

Eigenschaften des Spektrums periodischer Schrödingeroperatoren

Bachelorarbeit

Karim Zantout

Institut für Mathematik
Goethe-Universität Frankfurt
Frankfurt am Main

20. Januar 2021

Betreuer:

Prof. Dr. Tobias Weth

Zweitgutachterin:

Prof. Dr. Birgit Schörkhuber

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere an Eides statt durch meine eigene Unterschrift, dass ich die vorstehende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und alle Stellen, die wörtlich oder annähernd wörtlich aus Veröffentlichungen genommen sind, als solche kenntlich gemacht habe. Die Versicherung bezieht sich auch auf in der Arbeit gelieferte Zeichnungen, Skizzen, bildliche Darstellungen und dergleichen.

Datum: 16.11.2020

Unterschrift:

Inhaltsverzeichnis

Eidesstattliche Erklärung	i
Inhaltsverzeichnis	ii
KAPITEL 1. Einleitung und mathematische Grundlagen	1
1.1. Die Fourier-Transformation	1
1.2. Lineare Operatoren	3
1.3. Der kinetische Energie-Operator	8
1.4. Sobolev-Räume	11
1.5. Der potentielle Energie-Operator	16
KAPITEL 2. Physikalische Motivation	18
KAPITEL 3. Operator-Analysis für Schrödingeroperatoren	21
3.1. Spektrum selbstadjungierter linearer Operatoren	21
3.2. Kato-Störungstheorie	26
3.3. Die direkte Integral-Zerlegung	28
KAPITEL 4. Charakterisierung der Periodizität	43
4.1. Direktes Gitter	43
4.2. Reziprokes Gitter	44
KAPITEL 5. Eindimensionale periodische Schrödingeroperatoren	45
5.1. Die unitäre Transformation U_p	45
5.2. Die Floquet-Transformation	48
5.3. Die Bandstruktur des Spektrums	54
KAPITEL 6. Mehrdimensionale periodische Schrödingeroperatoren	60
KAPITEL 7. Eigenschaften des Randes des Energiespektrums	65
7.1. Einleitung	65
7.2. Der Operator $T_1(k_2, \lambda)$	66
7.3. Beweise der Hilfsaussagen	69
KAPITEL 8. Zusammenfassung und Ausblick	77
Anhang A. Der messbare Funktionalalkül und das Spektraltheorem	78
Anhang B. Distributionentheorie	81
Anhang. Literaturverzeichnis	83

Einleitung und mathematische Grundlagen

Ein prominentes Anwendungsgebiet der Theorie periodischer Schrödingeroperatoren ist die Festkörperphysik. Hierunter fällt unter anderem das Studium der Eigenschaften von Festkörpern und ihrer theoretischen Modellierung auf der Ebene von Atomen und Molekülen (siehe beispielsweise [1]). So lässt sich für viele Materialien unter bestimmten Voraussetzungen und nach Verwendung geschickter Näherungen zum Beispiel die Farbe, die elektrische Leitfähigkeit und vieles mehr alleine aus der Struktur und der Kenntnis der auftretenden Atome berechnen.

Dies ist nicht nur aus Sicht der wissenschaftlichen Forschung von Interesse, sondern bietet auch in wirtschaftlichen wie ökologischen Bereichen viele Möglichkeiten der Innovation und Optimierung. Es ist daher nicht verwunderlich, dass großes Interesse an der Struktur und den Aussagen der zugrundeliegenden Mathematik herrscht; nicht zu schweigen von der Bedeutung innerhalb der Mathematik (siehe z.B. [2]).

Die fundamentale Größe, die zur Berechnung der oben beschriebenen physikalischen Eigenschaften eingeht, ist dabei das Spektrum des periodischen Schrödingeroperators, der das Material mathematisch beschreibt. Bei einem Schrödingeroperator handelt es sich um einen Operator der Form

$$-\Delta + V,$$

wobei der Laplaceoperator Δ mit der kinetischen Energie des quantenmechanischen Teilchens im Zusammenhang steht und V ein Multiplikationsoperator ist, der zur potentiellen Energie des quantenmechanischen Teilchens korrespondiert.

In diesem Kapitel werden zunächst Grundlagen aus der linearen Funktionalanalysis wiederholt. Daraufhin wird in Kapitel 2 die Form des periodischen Schrödingeroperators aus der Festkörperphysik motiviert. Die wichtigsten Begriffe zum Spektrum eines Operators und weitere mathematische Werkzeuge, die für die Bestimmung des Spektrums hilfreich sind, werden in Kapitel 3 präsentiert.

Bevor wir in Kapitel 5 und 6 grundlegende Eigenschaften des Spektrums periodischer Schrödingeroperatoren im eindimensionalen bzw. mehrdimensionalen Fall herleiten, stellen wir in Kapitel 4 die wesentlichen Begriffe zur Charakterisierung der Periodizität in einem Kristall vor.

Ein weiteres modernes Problem zum Rand des Spektrums zweidimensionaler periodischer Schrödingeroperatoren wird in Kapitel 7 vorgestellt. Schließlich endet diese Arbeit mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick in Kapitel 8.

Zur Zitierweise: In dieser Arbeit werden zu Beginn jedes Abschnitts die Quellen genannt, an denen sich der jeweilige Abschnitt orientiert. Im Falle, dass einzelne Aussagen, Definitionen oder Beweise aus anderen Quellen entnommen sind, werden diese an gegebener Stelle in Klammern referenziert.

1.1. Die Fourier-Transformation

Der Inhalt dieses Abschnitts beruht auf Ref. [3] Kapitel 10, Ref. [4] Kapitel IX, Ref. [5] Kapitel V und Ref. [6] Kapitel 3.

1.1. Fourier-Transformation

Für die Bestimmung des Spektrums partieller Differentialoperatoren mit konstanten Koeffizienten – wie sie in Schrödingeroperatoren der Quantenmechanik oft vorkommen – ist die Theorie der Fourier-Transformation ein sehr nützliches Hilfsmittel. Wir wollen ihr daher diesen besonderen Platz einräumen und einige wichtige Erkenntnisse hierzu rekapitulieren.

Die Fourier-Transformation sei zunächst auf dem Banachraum $(L^1(\mathbb{R}^n), \lambda)$, $n \in \mathbb{N}$, definiert, wobei λ das Lebesgue-Maß bezeichne.

DEFINITION+SATZ 1.1.1 (Fourier-Transformation auf L^1). Die Abbildung

$$(1.1) \quad \begin{aligned} \mathcal{F} : L^1(\mathbb{R}^n) &\rightarrow (C_0(\mathbb{R}^n), \|\cdot\|_\infty) \\ f &\mapsto \hat{f}, \end{aligned}$$

wobei $\hat{f}(k) := (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-x \cdot k} dx$, $k \in \mathbb{R}^n$, ist eine wohldefinierte stetige lineare Abbildung. Es gilt zudem für alle $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$:

(i) Für $a \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left(e^{ia \cdot (\cdot)} f(\cdot)\right)(k) &= \hat{f}(k - a) \quad \forall k \in \mathbb{R}^n \\ \mathcal{F}(f(\cdot - a))(k) &= e^{-ia \cdot k} \hat{f}(k) \quad \forall k \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

(ii) Sei $\lambda > 0$, dann ist $\mathcal{F}\left(f\left(\frac{\cdot}{\lambda}\right)\right)(k) = \lambda^n \hat{f}(\lambda k) \quad \forall k \in \mathbb{R}^n$.

(iii) $f \star g \in L^1(\mathbb{R}^n)$ und $\mathcal{F}(f \star g) = (2\pi)^{n/2} \hat{f} \hat{g} \quad \forall k \in \mathbb{R}^n$, wobei \star die Konvolution bezeichnet.

(iv) Falls die Abbildung $x \mapsto h(x) := x_j f(x)$ für ein $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ in $L^1(\mathbb{R}^n)$ liegt, so ist \hat{f} stetig partiell nach k_j differenzierbar mit $\partial_j \hat{f}(k) = -i \hat{h}(k) \quad \forall k \in \mathbb{R}^n$.

(v) Falls $f \in C^1(\mathbb{R}^n) \cap L^1(\mathbb{R}^n)$ und die Abbildung $x \mapsto h(x) := \partial_j f(x)$ für ein $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ in $L^1(\mathbb{R}^n)$ liegt, so ist $ik_j \hat{f}(k) = \hat{h}(k) \quad \forall k \in \mathbb{R}^n$.

(vi) $\int_{\mathbb{R}^n} f(x) \hat{g}(x) dx = \int_{\mathbb{R}^n} g(x) \hat{f}(x) dx$.

(vii) Falls $f, g \in C_b(\mathbb{R}^n) \cap L^1(\mathbb{R}^n)$ und $\hat{f}, \hat{g} \in L^1(\mathbb{R}^n)$, dann ist $f(0) \int_{\mathbb{R}^n} \hat{g}(x) dx = g(0) \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(x) dx$.

BEMERKUNG 1.1.2. Alternativ kann man die Fourier-Transformation auch zunächst auf dem Schwartz-Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^1(\mathbb{R}^n)$ definieren. Auf diesem Raum ist die Fourier-Transformation bijektiv und man kann sie dann nicht nur eindeutig zu einer Bijektion auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ fortsetzen, sondern auch zu einer Bijektion auf dem Raum der temperierten Distributionen $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ erweitern (siehe z.B. [4] Abschnitt IX.1, [3] Teil I oder [6] Abschnitt 3.1). In Appendix B sind die wichtigsten Ergebnisse für diese Arbeit zusammengestellt.

Man kann beweisen, dass die Fourier-Transformation auf $L^1(\mathbb{R}^n)$ injektiv aber nicht surjektiv ist ([6], Theorem 3.1.15), weshalb eine geschlossene Integralformel für die inverse Fourier-Transformation nur unter bestimmten Bedingungen existiert.

THEOREM 1.1.3. Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap C_b(\mathbb{R}^n)$ und $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$, dann gilt

$$(1.2) \quad f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ik \cdot x} \hat{f}(k) dk \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

THEOREM 1.1.4. Sei $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$, dann gilt

$$(1.3) \quad \mathcal{F}^* \hat{f}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ik \cdot x} \hat{f}(k) dk$$

fast überall.

Es existiert eine eindeutige unitäre Fortsetzung der Fourier-Transformation auf dem für viele Schrödingeroperatoren grundlegenden Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^n)$:

THEOREM 1.1.5. *Zur Fourier-Transformation \mathcal{F} existiert eine eindeutige unitäre Fortsetzung (ebenfalls mit \mathcal{F} bezeichnet) $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ und es gilt die sogenannte Plancherel-Identität*

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\hat{f}(k)|^2 dk = \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 dx \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^n).$$

Leider kann die L^2 -Fourier-Transformation nicht mehr die einfache Integral-Darstellung aus Definition 1.1.1 haben, da $L^2(\mathbb{R}^n) \setminus L^1(\mathbb{R}^n) \neq \emptyset$. Alternativ kann man die L^2 -Fourier-Transformation für $r > 0$, $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $k \in \mathbb{R}^n$ durch den folgenden Grenzwert darstellen:

$$\mathcal{F}_r(f)(k) := (2\pi)^{-n/2} \int_{B_r(0)} e^{-ik \cdot x} f(x) dx$$

(1.4) $\lim_{r \rightarrow \infty} \|\mathcal{F}_r(f) - \mathcal{F}(f)\|_2 = 0.$

Dies folgt aus Theorem 1.1.5, da $\mathcal{F}_r(f) = \mathcal{F}(f_r)$ mit $f_r := f 1_{B_r(0)} \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ und $f_r \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f$ in $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Die wesentlichen Zusammenhänge zur Fourier-Transformation sind in Tabelle 1 zusammengestellt.

Fourier-Transformation	Eigenschaften	Darstellung
$\mathcal{F} : L^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow C_0(\mathbb{R}^n)$	injektiv, nicht surjektiv	Gleichung (1.1)
$\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$	bijektiv, isometrisch	Gleichung (1.4)
$\mathcal{F} : S(\mathbb{R}^n) \rightarrow S(\mathbb{R}^n)$	bijektiv	Gleichungen (1.4), (1.2)
$\mathcal{F} : S(\mathbb{R}^n)' \rightarrow S(\mathbb{R}^n)'$	bijektiv	Gleichungen (B.1), (B.2)

TABELLE 1. Eigenschaften der Fourier-Transformationen.

1.2. Lineare Operatoren

Der Inhalt dieses Abschnitts beruht im Wesentlichen auf Ref. [3] Kapitel 20, Ref. [7] und Ref. [8].

Die mathematische Beschreibung eines Teilchens in der Quantenmechanik nach der Kopenhagener Deutung (siehe z.B. [9]) erfolgt über sogenannte Wellenfunktionen, welche als Wahrscheinlichkeitsamplitude interpretiert werden.

Ein Teilchen, welches sich im \mathbb{R}^n , $n \in \{1, 2, 3\}$ befindet, wird demnach durch ein Element des Hilbertraums $(L^2(\mathbb{R}^n, \lambda), \langle \cdot, \cdot \rangle)$ beschrieben, wobei λ das Lebesgue-Maß bezeichne. Um physikalische Messgrößen und Eigenschaften oder die Dynamik des Teilchens beschreiben zu können, benötigt man die folgenden Definitionen.

Sei von nun an \mathcal{H} stets ein \mathbb{C} -Hilbertraum.

DEFINITION 1.2.1 (Linearer Operator). Die Abbildung $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ heißt (*linearer*) *Operator auf \mathcal{H}* , falls $D(A) \subset \mathcal{H}$ ein Untervektorraum ist und A eine \mathbb{C} -lineare Abbildung ist, d.h.

$$A(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha A\psi_1 + \beta A\psi_2 \quad \forall \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H} \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}.$$

Der Teilraum $D(A)$ wird als *Domäne von A* bezeichnet.

Ist $D(A) \subset \mathcal{H}$ dicht, so nennt man A *dicht definiert*.

1.2. Lineare Operatoren

BEMERKUNG 1.2.2. Im Falle, dass der lineare Operator $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ injektiv ist, d.h. $\ker(A) = \{0\}$, existiert ein linearer Operator $B : D(B) \rightarrow \mathcal{H}$ mit $Bx = x$ für alle $x \in D(A)$, wobei $D(B) = \text{im}(A)$. Der Operator B ist wegen der Linearität von A wohldefiniert und eindeutig aufgrund der Injektivität von A . Er wird als *inverser Operator von A* bezeichnet.

DEFINITION 1.2.3 (Erweiterung/Einschränkung einer Operators). Seien A, B lineare Operatoren in \mathcal{H} . Man nennt B eine *Erweiterung von A* , symbolisch $A \subset B$, falls $D(A) \subset D(B)$ und $Ax = Bx$ für alle $x \in D(A)$. Umkehrt heißt A auch *Einschränkung von B* und man schreibt $A = B|_{D(A)}$.

BEISPIEL 1.2.4. Wir betrachten den \mathbb{C} -Hilbertraum $\mathcal{H} = (L^2((0, 1), \lambda), \langle \cdot, \cdot \rangle)$ und die linearen Operatoren $A_i : D(A_i) \rightarrow \mathcal{H}$, $i = 1, 2$, gegeben durch $A_i \psi(x) := \frac{1}{x} \psi(x) \forall \psi \in D(A_i) \forall x \in (0, 1)$, wobei

$$D(A_1) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi \text{ stetig, } \text{supp}(\psi) \subset (0, 1)\}$$

und

$$D(A_2) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \frac{1}{\cdot} \psi(\cdot) \in \mathcal{H}\}.$$

Offensichtlich gilt $D(A_1) \subsetneq D(A_2) \subsetneq \mathcal{H}$ und $A_1 \subset A_2$.

Innerhalb der Quantenmechanik werden Messgrößen durch selbstadjungierte Operatoren auf einem Hilbertraum repräsentiert, da Messgrößen reell sind und das Spektrum solcher Operatoren reell ist (siehe Kapitel 3 Abschnitt 3.1).

Bevor wir zum Begriff der Selbstadjungiertheit gelangen, benötigen wir den sogenannten adjungierten Operator.

DEFINITION+SATZ 1.2.5 (Adjungierter Operator). Sei A ein dicht definierter Operator in \mathcal{H} , dann existiert ein eindeutiger Operator A^* auf \mathcal{H} , sodass

$$(1.5) \quad \langle x, Ay \rangle = \langle A^*x, y \rangle \quad \forall x \in D(A^*) \forall y \in D(A)$$

gilt. Die Domäne von A^* sei dabei durch

$$(1.6) \quad D(A^*) := \{x \in \mathcal{H} \mid \exists C_x < \infty, \text{ sodass } |\langle x, Ay \rangle| \leq C_x \|y\| \forall y \in D(A)\}$$

gegeben und A^* wird als der *zu A adjungierte Operator* bezeichnet.

Der Operator A^* ist maximal innerhalb der Menge

$$\mathcal{B} := \{B : D(B) \rightarrow \mathcal{H} \mid \langle x, Ay \rangle = \langle Bx, y \rangle \quad \forall x \in D(B) \forall y \in D(A)\},$$

d.h. $B \subset A^*$ für alle $B \in \mathcal{B}$.

BEWEIS. Mithilfe der Eigenschaften des Skalarprodukts sieht man sofort ein, dass $D(A^*)$ ein linearer Unterraum von \mathcal{H} ist und offensichtlich $0 \in D(A^*)$.

Sei $x \in D(A^*)$ ein beliebiges festes Element in \mathcal{H} und man betrachte die lineare Abbildung $T_{x,D(A)} : D(A) \rightarrow \mathbb{C}$ definiert durch $T_{x,D(A)}(y) := \langle Ay, x \rangle \quad \forall y \in D(A)$. Der Operator $T_{x,D(A)}$ ist wegen Gl. (1.6) zudem noch beschränkt durch $|T_{x,D(A)}(y)| \leq C_x \|y\|$ für alle $y \in D(A)$. Also existiert aufgrund der Dichtdefiniertheit eine eindeutige lineare Fortsetzung T_x von $T_{x,D(A)} \in D(A)'$, sodass $T_x \in \mathcal{H}'$ und $\|T_x\| = \|T_{x,D(A)}\|$ ([5] Satz II.1.5).

Nach dem Darstellungssatz von Fréchet-Riesz ([5] Theorem V.3.6) existiert ein eindeutiges $x^* \in \mathcal{H}$, sodass $T_x(y) = T_{x,D(A)}(y) = \langle y, x^* \rangle \quad \forall y \in D(A)$.

Wir definieren nun A^* eindeutig durch $A^*x := x^*$; die Linearität von A^* folgt sofort aus der Sesquilinearität des Skalarprodukts.

Der Operator A^* erfüllt dann per Konstruktion die Gl. (1.5).

Sei $B \in \mathcal{B}$, dann ist $D(B) \subset D(A^*)$ aufgrund der Cauchy-Schwarz-Ungleichung und wir finden für $x \in D(B)$, dass $\langle Bx, y \rangle = \langle x, Ay \rangle = \langle A^*x, y \rangle$. Damit gilt $Bx - A^*x \in D(A)^\perp = \{0\}$, da A dicht definiert ist. Somit folgt $B \subset A^*$. \square

LEMMA 1.2.6. Sei A ein dicht definierter Operator in \mathcal{H} , dann gilt

$$(\operatorname{im} A)^\perp = \ker A^*.$$

BEWEIS. Sei $y \in (\operatorname{im} A)^\perp$. Es gelten dann die Äquivalenzen

$$\begin{aligned} 0 &= \langle y, Ax \rangle \quad \forall x \in D(A) \\ \Leftrightarrow y &\in D(A^*), \quad 0 = \langle A^*y, x \rangle \quad \forall x \in D(A) \\ \Leftrightarrow A^*y &= 0. \end{aligned}$$

Die letzte Äquivalenz begründet sich dadurch, dass A dicht definiert ist. \square

LEMMA 1.2.7. Ist A ein dicht definierter injektiver Operator auf \mathcal{H} mit dichtem Bild $\operatorname{im} A \subset \mathcal{H}$, dann ist der zu A adjungierte Operator A^* invertierbar. Die Inverse ist gegeben durch

$$(A^*)^{-1} = (A^{-1})^*.$$

BEWEIS. Nach Lemma 1.2.6 ist $\{0\} = (\operatorname{im} A)^\perp = \ker A^*$, also ist A^* injektiv und besitzt eine eindeutige Inverse $(A^*)^{-1}$ mit $D((A^*)^{-1}) = \operatorname{im} A^*$.

Es bleibt zu zeigen, dass $D((A^*)^{-1}) = D((A^{-1})^*)$ und $(A^*)^{-1}x = (A^{-1})^*x$ für x in der gemeinsamen Domäne.

Sei $x \in D((A^*)^{-1}) = \operatorname{im} A^*$, d.h. $\exists! x' \in D(A^*)$ mit $x = A^*x'$ bzw. $(A^*)^{-1}x = x'$. Wir berechnen für beliebiges $y \in D(A^{-1})$

$$|\langle x, A^{-1}y \rangle| = |\langle A^*x', \underbrace{A^{-1}y}_{\in D(A)} \rangle| = |\langle x', AA^{-1}y \rangle| \leq \|x'\| \|y\| = \underbrace{\|(A^*)^{-1}x\|}_{=: c_x \leq \infty} \|y\|.$$

Nach Gl. (1.6) ist somit $x \in D((A^{-1})^*)$.

Ist andererseits $x \in D((A^{-1})^*)$ und $y \in D(A^{-1}) = \operatorname{im} A$ mit Urbild $x' \in D(A)$, d.h. $Ax' = y$, dann gilt

$$(1.7) \quad \langle A^*(A^{-1})^*x, x' \rangle = \langle (A^{-1})^*x, y \rangle = \langle x, A^{-1}y \rangle = \langle (A^{-1})^*x, Ax' \rangle = \langle x, x' \rangle.$$

Da $D(A) \subset \mathcal{H}$ dicht ist, gilt somit $A^*((A^{-1})^*x) = x$, also $x \in \operatorname{im} A^*$ und $(A^{-1})^*x = (A^*)^{-1}x$. \square

Zur weiteren Charakterisierung von Operatoren folgen nun weitere Definitionen.

DEFINITION 1.2.8 (Graph eines Operators, abschließbar/abgeschlossene Operatoren und Abschließung). Sei A ein Operator auf \mathcal{H} .

(i) Wir definieren den *Graphen von A* , symbolisch $\Gamma(A)$, durch

$$\Gamma(A) := \{(x, y) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H} \mid x \in D(A), y = Ax\}$$

(ii) Der Operator A heißt *abgeschlossen*, falls $\Gamma(A) \subset \mathcal{H} \times \mathcal{H}$ abgeschlossen ist.

(iii) Wir nennen A *abschließbar*, wenn $\overline{\Gamma(A)}$ der Graph eines (dadurch eindeutig bestimmten) Operators \overline{A} in \mathcal{H} ist. Der Operator \overline{A} wird als *Abschließung von A* bezeichnet.

Der wesentliche Unterschied zwischen abgeschlossenen und stetigen Operatoren besteht darin, dass im Falle eines stetigen Operators A aus der Konvergenz von $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A)$ bereits die Konvergenz der Bildfolge $(Ax_n)_{n \in \mathbb{N}}$ folgt.

Äquivalente Darstellungen der Definitionen werden im Folgenden gegeben.

PROPOSITION 1.2.9. Sei A ein Operator auf \mathcal{H} .

(i) A ist abgeschlossen genau dann, wenn für jede Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A)$ mit $x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x \in \mathcal{H}$ und die Bildfolge $(Ax_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y \in \mathcal{H}$ folgt, dass $x \in D(A)$ und $Ax = y$.

1.2. Lineare Operatoren

- (ii) Das Paar $(D(A), \|\cdot\|_A)$ mit $\|x\|_A = \|x\| + \|Ax\| \forall x \in D(A)$ ist ein Banachraum genau dann, wenn A abgeschlossen ist.
- (iii) A ist abschließbar genau dann, wenn für jede Null-Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A)$ und Bildfolge $(Ax_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y \in \mathcal{H}$ folgt, dass $y = 0$.

BEWEIS. Zu (i): Folgt sofort aus der Definition.

Zu (ii): A ist abgeschlossen genau dann, wenn $\Gamma(A) \subset \mathcal{H} \times \mathcal{H}$ abgeschlossen und somit auch vollständig ist ([5] Lemma I.1.3). Wegen $\|(x, Ax)\|_{\mathcal{H} \times \mathcal{H}} = \|x\|_A$ für alle $x \in D(A)$ ist dies äquivalent zur Vollständigkeit von $(D(A), \|\cdot\|_A)$.

Zu (iii): Angenommen A ist abschließbar. Sei $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A) \subset D(\bar{A})$ eine Nullfolge. Wegen $\bar{A}x_n = Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y \in \mathcal{H}$ folgt aus (i), dass $y = \bar{A}0 = 0$.

Wir müssen zeigen, dass $\overline{\Gamma(A)}$ der Graph des Abschlusses \bar{A} ist, falls dieser existiert. Der Operator \bar{A} hat als Domäne offensichtlich

$$D(\bar{A}) := \{x \in \mathcal{H} : \exists (x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A), x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x, Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \underbrace{y}_{=: \bar{A}x} \in \mathcal{H}\}.$$

Damit \bar{A} wohldefiniert sein kann, muss für $\bar{A}x = y$ der Wert y unabhängig von der Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \in D(A)$, $x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x$, sein. Hierzu sei $(x'_n)_{n \in \mathbb{N}} \in D(A)$, $x'_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x$ und $Ax'_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y'$, eine weitere Folge. Es ist zu zeigen, dass $y = y'$. Dies ist tatsächlich der Fall, denn aus $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n - x'_n = 0$ folgt $y - y' = 0$ nach Voraussetzung.

Die Linearität von \bar{A} folgt aus der Linearität von $D(\bar{A})$ und der Linearität des Limes. Es fehlt also noch die Abgeschlossenheit von \bar{A} . Sei dazu $(x, y) \in \overline{\Gamma(A)}$ und

$$(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(\bar{A}), x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x, \bar{A}x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y.$$

Wir müssen zeigen, dass $x \in D(\bar{A})$ und $\bar{A}x = y$. Für alle $n \in \mathbb{N}$ finden wir passende $x'_n \in D(A)$, sodass

$$\|x_n - x'_n\| + \|\bar{A}x_n - Ax'_n\| < \frac{1}{n}.$$

Damit gilt $x'_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x$ und $Ax'_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y$, also $x \in D(\bar{A})$ und $y = \bar{A}x$. \square

Es folgen weitere Eigenschaften zur Struktur von Operatoren.

THEOREM 1.2.10. *Sei A ein dicht definierter Operator auf \mathcal{H} . Dann gilt:*

- (i) Für einen Operator B auf \mathcal{H} gilt: $A \subset B \Rightarrow B^* \subset A^*$.
- (ii) $A^* = \bar{A}^*$.
- (iii) A ist abschließbar genau dann, wenn A^* dicht definiert. In diesem Fall ist $\bar{A} = (A^*)^* =: A^{**}$.

Wir wollen uns nun den Klassen von Operatoren zuwenden, die in dieser Arbeit eine zentrale Rolle einnehmen werden. Hierbei sind dicht definierte Operatoren die Grundlage, da wir in einem solchen Fall von einem eindeutigen adjungierten Operator sprechen können (siehe Satz 1.2.5).

Der Begriff der Selbstadjungiertheit ist ähnlich zu dem aus der linearen Algebra, aber weist einige Besonderheiten in unendlich-dimensionalen Hilberträumen auf.

DEFINITION 1.2.11 (Symmetrischer, selbstadjungierter und wesentlich selbstadjungierter Operator). Sei A ein dicht definierter Operator auf \mathcal{H} . Dann heißt A

- (i) *symmetrisch*, falls $\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle \forall x, y \in D(A)$ oder äquivalent: $A \subset A^*$,
- (ii) *normal*, falls A abgeschlossen ist und $AA^* = A^*A$,
- (iii) *selbstadjungiert*, falls $A = A^*$,
- (iv) *wesentlich selbstadjungiert*, falls A symmetrisch und \bar{A} selbstadjungiert ist (zur Wohldefiniertheit siehe Korollar 1.2.12(i)).

- KOROLLAR 1.2.12.** (i) Sei A ein symmetrischer Operator auf \mathcal{H} , dann ist A abschließbar und es gilt $\bar{A} = A^{**}$ und \bar{A} ist ebenfalls symmetrisch.
(ii) Ist A ein dicht definierter und abschließbarer Operator auf \mathcal{H} , dann gilt $(\bar{A})^* = A^*$.
(iii) Falls A wesentlich selbstadjungiert ist, gilt $A^* = A^{**} = \bar{A}$.
(iv) Ein selbstadjungierter Operator ist insbesondere wesentlich selbstadjungiert.
(v) Wesentlich selbstadjungierte Operatoren besitzen eine eindeutige selbstadjungierte Erweiterung, nämlich ihren Abschluss.
(vi) Sei N ein normaler Operator, dann ist $D(N) = D(N^*)$ und $\|Nx\| = \|N^*x\|$ für alle $x \in D(N)$.

BEWEIS. Zu (i): Da der adjungierte Operator eines symmetrischen Operators auch dicht definiert ist, folgt mit Satz 1.2.10(iii), dass A abschließbar ist mit $\bar{A} = A^{**}$. Nach Satz 1.2.10(i) folgt somit aus $A \subset A^*$, dass $A^{**} = \bar{A} \subset A^*$. Damit folgt die Symmetrie von \bar{A} aus Satz 1.2.10(i), denn $\bar{A} \subset A^*$ induziert $\bar{A} = A^{**} \subset (\bar{A})^*$.

Zu (ii): Erneut folgern wir mittels Satz 1.2.10(i), dass aus $A \subset \bar{A}$ auch $(\bar{A})^* \subset A^*$ gilt. Es fehlt nun zu zeigen, dass $A^* \subset (\bar{A})^*$. Sei hierzu $x \in D(A^*)$ und $y = A^*x$. Sei weiterhin $x' \in D(\bar{A})$ und $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A)$ mit $x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x'$ und $Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \bar{A}x'$. Es folgt

$$\langle y, x' \rangle = \langle A^*x, x' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle A^*x, x_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x, Ax_n \rangle = \langle x, \bar{A}x' \rangle.$$

Damit ist $x \in D((\bar{A})^*)$ und $y = (\bar{A})^*x$.

Zu (iii): Dies folgt sofort aus (i) und (ii).

Zu (iv): Dies folgt ebenfalls aus (i) und (ii).

Zu (v): Nach (ii) und (iii) ist mit dem Abschluss \bar{A} eine selbstadjungierte Erweiterung von A gegeben.

Sei B eine selbstadjungierte Erweiterung von A , dann gilt nach Satz 1.2.10(i): $B^* \subset A^*$ und $A^{**} \subset B^{**}$. Mit (iii) folgt dann $B = B^* \subset A^* = A^{**} \subset B^{**} = B$, also $B = A^* = \bar{A}$.

Zu (vi): Siehe [10], Theorem 13.32. \square

Innerhalb der Quantenmechanik werden physikalische Messgrößen wie die Energie eines Teilchens oft¹ durch selbstadjungierte Schrödingeroperatoren repräsentiert (siehe z.B. [9]). Die bisherigen Ergebnisse zur Charakterisierung dicht definierter Operatoren sind in Tabelle 2 dargestellt. Wir präsentieren noch eine wichtige Eigenschaft selbstadjungierter Operatoren.

LEMMA 1.2.13. Sei $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ ein dicht definierter Operator und $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer stetiger Operator. Dann gilt $(TA)^* = A^*T^*$.

BEWEIS. Es gilt $D(A^*T^*) = \{f \in \mathcal{H} \mid T^*f \in D(A^*)\}$. Sei nun $f \in D(A^*T^*)$ und $g \in D(TA)$, dann ist $\langle A^*T^*f, g \rangle = \langle T^*f, Ag \rangle = \langle f, TAG \rangle$ und somit $A^*T^* \subset (TA)^*$ nach Satz 1.2.5.

Sei nun $f \in D((TA)^*)$ und $g \in D(TA) = D(A)$. Dann gilt $\langle (TA)^*f, g \rangle = \langle f, TAG \rangle = \langle T^*f, Ag \rangle$, weshalb $T^*f \in D(A^*)$ und somit $f \in D(A^*T^*)$. Schließlicht folgt $(TA)^* = A^*T^*$. \square

Die Eigenschaft eines Operators selbstadjungiert zu sein, hängt entscheidend von der Domäne des Operators ab. Der folgende Satz gibt äquivalente Formulierungen von Selbstadjungiertheit.

¹Im Allgemeinen wird es sich um selbstadjungierte Operatoren (Hamiltonoperatoren) handeln, die auf einem dem Problem zugeschnittenen Hilbertraum operieren. Da das quantenmechanische Teilchen, das wir in dieser Arbeit betrachten, im Kontinuum \mathbb{R}^n lebt, handelt es sich bei dem Hamiltonoperator insbesondere um einen Schrödingeroperator (siehe Kapitel 2).

1.3. kinetische Energie

A dicht definierter Operator in \mathcal{H}		
Eigenschaften	Folgerungen	
A		$A^* = \overline{A^*}$
A abschließbar	A^* dicht def., $(\overline{A})^* = A^*$	$A \subset \overline{A} = A^{**}$
A symmetrisch	A abschließbar	$A \subset \overline{A} = A^{**} \subset A^*$
A abg. und symm.		$A = \overline{A} = A^{**} \subset A^*$
A wesentlich selbstadj.	\overline{A} eind. selbstadj. Erweiter.	$A \subset \overline{A} = A^{**} = A^*$
A selbstadj.		$A = \overline{A} = A^{**} = A^*$

TABELLE 2. Folgerungen, die sich aus bestimmten Eigenschaften dicht definierter Operatoren in \mathcal{H} ergeben.

THEOREM 1.2.14. *Sei A ein symmetrischer Operator auf \mathcal{H} , dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:*

- (i) $A = A^*$,
- (ii) $A = \overline{A}$ und $\ker(A^* \pm i) = \{0\}$,
- (iii) $\operatorname{im}(A \pm i) = \mathcal{H}$.

LEMMA 1.2.15. *Für einen symmetrischen Operator A auf \mathcal{H} gilt*

$$\overline{\operatorname{im}(A \pm i)} = \operatorname{im}(\overline{A} \pm i).$$

BEWEIS. " \subseteq ": Sei $y^\pm \in \overline{\operatorname{im}(A \pm i)}$, dann existiert eine Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A)$, sodass $y^\pm = \lim_{n \rightarrow \infty} y_n^\pm$, wobei $(y_n^\pm)_{n \in \mathbb{N}} := (Ax_n \pm ix_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Zudem gilt

$$\|y_n^\pm - y_m^\pm\|^2 = \|A(x_n - x_m) \pm i(x_n - x_m)\|^2 = \|A(x_n - x_m)\|^2 + \|x_n - x_m\|^2$$

für alle $n, m \in \mathbb{N}$. Damit sind $(Ax_n)_{n \in \mathbb{N}}, (x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H}$ ebenfalls Cauchyfolgen. Es folgt $x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x \in \mathcal{H}$, $Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \overline{A}x \in \mathcal{H}$ und damit $y^\pm = \overline{A}x \pm ix \in \operatorname{im}(\overline{A} \pm i)$.

" \supseteq ": Dieselbe Argumentation funktioniert auch umgekehrt. \square

Hieraus lassen sich nun auch Formulierungen für die Äquivalenz von wesentlicher Selbstadjungiertheit eines Operators formulieren.

KOROLLAR 1.2.16. *Sei A ein symmetrischer Operator auf \mathcal{H} , dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:*

- (i) A ist wesentlich selbstadjungiert,
- (ii) $\ker(A^* \pm i) = \{0\}$,
- (iii) $\overline{\operatorname{im}(A \pm i)} = \mathcal{H}$.

BEWEIS. A ist genau dann wesentlich selbstadjungiert, wenn \overline{A} (symmetrisch und) \overline{A} selbstadjungiert ist. Nach Korollar 1.2.12(ii) bedeutet dies $\overline{A} = \overline{A^*} = A^*$. Die Äquivalenzen folgen nun mittels Satz 1.2.14 und Lemma 1.2.15. \square

1.3. Der kinetische Energie-Operator

Der Inhalt dieses Abschnitts beruht im Wesentlichen auf Ref. [11] und Ref. [12] Abschnitt 9.7 und 9.8.

Auch wenn es viele physikalische Experimente gibt, die mittels der klassischen Newton-Mechanik oder Maxwell-Elektrodynamik nicht erklärt werden können, so enthalten sie doch viele Prinzipien, die essentiell in der Physik sind, und liefern Erklärungen für Experimente auf bestimmten Größenskalen.

Es ist daher nicht verwunderlich, dass die klassische Mechanik in ihrer Hamilton-Formulierung einige Ähnlichkeit zur Quantenmechanik aufweist und das Noether-Theorem die Form des Impulsoperators p festlegt; dieser ist gegeben durch $p := \frac{\hbar}{i} \nabla$ und nach

der klassischen Formel für die kinetische Energie ist der kinetische Energie-Operator $H_0 := \frac{1}{2m}p^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, wobei m die Masse des quantenmechanischen Teilchens und \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum bezeichnet.

Uns begeben nun zwei Probleme:

1. Wie definiert man partielle Ableitungen auf $L^2(\mathbb{R}^n)$?
2. Kann man sicher stellen, dass der Impuls- und kinetische Energie-Operator selbstadjungiert sind?

Auf beide Fragen kann man zufriedenstellende Antworten finden und diese wollen wir nun erarbeiten. Der kinetische Energie-Operator ist der erste Bestandteil des periodischen Schrödingeroperators, der in dieser Arbeit als zentrales Thema behandelt wird.

Ein guter Ausgangspunkt für den kinetischen Energie-Operator ist sicherlich der Operator

$$(1.8) \quad \begin{aligned} A : C_c^\infty(\mathbb{R}^n) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}^n) \\ f &\mapsto -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta f. \end{aligned}$$

Dieser ist wegen $C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ dicht nicht nur wohldefiniert, sondern auch dicht definiert. Mittels der zweiten Greenschen Identität (partielle Integration im Mehrdimensionalen) sieht man zudem schnell ein, dass A symmetrisch ist.

Da $C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset L^1(\mathbb{R}^n)$ ist, kann man die Fourier-Transformation (Definition 1.1.1) und Satz 1.1.1 (v) verwenden, um die Gleichung

$$(1.9) \quad (\mathcal{F}(Af))(k) = \frac{\hbar^2}{2m}|k|^2(\mathcal{F}f)(k) \quad \forall f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n), k \in \mathbb{R}^n$$

zu finden. Wegen $C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ kann man die Fourier-Transformation auch invertieren und wir erhalten

$$(1.10) \quad -\Delta = \mathcal{F}^{-1} \circ M_{k \mapsto |k|^2} \circ \mathcal{F},$$

wobei M_f den Multiplikationsoperator mit f bezeichnet.

Diese Form des Laplace-Operators erlaubt uns schrittweise den kinetischen Energie-Operator auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ zu definieren.

LEMMA 1.3.1. *Der Multiplikationsoperator $M_{k \mapsto |k|^2} =: M : D(M) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ mit $D(M) := \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \|Mf\|_2 < \infty\}$ ist dicht definiert und selbstadjungiert.*

BEWEIS. Offensichtlich gilt $C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset D(M)$ und demnach ist M dicht definiert. Seien $f, g \in D(M)$, dann folgt aus einfacher Rechnung $\langle Mf, g \rangle = \langle f, Mg \rangle$; also ist M symmetrisch, d.h. $M \subset M^*$.

Sei nun $g \in D(M^*)$, d.h. es gibt ein $C_g < \infty$ mit $|\langle g, Mf \rangle| \leq C_g \|f\|_2$ für alle $f \in D(M)$. Wir wählen speziell für ein festes $r > 0$ die Abbildung gegeben durch $f_r(k) = |k|^2 g(k) 1_{B_r(0)}(k) 1_{B_r(0)}(g(k))$ für alle $k \in \mathbb{R}^n$. Damit ist offensichtlich $f_r \in D(M)$ und simples Einsetzen zeigt zusammen mit der Symmetrie von M , dass $\|f_r\|_2^2 = |\langle g, Mf_r \rangle| \leq C_g \|f_r\|_2$, d.h. $\|f_r\|_2 \leq C_g$. Offensichtlich konvertiert $|f_r|^2$ im Grenzwert $r \rightarrow \infty$ punktweise gegen $|Mg|^2$ und aufgrund des Satzes von der monotonen Konvergenz folgt $\|f_r\|_2^2 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \|Mg\|_2^2 \leq C_g^2$, wobei die Ungleichung aus $\sup_{r \in \mathbb{R}} \|f_r\|_2 \leq C_g$ resultiert.

Damit ist also $g \in D(M)$ und wir haben $M^* \subset M$, also insgesamt $M = M^*$. \square

Nun sind wir in der Lage den kinetischen Energie-Operator zu definieren, um daraufhin zu zeigen, dass er tatsächlich selbstadjungiert ist und zudem noch eine Erweiterung von A .

1.3. kinetische Energie

DEFINITION 1.3.2 (kinetische Energie-Operator). Sei $H_0 : D(H_0) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ der Operator gegeben durch

$$(1.11) \quad H_0 := \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{F}^{-1} M_{k \mapsto |k|^2} \mathcal{F}$$

mit Domäne

$$(1.12) \quad D(H_0) := \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \|M_{k \mapsto |k|^2}(\mathcal{F}f)\|_2 < \infty\}.$$

H_0 wird als *kinetischer Energie-Operator* bezeichnet.

KOROLLAR 1.3.3. Der Operator H_0 ist selbstadjungiert und $A \subset H_0$ (siehe (1.8)).

BEWEIS. Durch kurze Betrachtung stellt man fest, dass $D(H_0) = \mathcal{F}^{-1}D(M)$ (Lemma 1.3.1) gilt. Da die Fourier-Transformation unitär ist und $D(M) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ dicht liegt, ist H_0 dicht definiert.

Wegen Gleichung (1.10) ist zudem $A \subset H_0$.

Nach Lemma 1.2.13 und 1.3.1 gilt

$$(1.13) \quad H_0^* = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathcal{F}^{-1}M\mathcal{F})^* = \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}^{-1}M)^* = \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{F}^{-1}M^*\mathcal{F} = \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{F}^{-1}M\mathcal{F}$$

$$(1.14) \quad = H_0.$$

□

Zuletzt zeigen wir, dass H_0 die selbstadjungierte Erweiterung von A ist.

THEOREM 1.3.4. Der Operator A (definiert in (1.8)) ist wesentlich selbstadjungiert und es gilt $\bar{A} = H_0$.

