

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 38 (1965)
Heft: VI

Artikel: Fastperiodische Potentiale
Autor: Scharf, G.
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-113612>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 15.03.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Fastperiodische Potentiale

von G. Scharf

Institut für Theoretische Physik der Universität, Zürich

(24. V. 65)

Summary. A detailed analysis of the Sturm-Liouville equation with an almost periodic potential is given. By means of spectral-theoretic methods a representation theorem for the solutions is derived, which generalizes FLOQUET's theorem. Two different possibilities may occur. In the first case the form of the solutions is analogous to the Floquet form, in the second case not. The results are then applied to discuss the one-dimensional Schrödinger-problem of an electron moving through a crystal lattice disturbed by lattice vibrations. Different circumstances are found in the two cases. The method also works with Stepanoff almost periodic potentials as is shown in an appendix.

Einleitung

Die fastperiodischen Funktionen sind eine natürliche Verallgemeinerung der periodischen Funktionen. Ihre Untersuchung geht auf H. BOHR zurück. Durch seine grundlegenden Arbeiten und die Resultate von WEYL und BOCHNER liegt eine geschlossene Theorie der (gleichmässig) fastperiodischen Funktionen vor. Auf diese Theorie wird in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich zurückgegriffen.

Obwohl die fastperiodischen Funktionen viele Analogien zu den periodischen aufweisen, gelten die entsprechenden Sätze über lineare Differentialgleichungen mit fastperiodischen Koeffizienten nicht. Das ist nicht überraschend, denn bei Integration können sich fastperiodische Funktionen anders verhalten als periodische. Unter zusätzlichen Bedingungen kann man trotzdem die zum periodischen Fall analogen Resultate erhalten. Solche Sätze beweist schon FAVARD⁹⁾, der lineare inhomogene Systeme von Differentialgleichungen 1. Ordnung untersucht, allerdings unter starken Voraussetzungen über die Koeffizienten. BOCHNER²⁾ betrachtet das homogene System mit ähnlichen Voraussetzungen. In den neueren Arbeiten^{14), 18), 20)} werden zahlreiche Sätze über periodische Koeffizienten auf fastperiodische übertragen, wobei jedoch deren sämtliche Fourier-Exponenten positiv vorausgesetzt werden müssen. Leider sind damit reelle Koeffizienten ausgeschlossen, so dass die physikalischen Bedürfnisse unerfüllt bleiben.

In dieser Arbeit wird das Problem ohne Einschränkungen für die Sturm-Liouville-Gleichung behandelt. Als Hilfsmittel dienen spektraltheoretische Methoden. Im 1. Kapitel werden die wichtigsten Sätze über fastperiodische Funktionen kurz zusammengestellt, die später benötigt werden. Im 2. Kapitel wird das Spektrum der singulären Sturm-Liouville-Operatoren mit fastperiodischem Potential untersucht sowie das oszillatorische Verhalten der Lösungen, das eng damit zusammenhängt. Im 3. Kapitel werden kanonische Formen der Lösungen hergeleitet. Es ergibt sich, dass

stets eine quadratische Form der Fundamentallösungen fastperiodisch ist. Im Spektrum ist diese definit, semidefinit oder ausgeartet, sonst indefinit. Führt man diese Form als unbekannte Funktion ein, so erhält man ein Fundamentalsystem, ausgedrückt durch eine unbekannte (reelle!) Funktion. Die Lösungen haben entweder die der Floquet-Darstellung entsprechende Form oder eine andere, je nach dem Verhalten des Integrals einer fastperiodischen Funktion, das in der Lösungsformel auftaucht. Im ersten Fall befindet man sich noch in «der Nähe» periodischer Funktionen, im zweiten nicht. Das 4. Kapitel enthält Beispiele zu diesen Resultaten.

Als physikalische Anwendung wird im 5. Kapitel das eindimensionale Schrödingerproblem diskutiert, wobei man sich die Bewegung von Elektronen in einem Kristall mit Gitterschwingungen vorstellen kann. Den beiden genannten Fällen entsprechen verschiedene physikalische Verhältnisse. Im ersten Fall findet man ein Verhalten, wie man es von der Blochschen Theorie her kennt: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons in Gebieten der Ausdehnung x ist über das Gitter konstant, ausser etwa Schwankungen über mikroskopische Distanzen, welche beliebig klein werden, wenn man für x Gitter(fast)perioden wählt. Es tritt keine Streuung auf. Im zweiten Fall schwankt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit über makroskopische Distanzen. Es liegt Streuung vor. Für $x \rightarrow \infty$ wächst die Schwankung mit $O(x^{1-\alpha})$, $0 \leq \alpha < 1$, was an die anomalen Dichteschwankungen eines Gases am kritischen Punkt erinnert.

In einem Anhang werden verallgemeinerte fastperiodische Potentiale im Sinne von STEPANOFF kurz behandelt, auf welche sich die Ergebnisse unmittelbar ausdehnen lassen.

Durch die Betrachtung fastperiodischer Potentiale scheint sich ein Zugang zur Theorie gestörter Kristallgitter zu eröffnen, der frei von störungstheoretischen Methoden ist.

Der Verfasser ist Herrn Prof. Dr. A. THELLUNG für zahlreiche Diskussionen zu herzlichem Dank verpflichtet, ferner dem Schweizerischen Nationalfonds für wissenschaftliche Forschung für finanzielle Unterstützung.

1. Fastperiodische Funktionen

In diesem Kapitel sollen die Begriffe und Sätze aus der Theorie der fastperiodischen Funktionen vorangestellt werden, die wir später benötigen. Bezüglich der Beweise und Details verweisen wir auf ¹⁾ und ⁵⁾ oder auf die Originalarbeiten.

Eine Menge von reellen Zahlen heisst relativ dicht, wenn eine Zahl $l > 0$ existiert, so dass jedes Intervall der Länge l mindestens ein Element der Menge enthält. $f(x)$ sei eine stetige komplexe Funktion der reellen Veränderlichen x , $-\infty < x < +\infty$. Eine Zahl τ heisst ε -Translationszahl von $f(x)$ zu $\varepsilon > 0$, wenn $|f(x + \tau) - f(x)| < \varepsilon$ ist, für alle $x \in (-\infty, +\infty)$. $f(x)$ heisst fastperiodisch, wenn die Menge der ε -Translationszahlen $\tau_\varepsilon(f)$ relativ dicht ist, für alle $\varepsilon > 0$. Es existiert also eine Zahl l_ε («Inklusionslänge»), so dass jedes Intervall der Länge l_ε mindestens ein $\tau_\varepsilon(f)$ enthält.

Jede fastperiodische Funktion ist beschränkt und gleichmässig stetig in $-\infty < x < +\infty$. Rationale Rechenoperationen mit fastperiodischen Funktionen führen wieder auf f.p.-Funktionen. Gleichmässig stetige Funktionen von f.p.-Funktionen sind f.p. Eine konvergente Folge von f.p.-Funktionen besitzt einen f.p.-Grenzwert, falls die Konvergenz in $(-\infty, +\infty)$ gleichmässig ist.

Falls die Ableitung einer f. p.-Funktion gleichmässig stetig ist, ist sie fastperiodisch. Das unbestimmte Integral einer f. p.-Funktion ist fastperiodisch, falls es beschränkt ist. Für jede fastperiodische Funktion existiert der Mittelwert

$$M \{f(x)\} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(x) dx$$

und hat die gewöhnlichen Eigenschaften (Linearität, Translationsinvarianz, Monotonie).

Zu jeder fastperiodischen Funktion $f(x)$ gibt es höchstens abzählbar unendlich viele reelle Λ_n , so dass der Mittelwert

$$M_x \{f(x) e^{-i\Lambda_n x}\} = A_n$$

von Null verschieden ist. Die Λ_n sind die Fourier-Exponenten von $f(x)$, die A_n die Fourier-Koeffizienten. Die formal gebildete Reihe

$$f(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i\Lambda_n x}$$

heisst Fourier-Reihe.

Verschiedene f. p.-Funktionen haben verschiedene Fourier-Reihen. Die Fourier-Reihe von Summe, Produkt oder Grenzwert einer gleichmässig konvergenten Folge von f. p.-Funktionen erhält man durch formale Ausführung der betreffenden Operation an der Fourier-Reihe. Die Fourier-Reihe der Ableitung oder des Integrals, sofern diese ebenfalls fastperiodisch sind, entsteht durch gliedweise Differentiation bzw. Integration.

Die Fourier-Koeffizienten erfüllen die Parsevalsche Gleichung:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |A_n|^2 = M \{ |f(x)|^2 \}.$$

Der Hauptsatz der Theorie ist der Approximationssatz: Jede fastperiodische Funktion lässt sich durch endliche trigonometrische Polynome

$$P_\nu(x) = \sum_{n=1}^{N_\nu} a_n^{(\nu)} e^{i\Lambda_n^{(\nu)} x}$$

gleichmässig beliebig genau approximieren. Die $\Lambda_n^{(\nu)}$ sind in den Fourier-Exponenten von $f(x)$ enthalten.

Der Modul einer f. p.-Funktion ist der Modul ihrer Fourier-Exponenten Λ_n , also die Menge der endlichen Linearkombinationen mit ganzen Koeffizienten:

$$\{n_1 \Lambda_1 + \dots + n_m \Lambda_m\} \quad n_1, \dots, n_m \text{ ganz, } m \text{ natürlich.}$$

Von grösster Bedeutung für später ist die Eigenschaft der Normalität:

Satz (1.1): Eine Funktion $f(x)$ ist genau dann fastperiodisch, wenn sie normal ist, das heisst, wenn jede reelle Zahlenfolge h_k eine Teilfolge h_i enthält, so dass $f(x + h_i)$ gleichmässig in $-\infty < x < +\infty$ konvergiert.

Die f. p.-Funktionen $g(x)$, die solche Grenzwerte $g(x) = \lim_{i \rightarrow \infty} f(x + h_i)$ sind, bilden die Hülle $H \{f(x)\}$ von $f(x)$.

Es gilt $H \{g(x)\} = H \{f(x)\}$, das heisst, die Hülle ist durch einen Repräsentanten bestimmt. Offensichtlich gehören alle $f(x + r)$ zu H . Ausser wenn $f(x)$ periodisch ist, liegen jedoch noch andere f. p.-Funktionen in H . Es gilt ein Satz von BOHR³⁾:

Satz (1.2): $g(x)$ gehört genau dann zur Hülle von

$$f(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i A_n x},$$

wenn

$$g(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i A_n h_n^*} e^{i A_n x}$$

ist, wobei

$$A_n h_n^* = \lim_{k \rightarrow \infty} A_n h_k \pmod{2\pi} \quad n = 1, 2, \dots$$

und h_k eine reelle Zahlenfolge ist, so dass die Limites existieren. Es gilt dann:

$$g(x) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x + h_k).$$

Einen weiteren Satz von BOHR⁴⁾, der sich auf den Logarithmus einer f. p.-Funktion bezieht, werden wir später brauchen:

Satz (1.3): Falls

$$f(x) = e^{i\varphi(x)}$$

fastperiodisch ist, ist $\varphi(x)$ von der Form $\varphi(x) = c x + \psi(x)$, c ist die sogenannte Säkularkonstante (wegen der astronomischen Anwendung), $\psi(x)$ ist fastperiodisch.

Zwischen den Fourier-Exponenten und den Translationszahlen besteht ein Zusammenhang:

Satz (1.4):

$$f(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i A_n x}$$

sei fastperiodisch.

Zu jedem $0 < \delta < \pi$ und jedem natürlichen N existiert ein $\varepsilon > 0$, so dass alle ε -Translationszahlen die N Ungleichungen

$$|A_n \tau_\varepsilon| < \delta \pmod{2\pi} \quad n = 1, 2, \dots, N$$

erfüllen.

Als Umkehrung von (1.4) gilt:

Satz (1.5):

$$f(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i A_n x}$$

sei fastperiodisch.

Zu jedem $\varepsilon > 0$ gibt es ein natürliches N und ein $0 < \delta < \pi$ (im allgemeinen nicht die gleichen wie im vorigen Satz), so dass jedes τ , das den N Ungleichungen

$$|A_n \tau| < \delta \pmod{2\pi} \quad n = 1, 2, \dots, N$$

genügt, eine ε -Translationszahl von f ist.

Mit Hilfe dieser Sätze wollen wir eine Invarianz-Definition der Fastperiodizität herleiten:

Satz (1.6): $f(x)$ ist genau dann fastperiodisch mit dem Modul M , wenn

$$\lim_{i \rightarrow \infty} f(x + \tau_i) = f(x)$$

gleichmässig in $-\infty < x < +\infty$ für alle $\{\tau_i\}$ mit

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \Lambda \tau_i = 0 \pmod{2\pi}$$

für alle $\Lambda \in M$ (und die erste Gleichung für andere $\{\tau_i'\}$ nicht gilt). Die Charakterisierung der τ_i ist ausführlich wie folgt zu verstehen: Zu jedem $0 < \delta < \pi$ und N gibt es ein i_0 , so dass

$$|\Lambda_n \tau_i| < \delta \pmod{2\pi} \quad \text{für alle } n = 1, 2, \dots, N, \Lambda_n \in M$$

gilt, falls nur $i > i_0$ ist.

Beweis.

