\mu}^v := \begin{pmatrix} \mu^1 \\ \vdots \\ \mu^{w_v} \\ \hat{\mu}^{w_v+1} \exp(-ikL_{w_v+1}) \\ \vdots \\ \hat{\mu}^{\deg(v)} \exp(-ikL_{\deg(v)}) \end{pmatrix} \quad \vec{\hat{\mu}}^v := \begin{pmatrix} \hat{\mu}^1 \\ \vdots \\ \hat{\mu}^{w_v} \\ \mu^{w_v+1} \exp(ikL_{w_v+1}) \\ \vdots \\ \mu^{\deg(v)} \exp(ikL_{\deg(v)}) \end{pmatrix} . \quad (3.3.25)$$

Lemma 3.3.9 (Knotenübergangsmatrix) *Seien $\mathbb{A}^v, \mathbb{B}^v$ so gewählt, dass $(\mathbb{A}^v, \mathbb{B}^v)$ vollen Rang besitzt und $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ selbstadjungiert ist. Sei*

$$\mathbb{T}^v(k) := -(\mathbb{A}^v + i\gamma(k)\mathbb{B}^v)^{-1}(\mathbb{A}^v - i\gamma(k)\mathbb{B}^v) \quad , \quad (3.3.26)$$

dann ist $\mathbb{T}^v(k)$ unitär. Die Matrix $\mathbb{T}^v(k)$ wird Knotenübergangsmatrix genannt.

Beweis. Wegen der Selbstadjungiertheit gilt

$$\mathbb{A}(\mathbb{B}^v)^\dagger = \left(\mathbb{A}^v(\mathbb{B}^v)^\dagger\right)^\dagger = \mathbb{B}^v(\mathbb{A}^v)^\dagger \quad . \quad (3.3.27)$$

Um die Notation zu vereinfachen, wird \mathbb{T} und γ statt $\mathbb{T}(k)$ und $\gamma(k)$ geschrieben. Damit folgt

$$\begin{aligned}
\mathbb{T}^v(\mathbb{T}^v)^\dagger &= (\mathbb{A}^v + i\gamma\mathbb{B}^v)^{-1}(\mathbb{A}^v - i\gamma\mathbb{B}^v) \left((\mathbb{A}^v)^\dagger + i\gamma(\mathbb{B}^v)^\dagger \right) \left((\mathbb{A}^v)^\dagger - i\gamma(\mathbb{B}^v)^\dagger \right)^{-1} \\
&= (\mathbb{A}^v + i\gamma\mathbb{B}^v)^{-1} \\
&\quad \left(\mathbb{A}^v(\mathbb{A}^v)^\dagger + i\gamma \left(\mathbb{A}^v(\mathbb{B}^v)^\dagger - \mathbb{B}^v(\mathbb{A}^v)^\dagger \right) + \gamma\mathbb{B}^v(\mathbb{B}^v)^\dagger \right) \\
&\quad \left((\mathbb{A}^v)^\dagger - i\gamma(\mathbb{B}^v)^\dagger \right)^{-1} \\
&= (\mathbb{A}^v + i\gamma\mathbb{B}^v)^{-1} \left(\mathbb{A}^v(\mathbb{A}^v)^\dagger + \gamma\mathbb{B}^v(\mathbb{B}^v)^\dagger \right) \left((\mathbb{A}^v)^\dagger - i\gamma(\mathbb{B}^v)^\dagger \right)^{-1} \\
&= (\mathbb{A}^v + i\gamma\mathbb{B}^v)^{-1} (\mathbb{A}^v + i\gamma\mathbb{B}^v) \\
&\quad \left((\mathbb{A}^v)^\dagger - i\gamma(\mathbb{B}^v)^\dagger \right)^{-1} \left((\mathbb{A}^v)^\dagger - i\gamma(\mathbb{B}^v)^\dagger \right) \\
&= \mathbf{1} \quad .
\end{aligned} \tag{3.3.28}$$

□

Lemma 3.3.10 ([BH03]) *Die ein- und auslaufenden Wellen an einem Knoten, repräsentiert durch $\vec{\mu}^v$ und $\tilde{\mu}^v$ aus Definition 3.3.8, sind gemäß*

$$\begin{aligned}
\vec{\mu}^v &= \mathbb{T}^v \tilde{\mu}^v \\
&= -(\mathbb{A}^v + i\gamma(k)\mathbb{B}^v)^{-1} (\mathbb{A}^v - i\gamma(k)\mathbb{B}^v) \tilde{\mu}^v
\end{aligned} \tag{3.3.29}$$

durch die Knotenübergangsmatrix verknüpft.

Beweis. Koeffizientenvergleich von Gleichungen 3.3.8 und 3.3.25 liefert

$$\psi_1^v = \vec{\mu}^v + \tilde{\mu}^v \quad \psi_2^v = i\gamma(k)(\vec{\mu}^v - \tilde{\mu}^v) \quad . \tag{3.3.30}$$

Einsetzen in Gleichung 3.3.5 ergibt

$$\begin{aligned}
0 &= \mathbb{A}^v(\vec{\mu}^v + \tilde{\mu}^v) + \mathbb{B}^v i\gamma(k)(\vec{\mu}^v - \tilde{\mu}^v) \\
\Leftrightarrow \vec{\mu}^v &= -(\mathbb{A}^v + i\gamma(k)\mathbb{B}^v)^{-1} (\mathbb{A}^v - i\gamma(k)\mathbb{B}^v) \tilde{\mu}^v \quad .
\end{aligned} \tag{3.3.31}$$

□

Um die Energieeigenwerte zu finden, muss die Streumatrix \mathbb{S} des gesamten Graphen aus den Knotenübergangsmatrizen gebildet werden.

Definition 3.3.11 (Streumatrix) Sei $\mu^{(ij)}$ der Koeffizient des Spinors auf der Kante zwischen den Knoten i und j der in die Richtung $i \rightarrow j$ propagiert. Die Streumatrix $S_{(ij)(lm)}$ ist dann definiert durch

$$\mathbb{S}_{(ij)(lm)} = \mathbb{T}_{(ij)(lm)}^m \delta^{mi} \exp(ikL_{(lm)}) \quad . \quad (3.3.32)$$

Anschaulich ergibt \mathbb{S} die Amplitude eines Spinors der von der Kante (lm) nach (ij) gestreut wird. Diese ist nur dann ungleich null, wenn die Kanten am gleichen Knoten verknüpft sind ($m = i$). Die Übergangsamplitude am Knoten m ist durch die Knotenübergangsmatrix \mathbb{T}^m gegeben. Während der Bewegung zum Knoten m entlang der Kante (lm) ändert sich die Phase gemäß $\exp(ikL_{(lm)})$.

Wird mit derjenigen Indizierung der Knoten und Kanten gearbeitet, die \mathbb{A} und \mathbb{B} blockdiagonal in die Matrizen \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v zerfallen lässt, so kann die Streumatrix kurz geschrieben werden als

$$\mathbb{S}(k) = \mathbb{T}(k)\mathbb{D}(k) \quad . \quad (3.3.33)$$

Dabei ist die sogenannte Phasenmatrix $\mathbb{D}(k)$ eine Diagonalmatrix, die die Phasen $\exp(ikL_{(lm)})$ auf ihren Diagonalelementen enthält. Als Produkt einer unitären Matrix mit einer Diagonalmatrix aus Phasenfaktoren ist \mathbb{S} unitär.

Satz 3.3.12 (Energieeigenwerte [BH03]) Die Energieeigenwerte sind gemäß Gleichung 2.4.5 durch diejenigen k gegeben für die

$$\det(\mathbf{1}_{2|E|} - \mathbb{S}(k)) = 0 \quad (3.3.34)$$

gilt.

Beweis. Sei $\boldsymbol{\mu}$ der Vektor der die Koeffizienten aller einlaufenden und ausgehenden Wellen an jedem Knoten enthält und demnach aus $\bar{\boldsymbol{\mu}}^v$ und $\bar{\boldsymbol{\mu}}^v$ zusammengesetzt ist. Die Streumatrix verknüpft dann die Koeffizienten vor und nach der Streuung $\boldsymbol{\mu}$ und $\boldsymbol{\mu}'$ gemäß

$$\boldsymbol{\mu}' = \mathbb{S}(k)\boldsymbol{\mu} \quad . \quad (3.3.35)$$

Eigenfunktionen des Hamiltonians müssen invariant unter Zeitevolution bleiben. Für die zugehörigen Koeffizientenvektoren muss also

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbb{S}(k)\boldsymbol{\mu} \quad (3.3.36)$$

gelten, was auf die behauptete Gleichung führt. □

3.4 Vierdimensionale Spinoren

3.4.1 Selbstadjungierte Realisierung auf Graphen

Die bisherige Herangehensweise, mittels symplektischer Formen den Definitionsbereich für eine selbstadjungierte Realisierung des Dirac-Operators zu finden, bleibt in diesem Abschnitt die gleiche. Statt mit zweidimensionalen soll mit vierdimensionalen Spinoren gearbeitet werden und der größtmögliche Unterraum des Quantengraphen $\mathcal{H} := \bigoplus_{e \in E} H^1([0, L_e])^4$ gefunden werden auf dem \mathcal{D} (Gleichung 2.4.2) selbstadjungiert realisiert werden kann. Das heißt es soll der größtmögliche Unterraum gefunden werden für den $\langle \phi | \mathcal{D} \psi \rangle = \langle \psi | \mathcal{D} \phi \rangle$ gilt. Wird die symplektische Form ω analog zu Gleichung 3.3.1 als

$$\omega(\phi, \psi) = \langle \phi | \mathcal{D} \psi \rangle - \langle \psi | \mathcal{D} \phi \rangle \quad (3.4.1)$$

definiert, so ergibt sich wieder mit der Sprache aus Definition 3.2.7, dass ein maximal isotroper Unterraum bzgl. ω gefunden werden soll. Durch partielle Integration gelangen wir zu einer komplexen symplektischen Form und definieren wiederum eine Einsetzungsabbildung.

