Zeta-Funktionen in der Physik - eine Einführung

Bernhard Schiekel

Zeta-Funktionen in der Physik - eine Einführung, Bernhard Schiekel,

4. Auflage, korr. (= Version 1.41), 03.06.2019, Ulm.

Dieser Text ist auch zugänglich über: www.mb-schiekel.de/zetafunc.pdf .

Drucksatz mit LYX 2.2.1, unter openSUSE-Linux 42.2 (Kernel 4.4.36),

KOMA-Scrip 2015.105.3.18svn37734-21.2t (TEX Live 2015),

BibTex-style natdin 3.0a4 (2005), pdfTEX 2015.104.svn37754-20.19 (TEX Live 2015).

Versionsgeschichte:

- V-1.03, Dez. 2007: 1. Auflage der Druck-Version im Eigenverlag.
- V-1.11, Juli 2008: 2. Auflage der Druck-Version im Eigenverlag. Fehlerkorrekturen, Überarbeitung des Kapitels zur semiklassischen Näherung in der QFT, neu: die Kapitel über Dimensionsanalyse, Regularisierung und Renormierung der $(\phi^4)_4$-Theorie mittels der spektralen Zeta-Funktion, Zusammenhang von Renormierung und Wärmekern-Koeffizienten, die Anhänge zur Funktionalableitung und der Literatur zur Funktionalintegration.
- V-1.20, Mai 2010: Fehlerkorrekturen, erweitert: Feynman-Propagator und Zustandssumme des freies Teilchen und des harmonischen Oszillators (jetzt mit Epsteinscher Zeta-Funktion), die Anhänge zur Gamma-Funktion und Riemannschen Zeta-Funktion, neu: die Anhänge zu Summenformeln, Jacobischer Theta-Funktion, Hurwitzscher und Epsteinscher Zeta-Funktion, sowie einige kurze Lebensläufe zu Euler, Riemann, et al.
- V-1.30, April 2011: neu: Anhänge zu Fredholm-Operatoren und Pseudodifferential-Operatoren.
- V-1-31, Juli 2011: neu: Kapitel zu klassischen deterministischen dynamischen Systemen.
- V-1-32, September 2011: überarbeitet: Herleitung des Feynmanschen Pfadintegrals, neu: Kapitel zur semiklassischen Näherung und Gutzwiller Spurformel.
- V-1-40, Juni 2017: kleine Korrekturen. Legende der Creative Commons (CC) Bilder korrigiert.
- V-1-41, Juni 2019: eine Korrektur einer Literaturangabe.

in Dankbarkeit für

Beate

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

„The Zeta function is probably the most challenging and mysterious object of modern mathematics, in spite of its utter simplicity."

Gutzwiller (1990),
Chaos in Classical and Quantum Mechanics, S. 308.

„Some decades ago I made - somewhat in jest - the suggestion that one should get accepted a non-proliferation treaty of Zeta functions. There was becoming such an overwhelming variety of these objects."

Atle Selberg, zitiert nach Baez (2005).

In den Kurs-Vorlesungen zur Theoretischen Physik taucht in der Thermodynamik gelegentlich und recht unvermittelt eine für Physiker etwas ungewohnte mathematische Funktion auf, die Riemannsche Zeta-Funktion $\zeta(x)$:

- $\zeta(2)$ im Hochtemperatur-Limes in der Zustandsdichte für den harmonischen Oszillator,
- $\zeta(\frac{5}{2})$ in der Zustandsdichte für ein freies Bosonen-Gas,
- $\zeta(4)$ im Zusammenhang mit dem Integral über die Stahlungsdichte der Planckschen Schwarzkörperstrahlung.

Dies legt die Frage nahe, was es mit dieser Zeta-Funktion auf sich hat und ob es tiefer liegende Gründe für ihr Auftauchen in der Thermodynamik gibt. Tatsächlich erweisen sich diese Riemannsche Zeta-Funktion und moderne Erweiterungen, wie die 'spektrale Zeta-Funktion' von Laplace-Operatoren als sehr interessante und tiefgründige Objekte, die komplexe Analysis, Zahlentheorie, Differentialgeometrie, Topologie, Quantentheorie, Quantenfeldtheorie und Chaostheorie miteinander verknüpfen und deren Eigenschaften, wie etwa die Riemannsche Vermutung, bis heute Gegenstand der Forschung sind.

Diese kleine, hier vorgelegte Arbeit wendet sich an Physik-Studenten und Physiker, die einen leichten Zugang zur Welt der Zeta-Funktionen suchen. Es werden auf einfachem Niveau einige Beispiele zum Auftreten der Riemannschen Zeta-Funktion aus der Quantentheorie der Bosonen-Einteilchen und Vielteilchen-Systeme präsentiert. Ausgehend vom harmonischen Oszillator führt der Weg über kohärente Zustände, Phasen-Operatoren und schließlich zur Vielteilchen-Pfadintegral-Darstellung mit kohärenten

Zuständen und der Zustandssumme freier Bosonen. Darauf folgt eine einfache Einführung in die Theorie der spektralen Zeta-Funktion mit den Beispielen des Casimir-Effektes und der euklidischen Pfadintegral-Darstellung des harmonischen Oszillators. Darauf folgt ein einfacher Einstieg in die spektrale Zeta-Funktion im Rahmen der semiklassischen Näherung in der Quantenfeldtheorie, also im Rahmen der 1-Schleifen-Näherung und des effektiven Potentials. Den Schluß bildet eine Einführung in deterministische dynamische Systeme, sowohl klassisch, als auch quantenmechanisch semiklassisch mit der Gutzwillerschen Spurformel und den entsprechenden dynamischen oder Ruelleschen Zetafunktionen.

In den Anhängen finden sich Einführungen in die Mathematik der Gamma-Funktion, der Riemannschen Zeta-Funktion, der Mellin-Integral-Transformation, der asymptotischen Entwicklungen, insb. der Methode der stationären Phase und der Sattelpunktmethode und ein einfacher Zugang zur Entwicklung des Wärmekerns (Wärmekern- oder Seeley-Koeffizienten) und des Indextheorems für elliptische Differential-Operatoren.

Alle Ergebnisse werden aus elementaren Kenntnissen der Quantentheorie ausführlich hergeleitet, auch wenn dadurch mancher Beweis etwas länger wird. Für die meisten mathematischen Anhänge werden nur einfache Kenntnisse aus Analysis und Funktionentheorie vorausgesetzt. Die Anhänge zur Theorie der Fredholm-Operatoren und Pseudodifferential-Operatoren sind mathematisch etwas anspruchsvoller, aber nicht notwendig zum Verständnis der übrigen Kapitel.

Danksagung:

Ich bedanke mich von Herzen bei meinem Vater Manfred Schiekel und meinen verehrten Lehrern Adolf Schlinger, Kurt Hawlitschek, Karl Kraus und Helmut Bross, welche meine Liebe zu Physik und Mathematik geweckt und gefördert haben.

Ein spezieller Dank geht an die LaTeX- und LyX-Community für die wunderbaren Open-Source Programme und die immer hilfreiche und freundliche Unterstützung!

Kommentare und Fehlerhinweise sind willkommen unter: mb.schiekel@arcor.de

Möge diese kleine Arbeit hilfreich sein. Viel Freude bei der Lektüre!

2 Der Harmonische Oszillator

2.1 Der klassische harmonische Oszillator

Immer wieder in der Physik dient der harmonische Oszillator als Inspiration und Ausgangspunkt für neue Überlegungen. Daher sollen hier zunächst einige der einfachsten klassischen Ergebnisse erinnert werden. Die Bedeutung des harmonischen Oszillators liegt darin, daß dieses Modell die Dynamik eines klassischen Einteilchen-Systems nahe der Gleichgewichtslage beschreibt. Sei also $H(p,q)$ die klassische Hamilton-Funktion eines Teilchens mit der Masse m:

$$H(p,q) := \frac{p^2}{2m} + V(q) \ . \tag{2.1.1}$$

Wir entwickeln das Potential $V(q)$ um die Gleichgewichtslage bei $q = 0$:

$$V(q) = V_0 + V_1 q + \frac{1}{2} V_2 q^2 + \dots \ . \tag{2.1.2}$$

Gleichgewichtslage bei $q = 0$ heißt, daß dort die Kraft verschwindet:

$$F(0) = -\left.\frac{\partial V(q)}{\partial q}\right|_{q=0} = V_1 = 0 \quad \Rightarrow$$

$$V(q) \approx V_0 + \frac{1}{2} V_2 q^2 =: V_0 + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \ . \tag{2.1.3}$$

Die Hamilton Gleichungen ergeben:

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2 q \ , \\ \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \ . \end{aligned} \tag{2.1.4}$$

und die entsprechende Poisson-Klammer ist:

$$\{q,p\} := \left(\frac{\partial}{\partial q} q \, \frac{\partial}{\partial p} p - \frac{\partial}{\partial q} p \, \frac{\partial}{\partial p} q\right) = 1 \ . \tag{2.1.5}$$

Wir machen den Ansatz

$$q(t) = b_1 \cos\omega t \ + \ b_2 \sin\omega t \ .$$

Wir führen für $b_1$und b_2 die neuen Variablen a und φ für Amplitude und Phase ein:

$$a := \sqrt{b_1^2 + b_2^2} \qquad\qquad \tan\varphi = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi} := \frac{b_2}{b_1} = \frac{b_2/a}{b_1/a} \; .$$

Damit folgen für $q(t)$, $p(t)$ und die Hamilton-Funktion $H(p,q)$:

$$q(t) = a\,(\frac{b_1}{a}\cos\omega t \; + \; \frac{b_2}{a}\sin\omega t) = a\,(\cos\varphi\cos\omega t \; + \; \sin\varphi\sin\omega t) = a\,\cos(\omega t - \varphi) \; ,$$

$$p(t) = m\dot{q}(t) = m\omega a\,(-\sin(\omega t - \varphi)) \; . \tag{2.1.6}$$

$$H(p,q) = \frac{m^2\omega^2 a^2}{2m}\,\sin^2(\omega t - \varphi) + \frac{m^2\omega^2 a^2}{2m}\,\cos^2(\omega t - \varphi) = \frac{m^2\omega^2 a^2}{2m} \; . \tag{2.1.7}$$

Im nächsten Schritt gehen wir von $q(t)$ und $p(t)$ zu den dimensionslosen Normal-Koordinaten $c(t)$ und $c^*(t)$ über:

$$c(t) := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(q(t) + \frac{i}{m\omega}p(t)) \; , \qquad c^*(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(q(t) - \frac{i}{m\omega}p(t)) \; , \tag{2.1.8}$$

$$q(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(c^*(t) + c(t)) \; , \qquad p(t) \; = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(c^*(t) - c(t)) \; . \tag{2.1.9}$$

Die entsprechende Poisson-Klammer ist:

$$\{c, c^*\} := (\frac{\partial}{\partial q}c\,\frac{\partial}{\partial p}c^* - \frac{\partial}{\partial q}c^*\,\frac{\partial}{\partial p}c) = \frac{m\omega}{2\hbar}(-\frac{i}{m\omega}) - \frac{m\omega}{2\hbar}(\frac{i}{m\omega}) = \frac{1}{i\hbar} \; . \tag{2.1.10}$$

Und für die Hamilton-Funktion $H(c,c^*)$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} H(c,c^*) &= \frac{1}{2m}\,\frac{(-m\hbar\omega)}{2}\,(c^* - c)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\,\frac{\hbar}{2m\omega}\,(c^* + c)^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}(2|c|^2 + 2|c|^2) = \hbar\omega|c|^2 \; . \end{aligned} \tag{2.1.11}$$

Die Bewegungs-Gleichung ergibt sich aus der Poisson-Klammer mit H:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}c(t) = \{c, H\} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\frac{p}{m} - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\frac{i}{m\omega}\,m\omega^2 q = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\frac{\hbar\omega}{i\hbar}\,(q + \frac{i}{m\omega}p) \\ &= \frac{\hbar\omega}{i\hbar}\,c(t) \; , \end{aligned}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}c(t) = \hbar\omega c(t) \; . \tag{2.1.12}$$

Die Lösung können wir wieder sofort angeben:

$$c(t) = c(0)e^{-i\omega t} = |c(0)|e^{-i(\omega t - \varphi)} \ . \tag{2.1.13}$$

wenn wir $c(0) = |c(0)|e^{i\varphi}$ mit $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ schreiben. Damit folgen für $q(t)$ und $p(t)$:

$$q(t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,|c(0)|\,\cos(\omega t - \varphi)\ , \quad p(t) = \sqrt{2m\hbar\omega}\,|c(0)|\,(-\sin(\omega t - \varphi))\ . \tag{2.1.14}$$

Damit erhalten wir das gleiche Ergebnis wie in 2.1.6 mit der Amplitude

$$a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,|c(0)|\ .$$

2.2 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

Wir führen die übliche kanonische Quantisierung durch, in der p und q, bzw. c und c^* durch Operatoren ersetzt werden, die statt der Poisson-Klammern die entsprechenden Kommutator-Relationen erfüllen sollen.

$$\hat{c}(t) := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{q}(t) + \frac{i}{m\omega}\hat{p}(t))\ , \qquad \hat{c}^\dagger(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{q}(t) - \frac{i}{m\omega}\hat{p}(t))\ , \tag{2.2.1}$$

$$\hat{q}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{c}^\dagger(t) + \hat{c}(t))\ , \qquad \hat{p}(t) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{c}^\dagger(t) - \hat{c}(t))\ . \tag{2.2.2}$$

$$[\hat{q}\,,\,\hat{p}] = i\hbar\hat{1}\ , \tag{2.2.3}$$

$$[\hat{c}\,,\,\hat{c}^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar}(\frac{i}{m\omega})\{-[\hat{q}\,,\,\hat{p}] + [\hat{p}\,,\,\hat{q}]\} = \hat{1}\ . \tag{2.2.4}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \\
&= \frac{1}{2m}(\frac{-m\hbar\omega}{2})(\hat{c}^\dagger - \hat{c})^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\frac{\hbar}{2m\omega})(\hat{c}^\dagger(t) + \hat{c}(t))^2 \\
&= \frac{\hbar\omega}{4}(-\hat{c}^{\dagger 2} + \hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{c}\hat{c}^\dagger - \hat{c}^2 + \hat{c}^{\dagger 2} + \hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{c}\hat{c}^\dagger + \hat{c}^2) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{c}\hat{c}^\dagger) = \hbar\omega(\hat{c}^\dagger\hat{c} + \frac{1}{2}\hat{1}) \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2}\hat{1}) \qquad \text{mit:} \quad \hat{n} := \hat{c}^\dagger\hat{c}\ . \tag{2.2.5}$$

Seien $\mid n\rangle$ die (orthogonalen) Eigenvektoren des selbstadjungierten Operators $\hat{n}$, also: $\hat{n} \mid n\rangle = n \mid n\rangle$.

Wir betrachten jetzt den Vektor $\mid g\rangle = \hat{c} \mid n\rangle$:

$$\hat{n} \mid g\rangle = \hat{c}^\dagger \hat{c}\hat{c} \mid n\rangle = (\hat{c}\hat{c}^\dagger - 1)\hat{c} \mid n\rangle = \hat{c}(\hat{c}^\dagger \hat{c} - 1) \mid n\rangle = \hat{c}(n-1) \mid n\rangle = (n-1) \mid g\rangle \ .$$

Also ist $\mid g\rangle$ ein Eigenvektor von $\hat{n}$ zum Eigenwert $\mid n-1\rangle$, d.h.:

$$\mid g\rangle = \hat{c} \mid n\rangle = c_n \mid n-1\rangle \ .$$

Die Konstante c_n läß sich folgendermaßen bestimmen:

$$n = \langle n \mid \hat{n} \mid n\rangle = \langle n \mid \hat{c}^\dagger \hat{c} \mid n\rangle = \langle \hat{c}n \mid \hat{c}n\rangle = |c_n|^2 \langle n-1 \mid n-1\rangle = |c_n|^2 \geq 0 \ .$$

Wir können c_n reell wählen als $c_n = \sqrt{n}$:

$$\hat{c} \mid n\rangle = \sqrt{n} \mid n-1\rangle \ . \tag{2.2.6}$$

Völlig analog ergibt sich für $\hat{c}^\dagger$:

$$\hat{c}^\dagger \mid n\rangle = \sqrt{n+1} \mid n+1\rangle \ . \tag{2.2.7}$$

Damit folgt für $\hat{n}$:

$$\hat{n} \mid n\rangle = \hat{c}^\dagger \hat{c} \mid n\rangle = n \mid n\rangle \ . \tag{2.2.8}$$

Das Spektrum von $\hat{n}$ ist nach unten beschränkt, daher kann man einen Vakuumzustand $|0\rangle$ definieren mit:

$$\hat{c} \mid 0\rangle := 0 \ , \quad \Rightarrow \quad \hat{n} \mid 0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad n \in \mathbb{N}_0 \ , \tag{2.2.9}$$

$$\mid n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{c}^\dagger)^n \mid 0\rangle \ . \tag{2.2.10}$$

$$\hat{H} \mid n\rangle = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2}\hat{1}) \mid n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \mid n\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\hat{H} \mid n\rangle = E_n \mid n\rangle \qquad \text{mit:} \quad E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \ . \tag{2.2.11}$$

Als nächstes betrachten wir die Zeitabhängigkeit von $\hat{c}$ und $\hat{c}^\dagger$ im Heisenberg-Bild:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{c}(t) = [\hat{c}(t) \, , \, \hat{H}] = \hbar\omega[\hat{c}(t) \, , \, \hat{c}^\dagger \hat{c}] = \hbar\omega\hat{c}(t) \ , \tag{2.2.12}$$

$$\hat{c}(t) = e^{-i\omega t}\hat{c}(0) = e^{-i\omega t}\hat{c} \,, \qquad \hat{c}^\dagger(t) = e^{i\omega t}\hat{c}^\dagger(0) = e^{i\omega t}\hat{c}^\dagger \,. \tag{2.2.13}$$

Mit 2.2.2 folgt für $\hat{q}(t)$ und $\hat{p}(t)$:

$$\hat{q}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(e^{i\omega t}\hat{c}^\dagger + e^{-i\omega t}\hat{c}) \,, \qquad \hat{p}(t) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(e^{i\omega t}\hat{c}^\dagger - e^{-i\omega t}\hat{c}) \,. \tag{2.2.14}$$

Interessant ist noch die Eigenschaft, daß im Vakuumzustand zwar die Erwartungswerte von $\hat{q}(t)$ und $\hat{p}(t)$ verschwinden, nicht aber die Erwartungswerte von $\hat{q}^2(t)$ und $\hat{p}^2(t)$ und damit die Schwankungsquadrate von $\hat{q}(t)$ und $\hat{p}(t)$ - man spricht von Vakuumfluktuationen:

$$\langle 0 \mid \hat{q}(t) \mid 0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(e^{i\omega t}\langle 0 \mid \hat{c}^\dagger \mid 0\rangle + e^{-i\omega t}\langle 0 \mid \hat{c} \mid 0\rangle) = 0 \,, \tag{2.2.15}$$

$$\langle 0 \mid \hat{p}(t) \mid 0\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(e^{i\omega t}\langle 0 \mid \hat{c}^\dagger \mid 0\rangle - e^{-i\omega t}\langle 0 \mid \hat{c} \mid 0\rangle) = 0 \,. \tag{2.2.16}$$

Mit 2.1.5 folgt:

$$\begin{aligned}\langle 0 \mid \frac{\hat{p}^2}{2m} \mid 0\rangle &= \langle 0 \mid \frac{\hbar\omega}{4}(-e^{i2\omega t}\hat{c}^{\dagger 2} + \hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{c}\hat{c}^\dagger - e^{-i2\omega t}\hat{c}^2 \mid 0\rangle \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}\langle 0 \mid \hat{c}\hat{c}^\dagger \mid 0\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\langle 1 \mid 1\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \,,\end{aligned} \tag{2.2.17}$$

$$\begin{aligned}\langle 0 \mid \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \mid 0\rangle &= \langle 0 \mid \frac{\hbar\omega}{4}(e^{i2\omega t}\hat{c}^{\dagger 2} + \hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{c}\hat{c}^\dagger + e^{-i2\omega t}\hat{c}^2 \mid 0\rangle \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}\langle 0 \mid \hat{c}\hat{c}^\dagger \mid 0\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\langle 1 \mid 1\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \,.\end{aligned} \tag{2.2.18}$$

Die Energie der Vakuumfluktuationen ist gerade:

$$\langle 0 \mid \hat{H} \mid 0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \,. \tag{2.2.19}$$

Die Grundzustands-Wellenfunktion im Ortsraum können wir auf folgende Weise erhalten:

$$\begin{aligned}0 &= \langle q \mid \hat{c} \mid 0\rangle = \langle q \mid \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,(\hat{q} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}) \mid 0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\langle(\hat{q} - \frac{i}{m\omega}\hat{p})\,q \mid 0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\langle(\hat{q} - \frac{i}{m\omega}(i\hbar\frac{d}{dq}))\,q \mid 0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,(q + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dq})\langle q \mid 0\rangle \,.\end{aligned}$$

Mit $\psi_0(q) := \langle q \mid 0 \rangle$ folgt

$$(q + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dq})\,\psi_0(q) = 0\ . \tag{2.2.20}$$

Mit dem Ansatz $\psi_0(q) = e^{\alpha q^2}$ für die unnormierte Wellenfunktion folgt:

$$(q + \frac{\hbar}{m\omega}\alpha 2q)\,\psi_0(q) = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = -\frac{1}{2}\,\frac{m\omega}{\hbar} \quad \Rightarrow$$

$$\psi_0(q) = e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}q^2}\ . \tag{2.2.21}$$

3 Phasen-Operatoren und kohärente Zustände

3.1 Ein quantenmechanischer Phasen-Operator

Wir hatten oben (2.2.15 und 2.2.16) gesehen, daß die Erwartungswerte von $\hat{q}(t)$ und $\hat{p}(t)$ im Grundzustand des harmonischen Oszillators verschwinden. Tatsächlich verschwinden die Erwartungswerte von $\hat{q}(t)$ und $\hat{p}(t)$ aber in jedem Besetzungszahlen-Zustand $|n\rangle$, d.h. immer wenn ein angeregter Zustand mit festem n vorliegt, wissen wir nichts über die Trajektorie des Systems.

$$\begin{aligned}\langle n \mid \hat{q}(t) \mid n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(e^{i\omega t}\langle n \mid \hat{c}^\dagger \mid n\rangle + e^{-i\omega t}\langle n \mid \hat{c} \mid n\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(e^{i\omega t}\sqrt{n+1}\,\langle n \mid n+1\rangle + e^{-i\omega t}\sqrt{n}\,\langle n \mid n-1\rangle) \\ &= 0\ ,\end{aligned} \tag{3.1.1}$$

$$\langle n \mid \hat{p}(t) \mid n\rangle = 0\ . \tag{3.1.2}$$

Jetzt kann man zwei Fragen stellen:

1. lassen sich theoretisch (und experimentell) auch Zustände erzeugen, die der klassischen Beschreibung des Systems mit einer definierten Trajektorie mit Amplitude und Phase (siehe: 2.1.14) nahekommen?
   Dieser Frage soll im nächsten Kapitel unter der Überschrift 'kohärente Zustände' nachgegangen werden.
2. läßt sich ein quantenmechanischer Phasen-Operator definieren (und messen)?
   Dieser Frage wollen wir uns im folgenden zuwenden.

Von einem solchen Phasen-Operator würde man die folgende Unschärfe-Relation erwarten:

$$\begin{aligned}&\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta n(\hbar\omega) \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta n \cdot (\omega \Delta t) \geq \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \\ &\Delta n \cdot \Delta\varphi \geq \frac{1}{2}\ .\end{aligned} \tag{3.1.3}$$

Die hier angegebene mögliche Definition von quantenmechanischen Phasen-Operatoren stammt von Susskind u. Glowgower (1964). Wir folgen der Darstellung von Loudon (1992).

Im klassischen Fall haben wir $c^* = |c|e^{-i\varphi}$ (2.1.13). Im quantenmechanischen Fall gilt $\hat{c}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ (2.2.7).

Wir definieren einen Phasen-Operator $\hat{E}_\varphi$ als Analogon zu $e^{i\varphi}$, indem wir $\hat{c}$ als das Produkt aus einem Amplituden- und einem Phasen-Operator schreiben:

$$\hat{c} := (\hat{n} + \hat{1})^{1/2}\hat{E}_\varphi\ , \qquad \hat{c}^\dagger := \hat{E}_\varphi{}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{1/2}\ , \tag{3.1.4}$$

$$\hat{n} + \hat{1} = \hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{1} = \hat{c}\hat{c}^\dagger = (\hat{n} + \hat{1})^{1/2}\hat{E}_\varphi\hat{E}_\varphi{}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{1/2}\ .$$

Daraus folgt, daß $\hat{E}_\varphi$ (einseitig) unitär sein muß, also:

$$\hat{E}_\varphi\hat{E}_\varphi{}^\dagger = \hat{1}\ . \tag{3.1.5}$$

Wir betrachten jetzt die Wirkung von $\hat{E}_\varphi$ auf Besetzungszahlen-Zustände $\mid n\rangle$:

$$\hat{E}_\varphi = (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c}\ , \qquad \hat{E}_\varphi{}^\dagger = \hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\ , \tag{3.1.6}$$

$$\hat{E}_\varphi \mid n\rangle = (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\sqrt{n} \mid n-1\rangle = \begin{cases} \mid n-1\rangle & \text{für}\, n > 0\ , \\ 0 & \text{für}\, n = 0\ , \end{cases} \tag{3.1.7}$$

$$\hat{E}_\varphi{}^\dagger \mid n\rangle = \hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid n\rangle =\mid n+1\rangle\ . \tag{3.1.8}$$

Also ist $\hat{E}_\varphi$ kein selbstadjungierter Operator und eignet sich nicht als Observable. Man kann aber aus $\hat{E}_\varphi$ und $\hat{E}_\varphi{}^\dagger$ einen 'cos'-, bzw. 'sin'- Operator definieren, die dann selbstadjungiert sind und sich als Observable für die Phase eignen:

$$\hat{C}_\varphi := \frac{1}{2}(\hat{E}_\varphi + \hat{E}_\varphi{}^\dagger)\ , \qquad \hat{S}_\varphi := \frac{1}{2i}(\hat{E}_\varphi - \hat{E}_\varphi{}^\dagger)\ . \tag{3.1.9}$$

Im folgenden sollen die Unschärfe-Relationen für $\Delta\hat{n} \cdot \Delta\hat{C}_\varphi$ und $\Delta\hat{n} \cdot \Delta\hat{S}_\varphi$ abgeleitet werden. Hierbei sind die Unschärfen $\Delta\hat{x}$, etc., wie üblich als Wurzel des mittleren Schwankungsquadrates definiert:

$$(\Delta\hat{x})^2 := \langle((\hat{x}) - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2\ , \tag{3.1.10}$$

$$\begin{aligned} [\hat{n}, \hat{c}] &= \hat{n}\hat{c} - \hat{c}\hat{n} = \hat{c}^\dagger\hat{c}\hat{c} - \hat{c}\hat{c}^\dagger\hat{c} = -\hat{c}\ , \\ [\hat{n}, \hat{c}^\dagger] &= \hat{n}\hat{c}^\dagger - \hat{c}^\dagger\hat{n} = \hat{c}^\dagger\hat{c}\hat{c}^\dagger - \hat{c}^\dagger\hat{c}^\dagger\hat{c} = \hat{c}^\dagger\ , \end{aligned} \tag{3.1.11}$$

$$\begin{aligned}[\hat{n}, \hat{E}_\varphi] &= \hat{n}(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}\hat{c} - (\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}\hat{c}\hat{n} = (\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}(\hat{n}\hat{c}-\hat{c}\hat{n}) \\ &= -(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}\hat{c} = -\hat{E}_\varphi \ ,\end{aligned} \tag{3.1.12}$$

$$\begin{aligned}[\hat{n}, \hat{E}_\varphi{}^\dagger] &= \hat{n}\hat{c}^\dagger(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2} - \hat{c}^\dagger(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}\hat{n} = (\hat{n}\hat{c}^\dagger - \hat{c}^\dagger\hat{n})(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2} \\ &= \hat{c}^\dagger(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2} = \hat{E}_\varphi{}^\dagger \ ,\end{aligned} \tag{3.1.13}$$

$$[\hat{n}, \hat{C}_\varphi] = [\hat{n}, \frac{1}{2}(\hat{E}_\varphi + \hat{E}_\varphi{}^\dagger)] = \frac{1}{2}(-\hat{E}_\varphi + \hat{E}_\varphi{}^\dagger) = -i\hat{S}_\varphi \ , \tag{3.1.14}$$

$$[\hat{n}, \hat{S}_\varphi] = [\hat{n}, \frac{1}{2i}(\hat{E}_\varphi - \hat{E}_\varphi{}^\dagger)] = \frac{1}{2i}(-\hat{E}_\varphi - \hat{E}_\varphi{}^\dagger) = i\hat{C}_\varphi \ . \tag{3.1.15}$$

Hieraus folgen mit Hilfe der allgemeinen Unschärferelation der Quantenmechanik sofort die gesuchten speziellen Unschärfe-Relationen:

$$\Delta\hat{n} \cdot \Delta\hat{C}_\varphi \geq \frac{1}{2}\left|\langle[n \cdot \hat{C}_\varphi]\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\langle\hat{S}_\varphi\rangle\right| \ , \tag{3.1.16}$$

$$\Delta\hat{n} \cdot \Delta\hat{S}_\varphi \geq \frac{1}{2}\left|\langle[n \cdot \hat{S}_\varphi]\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\langle\hat{C}_\varphi\rangle\right| \ . \tag{3.1.17}$$

Einerseits sieht man, daß die Besetzungszahl $\hat{n}$ und die Phasen $\hat{S}_\varphi$ und $\hat{C}_\varphi$ nicht gleichzeitig scharf gemessen werden können. Andererseits folgt sofort:

$$(\Delta\hat{n})^2 \cdot (\Delta\hat{C}_\varphi)^2 + (\Delta\hat{n})^2 \cdot (\Delta\hat{S}_\varphi)^2 \geq \frac{1}{4}(\langle\hat{S}_\varphi\rangle^2 + \langle\hat{C}_\varphi\rangle^2) \quad \Rightarrow$$

$$U^2 := (\Delta\hat{n})^2 \cdot \frac{(\Delta\hat{S}_\varphi)^2 + (\Delta\hat{C}_\varphi)^2}{(\langle\hat{S}_\varphi\rangle^2 + \langle\hat{C}_\varphi\rangle^2)} \geq \frac{1}{4} \ . \tag{3.1.18}$$

Im geeigneten klassischen Grenzübergang für kleine $\Delta\varphi$ geht dieser Ausdruck wegen $\sin\Delta\varphi \approx \Delta\varphi$ gerade in den klassischen Ausdruck $\Delta n \cdot \Delta\varphi \geq \frac{1}{2}$ (3.1.3) über.

Interessant ist auch noch der Kommutator $[\hat{C}_\varphi, \hat{S}_\varphi]$:

$$\begin{aligned}[\hat{C}_\varphi, \hat{S}_\varphi] &= \frac{1}{4i}[\hat{E}_\varphi + \hat{E}_\varphi{}^\dagger, \hat{E}_\varphi - \hat{E}_\varphi{}^\dagger] = \frac{1}{4i}(-[\hat{E}_\varphi, \hat{E}_\varphi{}^\dagger] + [\hat{E}_\varphi{}^\dagger, \hat{E}_\varphi]) \\ &= -\frac{1}{2i}[\hat{E}_\varphi, \hat{E}_\varphi{}^\dagger] = -\frac{1}{2i}[(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}\hat{c}\,,\ \hat{c}^\dagger(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}] \\ &= -\frac{1}{2i}((\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}\hat{c}\hat{c}^\dagger(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2} - \hat{c}^\dagger(\hat{n}+\hat{1})^{-1}\hat{c})\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2i}((\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}(\hat{n}+\hat{1})(\hat{n}+\hat{1})^{-1/2} - \hat{c}^{\dagger}(\hat{n}+\hat{1})^{-1}\hat{c}) \\
&= \frac{1}{2i}(\hat{c}^{\dagger}(\hat{n}+\hat{1})^{-1}\hat{c} - \hat{1}) \ . \qquad (3.1.19)
\end{aligned}
$$

Als Erwartungswerte für $[\hat{C}_{\varphi}, \hat{S}_{\varphi}]$ ergeben sich im Vakuumzustand $\mid 0\rangle$, bzw. für Zustände mit m, $n > 0$:

$$
\langle 0 \mid [\hat{C}_{\varphi}, \hat{S}_{\varphi}] \mid 0\rangle = -\frac{1}{2i} \ , \qquad (3.1.20)
$$

$$
\begin{aligned}
\langle m \mid [\hat{C}_{\varphi}, \hat{S}_{\varphi}] \mid n\rangle &= \frac{1}{2i}\langle m \mid (\hat{c}^{\dagger}(\hat{n}+\hat{1})^{-1}\hat{c} - \hat{1}) \mid n\rangle \\
&= \frac{1}{2i}(\langle m-1 \mid \sqrt{m}(\hat{n}+\hat{1})^{-1}\sqrt{n} \mid n-1\rangle - \langle m \mid n\rangle) \qquad (3.1.21) \\
&= \frac{1}{2i}(\langle m-1 \mid n-1\rangle - \langle m \mid n\rangle) \\
&= 0 \ .
\end{aligned}
$$

Also sind $\hat{C}_{\varphi}$ und $\hat{S}_{\varphi}$ für alle Zustände, mit Ausnahme des Vakuums, gleichzeitig exakt meßbar.

3.2 Das freie Elektromagnetische Feld

Aus den Maxwell-Gleichungen für das freie elektromagnetische Feld in Coulomb-Eichung folgen die Wellengleichung und die Transversalitäts-Bedingung für das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$ (siehe z.B. Greiner (1993)):

$$
\vec{\nabla}^2 \vec{A}(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \ , \qquad (3.2.1)
$$

$$
\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \ . \qquad (3.2.2)
$$

Wenn wir zusätzlich periodische Randbedingungen in einem Kasten der Kantenlänge L vorgeben, können wir die Lösung der Wellengleichung als Fourier-Reihe darstellen:

$$
\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k},\sigma}(\vec{A}_{\vec{k},\sigma} + \vec{A}^{*}_{\vec{k},\sigma}) = \sum_{\vec{k},\sigma} N_k \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma}(a_{\vec{k},\sigma} e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)} + a^{*}_{\vec{k},\sigma} e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)}) \ , \qquad (3.2.3)
$$

mit dem Wellenvektor

$$\vec{k} := \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} , \quad -\frac{L}{2} \leq n_i < \frac{L}{2} , \quad \omega_{\vec{k}} := c \cdot |\vec{k}| \tag{3.2.4}$$

und den Polarisationsvektoren

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} , \, \sigma \in \{1, 2\} \text{ mit } \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} \cdot \vec{k} = 0 , \tag{3.2.5}$$

wobei die Vektoren $\vec{k}$, $\vec{\epsilon}_{\vec{k},1}$, $\vec{\epsilon}_{\vec{k},2}$ ein rechtshändiges Orthogonalsystem bilden mögen. Daraus folgt:

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma'} = \delta_{\sigma,\sigma'} \text{ und } \vec{\epsilon}_{-\vec{k},\sigma} = -(-1)^{\sigma} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} \tag{3.2.6}$$

und einem Normierungsfaktor N_k, (abhängig von $|\vec{k}|$), den wir später noch genauer betrachten werden. Indem wir in der Fourier-Reihe für $\vec{A}(\vec{r}, t)$ zu jeder Fourier-Komponente $\vec{A}_{\vec{k},\sigma}$ auch die entsprechende konjugiert komplexe Fourier-Komponente $\vec{A}^*_{\vec{k},\sigma}$ addiert haben, erhalten wir also ein reelles Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$ und daraus folgend ebenso die reelle elektrische Feldstärke $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und magnetische Feldstärke $\vec{B}(\vec{r}, t)$:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t) \\ &= i \sum_{\vec{k},\sigma} N_k \frac{\omega_k}{c} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} (a_{\vec{k},\sigma} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)} - a^*_{\vec{k},\sigma} e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)}) , \end{aligned} \tag{3.2.7}$$

$$\begin{aligned} \vec{B}(\vec{r}, t) &= \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \\ &= i \sum_{\vec{k},\sigma} N_k \vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} (a_{\vec{k},\sigma} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)} - a^*_{\vec{k},\sigma} e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)}) . \end{aligned} \tag{3.2.8}$$

Die Zeitabhängigkeit ziehen wir im folgenden in die Entwicklungskoeffizienten $a_{\vec{k},\sigma}$ hinein:

$$a_{\vec{k},\sigma}(t) := a_{\vec{k},\sigma} e^{-i\omega_k t} \quad \text{und} \quad a^*_{\vec{k},\sigma}(t) := a^*_{\vec{k},\sigma} e^{i\omega_k t} . \tag{3.2.9}$$

Für die Hamilton-Funktion H (d.h. die Gesamtenergie), ergibt sich:

$$H = \frac{1}{8\pi} \int_{L^3} d^3x \, (\vec{E}^2 + \vec{B}^2)$$

$$= -\frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{k},\sigma} \sum_{\vec{k}',\sigma'} N_k N_{k'} \left[\frac{\omega_k \omega_{k'}}{c^2} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} \vec{\epsilon}_{\vec{k}',\sigma'} + (\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma}) \cdot (\vec{k}' \times \vec{\epsilon}_{\vec{k}',\sigma'}) \right]$$

$$\cdot \int_{L^3} d^3x \left[(a_{\vec{k},\sigma}(t)\, e^{i\vec{k}\vec{r}} - a^*_{\vec{k},\sigma}(t)\, e^{-i\vec{k}\vec{r}})(a_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{i\vec{k}'\vec{r})} - a^*_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{-i\vec{k}'\vec{r}}) \right] .$$

Mit der Beziehung für das Kreuzprodukt:
$(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot (\vec{c} \times \vec{d}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})(\vec{b} \cdot \vec{d}) - (\vec{b} \cdot \vec{c})(\vec{a} \cdot \vec{d})$
und der Berücksichtigung der Transversalitätsbedingung $\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} = 0$ folgt weiter:

$$H = -\frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{k},\sigma} \sum_{\vec{k}',\sigma'} N_k N_{k'} (\frac{\omega_k \omega_{k'}}{c^2} + \vec{k} \cdot \vec{k}') \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} \vec{\epsilon}_{\vec{k}',\sigma'}$$

$$\cdot \int_{L^3} d^3x \left[(a_{\vec{k},\sigma}(t)\, e^{i\vec{k}\vec{r}} - a^*_{\vec{k},\sigma}(t)\, e^{-i\vec{k}\vec{r}})(a_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{i\vec{k}'\vec{r})} - a^*_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{-i\vec{k}'\vec{r}}) \right]$$

$$= -\frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{k},\sigma} \sum_{\vec{k}',\sigma'} N_k N_{k'} (\frac{\omega_k \omega_{k'}}{c^2} + \vec{k} \cdot \vec{k}') \vec{\epsilon}_{\vec{k},\sigma} \vec{\epsilon}_{\vec{k}',\sigma'}$$

$$\cdot \Bigg[\int_{L^3} d^3x\, (a_{\vec{k},\sigma}(t)\, a_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}} + a^*_{\vec{k},\sigma}(t)\, a^*_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{-i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}})$$

$$- \int_{L^3} d^3x\, (a_{\vec{k},\sigma}(t)\, a^*_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} + a^*_{\vec{k},\sigma}(t)\, a_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}}) \,. \Bigg]$$

Aufgrund der Orthogonalitätsrelation für die $e^{i\vec{k}\vec{r}}$:

$$\int_{L^3} d^3x\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} = L^3 \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

tauchen also nur Terme mit $\vec{k} = \vec{k}'$ und $\vec{k} = -\vec{k}'$ auf, wobei sich wegen der Dispersionsrelation 3.2.4 auch die Terme mit $\vec{k} = -\vec{k}'$ wegheben:

$$H = -\frac{L^3}{4\pi} \sum_{\vec{k},\sigma} N_k^2 \frac{\omega_k^2}{c^2} \left(a_{\vec{k},\sigma}(t)\, a^*_{\vec{k},\sigma}(t) + a^*_{\vec{k},\sigma}(t)\, a_{\vec{k},\sigma}(t)\right) .$$

Die Zeitabhängigkeit von $a_{\vec{k},\sigma}(t)$ und $a^*_{\vec{k},\sigma}(t)$ hebt sich im Produkt gerade gegenseitig auf, so daß $a_{\vec{k},\sigma}(t)\, a^*_{\vec{k},\sigma}(t) = a_{\vec{k},\sigma}\, a^*_{\vec{k},\sigma}$ ist.

Jetzt wählen wir den Normierungsfaktor N_k als:

$$N_k := (\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3 \omega_k})^{1/2} \tag{3.2.10}$$

und erhalten für die Hamilton-Funktion H gerade:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar\omega_k (a_{\vec{k},\sigma} a^*_{\vec{k},\sigma} + a^*_{\vec{k},\sigma} a_{\vec{k},\sigma}) \ . \tag{3.2.11}$$

Jede Normalmode $(\vec{k}, \sigma)$ des elektromagnetischen Feldes schwingt also wie ein harmonischer Oszillator mit der Energie $\hbar\omega_k$ und kann wie ein harmonischer Oszillator quantisiert werden.

3.3 Kohärente Zustände

Wir hatten oben bei der Behandlung des harmonischen Oszillators (2.2.14, 2.2.15) gesehen, daß die Erwartungswerte von $\hat{q}$ und $\hat{p}$ in der Besetzungszahl-Darstellung verschwinden, daß wir also keine mittlere Trajektorie des Systems angeben können. Das gleiche gilt (wegen 3.2.7, 3.2.8) auch für die Erwartungswerte des elektrischen und des magnetischen Feldes:

$$\langle n \mid \hat{\vec{E}} \mid n \rangle = \langle n \mid \hat{\vec{B}} \mid n \rangle = 0 \ . \tag{3.3.1}$$

Es stellt sich hier natürlich die Frage, ob wir statt der Basis der $\{\mid n\rangle\}$ zu einer anderen Basis übergehen können, die dem klassischen Bild mit nichtverschwindenden elektrischen und magnetischen Feldstärken näherkommt? Glauber (Glauber (1963)) hat zu diesem Zweck die sogenannten kohärenten Zustände konstruiert, die sich weit über die Quantenelektrodynamik hinaus als hilfreich erwiesen haben.

Die Frage lautet: können wir einen Zustand $\mid \alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \mid n\rangle$ konstruieren, bei dem im zeitlichen Mittel die Unschärfe von $\hat{q}(t)$ bzw. $\hat{\vec{E}}(t)$ minimal wird - unter der Nebenbedingung eines festen $\langle \hat{n} \rangle$?

Sei $\langle\rangle_t$ das Zeitmittel über eine Periode.

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta q)^2\rangle_t &:= \langle\langle(\hat{q}(t) - \langle\hat{q}(t)\rangle)^2\rangle\rangle_t = \langle\langle\hat{q}^2(t)\rangle - \langle\hat{q}(t)\rangle^2\rangle\rangle_t \qquad (3.3.2)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\langle(e^{2i\omega t}\hat{c}^{\dagger 2} + \hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{c}\hat{c}^\dagger + e^{-2i\omega t}\hat{c}^2)\rangle \\
&\quad - (e^{2i\omega t}\langle\hat{c}^\dagger\rangle^2 + 2\langle\hat{c}^\dagger\rangle\langle\hat{c}\rangle + e^{-2i\omega t}\langle\hat{c}\rangle^2)\rangle_t \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}(2\langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle + 1 - 2\langle\hat{c}^\dagger\rangle\langle\hat{c}\rangle) \\
&= \frac{\hbar}{m\omega}\langle\hat{c}^\dagger\hat{c} - \langle\hat{c}^\dagger\rangle\langle\hat{c}\rangle + \frac{1}{2}\rangle \ .
\end{aligned}$$

$\langle(\Delta q)^2\rangle_t$ ist minimal, wenn $\langle\hat{c}^\dagger\rangle\langle\hat{c}\rangle = |\langle\hat{c}\rangle|^2$ maximal ist.

$$\langle\alpha \mid \hat{c} \mid \alpha\rangle = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} b_m^* b_n \langle m \mid \hat{c} \mid n\rangle = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} b_m^* b_n \sqrt{n}\langle m \mid n-1\rangle$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} b_m^* b_{n+1} \sqrt{n+1} \langle m \mid n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} b_n^* b_{n+1} \sqrt{n+1} \; .$$

Dies kann als Skalarprodukt $\langle \ldots , b_n, \ldots | \ldots , b_{n+1}\sqrt{n+1}, \ldots \rangle$ gelesen werden und mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung folgt dann:

$$|\langle \alpha \mid \hat{c} \mid \alpha \rangle|^2 \leq (\sum_{n=0}^{\infty} |b_n|^2)(\sum_{n=0}^{\infty} |b_{n+1}|^2 (n+1)) = (\sum_{n=0}^{\infty} |b_n|^2)(\sum_{n=-1}^{\infty} |b_{n+1}|^2 (n+1))$$

$$= (\sum_{n=0}^{\infty} |b_n|^2)(\sum_{n=0}^{\infty} |b_n|^2 (n)) = \langle \alpha \mid \alpha \rangle \langle \alpha \mid \hat{n} \mid \alpha \rangle = \langle \hat{n} \rangle \; .$$

Das Skalarprodukt zweier Vektoren ist maximal genau dann, wenn beide Vektoren parallel sind, d.h. in unserem Fall, wenn mit einem Proportionalitätsfaktor α gilt :

$$\hat{c} \mid \alpha \rangle = \alpha \mid \alpha \rangle \; , \tag{3.3.3}$$

$$b_{n+1}\sqrt{n+1} = \alpha b_n \quad \Rightarrow \quad b_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} b_0 \; .$$

Mit der Normierungsbedingung $\langle \alpha \mid \alpha \rangle = 1$ folgt:

$$\langle \alpha \mid \alpha \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |b_n|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} |b_0|^2 = e^{|\alpha|^2} |b_0|^2 = 1 \; .$$

Wir können b_0 reell wählen, also:

$$b_0 = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \; ,$$

und damit folgt unser gesuchter Zustandsvektor $\mid \alpha \rangle$ (auch Glauber-Vektor oder kohärenter Zustand genannt):

$$\mid \alpha \rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \mid n \rangle \; . \tag{3.3.4}$$

$\mid \alpha \rangle$ ist Eigenvektor von $\hat{c}$ zum Eigenwert α (so wurde $\mid \alpha \rangle$ ja auch gerade konstruiert, siehe 3.3.3):

$$\hat{c} \mid \alpha \rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} \mid n-1 \rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} \mid n-1 \rangle$$

$$= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha \frac{\alpha^n}{\sqrt{(n)!}} \mid n \rangle = \alpha \mid \alpha \rangle \quad \Rightarrow$$

$$\hat{c} \mid \alpha\rangle = \alpha \mid \alpha\rangle \;, \qquad\qquad \langle\alpha \mid \hat{c}^\dagger = \alpha^* \langle\alpha \mid \;. \tag{3.3.5}$$

Damit sieht man sofort, daß $|\alpha|^2$ gerade der Erwartungswert des Teilchenzahl-Operators in kohärenten Zuständen ist:

$$\langle\hat{n}\rangle = \langle\alpha \mid \hat{n} \mid \alpha\rangle = \langle\alpha \mid \hat{c}^\dagger\hat{c} \mid \alpha\rangle = \alpha^*\alpha = |\alpha|^2 \;. \tag{3.3.6}$$

Ein beliebiger kohärenter Zustand $\mid \alpha\rangle$ läßt sich aus dem Vakuumzustand $\mid 0\rangle$ aufbauen. Aus 2.2.7 folgt $\hat{c}^\dagger \mid n-1\rangle = \sqrt{n} \mid n\rangle$ und daraus folgt:

$$\mid n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\, \hat{c}^\dagger \mid n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\, \hat{c}^{\dagger n} \mid 0\rangle \;, \tag{3.3.7}$$

$$\mid \alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{c}^\dagger)^n}{n!} \mid 0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{c}^\dagger} \mid 0\rangle \;. \tag{3.3.8}$$

In der Literatur findet sich für den kohärenten Zustand $\mid \alpha\rangle$ auch noch ein anderer Erzeugungs-Operator aus dem Vakuum. Mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Relation (siehe etwa Greiner u. Reinhardt (1993), S. 32 ff.), die ja für $\hat{c}$ und $\hat{c}^\dagger$ erfüllt ist:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \quad \text{falls} \quad [[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = [[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}] = 0 \tag{3.3.9}$$

folgt aus 3.3.8:

$$\begin{aligned} \mid \alpha\rangle &= e^{\alpha\hat{c}^\dagger} e^{\alpha^*\hat{c}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \mid 0\rangle = e^{\alpha\hat{c}^\dagger} e^{\alpha^*\hat{c}} e^{-\frac{1}{2}[\alpha^*\hat{c}\,,\,\alpha\hat{c}^\dagger]} \mid 0\rangle \\ &= e^{\alpha\hat{c}^\dagger} e^{\alpha^*\hat{c}} e^{-\frac{1}{2}[\alpha\hat{c}^\dagger\,,\,-\alpha^*\hat{c}]} \mid 0\rangle = e^{\alpha\hat{c}^\dagger - \alpha^*\hat{c}} \mid 0\rangle \;. \end{aligned} \tag{3.3.10}$$

In der Literatur finden sich gelegentlich auch die unnormierten kohärenten Zustände $|\tilde{\alpha}\rangle$:

$$\mid \tilde{\alpha}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \mid n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{c}^\dagger)^n}{n!} \mid 0\rangle = e^{\alpha\hat{c}^\dagger} \mid 0\rangle \;. \tag{3.3.11}$$

Durch Differenzieren von 3.3.10 nach α ergibt sich als Entsprechung zu 3.3.5:

$$\hat{c}^\dagger \mid \alpha\rangle = \frac{d}{d\alpha} \mid \alpha\rangle \;, \qquad\qquad \langle\alpha \mid \hat{c} = \frac{d}{d\alpha^*} \langle\alpha \mid \;. \tag{3.3.12}$$

Als nächstes wollen wir die Frage der Orthogonalität und Vollständigkeit der kohärenten Zustände untersuchen.

$$\begin{aligned} \langle\alpha \mid \beta\rangle &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \langle m \mid n\rangle \frac{\alpha^{*m}\beta^n}{\sqrt{m!}\sqrt{n!}} \\ &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*m}\beta^m}{m!} = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} e^{\alpha^*\beta} \;, \end{aligned} \tag{3.3.13}$$

$$|\langle\alpha \mid \beta\rangle|^2 = e^{-(|\alpha|^2+|\beta|^2)} e^{\alpha^*\beta} e^{\alpha\beta^*} = e^{-|\alpha-\beta|^2} \ , \tag{3.3.14}$$

das heißt, je größer $|\alpha-\beta|$ ist, desto orthogonaler sind die kohärenten Zustände.

Wichtig ist, daß die kohärenten Zustände ein vollständiges System von Zustandsvektoren darstellen (wegen der mangelnden Orthogonalität spricht man auch von einem übervollständigen System). Dies läßt sich folgendermaßen beweisen:

$$\int \frac{d\alpha^* d\alpha}{2\pi i} \mid \alpha\rangle\langle\alpha \mid = \int \frac{d\alpha^* d\alpha}{2\pi i}\, e^{-|\alpha|^2} \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} \mid m\rangle\langle n \mid \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \ .$$

Wir gehen jetzt von den Variablen $\alpha = |\alpha| e^{i\varphi}$ und $\alpha^* = |\alpha| e^{-i\varphi}$ über zu den Variablen $|\alpha|$ und φ:

$$d\alpha^* d\alpha = \begin{vmatrix} \frac{\partial\alpha^*}{\partial|\alpha|} & \frac{\partial\alpha^*}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial\alpha}{\partial|\alpha|} & \frac{\partial\alpha}{\partial\varphi} \end{vmatrix} d|\alpha|\, d\varphi = \begin{vmatrix} e^{-i\varphi} & -i|\alpha|e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & i|\alpha|e^{i\varphi} \end{vmatrix} d|\alpha|\, d\varphi = 2|\alpha|\, d|\alpha|\, d\varphi \ , \tag{3.3.15}$$

$$\int \frac{d\alpha^* d\alpha}{2\pi i} \mid \alpha\rangle\langle\alpha \mid = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} |\alpha| \frac{d|\alpha|\, d\varphi}{\pi} e^{-|\alpha|^2} \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{m+n}}{\sqrt{m!\,n!}} e^{i\varphi(m-n)} \mid m\rangle\langle n \mid ,$$

Mit $\displaystyle\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{i\varphi(m-n)} = 2\pi\delta(m-n)$ folgt

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\alpha^* d\alpha}{2\pi i} \mid \alpha\rangle\langle\alpha \mid &= \int_0^\infty |\alpha|\, d|\alpha|\, 2e^{-|\alpha|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2m}}{m!} \mid m\rangle\langle m \mid \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \mid m\rangle\langle m \mid \int_0^\infty d|\alpha|\, 2|\alpha| e^{-|\alpha|^2} |\alpha|^{2m} \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \mid m\rangle\langle m \mid \int_0^\infty d\xi\, e^{-\xi}\xi^m \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \mid m\rangle\langle m \mid \Gamma(m+1) \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \mid m\rangle\langle m \mid = \hat{1} \ .
\end{aligned} \tag{3.3.16}$$

Als nächstes wollen wir die Erwartungswerte und Unschärfen von $\hat{q}(t)$ und $\hat{p}(t)$ in kohärenten Zuständen betrachten.

$$\begin{aligned}
\langle \hat{q}(t) \rangle = \langle \alpha \mid \hat{q}(t) \mid \alpha \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha \mid e^{i\omega t} \hat{c}^\dagger + e^{-i\omega t} \hat{c} \mid \alpha \rangle \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* e^{i\omega t} + \alpha e^{-i\omega t}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \, |\alpha| (e^{i(\omega t - \varphi)} + e^{-i(\omega t - \varphi)}) \\
&= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \, |\alpha| \, \cos(\omega t - \varphi) \, . \qquad (3.3.17)
\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis entspricht dem Ergebnis beim klassischen harmonischen Oszillator (2.1.6, 2.1.14).

Für $\langle (\Delta q)^2 \rangle_t$ ergibt sich mit 3.3.2:

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle_t = \frac{\hbar}{m\omega} \langle \hat{c}^\dagger \hat{c} - \langle \hat{c}^\dagger \rangle \langle \hat{c} \rangle + \frac{1}{2} \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (|\alpha|^2 - \alpha^* \alpha + \frac{1}{2}) = \frac{\hbar}{2m\omega} \, . \qquad (3.3.18)$$

Die Unschärfe Δq ist tatsächlich in dem Sinne minimal, daß sie nur noch von den Vakuum-Schwingungen herrührt.

Völlig analog ist das Ergebnis für Δp:

$$\begin{aligned}
\langle (\Delta p)^2 \rangle_t &:= \langle \langle (\hat{p}(t) - \langle \hat{p}(t) \rangle)^2 \rangle \rangle_t = \langle \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 \rangle_t \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \langle (e^{2i\omega t} \hat{c}^{\dagger 2} - \hat{c}^\dagger \hat{c} - \hat{c}\hat{c}^\dagger + e^{-2i\omega t} \hat{c}^2) \rangle \\
&\quad - (e^{2i\omega t} \langle \hat{c}^\dagger \rangle^2 - 2 \langle \hat{c}^\dagger \rangle \langle \hat{c} \rangle + e^{-2i\omega t} \langle \hat{c} \rangle^2) \rangle_t \\
&= \frac{m\hbar\omega}{2} (2 \langle \hat{c}^\dagger \hat{c} \rangle + 1 - 2 \langle \hat{c}^\dagger \rangle \langle \hat{c} \rangle) \\
&= m\hbar\omega (\langle \hat{c}^\dagger \hat{c} \rangle - \langle \hat{c}^\dagger \rangle \langle \hat{c} \rangle + \frac{1}{2}) = m\hbar\omega (|\alpha|^2 - \alpha^* \alpha + \frac{1}{2}) = \frac{m\hbar\omega}{2} \, . \qquad (3.3.19)
\end{aligned}$$

Auch hier ist die Unschärfe Δp in dem Sinne minimal, daß sie nur noch von den Vakuum-Schwingungen herrührt. Daraus folgt:

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle_t \cdot \langle (\Delta p)^2 \rangle_t = \frac{\hbar^2}{4} \, . \qquad (3.3.20)$$

Wir erhalten also in einem kohärenten Zustand für $\Delta q \cdot \Delta p$ die minimal mögliche Unschärfe-Relation! Das gleiche gilt beim freien elektromagnetischen Feld entsprechend für die Feldstärken $\vec{\hat{E}}$ und $\vec{\hat{B}}$.

Weiter ist es auch interessant, die Unschärfe und die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenzahl in kohärenten Zuständen zu betrachten.

$$\begin{aligned}(\Delta n)^2 &:= \langle(\Delta n)^2\rangle := \langle(\hat{n} - \langle\hat{n}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{n}^2\rangle - \langle\hat{n}\rangle^2 \\ &= \langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle - \langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle^2 == \langle\hat{c}^\dagger(\hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{1})\hat{c}\rangle - \langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle^2 \\ &= \alpha^{*2}\alpha^2 + \alpha^*\alpha - (\alpha^*\alpha)^2 = |\alpha|^2 = \langle\hat{n}\rangle \ , \end{aligned} \tag{3.3.21}$$

$$\frac{\Delta n}{n} := \frac{\sqrt{\langle(\Delta n)^2\rangle}}{\langle\hat{n}\rangle} = \frac{1}{\sqrt{\langle\hat{n}\rangle}} \ . \tag{3.3.22}$$

Betrachtet man also kohärente Zustände mit großenTeilchenzahlen, so geht die relative Unschärfe der Teilchenzahl für große n gegen 0.

Die Wahrscheinlichkeit, gerade n Teilchen zu finden ist eine Poissonverteilung in $\lambda := |\alpha|^2 = \langle\hat{n}\rangle$:

$$p(n) := |\langle n \mid \alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = e^{-\lambda}\frac{\lambda^n}{n!} \ . \tag{3.3.23}$$

Für Mittelwert und Varianz ergeben sich:

$$\langle n\rangle := \sum_{n=0}^{\infty} n\,p(n) = \sum_{n=0}^{\infty} n\,e^{-\lambda}\frac{\lambda^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda}\frac{\lambda\cdot\lambda^{n-1}}{(n-1)!} = \lambda\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda}\frac{\lambda^n}{n)!} = \lambda \ , \tag{3.3.24}$$

$$\begin{aligned}\langle n^2\rangle &:= \sum_{n=0}^{\infty} n^2\,p(n) = \sum_{n=0}^{\infty}(n)(n-1)\,p(n) + \sum_{n=0}^{\infty} n\,p(n) \\ &= \lambda^2\sum_{n=2}^{\infty} e^{-\lambda}\frac{\lambda^{n-2}}{(n-2)!} + \lambda = \lambda^2\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda}\frac{\lambda^n}{n!} + \lambda = \lambda^2 + \lambda \ , \end{aligned} \tag{3.3.25}$$

$$\sigma := \langle(n - \langle n\rangle)^2\rangle = \langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 = \lambda^2 + \lambda - \lambda^2 = \lambda \ . \tag{3.3.26}$$

Für große $\lambda = |\alpha|^2 = \langle\hat{n}\rangle$ ähnelt die Poisson-Verteilung einer Gauß-Verteilung in $n - \lambda = n - \langle n\rangle$.

Dies kann man folgendermaßen sehen: da der Logarithmus einer Gauß-Verteilung ein Polynom 2. Grades ist, entwickeln wir den Logarithmus der Poisson-Verteilung nach $n - \lambda$.

$$\ln p(n) \approx \ln p(n)|_\lambda + \frac{d}{dn}\ln p(n)\bigg|_\lambda (n-\lambda) + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dn^2}\ln p(n)\bigg|_\lambda (n-\lambda)^2 \ .$$

Zuvor ersetzen wir in $p(n)$ mit Hilfe der Stirling Formel $n!$ für große Werte von n (siehe I.5.9):

$$n! \approx \sqrt{2\pi n}\,(\frac{n}{e})^n \ , \tag{3.3.27}$$

$$p(n) = e^{-\lambda}\frac{\lambda^n}{n!} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n}}\,e^{n-\lambda}(\frac{\lambda}{n})^n \ ,$$

$$\ln p(n) = -\frac{1}{2}\ln(2\pi n) + (n-\lambda) + n(\ln\lambda - \ln n) \quad \Rightarrow$$

$$\ln p(n)|_\lambda = -\frac{1}{2}\ln(2\pi\lambda) \ ,$$

$$\frac{d}{dn}\ln p(n) = -\frac{1}{2}\frac{2\pi}{2\pi n} + 1 + (\ln\lambda - \ln n) + n(-\frac{1}{n}) = -\frac{1}{2n} + \ln\lambda - \ln n \quad \Rightarrow$$

$$\left.\frac{d}{dn}\ln p(n)\right|_\lambda = -\frac{1}{2\lambda} \ ,$$

$$\frac{d^2}{dn^2}\ln p(n) = \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{n} \quad \Rightarrow \quad \left.\frac{d^2}{dn^2}\ln p(n)\right|_\lambda = \frac{1}{2\lambda^2} - \frac{1}{\lambda} \ ,$$

$$\ln p(n) \approx -\frac{1}{2}\ln(2\pi\lambda) - \frac{(n-\lambda)}{2\lambda} + \frac{1}{2}(\frac{1}{2\lambda^2} - \frac{1}{\lambda})(n-\lambda)^2 \ .$$

Für große Werte von $\lambda = \langle n\rangle$ und für n-Werte in der Umgebung von λ, also für $|n-\lambda| \ll \lambda$, können wir die Terme $\frac{(n-\lambda)}{2\lambda}$ und $\frac{1}{4\lambda^2}(n-\lambda)^2$ vernachlässigen und erhalten:

$$\ln p(n) \approx -\frac{1}{2}\ln(2\pi\lambda) - \frac{(n-\lambda)^2}{2\lambda} \quad \Rightarrow$$

$$p(n) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}}\,e^{-\frac{(n-\lambda)^2}{2\lambda}} \ . \tag{3.3.28}$$

3.4 Phasen-Operatoren in kohärenten Zuständen

Man kann jetzt für die in 3.1.9 definierten Phasen-Operatoren die Erwartungswerte in kohärenten Zuständen untersuchen. Dies ist natürlich besonders interessant, um den

Grenzfall von der Quantentheorie zur klassischen Physik hin besser zu verstehen und zu beschreiben.

$$\begin{aligned}
\langle \alpha \mid \hat{C}_\varphi \mid \alpha \rangle &= \frac{1}{2} \langle \alpha \mid (\hat{E}_\varphi + \hat{E}_\varphi{}^\dagger) \mid \alpha \rangle \\
&= \frac{1}{2} \langle \alpha \mid ((\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \hat{c} + \hat{c}^\dagger (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}) \mid \alpha \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_n (\langle \alpha \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid n \rangle \langle n \mid \hat{c} \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \langle \alpha \mid \hat{c}^\dagger \mid n \rangle \langle n \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid \alpha \rangle) \\
&= \frac{1}{2}\, e^{-|\alpha|^2} \sum_n \left(\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n+1}} \cdot \alpha \cdot \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} + \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n+1}} \cdot \alpha^* \cdot \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \right) \\
&= \frac{1}{2}\, e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{\alpha^{*n} \alpha^{n+1} + \alpha^{*n+1} \alpha^n}{n! (n+1)^{\frac{1}{2}}} \\
&= \frac{1}{2}\, e^{-|\alpha|^2} \sum_n (\alpha + \alpha^*) \frac{(\alpha^* \alpha)^n}{n! (n+1)^{\frac{1}{2}}} \ .
\end{aligned}$$

Schreiben wir für α wieder $\alpha = |\alpha| e^{i\varphi}$, so folgt:

$$\langle \alpha \mid \hat{C}_\varphi \mid \alpha \rangle = |\alpha| \cos(\varphi)\, e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n! (n+1)^{\frac{1}{2}}} \ . \tag{3.4.1}$$

Man sieht unmittelbar, daß für $\hat{S}_\varphi$ völlig analog folgt:

$$\langle \alpha \mid \hat{S}_\varphi \mid \alpha \rangle = |\alpha| \sin(\varphi)\, e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n! (n+1)^{\frac{1}{2}}} \ . \tag{3.4.2}$$

Für große $n = \langle \hat{n} \rangle = |\alpha|^2 \gg 1$ kann man für die hier auftauchende Reihe eine nützliche asymptotische Entwicklung in $\frac{1}{|\alpha|^2}$ erhalten (siehe: Loudon (1992) und insb. die Originalarbeit von Carruthers u. Nieto (1965)):

$$\langle \alpha \mid \hat{C}_\varphi \mid \alpha \rangle \approx \cos(\varphi) \cdot (1 - \frac{1}{8|\alpha|^2}) \ , \tag{3.4.3}$$

$$\langle \alpha \mid \hat{S}_\varphi \mid \alpha \rangle \approx \sin(\varphi) \cdot (1 - \frac{1}{8|\alpha|^2}) \ . \tag{3.4.4}$$

Beweis. Zunächst einmal gilt mit Hilfe der Γ-Funktion

$$\frac{1}{n^z} = \frac{1}{n^z} \cdot \frac{\Gamma(z)}{\Gamma(z)} = \frac{1}{\Gamma(z)} \cdot \frac{1}{n^z} \cdot \int_0^\infty s^{z-1} e^{-s} ds = \frac{1}{\Gamma(z)} \cdot \int_0^\infty t^{z-1} e^{-nt} dt \ , \tag{3.4.5}$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!(n+1)^{\frac{1}{2}}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-(n+1)t} dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} (\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2 e^{-t})^n}{n!}) dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} e^{|\alpha|^2 e^{-t}} dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} (1 - t + \frac{t^2}{2} + O(t^3)) \cdot e^{|\alpha|^2 (1 - t + \frac{t^2}{2} + O(t^3))} dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} (1 - t + \frac{t^2}{2} + O(t^3)) \cdot e^{|\alpha|^2} \cdot e^{-|\alpha|^2 t} \cdot e^{|\alpha|^2 (\frac{t^2}{2} + O(t^3))} dt \\
&= \frac{e^{|\alpha|^2}}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-|\alpha|^2 t} (1 - t + \frac{t^2}{2} + O(t^3)) \cdot (1 + \frac{|\alpha|^2 t^2}{2} + |\alpha|^2 O(t^3)) dt \\
&= \frac{e^{|\alpha|^2}}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-|\alpha|^2 t} (1 - t + \frac{|\alpha|^2 + 1}{2} t^2 + (|\alpha|^2 + 1) O(t^3)) dt \\
&= e^{|\alpha|^2} \cdot [\, \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-|\alpha|^2 t} - \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{\frac{1}{2}} e^{-|\alpha|^2 t} dt \\
&\quad + \frac{(|\alpha|^2 + 1)}{2} \cdot \frac{\Gamma(\frac{5}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \frac{1}{\Gamma(\frac{5}{2})} \cdot \int_0^{\infty} t^{\frac{3}{2}} e^{-|\alpha|^2 t} dt \\
&\quad + (|\alpha|^2 + 1) \cdot \frac{\Gamma(\frac{7}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \frac{1}{\Gamma(\frac{7}{2})} \cdot \int_0^{\infty} O(t^{\frac{5}{2}}) e^{-|\alpha|^2 t} dt \,] \,.
\end{aligned}
$$

Mit $\Gamma(n+1) = n \cdot \Gamma(n)$ folgt: $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{1}{2} \cdot \Gamma(\frac{1}{2})$, $\Gamma(\frac{5}{2}) = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \Gamma(\frac{1}{2})$, $\Gamma(\frac{7}{2}) = \frac{5}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \Gamma(\frac{1}{2})$. Obwohl an dieser Stelle nicht benötigt, sei doch noch der Wert von $\Gamma(\frac{1}{2})$ angegeben: $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$. Damit erhalten wir für die obige Reihe:

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!(n+1)^{\frac{1}{2}}} &= e^{|\alpha|^2} \cdot [\, \frac{1}{(|\alpha|^2)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{(|\alpha|^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{3}{4} \cdot \frac{(|\alpha|^2 + 1)}{2} \cdot \frac{1}{(|\alpha|^2)^{\frac{5}{2}}} \\
&\quad + O(\frac{(|\alpha|^2 + 1)}{(|\alpha|^2)^{\frac{7}{2}}}) \,]
\end{aligned}
$$

$$= \frac{e^{|\alpha|^2}}{|\alpha|} \cdot (1 - \frac{1}{2|\alpha|^2} + \frac{3}{8} \cdot \frac{|\alpha|^2 + 1}{|\alpha|^4} + O(\frac{1}{|\alpha|^4}))$$

$$= \frac{e^{|\alpha|^2}}{|\alpha|} \cdot (1 - \frac{1}{8|\alpha|^2} + O(\frac{1}{|\alpha|^4})) \ . \tag{3.4.6}$$

□

Setzen wir dies in 3.4.1 und 3.4.2 ein, so folgen wie behauptet 3.4.3 und 3.4.4.

Um die Unschärfen von $\hat{C}_\varphi$ und $\hat{S}_\varphi$ berechnen zu können, benötigen wir als nächstes $\langle \alpha \mid \hat{C}_\varphi{}^2 \mid \alpha \rangle$ und $\langle \alpha \mid \hat{S}_\varphi{}^2 \mid \alpha \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \alpha \mid \hat{C}_\varphi{}^2 \mid \alpha \rangle &= \langle \alpha \mid \frac{1}{4}(\hat{E}_\varphi + \hat{E}_\varphi{}^\dagger)^2 \mid \alpha \rangle \\
&= \langle \alpha \mid \frac{1}{4}((\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c} + \hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2})^2 \mid \alpha \rangle \\
&= \frac{1}{4} \cdot [\langle \alpha \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c}(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c} \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \langle \alpha \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c}\hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \langle \alpha \mid \hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1}\hat{c} \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \langle \alpha \mid \hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid \alpha \rangle] \\
&= \frac{1}{4} \cdot [\sum_{n=0}^{\infty} \langle \alpha \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c}(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid n \rangle \langle n \mid \hat{c} \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \langle \alpha \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}(\hat{c}^\dagger\hat{c} + 1) \mid n \rangle \langle n \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \langle \alpha \mid \hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1} \mid n \rangle \langle n \mid \hat{c} \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \langle \alpha \mid \hat{c}^\dagger(\hat{n} + \hat{1})^{-1/2}\hat{c}^\dagger \mid n \rangle \langle n \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \mid \alpha \rangle] \\
&= \frac{1}{4} \cdot [\sum_{n=1}^{\infty} \langle \alpha \mid (\hat{n} + \hat{1})^{-1/2} \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n+1}} \mid n-1 \rangle \alpha \langle n \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{\sqrt{n+1}} \langle \alpha \mid n \rangle \frac{1}{\sqrt{n+1}} \langle n \mid \alpha \rangle \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^* \frac{1}{n+1} \langle \alpha \mid n \rangle \alpha \langle n \mid \alpha \rangle
\end{aligned}$$

$$+\sum_{n=0}^{\infty}\alpha^*\langle\alpha \mid (\hat{n}+\hat{1})^{-1/2}\sqrt{n+1} \mid n+1\rangle\frac{1}{\sqrt{n+1}}\langle n \mid \alpha\rangle]$$

$$=\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}\cdot[\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n}}\cdot\frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n+1}}\cdot\frac{\alpha^{*(n-1)}}{\sqrt{(n-1)!}}\cdot\alpha\cdot\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$$

$$+\sum_{n=0}^{\infty}|\alpha|^2\cdot\frac{1}{n+1}\cdot\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}+\sum_{n=0}^{\infty}\alpha^*\cdot\frac{1}{\sqrt{n+2}}\cdot\frac{\alpha^{*(n+1)}}{\sqrt{(n+1)!}}\cdot\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}]$$

$$=\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}\cdot[\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^{*(n-1)}}{\sqrt{(n-1)!}}\cdot\frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}+e^{|\alpha|^2}$$

$$+\ (e^{|\alpha|^2}-1)+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{*(n+2)}}{\sqrt{(n+2)!}}\cdot\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}]$$

$$=\frac{1}{2}-\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}+\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}\sum_{n=0}^{\infty}[\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}}\cdot\frac{\alpha^{n+2}}{\sqrt{(n+2)!}}+\frac{\alpha^{*(n+2)}}{\sqrt{(n+2)!}}\cdot\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}]$$

$$=\frac{1}{2}-\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}+\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{|\alpha|^{2n}}{n!\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}})\cdot(\alpha^2+\alpha^{*2})\ .$$

Schreiben wir für α wieder $\alpha=|\alpha|e^{i\varphi}$, so folgt:

$$\langle\alpha \mid \hat{C_\varphi}^2 \mid \alpha\rangle=\frac{1}{2}-\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}+|\alpha|^2(e^{2i\varphi}+e^{-2i\varphi})\,\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}\,\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{|\alpha|^{2n}}{n!\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}})$$

$$=\frac{1}{2}-\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}$$

$$+\ |\alpha|^2\frac{1}{4}((e^{i\varphi}+e^{-i\varphi})^2-2)\,e^{-|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{|\alpha|^{2n}}{n!\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}})$$

$$=\frac{1}{2}-\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}+|\alpha|^2(\cos^2(\varphi)-\frac{1}{2})\,e^{-|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{|\alpha|^{2n}}{n!\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}})\ . \quad (3.4.7)$$

Völlig analog folgt für $\hat{S_\varphi}^2$:

$$\langle\alpha \mid \hat{S_\varphi}^2 \mid \alpha\rangle=\frac{1}{2}-\frac{e^{-|\alpha|^2}}{4}+|\alpha|^2(\sin^2(\varphi)-\frac{1}{2})\,e^{-|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{|\alpha|^{2n}}{n!\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}})\ . \quad (3.4.8)$$

Auch für die hier auftauchenden Reihen kann man für große $n=\langle\hat{n}\rangle=|\alpha|^2\gg 1$ eine nützliche asymptotische Entwicklung in $\frac{1}{|\alpha|^2}$ erhalten (siehe wieder: Loudon (1992) und insb. die Originalarbeit von Carruthers u. Nieto (1965)):

$$\langle \alpha \mid \hat{C}_\varphi^{\ 2} \mid \alpha \rangle \approx \cos^2(\varphi) - \frac{\cos^2(\varphi) - \frac{1}{2}}{2|\alpha|^2} , \tag{3.4.9}$$

$$\langle \alpha \mid \hat{S}_\varphi^{\ 2} \mid \alpha \rangle \approx \sin^2(\varphi) - \frac{\sin^2(\varphi) - \frac{1}{2}}{2|\alpha|^2} . \tag{3.4.10}$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{|\alpha|^{2n}}{n!\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}}\right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n+2}}{(n+1)!} \cdot \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{n+2}} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n+1}} \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n+1}} \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot (1+\frac{1}{n})^{-\frac{1}{2}} \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot (1-\frac{1}{2n} + O(\frac{1}{n^2})) \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot (1-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{n+1} \cdot (1+\frac{1}{n}) + O(\frac{1}{n^2})) \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot (1-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{n+1} + O(\frac{1}{n^2})) \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot [e^{|\alpha|^2} - \frac{1}{2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n+2}}{(n+1)!} \cdot \frac{1}{|\alpha|^2} + O(\frac{1}{n^2})] \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot [e^{|\alpha|^2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot (\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} - 1) + O(\frac{1}{n^2})] \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot [e^{|\alpha|^2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot (e^{|\alpha|^2} - 1) + O(\frac{1}{n^2})] \\
&= \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot e^{|\alpha|^2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{|\alpha|^4} \cdot e^{|\alpha|^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{|\alpha|^4} + O(\frac{1}{n^2}) .
\end{aligned}$$

Bis zur Ordnung $O(\frac{1}{n^2}) = O(\frac{1}{|\alpha|^4})$ gilt also:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{|\alpha|^{2n}}{n!\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}}\right) = \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot e^{|\alpha|^2}(1 - \frac{1}{2|\alpha|^2}) + O(\frac{1}{|\alpha|^4}) . \tag{3.4.11}$$

Setzen wir dies in 3.4.7 und 3.4.8 ein, so folgen für $|\alpha|^2 \gg 1 \Rightarrow e^{-|\alpha|^2} = 0$ wie behauptet 3.4.9 und 3.4.10:

$$\begin{aligned} \langle \alpha \mid \hat{C_\varphi}^2 \mid \alpha \rangle &\approx \frac{1}{2} + (\cos^2(\varphi) - \frac{1}{2}) \cdot (1 - \frac{1}{2|\alpha|^2}) \\ &= \cos^2(\varphi) - \frac{\cos^2(\varphi) - \frac{1}{2}}{2|\alpha|^2} \ . \end{aligned} \qquad \square$$

Damit können wir jetzt die gesuchten Unschärfen von $\hat{C}_\varphi$und $\hat{S}_\varphi$ im kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$ für große $n = \langle \hat{n} \rangle = |\alpha|^2 \gg 1$ berechnen:

$$\begin{aligned} (\Delta \hat{C}_\varphi)^2 &= \langle \alpha \mid \hat{C_\varphi}^2 \mid \alpha \rangle - (\langle \alpha \mid \hat{C}_\varphi \mid \alpha \rangle)^2 \\ &= \cos^2(\varphi) - \frac{\cos^2(\varphi) - \frac{1}{2}}{2|\alpha|^2} - \cos^2(\varphi) \cdot (1 - \frac{1}{8|\alpha|^2})^2 + O(\frac{1}{|\alpha|^4}) \\ &= \frac{-2\cos^2(\varphi) + 1 + \cos^2(\varphi)}{4|\alpha|^2} + O(\frac{1}{|\alpha|^4}) \\ &= \frac{\sin^2(\varphi)}{4|\alpha|^2} + O(\frac{1}{|\alpha|^4}) \ . \end{aligned} \tag{3.4.12}$$

Und völlig analog:

$$(\Delta \hat{S}_\varphi)^2 = \frac{\cos^2(\varphi)}{4|\alpha|^2} + O(\frac{1}{|\alpha|^4}) \ . \tag{3.4.13}$$

Mit $\Delta n = |\alpha|$ (3.3.21) folgt:

$$(\Delta n) \cdot (\Delta \hat{C}_\varphi) = \frac{1}{2} \sin(\varphi) \ , \tag{3.4.14}$$

$$(\Delta n) \cdot (\Delta \hat{S}_\varphi) = \frac{1}{2} \cos(\varphi) \ . \tag{3.4.15}$$

Vergleichen wir dieses Ergebnis mit den allgemeinen Unschärfe-Relationen 3.1.16 und 3.1.17 für $\hat{C}_\varphi$ und $\hat{S}_\varphi$, so sehen wir, daß wir mit den kohärenten Zuständen auch hier die minimal mögliche Unschärfe erhalten.

Interessant ist auch, den Erwartungswert von $(\hat{C_\varphi}^2 + \hat{S_\varphi}^2)$ anzusehen. Hier erhalten wir aus 3.4.7 und 3.4.8 (ohne irgendeine Näherung) :

$$\langle \alpha \mid (\hat{C_\varphi}^2 + \hat{S_\varphi}^2) \mid \alpha \rangle = 1 - \frac{e^{-|\alpha|^2}}{2} \ . \tag{3.4.16}$$

Für $n = |\alpha|^2 \to 0$ erhalten wir hier den Wert $\frac{1}{2}$, während sich für $n = |\alpha|^2 \to \infty$ der erwartete klassische Wert 1 ergibt.

Als letztes wollen wir noch die Unschärfe U aus 3.1.18, also das quantenmechanische Analogon für den klassischen Ausdruck $\Delta n \cdot \Delta\varphi$, für die beiden Grenzfälle $n = |\alpha|^2 \to 0$ und $n = |\alpha|^2 \to \infty$ betrachten.

Für $|\alpha| \to 0$ benutzen wir 3.4.1, 3.4.2 und 3.4.7, 3.4.8:

$$\begin{aligned}\lim_{|\alpha|\to 0} U^2 &:= \lim_{|\alpha|\to 0} |\alpha|^2 \cdot \frac{(\Delta\hat{S}_\varphi)^2 + (\Delta\hat{C}_\varphi)^2}{(\langle\hat{S}_\varphi\rangle^2 + \langle\hat{C}_\varphi\rangle^2)} \\ &= \lim_{|\alpha|\to 0} |\alpha|^2 \cdot \frac{(\frac{1}{4} - 0) + (\frac{1}{4} - 0)}{|\alpha|^2 \sin^2(\varphi) + |\alpha|^2 \cos^2(\varphi)} = \frac{1}{2}\,. \end{aligned} \tag{3.4.17}$$

Für $|\alpha| \to \infty$ benutzen wir die asymptotischen Entwicklungen 3.4.3, 3.4.4 und 3.4.12, 3.4.13:

$$\begin{aligned}\lim_{|\alpha|\to\infty} U^2 &:= \lim_{|\alpha|\to\infty} |\alpha|^2 \cdot \frac{(\Delta\hat{S}_\varphi)^2 + (\Delta\hat{C}_\varphi)^2}{(\langle\hat{S}_\varphi\rangle^2 + \langle\hat{C}_\varphi\rangle^2)} \\ &= \lim_{|\alpha|\to 0} |\alpha|^2 \cdot \frac{\frac{1}{4|\alpha|^2}\sin^2(\varphi) + \frac{1}{4|\alpha|^2}\cos^2(\varphi)}{\sin^2(\varphi) + \cos^2(\varphi)} = \frac{1}{4}\,. \end{aligned} \tag{3.4.18}$$

Vergleichen wir dieses Ergebnis mit der allgemeinen Unschärfe-Relation 3.1.18, so sehen wir, daß wir mit den kohärenten Zuständen wiederum auch hier die minimal mögliche Unschärfe erhalten.

4 Das gewöhnliche Pfadintegral in der Quantenmechanik

4.1 Richard (Dick) Feynman (1918 – 1988)

Abbildung 4.1: R. Feynman
T. Thiel (1984), CC BY-SA 3.0.
[http://de.wikipedia.org/wiki/Feynman]

Feynman wurde 1918 in Far Rockaway in New York als Sohn einer ursprünglich ostjüdischen Familie geboren. Schon in seiner Kindheit begann er damit, Radios zu reparieren und bereits mit 15 Jahren lernte er Differential- und Integralrechnung. Sein Grundstudium absolvierte er am MIT und die Graduiertenausbildung an der Princeton University. Dort wurde er bei 1942 bei Archibald Wheeler promoviert. In seiner Doktorarbeit beschäftigte er sich mit dem *Prinzip der Stationären Wirkung in der Quantenmechanik*, womit er bereits die Grundlagen zu seiner späteren *Pfadintegral-Methode* legte. Danach beteiligte er sich in Los Alamos bis zum Kriegsende am Manhattan Project, der Entwicklung der amerikanischen Atombombe. Seine erste Frau Arlene Greenbaum starb schon im Juli 1945 an TBC (die Geschichte dieser Liebe und Ehe wurde 1996 unter dem Titel *Infinity* verfilmt). Mit seiner dritten Frau Gweneth hatte er einen Sohn und eine Adoptivtochter. Bethe, der sein Chef in Los Alamos gewesen war, berief Feynman an die Cornell University und im Jahr 1951 wechselte Feynman auf eine Professur für Theoretische Physik am Caltech in Kalifornien, wo er bis zu seinem Lebensende verblieb. Feynman verstarb 1988 an den Folgen zweier Krebserkrankungen, hielt aber noch 14 Tage vor seinem Tod eine Abschiedsvorlesung. Seine Vorlesungen, Vortäge und Bücher waren berühmt für ihren unkonventionellen Ansatz, ihren Humor und das Bemühen, immer die Physik hinter den Formeln transparent und verständlich zu machen. Weltweit bekannt wurde der Undergraduate Kurs *The Feynman Lectures on Physics* in Zusammenarbeit mit Leighton und Sands (1961-64). Sehr schön und lesenswert sind auch Feynmans autobiographischen Essays in *„Sie belieben wohl zu scherzen, Mr. Feynman!”* (Feynman, 1991) und seine Aufsätze in *Vom Wesen physikalischer Gesetze* (Feynman,

1993) - darin auf S. 160 der berühmte Ausspruch: „Andererseits kann ich mit Sicherheit behaupten, daß niemand die Quantenmechanik versteht".

In der Physik sind Feynmans wichtigsten Beiträge die *Pfadintegral-Methode in der Quantentheorie*, die *Feynman-Diagramme*, die *Quantenelektrodynamik*, für die er 1965 zusammen mit Schwinger und Tomonaga den Nobelpreis erhielt, Aufsätze zur *Suprafluidität*, zur *starken Wechsellwirkung*, zur *Quantengravitation* und zu *neuronalen Netzwerken.*

[Quellen: Wikipedia-Feynman (2010), Kleinert (2006)].

4.2 Hagen Kleinert (*1941)

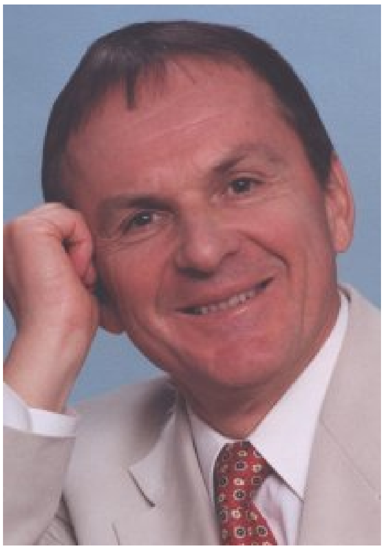


Abbildung 4.2: H. Kleinert
A. Kleinert (2006), PD.
[http://de.wikipedia.org/wiki /Hagen_Kleinert]

Kleinert wurde 1941 in Festenberg (poln. Twardogóra) in Niederschlesien geboren. Er begann 1960 sein Physikstudium an der TH Hannover und promovierte 1967 an der University of Colorado in Boulder. Seit 1969 wirkte er als Professor für Theoretische Physik an der FU Berlin.

An der Pfadintegral-Methode hatte Feynman schließlich die Freude verloren, nachdem es ihm trotz intensiver Bemühungen nicht gelang, das Wasserstoffatom mit dieser Methode zu lösen. 1972 sprach er Hagen Kleinert, der gerade ein Sabbatjahr an Feynmans Institut verbrachte, auf dieses Problem an: „Kleinert, you figured out all that group-theoretic stuff of the hydrogen atom, why don't you solve the path integral!" Eine vorläufige und noch inkonsistente Lösung fand Kleinert zusammen mit seinem Postdoc I.H. Duru 1982. Es dauerte dann aber noch bis 1989, bis Kleinert ein korrektes Pfadintegral, das Raumkrümmung und Torsion berücksichtigte, für das Wasserstoffatom aufstellen konnte. Noch kurz vor Feynmans Tod 1988 publizierte Kleinert zusammen mit Feynman eine gemeinsame Arbeit zu einer auch numerisch sehr erfolgreichen Näherungsmethode für Pfadintegrale. Seine zahlreichen Arbeiten zum Pfadintegral finden in Kleinerts 'Opus Magnum' *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets* (Kleinert (2006)) einen fachlich ebenso wie didaktisch beeindruckenden Höhepunkt!

Außerdem lieferte Kleinert wichtige Beiträge zu Quarktheorien, Supersymmetrie, Phasenübergängen und deren kritischen Exponenten. Er wandte die von ihm entwickelte Theorie der kollektiven Quantenfelder auf die Festkörperphysik, die Kern- und Elementarteilchenphysik an und die von ihm von Quantenfeld-Eichtheorien abgeleitete

Unordnungsfeldtheorie auf Defekte in Festkörpern. Im Jahr 2008 erhielt Kleinert für sein umfangreiches Lebenswerk von der DPG die Max-Born-Medaille. Sein Beitrag zum 100. Geburtstag von Lev D. Landau im Jahr 2008 wurde mit der Majorana-Medaille ausgezeichnet.

[Quellen: Wikipedia-Kleinert (2011), Kleinert (2006), Janke u. a. (2001), Homepage: `http://users.physik.fu-berlin.de/~kleinert/kleinert/`].

4.3 Pfadintegral in Hamiltonscher Form

Das gewöhnliche Feynmansche Pfadintegral der Quantenmechanik soll hier für den 1-dimensionalen Fall abgeleitet werden. In den Manuskript-Versionen vor V-1-32 wurde an dieser Stelle eine vereinfachte Ableitung des Feynmanschen Pfadintegrals für Hamilton-Operatoren ohne explizite Zeitabhängigkeit vorgeführt. Jetzt soll die etwas aufwendigere Herleitung für Hamilton-Operatoren mit eventueller explizite Zeitabhängigkeit gezeigt werden. Wir folgen dabei Kleinert (2006), Kapitel 1.6, 1.7, 2.1. Dabei ist die hier gezeigte Ableitung auf den Spuren Feynmans rein formal zu verstehen.

Es zeigt sich nämlich, daß für das ursprüngliche Feynmansche Pfadintegral im Kontinuum-Grenzwert kein gültiges Integrationsmaß existiert. Zu diesem Problemkreis und verschiedenen mathematischen Lösungen siehe Klauder (2010) und Cartier u. DeWitt-Morette (2006). Physiker pflegen sich nun üblicherweise damit zu behelfen, daß sie entweder das Pfadintegral als diskrete (endliche) Gittersumme verstehen und berechnen, oder indem sie durch den Übergang zu imaginären Zeiten zum Euklidischen Pfadintegral überwechseln, für welches ein Integrationsmaß im Kontinuum-Limes existiert. Noch problematischer ist die Frage der Konvergenz der Pfadintegrale. Wenn der Hamilton-Operator in der Form $\hat{H}(\hat{p},\hat{q},t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{q},t)$ gegeben ist und das Potential $V(\hat{q},t)$ nicht hinreichend regulär ist, z.B. das singuläre Coulomb-Potential $V(\vec{q}) = \frac{c}{|\vec{q}|}$, dann divergiert das Pfadintegral als diskrete Gittersumme. Die Lösung dieses Problems ist nichttrivial und aufwendig und wurde in den Jahren 1982-89 von Duru & Kleinert und Kleinert gefunden und ausgearbeitet. Dabei wird der Hamilton-Operator mit dem Coulomb-Potential im euklidischen Raum nichtlinear in einen anderen Raum transformiert, in dem das Coulom-Potential nach unten beschränkt ist und somit das Pfadintegral konvergiert. Allerdings muß dieses Kleinertsche Pfadintegral dann Raumkrümmung und Torsion korrekt berücksichtigen - siehe Kleinert (2006), Kapitel 10 bis 14.

Bei der Anwendung der Pfadintegrale in der Quantenfeldtheorie zeigen sich die üblichen quantenfeldtheoretischen Probleme. So ist zunächst einmal nicht klar, auf welche Weise die dort auftretenden divergenten Pfadintegrale zu verstehen und zu regularisieren sind. Im nächsten Kapitel wird die von Stephen Hawking eingeführte Methode der spektralen Zeta-Funktion als eine schöne Methode der Regularisierung anhand einfacher Beispiele vorgestellt.

Doch zunächst zur Herleitung des Feynmanschen Pfadintegrals!

Die Dynamik eines quantenmechanischen Systems, das der Schrödinger-Gleichung mit einem Hamilton-Operator $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t)$ gehorcht, kann durch einen unitären Zeitentwicklungs-Operator $\hat{U}(t_f, t_i)$ beschrieben werden. Hierbei bezeichne t_i den Anfangszeitpunkt und t_f den Endzeitpunkt der dynamischen Entwicklung, also

$$| \psi(t_f)\rangle =: \hat{U}(t_f, t_i) \mid \psi(t_i)\rangle \ . \tag{4.3.1}$$

Dabei erfüllt $\hat{U}(t_f, t_i)$ die Operatorgleichung (Schrödinger-Gleichung)

$$[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)]\, \hat{U}(t_f, t_i) = 0 \ , \tag{4.3.2}$$

denn für alle $| \psi(t_i)\rangle$ gilt:

$$0 =[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)] \ \mid \psi(t_f)\rangle = [i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)]\, \hat{U}(t_f, t_i) \mid \psi(t_i)\rangle \ .$$

$\hat{U}(t_f, t_i)$ ist unitär, denn

$$\begin{aligned} 1 &= |\langle\psi(t_f) \mid \psi(t_f)\rangle| = |\langle\hat{U}(t_f, t_i)\psi(t_i) \mid \hat{U}(t_f, t_i)\psi(t_i)\rangle| \\ &= |\langle\psi(t_i) \mid \hat{U}^\dagger(t_f, t_i)\hat{U}(t_f, t_i)\psi(t_i)\rangle| \ . \end{aligned}$$

Weiter bilden die Operatoren $\hat{U}(t_f, t_i)$ eine Gruppe mit dem neutralen Element $\hat{U}(t_i, t_i) = \hat{1}$, denn

$$| \psi(t_f)\rangle = \hat{U}(t_f, t_i) \mid \psi(t_i)\rangle \ , \text{ und mit } t_f > t_k > t_i \text{ gilt}$$

$$| \psi(t_f)\rangle = \hat{U}(t_f, t_k) \mid \psi(t_k)\rangle = \hat{U}(t_f, t_k)\hat{U}(t_k, t_i) \mid \psi(t_i)\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\hat{U}(t_f, t_i) = \hat{U}(t_f, t_k)\hat{U}(t_k, t_i) \quad \text{für } t_f > t_k > t_i \ . \tag{4.3.3}$$

Wenn der Hamilton-Operator $\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig ist, dann kann der Zeitentwicklungs-Operator $\hat{U}(t_f, t_i)$ sofort angegeben werden, nämlich

$$\hat{U}(t_f, t_i) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(\hat{p},\hat{q})\,(t_f - t_i)} \ , \tag{4.3.4}$$

denn

$$\begin{aligned} [i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q})]\, \hat{U}(t_f, t_i) &= [i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q})]\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(\hat{p},\hat{q})\,(t_f - t_i)} \\ &= [\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q})]\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(\hat{p},\hat{q})\,(t_f - t_i)} = 0 \ . \end{aligned}$$

Wenn der Hamilton-Operator $\hat{H}$ explizit zeitabhängig ist, dann kann der Zeitentwicklungs-Operator $\hat{U}(t_f, t_i)$ als zeitgeordnete Dyson-Reihe angegeben werden. Man unterteilt einfach das Zeitintervall $t_f - t_i$ in M kleine Teilintervalle der Länge $\epsilon := \frac{t_f - t_i}{M}$, mit

$t_f = t_M > t_{k+1} > t_k > t_0 = t_i$. Innerhalb des k-ten Teilintervalls kann dann $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t)$ bezüglich der expliziten Zeitabhängigkeit als konstant $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_k)$ betrachtet werden. Mit dem Zeitordnungsoperator $\hat{T}$, der ein zeitabhängiges Operator-Produkt von links nach rechts zu abfallenden Zeiten hin anordnet, ergibt sich:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t_f, t_i) &= \hat{T} \prod_{k=1}^{M} \hat{U}(t_k, t_{k-1}) = \hat{T} \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(\hat{p},\hat{q},t_k)\,\epsilon} \\ &= \hat{T}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{M} \hat{H}(\hat{p},\hat{q},t_k)\,\epsilon} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} \hat{T}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} \hat{H}(\hat{p},\hat{q},t)\,dt} \ . \end{aligned} \tag{4.3.5}$$

Wenn die Operator-Exponentialfunktion als Reihe entwickelt und die einzelnen Terme zeitgeordnet werden, spricht man von der Dyson-Reihe für den Zeitentwicklungs-Operator $\hat{U}(t_f, t_i)$.

Diesen Gedanken der zeitgeordneten Dyson-Reihe hat Feynman auf die folgende Übergangsamplitude angewandt, die nach ihm als Feynman-Propagator (oder Feynman-Kern) benannt wurde. q_i und q_f bezeichne die Ortskoordinaten des Systems zu den Anfangs- und Endzeitpunkten t_i und t_f.

$$\begin{aligned}U(q_f, t_f, q_i, t_i) &:= \langle q_f, t_f \mid q_i, t_i\rangle \\ &:= \langle q_f \mid \hat{U}_R(t_f, t_i) \mid q_i\rangle := \langle q_f \mid \Theta(t_f - t_i)\hat{U}(t_f, t_i) \mid q_i\rangle \ . \end{aligned} \tag{4.3.6}$$

Hierbei wollen wir unter $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ im Folgenden stets den retardierten Feynman-Propagator verstehen, was in dem Faktor $\Theta(t_f - t_i)$ der Definitionsgleichung zum Ausdruck kommt. Damit folgt für den retardierten Zeitentwicklungs-Operator $\hat{U}_R(t_f, t_i)$:

$$\begin{aligned}[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)]\,\hat{U}_R(t_f, t_i) &= [i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)]\,\Theta(t_f - t_i)\hat{U}(t_f, t_i) \\ &= i\hbar\delta(t_f - t_i)\hat{U}(t_f, t_i) + \Theta(t_f - t_i)[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)]\,\hat{U}(t_f, t_i) \\ &= i\hbar\delta(t_f - t_i)\hat{1} \ , \end{aligned} \tag{4.3.7}$$

Diese retardierten Zeitentwicklungs-Operatoren $\hat{U}_R(t_f, t_i)$ bilden nun keine Gruppe mehr wie die Zeitentwicklungs-Operatoren $\hat{U}(t_f, t_i)$, sondern nur noch eine Halbgruppe. Für den retardierten Feynman-Propagator $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ folgt:

$$\begin{aligned}[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)]\,U(q_f, t_f, q_i, t_i) &= \langle q_f \mid [i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f} - \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_f)]\,\hat{U}_R(t_f, t_i) \mid q_i\rangle \\ &= i\hbar\delta(t_f - t_i)\langle q_f \mid \hat{1} \mid q_i\rangle = i\hbar\delta(t_f - t_i)\delta(q_f - q_i) \ . \end{aligned} \tag{4.3.8}$$

Also ist der retardierte Feynman-Propagator $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ gerade die Orts- und Zeitabhängige Greenfunktion der Schrödingergleichung.

Wie bei der Dyson-Reihe unterteilt man einfach das Zeitintervall $t_f - t_i$ in M kleine Teilintervalle der Länge $\epsilon := \frac{t_f - t_i}{M}$, mit

$$t_M := t_f > t_{k+1} > t_k > t_0 := t_i \ ,$$

$$q_0 := q_i, \quad q_M := q_f, \quad q_k := q(t_k) := q(t_i + k\epsilon) \ ,$$

und schreibt

$$U(q_f, t_f, q_i, t_i) = \langle q_f \mid \hat{U}_R(t_f, t_i) \mid q_i \rangle = \langle q_f \mid \prod_{k=M}^{1} \hat{U}_R(t_k, t_{k-1}) \mid q_i \rangle$$

$$= \langle q_f \mid \prod_{k=M}^{1} \hat{U}(t_k, t_{k-1}) \mid q_i \rangle \ .$$

Hier haben wir die richtige Zeitordnung (von links nach rechts zu abfallenden Zeiten) bereits im Produkt berücksichtigt, so daß $\hat{U}_R(t_k, t_{k-1}) = \hat{U}(t_k, t_{k-1})$ ist. Im nächsten Schritt führt man zwischen den einzelnen Operatoren $\hat{U}(t_k, t_{k-1})$ jeweils einen vollständigen Satz von Eigenvektoren (Eigenfunktionen) des Ortsoperators ein:

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_k \ \mid q_k \rangle \langle q_k \mid \ .$$

Damit schreibt sich der Feynman-Propagator als

$$U(q_f, t_f, q_i, t_i) = \int \Big(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k \Big) \prod_{k=M}^{1} \langle q_k \mid \hat{U}(t_k, t_{k-1}) \mid q_{k-1} \rangle$$

$$= \int \Big(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k \Big) \prod_{k=1}^{M} \langle q_k \mid \hat{U}(t_k, t_{k-1}) \mid q_{k-1} \rangle \ .$$

Innerhalb des k-ten Teilintervalls kann $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t)$ bezüglich der expliziten Zeitabhängigkeit als konstant $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_k)$ betrachtet werden. Dadurch kann man den Zeitentwicklungs-Operator wieder in der Form $\hat{U}(t_k, t_{k-1}) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_k)\, \epsilon)$ darstellen.
Wir beschränken uns im Folgenden auf Hamilton-Operatoren der Form $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{q}, t)$ und erhalten also

$$U(q_f, t_f, q_i, t_i) = \int \Big(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k \Big) \prod_{k=1}^{M} \langle q_k \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t_k)} \mid q_{k-1} \rangle$$

$$= \int \Big(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k \Big) \prod_{k=1}^{M} \langle q_k \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon (\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{q}, t_k))} \mid q_{k-1} \rangle$$

$$= \int \Big(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k \Big) \prod_{k=1}^{M} \langle q_k \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon (V(\hat{q}, t_k) + \frac{1}{2m}\hat{p}^2)} \mid q_{k-1} \rangle \ .$$

Mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff Formel (siehe etwa Greiner u. Reinhardt (1993), S. 32 ff.):

$$e^{\epsilon\hat{A}+\epsilon\hat{B}} = e^{\epsilon\hat{A}}\, e^{\epsilon\hat{B}}\, e^{-\frac{1}{2}\epsilon^2[\hat{A},\hat{B}]+O(\epsilon^3)}$$

und unter Vernachlässigung der $O(\epsilon^2)$-Terme folgt

$$\begin{aligned}
U(q_f,t_f,q_i,t_i) &= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} \langle q_k \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(\hat{q},t_k)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2m}\hat{p}^2} \mid q_{k-1}\rangle \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, \langle q_k \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(\hat{q},t_k)} \mid q\rangle\langle q \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2m}\hat{p}^2} \mid q_{k-1}\rangle \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(q_k,t_k)}\langle q_k \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2m}\hat{p}^2} \mid q_{k-1}\rangle \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \int(\prod_{k=1}^{M} dp_k) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(q_k,t_k)}\langle q_k \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2m}\hat{p}^2} \mid p_k\rangle\langle p_k \mid q_{k-1}\rangle \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \int(\prod_{k=1}^{M} dp_k) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(q_k,t_k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2m}p_k^2}\langle q_k \mid p_k\rangle\langle p_k \mid q_{k-1}\rangle \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \int(\prod_{k=1}^{M} dp_k) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(q_k,t_k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2m}p_k^2} \\
&\qquad \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_k q_k} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}p_k q_{k-1}} \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \int(\prod_{k=1}^{M} \frac{dp_k}{2\pi\hbar}) \prod_{k=1}^{M} e^{\frac{i}{\hbar}[p_k(q_k-q_{k-1})-\epsilon H(p_k,q_k,t_k)]} \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \int(\prod_{k=1}^{M} \frac{dp_k}{2\pi\hbar}) \prod_{k=1}^{M} e^{\epsilon\frac{i}{\hbar}[p_k\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-H(p_k,q_k,t_k)]} \\
&= \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \int(\prod_{k=1}^{M} \frac{dp_k}{2\pi\hbar}) e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{M}\epsilon[p_k\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-H(p_k,q_k,t_k)]}\ .
\end{aligned}$$

Wenn der Grenzwert dieses Ausdrucks für $M \to \infty$ existiert, dann schreibt man diesen üblicherweise in der Form

$$U(q_f,t_f,q_i,t_i) = \lim_{M\to\infty}\int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \int(\prod_{k=1}^{M} \frac{dp_k}{2\pi\hbar}) e^{\frac{i}{\hbar}\sum\limits_{k=1}^{M}\epsilon[p_k\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-H(p_k,q_k,t_k)]} \tag{4.3.9}$$

$$=: \int_{(q_i,t_i)}^{(q_f,t_f)} D[q(t)]\, D[p(t)]\, e^{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f} dt[p(t)\dot{q}(t)-H(p(t),q(t),t)]}\ . \tag{4.3.10}$$

Dies ist das Feynmanschen Pfadintegrals in der Hamiltonschen Form . Hierbei ist zu erwähnen, daß die Formulierung 4.3.10 mit der Summierung über alle Pfade von (q_i, t_i) nach (q_f, t_f) mangels eines Integrationsmaßes zunächst einmal nur eine suggestive Abkürzung für den Grenzwert der Gitterpfadsumme 4.3.9 darstellt.

4.4 Pfadintegral in Lagrangescher Form

Wenn man nun Hamilton-Operatoren der Form $\hat{H}(\hat{p},\hat{q}) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{q},t)$ betrachtet, bei denen $\hat{p}$-Abhängigkeit einfach quadratisch ist, dann kann man mit Hilfe einer quadratischen Ergänzung des Exponenten und der Ausführung des Gaußschen Integrales

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\,(e^{-ap^2}) = (\frac{\pi}{a})^{\frac{1}{2}} \tag{4.4.1}$$

die p-Integrationen durchführen:

$$\begin{aligned}
U(q_f,t_f,q_i,t_i) &= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar}\, e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon[p_k\dot{q}_k - \frac{1}{2m}p_k^2 - V(q_k,t_k)]} \\
&= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar}\, e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon[\frac{-1}{2m}(p_k - m\dot{q}_k)^2 + \frac{m}{2}\dot{q}_k^2 - V(q_k,t_k)]} \\
&= \lim_{M\to\infty} (\prod_{k=1}^{M} \int \frac{dp'_k}{2\pi\hbar}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\epsilon}{2m}{p'_k}^2}) \int (\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon[\frac{m}{2}\dot{q}_k^2 - V(q_k,t_k)]} \\
&= \lim_{M\to\infty} (\frac{1}{2\pi\hbar}(\frac{\pi}{\frac{i}{\hbar}\frac{\epsilon}{2m}})^{1/2})^M \int (\prod_{k=1}^{M-1} dq_k)\, e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{k=1}^{M}[\frac{m}{2}\dot{q}_k^2 - V(q_k,t_k)]} \\
&= \lim_{M\to\infty} (\frac{m}{2\pi i\epsilon\hbar})^{M/2} \int (\prod_{k=1}^{M-1} dq_k)\, e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{k=1}^{M}[\frac{m}{2}\dot{q}_k^2 - V(q_k,t_k)]} \qquad (4.4.2) \\
&= \lim_{M\to\infty} (\frac{m}{2\pi i\epsilon\hbar})^{M/2} \int_{(q_i,t_i)}^{(q_f,t_f)} D^{M-1}[q(t)]\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt[\frac{m}{2}\dot{q}(t)^2 - V(q(t),t)]}\,,
\end{aligned}$$

$$U(q_f,t_f,q_i,t_i) = N \cdot \int_{(q_i,t_i)}^{(q_f,t_f)} D[q(t)]\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\, L(\dot{q}(t),q(t),t)} = N \cdot \int_{(q_i,t_i)}^{(q_f,t_f)} D[q(t)]\, e^{\frac{i}{\hbar}S(q)}\,. \tag{4.4.3}$$

Dies ist das Feynmanschen Pfadintegrals in der Lagrangeschen Form. Wiederum gilt, daß die Formulierung 4.4.3 mit der Summierung über alle Pfade von (q_i, t_i) nach (q_f, t_f)

und der 'Normierung' N nur eine (suggestive) Abkürzung für den Grenzwert der Gitterpfadsumme 4.4.2 darstellt. Da $\lim_{M\to\infty}(\frac{m\,M}{2\pi i\,(t_f-t_i)\,\hbar})^{M/2}$ allein für sich natürlich nicht existiert, ist dieser Faktor Teil einer geeigneten Maßfunktion und N in 4.4.3 ist lediglich ein Proportionalitätsfaktor zu dieser Maßfunktion, der die Unitarität des Pfadintegrals, d.h. des Feyman-Kerns $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$, sicherstellen soll.

Dort wo diese Gitterpfadsumme nicht konvergiert, behelfen sich die Physiker üblicherweise damit, in die komplexe Ebene auszuweichen. Dies kann entweder durch eine Drehung der komplexen Ebene um einen kleinen Winkel δ in mathematisch negativer Richtung erreicht werden, wobei sich die neue Zeitkoordinate τ aus der alten Zeitkoordinate t ergibt als: $\tau = e^{i\delta}\,t$. Dies führt zu einer exponentiellen Dämpfung der Beiträge im Pfadintegral für große τ. Oder man dreht die komplexe Ebene gleich um $\delta = \frac{\pi}{2}$, d.h. man geht zu imaginären Zeiten $\tau = it$ über. Dies ist die euklidische Form des Pfadintegrals, die im folgenden Abschnitt betrachtet werden soll. In diesem Fall werden aus den Phasen im normalen Pfadintegral abfallende Exponential-Funktionen und die Konvergenz ist gesichert. Für die mögliche Rücktransformation zu reellen Zeiten nach Duchführung der Rechnung im Euklidischen muß allerdings sichergestellt sein, daß die Lösung im Bereich der analytischen Fortsetzung keine Pole hat.

4.5 Pfadintegral in Euklidischer Form

Durch den Übergang zu imaginären Zeiten gelangen wir zum Euklidischen Pfadintegral. Sei $\tau := it$, $\epsilon_\tau := i\epsilon_t$, $\tau \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) &= \langle q_f \mid e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}(\tau_f-\tau_i)} \mid q_i\rangle = \dots \\ &= \lim_{M\to\infty}(\prod_{k=1}^{M}\int \frac{dp'_k}{2\pi\hbar}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\frac{\epsilon_\tau}{2m}{p'_k}^2}) \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon_\tau[\frac{m}{2}\dot{q}_k^2+V(q_k,\frac{1}{i}\tau_k)]} \\ &= \lim_{M\to\infty}(\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar})^{M/2} \int\limits_{(q_i,\tau_i)}^{(q_f,\tau_f)} D^{M-1}[q(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau[\frac{m}{2}\dot{q}(\tau)^2+V(q(\tau),\frac{1}{i}\tau)]} \qquad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) &= N\cdot \int\limits_{(q_i,\tau_i)}^{(q_f,\tau_f)} D[q(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H(\dot{q}(\tau),q(\tau),\frac{1}{i}\tau)} \\ &= N\cdot \int\limits_{(q_i,t_i)}^{(q_f,t_f)} D[q(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q)}\ . \end{aligned} \qquad (4.5.1)$$

4.6 Pfadintegral der Zustandssumme

Die kanonische Zustandssumme ist als Spur über $e^{-\beta\hat{H}}$ definiert und dies können wir als euklidisches Pfadintegral schreiben:

$$Z := Sp(e^{-\beta\hat{H}}) = \int dq \, \langle q \mid e^{-\frac{1}{\hbar}(\hbar\beta - 0)\hat{H}} \mid q\rangle = \int dq \, U_E(q, \hbar\beta, q, 0) \; . \tag{4.6.1}$$

Hier sind nun $q_0 = q(0)$ und $q_M = q(\hbar\beta)$ identisch, d.h. wir müssen zur Spurbildung das Integral über q mit dieser periodischen Randbedingung durchführen.

$$Z = \lim_{M\to\infty} (\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar})^{M/2} \int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} dq_0 \int (\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon[\frac{m}{2}\dot{q}_k^2 + V(q_k, \frac{1}{i}\tau_k)]} \; , \tag{4.6.2}$$

$$Z = N \cdot \int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} D[q(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_0^{\hbar\beta} d\tau H(\dot{q}(\tau), q(\tau), \frac{1}{i}\tau)} \; . \tag{4.6.3}$$

Hier erfolgt wegen der periodischen Randbedingung $q(0) = q(\hbar\beta)$ die Summation über alle entsprechenden zyklischen Pfade.

4.7 Gaußsche Integrale

Immer wieder stoßen wir bei der Pfadintegral-Methode auf Gaußsche Integrale (siehe 4.4.1). Tatsächlich sind diese Gaußschen Integrale auch die bedeutsamsten unter den wenigen Pfadintegralen, die wir analytisch exakt lösen können. Für die Anwendung in den folgenden Abschnitten sollen hier einige Ausdrücke für Gaußsche Integrale in M Dimensionen abgeleitet werden.

4.7.1 Das einfache Gaußsche Integral

Sei $a \in \mathbb{R}$ und $a \neq 0$, dann gilt:

$$\frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\frac{1}{2}ax^2} = a^{-1/2} \; . \tag{4.7.1}$$

Beweis. Man berechnet das quadrierte Integral mittels Polarkoordinaten.

$$\begin{aligned}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-y^2} &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-x^2-y^2} \\ &= \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \int\limits_0^{\infty} dr \, re^{-r^2} = 2\pi \int\limits_0^{\infty} \frac{1}{2} \, ds \, e^{-s}\end{aligned}$$

$$= \pi[-e^{-s}]_0^\infty = \pi \quad \Rightarrow$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} = \sqrt{\pi} \quad \Rightarrow \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{1}{2}ax^2} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\frac{a}{2}}}\, dy\, e^{-y^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}\ . \qquad \square$$

4.7.2 Das Gaußsche Integral für M-dimensionale symmetrische Matrizen

Sei A eine reelle, symmetrische, positiv definite Matrix der Dimension $M * M$, A habe also keine Null-Eigenwerte, dann gilt:

$$\frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_M\, e^{-\frac{1}{2}\langle x|A|x\rangle} = (\det A)^{-1/2}\ . \tag{4.7.2}$$

Beweis. Sei $|\, x\rangle :=|\, x_1 x_2 \dots x_M\rangle$ ein reeller M-dimensionaler Vektor, dann gibt es eine orthogonale Matrix U, die A auf Diagonalform $\mathrm{diag}(a_1, a_2, \dots, a_M)$ transformiert, mit:

$$\bar{A} = UAU^{-1}, \qquad |\, \bar{x}\rangle = U\, |\, x\rangle, \qquad d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \dots d\bar{x}_M = dx_1 dx_2 \dots dx_M\ ,$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_M\, e^{-\frac{1}{2}\langle x|A|x\rangle} &= \frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \dots d\bar{x}_M\, e^{-\frac{1}{2}\langle \bar{x}|UAU^{-1}|\bar{x}\rangle} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \dots d\bar{x}_M\, e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^M a_i \bar{x}_i^2} \\
&= \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\bar{x}_i\, e^{-\frac{1}{2}a_i \bar{x}_i^2} \\
&= \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{(a_i)^{1/2}} = \frac{1}{(\det A)^{1/2}}\ . \qquad \square
\end{aligned}$$

Häufig findet man auch die folgende Schreibweise mit $\mathrm{Sp}(\ln(A))$:

$$\ln(\det A) = \ln \prod_{i=1}^{M} a_i = \sum_{i=1}^{M} \ln a_i = \mathrm{Sp}(\ln\ A) \quad \Rightarrow \tag{4.7.3}$$

$$\det A = e^{\mathrm{Sp}(\ln\ A)}\ . \tag{4.7.4}$$

Damit läßt sich 4.7.2 jetzt schreiben als:

$$\frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_M\, e^{-\frac{1}{2}\langle x|A|x\rangle} = e^{-\frac{1}{2}\mathrm{Sp}(\ln\ A)}\ . \tag{4.7.5}$$

4.7.3 Das Gaußsche Integral für M-dimensionale symmetrische Matrizen mit Linearterm

Sei A eine reelle, symmetrische, positiv definite Matrix der Dimension $M * M$, A habe also keine Null-Eigenwerte, dann gilt:

$$\frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_M \, e^{-(\frac{1}{2}\langle x|A|x\rangle - \langle x|J\rangle)} = e^{\langle J|A^{-1}|J\rangle} \, (\det A)^{-1/2} \,. \tag{4.7.6}$$

Beweis. Wir wählen hier im Exponenten das Verfahren der quadratischen Ergänzung, um wieder zu einem rein qudratischen Ausdruck zu gelangen.

Das Minimum $\mid x_0\rangle$ von $(\frac{1}{2}\langle x \mid A \mid x\rangle - \langle x \mid J\rangle)$ finden wir mit

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\frac{1}{2}\langle x \mid A \mid x\rangle - \langle x \mid J\rangle) = 0 \quad \Rightarrow \quad A \mid x_0\rangle = \mid J\rangle \quad \Rightarrow \quad \mid x_0\rangle = A^{-1} \mid J\rangle \,.$$

Wir gehen von der Variablen $\mid x\rangle$ über zur Variablen $\mid y\rangle := \mid x\rangle - \mid x_0\rangle$, bzw. $\mid x\rangle = \mid y\rangle + \mid x_0\rangle$, dann folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\langle x \mid A \mid x\rangle - \langle x \mid J\rangle &= \frac{1}{2}\langle (y+x_0) \mid A \mid (y+x_0)\rangle - \langle (y+x_0) \mid J\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle y \mid A \mid y\rangle + \langle y \mid A \mid x_0\rangle - \langle y \mid J\rangle - \langle x_0 \mid J\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle y \mid A \mid y\rangle + \langle y \mid J\rangle - \langle y \mid J\rangle - \langle J \mid x_0\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle y \mid A \mid y\rangle - \langle J \mid A^{-1} \mid J\rangle \,.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_M \, e^{-(\frac{1}{2}\langle x|A|x\rangle - \langle x|J\rangle)} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{M/2}} \, e^{\langle J|A^{-1}|J\rangle} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 dy_2 \dots dy_M \, e^{-\frac{1}{2}\langle y|A|y\rangle} \\
&= e^{\langle J|A^{-1}|J\rangle} \, (\det A)^{-1/2} \,. \qquad \square
\end{aligned}$$

4.7.4 Das Gaußsche Integral für M-dimensionale hermitesche Matrizen

Sei A eine komplexe, hermitesche, positiv definite Matrix der Dimension $M * M$, A habe also keine Null-Eigenwerte, dann gilt:

$$\frac{1}{(2\pi)^{M}} \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 dz_1^* \dots dz_M dz_M^* \, e^{-\langle z|A|z\rangle} = (\det A)^{-1} \,. \tag{4.7.7}$$

Beweis. Sei $\mid z\rangle := \mid z_1 z_2 \dots z_M\rangle$ ein komplexer M-dimensionaler Vektor, dann gibt es eine unitäre Matrix U, die A auf Diagonalform $\mathrm{diag}(a_1, a_2, \dots, a_M)$ transformiert, mit:

$$\bar{A} = UAU^{-1}, \qquad \mid \bar{z}\rangle = U \mid z\rangle \ ,$$

$$d\bar{z}_1 d\bar{z}_1^* d\bar{z}_2 d\bar{z}_2^* \dots d\bar{z}_M d\bar{z}_M^* = dz_1 dz_1^* dz_2 dz_2^* \dots dz_M dz_M^* \ .$$

Mit $\mid z\rangle := \mid x\rangle + i \mid y\rangle$, also $z_k = x_k + i\, y_k$ für $k \in \{1 \dots M\}$, folgt für das Volumenelement:

$$dz_k dz_k^* = \left| \frac{\partial(z_k, z_k^*)}{\partial(x, y)} \right| dx\, dy = \begin{vmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{vmatrix} dx\, dy = \mid -2i \mid dx\, dy = 2\, dx\, dy \ . \tag{4.7.8}$$

Die Invarianz dieses Volumenelements kann man folgendermaßen sehen. Wir zerlegen ebenso wie $\mid z\rangle$ auch die Matrix $U := U_x + i\, U_y$ in Real- und Imaginärteil, d.h. U_x und U_y sind reelle Matrizen.

$$\begin{aligned} \mid \bar{z}\rangle := \mid \bar{x}\rangle + i \mid \bar{y}\rangle &= (U_x + i\, U_y)(\mid x\rangle + i \mid y\rangle) \\ &= (U_x \mid x\rangle - U_y \mid y\rangle) + i\,(U_y \mid x\rangle + U_x \mid y\rangle) \ , \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} \mid \bar{x}\rangle \\ \mid \bar{y}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_x & -U_y \\ U_y & U_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mid x\rangle \\ \mid y\rangle \end{pmatrix} := U_R \begin{pmatrix} \mid x\rangle \\ \mid y\rangle \end{pmatrix} ,$$

$$UU^\dagger = \hat{1} \quad \Rightarrow \quad (U_x + i\, U_y)(U_x^\dagger - i\, U_y^\dagger) = 1 \quad \Rightarrow$$

$$U_x U_x^\dagger + U_y U_y^\dagger = \hat{1} \qquad U_y U_x^\dagger - U_x U_y^\dagger = \hat{0} \quad \Rightarrow$$

$$U_R U_R^\dagger = \begin{pmatrix} U_x & -U_y \\ U_y & U_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_x^\dagger & U_y^\dagger \\ -U_y^\dagger & U_x^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_x U_x^\dagger + U_y U_y^\dagger & U_x U_y^\dagger - U_y U_x^\dagger \\ U_y U_x^\dagger - U_x U_y^\dagger & U_y U_y^\dagger + U_x U_x^\dagger \end{pmatrix} = \hat{1} \ .$$

Also ist die Matrix U_R der Dimension $2M * 2M$ reell und orthogonal und läßt das $2M$ dimensionale Volumenelement $dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 \dots dx_M dy_M$ invariant.

$$\frac{1}{(2\pi)^M} \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 dz_1^* \dots dz_M dz_M^*\, e^{-\langle z|A|z\rangle}$$

$$= \frac{1}{(\pi)^M} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 dy_1 \ldots dx_M dy_M \, e^{-\langle z|A|z\rangle}$$

$$= \frac{1}{(\pi)^M} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\bar{x}_1 d\bar{y}_1 \ldots d\bar{x}_M d\bar{y}_M \, e^{-\sum_{i=1}^{M} a_i(\bar{x}_i^2+\bar{y}_i^2)}$$

$$= \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\bar{x}_i d\bar{y}_i \, e^{-a_i\bar{x}_i^2} e^{-a_i\bar{y}_i^2}$$

$$= \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{\pi} (\frac{\pi}{a_i})^{1/2} (\frac{\pi}{a_i})^{1/2}$$

$$= \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{a_i} = (\det A)^{-1} = e^{-Sp(\ln A)} \; . \qquad \square$$

4.7.5 Das Gaußsche Integral für M-dimensionale normale Matrizen

Das Ergebnis 4.7.7 gilt nicht nur für hermitesche Matrizen, sondern auch für normale Matrizen A, wobei dort aber die Eigenwerte a_i beliebige komplexe Zahlen sein können. Normale Matrizen sind Matrizen mit $||A^\dagger \mid x\rangle|| = ||A \mid x\rangle||$ (siehe etwa Hassani (1999), S.117 ff.) . Da die kohärenten Zustände aus Eigenvektoren der nichthermiteschen Vernichtungs-Operatoren aufgebaut sind, werden wir im Zusammenhang mit dem kohärenten Pfadintegral das Ergebnis 4.7.7 für normale Matrizen benötigen.

4.8 Spektrale Zeta-Funktion

Wir haben soeben gesehen, daß wir bei der Berechnung M-dimensionaler Gaußscher Integrale auf die Berechnung von M-dimensionalen Determinanten geführt werden. Im Grenzwert $\lim_{M\to\infty}$ werden aus unseren M-dimensionalen Matrizen $\hat{A}_M$ jetzt unendlich-dimensionale Matrizen, d.h. Operatoren $\hat{A}$ in einem unendlich dimensionalen Hilbert-Raum. Wenn der Grenzwert der Determinanten $\lim_{M\to\infty}(\det \hat{A}_M)$ existiert, so werden wir diesen Grenzwert als die Funktionaldeterminante $\det(\hat{A})$ bezeichnen.

Wenn der Grenzwert $\lim_{M\to\infty}(\det \hat{A}_M)$ aber nicht existiert, wie etwa bei physikalischen Fragestellungen mit einer UV-Divergenz in Modellen der Quantenfeldtheorie, dann kann man versuchen, eine 'regularisierte' Funktionaldeterminante $\det(\hat{A})$ zu definieren, bei welcher auf definierte Weise ein Pol aus der divergenten Determinante herausgenommen wird. Einen mathematisch besonders klaren Weg zur Definition einer regularisierten Funktionaldeterminante stellt die Methode der spektralen Zeta-Funktion dar.

Sei jetzt $\hat{A}$ ein elliptischer Differential-Operator mit den Eigenwerten λ_n, so kann man analog zur Riemannschen Zeta-Funktion eine 'spektrale Zeta-Funktion' $\zeta_{\hat{A}}(s)$ definieren:

$$\zeta_{\hat{A}}(s) := \sum_{n=1} \frac{1}{\lambda_n^s} \ . \tag{4.8.1}$$

Wenn der eliptische Differential-Operator $\hat{A}$ von der Ordnung ω auf einer m-dimensionalen kompakten Mannigfaltigkeit ist, dann kann man zeigen, daß die obige Potenzsumme von $\zeta_{\hat{A}}(s)$ für $\Re(s) > \frac{m}{\omega}$ konvergiert (siehe 6.7.3 oder Schwarz (1993), S.132 ff.). Anschließend kann man diese spektrale Zeta-Funktion analytisch in der komplexen Ebene fortsetzen und dann an den uns interessierenden Punkten s, hier speziell $s = 0$, berechnen.

$$\zeta_{\hat{A}}(s) = \sum_{n=1} \frac{1}{\lambda_n^s} = \sum_{n=1} e^{-s \ln \lambda_n} = \mathrm{Sp}(e^{-s \ln \hat{A}}) \ . \tag{4.8.2}$$

$$\frac{d}{ds}\zeta_{\hat{A}}(s)\bigg|_{s=0} = -\sum_{n=1} \ln \lambda_n \, e^{-s \ln \lambda_n}\bigg|_{s=0} = -\sum_{n=1} \ln \lambda_n = -\ln \prod_{n=1} \lambda_n = -\ln \det(\hat{A}) \ .$$

Damit können wir jetzt eine regularisierte Funktionaldeterminante $\det(\hat{A})$ definieren als:

$$\det(\hat{A}) := \prod_{n=1} \lambda_n = e^{-\zeta'_{\hat{A}}(0)} \ . \tag{4.8.3}$$

Wir werden als Beispiele zunächst die Funktionaldeterminanten für das freie nichtrelativistische Teilchen und für den harmonischen Oszillator mit Hilfe der spektralen Zeta-Funktion berechnen, bevor wir dann später (in 6) das Thema vertiefen.

4.9 Feynman-Propagator und Zustandssumme des freien Teilchens

Wir wollen hier mit Hilfe der Gaußschen Integrale den Feynman-Propagator eines freien nichtrelativistischenTeilchens berechnen. Es ist also $L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2}\,\dot{q}(t)^2$.

$$S(q) = \int_{t_i}^{t_f} dt\, L(\dot{q}(t), q(t)) = \int_{t_i}^{t_f} dt\, \frac{m}{2}\,\dot{q}(t)^2 \ . \tag{4.9.1}$$

Wenn wir das Wirkungsintegral S als Funktional von q differenzieren (siehe etwa M.1.17 und M.1.18), so ergibt sich:

$$\frac{\delta S}{\delta q} = -m\,\frac{d^2 q(t)}{dt^2} \ , \quad \frac{\delta^2 S}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)} = m\,(-\frac{d^2}{dt_1^2})\,\delta(t_1 - t_2) \ , \quad \frac{\delta^3 S}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)\delta q(t_3)} = 0 \ .$$

Wenn die zweite Funktionalableitung lokal ist, verwenden wir auch die Schreibweise:

$$S^{(2)}_{loc}(q) := \int \frac{\delta^2 S}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)}\, dt_2 = -m\, \frac{d^2}{dt_1^2} \; .$$

Der klassische Pfad $q_{cl}(t)$ mit den Randbedingungen $q_{cl}(t_i) = q_i$ und $q_{cl}(t_f) = q_f$ folgt aus:

$$\frac{\delta S}{\delta q} = -m\, \frac{d^2 q(t)}{dt^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad q_{cl}(t) = q_i + \frac{(q_f - q_i)}{(t_f - t_i)}\,(t - t_i) \; . \tag{4.9.2}$$

Damit ergibt sich das klassische Wirkungsintegral zu:

$$S(q_{cl}) = \int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, \frac{m}{2}\, \dot{q}(t)^2 = \frac{m}{2}\, \frac{(q_f - q_i)^2}{(t_f - t_i)} \; . \tag{4.9.3}$$

Weil die dritte Funktionalableitung von $S(q)$ für das freie Teilchen verschwindet ist die semiklassische Näherung 4.11.5 in diesem Fall sogar exakt. Mit $q(t) := q_{cl}(t) + r(t)$ und 4.11.7 gilt also:

$$U(q_f, t_f, q_i, t_i) = e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \cdot N \cdot \int\limits_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} D[r(t)]\, e^{\frac{i}{2\hbar} \int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, r(t)\, S^{(2)}_{loc}(q_{cl})\, r(t)} \tag{4.9.4}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \cdot N \cdot \int\limits_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} D[r(t)]\, e^{\frac{im}{2\hbar} \int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, (\frac{dr(t)}{dt})^2} \; . \tag{4.9.5}$$

Aus der Konstruktion $q(t) := q_{cl}(t) + r(t)$ sehen wir, daß das Pfadintegral über die Wege $r(r)$ den klassischen Weg mit $r(t) = \text{const.} = 0$ nicht mehr enhält (bzw. keine Nullmode mit $\omega = 0$ enthält).

Dieses Pfadintegral ist der Grenzwert der folgenden Gittersumme (siehe 4.4.2, $\epsilon = (t_f - t_i)/M$):

$$U(q_f, t_f, q_i, t_i) := \lim_{M\to\infty} U^M(q_f, t_f, q_i, t_i)$$

$$:= \lim_{M\to\infty} (\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar})^{M/2} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \cdot \int (\prod_{k=1}^{M-1} dr_k)\, e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum\limits_{k=1}^{M} (r_k - r_{k-1})^2} \; .$$

Um das Integral $U^M(q_f, t_f, q_i, t_i)$ für ein festes M-Gitter als Gaußsches Integral lösen zu können symmetrisieren wir die Summe über die Fluktuationen r_k unter Berücksichtigung der Randbedingungen $r_0 = r_M = 0$:

$$\sum_{k=1}^{M} (r_k - r_{k-1})^2 = \sum_{k=1}^{M} (r_k^2 + r_{k-1}^2 - 2 r_k r_{k-1})$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{k=1}^{M} r_k^2 + \sum_{k=0}^{M-1} r_k^2 - \sum_{k=1}^{M} r_k r_{k-1} - \sum_{k=0}^{M-1} r_{k+1} r_k \\
&= \sum_{k=1}^{M-1} 2r_k^2 - \sum_{k=1}^{M-1} r_k r_{k-1} - \sum_{k=1}^{M-1} r_{k+1} r_k \\
&= \sum_{k=1}^{M-1} (2r_k^2 - r_k r_{k-1} - r_{k+1} r_k) \\
&:= \sum_{i,j=1}^{M-1} L_{ij}^{M-1}\, r_i\, r_j \ ,
\end{aligned}
$$

mit der $M-1$ dimensionalen symmetrischen Matrix

$$
L^{M-1} := \begin{pmatrix}
2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\
0 & & & & & & & 0 \\
\vdots & & & & & & & \vdots \\
\vdots & & & & & & & \vdots \\
0 & & & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\
0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\
0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 2
\end{pmatrix} .
$$

Jetzt suchen wir die Determinante von L^{M-1}. Wenn wir die Determinante nach der ersten Zeile entwickeln, erhalten wir die folgende Rekursionsbeziehung:

$$\det(L^{M-1}) = 2\ \det(L^{M-2}) - \det(L^{M-3})$$

mit der Anfangsbedingung $\det(L^1) = 2$ und $\det(L^2) = 3$. Daraus folgt $\det(L^{M-1}) = M$. Mit dem Gaußschen Integral für symmetrische Matrizen 4.7.2 folgt also für den Feynman-Propagator

$$
\begin{aligned}
U^M(q_f, t_f, q_i, t_i) &= \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar}\right)^{\frac{M}{2}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \cdot \int \left(\prod_{k=1}^{M-1} dr_k\right) e^{\frac{m}{i\hbar\epsilon}(-\frac{1}{2}) \sum_{i,j=1}^{M-1} L_{ij}^{M-1} r_i r_j} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar}\right)^{\frac{M}{2}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S(q_{cl})} \cdot (2\pi)^{\frac{M-1}{2}} \cdot \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon}\right)^{-\frac{M-1}{2}} \cdot M^{-\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

$$= (\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f - t_i)})^{\frac{1}{2}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_f-q_i)^2}{(t_f-t_i)}} ,$$

$$U(q_f, t_f, q_i, t_i) := \lim_{M\to\infty} U^M(q_f, t_f, q_i, t_i) = (\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f - t_i)})^{\frac{1}{2}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_f-q_i)^2}{(t_f-t_i)}} . \tag{4.9.6}$$

Mit $\tau = it$ folgt für den euklidischen Feynman-Propagator (4.5.1):

$$U_E(q_f, \tau_f, q_i, \tau_i) = (\frac{m}{2\pi\hbar(\tau_f - \tau_i)})^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_f-q_i)^2}{(\tau_f-\tau_i)}} . \tag{4.9.7}$$

und für die Zustandssumme (4.6.1):

$$Z = \int dq\, U_E(q, \hbar\beta, q, 0) = \int dq\, (\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta})^{\frac{1}{2}} = a\, (\frac{mkT}{2\pi\hbar^2})^{\frac{1}{2}} = \frac{a}{\lambda} , \tag{4.9.8}$$

$$\lambda := \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}} \quad \text{ist die sog. thermische Wellenlänge.} \tag{4.9.9}$$

Erwähnenswert ist hier vielleicht, daß wir, um eine endliche Zustandssumme zu erreichen, das freie Teilchen in einen (eindimensionalen) Kasten der Länge $a := \int dq$ eingesperrt haben. Die Divergenz bei unendlicher Kastenlänge, d.h. bei verschwindender Fouriertransformierter von q, ist ein einfacher Fall einer sogenannten Infrarot-Divergenz.

Als nächstes wollen wir den euklidischen Feynman-Propagator mit der Methode der spektralen Zeta-Funktion berechnen. Wir beginnen mit 4.9.4 und weisen nochmals daraufhin, daß diese Darstellung (semiklassische Näherung) für das freie Teilchen exakt ist.

$$U_E(q_f, \tau_f, q_i, \tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N \cdot \int_{(0,\tau_i)}^{(0,\tau_f)} D[r(\tau)]\, e^{-\frac{1}{2\hbar}\int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau\, r(\tau)\, S^{(2)}_{E,loc}(q_{cl})\, r(\tau)}$$

$$= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N \cdot \int_{(0,\tau_i)}^{(0,\tau_f)} D[r(\tau)]\, e^{-\frac{m}{2\hbar}\int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau\, r(\tau)\, (-\frac{d^2}{d\tau^2})\, r(\tau)} .$$

Um die Methode der spektralen Zeta-Funktion anwenden zu können, müssen wir von den Variablen r und τ zu dimensionslosen Größen r' und τ' übergehen. Dabei setzen wir $\tau_{fi} := \tau_f - \tau_i$.

$$\tau' := \frac{\tau - \tau_i}{\tau_f - \tau_i} = \frac{\tau - \tau_i}{\tau_{fi}} , \quad r'(\tau') := (\frac{m}{\hbar\tau_{fi}})^{\frac{1}{2}}\, r(\tau) \quad \Rightarrow \tag{4.9.10}$$

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})}\cdot N'\cdot \int\limits_{(0,\tau_i'=0)}^{(0,\tau_f'=1)} D[r'(\tau')]\, e^{-\frac{1}{2}\int\limits_0^1 d\tau'\, r'(\tau')\,(-\frac{d^2}{d\tau'^2})\, r'(\tau')}$$

$$= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})}\cdot N'\cdot \int\limits_{(0,\tau_i'=0)}^{(0,\tau_f'=1)} D[r'(\tau')]\, e^{-\frac{1}{2}\langle r'|-\frac{d^2}{d\tau'^2}|r'\rangle}\ . \tag{4.9.11}$$

In Analogie zum diskreten Gaußschen Integral 4.7.2 wird jetzt eine Funktionaldeterminante eines elliptischen Operators $\hat{A}$ definiert als:

$$(\det{}'(\hat{A}))^{-\frac{1}{2}} := \int\limits_{(0,\tau_i'=0)}^{(0,\tau_f'=1)} D[r'(\tau\text{'})]\, e^{-\frac{1}{2}\langle r'|\hat{A}|r'\rangle}\ . \tag{4.9.12}$$

Der Hochstrich ' bei der Determinante bezeichne die Nebenbedingung, daß der klassische Pfad mit $r(t) = \text{const.} = 0$ bei der Berechnung in der Determinante nicht mehr enhalten ist. Mit $\hat{A} := (-\frac{d^2}{d\tau'^2})$ schreibt sich unser euklidisches Pfadintegral dann als:

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})}\cdot N'\cdot\ (\det{}'(-\frac{d^2}{d\tau'^2}))^{-\frac{1}{2}}\ . \tag{4.9.13}$$

Da wir für die möglichen Pfade $r'(\tau')$ und damit auch für den Operator $(-\frac{d^2}{d\tau'^2})$ Dirichlet-Randbedingungen ($r'(0) = r'(1) = 0$) haben, folgen als Eigenfunktionen und Eigenwerte dieses Operators

$$r_n'(\tau') = \sin(\pi n\,\tau'), \quad \text{und} \quad \lambda_n = \pi^2 n^2\ . \tag{4.9.14}$$

Der Ausschluß des klassischen Weges mit $r(t) = \text{const.} = 0$ aus der $\det'$ bedeutet also den Ausschluß der Nullmode mit $n = 0$. Damit ist der Operator $(-\frac{d^2}{d\tau'^2})$ tatsächlich ein elliptischer Operator, auf den die Methode der spektralen Zeta-Funktion angewandt werden kann.

$$\zeta_{\hat{A}}(s) := \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\lambda_n^s} = (\frac{1}{\pi})^{2s}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^{2s}} = (\frac{1}{\pi})^{2s}\,\zeta(2s)\ ,$$

$$\zeta_{\hat{A}}'(s) = \frac{d}{ds}\zeta_{\hat{A}}(s) = 2\,\ln(\frac{1}{\pi})\,(\frac{1}{\pi})^{2s}\,\zeta(2s) + (\frac{1}{\pi})^{2s}\,2\zeta'(2s)\ .$$

Mit $\zeta(0) = -\frac{1}{2}$, (D.10.11, oder Abramowitz u. Stegun (1970), 23.2.11) und $\zeta'(0) = -\frac{1}{2}ln(2\pi)$ (D.11.6, oder Abramowitz u. Stegun (1970), 23.2.13) folgt:

$$\zeta_{\hat{A}}'(0) = -\ln(\frac{1}{\pi}) - \ln(2\pi) = -\ln(2) \quad \Rightarrow$$

$$\det{}'(-\frac{d^2}{d\tau'^2}) = e^{-\zeta_{\hat{A}}'(0)} = 2\ . \tag{4.9.15}$$

Damit erhalten wir für das euklidische Pfadintegral

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N' \cdot (\frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} \, .$$

Dies vergleichen wir mit dem auf direktem Weg erzielten Ergebnis 4.9.7 und erhalten damit die Normierungskonstante N':

$$N' = (\frac{m}{\pi\hbar(\tau_f-\tau_i)})^{\frac{1}{2}} \, , \tag{4.9.16}$$

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} (\frac{m}{2\pi\hbar(\tau_f-\tau_i)})^{\frac{1}{2}} \, . \tag{4.9.17}$$

Der Vollständigkeit halber sei dieses Ergebnis auch noch für den analogen nicht-euklidischen Fall angegeben (siehe 4.9.3 und 4.9.6):

$$N' = (\frac{m}{\pi i\hbar(t_f-t_i)})^{\frac{1}{2}} \, , \tag{4.9.18}$$

$$U(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})} (\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_i)})^{\frac{1}{2}} \, . \tag{4.9.19}$$

4.10 Feynman-Propagator und Zustandssumme des harmonischen Oszillators

Wir wollen hier den Feynman-Propagator des harmonischen Oszillators und seine Zustandssumme berechnen. Natürlich könnte man diese Größen auf herkömmliche quantenmechanische Weise recht einfach erhalten, aber es soll hier an diesem bekannten Modell die Methode der spektralen Zeta-Funktion bei bekanntem Spektrum demonstriert werden.

