

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gorny
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. KönigBlatt 2: Lösungen
Besprechung 06.11.2014

1. Reziprokes Gitter.

(2+4+4=10 Punkte)

- (a) Beweisen Sie, dass das reziproke Gitter eines reziproken Gitters wieder das ursprüngliche, reale Gitter ist.

*Lösung:*Gegeben seien die Gittervektoren $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1\dots d}$ eines Gitters in d Dimensionen. Die zugehörigen reziproken Gittervektoren seien $\{\mathbf{b}_j\}_{j=1\dots d}$. Es gilt:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad \forall i, j. \quad (1)$$

Seien $\{\mathbf{c}_k\}_{k=1\dots d}$ nun die reziproken Gittervektoren zu den $\{\mathbf{b}_j\}_{j=1\dots d}$, so gilt auch hier

$$\mathbf{b}_j \cdot \mathbf{c}_k = 2\pi\delta_{jk}, \quad \forall j, k. \quad (2)$$

Da beide Gleichungen für alle Werte von i, j, k gelten, gelten sie insb. auch für $i = k$, und daraus folgt dann für alle i und j , dass

$$(\mathbf{a}_i - \mathbf{c}_i) \cdot \mathbf{b}_j = 0. \quad (3)$$

Halten wir ein i fest, so gilt obige Gleichung für alle j . Da $\{\mathbf{b}_j\}_{j=1\dots d}$ eine vollständige Basis des d -dimensionalen Raumes bilden, gilt somit

$$\mathbf{a}_i = \mathbf{c}_i \quad (4)$$

für das gewählte i . Da wir i aber frei wählen konnten, gilt dies somit für alle i .

Damit ist gezeigt, dass die reziproken Gittervektoren reziproker Gittervektoren wieder die ursprünglichen Gittervektoren sind.

- (b) Konstruieren Sie explizit das reziproke Gitter des flächenzentrierten kubischen (fcc) Gitters.

Lösung:

Die kleinstmögliche Einheitszelle eines kubisch flächenzentrierten Gitters (gleichartiger Atome) enthält nur ein Atom. Eine mögliche Wahl der Einheitszelle lässt sich über die Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \quad (5)$$

definieren (andere Wahlen sind ebenfalls möglich). Hier sind $\mathbf{e}_{x,y,z}$ die Einheitsvektoren entlang den Koordinatenachsen und a die Gitterkonstante.

Wir verwenden die Formel $[\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 \mathbf{b}_3]^T = 2\pi[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3]^{-1}$, um die reziproken Gittervektoren zu bestimmen.¹ Es folgt:

$$[\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 \mathbf{b}_3]^T = \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^{-1}. \quad (6)$$

Eine einfache Matrixinversion führt zu

$$[\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 \mathbf{b}_3]^T = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}^T. \quad (7)$$

Somit können wir die reziproken Gittervektoren identifizieren:

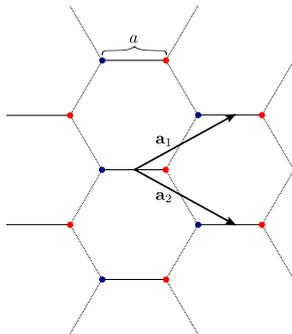
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z - \mathbf{e}_x), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z). \quad (8)$$

Erwartungsgemäß spannen die reziproken Gittervektoren ein kubisch raumzentriertes (bcc) Gitter auf.

- (c) Bestimmen Sie das reziproke Gitter des zweidimensionalen Honigwabengitters. Konstruieren Sie daraus die erste Brillouin-Zone von Graphen.

Lösung:

Um das Honigwabengitter als Bravais-Gitter darzustellen, benötigt man eine zweiatomige Einheitszelle. Wir gehen davon aus, dass das Honigwabengitter so ausgerichtet ist, dass Verbindungen zwischen Nachbaratomen in den Winkeln 0 (horizontal), $2\pi/3$ und $4\pi/3$ auftreten.



