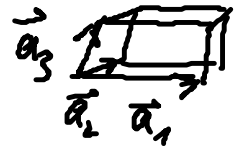


Periodizitätsgebiet: Elementarzelle $N\vec{a}_i$

$$\Omega = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3), \quad V = N^3 \Omega$$



Gittervektor $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$, n_i ganze Zahlen

Basisvektoren des reziproken Gitters: $\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{\Omega} \quad (i, j, k \text{ zyklisch})$

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

reziproker Gittervektor $\vec{G} = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3$ g_j ganze Zahlen

$$\vec{a}_i \cdot \vec{G} = 2\pi g_i; \quad \vec{b}_i \cdot \vec{R} = 2\pi n_i, \quad \vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi(n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3)$$

ebene Welle $\psi(\vec{r}) = f \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\}$; Hilbert-Raum \mathcal{H}
 der über dem Volumen V quadratisch integrierbaren Fktn.

Einteilchen-Näherung: Dichtefunktionaltheorie

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(\vec{r}), \quad v(\vec{r} + \vec{R}) = v(\vec{r})$$

$$H(\vec{r} + \vec{R}) = H(\vec{r}), \quad \text{EWG: } H\psi = E\psi$$

Bloch-Bedingung $\psi_n(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}) = \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{R}\} \psi_n(\vec{k}, \vec{r})$

Bloch-Funktionen $\psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\} u_n(\vec{k}, \vec{r})$

mit $u_n(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}) = u_n(\vec{k}, \vec{r})$

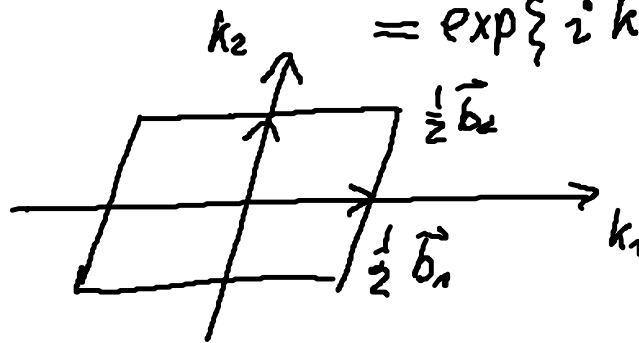
periodische Randbedingungen $N^3 = N_A = L$

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r} + N\vec{a}_j) = \psi_n(\vec{k}, \vec{r})$$

$$\Rightarrow \exp\{i\vec{k} \cdot N\vec{a}_j\} = 1 \Rightarrow \vec{k} \cdot N\vec{a}_j = 2\pi m_j$$

$$\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3 = \frac{m_1}{N} \vec{b}_1 + \frac{m_2}{N} \vec{b}_2 + \frac{m_3}{N} \vec{b}_3$$

$$\begin{aligned} \psi_n(\vec{k} + \vec{G}, \vec{r} + \vec{R}) &= \exp\{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{R}\} \psi_n(\vec{k} + \vec{G}, \vec{r}) \\ &= \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{R}\} \psi_n(\vec{k} + \vec{G}, \vec{r}) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} [c, c^\dagger] &= 1 \\ c^\dagger c &= c c^\dagger - 1 \end{aligned}$$

H0: $c^\dagger c$ $\vec{E}, \vec{B}, \vec{A}; \dots (\dots c + \dots c^\dagger)$

$$[c^\dagger c, c] = c^\dagger c c - c c^\dagger c = -1$$

$$[c^\dagger c, c^\dagger] = +1$$

$$c^\dagger c c^\dagger - c^\dagger c^\dagger c = c^\dagger c c^\dagger - c^\dagger c c^\dagger + 1 = 1$$