Definition 3.4.1 (Einsetzungsabbildung) *Sei $E = \{e_1, \dots, e_m\}$ die Menge der Kanten und \mathcal{H} ein Quantengraph aus Definition 3.1.6. Wir definieren:*

$$[\cdot]: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}^{8m}$$

$$\psi \mapsto \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}^+ \\ \boldsymbol{\psi}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\psi_1^1(0), \dots, \psi_1^m(0), \psi_2^1(0), \dots, \psi_2^m(0), \\ \psi_1^1(L_1), \dots, \psi_1^m(L_m), \psi_2^1(L_1), \dots, \psi_2^m(L_m))^T \\ (-\psi_4^1(0), \dots, -\psi_4^m(0), \psi_3^1(0), \dots, \psi_3^m(0), \\ \psi_4^1(L_1), \dots, \psi_4^m(L_m), -\psi_3^1(L_1), \dots, -\psi_3^m(L_m))^T \end{pmatrix}. \quad (3.4.2)$$

Satz 3.4.2 (Selbstadjungierte Realisierung) *Der Definitionsbereich $\mathfrak{D}(\mathcal{D})$ mit dem der Dirac-Operator selbstadjungiert auf dem Quantengraphen \mathcal{H} mit Kantenmenge $E = \{e_1, \dots, e_m\}$ realisiert werden kann, ist genau dann maximal gewählt, wenn es zwei Matrizen $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{C}^{4m, 4m}$ gibt, so dass $\mathfrak{D}(\mathcal{D}) = [\mathcal{M}(\mathbb{A}, \mathbb{B})]^{-1}$ ist, (\mathbb{A}, \mathbb{B}) vollen Rang besitzt und $\mathbb{A}\mathbb{B}^\dagger$ selbstadjungiert ist.*

Beweis. Mittels partieller Integration, Einsetzungsabbildung und der kanonischen symplektischen Form J (Beispiel 3.2.5) lässt sich die symplektische Form aus Gleichung 3.4.1

schreiben als

$$\omega(\phi, \psi) = \langle [\phi] | J[\psi] \rangle = \left\langle \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1}_{4B} \\ -\mathbf{1}_{4B} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \right\rangle . \quad (3.4.3)$$

Mit dem Gleichungssystem

$$\mathbb{A}\psi^+ + \mathbb{B}\psi^- = 0 \quad (3.4.4)$$

folgt der Rest des Beweises analog zu Satz 3.3.2 \square

3.4.2 Nebenbedingungen und Konnektivität

Wie im Abschnitt 3.3.2 ausführlich für zweidimensionale Spinoren diskutiert, wird die Konnektivität des Graphen dadurch berücksichtigt, dass im Gleichungssystem 3.4.4 Nebenbedingungen kodiert sind, die an den Knoten erfüllt sein müssen.

Ohne ausführlichen Beweis halten wir fest, dass Satz 3.3.3 auch bei vierdimensionalen Spinoren gilt und Nebenbedingungen, die an den jeweiligen Knoten unabhängig von anderen Knoten gestellt werden, ausreichen um \mathbb{A} und \mathbb{B} aus den Knotennebenbedingungsmatrizen \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v zu definieren. Insbesondere sind in diesem Fall die Voraussetzungen von Satz 3.4.2 genau dann für \mathbb{A} und \mathbb{B} erfüllt, wenn sie an jedem Knoten für \mathbb{A}^v und \mathbb{B}^v erfüllt sind. Wir nehmen im gesamten Abschnitt an, dass die Nebenbedingungen an jedem Knoten unabhängig von den anderen Knoten aufgestellt werden.

Analog zu Beispiel 3.3.7 ist auch bei vierdimensionalen Spinoren die Kontinuitätsbedingung

$$\forall v \in V : \forall e, e' \in E_v : \psi^e(v) = \psi^{e'}(v) \quad (3.4.5)$$

im Allgemeinen zu stark.

Aufgrund der Selbstadjungiertheit gilt auch bei vierdimensionalen Spinoren ein Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeitsstromdichte.

3.4.3 Energieeigenwerte

Die Energieeigenwerte ergeben sich analog zu den zweidimensionalen Spinoren in Abschnitt 3.3.3. Dafür werden wiederum die Koeffizientenvektoren der ein- und auslaufenden Wellen benötigt.

Definition 3.4.3 (Koeffizientenvektoren) *Für einen gegebenen Knoten werden die Koeffizienten der ein- $\vec{\mu}^v$ und auslaufenden Wellen $\vec{\mu}^v$ definiert, wobei die gleiche Sortierung wie in Gleichung 3.3.8 und Abbildung 3.1 angenommen wird. Mit der Lösung aus Gleichung*

chung 2.4.4 ergibt sich

$$\vec{\mu}^v := \begin{pmatrix} \mu_\alpha^1 \\ \mu_\beta^1 \\ \vdots \\ \mu_\alpha^{w_v} \\ \mu_\beta^{w_v} \\ \hat{\mu}_\alpha^{w_v+1} \exp(-ikL_{w_v+1}) \\ \hat{\mu}_\beta^{w_v+1} \exp(-ikL_{w_v+1}) \\ \vdots \\ \hat{\mu}_\alpha^{\deg(v)} \exp(-ikL_{\deg(v)}) \\ \hat{\mu}_\beta^{\deg(v)} \exp(-ikL_{\deg(v)}) \end{pmatrix} \quad \overleftarrow{\mu}^v := \begin{pmatrix} \hat{\mu}_\alpha^1 \\ \hat{\mu}_\beta^1 \\ \vdots \\ \hat{\mu}_\alpha^{w_v} \\ \hat{\mu}_\beta^{w_v} \\ \mu_\alpha^{w_v+1} \exp(ikL_{w_v+1}) \\ \mu_\beta^{w_v+1} \exp(ikL_{w_v+1}) \\ \vdots \\ \mu_\alpha^{\deg(v)} \exp(ikL_{\deg(v)}) \\ \mu_\beta^{\deg(v)} \exp(ikL_{\deg(v)}) \end{pmatrix} . \quad (3.4.6)$$

Alternative Versionen von Lemma 3.3.10 und Satz 3.3.12 können auf die gleiche Art auch für vierdimensionale Spinoren hergeleitet werden, um eine Formel für die Energieeigenwerte zu erhalten.

3.4.4 Zeitumkehrinvarianz

In diesem Abschnitt sollen Nebenbedingungen betrachtet werden, die zu zeitumkehrinvarianten Systemen führen. Der Zeitumkehroperator lautet im dreidimensionalen Fall in der Standarddarstellung

$$\mathcal{T} := -i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{K} \quad (3.4.7)$$

wobei \mathcal{K} für komplexe Konjugation steht. Bei zweidimensionalen Spinoren ist die Zeitumkehr nicht mehr wohldefiniert [WZ15]. Nichtsdestotrotz kann unter Nutzung der Blockstruktur ein zeitumkehrartiger Operator

$$\tilde{\mathcal{T}} := -i \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{K} \quad (3.4.8)$$

für zweidimensionale Spinoren definiert werden [BH03]. Es ist zu beachten, dass $\tilde{\mathcal{T}}$ und \mathcal{T} zu fundamental unterschiedlichen physikalischen Interpretationen führen. So kommutiert $\tilde{\mathcal{T}}$ nur für masselose Teilchen mit \mathcal{D} . Dementsprechend sind im Falle zweidimensionaler Spinoren für ein zeitumkehrinvariantes System masselose Teilchen erforderlich. Wie

Bolte und Harrison zeigen, ist es prinzipiell möglich, die Nebenbedingungen, welche zu Zeitumkehrinvarianz führen, mittels $\tilde{\mathcal{T}}$ auch für zweidimensionale Spinoren herzuleiten *und am Ende* auf das gleiche Spektrum wie für vierdimensionale Spinoren zu kommen [BH03]. Durch die inhärenten physikalischen Interpretationsprobleme werden in dieser Arbeit die zeitumkehrinvarianten Nebenbedingungen ausschließlich für vierdimensionale Spinoren hergeleitet.

Die allgemeine Herangehensweise ist dabei, dass der Zeitumkehroperator auf die Wellenfunktion angewendet wird, um dann zu fordern, dass sie weiterhin den gleichen Gesetzen gehorcht. Dafür benötigen wir folgendes Lemma.

Lemma 3.4.4 (Zeitumkehr Koeffizientenvektoren) *Seien ψ eine Wellenfunktion aus Gleichung 2.4.4 und $\vec{\mu}^v, \vec{\mu}^v$ die zugehörigen Koeffizientenvektoren der ein- und auslaufenden Wellen am Knoten v gemäß Definition 3.4.3. Seien $\psi_{\mathcal{T}} = \mathcal{T}\psi$ die zeitumgekehrte Wellenfunktion und $\vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v, \vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v$ die zugehörigen Koeffizientenvektoren. Dann gilt*

$$\begin{aligned}\vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v &= \mathcal{T}\vec{\mu}^v \\ \vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v &= \mathcal{T}\vec{\mu}^v \quad .\end{aligned}\tag{3.4.9}$$

Beweis. Beweis durch Nachrechnen. □

Satz 3.4.5 *Ein Graph und zugehörige Nebenbedingungen für den Dirac-Operator führen genau dann zu einem zeitumkehrinvarianten System wenn die Knotenübergangsmatrizen*

$$(\mathbb{T}^v)^{\top} = \begin{pmatrix} J^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & J^{-1} \end{pmatrix} \mathbb{T}^v \begin{pmatrix} J & & \\ & \ddots & \\ & & J \end{pmatrix}\tag{3.4.10}$$

erfüllen. Dabei ist

$$J := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad .\tag{3.4.11}$$

Beweis. Gemäß Lemma 3.4.4 gilt

$$\begin{aligned}\vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v = \mathcal{T}\vec{\mu}^v &= -i \begin{pmatrix} -J & & \\ & \ddots & \\ & & -J \end{pmatrix} \vec{\mu}^v \\ &= i \begin{pmatrix} J & & \\ & \ddots & \\ & & J \end{pmatrix} \vec{\mu}^v\end{aligned}\tag{3.4.12}$$

und

$$\vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v = \mathbf{i} \begin{pmatrix} J & & \\ & \ddots & \\ & & J \end{pmatrix} \overrightarrow{\mu}^v . \quad (3.4.13)$$

Es wird gefordert, dass die Beziehung zwischen ein- und auslaufenden Wellen im zeitumgekehrten System weiterhin durch die Knotenübergangsmatrix gegeben ist:

$$\begin{aligned} \vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v &= \mathbb{T}^v \vec{\mu}_{\mathcal{T}}^v \\ \Rightarrow \mathbf{i} \begin{pmatrix} J & & \\ & \ddots & \\ & & J \end{pmatrix} \overrightarrow{\mu}^v &= \mathbb{T}^v \mathbf{i} \begin{pmatrix} J & & \\ & \ddots & \\ & & J \end{pmatrix} \overrightarrow{\mu}^v \\ &\Rightarrow \overrightarrow{\mu}^v = \begin{pmatrix} J^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & J^{-1} \end{pmatrix} \mathbb{T}^v \begin{pmatrix} J & & \\ & \ddots & \\ & & J \end{pmatrix} \overrightarrow{\mu}^v \\ &\Rightarrow (\mathbb{T}^v)^{\top} \overrightarrow{\mu}^v = \begin{pmatrix} J^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & J^{-1} \end{pmatrix} \mathbb{T}^v \begin{pmatrix} J & & \\ & \ddots & \\ & & J \end{pmatrix} \overrightarrow{\mu}^v . \end{aligned} \quad (3.4.14)$$

Da \mathbb{T} vollen Rang besitzt und $\overrightarrow{\mu}^v$ ungleich Null ist, kann „gekürzt“ werden, was den Beweis schließt. \square

Aus der Reihenfolge der Kanten in der Definition 3.4.3 von $\vec{\mu}$, $\vec{\mu}$ folgt, dass die Knotenübergangsmatrix in 2×2 Blöcke $(\mathbb{T}^v)^{cb}$ zerfällt welche die Spinoren, die auf der Kante b einlaufen, mit den Spinoren, die auf der Kante c auslaufen, verknüpft. Die Kantenindizes b und c entsprechen dabei den Superskripten in Gleichung 3.4.6.

