Idealkristalle als Abelsche Varietäten

Udo Krause[1]

Weierstraß–Institut
für Angewandte Analysis und Stochastik
Mohrenstraße 39, D 10117 Berlin

Zusammenfassung

Es wird gezeigt, daß sich Idealkristalle in natürlicher Weise als hauptpolarisierte Abelsche Varietäten darstellen lassen. Es existiert demzufolge auf $\Lambda \times \Lambda$ eine ganzzahlige schiefsymmetrische Matrix $E : \Lambda \times \Lambda \longrightarrow \mathbb{Z}$, deren Elementarteiler sämtlich gleich 1 sind, wobei Λ das Translationsgitter des Idealkristalls im Phasenraum V ist. Bezüglich derartiger Gitter kann die Gitterdarstellung der Heisenberggruppe definiert werden oder mit anderen Worten: Auf einer hauptpolarisierten Abelschen Varietät kann nichtrelativistische Quantenmechanik betrieben werden. Die Gitterdarstellung wird detailliert betrachtet. Der harmonische Oszillator wird in der Gitterdarstellung berechnet und illustriert. Es zeigt sich, daß die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators in der Gitterdarstellung systematisch aus der mit einem Exponentialfaktor multiplizierten Riemannschen Thetafunktion für die zugrundeliegende hauptpolarisierte Abelsche Varietät hervorgehen. Die vollständigen Eigenfunktionensysteme der Impuls– sowie der Ortsoperatoren werden in der Gitterdarstellung aufgestellt und führen zu einer deutlichen Verbesserung des Galerkinverfahrens für die Berechnung der Bandstruktur des Kristallelektrons.

1991 Mathematics Subject Classification. 14 K 25, 22 E 70, 35 Q 40, 81 Q 10, 82 D 25.

[1]e–mail: krause@wias-berlin.de

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die in der Festkörperphysik, speziell in der Metall- und Halbleiterphysik betrachteten Kristalle sind aus mathematischer Sicht hauptpolarisierte Abelsche Varietäten. Der Abschnitt 2 der vorliegenden Arbeit enthält den Beweis dieser Aussage, die durch folgende Beobachtung motiviert wird: Die Thetafunktion auf einer hauptpolarisierten Abelschen Varietät und die Wellenfunktion eines Elektrons im Idealkristall haben bestimmte Translationseigenschaften gemeinsam. Sei $g \in \mathbb{N}, \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{Q}^g, \boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^g$ sowie Ω eine g–reihige symmetrische komplexe Matrix mit positiv definitem Imaginärteil; dann ist

$$\vartheta \begin{bmatrix} \boldsymbol{a} \\ \boldsymbol{b} \end{bmatrix} (\boldsymbol{z}, \Omega) := \sum_{\boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}^g} \exp\left(\pi i\, {}^t(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{a})\ \Omega\ (\boldsymbol{n}+\boldsymbol{a}) + 2\pi i\, {}^t(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{a})(\boldsymbol{z}+\boldsymbol{b})\right) \tag{1}$$

die klassische Thetafunktion [21] mit rationalen Charakteristiken. Es handelt sich um eine holomorphe quasiperiodische Funktion, die u. a. folgende Eigenschaft hat

$$\vartheta \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}+\boldsymbol{n} \\ \boldsymbol{b}+\boldsymbol{m} \end{bmatrix} (\boldsymbol{z}, \Omega) = \exp\left(2\pi i\, {}^t\boldsymbol{a}\boldsymbol{m}\right) \vartheta \begin{bmatrix} \boldsymbol{a} \\ \boldsymbol{b} \end{bmatrix} (\boldsymbol{z}, \Omega), \qquad \forall \boldsymbol{n}, \boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^g. \tag{2}$$

Das Bloch–Theorem [3] fordert von der Wellenfunktion $\psi_{\boldsymbol{k}\nu}(\boldsymbol{r})$ eines Elektrons mit den Quantenzahlen $\boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^3,\ \nu \in \mathbb{N}$ in einem Idealkristall mit dem Gitter $\Lambda_{(2)}$ die Eigenschaft

$$\psi_{\boldsymbol{k}\nu}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = \exp(i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R})\ \psi_{\boldsymbol{k}\nu}(\boldsymbol{r}), \qquad \boldsymbol{R} \in \Lambda_{(2)}, \boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3.$$

Die Analogie ist deutlich zu sehen, wenn man die Thetacharakteristiken $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ in $\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}$ umbenennt und

$$\vartheta \begin{bmatrix} \boldsymbol{k} \\ \boldsymbol{r} \end{bmatrix} (0, \Omega) \tag{3}$$

schreibt.

Man würde die Unterschiede zwischen Funktionentheorie und Operatortheorie verkennen, erwartete man, daß (3) geradezu eine Wellenfunktion, d. h. eine Eigenfunktion eines selbstadjungierten Operators der nichtrelativistischen Quantenmechanik sei. Es muß also ein anderer Zusammenhang zwischen der nichtrelativistischen Quantenmechanik und hauptpolarisierten Abelschen Varietäten bestehen. Dieser Zusammenhang folgt aus einer Eigenschaft der Translationsgitter Λ von Idealkristallen: Die im Abschnitt 2 bewiesene Aussage, daß der komplexe Torus $\mathbb{C}^g/\Lambda$ eine *hauptpolarisierte* Abelsche Varietät ist, bedeutet auch, daß Λ als maximal isotrope Untergruppe des Phasenraumes V angesehen werden kann. Somit kann bezüglich Λ die Gitterdarstellung [4, 32] der Heisenberggruppe [10, 23, 29, 30] definiert werden, wodurch eine z. B. zur üblichen Ortsdarstellung der Heisenberggruppe äquivalente Formulierung der nichtrelativistischen Quantenmechanik vorliegt. Die Gitterdarstellung wird im Abschnitt 3 im Detail betrachtet. Sie geht insofern über das Gebiet der Kristallphysik hinaus, als es gelingt, auch anderen physikalischen Systemen Gitter zuzuordnen, die maximal isotrope Untergruppen im Phasenraum sind. Ein Beispiel ist der harmonische Oszillator, der im Abschnitt 4 in der Gitterdarstellung durchgerechnet wird. Dabei wird sichtbar, daß das Gitter durch das Potential bestimmt ist. Im Abschnitt 5 wird das Kristallelektron in der Gitterdarstellung betrachtet. Es wird insbesondere ein einfaches vollständiges orthonormiertes Funktionensystem – die Eigenfunktionen des Impulsoperators – für solche Probleme aufgestellt und zur Verbesserung des Galerkinverfahrens für die Berechnung der elektronischen Bandstruktur verwendet.

2 Kristallgitter und Abelsche Varietäten

Sei $V_{(2)} \cong \mathbb{R}^g$ ein g-dimensionaler Vektorraum über $\mathbb{R}$ mit $g \in \mathbb{N}$, $g < \infty$. Die Basis in $V_{(2)}$ sei durch g linear unabhängige Vektoren $\{\boldsymbol{\lambda}_{(2)i}\}_{i=1}^{g}$ gegeben

$$\boldsymbol{\lambda}_{(2)i} = \sum_{j=1}^{g} A_{ij}\ \boldsymbol{e}_{0j}, \quad A \in M(g, \mathbb{R}), \quad \det A \neq 0 \tag{4}$$

oder

$$(\boldsymbol{\lambda}_{(2)1}, \boldsymbol{\lambda}_{(2)2}, \ldots, \boldsymbol{\lambda}_{(2)g}) = {}^tA,$$

wobei die Summe in (4) eine Linearkombination darstellt und $\{\boldsymbol{e}_{0j}\}_{j=1}^{g}$ die cartesischen Einheitsvektoren sind. Alle Vektoren werden als Spaltenvektoren verstanden, so daß ${}^t\boldsymbol{e}_{0j} = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)$ ein Zeilenvektor mit 1 an der j-ten Stelle und ${}^tA$ die zu A transponierte Matrix ist. $M(n_1 \times n_2, \mathcal{R})$ bezeichnet die Matrizen mit n_1 Zeilen, n_2 Spalten und Elementen aus $\mathcal{R}$; $M(n, \mathcal{R}) := M(n \times n, \mathcal{R})$. $\mathbb{I}_g$ symbolisiert die g-reihige Einheitsmatrix. Sei $\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^g$ und

$$\Lambda_{(2)} := \{\boldsymbol{v}_{(2)} \mid \boldsymbol{v}_{(2)} = \sum_{i=1}^{g} m_i\ \boldsymbol{\lambda}_{(2)i},\ m_i \in \mathbb{Z}\}.$$

$\Lambda_{(2)}$ ist ein *Gitter* [26, S. 32] in $V_{(2)}$ [3, S. 12], die $\boldsymbol{v}_{(2)} \in \Lambda_{(2)}$ heißen *Gitterpunkte*. Im Hinblick auf die folgenden Darlegungen sei $\Lambda_{(2)}$ als *Ortsgitter* und $V_{(2)}$ als *Ortsraum* bezeichnet.

Man denke sich nun irgendeine *starre* Anordnung $\mathfrak{A}_n$ von n $(1 \leq n < \infty)$ Atomen oder Molekülen. Man verhefte mit jedem Gitterpunkt aus $\Lambda_{(2)}$ ein identisches Exemplar von $\mathfrak{A}_n$ auf genau dieselbe Art und Weise, wobei kein Bestandteil der starren Anordnung mit einem Gitterpunkt zusammenfallen muß. Das derart entstandene Gebilde in $V_{(2)}$ besitzt die als *Translationssymmetrie* bezeichnete Symmetrie von $\Lambda_{(2)}$ und heißt *Idealkristall* [2]. Diejenigen affinen Transformationen von $V_{(2)}$ auf sich, die den Idealkristall invariant lassen, bezeichnet man als *Raumgruppe* des Idealkristalls. Die Raumgruppe enthält als Untergruppe die Symmetriegruppe von $\Lambda_{(2)}$. Nach den verschiedenen möglichen Symmetriegruppen unterscheidet man verschiedene Gittertypen, die *Bravaisgitter* [13, 3]. Es gibt 1 Bravaisgitter für $g = 1$, 5 für $g = 2$ und 14 für $g = 3$. Die Bravaisgitter für $g = 3$ sind im Anhang A (S. 36) abgebildet.

Man betrachtet außer dem Ortsgitter in der Kristallphysik das *reziproke Gitter* $\Lambda_{(1)}$:

$$\Lambda_{(1)} := \{\boldsymbol{v}_{(1)} \mid \boldsymbol{v}_{(1)} = \sum_{i=1}^{g} n_i\ \boldsymbol{\lambda}_{(1)i},\ n_i \in \mathbb{Z}\}$$

mit

$$\boldsymbol{\lambda}_{(1)i} = \sum_{j=1}^{g} ({}^tA^{-1})_{ij}\ \boldsymbol{e}_{0j} \tag{5}$$

oder

$$(\boldsymbol{\lambda}_{(1)1}, \boldsymbol{\lambda}_{(1)2}, \ldots, \boldsymbol{\lambda}_{(1)g}) = A^{-1},$$

[2] In der Natur $(1 \leq g \leq 3)$ kommen bei Temperaturen > 0 Kelvin *Realkristalle* vor. Realkristalle sind von endlicher räumlicher Ausdehnung, zeigen Schwingungen [2] der $\mathfrak{A}_n$, Emission und Absorption von Teilchen sowie Kristallbaufehler (Punktdefekte, Dislokationen, Disklinationen und Korngrenzen).

wobei in (4) und (5) *dieselbe* Matrix A und dieselbe Dimensionszahl g auftreten. Aus (4) und (5) folgt

$$
{}^t\boldsymbol{\lambda}_{(1)i}\ \boldsymbol{\lambda}_{(2)j} = ({}^tA^{-1}\ {}^tA)_{ij} = \delta_{ij}. \tag{6}
$$

Man bezeichne ein weiteres Exemplar von $\mathbb{R}^g$ mit $V_{(1)}$, nenne $V_{(1)}$ den *Impulsraum* und betrachte das Gitter $\Lambda := \Lambda_{(1)} \oplus \Lambda_{(2)}$ in $V := V_{(1)} \oplus V_{(2)}$. Ein Vektor $\boldsymbol{x} \in V$ wird geschrieben als

$$
\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{2g} x_i\ \boldsymbol{\lambda}_i = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{g} x_{(1)i}\ \boldsymbol{\lambda}_{(1)i} + x_{(2)i}\ \boldsymbol{\lambda}_{(2)i} \tag{7}
$$

und für die Basis $\{\boldsymbol{\lambda}_i\}_{i=1}^{2g}$ von Λ gilt

$$
(\boldsymbol{\lambda}_1, \boldsymbol{\lambda}_2, \ldots, \boldsymbol{\lambda}_{2g}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{(1)} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\lambda}_{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & {}^tA \end{pmatrix}. \tag{8}
$$

$\{\boldsymbol{\lambda}_i\}_{i=1}^{2g}$ gemäß (8) wird in dieser Arbeit als *Kristallbasis* in V, $\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}$ werden als *Kristallkoordinaten* eines Vektors aus V bezeichnet und Λ als *Kristallgitter*.

$V \cong \mathbb{R}^{2g}$ ist vermöge der kanonischen komplexen Struktur J_0 isomorph zu $\mathbb{C}^g$ [15, S. 78]. Man betrachte den *komplexen Torus* $M = \mathbb{C}^g/\Lambda$. In $\mathbb{C}^g$ liege irgendeine Basis $\{\mathfrak{e}_i\}_{i=1}^{g}$ vor. Man definiert mittels der Beziehung

$$
\boldsymbol{\lambda}_i = \sum_{\alpha=1}^{g} \omega_{\alpha i}\ \mathfrak{e}_\alpha, \quad \omega \in M(g \times 2g, \mathbb{C}), \quad i = 1, 2, \ldots, 2g \tag{9}
$$

die *Riemannsche Periodenmatrix* ω (vgl. [6, S. 18], [12, S. 304], [18, S. 8] bzw. [26, S. 67]). Von den Eigenschaften von ω hängt es ab, ob der komplexe Torus M eine *Abelsche Varietät* ist.

Definition 1. Ein komplexer Torus M heißt *Abelsche Varietät*, wenn er eine projektive algebraische Varietät ist, d. h. wenn M algebraisch in den projektiven Raum eingebettet werden kann [12, S. 301].

Ein Kriterium gibt der

Satz 1. *Die Existenz einer positiv definiten hermiteschen Form H auf $\mathbb{C}^g$ und einer ganzzahligen schiefsymmetrischen Form E auf Λ mit $E = \operatorname{Im} H$ ist notwendig und hinreichend dafür, daß auf dem komplexen Torus $\mathbb{C}^g/\Lambda$ g algebraisch unabhängige meromorphe Funktionen existieren. Wenn solche Funktionen auf $\mathbb{C}^g/\Lambda$ existieren, dann läßt sich der komplexe Torus in $\mathbb{P}^n$ für ein gewisses n einbetten und ist somit eine projektive Varietät [20, S. 60].* □

Es sei also $E \in M(2g, \mathbb{Z})$ mit ${}^tE = -E$ und $\det E \neq 0$ die Matrix der schiefsymmetrischen ganzzahligen Form E auf Λ und weiterhin $J \in M(2g, \mathbb{R})$ mit $JJ = -\mathbb{I}_{2g}$ eine komplexe Struktur auf V; dann ist

$$
H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := E(J\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + iE(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \tag{10}
$$

[21, S. 171] die im Satz 1 geforderte positiv definite hermitesche Form genau dann, wenn

$$E(J\boldsymbol{x}, J\boldsymbol{y}) = E(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \qquad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{2g} \tag{11}$$

$$E(J\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) > 0 \qquad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{2g} \setminus \{0\}. \tag{12}$$

Aus (9) folgt wegen

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{2g} x_i \boldsymbol{\lambda}_i = \sum_{\alpha=1}^{g} \left(\sum_{i=1}^{2g} \omega_{\alpha i}\ x_i \right) \mathfrak{e}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{g} z_\alpha\ \mathfrak{e}_\alpha$$

der $\mathbb{R}$–lineare Isomorphismus r zwischen V und $\mathbb{C}^g$

$$\begin{aligned} r : V &\longrightarrow \mathbb{C}^g \\ \boldsymbol{x} &\longrightarrow \boldsymbol{z}, \quad \begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ \bar{\boldsymbol{z}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix} \boldsymbol{x} \end{aligned}$$

und

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ \bar{\boldsymbol{z}} \end{pmatrix} =: (\Pi, \bar{\Pi}) \begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ \bar{\boldsymbol{z}} \end{pmatrix},$$

$\Pi \in M(2g \times g, \mathbb{C})$, $(\Pi, \bar{\Pi})$ regulär. Die komplexe Struktur J auf V kann man mit folgender Überlegung berechnen: Man sehe V als die Reellifizierung von $\mathbb{C}^g$ an und betrachte nun die Komplexifizierung $W := \mathbb{C} \otimes V \cong \mathbb{C}^{2g}$ von V. In W liegen z. B. die Zeilen von ω oder der Vektor $\binom{\boldsymbol{z}}{\bar{\boldsymbol{z}}}$, $\boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^g$. Sei $E_{\mathbb{C}}$ die komplexe lineare Erweiterung von E und $P \subset W$ ein komplexer g–dimensionaler Teilraum von W so, daß

$$E_{\mathbb{C}}(\underline{\boldsymbol{x}}, \underline{\boldsymbol{y}}) = 0 \qquad \forall \underline{\boldsymbol{x}}, \underline{\boldsymbol{y}} \in P \tag{13}$$

$$iE_{\mathbb{C}}(\underline{\boldsymbol{x}}, \bar{\underline{\boldsymbol{x}}}) < 0 \qquad \forall \underline{\boldsymbol{x}} \in P \setminus \{0\}. \tag{14}$$

Wegen (11) und (12) folgt $P = \{i\boldsymbol{x} - J\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in V\}$ (vgl. [21, S. 171] und [23, S. 18]). Mit $\underline{\boldsymbol{z}} := i\boldsymbol{x} - J\boldsymbol{x} \in P$, $\boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^g, \boldsymbol{x} \in V$ folgt

$$\begin{aligned} i\boldsymbol{z} &= i\omega\boldsymbol{x} = \omega i\boldsymbol{x} = \omega(\underline{\boldsymbol{z}} + J\boldsymbol{x}) \\ \overline{i\boldsymbol{z}} &= \overline{i\omega}\boldsymbol{x} = \bar{\omega}(-i\boldsymbol{x}) = \bar{\omega}(\bar{\underline{\boldsymbol{z}}} + J\boldsymbol{x}) \qquad \text{oder} \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} i\boldsymbol{z} \\ \overline{i\boldsymbol{z}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & -i\mathbb{I}_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix} J\boldsymbol{x} + \begin{pmatrix} \omega\underline{\boldsymbol{z}} \\ \bar{\omega}\bar{\underline{\boldsymbol{z}}} \end{pmatrix}.$$

Man fordert $\omega\underline{\boldsymbol{z}} \doteq 0$ und hat

$$J = \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} i\mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & -i\mathbb{I}_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}, \tag{15}$$

(vgl. [18, S. 76]). Es gilt $JJ = -\mathbb{I}_{2g}$ und

$$J = (\Pi, \bar{\Pi}) \begin{pmatrix} i\omega \\ -i\bar{\omega} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Pi_1 & \bar{\Pi}_1 \\ \Pi_2 & \bar{\Pi}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\omega_1 & i\omega_2 \\ -i\bar{\omega}_1 & -i\bar{\omega}_2 \end{pmatrix} = \bar{J},$$

wobei $\Pi = \binom{\Pi_1}{\Pi_2}$, $\omega = (\omega_1, \omega_2)$ mit $\Pi_1, \Pi_2, \omega_1, \omega_2 \in M(g, \mathbb{C})$ gesetzt wurde. J in (11) eingesetzt gibt

$$\begin{aligned}
{}^tJEJ &\doteq E \\
\begin{pmatrix} i\mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & -i\mathbb{I}_g \end{pmatrix} {}^t\!\begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}^{-1} E \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} i\mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & -i\mathbb{I}_g \end{pmatrix} &\doteq {}^t\!\begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}^{-1} E \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}^{-1} \\
\begin{pmatrix} i\mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & -i\mathbb{I}_g \end{pmatrix} {}^t(\Pi, \bar{\Pi}) E\, (\Pi, \bar{\Pi}) \begin{pmatrix} i\mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & -i\mathbb{I}_g \end{pmatrix} &\doteq {}^t(\Pi, \bar{\Pi}) E\, (\Pi, \bar{\Pi}) \\
\begin{pmatrix} -{}^t\Pi E \Pi & {}^t\Pi E \bar{\Pi} \\ {}^t\bar{\Pi} E \Pi & -{}^t\bar{\Pi} E \bar{\Pi} \end{pmatrix} &\doteq \begin{pmatrix} {}^t\Pi E \Pi & {}^t\Pi E \bar{\Pi} \\ {}^t\bar{\Pi} E \Pi & {}^t\bar{\Pi} E \bar{\Pi} \end{pmatrix} \\
\text{folglich} \quad {}^t\Pi E \Pi &\doteq 0
\end{aligned} \tag{16}$$

und aus (12) folgt mit (16)

$$\begin{aligned}
{}^t\boldsymbol{x}{}^tJE\, \boldsymbol{x} &\dot{>} 0 \\
{}^t\boldsymbol{x}\, {}^t\!\begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & -i\mathbb{I}_g \end{pmatrix} {}^t(\Pi, \bar{\Pi}) E\, (\Pi, \bar{\Pi}) \begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix} \boldsymbol{x} &\dot{>} 0 \\
{}^t\!\begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ \bar{\boldsymbol{z}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i\, {}^t\Pi E \bar{\Pi} \\ -i\, {}^t\bar{\Pi} E \Pi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ \bar{\boldsymbol{z}} \end{pmatrix} &\dot{>} 0 \\
-2i\, {}^t\bar{\boldsymbol{z}}\, {}^t\bar{\Pi} E \Pi \boldsymbol{z} &\dot{>} 0 \quad \forall \boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^g \setminus \{0\} \\
\text{folglich} \quad -i\, {}^t\bar{\Pi} E \Pi &\dot{>} 0.
\end{aligned} \tag{17}$$

Somit gilt (vgl. [6, S. 69], [12, S. 303], [26, S. 72] bzw. [18, S. 75]):

Korollar (Riemannsche Bedingungen). *Der komplexe Torus $M = \mathbb{C}^g/\Lambda$ ist eine Abelsche Varietät genau dann, wenn eine ganzzahlige schiefsymmetrische Matrix E existiert, so daß*

$${}^t\Pi E \Pi = 0$$

und

$$-i\, {}^t\bar{\Pi} E \Pi > 0$$

ist.[3]

Nach einem Satz von FROBENIUS (vgl. [6, S. 75], [12, S. 304] oder [26, S. 65]) gibt es zu jeder regulären ganzzahligen schiefsymmetrischen Matrix $E \in M(2g, \mathbb{Z})$ eine unimodulare ($\det \mathfrak{M} = \pm 1$) ganzzahlige Matrix $\mathfrak{M} \in M(2g, \mathbb{Z})$, so daß

$$\mathfrak{M} E\, {}^t\mathfrak{M} = \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D & 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

$$\text{mit} \quad D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_g \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad d_1 | d_2 | \dots | d_g, \quad 0 < d_i \in \mathbb{N}$$

[3] Mit $-i\, {}^t\bar{\Pi} E \Pi$ ist auch ${}^t(-i\, {}^t\bar{\Pi} E \Pi) = i\, {}^t\Pi E \bar{\Pi}$ hermitesch positiv definit. Mit $E = -Q$ hat (17) genau das Aussehen der zweiten Bedingung in [12, S. 303].

ist. Die Matrix $\left(\begin{smallmatrix} 0 & D \\ -D & 0 \end{smallmatrix}\right)$ nennt man *Polarisation* der Abelschen Varietät, $d_1, d_1, d_2, d_2, \dots, d_g, d_g$ sind die Elementarteiler von E [6, S. 76]. Im Falle $D = \mathbb{I}_g$ liegt eine *hauptpolarisierte* Abelsche Varietät vor. (18) bedeutet in der Form E praktisch den Übergang zu einer äquivalenten Gitterbasis für Λ, in welcher Λ in zwei Teilgitter bezüglich E zerfällt. Im Lichte der Riemannschen Bedingungen ist also ein komplexer Torus genau dann eine Abelsche Varietät, wenn er eine Polarisation zuläßt [18, S. 72]; daraus folgt dann die Dekomposition des Gitters.