Definiert man sich die Einheitszelle nun bestehend aus zwei Atomen, die horizontal nebeneinander sind, so lassen sich folgende Gittervektoren definieren, die diese Zweiergruppe auf jede andere horizontale Zweiergruppe im Gitter abbilden:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a \begin{pmatrix} 3 & \sqrt{3} \\ 2 & 2 \end{pmatrix}^T \\ \mathbf{a}_2 &= a \begin{pmatrix} 3 & \sqrt{3} \\ 2 & -2 \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \quad (9)$$

Auch hier verwenden wir wieder die Matrixdarstellung, $[\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2]^T = 2\pi[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2]^{-1}$, um die reziproken Gittervektoren zu bestimmen. Es folgt:

$$[\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2]^T = \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ \sqrt{3} & -\sqrt{3} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (10)$$

Matrixinversion ergibt:

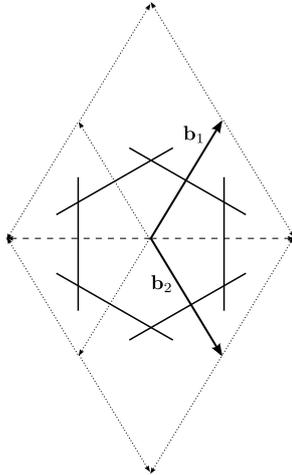
$$[\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2]^T = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 3 & -3 \end{pmatrix}^T, \quad (11)$$

¹Diese Formel ist äquivalent zu den Formeln mit den Kreuz- und Spatprodukten.

welches die reziproken Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}^T, \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix}^T \quad (12)$$

ergibt.



Damit lässt sich nun die Brillouin-Zone konstruieren. Man erkennt, dass es sich hierbei wieder um ein hexagonales Gitter handelt, allerdings in der Orientierung um $\pi/6$ gedreht zum ursprünglichen Gitter.

2. Kronig-Penney-Modell.

(4 + 5 + 3 + 4 + 4 = 20 Punkte)

Das Kronig-Penney-Modell für Elektronen im eindimensionalen Kristallgitter ist durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na) \quad (13)$$

mit $U_0 > 0$ gegeben. Im Folgenden brauchen keine Randbedingungen angenommen werden, das System sei unendlich ausgedehnt.

(Hinweis: In dieser Lösung ist $\hbar = 1$.)

- Leiten Sie für dieses Modell explizit die Bloch-Funktionen her. Beweisen Sie die Orthonormierung und Vollständigkeit.
- Bestimmen Sie die Ungleichung für die erlaubten Werte des Impulses.

Lösungen zu a) und b):

Lösung der Schrödingergleichung: Als Ansatz für die Eigenfunktion (zugehörig zur Energie $E_K = K^2/2m$) wählen wir im Intervall $x \in (0, a)$

$$\psi_K(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}, \quad K > 0. \quad (14)$$

Aufgrund des Blochtheorems folgt als Wellenfunktion für beliebiges $x \in \mathbb{R}$

$$\psi_K(x) = e^{ik\left[\frac{x}{a}\right]a} \psi\left(x - \left[\frac{x}{a}\right]a\right). \quad (15)$$

Hierbei ist [...] die Abrundungsfunktion und im Folgenden wird die Notation $n = \left[\frac{x}{a}\right]$ verwendet. Im Allgemeinen ist $k \neq K$, ein Zusammenhang zwischen den beiden Wellenzahlen wird in Gln. (17) (siehe unten) hergeleitet.

Die Stetigkeitsbedingung an den Grenzen der Einheitszellen implizieren

$$\psi(\delta) - e^{-ika}\psi(a - \delta) = 0 \quad (16a)$$

während die Integration der Schrödingergleichung folgenden Zusammenhang liefert

$$\psi'(\delta) - e^{-ika}\psi'(a - \delta) = 2mU_0\psi(0) \quad (16b)$$

Beide Gleichungen (16) sind im Limes $\delta \rightarrow 0^+$ zu verstehen. Setzt man Ansatz (14) ein, folgt als Bedingung für die Lösbarkeit des Gleichungssystems

$$F(Ka) := \frac{mU_0a}{Ka} \sin Ka + \cos Ka = \cos ka. \quad (17)$$

Da $-1 \leq \cos ka \leq 1$ folgt für die erlaubten Werte des Impulses K [Aufgabenteil b)]

$$|F(Ka)| \leq 1. \quad (18)$$

Die Eigenfunktionen des Problems haben die Form

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= e^{ikx} C_k e^{-ik(x-na)} \left[\underbrace{(e^{ika} - e^{-iKa})}_{\alpha_k} e^{iK(x-na)} - \underbrace{(e^{ika} - e^{iKa})}_{\beta_k} e^{-iK(x-na)} \right] \\ &=: e^{ikx} \tilde{u}_k(x - na) \end{aligned} \quad (19)$$