1. Die Notwendigkeit der Bedingung folgt aus Satz (1.5). Sei $f(x)$ fastperiodisch und $\varepsilon = 1/j$. Dann existieren N_j und $0 < \delta_j < \pi$, so dass jedes τ mit

$$|\Lambda_n \tau| < \delta_j \pmod{2\pi} \quad n = 1, 2, \dots, N_j$$

eine $1/j$ -Translationszahl von f ist. Sei jetzt eine Folge τ_i gegeben, so gilt von einer Stelle i_0 an

$$|\Lambda_n \tau_i| < \delta_j \pmod{2\pi} \quad n = 1 \dots N_j.$$

Daraus folgt

$$|f(x + \tau_i) - f(x)| < \frac{1}{j} \quad \text{für } i > i_0, \forall x,$$

und da j beliebig war, die gleichmässige Konvergenz:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} f(x + \tau_i) = f(x).$$

2. Sei jetzt die Bedingung erfüllt. Dann gilt also:

$$|f(x + \tau_i) - f(x)| < \varepsilon$$

für alle x , falls

$$|\Lambda_n \tau_i| < \delta \pmod{2\pi} \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

Die τ_i sind also ε -Translationszahlen, und zu zeigen ist nur noch, dass sie relativ dicht liegen. Das besagt der folgende Satz über simultane diophantische Approximation²²⁾: Seien $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_N$ und $\varepsilon > 0$ gegeben.

Dann gibt es N ganze Zahlen g_1, g_2, \dots, g_N und eine Konstante $C(\varepsilon, N)$, so dass jedes Intervall $T < \tau < T + C$ mindestens eine Lösung der N Ungleichungen

$$|\Lambda_n \tau - g_n| < \varepsilon \quad n = 1, 2, \dots, N$$

enthält.

Auf die Normalitätseigenschaft (1.1) bezieht sich der

Satz (1.7): $f(x)$ sei fastperiodisch. $g(x)$ habe die Eigenschaft, dass für alle $\{h_i\}$, für die $f(x + h_i)$ gleichmässig in $-\infty < x < +\infty$ konvergiert, auch $g(x + h_i)$ gleichmässig in $-\infty < x < +\infty$ konvergiert. Dann ist $g(x)$ fastperiodisch und $\text{Modul}(g) \subseteq \text{Modul}(f)$ ⁸⁾.

Die bisher aufgezählten Eigenschaften der fastperiodischen Funktionen konnten wir aus Analogie zu den periodischen erwarten. Die wesentliche Abweichung von dieser Analogie wollen wir jetzt besprechen, sie tritt beim Integral auf. Wir wissen schon, dass das unbestimmte Integral einer f.p.-Funktion fastperiodisch ist, falls es beschränkt ist. Das ist aber im allgemeinen nicht der Fall. Im Unterschied zu den periodischen Funktionen gibt es fastperiodische Funktionen mit dem Mittelwert 0 (sonst ist die Unbeschränktheit trivial) und unbeschränktem Integral. Ein Beispiel ist:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \cos \frac{x}{n},$$

das wir im 4. Kapitel noch ausführlicher betrachten werden.

Weitere Einsicht in diesen Sachverhalt erhalten wir durch Resultate von FAVARD ⁸⁾.

Satz (1.8): $f(x)$ sei fastperiodisch, $M\{f\} = 0$ und das Integral unbeschränkt. Dann gilt:

$$F(x) = \int_0^x f(t) dt = o(|x|).$$

Es ist jedoch im allgemeinen keine Verschärfung auf $O(|x|^{1-\alpha})$ möglich, mit noch so kleinem positiven α .

Satz (1.9): Falls sich die Fourier-Exponenten von $f(x)$ bei 0 nicht häufen und $M\{f\} = 0$ ist, gilt $\int_0^x f(t) dt \leq C < \infty$ für alle x .

Damit ist klar, weshalb sich die periodischen Funktionen so «harmlos» verhalten. Andererseits verdient der Fall, dass 0 ein Häufungspunkt der Fourier-Exponenten ist, im folgenden ein besonderes Interesse.

Satz (1.10): Besitzt $f(x)$ ein beschränktes f.p.-Integral, so auch jedes $g(x) \in H\{f(x)\}$. Besitzt $f(x)$ ein unbeschränktes Integral, so auch jedes $g \in H\{f\}$.

2. Das Spektrum fastperiodischer Potentiale

Allen folgenden Betrachtungen legen wir den Differentialausdruck

$$l(y) = -y'' + V(x)y \quad (2.1)$$

zugrunde, wobei $V(x)$ reell und fastperiodisch ist. Weitere Voraussetzungen über V werden wir nicht machen.

Da $V(x)$ nach unten beschränkt ist, ist (2.1) bei $+\infty$ und $-\infty$ vom Grenzpunkt – Typ ¹⁶⁾. Infolgedessen definiert (2.1) einen selbstadjungierten Operator L in $L^2(-\infty, +\infty)$, dessen Definitionsbereich aus allen Funktionen $y \in L^2(-\infty, +\infty)$ besteht, für die y und y' absolut stetig und $l(y) \in L^2$ ist. Ausser L werden wir noch die von (2.1) in $L^2(0, +\infty)$ und $L^2(0, -\infty)$ erzeugten Operatoren L^+ und L^- betrachten.

Diese sind nur in einem Randpunkt singulär, für die Selbstadjungiertheit ist deshalb jeweils eine Randbedingung bei 0 nötig. Die Definitionsbereiche sind:

$$L^+ : y \in L^2(0, +\infty) \quad y(0) \cos \alpha + y'(0) \sin \alpha = 0$$

$$L^- : y \in L^2(0, -\infty) \quad y(0) \cos \alpha + y'(0) \sin \alpha = 0$$

mit den gleichen Differenzierbarkeitsvoraussetzungen.

Mit $S = P \cup S'$ bezeichnen wir jeweils das Spektrum dieser Operatoren, P sei das Punktspektrum, S' das kontinuierliche Spektrum. S ist abgeschlossen. Eine oft verwendete elementare Beschreibung des Spektrums stützt sich auf folgenden Satz von HARTMAN und WINTNER¹²⁾:

Satz (2.1): Sei $\limsup_{x \rightarrow +\infty} V(x) < \infty$. Wenn

$$l(y) = E y$$

eine Lösung $y(x)$ besitzt, die für $x \rightarrow +\infty$ beschränkt bleibt, so ist $E \in S'_{L^+}$ oder $y \in L^2(0, \infty)$ (oder beides). Jedoch gilt die Umkehrung hiervon im allgemeinen nicht, so dass trotz $E \in S$ nur unbeschränkte Lösungen auftreten können (vergleiche 4.).

L^+ und L^- definieren eine Zerlegung von L : Sei L' die direkte Summe

$$L' = L^+ \oplus L^-,$$

so ist L eine selbstadjungierte Erweiterung von L' . Daher folgt für die kontinuierlichen Spektren:

$$S'_L = S'_{L^+} \cup S'_{L^-}. \tag{2.2}$$

Da bei fastperiodischen Funktionen $+\infty$ vor $-\infty$ in keiner Weise ausgezeichnet ist, vermuten wir, dass die drei kontinuierlichen Spektren übereinstimmen. Dieser Satz gilt tatsächlich.

Für den Beweis benötigen wir folgenden Satz über die Störung des Spektrums bzw. der Spektralschar^{19) 28)}:

Satz (2.2): A sei ein selbstadjungierter, B ein beschränkter selbstadjungierter Operator. $\Delta = [a, b]$ sei ein reelles Intervall.

A. Das Spektrum S_A von A bestehe im Inneren von Δ aus Eigenwerten mit der Summe der Vielfachheiten $k < \infty$. Der Abstand zwischen Δ und den übrigen Teilen des Spektrums sei grösser als $2 \|B\|$. Dann besteht das Spektrum S_{A+B} von $A + B$ in $[a - \|B\|, b + \|B\|]$ ebenfalls aus Eigenwerten mit Summe der Vielfachheiten k .

B. Ist $\lambda \in S'_A$, so liegt in $[\lambda - \|B\|, \lambda + \|B\|]$ wenigstens ein Punkt von S'_{A+B} .

C. Sei $a, b \notin S_A$ und $d = \text{Min}_{\lambda \in S_A} \{ |a - \lambda|, |b - \lambda| \}$

$$\varrho = \text{Max} \{ |a|, |b| \}, \quad 2 \|B\| \leq \frac{d}{d + \varrho + 1},$$

und seien $P_{\Delta}^{(A)}$ bzw. $P_{\Delta}^{(A+B)}$ die Projektoren der Spektralscharen von A bzw. $A + B$ zum Intervall Δ . Dann gilt:

$$\| P_{\Delta}^{(A+B)} - P_{\Delta}^{(A)} \| \leq \frac{d + \varrho + 1}{d^2} (b - a) \|B\|.$$

Jetzt können wir unseren Satz beweisen:

Satz (2.3): $V(x)$ sei fastperiodisch. Dann gilt $S'_L = S'_{L^+} = S'_{L^-}$, und das Punktspektrum von L ist leer (abgesehen von möglicherweise vorhandenen Eigenwerten, die gleichzeitig in S' liegen).

Beweis. Wir stützen uns auf die Invarianzdefinition der Fastperiodizität (1.6). Wir wählen eine Folge $\varepsilon_i \rightarrow 0$ und zugehörige Translationszahlen τ_i , so dass gilt:

$$V(x + \tau_i) \Rightarrow V(x)$$

(der Doppelpfeil bedeutet gleichmässige Konvergenz in $-\infty < x < +\infty$). Es gilt $\tau_i \rightarrow \pm\infty$ für $i \rightarrow \infty$, ausser wenn $V(x)$ periodisch ist. In diesem Fall gilt der Satz aber ohnehin (vergleiche 4.). Wir beweisen die Behauptung für L^+ und wählen dafür $\tau_i \rightarrow +\infty$.

L^+ ist in $L^2(0, \infty)$ definiert durch:

$$l = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad y(0) \cos \alpha + y'(0) \sin \alpha = 0.$$

S_{L^+} sei das Spektrum, E_n die isolierten Eigenwerte mit zugehörigen Eigenfunktionen $\psi(E_n, x)$, die reell und normiert sein sollen:

$$\int_0^{\infty} [\psi(E_n, x)]^2 dx = 1.$$

Wir definieren den selbstadjungierten Operator $A^{(i)}$ in $L^2(-\tau_i, \infty)$ durch:

$$l^{(i)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x + \tau_i) \quad y(-\tau_i) \cos \alpha + y'(-\tau_i) \sin \alpha = 0.$$

Er besitzt das gleiche Spektrum wie L^+ , weil nur die Variable transformiert wurde. Die Eigenfunktionen sind:

$$\psi^{(i)}(E_n, x) = \psi(E_n, x + \tau_i).$$

Sie sind wegen

$$\int_{-\tau_i}^{\infty} [\psi(E_n, x + \tau_i)]^2 dx = \int_0^{\infty} [\psi(E_n, x)]^2 dx = 1$$

ebenfalls normiert.

Es gilt¹²⁾:

$$\psi^{(i)}(E_n, x) \rightarrow 0 \quad \text{für } i \rightarrow \infty \tag{2.3}$$

gleichmässig in jedem nach unten beschränkten Intervall.

$$B^{(i)} = V(x) - V(x + \tau_i)$$

ist ein selbstadjungierter, beschränkter Operator,

$$\| B^{(i)} \| \leq \varepsilon_i,$$

den wir in $L^2(-\tau_i, \infty)$ betrachten.

Wir bilden den Operator $L^{(i)} = A^{(i)} + B^{(i)}$. Er ist definiert durch:

$$l = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad y(-\tau_i) \cos \alpha + y'(-\tau_i) \sin \alpha = 0. \tag{2.4}$$

Sein Spektrum $S_{L^{(i)}}$ ist gegenüber S_{L^+} ein wenig gestört. Falls $E \in S_{L^+}$ der Randpunkt eines Teiles von S'_{L^+} bzw. ein isolierter Eigenwert ist, so folgt für den entsprechenden Randpunkt bzw. Eigenwert $E^{(i)} \in S_{L^{(i)}}$:

$$E - \varepsilon_i \leq E^{(i)} \leq E + \varepsilon_i. \tag{2.5}$$

l ist bei $-\infty$ vom Grenzpunkt-Typ. Deshalb kann in (2.4) der Grenzübergang $\tau_i \rightarrow \infty$ eindeutig durchgeführt werden, das heisst unabhängig von α und von der Art, wie $\tau_i \rightarrow \infty$ geht²¹). Dabei geht $L^{(i)}$ in L über. Aus (2.5) folgt mit (2.2):

$$S'_{L^+} = S'_L.$$

Die isolierten Eigenwerte gehen in Regularitätspunkte von L über: Sei $\sigma_{jk}^{(i)}(E)$ die Spektralmatrix von $A^{(i)}$. Dann gilt in der Umgebung eines isolierten Eigenwertes E_n mit genügend kleinem δ :

$$\psi^{(i)}(E_n, x) = \sum_k [\sigma_{kk}^{(i)}(E_n + \delta) - \sigma_{kk}^{(i)}(E_n - \delta)]^{1/2} u_k^{(i)}(E_n, x),$$

wobei $u_k^{(i)}(E, x)$ ein Fundamentalsystem von $l^{(i)} y = E y$ ist:

$$\begin{aligned} u_1^{(i)}(E, 0) &= u_2^{(i)'}(E, 0) = 1 \\ u_1^{(i)'}(E, 0) &= u_2^{(i)}(E, 0) = 0. \end{aligned}$$

Für $i \rightarrow \infty$ und festes x folgt wegen (2.3) und Satz (2.2) C für die Spektralmatrix von $L^{(i)}$ und schliesslich von L :

$$\sigma_{kk}(E_n + \delta) - \sigma_{kk}(E_n - \delta) = 0 \quad k = 1, 2$$

und wegen

$$|\sigma_{jk}(\Delta)|^2 \leq \sigma_{jj}(\Delta) \sigma_{kk}(\Delta)$$

auch

$$\sigma_{jk}(E_n + \delta) - \sigma_{jk}(E_n - \delta) = 0,$$

das heisst, E_n ist ein Regularitätspunkt von L .

