SINGULÆR PERTURBATIONSTEORI

FOR DISKRETE LINEÆRE OPERATORER

AALBORG UNIVERSITET

AALBORG UNIVERSITET

Institut for Matematiske Fag • Niels Lund • 10. semester på matematik • Foråret 2014

AALBORG UNIVERSITET INSTITUT FOR MATEMATISKE FAG

TITEL:

Singulær perturbationsteori
for diskrete lineære operatorer

PROJEKTPERIODE:

10. semester på matematik
Forårssemesteret 2014

PROJEKT AFSLUTTET:

23. maj

SPECIALESTUDERENDE:

Niels Lund

VEJLEDER:

Horia Cornean

OPLAGSTAL: 4

ANTAL SIDER: 49

SYNOPSIS:

I denne rapport introduceres en matematisk beskrivelse af den periodiske struktur i en todimensionel krystal. Dette gøres i form af et perfekt gitter Λ med et atom i hvert gitterpunkt. Bølgefunktionerne $\boldsymbol{\psi}$ for elektronerne i denne krystal danner grund for et Hilbertrum kaldet $\ell^2(\Lambda)$. På dette rum defineres Hamiltonoperatoren, hvis spektrum består af de tilladte energi-niveauer for elektronerne i krystallen.

Ved at udskifte en af atomerne i gitteret opnås et nyt ikke-perfekt gitter. Hamiltonoperatoren for dette gitter har, ud over det oprindelige spektrum, en isoleret ikke-degenereret egenværdi E_λ med tilhørende egenvektor $\boldsymbol{\psi}_\lambda$. I rapporten vises det at denne egenværdi er stabil under magnetisk perturbation, samt at den perturberede egenværdi E_b kan skrives som en asymptotisk række omkring b, hvor de to første led kan bestemmes ved $\langle \boldsymbol{\psi}_\lambda, \widehat{H_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda \rangle$, hvor $\widehat{H_b}$ er den perturberede Hamiltonoperator. Derudover bliver det vist at der eksisterer en unitær operator $\widehat{U_b}$, således at den perturberede egenvektor kan findes ved $\boldsymbol{\psi}_b = \widehat{U_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda$.

FORORD

Denne rapport er udarbejdet som afsluttende speciale i analytisk matematik og fysik på Aalborg universitet i foråret 2014. Rapporten er skrevet med udgangspunkt i teorien fra kurserne "matematisk analyse 1 og 2" samt "operatorer i Hilbertrum", og læseren antages at have kendskab til disse emner. Læseren kan med fordel også have et grundlæggende kendskab til faststof fysik og kvantemekanik.

Jeg vil gerne takke min vejleder Horia Cornean for sin engagerede og kyndige vejledning, samt støtte i forbindelse med projektet.

Læsevejledning

Igennem rapporten vil der fremtræde kildehenvisninger, som henviser til en litteraturliste bagerst i rapporten. Kildehenvisningerne i rapporten vil være angivet efter Havard-metoden, hvor en kilde skrives som[Efternavn, År] [Evt. sidetal m.m.].

Sætninger og definitioner vil i denne rapport være indrammet i bokse. Beviser vil blive afsluttet med $\square$ og eksempler med $\Diamond$. Vektornotation vil gennem rapporten blive betegnet med små bogstaver og fed skrift eksempelvis $\boldsymbol{x}$. Skalarer skrives med små bogstaver, for eksempel m, medmindre andet er angivet. Den komplekst konjugerede af skalaren m noteres som $\overline{m}$. Rum og mængder vil igennem rapporten blive noteret med skrifttypen $\mathscr{H}$, medmindre der er tale om et specifikt rum eller mængde, for eksempel $\mathbb{R}^3$. Operatorer vil blive noteret med $\widehat{A}$, hvor den adjungerede operator skrives som $\widehat{A}^*$. Operatorens kerne vil oftest blive noteret som $A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$. Identitetsoperatoren betegnes $\widehat{I}$. Der kan være et indeks på denne for at tydeliggøre hvilket rum der arbejdes med.

Formler, sætninger m.m. er alle fortløbende nummereret efter hvilket kapitel, de er placeret i, og hvor i kapitlet de står. Derfor vil der nogle steder eksempelvis stå en reference i teksten, såsom "(2.4)", hvilket angiver den 4. navngivne formel i 2. kapitel.

Aalborg, den 23. maj 2014

Niels Lund

Abstract

In quantum physics the proparties of particles can be determined from the spectrum of self-adjoint operators. For instance the energy can be determined from the Hamiltonian. The Hamiltonian for a crystal can be calculated using the tight-binding model, which depends on the interaction between electrons and atoms, and between the electrons among themselves, where the latter is most often ignored, hence the model becomes an one-electron-approximation. The interaction between the electron and the atoms depends on the structure and materia of the crystal.

In this report the crystal of choise is a two dimensional squared latice, Λ, with one type of atom, and the tight-binding model includes only interaction between the electron and the nearst neighbour atoms. This leads to an exponential, almost diagonal Hamiltonian $\widehat{H_0}$ for which an magnetic field can be applied by using the Peierls substitution. This is a perturbation of the operator in form of a phase factor on the kernel of the operator,

$$H_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right) = e^{ib\,\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}\,H_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right),$$

where $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \Lambda$. The pertubated Hamiltonian is proved to have a stable resolvent set if the magnitude of the magnetic field is limited.

If a substitution of an atom in the lattice is made, it results in an contribution to the Hamiltonian $\widehat{H_\lambda}$ and hence a contribution to the spectrum of the Hamiltonian in form of an isolated non-degenerated eigenvalue E_λ with a corresponding eigenvector $\boldsymbol{\psi}_\lambda \in \ell^2(\Lambda)$. The pertubated Hamiltonian has an isolated non-degenerated eigenvalue E_b near the isolated eigenvalue E_λ of the original Hamiltonian $\widehat{H_\lambda}$. There exist an unitary operato, $\widehat{U_b}$ such that the eigenvector $\boldsymbol{\psi}_b$ corresponding to the pertubated eigenvalue E_b can be found by

$$\boldsymbol{\psi}_b = \widehat{U_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda.$$

Furthermore an estimate of the pertubated eigenvalue can be made using the non-perturbated eigenvector, so that

$$\left|\left\langle \boldsymbol{\psi}_\lambda, \widehat{H_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\rangle - E_b\right| \leq C\,b^2,$$

which implies that the two first terms of the pertubated eigenvalue can be calculated knowing only the non-perturbated eigenvector.

Indholdsfortegnelse

KAPITEL 1

INDLEDNING

Dette afsnit er skrevet ud fra [Phillips, 2009] og [Kristensen, 2009].

Indenfor kvantemekanik bestemmes mange af en partikels egenskaber ved at anvende operatorer på partiklens bølgefunktion. Denne bølgefunktion bestemmes ved at løse Schrödinger-ligningen

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi}(t,\boldsymbol{r}) = \widehat{H_0}\boldsymbol{\Psi}(t,\boldsymbol{r})$$

hvor $\widehat{H_0} = \widehat{T_0} + \widehat{V_0} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_0(t,\boldsymbol{r})$ er Hamiltonoperatoren.

Hvis Hamiltonoperatoren er tidsuafhængig kan Schrödinger-ligningen opdeles i en tidsafhængig og en tidsuafhængig del. Ved denne opdeling fås den tidsuafhængige Schrödinger-ligning på formen

$$\widehat{H_0}\boldsymbol{\psi} = E\boldsymbol{\psi},$$

hvor E er partiklens energi, ved at omskrive denne ligning fås

$$\left(\widehat{H_0} - E\right)\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{0}.$$

Dermed haves det at løsningerne til Schrödinger-ligningen kan bestemmes ved at finde spektrummet til Hamiltonoperatoren $\widehat{H_0}$.

Hamiltonoperatoren for elektroner i en krystal afhænger af krystallens struktur på grund af interaktionen mellem atomerne og elektronen, samt interaktion elektronerne imellem. Sidst nævnte interaktion ses der dog oftest bort fra, hvilket betyder at modellen bliver til en en-elektron-model. Der er forskellige metoder til at bestemme Hamiltonoperatoren og i denne rapport anvendes tight-binding modellen.

Ofte er potentialet for en partikel så omfattende at Schrödinger-ligningen ikke kan løses. Dette kan omgås ved at tage udgangspunkt i en forholdsvis simpel Hamiltonoperator, hvor egentilstanden er kendt. Derefter kan Hamiltonoperatoren ændres ved hjælp af perturbationer, sådan at den approksimerer Hamiltonoperatoren for det mere omfattende system. Disse perturbationer kan for eksempel bruges til, at approksimerer ændringer i krystalstrukturen, i form af ombytning eller tilføjelse af atomer, eller hvis der bliver påtrykt et magnetisk felt.

Der bliver i de indledende kapitler set på, hvad der opfattes ved en krystal i to dimensioner, og hvordan der generelt kan regnes med magnetisk perturbation af deres Hamiltonoperator. I kapitel 3 bliver der udvalgt en krystal, der tilpasses sådan at strukturen ikke længere er perfekt periodisk. Det bliver bestemt hvordan denne ændring i strukturen vil påvirke spektrummet. Derudover bliver der vist at den tilføjede egenværdi eksisterer, samt er stabil, hvis der bliver påtrykt et magnetfelt.

1.1 Krystalstruktur

Dette afsnit er skrevet ud fra [Kittel, 2005][Kapitel 1 og 2].

I følgende introduceres en matematisk notation af krystalstrukturer, hvorefter Peierls substitution, der er en formel for tilføjelsen af et magnetisk felt med konstant feltstyrke b i forhold til Hamiltonoperatoren, bliver indført.

En krystal er defineret som en struktur der er periodisk i alle retninger. Denne periodicitet medfører at krystallen er invariant, med hensyn til alle fysiske egenskaber, under translation af typen

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{\gamma}\,, \qquad \boldsymbol{\gamma} = u_1\boldsymbol{a}_1 + u_2\boldsymbol{a}_2 + \ldots + u_n\boldsymbol{a}_n\,,$$

hvor $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ er basisvektorene, $\boldsymbol{\gamma}$ er en gittervektor og $u_1, u_2, \ldots, u_n$ tilhører $\mathbb{Z}$. Mængden af gittervektorer bruges til at beskrive Bravais gitteret

$$\Gamma = \left\{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^n \,:\, \boldsymbol{\gamma} = u_1\boldsymbol{a}_1 + u_2\boldsymbol{a}_2 + \ldots + u_n\boldsymbol{a}_n \;,\; u_1, u_2, \ldots, u_n \in \mathbb{Z}\right\}.$$

Hvert punkt i gitteret bestemmer positionen af en enhedscelle, hvor det bemærkes at enhedscellerne tilsammen udgør hele krystallen. Enhedcellen kan med fordel placeres sådan at gitterpunktet passer med positionen af det første atom i enhedscellen. Generelt består hver enhedscelle af M atomer, hvor sættet af de tilhørende positioner er givet ved

$$\Omega = \{\boldsymbol{\omega}_m\}_{m=1,2,\ldots,M}\,,$$

hvor $\boldsymbol{\omega}_m$ er positionen for det m'te atom i enhedscellen. Det betyder at positionen af et vilkårligt atom i krystallen kan beskrives ved

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\omega}_m\,,$$

hvor $\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma$ og $\boldsymbol{\omega}_m \in \Omega$, mængden af disse positioner kaldes for Λ. Krystallen har også et tilhørende reciprokt gitter, hvor de reciprokke basisvektorer, $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \ldots, \boldsymbol{b}_n$, er defineret ved

$$\left\langle \boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_j \right\rangle = 2\pi\delta_i\left(j\right)\,, \quad \delta_i\left(j\right) = \begin{cases} 1 & \text{hvis } i = j \\ 0 & \text{hvis } i \neq j \end{cases}\,, \tag{1.1}$$

hvor $\delta_i\left(j\right)$ kaldes Kroneckers delta. For tre dimensioner giver dette

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{|\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3\rangle|}\,, \quad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{|\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3\rangle|} \quad \text{og} \quad \boldsymbol{b}_3 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{|\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3\rangle|} \tag{1.2}$$

Tilsvarende Bravais-gitteret kan det reciprokke gitter defineres ud fra de reciprokke basisvektorer ved

$$\Gamma_k = \left\{\boldsymbol{\gamma}_k \in \mathbb{R}^n \,:\, \boldsymbol{\gamma}_k = v_1\boldsymbol{b}_1 + v_2\boldsymbol{b}_2 + \ldots + v_n\boldsymbol{b}_n\,,\, v_1, v_2, \ldots, v_n \in \mathbb{Z}\right\}.$$

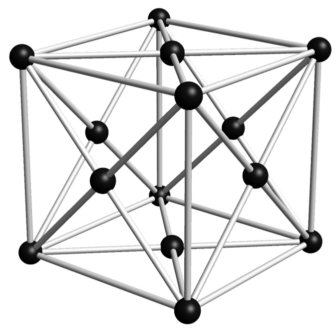
Ud fra ligning (1.1) ses det at $\langle \boldsymbol{\gamma}_k, \boldsymbol{\gamma} \rangle$ giver et helt antal 2π, eftersom $u_1, u_2, \ldots, u_n$ og $v_1, v_2, \ldots, v_n$ alle er heltal. De fysiske egenskaber der kan bestemmes ud fra det reciprokke gitter er også invariante under translationer. Dette medfører at der kan findes en Brillouin-zone, givet ved

$$\Omega_k = \left\{ \boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^n \ : \ \boldsymbol{k} = t_1 \boldsymbol{b}_1 + t_2 \boldsymbol{b}_2 + \ldots + t_n \boldsymbol{b}_n \ , \ -\frac{1}{2} \leq t_j \leq \frac{1}{2} \text{ hvor } j = 1, 2, \ldots, n \right\} ,$$

hvor de fysiske egenskaber alle kan bestemmes ud fra vektorerne indeholdt i denne.

Eksempel 1.1 (Struktur af typen fcc):

Dette eksempel er hentet fra [Kittel, 2005], hvor fcc står for *face-centred-cubic* og strukturen kan ses på figur 1.1.



Figur 1.1: *Bravais-gitteret for en fcc krystal,[Sohnesen et al., 2013]*

Denne struktur giver anledning til en primitiv enhedscelle med et atom, hvor basisvektorerne er givet ved

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{1}{2} a (\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2) \ , \quad \boldsymbol{a}_2 = \frac{1}{2} a (\boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3) \quad \text{og} \quad \boldsymbol{a}_3 = \frac{1}{2} a (\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_3) \ , \tag{1.3}$$

hvor $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$ og $\boldsymbol{e}_3$ er enhedsvektorerne langs kassens sider, og a er gitterkonstanten mellem to atomer i hjørnerne af kassen, se figur 1.1. Når metoden fra ligning (1.2) bruges på basisvektorerne i ligning (1.3) fås de reciprokke basisvektorer på formen

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{|\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3 \rangle|} = 2\pi \frac{\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a \\ 0 \\ \frac{1}{2}a \end{pmatrix}}{\left| \left\langle \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a \\ 0 \\ \frac{1}{2}a \end{pmatrix} \right\rangle \right|} = 2\pi \frac{\begin{pmatrix} \frac{1}{4}a^2 \\ \frac{1}{4}a^2 \\ -\frac{1}{4}a^2 \end{pmatrix}}{\left| \left\langle \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{4}a^2 \\ \frac{1}{4}a^2 \\ -\frac{1}{4}a^2 \end{pmatrix} \right\rangle \right|}$$

$$= 2\pi \frac{\frac{1}{4}a^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}}{\frac{1}{4}a^3} = \frac{2\pi}{a} (\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3)$$

og tilsvarende

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (-\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3) \quad \text{og} \quad \boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3) \ .$$

Bemærk at basisvektorerne og de reciprokke basisvektorer opfylder kravet i ligning (1.1), eftersom

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{b}_1 \rangle &= \left\langle \left(\frac{1}{2} a\left(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2\right)\right), \left(\frac{2\pi}{a}\left(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3\right)\right) \right\rangle \\
&= \pi \left(\langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_1 \rangle + \langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2 \rangle - \langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_3 \rangle + \langle \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 \rangle + \langle \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_2 \rangle - \langle \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3 \rangle \right) \\
&= \pi \left(\langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_1 \rangle + \langle \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_2 \rangle \right) = 2\pi \,, \\
\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{b}_2 \rangle &= \left\langle \left(\frac{1}{2} a\left(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2\right)\right), \left(\frac{2\pi}{a}\left(-\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3\right)\right) \right\rangle = \pi \left(-\langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_1 \rangle + \langle \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_2 \rangle \right) = 0 \,.
\end{aligned}$$

Resten af de indre produkter kan findes ved tilsvarende udregninger. ◊

1.2 Peierls substitution

Dette afsnit er skrevet ud fra [Brynildsen, 2011][afsnit 1.2] og [Saito et al., 1998][afsnit 6.2].