Das klassische Wirkungsfunktional ist also:

$$S(q) = \int\limits_{t_i}^{t_f} dt \, L(\dot q(t), q(t)) = \int\limits_{t_i}^{t_f} dt \, \frac{m}{2} \, (\dot q(t)^2 - \omega^2 q(t)^2) \, . \tag{4.10.1}$$

Wenn wir das Wirkungsintegral S als Funktional von q differenzieren (siehe etwa M.1.17 und M.1.18), so ergibt sich:

$$\frac{\delta S}{\delta q} = m\,(-\frac{d^2q(t)}{dt^2} - \omega^2 q(t)) \, , \quad \frac{\delta^2 S}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)} = m\,(-\frac{d^2}{dt_1^2} - \omega^2)\,\delta(t_1-t_2) \, ,$$

$$\frac{\delta^3 S}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)\delta q(t_3)} = 0 \, .$$

Da die zweite Funktionalableitung wieder lokal ist, verwenden wir erneut die Schreibweise:

$$S^{(2)}_{loc}(q) := \int \frac{\delta^2 S}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)}\, dt_2 = m\,(-\frac{d^2}{dt_1^2} - \omega^2)\ .$$

Der klassische Pfad $q_{cl}(t)$ mit den Randbedingungen $q_{cl}(t_i) = q_i$ und $q_{cl}(t_f) = q_f$ folgt aus:

$$\frac{\delta S}{\delta q} = m\,(-\frac{d^2 q(t)}{dt^2} - \omega^2) = 0\ . \tag{4.10.2}$$

Wir machen für $q_{cl}(t)$ den üblichen harmonischen Ansatz:

$$q_{cl}(t) := b_1 \cos\omega t\ +\ b_2 \sin\omega t\ . \tag{4.10.3}$$

Wir setzen noch zur Abkürzung $t_{fi} := t_f - t_i$ und können ohne Beschränkung der Allgemeinheit $t_i = 0$ wählen. Damit folgen sofort die Koeffizienten b_1 und b_2:

$$q_i := q_{cl}(t_i) = q_{cl}(0) = b_1\ ,$$
$$q_f := q_{cl}(t_f) = q_{cl}(t_{fi}) = b_1 \cos(\omega t_{fi}) + b_2 \sin(\omega t_{fi})\ ,$$

$$b_1 = q_i\ , \quad b_2 = \frac{q_f - q_i \cos(\omega t_{fi})}{\sin(\omega t_{fi})}\ .$$

Für die Berechnung der Wirkung auf dem klassischen Pfad q_{cl} benötigen wir $\dot q_{cl}(t)^2$ und $\omega^2 q_{cl}(t)^2$:

$$\begin{aligned}\dot q_{cl}(t)^2 &= (-b_1\omega \sin(\omega t) + b_2\omega\cos(\omega t))^2\\ &= \omega^2(b_1^2\sin^2(\omega t) - 2b_1 b_2 \sin(\omega t)\ \cos(\omega t) + b_2^2\cos^2(\omega t))\ ,\end{aligned}$$

$$\omega^2 q_{cl}(t)^2 = \omega^2(b_1^2\cos^2(\omega t) + 2b_1 b_2 \sin(\omega t)\ \cos(\omega t) + b_2^2 \sin^2(\omega t))\ .$$

Damit ergibt sich für die Wirkung auf dem klassischen Pfad q_{cl}:

$$\begin{aligned}S_{cl}(q_i, q_f) := S(q_{cl}) &= \int_0^{t_{fi}} dt\, \frac{m}{2}\,[\dot q(t)^2 - \omega^2 q(t)^2]\\ &= \int_0^{t_{fi}} dt\, \frac{m\omega^2}{2}\,[(b_1^2 - b_2^2)(\sin^2(\omega t) - \cos^2(\omega t)) - 4b_1 b_2 \sin(\omega t)\cos(\omega t)]\\ &= \frac{m\omega^2}{2}\int_0^{t_{fi}} dt\,[(b_1^2 - b_2^2)(2\sin^2(\omega t) - 1) - 4b_1 b_2\sin(\omega t)\cos(\omega t)]\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{m\omega^2}{2} \int\limits_0^{t_{fi}} dt\, [(b_1^2 - b_2^2)(2\sin^2(\omega t) - 1) - 4b_1 b_2 \sin(\omega t)\cos(\omega t)] \\
&= \frac{m\omega^2}{2} [(b_1^2 - b_2^2)(2(\frac{1}{2}t_{fi} - \frac{1}{4\omega}\sin(2\omega t_{fi})) - t_{fi}) - 4b_1 b_2 (\frac{1}{2\omega}\sin^2(\omega t_{fi}))] \\
&= \frac{m\omega^2}{2} [(b_1^2 - b_2^2)(2(-\frac{1}{4\omega} 2\sin(\omega t_{fi})\cos(\omega t_{fi}))) - 4b_1 b_2 (\frac{1}{2\omega}\sin^2(\omega t_{fi}))] \\
&= \frac{-m\omega}{2} [(b_1^2 - b_2^2)(\sin(\omega t_{fi})\cos(\omega t_{fi})) + 2b_1 b_2 \sin^2(\omega t_{fi})] \; .
\end{aligned}
$$

Hier haben wir $\int \sin^2 \omega t = \frac{1}{2}t - \frac{1}{4\omega}\sin(2\omega t)$ und $\int \sin(\omega t)\, \cos(\omega t) = \frac{1}{2\omega}\sin^2(\omega t)$ verwendet. Jetzt berechnen wir noch $(b_1^2 - b_2^2)$ und $(b_1 b_2)$ als Funktion von q_i und q_f:

$$
\begin{aligned}
(b_1^2 - b_2^2) &= \frac{q_i^2 \sin^2(\omega t_{fi}) - q_f^2 - q_i^2 \cos^2(\omega t_{fi}) + 2q_i q_f \cos(\omega t_{fi})}{\sin^2(\omega t_{fi})} \\
&= \frac{2q_i^2 \sin^2(\omega t_{fi}) - (q_i^2 + q_f^2) + 2q_i q_f \cos(\omega t_{fi})}{\sin^2(\omega t_{fi})} \; ,
\end{aligned}
$$

$$
b_1 b_2 = \frac{q_i q_f - q_i^2 \cos(\omega t_{fi})}{\sin(\omega t_{fi})} \; .
$$

Dies setzen wir in den obigen Ausdruck für die Wirkung ein und erhalten:

$$
\begin{aligned}
S_{cl}(q_i, q_f) &:= S(q_{cl}) \\
&= \frac{-m\omega}{2} [\frac{2q_i^2 \sin^2(\omega t_{fi})\cos(\omega t_{fi}) - (q_i^2 + q_f^2)\cos(\omega t_{fi}) + 2q_i q_f \cos^2(\omega t_{fi})}{\sin(\omega t_{fi})} \\
&\quad + \frac{2q_i q_f \sin^2(\omega t_{fi}) - 2q_i^2 \sin^2(\omega t_{fi})\cos(\omega t_{fi})}{\sin(\omega t_{fi})}] \\
&= \frac{m\omega}{2\sin(\omega t_{fi})} [(q_i^2 + q_f^2)\cos(\omega t_{fi}) - 2q_i q_f] \; .
\end{aligned}
\tag{4.10.4}
$$

An diesem Ausdruck für die klassische Wirkung $S_{cl}(q_i, q_f)$ können wir sehen, daß die obigen Überlegungen zunächst nur für kleine Zeitintervalle $t_{fi} = t_f - t_i < \frac{\pi}{\omega}$ gültig sein können. Die Singularitäten von $S_{cl}(q_i, q_f)$, d.h. die Punkte $t_{fi} = t_f - t_i = \frac{m\pi}{\omega}$ mit $m \in \mathbb{N}$, heißen Kaustiken und bedürfen bei Interesse an einer langfristigeren Zeitentwicklung einer gesonderten Analyse (siehe nächstes Kapitel, oder z.B. Schulman (2005), Kap. 15 - 16).

Wir können wieder mit $\tau = it$ zur euklidischen Wirkung übergehen:

$$
\sin(\omega t_{fi}) = \sin(-i\omega\tau_{fi}) = -i\, \sinh(\omega\tau_{fi}) \; ,
$$

$$\cos(\omega t_{fi}) = \cos(-i\omega\tau_{fi}) = \cosh(\omega\tau_{fi}) \ .$$

Damit geht $\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})$ über in $-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})$ mit:

$$S_{E,cl}(q_i, q_f) := S_E(q_{cl}) = \frac{m\omega}{2\sinh(\omega t_{fi})}\left[(q_i^2 + q_f^2)\cosh(\omega t_{fi}) - 2q_i q_f\right] . \qquad (4.10.5)$$

Weil die dritte Funktionalableitung von $S(q)$ für den harmonischen Oszillator ebenso wie für das freie Teilchen verschwindet, ist die semiklassische Näherung 4.11.5 in diesem Fall sogar exakt. Mit $q(t) := q_{cl}(t) + r(t)$ und 4.11.7 gilt also:

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N \cdot \int\limits_{(0,\tau_i)}^{(0,\tau_f)} D[r(\tau)]\, e^{-\frac{1}{2\hbar}\int\limits_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau\, r(\tau)\, S^{(2)}_{E,loc}(q_{cl})\, r(\tau)}$$

$$= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N \cdot \int\limits_{(0,\tau_i)}^{(0,\tau_f)} D[r(\tau)]\, e^{-\frac{m}{2\hbar}\int\limits_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau\, r(\tau)\,(-\frac{d^2}{d\tau^2}+\omega^2)\, r(\tau)} \ . \qquad (4.10.6)$$

Aus der Konstruktion $q(t) := q_{cl}(t) + r(t)$ sehen wir, daß das Pfadintegral über die Wege $r(r)$ den klassischen Weg mit $r(t) = \text{const.} = 0$ nicht mehr enhält (bzw. keine Nullmode mit $\omega = 0$ enthält).

Um die Methode der spektralen Zeta-Funktion anwenden zu können, müssen wir von den Variablen r und τ zu dimensionslosen Größen r' und τ' übergehen:

$$\tau' := \frac{\tau - \tau_i}{\tau_f - \tau_i} = \frac{\tau - \tau_i}{\tau_{fi}} \ , \quad r'(\tau') := (\frac{m}{\hbar\tau_{fi}})^{\frac{1}{2}}\, r(\tau) \quad \Rightarrow \qquad (4.10.7)$$

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N' \cdot \int\limits_{(0,\tau_i'=0)}^{(0,\tau_f'=1)} D[r'(\tau')]\, e^{-\frac{1}{2}\int\limits_0^1 d\tau'\, r'(\tau')\,(-\frac{d^2}{d\tau'^2}+\omega^2\tau_{fi}^2)\, r'(\tau')}$$

$$= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N' \cdot \int\limits_{(0,\tau_i'=0)}^{(0,\tau_f'=1)} D[r'(\tau')]\, e^{-\frac{1}{2}\langle r'|-\frac{d^2}{d\tau'^2}+\omega^2\tau_{fi}^2|r'\rangle} \ . \qquad (4.10.8)$$

Mit $\hat{A} := (-\frac{d^2}{d\tau'^2} + \omega^2\tau_{fi}^2)$ und 4.9.12 und 4.9.16 schreibt sich unser euklidisches Pfadintegral als:

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot N' \cdot (\det{}'(\hat{A}))^{-\frac{1}{2}}$$

$$= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot (\frac{m}{\pi\hbar(\tau_f - \tau_i)})^{\frac{1}{2}} \cdot (\det{}'(-\frac{d^2}{d\tau'^2} + \omega^2\tau_{fi}^2))^{-\frac{1}{2}} \ . \qquad (4.10.9)$$

Der Hochstrich ' bei der Determinante bezeichne die Nebenbedingung, daß der klassische Pfad mit $r'(\tau') = \text{const.} = 0$ bei der Berechnung in der Determinante nicht mehr enhalten ist. Da wir für die möglichen Pfade $r'(\tau')$ und damit auch für den Operator $(-\frac{d^2}{d\tau'^2} + \omega^2\tau_{fi}^2)$ Dirichlet-Randbedingungen $(r'(0) = r'(1) = 0)$ haben, folgen als Eigenfunktionen und Eigenwerte dieses Operators

$$r'_n(\tau') = \sin(\pi n\,\tau'), \quad \text{und} \quad \lambda_n = \pi^2 n^2 + \omega^2\tau_{fi}^2 \,. \tag{4.10.10}$$

Damit ist der Operator $(-\frac{d^2}{d\tau'^2} + \omega^2\tau_{fi}^2)$ tatsächlich ein elliptischer Operator (außerhalb der oben erwähnten Kaustiken), auf den die Methode der spektralen Zeta-Funktion angewandt werden kann.

$$\zeta_{\hat{A}}(s) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n^s} = (\frac{1}{\pi})^s \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n^2 + \frac{\omega^2\tau_{fi}^2}{\pi^2})^s} = (\frac{1}{\pi})^s\, \zeta_E(s, q^2) \,, \tag{4.10.11}$$

mit der speziellen Epsteinschen Zeta-Funktion

$$\zeta_E(s, q^2) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n^2 + q^2)^s} \,, \quad \text{und} \quad q := \frac{\omega\tau_{fi}}{\pi} \,. \tag{4.10.12}$$

Diese Epsteinsche Zeta-Funktion ist zunächst einmal nur für $\Re(s) > \frac{1}{2}$ definiert, kann aber ebenso wie die Riemannsche Zeta-Funktion analytisch fortgesetzt werden. Wir verwenden hier die folgende Darstellung dieser Epsteinsche Zeta-Funktion (G.0.6, siehe auch Elizalde (1995) 1.38 und 4.13), die insb. bei $s = 0$ analytisch ist und uns daher die gewünschte Berechnung von $\zeta'_{\hat{A}}(0)$ erlaubt:

$$\zeta_E(s, q^2) = -\frac{q^{-2s}}{2} + \frac{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(s - \frac{1}{2})}{2\Gamma(s)}\, q^{-2s+1} + \frac{2\pi^s q^{-s+\frac{1}{2}}}{\Gamma(s)} \sum_{n=1}^{\infty} n^{s-\frac{1}{2}}\, K_{s-\frac{1}{2}}(2\pi n q) \,, \tag{4.10.13}$$

mit der modifizierten Bessel-Funktion der dritten Art K_ν. Da $\zeta_E(s, q^2)$ bei $s = 0$ analytisch ist, folgt mit $\lim_{s\to 0} \Gamma(s) = \infty$:

$$\zeta_E(0, q^2) = -\frac{1}{2} \,. \tag{4.10.14}$$

Als nächstes berechnen wir nun $\zeta'_{\hat{A}}(s)$ und daraus dann $\zeta'_{\hat{A}}(0)$.

$$\zeta'_{\hat{A}}(s) = -\ln(\pi)\, \pi^{-s}\, \zeta_E(s, q^2) + \pi^{-s}\, \zeta'_E(s, q^2) \,,$$

$$\zeta'_E(s, q^2) = \ln(q)\, q^{-2s} + \frac{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma'(s - \frac{1}{2})}{2\Gamma(s)}\, q^{-2s+1} + \frac{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(s - \frac{1}{2})}{2}\, (\frac{1}{\Gamma(s)})'\, q^{-2s+1}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \frac{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(s-\frac{1}{2})}{2\Gamma(s)}\,(-2\ln(q))\,q^{-2s+1} \\
&+ [\frac{2\,\ln(\pi)\,\pi^s\,q^{-s+\frac{1}{2}}}{\Gamma(s)} + \frac{2\,\pi^s(-\ln(q))\,q^{-s+\frac{1}{2}}}{\Gamma(s)} + 2\,\pi^s\,q^{-s+\frac{1}{2}}\,(\frac{1}{\Gamma(s)})'] \\
&\cdot \sum_{n=1}^{\infty} n^{s-\frac{1}{2}}\,K_{s-\frac{1}{2}}(2\pi n q) \\
&+ \frac{2\pi^s q^{-s+\frac{1}{2}}}{\Gamma(s)}\,\frac{d}{ds}[\sum_{n=1}^{\infty} n^{s-\frac{1}{2}}\,K_{s-\frac{1}{2}}(2\pi n q)]\ .
\end{aligned}
$$

Mit $\Gamma(0) = \infty$ und $(\frac{1}{\Gamma(s)})'\Big|_{s=0} = 1$ (C.11.1) folgt:

$$
\zeta'_{\hat{A}}(0) = \ln(\pi) + \ln(q) + \frac{1}{2}\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(-\frac{1}{2})\,q + 2\,q^{\frac{1}{2}}\,\sum_{n=1}^{\infty} n^{-\frac{1}{2}}\,K_{-\frac{1}{2}}(2\pi n q)\ .
$$

Für die modifizierte Bessel-Funktion der dritten Art finden wir in Abramowitz u. Stegun (1970) (10.2.16 und 10.2.17):

$$
K_{-\frac{1}{2}}(z) = K_{\frac{1}{2}}(z) = (\frac{\pi}{2z})^{\frac{1}{2}} e^{-z} \qquad \Rightarrow
$$

$$
\begin{aligned}
\zeta'_{\hat{A}}(0) &= \ln(\pi) + \ln(q) + \frac{1}{2}\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(-\frac{1}{2})\,q + 2\,q^{\frac{1}{2}}\,\sum_{n=1}^{\infty} n^{-\frac{1}{2}}\,(\frac{\pi}{2\cdot 2\pi n q})^{\frac{1}{2}}\,e^{-2\pi n q} \\
&= \ln(\pi) + \ln(q) + \frac{1}{2}\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(-\frac{1}{2})\,q + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-2\pi n q}}{n}\ .
\end{aligned}
$$

Die Summe im letzten Term können wir auf den sinh zurückführen:

$$
\begin{aligned}
\ln(\sinh(z)) &= \ln(\frac{1}{2}(e^z - e^{-z})) = -\ln(2) + \ln((e^z - e^{-z})) \\
&= -\ln(2) + z + \ln(1 - e^{-2z}) \\
&= -\ln(2) + z + (-e^{-2z} - \frac{1}{2}e^{-4z} - \frac{1}{3}e^{-6z} - \ldots) \\
&= -\ln(2) + z - \sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-2nz}}{n}\ ,
\end{aligned}
$$

$$
\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-2\pi n q}}{n} = -\ln(2) + \pi q - \ln(\sinh(\pi q))\ . \tag{4.10.15}
$$

Weiter ist $\Gamma(\frac{1}{2}) = (-\frac{1}{2})\Gamma(-\frac{1}{2})$, also $\Gamma(-\frac{1}{2}) = -2\,\Gamma(\frac{1}{2}) = -2\pi^{\frac{1}{2}}$ (C.4.4), und damit folgt jetzt für $\zeta'_{\hat{A}}(0)$:

$$\begin{aligned}\zeta'_{\hat{A}}(0) &= \ln(\pi) + \ln(q) - \pi q - \ln(2) + \pi q - \ln(\sinh(\pi q)) \\ &= -\ln(2\,\frac{\sinh(\pi q)}{\pi q})\ . \end{aligned} \tag{4.10.16}$$

Damit folgt jetzt schließlich für unser euklidisches Pfadintegral des Feynman-Propagators des harmonischen Oszillators

$$\begin{aligned} U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) &= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})}\cdot N'\cdot(\det{}'(\hat{A}))^{-\frac{1}{2}} = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})}\cdot N'\cdot e^{\frac{1}{2}\zeta'_{\hat{A}}(0)} \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})}\cdot(\frac{m}{\pi\hbar(\tau_f-\tau_i)})^{\frac{1}{2}}\cdot(\frac{\omega(\tau_f-\tau_i)}{2\sinh(\omega(\tau_f-\tau_i))})^{\frac{1}{2}} \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})}\cdot(\frac{m\,\omega}{2\pi\hbar\,\sinh(\omega(\tau_f-\tau_i))})^{\frac{1}{2}}\ . \end{aligned} \tag{4.10.17}$$

Zum Schluß wollen wir noch die Zustandssumme des harmonischen Oszillators berechnen. Mit 4.6.1 und 4.10.5 und $q := q_i = q_f$ und $\tau_{fi} = \tau_f - \tau_i = \hbar\beta$ folgt:

$$\begin{aligned} Z &= \int dq\,U_E(q,\hbar\beta,q,0) = (\frac{m\omega}{2\pi\hbar\,\sinh(\hbar\beta\omega)})^{\frac{1}{2}}\int dq\,e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \\ &= (\frac{m\omega}{2\pi\hbar\,\sinh(\hbar\beta\omega)})^{\frac{1}{2}}\int dq\,e^{-\frac{1}{\hbar}\frac{2m\omega q^2}{2\sinh(\hbar\beta\omega)}[\cosh(\hbar\beta\omega)-1]} \\ &= (\frac{m\omega}{2\pi\hbar\,\sinh(\hbar\beta\omega)})^{\frac{1}{2}}(\frac{\pi\hbar\,\sinh(\hbar\beta\omega)}{2m\omega(\cosh(\hbar\beta\omega)-1)})^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2}\cdot(\frac{1}{\cosh(\hbar\beta\omega)-1})^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\,\sinh(\frac{\hbar\beta\omega}{2})} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\beta\omega}{2}}-e^{-\frac{\hbar\beta\omega}{2}}}\ . \end{aligned} \tag{4.10.18}$$

Damit haben wir das bekannte Ergebnis für die Zustandssumme der harmonischen Oszillators erhalten. Eine andere Berechnungsweise dieser Zustandssumme mit Hilfe der spektralen Zeta-Funktion und der Wärmekern-Entwicklung wird in 6.8 vorgestellt.

4.11 Semiklassische Näherung des Pfadintegrals

Wir betrachten die semiklassische Näherung, d.h. die Näherung $\hbar \to 0$, am Feynmanschen Pfadintegral in der Lagrange-Form 4.4.3 für $L(q,\dot{q}) = \frac{m}{2}\dot{q}(t)^2 - V(q(t))$. Der Einfachheit halber wählen wir das Potential hier also nicht explizit zeitabhängig.

$$U(q_f,t_f,q_i,t_i) = N\cdot\int_{(q_i,t_i)}^{(q_f,t_f)} D[q(t)]\,e^{\frac{i}{\hbar}S(q)}\ . \tag{4.11.1}$$

Diese Überlegungen lassen sich natürlich ebenso auf das euklidische Pfadintegral 4.5.1 und das Pfadintegral der Zustandssumme 4.6.3 übertragen.

Für $\hbar \to 0$ stellt $e^{\frac{i}{\hbar}S(q)}$ einen schnell oszillierenden Term dar und in der Summe werden sich die meisten dieser schnell oszillierenden Terme gegenseitig auslöschen. Den Hauptbeitrag des Pfadintegrals werden also Terme liefern, für die sich die Wirkung $S(q)$ nur wenig verändert, d.h. für die $S(q)$ extremal wird. Dies ist gerade die Aussage des Satzes der *Stationären Phase Methode* (siehe I.4). Die Wirkung $S(q)$ wird extremal gerade entlang des klassischen Pfades und deshalb entwickeln wir $S(q)$ um den klassischen Pfad $q_{cl}(t)$ herum, der ja gegeben ist durch:

$$\left.\frac{\delta S}{\delta q}\right|_{q_{cl}(t)} = 0\,. \tag{4.11.2}$$

Mit $q(t) := q_{cl}(t) + r(t)$ folgt

$$S(q) = S(q_{cl}) + \frac{1}{2}\int dt_1\, dt_2\, \left.\frac{\delta^2 S(q)}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)}\right|_{q_{cl}} r(t_1)\, r(t_2)\,. \tag{4.11.3}$$

Wenn die Lagrange-Funktion lokal in q ist, wie bei der von uns vornehmlich verwendeten Funktion $L(q,\dot q) = \frac{m}{2}\dot q(t)^2 - V(q(t))$, dann ist mit M.1.18 auch $S^{(2)}(q)$ lokal, also:

$$\left.\frac{\delta^2 S(q)}{\delta q(t_1)\delta q(t_2)}\right|_{q_{cl}} = S^{(2)}_{loc}(q_{cl})\,\delta(t_1 - t_2) \quad \Rightarrow \tag{4.11.4}$$

$$S(q) = S(q_{cl}) + \frac{1}{2}\int dt\, r(t)\, S^{(2)}_{loc}(q_{cl})\, r(t) \quad \Rightarrow$$

$$U(q_f,t_f,q_i,t_i) = N \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})} \cdot \int\limits_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} D[r(t)]\, e^{\frac{i}{2\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, r(t)\, S^{(2)}_{loc}(q_{cl})\, r(t)}\,. \tag{4.11.5}$$

Für unsere obige Lagrange-Funktion folgt mit M.1.20:

$$U(q_f,t_f,q_i,t_i) = N \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})} \cdot \int\limits_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} D[r(t)]\, e^{\frac{i}{2\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, [m\,(\frac{dr(t)}{dt})^2 - \left.\frac{d^2V(q)}{dq^2}\right|_{q_{cl}(t)} r(t)^2]}$$

$$= N \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})} \cdot \int\limits_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} D[r(t)]\, e^{\frac{im}{2\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, r(t)\, [-\frac{d^2}{dt^2} - \frac{1}{m}V''(q_{cl}(t))]\, r(t)}\,. \tag{4.11.6}$$

Wie oben in 4.5.1 folgt mit $\tau := it$, $\tau \in \mathbb{R}$ für das entsprechende euklidische Pfadintegral:

$$U_E(q_f,\tau_f,q_i,\tau_i) = N \cdot e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot \int\limits_{(0,\tau_i)}^{(0,\tau_f)} D[r(\tau)]\, e^{-\frac{1}{2\hbar}\int\limits_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau\, [m\,(\frac{dr(\tau)}{d\tau})^2 + \left.\frac{d^2V(q)}{dq^2}\right|_{q_{cl}(\tau)} r(\tau)^2]}$$

$$= N \cdot e^{-\frac{1}{\hbar}S_E(q_{cl})} \cdot \int\limits_{(0,\tau_i)}^{(0,\tau_f)} D[r(\tau)]\, e^{-\frac{m}{2\hbar}\int\limits_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau\, r(\tau)\,[-\frac{d^2}{d\tau^2}+\frac{1}{m}V''(q_{cl}(\tau))]\, r(\tau)} \, . \tag{4.11.7}$$

Wir erhalten also für den Feynman-Propagator $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ von 4.11.5 den Phasenfaktor der klassischen Wirkung und ein Pfadintegral über die Fluktuationen des Weges $r(t)$. Der Hochstrich ' bei der Determinante bezeichne wie oben wieder die Nebenbedingung, daß der klassische Pfad mit $r(t) = \text{const.} = 0$ (bzw. die Nullmode des Operators $S^{(2)}_{loc}(q_{cl})$) bei der Berechnung der Determinante nicht mehr enhalten ist. Den Normierungsfaktor N' übernehmen wir aus 4.9.18.

$$U(q_f, t_f, q_i, t_i) = N \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})} \cdot \int\limits_{(0,t_i)}^{(0,t_f)} D[r(t)]\, e^{\frac{im}{2\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f} dt\, r(t)\, S^{(2)}_{loc}(q_{cl})\, r(t)}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})} \cdot N' \cdot (\det{}'(S^{(2)}_{loc}(q_{cl}))^{-\frac{1}{2}}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})} \cdot (\frac{m}{\pi i\hbar(t_f - t_i)})^{\frac{1}{2}} (\det{}'[-\frac{d^2}{dt^2} - \frac{1}{m}V''(q_{cl}(t))])^{-\frac{1}{2}} \, . \tag{4.11.8}$$

Unter der Determinante ist hier das unendliche Produkt aller Eigenvektoren des folgenden Sturm-Liouville-Systems mit Dirichlet-Randbedingungen zu verstehen:

$$(\frac{d^2}{dt^2} + W(t) + \lambda)\, r_{W+\lambda}(t) = 0\, , \quad \text{mit} \;\; W(t) := \frac{1}{m}V''(q_{cl}(t)) \tag{4.11.9}$$

$$\text{und} \;\; r_{W+\lambda}(t_i) = r_{W+\lambda}(t_f) = 0\, .$$

Es ist ein bemerkenswertes und nicht triviales Ergebnis der Sturm-Liouville-Theorie, daß dieses unendliche Produkt von Eigenwerten gleich dem Funktionswert $f_W(t_f)$ ist, wenn $f_W(t)$ die Lösung des folgenden Anfangswert-Problems ist:

$$(\frac{d^2}{dt^2} + W(t))\, f_W(t) = 0\, , \quad \text{mit} \;\; f_W(t_i) = 0 \;\; \text{und} \;\; \frac{df_W}{dt}(t_i) = 1\, . \tag{4.11.10}$$

Vor dem Beweis soll zunächst an einige Resultate der Sturm-Liouville-Theorie erinnert werden. Wir folgen dabei Hassani (1999), Kapitel 18.

Definition 4.11.1 *Der Differential-Operator $L_t := \frac{d^2}{dt^2} + W(t)$ auf dem Raum der 2-mal stetig differenzierbaren Funktionen $C^2(\mathbb{R})$ mit den separierten Randbedingungen $\alpha_1 r(t_i) + \beta_1 \frac{dr}{dt}(t_i) = 0$ und $\alpha_2 r(t_f) + \beta_2 \frac{dr}{dt}(t_i) = 0$, die nicht identisch verschwinden mögen (d.h. nicht $[\alpha_1 = \beta_1 = 0$ oder $\alpha_2 = \beta_2 = 0])$ heißt reguläres Sturm-Liouville-System.*

Satz 4.11.2 *Ein reguläres Sturm-Liouville-System hat eine abzählbar unendliche Anzahl von rellen Eigenwerten λ_n in aufsteigender Größe $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots$ mit einzigem Häufungspunkt $+\infty$. Die Eigenfunktionen $r_n(t)$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem und besitzen genau n Nullstellen im Definitionsintervall $[t_i, t_f]$.*

Beweis. siehe Hassani (1999), S. 507 ff., oder ausführlicher Hellwig (1964), S. 111 ff. □

Satz 4.11.3 *Für die Eigenwerte λ_n und Eigenfunktionen $r_n(t)$ für großes n ergibt sich das folgende asymptotische Verhalten:*
$\sqrt{\lambda_n} = n\frac{\pi}{t_f - t_i} + O(\frac{1}{n})$ *und* $r_n(t) = \sqrt{\frac{2}{t_f - t_i}} \cos\frac{n\pi(t-t_i)}{t_f - t_i} + O(\frac{1}{n})$.

Beweis. siehe Hassani (1999), Satz 18.3.1. □

Nun zur Berechnung der Determinante aus 4.11.8. Unter den zahlreichen Beweisen in der Literatur erscheint besonders schön der funktionstheoretische Beweis von Sidney Coleman (Coleman (1988), The Uses of Instantons, Appendix 1, S. 340, siehe auch Schulman (2005), S. 95-96):

Satz 4.11.4 (Coleman) *Seien zwei Sturm-Liouville-Systeme 4.11.9 mit $W^{(1)}(t)$ und $W^{(2)}(t)$ gegeben, sowie die beiden entsprechenden Anfangswert-Probleme 4.11.10. Dann gilt:*

$$\frac{\det(\frac{d^2}{dt^2} + W^{(1)}(t) + \lambda)}{\det(\frac{d^2}{dt^2} + W^{(2)}(t) + \lambda)} = \frac{f_{W^{(1)}+\lambda}(t_f)}{f_{W^{(2)}+\lambda}(t_f)} . \tag{4.11.11}$$

Beweis. Jede Lösung $f_{W+\lambda}(t)$ des Anfangswert-Problems 4.11.10, die bei t_f eine Nullstelle hat, ist auch eine Lösung des Sturm-Liouville-Systems 4.11.9 zum Eigenwert λ. Sei umgekehrt $r_{W+\lambda}(t)$ eine Lösung des Sturm-Liouville-Systems mit beliebiger Anfangssteigungsteigung $b := \frac{dr_{W+\lambda}}{dt}(t_i) \neq 0$, dann ist nach Voraussetzung $r_{W+\lambda}(t_i) = r_{W+\lambda}(t_f) = 0$, und es gilt auch $\tilde{r}_{W+\lambda}(t) := \frac{1}{b} r_{W+\lambda}(t)$ mit $\frac{d\tilde{r}_{W+\lambda}}{dt}(t_i) = 1$ und $\tilde{r}_{W+\lambda}(t_i) = \tilde{r}_{W+\lambda}(t_f) = 0$. Also sind die Lösungen $\tilde{r}_{W+\lambda}(t)$ des Sturm-Liouville-Systems 4.11.9 auch Lösungen des Anfangswert-Problems 4.11.10 zum Eigenwert λ. Seien jetzt

$$g_L(\lambda) := \frac{\det(\frac{d^2}{dt^2} + W^{(1)}(t) + \lambda)}{\det(\frac{d^2}{dt^2} + W^{(2)}(t) + \lambda)} \quad \text{und}$$

$$g_R(\lambda) := \frac{f_{W^{(1)}+\lambda}(t_f)}{f_{W^{(2)}+\lambda}(t_f)} .$$

Dann kann man $g_L(\lambda)$ und $g_R(\lambda)$ als komplexe meromorphe Funktionen betrachten. Die beiden Funktionen $g_L(\lambda)$ und $g_R(\lambda)$ haben an den Stellen der Eigenwerte $\lambda_n^{(1)}$ des Sturm-Liouville-Systems mit $W^{(1)}$ gemeinsam einfache Nullstellen und an den Stellen der Eigenwerte $\lambda_n^{(2)}$ des Sturm-Liouville-Systems $W^{(2)}$ gemeinsam einfache Pole. Wegen des oben zitierten asymptotischen Verhaltens der Eigenwerte λ_n und Eigenfunktionen $r_n(t)$ des Sturm-Liouville-Systems für große n, welches von $W^{(1)}$ und $W^{(2)}$ unabhängig ist, gilt $\lim_{|\lambda|\to\infty} g_L(\lambda) = \lim_{|\lambda|\to\infty} g_R(\lambda) = 1$ (für $\lambda \notin \mathbb{R}_+$, um die Pole zu vermeiden). Also folgt $g_L(\lambda) = g_R(\lambda)$. □

Diesen Beweis kann man unschwer auf ein n-dimensionales Sturm-Liouville-System verallgemeinern, wenn sich dieses diagonalisieren läßt. Da $S_{loc}^{(2)}(q_{cl})$ und damit auch

$\frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_l}(q)\Big|_{q_{cl}(t)}$ symmetrische Matrizen sind, ist das folgende Sturm-Liouville-System mit Dirichlet-Randbedingungen diagonalisierbar:

$$\Big(\frac{d^2}{dt^2}\hat{1} + \hat{W}(t) + \lambda\hat{1}\Big)\,\vec{r}_{\hat{W}+\lambda\hat{1}}(t) = 0\,, \quad \text{mit} \;\; \hat{W}_{kl}(t) := \frac{1}{m}\,\frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_l}(q)\Big|_{q_{cl}(t)} \tag{4.11.12}$$

$$\text{und} \;\; \vec{r}_{\hat{W}+\lambda\hat{1}}(t_i) = \vec{r}_{\hat{W}+\lambda\hat{1}}(t_f) = 0\,.$$

Ebenso ist das entsprechende Anfangswert-Problem diagonalisierbar:

$$\Big(\frac{d^2}{dt^2}\hat{1} + \hat{W}(t)\Big)\,\vec{f}_{\hat{W}}(t) = 0\,, \quad \text{mit} \;\; \vec{f}_{\hat{W}}(t_i) = 0 \;\; \text{und} \;\; \frac{d\vec{f}_{\hat{W}}}{dt}(t_i) = \vec{1}\,. \tag{4.11.13}$$

Satz 4.11.5 *Seien zwei n-dimensionale Sturm-Liouville-Systeme 4.11.12 mit symmetrischen Matrizen $\hat{W}^{(1)}(t)$ und $\hat{W}^{(2)}(t)$ gegeben, sowie die beiden entsprechenden Anfangswert-Probleme 4.11.13 mit n linear unabhängen Lösungen $\{\vec{f^i}_{\hat{W}^{(1)}+\lambda\hat{1}}\,|\,i = 1\ldots n\}$. Dann gilt:*

$$\frac{\det(\frac{d^2}{dt^2}\hat{1} + \hat{W}^{(1)}(t) + \lambda\hat{1})}{\det(\frac{d^2}{dt^2}\hat{1} + \hat{W}^{(2)}(t) + \lambda\hat{1})} = \frac{\det(\vec{f^i}_{\hat{W}^{(1)}+\lambda\hat{1}}(t_f))}{\det(\vec{f^i}_{\hat{W}^{(2)}+\lambda\hat{1}}(t_f))}\,. \tag{4.11.14}$$

Beweis. Zunächst sieht man, daß 4.11.14 als Funktion von Determinanten unabhängig von einer Koordinatentransformation ist, also können die symmetrischen Matrizen $\hat{W}^{(1)}(t)$ und $\hat{W}^{(2)}(t)$ als diagonal angenommen werden. Damit entkoppeln die Differentialgleichungen des Sturm-Liouville-System und des Anfangswert-Problem und es gilt

$$g_L(\lambda) := \frac{\det(\frac{d^2}{dt^2}\hat{1} + \hat{W}^{(1)}(t) + \lambda\hat{1})}{\det(\frac{d^2}{dt^2}\hat{1} + \hat{W}^{(2)}(t) + \lambda\hat{1})} = \prod_{i=1}^{n} \frac{\det(\frac{d^2}{dt^2} + \hat{W}^{(1)}_{ii}(t) + \lambda)}{\det(\frac{d^2}{dt^2} + \hat{W}^{(2)}_{ii}(t) + \lambda)} \quad \text{und}$$

$$g_R(\lambda) := \prod_{i=1}^{n} \frac{\vec{f^i}_{i,\hat{W}^{(1)}+\lambda}(t_f)}{\vec{f^i}_{i,\hat{W}^{(2)}+\lambda}(t_f)} = \frac{\det(\vec{f^i}_{\hat{W}^{(1)}+\lambda\hat{1}}(t_f))}{\det(\vec{f^i}_{\hat{W}^{(2)}+\lambda\hat{1}}(t_f))}\,,$$

und mit dem Satz von Coleman folgt wieder $g_L(\lambda) = g_R(\lambda)$. □

Wir betrachten zunächst wieder den 1-dimensionalen Fall. Mit dem Ergebnis des Satzes von Coleman kann die Determinante $\det'[-\frac{d^2}{dt^2} - \frac{1}{m}V''(q_{cl}(t))]$ aus dem Feynman-Propagator 4.11.8 in eine Funktion der Wirkung $S(q_{cl})$ auf dem klassischen Weg $q_{cl}(q_f, t_f, q_i, t_i)$ umgeformt werden. Seien $W^{(1)}(t) := W(t) := \frac{1}{m}V''(q_{cl}(t))$ und $W^{(2)}(t) = 0$. Dann folgt mit $\det'(-\frac{d^2}{dt^2}) = 2$ (siehe 4.9.15) und 4.11.11 an der Stelle $\lambda = 0$:

$$\det{}'\Big(-\frac{d^2}{dt^2} - W(t)\Big) = \det{}'\Big(-\frac{d^2}{dt^2}\Big)\cdot\frac{f_W(t_f)}{f_0(t_f)} = 2\cdot\frac{f_W(t_f)}{f_0(t_f)}\,.$$

Die Funktion $f_0(t)$ als Lösung des Anfangswert-Problems $\frac{d^2 f_0(t)}{dt^2} = 0$ mit $f_0(t_i) = 0$ und $\frac{df}{dt}(t_i) = 1$ ist einfach $f_0(t) = t - t_i$ und damit folgt für die obige Determinante

$$\det{}'(-\frac{d^2}{dt^2} - W(t)) = \frac{2}{(t_f - t_i)} f_W(t_f) , \tag{4.11.15}$$

wobei $f_W(t)$ eine Lösung des Anfangswert-Problems 4.11.10 ist.

Nun zeigt sich, daß das Jacobi-Feld $J(p,t)$ der klassischen Mechanik im Wesentlichen eine Lösung des gleichen Anfangswert-Problems wie $f_W(t)$ darstellt. Dazu betrachtet man das Anfangswert-Problem von klassischen Bahnen $q_{cl}(p,t)$ mit $q_{cl}(p,t_i) = q_i$ und beliebigem Anfangsimpuls $p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\Big|_{q_i}$. Das Jacobi-Feld beschreibt, wie sich zwei Bahnen entwickeln, die zum gleichen Zeitpunkt t_i vom gleichen Anfangspunkt q_i mit benachbarten Impulsen p und $p + \epsilon$ starten:

$$J(p,t) := \frac{\partial q(p,t)}{\partial p} , \quad \text{d.h.} \;\; q(p+\epsilon, t) = q(p,t) + \epsilon J(p,t) + O(\epsilon^2) . \tag{4.11.16}$$

Die beiden Bahnen $q(p+\epsilon, t)$ und $q(p,t)$ sollen die Langrange-Gleichung erfüllen:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 . \tag{4.11.17}$$

Um zu sehen, wie sich die Bahnen mit benachbarten Anfangsimpulsen entwickeln, differenzieren wir die Lagrange-Gleichung nach p und erhalten:

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2}\frac{\partial \dot{q}}{\partial p} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}\partial q}\frac{\partial q}{\partial p}) - (\frac{\partial^2 L}{\partial q \partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial p} + \frac{\partial^2 L}{\partial q^2}\frac{\partial q}{\partial p}) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2}\dot{J}) + \frac{d}{dt}(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}\partial q}J) - (\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}\partial q}\dot{J} + \frac{\partial^2 L}{\partial q^2}J) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2}\dot{J}) + (\frac{d}{dt}\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}\partial q} - \frac{\partial^2 L}{\partial q^2})J = 0 . \tag{4.11.18}$$

Dies ist die Jacobi-Gleichung für das Jacobi-Feld $J(p,t)$ mit den Anfangsbedingungen

$$J(p,0) = \frac{\partial q_i}{\partial p} = 0 \;\; \text{und} \;\; \dot{J}(p,0) = \frac{\partial \dot{q}(p,0,)}{\partial p} . \tag{4.11.19}$$

Für die Lagrange-Funktion $L := \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q)$ lautet die Jacobi-Gleichung:

$$m\ddot{J}(p,t) + V''(q(t))J(p,t) = 0 \;\; \text{mit} \;\; J(p,0) = 0, \; \dot{J}(p,0) = \frac{1}{m} ,$$

bzw. mit dem normierten Jacobi-Feld $J_N(p,t) := mJ(p,t)$

$$\ddot{J}_N(p,t) + \frac{1}{m}V''(q(t))\, J_N(p,t) = 0 \;\; \text{mit} \;\; J_N(p,0) = 0, \; \dot{J}_N(p,0) = 1 . \tag{4.11.20}$$

Dies ist die gleiche Differentialgleichung, die wir oben in 4.11.10 für die Funktion $f_W(t)$ mit $W(t) = \frac{1}{m}V''(q(t))$ gefunden hatten. Damit können wir mit 4.11.15 für den Feynman-Propagator 4.11.8 jetzt schreiben:

$$\begin{aligned} U(q_f,t_f,q_i,t_i) &= e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})}\cdot(\frac{m}{\pi i\hbar(t_f-t_i)})^{\frac{1}{2}}(\det{}'[-\frac{d^2}{dt^2}-\frac{1}{m}V''(q_{cl}(t),t)])^{-\frac{1}{2}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})}\cdot(\frac{m}{\pi i\hbar(t_f-t_i)})^{\frac{1}{2}}(\frac{2}{(t_f-t_i)}\,f_W(t_f))^{-\frac{1}{2}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})}\cdot(\frac{m}{2\pi i\hbar})^{\frac{1}{2}}(J_N(p,t_f))^{-\frac{1}{2}} = e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})}\cdot(\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{1}{2}}(J(p,t_f))^{-\frac{1}{2}}\ . \end{aligned} \tag{4.11.21}$$

Üblicherweise führt man das Jacobi-Feld $J(p,t_f)$ noch auf eine zweifache Ableitung der Wirkung S einer extremalen Bahn (d.h. Lösung der Lagrange-Gleichung) mit Energieerhaltung zurück. Dazu betrachtet man $S(q_f,t_f,q_i,t_i)$ einer extremalen Bahn als eine Funktion von Anfangspunkt $q_i = q(t_i)$ und Endpunkt $q_f = q(t_f)$, also

$$\begin{aligned} S(q_f,t_f,q_i,t_i) &= \int_{t_i}^{t_f} L(q(t),\dot q(t))\,dt = \int_{t_i}^{t_f}(p(t)\dot q(t) - H(p(t),q(t))\,dt \\ &= \int_{q_i}^{q_f} p(t)\,dq - E(t_f-t_i)\ . \end{aligned} \tag{4.11.22}$$

Daraus folgt $\frac{\partial S(q_f,t_f,q_i,t_i)}{\partial q_i} = -p(t_i)$ und damit ergibt sich

$$J(p,t_f) = \frac{\partial q_f}{\partial p(t_i)} = (\frac{\partial p(t_i)}{\partial q_f})^{-1} = -(\frac{\partial^2 S(q_f,t_f,q_i,t_i)}{\partial q_f\partial q_i})^{-1}\ . \tag{4.11.23}$$

Damit folgt für den Feynman-Propagator 4.11.21

$$U(q_f,t_f,q_i,t_i) = e^{\frac{i}{\hbar}S(q_{cl})}(\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{1}{2}}(\frac{-\partial^2 S(q_f,t_f,q_i,t_i)}{\partial q_f\partial q_i})^{\frac{1}{2}}\ . \tag{4.11.24}$$

Die Verallgemeinerung auf den n-dimensionalen Fall erfolgt unproblematisch mittels der n-dimensionalen Version des Satzes von Coleman. Im folgenden bezeichne q_k und q_l die k-te, bzw. l-te Komponente von $\vec q$ und $q_{f,k} = q_k(t_f)$ und $q_{i,l} = q_l(t_i)$ die k-te Komponente von $\vec q_f = \vec q(t_f)$, bzw. die l-te Komponente von $\vec q_i = \vec q(t_i)$, sowie $\hat J_{k,l}(\vec p,t_f) := \frac{\partial q_k(\vec p,t)}{\partial p_l}$ die Jacobi-Matrix.

$$\begin{aligned} U(\vec q_f,t_f,\vec q_i,t_i) &= e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec q_{cl})}\cdot(\frac{m}{\pi i\hbar(t_f-t_i)})^{\frac{n}{2}}(\det{}'[-\frac{d^2}{dt^2}\hat 1 - \frac{1}{m}\,\frac{\partial^2 V}{\partial q_k\partial q_l}(\vec q,t)\Big|_{\vec q_{cl}(t)}])^{-\frac{1}{2}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec q_{cl})}\cdot(\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{n}{2}}(\det(\hat J(\vec p,t_f)))^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{4.11.25}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{q}_{cl})} \cdot (\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{n}{2}} (\det(\frac{-\partial^2 S(\vec{q_f}, t_f, \vec{q_i}, t_i)}{\partial q_{f,k} \partial q_{i,l}}))^{\frac{1}{2}} \ . \tag{4.11.26}$$

Wenn es mehrere extremale Pfade $\vec{q_\gamma}(t)$ zwischen $\vec{q_i}$ und $\vec{q_f}$ gibt, dann ist $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ die Summe über alle diese einzelnen Pfadbeiträge, also:

$$U(\vec{q_f}, t_f, \vec{q_i}, t_i) = \sum_\gamma e^{\frac{i}{\hbar}S^\gamma(\vec{q}_{cl})} \cdot (\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{n}{2}} (\det(\frac{-\partial^2 S^\gamma(\vec{q_f}, t_f, \vec{q_i}, t_i)}{\partial q_{f,k} \partial q_{i,l}}))^{\frac{1}{2}} \ . \tag{4.11.27}$$

Die Determinante in dieser semiklassischen Näherung des Feynman-Propagators $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ heißt in der Literatur *Van Vleck-Pauli-Morette Determinante*. Steiner betrachtet in Grosche u. Steiner (1998) (S. 13-18) ausführlich die Historie dieser semiklassischen Näherung und schlägt aufgrund seiner Untersuchung die Namensgebung *Pauli-Gleichung* mit *Morette-Van Hove Determinante* vor (S. 148).

Die Gleichungen 4.11.25 und 4.11.26 gelten zunächst natürlich nur, solange das Jacobi-Feld $J(p,t)$ in 4.11.21, bzw. die Jacobi-Determinante $\det(\hat{J}(\vec{p}, t_f))$ in 4.11.25 nicht Null werden. Die Nullstellen des Jacobi-Feldes, bzw. der Jacobi-Determinante heißen konjugierte Punkte, oder fokale Punkte, oder Kaustiken. Ein konjugierter Punkt $q(t_f)$ heißt auch fokaler Punkt, da zum Zeitpunkt t_i in $q(t_i)$ eine ganze Schar von Bahnen mit benachbarten Impulsen $p + \epsilon$ gestartet sind, die sich wegen $q(p+\epsilon, t) = q(p,t) + \epsilon J(p,t)$ zum Zeitpunkt t_f an einer Stelle mit $J(p, t_f) = 0$ alle wieder in $q(p, t_f)$ vereinigen.

Die Singularität des Feynman-Propagators $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ in 4.11.25 aufgrund der Kaustiken ist keine wirkliche physikalische Singularität, sondern eine Singularität des verwendeten Koordinatensystems, hier also der Ortsdarstellung. Während eine klassische Bewegung im Phasenraum durch die Koordinaten (q,p) eindeutig und frei von Koordinaten-Singularitäten beschrieben werden kann, wird im Ortsraum an q-Umkehrpunkten $J(p,t) = \frac{\partial q(p,t)}{\partial p} = 0$.

Die Fortsetzung des Feynman-Propagators $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ über die Kaustiken hinweg soll im nächsten Abschnitt kurz diskutiert werden.

4.12 Der Morse-Index

Zunächst soll gezeigt werden, daß die semiklassische Näherung des Feynman-Propagators $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ 4.11.25 zumindest für kurze Zeiten $t_f - t_i$ gültig ist (sofern das Potential in der Nähe von $q(t_i)$ nicht singulär ist), da in einem kurzen Zeitintervall nach t_i das Jacobi-Feld $J(p, t_f)$, bzw. die Jacobi-Determinante $\det(\hat{J}(\vec{p}, t_f))$, größer als Null sind.

Die Extremalbahn $q(t) = q_{cl}(t)$ als Lösungen der Lagrange-Gleichung ist im allgemeinen keine Minimalbahn, sondern tatsächlich nur eine Extremalbahn, die auch durch Sattelpunkte und Maxima verlaufen kann kann. Wir betrachten als Beispiel wieder die 1-dimensionale Lagrange-Funktion $L := \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q)$. In einem kleinen Zeitintervall $[t_i, t_f]$ kann das Teilchen auch nur einen kleinen Weg von q_i nach q_f zurücklegen, so daß auch $[q_i, q_f]$ klein ist. Wir setzen ein nichtsinguläres Potential $V(q)$ voraus, das wir für $q \in [q_i, q_f]$ linearisieren können: $V(q) = V_0 + (q - q_i)V_1$. Das zugeordnete Sturm-Liouville-System 4.11.9 lautet dann:

$$(\frac{d^2}{dt^2} + \frac{1}{m}V''(q_{cl}(t)) + \lambda)\, r_{\frac{1}{m}V''+\lambda}(t) = (\frac{d^2}{dt^2} + \lambda)\, r_\lambda(t) = 0\,, \qquad \text{mit} \;\; r_\lambda(t_i) = r_\lambda(t_f) = 0\,. \tag{4.12.1}$$

Wie man unschwer sieht, ist die Lösung dieses Randwert-Systems gegeben durch:

$$\lambda_n = (\frac{\pi n}{t_f - t_i})^2 \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}\,, \text{ und } \; r_\lambda(t) = \sin(\frac{\pi n(t - t_i)}{t_f - t_i})\,. \tag{4.12.2}$$

Da alle $\lambda_n > 0$ sind, ist auch

$$\det{}'(S^{(2)}_{loc}(q_{cl}) = \det{}'[-\frac{d^2}{dt^2} - \frac{1}{m}V''(q_{cl}(t))] = \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n > 0\,,$$

also ist die Extremalbahn $q(t)$ für kleine Zeiten tatsächlich eine Minimalbahn. Der kleinste Eigenwert $\lambda_1 = (\frac{\pi}{t_f - t_i})^2$ geht aber mit anwachsendem t_f wegen $\lambda_1(t_f) \sim \frac{1}{(t_f - t_i)^2}$ gegen Null. Unter Berücksichtigung des Potentials wird also im allgemeinen mit wachsendem t_f ein solches t_f existieren, für welches $\lambda_1(t_f) = 0$ ist. Damit ist auch das Jacobi-Feld $J(p, t_f) = 0$ und $q(t_f)$ ist ein konjugierter Punkt zu $q(t_i)$. Wenn $\lambda_1(t)$ an der Nullstelle bei t_f einen Nulldurchgang hat, d.h. wenn $\lambda_1(t) < 0$ für $t > t_f$, dann hat $J(p, t_f)$ an dieser Stelle einen Vorzeichenwechsel und der Feynman-Propagator $U(q_f, t_f, q_i, t_i)$ aus 4.11.21 erhält einen zusätzlichen Faktor $(-1)^{-\frac{1}{2}} = i^{-1} = e^{-i\frac{\pi}{2}}$.

Der Morse-Index ν für die Extremalbahn zwischen $q(t_i)$ und $q(t_f)$ kann jetzt im 1-dimensionalen Fall definiert werden als die Anzahl der Vorzeichenwechsel des Jacobi-Feld $J(p, t)$ im Intervall $[t_i, t_f]$ und im n-dimensionalen Fall als die Anzahl der negativen Eigenwerte von $\hat{J}(\vec{p}, t_f)$. Damit schreibt sich die semiklassische Näherung für den Feynman-Propagator 4.11.25 als:

$$\begin{aligned} U(\vec{q_f}, t_f, \vec{q_i}, t_i) &= e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{q}_{cl})} \cdot (\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{n}{2}} |\det(\hat{J}(\vec{p}, t_f))|^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{-\nu\frac{\pi}{2}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{q}_{cl})} \cdot (\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{n}{2}} |\det(\frac{-\partial^2 S(\vec{q_f}, t_f, \vec{q_i}, t_i)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}})|^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\nu\frac{\pi}{2}}\,. \end{aligned} \tag{4.12.3}$$

Diese Form des semiklassischen Feynman-Propagators hat Gutzwiller zu Beginn der 1970'er Jahre als Ausgangspunkt für die Entwicklung seiner berühmten Spurformel genommen, welche die semiklassische quantenmechanische Behandlung von Systemen erlaubt, die auf klassischer Ebene nicht-integrabel sind und chaotisches Verhalten zeigen (siehe Kapitel 8.12).

Die Frage, wie der Morse-Index ν als die Anzahl der negativen Eigenwerte von $\hat{J}(\vec{p}, t_f)$ im n-dimensionalen Fall mit der Anzahl der konjugierten Punkte auf der Extremalbahn zwischen $q(t_i)$ und $q(t_f)$ zusammenhängt, beantwortet das Morse-Index-Theorem.

Satz 4.12.1 (Morse Index Theorem) *Die zu $q(t_i)$ konjugierten Punkte auf der Extremalbahn (Geodäten) von $q(t_i)$ nach $q(t_f)$ seien isolierte konjugierte Punkte. Dann gibt es auf dieser Extremalbahn nur endlich viele konjugierte Punkte.*
Der Index ν der Jacobi-Matrix $\hat{J}(\vec{p}, t_f)$, d.h. die Anzahl der negativen Eigenwerte von $\hat{J}(\vec{p}, t_f)$, ist gleich der Summe der Multiplizitäten der zu $q(t_i)$ konjugierten Punkte auf der Extremalbahn (Geodäten) von $q(t_i)$ nach $q(t_f)$. Dabei ist die Multiplizität eines zu $q(t_i)$ konjugierten Punktes $q(t)$ gleich der Dimension des Nullraums von $\hat{J}(\vec{p}, t)$ (der Anzahl der Eigenvektoren von $\hat{J}(\vec{p}, t)$, die bei $q(t)$ Null werden). Dieser Index ν heißt Morse-Index und ist eine endliche natürliche Zahl.

Beweis. Die klassische Referenz ist Milnor (1963), S. 83 ff., moderner ist Jost (1995), S. 145 ff., und für Physiker vielleicht leichter lesbar ist Postnikov (2003), S.144 ff. □

4.13 Feynman-Propagator und Fouriertransformation I

Die Pfadintegrale 4.6.3 für die Zustandsdichte, sowie 4.11.6 und 4.11.7 für die semiklassische Näherung des Feynman-Propagators haben periodische Randbedingungen ($q(0) = q(\hbar\beta)$, bzw. $r(t_i) = r(t_f)$ und $r(\tau_i) = r(\tau_f)$). Damit bietet sich die Möglichkeit einer Fouriertransformation des Pfadintegrals an.

Wir betrachten hier zunächst eine diskrete Fouriertransformation der diskretisierten Zustandssumme 4.6.2 mit der Unterteilung des Integrations-Intervalles $\hbar\beta$ in M gleiche Teile der Länge $\epsilon := \hbar\beta/M$:

$$Z_M = \left(\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar}\right)^{M/2} \int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} dq_0 \int \left(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k\right) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon}\right)^2 + V(q_k)\right]} . \tag{4.13.1}$$

Da $q_k = q_{k+M}$ ist, stellen wir die q_k als endliche Fourierreihe dar:

$$q_k := q(\tau_k) := \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} a_n\, e^{i\omega_n \tau_k} , \quad \omega_n := \frac{2\pi}{\hbar\beta} n , \quad \tau_k := \frac{\hbar\beta}{M} k . \tag{4.13.2}$$

Die Frequenzen ω_n heißen Matsubara-Frequenzen. Die Nullmode $a_0/\sqrt{M}$ ist gerade der Mittelwert $\langle q \rangle$ von $q(\tau)$, denn:

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &:= \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau\, q(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \frac{1}{\sqrt{M}} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\sum_{n=0}^{M-1} a_n\, e^{i\omega_n \tau}\right) = \frac{1}{\hbar\beta} \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} a_n \int_0^{\hbar\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau} \\ &= \frac{1}{\hbar\beta} \frac{1}{\sqrt{M}} \left[a_0 \hbar\beta + \sum_{n=1}^{M-1} a_n \frac{1}{i\omega_n} \left(e^{i\omega_n \hbar\beta} - 1\right)\right] = \frac{a_0}{\sqrt{M}} . \end{aligned} \tag{4.13.3}$$

Die Menge der q_k mit $k \in \{0, \ldots, M-1\}$ besteht aus M reellen Zahlen, die Menge der a_n aus M komplexen Zahlen a_n mit $n \in \{0, \ldots, M-1\}$. Also müssen wir M

reelle Nebenbedingungen an die a_n berücksichtigen, so daß die q_k reell bleiben. Hier unterscheiden wir die beiden Fälle: M eine ungerade oder M eine gerade Zahl.

Sei also zunächst M ungerade, dann folgt:

$$
\begin{aligned}
q_k &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} a_n\, e^{i\omega_n \tau_k} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} \\
&= \frac{1}{\sqrt{M}} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{(M-1)/2} \left(a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} + a_{M-n}\, e^{i2\pi \frac{k}{M}(M-n)}\right)\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{M}} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{(M-1)/2} \left(a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} + a_{M-n}\, e^{-i2\pi \frac{k}{M} n}\right)\right].
\end{aligned}
$$

Die M reellen Nebenbedingungen an die a_n sind: $a_0 \in \mathbb{R}$ und die $(M-1)/2$ komplexen Nebenbedingungen $a_{M-n} = a_n^*$ für $n \in \{1, \ldots, (M-1)/2\}$, also:

$$
q_k = \frac{1}{\sqrt{M}} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{(M-1)/2} \left(a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} + a_n^*\, e^{-i2\pi \frac{k}{M} n}\right)\right], \quad M \text{ ungerade}. \tag{4.13.4}
$$

Sei nun M gerade, dann folgt:

$$
\begin{aligned}
q_k &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} a_n\, e^{i\omega_n \tau_k} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} \\
&= \frac{1}{\sqrt{M}} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{M/2-1} \left(a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} + a_{M-n}\, e^{i2\pi \frac{k}{M}(M-n)}\right) + a_{M/2} e^{i\pi k}\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{M}} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{M/2-1} \left(a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} + a_{M-n}\, e^{-i2\pi \frac{k}{M} n}\right) + (-1)^k a_{M/2}\right].
\end{aligned}
$$

Die M reellen Nebenbedingungen an die a_n sind: $a_0, a_{M/2} \in \mathbb{R}$ und die $M/2-1$ komplexen Nebenbedingungen $a_{M-n} = a_n^*$ für $n \in \{1, \ldots, M/2-1\}$, also:

$$
q_k = \frac{1}{\sqrt{M}} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{M/2-1} \left(a_n\, e^{i2\pi \frac{k}{M} n} + a_n^*\, e^{-i2\pi \frac{k}{M} n}\right) + (-1)^k a_{M/2}\right], \quad M \text{ gerade}. \tag{4.13.5}
$$

Im Folgenden machen wir Gebrauch von der Orthogonalitätsrelation der Basisfunktionen der diskreten Fouriertransformation:

$$
\frac{1}{M} \sum_{k=0}^{M-1} e^{i(\omega_{n_1} - \omega_{n_2})\tau_k} = \delta_{n_1,n_2}\,, \tag{4.13.6}
$$

denn

$$\frac{1}{M}\sum_{k=0}^{M-1} e^{i(\omega_{n_1}-\omega_{n_2})\tau_k} = \frac{1}{M}\sum_{k=0}^{M-1} e^{i2\pi\frac{n_1-n_2}{M}k} = \begin{cases} 1 & \text{für } n_1 = n_2\,, \\ \frac{1-e^{i2\pi(n_1-n_2)}}{M\,(1-e^{i2\pi\frac{n_1-n_2}{M}})} = 0 & \text{für } n_1 \neq n_2\,. \end{cases}$$

Aus dieser Orthogonalitätsrealtion folgt auch unmittelbar, daß die Transformation von den q_k zu den a_n eine unitäre Transformation ist, daß also die Funktionaldeterminante $|\det(\frac{\partial q}{\partial a})| = 1$ ist, denn:

$$(\frac{\partial q}{\partial a})_{k,n} := \frac{\partial q_k}{\partial a_n} = \frac{1}{\sqrt{M}}\, e^{i2\pi\frac{k}{M}n}\,, \quad \Rightarrow$$

$$\sum_{n=0}^{M-1} (\frac{\partial q}{\partial a})_{k,n}\cdot((\frac{\partial q}{\partial a})_{n,k'})^\dagger = \sum_{n=0}^{M-1} (\frac{\partial q}{\partial a})_{k,n}\cdot(\frac{\partial q}{\partial a})^*_{k',n} = \frac{1}{M}\sum_{n=0}^{M-1} e^{i2\pi\frac{k-k'}{M}n} = \delta_{k,k'} \quad \Rightarrow$$

$$\det(\frac{\partial q}{\partial a})\cdot\det(\frac{\partial q}{\partial a})^* = 1 \quad \Rightarrow \quad |\det(\frac{\partial q}{\partial a})| = 1\,. \tag{4.13.7}$$

Damit können wir das Integral über die dq_k jetzt als ein Integral über die da_n schreiben:

$$\int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} dq_0 \int(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k) = \begin{cases} \int da_0 \int(\prod_{n=1}^{(M-1)/2} da_n\, da_n^*)\,, & M \text{ ungerade}\,, \\ \int da_0 \int(\prod_{n=1}^{M/2-1} da_n\, da_n^*)\int da_{M/2}\,, & M \text{ gerade}\,. \end{cases} \tag{4.13.8}$$

Um die Betrachtung hier weiter zu vereinfachen, wählen wir wieder das Beispiel des freien Teilchens, also $V(q) = 0$. Der Integrand der Zustandsdichte 4.13.1 ist also einfach:

$$\prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon\frac{m}{2}(\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon})^2} = \prod_{k=0}^{M-1} e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon\frac{m}{2}(\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon})^2} = e^{-\frac{1}{2}\frac{mM}{\hbar^2\beta}\sum_{k=0}^{M-1}(q_k-q_{k-1})^2}\,.$$

Für die Berechnung von $(q_k - q_{k-1})^2$ machen wir wieder die Fallunterscheidung: M eine ungerade oder M eine gerade Zahl.

1. Sei wieder zunächst M ungerade, dann folgt mittels der Orthogonalitätsrelation 4.13.6 (dabei sei cc jeweils das konjugiert Komplexe des voranstehenden Ausdrucks):

$$q_k - q_{k-1} = \frac{1}{\sqrt{M}}\sum_{n=1}^{(M-1)/2}[a_n\, e^{i2\pi\frac{k}{M}n}(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n}) + cc]\,.$$

$$\sum_{k=0}^{M-1}(q_k - q_{k-1})^2 = \sum_{k=0}^{M-1}(q_k - q_{k-1})(q_k - q_{k-1})^*$$

$$= \frac{1}{M} \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{n_1,n_2=1}^{(M-1)/2} \{[a_{n_1} a^*_{n_2}\, e^{i2\pi \frac{k}{M}(n_1-n_2)}(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n_1})(1-e^{+i2\pi\frac{1}{M}n_2})$$

$$+ a_{n_1} a_{n_2}\, e^{i2\pi \frac{k}{M}(n_1+n_2)}(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n_1})(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n_2})] + cc\}$$

$$= \frac{1}{M} \sum_{n_1,n_2=1}^{(M-1)/2} \{[a_{n_1} a^*_{n_2}\, \delta_{n_1,n_2}\,(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n_1})(1-e^{+i2\pi\frac{1}{M}n_2})$$

$$+ a_{n_1} a_{n_2}\, \delta_{n_1,-n_2}\,(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n_1})(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n_2})] + cc\}\ .$$

Der zweite Term fällt weg, da $n_1, n_2 > 0 \ \Rightarrow\ \delta_{n_1,-n_2} = 0$.

$$\sum_{k=0}^{M-1} (q_k - q_{k-1})^2 = \sum_{n=1}^{(M-1)/2} \{[a_n a^*_n\, |1-e^{-i2\pi\frac{n}{M}}|^2] + cc\}$$

$$= 2 \sum_{n=1}^{(M-1)/2} a_n a^*_n\, |1-e^{-i2\pi\frac{n}{M}}|^2 = \frac{2}{M} \sum_{n=1}^{(M-1)/2} a_n a^*_n\,(2 - 2\cos\frac{2\pi n}{M})$$

$$= 2 \sum_{n=1}^{(M-1)/2} 2 a_n a^*_n\,(1-(\cos^2\frac{\pi n}{M} - \sin^2\frac{\pi n}{M}))$$

$$= 2 \sum_{n=1}^{(M-1)/2} 4 a_n a^*_n\, \sin^2\frac{\pi n}{M}\ .$$

Damit folgt für die diskretisierte Zustandssumme 4.13.1 des freienTeilchens (für M ungerade):

$$Z_M = (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2} \int da_0 \int (\prod_{n=1}^{(M-1)/2} da_n\, da^*_n)\, e^{-\frac{1}{2}\frac{mM}{\hbar^2\beta}\sum_{k=0}^{M-1}(q_k-q_{k-1})^2}$$

$$= (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2} \int da_0 \int (\prod_{n=1}^{(M-1)/2} da_n\, da^*_n)\, e^{-\frac{mM}{\hbar^2\beta}\sum_{n=1}^{(M-1)/2} 4a_n a^*_n \sin^2\frac{\pi n}{M}}\ .$$

Mit Hilfe von 4.7.7 können wir die $\int da_n\, da^*_n$ Integrationen durchführen und erhalten:

$$Z_M = (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2} \int da_0 \left(\frac{2\pi}{\frac{mM}{\hbar^2\beta}}\right)^{(M-1)/2} \frac{1}{\prod_{n=1}^{(M-1)/2} 4\sin^2\frac{\pi n}{M}}$$

$$= (\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta})^{1/2} \sqrt{M} \int da_0\, \frac{1}{\prod_{n=1}^{(M-1)/2} 4\sin^2\frac{\pi n}{M}}\ .$$

Nun ist auch $\sin\frac{\pi n}{M}$ periodisch:

$$\sin\frac{\pi(M-n)}{M} = \sin(\pi - \frac{\pi n}{M}) = \sin\pi\,\cos\frac{\pi n}{M} - \cos\pi\,\sin\frac{\pi n}{M} = \sin\frac{\pi n}{M}\ .$$

Hiermit und mit Hilfe einer Produktformel der sin-Funktion (siehe etwa C.9.3) folgt:

$$\prod_{n=1}^{(M-1)/2} 4\,\sin^2\frac{\pi n}{M} = \prod_{n=1}^{(M-1)/2} (2\,\sin\frac{\pi n}{M})\,(2\,\sin\frac{\pi(M-n)}{M}) = \prod_{n=1}^{M-1} 2\,\sin\frac{\pi n}{M} = M\,. \tag{4.13.9}$$

Damit ergibt sich die diskretisierte Zustandssumme Z_M für M ungerade also zu:

$$Z_M = (\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta})^{1/2}\frac{\sqrt{M}}{M}\int da_0 = (\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta})^{1/2}\int d\langle q\rangle = \frac{a}{\lambda}\,, \tag{4.13.10}$$

$$\lambda := \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}} \quad \text{ist die sog. thermische Wellenlänge,} \tag{4.13.11}$$

wobei wir das Teilchen wieder in einen (eindimensionalen) Kasten der Länge $a = \int d\langle q\rangle$ eingesperrt haben - siehe 4.9.8 und 4.9.9.

2. Sei jetzt M gerade, dann folgt wie oben:

$$q_k - q_{k-1} = \frac{1}{\sqrt{M}}\sum_{n=1}^{M/2-1}[a_n\,e^{i2\pi\frac{k}{M}n}(1-e^{-i2\pi\frac{1}{M}n}) + cc] + 2(-1)^k a_{M/2}\,.$$

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{M-1}(q_k-q_{k-1})^2 &= \sum_{k=0}^{M-1}(q_k-q_{k-1})(q_k-q_{k-1})^*\\ &= 2\sum_{n=1}^{(M-1)/2} 4a_n a_n^*\,\sin^2\frac{\pi n}{M} + 4a_{M/2}^2\,.\end{aligned}$$

Damit folgt für die diskretisierte Zustandssumme 4.13.1 des freienTeilchens (für M gerade):

$$\begin{aligned}Z_M &= (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2}\int da_0\int(\prod_{n=1}^{M/2-1} da_n\,da_n^*)\int da_{M/2}\,e^{-\frac{1}{2}\frac{mM}{\hbar^2\beta}\sum_{k=0}^{M-1}(q_k-q_{k-1})^2}\\ &= (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2}\int da_0\int(\prod_{n=1}^{M/2-1} da_n\,da_n^*)\int da_{M/2}\\ &\qquad e^{-\frac{mM}{\hbar^2\beta}\sum_{n=1}^{M/2-1}4a_n a_n^*\,\sin^2\frac{\pi n}{M} - \frac{1}{2}\frac{mM}{\hbar^2\beta}4a_{M/2}^2}\,.\end{aligned}$$

Mit Hilfe von 4.7.7 und 4.7.2 können wir die $\int da_n\,da_n^*\int da_{M/2}$ Integrationen durchführen und erhalten:

$$Z_M = (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2}\int da_0\left(\frac{2\pi}{\frac{mM}{\hbar^2\beta}}\right)^{M/2-1}\frac{1}{\prod_{n=1}^{M/2-1}4\,\sin^2\frac{\pi n}{M}}\left(\frac{2\pi}{\frac{mM}{\hbar^2\beta}}\right)^{1/2}\frac{1}{2}$$

$$= (\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta})^{1/2}\sqrt{M}\int da_0 \, \frac{1}{2\cdot\prod_{n=1}^{M/2-1}\ 4\,\sin^2\frac{\pi n}{M}}\,.$$

Ähnlich wie in 4.13.9 erhalten wir:

$$2\cdot\prod_{n=1}^{M/2-1} 4\,\sin^2\frac{\pi n}{M} = 2\,\sin\frac{\pi M/2}{M}\prod_{n=1}^{M/2-1}(2\,\sin\frac{\pi n}{M})\,(2\,\sin\frac{\pi(M-n)}{M})$$
$$= \prod_{n=1}^{M-1} 2\,\sin\frac{\pi n}{M} = M\,. \tag{4.13.12}$$

Damit ergibt sich für M gerade die diskretisierte Zustandssumme Z_M also genau wie oben für M ungerade zu:

$$Z_M = (\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta})^{1/2}\frac{\sqrt{M}}{M}\int da_0 = (\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta})^{1/2}\int d\langle q\rangle = \frac{a}{\lambda}\,, \tag{4.13.13}$$

3. Die diskrete Fouriertransformation der Zustandssumme für ein freies Teilchen führt also wieder zu dem schon aus 4.9.8 und 4.9.9 bekannten Wert:

$$Z = \lim_{M\to\infty} Z_M = \frac{a}{\lambda}\,,\quad a := \text{Kastenlänge},\ \lambda := \text{thermische Wellenlänge}\,(4.13.11). \tag{4.13.14}$$

4.14 Feynman-Propagator und Fouriertransformation II

Für das diskretisierte fouriertransformierte Pfadintegral hatten wir in 4.13.4 und 4.13.8 (bei M ungerade) gefunden:

$$q_k = \frac{1}{\sqrt{M}}\,[a_0 + \sum_{n=1}^{(M-1)/2}(a_n\,e^{i2\pi\frac{k}{M}n} + a_n^*\,e^{-i2\pi\frac{k}{M}n})]\,,$$

$$N_M\cdot\int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} D_M[q(\tau)] := (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2}\int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} dq_0\int(\prod_{k=1}^{M-1}dq_k)$$
$$= (\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta})^{M/2}\int da_0\int(\prod_{n=1}^{(M-1)/2}da_n\,da_n^*)\,.$$

Dies legt nun eine alternative **Definition** des Pfadintegrals nahe (cc bezeichne wieder das konjugiert Komplexe des verangegangenen Terms):

$$q(t) := q_0 + r(t) := q_0 + \sum_{n=1}^{\infty}(a_n\,e^{i\omega_n\tau} + cc)\,,\quad \omega_n := \frac{2\pi}{\hbar\beta}n\,,\quad a_{-n} = a_n^*. \tag{4.14.1}$$

$$\lim_{M\to\infty} N_M \cdot \int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} D_M[q(\tau)] := \int \frac{1}{\lambda} dq_0 \int (\prod_{n=1}^{\infty} \mu_n da_n \, da_n^*) \,. \tag{4.14.2}$$

Wir summieren also über alle Matsubara-Frequenzen. Das bedeutet, daß wir alle (periodischen) Pfade über einer kontinuierlichen Zeitvariablen τ betrachten und nicht wie im ursprünglichen Pfadintegral nur stückweise lineare Pfade über einer diskreten Zeitvariablen τ_k. Hierbei müßen wir natürlich das Integrationsmaß μ_n/λ auf der rechten Seite geeignet bestimmen. Da die Zustandssumme für das freie Teilchen $Z = a/\lambda$ ist (4.13.14), haben wir die thermische Wellenlänge λ im Integrationsmaß separat aufgeführt. Um das Integrationsmaß zu finden, betrachten wir also wieder den einfachen Fall des freien Teilchens.

Die Orthogonalitätsrelation gilt in der folgenden Form:

$$\int\limits_0^{\hbar\beta} d\tau \, e^{i(\omega_{n_1}-\omega_{n_2})\tau} = \left\{ \begin{array}{cc} \hbar\beta, & \text{für}\, \omega_{n_1} = \omega_{n_2} \\ \frac{[e^{i2\pi(n_1-n_2)}-1]}{\omega_{n_1}-\omega_{n_2}} = 0, & \text{für}\, \omega_{n_1} \neq \omega_{n_2} \end{array} \right\} = \hbar\beta \cdot \delta_{n_1,n_2} \,. \tag{4.14.3}$$

Für die Wirkung des freienTeilchens erhalten wir:

$$\dot{q} = \sum_{n=1}^{\infty} (i\omega_n a_n \, e^{i\omega_n \tau} + cc) \,, \quad \Rightarrow$$

$$\dot{q}^2 = \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} [(-\omega_{n_1}\omega_{n_2} e^{i(\omega_{n_1}+\omega_{n_2})\tau} a_{n_1} a_{n_2} + \omega_{n_1}\omega_{n_2} e^{i(\omega_{n_1}-\omega_{n_2})\tau} a_{n_1} a_{n_2}^*) + cc] \,, \quad \Rightarrow$$

$$\int\limits_0^{\hbar\beta} d\tau \, \dot{q}^2 = 2\hbar\beta \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n^2 \, a_n a_n^* \,, \quad \Rightarrow$$

$$-\frac{1}{\hbar} S_E(q) = -\frac{1}{\hbar} \int\limits_0^{\hbar\beta} d\tau \, \frac{m}{2} \dot{q}^2 = -m\beta \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n^2 \, a_n a_n^* \,.$$

Und damit folgt für den inneren Teil des fouriertransformierten Pfadintegrals (mit 4.7.7):

$$\begin{aligned} \int (\prod_{n=1}^{\infty} \mu_n da_n \, da_n^*) \, e^{-\frac{1}{\hbar} S_E(q)} &= \int (\prod_{n=1}^{\infty} \mu_n da_n \, da_n^*) \, e^{-m\beta \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n^2 \, a_n a_n^*} \\ &= \prod_{n=1}^{\infty} \mu_n \frac{2\pi}{m\beta\omega_n^2} \,. \end{aligned}$$

Wir wählen $\mu_n = m\beta\omega_n^2/(2\pi)$, damit wir wieder 4.13.14 erhalten:

$$Z = \int \frac{1}{\lambda} dq_0 \int (\prod_{n=1}^{\infty} \mu_n da_n \, da_n^*) \, e^{-\frac{1}{\hbar} S_E(q)} = \int \frac{1}{\lambda} dq_0 = \frac{a}{\lambda} \, .$$

Damit lautet jetzt also die Definition unseres neuen Fourier-Pfadintegrals für die Zustandssumme:

$$Z = \int \frac{1}{\lambda} dq_0 \int (\prod_{n=1}^{\infty} \frac{m\beta\omega_n^2}{2\pi} \, da_n \, da_n^*) \, e^{-\frac{1}{\hbar} S_E(q)} \, , \tag{4.14.4}$$

bzw. mit 4.7.8:

$$Z = \int \frac{1}{\lambda} dq_0 \int (\prod_{n=1}^{\infty} \frac{m\beta\omega_n^2}{\pi} \, d(\Re a_n) \, d(\Im a_n)) \, e^{-\frac{1}{\hbar} S_E(q)} \, . \tag{4.14.5}$$

5 Vielteilchen-Systeme

5.1 Beschreibung im Fock-Raum

Der Hilbert-Raum $\mathfrak{H}_n$ eines n-Teilchen Systems ist einfach der Produkt-Raum der Hilbert-Räume $\mathcal{H}_i$ der einzelnen Teilchen $i = 1 \dots n$:

$$\mathfrak{H}_n := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n = \prod_{i=1}^{n} \mathcal{H}_i \ .$$

Im folgenden möge es sich immer um n identische Teilchen handeln, also:

$$\mathfrak{H}_n := \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H} = \prod_{i=1}^{n} \mathcal{H} \ . \tag{5.1.1}$$

Sei $\{| \, k\rangle\} := \{| \, k^j\rangle \, | \, j = 1 \dots m\}$ eine orthonormale Basis in $\mathcal{H}$. Wenn keine Gefahr der Mehrdeutigkeit oder Verwechslung der Indizes besteht, kürzen wir diese Schreibweise häufig einfach ab zu $\{| \, k\rangle\} := \{| \, k\rangle \, | \, k = 1 \dots m\}$. Dabei kann m auch unendlich sein, wie z.B. beim harmonischen Oszillator oder beim Wasserstoffatom.

$$\langle k \mid k'\rangle = \delta_{kk'} \qquad \text{und:} \quad \sum_{k=1}^{m} | \, k\rangle\langle k \, | = \hat{1}_{\mathcal{H}} \ . \tag{5.1.2}$$

Dann können wir eine orthonormale Basis in $\mathfrak{H}_n$ einfach als Produktbasis konstruieren:

$$| \, k_1 k_2 \dots k_n) := | \, k_1 \otimes k_2 \otimes \cdots \otimes k_n\rangle \ , \tag{5.1.3}$$

$$\begin{aligned}(k_1 k_2 \dots k_n \mid k_1' k_2' \dots k_n') &= \langle k_1 \mid k_1'\rangle\langle k_2 \mid k_2'\rangle \cdots \langle k_n \mid k_n'\rangle \\ &= \delta_{k_1 k_1'} \delta_{k_2 k_2'} \cdots \delta_{k_n k_n'} \ ,\end{aligned} \tag{5.1.4}$$

$$\sum_{k_1 k_2 \dots k_n} | \, k_1 k_2 \dots k_n) \, (k_1 k_2 \dots k_n \, | = \hat{1}_{\mathfrak{H}_n} \ . \tag{5.1.5}$$

Die Erfahrung zeigt nun, daß für n identische Teilchen der Hilbert-Raum $\mathfrak{H}_n$ tasächlich zu groß gewählt ist, da in der Natur nur symmetrisierte, bzw. antisymmetrisierte n-Teilchen Zustände vorkommen. Beispiele für symmetrisierte Zustände, Bosonen genannt, sind z.B. Photonen, Pionen, Mesonen, Gluonen, ^{4}He-Atome; Beispiele für antisymmetrisierte Zustände, Fermionen genannt, sind z.B. Protonen, Neutronen, Elektronen, Myonen, Neutrinos, ^{3}He-Atome.

Also definieren wir Projektions-Operatoren $\hat{P}_B$ und $\hat{P}_F$ in $\mathfrak{H}_n$ auf die beiden Hilbert-Unterräume $\mathfrak{B}_n$ und $\mathfrak{F}_n$ für Bosonen und Fermionen :

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_n &:= \hat{P}_B \mathfrak{H}_n \ , \\ \mathfrak{F}_n &:= \hat{P}_F \mathfrak{H}_n \ . \end{aligned} \tag{5.1.6}$$

Sei jetzt $\pi(P)$ die Parität einer Permutation P von $(1, 2, \ldots, n)$, also die Anzahl der Vertauschungen von je zwei Elementen, um $(P(1), P(2), \ldots, P(n))$ in $(1, 2, \ldots, n)$ zu überführen, dann können wir die Projektoren $\hat{P}_B$ und $\hat{P}_F$ folgendermaßen konstruieren:

$$\hat{P}_B \mid k_1 k_2 \ldots k_n) := \frac{1}{n!} \sum_P \mid k_{P(1)} k_{P(2)} \ldots k_{P(n)}) \ ,$$

$$\hat{P}_F \mid k_1 k_2 \ldots k_n) := \frac{1}{n!} \sum_P (-1)^{\pi(P)} \mid k_{P(1)} k_{P(2)} \ldots k_{P(n)}) \ .$$

Dies läßt sich zusammenfassen zu:

$$\hat{P} \mid k_1 k_2 \ldots k_n) := \frac{1}{n!} \sum_P \xi^{\pi(P)} \mid k_{P(1)} k_{P(2)} \ldots k_{P(n)}) \ ,$$

$$\text{mit:} \quad \xi := \begin{cases} +1 & \text{für Bosonen ,} \\ -1 & \text{für Fermionen .} \end{cases} \tag{5.1.7}$$

Dieser Operator $\hat{P}$ ist tatsächlich ein Projektor, denn es gilt $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ und $\hat{P}^2 = \hat{P}$:

$$\hat{P}^2 \mid k_1 k_2 \ldots k_n) = \frac{1}{n! n!} \sum_{P'} \sum_P \xi^{\pi(P')} \xi^{\pi(P)} \mid k_{P'(P(1))} k_{P'(P(2))} \ldots k_{P'(P(n))}) \ .$$

Sei $Q := P' \cdot P$, so gilt:

$$\xi^{\pi(P')} \xi^{\pi(P)} = \xi^{\pi(P') + \pi(P)} = \xi^{\pi(P' \cdot P)} = \xi^{\pi(Q)} \ ,$$

und damit folgt für $\hat{P}^2$:

$$\begin{aligned} \hat{P}^2 \mid k_1 k_2 \ldots k_n) &= \frac{1}{n!} \sum_{P'} \frac{1}{n!} \sum_Q \xi^{\pi(Q)} \mid k_{Q(1)} k_{Q(2)} \ldots k_{Q(n)}) \\ &= \frac{1}{n!} \sum_Q \xi^{\pi(Q)} \mid k_{Q(1)} k_{Q(2)} \ldots k_{Q(n)}) \\ &= \hat{P} \mid k_1 k_2 \ldots k_n) \ . \end{aligned} \tag{5.1.8}$$

Aus der Vollständigkeit der $\mid k_1 k_2 \ldots k_n)$ in $\mathfrak{H}_n$ folgt die Vollständigkeit der $\hat{P} \mid k_1 k_2 \ldots k_n)$ in $\hat{P} \mathfrak{H}_n$, also:

$$\sum_{k_1 k_2 \ldots k_n} \hat{P} \mid k_1 k_2 \ldots k_n) \, (k_1 k_2 \ldots k_n \mid \hat{P} = N \, \hat{1}_{\mathfrak{H}_n} \ . \tag{5.1.9}$$

Der hier auftauchende Normierungsfaktor N wird weiter unten bestimmt. Zuvor wollen wir aber noch die Besetzungszahlen- Darstellung und den Fock-Raum einführen. In einem n-Teilchen System im Zustand $\hat{P} \mid k_1 k_2 \ldots k_n)$ möge jetzt ein bestimmter Einteilchen-Zustand $\mid k^j\rangle$, mit $j = 1 \ldots m$, gerade n_j mal vorkommen. Für Fermionen kann n_j nur die Werte 0 oder 1 annehmen, für Bosonen muß lediglich $n_j \leq n$ gelten. Für Fermionen wie Bosonen gilt als Nebenbedingung die Erhaltung der Gesamtteilchenzahl: $n = \sum_{j=1}^{m} n_j$.

Als eine Abkürzung der Schreibweise führen wir die Besetzungszahlen-Darstellung ein:

$$\begin{aligned} &\mid n_{j_1} n_{j_2} \ldots n_{j_m}\rangle := \\ &\frac{1}{\sqrt{N}} \hat{P} \mid k_1^{j_1} k_2^{j_1} \ldots k_{n_{j_1}}^{j_1} \, k_{n_{j_1}+1}^{j_2} \ldots k_{n_{j_1}+n_{j_2}}^{j_2} \, \ldots \, k_{n_{j_1}+\cdots+n_{j_{m-1}}+1}^{j_m} \ldots k_{n_{j_1}+\cdots+n_{j_m}}^{j_m}) \, . \end{aligned} \tag{5.1.10}$$

Das heißt, der n-Teilchen Zustand ist gerade ein symmetrisierter oder antisymmetrisierter n-Teilchen Produktzustand, bei welchem sich die Teilchen $1 \ldots n_{j_1}$ im Einteilchen-Zustand $\mid k^{j_1}\rangle$, usw., befinden.

Damit schreibt sich die Vollständigkeitsrelation in $\mathfrak{B}_n$ und $\mathfrak{F}_n$ als:

$$\sum_{\substack{\{n_j\} \\ n=\sum_1^m n_j}} \mid n_{j_1} n_{j_2} \ldots n_{j_m}\rangle\langle n_{j_1} n_{j_2} \ldots n_{j_m} \mid = \hat{1}_{\mathfrak{B}_n|\mathfrak{F}_n} \, . \tag{5.1.11}$$

Der Fock-Raum wird jetzt definiert als die direkte Summe aller n-Teilchen Räume, also:

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &= \mathfrak{B}_0 \oplus \mathfrak{B}_1 \oplus \cdots \oplus \mathfrak{B}_n \oplus \cdots \, , \\ \mathfrak{F} &= \mathfrak{F}_0 \oplus \mathfrak{F}_1 \oplus \cdots \oplus \mathfrak{F}_n \oplus \cdots \, . \end{aligned} \tag{5.1.12}$$

Die Vollständigkeitsrelation im Fock-Raum kann also folgendermaßen geschrieben werden:

$$\mid 0\rangle\langle 0 \mid + \sum_{\substack{n_{j_1} \\ 1=\sum_1^m n_j}} \mid n_{j_1}\rangle\langle n_{j_1} \mid + \sum_{\substack{n_{j_1}, n_{j_2} \\ 2=\sum_1^m n_j}} \mid n_{j_1} n_{j_2}\rangle\langle n_{j_1} n_{j_2} \mid + \cdots = \hat{1}_{\mathfrak{B}|\mathfrak{F}} \, . \tag{5.1.13}$$

Jetzt soll noch die Normierung der symmetrisierten, bzw. antisymmetrisierten n-Teilchen Zustände bestimmt werden. Sei $\mid k_1' k_2' \ldots k_n')$ eine Permutation von $\mid k_1 k_2 \ldots k_n)$, dann gilt:

$$\begin{aligned} (k_1' k_2' \ldots k_n' \mid \hat{P}^2 \mid k_1 k_2 \ldots k_n) &= (k_1' k_2' \ldots k_n' \mid \hat{P} \mid k_1 k_2 \ldots k_n) \\ &= \frac{1}{n!} \sum_P \xi^{\pi(P)} \langle k_1' \mid k_{P(1)}\rangle\langle k_2' \mid k_{P(2)}\rangle \cdots \langle k_n' \mid k_{P(n)}\rangle \, . \end{aligned}$$

Wegen der Orthogonalität der $\mid k_j\rangle$ ergibt sich nur ein Beitrag ungleich 0 für diejenigen Permutationen P , welche die n_j-Teilmengen gleicher Einteilchen-Zustände $\mid k_j\rangle$ ineinander überführen, und das sind gerade $n_j!$ Permutationen.

$$(k_1'k_2'\dots k_n' \mid \hat{P}^2 \mid k_1k_2\dots k_n) = \begin{cases} \frac{n_1!\,n_2!\cdots n_m!}{n!} & \text{für Bosonen ,} \\ \frac{(-1)^{\pi(P)}}{n!} & \text{für Fermionen .} \end{cases} \tag{5.1.14}$$

Dies läßt sich mit ξ aus 5.1.7 wieder zusammenfassen (wobei für Fermionen alle $n_j! = 1$ sind):

$$(k_1'k_2'\dots k_n' \mid \hat{P}^2 \mid k_1k_2\dots k_n) = (\xi)^{\pi(P)}\,\frac{n_1!\,n_2!\,\cdots\,n_m!}{n!}\ . \tag{5.1.15}$$

Also ergibt sich für den Normierungsfaktor N:

$$N := (k_1k_2\dots k_n \mid \hat{P}^2 \mid k_1k_2\dots k_n) = \frac{\prod_{j=1}^m n_j!}{n!}\ . \tag{5.1.16}$$

Damit können wir für den normierten n-Teilchen Zustand $\mid n_{j_1}n_{j_2}\dots n_{j_m}\rangle$, den wir im folgenden manchmal auch als $\mid k_1k_2\dots k_n\rangle$ bezeichnen, (mit Ket-Klammer rechts, im Gegensatz zu den unsymmetrisierten Zuständen mit runder Klammer rechts), schreiben:

$$\mid k_1k_2\dots k_n\rangle := \mid n_{j_1}n_{j_2}\dots n_{j_m}\rangle = \sqrt{\frac{n!}{\prod_{j=1}^m n_j!}}\,\hat{P} \mid k_1k_2\dots k_n)\ . \tag{5.1.17}$$

5.2 Kohärente Zustände für Bosonen-Vielteichen-Systeme

Ein beliebiger Zustand $\mid \alpha\rangle$ im Fock-Raum kann als Linearkombination der n-Teilchen Zustände $\mid k_1k_2\dots k_n\rangle$ aus 5.1.17 dargestellt werden:

$$\mid \alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k_1\dots k_n}\bar{\Phi}_{k_1\dots k_n} \mid k_1\dots k_n\rangle\ . \tag{5.2.1}$$

Im folgenden werden wir aber ausschließlich eine Entwicklung von $\mid \alpha\rangle$ nach den $\mid n_{j_1}n_{j_2}\dots n_{j_m}\rangle$ der Besetzungszahlen Darstellung (ebenfalls 5.1.17) verwenden. Im Einteilchen-Zustand $\mid j_i\rangle$ befinden sich gerade n_{j_i}Teilchen des n-Teilchen-Systems. Dabei bezeichne $\{\mid j_i\rangle\}$ eine orthonormale Basis des Einteilchen-Systems. Da im folgenden eigentlich keine Verwechslungen in den Indizes möglich ist, vereinfachen wir die Schreibweise weiter zu: $\mid n_1n_2\dots n_m\rangle := \mid n_{j_1}n_{j_2}\dots n_{j_m}\rangle$, d.h. der Index $i = 1\dots m$ der n_i zählt die möglichen Einteilchen-Zustände ab. Wie bereits bei der Einführung der Besetzungszahlen Darstellung gesagt, kann m endlich oder (abzählbar) unendlich sein.

$$\mid \alpha\rangle = \sum_{n_1 n_2 \ldots n_m} \Phi_{n_1 n_2 \ldots n_m} \mid n_1 n_2 \ldots n_m\rangle \ . \tag{5.2.2}$$

Im Falle eines einzelnen harmonischen Oszillators konnten wir alle Einteilchen-Zustände mit jeweils einem einzigen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operator aufbauen. Wenn wir die Vernichtungs-Operatoren $\hat{c}_i$ auf die kohärenten Einteilchen-Zuständen anwenden, so erhalten wir (siehe 3.3):

$$\hat{c}_i \mid \alpha_i\rangle = \alpha_i \mid \alpha_i\rangle \ ,$$

mit

$$\mid \alpha_i\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha_i|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_i^n}{\sqrt{n!}} \mid n\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha_i|^2} e^{\alpha_i \hat{c}_i{}^\dagger} \mid 0\rangle \ .$$

Jetzt möge $\mid \alpha\rangle$ ein Eigenzustand aller Vernichtungs-Operatoren $\hat{c}_i$ zu den entsprechenden kohärenten Einteilchen-Zuständen sein! Wir definieren $\mid \alpha\rangle$ also durch die Forderung:

$$\hat{c}_i \mid \alpha\rangle = \alpha_i \mid \alpha\rangle \ . \tag{5.2.3}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} &\sqrt{n_i} \sum_{n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m} \Phi_{n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m} \mid n_1 n_2 \ldots (n_i - 1) \ldots n_m\rangle \\ &\quad = \alpha_i \sum_{n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m} \Phi_{n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m} \mid n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m\rangle \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\sqrt{n_i}\, \Phi_{n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m} = \alpha_i\, \Phi_{n_1 n_2 \ldots (n_i - 1) \ldots n_m} \quad \Rightarrow$$

$$\Phi_{n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m} = \frac{\alpha_i^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \Phi_{n_1 n_2 \ldots 0 \ldots n_m} = \frac{\alpha_1^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{\alpha_2^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \cdots \frac{\alpha_m^{n_m}}{\sqrt{n_m!}} \Phi_{00 \ldots 0 \ldots 0} \ .$$

Jetzt wählen wir $\Phi_{0\,0 \ldots 0 \ldots 0}$ so, daß $\mid \alpha\rangle$ auf 1 normiert wird, und dies ist, wie wir gleich sehen werden, gerade dann der Fall, wenn wir setzen:

$$\Phi_{00 \ldots 0 \ldots 0} = e^{-\frac{1}{2}|\alpha_1|^2} e^{-\frac{1}{2}|\alpha_2|^2} \cdots e^{-\frac{1}{2}|\alpha_m|^2} \cdots = e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2} \ . \tag{5.2.4}$$

Damit ergibt sich $\mid \alpha\rangle$ zu:

$$\mid \alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2} \sum_{n_1 n_2 \ldots n_m} \left(\prod_{i=1}^m \frac{\alpha_i^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \right) \mid n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m\rangle \ . \tag{5.2.5}$$

Mit 3.3.7 können wir einen Besetzungszahlen-Zustand vom Vakuum-Zustand her aufbauen:

$$|n_1 n_2 \dots n_m\rangle = \frac{\hat{c_1}^{\dagger n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{\hat{c_2}^{\dagger n_2}}{\sqrt{n_2!}} \cdots \frac{\hat{c_m}^{\dagger n_m}}{\sqrt{n_m!}} |0\rangle \,, \tag{5.2.6}$$

und daraus folgt für $|\,\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned} |\,\alpha\rangle &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2} \sum_{n_1 n_2 \dots n_m} \prod_{i=1}^m \frac{\alpha_i^{n_i} \hat{c_i}^{\dagger n_i}}{n_i!} \;|\,0\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2} \prod_{i=1}^m \sum_{n_1 n_2 \dots n_m} \frac{\alpha_i^{n_i} \hat{c_i}^{\dagger n_i}}{n_i!} \;|\,0\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2 + \sum_{i=1}^m \alpha_i \hat{c_i}^\dagger} \;|\,0\rangle \,. \end{aligned} \tag{5.2.7}$$

Für das Skalarprodukt zweier kohärenter Vielteilchen-Zustände ergibt sich analog zu den kohärenten Einteilchen-Zuständen (3.3.13):

$$\begin{aligned} \langle\alpha \mid \beta\rangle &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2 - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^m |\beta_j|^2} \sum_{\dots n_i' \dots} \sum_{\dots n_i \dots} \left(\prod_{i=1}^m \frac{\alpha_i^{*n_i'} \beta_i^{n_i}}{\sqrt{n_i'! n_i!}} \right) \\ &\quad \cdot \langle n_1' n_2' \dots n_i' \dots n_m' \mid n_1 n_2 \dots n_i \dots n_m\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m (|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2)} \sum_{\dots n_i' \dots} \sum_{\dots n_i \dots} \left(\prod_{i=1}^m \frac{\alpha_i^{*n_i'} \beta_i^{n_i}}{\sqrt{n_i'! n_i!}} \right) \delta_{n_1' n_1} \delta_{n_2' n_2} \cdots \delta_{n_i' n_i} \cdots \delta_{n_m' n_m} \\ &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m (|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2)} \sum_{\dots n_i \dots} \prod_{i=1}^m \frac{\alpha_i^{*n_i} \beta_i^{n_i}}{n_i!} \\ &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m (|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2)} \prod_{i=1}^m \sum_{\dots n_i \dots} \frac{\alpha_i^{*n_i} \beta_i^{n_i}}{n_i!} \\ &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m (|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2)} \prod_{i=1}^m e^{\alpha_i^* \beta_i} \\ &= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m (|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2)} e^{\sum_{i=1}^m \alpha_i^* \beta_i} \,, \end{aligned} \tag{5.2.8}$$

$$|\langle\alpha \mid \beta\rangle|^2 = e^{-\sum_{i=1}^m (|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2)} e^{\sum_{i=1}^m \alpha_i^* \beta_i} e^{\sum_{i=1}^m \beta_i^* \alpha_i} = e^{-\sum_{i=1}^m |\alpha_i - \beta_i|^2} \,. \tag{5.2.9}$$

Wir sehen also, daß die Normierung von $|\,\alpha\rangle$ in 5.2.4 tatsächlich zu $\langle\alpha \mid \alpha\rangle = 1$ führt.

Ebenso folgt die Vollständigkeits-Relation der kohärenten Vielteilchen-Zustände aus derjenigen der kohärenten Einteilchen-Zustände (3.3.16):

$$\begin{aligned}
\int (\prod_{k=1}^{m} \frac{d\alpha_k^* d\alpha_k}{2\pi}) \mid \alpha\rangle\langle\alpha \mid &= \int (\prod_{k=1}^{m} \frac{d\alpha_k^* d\alpha_k}{2\pi})\, e^{-\sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2} \sum_{\ldots n_i' \ldots} \sum_{\ldots n_i \ldots} \left(\prod_{i=1}^{m} \frac{\alpha_i^{*n_i'} \alpha_i^{n_i}}{\sqrt{n_i'! n_i!}} \right) \\
&\quad \cdot \mid n_1' n_2' \ldots n_i' \ldots n_m' \rangle \langle n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m \mid \\
&= \ldots \\
&= \sum_{\ldots n_i \ldots} \mid n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m \rangle \langle n_1 n_2 \ldots n_i \ldots n_m \mid \\
&= \hat{1}\ . \qquad (5.2.10)
\end{aligned}$$

Ein großer Vorteil der kohärenten Zustände und ein Grund für ihre beliebte Verwendung ist die einfache Form, die Matrixelemente von normalgeordneten Operatoren in Besetzungzahl-Darstellung annehmen. Ein Operator $\hat{A} := A(\hat{c}_i{}^\dagger, \hat{c}_i)$ heißt normalgeordnet, kurz : $A(\hat{c}_i{}^\dagger, \hat{c}_i)$: , wenn alle Erzeugungs-Operatoren $\hat{c}_i{}^\dagger$ links von den jeweiligen Vernichtungs-Operatoren $\hat{c}_i$ stehen. Seien $\mid \alpha\rangle$ und $\mid \beta\rangle$ zwei kohärente Zustände, dann folgt aus 5.2.3 und 5.2.8:

$$\langle\alpha \mid: A(\hat{c}_i{}^\dagger, \hat{c}_i) :\mid \beta\rangle = e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m (|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2)}\, e^{\sum_{i=1}^m \alpha_i^* \beta_i}\, A(\alpha_i^*, \beta_i)\ . \qquad (5.2.11)$$

Ebenso einfach stellt sich die Spur für normalgeordnete Operatoren dar. Sei $\{\mid q\rangle\}$ ein beliebiger vollständiger Satz von Zustandsvektoren im Fock-Raum, dann folgt für die Spur von : $\hat{A}$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sp}(\hat{A}) &= \sum_l \langle q_l \mid \hat{A} \mid q_l\rangle = \int (\prod_{k=1}^{m} \frac{d\alpha_k^* d\alpha_k}{2\pi}) \sum_l \langle q_l \mid \alpha\rangle\langle\alpha \mid \hat{A} \mid q_l\rangle \\
&= \int (\prod_{k=1}^{m} \frac{d\alpha_k^* d\alpha_k}{2\pi}) \sum_l \langle\alpha \mid \hat{A} \mid q_l\rangle\langle q_l \mid \alpha\rangle = \int (\prod_{k=1}^{m} \frac{d\alpha_k^* d\alpha_k}{2\pi}) \langle\alpha \mid \hat{A} \mid \alpha\rangle \\
&= \int (\prod_{k=1}^{m} \frac{d\alpha_k^* d\alpha_k}{2\pi})\, A(\alpha_i^*, \alpha_i)\ . \qquad (5.2.12)
\end{aligned}$$

5.3 Pfadintegral mit kohärenten Zuständen

Das Pfadintegral mit kohärenten Zuständen wird völlig analog zum gewöhnlichen Pfadintegral abgeleitet, nur daß an den Punkten zwischen Anfangs- und Endzustand jetzt nicht Ortszustände eingeschoben werden, sondern jeweils ein vollständiger Satz von kohärenten Zuständen. Hier folgen wir im wesentlichen der Darstellung von Negele u. Orland (1998). Für eine vertiefte Diskussion siehe Klauder (2010).

Seien $\mid \alpha(i)\rangle$ der kohärente Anfangszustand zum Zeitpunkt t_i und $\mid \alpha(f)\rangle$ der kohärente Endzustand zum Zeitpunkt t_f.

Dann wird der kohärente Propagator definiert als:

$$U(\alpha_i^*(f), t_f, \alpha_i(i), t_i) := \langle \alpha(f), t_f \mid \alpha(i), t_i\rangle = \langle \alpha(f) \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_f - t_i)} \mid \alpha(i)\rangle \ . \qquad (5.3.1)$$

Das Zeitintervall $[t_i, t_f]$ wird jetzt in M gleiche Zeitintervalle der Länge $\epsilon := (t_f - t_i)/M$ zerlegt. Der Anfangszustand werde als $\mid \alpha_0\rangle :=\mid \alpha(i)\rangle$ mit den Komponenten $\alpha_{i,0}$ bezeichnet und der Endzustand entsprechend als $\mid \alpha_M\rangle :=\mid \alpha(f)\rangle$ mit den Komponenten $\alpha_{i,M}$. Dabei zählt der Index $i = 1 \ldots m$ die Einteilchen-Zustände ab. An den Zeitpunkten $\epsilon \cdot k$ mit $k = 1 \ldots M-1$ wird jeweils ein vollständiger Satz von kohärenten Zuständen $\mid \alpha_k\rangle :=\mid \alpha(k)\rangle$ mit den Komponenten $\alpha_{i,k}$ eingeschoben:

$$\int (\prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha_i^* d\alpha_i}{2\pi}) \mid \alpha(k)\rangle\langle\alpha(k) \mid = \hat{1} \ .$$

Wir gehen hier der Einfachheit halber davon aus, daß der Hamilton-Operator $\hat{H} = H(\hat{c_i}^\dagger, \hat{c_i})$ normalgeordnet sei, kurz : $H(\hat{c_i}^\dagger, \hat{c_i})$: , daß also alle $\hat{c_i}^\dagger$-Operatoren links von den jeweiligen $\hat{c_i}$-Operatoren stehen. Dann können wir den im folgenden auftretenden infinitesimalen Zeitentwicklungs-Operator durch einen normalgeordneten Zeitentwicklungs-Operator ersetzen, denn:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\hat{c_i}^\dagger, \hat{c_i})} - : e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\hat{c_i}^\dagger, \hat{c_i})} : = \sum_{n=2}^{\infty} (-\frac{i}{\hbar}\epsilon)^n (\hat{H}^n - : \hat{H}^n :) = O(\epsilon^2)\cdot\hat{1} \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
U(\alpha_i^*(f), t_f \, , \, \alpha_i(i), t_i) &= \langle \alpha(f) \mid e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_f - t_i)} \mid \alpha(i)\rangle \\
&= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha_{i,k}^* d\alpha_{i,k}}{2\pi}) \prod_{k=1}^{M} \langle \alpha(k) \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\hat{c_i}^\dagger, \hat{c_i})} \mid \alpha(k-1)\rangle \\
&= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha_{i,k}^* d\alpha_{i,k}}{2\pi}) \prod_{k=1}^{M} \langle \alpha(k) \mid : e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\hat{c_i}^\dagger, \hat{c_i})} : + O(\epsilon^2)\cdot\hat{1} \mid \alpha(k-1)\rangle \\
&= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha_{i,k}^* d\alpha_{i,k}}{2\pi}) \prod_{k=1}^{M} \langle \alpha(k) \mid \alpha(k-1)\rangle \, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\alpha_{i,k}^*, \alpha_{i,k-1})} \\
&= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha_{i,k}^* d\alpha_{i,k}}{2\pi}) \\
&\quad \cdot \prod_{k=1}^{M} \left[e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(|\alpha_{i,k}|^2 + |\alpha_{i,k-1}|^2)} \, e^{\sum_{i=1}^{m}(\alpha_{i,k}^* \alpha_{i,k-1})} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\alpha_{i,k}^*, \alpha_{i,k-1})} \right] \\
&= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha_{i,k}^* d\alpha_{i,k}}{2\pi})
\end{aligned}$$

$$\cdot \left[e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(|\alpha_{i,0}|^2+|\alpha_{i,M}|^2)} \, e^{-\sum_{k=1}^{M-1}\sum_{i=1}^{m}|\alpha_{i,k}|^2} \, e^{\sum_{k=1}^{M}[\sum_{i=1}^{m}(\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k-1})-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k-1})]} \right]$$

$$= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(|\alpha_{i,0}|^2+|\alpha_{i,M}|^2)} \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1}\prod_{i=1}^{m}\frac{d\alpha^*_{i,k}d\alpha_{i,k}}{2\pi})$$

$$\cdot \left[e^{\sum_{i=1}^{m}|\alpha_{i,M}|^2} \, e^{\sum_{k=1}^{M}[\sum_{i=1}^{m}(-|\alpha_{i,k}|^2+\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k-1})-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k-1})]} \right]$$

$$= e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(|\alpha_{i,0}|^2+|\alpha_{i,M}|^2)} \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M-1}\prod_{i=1}^{m}\frac{d\alpha^*_{i,k}d\alpha_{i,k}}{2\pi})$$

$$\cdot \left[e^{\sum_{i=1}^{m}|\alpha_{i,M}|^2} \, e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{k=1}^{M}[i\hbar\sum_{i=1}^{m}\alpha^*_{i,k}\frac{1}{\epsilon}(\alpha_{i,k}-\alpha_{i,k-1})-H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k-1})]} \right] . \tag{5.3.2}$$

Der Übergang zur Pfadintegral-Darstellung geschieht, indem wir im $\lim_{M\to\infty}$ von der diskreten Darstellung der $\alpha_{i,k}$ mit $k = 1 \ldots M$ zu einer Trajektorie $\alpha_i(t)$ übergehen.

$$\frac{\partial\alpha_i(t)}{\partial t} := \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}(\alpha_{i,k}-\alpha_{i,k-1}) ,$$

$$\int_{t_i}^{t_f} dt\, f(\alpha_i^*(t)\,,\,\alpha_i(t)) := \lim_{\epsilon\to 0}\sum_{k=1}^{M}\epsilon f(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k}) ,$$

$$H(\alpha_i^*(t)\,,\,\alpha_i(t)) := H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k}) \approx H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k-1}) .$$

Das Integrationsmaß schreiben wir als Funktionalintegral, wobei aber die richtigen Randbedingungen zu berücksichtigen sind. In der Definition des Propagators (5.3.1) werden die Randwerte durch $\mid\alpha(i)\rangle$ und $\langle\alpha(f)\mid$ vorgegeben, d.h. in der diskreten Darstellung durch die Komponenten $\alpha_{i,0}$ und $\alpha^*_{i,M}$ und in der Trajektorien-Darstellung also durch $\alpha_i(t_i)$ und $\alpha_i^*(t_f)$:

$$N \cdot \int_{\alpha_i(t_i)}^{\alpha_i^*(t_f)} D[\alpha_i^*(t)\,\alpha_i(t)] := \lim_{M\to\infty}\int(\prod_{k=1}^{M-1}\prod_{i=1}^{m}\frac{d\alpha^*_{i,k}d\alpha_{i,k}}{2\pi}) ,$$

$$U(\alpha_i^*(f),t_f\,,\,\alpha_i(i),t_i) = e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(|\alpha_{i,0}|^2+|\alpha_{i,M}|^2)}\, N \cdot \int_{\alpha_i(t_i)}^{\alpha_i^*(t_f)} D[\alpha_i^*(t)\,\alpha_i(t)]$$

$$\cdot \left[e^{\sum_{i=1}^{m}|\alpha_i(t_f)|^2} \, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}dt\,[i\hbar\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^*(t)\frac{\partial\alpha_i(t)}{\partial t}-H(\alpha_i^*(t),\alpha_i(t))]} \right] . \tag{5.3.3}$$

Jetzt können wir noch von der Hamilton-Form des Pfadintegrals zur Lagrange-Form übergehen:

$$L(\alpha_i^*(t), \alpha_i(t)) := i\hbar \sum_{i=1}^{m} (\alpha_i^*(t) \frac{\partial \alpha_i(t)}{\partial t}) - H(\alpha_i^*(t), \alpha_i(t)) \ , \tag{5.3.4}$$

bzw. in Operatoren-Form geschrieben:

$$\hat{L} := i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \ ,$$

$$U(\alpha_i^*(f), t_f \,, \alpha_i(i), t_i) = e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(|\alpha_{i,0}|^2 + |\alpha_{i,M}|^2)} \, N' \cdot \int\limits_{\alpha_i(t_i)}^{\alpha_i^*(t_f)} D[\alpha_i^*(t)\, \alpha_i(t)]$$

$$\cdot \left[e^{\sum_{i=1}^{m} |\alpha_i(t_f)|^2} \, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\, L(\alpha_i^*(t), \alpha_i(t))} \right] \ . \tag{5.3.5}$$

Wie beim Feynmanschen Pfadintegral gilt auch hier, daß die Formulierungen von 5.3.3 und 5.3.5 mit der Summierung über alle Pfade von (q_i, t_i) nach (q_f, t_f) nur eine (suggestive) Abkürzung für den Grenzwert der Gitterpfadsumme 5.3.2 darstellt. Wenn man nämlich im umgekehrten Weg versucht, das Pfadintegral von 5.3.3 als Ausgangspunkt zu nehmen und daraus eine Diskretisierung abzuleiten, so zeigt sich, daß es nicht nur *eine* Diskretisierung gibt (5.3.2), sondern auch andere, physikalisch unzutreffende Diskretisierungen. Ein instruktives Beispiel dafür geben etwa Negele u. Orland (1998) (S. 134).

Ein wesentlicher Unterschied zwischen dem Feynmanschen Pfadintegral und dem kohärenten Pfadintegral ist die Abhängigkeit von $\hbar$. Im Feynmanschen Pfadintegral steht im Exponenten einfach $i/\hbar$, dagegen taucht im kohärenten Pfadintegral in der Langrange-Funktion ein weiterer Faktor $\hbar$ auf. Daher unterscheiden sich die aus den beiden Pfadintegralen ableitbaren Störungsreihen und es hängt vom jeweiligen physikalischen System ab, welcher Ansatz eine bessere Näherung darstellt.

5.4 Zustandssumme für Bosonen-Vielteichen-Systeme

Die großkanonische Zustandssumme ist als Spur über $e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})}$ definiert und dies können wir als Pfadintegral mit kohärenten Zuständen schreiben:

$$Z := \mathrm{Sp}(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})}) = \int (\prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha_i^* d\alpha_i}{2\pi}) \, \langle \alpha \mid e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})} \mid \alpha \rangle \ . \tag{5.4.1}$$

Wir gehen im Pfadintegral 5.3.1 mit $\tau := (i/\hbar)t$ zu imaginären Zeiten über (Wick-Rotation), so daß wir statt dem Pfadintegral über $t \in [t_i, t_f]$ jetzt ein Pfadintegral über

$\tau \in [0, \beta]$ erhalten. Damit ist dann $\epsilon = \frac{\beta}{M}$. Bei der Spurbildung sind der Anfangszustand $\mid \alpha(0)\rangle$ und der Endzustand $\mid \alpha(\beta)\rangle$ des Propagators gleich, d.h. $\alpha_{i,0} = \alpha_{i,M}$, so daß im Pfadintegral also über alle zyklischen Trajektorien zu summieren ist.

$$Z = \int (\prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha^*_{i,M} d\alpha_{i,M}}{2\pi}) \, \langle \alpha(\beta) \mid e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})} \mid \alpha(0)\rangle$$

$$= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha^*_{i,M} d\alpha_{i,M}}{2\pi}) \, (\prod_{k=1}^{M-1} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha^*_{i,k} d\alpha_{i,k}}{2\pi})$$

$$\cdot \left[e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(|\alpha_{i,0}|^2 + |\alpha_{i,M}|^2)} \, e^{-\sum_{k=1}^{M-1}\sum_{i=1}^{m}|\alpha_{i,k}|^2} \, e^{\sum_{k=1}^{M}[\sum_{i=1}^{m}(\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k-1})(1+\epsilon\mu) - \epsilon H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k-1})]} \right]$$

$$= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha^*_{i,k} d\alpha_{i,k}}{2\pi})$$

$$\cdot \left[e^{-\sum_{k=1}^{M}[\sum_{i=1}^{m}|\alpha_{i,k}|^2} \, e^{\sum_{k=1}^{M}[\sum_{i=1}^{m}(\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k-1})(1+\epsilon\mu) - \epsilon H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k-1})]} \right]$$

$$= \lim_{M\to\infty} \int (\prod_{k=1}^{M} \prod_{i=1}^{m} \frac{d\alpha^*_{i,k} d\alpha_{i,k}}{2\pi})$$

$$\cdot \left[e^{-\epsilon\sum_{k=1}^{M}[\sum_{i=1}^{m}(\alpha^*_{i,k}(\frac{1}{\epsilon}(\alpha_{i,k}-\alpha_{i,k-1}) - \mu\alpha_{i,k-1})) + H(\alpha^*_{i,k},\alpha_{i,k-1})]} \right] \ . \tag{5.4.2}$$

Der Übergang zur Pfadintegral-Darstellung geschieht, indem wir wieder im $\lim_{M\to\infty}$ von der diskreten Darstellung der $\alpha_{i,k}$ mit $k = 1 \ldots M$ zu einer Trajektorie $\alpha_i(t)$ übergehen.

$$Z = N \cdot \int_{\alpha_i(0)}^{\alpha_i(\beta)=\alpha_i(0)} D[\alpha^*_i(\tau)\,\alpha_i(\tau)] \cdot e^{\int_0^\beta d\tau\,[\sum_{i=1}^{m}(\alpha^*_i(\tau)(\frac{\partial}{\partial t}-\mu)\alpha_i(\tau)) + H(\alpha^*_i(\tau),\alpha_i(\tau))]} \ . \tag{5.4.3}$$

5.5 Nichtwechselwirkende Bosonen-Vielteilchen-Systeme

Wir wählen eine Basis, in der $\hat{H} = H(\hat{c}_i{}^\dagger, \hat{c}_i) =: H(\hat{c}_i{}^\dagger, \hat{c}_i)$: diagonal ist.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{m} E_i \hat{c}_i{}^\dagger \hat{c}_i \ . \tag{5.5.1}$$

Aus 5.4.2 und $\epsilon := \frac{\beta}{M}$ folgt:

$$Z = \lim_{M\to\infty} \prod_{i=1}^{m} \left[\int (\prod_{k=1}^{M} \frac{d\alpha^*_{i,k} d\alpha_{i,k}}{2\pi}) \cdot e^{-\sum_{k,k'=1}^{M} \alpha^*_{i,k} S^{(i)}_{k,k'} \alpha_{i,k'}} \right] \tag{5.5.2}$$

$$\alpha^*_{i,k} S^{(i)}_{k,k'} \alpha_{i,k'} := -\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k}\,\delta_{k',k} + [\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k-1} - \frac{\beta}{M}(E_i-\mu)\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k-1}]\,\delta_{k',k-1}\;.$$

Mit $\alpha_{i,0} = \alpha_{i,M}$ und $a := 1 - \frac{\beta}{M}(E_i - \mu)$ sieht die Matrix $S^{(i)}$ folgendermaßen aus:

$$S^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -a \\ -a & 1 & 0 & & & 0 \\ 0 & -a & 1 & \ddots & & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & & \ddots & -a & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -a & 1 \end{pmatrix}\;. \tag{5.5.3}$$

Damit wir 4.7.7 anwenden können, soll zunächst gezeigt werden, daß $S^{(i)}$ normal ist. Dabei verwenden wir wieder $\alpha_{i,0} = \alpha_{i,M}$ und $\alpha_{i,1} = \alpha_{i,M+1}$:

$$\begin{aligned} \|S^{(i)\dagger} \mid \alpha_i\rangle\| &= \|(\alpha_{i,1} - a\alpha_{i,2},\, \alpha_{i,2} - a\alpha_{i,3},\, \ldots\,,\, \alpha_{i,M} - a\alpha_{i,1})\| \\ &= \sum_{k=1}^{M}(|\alpha_{i,k}|^2 - 2a\,\Re(\alpha_{i,k}\alpha^*_{i,k+1}) + a^2|\alpha_{i,k+1}|^2) \\ &= \sum_{k=1}^{M}|\alpha_{i,k}|^2 - 2a\sum_{k=1}^{M}\Re(\alpha^*_{i,k}\alpha_{i,k+1}) + a^2\sum_{k=1}^{M}|\alpha_{i,k+1}|^2 \\ &= \sum_{k=1}^{M}|\alpha_{i,k}|^2 - 2a\sum_{k=1}^{M}\Re(\alpha^*_{i,k-1}\alpha_{i,k}) + a^2\sum_{k=1}^{M}|\alpha_{i,k-1}|^2\;, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|S^{(i)} \mid \alpha_i\rangle\| &= \|(\alpha_{i,1} - a\alpha_{i,M},\, \alpha_{i,2} - a\alpha_{i,1},\, \ldots\,,\, \alpha_{i,M} - a\alpha_{i,M-1})\| \\ &= \sum_{k=1}^{M}(|\alpha_{i,k}|^2 - 2a\,\Re(\alpha_{i,k}\alpha^*_{i,k-1}) + a^2|\alpha_{i,k-1}|^2)\;, \end{aligned}$$

$$\|S^{(i)\dagger} \mid \alpha_i\rangle\| = \|S^{(i)} \mid \alpha_i\rangle\|\;.$$

Also ist $S^{(i)}$ normal und wir können die Berechnung des Gaußschen Integrals in der Zustandssumme auf die Berechnung der Determinante von $S^{(i)}$ zurückführen:

$$\det S^{(i)} = (1 + (-1)^{M-1}(-a)^M) = (1 - a^M) = \left(1 - (1 - \frac{\beta(E_i-\mu)}{M})^M\right)\;.$$

Hier erkennen wir die Definitions-Gleichung der Exponential-Funktion:

$$\lim_{M\to\infty} (1 + \frac{x}{M})^M = e^x \ ,$$

und damit folgt

$$\lim_{M\to\infty} \det S^{(i)} = 1 - e^{-\beta(E_i-\mu)} \ .$$

Also erhalten wir für die Zustandssumme Z und das großkanonische Potential Ω eines nichtwechselwirkenden Bosonen-Vielteilchen-Systems die bekannten Ausdrücke:

$$Z = \lim_{M\to\infty} \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{\det S^{(i)}} = \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_i-\mu)}} \ , \tag{5.5.4}$$

$$\Omega = -kT \ \ln Z = kT \sum_{i=1}^{m} \ln(1 - e^{-\beta(E_i-\mu)}) \ . \tag{5.5.5}$$

wobei das chemische Potential μ, bzw. die Fugazität $z := e^{\beta\mu}$ gerade so zu bestimmen sind, daß die vorgegebene mittlere Teilchenzahl N angenommen wird:

$$N(T,V,\mu) = -\left.\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right|_{T,V} = -kT \sum_{i=1}^{m} \frac{-\beta e^{-\beta(E_i-\mu)}}{1 - e^{-\beta(E_i-\mu)}} = \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{e^{\beta(E_i-\mu)} - 1} \ . \tag{5.5.6}$$

Der einzelne Summand in 5.5.6 ist gerade $\langle n_i \rangle$, wie man folgendermaßen sehen kann:

$$\langle n_i \rangle = \left.\frac{\partial\Omega}{\partial E_i}\right|_{\mu,V,E_k\neq E_i} = kT \, \frac{(-\beta)(-e^{-\beta(E_i-\mu)})}{1 - e^{-\beta(E_i-\mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(E_i-\mu)} - 1} \ . \tag{5.5.7}$$

Da nun $\langle n_i \rangle \geq 0$ sein muß, folgt $E_i > \mu$, und wenn $E_1 = 0$ ist, muß also gelten: $\mu < 0$, bzw. $z < 1$.

Aus dem großkanonischen Potential 5.5.5 folgen alle anderen thermodynamischen Zusammenhänge mittels:

$$\begin{aligned} S(T,V,\mu) &= -\left.\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right|_{V,\mu} \ , \\ p(T,V,\mu) &= -\left.\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right|_{T,\mu} \ , \\ \Omega(T,V,\mu) &= U - TS - \mu N = -pV \ . \end{aligned} \tag{5.5.8}$$

5.5.1 Nichtwechselwirkende harmonische Oszillatoren

Wir betrachten als erstes Beispiel ein System nichtwechselwirkender harmonischer Oszillatoren, wobei wir die Nullpunkt-Energie weglassen (was der Verwendung des normalgeordneten Hamilton-Operators entspricht).

Für die Energie-Eigenwerte gelte also: $E(i) := E_i = \hbar\omega i$ mit $i = 0 \ldots \infty$. Da wir die Summe im großkanonischen Potential 5.5.5 in ein Integral umwandeln wollen, müssen wir den Grundzustands-Term mit $E_0 = 0$, der ja im Integral nur einen Beitrag von 0 liefern würde, aus der Summe herausnehmen und explizit behandeln.

$$\begin{aligned}
\Omega(T, V, \mu) &= kT \sum_{i=1}^{\infty} \ln(1 - ze^{-\beta E_i}) + kT \ln(1-z) \\
&\approx kT \int_0^{\infty} di \ln(1 - ze^{-\beta E(i)}) + kT \ln(1-z) \\
&= \frac{kT}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} dE \ln(1 - ze^{-\beta E}) + kT \ln(1-z) \\
&= \frac{kT}{\hbar\omega} \Big[E \ln(1 - ze^{-\beta E})\Big]_0^{\infty} - \frac{kT}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} dE\, E \frac{z\beta e^{-\beta E}}{1 - ze^{-\beta E}} + kT \ln(1-z) \; .
\end{aligned}$$

Der erste Term aus der partiellen Integration verschwindet an der Ober- und Untergrenze (es ist $z < 1$).

$$\begin{aligned}
\Omega(T, V, \mu) &= -\frac{1}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} dE \, \frac{E^{2-1}}{z^{-1}e^{\beta E} - 1} + kT \ln(1-z) \\
&= -\frac{1}{\hbar\omega\beta^2} \int_0^{\infty} dx \, \frac{x^{2-1}}{z^{-1}e^{x} - 1} + kT \ln(1-z) \\
&= -\frac{(kT)^2}{\hbar\omega} \Gamma(2) \cdot g_2(z) + kT \ln(1-z) \\
&= -\frac{(kT)^2}{\hbar\omega} g_2(z) + kT \ln(1-z) \; . \qquad (5.5.9)
\end{aligned}$$

Dabei haben wir die Funktion $g_2(z)$ eingeführt mit:

$$\begin{aligned}
g_n(z) &:= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dx \, \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^{x} - 1} = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dx \, (ze^{-x}) \, \frac{x^{n-1}}{1 - ze^{-x}} \\
&= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dx \, x^{n-1} \, (ze^{-x}) \sum_{k=0}^{\infty} (ze^{-x})^k = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dx \, x^{n-1} \sum_{k=1}^{\infty} z^k e^{-xk}
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty dx\, x^{n-1} \sum_{k=1}^\infty z^k e^{-xk} = \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{k=1}^\infty z^k \int_0^\infty dx\, x^{n-1}\, e^{-xk}$$

$$= \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^n} \int_0^\infty dy\, y^{n-1}\, e^{-y} = \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^n}\, \Gamma(n) = \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^n} \; .$$

Wir finden also für $g_n(z)$:

$$g_n(z) := \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty dx\, \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x - 1} = \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^n} \; . \tag{5.5.10}$$

Die Funktion $g_n(z)$ ist monton wachsend und sie wird nach oben ($z = 1$) durch die Riemannsche Zeta-Funktion $\zeta(n)$ beschränkt:

$$g_n(z) \leq g_n(1) = \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^n} = \zeta(n) \; . \tag{5.5.11}$$

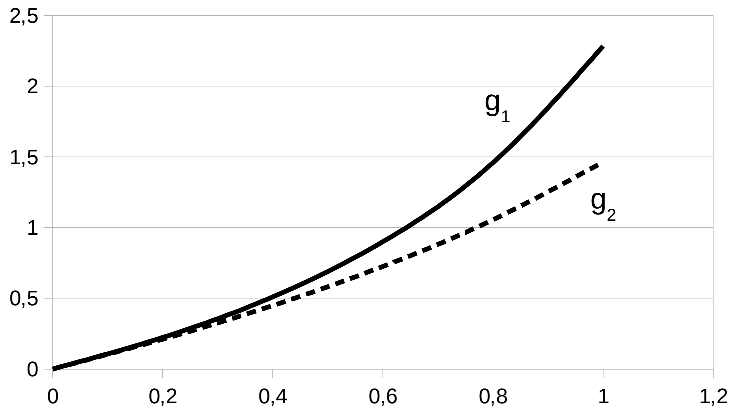


Abbildung 5.1: $g_n(z)$

Im Ausdruck 5.5.9 für das großkanonische Potential stellt der erste Term gerade den klassischen Grenzfall dar und der zweite Term den Beitrag des Grundzustandes $E_0 = 0$, der ja nur bei tiefen Temperaturen wesentlich bevölkert ist (Bose-Einstein-Kondensat). Jedoch eignet sich 5.5.9 nicht besonders, um hier den $\lim_{T\to\infty}$, oder $\lim_{\hbar\to 0}$ durchzuführen, da $kT\ \ln(1-z)$ scheinbar divergent wird - tatsächlich ist aber z, bzw. μ, eine Funktion von T und gerade so zu bestimmen, daß die vorgegebene mittlere Teilchenzahl N angenommen wird. Man könnte jetzt 5.5.6 genauer untersuchen, um festzustellen, daß im $\lim_{T\to\infty}$gilt: $z \to 0$, bzw. $\mu \to -\infty$. Dies soll im nächsten Beispiel (freie Teilchen im Kasten) gezeigt werde. Hier jedoch läßt sich der klassische Grenzfall leichter folgendermaßen ableiten:

$$\Omega(T,V,\mu) = kT \sum_{i=0}^\infty \ln(1 - ze^{-\beta\hbar\omega i}) = kT \sum_{i=0}^\infty (-1) \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k e^{-\beta\hbar\omega ik}}{k}$$

$$= -kT \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k} \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega k}} \; .$$

Im $\lim_{T\to\infty}$ oder $\lim_{\hbar\to 0}$ gilt $\beta\hbar\omega \to 0$:

$$\Omega(T,V,\mu) = -kT \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k} \frac{1}{\beta\hbar\omega k} = -\frac{(kT)^2}{\hbar\omega} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^2}$$

$$= -\frac{(kT)^2}{\hbar\omega}\, g_2(z) \; . \qquad (5.5.12)$$

5.5.2 Ideales Bose-Gas (freie Teilchen im Kasten)

Wir betrachten ein System nicht wechselwirkender Teilchen ohne Spin in einem kubischen Kasten, der von den Flächen $x=0$, $x=L$, $y=0$, $y=L$, $z=0$, $z=L$ begrenzt wird. Die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung liefert mit den Randbedingungen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla}^2\psi = E\psi \; ,$$

$$\psi(\overrightarrow{r}_{Rand}) = \psi(0,y,z) = \psi(x,0,z) = \psi(x,y,0) = 0 \; ,$$

$$\psi(\overrightarrow{r}_{Rand}) = \psi(L,y,z) = \psi(x,L,z) = \psi(x,y,L) = 0 \; ,$$

$$\psi_{\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}) = A\,\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z) \qquad \text{für } \overrightarrow{k} > 0 \; ,$$

$$\overrightarrow{k} = \frac{\pi}{L}\overrightarrow{i} \qquad \text{mit} \quad i_x, i_y, i_z = 1 \ldots L-1 \; ,$$

$$E_{\overrightarrow{k}} := E_{i_x i_y i_z} = \frac{\hbar \overrightarrow{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(i_x^2 + i_y^2 + i_z^2) \; ,$$

$$E_0 := E_{111} = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \qquad \text{ist die Grundzustands-Energie} \; . \qquad (5.5.13)$$

Da wir von einem makroskopischen Kasten ausgehen, also L sehr groß ist, können wir im folgenden $E_0 \approx 0$ annehmen. Wir berechnen das großkanonischen Potential 5.5.5, und da wir, wie oben bei den harmonischen Oszillatoren, die Summe in ein Integral umwandeln wollen, nehmen wir den Grundzustands-Term mit E_0 aus der Summe heraus und behandeln ihn explizit.

$$\Omega(T,V,\mu) = kT \sum_{i_x i_y i_z = 1}^{L-1} \ln(1 - z e^{-\beta E_{i_x i_y i_z}}) + kT\,\ln(1-z)$$

$$\approx kT \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty di_x di_y di_z \, \ln(1 - ze^{-\beta E_{i_x i_y i_z}}) + kT \, \ln(1-z) \; .$$

Hier erstreckt sich die Summation, bzw. die Integration über die $i_x i_y i_z$ nur über den ersten Oktanden. Da $E_{i_x i_y i_z} = E_{i_x i_y i_z}(i^2)$ ist, können wir die Integration auch über den ganzen $i_x i_y i_z$-Raum erstrecken. Außerdem gehen wir wieder von einer $i_x i_y i_z$-Integration zu einer Energie-Integration über mittels:

$$\begin{aligned} & E_i := E_{i_x i_y i_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} i^2 \quad \Rightarrow \\ & i = (\frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2})^{\frac{1}{2}} E_i^{\frac{1}{2}} \qquad \text{und} \quad di = (\frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2})^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} E_i^{-\frac{1}{2}} dE_i \; , \end{aligned} \tag{5.5.14}$$

$$\begin{aligned} \Omega(T,V,\mu) &= \frac{kT}{8} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty di_x di_y di_z \, \ln(1 - ze^{-\beta E_{i_x i_y i_z}}) + kT \, \ln(1-z) \\ &= \frac{4\pi kT}{8} \int_0^\infty di \, i^2 \, \ln(1 - ze^{-\beta E_{i_x i_y i_z}}) + kT \, \ln(1-z) \\ &= \frac{\pi kT}{2} (\frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2})^{\frac{3}{2}} \frac{1}{2} \int_0^\infty dE \, E^{\frac{1}{2}} \, \ln(1 - ze^{-\beta E}) + kT \, \ln(1-z) \\ &= \frac{2\pi kT \, V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dE \, E^{\frac{1}{2}} \, \ln(1 - ze^{-\beta E}) + kT \, \ln(1-z) \\ &= \frac{2\pi kT \, V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \left(\left[\frac{2}{3} E^{\frac{3}{2}} \, \ln(1 - ze^{-\beta E}) \right]_0^\infty - \int_0^\infty dE \, \frac{2}{3} \frac{E^{\frac{3}{2}} \beta z e^{-\beta E}}{1 - ze^{-\beta E}} \right) \\ &\quad + kT \, \ln(1-z) \; . \end{aligned}$$

Der erste Term aus der partiellen Integration verschwindet an der Ober- und Untergrenze (es ist $z < 1$).

$$\begin{aligned} \Omega(T,V,\mu) &= -\frac{4\pi V}{3h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dE \, \frac{E^{\frac{3}{2}}}{z^{-1} e^{\beta E} - 1} + kT \, \ln(1-z) \\ &= -\frac{4\pi V}{3h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\beta^{\frac{5}{2}}} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{\frac{5}{2}-1}}{z^{-1} e^x - 1} + kT \, \ln(1-z) \\ &= -kT \, \frac{4\pi V}{3} (\frac{2mkT}{h^2})^{\frac{3}{2}} \, \Gamma(\frac{5}{2}) \, g_{\frac{5}{2}}(z) + kT \, \ln(1-z) \end{aligned}$$

$$= -kT\,\frac{4\pi V}{3}\,(\frac{2mkT}{h^2})^{\frac{3}{2}}\,\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}\cdot\sqrt{\pi}\,g_{\frac{5}{2}}(z) + kT\,\ln(1-z)$$

$$= -kT\,V\,(\frac{2\pi mkT}{h^2})^{\frac{3}{2}}\,g_{\frac{5}{2}}(z) + kT\,\ln(1-z)$$

$$= -kT\,\frac{V}{\lambda^3}\,g_{\frac{5}{2}}(z) + kT\,\ln(1-z)\;. \tag{5.5.15}$$

Hierbei haben wir wieder $g_n(z)$ aus 5.5.9 verwendet und die Konstanten durch die 'thermischen Wellenlänge' $\lambda := (\frac{h^2}{2\pi mkT})^{\frac{1}{2}}$ ausgedrückt. Diese 'thermische Wellenlänge' ist definiert als die Wellenlänge eines freien quantenmechanischen Teilchens mit der Energie: $E := \pi kT = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$.