Der Begriff des Idealkristalls führte a priori auf das dekomponierte Gitter (8), so daß man vermuten kann, daß $\mathbb{C}^g/\Lambda$ eine Abelsche Varietät sei. In der Tat, man denke sich $\mathbb{C}^g$ und $\mathbb{R}^{2g}$ mit den cartesischen Basen $\{\mathfrak{e}_{0\alpha}\}_{\alpha=1}^{g}$ und $\{\boldsymbol{e}_{0j}\}_{j=1}^{2g}$ versehen und wähle die komplexe Struktur J_0

$$\mathbb{R}^{2g} \ni \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} \longrightarrow (i\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)}) \in \mathbb{C}^g$$

$$J_0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_g \\ -\mathbb{I}_g & 0 \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Die Periodenmatrix $\omega = (\omega_1, \omega_2)$ folgt aus (9)

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & {}^tA \end{pmatrix} &= (\omega_1, \omega_2) \\ &= (\text{Re } \omega_1 + i\text{Im } \omega_1, \text{Re } \omega_2 + i\text{Im } \omega_2) \\ &= \left(\begin{pmatrix} 0 \\ \text{Re } \omega_1 \end{pmatrix} + J_0 \begin{pmatrix} 0 \\ \text{Im } \omega_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \text{Re } \omega_2 \end{pmatrix} + J_0 \begin{pmatrix} 0 \\ \text{Im } \omega_2 \end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{pmatrix} \text{Im } \omega_1 & \text{Im } \omega_2 \\ \text{Re } \omega_1 & \text{Re } \omega_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

zu

$$\omega = (iA^{-1},\ {}^tA); \tag{20}$$

$$\text{daher} \quad \Pi = \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}A \\ \frac{1}{2}\ {}^tA^{-1} \end{pmatrix}, \quad \text{so daß}$$

$$\begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix} (\Pi, \bar{\Pi}) = \begin{pmatrix} iA^{-1} & {}^tA \\ -iA^{-1} & {}^tA \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}A & \frac{i}{2}A \\ \frac{1}{2}\ {}^tA^{-1} & \frac{1}{2}\ {}^tA^{-1} \end{pmatrix} = \mathbb{I}_{2g}.$$

Der Test der Riemannschen Bedingungen (16) und (17) gibt mit $E = \left(\begin{smallmatrix} 0 & \mathbb{I}_g \\ -\mathbb{I}_g & 0 \end{smallmatrix}\right)$

$$\begin{aligned} {}^t\Pi E \Pi &= (-\frac{i}{2}\ {}^tA, \frac{1}{2}A^{-1}) \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_g \\ -\mathbb{I}_g & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}A \\ \frac{1}{2}\ {}^tA^{-1} \end{pmatrix} \\ &= -\frac{i}{4}\mathbb{I}_g + \frac{i}{4}\mathbb{I}_g = 0, \\ -i\ {}^t\bar{\Pi} E \Pi &= -i(\frac{i}{2}\ {}^tA, \frac{1}{2}A^{-1}) \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_g \\ -\mathbb{I}_g & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}A \\ \frac{1}{2}\ {}^tA^{-1} \end{pmatrix} \\ &= -i(\frac{i}{4}\mathbb{I}_g + \frac{i}{4}\mathbb{I}_g) = \frac{1}{2}\mathbb{I}_g > 0, \end{aligned}$$

so daß sich der Idealkristall mit dem Gitter (8) ohne Anwendung des Frobeniusschen Satzes als hauptpolarisierte Abelsche Varietät erweist, da $D = \mathbb{I}_g$ ist.

Man normalisiert die Periodenmatrix (20), indem man $\mathbb{C}^g$ auf die Basis von $V_{(2)}$ bezieht:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\lambda}_i &= \sum_{\alpha=1}^{g} \omega_{\alpha i}\mathfrak{e}_{0\alpha} \\
&= \sum_{\alpha,\beta=1}^{g} \omega_{\alpha i} A^{-1}_{\alpha\beta}\, \boldsymbol{\lambda}_{(2)\beta} \qquad \text{vgl. (4)} \\
&= \sum_{\beta=1}^{g} \left(\sum_{\alpha=1}^{g} ({}^tA^{-1})_{\beta\alpha}\omega_{\alpha i} \right) \boldsymbol{\lambda}_{(2)\beta} \\
&= \sum_{\beta=1}^{g} (i\ {}^tA^{-1}A^{-1}, \mathbb{I}_g)_{\beta i}\, \boldsymbol{\lambda}_{(2)\beta}.
\end{aligned}$$

Der Idealkristall hat also die Periodenmatrix $\omega = (\Omega, \mathbb{I}_g)$ mit

$$\Omega = i\ {}^tA^{-1}A^{-1} =: iY. \tag{21}$$

Ω ist symmetrisch und hat einen positiv definiten Imaginärteil. Die komplexe Variable bezüglich der Basis von $V_{(2)}$ lautet

$$\boldsymbol{z} = \Omega \boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)}, \tag{22}$$

und die zugehörige komplexe Struktur (15) ist

$$J = \begin{pmatrix} 0 & Y^{-1} \\ -Y & 0 \end{pmatrix}. \tag{23}$$

Zusammengefaßt gilt der

Satz 2. *Die Kristallgitter $\Lambda = \Lambda_{(1)} \oplus \Lambda_{(2)} \subset V$ mit der Basis*

$$\{\boldsymbol{\lambda}_j\}_{j=1}^{2g} = (\boldsymbol{\lambda}_1, \ldots, \boldsymbol{\lambda}_{2g}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{(1)} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\lambda}_{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & {}^tA \end{pmatrix}$$

$A \in M(g, \mathbb{R})$, $\det A \neq 0$ *verursachen eine hauptpolarisierte Abelsche Varietät $\mathbb{C}^g/\Lambda$ mit*

$$\begin{aligned}
\textit{der komplexen Variablen} \quad & \boldsymbol{z} = \Omega\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)}, \\
\textit{der Periodenmatrix} \quad & \omega = (\Omega, \mathbb{I}_g) = (i\ {}^tA^{-1}A^{-1},\ \mathbb{I}_g), \\
\textit{der komplexen Struktur} \quad & J = \begin{pmatrix} 0 & Y^{-1} \\ -Y & 0 \end{pmatrix}, \\
\textit{und der nichtausgearteten alternierenden Bilinearform} \quad & E = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_g \\ -\mathbb{I}_g & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Bemerkung 1. Integriert man die holomorphen Differentiale auf einer kompakten Riemannfläche C vom Geschlecht g längs der Homologiebasis und faktorisiert $\mathbb{C}^g$ mit dem Ergebnis dieser Integration, so erhält man ebenfalls eine hauptpolarisierte Abelsche Varietät, die *Jacobische Mannigfaltigkeit* $\mathrm{Jac}(C)$ [20]. Das Schottky-Problem besteht in der Frage, welche der hauptpolarisierten

Abelschen Varietäten Jacobische Mannigfaltigkeiten sind [20, 25]. Durch Zählung der komplexen Parameter stellt man fest, daß die g–dimensionalen hauptpolarisierten Abelschen Varietäten von $g(g+1)/2$ komplexen Parametern (den Matrixelementen von Ω), die allgemeinen kompakten Riemannflächen vom Geschlecht $g > 1$ von $3g-3$ komplexen Parametern [12, S. 256] und die *hyperelliptischen* Riemannflächen vom Geschlecht g von $2g-1$ komplexen Parametern [12, S. 255] abhängen. Für $g = 3$ sind alle von Kristallgittern herrührenden hauptpolarisierten Abelschen Varietäten Jacobische Mannigfaltigkeiten, genauer gilt

Satz 3 (Kriterium von MATSUSAKA–RAN). *Eine dreidimensionale ($g = 3$) hauptpolarisierte Abelsche Varietät ist entweder die Jacobische Mannigfaltigkeit einer glatten Kurve vom Geschlecht 3 oder das hauptpolarisierte Produkt einer Abelschen Fläche mit einer elliptischen Kurve bzw. dreier elliptischer Kurven [18, S. 348].* □

Die Frage, ob diese Jacobischen Mannigfaltigkeiten ($g = 3$) zu hyperelliptischen Riemannflächen gehören, kann mittels eines Kriteriums von MUMFORD [22, §9] für einige der Kristallgitter verneint werden.

Bemerkung 2. Die allgemeine hauptpolarisierte Abelsche Varietät hat die Periodenmatrix $\omega = (X+iY, \mathbb{I}_g)$, ${}^t(X+iY) = X+iY$, $Y > 0$, dann ist

$$\begin{pmatrix} \omega \\ \bar{\omega} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}Y^{-1} & \frac{i}{2}Y^{-1} \\ \frac{1}{2}\mathbb{I}_g + \frac{i}{2}XY^{-1} & \frac{1}{2}\mathbb{I}_g - \frac{i}{2}XY^{-1} \end{pmatrix}$$

und nach (15)

$$J = \begin{pmatrix} Y^{-1}X & Y^{-1} \\ -Y - XY^{-1}X & -XY^{-1} \end{pmatrix},$$

vgl. [18, S. 246, Aufg. 10].

Bemerkung 3. Die euklidische Metrik auf V in Kristallkoordinaten ist

$$g_{ij} = {}^t\boldsymbol{\lambda}_i \otimes \boldsymbol{\lambda}_j = \begin{pmatrix} Y & 0 \\ 0 & Y^{-1} \end{pmatrix}_{ij}.$$

Das Skalarprodukt zweier Vektoren $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ ergibt also

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i,j=1}^{2g} g_{ij}\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{y}_j = {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}Y\boldsymbol{y}_{(1)} + {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}Y^{-1}\boldsymbol{y}_{(2)}. \tag{24}$$

Auf $\mathbb{C}^g$ in der Basis von $V_{(2)}$ ist die komplexe Metrik $g^{\mathbb{C}} = Y^{-1}$ und das Skalarprodukt für $\boldsymbol{u} := \Omega\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)}$, $\boldsymbol{v} := \Omega\boldsymbol{y}_{(1)} + \boldsymbol{y}_{(2)}$ ist

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{u}, \bar{\boldsymbol{v}}) &= {}^t(\Omega\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)})Y^{-1}(\bar{\Omega}\boldsymbol{y}_{(1)} + \boldsymbol{y}_{(2)}) \\ &= {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}Y\boldsymbol{y}_{(1)} + {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}Y^{-1}\boldsymbol{y}_{(2)} + i\,({}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{y}_{(2)} - {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}\boldsymbol{y}_{(1)}) \\ &= H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = E(J\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + iE(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \end{aligned} \tag{25}$$

mit $E = \left(\begin{smallmatrix} 0 & \mathbb{I}_g \\ -\mathbb{I}_g & 0 \end{smallmatrix}\right)$, $J = \left(\begin{smallmatrix} 0 & Y^{-1} \\ -Y & 0 \end{smallmatrix}\right)$. Beide Formeln messen natürlich für $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ das Quadrat der euklidischen Länge des Vektors $\boldsymbol{x} \in V \cong \mathbb{R}^{2g}$.

3 Reelle Heisenberggruppe und Gitterdarstellung

Sei $\mathcal{G}$ das cartesische Produkt von $\mathbb{C}_1^* = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$ mit $V \cong \mathbb{R}^{2g}$

$$\mathcal{G} = \mathbb{C}_1^* \times V.$$

$\mathcal{G}$ wird zu einer nichtabelschen Gruppe G, wenn als Multiplikation auf $\mathcal{G}$

$$(\lambda, \boldsymbol{x}) \cdot (\mu, \boldsymbol{y}) = (\lambda\mu\iota(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) \qquad \lambda, \mu \in \mathbb{C}_1^*;\ \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V \tag{26}$$
$$\iota : V \times V \longrightarrow \mathbb{C}_1^*$$

definiert wird. Damit die Assoziativität der Multiplikation auf $\mathcal{G}$ gesichert ist, muß ι die Relation

$$\iota(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \cdot \iota(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) = \iota(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) \cdot \iota(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \qquad \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in V$$

erfüllen. Sei $\tilde{x} = (\lambda, \boldsymbol{x})$, $\tilde{y} = (\mu, \boldsymbol{y}) \in G$, dann ist der Kommutator $\tilde{x}\tilde{y}\tilde{x}^{-1}\tilde{y}^{-1}$ aus $\mathbb{C}_1^*$ und hängt nur von $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y} \in V$ ab. Somit ist durch $e(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := \tilde{x}\tilde{y}\tilde{x}^{-1}\tilde{y}^{-1}$ eine Abbildung

$$e : V \times V \longrightarrow \mathbb{C}_1^*$$

definiert, für die

$$e(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \frac{\iota(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})}{\iota(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x})}$$

gilt. Sei $\hat{V}$ die Charaktergruppe [19, S. 216] von V und sei $\varphi : V \longrightarrow \hat{V}$ definiert durch

$$\varphi[\boldsymbol{x}](\boldsymbol{y}) = e(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}).$$

Definition 2. G heißt *Heisenberggruppe*, wenn φ ein Isomorphismus ist [23, S. 2].

G sei im folgenden immer *Heisenberggruppe*, sie wird auch als $Heis(V)$ oder $Heis(2g, \mathbb{R})$ bezeichnet.

V ist als Vektorraum auch eine lokalkompakte abelsche Gruppe.

Definition 3. Die abgeschlossene Untergruppe $H \subset V$ heißt *isotrop*, falls $e_{H \times H} \equiv 1$ ist.

Ist H eine *maximale* abgeschlossene Untergruppe von V mit $e_{H \times H} \equiv 1$, so heißt H *maximal isotrop*. Für jede maximal isotrope Untergruppe $H \subset V$ gilt $H = H^\perp$ mit $H^\perp := \{\boldsymbol{x} \in V \mid e(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 1 \ \ \forall \boldsymbol{y} \in H\}$. Man kann zeigen [23, S. 2], daß die beiden folgenden Eigenschaften einer abgeschlossenen Untergruppe $H \subset V$ äquivalent sind:

i) H ist isotrop;

ii) $\pi : G \longrightarrow V$ ist zerlegbar über H, d. h. es existiert ein Homomorphismus $\sigma : H \longrightarrow G$, so daß $\pi \circ \sigma = 1_H$, wobei π die Projektion von G auf V ist.

Bezüglich der Multiplikation in G ist eine Zerlegung von π über H durch eine Funktion

$$\sigma(\boldsymbol{x}) = (\alpha(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x}) \qquad \forall \boldsymbol{x} \in H \tag{27}$$

$$\text{mit} \quad \sigma(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) = \sigma(\boldsymbol{x}) \cdot \sigma(\boldsymbol{y}) \qquad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in H \tag{28}$$

$$\text{beziehungsweise} \quad \frac{\alpha(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y})}{\alpha(\boldsymbol{x}) \cdot \alpha(\boldsymbol{y})} = \iota(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \qquad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in H$$

gegeben.

Grundlegend für die Betrachtung konkreter Darstellungen der Heisenberggruppe ist der folgende

Satz 4 (STONE – VON NEUMANN – MACKEY). *Sei G Heisenberggruppe. Dann*

i) hat G eine eindeutige irreduzible unitäre Darstellung

$$U : G \longrightarrow Aut(\mathcal{H}_0)$$

so daß $U_\lambda = \lambda \cdot id.\ \forall \lambda \in \mathbb{C}_1^*$.

ii) kann diese Darstellung U für alle maximal isotropen Untergruppen $H \subset V$ und Zerlegungen $\sigma(\boldsymbol{x}) = (\alpha(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x})$ von π über H verwirklicht werden durch

$$\mathcal{H}_0 = \left\{ \begin{array}{ll} & \textit{meßbare Funktionen} \quad f : V \longrightarrow \mathbb{C} \quad \textit{mit} \\ a) & f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) = \alpha(\boldsymbol{h})^{-1}\ \iota(\boldsymbol{h},\boldsymbol{x})^{-1}\ f(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{h} \in H \\ b) & \int_{V/H} |f(\boldsymbol{x})|^2 d\boldsymbol{x} < \infty \end{array} \right\}$$

$$U_{(\lambda,\boldsymbol{y})}\ f(\boldsymbol{x}) = \lambda\ \iota(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\ f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}).$$

Dieser $\mathcal{H}_0$ wird als $L^2(V//H)$ bezeichnet.

iii) sind alle Darstellungen $(U, \mathcal{H})$ mit $U_\lambda = \lambda \cdot id.$, $\forall \lambda \in \mathbb{C}_1^*$, isomorph zu $\mathcal{H}_0 \hat{\otimes} \mathcal{H}_1$, wobei G trivial auf $\mathcal{H}_1$ operiert. □

Bemerkung 4. Der vorstehende Satz kann wesentlich allgemeiner formuliert und bewiesen werden [23]. Andere Beweise sind in [10, S. 35] und in [19, S. 276 - 278] zu finden. Die vorliegende Formulierung von Satz 4 ist eine auf den für diese Arbeit relevanten Fall $V \cong \mathbb{R}^{2g}$ beschränkte direkte Wiedergabe von [23, S. 1 - 4].

Bemerkung 5. Zur nichtrelativistischen Quantenmechanik gelangt man, wenn man V mit einer alternierenden nichtausgearteten Bilinearform E versieht und als *Phasenraum*, d. h. als *symplektischen* Vektorraum betrachtet sowie eine Beziehung zwischen $e(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ und $E(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ herstellt. Das Auftreten von *Funktionalgleichungen* auf den maximal isotropen Untergruppen $H \subset V$ ist das wesentliche Phänomen. Es ist je nach Blickwinkel Voraussetzung, Widerspiegelung oder Folgerung der Heisenbergschen Unschärferelation für die infinitesimalen Operatoren der Darstellung $U_{(\lambda,\boldsymbol{y})}$.

Bemerkung 6. Die verschiedenen Darstellungen der nichtrelativistischen Operator–Quantenmechanik entsprechen der Wahl verschiedener maximal isotroper Untergruppen $H \subset V$.

Sei V wieder der Vektorraum aus Abschnitt 2 mit der in Satz 2 zusammengefaßten Geometrie. Die Form E ist invariant bezüglich regulärer linearer Transformationen von einem Kristallgitter Λ auf irgendein anderes Kristallgitter Λ'. Die Dekomposition des Kristallgitters Λ ermöglicht die Festsetzung

$$e(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := \exp(2\pi i E(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})), \qquad \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V. \tag{29}$$

Daraus folgt $\iota(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \exp(\pi i E(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}))$ und die Heisenberggruppe $Heis(V) \equiv Heis(2g, \mathbb{R})$ ist als Menge der Paare $(\lambda, \boldsymbol{x})$, $\lambda \in \mathbb{C}_1^*$, $\boldsymbol{x} \in V$ mit der Multiplikation

$$(\lambda, \boldsymbol{x}) \cdot (\mu, \boldsymbol{y}) = (\lambda\mu \exp(\pi i E(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})), \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) \tag{30}$$

gegeben. Es ist offensichtlich, daß $V_{(1)}$ bzw. $V_{(2)}$ maximal isotrop bezüglich (29) sind. Die Wahl $H = V_{(1)}$ führt zur

Ortsdarstellung: $\mathcal{H}_2 := L^2(V_{(2)})$–Funktionen $\phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) : V_{(2)} \longrightarrow \mathbb{C}$, d. h.

$$\int_{V_{(2)}} |\phi(\boldsymbol{x}_{(2)})|^2 \, d\boldsymbol{x}_{(2)} < \infty$$

mit der Darstellung

$$U_{\left(\lambda, \binom{\boldsymbol{y}_{(1)}}{\boldsymbol{y}_{(2)}}\right)} \phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) = \lambda \exp(-2\pi i \, {}^t\boldsymbol{x}_{(2)} \boldsymbol{y}_{(1)} - \pi i \, {}^t\boldsymbol{y}_{(1)} \boldsymbol{y}_{(2)}) \phi(\boldsymbol{x}_{(2)} + \boldsymbol{y}_{(2)})$$

$\boldsymbol{y}_{(1)} \in V_{(1)}; \boldsymbol{x}_{(2)}, \boldsymbol{y}_{(2)} \in V_{(2)}$.

Die Darstellung $U_{(\lambda, \boldsymbol{y})}$ von $(\lambda, \boldsymbol{y}) \in \mathit{Heis}(2g, \mathbb{R})$ folgt aus der Funktionalgleichung nach Satz 4 für die Ortsdarstellung $(\alpha(\boldsymbol{y}_{(1)}) = 1)$

$$f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{h} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} = \exp(-\pi i \, {}^t\boldsymbol{h} \boldsymbol{x}_{(2)}) f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{h} \in V_{(1)}$$

$$\text{also} \quad f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} = \exp(-\pi i \, {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} \boldsymbol{x}_{(2)}) f\begin{pmatrix} 0 \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix},$$

daher sind die Funktionen aus $\mathcal{H}_2$ durch ihre Einschränkung auf $V_{(2)}$ bestimmt. Es wurde $\phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) := f\binom{0}{\boldsymbol{x}_{(2)}}$ gesetzt.

Die Wahl $H = V_{(2)}$ führt zur

Impulsdarstellung: $\mathcal{H}_1 := L^2(V_{(1)})$–Funktionen $\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}) : V_{(1)} \longrightarrow \mathbb{C}$, d. h.

$$\int_{V_{(1)}} |\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)})|^2 \, d\boldsymbol{x}_{(1)} < \infty$$

mit der Darstellung

$$U_{\left(\lambda, \binom{\boldsymbol{y}_{(1)}}{\boldsymbol{y}_{(2)}}\right)} \varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}) = \lambda \exp(2\pi i \, {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} \boldsymbol{y}_{(2)} + \pi i \, {}^t\boldsymbol{y}_{(1)} \boldsymbol{y}_{(2)}) \varphi(\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{y}_{(1)}),$$

$$\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}) := f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ 0 \end{pmatrix},$$

(vgl. [23, S. 16]).