BEWEIS. Nach Korollar 1.2.16 und Lemma 1.2.6 ist A wesentlich selbstadjungiert genau dann, wenn $\ker(A^* \pm i) = \text{im}(A \mp i)^\perp = \{0\}$. Sei nun $g_\pm \in \text{im}(A \pm i)^\perp$, d.h. für $f \in D(A) = C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$(1.15) \quad 0 = \langle (A \pm i)f, g_\pm \rangle \quad | \text{Thm. 1.1.5}$$

$$(1.16) \quad = \langle \mathcal{F}(A \pm i)f, \mathcal{F}g_\pm \rangle \quad | \text{Gl. (1.9)}$$

$$(1.17) \quad = \left\langle \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\cdot|^2 \pm i \right) \mathcal{F}f, \mathcal{F}g_\pm \right\rangle \quad | \text{Lem. 1.3.1}$$

$$(1.18) \quad = \left\langle \mathcal{F}f, \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\cdot|^2 \mp i \right) \mathcal{F}g_\pm \right\rangle.$$

Da $C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ dicht und \mathcal{F} unitär ist, folgt aus Gl. (1.18), dass

$$(1.19) \quad (|\cdot|^2 \mp i)\mathcal{F}g_\pm = 0.$$

Wegen $\| |\cdot|^2 \mp i \| \geq 1$ ist $\mathcal{F}g_\pm = 0$, also $g = 0$.

Wir wollen nun $\bar{A} = H_0$ zeigen, d.h. für beliebiges $f \in D(H_0)$ benötigen wir eine Folge $(f_L)_{L \in \mathbb{N}} \subset C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$, sodass $\lim_{L \rightarrow \infty} \|f - f_L\|_2 = 0$ und

$$(1.20) \quad \lim_{L \rightarrow \infty} \left\| H_0 f - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f_L \right) \right\|_2 = 0.$$

Sei $\eta \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $\text{supp}(\eta) \subset B_1(0)$, $\eta \geq 0$ und $\|\eta\|_1 = 1$.

Hieraus definieren wir eine weitere Parameter-abhängige Funktion $\eta_L := L^n \eta(L \cdot) \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$, $L \in \mathbb{N}$, mit $\text{supp}(\eta_L) \subset B_{1/L}(0)$ und $\|\eta_L\|_1 = 1$ für alle $L \in \mathbb{N}$.

Wir definieren außerdem $f_L := \eta_L * f$. Aufgrund der Konvolution mit einer C_c^∞ -Funktion gilt zudem $f_L \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ (siehe [13] App. C Thm. 7) und insbesondere

$$(1.21) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f_L(x) = \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \eta_L \right) * f \right)(x) = \langle f, H_0 \eta_L(x - \cdot) \rangle = \langle H_0 f, \eta_L(x - \cdot) \rangle$$

$$(1.22) \quad = (\eta_L * H_0 f)(x) =: (H_0 f)_L(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n,$$

wobei wir außerdem die Selbstadjungiertheit von H_0 verwendet haben (Kor. 1.3.3). Für die Glättung f_L von f gilt bekanntermaßen (siehe z.B. [13] App. C Thm. 7) die Konvergenz

$$(1.23) \quad f_L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} f \text{ in } L^2(\mathbb{R}^n).$$

Diese Konvergenz gilt natürlich auch für $(H_0 f)_L$ als weiteres geglättetes Element in $L^2(\mathbb{R}^n)$ und man folgert

$$(1.24) \quad \lim_{L \rightarrow \infty} \left\| H_0 f - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f_L \right) \right\|_2 = \lim_{L \rightarrow \infty} \| H_0 f - (H_0 f)_L \|_2 = 0.$$

Wir sind nun fast am Ziel, jedoch hat die Folge $(f_L)_{L \in \mathbb{N}}$ keinen kompakten Träger. Diesen können wir durch eine beliebige aber feste Funktion $\xi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $\xi|_{B_1(0)} \equiv 1$, $0 \leq \xi|_{B_2(0) \setminus B_1(0)} \leq 1$ und $\xi|_{\mathbb{R}^n \setminus B_2(0)} \equiv 0$ (siehe Abb. 1) mittels

$$(1.25) \quad f_{N,L} := \xi \left(\frac{\cdot}{N} \right) f_L(\cdot) \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n), \quad L \in \mathbb{N}$$

realisieren. Offensichtlich ist dann nach dem Satz von Beppo-Levi auch

$$(1.26) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \| f_L - f_{N,L} \|_2^2 \leq \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^n} 1_{|x| > N}(x) |f_L(x)|^2 dx = 0 \quad \forall L \in \mathbb{N}.$$

Eine einfache Rechnung (Produkt-, Kettenregel und Δ -Ungleichung) zeigt

$$(1.27) \quad \begin{aligned} \|\Delta f_{N,L} - \Delta f_L\|_2 &\leq \frac{1}{N^2} \left\| (\Delta \xi) \left(\frac{\cdot}{N} \right) f_L \right\|_2 + 2 \frac{1}{N} \left\| (\nabla \xi) \left(\frac{\cdot}{N} \right) \cdot \nabla f_L \right\|_2 \\ &\quad + \left\| \left(1 - \xi \left(\frac{\cdot}{N} \right) \right) \Delta f_L \right\|_2 \end{aligned}$$

$$(1.28) \quad \leq c_1 \frac{1}{N^2} \| f_L \|_2 + \frac{2c_2}{N} \| \nabla f_L \|_2 + \left\| \left(1 - \xi \left(\frac{\cdot}{N} \right) \right) \Delta f_L \right\|_2$$

mit $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ und $L \in \mathbb{N}$. Analog zu Gl. (1.26) findet man nun

$$(1.29) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \|\Delta f_{N,L} - \Delta f_L\|_2 = 0 \quad \forall L \in \mathbb{N}.$$

Sei nun $\epsilon > 0$ beliebig aber fest, dann finden wir nach Gl. (1.24) ein $L \in \mathbb{N}$, sodass $\left\| H_0 f - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f_L \right) \right\|_2 < \frac{\epsilon}{2}$. Zu diesem L gibt es nach Gl. (1.29) auch ein $N \in \mathbb{N}$, sodass $\left\| \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f_{N,L} \right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f_L \right) \right\|_2 < \frac{\epsilon}{2}$ und mittels Δ -Ungleichung folgt das gewünschte Ergebnis

$$(1.30) \quad \left\| H_0 f - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f_{N,L} \right) \right\|_2 < \epsilon.$$

□

1.4. Sobolev-Räume

Der Inhalt dieses Abschnitts basiert im Wesentlichen auf Ref. [5] Kapitel V.1 und V.2, Ref. [14], Ref. [13] II.5, Ref. [4] Kapitel IX.6 und IX.7 und Ref. [15] Kap. 7.

In Abschnitt 1.3 haben wir die selbstadjungierte Erweiterung des Laplace-Operators kennengelernt. Hiermit ist es uns gelungen Ableitungen für eine größere Klasse von Funktionen zu definieren. Wir wollen dem Ganzen nun auch einen Namen geben. Sei im Folgenden $\emptyset \neq \Omega \subset \mathbb{R}^n$ stets offen.

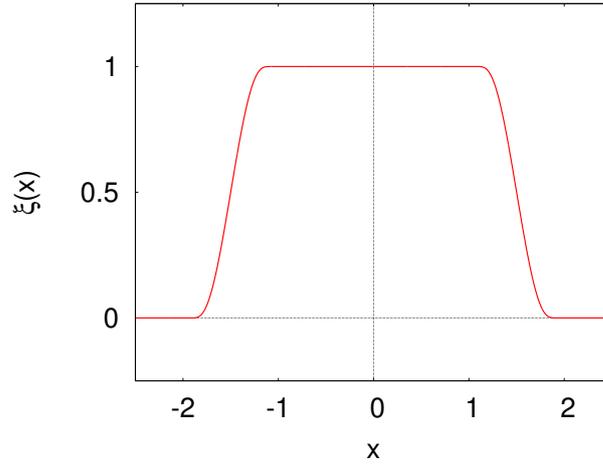


ABBILDUNG 1. Graph der Glättungsfunktionsfunktion ξ , die im Beweis von Satz 1.3.4 verwendet wird.

DEFINITION 1.4.1 (schwache partielle Ableitung). Sei $f \in L^2(\Omega)$ und α ein Multi-Index. Falls ein $g \in L^2(\Omega)$ existiert mit

$$(1.31) \quad \int_{\Omega} f(x) D^{\alpha} \phi(x) dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} g(x) \phi(x) dx \quad \forall \phi \in C_c^{\infty}(\Omega)$$

existiert, dann heißt g α -te schwache partielle Ableitung von f .

Im Folgenden sei α stets ein Multi-Index.

BEMERKUNG 1.4.2. (i) Die schwache Ableitung einer Funktion $f \in L^2(\Omega)$ ist eindeutig, denn für $g_1, g_2 \in L^2(\Omega)$ schwache Ableitungen gilt

$$\langle g_1 - g_2, \bar{\phi} \rangle = \int_{\Omega} (g_1 - g_2)(x) \phi(x) dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} (f - f)(x) D^{\alpha} \phi(x) dx = 0$$

für alle $\phi \in C_c^{\infty}(\Omega)$, also $g_1 = g_2 = 0$, da $C_c^{\infty}(\Omega) \subset L^2(\Omega)$ dicht.

Wir notieren die schwache ebenfalls wie die klassische Ableitung mit $D^{\alpha} f \equiv g_1 = g_2$.

(ii) Falls $f \in C^{|\alpha|}(\Omega) \cap L^2(\Omega)$ ist, dann stimmen die partiellen Ableitungen $D^{\alpha} f$ offensichtlich mit den schwachen partiellen Ableitungen überein.

Die Mengen schwach differenzierbarer Funktionen können –ausgestattet mit den richtigen Operationen– sehr interessante Eigenschaften haben. Sie sind insbesondere wichtig, wenn es um die Lösungen von linearen partiellen Differentialgleichungen geht. Wir wollen uns im Folgenden damit beschäftigen.

DEFINITION 1.4.3 (Sobolev-Raum). Für $\emptyset \neq \Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen ist das Tupel

$$(H_{(loc)}^2(\Omega), \langle \cdot, \cdot \rangle_{H^2(\Omega)})$$

mit

$$(1.32) \quad H^m(\Omega) := \{f \in L^2(\Omega) \mid D^{\alpha} f \in L^2(\Omega) \forall |\alpha| \leq m\},$$

$$(1.33) \quad H_{loc}^m(\Omega) := \{f \in L_{loc}^2(\Omega) \mid D^{\alpha} f \in L_{loc}^2(\Omega) \forall |\alpha| \leq m\}, \quad m \in \mathbb{N},$$

$$(1.34) \quad \langle f, g \rangle_{H^2(\Omega)} := \sum_{|\alpha| \leq 2} \langle D^{\alpha} f, D^{\alpha} g \rangle_{L^2(\Omega)} \quad \forall f, g \in H^2(\Omega)$$

ein sogenannter *Sobolev-Raum*.

LEMMA 1.4.4. Sei $f \in H^1(0, 2\pi)$, dann gibt es ein $g \in C[0, 2\pi]$, sodass $g = f$ fast überall und

$$(1.35) \quad g(x) - g(y) = \int_x^y f'(t) dt$$

für alle $x, y \in [0, 2\pi]$.

BEWEIS. Zunächst zeigen wir den Spezialfall, dass falls $f' = 0$ ist, man eine konstante Funktion g als Repräsentant findet. Sei dazu $\psi \in C_c(0, 2\pi)$ mit $\int_0^{2\pi} \psi dx = 1$ fest, $\phi \in C_c^\infty(0, 2\pi)$ beliebig und $f_\phi := \phi - \psi \int_0^{2\pi} \phi dx \in C_c(0, 2\pi)$. Offensichtlich besitzt f_ϕ die Stammfunktion $F_\phi \in C_c^1(0, 2\pi)$ gegeben durch $F_\phi(x) = \int_0^x f_\phi(t) dt$ für alle $x \in (0, 2\pi)$. Damit gilt

$$(1.36) \quad 0 = - \int_0^{2\pi} f' F_\phi dx = \int_0^{2\pi} f f_\phi dx = \int_0^{2\pi} f \phi dx - \int_0^{2\pi} \phi dx \int_0^{2\pi} f \psi dx$$

$$(1.37) \quad = \int_0^{2\pi} (f - c_f) \phi dx,$$

wobei $c_f := \int_0^{2\pi} f \psi dx$. Da ϕ beliebig war, folgt $f = c_f =: g$ fast überall auf $(0, 2\pi)$.

Nun zum allgemeinen Fall. Sei $g : (0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{C}$ gegeben durch $g(x) = \int_0^x f'(t) dt$ für alle $x \in (0, 2\pi)$. Nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung gilt für $y < x$ dann

$$(1.38) \quad |g(x) - g(y)| = \left| \int_y^x f'(t) dt \right| \leq \int_y^x |f'(t)| dt$$

$$(1.39) \quad \leq |x - y|^{1/2} \left| \int_x^y |f'(t)|^2 dt \right|^{1/2}$$

$$(1.40) \quad \leq |x - y|^{1/2} \|f'\|_2$$

für alle $x, y \in (0, 2\pi)$. Damit ist g gleichmäßig stetig und lässt sich daher zu einer stetigen Funktion $g : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C}$ fortsetzen. Damit ist g zudem in $L^2(0, 2\pi)$. Es bleibt nun noch zu zeigen, dass $g \in H^1(0, 2\pi)$ mit $g' = f'$ fast überall. Sei dazu wieder $\phi \in C_c^\infty(0, 2\pi)$ und dann folgt mittels des Satzes von Fubini

$$(1.41) \quad \int_0^{2\pi} \phi' g dx = \int_0^{2\pi} \phi'(x) \int_0^x f'(t) dt dx = \int_0^{2\pi} f'(t) \int_t^{2\pi} \phi'(x) dx dt$$

$$(1.42) \quad = - \int_0^{2\pi} f' \phi dx.$$

Damit ist $f' = g'$ fast überall, d.h. nach unseren Überlegungen zum Spezialfall gibt es einen Repräsentanten von $f - g$, der konstant ist. Diese Konstante kann man dann auf g draufaddieren und dann ist die daraus resultierende Funktion fast überall gleich f mit derselben schwachen Ableitung fast überall und es gilt

$$(1.43) \quad f(x) - f(y) = g(x) - g(y) = \int_x^y f'(t) dt$$

für alle $x, y \in [0, 2\pi]$. □

Wir verknüpfen nun die Erkenntnisse aus Abschnitt 1.3 mit der Definition der schwachen Ableitung.

LEMMA 1.4.5. Sei $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ mit schwacher Ableitung $D^\alpha f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, dann gilt

$$(1.44) \quad D^\alpha f = (\mathcal{F}^* \circ M_{k \rightarrow i|\alpha|k^\alpha} \circ \mathcal{F}) f.$$

1.4. Sobolev-Räume

BEWEIS. Sei $f, D^\alpha f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Nach Theorem 1.1.5 gilt

$$(1.45) \quad \langle \mathcal{F}(D^\alpha f), \mathcal{F}\phi \rangle = \langle D^\alpha f, \phi \rangle = (-1)^{|\alpha|} \langle f, D^\alpha \phi \rangle = (-1)^{|\alpha|} \langle \mathcal{F}f, \mathcal{F}(D^\alpha \phi) \rangle$$

$$(1.46) \quad = (-1)^{|\alpha|} \langle \mathcal{F}f, M_{k \mapsto i^{|\alpha|} k^\alpha} \mathcal{F}\phi \rangle = \langle M_{k \mapsto i^{|\alpha|} k^\alpha} \mathcal{F}f, \mathcal{F}\phi \rangle$$

für alle $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$, wobei beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile Satz 1.1.1(v) verwendet wurde. Damit gilt $\mathcal{F}(D^\alpha f) = (M_{k \mapsto i^{|\alpha|} k^\alpha} \circ \mathcal{F}) f$. \square

Somit bezeichnete die Erweiterung des Laplace-Operators (vgl. Def. 1.3.2) nichts anderes als den "schwachen" Laplace-Operator.

BEMERKUNG 1.4.6. Betrachten wir erneut die Domäne des kinetischen Energie-Operators H_0 (Def. 1.3.2), so lässt sich diese auch als

$$\begin{aligned} D(H_0) &= \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \|M_{k \mapsto |k|^2}(\mathcal{F}f)\|_2 < \infty\} \\ &= \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \|(\text{id} + M_{k \mapsto |k|^2})(\mathcal{F}f)\|_2 < \infty\} \\ &= \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \|\Delta f\|_2 < \infty\} = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \Delta f \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \end{aligned}$$

umschreiben, da wegen $f \in D(H_0)$ auch $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $M_{k \mapsto |k|^2}(\mathcal{F}f) \in L^2(\mathbb{R}^n)$, also insbesondere auch die Summe und umgekehrt: Wegen $\infty > \|(\text{id} + M_{k \mapsto |k|^2})(\mathcal{F}f)\|_2 = \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |k|^2)^2 |\hat{f}|^2(k) dk \geq \int_{\mathbb{R}^n} (|k|^2)^2 |\hat{f}|^2(k) dk$.

KOROLLAR 1.4.7. *Der Sobolev-Raum $H^2(\mathbb{R}^n)$ stimmt mit der Domäne $D(H_0)$ (siehe Bem. 1.4.6) des kinetischen Energie-Operators überein.*

BEWEIS. " \subseteq ": Sei $f \in H^2(\mathbb{R}^n)$, dann ist nach Lemma 1.4.5 $D^\alpha f = \mathcal{F}^* M_{k \mapsto i^{|\alpha|} k^\alpha} \mathcal{F}f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ für $|\alpha| \leq 2$, also nach dem Satz von Plancherel 1.1.5 auch $M_{k \mapsto |k|^2} \mathcal{F}f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. " \supseteq ": Sei $f \in D(H_0)$, dann ist

$$\begin{aligned} \infty &> \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |k|^2)^2 |\hat{f}(k)|^2 dk \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(\sum_{\alpha'_0 + \dots + \alpha'_n = 2} \binom{2}{\alpha'_0, \dots, \alpha'_n} 1^{\alpha'_0} |k_1|^{2\alpha'_1} \dots |k_n|^{2\alpha'_n} \right) |\hat{f}(k)|^2 dk \\ &\geq \int_{\mathbb{R}^n} |k_1|^{2\alpha_1} \dots |k_n|^{2\alpha_n} |\hat{f}(k)|^2 dk = \int_{\mathbb{R}^n} |i^{|\alpha|} k^\alpha|^2 |\hat{f}(k)|^2 dk, \quad |\alpha| \leq 2, \end{aligned}$$

nach dem Multinomialtheorem. Die Behauptung folgt dann wieder mittels des Satzes von Plancherel und Lemma 1.4.5. \square

Im Folgenden sei $\emptyset \neq \Omega \subset \mathbb{R}^n$ stets eine offene Teilmenge.

THEOREM 1.4.8. *Der Sobolev-Raum $(H^2(\Omega), \langle \cdot, \cdot \rangle_{H^2(\Omega)})$ ist ein Hilbertraum.*

Eine sehr wesentliche Eigenschaft von schwachen Ableitungen ist die Tatsache, dass man einen echt differenzierbaren Repräsentanten findet, falls die L^2 -Funktion oft genug schwach differenzierbar ist. Diese Feststellung ist im nächsten Satz formalisiert.

THEOREM 1.4.9 (Sobolev-Einbettungssatz). *Sei $l \in \mathbb{N}_0$ mit $2 > l + \frac{n}{2}$, $2 > \frac{n}{2}$. Dann existiert zu $f \in H^2(\Omega)$ eine Funktion $g \in C^l(\Omega)$ mit $f \equiv g$ fast überall.*

BEWEIS. Spezialfall ($\Omega = \mathbb{R}^n$):

Sei $f \in H^2(\Omega)$, dann gilt analog wie im Beweis zu Bem. 1.4.6 gezeigt, dass

$$|(ik)^\alpha \hat{f}(k)| \leq (1 + |k|^2)^{\frac{|\alpha|}{2}} |\hat{f}(k)|$$

$$(1.47) \quad = \underbrace{(1 + |k|^2)^{-\frac{n}{4} - \epsilon}}_{:=f_1(k)} \underbrace{(1 + |k|^2)^{\frac{n}{4} + \epsilon + \frac{|\alpha|}{2}}}_{:=f_2(k)} |\hat{f}(k)|$$

für alle $k \in \mathbb{R}^n$, $\epsilon \in \mathbb{R}$.

Nun ist $\int_{\mathbb{R}^n} |f_1(k)|^2 dk = S_n \int_0^\infty r^{n-1} (1 + r^2)^{-\frac{n}{2} - 2\epsilon} dr < \infty$ mit S_n die Oberfläche der n -Sphäre bezeichnend genau dann, wenn $n - 1 + 2(-\frac{n}{2} - 2\epsilon) < -1$, also $\epsilon > 0$.

Außerdem ist $\int_{\mathbb{R}^n} |f_2(k)|^2 dk < \infty$, wenn $\frac{n}{4} + \epsilon + \frac{|\alpha|}{2} \leq 1$ nach Bem. 1.4.6.

Zusammen erhalten wir mittels Cauchy-Schwarz-Ungleichung $|\langle f_1, f_2 \rangle| \leq \|f_1\|_2 \|f_2\|_2$ die Bedingung, dass $k \mapsto f_1(k) f_2(k) \in L^1(\mathbb{R}^n)$, wenn $|\alpha| < 2 - \frac{n}{2}$. Damit ist aber nach Gl. (1.47) insbesondere $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ und nach Lemma 1.4.5 auch $M_{k \rightarrow (ik)^\alpha} \hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ für alle $|\alpha| \leq l < 2 - \frac{n}{2}$, $l \in \mathbb{N}_0$.

Die Kombination aus Theorem 1.1.3, Theorem 1.1.4 und dem Satz von Plancherel 1.1.5 erlaubt uns die inverse Fourier-Transformation zu bestimmen,

$$(1.48) \quad f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ik \cdot x} \hat{f}(k) dk \quad \forall x \in \mathbb{R}^n,$$

wobei $f \in C(\Omega)$. Im Falle, dass $l = 1$ der oben genannten Ungleichung genügt, definieren wir außerdem die Vektorwertige stetige Funktion

$$(1.49) \quad g(x) := \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ik \cdot x} (ik) \hat{f}(k) dk \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

und es folgt mittels des Satzes von Lebesgue und für $h \in \mathbb{R}^n$, dass

$$(1.50) \quad \lim_{|h| \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x) - h \cdot g(x)}{|h|}$$

$$(1.51) \quad = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \lim_{|h| \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{e^{ik \cdot (x+h)} - e^{ik \cdot x} - ik \cdot h e^{ik \cdot x}}{|h|} \hat{f}(k) dk$$

$$(1.52) \quad = 0.$$

Demnach ist $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ und $\nabla f = g$. Dieses Argument kann nun für weitere $l > 1$ verwendet werden, solange diese die Bedingung $l < 2 - \frac{n}{2}$ erfüllen.

Allgemeiner Fall ($\emptyset \neq \Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen):

Sei $f \in H^2(\Omega)$, $y \in \Omega$, $B_r(y) \subset \mathbb{R}^n$ der abgeschlossene Ball um y mit Radius $r > 0$ so gewählt, dass $K := B_r(y) \subset \Omega$, und $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ mit $\phi|_K = 1$ (Eine gleichartige Funktion haben wir bereits in Satz 1.3.4 verwendet). Offensichtlich ist $\phi f \in H^2(\Omega)$ (siehe z.B. [13] II.5.2 Thm. 1). Da ϕf zudem in einer Umgebung von $\partial\Omega$ verschwindet, kann man ϕf trivial auf ganz \mathbb{R}^n fortsetzen, sodass $\phi f \in H^2(\mathbb{R}^n)$.

Der Spezialfall garantiert nun die Existenz einer Funktion $g_{y,r} \in C^l(\mathbb{R}^n)$ mit $g_{y,r} = \phi f$ fast überall.

Für $(\tilde{y}, \tilde{r}) \in \Omega \times \mathbb{R}^+$ mit $B := B_r(y) \cap B_{\tilde{r}}(\tilde{y}) \neq \emptyset$ ist $g_{y,r} = f = g_{\tilde{y},\tilde{r}}$ fast überall auf B . Dann ist $\{x \in B | g_{y,r}(x) \neq g_{\tilde{y},\tilde{r}}(x)\}$ aufgrund der Stetigkeit der beiden Funktionen eine offene Menge, aber wir hatten bereits gezeigt, dass diese Menge auch eine Nullmenge ist und damit muss sie leer sein. Also ist $g_{y,r}|_B = g_{\tilde{y},\tilde{r}}|_B$.

Damit ist $g : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$, $g(x) = g_{y,r}(x)$, falls $x \in B_r(y)$ für $y \in \Omega$ und $r > 0$ eine wohldefinierte $C^l(\Omega)$ -Funktion, die mit f fast überall übereinstimmt. \square

Das folgende Theorem erlaubt schließlich Sobolev-Funktionen und ihre schwachen Ableitungen durch glatte Funktionen und deren klassische Ableitungen zu approximieren.

THEOREM 1.4.10. ([16]) $C^\infty \cap H^2(\Omega) \subset H^2(\Omega)$ dicht.

1.5. Der potentielle Energie-Operator

Der Inhalt dieses Abschnitts beruht im Wesentlichen auf Ref. [3] Kapitel 20.4 und Ref. [15] Kapitel 2.2.

Der Ortsoperator \mathbf{x} , der die Positionsmessung eines Teilchens repräsentiert, hat in der sogenannten Ortsdarstellung, in der wir arbeiten, die folgende Form:

$$(1.53) \quad \begin{aligned} \mathbf{x}\psi(x) &= x\psi(x) \quad \forall \psi \in D(\mathbf{x}), \text{ für f.a. } x \in \mathbb{R}^n \\ D(\mathbf{x}) &= \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid x \mapsto x_i\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}^n), i = 1, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Damit dieser Operator tatsächlich eine physikalische Messung darstellen kann, muss er selbstadjungiert sein. Dies wird nun gezeigt.

LEMMA 1.5.1. *Der in Gl. (1.53) definierte Operator ist selbstadjungiert.*

BEWEIS. Zur Dichtheit: Für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist $(f_m)_{m \in \mathbb{N}} := (1_{B_m(0)}f)_{m \in \mathbb{N}} \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ mit $f_m \xrightarrow{m \rightarrow \infty} f$ nach dem Satz von Lebesgue. Weiterhin gilt $\|x \mapsto x_i f_m(x)\|_2 \leq m^2 \|f\|_2$ für $m \in \mathbb{N}$ und $i = 1, \dots, n$, also ist $\{1_{B_m(0)}f \mid f \in L^2(\mathbb{R}^n), m \in \mathbb{N}\} \subset D(\mathbf{x}) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ dicht.

Zur Selbstadjungiertheit: Der Multiplikationsoperator \mathbf{x} ist offensichtlich symmetrisch. Die Selbstadjungiertheit folgt nun mittels Theorem 1.2.14, da für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ein Urbild gegeben ist durch $x \mapsto \frac{1}{x_j \pm i} f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ für $j = 1, \dots, n$, denn $(x_j \pm i) \left(\frac{1}{x_j \pm i} f(x) \right) = f(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$. \square

Das Konzept der potentiellen Energie spielt eine große Rolle in der klassischen Mechanik (Lagrange- und Hamilton-Formalismus) und der Quantenmechanik. Während sie in der klassischen Mechanik das "Potential" eines Teilchens beschreibt Arbeit zu verrichten und die Newtonsche Formulierung der Mechanik auch prinzipiell ohne Potential auskommt, beschreibt die potentielle Energie in der Quantenmechanik alle nicht-kinetischen Beiträge zur Gesamtenergie des Teilchens und ist somit wesentlicher Bestandteil der Schrödingergleichung.

In vielen Fällen hängt die potentielle Energie eines Teilchens nur von dessen Position im Raum ab. Andererseits gibt es auch einige Fälle, wie z.B. in Anwesenheit von Magnetfeldern oder bei Spin-Bahn-Kopplung, wo das Potential zusätzlich vom Impuls des Teilchens abhängt.

In dieser Arbeit wollen wir uns nur mit potentiellen Energien beschäftigen, die alleine von der Position der Teilchen abhängen. Angelehnt an den Ortsoperator kann man dann den potentielle Energie-Operator als Multiplikationsoperator auffassen.

Wir wollen zunächst allgemeine potentielle Energie-Operatoren definieren und ihre Eigenschaften studieren.

DEFINITION+SATZ 1.5.2 (Der potentielle Energie-Operator). Sei $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ eine potentielle Energie-Funktion. Wir definieren den dazugehörigen selbstadjungierten *potentielle Energie-Operator* durch

$$(1.54) \quad \begin{aligned} V(\mathbf{x})\psi(x) &= V(x)\psi(x) \quad \forall \psi \in D(V(\mathbf{x})), \text{ für f.a. } x \in \mathbb{R}^n \\ D(V(\mathbf{x})) &= L^2(\mathbb{R}^n). \end{aligned}$$

BEWEIS. Zur Wohldefiniertheit: Sei $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ beliebig, dann ist $\|V(\mathbf{x})f\|_2 \leq \|V(\mathbf{x})\|_\infty \|f\|_2$. Somit ist $V(\mathbf{x})$ ein beschränkter linearer Operator und $D(V(\mathbf{x})) = L^2(\mathbb{R}^n)$.

Zur Selbstadjungiertheit: Man verfährt analog wie im Beweis zu Lemma 1.5.1. \square

Als Schrödingeroperatoren bezeichnet man nun alle Operatoren, die als Summe aus dem kinetischen Energie-Operator und einem potentielle Energie-Operator geschrieben werden können, also

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}).$$

Solche Operatoren beschreiben in vielen Fällen die Gesamtenergie eines Teilchens unter Einwirkung eines Potentials. Im Rahmen der Quantenmechanik ist dieser Operator außerdem der Generator der Zeitentwicklung, was im Zusammenhang mit dem Theorem von Stone-von-Neumann steht (siehe z.B. Ref. [9] 3.8 und 21.11.2a).

KAPITEL 2

Physikalische Motivation

Dieses Kapitel basiert auf der Seminararbeit [Zantout2019] und bekannten Ergebnissen der Festkörpertheorie, wie sie in Ref. [17] oder [18] zu finden sind.

Nachdem wir im vorangegangenen Kapitel die mathematischen Grundlagen allgemeiner Schrödingeroperatoren diskutiert haben, wenden wir uns in diesem Kapitel der speziellen Form der Schrödingeroperatoren in Festkörpern zu. Ein solches System besteht aus zahlreichen Atomen¹, was eine große Herausforderung für die exakte quantenmechanische Behandlung des Problems darstellt.

Um einen Kristall genauer zu verstehen, kann man chemische Verfahren anwenden, die auf dessen Zusammensetzung schließen lassen. In den einfachsten Fällen findet man eine Komposition aus Atomen, deren Auftreten in ganzzahligem Verhältnis steht, z.B. NaCl (Kochsalz) mit Na=Natrium und Cl=Chlor.

Von den chemischen Eigenschaften wollen wir uns nun den physikalischen Eigenschaften zuwenden. Dabei erlauben verschiedene Experimente die Struktur der Atome eines Festkörpers genau zu bestimmen; z.B. die Rastertunnelmikroskopie (siehe Abb. 2). Alle zeigen auf, dass die Atome in einem Kristall periodisch angeordnet sind (siehe auch [18]), wenn man von kleinen Abweichungen wie Störstellen oder Verunreinigungen absieht.

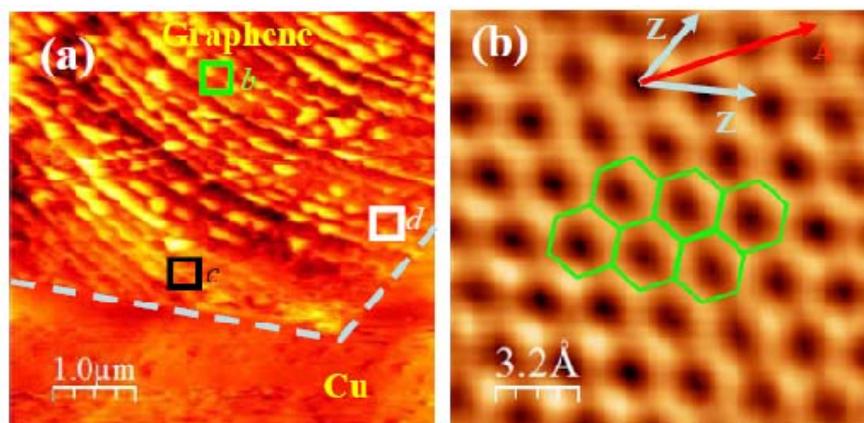


ABBILDUNG 2. Rastertunnelmikroskopische Messung von Graphen auf einem Kupfer-Substrat. Die Elektronendichte ist hierbei farblich kodiert dargestellt. Die periodische hexagonale Struktur des Kohlenstoffs in Graphen wird hierdurch auf der Längenskala von Atomen sichtbar. (Quelle: [19])

Nachdem wir ein genaueres Bild vom Aufbau eines Kristalls gewonnen haben, wenden wir uns dem Schrödingeroperator (Hamilton-Operator) H des Systems zu. Dieser

¹ So enthält beispielsweise 1cm^3 Kupfer etwa 10^{23} Teilchen.

besteht wie in Abschnitt 1.5 erläutert aus einem kinetischen und einem wechselwirkenden Teil:

$$\begin{aligned}
 H &= \underbrace{\sum_{i=1}^{N_e} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} V_{e,e}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}_{:=H_e \text{ (Elektronen)}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{N_k} \frac{P_i^2}{2M} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N_k} V_{Ion}(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)}_{:=H_k \text{ (Atomkerne)}} \\
 (2.1) \quad &+ \underbrace{\sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_k} V_{e,Ion}(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_j)}_{:=H_{e,k} \text{ (Elektronen und Atomkerne)}} \quad ,
 \end{aligned}$$

wobei der Kristall aus N_e Elektronen mit Masse m , aus N_k positiv geladenen Atomkernen mit Masse M_i besteht und der Impuls-Operator p_i (P_i) auf das i -te Elektron (den i -ten Atomkern) wirkt und entsprechend auch die Ortsoperatoren \mathbf{x}_i (\mathbf{X}_i) definiert seien für $i \in 1, \dots, N_e$ ($i \in 1, \dots, N_k$). Der potentielle Energie-Operator $V_{e,e}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ beinhaltet die Wechselwirkung zwischen Elektronen $i, j \in 1, \dots, N_e$, wobei aus Experimenten bekannt ist, dass diese nur vom Abstand der Elektronen $x_i - x_j$ abhängt. Analog beschreibt V_{Ion} die Wechselwirkung zwischen den Atomkernen und $V_{e,Ion}$ das Potential für die Elektronen-Atomkern-Wechselwirkung.

Mathematisch präziser handelt es sich hier um einen Hamilton-Operator, der auf einem Tensor-Produkt von $L^2(\mathbb{R}^n)$ -Räumen wirkt, da jedes Elektron und jeder Atomkern in einem eigenen $L^2(\mathbb{R}^n)$ -Hilbertraum beschrieben wird.

Der exakte Hamilton-Operator aus Gl. (2.1) ist aufgrund der großen Anzahl gekoppelter partieller Differentialgleichungen zu kompliziert, um die dazugehörige Schrödinger-Gleichung $H\psi = \lambda\psi$ zu lösen bzw. das Spektrum des Operators zu bestimmen. Wie üblich in der Physik werden also Näherungen notwendig und dies geschieht in diesem Fall in zwei Schritten.

Schritt 1:

Wir verwenden zuerst die sogenannte Born-Oppenheimer Näherung. Ausgangspunkt hierbei ist der große Massenunterschied zwischen Elektronen und Atomkernen, $m \ll M_i$. In erster Näherung bewegen sich damit die Kerne aus Sicht der Elektronen unendlich langsam, sodass man die Positionen der Atomkerne als feste Parameter $R_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, \dots, N_k$, annehmen kann. Dies separiert den elektronischen Teil des Hamilton-Operators H_e von dem der Atomkerne H_k .

Wir schränken unsere Betrachtung auf die elektronischen Eigenschaften des Kristalls ein; diese bestimmen viele makroskopische Messgrößen und man kann Korrekturen durch die Freiheitsgrade der Atomkerne oft nachträglich in Form einer Störungsentwicklung behandeln. Daher reduziert sich unser ursprünglicher Hamilton-Operator auf den elektronischen Hamilton-Operator

$$(2.2) \quad \tilde{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} V_{e,e}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_k} V_{e,Ion}(\mathbf{x}_i - R_j).$$

Schritt 2:

Trotz dieser ersten starken Vereinfachung ist die Kopplung zwischen den Elektronen weiterhin eine große Limitation. Aus diesem Grund machen wir von der ‘‘Unabhängige Teilchen Approximation’’ Gebrauch, in der das Elektron-Elektron-Potential $V_{e,e}$ durch ein effektives periodisches 1-Elektron-Potential $V_{e,eff}$ approximiert wird. Dies führt dazu, dass der elektronische Hamilton-Operator \tilde{H} aus Gl. 2.2 zu einer Summe von

entkoppelten effektiven 1-Elektron Hamilton-Operatoren A zerfällt, wobei

$$(2.3) \quad A = \frac{p^2}{2m} + V_{e,eff}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{N_k} V_{e,Ion}(\mathbf{x} - R_j) =: \frac{p^2}{2m} + V_{eff}.$$

Der so begründete Schrödingeroperator A ist ein linearer Operator auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ und man kann die Erkenntnisse aus Kapitel 1 anwenden. In Kapitel 3 wird gezeigt, dass unter bestimmten Voraussetzungen an das Potential V_{eff} der Hamilton-Operator der Kristall-Elektronen auf der Domäne $H^2(\mathbb{R}^n)$ selbstadjungiert ist.

Doch an dieser Stelle sei bereits bemerkt, dass in vielen interessanten Fällen die beiden verwendeten Approximationen ihre Legitimation verlieren, da die Kopplung zwischen Atomkernen und Elektronen nicht vernachlässigbar ist oder die Elektron-Elektron-Wechselwirkung so stark ist, dass die Elektronen nicht als unabhängige Teilchen modelliert werden können.

Da die Einbeziehung solcher Effekte den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden, sei im Falle der Elektron-Ion-Wechselwirkung z.B. auf [20] und im Falle starker Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf [21] verwiesen.

Operator-Analysis für Schrödingeroperatoren

Das Spektrum selbstadjungierter Operatoren enthält die Information über mögliche Ergebnisse bei der Messung von der korrespondierenden physikalischen Observable. Daher ist es entscheidend sich zunächst mit den Eigenschaften des Spektrums zu beschäftigen.

In diesem Kapitel tragen wir zunächst die wesentlichen Aspekte zum Spektrum von Operatoren zusammen und stellen daraufhin einige wichtige Werkzeuge vor, die zu dessen Bestimmung nützlich sein werden.

3.1. Spektrum selbstadjungierter linearer Operatoren

Einige Teile des Inhalts sind an der Darstellung in Ref. [22], Ref. [23] XII und XIII, Ref. [5] Kapitel VI und VII, Ref. [15] Kapitel 4, Ref. [6] Kapitel 8, Ref. [24] und Ref. [3] Kapitel 24 und 29 orientiert.

Im Rahmen der Quantenmechanik haben wir bereits gelernt, dass selbstadjungierte Operatoren eine wichtige Rolle spielen, da sie in vielen Fällen physikalische Messgrößen oder Generatoren von Zustandsänderungen repräsentieren.

Hierbei bildet das Spektrum eines selbstadjungierten Operators die Menge der beobachtbaren Messergebnisse. Innerhalb der klassischen Mechanik ist das Spektrum typischerweise kontinuierlich; so kann z.B. die (kinetische) Energie eines freien (nicht-relativistischen) Teilchens alle Werte in \mathbb{R}_0^+ annehmen, da seine Geschwindigkeit auch innerhalb \mathbb{R}_0^+ variieren kann. Anders verhält es sich für quantenmechanische Teilchen, wo das Spektrum auch kompliziertere Mengen bilden kann; so ist z.B. die Energie eines (nicht-relativistischen) quantenmechanischen Elektrons im Wasserstoffatom "quantisiert", d.h. sie nimmt nur Werte $E_m = \frac{E_0}{m^2}$, $m \in \mathbb{N}$ an, was experimentell im optischen Linienspektrum beobachtet werden kann (siehe Abb. 3). Es sei bemerkt, dass weitere Effekte zu zusätzlichen Korrekturen bei der Formel für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms führen.

Das Spektrum eines selbstadjungierten linearen Operators ist die Verallgemeinerung des Eigenwertbegriffs für lineare Abbildungen zwischen endlich-dimensionalen Hilberträumen. Man definiert das Spektrum daher als das Komplement der sogenannten Resolventenmenge.

DEFINITION 3.1.1 (Resolvente, Resolventenmenge, Spektrum, Punktspektrum, kontinuierliches Spektrum). Sei $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein selbstadjungierter Operator, dann ist die *Resolventenmenge von A* definiert als

$$(3.1) \quad \rho(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid (A - \lambda) : D(A) \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist bijektiv}\} \subset \mathbb{C}.$$

Für ein $\lambda \in \rho(A)$ heißt ein Operator $(A - \lambda)^{-1}$ *Resolvente*.

Das *Spektrum von A*, symbolisch $\sigma(A)$, ist das Komplement $\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ und lässt sich in das *Punktspektrum von A*

$$(3.2) \quad \sigma_p(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \ker(A - \lambda) \neq \{0\}\}$$

und das *kontinuierliche Spektrum von A*

$$(3.3) \quad \sigma_c(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \ker(A - \lambda) = \{0\}, \text{ im}(A - \lambda) \neq \mathcal{H}\}$$

3.1. Spektrum selbstadjungierter linearer Operatoren

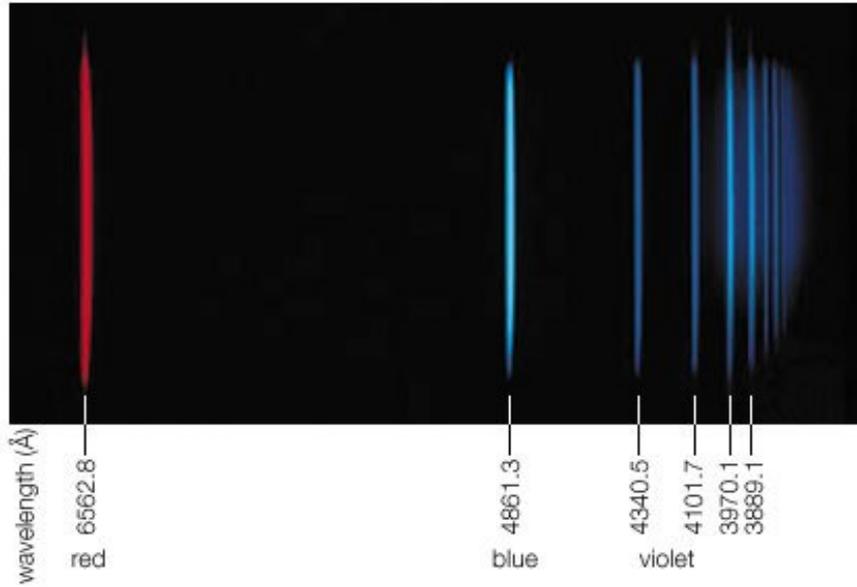


ABBILDUNG 3. Optisches Spektrum des Wasserstoffatoms bei Übergängen von Quantenzahl $2 < m \in \mathbb{N}$ zu Quantenzahl $m' = 2$ (Balmer-Serie). Die farbigen Linien entsprechen gerade der Energie $E = \frac{hc}{\lambda}$ eines Lichtteilchens gegeben durch $E = E_2 - E_m = E_0 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)$, wobei λ die Wellenlänge und c die Lichtgeschwindigkeit bezeichnet. D.h. das beobachtete Spektrum bildet die Anregungsenergien zwischen unterschiedlichen Energiezuständen im Wasserstoffatom ab. (Quelle:[25])

zerlegen, d.h. $\sigma(A) = \sigma_p(A) \uplus \sigma_c(A)$.