Für die vorgegebene mittlere Teilchenzahl N erhalten wir mit 5.5.6 und

$$N_0 := \frac{1}{e^{\beta(E_0-\mu)}-1} \approx \frac{1}{e^{-\beta\mu}-1} = \frac{1}{z^{-1}-1} = \frac{z}{1-z}\;,$$

$$N(T,V,\mu) = \sum_{i_x i_y i_z=1}^{L-1} \frac{1}{e^{\beta(E_{i_x i_y i_z}-\mu)}-1} + N_0$$

$$\approx \int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty di_x di_y di_z\,\frac{1}{z^{-1}e^{\beta E_{i_x i_y i_z}}-1} + N_0$$

$$= \frac{1}{8}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} di_x di_y di_z\,\frac{1}{z^{-1}e^{\beta E_{i_x i_y i_z}}-1} + N_0$$

$$= \frac{4\pi}{8}\int_0^\infty di\,i^2\,\frac{1}{z^{-1}e^{\beta E_{i_x i_y i_z}}-1} + N_0$$

$$= \frac{\pi}{2}\,(\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2})^{\frac{3}{2}}\,\frac{1}{2}\int_0^\infty dE\,E^{\frac{1}{2}}\,\frac{1}{z^{-1}e^{\beta E}-1} + N_0$$

$$= 2\pi\,(\frac{2mL^2}{h^2})^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty dE\,E^{\frac{1}{2}}\,\frac{1}{z^{-1}e^{\beta E}-1} + N_0$$

$$= 2\pi\,(\frac{2mL^2}{h^2})^{\frac{3}{2}}\,\frac{1}{\beta^{\frac{3}{2}}}\int_0^\infty dx\,\frac{x^{\frac{3}{2}-1}}{z^{-1}e^x-1} + N_0$$

$$= 2\pi V\,(\frac{2mkT}{h^2})^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty dx\,\frac{x^{\frac{3}{2}-1}}{z^{-1}e^x-1} + N_0$$

$$= 2\pi V\,(\frac{2mkT}{h^2})^{\frac{3}{2}}\,\Gamma(\frac{3}{2})\,g_{\frac{3}{2}}(z) + N_0$$

$$= 2\pi V\,(\frac{2mkT}{h^2})^{\frac{3}{2}}\,\frac{1}{2}\cdot\sqrt{\pi}\,g_{\frac{3}{2}}(z) + N_0$$

$$= V\,(\frac{2\pi mkT}{h^2})^{\frac{3}{2}}\,g_{\frac{3}{2}}(z) + N_0$$

$$= \frac{V}{\lambda^3}\,g_{\frac{3}{2}}(z) + N_0\;. \tag{5.5.16}$$

Jetzt wollen wir kurz noch die Temperatur-Abhängigkeit von z, bzw. von μ, und die damit verbundene Bose-Einstein-Kondensation (Ansammlung der Bosonen im Grundzustand E_0) betrachten.

$$N = N_E + N_0 := \frac{V}{\lambda^3}\,g_{\frac{3}{2}}(z) + N_0 = V\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}(z) + \frac{z}{1-z}\;, \tag{5.5.17}$$

$$N_E \le N_E^{max} = V\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \zeta(\frac{3}{2}) \approx 2.6\cdot V\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\;. \tag{5.5.18}$$

Für hohe Temperaturen und nicht zu große Dichten $n = \frac{N}{V}$ ist $N_E^{max} > N$ und nahezu alle Teilchen befinden sich in den höheren Enegieniveaus - also wird $z \approx 0$ sein, d.h. $\mu \approx -\infty$. Bei höheren Dichten oder bei sehr tiefen Temperaturen ($T \to 0$) werden die höheren Energieniveaus aber nicht mehr alle Teilchen aufnehmen können, da dann $N > N_E^{max}$ ist und mehr und mehr Teilchen werden den Grundzustand bevölkern: $N \approx N_0 \;\Rightarrow\; z \approx 1$, bzw. $\mu \approx 0$. Man kann eine kritische Temperatur T_c definieren, bei welcher der Übergang der Bosonen in den Grundzustand beginnt:

$$N = N_E^{max} \quad\Leftrightarrow\quad N = V\left(\frac{2\pi mkT_c}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \zeta(\frac{3}{2})\;,$$

$$kT_c = (\frac{n}{\zeta(\frac{3}{2})})^{\frac{2}{3}}\,\frac{h^2}{2\pi m}\;. \tag{5.5.19}$$

Für den Druck gilt nach 5.5.8:

$$p(T,V,\mu) = -\frac{1}{V}\,\Omega(T,V,\mu) = \frac{kT}{\lambda^3}\,g_{\frac{5}{2}}(z) - \frac{kT}{V}\,\ln(1-z)\;. \tag{5.5.20}$$

Hier können wir eine Unterscheidung in $T < T_c$ und $T > T_c$vornehmen.
Für kleine Temperaturen, d.h. $T < T_c$, gilt $z \to 1$:

$$p = \frac{kT}{\lambda^3}\,g_{\frac{5}{2}}(z) - \frac{kT}{V}\,\ln(1-z) \approx \frac{kT}{\lambda^3}\,\zeta(\frac{5}{2}) - \frac{kT}{V}\,\ln(\frac{1}{N}) = \frac{kT}{\lambda^3}\,\zeta(\frac{5}{2}) + kT\,\frac{\ln(N)}{V}\;.$$

Im thermodynamischen Grenzfall ($N \to \infty$, $V \to \infty$, $n = \frac{N}{V}$ = const.) verschwindet $\frac{\ln(N)}{V}$ und es gilt:

$$p = \frac{kT}{\lambda^3}\,\zeta(\frac{5}{2}) \qquad \text{für}\, T < T_c\,. \tag{5.5.21}$$

Für große Temperaturen, d.h. $T > T_c$, gilt $z < 1$ und damit ist $\ln(1-z)$ endlich und $\frac{\ln(1-z)}{V}$ verschwindet im thermodynamischen Grenzfall:

$$p = \frac{kT}{\lambda^3}\,g_{\frac{5}{2}}(z) - \frac{kT}{V}\,\ln(1-z) \approx \frac{kT}{\lambda^3}\,g_{\frac{5}{2}}(z) \approx \frac{kT}{\lambda^3}\,(z + \frac{z^2}{2^{\frac{5}{2}}} + \cdots)\,. \tag{5.5.22}$$

Aus 5.5.16 folgt bei hohen Temperaturen, wenn man nur den ersten Term der Entwicklungen von $g_{\frac{5}{2}}(z)$ und $g_{\frac{3}{2}}(z)$ berücksichtigt, das ideale Gasgesetz:

$$N = \frac{V}{\lambda^3}\,g_{\frac{3}{2}}(z) = \frac{V}{\lambda^3}\,(z + \frac{z^2}{2^{\frac{3}{2}}} + \cdots) \quad \Rightarrow \quad z \approx \frac{N}{V}\,\lambda^3 \quad \Rightarrow \quad p = \frac{kT}{\lambda^3}\,\frac{N}{V}\,\lambda^3 \quad \Rightarrow$$

$$pV = NkT\,. \tag{5.5.23}$$

5.5.3 Ultrarelativistisches Bose-Gas (Photonen)

Zunächst einmal muß man bei Teilchen mit Ruhemasse $m_0 = 0$ die Frage des chemischen Potentials μ diskutieren. In diesem Fall ist es nämlich gar nicht möglich, die Gesamtteilchenzahl N fest vorzugeben. Wegen der verschwindenden Ruhemasse ist es ja ohne Energieaufwand möglich, beliebig viele Teilchen im Zustand $E_0 = 0$ zu erzeugen und dem System ohne Kosten an Energie hinzuzufügen. Also setzen wir $\mu = 0$, bzw. $z = 1$, wodurch das großkanonische Potential $\Omega(T, V, \mu = 0)$ identisch mit der freien Energie $F(T, V)$ wird.

Wir betrachten nun ein System nicht wechselwirkender, relativistischer, masseloser Bosonen in einem Kasten mit den Kantenlängen L und mit (der Einfachheit halber) periodischen Randbedingungen. Die Lösung der stationären Maxwell-Wellengleichung, oder der Klein-Gordon-Gleichung mit Ruhemasse $m_0 = 0$ liefert dann:

$$\begin{aligned}
&-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 \psi = E^2 \psi\,,\\
&\psi(\vec{r}) := \psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L)\,,\\
&\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\,e^{i\vec{k}\vec{r}}\,,\\
&\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{i} \qquad \text{mit} \quad i_x, i_y, i_z = -L \ldots 0 \ldots (L-1)\,,\\
&E_{\vec{k}} = \hbar c|\vec{k}| = \frac{2\pi\hbar c}{L}\,(i_x^2 + i_y^2 + i_z^2)^{1/2}\,.
\end{aligned} \tag{5.5.24}$$

Wie oben wollen wir wieder das großkanonischen Potential 5.5.5 berechnen:

$$\Omega(T,V,\mu=0) = kT \sum_{i_x i_y i_z=-L}^{L-1} \ln(1-e^{-\beta E_{i_x i_y i_z}})$$
$$\approx kT \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} di_x di_y di_z \; \ln(1-e^{-\beta E_{i_x i_y i_z}}) \; .$$

Und wir gehen ebenfalls wieder von einer $i_x i_y i_z$-Integration zu einer Energie-Integration über mittels:

$$E_i := E_{i_x i_y i_z} = \hbar c \frac{2\pi}{L}\, i \quad \Rightarrow$$
$$i = (\frac{L}{2\pi\hbar c})\, E_i \qquad \text{und} \quad di = (\frac{L}{2\pi\hbar c})\, dE_i \; . \tag{5.5.25}$$

$$\Omega(T,V,\mu=0) = kT\, 4\pi \int_0^{\infty} di\, i^2 \; \ln(1-e^{-\beta E_i})$$
$$= kT\, \frac{4\pi V}{(hc)^3} \int_0^{\infty} dE\, E^2 \; \ln(1-e^{-\beta E})$$
$$= kT\, \frac{4\pi V}{(hc)^3} \left(\left[\frac{1}{3} E^3 \; \ln(1-ze^{-\beta E})\right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} dE\, \frac{1}{3}\, \frac{E^3 \beta e^{-\beta E}}{1-e^{-\beta E}} \right) \; .$$

Der erste Term aus der partiellen Integration verschwindet an der Ober- und Untergrenze (es ist $z < 1$).

$$\Omega(T,V,\mu=0) = -\frac{4\pi V}{3(hc)^3} \int_0^{\infty} dE\, \frac{E^3}{e^{\beta E}-1} = -\frac{4\pi V}{3(hc)^3}\, \frac{1}{\beta^4} \int_0^{\infty} dx\, \frac{x^{4-1}}{e^x - 1}$$
$$= -\frac{4\pi V}{3(hc)^3}\, \frac{1}{\beta^4}\, \Gamma(4)\, g_4(1) = -\frac{8\pi V}{(hc)^3}\, (kT)^4\, \zeta(4) \; . \tag{5.5.26}$$

Mit $g_4(1) = \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$ folgt also:

$$\Omega(T,V,\mu=0) = -\frac{8\pi V}{(hc)^3}\, \frac{\pi^4}{90}\, (kT)^4 \; . \tag{5.5.27}$$

Für die innere Energie ergibt sich mit 5.5.8:

$$U(T,V,\mu=0) = \Omega(T,V,\mu=0) - T\, \left.\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right|_{V,\mu} = \Omega - 4\Omega = -3\Omega \; , \tag{5.5.28}$$

und wenn wir hier 5.5.26 einsetzen und einen zusätzlichen Faktor 2 für die zwei Spin-Freiheitsgrade der Photonen berücksichtigen, so erhalten wir gerade die Plancksche Energieverteilung eines Schwarzen Körpers:

$$U(T,V)_{\text{Phot.}} = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \int_0^\infty dE \, \frac{E^3}{e^{\beta E} - 1} \; . \tag{5.5.29}$$

6 Regularisierung mit der spektralen Zeta-Funktion

6.1 Stephen Hawking (*1942)

Stephen Hawking wurde 1942 in Oxford geboren, wohin seine im Norden von London lebenden Eltern wegen der deutschen Luftangriffe auf London geflohen waren. Sein Vater arbeitete bei Stephens Geburt als Biologe am National Institute for Medical Research in London. Das Interesse von Stephen Hawking an Mathematik und Naturwissenschaften wurde wohl hauptsächlich durch seinen Mathematik-Lehrer geweckt. Er studierte dann Physik am University College in Oxford und sein Hauptinteresse galt Themodynamik, Relativität und Quantenmechanik. Hawkings Physik-Tutor in Oxford, R. Berman sagte später über seinen Schüler: „It was only necessary for him to know that something could be done, and he could do it without looking to see how other people did it. ... He didn't have very many books, and he didn't take notes. Of course, his mind was completely different from all of his contemporaries."

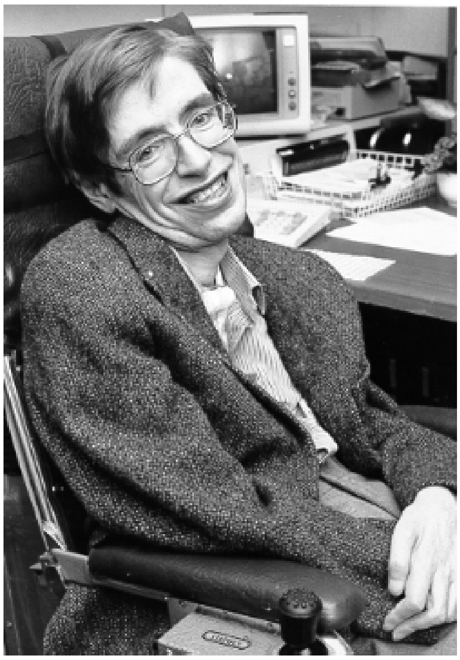


Abbildung 6.1: S. Hawking
NASA (1980), PD
[http://de.wikipedia.org/wiki
/Stephen_Hawking]

Nach seinem Batchelor-Abschluß 1962 wechselte Hawking zur Fortsetzung seines Studiums an die Universität Cambridge. Kurz danach wurde bei ihm die neuromuskuläre Krankheit ALS (Amyotrophe Lateralsklerose) diagnostiziert und ihm eine Lebenserwartung von 2-3 Jahren prognostiziert. Nachdem sich sein Gesundheitszustand etwas stabilisiert hatte, heirateten er und Jane Wilde und sie bekamen drei gesunde Kinder. Durch die Unterstützung seiner Frau und seines Doktorvaters Dennis Sciama hatte Hawking dann den Mut, 1965 mit seiner Doktorarbeit zu beginnen. Bei einem Gastaufenthalt 1985 am CERN in Genf erlitt Hawking eine Lungenentzündung, die einen Luftröhrenschnitt notwendig machte, wodurch Hawking seine Sprechfähigkeit verlor und nur noch über einen Sprachcomputer kommunizieren konnte. 1990 erfolgte die Scheidung von Jane Wilde. Danach lebte Hawking mit seiner

Pflegerin Elaine Mason zusammen und beide heiratete 1995. Im Jahr 2006 trennten sich Hawking und Mason.

Hawking hatte von 1979 bis zum Jahr 2009 den berühmten Lucasischen Lehrstuhl der Mathematik an der Universität von Cambridge inne, an dem vor ihm u.a. Newton und Dirac gewirkt hatten.

Seine wichtigsten Beiträge zur theoretischen und mathematischen Physik sind: die *Singularitäten-Sätze der Allgemeinen Relativitätstheorie* (zusammen mit Roger Penrose), das *No-Hair Theorem* (zusammen mit Carter, Israel, Robinson), welches besagt, daß ein klassisches Schwarzes Loch durch drei Größen (Masse, Drehimpuls, elektrische Ladung) vollständig beschrieben ist, die *Bekenstein-Hawking Strahlung* eines Schwarzen Loches. Im Zusammenhang mit seinen Forschungen zu einer quantenmechanischen Beschreibung von Schwarzen Löchern mit der Methode der Euklidischen Pfadintegral Quantengravitation führte Hawking die Methode der *Zeta-Funktions-Regularisierung* in die Physik ein (Hawking (1977)).

Darüber hinaus arbeitete Hawking über Quantenkosmologie, kosmische Inflation nach dem Big Bang, Topology und Struktur des Universums, Wurmlöcher, Yang-Mills Instantonen, Anti-de-Sitter-Räume, Entropie und Zeitpfeil, Supergravitation und String-Theorien, Gravitationswellen, und, und, und ...

Daneben verfaßte er eine Reihe populärwissenschaftlicher Bücher, am bekanntesten sind: „Eine kurze Geschichte der Zeit" (engl. 1988), „Das Universum in der Nussschale" (engl. 2001), „Giganten des Wissen" (engl. 2002), „Die kürzeste Geschichte der Zeit" (engl. 2005). Zusammen mit seiner Tochter Lucy veröffentlichte er auch zwei Kinderbücher.

Hawking erhielt sehr viele Preise, Auszeichnungen und Ehrungen, so etwa 1979 die 'Albert Einstein Medaille' und 1988 den 'Wolf Prize in Physics'. [Quelle: Wikipedia-Hawking (2010)]

6.2 Spektrale Zeta-Funktion bei bekanntem Spektrum

Sei $\hat{H}$ der Hamilton-Operator unseres Quantensystems, plus Randbedingungen, plus einem möglichen Hintergrundfeld, plus einer möglicherweise nichttrivialen Metrik (die eine gekrümmte Raumzeit beschreibt), so führt das alles aus mathematischer Sicht letztlich einfach zu einem entsprechenden Differential-Operator $\hat{A}$ mit gewissen Randbedingungen.

Das Auftreten von Divergenzen, insbesondere UV-Divergenzen in den Quantenfeldtheorien, zeigt aber, daß diese lokalen Theorien nicht bis zu beliebig kleinen Wellenlängen (d.h. hohen Energien) gültig sein können.

Damit stellt sich die Frage, ob es möglich ist im Rahmen der bisherigen Theorien gewisse Zusatzforderungen zu stellen, welche die genannten Divergenzen beseitigen und es uns erlauben diese Quantenfeldtheorien im Bereich niedriger oder mittlerer Energien sinnvoll zu verwenden. Diese Idee wurde tatsächlich in vielen Fällen unter den Begriffen

Regularisierung & Renormierung erfolgreich durchgeführt. Wir wollen uns hier nur mit dem Thema Regularisierung beschäftigen, und auch dieses Thema einschränken auf die Zeta-Funktion-Regularisierung.

Der einfachste, naheliegendste und auch gelegentlich angewandte Ansatz ist es natürlich, das (Energie-) Spektrum der Operators $\hat{A}$ nach oben mit einer Frequenz-Abschneide-Funktion $\chi(\omega, \omega_c)$ zu begrenzen.

Ein anderer Weg besteht darin, in unseren zu berechnenden physikalischen Größen auf definierte Weise die auftretenden Pole zu entfernen. Ein mathematisch besonders gut definierter und einsichtiger Weg besteht in der Methode der analytischen Fortsetzung in der komplexen Ebene. Man definiert die zu berechnende physikalische Größe zunächst in einem Bereich der komplexen Ebene, in welchem die Konvergenz gesichert ist und dehnt dann diese Definition mittels analytischer Fortsetzung auf jene Punkte aus, an denen man die physikalische Größe tatsächlich berechnen möchte (sofern dieser Punkt nicht gerade ein Pol ist). Als Vorbild dient das Vorgehen bei der Riemannsche Zeta-Funktion $\zeta(s)$, die ja als Reihe zunächst auch nur für Werte von $s > 1$ definiert ist, sich aber analytisch eindeutig auf die ganze komplexe Ebene (mit Ausnahme des Pols bei $(s = 1)$ fortsetzen läßt.

Die beiden prominentesten Methoden der Regularisierung durch analytische Fortsetzung sind die Dimensions-Regularisierung und die Zeta-Funktion-Regularisierung. Stephen Hawking hat gezeigt, daß die Dimensions-Regularisierung in gekrümmten Raumzeiten, etwa in der Schwarzschild-Metrik, sich nicht mehr eindeutig durchführen läßt und hat bei dieser Gelegenheit die Zeta-Funktion-Regularisierung in die Physik eingeführt, die wir im weiteren betrachten wollen.

Beginnen wir erneut mit den Pfadintegralen. Wir haben oben die Pfadintegrale als Grenzwerte einfach formal abgeleitet, ohne uns mit den problematischen Fragen der Existenz dieser Grenzwerte zu beschäftigen. Wenn man sich etwa das Funktionalintegral 4.6.3 als Grenzwert endlich-dimensionaler Integrale, 4.6.2, hinschreibt, also:

$$Z := \lim_{M\to\infty} Z_M := \lim_{M\to\infty} N'_M \cdot \int_{q(0)}^{q(1)} dq_0 \int \Big(\prod_{k=1}^{M-1} dq_k \Big) \prod_{k=1}^{M} e^{-\frac{1}{2}(q_k\, \hat{A}\, q_k)} \; .$$

dann kann man für jedes endliche M das Funktionalintegral Z_M als $Z_M = N'_M \cdot (\det \hat{A}_M)^{-1/2}$ berechnen (wobei man noch versuchen wird, N'_Min das Maß $\prod dq_k$ zu stecken). Man beachte auch, daß dq_0 und damit $\hat{A}$ so umskaliert werden müssen, daß $\hat{A}$ jetzt dimensionslos ist (siehe etwa die Herleitung von 4.10.8). Wenn die Folge dieser Z_M konvergiert, dann kann man die Determinante des Operators $\hat{A}$ (ein Operator in einem unendlichen Hilbert-Raums) als diesen Grenzwert $Z = \lim_{M\to\infty} Z_M$ definieren:

$$(\det \hat{A})^{-1/2} := Z = \lim_{M\to\infty} Z_M = \lim_{M\to\infty} (\det \hat{A}_M)^{-1/2} \; .$$

Manchmal aber, insb. in Quantenfeldtheorien, existiert dieser Grenzwert nicht, und es stellt sich dann die Frage, ob und ggf. wie man dem Funktionalintegral doch vielleicht eine sinnvolle Bedeutung geben kann.

Eine Methode der Regularisierung des obigen Funktionalintegrals ist es, als Verallgemeinerung der normalen Determinante eines Operators eine regularisierte Determinante des Operators $\hat{A}$ zu definieren. Wie oben bereits ganz allgemein gesagt, läßt man sich von der Idee der analytischen Fortsetzung in die komplexen Ebene leiten.

Sei $\hat{A}$ ein selbstadjungierter, nichtnegativer Operator mit den diskreten dimensionslosen Eigenwerten λ_i (wir setzen entsprechende Randbedingungen, z.B. System in einem endlichen Kasten voraus). Dann definieren wir die spektrale Zeta-Funktion $\zeta_{\hat{A}}(s)$ als:

$$\zeta_{\hat{A}}(s) := \sum_{i=1} \frac{1}{\lambda_i^s} \ . \tag{6.2.1}$$

Sei zum Beispiel $\hat{A} = \hat{n}$ der dimensionslose Hamilton-Operator des eindimensionalen Oszillators ohne Nullpunkt-Energie, also $\lambda_i = i$, dann ist die zugehörige spektrale Zeta-Funktion gerade die Riemannsche Zeta-Funktion $\zeta_{\hat{A}}(s) = \zeta_R(s)$:

$$\zeta_{\hat{A}}(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^s} = \zeta_R(s) \ .$$

Bei einem Spektrum von $\lambda_i = a(i+b)$ erhalten wir für $\zeta_{\hat{A}}(s)$ die Hurwitzsche Zeta-Funktion $\zeta_H(s)$ und bei einem Spektrum von $\lambda_i = a(i_1^2 + i_2^2)$ eine Epsteinsche Zeta-Funktion $\zeta_E(s)$.

Wenn das Spektrum bekannt ist und sich mittels einer der verallgemeinerten Zeta-Funktionen beschreiben läßt, so kann man als regularisierte spektrale Zeta-Funktion einfach die analytische Fortsetzung der entsprechenden Zeta-Funktion vom Riemann-, Hurwitz- oder Epstein-Typ verwenden.

6.3 Casimir-Effekt

Dieser Abschnitt stützt sich auf die Arbeiten von Elizalde (1995) und Hawking (1977). Es war ja insbesondere diese klassische Arbeit von Hawking, welche die Methode der Regularisierung mittels der spektralen Zeta-Funktion in der Physik etabliert hat.

Wir betrachten ein masseloses Skalarfeld (bzw. ein Photonenfeld) in einem Kasten mit den Kantenlängen $d*L*L$. Dieses Feld beschreiben wir mit der Klein-Gordon-Gleichung mit Ruhemasse $m_0 = 0$:

$$\Box\psi(\vec{r},t) := \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2\right)\psi(\vec{r},t) = 0 \ . \tag{6.3.1}$$

Für die Zeitabhängigkeit wählen wir wie üblich

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\, e^{i\omega t} \quad \Rightarrow \quad -c^2\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r}) = \omega^2\psi(\vec{r}) \ . \tag{6.3.2}$$

Wir wählen der Geometrie entsprechend Dirichlet-Randbedingungen

$$\psi(0,y,z) = \psi(x,0,z) = \psi(x,y,0) = 0 \; ,$$
$$\psi(d,y,z) = \psi(x,L,z) = \psi(x,y,L) = 0 \; , \tag{6.3.3}$$

und erhalten als Lösung

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{d^{1/2}L^{2/2}}\, e^{i\vec{k}\vec{r}} \; ,$$

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ \\ \vec{k_T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{d}n \\ \\ \frac{\pi}{L}\vec{i_T} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} n = -d\ldots 0 \ldots (d-1) \; , \\ i_y, i_z = -L \ldots 0 \ldots (L-1) \; , \end{cases}$$

$$\omega_{\vec{k}} = c\,|\,\vec{k}\,| = c\,((\frac{\pi}{d}n)^2 + \vec{k_T}^2)^{\frac{1}{2}} \; . \tag{6.3.4}$$

Die Nullpunkt-Energiedichte oder Vakuum-Energiedichte dieses Feldes ist

$$E_0 = \frac{1}{V}\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}} \tag{6.3.5}$$

$$= \frac{1}{V}\frac{\hbar c}{2}\sum_{n=-d}^{d-1}\sum_{i_y i_z=-L}^{L-1}((\frac{\pi}{d}n)^2 + \vec{k_T}(i_y,i_z)^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx \frac{1}{V}\frac{\hbar c}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} di_y di_z\,((\frac{\pi}{d}n)^2 + \vec{k_T}(i_y,i_z)^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{V}\frac{\hbar c}{2}\frac{L^2}{(2\pi)^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z\,((\frac{\pi}{d}n)^2 + k_y^2 + k_z^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{V}\frac{\hbar c}{2}\frac{L^2}{(2\pi)^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{0}^{\infty}(2\pi k)\,dk\,((\frac{\pi}{d}n)^2 + k^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{\hbar c}{4\pi d}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{0}^{\infty} dk\,k\,((\frac{\pi}{d}n)^2 + k^2)^{\frac{1}{2}} \; .$$

Offensichtlich divergiert diese Energiedichte wegen der hochfrequenten Anteile (UV-Divergenz). Die klassische Lösung dieses Problems stammt von Casimir aus dem Jahr 1948, siehe Greiner (1993), S. 159 ff. Casimir führt zunächst ein UV-Abschneideverfahren (UV-cutoff) ein, indem er E_0 durch ein $E_\lambda$ersetzt

$$E_\lambda = \frac{1}{V}\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}}\, e^{-\lambda\frac{\omega_{\vec{k}}}{c}} \; , \tag{6.3.6}$$

danach die Differenz der Energiedichten zweier verschiedener Kasten-Konfigurationen berechnet ($d \ll L$):

$$E_R(\lambda) := [E_\lambda(d, L, L) + E_\lambda(L-d, L, L)] - [E_\lambda(\frac{L}{2}, L, L) + E_\lambda(\frac{L}{2}, L, L)] \tag{6.3.7}$$

bildet und zum Schluß im Abschneideparameter den Grenzübergang $\lambda \to 0$ durchführt:

$$E_R := \lim_{\lambda \to 0} E_R(\lambda) \,. \tag{6.3.8}$$

Statt dieses Casimir-Verfahrens soll hier zur Regularisierung des Ausdrucks der Vakuum-Energiedichte die Regularisierung mittels der Zeta-Funktion Methode vorgeführt werden werden. E_0 ist bis auf einen Vorfaktor gerade gleich der spektralen Zeta-Funktion $\zeta_{\hat{A}}(s)$ mit $\hat{A} = (-c^2 \overrightarrow{\nabla}^2)^{1/2}$ an der Stelle $s = -1$. Wir berechnen also zunächst die Funktion $\tilde{E}_0(s) \sim \zeta_{\hat{A}}(s)$ mit einem $s \in \mathbb{R}$, $s > 0$ und wählen s so groß, daß $\tilde{E}_0(s)$ konvergiert. Anschließend setzen wir dieses $\tilde{E}_0(s)$, genau wie die Riemannsche Zeta-Funktion, analytisch fort zum Wert $s = -1$:

$$\tilde{E}_0(s) := \frac{\hbar}{2V} \sum_{\overrightarrow{k}} \omega_{\overrightarrow{k}}^{-s} = \frac{\hbar}{2V} \zeta_{\hat{A}}(s) \quad \text{mit} \quad E_0 = \tilde{E}_0(-1) \,, \tag{6.3.9}$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_0(s) &:= \frac{\hbar c}{4\pi d} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty dk \, \frac{k}{((\frac{\pi}{d}n)^2 + k^2)^{\frac{s}{2}}} \qquad (6.3.10) \\ &= \frac{\hbar c}{4\pi d} \int_0^\infty dk \, k^{1-s} + \frac{\hbar c}{4\pi d} 2 \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^\infty dk \, \frac{k}{((\frac{\pi}{d}n)^2 + k^2)^{\frac{s}{2}}} \,. \end{aligned}$$

Der erste Term $\int_0^\infty dk \, k^{1-s}$, der vom Summanden $n = 0$ (und damit letztlich von unseren periodischen Randbedingungen) herrührt, scheint für große positive s eine Infrarot-Divergenz zu ergeben. Wenn wir aber die Kastenlänge L endlich lassen, so ist der kleinstmögliche k-Wert gerade $\epsilon = \frac{2\pi}{L}$ und der Wert des Integrals $\sim \epsilon^{2-s}$. Setzen wir dies analytisch fort zu $s = -1$ und lassen erst dann das Kastenvolumen gegen unendlich gehen ($L \to \infty$, d.h. $\epsilon \to 0$), so sehen wir, daß der Beitrag dieses Integrals verschwindet.

$$\tilde{E}_0(s) = \frac{\hbar c}{2\pi d} \sum_{n=1}^{\infty} (\frac{\pi}{d}n)^{2-s} \int_0^\infty dk' \, \frac{k'}{(1 + k'^2)^{\frac{s}{2}}} \,.$$

Mit der Substitution $t = k'^2$, $k' = \sqrt{t}$, $dk' = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{t}} \, dt$ folgt:

$$\tilde{E}_0(s) = \frac{\hbar c}{2\pi d} \sum_{n=1}^{\infty} (\frac{\pi}{d}n)^{2-s} \int_0^\infty dt \, \frac{\frac{1}{2}}{(1+t)^{\frac{s}{2}}} = \frac{\hbar c}{4\pi d} \sum_{n=1}^{\infty} (\frac{\pi}{d}n)^{2-s} \int_0^\infty dt \, \frac{t^{(1)-1}}{(1+t)^{(1)+(\frac{s}{2}-1)}} \,.$$

Das Integral erkennt man mit C.4.2 (oder Abramowitz u. Stegun (1970), 6.2.1) gerade als einen speziellen Wert der Beta-Funktion, die dann mit C.4.3 (oder Abramowitz u. Stegun (1970), 6.2.2) auf ein Produkt von Gamma-Funktionen zurückgeführt werden kann:

$$\begin{aligned}\tilde{E}_0(s) &= \frac{\hbar c}{4\pi d}\sum_{n=1}^{\infty}(\frac{\pi}{d}n)^{2-s}\,B(1,\frac{s}{2}-1) = \frac{\hbar c}{4\pi d}\sum_{n=1}^{\infty}(\frac{\pi}{d}n)^{2-s}\,\frac{\Gamma(1)\Gamma(\frac{s}{2}-1)}{\Gamma(\frac{s}{2})} \\ &= \frac{\hbar c}{4\pi d}\,(\frac{\pi}{d})^{2-s}\frac{\Gamma(\frac{s}{2}-1)}{\Gamma(\frac{s}{2})}\sum_{n=1}^{\infty}n^{2-s} = \frac{\hbar c}{4\pi d}\,(\frac{\pi}{d})^{2-s}\frac{\Gamma(\frac{s}{2}-1)}{\Gamma(\frac{s}{2})}\,\zeta(s-2)\;.\end{aligned}$$

Mit Hilfe der Reflektionsformel für die Zeta-Funktion D.8.3 (oder Abramowitz u. Stegun (1970), 23.2.6):

$$\zeta(x) = 2^x\pi^{x-1}\sin(\frac{\pi x}{2})\Gamma(1-x)\zeta(1-x) \tag{6.3.11}$$

ergibt sich

$$\tilde{E}_0(s) = \frac{\hbar c}{4\pi d}\,(\frac{\pi}{d})^{2-s}\frac{\Gamma(\frac{s}{2}-1)}{\Gamma(\frac{s}{2})}\,2^{s-2}\pi^{s-3}\sin(\frac{\pi(s-2)}{2})\,\Gamma(3-s)\,\zeta(3-s)\;.$$

Jetzt werten wir $\tilde{E}_0(s)$ an der Stelle $s=-1$ aus:

$$\begin{aligned}E_0 = \tilde{E}_0(-1) &= \frac{\hbar c}{4\pi d}\,(\frac{\pi}{d})^3\frac{\Gamma(-\frac{3}{2})}{\Gamma(-\frac{1}{2})}\,2^{-3}\pi^{-4}\sin(\frac{-3\pi}{2})\,\Gamma(4)\,\zeta(4) \\ &= \frac{\pi^3}{4\pi}\cdot\frac{\Gamma(-\frac{3}{2})}{(-\frac{3}{2})\Gamma(-\frac{3}{2})}\cdot\frac{1}{8\pi^4}\cdot 1\cdot 6\cdot\frac{\pi^4}{90}\,\frac{\hbar c}{d^4} \\ &= -\frac{\pi^2}{720}\,\frac{\hbar c}{d^4}\;. \end{aligned}\tag{6.3.12}$$

In der Literatur (z.B. Greiner (1993), S. 163) findet man statt dem Wert E_0 für die Vakuum-Energiedichte üblicherweise die Energie $U(d) = E_0\cdot V = E_0\cdot d\cdot L^2$ angegeben:

$$U(d) = -\frac{\pi^2}{720}\,\frac{\hbar c L^2}{d^3}\;, \tag{6.3.13}$$

und für die anziehende Kraft pro Fläche zwischen den beiden Platten bei $x=0$ und $x=d$

$$\frac{1}{L^2}\,F = \frac{1}{L^2}\,(-\frac{\partial}{\partial d}\,U(d)) = -\frac{\pi^2}{240}\,\frac{\hbar c}{d^4}\;. \tag{6.3.14}$$

6.4 UV-Cutoff und spektrale Zeta-Funktion

Dieser Abschnitt stützt sich auf die Arbeit von Svaiter u. Svaiter (1993), die gezeigt haben, daß die Regularisierung des Ausdrucks der Vakuum-Energiedichte nach Casimir, d.h. mit einem UV-Abschneideverfahren (UV-cutoff) und der anschließenden Subtraktion des verbleibenden Pols, mathematisch äquivalent zur Regularisierung mittels der spektralen Zeta-Funktion ist.

Sei also ein Spektrum gegeben als eine Folge positiver Zahlen u_m , $m \in \mathbb{N}$ mit der Eigenschaft

$$0 < u_1 < u_2 < \dots \quad \text{und} \quad \lim_{m\to\infty} u_m = +\infty \, . \tag{6.4.1}$$

Zusätzlich zu Svaiter u. Svaiter (1993) setzen wir hier noch eine Wachstumsbedingung der $u_m$voraus:

$$u_m > m^\delta \quad \text{mit}\, \delta > 0 \text{ für alle}\, m \geq M \, . \tag{6.4.2}$$

Häufig tauchen in der Physik die folgenden zwei Funktionen auf ($z \in \mathbb{C}$, $\Re(z) > 0$):

$$h(z) = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-z u_m} \, , \tag{6.4.3}$$

$$g(z) = \sum_{m=1}^{\infty} u_m \, e^{-z u_m} \, . \tag{6.4.4}$$

Im folgenden soll gezeigt werden, daß $g(z)$ genau dann konvergiert, wenn $h(z)$ konvergiert.

Beweis. Aus der Konvergenz von $g(z)$ folgt sofort die Konvergenz von $h(z)$:

$$|h(z)| \leq \sum_{m=1}^{\infty} |e^{-z u_m}| < \frac{1}{u_1} \sum_{m=1}^{\infty} u_m \, |e^{-z u_m}| < \infty \, .$$

Svaiter u. Svaiter (1993) behaupten nun, daß auch umgekehrt ganz allgemein aus der Konvergenz von $h(z)$ die Konvergenz von $g(z)$ folge. Dies zu beweisen gelingt mir hier nur unter der zusätzlichen Annahme der Wachstumsbedingung 6.4.2, nämlich, daß die Folge der u_m, zumindest ab einem gewissen Indexwert M, nicht langsamer anwachsen möge als m^δ mit einem $\delta > 0$. (Nebenbei: es gibt keine *am langsamsten wachsende* Folge.)

$$\begin{aligned}\lim_{m\to\infty} u_m \, |e^{-z u_m}| &= \lim_{m\to\infty} u_m \, e^{-\Re(z)\, u_m} = \lim_{u_m\to\infty} u_m \, e^{-\Re(z)\, u_m} \\ &= \lim_{x\to\infty} \frac{x}{e^{\Re(z)\, x}} = \lim_{x\to\infty} \frac{1}{\Re(z)\, e^{\Re(z)\, x}} \, .\end{aligned}$$

Mit der Regel von l'Hospital erkennt man, daß die Folge der $u_m\, e^{-z u_m}$ gegen 0 konvergiert, wenn dies die Folge der $e^{-z u_m}$ tut. Durch fortgesetzte Anwendung der Regel von l'Hospital gilt diese Aussage auch für alle Folgen $u_m^n\, e^{-z u_m}$ mit festem $n \in \mathbb{N}$, $n > 0$.

Sei nun $0 < \delta \leq 1$, so wählen wir ein $r \in \mathbb{N}$ mit $\delta \cdot r > 1$, (bei $\delta > 1$ können wir $r = 1$ wählen), und erhalten damit also:

$$
\begin{aligned}
\lim_{m\to\infty} e^{-\Re(z)\, u_m} = 0 \quad &\Rightarrow \lim_{m\to\infty} u_m^{2r+1}\, e^{-\Re(z)\, u_m} = 0 \\
&\Rightarrow u_m^{2r+1}\, e^{-\Re(z)\, u_m} < A \\
&\Rightarrow u_m\, e^{-\Re(z)\, u_m} < \frac{A}{u_m^{2r}} < \frac{A}{m^{2\delta r}} < \frac{A}{m^2}\ ,
\end{aligned}
$$

$$
\sum_{m=1}^{\infty} u_m\, e^{-\Re(z)\, u_m} < \sum_{m=1}^{\infty} \frac{A}{m^2} < \infty\ .
$$

Somit haben wir eine konvergente Majorante für unsere Reihe $g(z)$ mit $\Re(z) > 0$ gefunden und gezeigt, daß $g(z)$ konvergiert, wenn $h(z)$ konvergiert. □

Wenn $h(z)$ für $\Re(z) > 0$ konvergiert, dann konvergiert diese Reihe für $\Re(z) \geq t_0 > 0$ auch gleichmäßig, denn

$$
\begin{aligned}
|h(z)| &\leq \sum_{m=1}^{\infty} |e^{-z u_m}| = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\Re(z)\, u_m} = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\Re(z)-t_0)\, u_m}\, e^{-t_0\, u_m} \\
&\leq e^{-(\Re(z)-t_0)\, u_1} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-t_0\, u_m} = e^{-(\Re(z)-t_0)\, u_1}\, h(t_0)\ .
\end{aligned}
$$

Wenn $h(z)$ und $g(z)$ existieren, d.h. wenn die obigen Reihen konvergieren, dann gilt:

$$
g(z) = -\frac{d}{dz}\, h(z)\ . \tag{6.4.5}
$$

Häufig zeigt sich nun in physikalischen Anwendungen, daß $h(z)$ in einen Bereich Ω analytisch fortgesetzt werden kann, der den Punkt $z = 0$ als einen Pol der Ordnung N_0 enthält. In diesem Fall kann $g(z)$ in den selben Bereich Ω analytisch fortgesetzt werden kann und weist bei $z = 0$ einen Pol der Ordnung $N_0 + 1$ auf. Wir können in diesem Fall also die Laurent-Reihen von $h(z)$ und $g(z)$ angeben

$$
h(z) = \sum_{n=-N_0}^{\infty} h_n z^n\ , \tag{6.4.6}
$$

$$
g(z) = \sum_{n=-(N_0+1)}^{\infty} g_n z^n\ . \tag{6.4.7}
$$

Das Verfahren von Casimir zur Regularisierung der Vakuum-Energiedichte besteht mathematisch gesprochen gerade darin, die divergente Reihe

$$E := \sum_{m=1}^{\infty} u_m = \infty \tag{6.4.8}$$

durch die Reihe $g(z)$ 6.4.4 mit dem Abschneideparameter z zu ersetzen, alle Pol-Terme zu subtrahieren

$$g_{\text{reg}}(z) := g(z) - \sum_{n=-(N_0+1)}^{-1} g_n z^n$$

und schließlich in $g_{\text{reg}}(z)$ den Abschneideparameter z gegen 0 gehen zu lassen

$$E_1 := g_{\text{reg}}(0) \ , \tag{6.4.9}$$

$$g(z) = -\frac{d}{dz}\, h(z) = -\sum_{n=-N_0}^{\infty} h_n n\, z^{n-1} \quad \Rightarrow$$

$$g_{\text{reg}}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n\, z^n = -\sum_{n=1}^{\infty} h_n n\, z^{n-1} \quad \Rightarrow$$

$$E_1 = g_{\text{reg}}(0) = g_0 = -h_1 \ . \tag{6.4.10}$$

Die Regularisierung mit Hilfe der spektralen Zeta-Funktion besteht darin, statt der ursprünglichen Reihe für E in 6.4.8 die spektrale Zeta-Funktion für einen Bereich $\Re(s) > s_0$ zu definieren und sie dann analytisch fortzusetzen und am Punkt $s = -1$ auszuwerten:

$$\zeta(s) := \sum_{m=1}^{\infty} u_m^{-s} \ , \tag{6.4.11}$$

$$E_2 := \zeta(-1) \ . \tag{6.4.12}$$

Wenn die Reihe 6.4.11 konvergiert, dann läßt sich analog zur Riemannschen Zeta-Funktion eine entsprechende Integraldarstellung für die spektrale Zeta-Funktion $\zeta(s)$ gewinnen. Mit Hilfe der Gamma-Funktion, der Substitution $y = u_m z$, und der gleichmäßigen Konvergenz von $h(z)$ folgt:

$$\begin{aligned} \zeta(s)\Gamma(s) &= \sum_{m=1}^{\infty} u_m^{-s} \int_0^{\infty} dy\, y^{s-1} e^{-y} = \sum_{m=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dz\, z^{s-1} e^{-z u_m} \\ &= \int_0^{\infty} dz\, z^{s-1} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-z u_m} = \int_0^{\infty} dz\, z^{s-1}\, h(z) \ , \end{aligned}$$

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dz\, z^{s-1}\, h(z) \; . \tag{6.4.13}$$

Nun kann man zeigen, daß diese Darstellung der spektralen Zeta-Funktion für $\Re(s) > N_0$ konvergiert:

$$\begin{aligned}
\zeta(s) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dz\, z^{s-1}\, h(z) \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \left[\int_0^{r_0} dz\, z^{s-1}\, h(z) + \int_{r_0}^\infty dz\, z^{s-1}\, h(z) \right] \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \left[\int_0^{r_0} dz\, z^{s-1} \sum_{n=-N_0}^{\infty} h_n z^n + \int_{r_0}^\infty dz\, z^{s-1}\, h(z) \right] \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \left[\sum_{n=-N_0}^{\infty} h_n \frac{1}{s+n}\, z^{s+n}\Big|_0^{r_0} + \int_{r_0}^\infty dz\, z^{s-1}\, h(z) \right] \; ,
\end{aligned}$$

womit gezeigt ist, daß diese Darstellung der spektralen Zeta-Funktion für $\Re(s) > N_0$ existiert und dort regulär ist. Man sieht unmittelbar, daß wir diese Darstellung der spektralen Zeta-Funktion

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \left[\sum_{n=-N_0}^{\infty} h_n \frac{r_0^{s+n}}{s+n} + \int_{r_0}^\infty dz\, z^{s-1}\, h(z) \right] \tag{6.4.14}$$

analytisch nach $\mathbb{C} - \{N_0, N_0 - 1, \ldots\}$ fortsetzen können. Da wir am Punkt $s = -1$ interessiert sind, nehmen wir den entsprechenden Summanden mit $n = 1$ aus der Summe heraus:

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \left[h_1 \frac{r_0^{s+1}}{s+1} + \sum_{\substack{n=-N_0 \\ n\neq 1}}^{\infty} h_n \frac{r_0^{s+n}}{s+n} + \int_{r_0}^\infty dz\, z^{s-1}\, h(z) \right] \; .$$

Nun hat die Gamma-Funktion bei $s = -1$ einen Pol erster Ordnung mit einem Residuum von -1 (siehe z.B. Abramowitz u. Stegun (1970), 6.1.3):

$$\operatorname*{Res}_{s=-1} \Gamma(s) = -1 \; ,$$

$$\lim_{s\to -1} \frac{1}{\Gamma(s)} = \lim_{s\to -1} \frac{1}{(-1)(\frac{1}{s+1})} = \lim_{s\to -1} (-1)(s+1) \; ,$$

$$E_2 = \lim_{s\to -1} \zeta(s) = -h_1 \ . \tag{6.4.15}$$

Wenn wir jetzt 6.4.10 mit 6.4.15 vergleichen, so sehen wir, daß die UV-cutoff Regularisierung nach Casimir zum gleichen Ergebnis führt wie die Regularisierung mit Hilfe der spektralen Zeta-Funktion:

$$E_1 = g_{\text{reg}}(0) = \lim_{s\to -1} \zeta(s) = E_2 \ . \tag{6.4.16}$$

6.5 Determinanten, Greensche Funktionen und Resolvente

Sei $\hat{A}$ ein linearer Operator auf einem Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ mit einer Spektralzerlegung (also z.B. ein kompakter, selbstadjungierter Operator) mit den Eigenwerten λ_m und einem orthonormalen und vollständigen Satz von Eigenvektoren $\{\mid \varphi_m\rangle\}$. Um die folgenden Überlegungen möglichst einfach zu halten, nehmen wir an, daß $\hat{A}$ keine Nullmoden habe, daß also der Eigenwert 0 im Spektrum nicht vorkommen möge (ggf. gehen wir dabei von $\hat{A}$ über zu $\hat{A}_+ := \hat{A} - \sum_j \mid 0, j\rangle\langle 0, j \mid$).

$$\hat{A} \mid \varphi_m\rangle = \lambda_m \mid \varphi_m\rangle \ , \tag{6.5.1}$$

bzw. mit $\varphi(x) := \langle x \mid \varphi\rangle$ und $(A\varphi)(x) := \langle x \mid \hat{A} \mid \varphi\rangle$:

$$(A\varphi_m)(x) = \lambda_m \varphi_m(x) \ , \tag{6.5.2}$$

$$\langle \varphi_m \mid \varphi_n\rangle = \delta_{mn} \quad \Leftrightarrow \quad \int dx\, \varphi_m^*(x)\, \varphi_n(x) = \delta_{mn} \ , \tag{6.5.3}$$

$$\sum_m \mid \varphi_m\rangle\langle\varphi_m \mid = \hat{1} \quad \Leftrightarrow \quad \sum_m \varphi_m^*(x)\, \varphi_m(y) = \delta(x-y) \ . \tag{6.5.4}$$

Die Funktionaldeterminante von$\hat{A}$ läßt sich als das Produkt der Eigenwerte definieren (in der Eigenwertbasis ist $\hat{A}$2.2.5 diagonal):

$$\det(\hat{A}) = \prod_m \lambda_m \ . \tag{6.5.5}$$

Dann existiert der Greensche Operator $\hat{G}$ als inverser Operator von $\hat{A}$ und löst die entsprechende inhomogene Operatorgleichung zu $\hat{A}$:

$$\hat{A}\hat{G} = \hat{1} \ , \tag{6.5.6}$$

$$\hat{A} \mid \varphi\rangle = \mid f\rangle \quad \Rightarrow \quad \mid \varphi\rangle = \hat{G} \mid f\rangle \quad \Leftrightarrow \tag{6.5.7}$$

$$\varphi(x) = \int dy \, \langle x \mid \hat{G} \mid y \rangle \, f(y) = \int dy \, G(x,y) \, f(y) \; . \tag{6.5.8}$$

Viele Methoden zur Untersuchung des Spektrums von $\hat{A}$ und damit auch zur Berechnung von Funktionaldeterminanten eines Operators $\hat{A}$ verwenden einen Weg über die Analyse der Resolvente $\hat{R}(\lambda)$ von $\hat{A}$, die ja gerade der Greensche Operator von $(\hat{A} - \lambda\hat{1})$ ist:

$$(\hat{A} - \lambda\hat{1})\hat{R}(\lambda) = \hat{1} \; , \tag{6.5.9}$$

oder, in der Ortsdarstellung - wobei wir voraussetzen, daß $\hat{A}$ lokal sein möge (wie z.B. die in der Physik vorkommenden typischen Differential-Operatoren), also:

$$\langle x \mid \hat{A} \mid x' \rangle = \langle x \mid \hat{A} \mid x \rangle \, \delta(x - x') := A(x) \, \delta(x - x') \; , \tag{6.5.10}$$

$$\langle x \mid (\hat{A} - \lambda\hat{1})\hat{R}(\lambda) \mid y \rangle = \langle x \mid y \rangle$$

$$\int dx' \, \langle x \mid (\hat{A} - \lambda\hat{1}) \mid x' \rangle \langle x' \mid \hat{R}(\lambda) \mid y \rangle = \delta(x - y)$$

$$\int dx' \, \langle x \mid x' \rangle (A(x') - \lambda) \langle x' \mid \hat{R}(\lambda) \mid y \rangle = \delta(x - y)$$

$$(A(x) - \lambda) \, R(x,y,\lambda) = \delta(x - y) \; . \tag{6.5.11}$$

Die Resolvente läßt sich nun in der Spektraldarstellung von $\hat{A}$ schreiben als:

$$\hat{R}(\lambda) = \frac{1}{(\hat{A} - \lambda\hat{1})} = \sum_m \frac{1}{\lambda_m - \lambda} \; \mid \varphi_m \rangle \langle \varphi_m \mid \; , \tag{6.5.12}$$

$$R(x,y,\lambda) = \sum_m \frac{\varphi_m(x) \, \varphi_m^*(y)}{\lambda_m - \lambda} \; . \tag{6.5.13}$$

Bilden wir die Spur und integrieren über λ, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \int d\lambda \int dx \, R(x,x,\lambda) &= \int d\lambda \int dx \, \sum_m \frac{\varphi_m(x) \, \varphi_m^*(x)}{\lambda_m - \lambda} \\ &= \int d\lambda \sum_m \frac{1}{\lambda_m - \lambda} = -\sum_m \ln(\lambda_n - \lambda) \\ &= -\ln \prod_m (\lambda_m - \lambda) \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\det(\hat{A}) = e^{-\int d\lambda \int dx \, R(x,x,\lambda=0)} \; . \tag{6.5.14}$$

Die Integrationskonstante kann dann durch eine weitere physikalische Randbedingung festgelegt werden, in der Quantentheorie etwa, indem man vom Propagator Unitärität verlangt, oder in der Quantenstatistik, indem man die Gültigkeit des Nernstschen Hauptsatzes fordert.

6.6 Wärmegleichung und spektrale Zeta-Funktion

Wenn das Spektrum komplex oder nicht explizit bekannt ist, so kann man die spektrale Zeta-Funktion über die Methode des sogenannten 'Wärmekerns' berechnen, was im folgenden gezeigt werden soll.

Sei $\hat{A}$ jetzt ein elliptischer Differential-Operator der Ordnung d auf einer n-dimensionalen kompakten Mannigfaltigkeit, so kann man zeigen, daß die Potenzsumme 6.2.1 für $\zeta_{\hat{A}}(s)$ für $\Re(s) > \frac{n}{d}$ konvergiert (siehe 6.7.3 oder Schwarz, 1993, S.132 ff.). Jetzt kann man diese spektrale Zeta-Funktion analytisch in der komplexen Ebene fortsetzen und dann an den uns interessierenden Punkten s berechnen.

$$\zeta_{\hat{A}}(s) = \sum_{m=1} \frac{1}{\lambda_m^s} = \sum_{m=1} e^{-s \ln \lambda_m} = \mathrm{Sp}(e^{-s \ln \hat{A}}) \;, \tag{6.6.1}$$

$$\frac{d}{ds}\zeta_{\hat{A}}(s)\bigg|_{s=0} = -\sum_{m=1} \ln \lambda_m \, e^{-s \ln \lambda_m}\bigg|_{s=0} = -\sum_{m=1} \ln \lambda_m = -\ln \prod_{m=1} \lambda_m = -\ln \det(\hat{A}) \;,$$

$$\det(\hat{A}) = \prod_{m=1} \lambda_m = e^{-\zeta'_{\hat{A}}(0)} \;. \tag{6.6.2}$$

Um eine analytische Fortsetzung von $\zeta_{\hat{A}}(s)$ zum Punkt $s = 0$ hin zu erhalten, betrachtet man den zu $\hat{A}$ gehörige Wärmekern, einen aus den Eigenwerten von $\hat{A}$ gebildete Operator $\hat{K}(t)$, der die folgende Wärme-Differentialgleichung mit Anfangswert erfüllt:

$$(\hat{A} + \frac{\partial}{\partial t})\hat{K}(t) = 0 \quad \text{mit } \hat{K}(0) = \hat{1} \;, \tag{6.6.3}$$

$$(A(x) + \frac{\partial}{\partial t})\hat{K}(x, y, t) = 0 \quad \text{mit } K(x, y, 0) = \delta(x - y) \;. \tag{6.6.4}$$

Mit Separation der Variablen und mittels der Eigenwerte λ_m und der Eigenfunktionen $\varphi_m(x) := \langle x \mid \varphi_m \rangle$ von $A(x)$ findet man:

$$\hat{K}(t) = e^{-\hat{A}t} = \sum_m e^{-\lambda_m t} \mid \varphi_m\rangle\langle\varphi_m \mid \;, \tag{6.6.5}$$

$$K(x, y, t) = \sum_{m=1} e^{-\lambda_m t}\varphi_m(x)\varphi_m^*(y) \;. \tag{6.6.6}$$

Tatsächlich hängen der Wärmekern $\hat{K}(t)$ und die Resolvente $\hat{R}(\lambda)$ von $\hat{A}$ eng miteinander zusammen:

$$\frac{i}{2\pi} \oint_C d\lambda \, e^{-\lambda t} \hat{R}(\lambda) = \frac{i}{2\pi} \oint_C d\lambda \, e^{-\lambda t} \, \frac{1}{\hat{A} - \lambda\hat{1}}$$

$$= \frac{i}{2\pi} \oint\limits_C d\lambda\, e^{-\lambda t} \frac{1}{\hat{A} - \lambda \hat{1}} \sum_m |\, \varphi_m\rangle\langle\varphi_m \,|$$

$$= \frac{i}{2\pi} \sum_m \oint\limits_C d\lambda\, e^{-\lambda t} \frac{-1}{\lambda \hat{1} - \hat{A}} \;|\, \varphi_m\rangle\langle\varphi_m \,|$$

$$= \frac{-i}{2\pi} \sum_m \oint\limits_C d\lambda\, e^{-\lambda t} \frac{1}{\lambda - \lambda_m} \;|\, \varphi_m\rangle\langle\varphi_m \,|$$

$$= \frac{-i}{2\pi} \sum_m 2\pi i\, e^{-\lambda_m t} \;|\, \varphi_m\rangle\langle\varphi_m \,|$$

$$= \sum_m e^{-\lambda_m t} \;|\, \varphi_m\rangle\langle\varphi_m \,|$$

$$= e^{-\hat{A}t} = \hat{K}(t) \;, \tag{6.6.7}$$

oder in der Ortsdarstellung:

$$\frac{i}{2\pi} \oint\limits_C d\lambda\, e^{-\lambda t} \hat{R}(x,y,\lambda) = \sum_m e^{-\lambda_m t}\, \varphi_m(x)\, \varphi_m^*(y) = K(x,y,t) \;. \tag{6.6.8}$$

Mittels $K(t) := \mathrm{Sp}(K(x,x,t))$ kann jetzt die gesuchte analytische Fortsetzung der spektralen Zeta-Funktion 4.8.2 (ganz analog zur Riemannschen Zeta-Funktion) konstruiert werden:

$$\frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1}\, K(t) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1} \int dx\, K(x,x,t)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1} \int dx \sum_{m=1} e^{-\lambda_m t}\, \varphi_m(x)\, \varphi_m^*(x)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1} \sum_{m=1} e^{-\lambda_m t} \int dx\, \varphi_m(x)\, \varphi_m^*(x)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{m=1} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1}\, e^{-\lambda_m t}$$

$$= \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{m=1} \frac{1}{\lambda_m^s} \int\limits_0^\infty dt'\, t'^{s-1}\, e^{-t'}$$

$$= \sum_{m=1} \frac{1}{\lambda_m^s} = \zeta_{\hat{A}}(s) \quad \Rightarrow$$

$$\zeta_{\hat{A}}(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1}\, K(t) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1} \sum_{m=1} e^{-\lambda_m t} \,. \tag{6.6.9}$$

Damit haben wir einen Weg gefunden, über eine analytische Fortsetzung der spektralen Zeta-Funktion eine regularisierte Determinante von $\hat{A}$ und das entsprechende Gaußsche Funktionalintegral sinnvoll zu definieren und zu berechnen:

1. finde die Lösung $K(x, y, t)$ der Wärme-Gleichung mit der Anfangsbedingung 6.6.4,
2. berechne damit nach 6.6.9 die spektrale Zeta-Funktion $\zeta_{\hat{A}}(s)$,
3. bestimme $\zeta'_{\hat{A}}(0)$ und daraus mit 4.8.3 $\det(\hat{A})$.

6.7 Wärmekern-Entwicklung und spektrale Zeta-Funktion

Wir haben oben gesehen, daß der erste Schritt auf dem Weg zur Berechnung der spektralen Zeta-Funktion $\zeta_{\hat{A}}(s)$ bei unbekanntem Spektrum von $\hat{A}$ das Auffinden der Lösung $K(x, y, t)$ der Wärmegleichung mit der Anfangsbedingung 6.6.4 ist. Nun läßt sich aber häufig eine geschlossene Lösung $K(x, y, t)$ der Wärmegleichung für den Operator $\hat{A}$ nicht ohne weiteres finden.

In diesen Fällen gibt es jedoch ein sehr bedeutsames mathematisches Hilfmittel, die sogenannte Wärmekern-Entwicklung, eine asymptotischen Entwicklung von $K(x, x, t)$ für kleine t, die hier und in vielen anderen Fällen sehr hilfreich ist.

Sei $\hat{A}$ also wiederum ein elliptischer Differential-Operator der Ordnung d auf einer n-dimensionalen kompakten Mannigfaltigkeit. Um die folgenden Überlegungen möglichst einfach zu halten, nehmen wir auch wieder an, daß $\hat{A}$ keine Nullmoden habe, daß also der Eigenwert 0 im Spektrum nicht vorkommen möge (ggf. gehen wir dabei von $\hat{A}$ über zu $\hat{A}_+ := \hat{A} - \sum_j \mid 0, j\rangle\langle 0, j \mid)$, dann gilt für $t \to 0_+$ die folgende Wärmekern-Entwicklung (zum Beweis siehe Anhang L.2 oder Elizalde u. a. (1994), S.285 ff. und Kirsten (2002), S.20 ff.) mit dem Wärmekern- oder Seeley-Koeffizienten B_k:

$$K(t) = \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}}\, B_k \quad \text{für } t \to 0_+ \,. \tag{6.7.1}$$

Gelegentlich taucht in der Literatur statt der Reihenentwicklung 6.7.1 mit ganzzahligen Indizes k auch eine Reihenentwicklung mit rationalen Indizes $k' = k/d$ auf, insbesondere halbzahlige Indizes $k' = k/2$ im Fall von $\omega = 2$. Wir werden von dieser Darstellung mit rationalen Indizes keinen Gebrauch machen.

Für den Grenzwert von $K(t)$ für $t \to \infty$ gilt, wenn λ_1 der Eigenwert mit dem kleinsten Realteil sei (wegen 6.6.6):

$$\lim_{t\to\infty} K(t) = \lim_{t\to\infty} \sum_{m=1} e^{-\lambda_m t} = \lim_{t\to\infty} e^{-\lambda_1 t} \,. \tag{6.7.2}$$

Damit folgt für $\zeta_{\hat{A}}(s)$:

$$\begin{aligned}\zeta_{\hat{A}}(s) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^\infty dt\, t^{s-1}\, K(t) \\ &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^1 dt\, t^{s-1}\, K(t) + \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_1^\infty dt\, t^{s-1}\, K(t) \\ &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_0^1 dt\, t^{s-1} \sum_{k=0}^\infty t^{\frac{k-n}{d}}\, B_k + \frac{1}{\Gamma(s)} \int\limits_1^\infty dt\, t^{s-1} \sum_{m=1} e^{-\lambda_m t} \;.\end{aligned}$$

Das zweite Integral konvergiert wegen des starken exponentiellen Abfalls und wir bezeichnen es als $\rho(s)$.

$$\zeta_{\hat{A}}(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=0}^\infty \int\limits_0^1 dt\, t^{s-1+\frac{k-n}{d}}\, B_k + \frac{1}{\Gamma(s)}\, \rho(s) \;.$$

Das erste Integral existiert nur für $s > \frac{n}{d}$ und ergibt sich dann unmittelbar zu:

$$\zeta_{\hat{A}}(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=0}^\infty \frac{1}{s+\frac{k-n}{d}}\, B_k + \frac{1}{\Gamma(s)}\, \rho(s) \;. \tag{6.7.3}$$

Diesen Ausdruck kann man nun in den Bereich $0 \le s \le \frac{n}{d}$ analytisch fortsetzen. Nehmen wir als Beispiel den Laplace-Operator $\Box_E$, $d = 2$, in vier Dimensionen, $n = 4$. Hier ist $\zeta_{\Box_E}(s)$ zunächst nur für $s > 2$ definiert, läßt sich aber folgendermaßen analytisch fortsetzen:

$$\zeta_{\Box_E}(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=0}^\infty \frac{1}{s+\frac{k-4}{2}}\, B_k + \frac{1}{\Gamma(s)}\, \rho(s) \;. \tag{6.7.4}$$

$\zeta_{\Box_E}(s)$ hat bei $s = 2$ einen einfachen Pol mit dem Residuum B_0, bei $s = 1$ ebenfalls einen einfachen Pol mit dem Residuum B_2. Bei $s = 0$ ist $\zeta_{\Box_E}(s)$ regulär, da sich der Pol von $1/(s+\frac{k-4}{2})$ gerade mit dem Pol der Γ-Funktion aufhebt:

$$\zeta_{\Box_E}(0) = B_4 \;. \tag{6.7.5}$$

Für ungerade k sind alle $B_k = 0$, siehe im Anhang L.2 die Anmerkung nach L.2.28.

6.8 Zustandssumme des harmonischen Oszillators

Natürlich könnte man die Zustandssumme des harmonischen Oszillators auf herkömmliche Weise viel müheloser berechnen, da das Spektrum ja bekannt und sehr einfach ist, dennoch ist es recht lehrreich, den Formalismus der spektralen Zeta-Funktion und Wärmegleichung einmal an diesem Standardbeispiel durchzuführen.

Wir folgen hier im wesentlichen Ramond (1989), S. 92-93, der den Lösungsweg mit den folgenden Worten skizziert: „Rather we do a little bit of (perverted) mathematical physics." Dennoch bin ich mir sicher, daß Euler an diesem Weg durchaus seine Freude hätte.

Wir hatten in 4.6.3 für die Zustandssumme gefunden:

$$Z = N \cdot \int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} D[q(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_0^{\hbar\beta} d\tau H(\dot{q}(\tau),q(\tau))} ,$$

und setzen jetzt die Hamilton-Funktion des harmonischen Oszillators ein:

$$Z = N \cdot \int\limits_{q(\hbar\beta)=q(0)} D[q(\tau)] e^{-\frac{m}{2\hbar}\int\limits_0^{\hbar\beta} d\tau\,(\dot{q}(\tau)^2+\omega^2 q(\tau)^2)} .$$

Damit wir die Zeta-Funktions-Methode verwenden können, ist es notwendig τ und $q(\tau)$ umzuskalieren, so daß diese beiden Größen dimensionslos werden:

$$\tau' = \frac{\tau}{\hbar\beta} \text{ und } q'(\tau') = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\beta}} q(\tau) \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} Z &= N' \cdot \int\limits_{q(1)=q(0)} D[q(\tau)]\, e^{-\frac{1}{2}\int\limits_0^1 d\tau [\dot{q}(\tau)^2+\beta^2\hbar^2\omega^2 q(\tau)^2)]} \\ &= N' \cdot \int\limits_{q(1)=q(0)} D[q(\tau)]\, e^{-\frac{1}{2}\int\limits_0^1 d\tau\, q(\tau)[-\frac{d^2}{d\tau^2}+\beta^2\hbar^2\omega^2] q(\tau)} \\ &=: N' \cdot \int\limits_{q(1)=q(0)} D[q(\tau)]\, e^{-\frac{1}{2}\langle q(\tau)|\hat{A}_\tau|q(\tau)\rangle} , \end{aligned}$$

wobei wir mit $\hat{A}_\tau$ den Operator für die Zustandssumme des eindimensionalen harmonischen Oszillators eingeführt haben :

$$\hat{A}_\tau := -\frac{d^2}{d\tau^2} + \beta^2\hbar^2\omega^2 .$$

Man sieht leicht, daß die folgende Greensche Funktion $K(\tau,\tau',\sigma)$ die Wärme-Gleichung 6.6.4 und die Anfangsbedingung 6.6.4 erfüllt:

$$K(\tau,\tau',\sigma) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi n(\tau-\tau')-(\beta^2\hbar^2\omega^2+4\pi^2 n^2)\sigma} , \tag{6.8.1}$$

$$A(\tau)\,K(\tau,\tau',\sigma) = (-(i2\pi n)^2 + \beta^2\hbar^2\omega^2) = (\beta^2\hbar^2\omega^2 + 4\pi^2 n^2) = -\frac{\partial}{\partial\sigma}K(\tau,\tau',\sigma)\;,$$

$$K(\tau,\tau',0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi n(\tau-\tau')} = \delta(\tau-\tau')\;.$$

Mit 6.6.9 folgt:

$$\begin{aligned}
\zeta_{\hat{A}}(s) &= \frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty d\sigma\,\sigma^{s-1}\int_0^1 d\tau \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(\beta^2\hbar^2\omega^2+4\pi^2n^2)\sigma} \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty d\sigma\,\sigma^{s-1}\int_0^1 d\tau\, e^{-\beta^2\hbar^2\omega^2\sigma}[1+2\sum_{n=1}^{\infty} e^{-4\pi^2n^2\sigma}] \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty d\sigma\,\sigma^{s-1}e^{-\beta^2\hbar^2\omega^2\sigma} \\
&\quad + \frac{2}{\Gamma(s)}\int_0^\infty d\sigma\,\sigma^{s-1}\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l\frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l!}\sigma^l\sum_{n=1}^{\infty} e^{-4\pi^2n^2\sigma} \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)}\frac{1}{(\beta\hbar\omega)^{2s}}\int_0^\infty d\sigma'\,\sigma'^{s-1}e^{-\sigma'} \\
&\quad + \frac{2}{\Gamma(s)}\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l\frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l!}\sum_{n=1}^{\infty}\int_0^\infty d\sigma\,\sigma^{s+l-1}e^{-4\pi^2n^2\sigma} \\
&= \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^{2s}} + \frac{2}{\Gamma(s)}\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l\frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l!}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(4\pi^2n^2)^{s+l}}\int_0^\infty d\sigma'\,\sigma'^{s+l-1}e^{-\sigma'} \\
&= \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^{2s}} + \frac{2}{\Gamma(s)}\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l\frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l!}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(4\pi^2)^{s+l}}\frac{1}{n^{2(s+l)}}\,\Gamma(s+l) \\
&= \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^{2s}} + \frac{2}{(4\pi^2)^s}\zeta(2s) + \frac{2}{\Gamma(s)}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-1)^l}{(4\pi^2)^{s+l}}\frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l!}\,\zeta(2(s+l))\,\Gamma(s+l)\;.
\end{aligned}$$

Im nächsten Schritt müssen wir $\zeta'_{\hat{A}}(0)$ berechnen:

$$\begin{aligned}
\zeta'_{\hat{A}}(s) &= -2\,\ln(\beta\hbar\omega)\,\frac{1}{(\beta\hbar\omega)^{2s}} - \ln(4\pi^2)\,\frac{2}{(4\pi^2)^s}\,\zeta(2s) + \frac{4}{(4\pi^2)^s}\,\frac{d\zeta(2s)}{d(2s)} \\
&\quad + 2(\frac{d}{ds}\frac{1}{\Gamma(s)})\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-1)^l}{(4\pi^2)^{s+l}}\,\frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l!}\,\zeta(2(s+l))\,\Gamma(s+l)
\end{aligned}$$

$$+ \frac{2}{\Gamma(s)} \frac{d}{ds} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(4\pi^2)^{s+l}} \frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l!} \zeta(2(s+l)) \, \Gamma(s+l) \ .$$

Im $\lim\limits_{s\to 0}$ verschwindet der letzte Term von $\zeta'_{\hat{A}}(s)$, da $\lim\limits_{s\to 0}\Gamma(s) = +\infty$ ist und wegen der Regularität von $\frac{1}{l!}\zeta(2(s+l))\Gamma(s+l)$ in der Umgebung von $s=0$ bei $l \geq 1$ die Summe begrenzt bleibt.

$$\zeta'_{\hat{A}}(0) = -2\,\ln(\beta\hbar\omega) - 4\ln(2\pi)\zeta(0) + 4\zeta'(0)$$
$$+\; 2\,(\Gamma^{-1})'(0) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(4\pi^2)^l} \frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l} \zeta(2l) \ .$$

Dieser Ausdruck läßt sich noch weiter vereinfachen, indem wir die Werte für $\zeta(0)$, $\zeta'(0)$ und $(\Gamma^{-1})'(0)$ einsetzen:

$\zeta(0) = -\frac{1}{2}$, (siehe D.10.11, oder Abramowitz u. Stegun (1970), 23.2.11).

$\zeta'(0) = -\frac{1}{2}\ln(2\pi)$, (siehe D.11.6, oderAbramowitz u. Stegun (1970), 23.2.13).

$(\Gamma^{-1})'(0) = 1$, (siehe C.8.8, oder Abramowitz u. Stegun (1970), 6.1.3). Damit folgt für $\zeta'_{\hat{A}}(0)$:

$$\zeta'_{\hat{A}}(0) = -2\,\ln(\beta\hbar\omega) + 2\ln(2\pi) - 2\ln(2\pi) + 2\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(4\pi^2)^l} \frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l} \zeta(2l) \ .$$

Die $\zeta(2l)$ können auf die Bernoulli-Zahlen B_{2l} zurückgeführt werden (siehe D.12.6 oder Arfken u. Weber (2001), 5.152, oder Abramowitz u. Stegun (1970), 23.2.16):

$$\zeta(2l) = \frac{(2\pi)^{2l}}{2(2l!)} (-1)^{l+1} B_{2l} \quad \Rightarrow$$

$$\zeta'_{\hat{A}}(0) = -2\,\ln(\beta\hbar\omega) - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l\,(2l)!} B_{2l} \ .$$

Die hier auftretende Summe können wir nun (etwas trickreich) auf hyperbolische Funktionen zurückführen. Für den $\coth z$ gibt es die folgende Reihenentwicklung mit den Bernoulli-Zahlen B_{2l} als Entwicklungskoeffizienten (siehe D.10.9 oder Abramowitz u. Stegun (1970), 4.5.67):

$$\coth z = \frac{1}{z} + 2\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2z)^{2l-1}}{(2l)!} B_{2l} \ .$$

Wenn wir beide Seiten integrieren erhalten wir mit Abramowitz u. Stegun (1970), 4.5.82:

$$\int_0^z \coth z' dz' = \begin{cases} \ln z + \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2z)^{2l}}{l\,(2l)!} B_{2l} \ , \\ \ln(\sinh z) \ . \end{cases}$$

Mit $z = \frac{1}{2}\beta\hbar\omega$ folgt:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\beta\hbar\omega)^{2l}}{l\,(2l)!}\, B_{2l} = 2\,\ln(\sinh(\frac{\beta\hbar\omega}{2})) - 2\,\ln(\frac{\beta\hbar\omega}{2})\ ,$$

$$\begin{aligned}
\zeta'_{\hat{A}}(0) &= -2\,\ln(\beta\hbar\omega) + 2\,\ln(\frac{\beta\hbar\omega}{2}) - 2\,\ln(\sinh(\frac{\beta\hbar\omega}{2})) \\
&= 2\,\ln(\frac{1}{2}) - 2\,\ln(\frac{1}{2}(e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega} - e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega})) \\
&= 2\,\ln(\frac{1}{2}) - 2\,\ln(\frac{1}{2}) - 2\,\ln(e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}(1 - e^{-\beta\hbar\omega}))\ ,
\end{aligned}$$

$$\zeta'_{\hat{A}}(0) = -\beta\hbar\omega - 2\,\ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega})\ . \tag{6.8.2}$$

Mit 4.8.3 ergibt sich für die Zustandssumme:

$$Z = N' \cdot (\det(\hat{A}))^{-\frac{1}{2}} = N' \cdot (e^{-\zeta'_{\hat{A}}(0)})^{-\frac{1}{2}} = N' \cdot e^{\frac{1}{2}\zeta'_{\hat{A}}(0)}\ ,$$

$$Z = N' \cdot e^{-(\frac{\beta\hbar\omega}{2} + \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}))}\ . \tag{6.8.3}$$

Weiter unten werden wir zeigen, daß mit dem Nernstschen Theorem $N' = 1$ folgt. Zunächst aber soll noch kurz für die Zustandssumme der klassische Grenzwert betrachtet werden ($\beta = \frac{1}{kT}$):

$$\begin{aligned}
Z_{kl} &= \lim_{\hbar\to 0} Z = \lim_{\hbar\to 0} e^{-(\frac{\beta\hbar\omega}{2} + \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}))} \\
&= \lim_{\hbar\to 0} e^{-(\ln(1-(1-\beta\hbar\omega))} = \lim_{\hbar\to 0} e^{-\ln(\beta\hbar\omega)}\ ,
\end{aligned}$$

$$Z_{kl} = \frac{kT}{\hbar\omega}\ . \tag{6.8.4}$$

Wir kehren wieder zurück zur Zustandssumme 6.8.3 und wollen daraus die freie Energie F, die Entropie S und die innere Energie U berechnen.

$$\begin{aligned}
F &= -\frac{1}{\beta}\ln Z = -\frac{1}{\beta}\ln(N') + \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{\beta}\ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \\
&= -kT\ln(N') + \frac{\hbar\omega}{2} + kT\ln(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}})\ .
\end{aligned}$$

Mit Hilfe des 3. Hauptsatzes der Thermodynamik (des Nernstschen Theorems), nämlich dem Verschwinden der Entropie am absoluten Nullpunkt, $\lim_{T\to 0} S = 0$, wollen wir jetzt versuchen, den Normierungsfaktor N' zu bestimmen.

$$\begin{aligned} S = -\frac{\partial F}{\partial T}\bigg|_V &= k\ln(N') - k\ln(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) - kT\frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\frac{-\hbar\omega}{kT^2}}{(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}})} \\ &= k\ln(N') - k\ln(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) + \frac{1}{T}\frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}})} \ , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lim_{T\to 0} S = \lim_{T\to 0}[k\ln(N') + \frac{1}{T}\frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}})}] &= \lim_{T\to 0}[k\ln(N') + \frac{1}{T}\frac{\hbar\omega}{(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1)}] \\ = \lim_{T\to 0}[k\ln(N') + \frac{1}{T}\frac{\hbar\omega}{\sum\limits_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(\frac{\hbar\omega}{kT})^n}] &= \lim_{T\to 0}[k\ln(N')] \ , \end{aligned}$$

$$\lim_{T\to 0} S = 0 \quad \Rightarrow \quad N' = 1 \ , \tag{6.8.5}$$

$$S = -k\ln(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) + \frac{1}{T}\frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}})} \ . \tag{6.8.6}$$

Damit folgt für die Freie Energie des harmonischen Oszillators:

$$F = -kT\,\ln Z = \frac{\hbar\omega}{2} + kT\ln(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) \tag{6.8.7}$$

und für die Innere Energie:

$$\begin{aligned} U &= F + TS \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} + kT\ln(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) - kT\ln(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) + \frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}})} \ , \end{aligned}$$

$$U = F + TS = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}})} \ . \tag{6.8.8}$$

Wir erhalten also tatsächlich die aus der gewöhnlichen statistischen Mechanik bekannten Zusammenhänge.

7 Semiklassische Entwicklung in der QFT

Funktionaldeterminanten und die spektrale Zeta-Funktion finden ihre häufigste Anwendung in den semiklassischen Näherungen der Feldtheorien der statischen Physik und der Quantenfelder (QFT) und der Theorie des Quantenchaos. Ohne tiefer in die Quantenfeldtheorien eindringen zu wollen, sei die semiklassische Entwicklung an einem einfachen Beispiel eines neutralen, bosonischen Feldes (Klein-Gordon-Feld) gezeigt. Wir folgen hier im wesentlichen Zinn-Justin (2002), Kapitel 7 und Ryder (2003), Kapitel 9, und betrachten eine euklidische Feldtheorie (siehe auch 4.5).

7.1 Das Funktional Z der Green-Funktionen

Das erzeugende Funktional der n-Punkt Green-Funktionen (Korrelationsfunktionen) der hier betrachteten bosonischen, euklidischen Quantenfeldtheorie sei also

$$Z(J) := N \int D[\phi]\, e^{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi)-\langle J|\phi\rangle)} = N \int D[\phi]\, e^{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi)-\int dx\, J(x)\phi(x))} \ . \tag{7.1.1}$$

Hierbei sei $S(\phi)$ die euklidische Wirkung, $J(x)$ ein Quellterm und N eine Normierung so, daß $Z(0) = 1$ ist.

Die n-Punkt Green-Funktionen werden folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} G^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) &:= N \int D[\phi]\, \phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_n)\, e^{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi)} \\ &= N \left[\int D[\phi]\, (\frac{\hbar\delta}{\delta J(x_1)}\, \frac{\hbar\delta}{\delta J(x_2)} \cdots \frac{\hbar\delta}{\delta J(x_n)})\, e^{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi)-\int dx\, J(x)\phi(x))}\right]_{J=0} \\ &= \left[\frac{\hbar\delta}{\delta J(x_1)}\, \frac{\hbar\delta}{\delta J(x_2)} \cdots \frac{\hbar\delta}{\delta J(x_n)}\, Z(J)\right]_{J=0} \ . \end{aligned} \tag{7.1.2}$$

Man kann zeigen, daß diese n-Punkt Green-Funktionen in der QFT gerade die Vakuumerwartungswerte des Produktes der zeitgeordneten Feld-Operatoren sind. Hierbei ist $\hat{T}$ der Zeitordnungs-Operator.

$$G^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle \hat{T}\, \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_2)\cdots\hat{\phi}(x_n)\rangle \ . \tag{7.1.3}$$

Damit schreibt sich das erzeugende Funktional $Z(J)$ als

$$Z(J) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n\, (\frac{1}{\hbar})^n\, G^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n)\, J(x_1)J(x_2) \cdots J(x_n) \ . \tag{7.1.4}$$

Im folgenden gehen wir davon aus, daß das Wirkungsfunktional $S(\phi)$ einen in ϕ quadratischen Term $\langle\phi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle$ mit einem selbstadjungierten Operator $\hat{A}$ und einen lokalen Selbstwechselwirkung-Term $V(\mid \phi\rangle)$ haben möge. Wir schreiben hier $\mid \phi\rangle$ für einen abstrakten Vektor im Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ und, wie in der Physik üblich, $\phi(x) := \langle x \mid \phi\rangle$ für eine Funktion ϕ im zu $\mathcal{H}$ isomorphen Hilbert-Raum $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^m)$. Wie üblich bezeichne $\langle J \mid \phi\rangle = \int dx\, J(x)\phi(x))$.

$$S(\mid \phi\rangle) = \frac{1}{2}\langle\phi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle + V(\mid \phi\rangle)\ . \tag{7.1.5}$$

Im wechselwirkungsfreien Fall können wir $Z_0(J)$ und $G_0^{(2)}(x_1, x_2)$ einfach bestimmen.

$$S_0(\mid \phi\rangle) = \frac{1}{2}\langle\phi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle\ . \tag{7.1.6}$$

Da wir Funktionalintegrale im wesentlichen nur für in ϕ quadratische Terme exakt lösen können, formen wir $S_0 - \langle J \mid \phi\rangle$ zu einem quadratischen Term um (quadratische Ergänzung). Dies geschieht am einfachsten, indem wir von $\mid \phi\rangle$ zu einem $\mid \phi'\rangle$ übergehen, das gerade die Differenz von $\mid \phi\rangle$ zu $\mid \phi_0\rangle$, dem Minimum von $S_0 - \langle J \mid \phi\rangle$, sein möge:

$$\mid \phi\rangle = \mid \phi_0\rangle + \mid \phi'\rangle\ .$$

Das Minimum $\mid \phi_0\rangle$ von $S_0 - \langle J \mid \phi\rangle$ finden wir durch Lösung von:

$$\frac{\delta(S_0 - \langle J \mid \phi\rangle)}{\delta \mid \phi\rangle} = \hat{A} \mid \phi\rangle - \mid J\rangle = 0\ . \tag{7.1.7}$$

Mit dem zu $\hat{A}$ inversen Operator $\hat{A}^{-1} := \Delta$, der auch selbstadjungiert ist (auch freier Propagator genannt) erhalten wir:

$$\mid \phi_0\rangle = \hat{A}^{-1} \mid J\rangle = \Delta \mid J\rangle\ . \tag{7.1.8}$$

Damit folgt für $S_0(\mid \phi\rangle) - \langle J \mid \phi\rangle$:

$$\begin{aligned}
S_0(\mid \phi\rangle) - \langle J \mid \phi\rangle &= \frac{1}{2}\langle\phi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle - \langle J \mid \phi\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle(\mid \phi'\rangle + \Delta \mid J\rangle) \mid \hat{A} \mid (\mid \phi'\rangle + \Delta \mid J\rangle)\rangle - \langle J \mid (\mid \phi'\rangle + \Delta \mid J\rangle)\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle\phi' \mid \hat{A} \mid \phi'\rangle + \frac{1}{2}\langle J\Delta \mid \hat{A} \mid \phi'\rangle + \frac{1}{2}\langle\phi' \mid \hat{A} \mid \Delta J\rangle + \frac{1}{2}\langle J\Delta \mid \hat{A} \mid \Delta J\rangle \\
&\quad - \langle J \mid \phi'\rangle - \langle J \mid \Delta \mid J\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle\phi' \mid \hat{A} \mid \phi'\rangle - \frac{1}{2}\langle J \mid \Delta \mid J\rangle\ .
\end{aligned} \tag{7.1.9}$$

Damit folgt für $Z_0(J)$:

$$
\begin{aligned}
Z_0(J) &= N_0 \int D\phi \, e^{-\frac{1}{\hbar}(S_0(\phi) - \langle J|\phi\rangle)} \\
&= N_0 \int D\phi \, e^{-\frac{1}{\hbar}(\frac{1}{2}\langle \phi'|\hat{A}|\phi'\rangle - \frac{1}{2}\langle J|\Delta|J\rangle)} \\
&= e^{\frac{1}{2\hbar}\langle J|\Delta|J\rangle} \, N_0 \int D\phi' \, e^{-\frac{1}{\hbar}\frac{1}{2}\langle \phi'|\hat{A}|\phi'\rangle} \\
&= e^{\frac{1}{2\hbar}\langle J|\Delta|J\rangle} \, N_0 Z(0) \\
&= e^{\frac{1}{2\hbar}\langle J|\Delta|J\rangle} \, .
\end{aligned} \tag{7.1.10}
$$

Damit gilt für die wechselwirkungsfreien Green-Funktionen $G_0^{(1)}$ und $G_0^{(2)}$:

$$
G_0^{(1)}(x_1) = \left. \frac{\hbar \delta Z_0(J)}{\delta J(x_1)} \right|_{J=0} = \langle x_1 \mid \Delta J \rangle \, e^{\frac{1}{2\hbar}\langle J|\Delta|J\rangle} \Big|_{J=0} = 0 \, , \tag{7.1.11}
$$

$$
\begin{aligned}
G_0^{(2)}(x_1, x_2) &= \left. \frac{\hbar^2 \delta^2 Z_0(J)}{\delta J(x_1) \delta J(x_2)} \right|_{J=0} \\
&= \hbar \langle x_1 \mid \Delta \mid x_2 \rangle \, e^{\frac{1}{2\hbar}\langle J|\Delta|J\rangle} \Big|_{J=0} \\
&\quad + \langle x_1 \mid \Delta J \rangle \, \langle \Delta J \mid x_2 \rangle \, e^{\frac{1}{2\hbar}\langle J|\Delta|J\rangle} \Big|_{J=0} \\
&= \hbar \Delta(x_1, x_2) \, .
\end{aligned} \tag{7.1.12}
$$

Wir gehen jetzt zum Fall mit Wechselwirkungspotential $V(\phi)$ über, wobei wir voraussetzen, daß $V(\phi)$ sich in eine Potenzreihe nach ϕ entwickeln lasse. Weiter nutzen wir aus, daß

$$
\phi(x) \, e^{\frac{1}{\hbar}\langle J|\phi\rangle} = \frac{\hbar \delta}{\delta J(x)} \, e^{\frac{1}{\hbar}\langle J|\phi\rangle} \, . \tag{7.1.13}
$$

Damit läßt sich $Z(J)$ umformen zu

$$
\begin{aligned}
Z(J) &= N \int D\phi \, e^{-\frac{1}{\hbar}V(\phi)} \, e^{-\frac{1}{2\hbar}\langle \phi|\hat{A}|\phi\rangle + \frac{1}{\hbar}\langle J|\phi\rangle} \\
&= N \int D\phi \, e^{-\frac{1}{\hbar}V(\frac{\hbar\delta}{\delta J(x)})} \, e^{-\frac{1}{2\hbar}\langle \phi|\hat{A}|\phi\rangle + \frac{1}{\hbar}\langle J|\phi\rangle} \\
&= e^{-\frac{1}{\hbar}V(\frac{\hbar\delta}{\delta J(x)})} \, N \int D\phi \, e^{-\frac{1}{2\hbar}\langle \phi|\hat{A}|\phi\rangle + \frac{1}{\hbar}\langle J|\phi\rangle} \\
&= e^{-\frac{1}{\hbar}V(\frac{\hbar\delta}{\delta J(x)})} \, Z_0(J)
\end{aligned}
$$

$$= e^{-\frac{1}{\hbar}V(\frac{\hbar\delta}{\delta J(x)})}\, e^{\frac{1}{2\hbar}\langle J|\Delta|J\rangle} \; . \tag{7.1.14}$$

Die Entwicklung von $Z(J)$ nach der Wechselwirkung V liefert die Störungsreihe für Z, bzw. für die Green-Funktionen $G^{(n)}$.

Wenn man sich diese Störungsreihe genauer anschaut, dann stellt man fest, daß einige n-Punkt Green-Funktionen faktorisieren, also

$$G^{(n)}(x_1,\ldots,x_n) = G^{(p)}(x_1,\ldots,x_p)\, G^{(n-p)}(x_{p+1},\ldots,x_n) \; ,$$

d.h. die entsprechenden Feynman-Graphen sind unverbunden.

7.2 Das Funktional W der zusammenhängenden Green-Funktionen

Neben dem erzeugenden Funktional $Z(J)$ taucht häufig das erzeugende Funktional $W(J)$ auf. In der Thermodynamik stehen Z für die kanonische Zustandssumme und F für die freie Energie.

$$\frac{1}{\hbar}W(J) := \ln(Z(J)) \quad \Leftrightarrow \quad Z(J) = e^{\frac{1}{\hbar}W(J)} \; . \tag{7.2.1}$$

Aus der Normierung für $Z(J)$ folgt die Normierung für $W(J)$ zu $W(0) = 0$.

Analog zu $Z(J)$ kann man auch $W(J)$ als erzeugendes Funktional von n-Punkt Green-Funktionen betrachten:

$$G_c^{(n)}(x_1,x_2,\ldots,x_n) := \left[\frac{\hbar\delta}{\delta J(x_1)}\,\frac{\hbar\delta}{\delta J(x_2)}\,\cdots\,\frac{\hbar\delta}{\delta J(x_n)}\,\frac{1}{\hbar}W(J)\right]_{J=0} \quad \Rightarrow \tag{7.2.2}$$

$$\frac{1}{\hbar}W(J) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int dx_1 dx_2\cdots dx_n\,(\frac{1}{\hbar})^n\, G_c^{(n)}(x_1,x_2,\ldots,x_n)\, J(x_1)J(x_2)\,\cdots\, J(x_n) \; . \tag{7.2.3}$$

Man kann nun zeigen (siehe z.B. Zinn-Justin (2002)), daß diese Green-Funktionen $G_c^{(n)}$ nicht faktorisieren, d.h. im Sinne der Feynman-Graphen verbunden sind. Daher heißen die $G_c^{(n)}$ zusammenhängende n-Punkt Green-Funktionen.

Für den Fall nichtwechselwirkender Felder gilt:

$$W_0(J) = \frac{1}{2}\langle J \mid \Delta \mid J\rangle \; , \tag{7.2.4}$$

$$G_{c,0}^{(1)}(x_1) = \left.\frac{\hbar\delta\frac{1}{\hbar}W_0(J)}{\delta J(x_1)}\right|_{J=0} = \langle x_1 \mid \Delta J\rangle|_{J=0} = 0 \; , \tag{7.2.5}$$

$$G_{c,0}^{(2)}(x_1,x_2) = \left.\frac{\hbar^2\delta^2\frac{1}{\hbar}W_0(J)}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)}\right|_{J=0} = \hbar\Delta(x_1,x_2) \quad \Rightarrow$$

$$G_{c,0}^{(2)}(x_1,x_2) = G_0^{(2)}(x_1,x_2) = \hbar\Delta(x_1,x_2) \; . \tag{7.2.6}$$

7.3 Das Funktional Γ der effektiven Wirkung

Das erzeugende Funktional Γ der effektiven Wirkung (bzw. erzeugendes Funktional der Vertexfunktionen) taucht in der QFT sehr häufig auf, weil es eine einfache physikalische Interpretation erlaubt und weil die Renormierung üblicherweise an den Vertexfunktionen vorgenommen wird. Man gelangt mittels einer Legendre-Transformation von $W(J)$ zu $\Gamma(\varphi)$. In der Thermodynamik entspräche das dem Übergang von der freien Energie zum thermodynamischen Potential. Wir folgen in der Definition wieder Zinn-Justin (2002) - viele andere QFT-Lehrbücher definieren Γ mit umgekehrtem Vorzeichen!

$$\Gamma(\varphi) + W(J) = \langle J \mid \varphi \rangle \, , \tag{7.3.1}$$

$$\varphi(x) := \frac{\delta W}{\delta J(x)} \quad \text{und} \quad J(x) = \frac{\delta \Gamma}{\delta \varphi(x)} \, . \tag{7.3.2}$$

Aus der Normierung für $W(J)$ folgt die Normierung für $\Gamma(\varphi)$ zu $\Gamma(0) = 0$.

Wir können $\Gamma(\varphi)$ als Erzeugende der Vertexfunktionen schreiben

$$\Gamma^{(n)}(x_1, x_2, \ldots, x_n) := \left[\frac{\delta}{\delta\varphi(x_1)} \frac{\delta}{\delta\varphi(x_2)} \cdots \frac{\delta}{\delta\varphi(x_n)} \Gamma(\varphi) \right]_{\varphi=0} \quad \Rightarrow \tag{7.3.3}$$

$$\Gamma(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n \, \Gamma^{(n)}(x_1, x_2, \ldots, x_n) \, \varphi(x_1)\varphi(x_2) \cdots \varphi(x_n) \, . \tag{7.3.4}$$

Sehr hilfreich ist auch der Übergang zu den Fouriertransformierten der $\varphi(x_i)$

$$\varphi(x_i) = (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int dp_i \, e^{i\, p_i x_i} \, \tilde{\varphi}(p_i) \, .$$

Damit können wir 7.3.4 schreiben als

$$\begin{aligned}
\Gamma(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n \, \Gamma^{(n)}(x_1, x_2, \ldots, x_n) \cdot \\
\cdot (2\pi)^{-\frac{m}{2}n} \int dp_1 \cdots dp_n \, \delta(\textstyle\sum p_i) \, e^{i \sum p_i x_i} \, \tilde{\varphi}(p_1)\tilde{\varphi}(p_1) \cdots \tilde{\varphi}(p_1) \\
= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dp_1 \cdots dp_n \, \delta(\textstyle\sum p_i) \, \Gamma_p^{(n)}(p_1, p_2, \ldots, p_n) \, \tilde{\varphi}(p_1)\tilde{\varphi}(p_1) \cdots \tilde{\varphi}(p_1) \, .
\end{aligned} \tag{7.3.5}$$

Dabei haben wir die aus der Translationsinvarianz

$$\varphi(x_1 + y)\varphi(x_2 + y) \cdots \varphi(x_n + y) = \varphi(x_1)\varphi(x_2) \cdots \varphi(x_n) \quad \Rightarrow$$

$$e^{(\sum p_i)\, y} = 1 \quad \Rightarrow \quad \sum p_i = 0$$

herrührende Erhaltung des Gesamtimpulses explizit in der Delta-Funktion $\delta(\sum p_i)$ aufgeführt. Die $\Gamma_p^{(n)}$ sind folgermaßen definiert:

$$\Gamma_p^{(n)}(p_1, p_2, \ldots, p_n) := (2\pi)^{-\frac{m}{2}n} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n \, e^{i\sum p_i x_i}\, \Gamma^{(n)}(x_1, x_2, \ldots, x_n) \,. \tag{7.3.6}$$

Wir können das nichtlokale Funktional 7.3.4 jedoch auch als eine lokale Entwicklung um einen Punkt x_0 schreiben, indem wir jede einzelne φ-Funktion um x_0 herum entwickeln:

$$\Gamma(\varphi) = \int dx \, [U(\varphi) + \frac{1}{2}\sum_\mu (\partial_\mu \varphi(x)(x-x_0)_\mu)^2 F_2(\varphi) + \ldots] \,. \tag{7.3.7}$$

Der lineare Term in dieser Entwicklung ist ungerade in x und fällt daher bei der Integration fort. Die effektive Wirkung $\Gamma(\varphi)$ hat in erster Ordnung, bzw. bei konstantem φ auch exakt, dort ein Minimum, wo auch das effektive Potential $U(\varphi)$ ein Minimum hat, denn

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta \varphi(x)} = \frac{dU(\varphi)}{d\varphi} \,. \tag{7.3.8}$$

Um die Vertexfunktionen $\Gamma^{(n)}(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ zu erhalten, muß man die Gleichung $\varphi(x, J)$ sukzessiv invertieren zu $J(x, \varphi)$.

$$\mid \varphi\rangle = \mid \varphi\rangle_{J=0} + \left.\frac{\delta \varphi}{\delta J}\right|_{J=0} \mid J\rangle + \ \ldots \,, \quad \text{bzw.} \tag{7.3.9}$$

$$\varphi(x) = \left.\varphi(x)\right|_{J=0} + \int dx_1 \; \left.\frac{\delta \varphi(x)}{\delta J(x_1)}\right|_{J=0} J(x_1) \,.$$

Mit 7.3.2 folgt

$$\frac{\delta \varphi}{\delta J} = \frac{\delta^2 W}{\delta J \delta J} = \frac{1}{\hbar}\, G_c^{(2)} \,, \quad \text{bzw.} \tag{7.3.10}$$

$$\frac{\delta \varphi(x)}{\delta J(x_1)} = \frac{\delta^2 W}{\delta J(x) \delta J(x_1)} = \frac{1}{\hbar}\, G_c^{(2)}(x, x_1) \,.$$

Damit folgt für $\mid J\rangle$:

$$\mid \xi\rangle := \mid \varphi\rangle - \mid \varphi\rangle_{J=0} = \frac{1}{\hbar} G_c^{(2)} \mid J\rangle + \ \ldots \,,$$

$$\mid J\rangle = \hbar\, (G_c^{(2)})^{-1} \mid \xi\rangle - \hbar\, (G_c^{(2)})^{-1}[\ldots] \,. \tag{7.3.11}$$

Und hiermit können wir $\Gamma^{(2)}$ bestimmen

$$\Gamma^{(2)} = \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \varphi\, \delta \varphi} = \frac{\delta J}{\delta \varphi} = \frac{\delta J}{\delta \xi} = \hbar\, (G_c^{(2)})^{-1} \,, \quad \text{bzw.} \tag{7.3.12}$$

$$\Gamma^{(2)}(x_1, x_2) = \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta\varphi(x_1)\,\delta\varphi(x_2)} = \frac{\delta J(x_1)}{\delta\varphi(x_2)} = \frac{\delta J(x_1)}{\delta\xi(x_2)} = \hbar\,(G_c^{(2)}(x_1, x_2))^{-1}\ .$$

Erneut betrachten wir den Fall wechselwirkungsfreier Felder:

$$\Gamma_0^{(2)} = \hbar\,(G_{c,0}^{(2)})^{-1} = \hbar\,(G_0^{(2)})^{-1} = \hat{A}\ , \tag{7.3.13}$$

$$\Gamma_0^{(3)} = \frac{\delta^3\Gamma}{\delta\varphi\,\delta\varphi\,\delta\varphi} = \frac{\delta^2 J}{\delta\varphi\,\delta\varphi} = \frac{\hbar\,\delta(G_c^{(2)})^{-1}}{\delta\varphi} = \frac{\delta\hat{A}}{\delta\varphi} = 0\,, \quad \text{usw.}$$

$$\Gamma_0(\varphi) = \langle\varphi \mid \Gamma_0^{(2)}\varphi\rangle = \langle\varphi \mid \hat{A}\varphi\rangle = \hat{S}_0(\varphi)\ . \tag{7.3.14}$$

Aus diesem Grund heißt $\Gamma(\varphi)$ das Funktional der effektiven Wirkung.

Im Fall eines wechselwirkenden Feldes kann man $\Gamma^{(2)}$ ansetzen als

$$\Gamma^{(2)}(x, y) = \Gamma_0^{(2)}(x, y) + \Sigma(x, y)\ , \tag{7.3.15}$$

mit dem Operator Σ der effektiven Masse (oder der Selbstenergie), der die Korrekturen durch die Vakuumfluktuationen enthält.

$$\hat{\Gamma}^{(2)} = \hat{\Gamma}_0^{(2)} + \hat{\Sigma} = \hat{A} + \hat{\Sigma}\ ,$$

$$\hat{G}_c^{(2)} = \hbar(\hat{\Gamma}^{(2)})^{-1} = \hbar\frac{1}{\hat{A}+\hat{\Sigma}} = \hbar\frac{1}{\hat{A}}\cdot\frac{1}{\Sigma(\hat{A})^{-1}} = \hbar\Delta\cdot\frac{1}{1+\Sigma\Delta} \tag{7.3.16}$$

$$= \hbar\Delta(1 - \Sigma\Delta + \dots)\ . \tag{7.3.17}$$

Zum Abschluß wollen wir noch einige Folgerungen für ein konstantes $\varphi(x) = a$ ziehen. Wir betrachten zunächst den Fall $J = 0$:

$$\begin{aligned}
\varphi(x)\big|_{J=0} &= \left.\frac{\hbar\delta(\frac{1}{\hbar}W)}{\delta J(x)}\right|_{J=0} = G_c^{(1)}(x)\Big|_{J=0} \\
&= \left.\frac{\hbar\delta(\ln(Z(J)))}{\delta J(x)}\right|_{J=0} = \frac{1}{Z(J)}\cdot\left.\frac{\hbar\delta Z(J)}{\delta J(x)}\right|_{J=0} \\
&= \langle\phi(x)\rangle_{J=0} = \left.\frac{\langle 0 \mid \hat{\phi}(x) \mid 0\rangle}{\langle 0 \mid 0\rangle}\right|_{J=0} = a\ .
\end{aligned} \tag{7.3.18}$$

Wegen der Translationsinvarianz des Vakuums ist also $\varphi(x)\big|_{J=0} = a$ konstant. Häufig kann diese Konstante $a = 0$ gesetzt werden, nur im Falle eines nichttrivialen Vakuums, z.B. bei spontaner Symmetriebrechung, wird $a \neq 0$ sein. Damit folgt für die effektive Wirkung:

$$\Gamma(a) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int dx_1 dx_2\cdots dx_n\,\Gamma^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n)\,a^n\ ,$$

$$\Gamma(a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \Gamma_p^{(n)}(p_1 = 0, p_2 = 0, \dots, p_n = 0) \ ,$$

$$\Gamma(a) = \int dx \, U(a) = \Omega \, U(a) \ . \tag{7.3.19}$$

Im Fall $J \neq 0$ wird man versuchen, $\varphi(x)$ um $\varphi(x)|_{J=0}$ herum zu entwickeln, was als Nächstes geschehen soll.

7.4 Semiklassische Näherung

Betrachten wir jetzt $Z(J)$ in 7.1.1 für $\hbar \to 0$, so vermutet man sofort, daß nur das Minimum des Exponenten zum Integral beitragen wird. Dies ist gerade der Inhalt des klassischen Sattelpunkt-Theorems (siehe Anhang I.5), das bei geeigneten Voraussetzungen auf Pfadintegrale übertragen werden kann. Das Minimum des Exponenten ist aber gerade die Lösung $\phi_{cl}(x, J)$ der klassischen Feldgleichung:

$$\left. \frac{\delta S}{\delta \phi(x)} \right|_{\phi_{cl}(x,J)} = J(x) \ . \tag{7.4.1}$$

Dabei ist $\phi_{cl}(x, J)$ ebenso wie $\phi(x, J)$ eine Funktion von x, aber ein Funktional von J. Für $J = 0$ (und nach Vorraussetzung für $\hbar \to 0$) ist $\phi(x, 0)$ das Extremum von $S(\phi)$ und ist auch gleichzeitig eine Konstante, denn

$$\langle 0 \mid \hat{\phi}(x) \mid 0 \rangle_{J=0} = a \ ,$$

da wir das Vakuum als translationsinvariant voraussetzen. Bei einem einfachen Vakuum wird $a = 0$ gelten, wenn eine spontan gebrochene Symmetrie vorliegt wird $a \neq 0$ sein. Zugleich gilt

$$\begin{aligned} \langle 0 \mid \hat{\phi}(x) \mid 0 \rangle_{J=0} &= N \int D[\phi] \, \phi(x) \, e^{-\frac{1}{\hbar} S(\phi)} \\ &= \lim_{\hbar \to 0} N \int D[\phi] \, \phi_{cl}(x, 0) \, e^{-\frac{1}{\hbar} S(\phi)} \\ &= \phi_{cl}(x, 0) \lim_{\hbar \to 0} N \int D[\phi] \, e^{-\frac{1}{\hbar} S(\phi)} = \phi_{cl}(x, 0) \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle 0 \mid \hat{\phi}(x) \mid 0 \rangle_{J=0} = \phi_{cl}(x, J = 0) = a \ . \tag{7.4.2}$$

Sei jetzt also $\phi_{cl}(x, J)$ ein bekanntes „Hintergrundfeld", dann entwickeln wir das Feld ϕ als Potenzreihe in $\hbar$ um dieses klassische Feld ϕ_{cl}:

$$\phi := \phi_{cl} + \sqrt{\hbar} \, \chi \ . \tag{7.4.3}$$

Ebenso entwickeln wir die Wirkung $S(\phi)$ von 7.1.5 nach ϕ_{cl}, setzen zur Abkürzung

$$S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}) := \left.\frac{\delta^2 S}{\delta\phi(x)\,\delta\phi(y)}\right|_{\phi_{cl}}$$

und erhalten

$$\begin{aligned} S(\phi) - \int dx\, J(x)\phi(x) &= S(\phi_{cl}) + \int dx\, \left.\frac{\delta S}{\delta\phi(x)}\right|_{\phi_{cl}} \sqrt{\hbar}\chi(x) - \int dx\, J(x)\phi_{cl}(x) \\ &\quad - \int dx\, J(x)\sqrt{\hbar}\chi(x) + \frac{\hbar}{2}\int dx\, dy\, S^{(2)}(x,y,\phi_{cl})\,\chi(x)\chi(y) + \ldots \\ &= S(\phi_{cl}) - \int dx\, J(x)\phi_{cl}(x) + \frac{\hbar}{2}\int dx\, dy\, S^{(2)}(x,y,\phi_{cl})\,\chi(x)\chi(y)\,. \end{aligned} \tag{7.4.4}$$

Wenn der Operator $S^{(2)}(x,y,\phi_{cl})$ lokal ist, läßt sich 7.4.4 vereinfachen zu:

$$S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}) = S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})\,\delta(x-y) \quad \Rightarrow \tag{7.4.5}$$

$$S(\phi) - \int dx\, J(x)\phi(x) = S(\phi_{cl}) - \int dx\, J(x)\phi_{cl}(x) + \frac{\hbar}{2}\int dx\, S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})\,\chi^2(x)\,. \tag{7.4.6}$$

Damit folgt für das erzeugende Funktional $Z(J)$ (wieder mit der Normierung $Z(0) = 1$ und der Normierung $N_1 := \exp(\frac{1}{\hbar}S(a))$):

$$\begin{aligned} Z(J) &= N\int D[\phi]\, e^{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi)-\int dx\, J(x)\phi(x))} \\ &= N_1 e^{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi_{cl})-\int dx\, J(x)\phi_{cl}(x))}\, N_2 \int D[\phi]\, e^{-\frac{1}{\hbar}(\frac{\hbar}{2}\int dx\, dy\, S^{(2)}(x,y,\phi_{cl})\,\hbar\chi(x)\chi(y))} \\ &= N_1 e^{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi_{cl})-\int dx\, J(x)\phi_{cl}(x))}\, [\det(S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}))/\det(S^{(2)}(x,y,a))]^{-\frac{1}{2}} \\ &= \exp\{-\frac{1}{\hbar}(S(\phi_{cl}) - S(a) - \int dx\, J(x)\phi_{cl}(x))\}\,\cdot \\ &\quad \cdot\ \exp\{-\frac{1}{2}\ \ln[\det(S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}))/\det(S^{(2)}(x,y,a))]\}\,, \end{aligned} \tag{7.4.7}$$

$$\begin{aligned} W(J) &= -[S(\phi_{cl}) - S(a) - \int dx\, J(x)\phi_{cl}(x)] \\ &\quad - \frac{\hbar}{2}\ \{\ln[\det(S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}))/\det(S^{(2)}(x,y,a))]\}\,. \end{aligned} \tag{7.4.8}$$

Man sieht also, daß sich die Korrekturen zu $Z(J)$, bzw. $W(J)$ in der ersten Ordnung von $\hbar$ gerade durch die Determinante des Operators der zweiten Funktionlableitung der Wirkung ergeben. Diese Determinante werden wir weiter unten mit Hilfe der Zeta-Funktion regularisieren.

Um eine physikalische Vorstellung von der Art dieser Näherung zu bekommen, wollen wir die beiden Beiträge nullter und erster Ordnung in $\hbar$ noch etwas genauer betrachten.

$$W(J) := W_0(J) + \hbar W_1(J) \ , \tag{7.4.9}$$

$$W_0(J) = -[S(\phi_{cl}) - S(a) - \int dx \, J(x)\phi_{cl}(x)] \ , \tag{7.4.10}$$

$$W_1(J) = -\frac{1}{2} \{\ln[\det(S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}))/\det(S^{(2)}(x,y,a))]\} \ . \tag{7.4.11}$$

Wenn jetzt die Wirkung gegeben sei als $S(\mid \phi\rangle) = \frac{1}{2}\langle\phi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle + V(\mid \phi\rangle) - \langle J \mid \phi\rangle$, dann läßt sich formal eine Störungsreihe nach Potenzen in $\hbar$ gewinnen, wobei wir nur die 0. und die 1. Ordnung betrachten.

Die 0. Ordnung von $W(J)$ in $\hbar$:

Aus der Wirkung $S(\mid \phi\rangle)$ folgt die Sattelpunktgleichung:

$$\hat{A} \mid \phi_{cl}\rangle + \mid \frac{\delta V}{\delta \phi}(\phi_{cl})\rangle = \mid J\rangle \ . \tag{7.4.12}$$

Mit der Green-Funktion (dem Propagator) $\hat{\Delta}$ zum Operator $\hat{A}$, d.h. $\hat{\Delta}\hat{A} = \hat{1}$, ergibt sich

$$\mid \phi_{cl}\rangle = \hat{\Delta} \mid J\rangle - \hat{\Delta} \mid \frac{\delta V}{\delta \phi}(\phi_{cl})\rangle \tag{7.4.13}$$

$$= \hat{\Delta} \mid J\rangle - \hat{\Delta} \mid \frac{\delta V}{\delta \phi}(\hat{\Delta} \mid J\rangle)\rangle + \dots \ . \tag{7.4.14}$$

Stellt man dieses Ergebnis als Feynman-Graph dar (mit einer Linie für den Propagator $\hat{\Delta}$ und einem Vertex für die Funktionalableitung $\frac{\delta V}{\delta \phi}$, so sieht man, daß diese Störungsreihe für $\mid \phi_{cl}(J)\rangle$ nur Baumdiagramme und keine Schleifen enthält. Setzt man dieses $\phi_{cl}(J)$ in $W_0(J)$ aus 7.4.10 ein, so erhält man die Störungsreihe für $W_0(J)$.

Die 1. Ordnung von $W(J)$ in $\hbar$:

Nun wollen wir die Quantenkorrekturen von $W(J)$ in erster Ordnung in $\hbar$, d.h. $W_1(J)$, untersuchen. Wir beginnen mit der Darstellung von 7.4.11:

$$W_1(J) := -\frac{1}{2} \{\ln[\det(S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}))/\det(S^{(2)}(x,y,a))]\}$$

$$= -\frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(S^{(2)}(x,y,\phi_{cl})/\mu^2)] - \ln(S^{(2)}(x,y,a)/\mu^2)]\ .$$

Hier haben wir adhoc einen willkürlichen Faktor μ^2 mit der Dimension eines Massenquadrates eingeführt, damit wir für das Argument des Logarithmus von $S^{(2)}$ eine dimensionslose Größe erhalten. Mehr zu diesen Dimensionsbetrachtungen findet sich in Kapitel 7.5.

Jetzt sehen wir sofort, daß wegen der Spurbildung nur Integrale (Feynman-Graphen) mit einer Schleife auftreten. Wenn zusätzlich gilt, daß

$$V^{(2)}(|\ a\rangle) = 0\ , \tag{7.4.15}$$

wie etwa bei der $(\phi^4)_4$-Theorie (ohne kosmologische Konstante), dann folgt

$$a = 0 \Rightarrow\ V^{(2)}(\phi_{cl})\Big|_{\phi_{cl}=a} = \frac{g}{2!}\phi_{cl}^2(x)\Big|_{\phi_{cl}=a} = 0\ ,$$

dann können wir den Ausdruck für $W_1(J)$ noch weiter entwickeln:

$$\begin{aligned} W_1(J) &= -\frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(\hat{A} + V^{(2)}(|\ \phi_{cl}\rangle)/\hat{A})] \\ &= -\frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(\hat{1} + \hat{\Delta}V^{(2)}(|\ \phi_{cl}\rangle))] \\ &= -\frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}[\hat{\Delta}V^{(2)}(|\ \phi_{cl}\rangle) - \frac{1}{2}(\hat{\Delta}V^{(2)}(|\ \phi_{cl}\rangle))(\hat{\Delta}V^{(2)}(|\ \phi_{cl}\rangle)) + \ldots]\ . \end{aligned} \tag{7.4.16}$$

Im letzten Schritt wurde die Entwicklung $\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \ldots$ angewandt, die ja auch für Operatoren mit einer Spektraldarstellung gilt (was wir hier voraussetzen). Für $|\ \phi_{cl}(J)\rangle$ können wir wieder den Baumgraphen aus 7.4.14 einsetzen und erhalten die Störungsreihe für $W(J)$. Hier sehen wir nun, daß tatsächlich nur Integrale (Feynman-Graphen) mit Propagatoren, Vertices und einer einzigen Schleife aufgrund der Spurbildung auftreten. Daher ist die $\hbar$-Näherung identisch mit der Ein-Schleifen-Näherung.

Hilfreich ist es auch, die effektive Wirkung und das effektive Potential zu betrachten:

$$\begin{aligned} \Gamma(\phi_{cl}) &:= \Gamma_0(\phi_{cl}) + \hbar\Gamma_1(\phi_{cl}) \\ &= -W(J) + \langle J \mid \phi_{cl}\rangle \\ &= -W_0(J) - \hbar W_1(J) + \langle J \mid \phi_{cl}\rangle \\ &= (S(\phi_{cl}) - S(a)) - \langle J \mid \phi_{cl}\rangle + \langle J \mid \phi_{cl}\rangle - \hbar W_1(J) \\ &= (S(\phi_{cl}) - S(a)) + \frac{\hbar}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(S^{(2)}(x,y,\phi_{cl})/\mu^2) - \ln(S^{(2)}(x,y,a)/\mu^2)]\ , \end{aligned} \tag{7.4.17}$$

oder bei einem lokalen Operator $S^{(2)}(x,y,\phi_{cl}) = S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})\,\delta(x-y)$

$$\Gamma(\phi_{cl}) = (S(\phi_{cl}) - S(a)) + \frac{\hbar}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})/\mu^2) - \ln(S^{(2)}_{loc}(x,a)/\mu^2)]\ . \tag{7.4.18}$$

Wenn nun $\phi_{cl}(x) = \phi_{cl} =$ const. ist (d.h. bei einem homogenen Hintergrundfeld), dann folgt für das effektive Potential (mit 7.3.19):

$$\Gamma(\phi_{cl}) = \Omega\, U(\phi_{cl})\ ,$$

$$S(\phi_{cl}) = \frac{1}{2}\langle\phi_{cl} \mid \hat{A} \mid \phi_{cl}\rangle + \Omega\, V(\phi_{cl})\ .$$

Für den Klein-Gordon-Operator $A_x = -\Box_x + m^2$ mit einer lokalen Selbstwechselwirkung $V(\phi_{cl})$ ist $S^{(2)}(x,y,\phi_{cl})$ lokal. Zusätzlich nehmen wir den Massenterm noch mit ins Potential herein und schreiben $V_m(\phi_{cl}) := \frac{1}{2}m^2\phi_{cl}^2 + V(\phi_{cl})$. Damit folgt

$$(S(\phi_{cl}) - S(a)) = \Omega(V_m(\phi_{cl}) - V_m(a))\ ,$$

$$U(\phi_{cl}) = (V_m(\phi_{cl}) - V_m(a)) + \frac{\hbar}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})/\mu^2) - \ln(S^{(2)}_{loc}(x,a)/\mu^2)]\ . \tag{7.4.19}$$

Aus diesem Grund wird U als effektives Potential bezeichnet, nämlich als Summe von V_m plus den Vakuumfluktuationen der Ein-Schleifen Näherung in erster Ordnung in $\hbar$.

7.5 Dimensions-Analyse

In der Quantenfeldtheorie wird zumeist das *energetische Einheiten-System* verwendet. Zur Frage der physikalischen Einheiten-Systeme und ihrer Zusammenhänge siehe sehr schön die Anhänge A.2 bis A.4 in Zeidler (2006). Das *energetische Einheiten-System* wird definiert durch

$$c = \hbar = \epsilon_0 = k \equiv 1\ . \tag{7.5.1}$$

Wenn wir die Einheit der Wirkung S mit $[S]$ bezeichnen, dann ist also S ohne Einheit, also $[S] = [\hbar] = 1$. Daraus folgen nun:

$$E = mc^2 \quad \Rightarrow \quad [E] = [m]\ ,$$

$$E = pc \quad \Rightarrow \quad [E] = [p] = [m]\ ,$$

$$E = p\cdot v - L \quad \Rightarrow \quad [L] = [p] = [m]\ ,$$

$$S = \int dt\, L \quad \Rightarrow \quad [L] = [t]^{-1} = [m] \ ,$$

$$v = \frac{x}{t} \quad \Rightarrow \quad [x] = [t] = [m]^{-1} \ ,$$

$$S = \int d^n x\, \mathcal{L} \quad \Rightarrow \quad [\mathcal{L}] = [x]^{-n} = [m]^n \ .$$

Es gibt also im *energetischen Einheiten-System* nur noch die eine Grundeinheit $[E] = [m] = [p]$ und Potenzen davon. Für den Klein-Gordon-Operator mit ϕ^4-Potential ergibt sich:

$$S = \int d^n x\, \phi(x)(-\Box_x + m^2)\phi(x) \quad \Rightarrow \quad 1 = [x]^n[\phi]^2[m]^2 \quad \Rightarrow \quad [\phi] = [m]^{\frac{n}{2}-1} \ ,$$

$$[\phi] = [m] \quad \text{bei } n = 4 \ , \tag{7.5.2}$$

$$S = \frac{g}{r!}\int d^n x\, \phi^r(x) \quad \Rightarrow \quad 1 = [g][x]^n[\phi]^r \quad \Rightarrow \quad [g] = [m]^{n-r} \ ,$$

$$[g] = [1] \quad \text{bei } n = r = 4 \ , \tag{7.5.3}$$

$$S = \frac{\hbar}{2}\int\int d^n x\, d^n y\, S^{(2)}(x,y,\phi)\,\chi(x)\,\chi(y) \quad \Rightarrow \quad 1 = [x]^{2n}[S^{(2)}(x,y,\phi)][\phi]^2 \quad \Rightarrow$$

$$[S^{(2)}(x,y,\phi)] = [m]^{2n-2} \quad \Rightarrow \quad [S^{(2)}(x,y,\phi)] = [m]^6 \quad \text{bei } n = 4 \ , \tag{7.5.4}$$

$$S^{(2)}(x,y,\phi) = S^{(2)}_{loc}(x,\phi)\,\delta(x-y) \quad \Rightarrow \quad S = \frac{\hbar}{2}\int d^n x\, S^{(2)}_{loc}(x,\phi)\,\chi^2(x) \quad \Rightarrow$$

$$1 = [x]^n[S^{(2)}_{loc}(x,\phi)][\phi]^2 \quad \Rightarrow \quad [S^{(2)}_{loc}(x,\phi)] = [m]^{n-2} \quad \Rightarrow$$

$$[S^{(2)}_{loc}(x,\phi)] = [m]^2 \quad \text{bei } n = 4 \ . \tag{7.5.5}$$

Eine Dimensions-Analyse physikalischer Gleichungen erscheint auf den ersten Blick eher trivial, jedoch ergeben sich häufig allein daraus bereits so starke Nebenbedingungen, daß die funktionale Form von Lösungen weitgehend festgelegt ist.

Wenn man sich die Ein-Schleifen Näherung der effektiven Wirkung genauer anschaut, dann stellt man fest, daß $\det(S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl}))/\det(S^{(2)}_{loc}(x,a))$ für viele QFTs UV-divergent ist. Wir werden das am Beispiel der $(\phi^4)_4$-Theorie im nächsten Unterkapitel kurz zeigen.

Deshalb geht man von der vorliegenden QFT zu einer 'regularisierten' QFT über. Ob man nun jedoch eine Impuls-Abschneide-Regularisierung wählt (siehe etwa Hochberg u. a. (1998a)), eine Dimensions-Regularisierung, oder wie hier die Zeta-Funktions-Regularisierung, stets kommt eine neue Variable und damit eine neue Energieskala ins Spiel. Bei der Zeta-Funktions-Regularisierung umgeht man Pole der UV-Divergenz mittels analytischer Fortsetzung in der komplexen Ebene. Wenn das Spektrum des Operators $S^{(2)}_{loc}$ nicht bekannt ist, wählt man zur Bestimmung der Zeta-Funktion den Weg über die Lösung der Wärmekern-Gleichung 6.6.4:

$$(S^{(2)}_{loc}(x,\phi(x)) + \frac{\partial}{\partial t'})\hat{K}(x,y,t') = 0\,, \quad \text{mit } K(x,y,0) = \delta(x-y)\,. \tag{7.5.6}$$

In dieser „Wärmegleichung" wurde die neue Variable t' eingeführt. Da $[S^{(2)}_{loc}(x,\phi)] = [m]^2$ ist, haben auch die Eigenwerte λ_j von $S^{(2)}_{loc}$ und die Variable $1/t'$ die Dimension $[m]^2$. Die Zeta-Funktion von $S^{(2)}_{loc}$ wurde in 4.8.2 definiert als:

$$\zeta_{S^{(2)}_{loc}}(s) = \sum_{j=1} \frac{1}{\lambda_j^s} = \sum_{j=1} e^{-s\,\ln\lambda_j} \quad \Rightarrow \quad [\zeta_{S^{(2)}_{loc}}(s)] = [m]^{-2s}\,. \tag{7.5.7}$$

Dieses Ergebnis für die Dimension der Zeta-Funktion ist nun aber nicht besonders hilfreich, da wir ja $\frac{d}{ds}\zeta(s)$ berechnen wollen, und dieses dann mit einer Dimension von $(\ln[m^2])\cdot[m]^{-2s}$ dimensionsmäßig nicht definierbar ist.

Stattdessen dividieren wir die ganze Wärmekern-Gleichung 7.5.6 durch die Skala von $1/t'$, also durch μ^2 mit $[\mu] = [m]$ und erhalten mit $S^{(2)}_{loc}/\mu^2$ und mit $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'}/\mu^2$, $\Rightarrow\ t = t'\cdot\mu^2$ eine dimensionslose Wärmekern-Gleichung:

$$(S^{(2)}_{loc}(x,\phi(x))/\mu^2 + \frac{\partial}{\partial t})\hat{K}(x,y,t) = 0\,, \quad \text{mit } K(x,y,0) = \delta(x-y)\,. \tag{7.5.8}$$

Damit sind $S^{(2)}_{loc}(x,\phi(x))/\mu^2$ und t dimensionslos. Und auch $\hat{K}(t)$ mit dimensionslosem t, siehe 6.6.5, ist dimensionslos:

$$\hat{K}(t) = e^{-(S^{(2)}_{loc}(x,\phi(x))/\mu^2)\,t}\,.$$

Ebenso definieren wir eine dimensionslose Zeta-Funktion 7.5.7 mit λ_j/μ^2:

$$\zeta_{S^{(2)}_{loc}/\mu^2}(s) = \sum_{j=1} \frac{1}{(\lambda_j/\mu^2)^s} = \sum_{j=1} e^{-s\,\ln(\lambda_j/\mu^2)} \quad \Rightarrow \quad [\zeta_{S^{(2)}_{loc}/\mu^2}(s)] = [1]\,. \tag{7.5.9}$$

Wir haben also die Skala μ^2 der ursprünglichen Variablen $1/t'$ mit der Dimension $[m]^2$ auf die anderen Massenquadrat- bzw. Energiequadrat-Terme abgewälzt.

Mit dieser dimensionslosen Zeta-Funktion werden wir als nächstes unsere QFT regularisieren, d.h. von einem UV-Pol befreien, allerdings um den Preis des neuen Skalenparameters μ. Mathematisch gesprochen gehen wir mit der Regularisierung also von unserer ursprünglichen divergenten QFT($\{\kappa_i\}$) mit den Kopplungsparametern $\{\kappa_i\}$ zu einer durch μ gekennzeichneten Schar von weniger divergenten, evtl. sogar endlichen, QFT($\mu, \{\kappa_i\}$) über. Im Renormierungsprogramm suchen wir schließlich nach einer konvergenten Untermannigfaltigkeit im Parameterraum der duch $\{\mu, \kappa_i\}$ gekennzeichneten QFT's. Wenn wir eine solche Untermannigfaltigkeit $\{\kappa_i(\mu)\}$ gefunden haben, suchen wir dort nach einem geeigneten Fixpunkt μ_*, an welchem wir die Kopplungsparameter experimentell bestimmen und damit die Theorie festlegen können.

7.6 UV-Divergenz der $(\phi^4)_4$-Theorie

Hier soll ganz kurz die UV-Divergenz der $(\phi^4)_4$-Theorie in der 1-Schleifen-Näherung, d.h. in erster Ordnung von $\hbar$ gezeigt werden.

Unter der $(\phi^4)_4$-Theorie verstehen wir, wie auch schon weiter oben immer wieder als Beispiel herangezogen, die bosonische QFT in 4 Dimensionen mit der folgenden euklidischen Wirkungsfunktion:

$$S = \int d^4x\, \phi(x)(-\Box_x + m^2)\phi(x) + \frac{g}{4!}\int d^4x\, \phi^4(x)\ , \tag{7.6.1}$$

$$S^{(2)}_{loc}(x, \phi(x)) = -\Box_x + m^2 + \frac{g}{2}\phi^2_{cl}(x)\ . \tag{7.6.2}$$

Wir betrachten hier nur eine massive Theorie, d.h. $m > 0$, um uns nicht mit der IR-Divergenz masseloser Theorien befassen zu müssen. Weiter setzen wir der Einfachheit halber auch voraus, daß das Hintergrundfeld ϕ_{cl} homogen sei, denn dann können wir mit einer Fouriertransformation in den Impulsraum übergehen und das Ortsintegral über das endliche Volumen Ω leicht durchführen. Wir beginnen mit dem Ausdruck für die effektive Wirkung in erster Ordnung von $\hbar$ (siehe 7.4.18):

$$\begin{aligned}
\Gamma_1(\phi_{cl}) &= \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})/\mu^2) - \ln(S^{(2)}_{loc}(x,a)/\mu^2)] \\
&= \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}[\ln(S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})/S^{(2)}_{loc}(x,a))] \\
&= \frac{1}{2}\int d^4x\, \langle x \mid \ln(S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})/S^{(2)}_{loc}(x,a)) \mid x\rangle \\
&= \frac{1}{2}\int d^4x \int d^4q_1 \int d^4q_2\, \langle x \mid q_1\rangle\langle q_1 \mid \ln(S^{(2)}_{loc}(x,\phi_{cl})/S^{(2)}_{loc}(x,a)) \mid q_2\rangle\langle q_2 \mid x\rangle \\
&= \frac{1}{2}\int d^4x \int d^4q_1 \int d^4q_2 \\
&\qquad \langle x \mid q_1\rangle\langle q_1 \mid \ln((q_1^2 + m^2 + \frac{g}{2}\phi^2_{cl})/(q_1^2 + m^2)) \mid q_1\rangle\delta(q_1 - q_2)\langle q_1 \mid x\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \int d^4x \int d^4q \, \langle x \mid q \rangle \langle q \mid x \rangle \ln((q^2 + m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)/(q^2 + m^2)) \\
&= \frac{1}{2} \int d^4x \, \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q \, \ln((q^2 + m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)/(q^2 + m^2)) \\
&= \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \frac{1}{2} \int d^4q \, \ln((q^2 + m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)/(q^2 + m^2)) \\
&= \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \frac{1}{2} \int d^4q \, \ln(1 + \frac{\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{q^2 + m^2}) \, . \qquad (7.6.3)
\end{aligned}
$$

Für den Fall $\frac{g}{2}\phi_{cl}^2 < (q^2+m^2)$, d.h. kleine Kopplungskonstante und kleines Hintergrundfeld, können wir den Logarithmus entwickeln und erhalten:

$$
\Gamma_1(\phi_{cl}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \frac{1}{2} [\int d^4q \, \frac{\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{q^2 + m^2} - \frac{1}{2} \int d^4q \, (\frac{\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{q^2 + m^2})^2 + \ldots] \, . \qquad (7.6.4)
$$

Hieran sieht man bereits, daß der erste Term von $\Gamma_1(\phi_{cl})$ für $\Lambda \to \infty$ divergiert, denn mit 4-dimensionalen Kugelkoordinaten (siehe z.B. Hassani (1999), S. 594) ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
\lim_{\Lambda\to\infty} \int d^4q \, \frac{1}{q^2 + m^2} &= \lim_{\Lambda\to\infty} \int_{|q|=0}^{\Lambda} d|q| \iiint d\Omega_m \, \frac{1}{q^2 + m^2} \\
&= \frac{(2\pi)^2}{\Gamma(2)} \lim_{\Lambda\to\infty} \int_{|q|=0}^{\Lambda} d|q| \, \frac{|q|^3}{|q|^2 + m^2} = \infty \, . \qquad (7.6.5)
\end{aligned}
$$

$\Gamma_1(\phi_{cl})$ in erster Ordnung von $\hbar$ für die $(\phi^4)_4$-Theorie wird z.B. in Hochberg u. a. (1998a) noch ausführlicher berechnet und diskutiert.

7.7 Regularisierung der $(\phi^4)_4$-Theorie mit der Zeta-Funktion

Wie schon oben sei also unser $S_{loc}^{(2)}$ der $(\phi^4)_4$-Theorie der Operator:

$$
S_{loc}^{(2)}(x, \phi(x)) = -\Box_x + m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2(x) \, . \qquad (7.7.1)
$$

Wir wollen uns nun die Wärmekern-Funktion $G(x, y, \tau)$ von $(S_{loc}^{(2)}(x, \phi(x))/\mu^2$ verschaffen und daraus die Zeta-Funktion, ihre Ableitung an der Stelle 0 und die effektive Wirkung berechnen.

Die Green-Funktion $G_0(x,y,\tau)$ der homogenen Wärmegleichung in 4 Dimensionen ist definiert als Lösung von

$$[\frac{\partial}{\partial\tau} - \Box_x/\mu^2]\, G_0(x,y,\tau) = 0 \quad \text{und} \quad G_0(x,y,+0) = \delta(x-y)\ . \tag{7.7.2}$$

Hierbei sei τ dimensionslos, d.h. $[\tau] = 1$, sowie $[\mu] = [m]$ und $[x] = [y] = [m]^{-1}$. Wir wollen zeigen, daß die folgende Green-Funktion $G_0(x,y,\tau)$ eine Lösung von 7.7.2 ist:

$$G_0(x,y,\tau) = \frac{\mu^4}{16\,\pi^2\tau^2}\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}\ . \tag{7.7.3}$$

Beweis: Zunächst zeigen wir, daß $G_0(x,y,\tau)$ die Wärmegleichung erfüllt:

$$\begin{aligned}
\frac{\Box_x}{\mu^2}\, G_0(x,y,\tau) &= \frac{\mu^2}{16\,\pi^2\tau^2} \sum_{i=1}^{4} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}} \\
&= \frac{\mu^2}{16\,\pi^2\tau^2} \sum_{i=1}^{4} \frac{\partial}{\partial x_i} [(\frac{-2\mu^2(x_i-y_i)}{4\tau})\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}] \\
&= \frac{\mu^2}{16\,\pi^2\tau^2} [\frac{-8\mu^2}{4\tau} + \sum_{i=1}^{4} \frac{4\mu^4(x_i-y_i)^2}{16\tau^2}]\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}} \\
&= \frac{\mu^2}{16\,\pi^2\tau^2} [\frac{-2\mu^2}{\tau} + \frac{\mu^4(x-y)^2}{4\tau^2}]\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}\ ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\tau} G_0(x,y,\tau) &= \frac{\mu^4}{16\,\pi^2} \frac{\partial}{\partial\tau} [\frac{1}{\tau^2}\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}] \\
&= \frac{\mu^4}{16\,\pi^2} [-\frac{2}{\tau^3} + \frac{1}{\tau^2} (\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau^2})]\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}} \\
&= \frac{\mu^2}{16\,\pi^2\tau^2} [-\frac{2\mu^2}{\tau} + (\frac{\mu^4(x-y)^2}{4\tau^2})]\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}\ . \quad \Box
\end{aligned}$$

Damit ist die Differentialgleichung erfüllt. Jetzt zur Anfangsbedingung:

$$I := \lim_{\tau\to 0_+} \int d^4y\, G_0(x,y,\tau)\, f(y) = \lim_{\tau\to 0_+} \int d^4y\, \frac{\mu^4}{16\,\pi^2\tau^2}\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}\, f(y)\ .$$

Wir substituieren

$$z := \frac{\mu(x-y)}{\sqrt{4\tau}} \quad \Rightarrow \quad y = x - \frac{\sqrt{4\tau}}{\mu}\, z$$

und benutzen 4.7.6 (in 4 Dimensionen mit $\hat{A} = \hat{1}$ und $\mid J\rangle = \mid 0\rangle$):

$$I = \lim_{\tau\to 0_+} \frac{\mu^4}{16\,\pi^2\tau^2} \int \frac{16\tau^2}{\mu^4}\, d^4z\, e^{-z^2}\, f(x - \frac{\sqrt{4\tau}}{\mu}\, z)$$
$$= f(x)\, \frac{1}{\pi^2} \int d^4z\, e^{-z^2} = f(x)\ . \quad \Box$$

Wir suchen jetzt die Wärmekern-Funktion der $(\phi^4)_4$-Theorie, d.h. die Green-Funktion $G(x, y, \tau)$ in 4 Dimensionen mit:

$$[\frac{\partial}{\partial\tau} + (-\Box_x + m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2(x))/\mu^2]\, G(x, y, \tau) = 0 \quad \text{und} \quad G(x, y, +0) = \delta(x - y)\ . \tag{7.7.4}$$

Diese Gleichung ist für ein beliebiges $\phi_{cl}(x)$ sehr schwer zu lösen, und wenn, dann meist nur numerisch. Wir sind an Lösungen langsam veränderlicher Felder $\phi_{cl}(x)$ interessiert und machen daher wieder die einfachste Näherung eines homogenen Hintergrundfeldes $\phi_{cl}(x) = \phi_{cl} = \text{const}$. Diese Näherung läßt sich durch eine Gradiententenentwicklung von $\Gamma(\phi_{cl}(x))$ verbessern, siehe etwa Hochberg u. a. (1998a) Abschnitt IX, und Zinn-Justin (2002) Anhang A9.2, worauf wir aber hier nicht eingehen wollen.

Die Green-Funktion für 7.7.4 ist:

$$G(x, y, \tau) = \frac{\mu^4}{16\,\pi^2\tau^2}\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}\, e^{-(m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)\,\frac{\tau}{\mu^2}}\ . \tag{7.7.5}$$

Beweis: Der Beweis ist ganz analog zum obigen Fall bei $G_0(x, y, \tau)$. Zunächst also die Wärmegleichung:

$$[\Box_x - m^2 - \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)/\mu^2\, G(x, y, \tau)]$$
$$= \frac{\mu^2}{16\,\pi^2\tau^2}\, [\frac{-2\mu^2}{\tau} + \frac{\mu^4(x-y)^2}{4\tau^2} - (m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)]\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}\, e^{-(m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)\,\frac{\tau}{\mu^2}}\ ,$$

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\, G(x, y, \tau)]$$
$$= \frac{\mu^2}{16\,\pi^2\tau^2}\, [\frac{-2\mu^2}{\tau} + \frac{\mu^4(x-y)^2}{4\tau^2} - (m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)]\, e^{-\frac{\mu^2(x-y)^2}{4\tau}}\, e^{-(m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)\,\frac{\tau}{\mu^2}}\ . \quad \Box$$

Damit ist die Differentialgleichung erfüllt. Jetzt zur Anfangsbedingung (wie oben):

$$\lim_{\tau\to 0_+} G(x, y, \tau) = \lim_{\tau\to 0_+} G_0(x, y, \tau) = \delta(x - y)\ . \quad \Box$$

Jetzt zur Berechnung der Zeta-Funktion:

$$\begin{aligned}
\zeta_{[-\Box_x+m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2]/\mu^2}(s) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int d\tau\, \tau^{s-1} \int d^4x\, G(x,x,\tau) \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \int d\tau\, \tau^{s-1} \int d^4x\, \frac{\mu^4}{16\,\pi^2\tau^2}\, e^{-(m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)\,\frac{\tau}{\mu^2}} \\
&= \frac{\Omega\mu^4}{16\,\pi^2}\, \frac{1}{\Gamma(s)} \int d\tau\, \tau^{s-3}\, e^{-(m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)\,\frac{\tau}{\mu^2}} \\
&= \frac{\Omega\mu^4}{16\,\pi^2}\, \frac{1}{\Gamma(s)}\, (\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})^{2-s} \int d\tau'\, \tau'^{s-3}\, e^{-\tau'} \\
&= \frac{\Omega\mu^4}{16\,\pi^2}\, \frac{\Gamma(s-2)}{\Gamma(s)}\, (\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})^{2-s} \\
&= \frac{\Omega\mu^4}{16\,\pi^2}\, \frac{1}{(s-1)(s-2)}\, (\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})^{2-s} \;,
\end{aligned}$$

$$\zeta_{[-\Box_x+m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2]/\mu^2}(0) = \frac{\Omega}{32\,\pi^2}\, (m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)^2 \;, \tag{7.7.6}$$

$$\zeta_{[-\Box_x+m^2]/\mu^2}(0) = \frac{\Omega}{32\,\pi^2}\, m^4 \;. \tag{7.7.7}$$

Als nächstes benötigen wir die Ableitung der Zeta-Funktion nach s an der Stelle 0:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds}\,\zeta_{[-\Box_x+m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2]/\mu^2}(s)\Big|_{s=0} &= \frac{d}{ds}\,[\frac{\Omega\mu^4}{16\,\pi^2}\, \frac{1}{(s-1)(s-2)}\, (\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})^{2-s}]\Big|_{s=0} \\
&= \frac{\Omega\mu^4}{16\,\pi^2}\, [\frac{(-1)(2s-3)}{(s-1)^2(s-2)^2}\, (\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})^{2-s} \\
&\quad + \frac{1}{(s-1)(s-2)}\, (-1)\, \ln(\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})\, (\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})^{2-s}]\Big|_{s=0} \\
&= \frac{\Omega\mu^4}{16\,\pi^2}\, (\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})^2\, [\frac{3}{4} - \frac{1}{2}\ln(\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})] \\
&= \frac{\Omega}{32\,\pi^2}\, (m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)^2\, [\frac{3}{2} - \ln(\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})] \;, \qquad (7.7.8)
\end{aligned}$$

$$\frac{d}{ds}\,\zeta_{[-\Box_x+m^2]/\mu^2}(s)\Big|_{s=0} = \frac{\Omega}{32\,\pi^2}\, m^4\, [\frac{3}{2} - \ln(\frac{m^2}{\mu^2})] \;. \tag{7.7.9}$$

Mit 4.8.3, 7.4.11, und 7.4.18 folgt für die effektive Wirkung:

$$\Gamma(\phi_{cl}) = \Gamma_0(\phi_{cl}) + \hbar\Gamma_1(\phi_{cl}) \,, \quad \text{mit}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_1(\phi_{cl}) &= +\frac{1}{2}[\ln\{\det[(-\Box_x + m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)/\mu^2]\} - \ln\{\det[(-\Box_x + m^2)/\mu^2]\}] \\
&= -\frac{1}{2}[\,\zeta'_{[-\Box_x+m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2]/\mu^2}(0) - \zeta'_{[-\Box_x+m^2]/\mu^2}(0)] \\
&= -\frac{\Omega}{64\,\pi^2}\,[(m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)^2\,(\frac{3}{2} - \ln(\frac{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})) - m^4\,(\frac{3}{2} - \ln(\frac{m^2}{\mu^2}))]\,. \qquad (7.7.10)
\end{aligned}$$

Hiermit haben wir die effektive Wirkung einer durch die Massenskala μ charakterisierten Schar von $(\phi^4)_4$-Quantenfeldtheorien QFT(μ, m, g) gefunden. Dies ist die Basis für die Renormierung im folgenden Kapitel.

7.8 Kenneth Wilson (*1936)

Kenneth Wilson wurde 1936 in den USA geboren. Sein Vater war der berühmten Chemiker E. Bright Wilson, ein Schüler von Linus Pauling. Kenneth Wilson studierte in Harvard und promovierte 1961 am Caltech in Pasadena / Los Angeles unter Gell-Mann. Von 1963 unterrichtete und forschte Wilson an der Cornell Universität in Ithaca, New York.

Seine wichtigsten Beiträge zur theoretischen Physik sind seine Forschungen zu *Renormierungsgruppen* und deren Anwendung sowohl in der Quantenfeldtheorie, als auch in der Statistischen Physik der Phasenübergänge. Mit diesen Renormierungsmethoden konnte er kritische Exponenten von Phasenübergängen 2. Ordnung auch numerisch berechnen. Mit einer weiteren Anwendung der Renormierungsmethoden in der Festkörper-Physik erklärte er den Kondo-Effekt. In der Quantenfeldtheorie formulierte er eine *Gitter-Quantenchromodynamik* und begründete damit das Gebiet der Gittereichtheorien.