Da $n = [x/a]$ lässt sich eine Funktion $u_k(x) = \tilde{u}_k(x - [x/a]a)$ definieren, sodass

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x). \quad (20)$$

Somit hat die Wellenfunktion die gewöhnliche Blochform, wobei der Anteil $u_k(x)$ manifest invariant unter $x \rightarrow x + ma, m \in \mathbb{Z}$ ist (im Einklang mit Blochs Theorem). Im ausgedehnten Zonenschema ist die Abbildung $|k| \mapsto K$ bijektiv, s. auch Gln. (17). Im reduzierten Zonenschema führen wir den Brillouinindex/Bandindex $\nu = \left[\frac{|k|a}{\pi} \right]$ ein. Wir werden im weiteren diesen Standpunkt verfolgen, dann ist $K = K_\nu(k)$, wobei $k \in 1. \text{ BZ.}$

Orthonormiertheit:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) &= \int_{EZ} dy u_{k,\nu}^*(y) u_{k',\nu'}(y) e^{-i(k-k')y} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')na} \\ &= (2\pi/a) \delta(k - k') \delta_{\nu,\nu'}. \end{aligned} \quad (21)$$

Es wurde verwendet, dass

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')na} = (2\pi/a) \delta(k - k'), \quad k, k' \in 1. \text{ BZ} \quad (22a)$$

$$\int_{EZ} dx u_{k,\nu}^*(x) u_{k',\nu'}(x) = \delta_{\nu,\nu'} \quad (22b)$$

und dass $K, K' > 0$. Die Orthonormiertheit der Wellenfunktionen $\psi_k(x)$ ist also eine Konsequenz der Orthonormiertheit modulo eines reziproken Gittervektors der

Fourierreihe, Gln. (22a) und der Orthonormiertheit der Blochfunktionen $u_{k,\nu}(x)$ im Intervall einer Einheitszelle (EZ). Letztere genügen der Schrödingergleichung

$$\left[\frac{(-i\partial_x + k)^2}{2m} + U(x) - E \right] u_{k,\nu}(x) = 0, \quad u_{k,\nu}(x) = u_{k,\nu}(x + a). \quad (23)$$

Hier ist k ein externer Parameter, konkret genügt es quadratintegrale Funktionen auf dem Intervall $(-a/2, a/2)$ zu betrachten. Das Eigenwertspektrum ist für gegebenes k diskret und nicht entartet, somit folgt Orthogonalität der Eigenfunktionen. Die Normierungsbedingung geht in die Konstante C_k aus Gln. (19) ein.

Vollständigkeit:

Die Vollständigkeitsrelation

$$\int (dk) \psi_k(x) \psi_k^*(x') \equiv \int_{1.BZ} (dk) e^{ik(x-x')} \sum_{\nu=0}^{\infty} u_{k,\nu}(x) u_{k,\nu}^*(x') = \frac{1}{a} \delta(x - x') \quad (24)$$

ist ebenfalls zerlegbar in die Vollständigkeitsrelationen

$$\int_{1.BZ} (dk) e^{ik(n-n')a} = \frac{1}{a} \delta_{n,n'}, \quad (25a)$$

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} u_{k,\nu}(x) u_{k,\nu}^*(x') = \delta(x - x'), \quad x, x' \in (0, a), \quad (25b)$$

die auf dem Gitter, Gln. (25a), beziehungsweise auf dem Raum \mathcal{H}_a der quadratintegrale, periodischen Funktionen mit Periodizität a , Gln. (25b), gültig sind. Letztere sind Lösungen der Schrödingergleichung (23) und somit vollständig. (Da das Spektrum von unten beschränkt aber nach oben offen ist, kann man ihre Vollständigkeit auf \mathcal{H}_a allgemein zeigen, siehe untenstehende InfoBox. Der Inhalt der InfoBox geht über die von den Studierenden erwartete Lösung hinaus.)