Wir brauchen also von jetzt an unser Augenmerk nur noch dem kontinuierlichen Spektrum zuzuwenden. Dieses besteht aus einer Folge von abgeschlossenen Intervallen. Es gibt einen kleinsten Wert $E^* \in S'$. Dieser lässt sich nach einem Satz von HARTMANN und PUTNAM¹⁰) folgendermassen charakterisieren:

Wenn die Lösungen von

$$y'' + [E - V(x)] y = 0 \tag{2.6}$$

für

$$E > E^* \quad \text{oszillatorisch}$$

für

$$E < E^* \quad \text{nicht oszillatorisch}$$

sind, dann ist E^* der kleinste Wert in S' .

Eine Lösung heisst oszillatorisch, wenn sie Nullstellen beliebiger Grösse besitzt. Auch hier herrschen bei fastperiodischen Potentialen einfache Verhältnisse:

Satz (2.4): Wenn eine Lösung $y(x)$ von (2.6) zwei Nullstellen hat, so ist sie oszillatorisch, und die Nullstellen liegen relativ dicht.

Beweis. Sei $y(x)$ eine nichttriviale Lösung von (2.6) mit zwei Nullstellen:

$$y(x_0) = y(x_1) = 0.$$

Wir wählen zu $\varepsilon > 0$ eine Translationszahl τ und betrachten die Gleichung

$$y'' + [E - V(x + \tau)] y = 0. \quad (2.7)$$

Sei $y_\tau(x)$ eine Lösung von (2.7) mit

$$y_\tau(x_0) = 0 \quad y'_\tau(x_0) = y'(x_0).$$

Wegen der stetigen Abhängigkeit der Lösung von den Koeffizienten existiert ein $\delta(\varepsilon) > 0$, so dass $y_\tau(x)$ eine Nullstelle innerhalb $x_1 - \delta < x < x_1 + \delta$ besitzt. Dann besitzt $y_\tau(x - \tau)$, welches eine Lösung von (2.6) ist, eine Nullstelle bei $x = x_0 + \tau$ und innerhalb $x_1 + \tau - \delta < x < x_1 + \tau + \delta$. Auf Grund des Sturmischen Trennungssatzes besitzt dann jede Lösung von (2.6) eine Nullstelle innerhalb $x_0 + \tau < x < x_1 + \tau + \delta$. Da die τ beliebig gross sind und relativ dicht liegen, ist das die Behauptung.

Wenn jede nichttriviale Lösung von (2.6) höchstens eine Nullstelle hat, nennt man die Gleichung diskongjugiert. In diesem Fall existiert eine Lösung, die überall positiv ist. Nach unserem Satz sind bei fastperiodischen Potentialen Oszillation und Diskongjugation Alternativen. Im Spektrum haben wir also nur mit oszillatorischen Lösungen zu tun mit Ausnahme des kleinsten Wertes (siehe unten).

Bei dieser Kenntnis können wir auf Oszillations- und Diskongjugations-Kriterien zurückgreifen:

Sei

$$y'' + W(x) y = 0. \quad (2.8)$$

Wenn

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x) dx = \infty,$$

so ist (2.8) oszillatorisch²⁴).

Wenn $W(x) \leq 0$, so ist (2.8) diskongjugiert.

Damit erhalten wir für die Lage von E^* folgendes Resultat:

Sei der Mittelwert $M\{V(x)\} = 0$. Dann liegt der kleinste Wert E^* des Spektrums innerhalb

$$\inf V(x) < E^* \leq 0.$$

Der Diskongjugationsbereich ist abgeschlossen.

Über die weitere Verteilung des Spektrums können noch einige Aussagen gemacht werden. Nach einem Satz von PUTNAM¹⁷) ist die Breite $\Delta(E)$ der offenen Intervalle, die nicht zum Spektrum gehören (gaps), kleiner als:

$$\Delta(E) \leq \sup V(x) - \inf V(x).$$

Sie geht für $E \rightarrow \infty$ gegen Null, wofür asymptotische Ausdrücke bekannt sind¹¹).

Als Letztes betrachten wir das Spektrum von Potentialen, die zur Hülle gehören.

Satz (2.5): Sei $\tilde{V}(x) \in H\{V(x)\}$. Dann haben die zu \tilde{V} gehörenden Operatoren \tilde{L} , \tilde{L}^+ und \tilde{L}^- das gleiche kontinuierliche Spektrum wie L .

Beweis. Sei

$$V(x + h_i) \Rightarrow \tilde{V}(x), \quad i \rightarrow \infty.$$

Die von

$$l^{(i)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x + h_i), \quad i = 1, 2, \dots$$

in $L^2(-\infty, +\infty)$ erzeugten Operatoren sind gleichmässig konvergent gegen \tilde{L} . Weil sie alle das gleiche (kontinuierliche) Spektrum wie L haben, folgt die Behauptung aus Satz (2.2) und Satz (2.3).

3. Die kanonische Form der Lösungen

In diesem Kapitel wenden wir uns der Hauptfrage zu. Wir verwenden dafür die funktionentheoretische Methode von WEYL²³⁾ und TITCHMARSH²¹⁾.

Wir betrachten die Gleichung

$$Y'' + [\lambda - V(x)] Y = 0 \tag{3.1}$$

für komplexe Werte von λ :

$$\lambda = E + i u.$$

Sei $\phi(\lambda, x)$, $\theta(\lambda, x)$ ein Fundamentalsystem, nämlich

$$\begin{aligned} \phi(\lambda, 0) &= \theta'(\lambda, 0) = 1 \\ \phi'(\lambda, 0) &= \theta(\lambda, 0) = 0, \end{aligned} \tag{3.2}$$

so dass

$$W[\phi, \theta] = \phi(\lambda, x) \theta'(\lambda, x) - \phi'(\lambda, x) \theta(\lambda, x) = 1. \tag{3.3}$$

Zunächst beschränken wir uns auf das endliche Intervall $0 \leq x \leq b$ und nehmen zwei selbstadjungierte Randbedingungen an:

$$Y(0) = 0 \tag{3.4}$$

$$Y(b) \cos \beta + Y'(b) \sin \beta = 0. \tag{3.5}$$

$\theta(\lambda, x)$ erfüllt (3.4), wir wählen $l_1(\lambda)$ so, dass

$$\psi^{(b)}(\lambda, x) = \phi(\lambda, x) + l_1(\lambda) \theta(\lambda, x) \tag{3.6}$$

der Randbedingung (3.5) genügt. $l_1(\lambda)$ ist eine meromorphe Funktion, ihre Pole liegen auf der reellen Achse bei den Eigenwerten $E_n^{(b)}$ des gewöhnlichen Sturm-Liouville-Problems (3.1), (3.4), (3.5). $\theta(E_n^{(b)}, x)$ sind die zugehörigen Eigenfunktionen, die noch nicht normiert sind. Die Pole bzw. Eigenwerte sind einfach.

Für zwei Lösungen $F(x)$ und $G(x)$ von (3.1) zu verschiedenen Werten λ und λ' folgt aus der Greenschen Formel die wichtige Beziehung:

$$(\lambda - \lambda') \int_0^b F(x) G(x) dx = W_b[F, G] - W_0[F, G]. \tag{3.7}$$

$W_z[]$ bedeutet stets die Wronski-Determinante an der Stelle z . Wird (3.7) auf $\psi^{(b)}$ angewandt, so folgt:

$$(\lambda - \lambda') \int_0^b \psi^{(b)}(\lambda, x) \psi^{(b)}(\lambda', x) dx = W_b - W_0.$$

Es ist $W_b = 0$, weil beide Funktionen die gleiche Randbedingung bei b erfüllen, und

$$W_0 = l_1(\lambda') - l_1(\lambda),$$

also

$$\int_0^b \psi^{(b)}(\lambda, x) \psi^{(b)}(\lambda', x) dx = \frac{l_1(\lambda) - l_1(\lambda')}{\lambda - \lambda'}. \quad (3.8)$$

Für

$$\lambda = E_m^{(b)} + i u, \quad \lambda' = E_n^{(b)} + i u' \quad \text{und} \quad u, u' \rightarrow 0$$

ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned} \int_0^b \theta(E_m^{(b)}, x) \theta(E_n^{(b)}, x) dx &= \lim_{u, u' \rightarrow 0} \frac{l_1(\lambda) - l_1(\lambda')}{l_1(\lambda) l_1(\lambda') (\lambda - \lambda')} \\ &= \lim_{u, u' \rightarrow 0} \frac{1/l_1(\lambda') - 1/l_1(\lambda)}{\lambda - \lambda'} = - \frac{\delta_{mn}}{\text{Res}_{E_n^{(b)}}(l_1)} = \frac{\delta_{mn}}{r_n}. \end{aligned}$$

Die Normierungskonstanten werden also durch die Residuen von $l_1(\lambda)$ bestimmt. Die normierten Eigenfunktionen zu (3.1), (3.4) und (3.5) sind damit:

$$\psi_n^{(b)} = \sqrt{r_n} \theta(E_n^{(b)}, x). \quad (3.9)$$

Die Greensche Funktion $G^{(b)}(\lambda, x, y)$ des Eigenwertproblems ist:

$$G^{(b)}(\lambda, x, y) = \begin{cases} \theta(\lambda, x) \psi^{(b)}(\lambda, y) & x \leq y \\ \psi^{(b)}(\lambda, x) \theta(\lambda, y) & x \geq y. \end{cases} \quad (3.10)$$

Sie besitzt folgende Entwicklung nach Eigenfunktionen:

$$G^{(b)}(\lambda, x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n^{(b)}(x) \psi_n^{(b)}(y)}{E_n^{(b)} - \lambda}. \quad (3.11)$$

Jetzt gehen wir durch den Grenzübergang $b \rightarrow \infty$ zum singulären Problem über. Da dieses bei $+\infty$ vom Grenzpunkt-Typ sein soll, existiert der Grenzwert

$$l_1(\lambda) \rightarrow m_+(\lambda) \quad \text{für} \quad \text{Im } \lambda \neq 0$$

eindeutig, das heisst unabhängig von β in (3.5). $m_+(\lambda)$ ist eine analytische Funktion von λ , regulär in der oberen (und unteren) Halbebene. Aus (3.6) wird

$$\psi^+(\lambda, x) = \phi(\lambda, x) + m_+(\lambda) \theta(\lambda, x) \in L^2(0, \infty) \quad (3.12)$$

ebenfalls eindeutig, das heisst, (3.12) ist bis auf Faktor die einzige Lösung in $L^2(0, \infty)$ von (3.1). Aus (3.8) ergibt sich für $\lambda' = \lambda^* = E - i u$ wegen $m(\lambda^*) = [m(\lambda)]^*$

$$\int_0^{\infty} |\psi^+(\lambda, x)|^2 dx = \frac{\text{Im } m_+(\lambda)}{u}. \quad (3.13)$$

Die normierte L^2 -Lösung ist also:

$$\psi_+(\lambda, x) = c_+(\lambda) \psi^+(\lambda, x) = \sqrt{\frac{u}{\operatorname{Im} m_+(\lambda)}} \psi^+(\lambda, x). \quad (3.14)$$

Ganz entsprechende Formeln gelten für das endliche Intervall $a \leq x \leq 0$, zum Beispiel

$$\psi^{(a)}(\lambda, x) = \phi(\lambda, x) + l_2(\lambda) \theta(\lambda, x), \quad (3.15)$$

woraus wir für $a \rightarrow -\infty$ eine (bis auf Faktor) eindeutige Lösung in $L^2(0, -\infty)$ erhalten:

$$\psi^-(\lambda, x) = \phi(\lambda, x) + m_-(\lambda) \theta(\lambda, x) \in L^2(0, -\infty).$$

Für diese gilt analog zu (3.13):

$$\int_{-\infty}^0 |\psi^-(\lambda, x)|^2 dx = -\frac{\operatorname{Im} m_-(\lambda)}{u}, \quad (3.16)$$

so dass

$$\psi_-(\lambda, x) = c_-(\lambda) \psi^-(\lambda, x) = \sqrt{-\frac{u}{\operatorname{Im} m_-(\lambda)}} \psi^-(\lambda, x) \quad (3.17)$$

die normierte Lösung ist. Wir berechnen noch die Wronski-Determinante

$$W[\psi_+, \psi_-] = c_+ c_- (m_- - m_+). \quad (3.18)$$

Für das endliche Intervall $a \leq x \leq b$ schliesslich ist die Greensche Funktion $G^{(a,b)}(\lambda, x, y)$ aus (3.6) und (3.15) zu bilden. Wir erhalten:

$$G^{(a,b)}(\lambda, x, y) = \begin{cases} \frac{\psi^{(a)}(\lambda, x) \psi^{(b)}(\lambda, y)}{W[\psi^{(b)}, \psi^{(a)}]} & x \leq y \\ \frac{\psi^{(b)}(\lambda, x) \psi^{(a)}(\lambda, y)}{W[\psi^{(b)}, \psi^{(a)}]} & x \geq y. \end{cases} \quad (3.19)$$

Die Entwicklung nach Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ bezüglich des Intervalls $[a, b]$ lautet:

$$G^{(a,b)}(\lambda, x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n(x) \psi_n(y)}{E_n - \lambda}. \quad (3.20)$$

Durch den Grenzübergang $a \rightarrow -\infty, b \rightarrow +\infty$ gehen wir zum zweifach singulären Eigenwertproblem über, dessen Greensche Funktion $G(\lambda, x, y)$ nach (3.18) und (3.19) die Form hat:

$$G(\lambda, x, y) = \begin{cases} \frac{\psi_-(\lambda, x) \psi_+(\lambda, y)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} \frac{1}{c_+ c_-} = \frac{\psi^-(\lambda, x) \psi^+(\lambda, y)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} & x \leq y \\ \frac{\psi_+(\lambda, x) \psi_-(\lambda, y)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} \frac{1}{c_+ c_-} = \frac{\psi^+(\lambda, x) \psi^-(\lambda, y)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} & x \geq y. \end{cases} \quad (3.21)$$

Diese Funktion wird bei den folgenden Überlegungen eine wichtige Rolle spielen. Weil $m_+(\lambda) \neq m_-(\lambda)$ ist (sonst wäre λ ein Eigenwert des zweifach singulären Problems), ist $G(\lambda, x, y)$ regulär in der oberen (und unteren) Halbebene. Auf der reellen Achse treten Singularitäten auf. Wir müssen das asymptotische Verhalten für $u \rightarrow 0$ untersuchen.