Lemma 3.4.6 *Es liegt genau dann ein zeitumkehrinvariantes System vor, wenn die 2×2 Blöcke $(\mathbb{T}^v)^{bc}$ der Knotenübergangsmatrix T^v*

$$(\mathbb{T}^v)^{bc} = \det\left((\mathbb{T}^v)^{cb}\right) \left((\mathbb{T}^v)^{cb}\right)^{-1} \quad (3.4.15)$$

erfüllen.

Beweis. Für die 2×2 Blöcke setzen wir

$$(\mathbb{T}^v)^{cb} = \begin{pmatrix} r & s \\ v & w \end{pmatrix} \quad (3.4.16)$$

an.

Wird die linke Seite von Gleichung 3.4.10 explizit geschrieben, ergibt sich

$$\begin{aligned}
(\mathbb{T}^v)^\top &= \begin{pmatrix} (\mathbb{T}^v)^{11} & \dots & (\mathbb{T}^v)^{1 \deg(v)} \\ \vdots & \ddots & (\mathbb{T}^v)^{cb} & \dots \\ & (\mathbb{T}^v)^{bc} & \ddots & \\ \vdots & & & \vdots \\ (\mathbb{T}^v)^{\deg(v)1} & \dots & & (\mathbb{T}^v)^{\deg(v) \deg(v)} \end{pmatrix}^\top \\
&= \begin{pmatrix} ((\mathbb{T}^v)^{11})^\top & \dots & ((\mathbb{T}^v)^{\deg(v)1})^\top \\ \vdots & \ddots & ((\mathbb{T}^v)^{bc})^\top & \dots \\ & ((\mathbb{T}^v)^{cb})^\top & \ddots & \\ \vdots & & & \vdots \\ ((\mathbb{T}^v)^{1 \deg(v)})^\top & \dots & & ((\mathbb{T}^v)^{\deg(v) \deg(v)})^\top \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.4.17}$$

Mit der linken Seite von Gleichung 3.4.10 folgt aus der Gleichung

$$((\mathbb{T}^v)^{bc})^\top = J^{-1}(\mathbb{T}^v)^{cb}J = \begin{pmatrix} w & -v \\ -s & r \end{pmatrix}, \tag{3.4.18}$$

die Bedingung, dass

$$\begin{aligned}
(\mathbb{T}^v)^{cb} &= \begin{pmatrix} r & s \\ v & w \end{pmatrix} \\
(\mathbb{T}^v)^{bc} &= \begin{pmatrix} r & -s \\ -v & w \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.4.19}$$

erfüllen muss. Es folgt, dass

$$(\mathbb{T}^v)^{bc}(\mathbb{T}^v)^{cb} = \det\left((\mathbb{T}^v)^{cb}\right)\mathbf{1} \tag{3.4.20}$$

und damit die Behauptung. \square

Lemma 3.4.7 Seien $u_b, u_c \in SU(2)$ und

$$\begin{aligned}
(\tilde{\mathbb{T}}^v)^{bc} &= u_b(\mathbb{T}^v)^{bc}u_c^{-1} \\
(\tilde{\mathbb{T}}^v)^{cb} &= u_c(\mathbb{T}^v)^{cb}u_b^{-1}
\end{aligned} \tag{3.4.21}$$

dann erfüllen $(\mathbb{T}^v)^{bc}$ und $(\mathbb{T}^v)^{cb}$ Gleichung 3.4.15 genau dann, wenn

$$(\tilde{\mathbb{T}}^v)^{bc} = \left| (\tilde{\mathbb{T}}^v)^{cb} \right| \left((\tilde{\mathbb{T}}^v)^{cb} \right)^{-1} \quad (3.4.22)$$

gilt.

Beweis.

$$\begin{aligned} & (\tilde{\mathbb{T}}^v)^{bc} = \left| (\tilde{\mathbb{T}}^v)^{cb} \right| \left((\tilde{\mathbb{T}}^v)^{cb} \right)^{-1} \\ \Leftrightarrow & \quad u_b (\mathbb{T}^v)^{bc} u_c^{-1} = \det \left(u_c (\mathbb{T}^v)^{cb} u_b^{-1} \right) \left(u_c (\mathbb{T}^v)^{cb} u_b^{-1} \right)^{-1} \\ & = \det(u_c) \det \left((\mathbb{T}^v)^{cb} \right) \det(u_b^{-1}) u_b \left((\mathbb{T}^v)^{cb} \right)^{-1} u_c^{-1} \quad (3.4.23) \\ & = \det \left((\mathbb{T}^v)^{cb} \right) u_b \left((\mathbb{T}^v)^{cb} \right)^{-1} u_c^{-1} \\ \Leftrightarrow & \quad (\mathbb{T}^v)^{bc} = \det \left((\mathbb{T}^v)^{cb} \right) \left((\mathbb{T}^v)^{cb} \right)^{-1} \end{aligned}$$

□

Definition 3.4.8 (Kronecker-Produkt) *Ist A eine $m \times n$ -Matrix und B eine $p \times r$ -Matrix, so ist das Kronecker-Produkt $C = A \otimes B$ definiert als*

$$C = (A_{ij} \cdot B) = \begin{pmatrix} A_{11}B & \cdots & A_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B & \cdots & A_{mn}B \end{pmatrix} . \quad (3.4.24)$$

Mit dem Kronecker-Produkt und Lemma 3.4.7 kann eine zeitumkehrinvariante Knotenübergangsmatrix als

$$\mathbb{T}^v = \begin{pmatrix} u_1 & & \\ & \ddots & \\ & & u_{\deg(v)} \end{pmatrix} \left(X \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} u_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & u_{\deg(v)^{-1}} \end{pmatrix} \quad (3.4.25)$$

geschrieben werden. Wobei X eine symmetrische, unitäre $\deg(v) \times \deg(v)$ Matrix und $u_i \in \text{SU}(2)$ ist. Offensichtlich erfüllt $X \otimes \mathbf{1}_2$ die Bedingungen von Lemma 3.4.6 und kann gemäß Lemma 3.4.7 ähnlichkeitstransformiert werden. Wird außerdem durch

$$X = \sigma X \sigma^{-1} \quad (3.4.26)$$

obendrein gefordert, dass X invariant unter Permutationen σ der Kantenindizes ist, so

muss

$$X = \exp(i\theta) \begin{pmatrix} q-1 & & q \\ & \ddots & \\ q & & q-1 \end{pmatrix}, \quad q := \frac{1 + \exp(i\omega)}{\deg(v)} \quad (3.4.27)$$

gelten. Die Notation ist eine Kurzschreibweise dafür, dass alle Diagonalelemente gleich $q-1$ und alle Nebendiagonalelemente gleich q sind. Der vorangestellte Phasenfaktor kann für die weitere Herleitung als Eins angenommen werden.

Satz 3.4.9 (Zeitumkehrinvarianz der Kirchhoff-Bedingung) *Die Nebenbedingungen*

$$\forall v \in V: \left(\forall e, e' \in E_v: \psi_1^e(v) = \psi_1^{e'}(v) \right) \wedge \left(\sum_{e \in E_v} B_{v,e} \psi_2^e(v) = 0 \right) . \quad (3.4.28)$$

aus Gleichung 3.3.24 führen zu einem zeitumkehr- und permutationsinvarianten System.

Beweis. Die Knotennebenbedingungsmatrizen lauten:

$$\mathbb{A}^v = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbb{B}^v = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{pmatrix} . \quad (3.4.29)$$

Einsetzen in Gleichung 3.3.26 und Ähnlichkeitstransformationen liefern für die Knotenübergangsmatrix

$$\mathbb{T}^v = \begin{pmatrix} u_1 & & \\ & \ddots & \\ & & u_{\deg(v)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\left(\frac{2}{\deg(v)} - 1 \right) & & \frac{2}{\deg(v)} \\ & \ddots & \\ \frac{2}{\deg(v)} & & \frac{2}{\deg(v)} - 1 \right) \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} u_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & u_{\deg(v)-1} \end{pmatrix} \end{pmatrix} . \quad (3.4.30)$$

□

Interessanterweise taucht $\gamma(k)$ in Gleichung 3.4.30 nicht mehr auf. Die Matrix \mathbb{T}^v ist also

unabhängig von Masse und Wellenzahl des betrachteten Teilchens. Bei Bolte und Harrison ist diese Eigenschaft zentral in der zeitumkehrinvarianten Beschreibung massebehafteter Teilchen mittels zweidimensionaler Spinoren [BH03].

3.5 Spektrale Dichte

In diesem Abschnitt soll eine Formel für die spektrale Dichte hergeleitet werden. Es werden *Kirchhoff-Nebenbedingungen* (Gleichung 3.3.24) angenommen, womit die Knotenübergangsmatrix eine Form gemäß Gleichung 3.4.30 annimmt. Dafür werden einige Definitionen und Lemmata benötigt.

Definition 3.5.1 (Distributionen und ihre Ableitung) *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Menge und $(C_0^\infty(\Omega), \|\cdot\|_\infty)$ der Raum der glatten Funktionen mit kompaktem Träger über Ω ausgestattet mit der Supremumsnorm. Der Raum $(C_0^\infty(\Omega), \|\cdot\|_\infty)$ wird auch Testfunktionenraum genannt und verkürzt als $C_0^\infty(\Omega)$ geschrieben. Eine Distribution ist ein stetiges Funktional über $C_0^\infty(\Omega)$ und damit ein Element des Dualraums $(C_0^\infty(\Omega))^*$.*

Sei also $T \in (C_0^\infty(\Omega))^$ eine Distribution und $\alpha \in \mathbb{N}^n$ ein Multiindex. Dann wird eine Distribution $\partial_x^\alpha T \in (C_0^\infty(\Omega))^*$ durch die Eigenschaft definiert, dass:*

$$\forall \phi \in C_0^\infty(\Omega): \langle \partial_x^\alpha T | \phi \rangle = (-1)^{|\alpha|} \langle T | (\partial_x^\alpha \phi) \rangle \quad . \quad (3.5.1)$$

Jeder integrierbaren Funktion f kann das Funktional $T_f(g) = \int f(x)g(x) dx \in (C_0^\infty(\Omega))^*$ zugeordnet werden. Damit können wir schwach differenzierbare Funktionen ohne Einschränkung auch als Distributionen auffassen und die Distributionsableitung anwenden. Ohne Beweis halten wir fest, dass die Distributionsableitung mit der schwachen und der „echten“ Ableitung zusammenfällt, wenn diese definiert ist.