Für zwei Gittervektoren $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}' \in \Lambda$ gilt

$$\exp(2\pi i E(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}')) = 1, \tag{31}$$

weil die Form E auf Λ ganzzahlig ist[4]. Folglich ist Λ isotrop in V bezüglich (29). Λ ist sogar maximal isotrop in V, weil es kein Gitter $\tilde{\Lambda} \subset V$ gibt, das Λ als echte Untergruppe enthält und (31) $\forall \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}' \in \tilde{\Lambda}$ erfüllt. Als Zerlegung setzt man mit [23, S. 16]

$$\sigma(\boldsymbol{\lambda}) = \sigma\begin{pmatrix} \sum_i n_i \boldsymbol{\lambda}_{(1)i} \\ \sum_i m_i \boldsymbol{\lambda}_{(2)i} \end{pmatrix} = (\exp(\pi i \, {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}), \boldsymbol{\lambda}) \quad \forall \boldsymbol{\lambda} \in \Lambda$$

[4] In Kristallkoordinaten ist ein Gittervektor durch ein $2g$–tupel ganzer Zahlen gegeben.

und erhält für $H = \Lambda$ die[5]

Gitterdarstellung: $\mathcal{H}_\Lambda :=$ Funktionen $f : \mathbb{R}^{2g} \longrightarrow \mathbb{C}$ mit

$$\int_{V/\Lambda} \left| f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} \right|^2 d\boldsymbol{x}_{(1)} d\boldsymbol{x}_{(2)} < \infty,$$

$$f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{n} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} + \boldsymbol{m} \end{pmatrix} = \exp\bigl(\pi i({}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m} - {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)} + {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)})\bigr)\, f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix}, \qquad \forall \begin{pmatrix} \boldsymbol{n} \\ \boldsymbol{m} \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^{2g} \tag{32}$$

und der Darstellung

$$U_{\left(\lambda, \binom{\boldsymbol{y}_{(1)}}{\boldsymbol{y}_{(2)}}\right)} f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} = \lambda\ \iota(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{y}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} + \boldsymbol{y}_{(2)} \end{pmatrix}$$

(vgl. [23, S. 17]).

$\mathcal{H}_\Lambda$ wird auch als $L^2(V/\!/\Lambda)$ oder als $L^2(\mathbb{R}^{2g}/\!/\mathbb{Z}^{2g})$ bezeichnet.

Der Vollständigkeit halber sei die *Fockdarstellung* erwähnt. Man erhält sie, indem man die Wirkung der Heisenberggruppe auf den Thetafunktionen (1) folgendermaßen ansetzt

$$U_{(\lambda,\boldsymbol{y})} \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} (\Omega \boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)}, \Omega) \overset{\text{def.}}{=} \lambda^{-1} \exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{y}_{(1)} \boldsymbol{y}_{(2)}) \vartheta \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_{(1)} \\ \boldsymbol{y}_{(2)} \end{bmatrix} (\Omega \boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)}, \Omega) \tag{33}$$

(vgl. [21, S. 10]) und dann auf den Raum der holomorphen Funktionen f über $\mathbb{C}^g$ mit der Norm $\int |f(\Omega \boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)})|^2 \exp(-2\pi\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} \mathrm{Im}(\Omega) \boldsymbol{x}_{(1)}) d\boldsymbol{x}_{(1)} d\boldsymbol{x}_{(2)}$ (*Fockraum*) ausdehnt (vgl. [23, S. 20]).

Ist $\phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) \in \mathcal{H}_2$ gegeben, so kann man die $Heis(V)$–äquivarianten Elemente $\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}) \in \mathcal{H}_1$ und $f\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}} \in \mathcal{H}_\Lambda$ berechnen. Es ist

$$f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} = \sum_{\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^g} \phi(\boldsymbol{x}_{(2)} + \boldsymbol{m}) \exp(-2\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)} - \pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} \boldsymbol{x}_{(2)}) \tag{34}$$

mit der Umkehrung

$$\phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) = \int\limits_{V_{(1)}/\Lambda_{(1)}} f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} \exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} \boldsymbol{x}_{(2)})\ d\boldsymbol{x}_{(1)}; \tag{35}$$

weiterhin [23, S. 17]

$$f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} = \sum_{\boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}^g} \varphi(\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{n}) \exp(2\pi i\ {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)} + \pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} \boldsymbol{x}_{(2)}) \tag{36}$$

und umgekehrt

$$\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}) = \int\limits_{V_{(2)}/\Lambda_{(2)}} f\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)} \end{pmatrix} \exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} \boldsymbol{x}_{(2)})\ d\boldsymbol{x}_{(2)}. \tag{37}$$

[5] FEAGIN [8, Kap. 12] bezeichnet die diskrete Approximation der Wellenfunktion in der Orts– bzw. der Impulsdarstellung als *Gitterdarstellung* der Wellenfunktion. Das hat natürlich nichts mit der folgenden Definition zu tun.

Aus (34) und (36) folgt

$$\begin{aligned}
&\sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} \varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}+\boldsymbol{n})\exp(2\pi i\, {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)})\\
&\qquad = \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g} \phi(\boldsymbol{x}_{(2)}+\boldsymbol{m})\exp(-2\pi i\, {}^t(\boldsymbol{m}+\boldsymbol{x}_{(2)})\boldsymbol{x}_{(1)})\\
&\qquad = \int \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g} \phi(\boldsymbol{y}_{(2)})\delta(\boldsymbol{x}_{(2)}+\boldsymbol{m}-\boldsymbol{y}_{(2)})\exp(-2\pi i\, {}^t\boldsymbol{y}_{(2)}\boldsymbol{x}_{(1)})\,d\boldsymbol{y}_{(2)}\\
&\qquad = \int \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} \phi(\boldsymbol{y}_{(2)})\exp(2\pi i\, {}^t\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}_{(2)}-\boldsymbol{y}_{(2)}))\ \exp(-2\pi i\, {}^t\boldsymbol{y}_{(2)}\boldsymbol{x}_{(1)})\,d\boldsymbol{y}_{(2)}\\
&\qquad = \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} \int \phi(\boldsymbol{y}_{(2)})\exp(-2\pi i\, {}^t(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{x}_{(1)})\boldsymbol{y}_{(2)})\,d\boldsymbol{y}_{(2)}\exp(2\pi i\, {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)}),
\end{aligned}$$

so daß der Koeffizientenvergleich

$$\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}) = \int_{V_{(2)}} \phi(\boldsymbol{x}_{(2)})\ \exp(-2\pi i\, {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{x}_{(2)})\,d\boldsymbol{x}_{(2)} \tag{38}$$

ergibt, d. h. Funktionen der Impulsdarstellung $\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)})$ sind die Fouriertransformierten der Funktionen der Ortsdarstellung $\phi(\boldsymbol{x}_{(2)})$ [7, §24]. Bei dieser Rechnung ist zu berücksichtigen, daß alle Koordinaten Kristallkoordinaten sind und $\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g$ die Koordinaten eines Gittervektors aus $\Lambda_{(2)}$, $\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g$ diejenigen eines Gittervektors aus $\Lambda_{(1)}$ bedeuten.

Neben (34) und (36) gibt es eine weitere Methode [23, S. 28] zur Bildung von Funktionen aus $L^2(V/\!/\Lambda)$. Sei $g\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{2g})$ eine schnellfallende C^∞-Funktion, dann ist

$$f(\boldsymbol{x}) := \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^{2g}} \exp\big(\pi i(\,{}^t\boldsymbol{n}_{(1)}\boldsymbol{n}_{(2)} + {}^t\boldsymbol{n}_{(1)}\boldsymbol{x}_{(2)} - {}^t\boldsymbol{n}_{(2)}\boldsymbol{x}_{(1)})\big)\, g(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{n})$$

aus $L^2(V/\!/\Lambda)$, wie man in direkter Rechnung bestätigt.

Die Heisenberggruppe $Heis(V)$ ist eine Lie–Gruppe und hat als differenzierbare Mannigfaltigkeit zu jedem $\tilde{x}\in Heis(V)$ einen Tangentialraum, die Lie–Algebra $LieHeis(V)$. Für $\tilde{X}\in LieHeis(V)$ ist $\exp(t\tilde{X})\in Heis(V)$ und man definiert

$$\delta U_{\tilde{X}}(f) = \lim_{t\to 0}\frac{(U_{\exp(t\tilde{X})}f)-f}{t} \qquad f\in\mathcal{H} \tag{39}$$

als infinitesimale Operatoren der Darstellung U auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$. Der Definitionsbereich des Grenzwertes (39) wurde von Cartier [4] untersucht[6]. $LieHeis(V)$ hat die Basis[7] [23]

$$A_1,\ldots,A_g,B_1,\ldots,B_g,C,$$

so daß

$$\begin{aligned}
\exp\left(\sum_{i=1}^g x_{(1)i}\ A_i\right) &= \left(1,\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\0\end{pmatrix}\right)\\
\exp\left(\sum_{i=1}^g x_{(2)i}\ B_i\right) &= \left(1,\begin{pmatrix}0\\\boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\right)\\
\exp(tC) &= (\exp(2\pi i t),0)
\end{aligned}$$

[6] Vgl. auch [10, Ch. 1].

[7] Der Vektor $\boldsymbol{A}$ ist nicht mit der Matrix A des Kristallkoordinatensystems zu verwechseln.

geschrieben werden kann. Man erhält gemäss (39)

$$\begin{array}{llll} & \delta U_{A_j}(\cdot) & \delta U_{B_j}(\cdot) & \\ \text{Ortsdarstellung} & -2\pi i x_{(2)j}\phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) & \dfrac{\partial\phi}{\partial x_{(2)j}}(\boldsymbol{x}_{(2)}) & (40) \\ \text{Impulsdarstellung} & \dfrac{\partial\varphi}{\partial x_{(1)j}}(\boldsymbol{x}_{(1)}) & 2\pi i x_{(1)j}\varphi(\boldsymbol{x}_{(1)}) & (41) \\ \text{Gitterdarstellung} & \dfrac{\partial f}{\partial x_{(1)j}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} - \pi i x_{(2)j} f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} & \dfrac{\partial f}{\partial x_{(2)j}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} + \pi i x_{(1)j} f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}. & (42) \end{array}$$

Da $\boldsymbol{x}_{(2)}$ als Ortsvektor und $\boldsymbol{x}_{(1)}$ als Impulsvektor definiert sind, hat man konventionellerweise die δU_{A_j} als die *Ortsoperatoren* und die δU_{B_j} als die *Impulsoperatoren* zu verstehen. Die in der Physik übliche Normierung ist

$$\hat{q}_j = \frac{i}{2\pi}\delta U_{A_j} \qquad \hat{p}_j = -i\hbar\delta U_{B_j} \tag{43}$$

mit den Vertauschungsrelationen [7, §21]

$$\hat{q}_j\hat{p}_l - \hat{p}_l\hat{q}_j = [\hat{q}_j, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{jl}. \tag{44}$$

Aus (43) und (44) folgt

$$[\delta U_{A_j}, \delta U_{B_l}] = 2\pi i\delta_{jl}. \tag{45}$$

Um die ϑ–Funktionen als Matrixelemente darstellen zu können, betrachten MUMFORD ET AL. [23, S. 22] für beliebiges Ω (d. h. $\Omega \in M(g, \mathbb{C})$, ${}^t\Omega = \Omega$, $\mathrm{Im}\Omega > 0$) die Operatoren

$$\hat{a}_i^+ := \delta U_{A_i} - \sum_{j=1}^{g}\Omega_{ij}\delta U_{B_j} \qquad i = 1, 2, \ldots, g$$

und fragen nach der Lösung der Gleichung

$$\hat{a}_i^+ f_\Omega = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, g. \tag{46}$$

Der adjungierte Operator zu $\hat{a}_i^+$ ist

$$\hat{a}_i := -\delta U_{A_i} + \sum_{j=1}^{g}\bar{\Omega}_{ij}\delta U_{B_j} \qquad i = 1, 2, \ldots, g$$

und die Vertauschungsrelation beider

$$[\hat{a}_k^+, \hat{a}_l] = 4\pi(\mathrm{Im}\ \Omega)_{kl}$$

zeigt, daß $\hat{a}_k^+$ und $\hat{a}_l$ für $k \neq l$ im allgemeinen *nicht* miteinander kommutieren. Sie werden daher in dieser Arbeit *nicht* als *Vernichter* bzw. *Erzeuger* bezeichnet.

Trotzdem lohnt es sich, die Lösung von (46) in der Orts– wie auch in der Impulsdarstellung zu berechnen und beide Lösungen in die Gitterdarstellung zu transformieren. Aus physikalischer Sicht muß das Resultat der Rechnung bis auf einen Faktor aus $\mathbb{C}_1^*$ unabhängig vom Ausgangspunkt der Rechnung sein.

In der Ortsdarstellung wird die Gleichung (sei $\Omega = i\ {}^t\!A^{-1}A^{-1}$, vgl. Satz 2)

$$\hat{a}_i^+ \phi^0(\boldsymbol{x}_{(2)}) = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, g$$

durch

$$\phi^0(\boldsymbol{x}_{(2)}) = \exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}\Omega^{-1}\boldsymbol{x}_{(2)})$$

gelöst. Die Norm ist

$$\int_{V_{(2)}} |\exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}\Omega^{-1}\boldsymbol{x}_{(2)})|^2 d\boldsymbol{x}_{(2)} = \frac{1}{2^{g/2}|\det A|}.$$

Die normierte Lösung von (46) lautet demnach in der Ortsdarstellung

$$\phi^0(\boldsymbol{x}_{(2)}) = 2^{g/4}\sqrt{|\det A|}\exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}\Omega^{-1}\boldsymbol{x}_{(2)}).$$

Mittels (34) ist ihr Bild in der Gitterdarstellung

$$\begin{aligned} f^0_\phi\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} &= \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g}\phi^0(\boldsymbol{x}_{(2)}+\boldsymbol{m})\exp(-2\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)} - \pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{x}_{(2)}) \\ &= 2^{g/4}\sqrt{|\det A|}\exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}\boldsymbol{z}')\ \vartheta(\boldsymbol{z}', -\Omega^{-1}) \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{z}' = \boldsymbol{x}_{(1)} + \Omega^{-1}\boldsymbol{x}_{(2)}. \end{aligned} \tag{47}$$

In der Impulsdarstellung ist die normierte Lösung von

$$\hat{a}_i^+ \varphi^0(\boldsymbol{x}_{(1)}) = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, g$$

$$\varphi^0(\boldsymbol{x}_{(1)}) = 2^{g/4}\frac{1}{\sqrt{|\det A|}}\exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\Omega\boldsymbol{x}_{(1)}),$$

deren Bild in $\mathcal{H}_\Lambda$ durch

$$\begin{aligned} f^0_\varphi\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} &= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g}\varphi^0(\boldsymbol{x}_{(1)}+\boldsymbol{n})\exp(2\pi i\ {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)} + \pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{x}_{(2)}) \\ &= \frac{2^{g/4}}{\sqrt{|\det A|}}\exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{z})\ \vartheta(\boldsymbol{z}, \Omega) \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{z} = \Omega\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{x}_{(2)} \\ &= \frac{2^{g/4}}{\sqrt{|\det A|}}\exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{x}_{(2)})\ \vartheta\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{bmatrix}(0, \Omega) \end{aligned} \tag{48}$$

gegeben ist.

Auf den ersten Blick sehen (47) und (48) nicht wie höchstens um einen Faktor aus $\mathbb{C}_1^*$ voneinander verschiedene Funktionen aus. Man bemerkt jedoch $\boldsymbol{z}' = \Omega^{-1}\boldsymbol{z}$ und erhält nun mit Hilfe eines Spezialfalles der ϑ–Funktionalgleichung [21, S. 195]

$$\vartheta(\Omega^{-1}\boldsymbol{z}, -\Omega^{-1}) = \sqrt{\det\left(\frac{\Omega}{i}\right)}\ \exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{z}\Omega^{-1}\boldsymbol{z})\ \vartheta(\boldsymbol{z}, \Omega) \tag{49}$$

die gewünschte Identität:

$$\begin{aligned}
f^0_\phi\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} &= 2^{g/4}\sqrt{|\det A|}\exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(2)}\boldsymbol{z}')\sqrt{\det\left(\frac{\Omega}{i}\right)}\ \exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{z}\Omega^{-1}\boldsymbol{z})\ \vartheta(\boldsymbol{z},\Omega)\\
&= 2^{g/4}\sqrt{|\det A|}\sqrt{\det\left(\frac{\Omega}{i}\right)}\exp\bigl(\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}(\Omega\boldsymbol{x}_{(1)}+\boldsymbol{x}_{(2)})\bigr)\ \vartheta(\boldsymbol{z},\Omega)\\
&= \frac{2^{g/4}}{\sqrt{|\det A|}}\exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{z})\ \vartheta(\boldsymbol{z},\Omega)\\
&= f^0_\varphi\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Damit wird tatsächlich von der Ortsdarstellung wie von der Impulsdarstellung aus für ein und denselben Operator $\hat{a}^+_j,\ j = 1, 2, \ldots, g$ derselbe Zustand in der Gitterdarstellung erreicht. Dies wirft ein gewisses Licht auf die Gitterdarstellung. In der Orts– bzw. der Impulsdarstellung sind ϕ bzw. φ Funktionen nur des Ortes bzw. nur des Impulses. In der Gitterdarstellung sind die $f\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}$ Funktionen von Ort *und* Impuls und müssen die Funktionalgleichung (32) erfüllen, weil sonst gegen die Unschärferelation verstoßen würde: Man hätte ohne (32) Funktionen, nämlich $f\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}$, die Aussagen bezüglich beliebig kleiner Gebiete in $V_{(1)}$ *und* $V_{(2)}$ träfen. Dank (32) kann $f\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}$ nur zu Aussagen modulo des Gitters Λ herangezogen werden.

Die Berechnung der Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{\boldsymbol{q}}$ und $\hat{\boldsymbol{p}}$ in der Gitterdarstellung erfordert zwei Standarddefinitionen [1, 14, 27]:

Definition 4. Zwei Punkte $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ heißen *kongruent* bezüglich des Gitters Λ, wenn $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} \in \Lambda$ gilt.

Definition 5. $F_\Lambda \subset V$ heißt *Fundamentalbereich* von V bezüglich Λ, wenn F_Λ zu jedem Punkt aus V genau einen kongruenten Punkt enthält.

F_Λ ist weder abgeschlossen noch offen. Der einfachste Fundamentalbereich in V für das Gitter Λ ist das Parallelepiped mit Kristallkoordinaten aus $[0,1)^{2g}$.

Sei $\mathfrak{f}_{(i)},\ i = 1, 2$ die Abbildung eines Vektors aus $V_{(i)}$ in den parallelepipedischen Fundamentalbereich $F_{\Lambda_{(i)}}$:

$$\begin{gathered}
\mathfrak{f}_{(i)}:\quad V_{(i)} \longrightarrow F_{\Lambda_{(i)}}\\
V_{(i)} \ni \boldsymbol{x}_{(i)} = \sum_{k=1}^{g} x_{(i)k}\ \boldsymbol{\lambda}_{(i)k} \longrightarrow \mathfrak{f}_{(i)}(\boldsymbol{x}_{(i)}) := \sum_{k=1}^{g}\bigl(x_{(i)k}/\mathbb{Z}\bigr)\ \boldsymbol{\lambda}_{(i)k}.
\end{gathered} \tag{50}$$

Satz 5. *In der Gitterdarstellung hat der Impulsoperator* $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}_{(2)}} + \pi\hbar\boldsymbol{x}_{(1)}$ *die Eigenfunktionen*

$$\psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} := \exp\Bigl(\pi i\ {}^t\Bigl(2(\mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \boldsymbol{\gamma}_{(1)}) - \boldsymbol{x}_{(1)}\Bigr)\ \boldsymbol{x}_{(2)}\Bigr) \in L^2(V//\Lambda); \tag{51}$$

der Ortsoperator $\hat{\boldsymbol{q}} = \dfrac{i}{2\pi}\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}_{(1)}} + \dfrac{1}{2}\boldsymbol{x}_{(2)}$ *hat die Eigenfunktionen*

$$\psi_{(2)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} := \exp\Bigl(-\pi i\ {}^t\Bigl(2(\mathfrak{f}_{(2)}(\boldsymbol{x}_{(2)}) + \boldsymbol{\gamma}_{(2)}) - \boldsymbol{x}_{(2)}\Bigr)\ \boldsymbol{x}_{(1)}\Bigr) \in L^2(V//\Lambda) \tag{52}$$

mit $\boldsymbol{\gamma}_{(i)} \in \Lambda_{(i)}, i = 1, 2$ *als beliebigen Gittervektoren.*

Beweis. Für $\psi_{(1)}$ ist

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = 2\pi\hbar\left(\mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma_{(1)}\right)\ \psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}. \tag{53}$$

Bezüglich der Zugehörigkeit zu $L^2(V/\!\!/\Lambda)$ ist die Befriedigung der Funktionalgleichung (32) zu prüfen:

$$\begin{aligned}
\psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}+\boldsymbol{n}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}+\boldsymbol{m}\end{pmatrix} &= \exp\bigl(\pi i(2\,{}^t\mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})\boldsymbol{m} - {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m} - {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)} - {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)})\bigr)\ \psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\\
&\qquad \text{da}\ \ \mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}+\boldsymbol{n}) = \mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})\ \text{per def.};\ \boldsymbol{n},\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g\\
&= \exp\bigl(\pi i(2\,{}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{m} + {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m} - {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)} - {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)})\bigr)\,\psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\\
&\qquad \text{da}\ \ (\boldsymbol{x}_{(1)} - \mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}))\in\mathbb{Z}^g\ \text{per def.}\\
&\qquad \text{und}\ \ \exp(\pi i\,{}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}) = \exp(-\pi i\,{}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m})\\
&= \exp\bigl(\pi i({}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m} - {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)} + {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)})\bigr)\,\psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Für $\psi_{(2)}$ gilt die Eigenwertgleichung

$$\hat{\boldsymbol{q}}\psi_{(2)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \left(\mathfrak{f}_{(2)}(\boldsymbol{x}_{(2)}) + \gamma_{(2)}\right)\ \psi_{(2)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}. \tag{54}$$

$\psi_{(2)}\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}\in L^2(V/\!\!/\Lambda)$ zeigt man analog zur Rechnung für $\psi_{(1)}\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}$. Die Integrabilität von $|\psi_{(i)}|^2$ in V/Λ ist offensichtlich. □

Bemerkung 7. Die Eigenfunktionen von $\hat{\boldsymbol{q}}$ und $\hat{\boldsymbol{p}}$ liegen bekanntlich weder in der Ortsdarstellung noch in der Impulsdarstellung in $L^2(V_{(2)})$ beziehungsweise in $L^2(V_{(1)})$, weil sie dort nicht integrabel sind.