1985 wurde er Leiter eines der nationalen Supercomputer-Zentren der USA in Cornell.

Wilson erhielt 1980 den 'Wolf Prize in Physics' (zusammen mit Fisher und Kadanoff) und 1982 den Physik-Nobelpreis.

[Quelle: Wikipedia-Wilson (2010)]

7.9 Renormierung der $(\phi^4)_4$-Theorie

An dieser Stelle soll keine Einführung in das weite und tiefe Gebiet der Renormierungstheorie gegeben werden. Für eine allererste Orientierung empfehlen sich die beiden Artikel Wikipedia-Renormalization (2008), Wikipedia-RenormalisationGroup (2008). Leider hat die philosophisch und didaktisch klare Sichtweise der Exakten Renormierungs-Gruppen-Gleichung (ERGE) nach Wilson und Wegner in den gängigen Lehrbüchern der QFT und auch in den Standardwerken von Collins (1984) und Zinn-Justin (2002) noch nicht ihren gebührenden Platz gefunden. Deshalb sei hier der sehr schöne Übersichtsartikel zu den diversen ERGE von Bagnuls u. Bervillier (2008) empfohlen.

Bei der Renormierungstheorie geht es um die Frage, ob wir eine Beschreibung eines dynamischen Systems finden können, die über viele Größenordnungen einer Längen- oder Energieskala hinweg gültig ist. Wenn sich herausstellt, daß unsere Beschreibung des Systems bei einer Skalentransformation exakt oder näherungsweise selbstähnlich ist, dann sprechen wir von einer renormierbaren Theorie. Selbstähnlich heißt eine Theorie genau dann, wenn die dynamische Gleichung für die Zustandsdichte, die Hamilton-Funktion oder die Wirkungsfunktion bei einer Skalentransformation forminvariant bleibt, mit in der Regel angepaßten (='renormierten') jetzt skalenabhängigen Kopplungsparametern.

Die Selbstähnlichkeit läßt sich sehr gut mit einer Semigruppe beschreiben und erlaubt im allgemeinen Fall auch nichtstörungstheoretische Einsichten in das Verhalten des Systems. Aufgrund der Komplexität der ERGE-Gleichungen wird man aber rasch zu Näherungen oder der numerischen Integration gezwungen sein. Die üblichste Näherung bleibt nach wie vor eine Störungstheorie um einen Fixpunkt des Systems herum. Im Fall der $(\phi^4)_4$-Theorie hat Polchinski den Beweis der Renormierbarkeit dieser Theorie in allen Ordnungen der Störungstheorie mit Hilfe einer ERGE drastisch vereinfacht. Für einen modernen und nochmals vereinfachten Beweis auf den Spuren Polchinskis siehe Salmhofer (1998).

Wir gehen im Folgenden also von dem Wissen aus, daß die $(\phi^4)_4$-Theorie in störungstheoretischer Näherung in der Nähe des Infrarot-Fixpunkts renormierbar ist. Damit ist das Zustansfunktional Z, bzw. die effektive Wirkung Γ forminvariant unter einer Skalentransformation und die Kopplungsparameter m und g werden skalenabhängig.

Weiterhin liege keine gebrochene Symmetrie vor, d.h. es gelte $a = 0$, und es gebe auch keine kosmologische Konstante, also $a = 0 \;\Rightarrow\; S(a) = 0$.

$$
\begin{aligned}
0 \stackrel{!}{=} \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \Gamma(\phi_{cl}) &= \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\Gamma_0(\phi_{cl}) + \hbar \Gamma_1(\phi_{cl}) + O(\hbar^2)\right] \\
&= \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(S(\phi_{cl}) - S(a)) + \hbar \Gamma_1(\phi_{cl})\right] + O(\hbar^2) \\
&= \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \left[S(\phi_{cl}) + \hbar \Gamma_1(\phi_{cl})\right] + O(\hbar^2)\;, \qquad (7.9.1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
0 \stackrel{!}{=} \mu \frac{\partial}{\partial \mu} &\Big\{S(\phi_{cl}) - \frac{\hbar \Omega}{64\,\pi^2} \Big[(m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2)^2 \,(\frac{3}{2} - \ln(\frac{m^2 + \frac{g}{2}\phi_{cl}^2}{\mu^2})) - m^4\,(\frac{3}{2} - \ln(\frac{m^2}{\mu^2}))\Big]\Big\} \\
&+ O(\hbar^2)\;.
\end{aligned}
$$

Wir sind hier nur an der 1-Schleifen-Näherung der Störungstheorie interessiert, die ja eine Näherung in der ersten Ordnung von $\hbar$, also $O(\hbar)$ ist. In diesem Sinne entwickeln wir auch die Kopplungsparameter $m^2(\mu)$ und $g(\mu)$ in eine Potenzreihe in $\hbar$:

$$\begin{aligned} m^2 &:= m^2(\mu) = m^2(\mu_0) + \hbar[\delta m^2](\mu) = m_0^2 + \hbar[\delta m^2](\mu), \quad m_0^2 := m^2(\mu_0)\ , \\ g &:= g(\mu) = g(\mu_0) + \hbar[\delta g](\mu) = g_0 + \hbar[\delta g](\mu), \quad g_0 := g(\mu_0)\ . \end{aligned}$$

$$\frac{\partial m^2(\mu)}{\partial\mu} = O(\hbar), \quad \text{und} \quad \frac{\partial g(\mu)}{\partial\mu} = O(\hbar)\ . \tag{7.9.2}$$

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,\Gamma(\phi_{cl}) \\ &= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,\Omega(\frac{m^2(\mu)}{2}\,\phi_{cl}^2 + \frac{g(\mu)}{4!}\,\phi_{cl}^4) \\ &\quad + \frac{\hbar\Omega}{64\,\pi^2}\,\{(m^2(\mu) + \frac{g(\mu)}{2}\phi_{cl}^2)^2\,\mu[\frac{\mu^2}{m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2}\,\frac{(-2)(m^2+\frac{g}{2}\phi_{cl}^2)}{\mu^3}]\} \\ &\quad - \frac{\hbar\Omega}{64\,\pi^2}\,\{(m^4(\mu))\,\mu[\frac{\mu^2}{m^2}\,\frac{(-2)\,m^2}{\mu^3}]\} + O(\hbar^2) \\ &= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,\Omega(\frac{m^2(\mu)}{2}\,\phi_{cl}^2 + \frac{g(\mu)}{4!}\,\phi_{cl}^4) - \frac{\hbar\Omega}{32\,\pi^2}\,\{(m^2(\mu) + \frac{g(\mu)}{2}\phi_{cl}^2)^2 - m^4(\mu)\} + O(\hbar^2) \\ &= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,\Omega(\frac{m^2(\mu)}{2}\,\phi_{cl}^2 + \frac{g(\mu)}{4!}\,\phi_{cl}^4) - \frac{\hbar\Omega}{32\,\pi^2}\,\{(m^2(\mu)g(\mu)\phi_{cl}^2 + \frac{g^2(\mu)}{4}\phi_{cl}^4)\} + O(\hbar^2)\ . \end{aligned}$$

Wir bringen die Ableitungen der Kopplungskonstanten $m^2(\mu)$ und $g(\mu)$ auf die linke Seite

$$\frac{1}{2}\mu\frac{\partial\, m^2(\mu)}{\partial\mu}\,\phi_{cl}^2 + \frac{1}{4!}\mu\frac{\partial\, g(\mu)}{\partial\mu}\,\phi_{cl}^4) = \frac{\hbar}{32\,\pi^2}\,\{(m^2(\mu)g(\mu)\phi_{cl}^2 + \frac{g^2(\mu)}{4}\phi_{cl}^4)\} + O(\hbar^2)$$

und gewinnen mit einen Koeffizientenvergleich in den ϕ_{cl}^2 und ϕ_{cl}^4 Termen die Renormierungs-Gleichungen der 1-Schleifen-Näherung:

$$\mu\frac{\partial\, g(\mu)}{\partial\mu} = \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g^2(\mu) + O(\hbar^2)\ , \tag{7.9.3}$$

$$\mu\frac{\partial\, m^2(\mu)}{\partial\mu} = \frac{\hbar}{16\,\pi^2}\,m^2(\mu)g(\mu) + O(\hbar^2)\ . \tag{7.9.4}$$

Häufig werden in diesem Zusammenhang auch die $\beta-$ und die $\gamma-$Funktionen eingeführt:

$$\beta(g) := \mu\frac{\partial\, g(\mu)}{\partial\mu} \quad \Rightarrow \quad \beta(g) = \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g^2(\mu)\ , \tag{7.9.5}$$

$$\gamma_m(g) := \frac{1}{2}\,\mu\frac{\partial \ln\, m^2(\mu)}{\partial\mu} = \frac{1}{2\,m^2(\mu)}\,\mu\frac{\partial\, m^2(\mu)}{\partial\mu} \quad \Rightarrow \quad \gamma_m(g) = \frac{\hbar}{32\,\pi^2}\,g(\mu)\,. \tag{7.9.6}$$

Die Renormierungs-Gleichungen 7.9.3 und 7.9.4 lassen sich integrieren und ergeben die Lösungen:

$$g(\mu) = g_0\,[1 - \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g_0\,\ln\frac{\mu}{\mu_0} + O(\hbar^2)]^{-1}\,, \tag{7.9.7}$$

$$m^2(\mu) = m_0^2\,(\frac{\mu}{\mu_0})^{\frac{\hbar g_0}{16\pi^2}}\,e^{O(\hbar^2)}\,. \tag{7.9.8}$$

Beweis: Zunächst $g(\mu)$:

$$\begin{aligned}
\mu\frac{\partial\, g(\mu)}{\partial\mu} &= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,g_0\,[1 - \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g_0\,\ln\frac{\mu}{\mu_0} + O(\hbar^2)]^{-1} \\
&= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,g_0\,[1 - \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g_0\,\ln\frac{\mu}{\mu_0}]^{-1} + O(\hbar^2) \\
&= \mu\,g_0\,(-1)[1 - \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g_0\,\ln\frac{\mu}{\mu_0}]^{-2}\,(-\frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g_0)\,\frac{\mu_0}{\mu}\,\frac{1}{\mu_0} + O(\hbar^2) \\
&= \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g_0^2\,[1 - \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g_0\,\ln\frac{\mu}{\mu_0}]^{-2} + O(\hbar^2) \\
&= \frac{3\hbar}{16\pi^2}\,g^2\,. \quad \square
\end{aligned}$$

Und jetzt $m^2(\mu)$:

$$\begin{aligned}
\mu\frac{\partial\, m^2(\mu)}{\partial\mu} &= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[m_0^2\,(\frac{\mu}{\mu_0})^{\frac{\hbar g_0}{16\pi^2}}\,e^{O(\hbar^2)}] \\
&= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[m_0^2\,e^{(\frac{\hbar g_0}{16\pi^2})(\ln\frac{\mu}{\mu_0})}]\,(1 + O(\hbar^2)) \\
&= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[m_0^2\,(1 + (\frac{\hbar g_0}{16\pi^2})(\ln\frac{\mu}{\mu_0}))]\,(1 + O(\hbar^2)) \\
&= \mu m_0^2\,\frac{\hbar g_0}{16\pi^2}\,\frac{\mu_0}{\mu}\,\frac{1}{\mu_0} + O(\hbar^2) \\
&= m_0^2\,\frac{\hbar g_0}{16\pi^2} + O(\hbar^2)\,.
\end{aligned}$$

Wegen 7.9.2 ist $\hbar m^2(\mu) = \hbar m_0^2 + O(\hbar^2)$ und $\hbar g(\mu) = \hbar g_0 + O(\hbar^2)$ und damit folgt:

$$\mu\frac{\partial\, m^2(\mu)}{\partial\mu} = \frac{\hbar}{16\pi^2}\,m^2 g + O(\hbar^2)\,. \quad \square$$

Damit haben wir gezeigt, daß in der Nähe des Infrarot-Fixpunktes die μ-Abhängigkeit der $(\phi^4)_4$-Theorie in erster Näherung in $\hbar$, d.h. in der 1-Schleifen-Näherung, als eine μ-Abhängigkeit der renormierten Kopplungsparameter m^2 und g verstanden werden kann. Allerdings sehen wir im Ausdruck für $g(\mu)$ (7.9.7) bei μ_L einen Pol:

$$1 = \frac{3\hbar}{16\pi^2}\, g_0 \ln \frac{\mu_L}{\mu_0} \quad \Rightarrow \quad \ln \frac{\mu_L}{\mu_0} = \frac{16\pi^2}{3\hbar g_0} \quad \Rightarrow \quad \mu_L = \mu_0\, e^{\frac{16\pi^2}{3\hbar g_0}} \;. \tag{7.9.9}$$

Das zeigt, daß unsere Näherung für große μ nicht mehr gültig ist, sondern nur in der Nähe des Infrarot-Fixpunktes $g_0 = 0 \;\Rightarrow\; \beta(g_0) = 0$. Der Pol bei μ_L heißt Landau-Punkt, weil Landau ihn bei seinen Untersuchungen zur QED gefunden hatte.

7.10 Renormierung und Wärmekern-Koeffizienten

Wir haben oben gezeigt, daß die $(\phi^4)_4$-Quantenfeldtheorie in der Ein-Schleifen-Näherung auf Funktionaldeterminanten führt, die mittels der spektralen Zeta-Funktion regularisiert und renormiert werden können. Diese Vorgehensweise ist jedoch keineswegs auf die $(\phi^4)_4$-QFT beschränkt, denn *jede* QFT führt ja in der Ein-Schleifen-Näherung auf Funktionaldeterminanten, und daher eignet sich die Methode der Zeta-Funktion-Regularisierung mit anschließender Renormierung für jede in 1. Ordnung in $\hbar$ renormierbare Theorie. Dies ist allgemein bekannt. Weniger bekannt ist, daß sich die Renormierungs-Gruppen-Gleichungen (RGE) *jeder* QFT in n Dimensionen aus der Kenntnis des entsprechenden Wärmekern- oder Seeley-Koeffizienten $B_n := \int dx\, b_n(x)$ (siehe L.2.28) ableiten lassen. Wir folgen hier im wesentlichen der schönen Arbeit von Hochberg u. a. (1998b).

In vielen physikalischen Veröffentlichungen zur Zeta-Funktion-Regularisierung findet sich die folgende Formel:

$$\zeta'_{\hat{A}/\mu^2}(0) = (\ln \mu^2)\zeta_{\hat{A}}(0) + \zeta'_{\hat{A}}(0) \;, \tag{7.10.1}$$

gelegentlich 'hergeleitet' aus der folgenden Darstellung der spektralen Zeta-Funktion

$$\zeta_{\hat{A}/\mu^2}(s) = \sum_i \frac{1}{(\lambda_i/\mu^2)^s} = \mu^{2s}\zeta_{\hat{A}}(s) \;.$$

Diese 'Herleitung' ist natürlich so nicht haltbar, weil zum einen die Reihendarstellung der Zeta-Funktion ja nur für $\Re(s) > \frac{n}{d}$ (siehe 6.7.3) und nicht für $s = 0$ definiert ist, zum anderen, weil für dimensionsbehaftete Operatoren $\hat{A}$ der Ausdruck $\zeta'_{\hat{A}}(s)$ nicht definiert ist (siehe Diskussion von 7.5.7). Daher wählen wir zum Beweis von 7.10.1 die Darstellung der Zeta-Funktion 6.6.9, die auch für $s = 0$ konvergiert:

$$\zeta_{\hat{A}/\mu^2}(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt\, t^{s-1}\, K(t)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt\, t^{s-1} \sum_{j=1} e^{-(\lambda_j/\mu^2)\, t} \ . \tag{7.10.2}$$

Mit $t' := t/\mu^2$ folgt

$$\zeta_{\hat{A}/\mu^2}(s) = \mu^{2s} \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt'\, t'^{s-1} \sum_{j=1} e^{-\lambda_j t'} \ .$$

Hieraus folgt zunächst einmal, daß $\zeta_{\hat{A}/\mu^2}(0)$ von μ^2 unabhängig und in n Dimensionen gleich dem Wärmekern- oder Seeley-Koeffizienten B_n ist (siehe Diskussion 6.7.3 bis 6.7.5):

$$\zeta_{\hat{A}/\mu^2}(0) = \zeta_{\hat{A}/\mu_0^2}(0) = \zeta_{\hat{A}}(0) = B_n = \int dx\, b_n(x) \ . \tag{7.10.3}$$

Damit folgt für die Ableitung der Zeta-Funktion $\zeta'(s) = \frac{d}{ds}\zeta(s)$:

$$\begin{aligned} {\zeta'}_{\hat{A}/\mu^2}(s) &= (\ln \mu^2)\, \mu^{2s} \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt'\, t'^{s-1} \sum_{j=1} e^{-\lambda_j t'} \\ &\quad + \mu^{2s} \frac{d}{ds}[\frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt'\, t'^{s-1} \sum_{j=1} e^{-\lambda_j t'}] \\ &= (\ln \mu^2)\, \zeta_{\hat{A}/\mu^2}(s) + \mu^{2s} \frac{d}{ds}[\frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt'\, t'^{s-1} \sum_{j=1} e^{-\lambda_j t'}] \ , \end{aligned} \tag{7.10.4}$$

$${\zeta'}_{\hat{A}/\mu^2}(0) = (\ln \mu^2)\, \zeta_{\hat{A}}(0) + {\zeta'}_{\hat{A}}(0) \ , \tag{7.10.5}$$

und für die Differenz zweier Zeta-Funktion-Ableitungen bei verschiedenen Energieparametern μ:

$$\begin{aligned} {\zeta'}_{\hat{A}/\mu^2}(s) - {\zeta'}_{\hat{A}/\mu_0^2}(s) &= (\ln \mu^2)\, \zeta_{\hat{A}/\mu^2}(s) - (\ln \mu_0^2)\, \zeta_{\hat{A}/\mu_0^2}(s) \\ &\quad + (\mu^{2s} - \mu_0^{2s}) \frac{d}{ds}[\frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt'\, t'^{s-1} \sum_{j=1} e^{-\lambda_j t'}] \ . \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist bei $s = 0$ regulär und daher folgt

$$\begin{aligned} {\zeta'}_{\hat{A}/\mu^2}(0) - {\zeta'}_{\hat{A}/\mu_0^2}(0) &= (\ln \mu^2)\, \zeta_{\hat{A}/\mu^2}(0) - (\ln \mu_0^2)\, \zeta_{\hat{A}/\mu_0^2}(0) \\ &= (\ln \frac{\mu^2}{\mu_0^2})\, \zeta_{\hat{A}/\mu^2}(0) \end{aligned} \tag{7.10.6}$$

$$= (\ln \frac{\mu^2}{\mu_0^2})\, B_n \ . \tag{7.10.7}$$

Wir betrachten hier nur den Fall von lokalen QFTs, und für diese ist

$$\hat{A}_x = S^{(2)}_{loc}(\phi, \lambda_j(\mu)) \tag{7.10.8}$$

ein Differential-Operator 2. Ordnung. Dabei verwenden wir im folgenden die Abkürzung

$$S^{(2)}_{loc}(\phi, \lambda_j(\mu)) := S^{(2)}_{loc}(\phi, \lambda_1(\mu), \ldots, \lambda_n(\mu)) \ .$$

Damit schreibt sich 7.10.7

$$\zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu))/\mu^2}(s) - \zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu))/\mu_0^2}(s) = (\ln \frac{\mu^2}{\mu_0^2})\, B_n \ . \tag{7.10.9}$$

Wegen der Renormierung in 1. Ordnung in $\hbar$ gilt (siehe etwa 7.9.3):
$\lambda_j(\mu) = \lambda_j(\mu_0) + O(\hbar)$, und damit folgt:

$$\zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu))/\mu^2}(s) - \zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu_0))/\mu_0^2}(s) + O(\hbar) = (\ln \frac{\mu^2}{\mu_0^2})\, B_n \ . \tag{7.10.10}$$

Unser Wirkungsfunktional schreiben wir jetzt ganz allgemein

$$S(\phi, \lambda_j(\mu)) = \sum_{k=0}^{n} \lambda_k(\mu) \int d^n x\, f_k(x) \ , \tag{7.10.11}$$

mit einer endlichen Zahl von Kopplungskonstanten $\lambda_k(\mu)$ und einer endlichen Zahl von Basisfunktionalen $f_k(x)$.

Für die ϕ^n-Theorie haben wir dann $f_0 = \frac{1}{2}(\partial\phi)^2$ und $f_m = \frac{1}{m!}\phi^m$, für Fermionen $f_0 = \bar{\psi}[\gamma^\mu(\partial_\mu - A_\mu)]\psi$ und $f_2 = m\bar{\psi}\psi$, für Eichtheorien $f_0 = F \cdot F$ und $f_1 = F \cdot \tilde{F}$ (plus Unitarität-erhaltende Terme), usw.

Der nächste Schritt ist nun, die Renormierungsbedingung für die effektive Wirkung 7.9.1 auszuwerten:

$$\begin{aligned}
0 \overset{!}{=} \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,\Gamma(\phi,\phi_0) &= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[\Gamma_0(\phi,\phi_0) + \hbar\Gamma_1(\phi,\phi_0) + O(\hbar^2)] \\
&= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[(S(\phi,\lambda_j(\mu)) - S(\phi_0,\lambda_j(\mu))) + \hbar\Gamma_1(\phi,\phi_0,\lambda_j(\mu))] + O(\hbar^2) \\
&= \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[(S(\phi,\lambda_j(\mu)) - S(\phi_0,\lambda_j(\mu))) \\
&\quad - \frac{\hbar}{2}(\zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu))/\mu^2}(s) - \zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi_0,\lambda_j(\mu))/\mu^2}(s))] + O(\hbar^2) \ .
\end{aligned} \tag{7.10.12}$$

Wir setzen für den Übergang von $\mu \to \mu_0$ in $\zeta'(s)$ 7.10.10 ein und erhalten:

$$\begin{aligned}
&\mu\frac{\partial}{\partial\mu}\left[S(\phi,\lambda_j(\mu)) - S(\phi_0,\lambda_j(\mu))\right] \\
&\qquad = \frac{\hbar}{2}\,\mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[\zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu))/\mu^2}(s) - \zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi_0,\lambda_j(\mu))/\mu^2}(s)] + O(\hbar^2) \\
&\qquad = \frac{\hbar}{2}\,\mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[\zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu_0))/\mu_0^2}(s) + (\ln\frac{\mu^2}{\mu_0^2})\,B_n(\phi,\lambda_i(\mu)) \\
&\qquad\quad - \zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi_0,\lambda_j(\mu_0))/\mu_0^2}(s) - (\ln\frac{\mu^2}{\mu_0^2})\,B_n(\phi_0,\lambda_j(\mu))] + O(\hbar^2)\;.
\end{aligned}$$

Da wir in der 1. Ordnung in $\hbar$ arbeiten (siehe etwa 7.9.3) gilt:

$$B_n(\phi,\lambda_j(\mu)) = B_n(\phi,\lambda_j(\mu_0) + O(\hbar)) = B_n(\phi,\lambda_j(\mu_0)) + O(\hbar) \quad\Rightarrow \tag{7.10.13}$$

$$\begin{aligned}
&\mu\frac{\partial}{\partial\mu}\left[S(\phi,\lambda_j(\mu)) - S(\phi_0,\lambda_j(\mu))\right] \\
&\qquad = \frac{\hbar}{2}\,\mu\frac{\partial}{\partial\mu}\,[\zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi,\lambda_j(\mu_0))/\mu_0^2}(s) + (\ln\frac{\mu^2}{\mu_0^2})\,B_n(\phi,\lambda_j(\mu_0)) \\
&\qquad\quad - \zeta'_{S^{(2)}_{loc}(\phi_0,\lambda_j(\mu_0))/\mu_0^2}(s) - (\ln\frac{\mu^2}{\mu_0^2})\,B_n(\phi_0,\lambda_j(\mu_0))] + O(\hbar^2) \\
&\qquad = \hbar\,[B_n(\phi,\lambda_j(\mu_0)) - B_n(\phi_0,\lambda_j(\mu_0))] + O(\hbar^2) \\
&\qquad = \hbar\,[B_n(\phi,\lambda_j(\mu)) - B_n(\phi_0,\lambda_j(\mu))] + O(\hbar^2)\;,
\end{aligned} \tag{7.10.14}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial\lambda_k(\mu)}\left[S(\phi,\lambda_j(\mu)) - S(\phi_0,\lambda_j(\mu))\right]\mu\frac{\partial\lambda_k(\mu)}{\partial\mu} \\
&\qquad = \hbar\int dx\,[b_n(\phi(x),\lambda_j(\mu)) - b_n(\phi_0(x),\lambda_j(\mu))] + O(\hbar^2)\;.
\end{aligned} \tag{7.10.15}$$

Oben in 7.10.11 hatten wir die $S(\phi,\lambda_j(\mu))$ nach den Basisfunktionalen $f_j(x)$ entwickelt. Wenn die vorliegende QFT renormierbar ist, müssen sich auch die Wärmekern-Koeffizienten $b_n(\phi(x),\lambda_j(\mu))$ nach denselben f_j entwickeln lassen.

$$b_n(\phi(x),\lambda_j(\mu)) = \sum_{k=0}^{n}\kappa_k(\lambda_j(\mu))\,f_k(x)\;. \tag{7.10.16}$$

Im Gegensatz dazu können bei einer nichtrenormierbaren QFT in den Wärmekern-Koeffizienten zusätzliche Terme auftauchen, die nicht im Wirkungsfunktional enthalten sind.

Damit folgen mit Koeffizientenvergleich in den ϕ-Termen in 7.10.15 die 1-Schleifen Beta-Funktionen:

$$\beta_k(\lambda_j(\mu)) := \mu \frac{\partial \lambda_k(\mu)}{\partial \mu} = \hbar \kappa_k(\lambda_j(\mu)) \ . \tag{7.10.17}$$

Dies sind gerade die gesuchten Renormierungsgruppen-Gleichungen in 1. Ordnung in $\hbar$.

Hier sind einige Punkte sehr bemerkenswert:

- Man beachte, daß keine weiteren Näherungen für ϕ, wie etwa homogene Felder, etc., verwendet wurden.
- Da die Wärmekern-Koeffizienten mit ungeraden Index verschwinden, sind also auch alle β-Funktionen in ungeraden Raumdimensionen gleich 0, d.h. in diesen Theorien sind die Kopplungsparameter nicht von der Skala μ abhängig. Dies gilt, wie die Wärmekern-Entwicklung, gleichermaßen für gekrümmte Raumzeiten.
- Tatsächlich werden die Vakuumfluktuationen einer *jeden* QFT in m Raum-Dimensionen in 1. Ordnung in $\hbar$ allein von dem Wärmekern-Koeffizienten $b_n(\phi(x), \lambda_j(\mu))$ bestimmt. Da die Wärmekern-Koeffizienten in der Regel Volumenintegrale (und bei Randbedingungen zusätzlich auch Oberflächenintegrale) von geometrischen Invarianten sind, lassen sich also die Vakuumfluktuationen auf geometrische Eigenschaften des elliptischen Differential-Operators auf der zugrunde liegenden raumzeitlichen Mannigfaltigkeit zurückführen. Wir haben hier einen Hinweis dafür, daß Vakuumfluktuationen vielleicht ganz allgemein eine Eigenschaft der Geometrie der Raumzeit sein könnten - aber das ist eine andere Geschichte, die ein andermal erzählt werden soll :-)

8 Dynamische Systeme

Unter dynamischen Systemen wollen wir hier physikalische oder mathematische Systeme verstehen, die eine Zeitabhängigkeit aufweisen. Weiter schränken wir das Gebiet auf deterministische dynamische Systeme ein, d.h. wir schließen stochastische dynamische Systeme von den folgenden Betrachtungen aus.

In den Physik-Vorlesungen zur Mechanik werden ja üblicherweise nur vollständig integrable hamiltonsche Systeme behandelt, vielleicht auch noch per Störungstheorie kleine nichtintegrable Störungen von vollständig integrablen Systemen. Aus einer umfassenderen Sicht handelt es sich aber bei den vollständig integrablen Systemen eigentlich nur um winzige Inseln inmitten eines wilden Ozeans von nichtlinearen und nichtintegrablen Systemen, in denen gänzlich neue Phänomene, wie Chaos, seltsame Attraktoren, und dergleichen mehr auftreten.

Deterministische dynamische Systeme werden üblicherweise mit einem diskreten Zeitverlauf als *interierte Abbildungen* oder mit einem kontinuierlichen Zeitverlauf als *Flüsse* modelliert. Das Gebiet der deterministischen dynamischen Systeme ist in den letzten Jahrzehnten geradezu explodiert und hat sich zu einem umfangreichen Teilgebiet der Mathematik entwickelt, mit zahlreichen Verbindungen zu Differentialgeometrie, Topologie, Zahlentheorie - und natürlich auch der Physik. Das Buch *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems* von Katok u. Hasselblatt (2009) stellt auf 802 Seiten grundlegende mathematische Definitionen und Beweise über dynamische Systeme zusammen (ein unersetzliches Standardwerk). Wir werden uns vornehmlich an der leichter zugänglichen und didaktisch sehr schönen physikalischen Darstellung von chaotischen Systemen im *Chaos-Book* von Cvitanović u. a. (2009) orientieren. Auch dieses im Internet frei verfügbare *Chaos-Book* bringt es auf über 900 Seiten Umfang (im DIN-A4 Format), und so beschränken wir uns hier ganz bescheiden auf die Behandlung einiger Zeta-Funktionen, die im Zusammenhang mit deterministischen dynamischen Systemen auftreten. Schon im Zusammenhang mit den spektralen Zeta-Funktionen von elliptischen Differential-Operatoren hatten wir gesehen, wie diese Zeta-Funktionen das lokale Verhalten der Differential-Operatoren mit dem globalen Verhalten der Lösungsmannigfaltigkeiten und deren Topologie und topologischen Invarianten (Stichwort: Index-Theoreme) verbinden. Eine ähnliche *lokal-global* Verbindung zeigt sich auch bei den Zeta-Funktionen der deterministischen dynamischen Systeme und ist hier bekannt als *Periodische-Orbit-Theorie*.

8.1 Jules Henri Poincaré (1854 - 1912)

Abbildung 8.1: J. H. Poincaré
E. Pirou (1887), PD.
[http://de.wikipedia.org/wiki/Henri_Poincaré]

Henri Poincaré wurde 1854 als Sohn eines Medizinprofessors in Nancy geboren. Ab 1873 studierte er Mathematik an der École Polytechnique und der École des Mines in Paris. Danach arbeitete er zunächst als Bergbau-Ingenieur und anschließend als Mathematikdozent an der Universität Caen. Schon zwei Jahre nach seiner Dissertation wurde Poincaré im Jahr 1881 auf eine Professur für mathematische Physik an die Sorbonne in Paris berufen, wo er bis zu seinem Tod im Jahr 1912 verblieb. Seit 1887 war er Mitglied der Académie des Sciences, seit 1908 auch der Académie Française.

Poincarés Arbeiten umfassen mehr als 30 Bücher und viele wissenschaftliche Einzelpublikationen aus einem weiten Bereich der Mathematik und theoretischen Physik. Besonders bedeutend waren seine grundlegenden Beiträge zur algebraischen Topologie, Homologie, Kohomologie, Mannigfaltigkeiten, Differentialformen, automorphen Funktionen, n-Körper-Problem, und seine frühen Denkansätze zur Morse-Theorie, symplektischen Geometrie, speziellen Relativitätstheorie und deterministischem Chaos. In der Theorie dynamischer Systeme ist gerade dieser letztgenannte Punkt hier von großer Bedeutung.

[Quelle: Wikipedia-Poincaré (2011)]

8.2 David Ruelle (*1935)

Ruelle studierte Bauingenieurwesen und parallel dazu Physik und Mathematik an der Université Mons in Belgien und an der Université Libre de Bruxelles. Im Jahr 1959 promovierte er bei Prof. Res Jost an der ETH Zürich über axiomatische Quantenfeldtheorie. Bis 1962 arbeitete Ruelle bei Jost als Assistent. Danach konnte er für 2 Jahre an das Institute for Advanced Study in Princeton gehen. Von 1964 bis zu seiner Emeritierung im Jahr 2000 war Ruelle Professor für mathematische Physik am Institut des Hautes Études Scientifiques (IHES) in Bures-sur-Yvette bei Paris. Ruelle ist seit 1985 Mitglied der französischen Académie des Sciences, seit 2002 auch Mitglied der US-amerikanischen Akademie der Wissenschaften und erhielt zahlreiche Preise, u.a. die Boltzmann-Medaille und den Henri-Poincaré-Preis.

Besonders bedeutend waren Ruelles Beiträge zu den mathematischen Grundlagen der statistischen Mechanik, zur Theorie dynamischer Systeme, zum deterministischen Chaos und der Entstehung von Turbulenz. Sehr lesenswert sind auch seine zwei kleinen populärwissenschaftlichen Bücher: *Zufall und Chaos* (Ruelle, 1993), *Wie Mathematiker ticken* (Ruelle, 2010).

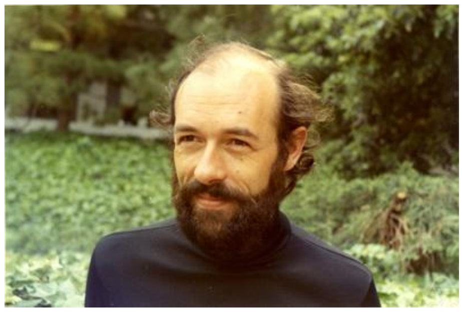


Abbildung 8.2: David Ruelle
G.M. Bergman (1973), CC BY-SA 3.0.
(Math. Inst. Oberwolfach)
[http://de.wikipedia.org/wiki
/David_Ruelle]

[Quelle: Wikipedia-Ruelle (2011)]

Im Zusammenhang mit der Theorie von Spinsystemen und dynamischen Systeme hat sich Ruelle auch intensiv mit den dort auftretenden Zeta-Funktionen beschäftigt.
Sehr schön ist das folgenden Zitat von Cvitanović (Cvitanović u. a. (2009), S. XV):

> Long ago, when we were innocent and knew not Borel measurable α to Ω sets, P. Cvitanović asked V. Baladi a question about dynamical zeta functions, who then asked J.-P. Eckmann, who then asked D. Ruelle. The answer was transmitted back: „The master says: 'It is holomorphic in a strip'."

8.3 Iterierte Abbildungen

Ein in der Zeit diskretes dynamisches System wird mathematisch beschrieben als ein Tripel $(\mathcal{T}, \mathcal{M}, f)$, mit einer Menge von Zeit-Punkten $\mathcal{T} = \mathbb{Z}$ bei invertierbaren Abbildungen, oder $\mathcal{T} = \mathbb{N}_0$ bei nichtinvertierbaren Abbildungen, einer nichtleeren Menge $\mathcal{M}$ als dem Zustandsraum und einer Abbildung $f : \mathcal{T} \times \mathcal{M} \to \mathcal{M}$, welche bzgl. der Zeit eine Gruppe (bei invertierbaren Abbildungen), oder eine Halbgruppe (bei nichtinvertierbaren Abbildungen) sei:

$$\begin{aligned} f^0(x) &:= f(0,x) = x \ , \\ f^{n_2}(f^{n_1}(x)) &:= f(n_2, f(n_1,x)) = f(n_2+n_1,x) = f^{n_2+n_1}(x) \ . \end{aligned} \tag{8.3.1}$$

Man definiert für ein festes $x_0 \in \mathcal{M}$ die *Bahnkurve (Orbit)* als
$\omega(x_0,n) := \{f^n(x_0) \in \mathcal{M} |\, x_0 \in \mathcal{M},\, n \in \mathcal{T}\}$.

Beispiel: Als einfaches Beispiel für eine eindimensionale (nichtinvertierbare) Abbildung werden wir im Folgenden die sogenannte *Zelt-Abbildung* betrachten. Dies ist eine unimodale Abbildung $f : [0,1] \to [0,1]$, d.h. eine stetige Abbildung mit nur einem Maximum im Wertebereich, die linear auf den zwei Teilintervallen $\mathcal{M}_0$ und $\mathcal{M}_1$ mit

$\mathcal{M} = [0,1] = \mathcal{M}_0 + \mathcal{M}_1$ ist.

$$f(x) = \begin{cases} m_1 x & \text{für } x \in \mathcal{M}_0 := [0, \frac{1}{m_1}] \,, \\ m_2(1-x) = \frac{1-x}{1-\frac{1}{m_1}} & \text{für } x \in \mathcal{M}_1 :=]\frac{1}{m_1}, 1] \,. \end{cases} \tag{8.3.2}$$

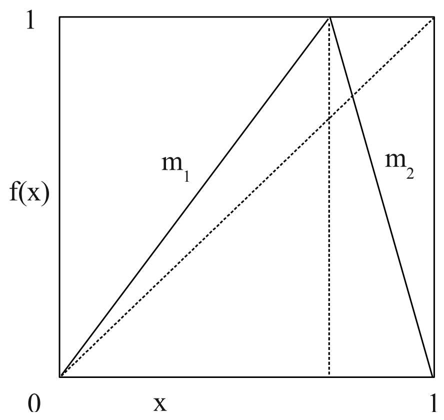


Abbildung 8.3: Zelt-Abbildung

Das Maximum der Zelt-Abbildung liegt bei $x = \frac{1}{m_1}$. Für beide Steigungen gilt: $|m_1| \geq 1$, $|m_2| \geq 1$. Die Zelt-Abbildung $f(x)$ hat zwei Fixpunkte x_*, d.h. Punkte mit $f(x_*) = x_*$, nämlich $x_{*1} = 0$ und $x_{*2} = \frac{m_2}{1+m_2}$. Wenn $|f'(x_*)| < 1$ ist nennt man den Fixpunkt einen Attraktor oder eine Senke, wenn $|f'(x_*)| > 1$ ist spricht man von einem Repeller oder einer Quelle. Der Hintergrund ist leicht zu sehen: wenn $|f'(x_*)| = \lim_{x_1 \to x_*} |f(x_1) - f(x_*)|/|x_1 - x_*| < 1$ ist, dann ist der Abstand $|f(x_1) - f(x_*)|$ kleiner als der Abstand $|x_1 - x_*|$, und da $f(x_1) = x_2$, also der x-Startwert der nächsten f-Iteration ist, konvergiert $f^n(x_1)$ gegen $f(x_*) = x_*$, sofern x_1 nahe genug an x_* liegt, d.h. im Einzugsbereich des Attraktors. Im Fall der Zelt-Abbildung ist für beide Fixpunkte $|f'(x_*)| > 1$; also handelt es sich bei beiden Fixpunkten um Repeller. □

8.4 Flüsse

Ein in der Zeit stetiges dynamisches System wird mathematisch beschrieben als ein Tripel $(\mathcal{T}, \mathcal{M}, f)$, mit einer Menge von Zeit-Punkten $\mathcal{T} = \mathbb{R}$ bei invertierbaren Abbildungen, oder $\mathcal{T} = \mathbb{R}^+$ bei nichtinvertierbaren Abbildungen, einer m-dimensionalen Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$ als dem Zustandsraum und einer Abbildung $f : \mathcal{T} \times \mathcal{M} \to \mathcal{M}$, welche bzgl. der Zeit eine Gruppe (bei invertierbaren Abbildungen), oder eine Halbgruppe (bei nichtinvertierbaren Abbildungen) sei:

$$f^0(x) := f(0,x) = x \;, \quad f^{t_2}(f^{t_1}(x)) := f(t_2, f(t_1,x)) = f(t_2 + t_1, x) = f^{t_2+t_1}(x) \;. \tag{8.4.1}$$

Man definiert für ein festes $x_0 \in \mathcal{M}$ die *Bahnkurve (Orbit)* als
$\omega(x_0, t) := \{f^t(x_0) \in \mathcal{M} | \, x_0 \in \mathcal{M}, \, t \in \mathcal{T}\}$.

Häufig werden Flüsse durch Vektor-Felder definiert. Hierzu wird vorausgesetzt, daß $\mathcal{M}$ eine differentierbare Mannigfaltigkeit ist. Sei $v(x)$ der Tangenten-Vektor bzgl. t an $\omega(x, t)$ bei $t = 0$, dann ist $v(x)$ ein Element des m-dimensionalen linearen Tangentialraums $T_x\mathcal{M}$. Unter einem Vektorfeld auf $\mathcal{M}$ versteht man eine Abbildung $v : x \to T_x\mathcal{M}$ für alle $x \in \mathcal{M}$ (bzw. in der Sprache der Differentialgeometrie einen *Schnitt* im Tangential-Bündel $T\mathcal{M} = \cup_{x \in \mathcal{M}} T_x\mathcal{M}$ mit $\pi \circ v = \mathrm{Id}_{\mathcal{M}}$, wobei $\pi : T\mathcal{M} \to \mathcal{M}$ mit $\pi(T_x\mathcal{M}) = x$ die kanonische Projektion ist). Wenn das Vektorfeld v in lokalen Koordinaten als $v(x_1, \ldots, x_m)$ gegeben und hinreichend glatt ist (z.B. stetig differentierbar), dann ergibt sich die Bahnkurve $\omega(x_0, t)$ als eindeutige Lösung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung:

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i(x_1, \ldots, x_m) \; , \quad \text{mit } x_i(0) = x_{0,i} \; . \tag{8.4.2}$$

Für kleine Werte von t, d.h. in einer Umgebung von x_0, kann man also aus dem lokalen Vektorfeld v auf die Transformation f schließen. Wenn sich das System der Differentialgleichungen für alle Werte von t lösen läßt, spricht man von einem vollständigen Vektorfeld, und hinreichend dafür ist, daß die Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$ abgeschlossen und kompakt ist. Da die Lösung eindeutig ist, können sich keine Bahnkurven überschneiden, sie können höchstens für $t \to \pm\infty$ in einem Fixpunkt zusammenlaufen.

8.5 Topologische Invarianten

Die Frage nach topologischen Invarianten allgemeiner topologischer Räume führt in beliebig weite und komplexe Gebiete (z.B. die Homotopie-Theorie, darin enthalten auch die im Anhang diskutierte Index-Theorie elliptischer (Pseudo-) Differential-Operatoren (K.4), die Homologie-Theorie, die Kohomologie-Theorie, etc.). Hier sollen in Kürze nur einige einfach beweisbare Tatsachen im Zusammenhang mit *periodischen Orbits*, im Folgenden kurz *Zyklen* genannt, in m-dimensionalen differentierbaren Mannigfaltigkeiten $\mathcal{M}$ erwähnt werden. Jede differentierbare Mannigfaltigkeit hat eine natürliche Topologie, weil sie lokal einem $\mathbb{R}^m$ entspricht. Hier beschäftigen wir uns nur mit der Invarianz unter *topologischer Konjugation* (d.h. unter stetigen Deformationen).

Definition 8.5.1 *Zwei stetige Abbildungen eines topologischen Raumes in sich $f, g : \mathcal{M} \to \mathcal{M}$ heißen topologisch konjugiert (oder auch C^0-äquivalent), wenn es einen Homöomorphismus $h : \mathcal{M} \to \mathcal{M}$ (d.h. eine stetige und stetig invertierbare Abbildung h) gibt, so daß gilt: $h \circ f = g \circ h$.*

Seien $f, g : \mathcal{M} \to \mathcal{M}$ iterierte Abbildungen, die topologische konjugiert sind, so folgt sofort, daß auch f^n, g^n topologisch konjugiert sind, und ebenso Fixpunkte von f, bzw. f^n, auf Fixpunkte von g, bzw. g^n abgebildet werden:

$$f = h^{-1} \circ g \circ h \quad \Rightarrow \quad f^n = h^{-1} \circ g^n \circ h \; . \tag{8.5.1}$$

$$f(x_*) = x_* \quad \Rightarrow \quad x_* = h^{-1}(g(h(x_*))) \quad \Rightarrow \quad y_* := h(x_*) = g(y_*) \ .$$

Also werden unter topologischer Konjugation periodische Punkte auf periodische Punkte und Zyklen auf Zyklen abgebildet. Das Gleiche gilt ebenso für Flüsse $f^t, g^t : \mathcal{M} \to \mathcal{M}$.

Wichtig zum Verständnis dynamischer Systeme ist die Untersuchung der Ableitungen, bzw. der Jacobi-Determinante von iterierten Abbildungen und Flüssen. Wir betrachten zunächst iterierte Abbildungen $f : \mathcal{M} \to \mathcal{M}$ mit $x_1 := f(x_0)$, $x_n := f^n(x_0) = f(x_{n-1})$.

$$J_{ij}(x_0) := \frac{\partial (f(x_0))_i}{\partial (x_0)_j} \quad \Rightarrow \tag{8.5.2}$$

$$\begin{aligned} J_{ij}^n(x_0) &:= \frac{\partial (f^n(x_0))_i}{\partial (x_0)_j} = \sum_{k_1=1}^{n} \frac{\partial (f(x_{n-1}))_i}{\partial (x_{n-1})_{k_1}} \cdot \frac{\partial (f^{n-1}(x_0))_{k_1}}{\partial (x_0)_j} \\ &= \sum_{k_1=1}^{n} J_{ik_1}(x_{n-1}) J_{k_1 j}^{n-1}(x_0) = \ldots = J(x_{n-1}) J(x_{n-2}) \cdots J(x_0) \ . \end{aligned} \tag{8.5.3}$$

Daraus folgt auch sofort die Gruppenstruktur (bzw. Halbgruppenstruktur):

$$J^{n_1+n_2}(x_0) = J^{n_2}(x_{n_2}) J^{n_1}(x_0) \ . \tag{8.5.4}$$

Die Jakobi-Matrix $J^n(x_0)$ eines Zyklus der Länge n hängt nicht vom Startpunkt x_0 ab, da wegen der $f^n(x_0) = x_0$ sofort $J^n(x_0) = J^n(x_i)$ mit $i \in \{1, \ldots, n\}$ folgt. Daher schreibt man für die Jacobi-Matrix eines Zyklus der Länge n einfach $J_p := J^n(x_0)$. Diese Matrix J_p wird auch Monodromie-Matrix des Zyklus p genannt und häufig mit M_p bezeichnet. Wird ein Zyklus der Länge n gerade r-mal durchlaufen, so ist $J_p^r = (J^n(x_0))^r = J^{nr}(x_0)$.

Für Flüsse ist die entsprechende Analyse ein wenig umfangreicher. Ein Punkt $x(t)$ auf einer Bahnkurve die am Anfangspunkt x_0 beginnt ist durch $x(t) = f^t(x_0)$ gegeben. Die entsprechende Jacobi-Matrix ist:

$$J_{ij}^t(x_0) := \frac{\partial x_i(t)}{\partial x_{0,j}} \ . \tag{8.5.5}$$

Wenn Eigenwerte der Jacobi-Matrix J zu einem Zeitpunkt t kleiner als 1 sind, dann laufen benachbarte Bahnkurven in Richtung der entsprechenden Eigenvektoren mit wachsendem t zusammen (*stabile* Richtungen), haben Eigenwerte von J den Wert 1, dann bleiben die Abstände benachbarter Bahnkurven in Richtung der entsprechenden Eigenvektoren erhalten (*marginale* Richtungen), und sind Eigenwerte von J größer als 1, dann laufen benachbarte Bahnkurven in Richtung der entsprechenden Eigenvektoren mit wachsendem t auseinander (*instabile* Richtungen). Eine besondere marginale Richtung ist die Richtung der Flusses, denn:

$$f^t f^{\delta t}(x_0) = f^t(x_0 + v(x_0)\delta t) = f^t(x_0) + J v(x_0) \delta t \ ,$$

$$f^{\delta t} f^t(x_0) = f^{\delta t}(x(t)) = x(t) + v(x(t)) \delta t \ ,$$

$$f^t f^{\delta t}(x_0) = f^{\delta t} f^t(x_0) \quad \Rightarrow \quad v(x(t)) = Jv(x_0) \; . \tag{8.5.6}$$

Da dies auch für $t = 0$ gilt, ist die Richtung des Flusses $v(x_0)$ ein Eigenvektor von J zum Eigenwert 1.

Sei $x+\delta x$ ein Punkt in der Nachbarschaft von x, dann gilt für seine zeitliche Veränderung

$$\frac{d}{dt}(x+\delta x)_i = v_i(x+\delta x) = v_i(x) + \sum_j A_{ij}(x)\delta x_j + O(\delta x^2) \text{ mit } A_{ij}(x) := \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} \; . \tag{8.5.7}$$

Die Matrix $A(x)$ heißt Stabilitäts-Matrix am Punkt x. Der Zusammenhang zwischen der Jacobi-Matrix und der Stabilitäts-Matrix ergibt sich mit $x(t) = x_0 + \delta x_0$ zu:

$$\frac{d}{dt}\delta x(t) = (\frac{d}{dt}J^t(x_0))\delta x_0 = A(x_0)\delta x(t) = A(x_0)J^t(x_0)\delta x_0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}J^t(x_0) = A(x_0)J^t(x_0) \; , \text{ mit } J^0(x_0) = \hat{1} \; . \tag{8.5.8}$$

Wenn A eine konstante Matrix ist, so können wir diese Differentialgleichung sofort integrieren und erhalten:

$$J^t(x_0) = e^{At} \; . \tag{8.5.9}$$

Wenn $A(x_0)$ jedoch vom jeweiligen Punkt x_0 und damit implizit von t abhängt, dann kann man ein *Pfadintegral* für $J^t(x_0)$ herleiten. Man zerlegt den Pfad von $t_0 = 0$ bis t in k kleine Abschnitte mit $\delta t := \frac{t}{k}$ und definiert für $J^t(x_0)$ eine Approximation $J^t_k(x_0)$:

$$J^t_k(x_0) := (1 + A(x_{k-1})\delta t)(1 + A(x_{k-2})\delta t) \cdots (1 + A(x_0)\delta t) \; .$$

Für $k \to \infty$ erhält man dann das Pfadintegral

$$\begin{aligned} J^t(x_0) &= \lim_{k\to\infty} J^t_k(x_0) = \lim_{k\to\infty} e^{A(x_{k-1})\delta t} e^{A(x_{k-2})\delta t} \cdots e^{A(x_0)\delta t} = \\ &= \lim_{k\to\infty} e^{[A(x_{k-1})+A(x_{k-2})+\ldots+A(x_0)]\delta t} =: e^{\int_0^t A(x(\tau))\, d\tau} \; . \end{aligned} \tag{8.5.10}$$

Wie bei iterierten Abbildungen folgt auch hier bei Flüssen sofort die Gruppenstruktur (bzw. Halbgruppenstruktur):

$$J^{t_2+t_1}(x_0) = J^{t_2}(x(t_1))J^{t_1}(x_0) \; . \tag{8.5.11}$$

Anders als bei iterierten Abbildungen hängt aber die Jacobi-Matrix $J^t(x_0)$ von Zyklen der Länge T_p bei Flüssen noch vom jeweiligen Anfangspunkt x_0 ab. Man schreibt für die Jacobi-Matrix eines Zyklus $J_p(x_0) := J^{T_p}(x_0)$. Diese Matrix $J_p(x_0)$ wird auch Monodromie-Matrix des Zyklus p mit Startpunkt x_0 genannt und häufig mit M_p bezeichnet. Wird ein Zyklus der Länge T_p gerade r-mal durchlaufen, so ist $J^r_p(x_0) = (J^{T_p}_p(x_0))^r = J^{T_p r}(x_0)$.

Sehr bemerkenswert und wichtig für alles Folgende ist aber die Tatsache, daß die Determinante der Jacobi-Matrix $\det(J_p(x_0))$ eines Zyklus der Länge T_{p} bei Flüssen vom Anfangspunkt x_0 unabhängig ist und eine topologische Invariante (unter topologischer Konjugation) ist. Dies kann man folgendermaßen sehen.
Sei f^t ein Fluß mit Anfangspunkt x_0 und einem Zyklus der Länge T_p und g^t ein Fluß mit Anfangspunkt y_0, topologisch konjugiert zu f^t. Wir hatten oben bereits gesehen, daß unter topologischer Konjugation periodische Punkte auf periodische Punkte und Zyklen auf Zyklen abgebildet werden. Also hat auch der Zyklus von g^t die Länge T_p.
Sei h der Homöomorphismus zwischen f^t und g^t, dann folgt:

$$y := h(x) = h(h^{-1}(y)) \quad \Rightarrow \quad 1 = \frac{\partial h(x)}{\partial x} \cdot \frac{\partial(h^{-1}(y))}{\partial y} \; .$$

$$y(t) = g^t(y_0) = h(x(t)) = h(f^t(x_0)) = h(f^t(h^{-1}(y_0))) \; ,$$

$$\begin{aligned} \tilde{J}^t(y_0) &:= \frac{\partial y(t)}{\partial y_0} = \frac{\partial h(x(t))}{\partial x(t)} \cdot \frac{\partial x(t)}{\partial x_0} \cdot \frac{\partial x_0}{\partial y_0} = \frac{\partial h(x(t))}{\partial x(t)} \cdot J^t(x_0) \cdot \frac{\partial(h^{-1}(y_0))}{\partial y_0} \\ &= \frac{\partial h(x(t))}{\partial x(t)} \cdot J^t(x_0) \cdot (\frac{\partial h(x_0)}{\partial x_0})^{-1} \; . \end{aligned}$$

$$\tilde{J}^{T_p}(y_0) = \frac{\partial h(x(T_{\mathrm{p}}))}{\partial x(T_p)} \cdot J^{T_p}(x_0) \cdot (\frac{\partial h(x_0)}{\partial x_0})^{-1} = \frac{\partial h(x_0)}{\partial x_0} \cdot J^{T_p}(x_0) \cdot (\frac{\partial h(x_0)}{\partial x_0})^{-1} \quad \Rightarrow$$

$$\det(\tilde{J}^{T_p}(y_0)) = \det(J^{T_p}(x_0)) \; . \tag{8.5.12}$$

Das heißt, wenn zwei Flüsse f^t und g^t topologisch konjugiert sind, dann sind die entsprechenden Jacobi-Determinanten eines Zyklus der Länge T_p gleich. Wenn man jetzt als spezielle Konjugation $y = h(x) := f^\tau(x)$ wählt, also eine Verschiebung auf dem Fluß f^t um die Zeit τ, dann ist

$$y(t) := g^t(y_0) = h(f^t(x_0)) = f^\tau(f^t(x_0)) = f^{\tau+t}(x_0) = f^t(x(\tau)) \; ,$$

und das heißt, daß $f^{\tau+t}$ und f^t topologisch konjugiert sind und daher für einen Zyklus der Länge T_p die gleiche Jacobi-Determinante haben:

$$\det(J^{T_p}(x(\tau))) = \det(J^{T_p}(x_0)) \; . \tag{8.5.13}$$

Also ist die Jacobi-Determinante eines Flusses für einen Zyklus der Länge T_p vom Anfangspunkt x_0 unabhängig und eine topologische Invariante (bzgl. der topologischen Konjugation). Daher schreiben wir künftig einfach:

$$\det(J_p) := \det(J^{T_p}(x_0)) \; . \tag{8.5.14}$$

Ebenso bedeutsam ist die Tatsache, daß auch die Eigenwerte der Jacobi-Matrix eines Flusses für einen Zyklus der Länge T_p vom Anfangspunkt x_0 unabhängig sind. Seien $\lambda_{p,i}$ und $| \, e_{p,i}(x_0)\rangle$ die Eigenwerte und Eigenvektoren von $J_p(x_0)$ und sei $x = f^t(x_0)$ ein Punkt der Bahnkurve durch x_0 zum Zeitpunkt t, dann gilt:

$$J_p(x_0) \mid e_{p,i}(x_0)\rangle = \lambda_{p,i} \mid e_{p,i}(x_0)\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} J^t(x_0)J^{T_p}(x_0) \mid e_{p,i}(x_0)\rangle &= J^{t+T_p}(x_0) \mid e_{p,i}(x_0)\rangle = J^{T_p+t}(x_0) \mid e_{p,i}(x_0)\rangle \\ &= J^{T_p}(x)J^t(x_0) \mid e_{p,i}(x_0)\rangle = \lambda_{p,i} J^t(x_0) \mid e_{p,i}(x_0)\rangle \; . \end{aligned} \tag{8.5.15}$$

Also ist $\lambda_{p,i}$ auch Eigenwert zu $J_p(x) = J^{T_p}(x)$ mit dem Eigenvektor $J^t(x_0) \mid e_{p,i}(x_0)\rangle$. Also sind alle Spektralfunktionen, wie $\mathrm{Sp}(J_p)$, $\det(J_p)$ und $\det(1 - J_p^r)$ topologische Invarianten (bzgl. der topologischen Konjugation).

8.6 Symbolische Dynamik

Zahlreiche dynamische Systeme lassen sich recht gut mit gewissen symbolischen dynamischen Systemen beschreiben, insbesondere wenn glatte (d.h. beliebig oft differenzierbare) dynamische Systeme eine endliche Anzahl invarianter Teilmengen aufweisen.

Zunächst seien hier einige einfache mathematische Definitionen und Zusammenhänge aus dem Gebiet der symbolischen Dynamik zusammengestellt. Wenn sich der Zustandsraum $\mathcal{M}$ des dynamischen Systems so partitionieren läßt, daß sich das System ausschließlich in einer endlichen Anzahl von Partitionen bewegt, also $\mathcal{M} = \cup_{i=0}^{N-1} \mathcal{M}_i$, dann können wir diese Partitionen durchnummerieren und bezeichnen diese Nummern, bzw. Symbole, als das Alphabet des Systems: $\mathcal{A} := \{0, 1, \ldots, N-1\}$.

Den zeitlichen Weg des Systems kann man dann durch eine zweiseitig unendliche Symbolsequenz $s_k \in \mathcal{A}$ bei invertierbaren Abbildungen, bzw. eine einseitig unendliche Symbolsequenz $s_k \in \mathcal{A}$ bei nichtinvertierbaren Abbildungen beschreiben, d.h. ein *Bahnkurve (Orbit)* ω ist ein Element von:

$$\begin{aligned} \Omega_N &:= \mathcal{A}^{\mathbb{Z}} := \{\omega = (\ldots, s_{-1}, s_0, s_1, \ldots) \,|\, s_k \in \mathcal{A},\ k \in \mathbb{Z}\} \;, \text{ bzw.} \\ \Omega_N^R &:= \mathcal{A}^{\mathbb{N}_0} := \{\omega = (s_0, s_1, \ldots) \,|\, s_k \in \mathcal{A},\ k \in \mathbb{N}_0\} \; . \end{aligned} \tag{8.6.1}$$

Im obigen Beispiel der Zelt-Abbbildung kann man ein einfaches binäres symbolisches dynamisches System aufstellen: das Alphabet besteht aus $\{0, 1\}$, die Systemmenge ist $\Omega_N^R = \{0,1\}^{\mathbb{N}_0}$ da die Abbildung $f : [0,1] \to [0,1]$ nichtinvertierbar ist, und wir bilden die Bahnkurve der $x_k := f^k(x_0)$ auf die Bahnkurve der s_k ab mittels:

$$s_k := \begin{cases} 0 & \text{für } x_k \in \mathcal{M}_0 \;, \\ 1 & \text{für } x_k \in \mathcal{M}_1 \;. \end{cases} \tag{8.6.2}$$

Die Abbildung $\sigma_N : \Omega_N \to \Omega_N$ heißt Linksverschiebung, wenn die Zahlenfolge von ω um eine Position nach links verschoben wird, bzw. die *Zeit* um eine Position nach rechts fortschreitet, also:

$$\sigma_N(\ldots, s_{-1}, s_0, s_1, \ldots) := (\ldots, s_0, s_1, s_2, \ldots) \,. \tag{8.6.3}$$

Wenn $\Omega \subset \Omega_N$ eine abgeschlossene Teilmenge ist, dann heißt (Ω, σ_N) ein *symbolisches dynamisches System*, wenn Ω invariant unter einer Linksverschiebung ist, d.h. wenn mit der Symbolsequenz ω auch die zeitverschobene Symbolsequenz $\sigma_N(\omega)$, im System Ω liegt. Eventuell ergänzt man das symbolische dynamische System noch um eine *Grammatik* $\mathcal{G} = \{g_1, \ldots, g_n | n \in \mathbb{N},\ g_i = (s_{i_1}, s_{i_1}, \ldots, s_{i_{m_i}})\}$, die nicht erlaubte endliche Symbolfolgen (Worte) g_i aufzählt. Diese Grammatik bestimmt die sogenannte *algorithmische Komplexität* des Systems.

Die Menge aller symbolischen dynamischen Systeme ist *sehr groß* und daher wollen wir hier nur eine spezielle, aber wichtige Teilmenge betrachten, die sogenannten Markov-Ketten. Zu dieser Teilmenge von symbolischen dynamischen Systemen gelangt man, indem man sich auf autonome (also nicht explizit zeitabhängige) und deterministische Systeme beschränkt. Beide Forderungen werden erfüllt, wenn man eine endliche $N \times N$ Transfer-Matrix T mit Matrixelementen $T_{ik} \in \{0, 1\}$ einführt, die definieren, ob der Übergang vom Symbol s_i zum Symbol s_k unmöglich oder möglich ist - und zwar unabhängig von der Position in der Symbolsequenz ω (d.h. unabhängig von der Zeit). Mathematisch formuliert heißt das, wir betrachten die Teilmenge symbolisch dynamischer Systeme Ω_T mit

$$\Omega_T := \{\omega \in \Omega_N \,|\, T_{\omega_n \omega_{n+1}} = 1 \quad \text{für}\, n \in \mathbb{Z}\} \,. \tag{8.6.4}$$

Nach Konstruktion ist Ω_T invariant unter einer Linksverschiebung. Die Einschränkung der Linksverschiebung σ_N auf die Menge Ω_T bezeichnet man als σ_T, als eine toplogische Markov-Kette (bzw. in der englischsprachigen Literatur häufig auch als *subshift of finite type*).

Eine Matrix heißt *nichtnegativ*, bzw. *positiv*, wenn alle Matrixelemente ≥ 0, bzw. > 0 sind. Die Transfer-Matrix T ist *nichtnegativ*, da alle $T_{ij} \geq 0$ sind. Wenn nun das durch die Transfer-Matrix T beschriebene symbolische dynamische System Ω_T von solcher Art ist, daß für alle $n \geq n_0 \in \mathbb{N}$ alle $(T^n)_{ij} > 0$ sind, dann heißt die Transfer-Matrix T eine Perron-Frobenius-Matrix. Dies bedeutet, daß ab dem Zeitpunkt n_0 der Übergang des Systems von jedem Symbol s_i zu jedem Symbol s_j in einem Schritt möglich ist. In diesem Fall heißt das System Ω_T *topologisch mischend.*

Die Anzahl der möglichen Bahnkurven der Länge n von j nach i ergibt sich als

$$(T^n)_{ij} = \sum_{k_1, k_2, \ldots, k_{n-1}} T_{ik_1} T_{k_1 k_2} \cdots T_{k_{n-1} j} \;, \tag{8.6.5}$$

denn jeder erlaubte Weg in der Summe liefert einen Summanden 1. Die Anzahl der Zyklen, d.h. der geschlossenen Wege, der Länge n von i nach i ist also $(T^n)_{ii}$ und die

Anzahl aller Zyklen der Länge n ist dann die Spur von T, also $\sum_i (T^n)_{ii} = \mathrm{Sp}(T^n)$. Ein Zyklus der Länge n von i nach i läuft über n periodische Punkte, von denen jeder ebenfalls als Anfangspunkt eines Zyklus der Länge n angesehen werden kann - also ist die Anzahl aller Zyklen der Länge n, d.h. $\mathrm{Sp}(T^n)$, gleich der Anzahl N_n aller periodischen Punkte der Periode n.

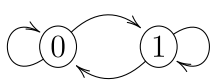
$$N_n = \mathrm{Sp}(T^n) \quad \Rightarrow \quad z^n N_n = \mathrm{Sp}((zT)^n) \quad \Rightarrow$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} z^n N_n = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{Sp}((zT)^n) = \mathrm{Sp}(\sum_{n=1}^{\infty} (zT)^n) = \mathrm{Sp}(\frac{zT}{1 - zT}) \; . \tag{8.6.6}$$

Gleichzeitig ist jeder Zyklus der Länge n ein Fixpunkt von $(\sigma_N)^n$. Wenn dem symbolischen dynamischen System (Ω, σ_N) eine interierte Abbildung f zugrunde liegt, dann entspricht jedem Fixpunkt von $(\sigma_N)^n$ ein Fixpunkt von $f^n(x_0)$.

Beispiel: Betrachten wir einmal die einfachste *vollständige binäre* symbolische Dynamik: das Alphabet bestehe aus der Menge $\{0, 1\}$ und es gebe kein grammtikalischen Einschränkungen, d.h. alle Übergänge von einem Symbol zu jedem anderen Symbol seien erlaubt, dann sehen die Transfer-Matrix T, bzw. der entsprechende Übergangs-Graph folgendermaßen aus:

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \equiv$$



$$. \tag{8.6.7}$$

Eine Symbolsequenz $\omega = (\ldots, 0, 1, 1, 0, 1, 1, \ldots)$ ist ein Fixpunkt von $(\sigma_2)^3$ und die Anzahl aller Zyklen der Länge 3 ist:

$$\mathrm{Sp}(T^3) = \mathrm{Sp}\left(\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^3\right) = \mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 4 & 4 \\ 4 & 4 \end{pmatrix} = 8 \; . \qquad \square$$

Hilfreich ist der Begriff der *Primzerlegung* von Bahnkurven. Es gebe eine abzählbare und geordnete (!) Menge von endlichen Symbolsequenzen $\mathcal{P} := \{p_0, p_1, \ldots\}$ mit $p_i \in \mathcal{A}^{n_i}$. Dann können wir beliebige endliche Symbolsequenzen (Worte) der Bahnkurve ω eindeutig in der Form einer Primzerlegung $\{p_0^{k_1} p_1^{k_2} \cdots p_j^{k_j}\}$ schreiben. Nehmen wir als Beispiel wieder die vollständige binäre symbolische Dynamik. Wir wählen $p_0 := 0$, $p_1 := 1$ als Primsequenzen. Die vier Symbolsequenzen der Länge 2 können wir schreiben als $00 = p_0^2$, $01 = p_0 p_1$, $11 = p_1^2$ und $p_2 := 10$ ist die dritte Primsequenz, denn $p_1 p_0$ ist wegen der vorausgesetzen Ordnung nicht erlaubt. Die acht Symbolsequenzem der Länge 3 können wir schreiben als: $000 = p_0^3$, $001 = p_0^2 p_1$, $010 = p_0 p_2$, $p_3 := 100$, $011 = p_0 p_1^2$, $p_4 := 101$, $110 = p_1 p_2$, $111 = p_1^3$, usw.

Wenn wir jetzt Zyklen zählen wollen, könnten wir das direkt mittels der gerade vorgestellten Primzerlegung durchführen - was sich für eine numerische Implementation auch anbietet. Wir folgen hier jedoch Cvitanović u. a. (2009) (Kap. 15), dessen Zählweise im Zusammenhang mit Zyklen auch sehr transparent ist: im Beispiel der vollständigen binären symbolischen Dynamik gibt als Zyklen der Länge 1 nur die beiden Primzyklen: $p_0 = 0$, $p_1 = 1$; als Zyklen der Länge 2 gibt es: $00 = p_0^2$, $11 = p_1^2$ und $p_2 := 10$ und den um einen periodischen Punkt verschobenen Zyklus 01, also 2-mal den Primzyklus p_2; als Zyklen der Länge 3 gibt es: $000 = p_0^3$, $111 = p_1^3$, 3-mal den Primzyklus $p_3 := 100$, 3-mal den Primzyklus $p_4 := 101$.

Wichtig in unserem Zusammenhang ist der folgende Satz:

Satz 8.6.1 (Perron-Frobenius) *Wenn T eine Perron-Frobenius-Matrix ist, dann hat T einen einfachen, positiven Eigenwert $\lambda_0 > 1$, der größer als die Beträge aller anderen Eigenwerte ist.*

Beweis. Katok u. Hasselblatt (2009), S. 52, bzw. Robinson (1999), S. 125. □

In vielen dynamischen Systemen zeigt sich nun, daß die Anzahl K_n der möglichen Bahnkurven der Länge n (d.h. der Anzahl n der Iterationen von f) exponentiell zunimmt. Diese Zunahme mißt man mit der *topologischen Entropie* h:

$$h := \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln(K_n) \ . \tag{8.6.8}$$

Wenn T eine Perron-Frobenius-Matrix mit dem größten Eigenwert λ_0 ist, dann gilt

$$h = \ln(\lambda_0) \ . \tag{8.6.9}$$

Beweis. $(T^n)_{ij}$ ist die Anzahl der erlaubten Wege der Länge n von j nach i. Seien λ_α und $\mid e_\alpha\rangle$ für $\alpha = 0, \ldots, m-1$ die Eigenwerte und Rechts-Eigenvektoren von T, so folgt:

$$K_n = \sum_{i,j} (T^n)_{ij} = (1, 1, \ldots, 1) T^n \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = (\sum_{\beta=0}^{m-1} a_\beta \langle e_\beta \mid) T^n (\sum_{\alpha=0}^{m-1} a_\alpha \mid e_\alpha\rangle)$$

$$= \sum_{\alpha=0}^{m-1} b_\alpha \lambda_\alpha^n \ , \qquad \text{mit } b_\alpha := \sum_{\beta=0}^{m-1} a_\beta a_\alpha \langle e_\beta \mid e_\alpha\rangle \ .$$

Dabei haben wir $(1, 1, \ldots, 1)$ nach den Rechts-Eigenvektoren $\mid e_\alpha\rangle$ entwickelt. Damit ergibt sich für die topologische Entropie h:

$$h = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln(K_n) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln(\sum_{\alpha=0}^{m-1} b_\alpha \lambda_\alpha^n)$$

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln[b_0\lambda_0^n(1 + \sum_{\alpha=1}^{m-1} \frac{b_\alpha}{b_0}(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_0})^n)]$$

$$= \ln(\lambda_0) + \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}[\ln(b_0) + \ln(1 + \sum_{\alpha=1}^{m-1} \frac{b_\alpha}{b_0}(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_0})^n)]$$

$$= \ln(\lambda_0)\ .$$

□

Beispiel: Wir betrachten wieder das obige Beispiel eines einfachen vollständigen binären dynamischen Systems. Die beiden Zeilen von T in 8.6.7 sind linear abhängig, deshalb kann man T nicht diagonalisieren. Man findet aber einen Rechteigenwert leicht aus der Lösung des charakteristischen Polynoms $\det(1 - zT) = 0$:

$$\det(1 - zT) = \det \begin{pmatrix} 1 - z & -z \\ -z & 1 - z \end{pmatrix} = 1 - 2z \overset{!}{=} 0 \quad \Rightarrow$$

$$z_0 = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \lambda_0 = \frac{1}{z} = 2\ .$$

Also ist die toplogische Entropie $h = \ln(2)$. Dies verwundert natürlich nicht, denn in dem vollständigen binären dynamischen System wächst ja die Anzahl K_n der möglichen Bahnkurven der Länge n in der Form $K_n = 2^n$. □

8.7 Topologische oder Artin-Mazursche Zeta-Funktion

Diese Zeta-Funktion wurde von Artin und Mazur 1965 eingeführt und wird deshalb häufig auch als Artin-Mazursche Zeta-Funktion bezeichnet. Sie wurde von Smale 1967 weiter untersucht und bekannt gemacht. Eine ausführliche mathematische Untersuchung findet sich in Parry u. Pollicott (1990). Wir folgen hier im Wesentlichen wieder Cvitanović u. a. (2009), Kapitel 15.

Wir hatten oben gesehen, daß die Anzahl aller Zyklen der Länge n gleich der Anzahl aller Fixpunkt von $(\sigma_N)^n$ und gleich der Spur von T^n ist, also $\mathrm{Fix}((\sigma_N)^n) = \mathrm{Fix}(f^n(x_0)) = \mathrm{Sp}(T^n)$. Da die Fixpunkte von $(\sigma_N)^n$, bzw. f^n topologische Invarianten sind, kamen Artin und Mazur auf den Gedanken, die Anzahl der Fixpunkte aller Zyklen der Länge n in einer Zeta-Funktion ähnlich der Riemannnschen Zeta-Funktion zusammenzufassen:

$$\zeta_{top}(z) := \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \mathrm{Fix}((\sigma_N)^n)\right) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \mathrm{Sp}(T^n)\right)\ . \tag{8.7.1}$$

Das Skelett aller Zyklen sind die sogenannten Primzyklen, Zyklen die keine kürzeren Zyklen enthalten. So wie man alle natürlichen Zahlen multiplikativ aus Primzahlen aufbauen kann, ebenso kann man alle Zyklen additiv aus Primzyklen aufbauen. Ein beliebiger

Zyklus der Länge n kann nun entweder ein Primzyklus der Länge $n = n_p$ sein, oder eine Summe von r Wiederholungen kürzerer Primzyklen, also $n = \sum_{n_p \leq n} \sum_{r=1}^{\infty} \delta_{n,n_p r}$. Indem nun die Anzahl der Primzyklen im Exponenten auftaucht, erhalten wir einen multiplikativen Aufbau der Zyklen aus Primzyklen, ebenso wie beim Aufbau der natürlichen Zahlen aus Primzahlen. Wenn wir in einem Primzyklus der Länge n_p den Anfangspunkt des Zyklus um eine Position verschieben, erhalten wir wieder einen Primzyklus; es gibt also gerade n_p Primzyklen der Länge n_p. Damit erhalten wir für die topologische Zeta-Funktion:

$$\begin{aligned}\zeta_{top}(z) &= \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \operatorname{Sp}(T^n)\right) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \sum_p n_p \sum_{r=1}^{\infty} \delta_{n,n_p r} \frac{1}{n} z^n\right) = \\ &= \exp\left(\sum_p n_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{n_p r} z^{n_p r}\right) = \exp\left(\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} (z^{n_p})^r\right) = \\ &= \exp\left(-\sum_p \ln(1 - z^{n_p})\right) = \prod_p (1 - z^{n_p})^{-1} \ . \end{aligned} \tag{8.7.2}$$

Hierbei haben wir die r-Summation mittels der Taylorreihe $\ln(1 - x) = -\sum_{r=1}^{\infty} \frac{x^r}{r}$ durchgeführt. Die Ähnlichkeit mit der Produktdarstellung der klassischen Riemanschen Zeta-Funktion (D.3.1) sieht man sofort, wenn man mittels $e^{-s} := z$ zu einer Variablen s übergeht:

$$\tilde{\zeta}_{top}(s) = \prod_p (1 - e^{-s n_p})^{-1} = \prod_p (1 - (l_p)^{-s})^{-1} \ . \tag{8.7.3}$$

Hierbei sind die $l_p := e^{n_p}$ '*multiplikative topologische Längen*' der Primzyklen.

Cvitanović u. a. (2009) (Kap. 15) führen noch die partiellen Spuren (t wie trace) $t_p := z^{n_p}$ ein, denn ein einzelner Primzyklus einer Matrix zT der Länge n_p, also $((zT)^{n_p})_{ii}$ liefert ja gerade den Faktor z^{n_p} (da für eine Perron-Frobenius-Matrix $T_{ij} \in \{0, 1\}$ ist), wenn es sich um einen erlaubten Zyklus, bzw. 0, wenn es sich um einen nicht erlaubten Zyklus handelt. Im Beispiel eines volständigen binären symbolischen Systems erhält man also:

$$\begin{aligned} &\operatorname{Sp}(zT) = t_0 + t_1 \ , \\ &\operatorname{Sp}((zT)^2) = t_0^2 + t_1^2 + 2t_{10} \ , \\ &\operatorname{Sp}((zT)^3) = t_0^3 + t_1^3 + 3t_{100} + 3t_{101} \ , \quad \text{etc.} \end{aligned}$$

Bei den hier betrachteten Perron-Frobenius-Matrizen sind die diese partiellen Spuren t_p natürlich trivial und eigentlich überflüssig; sie spielen erst bei Verallgemeinerungen eine Rolle.

Wichtig ist der Zusammenhang der topologischen Zeta-Funktion mit der Spektral-Determinante. Unter der Spektral-Determinante versteht man $\det(1 - zT)$, welche bei endlicher Dimension von T ja gerade das charakteristische Polynom von T ist und dessen Nullstellen $z_i = \frac{1}{\lambda_i}$ die (Rechts-) Eigenwerte λ_i von T liefern. Mit $\det(A) = \exp(\mathrm{Sp}(\ln(A)))$ und $\ln(1-x) = -\sum_{r=1}^{\infty} \frac{x^r}{r}$ folgt nun für die Spektral-Determinante von T:

$$\det(1 - zT) = \exp\left(\mathrm{Sp}(\ln(1 - zT))\right) = \exp\left(-\mathrm{Sp} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(zT)^n}{n}\right)$$

$$= \exp\left(-\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \mathrm{Sp}(T^n)\right) = \frac{1}{\zeta_{top}(z)} \, . \tag{8.7.4}$$

Wenn man die Exponentialfunktion von $\det(1 - zT)$ entwickelt, erhält man die sogenannte Kummulanten-Entwicklung:

$$\frac{1}{\zeta_{top}(z)} = \det(1 - zT) = 1 - z\mathrm{Sp}(T) - \frac{z^2}{2}\left(\mathrm{Sp}(T^2) - (\mathrm{Sp}(T))^2\right) - \ldots \, . \tag{8.7.5}$$

Mit dem obigen Beispiel eines vollständigen binären symbolischen Systems und den entsprechenden partiellen Spuren t_p ergibt sich also die folgende Entwicklung (von Cvitanović u. a. (2009) Krümmungs-Entwicklung genannt):

$$\frac{1}{\zeta_{top}(z)} = \det(1 - zT) = 1 - (t_0 + t_1) - \frac{1}{2}\left((t_0^2 + t_1^2 + 2t_{10}) - (t_0 + t_1)^2\right) - \ldots$$

$$= 1 - (t_0 + t_1) - (t_{10} - t_0 t_1) - \ldots \, . \tag{8.7.6}$$

Die Krümmungs-Entwicklung ist hier deshalb so interessant, weil sie anhand dieses einfachen Beispiels des vollständigen binären symbolischen Systems sehr schön den Effekt der sogenannten *Verschattung* demonstriert: bei der hier vorliegenden Perron-Frobenius-Matrix T ist ja $t_{10} = t_0 t_1$, d.h. die Reihe bricht bereits nach der ersten Ordnung in z ab und liefert gerade das charakteristische Polynom $\det(1-zT) = 1-(t_0+t_1) = 1-2z$. Bei allgemeineren dynamischen Systemen heben sich nun t_{10} und $t_0 t_1$ und die entsprechenden Terme höherer Ordnung nicht mehr komplett auf, sondern nur noch näherungsweise. So wird der Zyklus $\{01\}$ vom sogenannten *Pseudozyklus* $\{0\}\{1\}$ approximiert und durch die Differenzbildung *verschattet*. Dadurch ist diese Krümmungs-Entwicklung beim Vorliegen einer Verschattung eine außerordentlich schnell konvergierende Potenzreihe und hervorragend für die numerische Bestimmung der Nullstellen von $\det(1 - zT)$ (bzw. der Pole der entsprechenden Zeta-Funktion) geeignet. Wenn jedoch die Grammatik des Systems nicht endlich ist, dann ist auch die Anzahl der Terme der Potenzreihe, in denen keine Verschattung vorliegt, nicht mehr endlich und die Potenzreihe wird nur noch schlecht konvergieren - in diesem Fall ist die Krümmungs-Entwicklung ungeeignet.

Mittels der topologischen Zetafunktion können wir jetzt die erzeugende Formel 8.6.6 für die Anzahl der periodischen Punkte der Periode n umformulieren:

$$\sum_{n=1}^{\infty} z^n N_n = \mathrm{Sp}(\frac{zT}{1 - zT}) = \mathrm{Sp}(-z\frac{d}{dz} \ln(1 - zT)) = -z\frac{d}{dz}\mathrm{Sp}(\ln(1 - zT))$$

$$= -z\frac{d}{dz}\ \ln(\det(1 - zT)) = \frac{-z\frac{d}{dz}\ \det(1 - zT)}{\det(1 - zT)} = \frac{-z\frac{d}{dz}\frac{1}{\zeta_{top}(z)}}{\frac{1}{\zeta_{top}(z)}}\ . \tag{8.7.7}$$

Wenn wir die Anzahl N_n der periodischen Punkte der Periode n kennen, dann können wir auf die folgende Weise auch die Anzahl der Primzyklen bestimmen. Jeder Primzyklus der Länge d enthält d periodische Punkte. Wenn es M_d verschiedene Primzyklen der Länge d gibt, so enthalten diese $d \cdot M_d$ periodische Punkte. Die Anzahl N_n aller periodischen Punkte der Periode n ist nun die Summe über alle $d \cdot M_d$, sofern d die Periode n ganzzahlig teilt (d.h. der Primzyklus der Länge d wird r-mal durchlaufen, so daß $d \cdot r = n$ ist). Mit der Möbius-Funktion μ (D.14.1) und der Möbius-Inversions Formel (D.14.5) ergibt sich:

$$N_n = \sum_{d\colon d|n} dM_d \quad \Rightarrow \quad n \cdot M_n = \sum_{d\colon d|n} \mu(\frac{n}{d})N_d\ . \tag{8.7.8}$$

Auch für Flüsse kann eine topologische Zeta-Funktion definiert werden. Hierbei ersetzt man in der Eulerschen Produktdarstellung 8.7.3 die diskrete Zeit n_p eines Primzyklus durch die entsprechende kontinuierliche Zeit T_p:

$$\zeta_{top}(s) := \prod_p (1 - e^{-sT_p})^{-1}\ . \tag{8.7.9}$$

8.8 Zeitentwicklung und „Zustandsfunktion"

Wir betrachten jetzt zeitstetig dynamische Systeme, also Flüsse auf einer Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$. Die entsprechenden Aussagen für zeitdiskrete dynamische Systeme erhält man in der Regel einfach durch den Übergang von $t \to n$, $f^t \to f^n$, $\int dt \to \sum_n$.

Damit wir auf $\mathcal{M}$ integrieren können, benötigen wir ein Maß. Ohne hier tiefer in Maßtheorie und Ergodentheorie der dynamischen Systeme einzusteigen (bei Interesse siehe etwa Katok u. Hasselblatt (2009), Kap. 4 und 5) nehmen wir an, daß das Maß auf $\mathcal{M}$ durch $d\mu(x,t) = \rho(x,t)\,dx$ mit einer zeitabhängigen Dichte $\rho(x,t)$ gegeben sei, die angibt, wieviele Punkte des Flusses sich zum Zeitpunkt t im Volumen dx aufhalten. Die Dichte kann in chaotisch dynamischen Systemen recht komplex sein, z.B. eine unstetige oder gar singuläre Funktion auf einer fraktalen Menge, aber sie soll in einem abgeschlossenen System zu jedem Zeitpunkt normiert sein: $\int_{\mathcal{M}} \rho(x,t)\,dx = 1$.

Wenn die Zeitentwicklung des Flusses durch f^t gegeben ist, dann beschreibt der Perron-Frobenius-Operator L^t die Zeitentwicklung der Dichte $\rho(x,t)$:

$$\rho(x,t) := L^t \circ \rho(x_0, 0) := \int_{\mathcal{M}} \delta(x - f^t(x_0))\rho(x_0, 0)\,dx_0\ . \tag{8.8.1}$$

L^t bildet eine Darstellung der Gruppe f^t (bei invertierbaren Abbildungen), oder der Halbgruppe f^t (bei nichtinvertierbaren Abbildungen), d.h. $L^0 = \hat{1}$ und $L^{t_2} \circ L^{t_1} = L^{t_2+t_1}$, denn:

$$L^{t_2} \circ L^{t_1} \circ \rho(x_0, 0) = L^{t_2} \circ \rho(f^{t_1}(x_0), t_1) = \rho(f^{t_2}(f^{t_1}(x_0)), t_2 + t_1)$$

$$= \rho(f^{t_2+t_1}(x_0), t_2 + t_1) = L^{t_2+t_1} \circ \rho(x_0, 0)\ .$$

Als Kern des Perron-Frobenius-Operators bezeichnet man

$$L^t(x, x_0) := \delta(x - f^t(x_0))\ . \tag{8.8.2}$$

Sei $y(t) := f^t(x_0)$, dann kann man mittels der Jacobi-Matrix

$$J^t(x_0) := \frac{\partial y(t)}{\partial x_0} = \frac{\partial f^t(x_0)}{\partial x_0}\ , \ \text{bzw.}\ \ J^t_{ij}(x_0) := \frac{\partial (f^t(x_0))_i}{\partial (x_0)_j} \tag{8.8.3}$$

über die δ-Funktion integrieren und erhält für den Perron-Frobenius-Operator

$$\begin{aligned}\rho(x,t) := L^t \circ \rho(x_0, 0) &:= \int\limits_{\mathcal{M}} \delta(x - f^t(x_0))\rho(x_0, 0)\, dx_0 \\ &= \int\limits_{\mathcal{M}} \delta(x-y) \left(\sum_{x_0 : f^t(x_0) = x} \frac{1}{|\det(J^t(x_0))|} \right) \rho(x_0, 0)\, dy \\ &= \sum_{x_0 : f^t(x_0) = x} \frac{1}{|\det(J^t(x_0))|}\, \rho(x_0, 0)\ . \end{aligned} \tag{8.8.4}$$

Wenn f^t maßerhaltend in der Zeit ist, dann ist die Dichte stationär: $\rho_0(x) := \rho(x,t) = \rho(x, 0)$. Zudem ist $\rho_0(x)$ eine Eigenfunktion des Perron-Frobenius-Operators zum Eigenwert 1, denn $\rho_0 = L^t \circ \rho_0$. Physiker interessieren sich jetzt nicht für die Vielzahl von möglichen singulären stationären Dichten, sondern vornehmlich für Dichten, die das Langzeit-Verhalten deterministischer dynamischer Systeme modellieren. In diesem Zusammenhang hat sich das Sinai-Ruelle-Bowen Maß (SRB-Maß oder auch natürliches Maß oder Gleichgewichts-Maß) etabliert. Sei $x_0 \in \mathcal{M}$ eine generischer Punkt in $\mathcal{M}$, dann ist das SRB-Maß als die asymptotische Dichte $\bar{\rho}_{x_0}$ definiert:

$$\bar{\rho}_{x_0}(y) := \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int\limits_0^t \delta(y - f^\tau(x_0))\, d\tau\ . \tag{8.8.5}$$

Per Definition ist das SRB-Maß stationär. Da das SRB-Maß als Grenzwert definiert ist, ist es keineswegs sicher, daß für ein beliebiges dynamisches System das SRB-Maß existiert. Tatsächlich ist die mathematische Existenz des SRB-Maßes im Wesentlichen nur für Attraktoren von gleichmäßig hyperbolischen Systemen bewiesen worden (siehe etwa Robinson (1999), S. 393).

Sei $a : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ eine Observable des dynamischen Systems. Im physikalischen Kontext wird a zumeist als glatt, d.h. als C^∞-Funktion angenommen. Der räumliche Mittelwert von a in $\mathcal{M}$ mit der Dichte ρ ist definiert als:

$$\langle a \rangle_\rho(t) := \int\limits_{\mathcal{M}} \rho(x,t)\, a(x)\, dx\ . \tag{8.8.6}$$

Mit der SRB-Dichte ergibt sich

$$\begin{aligned}\langle a\rangle_{\bar{\rho}_{x_0}} &= \int_{\mathcal{M}} \bar{\rho}_{x_0}(x)\, a(x)\, dx = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t \int_{\mathcal{M}} \delta(x - f^\tau(x_0))\, a(x)\, dx\, d\tau \\ &= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t a(f^\tau(x_0))\, d\tau =: \bar{a}_{x_0}\ . \end{aligned} \tag{8.8.7}$$

Der räumliche Mittelwert $\langle a\rangle_{\bar{\rho}_{x_0}}$ ist also gleich dem zeitlichen Mittelwert $\bar{a}_{x_0}$. Dies ist ein Beispiel für den Birkhoffschen Ergoden-Satz (siehe etwa Katok u. Hasselblatt (2009), S. 136 ff.). Dieser Mittelwert $\bar{a}_{x_0}$ kann nun aber recht wild vom Anfangspunkt der Bahnkurve x_0 abhängen. Daher betrachtet man häufig bei Funktionen des Anfangspunktes x_0 noch die zusätzliche Mittelung über alle Anfangspunkte $x_0 \in \mathcal{M}$:

$$\langle a\rangle := \langle \bar{a}_{x_0}\rangle := \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} \bar{a}_{x_0}\, dx_0 = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} \frac{1}{t} \int_0^t a(f^\tau(x_0))\, d\tau\, dx_0\ . \tag{8.8.8}$$

Smale hatte bereits 1967 darüber spekuliert, ob man die Artin-Mazursche Zeta-Funktion von topologischen dynamischen Systemen vielleicht auf andere dynamische Systeme verallgemeinern könne. Eine solche Verallgemeinerung wurde dann von Ruelle auf dem Weg über den von ihm entwickelten *thermodynamischen Formalismus* dynamischer Systeme (sieheRuelle (1978)) gefunden. Wir folgen hier wieder Cvitanović u. a. (2009) (Kap. 17-19). Die zugrunde liegende Idee ist es, genau wie bei der topologischen Zeta-Funktion, zunächst im Raum der Bahnkurven eine multiplikative Gruppe zu konstruieren und dann beliebige Bahnkurven durch Produkte von Primzyklen zu approximieren.

Zunächst geht man von der Observablen $a : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ zu einer über eine Bahnkurve mit Anfangspunkt x_0 integrierten Observablen über:

$$A^t(x_0) := \int_0^t a(f^\tau(x_0)\, d\tau\, , \text{ bzw. diskret: } A^n(x_0) := \sum_{i=0}^{n-1} a(f^i(x_0))\ . \tag{8.8.9}$$

Für einen periodischen Zyklus ergibt sich mit der Zyklus-Umlaufzeit T_p und der Umlaufzahl $r \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} A_p &:= \int_0^{T_p} a(f^\tau(x_0)\, d\tau \quad \Rightarrow \\ a_p &:= \bar{a}(x_0) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t a(f^\tau(x_0))\, d\tau \\ &= \lim_{r\to\infty} \frac{1}{rT_P}[rA_p + \int_0^{t \bmod T_p} a(f^\tau(x_0))\, d\tau] = \frac{A_p}{T_\mathrm{p}}\ . \end{aligned} \tag{8.8.10}$$

Entsprechend ergibt sich für einen periodischen Zyklus mit der diskreten Zyklus-Umlaufzeit n_p und der Umlaufzahl $r \in \mathbb{N}$:

$$A_p := \sum_{i=0}^{n-1} a(f^i(x_0)) = \sum_{i=1}^{n} a(f^i(x_0)) \quad \Rightarrow$$

$$a_p := \bar{a}(x_0) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} a(f^i(x_0))$$

$$= \lim_{r\to\infty} \frac{1}{rn_P}[rA_p + \sum_{i=1}^{n \bmod n_p} a(f^i(x_0))] = \frac{A_p}{n_\mathrm{p}} \; . \tag{8.8.11}$$

Die $A^t(x_0)$ bilden bzgl. der Zeit eine additive Gruppe (bei invertierbaren Flüssen f^t), bzw. eine Halbgruppe (bei nicht invertierbaren Flüssen f^t). Indem man zu $\exp(A^t(x_0))$ übergeht, gelangt man zu der gewünschten multiplikativen Gruppenstruktur.

Im nächsten Schritt mittelt man über alle Anfangspunkte x_0 und definiert für diese Größe einen Zeitentwicklungs-Operator, ganz analog zum Perron-Frobenius-Operator.

$$e^{ts(\beta)} := \langle e^{\beta A^t} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} e^{\beta A^t(x_0)}\, dx_0 \quad \text{mit} \tag{8.8.12}$$

$$s(\beta) := \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln\langle e^{\beta A^t} \rangle \; . \tag{8.8.13}$$

β ist im Kontext der dynamischen Systeme nur ein physikalisch unbestimmter Hilfsparameter. Hier sieht man natürlich sofort, wie Ruelle die Theorie analog zur Thermodynamik entwickelt hat. Daher nannte er in seinen Arbeiten $\langle \exp(\beta A^t) \rangle$ auch die *„Zustandsfunktion"*, $s(\beta)$ den *„Druck"*, t das *„Volumen"* und $\lim_{t\to\infty}$ den *„thermodynamischen Grenzwert"* (analog zum *„Grenzwert großer Systeme"* $\lim_{V\to\infty}$ in der Thermodynamik). Wenn $s(\beta)$ einmal bestimmt ist, dann folgen daraus durch Ableitung nach β alle interessierenden Mittelwerte von a:

$$\left.\frac{\partial s}{\partial \beta}\right|_{\beta=0} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \langle A^t \rangle = \langle a \rangle \; , \tag{8.8.14}$$

$$\left.\frac{\partial^2 s}{\partial \beta^2}\right|_{\beta=0} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \frac{\partial}{\partial \beta} \left.\frac{\langle A^t e^{\beta A^t} \rangle}{\langle e^{\beta A^t} \rangle}\right|_{\beta=0} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} (\langle A^t A^t \rangle - \langle A^t \rangle \langle A^t \rangle)$$

$$= \lim_{t\to\infty} t\, (\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2) = \lim_{t\to\infty} t\, \langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle \; . \tag{8.8.15}$$

Analog zum Perron-Frobenius-Operator soll jetzt ein Zeitentwicklungs-Operator L^t für $\langle \exp(\beta A^t) \rangle$ definiert werden. Jede Bahnkurve in $\mathcal{M}$ mit dem Anfangspunkt x_0 ist ja gegeben durch $\delta(x - f^t(x_0))$ und da wir das System hier als abgeschlossenen betrachten, gilt:

$$\int_{\mathcal{M}} \delta(x - f^t(x_0))\, dx = 1 \quad \text{für alle } t \text{ und für alle } x_0 \in \mathcal{M} \,. \tag{8.8.16}$$

Damit folgt für $\langle \exp(\beta A^t) \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle e^{\beta A^t} \rangle &= \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} e^{\beta A^t(x_0)}\, dx_0 = \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} dx_0 \int_{\mathcal{M}} dx\, \delta(x - f^t(x_0))\, e^{\beta A^t(x_0)} \\ &=: \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} dx_0 \int_{\mathcal{M}} dx\, L^t(x, x_0) =: \langle L^t \rangle \,, \end{aligned} \tag{8.8.17}$$

d.h. $L^t(x, x_0) := \delta(x - f^t(x_0))\, \exp(\beta A^t(x_0))$ betrachten wir als den Kern eines von der Observablen a abhängigen Zeitentwicklungs-Operators L^t:

$$(L^t \phi)(x) := L^t \circ \phi(x_0) := \int_{\mathcal{M}} dx_0\, \delta(x - f^t(x_0))\, \exp(\beta A^t(x_0))\, \phi(x_0) \,. \tag{8.8.18}$$

Für die diskrete Zeitabhängigkeit bei interierten Abbildungen ergibt sich völlig analog:

$$(L^n \phi)(x) := L^n \circ \phi(x_0) := \int_{\mathcal{M}} dx_0\, \delta(x - f^n(x_0))\, \exp(\beta A^n(x_0))\, \phi(x_0) \,. \tag{8.8.19}$$

Der Erwartungswert von $e^{ts(\beta)} = \langle \exp(\beta A^t) \rangle$ wird für $t \to \infty$ von dem größten Eigenwert von L^t dominiert, wenn dieser mit der Zeit exponentiell wächst.

L^t bildet eine Darstellung der Gruppe f^t (bei invertierbaren Abbildungen), oder der Halbgruppe f^t (bei nichtinvertierbaren Abbildungen), d.h. $L^0 = \hat{1}$ und $L^{t_2} \circ L^{t_1} = L^{t_2 + t_1}$, denn:

$$\begin{aligned} L^{t_2} \circ L^{t_1} \circ \phi(x_0)) &= L^{t_2} \circ \left(\int_{\mathcal{M}} dx_0\, \delta(x_1 - f^{t_1}(x_0))\, \exp(\beta A^{t_1}(x_0))\, \phi(x_0) \right) \\ &= \int_{\mathcal{M}} dx_1\, \delta(x_2 - f^{t_2}(x_1))\, \exp(\beta A^{t_2}(x_1)) \\ &\quad \cdot \int_{\mathcal{M}} dx_0\, \delta(x_1 - f^{t_1}(x_0))\, \exp(\beta A^{t_1}(x_0))\, \phi(x_0) \\ &= \int_{\mathcal{M}} dx_1\, \delta(x_2 - f^{t_2}(x_1)) \\ &\quad \cdot \int_{\mathcal{M}} dx_0\, \delta(x_1 - f^{t_1}(x_0))\, \exp(\beta(A^{t_2}(x_1) + A^{t_1}(x_0)))\, \phi(x_0) \end{aligned}$$

$$= \int_{\mathcal{M}} dx_0\, \delta(x_2 - f^{t_2}(f^{t_1}(x_0)))\, \exp(\beta(A^{t_2}(f^{t_1}(x_0)) + A^{t_1}(x_0)))\, \phi(x_0)$$

$$= \int_{\mathcal{M}} dx_0\, \delta(x_2 - f^{t_2+t_1}(x_0))\, \exp(\beta A^{t_2+t_1}(x_0))\, \phi(x_0)$$

$$= L^{t_2+t_1} \circ \phi(x_0)\ .$$

8.9 Spektraldeterminanten für iterierte Abbildungen

Sei L der Zeitentwicklungs-Operator einer iterierten Abbildungen f. Dies ist ein linearer Operator und seine Eigenwerte $\lambda_i = \frac{1}{z_i}$ folgen als die Nullstellen der Determinante:

$$\det(1 - zL) = \prod_i (1 - z\lambda_i) \stackrel{!}{=} 0\ . \tag{8.9.1}$$

Für endliche Matrizen L ist dies das charakteristische Polynom in z, für unendlich-dimensionale Operatoren L ist dies eine Potenzreihe in z, deren Konvergenzverhalten im jeweiligen Fall zu untersuchen ist.

Mit $\det(X) = \exp(\mathrm{Sp}(\ln(X)))$ und $\ln(1-x) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n}$ folgt:

$$\det(1 - zL) = \exp(\mathrm{Sp}(\ln(1 - zL))) = \exp\left(\mathrm{Sp}(-\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n L^n}{n})\right)$$

$$= \exp\left(-\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \mathrm{Sp}(L^n)\right)\ . \tag{8.9.2}$$

Nun ist die $\mathrm{Sp}(L^n)$ gleich der Summe über alle Zyklen der Länge n. Also können wir die Summation über n als Doppelsummation über die Länge der Primzyklen n_p und Wiederholungen r mit $n = n_p r$ schreiben:

$$\det(1 - zL) = \exp\left(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^{n_p r}}{n_p r} \mathrm{Sp}(L^{n_p r})\right)\ .$$

Jetzt soll die Spur von $L^{n_p r}$ bestimmt werden. Aus der Definition von L^n (8.8.19) folgt:

$$\mathrm{Sp}(L^{n_p r}) = \int_{\mathcal{M}} dx\, \delta(x - f^{n_p r}(x))\, \exp(\beta A^{n_p r}(x))$$

$$= \sum_{x_i : x_i = f^{n_p}(x_i)} \frac{1}{|\det(1 - J_p^r)|}\, \exp(\beta A^{n_p r}) = n_p\, \frac{\exp(\beta A^{n_p r})}{|\det(1 - J_p^r)|}$$

$$= n_p\, \frac{\exp(\beta r A_p)}{|\det(1 - J_p^r)|}\ . \tag{8.9.3}$$

Der führende Faktor n_p entsteht, da jeder Primzyklus p ja n_p periodische Punkte hat, von denen jeder Anfangspunkt eines Zyklus der Länge n_p ist, und da $A^{n_p r}(x)$ in einem Primzyklus nicht von Anfangspunkt x_i, $i \in 0 \ldots n_p - 1$ abhängt (siehe 8.8.9):

$$A^{n_p r}(x_0) = \sum_{i=0}^{n_p r-1} a(f^i(x_0)) = r \sum_{i=0}^{n_p-1} a(f^i(x_0)) = r A_p \; . \tag{8.9.4}$$

Damit folgt jetzt für die Spektraldeterminante $\det(1 - zL)$:

$$\det(1 - zL) = \exp\left(- \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^{n_p r}}{r} \frac{\exp(\beta r A_p)}{|\det(1 - J_p^r)|} \right) \; . \tag{8.9.5}$$

Bislang haben wir in keiner Weise Fragen der Konvergenz behandelt. An dieser Stelle muß man aber offenkundig dafür Sorge tragen, daß der Nenner nicht 0 wird und dafür ist hinreichend, daß das System *hyperbolisch* ist, d.h. das alle Eigenwerte $|\lambda_i| < 1$ sind (kontrahierende Richtungen), oder $|\lambda_i| > 1$ sind (expandierende Richtungen).

8.10 Spektraldeterminanten für Flüsse

Sei L^t der lineare Zeitentwicklungs-Operator eines Flusses mit dem infinitesimalen Generator B, d.h.

$$L^t =: e^{Bt} \; , \tag{8.10.1}$$

und sei B beschränkt: $||B|| \leq \beta$. Dann ist es sinnvoll, statt dem Spektrum von L^t das Spektrum von B untersuchen, bzw. das Spektrum der Resolventen von B, welches gerade die Laplace-Transformierte von L^t ist:

$$\int_0^\infty L^t e^{-st} \, dt = \int_0^\infty e^{(B-s)t} \, dt = \frac{1}{s - B} \quad \text{für } \Re(s) > \beta \; . \tag{8.10.2}$$

Dann ist auch die Resolvente $(s - B)^{-1}$ ein beschränkter Operator, denn

$$||\frac{1}{s-B}|| = ||\frac{1}{B-s}|| \leq \int_0^\infty e^{||B-s||t} \, dt = \int_0^\infty e^{(\beta - s)t} \, dt = \frac{1}{s - \beta} \; .$$

Für die Spektraldeterminante $\det(s - B)$ folgt mit $\det(X) = \exp(\mathrm{Sp}(\ln(X)))$:

$$\det(s - B) = \exp(\mathrm{Sp}(\ln(s - B))) = C \cdot \exp(\mathrm{Sp}(\int_\beta^s \frac{1}{s' - B} \, ds'))$$

$$= C \cdot \exp(\mathrm{Sp}(\int_\beta^s \int_0^\infty e^{(B-s')t} \, dt \, ds')) = C \; \exp(\mathrm{Sp}(\int_\beta^s \int_0^\infty L^t e^{-s't} \, dt \, ds'))$$

$$= C \cdot \exp\left(\int_{\beta}^{s} \int_{0}^{\infty} \mathrm{Sp}(L^t) e^{-s't} \, dt \, ds'\right) , \tag{8.10.3}$$

mit

$$C := \exp(\mathrm{Sp}(\ln(\beta - B))) = \det(\beta - B) . \tag{8.10.4}$$

Im nächsten Schritt soll die $\mathrm{Sp}(L^t)$ bestimmt werden, was zu einer Summe über alle Zyklen führt. Dabei muß aber berücksichtigt werden, daß ein Fluss immer zumindest eine marginale Richtung mit einem Eigenwert der Größe $\lambda_{\|} = 1$ in Richtung des Flusses hat (siehe 8.5.6) und die Integration in Richtung des Flusses separat zu behandeln ist. In Richtung senkrecht zum Fluss gehen wir wieder davon aus, daß das System *hyperbolisch* ist, d.h. das alle Eigenwerte $|\lambda_i| < 1$ sind (kontrahierende Richtungen), oder $|\lambda_i| > 1$ sind (expandierende Richtungen).

$$\begin{aligned} \mathrm{Sp}(L^t) &= \int_{\mathcal{M}} dx \, \delta(x - f^t(x)) \, \exp(\beta A^t(x)) \\ &= \int_{\mathcal{M}_\perp} \int_{\mathcal{M}_\|} dx_\perp dx_\| \, \delta(x_\perp - f^t(x_\perp)) \, \delta(x_\| - f^t(x_\|)) \, \exp(\beta A^t(x)) . \end{aligned}$$

Wir gehen zur Laplace-Transformierten über, wobei wir noch eine Regularisierung vornehmen, indem wir statt $\int_0^\infty \ldots dt$ nur über $\int_\epsilon^\infty \ldots dt$ integrieren, d.h. wir ignorieren den Beitrag $\int_0^\epsilon \ldots dt$ der *ganz kurzen* Zyklen. Dieser Beitrag hat in Quantenmechanik ein Analogon im Thomas-Fermi-Beitrag zur Zustandsdichte (siehe Unterkapitel 8.12.2, und Cvitanović u. a. (2009), S. 361, Übungsaufgabe 18.1.).

$$\begin{aligned} \int_\epsilon^\infty \mathrm{Sp}(L^t) e^{-s't} \, dt &= \int_\epsilon^\infty dt \int_{\mathcal{M}_\perp} \int_{\mathcal{M}_\|} dx_\perp dx_\| \, \delta(x_\perp - f^t(x_\perp)) \\ &\quad \cdot \delta(x_\| - f^t(x_\|)) \, \exp(\beta A^t(x) - s't) \\ &= \int_\epsilon^\infty dt \int_{\mathcal{M}_\perp} dx_\perp \, \delta(x_\perp - f^t(x_\perp)) \\ &\quad \cdot \int_0^{T_p} d\tau \, v(\tau) \, \delta(x_\|(\tau) - x_\|(t+\tau)) \, \exp(\beta A^t(x) - s't) . \end{aligned}$$

Die Zeit t kann man jetzt als $t = rT_p + t'$ schreiben, d.h. als r Wiederholungen der Zykluszeit T_p plus $t' \in [0, T_p[$:

$$\int_\epsilon^\infty \mathrm{Sp}(L^t) e^{-s't} \, dt = \sum_p \sum_{r=1}^\infty \int_{(-T_p+\epsilon)}^{\epsilon} dt' \int_{\mathcal{M}_\perp} dx_\perp \, \delta(x_\perp - f^{rT_p+t'}(x_\perp))$$

$$\cdot \int_0^{T_p} d\tau\, v(\tau)\, \delta(x_\parallel(\tau) - x_\parallel(rT_p + t' + \tau))$$

$$\cdot \exp(\beta A^{rT_p + t'}(x) - s'(rT_p + t')) \; .$$

Im nächsten Schritt wird die t'-Integration (d.h. die Laplace-Transformation) über den Anteil der marginalen Richtung $x_\parallel$ durchgeführt:

$$g(t') := x_\parallel(\tau) - x_\parallel(rT_p + t' + \tau) = x_\parallel(\tau) - x_\parallel(t' + \tau) \; ,$$

$$\frac{\partial}{\partial t'} g(t') = -\frac{\partial x_\parallel(t' + \tau)}{\partial t'} = -v(t' + \tau) \; .$$

$g(t')$ hat eine Nullstelle bei $t'_0 = 0$ und

$$\left. \frac{\partial}{\partial t'} g(t') \right|_{t'=0} = -v(\tau) \; .$$

Damit erhalten wir für die Deltafunktion in $x_\parallel$-Richtung:

$$\delta(g(t')) = \delta(x_\parallel(\tau) - x_\parallel(t' + \tau)) = \frac{1}{|g'(t'_0)|}\delta(t') = \frac{1}{v(\tau)}\delta(t') \; .$$

Und damit folgt:

$$\int_\epsilon^\infty \mathrm{Sp}(L^t) e^{-s't}\, dt = \sum_p \sum_{r=1}^\infty \int_{\mathcal{M}_\perp} dx_\perp\, \delta(x_\perp - f^{rT_p}(x_\perp))$$

$$\cdot \int_0^{T_p} d\tau\, \exp(\beta A^{rT_p}(x) - s'rT_p) \; .$$

Mit 8.8.9 und 8.8.10 gilt $A^{rT_p}(x) = rA_p$ und damit folgt:

$$\begin{aligned} \int_\epsilon^\infty \mathrm{Sp}(L^t) e^{-s't}\, dt &= \sum_p \sum_{r=1}^\infty \int_{\mathcal{M}_\perp} dx_\perp\, \delta(x_\perp - f^{rT_p}(x_\perp))\, T_p \exp(\beta r A_p - s'rT_p) \\ &= \sum_p T_p \sum_{r=1}^\infty \frac{\exp(\beta r A_p - s'rT_p)}{|\det(1 - J^r_{\perp,p})|} \; . \end{aligned} \tag{8.10.5}$$

Dabei ist $J_{\perp,p}$ die $(m-1)$-dimensionale Jacobi-Matrix senkrecht zur Flussrichtung für einen Zyklus. Und schließlich setzen wir dieses Ergebnis 8.10.5 in 8.10.3 ein:

$$\det(s - B) = C \cdot \exp(\int_\beta^s ds' \sum_p T_p \sum_{r=1}^\infty \frac{\exp(\beta r A_p - s'rT_p)}{|\det(1 - J^r_{\perp,p})|})$$

$$= \exp(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{\exp(\beta r A_p - s r T_p)}{|\det(1 - J^r_{\perp,p})|}) \,. \tag{8.10.6}$$

C war in 8.10.4 ja gerade so bestimmt worden, daß es den β-Term der Integration aufhebt. Es besteht eine enge Analogie dieser Spektraldeterminante von Flüssen zu der Spektraldeterminante von iterierten Abbildungen 8.9.5, die man noch leichter sieht, wenn man in 8.9.5 setzt: $L \to e^B$, $z \to e^{-s}$, $n_p \to T_p$.

Die obige Integration über die marginale Richtung mit dem Eigenwert der Größe $\lambda_\| = 1$ in Richtung des Flusses ist ein Beispiel dafür, wie man auch andere marginale Richtungen in nicht vollständig hyperbolischen Systemen behandeln kann.

8.11 Dynamische oder Ruellesche Zeta-Funktion

Wir hatten bei der Behandlung der Artin-Mazurschen Zeta-Funktion (topologische Zeta-Funktion) gesehen, daß diese Zeta-Funktion gleich dem Inversen der Determinante $\det(1 - zT)$ mit der zugehörigen Transfer-Matrix T (der Perron-Frobenius-Matrix) ist (8.7.4), also:

$$\zeta_{top}(z) = \frac{1}{\det(1 - zT)} \,.$$

Diese Tatsache hat einige Autoren dazu geführt, auch die Inversen der Spektraldeterminante für iterierte Abbildungen $\det(1 - zL)^{-1}$, bzw. für Flüsse $\det(s - B)^{-1}$ als Zeta-Funktionen zu bezeichnen. Wir folgen hier jedoch Cvitanović u. a. (2009) und Ruelle, die darauf hinweisen, daß diese Spektraldeterminanten zwar die *richtigen* Objekte zur Untersuchung der Spektren hyperbolischer dynamischer Systeme sind, daß sie aber nicht Zeta-Funktionen genannt werden sollten, weil sie keine Euler-Produktformel (D.3.1) für Zeta-Funktionen erfüllen.

Sowohl in 8.9.5, wie auch in 8.10.6 findet sich im Nenner der Exponentialfunktion die Determinante $|\det(1 - M^r_p)|$ mit der sogenannten Monodromie-Matrix $M^r_p := J^r_p$ (Dimension $d := m$) , bzw. $M^r_p := J^r_{\perp,p}$ (Dimension $d := m - 1$). Man kann für die Bestimmung der Determinante $|\det(1 - M^r_p)|$ im Weiteren ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, daß M_p, bzw. M^r_p, eine symmetrische Matrix ist, denn andernfalls kann man ja übergehen zu

$$\begin{aligned} |\det(1 - M_p)| &= |\det[(1 - M_p)^T (1 - M_p)]|^{\frac{1}{2}} = |\det[(1 - M^T_p - M_p + M^T_p M_p)]|^{\frac{1}{2}} \\ &= |\det(1 - \tilde{M}_p)|^{\frac{1}{2}} \,, \end{aligned} \tag{8.11.1}$$

mit der symmetrischen Matrix mit $\tilde{M}_p := M^T_p + M_p - M^T_p M_p$.

Seien $\lambda_{p,i}$ die Eigenwerte der Monodromie-Matrix M_p eines Primzyklus p. Bei einem hyperbolischen System gibt es jetzt nur expandierende Eigenwerte $|\lambda_{p,e,i}| > 1$ und kontrahierende Eigenwerte $|\lambda_{p,c,i}| < 1$ (der marginale Eigenwert $\lambda_{\|} = 1$ in Richtung des Flusses wurde ja bereits durch Integration explizit berücksichtigt). Dann folgt:

$$
\begin{aligned}
|\det(1 - M_p^r)| &= |\prod_{i=1}^{d}(1 - \lambda_{p,i}^r)| = |\prod_{i=1}^{d_e}(1 - \lambda_{p,e,i}^r)| \cdot |\prod_{i=1}^{d_c}(1 - \lambda_{p,c,i}^r)| \\
&= |\prod_{i=1}^{d_e} \lambda_{p,e,i}^r| \cdot |\prod_{i=1}^{d_e}(1 - \frac{1}{\lambda_{p,e,i}^r})| \cdot |\prod_{i=1}^{d_c}(1 - \lambda_{p,c,i}^r) \\
&=: |\lambda_p^r| \cdot |\prod_{i=1}^{d_e}(1 - \frac{1}{\lambda_{p,e,i}^r})| \cdot |\prod_{i=1}^{d_c}(1 - \lambda_{p,c,i}^r)\ .
\end{aligned}
\tag{8.11.2}
$$

Für große Zeiten, d.h. $r \to \infty$, gehen $\frac{1}{\lambda_{p,e,i}^r}$ und $\lambda_{p,c,i}^r$ gegen 0 und man kann $|\det(1-M_p^r)|$ also näherungsweise schreiben als das Produkt der expandierenden Eigenvektoren:

$$
|\det(1 - M_p^r)| \approx |\lambda_p^r| := \lim_{r\to\infty} |\prod_{i=1}^{d_e} \lambda_{p,e,i}^r|\ . \tag{8.11.3}
$$

Mit dieser Näherung erhalten wir für die Spektraldeterminante für iterierte Abbildungen 8.9.5:

$$
\begin{aligned}
&\det(1 - zL) \approx \exp\left(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^{n_p r}}{r} \frac{\exp(\beta r A_p)}{|\lambda_p|^r}\right) = \exp(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{t_p^r}{r}) \\
&\text{mit} \quad t_p := z^{n_p} \frac{\exp(\beta A_p)}{|\lambda_p|}\ .
\end{aligned}
\tag{8.11.4}
$$

Mit $\ln(1 - t_p) = -\sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} t_p^r$ kann man die r-Summation durchführen und erhält:

$$
\begin{aligned}
\zeta_{dyn}(z) &:= \exp(\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{t_p^r}{r}) = \exp(-\sum_p \ln(1 - t_p)) = \prod_p \frac{1}{(1 - t_p(z))} \\
&\approx \frac{1}{\det(1 - zL)}\ .
\end{aligned}
\tag{8.11.5}
$$

Dies ist nun tatsächlich eine Euler-Produktformel (D.3.1) für Zeta-Funktionen, wie wir sie ähnlich bereits von der topologischen Zeta-Funktion in 8.7.2 kennen.

Mit der gleichen Näherung erhalten wir für die Spektraldeterminante von Flüssen 8.10.6:

$$
\begin{aligned}
&\det(s - B) \approx \exp(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{\exp(\beta r A_p - s r T_p)}{|\lambda_p|^r}) = \exp(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{t_p^r}{r}) \\
&\text{mit} \quad t_p := \frac{\exp(\beta A_p - s T_p)}{|\lambda_p|}
\end{aligned}
\tag{8.11.6}
$$

und damit wiederum

$$\zeta_{dyn}(s) := \exp(\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{t_p^r}{r}) = \exp(-\sum_p \ln(1-t_p)) = \prod_p \frac{1}{(1-t_p(s))} \approx \frac{1}{\det(s-B)} . \tag{8.11.7}$$

Die gesuchten Eigenwerte von L, bzw. B sind Nullstellen der Spektraldeterminante und also für große Zeiten näherungsweise Pole der dynamischen Zeta-Funktion.

8.12 Periodische Orbit-Entwicklung in Quantensystemen

8.12.1 Energieabhängige Greenfunktion und Zustandsdichte

Die Frage nach Zeichen des Chaos in Quantensystemen ist eine recht anspruchsvolle Fragestellung, die mit den berühmten Arbeiten von Gutzwiller Anfang der 1970'er Jahre begann und auch heute noch ein aktuelles Forschungsgebiet darstellt, das immer wieder für Überraschungen und vertiefte Einsichten gut ist (siehe etwa das schöne Buch von Haake (2010), 3. Auflage!).

Einerseits folgen Quantensysteme einer deterministischen Zeitentwicklung mit einem unitären Operator $\hat{U}(t_f, t_i)$ (siehe 4.3.1), andererseits können wir viele klassisch chaotische Systeme gar nicht quantisieren, weil sie nichtintegrabel sind und es damit nicht genügend kanonisch konjugierte Variablen für eine Quantisierung gibt. Einen hochinteressanten Weg konnte Gutzwiller mit Beginn der 1970'er Jahre eröffnen, indem er die semiklassische Näherung des Pfadintegrals zum Ausgang nahm und Spektralfunktionen, wie etwa die Zustandsdichte, nach klassischen periodischen Bahnen entwickelte (Gutzwillersche Spurformeln). Wir folgen Cvitanović u. a. (2009) (Kapitel 33-34) und Haake (2010) (Kapitel 10).

Wenn man an quantenmechanischen Systemen nicht gerade Streuexperimente vornimmt, dann interessiert man sich hauptsächlich für das Energiespektrum - und wir nehmen der Einfachheit halber hier wieder ein explizit zeitunabhängiges Potential an. Als eine zentrale Größe des Systems soll im Folgenden die Zustandsdichte $\rho(E)$ betrachtet werden.

$$\rho(E) := \sum_n \delta(E - E_n) . \tag{8.12.1}$$

Um in der folgenden Fourier- (bzw. Laplace-) Transformation Konvergenz zu sichern, pflegen Physiker üblicherweise die Übergangsamplituden für $t > 0$ mit einem Dämpfungsfaktor $e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon t}$ mit kleinem ϵ zu versehen, d.h. $e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}$ statt $e^{\frac{i}{\hbar}Et}$ zu verwenden.

Dieser Dämpfungsfaktor kann im obigen Ausdruck der Zustandsdichte am einfachsten mittels der Plemjl-Formel (z.B. Greiner (1993), S.96 ff.) eingeführt werden ($\epsilon > 0$):

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = \frac{x}{x^2+\epsilon^2} \mp i\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2} \quad \xrightarrow[\epsilon\to 0]{} \quad \mathrm{P}(\frac{1}{x}) \mp i\pi\delta(x) \quad \text{(im Distributionssinn)}\ , \tag{8.12.2}$$

da $\mathrm{P}(\frac{1}{x})$ und $\delta(x)$ reell sind, folgt

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0} -\frac{1}{\pi}\Im(\frac{1}{x+i\epsilon})\ . \tag{8.12.3}$$

Damit erhalten wir für die Zustandsdichte für kleines ϵ und mit dem Feynman-Propagator aus 4.3.6 (siehe auch 4.3.4):

$$\begin{aligned}
\rho(E) &= \sum_n \delta(E-E_n) \approx -\frac{1}{\pi}\Im[\sum_n \frac{1}{E-E_n+i\epsilon}] = \frac{1}{\pi}\Im[\sum_n \int_0^\infty dt\,\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(E-E_n+i\epsilon)t}] \\
&= \frac{1}{\pi}\Im[\int_0^\infty dt\,\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}] = \frac{1}{\pi}\Im[\int_0^\infty dt\,\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}\,\mathrm{Sp}(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t})] \\
&= \frac{1}{\pi}\Im[\int_0^\infty dt\,\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}Et}e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon t}\,\mathrm{Sp}(U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0))] \\
&= \frac{1}{\pi}\Im[\mathrm{Sp}\int_0^\infty dt\,\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,U_R(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)]\ ,
\end{aligned} \tag{8.12.4}$$

mit dem *retardierten* Feynman-Propagator

$$U_R(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0) = e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon t}\Theta(t)U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)\ . \tag{8.12.5}$$

Der Feynman-Propagator $U_R(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$ ist die Orts- und Zeit-abhängige retardierte Greenfunktion der Schrödingergleichung, $G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)$ die entsprechende Energie-abhängige Greenfunktion:

$$\begin{aligned}
G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) &:= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\,e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,U_R(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0) \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt\,e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}\,U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)\ .
\end{aligned} \tag{8.12.6}$$

Da nach Voraussetzung die Hamilton-Funktion $H(\vec{p},\vec{q})$ keine explizite Zeitabhängigkeit hat, d.h. Energieerhaltung gilt, ist $G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)$ tatsächlich eine Greenfunktion der zeitunabhängigen Schrödingergleichung, denn mit einer partiellen Integration und $[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\vec{p}_f,\vec{q}_f)]\,U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0) = 0$ (siehe 4.3.2) ergibt sich

$$[E-H(\vec{p}_f,\vec{q}_f)]\,G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\,[E-H(\vec{p}_f,\vec{q}_f)]\,e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,U_R(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\vec{p}_f,\vec{q}_f)]\,e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,\Theta(t)U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,[+i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\vec{p}_f,\vec{q}_f)]\,\Theta(t)U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,i\hbar\delta(t)\,U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$$

$$-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,\Theta(t)[+i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\vec{p}_f,\vec{q}_f)]U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$$

$$= U(\vec{q}_f,0,\vec{q}_i,0) + 0 = \delta(\vec{q}_f - \vec{q}_i)\ .$$

Weiter gilt für $G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)$ mit 8.12.4 die folgende Spektraldarstellung:

$$\mathrm{Sp}\,G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) = \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} \quad \Rightarrow \tag{8.12.7}$$

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi}\Im[\mathrm{Sp}\,G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)]\ . \tag{8.12.8}$$

Nebenbemerkung: Gelegentlich sieht man in der Literatur auch die Darstellung

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi\hbar}\Im[\mathrm{Sp}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,ie^{\frac{i}{\hbar}Et}\,U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)\,]\ ,$$

wobei man aber berücksichtigen muß, daß mit $U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$ hier tatsächlich implizit der *kausale* Feynman-Propagator $U_K(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$ gemeint ist:

$$U_K(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0) = e^{\frac{1}{\hbar}\epsilon t}\Theta(-t)U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0) + e^{-\frac{1}{\hbar}\epsilon t}\Theta(t)U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)\ .$$

Wenn $U(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0) = U(\vec{q}_f,-t,\vec{q}_i,0)$ ist fallen beide Definitionen zusammen.

Wir setzen den semiklassischen Feynman-Propagator aus 4.12.3 in 8.12.6, bzw. 8.12.8 ein, wobei wir statt $S(\vec{q}_f,t,\vec{q}_i,0)$ jetzt kürzer $S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t)$ schreiben. Die Indizes in $q_{f,k}$, bzw. $q_{i,l}$ bezeichnen wie üblich die k-te, bzw. l-te Komponente der Vektoren $\vec{q}_f$ (Bahn-Endpunkt) und $\vec{q}_i$ (Bahn-Anfangspunkt).

$$G(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) = -(\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{n}{2}}\int\limits_{0}^{\infty} dt\,\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{q}_{cl})}\cdot|\det(\frac{-\partial^2 S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}})|^{\frac{1}{2}}\cdot e^{-\nu(\vec{q}_{cl})\frac{\pi}{2}}\ , \tag{8.12.9}$$

Auch dieses Zeit-Integral soll für den semiklassischen Fall ($\hbar \to 0$) mit der Methode der *stationären Phase* (siehe I.4) weiterbearbeitet werden. Allerdings müssen wir hier zusätzlich zu den Lösungen der stationären Phase auch noch den Randterm des Integrals bei $t = 0$ separat berücksichtigen, denn für kleine Werte von t ergibt $e^{\frac{i}{\hbar}Et}$ keinen schnell fluktuierenden Faktor mehr. Wenn man die asymptotischen Entwicklungen der stationären Phase Methode I.2.5 und I.4.3 zusammenfaßt, so ergibt sich:

$$\int_0^\infty dt\, A(t)\, e^{is\phi(t)} \approx \text{Randterm } + \sum_\gamma \text{stationäre Phase-Terme an den Stellen } c_\gamma$$

$$= \frac{A(t)}{is\dot{\phi}(t)}\, e^{is\phi(t)}\Big|_0^\infty + \sum_\gamma A(c_\gamma)\, e^{is\phi(c_\gamma)}\, \Big(\frac{2\pi i}{s\,\ddot{\phi}(c_\gamma)}\Big)^{\frac{1}{2}} \,. \tag{8.12.10}$$

Diese beiden Beiträge zur Greenfunktion $G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) = G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) + G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ werden wir im folgenden separat betrachten. Aus dem ersten Term $G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ folgt die Thomas-Fermi-Zustandsdichte $\rho_0(E)$, der zweite Term $G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ enthält die Quantenfluktuationen in semiklassischer Näherung und führt zur Zustandsdichte $\rho_{osc}(E)$, die als eine der Gutzwillerschen Spurformeln bekannt ist.

8.12.2 Thomas-Fermi-Zustandsdichte

Wir wollen hier den Randterm $\mathrm{Sp}(G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E))$ berechnen. Zunächst einmal gilt für $\mathrm{Sp}(G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E))$ mit 8.12.9:

$$\mathrm{Sp}(G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) = -\mathrm{Sp}\int_0^\infty dt\, \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \cdot (e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t})$$

$$= -\int dq^n \int_0^\infty dt\, \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}\, \langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q}\rangle \,. \tag{8.12.11}$$

In 8.12.9 sind wir vom Feynman-Propagator $\langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q}\rangle$ zum semiklassischen Feynman-Propagator $\langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q}\rangle_{sc}$ (4.12.3) übergegangen und haben so die Phase $\phi(t) := \frac{1}{\hbar}(Et + S(\vec{q}_{cl}) + i\epsilon t)$ erhalten. Für die Zeit-Ableitung der Phase erhalten wir

$$\dot{\phi}(t) = \frac{1}{\hbar}(E + \frac{\partial}{\partial t} S(\vec{q}_{cl}(t)) + i\epsilon) \,. \tag{8.12.12}$$

Die klassische Bahn $\vec{q}_{cl}(t)$ ist eine Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) + \frac{\partial}{\partial t} S(\vec{q}(t)) = 0 \quad \text{ mit } p_k := \frac{\partial S}{\partial q_k} \,. \tag{8.12.13}$$

Wir ersparen uns im folgenden den Index von $\vec{q}_{cl}(t)$, da $\vec{q}(t)$ ab jetzt die Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung sein soll. Damit folgt für die Zeit-Ableitung der Phase

$$\dot{\phi}(t) = \frac{1}{\hbar}(E - H(\vec{q}, \vec{p}, t) + i\epsilon) \tag{8.12.14}$$

und mit 8.12.10 für die Greenfunktion $\mathrm{Sp}(G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E))$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sp}(G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) &= -\int dq^n \, \frac{i}{\hbar} \, \frac{e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}t}}{\frac{i}{\hbar}(E - H(\vec{q}, \vec{p}, t) + i\epsilon)} \, \langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q} \rangle_{sc} \Big|_0^\infty \\
&= \lim_{t \to 0} - \int dq^n \, \frac{-1}{(E - H(\vec{q}, \vec{p}, t) + i\epsilon)} \, \langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q} \rangle_{sc} \\
&= \lim_{t \to 0} \int dq^n \int dq_i^n \, \frac{\delta(\vec{q} - \vec{q}_i)}{(E - H(\vec{q}, \vec{p}, t) + i\epsilon)} \, \langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q}_i \rangle_{sc} \\
&= \lim_{t \to 0} \int dq^n \int dq_i^n \int dp^n \, \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \cdot \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{q} - \vec{q}_i)}}{(E - H(\vec{q}, \vec{p}, t) + i\epsilon)} \, \langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q}_i \rangle_{sc} .
\end{aligned}$$

Nun ist

$$\lim_{t \to 0} \langle \vec{q} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \mid \vec{q}_i \rangle_{sc} \approx \delta(\vec{q} - \vec{q}_i) \; ,$$

und damit folgt

$$\mathrm{Sp}\, G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) = \int dq^n \int dp^n \, \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \cdot \frac{1}{(E - H(\vec{q}, \vec{p}, t) + i\epsilon)} \; . \tag{8.12.15}$$

und mit 8.12.2 und 8.12.8

$$\rho_0(E) = -\frac{1}{\pi} \Im[\mathrm{Sp}\, G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dq^n \int dp^n \, \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p}, t)) \; . \tag{8.12.16}$$

$\rho_0(E)$ ist die bekannte Thomas-Fermi-Zustandsdichte. DieTatsache, daß in der semiklassischen Näherung die Zustandsdichte gleich dem Volumen der Energieschale dividiert duch $(2\pi\hbar)^n$ ist heißt auch Weylsches Gesetz. Weyl hatte diesen Ausdruck bereits 1911 bei Untersuchungen zum asymptotischen Verhalten der Eigenwerte des Laplace-Operators auf einem beschränkten Gebiet mit Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen gefunden (mehr hierzu siehe etwa Arendt u. a. (2009)).

8.12.3 Gutzwillersche Spurformel

Jetzt soll der Anteil der Zustandsdichte aufgrund der Quantenfluktuationen $\rho_{sc}(E)$ mit Hilfe der stationären Phase Methode berechnet werden. Ausgangspunkt ist die Darstellung von $G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ in 8.12.9. Wir lassen ab jetzt der einfacheren Schreibweise halber in der Phase $\phi(t) := \frac{1}{\hbar}(Et + S(\vec{q}_{cl}) + i\epsilon t)$ den Dämpfungsterm $-\frac{1}{\hbar}\epsilon t$ weg und erhalten mit 8.12.10:

$$\begin{aligned}
G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) &= -\left(\frac{1}{2\pi i\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} \int_0^\infty dt \, \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E + i\epsilon)t} e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{q}_{cl})} \cdot \left| \det\left(\frac{-\partial^2 S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial q_{f,k} \partial q_{i,l}}\right) \right|^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\nu(\vec{q}_{cl})\frac{\pi}{2}} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2\pi i\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} \sum_\gamma e^{\frac{i}{\hbar}(Et^\gamma + S^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t^\gamma))}
\end{aligned}$$

$$\cdot \Big(\frac{2\pi i\hbar}{\ddot{S}^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma)}\Big)^{\frac{1}{2}} \Big|\det\Big(\frac{\partial^2 S^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}}\Big)\Big|^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\nu^\gamma \frac{\pi}{2}} \ .$$

$\ddot{S}^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma)$ auf dem Weg $\vec{q}_\gamma$ von $\vec{q}_i$ nach $\vec{q}_f$ könnte nun auch ein negatives Vorzeichen haben. Dieses faßt man mit dem (wegabhängigen) Morse-Index zusammen und spricht vom (wegabhängigen) Maslov-Index:

$$\mu^\gamma := \nu^\gamma + \frac{1}{2}(1 - \mathrm{sign}(\ddot{S}^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma))) \ . \tag{8.12.17}$$

$$G_{osc}(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) = -\frac{i}{\hbar}\Big(\frac{1}{2\pi i\hbar}\Big)^{\frac{n-1}{2}} \sum_\gamma e^{\frac{i}{\hbar}(Et^\gamma + S^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma))}$$
$$\cdot \Big|\frac{1}{\ddot{S}^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma)} \det\Big(\frac{\partial^2 S^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}}\Big)\Big|^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\mu^\gamma \frac{\pi}{2}} \ . \tag{8.12.18}$$

Der extremale Pfad $\vec{q}_\gamma$ mit der Bahnzeit $t^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)$ zwischen $\vec{q}_i$ und $\vec{q}_f$ ist eine Lösung der Bewegungsgleichung:

$$\frac{\partial S^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t^\gamma)}{\partial t} + E = 0 \ . \tag{8.12.19}$$

Die Bahnzeit $t^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)$ des extremalen Pfades $\vec{q}_\gamma$ zwischen $\vec{q}_i$ und $\vec{q}_f$ hängt also über die Bewegungsgleichung von der Energie E ab. Wir gehen jetzt in der Wirkung $S(\vec{q}_{cl}){:=}S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t)$ mit einer Legendre-Transformation von der Variablen t zur Variablen E über:

$$S_E(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) := S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t) + Et \quad \text{mit} \quad t = t(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) \ , \tag{8.12.20}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t) = -E \ , \tag{8.12.21}$$

$$\frac{\partial S_E(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E} = \frac{\partial S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial t(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E} + t + E\frac{\partial t(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E} = t \ . \tag{8.12.22}$$

Für die kanonischen Impulse ergibt sich

$$S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t) = \int_0^t dt\, L(\vec{q},\dot{\vec{q}},t) = \int_0^t dt\,(\vec{p}\dot{\vec{q}} - H(\vec{q},\vec{p},t)) = \int_{\vec{q}_i}^{\vec{q}_f} d\vec{q}\,\vec{p} - Et \quad \Rightarrow \tag{8.12.23}$$

$$\frac{\partial S_E(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{f,k}} = \frac{\partial S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t)}{\partial q_{f,k}} + \frac{\partial S(\vec{q}_f,\vec{q}_i,t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial t(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{f,k}} + E\frac{\partial t(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{f,k}}$$

$$= \frac{\partial S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial q_{f,k}} = p_k(q_f) \quad \text{und ebenso} \tag{8.12.24}$$

$$\frac{\partial S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,k}} = \frac{\partial S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial q_{i,k}} = -p_k(q_i)\ . \tag{8.12.25}$$

Für die 2. Orts-Ableitung von S ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial q_{i,l}}(\frac{\partial S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial q_{f,k}}) = \frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,l}\partial q_{f,k}} + \frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E \partial q_{f,k}} \cdot \frac{\partial E}{\partial q_{i,l}}\ . \tag{8.12.26}$$

Hierbei ist $\frac{\partial E}{\partial q_{i,l}}$ bei konstantem $\vec{q}_f$ und konstantem t zu verstehen, d.h. also bei

$$0 = \frac{dt(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{dq_{i,l}} = \frac{\partial t(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,l}} + \frac{\partial t(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial q_{i,l}} \quad \Rightarrow \tag{8.12.27}$$

$$\frac{\partial E}{\partial q_{i,l}} = -\frac{\partial t(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,l}} \cdot (\frac{\partial t(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E})^{-1} = -\frac{\partial S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,l}\partial E} \cdot (\frac{\partial S_E^2(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E^2})^{-1}\ . \tag{8.12.28}$$

Und damit ergibt sich für 8.12.26

$$\frac{\partial^2 S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}} = \frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,l}\partial q_{f,k}} - \frac{\frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E \partial q_{f,k}} \cdot \frac{\partial S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,l}\partial E}}{\frac{\partial S_E^2(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E^2}}\ . \tag{8.12.29}$$

Für die 2. Zeit-Ableitungen von S folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial t} = -\frac{\partial E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial t} = -(\frac{\partial t(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E})^{-1} = -(\frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E^2})^{-1}\ . \tag{8.12.30}$$

Mit diesen Ergebnissen für die 2. Ableitungen von $S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)$ gehen wir jetzt in der Amplitude von 8.12.18 nach $S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ über:

$$\frac{\frac{\partial^2 S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}}}{\frac{\partial^2 S(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t)}{\partial t^2}} = -\frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E^2} \cdot \frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}} + \frac{\partial^2 S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{f,k}\partial E} \cdot \frac{\partial S_E(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E \partial q_{i,l}}\ , \tag{8.12.31}$$

und

$$A(S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) := |\frac{1}{\ddot{S}^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t^\gamma)} \det(\frac{\partial^2 S^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, t^\gamma)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}})|^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{f,k}\partial q_{i,l}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{f,k}\partial E} \\ \frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E \partial q_{i,l}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E^2} \end{pmatrix} \right|^{\frac{1}{2}} \tag{8.12.32}$$

und erhalten $G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ als Funktion der klassischen Wirkung $S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ und des bahnabhängigen topologischen Maslov-Index μ^γ:

$$G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar}\right)^{\frac{n-1}{2}} \sum_\gamma e^{\frac{i}{\hbar}S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)} \cdot A(S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) \cdot e^{-\mu^\gamma \frac{\pi}{2}} \; . \tag{8.12.33}$$

Im nächsten und letzten Schritt soll das Spurintegral $\mathrm{Sp}\, G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ ausgewertet werden, was zu einer Summe über alle Zyklen (periodische Orbits) führt. An dieser Stelle muß aber berücksichtigt werden, daß eine Bahn immer eine marginale Richtung mit einem Eigenwert der Größe $\lambda_\parallel = 1$ in Richtung der Bahn hat (siehe 8.5.6) und die Integration in dieser Richtung separat zu behandeln ist. In Richtung senkrecht zur Bahn gehen wir wieder davon aus, daß das System *hyperbolisch* ist, d.h. daß alle Eigenwerte $|\lambda_i| < 1$ sind (kontrahierende Richtungen), oder $|\lambda_i| > 1$ sind (expandierende Richtungen) - siehe auch die Diskussion in 8.10.

