Elektrische Leitfähigkeit für zufällige Schrödinger-Operatoren

Peter Müller

LMU München

Inhaltsverzeichnis

KAPITEL 1

Zufällige Schrödinger-Operatoren

Literatur:

- W.Kirsch, Random Schrödinger operators: A course in Lecture Notes in Physics, vol. 345, Springer 1989
- L.Pastor, A.Figotin, Spectra of random and almost-periodic operators, Springer 1992
- R.Carmona, J.Lacroix, Spectral theory of random Schrödinger operators, Birkhäuser 1990
- P.Stollmann, Caught by disorder: Bounded states in random media, Birkhäuser 2001
- W.Kirsch, An invitation to random Schrödinger operators, arXiv: 0709.3707

Ziel: Elektrische Eigenschaften ungeordneter Materialien, z.B. Legierungen, dotierte Halbleiter

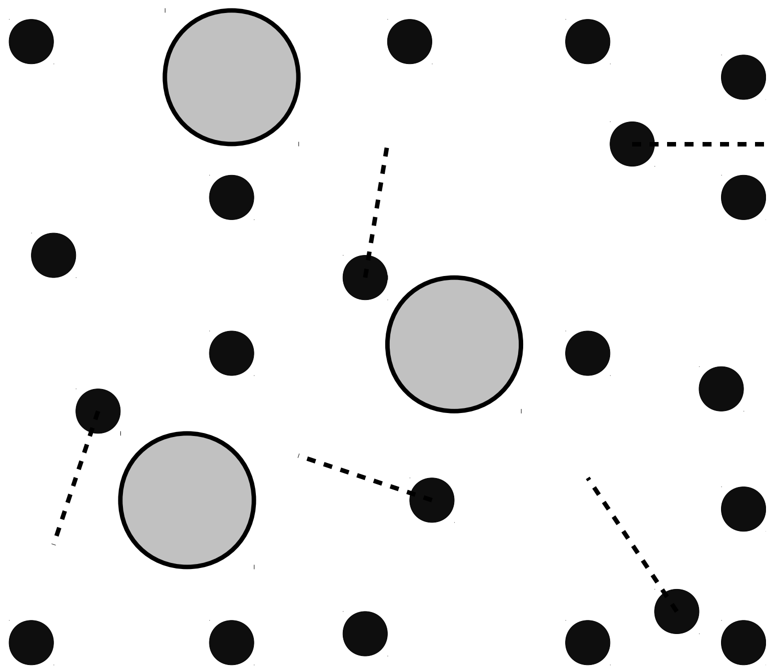

Abbildung 1.1: irregulärer atomarer Festkörper

Modellbildung: Keine Wechselwirkung zwischen den Elektronen $\Rightarrow$ 1-Elektronen HAMILTON-Operator:

$$\text{kinetische Energie} + \underbrace{\text{potetielle Energie}}_{\text{zufälliges Potential}}$$

Dies ist das einfachste Modell (ANDERSON, 1958).

1.1 Definition Sei $\mathbb{P}_0$ ein bezüglich des LEBESGUE-Maßes absolut stetiges Wahrscheinlichkeitsmaß auf $\mathbb{R}$ mit $\frac{d\mathbb{P}_0}{d\nu} \in L^\infty(\mathbb{R})$ und kompaktem Träger. sei $\Omega := \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d},\ d \in \mathbb{N},\ \mathbb{P} := \otimes_{\mathbb{Z}^d}\mathbb{P}_0$. Für $\omega = (\omega_x)_{x\in\mathbb{Z}^d} \in \Omega$ und $\lambda > 0$ sei

$$\begin{aligned} H^\omega &:= -\Delta + \lambda V^\omega \quad \text{auf } l^2(\mathbb{Z}^d) \\ (-\Delta\psi)(x) &:= \sum_{\substack{y\in\mathbb{Z}^d \\ |x-y|=1}} \psi(y) \quad \forall \psi \in l^2(\mathbb{Z}^d) \\ (V^\omega\psi)(x) &:= \omega_x\psi(x) \quad \forall x \in \mathbb{Z}^d. \end{aligned}$$

Dies ist der sogenannte HAMILTON-*Operator des* ANDERSON-*Modells.*

1.2 Bemerkung

(i) $(\omega_x)_{x\in\mathbb{Z}^d}$ kanonisch realisierte i.i.d. Zufallsvariablen

(ii)

- $-\Delta = (-\Delta)^*$ beschränkter selbstadjungierter Operator auf $l^2(\mathbb{Z}^d)$. $spec(-\Delta) = spec_{ac}(-\Delta) = [-2d, 2d]$
- V^ω beschränkter selbstadjungierter Multiplikationsoperator in $l^2(\mathbb{Z}^d)$ für $\mathbb{P}$-fast alle $\omega \in \Omega$, da supp$\mathbb{P}_0$ kompakt ist.

(iii) Wir haben drei Modellparameter: $\lambda,\ d$ und $\frac{d\mathbb{P}_0}{d\nu}$

(a) $H:\ \omega \mapsto H^\omega$ ist eine operatorwertige Zufallsvariable

1.3 Definition (und Lemma) *H ergodisch (bezüglich $\mathbb{Z}^d$-Translationen)*
Für $y \in \mathbb{Z}^d$ sei $\tau_y : \Omega \to \Omega,\ \omega \mapsto \tau_y\omega = (\omega_{x+y})_x$ und $U_y : l^2(\mathbb{Z}^d) \to l^2(\mathbb{Z}^d),\ \psi \mapsto u_y\psi := \psi(\bullet - y)$ (*unitärer Verschiebungsoperator*). Dann gilt

$$H^{\tau_y\omega} = U_y^* H^\omega U_y \quad \forall y \in \mathbb{Z}^d\ \forall \omega \in \Omega.$$

(Beweis: Übung!)