Bemerkung 8. Über die willkürlich gebliebenen Gittervektoren $\gamma_{(i)},\ i = 1,2$ kann in Abhängigkeit von dem betrachteten Problem verfügt werden. Dies geschieht in Abschnitt 5.

4 Der harmonische Oszillator in der Gitterdarstellung

Ein *harmonischer Oszillator* ist ein einzelner Massepunkt, der sich in einem Potential bewegt, das durch eine reelle symmetrische positiv definite quadratische Form der Ortsoperatoren gegeben ist. Sei m die Masse des Oszillators und ϖ seine Frequenz. Die Operatoren $\hat{\boldsymbol{p}}$ und $\hat{\boldsymbol{q}}$ (43) sind Vektoroperatoren in den Kristallkoordinaten. Da man zur Betrachtung der Gitterdarstellung ein beliebiges, aber fixiertes Kristallgitter Λ (vgl. die Abschnitte 2 und 3) benötigt, wird man zunächst daran denken, die hermitesche Form (10) auf V zur Konstruktion eines Hamiltonoperators für den harmonischen Oszillator heranzuziehen:

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{q}}) &:= \frac{1}{2m}E\left(J\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{p}}\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{p}}\\0\end{pmatrix}\right) + \frac{m}{2}\varpi^2\ E\left(J\begin{pmatrix}0\\\hat{\boldsymbol{q}}\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\\hat{\boldsymbol{q}}\end{pmatrix}\right)\\
&= \frac{1}{2m}\,{}^t\hat{\boldsymbol{p}}Y\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{m}{2}\varpi^2\,{}^t\hat{\boldsymbol{q}}Y^{-1}\hat{\boldsymbol{q}}.
\end{aligned} \tag{55}$$

Man kann nachrechnen, daß der Hamiltonoperator (55) in der Ortsdarstellung und in cartesischen Koordinaten durch den Ausdruck

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{g}\frac{\partial^2}{\partial(x^0_{(2)i})^2}+\frac{m}{2}\varpi^2\sum_{i=1}^{g}(x^0_{(2)i})^2$$

gegeben ist. Man sieht, daß mit dieser Konstruktion alle Kristallgitter denselben Hamiltonoperator erzeugen. Das ist völlig korrekt, denn durch die Benutzung von $E\,(J(\cdot),(\cdot))$ wird gar kein Potential *auf dem* Gitter vorgegeben, sondern es werden nur Abstände im Gitter gemessen.

Der Hamiltonoperator muß demnach in Kristallkoordinaten folgende Gestalt haben

$$\hat{H}(\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{q}})=\frac{1}{2m}\,{}^t\hat{\boldsymbol{p}}Y\hat{\boldsymbol{p}}+V(\hat{\boldsymbol{q}}), \tag{56}$$

speziell für den harmonischen Oszillator

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{q}})&=\frac{1}{2m}\,{}^t\hat{\boldsymbol{p}}Y\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{m}{2}\varpi^2\;{}^t\hat{\boldsymbol{q}}M\hat{\boldsymbol{q}}\\&=\frac{1}{2m}\,{}^t\hat{\boldsymbol{p}}Y\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{m}{2}\varpi^2\;{}^t\hat{\boldsymbol{q}}N\;{}^tN\hat{\boldsymbol{q}}.\end{aligned}$$

Der Ansatz $M=N\;{}^tN$ mit $N\in M(g,\mathbb{R})$, $\det N\neq 0$ sichert, daß das Potential symmetrisch und positiv definit ist.

$\hat{H}_{\text{osz}}$ hat in cartesischen Koordinaten das Aussehen

$$\hat{H}_{\text{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}_0,\hat{\boldsymbol{q}}_0)=\frac{1}{2m}\,{}^t\hat{\boldsymbol{p}}_0\;\hat{\boldsymbol{p}}_0+\frac{m}{2}\varpi^2\;{}^t\hat{\boldsymbol{q}}_0A^{-1}N\;{}^tN\;{}^tA^{-1}\hat{\boldsymbol{q}}_0. \tag{57}$$

Man hat jetzt zwei Schritte zu unternehmen, um das Eigenwertproblem zu lösen: (1) Transformation auf das Hauptachsensystem der Matrix $A^{-1}N\;{}^tN\;{}^tA^{-1}$, die auch symmetrisch und positiv definit ist; (2) Übergang zu dimensionslosen Variablen.

Dabei kommt es zu Transformationen zwischen verschiedenen Kristallgittern. Solche Transformationen seien deshalb in ihrer Wirkung auf die Operatoren $\hat{\boldsymbol{p}}$ und $\hat{\boldsymbol{q}}$ näher betrachtet. Sei $\begin{pmatrix}\boldsymbol{\lambda}_{(1)} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\lambda}_{(2)}\end{pmatrix}$ die Basis eines Kristallgitters. Durch

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\lambda}_{(1)i}&=\sum_{k=1}^{g}({}^tB^{-1})_{ik}\boldsymbol{\lambda}'_{(1)k}\qquad i=1,2,\ldots,g\\ \boldsymbol{\lambda}_{(2)i}&=\sum_{k=1}^{g}B_{ik}\boldsymbol{\lambda}'_{(2)k}\qquad \det B\neq 0,\;\; B\in M(g,\mathbb{R})\end{aligned}$$

wird es auf eine andere Kristallbasis $\begin{pmatrix}\boldsymbol{\lambda}'_{(1)} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\lambda}'_{(2)}\end{pmatrix}$ bezogen. Die Transformation der Kristallkoordinaten ist

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}B & 0\\ 0 & {}^tB^{-1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}'_{(1)}\\ \boldsymbol{x}'_{(2)}\end{pmatrix}$$

und für die Operatoren folgt (z. B. in der Gitterdarstellung)

$$\hat{p}_i=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_{(2)i}}+\pi\hbar x_{(1)i}=\sum_{k=1}^{g}B_{ik}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'_{(2)k}}+\pi\hbar x'_{(1)k})=\sum_{k=1}^{g}B_{ik}\hat{p}'_k,$$

analog

$$\hat{q}_i = \sum_{k=1}^{g} ({}^t B^{-1})_{ik} \hat{q}'_k.$$

Diese Formeln sind offensichtlich unabhängig von der gewählten Darstellung der Operatoren. Die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}[\hat{q}'_i, \hat{p}'_j] &= \left[\sum_{k=1}^{g} ({}^t B)_{ik} \hat{q}_k, \sum_{l=1}^{g} B^{-1}_{jl} \hat{p}_l \right] \\ &= \sum_{kl} B^{-1}_{jl} B_{ki} [\hat{q}_k, \hat{p}_l] \\ &= i\hbar \sum_{kl} B^{-1}_{jl} B_{ki} \delta_{kl} = i\hbar \delta_{ij}\end{aligned}$$

sind ebenfalls invariant. Sei nun $Q \in M(g, \mathbb{R})$ eine orthogonale Matrix ($Q\ {}^t Q = \mathbb{I}_g$) derart, daß $QA^{-1}N\ {}^t N\ {}^t A^{-1}\ {}^t Q = D$ gilt. D ist die Diagonalmatrix mit den strikt positiven Eigenwerten von $A^{-1}N\ {}^t N\ {}^t A^{-1}$ auf der Hauptdiagonalen; Q enthält zeilenweise die Eigenvektoren von $A^{-1}N\ {}^t N\ {}^t A^{-1}$. Im Falle der Entartung einiger Eigenwerte werden die Eigenvektoren in Q als bereits orthogonalisiert vorausgesetzt. Man diagonalisiert $\hat{H}_{\text{osz}}$ durch die Koordinatentransformation

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}^0_{(1)} \\ \boldsymbol{x}^0_{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^t Q & 0 \\ 0 & {}^t Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}'_{(1)} \\ \boldsymbol{x}'_{(2)} \end{pmatrix}$$

und erhält

$$\hat{H}_{\text{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}', \hat{\boldsymbol{q}}') = \frac{1}{2m}\ {}^t\hat{\boldsymbol{p}}' \hat{\boldsymbol{p}}' + \frac{m}{2}\varpi^2\ {}^t\hat{\boldsymbol{q}}' D\, \hat{\boldsymbol{q}}'.$$

$\binom{\boldsymbol{x}'_{(1)}}{\boldsymbol{x}'_{(2)}}$ ist ein orthogonales Kristallkoordinatensystem. Mit der abschließenden Transformation

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}'_{(1)} \\ \boldsymbol{x}'_{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{m\varpi}{\hbar}}\ \mathbb{I}_g & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\hbar}{m\varpi}}\ \mathbb{I}_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\xi}_{(1)} \\ \boldsymbol{\xi}_{(2)} \end{pmatrix}$$

folgt

$$\hat{H}_{\text{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}_\xi, \hat{\boldsymbol{q}}_\xi) = \frac{\hbar\varpi}{2} \left(\frac{1}{\hbar^2}\ {}^t\hat{\boldsymbol{p}}_\xi \hat{\boldsymbol{p}}_\xi + {}^t\hat{\boldsymbol{q}}_\xi D \hat{\boldsymbol{q}}_\xi \right). \tag{58}$$

D ist definitionsgemäß eine Diagonalmatrix mit strikt positiven Hauptdiagonalelementen. $\sqrt{D}$ ist dann einfach diejenige Diagonalmatrix, auf deren Hauptdiagonale die *positiven* Wurzeln der Hauptdiagonalelemente von D stehen und es gilt $\sqrt{D}\,\sqrt{D} = D$. Dirac [7, §34] folgend bildet man die *Vernichter*

$$\hat{\boldsymbol{a}}^{+}_{\xi} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\hbar} \hat{\boldsymbol{p}}_\xi - i\sqrt{D} \hat{\boldsymbol{q}}_\xi \right)$$

und die *Erzeuger*

$$\hat{\boldsymbol{a}}_\xi := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\hbar}\hat{\boldsymbol{p}}_\xi + i\sqrt{D}\hat{\boldsymbol{q}}_\xi\right).$$

Es gelten die üblichen Beziehungen:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\mathrm{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}_\xi, \hat{\boldsymbol{q}}_\xi) &= \hbar\varpi \sum_{i=1}^{g}\left(\hat{a}^+_{\xi i}\hat{a}_{\xi i} - \frac{1}{2}(\sqrt{D})_{ii}\right)\\
&= \hbar\varpi \sum_{i=1}^{g}\left(\hat{a}_{\xi i}\hat{a}^+_{\xi i} + \frac{1}{2}(\sqrt{D})_{ii}\right)\\
&= \sum_{i=1}^{g}\hat{H}_{\mathrm{osz}}(\hat{p}_{\xi i}, \hat{q}_{\xi i})\\
\left[\hat{a}^+_{\xi i}, \hat{a}_{\xi j}\right] &= (\sqrt{D})_{ij}.
\end{aligned} \tag{59}$$

Man befindet sich genau in der Situation, die DIRAC [7, §34] analysierte. Weitere wichtige Formeln sind

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}_\xi, \hat{\boldsymbol{q}}_\xi), \hat{a}_{\xi k}\right] = \hbar\varpi(\sqrt{D})_{kk}\hat{a}_{\xi k} \qquad \text{keine } k - \text{Summe} \tag{60}$$

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}_\xi, \hat{\boldsymbol{q}}_\xi), \hat{a}^+_{\xi k}\right] = -\hbar\varpi(\sqrt{D})_{kk}\hat{a}^+_{\xi k} \tag{61}$$

$$\left[\hat{a}^+_{\xi l}, (\hat{a}_{\xi m})^n\right] = n(\sqrt{D})_{lm}\,(\hat{a}_{\xi m})^{n-1}. \tag{62}$$

Durch die Gleichung

$$\hat{\boldsymbol{a}}^+_\xi|\mathbf{0}\rangle = 0$$

ist eine Funktion $|\mathbf{0}\rangle$ aus dem Darstellungsraum ausgezeichnet, aus der sich wegen (60) – (62) das System der Eigenfunktionen von $\hat{H}_{\mathrm{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}_\xi, \hat{\boldsymbol{q}}_\xi)$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\mathrm{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}_\xi, \hat{\boldsymbol{q}}_\xi)|\boldsymbol{n}\rangle &= \lambda|\boldsymbol{n}\rangle\\
|\boldsymbol{n}\rangle = |n_1, n_2, \ldots, n_g\rangle :&= (\hat{a}_{\xi 1})^{n_1}\,(\hat{a}_{\xi 2})^{n_2}\ldots(\hat{a}_{\xi g})^{n_g}\,|\mathbf{0}\rangle, \qquad n_i = 0,1,2,\ldots; i = 1,2,\ldots,g\\
&= \left(\hat{a}^{n_1}_{\xi 1}|0_1\rangle\right)\left(\hat{a}^{n_2}_{\xi 2}|0_2\rangle\right)\ldots\left(\hat{a}^{n_g}_{\xi g}|0_g\rangle\right)
\end{aligned}$$

mit dem Eigenwert

$$\lambda = \hbar\varpi\left(n_1(\sqrt{D})_{11} + n_2(\sqrt{D})_{22} + \cdots + n_g(\sqrt{D})_{gg} + \tfrac{1}{2}\mathrm{tr}\sqrt{D}\right)$$

und der Normierung

$$\langle\boldsymbol{n}\mid\boldsymbol{n}\rangle = \prod_{j=1}^{g}(D_{jj})^{n_j}\; n_j!\;\langle 0_j\mid 0_j\rangle$$

ergibt.

Diesen gut bekannten Tatsachen kann man eine andere Nuance abgewinnen, wenn man die Rechnungen nun in der Gitterdarstellung durchführt. Der (nicht normierte) Grundzustand in der Gitterdarstellung folgt aus der Gleichung

$$\hat{\boldsymbol{a}}^+_\xi\;|\mathbf{0}\rangle := \hat{\boldsymbol{a}}^+_\xi f^{\mathbf{0}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\xi}_{(1)}\\ \boldsymbol{\xi}_{(2)}\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-i\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\xi}_{(2)}} + \pi i\boldsymbol{\xi}_{(1)}\right) + \frac{\sqrt{D}}{2\pi}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\xi}_{(1)}} - \pi i\boldsymbol{\xi}_{(2)}\right)\right) f^{\mathbf{0}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\xi}_{(1)}\\ \boldsymbol{\xi}_{(2)}\end{pmatrix} = 0$$

mit $\tilde{\Omega} = \frac{i}{2\pi}\sqrt{D}$ zu

$$f^{\mathbf{0}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\xi}_{(1)}\\ \boldsymbol{\xi}_{(2)}\end{pmatrix} = \exp\Big(\pi i\ {}^t\boldsymbol{\xi}_{(2)}\Big(\tilde{\Omega}\boldsymbol{\xi}_{(2)} - \boldsymbol{\xi}_{(1)}\Big)\Big)\ \ \vartheta\Big(\tilde{\Omega}\boldsymbol{\xi}_{(2)} - \boldsymbol{\xi}_{(1)}, \tilde{\Omega}\Big)$$

und zerfällt konstruktionsgemäß:

$$= \prod_{j=1}^{g} f^0\begin{pmatrix}\xi^j_{(1)}\\ \xi^j_{(2)}\end{pmatrix} = \prod_{j=1}^{g} \exp\left(\pi i\xi^j_{(2)}\left(\frac{id_j}{2\pi}\xi^j_{(2)} - \xi^j_{(1)}\right)\right)\ \ \vartheta\left(\frac{id_j}{2\pi}\xi^j_{(2)} - \xi^j_{(1)}, \frac{id_j}{2\pi}\right).$$

In der letzten Gleichung wurde zur Vereinfachung der Schreibweise

$$\begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0\\ 0 & d_2 & & 0\\ \vdots & & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \dots & d_g\end{pmatrix} := \sqrt{D}$$

gesetzt. Die angeregten Zustände des harmonischen Oszillators kann man direkt in der Gitterdarstellung berechnen und mit dem Programm aus Anhang B.1 (S. 40) den Absolutbetrag angeregter Zustände graphisch darstellen. Mit der Eingabe `plotanfT6D[{12,9,0},4Pi^2 IdentityMatrix[3]]` erzeugt man Abb. 1 (S. 22). Die Diagonalelemente der Potentialmatrix $V = 4\pi^2\ \mathbb{I}_3$ stimmen miteinander überein, man kann daher Abb. 1 auch als Darstellung des Absolutbetrages des zwölften, neunten und nullten angeregten Zustandes *eines* räumlich eindimensionalen harmonischen Oszillators in der Gitterdarstellung auffassen.

Man fixiere einen Index $j \in [1, \dots, g]$ und setze $\xi_1 = \xi_1^j,\ \xi_2 = \xi_2^j,\ \tau = \frac{id_j}{2\pi}$ und $z = \tau\xi_2 - \xi_1$.

$$f^0\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix} = \exp(\pi i\xi_2 z)\ \vartheta(z,\tau)$$

ist der Grundzustand dieses räumlich eindimensionalen harmonischen Oszillators. Bezeichnet man den Erzeugungsoperator $\hat{a}_\xi$ ausführlich mit

$$\hat{a}(\xi_1,\xi_2,\tau) := \frac{-1}{\sqrt{2}}\left(i\left(\frac{\partial}{\partial\xi_2} + \pi i\xi_1\right) + \frac{\tau}{i}\left(\frac{\partial}{\partial\xi_1} - \pi i\xi_2\right)\right),$$

so gilt

$$\hat{a}(\xi_2, -\xi_1, -\frac{1}{\tau}) = \frac{1}{\tau}\ \hat{a}(\xi_1,\xi_2,\tau).$$

Die Wellenfunktion $|n\rangle$ des n–ten ($n = 0, 1, 2, \dots$) angeregten Zustands

$$\langle\xi_1,\xi_2,\tau|n\rangle := \frac{\hat{a}^n(\xi_1,\xi_2,\tau)}{\sqrt{n!\ (-2\pi i\tau)^n}}\ f^0\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}$$

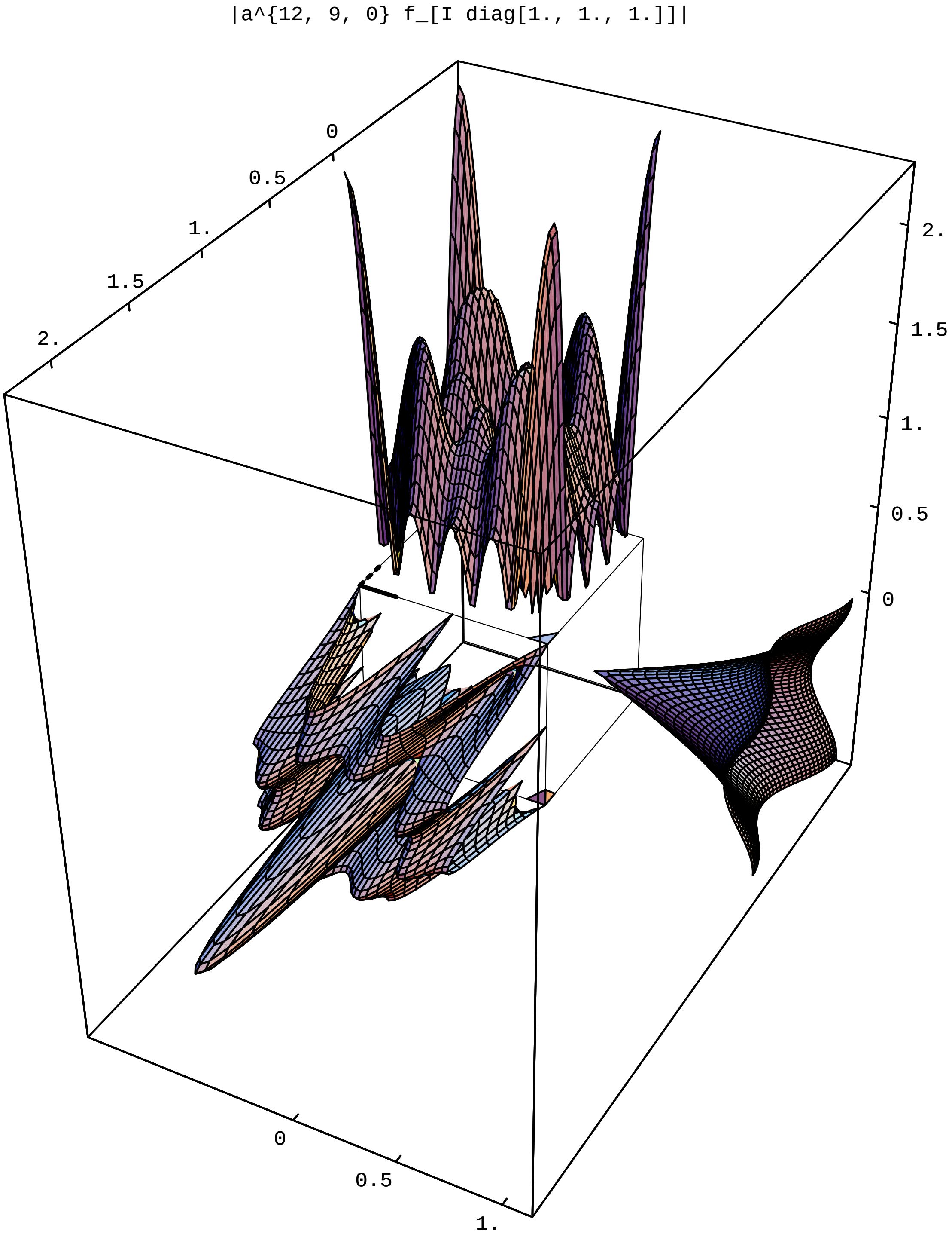

Abbildung 1: Zustände eines harmonischen Oszillators in der Gitterdarstellung. $|f^0|$ ist in x–Richtung aufgetragen, $|\hat{a}^9\ f^0|$ in Richtung der negativen y–Achse und $|\hat{a}^{12}\ f^0|$ in z–Richtung. Für $|\hat{a}^{12}\ f^0|$ ist x die reziproke Ortsvariable und y die Ortsvariable. Das kleine Dreieck in der Ecke legt die Orientierung fest.

hat wegen der Funktionalgleichung der Jacobischen Thetafunktionen

$$\vartheta\left(\frac{z}{\tau}, \frac{-1}{\tau}\right) = \exp\left(-\frac{\pi i}{4}\right)\ \sqrt{\tau}\ \exp\left(\frac{\pi i z^2}{\tau}\right)\ \vartheta(z,\tau)$$

[21, §7], vgl. auch (49), die folgende Eigenschaft:

$$\langle \xi_2, -\xi_1, -\frac{1}{\tau}|n\rangle = (-i)^n\ \sqrt{\tau}\ \exp\left(-\frac{\pi i}{4}\right)\ \langle \xi_1, \xi_2, \tau|n\rangle.$$

Für $\tau = i$ besitzt der Absolutbetrag der Wellenfunktion $|n\rangle$ unter Berücksichtigung der $\mathbb{Z}^2$–Translationsinvarianz in der Tat die in Abb. 1 sichtbare vierzählige Symmetrie.

