Das Blochsche Theorem für unendliche Systeme

Autor(en): **Scharf, G.**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **39 (1966)**

Heft 6

PDF erstellt am: **25.05.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-113706

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.
Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.
Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Ein Dienst der *ETH-Bibliothek*
ETH Zürich, Rämistrasse 101, 8092 Zürich, Schweiz, www.library.ethz.ch

http://www.e-periodica.ch

Das Blochsche Theorem für unendliche Systeme

von **G. Scharf**
Institut für Theoretische Physik der Universität Zürich

(16. VII. 66)

Summary. BLOCH's theorem concerning the eigenfunctions of a periodic Hamiltonian is derived from very general asumptions. This gives an illustration to a general method of constructing eigenfunctions for the continuous spectrum.

1. Einleitung

In der Quantenmechanik pflegt man die Betrachtung unendlicher Systeme gern zu vermeiden. Das hat seinen guten Grund immer dann, wenn der Hamiltonoperator im unendlichen Raum ein kontinuierliches Spektrum besitzt. Dann ist nämlich zunächst unklar, wie man Eigenfunktionen definieren soll. Die für das endliche Volumen bequeme Methode, die Eigenfunktionen durch Randbedingungen auszuzeichnen, ist nicht anwendbar. Eine gewisse Klasse von Lösungen (zum Beispiel die beschränkten Lösungen) der Eigenwertgleichung als Eigenfunktionen zu definieren, ist unzweckmässig, weil man die Gesamtheit der Lösungen von partiellen Differentialgleichungen in der Regel nicht übersehen kann. Falls vom Hamiltonoperator nur Selbstadjungiertheit vorausgesetzt wird, ist man bei der Charakterisierung von Eigenfunktionen im kontinuierlichen Spektrum durchaus in Verlegenheit. Das ist sofort anders, wenn der Hamiltonoperator eine Symmetriegruppe besitzt (oder auch nur eine approximative Symmetrie im asymptotischen Bereich, wie in der Streutheorie). Dann kann man fordern, dass die Eigenfunktionen (oder ihre asymptotischen Grenzwerte) Darstellungen der Symmetriegruppe liefern sollen.

In der folgenden Notiz soll an einem einfachen Beispiel gezeigt werden, wie man in einem solchen Falle die Eigenfunktionen explizit konstruieren kann und ihre wichtigsten Eigenschaften (Vollständigkeit, Entwicklungssatz) erhält. Dabei wird die Theorie der Eigenfunktionale von Gelfand, Kostjutschenko und anderen verwendet. Als Invarianzgruppe soll die diskrete Translationsgruppe gewählt werden, so dass die Ergebnisse beispielsweise auf selbstadjungierte Differentialoperatoren mit periodischen Koeffizienten zutreffen. Wir erhalten eine Verallgemeinerung des Blochschen Theorems.

Der Schrödingeroperator mit periodischem Potential im unendlichen Raum wurde bereits von ODEH und KELLER [1][1]) behandelt, doch lässt sich deren Methode nicht auf allgemeinere Verhältnisse übertragen.

---

[1]) Die Ziffern in eckigen Klammern verweisen auf das Literaturverzeichnis, Seite 560.

2. Form und Eigenschaften der Eigenfunktionale

Wir legen den Hilbertraum $L^2(R^n)$ zugrunde sowie den Testfunktionenraum $S(R^n)$ der C^∞-Funktionen, die samt allen Ableitungen für $|\vec{x}| \to \infty$ schneller als jede Potenz gegen 0 streben. S ist dicht in L^2, L^2 dicht im dualen Raum S' von S (bezüglich der schwachen Topologie in S'),

$$S \subset L^2 \subset S' \tag{1}$$

ist ein sogenanntes Gelfandsches Raumtripel [3].

L sei ein selbstadjungierter Operator in $L^2(R^n)$, der S in sich abbildet; also zum Beispiel eine selbstadjungierte Erweiterung eines hermiteschen Differentialoperators mit beliebig oft differenzierbaren Koeffizienten, die samt allen Ableitungen durch Polynome beschränkt sind (die Forderung der unendlichen Differenzierbarkeit kann abgeschwächt werden, [2] Seite 176). Ausserdem sei L bezüglich einer diskreten Translationsgruppe invariant:

Seien $U_1, U_2, \dots U_n$ deren primitive Translationen, die ohne Verlust an Allgemeinheit gleich 1 gewählt werden können

$$U_i f(x_1, \dots x_n) = f(x_1, \dots x_i + 1, \dots x_n) \qquad f \in L^2 \tag{2}$$

und $E_{k_0}^{(0)}$ die Spektralschar von L, also

$$L = \int_{-\infty}^{+\infty} k_0 \, dE_{k_0}^{(0)} . \tag{3}$$

Dann soll

$$[E_{k_0}^{(0)}, U_i] = 0 \tag{4}$$

gelten für alle k_0 und $i = 1, 2, \dots n$. Unter diesen Voraussetzungen wollen wir Eigenfunktionale von L bestimmen.