Dazu gehen wir von der Parsevalschen Gleichung für $G^{(a,b)}$ aus, nach (3.20) gilt:

$$\begin{aligned} \int_a^b |G^{(a,b)}(\lambda, x, y)|^2 dy &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n^2(x)}{|E_n - E - i u|^2} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n^2(x)}{(E - E_n)^2 + u^2}. \end{aligned}$$

Für festes E' und E'' und festes x ergibt sich:

$$\int_{E'}^{E''} dE \int_a^b dy |G^{(a,b)}(\lambda, x, y)|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^2(x) \int_{E'}^{E''} \frac{dE}{(E - E_n)^2 + u^2}.$$

Sei jetzt $-M \leq E' < E'' \leq +M$, $M \geq 1$, dann können wir abschätzen:

für $|E_n| \geq 2M$:

$$\int_{E'}^{E''} \frac{dE}{(E - E_n)^2 + u^2} \leq \int_{E'}^{E''} \frac{dE}{(1/2 E_n)^2 + u^2} \leq \frac{8M}{E_n^2} \leq \frac{16M}{E_n^2 + 1},$$

für $|E_n| < 2M$:

$$\int_{E'}^{E''} \frac{dE}{(E - E_n)^2 + u^2} \leq \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{(E - E_n)^2 + u^2} = \frac{\pi}{u} \leq \frac{\pi}{u} \frac{4M^2 + 1}{E_n^2 + 1}.$$

Also gilt:

$$\begin{aligned} \int_{E'}^{E''} dE \int_a^b dy |G^{(a,b)}|^2 &= O \left\{ \frac{1}{u} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n^2(x)}{E_n^2 + 1} \right\} \\ &= O \left\{ \frac{1}{u} \int_a^b dy |G^{(a,b)}(i, x, y)|^2 \right\} \\ &= O \{ u^{-1} \} \quad \text{für } u \rightarrow 0 \end{aligned}$$

gleichmässig in a, b bei festem E', E'', x .

Deshalb gilt auch:

$$\int_{E'}^{E''} dE \int_{-\infty}^{+\infty} dy |G(\lambda, x, y)|^2 = O(u^{-1})$$

und daher

$$\int_{E'}^{E''} dE |G(\lambda, x, y)| = O(u^{-1/2}) \tag{3.22}$$

mit Ausnahme höchstens einer Menge von y -Werten beliebig kleinen Masses. Ausführlich ist für $x \leq y$:

$$\begin{aligned} G(\lambda, x, y) &= \frac{1}{m_- - m_+} [\phi(\lambda, x) \phi(\lambda, y)] \\ &+ \frac{m_-}{m_- - m_+} [\theta(\lambda, x) \phi(\lambda, y)] + \frac{m_+}{m_- - m_+} [\phi(\lambda, x) \theta(\lambda, y)] \\ &+ \frac{m_- m_+}{m_- - m_+} [\theta(\lambda, x) \theta(\lambda, y)]. \end{aligned} \tag{3.23}$$

Die Fundamentallösungen gehen bei festem x bzw. y für $u \rightarrow 0$ gegen wohlbestimmte reelle Werte. Da (3.22) für beliebiges x und y (dem Mass nach) gilt, erfüllen die (eventuell singulären) Koeffizienten in (3.23) einzeln:

$$\int_{E'}^{E''} dE \left| \frac{1}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} \right| = O(u^{-1/2}) \quad (3.24)$$

$$\int_{E'}^{E''} dE \left| \frac{m_-(\lambda)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} \right| = O(u^{-1/2}) \quad (3.25)$$

$$\int_{E'}^{E''} dE \left| \frac{m_+(\lambda)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} \right| = O(u^{-1/2}) \quad (3.26)$$

und

$$\int_{E'}^{E''} dE \left| \frac{m_+(\lambda) m_-(\lambda)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} \right| = O(u^{-1/2}). \quad (3.27)$$

Diese Koeffizienten bilden die charakteristische Matrix M_{jk} :

$$\begin{aligned} M_{11}(\lambda) &= \frac{1}{m_- - m_+} & M_{22}(\lambda) &= \frac{m_+ m_-}{m_- - m_+} \\ M_{12}(\lambda) &= M_{21}(\lambda) = \frac{1}{2} \frac{m_+ + m_-}{m_- - m_+}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Ihre Imaginärteile sind für $u \rightarrow 0$ nicht singulär sondern streben gegen die Elemente σ_{jk} der Spektralmatrix:

$$\begin{aligned} \sigma_{jk}(\Delta) &= \frac{1}{\pi} \lim_{u \rightarrow 0} \int_{\Delta} \text{Im } M_{jk}(E + i u) dE \\ \Delta &= [E', E'']. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Nach diesen Vorbereitungen können wir fastperiodische Potentiale betrachten. Wir verwenden dabei die bereits von FAVARD benutzte Normalitätseigenschaft der fastperiodischen Funktionen (Sätze 1.1 und 1.7).

Satz (3.1): Die Greensche Funktion auf der Diagonalen

$$\begin{aligned} G(\lambda, x, x) &= \frac{\psi^+(\lambda, x) \psi^-(\lambda, x)}{m_-(\lambda) - m_+(\lambda)} \\ &= M_{11}(\lambda) \phi^2(\lambda, x) + 2 M_{12} \phi \theta + M_{22} \theta^2 \end{aligned} \quad (3.30)$$

ist fastperiodisch für $\text{Im } \lambda \neq 0$.

Beweis. A. Wir wissen (3.14, 3.17), dass die Gleichung

$$y'' + [\lambda - V(x)] y = 0 \quad (3.31)$$

genau eine normierte Lösung in $L^2(0, \infty)$ und eine solche in $L^2(-\infty, 0)$ besitzt:

$$\psi_+(\lambda, x) = c_+(\lambda) \psi^+(\lambda, x) \in L^2(0, \infty) \quad (3.32)$$

$$\psi_-(\lambda, x) = c_-(\lambda) \psi^-(\lambda, x) \in L^2(-\infty, 0). \quad (3.33)$$

Diese sind linear unabhängig.

Sei $\{h_i\}$ eine beliebige reelle Zahlenfolge, so dass

$$V(x + h_i) \Rightarrow \tilde{V}(x) \in H\{V(x)\} \quad (3.34)$$

(der Doppelpfeil bedeutet stets gleichmässige Konvergenz in $-\infty < x < +\infty$).

Auch die Gleichung

$$y'' + [\lambda - \tilde{V}(x)] y = 0$$

besitzt eindeutig die beiden normierten L^2 -Lösungen $\tilde{\psi}_+(\lambda, x)$ und $\tilde{\psi}_-(\lambda, x)$. Wegen der Eindeutigkeit gilt:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_+(\lambda, x) &= \lim_{i \rightarrow \infty} c_{\lambda+}(h_i) \psi^+(\lambda, x + h_i) \in L^2(0, \infty) \\ \tilde{\psi}_-(\lambda, x) &= \lim_{i \rightarrow \infty} c_{\lambda-}(h_i) \psi^-(\lambda, x + h_i) \in L^2(-\infty, 0) \end{aligned} \quad (3.35)$$

gleichmässig in jedem *endlichen* x -Intervall. Aus (3.35) sieht man, dass, falls zum Beispiel $h_i \rightarrow \infty$ geht, $c_{\lambda+}(h_i) \rightarrow \infty$ $c_{\lambda-}(h_i) \rightarrow 0$ gehen muss, damit die Normierung erhalten bleibt. Die Art, wie die Normierungskonstanten wachsen bzw. abnehmen, ist abhängig von der speziellen Wahl der Folge $\{h_i\}$ in (3.34). Wir bilden die Wronski-Determinante der (linear unabhängigen) Lösungen (3.35):

$$W[\tilde{\psi}_+, \tilde{\psi}_-] = \lim_{i \rightarrow \infty} \{c_{\lambda+}(h_i) c_{\lambda-}(h_i) W[\psi^+, \psi^-]\}.$$

Wegen der Konstanz der Wronski-Determinante folgt:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \{c_{\lambda+}(h_i) c_{\lambda-}(h_i)\} = \frac{W[\tilde{\psi}_+, \tilde{\psi}_-]}{W[\psi^+, \psi^-]} = \frac{1}{\tilde{w}} = \text{konst.}$$

Die Konstante ist nur von $\tilde{V}(x)$ abhängig, nicht aber von der speziellen Wahl der Folge $\{h_i\}$. Deshalb konvergiert

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \{\psi^+(\lambda, x + h_i) \psi^-(\lambda, x + h_i)\} = \tilde{w} \tilde{\psi}_+(\lambda, x) \psi_-(\lambda, x) \quad (3.36)$$

unabhängig von der speziellen Wahl der $\{h_i\}$ gleichmässig in jedem endlichen x -Intervall.

B. Wir zeigen jetzt indirekt, dass die Konvergenz in (3.36) gleichmässig in $-\infty < x < +\infty$ ist. Dann haben wir nach Satz (1.1) bewiesen, dass $\psi^+(\lambda, x) \psi^-(\lambda, x)$ fastperiodisch ist.

Wäre (3.36) nicht gleichmässig konvergent in $(-\infty, +\infty)$, so existierten zwei Teilfolgen k_i und k'_i von h_i und eine Folge x_i , so dass

$$|\psi^+(\lambda, x_i + k_i) \psi^-(\lambda, x_i + k_i) - \psi^+(\lambda, x_i + k'_i) \psi^-(\lambda, x_i + k'_i)| \geq \delta > 0 \quad (3.37)$$

für alle i . Aus diesen Teilfolgen könnten wir wegen der Normalität von $V(x)$ bzw. $\tilde{V}(x)$ Teilfolgen k_j , k'_j und x_j auswählen, so dass

$$\begin{array}{l} V(x + x_j + k_j) \\ V(x + x_j + k'_j) \end{array} \begin{array}{l} \Rightarrow \\ \Rightarrow \end{array} \tilde{V}(x + x_j) \Rightarrow \tilde{V}(x) \in H\{V(x)\}.$$

Auf die Gleichung mit $\tilde{V}(x)$ und die zugehörigen L^2 -Lösungen könnten wir die Schlüsse unter A noch einmal anwenden und erhielten das (3.36) entsprechende Resultat:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \{\psi^+(\lambda, x + x_j + k_j) \psi^-(\lambda, x + x_j + k_j)\} = \tilde{w} \tilde{\psi}_+(\lambda, x) \tilde{\psi}_-(\lambda, x) \tag{3.38}$$

gleichmässig in jedem endlichen x -Intervall und unabhängig von der speziellen Wahl der k_j, x_j , also auch

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \{\psi^+(\lambda, x + x_j + k'_j) \psi^-(\lambda, x + x_j + k'_j)\} = \tilde{w} \tilde{\psi}_+(\lambda, x) \tilde{\psi}_-(\lambda, x) . \tag{3.39}$$

Für $x = 0$ bilden die beiden letzten Gleichungen einen Widerspruch zu (3.37).

Also ist $\psi^+(\lambda, x) \psi^-(\lambda, x)$ fastperiodisch und damit auch $G(\lambda, x, x)$.

Nach Satz (1.7) haben wir gleichzeitig bewiesen, dass

$$\text{Modul } G(\lambda, x, x) \subseteq \text{Modul } V(x) . \tag{3.40}$$

Später werden wir sehen, dass sogar $=$ gilt.

Wir interessieren uns jetzt für reelle $\lambda = E$. Dabei sind die Fälle, dass E im Spektrum liegt oder nicht im Spektrum liegt, zu unterscheiden.

Satz (3.2): Sei $E \notin S'$. Dann ist eine nicht ausgeartete, hyperbolische quadratische Form der Fundamentallösungen fastperiodisch.