Zunächst stellen wir einige Eigenschaften des Spektrums zusammen.

THEOREM 3.1.2. *Sei A ein selbstadjungierter linearer Operator. Dann gilt:*

- (i) Für $\lambda \in \rho(A)$ ist $(A - \lambda)^{-1}$ ein beschränkter linearer Operator.
- (ii) Sei $\lambda \in \mathbb{C}$, dann gilt $\ker(A - \lambda) = \text{im}(A - \lambda)^\perp$.
- (iii) Für $\lambda \in \sigma_c(A)$ ist $\text{im}(A - \lambda) \not\subset \mathcal{H}$ dicht und $(A - \lambda)^{-1}$ ein unbeschränkter linearer Operator.
- (iv) $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

BEWEIS. Zu (i): Aufgrund der Selbstadjungiertheit von A ist A auch insbesondere abgeschlossen.

Wir wollen nun zeigen, dass auch $(A - \lambda)^{-1}$ abgeschlossen ist. Sei dazu $(y_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D((A - \lambda)^{-1}) = \text{im}(A - \lambda)$ mit $y_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y \in \mathcal{H}$ und $(A - \lambda)^{-1}y_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x \in \mathcal{H}$ bel. Sei $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A - \lambda)$ definiert durch $(A - \lambda)x_n = y_n$ und somit $(A - \lambda)^{-1}y_n = x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x \in \mathcal{H}$. Da mit A auch $A - \lambda$ abgeschlossen ist, gilt $x \in D(A - \lambda)$ und $(A - \lambda)x = y$, also auch $y \in D((A - \lambda)^{-1})$ und $x = (A - \lambda)^{-1}y$.

Aufgrund der Bijektivität von $(A - \lambda)$ ist $D((A - \lambda)^{-1}) = \mathcal{H}$. Zusammen mit der Abgeschlossenheit von $(A - \lambda)^{-1}$ liefert dies unter Verwendung des Satzes vom abgeschlossenen Graphen, dass $(A - \lambda)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Zu (ii): Sei $x \in \ker(A - \lambda) \setminus \{0\}$, dann ist $\langle Ax, x \rangle = \lambda \|x\|^2$ und $\langle x, Ax \rangle = \bar{\lambda} \|x\|^2$. Insgesamt gilt wegen der Selbstadjungiertheit von A , dass $\lambda = \bar{\lambda}$, also $\lambda \in \mathbb{R}$. Folglich ist $\langle x, (A - \lambda)y \rangle = \langle (A - \lambda)x, y \rangle = 0 \forall y \in D(A)$, d.h. $x \in \text{im}(A - \lambda)^\perp$.

Sei nun $x \in \text{im}(A - \lambda)^\perp \setminus \{0\}$. Damit ist $\langle x, Ay \rangle = \langle \bar{\lambda}x, y \rangle$ für alle $y \in D(A)$. Da A

selbstadjungiert (und dicht definiert) ist, gilt somit $Ax = \bar{\lambda}x$. Damit kann man wie in (i) gezeigt auch wieder $\lambda = \bar{\lambda}$ zeigen. Zusammen ergibt dies $x \in \ker(A - \lambda)$.

Der Nullvektor ist trivialerweise in beiden Mengen.

Zu (iii): Sei $\lambda \in \sigma_c(A)$, dann ist nach (ii) das Bild $\text{im}(A - \lambda)$ dicht wegen $\text{im}(A - \lambda)^\perp = \ker(A - \lambda) = \{0\}$. Dennoch ist $\text{im}(A - \lambda) \subsetneq \mathcal{H}$, da sonst $\lambda \in \rho(A)$.

Angenommen $(A - \lambda)^{-1}$ ist beschränkt bzw. stetig.

Wir zeigen zunächst, dass $\text{im}(A - \lambda) \subset \mathcal{H}$ abgeschlossen ist. Sei dazu $(y_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \text{im}(A - \lambda)$ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = y \in \text{im}(A - \lambda)$. Dies impliziert die Existenz einer Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A)$ mit $x_n := (A - \lambda)^{-1}y_n$, $n \in \mathbb{N}$. Aufgrund der Stetigkeit von $(A - \lambda)^{-1}$ gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} (A - \lambda)^{-1}y_n = (A - \lambda)^{-1}y$ und da $(A - \lambda)^{-1}$ insbesondere abgeschlossen ist, gilt $y \in D((A - \lambda)^{-1}) = \text{im}(A - \lambda)$. Zusammen mit der Dichtheit von $\text{im}(A - \lambda)$ ergibt dies $\text{im}(A - \lambda) = \mathcal{H}$, ein Widerspruch zur Definition von $\sigma_c(A)$.

Zu (iv): Sei $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, dann gilt $\|(A - \lambda)x\|^2 = \|(A - \Re\lambda)x\|^2 + (\Im\lambda)^2\|x\|^2 \geq \Im\lambda^2\|x\|^2 \forall x \in D(A)$. Damit ist $A - \lambda$ injektiv und $(A - \lambda)^{-1}$ beschränkt, da

$$(3.4) \quad \frac{\|x\|}{\|(A - \lambda)x\|} \leq \frac{1}{\Im\lambda}, \quad x \in D(A) \setminus \{0\}.$$

Nach (iii) und Definition des Punktspektrums ist $\lambda \notin \sigma_c(A) \cup \sigma_p(A)$, also $\lambda \in \rho(A)$ und folglich $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$. \square

BEISPIEL 3.1.3. Ein sehr wichtiges Beispiel in der Physik ist das freie quantenmechanische Teilchen. Wir betrachten den eindimensionalen Fall, d.h. $n = 1$. In diesem Fall ist der Hamilton-Operator des System der kinetische Energie-Operator H_0 (siehe Def. 1.3.2), der über die Fourier-Transformation unitär äquivalent ist zum Multiplikationsoperator $\frac{\hbar^2}{2m}M_{k \mapsto k^2}$. Nach Ref. [3] Example 24.1.2 gilt $\sigma(H_0) = [0, \infty)$. Dennoch findet man für $E_k \in \sigma(H_0)$ keine Eigenfunktion $\Psi_k \in H^2(\mathbb{R})$, sodass

$$H_0\Psi_k = E_k\Psi_k.$$

Diese gewöhnliche Differentialgleichung hat jedoch formal sogenannte *ebene Wellen* $\{e^{ik \cdot}\}_{k \in \mathbb{R}}$ als Lösung, wobei $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ gilt. Darüberhinaus stellen die ebenen Wellen ein *kontinuierliches Erzeugendensystem* dar, da man jede $L^2(\mathbb{R})$ -Funktion f über die Fourier-Transformation ("kontinuierliche Summe") aus kontinuierlichen Koeffizienten $\hat{f}(k)$ darstellen kann.

Da sich das Rechnen mit ebenen Wellen in der Quantenmechanik bewährt hat und die elegante *bra-ket*-Notation von Dirac diese ganz natürlich in der Quantenmechanik implementiert, muss man mathematisch den Hilbertraum $L^2(\mathbb{R})$ zu einem sogenannten *rigged* Hilbertraum $S(\mathbb{R}) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}) \hookrightarrow S(\mathbb{R})'$ erweitern, wobei die Einbettungen jeweils stetig sind und der $S(\mathbb{R})'$ der Raum der temperierten Distributionen ist (siehe Appendix B). Für die Details und Eigenschaften dieser Konstruktion sei auf Ref. [3] Kapitel 29 verwiesen.

Mittels dieser Einbettung kann man für $k \in \mathbb{R}$ die ebene Welle $e^{ik \cdot}$ als reguläre Distribution $I_{e^{ik \cdot}} \subset S(\mathbb{R})'$ betrachten. Es gilt dann für alle $\phi \in S(\mathbb{R})$

$$\begin{aligned} [H_0 I_{e^{ik \cdot}}](\phi) &= I_{e^{ik \cdot}}(H_0\phi) = I_{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{ik \cdot}}(\phi) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} I_{e^{ik \cdot}}(\phi), \\ \Rightarrow H_0 I_{e^{ik \cdot}} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} I_{e^{ik \cdot}}. \end{aligned}$$

3.1. Spektrum selbstadjungierter linearer Operatoren

wobei im zweiten Schritt partielle Integration¹ verwendet wurde, um den Ableitungsoperator von ϕ auf die ebene Welle zu schieben. Damit sind die ebenen Wellen *verallgemeinerte Eigenfunktionen* des freien Hamilton-Operators H_0 , d.h. Eigenfunktion im Sinne einer regulären temperierten Distribution.

Nun folgt mittels des Spektralsatzes

$$\langle H_0\psi, \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}_0^+} \underbrace{\lambda}_{\geq 0} d\|E^{H_0}(\lambda)\psi\|^2 \geq \int_{\mathbb{R}_0^+} 0 dE_{\psi,\psi}^{H_0}(\lambda) = 0\|\psi\|^2$$

für alle $\psi \in D(H_0)$. Daher ist H_0 ein *halbbeschränkter Operator*, d.h. es handelt sich um einen dicht definierten Operator, für den eine reelle Konstante c existiert, sodass $\langle H_0\psi, \psi \rangle \geq c\|\psi\|^2$ für alle $\psi \in D(H_0)$ gilt.

DEFINITION 3.1.4 (diskretes Spektrum, nicht-entarteter Eigenwert). Für einen selbstadjungierten Operator A auf \mathcal{H} definieren wir das *diskrete Spektrum* $\sigma_d(A)$ durch

$$\sigma_d(A) := \{\lambda \in \sigma_p(A) \mid \dim(\ker(A - \lambda)) < \infty, \lambda \text{ isoliert in } \sigma(A)\}.$$

Im Falle, dass für $\lambda \in \sigma_d(A)$ gilt, dass $\dim(\ker(A - \lambda)) = 1$ nennen wir λ einen *nicht-entarteten Eigenwert*.

Im Rahmen stetiger beschränkter Operatoren ließ sich das Spektrum kompakter Operatoren sehr genau klassifizieren. Wir wiederholen an dieser Stelle die wichtigsten Eigenschaften.

THEOREM 3.1.5. Sei $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ kompakt und \mathcal{H} unendlich-dimensional, dann gilt:

- (i) $0 \in \sigma(K)$,
- (ii) $\sigma(K) \setminus \{0\}$ ist höchstens abzählbar,
- (iii) Für $\lambda \in \sigma(K) \setminus \{0\} = \sigma_d(K) \setminus \{0\}$ ist $\text{im}(\lambda - K)$ abgeschlossen und $\dim \ker(\lambda - K) = \text{codim}(\text{im}(\lambda - K))$,
- (iv) $\sigma(K)$ besitzt keinen Häufungspunkt außer möglicherweise die Null.

Im Falle unbeschränkter selbstadjungierter Operatoren findet man eine ähnliche Umkehransage:

THEOREM 3.1.6. Sei A ein selbstadjungierter, halbbeschränkter Operator. Dann hat A eine kompakte Resolvente genau dann wenn A eine Orthonormalbasis $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(A)$ mit entsprechenden Eigenwerten $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $a_1 \leq a_2 \leq \dots \leq$ besitzt und $a_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty$ gilt.

Ebenso kann man das Spektrum von Multiplikationsoperatoren in bestimmten Fällen genauer bestimmen.

THEOREM 3.1.7. Sei $f \in L^\infty(\Omega, \mathbb{R})$, dann ist

$$\sigma(M_f) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \forall \epsilon > 0 \mu(f^{-1}[\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon]) > 0\} =: W^*(f),$$

d.h. das Spektrum stimmt mit dem wesentlichen Wertebereich $W^*(f)$ von f überein.

LEMMA 3.1.8. Für einen geschlossenen Operator A auf \mathcal{H} und $\lambda \in \rho(A)$ gilt $\sigma((A - \lambda)^{-1}) = \{0\} \cup (\sigma(A) - \lambda)^{-1}$ und $\sigma_p((A - \lambda)^{-1}) \setminus \{0\} = (\sigma_p(A) - \lambda)^{-1}$.²

Als eine direkte Konsequenz von Theorem 3.1.5 und Lemma 3.1.8 erhalten wir das folgende Theorem.

¹Mehr Details zur partiellen Ableitung von Distributionen findet man beispielsweise in Ref. [3] Abschnitt 4.1.

²Der zweite Teil der Aussage ist nicht in der angegebenen Quelle, aber elementar: $\mu \in \sigma_p((A - \lambda)^{-1}) \setminus \{0\} \Leftrightarrow \exists 0 \neq v \in D(A) : (A - \lambda)^{-1}v = \mu v \Leftrightarrow \frac{1+\lambda\mu}{\mu}v = Av$.

THEOREM 3.1.9. *Für einen selbstadjungierten Operator A auf dem unendlich-dimensionalen Hilbertraum \mathcal{H} mit kompakter Resolvente ist entweder $\sigma(A) = \emptyset$ oder $\sigma(A) = \sigma_d(A) = \{\lambda_i \mid i \in \mathbb{N}\}$ eine höchstens abzählbare Menge. Im Falle, dass $\sigma(A)$ unendlich ist, gilt $|\lambda_i| \xrightarrow{i \rightarrow \infty} \infty$.*

Mit einfachen Argumenten kann man folgende variationelle Klassifizierung der Eigenwerte finden.

THEOREM 3.1.10. *Sei A ein selbstadjungierter Operator mit rein diskretem Spektrum und Eigenwerten $a_1 \leq a_2 \leq \dots$, dann gilt für $n \in \mathbb{N}$ die Darstellung*

$$a_n = \max_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \min_{\psi \in U(\psi_1, \dots, \psi_{n-1})} \langle \psi, A\psi \rangle,$$

wobei $U(\psi_1, \dots, \psi_{n-1}) := \{\psi \in D(A) \mid \|\psi\| = 1, \psi \in \langle \psi_1, \dots, \psi_{n-1} \rangle^\perp\}$.

Ein wichtiges Resultat, das später wichtig sein wird, ist die Tatsache, dass unter bestimmten Bedingungen an den Schrödingeroperator der Grundzustand nicht entartet ist. Zur Formulierung werden folgende Definitionen benötigt.

DEFINITION 3.1.11 ((strikt) positive Funktionen, Positivität verbessernde Operatoren). Sei $(M, d\mu)$ ein σ -endlicher Maß-Raum. Eine Funktion $0 \neq f \in L^2(M, d\mu)$ heißt *positiv*, falls $f \geq 0$ fast überall, und *strikt positiv*, falls $f > 0$ fast überall. Ein beschränkter Operator A auf $L^2(M, d\mu)$ heißt *Positivität verbessernd*, falls $A\psi$ strikt positiv ist für ψ positiv.

THEOREM 3.1.12. *Sei H ein selbstadjungierter Operator auf $L^2(\Omega)$, der halbbeschränkt ist und nur diskretes Spektrum besitzt. Wenn $E = \min \sigma(H)$ ein Eigenwert und e^{-tH} für ein $t \in \mathbb{R}^+$ Positivität verbessernd ist, dann ist E ein einfacher Eigenwert.*

BEWEIS. Sei $t \in \mathbb{R}^+$. Der Grundzustand, d.h. ein Eigenvektor zum minimalen Eigenwert von H , entspricht nach dem messbaren Funktionalkalkül dem Eigenzustand zum maximalen Eigenwert von $A := e^{-tH}$, d.h. dem Eigenwert $\lambda := \|A\|$ (siehe [5] Satz VI.1.6). Sei $\psi \in \mathcal{H}$ ein Eigenvektor zum Eigenwert λ . Ohne Einschränkung können wir annehmen, dass ψ reellwertig ist, da A Positivität verbessernd ist und somit insbesondere reellwertige Funktionen auf reellwertige Funktionen abbildet³, d.h.

$$(3.5) \quad \lambda(\Re\psi) = \Re(\lambda\psi) = \Re(A\psi) = \Re(A(\Re\psi + i\Im\psi)) = A(\Re\psi).$$

Damit ist $\Re\psi$ ebenfalls Eigenfunktion zum Eigenwert λ und wir können uns auf reellwertige Eigenfunktionen einschränken.

Offensichtlich ist $|\psi| \pm \psi \geq 0$ und da A Positivität verbessernd ist, gilt $A(|\psi| \pm \psi) \geq 0$ bzw.

$$(3.6) \quad A|\psi| \geq |A\psi| = \lambda|\psi|.$$

Folglich ist

$$(3.7) \quad \lambda\|\psi\|^2 \geq \langle |\psi|, A|\psi| \rangle \geq \langle |\psi|, |A\psi| \rangle = \lambda\|\psi\|^2,$$

$$(3.8) \quad \lambda\|\psi\|^2 = \langle |\psi|, A|\psi| \rangle = \langle |\psi|, |A\psi| \rangle,$$

was zusammen mit Gl. (3.6) zu $A|\psi| = \lambda|\psi|$ führt, d.h. $|\psi|$ ist ebenfalls Eigenvektor, und da A Positivität verbessernd ist, gilt $|\psi| > 0$ fast überall.

Nun ist $|\psi| - \psi$ also entweder auch ein Eigenvektor zum Eigenvektor λ oder Null. Damit ist $|\psi| - \psi$ entweder fast überall ungleich Null oder aber fast überall Null, d.h. ψ hat fast überall dasselbe Vorzeichen. Angenommen der Grundzustand ist entartet, d.h. es gibt eine weitere Eigenfunktion $\phi \in \mathcal{H}$ und $\langle \psi, \phi \rangle = 0$, sodass $A\phi = \lambda\phi$. Die Argumentation

³Sei $f \in \mathcal{H}$ eine reellwertige Funktion und f^\pm jeweils der Positiv- bzw. Negativteil von f , dann ist $Af = A(f^+ - f^-) = Af^+ - Af^-$ als Differenz strikt positiver Funktionen insbesondere reellwertig.

3.2. Kato-Störungstheorie

von oben zeigt, dass man annehmen kann, dass ψ und ϕ strikt positiv sind. Dann kann die Bedingungen $\langle \psi, \phi \rangle = 0$ aber nicht erfüllt sein, d.h. der Grundzustand ist nicht entartet. \square

Im ersten Teil dieser Arbeit haben wir begründet, warum der Hamilton-Operator eines Kristalls als ein linearer Operator

$$A = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}),$$

$$(3.9) \quad D(A) = D(\Delta + V(\mathbf{x})) = D(\Delta) \cap D(V(\mathbf{x})) = D(\Delta) = H^2(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n, dx)$$

mit $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, $V(x) = V(x + a_i) \forall x \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, \dots, n$, aufgefasst werden kann. Der Operator A ist insbesondere dicht definiert.

Eine wichtige Frage, die sich sofort ergibt, ist, ob der Hamilton-Operator A auch weiterhin selbstadjungiert ist. Um diese Frage beantworten zu können müssen wir uns mit der Störungstheorie nach Kato [26] beschäftigen.

3.2. Kato-Störungstheorie

Der Inhalt dieses Abschnitts folgt [27].

DEFINITION 3.2.1 (Kato-Störung). Seien T, V dicht definierte Operatoren auf \mathcal{H} . Der Operator V heißt *Kato-Störung*, falls $D(T) \subset D(V)$ und falls es reelle Zahlen $0 \leq a < 1$ und b gibt, sodass

$$(3.10) \quad \|Vx\| \leq a\|Tx\| + b\|x\| \quad \forall x \in D(T).$$

Der entscheidende Satz lautet nun:

THEOREM 3.2.2 (Kato-Rellich). Sei T ein selbstadjungierter Operator und V ein symmetrischer Operator auf \mathcal{H} und eine Kato-Störung von T . Dann ist $T + V$ selbstadjungiert auf der Domäne $D(T)$.

BEWEIS. Nach Voraussetzung ist $T + V$ symmetrisch auf $D(T)$. Damit können wir Satz 1.2.14 verwenden und es genügt zu zeigen, dass $\text{im}(T + V \pm i) = \mathcal{H}$ oder⁴ $\text{im}(T + V \pm ic) = \mathcal{H}$ für $c \in \mathbb{R}^*$.

Sei $c \in \mathbb{R}^*$ fest und $x \in D(T)$, dann gilt

$$\|(T + ic)x\|^2 = \|Tx\|^2 - ic\langle Tx, x \rangle + ic\langle x, Tx \rangle + c^2\|x\|^2 = \|Tx\|^2 + c^2\|x\|^2$$

aufgrund der Symmetrie von T . Also ist der Operator $T + ic$ injektiv und somit invertierbar auf der Domäne $\text{im}(T + ic) = \text{im}(c(T/c + i)) = \mathcal{H}$, da T/c selbstadjungiert ist. Wir finden zu beliebigem aber festem $x \in D(T)$ somit eine Darstellung $x = (T + ic)^{-1}y$ mit $y \in \mathcal{H}$, also

$$\|y\|^2 = \|T(T + ic)^{-1}y\|^2 + \|ic(T + ic)^{-1}y\|^2$$

und damit

$$(3.11) \quad \|T(T + ic)^{-1}y\| \leq \|y\| \quad \text{und} \quad \|(T + ic)^{-1}y\| \leq \frac{\|y\|}{|c|}.$$

Verwendet man nun, dass V eine Kato-Störung von T ist, so gilt

$$(3.12) \quad \begin{aligned} \|V(T + ic)^{-1}y\| &\leq a\|T(T + ic)^{-1}y\| + b\|(T + ic)^{-1}y\| \\ &\stackrel{(3.11)}{\leq} \left(a + \frac{b}{|c|}\right) \|y\|. \end{aligned}$$

für Konstanten $0 \leq a < 1$ und $b \in \mathbb{R}$.

Insbesondere ist damit $S := V(T + ic)^{-1}$ ein beschränkter Operator mit $\|S\| \leq \left(a + \frac{b}{|c|}\right)$.

⁴Die Konstante c kann durch Skalierung von $T + V$ absorbiert werden.

Da $a < 1$ kann man c so wählen, dass $\left(a + \frac{b}{|c|}\right) < 1$, also $\|S\| < 1$.

Damit ist aber $(\text{id} + S)$ invertierbar, wobei die Inverse durch eine von-Neumann-Reihe gegeben ist (siehe z.B. [5] Satz II.1.12). Folglich ist $\text{im}(\text{id} + S) = \mathcal{H}$ und da $\text{im}(T + ic) = \mathcal{H}$ gilt, folgt

$$\text{im}(T + V + ic) = \text{im}((\text{id} + S)(T + ic)) = \mathcal{H}.$$

Die Gleichheit bleibt auch erhalten, wenn man in der ganzen Argumentation c durch $-c$ ersetzt. \square

Anders ausgedrückt besagt der Satz, dass Selbstadjungiertheit von Operatoren stabil ist gegen eine bestimmte Klasse von symmetrischen Störungen.

Zusammengenommen zeigt dieser bisher Abschnitt, dass periodische Schrödingeroperatoren der Form $H_0 + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})$ mit $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ auf $H^2(\mathbb{R}^n)$ selbstadjungiert ist.

Im nächsten Teil dieses Abschnitts beschäftigen wir uns mit Störungen des Spektrums eines Operators, d.h. wie verändert sich das Spektrum des Operators H_0 , wenn man die potentielle Energie als Störung auffasst. Dieser beruht auf Ref. [23] XII.2 und Ref. [26] VII.§1.1 und 1.2.

DEFINITION 3.2.3 (analytische Vektor-wertige Funktion und analytische Familie (vom Typ A)). Sei $U \subset K$, $K = \mathbb{R}$ oder $K = \mathbb{C}$, zusammenhängend und offen. Die Vektor-wertige Abbildung $\Psi(\cdot) : U \rightarrow \mathcal{H}$ heißt *analytisch*, falls die Abbildung $U \rightarrow \mathbb{C}$, $k \mapsto \langle \phi, \Psi(k) \rangle$ eine analytische Funktion für alle $\phi \in \mathcal{H}$ ist.

Eine *analytische Familie* ist eine Operator-wertige Abbildung $H(\cdot)$ auf U , sodass für alle $k \in U$

- (i) $H(k)$ ein abgeschlossener Operator mit $\emptyset \neq \rho(H(k))$ ist und
- (ii) ein $\lambda \in \rho(H(k))$ existiert, sodass $\lambda \in \rho(H(k'))$ für ein k' in einer Umgebung von k , und $k \mapsto (H(k) - \lambda)^{-1}\psi$ ist analytisch für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

Falls $H(\cdot)$ statt (ii) die Bedingungen

- (1) $H(k)$ hat eine von k unabhängige Domäne $D = D(H(k))$ und
- (2) $k \mapsto H(k)\psi$ ist analytisch für alle $\psi \in D$

erfüllt, bezeichnet man $H(\cdot)$ als *analytische Familie vom Typ A*.

BEMERKUNG 3.2.4. Dass analytische Familien vom Typ A auch insbesondere analytische Familien sind, wird in [26] VII.§2.1 (pp. 375) gezeigt.

Außerdem kann man zeigen, dass das λ in der Bedingung (ii) von Definition 3.2.3 keine ausgezeichnete Rolle spielt, denn, falls (ii) erfüllt ist, so ist sie auch für k' und λ' in einer Umgebung von k und $\lambda \in \rho(T(k))$ erfüllt (siehe [23] Thm XII.7).

Im Falle nicht-entarteter Eigenwerte findet man folgendes nützliches Theorem der analytischen Störungstheorie.

THEOREM 3.2.5. Sei $H(\cdot)$ eine selbstadjungierte analytische Familie auf $U \subset \mathbb{R}$ mit $k_0 \in U$. Sei weiterhin $E(k_0) \in \sigma_d(H(k_0))$ ein nicht-entarteter Eigenwert. Dann gibt es eine eindeutige analytische Funktion $E(\cdot)$ in einer Umgebung von k_0 , sodass $E(k) \in \sigma_d(H(k))$ ein nicht-entarteter Eigenwert ist und es gibt einen dazugehörigen normierten analytischen Eigenvektor $\psi(k)$.

Bei entarteten Eigenwerten werden wir das folgende Theorem verwenden.

THEOREM 3.2.6. Sei $H(\cdot)$ eine selbstadjungierte analytische Familie auf $U \subset \mathbb{R}$ mit $k_0 \in U$. Sei weiterhin $E(k_0) \in \sigma_d(H(k_0))$ mit Vielfachheit m . Dann gibt es m nicht notwendigerweise verschiedene analytische Funktionen $E_1(\cdot), \dots, E_m(\cdot)$ in einer Umgebung von k_0 , sodass $E_i(k_0) = E(k_0)$ und $E_i(k) \in \sigma_d(H(k))$ in einer Umgebung von k_0 für $i = 1, \dots, m$, wobei wiederholte Eigenwerte die Vielfachheit zählen und in dieser Umgebung von k_0 keine weiteren Eigenvektoren auftreten.

3.3. Die direkte Integral-Zerlegung

Die Inhalte in diesem Abschnitt sind an Ref. [23] Kapitel XIII.16 und Ref. [28] Kapitel 7.4 angelehnt.

Für viele Hamilton-Operatoren der Quantenmechanik lässt sich auch mit wenig mathematischem Werkzeug sehr viel über das Energiespektrum aussagen oder das Energiespektrum sogar explizit bestimmen. Dabei spielt das Verhalten der potentiellen Energie im Unendlichen eine große Rolle [29].

Im Falle periodischer potentieller Energien lassen sich dieselben Techniken nicht mehr anwenden und man muss zu anderen Hilfsmitteln greifen. Eine zentrale Rolle spielt dabei die Invarianz des Hamilton-Operators unter Translation mit Gittervektoren des zugrundeliegenden Kristalls. Dies führt zur direkten Integral-Zerlegung mit konstanten Fasern periodischer Schrödingeroperatoren, die wir hier nun besprechen wollen.

Im Folgenden sei (B, \mathcal{A}, μ) stets ein σ -endlicher Maßraum.

DEFINITION 3.3.1 (Messbares Feld von Hilberträumen). Sei $\{\mathcal{H}'_k\}_{k \in B}$ eine Menge separabler Hilberträume ohne den Nullraum. Falls Abbildungen $e_i : B \rightarrow \prod_{k \in B} \mathcal{H}'_k$, $i \in \mathbb{N}$ existieren mit den Eigenschaften

- (i) Die Abbildung $B \rightarrow \mathbb{C}$, $k \mapsto \langle e_i(k), e_j(k) \rangle_{\mathcal{H}'_k}$ ist messbar für alle $i, j \in \mathbb{N}$,
- (ii) Die Menge $\{e_i(k)\}_{i \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H}'_k$ ist total für alle $k \in B$,

dann heißt das Tupel $(\{\mathcal{H}'_k\}_{k \in B}, \{e_i\}_{i \in \mathbb{N}})$ *messbares Feld von Hilberträumen über B* .

Wir interessieren uns für den Spezialfall eines *konstanten Feldes von Hilberträumen über B* , wo $\mathcal{H}'_k = \mathcal{H}'$ und $e_i(k) = e_i$ für alle $k \in B, i \in \mathbb{N}$ mit $\{e_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H}'$ Orthonormalbasis zum separablen nichttrivialen Hilbertraum \mathcal{H}' . Dass es sich hierbei insbesondere um ein messbares Feld von Hilberträumen über B handelt, ist offensichtlich, da die Abbildungen $k \mapsto \langle e_i, e_j \rangle_{\mathcal{H}'}$ als konstante Funktionen auch messbar sind für alle $i, j \in \mathbb{N}$.

Sei von nun an $(\{\mathcal{H}'_k\}_{k \in B}, \{e_i\}_{i \in \mathbb{N}})$ stets ein konstantes Feld von separablen Hilberträumen über B .

DEFINITION 3.3.2 (schwach messbare vektorwertige Funktion). Eine Abbildung $f : B \rightarrow \mathcal{H}'$ heißt *schwach messbar*, wenn die Abbildung $B \rightarrow \mathbb{C}$, $k \mapsto \langle f(k), e_i \rangle_{\mathcal{H}'}$, für alle $i \in \mathbb{N}$ messbar ist.

PROPOSITION 3.3.3. Sind $f, g : B \rightarrow \mathcal{H}'$ schwach messbar, dann ist auch $B \rightarrow \mathbb{C}$, $k \mapsto \langle f(k), g(k) \rangle_{\mathcal{H}'}$ messbar.

BEWEIS. Aufgrund der Eigenschaft von $\{e_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ total zu sein, gilt (siehe [5] Satz V.4.9) die Darstellung

$$(3.13) \quad \langle f(k), g(k) \rangle_{\mathcal{H}'} = \sum_{i=1}^{\infty} \langle f(k), e_i \rangle_{\mathcal{H}'} \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'}$$

Da in diesem Ausdruck $k \mapsto \langle f(k), e_i \rangle_{\mathcal{H}'}$ per Definition und $k \mapsto \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'}$ als komplex Konjugiertes einer messbaren Funktion messbar sind, ist der punktweise Grenzwert $k \mapsto \sum_{i=1}^{\infty} \langle f(k), e_i \rangle_{\mathcal{H}'} \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'}$ ebenfalls messbar. \square

DEFINITION 3.3.4 (stark messbare vektorwertige Funktion). Eine Abbildung $f : B \rightarrow \mathcal{H}'$ heißt *stark messbar*, wenn die Funktion $f(k)$ für fast alle $k \in B$ der Grenzwert einer Folge von messbaren Treppenfunktion $(f_n(k))_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H}'$ ist, also $\lim_{n \rightarrow \infty} \|f(k) - f_n(k)\|_{\mathcal{H}'} = 0$.

Wie diese Begriffe von Messbarkeit mit dem klassischen Begriff von Messbarkeit in Zusammenhang stehen, wird im nächsten Theorem deutlich.

THEOREM 3.3.5. *Die Begriffe der (a) schwachen Messbarkeit, (b) starken Messbarkeit und (c) Messbarkeit in Bezug auf vektorwertige Funktionen $B \rightarrow \mathcal{H}'$ sind äquivalent.*

BEWEIS. Sei $f : B \rightarrow \mathcal{H}'$ bel.

”(a) \Rightarrow (b)“: Angenommen f ist schwach messbar, dann sind $k \mapsto \langle e_i, f(k) \rangle_{\mathcal{H}'}$ =: $\tilde{f}_i(k)$ messbar für alle $i \in \mathbb{N}$. Bekanntermaßen lassen sich die messbaren komplexwertigen Funktionen \tilde{f}_i durch Treppenfunktionen $f_{i,n} : B \rightarrow \mathbb{C}$ punktweise approximieren, sodass $|f_{i,n}| \leq |\tilde{f}_i|$ für alle $i, n \in \mathbb{N}$. Wir definieren Treppenfunktionen $f_n := \sum_{i=1}^n f_{i,n} e_i$ für $n \in \mathbb{N}$. Es gilt

$$(3.14) \quad \|f_n(k) - f(k)\| = \left\| \sum_{i=1}^n f_{i,n}(k) e_i - \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{f}_i(k) e_i \right\|$$

$$(3.15) \quad = \left\| \sum_{i=1}^{\infty} f_{i,n}(k) e_i - \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{f}_i(k) e_i - \sum_{i=n+1}^{\infty} f_{i,n}(k) e_i \right\|$$

$$(3.16) \quad \leq \left\| \sum_{i=1}^{\infty} (f_{i,n}(k) - \tilde{f}_i(k)) e_i \right\| + \left\| \sum_{i=n+1}^{\infty} f_{i,n}(k) e_i \right\|$$

$$(3.17) \quad \leq \sqrt{\lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^m |f_{i,n}(k) - \tilde{f}_i(k)|^2} + \sqrt{\sum_{i=n+1}^{\infty} |\tilde{f}_i(k)|^2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0,$$

wobei wir im letzten Schritt im ersten Summanden den Grenzwert für m mit dem Grenzwert für n nach dem Moore-Osgood Theorem – in den Voraussetzungen hierzu wird das Cauchy-Kriterium für konvergente Reihen verwendet – vertauscht haben.

Damit ist $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine punktweise Approximation von f durch messbare Treppenfunktionen, also ist f stark messbar.

”(b) \Rightarrow (c)“: Dies ist offensichtlich, da der punktweise Grenzwert messbarer Funktionen wieder messbar ist.

”(c) \Rightarrow (a)“: Die Abbildungen $f_i : B \rightarrow \mathbb{C}$, $k \mapsto \langle f(k), e_i \rangle$ für $i \in \mathbb{N}$ kann man auch als Verkettung $B \xrightarrow{f} \mathcal{H}' \xrightarrow{\langle \cdot, e_i \rangle} \mathbb{C}$ auffassen. Aufgrund der Stetigkeit des Skalarprodukts ist für ein beliebige offene Menge $U \subset \mathbb{C}$ das Urbild unter $g_i := \langle \cdot, e_i \rangle$ für alle $i \in \mathbb{N}$ auch offen und wegen der Messbarkeit von f ist zudem $f_i^{-1}(U) = f^{-1}(g_i^{-1}(U)) \in \mathcal{A}$. \square

DEFINITION+SATZ 3.3.6 (Direktes Integral mit konstanten Fasern $L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$). Mit $L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ bezeichnet man die Menge der Äquivalenzklassen messbarer Funktionen, die von B auf \mathcal{H}' abbilden und deren Elemente f die Eigenschaft

$$(3.18) \quad \int_B \|f(k)\|_{\mathcal{H}'}^2 d\mu(k) < \infty$$

erfüllen. Diese Menge ist ein Hilbertraum, wenn sie mit dem Skalarprodukt

$$(3.19) \quad \langle f, g \rangle = \int_B \langle f(k), g(k) \rangle_{\mathcal{H}'} d\mu(k)$$

ausgestattet wird. Alternativ schreibt man

$$(3.20) \quad L^2(B, d\mu, \mathcal{H}') = \int_B^{\oplus} \mathcal{H}' d\mu$$

und nennt diese Struktur *direktes Integral mit konstanten Fasern \mathcal{H}'* .

3.3. Direkte Integral-Zerlegung

BEWEIS. Die Ausdrücke sind wohldefiniert nach Prop. 3.3.3. Der Beweis der Vollständigkeit funktioniert analog wie für den klassischen Hilbertraum $L^2(B, d\mu)$. \square

BEMERKUNG 3.3.7. (i) Im Falle, dass in Definition 3.3.6 das Maß μ eine Summe von Punktmaßen auf endlich vielen Punkten $k_1, \dots, k_m \in B$ mit $m \in \mathbb{N}$ ist, wird jedes Element $f \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ durch $(f(k_1), \dots, f(k_m))$ eindeutig festgelegt, d.h. $L^2(B, d\mu, \mathcal{H}') \stackrel{\text{isom.}}{=} \bigoplus_{i=1}^m \mathcal{H}'$.

Im Falle allgemeiner Maße μ wird die direkte Summe zu einer "stetigen direkten Summe" $\int_B^\oplus d\mu$.

(ii) Offensichtlich hängt die ganze Konstruktion von direkten Integralen mit konstanten Fasern von der Wahl der Basis-Vektoren $\{e_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ ab. Mittels Proposition 3.3.3 ergibt sich aber eine Isomorphie $\int_B^\oplus \mathcal{H}' d\mu \stackrel{\text{isom.}}{=} L^2(B, d\mu, l^2)$ im Falle, dass $\dim(\mathcal{H}') = \infty$, da man \mathcal{H}' mit l^2 identifizieren kann und die Messbarkeit erhalten bleibt. Damit ist also die konstante-Faser-direkte-Integral-Struktur bis auf einen Isomorphismus unabhängig von der Wahl der Basis.

PROPOSITION 3.3.8. Seien $f, g \in \int_B^\oplus \mathcal{H}' d\mu$. Es gilt

$$(3.21) \quad k \mapsto \sum_{i=1}^N \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'} e_i =: g_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} g \text{ in } L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$$

und

$$(3.22) \quad \langle f, g \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \int_B \langle f(k), e_i \rangle_{\mathcal{H}'} \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'} d\mu(k).$$

BEWEIS. Für fast alle $k \in B$ gilt $g(k) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'} e_i$ und offensichtlich ist $g_N \in \int_B^\oplus \mathcal{H}' d\mu$ für alle $N \in \mathbb{N}$. Somit gilt

$$(3.23) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \|g - g_N\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')} = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_B \left\| g(k) - \sum_{i=1}^N \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'} e_i \right\|_{\mathcal{H}'}^2 d\mu(k)$$

$$(3.24) \quad = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_B \left\| \sum_{i=N+1}^{\infty} \langle e_i, g(k) \rangle_{\mathcal{H}'} e_i \right\|_{\mathcal{H}'}^2 d\mu(k)$$

$$(3.25) \quad = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_B \sum_{i=N+1}^{\infty} |\langle e_i, g(k) \rangle|^2 d\mu(k).$$

Wir verwenden nun den Satz von Lebesgue, wobei eine Majorante gegeben ist durch $k \mapsto \|g(k)\|_{\mathcal{H}'}^2$ und erhalten die erste Behauptung $\lim_{N \rightarrow \infty} g_N = g$. Die zweite Behauptung folgt mittels der ersten und der Stetigkeit des Skalarprodukts. \square

Dasselbe Konzept von direkten Integralen kann man auch auf beschränkte Operatoren erweitern.

DEFINITION 3.3.9 (messbares Feld von stetigen Operatoren). Ein Operator $T : B \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}')$ heißt *messbares Feld von stetigen Operatoren über B* , falls die Abbildung $f_\psi : B \rightarrow \mathcal{H}'$ gegeben durch $k \mapsto T(k)\psi(k)$ für alle messbaren Funktionen $\psi : B \rightarrow \mathcal{H}'$ messbar ist.

PROPOSITION 3.3.10. Sei $T : B \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}')$ ein Feld von stetigen Operatoren. Dann ist T messbar, genau dann wenn die Abbildung $f_{i,j} : B \rightarrow \mathbb{C}$ gegeben durch $k \mapsto \langle T(k)e_i, e_j \rangle$ für alle $i, j \in \mathbb{N}$ messbar ist.

BEWEIS. Die Hinrichtung ist trivial. Sei also

$$(3.26) \quad k \mapsto \langle T(k)e_i, e_j \rangle = \langle e_i, T(k)^*e_j \rangle$$

messbar für alle $i, j \in \mathbb{N}$. Damit ist $T(k)^*e_j$ (schwach) messbar für alle $j \in \mathbb{N}$. Nimmt man nun eine beliebige messbare Funktion $\psi : B \rightarrow \mathcal{H}'$, so ist

$$(3.27) \quad k \mapsto \langle \psi(k), T(k)^*e_j \rangle = \langle T(k)\psi(k), e_j \rangle$$

auch messbar nach Prop. 3.3.3. □

Innerhalb der Felder stetiger Operatoren stellen wir nun eine wichtige Klasse vor.

DEFINITION 3.3.11 ($L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$). Die Menge der Äquivalenzklassen fast überall identischer wesentlich beschränkter messbarer Felder von stetigen Operatoren $T : B \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}')$, d.h.

$$(3.28) \quad \|T\|_\infty := \text{ess sup}_{k \in B} \|T(k)\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H}')} < \infty,$$

wird mit $L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$ notiert.

DEFINITION 3.3.12 (Zerlegbarkeit durch die direkte Integral-Zerlegung). Sei T ein beschränkter Operator auf $\int_B^\oplus \mathcal{H}' d\mu$. Dann heißt T zerlegbar durch die direkte Integral-Zerlegung, falls ein $S \in L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$ existiert, sodass

$$(3.29) \quad (T\psi)(\cdot) = S(\cdot)\psi(\cdot) \quad \forall \psi \in \int_B^\oplus \mathcal{H}' d\mu.$$

Wir schreiben dann

$$(3.30) \quad T = \int_B^\oplus S(k) d\mu(k)$$

und nennen $S(k)$ die Fasern von T .