Bemerkung 9. Der harmonische Oszillator ist eine Aufgabe der nichtrelativistischen Quantenmechanik *ohne* translationssymmetrisches Potential. Das „Kristallgitter“ Λ in V wurde durch die Eigenvektoren der Potentialmatrix festgelegt. Es war dann möglich, in V/Λ die Eigenfunktionen und Eigenwerte des harmonischen Oszillators in der Gitterdarstellung zu berechnen. Diese Darstellung ist äquivalent zu den anderen Darstellungen der Quantenmechanik und man kommt zu dem Schluß, daß es zur Berechnung eines Quantensystems genügt, dieses im *Fundamentalbereich* eines geeignet gewählten Gitters im Phasenraum zu betrachten — wenigstens insoweit nur natürliche Randbedingungen für das Quantensystem in Betracht kommen.

5 Das Kristallelektron in der Gitterdarstellung

Ein *Kristallelektron* ist ein einzelner Massepunkt, der sich in einem Potential bewegt, das durch eine periodische Funktion der Ortsoperatoren gegeben ist. Sei m die Masse des Elektrons. Der Hamiltonoperator für dieses Problem lautet

$$\hat{H}_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}}) = \frac{1}{2m}\ {}^t\hat{\boldsymbol{p}} Y \hat{\boldsymbol{p}} + V(\hat{\boldsymbol{q}}). \tag{63}$$

Definition 6. $V(\hat{\boldsymbol{q}})$ heißt *periodisch* bezüglich $\Lambda_{(2)}$ (vgl. Satz 2), falls $V(\hat{\boldsymbol{q}} + \boldsymbol{m}) = V(\hat{\boldsymbol{q}})$ für alle $\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^g$ gilt. Mit $\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^g$ sind wie üblich die Koordinaten eines Gittervektors aus $\Lambda_{(2)}$ bezeichnet.

(63) ist in der Festkörperphysik als Hamiltonoperator der „Einteilchenschrödingergleichung“ bekannt. Den Gittern $\Lambda_{(1)}$ und $\Lambda_{(2)}$ werden sogenannte *Translationsoperatoren* $\hat{\tau}_{(1)}$ und $\hat{\tau}_{(2)}$ zugeordnet, die auf den Funktionen des Darstellungsraums der Heisenberggruppe operieren. Explizit haben die Translationsoperatoren in Kristallkoordinaten folgende Gestalt:

$$\hat{\tau}_{(1)}(\boldsymbol{n}) := \exp(-2\pi i\ {}^t\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{q}}) \tag{64}$$

für Translationen um Vektoren aus $\Lambda_{(1)}$ mit den Koordinaten $\boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}^g$ und

$$\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m}) := \exp(\frac{i}{\hbar}\ {}^t\boldsymbol{m}\hat{\boldsymbol{p}}) \tag{65}$$

für Translationen um Vektoren aus $\Lambda_{(2)}$ mit den Koordinaten $\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^g$.

Für Rechnungen mit den Translationsoperatoren benötigt man die beiden folgenden Aussagen:

i) Seien $\hat{A}$ und $\hat{B}$ Operatoren, die mit ihrem Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}]$ kommutieren. Dann gilt:

$$\exp(\hat{A})\exp(\hat{B}) = \exp(\tfrac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}])\exp(\hat{A} + \hat{B}); \tag{66}$$

ii) Sei $[\hat{A}, \hat{B}] = \rho$, ρ eine Konstante und $f(\hat{B})$ eine analytische Funktion des Operators $\hat{B}$. Dann gilt:

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = \rho \frac{\partial f(\hat{B})}{\partial \hat{B}}. \tag{67}$$

Mit (66) folgt

$$\begin{aligned}[\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m}), \hat{\tau}_{(1)}(\boldsymbol{n})] &= \big(\exp(-\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{n}) - \exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{m})\big)\ \exp(\frac{i}{\hbar}\ {}^t\boldsymbol{m}\hat{\boldsymbol{p}} - 2\pi i\ {}^t\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{q}}) \\ &= 0.\end{aligned}$$

Sei $V(\hat{\boldsymbol{q}})$ eine analytische Funktion von $\hat{\boldsymbol{q}}$ und sei $V(\hat{\boldsymbol{q}})$ periodisch bezüglich $\Lambda_{(2)}$. Dann folgt aus

$$\begin{aligned}\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})\hat{\tau}_{(2)}^{-1}(\boldsymbol{m}) &= \frac{1}{2m}\ {}^t\hat{\boldsymbol{p}}Y\hat{\boldsymbol{p}} + V\Big(\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})\hat{\boldsymbol{q}}\hat{\tau}_{(2)}^{-1}(\boldsymbol{m})\Big) \\ &= \frac{1}{2m}\ {}^t\hat{\boldsymbol{p}}Y\hat{\boldsymbol{p}} + V\Big(\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})[\hat{\boldsymbol{q}}, \hat{\tau}_{(2)}^{-1}(\boldsymbol{m})] + \hat{\boldsymbol{q}}\Big) \\ &= \frac{1}{2m}\ {}^t\hat{\boldsymbol{p}}Y\hat{\boldsymbol{p}} + V(\boldsymbol{m} + \hat{\boldsymbol{q}}) \qquad \text{mit (67)} \\ &= \hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})\end{aligned}$$

die wichtige Beziehung

$$[\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}}), \hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})] = 0, \tag{68}$$

die besagt, daß $\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ und $\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})$ ein simultanes System von Eigenfunktionen haben.

Unter den Eigenfunktionen von $\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})$ sind die Eigenfunktionen von $\hat{\boldsymbol{p}}$, welche hier darstellungsunabhängig mit $\psi_{(1)}(\cdot)$ bezeichnet seien. Es gilt

$$\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})\psi_{(1)}(\cdot) = \exp(2\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)})\psi_{(1)}(\cdot)$$

für die Impulseigenfunktionen. Wegen der Simultanität der Eigenfunktionen von $\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})$ und $\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ muß auch für die Lösungen $\psi(\cdot)$ des Eigenwertproblems

$$\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})\psi = E\psi \tag{69}$$

die Relation

$$\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})\psi(\cdot) \doteq \exp(2\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)})\psi(\cdot) \tag{70}$$

gelten. Die Gleichung (70) heißt in der Festkörperphysik *Blochtheorem* und wird in der Funktionalanalysis im Rahmen der *Floquettheorie* [24] hergeleitet. Ansätze für die Wellenfunktion $\psi(\cdot)$ als Lösung des Eigenwertproblems (69) müssen so beschaffen sein, daß (70) erfüllt wird. Daraus folgt in der Ortsdarstellung ebenso wie in der Gitterdarstellung, daß $\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ als Differentialoperator durch $\boldsymbol{x}_{(1)}$ parametrisiert wird und daß das Eigenwertproblem (69) genauer in der Form

$$\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})\psi_\nu\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = E_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\psi_\nu\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)} \\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} \tag{71}$$

zu schreiben ist, wobei die Nummer $\nu \in \mathbb{N}$ des parametrisierten Eigenwertes $E_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})$ als *Bandindex* bezeichnet wird.

Das Blochtheorem (70) stellt nur in der Ortsdarstellung eine neue Aussage dar; in der Gitterdarstellung gilt $\forall\ C^\infty_{\boldsymbol{x}_{(2)}}$–Funktionen $f \in L^2(V//\Lambda)$

$$\begin{aligned}\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} &= \exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)})\exp({}^t\boldsymbol{m}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_{(2)}}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\\ &= \exp(\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}+\boldsymbol{m}\end{pmatrix} \qquad \text{Taylorscher Satz}\\ &= U_{(1,\binom{0}{m})} f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\\ &= \exp(2\pi i\ {}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} \qquad \text{wegen (32)}\\ &= f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}+2\boldsymbol{m}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Definiert man $\forall\ f \in L^2(V//\Lambda)$ den Translationsoperator $\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m})$ vermöge

$$\hat{\tau}_{(2)}(\boldsymbol{m}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} := U_{(1,\binom{0}{m})} f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix},$$

so ist das Blochtheorem (70) einfach eine Folge der Funktionalgleichung (32). Analog ist für die $C^\infty_{\boldsymbol{x}_{(1)}}$–Funktionen aus $L^2(V//\Lambda)$

$$\hat{\tau}_{(1)}(\boldsymbol{n}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \exp(-2\pi i\ {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}+2\boldsymbol{n}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}.$$

Diese Gleichung kann zur Definition von $\hat{\tau}_{(1)}(\boldsymbol{n})$ auf dem gesamten $L^2(V//\Lambda)$ genutzt werden:

$$\hat{\tau}_{(1)}(\boldsymbol{n}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} := U_{(1,\binom{n}{0})} f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}.$$

War das Blochtheorem in der Gitterdarstellung im wesentlichen eine Folge der Definition, so ist die folgende Aussage in der Ortsdarstellung trivial, jedoch für die Gitterdarstellung sehr wichtig, weil $\hat{\boldsymbol{q}}$ hier einen Differentialoperator (42) enthält:

Satz 6. *Sei $V(\hat{\boldsymbol{q}})$ eine analytische Funktion von $\hat{\boldsymbol{q}}$ und periodisch bezüglich $\Lambda_{(2)}$. Dann ist für alle $f \in L^2(V//\Lambda)$ die Gleichung*

$$V(\hat{\boldsymbol{q}}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = V(\boldsymbol{x}_{(2)}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}$$

erfüllt.

Beweis. Nach Voraussetzung ist $V(\hat{\boldsymbol{q}}+\boldsymbol{m}) = V(\hat{\boldsymbol{q}}),\ \boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}^g$, so daß $V(\hat{\boldsymbol{q}})$ in eine Fourierreihe mit

Fourierkoeffizienten $v(\boldsymbol{n})$ auf dem Gitter $\Lambda_{(1)}$ entwickelt werden kann:

$$\begin{aligned}V(\hat{\boldsymbol{q}})f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} &= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} v(-\boldsymbol{n})\exp(-2\pi i\, {}^t\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{q}})f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\\ &= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} v(-\boldsymbol{n})\hat{\tau}_{(1)}(\boldsymbol{n})f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\\ &= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} v(-\boldsymbol{n})\exp(-2\pi i\, {}^t\boldsymbol{n}\boldsymbol{x}_{(2)})f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\\ &= V(\boldsymbol{x}_{(2)})f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

$\square$

Bemerkung 10. Der vorstehende Satz wurde zuerst von ZAK (vgl. [32]) aufgestellt und bewiesen. In vollständiger Analogie gilt auch die Gleichung

$$E_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = E_\nu\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{2\pi\hbar}\right) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix},$$

wobei $E_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})$ eine bezüglich $\Lambda_{(1)}$ periodische analytische Funktion und $f \in L^2(V//\Lambda)$ sei.

Obwohl man aus physikalischer Sicht bei $V(\hat{\boldsymbol{q}}) = V(\boldsymbol{x}_{(2)}) \equiv 0$ nicht mehr weiß, welches Kristallgitter vorliegt, sei ein Kristallgitter Λ fixiert und $V(\hat{\boldsymbol{q}}) = 0$ gesetzt. Für diesen sogenannten *potentialfreien* Fall $\hat{H}^0_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}}) := \frac{1}{2m}\, {}^t\hat{\boldsymbol{p}} Y \hat{\boldsymbol{p}}$ wird jetzt aus den Impulseigenfunktionen (51) ein vollständiges orthonormiertes Eigenfunktionensystem hergeleitet. Zunächst ist

$$\hat{H}^0_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})\psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\, {}^t\Big(\mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma_{(1)}\Big)\, Y\, \Big(\mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma_{(1)}\Big)\, \psi_{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte

$$E_{\gamma_{(1)}}(\boldsymbol{x}_{(1)}) = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\, {}^t\Big(\mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma_{(1)}\Big)\, Y\, \Big(\mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma_{(1)}\Big) \tag{72}$$

hängen außer von $\boldsymbol{x}_{(1)}$ noch von einem Gittervektor $\gamma_{(1)} \in \Lambda_{(1)}$ ab. Erwartet werden in der Festkörperphysik und in der Spektraltheorie periodischer Differentialoperatoren jedoch Eigenwerte $E_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})$ mit $\nu \in \mathbb{N}$, die die Ordnungsrelation

$$E_{\nu+1}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \geq E_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \qquad \forall \nu \in \mathbb{N} \tag{73}$$

erfüllen. In Anbetracht von (72) bedeutet die Forderung (73), mit Hilfe der Gittervektoren $\gamma_{(1)}$ aus dem parallelepipedischen Fundamentalbereich von $\Lambda_{(1)}$ unendlich viele neue, durch ν indizierte Fundamentalbereiche so zusammenzubauen, daß (73) erfüllt wird.

Fundamentalbereiche (Def. 5, S. 16) sind weder abgeschlossen noch offen. Die Bedingung (73) legt die folgende Definition [14] nahe:

Definition 7. Die abgeschlossene Menge $\bar{F}_\Lambda \subset V$ heißt *Fundamentalzone* bezüglich des Gitters Λ, wenn

i) $\bar{F}_\Lambda$ zu jedem Punkt $\boldsymbol{x} \in V$ einen kongruenten Punkt enthält;

ii) aus $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \bar{F}_\Lambda$ und $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} \in \Lambda \;\; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \partial \bar{F}_\Lambda$ folgt, wobei $\partial \bar{F}_\Lambda$ der Rand von $\bar{F}_\Lambda$ ist.

Das einfachste Beispiel einer Fundamentalzone für Λ in V ist das Parallelepiped mit Kristallkoordinaten aus $[0,1]^{2g}$. Aus den Fundamentalzonen kann man die gesuchten Fundamental*bereiche* erzeugen.

Sei also $\{\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\}_{\nu=1}^\infty$ eine abzählbare Menge von Funktionen $\bar{\mathbb{B}}_\nu$, die einem Vektor $\boldsymbol{x}_{(1)} \in V_{(1)}$ einen bezüglich $\Lambda_{(1)}$ kongruenten Vektor $\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})$ aus der ν–ten Fundamentalzone $\bar{b}_\nu$ von $V_{(1)}$ bezüglich $\Lambda_{(1)}$ zuweist:

$$\bar{b}_\nu \ni \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) = \boldsymbol{x}_{(1)} - \gamma^\nu_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \qquad \boldsymbol{x}_{(1)} \in V_{(1)}, \gamma^\nu_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \in \Lambda_{(1)}. \tag{74}$$

Diese Konstruktion soll es erlauben, die Energie in der Form

$$\begin{aligned} E_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) &= \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\, {}^t\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) Y \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \\ &=: \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) \end{aligned} \tag{75}$$

zu schreiben, wobei $(\,,)$ die symmetrische, positiv definite Bilinearform $(\boldsymbol{x}_{(1)}, \boldsymbol{y}_{(1)}) := {}^t\boldsymbol{x}_{(1)} Y \boldsymbol{y}_{(1)}$ auf $V_{(1)} \times V_{(1)}$ bezeichnet. Der Vergleich von (75) mit (72) und (73) ergibt, daß die Mengengleichheit

$$\bigcup_{\gamma_{(1)} \in \Lambda_{(1)}} \left\{ \mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma_{(1)} \right\} = V_{(1)} = \bigcup_{\nu=1}^{\infty} \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \tag{76}$$

gelten muß , wobei $\boldsymbol{x}_{(1)}$ den Raum $V_{(1)}$ durchlaufen soll; außerdem ist

$$\left(\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) \le \left(\bar{\mathbb{B}}_{\nu+1}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_{\nu+1}(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) \qquad \forall \nu \in \mathbb{N}, \forall \boldsymbol{x}_{(1)} \in V_{(1)} \tag{77}$$

zu erfüllen. Das Ungleichungssystem (77) enthält genügend Information zur Konstruktion der Fundamentalzonen $\{\bar{b}_\nu\}_{\nu=1}^\infty$. Mit Hilfe von (76) findet man dann die Funktionen $\left\{\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right\}_{\nu=1}^\infty$. Aus (74) folgt noch

$$\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \bar{\mathbb{B}}_\mu(\boldsymbol{x}_{(1)}) = \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \in \Lambda_{(1)}. \tag{78}$$

Man fixiert ein $\nu \in \mathbb{N}$ und betrachtet die Ungleichungen (77) für alle Indices $\mu < \nu$ sowie für alle Indices $\mu > \nu$. Für die „niederen“ Zonen soll gelten

$$\begin{aligned} \left(\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) &\ge \left(\bar{\mathbb{B}}_\mu(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_\mu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) \qquad \mu = 1, 2, \ldots, \nu - 1 \\ &\ge \left(\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) \quad \text{wegen (78)} \\ \text{d. h.} \qquad 0 &\ge \left(\gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) - 2\,\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right), \end{aligned} \tag{79}$$

für die „höheren“ Zonen jedoch entgegengesetzt

$$\begin{aligned} \left(\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) &\le \left(\bar{\mathbb{B}}_\mu(\boldsymbol{x}_{(1)}), \bar{\mathbb{B}}_\mu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) \qquad \mu = \nu + 1, \nu + 2, \ldots \\ \text{d. h.} \qquad 0 &\le \left(\gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) - 2\,\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right). \end{aligned} \tag{80}$$

Man hat $\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \subset V_{(1)}$ als dasjenige Gebiet $\bar{b}_\nu$ anzusehen, welches (79) *und* (80) $\forall \boldsymbol{x}_{(1)} \in V_{(1)}$ befriedigt. Das Innere $\overset{\circ}{b}_\nu$ der Fundamentalzone $\bar{b}_\nu$ wird definitionsgemäß durch die Punkte $\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \in V_{(1)}$ gegeben, die die Ungleichungen

$$\left(\gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) - 2\,\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) < 0 \qquad \mu = 1, 2, \ldots, \nu - 1 \tag{81}$$

und

$$0 < \left(\gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) - 2\,\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) \qquad \mu = \nu + 1, \nu + 2, \ldots \tag{82}$$

erfüllen. Der Rand $\partial\bar{b}_\nu$ der Fundamentalzone $\bar{b}_\nu$ erfüllt für geeignete $\gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \in \Lambda_{(1)}$ die Gleichungen

$$\left(\gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \gamma^{\nu\mu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) - 2\,\bar{\mathbb{B}}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})\right) = 0. \tag{83}$$

Sei $\gamma_{(1)} \in \Lambda_{(1)} \setminus \{0\}$ irgendein Gittervektor und Γ die Menge

$$\Gamma(\gamma_{(1)}) := \left\{\boldsymbol{x}_{(1)} \mid (\gamma_{(1)}, \gamma_{(1)} - 2\,\boldsymbol{x}_{(1)}) = 0, \boldsymbol{x}_{(1)} \in V_{(1)}\right\}.$$

$\Gamma(\gamma_{(1)})$ ist also eine Hyperebene in $V_{(1)}$, die den Gittervektor $\gamma_{(1)}$ halbiert. Die Hyperebene $\Gamma(\gamma_{(1)})$ ist zu dem Gittervektor $\gamma_{(1)}$ im geometrischen Sinne dual. Man bezeichnet einen Punkt $\boldsymbol{y}_{(1)} \in V_{(1)}$ als *vom Koordinatenursprung abgeschirmt durch die Hyperebene* $\Gamma(\gamma_{(1)})$, wenn

$$(\gamma_{(1)}, \gamma_{(1)} - 2\,\boldsymbol{y}_{(1)}) < 0$$

gilt. Somit wird jeder Gitterpunkt $\gamma_{(1)} \in \Lambda_{(1)} \setminus \{0\}$ durch seine Hyperebene $\Gamma(\gamma_{(1)})$ vom Ursprung abgeschirmt. Der Sinn der Bedingungen (81) und (82) ist demnach folgender: $\boldsymbol{y}_{(1)} \in \overset{\circ}{b}_\nu$ genau dann, wenn es genau $\nu - 1$ paarweise verschiedene Gittervektoren $\gamma^{\nu 1}_{(1)}(\boldsymbol{y}_{(1)}), \ldots, \gamma^{\nu,\nu-1}_{(1)}(\boldsymbol{y}_{(1)})$ gibt, deren Hyperebenen $\boldsymbol{y}_{(1)}$ vom Ursprung abschirmen, während die Hyperebenen aller *anderen* Gittervektoren $\gamma_{(1)} \in \Lambda_{(1)} \setminus \left\{0, \gamma^{\nu 1}_{(1)}(\boldsymbol{y}_{(1)}), \ldots, \gamma^{\nu,\nu-1}_{(1)}(\boldsymbol{y}_{(1)})\right\}$ $\boldsymbol{y}_{(1)}$ *nicht* vom Ursprung abschirmen. Wenn $\boldsymbol{y}_{(1)} \in \bar{b}_\nu \setminus \overset{\circ}{b}_\nu$, dann liegt $\boldsymbol{y}_{(1)}$ auf mindestens einer der Hyperebenen, die zu den in (79) und (80) auftretenden Gittervektoren gehören. Wegen (79) wird auch ein solches $\boldsymbol{y}_{(1)}$ von höchstens $\nu - 1$ Hyperebenen vom Ursprung abgeschirmt. Aus (79) und (80) folgt weiterhin, daß die Summe $S(\boldsymbol{y}_{(1)}) + M(\boldsymbol{y}_{(1)})$ größer oder gleich $\nu - 1$ ist, wobei $S(\boldsymbol{y}_{(1)})$ die Anzahl der Hyperebenen bedeutet, die $\boldsymbol{y}_{(1)}$ vom Ursprung abschirmen und $M(\boldsymbol{y}_{(1)})$ die Anzahl der Hyperebenen, auf denen $\boldsymbol{y}_{(1)}$ liegt.

Mit diesen Bemerkungen kann man die Fundamentalzonen $\{\bar{b}_\nu\}_{\nu=1}^{\infty}$ wirklich konstruieren: Man betrachtet die Gesamtheit der Hyperebenen $\Gamma(\gamma_{(1)})$, $\gamma_{(1)} \in \Lambda_{(1)} \setminus \{0\}$, ordnet jedem Punkt $\boldsymbol{y}_{(1)} \in V_{(1)}$ die bereits erwähnten ganzen nichtnegativen Zahlen $S(\boldsymbol{y}_{(1)})$ und $M(\boldsymbol{y}_{(1)})$:

$S(\boldsymbol{y}_{(1)})$ ist die Anzahl der Hyperebenen, die $\boldsymbol{y}_{(1)}$ vom Ursprung abschirmen

$M(\boldsymbol{y}_{(1)})$ ist die Anzahl der Hyperebenen, auf denen $\boldsymbol{y}_{(1)}$ liegt

zu und kann definieren (vgl. [14]):

Definition 8. $\bar{b}_\nu$ ist die Menge derjenigen $\boldsymbol{y}_{(1)} \in V_{(1)}$, für die die Ungleichungen

$$0 \leq S(\boldsymbol{y}_{(1)}) \leq \nu - 1 \qquad \text{und}$$
$$\nu - 1 \leq S(\boldsymbol{y}_{(1)}) + M(\boldsymbol{y}_{(1)})$$

erfüllt sind.