Definition 3.5.2 (Distributionsgleichheit) *Zur Vereinfachung der Notation schreiben wir bei integrierbaren Funktionen \doteq , wenn sich die zugeordneten Distributionen gleichen.*

Wenn sich zwei integrierbare Funktionen f und g bis auf Lebesgue-Nullmengen gleichen, so gilt insbesondere $f \doteq g$.

Beispiel 3.5.3 (Heaviside-Sprungfunktion) *Die Heaviside-Sprungfunktion ist definiert durch:*

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{cases} \quad . \quad (3.5.2)$$

Wir benötigen die Distributionsableitung, um die Heaviside-Sprungfunktion ableiten zu können, da für sie nicht einmal die schwache Ableitung definiert ist. Wir werden

zeigen, dass $\delta(x)$ die Ableitung von $H(x)$ ist. Für die erste Ableitung im Eindimensionalen reduziert sich Gleichung 3.5.1 auf die Forderung

$$\left\langle \frac{d}{dx} T \middle| \phi \right\rangle = - \left\langle T \middle| \frac{d}{dx} \phi \right\rangle . \quad (3.5.3)$$

Sei also $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ eine Testfunktion. Nach Definition der Dirac-Distribution gilt

$$\langle \delta | \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \delta(x) \phi(x) dx = \phi(0) . \quad (3.5.4)$$

Gleichzeitig gilt:

$$\begin{aligned} - \langle H | \phi' \rangle &= - \int_{\mathbb{R}} H(x) \phi'(x) dx \\ &= - \int_0^\infty \phi'(x) dx = -(\phi(\infty) - \phi(0)) = \phi(0) . \end{aligned} \quad (3.5.5)$$

Es wurde genutzt, dass ϕ kompakten Träger besitzt.

Definition 3.5.4 (Komplexer Logarithmus) Sei $z = a + ib \in \mathbb{C}$, dann ist der komplexe Logarithmus definiert durch

$$\begin{aligned} \log: \mathbb{C} &\rightarrow \mathbb{R} + i(-\pi, \pi] \\ \log(a + ib) &= \ln(|z|) + i \operatorname{atan2}(b, a) \end{aligned} \quad (3.5.6)$$

Die Definition ist so gewählt, dass $\log(z) = \ln(|z|) + i\theta$ ist, wenn $z = |z| \exp(i\theta)$ mit $\theta \in (-\pi, \pi]$ gewählt ist.

Lemma 3.5.5 (Logarithmusdarstellung mit einfachen Nullstellen) Sei $f: \mathfrak{D}(f) \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion mit der abzählbaren Menge an einfachen Nullstellen $N \subset \mathfrak{D}(f)$ und $\epsilon > 0$, dann gilt:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(f(x) + i\epsilon) \doteq \ln(|x|) + i\pi \sum_{x_n \in N} H(x_n - x) \quad (3.5.7)$$

und

$$- \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(f(x) + i\epsilon) \right) \doteq \sum_{x_n \in N} \delta(x - x_n) . \quad (3.5.8)$$

H ist dabei die Heaviside-Sprungfunktion und die Ableitung ist im Sinne einer Distributionsableitung zu verstehen. (Vgl. Beispiel 3.5.3)

Beweis. Es gilt

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(f(x) + i\epsilon) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\ln \left(\sqrt{f(x)^2 + \epsilon^2} \right) + i \operatorname{atan2}(\epsilon, f(x)) \right) \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\ln \left(\sqrt{f(x)^2 + \epsilon^2} \right) + i \begin{cases} \operatorname{atan} \left(\frac{\epsilon}{f(x)} \right) + \pi & f(x) < 0, \epsilon > 0 \\ \operatorname{atan} \left(\frac{\epsilon}{f(x)} \right) & f(x) > 0 \end{cases} \right) \\
&= \ln(|f(x)|) + i\pi \begin{cases} 1 & f(x) < 0 \\ 0 & f(x) > 0 \end{cases} \\
&\doteq \ln(|f(x)|) + i\pi \sum_{x_n \in N} H(x_n - x) \quad .
\end{aligned} \tag{3.5.9}$$

Unter Nutzung von Beispiel 3.5.3 ergibt sich

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(f(x) + i\epsilon) \right) &\doteq -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \ln(|f(x)|) + i\pi \sum_{x_n \in N} H(x_n - x) \right) \\
&\doteq \sum_{x_n \in N} \delta(x - x_n) \quad .
\end{aligned} \tag{3.5.10}$$

□

Es bleibt anzumerken, dass nicht die Einfachheit der Nullstellen, sondern deren gleichbleibende Vielfachheit benötigt wird. Wenn z. B. alle Nullstellen aus N v -fach entartet sind, so ergibt sich ein konstanter Faktor v auf der linken Seite von Gleichung 3.5.8 wie es im folgenden Lemma ausführlich beschrieben ist.

Lemma 3.5.6 (Logarithmusdarstellung mit mehrfachen Nullstellen) *Sei $f: \mathfrak{D}(f) \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion mit der abzählbaren Multimenge an Nullstellen $N \subset \mathfrak{D}(f)$ welche alle dieselbe Vielfachheit v besitzen. Sei außerdem $\epsilon > 0$, dann gilt:*

$$v \left(-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(f(x) + i\epsilon) \right) \right) \doteq \sum_{x_n \in N} \delta(x - x_n) \quad . \tag{3.5.11}$$

Beweis. Sei $A \subset \mathfrak{D}(f)$ die Menge der Nullstellen von f bei der jede entartete Nullstelle durch einen Repräsentanten ersetzt wird. Sei

$$d(k) := -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(f(x) + i\epsilon) \right) \tag{3.5.12}$$

dann ist A eine Menge einfacher Nullstellen auf die Lemma 3.5.5 angewendet werden kann. Damit gilt

$$\sum_{x_n \in A} \delta(x - x_n) \doteq -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(f(x) + i\epsilon) \right) = d(x) \quad . \quad (3.5.13)$$

Durch den Übergang zu v -fach entarteten Nullstellen ergibt sich ein konstanter Vorfaktor von v

$$\sum_{x_n \in N} \delta(x - x_n) = v \sum_{x_n \in A} \delta(x - x_n) = vd(x) \quad . \quad (3.5.14)$$

□

Definition 3.5.7 (Zählfunktion Eigenwerte) *Sei S das Spektrum eines selbstadjungierten Operators. Sei $N: S \rightarrow \mathbb{N}$ eine Funktion so, dass für $\lambda, \lambda' \in S$ durch $N(\lambda)$ angegeben wird, wie viele Eigenwerte $\lambda' \leq \lambda$, der Vielfachheit gezählt, existieren, dann wird N Zählfunktion (der Eigenwerte) genannt.*

Unter Nutzung der Heaviside-Sprungfunktion (Beispiel 3.5.3) lässt sich die Zählfunktion als

$$N(\lambda) = \sum_{\lambda_n \in S} H(\lambda - \lambda_n) \quad (3.5.15)$$

schreiben. Mit der Zählfunktion lässt sich die spektrale Dichte folgendermaßen definieren.

Definition 3.5.8 (Spektrale Dichte) *Die spektrale Dichte ist die Distributionsableitung der Zählfunktion der Eigenwerte.*

Physikalisch gesprochen ist die spektrale Dichte des Dirac-Operators die Zustandsdichte der Energie. Um die Beweisführung zu erleichtern wird die Zustandsdichte der Wellenzahl $d(k)$ betrachtet, die gemäß Gleichung 2.4.5 in Energien umgerechnet werden kann. Für den letztendlichen Beweis wird außerdem folgendes Lemma benötigt.

Lemma 3.5.9 *Sei $A \in \mathbb{C}^{2,2}$ eine unitäre 2×2 Matrix. Dann gilt $\operatorname{tr}(A) \in \mathbb{R}$.*

Beweis. Seien λ_1, λ_2 die beiden Eigenwerte von A . Dann gilt $1 = \det(A) = \lambda_1 \lambda_2$ und $|\lambda_1| = \lambda_1 \overline{\lambda_1} = |\lambda_2| = \lambda_2 \overline{\lambda_2} = 1$. Es folgt $\lambda_1 \overline{\lambda_1} = \lambda_1 \lambda_2$ und damit $\overline{\lambda_1} = \lambda_2$. Es folgt $\operatorname{tr}(A) = \lambda_1 + \lambda_2 = \lambda_1 + \overline{\lambda_1} = 2 \operatorname{Re}(\lambda_1)$. □

Die Herleitung der spektralen Dichte für den Dirac-Operator folgt der Darstellung von Bolte und Harrison [BH03] und ähnelt der analogen Herleitung für den Schrödingeroperator auf Graphen durch Kottos und Smilansky [KS97; KS99b]. Zuerst bleibt festzuhalten,

dass, gemäß dem Satz von Kramer, unter zeitumkehrinvarianten Nebenbedingungen und Abwesenheit eines Magnetfeldes die Energieeigenwerte des Dirac-Operators mindestens zweifach entartet vorliegen [Wig32].

Eine notwendige Annahme, die im Rahmen dieser Arbeit nicht bewiesen wird, ist dabei, dass rationale Unabhängigkeit der Kantenlängen die Einfachheit der Eigenwerte bis auf o. g. Kramer-Entartung impliziert. Dieser Satz ist von Friedlander für Laplace-Operatoren auf Graphen bewiesen und seine Richtigkeit wurde von Bolte und Harrison für den Dirac-Operator implizit angenommen [Fri05].