BEMERKUNG 3.3.13. (i) Eine Zerlegung durch die direkte Integral-Zerlegung ist eindeutig, da aus $\int_B^\oplus S(k) d\mu(k) = \int_B^\oplus \tilde{S}(k) d\mu(k)$ auch $\int_B^\oplus (S - \tilde{S})(k) d\mu(k) = 0$ folgt und somit $\|S - \tilde{S}\|_\infty = 0$.

(ii) Man kann leicht nachrechnen (siehe z.B. Ref. [30], Prop. 14.1.8), dass die Menge der zerlegbaren Operatoren in $\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))$ eine Teilalgebra von $\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))$ ist. Wir wollen diese Teilalgebra mit $\mathcal{D}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))$ notieren.

THEOREM 3.3.14. $\mathcal{D}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))$ ist isometrisch isomorph zu $L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$.

BEWEIS. Wir werden zeigen, dass ein isometrischer Algebrenisomorphismus gerade mittels Gl. 3.29 beschrieben ist. Hierbei ist die Injektivität

$$(3.31) \quad \mathcal{D}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')) \hookrightarrow L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$$

nach Bem. 3.3.13(i) ersichtlich.

Sei nun $S \in L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$ und $\psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$. Der Operator T sei durch Gl. 3.29 definiert. Es ist nun zu zeigen, dass $T \in \mathcal{D}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))$ und $\|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))} = \|S\|_\infty$.

Es gilt

$$(3.32) \quad (T\psi)(k) = S(k)\psi(k) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i, \psi(k) \rangle_{\mathcal{H}'} S(k)e_i = S(k) \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i, \psi(k) \rangle_{\mathcal{H}'} e_i$$

für fast alle $k \in B$, da S fast überall ein stetiger Operator ist.

Da S messbar ist, folgt per Definition die Messbarkeit von $k \mapsto S(k)e_i$ für alle $i \in \mathbb{N}$.

3.3. Direkte Integral-Zerlegung

Somit ist $k \mapsto \sum_{i=1}^n \langle e_i, \psi(k) \rangle S(k) e_i =: \phi_n(k)$, $n \in \mathbb{N}$, als Summe und Produkt messbarer Funktionen auch messbar. Man rechnet zudem

$$(3.33) \quad \|\phi_n\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')}^2 = \int_B \left\| \sum_{i=1}^n \langle e_i, \psi(k) \rangle S(k) e_i \right\|_{\mathcal{H}'}^2 d\mu(k)$$

$$(3.34) \quad \leq \|S\|_{\infty}^2 \int_B \left\| \sum_{i=1}^n \langle e_i, \psi(k) \rangle e_i \right\|_{\mathcal{H}'}^2 d\mu(k)$$

$$(3.35) \quad \leq \|S\|_{\infty}^2 \|\psi\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')}^2.$$

Analog zeigt man, dass

$$(3.36) \quad \sup_{m \geq n} \|\phi_n - \phi_m\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')}^2 \leq \|S\|_{\infty}^2 \int_B \sup_{m \geq n} \sum_{i=n+1}^m |\langle e_i, \psi(k) \rangle|^2 d\mu(k) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Demnach ist $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset L^2(X, d\mu, \mathcal{H}')$ eine Cauchyfolge mit Grenzwert $\phi \in L^2(X, d\mu, \mathcal{H}')$ nach Satz 3.3.6. Nach Gl. (3.32) konvergiert $(\phi_n(k))_{n \in \mathbb{N}}$ gegen $(T\psi)(k)$ für fast alle $k \in B$, also ist $T\psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ mit

$$(3.37) \quad \|T\psi\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')} = \|\phi\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')} \stackrel{(3.35)}{\leq} \|S\|_{\infty} \|\psi\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')} ,$$

d.h. $T \in \mathcal{D}(L^2(X, d\mu, \mathcal{H}'))$ mit $\|T\|_{\mathcal{L}(L^2(X, d\mu, \mathcal{H}'))} \leq \|S\|_{\infty}$.

Nun wollen wir die umgekehrte Ungleichung zeigen. Sei dazu $\{y_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subset B_1(0) \subset \mathcal{H}'$ eine dichte Teilmenge des Einheitsballs im separablen Hilbertraum \mathcal{H}' und $f \in L^1(B, d\mu)$, wobei wir eine Zerlegung $f = gh$ mit $g, h \in L^2(B, d\mu)$ und $\|g\|_2^2 = \|h\|_2^2 = \|f\|_1$ wählen; z.B. $f = |f| e^{i \arg(f)} = \underbrace{\sqrt{|f|} e^{i \arg(f)/2}}_{:=g} \underbrace{\sqrt{|f|} e^{i \arg(f)/2}}_{:=h}$. Zudem definieren wir

$\Psi_i := \bar{g} y_i$ und $\Phi_j = h y_j$ für $i, j \in \mathbb{N}$. Damit gilt

$$(3.38) \quad \left| \int_B f(k) \langle y_i, S(k) y_j \rangle d\mu(k) \right| = \left| \int_B \langle \bar{g}(k) y_i, S(k) h(k) y_j \rangle d\mu(k) \right|$$

$$(3.39) \quad = |\langle \Psi_i, T \Phi_j \rangle|$$

$$(3.40) \quad \leq \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))} \|\Psi_i\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')} \|\Phi_j\|_{L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')}$$

$$(3.41) \quad = \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))} \|y_i\|_{\mathcal{H}'} \|g\|_2 \|y_j\|_{\mathcal{H}'} \|h\|_2$$

$$(3.42) \quad = \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))} \|y_i\|_{\mathcal{H}'} \|y_j\|_{\mathcal{H}'} \|f\|_1$$

Da in unserer Betrachtung $(B, d\mu)$ σ -endlich ist, herrscht eine isometrische Isomorphie zwischen $L^\infty(B, d\mu)$ und $(L^1(B, d\mu))'$ (siehe z.B. [5] Satz II.2.4), weshalb wir

$$(3.43) \quad \sup_{0 \neq f \in L^1(B, d\mu)} \frac{\left| \int_B f(k) \langle y_i, S(k) y_j \rangle d\mu(k) \right|}{\|f\|_1} \leq \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))} \|y_i\|_{\mathcal{H}'} \|y_j\|_{\mathcal{H}'}$$

$$(3.44) \quad \text{ess sup}_{k \in B} |\langle y_i, S(k) y_j \rangle| \leq \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))} \|y_i\|_{\mathcal{H}'} \|y_j\|_{\mathcal{H}'}$$

$$(3.45) \quad \text{ess sup}_{k \in B} \sup_{i, j \in \mathbb{N}} \left| \left\langle \frac{y_i}{\|y_i\|_{\mathcal{H}'}} , S(k) \frac{y_j}{\|y_j\|_{\mathcal{H}'}} \right\rangle \right| \leq \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))}$$

$$(3.46) \quad \text{ess sup}_{k \in B} \|S(k)\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H}')} \leq \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))}$$

$$(3.47) \quad \|S\|_{\infty} \leq \|T\|_{\mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))}$$

folgern. □

Eine äquivalente Beschreibung von Zerlegbarkeit eines Operators lernen wir im nächsten Theorem kennen. Hierzu sei bemerkt, dass man aufgrund von Theorem 3.3.14

$$(3.48) \quad \mathcal{D}_{\text{id}}(B, d\mu) \cong L^\infty(B, d\mu, \mathbb{C}) \subset L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$$

als Subalgebra mit der Menge der zerlegbaren Operatoren, deren Fasern der Form $c \cdot \text{id}$, $c \in \mathbb{C}$, genügen, identifizieren kann.

THEOREM 3.3.15. *Ein Operator $T \in \mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))$ ist zerlegbar durch die direkte Integral-Zerlegung genau dann, wenn T mit allen Elementen aus $\mathcal{D}_{\text{id}}(B, d\mu)$ kommutiert.*

BEWEIS. " \Rightarrow ": Angenommen T ist zerlegbar, dann existiert ein $S \in L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$, sodass $(T\psi)(k) = S(k)\psi(k)$ für alle $k \in B$ und $\psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$. Damit gilt für eine beliebige Funktion $f \in L^\infty(B)$ und $\psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$, dass

$$(3.49) \quad ([T, f\text{id}]\psi)(\cdot) = [S(\cdot)f(\cdot) - f(\cdot)S(\cdot)]\psi(\cdot) = 0.$$

" \Leftarrow ": Da das Maß $d\mu$ σ -endlich ist existiert eine strikt-positive Funktion $f \in L^1(B, \mathbb{R})$, sodass für das Maß $d\mu' := fd\mu$ gilt $\int_B d\mu' = 1$ (siehe z.B. [31], Satz 9.2.6). Damit ist die Abbildung $U : L^2(B, d\mu, \mathcal{H}') \rightarrow L^2(B, d\mu', \mathcal{H}')$, $\psi(\cdot) \mapsto \psi(\cdot)/\sqrt{f(\cdot)}$ offensichtlich unitär. Demnach ist T genau dann zerlegbar auf $L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$, wenn UTU^{-1} zerlegbar auf $L^2(B, d\mu', \mathcal{H}')$ ist. Damit können wir unsere Überlegungen auf das Maß $d\mu'$ beschränken bzw. wir nehmen ohne Einschränkung an, dass $\int_B d\mu = 1$.

Angenommen T kommutiert mit jedem Element aus $\mathcal{D}_{\text{id}}(B, d\mu)$. Sei zudem $E_i \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ definiert durch $E_i(k) = e_i$ für alle $k \in B$ und $i \in \mathbb{N}$. Damit ist $\{E_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subset L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ orthonormal, da $\langle E_i, E_j \rangle = \int_B \langle e_i, e_j \rangle d\mu = \delta_{i,j} \int_X d\mu = \delta_{i,j}$ für alle $i, j \in \mathbb{N}$.

Nach Prop. 3.3.8 können wir TE_i auch als

$$(3.50) \quad TE_i = \sum_{j=1}^{\infty} t_{ij}E_j$$

schreiben, wobei es sich bei t_{ij} um Funktionen $t_{ij} : B \rightarrow \mathbb{C}$ für alle $i, j \in \mathbb{N}$ handelt. Da \mathcal{H}' separabel ist, können wir eine dichte Teilmenge $\{y_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H}'$ wählen, wobei die Elemente dargestellt werden können als

$$(3.51) \quad y_i = \sum_{j=1}^N y_{ij}e_j$$

mit Koeffizienten $y_{ij} \in \mathbb{C}$ und $i, j, N \in \mathbb{N}$. Entsprechend definieren wir zudem

$$(3.52) \quad Y_i := \sum_{j=1}^N y_{ij}E_j \quad \text{und} \quad S(k)y_i := \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{j=1}^N y_{ij}t_{jm}(k)e_m$$

mit $i \in \mathbb{N}$ und $k \in B$.

Sei nun $f \in L^\infty(B, d\mu, \mathbb{C})$ beliebig und demnach $M_f \in \mathcal{D}_{\text{id}}(B, d\mu)$, dann gilt nach Voraussetzung

$$(3.53) \quad T(M_f Y_i) = M_f(TY_i) = \sum_{j=1}^N f y_{ij} T E_j = \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{\infty} f y_{ij} t_{jm} E_m$$

für alle $i \in \mathbb{N}$ und damit

$$(3.54) \quad \|TM_f Y_i\|^2 = \int_B \sum_{m=1}^{\infty} \left| f(k) \sum_{j=1}^N y_{ij} t_{jm}(k) \right|^2 d\mu(k) = \int_B |f(k)|^2 \|S(k)y_i\|^2 d\mu(k)$$

$$(3.55) \quad \leq \|T\|^2 \|M_f Y_i\|^2$$

3.3. Direkte Integral-Zerlegung

$$(3.56) \quad = \|T\|^2 \left(\int_B |f(k)|^2 d\mu(k) \right) \|y_i\|^2.$$

Da das Maß $(B, d\mu)$ σ -additiv ist, gilt $L^\infty(B, d\mu) \stackrel{isom.}{\cong} (L^1(B, d\mu))'$, und es folgt (vgl. Beweis 3.3.14) für fast alle $k \in B$ und $i \in \mathbb{N}$, dass

$$(3.57) \quad \|S(k)y_i\| \leq \text{ess sup}_{k \in B} \|S(k)y_i\| \leq \|T\| \|y_i\|.$$

Damit lässt sich $S(k)$ für alle $k \in B$ zu einem stetigen linearen Operator auf \mathcal{H}' fortsetzen und es gilt $S(\cdot) \in L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$. Nach Theorem 3.3.14 existiert zu $S(\cdot)$ ein zerlegbarer Operator S . Wir wollen nun zeigen, dass dieser Operator S gerade T ist.

Sei $g \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ beliebig mit Approximation (Prop. 3.3.8)

$$(3.58) \quad g_N := \sum_{i=1}^N \langle E_i(\cdot), g(\cdot) \rangle E_i(\cdot) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} g,$$

wobei $\langle E_i(\cdot), g(\cdot) \rangle \in L^2(B, d\mu)$ für alle $i \in \mathbb{N}$ und

$$(3.59) \quad (Tg_N)(k) = \sum_{i=1}^N \langle E_i(k), g(k) \rangle (TE_i)(k) = \sum_{i=1}^N \langle E_i(k), g(k) \rangle S(k)e_i$$

$$(3.60) \quad = S(k) \sum_{i=1}^N \langle E_i(k), g(k) \rangle E_i(k) = S(k)g_N(k) = (Sg_N)(k)$$

für alle $k \in B$. Da die Operatoren stetig sind und g beliebig war, folgt $T = S$, weshalb T insbesondere zerlegbar ist. \square

Unser Begriff von Zerlegbarkeit ist bisher auf stetige Operatoren beschränkt. Da der Hamilton-Operator eines Festkörpers unbeschränkt ist, wollen wir unsere Begriffe auf allgemeine lineare selbstadjungierte Operatoren erweitern.

DEFINITION 3.3.16 (messbares Feld von selbstadjungierten Operatoren). Eine Abbildung T von $(B, d\mu)$ in die Menge der selbstadjungierten Operatoren über \mathcal{H}' heißt *messbares Feld selbstadjungierter Operatoren*, falls $(T(\cdot) + i)^{-1}$ ein messbares Feld stetiger Operatoren ist (vgl. Theorem 1.2.14).

BEMERKUNG 3.3.17. Die Definition der Messbarkeit eines selbstadjungierten Feldes von Operatoren $T(\cdot)$ kann man wie folgt verstehen. Da $(T(\cdot) + i)^{-1}$ und die Identität messbare Felder stetiger Operatoren sind, ist auch $\text{id} - i(T(\cdot) + i)^{-1} = T(\cdot)(T(\cdot) + i)^{-1}$ messbar. Für ein beliebiges messbares Feld $\Psi : B \rightarrow \mathcal{H}'$ gibt es die Darstellung

$$(3.61) \quad \Psi(k) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{c}_i(k) e_i$$

für alle $k \in B$ mit $\tilde{c}_i \in \mathcal{M}(B, d\mu) \forall i \in \mathbb{N}$. Will man nun diese Felder darauf beschränken, dass $\Psi(k) \in D(T(k))$ gilt, kann man $D(T(k)) = \text{im}((T(k) + i)^{-1})$ für alle $k \in B$ verwenden und erhält wegen der Messbarkeit von $(T(\cdot) + i)^{-1}$ die Darstellung

$$(3.62) \quad \Psi(k) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i(k) (T(k) + i)^{-1} e_i$$

für alle $k \in B$ mit $c_i \in \mathcal{M}(B, d\mu) \forall i \in \mathbb{N}$. Zusammengenommen liefern diese Überlegungen den Schluss, dass $T(\cdot)$ beliebige messbare Felder $\Psi(\cdot)$ auf messbare Felder abbildet, falls für die Fasern $\Psi(k) \in D(T(k))$ für alle $k \in B$ gilt.

Diese Bemerkung erlaubt es nun die direkte Integralzerlegung für selbstadjungierte Operatoren zu definieren.

DEFINITION 3.3.18 (direkte Integralzerlegung für selbstadjungierte Operatoren). Sei $T(\cdot) : B \rightarrow \text{Abb}(\mathcal{H}', \mathcal{H}')$ ein messbares Feld von selbstadjungierten Operatoren über \mathcal{H}' . Man definiert den Operator $T : D(T) \rightarrow L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ durch

$$(3.63) \quad D(T) := \left\{ \Psi \in \int_B^\oplus \mathcal{H}' d\mu(k) \mid \Psi(k) \in D(T(k)) \text{ f.ü., } \|T(\cdot)\Psi(\cdot)\| < \infty \right\}$$

$$(T\Psi)(k) = T(k)\Psi(k) \quad \forall \Psi \in D(T).$$

und wird mit $T = \int_B^\oplus T(k)d\mu(k)$ notiert.

Man beachte, dass bei der Definition von $D(T)$ nur gefordert wurde, dass die Fasern fast überall in $D(T(k))$ enthalten sind. Dies rührt daher, dass man $\text{im}(T) \subset L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ auf Nullmengen nicht spezifizieren muss. Wir wenden uns nun einigen Eigenschaften der direkten Integralzerlegung selbstadjungierter Operatoren zu.

THEOREM 3.3.19. Sei $T : B \rightarrow \text{Abb}(\mathcal{H}', \mathcal{H}')$ ein messbares Feld selbstadjungierter Operatoren über \mathcal{H}' und $T = \int_B^\oplus T(k)d\mu(k)$. Dann gilt:

(i) T ist selbstadjungiert.

(ii) Ein selbstadjungierter Operator S auf $L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ hat die Form $\int_B^\oplus S(k)d\mu(k)$ genau dann, wenn $(S + i)^{-1}$ ein stetiger zerlegbarer Operator ist.

(iii) Sei $f \in \mathcal{M}^\infty(\mathbb{R})$. Dann gilt:

$$(3.64) \quad f(T) = \int_B^\oplus f(T(k))d\mu(k).$$

(iv) $\lambda \in \sigma(T)$ genau dann, wenn für alle $\epsilon > 0$ gilt, dass

$$(3.65) \quad \mu(\{k \in B \mid \sigma(T(k)) \cap (\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon) \neq \emptyset\}) \neq 0.$$

(v) $\lambda \in \sigma_p(T)$ genau dann, wenn

$$(3.66) \quad \mu(\{k \in B \mid \lambda \in \sigma_p(T(k))\}) \neq 0.$$

(vi) Sei $T(\cdot) : B \rightarrow \text{Abb}(\mathcal{H}', \mathcal{H}')$ ein Feld halbbeschränkter selbstadjungierter Operatoren und sei $V(\cdot) : B \rightarrow \text{Abb}(\mathcal{H}', \mathcal{H}')$ ein konstantes Feld selbstadjungierter Multiplikationsoperatoren, wobei mit einer reellwertigen messbaren und wesentlich beschränkten Funktion multipliziert wird, über \mathcal{H}' , $V = \int_B^\oplus V(k)d\mu(k)$ und V eine Kato-Störung von T mit

$$(3.67) \quad \|V\Psi\| \leq a\|T\Psi\| + b\|\Psi\| \quad \forall \Psi \in D(T),$$

dann ist

$$(3.68) \quad \|V(k)\Psi(k)\| \leq a(k)\|T(k)\Psi(k)\| + b(k)\|\Psi(k)\|$$

für fast alle $k \in B$, wobei $a(k) \leq a$.

Der Operator $T + V = \int_B^\oplus (T(k) + V(k))d\mu(k)$ ist auf $D(T)$ selbstadjungiert.

BEWEIS. (i) Zunächst stellen wir fest, dass T symmetrisch ist, da für alle $\Phi, \Psi \in D(T)$ gilt

$$(3.69) \quad \langle T\Psi, \Phi \rangle = \int_B \langle T(k)\Psi(k), \Phi(k) \rangle d\mu(k) = \int_B \langle \Psi(k), T(k)\Phi(k) \rangle d\mu(k) = \langle \Psi, T\Phi \rangle.$$

Nach Theorem 1.2.14 bleibt noch zu zeigen, dass $\text{im}(T \pm i) = L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$. Wir definieren $S(k) := (T(k) + i)^{-1}$ für $k \in B$. Per Definition sind diese Operatoren messbar. Außerdem ist nach Theorem 3.1.2 $S(k)$ ein beschränkter linearer Operator für alle $k \in B$. Da für $k \in B$ gilt, dass $S(k) = f(T(k))$, wobei $f : \sigma(T(k)) \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ definiert durch $f(y) := \frac{1}{y+i}$ $\forall y \in \mathbb{R}$ stetig ist, gilt

3.3. Direkte Integral-Zerlegung

nach Theorem A.0.5, dass $S(k)$ normal ist. Damit ist nach Ref. [5] Satz VI.1.7 und dem Spektralabbildungssatz VII.1.4

$$(3.70) \quad \|S(k)\| = \max_{\lambda \in \sigma(S(k))} |\lambda| = \max_{\lambda \in \sigma(T(k))} \frac{1}{|\lambda + i|} = \frac{1}{\text{dist}(-i, \sigma(T(k)))} \leq 1.$$

Insgesamt können wir somit $S := \int_B^\oplus S(k) d\mu(k)$ definieren.

Sei $\Phi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ beliebig, aber fest und $\Psi := S\Phi$. Dann ist per Definition $\Psi(x) \in \text{im}(S(k)) = D(T(k))$ fast überall, wobei die Gleichheit aus Bem. 1.2.2 folgt. Man berechnet

$$(3.71) \quad \int_B \|T(k)\Psi(k)\|^2 d\mu(k) = \int_B \|T(k)(T(k) + i)^{-1}\Phi(k)\|^2 d\mu(k)$$

$$(3.72) \quad = \int_B \|(T(k) + i - i)(T(k) + i)^{-1}\Phi(k)\|^2 d\mu(k)$$

$$(3.73) \quad \leq \int_B (\|\Phi(k)\| + \|S(k)\Phi(k)\|)^2 d\mu(k)$$

$$(3.74) \quad \leq 4\|\Phi\|^2 < \infty,$$

weshalb $\Psi \in D(T)$ und $(T + i)\Psi = \Phi$, d.h. $\text{im}(T + i) = L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$, da Φ beliebig war.

Wegen Lemma 1.2.7 ist $(T(k) - i)^{-1} = S(k)^*$ und nach Prop. 3.3.10 ist $(T(k) - i)^{-1}$ messbar. Der Rest des Beweises, dass $\text{im}(T - i) = L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ ist, folgt wie eben für den Fall mit $+i$ demonstriert.

- (ii) " \Rightarrow ": Nach Theorem 3.1.2 ist $(S + i)^{-1}$ ein stetiger Operator auf $L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ und wie wir in (i) gezeigt haben, ist für alle $k \in B$ der Operator $\tilde{S}(k) := (S(k) + i)^{-1}$ ein beschränkter linearer Operator auf \mathcal{H}' mit $\|\tilde{S}(k)\| \leq 1$, aus dem sich $\tilde{S} = \int_B^\oplus \tilde{S}(k) d\mu(k)$ mit $\|\tilde{S}\|_\infty \leq 1$ konstruieren lässt. Dieser ist entsprechend wesentlich beschränkt und es bleibt zu zeigen, dass $\tilde{S} = (S + i)^{-1}$. Sei dazu $\Psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}') = \text{im}(S + i)$ mit Urbild $\Phi := (S + i)^{-1}\Psi$, dann gilt

$$(3.75) \quad [\tilde{S}\Psi](k) = (S(k) + i)^{-1}\Psi(k) = (S(k) + i)^{-1}[(S + i)\Phi](k)$$

$$(3.76) \quad = (S(k) + i)^{-1}(S(k) + i)\Phi(k) = \Phi(k) = [(S + i)^{-1}\Psi](k)$$

nach Voraussetzung für fast alle $k \in B$ und somit $\tilde{S} = (S + i)^{-1}$.

" \Leftarrow ": Angenommen $(S + i)^{-1}$ ist ein linearer stetiger zerlegbarer Operator, dann gibt es ein $\tilde{S} \in L^\infty(B, d\mu, \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$ mit

$$(3.77) \quad [(S + i)^{-1}\Psi](\cdot) = \tilde{S}(\cdot)\Psi(\cdot)$$

für alle $\Psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$.

In Ref. [32] Prop. 12.1.8(iv) wird gezeigt, dass ein direktes Integral von Operatoren $A = \int_B^\oplus A(k) d\mu(k)$ genau dann injektiv ist, wenn die einzelnen Fasern injektiv sind und es folgt zudem $A^{-1} = \int_B^\oplus A(k)^{-1} d\mu(k)$. Für den Beweis, der in der angegebenen Referenz ausgeführt wird, muss man sich tiefer in die Theorie der direkten Integralzerlegung mit nicht-konstanten Fasern – der Kern jeder Faser des Operators ist ein abgeschlossener Unterraum von \mathcal{H}' – begeben, was an dieser Stelle zu weit vom eigentlichen Thema abführen würde. Verwendet man diese Proposition, kann man einsehen, dass $\tilde{S}(\cdot)^{-1}\Psi(\cdot) = (S + i)\Psi(\cdot)$ fast überall für alle $\Psi \in D(S)$ ist.

Wir definieren nun ein Feld von Operatoren auf B durch $S(\cdot) := \tilde{S}(\cdot)^{-1} - i$,

wobei $S(\cdot) \equiv 0$ auf Nullmengen.

Sei $\Psi \in D(S)$, dann ist

$$(3.78) \quad \|S(\cdot)\Psi(\cdot) - S\Psi\| = \int_B \|S(k)\Psi(k) - S\Psi(k)\| d\mu(k)$$

$$(3.79) \quad = \int_B \|(\tilde{S}(k)^{-1} - i)\Psi(k) - S\Psi(k)\| d\mu(k)$$

$$(3.80) \quad = \int_B \|(S + i - i)\Psi(k) - S\Psi(k)\| d\mu(k)$$

$$(3.81) \quad = 0,$$

woraus

$$(3.82) \quad D(S) = \left\{ \Psi \in \int_B^\oplus \mathcal{H}' d\mu(k) \mid \Psi(k) \in D(S(k)) \text{ f.ü., } \|S(\cdot)\Psi(\cdot)\| < \infty \right\}$$

und

$$(3.83) \quad S\Psi(\cdot) = S(\cdot)\Psi(\cdot) \quad \forall \Psi \in D(S)$$

folgt.

Seien nun $\Psi, \Phi \in D(S)$, dann ist

$$(3.84) \quad \langle S(\cdot)\Psi(\cdot), \Phi \rangle = \langle \Psi, S(\cdot)\Phi(\cdot) \rangle$$

aufgrund der Selbstadjungiertheit von S und der Nullabbildung.

Weiterhin ist

$$(3.85) \quad \text{im}(S(\cdot) \pm i) = \begin{cases} \text{im}(\pm i) & , \text{ auf Nullmengen} \\ \text{im}((S \pm i)\cdot) & , \text{ sonst} \end{cases} = \mathcal{H}'$$

und somit ist $S(\cdot)$ ein Feld selbstadjungierter Operatoren und wegen $(S(\cdot) + i)^{-1} = \tilde{S}(\cdot)$ fast überall ist dieses Feld auch messbar (siehe z.B. [33] §13).

- (iii) Sei $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ fest, dann ist $C(k) := (T(k) - \lambda)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}')$ für alle $k \in B$ wohldefiniert, da $T(k)$ selbstadjungiert sind.

Wir wollen nun zeigen, dass $C(\cdot)$ messbar ist und nach Prop. 3.3.10 ist dies äquivalent dazu, dass die Abbildungen

$$(3.86) \quad \begin{aligned} f_{ij} &: B \rightarrow \mathbb{C} \\ k &\mapsto \langle C(k)e_i, e_j \rangle \end{aligned}$$

für alle $i, j \in \mathbb{N}$ messbar sind.

Da $T(\cdot)$ ein messbares Feld selbstadjungierter Operatoren ist, folgt per Definition die Messbarkeit von $(T(\cdot) + i)^{-1}$ und es handelt sich um ein Feld stetiger normaler Operatoren. Für das Spektrum von $C(k)$ gilt nach Spektralabbildungssatz (siehe z.B. Ref. [15], Theorem 3.17) mit $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, $x \mapsto (x + i)^{-1}$, dass

$$(3.87) \quad \sigma(C(k)) = f(\sigma(T(k))) \subset \overline{\text{im}(f)}.$$

Die Abbildungen f_{ij} lassen sich –der triviale Fall $\lambda = -i$ sei ausgeschlossen– als Verkettungen

$$(3.88) \quad f_{ij} = \langle G((T(\cdot) + i)^{-1})e_i, e_j \rangle$$

schreiben, wobei G im Sinne eines stetigen Funktionalkalküls Φ durch

$$\begin{aligned} G: \{(S + i)^{-1} \mid S = S^* \text{ lin. Op. auf } \mathcal{H}'\} &\rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}') \\ \tilde{S} := (S + i)^{-1} &\mapsto \Phi_{\tilde{S}}(g|_{\sigma(\tilde{S})}). \end{aligned}$$

3.3. Direkte Integral-Zerlegung

mit

$$g : \overline{\text{im}(f)} \rightarrow \mathbb{C}$$

$$s \mapsto (s^{-1} - i - \lambda)^{-1}$$

definiert ist und nach Gl. (3.87) auch wohldefiniert ist. Da $\overline{\text{im}(f)} \subset \mathbb{C}$ als beschränkte abgeschlossene Menge auch kompakt ist, lässt sich nach dem Satz von Stone-Weierstrass $g \in C(\overline{\text{im}(f)}, \mathbb{C})$ durch eine Folge $(p_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset C(\overline{\text{im}(f)}, \mathbb{C})$ gleichmäßig approximieren, wobei

$$(3.89) \quad p_n(\cdot) := \sum_{l=0}^{m_n} c_{l,n}(\cdot)^l$$

mit $c_{l,n} \in \mathbb{C}$, $m_n \in \mathbb{N}$ für alle $0 \leq l \leq m_n$, $n \in \mathbb{N}$.

Für festes $k \in B$ definieren wir $S(k) := (T(k) + i)^{-1}$ und es gilt somit

$$(3.90) \quad f_{ij}(k) = \langle \Phi_{S(k)}(g|_{\sigma(S(k))}) e_i, e_j \rangle$$

$$(3.91) \quad = \left\langle \Phi_{S(k)} \left(\lim_{n \rightarrow \infty} p_n|_{\sigma(S(k))} \right) e_i, e_j \right\rangle$$

$$(3.92) \quad = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \Phi_{S(k)}(p_n|_{\sigma(S(k))}) e_i, e_j \rangle,$$

wobei die letzte Gleichheit aus der starken Operatorkonvergenz des stetigen Funktionalkalküls und der Stetigkeit des Skalarprodukts folgt. Da der stetige Funktionalkalkül für Polynomfunktionen ein Einsetzungskalkül ist, gilt weiterhin

$$(3.93) \quad f_{ij}(k) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{m_n} c_{l,n} \langle S(k)^l e_i, e_j \rangle.$$

Verwendet man nun die Messbarkeit von $k \mapsto S(k)$, d.h. $k \mapsto S(k)e_i$, $k \mapsto S(k)^2 e_i$ usw. sind messbar, und die Messbarkeit punktweiser Grenzwerte messbarer Funktionen, so folgt das gewünschte Resultat.

Wie im Beweis von (i) folgt weiterhin $\|C(k)\| = \frac{1}{\text{dist}(\lambda, \sigma(T(k)))} \leq \frac{1}{\frac{1}{3}\lambda}$ für alle $k \in B$ und analoge Schritte wie in (ii) führen auf die Gleichheit

$$(3.94) \quad (T - \lambda)^{-1} = \int_B^{\oplus} (T(k) - \lambda)^{-1} d\mu(k).$$

Aufgrund der Teilalgebra-Eigenschaft zerlegbarer stetiger Operatoren (Bem. 3.3.13(ii)) kann man dieses Ergebnis auch verallgemeinern zu

$$(3.95) \quad (T - \lambda)^{-n} = \int_B^{\oplus} (T(k) - \lambda)^{-n} d\mu(k), \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Aus elementarer Analysis ist bekannt, dass

$$(3.96) \quad \exp(iy) = \frac{1}{\exp(-iy)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{iy}{n} \right)^{-n}$$

für alle $y \in \mathbb{R}$ und wir können im Rahmen des messbaren Funktionalkalküls und unter Verwendung der punktweise gleichmäßig beschränkten Konvergenz (siehe Defn. A.0.3(v)) folgern, dass

$$(3.97) \quad e^{iyT} \Psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{iyT}{n} \right)^{-n} \Psi \quad \forall \Psi \in D(T), y \in \mathbb{R},$$

$$(3.98) \quad e^{iyT(k)} \psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{iyT(k)}{n} \right)^{-n} \psi \quad \forall \psi \in \mathcal{H}', k \in B, y \in \mathbb{R}.$$

Darüberhinaus handelt es sich bei der Abbildung $B \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}')$, $k \mapsto e^{iyT(k)}$ aufgrund der punktweisen Approximation der Exponentialfunktion (Gleichung (3.98)) und Gleichung (3.95) als punktweise Grenzwerte messbarer stetiger Felder um messbare Felder stetiger Operatoren mit $\|e^{iyT(\cdot)}\|_\infty \leq 1$ nach Theorem A.0.5(iii) für alle $y \in \mathbb{R}$.

Für ein $\Psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$, $k \in B$ und $y \in \mathbb{R}$ gilt

$$(3.99) \quad e^{iyT}\Psi(k) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{iyT}{n}\right)^{-n} \Psi(k)$$

$$(3.100) \quad = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{iyT(k)}{n}\right)^{-n} \Psi(k) = e^{iyT(k)}\Psi(k)$$

und insgesamt folgt damit die Zerlegung

$$(3.101) \quad e^{iyT} = \int_B^\oplus e^{iyT(k)} d\mu(k).$$

Wir nehmen zunächst an, dass $f \in S(\mathbb{R})$. Damit können wir f gleichmäßig durch eine Folge von $C_c^\infty(\mathbb{R})$ -Funktionen approximieren. Zusammen mit der Beschränktheit von f liefert die Approximation von f mit analogen Argumenten wie für $C(\cdot)$, dass $f(T(\cdot))$ ein messbares Feld stetiger Operatoren ist.

Nach der Bemerkung 1.1.2 zur Fourier-Transformation gilt nun für $\Psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ und $\{E_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ Orthonormalbasis

$$(3.102) \quad f(T)\Psi(\cdot) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \langle f(T)\Psi, E_n \rangle E_n(\cdot)$$

$$(3.103) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \int_{\mathbb{R}} f(y) dE_{\Psi, E_n}^T(y) E_n(\cdot)$$

$$(3.104) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(k) e^{ik'y} dk' \right) dE_{\Psi, E_n}^T(y) E_n(\cdot)$$

$$(3.105) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(k') \left(\int_{\mathbb{R}} e^{ik'y} dE_{\Psi, E_n}^T(y) \right) dk' E_n(\cdot)$$

$$(3.106) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(k') \langle e^{ik'T}\Psi, E_n \rangle dk' E_n(\cdot)$$

$$(3.107) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(k') \langle e^{ik'T[\cdot]}\Psi[\cdot], E_n \rangle dk' E_n(\cdot)$$

$$(3.108) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(k') \int_B \langle e^{ik'T(k)}\Psi(k), E_n(k) \rangle d\mu(k) dk' E_n(\cdot)$$

$$(3.109) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(k') \int_B \int_{\mathbb{R}} e^{ik'y} dE_{\Psi(k), E_n(k)}^{T(k)}(y) d\mu(k) dk' E_n(\cdot)$$

$$(3.110) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \int_B \int_{\mathbb{R}} f(y) dE_{\Psi(k), E_n(k)}^{T(k)}(y) d\mu(k) E_n(\cdot)$$

$$(3.111) \quad = \sum_{n \in \mathbb{N}} \langle f(T[\cdot])\Psi[\cdot], E_n \rangle E_n(\cdot)$$

$$(3.112) \quad = f(T(\cdot))\Psi(\cdot),$$

wobei beim Vertauschen der Integrationsreihenfolgen der Satz von Fubini verwendet wurde. Die Voraussetzung dazu war gegeben, da $S(\mathbb{R}) \subset L^1(\mathbb{R})$ und $|\langle 1_{\sigma(T)}\Psi, E_n \rangle| = |\langle \Psi, E_n \rangle| < \infty$ (Gl. (3.105)), $|\langle e^{ik'T[\cdot]}\Psi[\cdot], E_n \rangle| \leq \|\Psi\| \|E_n\| <$

3.3. Direkte Integral-Zerlegung

∞ (Gl. (3.110)) und $|\langle 1_{\sigma(T(k))}\Psi(k), E_n(k) \rangle| = |\langle \Psi(k), E_n(k) \rangle| < \infty$ für fast alle $k \in B$ (Gl. (3.111)). Sei nun $f \in \mathcal{M}^\infty(\mathbb{R})$, dann existiert nach dem Satz von Lusin eine Folge $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset C_c(\mathbb{R})$ mit

$$(3.113) \quad \sup_{n \in \mathbb{N}} \|f_n\|_\infty \leq \|f\|_\infty,$$

die punktweise fast überall gegen f konvergiert. Somit sind die Abbildungen $B \rightarrow \mathbb{C}$ gegeben durch

$$(3.114) \quad k \mapsto \langle f(T(k))e_i, e_j \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(y) dE_{e_i, e_j}^{T(k)}(y)$$

$$(3.115) \quad = \int_{\mathbb{R}} \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(y) dE_{e_i, e_j}^{T(k)}(y)$$

$$(3.116) \quad = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} f_n(y) dE_{e_i, e_j}^{T(k)}(y)$$

$$(3.117) \quad = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n(T(k))e_i, e_j \rangle$$

für alle $i, j \in \mathbb{N}$ als punktweiser Grenzwert messbarer Funktionen (Argumentation wie für $C(\cdot)$) wieder messbar, wobei wir im vorletzten Schritt den Satz von Lebesgue mit Majorante

$$(3.118) \quad \sup_{n \in \mathbb{N}} |f_n| \in \mathcal{M}^\infty(\mathbb{R}),$$

weshalb

$$(3.119) \quad \left\langle \sup_{n \in \mathbb{N}} |f_n|(T(x))e_i, e_j \right\rangle < \infty,$$

verwendet haben. Insgesamt ist somit $f(T(\cdot))$ ein messbares Feld stetiger Operatoren. Für die Zerlegbarkeit verwendet man weiterhin, dass $C_c(\mathbb{R})$ -Funktionen gleichmäßig durch glatte Funktionen bzw. Schwartz-Funktionen approximiert werden können, d.h. es gibt für alle $n \in \mathbb{N}$ Folgen $\{f_{n,m}\}_{m \in \mathbb{N}} \in S(\mathbb{R})$ mit $\|f_{n,m} - f_n\|_\infty \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0$. Es folgt dann

$$(3.120) \quad f(T)\Psi(\cdot) = \sum_{j \in \mathbb{N}} \langle f(T)\Psi, E_j \rangle E_j(\cdot)$$

$$(3.121) \quad = \sum_{j \in \mathbb{N}} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} f_n(y) dE_{\Psi, E_j}^T(y) E_j(\cdot)$$

$$(3.122) \quad = \sum_{j \in \mathbb{N}} \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{m \rightarrow \infty} \langle f_{n,m}(T)\Psi, E_j \rangle E_j(\cdot),$$

wobei im zweiten Schritt wieder der Satz von Lebesgue und im letzten Schritt die starke Operatorkonvergenz des Funktionalkalküls verwendet wurde. Nun kann man für $\Psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$ genau wie in Gleichung (3.112) verfahren und erhält

$$(3.123) \quad f(T)\Psi(\cdot) = \sum_{j \in \mathbb{N}} \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{m \rightarrow \infty} \langle f_{n,m}(T[\cdot])\Psi[\cdot], E_j \rangle E_j(\cdot).$$

Die Grenzwerte kann man nun wieder ausführen, um f zurückzuerlangen. Insgesamt folgt also

$$(3.124) \quad f(T) = \int_B^\oplus f(T(k)) d\mu(x).$$

- (iv) Sei $\lambda \in \mathbb{R}$. Dann ist nach Korollar A.0.8 $\lambda \in \sigma(T)$ genau dann, wenn $0 \neq E^T((\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)) = 1_{(\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)}(T)$ für alle $\epsilon > 0$. Wir verwenden (iii) im Spezialfall $f = 1_{(\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)} \in \mathcal{M}^\infty(\mathbb{R})$ mit $\epsilon > 0$, d.h. $\lambda \in \sigma(T)$ genau dann wenn $\int_B^\oplus 1_{(\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)}(T(k)) d\mu(k) \neq 0$ für alle $\epsilon > 0$. Dies ist aber genau dann der Fall, wenn $\mu(\{k \in B \mid 1_{(\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)}(T(k)) \neq 0\}) > 0$ für alle $\epsilon > 0$ oder nach Korollar A.0.8 äquivalent dazu: $\mu(\{k \in B \mid \sigma(T(k)) \cap (\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon) \neq \emptyset\}) > 0$ für alle $\epsilon > 0$.
- (v) Man geht wie im Beweis von (iv) vor, aber man verwendet $f = 1_{\{\lambda\}} \in \mathcal{M}^\infty(\mathbb{R})$.
- (vi) Nach Voraussetzung ist $\|V\Psi\| \leq a\|T\Psi\| + b\|\Psi\| \quad \forall \Psi \in D(T)$ und da T selbstadjungiert ist, gilt $(T + il)^{-1} \in \mathcal{L}(L^2(B, d\mu, \mathcal{H}'))$ und dieselbe Rechnung wie zum Kato-Rellich-Theorem (Gl. (3.12)) liefert die Abschätzung $\|V(T + il)^{-1}\| \leq a + \frac{b}{l}$ für alle $l \in \mathbb{N}$. Damit gilt nach Gl. (3.94) und Bemerkung 3.3.17, dass $V(\cdot)(T(\cdot) + il)^{-1}\Psi(\cdot) = V(T + il)^{-1}\Psi(\cdot)$ für alle $\Psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$, da nach Voraussetzung V eine Kato-Störung von T ist, gilt also $(T(k) + il)^{-1}\Psi(k) \in D(V(k))$ fast überall für alle $\Psi \in L^2(B, d\mu, \mathcal{H}')$. Analoge Rechnungen wie in Gl. (3.42) und (3.47) liefern nun

$$(3.125) \quad \|V(\cdot)(T(\cdot) + il)^{-1}\|_\infty \leq \|V(T + il)^{-1}\| \leq a + \frac{b}{l},$$

weshalb $\|V(k)(T(k) + il)^{-1}\| \leq a + \frac{b}{l}$ fast überall. Damit rechnet man für fast alle $k \in B$ und $\Psi(k) \in D(T(k))$

$$(3.126) \quad \|V(k)\Psi(k)\| = \|V(k)(T(k) + il)^{-1}(T(k) + il)\Psi(k)\|$$

$$(3.127) \quad \leq \|V(k)(T(k) + il)^{-1}T(k)\Psi(k)\| + \|V(k)(T(k) + il)^{-1}\Psi(k)\|$$

$$(3.128) \quad \leq \left(a + \frac{b}{l}\right) \|T(k)\Psi(k)\| + \left(a + \frac{b}{l}\right) \|\Psi(k)\|.$$

Durch Anwendung des Supremum über $l \in \mathbb{N}$ erhält man schließlich Gleichung (3.68) und die gesuchte Abschätzung.