Weil die U_i unitäre Operatoren in L^2 sind, besitzen sie ebenfalls Spektralscharen $E_{k_1}^{(1)}, \dots E_{k_n}^{(n)}$,

$$U_i = \int_0^{2\pi} e^{ik_i} \, dE_{k_i}^{(i)} .$$

Alle $E_{k_i}^{(i)}$ kommutieren, deshalb ist

$$E(k) = E_{k_0}^{(0)} E_{k_1}^{(1)} \dots E_{k_n}^{(n)} \quad k = (k_0, \vec{k})$$
$$-\infty < k_0 < +\infty , \quad 0 \leqslant k_i < 2\pi \quad i = 1, \dots n \tag{5}$$

eine $n+1$-dimensionale Spektralschar. Weil das Spektrum von Translationsoperatoren in $L^2(R^1)$ einfach ist, existiert ein erzeugender Vektor $e \in L^2(R^n)$, so dass die Menge der Vektoren $E_{k_1}^{(1)} \dots E_{k_n}^{(n)} e$, $0 \leqslant k_i < 2\pi$ in $L^2(R^n)$ dicht liegt. Erst recht ist dann die Menge der $E(k)\, e$, $-\infty < k_0 < +\infty$, $0 \leqslant k_i < 2\pi$ dicht in $L^2(R^n)$. Wir bilden

$$\sigma(k) = \| E(k)\, e \|^2 .$$

$\sigma(k)$ ist ein nichtnegatives volladditives Mass im $n+1$-dimensionalen Raum: $-\infty < k_0 < +\infty$, $0 \leqslant k_i < 2\pi$, $i = 1, 2, \dots n$.

Wegen (1) kann $E(k)\,e$ als Funktional in S' betrachtet werden. Es ist von schwach beschränkter Schwankung hinsichtlich k ([2] S. 165). Da S ein nuklearer Raum ist, existiert daher fast überall eine schwache Ableitung nach jedem nichtnegativen volladditiven Mass im k-Raum. Also definiert

$$\frac{d}{d\sigma(k)}\left(E(k)\,e, \varphi\right) = (\psi_k, \varphi) \quad \varphi \in S \tag{6}$$

σ – fast überall Funktionale $\psi_k \in S'$, dieses sind die Eigenfunktionale. Als temperierte Distributionen haben sie die Form

$$(\psi_k, \varphi) = \int f_k\, D^p \varphi\, d^n x \quad D^p = \frac{\partial^{np}}{\partial x_1^p \ldots \partial x_n^p}, \tag{7}$$

wobei $f_k(\vec{x})$ stetig und durch ein Polynom beschränkt ist.

Die ψ_k sind schwache Lösungen der Eigenwertgleichungen:
Sei $\Delta = \{k \mid k_i^1 \leqslant k_i \leqslant k_i^2,\ i = 0, 1 \ldots n\}$ ein Würfel im k-Raum, der sich auf den Punkt k zusammenzieht, so ist

$$\begin{aligned}(\psi_k, L\,\varphi) &= \lim_{\Delta \to k} \frac{1}{\sigma(\Delta)} \left((E_{k_0^2}^{(0)} - E_{k_0^1}^{(0)}) \prod_{i=1}^{n} (E_{k_i^2}^{(i)} - E_{k_i^1}^{(i)})\, e, \int_{-\infty}^{+\infty} k_0\, dE_{k_0}^{(0)}\, \varphi \right) \\ &= \lim_{\Delta \to k} \frac{1}{\sigma(\Delta)} \left(\int_{k_0^1}^{k_0^2} k_0^*\, dE_{k_0}^{(0)} \prod_{i=1}^{n} (E_{k_i^2}^{(i)} - E_{k_i^1}^{(i)})\, e, \varphi \right) = (k_0^*\, \psi_k, \varphi)\end{aligned}$$

ebenso

$$(\psi_k, U_i\, \varphi) = (e^{-ik_i}\, \psi_k, \varphi)\,.$$

Die letzte Gleichung lautet ausgeschrieben:

$$\begin{aligned}\int f_k(\vec{x})\, D^p \varphi\, (x_1, \ldots x_i + 1, \ldots x_n)\, d^n x &= \int f_k\, (x_1, \ldots x_i - 1, \ldots x_n)\, D^p \varphi(\vec{x})\, d^n x \\ &= \int e^{-ik_i} f(\vec{x})\, D^p \varphi(\vec{x})\, d^n x \quad \varphi \in S\,.\end{aligned}$$