Satz 3.5.10 (Spektrale Dichte) *Die Verteilung der Wellenzahlen des Dirac-Operators auf einem Graphen mit Kirchhoff-Nebenbedingungen und rationell unabhängigen Kantenlängen ist gegeben durch*

$$d(k) \doteq \frac{4L}{\pi} + \frac{2}{\pi} \sum_{p \in P} \frac{l_p}{r_p} A_p \exp(i\pi\mu_p) \operatorname{tr}(d_p) \cos(kl_p) \quad . \quad (3.5.16)$$

Die auftretenden Größen sind:

- P : Die Menge der Pfade auf dem Graphen.
- L : Die Gesamtlänge der Kanten auf dem Graphen.
- l_p : Die Länge eines Pfades p .
- r_p : Anzahl der Wiederholungen primitiver Pfade aus denen der Pfad p zusammengesetzt ist.
- d_p : Einem Pfad zugeordnetes Produkt von $SU(2)$ -Matrizen (vgl. Gleichung 3.4.25) gemäß:

$$\begin{aligned} u^{b_i b_{i+1}} &:= u_{b_{i+1}} u_{b_i}^{-1} \\ d_p &:= u^{b_1 b_2} u^{b_2 b_3} \dots u^{b_n b_1} \quad . \end{aligned} \quad (3.5.17)$$

- μ_p : Die Zahl der Rückstreuungen an Knoten v mit $\deg(v) > 2$.
- A_p : Wird $\nu_p := n - \mu_p$ gesetzt, ist A_p definiert durch

$$A_p := \prod_{s=1}^{\mu_p} \left(1 - \frac{2}{\deg(v_s)} \right) \prod_{s=1}^{\nu_p} \left(\frac{2}{\deg(v_s)} \right) \quad . \quad (3.5.18)$$

Beweis. Es wird nochmals betont, dass $d(k)$ nicht die spektrale Dichte, sondern die Verteilung der Wellenzahlen ist und noch gemäß Gleichung 2.4.5 in Energien umgerechnet werden muss. Wie bereits erwähnt werden, analog zu Lemma 3.5.6, die Paare der zweifach entarteten Eigenwerte für den Beweis durch einen Repräsentanten ersetzt und am Ende mit zwei multipliziert.

Die Verteilung der Wellenzahlen ist gegeben durch

$$d(k) = \sum_{n=1}^{\infty} \delta(k - k_n) \quad , \quad (3.5.19)$$

wobei die k_n sich, nach Vielfachheit gezählt, aus Satz 3.3.12 ergeben. Das heißt die k_n sind die Nullstellen der Funktion

$$\tilde{\zeta}(k) := \det(\mathbf{1}_{4m} - \mathbb{S}(k)) \quad . \quad (3.5.20)$$

Dabei ist $m = |E|$ die Zahl der Kanten. Da \mathbb{S} nach Konstruktion (Definition 3.3.11) eine unitäre Matrix ist, kann sie unitär diagonalisiert werden. Sei U diese unitäre Transformationsmatrix und $\tilde{\mathbb{S}} = U\mathbb{S}U^{-1}$ die diagonalisierte Streumatrix. Dann kann wegen

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{1} - \mathbb{S}(k)) &= \det(U(\mathbf{1} - \mathbb{S}(k))U^{-1}) \\ &= \det(U\mathbf{1}U^{-1} - U\mathbb{S}(k)U^{-1}) = \det(\mathbf{1} - \tilde{\mathbb{S}}(k)) \end{aligned} \quad (3.5.21)$$

beliebig zwischen der Ursprungsmatrix \mathbb{S} und der Diagonalmatrix $\tilde{\mathbb{S}}$ gewechselt werden. Dadurch kann $\tilde{\zeta}(k)$ mit den Eigenwerten von \mathbb{S} , welche auf dem komplexen Einheitskreis liegen müssen, und den Phasenfunktionen ϕ_j geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} \tilde{\zeta}(k) &= \det(\mathbf{1}_{4m} - \mathbb{S}(k)) = \prod_{j=1}^{4m} (1 - \exp(i\phi_j(k))) \\ &= \prod_{j=1}^{4m} \exp\left(\frac{i\phi_j(k)}{2}\right) \left(\exp\left(\frac{-i\phi_j(k)}{2}\right) - \exp\left(\frac{i\phi_j(k)}{2}\right) \right) \\ &= \prod_{j=1}^{4m} \exp\left(\frac{i\phi_j(k)}{2}\right) \prod_{j=1}^{4m} 2 \sin\left(\frac{\phi_j(k)}{2}\right) \\ &= 2^{4m} \det(\mathbb{S}(k))^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{4m} \sin\left(\frac{\phi_j(k)}{2}\right) \quad . \end{aligned} \quad (3.5.22)$$

Die Funktion $\tilde{\zeta}$ ist eine komplexe Funktion mit dem Phasenfaktor $\det(\mathbb{S}(k))^{\frac{1}{2}}$. Indem wir mit $\det(\mathbb{S}(k))^{-\frac{1}{2}}$ multiplizieren, erhalten wir die reelle Funktion

$$\begin{aligned}\zeta(k) &= \det\left(\mathbb{S}(k)^{-\frac{1}{2}}\right) \det(\mathbf{1} - \mathbb{S}(k)) \\ &= 2^{4m} \prod_{j=1}^{4m} \sin\left(\frac{\phi_j(k)}{2}\right)\end{aligned}\tag{3.5.23}$$

welche die gleichen Nullstellen wie $\tilde{\zeta}$ besitzt. Da rationale Unabhängigkeit der Kantenlängen vorausgesetzt ist und im Rahmen dieser Arbeit angenommen wird, dass ein analoges Theorem zu Schrödinger-Operatoren auf den Dirac-Operator übertragbar ist, wird angenommen, dass alle Eigenwerte bis auf Kramer-Entartung einfach vorliegen [Fri05]. Mit der reellen Funktion ζ und jeweils doppelten Entartung der Eigenwerte sind die Voraussetzungen von Lemma 3.5.6 erfüllt, welches im Folgenden angewendet wird.

$$\begin{aligned}d(k) &= \sum_{n=1}^{\infty} \delta(k - k_n) \\ &\doteq -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(\zeta(k) + i\epsilon) \right) .\end{aligned}\tag{3.5.24}$$

Durch Einsetzen von ζ ergibt sich

$$\begin{aligned}d(k) &\doteq -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log \left(\det(\mathbf{1} - \mathbb{S}(k)) \det\left(\mathbb{S}(k)^{-\frac{1}{2}}\right) + i\epsilon \right) \right) \\ &= \underbrace{-\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log \left(\det\left(\mathbb{S}(k)^{-\frac{1}{2}}\right) + i\epsilon \right) \right)}_{\text{Konstante Dichte}} \\ &\quad \underbrace{-\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log(\det(\mathbf{1} - \mathbb{S}(k)) + i\epsilon) \right)}_{\text{Oszillierende Dichte}} .\end{aligned}\tag{3.5.25}$$

Konstante Dichte Wir berechnen die Summanden getrennt und betrachten zuerst die sogenannte *Konstante Dichte* $d_{\text{smth}}(k)$ die sich aus

$$\begin{aligned}d_{\text{smth}}(k) &= -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log \left(\det\left(\mathbb{S}(k)^{-\frac{1}{2}}\right) + i\epsilon \right) \right) \\ &= -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log \left(\det\left(\mathbb{T}(k)^{-\frac{1}{2}} \mathbb{D}(k)^{-\frac{1}{2}}\right) + i\epsilon \right) \right)\end{aligned}\tag{3.5.26}$$

ergibt. Weil im Fall von Kirchhoff-Nebenbedingungen die Knotenübergangsmatrix unabhängig von k ist (vgl. Gleichung 3.4.30), fällt dieser Faktor im Logarithmus durch Ableiten nach k weg. Es bleibt also nur die Phasenmatrix \mathbb{D} (vgl. Gleichung 3.3.32) übrig, welche von der Kantenlänge abhängt. Damit ergibt sich folgender konstanter Ausdruck

$$\begin{aligned}
d_{\text{smth}}(k) &= -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log \left(\det \left(\mathbb{D}(k)^{-\frac{1}{2}} + i\epsilon \right) \right) \right) \\
&= -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log \left(\prod_{j=1}^{4m} \exp \left(-\frac{ikl_j}{2} \right) + i\epsilon \right) \right) \\
&= -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \log \left(\exp \left(-\frac{ik4L}{2} \right) \right) \right) \\
&= \frac{4L}{\pi} .
\end{aligned} \tag{3.5.27}$$

Dabei wurde

$$L := \sum_{e \in E} l_e = \sum_{j=1}^m l_j \tag{3.5.28}$$

für die Gesamtlänge der Kanten gesetzt.

Oszillierende Dichte Die oszillierende Dichte d_{osc} ist gegeben durch

$$d_{\text{osc}}(k) := -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \log \left(\det(\mathbf{1} - \mathbb{S}(k)) + i\epsilon \right) \right) . \tag{3.5.29}$$

Der Logarithmus kann in einer Taylor-Serie der diagonalisierten Matrix $\tilde{\mathbb{S}}$

$$\log \left(\det \left(\mathbf{1}_{4m} - \tilde{\mathbb{S}}(k) \right) \right) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{tr} \left(\tilde{\mathbb{S}}^n(k) \right) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{tr} \left(\mathbb{S}^n(k) \right) \tag{3.5.30}$$

entwickelt werden. Unter Nutzung der Blockstruktur wie in Lemma 3.4.6 kann die Streumatrix in 2×2 Blöcke zerlegt werden. Außerdem gehen nach Definition der Spur nur Diagonalelemente von $\mathbb{S}^n(k)$ in die Berechnung ein. Damit ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\operatorname{tr} \left(\mathbb{S}^n(k) \right) = \operatorname{tr} \left(\sum_{e_1, \dots, e_n} \exp(ikl_{e_1}) \mathbb{T}^{e_1 e_2} \exp(ikl_{e_2}) \mathbb{T}^{e_2 e_3} \dots \exp(ikl_{e_n}) \mathbb{T}^{e_n e_1} \right) . \tag{3.5.31}$$

Die Folge (e_1, \dots, e_n) muss also einem periodischen Pfad p mit n Kanten auf dem Graphen entsprechen. Sei P_n die Menge der periodischen Pfade mit n Kanten und l_p die Länge des

Pfades p . Dann lässt sich Gleichung 3.5.31 schreiben als:

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(\mathbb{S}^n(k)) &= \operatorname{tr} \left(\sum_{e_1, \dots, e_n} \exp(ikl_{e_1}) \cdots \exp(ikl_{e_n}) \cdot \mathbb{T}^{e_1 e_2} \cdots \mathbb{T}^{e_n e_1} \right) \\ &= \sum_{p \in P_n} \exp(ikl_p) \cdot \operatorname{tr}(\mathbb{T}^{e_1 e_2} \cdots \mathbb{T}^{e_n e_1}) \quad . \end{aligned} \quad (3.5.32)$$

Um die Spur des Knotenübergangsmatrixproduktes zu berechnen, wird μ_p als die Zahl der Rückstreuungen an Knoten v mit $\deg(v) > 2$ definiert. Diese Rückstreuungen führen zu einem Phasenfaktor von $\exp(i\pi\mu_p)$. Wird außerdem $\nu_p := n - \mu_p$ gesetzt, so kann in Gleichung 3.4.30 eingesetzt werden.