1.4 Bemerkung $(\tau_y)_{y\in\mathbb{Z}^d}$ ist Gruppe ergodischer Schifts auf Ω, das heißt gilt für eine Zufallsvariable X auf Ω $X \circ \tau_y = X\ \forall y \in \mathbb{Z}^d$, so folgt $X = \text{const.}$ $\mathbb{P}$-fast sicher.

1.5 Satz (Nicht-Zufälligkeit des Spektrums) *Es existiert $S_x \subset \mathbb{R}$ kompakt, sodass $spec_x(H^\omega) = S$ für $\mathbb{P}$-fast alle $\omega \in \Omega$. Hierbei ist $x \in \{ac, sc, pp\}$. Nebenbedingung: $spec_{pp}(A) := \overline{\{\text{Eigenwerte von } A\}}$.*

*[*PASTOR 1980, KUNZ/SOUILLARD 1980, KIRSCH/MARTINELLI 1982*]*

Beweis: (Grundidee)
Für alle $E_1 < E_2 \in \mathbb{R}$ ist $X_{E_1,E_2} \circ \tau_y = X_{E_1,E_2}$ für alle $y \in \mathbb{Z}^d$, wobei

$$\omega \mapsto X^\omega_{E_1,E_2} := tr\ \chi_{[E_1,E_2]}(H^\omega)$$

messbarer Spektralprojektor. □

1.6 Satz (Lage des Spektrums) *Wir haben $S = \underbrace{[-2d, 2d]}_{spec(-\Delta)} + \lambda \cdot supp(\mathbb{P}_0) = \{\underbrace{E_0 + \lambda\nu}_{E} :\ E_0 \in spec(-\Delta),\ \nu \in supp(\mathbb{P}_0)\}$, wobei $supp(\mathbb{P}_0) = [v_-, v_+],\ v_- < 0 < v_+$.*

Erwartung:

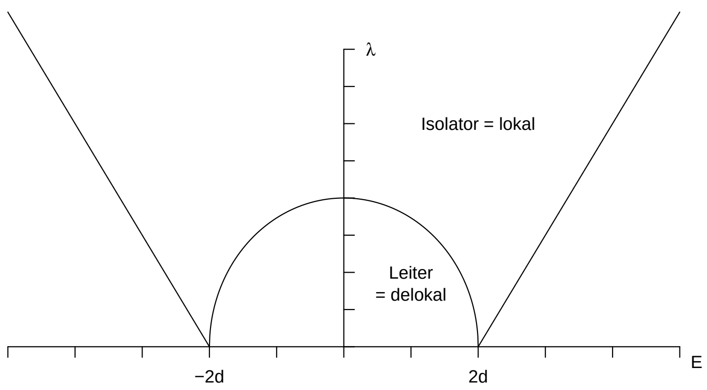

Abbildung 1.2:

1.7 Definition (Bereich (vollständiger/ANDERSON-)Lokalisierung)

$$E_{loc} := \{E \in S :\ \exists \delta, c > 0 \text{ sodass } \forall x, y \in \mathbb{Z}^d \\ \mathbb{E}\Big(\sup_{\substack{f \in L^\infty(\mathbb{R}): \\ \|f\|_\infty \le 1}} \big|\langle \delta_x, f(H)\ \chi_{[E-\delta,E+\delta]}(H)\ \delta_y \rangle\big|^2\Big) \le ce^{-|x-y|}\},$$

wobei $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das kanonische Skalarprodukt und $\delta_\cdot$ einen kanonischen Basisvektor in $l^2(\mathbb{Z}^d)$ bezeichne.

1.8 Bemerkung

(i) Sei $E \in E_{loc}$, $I := [E-\delta, E+\delta]$, $f = e^{-it\bullet}$, $t \geq 0$, im Supremum erlaubt, $\psi_t := e^{-itH} \underbrace{\chi_I(H)\delta_0}_{\psi_0}$

$$\Rightarrow \mathbb{E}[\sup_{t\geq 0} | \underbrace{\langle \delta_x, \psi_t \rangle}_{\psi_t(x)} |^2] \leq ce^{-|x|}$$

$|\psi_t(x)|^2$ q.m.W., dass dass ein Teilchen mit Anfangszustand ψ_0 (Energie $\in I$, $|\psi_0(x)|^2 \leq ce^{-|x|}$ aus $f \equiv 1$) zur Zeit t bei x gefunden wird (*dynamische Lokalisierung*).

(ii) Die Betonung in Definition 1.7 liegt auf f nicht glatt! Denn für alle $f \in C^\infty(\mathbb{R})$ gilt: Für alle $k \in \mathbb{N}$ existiert $c_k > 0$, sodass für alle $x, y \in \mathbb{Z}^d$

$$| \langle \delta_x, f(H^\omega \delta_y) \rangle | \leq \frac{c_k}{1+|x-y|^k}$$

gleichmäßig in ω. [Deterministisches Ergebnis via Combes-Thomas-Abschätzung und Helffer-Sjøstrand-Formel; siehe Germinet/Klein, Proc. Amer. Math. Soc. 131, 911 – 920 (2002)]

(iii) Für $\mu \in \mathbb{R}$, $T \geq 0$, $E \in \mathbb{R}$ sei

$$E \mapsto f_\mu^T(E) = \begin{cases} \chi_{]-\infty,\mu]}(E) & \text{, falls } T = 0 \\ (e^{(E-\mu)/T} + 1)^{-1} & \text{, falls } T \geq 0 \end{cases}$$

die Fermi-Funktion.