Bemerkung 11. $\bar{b}_\nu \in V_{(1)}$ sind die *Brillouinzonen* [1, 14, 17, 27, 28]. Sie wurden diesmal nicht – wie üblich – aus Nachbarschaftsbeziehungen im reziproken Gitter [1, 14, 27] oder aus der Beugungstheorie von Elektronen in Kristallen [17, 28] abgeleitet, sondern zur Ordnung der von den Impulseigenfunktionen (51) der Gitterdarstellung gelieferten Energiewerte (72) eingeführt.

Die Brillouinzonen $\{\bar{b}_\nu\}_{\nu=1}^{\infty}$ sind nur Fundamentalzonen, aber keine Fundamentalbereiche. Die Fundamentalbereiche b_ν erhält man aus $\mathring{b}_\nu$ und Teilen des Randes $\partial\bar{b}_\nu$ mittels folgender Betrachtung [27]: Sei $M(\boldsymbol{x}_{(1)0}) = m$, d. h. $\boldsymbol{x}_{(1)0}$ liegt auf dem gemeinsamen Rand der Fundamentalzonen $\bar{b}_\nu, \bar{b}_{\nu+1}, \ldots, \bar{b}_{\nu+m}$. Dann liegen auf der Sphäre

$$\sigma(\boldsymbol{x}_{(1)0}) = \left\{\boldsymbol{y}_{(1)} \mid |\boldsymbol{y}_{(1)} - \boldsymbol{x}_{(1)0}| = |\boldsymbol{x}_{(1)0}|, \boldsymbol{y}_{(1)} \in V_{(1)}\right\}$$

$m+1$ Gitterpunkte aus $\Lambda_{(1)} : \gamma_{(1)0} = 0, \gamma_{(1)j},\ j = 1, 2, \ldots, m$. Die Vektoren $\boldsymbol{x}_{(1)j} := \boldsymbol{x}_{(1)0} - \gamma_{(1)j},\ j = 1, 2, \ldots, m$ liegen ebenfalls auf dem gemeinsamen Rand von $\bar{b}_\nu, \bar{b}_{\nu+1}, \ldots, \bar{b}_{\nu+m}$ [14]. Weitere zu $\boldsymbol{x}_{(1)0}$ kongruente Punkte bezüglich $\Lambda_{(1)}$ gibt es auf dem gemeinsamen Rand von $\bar{b}_\nu, \bar{b}_{\nu+1}, \ldots, \bar{b}_{\nu+m}$ nicht. Man kann jetzt $\boldsymbol{x}_{(1)j}$ dem Fundamentalbereich $b_{\nu+j}$ zuweisen. $b_{\nu+j}$ besteht nach diesem ersten Schritt aus der Menge $\{\mathring{b}_{\nu+j}, \boldsymbol{x}_{(1)j}\}$. Dieses Verfahren führt man für alle nicht $\Lambda_{(1)}$–kongruenten Punkte auf allen Hyperebenen $\Gamma(\gamma_{(1)})$ aus und erhält die Fundamentalbereiche $\{b_\nu\}_{\nu=1}^{\infty}$. Beweise dafür, daß die Brillouinzonen in der Tat Fundamentalzonen sind, findet man in [1, 14, 27]. Nach Konstruktion gelten natürlich die Mengenbeziehungen

$$\bigcup_{\nu=1}^{\infty} b_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) = V_{(1)} \tag{84}$$

$$b_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \cap b_\mu(\boldsymbol{y}_{(1)}) = \emptyset \qquad \boldsymbol{x}_{(1)}, \boldsymbol{y}_{(1)} \in V_{(1)};\ \mu, \nu \in \mathbb{N};\ \mu \neq \nu, \tag{85}$$

wobei $\boldsymbol{x}_{(1)}, \boldsymbol{y}_{(1)}$ unabhängig voneinander $V_{(1)}$ durchlaufen sollen.

Man kann mit Hilfe von (76) und (84) nun die Funktionen $\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})$ aufbauen, die $\boldsymbol{x}_{(1)}$ in $\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \in b_\nu$ abbilden. Und zwar findet man

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) &= \boldsymbol{x}_{(1)} - \gamma^{\nu}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \\ &\equiv \boldsymbol{x}_{(1)} - \gamma^{1}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma^{2}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \\ \text{mit} \qquad \gamma^{1}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) &= \boldsymbol{x}_{(1)} - \mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \\ \text{und} \qquad \mathfrak{f}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \gamma^{2}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) &\,\dot{\in}\, b_\nu . \end{aligned} \tag{86}$$

Die Konstruktion der Brillouinzonen $\bar{b}_\nu$, der Fundamentalbereiche b_ν und der Funktionen $\mathbb{B}_\nu$ (86) gestattet es, die Eigenfunktionen des Impulsoperators $\hat{\boldsymbol{p}}$ in der Gitterdarstellung parameterfrei aufzuschreiben.

Satz 7. *Der Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ hat in der Gitterdarstellung das vollständige orthonormierte Eigenfunktionensystem $\left\{\Psi_{(1)\nu}\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}\right\}_{\nu=1}^{\infty}$:*

$$\Psi_{(1)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \exp\!\left(\pi i\ {}^{t}(2\,\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \boldsymbol{x}_{(1)})\boldsymbol{x}_{(2)}\right), \tag{87}$$

wobei $\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)})$ durch (86) gegeben ist.

Beweis. $\Psi_{(1)\nu}\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}} \in L^2(V/\!/\Lambda)$ folgt aus (86) und der Eigenschaft

$$\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)} + \gamma_{(1)}) = \mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \quad \forall \gamma_{(1)} \in \Lambda_{(1)},$$
$$\text{d. h. in Kristallkoordinaten} \quad \mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{n}) = \mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) \quad \forall \boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}^g \text{ und } \forall \nu \in \mathbb{N}.$$

Weiterhin ist in Kristallkoordinaten

$$\int\limits_{V_{(2)}/\Lambda_{(2)}} \overline{\Psi_{(1)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}} \Psi_{(1)\mu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} d\boldsymbol{x}_{(2)} = \int\limits_{V_{(2)}/\Lambda_{(2)}} \exp\big(2\pi i\, {}^t(\mathbb{B}_\mu(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}))\boldsymbol{x}_{(2)}\big)\ d\boldsymbol{x}_{(2)}$$
$$= \delta_{\mu\nu}$$

die Orthogonalitätsrelation. Die Vollständigkeitsrelation (mit $\boldsymbol{x}_{(1)}$ als Parameter) ergibt

$$\begin{aligned}
\sum_{\nu=1}^{\infty} \overline{\Psi_{(1)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}} \Psi_{(1)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}'_{(2)}\end{pmatrix} &= \sum_{\nu=1}^{\infty} \exp\Big(\pi i\, {}^t(2\,\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \boldsymbol{x}_{(1)})(\boldsymbol{x}'_{(2)} - \boldsymbol{x}_{(2)})\Big)\\
&= \exp\Big(\pi i\, {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}(\boldsymbol{x}'_{(2)} - \boldsymbol{x}_{(2)})\Big) \sum_{\nu=1}^{\infty} \exp\Big(2\pi i\, {}^t\gamma^\nu_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})(\boldsymbol{x}_{(2)} - \boldsymbol{x}'_{(2)})\Big)\\
&= \exp\Big(\pi i\, {}^t\boldsymbol{x}_{(1)}(\boldsymbol{x}'_{(2)} - \boldsymbol{x}_{(2)})\Big) \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g} \delta(\boldsymbol{x}_{(2)} - \boldsymbol{x}'_{(2)} - \boldsymbol{m}).
\end{aligned}$$

Man sieht leicht ein, daß für jedes *fixierte* $\boldsymbol{x}_{(1)} \in V_{(1)}\backslash\{\infty\}$ die Menge der Vektoren $\{\gamma^\nu_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})\}_{\nu=1}^\infty$ (vgl. (86)) mit der Menge aller Gittervektoren aus $\Lambda_{(1)}$ übereinstimmt, d. h. es gilt die Mengengleichheit

$$\Big\{\gamma^\nu_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})\Big\}_{\nu=1}^{\infty} = \left\{\gamma_{(1)} \mid \gamma_{(1)} = \sum_{i=1}^{g} n_i\, \boldsymbol{\lambda}_{(1)i},\ n_i \in \mathbb{Z}\right\}.$$

Angenommen, es existierte zu einem fixierten $\boldsymbol{x}_{(1)} \in V_{(1)}$ ein Gittervektor $\gamma^0_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})$, so daß

$$\boldsymbol{x}^0_{(1)} := \boldsymbol{x}_{(1)} - \gamma^0_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}) \notin b_\nu \qquad \forall \nu \in \mathbb{N}$$

gelten würde. Dann würde der Punkt $\boldsymbol{x}^0_{(1)}$ von keinem der Fundamentalbereiche überdeckt werden, was gemäß der Konstruktion nicht vorkommen kann. Ebenso kann es keine zwei verschiedenen Gittervektoren $\gamma^{01}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)}), \gamma^{02}_{(1)}(\boldsymbol{x}_{(1)})$ geben, die $\boldsymbol{x}_{(1)}$ in *denselben* Fundamentalbereich b_ν abbilden, weil dann b_ν im Widerspruch zur Konstruktion $\Lambda_{(1)}$–kongruente Punkte enthielte. Schließlich gibt es wegen (85) keinen Gittervektor aus $\Lambda_{(1)}$, der $\boldsymbol{x}_{(1)}$ in zwei verschiedene Fundamentalbereiche abbilden könnte.

Nun muß man noch die bereits bei der Herleitung von (38) benutzte Identität

$$\sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} \exp\Big(2\pi i\, {}^t\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}_{(2)} - \boldsymbol{x}'_{(2)})\Big) = \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g} \delta(\boldsymbol{x}_{(2)} - \boldsymbol{x}'_{(2)} - \boldsymbol{m})$$

beweisen. Das geschieht mit Hilfe eines Argumentes von MUMFORD [21, §2], welches auch für $g > 1$ zeigt, daß $\lim\limits_{\varepsilon\to 0} \vartheta(\boldsymbol{x}_{(2)}, \varepsilon i Y)$ das auf den Gitterpunkten von $\Lambda_{(2)}$ konzentrierte Diracfunktional δ ist. □

Bemerkung 12. Auch die Ortseigenfunktionen (52) auf Seite 16 können umgeschrieben werden, indem man in $V_{(2)}$ bezüglich des Gitters $\Lambda_{(2)}$ auf genau dieselbe Art und Weise die Brillouinzonen $\bar{b}_\nu$, die Fundamentalbereiche b_ν und die Funktionen $\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(2)})$ einführt, die einen Vektor $\boldsymbol{x}_{(2)} \in V_{(2)}$ in seinen $\Lambda_{(2)}$–kongruenten Vektor $\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(2)}) \in b_\nu \subset V_{(2)}$ überführen. Diese Eigenfunktionen von $\hat{\boldsymbol{q}}$ in der Gitterdarstellung wären dann

$$\Psi_{(2)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \exp\bigl(-\pi i\, {}^t(2\,\mathbb{B}_\nu(\boldsymbol{x}_{(2)}) - \boldsymbol{x}_{(2)})\boldsymbol{x}_{(1)}\bigr)\,, \qquad \nu \in \mathbb{N}. \tag{88}$$

Im Ortsraum $V_{(2)}$ ist die Bezeichnung *Brillouinzone* nicht üblich, obschon es sich geometrisch um dieselbe Konstruktion wie im Impulsraum $V_{(1)}$ handelt. Die erste Brillouinzone im Ortsraum heißt in der Festkörperphysik *Wigner–Seitz–Zelle*, in der Theorie der Zahlengitter *Dirichlet–* oder *Voronoi–Zelle*. Um einer Verwechselungsgefahr vorzubeugen, sollte man die Funktionen (88) endgültig in der Form

$$\Psi_{(2)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \exp\bigl(-\pi i\, {}^t(2\,\mathbb{W}_\nu(\boldsymbol{x}_{(2)}) - \boldsymbol{x}_{(2)})\boldsymbol{x}_{(1)}\bigr)\,, \qquad \nu \in \mathbb{N}, \tag{89}$$

schreiben. Dabei ist definitionsgemäß $\mathbb{W}_\mu$ diejenige Funktion, die einen Vektor $\boldsymbol{x}_{(2)} \in V_{(2)}$ auf seinen $\Lambda_{(2)}$-kongruenten Vektor aus dem zur μ-ten Wigner–Seitz–Zelle gehörenden Fundamentalbereich von $V_{(2)}$ bezüglich $\Lambda_{(2)}$ abbildet.

Die Anwendung von $\hat{\boldsymbol{p}}$ auf die Eigenfunktionen von $\hat{\boldsymbol{q}}$ führt auf den formalen Ausdruck

$$\hat{\boldsymbol{p}}\Psi_{(2)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = 2\pi\hbar\boldsymbol{x}_{(1)}\left(\sum_k \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g} \delta(\boldsymbol{x}_{(2)} - \Gamma_\nu(k) - \boldsymbol{m})\right)\Psi_{(2)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix},$$

wobei $\Gamma_\nu(k)$ das k-te Randstück der ν-ten Wigner–Seitz–Zelle darstellt und die k-Summe über alle diese Randstücke zu führen ist; diese Formel bedeutet, daß die $\left\{\Psi_{(2)\nu}\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}\right\}_{\nu=1}^{\infty}$ *nicht* auch Eigenfunktionen von $\hat{\boldsymbol{p}}$ sind. Dies ergibt sich natürlich unmittelbar aus dem Vergleich von (87) mit (89) und prinzipiell aus der Vertauschungsrelation (44).

Die Operatoren $\hat{\boldsymbol{p}}$ und $\hat{\boldsymbol{q}}$ zeichnen offensichtlich innerhalb von $L^2(V/\!/\Lambda)$ je einen Hilbertraum aus, in dem ihre Eigenfunktionensysteme liegen:

$$\left\{\Psi_{(1)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\right\}_{\nu=1}^{\infty} \subset L^2(V/\!/\Lambda) \cap L^2(V_{(2)}/\Lambda_{(2)}) \tag{90}$$

und

$$\left\{\Psi_{(2)\nu}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\right\}_{\nu=1}^{\infty} \subset L^2(V/\!/\Lambda) \cap L^2(V_{(1)}/\Lambda_{(1)}). \tag{91}$$

Beim Beweis von Satz 7 (S. 29) wurde die Eigenschaft (90) wesentlich benutzt.

In der Gitterdarstellung können die Hamiltonoperatoren $\hat{H}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ danach unterschieden werden, ob ihr Eigenfunktionensystem in $L^2(V/\!/\Lambda)$ allgemein oder spezieller in $L^2(V/\!/\Lambda) \cap L^2(V_{(i)}/\Lambda_{(i)})$ mit $i = 1$ oder $i = 2$ liegt. $\hat{H}_{\text{osz}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ hat ein Eigenfunktionensystem aus $L^2(V/\!/\Lambda)$, während $\hat{H}_{\text{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ als Operator mit periodischem Potential $V(\hat{\boldsymbol{q}})$ ein Eigenfunktionensystem aus $L^2(V/\!/\Lambda) \cap L^2(V_{(2)}/\Lambda_{(2)})$ besitzt.

Bemerkung 13. SKRIGANOV [27, §6 und §9] hat Eigenfunktionen $\left\{\psi_j^0(\boldsymbol{x}_{(2)}, \boldsymbol{x}_{(1)})\right\}_{j=1}^{\infty}$ für $\hat{H}_{\mathrm{el}}^0(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ in der Ortsdarstellung hergeleitet, die in den Bezeichnungen der vorliegenden Arbeit

$$\psi_j^0(\boldsymbol{x}_{(2)}, \boldsymbol{x}_{(1)}) = \exp(-2\pi i\ {}^t\mathbb{B}_j(\boldsymbol{x}_{(1)})\boldsymbol{x}_{(2)}) \tag{92}$$

lauten. Diese Funktionen genügen dem Blochtheorem (70) und sind aus $L^2(V_{(2)}/\Lambda_{(2)})$. Sie sind in der Festkörperphysik anscheinend unbekannt und werden auch von SKRIGANOV nicht in der klaren Form (92) geschrieben.

Abschließend kann man die Funktionen $\left\{\Psi_{(1)\nu}\binom{\boldsymbol{x}_{(1)}}{\boldsymbol{x}_{(2)}}\right\}_{\nu=1}^{\infty}$ benutzen, um mit einem Galerkinverfahren [11] die Eigenwerte und Eigenfunktionen von $\hat{H}_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ näherungsweise zu berechnen und diese Berechnung mit der gewohnten Entwicklung nach ebenen Wellen zu vergleichen.

In der Gitterdarstellung nutzt man das Funktionensystem (87) zu dem Ansatz

$$\psi\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{\infty} f_j(\boldsymbol{x}_{(1)})\Psi_{(1)j}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix},$$

betrachtet für irgendein $l \in \mathbb{N}$ den Ausdruck

$$\int\limits_{V_{(2)}/\Lambda_{(2)}} \overline{\Psi_{(1)l}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}}\hat{H}_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}}) \sum_{j=1}^{\infty} f_j(\boldsymbol{x}_{(1)})\Psi_{(1)j}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\, d\boldsymbol{x}_{(2)} =$$
$$= \int\limits_{V_{(2)}/\Lambda_{(2)}} \overline{\Psi_{(1)l}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}} E(\boldsymbol{x}_{(1)}) \sum_{j=1}^{\infty} f_j(\boldsymbol{x}_{(1)})\Psi_{(1)j}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix}\, d\boldsymbol{x}_{(2)}$$

und erhält die Matrixgleichung

$$\sum_{j=1}^{\infty}\left(\left(\frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\ {}^t\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)})Y\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) - E(\boldsymbol{x}_{(1)})\right)\delta_{lj} + v(\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \mathbb{B}_j(\boldsymbol{x}_{(1)}))\right) f_j(\boldsymbol{x}_{(1)}) = 0,$$
$$l = 1, 2, \ldots \tag{93}$$

mit den Fourierkoeffizienten $v(\boldsymbol{n})$ des Potentials $V(\boldsymbol{x}_{(2)})$ auf $\Lambda_{(1)}$. Man kann voraussetzen, daß das Potential beschränkt ist oder aus einer endlichen Menge von Punktquellen in $V_{(2)}/\Lambda_{(2)}$ besteht. Dann sind auch die Fourierkoeffizienten $v(\boldsymbol{n})$ beschränkt und für genügend großes l (und beliebiges $j \in \mathbb{N}$) wird

$$\frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\ {}^t\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)})Y\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) \gg v(\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \mathbb{B}_j(\boldsymbol{x}_{(1)}));$$

damit nehmen die Eigenwerte von (93) für solche l praktisch die Werte des potentialfreien Falles

$$E_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) \approx \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\ {}^t\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)})Y\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)})$$

an. Bei solchen Werten kann man das Galerkinverfahren (93) abbrechen und ein endliches Problem erhalten, weil dann auch die Eigenfunktionen (87) bekannt sind.

Im Gegensatz dazu entwickelt man gewöhnlich in der Ortsdarstellung (vgl. [17, S. 100], [28, Ziff. 8], [3, S. 51], [9, Kap. 5], [5]) nach ebenen Wellen

$$\psi\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g} a_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{x}_{(1)})\exp\left(2\pi i\ {}^t(\boldsymbol{x}_{(1)} + \boldsymbol{n})\boldsymbol{x}_{(2)}\right)$$

und erhält für die Koeffizienten $a_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{x}_{(1)})$ statt (93) die Matrixgleichung

$$\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g} \left(\left(\frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\,{}^t(\boldsymbol{x}_{(1)}+\boldsymbol{n})Y(\boldsymbol{x}_{(1)}+\boldsymbol{n}) - E(\boldsymbol{x}_{(1)}) \right) \delta_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}} + v(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{m}) \right) a_{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{x}_{(1)}) = 0, \qquad \boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^g \quad (94)$$

zur Lösung des Eigenwertproblems (71).

Die Unterschiede zwischen (93) und (94) sind die folgenden:

- (93) geht bei hohen Energien und beschränkten Potentialen klar in den potentialfreien Fall über; die Koeffizienten $f_j(\boldsymbol{x}_{(1)})$ hängen für beliebige Dimensionen $g \in \mathbb{N}$ nur von *einem* Index $j \in \mathbb{N}$ ab.
- (94) hat kein offensichtliches asymptotisches Verhalten; die Koeffizienten $a_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{x}_{(1)})$ hängen von g Indices aus $\mathbb{Z}$ ab.

Die einfache generelle Gestalt von (93) wird natürlich dadurch beeinträchtigt, daß die Ermittlung der Brillouinzonen für $g > 2$ kompliziert ist.

Die Ersetzung von (71) durch (93) entspricht dem üblichen Vorgehen in der Störungstheorie [24, 16], bei dem $\hat{H}_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ als Störung von $\hat{H}^0_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ betrachtet wird. Man bezeichne vorübergehend den Operator $\hat{H}_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ in der Ortsdarstellung mit $\hat{H}^1_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ und in der Gitterdarstellung mit $\hat{H}^\Lambda_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$. Sei

$$W(\boldsymbol{x}_{(1)}) : \mathcal{H}_1 \ni \phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) \longrightarrow f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} \in \mathcal{H}_\Lambda$$

die $Heis(V)$–äquivariante unitäre Abbildung (34)

$$f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = W(\boldsymbol{x}_{(1)})\phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) = \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^g} \phi(\boldsymbol{x}_{(2)}+\boldsymbol{m}) \exp(-2\pi i\,{}^t\boldsymbol{m}\boldsymbol{x}_{(1)} - \pi i\,{}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{x}_{(2)}),$$

deren inverse Abbildung

$$W^{-1}(\boldsymbol{x}_{(1)}) : \mathcal{H}_\Lambda \ni f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} \longrightarrow \phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) \in \mathcal{H}_1$$

durch (35) gegeben ist:

$$\phi(\boldsymbol{x}_{(2)}) = W^{-1}(\boldsymbol{x}_{(1)}) f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} = \int_{V_{(1)}/\Lambda_{(1)}} f\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_{(1)}\\ \boldsymbol{x}_{(2)}\end{pmatrix} \exp(\pi i\,{}^t\boldsymbol{x}_{(1)}\boldsymbol{x}_{(2)})\; d\boldsymbol{x}_{(1)}.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} W(\boldsymbol{x}_{(1)})\hat{H}^1_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})W^{-1}(\boldsymbol{x}_{(1)}) &= \hat{H}^\Lambda_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}}) \\ &= \frac{1}{2m}\,{}^t\!\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_{(2)}} + \pi\hbar\boldsymbol{x}_{(1)}\right) Y \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_{(2)}} + \pi\hbar\boldsymbol{x}_{(1)}\right) + V(\boldsymbol{x}_{(2)}). \end{aligned}$$

Um die Gesamtheit der $\hat{H}^\Lambda_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ zu bezeichnen, schreibt man symbolisch (vgl. [27, §4] oder [24, Th. XIII.97])

$$W\hat{H}^1_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})W^{-1} = \int_{V_{(1)}/\Lambda_{(1)}} \oplus \hat{H}^\Lambda_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})\; d\boldsymbol{x}_{(1)}.$$

Man sieht, daß die Gitterdarstellung ad hoc die „Fasern“ $\hat{H}_{\mathrm{el}}^{\Lambda}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ des direkten Integrals liefert und kann nun einige Sätze aus [24] heranziehen, um den Übergang von (71) zu (93) zu rechtfertigen. Nach [24, Th. XIII.98] haben sowohl $\hat{H}_{\mathrm{el}}^{0}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ als auch $\hat{H}_{\mathrm{el}}(\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{q}})$ – beide Operatoren in der Gitterdarstellung mit $V(\boldsymbol{x}_{(2)}) \in L^2(V_{(2)}/\Lambda_{(2)})$ – je ein vollständiges orthonormiertes Eigenfunktionensystem und diskrete Eigenwerte. Die Matrixgleichung (93) entspricht der Aufstellung der Rayleigh–Schrödingerschen Störungsreihe [24, S. 5], [16, §38] zur Berechnung der Störung eines diskreten nichtentarteten Eigenwertes $E^0(\boldsymbol{x}_{(1)})$ infolge des periodischen Potentials. Die Störungsreihe konvergiert, wenn man zusätzlich zu $V(\boldsymbol{x}_{(2)}) \in L^2(V_{(2)}/\Lambda_{(2)})$ für $l \neq j$

$$|v(\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \mathbb{B}_j(\boldsymbol{x}_{(1)}))| < |E_l^0(\boldsymbol{x}_{(1)}) - E_j^0(\boldsymbol{x}_{(1)})|$$

fordert, wobei nach Satz 7

$$E_l^0(\boldsymbol{x}_{(1)}) - E_j^0(\boldsymbol{x}_{(1)}) = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m}\, {}^t(\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) - \mathbb{B}_j(\boldsymbol{x}_{(1)}))Y(\mathbb{B}_l(\boldsymbol{x}_{(1)}) + \mathbb{B}_j(\boldsymbol{x}_{(1)}))$$

ist.