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(\mathbb{T}^{e_1 e_2} \cdots \mathbb{T}^{e_n e_1}) &= \\ \prod_{s=1}^{\mu_p} \left(1 - \frac{2}{\deg(v_s)} \right) \prod_{s=1}^{\nu_p} \left(\frac{2}{\deg(v_s)} \right) &\operatorname{tr}(u_{e_2} u_{e_1}^{-1} u_{e_3} u_{e_2}^{-1} \cdots u_{e_1} u_{e_n}^{-1}) \exp(i\pi\mu_p) \quad . \end{aligned} \quad (3.5.33)$$

Um die Notation zu verkürzen, setzen wir

$$A_p := \prod_{s=1}^{\mu_p} \left(1 - \frac{2}{\deg(v_s)} \right) \prod_{s=1}^{\nu_p} \left(\frac{2}{\deg(v_s)} \right) \quad (3.5.34)$$

und

$$\begin{aligned} u^{e_i e_{i+1}} &:= u_{e_{i+1}} u_{e_i}^{-1} \\ d_p &:= u^{e_1 e_2} u^{e_2 e_3} \cdots u^{e_n e_1} \quad . \end{aligned} \quad (3.5.35)$$

Unter Zusammenfassung aller bisherigen Ergebnisse ergibt sich

$$\operatorname{tr}(\mathbb{S}^n(k)) = \sum_{p \in P_n} A_p \exp(i\pi\mu_p) \operatorname{tr}(d_p) \exp(ikl_p) \quad (3.5.36)$$

Damit gilt für die oszillierende Dichte

$$\begin{aligned} d_{\text{osc}}(k) &= \frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{tr}(\mathbb{S}^n(k) + i\epsilon) \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dk} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{p \in P_n} A_p \exp(i\pi\mu_p) \operatorname{tr}(d_p) \exp(ikl_p) \right) \end{aligned} \quad (3.5.37)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{p \in P_n} i l_p A_p \exp(i\pi \mu_p) \operatorname{tr}(d_p) \exp(ikl_p) \right) \\
&= \frac{2}{\pi} \operatorname{Re} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{p \in P_n} l_p A_p \exp(i\pi \mu_p) \operatorname{tr}(d_p) \exp(ikl_p) \right) \\
&= \frac{2}{\pi} \operatorname{Re} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{p \in P_n} l_p A_p (-1)^{\mu_p} \operatorname{tr}(d_p) \exp(ikl_p) \right) \\
&= \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{p \in P_n} l_p A_p (-1)^{\mu_p} \operatorname{tr}(d_p) \operatorname{Re}(\exp(ikl_p)) \\
&= \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{p \in P_n} l_p A_p (-1)^{\mu_p} \operatorname{tr}(d_p) \cos(kl_p) \\
&= \frac{2}{\pi} \sum_{p \in P} \frac{l_p}{r_p} A_p (-1)^{\mu_p} \operatorname{tr}(d_p) \cos(kl_p) \quad .
\end{aligned}$$

Hierbei wurde mit Lemma 3.5.9 genutzt, dass unitäre 2×2 Matrizen immer eine reelle Spur besitzen. Zusammen mit der konstanten Dichte ergibt sich die gesamte Verteilung der Wellenzahlen als

$$d(k) = \frac{4L}{\pi} + \frac{2}{\pi} \sum_{p \in P} \frac{l_p}{r_p} A_p (-1)^{\mu_p} \operatorname{tr}(d_p) \cos(kl_p) \quad . \quad (3.5.38)$$

Wenn ein Pfad aus r_p Wiederholungen kürzerer Pfade zusammengesetzt ist, so taucht nur die Länge l_p/r_p des primitiven Pfades in der Gleichung auf. \square

4 Zusammenfassung

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde der Dirac-Operator freier Teilchen definiert und seine Eigenschaften diskutiert. Es wurde der Sobolev-Raum $H^1(\mathbb{R}^3)^4$ als Definitionsbereich für eine selbstadjungierte Realisierung des Operators eingeführt und das Spektrum in Satz 2.2.7 hergeleitet. Die Bewegung des freien Teilchens entlang einer Dimension wurde auf zwei verschiedene Arten dargestellt. Eine Möglichkeit ist es den dreidimensionalen Anschauungsraum auf eine Dimension zu beschränken, was zu einer Beschreibung mit vierdimensionalen Spinoren führt. Eine andere Möglichkeit ist es die Grundgleichungen von vornherein nur für eine Dimension herzuleiten und zweidimensionale Spinoren zu verwenden. Aufgrund der Schwierigkeiten in der physikalischen Interpretation zweidimensionaler Spinoren wurden später vierdimensionale Spinoren verwendet. Als letztes Ergebnis des ersten Teils wurde die Zitterbewegung ausführlicher untersucht, um für den zweiten Teil der Arbeit begründen zu können, warum ausschließlich Wellenfunktionen positiver Energie betrachtet wurden.

Im zweiten Teil wurden Definitionen und Eigenschaften von Graphen und symplektischen Formen präsentiert. Anschließend wurde ein geeigneter Hilbertraum für den Dirac-Operator auf Graphen definiert und Nebenbedingungen hergeleitet, die zu einer selbstadjungierten Realisierung führen. Dabei wurde die Frage nach der Selbstadjungiertheit in einem unendlichdimensionalen Raum auf die lineare Algebra endlichdimensionaler symplektischer Formen reduziert. Mit diesen Werkzeugen wurden konkrete Nebenbedingungen betrachtet und ein „Kirchhoffsches Gesetz“ formuliert. Abschließend wurden zeitumkehrinvariante Nebenbedingungen gefordert und damit die spektrale Dichte hergeleitet.

5 Ausführliche Beweise

5.1 Standardgeschwindigkeitsoperator

Da in diesem Abschnitt der Begriff „beschränkt“ im Sinne der Analysis benötigt wird, werden beschränkte Operatoren, beschränkt im Sinne der Funktionalanalysis, bis zum Ende dieses Abschnittes konsequent als stetig bezeichnet.

5.1.1 Definitionsbereich Ortsoperator

Um den Kommutator auszuwerten, muss zuerst der Definitionsbereich des Ortsoperators definiert werden. Üblicherweise wird der Ortsoperator komponentenweise definiert, so dass sich für die i -te Komponente ein Multiplikationsoperator auf $\mathfrak{D}(\mathcal{D})$ mit

$$\mathbf{x}_i\psi := (\mathbf{x}_i\psi_1, \mathbf{x}_i\psi_2, \mathbf{x}_i\psi_3, \mathbf{x}_i\psi_4)^\top \quad (5.1.1)$$

ergibt [Tha92, Kapitel 1]. Wird aus den drei Komponenten des Ortsoperator ein vektorwertiger Ortsoperator mit drei Komponenten definiert, kann er nicht mehr auf $H^1(\mathbb{R}^3)^4$, sondern muss auf dem expandierten Unterraum von $H^1(\mathbb{R}^3)^{4,3}$

$$\mathfrak{D}(\mathcal{D})_{\text{exp}} = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} \psi_1 & \psi_1 & \psi_1 \\ \psi_2 & \psi_2 & \psi_2 \\ \psi_3 & \psi_3 & \psi_3 \\ \psi_4 & \psi_4 & \psi_4 \end{pmatrix} \mid \psi_i \in H^1(\mathbb{R}^3), i \in \{1, 2, 3, 4\} \right\} \quad (5.1.2)$$

definiert werden durch

$$\mathbf{x}\psi = \begin{pmatrix} x_1\psi_1 & x_2\psi_1 & x_3\psi_1 \\ x_1\psi_2 & x_2\psi_2 & x_3\psi_2 \\ x_1\psi_3 & x_2\psi_3 & x_3\psi_3 \\ x_1\psi_4 & x_2\psi_4 & x_3\psi_4 \end{pmatrix}. \quad (5.1.3)$$

Das Skalarprodukt und damit Norm und Topologie auf dem Produktraum ergeben sich aus Satz 2.2.1. Operatoren aus $\mathfrak{D}(\mathcal{D})$ können natürlicherweise auf $\mathfrak{D}(\mathcal{D})_{\text{exp}}$ definiert werden,

indem sie spaltenweise angewendet werden.

Satz 5.1.1 (Definitionsbereich des Ortsoperators unter Zeitevolution) *Der Definitionsbereich $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ des Multiplikationsoperators \mathbf{x} ist invariant unter Zeitevolution.*

$$\mathfrak{D}(\mathbf{x}(t)) = \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right) \mathfrak{D}(\mathbf{x}) = \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \quad (5.1.4)$$

Beweis. Für den Beweis wird der regularisierte Ortsoperator \mathbf{x}_λ

$$\mathbf{x}_\lambda \equiv \frac{\mathbf{x}}{1 + \lambda\|\mathbf{x}\|}, \quad \lambda > 0 \quad (5.1.5)$$

benötigt. Für $\lambda > 0$, ist jede Komponente von \mathbf{x}_λ ein stetiger Multiplikationsoperator auf dem Hilbertraum $H^1(\mathbb{R}^3)^{4,3}$. Eine Funktion ψ liegt genau dann im Definitionsbereich von \mathbf{x} , wenn $\|\mathbf{x}_\lambda\psi\|$ gleichmäßig beschränkt bleibt unter $\lambda \rightarrow 0$.

Es folgt mit Lemma 5.1.2, dass $\mathbf{x}_\lambda\psi \in \mathfrak{D}(\mathcal{D})_{\text{exp}} = H^1(\mathbb{R}^3)^{4,3}$ liegt, wenn $\psi \in \mathfrak{D}(\mathcal{D})_{\text{exp}}$. Auf diesen Zuständen kann die Zeitableitung für den Operator \mathbf{x}_λ ausgewertet werden:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}_\lambda(t)\psi = \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right) \frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}_\lambda] \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\psi \quad (5.1.6)$$

Als Komposition stetiger Operatoren ist der Ausdruck auf der rechten Seite von Gleichung 5.1.6 selbst auch ein stetiger Operator. Wird Gleichung 5.1.6 von 0 bis t integriert und die Norm gebildet, ergibt sich für alle $\psi \in \mathfrak{D}(\mathcal{D})_{\text{exp}}$ und $\lambda > 0$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_\lambda(t)\psi\| &= \left\| \mathbf{x}_\lambda \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\psi \right\| \\ &= \left\| \mathbf{x}_\lambda\psi(\mathbf{x}, 0) + \int_0^t \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right) \frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}_\lambda] \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right)\psi(\mathbf{x}, s) ds \right\| \\ &\leq \|\mathbf{x}_\lambda\psi(\mathbf{x}, 0)\| + \left\| \int_0^t \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right) \frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}_\lambda] \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right)\psi(\mathbf{x}, s) ds \right\| \\ &\leq \|\mathbf{x}_\lambda\psi(\mathbf{x}, 0)\| + \int_0^t \left\| \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right) \frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}_\lambda] \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right)\psi(\mathbf{x}, s) \right\| ds \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