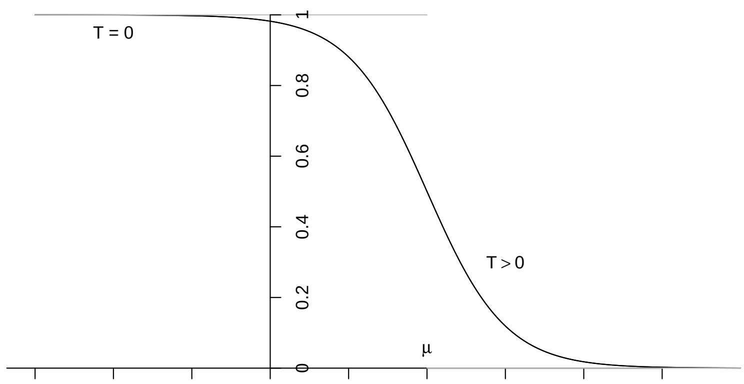

Abbildung 1.3:

Sei $T > 0$ oder $\mu \in E_{loc}$. Dann folgt nach (ii): Für alle $k \in \mathbb{N}$ existiert ein $c_k > 0$, sodass für alle $x, y \in \mathbb{Z}^d$

$$\mathbb{E}[| \langle \delta_x, f_\mu^T(H)\delta_y \rangle |^2] \leq \frac{c_k}{1+|x-y|^k}$$

gilt.

– $T > 0$ klar; $T = 0$ und $\mu \in E_{loc}$ ist eine Übung!

– Es gilt sogar exponentieller Abfall in $|x - y|$ für $T = 0$ und $\mu \in E_{loc}$ [AIZENMANN/GRAF, J.Phys. A 32, 6783 – 6806 (1998)].

1.9 Satz (Dynamische Lokalisierung ⇒ Spektrale Lokalisierung)

$$S_{ac} \cap E_{loc} = \emptyset = S_{sc} \cap E_{loc} \quad (\Rightarrow \; S \cap E_{loc} = S_{pp} \cap E_{loc})$$

und für jede Eigenfunktion $\psi_E^\omega \in l^2(\mathbb{Z}^d)$ von H^ω mit Eigenwert $E^\omega \in E_{loc}$ gilt:

$$\limsup_{|x|\to\infty} \frac{\ln |\psi_E^\omega(x)|}{|x|} < 0$$

(exponentieller Abfall der Eigenfunktionen).

Beweis: Verallgemeinerte Eigenfunktionen + RAGE-Theorem [siehe KIRSCH 2007] □

1.10 Satz (Anderson-Lokalisierung)

– *$d = 1$: Für alle $\lambda > 0$ ist $\mathbb{E}_{loc} = S$*

– *$d \geq 1$:*

(i) *starke Unordnung: Es existiert ein $\lambda_0 > 0$, sodass für alle $\lambda \geq \lambda_0$: $E_{loc} = S$.*

(ii) *extreme Energien: (= nahe Bandkanten) Für alle $\lambda > 0$ existiert ein $\varepsilon_\lambda > 0$:*

$$\mathbb{E}_{loc} \supseteq [\inf(S), \inf(S) + \varepsilon_\lambda[\, \cup \,]\sup(S) - \varepsilon_\lambda, \sup(S)].$$

*[*FRÖHLICH/SPENCER 1983, AIZENMANN/MOLCHANOV 1993, GERMINET/KLEIN 2001, 2004*]*

1.11 Bemerkung

(i) E_{loc} offen in S (nach Definition) $\overset{\text{für f.a.}\omega}{\Longrightarrow}$ es existieren unendlich viele dicht liegende Eigenwerte $\{E_j^\omega\}_{j\in\mathbb{N}}$ in E_{loc} (beachte: $\{E_j^\omega\}_{j\in\mathbb{N}}$ variieren in ω, während E_{loc} unabhängig von ω).

(ii) *Vermutung für $d \geq 3$:*

– spektrale Delokalisierung: $\exists \tilde{\lambda} \in]0, \lambda_0[$ und Intervall $I \subset S$, sodass

$$\forall \lambda \in [0, \tilde{\lambda}] : \; S_{pp} \cap I = \emptyset = S_{cc} \cap I \quad (\Rightarrow S \cap I = S_{ac} \cap I).$$

(Bewiesen auf BETHE-Gitter statt $\mathbb{Z}^d$: KLEIN, 1996, AIZENMANN/WARZEL, FROESE/HASLER/SPITZE).

– dynamische Delokalisierung auch nicht bekannt: Zum Beispiel Diffusion: $\exists \psi_0 \in l^2(\mathbb{Z}^d)$ und $D > 0$, sodass

$$\mathbb{E}[\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} |x|^2 |(e^{-itH}\psi_0)(x)|^2] \overset{t\to\infty}{\sim} Dt.$$

Im Folgenden: Direkte physikalische Observable zur Charakterisierung als Leiter/Isolator.

KAPITEL 2

Physikalische Heuristik zur elektrischen Leitfähigkeit

Elektrische Leitfähigkeit: Quantifizierung der Fähigkeit eines Materials auf ein angelegtes elektrisches Feld mit einem elektrischen Strom zu reagieren.

Räumlich konstantes, zeitabhängiges Feld:

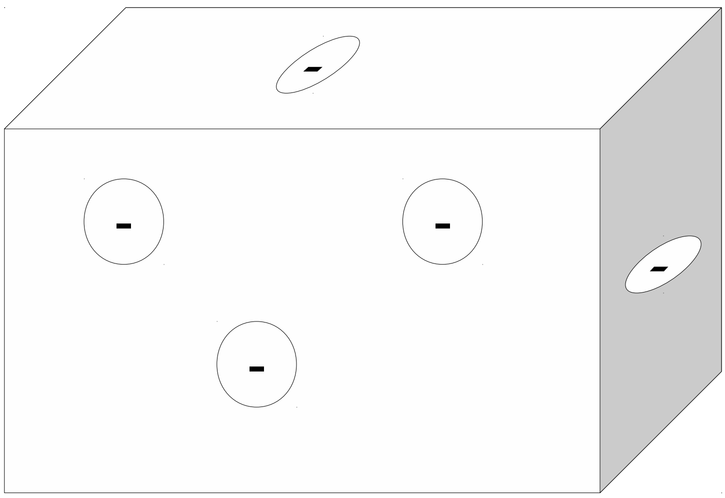

Abbildung 2.1:

– Energie:

$$H_E(t) := H + E(t) \cdot X,$$

H hier gemäß ANDERSON, Operator: $(X_\alpha \psi)(x) := x_\alpha \psi(x),\ \alpha = 1, \ldots, d.$

– *elektrische Stromdichte* für nicht wechselwirkende, identische Elektronen: Q.m. Erwartungswert des Geschwindigkeitsoperators *eines* elektrons mit FERMI-Funktion

$$J(tE)_\alpha := -\tau(w_E(t)\dot{X}_\alpha) \tag{2.1}$$

mit

- *Spur pro Volumen* $\tau := \mathbb{E}[\langle \delta_0, (\cdot)\delta_0 \rangle]$

- *Geschwindigkeitsoperator* $\dot{X}$ (nicht zufällig!)

$$\dot{X}_\alpha := i[H(t), X_\alpha] = i[-\Delta, X_\alpha].$$

(Übung: $(\dot{X}_\alpha \psi)(x) = i\psi(x + e_\alpha) - i\psi(x - e_\alpha)$)

- *Zeitentwickelter Zustand im E-Feld aus thermodynamischem Gleichgewicht* (Temperatur $T \geq 0$, chemische Potential $\mu \in \mathbb{R}$) *zur Zeit* $t = -\infty$:

$$w_E(t) \qquad \text{(zufällig!)}$$

löst das Anfangswertproblem der Liouville-von Neumann-Gleichung

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} w_E^\omega(t) = -i[H_E^\omega(t), w_E^\Omega] \\ \\ \lim_{t \to -\infty} w_E^\omega(t) = f_\mu^T(H^\omega) \end{cases}$$

- in geeignetem nicht-kommutativen L^p-Raum von Operatoren: Siehe nächstes Kapitel.
- chemisches Potential μ codiert die Elektronendichte (Jargon für $T = 0$: $\mu =$ Fermi-*Energie*)

Da (2.1) nicht berechenbar für beliebige $E(t)$ ist (viel zu kompliziert!), beschäftigen wir uns mit der *Linearen Antworttheorie*: falls $J(t, E)$ Taylor-entwickelbar in E bis zur Ordnung 2 ist, so ist die erwartete Form:

$$J(t, E)_\alpha = \underbrace{\sum_{\beta=1}^{d} \int_{-\infty}^{t} dt' \ \check{\sigma}_{\alpha\beta}(t - t') E_\beta(t')}_{J_{lin}(t,E)_\alpha} + \mathcal{O}(E^2).$$

– keine E^0-Terme, da $E = 0 \Rightarrow J = 0$

– *Lineare Antwortfunktionen* $t \mapsto \check{\sigma}_{\alpha\beta}(t) \in \mathbb{R}$

- „Maß“wie stark ein E-Feld $E_\beta(t')$ in der Vergangenheit ($t' \leq t \leftrightarrow$ Kausalität!) Stromdichte $J(t, E)_\alpha$ in der Gegenwart beeinflusst.
- wird ausschließlich durch H (hier: Anderson) bestimmt

Falls $E(t) = \int_{\mathbb{R}} d\nu \ e^{i\nu t} \sigma_{\alpha\beta}(\nu) \hat{E}_\beta(\nu)$ [E reel $\Rightarrow \hat{E}(\nu) = \overline{\hat{E}(-\nu)}$] $\Rightarrow J_{lin}(t, E)_\alpha = \sum_{\beta=1}^{d} \int_{\mathbb{R}} d\nu \ e^{i\nu t} \sigma_{\alpha\beta}(\nu) \hat{E}_\beta(\nu)$ *Stromdichte in linearer Antwort.*

Komplexe frequenzabhängige Leitfähigkeit (Matrix mit Einträgen)

$$\nu \mapsto \sigma_{\alpha\beta}(\nu) := \int_0^\infty dt \ e^{-i\nu t} \underbrace{\check{\sigma}_{\alpha\beta}(t)}_{\in \mathbb{R}}, \quad \nu \in \mathbb{R}.$$

In-/außerphasiger Anteil

$$\nu \mapsto \begin{cases} Re(\sigma_{\alpha\beta}(\nu)) & \text{, gerade in } \nu \\ i\ Im(\sigma_{\alpha\beta}(\nu)) & \text{, ungerade in } \nu \end{cases}$$

$$\Rightarrow \ \text{Zerlegung } J_{lin}(t,E)_\alpha = \underbrace{J_{lin}^{in}(t,E)_\alpha}_{\text{Anteil von } Re} + \underbrace{J_{lin}^{ant}(t,E)_\alpha}_{\text{Anteil von } i\ Im} .$$

in- beziehungsweise *außerphasiger Anteil* des linearen Antwortstroms.

Interpretation: $E(t) = E_0 \cos(\nu_0 t)$ (bzw. $\sin(\nu_0 t)$).

$$\Rightarrow J_{lin}^{in} \sim \cos(\nu_0 t) \quad (\text{bzw. } \sin(\nu_0 t))$$
$$J_{lin}^{ant} \sim \sin(\nu_0 t) \quad (\text{bzw. } \cos(\nu_0 t))$$

Ziele:

– Mathematische Rechtfertigung des obigen Vorgehens

– Dichte $\sigma_{\alpha\beta}$ durch Spektraleigenschaften von H aus $\to$ Kubo-*Formel*

– Für $T = 0$ und $\mu \in E_{loc}$: $\underbrace{\sigma_{\alpha\beta}(0)}_{\text{Gleichstromleitfähigkeit}} = 0 \ \forall \alpha, \beta = 1, \ldots, d$

KAPITEL 3

Nicht-kommutative L^p-Räume ergodischer Operatoren

Wir betrachten den HILBERT-Raum $H = l^2(\mathbb{Z}^d)$ und die messbare Abbildung $A : \Omega \to BL(H)$, $\omega \mapsto A^\omega$, wobei $BL(H)$ die Menge der beschränkten linearen Operatoren auf H bezeichne. Darüberhinaus ist $\omega \mapsto \langle \varphi, A^\omega \psi \rangle$ messbar für alle $\varphi, \psi \in H$. Es sei $(\tau_x)_{x \in \mathbb{Z}^d}$ eine Gruppe ergodischer Transformationen auf Ω. Wir benötigen eine Referenz-Algebra und eine halbendliche, normale, treue Spur.