Wir führen zunächst für jede Bahn $\vec{q}^\gamma(t)$ ein bahnabhängiges lokales Koordinatensystem ein, indem wir an jeder Position $\vec{q}^\gamma$ die Komponente q_1^γ in die Bewegungsrichtung $q_\parallel$ drehen. Durch diese orthogonale Transformation bleiben das Spurintegral und die Determinante $A(S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E))$ unverändert.

$$\vec{q}^\gamma = (q_1, q_2, \ldots, q_n) \to \vec{q}^\gamma := (q_\parallel, q_{\perp 1}, q_{\perp 2}, \ldots, q_{\perp n-1}) \quad \Rightarrow \tag{8.12.34}$$

$$\dot{\vec{q}}^\gamma = (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots, \dot{q}_n) \to \dot{\vec{q}}^\gamma = (\dot{q}_\parallel, 0, 0, \ldots, 0) \; . \tag{8.12.35}$$

Für die Determinante ergibt sich

$$\begin{aligned} A(S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) &= \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\parallel f}\partial q_{\parallel i}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\parallel f}\partial q_{\perp i,l}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\parallel f}\partial E} \\ \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\perp f,k}\partial q_{\parallel i}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\perp f,k}\partial q_{\perp i,l}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\perp f,k}\partial E} \\ \frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E\partial q_{\parallel i}} & \frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E\partial q_{\perp i,l}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E^2} \end{pmatrix} \right|^{\frac{1}{2}} \\ &= \left| \det \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\parallel f}\partial E} \\ 0 & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\perp f,k}\partial q_{\perp i,l}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial q_{\perp f,k}\partial E} \\ \frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E\partial q_{\parallel i}} & \frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E\partial q_{\perp i,l}} & \frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E)}{\partial E^2} \end{pmatrix} \right|^{\frac{1}{2}} \; , \end{aligned} \tag{8.12.36}$$

denn für eine vorgegebene Energie E bei festem Anfangspunkt $\vec{q}_i$ und festem Endpunkt $\vec{q}_f$, und damit festgelegtem $q^\gamma(t)$, ist $H(\vec{q}, \vec{p}) = H(\vec{q}, \frac{\partial S}{\partial \vec{q}}) = E$ und damit

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial E}{\partial q_{i,l}} &= \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}_f)}{\partial q_{i,l}} = \sum_k \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}_f)}{\partial p_{f,k}} \frac{\partial p_{f,k}}{\partial q_{i,l}} \\ &= \sum_k \dot{q}_{f,k} \, \frac{\partial^2 S_E^\gamma}{\partial q_{i,l}\partial q_{f,k}} = \dot{q}_{\parallel f} \, \frac{\partial^2 S_E^\gamma}{\partial q_{i,l}\partial q_{\parallel f}} \quad \text{und} \end{aligned}$$

$$0 = \frac{\partial E}{\partial q_{f,k}} = \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}_i)}{\partial q_{f,k}} = \sum_l \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}_i)}{\partial p_{i,l}} \frac{\partial p_{i,l}}{\partial q_{f,k}}$$

$$= \sum_l \dot{q}_{i,l} \frac{(-\partial^2 S_E^\gamma)}{\partial q_{f,k} \partial q_{i,l}} = \dot{q}_{\parallel i} \frac{(-\partial^2 S_E^\gamma)}{\partial q_{f,k} \partial q_{\parallel i}} \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2 S_E^\gamma}{\partial q_{i,l} \partial q_{\parallel f}} = 0 \; , \quad \frac{\partial^2 S_E^\gamma}{\partial q_{f,k} \partial q_{\parallel i}} = 0 \; , \tag{8.12.37}$$

sofern $\dot{q}_{\parallel f} \neq 0$ und $\dot{q}_{\parallel i} \neq 0$ sind, d.h. sofern $\vec{q}_i$ und $\vec{q}_f$ keine Wendepunkte sind. Da wir bei der folgenden Spurbildung über geschlossene periodische Bahnen mit $\vec{q}_i = \vec{q}_f$ integrieren, können wir als als Anfangs-Endpunkt der Bahn einen beliebigen Punkt $\vec{q}$ der Bahn nehmen, der gerade kein Wendepunkt ist. Für die Beiträge in der rechten oberen und linken unteren Ecke der Determinante ergibt sich

$$\frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{\parallel f} \partial E} = \frac{\partial t}{\partial q_{\parallel f}} = \frac{1}{\dot{q}_f^\gamma} \quad \text{und} \quad \frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial E \partial q_{\parallel i}} = \frac{\partial t}{\partial q_{\parallel i}} = \frac{1}{\dot{q}_i^\gamma} \; . \tag{8.12.38}$$

Damit und mit $\frac{\partial q_{\perp i,l}}{\partial q_{\perp f,k}} = 0$ (denn $\vec{q}_{\perp f}$ und $\vec{q}_{\perp i}$ sind voneinander unabhängig), ergibt sich für die Amplitude

$$A(S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) = (\frac{1}{\dot{q}_f^\gamma \dot{q}_i^\gamma})^{\frac{1}{2}} \left| \det \left(\frac{\partial^2 S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{\perp f,k} \partial q_{\perp i,l}} \right) \right|^{\frac{1}{2}} = (\frac{1}{\dot{q}_f^\gamma \dot{q}_i^\gamma})^{\frac{1}{2}} \left| \det \left(\frac{-\partial p_{\perp i,l}^\gamma}{\partial q_{\perp f,k}^\gamma} \right) \right|^{\frac{1}{2}}$$

$$= (\frac{1}{\dot{q}_f^\gamma \dot{q}_i^\gamma})^{\frac{1}{2}} \left| \det \begin{pmatrix} 1 & \frac{\partial p_{\perp i,l}^\gamma}{\partial q_{\perp i,k}^\gamma} \\ 0 & \frac{-\partial p_{\perp i,l}^\gamma}{\partial q_{\perp f,k}^\gamma} \end{pmatrix} \right|^{\frac{1}{2}} = (\frac{1}{\dot{q}_f^\gamma \dot{q}_i^\gamma})^{\frac{1}{2}} \left| \det \left(\frac{\partial(\vec{q}_{\perp i}^\gamma \, , \, \vec{p}_{\perp i}^\gamma)}{\partial(\vec{q}_{\perp i}^\gamma \, , \, \vec{q}_{\perp f}^\gamma)} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \; , \tag{8.12.39}$$

Für $G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ in 8.12.33 ist jetzt das Spurintegral $\int dq^n$ zu berechnen ($\vec{q} := \vec{q}_i = \vec{q}_f$):

$$\mathrm{Sp}\, G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) = -\frac{i}{\hbar} (\frac{1}{2\pi i \hbar})^{\frac{n-1}{2}} \sum_\gamma \int dq_\parallel \frac{1}{|\dot{q}_\parallel|} \int dq_\perp^{n-1} \, e^{\frac{i}{\hbar} S_E^\gamma(\vec{q}, \vec{q}, E)}$$

$$\cdot \left| \det \left(\frac{\partial(\vec{q}_{\perp i}^\gamma \, , \, \vec{p}_{\perp i}^\gamma)}{\partial(\vec{q}_{\perp i}^\gamma \, , \, \vec{q}_{\perp f}^\gamma)} \right) \right|^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp,f} = \vec{q}_{\perp,i}} \cdot e^{-\mu^\gamma \frac{\pi}{2}} \; . \tag{8.12.40}$$

Für das Integral $\int dq^n = \int dq_\parallel \int dq_\perp^{n-1}$ soll erneut die Methode der stationären Phase angewendet werden. Zunächst erhalten wir als notwendige Bedingung für eine stationäre Phase von $e^{\frac{i}{\hbar} S_E^\gamma(\vec{q}, \vec{q}, E)}$

$$(\frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{f,k}} + \frac{\partial S_E^\gamma(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)}{\partial q_{i,k}})_{\vec{q} = \vec{q}_f = \vec{q}_i} = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\vec{p}_f^{\gamma}(\vec{q},\vec{q},E) - \vec{p}_i^{\gamma}(\vec{q},\vec{q},E) = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{p}_f^{\gamma}(\vec{q},\vec{q},E) = \vec{p}_i^{\gamma}(\vec{q},\vec{q},E)\ . \tag{8.12.41}$$

Das heißt, zur Spur tragen nur die zyklischen Bahnen im *vollen* Phasenraum bei:

$$(\vec{q}^{\gamma},\vec{p}^{\gamma}) := (\vec{q}_f^{\gamma},\vec{p}_f^{\gamma}) = (\vec{q}_i^{\gamma},\vec{p}_i^{\gamma}) \tag{8.12.42}$$

und damit ist $S_E^{\gamma}(\vec{q},\vec{q},E)$ als die Wirkung über einen oder mehrere Umläufe von $\vec{q}_i^{\gamma} = \vec{q}^{\gamma}$ nach $\vec{q}_f^{\gamma} = \vec{q}^{\gamma}$ auf der zyklischen Bahn $\vec{q}^{\gamma}(t)$ zu verstehen und damit unabhängig vom Anfangs-/Endpunkt auf der Bahn.

Das verbleibende Integral $\int dq_{\perp}^{n-1}$ schreiben wir als

$$\int dq_{\perp}^{n-1} = \int\limits_{q_{\perp i,1}}^{q_{\perp f,1}} dq_{\perp 1} \int\limits_{q_{\perp i,2}}^{q_{\perp f,2}} dq_{\perp 2} \cdots \int\limits_{q_{\perp i,n-1}}^{q_{\perp f,n-1}} dq_{\perp n-1}$$

mit $q_{\perp i,k} < 0 < q_{\perp f,k}$ für $k \in 1,\dots,n-1$. Dieses Integral soll jetzt explizit mit der Methode der stationären Phase ausgewertet werden, wobei $S_E^{\gamma}(\vec{q},\vec{q},E)$ wie üblich um den extremalen Punkt bei $(q_{\perp i,1}, q_{\perp i,2},\dots,q_{\perp i,n-1}) = \vec{0}$ entwickelt wird:

$$\begin{aligned} S_E^{\gamma}(\vec{q},\vec{q},E) &= S_E^{\gamma}(q_{\|},\vec{q}_{\perp},q_{\|},\vec{q}_{\perp},E) = S_E^{\gamma}(q_{\|},0,q_{\|},0,E) \\ &\quad + \frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{n-1} (\frac{\partial}{\partial q_{\perp f,k}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp i,l}})^2 S_E^{\gamma}(q_{\|},\vec{q}_{\perp f},q_{\|},\vec{q}_{\perp i},E)\bigg|_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0} q_{\perp,k}q_{\perp,l}\ . \end{aligned} \tag{8.12.43}$$

Implizit setzt diese Konstruktion natürlich die Hyperbolizität voraus, also daß sich in unserem schlauchartigen Integrationsbereich $\int dq_{\perp}^{n-1}$ eben nur die *eine* Bahn $\vec{q}^{\gamma}(t)$ befinden möge. Damit erhalten wir für $\rho(E)$

$$\begin{aligned} \mathrm{Sp}\, G_{osc}(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E) &= -\frac{i}{\hbar}(\frac{1}{2\pi i\hbar})^{\frac{n-1}{2}} \sum_{\gamma} \oint dq_{\|}\, \frac{1}{|\dot{q}_{\|}|}\, e^{\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma}(q_{\|},0,q_{\|},0,E)} \\ &\quad \cdot (2\pi i\hbar)^{\frac{n-1}{2}} \left(\det\left((\frac{\partial}{\partial q_{\perp f,k}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp i,l}})^2 S_E^{\gamma}(q_{\|},\vec{q}_{\perp f},q_{\|},\vec{q}_{\perp i},E)\bigg|_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0}\right)\right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot \left|\det\left(\frac{\partial(\vec{q}_{\perp i}^{\gamma}\,,\,\vec{p}_{\perp i}^{\gamma})}{\partial(\vec{q}_{\perp i}^{\gamma}\,,\,\vec{q}_{\perp f}^{\gamma})}\right)\right|^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}} \cdot e^{-\mu^{\gamma}\frac{\pi}{2}}\ . \end{aligned} \tag{8.12.44}$$

Ein etwaiges negatives Vorzeichen der neuen Determinante aus der stationären Phase Methode der Spurberechnung addieren wir zum Maslov-Index μ^{γ} hinzu:

$$\mu_{Sp}^{\gamma} := \frac{1}{2}(1 - \mathrm{sign}(\det\left((\frac{\partial}{\partial q_{\perp f,k}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp i,l}})^2 S_E^{\gamma}(q_{\|},\vec{q}_{\perp f},q_{\|},\vec{q}_{\perp i},E)\bigg|_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0}\right)))\ , \tag{8.12.45}$$

$$\mu_{ges}^{\gamma} := \mu^{\gamma} + \mu_{Sp}^{\gamma} \; . \tag{8.12.46}$$

Wie schon oben bemerkt, ist $S_E^{\gamma}(q_{\|}, 0, q_{\|}, 0, E)$ vom Anfangs-/Endpunkt $q_{\|}$ unabhängig und hängt für eine feste Energie E nur von der Bahn γ ab:

$$S_E^{\gamma} := S_E^{\gamma}(q_{\|}, 0, q_{\|}, 0, E) \; . \tag{8.12.47}$$

Ebenso ist der Maslov-Index μ^{γ} unabhängig von Anfangs-/Endpunkt $q_{\|}$ und hängt nur von der Bahn γ ab. Wir werden jetzt sehen, daß auch das Produkt der Determinanten vom Anfangs-/Endpunkt $q_{\|}$ unabhängig ist und damit dann auch der Gesamt-Maslov-Index μ_{ges}^{γ}.

Zunächst schreiben wir die Determinante aus der stationären Phase Methode der Spurberechnung etwas um:

$$\begin{aligned}
D(S_E^{\gamma}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) &:= \left| \det \left((\frac{\partial}{\partial q_{\perp f,k}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp i,l}})^2 S_E^{\gamma}(q_{\|}, \vec{q}_{\perp f}, q_{\|}, \vec{q}_{\perp i}, E) \right) \right|^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f} = \vec{q}_{\perp i} = 0} \\
&= \left| \det \left((\frac{\partial^2}{\partial q_{\perp f,k} \partial q_{\perp f,l}} + \frac{\partial^2}{\partial q_{\perp f,k} \partial q_{\perp i,l}} + \frac{\partial^2}{\partial q_{\perp i,k} \partial q_{\perp f,l}} + \frac{\partial^2}{\partial q_{\perp i,k} \partial q_{\perp i,l}}) \right.\right. \\
&\qquad \left.\left. \cdot \; S_E^{\gamma}(q_{\|}, \vec{q}_{\perp f}, q_{\|}, \vec{q}_{\perp i}, E)^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f} = \vec{q}_{\perp i} = 0} \right) \right| \\
&= \left| \det \left(\frac{\partial p_{\perp f,k}^{\gamma}}{\partial q_{\perp f,l}} - \frac{\partial p_{\perp i,k}^{\gamma}}{\partial q_{\perp f,l}} + \frac{\partial p_{\perp f,k}^{\gamma}}{\partial q_{\perp i,l}} - \frac{\partial p_{\perp i,k}^{\gamma}}{\partial q_{\perp i,l}} \right) \right|^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f} = \vec{q}_{\perp i} = 0} \\
&= \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial (p_{\perp f,k}^{\gamma} - p_{\perp i,k}^{\gamma})}{\partial q_{\perp f,l}} & 1 \\ \frac{\partial (p_{\perp f,k}^{\gamma} - \partial p_{\perp i,k}^{\gamma})}{\partial q_{\perp i,l}} & -1 \end{pmatrix} \right|^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f} = \vec{q}_{\perp i} = 0} \\
&= \left| \det \left(\frac{\partial (\vec{p}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{p}_{\perp i}^{\gamma} \, , \, \vec{q}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{q}_{\perp i}^{\gamma})}{\partial (\vec{q}_{\perp f}^{\gamma} \, , \, \vec{q}_{\perp i}^{\gamma})} \right) \right|^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f} = \vec{q}_{\perp i} = 0}
\end{aligned} \tag{8.12.48}$$

Dies setzen wir in 8.12.44 ein und erhalten

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sp}\, G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\gamma} e^{\frac{i}{\hbar} S_E^{\gamma}} \oint dq_{\|} \, \frac{1}{|\dot{q}_{\|}|} \left| \det \left(\frac{\partial (\vec{p}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{p}_{\perp i}^{\gamma} \, , \, \vec{q}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{q}_{\perp i}^{\gamma})}{\partial (\vec{q}_{\perp f}^{\gamma} \, , \, \vec{q}_{\perp i}^{\gamma})} \right) \right|^{-\frac{1}{2}}_{\substack{\vec{q}_{\perp f} = 0 \\ \vec{q}_{\perp i} = 0}} \\
&\qquad \cdot \left| \det \left(\frac{\partial (\vec{q}_{\perp i}^{\gamma} \, , \, \vec{p}_{\perp i}^{\gamma})}{\partial (\vec{q}_{\perp i}^{\gamma} \, , \, \vec{q}_{\perp f}^{\gamma})} \right) \right|^{\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f} = \vec{q}_{\perp i} = 0} \cdot e^{-\mu_{ges}^{\gamma} \frac{\pi}{2}} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\gamma} e^{\frac{i}{\hbar} S_E^{\gamma}} \oint dq_{\|} \, \frac{1}{|\dot{q}_{\|}|} \left| \det \left(\frac{\partial (\vec{p}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{p}_{\perp i}^{\gamma} \, , \, \vec{q}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{q}_{\perp i}^{\gamma})}{\partial (\vec{q}_{\perp i}^{\gamma} \, , \, \vec{p}_{\perp i}^{\gamma})} \right) \right|^{-\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f} = \vec{q}_{\perp i} = 0} \cdot e^{-\mu_{ges}^{\gamma} \frac{\pi}{2}}
\end{aligned}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\sum_{\gamma} e^{\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma}} \left|\det\left(\frac{\partial(\vec{q}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{q}_{\perp i}^{\gamma}\,,\,\vec{p}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{p}_{\perp i}^{\gamma})}{\partial(\vec{q}_{\perp i}^{\gamma}\,,\,\vec{p}_{\perp i}^{\gamma})}\right)\right|^{-\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0} \cdot e^{-\mu_{ges}^{\gamma}\frac{\pi}{2}} \oint dq_{\parallel}\,\frac{1}{|\dot{q}_{\parallel}|}\ .$$

Für das verbleibende Integral $\oint dq_{\parallel}\,\frac{1}{|\dot{q}_{\parallel}|}$ ergibt sich gerade die Zeit T^{γ_p} für einen einfachen Umlauf auf der geschlossenen Bahn γ_p (hier mit γ_p bezeichnet, da γ ja auch mehrfache geschlossene Umläufe einschließt). Die Determinante können wir noch kompakter schreiben, wenn wir zur Phasenraumkoordinate $\vec{x} := (\vec{q}, \vec{p})$ übergehen:

$$\begin{aligned}\mathrm{Sp}\, G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) &= -\frac{i}{\hbar}\sum_{\gamma} T^{\gamma} e^{\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma} - \mu_{ges}^{\gamma}\frac{\pi}{2}} \left|\det\left(\frac{\partial(\vec{x}_{\perp f}^{\gamma} - \vec{x}_{\perp i}^{\gamma})}{\partial(\vec{x}_{\perp i}^{\gamma})}\right)\right|^{-\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\sum_{\gamma} T^{\gamma} e^{\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma} - \mu_{ges}^{\gamma}\frac{\pi}{2}} \left|\det\left(\hat{J}_{\perp}^{\gamma} - \hat{1}\right)\right|^{-\frac{1}{2}}_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0}\ , \end{aligned} \qquad (8.12.49)$$

mit der zur Bahn orthogonalen Jacobi-Matrix $\hat{J}_{\perp}^{\gamma}$

$$\hat{J}_{\perp}^{\gamma} := \left.\frac{\partial(\vec{x}_{\perp f}^{\gamma})}{\partial(\vec{x}_{\perp i}^{\gamma})}\right|_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0}\ . \qquad (8.12.50)$$

Diese Jacobi-Matrix $\hat{J}_{\perp}^{\gamma}$ wird auch als Monodromie-Matrix $\hat{M}^{\gamma}$ bezeichnet. Nun kann die geschlossene Bahn γ nicht nur einmal, sondern auch mehrfach durchlaufen werden. Daher schreiben wir jetzt die Summe über alle geschlossenen Bahnen γ als eine Doppelsumme über alle verschiedenen geschlossenen Bahnen mit einem Umlauf γ_p (auch Prim-Bahnen genannt) und über alle r-fachen Bahnwiederholungen, also $\sum_{\gamma} = \sum_{\gamma_p}\sum_r$. Der Gesamt-Maslov-Index μ_{ges}^{γ} zählt die Vorzeichenwechsel der Determinante $\det\left(\hat{J}_{\perp}^{\gamma} - \hat{1}\right)_{\vec{q}_{\perp f}=\vec{q}_{\perp i}=0}$ auf dem Weg von $\vec{q}_i^{\gamma}$ nach $\vec{q}_f^{\gamma} = \vec{q}_i^{\gamma}$, ist also additiv bei Bahnwiederholungen. Die Jacobi-Matrix $\hat{J}_{\perp}^{\gamma}$ verhält sich multiplikativ bzgl. Teilstrecken, und damit auch Bahnwiederholungen, denn sei $\vec{x}_{\perp g}^{\gamma}$ ein Bahnpunkt zwischen $\vec{x}_{\perp i}^{\gamma}$ und $\vec{x}_{\perp f}^{\gamma}$, dann gilt

$$\frac{\partial(\vec{x}_{\perp f}^{\gamma})}{\partial(\vec{x}_{\perp i}^{\gamma})} = \frac{\partial(\vec{x}_{\perp g}^{\gamma})}{\partial(\vec{x}_{\perp i}^{\gamma})} \cdot \frac{\partial(\vec{x}_{\perp f}^{\gamma})}{\partial(\vec{x}_{\perp g}^{\gamma})}\ .$$

Damit schreibt sich die Gutzwiller-Spurformel für die Spur der Greenfunktion $G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ und die Zustandsdichte in der übersichtlichen Form

$$\mathrm{Sp}\, G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{\gamma_p} T^{\gamma_p} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p} - \mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r - \hat{1}\right)\right|}}\ . \qquad (8.12.51)$$

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi\hbar}\Re[\sum_{\gamma_p} T^{\gamma_p} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p} - \mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r - \hat{1}\right)\right|}}]\ . \qquad (8.12.52)$$

Das Energie-Spektrum läßt sich jetzt aus den Polen der Zustandsdichte $\rho(E)$ bestimmen.

Ein alternativer, deutlich kürzerer und sehr schöner Beweis der Gutzwiller-Spurformel auf der Grundlage kohärenter Zustände und symplektischer Geometrie wurde von Mehlig u. Wilkinson (2001) vorgestellt. Allerdings verbirgt sich bei diesem Ansatz die Komplexität des Problems in der semiklassischen Entwicklung der kohärenten Zustände und der symplektischen Darstellungen der Operatoren. Mehr zum Thema der Quantenmechanik im Phasenraum findet sich etwa bei Schleich (2001) (physikalische Darstellung) und bei de Gosson (2006) (mathematische Darstellung).

Wir haben Fragen der Konvergenz bei der obigen Ableitung der Gutzwiller-Spurformel nicht behandelt. Einerseits ist die stationäre Phase Methode ja nur eine asymptotische Entwicklung für $\hbar \to 0$. Andererseits zeigt sich bei genauerer Betrachtung, daß für viele Systeme die Gutzwiller-Spurformel durch eine exponentielle Zunahme von periodischen Bahnen γ_p mit der Bahnlänge divergiert. Dieses Problem konnte mit verschiedenen Methoden gelöst werden. So haben etwa Sieber u. Steiner (1990) verallgemeinerte, absolut konvergente Spurformeln hergeleitet. Eine andere Methode (konvergente Resummation langer Orbits) wurde von Berry und Keating entwickelt - mehr dazu im nächsten Unterkapitel.

Der Gutzwillersche Ansatz war und ist Ausgangspunkt zahlreicher Untersuchungen in verschiedensten physikalischen Systemen - siehe Gutzwiller (1990). Besonders zu erwähnen sind sicherlich die semiklassische quantenmechanische Behandlung von nichtintegrablen klassischen Systemen, die in ihren Spektren Spuren von klassisch chaotischem Verhalten zeigen. Auch die aktuellen Forschungen an mesoskopischen Systemen stützen sich häufig auf den Gutzwillerschen semiklassischen Ansatz. Mehr zu diesen interessanten Themen findet sich z.B. in Cvitanović u. a. (2009), Haake (2010), Brack u. Bhaduri (2003).

8.12.4 Spektraldeterminante

Wenn man mit semiklassischen Methoden das Energie-Spektrum eines Systems berechnen möchte, dann kann man wie oben gezeigt, die Zustandsdichte $\rho(E)$ aus der periodischen Orbit-Entwicklung 8.12.52 bestimmen und aus den Polen von $\rho(E)$ die Energieeigenwerte E_n. Eine andere Möglichkeit der Bestimmung des Energie-Spektrums ist es, die Nullstellen der Spektraldeterminante zu finden:

$$\det(E - \hat{H} + i\epsilon) = \prod_n (E - E_n + i\epsilon) \; . \tag{8.12.53}$$

Nun wird möglicherweise diese Determinante nicht konvergieren. Dann kann man aber versuchen, zu einer regularisierten Determinante mit den gleichen Nullstellen überzugehen. Sei also $A(\hat{H}, E)$ eine Regulator-Funktion, die für reelle E keine Nullstellen haben möge und mittels derer gelte:

$$\det(E - \hat{H} + i\epsilon)_{reg} := \det[(A(\hat{H}, E)) \cdot (E - \hat{H} + i\epsilon)] < \infty \; .$$

Die Determinante $\det(E - \hat{H} + i\epsilon)$ hängt nun mit $\operatorname{Sp} G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ zusammen:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dE}\ln(\det(E - \hat{H} + i\epsilon)) &= \frac{d}{dE}\ln(\prod_n (E - E_n + i\epsilon)) = \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} \\ &= \operatorname{Sp} G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) \quad \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\det(E - \hat{H} + i\epsilon)_{reg} = \det(A(\hat{H}, E)) \cdot \det(-\hat{H}) \cdot \exp(\int_0^E dE' \operatorname{Sp} G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E')) \ . \tag{8.12.54}$$

Die Spur der Greenfunktion $\operatorname{Sp}G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)$ setzt sich aus den beiden Beiträgen 8.12.15 und 8.12.51 zusammen:

$$\begin{aligned}\operatorname{Sp} G(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) &:= \operatorname{Sp} G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) + \operatorname{Sp} G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) \\ &= \Re(\operatorname{Sp} G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) + i\Im(\operatorname{Sp} G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) + \operatorname{Sp} G_{osc}(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E) \\ &= \Re(\operatorname{Sp} G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E)) - i\pi\rho_0(E) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\gamma_p} T^{\gamma_p} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma p} - \mu_{ges}^{\gamma p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r - \hat{1}\right)\right|}} \ .\end{aligned} \tag{8.12.55}$$

Möglicherweise konvergiert $\Re(\operatorname{Sp} G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E))$ nicht (siehe etwa Cvitanović u. a. (2009), S. 630), aber hierfür haben wir ja oben die Regulatorfunktion $A(\hat{H}, E)$ eingeführt! Damit ergibt sich für die regularisierte Spektraldeterminante:

$$\begin{aligned}\det(E - \hat{H} + i\epsilon)_{reg} &= \det(-A(\hat{H}, E) \cdot \hat{H}) \cdot \exp\int_0^E dE' \,[\Re(\operatorname{Sp} G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E')) \\ &\qquad - i\pi\rho_0(E') - \frac{i}{\hbar}\sum_{\gamma_p} T^{\gamma_p} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_{E'}^{\gamma p} - \mu_{ges}^{\gamma p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r - \hat{1}\right)\right|}}] \\ &= \det(-A(\hat{H}, E) \cdot \hat{H}) \cdot \exp\int_0^E dE' \,[\Re(\operatorname{Sp} G_0(\vec{q}_f, \vec{q}_i, E'))] \\ &\quad \cdot \exp(-i\pi N_0(E)) \cdot \exp(\int_0^E dE' \,[-\frac{i}{\hbar}\sum_{\gamma_p} T^{\gamma_p} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_{E'}^{\gamma p} - \mu_{ges}^{\gamma p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r - \hat{1}\right)\right|}}]) \ .\end{aligned}$$

Hierbei ergab die E'-Integration über die Zustandsdichte $\rho_0(E')$ gerade die integrierte Zustandsdiche $N_0(E)$, d.h. die Anzahl der Zustände bis zur Energie E. Als nächstes kann man im Term der periodischen Orbits die Integration über E' durchführen. Mit8.12.22 ergibt sich:

$$\frac{d}{dE}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}} = r\frac{i}{\hbar}\frac{dS_E^{\gamma_p}}{dE}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}}$$

$$- r\frac{\pi}{2}\frac{d\mu_{ges}^{\gamma_p}}{dE}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}} + e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}\frac{d}{dE}(\frac{1}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}})$$

$$= r\frac{i}{\hbar}\frac{dS_E^{\gamma_p}}{dE}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}} + \frac{1}{\hbar}O(\hbar)$$

$$= r\frac{i}{\hbar}T^{\gamma_p}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}} + \frac{1}{\hbar}O(\hbar)\ .$$

In der semiklassischen Näherung $\hbar \to 0$ können die $O(\hbar)$ Terme vernachlässigt werden und es folgt

$$\int_0^E dE'\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_{E'}^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}} = \frac{1}{r\frac{i}{\hbar}T^{\gamma_p}}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}}\ .$$

Damit ergibt sich die periodische Orbit-Entwicklung für die Spektraldeterminante

$$\begin{aligned}\det(E-\hat{H}+i\epsilon)_{reg} &= \det(-A(\hat{H},E)\cdot\hat{H})\cdot\exp\int_0^E dE'\,[\Re(\mathrm{Sp}\,G_0(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E'))] \\ &\quad\cdot e^{-i\pi N_0(E)}\cdot\exp[-\sum_{\gamma_p}\sum_{r=1}^{\infty}\frac{1}{r}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}}] \\ &=: B(E_n,E)\cdot e^{-i\pi N_0(E)}\cdot\exp[-\sum_{\gamma_p}\sum_{r=1}^{\infty}\frac{1}{r}\frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p}-\mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{\left|\det\left((\hat{M}^{\gamma_p})^r-\hat{1}\right)\right|}}]\ ,\end{aligned} \tag{8.12.56}$$

$$\text{mit}\quad B(E_n,E) := \det(-A(\hat{H},E)\cdot\hat{H})\cdot\exp\int_0^E dE'\,[\Re(\mathrm{Sp}\,G_0(\vec{q}_f,\vec{q}_i,E')]\ . \tag{8.12.57}$$

Der reelle Faktor $B(E_n, E)$ hat als Funktion von E keine Nullstellen. Die gesuchten Energie-Eigenwerte E_n sind die Nullstellen der regularisierten Spektraldeterminante

$\det(E - \hat{H} + i\epsilon)_{reg}$ und damit die Nullstellen des komplexen periodische Orbit-Faktors $\exp[-\sum_{\gamma_p}\sum_{r=1}^{\infty}\ldots]$.

Problematisch ist für viele Systeme eine exponentielle Zunahme von periodischen Bahnen γ_p mit der Bahnlänge. Berry und Keating konnten dieses Problem durch eine konvergente Resummation der langen Orbits lösen. Als Schlüssel zur Lösung erwies sich, daß alle Bahnen mit Bahnzeiten T^{γ_p} größer als der Hälfte der Heisenberg-Zeit, also $T^{\gamma_p} > \frac{1}{2}T_H$, auf Bahnen mit Bahnzeiten $T^{\gamma_p} < \frac{1}{2}T_H$ abgebildet werden können. Hierbei ist die Heisenberg-Zeit definiert als $T_H := \frac{2\pi\hbar}{\langle\Delta E\rangle}$, wenn $\langle\Delta E\rangle$ der mittlere Abstand zweier Energieniveaus des Systems ist. Wenn $\langle\Delta E\rangle \sim \hbar^n$, dann wächst die Heisenberg-Zeit mit $T_H \sim \hbar^{1-n}$. Siehe die Arbeiten von Berry und Keating in: Keating (1993), Keating u. Muller (2007), Haake (2010) - Kapitel 10.5 „Riemann-Siegel Look-Alike”, S. 423 ff..

Trotz dieses Erfolgs der „Riemann-Siegel Look-Alike” Konstruktion von Berry und Keating ist die gute Konvergenz der periodischen Orbit-Entwicklung für $\hbar \to 0$ bei Systemen, deren klassische Entsprechungen Chaos aufweisen ($n \geq 2$) immer noch erstaunlich. Ein tieferes Verständnis für die Konvergenz der periodischen Orbit-Entwicklung konnte erst in den letzten Jahren durch die Entdeckung der Sieber-Richter Partner-Bahnen, bzw. Bahnen-Bündel gefunden werden. Hier zeigte sich, daß die viele klassische Bahnen γ_p von Randwertproblemen keineswegs alle unabhängig voneinander verlaufen, sondern stattdessen enge Bahnen-Bündel bilden, die sich sehr gut durch eine einzelne Bahn approximieren lassen. Dieser Effekt wirkt der Zunahme von periodischen Bahnen γ_p mit der Bahnlänge entgegen und sichert so die Konvergenz der periodischen Orbit-Entwicklung. Siehe Haake (2010) - Kapitel 9.14 - 9.17, S. 362 ff.

8.12.5 Dynamische oder Ruellesche Zetafunktion in Quantensystemen

In 8.11 hatten wir für den klassischen Fall aus der dortigen Spektraldeterminante mit einer Näherung für die Monodromie-Matrix $\hat{M}^{\gamma_p}$ eine Zetafunktion gewonnen, die *dynamische* oder *Ruellesche Zetafunktion*. Wie schon dort bemerkt, bezeichnen einige Autoren die Inverse der Spektraldeterminante, ja gelegentlich sogar die Spektraldeterminante selbst, als Zeta-Funktion. Wir folgen hier jedoch Cvitanović u. a. (2009) und Ruelle, die darauf hinweisen, daß diese Spektraldeterminanten zwar die *richtigen* Objekte zur Untersuchung der Spektren hyperbolischer dynamischer Systeme sind, daß sie aber nicht Zeta-Funktionen genannt werden sollten, weil sie keine Euler-Produktformel (D.3.1) für Zeta-Funktionen erfüllen.

Seien $\lambda_{p,i}$ die Eigenwerte der Monodromie-Matrix $\hat{M}^{\gamma_p}$ eines Primzyklus γ_p. Bei einem hyperbolischen System gibt es jetzt nur expandierende Eigenwerte $|\lambda_{p,e,i}| > 1$ und kontrahierende Eigenwerte $|\lambda_{p,c,i}| < 1$ (der marginale Eigenwert $\lambda_{\|} = 1$ in Richtung des Flusses wurde ja bereits durch Integration entlang der Bahn explizit berücksichtigt). Für große Zeiten, d.h. $r \to \infty$, gehen die expandierenden Eigenwerte $\frac{1}{\lambda^r_{p,e,i}}$ und die kontrahierenden Eigenwerte $\lambda^r_{p,c,i}$ gegen 0 und man kann $|\det((\hat{M}^{\gamma_p})^r - \hat{1})|$ also näherungsweise schreiben als das Produkt der expandierenden Eigenvektoren (siehe 8.11.3):

$$|\det((\hat{M}^{\gamma_p})^r - \hat{1})| \approx |\lambda_p^r| := \lim_{r\to\infty} |\prod_{i=1}^{d_e} \lambda_{p,e,i}^r| \,. \tag{8.12.58}$$

Mit dieser Näherung erhalten wir für die regularisierte Spektraldeterminante

$$\begin{aligned}\det(E - \hat{H} + i\epsilon)_{reg} &\approx B(E_n, E) \cdot e^{-i\pi N_0(E)} \exp[-\sum_{\gamma_p}\sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{e^{r(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p} - \mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}}{\sqrt{|\lambda_p|}^r}] \\ &= B(E_n, E) \cdot e^{-i\pi N_0(E)} \exp(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{t_p^r}{r})\end{aligned}$$

$$\text{mit} \quad t_p := \frac{\exp(\frac{i}{\hbar}S_E^{\gamma_p} - \mu_{ges}^{\gamma_p}\frac{\pi}{2})}{\sqrt{|\lambda_p|}} \,. \tag{8.12.59}$$

Jetzt kann man die dynamische oder Ruellesche Zetafunktion definieren:

$$\zeta_{dyn}(s) := \exp(\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{t_p^r}{r}) = \exp(-\sum_p \ln(1-t_p)) = \prod_p \frac{1}{(1-t_p(s))} \tag{8.12.60}$$

$$\approx \frac{B(E_n, E) \cdot e^{-i\pi N_0(E)}}{\det(E - \hat{H} + i\epsilon)_{reg}} \,. \tag{8.12.61}$$

Die Produktdarstellung 8.12.60 zeigt, daß es sich wirklich um eine 'Zetafunktion' handelt. Gleichzeitig sieht man in 8.12.61, daß sich hier der Regularitätsfaktor gerade herauskürzt.

Die gesuchten Energie-Eigenwerte von $\hat{H}$ sind Nullstellen der Spektraldeterminante und also für große Zeiten (d.h. große r) näherungsweise Pole der dynamischen Zeta-Funktion.

8.13 Literatur zu deterministischen dynamischen Systemen

Die Literatur zum Gebiet der dynamischen Systeme ist riesig. Die folgende Literatur-Auswahl ist also sehr subjektiv zu verstehen. Die obigen Abschnitte dieses Kapitels stützen sich vornehmlich auf Cvitanović u. a. (2009), unter Zuziehung von Katok u. Hasselblatt (2009), Robinson (1999) und Haake (2010).

- Alligood u. a. (1996), Chaos - An Introduction to Dynamical Systems:
  eine schöne erste Einführung für Naturwissenschaftler.
- Rebhan (1999), Theoretische Physik I, Kapitel 9: Nicht-integrable Hamiltonsche Systeme und deterministisches Chaos:
  eine kurze und sehr schöne Einführung für Physiker.

- Cvitanović u. a. (2009), Chaos - Classical and Quantum:
  ein didaktisch großartiges und inspirierendes Internet-Buch mit fortlaufenden Aktualisierungen. Schwerpunkt ist die Entwicklung von Spektraldeterminanten nach periodischen Orbits. Von Physikern für Physiker.
- Robinson (1999), Dynamical Systems:
  ein schönes und gut lesbares mathematisches Lehrbuch auf Graduierten-Niveau - auch zum Selbststudium geeignet.
- Denker (2005), Einführung in die Analysis dynamischer Systeme:
  ein deutsches mathematisches Lehrbuch mit einer interessanten Themenauswahl. Leider sind zahlreiche Beweise doch recht knapp ausgefallen, oder wurden gleich als Übungsaufgaben gestellt :-(
- Katok u. Hasselblatt (2009), Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems:
  die unverzichtbare mathematische Referenz mit Definitionen und lesbaren Beweisen! Dies ist eines der ganz großen mathematischen Lehrbücher und gehört sicher auf den Schreibtisch jedes an dynamischen Systemen interessierten Studenten und Forschers.
- Parry u. Pollicott (1990), Zeta functions and the periodic orbit structure of hyperbolic dynamics:
  das mathematische Standardwerk zu dynamischen Zeta-Funktionen und periodischen Orbits in hyperbolischen Systemen.
- Ruelle (1994), Dynamical Zeta Functions for Piecewise Monoton Maps of the Intervall:
  eine kleine und schöne Einführung in das Thema vom Meister.
- Ruelle (1978), Thermodynamic Formalism:
  Ruelles klassisches Werk über die Anwendung des Thermodynamischen Formalismus auf dynamische Systeme.
- Baez (2005), Week 216 - What is a Zeta-Function? Aus dem Blog von John Baez zur mathematischen Physik - kurz und erhellend!

8.14 Literatur zu semiklassischen Näherungen und 'Quantenchaos'

- Gutzwiller (1990), Chaos in Classical and Quantum Mechanics:
  das große, klassische Werk von Gutzwiller. Kein Lehrbuch für Anfänger, sondern eher ein umfangreiches Übersichtswerk für Spezialisten.
- Cvitanović u. a. (2009), Chaos - Classical and Quantum:
  ein didaktisch großartiges und inspirierendes Internet-Buch mit fortlaufenden Aktualisierungen. Schwerpunkt ist die Entwicklung von Spektraldeterminanten nach periodischen Orbits. Von Physikern für Physiker.

- Brack u. Bhaduri (2003), Semiclassical Physics:
  ein sehr schönes Standardwerk über semiklassische Physik.
- Haake (2010), Quantum Signatures of Chaos:
  dieses sorgfältig und inspirierend geschriebene Buch bietet eine gute Einführung in die Random-Matrix-Theorie, die semiklassische Periodische-Orbit-Theorie und verwandte Themen. Es ist besonders die 3. Auflage aus dem Jahr 2010 (oder neuer) zu empfehlen, denn sie enthält wichtige neue Einsichten, wie z.B. die Sieber-Richter Partner-Orbits.
- Steiner (1994), Quantum Chaos:
  ein kurzer und sehr schöner Übersichtsartikel von einem bedeutenden Forscher dieses Gebiets.

A Zum Weiterlesen

- Greiner u. Reinhardt (1993), Feldquantisierung:
  Eine Einführung in die klassische Quantenfeldtheorie. Die Bücher des Lehrgangs für Theoretische Physik von Greiner et al. sind für Anfänger besonders gut geeignet durch die vielen ausführlich durchgerechneten Beispiele und Übungsaufgaben.
- Ramond (1989), Field Theory, A Modern Primer:
  Eine schöne Einführung in die moderne Quantenfeldtheorie. Insbesondere zeigt Ramond einfache und sehr instruktive Anwendungen der spektralen Zeta-Funktion in der QFT.
- Ryder (2003), Quantum Field Teory:
  Eine sehr schöne Einführung in die moderne Quantenfeldtheorie. Die Regularisierung erfolgt hier nicht mit der spektralen Zeta-Funktion, sondern mit der Dimensions-Regularisierung. Ein sehr schönes, lesbares und empfehlenswertes Buch.
- Schwarz (1993), Quantum Field Theory and Topology:
  Neben vielen anderen interessanten Themen gibt Schwarz in diesem Buch eine insbesonders für Physiker lesbare Einführung in die Mathematik der spektralen Zeta-Funktion und der Wärmekern-Entwicklung und ihre Anwendung in der QFT.
- Zeidler (2006), Quantum Field Theory I: Basics in Mathematics and Physics:
  Dieses wunderbare Buch habe ich erst nach Fertigstellung der ersten Version meines Manuskriptes entdeckt. Zeidler versucht eine Brücke zu bauen zwischen der theoretischen Physik, insbesondere der Quantenfeldtheorie, und modernen Entwicklungen der Mathematik. Dies ist, zumindest aus der Sicht der Physik, so überzeugend gelungen, daß dieses auf 6 Bände (!) angelegte Werk für viele Jahre das Referenzwerk sein wird - und nebenbei mit großer Freude und großem Gewinn zu lesen ist!
- Vassilevich (2003), Heat kernel expansion: user's manual:
  Ein sehr empfehlenswerter Übersichtsartikel über die Wärmekern-Entwicklung der spektralen Zeta-Funtionen mit sehr guten Literaturempfehlungen.
- Elizalde u. a. (1994), Zeta Regularization Techniques with Applications:
  Ein Sammelband mit vielfältigen Beiträgen von Spezialisten zu Theorie und Anwendungen der spektralen Zeta-Funktionen. Bei vielen Fragen zu Zeta-Funktionen geht mein erster Blick zu Vassilevich, s.o., oder in dieses Buch.
- Elizalde (1995), Ten Physical Applications of Spectral Zeta Function:
  Die Einführung in die Theorie der spektralen Zeta-Funktion und die Anwendung auf den Casimir-Effekt sind recht gut lesbar und hilfreich, ebenso die gute Bibliographie. In den Beispielen werden vornehmlich Fälle mit bekanntem Spektrum behandelt, viele davon aus der String-Theorie.

- Kirsten (2002), Spectral Functions in Mathematics and Physics:
  Dieses Buch dürfte inzwischen ein Standardwerk über Spektralfunktionen für Physiker sein, insbesondere in den Fällen, in denen das Spektrum nicht bekannt ist. Die von Kirsten mitentwickelten neuen anaytischen Techniken werden an Beispielen aus dem Bereich der Quantenfeldtheorie mit nichttrivialen Randbedingungen vorgeführt. Eine hervorragende und wirklich umfassende Bibliographie geben dem Buch einen weiteren großen Wert.

Bereits bei dem Buch von Schwarz, aber erst recht bei aktuellen physikalischen Veröffentlichungen oder mathematischen Büchern zu diesem Themenkreis ist eine größere Vertrautheit mit Begriffen und Ergebnissen der modernen Topologie, Differentialgeometrie, Algebra und Funktionalanalysis von großer Hilfe.

Aus der Vielzahl der möglichen Zugänge seinen hier zwei für Physiker gut geeignete und sich ergänzende Einführungen genannt:

- Hassani (1999), Mathematical Physics, A Modern Introduction to Its Foundations,
- Nakahara (2003), Geometry, Topology and Physics:
  diese zweite Auflage enthält neben vielen anderen wichtigen Dingen einen besonders für Physiker sehr interessanten Beweis des Index-Theorems mittels Supersymmetrie!

Wenn man die zugrundeliegende Mathematik der Elliptischen Differential-Operatoren, Wärmekern-Entwicklung und Seeley-Koeffizienten, Atiyah-Singer-Index-Theorem, etc., noch tiefer als bei Nakahara verstehen will, dann muß man mathematische Werke zu diesen Themen konsultieren, die für Physiker nicht ohne weiteres (leicht) lesbar sind. Sie kennen ja sicher den schönen Satz von Yang (der Erinnerung nach zitiert): „Es gibt nur zwei Arten von Mathematikbüchern, diejenigen, bei denen man nach der ersten Seite nichts mehr versteht, und diejenigen, bei denen man nach dem ersten Satz nichts mehr versteht."

- Roe (1998), Elliptic Operators, Topology and Asymptotic Methods:
  ein sehr schönes Buch über Spinor-Dirac-Operatoren. Dieses Werk setzt nur normale Kenntnisse in Differentialgeometrie und Funktionalanalysis voraus und entwickelt alle hier benötigten Teile der Theorie der partiellen Differential-Gleichungen. Der Beweis des Index-Theorems folgt dem modernen, auch für praktische Berechnungen hilfreichen Beweis von Getzler.
- Taylor (1996), Partial Differential Equations - 2. Qualitative Studies of Linear Equations:
  Die 3 Bände von Taylor über Partielle Differentialgleichungen bieten in meinen Augen zur Zeit die beste und aktuellste Darstellung zu PDGL. Band 2 Kapitel 10: Dirac Operators and Index Theory (Atiyah-Singer-Index Theorem, Chern-Gauss-Bonnet Theorem, Riemann-Roch Theorem).
- Gilkey (1995), Invariance Theory, the Heat Equation, and the Atiyah-Singer Index Theorem:
  das mathematische Standard-Werk, von einem der aktiven Forscher dieses Gebie-

tes. Der Beweis des Index-Theorems erfolgt hier auf dem Weg über die Invarianz-Theorie.

And last but not least:

- Watkins (2004), Number Theory and Physics Archive:
  eine Quelle der Inspiration über Zusammenhänge zwischen Zahlentheorie und Theoretischer Physik.

B Summenformeln

Die folgenden Summenformeln und komplexere Varianten davon haben in der Physik insbesondere bei der Regularisierung von Ausdrücken zur Grundzustands-Energie des Vakuums eine Rolle gespielt. Die Idee dabei ist die folgende: sei die Grundzustands-Energie des Vakuums (in Bezug auf ein quantisiertes Feld) ohne Randbedingungen $E_0 = \hbar \int_0^\infty \omega(t)\, dt$ und die Grundzustands-Energie des Vakuums mit geeigneten Randbedingungen durch ein Experiment $E_1 = \hbar \sum_{n=0}^{\infty} \omega(n)$, dann kommt es durch das Experiment also zu einer Verschiebung der Grundzustands-Energie um $\Delta_0^\infty E = E_1 - E_0$. Selbst wenn E_1 und E_0 divergent sind, wie so häufig in der Quantenfeldtheorie, kann aber möglicherweise doch der Grenzwert der Differenz $\Delta_0^n E$ existieren:

$$E_1 - E_0 := \Delta_0^\infty E = \lim_{n\to\infty} \Delta_0^n E = \hbar \lim_{n\to\infty} \left[\sum_{n=0}^{n} \omega(n) - \int_0^n \omega(t)\, dt \right] . \qquad \text{(B.0.1)}$$

Genau dieses Verfahren hat Casimir bei der Berechnung des nach ihm benannten Effektes verwandt, um die Kraft der Vakuumenergie des elektromagnetischen Feldes auf zwei parallele leitende Platten zu berechnen. Siehe hierzu die schöne Arbeit von Dowling (1989).

B.1 Poisson-Summenformel

Sei $S(x)$ mit $x \in \mathbb{R}$ ein sog. Delta-Kamm, d.h. eine Delta-Funktion mit der Periode 1, dann gilt:

$$S(x) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m x} . \qquad \text{(B.1.1)}$$

Beweis. Die linke Seite ist periodisch in $x \in \mathbb{R}$ mit der Periode 1 und kann daher in eine Fourierreihe entwickelt werden:

$$S(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n\, e^{2\pi i n x} , \quad \text{mit}$$

$$c_n = \int\limits_0^\pi dx \,(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x-m)\, e^{-2\pi i n x}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int\limits_0^\pi dx\, (\delta(x-m)\, e^{-2\pi i n x})$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int\limits_{-m}^{(-m+1)} dx'\, (\delta(x')\, e^{-2\pi i n (x'+m)}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx'\, (\delta(x')\, e^{-2\pi i n x'}) = 1 , \quad \Rightarrow$$

$$S(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n x} \; . \qquad \square$$

Im folgenden wollen wir eine Fouriertransformation verwenden und fordern deshalb, daß die Funktion $f(x)$ ein Element eines Schwarzraumes $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ ist (d.h. daß $f(x)$ glatt ist und für $|x| \to \infty$ mit allen Ableitungen schneller als jedes Polynom abfällt):

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \{f \in C^{\infty}(\mathbb{R}) : \sup_{x\in\mathbb{R}} (1 + |x|)^n \, D^{\alpha} f(x) = 0, \quad |\alpha|, n \in \mathbb{N}_0\}$$

$$\vartheta(\pi x, 0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n) \; .$$

Mit der Fourier-Transformierten $\tilde{f}(y) := \int_{-\infty}^{\infty} dx \, (e^{2\pi i y x} \, f(x))$ ergibt sich die Poisson-Summenformel:

$$\begin{aligned}\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, (\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n) \, f(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, (\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m x} \, f(x)) \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, (e^{2\pi i m x} \, f(x)) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \tilde{f}(m) \; . \end{aligned} \qquad \text{(B.1.2)}$$

B.2 Euler-Maclaurin-Summenformel

Für die Euler-Maclaurin-Summenformel benötigen wir einige Aussagen zu den Bernoulli-Polynomen und Bernoulli-Zahlen, die wir zunächst hier zusammentragen wollen (für eine ausführlichere Darstellung siehe etwa Richter u. Schiekel (2004)). Euler hat die Bernoulli-Polynome als Potenzreihe einer erzeugenden Funktion definiert:

$$\frac{te^{tx}}{e^t - 1} := \sum_{m=0}^{\infty} B_m(x) \, \frac{t^m}{m!} \; . \qquad \text{(B.2.1)}$$

Wenn man dies etwas umschreibt und die Exponential-Funktionen entwickelt, so erhält man

$$e^{tx} = \frac{e^t - 1}{t} \sum_{m=0}^{\infty} B_m(x) \, \frac{t^m}{m!} \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}&(1 + \frac{tx}{1!} + \frac{(tx)^2}{2!} + \dots) \\ &\qquad = (1 + \frac{t}{2!} + \frac{(t)^2}{3!} + \dots) \cdot (B_0(x) + B_1(x)\frac{t}{1!} + B_2(x)\frac{t^2}{2!} + \dots) \; .\end{aligned}$$

Ein Koeffizientenvergleich führt zu:

$$B_0(x) = 1\,, \quad B_1(x) = x - \frac{1}{2}\,, \quad \ldots\,. \tag{B.2.2}$$

Für die Bernoulli-Zahlen ergibt sich:

$$B_m := B_m(0)\,, \quad \Leftrightarrow \quad \frac{t}{e^t - 1} := \sum_{m=0}^{\infty} B_m \frac{t^m}{m!}\,. \tag{B.2.3}$$

$$B_0 = 1\,, \quad B_1 = -\frac{1}{2}\,, \ldots\,. \tag{B.2.4}$$

Die ungeraden Bernoulli-Zahlen mit $m > 1$ sind gleich Null, denn die folgende Funktion $f(t)$ ist symmetrisch bei einer Spiegelung $t \to -t$:

$$f(t) := B_0 + \sum_{m=2}^{\infty} B_m \frac{t^m}{m!} = \frac{t}{e^t - 1} + \frac{t}{2} = \frac{2t + t\,(e^t - 1)}{2(e^t - 1)}$$

$$= \frac{t\,(e^t + 1)}{2(e^t - 1)} = \frac{t\,(e^{\frac{1}{2}} + e^{-\frac{1}{2}})}{2(e^{\frac{1}{2}} - e^{-\frac{1}{2}})} = f(-t)\,, \quad \Rightarrow$$

$$B_{2m+1} = 0 \quad \text{für } m \in \mathbb{N}\,. \tag{B.2.5}$$

Nützlich ist auch die folgende Beziehung zwischen $B_m(x+1)$ und $B_m(x)$:

$$\sum_{m=0}^{\infty} (B_m(x+1) - B_m(x))\,\frac{t^m}{m!} = \frac{t\,e^{(x+1)t}}{e^t - 1} - \frac{t\,e^{xt}}{e^t - 1} = t\,e^{xt}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} x^m \frac{t^{m+1}}{m!} = \sum_{m=1}^{\infty} x^{m-1} \frac{t^m}{(m-1)!}\,,$$

$$B_m(x+1) - B_m(x) = m\,x^{m-1}\,. \tag{B.2.6}$$

Speziell für $x = 0$ ergibt diese Formel $B_1(1) = B_1(0) + 1 = B_1 + 1 = \frac{1}{2} = -B_1(0) = -B_1$ und $B_m(1) = B_m(0) = B_m$ für $m > 1$. Dies läßt sich zusammen fassen zu:

$$B_m(1) = (-1)^m B_m\,. \tag{B.2.7}$$

Wesentlich für die Ableitung Euler-Maclaurin-Summenformel ist auch die folgende Differentialbeziehung der Bernoulli-Polynome:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{d\,B_m(x)}{dx} \frac{t^m}{m!} = \frac{d}{dx}\Big(\frac{t\,e^{xt}}{e^t - 1}\Big) = \frac{t^2\,e^{xt}}{e^t - 1}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} B_m(x) \, \frac{t^{m+1}}{m!} = \sum_{m=1}^{\infty} B_{m-1}(x) \, \frac{t^m}{(m-1)!} \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx} \, \frac{B_m(x)}{m!} = \frac{B_{m-1}(x)}{(m-1)!} \, , \quad \text{für } m \geq 1 \, . \tag{B.2.8}$$

Nach dieser Vorarbeit jetzt also zur Ableitung der Euler-Maclaurin-Summenformel. In Hardys berühmtem Buch über divergente Reihen (Hardy (1963), S.325) findet sich ein einfacher, allerdings rein formaler Beweis einer Euler-Maclaurin-Summenformel. Sei $D := \frac{d}{dx}$, dann können wir die Taylor-Entwicklung der Funktion $f(x+n)$ um den Punkt x schreiben als:

$$f(x+n) = e^{nD} f(x) \, .$$

Wenn man auf beiden Seiten die Summe von $n = 0$ bis $n = N - 1$ bildet und auf der rechten Seite die Summenformel der geometrischen Reihe verwendet, so erhält man

$$\sum_{n=0}^{N-1} f(x+n) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{nD} f(x) = \frac{e^{ND} - 1}{e^D - 1} \, f(x) = \frac{1}{e^D - 1} \, [f(x+N) - f(x)] \, .$$

Für $\frac{1}{e^D - 1}$ setzen wir die erzeugende Funktion der Bernoulli-Zahlen (B.2.3) ein und erhalten:

$$\sum_{n=0}^{N-1} f(x+n) = (D^{-1} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \, D^{m-1}) \, [f(x+N) - f(x)] \, .$$

Wenn $f(x)$ rasch genug abfällt, d.h., wenn $\lim_{N\to\infty} D^{-1} f(x+N) = \lim_{N\to\infty} f(x+N) = 0$, dann folgt sofort eine erste Form der Euler-Maclaurin-Summenformel:

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(x+n) - \int_0^{\infty} f(x+t) \, dt = - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \, D^{m-1} \, f(x) \, . \tag{B.2.9}$$

Der ausführlichere Beweis der Euler-Maclaurin-Summenformel ist etwas aufwendiger als Hardys Kurzbeweis, liefert dafür aber auch eine wichtige Aussage zu einem Restterm bei endlichen Summen. Seien $a, b, m, n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
\Delta(f, a, b) &:= \sum_{n=a}^{b} f(n) - \int_a^b f(x) \, dx \\
&= \frac{1}{2} \, [f(b) + f(a)] + \sum_{n=a}^{b-1} \frac{1}{2} [f(n+1) + f(n)] - \sum_{n=a}^{b-1} \int_n^{n-1} f(x) \, dx \\
&= \frac{1}{2} \, [f(b) + f(a)] + \sum_{n=a}^{b-1} \left[\frac{1}{2} [f(n+1) + f(n)] - \int_n^{n+1} f(x) \, dx \right]
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \sum_{n=a}^{b-1} \left[\frac{1}{2}[f(n+1)+f(n)] - x\cdot f(x)\big|_n^{n+1} + \int\limits_n^{n+1} x\cdot f'(x)\,dx\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \sum_{n=a}^{b-1} \left[(n+\frac{1}{2})[-f(n+1)+f(n)] + \int\limits_n^{n+1} x\cdot f'(x)\,dx\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \sum_{n=a}^{b-1} \left[\int\limits_n^{n+1} [x-n-\frac{1}{2}]\cdot f'(x)\,dx\right].$$

Im Intervall $x \in [n, n+1)$ ist n identisch mit $[x]$, der größten ganzen Zahl, die kleiner als x ist. Also schreiben wir im obigen Integral: $x - n - \frac{1}{2} = x - [x] - \frac{1}{2} = \{x\} - \frac{1}{2}$, mit $\{x\} = x - [x] = x \mod 1$, dem Dezimalbruchteil von x. Nun ist mit B.2.2 $\{x\} - \frac{1}{2} = B_1(\{x\})$ und damit und mit B.2.8 folgt:

$$\Delta(f,a,b) = \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \sum_{n=a}^{b-1} \left[\int\limits_n^{n+1} B_1(\{x\})\cdot f'(x)\,dx\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \int\limits_a^b B_1(\{x\})\cdot f^{(1)}(x)\,dx$$

$$= \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \int\limits_a^b \frac{d\,B_2(\{x\})}{dx\,2}\cdot f^{(1)}(x)\,dx$$

$$= \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \frac{B_2(\{x\})}{2}\cdot f^{(1)}(x)\Big|_a^b - \int\limits_a^b \frac{B_2(\{x\})}{2}\cdot f^{(2)}(x)\,dx$$

$$= \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \sum_{k=2}^{m}(-1)^k\,\frac{B_k(\{x\})}{k!}\cdot f^{(k-1)}(x)\Big|_a^b$$

$$+ (-1)^{m+1}\int\limits_a^b \frac{B_m(\{x\})}{m!}\cdot f^{(n)}(x)\,dx\,.$$

Aus $a, b \in \mathbb{N}$ folgt $B_k(\{a\}) = B_k(a-[a]) = B_k(0) = B_k$ und ebenso $B_k(\{b\}) = B_k$. Die $B_{2k+1} = 0$ für $k \in \mathbb{N}$ (wegen B.2.5), $B_1 = -\frac{1}{2}$ (wegen B.2.4), und so erhalten wir:

$$\Delta(f,a,b) = \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \sum_{k=2}^{m}\frac{B_k}{k!}\,f^{(k-1)}(x)\Big|_a^b$$

$$+ (-1)^{m+1}\int\limits_a^b \frac{B_m(\{x\})}{m!}\cdot f^{(n)}(x)\,dx$$

$$= f(b) - \frac{1}{2}\left[f(b) - f(a)\right] + \sum_{k=2}^{m} \frac{B_k}{k!}\, f^{(k-1)}(x)\Big|_a^b$$

$$+ (-1)^{m+1} \int_a^b \frac{B_m(\{x\})}{m!} \cdot f^{(n)}(x)\, dx$$

$$= f(b) + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_k}{k!}\, f^{(k-1)}(x)\Big|_a^b + (-1)^{m+1} \int_a^b \frac{B_m(\{x\})}{m!} \cdot f^{(n)}(x)\, dx\ . \tag{B.2.10}$$

Mit $\sum_{n=a}^{b} f(n) - f(b) = \sum_{n=a}^{b-1} f(n)$ ergibt sich die übliche Formulierung der Euler-Maclaurin-Summenformel:

$$\sum_{n=a}^{b-1} f(n) = \int_a^b f(x)\, dx + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_k}{k!}\, f^{(k-1)}(x)\Big|_a^b + (-1)^{m+1} \int_a^b \frac{B_m(\{x\})}{m!}\, f^{(m)}(x)\, dx\ . \tag{B.2.11}$$

Wenn wir an der Summe von $n = 0$ bis $n = \infty$ interessiert sind und voraussetzen, daß $f(z)$ mit allen Ableitungen im Unendlichen verschwindet, so erhalten wir mit $B_1 = -\frac{1}{2}$ (B.2.4) und $B_{2k+1} = 0$ (B.2.5):

$$\lim_{b\to\infty} \left[\sum_{n=0}^{b} f(n) - \int_0^b f(x)\, dx\right] = f(0) - \sum_{k=1}^{m} \frac{B_k}{k!}\, f^{(k-1)}(0)$$

$$= \frac{f(0)}{2} - \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\, f^{(2k-1)}(0)\ . \tag{B.2.12}$$

B.3 Abel-Plana-Summenformel

Am durchsichtigsten erscheint die Abel-Plana Summenformel, wenn man sie aus dem Argument-Prinzip der Funktionentheorie entwickelt. Sei also $g : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ eine meromorphe Funktion, d.h. eine analytische Funktion mit isolierten Polen endlicher Ordnung. Sei $z_k \in \Omega \subset \bar{\Omega} \subset \mathbb{C}$ die k-te Nullstelle von $g(z)$ der Ordnung n_k und C ein geschlossener Weg um Ω, dann erhalten wir für $g'(z)/g(z)$:

$$g(z) = (z - z_k)^{n_k}\, \varphi(z)\ , \quad \text{mit } \varphi(z_k) \neq 0\ .$$

$$g'(z) = n_k (z - z_k)^{n_k - 1}\, \varphi(z) + (z - z_0)^{n_k}\, \varphi'(z)\ .$$

$$\frac{g'(z)}{g(z)} = \frac{n_k}{(z - z_k)} + \frac{\varphi'(z)}{\varphi(z)}\ , \quad \Rightarrow \quad n_k = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{g'(z)}{g(z)}\, dz\ . \tag{B.3.1}$$

Sei umgekehrt $z_k \in \Omega \subset \bar{\Omega} \subset \mathbb{C}$ der k-te Pol von $g(z)$ der Ordnung p_k, dann erhalten wir wiederum für $g'(z)/g(z)$:

$$g(z) = (z - z_k)^{-p_k}\, \varphi(z)\ , \quad \text{mit } \varphi(z_k) \neq 0\ .$$

$$g'(z) = -p_k(z - z_k)^{-p_k-1}\, \varphi(z) + (z - z_k)^{-p_k}\, \varphi'(z)\ .$$

$$\frac{g'(z)}{g(z)} = \frac{-p_k}{(z - z_k)} + \frac{\varphi'(z)}{\varphi(z)}\ , \quad \Rightarrow \quad -p_k = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{g'(z)}{g(z)}\, dz\ . \tag{B.3.2}$$

Wenn also in dem vom Weg C umschlossenen Gebiet Ω gerade r Nullstellen der Ordnung n_k , $1 \leq k \leq r$, und s Pole der Ordnung $p_{k'}$, $1 \leq k' \leq s$ der Funktion $g(z)$ liegen, so gilt:

$$N - P := \sum_{k=1}^{r} n_k - \sum_{k'=1}^{s} p_{k'} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{g'(z)}{g(z)}\, dz\ .$$

Man spricht in diesem Zusammenhang vom Argument-Prinzip, denn mit $\Delta_C(h(z)) :=$ Differenz von $h(z)$ beim einmaligen Umlaufen von Ω auf dem Weg C gilt ja:

$$\oint_C \frac{g'(z)}{g(z)}\, dz = \Delta_C(\ln(g(z))) = \Delta_C(\ln|g(z)|) + \Delta_C(\arg(g(z))) = \Delta_C(\arg(g(z)))\ .$$

Diese Größe $N - P$, also die Differenz der Anzahl der Nullstellen minus der Anzahl der Pole (wobei wir jede Nullstelle und jeden Pol mehrfach entsprechend ihrer Ordnung zählen), wird auch Abbildungsgrad der Funktion g auf Ω genannt:

$$deg(g, \Omega) := N - P := \sum_{k=1}^{r} n_k - \sum_{k'=1}^{s} p_{k'} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{g'(z)}{g(z)}\, dz\ . \tag{B.3.3}$$

Wenn also $g(z)$ auf $\bar{\Omega}$ regulär und $deg(g, \Omega) \neq 0$ ist, so gibt es auf Ω mindestens eine Lösung von $g(z) = 0$. Wirklich interessant werden die Abbildungsgrade erst dann, wenn man sie auf Abbildungen von Banchräumen verallgemeinert und dann zu Existenzaussagen über homogene Lösungen von Differential- und Integral-Operatoren gelangt.

Wir bleiben hier aber bei der einfachen Funktionentheorie und verallgemeinern die Formel B.3.3 noch ein wenig. Sei zusätzlich zu der oben gegebenen Funktion $g(z)$ noch eine auf $\bar{\Omega}$ reguläre Funktion $f(z)$ gegeben. Dann gilt für die k-te Nullstelle von $g(z)$ der Ordnung n_k:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z)\, \frac{g'(z)}{g(z)}\, dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z)\, [\frac{n_k}{(z - z_k)} + \frac{\varphi'(z)}{\varphi(z)}]\, dz = \operatorname*{Res}_{z=z_k} \frac{n_k f(z)}{(z - z_k)}$$

$$= n_k f(z_k) \ .$$

Ebenso gilt für den k-ten Pol von $g(z)$ der Ordnung p_k:

$$\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_C f(z)\,\frac{g'(z)}{g(z)}\,dz = \frac{1}{2\pi i}\oint\limits_C f(z)\,[\frac{-p_k}{(z-z_k)} + \frac{\varphi'(z)}{\varphi(z)}]\,dz = \operatorname*{Res}_{z=z_k}\frac{-p_k f(z)}{(z-z_k)}$$

$$= -p_k f(z_k) \ .$$

Wenn also in dem vom Weg C umschlossenen Gebiet Ω gerade r Nullstellen der Ordnung n_k , $1 \le k \le r$, und s Pole der Ordnung $p_{k'}$, $1 \le k' \le s$ der Funktion $g(z)$ liegen, so gilt:

$$\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_C f(z)\,\frac{g'(z)}{g(z)}\,dz = \sum_{k=1}^{r} n_k f(z_k) - \sum_{k'=1}^{s} p_{k'} f(z_{k'}) \ . \tag{B.3.4}$$

Aus B.3.4 kann man durch geeignete Wahl der Funktion $g(z)$ und des geschlossenen Weges C die verschiedensten Summenformeln ableiten, die man als verallgemeinerte Abel-Plana-Summenformeln bezeichnen kann.

Um die eigentliche Abel-Plana-Summenformel abzuleiten, wählen wir $\frac{g_k'(z)}{g_k(z)} = \frac{1}{z-k}$, bzw. eine k-Summe über diese $\frac{g_k'(z)}{g_k(z)}$, und als geschlossenen Integrationsweg $C = C_1 + C_{1\epsilon} + C_2 + C_{3\epsilon} + C_3 + C_4$:

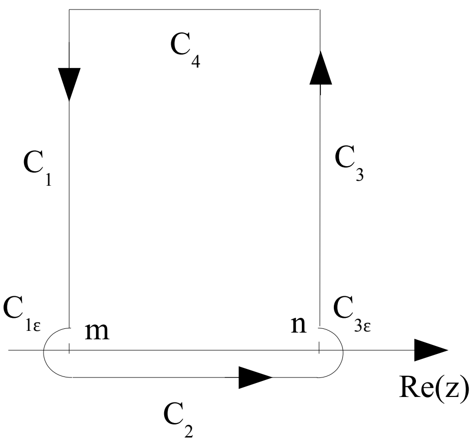


Abbildung B.1: Integrationsweg von $f(z)$

Die Funktion $f(z)$ nehmen wir als regulär in dem vertikalen Streifen zwischen m und n an, d.h. im Gebiet $\Omega := \{z \in \mathbb{C}\,|\, m-\epsilon \le \Re(z) \le n+\epsilon,\ m,n \in \mathbb{N},\ m<n,\ \epsilon>0\}$.

$$\sum_{k=m}^{n} f(k) = \frac{1}{2\pi i}\sum_{k=m}^{n}\oint\limits_C \frac{f(z)}{z-k}\,dz = \frac{1}{2\pi i}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\oint\limits_C \frac{f(z)}{z-k}\,dz \ .$$

Dabei haben wir ausgenutzt, daß auch $\frac{f(z)}{z-k}$ für $k < m$ und $k > n$ in unserem Gebiet Ω regulär ist und also das Integral dieser Funktion über den gewählten geschlossenen Weg C verschwindet, also

$$\frac{1}{2\pi i}\sum_{k=-\infty}^{m-1}\oint_C \frac{f(z)}{z-k}\,dz = \frac{1}{2\pi i}\sum_{k=n+1}^{\infty}\oint_C \frac{f(z)}{z-k}\,dz = 0\ .$$

Mit D.10.5 erkennen wir in $\sum_{k=-\infty}^{\infty}\frac{1}{z-k}$ gerade die Partialbruch-Entwicklung von $\pi \cdot \cot(\pi z)$. Damit können wir die Funktionssumme weiter umformen:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=m}^{n} f(k) &= \frac{1}{2\pi i}\oint_C f(z)\,\pi\cot(\pi z)\,dz \\
&= \frac{1}{2\pi i}\oint_C f(z)\,\pi[\frac{\frac{1}{2}(e^{i\pi z}+e^{-i\pi z})}{\frac{1}{2i}(e^{i\pi z}-e^{-i\pi z})}+\pi i-\pi i]\,dz \\
&= \frac{1}{2\pi i}\oint_C f(z)\,i\pi[\frac{e^{i\pi z}+e^{-i\pi z}+e^{i\pi z}-e^{-i\pi z}}{e^{i\pi z}-e^{-i\pi z}}-1]\,dz \\
&= \oint_C f(z)\,[\frac{1}{1-e^{-2i\pi z}}-\frac{1}{2}]\,dz = \oint_C \frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1}\,dz := \oint_C F(z)\,dz\ .
\end{aligned}$$

Hier haben wir wieder die Regularität von $f(z)$ in Ω ausgenutzt, so daß $\frac{1}{2}\oint_C f(z)\,dz = 0$ ist. Jetzt betrachten wir das Integral über den Weg C genauer. Wir fordern, daß $\lim_{y\to\infty}\int_{C_4} F(z)\,dz = 0$ ist. Dann folgt:

$$\oint_C F(z)\,dz := \oint_C \frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1}\,dz = \int_{C_1+C_{1\epsilon}+C_2+C_{3\epsilon}+C_3} \frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1}\,dz\ .$$

$$I_1 := \int_{C_1}\frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1}\,dz = \int_{\infty}^{\epsilon}\frac{-f(m+iy)}{e^{2\pi y}-1}\,d(iy) = i\int_{\epsilon}^{\infty}\frac{f(m+iy)}{e^{2\pi y}-1}\,dy\ ,$$

$$I_3 := \int_{C_3}\frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1}\,dz = -i\int_{\epsilon}^{\infty}\frac{f(n+iy)}{e^{2\pi y}-1}\,dy\ ,$$

$$I_2 := \int_{C_2}\frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1}\,dz = \int_{m+\epsilon}^{n-\epsilon}\frac{-f(x-i\epsilon)}{e^{-2\pi i(x-i\epsilon)}-1}\,dx\ ,$$

$$I_{1\epsilon} := \int_{C_{1\epsilon}}\frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1}\,dz = \int_{\pi/2}^{3\pi/2}\frac{-f(m+\epsilon e^{i\varphi})}{e^{-2i\pi\epsilon e^{i\varphi}}-1}\,(i\epsilon e^{i\varphi}d\varphi)$$

$$= \int\limits_{\pi/2}^{3\pi/2} \frac{-f(m)(1+O(\epsilon))}{-2i\pi\epsilon e^{i\varphi}(1+O(\epsilon))} (i\epsilon e^{i\varphi} d\varphi) = \frac{f(m)}{2\pi} (1+O(\epsilon)) \int\limits_{\pi/2}^{3\pi/2} d\varphi$$

$$= \frac{f(m)}{2} (1+O(\epsilon)) \; ,$$

$$I_{3\epsilon} := \int\limits_{C_{3\epsilon}} \frac{-f(z)}{e^{-2i\pi z}-1} \, dz = \int\limits_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{-f(n+\epsilon e^{i\varphi})}{e^{-2i\pi\epsilon e^{i\varphi}}-1} (i\epsilon e^{i\varphi} d\varphi) = \ldots$$

$$= \frac{f(n)}{2} (1+O(\epsilon)) \; .$$

Jetzt kommt ein Kunstgriff, um das obige Integral $\oint_C F(z)\,dz$ noch etwas symmetrischer zu schreiben. Wir addieren zu $\oint_C F(z)\,dz$ noch ein geeignetes Wegintegral $\oint_{\tilde{C}} \tilde{F}(z)\,dz = 0$ einer regulären Funktion $\tilde{F}(z)$ über einen geschlossenen Weg $\tilde{C}$, das ja einfach Null ergibt. Als Funktion und Integrationsweg $\tilde{C}$ wählen wir:

$$\oint\limits_{\tilde{C}} \tilde{F}(z)\,dz := \oint\limits_{\tilde{C}} \frac{-f(z)}{e^{2i\pi z}-1} \, dz = \int\limits_{C_5+C_2+C_6} \frac{-f(z)}{e^{2i\pi z}-1} \, dz \; ,$$

wobei wir wie oben gefordert haben, daß $\lim_{y\to-\infty} \int_{C_7} \tilde{F}(z)\,dz = 0$.

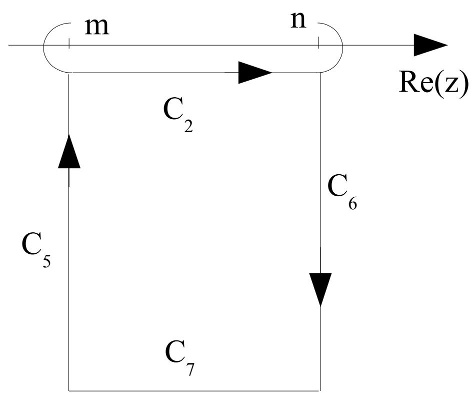


Abbildung B.2: Integrationsweg von $\tilde{f}(z)$

Damit ergeben sich die einzelnen Wegintegrale zu:

$$\tilde{I}_5 := \int\limits_{C_5} \frac{-f(z)}{e^{2i\pi z}-1} \, dz = \int\limits_{-\infty}^{-\epsilon} \frac{-f(m+iy)}{e^{-2\pi y}-1} \, d(iy) = -i \int\limits_{\epsilon}^{\infty} \frac{f(m-iy)}{e^{2\pi y}-1} \, dy \; ,$$

$$\tilde{I}_6 := \int\limits_{C_6} \frac{-f(z)}{e^{2i\pi z}-1} \, dz = \int\limits_{-\epsilon}^{-\infty} \frac{-f(n+iy)}{e^{-2\pi y}-1} \, d(iy) = i \int\limits_{\epsilon}^{\infty} \frac{f(n-iy)}{e^{2\pi y}-1} \, dy \; ,$$

$$\tilde{I}_2 := \int\limits_{C_2} \frac{-f(z)}{e^{2i\pi z}-1}\,dz = \int\limits_{m+\epsilon}^{n-\epsilon} \frac{-f(x-i\epsilon)}{e^{2\pi i(x-i\epsilon)}-1}\,dx \;.$$

Jetzt sammeln wir all unsere einzelnen Wegintegrale zusammen:

$$\begin{aligned}\sum_{k=m}^{n} f(k) &= \oint\limits_{C} F(z)\,dz + \oint\limits_{\tilde{C}} \tilde{F}(z)\,dz = I_1 + I_{1\epsilon} + I_2 + I_{3\epsilon} + I_3 + \tilde{I}_5 + \tilde{I}_2 + \tilde{I}_6 \\ &= \frac{f(m)}{2}\,(1+O(\epsilon)) + \frac{f(n)}{2}\,(1+O(\epsilon)) \\ &\quad + i\int\limits_{\epsilon}^{\infty} \frac{f(m+iy)-f(m-iy)-f(n+iy)+f(n-iy)}{e^{2\pi y}-1}\,dy \\ &\quad + \int\limits_{m+\epsilon}^{n-\epsilon} f(x-i\epsilon)\left[\frac{-1}{e^{-2\pi i(x-i\epsilon)}-1} + \frac{-1}{e^{2\pi i(x-i\epsilon)}-1}\right] dx \;.\end{aligned}$$

Der Ausdruck in der eckigen Klammer ist gerade 1, denn:

$$\frac{-1}{a^{-1}-1} + \frac{-1}{a-1} = -\frac{a-1+a^{-1}-1}{1-a^{-1}-a+1} = 1 \;.$$

Jetzt können wir auf der rechten Seite unbehindert von den Polen den $\lim_{\epsilon\to 0}$ bilden und erhalten die Abel-Plana-Summenformel:

$$\begin{aligned}&\sum_{k=m}^{n} f(k) - \int\limits_{m}^{n} f(x)dx \\ &\quad = \frac{f(m)}{2} + \frac{f(n)}{2} + i\int\limits_{0}^{\infty} \frac{f(m+iy)-f(m-iy)-f(n+iy)+f(n-iy)}{e^{2\pi y}-1}\,dy \;.\end{aligned} \tag{B.3.5}$$

Wenn $f(n)$ im $\lim_{n\to\infty}$ so stark abfällt, daß die n-abhängigen Terme verschwinden, dann erhalten wir die folgende vereinfachte Abel-Plana-Summenformel:

$$\lim_{n\to\infty}\left[\sum_{k=0}^{n} f(k) - \int\limits_{0}^{n} f(x)dx\right] = \frac{f(0)}{2} + i\int\limits_{0}^{\infty} \frac{f(iy)-f(-iy)}{e^{2\pi y}-1}\,dy \;. \tag{B.3.6}$$

In der Physik ist im Zusammenhang mit der Renormierung besonders jener Fall interessant, bei welchem zwar die einzelnen Grenzwerte:

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n} f(k) \quad \text{und} \quad \lim_{n\to\infty}\int_0^n f(x)dx$$

divergieren, weil sie beide eine unendliche Vakuumenergie enthalten, bei welchem aber der Grenzwert der rechten Seite der Abel-Plana-Summenformel B.3.5 existiert, so daß man die linke Seite der Summenformel als die Casimir-Energie definieren kann.

Man kann sich auch die Frage stellen, ob die verschiedenen Summenformeln nicht irgendwie miteinander zusammenhängen. Tatsächlich können wir aus B.3.6 unschwer eine Euler-Maclaurin-Summenformel ableiten. Da für B.3.6 $f(z)$ analytisch in der rechten Halbebene $\Re(z) > -\epsilon$ mit $\epsilon > 0$ vorausgesetzt wurde, existiert für $f(z)$ in diesem Gebiet eine Darstellung als Taylorreihe:

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} z^k \ .$$

Diese Entwicklung setzen wir in B.3.6 ein und erhalten:

$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty} \left[\sum_{k=0}^{n} f(k) - \int_0^n f(x)dx \right] &= \frac{f(0)}{2} + i \int_0^\infty \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \frac{(iy)^k - (-iy)^k}{e^{2\pi y} - 1} dy \\
&= \frac{f(0)}{2} + i \int_0^\infty \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \frac{(iy)^k - (-1)^k (iy)^k}{e^{2\pi y} - 1} dy \\
&= \frac{f(0)}{2} + i \int_0^\infty \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f^{(2k-1)}(0)}{(2k-1)!} \frac{2(iy)^{2k-1}}{e^{2\pi y} - 1} dy \\
&= \frac{f(0)}{2} + 2 \int_0^\infty \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f^{(2k-1)}(0)}{(2k-1)!} \frac{(-1)^k (y)^{2k-1}}{e^{2\pi y} - 1} dy \ .
\end{aligned}$$

Wenn wir uns jetzt auf Funktionen $f(z)$ beschränken , für die das Integral gleichmäßig konvergiert, dann können wir Intergration und Summation miteinander vertauschen:

$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty} \left[\sum_{k=0}^{n} f(k) - \int_0^n f(x)dx \right] &= \frac{f(0)}{2} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k f^{(2k-1)}(0)}{(2k-1)!} \int_0^\infty \frac{(y)^{2k-1}}{e^{2\pi y} - 1} dy \\
&= \frac{f(0)}{2} - \sum_{k=1}^{\infty} f^{(2k-1)}(0) \left\{ \frac{2\,(-1)^{k-1}}{(2\pi)^{2k}} \left[\frac{1}{(2k-1)!} \int_0^\infty \frac{t^{2k-1}}{e^t - 1} dy \right] \right\} \ .
\end{aligned}$$

Hier erkennen wir in der eckigen Klammer mit D.4.2 die Riemannsche Zeta-Funktion $\zeta(2k)$ und in der geschweiften Klammer mit D.10.10 den Bernoulli-Koeffizienten $\frac{1}{(2k)!} B_{2k}$:

$$\lim_{n\to\infty} \left[\sum_{k=0}^{n} f(k) - \int_0^n f(x)dx \right] = \frac{f(0)}{2} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} f^{(2k-1)}(0) \ , \tag{B.3.7}$$

was gerade die Euler-Maclaurin-Summenformel in der Form B.2.12 ist.

B.4 Literatur zu Summenformeln

- Abramowitz u. Stegun (1970), Handbook of Mathematical Functions,
- Arfken u. Weber (2001), Mathematical Methods for Physicists,
- Dowling (1989), The Mathematics of the Casimir Effect,
- Whittacker u. Watson (1969), A Course in Modern Analysis,
- Wang u. Guo (1989), Special Functions,
- Hardy (1963), Divergent Series.

C Einführung in die Gamma-Funktion

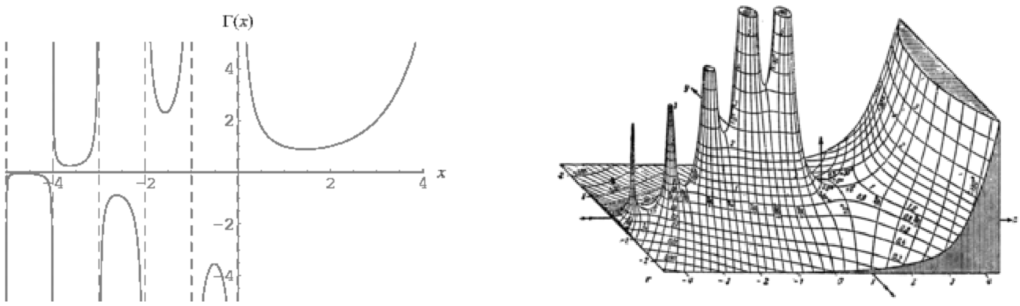
C.1 Leonhard Euler (1707 – 1783)

Leonhard Euler wurde 1707 in Basel geboren. Sein Vater, ein protestantischer Pfarrer, war mit dem Mathematiker Johann Bernoulli befreundet, der sehr schnell die Begabungen des jungen Leonhard Euler erkannte und einen großen Einfluß auf dessen Entwicklung und Ausbildung hatte. 1727 nahm Euler eine Anstellung an der Akademie St. Petersburg an. 1734 heiratete er in St. Petersburg Katharina Gsell. Von ihren dreizehn Kindern überlebten nur fünf die frühe Kindheit. Eine schwere Infektion Eulers 1735 hatte in den folgenden Jahren die völlige Erblindung seines rechten Auges zur Folge. 1741 folgte Euler einer Einladung Friedrichs des Großen an die Akademie Berlin. 1766 mußte er die Akademie nach einem Zerwürfnis mit Friedrich wieder verlassen und nahm eine Einladung Katharinas der Großen an, an die Akademie St. Petersburg zurückzukehren. Gleichzeitig erblindete er nun auch auf dem linken Auge aufgrund eines Katarakts (Grauer Star). Dennoch konnte er mit der Hilfe zweier seiner Söhne und seines Sekretärs Nicolas Fuß weiter arbeiten und publizieren. 1771 verlor er bei einem Großfeuer in St. Petersburg sein Haus und fast sein Leben. 1773 starb seine Frau Katharina. Drei Jahre danach heiratete er die Halbschwester seiner verstorbenen Frau Salome Abigail Gsell. 1783 starb Euler nach dem Mittagessen mit seiner Familie mitten in einem Gespräch über den neuentdeckten Planeten Uranus an einer Hirnblutung.

Abbildung C.1: L. Euler
E. Handmann (c. 1756), PD.
[http://de.wikipedia.org/wiki/Leonhard_Euler]

Euler forschte und veröffentlichte auf allen Gebieten der damaligen Mathematik und Physik: Analysis (insb. Differential-, Integral-Rechnung, Reihen, Variationsrechnung), Geometrie, Graphentheorie, Algebra, Anfänge der Topologie, Zahlentheorie, Mechanik, Astronomie, Elastizitätstheorie, Hydrodynamik, Optik, Musiktheorie. Euler gilt als einer der größten und produktivsten Mathematiker aller Zeiten. Das Euler Kommittee der Schweizer Akademie der Wissenschaften hat im Jahr 1907 mit der wissenschaftlich editierten Neuveröffentlichung aller Bücher und Publikationen Eulers (*Opera Omnia*) begonnen und will diese Aufgabe mit dem letzten Band Nr.74 im Jahr 2010 vollendet haben (wobei die wissenschaftliche Korrespondenz Eulers anschließend in einer Zusatzreihe erscheinen soll). [Quelle: Wikipedia-Euler (2010)].

C.2 Integral-Darstellung der Gamma-Funktion



(a) $\Gamma(\Re(z))$, Alessio Damato (2005), CC BY-SA 3.0. [http://en.wikipedia.org/wiki/Gamma_function]

(b) $|\Gamma(z)|$, [Jahnke u. Emde (1909), PD]

Abbildung C.2: Gamma-Funktion

Die Eulersche Gamma-Funktion, auch 2. Eulersches Integral genannt, ist definiert als:

$$\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \qquad \text{für } x \in \mathbb{R},\ x > 0 \ . \tag{C.2.1}$$

Zunächst sieht man unschwer, daß dieses Integral tatsächlich für $x > 0$ konvergiert, denn:

$$x > 0 \ \Rightarrow \ \exists \, [r, R] \quad \text{mit } r > 0 \text{ und } x \in [r, R] \ ,$$

und die folgende Funktion $g(t)$ ist dann eine Majorante für $t^{x-1}e^{-t}$:

$$g(t) = \begin{cases} t^{r-1} & \text{für } 0 < t \leq 1 \ , \\ t^R e^{-t} & \text{für } t \geq 1 \ . \end{cases}$$

$$\Gamma(x) \leq \int_0^\infty g(t)dt = \int_0^1 g(t)dt + \int_1^\infty g(t)dt = \int_0^1 t^{r-1}dt + \int_1^\infty t^R e^{-t}dt < \infty \ .$$

Aus der Definitions-Gleichung C.2.1 folgt direkt:

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty e^{-t}dt = -e^{-t}\Big|_0^\infty = 1 \ , \tag{C.2.2}$$

$$\Gamma(x+1) = \int_0^\infty t^x e^{-t} dt = t^x(-e^{-t})\Big|_0^\infty - x\int_0^\infty t^{x-1}(-e^{-t})dt = x\int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}dt$$

$$= x\Gamma(x) \,, \tag{C.2.3}$$

$$\Gamma(n+1) = n! \quad \text{mit } \Gamma(1) = 0! = 1 \quad \text{und } \Gamma(2) = 1! = 1 \,. \tag{C.2.4}$$

Den häufig benötigten Wert

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \int_0^\infty t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} dt$$

kann man folgendermaßen bestimmen:
zunächst substituieren wir $t = \frac{x^2}{2}$, $dt = x\,dx$ und erhalten

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \int_0^\infty \sqrt{2}\,x^{-1}\,e^{-\frac{x^2}{2}}\,x\,dx = \sqrt{2}\int_0^\infty e^{-\frac{x^2}{2}}\,dx = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{x^2}{2}}\,dx \,,$$

$$\Gamma(\frac{1}{2})\cdot\Gamma(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}\,dx\,dy = \frac{1}{2}\int_0^\infty\int_0^{2\pi} e^{-\frac{r^2}{2}}\,r\,d\varphi\,dr = \frac{2\pi}{2}\int_0^\infty e^{-\frac{r^2}{2}}\,r\,dr \,.$$

Mit der Substitution $s = r^2$, $ds = 2r\,dr$ folgt

$$\Gamma(\frac{1}{2})\cdot\Gamma(\frac{1}{2}) = \pi\int_0^\infty e^{-\frac{s}{2}}\,\frac{1}{2}\,ds = \frac{\pi}{2}(-2e^{-\frac{s}{2}})\Big|_0^\infty = \pi \quad \Rightarrow \quad \Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi} \,. \tag{C.2.5}$$

C.3 Fortsetzung der Gamma-Funktion

Mit Hilfe von C.2.3 kann $\Gamma(x)$ für $x < 0$ fortgesetzt werden ($n \in \mathbb{N}$):

$$\Gamma(x+n) = (x+n-1)(x+n-2)\,\cdots\,(x+1)(x)\,\Gamma(x) \quad \Rightarrow$$

$$\Gamma(x) = \frac{1}{x(x+1)\,\cdots\,(x+n-1)}\,\Gamma(x+n) \,. \tag{C.3.1}$$

Wenn $(x+n) \in]0,1[$, so wird hierdurch $\Gamma(x)$ im Intervall $]-n,-n+1[$ definiert.

Mit dieser Definition kann $\Gamma(x)$ nun auch als $\Gamma(z)$, $z \in \mathbb{C}$, in die komplexe Ebene fortgesetzt werden und ist überall holomorph, außer bei $x = \Re(z) \in \{0,-1,-2,\ldots\}$, wo ein einfacher Pol vorliegt:

$$\operatorname*{Res}_{z=-n+1}\Gamma(z) = \frac{\Gamma(1)}{(-n+1)(-n+2)\,\cdots\,(-1)} = \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \quad \Rightarrow$$

$$\operatorname*{Res}_{z=-n}\Gamma(z) = \frac{(-1)^n}{n!} \,. \tag{C.3.2}$$

C.4 Die Beta-Funktion

Die Beta-Funktion, auch 1. Eulersches Integral genannt, ist definiert als:

$$B(x,y) = \int_0^1 (1-t)^{x-1}(t)^{y-1} dt \ . \tag{C.4.1}$$

Die Beta-Funktion ist zunächst definiert für $x, y \in \mathbb{R}$, $x, y > 0$ und kann für $x, y \in \mathbb{C}$, $\Re(x), \Re(y) > 0$ in die komplexe Ebene fortgesetzt werden.

Die Substitution

$$t = \frac{u}{1+u} \ , \ u = \frac{t}{1-t} \ , \ dt = (\frac{1}{1+u} + \frac{-u}{(1+u)^2})\, du = \frac{1}{(1+u)^2}\, du$$

liefert eine weitere, häufig anzuteffende Form der Beta-Funktion

$$B(x,y) = \int_0^\infty \frac{u^{y-1}}{(1+u)^{x+y}}\, du \ . \tag{C.4.2}$$

Die Beta-Funktion hängt folgendermaßen mit der Gamma-Funktion zusammen:

$$\Gamma(x)\Gamma(y) = \int_0^\infty \int_0^\infty s^{x-1} t^{y-1} e^{-(s+t)}\, ds\, dt \ .$$

Mit einer ersten Substitution der Integrationsvariablen $s = u^2$, $t = v^2$ und einer anschließenden zweiten Substitution $u = r \cdot \cos\varphi$, $v = r \cdot \sin\varphi$ und einer anschließenden dritten Substitution $s = r^2$, $t = \cos^2\varphi$ wird daraus:

$$\begin{aligned}
\Gamma(x)\Gamma(y) &= 4 \int_0^\infty \int_0^\infty u^{2x-1} v^{2y-1} e^{-(u^2+v^2)}\, du\, dv \\
&= 4 \int_0^\infty e^{-r^2} r^{2(x+y)-1}\, dr \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^{2x-1}(\varphi)\, \sin^{2y-1}(\varphi)\, d\varphi \\
&= 2 \int_0^\infty s^{(x+y)-1}\, e^{-s}\, ds \int_1^0 t^{x-1}(1-t)^{y-1}\, (-\frac{1}{2})\, dt \\
&= \int_0^\infty s^{(x+y)-1}\, e^{-s}\, ds \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}\, dt \\
&= \Gamma(x+y)\, B(y,x) \ ,
\end{aligned}$$

$$B(x,y) = B(y,x) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \ . \tag{C.4.3}$$

Hiermit läßt sich auf anderem Weg nochmals C.2.5 ableiten:

$$\Gamma(\frac{1}{2})^2 = \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(1)} = B(\frac{1}{2},\frac{1}{2}) = \int\limits_0^1 (1-t)^{-\frac{1}{2}}(t)^{-\frac{1}{2}} dt \ .$$

Mit der Substitution $t = \sin^2\varphi$, $dt = 2\,\sin\varphi\cos\varphi\,d\varphi$ folgt

$$\Gamma(\frac{1}{2})^2 = \int\limits_0^1 (1-t)^{-\frac{1}{2}}(t)^{-\frac{1}{2}} dt = \int\limits_0^{\pi/2} (\cos^2\varphi)^{-\frac{1}{2}}(\sin^2\varphi)^{-\frac{1}{2}}\, 2\,\sin\varphi\cos\varphi\,d\varphi$$

$$= 2\int\limits_0^{\pi/2} d\varphi = \pi \quad \Rightarrow$$

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi} \ . \tag{C.4.4}$$

C.5 Reflektions-Formel der Gamma-Funktion

Eine wichtige Beziehung ist die Komplement-Formel oder Reflektions-Formel der Gamma-Funktion:

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = B(x,1-x) = \frac{\pi}{sin(\pi x)} \ . \tag{C.5.1}$$

Beweis.

$$B(x,1-x) = B(1-x,x) = \int\limits_0^1 (1-t)^{-x}(t)^{x-1} dt \ .$$

Wir führen die folgende Substitution durch:

$$t = \frac{\tau}{\tau+1} \ \Rightarrow\ \tau t + t - \tau = 0 \ \Rightarrow\ \tau = \frac{-t}{t-1} = \frac{t}{1-t} \ ,$$

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\tau+1} - \frac{\tau}{(\tau+1)^2} = \frac{1}{(\tau+1)^2} \ ,$$

$$B(x,1-x) = \int\limits_0^\infty (1-\frac{\tau}{\tau+1})^{-x}(\frac{\tau}{\tau+1})^{x-1}\,\frac{1}{(\tau+1)^2}\,d\tau$$

$$= \int_0^\infty (\frac{1}{\tau+1})^{-x} \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)^{x-1}} \frac{1}{(\tau+1)^2} \, d\tau$$

$$= \int_0^\infty \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)} \, d\tau \ .$$

Daß dieses Integral gerade den Wert $\frac{\pi}{\sin(\pi x)}$ hat, zeigt man am leichtesten mit Hilfe der Funktionentheorie.

Sei also $f(\tau) = \frac{\tau^{x-1}}{\tau+1}$ der in die komplexe τ-Ebene fortgesetzte Integralkern von $B(x, 1-x)$. Die Funktion $g(\tau) = \tau^{x-1}$ ist mehrdeutig, wenn $(x-1)$ nicht ganzzahlig ist: bei jedem Umlauf um den Ursprung in Gegenuhrzeiger-Richtung kommt ein multiplikativer Faktor $e^{2\pi i(x-1)}$hinzu. Man kann $g(\tau)$ jetzt eindeutig machen, indem man die komplexe τ-Ebene entlang der positiven reellen Achse aufschneidet und das Argument von $g(\tau)$ am oberen Ufer des Schnittes frei definiert - wir wählen hier $\arg(g(\tau)) = -\pi$ und erhalten damit $g(\tau) = \tau^{x-1} e^{-i\pi(x-1)}$ (hier jetzt mit $\tau \in \mathbb{R}$). Auf der negativen reellen Achse haben wir $\arg(g(\tau)) = -\pi + \pi = 0$ und damit $g(\tau) = \tau^{x-1}$ (auch hier mit $\tau \in \mathbb{R}$). Auf der positiven reellen Achse am unteren Ufer des Schnittes haben wir $\arg(g(\tau)) = -\pi + 2\pi = \pi$ und damit $g(\tau) = \tau^{x-1} e^{i\pi(x-1)}$ (auch hier mit $\tau \in \mathbb{R}$).

Wir wollen den Residuen-Satz ausnutzen und wählen den folgenden geschlossenen Integrationsweg L mit den Kreisen C_R und $-C_\epsilon$, wobei C_R im Gegenuhrzeigersinn durchlaufen wird und C_ϵ im Uhrzeigersinn (deshalb die Bezeichnungsweise $-C_\epsilon$) :

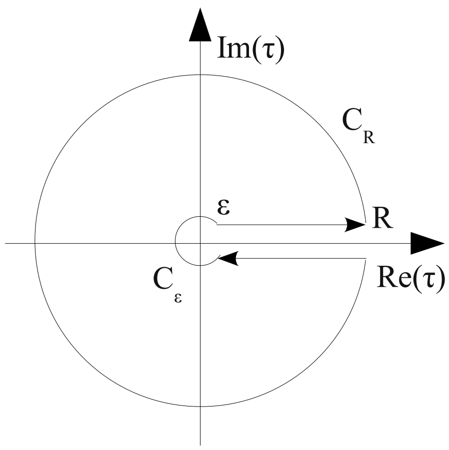


Abbildung C.3: Integrationsweg von $f(\tau)$

$$\oint_L f(\tau) \, d\tau = \int_{(0,+)}^{(\infty,+)} f(\tau) \, d\tau + \int_{C_R} f(\tau) \, d\tau + \int_{(\infty,-)}^{(0,-)} f(\tau) \, d\tau + \int_{-C_\epsilon} f(\tau) \, d\tau \ .$$

Das Integral über C_R verschwindet für $R \to \infty$, denn:

$$\left| \int_{C_R} f(\tau)\, d\tau \right| = \left| \int_{C_R} \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)}\, d\tau \right| \leq 2\pi R \,\frac{R^{x-1}}{R+1} = 2\pi\,\frac{R^x}{R+1} \quad \Rightarrow$$

$$\lim_{R\to\infty} \left| \int_{C_R} f(\tau)\, d\tau \right| \leq \lim_{R\to\infty} 2\pi\,\frac{R^x}{R+1} = 0 \quad \text{für } x < 1\ .$$

Ebenso verschwindet das Integral über C_ϵ für $\epsilon \to 0$, denn:

$$\left| \int_{-C_\epsilon} f(\tau)\, d\tau \right| = \left| -\int_{C_\epsilon} f(\tau)\, d\tau \right| = \left| \int_{C_\epsilon} \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)}\, d\tau \right| \leq 2\pi\epsilon\,\frac{\epsilon^{x-1}}{\epsilon+1} = 2\pi\,\frac{\epsilon^x}{\epsilon+1} \quad \Rightarrow$$

$$\lim_{\epsilon\to 0} \left| \int_{C_\epsilon} f(\tau)\, d\tau \right| \leq \lim_{\epsilon\to 0} 2\pi\,\frac{\epsilon^x}{\epsilon+1} = 0 \quad \text{für } 0 < x\ .$$

Also gilt für $0 < x < 1$:

$$\begin{aligned}
\oint_L f(\tau)\, d\tau &= \int_0^\infty \frac{\tau^{x-1} e^{-i\pi(x-1)}}{(\tau+1)}\, d\tau + \int_\infty^0 \frac{\tau^{x-1} e^{i\pi(x-1)}}{(\tau+1)}\, d\tau \\
&= (e^{-i\pi(x-1)} - e^{i\pi(x-1)}) \int_0^\infty \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)}\, d\tau \\
&= (-e^{-i\pi x} - (-1) e^{i\pi x}) \int_0^\infty \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)}\, d\tau \\
&= 2i\, \sin(\pi x) \int_0^\infty \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)}\, d\tau\ .
\end{aligned}$$

Gleichzeitig folgt aus dem Residuen-Satz:

$$\begin{aligned}
\oint_L f(\tau)\, d\tau &= 2\pi i \sum_k \operatorname*{Res}_{\tau=\tau_k} f(\tau) = 2\pi i \sum_k \operatorname*{Res}_{\tau=\tau_k} \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)} \\
&= 2\pi i \operatorname*{Res}_{\tau=-1} \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)} = 2\pi i\, |\tau|^{x-1}\Big|_{\tau=-1} = 2\pi i\ .
\end{aligned}$$

Jetzt setzen wir die beiden Ausdrücke für $\oint_L f(\tau)\, d\tau$ gleich:

$$2i\, \sin(\pi x) \int_0^\infty \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)}\, d\tau = 2\pi i \quad \Rightarrow \quad \int_0^\infty \frac{\tau^{x-1}}{(\tau+1)}\, d\tau = \frac{\pi}{\sin(\pi x)}\ .$$

womit der Beweis von C.5.1 abgeschlossen ist. □

C.6 Zwei trigonometrische Integrale

Auch die folgenden beiden trigonometrischen Integrale lassen sich auf die Gamma-Funktion zurückführen:

$$u(x) := \int_0^\infty t^{x-1}\cos(t)\,dt \quad \text{für}\, t \in \mathbb{R}\ ,$$

$$v(x) := \int_0^\infty t^{x-1}\sin(t)\,dt \quad \text{für}\, t \in \mathbb{R}\ .$$

$$u(x) + iv(x) = \int_0^\infty t^{x-1}e^{it}\,dt = (i)^x \int_0^\infty \tau^{x-1}e^{-\tau}\,d\tau = (i)^x\,\Gamma(x) \quad (\text{mit}\, t = i\tau)\ ,$$

$$u(x) - iv(x) = \int_0^\infty t^{x-1}e^{-it}\,dt = (-i)^x \int_0^\infty \tau^{x-1}e^{-\tau}\,d\tau(-i)^x\,\Gamma(x) \quad (\text{mit}\, t = -i\tau)\ .$$

$$u(x) = \frac{1}{2}((i)^x + (-i)^x)\,\Gamma(x) = \frac{1}{2}((e^{i\frac{\pi}{2}})^x + (e^{-i\frac{\pi}{2}})^x)\,\Gamma(x) = \cos(\frac{\pi x}{2})\,\Gamma(x)\ ,$$

$$v(x) = \frac{1}{2i}((i)^x - (-i)^x)\,\Gamma(x) = \frac{1}{2i}((e^{i\frac{\pi}{2}})^x - (e^{-i\frac{\pi}{2}})^x)\,\Gamma(x) = \sin(\frac{\pi x}{2})\,\Gamma(x)\ .$$

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty t^{x-1}\cos(t)\,dt = \cos(\frac{\pi x}{2})\,\Gamma(x)\ , \\ &\int_0^\infty t^{x-1}\sin(t)\,dt = \sin(\frac{\pi x}{2})\,\Gamma(x)\ . \end{aligned} \tag{C.6.1}$$

C.7 Einige Abschätzungen zur Exponential-Funktion

Zunächst soll mittels vollständiger Induktion bewiesen werden:

$$(1-a)^n \geq 1 - na\ . \tag{C.7.1}$$

Für $n = 1$ ist die Aussage offensichtlich erfüllt. Sei also die Aussage für n gültig, dann folgt für $n+1$:

$$(1-a)^{n+1} = (1-a)(1-a)^n \geq (1-a)(1-na)$$

$$= 1 - a - na + na^2 > 1 - (n+1)a \; . \quad \square$$

Um Abschätzungen zur Exponential-Funktion zu gewinnen, kann man von der folgenden Ungleichung ausgehen ($y \in \mathbb{R}$):

$$1 + y < 1 + \frac{y^1}{1!} + \frac{y^2}{2!} + \cdots < 1 + y + y^2 + \cdots = \frac{1}{1-y} \qquad \Rightarrow$$

$$1 + y < e^y < \frac{1}{1-y} \; . \tag{C.7.2}$$

Setzen wir in der linken Ungleichung $y = \frac{1}{n}$ und in der rechten Ungleichung $y = \frac{1}{n+1}$, so folgt:

$$\ln(1 + \frac{1}{n}) < \frac{1}{n} \quad \text{und}$$

$$\frac{1}{n+1} < \ln(\frac{1}{1 - \frac{1}{n+1}}) = \ln(\frac{n+1}{n}) = \ln(1 + \frac{1}{n}) \quad \Rightarrow$$

$$\frac{1}{n+1} < \ln(1 + \frac{1}{n}) < \frac{1}{n} \; . \tag{C.7.3}$$

Setzen wir in C.7.2 $y = \frac{t}{n}$ und potenzieren mit $-n$, so folgt:

$$(1 - \frac{t}{n})^n < e^{-t} < (1 + \frac{t}{n})^{-n} \; . \tag{C.7.4}$$

Aus der linken Ungleichung läßt sich mit Hilfe von $(1 + \frac{t}{n})^n < e^t$ und C.7.1 noch eine weitere hilfreiche Ungleichung ableiten:

$$\begin{aligned} 0 &< e^{-t} - (1 - \frac{t}{n})^n = e^{-t}(1 - e^t(1 - \frac{t}{n})^n) \\ &< e^{-t}(1 - (1 + \frac{t}{n})^n(1 - \frac{t}{n})^n) = e^{-t}(1 - (1 - \frac{t^2}{n^2})^n) \\ &< e^{-t}(1 - (1 - n\frac{t^2}{n^2})) = e^{-t}\,\frac{t^2}{n} \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$0 < e^{-t} - (1 - \frac{t}{n})^n < e^{-t}\,\frac{t^2}{n} \; . \tag{C.7.5}$$

C.8 Die Produkt-Darstellung der Gamma-Funktion

Euler kannte bereits die folgende Produkt-Darstellung der Gamma-Funktion, doch erst Gauß hat diese Darstellung publiziert:

$$\Gamma(x) = \lim_{n\to\infty} \frac{n^x \cdot n!}{x\,(x+1)\,\cdots\,(x+n)}\ . \tag{C.8.1}$$

Gelegentlich wird auch die folgende Darstellung benützt:

$$\Gamma(x) = \lim_{n\to\infty} \frac{n^x \cdot (n-1)!}{x\,(x+1)\,\cdots\,(x+n-1)}\ . \tag{C.8.2}$$

Wegen $\lim_{n\to\infty} \frac{n}{(x+n)} = 1$ sind beide Darstellungen äquivalent.

Beweis. Euler hat die Exponential-Funktion definiert als

$$e^t = \lim_{n\to\infty} (1+\frac{t}{n})^n\ . \tag{C.8.3}$$

Betrachtet man jetzt die Folge der Funktionen

$$\Gamma_n(x) := \int_0^n t^{x-1}(1-\frac{t}{n})^n\,dt \tag{C.8.4}$$

für $n\to\infty$, so kann man zeigen, daß diese Folge gegen $\Gamma(x)$ konvergiert:

$$\begin{aligned}(\Gamma(x)-\Gamma_n(x)) &= \int_0^\infty t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt \\ &= \int_0^n t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt + \int_n^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt\ .\end{aligned}$$

Das letzte Integral geht für $n\to\infty$ gegen 0, denn

$$\begin{aligned}\Gamma(x) &= \int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt = \int_0^n t^{x-1}e^{-t}\,dt + \int_n^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt \\ &= \lim_{n\to\infty}\int_0^n t^{x-1}e^{-t}\,dt + \lim_{n\to\infty}\int_n^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt = \Gamma(x) + \lim_{n\to\infty}\int_n^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt \quad \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\lim_{n\to\infty}\int_n^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt = 0\ .$$

Zu jedem vorgegebenen kleinen ϵ gibt es also ein n_0, mit $\int_{n_0}^{\infty} t^{x-1}e^{-t}\,dt < \epsilon$:

$$\lim_{n\to\infty}(\Gamma(x)-\Gamma_n(x)) = \lim_{n\to\infty}\int_0^n t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt + \lim_{\epsilon\to 0}\epsilon$$

$$= \lim_{n\to\infty}\left[\int_0^{n_0} t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt + \int_{n_0}^{n} t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt\right]$$

$$< \lim_{n\to\infty}\int_0^{n_0} t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt + \lim_{n\to\infty}\int_{n_0}^{n} t^{x-1}e^{-t}\,dt$$

$$< \lim_{n\to\infty}\int_0^{n_0} t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt + \lim_{n\to\infty}\int_{n_0}^{\infty} t^{x-1}e^{-t}\,dt$$

$$< \lim_{n\to\infty}\int_0^{n_0} t^{x-1}(e^{-t}-(1-\frac{t}{n})^n)\,dt + \lim_{\epsilon\to 0}\epsilon\ .$$

Mit Hilfe von C.7.5 folgt

$$\lim_{n\to\infty}(\Gamma(x)-\Gamma_n(x)) < \lim_{n\to\infty}\int_0^{n_0} t^{x-1}e^{-t}\,\frac{t^2}{n}\,dt = \lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\int_0^{n_0} t^{x+1}\,dt = 0\ .$$

Nachdem wir jetzt wissen, daß

$$\Gamma(x) = \lim_{n\to\infty}\Gamma_n(x)\ , \tag{C.8.5}$$

wollen wir diese $\Gamma_n(x)$ mit der Substitution $t = n\cdot\tau$ und partieller Integration noch etwas weiter umformen:

$$\Gamma_n(x) = \int_0^n t^{x-1}(1-\frac{t}{n})^n\,dt = n^x\int_0^1 \tau^{x-1}(1-\tau)^n\,d\tau$$

$$= n^x\,[\frac{1}{x}\tau^x(1-\tau)^n\Big|_{\tau=0}^{1} - \frac{n}{x}\int_0^1 \tau^x(-1)(1-\tau)^{n-1}\,d\tau]$$

$$= n^x\,[\frac{n}{x}\int_0^1 \tau^x(1-\tau)^{n-1}\,d\tau] = n^x\,[\frac{n(n-1)}{x(x+1)}\int_0^1 \tau^{x+1}(1-\tau)^{n-2}\,d\tau]$$

$$= \ldots$$

$$= n^x\,\frac{n!}{x(x+1)\cdots(x+n)}\ .$$

Damit ist C.8.1 bewiesen. □

Weierstraß hat diese Produkt-Darstellung der Gamma-Funktion noch etwas weiterentwickelt:

$$\begin{aligned}
\Gamma_n(x) &= n^x \, \frac{n!}{x(x+1)\cdots(x+n)} \\
&= \frac{1}{x} \, \frac{e^{x \log n}}{(1+\frac{x}{1})(1+\frac{x}{2})\cdots(1+\frac{x}{n})} \\
&= \frac{1}{x} \, e^{x(\log n - \frac{1}{1} - \frac{1}{2} - \ldots - \frac{1}{n})} \, \frac{e^{\frac{x}{1}} e^{\frac{x}{2}} \cdots e^{\frac{x}{n}}}{(1+\frac{x}{1})(1+\frac{x}{2})\cdots(1+\frac{x}{n})} \\
&= \frac{1}{x} \, e^{x(\log n - \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k})} \prod_{k=1}^{n} \frac{e^{\frac{x}{k}}}{(1+\frac{x}{k})} \\
&= e^{-\gamma_n x} \, \frac{1}{x} \prod_{k=1}^{n} \frac{e^{\frac{x}{k}}}{(1+\frac{x}{k})} \; .
\end{aligned}$$

Jetzt stellt sich die Frage nach der Konvergenz der Folge γ_n:

$$\gamma_n := \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} - \ln(n) \; . \tag{C.8.6}$$

Wir führen eine weitere Folge δ_n ein mit $\delta_n < \gamma_n$ und zeigen mit Hilfe von C.7.3, daß γ_n monoton fällt, während δ_n monton steigt, womit die Konvergenz nachgewiesen ist:

$$\begin{aligned}
&\delta_n := \gamma_n - \frac{1}{n} \quad \Rightarrow \delta_n < \gamma_n \; , \\
&\gamma_{n+1} - \gamma_n = \frac{1}{n+1} - \ln(1 + \frac{1}{n}) < 0 \; , \\
&\delta_{n+1} - \delta_n = \frac{1}{n} - \ln(1 + \frac{1}{n}) > 0 \; .
\end{aligned}$$

Der Grenzwert der Folge γ_n heißt Euler-Mascheroni Konstante

$$\gamma := \lim_{n\to\infty} \left[\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} - \ln(n) \right] \approx 0.5772157 \; . \tag{C.8.7}$$

Und damit wird die Weierstraßsche Produktdarstellung der Gamma-Funktion zu

$$\Gamma(x) = e^{-\gamma x} \, \frac{1}{x} \prod_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\frac{x}{k}}}{(1+\frac{x}{k})} \; . \tag{C.8.8}$$

C.9 Eine Multiplikationsformel für die Gamma-Funktion

Sei $m \in \mathbb{N}$, dann gilt für die Gamma-Funktion die folgende Multiplikationsformel:

$$\prod_{r=0}^{m-1} \Gamma(x + \frac{r}{m}) := \Gamma(x) \cdot \Gamma(x + \frac{1}{m}) \cdot \Gamma(x + \frac{2}{m}) \cdot \ldots \cdot \Gamma(x + \frac{m-1}{m})$$

$$= (2\pi)^{\frac{m-1}{2}}\, m^{\frac{1}{2}-mx}\, \Gamma(mx)\ . \tag{C.9.1}$$

Beweis. Mit Hilfe der Produktdarstellung C.8.2 betrachten wir zunächst den folgenden Ausdruck $Q_m(x)$, von dem wir zeigen wollen, daß er von x unabhängig ist:

$$Q_m(x) := \frac{m^{mx}}{m} \cdot \frac{\prod_{r=0}^{m-1} \Gamma(x + \frac{r}{m})}{\Gamma(mx)}$$

$$= m^{mx-1} \cdot \frac{\prod_{r=0}^{m-1} \lim_{n\to\infty} \frac{n^{x+\frac{r}{m}} \cdot (n-1)!}{(x+\frac{r}{m})\,(x+\frac{r}{m}+1) \cdots (x+\frac{r}{m}+n-1)}}{\lim_{n\to\infty} \frac{n^{mx} \cdot (n-1)!}{mx\,(mx+1) \cdots (mx+n-1)}}$$

$$= m^{mx-1} \cdot \frac{\prod_{r=0}^{m-1} \lim_{n\to\infty} \frac{n^{x+\frac{r}{m}} \cdot (n-1)!}{(x+\frac{r}{m})\,(x+\frac{r}{m}+1) \cdots (x+\frac{r}{m}+n-1)}}{\lim_{n\to\infty} \frac{(mn)^{mx} \cdot (mn-1)!}{mx\,(mx+1) \cdots (mx+mn-1)}}\ .$$

In der letzten Zeile haben wir im Nenner n durch $m \cdot n$ ersetzt, was ja im $\lim_{n\to\infty}$ das gleiche ergibt. Damit folgt:

$$Q_m(x) = m^{mx-1} \cdot \lim_{n\to\infty} \frac{((n-1)!)^m\, n^{mx+\frac{m-1}{2}}\, \prod_{r=0}^{m-1} \frac{1}{(x+\frac{r}{m})\,(x+\frac{r}{m}+1) \cdots (x+\frac{r}{m}+n-1)}}{(mn)^{mx} \cdot (mn-1)!\, \frac{1}{mx\,(mx+1) \cdots (mx+mn-1)}}$$

$$= m^{mx-1} \cdot \lim_{n\to\infty} \frac{((n-1)!)^m\, n^{mx+\frac{m-1}{2}}\, m^{mn}\, \frac{x\,(x+\frac{1}{m}) \cdots (x+\frac{mn-1}{m})}{\prod_{r=0}^{m-1} (x+\frac{r}{m})\,(x+\frac{r}{m}+1) \cdots (x+\frac{r}{m}+n-1)}}{(mn)^{mx} \cdot (mn-1)!}\ .$$

Wegen $x + \frac{mn-1}{m} = x + \frac{m-1}{m} + n - 1$ folgt

$$\frac{x\,(x+\frac{1}{m})\,\cdots\,(x+\frac{mn-1}{m})}{\prod_{r=0}^{m-1} (x+\frac{r}{m})\,(x+\frac{r}{m}+1)\,\cdots\,(x+\frac{r}{m}+n-1)} = 1\ .$$

Damit ist $Q_m(x)$ tatsächlich von x unabhängig:

$$Q_m := Q_m(x) = m^{mx-1} \cdot \lim_{n\to\infty} \frac{((n-1)!)^m\, n^{mx+\frac{m-1}{2}}\, m^{mn}}{(mn)^{mx} \cdot (mn-1)!}$$

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{((n-1)!)^m\, n^{\frac{m-1}{2}}\, m^{mn-1}}{(mn-1)!}\ .$$

Jetzt berechnen wir Q_m^2 als $Q_m(x)^2$ an der Stelle $x = \frac{1}{m}$:

$$Q_m^2 = Q_m(\frac{1}{m})^2 = (\frac{m^{m\frac{1}{m}}}{m} \cdot \frac{\prod_{r=0}^{m-1} \Gamma(\frac{1}{m} + \frac{r}{m})}{\Gamma(m\frac{1}{m})})^2 = (\prod_{r=0}^{m-1} \Gamma(\frac{r+1}{m}))^2$$

$$= (\prod_{r=1}^{m-1} \Gamma(\frac{r}{m}))^2 = \prod_{r=1}^{m-1} \Gamma(\frac{r}{m}) \cdot \prod_{r=1}^{m-1} \Gamma(1 - \frac{r}{m}) = \prod_{r=1}^{m-1} \Gamma(\frac{r}{m}) \cdot \Gamma(1 - \frac{r}{m}) \ .$$

Mit C.5.1 folgt:

$$Q_m^2 = \prod_{r=1}^{m-1} \frac{\pi}{sin(\pi\frac{r}{m})} = \pi^{m-1} \prod_{r=1}^{m-1} \frac{1}{sin(\pi\frac{r}{m})} \ .$$

Dieser Ausdruck für Q_m^2 läßt sich noch weiter vereinfachen. Das Polynom $x^m - 1$ hat die m Nullstellen $e^{2\pi i \frac{r}{m}}$ mit $r \in \{0, 1, 2, \dots, m-1\}$. Daraus folgt:

$$\sum_{r=0}^{m-1} x^r = \frac{x^m - 1}{x - 1} = \prod_{r=1}^{m-1} (x - e^{2\pi i \frac{r}{m}}) \ . \tag{C.9.2}$$

Mit $x = 1$ erhalten wir:

$$m = \prod_{r=1}^{m-1} (1 - e^{2\pi i \frac{r}{m}}) = \prod_{r=1}^{m-1} e^{\pi i \frac{r}{m}} (e^{-\pi i \frac{r}{m}} - e^{\pi i \frac{r}{m}})$$

$$= \prod_{r=1}^{m-1} e^{\pi i \frac{m-1}{2}} (-2i \ \sin(\pi\frac{r}{m})) = 2^{m-1} \, i^{m-1} \, (-i)^{m-1} \prod_{r=1}^{m-1} \sin(\pi\frac{r}{m})$$

$$= 2^{m-1} \prod_{r=1}^{m-1} \sin(\pi\frac{r}{m}) \ . \tag{C.9.3}$$

Damit folgt jetzt für Q_m:

$$Q_m = \pi^{\frac{m-1}{2}} (\prod_{r=1}^{m-1} \frac{1}{sin(\pi\frac{r}{m})})^{\frac{1}{2}} = (2\pi)^{\frac{m-1}{2}} \, m^{-\frac{1}{2}} \ ,$$

und schließlich

$$\prod_{r=0}^{m-1} \Gamma(x + \frac{r}{m}) = Q_m m^{-mx+1} \Gamma(mx) = (2\pi)^{\frac{m-1}{2}} \, m^{\frac{1}{2} - mx} \, \Gamma(mx) \ . \qquad \square$$

Häufiger wird diese Formel für den Fall $m = 2$ benötigt:

$$\Gamma(x) \cdot \Gamma(x + \frac{1}{2}) = \pi^{\frac{1}{2}} \, 2^{1-2x} \, \Gamma(2x) \ . \tag{C.9.4}$$

C.10 Die Digamma-Funktion und $\ln(\Gamma(x))$

Die Digamma-Funktion $F(x)$ ist als die logarithmische Ableitung der Gamma-Funktion $\Gamma(1+x)$ definiert.

$$F(x) := \frac{d}{dx}(\ln(\Gamma(1+x))) = \frac{\Gamma'(1+x)}{\Gamma(1+x)} \;. \tag{C.10.1}$$

Häufig wird als Digamma-Funktion auch $\psi(x)$, die logarithmische Ableitung von $\Gamma(x)$ bezeichnet und verwendet. Der Zusammenhang beider Digamma-Funktionen ist:

$$\psi(x) := \frac{d}{dx}(\ln(\Gamma(x))) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)} \tag{C.10.2}$$

$$= F(x-1) \;. \tag{C.10.3}$$

Damit besteht folgender einfacher Zusammenhang zwischen beiden Digamma-Funktionen:

$$F(x) = \frac{d}{dx}(\ln(\Gamma(1+x))) = \frac{d}{dx}(\ln(x \cdot \Gamma(x))) = \frac{d}{dx}(\ln(x) + \ln(\Gamma(x)))$$

$$= \frac{1}{x} + \psi(x) \;. \tag{C.10.4}$$

Die folgende Reihenentwicklung der Digamma-Funktion $F(x)$ wird auch im Zusammenhang mit der Hurwitzschen Zeta-Funktion benötigt:

$$F(x) := \frac{d}{dx}(\ln(\Gamma(1+x))) = \frac{\Gamma'(1+x)}{\Gamma(1+x)} = \frac{d}{dx}(\ln(x\Gamma(x)))$$

$$= \frac{d}{dx}(\ln(e^{-\gamma x} \prod_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\frac{x}{k}}}{(1+\frac{x}{k})})) = \frac{d}{dx}(-\gamma x + \sum_{k=1}^{\infty}(\frac{x}{k} - \ln(1+\frac{x}{k})))$$

$$= -\gamma + \sum_{k=1}^{\infty}(\frac{1}{k} - \frac{1}{1+\frac{x}{k}} \cdot \frac{1}{k}) = -\gamma + \sum_{k=1}^{\infty}(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+x})$$

$$= -\gamma + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x}{k\,(k+x)} \;. \tag{C.10.5}$$

Jetzt sollen noch zwei wichtige Integraldarstellungen für $\psi(x)$ und $\ln(\Gamma(x))$ hergeleitet werden:

$$\psi(x) = -\frac{1}{2x} + \ln x - \int_0^{\infty} \frac{2\,y}{x^2+y^2} \cdot \frac{1}{e^{2\pi y}-1}\, dy \;, \tag{C.10.6}$$

und die sogenannte 2. Binetsche Formel für $\ln(\Gamma(x))$:

$$\ln(\Gamma(x)) = -\frac{1}{2}\ln(x) + x(\ln x - 1) + \int_0^{\infty} \frac{2\,\arctan(\frac{y}{x})}{e^{2\pi y}-1}\, dy + \frac{1}{2}\ln(2\pi) \;. \tag{C.10.7}$$

Beweis. Aus C.10.5 folgt für $\psi'(x)$:

$$\psi'(x) = F'(x-1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(k+x-1)^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+x)^2} \; . \tag{C.10.8}$$

Zu einer Integraldarstellung von C.10.8 gelangen wir, indem wir erkennen, daß $\psi'(x)$ identisch mit der Hurwitzschen Zeta-Funktion $\zeta(2,x)$ ist (siehe F.1.1) und dann die entsprechende Integraldarstellung F.3.2 für $\zeta(2,x)$ einsetzen. Dabei schreiben wir zur Abkürzung $\Theta := \arctan(\frac{y}{x})$:

$$\psi'(x) = \frac{1}{2x^2} + \frac{1}{x} + \int_0^{\infty} \frac{2\,\sin(2\Theta)}{(x^2+y^2)} \cdot \frac{1}{e^{2\pi y}-1}\, dy \; .$$

Mit $\sin(2\Theta) = 2\,\sin(\Theta)\,\cos(\Theta) = \frac{2\,y\,x}{(x^2+y^2)}$ folgt:

$$\psi'(x) = \frac{1}{2x^2} + \frac{1}{x} + \int_0^{\infty} \frac{4\,x\,y}{(x^2+y^2)^2} \cdot \frac{1}{e^{2\pi y}-1}\, dy \; .$$

Das Integral konvergiert gleichmäßig für $\Re(x) \geq \delta > 0$, denn:

$$\left| \int_0^{\infty} \frac{4\,x\,y}{(x^2+y^2)^2} \cdot \frac{1}{e^{2\pi y}-1}\, dy \right| \leq \int_0^{\infty} \frac{4\,y}{|x^2|} \cdot \frac{1}{e^{2\pi y}-1}\, dy \leq \frac{1}{\delta} \int_0^{\infty} \frac{4\,y}{e^{2\pi y}-1}\, dy \; .$$

Damit können wir also $\psi(x)$ durch einfache Integration erhalten:

$$\psi(x) = -\frac{1}{2x} + \ln(x) - \int_0^{\infty} \frac{2\,y}{(x^2+y^2)} \cdot \frac{1}{e^{2\pi y}-1}\, dy + C_1 \, .$$

Durch nochmalige Integration ergibt sich $\ln(\Gamma(x))$. Dabei verwenden wir noch (siehe auch F.3.3):

$$\frac{d}{dx}\arctan(x) = \frac{1}{1+x^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx}\arctan(\frac{y}{x}) = \frac{-\frac{y}{x^2}}{1+(\frac{y}{x})^2} = -\frac{y}{(x^2+y^2)}$$

und erhalten:

$$\ln(\Gamma(x)) = -\frac{1}{2}\ln(x) + x(\ln x - 1) + \int_0^{\infty} \frac{2\,\arctan(\frac{y}{x})}{e^{2\pi y}-1}\, dy + C_1 x + C_2 \; . \tag{C.10.9}$$

Jetzt bleiben noch die beiden Integrationskonstanten C_1 und C_2 zu bestimmen. Whittacker u. Watson (1969) leiten zu diesem Zweck in Kapitel 12.31 die 1. Binetsche Formel für $\ln(\Gamma(x))$ her, die sich dann auch zur Ableitung der Stirling Formel für die Gamma-Funktion nutzen läßt. Wir wählen hier den einfacheren Weg, C_1 und C_2 aus der Kenntnis der Stirling Formel zu berechnen, die wir im Zusammenhang mit asymptotischen Entwicklungen in I.5.9 beweisen werden. Die Stirling Formel der Gamma-Funktion gilt asymptotisch für große Wert von x:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \approx \sqrt{2\pi}\, e^{-x}\, x^{x+\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow$$

$$\ln(\Gamma(x)) = \ln(\frac{1}{x}\Gamma(x+1)) = -\ln(x) + \ln(\Gamma(x+1))$$
$$\approx -\ln(x) + \frac{1}{2}\ln(2\pi) - x + (x+\frac{1}{2})\ln(x) = \frac{1}{2}\ln(2\pi) - x + (x-\frac{1}{2})\ln(x)\ . \tag{C.10.10}$$

Wir erkennen in diesem Ausdruck der Stirling Formel bereits eine gewissen Ähnlichkeit mit C.10.9. Es bleibt die Frage, ob wir das Integral in C.10.9 für große Werte von x geeignet abschätzen können. Wegen $0 \leq \arctan(\frac{y}{x}) \leq \frac{y}{x}$ (siehe F.3.4) gilt:

$$\lim_{x\to\infty} \int_0^\infty \frac{2\,\arctan(\frac{y}{x})}{e^{2\pi y}-1}\,dy \leq \lim_{x\to\infty} \frac{1}{x} \int_0^\infty \frac{2\,y}{e^{2\pi y}-1}\,dy = 0\ .$$

Durch Gleichsetzen von C.10.9 für große Werte von x mit C.10.10 folgt:

$$-\frac{1}{2}\ln(x) + x(\ln x - 1) + C_1 x + C_2 \stackrel{!}{=} \frac{1}{2}\ln(2\pi) - x + (x-\frac{1}{2})\ln(x) \quad \Rightarrow$$

$$C_1 = 0\,, \quad C_2 = \frac{1}{2}\ln(2\pi)\ ,$$

womit C.10.6 und C.10.7 bewiesen sind. □

C.11 Die Funktionswerte von $(\Gamma^{-1})'(0)$ und $\Gamma'(1)$

Häufiger werden die beiden Werte $\frac{d}{dx}\Gamma^{-1}(x)\Big|_{x=0}$ und $\frac{d}{dx}\Gamma(x)\Big|_{x=1}$ benötigt.

$$(\Gamma^{-1})(x) = x\, e^{\gamma s} \prod_{n=1}^{\infty} [(1+\frac{x}{n})e^{-\frac{x}{n}}] \quad \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx}(\Gamma^{-1})(x) = e^{\gamma x} \prod_{n=1}^{\infty} [(1+\frac{x}{n})e^{-\frac{x}{n}}] + x\,\frac{d}{dx}(\,e^{\gamma x} \prod_{n=1}^{\infty} [(1+\frac{x}{n})e^{-\frac{x}{n}}]) \quad \Rightarrow$$

$$(\Gamma^{-1})'(0) = 1\ . \tag{C.11.1}$$

$\Gamma'(1)$ erhalten wir über die Digamma-Funktion $F(x)$, die logarithmische Ableitung der Gamma-Funktion $\Gamma(1+x)$, an der Stelle $x = 0$:

$$F(0) = \frac{\Gamma'(1)}{\Gamma(1)} = \Gamma'(1) = -\gamma\ . \tag{C.11.2}$$

C.12 Produktdarstellung der Sinus-Funktion

Aus der Weierstraßschen Produktdarstellung der Gamma-Funktion läßt sich unschwer eine wichtige Produktdarstellung der Sinus-Funktion ableiten. Mit C.2.3 und C.5.1 folgt:

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \Gamma(x)(-x)\Gamma(-x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)} \ ,$$

$$\begin{aligned} \sin(\pi x) &= -\frac{\pi}{x}\,\frac{1}{\Gamma(x)\Gamma(-x)} = -\frac{\pi}{x}\left(e^{\gamma x}\, x \prod_{k=1}^{\infty}\frac{(1+\frac{x}{k})}{e^{\frac{x}{k}}}\right)\left(e^{-\gamma x}\,(-x)\prod_{k=1}^{\infty}\frac{(1-\frac{x}{k})}{e^{-\frac{x}{k}}}\right) \\ &= \pi x \prod_{k=1}^{\infty}(1-\frac{x^2}{k^2}) \ . \end{aligned} \tag{C.12.1}$$

C.13 Gamma-Funktion und logarithmische Konvexität

Sehr schön ist auch der Beweis von Artin (Artin (1931)), daß die Forderung von „logarithmischer Konvexität” zusammen mit der Funktionalgleichung $f(x+1) = xf(x)$ und dem Anfangswert $f(1) = 1$ die Gamma-Funktion $\Gamma(x)$ eindeutig definiert.

Eine Funktion $f(x)$ heißt konvex, wenn für ein festes $x_0 \in \mathbb{R}$ die Funktion der Differenzenquotienten

$$\varphi(x, x_0) := \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

eine monton zunehmende Funktion darstellt.

Eine Funktion $f(x)$ heißt logarithmisch konvex, wenn $\ln(f(x))$ eine konvexe Funktion ist.

Beweis. Sei jetzt $0 < x \leq 1$, $n \geq 2$, so folgt aus der logarithmischen Konvexität (am Punkt $x_0 = n$):

$$\frac{\ln(f(-1+n)) - \ln(f(n))}{(-1+n)-n} \leq \frac{\ln(f(x+n)) - \ln(f(n))}{(x+n)-n} \leq \frac{\ln(f(1+n)) - \ln(f(n))}{(1+n)-n} \ .$$

Mit Hilfe der Funktionalgleichung und des Anfangswertes für $f(x)$ können wir das umformen zu:

$$\frac{\ln((n-2)!) - \ln((n-1)!)}{(-1)} \leq \frac{\ln(f(x+n)) - \ln((n-1)!)}{(x+n)-n} \leq \frac{\ln((n)!) - \ln((n-1)!)}{(1)} \ ,$$

$$x\, \ln(n-1) \leq \ln(f(x+n)) - \ln((n-1)!) \leq x\, \ln(n) \ ,$$

$$\ln[(n-1)^x (n-1)!] \leq \ln(f(x+n)) \leq \ln[(n)^x (n-1)!] \ .$$

Da ln eine monoton wachsende Funktion ist, folgt:

$$(n-1)^x(n-1)! \le f(x+n) \le (n)^x(n-1)! \;,$$

$$\frac{(n-1)^x(n-1)!}{x(x+1)\cdots(x+n-1)} \le f(x) \le \frac{(n)^x(n-1)!}{x(x+1)\cdots(x+n-1)} \;,$$

$$\frac{(n-1)^x(n-1)!}{x(x+1)\cdots(x+n-1)} \le f(x) \le \frac{(n)^x(n)!}{x(x+1)\cdots(x+n-1)(x+n)} \cdot \frac{(x+n)}{n} \;.$$

Die linke Ungleichung gilt für jedes $n \ge 2$, also auch für $n+1$:

$$\frac{(n)^x(n)!}{x(x+1)\cdots(x+n)} \le f(x) \le \frac{(n)^x(n)!}{x(x+1)\cdots(x+n-1)(x+n)} \cdot \frac{(x+n)}{n} \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{n}{(x+n)}\, f(x) \le \frac{n^x n!}{x(x+1)\cdots(x+n)} \le f(x) \qquad \Rightarrow$$

$$f(x) = \lim_{n\to\infty} \frac{n^x n!}{x(x+1)\cdots(x+n)} \;.$$

Wegen C.8.1 ist $f(x)$ also gerade $\Gamma(x)$. □

C.14 Literatur zur Gamma-Funktion

- Abramowitz u. Stegun (1970), Handbook of Mathematical Functions,
- Weisstein (1999), Gamma Function, MathWorld (Internet),
- Sebah u. Gourdon (2002), Introduction to the Gamma Function (Internet),
- Arfken u. Weber (2001), Mathematical Methods for Physicists,
- Smirnow (1972b), Lehrgang der Höheren Mathematik, III/2,
- Whittacker u. Watson (1969), A Course in Modern Analysis,
- Wang u. Guo (1989), Special Functions,
- Kratzer u. Franz (1963), Transzendente Funktionen,
- Artin (1931), Einführung in die Theorie der Gamma-Funktion,
- Jahnke u. Emde (1909), Tables of Functions with Formulae and Curves (Funktionentafeln).

D Einführung in die Riemannsche Zeta-Funktion

D.1 Bernhard Riemann (1826 – 1866)

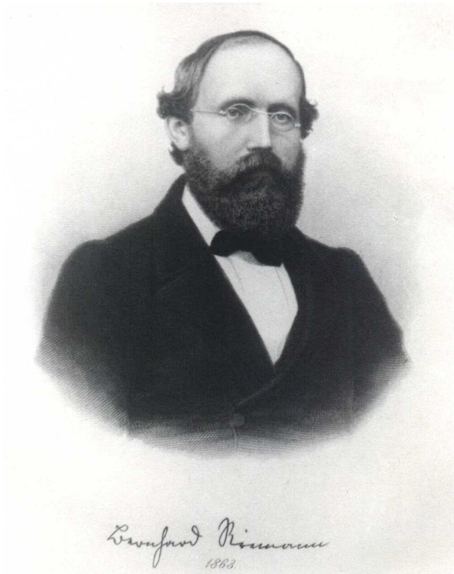


Abbildung D.1: B. Riemann
A. Weger (1863), PD.
[http://de.wikipedia.org/wiki/
Bernhard_Riemann]

Bernhard Riemann wurde 1826 in Breselenz bei Dannenberg in Niedersachsen geboren. Wie sein Vater sollte er zunächst Pfarrer werden, aber bereits auf dem Gymnasium fiel dem Rektor Riemanns außergewöhnliche Begabung für Mathematik auf. Es heißt, Riemann habe das von seinem Rektor entliehene Buch von Legendre über Zahlentheorie mit 859 Seiten in einer Woche gelesen. Er begann ein Studium der Mathematik in Göttingen, wo er erstmals Gauss hörte, der aber für Studenten der Anfangssemester unzugänglich war. Riemann wechselte dann nach Berlin zu Jacobi und Dirchlett, die ihn unterstützten und förderten, und dann wieder zurück nach Göttingen. Er promovierte mit einer Arbeit über Funktionentheorie. Um als Privatdozent in Göttingen lehren zu dürfen, mußten die Kandidaten drei Themenvorschläge für ihre Probevorlesung einreichen - und üblicherweise wurde vom Dekan der Fakultät der oberste Vorschlag dieser Liste ausgewählt. Riemanns Vorschlag Nr. 3 lautete „Grundlagen der Geometrie”, und als Gauss das las, wählte er als Dekan dieses Thema für Riemanns Probevorlesung. Überrascht legte Riemann all seine Untersuchungen zum Thema „Elektrizität, Magnetismus, Licht und Gravitation” zur Seite und schuf im Jahr 1854 in den 2 Monaten bis zu seiner Probevorlesung die Grundlagen der Differentialgeometrie. Nun, Gauss war begeistert! 1855 starb Gauss und Dirichlett folgte ihm in Göttingen nach. Als auch Dirichlett im Jahr 1859 starb, erhielt Riemann den Göttinger Lehrstuhl für Mathematik. 1862 heiratete er Elise Koch, mit der er eine Tochter hatte. Riemann erkrankte an TBC und suchte Linderung im milderen Klima des Tessin, wo er dann mit nur 39 Jahren am Lago Maggiore verstarb.

Neben der Begründung der Differentialgeometrie in seiner Probevorlesung sind besonders wichtig Riemanns zahlreiche Beiträge zur Funktionentheorie, seine Arbeit '*Über die*

Anzahl der Primzahlen unter einer gegebenen Größe' von 1859 mit den Erkenntnissen zur Zeta-Funktion, sowie weitere Arbeiten zur Theorie der Integration, der Fourier-Transformation, der hypergeometrische Differentialgleichung, der hyperbolischen Differentialgleichungen und Stabilitätsproblemen von Lösungen partieller Differentialgleichungen der mathematischen Physik. Seine italienischen Mathematiker-Freunde Betti und Beltrami beinflußte Riemann bei ihren Forschungen zur algebraischen Geometrie und Topologie. [Quelle: Wikipedia-Riemann (2010)].