Nach dem Kato-Rellich Theorem 3.2.2 ist $T + V$ auf $D(T)$ selbstadjungiert und $T(x) + V(x)$ auf $D(T(x))$ fast überall selbstadjungiert.

Dass $T(\cdot) + V(\cdot)$ ein messbares Feld von Operatoren ist, folgt direkt aus den Voraussetzungen an $T(\cdot)$, $V(\cdot)$, da nach dem Beweis von (iii) die Messbarkeit von $(T(\cdot) + V(\cdot) + \lambda)^{-1}$, $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ die Messbarkeit von $(T(\cdot) + V(\cdot) + i)^{-1}$ impliziert. Daher reicht festzustellen, dass

$$(3.129) \quad T(k) + V(k) + \lambda = T(k) + V(\mathbf{x}) + \Re\lambda + i\Im\lambda$$

$$(3.130) \quad = (\text{id} + (V(\mathbf{x}) + i\Im\lambda)(T(k) + \Re\lambda)^{-1})(T(k) + \Re\lambda).$$

Damit $(\text{id} + (V(\mathbf{x}) + i\Im\lambda)(T(k) + \Re\lambda)^{-1})$ invertierbar ist, wobei die Inverse durch die Neumann-Reihe gegeben wäre, muss $\|(V(\mathbf{x}) + i\Im\lambda)(T(k) + \Re\lambda)^{-1}\| < 1$ gelten. Nun ist aufgrund der Submultiplikativität der Operatornorm, der Halbbeschränktheit von $T(k)$ und den Eigenschaften des messbaren Funktionalkalküls

$$(3.131) \quad \|(V(\mathbf{x}) + i\Im\lambda)(T(k) + \Re\lambda)^{-1}\| \leq \|V(\mathbf{x}) + i\Im\lambda\| \|(T(k) + \Re\lambda)^{-1}\|$$

$$(3.132) \quad \leq (\|V\|_\infty + |\Im\lambda|) \sup_{x \in \mathbb{R}_+} \left| \frac{1}{x + \Re\lambda} \right|$$

$$(3.133) \quad = (\|V\|_\infty + |\Im\lambda|) \frac{1}{\Re\lambda}.$$

3.3. Direkte Integral-Zerlegung

Sei λ nun so gewählt, dass die Inversion möglich ist, d.h.

$$(3.134) \quad (T(k) + V(k) + \lambda)^{-1} = (T(k) + \Re\lambda)^{-1} \sum_{i=0}^{\infty} [(V(\mathbf{x}) + i\Im\lambda)(T(k) + \Re\lambda)^{-1}]^i,$$

wobei die Messbarkeit aus der Messbarkeit der Bestandteile des Ausdrucks folgt. Ansonsten folgt aufgrund von Gl. (3.128) und $D(T(k)+V(k)) = D(T(k))$ fast überall, dass $D(T + V) = D(T) = D(\int_B^{\oplus} (T(k) + V(k))d\mu(k))$ und für $\Psi \in D(T)$ gilt

$$(3.135) \quad (T + V)\Psi(k) = T\Psi(k) + V\Psi(k)$$

$$(3.136) \quad = T(k)\Psi(k) + V(k)\Psi(k)$$

$$(3.137) \quad = (T(k) + V(k))\Psi(k)$$

fast überall und somit

$$(3.138) \quad T + V = \int_B^{\oplus} (T(k) + V(k))d\mu(k).$$

□

Charakterisierung der Periodizität

Der Inhalt dieses Kapitels folgt der Darstellung in Ref. [Zantout2019] und Ref. [22].

In Rahmen der physikalischen Motivation (Kapitel 2) haben wir festgestellt, dass ein Kristall aus periodisch angeordneten Atomen besteht, der sich unter bestimmten Vereinfachungen durch einen Schrödingeroperator mit periodischem Potential quantenmechanisch beschreiben lässt. Die Periodizität des Potentials folgt nach Gl. (2.3) derselben Periodizität wie der des Kristalls, also insbesondere der Periodizität der Atomkerne. Nach dem Rutherford'schen Streuexperiment zu urteilen ist deren räumliche Ausdehnung einige Größenordnungen kleiner als die des dazugehörigen Atoms und kann somit approximativ als punktförmig angenommen werden. Die Gleichgewichtspositionen der Atomkerne dienen uns als Knoten im (Kristall-)gitter.

4.1. Direktes Gitter

DEFINITION 4.1.1 (Gitter und Gittervektoren). Seien $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^n$, linear unabhängige Vektoren, dann heißt die Menge

$$G_{a_1, \dots, a_n} = \left\{ \sum_{i=1}^n x_i a_i \mid x_i \in \mathbb{Z}, i = 1, \dots, n \right\}$$

das aus a_1, \dots, a_n erzeugte Gitter. Wir bezeichnen die Vektoren a_1, \dots, a_n als *Gittervektoren*.

Wir können die Atomkerne des Kristalls aufgrund der großen Anzahl an Atomen darin als ein aus $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^n$, erzeugtes Gitter G modellieren, wobei die Gittervektoren a_1, \dots, a_n experimentell (siehe Abschnitt 2) bestimmt werden können (siehe Abb. 4).

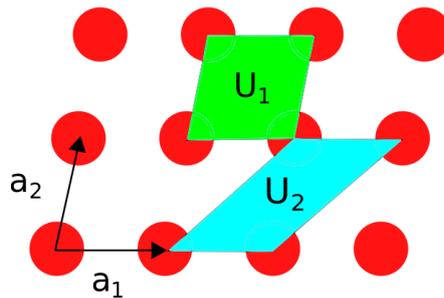


ABBILDUNG 4. Kristall im \mathbb{R}^2 , der aus Atomen (rote Kugeln) besteht und dessen Gittervektoren durch $a_1, a_2 \in \mathbb{R}^2$ gegeben sind. Sowohl U_1 als auch U_2 sind legitime Einheitszellen dieses Kristalls. (Quelle: [Zantout2019])

DEFINITION 4.1.2 (Einheitszelle). Seien $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^n$, $n \in \mathbb{N}$, Gittervektoren. Dann heißt jede zusammenhängende Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ *Einheitszelle*, die

$$(4.1) \quad \mathbb{R}^n = \bigcup_{z \in G_{a_1, \dots, a_n}} z + \Omega$$

4.2. Reziprokes Gitter

erfüllt und minimal mit dieser Eigenschaft ist, d.h. es gibt keine echte Teilmenge von Ω , die ebenfalls Gl. (4.1) erfüllt.

BEISPIEL 4.1.3. Für das einfache Gitter aus Abb. 4 mit Gittervektoren $a_1, a_2 \in \mathbb{R}^2$ sind die Parallelogramme $U_1 := \{xa_1 + ya_2 \mid 0 \leq x, y < 1\}$ und $U_2 := \{x(a_1 + a_2) + ya_1 \mid 0 \leq x, y < 1\}$ legitime Einheitszellen des Kristalls.

4.2. Reziprokes Gitter

Wir definieren nun weitere Gittervektoren zu einem gegebenen Kristall. Diese spannen nicht das Kristallgitter auf und ihre Nützlichkeit wird erst im Laufe der nächsten Kapitel deutlich.

DEFINITION 4.2.1 (Reziproke Gittervektoren). Zu Gittervektoren $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^n$ definieren wir $M := (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Aufgrund der linearen Unabhängigkeit der Gittervektoren sind M und M^T invertierbar und wir definieren die *reziproken Gittervektoren* $b_1, \dots, b_n \in \mathbb{R}^n$ als die Spalten der Matrix $2\pi(M^T)^{-1}$, d.h.

$$(4.2) \quad 2\pi(M^T)^{-1} =: (b_1 \ \dots \ b_n).$$

BEMERKUNG 4.2.2. Die lineare Unabhängigkeit der reziproken Gittervektoren wird von den Gittervektoren in M geerbt, da Inversion und Transponierung den Rang einer Matrix nicht ändern. Außerdem findet man leicht die folgende Relation zwischen Gittervektoren und reziproken Gittervektoren:

$$(4.3) \quad b_i \cdot a_j = \sum_{k=1}^n 2\pi(M^T)^{-1}_{ki} M_{kj} = 2\pi \sum_{k=1}^n M_{ik}^{-1} M_{kj} = 2\pi \delta_{ij}.$$

BEISPIEL 4.2.3. Wir betrachten das Gitter aus Bsp. 4.1.3 mit Gittervektoren $a_1, a_2 \in \mathbb{R}^2$. Die daraus resultierenden reziproken Gittervektoren b_1, b_2 sind in Abb. 5 gezeigt.

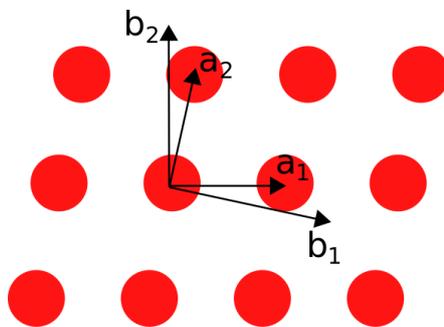


ABBILDUNG 5. Reziproke Gittervektoren $b_1, b_2 \in \mathbb{R}^2$ zum Kristall aufgespannt von Gittervektoren a_1, a_2 aus Bsp. 4.1.3. (Quelle: [Zantout2019])

Eine spezielle Wahl der Einheitszelle des reziproken Gitters wird in den folgenden Kapiteln eine besondere Rollen spielen.

DEFINITION 4.2.4 (Erste Brillouin-Zone). Sei G_{b_1, \dots, b_n} das durch reziproke Gittervektoren $b_1, \dots, b_n, n \in \mathbb{N}$, erzeugte Gitter. Dann definieren wir die *erste Brillouin-Zone* als die Menge der Punkte $B \subset \mathbb{R}^n$, die zu $0 \in \mathbb{R}^n$ näher sind als zu allen anderen Gitterpunkten.

Bei der ersten Brillouin-Zone handelt es sich also insbesondere um eine Einheitszelle des reziproken Gitters.

BEMERKUNG 4.2.5. Die erste Brillouin-Zone kann man anschaulich mittels der Wigner-Seitz Konstruktion (siehe z.B. Ref. [17]) aus den reziproken Gittervektoren erhalten.

Eindimensionale periodische Schrödingeroperatoren

Dieser Abschnitt basiert auf Ref. [23] XIII.16 und Ref. [22].

Nachdem die Theorie der direkten Integralzerlegung und Kato-Störungstheorie in Kapitel 3 eingeführt wurde, kann man sich nun dem Spektrum periodischer Schrödingeroperatoren zuwenden. Zunächst wird die Theorie separat für den Fall $n = 1$ dargestellt, da in diesem Fall die Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen anwendbar ist.

Der betrachtete Kristall-Gittervektor sei a . Damit ist der reziproke Gittervektor $b = 2\pi/a$ und die erste Brillouin-Zone ist somit $B = (-\pi/a, \pi/a]$.

5.1. Die unitäre Transformation U_p

Kehrt man nun also zum Hamilton-Operator A (Gl. (3.9)) zurück und schränkt sich zunächst auf ein Potential $V(\mathbf{x}) \in C_0^1(\mathbb{R})$ mit Periode a ein, so lässt sich V in einer gleichmäßig konvergenten Fourier-Reihe mit Koeffizienten $\{\hat{V}_n\}_{n \in \mathbb{Z}} \subset \mathbb{C}$ entwickeln (siehe z.B. [5] Satz IV.2.9), d.h.

$$(5.1) \quad V(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{V}_n e^{i2\pi n x/a}, \quad x \in \mathbb{R}$$

$$(5.2) \quad \hat{V}_n = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} V(x) e^{-i2\pi n x/a} dx, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Da der Hamilton-Operator $A : H^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ auf $L^2(\mathbb{R})$ abbildet, kann man für $\psi \in H^2(\mathbb{R})$ den Ausdruck $A\psi$ Fourier-transformieren und erhält

$$(5.3) \quad \mathcal{F}[A\psi](k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{\psi}(k) + \mathcal{F}[V\psi](k)$$

für $k \in \mathbb{R}$, wobei der zweite Term zu

$$(5.4) \quad \mathcal{F}[V\psi](k) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-R}^R e^{-ikx} \psi(x) V(x) dx$$

$$(5.5) \quad = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-R}^R e^{-ikx} \psi(x) \lim_{N \rightarrow \infty} \underbrace{\sum_{n=-N}^N \hat{V}_n e^{i2\pi n x/a}}_{:=f_N(x)} dx$$

weiter vereinfacht werden kann. Nun darf man nämlich Grenzwert und Integral nach dem Satz von Lebesgue vertauschen, da für festes $\epsilon > 0$ ein $N \in \mathbb{N}$ existiert, sodass $\|f_n - V\|_\infty < \epsilon$ für alle $n \geq N$ (gleichmäßige Konvergenz) und dies erlaubt die Konstruktion einer Majorante g gegeben durch

$$(5.6) \quad g(x) := \sum_{n=-N}^N |\hat{V}_n \psi(x)| + (\|V\|_\infty + \epsilon) |\psi(x)|, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Man beachte, dass in Gleichung (5.5) über ein Intervall endlichen Maßes integriert wird, d.h. in diesem Fall ist $L^2 \subset L^1$ (siehe z.B. [31] Beispiel 8.4.9(2)), was die Wahl

der Majorante rechtfertigt.

Damit folgt, dass für $k \in \mathbb{R}$ und $\psi \in H^2(\mathbb{R})$

$$(5.7) \quad \mathcal{F}[V\psi](k) = \lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-R}^R \psi(x) e^{-ikx} \sum_{n=-N}^N \hat{V}_n e^{i2\pi nx/a} dx$$

$$(5.8) \quad = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{V}_n \hat{\psi}(k - 2\pi n/a)$$

gilt, wobei in der letzten Gleichheit das Moore-Osgood-Theorem angewandt wurde und die Voraussetzungen dazu aufgrund von der punktweisen Konvergenz des R -Grenzwertes und der gleichmäßigen Konvergenz des N -Grenzwertes gegeben waren. Insgesamt ergibt sich

$$(5.9) \quad \mathcal{F}[A\psi](k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{\psi}(k) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{V}_n \hat{\psi}(k - 2\pi n/a).$$

Aufgrund der Eigenschaften der Fouriertransformation ist es möglich den Hamilton-Operator auf der ersten Brillouin-Zone B zu zerlegen. Dies wird durch die im folgenden beschriebene Transformation U_p möglich, wobei der Index p verdeutlichen soll, dass die Zerlegung über dem reziproken Raum geschieht. Formal gesprochen ist $L^2(\mathbb{R})$ unitär äquivalent zu $\mathcal{H} = \int_B^\oplus \mathcal{H}' dx$ mit $\mathcal{H}' = l^2(\mathbb{Z})$.

DEFINITION+SATZ 5.1.1 (Die Transformation U_p (1D)). Die Abbildung $U_p : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow \int_B^\oplus l^2(\mathbb{Z}) dx$ gegeben durch $[U_p \Psi](k)_j := \hat{\Psi}(k + 2\pi j/a)$ für alle $\Psi \in L^2(\mathbb{R}, dx)$, $k \in B$, $j \in \mathbb{Z}$ ist ein isometrischer Isomorphismus mit inverser Abbildung

$$(5.10) \quad U_p^{-1} : \int_B^\oplus l^2(\mathbb{Z}) dx \rightarrow L^2(\mathbb{R})$$

$$\Psi \mapsto \mathcal{F}^{-1} \left[\sum_{j \in \mathbb{Z}} 1_B(\cdot - 2\pi j/a) \Psi(\cdot - 2\pi j/a)_j \right].$$

BEWEIS. Für ein $\Psi \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ gilt

$$\|\Psi\|_2^2 = \|\hat{\Psi}\|_2^2 = \int_{\mathbb{R}} |\hat{\Psi}(x)|^2 dx = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} |\hat{\Psi}(x + 2\pi j/a)|^2 dx.$$

Nach dem Satz von der monotonen Konvergenz kann man Integral und Summe vertauschen und erhält

$$\|\Psi\|_2^2 = \|U_p \Psi\|_{\mathcal{H}}^2.$$

Damit ist U_p als lineare Isometrie insbesondere injektiv.

Damit U_p^{-1} wohldefiniert sein, kann muss bereits der Term in eckigen Klammern in Gl. (5.10) ein Element von $L^2(\mathbb{R})$ sein. Messbarkeit ist klar und für $\Psi \in \mathcal{H}$ gilt wieder aufgrund des Satzes von der monotonen Konvergenz, dass

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{j \in \mathbb{Z}} 1_B(\cdot - 2\pi j/a) \Psi(\cdot - 2\pi j/a)_j \right\|_2^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{j \in \mathbb{Z}} 1_B(x - 2\pi j/a) |\Psi(x - 2\pi j/a)_j|^2 dx \\ &= \sum_{j \in \mathbb{Z}} \int_{-\infty}^{\infty} 1_B(x) |\Psi(x)_j|^2 dx \\ &= \sum_{j \in \mathbb{Z}} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} |\Psi(x)_j|^2 dx = \|\Psi\|_{\mathcal{H}}^2. \end{aligned}$$

5.1. Die unitäre Transformation U_p

Einsetzen und ausrechnen zeigt zudem $U_p U_p^{-1} = U_p^{-1} U_p = \text{id}$, was die Notation als Inverse rechtfertigt. \square

BEMERKUNG 5.1.2. Bildlich gesprochen bildet U_p den für $L^2(\mathbb{R})$ zugrundeliegenden Realraum \mathbb{R} , in dem sich die Elektronen bewegen, per Fouriertransformation auf den reziproken Raum \mathbb{R} ab, wo die gesamte Information aufgrund der Periodizität in einem Punktgitter und einer besonderen Einheitszelle des reziproken Gitters, nämlich der ersten Brillouin-Zone B , gespeichert ist (siehe Abb. 6).

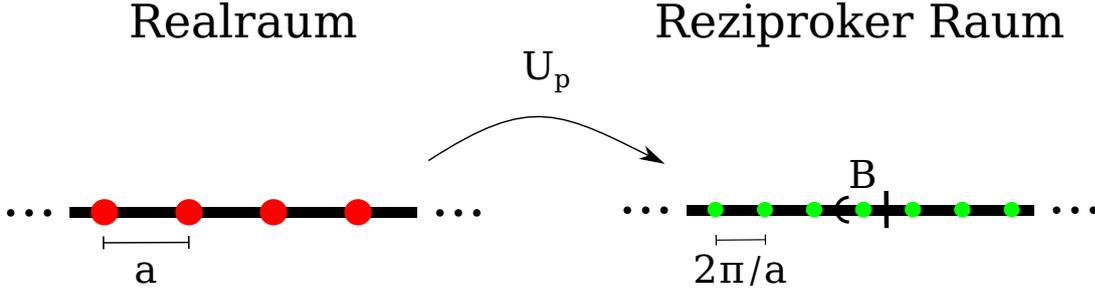


ABBILDUNG 6. Anschaulich kann man sich U_p (siehe Def. 5.1.1) als Abbildung vorstellen, die den Realraum \mathbb{R} in den reziproken Raum \mathbb{R} überführt und die periodische Struktur ausnutzt, um diesen in ein Punktgitter (grüne Punkte) und die Einheitszelle B zu zerlegen.

Nachdem man nun eine Zerlegung des Hilbertraumes $L^2(\mathbb{R})$ gefunden hat, muss man überprüfen, ob der Hamilton-Operator durch die Transformation U_p auf der ersten Brillouin-Zone B auch zerlegbar ist. Wir starten hierbei mit der kinetischen Energie.

Sei $\Psi \in U_p H^2(\mathbb{R})$, dann gilt für $k \in B$ und $j \in \mathbb{Z}$

$$\begin{aligned}
 (5.11) \quad & \left[U_p \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) U_p^{-1} \Psi \right] (k)_j \\
 (5.12) \quad & = \mathcal{F}|_{2\pi j/a+k} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{F}^{-1} \left[\sum_{j' \in \mathbb{Z}} 1_B(\cdot - 2\pi j'/a) \Psi(\cdot - 2\pi j'/a)_{j'} \right] \\
 (5.13) \quad & = \frac{\hbar^2}{2m} (2\pi j/a + k)^2 \sum_{j' \in \mathbb{Z}} \underbrace{1_B(k + 2\pi(j - j')/a)}_{=\delta_{j,j'}} \Psi(k + 2\pi(j - j')/a)_{j'} \\
 (5.14) \quad & = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} (2\pi j/a + k)^2}_{=: T(k)_j} \Psi(k)_j,
 \end{aligned}$$

wobei wir das Feld

$$(5.15) \quad T(\cdot) : B \rightarrow \text{Abb}(l^2(\mathbb{Z}))$$

$$(5.16) \quad k \mapsto (T(k)\cdot)_j := \frac{\hbar^2}{2m} (k + 2\pi j/a)^2 (\cdot)_j$$

mit $D(T(k)) = [U_p H^2(\mathbb{R})](k)$, $k \in B$ und $j \in \mathbb{Z}$ definiert haben. Nun ist $T(\cdot)$ offensichtlich ein Feld symmetrischer Multiplikationsoperatoren. Für ein $y \in l^2(\mathbb{Z})$ und $k \in B$ ist mit

$$(5.17) \quad (x_l(k))_{l \in \mathbb{Z}} := \left(\frac{2my_l}{\hbar^2(k + 2\pi l/a)^2 + i} \right)_{l \in \mathbb{Z}} \in D(T(k))$$

ein Urbild von y unter $T(k) + i$ gegeben, d.h. $\text{im}(T(k) + i) = l^2(\mathbb{Z})$ und somit ist $T(\cdot)$ ein Feld selbstadjungierter Operatoren.

Sei $(e_i)_{j \in \mathbb{Z}} := (\delta_{i,j})_{j \in \mathbb{Z}}$ für $i \in \mathbb{Z}$ die Wahl der Basis von $l^2(\mathbb{Z})$ in diesem Fall. Dann ist

$$(5.18) \quad k \mapsto \langle (T(k) + i)^{-1} e_n, e_m \rangle = \frac{2m}{\hbar^2(k + 2\pi n/a)^2 + i} \delta_{n,m}$$

für alle $n, m \in \mathbb{Z}$ offensichtlich messbar und es gilt $T = \int_B^\oplus T(k) dk$.

Wir fahren nun mit dem potentielle Energie-Operator fort. Sei $\Psi \in U_p H^2(\mathbb{R})$, dann gilt für $k \in B$ und $j \in \mathbb{Z}$ unter Verwendung von Gl. (5.9)

$$(5.19) \quad \begin{aligned} & [U_p V(\mathbf{x}) U_p^{-1} \Psi](k)_j \\ &= \mathcal{F}|_{2\pi j/a+k} V(\mathbf{x}) \mathcal{F}^{-1} \left[\sum_{j' \in \mathbb{Z}} 1_B(\cdot - 2\pi j'/a) \Psi(\cdot - 2\pi j'/a)_{j'} \right] \end{aligned}$$

$$(5.20) \quad = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{V}_n \sum_{j' \in \mathbb{Z}} \underbrace{1_B(k + 2\pi(j - n - j')/a)}_{=\delta_{j-n,j'}} \Psi(k + 2\pi(j - n - j')/a)_{j'}$$

$$(5.21) \quad = \underbrace{\sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{V}_n \Psi(k)_{j-n}}_{=:[V(k)\Psi(k)]_j}$$

wobei wir

$$(5.22) \quad V(\cdot) : B \rightarrow \text{Abb}(l^2(\mathbb{Z}))$$

$$(5.23) \quad k \mapsto (V(k)\cdot)_j := \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{V}_n(\cdot)_{j-n}$$

mit Domäne $D(V(k)) = [U_p D(V(\mathbf{x}))](k)$, $k \in B$ und $j \in \mathbb{Z}$. Nun ist $V(\cdot)$ als konstantes Feld insbesondere messbar und da V beschränkt ist und U unitär ist, folgt $\|V(\cdot)\|_\infty < \infty$. Zusammengenommen liefert dies $V = \int_B^\oplus V(k) dk$.

Da V als beschränkte Funktion eine Kato-Störung ist, gilt nach Theorem 3.3.19(vi) der folgende Satz.

THEOREM 5.1.3. *Sei $\mathcal{H}' = l^2(\mathbb{Z})$, $\mathcal{H} = \int_B^\oplus \mathcal{H}' dx$, $A = H_0 + V$ auf $L^2(\mathbb{R}, dx)$ mit $V \in C_0^1(\mathbb{R})$ periodisch mit Periode a . Nach Identifikation von $L^2(\mathbb{R}, dx)$ mit \mathcal{H} durch die Transformation U_p gilt für die Fasern $A(\cdot)$ von A :*

$$(5.24) \quad (A(k)\psi)_j = \frac{\hbar^2}{2m} (k + 2\pi j/a)^2 \psi_j + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{V}_n \psi_{j-n}$$

für $\psi \in D(T(k)) = [U_p H^2(\mathbb{R})](k)$, $k \in B$, $j \in \mathbb{Z}$, d.h. es gilt

$$(5.25) \quad U_p A U_p^{-1} = \int_B^\oplus A(k) dk.$$

5.2. Die Floquet-Transformation

Die im letzten Theorem beschriebene Zerlegung geschieht über der ersten Brillouin-Zone B und erzeugt Fasern in $l^2(\mathbb{Z})$, die die Information des Punktgitters tragen, aber Abb. 6 suggeriert bereits, dass die Information des Punktgitters auch in der Einheitszelle $\Omega = [0, a)$ enthalten sein sollte. Dies führt zur sogenannten Floquet-Transformation.

DEFINITION+SATZ 5.2.1 (Floquet-Transformation U (1D)). Sei $\mathcal{H} = \int_B^\oplus \mathcal{H}' dk$ mit $\mathcal{H}' = L^2(\Omega, dx)$. Dann ist die Abbildung

$$U : L^2(\mathbb{R}, dx) \rightarrow \mathcal{H}$$

5.2. Die Floquet-Transformation

$$(5.26) \quad \Psi \mapsto [U\Psi]_k(x) := \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikan}}{\sqrt{|B|}} \Psi(x - an) \quad x \in \Omega, \quad k \in B$$

mit inverser Abbildung

$$(5.27) \quad U^{-1} : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\mathbb{R}, dx)$$

$$\Psi \mapsto [U^{-1}\Psi](x - an) := \int_B \frac{e^{-ikan}}{\sqrt{|B|}} \Psi_k(x) dk \quad x \in \Omega, \quad n \in \mathbb{Z}$$

unitär. Man bezeichnet U als *Floquet-Transformation*.

BEWEIS. Sei $\Psi \in L^2(\mathbb{R}, dx)$, dann gilt

$$(5.28) \quad \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2 dx = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\Omega} |\Psi(x - an)|^2 dx$$

$$(5.29) \quad = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x - an)|^2 1_{\Omega}(x) dx$$

$$(5.30) \quad = \lim_{m \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} \sum_{n=-m}^m |\Psi(x - an)|^2 1_{\Omega}(x) dx$$

$$(5.31) \quad = \int_{\Omega} \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\Psi(x - an)|^2 dx,$$

wobei in der letzten Gleichheit der Satz von der monotonen Konvergenz verwendet wurde. Es folgt

$$(5.32) \quad \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\Psi(x - an)|^2 < \infty$$

für fast alle $x \in \Omega$. Damit konvergiert nach Ref. [3] Korollar 17.2 $[U\Psi]_k(x)$ als Fourierreihe mit Variable ak für fast alle $x \in \Omega$. Dann gilt nach der Parseval-Identität gilt

$$(5.33) \quad \int_B |[U\Psi]_k(x)|^2 dk = \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\Psi(x - an)|^2$$

für fast alle $x \in \Omega$. Nach Gl. (5.31) ist die rechte Seite als Funktion von x in $L^2(\Omega)$ – also ist U wohldefiniert – und demnach gilt

$$(5.34) \quad \|U\Psi\|^2 = \int_B \int_{\Omega} |[U\Psi]_k(x)|^2 dx dk$$

$$(5.35) \quad = \int_{\Omega} \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\Psi(x - an)|^2 dx$$

$$(5.36) \quad = \|\Psi\|^2,$$

wobei wir den Satz von Fubini verwendet haben. Als lineare Isometrie ist U insbesondere injektiv und es bleibt die Surjektivität zu zeigen.

Sei dazu $\Phi \in \mathcal{H}$. Dann kann man für festes $x \in \Omega$ die Folge $((U^{-1}\Phi)(x - an))_{n \in \mathbb{Z}}$ nach Gl. (5.27) als Fourier-Koeffizienten zur Fourierreihe der Funktion $\Phi(x)$ mit der Variablen ak , $k \in B$, auffassen. Dann gilt wieder nach der Parseval-Identität

$$(5.37) \quad \sum_{n \in \mathbb{Z}} |[U^{-1}\Phi](x - an)|^2 = \int_B |\Phi_k(x)|^2 dk$$

und nach Integration über die Einheitszelle Ω folgt

$$(5.38) \quad \infty \stackrel{\Phi \in \mathcal{H}}{>} \int_{\Omega} \int_B |\Phi_k(x)|^2 dk dx = \int_{\Omega} \sum_{n \in \mathbb{Z}} |[U^{-1}\Phi](x - an)|^2$$

$$(5.39) \quad \int_B \int_\Omega |\Phi_k(x)|^2 dx dk = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_\Omega |[U^{-1}\Phi](x - an)|^2$$

$$(5.40) \quad \|\Phi\|^2 = \|U^{-1}\Phi\|^2,$$

wobei wir die Integrationsreihenfolge nach dem Satz von Fubini und Summe und Integral nach dem Satz von der monotonen Konvergenz vertauscht haben. Demnach ist U^{-1} wohldefiniert und ebenfalls Isometrie. Dass es sich tatsächlich um die Inverse handelt, sieht man aus

$$(5.41) \quad U^{-1}[U\Psi](x - an) = \int_B \frac{e^{-ikan}}{\sqrt{|B|}} [U\Psi]_k(x) dk$$

$$(5.42) \quad = \frac{1}{|B|} \int_B \sum_{m \in \mathbb{Z}} \Psi(x - am) e^{-iak(n-m)} dk$$

$$(5.43) \quad = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \Psi(x - am) \underbrace{\frac{1}{|B|} \int_B e^{-iak(n-m)} dk}_{=\delta_{n,m}}$$

$$(5.44) \quad = \Psi(x - an)$$

für $\Psi \in L^2(\mathbb{R})$, $x \in \Omega$ und $n \in \mathbb{Z}$. Analog rechnet man $UU^{-1} = \text{id}$ aus. Dies rechtfertigt *a posteriori* die Bezeichnung U^{-1} . \square

Um die direkte Integralzerlegung mittels der Floquet-Transformation zu bestimmen, definieren wir zunächst das Feld

$$(5.45) \quad H_0(\cdot) : B \rightarrow \text{Abb}(L^2(\overline{\Omega}))$$

durch

$$(5.46) \quad D(H_0(k)) := \{\psi \in H^2(\Omega^\circ) \mid \psi \in C^1(\overline{\Omega}), \psi^{(j)}(a) = e^{iak}\psi^{(j)}(0), j = 0, 1\}$$

und

$$(5.47) \quad H_0(k)\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x)$$

für alle $k \in B$, $\psi \in D(H_0(k))$ und $x \in \overline{\Omega}$. Zur Wohldefiniertheit muss noch angemerkt werden, dass für ein $\psi \in H^2(\Omega^\circ) \hookrightarrow C^1(\Omega^\circ)$ (Theorem 1.4.9) nach dem Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung und Lemma 1.4.4 ein Repräsentant mit

$$(5.48) \quad \psi^{(i)}(x) - \psi^{(i)}(y) = \int_y^x \psi^{(i+1)}(t) dt$$

für alle $x, y \in \Omega^\circ$ und $i = 0, 1$ existiert. Wegen $\mu(\Omega^\circ) < \infty$ ist $\psi^{(i+1)} \in L^2(\Omega^\circ) \subset L^1(\Omega^\circ)$ und man kann mittels der Hölder-Ungleichung

$$(5.49) \quad |\psi^{(i)}(x) - \psi^{(i)}(y)| \leq |x - y|^{1/2} \|\psi^{(i+1)}\|_2$$

für alle $x, y \in \Omega^\circ$ und $i = 0, 1$ abschätzen. Damit sind $\psi^{(i)}$ gleichmäßig stetig und man findet stetige Erweiterungen $\psi^{(i)} : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{C}$ für $i = 0, 1$. Da die beiden Erweiterungen stetig sind und aufgrund von Gl. (5.48) findet man einen Repräsentanten $\psi \in C^1(\overline{\Omega})$. Zudem ist $D(H_0(k)) \subset L^2([0, 2\pi])$ dicht für $k \in B$ und der kinetische Energie-Operator kann auf dieser Domäne angewandt werden.

Wir zeigen nun, dass es sich um ein Feld selbstadjungierter Operatoren handelt.

Dafür geben wir zunächst den Funktionen mit der Eigenschaft (5.48) einen Namen (siehe z.B. Ref. [15] Abschnitt 2.7).

DEFINITION 5.2.2 (absolutstetige Funktion). Für $-\infty < a < b < \infty$ heißt eine Funktion $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ *absolutstetig*, falls ein $f \in C(a, b)$ und ein $g \in L^1(a, b)$ existiert, sodass $f(x) - f(y) = \int_y^x g(t) dt$ für alle $x, y \in [a, b]$ gilt.

5.2. Die Floquet-Transformation

Folglich ist $f' = g$ fast überall (siehe Lemma 1.4.4).

Nach dem Fundamentalsatz der Lebesgue-Integration (siehe z.B. Ref. [5] Definition A.1.9 und Satz A.1.10) ist diese Definition äquivalent dazu, dass für alle $\epsilon > 0$ ein $\delta > 0$ existiert, sodass für alle $a \leq a_1 < b_1 \leq a_2 < b_2 \leq \dots \leq a_n < b_n \leq b$, $n \in \mathbb{N}$ beliebig gilt, dass

$$(5.50) \quad \sum_{i=1}^n (b_i - a_i) < \delta \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^n (f(b_i) - f(a_i)) < \epsilon.$$

Damit sind also die Repräsentanten $\psi^{(i)}$ aus Gl. (5.48) absolutstetige Funktionen und in Lemma 1.4.4 haben wir bereits gezeigt, dass diese fast überall differenzierbar sind mit Ableitung $\psi^{(i+1)}$, $i = 0, 1$.

Ein wichtiges Lemma zeigt uns, dass für absolutstetige Funktionen partielle Integration anwendbar ist.

LEMMA 5.2.3. *Seien $f, g : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ absolutstetige Funktionen, dann gilt*

$$\int_a^b f(x)g'(x)dx = [f(x)g(x)]_a^b - \int_a^b f'(x)g(x)dx.$$

BEWEIS. Da f, g absolutstetig sind, folgt insbesondere, dass sie beschränkt sind und damit ist für eine Wahl von Punkten $(a_i, b_i)_{1 \leq i \leq n} \subset [a, b]$ wie in Def. 5.2.2 nach der Dreiecksungleichung

$$(5.51) \quad \begin{aligned} & \sum_{i=1}^n |f(b_i)g(b_i) - f(a_i)g(a_i)| \\ & \leq \sum_{i=1}^n |f(b_i)g(b_i) - f(a_i)g(b_i)| + \sum_{i=1}^n |f(a_i)g(b_i) - f(a_i)g(a_i)| \end{aligned}$$

$$(5.52) \quad \leq \|g\|_\infty \sum_{i=1}^n |f(b_i) - f(a_i)| + \|f\|_\infty \sum_{i=1}^n |g(b_i) - g(a_i)|.$$

Also ist fg ebenfalls absolutstetig. Dabei bleibt die Produktregel der Differentiation aufgrund der Integraldarstellung erhalten, d.h. $(fg)' = f'g + g'f$ fast überall. Die Integration über $[a, b]$ führt dann auf die gesuchte Formel. \square

Sei nun $k \in B$ fest und $\psi, \phi \in D(H_0(k))$, dann ist

$$(5.53) \quad -\frac{2m}{\hbar^2} \langle \psi, H_0(k)\phi \rangle = \underbrace{[\overline{\psi(x)}\phi'(x)]_0^a}_{=0} - \langle \psi', \phi' \rangle$$

$$(5.54) \quad = -\underbrace{[\overline{\psi'(x)}\phi(x)]_0^a}_{=0} + \langle \psi'', \phi \rangle = -\frac{2m}{\hbar^2} \langle H_0(k)\psi, \phi \rangle,$$

wobei wir die Randbedingungen aus $D(H_0(k))$ und partielle Integration verwendet haben. Damit ist $H_0(k)$ symmetrisch und für die Selbstadjungiertheit orientieren wir uns am Beweis von Lemma 20.3 aus Ref. [3], wo mit ähnlichen Schritten die Selbstadjungiertheit des Impulsoperators gezeigt wird.

Sei $\psi \in D(H_0(k)^*)$, d.h. $H_0(k)^*\psi \in L^2(\overline{\Omega}) \subset L^1(\overline{\Omega})$. Somit ist die durch $\phi_1(x) := \int_0^x H_0(k)^*\psi(t)dt$, $x \in \overline{\Omega}$, definierte Funktion absolutstetig mit $\phi_1' = H_0(k)^*\psi$ fast überall. Weiterhin sei ϕ_0 definiert durch $\phi_0(x) := \int_0^x \phi_1(t)dt$, $x \in \overline{\Omega}$. Damit ist $\phi_0 \in C^1(\overline{\Omega})$ mit $\phi_0'' = \phi_1' = H_0(k)^*\psi$ fast überall.

Für ein beliebiges $\phi \in D(H_0(k))$ gilt unter Verwendung der Produktregel und Randbedingungen

$$(5.55) \quad \langle \psi, H_0(k)\phi \rangle = \langle H_0(k)^*\psi, \phi \rangle = \int_{\overline{\Omega}} \overline{\phi_0''(x)}\phi(x)dx$$

$$(5.56) \quad = [\overline{\phi'_0(x)\phi(x)}]_0^a - \int_{\Omega} \overline{\phi'_0(x)\phi'(x)} dx$$

$$(5.57) \quad = [\overline{\phi'_0(a)}e^{-ika} - \overline{\phi'_0(0)}]\phi(0) + [\overline{\phi_0(x)\phi'(x)}]_0^a + \int_{\Omega} \overline{\phi_0(x)\phi''(x)} dx$$

oder nach einer kleinen Umsortierung ist

$$(5.58) \quad \langle \psi - \frac{2m}{\hbar^2} \phi_0, H_0(k)\phi \rangle = [\overline{\phi'_0(a)}e^{-ika} - \overline{\phi'_0(0)}]\phi(0) + [\overline{\phi_0(a)}e^{-ika} - \overline{\phi_0(0)}]\phi'(0).$$

Da $C_c^2(\overline{\Omega}) \subset \text{im}(H_0(k))$ dicht in $L^2(\overline{\Omega})$ liegt, folgt $\frac{\hbar^2}{2m}\psi = \phi_0$ fast überall und somit auch $\frac{\hbar^2}{2m}\psi' = \phi'_0$, $\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = H_0(k)^*\psi$ fast überall. Damit finden wir für ψ einen Repräsentanten in $C^1(\overline{\Omega})$. Die rechte Seite von Gl. (5.58) muss dann entsprechend für beliebige $\phi \in D(H_0(k))$ verschwinden, d.h.

$$(5.59) \quad 0 = [\overline{\phi'_0(a)}e^{-ika} - \overline{\phi'_0(0)}] = [\overline{\phi_0(a)}e^{-ika} - \overline{\phi_0(0)}].$$

Dies erzwingt nun die Randbedingung aus $D(H_0(k))$ auf den $C^1(\overline{\Omega})$ -Repräsentanten von ψ und es folgt: $\psi \in D(H_0(k))$ und $H_0(k)^*\psi = H_0(k)\psi \forall \psi \in D(H_0(k)^*)$. Folglich ist $H_0(\cdot)$ ein Feld selbstadjungierter Operatoren. Da diese bis auf eine Randbedingung auf einer Nullmenge (0 und a) unabhängig von B sind, ist das Feld auch messbar.

Damit kann man schließlich den Operator $\int_B^{\oplus} H_0(k)dk =: A_U$ definieren.

Im nächsten Schritt soll gezeigt werden, dass $A_U = UAU^{-1}$ ist, d.h. zunächst $U^{-1}D(A_U) \subset D(A)$ und $UD(A) \subset D(A_U)$.

Zu $UD(A) \subset D(A_U)$: Sei $\Psi \in D(A) = H^2(\mathbb{R})$, $\alpha \in \{0, 1, 2\}$, und $(\Psi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset C^\infty(\mathbb{R}) \cap H^2(\mathbb{R})$ eine approximierende Folge nach dem Satz von Meyers und Serrin 1.4.10. Dann ist für ein beliebiges $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ aufgrund der Stetigkeit von U und der Tatsache, dass $(\Psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine H^2 -Cauchyfolge insbesondere $(D^\alpha \Psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine L^2 -Cauchyfolge impliziert,

$$(5.60) \quad \langle \overline{[U\Psi]_k}, D^\alpha \phi \rangle_{L^2(\Omega)} = \langle \overline{[U \lim_{m \rightarrow \infty} \Psi_m]_k}, D^\alpha \phi \rangle_{L^2(\Omega)}$$

$$(5.61) \quad = \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \overline{[U\Psi_m]_k}, D^\alpha \phi \rangle_{L^2(\Omega)}$$

$$(5.62) \quad = \lim_{m \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikna}}{\sqrt{|B|}} \Psi_m(x - na) D^\alpha \phi(x) dx$$

$$(5.63) \quad = (-1)^{|\alpha|} \lim_{m \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikna}}{\sqrt{|B|}} D^\alpha \Psi_m(x - na) \phi(x) dx$$

$$(5.64) \quad = (-1)^{|\alpha|} \langle \overline{[U \lim_{m \rightarrow \infty} D^\alpha \Psi_m]_k}, \phi \rangle_{L^2(\Omega)}$$

$$(5.65) \quad = (-1)^{|\alpha|} \langle \overline{[UD^\alpha \Psi]_k}, \phi \rangle_{L^2(\Omega)}$$

für fast alle $k \in B$, wobei die vierte Gleichheit aus partieller Integration folgt und die Vertauschung von Summation und Ableitung erlaubt ist, da die Koeffizienten der Fourierreihe

$$(5.66) \quad \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikna}}{\sqrt{|B|}} D^\alpha \Psi_m(x - na)$$

wegen $D^\alpha \Psi_m \in C^\infty(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ ab einem $N \in \mathbb{N}$ betragsmäßig durch C/n^s , $s > 1/2$, $C \in \mathbb{R}$, $|n| > N$, abgeschätzt werden können und die Reihe somit gleichmäßig konvergiert (siehe z.B. Ref. [34] Prop. 1.3).