3.1 Definition (Referenz-Algebra)

$$\mathcal{K} := \{A : \Omega \to BL(H) \text{ messbar, ergodisch, } \|A\|_\infty < \infty\},$$

mit $\|A\|_\infty := \mathbb{P}\text{-essup}_{\omega \in \Omega} \|A\|_{Op}$. Analog zu 1.3 ist $A^{\tau_x \omega} = U_x^* A^\omega U_x$ mit U_x unitäre (projektive) Darstellung von $\mathbb{Z}^d$ auf H.

3.2 Lemma $\mathcal{K}$ *ist* VON NEUMANN-*Algebra, das heißt* $*$*-invariante, schwach abgeschlossene Unteralgebra von* $BL(H^\Omega)$*, wobei*

$$H^\Omega := \int_\Omega \mathbb{P}^\oplus(d\omega)$$

$$\begin{aligned} H := \{\Psi = (\psi^\omega)_{\omega \in \Omega} :\ & \psi^\omega \in H \textit{ für } \mathbb{P}\textit{-fast alle } \omega \in \Omega, \\ & \omega \mapsto \|\psi^\omega\| \textit{ messbar}, \langle \Psi, \Psi \rangle_\Omega < \infty\}. \end{aligned}$$

$\langle \Phi, \Psi \rangle_\Omega := \int_\Omega \mathbb{P}(d\omega) \, \langle \varphi^\omega, \psi^\omega \rangle$ *sei das zugehörige Skalarprodukt.*

Beweis: (Skizze)
Ziel: Benutze VON NEUMANNs Bikommutantensatz:

$$\mathcal{K} \text{ VON NEUMANN-Algebra in } BL(H) \;\Leftrightarrow\; \mathcal{K} = \mathcal{K}''.$$

Hierbei bezeichnet $\mathcal{K}' := \{A' \in BL(H^\Omega) :\ [A', A] = 0\ \forall a \in \mathcal{K}\}$ die *Kommutante* und $\mathcal{K}'' := (\mathcal{K}')' \supseteq \mathcal{K}$ die *Bikommutante*. Wir müssen zeigen, dass $\mathcal{K}'' \subseteq \mathcal{K}$ gültig ist.

– klar: $\mathcal{K} \subseteq BL(H^\Omega)$ [$\omega \mapsto (A\Psi)^\omega := A^\omega \psi^\omega$ messbar (*zerlegbarer Operator: Diagonal in* ω)]

Charaktersisierung:

3.3 Satz

$$A \in BL(H^\Omega) \text{ zerlegbar } \Leftrightarrow A \in \mathcal{M}',$$

wobei $\mathcal{M} := \{M_f \in BL(H^\Omega) : \ f \in L^\infty(\Omega, \mathbb{P})\}$ *und* $(M_f\Psi)^\omega := f(\omega)\psi^\omega$
[Beweis: DIXMIER, *Cor., p.188]*

– A ergodisch $\Leftrightarrow U_x A^\omega = A^{\tau_{-x}\omega} U_x \ \forall x \in \mathbb{Z}^d$. Definiere $\hat{U}_x \in BL(H^\Omega)$ via $(\hat{U}_x\Psi)^\omega := U_x \psi^{\tau_{-x}\omega}$, also A ergodisch $\Leftrightarrow S \in \mathcal{U}'$, wobei $\mathcal{U} := \{\hat{U}_x : \ x \in \mathbb{Z}^d\}$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \mathcal{K} = \mathcal{M}' \cap \mathcal{U}' \\
&\Rightarrow \mathcal{K}' \supseteq \mathcal{M}'' \cup \mathcal{U}'' \supseteq \mathcal{M} \cup \mathcal{U} \\
&\Rightarrow \mathcal{K}'' \overset{\mathcal{K}' \supseteq \mathcal{M}}{\subseteq} \mathcal{M}' \text{ und } \mathcal{K}'' \overset{\mathcal{K}' \supseteq \mathcal{U}}{\subseteq} \mathcal{U}', \text{ d.h } \mathcal{K}'' \subseteq \mathcal{M}' \cap \mathcal{U}' = \mathcal{K}
\end{aligned}$$

□

3.4 Definition (und Lemma; Spur auf $\mathcal{K}$)
Sei

$$\tau : \mathcal{K} \to \mathbb{C}, \ A \mapsto \int_\Omega d\mathbb{P}(\omega) \langle \delta_0, A^\omega \delta_0 \rangle =: \tau(A).$$

Dann gilt

(i) $|\tau(A)| \geq \|A\|_\infty \ \ \forall A \in \mathcal{K}$, also $\tau \in \mathcal{K}^*$

(ii) $\tau(A^*A) = \tau(AA^*) \ \forall A \in \mathcal{K}$

(iii) Treu: $0 \neq A \geq 0 \ \Rightarrow \ \tau(A) > 0$

(iv) Normal: Für alle beschränkten, wachsenden Netzte $(A_i)_{i\in I}$ gilt $\tau(\sup_{i\in I} A_i) = \sup_{i\in I} \tau(A_i)$.

Es sei erwähnt, dass aus (i) und (ii) die Endlichkeit folgt.

Beweis:

(i) klar!