D.2 Reihendarstellung der Zeta-Funktion

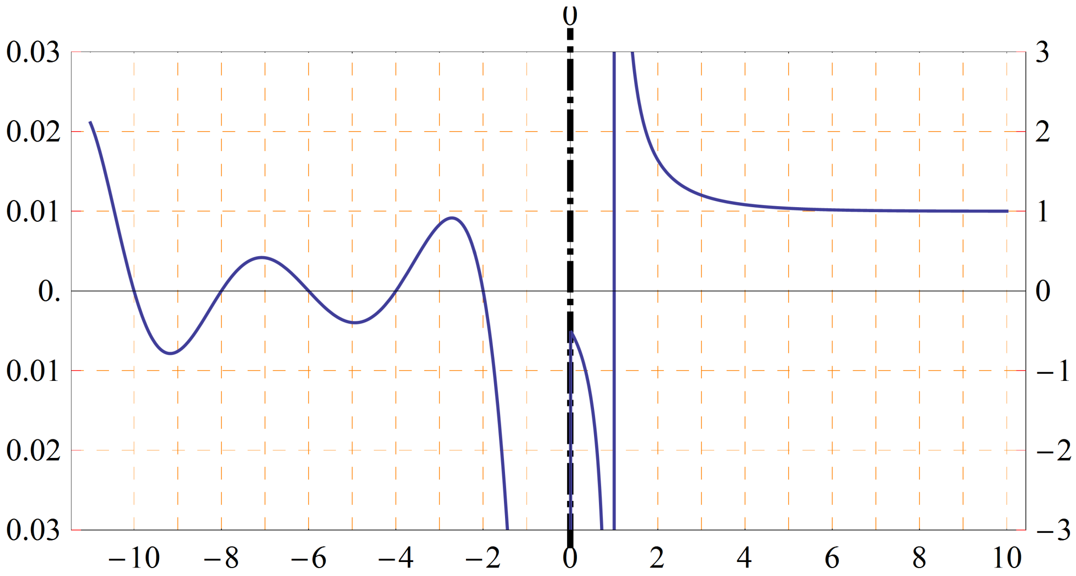


Abbildung D.2: Riemannsche Zeta-Funktion
Infovarius (2012), PD.
[https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Zeta_function_graph.png]

Euler hat im Zusammenhang seiner Untersuchungen von Potenzreihen die Zeta-Funktion definiert als

$$\zeta(s) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \quad \text{mit } s \in \mathbb{N},\ s > 1\ . \tag{D.2.1}$$

Riemann hat diese Definition dann ins Komplexe erweitert

$$\zeta(z) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} \quad \text{mit } z \in \mathbb{C},\ \Re(z) > 1\ . \tag{D.2.2}$$

D.3 Produktdarstellung der Zeta-Funktion

Die Darstellung der Zeta-Funktion D.7.2 ist auch deshalb interessant, weil eine ähnliche Konstruktion zu einer wichtigen Produktdarstellung der Zeta-Funktion führt, die zuerst von Euler gefunden wurde und die algebraischen Zahlentheorie begründet hat.

$$\zeta(z)\,(1-2^{-z}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^z} = \sum_{\substack{n=1 \\ n\notin 2\mathbb{N}}}^{\infty} \frac{1}{n^z} \,.$$

In dieser Summe fallen alle Terme weg, in denen n durch 2 teilbar ist, d.h. $n \in 2\mathbb{N}$. Multipliziert man $\zeta(z)\,(1-2^{-z})$ jetzt mit $(1-3^{-z})$, so fallen in der Summe zusätzlich noch alle Terme weg, in denen n auch noch durch 3 teilbar ist, d.h. $n \in 2\mathbb{N} \cup 3\mathbb{N}$. Dieses Verfahren kann man nun für *alle* Primzahlen fortsetzen und erhält

$$\zeta(z)\,(1-2^{-z})(1-3^{-z})(1-5^{-z})\cdots = 1 \quad \Rightarrow \quad \zeta(z) \prod_{p(\mathrm{prim})=2}^{\infty} (1-p^{-z}) = 1 \quad \Rightarrow$$

$$\zeta(z) = \frac{1}{\prod_{p(\mathrm{prim})=2}^{\infty}(1-p^{-z})} = \prod_{p(\mathrm{prim})=2}^{\infty} (1+p^{-z}+p^{-2z}+\ldots) \,. \tag{D.3.1}$$

D.4 Integraldarstellung der Zeta-Funktion

Mit Hilfe der Gamma-Funktion $\Gamma(z)$ läßt sich die sehr häufig vorkommende Integraldarstellung der Zeta-Funktion gewinnen:

$$\zeta(z)\cdot\Gamma(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} \cdot \Gamma(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} \cdot \int_0^{\infty} y^{z-1} e^{-y}\, dy \,. \tag{D.4.1}$$

Mit der Substitution $y = nx$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \zeta(z)\cdot\Gamma(z) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-nx}\, dx = \int_0^{\infty} \left(x^{z-1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} \right) dx \\ &= \int_0^{\infty} x^{z-1} \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}}\, dx = \int_0^{\infty} \frac{x^{z-1}}{e^x-1}\, dx \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^{\infty} \frac{x^{z-1}}{e^x-1}\, dx \,. \tag{D.4.2}$$

Auch für diese Integraldarstellung der Zeta-Funktion gilt, ebenso wie für die Reihendarstellung F.1.1, der Gültigkeitsbereich $z \in \mathbb{C}$, $\Re(z) > 1$. Dies sieht man sofort, wenn man sich den folgenden Anteil des obigen Integrals anschaut:

$$\int_0^{1} \frac{x^{z-1}}{(1+x+O(x^2))-1}\, dx = \int_0^{1} (x^{z-2}(1-O(x^1))\, dx = \frac{1}{z-1}\,(1+O(1)) \,.$$

D.5 Analytische Fortsetzung der Zeta-Funktion nach $0 < \Re(z) < 1$

Zunächst ist die Zeta-Funktion ja nur für $\Re(z) > 1$ definiert. Riemann hat nun gezeigt, wie sich die Zeta-Funktion mit Hilfe der Eulerschen Summenformel analytisch in den Bereich $0 < \Re(z) < 1$ fortsetzen läßt.

Wir verwenden hier für die Eulersche Summenformel folgende Schreibweise (siehe B.2.11, bzw. Richter u. Schiekel (2004), 6.1 und 6.2):

$$\sum_{n=a}^{b-1} f(n) = \int_a^b f(x)\,dx + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_k}{k!}\, f^{(k-1)}(x)\Big|_a^b + (-1)^{m+1} \int_a^b \frac{B_m(\{x\})}{m!}\, f^{(m)}(x)\,dx\ . \tag{D.5.1}$$

Dabei sind die B_k die Bernoulli-Zahlen und die $B_m(x)$ die Bernoulli-Polynome (B.2 oder Richter u. Schiekel (2004)) und $\{x\} = x - [x] = x \mod 1$ bezeichne den Dezimalbruchteil von x. Wir verwenden hier im Zusammenhang mit der Zeta-Funktion die Eulersche Summenformel mit $a = 1$, $b = \infty$ und dem Funktionsreihen-Index $m = 1$. Deshalb benötigen wir die Bernoulli-Zahlen und Bernoulli-Polynome nur zum Index $m = 1$, also $B_1 = -\frac{1}{2}$ und $B_1(\{x\}) = \{x\} - \frac{1}{2} = x - [x] - \frac{1}{2}$. Wir beginnen zunächst wieder mit dem Bereich $\Re(z) > 1$, und erhalten damit:

$$\begin{aligned}
\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} &= \int_1^{\infty} \frac{1}{x^z}\,dx + \frac{B_1}{1!} \cdot \frac{1}{x^z}\Big|_1^{\infty} + \int_1^{\infty} \frac{B_1(\{x\})}{1!}\, \frac{(-z)}{x^{z+1}}\,dx \\
&= \frac{-1}{z-1} \cdot \frac{1}{x^{z-1}}\Big|_1^{\infty} + (-\frac{1}{2}) \cdot \frac{1}{x^z}\Big|_1^{\infty} - z \int_1^{\infty} \frac{x - [x] - \frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx \\
&= \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2} - z \int_1^{\infty} \frac{x - [x] - \frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx\ .
\end{aligned}$$

Bei dieser Darstellung der Zeta-Funktion sieht man, daß der Integralterm für $\Re(z) > 0$ konvergiert und eine reguläre Funktion definiert, denn $B_1(\{x\}) = x - [x] - \frac{1}{2}$ ist eine periodische und beschränkte Funktion. Bei $z = 1$ hat $\zeta(z)$ einen Pol erster Ordnung mit Residuum 1. Also kann man jetzt die Zeta-Funktion im Bereich $\Re(z) > 0$ *definieren* als

$$\zeta(z) := \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2} - z \int_1^{\infty} \frac{x - [x] - \frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx\ . \tag{D.5.2}$$

Bevor wir uns weiter mit dieser analytischen Fortsetzung der Zeta-Funktion beschäftigen, soll zunächst noch der $\lim_{z\to 1} \zeta(z)$ untersucht werden.

$$\lim_{z\to 1}\,[\zeta(z) - \frac{1}{z-1}] = \int_1^{\infty} \frac{[x] - x + \frac{1}{2}}{x^2}\,dx + \frac{1}{2} = \int_1^{\infty} \frac{[x] - x}{x^2}\,dx + \frac{1}{2}(-1)\frac{1}{x}\Big|_1^{\infty} + \frac{1}{2}$$

$$= \lim_{n\to\infty} \int_1^n \frac{[x]-x}{x^2}\,dx + 1 = \lim_{n\to\infty} \left[\int_1^n \frac{[x]}{x^2}\,dx - \int_1^n \frac{1}{x}\,dx\right] + 1$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left[\int_1^n \frac{[x]}{x^2}\,dx - \log x\Big|_1^n\right] + 1$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left[\sum_{m=1}^{n-1} \int_m^{m+1} \frac{m}{x^2}\,dx - \log n\right] + 1$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left[\sum_{m=1}^{n-1} \frac{-m}{x}\Big|_m^{m+1} - \log n\right] + 1$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left[1 + \sum_{m=1}^{n-1} (\frac{-m}{m+1} + 1) - \log n\right]$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left[1 + \sum_{m=1}^{n-1} \frac{1}{m+1} - \log n\right]$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left[1 + \sum_{k=2}^{n} \frac{1}{k} - \log n\right] \quad \Rightarrow$$

$$\lim_{z\to 1} [\zeta(z) - \frac{1}{z-1}] = \lim_{n\to\infty} \left[\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} - \log n\right] := \gamma\ . \tag{D.5.3}$$

Hierbei ist γ die Euler-Mascheroni Konstante, der wir schon bei der Weierstraßschen Produktdarstellung der Gamma-Funktion begegnet sind (siehe C.8.7).

Wir kehren zurück zur Definition der Zeta-Funktion in D.5.2 und untersuchen diese Darstellung im Bereich $0 < \Re(z) < 1$ noch etwas genauer. Dieser Bereich ist deshalb so wichtig, weil sich hier, wie später gezeigt wird, alle imaginären Nullstellen von $\zeta(z)$ befinden (welche ja Gegenstand der berühmten Riemannschen Vermutung sind).

$$\zeta(z) = z \int_1^\infty \frac{[x]-x+\frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx + \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2}$$

$$= z \int_1^\infty \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx + \frac{z}{2} \int_1^\infty \frac{1}{x^{z+1}}\,dx + \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2}$$

$$= z \int_1^\infty \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx + \frac{z}{2}(\frac{-1}{z})\frac{1}{x^z}\Big|_1^\infty + \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2}$$

$$= z \int_1^\infty \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx + \frac{1}{2} + \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2} = z \int_1^\infty \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx + \frac{z}{z-1}\ .$$

$\frac{z}{z-1}$ läßt sich jetzt in ein geeignetes Integral über $\frac{[x]-x}{x^{z+1}}$ umformen

$$z\int_0^1 \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx = z\int_0^1 \frac{-x}{x^{z+1}}\,dx = -z\int_0^1 \frac{1}{x^z}\,dx = \frac{z}{z-1}\,\frac{1}{x^{z-1}}\Big|_0^1 = \frac{z}{z-1}\ ,$$

und damit erhalten wir die wichtige Darstellung von $\zeta(z)$ auf $0 < \Re(z) < 1$

$$\zeta(z) = z\int_1^\infty \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx + z\int_0^1 \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx = z\int_0^\infty \frac{[x]-x}{x^{z+1}}\,dx\ . \tag{D.5.4}$$

D.6 Analytische Fortsetzung der Zeta-Funktion nach $-1 < \Re(z) < 0$

Ebenso wie wir oben $\frac{z}{z-1}$ in ein geeignetes Integral über $\frac{[x]-x}{x^{z+1}}$ umgeformt haben, wollen wir hier $\frac{1}{z-1}+\frac{1}{2}$ in ein geeignetes Integral über $\frac{[x]-x+\frac{1}{2}}{x^{z+1}}$ umformen

$$z\int_0^1 \frac{[x]-x+\frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx = -z\int_0^1 \frac{1}{x^z}\,dx + \frac{z}{2}\int_0^1 \frac{1}{x^{z+1}}\,dx = \frac{z}{z-1}\,\frac{1}{x^{z-1}}\Big|_0^1 + \frac{z}{2}\,(\frac{-1}{z})\,\frac{1}{x^z}\Big|_0^1$$

$$= \frac{z}{z-1} - \frac{1}{2} = \frac{z}{z-1} - 1 + \frac{1}{2} = \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2}\ .$$

$$\begin{aligned}\zeta(z) &= z\int_1^\infty \frac{[x]-x+\frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx + \frac{1}{z-1} + \frac{1}{2}\\ &= z\int_1^\infty \frac{[x]-x+\frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx + z\int_0^1 \frac{[x]-x+\frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx\\ &= z\int_0^\infty \frac{[x]-x+\frac{1}{2}}{x^{z+1}}\,dx\ .\end{aligned} \tag{D.6.1}$$

Dies ist also eine geeignete Darstellung von $\zeta(z)$ im Bereich $-1 < \Re(z) < 0$.

D.7 Alternierende Zeta-Funktion (Dirichletsche Eta-Funktion)

Dirichlet hat in Analogie zu F.1.1 noch die alternierende Zeta-Funktion, auch Eta-Funktion genannt, eingeführt:

$$\eta(z) := \sum_{n=1}^\infty \frac{(-1)^{n-1}}{n^z} \quad \text{mit } z\in\mathbb{C},\ \Re(z) > 0\ . \tag{D.7.1}$$

Wir werden unten zeigen, daß der Gültigkeitsbereich dieser Darstellung der Eta-Funktion mit $z \in \mathbb{C}$, $\Re(z) > 0$ tatsächlich bedeutsam größer ist als der Gültigkeitsbereich der Reihendarstellung F.1.1 und der Integraldarstellung D.7.4 der Zeta-Funktion.

Aus der Eta-Funktion läßt sich eine weitere wichtige Darstellung der Zeta-Funktion gewinnen - und auch diese Darstellung der Zeta-Funktion ist jetzt für $z \in \mathbb{C}$, $\Re(z) > 0$ gültig, also auch im sog. kritischen Bereich der Zeta-Funktion $0 < \Re(z) < 1$:

$$\zeta(z) - \eta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n^z} + \frac{(-1)^n}{n^z} \right)$$

$$= 2 \sum_{n=2,4,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^z} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^z} = 2^{1-z} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} = 2^{1-z}\,\zeta(z) \quad \Rightarrow$$

$$\zeta(z) = \frac{1}{1-2^{1-z}}\,\eta(z) = \frac{1}{1-2^{1-z}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^z} \;. \tag{D.7.2}$$

Wie für die Zeta-Funktion läßt sich auch für die Eta-Funktion mit Hilfe der Gamma-Funktion eine Integraldarstellung angeben:

$$\eta(z) \cdot \Gamma(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^z} \cdot \Gamma(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^z} \cdot \int_0^{\infty} y^{z-1} e^{-y}\,dy \;. \tag{D.7.3}$$

Mit der Substitution $y = nx$ erhalten wir:

$$\eta(z) \cdot \Gamma(z) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-nx}\,dx = \int_0^{\infty} \left(x^{z-1} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1}\, e^{-nx} \right) dx$$

$$= \int_0^{\infty} \left(x^{z-1} (-1) \sum_{n=1}^{\infty} (-e^{-x})^n \right) dx = \int_0^{\infty} x^{z-1}\,(-1)\,\frac{(-e^{-x})}{1-(-e^{-x})}\,dx$$

$$= \int_0^{\infty} \frac{x^{z-1}}{e^x + 1}\,dx \quad \Rightarrow$$

$$\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^{\infty} \frac{x^{z-1}}{e^x+1}\,dx \;. \tag{D.7.4}$$

Für diese Integraldarstellung der Eta-Funktion gilt der gleiche Gültigkeitsbereich $z \in \mathbb{C}$, $\Re(z) > 0$ wie für die Reihendarstellung D.7.1. Dies sieht man sofort, wenn man sich den folgenden Anteil des obigen Integrals anschaut:

$$\int_0^1 \frac{x^{z-1}}{(1+O(x))+1}\,dx = \int_0^1 (x^{z-1}(1-O(x))\,dx = \frac{1}{z}\,(1+O(1)) \;.$$

Gelegentlich werden noch die beiden Werte $\eta(0)$ und $\eta(1)$ benötigt. $\eta(0)$ wird durch analytische Fortsetzung von D.7.2 und mittels des Wertes von $\zeta(0) = -\frac{1}{2}$ (siehe D.10.11) bestimmt:

$$\eta(0) = (1 - 2^1)\,\zeta(0) = -(-\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\ . \tag{D.7.5}$$

$\eta(1)$ können wir aus der Taylorreihe des Logarithmus bestimmen. Für $-1 < x \leq 1$ gilt:

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 + \ldots \quad \Rightarrow$$

$$\ln(2) = \ln(1+1) = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \ldots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} = \eta(1) \quad \Rightarrow$$

$$\eta(1) = \ln(2)\ . \tag{D.7.6}$$

D.8 Reflektions-Formel (Funktionalgleichung) der Zeta-Funktion

Sowohl in der Darstellung der Zeta-Funktion D.5.2, als auch in D.6.1, taucht im Zähler des Integranden die Funktion $[x] - x + \frac{1}{2}$ auf. Diese Funktion ist periodisch in den Intervallen $[n, n+1]$ mit $n \in \mathbb{N}$ und kann also in eine Fourier-Reihe entwickelt werden:

$$[x] - x + \frac{1}{2} = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(2\pi k x) + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin(2\pi k x)\ . \tag{D.8.1}$$

$$a_0 = 2\int_0^1 ([x] - x + \frac{1}{2})\,\cos(2\pi\cdot 0\cdot x)\,dx = 2\int_0^1 (-x + \frac{1}{2})\,dx = 2\,(-\frac{x^2}{2} + \frac{x}{2})\Big|_0^1 = 0\ .$$

$$\begin{aligned} a_k &= 2\int_0^1 ([x] - x + \frac{1}{2})\,\cos(2\pi\cdot k\cdot x)\,dx \\ &= -2\int_0^1 x\,\cos(2\pi\cdot k\cdot x)\,dx + \int_0^1 \cos(2\pi\cdot k\cdot x)\,dx \\ &= \frac{-2}{(2\pi)^2}\int_0^{2\pi} y\,\cos(k\cdot y)\,dy + \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos(k\cdot y)\,dy \end{aligned}$$

$$= \frac{-2}{(2\pi)^2} \left[\frac{y}{k} \sin(k \cdot y) \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \frac{1}{k} \sin(k \cdot y)\, dy \right] + \frac{1}{2\pi} \frac{1}{k} \sin(k \cdot y) \Big|_0^{2\pi}$$

$$= \frac{-2}{(2\pi)^2} \left[- \frac{(-1)}{k^2} \cos(k \cdot y) \Big|_0^{2\pi} \right] = 0 \; .$$

$$b_k = 2 \int_0^1 ([x] - x + \frac{1}{2}) \sin(2\pi \cdot k \cdot x)\, dx$$

$$= -2 \int_0^1 x \sin(2\pi \cdot k \cdot x)\, dx + \int_0^1 \sin(2\pi \cdot k \cdot x)\, dx$$

$$= \frac{-2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} y \sin(k \cdot y)\, dy + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin(k \cdot y)\, dy$$

$$= \frac{-2}{(2\pi)^2} \left[\frac{-y}{k} \cos(k \cdot y) \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \frac{-1}{k} \cos(k \cdot y)\, dy \right] + \frac{1}{2\pi} \frac{-1}{k} \cos(k \cdot y) \Big|_0^{2\pi}$$

$$= \frac{-2}{(2\pi)^2} \left[\frac{-2\pi}{k} \right] = \frac{1}{\pi k} \; .$$

Setzen wir diese Fourier-Koeffizienten ein in D.8.1, so erhalten wir

$$[x] - x + \frac{1}{2} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi k x)}{\pi k} \; . \tag{D.8.2}$$

Dies Ergebnis setzen wir jetzt in die Darstellung der Zeta-Funktion für den Bereich $-1 < \Re(z) < 0$ (D.6.1) ein:

$$\zeta(z) = z \int_0^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi k x)}{\pi k \cdot x^{z+1}}\, dx = \frac{z}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \int_0^{\infty} \frac{\sin(2\pi k x)}{x^{z+1}}\, dx$$

$$= \frac{z}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2\pi k)^z}{k} \int_0^{\infty} \frac{\sin(y)}{y^{z+1}}\, dy \; .$$

Für die Gamma-Funktion hatten wir in C.6.1 abgeleitet:

$$\int_0^{\infty} y^{z-1} \sin(y)\, dy = \sin(\frac{\pi z}{2}) \Gamma(z) \quad \Rightarrow \quad \int_0^{\infty} \frac{\sin(y)}{y^{z+1}}\, dy = \sin(-\frac{\pi z}{2}) \Gamma(-z) \; .$$

$$\zeta(z) = \frac{z}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2\pi k)^z}{k} \left[-\Gamma(-z) \sin(\frac{\pi z}{2})\right] = (-z) \cdot \Gamma(-z)\, 2^z\, \pi^{z-1} \sin(\frac{\pi z}{2}) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{1-z}}$$

$$= 2^z\, \pi^{z-1} \sin(\frac{\pi z}{2})\, \Gamma(1-z)\, \zeta(1-z)\ . \tag{D.8.3}$$

Dies ist die berühmte Reflektions-Formel oder Funktionalgleichung der Zeta-Funktion von Riemann. Diese Gleichung gilt zunächst für den Bereich $-1 < \Re(z) < 0$, ist aber analytisch für alle $z \in \mathbb{C}$ mit Ausnahme des Pols bei $z = 1$ und kann daher als analytische Fortsetzung von $\zeta(z)$ auf ganz $\mathbb{C} \setminus 1$ ausgedehnt werden.

D.9 Nullstellen der Zeta-Funktion

Aus der Eulerschen Produktdarstellung D.3.1 folgt, das $\zeta(z)$ für $\Re(z) > 1$ keine Nullstellen hat, da $\zeta(z)$ für $\Re(z) > 1$ ein konvergentes Produkt unendlich vieler nichtverschwindender Faktoren ist.

Sei jetzt $\Re(z) < 0$, dann folgt aus D.8.3, daß die einzigen Nullstellen von $\zeta(z)$ die Nullstellen von $\sin(\frac{\pi z}{2})$ sind, also $z \in \{-2, -4, -6, \ldots\}$. Diese Nullstellen heißen triviale Nullstellen von $\zeta(z)$.

Der *kritische Bereich* der Zeta-Funktion in Bezug auf Nullstellen ist der Bereich $0 < \Re(z) < 1$. Aus D.8.3 und dem Schwarzschen Reflektionsprinzip [$\zeta(z)$ analytisch und $\zeta(z)$ reell auf der reellen Achse $\Rightarrow$ $\zeta^*(z) = \zeta(z^*)$] folgt, daß die Nullstellen von $\zeta(z)$ immer paarweise und symmetrisch zur Linie $\Re(z) = \frac{1}{2}$ vorkommen müssen:

$$\zeta(\rho) = 0 \ \Rightarrow\ \zeta(1-\rho) = 0\ ,$$

$$\zeta(\rho) = 0 \ \Rightarrow\ \zeta(\rho^*) = 0\ ,$$

$$\Rightarrow \quad [\zeta(\rho) = 0 \ \Rightarrow\ \zeta(1-\rho^*) = 0] \quad \Rightarrow$$

$$\zeta(\alpha + i\beta) = 0 \ \Rightarrow\ \zeta(1 - \alpha + i\beta) = 0\ . \tag{D.9.1}$$

Das heißt, die Nullstellen von $\zeta(z)$ liegen auf der Linie $\Re(z) = \frac{1}{2}$ oder symmetrisch zu dieser Linie. Man kann nun zeigen, daß $\zeta(z)$ in dem kritischen Bereich $0 < \Re(z) < 1$ unendlich viele Nullstellen hat, ja sogar unendlich viele Nullstellen auf der Linie $\Re(z) = \frac{1}{2}$ (siehe Titchmarsh (1986)).

Die berühmte Riemannsche Vermutung, daß tatsächlich alle Nullstellen von $\zeta(z)$ im kritischen Bereich $0 < \Re(z) < 1$ auf der Linie $\Re(z) = \frac{1}{2}$ liegen, konnte bis heute weder bewiesen noch widerlegt werden - siehe Wikipedia-Riemann-Hypothesis (2010).

Wedeniwski (2005) hat mit seinem numerischen Projekt ZetaGrid (Stand Oktober 2005) für die ersten 100 Milliarden Nullstellen der Riemannschen Zeta-Funktion bis hin zu einem $\Im(z) < 29\,538\,618\,432\,236$ die Riemannsche Hyothese verifiziert.

D.10 Cotangensentwicklung, Zeta-Funktion und Bernoulli-Zahlen

Die Funktion $\cos(zx)$ als Funktion von x ist periodisch in $\frac{2\pi}{z}$ und kann daher in eine Fourierreihe entwickelt werden

$$\cos(zx) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(kx) + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin(kx) \; . \tag{D.10.1}$$

Da $\cos(zx)$ gerade ist, d.h. $\cos(zx) = \cos(-zx)$, sind alle $b_k = 0$.

$$a_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(zx)\, dx = \frac{2}{\pi} \frac{\sin(zx)}{z}\bigg|_{x=0}^{\pi} = \frac{2\,\sin(\pi z)}{\pi z} \; .$$

Im folgenden werden zwei Additionsformeln für die trigonometrischen Funktionen benötigt (siehe Abramowitz u. Stegun (1970), 4.3.16, 4.3.17)

$$\sin(x \pm y) = \sin(x)\cos(y) \pm \cos(x)\sin(y) \; ,$$

$$2\,\cos(x)\cos(y) = \cos(x+y) + \cos(x-y) \; .$$

$$\begin{aligned}
a_k &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(zx)\;\cos(kx)\, dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{2}[\cos(z+k)x + \cos(z-k)x]\, dx \\
&= \frac{1}{\pi} \left[\frac{\sin(z+k)x}{z+k} + \frac{\sin(z-k)x}{z-k}\right]_{x=0}^{\pi} = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\sin(\pi z + k\pi)}{z+k} + \frac{\sin(\pi z - k\pi)}{z-k}\right] \\
&= \frac{1}{\pi} \left[\frac{\sin(\pi z + k\pi)}{z+k} + \frac{\sin(\pi z - k\pi)}{z-k}\right] \\
&= \frac{1}{\pi} \left[\frac{\sin(\pi z)\cos(k\pi) + \cos(\pi z)\sin(k\pi)}{z+k} + \frac{\sin(\pi z)\cos(k\pi) - \cos(\pi z)\sin(k\pi)}{z-k}\right] \\
&= \frac{1}{\pi}\,(-1)^k\,\sin(\pi z)\,\left[\frac{1}{z+k} + \frac{1}{z-k}\right] = \frac{1}{\pi}\,(-1)^k\,\sin(\pi z)\,\frac{2z}{z^2-k^2} \\
&= -(-1)^k\,\frac{2z\,\sin(\pi z)}{\pi(k^2-z^2)} \; .
\end{aligned}$$

$$\cos(zx) = \frac{2z\,\sin(\pi z)}{\pi} \left[\frac{1}{2z^2} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2-z^2}\,\cos(kx)\right] \; . \tag{D.10.2}$$

Dies ist die Partialbruch-Zerlegung von $\cos(zx)$.
Aus D.10.2 läßt sich mit $x = 0$ leicht eine analoge Entwicklung für $\frac{\pi z}{\sin(\pi z)}$, bzw. für $\frac{y}{\sin(y)}$ gewinnen

$$1 = \frac{2z\,\sin(\pi z)}{\pi}\,\left[\frac{1}{2z^2} - \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k^2 - z^2}\,\cos(kx)\right]\ ,$$

$$\frac{\pi z}{\sin(\pi z)} = 1 - \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k\,2z^2}{k^2 - z^2}\ ,$$

$$\frac{y}{\sin(y)} = 1 - 2\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\,\frac{y^2}{k^2\pi^2 - y^2}\ . \tag{D.10.3}$$

Mit D.10.2 und $x = \pi$ folgt die gesuchte Partialbruch-Entwicklung für $\cot(y)$:

$$\cot(\pi z) = \frac{\cos(\pi z)}{\sin(\pi z)} = \frac{1}{\pi z}\,\left[1 - \sum_{k=1}^{\infty}\frac{2z^2}{k^2 - z^2}\right] \tag{D.10.4}$$

$$= \frac{1}{\pi}\,\left[\frac{1}{z} + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{2z}{z^2 - k^2}\right] = \frac{1}{\pi}\,\left[\frac{1}{z} + \sum_{k=-\infty}^{\infty}{}'\,\frac{z}{z^2 - k^2}\right]$$

$$= \frac{1}{\pi}\,\left[\frac{1}{z} + \sum_{k=-\infty}^{\infty}{}'\,\frac{z+k}{z^2 - k^2}\right] = \frac{1}{\pi}\,\left[\frac{1}{z} + \sum_{k=-\infty}^{\infty}{}'\,\frac{1}{z-k}\right]$$

$$= \frac{1}{\pi}\,\sum_{k=-\infty}^{\infty}\frac{1}{z-k}\ . \tag{D.10.5}$$

Die Darstellung D.10.5 ist insbesondere bei der Entwicklung von Summenformeln hilfreich.

Die Entwicklung D.10.4 der Cotangens-Funktion läßt sich weiter zu einer Entwicklung nach $\zeta(2n)\cdot y^{2n}$, mit $y := \pi z$, umformen:

$$y\,\cot(y) = 1 - 2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{y^2}{k^2\pi^2 - y^2} \tag{D.10.6}$$

$$= 1 - 2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{y^2}{k^2\pi^2}\,\frac{1}{1 - \frac{y^2}{k^2\pi^2}} = 1 - 2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{y^2}{k^2\pi^2}\,\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{y^2}{k^2\pi^2}\right)^n$$

$$= 1 - 2\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{y^2}{k^2\pi^2}\right)^{n+1} = 1 - 2\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{y^2}{k^2\pi^2}\right)^n$$

$$= 1 - 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{y^{2n}}{\pi^{2n}}\,\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{2n}}\ , \quad \Rightarrow$$

$$y\,\cot(y) = 1 - 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\zeta(2n)}{\pi^{2n}}\, y^{2n}\ . \tag{D.10.7}$$

Andererseits können wir für $y\,\cot(y)$ auch eine Entwicklung in $B_{2n} \cdot y^{2n}$ mit den geradzahligen Bernoulli-Zahlen B_{2n} gewinnen. Der Ausgangspunkt hierfür ist die erzeugende Funktion für die Bernoulli-Zahlen (siehe Richter u. Schiekel (2004) 5.3, oder Abramowitz u. Stegun (1970) 23.1.1, 23.1.2):

$$\frac{x}{e^x - 1} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n\, x^n}{n!}\ . \tag{D.10.8}$$

Da $B_1 = -\frac{1}{2}$ und für alle ungeradzahligen $n > 1$ die $B_n = 0$ sind, folgt

$$\frac{x}{e^x - 1} + \frac{x}{2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_{2n}\, x^{2n}}{(2n)!}\ .$$

Mit $x = 2iy$ können wir die linke Seite dieser Gleichung im Bereich $-\pi < y < \pi$ schreiben als

$$\frac{x}{e^x - 1} + \frac{x}{2} = \frac{x}{2}\left(\frac{2}{e^x - 1} + \frac{e^x - 1}{e^x - 1}\right) = \frac{x}{2}\,\frac{e^x + 1}{e^x - 1} = \frac{x}{2}\,\frac{e^{x/2} + e^{-x/2}}{e^{x/2} - e^{-x/2}}$$

$$= iy\,\frac{e^{iy} + e^{-iy}}{e^{iy} - e^{-iy}} = y\,\frac{\cos(y)}{\sin(y)} = y\,\cot(y) \quad \Rightarrow$$

$$y\,\cot(y) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n\, \frac{B_{2n}\,(2y)^{2n}}{(2n)!}\ . \tag{D.10.9}$$

Wenn wir jetzt in den beiden Entwicklungen D.10.7 und D.10.9 von $y\,\cot(y)$ einen Koeffizientenvergleich der y^{2n}-Terme durchführen, erhalten wir

$$-2\,\frac{\zeta(2n)}{\pi^{2n}} = (-1)^n\,\frac{B_{2n}\,2^{2n}}{(2n)!} \quad \Rightarrow$$

$$\zeta(2n) = \frac{(-1)^{n-1}(2\pi)^{2n}}{2\cdot(2n)!}\,B_{2n}\ . \tag{D.10.10}$$

Für $n = 0$ und $n = 1$ folgen also mit $B_0 = 1$ und $B_2 = \frac{1}{6}$:

$$\zeta(0) = -\frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \zeta(2) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} = \frac{(2\pi)^2}{2\cdot 2}\,B_2 = \frac{\pi^2}{6}\ . \tag{D.10.11}$$

D.11 Die logarithmische Ableitung der Zeta-Funktion

Sei $\Re(z) > 1$, dann gilt mit D.5.3 in der Nähe von $z = 1$:

$$\zeta(z) = \frac{1}{z-1} + \gamma + O(|z-1|) \quad \Rightarrow \quad \zeta'(z) = \frac{-1}{(z-1)^2}(1 + O(|z-1|^2) \; .$$

Daraus folgt für die logarithmische Ableitung $\frac{d}{dz}\ln(\zeta(z)) = \frac{\zeta'(z)}{\zeta(z)}$ in der Nähe von $z = 1$:

$$\frac{\zeta'(z)}{\zeta(z)} = \frac{\frac{-1}{(z-1)^2}(1 + O(|z-1|^2))}{\frac{1}{z-1} + \gamma + O(|z-1|)} = \frac{-(1 + O(|z-1|^2))}{(z-1)(1 + \gamma(z-1) + O(|z-1|^2))}$$

$$= -\frac{1}{z-1} + \gamma + O(|z-1|) \; . \tag{D.11.1}$$

Sei weiterhin $\Re(z) > 1$, also $\Re(1-z) < 0$, dann können wir die Funktionalgleichung der Zeta-Funktion D.8.3 folgendermaßen schreiben:

$$\zeta(1-z) = 2^{1-z}\,\pi^{-z}\,\sin(\frac{\pi(1-z)}{2})\,\Gamma(z)\,\zeta(z) = 2^{1-z}\,\pi^{-z}\,\cos(\frac{\pi z}{2})\,\Gamma(z)\,\zeta(z) \; . \tag{D.11.2}$$

Für die Ableitung von $\zeta(1-z)$ und die logarithmische Ableitung $\frac{d}{dz}\ln(\zeta(1-z)) = \frac{\frac{d}{dz}\zeta(1-z)}{\zeta(1-z)}$ folgt dann:

$$\zeta'(1-z) := \frac{d}{dz_1}\zeta(z_1)\bigg|_{1-z} = \frac{d}{dz_1}\zeta(z_1)\cdot(-1)\cdot\frac{dz_1}{dz} = -\frac{d}{dz}\zeta(1-z) \; ,$$

$$\frac{\zeta'(1-z)}{\zeta(1-z)} = -[-\ln(2) - \ln(\pi) - \frac{\pi}{2}\tan(\frac{\pi z}{2}) + \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} + \frac{\zeta'(z)}{\zeta(z)}]$$

$$= \ln(2\pi) + \frac{\pi}{2}\tan(\frac{\pi z}{2}) - \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} - \frac{\zeta'(z)}{\zeta(z)} \; . \tag{D.11.3}$$

Diesen Ausdruck wollen wir jetzt im $\lim_{z\to 1_+}$ noch weiter betrachten. Dazu entwickeln wir zunächst $\tan(\frac{\pi z}{2})$ um $z = 1$ herum:

$$\sin(\frac{\pi z}{2}) = \sin(\frac{\pi}{2}) + \frac{\pi}{2}\,(z-1)\,\cos(\frac{\pi}{2}) + O(|z-1|^2) \; ,$$

$$\cos(\frac{\pi z}{2}) = \cos(\frac{\pi}{2}) - \frac{\pi}{2}\,(z-1)\,\sin(\frac{\pi}{2}) + O(|z-1|^3) \; ,$$

$$\tan(\frac{\pi z}{2}) = \frac{\sin(\frac{\pi z}{2})}{\cos(\frac{\pi z}{2})} = \frac{1 + O(|z-1|^2}{-\frac{\pi}{2}\,(z-1)\,(1 + O(|z-1|^2))} = \frac{-2}{\pi(z-1)} + O(|z-1|^2) \; . \tag{D.11.4}$$

Mit C.11.2 und D.11.1 folgt:

$$\frac{\zeta'(0)}{\zeta(0)} = \lim_{z\to 1_+} \frac{\zeta'(1-z)}{\zeta(1-z)} = \ln(2\pi) - \frac{1}{z-1} + \gamma + \frac{1}{z-1} - \gamma = \ln(2\pi)\ . \tag{D.11.5}$$

Damit erhalten wir für $\zeta'(0)$ mit D.10.11:

$$\zeta'(0) = \zeta(0)\ \ln(2\pi) = -\frac{1}{2}\ \ln(2\pi)\ . \tag{D.11.6}$$

D.12 Nochmals Zeta-Funktion und Bernoulli-Zahlen

Die Beziehung D.10.10 kann auch auf dem Weg über die Funktionentheorie abgeleitet werden. Wir beginnen wieder mit der Definitionsgleichung der Bernoulli-Zahlen D.10.8

$$f(x) := \frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n\, x^n}{n!}\ .$$

Wir setzen die Definition von $f(x)$ in die komplexe Ebene fort und können $f(z)$ im regulären Gebiet um $z = 0$ in eine Taylorreihe entwickeln. Bei $\pm 2\pi i\, m$ mit $m \in \mathbb{N}$ hat $f(z)$ Pole. Für die n-te Ableitung von $f(z)$ an der Stelle $z = 0$ gilt:

$$f^{(n)}(z)\Big|_{z=0} = \left(\frac{n!}{n!}\, B_n + \frac{(n+1)!}{1!\, n!}\, B_{n+1}\, z + \ldots\right)\Bigg|_{z=0} = B_n\ .$$

Andererseits gilt mit dem Cauchyschen Integralsatz

$$f^{(n)}(z)\Big|_{z=0} = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{C_0} \frac{f(z)}{z^{n+1}}\, dz\ , \tag{D.12.1}$$

wobei C_0 ein Kreis um $z_0 = 0$ im Gegenuhrzeigersinn mit $|z| < 2\pi$ sei (um die Pole bei $\pm 2\pi i\, m$ zu vermeiden). Damit erhalten wir folegende Darstellung für die B_n:

$$B_n = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{C_0} \frac{z}{e^z - 1} \cdot \frac{1}{z^{n+1}}\, dz\ . \tag{D.12.2}$$

Hieraus können wir jetzt sofort B_0 und B_1 bestimmen.

$$\begin{aligned} B_0 &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_0} \frac{1}{e^z - 1}\, dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_0} \frac{1}{(1 + \frac{z}{1!} + \frac{z^2}{2!} + \ldots) - 1}\, dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_0} \frac{1}{z\,(\frac{1}{1!} + \frac{z}{2!} + \ldots)}\, dz\ . \end{aligned}$$

Der Integrand hat also bei $z = 0$ einen Pol erster Ordnung mit einem Residuum 1 und damit folgt für B_0

$$B_0 = \frac{1}{2\pi i}\, 2\pi i\, (\operatorname*{Res}_{z=0} \frac{1}{e^z - 1}) = 1 \; . \tag{D.12.3}$$

Ebenso gilt für B_1:

$$B_1 = \frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{C_0} \frac{1}{(e^z - 1)\, z}\, dz = \frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{C_0} \frac{1}{z^2\, (\frac{1}{1!} + \frac{z}{2!} + \ldots)}\, dz \; .$$

Der Integrand hat also bei $z = 0$ einen Pol zweiter Ordnung und die Funktion

$$g(z) := \frac{1}{(\frac{1}{1!} + \frac{z}{2!} + \frac{z^2}{3!} + \ldots)}$$

ist bei $z = 0$ regulär und kann dort also in eine Taylor-Reihe entwickelt werden

$$\begin{aligned} g(z) &= g(0) + \frac{g'(0)}{1!}\, z + O(z^2) = 1 + \left.\frac{(-1)(\frac{1}{2!} + \frac{2}{3!}\, z + \ldots)}{(\frac{1}{1!} + \frac{z}{2!} + \frac{z^2}{3!} + \ldots)^2}\right|_{z=0} \cdot z \, + O(z^2) \\ &= 1 - \frac{z}{2} + O(z^2) \; . \end{aligned}$$

Damit folgt für B_1:

$$B_1 = \frac{1}{2\pi i}\, 2\pi i\, (\operatorname*{Res}_{z=0} \frac{1}{z^2\, (\frac{1}{1!} + \frac{z}{2!} + \ldots)}) = \operatorname*{Res}_{z=0} \frac{g(z)}{z^2} = \operatorname*{Res}_{z=0} \frac{1 - \frac{z}{2} + O(z^2)}{z^2} = -\frac{1}{2} \; . \tag{D.12.4}$$

Für B_n mit $n \geq 2$ wollen wir wieder den Residuen-Satz ausnutzen, wählen dafür aber den folgenden geschlossenen Integrationsweg L mit den Kreisen C_R und C_0. Hierbei wird C_0 im Uhrzeigersinn statt im Gegenuhrzeigersinn durchlaufen, was wir durch $-C_0$ ausdrücken:

$$\begin{aligned} \oint\limits_{L} f(z)\, dz &= \oint\limits_{C_R} f(z)\, dz + \int\limits_{\infty}^{r} f(z)\, dz + \oint\limits_{-C_0} f(z)\, dz + \int\limits_{r}^{\infty} f(z)\, dz \\ &= \oint\limits_{C_R} f(z)\, dz - \oint\limits_{C_0} f(z)\, dz = - \oint\limits_{C_0} f(z)\, dz \; . \end{aligned}$$

Dabei sei $f(z)$ der Integrand aus D.12.2

$$f(z) := \frac{z}{e^z - 1} \cdot \frac{1}{z^{n+1}} = \frac{1}{(e^z - 1)\, z^n} \; .$$

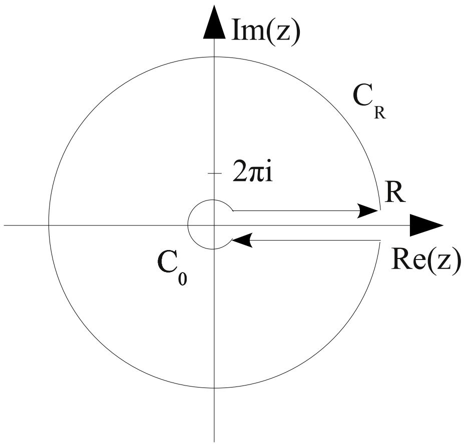


Abbildung D.3: Integrationsweg für $f(z)$

Die beiden Integrale entlang der positiven x-Achse heben sich gegenseitig auf, da $f(z)$ dort analytisch ist. Das Kreisintegral über C_R geht wegen des Faktors z^{-n} mit $n \geq 2$ im $\lim_{R\to\infty}$ gegen Null. Und das Kreisintegral über $-C_0$ ist gleich dem negativen Integral über C_0. Damit können wir D.12.2 für $n \geq 2$ schreiben als

$$B_n = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{C_0} f(z)\, dz = -\frac{n!}{2\pi i} \oint_{L} f(z)\, dz = -\frac{n!}{2\pi i}\, 2\pi i \sum_{m=1}^{\infty} \operatorname*{Res}_{z=\pm 2\pi i\, m} f(z)\ .$$

Der Integrand $f(z)$ an der Stelle $z = 2\pi i\, m$ ist

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{1}{(e^z-1)\, z^n} = \frac{1}{(e^z e^{-2\pi i\, m}-1)\, z^n} = \frac{1}{(e^{z-2\pi i\, m}-1)\, z^n} \\ &= \frac{1}{(z-2\pi i\, m)\,[1+O((z-2\pi i\, m)^2)]\, z^n}\ . \end{aligned}$$

Also hat $f(z)$ bei $z = 2\pi i\, m$ einen Pol erster Ordnung mit dem Residuum $(2\pi i\, m)^{-n}$.

$$B_n = -n! \sum_{m=1}^{\infty} \left[\left(\frac{1}{2\pi i\, m}\right)^n + \left(\frac{-1}{2\pi i\, m}\right)^n \right]\ .$$

Hieraus folgt sofort, daß die ungeraden B_{2n+1} für $n \geq 2$ alle verschwinden:

$$B_{2n+1} = 0 \quad \text{für}\, n \geq 2\ . \tag{D.12.5}$$

Für die geraden B_{2n} erhalten wir erneut das Ergebnis von D.10.10:

$$B_{2n} = -(2n)!\, 2\, \frac{(-1)^n}{(2\pi)^{2n}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{2n}} = -(2n)!\, 2\, \frac{(-1)^n}{(2\pi)^{2n}}\, \zeta(2n)\ .$$

$$\zeta(2n) = \frac{(-1)^{n-1}(2\pi)^{2n}}{2\cdot(2n)!}\, B_{2n}\ . \tag{D.12.6}$$

D.13 Zeta-Funktion und Primzahl-Theorem

Sei $\pi(x)$ die Anzahl der Primzahlen kleiner oder gleich x, also

$$\pi(x) := \{\text{Anzahl}\{p_i\} \,|\, p_i \,\text{prim},\, p_i \leq x\}\ . \tag{D.13.1}$$

Dann kann man D.3.1 (mit $\Re(z) > 1$) logarithmieren

$$\begin{aligned} \log\zeta(z) &= -\sum_{p(\text{prim})=2}^{\infty} \log(1-\frac{1}{p^z}) = -\sum_{n=2}^{\infty} [\pi(n)-\pi(n-1)]\,\log(1-\frac{1}{n^z}) \\ &= -\sum_{n=2}^{\infty} \pi(n)\,[\log(1-\frac{1}{n^z}) - \log(1-\frac{1}{(n+1)^z})]\ . \end{aligned}$$

Die Ableitung von $\log(1-\frac{1}{x^z})$ ist

$$\frac{d}{dx}\log(1-\frac{1}{x^z}) = \frac{1}{(1-\frac{1}{x^z})}(-1)\frac{(-z)}{x^{z+1}} = \frac{z}{x(x^z-1)}\ .$$

Damit können wir die Gleichung für $\log\zeta(z)$ weiter umformen zu

$$\log\zeta(z) = \sum_{n=2}^{\infty}\pi(n)\,[\int_n^{n+1}\frac{z}{x(x^z-1)}\,dx] = z\int_2^{\infty}\frac{\pi(x)}{x(x^z-1)}\,dx\ . \tag{D.13.2}$$

Hadamard und de la Vallée Poussin haben unabhängig voneinander versucht, diese Gleichung zu invertieren und haben so 1896 das Primzahl-Theorem bewiesen (siehe etwa Titchmarsh (1986)):

$$\lim_{x\to\infty}\pi(x) = \lim_{x\to\infty}\frac{x}{\log(x)}\ . \tag{D.13.3}$$

Die Beweise von Hadamard und de la Vallée Poussin waren recht lang und aufwendig. Im Jahr 1980 hat Newman dann einen neuen, eleganten und kurzen Beweis des Primzahl-Theorems publiziert, der kaum mehr als das Cauchy-Theorem der Funktionentheorie voraussetzt (siehe dazu Korevaar (1982) und insb. die schöne Arbeit von Zagier (1997)).

D.14 Zeta-Funktion und Möbius-Funktion

Eine weitere und speziell in der Zahlentheorie gebräuchliche Darstellung der Zeta-Funktion ist möglich mit Hilfe der Möbius-Funktion $\mu(n)$:

$$\mu(1) := 1\ ,$$

$$\mu(n) := \begin{cases} (-1)^k & \text{wenn } n \text{ das Produkt von } k \text{ verschiedenen Primzahlen ist,} \\ 0 & \text{wenn } n \text{ einen Primfaktor mehrfach enthält.} \end{cases} \tag{D.14.1}$$

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	...
$\mu(n)$	1	-1	-1	0	-1	1	-1	0	0	1	...

Hiermit läßt sich $\zeta^{-1}(z)$ für $\Re(z) > 1$ (siehe D.3.1) darstellen als $(p, m_1, \ldots, m_k$: prim, $m_i \neq m_j$ für $i \neq j)$:

$$\frac{1}{\zeta(z)} = \prod_{p(\mathrm{prim})=2}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{p^z}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^k \, \delta_{n,m_1 \cdot \ldots \cdot m_k} \frac{1}{n^z} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu(n)}{n^z} \ . \tag{D.14.2}$$

Ganz ähnlich sieht der Ausdruck für $\zeta(z)/\zeta(2z)$ aus:

$$\begin{aligned} \frac{\zeta(z)}{\zeta(2z)} &= \prod_{p(\mathrm{prim})=2}^{\infty} \frac{(1-\frac{1}{p^{2z}})}{(1-\frac{1}{p^z})} = \prod_{p(\mathrm{prim})=2}^{\infty} \frac{(1+\frac{1}{p^z})(1-\frac{1}{p^z})}{(1-\frac{1}{p^z})} \prod_{p(\mathrm{prim})=2}^{\infty} (1+\frac{1}{p^z}) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\mu(n)|}{n^z} \ . \end{aligned} \tag{D.14.3}$$

Aus der Darstellung der inversen Zeta-Funktion D.14.2 läßt sich sofort eine andere Darstellung der Möbius-Funktion gewinnen (wir verwenden hier die in der Zahlentheorie übliche Schreibweise $n|q := n$ teilt q ganzzahlig):

$$1 = \zeta(z) \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu(n)}{n^z} = \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^z}\right) \cdot \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu(n)}{n^z}\right) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(m \cdot n)^z} \cdot \mu(n) \ .$$

Diese Doppelreihe kann man umsortieren zu

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \delta_{m \cdot n, q} \frac{1}{q^z} \cdot \mu(n) = \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q^z} \sum_{m=1}^{q} \sum_{n=1}^{q} \delta_{m,\frac{q}{n}} \, \mu(n) \\ &= \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q^z} \sum_{\substack{n=1 \\ n|q}}^{q} \mu(n) := \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q^z} a_q \ . \end{aligned}$$

Diese Beziehung gilt nun für alle z mit $\Re(z) > 1$. Das ist aber nur möglich, wenn gilt $a_1 = 1$ und $a_q = 0$ für $q > 1$:

$$a_1 = \sum_{\substack{n=1 \\ n|1}}^{1} \mu(n) = \mu(1) = 1 \ ,$$

$$a_q = \sum_{\substack{n=1 \\ n|q}}^{q} \mu(n) = 0 \quad \text{für}\, q > 1 \ .$$

Dies kann man zusammenfassen zu

$$\sum_{\substack{d=1\\ d|q}}^{q} \mu(d) = \delta_{q,1} \; . \tag{D.14.4}$$

Häufig taucht in der Zahlentheorie auch die Möbius-Inversions-Formel auf.
Seien $f,\, g:\, \mathbb{N} \to \mathbb{R}$ oder $f,\, g:\, \mathbb{N} \to \mathbb{C}$, zwei Funktionen mit

$$g(q) := \sum_{d:\, d|q} f(d) \quad \Rightarrow$$

$$f(q) = \sum_{d:\, d|q} \mu(\frac{q}{d})\, g(d) \; . \tag{D.14.5}$$

Beweis: Wir setzen $g(q)$in D.14.5 ein und erhalten

$$\sum_{d:\, d|q} \mu(\frac{q}{d})\, g(d) = \sum_{d:\, d|q} \mu(\frac{q}{d}) \sum_{r:\, r|d} f(r) := \sum_{r:\, r|q} b_r\, f(r) \; .$$

Zunächst betrachten wir auf der rechten Seite der obigen Gleichung den Summanden mit $d = q$ und $r = d = q$ und erhalten

$$\mu(1)\, f(q) = f(q) \; ,$$

was in Einklang mit D.14.5 ist, wenn alle anderen Summanden verschwinden. Sei jetzt also $r < q$, d.h. $\frac{q}{r} > 1$, dann betrachten wir:

$$r|d \Leftrightarrow \exists k \in \mathbb{N}:\; d = k \cdot r \; ,$$

$$d|q \Leftrightarrow \exists l \in \mathbb{N}:\; q = l \cdot d = l \cdot k \cdot r \Leftrightarrow k \cdot r|q \Leftrightarrow k|\frac{q}{r} \; .$$

Gleichzeitg gilt aber auch:

$$l := \frac{q}{k \cdot r} \Leftrightarrow l|\frac{q}{r} \; .$$

Jetzt betrachten wir zu festem r den Koeffizienten zu $f(r)$, oben b_r genannt, und finden

$$\sum_{\substack{d:\, d|q\\ r|d}} \mu(\frac{q}{d}) = \sum_{k:\, kr|q} \mu(\frac{q}{kr}) = \sum_{k:\, k|\frac{q}{r}} \mu(\frac{\frac{q}{r}}{k}) = \sum_{l:\, l|\frac{q}{r}} \mu(l) = 0 \; ,$$

da $\frac{q}{r} > 1$ ist. $\square$

Eine zweite und äquivalente Form der Möbius-Inversions-Formel ist die folgende. Seien f und g wieder die beiden Funktionen aus D.14.5 mit

$$g(q) := \sum_{d:\, d|q} f(d) \; ,$$

und seien $F : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ und $G : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ folgendermaßen definiert

$$F(z) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f(n)}{n^z} \qquad \text{und} \qquad G(z) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g(n)}{n^z} \,, \tag{D.14.6}$$

dann gilt

$$F(z) = \frac{1}{\zeta(z)} G(z) \,. \tag{D.14.7}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\zeta(z)} G(z) &= \frac{1}{\zeta(z)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g(n)}{n^z} = \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{\mu(m)}{m^z} \right) \cdot \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{g(n)}{n^z} \right) \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(m \cdot n)^z} \cdot \mu(m) \cdot g(n) \\
&= \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \delta_{m \cdot n, q} \frac{1}{q^z} \cdot \mu(m) \cdot g(n) \\
&= \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q^z} \sum_{m=1}^{q} \sum_{n=1}^{q} \delta_{m, \frac{q}{n}} \, \mu(m) \cdot g(n) \\
&= \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q^z} \sum_{\substack{n=1 \\ n|q}}^{q} \mu(\frac{q}{n}) \cdot g(n) = \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q^z} \cdot f(q) = F(z) \,. \quad \square
\end{aligned}$$

D.15 Literatur zur Riemannschen Zeta-Funktion

- Abramowitz u. Stegun (1970), Handbook of Mathematical Functions,
- Weisstein u. Sondowet (1999), Riemann Zeta Function, MathWorld (Internet),
- Gourdon u. Sebah (2003), The Riemann Zeta-function $\zeta(s)$: generalities (Internet),
- Arfken u. Weber (2001), Mathematical Methods for Physicists,
- Smirnow (1972a), Lehrgang der Höheren Mathematik, II [157],
- Smirnow (1972b), Lehrgang der Höheren Mathematik, III/2 [77],
- Titchmarsh (1986), The theory of the Riemann Zeta-function,
- Whittacker u. Watson (1969), A Course in Modern Analysis,
- Kratzer u. Franz (1963), Transzendente Funktionen.
- Wikipedia-Riemann-Hypothesis (2010), Riemann Hypothesis (Internet).

E Die Jacobische Theta-Funktion

E.1 Definition und Quasiperiodizität

Wir wollen in diesem Kapitel ein Lemma zur Jacobischen Theta-Funktion ableiten, nämlich die sogenannte Jacobi-Identität. Jacobi hat vier eng miteinander verwandte Theta-Funktionen definiert und untersucht. Wir bezeichnen hier mit $\vartheta(z,\tau)$ die dritte Jacobische Theta-Funktion $\vartheta_3(z,\tau)$, die folgendermaßen definiert ist:

$$\begin{aligned}\vartheta(z,\tau) &:= 1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} e^{i\pi\tau n^2}\,\cos(2nz) \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{i\pi\tau n^2}\,(e^{2inz} + e^{-2inz}) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi\tau n^2 + 2inz}\;, \quad z,\tau \in \mathbb{C},\; \Im(\tau) > 0 \Leftrightarrow |e^{i\pi\tau}| < 1\;. \end{aligned} \tag{E.1.1}$$

Die Theta-Funktion $\vartheta(z,\tau)$ ist bei festem τ eine Fourierreihe in z mit der Periode π, d.h.:

$$\vartheta(z+\pi,\tau) = \vartheta(z,\tau)\;. \tag{E.1.2}$$

Gleichzeitig ist $\vartheta(z,\tau)$ quasiperiodisch in z mit der Periode $\pi\tau$:

$$\begin{aligned}\vartheta(z+\pi\tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi\tau n^2 + 2inz + 2i\pi\tau n} = e^{-i\pi\tau}\,e^{-2iz}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi\tau(n+1)^2 + 2i(n+1)z} \\ &= e^{-i(\pi\tau+2z)}\,\vartheta(z)\;. \end{aligned} \tag{E.1.3}$$

Insgesamt ist die Theta-Funktion $\vartheta(z,\tau)$ also eine 2-fach quasiperiodische Funktion in z mit den Perioden π und $\pi\tau$ und den Periodizität-Skalenfaktoren 1 und $e^{-i(\pi\tau+2z)}$.

E.2 Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung

Die Theta-Funktion $\vartheta(z,\tau)$ ist auch eine Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung mit räumlich periodischen Randbedingungen zum Zeitpunkt $\tau = 0$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\vartheta(x,it) = \frac{\partial}{\partial t}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi n^2(it)+2inx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}(-\pi n^2)\,e^{-\pi n^2 t + 2inx}\;, \quad x,t \in \mathbb{R}\,,$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\vartheta(x,it) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi n^2(it)+2inx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}(-4n^2)\,e^{-\pi n^2 t+2inx}\ , \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\vartheta(x,it) = \frac{1}{4\pi}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\vartheta(x,it)\ . \tag{E.2.1}$$

Die Anfangsbedingung $\vartheta(x,0)$ ist dabei eine räumlich periodische Delta-Funktion, ein sog. Delta-Kamm:

$$\vartheta(x,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2imx} = \pi\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-\pi n)\ . \tag{E.2.2}$$

Beweis:

Die rechte Seite ist periodisch in $x \in \mathbb{R}$ mit der Periode π und kann daher in eine Fourierreihe entwickelt werden:

$$S(x) := \pi\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-\pi n) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n\,e^{i2\pi nx/\pi}\ , \quad \text{mit}$$

$$\begin{aligned}
c_n &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\pi} dx\,(\pi\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(x-\pi m)\,e^{-i2\pi nx/\pi}) \\
&= \sqrt{\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\int_0^{\pi} dx\,(\delta(x-\pi m)\,e^{-i2\pi nx/\pi}) \\
&= \sqrt{\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\int_{-m\pi}^{(-m+1)\pi} dx'\,(\delta(x')\,e^{-i2n(x'+m\pi)}) \\
&= \sqrt{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,(\delta(x')\,e^{-i2nx'}) = \sqrt{\pi}\ , \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$S(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2nx}\ . \quad \square$$

E.3 Die Poisson-Summenformel

Aus E.1.2 folgt sofort, daß $\vartheta(\pi x,0)$ periodisch in $x \in \mathbb{R}$ mit der Periode 1 ist. Die Entsprechung zu E.2.2 lautet dann:

$$\vartheta(\pi x,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi imx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-n)\ . \tag{E.3.1}$$

Wie schon bei bei der Ableitung der Poisson-Summenformel in B.1.2 setzen wir wieder voraus, daß $f(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ ist (dann konvergieren Summe und Integral absolut und gleichmäßig). Mit der Fourier-Transformierten $\tilde{f}(y) := \int_{-\infty}^{\infty} dx\ (e^{2\pi iyx} f(x))$ ergibt sich die Poisson-Summenformel:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ (\vartheta(\pi x, 0)\, f(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi imx} f(x) \right)$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(e^{2\pi imx} f(x) \right) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \tilde{f}(m)\ . \tag{E.3.2}$$

E.4 Jacobi-Identität

Das Lemma der Jacobi-Identität für $\vartheta(z, \tau)$ lautet:

$$\vartheta(z, \tau) = (-i\tau)^{-\frac{1}{2}}\, e^{\frac{z^2}{i\pi\tau}}\, \vartheta(\frac{z}{\tau}, -\frac{1}{\tau})\ , \tag{E.4.1}$$

oder in ausführlicher Form:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi\tau n^2 + 2inz} = (-i\tau)^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\frac{(z-\pi n)^2}{i\pi\tau}}\ . \tag{E.4.2}$$

Beweis. Zunächst der Beweis, daß die beiden rechten Seiten von E.4.1 und E.4.2 gleich sind:

$$(-i\tau)^{-\frac{1}{2}}\, e^{\frac{z^2}{i\pi\tau}}\, \vartheta(\frac{z}{\tau}, -\frac{1}{\tau}) = (-i\tau)^{-\frac{1}{2}}\, e^{\frac{z^2}{i\pi\tau}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-2\pi(\frac{1}{\tau})n^2 + 2in(\frac{z}{\tau})}$$

$$= (-i\tau)^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\frac{(z-\pi n)^2}{i\pi\tau}}\ .$$

Wir beginnen mit der Summe auf der rechten Seite von E.4.2. Da diese Summe als Funktion von z periodisch mit der Periode π ist, entwickeln wir sie in eine Fourierreihe:

$$S(z) := \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{\frac{(z-\pi m)^2}{i\pi\tau}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{\frac{2\pi inz}{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{2inz}\ , \quad \text{mit}$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} dz\, e^{-\frac{2\pi inz}{\pi}}\, S(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} dz\, e^{-2inz} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{\frac{(z-\pi m)^2}{i\pi\tau}}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\pi} dz\, e^{\frac{(z-\pi m)^2}{i\pi\tau}}\, e^{-2inz} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\pi m}^{-\pi(m-1)} dz'\, e^{\frac{z'^2}{i\pi\tau}}\, e^{-2in(z'+\pi m)} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{\pi(m-1)}^{\pi m} dz\, e^{\frac{z^2}{i\pi\tau}}\, e^{+2inz} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{\frac{z^2}{i\pi\tau}+2inz} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{(\frac{z}{\sqrt{i\pi\tau}}-\sqrt{\frac{\pi\tau}{i}}n)^2}\, e^{-\frac{\pi\tau n^2}{i}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{i\pi\tau n^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz'\, e^{-(\frac{i}{\pi\tau})z'^2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{(\frac{i}{\pi\tau})}}\, e^{i\pi\tau n^2} = \sqrt{-i\pi\tau}\, e^{i\pi\tau n^2} \,.
\end{aligned}
$$

$$
S(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{2inz} = \sqrt{-i\tau} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi\tau n^2+2inz} \,. \qquad \square
$$

Von der Jacobi-Identität E.4.2 benötigen wir noch eine andere Version, die wir mit zwei Transformationen erhalten. Sei also zunächst einmal $t' := -i\pi\tau$ und $z' := \frac{1}{\pi}z$:

$$
\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-n^2 t'+2\pi i n z'} = \sqrt{\frac{\pi}{t'}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2(n-z')^2}{t'}} \,,
$$

und zum zweiten $t := \frac{\pi^2}{t'}$ und $z := z'$:

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n^2}{t}} e^{2\pi i n z} &= \sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(n-z)^2 t} = \sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(-n-z)^2 t} \\
&= \sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(n+z)^2 t} \,.
\end{aligned}
$$

Jetzt führen wir auf der linken Seite noch eine Partialsummation durch, vertauschen die linke und die rechte Seite und erhalten dann:

$$
\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(n+z)^2 t} = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \left(1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n^2}{t}} \cos(2\pi n z)\right) . \tag{E.4.3}
$$

Diese Form der Jacob-Identität werden wir bei der analytischen Fortsetzung der eindimensionalen Epsteinschen Zeta-Funktion verwenden.

E.5 Verbindung mit der Riemannschen Zeta-Funktion

Aus der Definition der Theta-Funktion in E.1.1 folgt:

$$
\frac{1}{2}(\vartheta(0,it)-1) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\pi t n^2} \,, \quad \Rightarrow
$$

$$\frac{1}{2}\int_0^\infty dt\,(\vartheta(0,it)-1)\,t^{\frac{s}{2}-1} = \int_0^\infty dt\,(\sum_{n=1}^\infty e^{-\pi t n^2}\,t^{\frac{s}{2}-1}) = \int_0^\infty dt'\,(\sum_{n=1}^\infty e^{-t'}\,t'^{\frac{s}{2}-1}\,(\pi n^2)^{-\frac{s}{2}})$$

$$= \pi^{-\frac{s}{2}}\,(\sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^s}\int_0^\infty dt'\,(e^{-t'}\,t'^{\frac{s}{2}-1})$$

$$= \pi^{-\frac{s}{2}}\,\Gamma(\frac{s}{2})\,\zeta(s)\ ,\ \text{für}\,\Re(s)>1\ . \tag{E.5.1}$$

Riemann hat mit Hilfe dieses Ausdrucks die berühmte Reflektions-Formel, bzw. Funktionalgleichung, der Zeta-Funktion D.8.3 bewiesen, was wir hier nachvollziehen wollen. Zunächst soll gezeigt werden, daß der Ausdruck E.5.1 symmetrisch bei der Transformation $s \ \rightarrow \ 1-s$ ist.

$$\pi^{-\frac{s}{2}}\,\Gamma(\frac{s}{2})\,\zeta(s) = \frac{1}{2}\int_0^\infty dt\,(\vartheta(0,it)-1)\,t^{\frac{s}{2}-1}$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^1 dt\,(\vartheta(0,it)-t^{-\frac{1}{2}}+t^{-\frac{1}{2}}-1)\,t^{\frac{s}{2}-1} + \frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it)-1)\,t^{\frac{s}{2}-1}$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^1 dt\,(t^{\frac{s}{2}-\frac{1}{2}-1}-t^{\frac{s}{2}-1}) + \frac{1}{2}\int_0^1 dt\,(\vartheta(0,it)-t^{-\frac{1}{2}})\,t^{\frac{s}{2}-1}$$

$$+\frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it)-1)\,t^{\frac{s}{2}-1}\ .$$

Im zweiten Integral setzen wir die Jacobi-Identität in der Form E.4.1 mit $z=0$ und $\tau = it$ ein:

$$\vartheta(0,it) = t^{-\frac{1}{2}}\,\vartheta(0,i\frac{1}{t})\ , \quad \Rightarrow$$

$$\pi^{-\frac{s}{2}}\,\Gamma(\frac{s}{2})\,\zeta(s)$$

$$= \frac{1}{2}(\frac{2}{s-1}-\frac{2}{s}) + \frac{1}{2}\int_0^1 dt\,(t^{-\frac{1}{2}}\vartheta(0,i\frac{1}{t})-t^{-\frac{1}{2}})\,t^{\frac{s}{2}-1} + \frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it)-1)\,t^{\frac{s}{2}-1}$$

$$= \frac{1}{s-1}-\frac{1}{s}+\frac{1}{2}\int_0^1 dt\,(\vartheta(0,i\frac{1}{t})-1)\,t^{\frac{s}{2}-\frac{1}{2}-1} + \frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it)-1)\,t^{\frac{s}{2}-1}$$

$$= \frac{1}{s-1}-\frac{1}{s}+\frac{1}{2}\int_\infty^1 (-1)dt'\,(\vartheta(0,it')-1)\,t'^{-\frac{s}{2}+\frac{1}{2}+1-2} + \frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it)-1)\,t^{\frac{s}{2}-1}$$

$$= \frac{1}{s-1} - \frac{1}{s} + \frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it') - 1)\,t^{\frac{1-s}{2}-1} + \frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it) - 1)\,t^{\frac{s}{2}-1}$$

$$= \frac{1}{s-1} - \frac{1}{s} + \frac{1}{2}\int_1^\infty dt\,(\vartheta(0,it') - 1)\,(t^{\frac{1-s}{2}-1} + t^{\frac{s}{2}-1})\,.$$

Dieser Ausdruck ist symmetrisch bei der Transformation $s \to 1-s$ und damit erhalten wir

$$\pi^{-\frac{s}{2}}\,\Gamma(\frac{s}{2})\,\zeta(s) = \pi^{-\frac{1-s}{2}}\,\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{s}{2})\,\zeta(1-s) \quad \Rightarrow$$

$$\zeta(s) = \pi^{s-\frac{1}{2}}\,\frac{\Gamma(-\frac{s}{2}+\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{s}{2})}\,\zeta(1-s)\,. \tag{E.5.2}$$

Dies ist, bis auf den Vorfaktor, gerade die Funktionalgleichung der Riemannschen Zeta-Funktion D.8.3. Jetzt soll noch gezeigt werden, daß tatsächlich auch die Vorfaktoren dieser beiden Funktionalgleichungen übereinstimmen. Mit C.5.1 folgt aus E.5.2:

$$\begin{aligned}\pi^{s-\frac{1}{2}}\,\frac{\Gamma(-\frac{s}{2}+\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{s}{2})} &= \pi^{s-\frac{1}{2}}\,\frac{\pi}{\sin(\pi(-\frac{s}{2}+\frac{1}{2}))\,\Gamma(\frac{s}{2}+\frac{1}{2})\,\Gamma(\frac{s}{2})}\\ &= \pi^{s+\frac{1}{2}}\,\frac{1}{\cos(-\pi\frac{s}{2})\,\Gamma(\frac{s}{2}+\frac{1}{2})\,\Gamma(\frac{s}{2})}\,.\end{aligned}$$

Das Produkt $\Gamma(\frac{s}{2}+\frac{1}{2})\cdot\Gamma(\frac{s}{2})$ können wir mit C.9.4 zu einem Ausdruck mit $\Gamma(s)$ umfomen:

$$\begin{aligned}\pi^{s-\frac{1}{2}}\,\frac{\Gamma(-\frac{s}{2}+\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{s}{2})} &= \pi^{s+\frac{1}{2}}\,\frac{1}{\cos(\pi\frac{s}{2})\,(2\pi)^{\frac{1}{2}}\,2^{-s+\frac{1}{2}}\,\Gamma(s)}\\ &= \pi^{s}\,2^{s-1}\,\frac{1}{\cos(\pi\frac{s}{2})\,\Gamma(s)}\,.\end{aligned}$$

Wiederum wenden wir C.5.1 an und erhalten:

$$\begin{aligned}\pi^{s-\frac{1}{2}}\,\frac{\Gamma(-\frac{s}{2}+\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{s}{2})} &= \pi^{s}\,2^{s-1}\,\frac{\sin(\pi s)\,\Gamma(1-s)}{\pi\cos(\pi\frac{s}{2})}\\ &= \pi^{s}\,2^{s-1}\,\frac{2\,\sin(\pi\frac{s}{2})\,\cos(\pi\frac{s}{2})\,\Gamma(1-s)}{\pi\cos(\pi\frac{s}{2})}\\ &= \pi^{s-1}\,2^{s}\,\sin(\pi\frac{s}{2})\,\Gamma(1-s)\,. \quad \Box\end{aligned} \tag{E.5.3}$$

Dies ist tatsächlich der Vorfaktor von D.8.3, womit die Riemannsche Reflektionsformel, bzw. Funktionalgleichung, also erneut bewiesen ist.

E.6 Literatur zur Jacobischen Theta-Funktion

- Whittacker u. Watson (1969), A Course in Modern Analysis,
- Wang u. Guo (1989), Special Functions.

F Die Hurwitzsche Zeta-Funktion

F.1 Reihendarstellung der Hurwitzschen Zeta-Funktion

Hurwitz hat im Zusammenhang mit seinen Untersuchungen der Riemannschen Zeta-Funktion eine verallgemeinerte Zeta-Funktion definiert, die heute als Hurwitzsche Zeta-Funktion bekannt ist:

$$\zeta(z,a) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+a)^z} \quad \text{mit } z \in \mathbb{C},\ \Re(z) > 1,\ a \in \mathbb{C},\ \Re(a) > 0\ . \tag{F.1.1}$$

Durch Vergleich mit D.2.2 sehen wir sofort, daß

$$\zeta(z,1) = \zeta(z)\ . \tag{F.1.2}$$

F.2 Integraldarstellung der Hurwitzschen Zeta-Funktion

Eine Integraldarstellung der Hurwitzschen Zeta-Funktion gewinnen wir wie im Falle der Riemannschen Zeta-Funktion mit Hilfe der Gamma-Funktion $\Gamma(z)$:

$$\zeta(z,a) \cdot \Gamma(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+a)^z} \cdot \Gamma(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+a)^z} \cdot \left(\int_0^{\infty} y^{z-1} e^{-y}\, dy \right)\ .$$

Mit der Substitution $y = (n+a) \cdot x$ folgt:

$$\begin{aligned} \zeta(z,a) \cdot \Gamma(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-(n+a)x}\, dx = \int_0^{\infty} \left(x^{z-1} e^{-ax} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} \right) dx \\ &= \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-ax} \frac{1}{1-e^{-x}}\, dx = \int_0^{\infty} \frac{x^{z-1}}{e^{ax}\left(1-e^{-x}\right)}\, dx\ . \end{aligned} \tag{F.2.1}$$

F.3 Hermite-Formel

Eine weitere sehr wichtige Darstellung der Hurwitzschen Zeta-Funktion erhält man mit Hilfe der Abel-Plana-Formel B.3.6:

$$\lim_{n\to\infty}\left[\sum_{k=0}^{n} f(k) - \int_0^n f(x)\,dx\right] = \frac{f(0)}{2} + i\int_0^\infty \frac{f(iy)-f(-iy)}{e^{2\pi y}-1}\,dy\ .$$

Wir wählen der Einfachheit halber in $\zeta(z,a)$ das $a \in \mathbb{R}$ (eine Verallgemeinerung auf $a \in \mathbb{C}$ ist unschwierig). Sei jetzt $f(w) := (w+a)^{-z}$, mit $|\arg(w+a)| < \pi$, dann folgt zunächst formal (d.h. ohne Untersuchung der Konvergenz):

$$\begin{aligned}
\zeta(z,a) &:= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+a)^z} = \sum_{k=0}^{\infty} f(k) = \\
&= \int_0^\infty f(x)\,dx + \frac{f(0)}{2} + i\int_0^\infty \frac{f(iy)-f(-iy)}{e^{2\pi y}-1}\,dy \\
&= \frac{a^{-z}}{2} + \int_0^\infty \frac{1}{(x+a)^z}\,dx + i\int_0^\infty \frac{(iy+a)^{-z}-(-iy+a)^{-z}}{e^{2\pi y}-1}\,dy\ .
\end{aligned}$$

Jetzt gehen wir bei $(iy+a)$ zur Polardarstellung über: $r\cdot e^{i\phi} := (iy+a)$, $r = (y^2+a^2)^{\frac{1}{2}}$, $\phi = \arg(iy+a)$, $\phi = \arctan(\frac{y}{a})$.

$$\begin{aligned}
\zeta(z,a) &= \frac{a^{-z}}{2} - \frac{a^{1-z}}{1-z} + i\int_0^\infty \frac{(r(y)\cdot e^{i\phi(y)})^{-z} - (r(y)\cdot e^{-i\phi(y)})^{-z}}{e^{2\pi y}-1}\,dy \\
&= \frac{a^{-z}}{2} - \frac{a^{1-z}}{1-z} + 2\int_0^\infty \frac{r(y)^{-z}\,\sin(z\cdot\phi(y))}{e^{2\pi y}-1}\,dy \\
&= \frac{a^{-z}}{2} - \frac{a^{1-z}}{1-z} + 2\int_0^\infty \frac{(y^2+a^2)^{-\frac{z}{2}}\,\sin(z\cdot\phi(y))}{e^{2\pi y}-1}\,dy \qquad \text{(F.3.1)} \\
&= \frac{a^{-z}}{2} - \frac{a^{1-z}}{1-z} + 2\int_0^\infty \frac{(y^2+a^2)^{-\frac{z}{2}}\,\sin(z\cdot\arctan(\frac{y}{a}))}{e^{2\pi y}-1}\,dy\ . \qquad \text{(F.3.2)}
\end{aligned}$$

Es bleibt jetzt noch nachzutragen, daß das obige Integral auf der rechten Seite von F.3.1 tatsächlich konvergiert.

Beweis. Zunächst wollen wir $\tau := \arctan(\xi)$ für $\xi > 0$ abschätzen. Aus $\xi = \tan(\tau)$ folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{d\xi}{d\tau} &= \frac{d}{d\tau}\tan(\tau) = \frac{d}{d\tau}\frac{\sin(\tau)}{\cos(\tau)} = \frac{\cos^2(\tau)+\sin^2(\tau)}{\cos^2(\tau)} = 1 + \frac{\sin^2(\tau)}{\cos^2(\tau)} \\
&= 1+\tan^2(\tau) = 1+\xi^2\,, \quad \Rightarrow \quad \frac{d\tau}{d\xi} = \frac{1}{1+\xi^2}\,, \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\tau = \arctan(\xi) = \int_0^\xi \frac{1}{1+t^2}\, dt\,. \tag{F.3.3}$$

Gleichzeitig gilt auch:

$$\lim_{\tau \to \frac{\pi}{2}\text{-}0} \tan(\tau) = +\infty\,, \quad \Rightarrow \quad \lim_{\xi\to+\infty} \arctan(\xi) = \frac{\pi}{2}\,.$$

Diese beiden Abschätzungen für $\arctan(\xi)$ können wir zusammenfassen zu:

$$\arctan(\xi) = \int_0^\xi \frac{1}{1+t^2}\, dt < \begin{cases} \int_0^\xi dt = \xi\,, \\ \lim_{\xi\to+\infty} \arctan(\xi) = \frac{\pi}{2}\,. \end{cases} \tag{F.3.4}$$

Sei also $I(z,a)$ das Integral aus F.3.2. Da $z \in \mathbb{C}$ folgt $|\sin(z\cdot\arctan(\frac{y}{a}))| \leq |\sinh(|z|\cdot\arctan(\frac{y}{a}))|$. Weiter zerlegen wir $I(z,a) = \int_0^\infty \ldots\, dy = \int_0^a \ldots\, dy + \int_a^\infty \ldots\, dy$ und verwenden für $\arctan(\frac{y}{a})$ im ersten Integral die obere und im zweiten Integral die untere Abschätzung von F.3.4.

$$\begin{aligned} I(z,a) &:= \int_0^\infty \frac{(y^2+a^2)^{-\frac{z}{2}}\, \sin(z\cdot\arctan(\frac{y}{a}))}{e^{2\pi y}-1}\, dy \\ &\leq \int_0^\infty \frac{(y^2+a^2)^{-\frac{z}{2}}\, |\sinh(|z|\cdot\arctan(\frac{y}{a}))|}{e^{2\pi y}-1}\, dy \\ &\leq \int_0^a \frac{(y^2+a^2)^{-\frac{z}{2}}\, |\sinh(|z|\cdot\frac{y}{a})|}{e^{2\pi y}-1}\, dy + \int_a^\infty \frac{(y^2+a^2)^{-\frac{z}{2}}\, |\sinh(|z|\cdot\frac{\pi}{2})|}{e^{2\pi y}-1}\, dy\,. \qquad \square \end{aligned}$$

Diese Darstellung zeigt sofort, daß $I(z,a)$ für alle Werte von $z \in \mathbb{C}$ existiert und daß damit die Hermite-Formel für $\zeta(z,a)$ für alle Werte von $z \in \mathbb{C}\setminus\{1\}$ existiert.

Damit haben wir zugleich eine analytische Fortsetzung der Riemannschen Zeta-Funktion für alle Werte von $z \in \mathbb{C}\setminus\{1\}$ gefunden:

$$\zeta(z) = \zeta(z,1) = \frac{1}{2} - \frac{1}{1-z} + 2\int_0^\infty \frac{(y^2+1)^{-\frac{z}{2}}\, \sin(z\cdot\arctan(y))}{e^{2\pi y}-1}\, dy\,. \tag{F.3.5}$$

Für die Ableitung der Hurwitzschen Zeta-Funktion auf $z \in \mathbb{C}\setminus\{1\}$ ergibt sich aus F.3.2:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz}\zeta(z,a) &= -\frac{1}{2}\,\ln(a)\,a^{-z} - \frac{\ln(a)\,a^{1-z}}{z-1} - \frac{a^{1-z}}{(z-1)^2} \\ &\quad - \int_0^\infty \ln(a^2+y^2)\, \frac{\sin(z\,\arctan(\frac{y}{a}))}{(a^2+y^2)^{\frac{z}{2}}(e^{2\pi y}-1)}\, dy \\ &\quad + 2\int_0^\infty \frac{\arctan(\frac{y}{a})\,\cos(z\,\arctan(\frac{y}{a}))}{(a^2+y^2)^{\frac{z}{2}}(e^{2\pi y}-1)}\, dy\,. \end{aligned} \tag{F.3.6}$$

F.4 Die Hurwitzsche Zeta-Funktion bei $z = 0$ und $z = 1$

Für $z = 0$ folgt aus F.3.2 für $\zeta(0, a)$ sofort:

$$\zeta(0, a) = \frac{1}{2} - a \,, \tag{F.4.1}$$

und aus F.3.6 für $\frac{d}{dz}\zeta(z, a)\Big|_{z=0}$:

$$\frac{d}{dz}\zeta(z, a)\bigg|_{z=0} = -\frac{1}{2}\ln(a) + a\ln(a) - a + 2\int_0^\infty \frac{\arctan(\frac{y}{a})}{e^{2\pi y} - 1}\,dy \,. \tag{F.4.2}$$

Mit der 2. Binetschen Formel C.10.7:

$$\ln(\Gamma(a)) = -\frac{1}{2}\ln(a) + a\ln a - a + 2\int_0^\infty \frac{\arctan(\frac{y}{x})}{e^{2\pi y} - 1}\,dy + \frac{1}{2}\ln(2\pi)$$

ergibt sich:

$$\frac{d}{dz}\zeta(z, a)\bigg|_{z=0} = \ln(\Gamma(a)) - \frac{1}{2}\ln(2\pi) \,. \tag{F.4.3}$$

Wichtig ist auch der Grenzwert der Hurwitzschen Zeta-Funktion bei der Singularität bei $z = 1$.

$$\begin{aligned}
\lim_{z\to 1}\left[\zeta(z, a) - \frac{1}{z-1}\right] &= \lim_{z\to 1}\left[\frac{1}{2a} - \frac{a^{1-z} - 1}{z - 1} + \int_0^\infty \frac{2\sin(\arctan(\frac{y}{a}))}{(a^2 + y^2)^{\frac{1}{2}}(e^{2\pi y} - 1)}\,dy\right] \\
&= \frac{1}{2a} - \lim_{z\to 1}\left[\frac{a^{1-z} - 1}{z - 1}\right] + \int_0^\infty \frac{2\,y}{(a^2 + y^2)(e^{2\pi y} - 1)}\,dy \\
&= \frac{1}{2a} - \lim_{z\to 1}\left[\frac{\ln(a)\,(-1)\,a^{1-z}}{1}\right] + \int_0^\infty \frac{2\,y}{(a^2 + y^2)(e^{2\pi y} - 1)}\,dy \\
&= \frac{1}{2a} - \ln(a) + \int_0^\infty \frac{2\,y}{(a^2 + y^2)(e^{2\pi y} - 1)}\,dy \\
&= -\psi(a) := -\frac{\Gamma'(a)}{\Gamma(a)} \,.
\end{aligned} \tag{F.4.4}$$

Dabei haben wir in der letzten Zeile von der Integraldarstellung C.10.6 der Digamma-Funktion $\psi(x)$, der logarithmischen Ableitung der Gamma-Funktion $\Gamma(x)$ Gebrauch gemacht.

F.5 Literatur zur Hurwitzschen Zeta-Funktion

- Whittacker u. Watson (1969), A Course in Modern Analysis,
- Wang u. Guo (1989), Special Functions.

G Die eindimensionale Epsteinsche Zeta-Funktion

In diesem Kapitel soll die analytische Fortsetzung der folgenden eindimensionalen Epsteinschen Zeta-Funktion hergeleitet werden:

$$\zeta_{E1}(s,a,c,q) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(a(n+c)^2+q)^s} \,, \tag{G.0.1}$$

$$a > 0,\; q > 0,\; c \in \mathbb{C} \setminus \{-1,-2,\ldots\} \,, s > \frac{1}{2} \,.$$

Wir folgen hierbei im wesentlichen Elizalde (1995) (1.38 und 4.13), führen aber einen dort im Kapitel 4 angedeuteten Beweis hier explizit aus. Um zu einer analytischen Fortsetzung von $\zeta_{E1}(s,a,c,q)$ zu gelangen, nutzen wir zunächst die übliche Integraldarstellung der Gamma-Funktion aus (D.7.3).

$$\begin{aligned}
\zeta_{E1}(s,a,c,q) &:= \frac{1}{a^s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{((n+c)^2+\frac{q}{a})^s} \\
&= \frac{1}{a^s\Gamma(s)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty du\, u^{s-1}\, e^{-((n+c)^2+\frac{q}{a})u} \\
&= \frac{1}{a^s\Gamma(s)} \int_0^\infty du\, u^{s-1}\, (\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-((n+c)^2+\frac{q}{a})u}) \\
&= \frac{1}{a^s\Gamma(s)} \int_0^\infty du\, u^{s-1} e^{-(\frac{q}{a})u}\, (\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(n+c)^2 u}) \,.
\end{aligned}$$

Für die Summe auf der rechten Seite setzen wir die Jacobi-Identität der Jacobischen Theta-Funktion E.4.3 ein und erhalten:

$$\zeta_{E1}(s,a,c,q) = \frac{1}{a^s\Gamma(s)} \int_0^\infty du\, u^{s-1} e^{-(\frac{q}{a})u}\, (\sqrt{\frac{\pi}{u}}\,(1+2\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n^2}{u}} \cos(2\pi nc)))$$

$$= \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{a^s\Gamma(s)} \int_0^\infty du\, u^{s-\frac{1}{2}-1} e^{-(\frac{q}{a})u}\, (1+2\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n^2}{u}} \cos(2\pi nc))$$

$$= \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{a^s\Gamma(s)} \left[\int_0^\infty du\,(u^{s-\frac{1}{2}-1}e^{-(\frac{q}{a})u}) + 2\int_0^\infty du\,u^{s-\frac{1}{2}-1}e^{-(\frac{q}{a})u}\sum_{n=1}^\infty e^{-\frac{\pi^2n^2}{u}}\cos(2\pi nc))\right]$$

$$= \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{a^s\Gamma(s)} \left[\int_0^\infty du'\,((\frac{q}{a})^{-s+\frac{1}{2}}(u')^{s-\frac{1}{2}-1}e^{-u'})\right] + S_2(s)$$

$$= (\frac{\pi}{a})^{\frac{1}{2}}\,q^{\frac{1}{2}-s}\,\frac{\Gamma(s-\frac{1}{2})}{\Gamma(s)} + S_2(s)\ .$$

Es bleibt also noch das zweite, oben mit $S_2(s)$ bezeichnete, Integral zu berechnen:

$$S_2(s) := \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{a^s\Gamma(s)}\,2\int_0^\infty du\,u^{s-\frac{1}{2}-1}e^{-(\frac{q}{a})u}\sum_{n=1}^\infty e^{-\frac{\pi^2n^2}{u}}\cos(2\pi nc))$$

$$= \frac{2\pi^{\frac{1}{2}}}{a^s\Gamma(s)}\int_0^\infty du'\,(\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}(u')^{s-\frac{1}{2}-1}e^{-(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}u'}\sum_{n=1}^\infty e^{-(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}\frac{\pi^2n^2}{u'}}\cos(2\pi nc))$$

$$= (\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}\frac{2\pi^{\frac{1}{2}}}{a^s\Gamma(s)}\sum_{n=1}^\infty\int_0^\infty du\,(u)^{s-\frac{1}{2}-1}e^{-(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}(u+\frac{\pi^2n^2}{u})}\cos(2\pi nc))$$

$$= (\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}\frac{2\pi^{\frac{1}{2}}}{a^s\Gamma(s)}\sum_{n=1}^\infty(\pi n)^{s-\frac{1}{2}}\int_0^\infty du'\,(u')^{s-\frac{1}{2}-1}e^{-(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}\pi n(u'+\frac{1}{u'})}\cos(2\pi nc))\ .$$

Jetzt substituieren wir $e^t := u',\ e^t dt = du',\ t = \ln(u')$ und erhalten:

$$S_2(s) = \frac{2\pi^s}{a^s\Gamma(s)}(\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}\sum_{n=1}^\infty n^{s-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^\infty dt\,e^{t(s-\frac{1}{2})}\,e^{-2\pi n(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}\cosh(t)}\cos(2\pi nc))$$

$$= \frac{2\pi^s}{a^s\Gamma(s)}(\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}\sum_{n=1}^\infty n^{s-\frac{1}{2}}\int_0^\infty dt\,(e^{t(s-\frac{1}{2})}+e^{-t(s-\frac{1}{2})})\,e^{-2\pi n(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}\cosh(t)}\cos(2\pi nc))$$

$$= \frac{4\pi^s}{a^s\Gamma(s)}(\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}\sum_{n=1}^\infty n^{s-\frac{1}{2}}\int_0^\infty dt\,\cosh(t(s-\frac{1}{2}))\,e^{-2\pi n(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}\cosh(t)}\cos(2\pi nc))\ .$$

Diesen Ausdruck können wir mit einer Bessel-Funktion noch etwas kompakter schreiben. Wir finden in Abramowitz u. Stegun (1970), 9.6.24, für die modifizierte Bessel-Funktion der 3. Art $K_\nu(z)$:

$$K_\nu(z) := \int_0^\infty dt\,e^{-z\cosh(t)}\cosh(\nu t)\ , \quad \text{für } |\arg(z)| < \frac{\pi}{2}\ . \tag{G.0.2}$$

Für $S_2(s)$ folgt also:

$$S_2(s) = \frac{4\pi^s}{\Gamma(s)\, a^s} \, (\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}} \, \sum_{n=1}^{\infty} n^{s-\frac{1}{2}} \, \cos(2\pi nc) \, K_{s-\frac{1}{2}}(2\pi n (\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}) \; .$$

Damit erhalten wir für $\zeta_{E1}(s,a,c,q)$:

$$\begin{aligned}
\zeta_{E1}(s,a,c,q) &= \frac{1}{a^s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{((n+c)^2 + \frac{q}{a})^s} \\
&= (\frac{\pi}{a})^{\frac{1}{2}} \, q^{\frac{1}{2}-s} \, \frac{\Gamma(s-\frac{1}{2})}{\Gamma(s)} \\
&\quad + \frac{4\pi^s}{\Gamma(s)\, a^s} \, (\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}} \, \sum_{n=1}^{\infty} n^{s-\frac{1}{2}} \, \cos(2\pi nc) \, K_{s-\frac{1}{2}}(2\pi n (\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}}) \; . \qquad \text{(G.0.3)}
\end{aligned}$$

Wir wollen noch die beiden Spezialfälle $c = \frac{1}{2}$ und $c = 0$ betrachten, für die es möglich ist, von $\sum_{n=-\infty}^{\infty}$ zu einer $\sum_{n=0}^{\infty}$ überzugehen. Für $c = \frac{1}{2}$ folgt:

$$\begin{aligned}
\zeta_{E1}(s,a,\frac{1}{2},q) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} \\
&= \sum_{n=-\infty}^{-1} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(a(-n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(a(n-\frac{1}{2})^2 + q)^s} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} \\
&= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} \; .
\end{aligned}$$

Mit $\cos(2\pi n \frac{1}{2}) = \cos(\pi n) = (-1)^n$ folgt:

$$\begin{aligned}
\zeta_{E2}(s,a,\frac{1}{2},q) &:= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a(n+\frac{1}{2})^2 + q)^s} \\
&= \frac{1}{2} \, \zeta_{E1}(s,a,\frac{1}{2},q) =
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}\,(\frac{\pi}{a})^{\frac{1}{2}}\,q^{\frac{1}{2}-s}\,\frac{\Gamma(s-\frac{1}{2})}{\Gamma(s)}$$

$$+\,\frac{2\pi^s}{\Gamma(s)\,a^s}\,(\frac{q}{a})^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}\,\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\,n^{s-\frac{1}{2}}\,K_{s-\frac{1}{2}}(2\pi n(\frac{q}{a})^{\frac{1}{2}})\;. \qquad \text{(G.0.4)}$$

Der Fall $c = 0$ ist in der Physik bei dem System eines einzelnen eindimensionalen harmonischen Oszillators von Bedeutung.

$$\zeta_{E1}(s,a,0,q) = \frac{1}{a^s}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{(n^2+\frac{q}{a})^s} = q^{-s} + \frac{2}{a^s}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n^2+\frac{q}{a})^s}\;. \qquad \text{(G.0.5)}$$

Damit folgt für die Epsteinsche Zeta-Funktion $\zeta_{E3}(s,q)$:

$$\zeta_{E3}(s,q) := \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n^2+q)^s} = \frac{1}{2}[-q^{-s}+\zeta_{E1}(s,1,0,q)]$$

$$= \frac{1}{2}\,[-q^{-s}+\pi^{\frac{1}{2}}q^{\frac{1}{2}-s}\,\frac{\Gamma(s-\frac{1}{2})}{\Gamma(s)}+\frac{4\pi^s}{\Gamma(s)}\,q^{\frac{1}{4}-\frac{s}{2}}\,\sum_{n=1}^{\infty}n^{s-\frac{1}{2}}\,K_{s-\frac{1}{2}}(2\pi n q^{\frac{1}{2}})]\;. \qquad \text{(G.0.6)}$$

G.1 Literatur zu Epsteinschen Zeta-Funktionen

- Elizalde (1995), Ten Physical Applications of Spectral Zeta Function,
- Abramowitz u. Stegun (1970), Handbook of Mathematical Functions,
- Whittacker u. Watson (1969), A Course in Modern Analysis,
- Wang u. Guo (1989), Special Functions.

H Einführung in die Mellin-Transformation

H.1 Die Mellin-Integraltransformation

Ein möglicher Ausgangspunkt für den Beweis der Mellin-Integraltransformation ist die Fourier-Integraltransformation. Wir folgen hier Courant u. Hilbert (1968), S.87 ff.

Sei die Funktion $f(x)$ stückweise glatt, d.h. stückweise stetig differentierbar; sei an den Unstetigkeitsstellen x_i die Funktion $f(x)$ definiert als $f(x_i) := \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{2}(f(x_i - \epsilon) + f(x_i + \epsilon))$; sei weiter $f(x)$ absolut integrabel, d.h. $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|\, dx < \infty$.

Dann existiert das Fourier-Integral (Beweis siehe Courant u. Hilbert (1968), S.67):

$$g(\omega) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)\, e^{i\omega x}\, dx \ , \tag{H.1.1}$$

und es gilt

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\omega)\, e^{-i\omega x}\, d\omega \tag{H.1.2}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(y)\, e^{i\omega(y-x)}\, dy \ . \tag{H.1.3}$$

Für eine Verallgemeinerung der Fourier-Integraltransformation auf andere normierte Funktionenräume siehe etwa Titchmarsh (1967), oder Standardwerke der Funktionalanalysis (empfehlenswert etwa Werner (2005)).

Für die Mellin-Integraltransformation betrachten wir nur den Definitionsbereich $x \in \mathbb{R}_+$, d.h. $x > 0$, und setzen wie bei der Fourier-Integraltransformation voraus: sei die Funktion $f(x)$ stückweise glatt, d.h. stückweise stetig differentierbar; sei an den Unstetigkeitsstellen x_i die Funktion $f(x)$ definiert als $f(x_i) := \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{2}(f(x_i - \epsilon) + f(x_i + \epsilon))$; und sei zusätzlich im offenen Intervall $\{\sigma \in \mathbb{R} \,|\, \alpha < \sigma < \beta\}$ die Funktion $f(x)x^{\sigma-1}$ absolut integrabel, d.h. $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)x^{\sigma-1}|\, dx < \infty$.

Dann existiert im offenen Streifen $\{s \in \mathbb{C} \,|\, s = \sigma + i \cdot t \, , \, \alpha < \sigma < \beta\}$ das Mellin-Integral:

$$g(s) = \int\limits_{0}^{\infty} f(x)\, x^{s-1}\, dx \ . \tag{H.1.4}$$

Wenn $g(s)$ in im offenen Streifen $\{s \in \mathbb{C} \,|\, s = \sigma + i \cdot t \,,\, \alpha < \sigma < \beta\}$ regulär ist, absolut integrabel ist, d.h. $\int_{-\infty}^{\infty} |g(\sigma + i \cdot t)| \, dt < \infty$, und wenn die Funktion $g(s)$ im schmaleren abgeschlossenen Streifen $\{s \in \mathbb{C} \,|\, s = \sigma + i \cdot t \,,\, \alpha + \delta \leq \sigma \leq \beta - \delta \,,\, \delta > 0\}$ im Unendlichen gleichmäßig gegen Null geht, d.h. $\lim_{t\to\infty} g(\sigma \pm i \cdot t) = 0$, dann gilt auch die Umkehrung (auch Fourier-Mellin-Integral oder Bromwich-Integral genannt):

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} g(s)\, x^{-s}\, ds \,. \tag{H.1.5}$$

Beweis. Zunächst soll H.1.5 gezeigt werden. Wir führen die Variablen u und v ein als $x = e^u$ und $y = e^v$ und benützen in der letzten Zeile die Fourier-Transformation H.1.3:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} g(s)\, x^{-s}\, ds &= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\sigma + i \cdot t)\, x^{-\sigma + i \cdot t}\, dt \\
&= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt \, [e^{-u(\sigma + i \cdot t)} \int\limits_{0}^{\infty} f(y)\, y^{s-1}\, dy] \\
&= \frac{1}{2\pi}\, e^{-u\sigma} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt \, [e^{-i \cdot tu} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(e^v)\, e^{vs}\, dv] \\
&= \frac{1}{2\pi}\, e^{-u\sigma} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt \int\limits_{-\infty}^{\infty} [f(e^v)\, e^{v\sigma}]\, e^{i \cdot t(v-u)}\, dv \\
&= e^{-u\sigma}\, [f(e^u)\, e^{u\sigma}] = f(e^u) = f(x) \,. \qquad \square
\end{aligned}$$

Nun zum Beweis von H.1.4.

Beweis. Da $g(s)$ im abgeschlossenen Streifen $\{s \in \mathbb{C} \,|\, s = \sigma + i \cdot t \,,\, \alpha + \delta \leq \sigma \leq \beta - \delta \,,\, \delta > 0\}$ regulär ist und im Unendlichen gleichmäßig gegen Null geht, darf der Integrationsweg in H.1.5 verschoben werden. Wir wählen für das folgende als Integrationswege die senkrechten Geraden $\{s \in \mathbb{C} \,|\, s = \sigma_1 + i \cdot t\}$ und $\{s \in \mathbb{C} \,|\, s = \sigma_2 + i \cdot t\}$ mit festem $\sigma_1$und σ_2 mit $\alpha < \sigma_1 < \sigma < \sigma_2 < \beta$.

$$\begin{aligned}
J(s) := \int\limits_{0}^{\infty} f(x)\, x^{s-1}\, dx &= \int\limits_{0}^{1} f(x)\, x^{s-1}\, dx + \int\limits_{1}^{\infty} f(x)\, x^{s-1}\, dx \\
&= \int\limits_{0}^{1} dx\, [x^{s-1} \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma_1 - i\infty}^{\sigma_1 + i\infty} g(s_1)\, x^{-s_1}\, ds_1] + \int\limits_{1}^{\infty} dx\, [x^{s-1} \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma_2 - i\infty}^{\sigma_2 + i\infty} g(s_2)\, x^{-s_2}\, ds_2] \\
&=: J_1(s) + J_2(s) \,.
\end{aligned}$$

Beide Integrale sind absolut konvergent, denn:

$$
\begin{aligned}
|J_1(s)| &= |\int\limits_0^1 dx\,[x^{\sigma+i\cdot t-1}\,\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\sigma_1+i\cdot t_1)\,x^{-\sigma_1-i\cdot t_1}\,dt_1]\,| \\
&\le |\int\limits_0^1 dx\,x^{\sigma-\sigma_1-1}|\,\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} |g(\sigma_1+i\cdot t_1)|\,dt_1 \\
&= \frac{1}{\sigma-\sigma_1}\,\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} |g(\sigma_1+i\cdot t_1)|\,dt_1 < \infty
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|J_2(s)| &= |\int\limits_1^{\infty} dx\,[x^{\sigma+i\cdot t-1}\,\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\sigma_2+i\cdot t_2)\,x^{-\sigma_2-i\cdot t_2}\,dt_2]\,| \\
&\le |\int\limits_1^{\infty} dx\,x^{\sigma-\sigma_2-1}|\,\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} |g(\sigma_2+i\cdot t_2)|\,dt_2 \\
&= \frac{1}{\sigma_2-\sigma}\,\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} |g(\sigma_2+i\cdot t_2)|\,dt_2 < \infty\,.
\end{aligned}
$$

Also darf in $J_1(s)$ und $J_2(s)$ die Integrationsreihenfolge vertauscht werden:

$$
\begin{aligned}
J(s) &= \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_1-i\infty}^{\sigma_1+i\infty} ds_1\,[g(s_1)\int\limits_0^1 x^{s-s_1-1}dx] + \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_2-i\infty}^{\sigma_2+i\infty} ds_2\,[g(s_2)\int\limits_1^{\infty} x^{s-s_2-1}dx] \\
&= \frac{-1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_1-i\infty}^{\sigma_1+i\infty}\frac{g(s_1)}{s_1-s}\,ds_1 + \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_2-i\infty}^{\sigma_2+i\infty}\frac{g(s_2)}{s_2-s}\,ds_2 \\
&= \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_1+i\infty}^{\sigma_1-i\infty}\frac{g(s_1)}{s_1-s}\,ds_1 + \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_2-i\infty}^{\sigma_2+i\infty}\frac{g(s_2)}{s_2-s}\,ds_2\,.
\end{aligned}
$$

Da $g(\sigma+i\cdot t)$ für $t\to\infty$ gleichmäßig gegen Null geht, verschwinden auch die beiden horizontalen Integrale:

$$
J_3(s) := \lim_{t\to\infty}\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_2+i\cdot t}^{\sigma_1+i\cdot t}\frac{g(\sigma_3+i\cdot t)}{s_3-s}\,d\sigma_3 = 0\,,
$$

$$
J_4(s) := \lim_{t\to\infty}\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\sigma_1-i\cdot t}^{\sigma_2-i\cdot t}\frac{g(\sigma_4+i\cdot t)}{s_4-s}\,d\sigma_4 = 0\,.
$$

Damit können wir $J(s) = J_1(s) + J_2(s) = J_1(s) + J_4(s) + J_2(s) + J_3(s)$ als Integral über einen geschlossenen Integrationsweg schreiben und erhalten mit der Cauchyschen Integralformel

$$J(s) = \int_0^\infty f(x)\, x^{s-1}\, dx = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{g(s_1)}{s_1 - s}\, ds_1 = g(s)\ . \qquad \square$$

H.2 Beispiel Gamma-Funktion

Aus der Darstellung für die **Gamma-Funktion** C.2.1 folgt mit der inversen Mellin-Transformation:

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty e^{-x}\, x^{s-1}\, dx \quad \Rightarrow \tag{H.2.1}$$

$$e^{-x} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \Gamma(s)\, x^{-s}\, ds\ . \tag{H.2.2}$$

H.3 Beispiel Riemannsche Zeta-Funktion

Aus der Darstellung für die **Riemannsche Zeta-Funktion** D.7.4 folgt mit der inversen Mellin-Transformation:

$$\Gamma(s)\zeta(s) = \int_0^\infty \frac{1}{e^x - 1}\, x^{s-1}\, dx \quad \Rightarrow \tag{H.3.1}$$

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \Gamma(s)\zeta(s)\, x^{-s}\, ds\ . \tag{H.3.2}$$

H.4 Mellin-Transformation für asymptotische Entwicklungen

Die Mellin-Transformation ermöglicht eine wenig bekannte, aber doch sehr wirkungsvolle und leicht anwendbare Methode zur Bestimmung des Verhaltens einer Funktion $f(x)$ für $x \to \infty$:

Wenn die Mellin-Transformierte von $f(x)$:

$$g(s) = \int_0^\infty f(x)\, x^{s-1}\, dx$$

für $s > 0$ existiert und eine meromorphe Funktion darstellt, dann fällt $g(s)\,x^{-s}$ für $x \to \infty$ exponentiell stark ab und der Integrationsweg des Integrals

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} g(s)\,x^{-s}\,ds$$

kann in der rechten Halbebene geschlossen werden und wir erhalten mit dem Residuensatz eine asymptotische Näherung für $f(x)$ für $x \to \infty$:

$$f(x) \approx \sum_{i=1}^{n} \operatorname*{Res}_{s_i}(g(s)\,x^{-s}) \;. \tag{H.4.1}$$

I Asymptotische Entwicklungen

I.1 Landausche Ordnungssymbole

Asymptotische Entwicklungen von Funktionen spielen nicht nur für die näherungsweise Lösung von Integralen und Differentialgleichungen eine wichtige Rolle, sondern in einer Verallgemeinerung für Funktionale eine ganz zentrale Rolle in Reihenentwicklungen der Quantenfeldtheorie.

Zu Beginn seien einige Definitionen angeführt. Die Größenordnung von Funktionen wird häufig mit den Begriffen der *asymptotischen Gleichheit* und den *Landauschen Ordnungs-Symbolen* $O(f(x))$ und $o(f(x))$ beschrieben:

$$f(x) \approx g(x) \text{ für } x \to a \;\Leftrightarrow\; \lim_{x\to a} \frac{f(x)}{g(x)} = 1 \;, \tag{I.1.1}$$

$$f(x) = O(g(x)) \text{ für}\, x \to a \;\Leftrightarrow\; \left|\frac{f(x)}{g(x)}\right| \leq M \in \mathbb{R} \quad \text{für alle}\, x \in \text{Umgebung}\, U(a) \;, \tag{I.1.2}$$

$$f(x) = o(g(x)) \text{ für}\, x \to a \;\Leftrightarrow\; \lim_{x\to a} \left|\frac{f(x)}{g(x)}\right| = 0 \;. \tag{I.1.3}$$

Asymptotische Entwicklungen wurden von Poincaré am Ende des 19. Jahrhunderts bei seinen Untersuchungen zur Himmelsmechanik eingeführt.

Nach Poincaré hat eine Funktion $f(x)$ eine asymptotische Entwicklung in einer Funktionenfolge $\Phi_k(x)$ für $x \to \infty$, wenn gilt:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{N} f_k \Phi_k(x) + O(\Phi_{N+1}(x)) \quad \text{für}\, x \to \infty \;, \tag{I.1.4}$$

$$\Phi_{k+1}(x) = o(\Phi_k(x)) \;. \tag{I.1.5}$$

Wir beziehen uns im weiteren nur auf die Funktionenfolge $\Phi_k(x) = (\frac{1}{x})^k$ und schreiben, wenn I.1.4 erfüllt ist:

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^{\infty} f_k \, (\frac{1}{x})^k \quad \text{für}\, x \to \infty \;. \tag{I.1.6}$$

Den Unterschied zwischen einer konvergenten und einer asymptotischen Reihe sieht man vielleicht am leichtesten folgendermaßen:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \, (\frac{1}{x})^k$$

ist konvergent genau dann, wenn für ein festes x und $\forall \varepsilon > 0 \; \exists N \in \mathbb{N}$:

$$\left| f(x) - \sum_{k=0}^{M} f_k \, (\frac{1}{x})^k \right| < \varepsilon \text{ für } \forall M \in \mathbb{N},\, M > N \; , \tag{I.1.7}$$

und

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^{\infty} f_k \, (\frac{1}{x})^k$$

ist asymptotisch genau dann, wenn für ein festes N und $\forall \varepsilon > 0 \; \exists x_0 \in \mathbb{R}$:

$$\left| f(x) - \sum_{k=0}^{N} f_k \, (\frac{1}{x})^k \right| < \varepsilon (\frac{1}{x})^N \text{ für } \forall x \in \mathbb{R},\, x > x_0 \; . \tag{I.1.8}$$

Die Darstellung des *Watson Lemma*, der *Laplace Methode* und der *Stationäre Phase Methode* orientiert sich an dem Vorlesungsskript von Lega (1999) und dem Kapitel über asymptotische Entwicklungen von Ablowitz u. Fokas (1997).

I.2 Einige Lemmata über Größenabschätzungen

I.2.1 Lemma von Jordan

Das Lemma von Jordan benötigen wir für die *Stationäre Phase Methode*. Sei $f(z)$ eine analytische Funktion in der oberen Halbebene, $0 \leq \arg(z) \leq \pi$, evtl. mit einer endlichen Anzahl von Polen, und verschwinde $f(z)$ für $|z| \to \infty$:

$$\lim_{|z| \to \infty} f(z) = 0 \; ,$$

dann verschwindet auch das 'Fourier-Integral' von $f(z)$ über den unendlich fernen oberen Halbkreis:

$$\lim_{R \to \infty} \int_{C_R} f(z) \, e^{isz} dz = 0 \; . \tag{I.2.1}$$

Beweis.

$$I_R(s) = \int_{C_R} f(z) \, e^{isz} dz = \int_0^{\pi} f(Re^{i\varphi}) \, e^{isR\cos\varphi - sR\sin\varphi} (iRe^{i\varphi}) d\varphi \; .$$

Jetzt sei R so groß, daß $|f(z)| < \varepsilon$, dann gilt

$$|I_R(s)| \leq \varepsilon R \int\limits_0^{\pi} e^{-sR\sin\varphi} d\varphi = 2\varepsilon R \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-sR\sin\varphi} d\varphi \; .$$

Im Bereich $[0, \frac{\pi}{2}]$ liegt die Gerade vom Ursprung ($x = 0$, $y = 0$) zum Punkt ($x = \frac{\pi}{2}$, $y = 1$) mit der Steigung $\frac{2}{\pi}$ immer unterhalb der Sinus-Funktion (der Sinus beginnt ja am Ursprung mit Steigung 1), d.h. $\frac{2}{\pi}\varphi \leq \sin\varphi \;\Rightarrow$

$$|I_R(s)| \leq 2\varepsilon R \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-sR\frac{2}{\pi}\varphi} d\varphi = 2\varepsilon R \, \frac{-1}{sR\frac{2}{\pi}} \; e^{-sR\frac{2}{\pi}\varphi}\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = -\varepsilon\frac{\pi}{s}\left(e^{-sR} - 1\right) \, ,$$

$$\lim_{R\to\infty} \; |I_R(s)| \leq \lim_{R\to\infty} \; \varepsilon\frac{\pi}{s} = 0 \; . \qquad \square$$

I.2.2 Lemma von Watson

Das Lemma von Watson benötigen wir für die *Laplace Methode*. Zunächst eine Vorbemerkung. Wenn eine reelle Funktion $f(x)$ sich als eine konvergente Potenzreihenentwicklung um $x = 0$ darstellen läßt, dann folgt für ihre Laplace-Transformierte $\tilde{f}(s)$, sofern sie existiert, eine Potenzreihenentwicklung in $\frac{1}{s}$. Das Lemma von Watson verallgemeinert diese Aussage für asymptotische Potenzreihenentwicklungen.

Wir betrachten zunächst den einfachen Fall: sei also $f(x)$ eine reelle Funktion mit einer Potenzreihenentwicklung, die für $|x| < R$ konvergiert, und wachse $f(x)$ für $|x| \to \infty$ nicht schneller als $e^{\alpha x}$ mit $\alpha > 0$:

$$\lim_{x\to\infty} \; f(x) \leq \lim_{x\to\infty} \; e^{\alpha x} M \; ,$$

dann gilt für das Laplace-Integral von $f(x)$ die folgende Entwicklung:

$$\tilde{f}(s) := \int\limits_0^{\infty} f(x)\, e^{-sx} dx = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{s^{k+1}} \; . \tag{I.2.2}$$

Beweis.

$$\tilde{f}(s) := \int\limits_0^{\infty} f(x)\, e^{-sx} dx = \int\limits_0^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \, x^k \, e^{-sx} dx$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \int\limits_0^{\infty} x^k \, e^{-sx} dx = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \int\limits_0^{\infty} \frac{1}{s^{k+1}} \, (sx)^k \, e^{-sx} \, s \cdot dx$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \frac{1}{s^{k+1}} \int_0^{\infty} (y)^k e^{-y} \, dy = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \frac{1}{s^{k+1}} \Gamma(k+1)$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \frac{1}{s^{k+1}} k! = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{s^{k+1}} . \qquad \square$$

Das Lemma von Watson:

Sei $f(x)$ eine reelle, stetige und integrable Funktion auf $0 \le x \le b$ mit einer asymptotischen Entwicklung:

$$f(x) = x^{\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{\beta k} \quad \text{mit}\, \alpha > -1,\, \beta > 0 \,,$$

und sei $f(x)$ für $|x| \to \infty$ beschränkt durch:

- falls $b = \infty$: $\lim_{x\to\infty} f(x) \le \lim_{x\to\infty} M \cdot e^{cx}$ mit $c > 0$, $M > 0$,
- falls $b < \infty$: $|f(x)| < M$ mit $M > 0$,

dann gilt für das *verallgemeinerte Laplace-Integral* von $f(x)$ für $s \to \infty$ folgende Entwicklung:

$$\tilde{f}(s) := \int_0^b f(x) \, e^{-sx} dx \approx \sum_{k=0}^{\infty} a_k \frac{\Gamma(\alpha + \beta k + 1)}{s^{\alpha+\beta k+1}} \,. \tag{I.2.3}$$

Beweis. Wir trennen zunächst das Integral $\tilde{f}(s)$ in zwei Anteile auf. Dabei sei $R < b$ eine positive Konstante.

$$\tilde{f}(s) = \int_0^b f(x) \, e^{-sx} dx = \int_0^R f(x) \, e^{-sx} dx + \int_R^b f(x) \, e^{-sx} dx =: \tilde{f}_1(s) + \tilde{f}_2(s) \,.$$

Wir betrachten zuerst den Beitrag $\tilde{f}_2(s)$ außerhalb des Konvergenzradius von $f(x)$ für den Fall $b < \infty$:

$$\left|\tilde{f}_2(s)\right| = \left|\int_R^b f(x) \, e^{-sx} dx\right| \le M \int_R^b e^{-sx} dx = M \, (\frac{e^{-sb}}{-s} - \frac{e^{-sR}}{-s}) \approx O(\frac{e^{-sR}}{s}) \,.$$

Im Fall $b = \infty$ gibt es ein $R_{M,c}$, so daß für alle $x \ge R_{M,c}$gilt: $|f(x)| \le M \cdot e^{cx}$.

$$\left|\tilde{f}_2(s)\right| = \left|\int_R^{\infty} f(x) \, e^{-sx} dx\right| \le \left|\int_R^{R_{M,c}} f(x) \, e^{-sx} dx\right| + \left|\int_{R_{M,c}}^{\infty} f(x) \, e^{-sx} dx\right|$$

$$= M \, (\frac{e^{-sR_{M,c}}}{-s} - \frac{e^{-sR}}{-s}) + M \left|\int_{R_{M,c}}^{\infty} e^{-(s-c)x} dx\right|$$

$$\approx O(\frac{e^{-sR}}{s}) + M \left| \frac{e^{-(s-c)R_{M,c}}}{s-c} \right| \approx O(\frac{e^{-sR}}{s}) \ .$$

Als nächstes betrachten wir den Beitrag $\tilde{f}_1(s)$ innerhalb von R.

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_1(s) &= \int_0^R f(x)\, e^{-sx} dx = \int_0^R \left[\sum_{k=0}^{\infty} a_k\, x^{\alpha+\beta k} \right] e^{-sx} dx \\
&= \int_0^R \left[\sum_{k=0}^{N} a_k\, x^{\alpha+\beta k} + O(x^{\alpha+\beta(N+1)}) \right] e^{-sx} dx \\
&= \sum_{k=0}^{N} a_k \int_0^R x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx + \int_0^R O(x^{\alpha+\beta(N+1)})\, e^{-sx} dx \\
&= \sum_{k=0}^{N} a_k \left[\int_0^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx - \int_R^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx \right] + \int_0^R O(x^{\alpha+\beta(N+1)})\, e^{-sx} dx \\
&= \sum_{k=0}^{N} a_k \left[\int_0^\infty \frac{y^{\alpha+\beta k}}{s^{\alpha+\beta k+1}}\, e^{-y} dy - \int_R^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx \right] + \int_0^R O(x^{\alpha+\beta(N+1)})\, e^{-sx} dx \\
&= \sum_{k=0}^{N} a_k \left[\frac{\Gamma(\alpha+\beta k+1)}{s^{\alpha+\beta k+1}} - \int_R^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx \right] + \int_0^R O(x^{\alpha+\beta(N+1)})\, e^{-sx} dx \ .
\end{aligned}$$

Den zweiten Term können wir folgendermaßen abschätzen - dabei sei $\alpha+\beta N \leq m \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
\int_R^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx &= e^{-sR} \int_R^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-s(x-R)} dx = e^{-sR} \int_0^\infty (y+R)^{\alpha+\beta k}\, e^{-sy} dy \\
&\leq e^{-sR} \int_0^\infty (y+R)^m\, e^{-sy} dy = e^{-sR} \int_0^\infty \sum_{i=0}^{m} \binom{m}{i} y^i R^{m-i}\, e^{-sy} dy \\
&= e^{-sR} \sum_{i=0}^{m} \binom{m}{i} R^{m-i} \int_0^\infty y^i\, e^{-sy} dy \\
&= e^{-sR} \sum_{i=0}^{m} \binom{m}{i} R^{m-i}\, \Gamma(i+1) \\
&=: e^{-sR} A_N \ ,
\end{aligned}$$

$$\left| \sum_{k=0}^{N} a_k \int_R^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx \right| \leq e^{-sR} A_N \sum_{k=0}^{N} |a_k| \approx O(e^{-sR}) \ .$$

Auch den dritten Term können wir mittels der Definitionsgleichung von $O(.)$ (I.1.2) leicht abschätzen:

$$\int_0^R O(x^{\alpha+\beta(N+1)})\, e^{-sx} dx \leq B_N \int_0^R x^{\alpha+\beta(N+1)}\, e^{-sx} dx \leq B_N \int_0^\infty x^{\alpha+\beta(N+1)}\, e^{-sx} dx$$
$$\leq B_N \int_0^\infty \frac{y^{\alpha+\beta(N+1)}}{s^{\alpha+\beta(N+1)+1}}\, e^{-y} dy = B_N\, \frac{\Gamma(\alpha+\beta(N+1)+1)}{s^{\alpha+\beta(N+1)+1}}$$
$$\approx O(\frac{1}{s^{\alpha+\beta(N+1)+1}})\ .$$

Damit folgt nun für unser *verallgemeinertes Laplace-Integral* $\tilde{f}(s)$ für $s \to \infty$:

$$\tilde{f}(s) = \int_0^b f(x)\, e^{-sx} dx = \tilde{f}_1(s) + \tilde{f}_2(s)$$
$$\approx \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, \frac{\Gamma(\alpha+\beta k+1)}{s^{\alpha+\beta k+1}} + O(e^{-sR}) + O(\frac{1}{s^{\alpha+\beta(N+1)+1}}) + O(\frac{e^{-sR}}{s})$$
$$\approx \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, \frac{\Gamma(\alpha+\beta k+1)}{s^{\alpha+\beta k+1}} + O(\frac{1}{s^{\alpha+\beta(N+1)+1}})\ . \qquad \square$$

Anmerkung: Die Bedingung $\alpha > -1$, $\beta > 0$ in den Voraussetzungen des Watson Lemma ist notwendig, um die Existenz von $\int_0^\infty x^{\alpha+\beta k}\, e^{-sx} dx$, d.h. der Γ-Funktion zu gewährleisten.

I.2.3 Lemma von Riemann-Lebesgue

Das Lemma von Riemann-Lebesgue benötigen wir für die *Stationäre Phase Methode*. Sei $f(x)$ auf dem Intervall $a \leq x \leq b$ integrabel, d.h. $f \in L^1([a,b])$, sei $g(x)$ auf $a \leq x \leq b$ stetig differenzierbar, d.h. $g \in C^1([a,b])$ und nicht identisch 0, sei $g'(x) \neq 0$ auf $[a,b]$, und sei auch $\frac{d}{dx}(f(x)/g'(x)) \in L^1([a,b])$, dann gilt für das *verallgemeinerte Fourier-Integral* für $s \to \infty$:

$$\lim_{s\to\infty} \tilde{f}(s) := \lim_{s\to\infty} \int_a^b f(x)\, e^{isg(x)} dx = 0\ . \tag{I.2.4}$$

Beweis. Die Idee dieses Lemmas ist klar - wenn $g(x)$ keine horizontale Tangente auf $[a,b]$ hat, dann erwarten wir, daß das Integral für $s \to \infty$ wegen der schnellen Oszillationen gegen 0 geht. Da $g \in C^1([a,b])$ ist, führen wir eine partielle Integration durch, die uns einen Faktor $\frac{1}{s}$ liefert:

$$\int_a^b f(x)\, e^{isg(x)} dx = \int_a^b f(x)\, \frac{1}{isg'(x)}\, \frac{d}{dx}(e^{isg(x)})\, dx$$

$$= \frac{f(x)}{isg'(x)}\, e^{isg(x)}\Big|_a^b - \int_a^b \frac{d}{dx}(\frac{f(x)}{isg'(x)})\, e^{isg(x)}\, dx \ .$$

Dabei ist der erste Ausdruck rechts $O(\frac{1}{s})$ und der zweite Ausdruck kann nochmals partiell integriert werden und ist damit $O(\frac{1}{s^2})$:

$$\int_a^b f(x)\, e^{isg(x)} dx \approx \frac{f(x)}{isg'(x)}\, e^{isg(x)}\Big|_a^b + O(\frac{1}{s^2}) \ . \tag{I.2.5}$$

Wir werden im folgenden sehen, daß die Stationäre Phase Methode für jedes Extremum der Phase $g(x)$ einen Term der Ordnung $O((\frac{1}{s})^{\frac{1}{2}})$ liefert. Manchmal ist es daher sinnvoll, auch noch den Randterm der Ordnung $O(\frac{1}{s})$ von I.2.5 mitzuberücksichtigen.

Sofern $g'(x)$ auf $[a, b]$ keine Nullstellen hat, ist

$$\left| \frac{f(x)}{isg'(x)}\, e^{isg(x)}\Big|_a^b \right| \le \left|\frac{f(b)}{g'(b)}\right| + \left|\frac{f(a)}{g'(a)}\right| =: M_1 \ ,$$

$$\left| \int_a^b \frac{d}{dx}(\frac{f(x)}{ig'(x)})\, e^{isg(x)}\, dx \right| \le \int_a^b \left| \frac{d}{dx}(\frac{f(x)}{g'(x)})\, dx \right| =: M_2 \ .$$

Und damit folgt die Behauptung:

$$\lim_{s\to\infty} \left| \int_a^b f(x)\, e^{isg(x)} dx \right| \le \lim_{s\to\infty} \frac{1}{s} \cdot (M_1 - M_2) = 0 \ . \qquad \square$$

Wenn die Funktionen f und g hinreichend glatt sind, so kann man n-mal partiell integrieren und erhält mit $\lim_{s\to\infty} \tilde{f}(s) \sim 1/s^n$ eine entsprechend bessere asymptotische Entwicklung.

I.3 Laplace Methode

Wir suchen eine asymptotische Entwicklung des *verallgemeinerten Laplace-Integrals* für $s \to \infty$:

$$I(s) = \int_a^b f(x)\, e^{-sg(x)} dx \ . \tag{I.3.1}$$

Die Idee der Laplace-Methode ist, daß im $\lim_{s\to\infty}$ nur ein kleiner Bereich um das Minimum von $g(x)$ herum zum Wert des Integrals beiträgt. Wir nehmen für das folgende an, daß es im Intervall $[a, b]$ nur ein einziges Extremum von $g(x)$ bei c gebe und dieses sei ein Minimum. Im weiteren müssen wir drei Fälle unterscheiden:

1. $c = a$: $\quad I_{cb}(s) = \int\limits_c^b f(x)\, e^{-sg(x)} dx$,
2. $c = b$: $\quad I_{ac}(s) = \int\limits_a^c f(x)\, e^{-sg(x)} dx$,
3. $c \in (a, b)$: $\quad I(s) = I_{ac}(s) + I_{cb}(s) = \int\limits_a^c f(x)\, e^{-sg(x)} dx + \int\limits_c^b f(x)\, e^{-sg(x)} dx$.

Wir beginnen mit den ersten zwei Fällen. Da $g(x)$ im gesamten Intervall monoton ist, existiert die inverse Funktion und wir können das Integral auf ein einfaches Laplace-Integral im Sinne des Watson Lemma zurückführen. Weil $g(x)$ bei $x = c$ ein Minimum hat, ist $g'(c) = 0$ und $g''(c) > 0$. Wir führen als neue Variable ein: $\tau(x) := g(x) - g(c)$. Die Umkehrfunktion dazu sei: $x = x(\tau) = \tau^{-1}(x)$.

$$I_{cb}(s) = \int\limits_c^b f(x)\, e^{-sg(x)} dx = e^{-sg(c)} \int\limits_c^b f(x)\, e^{-s(g(x)-g(c))} dx$$

$$= e^{-sg(c)} \int\limits_0^{g(b)-g(c)} \frac{f(x(\tau))}{g'(x(\tau))}\, e^{-s\tau} d\tau \ ,$$

$$I_{ac}(s) = \int\limits_a^c f(x)\, e^{-sg(x)} dx = e^{-sg(c)} \int\limits_a^c f(x)\, e^{-s(g(x)-g(c))} dx$$

$$= e^{-sg(c)} \int\limits_{g(a)-g(c)}^0 \frac{f(x(\tau))}{g'(x(\tau))}\, e^{-s\tau} d\tau = e^{-sg(c)} \int\limits_0^{g(a)-g(c)} \frac{-f(x(\tau))}{g'(x(\tau))}\, e^{-s\tau} d\tau \ .$$

Jetzt soll der Ausdruck $f(x(\tau))/g'(x(\tau))$ nach τ entwickelt werden. Wir beginnen zunächst mit einer Entwicklung dieses Ausdrucks nach $(x - c)$, in welche wir dann eine Entwicklung von $(x - c)$ nach τ einsetzen.

$$\frac{f(x)}{g'(x)} \approx \frac{f(c) + (x-c)\, f'(c) + O((x-c)^2)}{g''(c)(x-c) + \frac{1}{2} g'''(c)(x-c)^2 + O((x-c)^3)}$$

$$= \frac{f(c) + (x-c)\, f'(c) + O((x-c)^2)}{g''(c)(x-c)[1 + \frac{g'''(c)}{2g''(c)}(x-c) + O((x-c)^2)]}$$

$$= \frac{1}{g''(c)(x-c)} \cdot [1 - \frac{g'''(c)}{2g''(c)}(x-c) + O((x-c)^2)]$$

$$\cdot [f(c) + (x-c)\, f'(c) + O((x-c)^2)]$$

$$= \frac{f(c)}{g''(c)(x-c)} - \frac{f(c)g'''(c)}{2(g''(c))^2} + \frac{f'(c)}{g''(c)} + O(x-c) \; .$$

Jetzt benötigen wir eine Entwicklung von $(x-c)$ nach τ:

$$\tau := g(x) - g(c) \approx \frac{1}{2}g''(c)(x-c)^2 + \frac{1}{3!}g'''(c)(x-c)^3 + O((x-c)^4) \; .$$

In niedrigster Ordnung gilt:

$$\tau \approx \frac{1}{2}g''(c)(x-c)^2 \quad \Rightarrow \quad (x-c) \approx \pm\sqrt{\frac{2}{g''(c)}}\,\tau^{\frac{1}{2}} \; .$$

Hierbei gilt das positive Vorzeichen im Bereich $x > c$, d.h. für das Integral $I_b(s)$, und das negative Vorzeichen gilt im Bereich $x < c$, d.h. für das Integral $I_a(s)$.

Für eine verbesserte Entwicklung von $(x-c)$ nach τ machen wir den Ansatz:

$$(x-c) \approx \pm\sqrt{\frac{2}{g''(c)}}\,\tau^{\frac{1}{2}} + a \cdot \tau^{\alpha} \; .$$

Setzen wir diese Entwicklung in die ursprüngliche Gleichung für τ ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\tau \approx\; & \frac{1}{2}g''(c)[\frac{2}{g''(c)}\,\tau \pm 2a\,(\frac{2}{g''(c)})^{\frac{1}{2}}\,\tau^{\frac{1}{2}+\alpha} + a^2\tau^{2\alpha}] \\
& + \frac{1}{3!}g'''(c)[\pm(\frac{2}{g''(c)})^{\frac{3}{2}}\,\tau^{\frac{3}{2}} + 3a\,\frac{2}{g''(c)}\,\tau^{1+\alpha} \pm 3a^2\,(\frac{2}{g''(c)})^{\frac{1}{2}}\,\tau^{\frac{1}{2}+2\alpha} + a^3\tau^{3\alpha}] \\
& + O((x-c)^4) \; .
\end{aligned}$$

Diese Gleichung können wir mit $\alpha = 1$ näherungsweise lösen:

$$\pm a(2g''(c))^{\frac{1}{2}}\tau^{\frac{3}{2}} \approx -[\pm\frac{1}{6}g'''(c)(\frac{2}{g''(c)})^{\frac{3}{2}}\,\tau^{\frac{3}{2}}] + O(\tau^2) \quad \Rightarrow$$

$$a \approx -\frac{1}{6}g'''(c)\,\frac{2}{(g''(c))^2} + O(\tau^{\frac{1}{2}}) = -\frac{g'''(c)}{3(g''(c))^2} + O(\tau^{\frac{1}{2}}) \; .$$

Damit folgt für $(x-c)$:

$$\begin{aligned}
(x-c) &\approx \pm\sqrt{\frac{2}{g''(c)}}\,\tau^{\frac{1}{2}} - \frac{g'''(c)}{3(g''(c))^2}\,\tau + O(\tau^{\frac{3}{2}}) \\
&= \pm\sqrt{\frac{2}{g''(c)}}\,\tau^{\frac{1}{2}}[1 \mp \frac{g'''(c)}{3\sqrt{2}(g''(c))^{\frac{3}{2}}}\,\tau^{\frac{1}{2}} + O(\tau)] \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{x-c} \approx \pm\sqrt{\frac{g''(c)}{2}}\,\tau^{-\frac{1}{2}}[1 \pm \frac{g'''(c)}{3\sqrt{2}(g''(c))^{\frac{3}{2}}}\,\tau^{\frac{1}{2}} + O(\tau)]\ .$$

Damit können wir jetzt die Entwicklung von $f(x(\tau))/g'(x(\tau))$ nach τ angeben:

$$\begin{aligned}\frac{f(x)}{g'(x)} &\approx \frac{f(c)}{g''(c)}\,(\pm\sqrt{\frac{g''(c)}{2}}\,\tau^{-\frac{1}{2}})\,[1 \pm \frac{g'''(c)}{3\sqrt{2}(g''(c))^{\frac{3}{2}}}\,\tau^{\frac{1}{2}} + O(\tau)] \\ &\qquad - \frac{f(c)g'''(c)}{2(g''(c))^2} + \frac{f'(c)}{g''(c)} + O(\tau^{\frac{1}{2}}) \\ &= \pm\frac{f(c)}{\sqrt{2g''(c)}}\,\tau^{-\frac{1}{2}} + \frac{f(c)g'''(c)}{(g''(c))^2}(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}) + \frac{f'(c)}{g''(c)} + O(\tau^{\frac{1}{2}}) \\ &= \pm\frac{f(c)}{\sqrt{2g''(c)}}\,\tau^{-\frac{1}{2}} + (\frac{f'(c)}{g''(c)} - \frac{f(c)g'''(c)}{3(g''(c))^2}) + O(\tau^{\frac{1}{2}}) \\ &=: \tau^{-\frac{1}{2}}[\pm a_0 + a_1\tau^{\frac{1}{2}} + O(\tau)]\ .\end{aligned}$$

Jetzt können wir das Watson Lemma mit $\alpha = \frac{1}{2}$ und $\beta = \frac{1}{2}$ anwenden und erhalten:

$$\begin{aligned}I_{cb}(s) &\approx e^{-sg(c)}\,[a_0\frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{s^{\frac{1}{2}}} + a_1\frac{\Gamma(1)}{s^1} + O(\frac{1}{s^{\frac{3}{2}}})] \\ &= e^{-sg(c)}\frac{\sqrt{\pi}f(c)}{\sqrt{2sg''(c)}} + e^{-sg(c)}(\frac{f'(c)}{g''(c)} - \frac{f(c)g'''(c)}{3(g''(c))^2})\cdot\frac{1}{s} + O(\frac{e^{-sg(c)}}{s^{\frac{3}{2}}})\ ,\end{aligned} \tag{I.3.2}$$

$$\begin{aligned}I_{ac}(s) &\approx e^{-sg(c)}\,[a_0\frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{s^{\frac{1}{2}}} - a_1\frac{\Gamma(1)}{s^1} + O(\frac{1}{s^{\frac{3}{2}}})] \\ &= e^{-sg(c)}\frac{\sqrt{\pi}f(c)}{\sqrt{2sg''(c)}} - e^{-sg(c)}(\frac{f'(c)}{g''(c)} - \frac{f(c)g'''(c)}{3(g''(c))^2})\cdot\frac{1}{s} + O(\frac{e^{-sg(c)}}{s^{\frac{3}{2}}})\ .\end{aligned} \tag{I.3.3}$$

Im unserem dritten Fall, wenn c innerhalb des offenen Intervalles (a,b) liegt, erhalten wir:

$$I(s) = I_{ac}(s) + I_{cb}(s) \approx f(c)\,e^{-sg(c)}\sqrt{\frac{2\pi}{sg''(c)}} + O(\frac{e^{-sg(c)}}{s^{\frac{3}{2}}})\ . \tag{I.3.4}$$

I.4 Stationäre Phase Methode

Wir suchen eine asymptotische Entwicklung des *verallgemeinerten Fourier-Integrals* für $s \to \infty$:

$$I(s) = \int\limits_a^b f(x)\,e^{isg(x)}dx\ . \tag{I.4.1}$$

Die Idee der *Stationäre Phase Methode* ist, daß wegen des Lemma von Riemann-Lebesgue (I.2.4), d.h. wegen der starken Oszillationen des Integranden für $s \to \infty$, nur ein kleiner Bereich um ein Extremum von $g(x)$, d.h. einen stationären Punkt c mit $g'(c) = 0$, zum Integral beiträgt. Wir nehmen für das folgende an, daß es im Intervall $[a, b]$ nur ein einziges Extremum von $g(x)$ bei c gebe. Im weiteren müssen wir drei Fälle unterscheiden:

1. $c = a$: $\quad I_{cb}(s) = \int_c^b f(x)\, e^{isg(x)} dx$,
2. $c = b$: $\quad I_{ac}(s) = \int_a^c f(x)\, e^{isg(x)} dx$,
3. $c \in (a, b)$: $\quad I(s) = I_{ac}(s) + I_{cb}(s) = \int_a^c f(x)\, e^{isg(x)} dx + \int_c^b f(x)\, e^{isg(x)} dx$.

Wir beginnen mit dem ersten Fall. Wegen des Lemma von Riemann-Lebesgue können wir uns auf das Intervall $[c, c + \varepsilon]$ beschränken.

$$\begin{aligned}
I_{cb}(s) &= \int_c^b f(x)\, e^{isg(x)} dx = \int_c^{c+\varepsilon} f(x)\, e^{isg(x)} dx + \int_{c+\varepsilon}^b f(x)\, e^{isg(x)} dx \\
&= \int_c^{c+\varepsilon} f(x)\, e^{isg(x)} dx + O(\frac{1}{s}) \\
&\approx \int_c^{c+\varepsilon} f(x)\, e^{isg(x)} dx = \int_c^{c+\varepsilon} f(c)\, e^{isg(c)}\, e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,(x-c)^2} dx \\
&= f(c)\, e^{isg(c)} \int_0^{\varepsilon} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,y^2} dy \; .
\end{aligned}$$

Wegen des Lemma von Riemann-Lebesgue können wir den Integrationsbereich wieder bis ∞ ausdehnen, denn

$$\int_{\varepsilon}^{\infty} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,y^2} dy \approx O(\frac{1}{s}) \quad \Rightarrow$$

$$I_{cb}(s) \approx f(c)\, e^{isg(c)} \int_0^{\infty} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,x^2} dx \; .$$

Den gleichen Ausdruck erhalten wir auch für $I_{ac}(s)$, denn:

$$I_{ac}(s) = \int_a^c f(x)\, e^{isg(x)} dx = \int_a^{c-\varepsilon} f(x)\, e^{isg(x)} dx + \int_{c-\varepsilon}^c f(x)\, e^{isg(x)} dx$$

$$= O(\frac{1}{s}) + \int\limits_{c-\varepsilon}^{c} f(x)\, e^{isg(x)} dx$$

$$\approx \int\limits_{c-\varepsilon}^{c} f(x)\, e^{isg(x)} dx = \int\limits_{c-\varepsilon}^{c} f(c)\, e^{isg(c)}\, e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,(x-c)^2} dx$$

$$= f(c)\, e^{isg(c)} \int\limits_{-\varepsilon}^{0} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,y^2} dy = f(c)\, e^{isg(c)} \int\limits_{0}^{\varepsilon} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,y^2} dy$$

$$\approx f(c)\, e^{isg(c)} \int\limits_{0}^{\infty} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,x^2} dx\ ,$$

$$I_{cb}(s) = I_{ac}(s) \approx f(c)\, e^{isg(c)} \int\limits_{0}^{\infty} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,x^2} dx := f(c)\, e^{isg(c)}\, I_0\ .$$

Jetzt nehmen wir erneut eine Fallunterscheidung vor, und zwar in die beiden Fälle $g''(c) > 0$ und $g''(c) < 0$. Wir beginnen zunächst mit $g''(c) > 0$ und wollen zeigen, daß das folgende Integral I_R über das Kreissegment C_R mit $z = Re^{i\varphi}$, $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{4}$, für $R \to \infty$ gegen Null geht:

$$I_R := \int\limits_{C_R} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,z^2} dz = \int\limits_{0}^{\frac{\pi}{4}} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,R^2 e^{i2\varphi}} R\, i\, e^{i\varphi} d\varphi$$

$$= \int\limits_{0}^{\frac{\pi}{2}} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,R^2 e^{i\phi}}\, \frac{i\, R\, e^{i\frac{\phi}{2}}}{2} d\phi = \int\limits_{0}^{\frac{\pi}{2}} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,R^2 e^{i\phi}}\, \frac{i\, R^2\, e^{i\phi}}{2(R^2 e^{i\phi})^{1-\frac{1}{2}}}\, d\phi$$

$$= \int\limits_{0}^{\frac{\pi}{2}} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,\rho e^{i\phi}}\, \frac{i\, \rho\, e^{i\phi}\, d\phi}{2(\rho e^{i\phi})^{1-\frac{1}{2}}} = \int\limits_{C_\rho} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,z}\, \frac{dz}{2\,(z)^{1-\frac{1}{2}}}\ .$$

Hierbei wurden $\rho := R^2$ und $C_\rho :\ z = \rho e^{i\phi}$ mit $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{2}$ verwendet. Nun ist $g''(c) > 0$ und $\lim_{\rho\to\infty} |\frac{1}{z^{1/2}}| = \lim_{\rho\to\infty} \rho^{-1/2} = 0$. Also können wir das Jordan Lemma I.2.1 auf den Weg $C\rho$ anwenden und erhalten $\lim_{R\to\infty} I_R = 0$.