I denne rapport bliver set på krystaller der er periodiske i to dimensioner, med tilhørende basisvektorerne $\boldsymbol{a}_1$ og $\boldsymbol{a}_2$. Krystallens gitter vil blive behandlet med tight-binding modellen, hvor der antages en forøget sandsynlighed for at elektronen er lokaliseret nær et atom.

I denne model tilføjes et magnetisk felt ved at anvende Peierls substitution, hvor kernen for den magnetiske Hamiltonoperator findes ved at gange en fasefaktor på kernen for krystallens Hamiltonoperator svarende til

$$H_b\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right) = e^{ib\varphi\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)} H_0\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right) . \tag{1.4}$$

Magnetfeltet antages vinkelret på strukturen, hvilket vil sige, at der for disse formler regnes med en tredje retning vinkelret derpå. Det magnetiske felt anses i denne rapport for at være konstant. Fasefaktoren indeholder fluxen af et uniformt felt, med feltstyrke 1, igennem trekanten udspændt af gitterpunkterne $\boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{x}$ og $\boldsymbol{y}$. Da arealet af denne trekant kan bestemmes som den halve længde af krydsproduktet fås

$$\begin{aligned}
\varphi\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right) &= \frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{y} \times \boldsymbol{x} \right\| \\
&= \frac{1}{2} \left[\boldsymbol{y} \times \boldsymbol{x} \right]_3 \\
&= \frac{1}{2} \left(y_1 x_2 - x_1 y_2 \right) .
\end{aligned}$$

Det følger af denne definition at $\varphi\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)$ er anti-symmetrisk, hvilket vil sige at $\varphi\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right) = -\varphi\left(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}\right)$. Derudover er $\varphi\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)$ er begrænset af

$$\left|\varphi\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)\right| = \frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{y} \times \boldsymbol{x} \right\| \leq \frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{x} \right\| \left\| \boldsymbol{y} \right\| .$$

Ud fra reglen for summering af krydsprodukter, [Spiegel et al., 2009][side 121], fås

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{y}\times\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z}\times\boldsymbol{y} &= \boldsymbol{y}\times\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z}\times\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\times\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}+\left(\boldsymbol{y}\times\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\times\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z}\times\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}\right) \\
&= \boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}+\left[\boldsymbol{y}\times\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right)-\boldsymbol{z}\times\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right)\right] \\
&= \boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}-\left[\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right)\times\boldsymbol{y}-\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right)\times\boldsymbol{z}\right] \\
&= \boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}-\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right)\times\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z}\right) \\
&= \boldsymbol{z}\times\boldsymbol{x}+\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z}\right)\times\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right),
\end{aligned}$$

og dermed bliver

$$\varphi\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)+\varphi\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\right)=\varphi\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}\right)+\mathrm{fl}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\right), \tag{1.5}$$

hvor $\mathrm{fl}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\right)=\frac{1}{2}\left[\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z}\right)\times\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right)\right]_3$. Bemærk at $\mathrm{fl}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\right)$ er det magnetiske flux af et uniformt felt med feltstyrke 1, igennem trekanten udspændt af gitterpunkterne $\boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ og $\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z}$.

KAPITEL 2

STABILITET AF RESOLVENTMÆNGDEN UNDER MAGNETISK PERTURBATION

Dette kapitel er skrevet ud fra [Brynildsen, 2011][kapitel 2], [Fitzpatrick, 2009] og [Hansen et al., 2012]

For at kunne arbejde med spektrummet til Hamiltonoperatoren er der nogle begreber der skal defineres. For eksempel Schur-Holmgreen-normen og eksponentielle, næsten diagonale operaterer. Derudover er det relevant at bestemme hvordan resolventen bliver påvirket af det magnetiske felt for bedre at kunne bestemme spektrummets opførsel.

Definition 2.1 (Schur-Holmgreen-normen)
For en lineær operator $\widehat{A}$ med kerne $A(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ for $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\Lambda$, er Schur-Holmgreen-normen givet som

$$\left\|\widehat{A}\right\|_1 = \max\left\{\sup_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|, \sup_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\right\}. \tag{2.1}$$

Hvis operatoren $\widehat{A}$ opfylder at $\left\|\widehat{A}\right\|_1<\infty$ siges den at være Schur-Holmgreen-begrænset.

Schur-Holmgreen-normen er en norm, da den opfylder de tre egenskaber der gælder for en norm:

(i) *ikke-negativitet*: Dette er opfyldt eftersom $\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\geq 0$. Yderligere haves der at $\left\|\widehat{A}\right\|_1=0$ medfører at $\widehat{A}$ er nul-operatoren, eftersom dette kræver at $\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|=0$ for alle $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\Lambda$.

(ii) *homogenitet*: Dette er opfyldt da det er tilladt at trække en konstant ud fra en sum.

(iii) *trekantsuligheden*: Dette følger af udregningen

$$\begin{aligned}\sup_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)+B\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| &\leq \sup_{\boldsymbol{x}}\left(\sum_{\boldsymbol{y}}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|+\sum_{\boldsymbol{y}'}\left|B\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}'\right)\right|\right)\\ &\leq \sup_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|+\sup_{\boldsymbol{x}'}\sum_{\boldsymbol{y}'}\left|B\left(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'\right)\right|,\end{aligned}$$

og da tilsvarende udregning kan laves for $\sup_{\boldsymbol{y}} \sum_{\boldsymbol{x}} \left| A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right) + B\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|$ medfører dette at

$$\left\|\widehat{A}+\widehat{B}\right\|_1 \le \left\|\widehat{A}\right\|_1 + \left\|\widehat{B}\right\|_1 .$$

Det følgende lemma medfører, at det er tilstrækkeligt, at vise at en operator er Schur-Holmgreen-begrænset for at den er begrænset, hvilket bliver anvendeligt senere.

Lemma 2.2
Hvis $\left\|\widehat{A}\right\|_1 < \infty$, så er $\left\|\widehat{A}\right\| \le \left\|\widehat{A}\right\|_1$, hvor $\left\|\widehat{A}\right\|$ er operatornormen.

Bevis:
Sætningen bevises ved at vise at

$$\left\|\widehat{A}\right\| \le \left(\sup_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sup_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'\right)\right|\right)^{\frac{1}{2}} \le \left\|\widehat{A}\right\|_1 . \tag{2.2}$$

Hvor andel ulighed følger af definitionen på Schur-Holmgreen-normen. For et vilkårligt $\boldsymbol{\psi} \in \ell^2(\Lambda)$ hvor $\|\boldsymbol{\psi}\| = 1$ gælder det at

$$\begin{aligned}
\left|\left(\widehat{A}\boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{x})\right| &\le \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right| \\
&\le \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right| \\
&= \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left(\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\right)^{\frac{1}{2}} \left(\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\right)^{\frac{1}{2}} \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right| \\
&\le \left(\sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}'\right)\right|\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right|^2\right)^{\frac{1}{2}} ,
\end{aligned}$$

hvor den første ulighed kommer fra trekantsuligheden. Ved at kvadrere begge sider fås

$$\begin{aligned}
\left|\left(\widehat{A}\boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{x})\right|^2 &\le \left(\sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}'\right)\right|\right) \left(\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right|^2\right) \\
&\le \left(\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \left(\sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'\right)\right|\right)\right) \left(\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right|^2\right).
\end{aligned}$$

Fra definitionen af normen følger at

$$\begin{aligned}
\left\|\widehat{A}\boldsymbol{\psi}\right\|^2 &= \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left|\left(\widehat{A}\boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{x})\right|^2 \\
&\le \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left(\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \left(\sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'\right)\right|\right)\right) \left(\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right|^2\right) \\
&= \left(\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'\right)\right|\right) \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left(\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right|^2\right) \\
&\le \left(\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'\right)\right|\right) \left(\sup_{\boldsymbol{z}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left|A(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})\right|\right) \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \left|\psi\left(\boldsymbol{y}\right)\right|^2 \\
&= \left(\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|A\left(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'\right)\right|\right) \left(\sup_{\boldsymbol{z}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left|A(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})\right|\right).
\end{aligned}$$

Hvilket medfører

$$\left\| \widehat{A}\boldsymbol{\psi} \right\| \leq \left(\sup_{\boldsymbol{x}' \in \Lambda} \sum_{\boldsymbol{y}' \in \Lambda} \left| A\left(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{y}'\right) \right| \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sup_{\boldsymbol{z} \in \Lambda} \sum_{\boldsymbol{x} \in \Lambda} \left| A\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}\right) \right| \right)^{\frac{1}{2}} .$$

Eftersom dette gælder for et vilkårlig $\boldsymbol{\psi} \in \ell^2(\Lambda)$ og operatornormen kan findes ved $\left\| \widehat{A} \right\| = \sup_{\|\boldsymbol{\psi}\|=1} \left\| \widehat{A}\boldsymbol{\psi} \right\|$ er ligning (2.2) bevist. □

Definition 2.3 (Eksponentiel, næsten diagonal operator)
En operator $\widehat{A} : \ell^2(\Lambda) \to \ell^2(\Lambda)$ kaldes for eksponentiel, næsten diagonal operator, hvis der eksisterer to konstanter, $C_1 > 0$ og $C_2 > 0$, sådan at

$$\left| A\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right) \right| \leq C_1 e^{-C_2 \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}, \quad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \Lambda . \tag{2.3}$$

Hamiltonoperatoren antages at være eksponentiel, næsten diagonal, da interaktioner antages at være afstandsafhængig. Beviset for følgende sætning kan findes i [Brynildsen, 2011][Sætning 2.4 side 12].

Sætning 2.4
En eksponentiel, næsten diagonal operator er Schur-Holmgreen-begrænset.

Før Combes-Thomas' sætning for eksponentielle, næsten diagonale operatorer kan bevises kræves følgende lemma.

Lemma 2.5
Lad $\mathscr{M} \subset \rho\left(\widehat{A}\right)$ være en kompakt mængde, og lad $\sigma\left(\widehat{A}\right)$ være begrænset, så er afstanden, defineret ved

$$\begin{aligned} \operatorname{dist}\left(\mathscr{M}, \sigma\left(\widehat{A}\right)\right) &= \inf_{z \in \mathscr{M}} \left\{ \operatorname{dist}\left(z, \sigma\left(\widehat{A}\right)\right) \right\} \\ &= \inf\left\{ \operatorname{dist}(z, s) \ : \ z \in \mathscr{M}, s \in \sigma\left(\widehat{A}\right) \right\} , \end{aligned}$$

et minimum, og det gælder at $\operatorname{dist}\left(\mathscr{M}, \sigma\left(\widehat{A}\right)\right) > 0$.

Bevis:
Eftersom $\rho\left(\widehat{A}\right)$ og $\sigma\left(\widehat{A}\right)$ er delmængder af $\mathbb{C}$, haves det for $\mathscr{M} \subset \rho\left(\widehat{A}\right)$ at

$$\operatorname{dist}(z, s) = |z - s| > 0, \quad z \in \mathscr{M}, s \in \sigma\left(\widehat{A}\right) ,$$

da $|\bullet - \bullet|$ ikke kan antage negative værdier. Ligningen kan heller ikke være lig 0, da $|z - s| = 0$ ville betyde at $z = s$, og dermed ville $\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)$ både være invertibel og ikke-invertibel, hvilket er en modstrid.

Da $\sigma\left(\widehat{A}\right)$ er lukket og begrænset må den være kompakt, og dermed er $\mathscr{M} \times \sigma\left(\widehat{A}\right)$ en kompakt delmængde af $\mathbb{C}^2$. Yderligere er funktionen $|\bullet - \bullet| : \mathbb{C} \times \mathbb{C} \to \mathbb{R}$ kontinuert, hvilktet betyder ekstreme-value sætning, [Fitzpatrick, 2009][Sætning 12.37 side 342], kan anvendes. Det medfører at $\inf\left\{|z-s| : z \in \mathscr{M}, s \in \sigma\left(\widehat{A}\right)\right\}$ har mindst et sæt $(z_0, s_0) \in \mathscr{M} \times \sigma\left(\widehat{A}\right)$, hvor funktionen antager minimum. Hvoraf sætningen er bevist. □

Sætning 2.6 (Combes-Thomas' sætning)
Lad $z \in \rho\left(\widehat{A}\right)$ være et kompleks tal og lad $\widehat{A}$ være en selvadjungeret eksponentiel, næsten diagonal operator på Hilbertrummet $\ell^2(\Lambda)$, hvor Λ er et vilkårligt gitter. Så er resolventen $\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}$ også en eksponentiel, næsten diagonal operator, så der eksisterer to positive konstanter C_3 og C_4 således at

$$\left|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\right| \leq C_3 e^{-C_4\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}.$$

Hvis z er indeholdt i en kompakt delmængde $\mathscr{M}$ af $\rho\left(\widehat{A}\right)$ er C_3 og C_4 begrænset af

$$C_3 \leq 2 \sup_{z \in \mathscr{M}} \left\{\frac{1}{\operatorname{dist}\left(z, \sigma\left(\widehat{A}\right)\right)}\right\}$$
$$C_4 \leq \min\left\{\frac{\operatorname{dist}\left(z, \sigma\left(\widehat{A}\right)\right)}{2\tilde{C}}, \frac{C_2}{4}\right\},$$

hvor $\tilde{C}$ er en konstant.

