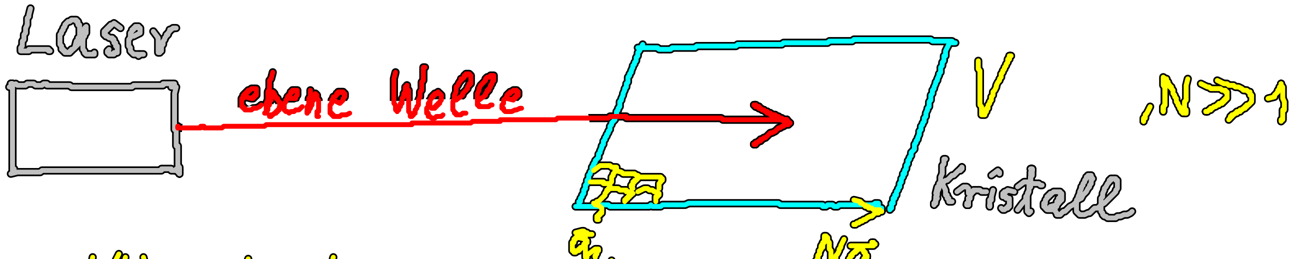
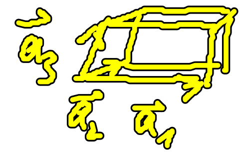


Periodizitätsgebiet: Elementarzelle



$\Omega = (\vec a_1, \vec a_2, \vec a_3)$, $V = N^3 \Omega$

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: $\vec b_i = 2\pi \frac{\vec a_j \times \vec a_k}{\Omega}$; (i,j,k) zyklisch

$\vec a_i \cdot \vec b_j = 2\pi \delta_{ij}$

reziproken Gittervektor $\vec G = g_1 \vec b_1 + g_2 \vec b_2 + g_3 \vec b_3$; g_j ganze Zahlen

$\underline{\vec a_i \cdot \vec G = 2\pi g_i}$; $\vec b_i \cdot \vec R = 2\pi n_i$, $\vec G \cdot \vec R = 2\pi(n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3)$

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 $\quad N^3 = N_A = L$

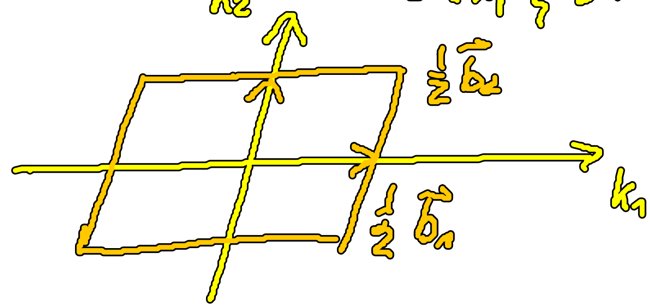
$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r} + N\vec{a}_j) = \psi_n(\vec{k}, \vec{r})$$

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

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

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

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



$$[c, c^+] = 1$$
$$c^+c = cc^+ - 1$$

HO: $\quad c^+c \qquad \vec{E}, \vec{B}, \vec{A}, \; \cdots(\cdots c + \cdots\cdots c^+)$

$$[c^+c, c] = c^+cc - cc^+c = -1$$

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

$$c^+cc^+ - c^+c^+c = c^+cc^+ - c^+cc^+ + 1 = 1$$