- (c) Untersuchen Sie diese Ungleichung und illustrieren Sie graphisch, dass das Spektrum als eine Serie von Bändern dargestellt werden kann. Diskutieren Sie die Eigenschaften (z.B. Bandlücke, Bandkrümmung, ...) der Bänder.
- (d) Bestimmen Sie die Bandlücke für $mU_0a/\hbar^2 \ll 1$.
- (e) Analysieren Sie die Bandstruktur für $mU_0a/\hbar^2 \gg 1$.

Lösung c)-e):

Wie erwähnt ist die Energie $E_K = K^2/2m$ implizit über den Zusammenhang $K_\nu(k)$, bestimmt durch Gln. (17), gegeben. Die daraus folgende Impulsbedingung (18) ist in Abb. 1 graphisch dargestellt: Es gibt Bereiche auf der Ka -Achse mit $|F(Ka)| \geq 1$. Hier hat die Schrödingergleichung keine Lösung, es sind also Bandlücken entstanden. Durch explizites Einsetzen in Gln. (17) wird ersichtlich, dass für alle Bänder die obere Bandkante (unabhängig von mU_0a) $K_\nu^\nu = \nu\pi/a$, $\nu \in \mathbb{N}$, ist.

Betrachten wir zunächst den Fall $mU_0a \gg 1$. Beachten Sie, dass selbst bei $mU_0a \rightarrow \infty$ erlaubte Impulse $Ka = \nu\pi$ übrig bleiben und eine nichtdispersive Bandstruktur atomarer Niveaus erhalten bleibt. Andererseits gibt es bei endlichem, grossem $mU_0a \gg 1$ Bänder mit genügend grossem Bandindex $\nu\pi \gg mU_0a$ in denen sich die Teilchen quasifrei bewegen. Konzentrieren wir uns nun auf niedrige Bänder $\nu\pi \ll mU_0a$. Der Ansatz $Ka = \nu\pi - \delta Ka$ erlaubt den Impuls an der unteren

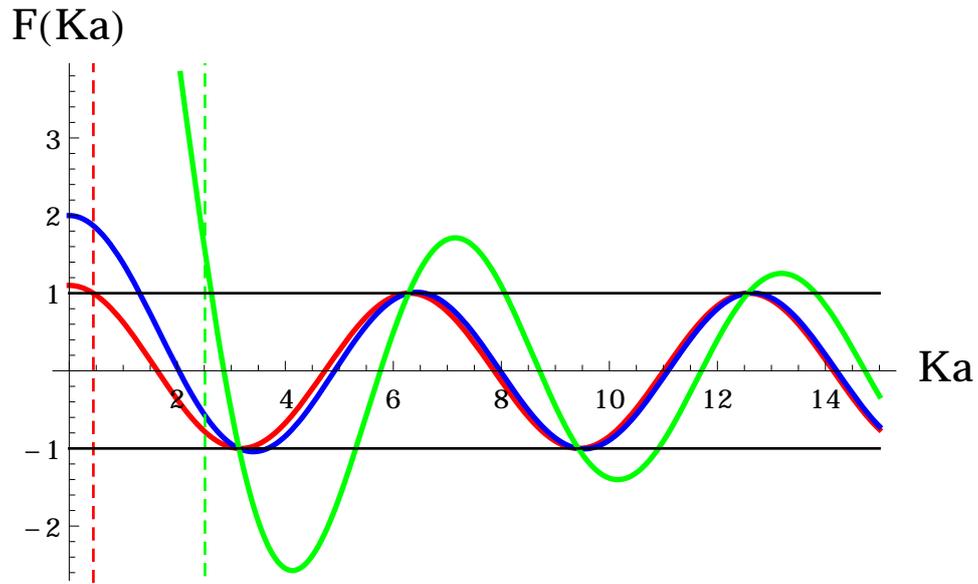


Abbildung 1: Die Funktion $F(Ka)$ für verschiedene Stärken des Gitterpotentials: Kurven für $mU_0a = (0.1, 1, 10)$ sind in (rot,blau,grün) dargestellt.