Auf Grund des Residuensatzes gilt:

$$I_0 + I_R + I_{\pi/4} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{R\to\infty} I_0 = -\lim_{R\to\infty} I_{\pi/4} \quad \Rightarrow$$

$$\int\limits_{0}^{\infty} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,x^2} dx = -\int\limits_{\infty}^{0} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,(re^{\frac{\pi}{4}})^2}\, e^{\frac{\pi}{4}}\, dr = \int\limits_{0}^{\infty} e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,r^2 i} e^{\frac{\pi}{4}}\, dr$$

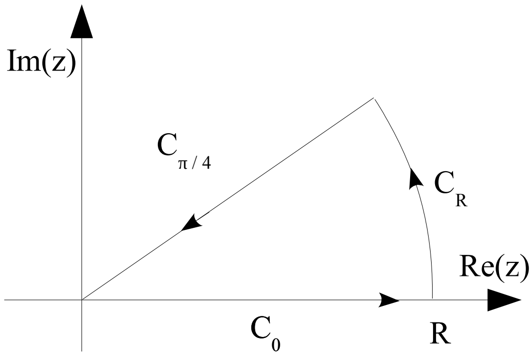


Abbildung I.1: Integrationsweg $C_0 + C_R + C_{\pi/4}$

$$= e^{\frac{\pi}{4}} \int_0^\infty e^{-s\frac{1}{2!}g''(c)\,r^2}\,dr\ .$$

Mit den Substitutionen $u := (s\frac{1}{2!}g''(c))^{1/2} \cdot r$ und $v := u^2$ folgt:

$$\int_0^\infty e^{is\frac{1}{2!}g''(c)\,x^2}dx = e^{\frac{\pi}{4}} \int_0^\infty e^{-u^2}\,(\frac{s\,g''(c)}{2!})^{-\frac{1}{2}}\,du = e^{\frac{\pi}{4}}\,(\frac{s\,g''(c)}{2!})^{-\frac{1}{2}} \int_0^\infty e^{-v}\,\frac{1}{2\,v^{\frac{1}{2}}}\,dv$$

$$= e^{\frac{\pi}{4}}\,(\frac{s\,g''(c)}{2!})^{-\frac{1}{2}}\,\frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-v}\,v^{\frac{1}{2}-1}\,dv = e^{\frac{\pi}{4}}\,(\frac{s\,g''(c)}{2!})^{-\frac{1}{2}}\,\frac{1}{2}\,\Gamma(\frac{1}{2})\ .$$

Damit erhalten wir also für den Fall $g''(c) > 0$:

$$I_{cb}(s) = I_{ac}(s) \approx f(c)\,e^{isg(c)}\,e^{\frac{\pi}{4}}\,(\frac{2!}{s\,g''(c)})^{\frac{1}{2}}\,\frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{2}\ . \tag{I.4.2}$$

Falls der stationäre Punkt c inmitten des Intervalles (a, b) liegt, ergibt sich nochmals ein Faktor 2:

$$I(s) = I_{ac}(s) + I_{cb}(s) \approx f(c)\,e^{isg(c)}\,e^{\frac{\pi}{4}}\,(\frac{2!}{s\,g''(c)})^{\frac{1}{2}}\,\Gamma(\frac{1}{2})\ . \tag{I.4.3}$$

Im Fall von $g''(c) < 0$ wählen wir ein Kreissegment C_R in der unteren Halbebene mit $z = Re^{i\varphi}$, $0 \leq \varphi \leq -\frac{\pi}{4}$, so daß wir nun auch wieder das Jordan Lemma anwenden können und ebenso wie oben $\lim_{R\to\infty} I_R = 0$ erhalten. Wieder folgern wir mit Hilfe des Residuensatzes:

$$I_0 + I_R + I_{-\pi/4} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{R\to\infty} I_0 = -\lim_{R\to\infty} I_{-\pi/4}$$

und erhalten also für $g''(c) < 0$:

$$I_{cb}(s) = I_{ac}(s) \approx f(c)\,e^{isg(c)}\,e^{-\frac{\pi}{4}}\,(\frac{2!}{s\,g''(c)})^{\frac{1}{2}}\,\frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{2}\ . \tag{I.4.4}$$

Falls der stationäre Punkt c inmitten des Intervalles (a, b) liegt, ergibt sich noch ein Faktor 2:

$$I(s) = I_{ac}(s) + I_{cb}(s) \approx f(c)\, e^{isg(c)}\, e^{-\frac{\pi}{4}}\, (\frac{2!}{s\, g''(c)})^{\frac{1}{2}}\, \Gamma(\frac{1}{2}) \; . \tag{I.4.5}$$

Anmerkung 1: Es stellt sich natürlich die Frage, warum wir oben als Integrationswege gerade $C_{\pi/4}$, bzw. $C_{-\pi/4}$ genommen haben. Es zeigt sich bei der nachfolgend besprochenen *Sattelpunkt Methode*, daß dieser Weg gerade der Weg des größten Gefälles ist.

Anmerkung 2: Die Ergebnisse I.3.2 bis I.3.4 der *Laplace Methode* gelten asymptotisch für $O(\frac{e^{-sg(c)}}{s^{3/2}})$, die Ergebnisse I.4.2 bis I.4.5 der *Stationäre Phase Methode* dagegen deutlich schwächer nur für $O(\frac{1}{s})$.

I.5 Sattelpunkt Methode

I.5.1 Sattelpunkt Methode allgemein

Bei Problemen der mathematischen Physik tauchen immer wieder auch allgemeinere Wegintegrale als die oben mit Hilfe der *Laplace Methode* und der *Stationäre Phase Methode* behandelten Integrale auf:

$$I(s) := \int\limits_C f(z)\, e^{s \cdot g(z)} dz \; . \tag{I.5.1}$$

Dabei seien $f(z)$ und $g(z)$ zwei Funktionen, die in einem gewissen Bereich $D \subseteq \mathbb{C}$, der den Weg C enthält, analytisch sein sollen. Den Parameter s können wir stets als reell und positiv annehmen, denn eine eventuelle komplexe Phase von s ließe sich ja immer in $g(z)$ absorbieren. Falls es nicht gelingt $I(s)$ direkt zu lösen, z.B. mit Hilfe des Residuensatzes, so ist man häufig schon zufrieden, wenn man wenigstens eine asymptotische Darstellung für $s \to \infty$ gewinnen kann.

Wenn $f(z)$ und $g(z)$ im Bereich D für $|z| \to \infty$ gegen Null gehen, und wenn es einen Punkt $z_0 \in D$ gibt, am welchem der Realteil von $g(z)$ ein Maximum hat, so können wir den Weg C zu einem Weg C_0 deformieren, so daß er über dieses Maximum von $\Re(g(z))$ bei z_0 führt. Nun können wir vermuten, daß der größte Beitrag zum Integral $I(s)$ für $s \to \infty$ aus der unmittelbaren Umgebung dieses Maximums herrührt. Wie gut oder schlecht diese Näherung tatsächlich ist, muß dann jedoch für den konkreten Einzelfall noch untersucht werden.

Sei $g(z) := g(x + iy) := u(x, y) + iv(x, y)$. Notwendig für ein Maximum von $u(x, y)$ bei (x_0, y_0)ist:

$$\left.\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\right|_{x_0,y_0} = \left.\frac{\partial u(x,y)}{\partial y}\right|_{x_0,y_0} = 0 \; .$$

Da $g(z)$ analytisch ist, gelten für $g(z)$ die Cauchy-Riemann Bedingungen:

$$\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial v(x,y)}{\partial y} \quad \text{und} \quad \frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = -\frac{\partial v(x,y)}{\partial x} \ ,$$

und damit folgt für das Maximum von $u(x,y)$ bei (x_0, y_0):

$$\left.\frac{\partial v(x,y)}{\partial y}\right|_{x_0,y_0} = -\left.\frac{\partial v(x,y)}{\partial x}\right|_{x_0,y_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left.\frac{dg(z)}{dz}\right|_{x_0+iy_0} = 0 \ .$$

Aus den Cauchy-Riemann Bedingungen folgt, daß $u(x,y)$ und $v(x,y)$ die Lapalce-Gleichung erfüllen:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \ ,$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \ ,$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0 \ . \tag{I.5.2}$$

Daraus folgt aber sofort, daß $u(x,y)$ bei (x_0, y_0) kein einfaches Maximum oder Minimum haben kann, denn ein $\partial^2 u/\partial x^2 < 0$ impliziert ja ein $\partial^2 u/\partial y^2 > 0$. Ein solcher Punkt (x_0, y_0) mit $dg(z)/dz|_{x_0+iy_0} = 0$ heißt Sattelpunkt und daher rührt auch der Name der Methode.

Wir führen jetzt die Vektoren der Gradienten der $u(x,y)$-Fläche und der $v(x,y)$-Fläche ein:

$$\vec{\nabla} u(x,y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u(x,y)}{\partial x} \\ \\ \frac{\partial u(x,y)}{\partial y} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{\nabla} v(x,y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial v(x,y)}{\partial x} \\ \\ \frac{\partial v(x,y)}{\partial y} \end{pmatrix} \ .$$

Wegen $du = \vec{\nabla} u \cdot \vec{dr}$ steht der Gradient senkrecht auf den durch $du = 0$ definierten Höhenlinien von $u(x,y)$, denn $du = 0 \Rightarrow \vec{\nabla} u \perp \vec{dr}$, und er zeigt in Richtung des größten Gefälles, denn du ist maximal für $\vec{\nabla} u \parallel \vec{dr}$.

Wegen

$$\vec{\nabla} u(x,y) \cdot \vec{\nabla} v(x,y) = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial x}(-\frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \ . \tag{I.5.3}$$

stehen $\vec{\nabla} u$ und $\vec{\nabla} v$ senkrecht aufeinander, d.h. die Richtung von $\vec{\nabla} u$, die Richtung des größten Gefälles von $u(x,y)$ ist zugleich die Richtung der $v(x,y)$-Höhenlinien.

Wir entwickeln g um z_0 in eine Taylorreihe

$$g(z) = g(z_0) + \frac{1}{2}(z - z_0)^2 g''(z_0) \ .$$

und wollen den Integrationsweg C_0 durch eine Gerade durch z_0 in Richtung des größten Gefälles von $\Re(g(z))$, oder was das Gleiche ist, der Konstanz von $\Im(g(z))$, ersetzen. Sei also:

$$z - z_0 = r \cdot e^{i\varphi_1} \quad \text{und} \quad g''(z_0) = |g''(z_0)| \cdot e^{i\varphi_2} \quad \Rightarrow$$

$$g(z) - g(z_0) = \frac{1}{2} r^2 |g''(z_0)| \cdot e^{i\,(2\varphi_1 + \varphi_2)} \quad \Rightarrow$$

$$\Re(g(z) - g(z_0)) = \frac{1}{2} r^2 |g''(z_0)| \cdot \cos(2\varphi_1 + \varphi_2) \ .$$

Die Richtung des größten Gefälles von $\Re(g(z))$ liegt vor bei

$$2\varphi_1 + \varphi_2 = \pi \quad \Leftrightarrow \quad \varphi_1 = \frac{1}{2}(\pi - \varphi_2) \ , \tag{I.5.4}$$

denn dann gilt ja gerade

$$\Re(g(z) - g(z_0)) = -\frac{1}{2} r^2 |g''(z_0)| \ ,$$

$$\Im(g(z) - g(z_0)) = 0 \ .$$

Damit lautet die entsprechende Geradengleichung in der komplexen Ebene:

$$z - z_0 = r \cdot e^{i\varphi_1} \quad \Rightarrow \quad y - y_0 = \tan(\frac{1}{2}(\pi - \varphi_2)) \cdot (x - x_0) \ ,$$

und auf dieser Geraden fällt nun der Integrand von $I(s)$ für $s \to \infty$ tatsächlich exponentiell sehr schnell ab

$$f(z)\, e^{s \cdot g(z)} \approx f(z_0)\, e^{s \cdot g(z_0)}\, e^{-\frac{1}{2} s |g''(z_0)| \cdot r^2} \quad \Rightarrow$$

$$I(s) = \int\limits_C f(z)\, e^{s \cdot g(z)} dz$$

$$\approx f(z_0)\, e^{s \cdot g(z_0)} \int\limits_a^b e^{-\frac{1}{2} s |g''(z_0)| \cdot r^2} e^{i\varphi_1} dr$$

$$
\begin{aligned}
&\approx f(z_0)\, e^{s\cdot g(z_0)}\, e^{i\varphi_1} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}s|g''(z_0)|\cdot r^2} dr \\
&= f(z_0)\, e^{s\cdot g(z_0)}\, e^{i\varphi_1} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2}s\,|g''(z_0)|}} \\
&= f(z_0)\, e^{s\cdot g(z_0)}\, e^{i\varphi_1} \sqrt{\frac{2\pi}{s\,|g''(z_0)|}}\ . \qquad \text{(I.5.5)}
\end{aligned}
$$

I.5.2 Reelle Sattelpunkt Methode = Laplace Methode

Im Falle von verallgemeinerten Laplace-Integralen, also von

$$
I(s) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)\, e^{s\cdot g(x)} dx\ ,
$$

mit einem Maximum bei $z_0 = x_0$ gilt: $g''(x_0) = -|g''(x_0)| = |g''(x_0)| \cdot e^{i\pi}$:

$$
\varphi_2 = \pi \quad \Rightarrow \quad \varphi_1 = 0 \quad \Rightarrow
$$

$$
I(s) \approx f(z_0)\, e^{s\cdot g(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{s\,|g''(z_0)|}}\ , \qquad \text{(I.5.6)}
$$

und das ist gerade wieder das Ergebnis der *Laplace Methode* von I.3.4

I.5.3 Imaginäre Sattelpunkt Methode = Stationäre Phase Methode

Im Falle von verallgemeinerten Fourier-Integralen, also von

$$
I(s) = \int\limits_{a}^{b} f(x)\, e^{isg(x)} dx\ ,
$$

mit einem Extremum bei $z_0 = x_0$ gilt: $g''(x_0) = |g''(x_0)| e^{i\varphi_2} = \pm i\,|g''(x_0)|$:

$$
\varphi_2 = \begin{cases} \frac{\pi}{2} & \text{für } g''(x_0) > 0\ , \\ \frac{3\pi}{2} & \text{für } g''(x_0) < 0\ , \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \varphi_1 = \frac{1}{2}(\pi - \varphi_2) = \begin{cases} \frac{\pi}{4} & \text{für } g''(x_0) > 0\ , \\ -\frac{\pi}{4} & \text{für } g''(x_0) < 0\ . \end{cases}
$$

$$
I(s) \approx f(z_0)\, e^{s\cdot g(z_0)}\, e^{\pm i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{2\pi}{s\,|g''(z_0)|}} \quad \text{für } g''(x_0) \gtrless 0\ , \qquad \text{(I.5.7)}
$$

und das ist gerade wieder das Ergebnis der *Stationäre Phase Methode* von I.4.3, bzw. I.4.5.

I.5.4 Beispiel: Stirling Näherung der Fakultät

$$I(s) = s! = \Gamma(s+1) = \int_0^\infty t^s e^{-t} dt \tag{I.5.8}$$

$$= \int_0^\infty e^{s \cdot \ln(t)} e^{-t} dt = \int_0^\infty e^{s(\ln(t) - \frac{t}{s})} dt \; .$$

Wir identifizieren $f(x) = 1$ und $g(x) = \ln(x) - \frac{x}{s}$.

$$g'(x) = \frac{1}{x} - \frac{1}{s}\,, \quad g'(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x_0 = s\,, \quad g(x_0) = \ln(s) - 1\;,$$

$$g''(x) = -\frac{1}{x^2} \quad \Rightarrow \quad g''(x_0) = -\frac{1}{s^2}\;.$$

Für große Werte von s liegt das Maximum von $g(x)$ und damit der Hauptbeitrag zu $I(s)$ bei s und wir wenden die reelle Sattelpunktmethode an:

$$I(s) \approx e^{s(\ln(s)-1)} \sqrt{2\pi s} = \sqrt{2\pi}\, e^{-s}\, s^{s+\frac{1}{2}}\;. \tag{I.5.9}$$

J Funktionalanalysis von Fredholm-Operatoren

The beginner … should not be discouraged if … he finds that he does not have the prerequisites for reading the prerequisites. *P. Halmos*

Zitiert nach *Functional Analysis*, Reed u. Simon (1980), S. 1.

J.1 Einführung

In der Quantentheorie lernen wir gleich zu Beginn, daß der Impuls-Operator in der Form $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$ auf $L^2(a,b)$ ein linear unbeschränkter Operator ist, mit allen Komplikationen, die unbeschränkte Operatoren an sich haben. Und vielleicht lernen wir auch, daß die für die Quantentheorie typischen kanonischen Vertauschungsrelationen der Form $[A,B] = i \cdot \hat{1}$ sich nicht mit zwei linear beschränkten Operatoren A und B erfüllen lassen, sondern daß in diesem Fall zumindest einer der beiden Operatoren unbeschränkt sein muß (Beweis siehe unten).

Wenn wir uns aber mit mathematischer Literatur zu elliptischen Differential-Operatoren und dem Indextheorem beschäftigen, so erfahren wir, daß elliptische Differential-Operatoren Fredholm-Operatoren sind. Wenn nun $\frac{d}{dx}$ als ein elliptischer Differential-Operator ein Fredholm-Operator ist, dann muß $\frac{d}{dx}$ ein beschränkter Operator sein, da Fredholm-Operatoren ja beschränkt sind.

Der Widerspruch löst sich dadurch auf, daß in der modernen Analysis elliptische Differential-Operatoren nicht auf L^2, sondern in einem erweiterten Rahmen als Pseudodifferential-Operatoren in Sobolevräumen betrachtet werden und nur in diesem Rahmen als Fredholm-Operatoren behandelt werden können. Die Vorteile dieser Behandlungsweise von partiellen Differential-Operatoren sind so umfassend, daß der Kalkül der Pseudodifferential-Operatoren in der Mathematik schon seit Jahrzehnten zum Standardrepertoire der Theorie der partiellen Differentialgleichungen gehört.

Bevor wir im nächsten Kapitel auf den Kalkül der Pseudodifferential-Operatoren und speziell die elliptischen Differential-Operatoren eingehen, sollen in diesem Kapitel kurz einige benötigte Grundlagen der Funktionalanalysis zusammengestellt werden. Jedes Lehrbuch der Funktionalanalysis behandelt die hier angeführten Themen ausführlich. Für diese Darstellung wurden herangezogen: Großmann (1972), Werner (2005), Lax (2002), Voigt u. Wloka (1975), Gilkey (1995), Booß (1977), Fischer u. Kaul (2001), Fischer u. Kaul (1998). Dabei ist Großmann (1972) als Einstieg in die Funktionalanalysis für Physiker gut geeignet und leicht lesbar. Die hervorragende *Funktionanalysis* von Werner (2005) ist eine moderne deutschsprachige Standardreferenz. Das Lehrbuch des berühmten Altmeisters der Analysis Peter D. Lax, Lax (2002), ragt durch besonders schöne Beweise und die didaktisch gelungene Präsentation auch ungewohnter Zusammenhänge hervor. Booß (1977) ist eine mit Gewinn zu lesende Einführung in die Theorie der Fredholm-Operatoren und die Indextheorie.

J.2 Beschränkte Operatoren

Definition J.2.1 *Alle linearen Räume die im folgenden betrachtet werden, seien Vektorräume über einem Körper* $\mathbb{K}$ *- wobei hier stets* $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ *oder* $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ *ist.*

Definition J.2.2 *Sei* $\mathcal{H}$ *ein separabler Hilbert-Raum. Ein beliebiger Operator* $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ *heißt beschränkt, wenn es eine Konstante* $C \in \mathbb{R}$ *gibt mit*

$$\|Af\| \leq C\|f\| \quad \textit{für alle } f \in \mathcal{H} \; .$$

Die kleinste Schranke C *heißt Norm des Operators:*

$$\|A\| := \sup_{f \in \mathcal{H}, \|f\| \neq 0} \frac{\|Af\|}{\|f\|} \; .$$

Definition J.2.3 *Wir bezeichnen die Menge der linearen und beschränkten Operatoren in* $\mathscr{H}$ *mit* $\mathscr{L}(\mathscr{H})$*.*

Wenn A ein linear-beschränkter Operator ist, läßt sich wegen der Linearität die Operatornorm auch schreiben als:

$$\|A\| := \sup_{f \in \mathcal{H}, \|f\| = 1} \|Af\|$$

Definition J.2.4 *Ein beliebiger Operator* $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ *heißt (folgen-)stetig an der Stelle* $f \in \mathcal{H}$*, wenn für jede Cachy-Folge* $f_n \in \mathcal{H}$ *mit*

$$\lim_{n \to \infty} f_n = f \quad \Rightarrow \quad \lim_{n \to \infty} Af_n = Af \; .$$

Ein beliebiger Operator $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ *heißt stetig, wenn er an allen Stellen* $f \in \mathcal{H}$ *stetig ist.*

Satz J.2.5 *a. Ein linear-beschränkter Operator* $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ *ist an jeder Stelle* $f \in \mathscr{H}$ *stetig, oder an keiner.*

b. Die hier definierte Folgenstetigkeit ist in metrischen Räumen äquivalent zum allgemeineren topologischen Begriff der Stetigkeit, d.h. eine Abbildung $A : M \to M$ *ist genau dann folgenstetig, wenn das Urbild* $A^{-1}(D)$ *jeder offenen oder abgeschlossenen Menge* $D \subset M$ *offen oder abgeschlossen ist.*

Beweis. a. Sei A stetig bei $f \in \mathscr{H}$ und sei $\{g_i\} \in \mathscr{H}$ eine Cachyfolge mit $\lim_{i\to\infty} g_i = g$, dann ist $\{f_i := g_i - g + f\}$ eine Cachyfolge mit $\lim_{i\to\infty} f_i = f$ und wegen der Linearität und Stetigkeit von A bei f gilt:

$$\lim_{i\to\infty} Af_i = \lim_{i\to\infty} A(g_i - g + f) = \lim_{i\to\infty} Ag_i - Ag + Af \quad \Rightarrow \quad \lim_{i\to\infty} Ag_i = Ag \; .$$

b. Sei das Urbild $A^{-1}(D)$ jeder offenen Menge $D \subset M$ offen, dann ist äquivalent dazu auch das Urbild $A^{-1}(E)$ jeder abgeschlossenen Menge $E \subset M$ abgeschlossen, denn zu jedem E ist ja die Komplementmenge $E^c := M \setminus E$ eine offene Menge und also $A^{-1}(E^c)$ auch offen:

$$A^{-1}(E^c) = \{f \,|\, Af \in E^c\} = \{f \,|\, Af \in E\}^c = (A^{-1}(E))^c \quad \Leftrightarrow$$

$$A^{-1}(E) \text{ abgeschlossen} \; .$$

Sei jetzt $A : M \to M$ folgenstetig, $E \subset M$ abgeschlossen und $\{f_i\}$ eine Cauchyfolge in $A^{-1}(E)$ mit $f := \lim_{i\to\infty} f_i$. Es ist zu zeigen, daß $A^{-1}(E)$ abgeschlossen ist, d.h. daß $f \in A^{-1}(E)$ liegt. Wegen der Folgenstetigkeit von A ist $\{g_i := Af_i\}$ eine Cauchyfolge in E und wegen der Abgeschlossenheit von E gibt es ein $g \in E$ mit $g = \lim_{i\to\infty} g_i$ und $g = Af$. Also liegt f in $A^{-1}(E)$. Die Folgenstetigkeit implziert also die topologische Stetigkeit.

Für die umgekehrte Richtung sei jetzt $A : M \to M$ stetig (im topologischen Sinne) und $\{f_i\}$ eine Cauchyfolge in M mit $f := \lim_{i\to\infty} f_i$. Es ist zu zeigen, daß $\{f_i\}$ folgenstetig ist, d.h. daß $Af := \lim_{i\to\infty} Af_i$. Sei also $D := K_\epsilon(A(f))$ eine offene ϵ-Umgebung von Af, dann ist $f \in A^{-1}(D)$ und $A^{-1}(D)$ ist wegen der Stetigkeit auch offen. Also gibt es in $A^{-1}(D)$ eine offene δ-Umgebung $K_\delta(f)$ in der fast alle f_i liegen, und daraus folgt, daß fast alle Af_i in $D = K_\epsilon(A(f))$ liegen und das heißt, daß $Af := \lim_{i\to\infty} Af_i$. Die topologische Stetigkeit impliziert also die Folgenstetigkeit. □

Satz J.2.6 *Ein linearer Operator $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ ist genau dann stetig, wenn er beschränkt ist.*

Beweis. a) A sei linear und beschränkt $\Rightarrow$ $A0 = 0$ $\Rightarrow \| Af_i - A0 \| = \| Af_i \| \leq C \| f_i \| \to 0$ wenn $\| f_i \| \to 0$. Also ist A an der Stelle 0 stetig und wegen der Linearität überall auf $\mathscr{H}$ stetig.
b) A sei linear und auf $\mathscr{H}$ stetig. Wenn A nicht beschränkt ist, dann gibt es eine Folge $\{f_i\} \in \mathscr{H}$ mit $\| f_i \| \neq 0$ und $c_i := \| Af_i \| \,/\, \| f_i \| \to \infty$.
Dann ist $\{g_i := (1/c_i)(f_i/ \| f_i \|)\}$ eine Nullfolge in $\mathscr{H}$ und wegen der Stetigkeit von A gilt $Ag_i \to 0$. Andererseits gilt aber auch $\| Ag_i \| = (1/c_i)(Af_i/ \| f_i \|) = 1 \neq 0$. Widerspruch, also ist A beschränkt. □

Als Beispiel eines nicht beschränkten Operators in einem Hilbert-Raum betrachten wir den eindimensionalen Impuls-Operator in der Ortsdarstellung auf $L^2(a,b)$, $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b :$ $A := -i\hbar \frac{d}{dx} \, : \, L^2(a,b) \to L^2(a,b)$.

Die Funktionen $f_k(x) := (1/\sqrt{b-a}) \exp(i2\pi kx/(b-a))$ sind Elemente von $L^2(a,b)$ mit $\| f_k \| = 1$, aber $\| \frac{d}{dx} f_k \| = \frac{2\pi}{b-a} k \to \infty$. Also ist der Impuls-Operator $A := -i\hbar \frac{d}{dx}$ nicht auf allen Elementen von $L^2(a,b)$ stetig und damit auf $L^2(a,b)$ unbeschränkt. Gleichzeitig ist dieser eindimensionale Impuls-Operator aber ein elliptischer Differential-Operator. Wir werden im Abschnitt über Pseudodifferential-Operatoren sehen, daß wir elliptische Pseudodifferential-Operatoren in geeigneten Sobolevräumen als beschränkte Operatoren definieren können. Dies bietet uns dann deutlich erweiterte Möglichkeiten zur Untersuchung partieller Differentialgleichungen.

Nun stellt sich natürlich die Frage, ob wir nicht vielleicht sogar alle quantenmechanischen Operatoren statt in $L^2(a,b)$ in einem geeigneten Sobolev-Raum betrachten können, um sie solcherart zu beschränkten Operatoren zu machen? Diese Idee funktioniert leider nicht, wie der folgende Satz zeigt:

Satz J.2.7 (Wielandt) *Die Vertauschungsrelation* $[A,B] := AB - BA = i\hat{1}$ *ist im Raum der linear beschränkten Operatoren nicht möglich.*

Beweis. Seien $A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$, welche die Vertauschungsrelation $[A,B] = i\hat{1}$ erfüllen. Zunächst beweisen wir per Induktion die Relation $i\,nB^{n-1} = AB^n - B^nA$. Für $n = 1$ ist dies nach Voraussetzung richtig. Jetzt sei die Relation für n richtig, dann folgt für $n+1$:

$$
\begin{aligned}
AB^{n+1} - B^{n+1}A &= AB^nB - B^nBA = AB^nB - B^n(AB - i\hat{1}) \\
&= [A, B^n]B + iB^n = i\,nB^{n-1}B + iB = i(n+1)B^n) \,.
\end{aligned}
$$

Nun bilden wir von beiden Seiten dieser Relation die Norm und erhalten:

$$
n \| B^{n-1} \| \leq \| AB^n \| + \| B^nA \| \leq 2 \| B^{n-1} \| \| B \| \| A \| \ .
$$

Wenn $n > 2 \| B \| \| A \|$ ist, dann gibt es nur die Lösung $\| B^{n-1} \| = 0$ und damit $B^{n-1} = \hat{0}$. Setzen wir dies auf der rechten Seite von $i\,(n-1)B^{n-2} = AB^{n-1} - B^{n-1}A$ ein, so folgt $B^{n-2} = \hat{0}$ und induktiv dann $B = \hat{0}$. Widerspruch, also muß zumindest einer der beiden Operatoren A und B ein unbeschränkter Operator sein. □

Satz J.2.8 *Die Menge der linear-beschränkten Operatoren* $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ *bildet einen Banach-Raum.*

Beweis. Mit $A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$, $a \in \mathbb{C}$ folgt sofort, daß $A+B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ und $aA \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$, daß also $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ ein linearer, normierter Raum ist. Zu zeigen bleibt also noch, daß $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ auch abgeschlossen ist. Sei $\{A_n \in \mathscr{L}(\mathscr{H})\}$ eine Cauchy-Folge in $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ und $f \in \mathcal{H}$, dann gilt: $\| (A_m - A_n)f \| \leq \| A_m - A_n \| \| f \| \to 0$ mit $m, n \to \infty$. Da $\mathcal{H}$ abgeschlossen ist, gilt also, daß $g := \lim_{n\to\infty} A_nf$ existiert und gerade $Af := g = \lim_{n\to\infty} A_nf$ definiert. Offensichtlich ist A auch linear und auch beschränkt, denn aus $\| A_nf \| / \| f \| \leq \| A_n \| \leq C$ folgt wegen der Stetigkeit der Norm:
$\lim_{n\to\infty} \| A_nf \| / \| f \| = \| \lim_{n\to\infty} A_nf \| / \| f \| = \| Af \| / \| f \| \leq \| A \| \leq C$.

Für viele Beweise im Zusammenhang mit linear-beschränkten Operatoren ist der folgende Satz über die gleichmäßige Beschränktheit grundlegend:

Satz J.2.9 (Banach-Steinhaus) *Eine beliebige Menge linear-beschränkter Operatoren* $\{A_n\} \subset \mathscr{L}(\mathscr{H})$ *ist in* $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ *beschränkt, wenn für jedes* $f \in \mathcal{H}$ *die Menge* $\{A_n f\}$ *beschränkt ist. Also:* $\| A_n f \| \leq C_f$ *für alle* $n \in$ *Indexmenge,* $f \in \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad \| A_n \| \leq C$.

Beweis. siehe Werner (2005), S.141, Theorem IV.2.1. □

Lemma J.2.10 *Das Produkt zweier linear-beschränkter Operatoren in* $\mathscr{H}$ *ist linear-beschränkt.*

Beweis. Seien $A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$, dann folgt:

$$\begin{aligned}
\|AB\| &= \sup_{f\in\mathscr{H},\|f\|\neq 0} \frac{\|AB\,f\|}{\|f\|} = \sup_{f\in\mathscr{H},\|f\|\neq 0,\|\mathbf{Bf}\|\neq\mathbf{0}} \frac{\|AB\,f\|}{\|Bf\|}\,\frac{\|Bf\|}{\|f\|} \\
&\leq \Big(\sup_{f\in\mathscr{H},\|f\|\neq 0,\|\mathbf{Bf}\|\neq\mathbf{0}} \frac{\|A(Bf)\|}{\|Bf\|}\Big)\Big(\sup_{f\in\mathscr{H},\|f\|\neq 0} \frac{\|Bf\|}{\|f\|}\Big) \\
&\leq \Big(\sup_{Bf\in\mathscr{H},\|\mathbf{Bf}\|\neq\mathbf{0}} \frac{\|A(Bf)\|}{\|Bf\|}\Big)\Big(\sup_{f\in\mathscr{H},\|f\|\neq 0} \frac{\|Bf\|}{\|f\|}\Big) = \|A\|\|B\|\;.
\end{aligned}$$

□

Zu einem linear-beschränkten Operator in einem Hilbert-Raum gibt es einen linear-beschränkten adjungierten Operator. Dies beweist man mit dem Rieszschen Darstellungssatz linear-beschränkter Funktionale in einem Hilbert-Raum.

Satz J.2.11 (Riesz-Fréchet) *Jedes linear-beschränkte Funktional* $l : \mathscr{H} \to \mathbb{C}$ *über einem Hilbert-Raum* $\mathscr{H}$ *ist darstellbar in der Form* $l(f) = \langle g \mid f\rangle$ *für alle* $f \in \mathscr{H}$. *Dabei ist* $g \in \mathscr{H}$ *eindeutig durch das Funktional* l *bestimmt und es gilt* $\|l\| = \|g\|$.

Beweis. Zunächst betrachten wir den Kern von l, hier als $N_l \subseteq \mathscr{H}$ bezeichnet. Wenn $N_l = \mathscr{H}$, dann können wir $g = 0$ wählen. Sei jetzt also der Kern von l kleiner als $\mathscr{H}$, d.h. $\dim N_l^{\perp} > 0$, dann gibt es ein $p \in N_l^{\perp}$ mit $p \neq 0$. Dann ist das folgende $q := l(p)f - l(f)p \in K_l$, denn $l(q) = 0$, und $\langle p \mid q\rangle = 0$.

$$0 = \langle p \mid q\rangle = l(p)\langle p \mid f\rangle - l(f)\|p\|^2 \quad \Rightarrow \quad l(f) = \langle g \mid f\rangle \text{ mit } g := \langle \frac{l(p)}{\|p\|^2} p \mid f\rangle.$$

Das hier konstruierte $g \in \mathscr{H}$ ist eindeutig, denn: $\langle g_1 \mid f\rangle = \langle g_2 \mid f\rangle$ für alle $f \in \mathscr{H} \Rightarrow g_1 = g_2$. Also ist der zum Kern von l senkrechte Unterraum $N_l^{\perp}$ eindimensional. □

Satz J.2.12 *Zu jedem linear-beschränkten Operator* $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ *in einem Hilbert-Raum gibt es einen adjungierten Operator* $A^\dagger$, *der ebenfalls linear-beschränkt ist:*

$$\langle A^\dagger g \mid f\rangle := \langle g \mid Af\rangle \textit{ für alle } f, g \in \mathscr{H} \quad \textit{und} \quad \|A^\dagger\| = \|A\|\;.$$

Beweis. $\langle g \mid Af \rangle$ ist bei festem $g \in \mathscr{H}$ linear-beschränktes Funktional: $l_{g,A}(f) := \langle g \mid Af \rangle$. Nach dem Rieszschen Darstellungssatz gibt es ein $g' \in \mathscr{H}$ mit $l_{g,A}(f) = \langle g' \mid f \rangle$. Die Abbildung von $g \to g'$ nennen wir den adjungierten Operator $A^\dagger$. $A^\dagger$ ist linear, denn:

$$\langle A^\dagger(a_1 g_1 + a_2 g_2) \mid f \rangle = \langle (a_1 g_1 + a_2 g_2) \mid Af \rangle = a_1^* \langle g_1 \mid Af \rangle + a_2^* \langle g_2 \mid Af \rangle$$
$$= a_1^* \langle A^\dagger g_1 \mid f \rangle + a_2^* \langle A^\dagger g_2 \mid f \rangle = \langle a_1 A^\dagger g_1 + a_2 A^\dagger g_2 \mid f \rangle \ .$$

Die Beschränktheit von $A^\dagger$ sieht man so:

$$\|A^\dagger g\|^2 = \langle A^\dagger g \mid A^\dagger g \rangle = \langle g \mid AA^\dagger g \rangle \leq \|g\| \|A\| \|A^\dagger g\| \ ,$$

also ist entweder $A^\dagger g = 0$ und damit $\|A^\dagger\| = 0$, oder $\|A^\dagger g\| \leq \|g\| \|A\|$. Umgekehrt gilt ebenso:

$$\|Af\|^2 = \langle Af \mid Af \rangle = \langle f \mid A^\dagger A f \rangle \leq \|f\| \|A^\dagger\| \|Af\| \ ,$$

also ist entweder $Af = 0$ und damit $\|A\| = 0$, oder $\|Af\| \leq \|f\| \|A^\dagger\|$. Damit folgt: $\|A^\dagger\| = \|A\|$. □

Somit ist die Menge $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ der linear-beschränkten Operatoren in einem Hilbert-Raum nicht nur ein Banach-Raum, sondern wegen der Abgeschlossenheit der Multiplikation und der Adjungation in $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ auch eine *-Algebra, zusammenfasend also eine Banach*-Algebra genannt (die Mathematiker verwenden für die Adjungation üblicherweise einen *, die Physiker zumeist ein †).

Die Operatoren in $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ erfüllen darüber hinaus noch die sogenannte C*-Eigenschaft, d.h. $\|A^\dagger A\| = \|A\|^2$, denn

$$\|A^\dagger A\| \leq \|A^\dagger\| \|A\| = \|A\|^2 \ ,$$
$$\|Af\|^2 = \langle Af \mid Af \rangle = \langle f \mid A^\dagger A f \rangle \leq \|f\| \|A^\dagger A f\| \leq \|A^\dagger A\| \|f\|^2 \ .$$

Eine Banach*-Algebra, welche wie hier $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ zusätzlich die C*-Eigenschaft besitzt, nennt man eine C*-Algebra. Solche C*-Algebren bilden die grundlegende Struktur zur algebraischen Untersuchung der Quantentheorie.

Die folgenden Aussagen über das orthogonale Komplement $D^\perp$ eines Teilraums $D \subset \mathscr{H}$, die Bildbereiche R_A, $R_{A^\dagger}$, die Kerne N_A, $N_{A^\dagger}$, eines Operators $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ und seines adjungierten Operators $A^\dagger$ werden öfter benötigt, z.B. im Zusammenhang mit der Bestimmung des Index von Fredholm-Operatoren, und sollen deshalb hier zusammengestellt werden.

Lemma J.2.13

a. $D \subset \mathscr{H} \ \Rightarrow \ D^\perp$ *abgeschlossen* , (J.2.1)

b. D *abgeschlossen* $\ \Rightarrow \ \mathscr{H} = D \oplus D^\perp$, (J.2.2) *c.* $D \subseteq (D^\perp)^\perp$, *und* D *abgeschlossen* $\quad\Rightarrow\quad D = (D^\perp)^\perp$, (J.2.3)

d. N_A *ist abgeschlossen* , (J.2.4)

e. $N_{A^\dagger} = {R_A}^\perp$ *und* $N_A = {R_{A^\dagger}}^\perp$. (J.2.5)

f. $\overline{R_A} = {N_{A^\dagger}}^\perp$. (J.2.6)

Beweis. a. D sei ein beliebiger Teilraum von $\mathscr{H}$ und $D^\perp$ sein orthogonales Komplement, $\{f_i\} \in D^\perp$ sei eine Cauchy-Folge, dann gilt $\langle f_i \mid g\rangle = 0$ für alle $g \in D$. $D^\perp$ ist offensichtlich ein linearer Raum und enthält als solcher natürlich auch $\{0\}$. Wir nehmen an, daß $f_i \to f \in D$, $\|f\| > 0$, dann gilt einerseits $\|f - f_i\| < \epsilon$ und andererseits $\|f - f_i\|^2 = \langle f - f_i \mid f - f_i\rangle = \|f\|^2 - \langle f \mid f_i\rangle - \langle f_i \mid f\rangle + \|f_i\|^2 = \|f\|^2 + \|f_i\|^2 > 0$, Widerspruch, also kann f nicht in D, sondern muß in $D^\perp$ liegen, also ist $D^\perp$ abgeschlossen.

b. D sei jetzt ein abgeschlossener Teilraum von $\mathscr{H}$, also selbst ein Hilbert-Raum, also gibt es eine vollständige Orthonormalbasis von D: $\{e_i\}$. Die Projektion eines beliebigen Vektors $f \in \mathscr{H}$ hinein in D ist dann $f_1 := \sum_i \langle e_i \mid f\rangle e_i \in D$ und $f_2 := f - f_1 \in D^\perp$. Also ist $f = f_1 + f_2$ mit $f_1 \in D$ und $f_2 \in D^\perp$. Diese Zerlegung ist eindeutig, denn sei etwa $f = g_1 + g_2$ mit $g_1 \in D$ und $g_2 \in D^\perp$, dann gilt

$$0 = f - f = (f_1 - g_1) + (f_2 - g_2) ,$$

$$0 = \langle (f_1 - g_1) + (f_2 - g_2) \mid (f_1 - g_1) + (f_2 - g_2)\rangle = \|(f_1 - g_1)\|^2 + \|(f_2 - g_2)\|^2 ,$$

und daraus folgt $f_1 = g_1$ und $f_2 = g_2$. Die Zerlegung von $f \in \mathscr{H}$ ist also eindeutig.

c. Wenn D abgeschlossen ist, d.h. $D = \overline{D}$, dann ist wegen b. $\mathscr{H} = D \oplus D^\perp$. Da $D^\perp$ immer abgeschlossen ist, gilt aber auch $\mathscr{H} = D^\perp \oplus (D^\perp)^\perp = (D^\perp)^\perp \oplus D^\perp$. Wegen der Eindeutigkeit der Zerlegung ist also $D = \overline{D} = (D^\perp)^\perp$ und falls D nicht abgeschlossen ist $D \subset \overline{D} = (D^\perp)^\perp$.

d. $\{0\}$ ist abgeschlossen, also ist $\{0\}^C = R_A \setminus \{0\}$ offen, also ist wegen der Stetigkeit von A die Urbildmenge $A^{-1}(R_A \setminus \{0\}) = D_A \setminus N_A$ offen, also ist $(D_A \setminus N_A)^C = N_A$ abgeschlossen.

e. $f \in N_{A^\dagger} \subseteq \mathscr{H} \;\Leftrightarrow\; \langle g \mid A^\dagger f\rangle = 0$ für alle $g \in \mathscr{H} \;\Leftrightarrow\; \langle Ag \mid f\rangle = 0$. Die zweite Aussage folgt, indem einfach A durch $A^\dagger$ ersetzt wird.

f. Aus c. und e. folgt sofort: ${N_{A^\dagger}}^\perp = ({R_A}^\perp)^\perp = \overline{R_A}$. □

Die beiden wichtigsten Fragen im Zusammenhang mit Operatoren sind die Frage nach dem Spektrum und die Frage einer möglichen Inversen. Wir beschäftigen uns im folgenden nur mit der dem Problemkreis der inversen Operatoren, also der Frage der Auflösbarkeit der Operatorgleichung $Af = g$ mit $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$, $f, g \in \mathscr{H}$. Wenn der Bildbereich von A gleich $\mathscr{H}$ ist, also $R_A = \overline{R_A} = \mathscr{H}$, dann können wir A auf $\mathscr{H}$ invertieren. Wegen f. ist äquivalent dazu und leichter zu beweisen die Bedingung $(N_{A^\dagger}) = \{0\}$.

Zentral für Untersuchungen zur Invertierbarkeit von Operatoren ist der *Satz der offenen Abbildung,* einer der wichtigsten Sätze der Funktionalanalysis. Dieser Satz wird üblicherweise für linear-beschränkte Abbildungen zwischen Banach-Räumen formuliert und bewiesen - wir beschränken uns hier auf eine Formulierung in $\mathscr{L}(\mathscr{H})$.

Satz J.2.14 *Wenn $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ surjektiv auf $\mathscr{H}$ (oder einen abgeschlossenen Teilraum) abbildet, dann ist A offen, d.h. bildet offene Mengen in offene Mengen ab. Wenn A zusätzlich injektiv auf $\mathscr{H}$ (oder einen abgeschlossenen Teilraum) abbildet, d.h. wenn also der inverse Operator A^{-1} auf $\mathscr{H}$ (oder einen abgeschlossenen Teilraum) existiert, dann ist dieser beschränkt.*

Beweis. Zum ersten Teil des Satzes, dessen Beweis von Banach stammt und der nicht trivial ist, sei auf Werner (2005), S.152, Theorem IV.3.3 verwiesen. Wesentlich ist hierbei die Voraussetzung der *Abgeschlossenheit* des Bildbereichs. Der zweite Teil des Satzes ist eine einfache Folgerung, denn wenn A ein-eindeutig offene Mengen in offene Mengen abbildet, dann hat also eine offene Bildmenge von A^{-1} eine offene Urbildmenge, und A^{-1} ist damit stetig und damit beschränkt. □

Definition J.2.15 *Die Teilmenge der invertierbaren und beschränkten Operatoren aus $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ bilden eine Gruppe, die wir $Gl(\mathscr{H})$ nennen.*

Satz J.2.16 *Wenn $\|A\| < 1$, dann hat der Operator $(\hat{1} - A)$ die Inverse $(\hat{1} - A)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} A^k$, und $Gl(\mathscr{H})$ enthält die offene Einheitskugel (d.h. Kugel mit Radius $= 1$) um den $\hat{1}$-Operator.*

Beweis. Zunächst einmal ist die existiert Neumann-Reihe $S := \sum_{k=0}^{\infty} A^k$ für $\|A\| < 1$ und ist beschränkt:

$$\|S\| = \| \sum_{k=0}^{\infty} A^k \| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \|A^k\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \|A\|^k = \frac{1}{1 - \|A\|} < \infty \ .$$

Weiter folgt:

$$AS = A(\sum_{k=0}^{\infty} A^k) = \sum_{k=1}^{\infty} A^k = S - \hat{1} \quad \Rightarrow \quad (\hat{1} - A)S = \hat{1} \ ,$$

$$SA = (\sum_{k=0}^{\infty} A^k)A = \sum_{k=1}^{\infty} A^k = S - \hat{1} \quad \Rightarrow \quad S(\hat{1} - A) = \hat{1} \ .$$

Also ist $S = \sum_{k=0}^{\infty} A^k$ der inverse und linear-beschränkte Operator zu $\hat{1} - A$.

Sei $B_1(\hat{1})$ die offene Einheitskugel in $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ um den $\hat{1}$-Operator, also

$$B_1(\hat{1}) := \{(\hat{1} + A) \in \mathscr{L}(\mathscr{H}) \,|\, \|(\hat{1} + A) - \hat{1}\| = \|A\| < 1 \ .\}$$

Weiter ist $(\hat{1} - A) \in B_1(\hat{1})$ und hat einen linear-beschränkten inversen Operator, also ist $B_1(\hat{1}) \subseteq Gl(\mathscr{H})$. □

Satz J.2.17 *Wenn $B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ invertierbar ist, dann sind auch alle Elemente aus $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ invertierbar, die nahe genug bei B liegen, d.h. $\|A\| < \frac{1}{\|B^{-1}\|} \Rightarrow (B-A)$ ist invertierbar.*

Beweis. $(B-A) = B(\hat{1} - B^{-1}A)$ und $\|B^{-1}A\| \leq \|B^{-1}\|\|A\| < 1 \quad \Rightarrow$

$$(B-A)^{-1} = (\hat{1} - B^{-1}A)^{-1}B^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty}(B^{-1}A)^k\, B^{-1}\,.$$

Damit ist $(B-A)^{-1}$ invertierbar. □

Dieses Ergebnis ist Grundlage für die Untersuchung der Spektren beschränkter Operatoren, denn sei $\|A\| < |\lambda|$, $\lambda \in \mathbb{C}$, dann existiert nach dem obigen Satz $R(\lambda) := (A - \lambda\hat{1})^{-1}$ die Resolvente von A. Die Menge aller $\lambda \in \mathbb{C}$ für welche die Resolvente existiert heißt Resolventenmenge, das Komplement in $\mathbb{C}$ heißt Spektrum.

J.3 Kompakte Operatoren

Ein zentrales Konzept der Funktionalanalysis ist der Begriff der Kompaktheit, denn er ermöglicht uns in unendlich-dimensionalen Räumen Konvergenzaussagen zu klären. Kompaktheitsbeweise können gelegentlich sehr aufwendig und subtil sein. Ohne zu sehr in die Tiefe gehen zu wollen, seien hier nur einige einführende Definitionen und Sätze zu kompakten Mengen und den Grundlagen kompakter Operatoren aufgeführt.

Definition J.3.1 *a. Eine Teilmenge $\Omega \subseteq T$ eines topologischen Raums T heißt kompakt, wenn jede offene Überdeckung von Ω eine endliche Teilüberdeckung besitzt, d.h. wenn $\{O_i\}$ mit $i \in I$ (I eine Indexmenge) eine Familie offener Mengen mit $\Omega = \cup_{i\in I} O_i$ ist, dann existieren in dieser Familie endlich viele offene Mengen $O_{i_1}, \ldots, O_{i_n}$ mit $\Omega = \cup_{i_k=1}^{n} O_i$.*

b. Eine Teilmenge $\Omega \subseteq T$ eines topologischen Raums T heißt folgenkompakt, wenn jede Folge in Ω eine Teilfolge besitzt, die gegen ein $x \in \Omega$ konvergiert.

c. Eine Teilmenge $\Omega \subseteq M$ eines metrischen Raums M heißt präkompakt oder ϵ-kompakt, wenn es zu jedem $\epsilon > 0$ eine endliche Teilüberdeckung mit offenen ϵ-Kugeln gibt.

Da wir es im folgenden immer nur mit Banach- oder Hilbert-Räumen zu tun haben und beide ja metrische Räume sind, können wir uns aufgrund des folgenden Satzes bei Kompaktheitsbeweisen stets auf den Nachweis der Folgenkompaktheit beschränken.

Satz J.3.2 *In einem metrischen Raum M fallen eine Reihe der verschiedenen Kompaktheitsbegriffe zusammen:*
a. die Begriffe der Kompaktheit und der Folgenkompaktheit sind äquivalent,
b. wenn Ω präkompakt ist, dann ist die Abschließung $\overline{\Omega}$ kompakt.

Beweis. siehe Werner (2005), S.499, Satz B.1.7. □

Wir erinnern zuerst an die aus der Analysis bekannte Situation in $\mathbb{R}$.

Satz J.3.3 (Bolzano-Weierstraß) *Jede beschränkte Folge $\{x_n\}$ in $\mathbb{R}$ besitzt mindestens eine konvergente Teilfolge.*

Beweis. Wir orientieren uns an dem Beweis in Fischer u. Kaul (2001), S. 49. $|x_n| \leq C$. Man konstruiert sich jetzt durch Intervallhalbierung eine Folge ineinander geschachtelter Intervalle:

$$I_1 := [a_1, b_1] := \begin{cases} [-C, 0] & \text{falls unendl. viele } x_n \text{ in } [-C, 0] \text{ liegen,} \\ [0, C] & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$n_1 := \min\{n \in \mathbb{N} \,|\, x_n \in I_1\} \quad \Rightarrow \quad x_{n_1} \in I_1 \ .$$

$$I_2 := [a_2, b_2] := \begin{cases} [a_1, (a_1 + b_1)/2] & \text{falls unendl. viele } x_n \text{ in } [a_1, (a_1 + b_1)/2] \text{ liegen,} \\ [(a_1 + b_1)/2, b_1] & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$n_2 := \min\{n \in \mathbb{N} \,|\, n_2 > n, \ x_n \in I_2\} \quad \Rightarrow \quad x_{n_2} \in I_2 \ .$$

Also ist $x_{n_k} \in I_k \subset I_{k-1} \subset \ldots \subset I_1 \subset [-C, C]$ und unendlich viele x_n liegen in I_k und die Länge des Intervalls I_k ist $b_k - a_k = C/2^k$. Nun existiert $\lim_{k\to\infty} a_k = \lim_{k\to\infty} b_k =: a$ und wegen $a_k \leq x_{n_k} \leq b_k$ folgt $a = \lim_{k\to\infty} x_{n_k}$.
Also ist eine beschränkte und abgeschlossene Menge in $\mathbb{R}$ kompakt. □

Dieser Beweis läßt sich nun mühelos für Folgen in $\mathbb{R}^n$ für jedes endliche $n \in \mathbb{N}$ verallgemeinern. Also sind auch in $\mathbb{R}^n$ beschränkte und abgeschlossene Mengen kompakt.

Eine wichtige Kompaktheitsaussage im Funktionenraum $C(\bar{\Omega})$ der stetigen Funktionen über $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^n$ liefert der Satz von Arzelà-Ascoli, der auch Grundlage für einen zentralen Einbettungssatz in Sobolev-Räumen von Rellich (s.u.) ist, und der gerade die Verbindung von elliptischen Pseudodifferential-Operatoren und Fredholm-Operatoren ermöglicht.

Satz J.3.4 (Arzelà-Ascoli) *Sei Ω eine beschränkte Menge in $\mathbb{R}^n$ und $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^n$ ihre Abschließung, sei weiter $C(\bar{\Omega})$ der Funktionenraum der stetigen, beschränkten Funktionen $f : \bar{\Omega} \to \mathbb{K}$ mit $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ und sei $C(\bar{\Omega})$ wie üblich mit der Supremumsnorm ausgestattet, also $\|f\| := \|f\|_\infty := \sup_{x\in\bar{\Omega}} |f(x)|$. Sei die Teilmenge $M \subset C(\bar{\Omega})$ abgeschlossen und gleichgradig stetig, d.h. zu jedem $\epsilon > 0$ existiere ein $\delta > 0$ mit $|f(x) - f(x')| < \epsilon$, wenn $|x - x'| < \delta$ ist, und zwar für alle $f \in M$,*
dann ist die Funktionenmenge $\bar{M} \subset C(\bar{\Omega})$ kompakt.

Beweis. Der Beweis basiert auf dem Diagonalfolge-Argument. Zunächst einmal ist $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^n$ separabel, denn die abzählbare Menge der rationalen Punkte $\{x_k \in \Omega\}$ liegt dicht in $\bar{\Omega}$, d.h. $\bar{\Omega} = \overline{\cup_{k\in\mathbb{N}}\{x_k\}}$. Wir müssen jetzt zeigen, daß jede Folge $\{f_i \in M\}$ eine Cachyfolge besitzt. Sei nun $\{f_i \in M, \ \|f_i\| \leq C\}$ ein beschränkte Folge, d.h. $\{f_i(x) \in \mathbb{K}, \ |f_i(x)| \leq C$

für alle $x \in \bar{\Omega}\}$, dann ist also $\{f_i(x_1), |f_i(x_1)| \leq C\}$ eine beschränkte Zahlenfolge und diese enthält wegen der Kompaktheit beschränkter und abgeschlossener Mengen in $\mathbb{K}$ eine konvergente Teilfolge $f_i^{(1)}(x_1)$. Nun ist $f_i^{(1)}(x_2)$ ebenfalls eine beschränkte Zahlenfolge, die wiederum eine konvergente Teilfolge $f_i^{(2)}(x_2)$ enthält, die nun für x_1 und x_2 konvergiert. Dieses Verfahren wird sukzessive fortgesetzt. Nun schreiben wir all diese Folgen der $f_i^{(k)}$ untereinander:

$$\begin{array}{cccccc}
\{f_i^{(1)}\}: & f_1^{(1)} & f_2^{(1)} & \dots & f_i^{(1)} & \dots \\
\{f_i^{(2)}\}: & f_1^{(2)} & f_2^{(2)} & \dots & f_i^{(2)} & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\{f_i^{(k)}\}: & f_1^{(k)} & f_2^{(k)} & \dots & f_i^{(k)} & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
\end{array}$$

Die Diagonalfolge $\{f_i^{(i)}\}$ konvergiert für alle x_i, denn $\{f_i^{(i)}\}_{i\geq k}$ ist ja eine Teilfolge von $\{f_i^{(k)}\}$, welches für $x_1, \dots, x_k$ konvergiert. Wir bezeichnen die Diagonalfolge jetzt kurz mit $\{f_i\}$ und wollen zeigen, daß sie eine Cauchy-Folge in $C(\bar{\Omega})$ ist. $\bar{M}$ ist ebenso wie M gleichgradig stetig, also gibt es zu jedem $\epsilon > 0$ ein $\delta > 0$ mit

$$|x - x'| < \delta \quad \Rightarrow \quad |f_i(x) - f_i(x')| < \epsilon \, .$$

Da $\bar{\Omega}$ kompakt ist, gibt es eine endliche Überdeckung mit δ-Kugeln: $\bar{\Omega} = \cup_{k=1}^{p} K_\delta(x_k)$ und für die Diagonalfolge an diesen Stellen x_k gilt:

$$i, j \geq m(\epsilon) \quad \Rightarrow \quad |f_i(x_k) - f_j(x_k)| < \epsilon \, .$$

Da jedes $x \in \bar{\Omega}$ in mindestens einer der $K_\delta(x_k)$ Kugeln liegt, folgt also:

$$|f_i(x) - f_j(x)| \leq |f_i(x) - f_i(x_k)| + |f_i(x_k) - f_j(x_k)| + |f_j(x_k) - f_j(x)| < 3\epsilon \, ,$$

also ist $\{f_i\}$ eine Cauchy-Folge in $C(\bar{\Omega})$. □

Linear-beschränkte Operatoren bilden beschränkte Mengen in beschränkte Bildmengen ab. Im $\mathbb{R}^n$ sind diese beschränkten Bildmengen dann also immer kompakt, in unendlich-dimensionalen Räumen sind sie es aber im allgemeinen nicht mehr.

Als Standardbeispiel diene hier die Einheitskugel $K_1(0) := \{x \mid \|x\| \leq 1\}$. Sie im $\mathbb{R}^n$ kompakt, nicht aber in einem separablen unendlich-dimensionalen Hilbert-Raum, denn dort können wir eine Folge von Einheits-Basisvektoren $\{e_n\}$ bilden, die keine konvergente Teilfolge enthalten.

Wenn man also von linear-beschränkten Operatoren zusätzlich verlangt, daß sie beschränkte Mengen in kompakte Bildmengen abbilden sollen, dann lassen sich für diese Klasse von Operatoren sehr viel weitergehende Aussagen gewinnen, insbesondere läßt sich das Spektralproblem übersichtlich lösen. In physikalischen Anwendungen finden wir häufig solche kompakten Operatoren.

Definition J.3.5 *Ein Operator $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ heißt kompakt (ursprünglich von Hilbert vollstetig genannt), wenn er beschränkte Mengen in präkompakte Mengen abbildet, d.h. wenn $\|f_n\| \leq C$ eine beschränkte Folge in $\mathscr{H}$ ist, dann gibt es eine Teilfolge $\{f_{n_k}\}$, so daß $\{Af_{n_k}\}$ eine Cauchy-Folge ist, deren Grenzwert in $\overline{\{Af_n\}}$, d.h. in der Abschließung von $\{Af_n\}$ liegt.*
Die Menge der kompakten Operatoren in $\mathscr{H}$ nennen wir $\mathscr{K}(\mathscr{H})$.

Kompakte Operatoren sind linear-beschränkte Operatoren, d.h. $\mathscr{K}(\mathscr{H}) \subset \mathscr{L}(\mathscr{H})$, denn da jede präkompakte Menge beschränkt ist, bildet also ein kompakter Operator eine beschränkte Menge in eine beschränkte Menge ab. Und wegen der Stetigkeit bildet ein linear-beschränkter Operator natürlich kompakte Mengen auf kompakte Mengen ab.

Lemma J.3.6 *Weiter ist $\mathscr{K}(\mathscr{H})$ abgeschlossen, d.h. sei $\{A_n \in \mathscr{K}(\mathscr{H})\}$ eine Folge kompakter Operatoren, die gegen einen Operator $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ konvergiert, also $\|A - A_n\| \to 0$, dann ist der Operator A auch kompakt.*

Beweis. Auch dieser Beweis basiert auf dem Diagonalfolge-Argument. Sei $\{f_n \in \mathscr{H}\}$ eine beschränkte Folge, dann enthält $\{A_1 f_n\}$ eine konvergente Teilfolge $\{A_1 f_n^{(1)}\}$. Jetzt ist natürlich die Folge $\{f_n^{(1)}\}$ wieder ein beschränkte Folge und so enthält auch $\{A_2 f_n^{(1)}\}$ eine konvergente Teilfolge $\{A_2 f_n^{(2)}\}$, usw. Also konvergieren alle Folgen $\{A_l f_n^{(k)}\}$ für festes $l \leq k$. Wir schreiben diese Folgen der $f_n^{(k)}$ einmal untereinander:

$$\begin{array}{llllll}
\{f_n^{(1)}\}: & f_1^{(1)} & f_2^{(1)} & \dots & f_n^{(1)} & \dots \\
\{f_n^{(2)}\}: & f_1^{(2)} & f_2^{(2)} & \dots & f_n^{(2)} & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\{f_n^{(k)}\}: & f_1^{(k)} & f_2^{(k)} & \dots & f_n^{(k)} & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
\end{array}$$

Dann sehen wir, daß für die Diagonalfolge $\{g_n\} := \{f_1^{(1)}, f_2^{(2)}, \dots, f_n^{(n)}, \dots\}$ die Folge $\{A_l g_n\}$ für jeden Operator A_l konvergiert. Jetzt wollen wir zeigen, daß für diese Diagonalfolge $\{g_n\}$ auch die Folge $\{Ag_n\}$ konvergiert, denn dann ist ja der Grenz-Operator A auch kompakt:

$$Ag_m - Ag_n = Ag_m - A_l g_m + A_l g_m - A_l g_n + A_l g_n - Ag_n \ ,$$

$$\|Ag_m - Ag_n\| \leq \|Ag_m - A_l g_m\| + \|A_l g_m - A_l g_n\| + \|A_l g_n - Ag_n\| < \epsilon ,$$

wenn wir m, n, l groß genug wählen, denn der erste und dritte Term gehen gegen Null, weil $A_l \to A$ geht, und der zweite Term geht gegen Null, weil $\{g_n\}$ für jeden Operator A_l eine Cauchy-Folge ist. □

Lemma J.3.7 *Wenn A kompakt ist, dann ist auch der adjungierte Operator $A^\dagger$ kompakt, d.h. $A \in \mathscr{K}(\mathscr{H}) \Leftrightarrow A^\dagger \in \mathscr{K}(\mathscr{H})$.*

Beweis. Sei $A^\dagger$ nicht kompakt, dann gibt es eine Folge $\{f_n \,|\, \|f_n\| \leq 1\}$ mit $\|A^\dagger f_m - A^\dagger f_n\| \geq \delta > 0$ für $m \neq n$. Dann ist $\{g_n := A^\dagger f_n\}$ eine beschränkte Folge. Jetzt wollen wir zeigen, daß $\{Ag_n\}$ keine konvergente Teilfolge in $\mathscr{H}$ hat. Dazu nutzen wir folgende Abschätzung:

$$|\langle Ag_m - Ag_n \mid f_m - f_n\rangle| \leq \|Ag_m - Ag_n\|\|f_m - f_n\| \leq \|Ag_m - Ag_n\|(\|f_m\| + \|f_n\|)$$

$$\leq 2\|Ag_m - Ag_n\| , \quad \Rightarrow$$

$$2\|Ag_m - Ag_n\| \geq |\langle Ag_m - Ag_n \mid f_m - f_n\rangle| = |\langle A^\dagger f_m - A^\dagger f_n \mid A^\dagger f_m - A^\dagger f_n\rangle|$$

$$= \|A^\dagger f_m - A^\dagger f_n\|^2 \geq \delta^2 > 0 .$$

Da dies für alle $m, n \in \mathbb{N}$ mit $m \neq n$ gilt, enthält also $\{Ag_n\}$ keine Teilfolge, die eine Cauchy-Folge ist. Dies ist ein Widerspruch zur Kompaktheit von A. Also ist mit A auch $A^\dagger$ kompakt. □

Lemma J.3.8 *Wenn A kompakt und B beschränkt ist, dann ist auch die Produkte AB und BA kompakt, d.h. $A \in \mathscr{K}(\mathscr{H})$, $B \in \mathscr{L}(\mathscr{H}) \Leftrightarrow AB, BA \in \mathscr{K}(\mathscr{H})$.*

Beweis. Sei $\{f_n \in \mathscr{H}\}$ eine beschränkte Folge, dann ist auch $\{g_n := Bf_n\}$ eine beschränkte Folge. Da A kompakt ist, gibt es eine Teilfolge $\{g_{n_k}\}$, so daß $\{Ag_{n_k} = ABf_{n_k}\}$ konvergiert. Das gleiche gilt für das Produkt BA. □

Eine unmittelbare Folgerung ist, daß der zu $A \in \mathscr{K}(\mathscr{H})$ inverse Operator A^{-1}, wenn er existiert, nicht beschränkt sein kann. Denn sei A^{-1} beschränkt, dann muß $AA^{-1} = \hat{1}$ kompakt sein, und der beschränkte Operator $\hat{1}$ in einem unendlich-dimensionalen linearen Raum ist nicht kompakt, also Widerspruch.

Beispiel (1): Sei $l : \mathscr{H} \to \mathbb{K}$ mit $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ ein linear-beschränktes Funktional und $g \in \mathscr{H}$ fest, dann ist der linear-beschränkte Operator $A_g f := l(f)g$ kompakt, denn die Menge $\{l(f)g\}$ ist isomorph zu $\{l(f)\} \leq C$ und dies ist beschränkt und abgeschlossen, also kompakt. Da die Summen kompakter Operatoren kompakt sind, ist also auch $Af := \sum_{i=1}^n l_i(f)g_i$ ein kompakter Operator.

Speziell sind also Operatoren der Form $A := \sum_{i=1}^n \mid g_i\rangle\langle h_i \mid$ kompakt. In $\mathscr{H} = \mathscr{L}_2$ ist A dann ein Integralkern der Form $A(x, y) := \sum_{i=1}^n g_i(x)h_i^*(y)$. Solche Operatoren heißen *von endlichen Rang* oder *ausgeartet.*

Da eine Folge kompakter Operatoren wiederum kompakt ist, ist der Norm-Grenzwert einer Folge von Operatoren von endlichem Rang auch kompakt. □

Beispiel (2): Wenn der Bildbereich R_A eines linear-beschränkten Operators endlich-dimensional ist, so ist A kompakt. Denn: sei $\{g_1, \dots, g_n\}$ eine orthonormale Basis von R_A, dann kann A dargestellt werden als $Af := \sum_{i=1}^n a_i(f)g_i$, und ist also wie oben ein Operator von endlichem Rang und somit kompakt.

Speziell sind also Projektoren auf endliche Unterräume von $\mathscr{H}$ kompakt. □

Beispiel (3): Eine in der Physik häufig vorkommende Klasse von Integral-Operatoren sind die sogenannten Hilbert-Schmidt-Operatoren. Dies sind linear-beschränkte Operatoren, die zusätzlich noch die Bedingung erfüllen:

$$\|A\|_{HS}^2 := \sum_{i=1}^{\infty} \|Ae_i\|^2 < \infty \,, \text{ mit einer ON-Basis} \{e_i\} \,.$$

Jeder Hilbert-Schmidt-Operator ist kompakt, denn mit $Af = \sum_{i=1}^{\infty} A(f_i e_i) = \sum_{i=1}^{\infty} f_i Ae_i$ folgt:

$$\|Af - \sum_{i=1}^{n} f_i Ae_i\|^2 = \| \sum_{i=n+1}^{\infty} f_i Ae_i\|^2 \leq \|f\|^2 \sum_{i=n+1}^{\infty} \|Ae_i\|^2 \,.$$

Wegen der Hilbert-Schmidt Eigenschaft können wir n so groß wählen, daß $\sum_{i=n+1}^{\infty} \|Ae_i\|^2 < \epsilon$ gilt. Also approximieren die Operatoren $A_n f := \sum_{i=1}^{n} f_i Ae_i$ den Operator A beliebig gut. Diese Operatoren A_n bilden aber auf einen endlich-dimensionalen Bildraum ab, sind also kompakt. Oben hatten wir gezeigt, daß der Grenz-Operator einer Folge kompakter Operatoren auch kompakt ist, also ist der Hilbert-Schmidt-Operator A kompakt. □

J.4 Quotienten-Räume

Quotienten-Räume sind ein einfaches und doch sehr anschauliches Hilfsmittel, das man mit Gewinn bei der Untersuchung der Fredholm-Operatoren anwenden kann. Daher sollen hier zunächst einige elementare Aussagen zu Quotienten-Räumen in der Funktionalanalysis zusammengestellt werden.

Hilfreich bei Konvergenzuntersuchungen in normierten Räumen sind die beiden folgenden einfache Lemmata.

Lemma J.4.1 *Sei D ein abgeschlossener, echter Unterraum eines normierten, linearen Raumes X, d.h. $D \subset X$, dann gibt es einen Vektor $z \in X$ mit $\|z\| = 1$, der einen endlichen Wert von D entfernt ist, d.h. $\|z - d\| > \frac{1}{2}$ für alle $d \in D$, oder allgemeiner $\|x - d\| > \epsilon$ mit $0 < \epsilon < 1$, bzw. $\|x - d\| \geq 1 - \epsilon$.*

Beweis. Da D ein echter Unterraum von X ist, gibt es also einen Vektor $x \in X$ der nicht zu D gehört. Da D abgeschlossen ist, ist also $X \setminus D$ offen, und der Vektor x hat einen positiven Abstand r zu $D : r := \inf_{d \in D} \|x - d\| > 0$. Nun gibt in D auch Elemente, die von x etwas weiter als r entfernt sind, sei also $d_0 \in D$ solch ein Element mit $\|x - d_0\| < 2r$. Dann ist $z_0 := (x - d_0) \in X$ mit $\|z_0\| < 2r$. Andererseits folgt aus der Definition von r als dem Minimalabstand: $\|z_0 - d\| = \|x - d_0 - d\| \geq r$ für alle $d \in D$.

$$\frac{\|z_0 - d\|}{\|z_0\|} \geq \frac{r}{\|z_0\|} > \frac{r}{2r} = \frac{1}{2} \quad \text{für alle } d \in D \ ,$$

und da $\{\frac{d}{\|z_0\|}, d \in D\} = \{d \in D\}$ ist, haben wir also mit $z := \frac{z_0}{\|z_0\|}$ einen normierten Vektor mit $\|z\| = 1$ und

$$\|z - d\| > \frac{1}{2} \quad \text{für alle } d \in D \ .$$

Natürlich hätten wir im obigen Beweis statt $\|x - d_0\| < 2r$ auch $\|x - d_0\| < \frac{1}{\epsilon} r$ mit $0 < \epsilon < 1$ nehmen können und hätten dann als Abschätzung erhalten:

$$\|z - d\| > \epsilon > 0 \quad \text{oder} \quad \|z - d\| \geq (1 - \epsilon) > 0 \quad \text{für alle } d \in D \ . \qquad \square$$

Lemma J.4.2 *Ein normierter linearer Raum X ist genau dann vollständig, d.h. ein Banach-Raum, wenn jede absolut konvergente Reihe konvergiert, d.h. wenn aus $\sum_{k=1}^{\infty} \|x_k\| < \infty$ folgt, daß ein $x \in X$ mit $x = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} x_k$ existiert.*

Beweis. a. Sei X vollständig und $\{x_k\} \in X$ mit $\sum_{k=1}^{\infty} \|x_k\| < \infty$. Da die Folge $\{\sum_{k=1}^{n} \|x_k\|\}$ konvergiert, ist sie eine Cauchy-Folge. Und wegen $\|\sum_{k=1}^{n} x_k\| \leq \sum_{k=1}^{n} \|x_k\|$ ist also auch $\{\sum_{k=1}^{n} x_k\}$ eine Cauchy-Folge. Da X vollständig ist, existiert ein $x \in X$ mit $x = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} x_k$.

b. Sei $\{x_i\}$ eine Cauchy-Folge in X. Wir wollen jetzt die Existenz eines Grenzwertes $x \in X$ zeigen. Für jedes $\epsilon > 0$ gibt es $m, n \geq N_\epsilon$ mit $\|x_m - x_n\| < \epsilon$, d.h. mit $\epsilon_k := 2^{-k}$ gilt $\|x_m - x_n\| < 2^{-k}$. Jetzt betrachten wir eine Teilfolge $\{x_{i_k}\}$ der ursprünglichen Folge $\{x_i\}$ mit der Eigenschaft $\|x_{i_{k+1}} - x_{i_k}\| < 2^{-k}$. Für $y_k := (x_{i_{k+1}} - x_{i_k})$ gilt also $\sum_{k=1}^{\infty} \|y_k\| < \sum_{k=1}^{\infty} 2^{-k} = 1 < \infty$. Nach Voraussetzung existiert jetzt ein $y \in X$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|y - \sum_{k=1}^{n} y_k)\| = \begin{cases} 0 \ , \\ \lim_{n\to\infty}(y - (x_{i_{n+1}} - x_{i_1})) \ . \end{cases}$$

Also konvergiert die Teilfolge $\{x_{i_k}\}$ gegen einen Grenzwert $x = y + x_{i_1}$. Wenn nun eine Teilfolge einer Cauchy-Folge einen Grenzwert hat, dann hat die auch die ursrüngliche Cauchy-Folge den gleichen Grenzwert, denn:

$$\|x - x_i\| = \|x - x_{i_k} + x_{i_k} - x_i\| \leq \|x - x_{i_k}\| + \|x_{i_k} - x_i\| < \epsilon_1 + \epsilon_2 \ .$$

Also existiert für die Cauchy-Folge $\{x_i\}$ ein $x \in X$ und damit ist X abgeschlossen. $\square$

Sei $D \subset X$ ein abgeschlossener, echter, linearer Teilraum eines linearen Raumes X über einem Körper $\mathbb{K}$. Dann heißen zwei Elemente $x_1, x_2 \in X$ äquivalent, wenn $(x_1 - x_2) \in D$. Dies ist eine Äquivalenzrelation und induziert eine Äquivalenzklassen Einteilung in X. Die Klasse von $x \in X$ wollen wir mit $[x]$ bezeichnen: $[x] := \{x + d \,|\, d \in D\}$. Diese Klassen bilden ebenfalls einen linearen Raum, den Quotientenraum X/D, wenn man die Addition und Skalarmultiplikation wie folgt definiert: $[x] + [y] := [x + y]$ und $\lambda[x] := [\lambda x]$ mit $\lambda \in \mathbb{K}$. Die Abbildung von $x \to [x]$ heißt kanonische Abbildung.

Definition J.4.3 *Wenn X ein normierter Raum ist, dann kann man auf X/D mit*

$$\|[x]\| := \inf_{x\in[x]} \|x\| = \inf_{d\in D} \|x+d\|$$

auch eine Norm definieren. Geometrisch betrachtet ist also $\|[x]\|$ gerade der minimale Abstand des Vektors x zum Teilraum D.

Die Normaxiome werden tatsächlich erfüllt, denn:

$$[0] = D \Rightarrow \|[0]\| = 0 \quad \text{und} \quad [x] \neq [0] \Rightarrow x \notin D \Rightarrow \|[x]\| = \inf_{d\in D} \|x+d\| > 0\ ,$$

$$\|[x+y]\| = \inf_{x\in[x],y\in[y]} \|x+y\| \leq \inf_{x\in[x],y\in[y]} (\|x\| + \|y\|)$$

$$= \inf_{x\in[x]} \|x\| + \inf_{y\in[y]} \|y\|) = \|[x]\| + \|[y]\|\ .$$

Satz J.4.4 *Der Quotientenraum X/D ist mit der soeben eingeführten Norm sogar abgeschlossen, also ein Banach-Raum.*

Beweis. Wir beginnen wie in Lemma J.4.1. Da D ein echter Unterraum von X und abgeschlossen ist, so ist also $X \setminus D$ offen und es gibt Vektoren $x, y \in X \setminus D$. Es sei $x \neq y$ und daraus folgt wegen $x, y, (x-y) \notin D$ auch $[x] \neq [y]$. Der Vektor $(x-y)$ hat einen positiven Abstand r zu $D : r := \inf_{d\in D} \|(x-y) - d\| > 0$. Nun gibt in D auch Elemente, die von $(x-y)$ etwas weiter als r entfernt sind, sei also $d_0 \in D$ solch ein Element mit

$$\|(x-y) - d_0\| < 2r = 2 \cdot \inf_{d\in D} \|(x-y) - d\| = 2 \cdot \|[x-y]\| = 2 \cdot \|[x] - [y]\|\ .$$

Nun gilt $x \in [x]$ und $y' := (y + d_0) \in X$ und $y' \in [y'] = [y]$, womit folgt:

$$\|x - y'\| < 2 \cdot \|[x] - [y]\| = 2 \cdot \|[x] - [y']\|\ ,$$

d.h. zu jedem $x \in [x]$ gibt es ein $y \in [y]$ mit $\|x - y\| < 2 \cdot \|[x] - [y]\|$.

Jetzt wollen wir die Vollständigkeit von X/D mit Hilfe von Lemma J.4.2 nachweisen. Sei also $\{[x_k]\} \in X/D$ eine spezielle Cauchyfolge mit absolut konvergenter Reihe $\sum_{k=1}^{\infty} \|[x_k] - [x_{k+1}]\| < \infty$. Zu jedem $x_k \in [x_k]$ gibt es also ein $x_{k+1} \in [x_{k+1}]$ mit $\|x_k - x_{k+1}\| < 2 \cdot \|[x_k] - [x_{k+1}]\|$ und wegen

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|x_k - x_{k+1}\| < 2 \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \|[x_k] - [x_{k+1}]\| < \infty$$

ist also auch die Cauchy-Folge $\{x_k\} \in X$ absolut konvergent. Die Cauchy-Folge $\{x_k\}$ hat wegen Lemma J.4.2 einen Grenzwert $x \in X$. Mit

$$\|[x] - [x_k]\| = \|[x - x_k]\| \leq \|x - x_k\|$$

hat nun also auch die Cauchy-Folge $\{[x_k]\} \in X \setminus D$ einen Grenzwert $\{[x]\} \in X \setminus D$. Damit ist $X \setminus D$ abgeschlossen. □

J.5 Fredholm-Operatoren

In diesem Unterkapitel soll eine Einführung in lineare Fredholm-Operatoren in unendlich-dimensionalen, separablen Hilbert-Räumen gegeben werden. Aus didaktischen Gründen werden wir der Transparenz wegen Operatoren zwischen zwei verschiedenen Hilbert-Räumen betrachten, also $A : \mathscr{H}_1 \to \mathscr{H}_2$, auch wenn diese beiden Hilbert-Räume natürlich isomorph sind.

Definition J.5.1 *Sei $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ ein linear-beschränkter Operator, $ker_A := N_A := \{f \,|\, Af = 0\} \subseteq \mathscr{H}_1$ der Kern (auch Nulldefekt) von A, $coker_A := \mathscr{H}_2 / R_A$ der Kokern (auch Bilddefekt) von A, dann heißt A ein Fredholm-Operator, wenn*

$$\dim(N_A) < \infty \quad \textit{und} \quad \textit{codim}(A) := \dim(\textit{coker}_A) < \infty \,.$$

Die Menge der Fredholm-Operatoren werde mit $\mathscr{F}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ bezeichnet. Der Index eines Fredholm-Operators A ist definiert als $index(A) := \dim(N_A) - \dim(coker_A)$.

Für die Isomorphismen $I \in \mathscr{I}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ ist natürlich $\ker_I = \mathrm{coker}_I = \{0\}$, also $I \in \mathscr{I}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2) \subset \mathscr{F}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$.

Lemma J.5.2 (Fredholm Alternative) *Es ist sofort ersichtlich, was die Fredholm-Eigenschaft für die Lösung der Operatorgleichung $Af = g$ bedeutet: wenn n_1 die Dimension des Kerns von A ist, so besitzt die homogene Gleichung $Af = 0$ gerade n_1 linear unabhängige Lösungen, und wenn n_2 die Dimension des Kokerns ist, so muß g gerade n_2 lineare Bedingungen erfüllen, damit es in R_A liegt.*

Zunächst waren nur Fredholm-Operatoren mit Index 0 bekannt. Fredholm-Operatoren mit einem Index $\neq 0$ hatte erstmalig Fritz Noether (ein Bruder von Emmy Noether) 1921 bei seinen Untersuchungen von singulären Integral-Operatoren entdeckt, weshalb Lax (Lax, 2002) auch vorschlägt, vom Noether-Index zu sprechen.

Satz J.5.3 (Kato) *Wenn $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_{2,})$ mit $\dim(coker_A) < \infty$, dann ist R_A abgeschlossen.*

Beweis. Satz J.2.14 kann hier nicht angewandt werden, weil dessen Voraussetzung die Abgeschlossenheit von R_A ist, die ja gerade erst nachgewiesen werden soll. Sei P die kanonische Abbildung $P : \mathscr{H}_1 \to \mathscr{H}_1/N_A$ in den Quotientenraum $\mathscr{H}_1/N_A$ und $S : \mathscr{H}_1/N_A \to R_A$. Dann ist S durch $S[f] := Af$ eine eindeutig definierte lineare und bijektive Abbildung.

$$\begin{tikzcd} \mathscr{H}_1 \arrow[rr, "A"] \arrow[dr, "P"'] & & R_A \subset \mathscr{H}_2 \\ & \mathscr{H}_1/N_A \arrow[ur, "S"'] & \end{tikzcd}$$

S ist auch beschränkt mit $\|S\| = \|A\|$, denn mit $f \in \mathscr{H}_1$, $d \in N_A$ gilt:

$$\|S[f]\| = \|Af\| = \|A(f-d)\| \leq \|A\|\|f-d\| \quad \Rightarrow$$

$$\|S\| := \sup_{f\in[f]} \frac{\|S[f]\|}{\|[f]\|} = \frac{\|S[f]\|}{\inf_{d\in N_A} \|f-d\|} \leq \|A\| \ ,$$

und damit ist S beschränkt; umgekehrt ist $\|Af\| = \|S[f]\| \leq \|S\|\|[f]\| \leq \|S\|\|f\|$, also $\|A\| \leq \|S\|$, und damit $\|S\| = \|A\|$.

Jetzt zerlegen wir den Hilbert-Raum $\mathscr{H}_2$ in die direkte Summe von R_A und Komplementraum D, also $\mathscr{H}_2 = R_A \oplus D$, mit $D = \mathscr{H}_2 \setminus R_A$. Zunächst wird man vielleicht auf den Gedanken kommen, als Komplementraum ${R_A}^\perp$ zu nehmen, aber wenn R_A etwa offen ist, dann ist $\mathscr{H}_2 \neq R_A \oplus {R_A}^\perp$, denn es fehlt ∂R_A, der Rand von R_A. Das hier verwendete Komplement $D = \mathscr{H}_2 \setminus R_A$ ist isomorph mit dem Quotientenraum $\mathscr{H}_2/R_A$, denn die Abbildung $B : D \to \mathscr{H}_2/R_A$ mit $Bd := [d] = \{d + R_A\}$ für $d \in D = \mathscr{H}_2 \setminus R_A$ ist surjektiv und injektiv, also ein Isomorphismus. Da $n := \dim(\mathrm{coker}_A)$ endlich ist, ist der Quotientenraum $\mathscr{H}_2/R_A$ abgeschlossen und hat eine endliche Basis $\{[e_1], [e_2], \ldots, [e_n]\}$. Damit ist auch D abgeschlossen und hat die endliche Basis $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$.

Jetzt kommt die eigentliche Beweisidee: auf der abgeschlossenen(!) Menge $\mathscr{H}_1/N_A \times D$ definieren wir eine Abbildung $\tilde{S} : \mathscr{H}_1/N_A \times D \to \mathscr{H}_2$ mit $\tilde{S}([f], d) := S[f] + d$. Diese Abbildung $\tilde{S}$ ist linear, bijektiv und beschränkt, da ja S beschränkt ist. Nach Satz J.2.14 ist auch $\tilde{S}^{-1}$ beschränkt und damit haben abgeschlossene Bilder von $\tilde{S}^{-1}$ abgeschlossene Urbilder. Die Menge $\mathscr{H}_1/N_A \times \{0\}$ ist eine abgeschlossene Menge in $\mathscr{H}_1/N_A \times D$, d.h. im Bildbereich von $\tilde{S}^{-1}$. Also ist auch das entsprechende Urbild $\tilde{S}(\mathscr{H}_1/N_A \times \{0\}) = R_A$ abgeschlossen in $\mathscr{H}_2$.

Man sieht also, daß die Bedingung $\dim(\mathrm{coker}_A) < \infty$ eine hinreichende Bedingung ist, um die Abgeschlossenheit des Quotientenraums $\mathscr{H}_2/R_A \sim D$ und damit die Abgeschlossenheit von R_A zu erreichen. □

Daß R_A keineswegs für jedes $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ abgeschlossen sein muß, sieht man etwa an dem folgenden Gegenbeispiel:
sei $\mathscr{H}_1 = \mathscr{H}_2 := L^2([0,1])$ und A der Projektor $A := \{\hat{1}$ auf $C([0,1])$, und $\hat{0}$ auf dem übrigen $L^2([0,1])\}$, dann ist $R_A = C([0,1])$ in $L^2([0,1])$ und damit nicht abgeschlossen.

In J.2.5 wurde gezeigt:

$$N_{A^\dagger} = {R_A}^\perp \quad \text{und} \quad N_A = {R_{A^\dagger}}^\perp \ .$$

Da für einen Fredholm-Operator R_A abgeschlossen ist, können wir den Hilbert-Raum $\mathscr{H}_2$ jetzt eindeutig zerlegen in

$$\mathscr{H}_2 = R_A \oplus {R_A}^\perp = R_A \oplus N_{A^\dagger} \ , \ \text{also: } \mathrm{coker}_A = N_{A^\dagger} \ . \tag{J.5.1}$$

Weiter folgt:

$$N_{A^\dagger}{}^\perp = R_A \quad \text{und} \quad N_A{}^\perp = R_{A^\dagger} \; . \tag{J.5.2}$$

Für Fredholm-Operatoren existiert eine *Pseudoinversion*, d.h. eine Inversion modulo eines kompakten Operators. Dies ist von zentraler Bedeutung bei der Untersuchung von elliptischen Differentialoperatoren.

Definition J.5.4 *Sei A ein linear-beschränkter Operator, d.h. $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$. Zwei linear-beschränkte Operatoren $S_1, S_2 \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$ heißen Links-Parametrix und Rechts-Parametrix (oder Links-/Rechts-Pseudoinverse), wenn gilt: $S_1 A = \hat{1}_{\mathscr{H}_1} + K_1$ und $AS_2 = \hat{1}_{\mathscr{H}_2} + K_2$, mit kompakten Operatoren $K_1 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_1)$, $K_2 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_2)$.*

Wenn es eine Links- und eine Rechts-Parametrix gibt, so unterscheiden sie sich nur um einen kompakten Operator und können also beide gleich gewählt werden, denn

$$S_1 A S_2 - S_2 = K_1 S_2 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_1) \text{ und}$$

$$S_1 A S_2 - S_1 = S_1 K_2 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_1) \;\Rightarrow$$

$$S_1 - S_2 = K_1 S_2 - S_1 K_2 =: K \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1) \; .$$

Man spricht daher einfach von einer Parametrix $S \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$.

Satz J.5.5 (Atkinson) *$A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ ist genau dann ein Fredholm-Operator, wenn zu A eine Parametrix $S \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$ existiert.*

Beweis. Sei $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ ein Fredholm-Operator, dann sind $N_A \subseteq \mathscr{H}_1$ und $N_{A^\dagger} \subseteq \mathscr{H}_2$ endlich-dimensional. Wir zerlegen $\mathscr{H}_1$ und $\mathscr{H}_2$ in:

$$\mathscr{H}_1 = N_A \oplus N_A{}^\perp \quad \text{und} \quad \mathscr{H}_2 = N_{A^\dagger} \oplus R_A \; .$$

$A : N_A{}^\perp \to R_A$ ist eine Bijektion, also existiert nach Satz J.2.14 ein linear-beschränkter inverser Operator $S : R_A \to N_A{}^\perp$, so daß $SA = \hat{1}_{N_A^\perp}$ und $AS = \hat{1}_{R_A}$ ist. Jetzt kann man S auf ganz $\mathscr{H}_2$ erweitern, indem man $S(N_{A^\dagger}) := \hat{0}$ setzt. Die beiden Projektoren P_{N_A} und $P_{N_{A^\dagger}}$ sind Projektoren auf endlich-dimensionale Unterräume und damit kompakte Operatoren. Damit erhalten wir:

$$SA - \hat{1}_{\mathscr{H}_1} = P_{N_A} \quad \text{und} \quad AS - \hat{1}_{\mathscr{H}_2} = P_{N_{A^\dagger}} \; .$$

Also existiert eine Parametrix.

Sei jetzt umgekehrt $S_1 \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$ eine Links-Parametrix zu $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$. Sei $\{f_n\} \in N_A$ eine beschränkte Folge mit $\|f_n\| \leq 1$, dann folgt:

$$f_n = \hat{1}_{\mathscr{H}_1} f_n = (\hat{1}_{\mathscr{H}_1} - S_1 A) f_n = K_1 f_n \; .$$

Da $K_1 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_1)$ kompakt ist existiert also eine konvergente Teilfolge von $K_1 f_n$ für jede Folge $\{f_n\}$ aus der abgeschlossenen Einheitskugel in N_A, also muß N_A endlich-dimensional sein. Das gleiche gilt mittels der Rechts-Parametrix für $N_{A^\dagger}$. Also ist A ein Fredholm-Operator. □

Als Anwendung dieses Satzes sieht man sofort, daß die Paramatrix $S \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$ eines Fredholm-Operators $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ ebenfalls ein Fredholm-Operator ist, denn die Bedingungsgleichungen $SA = \hat{1}_{\mathscr{H}_1} + K_1$ und $AS = \hat{1}_{\mathscr{H}_2} + K_2$, mit kompakten Operatoren $K_1 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_1)$, $K_2 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_2)$, sind in A und S symmetrisch. Weiter unten werden wir zeigen, daß $\mathrm{index}_S = -\mathrm{index}_A$.

Lemma J.5.6 *a) Mit A ist auch $A^\dagger$ ein Fredholm-Operator und es gilt index$(A^\dagger) = -$index(A).*

b) Sind A und B Fredholm-Operatoren, dann ist auch BA ein Fredholm-Operator und es gilt index$(BA) =$ index$(B) +$ index(A).

Beweis. a) seien $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$, $A^\dagger \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$ und $S_1 \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$ eine Links-Parametrix von A, d.h. $S_1 A = \hat{1}_{\mathscr{H}_1} + K_1$, mit $K_1 \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_1)$, dann ist $S_1^\dagger \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ eine Rechts-Parametrix von $A^\dagger$, denn

$$S_1 A = \hat{1}_{\mathscr{H}_1} + K_1 \quad \Rightarrow$$

$$(S_1 A)^\dagger = (\hat{1}_{\mathscr{H}_1} + K_1)^\dagger \quad \Rightarrow \quad A^\dagger S_1^\dagger = (\hat{1}_{\mathscr{H}_2} + K_1^\dagger) \; ,$$

und $K_1^\dagger \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_2)$ ist wieder ein kompakter Operator. Wegen J.5.2 ist der Kern von A gerade der Kokern von $A^\dagger$ und der Kern von $A^\dagger$ der Kokern von A und damit folgt $\mathrm{index}(A^\dagger) = -\mathrm{index}(A)$.

b) seien $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2)$ und $B \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_3)$ Fredholm-Operatoren mit den Links-Parametrizes $S_1 \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2, \mathscr{H}_1)$ und $S_2 \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_3, \mathscr{H}_2)$, dann ist $S_1 S_2 : \mathscr{H}_3 \to \mathscr{H}_1$ eine Linksparametrix für BA:

$$S_1 S_2 BA - \hat{1}_{\mathscr{H}_1} = S_1(S_2 B - \hat{1}_{\mathscr{H}_2})A + (S_1 A - \hat{1}_{\mathscr{H}_1}) = K \in \mathscr{K}(\mathscr{H}_1) \; ,$$

und gleicherweise für die Rechts-Parametrix.

Jetzt soll der Index von BA berechnet werden. $A^{-1}(\Omega)$ bezeichne der Urbildmenge von Ω. Dann setzt sich der Kern von BA aus den beiden Kern-Anteilen von A und B wie folgt zusammen:

$$N_{BA} = N_A \cup A^{-1}(N_B \cap R_A)$$

und ebenso

$$N_{A^\dagger B^\dagger} = N_{B^\dagger} \cup (B^\dagger)^{-1}(N_{A^\dagger} \cap R_{B^\dagger}) = N_{B^\dagger} \cup (B^\dagger)^{-1}({R_A}^\perp \cap {N_B}^\perp) \; .$$

Die beiden Kern-Anteile sind offensichtlich disjunkte Mengen (also ist hier $\cup = \oplus$) und daher kann man bei der Bestimmung von $\dim(N_{BA})$ und $\dim(N_{A^\dagger B^\dagger})$ die Dimensionen der Teilmengen addieren. Da $A : {N_A}^\perp \to R_A$ eine Bijektion ist, gilt $\dim A^{-1}(\Omega) = \dim \Omega$. Daher folgt für den Index:

$$\mathrm{index}(BA) = N_{BA} - N_{A^\dagger B^\dagger}$$

$$
\begin{aligned}
&= \dim(N_A) + \dim(N_B \cap R_A) - \dim(N_{B^\dagger}) - \dim({R_A}^\perp \cap {N_B}^\perp) \\
&= \dim(N_A) + \dim(N_B \cap R_A) + \dim(N_B \cap {R_A}^\perp) \\
&\quad - \dim(N_{B^\dagger}) - \dim({R_A}^\perp \cap {N_B}^\perp) - \dim(N_B \cap {R_A}^\perp) \\
&= \dim(N_A) + \dim(N_B) - \dim(N_{B^\dagger}) - \dim({R_A}^\perp) \\
&= \dim(N_A) + \dim(N_B) - \dim(N_{B^\dagger}) - \dim(N_{A^\dagger}) \\
&= \mathrm{index}(A) + \mathrm{index}(B)\ . \qquad \square
\end{aligned}
$$

Satz J.5.7 (Riesz) *Jeder Operator $C : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ der Form $C := \hat{1} + K$ mit einem kompakten Operator $K \in \mathscr{K}(\mathscr{H})$ ist ein Fredholm-Operator mit Index* 0.

Beweis. $\hat{1}$ ist eine Parametrix zu C, also ist C ein Fredholm-Operator.

Zunächst sollen Operatoren der Form $C := \hat{1} + K$ mit Operatoren K von endlichem Rang betrachtet werden, d.h. $\dim(R_K) < \infty$. Wenn K von endlichem Rang ist, dann ist K kompakt. Für solche C ist nun $\mathrm{index}(C) = 0$, denn: die Abbildung von $\mathscr{H}/N_K \to R_K$ ist eine Bijektion, also ist $\dim(\mathscr{H}/N_K) = \dim(R_K)$, also ist $\mathscr{H}/N_K$ abgeschlossen. Da N_K als Kern eines beschränkten Operators ja auch abgeschlossen ist, haben wir also eine Zerlegung von $\mathscr{H} = N_K \oplus {N_K}^\perp$, mit der Isomorphie ${N_K}^\perp \sim \mathscr{H}/N_K$.

Sei jetzt $C_0 : N_K \to \mathscr{H}$ die Einschränkung von C auf N_K, dann ist auch C_0 ein Fredholm-Operator. Sei $\hat{1}_0 : N_K \to \mathscr{H}$ die Einschränkung von $\hat{1}$ auf N_K, dann ist $\hat{1}_0$ ein Fredholm-Operator und es ist $N_{\hat{1}_0} = \{0\}$, $R_{\hat{1}_0} = N_K$ und damit $\mathrm{index}(\hat{1}_0) = -\dim({N_K}^\perp)$. Nun ist $C_0 = C\hat{1}_0$ und daraus folgt

$$\mathrm{index}(C_0) = \mathrm{index}(C) + \mathrm{index}(\hat{1}_0) = \mathrm{index}(C) - \dim({N_K}^\perp)\ .$$

Andererseits ist $C = \hat{1} + K$ auf N_K gleich $\hat{1}_0$, also

$$\mathrm{index}(C_0) = \mathrm{index}(\hat{1}_0) = -\dim({N_K}^\perp)\ .$$

Aus den beiden letzten Gleichungen folgt also $\mathrm{index}(C) = 0$.

Jetzt soll dieses Ergebnis auf unendlich-dimensionale kompakte Operatoren K verallgemeinert werden. Im Fall von Banach-Räumen muß sorgfältig die Abgeschlossenheit von $R_C = R_{\hat{1}+K}$ nachgewiesen werden, im Fall von Hilbert-Räumen kann man den Beweis vereinfachen (Booß (1977), S. 26). Wir approximieren den kompakten Operator K durch eine Folge von kompakten Operatoren K_n von endlichem Rang (eine konvergente Folge kompakter Operatoren konvergiert gegen einen kompakten Operator). Sei n so gewählt, daß $\|K - K_n\| < 1$ ist, dann existiert nach Satz J.2.16 die Inverse von $\hat{1} + K - K_n$.

$$\hat{1} + K = \hat{1} + K - K_n + K_n = (\hat{1} + K - K_n)(\hat{1} + (\hat{1} + K - K_n)^{-1}K_n)\ .$$

Der linke Faktor $(\hat{1}+K-K_n)$ ist invertierbar, ist also eine Bijektion und hat damit den Index 0. Der rechte Faktor ist von der Form $(\hat{1}+K_m)$ mit einem kompakten Operator K_m von endlichem Rang und hat damit auch den Index 0. Der Index von $\hat{1}+K$ ist die Summe der Indizes des Produktes auf der rechten Seite und damit 0. □

Eine unmittelbare Folge dieses Satzes ist, daß, wie bereits oben erwähnt, ein Fredholm-Operator und seine Parametrix einen entgegengesetzten Index haben, d.h. $\mathrm{index}_S = -\mathrm{index}_A$.

Bei dem gerade geführten Beweis fällt auf, daß K nicht bis auf ein ϵ durch die Folge der K_n approximiert werden muß, sondern nur bis auf $\|K-K_n\|<1$. Dies deutet auf eine Stabilität des Index gegenüber Störungen hin.

Satz J.5.8 (Yood) *Sei A ein Fredholm-Operator und K_2 ein kompakter Operator, dann ist $index_{A+K_2} = index_A$.*

Beweis. Sei S eine Parametrix zu A, dann ist wegen

$$S(A+K_2) = SA + SK_2 = \hat{1} + K + SK_2$$

S auch eine Parametrix zu $(A+K_2)$, da ja SK_2 kompakt ist. Also ist

$$\mathrm{index}_{A+K_2} = -\mathrm{index}_S = \mathrm{index}_A \ .$$

□

Satz J.5.9 (Dieudonné) *Sei A ein Fredholm-Operator, $A \in \mathscr{F}(\mathscr{H}_1,\mathscr{H}_2)$, dann gibt es ein $\epsilon > 0$, so daß für alle linear-beschränkten Operatoren $B \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1,\mathscr{H}_2)$ mit $\|B\| < \epsilon$ gilt: $index_{A+B} = index_A$.*

Beweis. Sei S eine Parametrix von A, dann folgt:

$$S(A+B) = SA + SB = \hat{1} + K + SB \ .$$

Wir wählen $\epsilon := \|S\|^{-1}$ und damit folgt $\|SB\| \le \|S\|\|B\| < 1$. Also ist mit Satz J.2.16 der Operator $\hat{1}+SB$ invertierbar.

$$(\hat{1}+SB)^{-1}S(A+B) = (\hat{1}+SB)^{-1}(\hat{1}+K+SB) = \hat{1} + (\hat{1}+SB)^{-1}K \ .$$

Also ist $(\hat{1}+SB)^{-1}S$ eine Parametrix von $(A+B)$ und da $(\hat{1}+SB)^{-1}$ eine Bijektion ist folgt:

$$\mathrm{index}_{A+B} = -\mathrm{index}_{(\hat{1}+SB)^{-1}S} = -\mathrm{index}_S = \mathrm{index}_A \ .$$

□

Satz J.5.10 (Homotopie-Invarianz) *Sei $A(t)$ eine in t stetige Einparameter-Familie von Fredholm-Operatoren mit $0 \le t \le 1$, dann ist der Index von A unabhängig von t und speziell gilt $index_{A(0)} = index_{A(1)}$.*

Beweis. Sei $\|A(t_\epsilon) - A(0)\| < \epsilon$, dann folgt mit dem vorhergehenden Satz:

$$\mathrm{index}_{A(t_\epsilon)} = \mathrm{index}_{A(0)+(A(t_\epsilon)-A(0))} = \mathrm{index}_{A(0)} \ ,$$

usw. □

Es ist gerade diese Homotopie-Invarianz der Fredholm-Operatoren, die die Verbindung zur Topologie und zum *Atiyah-Singer Index-Theorem* herstellt.

J.6 Literatur zu Funktionalanalysis und Fredholm-Operatoren

- Großmann (1972), Funktionalanlysis I u. II,
- Werner (2005), Funktionalanalysis,
- Lax (2002), Functional Analysis,
- Fischer u. Kaul (2001), Mathematik für Physiker, Band 1,
- Fischer u. Kaul (1998), Mathematik für Physiker, Band 2,
- Voigt u. Wloka (1975), Hilberträume und elliptische Differentialoperatoren,
- Gilkey (1995), Invariance Theory, the Heat Equation, and the Atiyah-Singer Index Theorem,
- Booß (1977), Topologie und Analysis.

K Pseudodifferential-Operatoren

In diesem Kapitel soll eine einfache Einführung in einige Grundgedanken der Sobolev-Räume und der Pseudodifferential-Operatoren gegeben werden. Das Ziel ist die Identifizierung der elliptischen Pseudodifferential-Operatoren auf Sobolev-Räumen als Fredholm-Operatoren. Über den Index der Fredholm-Operatoren ist dann die Verbindung zwischen der Analysis der elliptischen Pseudodifferential-Operatoren und der Topologie hergestellt, die letztlich zu den berühmten Index-Theoremen von Atiyah-Singer et al. führt.

Dieses Kapitel stützt sich hauptsächlich auf Gilkey (1995). Daneben wurden wurden herangezogen: Alinhac u. Gérard (2007), Wong (1999), Voigt u. Wloka (1975), Booß (1977), Werner (2005), Dobrowolski (2006), Fischer u. Kaul (1998), Großmann (1972).

Alinhac u. Gérard (2007) und Wong (1999) sind für die Theorie der Pseudodifferential-Operatoren eine gute Ergänzung zu der sehr knappen und dichten Darstellung von Gilkey (1995).

K.1 Schwartz-Raum und Fouriertransformation

Eine n-dimensionale Mannigfaltigkeit M entspricht lokal einem n-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^n$. Um die folgenden Betrachtungen möglichst einfach zu halten, werden wir hier nur Operatoren im $\mathbb{R}^n$ betrachten. Die Erweiterung auf allgemeine n-dimensionale Mannigfaltigkeiten ist unproblematisch und findet sich etwa in Gilkey (1995), Alinhac u. Gérard (2007).

Für partielle Differential-Operatoren (PDO) der Ordnung d auf dem $\mathbb{R}^n$ führt man die übliche Multiindex-Schreibweise ein:

$$x := (x^1, \ldots, x^n) \ ,$$

$$\alpha := (\alpha_1, \ldots, \alpha_n), \quad |\alpha| := \alpha_1 + \alpha_2 + \ldots + \alpha_n, \quad \alpha! := \alpha_1!\alpha_2! \cdots \alpha_n! \ ,$$

$$\beta \le \alpha \quad :\Leftrightarrow \quad \beta_j \le \alpha_j \ , \quad \text{für } j = 1, \ldots, n \ ,$$

$$D_{x^j} := \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \ , \quad \text{für } j = 1, \ldots, n \ ,$$

$$D_x^\alpha := \prod_{j=1}^n D_{x^j}^{\alpha_j} \ ,$$

$$P(x,D) := \sum_{|\alpha|=0}^{d} a_\alpha(x)\, D_x^\alpha \ . \tag{K.1.1}$$

Für einen linearen PDO 2. Ordnung sieht das ausführlich aufgeschrieben so aus:

$$P(x,D) = a_0(x) + \sum_{j=1}^{n} a_1^j(x)\, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x^j} + \sum_{j,k=1}^{n} a_2^{jk}(x)\,(-1)\frac{\partial^2}{\partial x^j \partial x^k} \ . \tag{K.1.2}$$

Hierbei wurde die Multiindex-Schreibweise vereinfacht zu:

$$a_0 := a_{|\alpha|=0} := a_{(0,\dots,0)} \ ,$$

$$a_1^j := a_{|\alpha|=1}^j := a_{(0,\dots,0,1,0,\dots,0)} \ ,$$

$$a_2^{jk} := a_{|\alpha|=2}^{jk} := \begin{cases} a_{(0,\dots,0,2,0,\dots,0)} & \text{für } j=k \ , \\ a_{(0,\dots,0,1,0,\dots,0,1,0,\dots,0)} & \text{für } j \neq k \ . \end{cases}$$

Von diesem Typ ist z.B. der in der Physik häufig auftauchende Laplace-Operator

$$L_x = -\sum_{j,k=1}^{n} g^{jk}(x)\,\frac{\partial^2}{\partial x^j \partial x^k} - \sum_{j=1}^{n} p^j(x)\,\frac{\partial}{\partial x^j} - q(x) \ . \tag{K.1.3}$$

Für das Differenzieren von Produkten von Funktionen in $\mathbb{R}^n$ gilt eine verallgemeinerte Leibnitz-Formel, die wie im gewöhnlichen Fall mittels vollständiger Induktion bewiesen wird. Seien α, β Multiindizes, dann ist:

$$D_x^\alpha(f(x)g(x)) = \sum_{\beta\le\alpha} \binom{\alpha}{\beta} (D_x^\beta f(x))\,(D_x^{\alpha-\beta} g(x)) \ . \tag{K.1.4}$$

Eine Standard-Methode der Behandlung von Differentialgleichungen ist die Fouriertransformation, da sich hierdurch Differentialgleichungen in algebraische Gleichungen umwandeln lassen. Die üblichste Fouriertransformation ist eine Abbildung $\mathcal{F} : L^1(\mathbb{R}^n) \to C(\mathbb{R}^n)$. Hierbei ist L^1 der Raum der Lebesgue-meßbaren komplex-wertigen Funktionen mit der 1-Norm, d.h. $\|f\|_1 = \int dt\,|f(t)|$, und C der Raum der komplexwertigen stetigen Funktionen. Aus funktionalanalytischer Sicht ist es jedoch günstiger die Fouriertransformation als eine symmetrische Abbildung zwischen zwei gleichen Räumen zu definieren. Optimal ist dabei eine Einschränkung auf eine Teilmenge aus L^1, den sog. Schwartzraum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, nämlich den Teilraum der komplex-wertigen glatten Funktionen, d.h. $C^\infty(\mathbb{R}^n)$ Funktionen, die für $|x| \to \infty$ schneller als jedes Polynom in x abfallen:

Definition K.1.1 *Der Raum der schnellfallenden Funktionen (für $|x| \to \infty$) heißt Schwartzraum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$:*

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) := \{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \,|\, D_x^\alpha f(x) \le C_{m,\alpha}(1+|x|)^{-m} \,, \textit{für alle}\ m, \alpha \} \ .$$

Definition K.1.2 *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen, dann heißt der Raum der C^∞-Funktionen mit kompaktem Träger $C_0^\infty(\Omega)$, bzw. Testfunktionenraum $\mathcal{D}(\Omega)$:*

$$\mathcal{D}(\Omega) := C_0^\infty(\Omega) := \{f \in C^\infty(\Omega) \,|\, supp(f) := \overline{\{x \,|\, f(x) \neq 0\}} \text{ ist kompakt}\} \,.$$

Offensichtlich ist $C_0^\infty(\Omega) \subset \mathcal{S}(\Omega) \subset L^2(\Omega)$. Häufig wird von der Tatsache Gebrauch gemacht, daß $\mathcal{S}(\Omega)$ dicht in $L^2(\Omega)$ ist. Dies zeigt man üblicherweise dadurch, daß man nachweist, daß $C_0^\infty(\Omega)$ dicht in $L^2(\Omega)$ ist .

Satz K.1.3 *Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, dann ist $C_0^\infty(\Omega)$ dicht in $L^2(\Omega)$.*

Beweis. Hier folgen wir dem Beweis in Großmann (1972) (S. 73 ff.), mit $n = 1$ und $\Omega = \mathbb{R}^1$. Für einen alternativen Beweis siehe etwa Werner (2005) (S. 81 ff., 203 ff).

1. Die Menge der meßbaren, beschränkten Funktionen mit endlichem Träger ist dicht in $L^2(\mathbb{R})$, denn:
sei $f \in L^2(\mathbb{R})$ beliebig, dann definieren wir eine Folge beschränkter, meßbarer Funktionen mit beschränktem Träger $g_n(x) := f(x)$ für $x \in [-n, n]$ und $|f(x)| \leq n$, bzw. $g_n(x) := 0$ ansonsten. Dann gilt

$$\lim_{n\to\infty} |f(x) - g_n(x)|^2 = 0 \quad \text{fast überall .}$$

Außerdem ist $|f(x)|^2$ für $|f(x) - g_n(x)|^2 \leq |f(x)|^2$ eine Lebesgue-integrierbare Majorante. Also können wir mit dem Satz von der majorisierten Konvergenz von Lebesgue die Integration und Grenzwertbildung miteinander vertauschen und erhalten:

$$\lim_{n\to\infty} \|f - g_n\| = \lim_{n\to\infty} \int |f(x) - g_n(x)|^2 \, dx = \int \lim_{n\to\infty} |f(x) - g_n(x)|^2 \, dx = 0 \,.$$

2. Die Menge der Stufenfunktionen $h(x) := \sum_{i=1}^n a_i \chi(\Omega_i)$ mit den charakteristischen Funktionen $\chi(\Omega_i)$ auf Ω_i (d.h. $\chi(\Omega_i) = 1$ für $x \in \Omega_i$, bzw. $\chi(\Omega_i) = 0$ für $x \notin \Omega_i$) ist dicht in $L^2(\mathbb{R})$, denn:
sei $g(x)$ eine beliebige meßbare, beschränkte Funktion mit endlichem Träger, so soll diese Funktion durch eine Stufenfunktionen approximiert werden. Wenn $-C \leq g(x) \leq +C$ ist, dann sei $\{a_i \,|\, i = 1, \ldots, n+1\}$ eine Zerlegung des Intervalls $[-C, +C]$ mit $\epsilon := \max_{i=1,\ldots,n} |a_{i+1} - a_i|$. Die Mengen Ω_i seien definiert als $\Omega_i := \{x \,|\, x \in \text{supp } g,\, a_i \leq g(x) < a_{i+1},\, i = 1, \ldots, n\}$. Dann ist

$$|g(x) - h(x)| = |g(x) - a_i| < |a_{i+1} - a_i| = \epsilon \quad \text{für } x \in \Omega_i \quad \Rightarrow$$

$$\|g - h\|^2 = \int |g(x) - h(x)|^2 dx < \epsilon \cdot \text{supp}\, g \,.$$

Sei nun $f \in L^2(\mathbb{R})$ beliebig, dann gilt mit 1.:

$$\|f - h\| \leq \|f - g\| + \|g - h\| \leq C \cdot \epsilon \,,$$

also ist die Menge der Stufenfunktionen dicht in $L^2(\mathbb{R})$.

3. Jetzt soll eine Stufenfunktion durch eine $C_0^\infty(\mathbb{R})$-Funktion approximiert werden. Dabei reicht es, eine beliebige charkteristische Funktion $\chi([a,b])$ durch eine $C_0^\infty(\mathbb{R})$-Funktion zu approximieren. Zunächst soll die linke Seite der Rechteckfunktion $\chi([a,b])$ durch eine $C_0^\infty(\mathbb{R})$-Funktion angenähert werden. Als Grundfunktion der folgenden Konstruktion wählt man die unendlich differenzierbare Funktion $\exp(-\frac{1}{x})$:

$$u_n(x) := \frac{1}{N}\int\limits_a^x \exp(-\frac{1}{\xi - a} + \frac{1}{\xi - (a+\frac{1}{n})})\,d\xi \quad \text{für } x \in [a, a+\frac{1}{n}]\ .$$

N ist ein Normierungsfaktor, so daß $\frac{1}{N}\int_a^{a+\frac{1}{n}} u_n(x)\,dx = 1$ ist. Zunächst einmal sieht man, daß $u_n \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ mit $u_n(a) = 0$ und $u_n(a+\frac{1}{n}) = 1$. An den Stellen $x = a$ und $x = a + \frac{1}{n}$ sind alle Ableitungen von $u_n(x)$ gleich 0, denn:

$$\lim_{\substack{x-a\to 0\\ x-a>0}} \exp(-\frac{1}{x-a}) = 0\ , \qquad \lim_{\substack{x-(a+\frac{1}{n})\to 0\\ x-(a+\frac{1}{n})<0}} \exp(\frac{1}{x-(a+\frac{1}{n})}) = 0\ .$$

Außerdem gilt im Intervall $[a, a+\frac{1}{n}]$:

$$\begin{aligned}\lim_{n\to\infty} \|\chi - u_n\|^2 &= \lim_{n\to\infty} \int\limits_a^{a+\frac{1}{n}} |\chi(x) - u_n(x)|^2 dx \le \lim_{n\to\infty} \int\limits_a^{a+\frac{1}{n}} |\chi(x)|^2 dx \\ &= \lim_{n\to\infty} \int\limits_a^{a+\frac{1}{n}} dx = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} = 0\ .\end{aligned}$$

In gleicher Weise kann die Rechteckfunktion $\chi(x)$ auf der rechten Seite des Intervalls $[a,b]$ durch eine Funktion $v_n \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ approximiert werden. Also ist $C_0^\infty(\mathbb{R})$ dicht in der Menge der Rechteckfunktionen und damit dicht in der Menge der Stufenfunktionen und damit dicht in der Menge der meßbaren, beschränkten Funktionen mit endlichem Träger und damit dicht in $L^2(\mathbb{R})$. □

Im folgenden betrachten wir die Fouriertransformation als eine Abbildung zwischen zwei Schwartzräumen: $\mathcal{F}:\ \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)\ \to\ \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$:

$$\xi := (\xi_1, \ldots, \xi_n)\ , \quad \xi(x) := (2\pi)^{-\frac{n}{2}}\, e^{ix\xi}\ , \tag{K.1.5}$$

$$\tilde{f}(\xi) := \mathcal{F}(u)(\xi) := \int \xi^*(x) f(x)\, d^n x = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{-ix\xi}\, f(x)\, d^n x\ , \tag{K.1.6}$$

$$g(x) := \mathcal{F}^{-1}(\tilde{g})(x) := \int \xi(x)\tilde{g}(\xi)\, d^n\xi = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi}\, \tilde{g}(\xi)\, d^n\xi\ . \tag{K.1.7}$$

Weiter bezeichne $*:\ \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)\times\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)\ \to\ \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ die Faltung zweier Funktionen $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$:

$$(f*g)(x) := \int f(x-y) g(y)\, d^n y = \int f(y) g(x-y)\, d^n y\ .$$

Satz K.1.4 *a)* $f(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi} \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi = (2\pi)^{-n} \int d^n y\, e^{i(x-y)\xi} f(y)\, d^n\xi$.

b) $D_\xi^\alpha \tilde{f}(\xi) = (-1)^{|\alpha|}(2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{-ix\xi} x^\alpha f(x)\, d^n x$,

$\xi^\alpha \tilde{f}(\xi) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{-ix\xi} D_x^\alpha f(x)\, d^n x$,

$D_x^\alpha f(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi} \xi^\alpha \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi$,

$x^\alpha f(x) = (-1)^{|\alpha|}(2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi} D_\xi^\alpha \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi$.

c) $\tilde{f} \cdot \tilde{g} = \mathcal{F}(f * g)$, *und* $\tilde{f} * \tilde{g} = \mathcal{F}(f \cdot g)$.

d) $\mathcal{F}\mathcal{F} f(x) = f(-x)$.

e) Plancherel-Formel: $\langle f \mid g \rangle_{L_2} = \langle \tilde{f} \mid \tilde{g} \rangle_{L_2}$.

Beweis. a)-d) siehe etwa Gilkey (1995), S. 4 ff., Werner (2005), S. 206 ff.

e) Da $\mathcal{S}$ dicht in L_2 liegt, kann man die auf $\mathcal{S}$ definierte Fouriertransformation auf L_2 ausdehnen und es gilt:

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{f} \mid g \rangle_{L_2} &= \int [(2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int (e^{-ix\xi} f(x))^*\, d^m x]\, g(\xi)\, d^n\xi \\
&= \int f^*(x)\, [(2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{+ix\xi} g(\xi)\, d^n\xi]\, d^n x \\
&= \int f^*(x)\, [(2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{-ix\xi} g(-\xi)\, d^n\xi]\, d^n x \\
&= \langle f \mid \tilde{g}(-x) \rangle_{L_2} = \langle f \mid \mathcal{F} g(-x) \rangle_{L_2} \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\langle \tilde{f} \mid \tilde{g} \rangle_{L_2} = \langle f \mid \mathcal{F}\tilde{g}(-x) \rangle_{L_2} = \langle f \mid \mathcal{F}\mathcal{F} g(-x) \rangle_{L_2} = \langle f \mid g \rangle_{L_2} \ . \qquad \square$$

K.2 Sobolev-Räume

Um bei Problemen der Variationsrechnung und der partiellen Differentialgleichungen zu umfassenderen Aussagen zu gelangen bedarf es sehr feiner Abschätzungen über das Wachstumsverhalten der beteiligten Funktionen. Die Sobolev-Räume haben sich in dieser Hinsicht zu einem unerläßlichen Hilfsmittel der Analysis entwickelt. Wir verwenden hier nur die einfachste Form von Sobolev-Räumen $H_s(\mathbb{R}^n)$, die isomorph zu $L_2(\mathbb{R}^n)$ sind. Zu erweiterten Sobolev-Räumen der Form $H_{s,p}(\mathbb{R}^n)$, die isomorph zu $L_p(\mathbb{R}^n)$ sind, siehe etwa Dobrowolski (2006), S. 89 ff.

Definition K.2.1 *Sei* $s \in \mathbb{R}$ *und* $f \in \mathcal{S}$ *und* $\|f\|_s^2 := \int (1 + |\xi|^2)^s |\tilde{f}(\xi)|^2\, d\xi$, *dann ist* $H_s(\mathbb{R}^n)$ *der Abschluß von* $\mathcal{S}$ *in der* $\|\cdot\|_s$*-Norm.*

Da $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ dicht in $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ ist, kann man $H_s(\mathbb{R}^n)$ auch als Abschluß von C_0^∞ in der $\|\cdot\|_s$-Norm betrachten. $H_0(\mathbb{R}^n)$ ist offensichtlich identisch mit $L_2(\mathbb{R}^n)$ Wegen der Plancherel-Formel der Fourier-Transformation ist $H_s(\mathbb{R}^n)$ isomorph zu $L_2(\mathbb{R}^n)$ mit dem Integrationsmaß $(1 + |\xi|^2)^s$.

Lemma K.2.2 *Sei $t < s$, dann ist $H_s \subset H_t$.*

Beweis. $t < s \Rightarrow (1+|\xi|^2)^t < (1+|\xi|^2)^s \Rightarrow \|f\|_t < \|f\|_s \Rightarrow H_s \subset H_t$. □

Lemma K.2.3 *Sei $s \in \mathbb{R}$, dann sind $\int (1+|\xi|^2)^s |\tilde{f}(\xi)|^2\,d\xi$ und $\int (1+|\xi|)^{2s} |\tilde{f}(\xi)|^2\,d\xi$ auf $H_s(\mathbb{R}^n)$ äquivalente $\|\cdot\|_s$-Normen.*

Beweis. 1. $(1+|\xi|^2)^s \le (1+2|\xi|+|\xi|^2)^s = (1+|\xi|)^{2s}$,

2. sei $|\xi| < 1$: $(1+|\xi|)^{2s} = (1+2|\xi|+|\xi|^2)^s \le (3+|\xi|^2)^s \le 3^s(1+|\xi|^2)^s$,

sei $|\xi| \ge 1$: $(1+|\xi|)^{2s} = (1+2|\xi|+|\xi|^2)^s \le (1+3|\xi|^2)^s \le 3^s(1+|\xi|^2)^s$,

3. also ist $(1+|\xi|^2)^s \le (1+|\xi|)^{2s} \le 3^s(1+|\xi|^2)^s$, also führen beide Faktoren zu äquivalenten Normen. □

Lemma K.2.4 *Sei $k \in \mathbb{N}$, dann ist $\|f\|_{D,k}$ mit $\|f\|^2_{D,k} := \sum_{|\alpha|\le k} \|D^\alpha_x f\|^2$ eine zu $\|f\|_k$ äquivalente Norm auf $H_k(\mathbb{R}^n)$.*

Beweis. 1. $\frac{1}{k!}(1+|\xi|^2)^k = \sum_{i=0}^k \frac{1}{k!}\left(\frac{k!}{i!(k-i)!}\right)|\xi|^{2i} \le \sum_{|\alpha|\le k} |\xi^\alpha|^2 \le (1+|\xi|^2)^k \quad \Rightarrow$

$\frac{1}{k!}\int (1+|\xi|^2)^k |\tilde{f}(\xi)|^2\,d\xi \le \int \sum_{|\alpha|\le k} |\xi^\alpha \tilde{f}(\xi)|^2\,d\xi \le \int (1+|\xi|^2)^k |\tilde{f}(\xi)|^2\,d\xi \quad \Rightarrow$

$\frac{1}{k!}\|f\|_k^2 \le \int \sum_{|\alpha|\le k} |\xi^\alpha \tilde{f}(\xi)|^2\,d\xi \le \|f\|_k^2$.

2. $\int |\xi^\alpha \tilde{f}(\xi)|^2\,d\xi = \langle \xi^\alpha \tilde{f}(\xi) \mid \xi^\alpha \tilde{f}(\xi)\rangle = \langle \mathcal{F}(D^\alpha_x f(x)) \mid \mathcal{F}(D^\alpha_x f(x))\rangle$

$= \langle D^\alpha_x f(x) \mid D^\alpha_x f(x)\rangle = \int |D^\alpha_x f(x)|^2\,dx = \|D^\alpha_x f\|^2$.

3. $\frac{1}{k!}\|f\|_k^2 \le \int \sum_{|\alpha|\le k} |D^\alpha_x f(x)|^2\,d\xi = \sum_{|\alpha|\le k} \|D^\alpha_x f\|^2 = \|f\|^2_{D,k} \le \|f\|_k^2$. □

Lemma K.2.5 *D^α_x ist eine stetige Abbildung von H_s in $H_{s-|\alpha|}$. ($H_s \subset H_{s-|\alpha|}$ wurde bereits oben gezeigt.)*

Beweis. Sei $f \in \mathcal{S}$. Aus $|\xi^\alpha|^2 \le |\xi|^{2|\alpha|} \le (1+|\xi|^2)^{|\alpha|}$ folgt $|\xi^\alpha|^2(1+|\xi|^2)^{s-|\alpha|} \le (1+|\xi|^2)^s$.
$\|D^\alpha_x f\|^2_{s-|\alpha|} = \int |\xi^\alpha \tilde{f}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^{s-|\alpha|}\,d\xi \le \int |\tilde{f}(\xi)|^2(1+|\xi|^2)^s\,d\xi = \|f\|_s^2$.
Da H_s sie Abschließung von $\mathcal{S}$ in der $\|\cdot\|_s$ -Norm ist, folgt also $D^\alpha_x : H_s \to H_{s-|\alpha|}$. □

Eine weitere wichtige Norm in Sobolev-Räumen ist $\|f\|_{\infty,k}$. Mit Hilfe dieser Norm kann man sehr schön den Satz von Sobolev beweisen, der den Zusammenhang von $H_s(\mathbb{R}^n)$-Funktionen (z.B. als schwachen Lösungen von Differentialgleichungen) und $C^k(\mathbb{R}^n)$-Funktionen herstellt.

Definition K.2.6 *Sei $\|f\|_{\infty,k} := \sup_{x\in(\mathbb{R}^m)} \sum_{|\alpha|\le k} |D^\alpha_x f(x)|$, für $k \in \mathbb{N}$ und $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.*

Die Vervollständigung von $\mathcal{S}$ mit der $\|f\|_{\infty,k}$-Norm ist eine Teilmenge von $C^k(\mathbb{R}^n)$.

Satz K.2.7 (Sobolev) *Sei $k \in \mathbb{N}$, $f \in H_s(\mathbb{R}^n)$ und $s - k > \frac{n}{2}$, dann ist $f \in C^k(\mathbb{R}^n)$ und $\|f\|_{\infty,k} \le c\|f\|_s$, d.h. $H_s(\mathbb{R}^n) \subset C^k(\mathbb{R}^n)$.*

Beweis. 1. sei zunächst $k = 0$ und $f \in \mathcal{S}$. Dann gilt für $f(x)$:

$f(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi} \tilde{f}(\xi)\, d\xi = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi} \tilde{f}(\xi)(1 + |\xi|^2)^{\frac{s}{2}}(1 + |\xi|^2)^{-\frac{s}{2}}\, d\xi$. Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung folgt:

$|f(x)|^2 \leq \|f\|_s^2 \cdot \int (1 + |\xi|^2)^{-s}\, d\xi$. Wenn $2s > n$, dann ist $(1 + |\xi|^2)^{-s}$ integrabel und $c := \int (1 + |\xi|^2)^{-s}\, d\xi$. Also folgt:

$\|f\|_\infty^2 := \|f\|_{\infty,0}^2 := \sup_{x\in\mathbb{R}^m} |f(x)|^2 \leq c\|f\|_s^2$. Beide Normen sind stetig und $f \in \mathcal{S}$ ist gleichmäßig stetig in x, also kann die Ungleichung von $\mathcal{S}$ auf H_s ausgedehnt werden.

2. sei jetzt $k > 0$, $k \geq |\alpha|$ und $2(s - k) > n$, dann folgt wie oben:

$|D_x^\alpha f(x)|^2 \leq \|D_x^\alpha f\|_{s-|\alpha|}^2 \cdot \int (1 + |\xi|^2)^{-(s-|\alpha|)}\, d\xi$. Wenn $2(s - k) > n$, dann ist $(1 + |\xi|^2)^{-2(s-|\alpha|)} \leq (1 + |\xi|^2)^{-2(s-k)}$ integrabel und $c := \int (1 + |\xi|^2)^{-(s-k)}\, d\xi$.

$\|f\|_{\infty,|\alpha|}^2 = \|D_x^\alpha f\|_{\infty,0}^2 \leq c_1 \|D_x^\alpha f\|_{s-|\alpha|}^2 \leq c_1 c_2 \|f\|_s^2$.

Damit folgt, daß $[H_s(\mathbb{R}^n), \|\cdot\|_s] \subset [C^k(\mathbb{R}^n), \|f\|_{\infty,k}]$, wenn $s - k > \frac{n}{2}$ ist. □

Zentral für den Nachweis, daß elliptische Pseudodifferential-Operatoren auf Sobolev-Räumen Fredholm-Operatoren sind, ist der folgende Einbettungssatz von Rellich. Dieser Satz argumentiert mit C_0^∞-Funktionen, da diese ja dicht in $\mathcal{S}$ und damit dicht in H_s liegen.

Satz K.2.8 (Rellich) *Sei $t < s$ und $K \subset \mathbb{R}^n$ eine kompakte Menge, dann ist die Einbettung von $H_s(K)$ in $H_t(K)$ kompakt. Genauer gesagt: sei $\{f_n\}$ eine in $H_s(K)$ beschränkte Folge von C_0^∞-Funktionen, d.h. $\|f_n\|_s < c$ und $f_n \in C_0^\infty(K)$, dann gibt es eine Teilfolge von $\{f_n\}$, die in $H_t(K)$ konvergiert.*

Beweis. 1. Zunächst soll gezeigt werden, daß es in $H_s(K)$ eine Teilfolge von $\{f_n\}$ gibt, hier $\{f_{n_i}\}$ genannt, für welche die fouriertransformierte Folge $\tilde{f}_{n_i}$ gleichmäßig in $H_s(K)$ konvergiert. Sei $g \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ eine Funktion, die auf einer Umgebung von K identisch 1 ist, dann folgt aus $f_n = g \cdot f_n$ auf K: $\tilde{f}_n = \tilde{g} * \tilde{f}_n$ und damit

$$|\partial_{\xi_j} \tilde{f}_n(\xi)| = |\int \partial_{\xi_j} \tilde{g}(\xi - \eta) \tilde{f}_n(\eta)\, d\eta| \leq \int |\partial_{\xi_j} \tilde{g}(\xi - \eta)| \cdot |\tilde{f}_n(\eta)|\, d\eta \,.$$

Diesen Ausdruck kann man mittels der folgenden Funktion $h_j(\xi)$ weiter abschätzen:

$$h_j(\xi) := [\int |\partial_{\xi_j} \tilde{g}(\xi - \eta)|^2 \cdot (1 + |\eta|^2)^{-s}]^{\frac{1}{2}} \,, \quad h_j := \max_{\xi\in K} h_j(\xi) \,.$$

$$\begin{aligned} |\partial_{\xi_j} \tilde{f}_n(\xi)| &\leq \int |\partial_{\xi_j} \tilde{g}(\xi - \eta)|(1 + |\eta|^2)^{-\frac{s}{2}} \cdot (1 + |\eta|^2)^{+\frac{s}{2}} |\tilde{f}_n(\eta)|\, d\eta \\ &\leq [\int |\partial_{\xi_j} \tilde{g}(\xi - \eta)|^2 (1 + |\eta|^2)^{-s}\, d\eta]^{\frac{1}{2}} \cdot [\int (1 + |\eta|^2)^{+s} |\tilde{f}_n(\eta)|^2\, d\eta]^{\frac{1}{2}} \\ &\leq h_j(\xi) \cdot \|f_n\|_s \leq h \cdot c \,. \end{aligned}$$

Ebenso kann $|\tilde{f}_n(\xi)|$ abgeschätzt werden.

Das bedeutet nun, daß $\tilde{f}_n$ ebenso wie f_n eine $C_0^\infty(K)$-Funktion ist und weiter, daß $\{\tilde{f}_n\}$ eine gleichmäßig beschränkte und gleichgradig stetige Funktionenmenge darstellt. Mit dem Satz von Arzelà-Ascoli (Satz J.3.4) folgt, daß es eine konvergente Teilfolge $\{\tilde{f}_{n_i}\}$, bzw. $\{f_{n_i}\}$ auf $H_s(K)$ gibt.

2. Nachdem geklärt ist, daß eine beschränkte Folge $\{f_n\}$ auf $H_s(K)$ eine konvergente Teilfolge $\{f_{n_i}\}$ enthält, soll jetzt gezeigt werden, daß diese konvergente Teilfolge nicht nur in $H_s(K)$, sondern auch in $H_t(K)$ mit $t < s$ konvergiert. Wir bezeichnen der Einfachheit halber $\{f_{n_i}\}$ wieder als $\{f_n\}$ und wollen nachweisen, daß diese Folge $\{f_n\}$ auch in $H_t(K)$ eine Cauchy-Folge ist. Dazu zerlegt man das Integral $\|f_i - f_k\|_t^2$ in zwei Anteile, die dann einzeln abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned}\|f_i - f_k\|_t^2 &= \int |\tilde{f}_i(\xi) - \tilde{f}_k(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^t \, d\xi \\ &= \int\limits_{|\xi|\le r} |\tilde{f}_i(\xi) - \tilde{f}_k(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^t \, d\xi + \int\limits_{|\xi|\ge r} |\tilde{f}_i(\xi) - \tilde{f}_k(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^t \, d\xi \,.\end{aligned}$$

Für ein vorgegebenes $\epsilon > 0$ wählt man $i > n_0$, $k > n_0$ so, daß $|\tilde{f}_i(\xi) - \tilde{f}_k(\xi)|^2 < \epsilon$ ist, und man wählt den Radius r so, daß $(1+r^2)^{t-s} \le \epsilon$ gilt. Dann folgt für das erste Integral:

$$\int\limits_{|\xi|\le r} |\tilde{f}_i(\xi) - \tilde{f}_k(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^t \, d\xi \le (1+r^2)^t \cdot \epsilon \cdot \int\limits_{|\xi|\le r} d\xi \,,$$

und für das zweite Integral:

$$\begin{aligned}\int\limits_{|\xi|\ge r} |\tilde{f}_i(\xi) - \tilde{f}_k(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^t \, d\xi &\le (1+|r|^2)^{t-s} \int\limits_{|\xi|\ge r} |\tilde{f}_i(\xi) - \tilde{f}_k(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^s \, d\xi \\ &\le (1+|r|^2)^{t-s} \cdot \|f_i - f_k\|_s^2 \le \epsilon \cdot \|2f_i\|_s^2 \le \epsilon \cdot 4c^2 \,.\end{aligned}$$

Also wird $\|f_i - f_k\|_t^2$ beliebig klein und damit ist $\{f_n\}$ eine Cauchy-Folge in $H_t(K)$. □

Lemma K.2.9 *a. Seien $f, g \in \mathcal{S}$, dann dann man H_{-s} im folgenden Sinn als einen Dualraum von H_s ansehen: $|\langle f \mid g\rangle_{L_2}| \le \|f\|_s \|g\|_{-s}$.*

b. Zu jedem $f \in \mathcal{S}$ gibt es ein $g \in \mathcal{S}$, so daß $\langle f \mid g\rangle_{L_2} = \|f\|_s \|g\|_{-s}$.

c. $\|f\|_s = \sup_{g\in H_{-s}, g\neq 0} \frac{|\langle f|g\rangle_{L_2}|}{\|g\|_{-s}}$.

Beweis. a.

$$\begin{aligned}|\langle f \mid g\rangle_{L_2}|^2 &= |\langle \tilde{f} \mid \tilde{g}\rangle_{L_2}|^2 = |\int d\xi \, \tilde{f}^*(\xi)\tilde{g}(\xi)|^2 \le \int d\xi \, |\tilde{f}(\xi)|^2 |\tilde{g}(\xi)|^2 \\ &= \int d\xi \, |\tilde{f}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^s |\tilde{g}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^{-s}\end{aligned}$$

$$\leq \int d\xi\, |\tilde{f}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^s \cdot \int d\xi\, |\tilde{g}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^{-s}$$

$$= \|f\|_s^2 \cdot \|g\|_{-s}^2 \,.$$

b. Sei $\tilde{g}(\xi) := \tilde{f}(\xi)(1+|\xi|^2)^s$, dann ist

$$\|g\|_{-s}^2 = \int d\xi\, |\tilde{g}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^{-s} = \int d\xi\, |\tilde{f}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^{2s} (1+|\xi|^2)^{-s}$$

$$= \int d\xi\, |\tilde{f}(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^s = \|f\|_s^2 \,,$$

$$|\langle f \mid g\rangle_{L_2}| = |\langle \tilde{f} \mid \tilde{g}\rangle_{L_2}| = |\int d\xi\, \tilde{f}^*(\xi)\tilde{g}(\xi)|$$

$$= |\int d\xi\, \tilde{f}^*(\xi)\tilde{f}(\xi)(1+|\xi|^2)^s| = \|f\|_s^2 \,.$$

Also ist $|\langle f \mid g\rangle_{L_2}| = \|f\|_s^2 = \|f\|_s \cdot \|g\|_{-s}$.

c. Folgt unmittelbar aus a. und b. □

Eine häufig im Zusammenhang mit Sobolev-Raumen verwendete Ungleichung stammt von Peetre:

Lemma K.2.10 (Peetre) *Seien $x, y \in \mathbb{R}^n$ und $s \in \mathbb{R}$, dann gilt:* $(1+|x+y|)^s \leq (1+|x|)^s(1+|y|)^{|s|}$.

Beweis. 1. sei $s \geq 0$:

$$(1+|x+y|) \leq (1+|x|+|y|) \leq (1+|x|)(1+|y|) \quad \Rightarrow$$

$$(1+|x+y|)^s \leq (1+|x|)^s(1+|y|)^s \,,$$

2. sei $s < 0$, dann verwenden wir die obige Ungleichung mit $x+y =: u$ und $y =: -v$ und erhalten:

$$(1+|u|)^{-s} \leq (1+|u+v|)^{-s}(1+|v|)^{-s} \,,$$

$$(1+|u+v|)^s \leq (1+|u|)^s(1+|v|)^{-s} = (1+|u|)^s(1+|v|)^{|s|} \,.$$ □

K.3 Pseudodifferential-Operatoren

Die Geschichte der Pseudodifferential-Operatoren (ΨDO) ist historisch gesehen zunächst eine Geschichte langer und mühsamer Untersuchungen von singuären Integral-Operatoren (SIO). Da die üblichen Green-Funktionen der Physik gerade SIO sind, ist dieses Thema auch für Physiker hoch bedeutsam. Die Arbeiten an SIO begannen im Jahr 1909 durch Lebesgue. Die nächsten wichtigen Schritte waren die Einführung des *Index* von Integral-Fredholm-Operatoren durch Fritz Noether (1921) und des *Symbols* von SIO durch Solomon Mikhlin (1936). Anfang der 1950'er Jahre arbeitete Antoni Zygmund mit seinem Studenten Alberto Calderón an einer Verallgemeinerung der bislang untersuchten SIO, den später so benannten Calderón-Zygmund-Operatoren. Und erst 1965 wurden die tieferen Zusammenhänge zwischen den PDO und den SIO durch Kohn und Nirenberg erkannt, die dann zusammen mit Hörmander u.a. die heutige Theorie der ΨDO begründet und ausgebaut haben. Seither stellen die ΨDO die Grundlage zur Behandlung linearer, partieller Differential- und Integral-Operatoren dar.

Eine weitere Verallgemeinerung der ΨDO sind die Fourierintegral-Operatoren (FIO), die insbesondere bei der Behandlung von hyperbolischen PDO zur Anwendung kommen.

Sei $P(x,D) := \sum_{|\alpha|\leq d} a_\alpha(x)\, D_x^\alpha$ ein linearer PDO der Ordnung d auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, dann kann man mittels der Fouriertransformation zur folgenden Darstellung von $P(x,D)$ gelangen:

$$
\begin{aligned}
(P(x,D)f)(x) &= \sum_{|\alpha|\leq d} a_\alpha(x)\, D_x^\alpha f(x) \\
&= \sum_{|\alpha|\leq d} a_\alpha(x)\, (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi}\, \xi^\alpha \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi \\
&= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi}\, \big(\sum_{|\alpha|\leq d} a_\alpha(x)\, \xi^\alpha\big)\, \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi \\
&= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi}\, \sigma(x,\xi) \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi\ , \qquad \text{(K.3.1)}
\end{aligned}
$$

$$\sigma(x,\xi) := \sum_{|\alpha|\leq d} a_\alpha(x)\, \xi^\alpha\ . \qquad \text{(K.3.2)}$$

Man nennt $\sigma(x,\xi)$ das *Symbol* des Operators $P(x,D)$. Dieses Symbol eines linearen PDO ist ein Polynom des Grades d in ξ. Der in ξ^d homogene Teil des Symbols, also $\sum_{|\alpha|=d} a_\alpha(x)\, \xi^\alpha$, heißt *Hauptteil* des Symbols.