(ii)

$$\begin{aligned}
\tau(A^*A) &\overset{\text{PARSEVAL}}{=} \sum_{x\in\mathbb{Z}^d} \int_\Omega d\mathbb{P}(\omega) \langle \delta_0, A^{*\omega}\delta_x \rangle \langle \delta_x, A^\omega \delta_0 \rangle \\
&\overset{\tau_x \text{ maßerh.}}{=} \sum_{x\in\mathbb{Z}^d} \int_\Omega d\mathbb{P}(\omega) \langle \delta_0, A^\omega \delta_{-x} \rangle \langle \delta_{-x}, A^{*\omega}\delta_0 \rangle \\
&= \tau(AA^*)
\end{aligned}$$

(iii) Sei $A \geq 0$ und $0 = \tau(A) = \int_\Omega d\mathbb{P}(\omega)\, \underbrace{\langle \delta_0, A^\omega \delta_0 \rangle}_{\geq 0}$

$$\Rightarrow \quad 0 = \langle \delta_0, A^\omega \delta_0 \rangle \text{ für } \mathbb{P}\text{-fast alle } \omega \in \Omega$$

$$\overset{\forall x \in \mathbb{Z}^d}{\Rightarrow} \quad \langle \delta_x, A^\omega \delta_x \rangle = \left\langle \delta_0, \underbrace{U_x^* A^\omega U_x}_{A^{\tau_x \omega}} \delta_0 \right\rangle = 0 \;\forall \omega \in \Omega_x,\; \mathbb{P}(\Omega_x) = 1$$

$$\Rightarrow \quad \forall x, y \in \mathbb{Z}^d \; |\langle \delta_x, A^\omega \delta_y \rangle| \overset{A \geq 0}{=} |\left\langle (A^\omega)^{\frac{1}{2}} \delta_x, (A^\omega)^{\frac{1}{2}} \delta_y \right\rangle|$$

$$\overset{\text{Cauchy-Schwarz}}{\leq} \underbrace{\left\| (A^\omega)^{\frac{1}{2}} \delta_x \right\|^{\frac{1}{2}}}_{\langle \delta_x, A^\omega \delta_y \rangle = 0} \left\| (A^\omega)^{\frac{1}{2}} \delta_y \right\|^{\frac{1}{2}}$$

Sei $\tilde{\Omega} := \bigcap_{x \in \mathbb{Z}^d} \Omega_x$, so folgt $\mathbb{P}(\tilde{\Omega}) = 1$ und für alle $\omega \in \tilde{\Omega}$

$$\langle \delta_x, A^\omega \delta_y \rangle = 0 \;\forall x, y \in \mathbb{Z}^d \;\Rightarrow\; A^\omega = 0.$$

(iv) Folgt aus $\sup_{i \in I} \langle \varphi_0, A_i^\omega \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0, \sup_{i \in I} A_i^\omega \varphi_0 \rangle$ für $\mathbb{P}$-fast alle ω.

□

3.5 Definition (Nicht-kommutative L^p-Räume)
Für $p \in [1, \infty[$ ist $|||A|||_p := \tau(|A|^p)^{\frac{1}{p}}$ Norm auf $\mathcal{K}$ (τ treu, $|A| := (A^*A)^{\frac{1}{2}}$).
Setze für $p \in [1, \infty]$
$$L^p(\mathcal{K}) := \overline{\mathcal{K}}^{|||\cdot|||}.$$

3.6 Bemerkung

(i) Definition 3.5 benutzt die Endlichkeit von τ. Falls τ nur halbendlich ist, führe eine Vervollständigung bezüglich der τ-Maß-Topologie ein (generelles Vorgehen!).

(ii) $L^p(\mathcal{K})$ enthält unbeschränkte Operatoren für $p < \infty$.

3.7 Satz

(i) *$L^p(\mathcal{K})$ ist ein* Banach-*Raum für alle $p \in [1, \infty]$, insbesondere ist $L^\infty(\mathcal{K}) = \mathcal{K}$.*

(ii) *$L^2(\mathcal{K})$ ist ein* Hilbert-*Raum bezüglich $\langle\langle A, B \rangle\rangle := \tau(A^*B)$.*

(iii) *Für alle $p \in [1, \infty]$; $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ und $A \in L^p(\mathcal{K}),\; B \in L^q(\mathcal{K})$ gilt:*

$$AB, BA \in L^1(\mathcal{K}),\; \tau(AB) = \tau(BA) \text{ und } |\tau(AB)| \leq |||A|||_p |||B|||_q \text{ (Hölder)}$$

(iv) $L^\infty(\mathcal{K}) \subseteq L^p(\mathcal{K}) \subseteq L^{p'}(\mathcal{K}) \subseteq L^1(\mathcal{K})$ *für alle* $p > p' \in]1, \infty[$.

Moral: Wie komm. L^p*-Räume mit endlichem Maß!*

3.8 Definition Sei $\mathcal{K}_B := \{A \in \mathcal{K} : \ \exists R > 0, \text{ sodass } \langle \delta_x, A\delta_y \rangle = 0, \text{ falls } |x - y| > R\}$ $*$-Unteralbegra der „endlichen Bandoperatoren". Für $\alpha \in \{1, \ldots, d\}$ ist $\partial_\alpha : A \mapsto i[X_\alpha, A] =: \partial_\alpha A$ wohldefiniert als Abbildung von $\mathcal{K}_B$ in sich selbst (Übung). Setze $\partial := (\partial_1, \ldots, \partial_d)$

3.9 Bemerkung

– X_α ist *nicht* ergodisch!!!

– $\langle \delta_x, \partial_\alpha A \delta_y \rangle = (x - y) \langle \delta_x, A\delta_y \rangle$

3.10 Lemma *(Nicht-Kommutativer* Sobolev*-Raum)*
Für alle $p \in [1, \infty]$ *gilt:*

(i) $W^{1,p}(\mathcal{K}) := \{A \in L^p(\mathcal{K}) : \ \partial_\alpha A \in L^p(\mathcal{K}), \ \alpha = 1, \ldots, d\}$ *liegt dicht in* $L^p(\mathcal{K})$ *und* ∂ *ist* $*$*-Derivation auf* $W^{1,p}(\mathcal{K})$.