Bevis:
For $\alpha > 0$ og en vilkårlig position i gitteret $\boldsymbol{x}_0 \in \Lambda$ defineres operatoren $\widehat{A_\alpha} : \ell^2(\Lambda) \to \ell^2(\Lambda)$ ved

$$\widehat{A_\alpha} = e^{\alpha\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|} \widehat{A} e^{-\alpha\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|}$$

sådan at

$$\left(\widehat{A_\alpha}\boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{x}) = e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|} \sum_{\boldsymbol{y} \in \Lambda} A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) e^{-\alpha\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|} \psi(\boldsymbol{y}),$$

hvor $A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ er kernen til operatoren $\widehat{A}$. Hvis α vælges tilstrækkelig lille er $\widehat{A_\alpha}$ begrænset, eftersom

$$\begin{aligned} |A_\alpha(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})| &= \left|e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|} A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) e^{-\alpha\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|}\right| = \left|e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|} A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) e^{-\alpha\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|}\right| \\ &\leq \left|A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}\right| \leq \left|C_1 e^{-(C_2-\alpha)\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}\right|. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Den første ulighed kommer fra trekantsuligheden, $\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}_0\| - \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}_0\| \leq \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|$, og den sidste ulighed følger af at $\widehat{A}$ er en eksponentiel, næsten diagonal operator. Fra ligning (2.4) ses det at $\widehat{A_\alpha}$ er eksponentiel, næsten diagonal for $\alpha < C_2$, og dermed begrænset. Ved omskrivning fås

$$\begin{aligned} \left(\widehat{A}_\alpha - z\widehat{I}\right) &= \widehat{A} - \widehat{A} + \left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right) = \left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right) + \left(\widehat{A_\alpha} - \widehat{A}\right) \\ &= \left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right) - \left(\widehat{A} - \widehat{A_\alpha}\right) = \left(\widehat{I} - \left(\widehat{A} - \widehat{A_\alpha}\right)\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right)\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right), \end{aligned} \tag{2.5}$$

der er invertibel hvis $\left\|\left(\widehat{A}-\widehat{A_\alpha}\right)\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| \leq \left\|\left(\widehat{A}-\widehat{A_\alpha}\right)\right\| \left\|\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| < 1$ og $z \in \rho\left(\widehat{A}\right)$. Dette kan opnås for et fast z hvis det gælder at

$$\left\|\widehat{A_\alpha}-\widehat{A}\right\| \xrightarrow{\alpha\to 0} 0 . \tag{2.6}$$

For at vise at ligning (2.6) gælder bestemmes Schur-Holmgreen-normen af $\widehat{A_\alpha}-\widehat{A}$, hvilket giver

$$\begin{aligned}
\left\|\widehat{A_\alpha}-\widehat{A}\right\|_1 &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\left|e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|}A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)e^{-\alpha\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|}-A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| \\
&= \sup_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\left|e^{\alpha\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|-\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|\right)}-1\right| \\
&\leq \sup_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\left|\alpha\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|-\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|\right)\right|e^{\left|\alpha\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|-\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|\right)\right|} \\
&= \sup_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\alpha\left|\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|-\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\right\|\right|e^{\alpha\left|\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|-\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\|\right|} \\
&\leq \sup_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left|A\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\alpha\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right\|e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} \\
&\leq \sup_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}C_1e^{-C_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}\alpha\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right\|e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} .
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Den første ulighed kommer fra ligning (A.2) side 39. Den anden ulighed kommer fra trekantsuligheden, $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\right\|-\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_0\right\| \leq \left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right\|$, og den tredje ulighed kommer af at $\widehat{A}$ er eksponentiel, næsten diagonal. Ved at anvende ligning (A.3) på side 40 omskrives ligning (2.7) til

$$\left\|\widehat{A_\alpha}-\widehat{A}\right\|_1 \leq \alpha\tilde{C}_1\sup_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{y}}e^{-\left(\frac{C_2}{2}-\alpha\right)\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} .$$

For $\alpha < \frac{C_2}{4}$ medfører dette at

$$\begin{aligned}
\left\|\widehat{A_\alpha}-\widehat{A}\right\|_1 &\leq \alpha\tilde{C}, \\
\tilde{C} = \tilde{C}_1\sup_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}e^{-\frac{C_2}{4}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} &= \tilde{C}_1\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}e^{-\frac{C_2}{4}\|\boldsymbol{y}\|} .
\end{aligned}$$

Hvilket betyder at ligning (2.6) gælder hvis $\alpha < \frac{C_2}{4}$. Ud fra definitionen af $\widehat{A_\alpha}$ ses det at

$$\begin{aligned}
e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A_\alpha}-z\widehat{I}\right) &= e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\left(e^{\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\widehat{A}e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}-z\widehat{I}\right) \\
&= \widehat{A}e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}-e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}z\widehat{I} \\
&= \left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|} ,
\end{aligned}$$

hvilket medfører at

$$\begin{aligned}
&\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A_\alpha}-z\widehat{I}\right) = \left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|} \\
\Rightarrow\ &\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A_\alpha}-z\widehat{I}\right)\left(\widehat{A_\alpha}-z\widehat{I}\right)^{-1} = e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A_\alpha}-z\widehat{I}\right)^{-1} \\
\Rightarrow\ &\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|} = e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A_\alpha}-z\widehat{I}\right)^{-1} .
\end{aligned}$$

Da dette gælder for et vilkårligt $\boldsymbol{\phi} \in \ell^2\left(\Lambda\right)$ kan denne vælges således at det gælder at

$$e^{\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}e^{-\alpha\|\bullet-\boldsymbol{x}_0\|} = \left(\widehat{A_\alpha}-z\widehat{I}\right)^{-1} . \tag{2.8}$$

Hvis α for et given $z \in \rho\left(\widehat{A}\right)$ opfylder

$$\alpha(z) \leq \frac{1}{2\tilde{C}\left\|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\|} \tag{2.9}$$

gælder det at

$$\left\|\left(\widehat{A} - \widehat{A_\alpha}\right)\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| = \left\|\widehat{A} - \widehat{A_\alpha}\right\| \left\|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| \leq \alpha(z)\,\tilde{C}\left\|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{2}.$$

Sammen med ligning (2.8) giver dette

$$\begin{aligned}
\left\|e^{\alpha\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1} e^{-\alpha\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|}\right\| &= \left\|\left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| \\
&\leq \left\|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| \frac{1}{1 - \left\|\left(\widehat{A} - \widehat{A_\alpha}\right)\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\|} \\
&\leq 2\left\|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\|,
\end{aligned}$$

hvor første ulighed følger af ligning (2.5), og dermed gælder det at

$$\sup_{\boldsymbol{x}_0 \in \Lambda}\left\|e^{\tilde{\alpha}\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1} e^{-\alpha\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|}\right\| \leq 2\left\|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| = C(z),$$

hvor $0 \leq \tilde{\alpha} \leq \alpha(z)$. Der vælges en basis for $\ell^2(\Lambda)$ givet ved

$$\delta_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{y}) = \begin{cases} 1 & \text{, hvis } \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \\ 0 & \text{, hvis } \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{y} \end{cases}, \quad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \Lambda.$$

Denne basis kan, på grund af ligning (2.8), anvendes til at undersøge kernen af operatoren $\left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right)^{-1}$ ved at

$$\begin{aligned}
\left\langle \delta_{\boldsymbol{x}}, \left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right)^{-1} \delta_{\boldsymbol{y}} \right\rangle &= \left\langle \delta_{\boldsymbol{x}}, e^{\alpha\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1} e^{-\alpha\|\bullet - \boldsymbol{x}_0\|}\delta_{\boldsymbol{y}} \right\rangle \\
&= e^{\alpha\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, e^{-\alpha\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}_0\|}.
\end{aligned}$$

Hvis $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{y}$ giver dette

$$\left\langle \delta_{\boldsymbol{x}}, \left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right)^{-1} \delta_{\boldsymbol{x}_0} \right\rangle = e^{\alpha\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_0),$$

som medfører at

$$\begin{aligned}
\left|e^{\alpha\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\|}\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_0)\right| &= e^{\alpha\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\|}\left|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_0)\right| \\
&= \left|\left\langle \delta_{\boldsymbol{x}}, \left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right)^{-1} \delta_{\boldsymbol{x}_0} \right\rangle\right| \\
&\leq \|\delta_{\boldsymbol{x}}\| \left\|\left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right)^{-1} \delta_{\boldsymbol{x}_0}\right\| \\
&\leq \left\|\left(\widehat{A_\alpha} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| \\
&\leq C(z).
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Første ulighed følger af Cauchy-Schwartz-uligheden og den anden ulighed følger af definitionen af operatornormen. Ligning (2.10) medfører at $\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)^{-1}$ er eksponentiel, næsten diagonal, eftersom den kan omskrives til

$$\left|\left(\widehat{A} - z\widehat{I}\right)(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_0)\right| \leq Ce^{-\alpha\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\|}.$$

Vælges z således at den tilhører en kompakt delmængde $\mathscr{M}$ af $\rho\left(\widehat{A}\right)$ medfører spektral sætningen at

$$\left\|\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| = \frac{1}{\operatorname{dist}\left(z,\sigma\left(\widehat{A}\right)\right)} .$$

På grund af lemma 2.5 giver dette at

$$\min_{z\in\mathscr{M}}\left\{\frac{1}{\left\|\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}\right\|}\right\} = \min_{z\in\mathscr{M}}\left\{\operatorname{dist}\left(z,\sigma\left(\widehat{A}\right)\right)\right\} = \operatorname{dist}\left(\mathscr{M},\sigma\left(\widehat{A}\right)\right)$$

Det medfører at $\alpha(z)$ fra ligning (2.9) bliver begrænset således at

$$\alpha(z) \le \alpha_0 = \frac{\operatorname{dist}\left(G,\sigma\left(\widehat{A}\right)\right)}{2\tilde{C}} .$$

Denne begræsning betyder at

$$\begin{aligned}
\left|\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right| &\le 2\sup_{z\in\mathscr{M}}\left\{\left\|\left(\widehat{A}-z\widehat{I}\right)^{-1}\right\|\right\} e^{-\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} \\
&= 2\sup_{z\in\mathscr{M}}\left\{\frac{1}{\operatorname{dist}\left(z,\sigma\left(\widehat{A}\right)\right)}\right\} e^{-\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} ,
\end{aligned}$$

så dermed er sætningen bevist. □

2.1 Magnetisk perturbation

Da Hamiltonoperatoren er antaget eksponentiel, næsten diagonal følger det af Combes-Thomas' sætning at resolventen til operatoren også er det. Fra sætning 2.4 og lemma 2.2 følger det at resolventen også er begræset. Hermed kan det magnetiske felts indflydelse på Hamiltonoperatoren resolventmængde bestemmes.

Lad $\widehat{S_b}(z)$, med $z\in\rho\left(\widehat{H_0}\right)$, være defineret som operatoren med kernen

$$\begin{aligned}
S_b(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};z) &= e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})} S_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};z) \\
&= e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}\left(\widehat{H_0}-z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) .
\end{aligned}$$

Da bliver kernen til operatoren $\widehat{H_b}\widehat{S_b}$ på formen

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{H_b}\widehat{S_b}\right)(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') &= \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} H_b(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, S_b(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z) \\
&= \sum_{\boldsymbol{y}} e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})} H_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, e^{ib\varphi(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')} S_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z) \\
&= \sum_{\boldsymbol{y}} e^{ib(\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})+\varphi(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}'))} H_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, S_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z) \\
&= e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')} \sum_{\boldsymbol{y}} e^{ib\,\mathrm{fl}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')} H_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, S_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z) \qquad (2.11) \\
&= e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')} \sum_{\boldsymbol{y}} \left(1+e^{ib\,\mathrm{fl}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')}-1\right) H_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, S_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z) ,
\end{aligned}$$

hvor ligning (2.11) kommer fra ligning (1.5) på side 5. Lad $\widehat{K_b}$ være operatoren med kernen

$$K_b(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',z) = e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')} \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\left(e^{ib\,\mathrm{fl}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')}-1\right) H_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, S_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z) ,$$

og bemærk at

$$e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} H_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)S_0\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}',z\right) = e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}\left(\widehat{H_0}\widehat{S_0}\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right).$$

Heraf fås det at

$$\left(\widehat{H_b}\widehat{S_b}\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) = e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}\left(\widehat{H_0}\widehat{S_0}\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) + K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right). \tag{2.12}$$

Kernen til $\widehat{H_0}\widehat{S_0}$ kan omskrives til

$$\begin{aligned}\left(\widehat{H_0}\widehat{S_0}\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) &= \left(\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)\widehat{S_0}\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) + zS_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right)\\ &= \delta_{\boldsymbol{x}}\left(\boldsymbol{x}'\right) + zS_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right),\end{aligned}$$

hvoraf det følger at ligning (2.12) kan omskrives til

$$\begin{aligned}\left(\widehat{H_b}\widehat{S_b}\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) &= e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}\left(\widehat{H_0}\widehat{S_0}\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) + K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right)\\ &= e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}\delta_{\boldsymbol{x}}\left(\boldsymbol{x}'\right) + ze^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}S_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) + K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right)\\ &= \delta_{\boldsymbol{x}}\left(\boldsymbol{x}'\right) + ze^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}S_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) + K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right), \end{aligned}\tag{2.13}$$

hvor den sidste ligning følger af at $\varphi\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\right) = 0$ samt definitionen af $\delta_{\boldsymbol{x}}\left(\boldsymbol{x}'\right)$. Ud fra ligning (2.13) følger det at

$$\left(\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)\widehat{S_b}(z)\right)\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'\right) = \delta_{\boldsymbol{x}}\left(\boldsymbol{x}'\right) + K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right),$$

hvilket medfører at

$$\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)\widehat{S_b} = \widehat{I} + \widehat{K_b}. \tag{2.14}$$

For at bestemme Schur-Holmgreen-normen for $\widehat{K_b}(z)$ evalueres

$$\begin{aligned}\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\left|K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right)\right| &\le \sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\left|\left(e^{ib\,\mathrm{fl}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')} - 1\right)H_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)S_0\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z\right)\right|\\ &= \sup_{\boldsymbol{x}'}\sum_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left|e^{ib\,\mathrm{fl}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')} - 1\right|\left|H_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\left|S_0\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z\right)\right|\\ &\le \sup_{\boldsymbol{x}'}\sum_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left|b\,\mathrm{fl}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}'\right)\right|\left|H_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\left|S_0\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z\right)\right| \qquad (2.15)\\ &\le b\sup_{\boldsymbol{x}'}\sum_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right\|\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\right\|\left|H_0\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right|\left|S_0\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}';z\right)\right|\\ &\le b\sup_{\boldsymbol{x}'}\sum_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right\|\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\right\|C_1e^{-C_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}C_3(z)\,e^{-C_4(z)\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|} \qquad (2.16)\\ &= bC_1C_3(z)\sup_{\boldsymbol{x}'}\sum_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\right\|e^{-C_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\right\|e^{-C_4(z)\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|}\\ &\le bC_1C_3(z)\sup_{\boldsymbol{x}'}\sum_{\boldsymbol{x}}\sum_{\boldsymbol{y}}C_5e^{-\frac{C_2}{2}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}C_6e^{-\frac{C_4(z)}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|}. \qquad (2.17)\end{aligned}$$

Omskrivningen i ligning (2.15) kommer fra ligning (A.1) side 39. Ligning (2.16) kommer fra sætning 2.6, samt at $\widehat{H_0}$ er eksponentiel, næsten diagonal. Ligning (2.17) kommer fra ligning (A.3) side 40. Hvis z vælges fra en kompakt mængde $\mathcal{M} \subset \rho\left(\widehat{H_0}\right)$ kan der findes en øvre grænse, sådan at

$$\sup_{z\in\mathcal{M}}\left\{\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda}\left|K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right)\right|\right\} \le bC.$$

Tilsvarende argument kan gennemføres for $\sup_{\boldsymbol{x}} \sum_{\boldsymbol{x}'} \left| K_b\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', z\right)\right|$, hvilket, på grund af Schur-Holmgreen-normen, medfører at

$$\sup_{z\in\mathcal{M}} \left\{\left\|\widehat{K_b}(z)\right\|\right\} \leq \sup_{z\in\mathcal{M}} \left\{\left\|\widehat{K_b}(z)\right\|_1\right\} \leq bC. \tag{2.18}$$

Sætning 2.7
Lad $\mathcal{M} \subset \rho\left(\widehat{H_0}\right)$ være kompakt, så eksisterer der et $b_{\mathcal{M}} > 0$ sådan at $\mathcal{M} \subset \rho\left(\widehat{H_b}\right)$ for alle $0 \leq b \leq b_{\mathcal{M}}$.