Um den Kommutator $[\mathcal{D}, \mathbf{x}_\lambda]$ auszuwerten, wird im Folgenden von der Einsteinschen Summenkonvention Gebrauch gemacht und über gleiche Indizes summiert. Mit dieser Konvention kann die Diracgleichung (Gleichung 2.1.12) geschrieben werden als

$$(c\alpha_{i,j,k}\mathbf{p}_k + \beta_{i,j}mc^2)\psi(t, \mathbf{x})_j = (-ci\hbar\alpha_{i,j,k}\partial_k + \beta_{i,j}mc^2)\psi(t, \mathbf{x})_j \quad (5.1.8)$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}_\lambda]_{i,j,l} &= \frac{i}{\hbar} \left((-ci\hbar\alpha_{i,j,k}\partial_k + \beta_{i,j}mc^2)\mathbf{x}_{\lambda,l} - \mathbf{x}_{\lambda,l}(-ci\hbar\alpha_{i,j,k}\partial_k + \beta_{i,j}mc^2) \right) \\
&= c\alpha_{i,j,k}(\partial_k\mathbf{x}_{\lambda,l} - \mathbf{x}_{\lambda,l}\partial_k) = c\alpha_{i,j,k}[\partial_k, \mathbf{x}_{\lambda,l}] \\
&= c\alpha_{i,j,k}(\partial_k\mathbf{x}_{\lambda,l}) \quad .
\end{aligned} \tag{5.1.9}$$

Die letzte Äquivalenz ergibt sich mit einer Testfunktion f und der Produktregel

$$\begin{aligned}
[\partial_k, \mathbf{x}_{\lambda,l}]f &= \partial_k\mathbf{x}_{\lambda,l}f - \mathbf{x}_{\lambda,l}\partial_kf \\
&= (\partial_k\mathbf{x}_{\lambda,l})f + (\mathbf{x}_{\lambda,l}\partial_k)f - (\mathbf{x}_{\lambda,l}\partial_k)f = (\partial_k\mathbf{x}_{\lambda,l})f \quad .
\end{aligned} \tag{5.1.10}$$

Die Ableitungen $(\partial_k\mathbf{x}_{\lambda,l})$ finden sich in Gleichung 5.1.14 und sind betragsmäßig durch Eins beschränkt. Damit ist zweite Summand von

$$\|\mathbf{x}_\lambda\psi(\mathbf{x}, 0)\| + \int_0^t \left\| \exp\left(\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right) \frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}_\lambda] \exp\left(-\frac{i\mathcal{D}}{\hbar}s\right) \psi(\mathbf{x}, s) \right\| ds \tag{5.1.11}$$

gleichmäßig beschränkt bezüglich λ . Der erste Summand ist genau dann gleichmäßig beschränkt, wenn $\psi \in \mathfrak{D}(\mathbf{x})$ liegt. Es folgt für die vollständige Beweiskette:

$$\begin{aligned}
\psi \in \mathfrak{D}(\mathbf{x}) &\Leftrightarrow \|\mathbf{x}_\lambda\psi\| \text{ ist gleichmäßig beschränkt bzgl. } \lambda \\
&\Leftrightarrow \|\mathbf{x}_\lambda(t)\psi\| \text{ ist gleichmäßig beschränkt bzgl. } \lambda \\
&\Leftrightarrow \psi \in \mathfrak{D}(\mathbf{x}(t))
\end{aligned} \tag{5.1.12}$$

□

Lemma 5.1.2 (Charakterisierung von \mathbf{x}_λ) *Der regularisierte Ortsoperator aus Gleichung 5.1.5 ist einmal stetig differenzierbar und es gilt*

$$\psi \in \mathfrak{D}(\mathcal{D})_{exp} \Rightarrow \mathbf{x}_\lambda\psi \in \mathfrak{D}(\mathcal{D})_{exp} = H^1(\mathbb{R}^3)^{4,3} \tag{5.1.13}$$

Beweis. Der regularisierte Ortsoperator \mathbf{x}_λ ist beschränkt durch $1/\lambda$. Die Ableitung von \mathbf{x}_λ ist mit der Schreibweise $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)^\top = (x, y, z)^\top$ gegeben durch

$$\nabla\mathbf{x}_\lambda = \frac{1}{(1 + \lambda\|\mathbf{x}\|)^2\|\mathbf{x}\|} \begin{pmatrix} \|\mathbf{x}\| + \lambda(y^2 + z^2) & -\lambda xy & -\lambda xz \\ -\lambda xy & \|\mathbf{x}\| + \lambda(x^2 + z^2) & -\lambda yz \\ -\lambda xz & -\lambda yz & \|\mathbf{x}\| + \lambda(x^2 + y^2) \end{pmatrix} . \tag{5.1.14}$$

und sowohl stetig, als auch betragsmäßig beschränkt durch Eins. Sei $M := \max(1, 1/\lambda)$ das Maximum beider Schranken.

Mit der Produktregel schwach differenzierbarer Funktionen gilt, dass $\nabla(\mathbf{x}_\lambda \psi) = \nabla \mathbf{x}_\lambda \psi + \mathbf{x}_\lambda \nabla \psi \in W^{1,1}(\mathbb{R}^3)^{3,4,3}$ es muss also gezeigt werden, dass $\nabla(\mathbf{x}_\lambda \psi) \in L^2(\mathbb{R}^3)^{3,4,3}$.

$$\begin{aligned}
\langle \nabla(\mathbf{x}_\lambda \psi) | \nabla(\mathbf{x}_\lambda \psi) \rangle &= \langle \nabla \mathbf{x}_\lambda \psi + \mathbf{x}_\lambda \nabla \psi | \nabla \mathbf{x}_\lambda \psi + \mathbf{x}_\lambda \nabla \psi \rangle \\
&= \langle \nabla \mathbf{x}_\lambda \psi | \nabla \mathbf{x}_\lambda \psi \rangle + \langle \mathbf{x}_\lambda \nabla \psi | \mathbf{x}_\lambda \nabla \psi \rangle \\
&\leq M^2 (\langle \psi | \psi \rangle + \langle \nabla \psi | \nabla \psi \rangle) \\
&\Rightarrow \nabla(\mathbf{x}_\lambda \psi) \in L^2(\mathbb{R}^3)^{3,4,3}
\end{aligned} \tag{5.1.15}$$

□

Satz 5.1.3 (Definitionsbereich von $[\mathcal{D}, \mathbf{x}(t)]$) Sei \mathcal{D}^{-1} der inverse Diracoperator und $A := \mathcal{D}^{-1} \mathfrak{D}(\mathbf{x})$. Dann liegt die Menge

$$A \subset \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \cap \mathfrak{D}(\mathcal{D}) \tag{5.1.16}$$

dicht in $H^1(\mathbb{R}^3)^{4,3}$, ist invariant unter Zeitevolution und $[\mathcal{D}, \mathbf{x}(t)]$ ist wohldefiniert auf A . Es gilt

$$\frac{i}{\hbar} [\mathcal{D}, \mathbf{x}(t)] = c \boldsymbol{\alpha}(t) \quad . \tag{5.1.17}$$

Beweis. Der Operator \mathcal{D}^{-1} ist stetig, weil 0 nicht im Spektrum von \mathcal{D} liegt.

Nehme für einen Widerspruch an, dass A nicht dicht liegt und es damit einen Vektor $f \in H^1(\mathbb{R}^3)^{4,3}$ ungleich Null gibt, so dass für alle $\psi \in \mathfrak{D}(\mathbf{x})$

$$0 = \langle f | \mathcal{D}^{-1} \psi \rangle = \langle \mathcal{D}^{-1} f | \psi \rangle \quad . \tag{5.1.18}$$

Da $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ dicht liegt [Tha92, Theorem 1.3], folgt aus Gleichung 5.1.18 dass $\mathcal{D}^{-1} f = 0$ und damit $f = \mathcal{D} \mathcal{D}^{-1} f = 0$ ist. Damit ist ein Widerspruch zur Annahme konstruiert und es folgt, dass A dicht liegt.

Um die Beziehung $A \subset \mathfrak{D}(\mathbf{x})$ zu beweisen wird in den Impulsraum gewechselt. Sei $\psi \in \mathfrak{D}(\mathbf{x})$ und damit $\mathcal{F} \psi \in \mathfrak{D}(\nabla_p)$. Aus

$$\begin{aligned}
\mathbf{x} \mathcal{D}^{-1} \psi &= \mathcal{F}^{-1} i \nabla_p h(\mathbf{p})^{-1} \mathcal{F} \psi \\
&= \mathcal{F}^{-1} i ((\nabla_p h(\mathbf{p})^{-1}) + (h(\mathbf{p})^{-1} \nabla_p)) \mathcal{F} \psi
\end{aligned} \tag{5.1.19}$$

folgt, dass $\mathcal{D}^{-1}\psi \in \mathfrak{D}(\mathbf{x})$, weil die Ableitung von

$$h(\mathbf{p})^{-1} = \frac{c\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2}{c^2 p^2 + m^2 c^4} \quad (5.1.20)$$

nach \mathbf{p} beschränkt ist. Damit sind beide Summanden auf der rechten Seite von Gleichung 5.1.19 stetige Operatoren. Daraus folgend ergibt sich die linke Seite aus der unitären Transformation eines stetigen Operators selbst als stetiger Operator. Es folgt $A = \mathcal{D}^{-1}\mathfrak{D}(\mathbf{x}) \subset \mathfrak{D}(\mathbf{x})$ und damit $A \subset \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \cap \mathfrak{D}(\mathcal{D})$, da die Beziehung $A \subset \mathfrak{D}(\mathcal{D})$ trivialerweise erfüllt ist.

Offensichtlich ist der Kommutator $[\mathcal{D}, \mathbf{x}(t)]$ wohldefiniert auf $\exp\left(\frac{-i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\mathcal{D}^{-1}\mathfrak{D}(\mathbf{x})$. Mit Satz 5.1.1 und $A \subset \mathfrak{D}(\mathbf{x})$ folgt, dass der Kommutator wohldefiniert auf $A = \exp\left(\frac{-i\mathcal{D}}{\hbar}t\right)\mathcal{D}^{-1}\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ ist.

Wird der Kommutator $[\mathcal{D}, \mathbf{x}(t)]$ unter Zuhilfenahme von Gleichung 5.1.9 mit $\lambda = 0$ ausgewertet, so ergibt sich

$$\frac{i}{\hbar}[\mathcal{D}, \mathbf{x}(t)] = c\alpha(t) \quad . \quad (5.1.21)$$

Da dieser Ausdruck beschränkt ist, ergibt sich ein stetiger Multiplikationsoperator auf der dichten Menge A der damit eindeutig auf den gesamten Raum fortgesetzt werden kann. \square

5.2 Lemmata zu symplektischen Formen

In diesem Abschnitt sollen Lemmata für den Beweis von Satz 3.2.9 bewiesen werden. Der folgende Satz verallgemeinert Korollar 1.3 von [War13] unter Verwendung eines eleganteren Beweises.