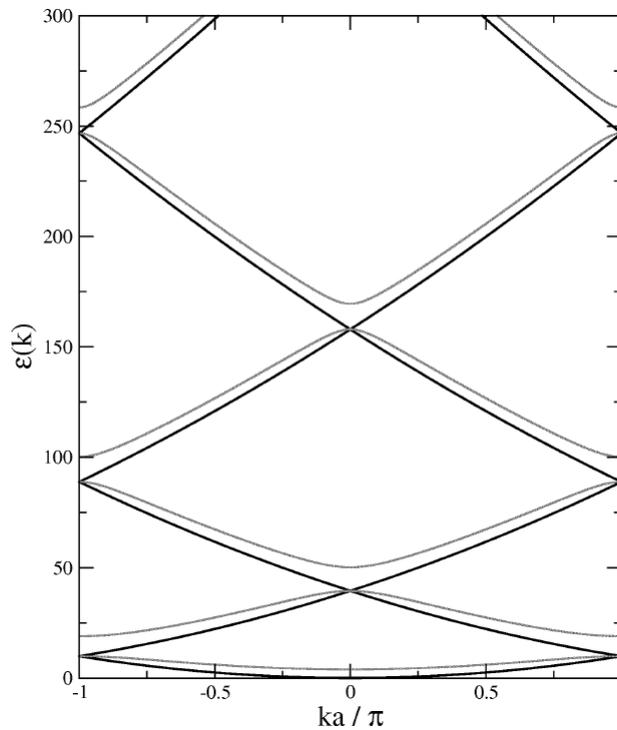


Abbildung 2: Dispersion $\epsilon(k)$ in der 1.BZ. (in Einheiten von $1/(2ma^2)$). Schwarze Linie: freies Teilchen ($U_0 = 0$); graue Linie: mit Potential $mU_0a = 3$.

Bandkante zu ermitteln. Er ist $\delta K_{<a} = 2\nu\pi/mU_0a$. Somit ist die Bandbreite der niederenergetischen Bänder

$$E_{>}^\nu - E_{<}^\nu = \frac{(\nu\pi/a)^2}{2m} \frac{4}{mU_0a}. \quad (26)$$

Die approximierte, analytische Wert für die untere Bandkante des ersten Bandes ist in Abb. 1 durch eine gestrichelte, grüne Line dargestellt.

Wenden wir uns nun dem Fall $mU_0a \ll 1$ zu. Die approximierte Nte Bandlücke lässt sich durch den Ansatz $Ka = N\pi + \delta Ka$, $ka = N\pi + \delta ka$ und einsetzen in Gln. (17) bestimmen. Es folgt für $N > 0$

$$\frac{1}{2}(\delta Ka)^2 - \delta Ka \frac{mU_0a}{N\pi} - \frac{(\delta ka)^2}{2} = 0. \quad (27)$$

Somit gilt in der Nähe der Bandlücke

$$Ka \approx N\pi + \frac{mU_0a}{N\pi} \pm \sqrt{\left(\frac{mU_0a}{N\pi}\right)^2 + (\delta ka)^2}. \quad (28)$$

Die Bandlücke ist also $\Delta E_N = \frac{2U_0}{a}$ und die effektive Masse ist $m^*/m = \pm \frac{mU_0a}{(N\pi)^2}$ oberhalb/unterhalb der Lücke. Für $N = 0$ liefert der Ansatz

$$\frac{1}{2}(\delta Ka)^2 - mU_0a - \frac{(\delta ka)^2}{2} = 0. \quad (29)$$

Und somit

$$\Delta E_0 = \frac{\delta K^2}{2m} = \frac{U_0}{a}. \quad (30)$$

Dieses Resultat ist in Abb. 1 durch eine gestrichelte rote Linie dargestellt. Ferner folgt für die Bandkrümmung $m^* = m$.

Die Resultate für die Bandkrümmung lassen sich mittels der Bandstruktur, Abb. 2 überprüfen.