Bevis:
Ved at anvende samme metode som ovenfor fås det at

$$\begin{aligned}\sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left|S_b\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; z\right)\right| &= \sup_{\boldsymbol{x}'} \sum_{\boldsymbol{x}} \left|e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')} S_0\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; z\right)\right| \\ &= \sup_{\boldsymbol{x}'} \sum_{x} \left|S_0\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; z\right)\right| \\ &\leq C_3(z) \sup_{\boldsymbol{x}'} \sum_{\boldsymbol{x}} e^{-C_4(z)\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|}.\end{aligned}$$

Hvilket medfører at

$$\sup_{z\in\mathcal{M}} \left\{ \sup_{\boldsymbol{x}'\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left|S_b\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; z\right)\right| \right\} \leq C_S,$$

og da det tilsvarende kan vises for $\sup_{\boldsymbol{x}} \sum_{\boldsymbol{x}'} \left|S_b\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; z\right)\right|$betyder dette at

$$\left\|\widehat{S_b}\right\| \leq \left\|\widehat{S_b}\right\|_1 \leq C_S.$$

Spektrummet til $\widehat{H_b}$ tilhører den reelle akse eftersom $\widehat{H_b}$ er en selvadjungeret operator. Antag $\lambda \in \mathcal{M} \cap \mathbb{R}$ hvor det gælder at $\lambda \neq 0$. Da $\sigma\left(\widehat{H_b}\right) \subset \mathbb{R}$ vil det for $\varepsilon \neq 0$ gælde at operatoren $\left(\widehat{H_b} - (\lambda - i\varepsilon)\hat{I}\right)$ er invertibel.

For alle $z \in [\lambda - i, \lambda + i] \subset \rho\left(\widehat{H_0}\right)$ gælder ligning (2.18) for ethvert $\lambda \in \mathcal{M} \cap \mathbb{R}$, hvilket medfører at det for tilstrækkelig lille b gælder at $\left(\hat{I} + \widehat{K_b}\right)$ er invertibel. Ved at sætte $z = \lambda + i\varepsilon$ kan ligning (2.14) omskrives til

$$\begin{aligned} &\left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\hat{I}\right)\widehat{S_b} = \hat{I} + \widehat{K_b} \\ \Rightarrow\ &\left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\hat{I}\right) S_b \left(\hat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1} = \left(\hat{I} + \widehat{K_b}\right)\left(\hat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1} \\ \Rightarrow\ &\left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\hat{I}\right)^{-1}\left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\hat{I}\right)\widehat{S_b}\left(\hat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1} = \left(\widehat{H_b} - (\lambda - i\varepsilon)\hat{I}\right)^{-1} \\ \Rightarrow\ &\widehat{S_b}\left(\hat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1} = \left(\widehat{H_b} - (\lambda - i\varepsilon)\hat{I}\right)^{-1}. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Dette medfører sammen med ligning (2.18) og [Brynildsen, 2011][Korollar A.4 side 51] at normen til $\left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\hat{I}\right)^{-1}$ er begrænset af

$$\begin{aligned}\left\|\left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\hat{I}\right)^{-1}\right\| &= \left\|\widehat{S_b}\right\| \left\|\left(\hat{I} - \widehat{K_b}\right)^{-1}\right\| \\ &\leq \left\|\widehat{S_b}\right\| \frac{1}{1 - \left\|\widehat{K_b}\right\|} \\ &\leq C_S \frac{1}{1 - bC}.\end{aligned}$$

Hvor konstanten ikke afhænger af ε men af $\mathscr{M}$, eftersom både C_S og C begge er maksimerede i forhold til $z \in \mathscr{M}$. Ved omskrivning fås

$$\left(\widehat{H_b} - \lambda \widehat{I}\right) = \left(\widehat{I} + i\varepsilon \left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\, \widehat{I}\right)^{-1}\right)\left(\widehat{H_b} - (\lambda - i\varepsilon)\, \widehat{I}\right),$$

der er invertibel for tilstrækkelig lille ε, da $(\lambda + i\varepsilon) \in \rho\left(\widehat{H_b}\right)$ samt at normen til $\left(\widehat{H_b} - (\lambda + i\varepsilon)\, \widehat{I}\right)^{-1}$ ikke afhænger af ε. □

For at kunne omskrive $\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}$, hvor $z \in \rho\left(\widehat{H_b}\right)$, anvendes det at

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1} &= \sum_{n\geq 0} (-1)^n \widehat{K_b}^{\,n} = \widehat{I} + \sum_{n\geq 1} (-1)^n \widehat{K_b}^{\,n} \\
&= \widehat{I} + \sum_{n\geq 0} (-1)^{n+1} \widehat{K_b}^{\,n+1} = \widehat{I} - \left(\sum_{n\geq 0} (-1)^n \widehat{K_b}^{\,n}\right)\widehat{K_b} \\
&= \widehat{I} - \left(\widehat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1} \widehat{K_b}.
\end{aligned}$$

Ud fra ligning (2.19) er

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1} &= \widehat{S_b}(z)\left(\widehat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1} \\
&= \widehat{S_b}(z)\left(\widehat{I} - \left(\widehat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1}\widehat{K_b}\right) \\
&= \widehat{S_b}(z) - \widehat{S_b}(z)\left(\widehat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1}\widehat{K_b} \\
&= \widehat{S_b} - \widehat{S_b}(z)\left(\widehat{I} - \left(\widehat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1}\widehat{K_b}\right)\widehat{K_b} \\
&= \widehat{S_b}(z) - \widehat{S_b}(z)\widehat{K_b} + \widehat{S_b}(z)\left(\widehat{I} + \widehat{K_b}\right)^{-1}\widehat{K_b}^{\,2} \\
&= \widehat{S_b}(z) - \widehat{S_b}(z)\widehat{K_b} + \left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}\widehat{K_b}^{\,2} \\
&= \widehat{S_b}(z) - \widehat{S_b}\widehat{K_b} + \widehat{\mathscr{R}_b}(z),
\end{aligned} \tag{2.20}$$

hvor

$$\widehat{\mathscr{R}_b}(z) = \left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}\widehat{K_b}^{\,2},$$

kaldes for restledet, og bliver analyseret i følgende sætning.

Sætning 2.8 (Restledet)
Lad $\mathscr{M} \subset \rho\left(\widehat{H_0}\right)$ være lukket, så er restledet eksponentielt, næsten diagonal, hvor der eksisterer konstanter, $C_5, C_6 \geq 0$ sådan at

$$\sup_{z\in\mathscr{M}} \left|\mathscr{R}_b\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}; z\right)\right| \leq b^2 C_5 e^{-C_6\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}.$$

Bevis:
Fra sætning 2.6 haves det at der for $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \Lambda$ og $z \in \mathscr{M}$, med $\mathscr{M} \subset \rho\left(\widehat{H_0}\right)$, gælder at

$$\sup_{z\in\mathscr{M}} \left|\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)\right| \leq \tilde{C}_1 e^{-\tilde{C}_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|},$$

eftersom

$$\left|H_b\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)\right| = \left|e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})} H_0\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)\right| = \left|H_0\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\right)\right|.$$

Fra ligning (2.17) fås det at

$$
\begin{aligned}
\left|K_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right)\right| &\le b\,C \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} e^{-\frac{C_2}{2}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} e^{-\frac{C_4}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|} \\
&\le b\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-2\tilde{C}_4\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|\right)}, \quad \tilde{C}_4 = \frac{1}{2}\min\left\{\frac{C_2}{2},\frac{C_4}{2}\right\} \\
&= b\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_4\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|\right)} e^{-\tilde{C}_4\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|\right)} \\
&\le b\,C\, e^{-\tilde{C}_4\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|} \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_4\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|\right)} \\
&= b\,C\, e^{-\tilde{C}_4\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|} \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_4\left(\|\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{x}-(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{x}')\|\right)} \\
&\le b\,C\, e^{-\tilde{C}_4\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|} \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_4\|\boldsymbol{y}\|} \\
&\le b\,C\, e^{-\tilde{C}_4\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|},
\end{aligned}
$$

hvilket betyder at $\widehat{K_b}$ ud over at være begrænset, også er eksponentiel, næsten diagonal. Ved at anvende samme omskrivning på restleddet fås det at

$$
\begin{aligned}
\left|\mathcal{R}_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';z\right)\right| &\le \sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\sum_{\boldsymbol{y}'\in\Lambda} \left|\left(\widehat{H_b}-z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right| \left|K_b\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}';z\right)\right| \left|K_b\left(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}';z\right)\right| \\
&\le \sum_{\boldsymbol{y}}\sum_{\boldsymbol{y}'} \tilde{C}_1 e^{-\tilde{C}_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}\, b\,\tilde{C}_3 e^{-\tilde{C}_4\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'\|}\, b\,\tilde{C}_3 e^{-\tilde{C}_4\|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{x}'\|} \\
&= b^2\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} \sum_{\boldsymbol{y}'} e^{-\tilde{C}_4\left(\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'\|+\|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{x}'\|\right)} \\
&= b^2\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} \sum_{\boldsymbol{y}'} e^{-\frac{\tilde{C}_4}{2}\left(\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'\|+\|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{x}'\|\right)} e^{-\frac{\tilde{C}_4}{2}\left(\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'\|+\|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{x}'\|\right)} \\
&\le b^2\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} e^{-\frac{\tilde{C}_4}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|} \sum_{\boldsymbol{y}'} e^{-\frac{\tilde{C}_4}{2}\left(\|\boldsymbol{y}'\|+\|\boldsymbol{y}-(\boldsymbol{y}'+\boldsymbol{x}')\|\right)} \\
&\le b^2\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} e^{-\frac{\tilde{C}_4}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|} \sum_{\boldsymbol{y}'} e^{-\frac{\tilde{C}_4}{2}\|\boldsymbol{y}'\|} \\
&\le b^2\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-\tilde{C}_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|} e^{-\frac{\tilde{C}_4}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|} \\
&\le b^2\,C \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-C_6\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|\right)} e^{-C_6\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'\|\right)}, \quad C_6 = \frac{1}{2}\min\left\{\tilde{C}_2,\frac{\tilde{C}_4}{2}\right\} \\
&\le b^2\,C\, e^{-C_6\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|} \sum_{\boldsymbol{y}} e^{-C_6\left(\|\boldsymbol{y}\|+\|\boldsymbol{x}-(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{x})\|\right)} \\
&\le b^2\,C\, e^{-C_6\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|}.
\end{aligned}
$$

Dette betyder at restleddet også er eksponentielt, næsten diagonal. Derudover ses det at der er en b^2-afhængighed i forhold til magnetfeltet. □

Ved at fortsætte omskrivningen af $\left(\widehat{H_b}-z\widehat{I}\right)^{-1}$ i ligning (2.20) vil et tilsvarende restled kunne opstilles med en b^n-afhængighed, hvor de foregående led vil have en b^k-afhængighed med $k=0,\ldots,n-1$. Denne afhængighed stammer fra $\widehat{K_b}^{\,k}$ der vil indgå i leddene.

KAPITEL 3

IKKE-PERFEKTE KRYSTALLER

Dette kapitel handler om en krystal beskrevet med et simpelt kvadratisk gitter, hvor de forgående to omhandler en todimensional krystal med M atomer i enhedscellen. Dette vil sige at der stadig er to dimensioner, men at der kun er et atom i enhedscellen, samt at koordinatsystemet kan vælges sådan at basisvektorerne har længde 1 og ligger langs akserne. Der vil igennem resten af rapporten kun blive set på en tight-binding model med nærmest-nabo interaktioner, hvilket vil sige det kun er de nærmeste atomer der har indflydelse på elektronen.

Generelt består Hamiltonoperatoren, $\widehat{H_0}$ af en potentiel del $\widehat{V_0}$ og en kinetisk del $\widehat{T_0}$. Den potentielle del for denne krystal er givet ved

$$\left(\widehat{V_0}\boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{x}) = v\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) \ , \quad \text{for } \boldsymbol{x} \in \Lambda ,$$

og da alle atomerne i krystallen er ens kan v sættes til 0. Den kinetiske del bestemmes sådan at kernen af $\widehat{T_0}$ bliver

$$T_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = T_{0_1}(x_1,y_1)\,\delta_{x_2}(y_2) + T_{0_2}(x_2,y_2)\,\delta_{x_1}(y_1) \ ,$$

hvor $\boldsymbol{x}$ og $\boldsymbol{y}$ tilhører Λ. Da interaktioner mellem elektronen og det tilhørende atom kun bidrager med en forskydning af egenværdierne kan disse ignoreres. Da der kun ses på nærmest-nabo interaktioner kan kernen skrives som

$$T_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \tau_1\delta_{x_1}(y_1 \pm 1)\,\delta_{x_2}(y_2) + \tau_2\delta_{x_2}(y_2 \pm 1)\,\delta_{x_1}(y_1) \ .$$

Da krystallen er en simpel kvadratisk krystal og da det er samme type atom i alle gitterpunkterne er $\tau_1 = \tau_2$, og disse kan for nemheds skyld sættes til 1. Dette medfører at Hamiltonoperatorens kerne kan skrives som

$$H_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \delta_{x_1}(y_1 \pm 1)\,\delta_{x_2}(y_2) + \delta_{x_2}(y_2 \pm 1)\,\delta_{x_1}(y_1) \tag{3.1}$$

Hvis $\widehat{H_0}$ angiver Hamiltonoperatoren for en perfekt krystal kan der blive indført en forurening i form af en udskiftning af et atom, på eksempelvis gitterplads **0**, ved

$$\widehat{H_\lambda} = \widehat{H_0} + \lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}| \ ,$$

hvor $\lambda \in \mathbb{R}$, $\lambda > 0$. Bemærk, at den såkaldte Bra-Ket notation anvendes, hvor $|\mathbf{0}\rangle$ beskriver tilstanden i **0** og hvor $\langle\mathbf{0}|\widehat{A}|\mathbf{0}\rangle = \left\langle\mathbf{0},\widehat{A}\mathbf{0}\right\rangle$ beskriver det indre produkt. For at bestemme resolventen for den nye Hamiltonoperator er det nødvendigt at omskrive

$$\begin{aligned}\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I} &= \widehat{H_0} - z\widehat{I} + \lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}| \\ &= \left(\widehat{I} + \lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right)\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right).\end{aligned}$$

Dette medfører at

$$\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} = \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\left(\widehat{I} + \lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right)^{-1}.$$

Hvis λ er tilstrækkelig lille kan denne operator vha. Neumann-rækker omskrives til

$$\begin{aligned}\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} &= \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\left(\widehat{I} - \left[-\lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right]\right)^{-1} \\
&= \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} - \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \\
&\quad + \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \\
&\quad - \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\lambda\,|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} + \ldots \\
&= \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} - \lambda\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \\
&\quad + \lambda^2\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}|\mathbf{0}\rangle\left\langle\mathbf{0},\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}\right\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \\
&\quad - \lambda^3\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}|\mathbf{0}\rangle\left\langle\mathbf{0},\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}\right\rangle^2\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} + \ldots \\
&= \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} - \lambda\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)|\mathbf{0}\rangle\left(\sum_{n\geq 0}\left(-\lambda\left\langle\mathbf{0},\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}\right\rangle\right)^n\right)\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \\
&= \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} - \frac{\lambda}{1 + \lambda\left\langle\mathbf{0},\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}\right\rangle}\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}.\end{aligned}$$

Hvilket betyder, at spektrummet for den ikke-perfekte krystal vil bestå af spektrummet fra den perfekte krystal, samt der hvor

$$\frac{-1}{\frac{1}{\lambda} + \left\langle\mathbf{0},\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}\right\rangle}\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}|\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}$$

ikke er veldefineret. Hvis der ses bort fra de steder hvor $\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}$ ikke er veldefineret, da dette er spektrummet af den originale Hamiltonoperator, kan de resterende punkter i spektrummet bestemmes ved at finde singulariteter af brøken. Disse kan findes ved at løse

$$\left\langle\mathbf{0},\left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}\right\rangle = -\frac{1}{\lambda}. \tag{3.2}$$

For at løse denne ligning er det nødvendigt at indføre k-rummet, hvor Brillouin-zonen er defineret.

3.1 K-rummet

Dette afsnit er skrevet ud fra [Brynildsen, 2011][Kapitel 3].