Beweis. Dieser Satz kann genauso bewiesen werden wie der vorige. Wegen der folgenden Überlegungen geben wir noch einen anderen Beweis. Nach Satz (3.1) konvergiert

$$G(\lambda, x + h_i, x + h_i) \Rightarrow \tilde{G}(\lambda, x, x) \tag{3.41}$$

gleichmässig in $-\infty < x < +\infty$. Nach Satz (2.5) ist $E \notin S'_L$, wobei \tilde{L} der zu $\tilde{V}(x)$ gehörende selbstadjungierte Operator ist. Also sind G und \tilde{G} für $\lambda = E$ regulär. Daher existieren Grenzwerte für $u \rightarrow 0$ in (3.41):

$$\begin{aligned} & \lim_{u \rightarrow 0} \lim_{i \rightarrow \infty} G(E + i u, x + h_i, x + h_i) \\ &= \lim_{i \rightarrow \infty} \lim_{u \rightarrow 0} G(E + i u, x + h_i, x + h_i) \\ &= \lim_{i \rightarrow \infty} G(E, x + h_i, x + h_i) = \tilde{G}(E, x, x) \end{aligned} \tag{3.42}$$

gleichmässig in jedem endlichen x -Intervall. Die Grenzübergänge sind vertauschbar, weil die Lösungen bzw. G stetig von dem zweidimensionalen Parameter (λ, h_i) abhängen. Wegen der Unabhängigkeit von der speziellen Wahl der $\{h_i\}$ schliessen wir wie in Satz (3.1) B indirekt auf:

$$G(E, x + h_i, x + h_i) \Rightarrow \tilde{G}(E, x, x) .$$

Das bedeutet Fastperiodizität von

$$G(E, x, x) = M_{11}(E) \phi^2 + 2 M_{12}(E) \phi \theta + M_{22}(E) \theta^2 . \tag{3.43}$$

Setzen wir die Werte aus (3.28) ein und untersuchen die Diskriminante, so folgt aus

$$\frac{m_+ m_-}{(m_- - m_+)^2} < \frac{1}{4} \frac{(m_+ + m_-)^2}{(m_- - m_+)^2} ,$$

dass die Form (3.43) hyperbolisch ist (wir sagen absichtlich nicht «indefinit», weil (3.43) im Diskonjugationsbereich positiv ist).

$$m_+(E) = m_-(E)$$

ist ausgeschlossen, weil keine diskreten Eigenwerte auftreten (Satz 2.3).

Satz (3.3): Sei $E \in S'$. Dann ist eine quadratische Form der Fundamentallösungen fastperiodisch, die elliptisch, parabolisch oder ausgeartet sein kann.

Beweis. Vor dem Grenzübergang $u \rightarrow 0$ bilden wir jetzt in (3.41) den Imaginärteil:

$$\operatorname{Im} G(\lambda, x + h_i, x + h_i) \Rightarrow \operatorname{Im} \tilde{G}(\lambda, x, x). \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} G &= \operatorname{Im} M_{11} \operatorname{Re} \phi^2 + 2 \operatorname{Im} M_{12} \operatorname{Re} (\phi \theta) \\ &\quad + \operatorname{Im} M_{22} \operatorname{Re} \theta^2 + \operatorname{Re} M_{11} \operatorname{Im} \phi^2 \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} M_{12} \operatorname{Im} (\phi \theta) + \operatorname{Re} M_{22} \operatorname{Im} \theta^2. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Für $u \rightarrow 0$ gehen ϕ^2 , θ^2 und $\phi \theta$ gegen reelle Werte. Deshalb gehen ihre Imaginärteile mit $O(u)$ gegen Null. Berücksichtigen wir die asymptotischen Resultate (3.24) bis (3.27), so ergibt sich, dass nach Integration $\int_{E'}^{E''} dE$ die 3 letzten Terme in (3.45) mit $O(u^{1/2})$ gegen Null gehen. In den 3 ersten Termen treten die Elemente der Spektralmatrix auf (3.29). Durch Vertauschen der Grenzübergänge folgt aus (3.44):

$$\begin{aligned} \lim_{i \rightarrow \infty} \int_{E'}^{E''} \{ \phi^2(E, x + h_i) d\sigma_{11}(E) + 2 \phi \theta d\sigma_{12}(E) \\ + \theta^2(E, x + h_i) d\sigma_{22}(E) \} &= \int_{E'}^{E''} \{ \tilde{\phi}^2(E, x) d\tilde{\sigma}_{11}(E) \\ + 2 \tilde{\phi} \tilde{\theta} d\tilde{\sigma}_{12}(E) + \tilde{\theta}^2(E, x) d\tilde{\sigma}_{22}(E) \} \end{aligned} \quad (3.46)$$

gleichmässig in jedem endlichen x -Intervall, E' , E'' fest. Wieder ergibt sich indirekt wie in Satz (3.1) B die Gleichmässigkeit in $-\infty < x < +\infty$. Fast überall (in E) existiert die quadratische Form:

$$f(E, x) = \frac{d\sigma_{11}}{dE} \phi^2 + 2 \frac{d\sigma_{12}}{dE} \phi \theta + \frac{d\sigma_{22}}{dE} \theta^2, \quad (3.47)$$

die somit fastperiodisch ist. Auf der ausgeschlossenen Nullmenge können Ausartungen auftreten.

Wir müssen noch die Diskriminante von (3.47) untersuchen. Aus

$$\begin{aligned} A &= \lim_{u \rightarrow 0} \operatorname{Im} \frac{1}{m_- - m_+} = \lim_{u \rightarrow 0} \frac{\operatorname{Im} m_+ - \operatorname{Im} m_-}{|m_- - m_+|^2} \\ B &= \lim_{u \rightarrow 0} \operatorname{Im} \frac{1}{2} \frac{m_+ + m_-}{m_- - m_+} = \lim_{u \rightarrow 0} \frac{\operatorname{Im} m_+ \operatorname{Re} m_- - \operatorname{Re} m_+ \operatorname{Im} m_-}{|m_- - m_+|^2} \\ C &= \lim_{u \rightarrow 0} \operatorname{Im} \frac{m_+ m_-}{m_- - m_+} = \lim_{u \rightarrow 0} \frac{|m_-|^2 \operatorname{Im} m_+ - |m_+|^2 \operatorname{Im} m_-}{|m_- - m_+|^2} \end{aligned}$$

erhalten wir:

$$A C - B^2 = - \lim_{u \rightarrow 0} \frac{\operatorname{Im} m_+ \operatorname{Im} m_-}{|m_- - m_+|^2} \geq 0$$

wegen (3.13) und (3.16). Daher ist die Form (3.47) elliptisch, parabolisch oder ausgeartet.

Nach diesen Ergebnissen ist es nun sehr leicht, Fundamentalsysteme für die Differentialgleichung zu gewinnen. Dabei tritt die jeweils fastperiodische quadratische Form als unbekannte Funktion auf. Diese Darstellung der Lösungen entspricht dann vollständig der Floquetschen Darstellung im Falle periodischer Koeffizienten und geht in diese bei periodischem $V(x)$ über.

1. Hyperbolisch-diskonjugierter Fall

Wir wählen die Lösungen $y_1(x)$ und $y_2(x)$ so, dass die hyperbolische Form die Gestalt

$$y_1(x) y_2(x) = F(x) \quad (3.48)$$

annimmt. $F(x)$ kann wegen der Diskonjugiertheit (Satz 2.4) höchstens zweimal das Vorzeichen wechseln. Käme das jedoch einmal vor, so wegen der Fastperiodizität von $F(x)$ unendlich oft. Also ist $F(x) \geq 0$ oder $F(x) \leq 0$ für alle x . Fügen wir zu (3.48) noch die Gleichung

$$y_1(x) y_2'(x) - y_1'(x) y_2(x) = 2\alpha \quad (3.49)$$

hinzu, so lässt sich das System elementar integrieren. Wir schreiben $F(x) = \varphi^2(x)$ und erhalten:

$$y_1(x) = \varphi(x) e^{-\alpha \int (dt/\varphi^2)} \quad y_2(x) = \varphi(x) e^{\alpha \int (dt/\varphi^2)}. \quad (3.50)$$

Darin ist $\varphi(x)$ oder α bis auf einen Faktor unbestimmt, denn die charakteristischen Exponenten

$$\lambda_k = \limsup_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \log |y_k(x)| \quad k = 1, 2$$

sind fest:

$$\lambda_1 = -\alpha M \left\{ \frac{1}{\varphi^2} \right\} < 0 \quad \lambda_2 = \alpha M \left\{ \frac{1}{\varphi^2} \right\} > 0. \quad (3.51)$$

Wenn $V(x)$ periodisch ist, ist auch $\varphi(x)$ periodisch, weil Modul $V(x) \supseteq$ Modul (φ^2) . Dann ist

$$\pm \alpha \int \frac{dt}{\varphi^2} = \pm \lambda x + \text{periodische Funktion},$$

und wir erhalten die Floquet-Darstellung.

2. Hyperbolisch-oszillatorischer Fall

In diesem Fall wechselt $F(x)$ unendlich oft das Vorzeichen. Aus (3.48) und (3.49) erhalten wir jetzt:

$$\begin{aligned} y_1(x) &= \pm \sqrt{|F(x)|} e^{-\alpha \int (dt/F)} & y_1 &> 0 \\ & & y_1 &< 0 \\ y_2(x) &= \pm \sqrt{|F(x)|} e^{\alpha \int (dt/F)} & y_2 &> 0 \\ & & y_2 &< 0. \end{aligned} \quad (3.52)$$

3. Elliptischer Fall

Jetzt ergeben sich aus

$$y_1^2(x) + y_2^2(x) = \varphi^2(x) \quad (3.53)$$

$$y_1 y_2' - y_1' y_2 = k \quad (3.54)$$

die Fundamentallösungen:

$$y_1(x) = \varphi(x) \cos k \int \frac{dt}{\varphi^2} \quad y_2(x) = \varphi(x) \sin k \int \frac{dt}{\varphi^2}. \quad (3.55)$$

Hierin ist wieder $\varphi(x)$ oder k bis auf einen Faktor unbestimmt. Setzen wir etwa

$$M\left\{\frac{1}{\varphi^2}\right\} = 1,$$

so ist k durch (3.54) festgelegt. Damit haben wir die Funktion $E(k)$ definiert.

Wir gehen zu einem Potential der Hülle $\tilde{V}(x) \in H\{V(x)\}$ über und zeigen

Satz (3.4): Sei

$$V(x + h_i) \Rightarrow \tilde{V}(x), \text{ dann folgt } \varphi(x + h_i) \Rightarrow \tilde{\varphi}(x),$$

und die Funktion $E(k)$ ist für $V(x)$ und $\tilde{V}(x)$ die gleiche.

Die erste Behauptung ist die Gleichung (3.46), die zweite folgt dann aus (3.53) und (3.54), weil Wronski-Determinante und Mittelwert translations-invariant sind und alle Grenzübergänge kommutieren.

4. Parabolischer Fall

In diesem Fall ist eine Lösung fastperiodisch, die zweite nicht:

$$y_1 = \pm \sqrt{|F|} \quad y_2 = \pm \sqrt{|F|} \int \frac{dt}{F}. \quad (3.56)$$

Dieser Fall tritt in der Hillschen Differentialgleichung in den Randpunkten des Spektrums auf.

Eine letzte Bemerkung machen wir über die Moduln. Nach unseren Schlüssen und Satz (1.7) ist der Modul von $F(x)$ bzw. $\varphi(x)$ enthalten im Modul von $V(x)$. Andererseits können wir umgekehrt $V(x)$ durch diese Funktionen ausdrücken:

$$V(x) - E = \begin{cases} \frac{\varphi''}{\varphi} + \frac{\alpha^2}{\varphi^4} \\ \frac{\varphi''}{\varphi} - \frac{k^2}{\varphi^4} \end{cases}.$$

Daraus folgt:

$$\text{Modul } (V) \subseteq \text{Modul } (\varphi).$$

Also sind die Moduln gleich:

$$\text{Modul } (V) = \text{Modul } (\varphi). \quad (3.57)$$

4. Beispiele

Die Resultate des vorigen Kapitels sollen an zwei Beispielen demonstriert werden, die zwei extrem entgegengesetzte Möglichkeiten repräsentieren: Als erstes betrachten wir ein periodisches, als zweites ein pathologisch fastperiodisches Potential.

Im Fall des periodischen Potentials kann man die Spektralzerlegung explizit herstellen. Daher können die wesentlichen Sätze (3.2) und (3.3) über die fastperiodischen quadratischen Formen unabhängig vom vorigen Kapitel verifiziert werden.