Sei als Beispiel das Eigenwertproblem (71) mit dem Potential $V(\hat{q}) = \vartheta(\hat{q}, iY)$ für $g = 1$ betrachtet. In diesem Fall sind die Funktionen $\mathbb{B}_\nu(x_{(1)})$ in Kristallkoordinaten einfach

$$\mathbb{B}_\nu(x_{(1)}) = \begin{cases} \left(\tilde{x}_{(1)} - \mathrm{sign}(\tilde{x}_{(1)})\right)(-1)^\nu \left[\frac{\nu}{2}\right] & \tilde{x}_{(1)} \notin \mathbb{Z} \\ -1^{\nu+1}\left[\frac{\nu}{2}\right] & \tilde{x}_{(1)} \in \mathbb{Z} \end{cases}$$

$$\text{mit} \qquad \tilde{x}_{(1)} = x_{(1)} - \mathrm{floor}(x_{(1)} + \frac{1}{2})$$

$$\text{und} \qquad \left[\frac{\nu}{2}\right] = \begin{cases} \nu/2 & \nu \text{ gerade} \\ (\nu-1)/2 & \nu \text{ ungerade,} \end{cases}$$

dabei ist $\mathrm{floor}(x)$ die größte ganze Zahl, die nicht größer als $x \in \mathbb{R}$ ist.

Das Programm aus Anhang B.2 (S. 43) erzeugt aus der Eingabe `plotBandS[{1, 2, 3}, 10, 1/7]` die Abbildung 2. Die Abbildung 3 zeigt das Potential $\vartheta(x_{(2)}, \frac{i}{7})$ in Kristallkoordinaten.

6 Danksagung

Herrn Prof. Dr. H. GAJEWSKI (WIAS) danke ich sehr herzlich für die meinerseits als Glücksfall empfundene Gelegenheit, die vorliegende Arbeit in seiner Forschungsgruppe anzufertigen.

Herrn Prof. Dr. J. FREHSE (Rheinische Friedrich–Wilhelms–Universität Bonn) bin ich dankbar für die Unterstützung der Arbeit in den Jahren 1994 und 1995.

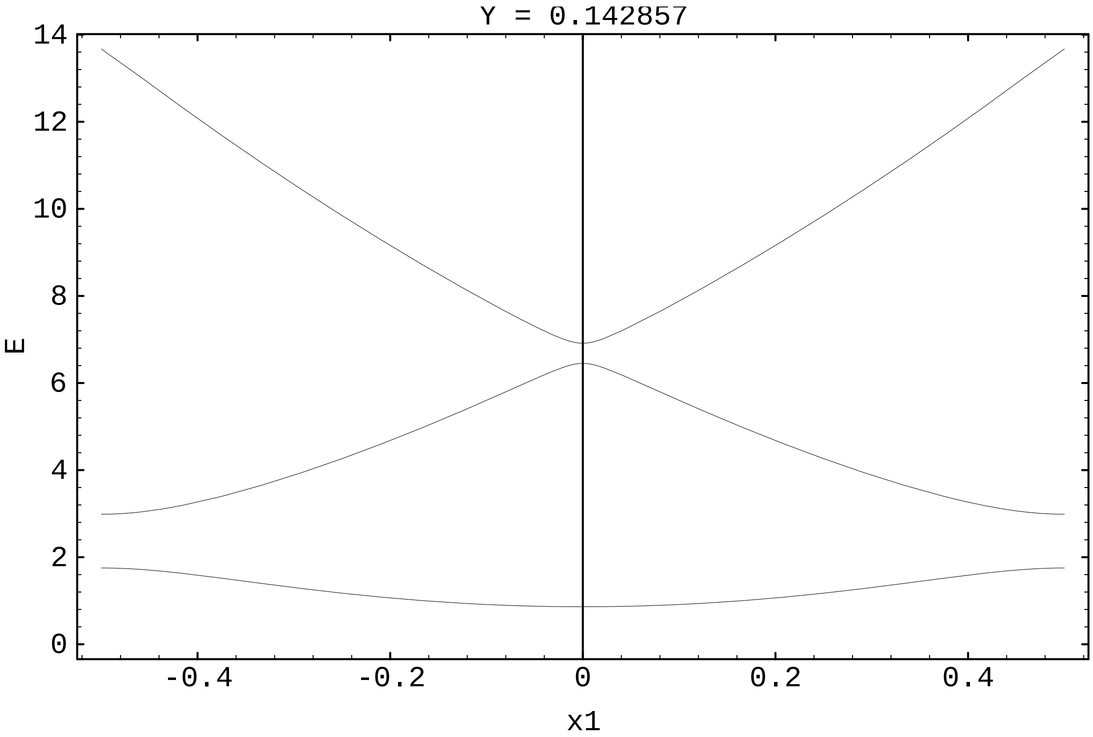

Abbildung 2: Die ersten drei Energiebänder eines räumlich eindimensionalen Kristalls mit dem Potential aus Abb. 3

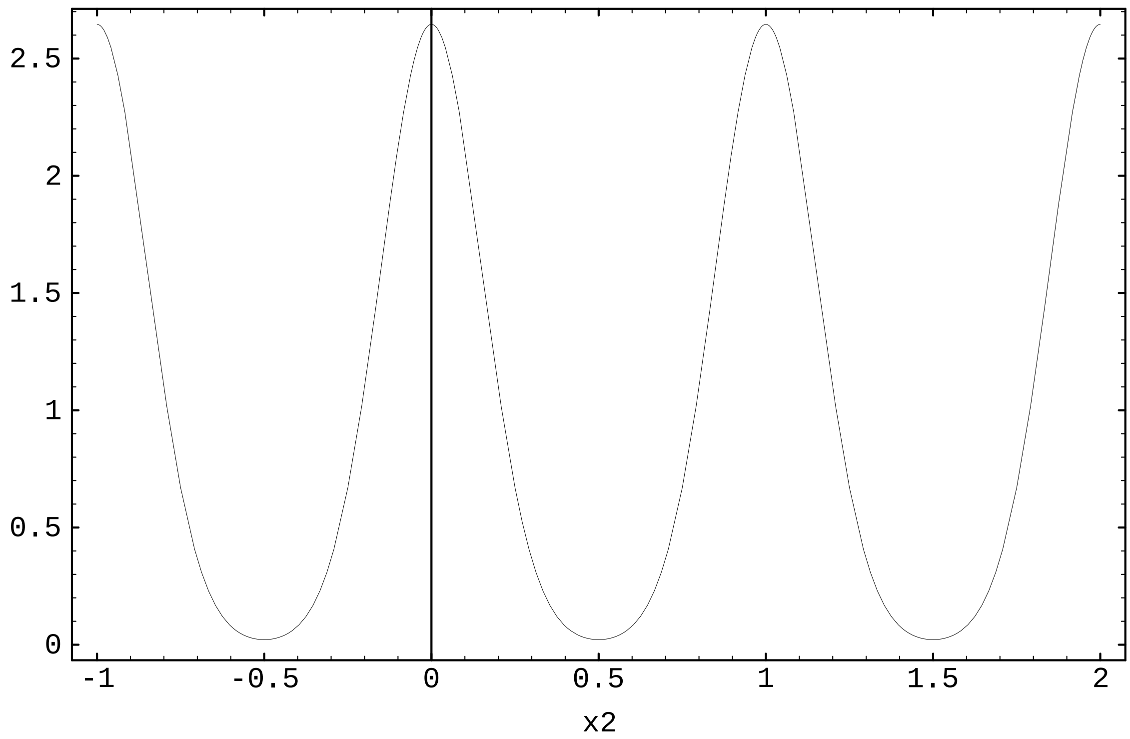

Abbildung 3: Die Funktion $\vartheta(x_{(2)}, \frac{i}{7})$.

7 Anhänge

A Die Bravaisgitter für $g = 3$

Zur Veranschaulichung der Bravaisgitter im dreidimensionalen Raum $V_{(2)}$ zeigen die Abbildungen 4 bis 17 die konventionellen Einheitszellen[8] und die Basisvektoren der Elementarzellen dieser Gitter [13]. In den Bildunterschriften bezeichnen a, b bzw. c die Kantenlängen der konventionellen Einheitszelle. Der Einfachheit halber wurde stets eine Kante der konventionellen Einheitszelle parallel zu $\boldsymbol{e}_{01}$ und eine weitere ihrer Kanten in die von den Einheitsvektoren $\boldsymbol{e}_{01}$ und $\boldsymbol{e}_{02}$ aufgespannte Ebene gelegt. Zwischen den Kantenvektoren $\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2$ und $\boldsymbol{k}_3$ bestehen die Innenwinkel

$$\begin{aligned} \alpha &:= \sphericalangle(\boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{k}_3), \\ \beta &:= \sphericalangle(\boldsymbol{k}_3, \boldsymbol{k}_1), \\ \gamma &:= \sphericalangle(\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2). \end{aligned}$$

Es wird natürlich vorausgesetzt, daß die Kantenlängen strikt größer als Null sind. Die Matrix A enthält dann jeweils zeilenweise die Basisvektoren von $\Lambda_{(2)}$. Durch geeignete Parallelverschiebungen dieser Vektoren erhält man die Elementarzelle des jeweiligen Gitters $\Lambda_{(2)}$, die nach Konstruktion eine Fundamentalzone dieses Gitters ist.

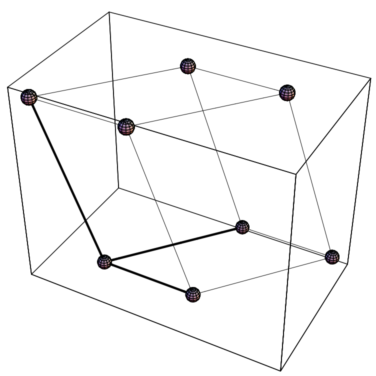

Abbildung 4: triklin Γ_r

$a,\ b,\ c, \alpha, \beta, \gamma$ beliebig,

$$A = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ t_{21} & t_{22} & 0 \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{pmatrix}$$

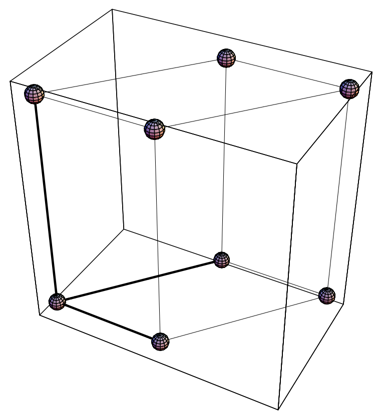

Abbildung 5: monoklin einfach Γ_m

$a,\ b,\ c$ beliebig, $\alpha = \beta = 90°, \gamma$ beliebig

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ b\cos\gamma & b\sin\gamma & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

[8] Das monoklin zentrierte Gitter (Abb. 6) kann auch monoklin basiszentriert aufgestellt werden.

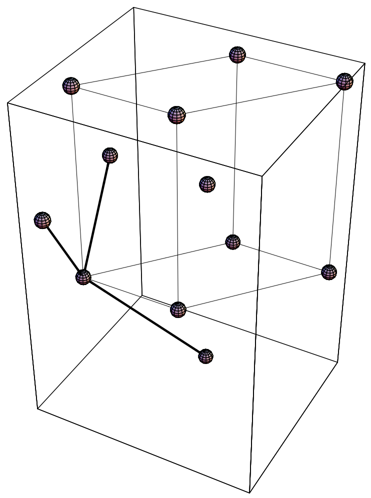

Abbildung 6: monoklin zentriert Γ_m'

$$A = \begin{pmatrix} \frac{-a+b\cos\gamma}{2} & \frac{b\sin\gamma}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{a-b\cos\gamma}{2} & -\frac{b\sin\gamma}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{a+b\cos\gamma}{2} & \frac{b\sin\gamma}{2} & -\frac{c}{2} \end{pmatrix}$$

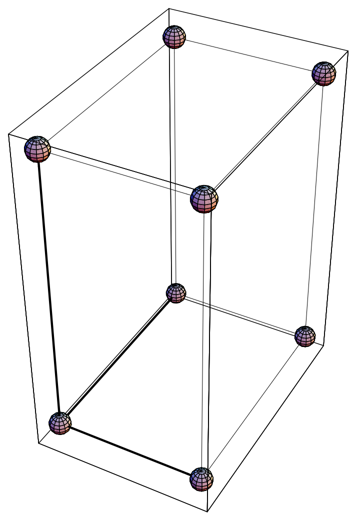

Abbildung 7: orthorhombisch einfach Γ_v

a, b, c beliebig, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

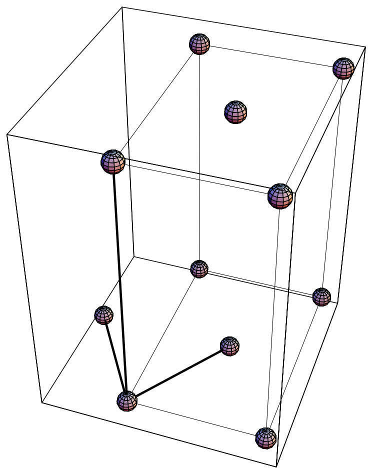

Abbildung 8: orthorhombisch basiszentriert Γ_v'

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{b}{2} & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{b}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

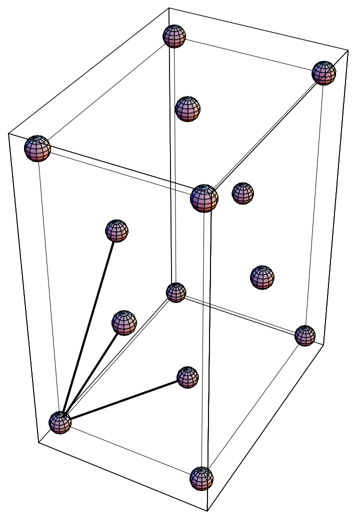

Abbildung 9: orthorhombisch flächenzentriert Γ_v''; $A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{b}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{c}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{b}{2} & 0 \end{pmatrix}$

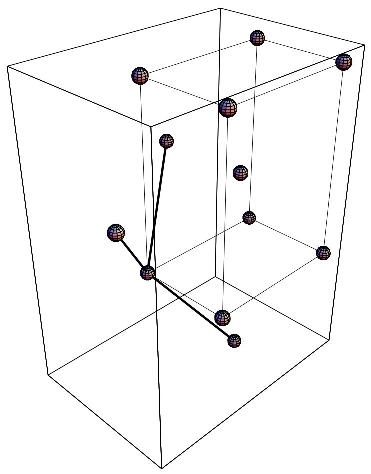

Abbildung 10: orthorhombisch raumzentriert Γ_v'''

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{b}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{b}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{b}{2} & -\frac{c}{2} \end{pmatrix}$$

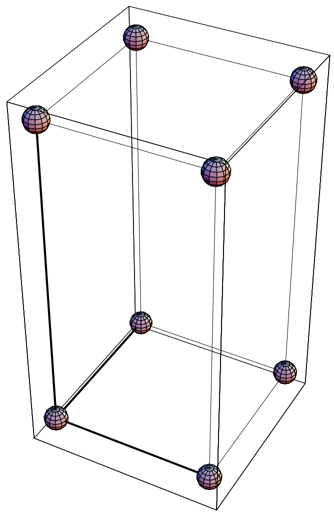

Abbildung 11: tetragonal einfach Γ_q

a = b, c beliebig, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

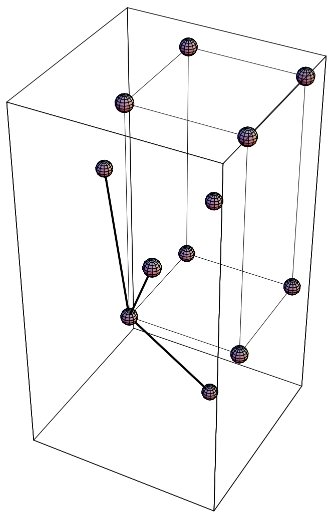

Abbildung 12: tetragonal zentriert Γ_q'

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{c}{2} \end{pmatrix}$$

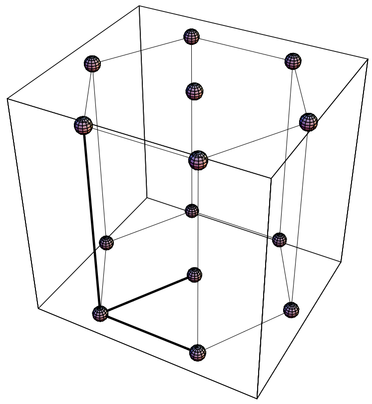

Abbildung 13: hexagonal Γ_h

a = b, c beliebig, $\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

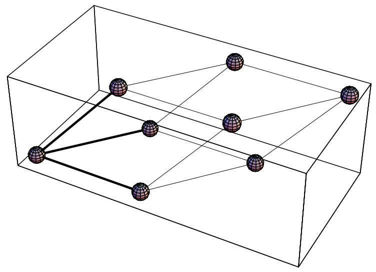

Abbildung 14: trigonal (rhomboedrisch) Γ_{rh}
a = b = c, $\alpha = \beta = \gamma < 120°$

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ a\cos\gamma & a\sin\gamma & 0 \\ a\cos\gamma & \substack{(1-\cos\gamma) \\ *a\cot\gamma} & \substack{\sqrt{1+2\cos\gamma} \\ *a\tan(\frac{\gamma}{2})} \end{pmatrix}$$

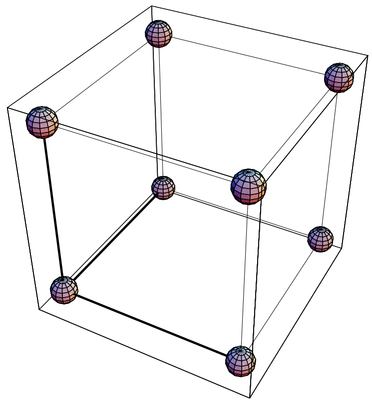

Abbildung 15: kubisch einfach Γ_c
a = b = c, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}$$

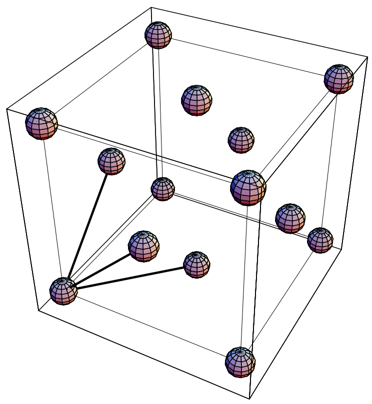

Abbildung 16: kubisch flächenzentriert Γ_c'

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

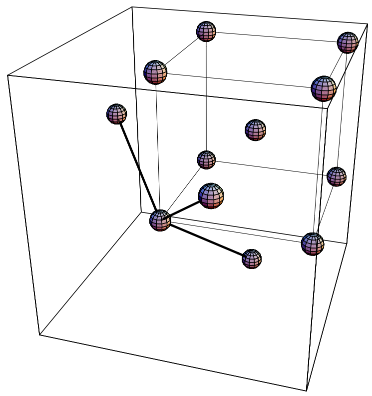

Abbildung 17: kubisch raumzentriert Γ_c''

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

B Code

Die Programme sind in *Mathematica* [31] geschrieben.