Demnach ist $[U\Psi]_k \in H^2(\Omega^\circ)$ für fast alle $k \in B$ mit schwacher Ableitung $[UD^\alpha \Psi]_k \in L^2(\Omega)$, weshalb auch $\|H_0(\cdot)[U\Psi]_{(\cdot)}\| < \infty$ folgt.

5.2. Die Floquet-Transformation

Nun ist zudem

$$(5.67) \quad [U\Psi]_k(a) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikna}}{\sqrt{|B|}} \Psi_m(a - na)$$

$$(5.68) \quad = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ik(n-1)a} e^{ika}}{\sqrt{|B|}} \Psi_m(0 - (n-1)a) = e^{ika} [U\Psi]_k(0)$$

und analog findet man zudem $[U\Psi']_k(a) = e^{ika} [U\Psi']_k(0)$. Damit ist aber bereits $U\Psi \in D(A_U)$.

Zu $U^{-1}D(A_U) \subset D(A)$: Sei $\Psi \in D(A_U)$, d.h. $\Psi \in \int_B^\oplus L^2(\Omega) dx$, $\Psi_k \in D(H_0(k))$ f.ü. und $\|H_0(\cdot)\Psi(\cdot)\| < \infty$. Es gilt

$$(5.69) \quad [U^{-1}\Psi](x - an) = \int_B \frac{e^{-ikan}}{\sqrt{|B|}} \Psi_k(x) dk$$

für alle $x \in \Omega$ und $n \in \mathbb{Z}$. Nach dem Satz von Lebesgue ist außerdem

$$(5.70) \quad D^\alpha [U^{-1}\Psi] = U^{-1} \left[\frac{2m}{\hbar^2} H_0(\cdot) \Psi(\cdot) \right] \in L^2(\mathbb{R})$$

für $\alpha \in \{0, 1, 2\}$ und somit $U^{-1}\Psi \in D(A)$.

Schließlich wird durch Gleichung (5.70) deutlich, dass

$$(5.71) \quad UAU^{-1} = A_U = \int_B^\oplus H_0(k) dk.$$

Im nächsten Schritt führen wir nun auch den periodischen potentiellen Energie-Operator $V(\mathbf{x})$, $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ messbar und beschränkt, wieder ein. Dieser ist damit ein stetiger Operator und wir definieren das konstante messbare Feld stetiger Operatoren

$$(5.72) \quad \begin{aligned} V(\cdot) : B &\rightarrow \mathcal{L}(L^2(\Omega)) \\ k &\mapsto V(k) := V(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Wir zeigen nun, dass

$$(5.73) \quad UVU^{-1} = \int_B^\oplus V(k) dk.$$

Sei dazu $\Psi \in L^2(\mathbb{R})$, $k \in B$ und $x \in \Omega$. Es gilt

$$(5.74) \quad [UV\Psi]_k(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikna}}{\sqrt{|B|}} [V\Psi](x - na)$$

$$(5.75) \quad = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikna}}{\sqrt{|B|}} V(x - na) \Psi(x - na)$$

$$(5.76) \quad = V(x) \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ikna}}{\sqrt{|B|}} \Psi(x - na)$$

$$(5.77) \quad = V(\mathbf{x}) [U\Psi]_k(x) = V(k) [U\Psi]_k(x).$$

Damit ist bereits $UVU^{-1} = \int_B^\oplus V(k) dk$. Aufgrund der Stetigkeit und Symmetrie von $V(\mathbf{x})$ ist $V(k)$ eine Kato-Störung von $H_0(k)$ für fast alle $k \in B$ nach Satz 3.3.19(vi), sodass die beiden Teilergebnisse zum kinetischen und potentielle Energie-Operator den folgenden Satz beweisen.

THEOREM 5.2.4. Sei $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine wesentlich beschränkte messbare Funktion mit Periode a . Dann überführt die Floquet-Transformation U den Hamilton-Operator $A = H_0 + V(\mathbf{x})$ nach

$$(5.78) \quad UAU^{-1} = \int_B^\oplus H_0(k) + V(k)dk.$$

5.3. Die Bandstruktur des Spektrums

Nun haben wir alles nötige Werkzeug zusammen, um die Struktur des Spektrums genau zu bestimmen. Wir beginnen hierbei mit dem Operator H_0 und definieren zunächst den Begriff der Operatorhalbgruppe wie er in Ref. [5] Defn. VII.4.1 zu finden ist.

DEFINITION 5.3.1 (Operatorhalbgruppe). Eine Menge von linearen beschränkten Operatoren $(T_t)_{t \in \mathbb{R}_0^+} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt *Operatorhalbgruppe*, falls

- (i) $T_0 = \text{id}$,
- (ii) $T_{s+t} = T_s T_t$ für alle $t, s \in \mathbb{R}_0^+$ und
- (iii) $\lim_{t \rightarrow 0} T_t \psi = \psi$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$

gilt.

Bevor wir uns der Bestimmung des Spektrums des Schrödingeroperators $A = H_0 + V$ zuwenden können, benötigen wir noch das folgende Lemma.

- LEMMA 5.3.2.**
- (i) Für alle $k \in B$ hat $H_0(k)$ eine kompakte Resolvente und $(-\infty, 0) \subset \rho(H_0(k))$.
 - (ii) Die Menge der Operatoren $\exp(-tH_0(0))$, $t \in \mathbb{R}_0^+$, ist eine Positivität verbessernde Operatorhalbgruppe.
 - (iii) $k \mapsto [H_0(k) + c]^{-1}$, $c \in \mathbb{R}^+$ ist eine analytische Familie in einer Umgebung von B .

BEWEIS. (i) Zunächst betrachten wir die Resolvente $K := (H_0 + c^2)^{-1}$ für $c \in \mathbb{R}^+$ fest, wobei nach Beispiel 3.1.3 K ein stetiger wohldefinierter Operator auf ganz $L^2(\mathbb{R})$ ist.

Sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definiert durch $x \mapsto \frac{1}{x^2 + c^2}$. Damit ist $f \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ und folglich gilt nach Ref. [4] Thm. IX.29, dass

$$(5.79) \quad [\mathcal{F}^{-1} f \mathcal{F}] \psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\mathcal{F}^{-1} f] \star \psi$$

für alle $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Nun ist analog zu Gl. (1.4)

$$(5.80) \quad [\mathcal{F}^{-1} f] = \lim_{R \rightarrow \infty} f_r,$$

$$(5.81) \quad f_r(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-R}^R \frac{e^{ixy}}{y^2 + c^2} dy,$$

wobei der Grenzwert im $L^2(\mathbb{R})$ -Sinne gemeint ist. Der Grenzwert des Integrals aus Gl. (5.81) lässt sich für $x \neq 0$ mittels Residuensatz und der Konturen in Abb. 7 und im Falle $x = 0$ durch eine Tangens-Substitution berechnen und ergibt

$$(5.82) \quad [\mathcal{F}^{-1} f](x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi c}} \pi e^{-|x|c}.$$

Wertet man nun f im Sinne des Spektralsatzes im mit $\frac{1}{\sqrt{2m}}$ skalierten Impuls-Operator p aus, so erhält man nach Gl. (5.79) den Ausdruck

$$(5.83) \quad K\psi(x) = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2\hbar c}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}|x-y|c} \psi(y) dy$$

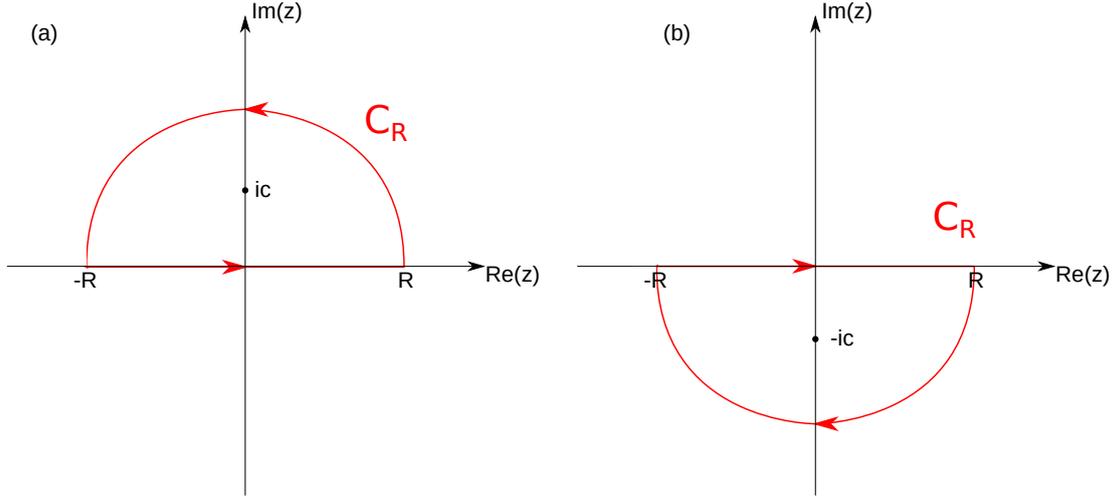


ABBILDUNG 7. Pfade zur Berechnung des Integrals in Gleichung (5.81) mittels des Residuensatzes. (a) kann hierbei im Falle von $y > 0$ und (b) im Falle $y < 0$ verwendet werden. Die Polstellen $\pm ic$ sind ebenfalls innerhalb der Konturen C_R markiert.

für alle $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ und $x \in \mathbb{R}$, sodass K ein Integraloperator ist.

Man stellt nun für $\Psi \in D(H_0(k))$, $k \in B$, fest, dass aus

$$(5.84) \quad (H_0(k) + c^2)\Psi = 0 \quad |\langle \cdot, \Psi \rangle,$$

$$(5.85) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \Psi'', \Psi \rangle = -c^2 \|\Psi\|^2$$

$$(5.86) \quad 0 \leq \frac{\hbar^2}{2m} \|\Psi'\|^2 = -c^2 \|\Psi\|^2 \leq 0,$$

$\Psi = 0$ folgt, wobei im letzten Schritt der Äquivalenzumformungen Lemma 5.2.3 und die Randbedingungen aus $D(H_0(k))$ verwendet wurden. Demnach ist $(H_0(k) + c^2)$ invertierbar und wir können $K(k) := (H_0(k) + c^2)^{-1}$ für alle $k \in B$ definieren.

Sei $\psi \in C_c^\infty(\Omega)$ bzw. $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ durch triviale Fortsetzung, dann erfüllen $K\psi$ und $K(k)\psi$ beide die Differentialgleichung

$$(5.87) \quad (H_0(k) + c^2)u = -\frac{\hbar^2}{2m}u'' + c^2u = \psi$$

auf Ω . Somit erfüllt deren Differenz $K\psi - K(k)\psi$ die Differentialgleichung

$$(5.88) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}v'' + c^2v = 0$$

auf Ω , sodass

$$(5.89) \quad [K(k)\psi](x) = [K\psi](x) + c_{k1}e^{\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar}x} + c_{k2}e^{-\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar}x}$$

für $x \in \Omega$, $c_{k1}, c_{k2} \in \mathbb{C}$ und damit $K(k)\psi \in D(H_0(k))$ gelten kann, müssen die Randbedingungen $[K(k)\psi](a) = e^{ika}\psi(0)$, $[K(k)\psi]'(a) = e^{ika}\psi'(0)$ erfüllt sein. Zusammen mit den Gleichungen (5.83) und (5.89) liefern die Randbedingungen nach Koeffizientenvergleich von $\exp\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar}x$ und $\exp-\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar}x$ die Integraloperatorform

$$(5.90) \quad [K(k)\psi](x) = \int_{\Omega} G_k(x, y)\psi(y)dy,$$

$$(5.91) \quad G_k(x, y) := \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2\hbar c}} e^{-\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar}|x-y|} + \alpha(k) e^{\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar}(x-y)} + \beta(k) e^{-\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar}(x-y)},$$

$$(5.92) \quad \alpha(k) := \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2\hbar c}} \left(e^{\left(\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar} - ik\right)a} - 1 \right)^{-1},$$

$$(5.93) \quad \beta(k) := \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2\hbar c}} \left(e^{\left(\frac{\sqrt{2mc}}{\hbar} + ik\right)a} - 1 \right)^{-1}.$$

Aus der Stetigkeit von G_k folgt damit, dass $K(k) : L^2(\Omega) \rightarrow D(H_0(k))$ ebenfalls ein Integraloperator ist und wegen $\|G_k\|_{L^2(\Omega \times \Omega)} < \infty$ handelt es sich um einen Hilbert-Schmidt-Operator (siehe z.B. Ref. [35] Thm. VI.23) und dieser ist somit kompakt (siehe z.B. Ref. [6] Lemma 5.5.4). Damit haben wir nicht nur gezeigt, dass $H_0(k)$ eine kompakte Resolvente besitzt, sondern auch, dass $(-\infty, 0) \subset \rho(H_0(k))$.

- (ii) Aus Gleichungen (5.90)-(5.93) liest man sofort ab, dass G_0 strikt positiv ist und somit ist $K(0)$ Positivität verbessernd. Wegen $(-\infty, 0) \subset \rho(H_0(0))$ ist die Menge

$$(5.94) \quad (e^{-tH_0(0)})_{t \in \mathbb{R}_0^+} \subset \mathcal{L}(L^2(\Omega))$$

und wegen der grundlegenden Eigenschaften des messbaren Funktionalkalküls (Theorem A.0.3) und des Spektralsatzes (Theorem A.0.7) auch eine Operatorhalbgruppe. Außerdem kann man analog wie in Gl. (3.98) argumentieren, um die starke Operatorkonvergenz

$$(5.95) \quad e^{-tH_0(0)}\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{tH_0(0)}{n} \right)^{-n} \psi$$

für alle $\psi \in L^2(\Omega)$ zu begründen, weshalb dann auch $(e^{-tH_0(0)})_{t \in \mathbb{R}_0^+}$ Positivität verbessernd ist.

- (iii) Die Behauptung folgt direkt aus Gl. (5.90), da diese Gleichung die Konstruktion von Hilbert-Schmidt-Operatoren in einer Umgebung von B ($|\Im k| < \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}$ ist die Bedingung) erlaubt und diese offensichtlich analytisch in k sind. \square

Aus der Existenz einer kompakten Resolvente von $H_0(k)$, $k \in B$, folgern wir mit Theorem 3.1.9, dass alle $H_0(k)$ diskretes Spektrum besitzen. Dieses lässt sich mit einfachen Methoden zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen bestimmen, denn $H_0(k)u = -\frac{\hbar^2}{2m}u'' = \lambda u$ hat Lösungen der Form

$$(5.96) \quad u(x) := c_1 \exp(i\sqrt{2m\lambda}x/\hbar) + c_2 \exp(-i\sqrt{2m\lambda}x/\hbar)$$

mit $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ und $x \in \Omega$. Die Randbedingungen von $D(H_0(k))$ führen zu einer Quantisierung der möglichen Energieeigenwert λ , denn sie liefern die Gleichung

$$(5.97) \quad 1 = \exp(ika + i\sqrt{2m\lambda}a/\hbar),$$

was durch

$$(5.98) \quad \epsilon_n(k) := \frac{\hbar^2(2\pi n - ka)^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

gelöst wird. Dies führt dann zur allgemeinen Lösung

$$(5.99) \quad u_{n,k}(x) = c_1 \exp(i(2\pi n + ka)x/a) + c_2 \exp(-i(2\pi n - ka)x/a).$$

Die Energieeigenwerte bilden als (reell-analytische) Funktionen von k sogenannte *Energiebänder* aus (siehe Abb. 8), die in der theoretischen Physik zur Bestimmung physikalischer Eigenschaften von Festkörpern eine sehr wichtige Rolle spielen. Durch die

5.3. Die Bandstruktur des Spektrums

Umsortierung $\mathbb{Z} \rightarrow 0, 1, -1, 2, -2, \dots$ führt man den Index n in den sogenannten *Bandindex* $n \in \mathbb{N}$ über.

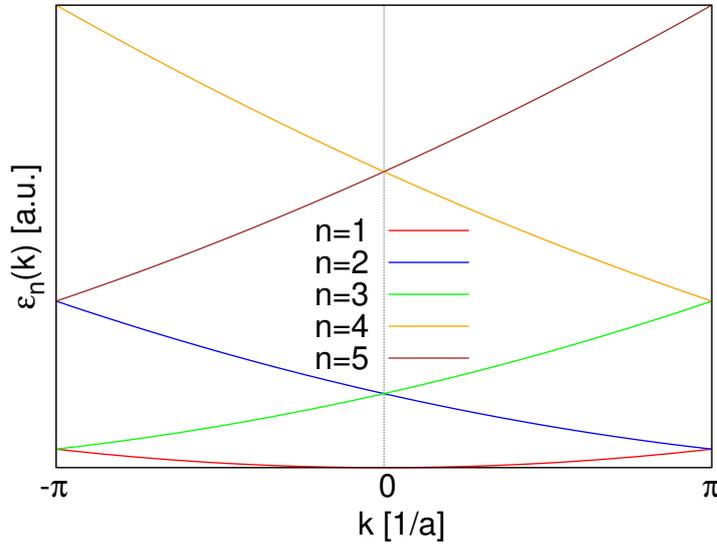


ABBILDUNG 8. Das Spektrum von $H_0(k)$, $k \in B$, besteht aus sogenannten Energiebändern, die anhand ihres Bandindex n voneinander unterschieden werden.

Die Frage, die sich nun stellt ist, ob diese Bandstruktur der Energieeigenwerte auch in Anwesenheit einer potentiellen Energie V erhalten bleibt. Diese Fragestellung ist gerade ein Anwendungsgebiet der Kato-Störungstheorie und wir fassen die Ergebnisse im folgenden Theorem zusammen.

THEOREM 5.3.3. *Für eine wesentlich beschränkte potentielle Energie $V \in L^\infty(\Omega, \mathbb{R})$ gilt*

- (i) $H(k) = H_0(k) + V(\mathbf{x})$, $k \in B$ hat rein diskretes Spektrum und ist eine reell analytische Familie.
- (ii) $H(k)$ ist antiunitär äquivalent zu $H(2\pi/a - k)$ bezüglich komplexer Konjugation für alle $k \in B$.
- (iii) Für $k \in B \setminus \{0, \pi/a\}$ besitzt $H(k)$ nur nicht-entartete Eigenwerte.
- (iv) Sei $E_n(k)$ der n -te Eigenwert von $H(k)$ mit $k \in (0, \pi/a)$. Dann ist $E_n(k)$ für $k \in (0, \pi/a)$ analytisch und stetig in $k = 0, \pi/a$.

BEWEIS. (i) Da V wesentlich beschränkt ist, gibt es nach Theorem 5.2.4 ein $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, sodass $\lambda \in \rho(H(k)) \cap \rho(H_0(k))$ für alle $k \in B$. Nun gilt

$$(5.100) \quad (\lambda - H(k))[(\lambda - H(k))^{-1} - (\lambda - H_0(k))^{-1}](\lambda - H_0(k))$$

$$(5.101) \quad = [\text{id} - (\lambda - H(k))(\lambda - H_0(k))^{-1}](\lambda - H_0(k))$$

$$(5.102) \quad = H(k) - H_0(k)$$

$$(5.103) \quad = V(\mathbf{x})$$

und durch Multiplikation mit $(\lambda - H(k))^{-1}$ von links und $(\lambda - H_0(k))^{-1}$ von rechts erhält man

$$(5.104) \quad (\lambda - H(k))^{-1}V(\mathbf{x})(\lambda - H_0(k))^{-1} = (\lambda - H(k))^{-1} - (\lambda - H_0(k))^{-1}$$

beziehungsweise

$$(5.105) \quad (\lambda - H(k))^{-1}V(\mathbf{x})(\lambda - H_0(k))^{-1} + (\lambda - H_0(k))^{-1} = (\lambda - H(k))^{-1}.$$

Die linke Seite der Gleichung beschreibt nach Lemma 5.3.2(i) einen kompakten Operator, sodass folglich $H(k)$ eine kompakte Resolvente besitzt. Nach Theorem 3.1.9 gilt dann $\sigma(H(k)) = \sigma_d(H(k))$.

Nun zeigen wir, dass $H(\cdot)$ eine analytische Familie ist. Dazu bemerken wir aufgrund der Selbstadjungiertheit von $H(k)$, $k \in B$, dass $-\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ mit $\Re \lambda > 0$ immer ein Element in $\rho(H(k))$, $k \in B$, ist. Es bleibt noch zu zeigen, dass $k \mapsto (H(k) + \lambda)^{-1}\psi$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$ analytisch ist.

Dies folgt aber aus denselben Argumenten wie in Gl. (3.130) und (3.133), sodass ein λ so gewählt werden kann, dass die Neumann-Reihe

$$(5.106) \quad (H(k) + \lambda)^{-1} = (H_0(k) + \Re \lambda)^{-1} \sum_{i=0}^{\infty} [(V(\mathbf{x}) + i\Im \lambda)(H_0(k) + \Re \lambda)^{-1}]^i$$

konvergiert. Aus Lemma 5.3.2(i) und der im Beweis beschriebenen expliziten Form von $(H_0(k) + \Re \lambda)^{-1}$ folgt, dass $H(\cdot)$ eine reell analytische Familie ist.

- (ii) Der Übergang $k \rightarrow 2\pi/a - k$ ändert in $H_0(k)$ nur die Randbedingung in $D(H_0(k))$, indem der komplex konjugierte Exponentialfaktor jeweils steht. Da die potentielle Energie reellwertig und unabhängig von k ist, gilt $H(k)\bar{\psi} = H(2\pi/a - k)\psi$.
- (iii) Wegen (ii) genügt es bezüglich der Entartung nur $k \in (0, \pi/a)$ zu betrachten. Sei $E \in \sigma(H(k)) \subset \mathbb{R}$, d.h. $-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + V(\mathbf{x})u = Eu$ besitzt eine Lösung, die den Randbedingungen in $D(H_0(k))$ genügt. Für $k \in B \setminus \{0, \pi/a\}$ führen die Randbedingungen auf komplexwertige Lösungen, sodass zu einer Lösung u die linear unabhängige Lösung \bar{u} nach (ii) den Randbedingungen von $D(H_0(2\pi/a - k))$ gehorcht, welche ungleich denen von $D(H_0(k))$ sind. Da die gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung $H(k)u = Eu$ zwei linear unabhängige Lösungen zulässt, gibt es immer höchstens eine Lösung, die den Randbedingungen von $D(H_0(k))$ genügt.
- (iv) Sei $k \in B$ fest. Analog wie in Bsp. 3.1.3 kann man zeigen, dass $H_0(k)$ halbbeschränkt ist und da $V \in L^\infty(\Omega)$ ist auch $H(k)$ für alle $k \in B$ halbbeschränkt. Daraus folgt, dass das diskrete Spektrum $\sigma(H(k))$ ein Minimum hat, denn für einen Eigenvektor $\psi(k)$ zum Eigenwert $\epsilon(k)$ gilt

$$(5.107) \quad \langle H(k)\psi(k), \psi(k) \rangle = \epsilon(k)\|\psi(k)\|^2 \geq c\|\psi(k)\|^2,$$

wobei $c \in \mathbb{R}$ eine untere Schranke von $H(k)$ ist. Damit ist $(e^{-tH(0)})_{t \in \mathbb{R}^+} \subset \mathcal{L}(L^2(\Omega))$ – wie in Lemma 5.3.2(ii) argumentiert – eine Operatorhalbgruppe. Sei $a > \|V\|_\infty$, dann ist

$$(5.108) \quad (a + H(0))^{-1} = (a - \|V\|_\infty + H_0(0) + V(\mathbf{x}) + \|V\|_\infty)^{-1}$$

$$(5.109) \quad = (\text{id} + (a - \|V\|_\infty + H_0(0))^{-1}(V(\mathbf{x}) + \|V\|_\infty))^{-1}(a - \|V\|_\infty + H_0(0))^{-1}.$$

Somit ist $(e^{-tH(0)})_{t \in \mathbb{R}^+}$ ebenfalls Positivität verbessernd, da wie für Lemma 5.3.2(ii) argumentiert insbesondere $(a - \|V\|_\infty + H_0(0))^{-1}$ und insgesamt also $(a + H(0))^{-1}$ für hinreichend große a Positivität verbessernd ist. Damit ist nach Theorem 3.1.12 der Grundzustand nicht entartet.

Da in (i) gezeigt wurde, dass $H(k)$ eine analytische Familie in einer Umgebung von $k = 0$ ist, existiert nach Theorem 3.2.5 eine analytische Funktion $\tilde{E}_1(k)$

5.3. Die Bandstruktur des Spektrums

für $k \in [0, \epsilon)$ und $\epsilon > 0$, sodass $\tilde{E}_1(0) = \min \sigma_d(H(0))$ und $\tilde{E}_1(k) \in \sigma(H(k))$.
Angenommen $\epsilon < \pi/a$. Falls

$$(5.110) \quad \lim_{k \rightarrow \epsilon^-} \tilde{E}_1(k) < \infty,$$

können wir mittels (iii) einsehen, dass $\lim_{k \rightarrow \epsilon^-} \tilde{E}_1(k)$ ein einfacher Eigenwert von $H(\epsilon)$ ist, da eine Divergenz nach $-\infty$ aufgrund der Halbbeschränktheit von $H(k)$ ausgeschlossen ist. Damit existiert nun nach Theorem 3.2.5 ein $\delta > 0$ und eine analytische Funktion $g(\cdot)$ auf $U_\delta(\epsilon)$, sodass $g(k) \in \sigma(H(k))$ und $g(k_n) = \tilde{E}_1(k_n)$ für große $n \in \mathbb{N}$ – dann nämlich, wenn $k_n \in U_\delta(\epsilon)$, wobei $(k_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset [0, \epsilon)$ eine Folge mit $\lim_{n \rightarrow \infty} k_n = \epsilon$ ist. Damit stellt g eine analytische Fortsetzung von \tilde{E}_1 über $[0, \epsilon]$ hinaus dar, sodass dasselbe Argument eine analytische Fortsetzung auf ganz $[0, \pi/a)$ ergibt.

Es bleibt also nun zu zeigen, dass \tilde{E}_1 beschränkt ist. Zunächst stellt man fest, dass $H(k)$ auf $[0, \epsilon)$ keinen Eigenwert kleiner $\tilde{E}_1(k)$ haben kann, denn sonst könnte man diesen Eigenwert nach $k = 0$ – wie eben beschrieben – fortsetzen. Aufgrund der Einfachheit der Eigenwerte und der Argumentation zuvor müsste diese Fortsetzung strikt kleiner als \tilde{E}_1 sein und wir hätten einen Widerspruch zur Minimalität von $\tilde{E}_1(0)$. Da also $\tilde{E}_1(k)$ der kleinste Eigenwert von $\sigma(H(k))$ für $k \in [0, \epsilon)$ ist, kann der Grenzwert $\lim_{k \rightarrow \epsilon^-} \tilde{E}_1(k)$ nicht divergieren, sodass die analytische Fortsetzung von $\tilde{E}_1(\cdot)$ gerade dem kleinsten Eigenwert von $H(\cdot)$ entsprechen muss, d.h. $E_1(\cdot)$ ist analytisch auf $[0, \pi/a]$ und wegen (ii) auch auf ganz B .

Betrachten wir nun $E_2(0)$, wobei der erste angeregte Zustand entartet sein kann (siehe Abb. 8). Nichtsdestotrotz wird diese Entartung nach (iii) für $k \in B \setminus \{0, \pi/a\}$ aufgehoben. Nun kann man Theorem 3.2.6 verwenden, um für die möglicherweise bei $k \neq 0$ aufgespaltenen Energieeigenwerte analytische Funktionen zu finden. Dasselbe Argument wie eben lässt sich nun für die einzelnen analytischen Funktionen wiederholen, sodass man erneut analytische Energiebänder auch für den ersten angeregten Zustand erhält.

Das Argument kann man nun induktiv für alle Eigenwerte wiederholen. □

Tatsächlich kann man im eindimensionalen Fall noch mehr aussagen, nämlich, dass die Energiebänder jeweils entweder streng monoton fallend oder steigend sind (siehe z.B. Ref. [23] Thm. XIII.89 (e)) und dass die Eigenfunktionen, welche als *Bloch-Wellen* bezeichnet werden, ebenfalls analytisch auf $B \setminus \{0, \pi/a\}$ gewählt werden können (siehe z.B. Ref. [23] Thm. XIII.89 (f)).

THEOREM 5.3.4. *Es gilt $\sigma(H) = \{E_n(k) \mid n \in \mathbb{N}, k \in \overline{B}\}$.*

BEWEIS. Da die Energiebänder $E_n(\cdot)$ auf \overline{B} für alle $n \in \mathbb{N}$ stetig sind, gibt es zu gegebenen $k_0 \in \overline{B}$ und $\epsilon > 0$ ein $\delta > 0$, sodass

$$E_n(U_\delta(k_0)) \subset U_\epsilon(E_n(k_0))$$

und damit ist nach Theorem 3.3.19(iv) $\sigma(H) = \{E_n(k) \mid n \in \mathbb{N}, k \in \overline{B}\}$. □

THEOREM 5.3.5. *Die Blochwellen bilden eine Orthonormalbasis von $L^2(\Omega)$.*

BEWEIS. Der Beweis wird im allgemeineren mehrdimensionalen Fall ausgeführt (Theorem 6.0.3). □

Weitere Eigenschaften der Bloch-Wellen und Energiebänder sind in Ref. [23] Thm. XII.90-95 und in Ref. [2] und den Referenzen darin gegeben. Wir benötigen diese im Folgenden nicht mehr und lassen sie deswegen aus.

Mehrdimensionale periodische Schrödingeroperatoren

Dieser Abschnitt beruht auf Ref. [23] XIII.16, Ref. [Zantout2019] und Ref. [22]. Im vorangegangenen Kapitel sind immer wieder Aussagen aus der Lösungstheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen eingegangen, die man im mehrdimensionalen Fall nicht anwenden kann. Dennoch bleiben viele Resultate bestehen, müssen aber gegebenenfalls anders begründet werden.

Zunächst einmal kann man die Floquet-Transformation für \mathbb{R}^n verallgemeinern. Sei dazu im Folgenden stets $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine Einheitszelle zum Kristall mit Gittervektoren $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^n$ und $B \subset \mathbb{R}^n$ die erste Brillouin-Zone.

DEFINITION+SATZ 6.0.1 (Floquet-Transformation U). Sei $\mathcal{H} = \int_B^\oplus \mathcal{H}' d^n k$ mit $\mathcal{H}' = L^2(\Omega, d^n x)$. Dann ist die Abbildung

$$U : L^2(\mathbb{R}^n, d^n x) \rightarrow \mathcal{H}$$

$$(6.1) \quad \Psi \mapsto [U\Psi]_k(x) := \sum_{n \in \mathbb{Z}^n} \frac{e^{ik^T \cdot (a_1, \dots, a_n) \cdot n}}{\sqrt{|B|}} \Psi(x - (a_1, \dots, a_n) \cdot n), \quad x \in \Omega, \quad k \in B$$

mit inverser Abbildung

$$(6.2) \quad U^{-1} : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n, d^n x)$$

$$\Psi \mapsto [U^{-1}\Psi](x - (a_1, \dots, a_n) \cdot n) := \int_B \frac{e^{-ik^T \cdot (a_1, \dots, a_n) \cdot n}}{\sqrt{|B|}} \Psi_k(x) dk$$

für $x \in \Omega$, $n \in \mathbb{Z}^n$ unitär. Man bezeichnet U als *Floquet-Transformation*.

BEWEIS. Der Beweis funktioniert wie im eindimensionalen Fall (siehe Satz 5.2.1). Alternativ findet sich der Beweis in der mehrdimensionalen Notation auch in Ref. [22] Lemma 2. \square

Die Floquet-Transformation ist dann wieder der Schlüssel, um die direkte Integralzerlegung für den mehrdimensionalen Schrödingeroperator zu finden.

THEOREM 6.0.2. Sei $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ mit $V(x + a_i) = V(x)$ für alle $i = 1, \dots, n$ und $x \in \mathbb{R}^n$. Dann definieren wir für $k \in B$ den Operator $H_0(k)$ als den Operator $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ auf \mathcal{H}' mit Randbedingungen

$$(6.3) \quad \psi(x + a_j) = e^{ik \cdot a_j} \psi(x) \quad \text{und} \quad \partial_j \psi(x + a_j) = e^{ik \cdot a_j} \partial_j \psi(x)$$

für alle $x \in \mathbb{R}^n$, sodass $x, x + a_j \in \bar{\Omega}$, und $j \in \{1, \dots, n\}$. Bei $H_0(\cdot)$ handelt es sich dann um ein messbares Feld selbstadjungierter Operatoren. Weiterhin definiert man für $k \in B$ den Operator $V(k)$ als Multiplikationsoperator $V(\mathbf{x})$ mit $D(V(k)) = D(H_0(k))$, sodass es sich bei $V(\cdot)$ ebenfalls um ein messbares Feld selbstadjungierter Operatoren handelt.

Es gilt dann für den Hamilton-Operator $A = H_0 + V(\mathbf{x})$:

$$(6.4) \quad UAU^{-1} = \int_B^\oplus H_0(k) + V(k) dk.$$

BEWEIS. Der Beweis ist analog wie in Theorem 5.2.4, wobei das Argument zur Wohldefiniertheit von $D(H_0(k))$, $k \in B$, im mehrdimensionalen Fall über den Spursatz (siehe z.B. Ref. [36] Satz 9.40) erfolgt, der die Existenz einer stetigen Erweiterung von $H^2(\Omega)$ auf den Rand $H^{3/2}(\partial\Omega) \supset H^1(\partial\Omega)$ erklärt. Der Beweis der Selbstadjungiertheit erfolgt dann über die zweite Green'sche Formel, die auch für $H^2(\Omega)$ -Funktionen gilt (siehe z.B. Ref. [37] Thm. 13.7.1 und Rmk. 13.7.3), wie im eindimensionalen Fall durch die Randbedingungen. \square

THEOREM 6.0.3. Für $k \in B$ hat $H(k)$ eine Orthonormalbasis aus Eigenfunktionen $(\psi_{n,k})_{n \in \mathbb{N}}$ mit Eigenwerten $(\epsilon_n(k))_{n \in \mathbb{N}}$. Die Energiebänder $\epsilon_n : B \rightarrow \mathbb{R}$ sind stetig und stückweise analytisch. Weiterhin können die Blochwellen $\psi_{n,k}$ als Funktion von $k \in B$ messbar gewählt werden.

BEWEIS. Sei $k \in B$ fest. Analog wie im eindimensionalen Fall findet eine Eigenbasis aus Eigenfunktionen von $H_0(k)$ durch

$$(6.5) \quad \psi_{m,k}^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{|B|}} \exp [i(2\pi m \cdot M^{-1} + k) \cdot x],$$

wobei $m \in \mathbb{Z}^n$, $x \in \mathbb{R}$ und $M = (a_1, \dots, a_n)$, denn

$$(6.6) \quad \langle \psi_{m,k}^{(0)}, \psi_{m',k}^{(0)} \rangle = \frac{1}{|B|} \int_{\Omega} \exp[i2\pi(m - m') \cdot M^{-1} \cdot x] dx$$

$$(6.7) \quad = \frac{1}{|B|} \underbrace{|M^{-1}|}_{=1/|\Omega|} \int_{[0,1]^n} \exp[i2\pi(m - m') \cdot x] dx$$

$$(6.8) \quad = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{[0,2\pi]^n} \exp[i(m - m') \cdot x] dx$$

$$(6.9) \quad = \delta_{m,m'}$$

und die Randbedingungen von $D(H_0(k))$ und die Eigenfunktionseigenschaft sind offensichtlich erfüllt. Die Eigenwerte sind gegeben durch

$$(6.10) \quad \epsilon_m^{(0)}(k) = \frac{\hbar^2}{2m} |(2\pi m \cdot M^{-1} + k)|^2.$$

Damit folgt aus Theorem 3.1.6, dass $H_0(k)$ eine kompakte Resolvente besitzt, wobei die Halbbeschränktheit wie im eindimensionalen Fall analog zu Beispiel 3.1.3 gefolgert wird.

Derselbe Beweis wie Theorem 5.3.3 zeigt, dass $H(k)$ ebenfalls eine kompakte Resolvente besitzt. Wir notieren die einfachen Eigenwerte von $H(k)$ mit $(\epsilon_n(k))_{n \in \mathbb{N}}$ und die korrespondierenden Eigenfunktionen $(\psi_{n,k})_{n \in \mathbb{N}}$. Diese bilden nach Theorem 3.1.6 eine Orthonormalbasis von $L^2(\Omega)$.

Zum Beweis der Stetigkeit von ϵ_n definieren wir zunächst ein messbares Feld unitärer Transformationen auf $L^2(\Omega)$

$$(6.11) \quad \phi_{n,k}(x) := e^{-ik \cdot x} \psi_{n,k}(x)$$

für $x \in \bar{\Omega}$. Dann rechnet man mittels der Produktregel

$$(6.12) \quad \epsilon_n(k) \psi_{n,k}(x) = H(k) \psi_{n,k}(x) = H(k) e^{ik \cdot x} \phi_{n,k}(x)$$

$$(6.13) \quad = V(x) \psi_{n,k}(x) - \frac{\hbar^2}{2m} e^{ik \cdot x} [-k^2 \phi_{n,k}(x) + 2ik \cdot (\nabla \phi_{n,k})(x) + \Delta \phi_{n,k}(x)]$$

und Multiplikation mit $e^{-ik \cdot x}$ liefert

$$(6.14) \quad \epsilon_n(k) \phi_{n,k} = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 + 2ik \cdot \nabla + \Delta) + V(\mathbf{x}) \right]}_{=: \tilde{H}(k)} \phi_{n,k}.$$

Entsprechend übersetzen sich die Randbedingungen an die Blochwellen $\psi_{n,k}$ nach

$$(6.15) \quad \phi(x + a_j) = \phi(x) \quad \text{und} \quad \partial_j \phi(x + a_j) = \partial_j \phi(x)$$

für alle $x, x + a_j \in \bar{\Omega}$. Da die Randbedingungen und somit die Definitionsbereiche von $\tilde{H}(\cdot)$ nun unabhängig von k sind, folgt aus dem Minmax-Theorem 3.1.10,

$$(6.16) \quad \epsilon_n(k) = \max_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \min_{\substack{\psi \in D(\tilde{H}(k)), \|\psi\|=1 \\ \psi \in \langle \psi_1, \dots, \psi_{n-1} \rangle^\perp}} \langle \psi, \tilde{H}(k)\psi \rangle,$$

die Stetigkeit von ϵ_n aus der Stetigkeit von $\tilde{H}(\cdot)$ durch Einsetzen von $\tilde{H}(\cdot)$.

Zur Messbarkeit der Blochwellen $\psi_{n,\cdot} := \psi_n(\cdot)$ auf B definieren wir zunächst

$$M_{n,m} := \{k \in B \mid \epsilon_n(k) \text{ ist } m\text{-fach entartet}\}$$

für $n, m \in \mathbb{N}$. Da die Eigenwerte $\epsilon_n(k)$ für alle $k \in B$ nach der Größe aufsteigend sortiert sind, lässt sich $M_{n,m}$ auch schreiben als

$$(6.17) \quad M_{n,m} = \{k \in B \mid \epsilon_n(k) \text{ ist } m\text{-fach entartet}\}$$

$$(6.18) \quad = \underbrace{\left[\bigcup_{j=0}^{m-1} \left(\bigcap_{l=n-m+1+j}^{n+j} N_{n,l} \right) \right]}_{\text{mindestens } m\text{-fach entartet}} \cap \underbrace{\left[\bigcup_{j=0}^m \left(\bigcap_{l=n-m+j}^{n+j} N_{n,l} \right) \right]^c}_{\text{höchstens } m\text{-fach entartet}},$$

wobei

$$(6.19) \quad N_{n,l} := (\epsilon_n - \epsilon_l)^{-1}(\{0\}).$$

Da die Energiebänder ϵ_n stetig sind, folgt, dass $M_{n,m}$ als Schnitt einer offenen und einer abgeschlossenen Menge messbar ist.

Offensichtlich ist

$$(6.20) \quad B = \bigsqcup_{m \in \mathbb{N}} M_{n,m}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Nun ist das Feld selbstadjungierter Operatoren $\tilde{H}(\cdot)$ (Gl. (6.14)) mit Definitionsbereich $H^2(\Omega)$ plus den zusätzlichen Randbedingungen aus Gl. (6.15) offensichtlich eine analytische Familie vom Typ A. Zusammen mit Bemerkung 3.2.4 und der Stetigkeit der Bandfunktionen folgt, dass für alle $k \in M_{n,m}$ eine Umgebung und eine feste Kontur $\Gamma_{n,k} \subset \mathbb{C}$ existieren, sodass die Riesz-Projektoren

$$(6.21) \quad \tilde{P}_n(k) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_{n,k}} (\tilde{H}(k) - \lambda)^{-1} d\lambda, \quad k \in B,$$

auf den Eigenraum zum Eigenwert $\epsilon_n(\cdot)$ stetig sind, wobei die geschlossene Kurve $\Gamma_{n,k} \subset \rho(\tilde{H}(k))$ um $\epsilon_n(k)$ so gewählt wurde, dass im Inneren sonst kein anderes Band vorhanden ist. Um von der lokalen Stetigkeit der Projektoren $\tilde{P}_n(\cdot)$ auf die lokale Stetigkeit eines dazugehörigen Eigenvektors zu schließen, betrachtet man eine feste normierte Eigenfunktion $\phi_0 \in \text{im}(\tilde{P}_n(k_0))$ mit $k_0 \in M_{n,m}$, sodass $\langle \tilde{P}_n(k_0)\phi_0, \phi_0 \rangle = 1$. Aufgrund der lokalen Stetigkeit von $\tilde{P}_n(\cdot)$ gibt es nun eine Umgebung von k_0 , sodass $\langle \tilde{P}_n(k)\phi_0, \phi_0 \rangle > 0$ für alle $k \in M_{n,m}$ aus dieser Umgebung von k_0 . Damit können wir mittels Normierung

$$(6.22) \quad \phi_n(\cdot) := \tilde{P}_n(\cdot)\phi_0 / \sqrt{\langle \tilde{P}_n(\cdot)\phi_0, \phi_0 \rangle}$$

in einer Umgebung von k_0 setzen.