Wir betrachten

$$y'' + [\lambda - V(x)] y = 0 \quad (4.1)$$

mit periodischem $V(x)$:

$$V(x + d) = V(x) \quad (4.2)$$

und komplexem $\lambda = E + i u$. Wir wählen zwei Fundamentallösungen mit

$$\begin{aligned} y_1(\lambda, 0) &= y_2'(\lambda, 0) = 1 \\ y_1'(\lambda, 0) &= y_2(\lambda, 0) = 0 \end{aligned} \quad W[y_1, y_2] = 1. \quad (4.3)$$

Bei Translation um d gehen diese Lösungen wieder in Lösungen von (4.1) über:

$$\begin{aligned} y_1(\lambda, x + d) &= \alpha_{11}(\lambda) y_1(\lambda, x) + \alpha_{12}(\lambda) y_2(\lambda, x) \\ y_2(\lambda, x + d) &= \alpha_{21}(\lambda) y_1(\lambda, x) + \alpha_{22}(\lambda) y_2(\lambda, x). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Aus der Translationsinvarianz der Wronski-Determinante folgt

$$\det(\alpha_{ik}) = 1 \quad (4.5)$$

und weil $V(x)$ reell ist

$$\alpha_{ik}(\lambda^*) = [\alpha_{ik}(\lambda)]^*. \quad (4.6)$$

Wir wollen die Eigenelemente der linearen Transformation (4.4) bestimmen. Die charakteristische Gleichung

$$a^2 - 2s a + 1 = 0 \quad 2s = \alpha_{11} + \alpha_{22} \quad (4.7)$$

besitzt die Lösungen

$$\begin{aligned} a_{1,2} &= s \pm \sqrt{s^2 - 1} & a_1 + a_2 &= 2s \\ & & a_1 a_2 &= 1. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Ausser wenn s reell ist und

$$s^2 - 1 \leq 0, \quad (4.9)$$

was nur für Werte von λ im Spektrum der Fall ist (vergleiche unten), gilt folgende Unterscheidung der Eigenwerte (4.8) nach der Grösse ihres Betrages:

$$|a_+| > 1, \quad |a_-| < 1. \quad (4.10)$$

Die zugehörigen Eigenlösungen sind:

$$y_{\pm} = y_1 + m_{1,2}(\lambda) y_2 \quad (4.11)$$

mit

$$y_{\pm}(\lambda, x + d) = a_{\pm}(\lambda) y_{\pm}(\lambda, x) \quad (4.12)$$

und

$$m_{1;2} = \frac{a_{1;2} - \alpha_{11}}{\alpha_{21}}. \quad (4.13)$$

Aus (4.10) und (4.12) schliessen wir:

$$\begin{aligned} y_+(\lambda, x) &= y_1 + m_1(\lambda) y_2 \in L^2(0, -\infty) \\ y_-(\lambda, x) &= y_1 + m_2(\lambda) y_2 \in L^2(0, +\infty) \end{aligned} \quad (4.14)$$

und daher

$$m_+(\lambda) = m_2 = \frac{a_- - \alpha_{11}}{\alpha_{21}}, \quad m_-(\lambda) = m_1 = \frac{a_+ - \alpha_{11}}{\alpha_{21}}. \quad (4.15)$$

Damit erhalten wir die charakteristische Matrix:

$$\begin{aligned} M_{11}(\lambda) &= \frac{1}{m_- - m_+} = \frac{\alpha_{21}}{a_+ - a_-} = \frac{\alpha_{21}}{2\sqrt{s^2 - 1}} \\ M_{12}(\lambda) = M_{21}(\lambda) &= \frac{1}{2} \frac{m_+ + m_-}{m_- - m_+} = \frac{\alpha_{22} - \alpha_{11}}{4\sqrt{s^2 - 1}} \\ M_{22}(\lambda) &= \frac{m_+ m_-}{m_- - m_+} = -\frac{\alpha_{12}}{2\sqrt{s^2 - 1}}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Wir sehen, dass die Bedingung (4.9) das Spektrum charakterisiert. Aus der Theorie der Hillschen Differentialgleichung weiss man¹³⁾, dass (4.9) für eine Sequenz abgeschlossener Intervalle

$$E_0 \leq E \leq E_1, E_2 \leq E \leq E_3, \dots$$

gilt. Dann ist

$$\sqrt{s^2 - 1} = (-1)^{n+1} i \sqrt{1 - s^2} \text{ für } E_{2n} \leq E \leq E_{2n+1}, \quad (4.17)$$

und wir bekommen aus (4.16) die Spektralmatrix:

$$\frac{d\sigma}{dE} = \frac{(-1)^{n+1}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{1 - s^2}} \begin{pmatrix} 2\alpha_{21} & \alpha_{22} - \alpha_{11} \\ \alpha_{22} - \alpha_{11} & -2\alpha_{12} \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Es liegt ein rein kontinuierliches Spektrum vor. n ist der Bandindex.

Jetzt wollen wir die periodischen quadratischen Formen bestimmen und beginnen mit dem hyperbolischen Fall. Falls $E \notin S$ ist, setzen wir $a_{\pm} = e^{\pm\alpha}$ und erhalten aus (4.11) und (4.12):

$$y_{\pm} = e^{\pm\alpha x} u_{\pm}(x) = y_1 + m_{\mp} y_2.$$

$u_{\pm}(x)$ sind periodisch. Dann ist

$$y_+ y_- = (y_1 + m_- y_2)(y_1 + m_+ y_2) = y_1^2 + (m_+ + m_-) y_1 y_2 + m_+ m_- y_2^2$$

periodisch, und ebenso

$$\frac{y_+ y_-}{m_- - m_+} = M_{11} y_1^2 + 2 M_{12} y_1 y_2 + M_{22} y_2^2$$

in Übereinstimmung mit Satz (3.2) und Gleichung (3.43). Falls $E \in S$ ist, setzen wir $a_{1;2} = e^{\pm ik}$ und erhalten

$$y_{\pm} = e^{\pm ikx} u_{\pm}(x) = y_1 + m_{1;2} y_2. \quad (4.19)$$

$u_{\pm}(x)$ sind periodisch. Jetzt ist der Betrag von (4.19) periodisch, also

$$\begin{aligned} (\operatorname{Re} y_+)^2 + (\operatorname{Im} y_+)^2 &= (y_1 + \operatorname{Re} m_1 y_2)^2 + (\operatorname{Im} m_1 y_2)^2 \\ &= y_1^2 + \frac{\alpha_{22} - \alpha_{11}}{\alpha_{21}} y_1 y_2 - \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{21}} y_2^2. \end{aligned}$$

Multiplizieren wir noch mit

$$\frac{(-1)^{n+1}}{4\pi} \frac{2\alpha_{21}}{\sqrt{1-s^2}},$$

so ist dieses gerade

$$f(E, x) = \frac{d\sigma_{11}}{dE} y_1^2 + 2 \frac{d\sigma_{12}}{dE} y_1 y_2 + \frac{d\sigma_{22}}{dE} y_2^2$$

in Übereinstimmung mit Satz (3.3) und Gleichung (3.47). Damit sind die allgemeinen Sätze für periodische Potentiale verifiziert.

Das zweite Beispiel soll auf die Besonderheiten hinweisen, die auftreten können, wenn 0 Häufungspunkt des Moduls von $V(x)$ ist. Wir gehen von der Funktion

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \cos \frac{x}{n} \quad (4.20)$$

aus. Weil

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \quad (4.21)$$

eine Majorante ist, ist (4.20) fastperiodisch. Der Mittelwert ist:

$$M \{f(x)\} = 0. \quad (4.22)$$

Wir können (4.20) wegen der gleichmässigen Konvergenz gliedweise integrieren und erhalten:

$$F(x) = \int_0^x f(t) dt = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin \frac{x}{n}, \quad (4.23)$$

gleichmässig konvergent in jedem endlichen Intervall. Jedoch konvergiert (4.23) nicht gleichmässig in $-\infty < x < +\infty$, $F(x)$ ist für $x \rightarrow \infty$ unbeschränkt:

$$\limsup_{x \rightarrow \infty} F(x) = +\infty, \quad \liminf_{x \rightarrow \infty} F(x) = -\infty \quad (4.24)$$

und folglich nicht fastperiodisch.

Um das einzusehen, betrachten wir eine Teilsumme

$$F_N(x) = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} \sin \frac{x}{n} \quad \text{mit } N = 4m + 1. \quad (4.25)$$

Jeder Summand in (4.25) ist periodisch mit der Periode $2\pi n$, $F_N(x)$ ebenfalls mit der Periode

$$P_N = 2\pi [1, 2, \dots, N], \quad (4.26)$$

wobei $[1, 2, \dots, N]$ das kleinste gemeinsame Vielfache der Zahlen $1, 2, \dots, N$ ist. In einem x -Intervall der Länge P_N wird jede mögliche Lage der Perioden der einzelnen Summanden relativ zueinander genau einmal eingenommen. Für die Summanden mit $n = 4\nu + 1$, $\nu = 0, 1, \dots, m$ existieren Stellen $x = \pi/2 (4\mu + 1)$, so dass zum Beispiel

die Maxima koinzidieren. Unter diesen Koinzidenzstellen gibt es mindestens eine x_0 , an der alle übrigen Summanden positiv sind. Dort ist

$$F_N(x_0) > \sum_{\nu=0}^m \frac{1}{4\nu+1} > \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{m+1} \frac{1}{n},$$

was für $N \rightarrow \infty$ wie die harmonische Reihe divergiert.

Aus (4.20) bilden wir

$$g(x) = 2 \sum_1^{\infty} \frac{1}{n^2} \cos \frac{x}{n} + \frac{\pi^2}{3} = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} e^{i(x/n)} + \frac{\pi^2}{3} > 0 \quad (4.27)$$

und setzen

$$\frac{1}{\varphi^2} = g(x) \quad (4.28)$$

$$V(x) - E = \frac{\varphi''}{\varphi} + \frac{\alpha^2}{\varphi^4}. \quad (4.29)$$

Nach der Parsevalschen Gleichung ist

$$M \left\{ \frac{1}{\varphi^4} \right\} = 2 \sum_1^{\infty} \frac{1}{n^4} + \frac{\pi^4}{9} = \frac{6}{45} \pi^4$$

und durch partielle Integration:

$$M \left\{ \frac{\varphi''}{\varphi} \right\} = M \left\{ \frac{\varphi'^2}{\varphi^2} \right\} > 0. \quad (4.30)$$

Weil $V(x)$ den Mittelwert 0 haben soll, ergibt sich aus (4.29):

$$-E = M \left\{ \frac{\varphi'^2}{\varphi^2} \right\} + \frac{6}{45} \pi^4 \alpha^2 \quad (4.31)$$

und

$$\alpha^2 = -\frac{45}{6\pi^4} \left[E + M \left\{ \frac{\varphi'^2}{\varphi^2} \right\} \right]. \quad (4.32)$$

Durch die Gleichungen (4.27), (4.28), (4.29), (4.32) ist unser Potential bestimmt:

$$V(x) = \alpha^2 g^2 + \frac{3g'^2 - 2gg''}{4g^2} + E. \quad (4.33)$$

Nun können wir zu den einzelnen Fällen Beispiele geben:

1. Hyperbolischer Fall

Sei

$$E < -M \left\{ \frac{\varphi'^2}{\varphi^2} \right\},$$

so ist nach (4.32) α reell, und die Lösungen lauten:

$$y_1(x) = \frac{1}{\sqrt{g}} e^{\alpha \int g dt} \quad y_2(x) = \frac{1}{\sqrt{g}} e^{-\alpha \int g dt}.$$

Sie sind diskonguiert, und es existiert keine Lösung der Form

$$e^{\alpha x} u(x)$$

mit fastperiodischem $u(x)$.

2. Elliptischer Fall

Sei

$$E > -M \left\{ \frac{\varphi'^2}{\varphi^2} \right\},$$

so ist $\alpha = i k$, und die Lösungen sind:

$$y_1(x) = \frac{1}{\sqrt{g}} \cos k \int^x g dt \quad y_2(x) = \frac{1}{\sqrt{g}} \sin k \int^x g dt.$$

Es existiert keine Lösung der Form

$$e^{i k x} u(x)$$

mit fastperiodischem $u(x)$.

3. Parabolischer Fall

Sei

$$E = -M \left\{ \frac{\varphi'^2}{\varphi^2} \right\},$$

so lauten die Lösungen:

$$y_1(x) = \varphi = \frac{1}{\sqrt{g}} > 0 \quad y_2(x) = \varphi \int^x \frac{dt}{\varphi^2} = \frac{1}{\sqrt{g}} \int^x g dt.$$

$y_1(x)$ ist fastperiodisch, $y_2(x)$ ist unbeschränkt. Der parabolische Fall bildet hier in gewissem Sinn den Übergang vom hyperbolischen zum elliptischen. Dass dieses nicht immer so ist, zeigt das folgende Beispiel.

4. Ausgearteter Fall

Wir wählen:

$$V(x) = f'(x) + f^2(x) - \frac{1}{2} \zeta \quad (4)$$

und

$$E = -\frac{1}{2} \sum_1^{\infty} \frac{1}{n^4} = -\frac{\pi^4}{180}.$$

Eine Lösung ist dann

$$y_1(x) = e^{\int f(t) dt} = e^{F(x)} > 0.$$

Sie ist diskonjugiert und unbeschränkt. Weil andererseits der charakteristische Exponent

$$\limsup_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \log |y_1(x)| = M \{f(x)\} = 0$$

ist, folgt, dass E der kleinste Wert $E \in S'$ ist (3.51). Die zweite Fundamentallösung lautet:

$$y_2(x) = y_1 \int^x \frac{dt}{y_1^2}.$$

Sie ist ebenfalls unbeschränkt. Es existiert keine beschränkte Lösung, denn wäre $y(x)$ eine solche, so müsste auch $y'(x)$ beschränkt sein¹²⁾. Dann wäre wegen (4.24) aber

$$\liminf_{x \rightarrow \infty} [y_1 y' - y_1' y] = 0.$$

Das ist unmöglich, weil die Wronski-Determinante konstant ist.

Die Umkehrung von Satz (2.1) gilt also im allgemeinen nicht.

5. Physikalische Diskussion

Als Anwendung unserer Resultate wollen wir die Bewegung eines Elektrons in einem fastperiodischen Potential

$$V(r) = \sum_k A_k e^{i A_k r} + k k. \quad (5.1)$$

untersuchen ($k k$ bedeutet den konjugiert komplexen Ausdruck). Das System sei unendlich gedacht. Wenn der Modul von $V(r)$ diskret ist, liegt ein periodisches «Supergitter» vor, und wir erhalten die Blochsche Theorie. Diese spezielle Möglichkeit ist stets mit eingeschlossen, doch liegt unser Interesse beim allgemeinen Fall: Wenn $V(r)$ wenigstens zwei rational unabhängige Fourier-Exponenten besitzt, ist der Modul überall dicht. Das wollen wir annehmen.