- (f) Analysieren Sie das Modell (13) mit $U_0 < 0$. (5 Bonuspunkte)

Lösung: Auch in diesem Fall gibt es Lösungen der obigen Art mit positiven Energien $K^2/2m$, die der Gleichung (17) genügen. Diese ist in Abb. 3 dargestellt.

Ferner gibt es Lösungen negativer Energie. Hierzu muss in den Rechnungen des Aufgabenteils a) die Ersetzung $iK \rightarrow \kappa$ durchgeführt werden. Es folgt, analog zu Gln. (17), die Bedingung

$$G(\kappa a) := -\frac{|mU_0a|}{\kappa a} \sinh \kappa a + \cosh \kappa a = \cos \kappa a. \quad (31)$$

Die zugehörige Funktion $G(\kappa a)$ ist in Abb. 4 graphisch dargestellt. Es gibt nur ein Band negativer Energien, welches für $|mU_0a| \leq 2$ die Nullenergie $E_\kappa = 0$ einschliesst. Für grössere Potentialstärken beginnt das Band bei einem endlichen Energiewert.

Im Grenzwert kleiner Potentialstärken ergibt eine Taylorreihenentwicklung die obere Bandgrenze $\kappa_{>a} = \sqrt{2|mU_0a|}$. Dieser asymptotische Wert ist durch die gestrichelte rote Linie in Abb. 4 dargestellt.

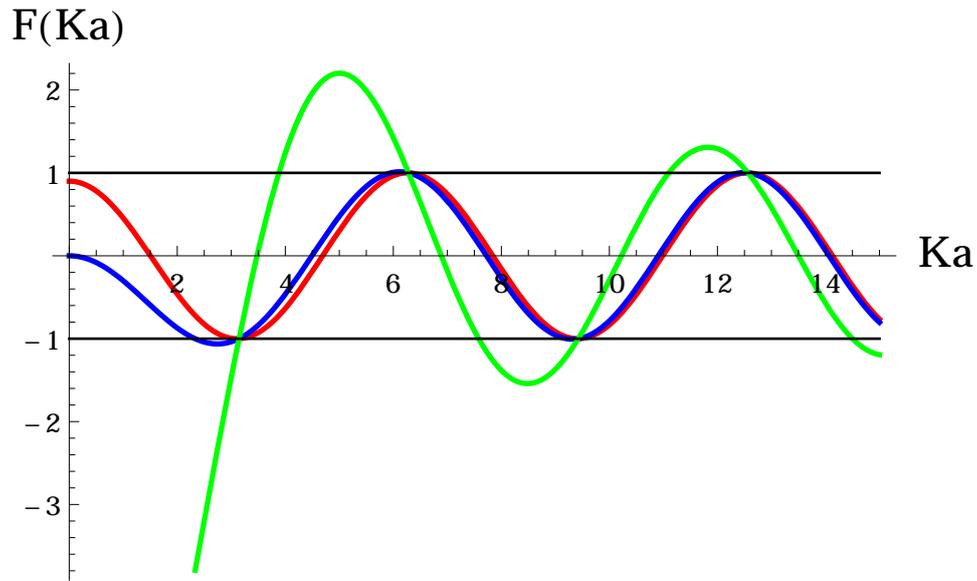


Abbildung 3: Die Funktion $F(Ka)$ für verschiedene Stärken des attraktiven Gitterpotentials: Kurven für $|mU_0a| = (0.1, 1, 10)$ sind in (rot,blau,grün) dargestellt.

Im Grenzwert grosser Potentialstärken befindet sich ein wenig dispersives Band in der Nähe von $\kappa a = |mU_0a|$, die Bandbreite ist $4mU_0^2e^{-|mU_0a|}$. Die effektive Masse ist in der Nähe von $ka = 0$

$$\frac{m^*}{m} = \frac{e^{|mU_0a|}}{2|mU_0a|^2}, \quad (32)$$

also invers proportional zur ursprünglichen Masse.