Til forskel fra $\ell^2(\Lambda)$, der er et uendelig-dimensionelt rum, hvor bølgefunktionerne får tildelt en værdi for hvert atom i krystallen, er k-rummet et endelig-dimensionelt kontinuert rum, hvor dimensionen er bestemt ud fra enhedscellen. K-rummet bestemmes ved

$$\mathcal{H}_k = \int_{\Omega_k}^{\oplus}\ell^2(\Omega)\,\mathrm{d}^2 k.$$

Det kan vises at dette rum er et Hilbertrum med det indre produkt defineret ved

$$\langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{g} \rangle_k = \int_{\Omega_k} \sum_{\boldsymbol{\omega} \in \Omega} \overline{f(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{k})}\, g(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{k}) \, \mathrm{d}^2 k,$$

hvor $\boldsymbol{f}, \boldsymbol{g} \in \mathscr{H}_k$. Der indføres en operator, $\widehat{U}$, der afbilder fra $\ell^2_C(\Lambda)$ over i $\mathscr{H}_k$ defineret ved

$$\left(\widehat{U_k} \boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma} e^{i\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{\gamma} \rangle} \psi(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\gamma}), \quad \boldsymbol{k} \in \Omega_k, \boldsymbol{\omega} \in \Omega, \tag{3.3}$$

hvor $\ell^2_C(\Lambda)$ er mængden af vektorer i $\ell^2(\Lambda)$ med et kompakt støtte, hvilket vil sige, at der kun er et endeligt antal komponenter forskellig fra 0. I følgende sætning vises det at $\widehat{U_k}$ har en unitær udvidelse, hvilket ifølge [Reed og Simon, 1980][side 39] medfører at $\ell^2(\Lambda)$ og $\mathscr{H}_k$ er isomorf.

Sætning 3.1
Operatoren $\widehat{U_k}$ defineret i ligning (3.3) har en unitær udvidelse på $\ell^2(\Lambda)$.

Bevis:
Det kan vises at $\ell^2_C(\Lambda)$ er en tæt delmængde af $\ell^2(\Lambda)$. For en tilfældig $\boldsymbol{\psi} \in \ell^2_C(\Lambda)$ gælder det

$$\begin{aligned}
\left\|\widehat{U_k}\boldsymbol{\psi}\right\|_k^2 &= \langle \widehat{U_k}\boldsymbol{\psi}, \widehat{U_k}\boldsymbol{\psi}\rangle_k \\
&= \int_{\Omega_k} \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\Omega} \overline{\left(\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} \psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma})\right)} \left(\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\beta}\in\Gamma} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle} \psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\beta})\right) \mathrm{d}^2 k \\
&= \int_{\Omega_k} \sum_{\boldsymbol{\omega}} \left(\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\gamma}} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} \overline{\psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma})}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\beta}} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle} \psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\beta})\right) \mathrm{d}^2 k \\
&= \sum_{\boldsymbol{\omega}} \sum_{\boldsymbol{\gamma}} \sum_{\boldsymbol{\beta}} \overline{\psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma})}\, \psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\beta}) \, \frac{1}{|\Omega_k|} \int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle} \, \mathrm{d}^2 k.
\end{aligned}$$

Da det gælder at

$$\int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle} \, \mathrm{d}^2 k = \begin{cases} 0 & \text{, for } \boldsymbol{\gamma} \neq \boldsymbol{\beta} \\ |\Omega_k| & \text{, for } \boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\beta} \end{cases}, \tag{3.4}$$

følger det af omskrivningen at

$$\left\|\widehat{U_k}\boldsymbol{\psi}\right\|_k^2 = \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\Omega} \sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma} \overline{\psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma})}\, \psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma}) = \|\boldsymbol{\psi}\|^2 .$$

Hvilket medfører at der eksisterer en unitær udvidelse, eftersom $\ell^2_C(\Lambda)$ er en tæt delmængde af $\ell^2(\Lambda)$. Denne udvidelse kaldes tilsvarende for $\widehat{U_k}$.

Den adjungerede operator, det vil sige operatoren $\widehat{U_k}^*$ der opfylder at $\langle \boldsymbol{f}, \widehat{U_k}\boldsymbol{\psi}\rangle_k = \left\langle \widehat{U_k}^* \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\psi}\right\rangle$, hvor det antages at $\boldsymbol{f}$ er kontinuert differentiabel i en tilstrækkelig grad og periodisk i forhold til $\boldsymbol{k}$, findes ved

$$\begin{aligned}
\langle \widehat{U_k}\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{f}\rangle_k &= \int_{\Omega_k} \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\Omega} \overline{\left(\widehat{U_k}\boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega})}\, f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}) \, \mathrm{d}^2 k \\
&= \int_{\Omega_k} \sum_{\boldsymbol{\omega}} \overline{|\Omega_k|^{-\frac{1}{2}} \sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} \psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma})}\, f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}) \, \mathrm{d}^2 k \\
&= \sum_{\boldsymbol{\omega}} \sum_{\boldsymbol{\gamma}} \overline{\psi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma})} \, \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}) \, \mathrm{d}^2 k .
\end{aligned}$$

Dette vil sige

$$\left(\widehat{U_k}^* \boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma}) = \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega})\, \mathrm{d}^2 k.$$

Ved at anvende ligning (3.4) fås det for $\boldsymbol{\phi} \in \ell^2_C(\Lambda)$ at

$$\begin{aligned}
\widehat{U_k}^* \widehat{U_k} \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma}) &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} \left(\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\beta}\in\Gamma} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle} \phi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\beta}) \right) \mathrm{d}^2 k \\
&= \frac{1}{|\Omega_k|} \sum_{\boldsymbol{\beta}} \left(\int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle} \mathrm{d}^2 k \right) \phi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\beta}) \\
&= \frac{1}{|\Omega_k|} |\Omega_k| \phi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma}) = \phi(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma}),
\end{aligned}$$

hvilket medfører at operatoren opfylder

$$\widehat{U_k}^* \widehat{U_k} = \widehat{I}.$$

For $\boldsymbol{f} \in \mathscr{H}_k$, hvor $\boldsymbol{f}$ er kontinuert differentiabel i en tilstrækkelig høj grad og periodisk med hensyn til $\boldsymbol{k}$, gælder det for $\boldsymbol{\omega} \in \Omega$ at

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{U_k}\widehat{U_k}^* \boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}) &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} \left(\widehat{U_k}^* \boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma} e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle} \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k}',\boldsymbol{\gamma}\rangle} f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{\gamma})\, \mathrm{d}^2 k',
\end{aligned}$$

hvilket ifølge [Reed og Simon, 1980][Kapitel 9] er en Fourierrække til $f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega})$. Da $\boldsymbol{f}$ er valgt kontinuert differentiabel i en tilstrækkelig høj grad gælder Fouriers inversionsætning, og dermed er

$$\left(\widehat{U_k}\widehat{U_k}^* \boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}) = f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}),$$

hvilket medfører at

$$\widehat{U_k}\widehat{U_k}^* = \widehat{I_k}.$$

Bemærk at glatte funktioner tilhørende $\mathscr{H}_k$, der er periodiske i forhold til Ω_k, er en tæt delmængde af $\mathscr{H}_k$. Da begge delmængder er tætte i forhold til henholdsvis $\ell^2(\Lambda)$ og $\mathscr{H}_k$ betyder det, at $\widehat{U_k}$ har en unitær udvidelse på $\ell^2(\Lambda)$, og $\widehat{U_k}^*$ har en unitær udvidelse på $\mathscr{H}_k$, så begge udvidelser opfylder tilsvarende egenskaber. □

3.1.1 Operatorer i k-rummet

Ved at overføre operatorerne fra $\ell^2(\Lambda)$ til k-rummet, $\mathscr{H}_k$, kan egentilstanden beregnes ved hjælp af endelige matricer, hvor matricens format bestemmes ud fra antal atomer i enhedscellen. Hvis der ses på en selvadjungeret, eksponentiel, næsten diagonal Hamiltonoperator $\widehat{H_0}$ på Λ, der er kommutativ med hensyn til translationer på formen $\left(\widehat{\mathcal{T}_{\boldsymbol{\gamma}}}\boldsymbol{\psi}\right)(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\gamma})$, så kan operatoren overføres til k-rummet ved hjælp af $\widehat{U_k}$. Operatoren i k-rummet er på formen

$\widehat{U_k}\widehat{H_0}\widehat{U_k}:\mathscr{H}_k\to\mathscr{H}_k$, og hvis den anvendes på $\boldsymbol{f}$, der er kontinuert differentiabel i en tilstrækkelig høj grad og periodisk med hensyn til $\boldsymbol{k}$, giver dette

$$\begin{aligned}\left(\widehat{U_k}\widehat{H_0}\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}) &= \sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle}\left(\widehat{H_0}\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\gamma})\\
&= \sum_{\boldsymbol{\gamma}}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle}\left(\widehat{\mathcal{T}_{\boldsymbol{\gamma}}}\widehat{H_0}\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{\omega})\\
&= \sum_{\boldsymbol{\gamma}}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle}\left(\widehat{H_0}\widehat{\mathcal{T}_{\boldsymbol{\gamma}}}\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{\omega})\\
&= \sum_{\boldsymbol{\gamma}}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}\left(T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{y})+v(\boldsymbol{y})\right)\left(\widehat{\mathcal{T}_{\boldsymbol{\gamma}}}\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{y})\\
&= \sum_{\boldsymbol{\gamma}}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle}\sum_{\boldsymbol{y}}\left(T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{y})\left(\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\gamma})+v(\boldsymbol{y})\left(\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\gamma})\right).\end{aligned}$$

For den valgte krystal er potentialet sat til $v(\boldsymbol{y})=0$, og det er dermed nok at regne på den kinetiske del af Hamiltonoperatoren, hvilket giver

$$\begin{aligned}&\sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle}\sum_{\boldsymbol{y}\in\Lambda}T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{y})\left(\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\gamma})\\
&\quad= \sum_{\boldsymbol{\gamma}}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}\rangle}\sum_{\boldsymbol{\omega}'\in\Omega}\sum_{\boldsymbol{\beta}\in\Gamma}T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}'+\boldsymbol{\beta})\left(\widehat{U_k}^*\boldsymbol{f}\right)(\boldsymbol{\omega}'+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\gamma})\\
&\quad= \sum_{\boldsymbol{\omega}'}\sum_{\boldsymbol{\beta}}T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}'+\boldsymbol{\beta})\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}\sum_{\boldsymbol{\gamma}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\beta}\rangle}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}\int_{\Omega_k}e^{-i\langle\boldsymbol{k}',\boldsymbol{\gamma}-\boldsymbol{\beta}\rangle}f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{\omega}')\,\mathrm{d}^2k'\\
&\quad= \sum_{\boldsymbol{\omega}'}\sum_{\boldsymbol{\beta}}T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}'+\boldsymbol{\beta})e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}\sum_{\boldsymbol{\gamma}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}-\boldsymbol{\beta}\rangle}\frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}}\int_{\Omega_k}e^{-i\langle\boldsymbol{k}',\boldsymbol{\gamma}-\boldsymbol{\beta}\rangle}f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{\omega}')\,\mathrm{d}^2k'\\
&\quad= \sum_{\boldsymbol{\omega}'}\sum_{\boldsymbol{\beta}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle}T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}'+\boldsymbol{\beta})f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}'),\end{aligned}$$

hvor der ved sidste ligning udnyttes Fouriers inversionsætning. For hvert $\boldsymbol{k}\in\Omega_k$ defineres det $\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}'$ matrix element, for $\boldsymbol{\omega}',\boldsymbol{\omega}\in\Omega$, af den kinetiske del af Hamiltonoperator i k-rummet ved

$$\begin{aligned}T_k(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}';\boldsymbol{k}) &= \sum_{\boldsymbol{\beta}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle}T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}'+\boldsymbol{\beta})\\
&= \sum_{\boldsymbol{\beta}}e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle}T_0(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\omega}').\end{aligned}\tag{3.5}$$

Sidste lighed følger af at krystallen antages at være periodisk, og dermed at $T_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}+\boldsymbol{\gamma})=T_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{y})$ for $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\Lambda$ og $\boldsymbol{\gamma}\in\Gamma$. Yderligere gælder det at $T_k(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}';\boldsymbol{k})$ er selvadjungeret, eftersom $T_0(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}')$ er selvadjungeret. Hamiltonoperatoren i k-rummet kan derfor skrives som

$$\widehat{U_k}\widehat{H_0}\widehat{U_k}^*=\int_{\Omega_k}^{\oplus}T_k(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}';\boldsymbol{k})\,\mathrm{d}^2k.\tag{3.6}$$

Tilsvarende ligning (3.5) kan der bestemmes en formel til at udregne kernen af Hamiltonoperatoren i $\ell^2(\Lambda)$ ud fra matrix elementerne fra Hamiltonoperatoren i k-rummet. Dette gøres ved at dividere med $e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle}$ på begge sider af ligheden i ligning (3.5), samt integrere $\boldsymbol{k}$ ud, hvilket giver

$$T_0(\boldsymbol{\omega}-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\omega}')=\int_{\Omega_k}e^{-i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle}T_k(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}';\boldsymbol{k})\,\mathrm{d}^2k.\tag{3.7}$$

Energibånd

Spektral sætningen, [Reed og Simon, 1980][Kapitel 7], medfører at der for hvert $\boldsymbol{k}$ kan vælges en basis af $\ell^2(\Omega)$ sådan at $\widehat{H_k}(\boldsymbol{k})$ er en diagonal matrix, hvilket medfører at operatoren kan have op til $|\Omega|$ forskellige egenværdier. Hvis egenværdierne sorteres således at

$$\varepsilon_1(\boldsymbol{k}) \leq \varepsilon_2(\boldsymbol{k}) \leq \ldots \leq \varepsilon_{|\Omega|}(\boldsymbol{k})$$

repræsenterer hver af disse et energibånd. Hvis der er lighed mellem to af egenværdierne siges båndene at være degenererede. Disse energibånd er relevante indenfor fysik, da mange fysiske egenskaber ved et materiale kan bestemmes ud fra disse. For eksempel reflektivitet og varmekapacitet.