Simultan mit (5.1) betrachten wir die Hülle:

$$H \{V(r)\} = \{\tilde{V}(r)\}. \quad (5.2)$$

Nach Satz (1.2) ist das ein Ensemble von Potentialen

$$\tilde{V}(r) = \sum_k A_k e^{i \delta_k} e^{i A_k r} + k k. \quad (5.3)$$

mit

$$\delta_k = \lim_{i \rightarrow \infty} A_k h_i \pmod{2\pi}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.4)$$

wobei $\{h_i\}$ irgendeine reelle Zahlenfolge ist, so dass (5.4) existiert. Das bedeutet stochastische Phasen δ_k in (5.3) in folgendem Sinn: Wir wählen eine Basis der $\{A_k\}$, das heisst, eine endliche oder abzählbar unendliche Menge

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\nu, \dots \quad (5.5)$$

von linear unabhängigen λ_ν , so dass jedes A_k als endliche Linearkombination

$$A_k = r_{k1} \lambda_1 + r_{k2} \lambda_2 + \dots + r_{km_k} \lambda_{m_k} \quad (5.6)$$

mit rationalen r_{kj} dargestellt werden kann. Nach dem Kroneckerschen Approximationssatz müssen die Phasen δ_k in (5.4) dann folgendermassen gewählt werden: Die Phasen $\delta^{(i)}$ zu den linear unabhängigen λ_j sind unabhängige stochastische Variable (wir nehmen zum Beispiel Gleichverteilung mod 2π an), die Phase eines linear abhängigen Fourier-Exponenten (5.6) ist:

$$\delta_k = r_{k1} \delta^{(1)} + r_{k2} \delta^{(2)} + \dots + r_{km_k} \delta^{(m_k)}. \quad (5.7)$$

Harmonische sind kohärent. Nach den Sätzen (2.5) und (3.4) sind das Spektrum und die Funktion $E(k)$ für alle Potentiale der Hülle die gleichen, das heisst unabhängig von den stochastischen Variablen. Das System besitzt also gut definierte Zustände.

Um zu veranschaulichen, wie dieses Modell auf reale Verhältnisse zutreffen kann, betrachten wir ein Kristallgitter, dessen Ionen Temperaturschwingungen ausführen. Als Potential können wir dann ansetzen:

$$V(r, t) = V_0(r) + \sum_k C_k e^{i A_k r - i \omega_k t} + k k. \quad (5.8)$$

$V_0(r)$ ist das ungestörte periodische Potential, ω_k und Λ_k sind Phononfrequenzen beziehungsweise -wellenzahlen. Um ein zeitunabhängiges Potential zu bekommen, setzen wir:

$$t = t_0 + \frac{r}{v_F}. \quad (5.9)$$

v_F ist die Fermigeschwindigkeit. Dann erhalten wir das folgende Pseudopotential

$$V(r) = V_0(r) + \sum_k C_k e^{-i\omega_k t_0} e^{i\Lambda'_k r} + k k \quad (5.10)$$

mit linear unabhängigen $\Lambda'_k = \Lambda_k - \omega_k/v_F$. Die klassische Gleichung (5.9) und das Pseudopotential (5.10) sind dann gerechtfertigt, wenn wir ein Wellenpaket so konstruieren können, dass (a) das Elektron an der Fermigrenze einen Impuls kleiner relativer Unschärfe besitzt und (b) das Pseudopotential innerhalb des Wellenpakets angenähert mit dem wirklichen Potential (5.8) übereinstimmt. (a) ist der Fall, wenn wir ein Wellenpaket der räumlichen Ausdehnung l so wählen, dass

$$m v_F \gg \hbar \Delta k \sim \frac{\hbar}{l}$$

oder

$$E_F \gg \frac{\hbar}{\tau}, \quad (5.11)$$

wo $\tau = l/v_F$ die Durchgangszeit des Wellenpakets durch einen festen Raumpunkt bedeutet. (b) ist erfüllt, wenn

$$\omega_k \tau \ll 1.$$

Beides lässt sich befriedigen, wenn τ so gewählt werden kann, dass

$$\frac{\hbar}{E_F} \ll \tau \ll \frac{1}{\omega_k}.$$

Das ist in der Tat möglich, weil für Phononen die $1/\omega_k$ mindestens von der Grössenordnung 10^{-13} sec sind und andererseits in typischen Metallen, die wir im Auge haben, $\hbar/E_F \sim 10^{-15} - 10^{-16}$ sec beträgt.

Unserer Diskussion legen wir die Lösungen (3.55) zugrunde:

$$y_1(x) = \varphi(x) \cos k \int \frac{dt}{\varphi^2}, \quad y_2(x) = \varphi(x) \sin k \int \frac{dt}{\varphi^2}. \quad (5.12)$$

Wir setzen

$$M \left\{ \frac{1}{\varphi^2} \right\} = 1, \quad (5.13)$$

damit k eindeutig bestimmt ist. $\varphi(x)$ ist eine fastperiodische Funktion mit dem Modul des Gitters. Weil

$$\varphi^2(x) = y_1^2(x) + y_2^2(x)$$

ist, gilt

$$k \int \frac{dt}{\varphi^2} = \pi N(x), \quad (5.14)$$

wobei $N(x)$ die Zahl der Nullstellen einer reellen Lösung von der unteren Grenze an bis x bedeutet. $N(x)$ ist also die Verteilungsfunktion der Nullstellen, die durch (5.14) noch sinnvoll interpoliert ist.

Nach dem Sturmschen Vergleichssatz nimmt die Zahl der Nullstellen in einem festen endlichen Intervall monoton mit E zu. Daraus folgt wegen (5.13), dass k monoton mit E wächst. Die natürliche Beschreibungsweise für Elektronen (im Gegensatz zu Phononen) ist demnach das ausgedehnte Zonenschema.

Wir bilden jetzt aus (5.12) die komplexen Lösungen:

$$\psi_k(x) = \varphi_k e^{i k \int_0^x (dt/\varphi_k^2)} \quad \psi_k^*(x) = \varphi_k e^{-i k \int_0^x (dt/\varphi_k^2)}. \quad (5.15)$$

Ihr Betrag ist fastperiodisch, er ist durch (5.13) noch nicht normiert, denn nach der Schwarzschen Ungleichung gilt:

$$M \{ |\psi_k|^2 \} > \frac{1}{M \{ 1/\varphi_k^2 \}} = 1. \quad (5.16)$$

Der Modul von $\varphi_k(x)$ ist überall dicht. Daher ist Null ein Häufungspunkt, und wir müssen mit zwei verschiedenen Möglichkeiten rechnen, von denen bei einem diskreten Modul nur eine vorhanden ist.

Im einen Fall kann $\psi_k(x)$ fastperiodisch sein. Nach Satz (1.3) ist dafür notwendig und hinreichend, dass

$$k \int_0^x \frac{dt}{\varphi_k^2} = k x + f(x) \quad (5.17)$$

gilt, wobei $f(x)$ eine fastperiodische Funktion mit dem Mittelwert 0 ist. Es muss also $\int_0^x (dt/\varphi_k^2) - x$ beschränkt sein. $\psi_k(x)$ hat dann die Form

$$\psi_k(x) = u_k(x) e^{i k x}. \quad (5.18)$$

$u_k(x)$ ist fastperiodisch, komplex. Die Nullstellenzahl, von 0 an gezählt, ist:

$$\pi N(x) = k x + O(1), \quad (5.19)$$

ihre relative Schwankung ist normal: $\Delta N/N = O(N^{-1})$. Eine konstante Nullstellendichte ist für ebene Wellen und (bis auf mikroskopische Schwankung) für Blochlösungen charakteristisch und deutet auf konstante Aufenthaltswahrscheinlichkeit hin. Wir werden sehen, dass die Lösungen (5.18) sich ebenso verhalten, und nennen diesen Fall s-Fall.

Im anderen Fall (n-Fall) ist $\psi_k(x)$ nicht fastperiodisch. Dann muss $\int_0^x (dt/\varphi_k^2) - x$ unbeschränkt sein. Nach Satz (1.8) gilt für die Nullstellenzahl:

$$\pi N(x) = k x + O(x^{1-\alpha}), \quad 0 \leq \alpha < 1. \quad (5.20)$$

Ihre Schwankung ist unbeschränkt: $\Delta N = O(N^{1-\alpha})$.

Wir schreiben die Lösungen (5.15) in der Form

$$\psi_k(r) = A_k(r) e^{i k r}, \quad A_k(r) = \varphi_k(r) e^{i k \int_0^r ((1/\varphi_k^2) - 1) dt} \quad (5.21)$$

und berechnen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Zustand k für das Gebiet $0 \dots X$. Dazu wird die Schrödinger-Gleichung für ψ_k

$$\frac{\partial^2 \psi_k}{\partial r^2} + \frac{2 m}{\hbar^2} [E_k - V(r)] \psi_k = 0 \quad (5.23)$$

nach k differenziert

$$\frac{2m}{\hbar^2} \psi_k \frac{dE}{dk} = - \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\partial \psi_k}{\partial k} - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \frac{\partial \psi_k}{\partial k}$$

und (5.21) eingesetzt:

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} \psi_k \frac{dE}{dk} &= - 2i \frac{\partial \psi_k}{\partial r} - i r \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left(e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \frac{\partial \psi_k}{\partial k} \\ &= - 2i \frac{\partial \psi_k}{\partial r} + i \frac{2m}{\hbar^2} r (E - V) \psi_k - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \frac{\partial \psi_k}{\partial k} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left(e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \right) \\ &= - 2i \frac{\partial \psi_k}{\partial r} - \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \right] \left(e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \right). \end{aligned} \quad (5.24)$$

1. 2. 3.

Diese Gleichung multiplizieren wir mit ψ_k^* und integrieren über r von 0 bis x . Der erste Term rechts liefert:

$$- 2i \int_0^x \psi_k^* \frac{\partial \psi_k}{\partial r} dr = - i \int_0^x \left(\psi_k^* \frac{\partial \psi_k}{\partial r} - \psi_k \frac{\partial \psi_k^*}{\partial r} \right) dr - i \varphi_k^2 \Big|_0^x = 2kx - i \varphi_k^2 \Big|_0^x.$$

Der zweite Term in (5.24) wird zweimal partiell integriert:

$$\begin{aligned} & \int_0^x \psi_k^* \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left(e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \right) dr \\ &= \left[\psi_k^* \frac{\partial}{\partial r} \left(e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \right) - e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \frac{\partial \psi_k^*}{\partial r} \right]_0^x + \int_0^x dr e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \frac{\partial^2 \psi_k^*}{\partial r^2}. \end{aligned}$$

4. 5.

Beim Einsetzen addieren sich der 3. und 5. Term zu Null, weil ψ_k^* die Schrödinger-Gleichung erfüllt:

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{dE}{dk} \int_0^x |\psi_k|^2 dr &= 2kx - i \varphi_k^2 \Big|_0^x \\ &- \left[\psi_k^* \frac{\partial}{\partial r} \left(e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \right) - e^{ikr} \frac{\partial A_k}{\partial k} \frac{\partial \psi_k^*}{\partial r} \right]_0^x. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Die Klammer ergibt ausgerechnet:

$$[] = 2ik A_k^* \frac{\partial A_k}{\partial k} + A_k^* \frac{\partial^2 A_k}{\partial r \partial k} - \frac{\partial A_k}{\partial k} \frac{\partial A_k^*}{\partial r}. \quad (5.26)$$

Falls $A_k(r)$ periodisch ist, gibt sie keinen Beitrag, sofern x ein Vielfaches der Gitterperiode ist. Wir setzen den Wert für $A_k(r)$ aus (5.21) ein und erhalten, indem wir alles ausrechnen:

$$\begin{aligned} []_0^x &= - 2k \int_0^x \left(\frac{1}{\varphi_k^2} - 1 \right) dr - 2k^2 \frac{\partial}{\partial k} \int_0^x \left(\frac{1}{\varphi_k^2} - 1 \right) dr \\ &- \left[i \varphi_k^2 - \varphi_k \frac{\partial^2 \varphi_k}{\partial r \partial k} + \frac{\partial \varphi_k}{\partial r} \frac{\partial \varphi_k}{\partial k} \right]_0^x. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Das Auftreten der Integrale ist wesentlich.

Insgesamt erhalten wir aus (5.25):

$$\int_0^x |\psi_k|^2 dr = \frac{\hbar^2 k}{m} \frac{dk}{dE} \left\{ \underset{1.}{x} + \int_0^x \left(\frac{1}{\varphi_k^2} - 1 \right) dr \right. \\ \left. + k \frac{\partial}{\partial k} \int_0^x \left(\frac{1}{\varphi_k^2} - 1 \right) dr + \frac{1}{2k} \left[\frac{\partial \varphi_k}{\partial r} \frac{\partial \varphi_k}{\partial k} - \varphi_k \frac{\partial^2 \varphi_k}{\partial r \partial k} \right]_0^x \right\}. \quad (5.28)$$

3. 4.

x ist der Hauptterm, die Integrale bestimmen die Fallunterscheidung, der 4. Term ist stets fastperiodisch.

Im s -Fall sind nach (5.17) alle Terme ausser x fastperiodisch. Es existieren also relativ dichte Translationszahlen beliebiger Güte. Wählen wir für x eine Folge von ε -Translationszahlen τ_i , so ist:

$$\int_0^{\tau_i} |\psi_k|^2 dr = M \{ \varphi_k^2 \} (\tau_i + \delta), \quad |\delta| \leq \varepsilon \quad (5.29)$$

$i=1, 2, \dots$

ε kann durch geeignete Wahl der τ_i beliebig klein gemacht werden. Weil die τ_i relativ dicht liegen, besitzen sie einen wohlbestimmten mittleren Abstand a , der als mikroskopische Grösse anzusehen ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dann bis auf Schwankung über Distanzen der Grössenordnung a über das Gitter konstant.