Da $f_k(\vec{x})$ stetig ist, folgt

$$f_k\, (x_1, \ldots x_i - 1, \ldots x_n) = e^{-ik_i} f_k(\vec{x})\,.$$

Setzen wir

$$f_k(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}}\, u_k(\vec{x}) \qquad \vec{k} = (k_1, \ldots k_n)\,,$$

so folgt, dass $u_k(\vec{x})$ stetig und periodisch in $\vec{x}$ ist. Insgesamt ergibt sich für ψ_k die folgende Form

$$(\psi_k, \varphi) = (e^{i\vec{k}\vec{x}}\, u_k(\vec{x}), D^p \varphi) = (e^{i\vec{k}\vec{x}}\, D^p\, v_k(\vec{x}), \varphi)$$

oder

$$\psi_k = e^{i\vec{k}\vec{x}}\, w_k\,,$$

wobei w_k eine periodische Distribution ist, das heisst eine Ableitung einer stetigen periodischen Funktion ([5] S. 62). Dieses ist eine Verallgemeinerung des Blochschen Theorems.

Hinsichtlich der weiteren Eigenschaften der Eigenfunktionale kann die allgemeine Theorie zitiert werden [2]. Die verallgemeinerte Fourier-Transformation F

$$\varphi \in S \xrightarrow{F} (\psi_k, \varphi) = \varphi(k) \in L^2_\sigma .$$

vermittelt eine isometrische Abbildung von $S \to L^2_\sigma$,

$$(\varphi_1, \varphi_2) = \int (\psi_k, \varphi_1)^* (\psi_k, \varphi_2)\, d\sigma(k) ,$$

die sich wegen der Dichtheit von S auf ganz $L^2(R^n)$ ausdehnen lässt. Die inverse Abbildung wird durch die Formel

$$\varphi = \int (\psi_k, \varphi)\, \psi_k\, d\sigma(k) \tag{8}$$

beschrieben. Damit ist die Entwicklung nach den Eigenfunktionalen gefunden.

3. Spezialfälle

Zunächst sei angemerkt, dass im Falle eines elliptischen Differentialoperators L die Eigenfunktionale ψ_k C^∞-Funktionen sind und im gewöhnlichen Sinn der Eigenwertgleichung genügen ([4] S. 136). Sodann wird auffallen, dass die Eigenfunktionale von dem $n+1$-dimensionalen Parameter $(k_0, \vec{k})$ abhängen. Im Falle des Schrödingeroperators weiss man, dass sich die Eigenfunktionen durch den Wellenvektor $\vec{k}$ und einen diskreten Bandindex l beschreiben lassen. Der Wert der Energie k_0 ist durch diese beiden bestimmt, es gibt eine Dispersionsbeziehung. Die Integration in der Entwicklungsformel (8) reduziert sich dann auf eine n-dimensionale Integration über den $\vec{k}$-Raum und eine Summation über den Bandindex l. Wir prüfen, wann dieses allgemein zutrifft.

Nach einem bekannten Satz über Abelsche Operatoralgebren [7] existieren vertauschbare selbstadjungierte Operatoren $A_1, \dots A_n$, so dass L und alle U_i Funktionen der A_ν sind:

$$L = a_0 (A_1, \dots A_n) , \quad U_i = a_i (A_1, \dots A_n) \qquad i = 1, \dots n . \tag{9}$$

Seien

$$A_\nu = \int \lambda_\nu\, dP^{(\nu)}_{\lambda_\nu}$$

die Spektraldarstellungen der A_ν, so folgt für die Spektralscharen von L beziehungsweise U_i:

$$E^{(i)}_{k_i} = e_{k_i} (A_1, \dots A_n) \quad i = 0, 1, \dots n ,$$

wobei

$$e_{k_i} (\lambda_1, \dots \lambda_n) = \begin{cases} 1 \text{ für } \lambda_\nu \in Sp(A_\nu) \quad \nu = 1, \dots n \quad a_i (\lambda_1, \dots \lambda_n) \leqslant k_i \\ 0 \text{ sonst} \end{cases}$$