3.1.2 Resolventen af Hamiltonoperatoren

Det er nu muligt at overfører resolventen til k-rummet. Ud fra ligning (3.6) følger det at

$$\begin{aligned}\widehat{U_k}\left(\widehat{H_0}-z\widehat{I}\right)\widehat{U_k}^* &= \widehat{U_k}\widehat{H_0}\widehat{U_k}^* - \widehat{U_k}z\widehat{I}\widehat{U_k}^* \\ &= \int_{\Omega_k}^{\oplus} T_k\left(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}'\right)\,\mathrm{d}^2k - \int_{\Omega_k}^{\oplus} z\,\mathrm{d}^2k \\ &= \int_{\Omega_k}^{\oplus} T_k\left(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}';\boldsymbol{k}\right) - z\,\mathrm{d}^2k.\end{aligned}$$

Hvis denne operator kaldes for $\widehat{A}$ følger det at

$$\widehat{H_0} - z\widehat{I} = \widehat{U_k}^{-1}\widehat{A}\left(\widehat{U_k}^*\right)^{-1} = \widehat{U_k}^*\widehat{A}\widehat{U_k}.$$

Hvoraf det følger at den inverse kan findes som

$$\left(\widehat{H_0}-z\widehat{I}\right)^{-1} = \widehat{U_k}^{-1}\widehat{A}^{-1}\left(\widehat{U_k}^*\right)^{-1} = \widehat{U_k}^*\widehat{A}^{-1}\widehat{U_k},$$

hvilket medfører at resolventen kan skrives på formen

$$\widehat{U_k}\left(\widehat{H_0}-z\widehat{I}\right)^{-1}\widehat{U_k}^* = \widehat{A}^{-1} = \int_{\Omega_k}^{\oplus} \frac{1}{T_k(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\omega}';\boldsymbol{k}) - z}\,\mathrm{d}^2k. \tag{3.8}$$

Før det er muligt at bestemme et udtryk for reslonventen er det nødvendigt at undersøge matrix elementet af Hamiltonoperatoren i k-rummet. Eftersom der ses på en krystal, hvor kernen til Hamiltonoperatoren er beskrevet ved ligning (3.1) bliver matrix elementet i k-rummet for et given $\boldsymbol{k}$, ifølge ligning (3.5), på formen

$$\begin{aligned}T_k(\mathbf{0},\mathbf{0};\boldsymbol{k}) &= \sum_{\boldsymbol{\beta}} e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\beta}\rangle}T_0\left(\mathbf{0}-\boldsymbol{\beta},\mathbf{0}\right) \\ &= e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{a}_1\rangle}T_0(\mathbf{0}-\boldsymbol{a}_1,\mathbf{0}) + e^{i\langle\boldsymbol{k},-\boldsymbol{a}_1\rangle}T_0(\mathbf{0}+\boldsymbol{a}_1,\mathbf{0}) \\ &\quad + e^{i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{a}_2\rangle}T_0(\mathbf{0}-\boldsymbol{a}_2,\mathbf{0}) + e^{i\langle\boldsymbol{k},-\boldsymbol{a}_2\rangle}T_0(\mathbf{0}+\boldsymbol{a}_2,\mathbf{0}) \\ &= 2\cos(k_1) + 2\cos(k_2),\end{aligned} \tag{3.9}$$

hvor k_1 og k_2 er første og anden komponent af $\boldsymbol{k}$. Da dette gælder for et vilkårligt $\boldsymbol{\beta} \in \Gamma$ må det også gælde for $\left(\boldsymbol{\gamma}'-\boldsymbol{\gamma}\right)$ hvor $\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\gamma}' \in \Gamma$. På grund af ligning (3.7) og (3.8) medfører dette at kernen til resolventen er på formen

$$\left(\widehat{H_0}-z\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\gamma}') = \int_{\Omega_k} e^{-i\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{\gamma}'-\boldsymbol{\gamma}\rangle}\frac{1}{2\cos(k_1)+2\cos(k_2)-z}\,\mathrm{d}^2k.$$

3.2 Spektrummet af den ikke-perfekte krystals Hamiltonoperator

Spektrummet for den oprindelige Hamiltonoperator kan bestemmes ved at finde de værdier for $z \in \mathbb{R}$, hvor

$$T_k(\mathbf{0},\mathbf{0};\boldsymbol{k}) - z = 0$$

for et vilkårligt $\boldsymbol{k} \in \Omega_k$, hvilket ifølge ligning (3.9) kan omskrives til

$$2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) = z,$$

for vilkårlige $k_1, k_2 \in [-\pi, \pi]$. Eftersom cosinus-funktionen er en kontinuert funktion med en periode på 2π og en billedemængde $[-1,1]$ er spektrummet for den oprindelige Hamiltonoperator givet ved

$$\sigma\left(\widehat{H_0}\right) = [-4,4]\,.$$

Det er nu muligt at fortsætte med at bestemme spektrummet for Hamiltonoperatoren for den ikke-perfekte krystal. Dette gøres ved at løse ligning (3.2)

$$-\frac{1}{\lambda} = \left\langle \mathbf{0}, \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \mathbf{0} \right\rangle, \quad z \in \left]-\infty, 4\right[\cup \left]4, \infty\right[\,, \ \lambda \in \mathbb{R}_+\,. \tag{3.2}$$

For at løse denne ligning indføres funktionen

$$\begin{aligned} f(E) &= \left\langle \mathbf{0}, \left(\widehat{H_0} - E\widehat{I}\right)^{-1} \mathbf{0} \right\rangle = \left(\widehat{H_0} - E\widehat{I}\right)^{-1}(\mathbf{0},\mathbf{0}) \\ &= \int_{\Omega_k} e^{-i\langle \boldsymbol{k},\mathbf{0}\rangle} \frac{1}{2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) - E}\,\mathrm{d}^2 k \\ &= \int_{\Omega_k} \frac{1}{2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) - E}\,\mathrm{d}^2 k\,. \end{aligned}$$

Ved at opstille Taylor-rækken omkring π for de to cosinus-funktioner fås

$$\begin{aligned} 2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) &= 2\cos(\pi) + 2\cos(\pi) - 2\sin(\pi)(k_1-\pi) \\ &\qquad - 2\sin(\pi)(k_2-\pi) - \cos\left(pi\right)(k_1-\pi)^2 - \cos(\pi)(k_2-\pi)^2 + \ldots \\ &= -4 + (k_1-\pi)^2 + (k_2-\pi)^2 + \ldots\,. \end{aligned}$$

Dette medfører at

$$f(E) \to \infty, \quad \text{for } E \to -4\,,\ E \in \left]-\infty, -4\right[\,.$$

En tilsvarende Taylor-række kan opstilles omkring 0, sådan at

$$2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) = 4 - k_1^2 - k_2^2 + \ldots\,,$$

hvilket medfører at

$$f(E) \to -\infty, \quad \text{for } E \to 4\,,\ E \in \left]4, \infty\right[\,.$$

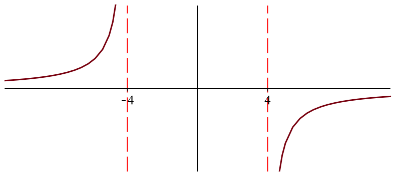
Ved at differentiere $f(E)$ fås

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E} f(E) &= \int_{\Omega_k} \frac{d}{dE} \left(\frac{1}{2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) - E} \right) \mathrm{d}^2 k \\
&= \int_{\Omega_k} -\frac{-1}{(2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) - E)^2} \mathrm{d}^2 k \\
&= \int_{\Omega_k} \frac{1}{(2\cos(k_1) + 2\cos(k_2) - E)^2} \mathrm{d}^2 k . \qquad (3.10)
\end{aligned}$$

Den afledte er positiv for alle $E \in]-\infty, -4[\cup]4, \infty[$, og dermed er $f(E)$ strengt voksende på både $]-\infty, -4[$ og $]4, \infty[$. Da

$$f(E) \to 0, \quad \text{for } E \to \pm\infty,$$

medfører det at ligning (3.2) kun har en løsning, og eftersom $\lambda \in \mathbb{R}_+$ er den tilhørende energi, E_λ, positiv og dermed større end 4, hvilket kan ses på figur 3.1.



Figur 3.1: *Illustration af $f(E)$.*

Efter $f(E)$ er indført kan resolventet til Hamiltonoperatoren for den ikke-perfekte krystal skrives som

$$\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} = \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right) - \frac{1}{f(z) - f(E_\lambda)} \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right) |\mathbf{0}\rangle \langle\mathbf{0}| \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right).$$

For en positiv orienteret cirkel ξ med radius valgt således at E_λ er omkranset uden at ξ indeslutter andre egenværdier, følger det, fra [Reed og Simon, 1978][side 5], at den tilhørende projektion er på formen

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathcal{P}_\lambda} &= \frac{-1}{2\pi i} \int_\xi \left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right) \mathrm{d}z \qquad (3.11) \\
&= \frac{-1}{2\pi i} \int_\xi \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right) \mathrm{d}z + \frac{1}{2\pi i} \int_\xi \frac{1}{f(z) - f(E_z)} \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} |\mathbf{0}\rangle \langle\mathbf{0}| \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \mathrm{d}z \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_\xi \frac{1}{f(z) - f(E_z)} \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} |\mathbf{0}\rangle \langle\mathbf{0}| \left(\widehat{H_0} - z\widehat{I}\right)^{-1} \mathrm{d}z \\
&= \frac{1}{f'(E_\lambda)} \left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1} |\mathbf{0}\rangle \langle\mathbf{0}| \left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1}.
\end{aligned}$$

Sidste omskrivning kommer fra Cauchys residue-sætning, [Jensen, 2011][Sætning 8.5 side 27-28]. Den tilhørende egenvektor sættes til

$$\boldsymbol{\psi}_\lambda = \frac{1}{\sqrt{f'(E_\lambda)}} \left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1} |\mathbf{0}\rangle,$$

hvilket medfører, at projektionen kan omskrives til

$$\widehat{\mathcal{P}_\lambda} = |\boldsymbol{\psi}_\lambda\rangle\langle\boldsymbol{\psi}_\lambda|.$$

Bemærk at dette medfører, at billedmængden af projektionen er endimensional, og at egenværdien E_λ dermed er ikke-degeneret. Valget af egenvektoren medfører

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{\psi}_\lambda\|^2 = \langle \boldsymbol{\psi}_\lambda, \boldsymbol{\psi}_\lambda\rangle &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{f'(E_\lambda)}}\left(\widehat{H_0} - E_\lambda \widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}, \frac{1}{\sqrt{f'(E_\lambda)}}\left(\widehat{H_0} - E_\lambda \widehat{I}\right)^{-1}\mathbf{0}\right\rangle \\ &= \frac{1}{f'(E_\lambda)}\left\langle \mathbf{0}, \left(\left(\widehat{H_0} - E_\lambda \widehat{I}\right)^{-1}\right)^2 \mathbf{0}\right\rangle = \frac{1}{f'(E_\lambda)} f'(E_\lambda) = 1,\end{aligned}$$

hvor fjerde lighed følger af ligning (3.10). Ud fra dette ses det også at projektionen anvendt på egenvektoren giver egenvektoren selv, eftersom

$$\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\boldsymbol{\psi}_\lambda = \left(|\boldsymbol{\psi}_\lambda\rangle\langle\boldsymbol{\psi}_\lambda|\right)\boldsymbol{\psi}_\lambda = \langle\boldsymbol{\psi}_\lambda, \boldsymbol{\psi}_\lambda\rangle\boldsymbol{\psi}_\lambda = \boldsymbol{\psi}_\lambda. \tag{3.12}$$

Det ses at Hamiltonoperatoren og projektionen kommuterer, eftersom

$$\begin{aligned}\widehat{H_\lambda}\widehat{\mathcal{P}_\lambda} &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \widehat{H_\lambda}\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} \mathrm{d}^2 k \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} + z\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} \mathrm{d}^2 k \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \widehat{I} + z\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} \mathrm{d}^2 k \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \widehat{I} + \left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} z\, \mathrm{d}^2 k \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1}\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I} + z\widehat{I}\right) \mathrm{d}^2 k \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1}\widehat{H_\lambda}\, \mathrm{d}^2 k = \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\widehat{H_\lambda}.\end{aligned}$$

Fra [Reed og Simon, 1978][Sætning XII.5 side 11] følger det at projektionen er en ortogonalprojektion, dvs. at $\widehat{\mathcal{P}_\lambda}^2 = \widehat{\mathcal{P}_\lambda}$ og $\widehat{\mathcal{P}_\lambda}^* = \widehat{\mathcal{P}_\lambda}$. For at kunne bestemme størrelsen af kernen til denne projektion er det nødvendigt at bestemme $|\psi(\boldsymbol{x})|$. Fra Combes-Thomas' sætning på side 10, følger det at $\left(\widehat{H_0} - E_\lambda\right)^{-1}$ er eksponentiel, næsten diagonal, eftersom $\widehat{H_0}$ er eksponentiel næsten diagonal, og $E_\lambda \in \rho\left(\widehat{H_0}\right)$. Dette medfører at

$$\widehat{D_\alpha} = e^{\alpha\|\bullet\|}\left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1} e^{-\alpha\|\bullet\|}$$

er begrænset, eftersom kernen opfylder at

$$\begin{aligned}\left|D_\alpha(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\right| &= \left|e^{\alpha\|\boldsymbol{x}\|}\left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, e^{-\alpha\|\boldsymbol{y}\|}\right| \\ &= \left|\left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, e^{\alpha(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}\| - \|\boldsymbol{y}\|)}\right| \\ &\leq \left|\left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, e^{\alpha\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}\right| \\ &\leq \left|C e^{-(C_\alpha - \alpha)\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|}\right|,\end{aligned}$$

hvoraf det følger at $\widehat{D_\alpha}$ er eksponentiel, næsten diagonal for $\alpha < C_\alpha$. På grund af sætning 2.4 og lemma 2.2 medfører det at $\widehat{D_\alpha}$ er begrænset. Hvis der ses på et element af denne operator, anvendt på $|\mathbf{0}\rangle$, fås

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{f'(E_\lambda)}}\left(e^{\alpha\|\bullet\|}\left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1} e^{-\alpha\|\bullet\|}|\mathbf{0}\rangle\right)(\boldsymbol{x}) &= \frac{1}{\sqrt{f'(E_\lambda)}} e^{\alpha\|\boldsymbol{x}\|}\left(\left(\widehat{H_0} - E_\lambda\widehat{I}\right)^{-1} e^{-\alpha\|\mathbf{0}\|}|\mathbf{0}\rangle\right)(\boldsymbol{x}) \\ &= e^{\alpha\|\boldsymbol{x}\|}\psi_\lambda(\boldsymbol{x}).\end{aligned}$$

Da operatoren er begrænset og anvendes på en vektor med endelig norm giver det en vektor med endelig norm, og dermed følger det at

$$\sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} e^{2\alpha\|\boldsymbol{x}\|}\left|\psi_\lambda(\boldsymbol{x})\right|^2 < \infty .$$

Det medfører at alle elementerne er begrænsede, hvoraf en konstant c kan bestemmes sådan at

$$\left|\psi_\lambda(\boldsymbol{x})\right| \leq c e^{-\alpha\|\boldsymbol{x}\|} .$$

Eftersom projektionen er på formen $\widehat{\mathcal{P}_\lambda} = \left|\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\rangle\left\langle\boldsymbol{\psi}_\lambda\right|$ medfører dette at

$$\left|\mathcal{P}_\lambda\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\right| = \left|\psi_\lambda(\boldsymbol{x})\,\overline{\psi_\lambda\left(\boldsymbol{y}\right)}\right| \leq C e^{-\alpha\|\boldsymbol{x}\|} e^{-\alpha\|\boldsymbol{y}\|} .$$

3.3 Magnetisk perturbation af Hamiltonoperatoren for den ikke-perfekte krystal

Følgende hovedsætning gælder for egenværdien af Hamiltonoperatoren efter magnetisk perturbation med konstant magnetisk felt b. Sætning medfører at den perturberede egenværdi eksisterer, samt at de første to led af egenværdien kan bestemmes ud fra den ikke-perturberede egenvektor.