Satz 5.2.1 (Dimension symplektischer Vektorräume) *Sei V ein endlicher, symplektischer \mathbb{C} -Vektorraum. Genau dann wenn die Determinante der Darstellungsmatrix $\det(\Omega)$ in \mathbb{R} liegt, ist die Dimension n von V gerade.*

Beweis. Nach Satz 3.2.4 ist Ω eine schieffermitesche, invertierbare Matrix. Es gilt

$$\begin{aligned} \Omega &= -\Omega^\dagger = -\overline{\Omega^\top} \\ \det(\Omega) &= \det\left(\Omega^\top\right) = \det(-\overline{\Omega}) = (-1)^n \overline{\det(\Omega)} \quad . \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

Sei $\det(\Omega) \in \mathbb{R}$. Wenn die Dimension n von V ungerade ist, so gilt $\det(\Omega) = -\overline{\det(\Omega)}$ und mit der Annahme $\det(\Omega) \in \mathbb{R}$ folgt durch $\det(\Omega) = 0$ ein Widerspruch zur Invertierbarkeit.

Sei n gerade. Es folgt aus 5.2.1, dass $\det(\Omega) = \overline{\det(\Omega)}$. \square

Satz 5.2.2 (Dimensionsformel [War13]) *Sei V ein endlicher, symplektischer \mathbb{C} -Vektorraum und $W \subset V$ ein Unterraum. Dann gilt $\dim(W) + \dim(W^\top) = \dim(V)$.*

Beweis. Sei mit V^* der duale Raum zu V notiert und definiere

$$\begin{aligned} \mathcal{I}: W &\rightarrow W^* \\ w &\mapsto (\tilde{w} \mapsto \omega(w, \tilde{w})), \quad w, \tilde{w} \in W \quad . \end{aligned} \tag{5.2.2}$$

Aus der Invertierbarkeit von Ω folgt, dass \mathcal{I} injektiv und wegen gleicher Dimension ein Isomorphismus ist. Nun definiere

$$\begin{aligned} \mathcal{T}: V &\rightarrow W^* \\ v &\mapsto (w \mapsto \omega(v, w)), \quad v \in V, w \in W \quad . \end{aligned} \tag{5.2.3}$$

Nach Definition von W^\top gilt $\ker(\mathcal{T}) = W^\top$ und wegen der Isomorphie von \mathcal{I} folgt $\text{ran}(\mathcal{T}) = W$. Mit der Dimensionsformel für lineare Abbildungen folgt die Aussage. \square

Satz 5.2.3 (Dimension eines isotropen Raumes [Ler17]) *Sei $V = \mathbb{C}^{2n}$ ein endlicher, symplektischer Vektorraum gerader Dimension und $W \subset V$ ein isotroper Unterraum, dann gilt $\dim(W) \leq n$. Genau dann wenn W ein lagrangescher Unterraum ist, gilt $\dim(W) = n$.*

Beweis. Sei $m := \dim(W) > n$. Da W isotrop ist, gilt mit Definition 3.2.7

$$\forall w, \tilde{w} \in W: \omega(w, \tilde{w}) = 0 \quad . \tag{5.2.4}$$

Wird die Basis von V so gewählt, dass zuerst Vektoren aus W erscheinen, dann erhält die Darstellungsmatrix Ω demnach einen $m \times m$ Block $\mathbf{0}$ in der oberen linken Ecke. Da $2n - m < m$ ist, müssen die ersten m Spaltenvektoren von Ω linear abhängig sein, im Widerspruch zu Satz 3.2.4.

Sei W ein lagrangescher Unterraum. Nehme für Widerspruch an, dass $\dim(W) < n$, dann gilt $\dim(W^\top) = \dim(V) - \dim(W) > n$. Das heißt es gibt einen Vektor $v \neq 0 \in W^\top \setminus W$. Setze $X := W \oplus v\mathbb{C}$ und zeige, dass X isotrop ist. Seien $x, x' \in X$ und wähle $w, w' \in W$ und $a, a' \in \mathbb{C}$ so, dass $x = w + av$ und $x' = w' + a'v$. Dann gilt

$$\omega(x, x') = \omega(w, w') + aa'\omega(v, v) + a\omega(v, w') + a'\omega(w, v) = 0 \quad . \tag{5.2.5}$$

Das heißt X ist ein isotroper Raum, was im Widerspruch zur Maximalität von W steht. \square

Für das folgende Lemma ist der Notationsunterschied zwischen W^\perp , dem orthogonalen Komplement, und W^\top , dem symplektischen Komplement, zu beachten.

Lemma 5.2.4 (Lagrangeraum als orthogonales Komplement) *Sei $V = \mathbb{C}^{2n}$ ein endlicher, symplektischer Vektorraum. Ein Unterraum $W \subset V$ ist genau dann lagrangesche, wenn W^\perp lagrangesche ist und $W^\perp = \Omega W$.*

Beweis. Nach Definition von W^\perp gilt $\forall w \in W, \tilde{w} \in W^\perp: \langle w | \tilde{w} \rangle = 0$. Gleichzeitig gilt nach Annahme, dass $\forall w' \in W: \Omega w' \in W^\perp$. Das heißt $\forall w, w' \in W: \langle w | \Omega w' \rangle = \omega(w, w') = 0$. Das heißt W ist isotrop. Gleichzeitig gilt für orthogonale Komplemente $V = W \oplus W^\perp$ und da W^\perp nach Annahme maximal isotrop ist, folgt die Aussage gemäß Satz 5.2.3 mit einem Dimensionalitätsargument. \square

Symbole

α Diracmatrix α . Siehe Gleichung 2.1.7.

B Die Anzahl der Kanten in einem Graphen.

β Diracmatrix β . Siehe Gleichung 2.1.7.

c Lichtgeschwindigkeit.

\mathfrak{D} Definitionsbereich eines Operators.

\mathcal{D} Der Diracoperator. Siehe Gleichung 2.1.12

\mathcal{F} Die Fouriertransformation einer Funktion. Siehe Gleichung 2.2.5.

\doteq Gleichheit der zugeordneten Distribution von integrierbaren Funktionen (Definition 3.5.2)

h Planck-Konstante.

H H^n ist der Sobolevraum der n -fach schwach differenzierbaren Funktionen die in L^2 liegen. ($H^n := W^{n,2}$)

H Die Heaviside-Sprungfunktion.

\hbar Reduzierte Planck-Konstante. $\hbar := \frac{h}{2\pi}$

\mathcal{H} Ein Hilbertraum, d.h. ein vollständiger, normierter Raum mit Skalarprodukt.

j Die relativistische Wahrscheinlichkeitsstromdichte (Definition 3.3.5).

J Kanonische symplektische Form (Siehe Beispiel 3.2.5).

L $L^p(X, Y)$ ist der Lebesgueraum der p -integrierbaren Funktionen, die von X nach Y abbilden.

\log Der komplexe Logarithmus (Definition 3.5.4).

∇ Der Nabla-Operator.

∇^2 Der Laplace-Operator.

σ Paulimatrix σ . Siehe Gleichung 2.1.9.

$\langle \cdot | \cdot \rangle$ Das Skalarprodukt zweier Elemente x, y eines Vektorraums V wird durch $\langle x | y \rangle$ angegeben.

SU Die spezielle unitäre Gruppe.

V^* Der duale Raum eines Vektorraumes V .

\mathcal{W} Transformation welche den Dirac-Operator in einen Multiplikationsoperator konvertiert. Siehe Satz 2.2.7.

Literatur

- [BH03] J. Bolte und J. Harrison. „Spectral Statistics for the Dirac Operator on Graphs“. In: *J. Phys. A. Math. Gen.* 36.11 (2003), S. 2747–2769.
- [Dir30] P. A. M. Dirac. *The Principles Of Quantum Mechanics*. Hrsg. von R. H. Fowler und P. Kapitza. Oxford: Clarendon Press, 1930. 257 S.
- [EM99] W. N. Everitt und L. Markus. „Complex Symplectic Geometry with Applications to Ordinary Differential Operators“. In: *Trans. Am. Math. Soc.* 351.12 (1999), S. 4905–4945.
- [Fri05] L. Friedlander. „Genericity of Simple Eigenvalues for a Metric Graph“. In: *Israel Journal of Mathematics* 146.1 (1. Dez. 2005), S. 149–156.
- [Jag] C. Jager. „Symplectic Vector Spaces, Lagrangian Subspaces, and Liouville’s Theorem“. In: *Celest. Mech. Jr. Semin.* S. 1–11.
- [Kir45] G. R. Kirchhoff. „Über Den Durchgang Eines Elektrischen Stromes Durch Eine Ebene, Insbesondere Durch Eine Kreisförmige“. In: *Annalen der Physik und Chemie* LXIV (1845), S. 513.
- [KS97] T. Kottos und U. Smilansky. „Quantum Chaos on Graphs“. In: *Physical Review Letters* 79.24 (15. Dez. 1997), S. 4794–4797.
- [KS99a] V. Kostrykin und R. Schrader. „Kirchhoff’s Rule for Quantum Wires“. In: *J. Phys. A. Math. Gen.* 32 (1999), S. 595–630.
- [KS99b] T. Kottos und U. Smilansky. „Periodic Orbit Theory and Spectral Statistics for Quantum Graphs“. In: *Annals of Physics* 274.1 (Mai 1999), S. 76–124.
- [Ler17] E. Lerman. „Symplectic Geometry and Hamiltonian Systems“. In: 2017, S. 1–96.
- [RS53] K. Ruedenberg und C. W. Scherr. „Free-Electron Network Model for Conjugated Systems. I. Theory“. In: *J. Chem. Phys.* 21.9 (1953), S. 1565–1581.
- [Tha92] B. Thaller. *The Dirac Equation*. Hrsg. von W. Beiglböck, W. Thirring und E. H. Lieb. Heidelberg: Springer, 1992. 357 S.

- [vBM13] J. von Below und D. Mugnolo. „The Spectrum of the Hilbert Space Valued Second Derivative with General Self-Adjoint Boundary Conditions“. In: *Linear Algebra Appl.* 439.7 (2013), S. 1792–1814.
- [War13] J. Warner. „Symplectic Vector Space“. In: 1.1 (2013), S. 1–4.
- [Wer07] D. Werner. *Funktionalanalysis*. 6. Aufl. Heidelberg: Springer, 2007. 531 S.
- [Wig32] E. Wigner. „Über die Operation der Zeitumkehr in der Quantenmechanik“. In: *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse* 1932 (1932), S. 546–559.
- [WZ15] R. Winkler und U. Zülicke. „Discrete Symmetries of Low-Dimensional Dirac Models: A Selective Review with a Focus on Condensed-Matter Realizations“. In: *ANZIAM J.* 57.1 (2015), S. 3–17.

Abbildungsverzeichnis

3.1	Ein einzelner Knoten an dem Nebenbedingungen spezifiziert werden sollen.	24
3.2	Einfacher Graph.	26