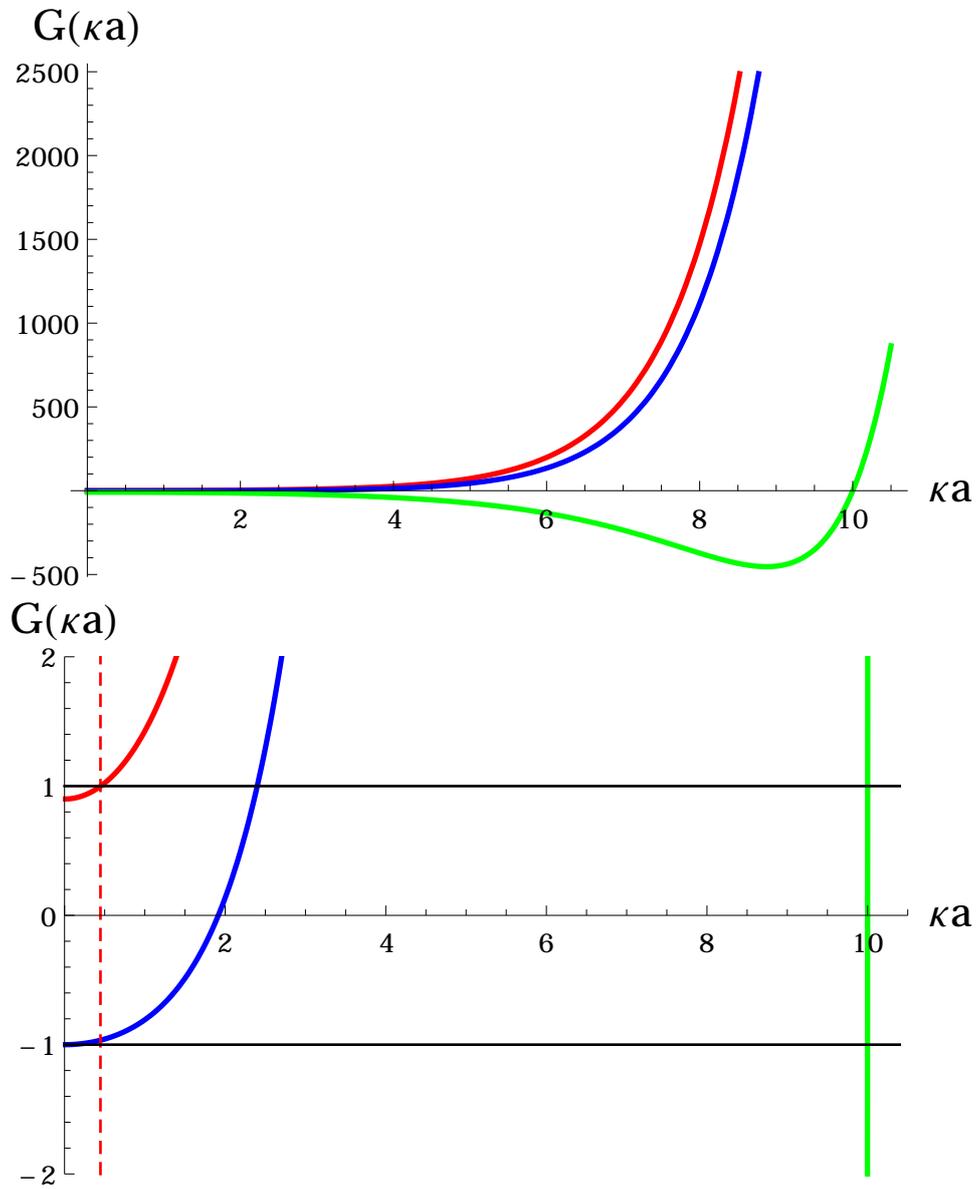


Abbildung 4: Die Funktion $G(\kappa a)$ für verschiedene Stärken des attraktiven Gitterpotentials: Kurven für $|mU_0a| = (0.1, 2, 10)$ sind in (rot,blau,grün) dargestellt.