Sætning 3.2 (Perturberet egenværdi)
Hvis det magnetiske felt b er tilstrækkeligt lille eksisterer der en ikke-degenereret perturberet egenværdi E_b nær den isolerede ikke-degenererede egenværdi E_λ. Ydermere eksisterer en konstant, C, således at

$$\left|\left\langle\boldsymbol{\psi}_\lambda, \widehat{H_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\rangle - E_b\right| \leq C b^2 .$$

Bevis:
I afsnit 2.1 blev resolventen for den magnetisk perturberede Hamiltonoperator omskrevet til

$$\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1} = \widehat{S_b} - \left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}\widehat{K_b},$$

hvor $S_b\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};z\right) = e^{ib\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}\left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)$. Hvilket medfører at projektionen til $\widehat{H_b}$, tilsvarende ligning (3.11), er givet ved

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{P}_b} &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1} \mathrm{d}z \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \widehat{S_b}(z)\,\mathrm{d}z + \frac{1}{2\pi i}\int_\xi \left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}\widehat{K_b}(z)\,\mathrm{d}z,\end{aligned}$$

hvor sætning 2.7 medfører at det, for b valgt tilstrækkelig lille, gælder at $\xi \subset \rho\left(\widehat{H_b}\right)$. For at kunne bestemme $\left\|\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\|$ indføres operatoren

$$\widehat{Q_b} = -\frac{1}{2\pi i}\int_\xi \widehat{S_b}(z)\,\mathrm{d}z,$$

sådan at

$$\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{Q}_b} = \frac{1}{2\pi i} \int_\xi \left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1} \widehat{K_b}(z)\, \mathrm{d}z.$$

Fra sætning 2.6 følger det at $\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}$ er eksponentiel, næsten diagonal, hvilket ifølge sætning 2.4 samt lemma 2.2 medfører at den er begrænset. Ud fra ligning (2.18) følger det at $\left\|\widehat{K_b}\right\| \leq bC$, hvilket ud fra [Kristensen, 2009][Sætning 1.3 side 14 og sætning 1.8 side 18] medfører at

$$\begin{aligned}
\left\|\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{Q}_b}\right\| &= \left\| \frac{1}{2\pi i} \int_\xi \left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1} \widehat{K_b}(z)\, \mathrm{d}z \right\| \\
&\leq \left|\frac{1}{2\pi i}\right| \int_\xi \left\|\left(\widehat{H_b} - z\widehat{I}\right)^{-1}\right\| \left\|\widehat{K_b}(z)\right\| |\mathrm{d}z| \leq bC_a.
\end{aligned}$$

Kernen til $\widehat{\mathcal{Q}_b}$ opfylder at

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_b(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) &= -\frac{1}{2\pi i} \int_\xi S_b(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};z)\, \mathrm{d}z \\
&= -\frac{1}{2\pi i} \int_\xi e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})} \left(\widehat{H_\lambda} - z\widehat{I}\right)^{-1} (\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}z \\
&= e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})} \mathcal{P}_\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \\
&= \mathcal{P}_\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) + \left(e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})} - 1\right) \mathcal{P}_\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}),
\end{aligned}$$

og dermed at

$$\begin{aligned}
\sup_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left|(\mathcal{Q}_b - \mathcal{P}_\lambda)(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right| &= \sup_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \left|\left(e^{ib\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})} - 1\right) \mathcal{P}_\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right| \\
&\leq \sup_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} |b| \left|\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right| \left|\mathcal{P}_\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right| \\
&\leq \sup_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} |b| \,\|\boldsymbol{x}\| \left\|\boldsymbol{y}\right\| \left|\mathcal{P}_\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right| \\
&\leq b \sup_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} \|\boldsymbol{x}\| \left\|\boldsymbol{y}\right\| e^{-\alpha\|\boldsymbol{x}\|} e^{-\alpha\|\boldsymbol{y}\|} \\
&\leq b \sup_{\boldsymbol{y}\in\Lambda} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Lambda} C e^{-\frac{\alpha}{2}\|\boldsymbol{x}\|} e^{-\frac{\alpha}{2}\|\boldsymbol{y}\|} \leq bC_b.
\end{aligned}$$

Den sidste omskrivning følger af at ligningen er eksponentielt aftagende i forhold til både $\|\boldsymbol{x}\|$ og $\left\|\boldsymbol{y}\right\|$. En tilsvarende udledning kan laves for $\sup_{\boldsymbol{x}} \sum_{\boldsymbol{y}} \left|(\mathcal{Q}_b - \mathcal{P}_\lambda)(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right|$, hvilket medfører at

$$\left\|\widehat{\mathcal{Q}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\| \leq \left\|\widehat{\mathcal{Q}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\|_1 \leq bC_b.$$

Ved at anvende trekantsuligheden ses det at

$$\begin{aligned}
\left\|\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\| &= \left\|\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{Q}_b} + \widehat{\mathcal{Q}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\| \\
&\leq \left\|\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{Q}_b}\right\| + \left\|\widehat{\mathcal{Q}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\| \\
&\leq bC_a + bC_b = bC,
\end{aligned}$$

hvorved der eksisterer et $b' = \frac{1}{C}$, således at $\left\|\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\| < 1$ for $b < b'$. Da $\widehat{\mathcal{P}_b}$ er på samme form som $\widehat{\mathcal{P}_\lambda}$ er det også en ortogonalprojektion, der yderligere kommuterer med $\widehat{H_b}$. Alt i alt medfører dette at $\widehat{\mathcal{P}_b}$ og $\widehat{\mathcal{P}_\lambda}$ opfylder betingelserne for følgende sætning.

Sætning 3.3
Lad $\widehat{\mathcal{P}_1}$ og $\widehat{\mathcal{P}_2}$ være ortogonalprojektioner der opfylder at $\left\|\widehat{\mathcal{P}_1}-\widehat{\mathcal{P}_2}\right\|<1$. Da eksisterer der en unitær operator $\widehat{U}$ således at $\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{U}=\widehat{U}\widehat{\mathcal{P}_2}$. Denne operator kan skrives på formen

$$\widehat{U}=\left(\widehat{I}-\left(\widehat{\mathcal{P}_1}-\widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}}\left(\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}+\left(\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}\right)\left(\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_2}\right)\right).$$

Bevis:
Denne sætning med bevis er skrevet ud fra [Kristensen, 2009][Kapitel 3].

Fra [Kristensen, 2009][side 51-55] fremgår det at operatorer på formen $\left(\widehat{I}-\widehat{T}\right)^{-\frac{1}{2}}$ med $\left\|\widehat{T}\right\|<1$ er analytiske, og dermed kan skrives på formen

$$\left(\widehat{I}-\widehat{T}\right)^{-\frac{1}{2}}=\sum_{k\geq 0}\eta_k\widehat{T}^k \tag{3.13}$$

hvor $\eta_k\in\mathbb{R}$, således at

$$\left(\widehat{I}-\widehat{T}\right)^{-\frac{1}{2}}\left(\widehat{I}-\widehat{T}\right)^{-\frac{1}{2}}=\left(\widehat{I}-\widehat{T}\right)^{-1}=\sum_{k\geq 0}\widehat{T}^k.$$

Der bliver yderligere vist at

$$\eta_k=\left.\frac{1}{k!}\frac{\mathrm{d}^k(1-x)^{-\frac{1}{2}}}{\mathrm{d}x^k}\right|_{x=0}$$

Disse resultater vil blive relevante senere i beviset. Antag at $\widehat{\mathcal{P}_1}$ og $\widehat{\mathcal{P}_2}$ er ortogonalprojektioner, der opfylder at $\left\|\widehat{\mathcal{P}_1}-\widehat{\mathcal{P}_2}\right\|<1$. Operatoren $\widehat{\mathcal{Q}_1}=\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}$ er også en ortogonalprojektion eftersom

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{Q}_1}^2&=\left(\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}\right)\left(\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}\right)=\widehat{I}-2\widehat{\mathcal{P}_1}+\widehat{\mathcal{P}_1}^2=\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}=\widehat{\mathcal{Q}_1}\\ \widehat{\mathcal{Q}_1}^*&=\left(\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}\right)^*=\widehat{I}^*-\widehat{\mathcal{P}_1}^*=\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}=\widehat{\mathcal{Q}_1},\end{aligned}$$

hvilket også kan vises for operatoren $\widehat{\mathcal{Q}_2}=\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_2}$. Yderligere gælder det at $\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{Q}_1}=\widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{P}_1}=\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{Q}_2}=\widehat{\mathcal{Q}_2}\widehat{\mathcal{P}_2}=\widehat{0}$, hvilket ses ved at

$$\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{Q}_1}=\widehat{\mathcal{P}_1}\left(\widehat{I}-\widehat{\mathcal{P}_1}\right)=\widehat{\mathcal{P}_1}-\widehat{\mathcal{P}_1}^2=\widehat{\mathcal{P}_1}-\widehat{\mathcal{P}_1}=\widehat{0}.$$

Ud fra disse projektioner defineres operatoren $\widehat{A}$ som

$$\widehat{A}=\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}+\widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{Q}_1},$$

hvilket medfører at

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{A}&=\widehat{\mathcal{P}_1}^2\widehat{\mathcal{P}_2}+\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{Q}_2}\\ &=\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}+\widehat{0}\\ &=\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}^2+\widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{Q}_2}\widehat{\mathcal{P}_2}=\widehat{A}\widehat{\mathcal{P}_2}.\end{aligned}$$

Måden hvorpå $\widehat{A}$ er defineret medfører at den kommuterer med $\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\right)^2$ eftersom

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\right)^2 \widehat{A} &= \left(\widehat{\mathcal{P}_1}^2 - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}^2\right)\left(\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \left(\widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_1}\right)\left(\widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)\right) \\
&= \left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\right)\left(2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right) \\
&= 2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - 2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} \\
&\quad - 2\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + 2\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2} \\
&= \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - 2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2},
\end{aligned}$$

samt ved tilsvarende omskrivning at

$$\widehat{A}\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2 = \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - 2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}.$$

Operatoren $\widehat{U}$ defineres som

$$\widehat{U} = \widehat{B}^{-\frac{1}{2}}\widehat{A},$$

hvor $\widehat{B}$ er på formen

$$\widehat{B} = \widehat{I} - \left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2.$$

Ud fra formen på $\widehat{B}$, ligning (3.13) og antagelsen om at $\left\|\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right\| < 1$ udledes det at

$$\widehat{B}^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k\geq 0}\eta_k\left(\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2\right)^k.$$

Det gælder at $\widehat{A}$ og $\widehat{B}^{-\frac{1}{2}}$ kommuterer, da $\widehat{A}$ kommuterer med $\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2$, hvilket betyder at

$$\widehat{U} = \widehat{B}^{-\frac{1}{2}}\widehat{A} = \widehat{A}\widehat{B}^{-\frac{1}{2}}.$$

Da $\eta_k \in \mathbb{R}$ samt $\widehat{\mathcal{P}_1}$ og $\widehat{\mathcal{P}_2}$ er ortogonalprojektioner, kan den adjungerede af $\widehat{U}$ skrives som

$$\begin{aligned}
\widehat{U}^* &= \widehat{A}^*\left(\sum_{k\geq 0}\eta_k\left(\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2\right)^k\right)^* \\
&= \widehat{A}^*\sum_{k\geq 0}\eta_k\left(\left(\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^*\right)^2\right)^k \\
&= \widehat{A}^*\sum_{k\geq 0}\eta\left(\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2\right)^k = \widehat{A}^*\widehat{B}^{-\frac{1}{2}},
\end{aligned}$$

hvor

$$\widehat{A}^* = \left(\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\right)^* + \left(\widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{Q}_2}\right)^* = \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{Q}_2}\widehat{\mathcal{Q}_1}.$$

Det ses at $\widehat{A}^*$ og $\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2$ kommuterer, eftersom

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2 \widehat{A}^* &= \left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\right)\left(2\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\right) \\
&= 2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1} - 2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} \\
&\quad - 2\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + 2\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} \\
&= \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - 2\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1},
\end{aligned}$$

samt tilsvarende at

$$\widehat{A}^* \left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2 = \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - 2\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\,.$$

Dette medfører at $\widehat{A}^*$ og $\widehat{B}^{-\frac{1}{2}}$ kommuterer, hvilket betyder at

$$\widehat{U}\widehat{U}^* = \widehat{B}^{-\frac{1}{2}}\widehat{A}\widehat{A}^*\widehat{B}^{-\frac{1}{2}} = \widehat{A}\widehat{A}^*\widehat{B}^{-1} \quad \text{og} \quad \widehat{U}^*\widehat{U} = \widehat{A}^*\widehat{A}\widehat{B}^{-1}\,.$$

Det følger at $\widehat{U}$ er en unitær operator, såfremt det gælder at $\widehat{A}^*\widehat{A} = \widehat{A}\widehat{A}^* = \widehat{B}$, hvilket følger af at

$$\begin{aligned}
\widehat{A}^*\widehat{A} &= \left(\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{Q}_2}\widehat{\mathcal{Q}_1}\right)\left(\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{Q}_2}\right) \\
&= \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{Q}_2}\widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{Q}_2} \\
&= \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \left(\widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)\left(\widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_1}\right)\left(\widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right) \\
&= \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \left(\widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\right)\left(\widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right) \\
&= \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{I} - \widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} \\
&= \widehat{I} - \left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2}\right) \\
&= \widehat{I} - \left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2 = \widehat{B}\,.
\end{aligned}$$

Ved tilsvarende omskrivning fås det at $\widehat{A}\widehat{A}^* = \widehat{B}$, og dermed bliver $\widehat{U}^*\widehat{U} = \widehat{U}\widehat{U}^* = \widehat{I}$, så $\widehat{U}$ er en unitær operator. Ydermere gælder det at

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{A}\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2 &= \widehat{\mathcal{P}_1}\left(\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{Q}_1}\widehat{\mathcal{Q}_2}\right)\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2 \\
&= \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\left(\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\right) \\
&= \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1} \\
&= \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} \\
&= \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} + \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} \\
&= \left(\widehat{\mathcal{P}_1} + \widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} - \widehat{\mathcal{P}_2}\widehat{\mathcal{P}_1}\right)\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{\mathcal{P}_2} \\
&= \left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{A}\,,
\end{aligned}$$

så $\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{A}$ og $\left(\widehat{\mathcal{P}_1} - \widehat{\mathcal{P}_2}\right)^2$ kommuterer. Dermed kommuterer $\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{A}$ og $\widehat{B}^{-\frac{1}{2}}$, således at

$$\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{U} = \widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{A}\widehat{B}^{-\frac{1}{2}} = \widehat{B}^{-\frac{1}{2}}\widehat{\mathcal{P}_1}\widehat{A} = \widehat{B}^{-\frac{1}{2}}\widehat{A}\widehat{\mathcal{P}_2} = \widehat{U}\widehat{\mathcal{P}_2}\,,$$

hvorved sætningen er bevist. □

Sætningen medfører, at der eksisterer en unitær operator $\widehat{U_b}$ således at følgende sammenhæng gælder

$$\widehat{\mathcal{P}_b}\widehat{U_b} = \widehat{U_b}\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\,, \tag{3.14}$$

hvor $\widehat{U_b}$ er på formen

$$\begin{aligned}
\widehat{U_b} &= \left(\hat{I} - \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\widehat{\mathcal{P}_b}\widehat{\mathcal{P}_\lambda} + \left(\hat{I} - \widehat{\mathcal{P}_b}\right)\left(\hat{I} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\right) \\
&= \left(\sum_{k\geq 0} \eta_k \left(\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right)^k\right) \left(\widehat{\mathcal{P}_b}\widehat{\mathcal{P}_\lambda} + \left(\hat{I} - \widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda} - \widehat{\mathcal{P}_b}\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\right) \\
&= \left(\sum_{k\geq 0} \eta_k \left(\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right)^k\right) \left(\hat{I} + \widehat{\mathcal{P}_b}\widehat{\mathcal{P}_\lambda} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\widehat{\mathcal{P}_b} - \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right) \\
&= \left(\sum_{k\geq 0} \eta_k \left(\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right)^k\right) \left(\hat{I} + \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\widehat{\mathcal{P}_\lambda} + \widehat{\mathcal{P}_\lambda}^2 - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right) - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}^2 - \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right) \\
&= \left(\sum_{k\geq 0} \eta_k \left(\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right)^k\right) \left(\hat{I} + \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\widehat{\mathcal{P}_\lambda} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right) - \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right). \qquad (3.15)
\end{aligned}$$

Ligning (3.12) og (3.14) medfører at det for egenvektoren $\boldsymbol{\psi}_\lambda$ til $\widehat{H_\lambda}$ gælder at

$$\widehat{U_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda = \widehat{U_b}\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\boldsymbol{\psi}_\lambda = \widehat{\mathcal{P}_b}\widehat{U_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda,$$

hvilket vil sige, at $\widehat{U_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda$ er en egenvektor til $\widehat{H_b}$ med egenværdien E_b omkranset af ξ. Dette medfører at

$$\dim\left(\text{Range}\left(\widehat{\mathcal{P}_b}\right)\right) \geq \dim\left(\text{Range}\left(\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\right).$$