ist, $Sp(A_\nu) = \operatorname{supp} dP^{(\nu)}_{\lambda_\nu}$ bezeichnet das Spektrum von A_ν. Damit ergibt sich

$$E^{(i)}_{k_i} = \int_{D_i} dP^{(1)}_{\lambda_1} \dots dP^{(n)}_{\lambda_n}$$

mit

$$D_i = \{\vec{\lambda} \mid \lambda_\nu \in Sp(A_\nu), a_i(\vec{\lambda}) \leqslant k_i\}$$

und

$$E(k) = \prod_{i=0}^{n} E_{k_i}^{(i)} = \int_D dP_{\lambda_1}^{(1)} \dots dP_{\lambda_n}^{(n)}$$

mit

$$D = \bigcap_{i=0}^{n} D_i = \{\vec{\lambda} \mid \lambda_\nu \in Sp(A_\nu),\, a_i(\vec{\lambda}) \leqslant k_i\,,\, i = 0, 1, \dots n\}\,.$$

Daraus sieht man, dass das Mass $d\sigma(k)$ bzw. die Eigenfunktionale ψ_k nur dann nicht verschwinden, wenn die $n + 1$ Bedingungen

$$a_i\,(\lambda_1, \dots \lambda_n) = k_i\,, \lambda_\nu \in Sp(A_\nu), \quad i = 0, 1, \dots n \tag{10}$$

erfüllt sind. Sie sind als Parameterdarstellungen einer Punktmenge M im $(k_0, \vec{k})$-Raum zu betrachten, über die effektiv integriert wird. Wenn die k_i etwa stetig partiell nach den λ_j differenzierbar sind, und der Rank der Matrix $(\partial k_i/\partial \lambda_j)$ n ist, so ist dies eine n-dimensionale Mannigfaltigkeit M_n, so dass die Eigenfunktionale nur noch von n 1-dimensionalen Parametern abhängen. Wenn überdies die Funktionaldeterminante

$$\frac{\partial(k_1, \dots k_n)}{\partial(\lambda_1, \dots \lambda_n)} \neq 0$$

ist, kann man M_n im Kleinen eindeutig durch $\vec{k}$ parametrisieren; im Grossen tritt Mehrdeutigkeit auf, die durch einen Index l abgezählt werden möge. Trifft dies σ – fast überall zu, so schreibt sich die Entwicklungsformel (8) in der gewohnten Form

$$\varphi = \sum_l \int (\psi_{\vec{k}}^{(l)}, \varphi)\, \psi_{\vec{k}}^{(l)}\, d\sigma_l(\vec{k})$$

als Integral über den $\vec{k}$-Raum. Für $k_0 =$ konst bestimmt dann (10) eine höchstens $n - 1$-dimensionale Untermannigfaltigkeit im $\vec{k}$-Raum, die Fermifläche im Fall des Schrödingeroperators.

Es ist auch möglich, an Stelle der n Parameteroperatoren in (9) weniger, ja sogar einen einzigen zu wählen ([8] S.66). Doch erhält man dann «pathologische» Parameterdarstellungen für M in der Art der Peanoschen Kurve. Weil die bekannten Sätze über Funktionen von Operatoren solche Pathologien stets mit einschliessen, ist die Beschaffenheit der Integrationsmannigfaltigkeit M in allgemeinen Fällen durchaus ein delikates Problem. Falls man dieses auf anderem Wege lösen kann (wie beim Schrödingeroperator) erhält man umgekehrt Aufschluss über die funktionale Abhängigkeit zwischen dem Operator L und den Translationen.

Literatur

[1] F. Odeh, J. B. Keller, *Partial Differential Equations with Periodic Coefficients and Bloch Waves in Crystals*, J. Math. Phys. *5*, 1499 (1964).

[2] I. M. Gelfand, G. E. Schilow, *Verallgemeinerte Funktionen III*, Berlin 1964.

[3] I. M. Gelfand, N. J. Wilenkin, *Verallgemeinerte Funktionen IV*, Berlin 1964.

[4] L. Schwartz, *Théorie des Distributions I*, Paris 1950.

[5] L. Schwartz, *Théorie des Distributions II*, Paris 1951.

[6] J. von Neumann, *Zur Algebra der Funktionaloperatoren und Theorie der normalen Operatoren*, Math. Ann. *102*, 370 (1929).

[7] B. Sz. Nagy, *Spektraldarstellung linearer Transformationen des Hilbertschen Raumes*, Ergeb. Math. *5*, Nr. 5 (1942).