(ii) $\tau(\partial A) = 0$ *für alle* $A \in W^{1,1}(\mathcal{K})$

Beweis: (Grundidee)

(i) $\mathcal{K}_B$ liegt dicht in $\mathcal{K}$ bezüglich $|||\cdot|||_\infty$ (siehe Dombrowski), $\overline{\mathcal{K}}^{|||\cdot|||_p} = L^p(\mathcal{K}) \ \Rightarrow \ \overline{\mathcal{K}_B}^{|||\cdot|||_p} = L^p(\mathcal{K})$ und $\mathcal{K}_B \subseteq W^{1,p}(\mathcal{K})$.

$*$-Derivation:

$$\begin{aligned} \partial_\alpha A^* &= (\partial_\alpha A)^*, \ \partial_\alpha \text{ linear und} \\ \partial_\alpha (AB) &\overset{\text{Rechnen}}{=} (\partial_\alpha A)B + A(\partial_\alpha B) \end{aligned}$$

für alle $A, B \in W^{1,p}(\mathcal{K})$ mit $AB, (\partial_\alpha A)B, A(\partial_\alpha B) \in L^p(\mathcal{K})$

(ii) klar, da $X_{\alpha\delta_0} = 0$.

□

3.11 Bemerkung Gemäß Bemerkung 1.8(iii) ist

$$f_\mu^T(H) \in W^{1,p}(\mathcal{K}) \ \forall p \in [1, \infty[, \text{ falls } T > 0 \text{ und } \mu \in E_{loc}.$$

3.12 Definition Sei $H \in L^\infty(\mathcal{K})$ und $p \in [1, \infty]$. Wir definieren den Liouville-Operator

$$\mathcal{L} : L^p(\mathcal{K}) \to L^p(\mathcal{K}), \ A \mapsto i[H, A].$$

3.13 Bemerkung

(i) $cL \in BL(L^p(\mathcal{K}))$ mit $||\mathcal{L}|| \leq 2|||H|||_\infty$

(ii) Für $p = 2$ ist $\mathcal{L} = \mathcal{L}^*$ auf $L^2(\mathcal{K})$ (Übung)

(iii) Für alle $A \in L^p(\mathcal{K})$ und für alle $B \in L^q(\mathcal{K})$ mit $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ gilt

$$\tau((\mathcal{L}A)B) = -\tau(A(\mathcal{L}B)) \quad \text{(Übung)}$$

KAPITEL 4

Lineare Antworttheorie in $L^p(\mathcal{K})$

Grundvoraussetzungen:

– H wie in Definition 1.1

– $\hat{E} \in (C_c(\mathbb{R}))^d,\ \hat{E}(-\nu) = \overline{\hat{E}(\nu)},\ E(t) := \int_{\mathbb{R}} d\nu\ e^{i\nu t}\hat{E}(\nu)$

– Für $\eta > 0$ sei $F_\eta(t) := \int_{-\infty}^t ds\ \underbrace{e^{\eta s}E(s)}_{E_\eta(s)}$ *adiabatische Einschalten*

Ungleichung: Da $H_{E_\eta}(t) = H + E_\eta(t)X$ nicht beschränkt, verwende $\tilde{H}_\eta(t)$,

$$(\tilde{H}_\eta^\omega(t)\psi)(x) := \sum_{\substack{y\in\mathbb{Z}^d \\ |x-y|=1}} e^{-iF_\eta(t)(y-x)}\psi(y) + \omega_x\psi(x)$$

für alle $\psi \in l^2(\mathbb{Z}^d)$ und für alle $x \in \mathbb{Z}^d$.

– physikalisch gleichwertig:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_t = H_{E_\eta}^\omega(t)\psi_t \ \Leftrightarrow\ i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}_t = \tilde{H}_{E_\eta}^\omega(t)\tilde{psi}_t \quad (*)$$

mit $\tilde{psi}_t := e^{iF_\eta(t)X}\psi_t$.

– $\tilde{H}_\eta(t) \in L^\infty(\mathcal{K})$ für alle t.

4.1 Satz (Yosida; Propagator für Schrödinger-Gleichung) *Für $\mathbb{P}$-fast alle $\omega \in \Omega$ und für alle $t, s \in \mathbb{R}$ existiert ein $U^\omega(t,s) \in BL(l^2(\mathbb{Z}^d))$ unitär, sodass*

– $U^\omega(t,r)U^\omega(r,s) = U^\Omega(t,s,),U^\omega(t,t) = 1, U^\omega(t,s) = (U^\omega(s,t))^-$

– $i\frac{\partial}{\partial t}U^\omega(t,s)\varphi = \tilde{H}_\eta^\omega(t)U^\omega(t,s)\varphi$ *(also:(∗))*

– $i\frac{\partial}{\partial s}U^\omega(t,s)\varphi = -U^\omega(t,s)\tilde{H}_\eta^\omega(s)\varphi$

– $(t,s) \mapsto U^\omega(t,s)$ *stark stetig*

Beweis: Satz XIV.3.1 in Yosida, Func. Analysis, 1980. □

4.2 Bemerkung Spezialfall $E(T) = 0$ (also $\tilde{H}_\eta(t) = H$):

$$U^{(\omega)}(t,s) = U_0^{(\omega)}(t-s)$$

mit $U_0^{(\omega)}(t) := e^{-itH^\omega}$.

4.3 Definition (und Lemma)
Für alle $p \in [1, \infty]$, für alle $A \in L^p(\mathcal{K})$ und für alle $t, s \in \mathbb{R}$ sei

$$U(t,s)A : \omega \mapsto U^\omega(t,s)A^\omega U^\omega(s,t).$$

Es gilt:

– $U(t,s) \in BL(L^p(\mathcal{K}))$ (Messbarkeit).

– $U(t,s)$ ist eine Isometrie, für $p = 2$ unitär.

– $(t,s) \mapsto U(t,s)$ stark stetig.