Ligning (3.14) kan omskrives til $\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\widehat{U_b}^* = \widehat{U_b}^*\widehat{\mathcal{P}_b}$, eftersom $\widehat{U_b}$ er unitær, og dermed opfylder at $\widehat{U_b}^{-1} = \widehat{U_b}^*$. Dette medfører at der for egenvektoren $\boldsymbol{\psi}_b$ til $\widehat{H_b}$ med egenværdi E_b tilsvarende gælder at

$$\widehat{U_b}^*\boldsymbol{\psi}_b = \widehat{U_b}^*\widehat{\mathcal{P}_b}\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{b}} = \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\widehat{U_b}^*\boldsymbol{\psi}_b,$$

hvoraf det følger at $\widehat{U_b}^*\boldsymbol{\psi}_b$ er en egenvektor til $\widehat{H_\lambda}$ med tilhørende egenværdi E_λ. Dette betyder at

$$\dim\left(\text{Range}\left(\widehat{\mathcal{P}_b}\right)\right) \leq \dim\left(\text{Range}\left(\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\right).$$

Alt i alt betyder det at billedmængden af de to projektioner har samme dimension. Det vil sige at

$$\dim\left(\text{Range}\left(\widehat{\mathcal{P}_b}\right)\right) = \dim\left(\text{Range}\left(\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\right).$$

Da E_λ er en ikke-degenereret egenværdi for $\widehat{H_\lambda}$ medfører dette, at der er en tilsvarende perturberet, ikke-degenereret egenværdi E_b for $\widehat{H_b}$, hvor egenvektoren kan bestemmes ved $\boldsymbol{\psi}_b = \widehat{U_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda$. Det er nu muligt at vise ligningen fra sætning (3.2), eftersom

$$\begin{aligned}
\left|\left\langle\boldsymbol{\psi}_\lambda, \widehat{H_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\rangle - E_b\right| &= \left|\left\langle\boldsymbol{\psi}_\lambda, \left(\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right)\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\rangle\right| \\
&= \left|\left\langle\boldsymbol{\psi}_\lambda, \left(\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right)\left(\boldsymbol{\psi}_\lambda - \boldsymbol{\psi}_b\right)\right\rangle\right| \\
&= \left|\left\langle\left(\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right)\boldsymbol{\psi}_\lambda, \boldsymbol{\psi}_\lambda - \boldsymbol{\psi}_b\right\rangle\right| \\
&= \left|\left\langle\left(\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right)\left(\boldsymbol{\psi}_\lambda - \boldsymbol{\psi}_b\right), \boldsymbol{\psi}_\lambda - \boldsymbol{\psi}_b\right\rangle\right| \\
&= \left|\left\langle\left(\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right)\left(\hat{I} - \widehat{U_b}\right)\boldsymbol{\psi}_\lambda, \left(\hat{I} - \widehat{U_b}\right)\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\rangle\right| \\
&\leq \left\|\left(\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right)\left(\hat{I} - \widehat{U_b}\right)\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\| \left\|\left(\hat{I} - \widehat{U_b}\right)\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\| \\
&= \left\|\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right\| \left\|\hat{I} - \widehat{U_b}\right\|^2,
\end{aligned}$$

hvor omskrivningen i anden og tredje ligning følger af at E_b tilhører spektrummet af $\widehat{H_b}$ og $\widehat{H_b}$ er selvadjungeret. Hvis der ses på $\widehat{U_b}$'s form fra ligning (3.15) fremgår det, at der for $k \geq 1$ vil være en b-afhængighed for alle leddene. For $k = 0$ bliver $\eta_0 = (1-0)^{-\frac{1}{2}} = 1$, hvilket betyder at

$$\begin{aligned}
\left\|\hat{I} - \widehat{U_b}\right\| &= \left\|\hat{I} - \left(\sum_{k\geq 0} \eta_k \left(\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right)^k\right)\left(\hat{I} + \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\widehat{\mathcal{P}_\lambda} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right) - \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right)\right\| \\
&= \left\|\hat{I} - \hat{I}\left(\hat{I} + \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\widehat{\mathcal{P}_\lambda} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right) - \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right) + \ldots\right\| \\
&= \left\|-\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\widehat{\mathcal{P}_\lambda} + \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right) + \left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2 + \ldots\right\| \\
&\leq \left\|\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right\| + \left\|\widehat{\mathcal{P}_\lambda}\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)\right\| + \left\|\left(\widehat{\mathcal{P}_b} - \widehat{\mathcal{P}_\lambda}\right)^2\right\| + \mathcal{O}(b) \leq C b.
\end{aligned}$$

Da $\widehat{H_b}$ er en eksponentiel, næsten diagonal operator, og dermed begrænset, og da E_b er omkranset af ξ, og dermed endelig, kan en konstant findes således at,

$$\begin{aligned}
\left|\left\langle \boldsymbol{\psi}_\lambda, \widehat{H_b}\boldsymbol{\psi}_\lambda\right\rangle - E_b\right| &\leq \left\|\widehat{H_b} - E_b\hat{I}\right\| \left\|\hat{I} - \widehat{U_b}\right\|^2 \\
&\leq C b^2,
\end{aligned}$$

hvorved sætningen er bevist. □

KAPITEL 4

KONKLUSION

I starten af denne rapport indføres en metode til at beskrive en periodisk krystalstruktur Λ. Det antages at elektronerne tilhørende krystallen er bundet til atomer liggende i de positioner der danner krystalstrukturen, så deres bølgefunktion kan bestemmes ved at tildele en værdi til hver position i strukturen. Disse bølgefunktioner danner grund for et Hilbertrum, kaldet $\ell^2(\Lambda)$, hvor der kan anvendes operatorer på bølgefunktionen for at bestemme elektronens egenskaber. For eksempel bestemmer Hamiltonoperatoren elektronens energi.

Peierls substitutionen indføres, hvor det antages, at en magnetisk perturbation af Hamiltonoperatoren kan beskrives ved at gange en fasefaktor på kernen. Det vil sige

$$H_b(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = e^{ib\varphi(x,y)} H_\lambda(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \, .$$

Resolventmængden for Hamiltonoperatorer der er eksponentielle, næsten diagonale vises, at være stabil under denne perturbation.

Til sidst i rapporten ændres potentialet for en kendt, simpel struktur, svarende til at ændre et af atomerne. Denne ændring vises at tilføje et isoleret punkt i spektrummet, svarende til en ikke-degenereret egenværdi, E_λ. Det bliver vist at denne egenværdi stadig er isoleret og ikke-degenereret efter perturbationen.

Derudover kan der findes en unitær operator $\widehat{U_b}$, hvor den perturberede egenvektor kan bestemmes ved at anvende operatoren på den oprindelige egenvektor. Hvis teorien generaliseres til en degenereret egenværdi, vil perturbationen generere et sæt af egenværdier, hvor deres egenvektorer tilsammen udspænder et underrum af samme dimension som egenvektorerne tilhørende den oprindelige egenværdi. Det bliver vist at den perturberede egenværdi opfylder

$$\left| \langle \boldsymbol{\psi}_\lambda, \widehat{H_b} \boldsymbol{\psi}_\lambda \rangle - E_b \right| \leq C b^2 \, ,$$

hvilket medfører at den kan bestemmes op til b^2-led ved at anvende egenvektoren tilhørende den oprindelige egenværdi.

I det meste af rapporten er der taget udgangspunkt i en simpel kvadratisk krystal med et atom i enhedscellen, hvor energiniveauet er tilpasset således at potentialet for atomerne er lig nul. Dette er gjort for at undgå at formlerne bliver unødvendigt komplicerede, men teorien kan udvides til at gælde for en vilkårlig to- eller tredimensional struktur. Mængden af ændringer i strukturen, i form af udskiftning af atomer, kan også udvides, således at der bliver dannet flere isolerede egenværdier. Denne form for udskiftning af atomer anvendes blandt andet til *doping* af halvledere, hvor halvlederens ledningsevne kan tilpasses efter behov.

Yderligere bliver der i rapporten kun set på interaktioner mellem elektronen og naboatomerne. For at gøre modellen mere præcis vil det med fordel kunne udvides til interaktioner mellem elektronen og de næst-nærmest naboatomer, hvilket vil give en mere avanceret kerne til Hamiltonoperatoren.

Litteratur

Brynildsen, 2011. Mikkel Haggren Brynildsen. *Orbital Magnetism in Graphene-like Materials*, 2011.

Fitzpatrick, 2009. Patrick M. Fitzpatrick. *Advanced Calculus*. ISBN: 978-0-8218-4791-6. American Mathematical Society, 2009.

Hansen, Ottesen, Lund, Thiilborg, Rasmussen, og Ottosen, 2012. Dennis Hansen, Alexander B. Ottesen, Niels Lund, Daniel M. Thiilborg, Jon D. Rasmussen, og Emil S. Ottosen. *Funktionalanalyse: Operatorer i Hilbertrum*, 2012.

Jensen, 2011. Arne Jensen. *A Short Introduction to Comlplex Analysis*, 2011.

Kittel, 2005. Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. ISBN: 978-0-471-41526-8. Wiley, 2005.

Kristensen, 2009. Mette Kristensen. *Analytisk perturbationsteori for lineære operatorer*, 2009.

Phillips, 2009. A. C. Phillips. *Introduction to Quantum Mechanics*. ISBN: 978-0-470-85323-8. Wiley, 2009.

Reed og Simon, 1980. Michal Reed og Barry Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics 1: Functional Analysis*. ISBN: 0-12-585050-6. Academic press, Inc., 1980.

Reed og Simon, 1978. Michal Reed og Barry Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics 4: Analysis of Operators*. ISBN: 0-12-585004-2. Academic press, Inc., 1978.

Saito, Dresselhaus, og Dresselhaus, 1998. R. Saito, G. Dresselhaus, og M. S. Dresselhaus. *Physical properties of carbon nanotubes*. ISBN: 9781860940934. London : Imperial College Press, 1998.

Sohnesen, Sommer, Lund, og Larsen, 2013. Joana Angelica Rodzewicz Sohnesen, Rolf Sommer, Niels Lund, og Anders Larsen. *Modelling electronic properties of Pb(111) thin films*, 2013.

Spiegel, Lipschutz, og Liu, 2009. Murray R. Spiegel, Seymour Lipschutz, og John Liu. *Schaum's outlines: Mathematical Handbook of Formulas and Tables*. ISBN: 978-0-07-154855-7. Wiley, 2009.

APPENDIKS A

NYTTIGE OMSKRIVNING

I dette appendiks fremgår nogle ligninger med bevis, som anvendes til omskrivninger i rapporten.

Det gælder at

$$\left|e^{ix}-1\right| \le |x|\,, \quad \forall x\,. \tag{A.1}$$

Bevis for ligning (A.1)**:**

Ved omskrivning fås

$$e^{ix}-1 = e^{i\frac{x}{2}}\left(e^{i\frac{1}{2}x}-e^{-i\frac{1}{2}x}\right) = 2ie^{i\frac{1}{2}x}\sin\left(\frac{x}{2}\right),$$

og dermed bliver

$$\left|e^{ix}-1\right| = 2\left|\sin\left(\frac{x}{2}\right)\right| \le |x|\,.$$

Hvor uligheden kan vises ved at sætte $f(x) = 2\sin\left(\frac{1}{2}x\right)$ og $g(x) = x$. Det haves at $f(0) = 2\sin(0)$ og $g(0) = 0$, samt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}f(x) &= 2\cdot\frac{1}{2}\cos\left(\frac{x}{2}\right) = \cos\left(\frac{x}{2}\right)\\
\frac{d}{dx}g(x) &= 1 \ge \cos\left(\frac{x}{2}\right),
\end{aligned}$$

hvoraf det følger at $f(x) \le g(x)$ for $x \ge 0$, men da

$$\begin{aligned}
f(x) &= -f(-x)\\
g(x) &= -g(-x)\,,
\end{aligned}$$

medfører dette at

$$\left|f(x)\right| \le \left|g(x)\right|, \quad \forall x\,.$$

Hvoraf ligningen er bevist. □

Yderligere gælder det at

$$\left|e^{x}-1\right| \le |x|\,e^{|x|}\,. \tag{A.2}$$

Bevis for ligning (A.2)**:**

Dette vises for tre situationer, $x < 0$, $x = 0$ og $x > 0$. For $x = 0$ er beviset trivielt, da det gælder at $e^0 - 1 = 0e^0 = 0$.

For $x > 0$ svarer ligning (A.2) til

$$e^x - 1 \leq xe^x .$$

Dette vises ved at sætte

$$f(x) = e^x - 1 - xe^x$$

hvoraf det følger at $f(0) = 0$, samt

$$\frac{d}{dx} f(x) = e^x - e^x - xe^x = -xe^x ,$$

og dermed er $f(x)$ aftagende for $x \geq 0$, hvoraf det følger at $e^x - 1 \leq xe^x$.

For $x < 0$ svarer ligning (A.2) til $1 - e^x \leq -xe^{-x}$, hvilket kan omskrives til

$$1 - e^{-x} \leq xe^x , \quad \text{for } x > 0$$

Dette vises ved at sætte

$$g(x) = 1 - e^{-x} - xe^x$$

hvoraf det følger at $g(0) = 0$, samt

$$\frac{d}{dx} g(x) = e^{-x} - e^x - xe^x = e^{-x} - (1 + x) e^x \leq 0 \text{ for } x \geq 0 .$$

Hvilket medfører at $g(x)$ er aftagende for $x \geq 0$, og dermed gælder det at $1 - e^x \leq -xe^{-x}$ for $x < 0$. Hvilket beviser den sidste situation, og dermed ligningen. $\square$

Det gælder også at

$$\sum_{n \geq 0} e^{-2n} n^N \leq \sum_{n \geq 0} e^{-n} e^{-N} N^N , \quad \text{for } N \geq 0 . \tag{A.3}$$

Bevis for ligning (A.3)**:**

Hvis der tages udgangspunkt i elementerne fra rækken på venstre side af lighedstegnet fås

$$e^{-2n} n^N = e^{-n} \left(e^{-n} n^N \right)$$

Hvis $f(x)$ sættes til

$$f(x) = e^{-x} x^N .$$

Ekstremum af denne funktion findes ved at differentiere og sætte lig 0, så

$$\frac{d}{dx} f(x) = -e^{-x} x^N + N e^{-x} x^{N-1} = 0 ,$$

hvor de to ekstrema er $x = 0$ og $x = N$. For at bestemme hvilke der er maksimum differentieres $f(x)$ igen

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx^2} f(x) &= \frac{d}{dx}\left(-e^{-x} x^N + N e^{-x} x^{N-1}\right) \\ &= e^{-x} x^N - N e^{-x} x^{N-1} - N e^{-x} x^{N-1} + N(N-1) e^{-x} x^{N-2} \\ &= e^{-x} x^N - 2N e^{-x} x^{N-1} + N(N-1) e^{-x} x^{N-2}.\end{aligned}$$

Hvis $x = 0$ indsættes fås

$$\left.\frac{d^2}{dx^2} f(x)\right|_{x=0} = e^{-0} 0^N - 2N e^{-0} 0^{N-1} + N(N-1) e^{-0} 0^{N-2}.$$

Dette er ikke defineret for $N < 2$, og for $N \geq 2$ medfører det at $f(0)$ er en udfladning. Yderligere gælder det for $N \geq 0$ at $f(0) \leq f(N)$, og $x = 0$ er derfor ikke relevant i forhold til det globale maksimum.

For $x = N$ fås der at

$$\begin{aligned}\left.\frac{d^2}{dx^2} f(x)\right|_{x=N} &= e^{-N} N^N - 2N e^{-N} N^{N-1} + N(N-1) e^{-N} N^{N-2} \\ &= e^{-N} N^N - 2e^{-N} N^N + e^{-N} N^N - e^{-N} N^{N-1} \\ &= -e^{-N} N^{N-1} \leq 0,\end{aligned}$$

og dermed er $x = N$ et maksimum for $f(x)$. Dette medfører at

$$e^{-n} n^N \leq e^{-N} N^N,$$

og dermed er ligningen bevist. $\square$