B.1 Harmonischer Oszillator

```
BeginPackage["holr`", "Utilities`FilterOptions`"]

a0fT::usage = "a0fT[x1, x2, dj] berechnet den Wert der Wellenfunktion des
        Grundzustandes eines raeumlich eindimensionalen harmonischen
        Oszillators mit der einreihigen Periodenmatrix T = I dj/(2 Pi) an der
        Stelle (x1, x2) unter Benutzung von EllipticTheta[3, ...]."

a1fT::usage = "a1fT[x1, x2, dj] := _a_ a0fT[x1, x2, dj], wobei _a_ der
        Erzeugungsoperator eines raeumlich eindimensionalen harmonischen
        Oszillators mit der einreihigen Periodenmatrix T = I dj/(2 Pi)
        sei. Zur Berechnung werden die Standardfunktionen
        EllipticTheta[3, ...] und EllipticThetaPrime[3, ...] benutzt."

anfT::usage = "anfT[n, x1, x2, dj] := (_a_)^n anfT[0, x1, x2, dj] berechnet den
        Wert der Wellenfunktion des n-ten angeregten Zustandes eines raeumlich
        eindimensionalen harmonischen Oszillators mit der einreihigen
        Periodenmatrix T = I dj/(2 Pi) an der Stelle (x1, x2). Fuer n = 0, 1
        werden die elliptischen Thetafunktionen von Mathematica nicht genutzt."

testa0fT::usage = "testa0fT[k] berechnet k mal an zufaellig gewaehlten Stellen
        (x1, x2) mit zufaelligem dj den Wert der Wellenfunktion des
        Grundzustandes auf zwei unterschiedliche Weisen: anfT[0, x1, x2, dj]
        und a0fT[x1, x2, dj]."

testa1fT::usage = "testa1fT[k] berechnet k mal an zufaellig gewaehlten Stellen
        (x1, x2) mit zufaelligem dj den Wert der Wellenfunktion des ersten
        angeregten Zustandes auf zwei unterschiedliche Weisen:
        anfT[1, x1, x2, dj] und a1fT[x1, x2, dj]."

testqpS::usage = "testqpS[n, k, opts] berechnet k mal an zufaellig gewaehlten
        Stellen (x1, x2) mit zufaelligem dj die Werte anfT[n, x1, x2, dj] und
        Sqrt[-2 Pi I/dj] I^n Exp[Pi I/4] anfT[n, x2, -x1, 4 Pi^2/dj].
        Diese beiden Werte muessen uebereinstimmen. Die Optionen opts werden
        gefiltert an NSum uebergeben."

plotanfT::usage = "plotanfT[n, dj, {x1min, x1max, x2min, x2max}, opts]
        zeichnet den Absolutbetrag der Wellenfunktion des n-ten angeregten
        Zustandes eines raeumlich eindimensionalen harmonischen Oszillators
        mit der einreihigen Periodenmatrix T = I dj/(2 Pi) im Gebiet
        [x1min, x1max] x [x2min, x2max]. Die Optionen opts werden gefiltert
        global an NSum und an Plot3D uebergeben."

finit::usage = "finit -> True ist Default fuer plotanfT. anfT wird dann
        mit endlichen, gebietsabhaengigen Grenzen aufgerufen."

plotanfT6D::usage = "plotanfT6D[{n1, n2, n3}, V] zeichnet den Absolutbetrag
        der Wellenfunktion des {n1, n2, n3}-ten angeregten Zustandes eines
        raeumlich dreidimensionalen harmonischen Oszillators mit der positiv
        definiten symmetrischen Potentialmatrix V im Gebiet
        [0, 1] x [0, 1] x [0, 1] x [0, 1] x [0, 1] x [ 0, 1] in dem
        Koordinatensystem, in dem sich die Veraenderlichen trennen lassen.
        Zu diesem Zweck wird V mit einer Aehnlichkeitstransformation
        diagonalisiert. Die dreireihige Periodenmatrix T in den neuen
        Koordinaten ist T = I DiagonalMatrix[Sqrt[Eigenvalues[V]]]/(2 Pi).
        Wegen der Trennung der Veraenderlichen lae3t sich eine besondere
        Darstellungsweise waehlen, bei der der Absolutbetrag je eines der
        drei Faktoren der Wellenfunktion ueber einer der drei sichtbaren
        Seiten eines Wuerfels abgetragen wird."
```

```
Begin["`uk`"]

Options[plotanfT] = {finit -> True};
SetOptions[NSum, Method -> Fit];

a0fT[x1_, x2_, (dj_)?Positive] := Exp[-x2 (Pi I x1 + dj x2/2)]*\
    EllipticTheta[3, (I dj x2/2 - Pi x1), Exp[-dj/2]] // N

a1fT[x1_, x2_, (dj_)?Positive] := Exp[-x2 (Pi I x1 + dj x2/2)]*\
    (2 I dj x2 EllipticTheta[3, (I dj x2/2 - Pi x1), Exp[-dj/2]] + \
    dj EllipticThetaPrime[3, (I dj x2/2 - Pi x1), Exp[-dj/2]])/Sqrt[2 dj] // N

anfT[(j_Integer)?NonNegative, x1_, x2_, (dj_)?Positive,
   s0_:DirectedInfinity[-1], s1_:DirectedInfinity[1]] :=
Module[{n, v1, v2},
   NSum[Evaluate[
      (Nest[
         Simplify[(-I*D[#, v2] + Pi*v1*# - dj/(2 Pi)*(D[#, v1] - Pi*I*v2*#))]&,
      E^(-((v2 + 2 n) (Pi I v1 + dj v2/2) + n^2 dj/2)), j]\
      /Sqrt[j! (2 dj)^j]) //. {v1 -> x1, v2 -> x2}],
   {n, s0, s1}]
] /; j < 16

anfT[(j_Integer)?NonNegative, x1_, x2_, (dj_)?Positive,
   s0_:DirectedInfinity[-1], s1_:DirectedInfinity[1]] :=
Module[{n, v1, v2, localWP = Options[NSum, WorkingPrecision][[1, 2]], iP, nE},
   iP = N[Pi, localWP];
   nE = N[E, localWP];
   NSum[Evaluate[
      (Nest[
         Simplify[(-I*D[#, v2] + Pi*v1*# - dj/(2 Pi)*(D[#, v1] - Pi*I*v2*#))]&,
      E^(-((v2 + 2 n) (Pi I v1 + dj v2/2) + n^2 dj/2)), j]\
      /Sqrt[j! (2 dj)^j]) //. {v1 -> x1, v2 -> x2, E -> nE, Pi -> iP}],
   {n, s0, s1}]
] /; j > 15

affineT[(m_List)?MatrixQ, (t_List)?VectorQ, (v_List)?VectorQ] :=
    m . v + t /; Length[Transpose[m]] == Length[v] && Length[m] == Length[t]

testa0fT[n_Integer] :=
Module[{i, v1, v2, v3, iP, r1, r2, r3,
        localWP = Options[NSum, WorkingPrecision][[1, 2]]},
    iP = N[Pi, localWP];
    For[i = 1, i < n + 1, i++,
        {v1, v2, v3} = Random[Real, #, localWP]& /@ {{-10, 10}, {-10, 10},
            {iP/10, 10 iP}};
        {r1, r2, r3} = Rationalize[{v1, v2, v3}, 0];
        Print[i, ". x1 = ", v1, "   x2 = ", v2, "   dj = ", v3];
        Print["    a0fT  = ", a0fT[v1, v2, v3]];
        Print["   a^0 fT = ", anfT[0, r1, r2, r3]]
    ]
] /; n > 0

testa1fT[n_Integer] :=
Module[{i, o1, o2, o3, v1, v2, v3, jf, r1, r2, r3,
        localWP = Options[NSum, WorkingPrecision][[1, 2]]},
    iP = N[Pi, localWP];
    jf = Function[{o1, o2, o3}, Evaluate[anfT[1, o1, o2, o3]]];
    For[i = 1, i < n + 1, i++,
        {v1, v2, v3} = Random[Real, #, localWP]& /@ {{-10, 10}, {-10, 10},
            {iP/10, 10 iP}};
        {r1, r2, r3} = Rationalize[{v1, v2, v3}, 0];
        Print[i, ". x1 = ", v1, "   x2 = ", v2, "   dj = ", v3];
        Print["    a1fT  = ", a1fT[v1, v2, v3]];
        Print["   a^1 fT = ", jf[r1, r2, r3]]
```

```
    ]
] /; n > 0

testqpS[(j_Integer)?NonNegative, n_Integer, opts___Rule] :=
Module[{i, o1, o2, o3, v1, v2, v3, jf, oldOptsNSum, localWP, iP, r1, r2, r3},
    oldOptsNSum = Options[NSum];
    SetOptions[NSum, Method -> Fit, FilterOptions[NSum, opts]];
    localWP = Options[NSum, WorkingPrecision][[1, 2]];
    iP = N[Pi, localWP];
    jf = Function[{o1, o2, o3}, Evaluate[anfT[j, o1, o2, o3]]];
    Print[StringJoin["  W1 := anfT[", ToString[j], ", x1, x2, dj]"]];
    Print[StringJoin["  W2 := Sqrt[-2 Pi I/dj] I^", ToString[j],
        " Exp[Pi I/4] anfT[", ToString[j], ", x2, -x1, 4 Pi^2/dj]"]];
    For[i = 1, i < n + 1, i++,
        {v1, v2, v3} = Random[Real, #, localWP]& /@ {{-10, 10}, {-10, 10},
            {iP/10, 10 iP}};
        {r1, r2, r3} = If[j < 16,
            Rationalize[{v1, v2, v3}, 0],
            {v1, v2, v3}];
        Print[i, ". x1 = ", v1, "   x2 = ", v2, "   dj = ", v3];
        Print["     W1 = ", jf[r1, r2, r3]];
        Print["     W2 = ",
            Sqrt[-2 iP I/r3] (I^j) Exp[iP I/4] jf[r2, -r1, 4 Pi^2/r3]
        ]
    ];
    (SetOptions[NSum, #]& /@ oldOptsNSum);
    Null
] /; n > 0;

(* g = 1: T = I dj/(2 Pi) *)
plotanfT[(j_Integer)?NonNegative, (dj_)?Positive, ll_List, opts___Rule] :=
Module[{xu, xo, yu, yo, s0, s1, jf, x1, x2, y1, y2, localWP},
    {xu, xo, yu, yo} = ll;
    s0 = Floor[-yu - N[Sqrt[yu^2 - 2 Log[$MachineEpsilon]/dj]]];
    s1 = Floor[-yo + N[Sqrt[yo^2 - 2 Log[$MachineEpsilon]/dj]]] + 1;
    SetOptions[NSum, Method -> Fit, FilterOptions[NSum, opts]];
    localWP = Options[NSum, WorkingPrecision][[1, 2]];
    SetOptions[Plot3D,
        BoxRatios -> {1, 1, 1}, PlotPoints -> 73,
        FaceGrids -> {{0, 0, -1}},
        AxesLabel -> {"Impuls/hPlanck", "Ort", None},
        ClipFill -> None, PlotRange -> All,
        AxesEdge -> {Automatic, {1, -1}, Automatic},
        PlotLabel -> StringJoin["|a^", ToString[j], " f_[",
            ToString[I N[dj/(2 Pi)]], "]|"],
        DisplayFunction -> $DisplayFunction,
        FilterOptions[Plot3D, opts]];
    If[finit /. {opts} /. Options[plotanfT],
        jf = Compile[{{x1, _Real}, {x2, _Real}},
            Evaluate[anfT[j, x1, x2, N[dj, localWP], s0, s1]]],
        jf = Compile[{{x1, _Real}, {x2, _Real}},
            Evaluate[anfT[j, x1, x2, N[dj, localWP]]]]
    ];
    Plot3D[Abs[jf[y1, y2]] // N, {y1, xu, xo}, {y2, yu, yo}]
] /; VectorQ[ll] && Length[ll] == 4 && Apply[And, OrderedQ /@ Partition[ll, 2]]

plotanfT6D[reiz_List, mm_List] :=
Module[{ev, ll, picz, picy, picx, label},
    ev = {}; ll = {0, 1, 0, 1};
    ev = Sqrt[Eigenvalues[mm]];
    picz = Graphics3D[plotanfT[reiz[[1]], ev[[1]], ll,
        PlotPoints -> 43, DisplayFunction -> Identity]];
    picy = If[reiz[[2]] == reiz[[1]] && ev[[2]] == ev[[1]], (*then*) (*else*)
        picz, Graphics3D[plotanfT[reiz[[2]], ev[[2]], ll,
            PlotPoints -> 43, DisplayFunction -> Identity]]];
    picx = If[reiz[[3]] == reiz[[2]] && ev[[3]] == ev[[2]], (*then*) (*else*)
```

```
        picy, Graphics3D[plotanfT[reiz[[3]], ev[[3]], ll,
            PlotPoints -> 43, DisplayFunction -> Identity]]];
    label = StringJoin["|a^{", ToString[reiz[[1]]], ", ",
        ToString[reiz[[2]]], ", ", ToString[reiz[[3]]],
        "} f_[I diag[", ToString[N[ev[[1]]/(2 Pi)]], ", ",
        ToString[N[ev[[2]]/(2 Pi)]], ", ",
        ToString[N[ev[[3]]/(2 Pi)]], "]]|"];
    pseudoPlot6Space[{picz, picy, picx}, label]
] /; (VectorQ[reiz, NonNegative] && Length[reiz] == 3 &&
    MatrixQ[mm] && mm - Transpose[mm] == DiagonalMatrix[{0, 0, 0}] &&
    VectorQ[Eigenvalues[mm], Positive])

pseudoPlot6Space[gl_List, bla_String] :=
Module[{gz, gy, gx, hx, hy, hz, wuerfel, mx, my},
    mx = {{0, 0, 1}, {0, 1, 0}, {-1, 0, 0}};
    my = {{1, 0, 0}, {0, 0, -1}, {0, 1, 0}};
    wuerfel = {{Thickness[0.001], Line[{{0, 0, 0}, {1, 0, 0}}],
        Line[{{0, 0, 0}, {0, 1, 0}}], Line[{{0, 0, 0}, {0, 0, -1}}],
        Line[{{1, 1, -1}, {0, 1, -1}}], Line[{{1, 1, -1}, {1, 0, -1}}],
        Line[{{1, 1, -1}, {1, 1, 0}}], Line[{{1, 0, 0}, {1, 1, 0}}],
        Line[{{1, 1, 0}, {0, 1, 0}}], Line[{{0, 1, 0}, {0, 1, -1}}],
        Line[{{0, 1, -1}, {0, 0, -1}}], Line[{{1, 0, 0}, {1, 0, -1}}],
        Line[{{1, 0, -1}, {0, 0, -1}}]},
        {Polygon[{{0.9, 0, 0}, {1, 0, 0}, {1, 0.1, 0}}],
        Polygon[{{0.9, 0, -1}, {1, 0, -1}, {1, 0, -0.9}}],
        Polygon[{{1, 0, -0.9}, {1, 0, -1}, {1, 0.1, -1}}]},
        {AbsoluteThickness[2], Line[{{0, 0, 0}, {0.2, 0, 0}}]},
        {AbsoluteThickness[2], AbsoluteDashing[{2, 3}],
            Line[{{0, 0, 0}, {0, 0.2, 0}}]}
    };

    {gz, gy, gx} = gl;
    {hz, hy, hx} = (FullOptions[#, PlotRange][[3, 2]])& /@ gl;

    Show[Graphics3D /@ {Identity @@ Take[gz, 1],
        MapAt[affineT[my, {0, 0, -1}, #]&, Apply[Identity, Take[gy, 1]],
            Position[Apply[Identity, Take[gy, 1]], {_, _, _}]],
        MapAt[affineT[mx, {1, 0, 0}, #]&, Apply[Identity, Take[gx, 1]],
            Position[Apply[Identity, Take[gx, 1]], {_, _, _}]],
        wuerfel},
        PlotLabel -> bla,
        BoxRatios -> {1 + hx, 1 + hy, 1 + hz},
        Axes -> True,
        AxesEdge -> {{-1, -1}, {-1, 1}, {1, 1}},
        Ticks -> {Table[{j0, ToString[N[j0 - 1]]},
                {j0, 1, 1 + Floor[2 hx]/2, 1/2}],
            Table[{j0, ToString[N[-j0]]}, {j0, -Floor[2 hy]/2, 0, 1/2}],
            Table[{j0, ToString[N[j0]]}, {j0, 0, Floor[2 hz]/2, 1/2}]}
    ]
]

End[ ]

Protect["*a*fT*", testqpS, finit]

EndPackage[ ]

(* Bemerkung zu testqpS:
Bei hoeheren angeregten (n > 7) Zustaenden muss man die NSum-Optionen
WorkingPrecision, NSumTerms und NSumExtraTerms mit der Quantenzahl n
erhoehen; diese Aenderungen sind wirksam, wenn Compiled -> False gesetzt wird.
*)
```

B.2 Kristallelektron

```
BeginPackage["ellr`"]
```

```
b1::usage = "b1[ny, x1] weist der Impulsvariablen x1 (g = 1) ihre bezueglich
        des Impulsgitters (in Kristallkoordinaten sind das die ganzen Zahlen Z)
        kongruente Stelle in der ny-ten Brillouinzone zu."

w1::usage = "w1[ny, x2] weist der Ortsvariablen x2 (g = 1) ihre bezueglich des
        Ortsgitters (in Kristallkoordinaten sind das die ganzen Zahlen Z)
        kongruente Stelle in der ny-ten (Orts)Brillouinzone zu."

electronM1DT::usage = "electronM1DT[n, Y, x1] stellt fuer das in
        Kristallkoordinaten gegebene Potential EllipticTheta[3, Pi x2,
        Exp[-Pi Y]] die n-reihige Matrix fuer das Eigenwertproblem der
        raeumlich eindimensionalen Schroedingergleichung in der
        Gitterdarstellung an der Stelle x1 in atomaren Einheiten auf."

plotBandS::usage = "plotBandS[bal, n, Y] zeichnet die Eigenwerte bal der
        Matrix electronM1DT ueber der ersten Brillouinzone."

Begin["‘uk‘"]

b1[ny_Integer, x1_] := Module[{xs = x1 - Floor[x1 + 1/2]},
    If[Ceiling[x1] - Floor[x1] == 0,
        (-1)^(ny + 1) Floor[ny/2],
        xs - (-1)^ny Sign[xs] Floor[ny/2]
    ]
] /; ny > 0

w1[ny_Integer, x2_] := Module[{xs = x2 - Floor[x2 + 1/2]},
    If[Ceiling[x2] - Floor[x2] == 0,
        (-1)^(ny + 1) Floor[ny/2],
        xs - (-1)^ny Sign[xs] Floor[ny/2]
    ]
] /; ny > 0

electronM1DT[n_Integer, Y_, x1_] := (* n := MatrixGroe3e *)
Module[{y0},
    Table[If[j == l,
        1 + 4 Pi^2 Y b1[j, x1]^2,
        E^(-Pi Y (b1[j, x1] - b1[l, x1])^2)],
    {j, n}, {l, n}]
] /; n > 0 && Y > 0

plotBandS[bal_List, n_Integer, Y_] :=
Module[{lpic, x},
    lpic = {};
    lpic = Table[
        Plot[Sort[Eigenvalues[electronM1DT[n, Y, x]]][[bal[[i]]]],
                {x, -1/2, 1/2}, DisplayFunction -> Identity,
                PlotStyle -> AbsoluteThickness[0.0001]
        ], {i, Length[bal]}];
    Show[lpic, DisplayFunction -> $DisplayFunction,
        PlotLabel -> "Y = " <> ToString[N[Y]],
        Frame -> True, FrameLabel -> {"x1", "E"}
    ]
] /; Y > 0 && VectorQ[bal, IntegerQ] && n > Max[bal] && Min[bal] > 0

End[ ]

(* Protect[ ] *)

EndPackage[ ]
```

Literatur

[1] L. Bieberbach. Über die Inhaltsgleichheit der Brillouinschen Zonen. *Monatshefte für Mathematik und Physik*, **48**:509, 1939.

[2] M. Born, M. Göppert-Mayer. Dynamische Gittertheorie der Kristalle. In H. Geiger, K. Scheel (Herausgeber), *Handbuch der Physik*, Band **XXIV/2**, Kapitel 4, S. 623. Springer, Berlin, 1933.

[3] W. Brauer, H.-W. Streitwolf. *Theoretische Grundlagen der Halbleiterphysik*, Band **119** der Reihe *Wissenschaftliche Taschenbücher*. Akademie–Verlag, Berlin, 1973.

[4] P. Cartier. Quantum Mechanical Commutation Relations and Theta Functions. In *Algebraic Groups and Discontinuous Subgroups*, Band **9** der *Proceedings of Symposia in Pure Mathematics*, S. 361, Providence, 1966. American Mathematical Society.

[5] J. R. Chelikowsky, M. L. Cohen. Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc–blende semiconductors. *Physical Review B*, **14**:556, 1976.

[6] F. Conforto. *Abelsche Funktionen und algebraische Geometrie*, Band **84** der Reihe *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, Berlin, 1956.

[7] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, Oxford, 1958.

[8] J. M. Feagin. *Methoden der Quantenmechanik mit Mathematica*. Springer, Berlin, 1995.

[9] D. K. Ferry. *Semiconductors*. Macmillan, New York, 1991.

[10] G. B. Folland. *Harmonic Analysis in Phase Space*, Band **122** der Reihe *Annals of Mathematics Studies*. Princeton University Press, Princeton, 1989.

[11] H. Gajewski, K. Gröger, K. Zacharias. *Nichtlineare Operatorgleichungen und Operatordifferentialgleichungen*. Akademie-Verlag, Berlin, 1974.

[12] P. Griffiths, J. Harris. *Principles of Algebraic Geometry*. John Wiley & Sons, New York, 1978.

[13] H. Jagodzinski. Kristallographie. In S. Flügge (Herausgeber), *Handbuch der Physik*, Band **VII/1**, S. 1. Springer, Berlin, 1955.

[14] G. A. Jones. Geometric and Asymptotic Properties of Brillouin Zones in Lattices. *The Bulletin of the London Mathematical Society*, **16**:241, 1984.

[15] A. I. Kostrikin, Yu. I. Manin. *Lineinaya Algebra i Geometriya*. Nauka, Moskau, 1986. In Russisch.

[16] L. D. Landau, E. M. Lifschitz. *Quantenmechanik*, Band **III** der Reihe *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Akademie-Verlag, Berlin, 1979.

[17] P. T. Landsberg. An Electron in a Perfect Crystal. In P. T. Landsberg (Herausgeber), *Solid State Theory – Methods and Applications*, Kapitel II - III, S. 39. Wiley–Interscience, London, 1969.

[18] H. Lange, Ch. Birkenhake. *Complex Abelian Varieties*, Band **302** der Reihe *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften.* Springer, Berlin, 1992.

[19] K. Maurin. *General Eigenfunction Expansions and Unitary Representations of Topological Groups*, Band **48** der Reihe *Monografie Matematyczne.* PWN – Polish Scientific Publishers, Warszawa, 1968.

[20] D. Mumford. *Curves and Their Jacobians.* The University of Michigan Press, Ann Arbor, 1976.

[21] D. Mumford. *Tata Lectures on Theta I*, Band **28** der Reihe *Progress in Mathematics.* Birkhäuser, Boston, 1983.

[22] D. Mumford. *Tata Lectures on Theta II*, Band **43** der Reihe *Progress in Mathematics.* Birkhäuser, Boston, 1984.

[23] D. Mumford with M. Nori and P. Norman. *Tata Lectures on Theta III*, Band **97** der Reihe *Progress in Mathematics.* Birkhäuser, Boston, 1991.

[24] M. Reed, B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators.* Academic Press, New York, 1978.

[25] T. Shiota. Characterization of Jacobian varieties in terms of soliton equations. *Inventiones mathematicae*, **83**:333, 1986.

[26] C. L. Siegel. *Topics in Complex Function Theory Volume III.* Wiley–Interscience, New York, 1989.

[27] M. M. Skriganov. Geometric and arithmetic methods in the spectral theory of multidimensional periodic operators. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, **171**:1, 1985. In Russisch.

[28] A. Sommerfeld, H. Bethe. Elektronentheorie der Metalle. In H. Geiger, K. Scheel (Herausgeber), *Handbuch der Physik*, Band **XXIV/2**, Kapitel 3, S. 333. Springer, Berlin, 1933.

[29] N. Ja. Vilenkin, A. U. Klimyk. *Representation of Lie Groups and Special Functions. Vol.: 3 Classical and Quantum Groups and Special Functions*, Band **75** der Reihe *Mathematics and Its Applications (Soviet Series).* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1992.

[30] N. Ja. Vilenkin, A. U. Klimyk. *Representation of Lie Groups and Special Functions. Vol.: 2 Class I Representations, Special Functions, and Integral Transforms*, Band **74** der Reihe *Mathematics and Its Applications (Soviet Series).* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1993.

[31] S. Wolfram. *Mathematica.* Addison Wesley, Redwood City, 1991.

[32] J. Zak. The kq–Representation in the Dynamics of Electrons in Solids. *Solid State Physics*, **27**:1, 1972.