Im n -Fall sind die Integrale in (5.28) nicht fastperiodisch. Dann gibt es keine relativ dichten Translationszahlen, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit schwankt über makroskopische Distanzen. Für $x \rightarrow \infty$ nimmt die Schwankung im Gegensatz zum s -Fall unbeschränkt zu (Satz 1.8):

$$\int_0^x |\psi_k|^2 dr = M \{ \varphi_k^2 \} x + O(x^{1-\alpha}) \quad (5.30)$$

$0 \leq \alpha < 1.$

Ein weiterer Unterschied zwischen s - und n -Fall zeigt sich bei Betrachtung der Streuung am f.p.-Potential. Wir wählen als Anfangszustand ein normiertes Wellenpaket $\varphi(r, 0)$ und entwickeln nach Eigenfunktionen ψ_E des zum f.p.-Potential gehörenden Hamiltonoperators:

$$\varphi(r) = \int (\psi_E, \varphi) \psi_E(r) d\sigma(E), \quad t = 0.$$

Wir wollen die Impulsübertragung bei dieser Wechselwirkung untersuchen. Deshalb bilden wir den Erwartungswert des Impulses zur Zeit t :

$$\langle \varphi_t | P | \varphi_t \rangle = \int (\psi_E, \varphi)^* (\psi_{E'}, \varphi) e^{-i(\hbar)^{-1}(E' - E)t} \psi_E^* P \psi_{E'} dr d\sigma(E) d\sigma(E') \quad (5.31)$$

und fragen, wann dieser zeitlich konstant ist. Dafür muss gelten:

$$\int \psi_E^* P \psi_{E'} dr \sim \delta(E' - E) \quad (5.32)$$

innerhalb des Energiebereiches des Wellenpaketes. Weil der Impulsoperator durch ebene Wellen diagonalisiert wird, muss ψ_E notwendig fastperiodisch sein:

$$\psi_E(r) = \sum_n A_n(E) e^{i\lambda_n(E)r}. \quad (5.33)$$

Im n -Fall ist der Impuls also nicht erhalten. Im s -Fall müssten für (5.32) noch die Fourier-Exponenten $\lambda_n(E)$ in (5.33) bei verschiedenem E alle verschieden sein, denn

$$\begin{aligned} -i \int \psi_E^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_{E'} dr &= \sum_{n,m} A_n^*(E) A_m(E') \int e^{-i\lambda_n(E)r} \lambda_m(E') e^{i\lambda_m(E')r} dr \\ &= \sum_{n,m} A_n^*(E) A_m(E') \lambda_m(E') \delta[\lambda_m(E') - \lambda_n(E)] 2\pi. \end{aligned}$$

Die $\lambda_n(E)$ haben nach (5.18) die Form $\lambda_n(E) = k(E) + A_n$, die A_n sind konstante F -Exponenten aus dem Modul des Gitters. Weil $k(E)$ monoton ist, gilt tatsächlich

$$\lambda_n(E) \neq \lambda_n(E') \text{ für } E' \neq E.$$

Das ergibt den Hauptterm (5.32). Für gewisse $E' = E + \varepsilon_m$ ist jedoch eine Beziehung $\lambda_n(E) = \lambda_m(E + \varepsilon_m)$, $m \neq n$ möglich. Dadurch entstehen Korrekturterme in (5.32):

$$\int \psi_E^* P \psi_{E'} dr = B_0(E) \delta(E' - E) + B_1(E) \delta(E' - E - \varepsilon_1) + \dots$$

(5.31) wird dadurch zeitlich fastperiodisch und nicht exakt zeitlich konstant:

$$\langle \varphi_t | P | \varphi_t \rangle = p + \sum_m B_m e^{-(i/\hbar)\varepsilon_m t} \int (\psi_E, \varphi)^* (\psi_{E+\varepsilon_m}, \varphi) d\sigma(E). \quad (5.34)$$

Die Fastperioden τ der zeitlichen Schwankungen haben die Grössenordnung $\tau \approx \hbar/\varepsilon_m$. Mittelt man über Zeiten $T \gg \tau$, so ist der Impuls erhalten. Diese Mittelung ist aber wegen der Unschärferelation für die Energie geboten: Um nämlich den Anfangszustand φ bis auf eine Unsicherheit $< \varepsilon_m$ zu bestimmen, ist eine Messzeit $T > \tau$ erforderlich. Damit ist der Zeitpunkt t der späteren Impulsmessung gegenüber der Energiemessung um T unscharf, dem wird durch die Mittelung Rechnung getragen. In diesem Sinn gilt im s -Fall Impulserhaltung.

Im n -Fall wird (5.31) nicht f. p. in t . Dann können die Impulsschwankungen durch Mittelung über mikroskopische Zeiten nicht beseitigt werden, der Impuls ist zeitlich echt veränderlich. Das Gitter muss Impuls aufnehmen. Im n -Fall kann daher ein elektrischer Widerstand auftreten, was unsere Bezeichnungsweise begründet.

Schliesslich muss der Einfluss der Phasen untersucht werden. Sei $\tilde{V}(r)$ ein Potential aus der Hülle $\tilde{V}(r) \in H\{V(r)\}$, so folgt nach Satz (3.4) $\tilde{\varphi}(r) \in H\{\varphi(r)\}$. Nach Satz (1.10) besitzt $\int^x \tilde{\varphi}^2$ bzw. $\int^x ((1/\tilde{\varphi}^2) - 1)$ daher das gleiche asymptotische Verhalten wie $\int^x \varphi^2$ bzw. $\int^x ((1/\varphi^2) - 1)$. Die Fallunterscheidung ist also phasenunabhängig, der n -Fall setzt unabhängig von den Phasen ein.

Auf die Gleichung (5.28) soll noch einmal hingewiesen werden. Mit Hilfe der Schwarzschen Ungleichung (5.16) folgt:

$$\frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} < \frac{\hbar k}{m}.$$

Das bedeutet, dass die Gruppengeschwindigkeit im fastperiodischen (und natürlich auch periodischen) Potential stets kleiner ist als die Gruppengeschwindigkeit für ein freies Teilchen mit gleichem k .

6. Anhang

Stepanoff-fastperiodische Potentiale

Die Ergebnisse über gleichmässig fastperiodische Potentiale können sofort auf die weitere Klasse der Stepanoff-fastperiodischen Potentiale ausgedehnt werden.

Eine Funktion $f(x)$ (der Klasse L^p) heisst S_l^p -fastperiodisch, wenn die Menge der S_l^p -Fastperioden zu jedem $\varepsilon > 0$ relativ dicht ist¹⁾²⁵⁾. Eine S_l^p -Fastperiode τ ist definiert durch:

$$\sup_{-\infty < x < +\infty} \left[\frac{1}{l} \int_x^{x+l} |f(y + \tau) - f(y)|^p dy \right]^{(1/p)} < \varepsilon, \quad p \geq 1 \quad (6.1)$$

mit festem endlichen l . Die Wahl von l ist unwesentlich, wir setzen $l = 1$.

Die Eigenschaften der S^p -f.p.-Funktionen entsprechen weitgehend denen der gleichmässig f.p.-Funktionen, wenn man die Metrik der gleichmässigen Konvergenz durch die S^p -Metrik ersetzt. So ist zum Beispiel ein S^p -(f.p.)-Potential $V(x)$ S^p -beschränkt:

$$\sup_x \int_x^{x+1} |V(y)|^p dy \leq K < \infty \quad (6.2)$$

und S^p -normal²⁷⁾: Jede reelle Folge $\{h_k\}$ besitzt eine Teilfolge $\{h_i\}$ mit:

$$\sup_x \int_x^{x+1} |V(y + h_i) - \tilde{V}(y)|^p dy \rightarrow 0 \quad \text{für } i \rightarrow \infty. \quad (6.3)$$

Tatsächlich wird bei den Beweisen in Kapitel 2 und 3 die gleichmässige Konvergenz bzw. Beschränktheit nie voll ausgenutzt. Um den Grenzpunkt-Fall zu garantieren, genügt die wesentliche Beschränktheit (6.2) von $V(x)$ (vergleiche ¹⁶⁾). In Satz (2.3) und (2.5) ist die Konvergenz dem Mass nach (oder die Konvergenz fast überall einer Teilfolge) hinreichend, welche durch

$$\sup_x \int_x^{x+1} |V(y + \tau_i) - V(y)|^p dy \rightarrow 0 \quad \text{für } i \rightarrow \infty$$

gesichert ist. Für den Satz (3.1) reicht die Konvergenz dem Mass nach (6.3) ebenfalls hin. Das erkennt man beim Übergang von der Differentialgleichung zu einem System von zwei Integralgleichungen (vergleiche ²⁸⁾). Die Sätze (3.2) und (3.3) samt ihren Konsequenzen gelten deshalb allgemeiner:

Satz. Das Potential in der Sturm-Liouville-Gleichung sei S^p -fastperiodisch. Dann ist eine quadratische Form der Fundamentallösungen *gleichmässig* fastperiodisch. Im Spektrum ist diese elliptisch, parabolisch oder ausgeartet, sonst hyperbolisch. Die Lösungen haben die frühere Form (3.50), (3.52), (3.55) oder (3.56).

Die physikalische Bedeutung dieser Erweiterung liegt darin, dass allgemeinere Störungen der Periodizität zugelassen werden können, als sie durch gleichmässig (f.p.)-Funktionen beschrieben werden. Nach (6.1) werden die Werte bei Translation

lediglich im Integralmittel imitiert, nicht mehr punktweise, wie bei gleichmässig fastperiodischen Funktionen. Dabei kann man an Kristallgitter mit Fehlstellen denken.

Literatur

- 1) BESICOVITCH, A. S., *Almost Periodic Functions* (1954).
- 2) BOCHNER, S., *Homogeneous Systems of Differential Equations with a.p. Coefficients*, J. London math. Soc. 8, 283 (1933).
- 3) BOHR, H., *Zur Theorie der (f.p.)-Funktionen*, Acta math. 46, 165 (1925).
- 4) BOHR, H., *Über fastperiodische ebene Bewegungen*, Com. math. helv. 4, 51 (1932).
- 5) BOHR, H., *Fastperiodische Funktionen*, Erg. Math. 1, Nr. 5 (1932).
- 6) CASSEL, J. W. S., *An Introduction to Diophantine Approximation* (1957).
- 7) CODDINGTON, E. A., LEVINSON, N., *Theory of Ordinary Differential Equations* (1955).
- 8) FAVARD, J., *Sur les équations différentielles linéaires à coefficients presque-périodiques*, Acta math. 51, 31 (1927).
- 9) FAVARD, J., *Leçons sur les fonctions presque-périodiques* (1933).
- 10) HARTMAN, P., PUTNAM, C. R., *The Least Cluster Point of the Spectrum of Boundary Problems*, Amer. J. Math. 70, 389 (1948).
- 11) HARTMAN, P., PUTNAM, C. R., *On the Essential Spectra of Bounded Potentials*, Duke math. J. 23, 561 (1956).
- 12) HARTMAN, P., WINTNER, A., *On the Location of Spectra of Wave Equations*, Amer. J. Math. 71, 214 (1949).
- 13) HOCHSTADT, H., *Functiontheoretic Properties of the Discriminant of Hill's Equation*, Math. Zeitschr. 82, 237 (1963).
- 14) LILLO, J. C., *Linear Differential Equations with a.p. Coefficients*, Amer. J. Math. 81, 37 (1959).
- 15) MAAK, W., *Fastperiodische Funktionen* (1950).
- 16) NEUMARK, M. A., *Lineare Differential-Operatoren* (1960).
- 17) PUTNAM, C. R., *The Cluster Spectra of Bounded Potentials*, Amer. J. Math. 71, 612 (1949).
- 18) PUTNAM, C. R., WINTNER, A., *Linear Differential Equations with a.p. or Laplace Transform Coefficients*, Amer. J. Math. 73, 792 (1951).
- 19) SMIRNOW, W. I., *Lehrgang der höheren Mathematik V* (1962).
- 20) STELIK, V. G., *On the Solutions of Linear Systems of Differential Equations with a.p. Coefficients*, Ukrain. Mat. Z. 10, 318 (1958).
- 21) TITCHMARSH, E. C., *Eigenfunction Expansion* (1962).
- 22) WENNBERG, S., *Zur Theorie der Diricletschen Reihen* (1920).
- 23) WEYL, H., *Über gewöhnliche Differentialgleichungen mit Singularitäten und die zugehörigen Entwicklungen willkürlicher Funktionen*, Math. Ann. 68, 222 (1910).
- 24) WINTNER, A., *On the Non-existence of Conjugate Points*, Amer. J. Math. 73, 368 (1951).
- 25) BOHR, H., FOLNER, E., *Verallgemeinerte (f.p.)-Funktionen*, Acta math. 76, 31 (1944).
- 26) CARATHÉODORY, C., *Vorlesungen über reelle Funktionen* (1927).
- 27) URSELL, H. D., *Parseval's Theorem for a.p. Functions*, Proc. Lond. Math. Soc. [2] 32, 402 (1931).
- 28) RIESZ, F., SZ.-NAGY, B., *Leçons d'analyse fonctionnelle* (1952).