Die Verallgemeinerung zu Pseudodifferential-Operatoren (ΨDO) wird dadurch vorgenommen, daß man in K.3.7 jetzt auch gewisse Klassen nichtpolynomialer Symbole $\sigma(x,\xi)$ zuläßt. Es gibt eine ganze Reihe verschiedener solcher Symbolklassen - siehe etwa Taylor (1996), S. 1 ff. Allen diesen Symbolklassen ist gemeinsam, daß $\sigma(x,\xi)$ in ξ für $|\xi| \to \infty$ polynomial anwächst oder abfällt und daß die Variation in x schwach genug ist, um eine Trennung der Fouriertransformierten in 'Amplitude' $\sigma(x,\xi)$ und 'Phase' $e^{ix\xi}$ zu rechtfertigen. Für unsere Zwecke genügt die einfache Symbolklasse S^d:

Definition K.3.1 *$S^d \equiv S^d(K)$ ist die Menge aller Symbole $\sigma(x,\xi)$, so daß σ glatt ist in (x,ξ), σ in x einen kompakten Träger $K \subset \mathbb{R}^n$ hat, also $\sigma : K \times \mathbb{R}^n \to C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \times C^\infty(\mathbb{R}^n)$, und σ in ξ folgende Wachstums- oder Abfall-Bedingung erfüllt:*

$$|D_x^\alpha D_\xi^\beta \sigma(x,\xi)| \leq C_{\alpha,\beta}(1+|\xi|)^{d-|\beta|}\ . \qquad \text{(K.3.3)}$$

$S^{-\infty}$ bezeichne die Menge aller Symbole $\sigma(x,\xi)$, die in ξ schneller als jedes Polynom abfallen, d.h. die bzgl. ξ aus $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ sind.

Ψ^d bezeichne dann der Raum der ΨDO P_σ mit $\sigma \in S^d$:

$$P_\sigma f(x) := (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi}\, \sigma(x,\xi) \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi \;. \tag{K.3.4}$$

Wesentlich für die hier verwendete Symbolklasse ist die Beschränkung auf einen kompakten Träger in der ersten Variablen des Symbols. Man kann auch Symbolklassen auf dem kompletten $\mathbb{R}^n$ definieren, benötigt dann aber Zusatzbedingungen für den Abfall des Symbols in der ersten Variablen im Unendlichen - siehe Shubin (2001).

Da $\tilde{f}(\xi) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ und $\sigma(x,\xi) \in S^d$ höchstens polynomial wächst existiert das Integral K.3.4 und $P_\sigma : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \to C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Weiter unten werden wir die Definition von P_σ auf H_s ausdehnen.

Weiter folgt unmittelbar $d_1 < d_2 \;\Rightarrow\; S^{d_1} \subset S^{d_2}$.

Ein Beispiel für ein Symbol aus $S^{-\infty}$ ist $\sigma(x,\xi) := e^{-|\xi|^2}$.

Das Symbol eines linearen PDO der Ordnung d, also $\sigma(x,\xi) = \sum_{\alpha,|\alpha|\le d} a_\alpha(x)\, \xi^\alpha$ gehört zu S^d.

Lemma K.3.2 *a. $\sigma(x,\xi) \in S^d$, dann ist $D_x^\gamma D_\xi^\delta \sigma(x,\xi) \in S^{d-|\delta|}$.*

b. $\sigma_1(x,\xi) \in S^{d_1}$ und $\sigma_2(x,\xi) \in S^{d_2}$, dann ist $\sigma_1(x,\xi) \cdot \sigma_2(x,\xi) \in S^{d_1+d_2}$.

Beweis. a.

$$\begin{aligned} |D_x^\alpha D_\xi^\beta (D_x^\gamma D_\xi^\delta \sigma(x,\xi))| &= |D_x^{\alpha+\gamma} D_\xi^{\beta+\delta} \sigma(x,\xi)| \\ &\le C_{\alpha+\gamma,\beta+\delta}(1+|\xi|)^{d-|\beta+\delta|} \le C_{\alpha,\beta}(1+|\xi|)^{(d-|\delta|)-|\beta|} \;. \end{aligned}$$

b.

$$\begin{aligned} |D_x^\alpha D_\xi^\beta (\sigma_1(x,\xi)\sigma_2(x,\xi))| &= |D_x^\alpha \sum_{\delta\le\beta} \binom{\beta}{\delta} (D_\xi^\delta \sigma_1(x,\xi))\, (D_\xi^{\beta-\delta}\sigma_2(x,\xi))| \\ &= |\sum_{\gamma\le\alpha} \binom{\alpha}{\gamma} \sum_{\delta\le\beta} \binom{\beta}{\delta} (D_x^\gamma D_\xi^\delta \sigma_1(x,\xi))\, (D_x^{\alpha-\gamma} D_\xi^{\beta-\delta}\sigma_2(x,\xi))| \\ &\le \sum_{\gamma\le\alpha} \binom{\alpha}{\gamma} \sum_{\delta\le\beta} \binom{\beta}{\delta} |D_x^\gamma D_\xi^\delta \sigma_1(x,\xi)|\, |D_x^{\alpha-\gamma} D_\xi^{\beta-\delta}\sigma_2(x,\xi)| \\ &\le \sum_{\gamma\le\alpha} \binom{\alpha}{\gamma} \sum_{\delta\le\beta} \binom{\beta}{\delta} C_{\gamma,\delta}(1+|\xi|)^{d_1-|\delta|}\, C_{\alpha-\gamma,\beta-\delta}(1+|\xi|)^{d_2-|\beta-\delta|} \\ &\le C_{\alpha,\beta}(1+|\xi|)^{d_1+d_2-|\beta|} \;. \end{aligned}$$

□

Daß D_x^α eine stetige Abbildung von H_s in $H_{s-|\alpha|}$ ist, wurde ja schon oben (Lemma K.2.5) gezeigt. Diese Aussage soll jetzt für beliebige ΨDO verallgemeinert werden.

Satz K.3.3 *Sei $\sigma \in S^d$, $P_\sigma \in \Psi^d$, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, dann ist $\|P_\sigma f\|_{s-d} \leq C\|f\|_s$ und P_σ läßt sich erweitern zu einer stetigen Abbildung $P_\sigma : H_s \to H_{s-d}$.*

Beweis. Wie alle relevanten Beweise im Zusammenhang mit Sobolev-Räumen und ΨDO besteht auch dieser Beweis aus einer Reihe sorgfältiger Abschätzungen.

1. Sei $q(\zeta,\xi)$ die Fouriertransformierte des Symbols $\sigma(x,\xi) \in S^d$ bzgl. des ersten Arguments, also $q(\zeta,\xi) := \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_K e^{-ix\zeta}\sigma(x,\xi)\,dx$. Dann folgt für die Fouriertransformierte von P_σ:

$$\mathcal{F}(P_\sigma f)(\zeta) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_K e^{-ix\zeta} \int e^{ix\xi}\sigma(x,\xi)\tilde{f}(\xi)\,d\xi\,dx \ .$$

Da $\sigma(x,\xi)$ in x einen kompakten Träger K hat und $\tilde{f}(\xi) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ schnellfallend ist, ist das Integral absolut konvergent, und man kann die Reihenfolge der Integrationen vertauschen:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(P_\sigma f)(\zeta) &= \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{ix\xi}\tilde{f}(\xi) \int\limits_K e^{-ix\zeta}\sigma(x,\xi)\,dx\,d\xi \\ &= \frac{1}{(2\pi)^n} \int \tilde{f}(\xi) \int\limits_K e^{-ix(\zeta-\xi)}\sigma(x,\xi)\,dx\,d\xi \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int q(\zeta-\xi,\xi)\tilde{f}(\xi)\,d\xi \ . \end{aligned} \tag{K.3.5}$$

2. Weiter kann man jetzt $D_\zeta^\alpha D_\xi^\beta q(\zeta,\xi)$ abschätzen. Zunächst folgt unmittelbar aus der Definition von $\sigma(x,\xi) \in S^d$:

$$|D_x^\gamma x^\alpha D_\xi^\beta \sigma(x,\xi)| \leq C_{\alpha,\beta,\gamma}(1+|\xi|)^{d-|\beta|} \ .$$

Mit dem Satz K.1.4 zur Fouriertransformation folgt:

$$\begin{aligned}|\zeta^\gamma D_\zeta^\alpha D_\xi^\beta q(\zeta,\xi)| &= |\zeta^\gamma D_\zeta^\alpha D_\xi^\beta \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int\limits_K e^{-ix\zeta}\sigma(x,\xi)\,dx| \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} |\int\limits_K e^{-ix\zeta} D_x^\gamma (-1)^{|\alpha|} x^\alpha D_\xi^\beta \sigma(x,\xi)\,dx| \\ &\leq C_{\alpha,\beta,\gamma} \cdot \int\limits_K dx \cdot (1+|\xi|)^{d-|\beta|} \ . \end{aligned}$$

Nun ist $(1+|\zeta|)^k$ mit $k \in \mathbb{N}$ ein Polynom in k und daher folgt:

$$(1+|\zeta|)^k |D_\zeta^\alpha D_\xi^\beta q(\zeta,\xi)| = |(1+|\zeta|)^k D_\zeta^\alpha D_\xi^\beta q(\zeta,\xi)|$$

$$\leq C_{\alpha,\beta,k} \cdot (1+|\xi|)^{d-|\beta|} \quad \Rightarrow$$

$$|D_\zeta^\alpha D_\xi^\beta q(\zeta,\xi)| \leq C_{\alpha,\beta,k} \cdot (1+|\zeta|)^{-k}(1+|\xi|)^{d-|\beta|} \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N}\,. \tag{K.3.6}$$

3. Sei $L(\zeta,\xi) := q(\zeta-\xi,\xi)(1+|\xi|)^{-s}(1+|\zeta|)^{s-d}$. Dann kann man $L(\zeta,\xi)$ mit K.3.6 ($\alpha=\beta=0$) folgendermaßen abschätzen:

$$\begin{aligned}|L(\zeta,\xi)| &\leq C_k(1+|\zeta-\xi|)^{-k}(1+|\xi|)^d(1+|\xi|^{-s})(1+|\zeta|)^{s-d}\\ &= C_k(1+|\zeta-\xi|)^{-k}(1+|\xi|)^{d-s}(1+|\zeta|)^{s-d}\,.\end{aligned}$$

Peetres Ungleichung K.2.10 für $x := \zeta$, $y := \xi-\zeta$ lautet

$$(1+|\xi|)^{d-s} \leq (1+|\zeta|)^{d-s}(1+|\xi-\zeta|)^{|d-s|}$$

und damit ergibt sich für $L(\zeta,\xi)$:

$$\begin{aligned}|L(\zeta,\xi)| &\leq C_k(1+|\zeta-\xi|)^{-k}(1+|\zeta|)^{d-s}(1+|\xi-\zeta|)^{|d-s|}(1+|\zeta|)^{s-d}\\ &= C_k(1+|\xi-\zeta|)^{|d-s|-k}\,.\end{aligned}$$

Weil nun $k \in \mathbb{N}$ beliebig groß sein kann, ist $|L(\zeta,\xi)|$ integrabel für alle $k \geq k_0$, d.h. $\int |L(\zeta,\xi)|\,d\zeta < C_1$ und $\int |L(\zeta,\xi)|\,d\xi < C_2$.

4. Im nächsten Schritt soll $|\langle P_\sigma f \mid g\rangle|$ abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned}|\langle P_\sigma f \mid g\rangle|^2 &= |\langle \mathcal{F}P_\sigma f \mid \mathcal{F}g\rangle|^2 = \frac{1}{(2\pi)^{2n}}\Big|\int q^*(\zeta-\xi,\xi)\tilde{f}^*(\xi)\tilde{g}(\zeta)\,d\xi\,d\zeta\Big|^2\\ &= \frac{1}{(2\pi)^{2n}}\Big|\int L^*(\zeta,\xi)\tilde{f}^*(\xi)(1+|\xi|)^s(1+|\zeta|)^{d-s}\tilde{g}(\zeta)\,d\xi\,d\zeta\Big|^2\\ &\leq \frac{1}{(2\pi)^{2n}}\int |L(\zeta,\xi)|^2 \cdot |\tilde{f}^*(\xi)|^2(1+|\xi|)^{2s} \cdot |\tilde{g}(\zeta)|^2(1+|\zeta|)^{2(d-s)}\,d\xi\,d\zeta\\ &\leq \frac{1}{(2\pi)^{2n}}\int |L(\zeta,\xi)| \cdot |\tilde{f}(\xi)|^2(1+|\xi|)^{2s}\,d\xi\,d\zeta\\ &\qquad \cdot \int |L(\zeta,\xi)| \cdot |\tilde{g}(\zeta)|^2(1+|\zeta|)^{2(d-s)}\,d\xi\,d\zeta\\ &\leq \frac{1}{(2\pi)^{2n}}\,C_1\int |\tilde{f}(\xi)|^2(1+|\xi|)^{2s}\,d\xi \cdot C_2\int |\tilde{g}(\zeta)|^2(1+|\zeta|)^{2(d-s)}\,d\zeta\\ &= C_1C_2\|f\|_s^2 \cdot \|g\|_{d-s}^2 \quad \Rightarrow\end{aligned}$$

$$|\langle P_\sigma f \mid g\rangle| \leq C\|f\|_s \cdot \|g\|_{d-s}\,.$$

Aus Lemma K.2.9 c. folgt:

$$\|P_\sigma f\|_{s-d} = \sup_{g\in H_{-s}, g\neq 0} \frac{|\langle P_\sigma f \mid g\rangle|}{\|g\|_{d-s}} \leq \sup_{g\in H_{-s}, g\neq 0} \frac{C\|f\|_s \cdot \|g\|_{d-s}}{\|g\|_{d-s}} = C\|f\|_s \,. \qquad \square$$

Dieser Satz klärt jetzt auch die Eigenschaften von ΨDO der Klasse $\Psi^{-\infty}$, d.h. P_σ mit in ξ schnellfallendem $\sigma(x,\xi) \in S^{-\infty}$. Sei also $d = -\infty$, dann ist $P_\sigma : H_s \to H_{s-d} = H_\infty$ und aus dem Sobolev-Satz (SatzK.2.7) folgt wegen $\infty > k + \frac{n}{2}$ für alle $k \in \mathbb{N}$: $P_\sigma(H_s) \subset C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Operatoren aus $\Psi^{-\infty}$ sind also *glättend*. Darüber hinaus vermitteln $\Psi^{-\infty}$-Operatoren stetige Abbildungen von H_s nach H_t mit beliebigem $s,t \in \mathbb{R}$, denn es gilt ja $P_\sigma : H_s \to H_\infty \subset H_t$ und $P_\sigma : H_t \to H_\infty \subset H_s$.

Lemma K.3.4 *Der wichtige Zusammenhang mit der Funktionalanalysis ergibt sich jetzt sofort mit Hilfe des Satzes von Rellich (Satz K.2.8): $\Psi^{-\infty}$-Operatoren sind kompakte Operatoren in H_s.*

Beweis. sei $P_\sigma \in \Psi^{-\infty}$, dann können wir für $P_\sigma : H_s \to H_s$ auch schreiben

$$H_s \xrightarrow{P_\sigma} H_{s-1} \xrightarrow{\hat{1}} H_s$$

Da $P_\sigma : H_s \to H_{s-1}$ stetig ist und die Einbettung $\hat{1} : H_{s-1} \to H_s$ kompakt ist, ist also auch $P_\sigma \circ \hat{1} : H_s \to H_s$ kompakt, das heißt $\Psi^{-\infty}$-Operatoren sind kompakte Operatoren in H_s. $\square$

Definition K.3.5 *a. Zwei Symbole σ, τ heißen äquivalent über Ω, kurz $\sigma \sim \tau$, wenn $(\sigma - \tau) \in S^{-\infty}(\Omega)$ ist.*

b. sei σ_j mit $j \in \mathbb{N}$ eine Folge von Symbolen $\sigma_j \in S^{d_j}$ mit einer absteigenden Folge $d_j \in \mathbb{R} \to -\infty$ gegeben (häufig wird $d_j = d - j$ gewählt). Dann heißt ein Symbol σ äquivalent zu $\sum_{j=1}^\infty \sigma_j$, kurz $\sigma \sim \sum_{j=1}^\infty \sigma_j$, wenn für alle $k \geq 1$ gilt: $(\sigma - \sum_{j=1}^k \sigma_j) \in S^{d_{k+1}}$. Weil hierdurch das Verhalten der Symbole nur für $|\xi| \to \infty$ festgelegt wird, handelt es sich bei $\sum_{j=1}^\infty \sigma_j$ i.a. um keine konvergente Reihe, sondern nur um eine asymptotische Reihe!

Mit dieser Definition ist festgelegt, wann ein Symbol äquivalent zu einer Symbolreihe ist. Aber gibt es denn überhaupt zu jeder Symbolreihe ein äquivalentes Symbol? Oder anders gefragt, ist die Algebra der Symbole abgeschlossen gegenüber der Reihenbildung? Das folgende Lemma bejaht die Frage mittels eines konstruktiven Beweises.

Lemma K.3.6 *Sei $K \subset \mathbb{R}^n$ eine kompakte Menge und $O \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Menge mit $K \subset O$. Sei σ_j mit $j \in \mathbb{N}$ eine Folge von Symbolen $\sigma_j \in S^{d_j}(K)$ mit einer absteigenden Folge $d_j \in \mathbb{R} \to -\infty$, dann gibt es ein Symbol $\sigma \in S^{d_1}(O)$, so daß $\sigma \sim \sum_{j=1}^\infty \sigma_j$ ist.*

Beweis. sei $\psi(\xi) \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ eine Abschneidefunktion um $\xi = 0$, d.h. $0 \leq \psi(x) \leq 1$, $\psi(\xi) = 0$ für $|\xi| \leq 1$, $\psi(\xi) = 1$ für $|\xi| \geq 2$. Diese Funktion ψ wird benutzt, um den

$\sup_\xi \sigma_j(x,\xi)$ um $\xi = 0$ herauszuschneiden, und zwar für jedes σ_j mit wachsendem j einem größeren Bereich. Dazu wählen wir eine Folge $t_j \in \mathbb{R}$ mit $t_j \to 0$ und die Abschneidenfunktion $\psi(t_j\xi)$. Nun konstruieren wir ein Symbol $\sigma(x,\xi) := \sum_{j=1}^{\infty} \psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi)$. Zunächst sieht man, daß der $\sup_x \sigma(x,\xi) \subset O$ ist. Weiter sieht man, daß wegen der mit j anwachsenden Abschneidefunktion für einen festen Wert von ξ nur endlich viele Summanden zur Reihe von σ beitragen - damit existiert die Summe und ist glatt in (x,ξ). Jetzt gilt für $j > 1$:

$$|\sigma_j(x,\xi)| \le C_j(1+|\xi|)^{d_j} = C_j(1+|\xi|)^{d_1}(1+|\xi|)^{d_j-d_1} \; .$$

Sei nun der feste Wert von ξ so groß gewählt, daß $(1+|\xi|)^{d_j-d_1} \le 2^{-j}$ ist, dann gilt:

$$|\sigma_j(x,\xi)| \le 2^{-j}(1+|\xi|)^{d_1} \; .$$

Nun kann man zu einer Teilfolge von t_j übergehen (wiederum einfach mit t_j bezeichnet), so daß auch

$$|\psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi)| \le 2^{-j}(1+|\xi|)^{d_1} \; .$$

Summieren wir über j, so erhalten wir

$$\sigma(x,\xi) = \sum_{j=1}^{\infty} \psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi) \le C_1'(1+|\xi|)^{d_1} \; ,$$

also ist $\sigma \in S^{d_1}$.
Das gleiche Argument können wir nun auch sukzessiv auf $\sum_{j=k}^{\infty} \psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi)$ für alle $k \ge 2$ anwenden, ggf. nach Übergang zu einer Teilfolge der bisherigen Folge der t_j, und erhalten $\sum_{j=k}^{\infty} \psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi) \in S^{d_k}$, etc.

Nun ist $(\psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi) - \sigma_j(x,\xi)) \in S^{-\infty}$ und damit folgt:

$$\begin{aligned}\sigma(x,\xi) - \sum_{j=1}^{k} \sigma_j(x,\xi) &= \{\sum_{j=1}^{k}(\psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi) - \sigma_j(x,\xi)) + \sum_{j=k+1}^{\infty} \psi(t_j\xi)\sigma_j(x,\xi)\} \\ &\in S^{-\infty} \cup S^{d_{k+1}} = S^{d_{k+1}} \; .\end{aligned}$$

Damit ist $\sigma \in S^{d_1}$ äquivalent zu $\sum_{j=1}^{\infty} \sigma_j$. □

Oben wurden die Sobolev-Räume $H_s(\mathbb{R}^n)$ über $\mathbb{R}^n$ als Abschluß von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, bzw. $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, in der $\|\cdot\|_s$-Norm definiert. Im folgenden soll der betrachtete Definitionsbereich der Funktionenräume auf eine kompakte Menge $K \subset \mathbb{R}^n$, bzw. eine offene Obermenge O mit $K \subset O \subset \bar{O} \subset \mathbb{R}^n$, eingeschränkt werden. Der Hintergrund für diese Konstruktion ist, daß man auf $\bar{O}$ eine Plateau-Funktion definieren möchte, die auf K identisch 1 ist und dann bis zum Rand von $\bar{O}$ als C^∞-Funktion auf 0 abfällt.

Wenn man stattdessen die Theorie der ΨDO auf dem kompletten $\mathbb{R}^n$ definieren möchte benötigt man Zusatzbedingungen für den Abfall der Funktionen im Unendlichen, um die Konvergenz aller auftretenden Integrale zu gewährleisten - siehe Shubin (2001).

Definition K.3.7 *Sei $K \subset \mathbb{R}^n$ eine kompakte Menge und O eine offene Menge mit $K \subset O \subset \bar{O} \subset \mathbb{R}^n$.*

a. $H_s(K)$ ist der Abschluß von $C_0^\infty(K)$, in der $\|\cdot\|_s$-Norm.

b. $f \in H_s(K)$ heißt glatt auf einer offenen Teilmenge $\Omega \subset K$, wenn für alle $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$ auch $\phi f \in C_0^\infty(\Omega)$ ist.

c. Ein Operator P heißt lokal, wenn $f = 0 \;\Rightarrow\; Pf = 0$, d.h. wenn P den Träger $\operatorname{supp} f$ nicht vergrößert.

c. Ein Operator P heißt pseudolokal, wenn $f \in C^\infty \;\Rightarrow\; Pf \in C^\infty$, d.h. wenn P den singulären Träger sing-supp f, d.h. jenen Bereich, in dem f nicht C^∞ ist, nicht vergrößert.

Zu diesen Definitionen einige Bemerkungen. Für die Funktion ϕ werden wir im folgenden häufig mit $\phi(x) \in C_0^\infty(\bar{O})$ eine sogenannte Plateau-Funktion auf $\bar{O}$ wählen, d.h. $\phi(x) = 1$ auf K, die gerade die gewünschte Einschränkung vermittelt. Sei nun $\tau(x,\xi) := \phi(x)$ ein Symbol, dann ist $\tau \in S^0$ und $P_\tau \in \Psi^0$. Daraus folgt

$$\begin{aligned} P_\tau f(x) = P_\phi f(x) &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi}\, \tau(x,\xi) \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi \\ &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int e^{ix\xi}\, \phi(x) \tilde{f}(\xi)\, d^n\xi = \phi(x) \cdot f(x)\ . \end{aligned}$$

Also ist der Operator P_ϕ, die Multiplikation mit $\phi(x)$, ein ΨDO der Ordnung 0 mit $P_\phi : H_s \to H_s$. Daher eignet sich die Multiplikation mit $\phi(x) \in C_0^\infty(\bar{O})$ zur Einschränkung von Funktionen auf $H_s(K)$.

Bevor wir uns der Frage der Pseudolokalität von ΨDO zuwenden können, benötigen wir eine Aussage über die Multiplikation von ΨDO.

Die Menge der PDO ist gegenüber wichtigen algebraischen Operationen wie etwa der Bildung von Inversen oder von Wurzeln nicht abgeschlossen. Der Kalkül der ΨDO wird gerade dadurch so bedeutsam, daß man in der Menge der ΨDO diese algebraischen Operationen vornehmen kann - allerdings nur mod $\Psi^{-\infty}$-Operatoren. Der folgende zentrale Satz zeigt, daß die Operationen der Multiplikation und Adjungation nicht aus der Menge der ΨDO herausführt.

Satz K.3.8 *Sei $K \subset \mathbb{R}^n$ eine kompakte Menge und O eine offene Menge mit mit $K \subset O \subset \bar{O} \subset \mathbb{R}^n$. Seien $P_{\sigma_1} \in \Psi^{d_1}(K)$, $P_{\sigma_2} \in \Psi^{d_2}(K)$ und $f, g \in C_0^\infty(K)$, dann folgt:*

a. es gibt einen ΨDO $R_{\sigma_3} \in \Psi^{d_1+d_2}$ mit $R_{\sigma_3} f = P_{\sigma_1} P_{\sigma_2} f$ und

$$\sigma_3(x,\xi) \sim \sum_\alpha \frac{1}{\alpha!} (\partial_\xi^\alpha \sigma_1(x,\xi))\, (D_x^\alpha \sigma_2(x,\xi))\ . \tag{K.3.7}$$

b. es gibt einen ΨDO $P_{\sigma_3}^\dagger \in \Psi^{d_1}(O)$ mit $\langle P_{\sigma_1} f \mid g \rangle_{L_2} = \langle f \mid P_{\sigma_3}^\dagger g \rangle_{L_2}$ und

$$\sigma_3(x,\xi) \sim \sum_\alpha \frac{1}{\alpha!} \partial_\xi^\alpha D_x^\alpha \sigma_1^*(x,\xi)\ .$$

Beweis. Die Beweise sind nicht schwierig, aber etwas technisch, deshalb sei hier auf die Literatur verwiesen: etwa Gilkey (1995), S. 17 ff., Alinhac u. Gérard (2007), S. 43 ff. □

Partielle Differentialoperatoren sind offensichtlich lokale Operatoren, ΨDO sind i.A. nicht lokal, da sie ja über die Fouriertransformation definiert sind und diese den Träger vergrößert. Man kann für ΨDO aber eine schwächere Eigenschaft als die Lokalität beweisen, nämlich die Pseudolokalität.

Lemma K.3.9 *ΨDO sind pseudolokal.*

Beweis. Sei $P_\sigma \in \Psi^d(K)$ und sei $f \in H_s(K)$ glatt auf jeder offenen Teilmenge $\Omega \subset K$, sei $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$, dann gilt es zu zeigen, daß auch $P_\sigma f$ glatt auf Ω ist, d.h. daß $\psi P_\sigma f \in C_0^\infty(\Omega)$. Wir wählen eine Plateau-Funktion $\phi \in C_0^\infty(\bar{O})$, die auf supp ψ identisch 1 ist.

$$\psi P_\sigma f = \psi P_\sigma \phi f + \psi P_\sigma (1-\phi) f \ .$$

Man betrachte zunächst den ersten Term auf der rechten Seite: f glatt auf Ω bedeutet $\phi f \in C_0^\infty(\Omega)$, daraus folgt mit der Definition von P_σ, daß $P_\sigma \phi f \in C_0^\infty(\Omega)$ und daraus folgt, daß $\psi P_\sigma \phi f \in C_0^\infty(\Omega)$.

Für den zweiten Term untersucht man das Symbol von $\psi P_\sigma(1-\phi)$. Sei $Q_q := P_\sigma(1-\phi(x))$, dann ist Q_q das Produkt zweier ΨDO, nämlich $P_\sigma \in \Psi^d(K)$ und $(1-\phi(x)) \in \Psi^d(K)$. Für das Symbol $q(x,\xi)$ folgt also:

$$q(x,\xi) \sim \sum_{|\alpha| \le d} d_\xi^\alpha \sigma(x,\xi) D_x^\alpha (1-\phi(x)) = 0 \ , \ x \in \operatorname{supp} \psi \ ,$$

da ja $\phi(x) = 1$ auf supp ψ. Für das Symbol des Operators $R_r := \psi(x) Q_q = \psi P_\sigma(1-\phi)$ gilt dann

$$r(x,\xi) \sim \sum_{|\alpha| \le d} d_\xi^\alpha \psi(x) D_x^\alpha q(x,\xi) \sim 0 \ , x \in \Omega \ .$$

Also ist $R_r \Psi^{-\infty}(\Omega)$ und damit $R_r f \in C_0^\infty(\Omega)$ und damit $\psi P_\sigma f \in C_0^\infty(\Omega)$. □

K.4 Elliptische Pseudodifferential-Operatoren

Definition K.4.1 *Sei $K \subset \mathbb{R}^n$ eine kompakte Menge und O eine offene Menge mit $K \subset O \subset \bar{O} \subset \mathbb{R}^n$.*

Das Symbol $\sigma \in S^d(K)$ heißt elliptisch, wenn $|\sigma(x,\xi)|^{-1} \le C_1(1+|\xi|)^{-d}$ für alle $x \in O$ und $|\xi| \ge C_0$.

Der ΨDO $P_\sigma \in \Psi^d(K)$ heißt elliptisch, wenn sein Symbol $\sigma(x,\xi) \in S^d(K)$ elliptisch ist.

Lemma K.4.2 *Sei $\phi(x) \in C_0^\infty(\bar{O})$ eine sogenannte Plateau-Funktion auf $\bar{O}$, d.h. $\phi(x) = 1$ auf K. Das Symbol $\sigma \in S^d(K)$ ist genau dann ein elliptisches Symbol, wenn es ein Symbol $\tau(x,\xi) \in S^{-d}(K)$ gibt mit*

a. $\phi(\sigma\tau - 1) \in S^{-\infty}(K)$ *und* $\phi(\tau\sigma - 1) \in S^{-\infty}(K)$, *oder*

b. $\phi(\sigma\tau - 1) \in S^{-1}(K)$ *und* $\phi(\tau\sigma - 1) \in S^{-1}(K)$.

c. Seien $\sigma_d \in S^d(K)$ und $\sigma_{d-1} \in S^{d-1}(K)$ zwei Symbole, dann ist $\sigma_d + \sigma_{d-1}$ genau dann ein elliptisches Symbol, wenn σ_d ein elliptisches Symbol ist und die Addition weiterer Terme niedrigerer Ordnung, d.h. σ_{d-i} mit $i > 1$ ändert nichts an der Elliptizität.

Beweis. 1. sei das Symbol $\sigma \in S^d(K)$ elliptisch und sei $\psi(\xi) \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ eine Regularisierungsfunktion um $\xi = 0$, d.h. $\psi(\xi) = 0$ für $|\xi| < C < C_0$ und $\psi(\xi) = 1$ für $|\xi| \geq C_0$. Da $\sigma \in S^d(K)$ elliptisch ist, gilt $\sigma(x,\xi)^{-1} \in S^{-d}(K)$ für alle $x \in O$ und $|\xi| \geq C_0$. Damit ist auch $\tau(x,\xi) := \psi(\xi)\phi(x)\sigma^{-1}(x,\xi) \in S^{-d}(K)$ und es gilt

$$\phi(x)(\sigma(x,\xi)\tau(x,\xi) - 1) \in S^{-\infty}(K) \quad \text{und} \quad \phi(x)(\sigma(x,\xi)\tau(x,\xi) - 1) \in S^{-\infty}(K)\,.$$

Also gilt a.

2. da $S^{-\infty}(K) \subset S^{-1}(K)$ folgt aus a. sofort b.

3. jetzt gelte b., d.h. $\phi(x)(\sigma(x,\xi)\tau(x,\xi) - 1) \in S^{-1}(K)$, dann folgt $|\sigma(x,\xi)\tau(x,\xi) - 1| \leq C_2(1 + |\xi|)^{-1}$ für $x \in O$.

Wir wählen ξ so groß, daß $C_3 := C_2(1 + |\xi|)^{-1} < 1$ ist, dann konvergiert die Neumann-Reihe gleichmäßig:

$$|\sum_{i=0}^{\infty}(1 - \sigma\tau)^i| = |\frac{1}{1 - (1 - \sigma\tau)}| = |\frac{1}{\sigma\tau}| \leq \sum_{i=0}^{\infty} C_3^i = \frac{1}{1 - C_3}\,,$$

und es folgt

$$|\sigma^{-1}| \leq |\tau| \cdot |(\sigma\tau)^{-1}| \leq C_3(1 + |\xi|)^{-d} \cdot \frac{1}{1 - C_3} =: C_4(1 + |\xi|)^{-d}\,.$$

Also ist das Symbol $\sigma \in S^d(K)$ elliptisch.

4. mit b. folgt c., denn

$$\phi((\sigma_d + \sigma_{d-1})\tau - 1) = \phi(\sigma_d\tau - 1) + \phi(\sigma_{d-1}\tau) \in S^{-1}(K)\,,$$

da $\phi(\sigma_d\tau - 1) \in S^{-1}(K)$ und $\phi(\sigma_{d-1}\tau) \sim \sigma_{-1} \in S^{-1}(K)$.

Die Addition von Termen niedrigerer Ordnung ($i > 1$) führt zu $\phi(\sigma_{d-i}\tau) \sim \sigma_{-i} \in S^{-i}(K) \subset S^{-1}(K)$. □

Der folgende Satz weist jetzt konstruktiv die Existenz einer Parametrix, d.h. einer Pseudoinversen, eines elliptischen ΨDO nach. Weil diese Inversion nur $\mod \Psi^{-\infty}$ bestimmt ist und weil $\Psi^{-\infty}$-ΨDO kompakte Operatoren sind (Lemma K.3.4), daher sind die Parametrix ebenso wie der elliptischen ΨDO Fredholm-Operatoren.

Damit ist der Zusammenhang zwischen elliptischen ΨDO auf kompakten Teilmengen des $\mathbb{R}^n$ und der Funktionalanalysis der Fredholm-Operatoren hergestellt!

Satz K.4.3 *Sei $\phi(x) \in C_0^\infty(\bar{O})$ eine sogenannte Plateau-Funktion auf $\bar{O}$, d.h. $\phi(x) = 1$ auf K. Sei $P_\sigma \in \Psi^d(K)$ ein elliptischer ΨDO auf K, dann folgt:*

es gibt einen ΨDO $P_\tau \in \Psi^{-d}(K)$ mit $\phi(x)(P_\sigma P_\tau - 1) \in \Psi^{-\infty}(K)$ und $\phi(x)(P_\tau P_\sigma - 1) \in \Psi^{-\infty}(K)$.

Beweis. Wir führen den Existenzbeweis für eine Rechts-Parametrix (eine rechtsmuliplikative Pseudoinverse) P_τ konstruktiv. Dazu nehmen wir an, daß es eine Symbolreihe $\sum_{j=1}^\infty \tau_j$ gebe mit $\tau_j \in S^{-d-j+1}$. Mit Lemma K.3.6 folgt dann die Existenz eines Symbols $\tau \in S^{-d}$ mit $\tau \sim \sum_{j=1}^\infty \tau_j$. Sei jetzt $P_\omega := P_\sigma \cdot P_\tau$, dann folgt für das Symbol $\omega \in S^0$ mit K.3.7:

$$\omega \sim \sum_\alpha \frac{1}{\alpha!}(\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi))\,(D_x^\alpha \tau(x,\xi)) \sim \sum_\alpha \sum_{j=1}^\infty \frac{1}{\alpha!}(\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi))\,(D_x^\alpha \tau_j(x,\xi)) \;.$$

Jetzt sollen die τ_j rekursiv so bestimmt werden, daß $P_\omega = P_\sigma \cdot P_\tau \sim 1$ auf K ist. Die $1 \in S^0$, der Faktor $(\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi)) \in S^{d-|\alpha|}$, der Faktor $(D_x^\alpha \tau_j(x,\xi)) \in S^{-d-j+1}$ und das Produkt ist $\in S^{-|\alpha|-j+1}$. Daher schreiben wir die obige Summe für ω um in:

$$\omega \sim \sum_\alpha \sum_{j=1}^\infty \frac{1}{\alpha!}(\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi))\,(D_x^\alpha \tau_j(x,\xi)) = \sum_{\substack{k=1\\|\alpha|+j=k}}^\infty \frac{1}{\alpha!}(\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi))\,(D_x^\alpha \tau_j(x,\xi))$$

$$\sim \begin{cases} 1 & \text{für } k = 1 \\ 0 & \text{für } k > 1 \end{cases} \;.$$

Für $k = 1$ ist nur $j = 1$ und $|\alpha| = 0$ möglich und daraus folgt: $\sigma(x,\xi)\tau_1(x,\xi) = 1$, also $\tau_1(x,\xi) = \sigma^{-1}(x,\xi)$.

Für $k > 1$ folgt

$$0 = \sum_{\substack{|\alpha|,j\le k\\|\alpha|+,j=k}}^\infty \frac{1}{\alpha!}(\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi))\,(D_x^\alpha \tau_j(x,\xi))$$

$$= \sum_{\substack{|\alpha|,j<k\\|\alpha|+,j=k}}^\infty \frac{1}{\alpha!}(\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi))\,(D_x^\alpha \tau_j(x,\xi)) + \sigma(x,\xi)\tau_k(x,\xi) \quad \Rightarrow$$

$$\tau_k(x,\xi) = -\sigma^{-1}(x,\xi) \cdot \sum_{\substack{|\alpha|,j<k \\ |\alpha|+,j=k}}^{\infty} \frac{1}{\alpha!} (\partial_\xi^\alpha \sigma(x,\xi)) \, (D_x^\alpha \tau_j(x,\xi)) \; .$$

Nach Konstruktion ist $\tau \in S^{-d}$, also $P_\tau \in \Psi^{-d}(K)$ eine Rechtsparametrix.

Sei nun Q_τ eine Linksparametrix, also $Q_\tau P_\sigma \sim \hat{1}$, dann folgt

$$\begin{aligned} P_\tau - Q_\tau &= P_\tau - Q_\tau P_\sigma P_\tau + Q_\tau P_\sigma P_\tau - Q_\tau \\ &= (\hat{1} - Q_\tau P_\sigma) P_\tau - Q_\tau (\hat{1} - P_\sigma P_\tau) \sim \hat{0} \; , \end{aligned}$$

also können wir $\mod \Psi^{-\infty}(K)$ die Rechtsparametrix auch als Linksparametrix verwenden. □

Wir hatten oben bewiesen, daß ΨDO pseudolokal sind, d.h. f glatt auf Ω impliziert $P_\sigma f$ glatt auf Ω. Im Fall von elliptischen ΨDO kann man auch die Umkehrung beweisen. Diese Eigenschaft heißt Hypoelliptizität.

Lemma K.4.4 *Elliptische ΨDO sind hypoelliptisch, d.h. $P_\sigma f$ glatt auf jeder offenen Teilmenge $\Omega \subset K$ impliziert f glatt auf Ω.*

Beweis. Sei $f \in H_s(K)$, $P_\sigma \in \Psi^d(K)$, $P_\tau \in \Psi^{-d}(K)$ eine Parametrix zu P_σ, $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$ und $\phi P_\sigma f \in C_0^\infty(\Omega)$, dann ist

$$\phi f = \phi(1 - P_\tau P_\sigma) f + \phi P_\tau P_\sigma f \; .$$

$\phi(1 - P_\tau P_\sigma) \sim 0$ und daher $\phi(1 - P_\tau P_\sigma) f \in C_0^\infty(\Omega)$. Weiter ist nach Voraussetzung $\phi P_\sigma f \in C_0^\infty(\Omega)$, und da P_τ als ΨDO pseudolokal ist, folgt also: $\phi P_\tau P_\sigma f \in C_0^\infty(\Omega)$, und damit $\phi f \in C_0^\infty(\Omega)$. □

Nachdem wir die Existenz einer Parametrix für elliptische ΨDO nachgewiesen haben und jetzt wissen, daß elliptische ΨDO $P_\sigma \in \Psi^d$ mit $P_\sigma : H_s \to H_{s-d}$ Fredholm-Operatoren sind, stellt sich noch die Frage, ob der Index von P_σ eventuell von der Ordnung s des Sobolev-Raums H_s abhängt?

Lemma K.4.5 *Sei $P_\sigma \in \Psi^d$ mit $P_\sigma : H_s \to H_{s-d}$ und N_{P_σ} der Kern von P_σ,*

a. dann ist $N_{P_\sigma} \subset C^\infty$ und damit unabhängig von s und damit ist auch index_{P_σ} unabhängig von s.

b. dann ist der index_{P_σ} nur vom Hauptwert von P_σ, d.h. dem Term der Ordnung d, abhängig.

Beweis. a. Sei $f \in N_{P_\sigma}$, d.h. $P_\sigma f = 0$, dann ist $P_\sigma f$ glatt und wegen der Hypoelliptizität ist auch f glatt, also hängt N_{P_σ} nicht von s ab. Das gleich gilt auch für den zu P_σ adjungierten Operator $P_\sigma^\dagger$, und folglich ist index_{P_σ} unabhängig von s.

b. Oben hatten wir gesehen, daß die Elliptizität eines elliptischen ΨDO $P_\sigma \in \Psi^d$ nur vom Hauptwert des Symbols σ, d.h. dem Term der Ordnung d abhängt. Bei der Untersuchung von Fredholm-Operatoren hatten wir eine Homotopie-Invarianz des Index von Fredholm-Operatoren gefunden (Satz J.5.10), d.h. daß der $\mathrm{index}_{P_\sigma}$ bei einer stetigen Änderung eines Parameters unverändert bleibt. Wenn wir nun $P_\sigma(t) \in \Psi^d$, $0 \le t \le 1$, in der Form $P_\sigma(t) := P_{\sigma_H} + tP_{\sigma_R}$ mit $P_{\sigma_H} \in \Psi^d$ und $P_{\sigma_R} \in \Psi^{d-i}$, $i{\geq}1$, schreiben, dann folgt aus der Homotopie-Invarianz von $P_\sigma(t)$, daß der Index von $P_\sigma(t)$ nur vom Hauptwert P_{σ_H} abhängt. □

Den Abschluß dieser Betrachtungen möge der Beweis einer Ungleichung von Gårding bilden, die im Zusammenhang mit der Lösung des Dirichlett-Problems bei elliptischen ΨDO von zentraler Bedeutung ist.

Lemma K.4.6 (Gårdingsche Ungleichung) *Seien $f \in C_0^\infty(K)$ und $P_\sigma \in \Psi^d(K)$ ein elliptischer ΨDO auf K dann gilt:*

a. $\|f\|_d \le C(\|f\|_0 + \|P_\sigma f\|_0)$,

b. für $d \geq 0$ ist $\|f\|_0 + \|P_\sigma f\|_0$ eine zu $\|f\|_d$ äquivalente Norm in $H_d(K)$.

Beweis. a. sei $\phi(x) \in C_0^\infty(\bar{O})$ wieder eine Plateau-Funktion auf $\bar{O}$, d.h. $\phi(x) = 1$ auf $K \subset O$, und sei $P_\sigma \in \Psi^d(K)$ ein elliptischer ΨDO auf K, dann gilt

$$\begin{aligned}\|f\|_d &= \|\phi f\|_d = \|\phi(1 - P_\tau P_\sigma)f + \phi P_\tau P_\sigma f\|_d \\ &\le \|\phi(1 - P_\tau P_\sigma)f\|_d + \|\phi P_\tau P_\sigma f\|_d \,.\end{aligned}$$

Für den ersten Summanden auf der rechten Seite gilt zunächst einmal $\|\cdot\|_d \le \|\cdot\|_\infty$. Da nun $\phi(x)(P_\tau P_\sigma - 1) \in \Psi^{-\infty}(K)$ ist, folgt mit Satz K.3.3 mit $s = 0$, $d = \infty$:

$$\|\phi(x)(P_\tau P_\sigma - 1)f\|_d \le \|\phi(x)(P_\tau P_\sigma - 1)f\|_\infty \le C_1 \|f\|_0 \,.$$

Da $\phi P_\tau \in \Psi^{-d}(K)$ ist, folgt für den zweiten Summanden $\|\phi P_\tau P_\sigma f\|_d \le C_2 \|P_\sigma f\|_0$ und damit

$$\|f\|_d \le C_1 \|f\|_0 + C_2 \|P_\sigma f\|_0 \le C(\|f\|_0 + \|P_\sigma f\|_0) \,.$$

b. wenn $P_\sigma \in \Psi^d(K)$ ein elliptischer ΨDO auf K mit $d \geq 0$ ist, dann gilt $\|f\|_0 \le \|f\|_d$ und $\|P_\sigma f\|_0 \le C_3 \|f\|_d$, und mit a. folgt

$$\|f\|_d \le C(\|f\|_0 + \|P_\sigma f\|_0) \le C_4 \|f\|_d \,,$$

also sind $\|f\|_d$ und $\|f\|_0 + \|P_\sigma f\|_0$ äquivalente Normen. □

K.5 Literatur zu Pseudodifferential-Operatoren

- Gilkey (1995), Invariance Theory, the Heat Equation, and the Atiyah-Singer Index Theorem,
- Alinhac u. Gérard (2007), Pseudo-differential Operators and the Nash-Moser Theorem,
- Wong (1999), Pseudo-Differential Operators,
- Shubin (2001), Pseudodifferential Operators and Spectral Theory,
- Voigt u. Wloka (1975), Hilberträume und elliptische Differentialoperatoren,
- Dobrowolski (2006), Angewandte Funktionalanalysis,
- Großmann (1972), Funktionalanlysis I u. II,
- Werner (2005), Funktionalanalysis,
- Fischer u. Kaul (1998), Mathematik für Physiker, Band 2.

L Wärmekern-Entwicklung und Indextheorem

L.1 Sir Michael Atiyah (*1929)

Atiyah ist einer der einflußreichsten Mathematiker des 20. Jh. und besonders interessiert am Dialog zwischen der Mathematik und der theoretischen Physik. Siehe dazu etwa den neueren Artikel von Atiyah mit Dijkgraaf und Hitchin 'Geometry and Physics': Atiyah u. a. (2010).

Abbildung L.1: M. Atiyah
G. Greuel (2007), CC-BY-SA-2.0 de
(Math. Inst. Oberwolfach)
[http://de.wikipedia.org/wiki/
Michael_Francis_Atiyah]

Atiyah wurde in London geboren, verbrachte jedoch seine Schulzeit in Khartoum in Sudan und in Kairo in Ägypten. Zum Studium der Mathematik kehrte er nach England zurück und wurde bei Hodge in Cambridge promoviert mit dem Thema: *Some Applications of Topological Methods in Algebraic Geometry*. Er heiratete 1955 Lily Brown und hat mit ihr drei Söhne. Es folgten Aufenthalte am 'Institute for Advanced Study' in Princeton, dann erneut an der 'Cambridge University' und schließlich eine Professur an der 'University of Oxford'. Atiyah engagierte sich auch gesellschaftspolitisch in der 'Pugwash Conferences on Science and World Affairs'.

Seine wichtigsten mathematischen Beiträge sind das *Atiyah–Bott Fixpunkt-Theorem*, das *Atiyah-Singer Index-Theorem* (das uns hier interessieren soll), die *topologische K-Theorie* zusammen mit Friedrich Hirzebruch, *hyperbolische Differential-Gleichungen* zusammen mit Lars Gårding , *Yang-Mills Theorien* zusammen mit Jones, *M-Theorie* und *topologische Quantenfeld-Theorien* zusammen mit Witten, und, und, und ...

Atiyah selbst nennt als die Mathematiker, die ihn am meisten beeinflußt haben: Riemann, Hamilton, ganz besonders Weyl, und in der Gegenwart Penrose, Hörmander, Connes und Bismut. Atiyah erhielt zahlreiche Preise, darunter 1966 die Fields-Medaille und 2004 zusammen mit Singer den Abel-Preis. [Quelle: Wikipedia-Atiyah (2010)].

L.2 Wärmekern-Entwicklung

Satz L.2.1 *Sei $\hat{A}$ ein elliptischer, nichtnegativer Differential-Operator der Ordnung d in einer n-dimensionalen kompakten Mannigfaltigkeit. Um die folgenden Überlegungen* *möglichst einfach zu halten, nehmen wir hier an, daß $\hat{A}$ keine Nullmoden habe, daß also der Eigenwert 0 im Spektrum nicht vorkommen möge (ggf. gehen wir dabei von $\hat{A}$ über zu $\hat{A}_+ := \hat{A} - \sum_i \mid 0, i\rangle\langle 0, i \mid$), und daß keine Randbedingungen vorliegen mögen, dann gilt für $t \to 0_+$ die folgende Wärmekern-Entwicklung:*

$$K(x,x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}}\, b_k(x)\ , \tag{L.2.1}$$

$$K(t) := Sp(K(x,x,t)) = \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}}\, B_k \quad mit\ B_k := \int dx\, b_k(x)\ . \tag{L.2.2}$$

Die Koeffizienten B_k heißen Wärmekern- oder Seeley-Koeffizienten, und tauchen in der Literatur auch unter den folgenden Namen auf: Minakshisundaram-Pleijel-Koeffizienten, Hadamard-Koeffizienten, Schwinger-DeWitt-Koeffizienten, Seeley-DeWitt-Koeffizienten, Seeley-Gilkey-Koeffizienten.

Beweis. Für den Beweis orientieren wir uns an Gilkey (1995), Elizalde u. a. (1994), S.285 ff., Kirsten (2002), S.20 ff. Wir wollen uns zunächst eine Näherungslösung für die Resolvente $\hat{R}(\lambda)$ von $\hat{A}$ verschaffen. Dazu wählen wir den Weg der Fouriertransformation im Rahmen der elliptischen Pseudodifferential-Operatoren. Anschließend folgt mit Hilfe von 6.6.7, bzw. 6.6.8:

$$\hat{K}(t) = e^{-\hat{A}t} = \frac{i}{2\pi}\oint_C d\lambda\, e^{-\lambda t}\hat{R}(\lambda)\ ,$$

$$K(x,y,t) = \frac{i}{2\pi}\oint_C d\lambda\, e^{-\lambda t}R(x,y,\lambda)\ ,$$

$$K(t) = \mathrm{Sp}(K(x,x,t)) = \frac{i}{2\pi}\oint_C d\lambda\, e^{-\lambda t}R(\lambda)\ . \tag{L.2.3}$$

Zur Definition der üblichen Multiindex-Schreibweise und Fouriertransformation $\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ auf dem Schwartz-Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ siehe K.1. Zur Definition des Symbols $\sigma(x,\xi) \in S^d$ linearer, partieller Differential-Operatoren (PDO) und Pseudodifferential-Operatoren (ΨDO) siehe K.3. Wir wiederholen kurz einige Begriffe und Schreibweisen.

$$\xi := (\xi_1, \ldots, \xi_n)\ ,$$

$$\xi(x) := \langle x \mid \xi\rangle := (2\pi)^{-\frac{n}{2}}\, e^{ix\xi}\ , \tag{L.2.4}$$

$$\begin{aligned}\hat{A}u(x) &:= \langle x \mid \hat{A}u\rangle = \int d^n\xi\, \langle x \mid \hat{A} \mid \xi\rangle\langle\xi \mid u\rangle \\ &= \int d^n\xi\, \langle x \mid \hat{A} \mid \xi\rangle\, \tilde{u}(\xi)\ .\end{aligned} \tag{L.2.5}$$

Es sei $\tilde{u}(\xi)$ die Fouriertransformierte von $u(x)$:

$$\tilde{u}(\xi) = \langle \xi \mid u \rangle = \int d^n x \, \langle \xi \mid x \rangle \langle x \mid u \rangle = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int d^n x \, e^{-ix\xi} \, u(x) \; , \tag{L.2.6}$$

$$\begin{aligned} \langle x \mid \hat{A} \mid \xi \rangle &= \int d^n x' \, \langle x \mid \hat{A} \mid x' \rangle \langle x' \mid \xi \rangle \\ &= \int d^n x' \, A_x \delta(x - x') \langle x' \mid \xi \rangle = A_x \langle x \mid \xi \rangle \\ &=: \sigma(A_x, x, \xi) \langle x \mid \xi \rangle \; . \end{aligned} \tag{L.2.7}$$

Hier wurde der Begriff des Symbols $\sigma(A_x, x, \xi)$ des Operators $\hat{A}$ eingeführt, wobei davon ausgegangen wurde, daß $\hat{A}$ in der Ortsdarstellung diagonal ist (was ja für einen lokalen Differential-Operator zutrifft). Für den Operator A_x aus K.1.1 folgt:

$$\begin{aligned} \sigma(A_x, x, \xi) \langle x \mid \xi \rangle &= A_x \langle x \mid \xi \rangle = A_x \, (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \, e^{ix\xi} \\ &= \sum_{|\alpha|=0}^{\omega} a_\alpha \xi^\alpha \, (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \, e^{ix\xi} \; , \end{aligned}$$

$$\sigma(A_x, x, \xi) = \sum_{|\alpha|=0}^{d} a_\alpha \xi^\alpha \quad \text{mit } \xi^\alpha := \prod_{j=1}^{n} \xi_j^{\alpha_j} \; . \tag{L.2.8}$$

Also ist $\sigma(A_x, x, \xi)$ ein Polynom vom Grad d in ξ.

Mit dem Symbol schreibt sich nun K.1.7

$$\begin{aligned} \hat{A} u(x) &= \int d^n \xi \, \langle x \mid \hat{A} \mid \xi \rangle \, \tilde{u}(\xi) \\ &= \int d^n \xi \, \langle x \mid \xi \rangle \, \sigma(A_x, x, \xi) \, \tilde{u}(\xi) \\ &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int d^n \xi \, e^{ix\xi} \, \sigma(A_x, x, \xi) \, \tilde{u}(\xi) \; . \end{aligned} \tag{L.2.9}$$

Wir sprechen von einem elliptischen DO oder elliptischen ΨDO, wenn das Symbol in den ξ_j nur die 0 als einzige reelle Nullstelle hat, d.h. wenn das Symbol im Definitionsbereich das Vorzeichen nicht wechselt.

Zur Lösung einer partiellen elliptischen Differentialgleichung der Form $A_x u(x) = f(x)$ benötigen wir die Resolvente $R(x, y, \lambda)$, d.h. den zu $(A_x - \lambda)$ inversen Operator. Dieser inverse Operator wird aber als Integral-Operator in der Regel kein elliptischer Operator mehr sein. Die Vereinheitlichung der Behandlung von Differential- und Integral-Operatoren löst man im Rahmen der Theorie der oben eingeführten elliptischen ΨDO. Ein großer Vorteil dieser ΨDO ist, daß die Klasse dieser Operatoren abgeschlossen ist

(mod eines glättenden Operators, d.h. eines ΨDO mit Symbol der Klasse $S^{-\infty}$) bzgl. der Addition, der Multiplikation, der Inversenbildung, der Adjungiertenbildung und der Folgenbildung (siehe K.3).

Wir suchen jetzt die Resolvente $\hat{R}(\lambda)$, bzw. $R(x,y,\lambda)$ in der Menge der pseudoelliptischen Operatoren.

$$(\hat{A} - \lambda \hat{1})\, \hat{R}(\lambda) = \hat{1}\ . \tag{L.2.10}$$

Fouriertransformiert wird daraus

$$\sigma[(\hat{A} - \lambda \hat{1})\, \hat{R}(\lambda)] = \sigma(\hat{1}) = 1\ . \tag{L.2.11}$$

Um hiervon auf das Symbol $\sigma[\hat{R}(\lambda)]$ schließen zu können, benötigen wir einen Ausdruck, der das Symbol eines Operatorproduktes mit den Symbolen der einzelnen Operatoren verbindet. Sei also

$$A_x = \sum_{|\alpha|=0}^{d} a_\alpha(x)\, D_x^\alpha \quad \text{und} \quad B_x = \sum_{|\beta|=0}^{d'} b_\beta(x)\, D_x^\beta\ , \tag{L.2.12}$$

so folgt

$$A_x B_x = \sum_{|\alpha|=0}^{d} \sum_{|\beta|=0}^{d'} \sum_{\gamma_i \le \alpha_i} a_\alpha(x) \binom{\alpha_1}{\gamma_1} \cdots \binom{\alpha_n}{\gamma_n} \left[\prod_{j=1}^{n} D_{x^j}^{\gamma_j}\, b_\beta(x) \right] \left[\prod_{j=1}^{n} D_{x^j}^{\alpha_j - \gamma_j + \beta_j} \right]\ ,$$

$$\begin{aligned}
\sigma(A_x B_x) &= \sum_{|\alpha|=0}^{d} \sum_{|\beta|=0}^{d'} \sum_{|\gamma|=0}^{|\alpha|} \left(\prod_{j=1}^{n} \binom{\alpha_j}{\gamma_j} \right) a_\alpha(x)\ [D_x^\gamma\, b_\beta(x)] \left[\xi^{\alpha-\gamma+\beta} \right] \\
&= \sum_{|\alpha|=0}^{d} \sum_{|\beta|=0}^{d'} \sum_{|\gamma|=0}^{|\alpha|} \left[\frac{\alpha!}{\gamma!(\alpha-\gamma)!}\, a_\alpha(x)\, \xi^{\alpha-\gamma} \right] \left[D_x^\gamma\, b_\beta(x)\, \xi^\beta \right] \\
&= \sum_{|\alpha|=0}^{d} \sum_{|\gamma|=0}^{|\alpha|} \frac{1}{\gamma!}\ [(i\, D_\xi)^\gamma\, a_\alpha(x)\, \xi^\alpha]\ [D_x^\gamma\, \sigma(B_x, x, \xi)]\ .
\end{aligned}$$

Wegen $D_\xi^\gamma\, \xi^\alpha = 0$ für $\gamma > \alpha$ kann die Summationsgrenze der $|\gamma|$-Summe von $|\alpha|$ auf d erhöht werden:

$$\begin{aligned}
\sigma(A_x B_x) &= \sum_{|\alpha|=0}^{d} \sum_{|\gamma|=0}^{d} \frac{1}{\gamma!}\ [(i\, D_\xi)^\gamma\, a_\alpha(x)\, \xi^\alpha]\ [D_x^\gamma\, \sigma(B_x, x, \xi)] \\
&= \sum_{|\gamma|=0}^{d} \frac{1}{\gamma!}\ [(i\, D_\xi)^\gamma\, \sigma A_x, x, \xi)]\ [D_x^\gamma\, \sigma(B_x, x, \xi)]\ .
\end{aligned} \tag{L.2.13}$$

Diese Produktdarstellung des Symbols wollen wir jetzt auf unsere Gleichung L.2.11 anwenden. Zunächst schreiben wir

$$\sigma(A_x, x, \xi, \lambda) := \sigma(A_x - \lambda), x, \xi) = \sum_{j=0}^{d} a_j(x, \xi, \lambda) \quad \text{mit} \tag{L.2.14}$$

$$a_j(x, \xi, \lambda) = \begin{cases} \sum_{|\alpha|=d} a_\alpha(x)\xi^\alpha - \lambda & \text{für } j = d\,, \\ \sum_{|\alpha|=j} a_\alpha(x)\xi^\alpha & \text{für } 0 \le j < d\,. \end{cases} \tag{L.2.15}$$

Daraus folgt, daß die $a_j(x, \xi, \lambda)$ homogene Funktionen des Grades j in den Variablen ξ und $\lambda^{\frac{1}{d}}$ sind, denn

$$a_j(x, c\xi, (c\lambda^{\frac{1}{d}})^d) = c^d a_j(x, \xi, \lambda)\,. \tag{L.2.16}$$

Für die $\sigma(R, x, \xi, \lambda)$ machen wir einen Reihenansatz mit

$$\sigma(R, x, \xi, \lambda) := \sum_{k=0}^{\infty} q_{-d-k}(x, \xi, \lambda)\,, \tag{L.2.17}$$

wobei wir von den $q_{-d-k}(x, \xi, \lambda)$ verlangen, daß sie ebenso wie oben die $a_j(x, \xi, \lambda)$ homogene Funktionen des Grades $(-d-k)$ in den Variablen ξ und $\lambda^{\frac{1}{d}}$ sein sollen. Die Reihe startet bei q_{-d}, damit wir gerade die richtigen Terme zur algebraischen Auflösung in Bezug auf a_d erhalten. Damit wird unsere Ausgangsgleichung L.2.11 zu:

$$\sigma[(A_x - \lambda)\, R(\lambda), x, \xi] = \sum_{|\gamma|=0}^{d} \sum_{j=0}^{d} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\gamma!} \left[(i\, D_\xi)^\gamma\, a_j(x, \xi, \lambda)\right] \left[D_x^\gamma\, q_{-\omega-k}(x, \xi, \lambda)\right] = 1\,.$$

Diese Summe ordnen wir mit dem Index n nach Potenzen von ξ^{-1}:

$$1 = \sum_{n=0}^{d} \sum_{|\gamma|=0}^{d} \sum_{j=0}^{d} \sum_{k=0}^{\infty} \delta_{n,\gamma-j+d+k} \frac{1}{\gamma!} \left[(i\, D_\xi)^\gamma\, a_j(x, \xi, \lambda)\right] \left[D_x^\gamma\, q_{-d-k}(x, \xi, \lambda)\right]\,. \tag{L.2.18}$$

Dies liefert uns das folgende algebraische Gleichungssystem zur sukzessiven Bestimmung der q_{-d-k}:

$$n = 0 \;\Rightarrow\; \gamma = k = 0,\; j = d : 1 = a_d(x, \xi, \lambda)\, q_{-d}(x, \xi, \lambda)\,. \tag{L.2.19}$$

Für den Fall $n \ge 1 \;\Rightarrow\; k \le n$ schreiben wir die Summe als $\delta_{k,n}$-Term + Rest, wobei bei $k = n$ gilt $\gamma = 0$, $j = d$:

$$\begin{aligned} 0 &= a_d(x, \xi, \lambda)\, q_{-d-n}(x, \xi, \lambda) \\ &\quad + \sum_{|\gamma|=0}^{d} \sum_{j=0}^{d} \sum_{k=0}^{n-1} \delta_{n,\gamma-j+d+k} \frac{1}{\gamma!} \left[(i\, D_\xi)^\gamma\, a_j(x, \xi, \lambda)\right] \left[D_x^\gamma\, q_{-d-k}(x, \xi, \lambda)\right]\,. \end{aligned} \tag{L.2.20}$$

Aus L.2.19 folgt

$$q_{-d}(x,\xi,\lambda) = \Big(\sum_{|\alpha|=d} a_\alpha(x)\xi^\alpha - \lambda\Big)^{-1} . \tag{L.2.21}$$

Wir sehen, daß $q_{-d}(x,\xi,\lambda)$ wie gefordert eine homogene Funktion des Grades $(-d)$ in den Variablen ξ und $\lambda^{\frac{1}{d}}$ ist. Die anderen $q_{-d-k}(x,\xi,\lambda)$ folgen sukzessive aus L.2.20 und die Homogenität vom Grade $-d-k$ von $q_{-d-k}(x,\xi,\lambda)$ in den Variablen ξ und $\lambda^{\frac{1}{d}}$ folgt durch Induktion. Auf diese Weise verschaffen wir uns also eine Näherungslösung von $\sigma(R,x,\xi,\lambda)$ als

$$\sigma^{(m)}(R,x,\xi,\lambda) := \sum_{k=0}^{m} q_{-d-k}(x,\xi,\lambda) \tag{L.2.22}$$

und mit der Fourierrücktransformation eine Näherungslösung von $R(x,y,\lambda)$ als

$$\begin{aligned} R^{(m)}(x,y,\lambda) &:= \langle x \mid \hat{R}^{(m)}(\lambda) \mid y\rangle = \int d\xi^n \,\langle x \mid \hat{R}^{(m)}(\lambda) \mid \xi\rangle\langle \xi \mid y\rangle \\ &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int d\xi^n \,\sigma^{(m)}(R,x,\xi,\lambda)\langle \xi \mid y\rangle \\ &= (2\pi)^{-n} \int d\xi^n \,\sigma^{(m)}(R,x,\xi,\lambda)\, e^{i\xi(x-y)} . \end{aligned} \tag{L.2.23}$$

Da eine Folge $R^{(m)}(x,y,\lambda)$ von Pseudodifferential-Operatoren wegen der Vollständigkeit (mod ΨDO mit Symbol aus $S^{-\infty}$) asymptotisch gegen $R(x,y,\lambda)$ geht, folgt damit für den Wärmekern:

$$\begin{aligned} K(x,x,t) &= \frac{i}{2\pi} \oint_C d\lambda\, e^{-\lambda t}\, R(x,x,\lambda) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^{n+1}} \oint_C d\lambda\, e^{-\lambda t}\, \sigma(R,x,\xi,\lambda) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^{n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \oint_C d\lambda\, e^{-\lambda t} \int d\xi\, q_{-d-k}(x,\xi,\lambda) . \end{aligned} \tag{L.2.24}$$

Da nach Voraussetzung alle Eigenwerte von $\hat{A}$ in der rechten Halbebene liegen, wählen wir für die λ-Integration als Integrationsweg die imaginäre Achse von $+i\infty$ bis $-i\infty$ und dann den im Unendlichen verlaufenden rechten Halbkreis. Wegen des starken Abfalls des Integranden auf dem rechten Halbkreis für $|\lambda| \to \infty$ verschwindet das Integral über den rechten Halbkreis und wir erhalten mit $\lambda := -i\, s$:

$$K(x,x,t) = \frac{i}{(2\pi)^{n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \int_{i\infty}^{-i\infty} d\lambda\, e^{-\lambda t} \int d\xi\, q_{-d-k}(x,\xi,\lambda)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{ist} \int d\xi\, q_{-d-k}(x, \xi, -is) \; .$$

Mit der Substitution $u := ts,\ \mu := t^{\frac{1}{d}}\xi$ und der Homogenitätseigenschaft der $q_{-d-k}(x, \xi, \lambda)$ vom Grad $(-d-k)$ in ξ und $\lambda^{\frac{1}{d}}$ folgt

$$\begin{aligned} q_{-d-k}(x, t^{-\frac{1}{d}}\mu, -it^{-1}u) &= q_{-d-k}(x, t^{-\frac{1}{d}}\mu, -i(t^{-\frac{1}{d}} u^{\frac{1}{d}})^d) \\ &= t^{-\frac{1}{d}(-d-k)}\, q_{-d-k}(x, \mu, -iu) \; . \end{aligned}$$

Damit folgt schließlich für $K(x, x, t)$

$$\begin{aligned} K(x, x, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (t^{-1}) du\, e^{iu} \int (t^{-\frac{1}{d}}) d\mu\, t^{-\frac{1}{d}(-d-k)}\, q_{-d-k}(x, \mu, -iu) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}} \frac{1}{(2\pi)^{n+1}} \int_{\mathbb{R}^n} d\mu \int_{-\infty}^{\infty} du\, e^{iu}\, q_{-d-k}(x, \mu, -iu) \end{aligned}$$

$$K(x, x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}}\, b_k(x) \; , \tag{L.2.25}$$

$$b_k(x) := \frac{1}{(2\pi)^{n+1}} \int_{\mathbb{R}^n} d\mu \int_{-\infty}^{\infty} du\, e^{iu}\, q_{-d-k}(x, \mu, -iu) \; , \tag{L.2.26}$$

$$K(t) = \mathrm{Sp}(K(x, x, t)) = \int_{\mathbb{R}^n} dx\, K(x, x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}}\, B_k \; , \tag{L.2.27}$$

$$B_k := \int_{\mathbb{R}^n} dx\, b_k(x) \; . \tag{L.2.28}$$

□

Dies ist die berühmte Wärmekern-Entwicklung mit den Wärmekern- oder Seeley-Koeffizienten B_k, bzw. $b_k(x)$.

Wenn $(d-k)$ ungerade ist, gilt $b_k(x) = 0$, da dann $q_{-d-k}(x, \mu, -iu)$ in μ, ebenso wie $q_{-d-k}(x, \xi, \lambda)$ in ξ, wegen der Homogenität eine ungerade Funktion ist und die Integration über μ, bzw. über ξ gerade Null ergibt. Wenn jetzt, wie häufig in der Physik, $d = 2$ ist, dann sind also alle $b_k(x) = 0$, wenn k ungerade ist.

Dies gilt natürlich in der Regel nicht mehr in Fällen mit Randbedingungen - dazu siehe etwa Elizalde u. a. (1994), Kirsten (2002), Vassilevich (2003).

Gelegentlich taucht in der Literatur statt der Reihenentwicklung L.2.25 mit ganzzahligen Indizes k auch eine Reihenentwicklung mit rationalen Indizes $k' = k/d$ auf, insbesondere halbzahlige Indizes $k' = k/2$ im Fall von $d = 2$:

$$K(x, x, t) = \sum_{k'=0,1/2,}^{\infty} t^{k'-\frac{n}{2}} \, \epsilon\tilde{b}_{k'}(x) \ . \tag{L.2.29}$$

Wir werden von dieser Darstellung mit rationalen Indizes keinen Gebrauch machen.

L.3 Indextheorem

Die verschiedenen Index-Theoreme (Atiyah-Singer, et.al.) verbinden die Theorie der elliptischen Differential-Operatoren mit der algebraischen Topologie und gehören zu den größten mathematischen Entdeckungen des 20. Jahrhunderts. Im Jahr 1966 erhielt Atiyah hierfür die Fields-Medaille und im Jahr 2004 zusammen mit Singer den Abel-Preis. Hier soll nur für einen einfachsten Fall ohne Randbedingungen der analytische Index berechnet werden und gezeigt werden, daß diese natürliche Zahl invariant ist unter stetigen Änderungen des Differential-Operators, solange dieser nur elliptisch bleibt.

Wir folgen hier im Wesentlichen der Darstellung von Schwarz (1993), S.163 ff. und Nakahara (2003), S.472 ff.

Sei $\hat{A}$ ein elliptischer Differential-Operator der Ordnung d auf einer n-dimensionalen kompakten Mannigfaltigkeit. Um die folgenden Überlegungen möglichst einfach zu halten, nehmen wir hier an, daß keine Randbedingungen vorliegen mögen. Der Kern von $\hat{A}$ werde bezeichnet als $\mathrm{Ker}(\hat{A})$ und ist die Menge der nichttrivialen Lösungen der homogenen Gleichung $\hat{A} \mid \varphi\rangle = 0$, in der Physik auch als die Menge der Nullmoden bezeichnet. Die Dimension des Kerns von $\hat{A}$ wird bezeichnet als $l(\hat{A}) := \dim \mathrm{Ker}(\hat{A})$. In der Theorie der elliptischen Operatoren auf kompakten Mannigfaltigkeiten wird bewiesen, daß die Eigenräume zu allen Eigenvektoren endlichdimensional sind, daß also auch $l(\hat{A})$ eine endliche Zahl ist. Weiter gebe es ein Skalarprodukt und bezüglich diesem auch einen adjungierten Operator $\hat{A}^\dagger$. Der Index von $\hat{A}$ kann definiert werden als:

$$\mathrm{index}\, \hat{A} := l(\hat{A}) - l(\hat{A}^\dagger) \ . \tag{L.3.1}$$

Für das Weitere möchten wir die Wärmekern-Entwicklung anwenden. Da diese aber nur für nichtnegative, elliptische Operatoren gilt, betrachten wir die Operatoren $\hat{C} := \hat{A}^\dagger \hat{A}$ und $\hat{C}^\dagger := \hat{A}\hat{A}^\dagger$. Beides sind nichtnegative, elliptische Operatoren und es gilt:

$$\mathrm{index}\, \hat{A} = l(\hat{A}^\dagger \hat{A}) - l(\hat{A}\hat{A}^\dagger) \ . \tag{L.3.2}$$

Beweis.

$$\hat{A} \mid \varphi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{A}^\dagger \hat{A} \mid \varphi\rangle = 0$$

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} \mid \varphi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle\varphi \mid \hat{A}^\dagger \hat{A} \mid \varphi\rangle = \langle \hat{A}\varphi \mid \hat{A}\varphi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{A} \mid \varphi\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad l(\hat{A}^\dagger \hat{A}) = l(\hat{A}) \qquad \text{und analog} \quad l(\hat{A}\hat{A}^\dagger) = l(\hat{A}^\dagger)\ . \tag{L.3.3}$$

Weiter haben die Operatoren $\hat{C}$ und $\hat{C}^\dagger$ auch die gleichen positiven Eigenwerte ($\lambda_n > 0$) mit der gleichen Multiplizität, denn

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} \mid \varphi\rangle = \lambda \mid \varphi\rangle \quad \Rightarrow \quad (\hat{A}\hat{A}^\dagger)\hat{A} \mid \varphi\rangle = \lambda \hat{A} \mid \varphi\rangle \quad \Rightarrow$$

$$(\hat{A}\hat{A}^\dagger) \mid \varphi'\rangle = \lambda \mid \varphi'\rangle \quad \Rightarrow \quad \text{Spektrum}_{\lambda_n>0}(\hat{C}) = \text{Spektrum}_{\lambda_n>0}(\hat{C}^\dagger)\ . \tag{L.3.4}$$

Nebenbei: dies können wir als eine sehr einfach Form der Supersymmetrie auffassen.

Für diese nichtnegativen $\hat{C} := \hat{A}^\dagger \hat{A}$ können wir die zugeordnete Wärmegleichung 6.6.3 untersuchen:

$$(\hat{C} + \frac{\partial}{\partial t})\hat{K}(t) = 0 \quad \text{mit } \hat{K}(0) = \hat{1} \quad \Rightarrow$$

$$\hat{K}(t) = e^{-\hat{C}t} = \sum_i e^{-\lambda_i t} \mid \varphi_i\rangle\langle\varphi_i \mid \quad \Rightarrow$$

$$K(t) = \text{Sp } \hat{K}(t) = \text{Sp } e^{-\hat{C}t} = \text{Sp } (\sum_i e^{-\lambda_i t} \mid \varphi_i\rangle\langle\varphi_i \mid) = \sum_i e^{-\lambda_i t}$$

$$= l(\hat{C}) + \sum_{i,\lambda_i>0} e^{-\lambda_i t}\ . \tag{L.3.5}$$

Weil nun das Spektrum der Operatoren $\hat{C}$ und $\hat{C}^\dagger$ für positive Eigenwerte $\lambda_i > 0$ übereinstimmt, können wir schreiben:

$$\text{index}\,\hat{A} = l(\hat{A}) - l(\hat{A}^\dagger) = l(\hat{A}^\dagger\hat{A}) - l(\hat{A}\hat{A}^\dagger) = l(\hat{C}) - l(\hat{C}^\dagger)$$

$$= \text{Sp } e^{-\hat{C}t} - \text{Sp } e^{-\hat{C}^\dagger t}\ . \tag{L.3.6}$$

Da sich die Summen über die positiven Eigenwerte gerade aufheben ist dieser Ausdruck tatsächlich unabhängig von t. Schließlich können wir in L.3.6 die Wärmekern-Entwicklung L.2.2 einsetzen und erhalten wegen der t-Unabhängigkeit:

$$\text{index}\,\hat{A} = \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}}\, B(\hat{C})_k - \sum_{k=0}^{\infty} t^{\frac{k-n}{d}}\, B(\hat{C}^\dagger)_k \quad \Rightarrow$$

$$\text{index}\,\hat{A} = B(\hat{C})_n - B(\hat{C}^\dagger)_n\ . \tag{L.3.7}$$

□

Für einen Laplace-Operator in einer vierdimensionalen Mannigfaltigkeit ergibt sich also:

$$\text{index}\,\hat{A} = B(\hat{C})_4 - B(\hat{C}^\dagger)_4\ . \tag{L.3.8}$$

Die rechte Seite von L.3.7 stellt eine topologische Invariante dar, in die nur die Koeffizienten bzw. Koeffizienten-Funktionen des Differential-Operators und die Metrik des Raumes eingehen - dies ist gerade die Aussage des berühmten Indextheorems von Atiyah-Singer.

Für Verallgemeinerungen, die insbesondere Randbedingungen mit berücksichtigen, siehe etwa: Gilkey (1995), Kirsten (2002).

M Funktionalableitung

M.1 Funktionalableitung oder Fréchet-Ableitung

Die Funtionalableitung oder Fréchet-Ableitung eines Operators entspricht seiner Linearisierung. Seien $\mathcal{H}_1$ und $\mathcal{H}_2$ zwei Hilbert-Räume mit den jeweiligen Normen $\|\cdot\|_1$ und $\|\cdot\|_2$. (Zur Definition der Fréchet-Ableitung genügen bereits normierte Räume.) Sei $F : \Omega \subseteq \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ eine im allgemeinen nichtlineare Abbbildung von $\Omega \subseteq \mathcal{H}_1$ nach $\mathcal{H}_2$ und seien die Vektoren $|\ \phi\rangle$, $|\ \psi\rangle$ und $(|\ \phi\rangle + |\ \psi\rangle)$ alle Elemente aus Ω. Wenn es nun eine lineare, stetige Abbildung $DF(|\ \phi\rangle) : \Omega \subseteq \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ gibt, so daß diese eine Tangente an die Abbildung F an der Stelle $|\ \phi\rangle$ ist, dann heißt F differentierbar bei $|\ \phi\rangle$ und $DF(|\ \phi\rangle)$ die Ableitung von F an der Stelle $|\ \phi\rangle$.

Definition M.1.1 *Wenn also ein $DF(|\ \phi\rangle) : \Omega \subseteq \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ existiert, welches linear ist (bzw. kürzer gesagt $DF : \Omega \subseteq \mathcal{H}_1 \to \mathscr{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$), welches stetig ist und für welches der folgende Grenzwert existiert*

$$\lim_{\||\psi\rangle\|_1 \to 0} \frac{\|F(|\ \phi\rangle + |\ \psi\rangle) - F(|\ \phi\rangle) - DF(|\ \phi\rangle)\ |\ \psi\rangle\|_2}{\|\ |\ \psi\rangle\|_1} = 0\ , \tag{M.1.1}$$

$$\textit{bzw. mit} \quad \epsilon : \mathbb{R} \to \mathbb{R} \quad \textit{und} \quad \lim_{x \to 0} \epsilon(x) = 0 \quad \textit{für alle}\ \|\ |\ \psi\rangle\|_1 < \delta\ :$$

$$\|F(|\ \phi\rangle + |\ \psi\rangle) - F(|\ \phi\rangle) - DF(|\ \phi\rangle)\ |\ \psi\rangle\|_2 \le \|\ |\ \psi\rangle\|_1\ \epsilon(\|\ |\ \psi\rangle\|_1)\ . \tag{M.1.2}$$

dann heißt dieses $DF(|\ \phi\rangle)$ die Ableitung von F an der Stelle $|\ \phi\rangle$.

Wenn F differentierbar ist, dann ist F auch stetig, denn aus M.1.2 folgt:

$$\|F(|\ \phi\rangle + |\ \psi\rangle) - F(|\ \phi\rangle)\|_2 \le \|\ |\ \psi\rangle\|_1\, \epsilon(\|\ |\ \psi\rangle\|_1) + \|DF(|\ \phi\rangle)\| \cdot \|\ |\ \psi\rangle\|_1\ ,$$

$$\lim_{\||\psi\rangle\|_1 \to 0} \|F(|\ \phi\rangle + |\ \psi\rangle) - F(|\ \phi\rangle)\|_2 = 0\ . \tag{M.1.3}$$

Wenn F differentierbar ist, dann existiert die folgenden Richtungsableitung von F in Richtung $|\ \psi\rangle$ und ist mit der Ableitung aus M.1.1 identisch:

$$DF(|\ \phi\rangle)\ |\ \psi\rangle = \frac{d}{dt}(F(|\ \phi\rangle + t\ |\ \psi\rangle))\Big|_{t=0}\ . \tag{M.1.4}$$

Beweis. Wir setzen in der obigen Definition von M.1.1 $\mid\psi\rangle \to t\mid\psi\rangle$:

$$\lim_{t\|\mid\psi\rangle\|_1\to 0}\frac{\|F(\mid\phi\rangle+t\mid\psi\rangle)-F(\mid\phi\rangle)-t\,DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi\rangle\|_2}{t\|\mid\psi\rangle\|_1}=0 \quad\Rightarrow$$

$$\lim_{t\to 0}\|\frac{1}{t}\left(F(\mid\phi\rangle+t\mid\psi\rangle)-F(\mid\phi\rangle)\right)-DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi\rangle\|_2=0 \quad\Rightarrow$$

$$\|\frac{d}{dt}\left(F(\mid\phi\rangle+t\mid\psi\rangle)\right)\Big|_{t=0}-DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi\rangle\|_2=0 \quad\Rightarrow$$

$$DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi\rangle=\frac{d}{dt}(F(\mid\phi\rangle+t\mid\psi\rangle))\Big|_{t=0}\ . \qquad\square$$

Die Ableitung $DF(\mid\phi\rangle)$ an der Stelle $\mid\phi\rangle$ ist definitionsgemäß linear in Bezug auf das Argument $\mid\psi\rangle$, die Richtung, (und nicht etwa in Bezug auf die Stelle $\mid\phi\rangle$,) also:

$$DF(\mid\phi\rangle)(\alpha_1\mid\psi_1\rangle+\alpha_2\mid\psi_2\rangle)=\alpha_1 DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi_1\rangle+\alpha_2 DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi_2\rangle)\ .$$

Bei fixierter Richtung $\mid\psi_1\rangle\in\Omega\subseteq\mathcal{H}_1$ ist $DF(\cdot)\mid\psi_1\rangle$ wieder eine Abbildung von $\Omega\subseteq\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_2$ und wir können also die Ableitung von $DF(\cdot)\mid\psi_1\rangle$ bestimmen, welche dann die 2. Ableitung von F ist. Wenn also ein $D^2F(\mid\phi\rangle):\Omega\times\Omega\subseteq\mathcal{H}_1\times\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_2$ existiert, welches linear und stetig ist und für welches der folgende Grenzwert existiert

$$\lim_{\|\mid\psi_2\rangle\|_1\to 0}\frac{\|DF(\mid\phi\rangle+\mid\psi_2\rangle)\mid\psi_1\rangle-DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi_1\rangle-D^2F(\mid\phi\rangle)\mid\psi_1\rangle\mid\psi_2\rangle\|_2}{\|\mid\psi_2\rangle\|_1}=0\ , \tag{M.1.5}$$

dann heißt dieses $D^2F(\mid\phi\rangle)$ die 2. Ableitung von F an der Stelle $\mid\phi\rangle$.

Folgerung:

Wenn F linear ist, also $F(\alpha_1\mid\phi\rangle+\alpha_2\mid\psi\rangle)=\alpha_1F(\mid\phi\rangle)+\alpha_2F(\mid\psi\rangle)$, dann können wir $F(\mid\phi\rangle)=F\mid\phi\rangle$ schreiben. Und weiter folgt aus M.1.1 sofort, daß $F(\mid\psi\rangle)=F\mid\psi\rangle=DF(\mid\phi\rangle)\mid\psi\rangle$ für alle $\mid\phi\rangle\in\Omega\subseteq\mathcal{H}_1$, d.h. $DF(\mid\phi\rangle)=F$ ist unabhängig von der Stelle $\mid\phi\rangle\in\Omega\subseteq\mathcal{H}_1$.

Für die zweite Ableitung eines linearen Operators F folgt wegen $DF(\mid\phi\rangle+\mid\psi_2\rangle)=DF(\mid\phi\rangle)$ mit M.1.5, daß D^2F ein Null-Operator ist.

Besonders häufig kommt der Fall vor, daß $\mathcal{H}_2=\mathbb{R}$ ist, daß also F ein nichtlineares Funktional auf $\mathcal{H}_1$ ist. Dann ist DF ein lineares Funktional auf $\mathcal{H}_1$ und wird häufig als δF bezeichnet, als Differential von F, also $\delta F:\Omega\subseteq\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_1^*=\mathscr{L}(\mathcal{H}_1,\mathbb{R})$. Entsprechend wird $\delta F(\mid\phi\rangle)$ mit $\delta F(\mid\phi\rangle):\Omega\subseteq\mathcal{H}_1\to\mathbb{R}$ als das Differential von F an der Stelle $\mid\phi\rangle$ bezeichnet.

Da $\delta F(|\,\phi\rangle)$ nun ein Element aus $\mathcal{H}_1^*$ ist, dem Dualraum von $\mathcal{H}_1$, kann man für $\delta F(|\,\phi\rangle)$ auch die folgende Dirac-Schreibweise einführen:

$$\langle\frac{\delta F}{\delta\phi}\mid := \delta F(|\,\phi\rangle)\ , \tag{M.1.6}$$

und damit schreibt sich die Ableitung von F an der Stelle $|\,\phi\rangle$ in Richtung $|\,\psi\rangle$ als

$$\delta F(|\,\phi\rangle)\mid\psi\rangle = \frac{d}{dt}\,F(|\,\phi\rangle + t\mid\psi\rangle) = \langle\frac{\delta F}{\delta\phi}\mid\psi\rangle\ , \tag{M.1.7}$$

oder wenn wir von $\mathcal{H}_1$ auf auf den Raum der quadratintegrablen Funktionen $L^2(\Omega\subset\mathbb{R}^n)$ übergehen

$$\langle\frac{\delta F}{\delta\phi}\mid\psi\rangle = \int dx\,\langle\frac{\delta F}{\delta\phi}\mid x\rangle\langle x\mid\psi\rangle = \int dx\,\frac{\delta F}{\delta\phi}(x)\,\psi(x)\ . \tag{M.1.8}$$

Beispiel (1): sei $\mathcal{H}_1 = \mathbb{R}^n$ und $|\,x\rangle :=|\,x_1,\ldots,x_n\rangle$, dann folgt

$$\begin{aligned}\delta F(|\,x_1,\ldots,x_n\rangle)\mid y_1,\ldots,y_n\rangle &= \frac{d}{dt}\,F(|\,x_1+ty_1,\ldots,x_n{+}ty_n\rangle)\\ &= \sum_{i=1}^{n}\left.\frac{\partial F(|\,\ldots,x_i+ty_i,\ldots\rangle)}{\partial(x_i+ty_i)}\right|_{t=0} y_i\\ &= \langle\vec{\nabla}F(|\,x_1,\ldots,x_n\rangle)\mid y_1,\ldots,y_n\rangle\ ,\end{aligned}$$

$$\delta F(|\,x_1,\ldots,x_n\rangle) = \vec{\nabla}F(|\,x_1,\ldots,x_n\rangle)\ . \tag{M.1.9}$$

□

Also ist im Falle des $\mathbb{R}^n$ das Differential von F an der Stelle $|\,x\rangle$ gerade der Gradient von F nach $|\,x\rangle$.

Beispiel (2):

$$F_y(|\,\phi\rangle) := \langle y\mid\phi\rangle = \phi(y) \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\delta F_y(|\,\phi\rangle)\mid\psi\rangle = \langle\frac{\delta F_y}{\delta\phi}\mid\psi\rangle = \int dx\,\frac{\delta F_y}{\delta\phi}(x)\,\psi(x) &= \left.\frac{d}{dt}\,F_y(|\,\phi\rangle + t\mid\psi\rangle)\right|_{t=0}\\ = \left.\frac{d}{dt}\,(\phi(y)+t\psi(y))\right|_{t=0} &= \psi(y) = \int dx\,\delta(x-y)\,\psi(x) \quad \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\frac{\delta\phi(y)}{\delta\phi}(x) = \delta(x-y)\ . \tag{M.1.10}$$

□

Beispiel (3):

$$F_y(|\,\phi\rangle) := g(\phi(y)) \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\delta F_y(|\,\phi\rangle)\mid\psi\rangle = \langle\frac{\delta F_y}{\delta\phi}\mid\psi\rangle = \int dx\,\frac{\delta F_y}{\delta\phi}(x)\,\psi(x) = \frac{d}{dt}\,F_y(|\,\phi\rangle + t\mid\psi\rangle)\Big|_{t=0} \\ = \frac{d}{dt}\,g(\phi(y)+t\psi(y))\Big|_{t=0} = g'(\phi(y))\,\psi(y) \\ = \int dx\,\delta(x-y)\,g'(\phi(y))\,\psi(y) \quad \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\frac{\delta g(\phi(y))}{\delta\phi}(x) = g'(\phi(x))\,\delta(x-y)\ . \tag{M.1.11}$$

□

Beispiel (4):

$$F_y(|\,\phi\rangle) := \langle y\mid\phi'\rangle = \phi'(y) \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\int dx\,\frac{\delta F_y}{\delta\phi}(x)\,\psi(x) &= \frac{d}{dt}\,F_y(|\,\phi\rangle + t\mid\psi\rangle)\Big|_{t=0} \\ &= \frac{d}{dt}\,(\phi'(y)+t\psi'(y))\Big|_{t=0} = \psi'(y) = \int dx\,\delta(x-y)\,\psi'(x) \\ &= -\int dx\,\delta'(x-y)\,\psi(x)\ , \\ &\quad (\text{sofern } \delta(x-y)\,\psi(x) = 0 \text{ für } x\in\text{Rand}) \quad \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\frac{\delta\phi'(y)}{\delta\phi}(x) = -\delta'(x-y)\ . \tag{M.1.12}$$

□

Beispiel (5):

$$F_y(|\,\phi\rangle) := \langle y\mid\phi''\rangle = \phi''(y) \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\int dx\,\frac{\delta F_y}{\delta\phi}(x)\,\psi(x) &= \frac{d}{dt}\,F_y(|\,\phi\rangle + t\mid\psi\rangle)\Big|_{t=0} \\ &= \frac{d}{dt}\,(\phi''(y)+t\psi''(y))\Big|_{t=0} = \psi''(y) = \int dx\,\delta(x-y)\,\psi''(x)\end{aligned}$$

$$= \int dx\, \delta''(x-y)\, \psi(x)\ ,$$

$$\text{(sofern } \delta(x-y)\, \psi'(x) = \delta'(x-y)\, \psi(x) = 0$$

$$\text{für } x \in \text{Rand}) \Rightarrow$$

$$\frac{\delta\phi''(y)}{\delta\phi}(x) = \delta''(x-y)\ . \tag{M.1.13}$$

□

Beispiel (6):

$$F(\mid \phi\rangle) := \int dx\, \phi^m(x) \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
\int dx\, \frac{\delta F}{\delta\phi}(x)\, \psi(x) &= \frac{d}{dt}\, F(\mid \phi\rangle + t \mid \psi\rangle)\Big|_{t=0} = \frac{d}{dt} \int dx\, (\phi(x) + t\psi(x))^m \Big|_{t=0} \\
&= \int dx\, n\, (\phi(x) + t\psi(x))^{m-1}\Big|_{t=0} \psi(x) \\
&= \int dx\, n\phi^{m-1}(x)\psi(x) \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\frac{\delta}{\delta\phi(x)} \int dx\, \phi^m(x) = m\phi^{m-1}(x)\ . \tag{M.1.14}$$

□

Beispiel (7):

$$F(\mid \phi\rangle) := \int dx\, (\frac{d\phi(x)}{dx})^m = \int dx\, (\phi'(x))^m \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
\int dx\, \frac{\delta F}{\delta\phi}(x)\, \psi(x) &= \frac{d}{dt}\, F(\mid \phi\rangle + t \mid \psi\rangle)\Big|_{t=0} = \frac{d}{dt} \int dx\, ((\phi(x) + t\psi(x))')^m \Big|_{t=0} \\
&= \int dx\, n((\phi'(x) + t\psi'(x)))^{m-1}\, \frac{d}{dx}\psi(x)\Big|_{t=0} \\
&= \int dx\, n(\phi'(x))^{m-1}\, \frac{d}{dx}\psi(x) = -\int dx\, n\, \frac{d}{dx}(\phi'(x))^{m-1}\, \psi(x)\ , \\
&\quad \text{(sofern } (\phi'(x))^{m-1}\, \psi(x) \text{ für } x \in \text{Rand verschwindet)} \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\frac{\delta}{\delta\phi(x)} \int dx\, (\phi'(x))^m = -m\, \frac{d}{dx}\, (\phi'(x))^{m-1}\ . \tag{M.1.15}$$

□

Beispiel (8):

$$F(|\,\phi\rangle) := \int dx\, g(\phi(x)) \quad \Rightarrow$$

$$\int dx\, \frac{\delta F}{\delta\phi}(x)\, \psi(x) = \frac{d}{dt}\, F(|\,\phi\rangle + t\,|\,\psi\rangle)\Big|_{t=0} = \frac{d}{dt}\int dx\, g(\phi(x) + t\psi(x))\Big|_{t=0}$$
$$= \int dx\, g'(\phi(x) + t\psi(x)))\, \psi(x)\Big|_{t=0}$$
$$= \int dx\, g'(\phi(x))\, \psi(x) \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\delta}{\delta\phi(x)} \int dx\, g(\phi(x)) = g'(\phi(x))\ . \tag{M.1.16}$$

□

Beispiel (9): Wirkungs-Funktional:

$$S(r) := \int dt\, L(r(t), \dot r(t)) := \int dt\, [\frac{m}{2}(\frac{d\,r(t)}{dt})^2 - V(r(t))] \quad \Rightarrow$$

mit M.1.15 und M.1.16 folgt:

$$\frac{\delta S(r)}{\delta r}(t) = -m\frac{d}{dt}(\frac{d\,r(t)}{dt}) - \frac{d\,V(r(t))}{dr} = -m\frac{d^2\,r(t)}{dt^2} - \frac{dV(r(t))}{dr}\ . \tag{M.1.17}$$

Eine Nullstelle der Funktionalableitung des WirkungsFunktionals $S(r)$, also $\frac{\delta S}{\delta r}(t) = 0$, führt also gerade auf die Bewegungsgleichung $m\,\dot r^2(t) = -dV/dr$. Für die zweite Funktionalableitung von S ergibt sich mit M.1.13 und M.1.11:

$$\frac{\delta^2 S(r)}{\delta r(t_1)\,\delta r(t_2)} = \frac{\delta}{\delta r(t_1)}\,[-m\frac{d^2\,r(t_2)}{dt_2^2} - \frac{dV(r(t_2))}{dr}]$$
$$= -m\,\delta''(t_1 - t_2) - \frac{d^2V(r(t_2))}{dr^2}\,\delta(t_1 - t_2)$$
$$= (-m\,\frac{d^2}{dt_1^2} - \frac{d^2V(r(t_1))}{dr^2})\,\delta(t_1 - t_2) \tag{M.1.18}$$
$$:= S^{(2)}_{loc}(r(t_1))\,\delta(t_1 - t_2)\ . \tag{M.1.19}$$

Damit ergibt sich für die quadratischen Fluktuationen der Wirkung (wiederum unter der Voraussetzung, daß $r(t) = 0$ auf dem Rand):

$$\int dt_1\, dt_2\, \frac{\delta^2 S(r)}{\delta r(t_1)\,\delta r(t_2)}\, r(t_1)\, r(t_2) = \int dt_1\, dt_2\, r(t_2)\, S^{(2)}_{loc}(r(t_1))\,\delta(t_1 - t_2)\, r(t_1)$$

$$= \int dt\, r(t)\, S_{loc}^{(2)}(r(t))\, r(t)$$

$$= \int dt\, [-m\, r(t)\, \frac{d^2 r(t)}{dt^2} - \frac{d^2 V(r(t))}{dr^2}\, r(t)^2]$$

$$= \int dt\, [m\, (\frac{dr(t)}{dt})^2 - \frac{d^2 V(r(t))}{dr^2}\, r(t)^2]\;. \qquad \text{(M.1.20)}$$

□

Beispiel (10): Integralkern:

$$F_y(|\,\phi\rangle) := \int dx\, K(y,x)\phi(x) \quad \Rightarrow$$

$$\int dx\, \frac{\delta F_y}{\delta\phi}(x)\, \psi(x) = \frac{d}{dt}\, F_y(|\,\phi\rangle + t\,|\,\psi\rangle)\Big|_{t=0}$$

$$= \frac{d}{dt} \int dx\, K(y,x)(\phi(x) + t\psi(x))\Big|_{t=0}$$

$$= \int dx\, K(y,x)\psi(x) \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\delta}{\delta\phi(x)} \int dx\, K(y,x)\phi(x) = K(y,x)\;. \qquad \text{(M.1.21)}$$

□

Für Funktionalableitungen gilt auch eine Produktregel. Seien F und G Abbildungen mit $F : \Omega_1 \subseteq \mathcal{H}_1 \to \Omega_2 \subseteq \mathcal{H}_2$ und $G : \Omega_2 \subseteq \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_3$ und seien $|\,\phi\rangle$, $|\,\psi_1\rangle \in \Omega_1$ und $F\,|\,\phi\rangle$, $|\,\psi_2\rangle \in \Omega_2$. Sei weiter $G \circ F : \Omega_1 \subseteq \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_3$ die Produktabbildung von F und G, dann gilt:

$$\frac{\delta(G \circ F)}{\delta\phi}\,|\,\psi_1\rangle = \frac{\delta G}{\delta(F\,|\,\phi\rangle)}\, \frac{\delta F}{\delta\phi}\,|\,\psi_1\rangle \quad \text{oder} \quad \frac{\delta(G \circ F)}{\delta\phi} = \frac{\delta G}{\delta(F(\phi))}\, \frac{\delta F}{\delta\phi}\;. \qquad \text{(M.1.22)}$$

Beweis.

$$\frac{\delta(G \circ F)}{\delta\phi}\,|\,\psi_1\rangle = \frac{d}{dt}\, G(F(|\,\phi\rangle + t\,|\,\psi_1\rangle))\Big|_{t=0}$$

$$= \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}\, G(F(|\,\phi\rangle + t\,|\,\psi_1\rangle))\Big|_{t=0}\;.$$

Weil G und F stetig sind folgt

$$\frac{\delta(G \circ F)}{\delta\phi}\,|\,\psi_1\rangle = \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}\, G(F(|\,\phi\rangle) + t\, \frac{\delta F}{\delta\phi}\,|\,\psi_1\rangle))\Big|_{t=0}$$

und mit

$$| \psi_2\rangle := \frac{\delta F}{\delta\phi} \mid \psi_1\rangle$$

folgt

$$\frac{\delta(G\circ F)}{\delta\phi} \mid \psi_1\rangle = \lim_{t\to 0}\frac{1}{t}\, G(F(\mid\phi\rangle) + t\ \mid\psi_2\rangle))\Big|_{t=0}$$

$$= \frac{\delta(G)}{\delta F(\mid\phi\rangle)} \mid\psi_2\rangle = \frac{\delta(G)}{\delta F(\mid\phi\rangle)}\frac{\delta F}{\delta\phi} \mid\psi_1\rangle\ . \qquad \square$$

M.2 Funktional-Differentialgleichungen

Seien F, $\frac{\delta(F)}{\delta\phi}$ und f Abbildungen von $\Omega_1 \subseteq L^2 \to \mathbb{R}$. Die Funktionalableitung schreibt sich dann:

$$\frac{\delta F}{\delta\phi}(\psi) = \delta F(\mid\phi\rangle) \mid\psi\rangle = \langle\frac{\delta F}{\delta\phi} \mid \psi\rangle\ .$$

Eine Möglichkeit, eine Funktional-Differentialgleichung 1. Ordnung zu definieren, ist die folgende:

$$\langle\frac{\delta F}{\delta\phi} \mid \psi\rangle = \langle f \mid \psi\rangle\ . \tag{M.2.1}$$

Wenn wir jetzt als Urbildraum den Raum $\mathbb{R}^n$ anstelle von L^2 nehmen, wird unsere Funktional-Differentialgleichung zu einem n-dimensionalen System gekoppelter partieller Differentialgleichungen 1. Ordnung:

$$\phi,\ \psi\in\mathbb{R}^n,\quad F,\ \frac{\delta F}{\delta\phi},\ f_1,\ldots,f_n:\ \Omega_1\subseteq\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}\ .$$

Mit $\{e_i\}_{i\in<1,n>}$ bezeichnen wir eine Basis in $\mathbb{R}^n$, mit $\{e^j\}_{j\in<1,n>}$ eine Basis im Dualraum, der ja ebenfalls $\mathbb{R}^n$ ist. Seien also:

$$\phi = \sum_{i=1}^{n}\phi^i e_i\,,\quad f=\sum_{j=1}^{n} f_j e^j\,,\quad \frac{\delta F}{\delta\phi} = \sum_{j=1}^{n}(\frac{\delta F}{\delta\phi})_j e^j \Rightarrow$$

$$\frac{\delta F}{\delta\phi}(e_i) = \langle\frac{\delta F}{\delta\phi}\mid e_i\rangle = \frac{d}{dt}\,F(\phi^1,\ldots,\phi^i+t,\ldots,\phi^n) = \frac{\partial F(\phi^1,\ldots,\phi^n)}{\partial\phi^i}\ .$$

Damit wird aus der Funktional-Differentialgleichung M.2.1

$$\langle\frac{\delta F}{\delta\phi}\mid e_i\rangle = \langle f\mid e_i\rangle \quad\Rightarrow\quad \frac{\partial F(\phi^1,\ldots,\phi^n)}{\partial\phi^i} = f_i(\phi^1,\ldots,\phi^n),\quad i=1,\ldots,n \tag{M.2.2}$$

ein n-dimensionalen System gekoppelter partieller Differentialgleichungen 1. Ordnung.

Ganz entsprechend können wir eine Funktional-Differentialgleichung M.2.1 mit Funktionalen von $L^2 \to \mathbb{R}$ als ein ∞-dimensionales System gekoppelter partieller Differentialgleichungen 1. Ordnung ansehen.

Beispiel: Sei $f_i(\phi^1, \dots, \phi^n) = \mu F(\phi^1, \dots, \phi^n)$, dann folgt:

$$\frac{\partial F(\phi^1, \dots, \phi^n)}{\partial \phi^i} = \mu F(\phi^1, \dots, \phi^n) \, . \tag{M.2.3}$$

Zur Lösung machen wir den Ansatz der Trennung der Variablen. Dadurch faktorisieren wir das Funktional F:

$$F(\phi^1, \dots, \phi^n) = F_1(\phi^1) \cdots F_n(\phi^n) \, ,$$

und wir erhalten das entkoppelte System partieller Differentialgleichungen

$$\frac{\partial F_i(\phi^i)}{\partial \phi^i} = \mu F_i(\phi^i)$$

mit der Lösung

$$F_i(\phi^i) = e^{\mu \phi^i} \quad \Rightarrow$$

$$F(\phi^1, \dots, \phi^n) = \prod_{i=1}^{n} F_i(\phi^i) = \prod_{i=1}^{n} e^{\mu \phi^i} = e^{\mu \sum_{i=1}^{n} \phi^i} \, , \tag{M.2.4}$$

bzw. in L^2 anstelle von $\mathbb{R}^n$:

$$F(\phi) = e^{\mu \int dx \, \phi(x)} \, . \tag{M.2.5}$$

□

N Literatur zur Funktionalintegration

Auf eine gewisse Weise kann man die Funktionalintegration als die inverse Operation zur Funktionalableitung sehen. Für Physiker ist das von Feynman eingeführte Funktionalintegral eine große Quelle der Inspiration und aus der statistischen Physik und den Quantenfeldtheorien gar nicht mehr wegzudenken. Physikalische Bücher zu Pfadintegralen, die mir hilfreich waren sind:

- Kleinert (2006), Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets:
  Dieses 1547 Seiten dicke (und schwere) Buch gilt zu Recht für Physiker als die Bibel der Funktionalintegrale. Es ist sehr gut und lesbar geschrieben und geht auf viele konkrete physikalische Anwendungen ein, allerdings nicht auf die QFT.
- Roepstorff (1992), Pfadintegrale in der Quantenphysik:
  Ein älteres, gut lesbares und gründliches Lehrbuch. Es enthält auch die Anwendung der Pfadintegrale auf die QFT von Bosonen, Fermionen und nichtabelschen Eichtheorien. Leider gibt es von diesem schönen Buch keine Neuauflage mehr, sondern nur noch einzelne antiquarische Exemplare.
- Schulman (2005), Techniques and Applications of Path Integration:
  Von diesem hilfreichen Buch erschien erfreulicherweise 2005 ein Nachdruck der Ausgabe von 1981 mit einigen neuen Anhängen. Schulman diskutiert sehr viele hochinteressante Anwendungen der Pfadintegrale, z.B. etwa in der geometrischen Optik, und er gibt gute Literaturangaben. Andererseits deutet er viele Beweise nur an und behandelt auch die QFT nicht.
- Grosche u. Steiner (1998), Handbook of Feynman Path Integrals:
  Steiner hat auf 154 Seiten eine unbedingt lesenswerte Einführung zur Theorie der Pfadintegrale verfaßt, in welcher die historischen Bemerkungen, die Einführung in Transformationstechniken und eine Beschreibung der Semiklassischen Näherungen bis hin zur Gutzweilerschen Spur-Formel besonders hevorragen. Dann folgen umfangreiche Integraltafeln und am Schluß die mit fast 1000 Referenzen vielleicht umfangreichste Bibliographie zu Pfadintegralen. Leider erscheint mir der vom Springer-Verlag verlangte Preis von 245.-€ doch unangemessen hoch.
- Cartier u. DeWitt-Morette (2006), Functional Integration:
  Cécille DeWitt Morette hat ihr ganzes akademisches Leben lang, seit 1948, über die vielfältigen physikalischen und mathematischen Fragen der Pfadintegrale geforscht. In diesem Alterswerk legt sie zusammen mit dem Mathematiker Pierre Cartier eine mathematisch saubere, lesbare(!) und inspirierende Zusammenfassung ihres Lebenswerks zur Funktionalintegration vor. Ein großes Geschenk für alle Freunde und Freundinnen der mathematischen Physik.

- Klauder (2010), A Modern Introduction to Functional Integration:
  Dieses ganz neu erschienen Werk von John Klauder ist für Physiker vielleicht leichter lesbar als Cartier u. DeWitt-Morette (2006), klärt aber doch viele Fragen zur Funktionalintegration. Besonderes Gewicht legt Klauder auf das Pfadintegral mit kohärenten Zuständen, dessen Theorie er ja ganz wesentlich entwickelt und ausgebaut hat. Aktuell und interessant sind auch Klauders Gedanken in seinem letzten Kapitel „A Modern Approach to Nonrenormalizable Models".

Nun, solange man die Theorie einfach auf einem endlichen Gitter mit der Gitterkonstanten a entwickelt, ist ja alles recht einfach und durchsichtig - die Probleme entstehen erst beim Kontinuum-Limes, also bei $\lim_{a\to 0}$. Kac soll dazu gesagt haben: „When in doubt, discretize." (Schulman (2005), S. 394). Schon Feynman erkannte, daß die Frage dieses Grenzübergangs, bei der aus den endlichen Summationen nun Integrationen über Funktionenräume werden, mathematisch schwierig und bislang nicht wirklich verstanden war. Für Mathematiker sind alle „Beweise" von Physikern zur Funktionalintegration einfach nur schlichte Heuristik. Viele der mir offenen Fragen scheinen die schönen Bücher von Klauder (2010) und Cartier u. DeWitt-Morette (2006) zu klären.

Für mich sehr hilfreich waren die Bemerkungen von Zeidler (2006) in seinem wunderbaren Buch „Quantum Field Theory I, Basics in Mathematics and Physics" , und daher soll hier ein Zitat von Zeidler (S. 14-15) diesen kleinen Anhang zur Funktionalintegration beschließen:

> „Another typical feature of physical mathematics is the description of many-particle systems by *partition functions* which encode essential information. As we will show, the Feynman functional integral is nothing other than a partition function which encodes the essential properties of quantum fields. From the physical point of view, the Riemann zeta function is a partition function for the infinite system of prime numbers. ...
> Summarizing I dare say that
>
> *The most important notion of modern physics is the Feynman functional integral as a partition function for the states of many particle systems.*
>
> It is a challenge of mathematics to understand this notion in a better way than known today."

O LyX- und LaTeX-Formatierungen

O.1 LyX Document settings

```
Document class:
book (KOMA-Script)
version=,fontsize=12pt,fleqn,BCOR15mm,headinclude,footinclude=false,
headings=normal,titlepage=false,captions=nooneline,numbers=noendperiod,
Fonts:
Base Size: 12,
Text Layout:
Vertical space: MedSkip,
Page Layout:
Format: A4,
Orientation: Portrait,
Heading style: headings,
Two-sided document,
Language:
German (old spelling),
Quote style: „text",
Encoding: other: Western European (ISO 8859-1),
Numbering & TOC:
Part/Chapter/Section/Subsection/Subsubsection: Yes, Yes,
Bibliography: Natbib, Natbib style: Author-year,
Math Options: Use AMS math package,
Float Placement: Bottom of page/Here if possible/Ignore LATEX rules.
```

O.2 LaTeX preamble

```
\pdfoutput=1
\usepackage{eurosym}
\usepackage{array}
\usepackage{lmodern}
% cbfonts muss installiert sein
% greek-fontenc muss installiert sein
% babel-greek muss installiert sein
\usepackage{amssymb}    %zusaetzl. Formelumgebungen
\usepackage{amsmath}    %zusaetzl. math. Symb.
\usepackage{mathrsfs}   %zusaetzl. math. Symb.
%
% eigene TEX defeqq-, eqqdef-, eqdef-, und eqexcl-Kommandos
```

```
\newcommand*{\defeqq}{%
\mathrel{\vcenter{\offinterlineskip %
\hbox{.}\vskip-.80ex\hbox{.}}}\joinrel \hskip 3pt =}
%
\newcommand*{\eqqdef}{%
=\hskip 3pt \joinrel \mathrel{\vcenter{\offinterlineskip %
\hbox{.}\vskip-.80ex\hbox{.}}} }
%
\newcommand{\eqdef}{\ensuremath{\stackrel{\mathrm{def}}{=}}}
\newcommand{\eqexcl}{\ensuremath{\stackrel{\mathrm{!}}{=}}}
%
% Variable fuer eigene Einrueckungen mit \settowidth
\newlength{\meineEinrueck}
%
% Hier ntheorem u.a. wegen des Schlusspunktes (DIN)
\usepackage[amsmath,thmmarks,standard,hyperref]{ntheorem}
\theoremseparator{}
\theoremsymbol{}
\qedsymbol{\ensuremath{\Box}}
\theoremstyle{plain}
\renewtheorem{Satz}{Satz}[section]
\renewtheorem{Lemma}[Satz]{Lemma}
\renewtheorem{Definition}[Satz]{Definition}
\renewtheorem{Korollar}[Satz]{Korollar}
\theoremstyle{nonumberplain}
\theoremheaderfont{\textsc}
\theorembodyfont{\normalfont}
\theoremsymbol{\ensuremath{\Box}}
\theoremseparator{:}
\renewtheorem{Beispiel}{Beispiel}
\theoremseparator{}
\renewtheorem{Beweis}{Beweis.}
%
\usepackage[format=plain%
,justification=centering%
,indention=0cm]{caption}%
\usepackage[]{subfig}
%
% Formel-Satz (mit AMSmath)
\mathindent7mm                    %eigenstaendige Formel einruecken
\setlength{\jot}{4mm}             %Abstand in mehrzeiligen Formeln
\numberwithin{equation}{section} %
Formelnummerierung in Sections
\allowdisplaybreaks               %Seitenumbruch in Formeln erlauben
\renewcommand{\arraystretch}{2}  %Zeilenabstand in Arrays vergrössern
%
% Satzspiegelberechnung book (koma-script)
```

```
% siehe: scrguide.pdf,
% in Optionen der Dokumentenklasse
%
% Kopf- und Fusszeilen mit scrpage2
\usepackage[]{scrpage2}
\pagestyle{scrheadings}
\clearscrheadfoot
\let\ps@plain=\ps@empty % Kapitelseite ohne Seitenzahl
\ihead{}
\chead{\headmark}
\ohead{\pagemark}
\ifoot{}
\cfoot{}
\ofoot{}
%
% Kommutative Diagramme mit xymatrix aus Xy-pic
\usepackage[all]{xy}
%
%
\usepackage[pdftex]{graphicx}
%
%
% \usepackage[backref=page %Rueckverweise in Bibl.
% ,pdftex
% ,plainpages=false %Seitenanker=format. SeitenNr.
% ,pdfpagelabels % AcroRead4.0 zeigt log. SeiteNr.
% ,%colorlinks% Links und Anker nicht faerben
% ,bookmarks% erstellt Lesezeichen
% ,pdfpagemode=None
% ,pdfstartview=FitH
% ]{hyperref}
%
%
% \hypersetup{pdftitle={Zeta-Funktionen in der Physik - eine Einführung}%
% ,pdfsubject={Zeta-Funktionen}%
% ,pdfkeywords={Zeta-Funktion, Physik, Einführung}%
% ,pdfauthor={Bernhard Schiekel}%
% }
%
%Format der Rueckverweise im Literaturverzeichnis
\renewcommand*{\backref}[1]{- zitiert auf S. #1.}
%
```

O.3 Einstellungen am Dokumentbeginn

```
% neue Satzspiegelberechnung, siehe scrguide.pdf,
```

```
% Optionen in Dokumentenklasse-Def.
\typearea[current]{15}
%
% Title
% 1. Hyperref-Spezialität:
% \renewcommand{\thepage}{Title} ist nötig, damit beim Indizieren mit
% hyperref bei der Titelseite und der Folgeseite nicht zweimal die
% gleiche Seitennummer in \page auftritt.
% 2. In der Präambel wird der Seitenstil plain auf empty umdefiniert,
% um auf Leerseiten keine headings zu haben
% 3. Bei den Optionen für scnbook wird notitlepage gewählt und die
% Titelei von Hand gestaltet.
%----------------------------------------------------------------------
\begingroup
\renewcommand{\thepage}{Title}
\setcounter{page}{1}
\title{\vspace{2cm} Zeta-Funktionen in der Physik -\\
 eine Einführung\\ \ }
\author{\\ \textbf{Bernhard Schiekel}}
\date{ }
\maketitle
\endgroup
```

O.4 BibTEX style

BibiTEX style: natdin

In Bibtex-Eintraegen mit % in URLs müssen diese als \% maskiert werden, sonst gibt es Konflikte mit der Option 'backref' des Packets 'hyperref'.
(Fehlermeldung: „Paragraph ended before \BR@@lbibitem was complete").

Literaturverzeichnis

[Ablowitz u. Fokas 1997]
Ablowitz, Mark J. ; Fokas, Athanassios S.: *Complex Variables - Introduction and Applications*. Cambridge University Press, New York, USA, 1997 - zitiert auf S. 286.

[Abramowitz u. Stegun 1970]
Abramowitz, Milton ; Stegun, Irene A.: *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, New York, USA, 1970 - zitiert auf S. 59, 65, 111, 115, 124, 217, 237, 249, 251, 259, 276, 278.

[Alinhac u. Gérard 2007]
Alinhac, Serge ; Gérard, Patrick: *Pseudo-differential Operators and the Nash-Moser Theorem*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, USA, 2007 - zitiert auf S. 327, 343, 348.

[Alligood u. a. 1996]
Alligood, K. T. ; Sauer, T. D. ; Yorke, J.A.: *Chaos - An Introduction to Dynamical Systems*. Springer-Verlag, New York, USA, 1996 - zitiert auf S. 197.

[Arendt u. a. 2009]
Kapitel 1. Weyl's Law: Spectral Properties of the Laplacian in Mathematics and Physics. In: Arendt, Wolfgang ; Nittka, Robin ; Peter, Wolfgang ; Steiner, Frank: *Mathematical Analysis of Evolution, Information, and Complexity*. Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2009, S. S. 1–23 - zitiert auf S. 185.

[Arfken u. Weber 2001]
Arfken, George B. ; Weber, Hans J.: *Mathematical Methods for Physicists*. 5.Ed. Academic Press, San Diego, Ca., USA, 2001 - zitiert auf S. 124, 217, 237, 259.

[Artin 1931]
Artin, E.: *Einführung in die Theorie der Gammafunktion*. Teubner, Leipzig, 1931 - zitiert auf S. 236, 237.

[Atiyah u. a. 2010]
Atiyah, Michael ; Dijkgraaf, Robbert ; Hitchin, Nigel: Geometry and physics. In: *Phil. Trans. R. Soc. A* 368 (2010), 913-926. `http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/368/1914/913.full.html` - zitiert auf S. 349.

[Baez 2005]
Baez, John: This Week's Finds in Mathematical Physics (Week 216). (What is a Zeta-Function?). (2005). `http://math.ucr.edu/home/baez/week216.html` - zitiert auf S. 13, 198.

[Bagnuls u. Bervillier 2008]
BAGNULS, C. ; BERVILLIER, C.: Exact Renormalization Group Equations. An Introductory Review. (2008). `http://arxiv.org/abs/hep-th/0002034v2` - zitiert auf S. 147.

[Booß 1977]
BOOSS, Bernhelm: *Topologie und Analysis.* Springer Verlag, Berlin, 1977 - zitiert auf S. 303, 304, 323, 325, 327.

[Brack u. Bhaduri 2003]
BRACK, Matthias ; BHADURI, Rajat K.: *Semiclassical Physics.* Westview Press, Boulder, USA, 2003 - zitiert auf S. 193, 199.

[Carruthers u. Nieto 1965]
CARRUTHERS, P. ; NIETO, M. M.: Coherent States and the Number-Phase Uncertainty Relation. In: *Phys. Rev. Lett.* 14 (1965), Nr. 11, S. 387 - zitiert auf S. 34, 38.

[Cartier u. DeWitt-Morette 2006]
CARTIER, Pierre ; DEWITT-MORETTE, Cécille: *Functional Integration - Action and Symmetries.* Cambridge University Press, Cambridge, 2006 - zitiert auf S. 43, 369, 370.

[Coleman 1988]
COLEMAN, Sidney: *Aspects of Symmetry, Selected Erice Lectures.* Cambridge University Press, Cambridge, 1988 - zitiert auf S. 69.

[Collins 1984]
COLLINS, John C.: *Renormalization.* Cambridge University Press, Cambridge, GB, 1984 - zitiert auf S. 147.

[Courant u. Hilbert 1968]
COURANT, R. ; HILBERT, D.: *Methoden der mathematischen Physik I.* Springer Verlag, Berlin, 1968 - zitiert auf S. 279.

[Cvitanović u. a. 2009]
CVITANOVIĆ, Predrag ; ARTUSO, Roberto ; MANIERI, Ronnie ; TANNER, Gregor ; VATTAY, Gábor: *Chaos Book.* ChaosBook.org, 2009 - zitiert auf S. 155, 157, 166, 167, 168, 169, 172, 177, 179, 181, 193, 194, 196, 197, 198.

[Denker 2005]
DENKER, Manfred: *Einführung in die Analysis dynamischer Systeme.* Springer-Verlag, Berlin, 2005 - zitiert auf S. 198.

[Dobrowolski 2006]
DOBROWOLSKI, Manfred: *Angewandte Funktionalanalysis.* Springer Verlag, Berlin, 2006 - zitiert auf S. 327, 331, 348.

[Dowling 1989]
DOWLING, J. P.: The Mathematics of the Casimir Effect. In: *Mathematics Magazine* 62 (1989), S. 324–331 - zitiert auf S. 205, 217.

[Elizalde u. a. 1994]
ELIZALDE, E. ; ODINTSOV, S. D. ; ROMEO, A. ; BYTSENKO, A. A. ; ZERBINI, S.: *Zeta Regularization Techniques with Applications.* World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Singapore, 1994 - zitiert auf S. 120, 201, 350, 355.

[Elizalde 1995]
ELIZALDE, Emilio: *Ten Physical Applications of Spectral Zeta Function.* Springer, New York, USA, 1995 - zitiert auf S. 64, 108, 201, 275, 278.

[Feynman 1991]
FEYNMAN, Richard P.: *Sie belieben wohl zu scherzen, Mr. Feynman!* Piper GmbH & Co. KG, München, 1991 - zitiert auf S. 41.

[Feynman 1993]
FEYNMAN, Richard P.: *Vom Wesen physikalischer Gesetze.* Piper GmbH & Co. KG, 1993 - zitiert auf S. 41.

[Fischer u. Kaul 1998]
FISCHER, H. ; KAUL, H.: *Mathematik für Physiker, Band 2.* Teubner GmbH, Stuttgart, 1998 - zitiert auf S. 303, 325, 327, 348.

[Fischer u. Kaul 2001]
FISCHER, H. ; KAUL, H.: *Mathematik für Physiker, Band 1.* Teubner GmbH, Stuttgart, 2001 - zitiert auf S. 303, 312, 325.

[Gilkey 1995]
GILKEY, Peter B.: *Invariance Theory, the Heat Equation, and the Atiyah-Singer Index Theorem.* 2. Ed. CRC Press, Boca Raton, USA, 1995 - zitiert auf S. 202, 303, 325, 327, 331, 343, 348, 350, 357.

[Glauber 1963]
GLAUBER, R. J.: In: *Phys. Rev.* (1963), Nr. 131, 2766 S - zitiert auf S. 27.

[de Gosson 2006]
GOSSON, Maurice de: *Symplectic Geometry and Quantum Mechanics.* Birkhäuser Verlag, Basel, 2006 - zitiert auf S. 193.

[Gourdon u. Sebah 2003]
GOURDON, Xavier ; SEBAH, Pascal: The Riemann Zeta-function: generalities. (2003). `http://numbers.computation.free.fr/Constants/Miscellaneous/zeta.pdf` - zitiert auf S. 259.

[Greiner 1993]
GREINER, Walter: *Quantentheorie - spezielle Kapitel.* 4. Aufl. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 1993 (Theoretische Physik 4A) - zitiert auf S. 24, 109, 111, 182.

[Greiner u. Reinhardt 1993]
GREINER, Walter ; REINHARDT, Joachim: *Feldquantisierung.* 1. Aufl. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 1993 (Theoretische Physik 7A) - zitiert auf S. 29, 47, 201.

[Grosche u. Steiner 1998]
GROSCHE, C. ; STEINER, F.: *Handbook of Feynman Path Integrals.* Springer Verlag, Berlin, 1998 - zitiert auf S. 73, 369.

[Großmann 1972]
GROSSMANN, Siegfried: *Funktionalanlysis I u. II.* Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt am Main, 1972 - zitiert auf S. 303, 325, 327, 329, 348.

[Gutzwiller 1990]
GUTZWILLER, Martin C.: *Chaos in Classical and Quantum Mechanics.* Springer-Verlag, New York, 1990 - zitiert auf S. 13, 193, 198.

[Haake 2010]
HAAKE, Fritz: *Quantum Signatures of Chaos.* 3. ed. Springer Verlag, Berlin, 2010 - zitiert auf S. 181, 193, 196, 197, 199.

[Hardy 1963]
HARDY, G. H.: *Divergent Series.* Oxford University Press, London, 1963 - zitiert auf S. 208, 217.

[Hassani 1999]
HASSANI, Sadri: *Mathematical Physics, A Modern Introduction to Its Foundations.* Springer, New York, USA, 1999 - zitiert auf S. 54, 68, 69, 142, 202.

[Hawking 1977]
HAWKING, S. W.: Zeta Funktion Regularization of Path Integrals in Curved Spacetime. In: *Commun. math. Phys.* 55 (1977), S. 133–148 - zitiert auf S. 106, 108.

[Hellwig 1964]
HELLWIG, Günter: *Differentialoperatoren der mathematischen Physik.* Springer-Verlag, Berlin, 1964 - zitiert auf S. 69.

[Hochberg u. a. 1998a]
HOCHBERG, David ; MOLINA-PARIS, Carmen ; PEREZ-MERCADER, Juan ; VISSER, Matt: Renormalization Group Improving the Effective Action. (1998). `http://arxiv.org/abs/hep-th/9809198v1` - zitiert auf S. 140, 142, 144.

[Hochberg u. a. 1998b]
HOCHBERG, David ; MOLINA-PARIS, Carmen ; PEREZ-MERCADER, Juan ; VISSER, Matt: Zeta functions, renormalization group equations, and the effective action. (1998). `http://arxiv.org/abs/hep-th/9809206v1` - zitiert auf S. 150.

[Jahnke u. Emde 1909]
JAHNKE, E. ; EMDE, F.: *Tables of Functions with Formulae and Curves (Funktionentafeln).* Dover Publications, 1909 - zitiert auf S. 220, 237.

[Janke u. a. 2001]
JANKE, W. (Hrsg.) ; PELSTER, A. (Hrsg.) ; SCHMIDT, H.-J. (Hrsg.) ; BACHMANN, M. (Hrsg.): *Fluctuating Paths and Fields - Festschrift Dedicated to Hagen Kleinert on Occasion of His 60. Birthday.* World Scientific Pub Co, Singapore, 2001 - zitiert auf S. 43.

[Jost 1995]
JOST, Jürgen: *Riemannian Geometry and Geometrical Analysis.* Springer Verlag, Berlin, 1995 - zitiert auf S. 75.

[Katok u. Hasselblatt 2009]
KATOK, Anatole ; HASSELBLATT, Boris: *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems*. 10. printing. Cambridge University Press, New York, USA, 2009 - zitiert auf S. 155, 166, 170, 172, 197, 198.

[Keating u. Muller 2007]
KEATING, J. P. ; MULLER, S.: Resummation and the semiclassical theory of spectral statistics. In: *Proc. R. Soc. A, London* 463 (2007), 3241-3250. `http://rspa.royalsocietypublishing.org/cgi/reprint/463/2088/3241` - zitiert auf S. 196.

[Keating 1993]
KEATING, Jonathan: The quantum mechanics of chaotic systems. In: MULLIN, Tom (Hrsg.): *The Nature of Chaos*. Clarendon Press, Oxford, 1993 - zitiert auf S. 196.

[Kirsten 2002]
KIRSTEN, Klaus: *Spectral Functions in Mathematics and Physics*. Chapman and Hall / CRC Press, Boca Raton, FL., USA, 2002 - zitiert auf S. 120, 202, 350, 355, 357.

[Klauder 2010]
KLAUDER, John R.: *A Modern Approach to Functional Integration*. Birkhäuser/Springer, New York, 2010 - zitiert auf S. 43, 89, 370.

[Kleinert 2006]
KLEINERT, H.: *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*. 4. ed. World Scientific, Singapore, 2006 - zitiert auf S. 42, 43, 369.

[Korevaar 1982]
KOREVAAR, J.: On Newman's Quick Way to the Prime Number Theorem. In: *The Mathematical Intelligencer* 4 (1982), S. 108–115 - zitiert auf S. 256.

[Kratzer u. Franz 1963]
KRATZER, A. ; FRANZ, W.: *Transzendente Funktionen*. Akad. Verlagsges. Geest und Portig, Leipzig, 1963 - zitiert auf S. 237, 259.

[Lax 2002]
LAX, Peter D.: *Functional Analysis*. John Wiley & Sons, Inc, New York, 2002 - zitiert auf S. 303, 319, 325.

[Lega 1999]
LEGA, Joceline: Principles and Methods of Applied Mathematics. (1999). `http://math.arizona.edu/~lega/583/Spring99/583b.html` - zitiert auf S. 286.

[Loudon 1992]
LOUDON, Rodney: *The Quantum Theory of Light*. 2.ed. Clarendon Press, Oxford, 1992. – 1.ed. 1983 - zitiert auf S. 21, 34, 37.

[Mehlig u. Wilkinson 2001]
MEHLIG, B. ; WILKINSON, M.: Semiclassical trace formula using coherent states. In: *Ann. Phys.* 18 (2001), 541-555. `http://arxiv.org/abs/cond-mat/0012027` - zitiert auf S. 193.

[Milnor 1963]
Milnor, J.: *Morse Theory.* Princeton University Press, Princeton, New Jersey, USA, 1963 - zitiert auf S. 75.

[Nakahara 2003]
Nakahara, Mikio: *Geometry, Topology and Physics.* Taylor and Francis Group, Boca Raton, FL., USA, 2003 - zitiert auf S. 202, 356.

[Negele u. Orland 1998]
Negele, John W. ; Orland, Henri: *Quantum Many-Particle Systems.* Westview Press, Boulder, USA, 1998 - zitiert auf S. 89, 92.

[Parry u. Pollicott 1990]
Parry, William ; Pollicott, Mark: *Zeta functions and the periodic orbit structure of hyperbolic dynamics.* Astérisque, Vol. 187-188, Société Mathématique de France, Paris, 1990 - zitiert auf S. 167, 198.

[Postnikov 2003]
Postnikov, M. M.: *The Variational Theory of Geodesics.* unveränderter Nachdruck der Original-Ausgabe von 1967. Dover Pub. Inc., Mineola, New York, 2003 - zitiert auf S. 75.

[Ramond 1989]
Ramond, Pierre: *Field Theory: A Modern Primer.* Addison-Wesley, New York, 1989 - zitiert auf S. 122, 201.

[Rebhan 1999]
Rebhan, Eckhard: *Theoretische Physik I.* Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 1999 - zitiert auf S. 197.

[Reed u. Simon 1980]
Reed, Michael ; Simon, Barry: *Methods of Modern Mathematical Physics - Vol. 1 - Functional Analysis.* Academic Press, New York, 1980 - zitiert auf S. 303.

[Richter u. Schiekel 2004]
Richter, H. ; Schiekel, B.: Potenzsummen, Bernoulli-Zahlen und Eulersche Summenformel. (2004). `http://dx.doi.org/10.18725/OPARU-1819` - zitiert auf S. 206, 242, 251.

[Robinson 1999]
Robinson, Clark: *Dynamical Systems.* 2. ed. CRC Press, Boca Raton, USA, 1999 - zitiert auf S. 166, 171, 197, 198.

[Roe 1998]
Roe, John: *Elliptic Operators, Topology and Asymptotic Methods.* 2. ed. Addison Wesley Longman Ltd., Essex, England, 1998 - zitiert auf S. 202.

[Roepstorff 1992]
Roepstorff, G.: *Pfadintegrale in der Quantenphysik.* 2. Auflage. Vieweg Verlag, Braunschweig, 1992 - zitiert auf S. 369.

[Ruelle 1978]
RUELLE, David: *Thermodynamic Formalism.* Addison-Wesley, Reading, MA., USA, 1978 - zitiert auf S. 172, 198.

[Ruelle 1993]
RUELLE, David: *Zufall und Chaos.* Springer Verlag, Berlin, 1993 - zitiert auf S. 157.

[Ruelle 1994]
RUELLE, David: *Dynamical Zeta Functions for Piecewise Monoton Maps of the Intervall.* American Mathematical Society, Providence, RI, USA, 1994 - zitiert auf S. 198.

[Ruelle 2010]
RUELLE, David: *Wie Mathematiker ticken.* Springer Verlag, Berlin, 2010 - zitiert auf S. 157.

[Ryder 2003]
RYDER, Lewis H.: *Quantum Field Theory.* 2. ed. Cambridge University Press, Cambridge, 2003 - zitiert auf S. 127, 201.

[Salmhofer 1998]
SALMHOFER, M.: *Renormalization - An Introduction.* 2. ed. Springer, Berlin, 1998 - zitiert auf S. 147.

[Schleich 2001]
SCHLEICH, Wolfgang P.: *Quantum Optics in Phase Space.* Wiley-VCH Verlag, Berlin, 2001 - zitiert auf S. 193.

[Schulman 2005]
SCHULMAN, L. S.: *Techniques and Applications of Path Integration.* 2. ed. Dover Pub. Inc., New York, 2005 - zitiert auf S. 62, 69, 369, 370.

[Schwarz 1993]
SCHWARZ, Albert S.: *Quantum Field Theory and Topology.* Springer, Berlin, 1993 - zitiert auf S. 55, 201, 356.

[Sebah u. Gourdon 2002]
SEBAH, Pascal ; GOURDON, Xavier: Introduction to the Gamma Function. (2002). `http://numbers.computation.free.fr/Constants/Miscellaneous/gammaFunction.ps` - zitiert auf S. 237.

[Shubin 2001]
SHUBIN, Mikhail A.: *Pseudodifferential Operators and Spectral Theory.* 2. ed. Springer-Verlag, Berlin, 2001 - zitiert auf S. 337, 341, 348.

[Sieber u. Steiner 1990]
SIEBER, M. ; STEINER, F.: Generalized Periodic-Orbit Sum Rules for Strongly Chaotic Systems. In: *Phys. Lett. A* 144 (1990), S. 159–163 - zitiert auf S. 193.

[Smirnow 1972a]
SMIRNOW, W. I.: *Lehrgang der Höheren Mathematik, II.* VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1972 - zitiert auf S. 259.

[Smirnow 1972b]
SMIRNOW, W. I.: *Lehrgang der Höheren Mathematik, III/2.* VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1972 - zitiert auf S. 237, 259.

[Steiner 1994]
STEINER, Frank: Quantum Chaos. In: *DESY 494-013* (1994). http://arxiv.org/abs/chao-dyn/9402001 - zitiert auf S. 199.

[Susskind u. Glowgower 1964]
SUSSKIND, L. ; GLOWGOWER, J.: Quantum mechanical phase operator. In: *Physics* (1964), Nr. 1, S. 49 - zitiert auf S. 21.

[Svaiter u. Svaiter 1993]
SVAITER, B. F. ; SVAITER, N. F.: Zero point energy and anlytic regularizations. In: *Phys. Rev. D 47, 4581* (1993) - zitiert auf S. 112.

[Taylor 1996]
TAYLOR, Michael E.: *Partial Differential Equations - 2. Qualitative Studies of Linear Equations.* Springer-Verlag, New York, 1996 - zitiert auf S. 202, 336.

[Titchmarsh 1967]
TITCHMARSH, E. C.: *Introduction to the Theory of Fourier Integrals.* 2. ed. Oxford University Press, London, 1967 - zitiert auf S. 279.

[Titchmarsh 1986]
TITCHMARSH, E. C. ; HEATH-BROWN, D. R. (Hrsg.): *The theory of the Riemann Zeta-function.* 2. ed. Oxford Science publications, 1986 - zitiert auf S. 248, 256, 259.

[Vassilevich 2003]
VASSILEVICH, D. V.: Heat kernel expansion: unser's manual. (2003). http://arxiv.org/abs/hep-th/0306138v3 - zitiert auf S. 201, 355.

[Voigt u. Wloka 1975]
VOIGT, Alexander ; WLOKA, Josef: *Hilberträume und elliptische Differentialoperatoren.* Bibliographisches Institut, Mannheim, 1975 - zitiert auf S. 303, 325, 327, 348.

[Wang u. Guo 1989]
WANG, Z.X. ; GUO, D.R.: *Special Functions.* World Scientific Pub., Singapore, 1989 - zitiert auf S. 217, 237, 267, 273, 278.

[Watkins 2004]
WATKINS, Matthew R.: *Number Theory and Physics Archive.* http://www.maths.ex.ac.uk/~mwatkins/zeta/physics.htm. Version: 2004 - zitiert auf S. 203.

[Wedeniwski 2005]
WEDENIWSKI, Sebastian: ZetaGrid - Computational verification of the Riemann Hypothesis. (2005). http://www.zetagrid.net/zeta/rh.html - zitiert auf S. 248.

[Weisstein 1999]
WEISSTEIN, Eric W.: *Gamma Function.* From MathWorld–A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/GammaFunction.html. Version: 1999 - zitiert auf S. 237.

[Weisstein u. Sondowet 1999]
WEISSTEIN, Eric W. ; SONDOWET, Jonathan: *Riemann Zeta Function.* From MathWorld–A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/RiemannZetaFunction.html. Version: 1999 - zitiert auf S. 259.

[Werner 2005]
WERNER, Dirk: *Funktionalanalysis.* 5. Auflage. Springer-Verlag, Berlin, 2005 - zitiert auf S. 279, 303, 307, 310, 311, 325, 327, 329, 331, 348.

[Whittacker u. Watson 1969]
WHITTACKER, E. T. ; WATSON, G. N.: *A Course in Modern Analysis.* Cambridge University Press, Cambridge, 1969 - zitiert auf S. 217, 234, 237, 259, 267, 273, 278.

[Wikipedia-Atiyah 2010]
WIKIPEDIA-ATIYAH: Michael Atiyah. (2010). http://en.wikipedia.org/wiki/Michael_Atiyah - zitiert auf S. 349.

[Wikipedia-Euler 2010]
WIKIPEDIA-EULER: Leonhard Euler. (2010). http://en.wikipedia.org/wiki/Euler - zitiert auf S. 220.

[Wikipedia-Feynman 2010]
WIKIPEDIA-FEYNMAN: Richard Feynman. (2010). http://en.wikipedia.org/wiki/Richard_feynman - zitiert auf S. 42.

[Wikipedia-Hawking 2010]
WIKIPEDIA-HAWKING: Stephen Hawking. (2010). http://en.wikipedia.org/wiki/Stephen_Hawking - zitiert auf S. 106.

[Wikipedia-Kleinert 2011]
WIKIPEDIA-KLEINERT: Hagen Kleinert. (2011). http://de.wikipedia.org/wiki/Hagen_Kleinert - zitiert auf S. 43.

[Wikipedia-Poincaré 2011]
WIKIPEDIA-POINCARÉ: Jules Henri Poincaré. (2011). http://en.wikipedia.org/wiki/Henri_Poincar%C3%A9 - zitiert auf S. 156.

[Wikipedia-RenormalisationGroup 2008]
WIKIPEDIA-RENORMALISATIONGROUP: Renormalisation Group. (2008). http://en.wikipedia.org/wiki/Renormalisation_group - zitiert auf S. 146.

[Wikipedia-Renormalization 2008]
WIKIPEDIA-RENORMALIZATION: Renormalization. (2008). http://en.wikipedia.org/wiki/Renormalization - zitiert auf S. 146.

[Wikipedia-Riemann 2010]
WIKIPEDIA-RIEMANN: Bernhard Riemann. (2010). http://de.wikipedia.org/wiki/Riemann - zitiert auf S. 240.

[Wikipedia-Riemann-Hypothesis 2010]
WIKIPEDIA-RIEMANN-HYPOTHESIS: Riemann Hypothesis. (2010). http://en.wikipedia.org/wiki/Riemann_hypothesis - zitiert auf S. 248, 259.

[Wikipedia-Ruelle 2011]
WIKIPEDIA-RUELLE: David Ruelle. (2011). `http://de.wikipedia.org/wiki/DavidRuelle` - zitiert auf S. 157.

[Wikipedia-Wilson 2010]
WIKIPEDIA-WILSON: Kenneth Wilson. (2010). `http://en.wikipedia.org/wiki/Kenneth_G._Wilson` - zitiert auf S. 146.

[Wong 1999]
WONG, Man W.: *Pseudo-Differential Operators.* World Scientific Pub. Co., Singapore, 1999 - zitiert auf S. 327, 348.

[Zagier 1997]
ZAGIER, D.: Newman's Short Proof of the Prime Number Theorem. In: *American Mathematical Monthly* 104 (1997), 705-708. `http://mathdl.maa.org/images/upload_library/22/Chauvenet/Zagier.pdf` - zitiert auf S. 256.

[Zeidler 2006]
ZEIDLER, Eberhard: *Quantum Field Theory I: Basics in Mathematics and Physics.* Springer Verlag, Berlin, 2006 - zitiert auf S. 138, 201, 370.

[Zinn-Justin 2002]
ZINN-JUSTIN, Jean: *Quantum Field Theory and Critical Phenomena.* 4. Ed. Oxford Science Publications, Clarendon Press Oxford,GB, 2002 - zitiert auf S. 127, 130, 131, 144, 147.