InfoBox:**Beweis der Vollständigkeit der Eigenfunktionen eines Hamiltonoperators**

Annahmen: Wir betrachten einen hermiteschen Operator H , der auf Funktionen $|f\rangle$ mit $\langle f|f\rangle < \infty$ wirkt. Seien ferner auch

$$\langle Hf|Hf\rangle < \infty \quad (33)$$

und die Eigenwerte λ_k von H^2 die Folge mit den Eigenschaften

$$0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \rightarrow \infty. \quad (34)$$

Notation: Seien $|k\rangle$ die Eigenzustände zu H bzw. zu H^2 mit Eigenwerten E_k bzw. λ_k :

$$H^2|k\rangle = \lambda_k|k\rangle. \quad (35)$$

Sei ihre Orthonormiertheit bereits bewiesen:

$$\langle m|k\rangle = \delta_{mk}. \quad (36)$$

Behauptung (Vollständigkeit): Für beliebige $|f\rangle$ hat

$$|f_n\rangle := |f\rangle - \sum_{m=1}^n |m\rangle \langle m|f\rangle \quad (37)$$

die Eigenschaft

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n|f_n\rangle = 0. \quad (38)$$

Bemerkung: Für beliebige $|f\rangle$ ist $|f_n\rangle$ orthogonal zu allen $|k\rangle$ mit $k \leq n$:

$$\langle k|f_n\rangle = \langle k|f\rangle - \sum_{m=1}^n \langle k|m\rangle \langle m|f\rangle = \langle k|f\rangle - \sum_{m=1}^n \delta_{km} \langle m|f\rangle = \langle k|f\rangle - \langle k|f\rangle = 0. \quad (39)$$

Im folgenden Beweis soll vom trivialen Fall, in dem $|f_n\rangle = 0 \quad \forall n \geq n_*$, abgesehen werden.

Beweis:

Für den Beweis wollen wir zunächst für beliebiges $|f\rangle \neq 0$ folgendes Funktional minimieren:

$$\lambda(f) := \frac{\langle Hf|Hf\rangle}{\langle f|f\rangle}. \quad (40)$$

Der Variationsansatz $|f\rangle \rightarrow |f_{\min}\rangle + |\delta f\rangle$ impliziert, dass das Minimum $|f_{\min}\rangle$ die Eigenwertgleichung

$$H^2|f_{\min}\rangle = \lambda(f_{\min})|f_{\min}\rangle \quad (41)$$

erfüllt. Um diese Gleichung zu erhalten werden folgende Zwischenschritte durchgeführt:

$$\begin{aligned} \lambda(f + \delta f) - \lambda(f) &\stackrel{\mathcal{O}(\delta f)}{\simeq} \frac{\langle Hf|H\delta f\rangle + \langle H\delta f|Hf\rangle}{\langle f|f\rangle} - \lambda(f) \frac{\langle f|\delta f\rangle + \langle \delta f|f\rangle}{\langle f|f\rangle} \\ &= \frac{1}{\langle f|f\rangle} \{ \langle [H^2 - \lambda(f)]f|\delta f\rangle + \langle \delta f|[H^2 - \lambda(f)]f\rangle \} \\ &\stackrel{\text{für alle } \delta f}{=} 0. \end{aligned} \quad (42)$$

Nun suchen wir eine Funktion innerhalb der $\{|f_n\rangle\}$ die $\lambda(f_n)$ minimiert. Aufgrund von Gl. (41) muss diese Funktion ein Eigenzustand sein. Beachten Sie, dass auf Grund von Gln. (39) und (36) für $k \leq n$ die Eigenzustände $|k\rangle$ nicht Elemente von $\{|f_n\rangle\}$ sind. Folglich muss die Funktion $|f_{\min}\rangle \in \{|f_n\rangle\}$ die Eigenfunktion $|n+1\rangle$ sein. Es gilt also

$$\lambda(f)|_{|f\rangle \in \{|f_n\rangle\}} \geq \lambda_{n+1}, \quad (43)$$

$$0 \leq \langle f_n | f_n \rangle \stackrel{\text{Gl. (43)}}{\leq} \frac{\langle H f_n | H f_n \rangle}{\lambda_{n+1}} = \frac{\langle H f | H f \rangle - \sum_{m=1}^n \lambda_m |\langle f | m \rangle|^2}{\lambda_{n+1}} \leq \frac{\langle H f | H f \rangle}{\lambda_{n+1}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \quad (44)$$

Im letzten Schritt wurden die Annahmen (33) und (34) verwendet. Somit

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n | f_n \rangle &= 0, \\ |f\rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} |m\rangle \langle m | f \rangle. \end{aligned} \quad (45)$$