Setzt man nun ein $\phi_n(\cdot)$ auf ganz $M_{n,m}$ aus den eben beschriebenen $\phi_n(\cdot)$ zusammen¹ und fügt diese über Indikatorfunktionen $1_{M_{n,m}}$ zu einem messbaren Feld auf ganz B aneinander, so sind diese Eigenfunktionen fast überall definiert.

Die Messbarkeit von $\phi_n(\cdot)$ wird über das unitäre Feld aus Gl. (6.11) auf die Eigenfunktionen $\psi_n(\cdot)$ von $H(\cdot)$ übertragen.

Nun kann man auch die Analytizität von $\tilde{H}(\cdot)$ verwenden, um mittels Theorem 3.2.6 zu zeigen, dass die Energiebänder stückweise analytisch sind, wobei sich das stückweise darauf bezieht, dass man an den Kreuzungspunkten der Energiebänder von einem Band zum nächsten Band “springen” darf und die so zusammengesetzten Bänder jeweils analytisch sind. An diesen höchstens abzählbar vielen Ausnahmepunkten kann man dann nicht sinnvoll eindeutig differenzieren (siehe Ref. [26] VII §3.4 und 3.5, pp. 390-393). \square

BEMERKUNG 6.0.4. An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Transformation in Gl. (6.11) das ursprüngliche Randwertproblem mit den Randbedingungen aus Gl. (6.3) in ein periodisches Randwertproblem überführt (siehe Gl. (6.14) und (6.15)). In der Literatur wird aufgrund der unitären Äquivalenz auch oft mit dem periodischen Randwertproblem gearbeitet.

THEOREM 6.0.5. *Die Blochwellen $\psi_{n,k}$ lassen sich mittels der Randbedingung aus $D(H_0(k))$ auf ganz \mathbb{R}^n fortsetzen. Vermöge der Floquet-Transformation U bilden sie dann eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{R}^n)$; genauer gesagt, gilt für ein $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ die Entwicklung*

$$(6.23) \quad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|B|}} \sum_{m=1}^{\infty} \int_B \langle [U\psi]_k(\cdot), \psi_{m,k}(\cdot) \rangle_{L^2(\Omega)} \psi_{m,k}(x) dk$$

für alle $x \in \mathbb{R}^n$ in $L^2(\mathbb{R}^n)$.

THEOREM 6.0.6. *Das Spektrum des Schrödingeroperators H ist wie im eindimensionalen Fall durch das Bild der Energiebänder gegeben, d.h.*

$$\sigma(H) = \{\epsilon_n(k) \mid n \in \mathbb{N}, k \in \overline{B}\}.$$

BEWEIS. Der Beweis erfolgt wie im eindimensionalen Fall (Theorem 5.3.4). \square

BEMERKUNG 6.0.7. Dass man die Bezeichnung “Energiebänder” auch im mehrdimensionalen Fall verwendet, auch wenn es sich bei dem Spektrum eigentlich um komplizierte Schnitte von Hyperebenen handelt, ist der Tatsache geschuldet, dass man in praktischen Anwendungen der Physik das Spektrum entlang spezieller Pfade in der ersten Brillouin-Zone B betrachtet.

Zuletzt sei noch angemerkt, dass dieses mathematische Ergebnis über die Struktur des Spektrums eines periodischen Hamiltonoperators auch im Experiment beobachtet werden kann. So kann beispielsweise mittels Röntgen-Bestrahlung das Energiespektrum der Elektronen in einem Kristall in Abhängigkeit von $k \in B$ gemessen werden. Diese Methode heißt “ARPES”, wobei das Akronym für angle-resolved photoemission spectroscopy steht. Für einführende Literatur sei auf Ref. [38] verwiesen.

Von Seiten der theoretischen Physik stellt die sogenannte Dichte-Funktionaltheorie ein überaus nützliches Mittel dar, um das Energiespektrum von Kristallen approximativ zu berechnen. Auch in diesem Fall sei auf einführende Literatur zur Dichtefunktionaltheorie, z.B. Ref. [39], verwiesen. In Abb. 9 ist das gemessene und berechnete Energiespektrum eines zweidimensionalen Graphen-Kristalls dargestellt. Man sieht deutlich

¹Aufgrund der Separabilität von $B \subset \mathbb{R}^n$ wird es sich um höchstens abzählbar viele Umgebungen in $M_{n,k}$ handeln, aus denen man wählen muss. Auf jeder Menge $M_{n,k}$ konstruiert man also ϕ_n als punktwisen Grenzwert messbarer Funktionen, weshalb dieser Grenzwert ebenfalls messbar ist.

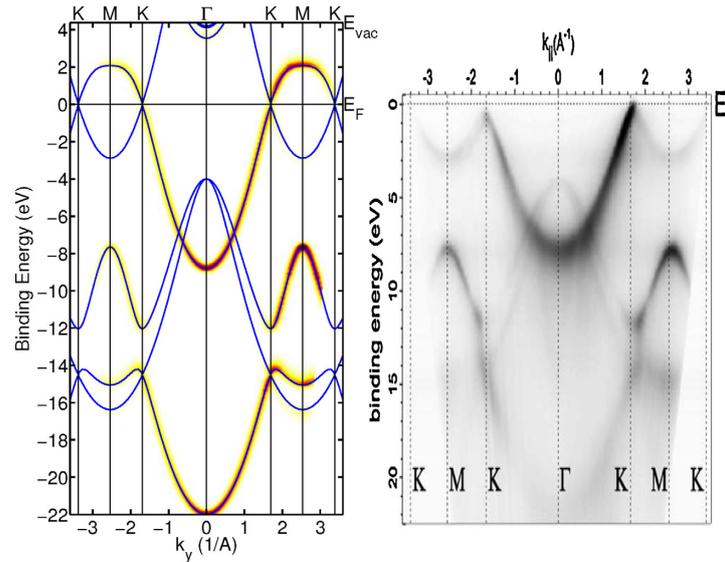


ABBILDUNG 9. Negatives Energiespektrum (Bindungsenergien) von Graphen entlang eines Pfades in der Brillouin-Zone B , wobei Γ , K und M Hochsymmetriepunkte in B kennzeichnen. Links: Berechnet im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie. Rechts: ARPES-Messung (Quelle: [40]).

die Bandstruktur des Energiespektrums, wobei die Aufweichung der Bänder im Experiment verschiedene Ursachen haben kann, die uns an dieser Stelle nicht interessieren. Jedoch können diese Ursachen rechnerisch simuliert und in die berechnete Bandstruktur nachträglich eingebaut werden, sodass auch von Seiten der Theorie die Bänder entlang von bestimmten Bandsegmenten verschwimmen.

Bei Graphen handelt es sich um einen (Halb-)leiter, da das Energiespektrum auch in einer Umgebung um die Bindungsenergie gleich Null existiert. Legt man nun eine Spannung an den Kristall an, so existieren quasi-freie Zustände (bei Bindungsenergie fast Null), die durch die Spannung angeregt werden können und so zur Stromleitung bereit stehen.

Andererseits gibt es viele Materialien, bei denen das Energiespektrum eine Lücke bei Bindungsenergie gleich Null aufweist. In diesem Fall handelt es sich um einen Nichtleiter oder Halbleiter².

Tatsächlich lassen sich noch viele weitere Aussagen zum Spektrum von periodischen Schrödingeroperatoren treffen, aber dies würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen und es sei daher auf Ref. [2] und die darin gelistete Literatur verwiesen.

²Die Unterscheidung zwischen Halbleiter und Nichtleiter erfolgt über die Größe der Bandlücke.

Eigenschaften des Randes des Energiespektrums

Dieses Kapitel basiert auf den Ergebnissen in Ref. [41].

7.1. Einleitung

Nachdem wir in den vorangegangenen Kapiteln die allgemeine Struktur des Energiespektrums periodischer Schrödingeroperatoren untersucht haben, wollen wir uns nun speziell mit den Eigenschaften der Bandfunktionen am Übergang zu Bandlücken beschäftigen.

Wir beschränken uns hier auf den Fall zweidimensionaler Probleme, da die Frage im eindimensionalen Fall aufgrund von Theorem 5.3.3 und der erwähnten Monotonie der Bandfunktionen (siehe Ref. [23] Thm. XIII.89 (e) oder Ref. [2] Thm. 1.12) trivial ist. In Dimensionen $n > 1$ ist die Frage nach der Struktur von Energierändern noch immer ein offenes Problem, auch wenn man allgemein davon ausgeht, dass die k -Punkte bei Bandextrema nicht-entartet sind [2, 42], wobei feststeht, dass für allgemeine periodische Schrödingeroperatoren, wie wir sie in den vorangegangenen Kapiteln beschrieben haben, der Spektralrand durch ein einziges Band erzeugt wird [43]. Weiterhin kann man zudem beweisen, dass Bandfunktionen nie konstant sind [44].

Rigoreuse Ergebnisse bezüglich der Entartung an einer Spektrallücke finden sich bisher nur für das niedrigste Energieband [45], für spezielle potentielle Energieoperatoren [46, 47] und für $n = 2$ [41].

In diesem Kapitel widmen wir uns dem Ergebnis von [41], das besagt, dass unter den bisherigen Bedingungen an den periodischen Schrödingeroperator und in Dimension $n = 2$ jedes globale Maximum oder Minimum einer beliebigen Bandfunktion nur an einer diskreten Menge von k -Punkten angenommen werden kann. Dieses Ergebnis betrifft insbesondere Bänder an Spektrallücken, aber auch Bänder, deren Maximum/Minimum keine Bandlücke definiert.

Dieses Ergebnis ist nicht nur aus Sicht der Festkörperphysik wichtig, da es weitere Aufschlüsse über die Existenz von van-Hove-Singularitäten in Kristallen (siehe z.B. Ref. [1, 18]) erlaubt, sondern auch mathematisch wichtige Implikationen hat; z.B. die Anwendbarkeit von Liouville-Theoremen und die Asymptotik von Green'schen Funktionen [41].

Die zentrale Aussage, die wir in diesem Abschnitt behandeln wollen, ist Theorem 2.1 aus [41]:

THEOREM 7.1.1. *Sei $A = H_0 + V(\mathbf{x})$ der Schrödingeroperator aus Gl. (3.9) in zwei Dimensionen ($n = 2$). Sei weiterhin $\epsilon_{\pm,j}$ ein globales Maximum bzw. Minimum der Bandfunktion ϵ_j zum Operator A . Dann ist die Niveaumenge*

$$(7.1) \quad \{k \in B \mid \epsilon_j(k) = \epsilon_{\pm,j}\} \subset \mathbb{R}^2$$

endlich.

Ausgangspunkt für den Beweis von Thm. 7.1.1 ist die direkte Integralzerlegung von A (siehe Thm. 6.0.2),

$$(7.2) \quad UAU^{-1} = \int_B^\oplus H_0(k) + V(k)dk,$$

wobei wir nach Bem. 6.0.4 das unitär äquivalente Feld von Operatoren

$$(7.3) \quad H(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 + 2ik \cdot \nabla + \Delta) + V(\mathbf{x})$$

$$(7.4) \quad = \frac{\hbar^2}{2m} (-i\nabla + \bar{k})^* (-i\nabla + k) + V(\mathbf{x}), \quad k \in B,$$

auf $L^2(\Omega)$ mit Definitionsgebiet $D(H(k)) = H_{per}^2(\Omega)$ betrachten können. Hierzu haben wir $H_{per}^2(\Omega)$ als den gewöhnlichen Funktionenraum $H^2(\Omega)$ mit periodischen Randbedingungen

$$(7.5) \quad \phi(x + a_j) = \phi(x) \quad \text{und} \quad \partial_j \phi(x + a_j) = \partial_j \phi(x)$$

für alle $x, x + a_j \in \bar{\Omega}$, definiert.

Das Feld von Operatoren $H(\cdot)$ in Gl. (7.4) lässt sich auch für $k \in \mathbb{C}^2$ definieren und bleibt dennoch eine analytische Familie vom Typ A. Weiterhin stellt man fest, dass diese Familie eine kompakte Resolvente besitzt, da aufgrund der Analytizität die Familie $H(\cdot)$ eine nicht-leere Resolventenmenge besitzt und somit die Existenz der kompakten Resolvente aus [26] VII §2.1 Thm. 2.4, p. 377, folgt.

Auf dieser Grundlage lässt sich nun der in Kapitel 6 beschriebene Formalismus auch auf diese neue analytische Familie anwenden (siehe z.B. Ref. [48]).

Sei $\{e_1, e_2\}$ die kanonische Basis des \mathbb{R}^2 und für einen reziproken Vektor $k \in B$ bezeichnen die Komponenten in dieser Basis mit k_1 bzw. k_2 , d.h.

$$(7.6) \quad k = k_1 e_1 + k_2 e_2.$$

Außerdem führen wir die gängige Notation

$$(7.7) \quad H(k_1, k_2) \equiv H(k_1 e_1 + k_2 e_2) = H(k)$$

ein und stellen fest, dass Thm. 7.1.1 unabhängig von der Koordinatenwahl ist, weshalb wir ohne Einschränkung die Basis des reziproken Gitters als (b_1, b_2) mit

$$(7.8) \quad b_1 = \alpha e_1 \quad \text{und} \quad b_2 = \beta e_1 + e_2$$

wählen können. Um die Notation mit Ref. [41] zu vereinheitlichen, skalieren wir die reziproken Gittervektoren mit $1/2\pi$.

7.2. Der Operator $T_1(k_2, \lambda)$

Für den Beweis führen wir die Eigenwerte am Rande des Spektrums von $H(k)$, $k \in B$ auf Eigenwerte des Operators $T_1(k_2, \lambda)$ zurück, der in diesem Abschnitt vorgestellt wird. Zur Vereinfachung der Notation geben wir ab jetzt alle Energien in Einheiten von

$$(7.9) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{L^2}$$

an, wobei L die Längeneinheit ist, mit der wir die Gittervektoren messen.

Wir definieren das Feld von linearen Operatoren

$$(7.10) \quad T_1(k_2, \lambda) := \begin{pmatrix} 0 & \text{id}_{H_{per}^1(\Omega)} \\ -(H(0, k_2) - \lambda) & 2i\partial_1 \end{pmatrix}$$

auf dem Hilbertraum¹ $H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$ mit $k_2, \lambda \in \mathbb{C}$ und Definitionsgebiet $D(T_2(k_2, \lambda)) = H_{per}^2(\Omega) \oplus H_{per}^1(\Omega)$, wobei die Notation folgendermaßen zu verstehen ist:

Für $u \in H_{per}^2(\Omega)$ und $v \in H_{per}^1(\Omega)$ gilt

$$(7.11) \quad T_1(k_2, \lambda)(u, v) := \begin{pmatrix} 0 & \text{id}_{H_{per}^1(\Omega)} \\ -(H(0, k_2) - \lambda) & 2i\partial_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

¹Dass $H_{per}^1(\Omega)$ ein Hilbertraum ist, sieht man ein, wenn man Ω aufgrund der periodischen Randbedingungen zu einem Torus $\tilde{\mathbb{T}}$ aufwickelt und somit $H_{per}^1(\Omega)$ mit $H^1(\tilde{\mathbb{T}})$ identifiziert.

7.2. Der Operator $T_1(k_2, \lambda)$

$$(7.12) \quad = (v, -(H(0, k_2) - \lambda)u + 2i\partial_1 v)^T$$

Wir tragen zunächst einige Eigenschaften der Operatoren $T_1(k_2, \lambda)$, $\lambda, k_2 \in \mathbb{C}$, zusammen.

LEMMA 7.2.1. (i) Die Operatoren $T_1(k_2, \lambda)$, $\lambda, k_2 \in \mathbb{C}$, sind abgeschlossen und das Feld $T_1(\cdot, \lambda)$ ist eine analytische Familie vom Typ A.

(ii) Angenommen $\lambda \in \rho(H(k))$, dann ist $k_1 \in \rho(T_1(k_2, \lambda))$ und die Resolvente

$$(7.13) \quad \left(T_1(k_2, \lambda) - k_1 \text{id}_{H_{per}^2(\Omega) \oplus H_{per}^1(\Omega)} \right)^{-1}$$

ist kompakt auf $H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$.

(iii) $k_1 \in \sigma(T_1(k_2, \lambda))$ genau dann, wenn $\lambda \in \sigma(H(k))$.

(iv) Für alle $k_2, \lambda \in \mathbb{C}$ ist die Menge $\sigma(T_1(k_2, \lambda)) \subset \mathbb{C}$ diskret und $2\pi\alpha$ -periodisch (siehe Gl. (7.8)).

BEWEIS. (i) Seien $k_1, \lambda \in \mathbb{C}$. Aus Gl. (7.12) erkennen wir sofort, dass $T_1(k_2, \lambda)$ aufgefasst als Operator

$$(7.14) \quad T_1(k_2, \lambda) : H_{per}^2(\Omega) \oplus H_{per}^1(\Omega) \rightarrow H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$$

beschränkt ist. Außerdem können wir für $u \in H_{per}^2(\Omega)$ und $v \in H_{per}^1(\Omega)$ die Norm folgendermaßen abschätzen:

$$(7.15) \quad \begin{aligned} & \|T_1(k_2, \lambda)(u, v)\|^2 \\ &= \|(v, -(H(0, k_2) - \lambda)u + 2i\partial_1 v)^T\|^2 \\ (7.16) \quad &= \|v\|_{H_{per}^1(\Omega)}^2 + \|-(H(0, k_2) - \lambda)u + 2i\partial_1 v\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &= \|v\|_{H_{per}^1(\Omega)}^2 + \|(H(0, k_2) - \lambda)u\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ (7.17) \quad &+ 2\Re \langle -(H(0, k_2) - \lambda)u, 2i\partial_1 v \rangle + \|2\partial_1 v\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Nach Prop. 1.2.9(i) folgt, dass $T_1(k_2, \lambda)$ abgeschlossen ist, da die obige Rechnung zeigt, dass für eine Folge $(u_n, v_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(T_1(k_2, \lambda))$ mit $(u_n, v_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} (u, v) \in H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$ und $T_1(k_2, \lambda)(u_n, v_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y \in H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$ die Konvergenz in der $H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$ -Norm bereits die Konvergenz von $(v_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset H_{per}^1(\Omega)$ und dann auch $(u_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset H_{per}^2(\Omega)$ impliziert. Damit ist $(u, v) \in D(T_1(k_2, \lambda))$ und zusammen mit der Beschränktheit von $T_1(k_2, \lambda)$ folgt man auch $T_1(k_2, \lambda)(u, v) = y$. Als Familie abgeschlossener Operatoren ist $T_1(\cdot, \cdot)$ offensichtlich eine analytische Familie vom Typ A².

(ii) Angenommen $\lambda \in \rho(H(k))$, dann besitzt die Gleichung

$$(7.18) \quad (f, g)^T = (T_1(k_2, \lambda) - k_1 \text{id}_{H_{per}^2(\Omega) \oplus H_{per}^1(\Omega)})(u, v)$$

$$(7.19) \quad = (v - k_1 u, -(H(0, k_2) - \lambda)u + 2i\partial_1 v - k_1 v)^T$$

mit $(f, g) \in H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$ fest die eindeutige Lösung

$$(7.20) \quad v = f + k_1 u,$$

woraus dann auch

$$(7.21) \quad g = -(H(0, k_2) - \lambda)u + 2i\partial_1 v - k_1 v,$$

$$(7.22) \quad g = -(H(0, k_2) - \lambda)u + 2i\partial_1(f + k_1 u) - k_1(f + k_1 u),$$

$$(7.23) \quad g + k_1 f - 2i\partial_1 f = -(H(0, k_2) - \lambda)u + 2ik_1 \partial_1 u - k_1^2 u,$$

$$(7.24) \quad g + k_1 f - 2i\partial_1 f = -(H(k_1, k_2) - \lambda)u,$$

²Man muss noch die Bedingung $\rho(T_1(k_2, \lambda)) \neq \emptyset$ prüfen, aber dies ist aufgrund von Thm. 6.0.3 und Punkt (iii) sofort gegeben.

$$(7.25) \quad u = (H(k) - \lambda)^{-1} (2i\partial_1 f - k_1 f - g)$$

folgt. Dies zeigt, dass $\lambda \in \rho(H(k))$ auch $k_1 \in \rho(T_1(k_2, \lambda))$ impliziert.

Für die Kompaktheit der Resolvente bestimmen wir die Lösung (u, v) zunächst explizit aus Gleichung (7.19) und mittels der gefundenen Lösung, i.e.

$$(7.26) \quad (T_1(k_2, \lambda) - k_1 \text{id}_{H_{per}^2(\Omega) \oplus H_{per}^1(\Omega)})^{-1} (f, g)^T = (u, v)^T$$

$$(7.27) \quad = ((H(k) - \lambda)^{-1} (2i\partial_1 f - k_1 f - g), f + k_1 u)^T$$

$$(7.28) \quad = ((H(k) - \lambda)^{-1} (2i\partial_1 f - k_1 f - g)^T, f + k_1 ((H(k) - \lambda)^{-1} (2i\partial_1 f - k_1 f - g)))$$

$$(7.29) \quad = (0, f)^T + (H(k) - \lambda)^{-1} (2i\partial_1 f - k_1 f - g, k_1 (2i\partial_1 f - k_1 f - g))^T$$

$$(7.30) \quad = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k_1 \end{pmatrix} (H(k) - \lambda)^{-1} (2i\partial_1 f - k_1 f - g, 2i\partial_1 f - k_1 f - g)^T$$

$$(7.31) \quad = \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k_1 \end{pmatrix} (H(k) - \lambda)^{-1} \begin{pmatrix} 2i\partial_1 - k_1 & -1 \\ 2i\partial_1 - k_1 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}.$$

Der erste Operator in Gl. (7.31) ist effektiv die Einbettung $H_{per}^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$, die nach dem Theorem von Rellich-Kondrachov (siehe z.B. Ref. [36] Satz 6.19) kompakt ist. Weiterhin sind die drei übrigen Operatoren von Gl. (7.31) zumindest stetig, wobei die Resolvente $(H(k) - \lambda)^{-1}$ als Operator $(H(k) - \lambda)^{-1} : L^2(\Omega) \rightarrow H_{per}^2(\Omega)$ bereits stetig ist (siehe Thm. 6.0.2). Entsprechend ist die Resolvente als Operator $(H(k) - \lambda)^{-1} : L^2(\Omega) \rightarrow H_{per}^1(\Omega)$ eine Verknüpfung des stetigen Operators nach $H_{per}^2(\Omega)$ verknüpft mit Einbettung $H_{per}^2(\Omega) \hookrightarrow H_{per}^1(\Omega)$, welche kompakt ist (siehe z.B. Ref. [34] Chap. 4 Prop. 3.4). Damit ist die gesamte rechte Seite ein kompakter Operator und somit auch die Resolvente auf der linken Seite.

(iii) " \Rightarrow " : Dieser Teil der Aussage ist bereits in (ii) enthalten.

" \Leftarrow " : Angenommen es existiert ein $u \in H_{per}^2(\Omega)$ zu $k \in \Omega$ mit

$$(7.32) \quad H(k)u = \lambda u$$

und somit auch

$$(7.33) \quad T_1(k_2, \lambda)(u, k_1 u) = \begin{pmatrix} 0 & \text{id}_{H_{per}^1(\Omega)} \\ -(H(0, k_2) - \lambda) & 2i\partial_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ k_1 u \end{pmatrix}$$

$$(7.34) \quad = \begin{pmatrix} k_1 u \\ -(H(0, k_2) - \lambda)u + 2ik_1 \partial_1 u + (k_1^2 u - k_1^2 u) \end{pmatrix}$$

$$(7.35) \quad = \begin{pmatrix} k_1 u \\ -(H(k) - \lambda)u + k_1^2 u \end{pmatrix}$$

$$(7.36) \quad = k_1 \begin{pmatrix} u \\ k_1 u \end{pmatrix}.$$

Damit ist $k_1 \in \sigma(T_1(k_2, \lambda))$.

(iv) Der Beweis startet mit Lemma 1 aus [44], welches besagt, dass Bandfunktionen als Funktionen von k_1 oder k_2 nicht konstant sind, sodass zu festen λ , $k_2 \in \mathbb{C}$ die Nullstellen der nicht-konstanten analytischen Funktionen $\epsilon_j(\cdot, k_2) - \lambda$ eine diskrete Menge in \mathbb{C} bilden, d.h.

$$(7.37) \quad \{k_1 | \lambda \in \sigma(H(k))\} = \{k_1 | k_1 \in \sigma(T_1(k_2, \lambda))\} \subset \mathbb{C}$$

ist diskret, wobei wir (iii) verwendet haben.

Die $2\pi\alpha$ -Periodizität folgt direkt aus der unitären Äquivalenz von $H(k)$ und $H(k + b_1) = H(k_1 + 2\pi\alpha, k_2)$ (vgl. Thm. 5.3.3(ii)).

□

Das nächste Lemma stellt nun einen Zusammenhang zwischen den Extrema der Bandfunktionen und der Multiplizität eines Eigenwerts der Operatorfamilie T_1 her.

LEMMA 7.2.2. *Sei ϵ_{\pm} ein Bandminimum/-maximum einer Bandfunktion ϵ_j , $j \in \mathbb{N}$, wobei das Extremum bei $q \in \mathbb{R}^2$ angenommen werden soll. Dann ist $q_1 \in \sigma(T_1(q_2, \epsilon_{\pm}))$ ein entarteter Eigenwert.*

BEWEIS. Nach Lemma 7.2.1(iii) ist $q_1 \in \sigma(T_1(q_2, \epsilon_{\pm}))$. Da das Spektrum von $H(q)$ diskret ist, gibt es ein $\epsilon > 0$, sodass

$$(7.38) \quad B_{\epsilon}(q_1) \cap \sigma(T_1(q_2, \epsilon_{\pm})) = \{q_1\},$$

d.h. im Spektrum befindet sich sonst kein anderer Eigenwert. Wir definieren den Rieszprojektor

$$(7.39) \quad P(q_2, \lambda) := -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial B_{\epsilon}(q_1)} (T_1(q_2, \lambda) - \mu)^{-1} d\mu$$

Aufgrund der Analytizität von $T_1(q_2, \cdot)$ existiert ein $\delta > 0$ derart, dass der Rieszprojektor $P(q_2, \cdot)$ stetig ist in der Umgebung $B_{\delta}(\epsilon_{\pm})$ (vgl. Beweis von Thm. 6.0.3). Wir verwenden wieder Lemma 1 aus [44], welches besagt, dass $\epsilon_j(\cdot, q_2)$ nicht konstant sein kann. Daraus folgert man aufgrund der Stetigkeit und der Extremaleigenschaft von $\epsilon_{\pm} = \epsilon_j(q)$, dass, wenn δ klein genug gewählt wird, die Gleichung

$$(7.40) \quad \epsilon_j(k, q_2) = \epsilon_{\pm} \mp \delta, \quad k \in \mathbb{R},$$

mindestens zwei Lösungen besitzt. Damit ist dann wegen Lem. 7.2.1(iii) insbesondere die Dimension des Bildes der Rieszprojektion $P(q_2, \epsilon_{\pm} \mp \delta)$ größer gleich zwei und aufgrund der Stetigkeit des Projektors folgt dann auch

$$(7.41) \quad \dim \operatorname{im}(P(q_2, \epsilon_{\pm})) \geq 2.$$

□

THEOREM 7.2.3. *Für $\lambda \in \mathbb{R}$ ist die Menge*

$$\{k_2 \in \mathbb{R} \mid T_1(k_2, \lambda) \text{ hat mindestens einen reellen entarteten Eigenwert}\}$$

diskret.

Damit sind wir bereit den Beweis von der Hauptaussage 7.1.1 auszuführen.

BEWEIS VON 7.1.1. Sei $j \in \mathbb{N}$ fest gewählt und ϵ_{\pm} ein Maximum/Minimum der Bandfunktion ϵ_j . Nach Thm. 7.2.3 (für die spezielle Wahl $\lambda = \epsilon_{\pm}$) und Lem. 7.2.2 ist für festes $k_1 \in \mathbb{R}$ die Menge

$$\{k_2 \in \mathbb{R} \mid \epsilon_j(k) = \epsilon_{\pm}\}$$

diskret. Mit Lemma 7.2.1(iii) und (iv) folgert man schließlich, dass

$$\{k \in B \mid \epsilon_j(k) = \epsilon_{\pm, j}\} \subset \mathbb{R}^2$$

diskret ist. Da B zudem beschränkt ist, folgt auch die Endlichkeit der Menge. □

7.3. Beweise der Hilfsaussagen

Die folgende Bemerkung aus der Algebra (siehe z.B. Ref. [49] §5.9) wird später nützlich sein.

BEMERKUNG 7.3.1. Sei

$$p(z) = \sum_{i=0}^n a_i z^i$$

ein Polynom in $\mathbb{C}[X]$ mit $a_n = 1$ und Nullstellen z_1, \dots, z_n , dann ist die Diskriminante

$$(7.42) \quad \Delta(p) := \prod_{1 \leq i < j \leq n} (z_i - z_j)^2$$

ein multivariantes Polynom in den Variablen a_0, \dots, a_{n-1} und die Diskriminante $\Delta(p)$ ist Null genau dann, wenn es eine Nullstelle mit Vielfachheit größer gleich Zwei gibt.

LEMMA 7.3.2. *Sei $\mathcal{C} \subset \mathbb{C}$ eine einfache, stückweise glatte, geschlossene Kurve und $T(\cdot)$ eine analytische Familie vom Typ A über dem Hilbertraum \mathcal{H} auf einem einfach zusammenhängenden Gebiet $\mathcal{D} \subset \mathbb{C}$. Angenommen, dass das Spektrum von $T(z)$, $z \in \mathcal{D}$, im Inneren von \mathcal{C} diskret und endlich ist und $\sigma(T(z)) \cap \mathcal{C} = \emptyset$ gilt. Dann ist die Menge*

(7.43) $\{z \in \mathcal{D} \mid T(z) \text{ hat mind. einen entarteten Eigenwert im Inneren von } \mathcal{C}\} \subset \mathcal{D}$
die Nullstellenmenge einer analytischen Funktion auf \mathcal{D} und somit entweder identisch mit \mathcal{D} oder diskret³.

BEWEIS. Wir betrachten zu $z \in \mathcal{D}$ den Riesz-Projektor

$$(7.44) \quad P(z) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} (T(z) - \mu)^{-1} d\mu,$$

wobei nach Voraussetzung $\sigma(T(z)) \cap \mathcal{C} = \emptyset$, $z \in \mathcal{D}$, keine Bandfunktion⁴ die Kontur \mathcal{C} kreuzt und somit auch $n := \dim \operatorname{im} P(z)$ konstant ist. Weiterhin führt die Voraussetzung, dass das Spektrum jeder Faser $T(z)$ in \mathcal{C} endlich ist, dazu, dass $n < \infty$.

Sei $z_0 \in \mathcal{D}$ fest gewählt.

Nach analytischer Störungstheorie (siehe Ref. [26] §VII.1.3 und §II.4.2) existieren analytische Felder von Transformation $U(\cdot)$, $U(\cdot)^{-1} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$, sodass

$$(7.45) \quad P(z) = U(z)P(z_0)U(z)^{-1}.$$

Wir definieren nun

$$(7.46) \quad T_0(z) := U(z)^{-1}T(z)U(z)|_{\operatorname{im} P(z_0)},$$

sodass es sich bei $T_0(\cdot) : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{L}(\operatorname{im} P(z_0))$ um eine analytische Familie handelt, welche dieselben Eigenwerte und Entartungen hat wie $T(z)|_{\operatorname{im} P(z)}$.

Das Polynom

$$(7.47) \quad p_z(\mu) := (-1)^n \det(T_0(z) - \mu)$$

ist das charakteristische Polynom von $T_0(z)$ und besitzt als Polynom in z aufgefasst analytische Koeffizienten über \mathcal{D} . Somit ist die Diskriminante $\Delta(p_z)$ ebenfalls eine analytische Funktion in \mathcal{D} nach Bem. 7.3.1 und sie ist identisch Null genau dann, wenn $T_0(z)$ bzw. $T(z)$ im Inneren von \mathbb{C} einen entarteten Eigenwert besitzt. \square

Für den allgemeinen Fall $k = k_1 e_1 + k_2 e_2 \in \mathbb{C}^2$ führen wir die folgende Darstellung ein:

$$(7.48) \quad k_1 = r_1 + il_1 \quad \text{und} \quad k_2 = r_2 + il_2,$$

wobei r_1, r_2, l_1 und l_2 reell sind.

³Im Detail: Angenommen es existieren unendlich viele Nullstellen der analytischen Funktion mit einem Häufungspunkt in \mathcal{D} , dann folgt bereits nach dem Identitätssatz für holomorphe Funktionen, dass die analytische Funktion identisch Null ist.

⁴Die Bandstruktur, die wir für den speziellen Fall eines Kristall-Hamiltonoperators hergeleitet haben, beruhte auf der Tatsache, dass sich dieser Operator in eine analytische Familie vom Typ A zerlegen ließ.

7.3. Beweise der Hilfsaussagen

Weiterhin wollen wir von nun an ohne Einschränkung $\lambda = 0$ in der Definition von $T_1(k_2, \lambda)$ wählen, da dies beispielsweise durch Verschieben des Potentials V immer möglich ist. Wir führen außerdem die Notation

$$(7.49) \quad T_1(k_2) \equiv T_1(k_2, 0)$$

ein. Die folgenden zwei Sätze sind die Hauptzutaten, um Theorem 7.2.3 zu beweisen.

THEOREM 7.3.3. *Sei $\delta > 0$, dann existieren Konstanten $C_V \in \mathbb{R}$ und $C_{V,\delta} \in 2\pi\mathbb{Z}$, sodass der Hamilton-Operator $H(k)$ invertierbar ist und die Abschätzung*

$$(7.50) \quad \|H(k)^{-1}\| \leq \frac{C_V}{|l_1|\delta^2}$$

unter der Voraussetzung $\text{dist}(r_2, 2\pi\mathbb{Z}) \geq \delta$, $l_1 \in 2\pi\mathbb{Z}$ und $|l_1| \geq C_{V,\delta}$ erfüllt ist.

Folglich ist mit Lem. 7.2.1(iii) der Schnitt von $\{(r, \pm C_{V,\delta}) \mid r \in \mathbb{R}\} \subset \mathbb{C}^2$ mit $\sigma(T_1(k_2))$ leer, falls $r_2 \notin 2\pi\mathbb{Z}$.

THEOREM 7.3.4. *Es existieren $l_V \in 2\pi\mathbb{Z}$, sodass für alle $n \in 2\pi\mathbb{Z}$ gilt, dass das Spektrum von $T_1(k_2)$ für $k_2 = \pi/2 + n + i(\pi/2 + l_V)\alpha$ einfach ist.*

Wir schieben nun den Beweis von Thm. 7.2.3 ein, bevor wir mit den Beweisen der zwei vorangegangenen Theoreme fortfahren.

BEWEIS VON 7.2.3. Angenommen die Aussage wäre falsch, d.h. die Menge

$$(7.51) \quad \{k_2 \in \mathbb{R} \mid T_1(k_2) \text{ hat mindestens einen reellen entarteten Eigenwert}\}$$

besitzt einen Häufungspunkt $k_2^{(0)}$. Wir unterscheiden nun zwei Fälle:

Fall 1 ($\text{dist}(k_2^{(0)}, 2\pi\mathbb{Z}) > 0$): Wir setzen $\delta := \min(\pi/2, \text{dist}(k_2^{(0)}, 2\pi\mathbb{Z})) \leq \pi/2$, dann existiert genau ein $n \in 2\pi\mathbb{Z}$, sodass $k_2^{(0)} \in [n + \delta, n + 2\pi - \delta]$, da nach Voraussetzung $\text{dist}(k_2^{(0)}, 2\pi\mathbb{Z}) > 0$ (siehe Abb. 10). Sei nun C_0 der gerade Pfad von $k_2^{(0)}$ über $\pi/2 + n$

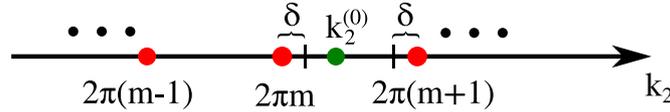


ABBILDUNG 10. Veranschaulichung der Eindeutigkeit von $n = 2\pi m$ mit $m \in \mathbb{Z}$ im Beweis von Thm. 7.2.3.

nach $k_2^{(1)} := \pi/2 + n + i(\pi/2 + l_V)\alpha$ aus Thm. 7.3.4. Anhand von Abb. 10 kann man sich außerdem klar machen, dass die Punkte $k_2 \in C_0$ die Bedingung $\text{dist}(r_2, 2\pi\mathbb{Z}) \geq \delta$ aus Theorem 7.3.3 erfüllen. Wir betrachten nun die Eigenwerte $k_1 \in T_1(k_2)$, die $|l_1| < C_{V,\delta}$ erfüllen, wobei $C_{V,\delta}$ die Konstante aus Thm. 7.3.3 ist. Nach Lem. 7.2.1(iv) handelt es sich hierbei um eine diskrete $2\pi\alpha$ -periodische Menge. Somit gibt es für alle $k_2 \in C_0$ einen Punkt $r(k_2) \in \mathbb{R}$, der nicht Realteil irgendeines Eigenwerts von $T_1(k_2)$ ist und aufgrund von Stetigkeit gilt dies auch in einer kleinen Umgebungen dieser Punkte k_1 . Als beschränkte Menge in \mathbb{C} können wir daher C_0 durch endlich viele dieser Umgebungen D_j , $j = 1, \dots, p$, überdecken, sodass $k_2^{(0)} \in D_1$ und $k_2^{(1)} \in D_p$, wobei wir die entsprechenden reellen Zahlen $r(k_2)$ mit R_j notieren.

Zu jedem $j \in \{1, \dots, p\}$ definieren wir mit C_j den Rand des Rechtecks

$$(7.52) \quad R_j < r_1 < R_j + 2\pi\alpha, \quad -C_{V,\delta} < l_1 < C_{V,\delta}.$$

Diese Konstruktion kann man wie folgt verstehen. Aufgrund der Periodizität der Eigenwerte von $T_1(k_2)$ schränkt man den Realteil auf eine Periode ein. Weiterhin sorgt die Einschränkung des Imaginärteils von k_1 dafür, dass keine Bandfunktion aus dem

Rechteck herauslaufen kann nach Thm. 7.3.3.

Wir wollen nun Lem. 7.3.2 auf die Gebiete D_j und Konturen \mathcal{C}_j anwenden und prüfen dazu die Voraussetzungen. Dass $\sigma(T(k_2)) \cap \mathcal{C}_j = \emptyset$, $k_2 \in D_j$, ist, folgt aus der Konstruktion von R_j und dem zweiten Teil von Thm. 7.3.3. Weiterhin folgt, dass $\sigma(T(k_2))$ innerhalb von \mathcal{C}_j diskret und endlich ist aus Lem. 7.2.1(iv) und der Analytizität der Bandfunktionen $\epsilon_i(\cdot, k_2)$ und Lem. 7.2.1(iii), denn nach dem Identitätssatz für holomorphe Funktionen kann die Nullstellenmenge der nicht-trivialen Bandfunktionen keinen Häufungspunkt haben. Lem. 7.3.2 liefert nun, dass die Mengen

$$(7.53) \quad \{k_2 \in D_j \mid T_1(k_2) \text{ hat einen entarteten Eigenwert im Inneren von } \mathcal{C}_j\} \subset D_j$$

entweder identisch D_j oder diskret sind.

Nach Thm. 7.3.4 ist das Spektrum von $T_1(k_2^{(1)})$ einfach, sodass die Menge

$$(7.54) \quad \{k_2 \in D_p \mid T_1(k_2) \text{ hat einen entarteten Eigenwert im Inneren von } \mathcal{C}_p\} \subset D_p$$

diskret und nicht identisch D_p ist. Aufgrund von Analytizität gilt dies sogar in jeder Umgebung D_1, \dots, D_p . Da nun der Häufungspunkt $k_2^{(0)} \in D_1$ ist, kann dies für die Umgebung D_1 nicht stimmen. Widerspruch.

Fall 2 ($k_2^{(0)} \in 2\pi\mathbb{Z}$): Ausgehend von Lem. 7.2.1(iv) folgern wir zunächst, dass das reelle Spektrum von $T_1(k_2^{(0)})$ diskret und $2\pi\alpha$ -periodisch ist. Sei außerdem \mathcal{C} eine glatte Kontur, die die reellen Eigenwerte von $T_1(k_2^{(0)})$ innerhalb einer Periode einschließt und sonst keine weiteren. Weiterhin sei D_0 eine kleine Umgebung von $k_2^{(0)}$ so gewählt, dass die in \mathcal{C} eingeschlossenen Eigenwerte aufgrund von Analytizität auch für diese Werte von k_2 in der Kontur \mathcal{C} verbleiben.

Durch Anwendung von Lem. 7.3.2 erfahren wir, dass die Menge

$$(7.55) \quad \{k_2 \in D_0 \mid T_1(k_2) \text{ hat einen entarteten Eigenwert im Inneren von } \mathcal{C}\} \subset D_0$$

entweder diskret oder ganz D_0 ist. Da $k_2^{(0)}$ ein Häufungspunkt ist, muss die Menge ganz D_0 sein, sodass wir einen weiteren Punkt $\tilde{k}_2^{(0)} \in \mathbb{R} \setminus 2\pi\mathbb{Z}$ finden können, der dieselben Eigenschaft hat. Damit sind wir wieder beim ersten Fall. \square

Bevor wir uns den Beweisen von Thm. 7.3.3 und 7.3.4 widmen können, müssen wir uns noch einiger Notation zu dem nicht-wechselwirkenden Fall, d.h. $H(k) = H_0(k)$, zuwenden. Nach Gl. (6.5) und (6.11) sind die Eigenfunktionen $\phi_{\tilde{m},k}^{(0)}$ gegeben durch

$$(7.56) \quad \phi_{\tilde{m},k}^{(0)}(x) = e^{-ik \cdot x} \psi_{\tilde{m},k}^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{|B|}} \exp [i(2\pi\tilde{m} \cdot M^{-1}) \cdot x]$$

und die dazugehörigen Eigenwerte sind nach (6.10)

$$(7.57) \quad \epsilon_{\tilde{m}}^{(0)}(k) = |(2\pi\tilde{m} \cdot M^{-1} + k)|^2.$$

Mithilfe der Definition der reziproken Gittervektoren (siehe Gl. (4.2)) lässt sich dies umschreiben zu

$$(7.58) \quad \phi_{\tilde{m},k}^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{|B|}} \exp [i\tilde{m} \cdot (b_1, b_2)^T \cdot x] = \frac{1}{\sqrt{|B|}} \exp [i\tilde{m}' \cdot x],$$

wobei $m' = (2\pi\tilde{m}_1)(b_1/2\pi) + (2\pi\tilde{m}_2)(b_2/2\pi) =: m_1(b_1/2\pi) + m_2(b_2/2\pi)$. Für die spezielle Wahl der reziproken Gitterbasis aus Gl. (7.8) folgt dann

$$(7.59) \quad H_0(k) \phi_{m,k}^{(0)} = \underbrace{\left[(\alpha m_1 + \beta m_2 + k_1)^2 + (m_2 + k_2)^2 \right]}_{=q_m^+(k)q_m^-(k)} \phi_{m,k}^{(0)}$$

7.3. Beweise der Hilfsaussagen

mit

$$(7.60) \quad q_m^\pm(k) := \alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 \mp l_2 + i(l_1 \pm m_2 \pm r_2).$$

Zu diesen Funktionen definieren⁵ wir die dazugehörigen Operatoren $Q^\pm(k)$, sodass

$$(7.61) \quad H_0(k) = Q^+(k)Q^-(k).$$

BEWEIS VON 7.3.3. Angenommen⁶ $\delta = \text{dist}(r_2, 2\pi\mathbb{Z}) > 0$. Dann ist nach Voraussetzung $l_1 + m_2 \in 2\pi\mathbb{Z}$, sodass $|q_m^\pm(k)| \geq |\Re q_m^\pm(k)| \geq \delta$. Simples Nachrechnen zeigt zudem $\Im q_m^+(k) + \Im q_m^-(k) = 2l_1$, woraus folgt, dass entweder $|q_m^+(k)| \geq |l_1|$ oder $|q_m^-(k)| \geq |l_1|$. Diese Abschätzungen zusammen ergeben

$$(7.62) \quad |q_m^+(k)||q_m^-(k)| \geq |l_1|\delta,$$

sodass auch

$$(7.63) \quad \|H_0(k)^{-1}\| \leq \frac{1}{|l_1|\delta} \quad \text{und} \quad \|Q^\pm(k)\| \leq \frac{1}{\delta}$$

folgt. Dies ist der Beweis für den Spezialfall $V = 0$.

Aus der Neumannreihen-Darstellung von $H(k)^{-1}$ in Gl. (5.106) erhält man weiterhin die Abschätzung

$$(7.64) \quad \|H(k)^{-1}\| \leq \|H_0(k)^{-1}\| \sum_{i=0}^{\infty} \left(\|V\|_{L^\infty(\Omega)} \|H_0(k)^{-1}\| \right)^i$$

$$(7.65) \quad \leq \frac{1}{|l_1|\delta^2} \frac{\delta}{1 - \|V\|_{L^\infty(\Omega)}/(|l_1|\delta)},$$

wobei $|l_1| > C_{V,\delta}$ für eine hinreichend große Konstante $C_{V,\delta} \in 2\pi\mathbb{Z}$ genügt, um die Konvergenz der Reihe sicherzustellen. \square

Nun stehen ein paar Vorbereitungen an, die für den Beweis von Thm. 7.3.4 notwendig sind. Hierzu wird für k_2 die Form

$$(7.66) \quad k_2 = \pi/2 + n + i(\pi/2 + l_V)\alpha$$

angenommen, wobei $l_V, n \in 2\pi\mathbb{Z}$. Wir definieren weiterhin die Menge

$$(7.67) \quad \Sigma_{n,l_V} := \{k_1 \in \mathbb{C} \mid h_m(k_1, k_2) = 0 \text{ für mindestens ein Paar } m_1, m_2 \in 2\pi\mathbb{Z}\}.$$

Damit beinhaltet Σ_{n,l_V} diejenigen k_1 -Punkte, für die $H_0(k_1, k_2)$ nicht invertierbar ist. Diese können wir mittels Gl. (7.59) und (7.60) explizit bestimmen zu

$$(7.68) \quad 0 = q_m^+(k)q_m^-(k) \\ = (\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 - l_2 + i(l_1 + m_2 + r_2)) \times \\ (7.69) \quad \times (\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 + l_2 + i(l_1 - m_2 - r_2)) \\ = (\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 - l_2)(\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 + l_2) \\ - (l_1 + m_2 + r_2)(l_1 - m_2 - r_2) \\ + i[(l_1 + m_2 + r_2)(\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 + l_2) \\ (7.70) \quad + (\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 - l_2)(l_1 - m_2 - r_2)].$$

Real- und Imaginärteil können nur dann gleichzeitig verschwinden, wenn k_1 Element der Menge

$$(7.71) \quad \{k_1 = r_1 + il_1 \mid r_1 = \pm l_2 - \alpha m_1 - \beta m_2, l_1 = \mp(m_2 + r_2), m_1, m_2 \in 2\pi\mathbb{Z}\}.$$

⁵Dies gelingt in einer eindeutigen Weise, da die Blochfunktionen $\phi_{m,k}^{(0)}$ eine Basis von $L^2(\Omega)$ bilden.

⁶Im Falle, dass $\delta < \text{dist}(r_2, 2\pi\mathbb{Z})$ ergibt sich die Aussage insbesondere.

Für die spezielle Form von k_2 (siehe Gl. (7.66)) können wir die Menge umschreiben in
 (7.72) $\{r_1 + il_1 \mid r_1 = \pm\alpha\pi/2 + (\pm l_V - m_1)\alpha - \beta m_2, l_1 = \mp(\pi/2 + n + m_2), m_{1/2} \in 2\pi\mathbb{Z}\}$.

Da $l_V \in 2\pi\mathbb{Z}$, kann man m_1 auch durch $\pm l_V - m_1$ ersetzen, woraus folgt, dass

$$(7.73) \quad \Sigma_{n, l_V} = \Sigma_n.$$

Wir machen nun einige Beobachtungen zu den Mengen Σ_n .

Zunächst stellen wir fest, dass unterschiedliche Werte von (m_1, m_2) auch zu unterschiedlichen Punkten k_1 führen, da m_2 eindeutig durch den Wert von l_1 festgelegt ist und folglich auch m_1 durch r_1 , m_2 fest bestimmt ist.

An der Struktur von l_1 in Gl. (7.72) lesen wir weiterhin ab, dass Σ_n auf horizontalen Linien in der komplexen k_1 -Ebene beschrieben durch $\Im k_1 \in \pi/2 + \pi\mathbb{Z}$ liegt. Auf einer solchen fest gewählten Linie – dies legt als den Wert m_2 fest – befinden sich die Punkte von Σ_n in einem gleich Abstand von $2\pi\alpha$ verteilt.

Für den Beweis benötigt man außerdem die Menge

$$(7.74) \quad G_n := (\mathbb{R} + i\pi\mathbb{Z}) \cup \bigcup_{z \in \Sigma_n} (z + \pi\alpha + i[-\pi/2, \pi/2]).$$

Bei dieser Menge handelt es sich um horizontale Linien, die mittig zwischen den horizontalen Punkten aus Σ_n liegen, und vertikalen Linien der Höhe π , die mittig zwischen zwei benachbarten Punkten aus Σ_n mit demselben Imaginärteil stehen. Demnach sieht die Menge G_n wie eine Ziegelmauer aus, in der die Größe eines Rechtecks (Ziegelsteins) dadurch festgelegt ist, dass in der Mitte genau ein Punkt von Σ_n liegt und alle Ziegel ohne Zwischenraum aneinandergrenzen.

LEMMA 7.3.5. *Sei $k_1 \in G_n$ und $k_2 = \pi/2 + n + i(\pi/2 + l_V)\alpha$ für $l_V, n \in 2\pi\mathbb{Z}$. Dann gilt die Abschätzung*

$$(7.75) \quad |q_m^+(k)q_m^-(k)| \geq C|l_V|$$

für alle $m_1, m_2 \in 2\pi\mathbb{Z}$ und eine Konstante $C \in \mathbb{R}^+$.

BEWEIS. Wir rechnen zunächst aus Gl. (7.60) nach, dass

$$(7.76) \quad |q_m^+(k)| + |q_m^-(k)| \geq |\Re q_m^+(k) - \Re q_m^-(k)| = 2|l_2| = |\alpha|\pi + 2l_V \geq \tilde{C}|l_V|,$$

wobei $\tilde{C} = |\alpha|$ bereits ausreicht. Demnach gilt entweder

$$(7.77) \quad |q_m^+(k)| \geq \tilde{C}|l_V|/2 \quad \text{oder} \quad |q_m^-(k)| \geq \tilde{C}|l_V|/2.$$

Bei genauerer Betrachtung stellen wir fest, dass

$$(7.78) \quad |q_m^+(k)| = |\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 - l_2| + |l_1 + m_2 + r_2|$$

$$(7.79) \quad = |r_1 - (l_2 - \alpha m_1 - \beta m_2)| + |l_1 - (-m_2 - r_2)|$$

$$(7.80) \quad = \|k_1 - q_1\|_1,$$

$$(7.81) \quad |q_m^-(k)| = |\alpha m_1 + \beta m_2 + r_1 + l_2| + |l_1 - m_2 - r_2|$$

$$(7.82) \quad = |r_1 - (-l_2 - \alpha m_1 - \beta m_2)| + |l_1 - (m_2 + r_2)|$$

$$(7.83) \quad = \|k_1 - \tilde{q}_1\|_1,$$

wobei $q_1, \tilde{q}_1 \in \Sigma_n$. Damit können wir andererseits die Abschätzung

$$(7.84) \quad |q_m^\pm(k)| \geq \text{dist}(k_1, \Sigma_n) \geq \text{dist}(G_n, \Sigma_n) = \min(\pi/2, \pi\alpha)$$

ableiten, wobei die letzte Gleichheit aus der Konstruktion von G_n folgt. Beide Abschätzungen zusammen liefern

$$(7.85) \quad |q^+(k)q^-(k)| \geq \min(\pi/2, \pi\alpha)\tilde{C}|l_V|/2 =: C|l_V|.$$

□

7.3. Beweise der Hilfsaussagen

KOROLLAR 7.3.6. *Unter den Voraussetzungen von Lem. 7.3.5 existieren Konstanten $L_V > 0$, sodass unter der Voraussetzung $|l_V| > L_V$ der Operator $H(k)$ invertierbar ist und die Abschätzung*

$$(7.86) \quad \|H(k)^{-1}\| \leq \frac{C_V}{|l_V|}$$

gilt.

BEWEIS. Wir starten mit der Abschätzung aus Gl. (7.65),

$$(7.87) \quad \|H(k)^{-1}\| \leq \|H_0(k)^{-1}\| \sum_{i=0}^{\infty} \left(\|V\|_{L^\infty(\Omega)} \|H_0(k)^{-1}\| \right)^i,$$

und kombinieren diese mit Lem. 7.3.5, um

$$(7.88) \quad \|H(k)^{-1}\| \leq \frac{1}{C|l_V|} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\|V\|_{L^\infty(\Omega)} \frac{1}{C|l_V|} \right)^i$$

zu erhalten. Nun muss die Konstante L_V so gewählt werden, dass die Reihe konvergiert. Wir bezeichnen den so bestimmten minimal zulässigen Wert von l_V mit $l_V^{min} \in 2\pi\mathbb{Z}$ und erhalten die finale Abschätzung

$$(7.89) \quad \|H(k)^{-1}\| \leq \frac{1}{|l_V|} \underbrace{\frac{1}{C} \frac{1}{1 - \|V\|_{L^\infty(\Omega)} \frac{1}{C|l_V^{min}|}}}_{=: C_V}.$$

□

BEWEIS VON 7.3.4. Sei $T_\mu(k_2)$ der Operator $T_1(k_2)$ bei dem das Potential V durch μV ersetzt wurde, sodass $T_\mu(k)$ eine 1-Parameter Familie ist, die den freien Operator $T_0(k_2)$ mit dem voll wechselwirkenden Operator $T_1(k_2)$ verbindet. Da Σ_n so definiert wurde, dass $H_0(k)$ nicht invertierbar ist, gilt nach Lem. 7.2.1(iii) $\sigma(T_0(k_2)) = \Sigma_n$. Der Eigenraum zu k_1 lässt sich aus

$$(7.90) \quad 0 = (T_0(k_2) - k_1) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

$$(7.91) \quad = \begin{pmatrix} -k_1 & \text{id} \\ -H_0(0, k_2) & 2i\partial_1 - k_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

$$(7.92) \quad = \begin{pmatrix} -k_1 v_1 + v_2 \\ -H_0(0, k_2) v_1 + 2i\partial_1 v_2 - k_1 v_2 \end{pmatrix}$$

leicht bestimmen, da die erste Zeile $v_2 = k_1 v_1$ festlegt und die zweite Zeile damit zu

$$(7.93) \quad 0 = -H_0(0, k_2) v_1 + 2ik_1 \partial_1 v_1 - k_1^2 v_1 = -H_0(k) v_1$$

reduziert. Diese Gleichung können wir durch die Blochwellen in Gl. (7.58) lösen, wobei die Eigenenergien $q_m^+(k) q_m^-(k)$ gerade Null sein muss, d.h. die Quantenzahlen m sind durch die Menge Σ_n (siehe (7.72)) festgelegt:

$$(7.94) \quad \text{Eig}(T_0(k_2), k_1) = \left\langle \begin{pmatrix} e^{im \cdot x} \\ k_1 e^{im \cdot x} \end{pmatrix} \right\rangle.$$

Nach (7.72) gehören aufgrund der Vorzeichenwahl zu jedem Wert von m zwei verschiedene Werte $k_1 \in \Sigma_n$, sodass wir durch Linearkombination von Eigenfunktionen zu festem m aber unterschiedlichem k_1 den Eigenraum auch durch

$$(7.95) \quad \left\langle \begin{pmatrix} e^{im \cdot x} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ e^{im \cdot x} \end{pmatrix} \right\rangle$$

aufspannen können. Also spannt die Menge aller Eigenvektoren ganz $H_{per}^1(\Omega) \oplus L^2(\Omega)$ auf, sodass das Spektrum von $T_0(k_2)$ einfach ist.

Um nun von $T_0(k_2)$ auf $T_1(k_2)$ schließen zu können, betrachten wir den Riesz-Projektor

$$(7.96) \quad P_\mu = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_n} (T_\mu(k_2) - \lambda)^{-1} d\lambda,$$

wobei die Kontur C_n den Rand eines Rechtecks (Ziegels) von G_n ablaufen soll. Für $\mu = 0$ haben wir eben gefolgert, dass C_n genau einen einfachen Eigenwert einschließt und dass die Dimension des Bildes von P_0 gerade Eins ist. Will man nun durch stetiges Vergrößern von $\mu = 0$ nach $\mu = 1$ erreichen, dass $\dim \text{im} P_\mu$ größer wird, so gibt es nur die Möglichkeit, dass ein Eigenwert in einem anderen Rechteck nach C_n hineindringt. Dies ist jedoch nach Kor. 7.3.6 nicht möglich, da im Falle, dass $k_1 \in C_n$ und k_2 wie in den Voraussetzungen zum Theorem automatisch⁷ $H(k) - 0$ invertierbar ist, sodass $k_1 \notin \sigma(T_1(k_2))$. \square

BEISPIEL 7.3.7. Im Falle eines wesentlich beschränkten periodischen Potentials $V(x_1, x_2) = V_1(x_1) + V_2(x_2)$ stellen wir zunächst fest, dass die Bandfunktionen in eine Summe $\epsilon_n(k) = \epsilon_{n,1}(k_1) + \epsilon_{n,2}(k_2)$ zerfallen, wobei $\epsilon_{n,i}(k_i)$ die Bandfunktionen zum eindimensionalen periodischen Schrödingeroperator $H_0 + V(\mathbf{x}_i)$ ist. Aufgrund der Monotonie eindimensionaler Bandfunktionen (siehe z.B. Ref. [23] Thm. XIII.89 (e)) folgt damit, dass die Bandextrema immer nur im Zentrum, den Mittelpunkten der Kanten oder an den Ecken der ersten Brillouinzone auftreten können. Insbesondere handelt es sich damit um eine endliche Menge.

⁷Hier ist wichtig, dass $\mu \in [0, 1]$, da man nur so dieselbe Konstruktion von G_n und Σ_n für alle μV verwenden kann.

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir das Spektrum periodischer Schrödingeroperatoren untersucht. Dazu haben wir zunächst die Theorie linearer Operatoren, der direkten Integralzerlegung und der Kato-Störungstheorie vorgestellt. Mittels dieser Werkzeuge wurde es dann möglich die Bandstruktur des Spektrums herzuleiten und einige Aussagen zur Regularität der Bandfunktionen zu treffen. Hierbei stellten wir fest, dass der eindimensionale Fall, in dem man auf viele Resultate zu gewöhnlichen Differentialgleichungen zurückgreifen kann, wesentlich einfacher zu behandeln ist, als der mehrdimensionale Fall.

Zuletzt haben wir uns einem modernen Problem aus diesem Gebiet gewidmet; es handelte sich um das Verhalten von Bandfunktionen beim Übergang zu Bandlücken. Im zweidimensionalen Fall ließ sich zeigen, dass die Bandextrema eine diskrete Menge bilden.

Es ist ein offener Problem, ob und falls ja, wie sich das Resultat zu den Bandextrema im Zweidimensionalen auf höhere Dimensionen übertragen lassen. Die Konstruktion, die wir aus Ref. [41] entnommen haben, lässt sich zumindest in der angegebenen Form nicht auf höhere Dimensionen übertragen.

Im Zusammenhang mit der Festkörpermodellierungen sind weitere Möglichkeiten zur Erweiterung des Schrödingeroperators das Einbauen von zufälligen Störstellen oder Verunreinigungen, was die Periodizität des Systems zerstört und somit die Bloch-Wellen Lösung hinfällig macht, aber stattdessen lokalisierte Eigenzustände im Spektrum erzeugt [50]. Ein weiterer interessanter Aspekt wäre der schrittweise Einbau von Kopplungen zwischen dem Gitter und der Elektronen und der Elektronen untereinander (vgl. Kapitel 2). Während Ersteres zu interessanten Phänomenen wie konventioneller Supraleitung führt (siehe z.B. [51]), ist der zweite Punkt wichtig in der Beschreibung bestimmter Phänomene sogenannter korrelierter Systeme (siehe z.B. [52]).

Zuletzt sei noch angemerkt, dass sich auf den Fasern des Schrödingeroperators eine Geometrie definieren lässt, die direkte Implikationen auf physikalische Observable hat (siehe z.B. [53]).

Der messbare Funktionalkalkül und das Spektraltheorem

Die im Rahmen stetiger linearer Operatoren bekannten Aussagen zum messbaren Funktionalkalkül ([5], Satz VII.1.6) und Spektraltheorem für normale Operatoren ([5], Satz VII.1.25) lassen sich auch auf Aussagen ohne die Forderung der Stetigkeit an die Operatoren verallgemeinern.

Aufgrund des ausufernden Umfangs, den eine explizite Darstellung der Beweise für die oben genannten Erweiterungen einnehmen würde, sollen an dieser Stelle nur die wesentlichen Definitionen und Resultate zusammengefasst sein. Mehr Details können beispielsweise [10] Kapitel 13, [54] Abschnitt 3.2, 3.3 und [15] 3.1, 3.2 entnommen werden, welche auch die Quellen für die hier gewählte Form bilden.

Sei im Folgenden $0 \neq \mathcal{H}$ stets ein separabler \mathbb{C} -Hilbertraum.

DEFINITION+SATZ A.0.1 (orthogonale Projektion). Ein Operator $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt *Projektion*, falls $PP = P$. Gilt zudem $P = P^*$, dann heißt P *orthogonale Projektion*. Für eine orthogonale Projektion gilt $\text{im}(P)^\perp = \text{ker}(P)$ und $\|P\| \leq 1$.

DEFINITION A.0.2 (messbarer Raum, Spektralmaß). Das Tupel (X, Σ) heißt *messbarer Raum*, wenn X eine nicht-leere Menge ist und Σ eine σ -Algebra auf X . Im Folgenden sei stets $\Sigma = \mathcal{B}(X)$ die Borel- σ -Algebra.

Wir definieren die Mengen

$$\mathcal{M}(X, \Sigma) := \{f : X \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ Borel-messbar}\},$$

$$\mathcal{M}^\infty(X, \Sigma) := \{f \in \mathcal{M}(X, \Sigma) \mid f \text{ beschränkt}\}.$$

Das Tupel $(\mathcal{M}^\infty(X, \Sigma), \|\cdot\|_\infty)$ ist eine Banachalgebra, die abgeschlossen ist unter punktweiser gleichmäßig beschränkter Konvergenz, d.h. für $(f_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{M}^\infty(X, \Sigma)$ mit $\sup_{n \in \mathbb{N}} \|f_n\|_\infty < \infty$ und $f_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} f$ punktweise, folgt bereits $f \in \mathcal{M}^\infty(X, \Sigma)$.

Eine Abbildung $E : \Sigma \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ wird *Spektralmaß* genannt, falls gilt:

- (i) $E(M)$ ist eine orthogonale Projektion für alle $M \in \Sigma$.
- (ii) $E(X) = \text{id}$.
- (iii) Für disjunkte $M_1, M_2, \dots \in \Sigma$ gilt $\sum_{i=1}^{\infty} E(M_i)x = E\left(\bigsqcup_{i \in \mathbb{N}} M_i\right)x$ für alle $x \in \mathcal{H}$.

DEFINITION+SATZ A.0.3 (messbarer Funktionalkalkül). Ein *messbarer Funktionalkalkül* auf einem messbaren Raum (X, Σ) ist ein Tupel (Φ, \mathcal{H}) , wobei

$$\Phi : \mathcal{M}(X, \Sigma) \rightarrow \mathcal{C}(\mathcal{H})$$

eine Abbildung in die Menge der dicht definierten abgeschlossenen linearen Operatoren auf \mathcal{H} ist, geschrieben $\mathcal{C}(\mathcal{H})$, die folgende Eigenschaften erfüllt:

- (i) $\Phi(1_X) = \text{id}$.
- (ii) Für $f, g \in \mathcal{M}(X, \Sigma)$ und $\lambda \in \mathbb{C}$ gelten:
 - (a) $\Phi(f) + \Phi(g) \subset \Phi(f + g)$ und $\lambda\Phi(f) \subset \Phi(\lambda f)$.
 - (b) $\Phi(f)\Phi(g) \subset \Phi(fg)$ und $D(\Phi(f)\Phi(g)) = D(\Phi(g)) \cap D(\Phi(fg))$.
- (iii) $\Phi(\bar{f}) = \Phi(f)^*$.
- (iv) Falls $f \in \mathcal{M}^\infty(X, \Sigma)$, dann $\Phi(f) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.

(v) Ist $(f_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{M}^\infty(X, \Sigma)$ mit $\sup_{n \in \mathbb{N}} \|f_n\|_\infty < \infty$ und $f_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} f$ punktweise, dann ist $\Phi(f_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \Phi(f)$ im Sinne der starken Operator-topologie.

BEMERKUNG A.0.4. Eigentlich folgt der Punkt A.0.3(iv) bereits aus den vorangegangenen Punkten der Definition, aber er wird benötigt, um die starke Operatorkonvergenz sinnvoll in der Definition fordern zu können (A.0.3(v)).

Ein paar wichtige Eigenschaften des messbaren Funktionalkalkül seien im Folgenden aufgelistet.

THEOREM A.0.5. Sei (Φ, \mathcal{H}) ein messbarer Funktionalkalkül auf einem messbaren Raum (X, Σ) , dann gilt mit $f \in \mathcal{M}(X, \Sigma)$:

- (i) Falls $f^{-1}(0) = \emptyset$, dann ist $\Phi(f)$ injektiv und $\Phi\left(\frac{1}{f}\right) = \Phi(f)^{-1}$.
- (ii) $\Phi(f)$ ist normal und es gilt $\Phi(\bar{f})\Phi(f) = \Phi(|f|^2)$.
- (iii) Falls $f \in \mathcal{M}^\infty(X, \Sigma)$ ist, dann folgt die Stetigkeit von $\Phi(f)$ mit Schranke $\|\Phi(f)\| \leq \|f\|_\infty$.
- (iv) Ist f reellwertig, dann ist $\Phi(f) = \Phi(f)^*$.

THEOREM A.0.6. Zu einem Spektralmaß E auf einem messbaren Raum (X, Σ) wird durch

$$\begin{aligned} \Phi_E : \mathcal{M}(X, \Sigma) &\rightarrow \mathcal{C}(\mathcal{H}) \\ f &\mapsto \Phi_E(f) \equiv \int_X f(z) dE(z) \end{aligned}$$

ein messbarer Funktionalkalkül (Spektralintegral genannt) Φ_E auf (X, Σ) definiert, wobei

$$D(\Phi_E(f)) := \left\{ x \in \mathcal{H} \mid \int_X |f|^2(z) dE_{x,x}(z) \right\}$$

mit dem komplexen Maß $dE_{x,y}$ auf (X, Σ) durch

$$E_{x,y}(M) := \langle E(M)x, y \rangle \quad \forall M \in \Sigma$$

festgelegt ist und

$$\langle \Phi_E(f)x, y \rangle := \int_X f(z) dE_{x,y}(z), \quad x \in D(\Phi_E(f)), \quad y \in \mathcal{H},$$

den Operator $\Phi_E(f)$ auf $D(\Phi_E(f))$ eindeutig festlegt. Diese Zuweisung eines Spektralmaßes E auf ein messbares Funktionalkalkül Φ_E wird durch das Spektralmaß

$$\begin{aligned} E_\Phi : \Sigma &\rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) \\ M &\mapsto E_\Phi(M) := \Phi(1_M). \end{aligned}$$

umgekehrt, d.h. $E = E_{\Phi_E}$.

Wir kommen nun zum zentralen Ergebnis dieses Anhangs.

THEOREM A.0.7 (Spektralsatz). Zu einem normalen Operator N auf \mathcal{H} existiert ein eindeutiges Spektralmaß E^N auf $(\mathbb{C}, \mathcal{B}(\mathbb{C}))$, sodass

$$N = \int_{\mathbb{C}} z dE^N(z).$$

In diesem Fall ist sogar $N = \int_{\mathbb{C}} z 1_{\sigma(N)}(z) dE^N(z)$ und $E^N(\sigma(N)) = \text{id}$, d.h. das Spektralintegral ist in $\sigma(N)$ konzentriert.

Wir bezeichnen E^N als das Spektralmaß zu N .

Im Falle selbstadjungierter Operatoren kann man Spektrum auch durch die dazugehörige Spektralprojektion charakterisieren:

KOROLLAR A.0.8. *Zu einem selbstadjungierten Operator A auf \mathcal{H} sei mit E^A das zugehörige Spektralmaß notiert. Es gilt dann:*

$$\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid E^A((\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)) \neq 0 \ \forall \epsilon > 0\}$$

$$\sigma_p(A) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid E^A(\{\lambda\}) \neq 0\}$$

$$E^A((a, b)) = 0 \Leftrightarrow (a, b) \subset \rho(A) \quad \forall a, b \in \mathbb{R}, \ a < b$$

THEOREM A.0.9. *Sei N ein normaler Operator auf \mathcal{H} mit Spektralmaß E^N und $f, g \in \mathcal{M}(\mathbb{C}, \mathcal{B}(\mathbb{C}))$, dann ist $\Phi_{E^N}(f) =: f(N)$ normal und es gilt*

$$g(f(N)) = (g \circ f)(N).$$

Distributionentheorie

Dieser Abschnitt orientiert sich an [3] Teil I und [5] Abschnitt VIII.5.

Die Motivation der Distributionentheorie ist ähnlich wie bei schwachen Ableitungen den Begriff einer Funktion zu verallgemeinern. Hierzu muss man von der Charakterisierung einer Funktion über ihre Funktionswerte zu einem Funktional auf einem geeignet topologisierten Vektorraum von sogenannten Testfunktionen übergehen.

Im Folgenden sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ stets eine nicht-leere offene Menge.

Der Raum der Testfunktionen für Distributionen ist $C_c^\infty(\Omega)$, wobei die Topologie auf diesem durch die Topologie auf $C_K^\infty(\Omega)$ – dies sind Funktionen in $C^\infty(\Omega)$ mit Träger im Kompaktum $K \subset \Omega$ und die Topologie wird durch die trennende und filternde Familie von Halbnormen $\{p_{K,m}\}_{m \in \mathbb{N}}$ mit $p_{K,m}(\phi) := \sup_{x \in K, |\alpha| \leq m} |D^\alpha \phi(x)|$, $\phi \in C^\infty(\Omega)$, $m \in \mathbb{N}$,

erzeugt– induziert wird (siehe [3] Abschnitt 2.1.1 und 2.2.1).

Zu dem eben definierten topologischen Vektorraum $C_c^\infty(\Omega)$ kann man den topologischen Dualraum $C_c^\infty(\Omega)'$ definieren und dieser ist gerade die Menge aller Distributionen ([3] Abschnitt 3.2):

DEFINITION B.0.1 (Distribution). Für $\emptyset \neq \Omega \subset \mathbb{R}^n$ ist eine *Distribution* T eine stetige lineare Abbildung $T : D(\Omega) \rightarrow \mathbb{K}$.

Analog dazu kann man den Schwartz-Raum $S(\Omega)$ durch die Familie von Halbnormen $\{p_{m,l}\}_{m,l \in \mathbb{N}_0}$ definiert durch

$$p_{m,l}(\phi) := \sup_{x \in \Omega, |\alpha| \leq l} (1 + x^2)^{m/2} |D^\alpha \phi(x)|, \quad \phi \in S(\Omega), \quad m, l \in \mathbb{N}_0$$

topologisieren (siehe [3] Abschnitt 2.2.2).

Dies erlaubt die Definition der sogenannten temperierten Distributionen.

DEFINITION B.0.2 (temperierte Distributionen). Für $\emptyset \neq \Omega \subset \mathbb{R}^n$ ist $T : S(\Omega) \rightarrow \mathbb{K}$ eine *temperierte Distribution*, falls $T \in S(\Omega)'$.

Die Bezeichnung Distribution ist hierbei gerechtfertigt, da $C_c^\infty(\Omega) \subset S(\Omega)$ stetig eingebettet ist ([3] Theorem 2.8) und somit auch $S(\Omega)' \subset C_c^\infty(\Omega)'$.

Eine weitere wichtige Klasse von Distributionen sind die sogenannten *regulären Distributionen*. Hierzu stattet man $L_{loc}^1(\Omega)$ über die Familie von Halbnormen $\{\int_K |[\cdot](x)| dx : K \subset \Omega \text{ kompakt}\}$ mit einer Topologie aus. Man kann dann zeigen, dass $L_{loc}^1(\Omega) \subset C_c^\infty(\Omega)'$ stetig eingebettet ist, wobei die Einbettung durch $I : L_{loc}^1(\Omega) \rightarrow C_c^\infty(\Omega)'$, $[I(f)](\phi) = \int_\Omega f(x)\phi(x)dx$ für alle $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ und $f \in L_{loc}^1(\Omega)$, geschieht ([3] Abschnitt 3.2.1).

In der Physik spielt die folgende Distribution eine besondere Rolle.

BEISPIEL B.0.3 (Dirac'sche Delta-Distribution). Für ein $x_0 \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ definiert $\delta_{x_0} : C_c(\Omega) \rightarrow \mathbb{K}$ mit $\delta_{x_0}(\phi) = \phi(x_0)$ für alle $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ eine irreguläre Distribution und wird als *Dirac'sche Delta-Distribution* bezeichnet ([3] Abschnitt 3.2.2.1).

BEMERKUNG B.0.4. Man trifft in der Literatur oft die irreführende Notation

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)\delta(x - x_0)dx = \phi(x_0),$$

aber dieser Ausdruck macht im Rahmen einer Lebesgue-Integration keinen Sinn und ist motiviert durch die Tatsache, dass man die Dirac'sche Delta-Funktion auch als verallgemeinerte Ableitung der Heavyside-Funktion beschreiben kann. Partielle Integration führt dann zu dem oben beschriebenen Integralausdruck.

Um den Raum der Distributionen mit mehr Struktur auszustatten definiert man die sogenannte schwache Topologie ([5] Abschnitt VIII.1).

DEFINITION B.0.5 (schwache Topologie). Zu einem normierten Raum V und seinem topologischen Dualraum V' wird durch die Familie von Halbnormen $|\cdot|(x) : x \in V$ eine Topologie auf V' erzeugt. Wir bezeichnen sie als *schwache Topologie* und verwenden die Notation $\sigma := \sigma(V', V)$.

Ausgestattet mit dieser Topologie kann man nun zeigen, dass $C_c^\infty(\Omega)'$ und $S(\Omega)'$ vollständig sind, d.h. für eine Folge von Distributionen $(T_i)_{i \in \mathbb{N}} \subset C_c^\infty(\Omega)'$, sodass $(T_i(\phi))_{i \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{K}$ Cauchyfolge für alle $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ ist, folgt, dass ein $T \in C_c^\infty(\Omega)'$ existiert, sodass $T_i(\phi) \xrightarrow{i \rightarrow \infty} T(\phi)$ für alle $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ ([3] Theorem 3.3 und 3.5). Analog folgt dann auch das folgende nützliche Korollar:

KOROLLAR B.0.6. ([3] Corrolary 3.2) Für eine Folge $(T_i)_{i \in \mathbb{N}} \subset C_c^\infty(\Omega)'$ konvergiert die formale Reihe $\sum_{i \in \mathbb{N}} T_i$, d.h. es gibt ein $T \in C_c^\infty(\Omega)'$, sodass $\sum_{i \in \mathbb{N}} T(\phi)$ in \mathbb{K} für alle $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ gegen $T(\phi)$ konvergiert, genau dann, wenn $\sum_{i \in \mathbb{N}} T_i(\phi)$ für alle $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ konvergiert.

Aufgrund von Dualität kann man die isomorphe Fouriertransformation $\mathcal{F} : S(\mathbb{R}^n) \rightarrow S(\mathbb{R}^n)$ auf den Raum der temperierten Distributionen ausweiten ([3] Abschnitt 10.3):

DEFINITION B.0.7 (Fouriertransformation). Für eine temperierte Distribution $T \in S(\mathbb{R}^n)'$ sind die Fouriertransformation $\mathcal{F} : S(\mathbb{R}^n)' \rightarrow S(\mathbb{R}^n)'$ und ihre Inverse \mathcal{F}^{-1} definiert durch

$$(B.1) \quad [\mathcal{F}T](\phi) = T(\mathcal{F}\phi),$$

$$(B.2) \quad [\mathcal{F}^{-1}T](\phi) = T(\mathcal{F}^{-1}\phi), \quad \phi \in S(\mathbb{R}^n).$$

Hierzu seien noch zwei Beispiele genannt.

- BEISPIEL B.0.8. (1) Die Fourier-Transformation der Dirac'sche Delta-Distribution δ_0 ist gegeben durch $\mathcal{F}\delta_0 = (2\pi)^{-n/2}I(1)$.
 (2) Umgekehrt ist für $c \in \mathbb{C}$ die Fourier-Transformation von $I(c)$ gegeben durch $c(2\pi)^{n/2}\delta_0$.

Literaturverzeichnis

- [1] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid-state physics*. Cengage Learning, 1976.
- [2] P. Kuchment. An overview of periodic elliptic operators. *Bull. Amer. Math. Soc.* 53 (3):343–414, 2016.
- [3] P. Blanchard and E. Brüning. *Mathematical Methods in Physics*. Birkhäuser Basel, 2015.
- [4] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics*, Vol. 2. Academic Press, 1972.
- [5] D. Werner. *Funktionalanalysis*. Springer, 8th ed., 2018.
- [6] E. B. Davies. *Linear Operators and their Spectra*. Cambridge University Press, 2007.
- [7] S. Attal. *Operator and spectral theory*, Zugriff: 12.10.2019. http://math.univ-lyon1.fr/~attal/Op_and_Spect.pdf.
- [8] M. Loss. *About closed operators*, Zugriff: 12.10.2019. <http://people.math.gatech.edu/~loss/13SPRINGTEA/closedoperators.pdf>.
- [9] P. Bongaarts. *Quantum Theory: A Mathematical Approach*. Springer International Publishing, 2014.
- [10] W. Rudin. *Functional Analysis*. McGraw-Hill Book Company New York, second edition, 1991.
- [11] M. Loss. *The laplace operator as a self adjoint operator*, Zugriff: 14.10.2019. <http://people.math.gatech.edu/~loss/14SPRINGTEA/laplacian.pdf>.
- [12] B. C. Hall. *Quantum Theory for Mathematicians*. Springer, 2013.
- [13] L. C. Evans. *Partial Differential Equations*. Graduate Studies in Mathematics, vol. 19. American Mathematical Society, 2010.
- [14] T. Weth. *Lineare Funktionalanalysis*, 2018. Vorlesungsskript.
- [15] G. Teschl. *Mathematical Methods in Quantum Mechanics: With Applications to Schrödinger Operators*. American Mathematical Society, 2014.
- [16] N. Meyers and J. Serrin. H=W. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 51:1055–1056, 1964.
- [17] G. Czocholl. *Theoretische Festkörperphysik*, Vol. 1. Springer Spektrum, 4th ed., 2016.
- [18] K. Kopitzki and P. Herzog. *Einführung in die Festkörperphysik*. Springer, 2017.
- [19] Q. Yu, L. A. Jauregui, W. Wu, R. Colby, J. Tian, Z. Su, H. Cao, Z. Liu, D. Pandey, D. Wei, T. F. Chung, P. Peng, N. P. Guisinger, E. A. Stach, J. Bao, S.-S. Pei, and Y. P. Chen. Control and characterization of individual grains and grain boundaries in graphene grown by chemical vapour deposition. *Nature Materials* 10 (6):443–449, 2011.
- [20] G. Grimvall. *The electron-phonon interaction in metals*. Selected topics in solid state physics. Edited by E. Wohlfarth. North-Holland New York, 1981.
- [21] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-particle Systems*. Dover Books on Physics. Dover Publications, 2003.
- [22] W. Dörfler, A. Lechleiter, M. Plum, G. Schneider, and C. Wieners. *Photonic Crystals: Mathematical Analysis and Numerical Approximation*, Vol. 42. Springer Basel, 2011.
- [23] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics*, Vol. 4. Academic Press, 1978.
- [24] R. Schnaubelt. *Lecture Notes Spectral Theory*, Zugriff: 10.06.2020. <http://www.math.kit.edu/iana3/~schnaubelt/media/st-skript15.pdf>.
- [25] *Encyclopædia Britannica*. *Balmer series of hydrogen lines*, Zugriff: 12.06.2020. <https://www.britannica.com/science/Balmer-series#/media/1/50799/206855>.
- [26] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1966.
- [27] M. Loss. *About closed operators*, Zugriff: 18.10.2019. <http://people.math.gatech.edu/~loss/14SPRINGTEA/katorellich.pdf>.
- [28] G. Folland. *A Course in Abstract Harmonic Analysis*. Textbooks in Mathematics. Chapman and Hall/CRC, 1995.
- [29] M. Schechter. *Operator Methods in Quantum Mechanics*. Elsevier North Holland Inc., 1981.
- [30] R. V. Kadison and J. R. Ringrose. Direct Integrals and Decompositions. In *Fundamentals of the Theory of Operator Algebras*, pages 818–842. 1992.
- [31] K. D. Schmidt. *Maß und Wahrscheinlichkeit*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2nd ed., 2011.
- [32] K. Schmüdgen. *Unbounded Operator Algebras and Representation Theory*. Operator Theory: Advances and Applications. Birkhäuser Basel, 2013.

-
- [33] H. Bauer and R. B. Burckel. *Measure and Integration Theory*. De Gruyter Studies in Mathematics. De Gruyter, 2011.
- [34] M. Taylor. *Partial Differential Equations i*. 115. Springer-Verlag New York, 2nd ed., 2011.
- [35] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics*, Vol. 1. Academic Press, 1980.
- [36] M. Dobrowolski. *Angewandte Funktionalanalysis: Funktionalanalysis, Sobolev-Räume und elliptische Differentialgleichungen*. Masterclass. Springer Berlin Heidelberg, 2005.
- [37] M. Tucsnak and G. Weiss. *Observation and Control for Operator Semigroups*. Birkhäuser Advanced Texts Basler Lehrbücher. Birkhäuser Basel, 2009.
- [38] S. Hüfner. *Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications*. Advanced Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [39] R. M. Martin. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press, 2004.
- [40] P. Puschnig and D. Lftner. Simulation of angle-resolved photoemission spectra by approximating the final state by a plane wave: From graphene to polycyclic aromatic hydrocarbon molecules. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 200:193–208, 2015.
- [41] N. Filonov and I. Kachkovskiy. On the structure of band edges of 2-dimensional periodic elliptic operators. *Acta Math.* 221 (1):59–80, 2018.
- [42] P. Kuchment and Y. Pinchover. Liouville theorems and spectral edge behavior on abelian coverings of compact manifolds. *Transactions of the American Mathematical Society* 359 (12):5777–5815, 2007.
- [43] F. Klopp and J. Ralston. Endpoints of the spectrum of periodic operators are generically simple. *Methods and Applications of Analysis* 7 (3):459–464, 2000.
- [44] L. E. Thomas. Time dependent approach to scattering from impurities in a crystal. *Comm. Math. Phys.* 33 (4):335–343, 1973.
- [45] W. Kirsch and B. Simon. Comparison theorems for the gap of schrödinger operators. *Journal of Functional Analysis* 75 (2):396–410, 1987.
- [46] Y. Colin de Verdière and Collectif. Sur les singularités de van hove génériques. In *Analyse globale et physique mathématique (colloque à la mémoire d’Edmond Combet)*, pages 99–109. 1991.
- [47] M. Birman and T. Suslina. Second order periodic differential operators. Threshold properties and homogenization. *St. Petersburg Mathematical Journal* 15 (5):639–714, 2004.
- [48] M. Sh. Birman and T. A. Suslina. The two-dimensional periodic magnetic Hamiltonian is absolutely continuous. *Algebra i Analiz* 9 (1):32–48, 1997.
- [49] B. L. van der Waerden. *Algebra*, Vol. II. Springer New York, 1991.
- [50] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.* 109:1492–1505, 1958.
- [51] J. F. and J. F. Annett. *Superconductivity, superfluids and condensates*. Oxford Master Series in Physics. OUP Oxford, 2004.
- [52] V. I. Anisimov. Electronic structure of strongly correlated materials. *AIP Conference Proceedings* 1297 (1):3–134, 2010.
- [53] A. S. Sergeev. *Topological insulators and geometry of vector bundles*, 2020. arxiv: 2011.05004.
- [54] M. Haase. *Lectures on functional calculus*, 2018. https://www.mathematik.tu-darmstadt.de/media/analysis/lehmaterial_anapde/hallerd/ISem21complete.pdf.