– $i\frac{\partial}{\partial t}U(t,s)A = [\tilde{H}_\eta(t), U(t,s)A]$.

– $i\frac{\partial}{\partial s}U(t,s)A = -U(t,s)([\tilde{H}_\eta(t), A])$.

Aus den letzten beiden Punkten folgt $\frac{\partial}{\partial t}U(t,s)$ und $\frac{\partial}{\partial s}U(t,s)$ liegen in $BL(L^p(\mathcal{K}))$. Analoges gilt für $U_0(t) := e^{-it\alpha}$

4.4 Satz *Sei $p \in [1, \infty[$, $T > 0$ oder $\mu \in E_{loc}$. Das Anfangswertproblem*

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}w_{E_\eta}(t) & = [\tilde{H}_\eta(t), w_{E_\eta}(t)] \\ \lim_{t\to\infty} w_{E_\eta}(t) & = f_\mu^T(H) \end{cases}$$

hat eine eindeutige Lösung $t \mapsto w(t) \in L^p(\mathcal{K})$, wobei

$$\begin{aligned} w_{E_\eta}(t) &= \lim_{s\to\infty} U(t,s)w_0 \\ &= f_\mu^T(\tilde{H}_\eta(t)) - \int_{-\infty}^t ds\ e^{\eta s}U(t,s)(E(s)\cdot \partial f_\mu^T(\tilde{H}_\eta(s))). \end{aligned}$$

Beweis: Satz 4.1, Definition und Lemma 4.3. Explizizte form der Lösung durch Differenzieren bestätigen. Benutze

$$\begin{aligned} & \tilde{H}_\eta^\omega(t) = e^{iF_\eta(t)\cdot X}H^\omega e^{-iF_\eta(t)\cdot X} \\ \Rightarrow\ & f_\mu^T(\tilde{H}_\eta^\omega(t)) = e^{iF_\eta(t)\cdot X}f_\mu^T(H^\omega)e^{-iF_\eta(t)\cdot X} \quad \text{in } l^2(\mathbb{Z}^d) \\ \Rightarrow\ & f_\mu^T(\tilde{H}_\eta(t)) = e^{F_\eta(t)\cdot\partial}(f_\mu^T(H)) \quad \text{in } L^p(\mathcal{K}). \end{aligned}$$

□

4.5 Satz *Sei $T > 0$ oder $\mu \in E_{loc}$. Dann ist*

$$\mathbb{R} \ni \gamma \mapsto J(t, \gamma E_\eta) := \tau(w_{\gamma E_\eta}(t)\partial\tilde{H}_\eta(t))$$

differenzierbar in $\gamma = 0$ *und für alle* $\alpha \in \{1, \dots, d\}$

$$\begin{aligned} J_{lin}(t, E_\eta)_\alpha &:= \frac{\partial}{\partial \gamma}\Big|_{\gamma=0} J(t, \gamma E_\eta)_\alpha \\ &= -\sum_{\beta=1}^{d} \tau \left(\int_{-\infty}^{t} ds\ e^{\eta s} E_\beta(s) \left(e^{-i(t-s)\mathcal{L}} \partial_\beta f_\mu^T(H) \right) \partial_\alpha H \right) \\ &= e^{\eta t} \sum_{\beta=1}^{d} \int_{\mathbb{R}} d\nu\ e^{i\nu t} \hat{E}_\beta(\nu) \sigma_{\alpha\beta}(\nu, \eta) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(\nu, \eta) &:= -\tau \left(\int_{-\infty}^{t} ds\ \left(e^{-i(t-s)(\mathcal{L}+\nu-i\eta)} \partial_\beta f_\mu^T(H) \right) \partial_\alpha H \right) \\ &= i\tau((\mathcal{L} + \nu - i\eta)^{-1} \partial_\beta f_\mu^T(H)) \partial_\alpha H \end{aligned}$$

adiabatisch regularisierte Leitfähigkeit.

4.6 Definition Sei $T > 0$ oder $\mu \in E_{loc}$, sei $B \subseteq \mathbb{R}$ Borel.

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(B) := -\pi \left\langle\left\langle \partial_\alpha H, \chi_B(\mathcal{L}) \partial_\beta f_\mu^T(H) \right\rangle\right\rangle$$

Leitfähigkeitsmaß (gerades, positives Maß!). Damit

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(\nu, \eta) = -\frac{i}{\pi} \int_{\mathbb{R}} \Sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(d\lambda)\ \frac{1}{\lambda + \nu - i\eta}.$$

4.7 Satz

$$\begin{aligned} J_{lin}^{in}(t, E)_\alpha &:= \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{\beta=1}^{d} \int_{\mathbb{R}} d\nu\ e^{i\nu t} \hat{E}(\nu)\ Re\left(\sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(\nu, \eta) \right) \\ &= \sum_{\beta=1}^{d} \int_{\mathbb{R}} \Sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(d\nu)\ e^{i\nu t} \hat{E}(\nu). \end{aligned}$$

Beweis:

$$Re\left(\sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(\nu, \eta) \right) = \int_{\mathbb{R}} \Sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(d\lambda)\ \frac{\eta/\pi}{(\lambda + \nu)^2 + \eta^2}$$

. □

4.8 Bemerkung

(i) Ob $\Sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}$ absolut stetig bezüglich des Lebesgue-Maßes ist, ist ein offenes Problem. Sollte dies gelten, so wäre $Re\left(\sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(\nu) \right) = \frac{\Sigma_{\alpha\beta}^{\mu,T}(d\nu)}{d\nu}$.

(ii) Definition 4.6 ist die KUBO-Formel für das Leitfähigkeitsmaß.

4.9 Satz(Gleichstromleitfähigkeit) *Es sei $\mu \in E_{loc}$, so gilt*

$$\begin{aligned}\lim_{\eta \searrow 0} \sigma^{\mu,0}_{\alpha\beta}(0,\eta) &= -i\tau \left\{ f^0_\mu(H) \left[\partial_\alpha f^0_\mu(H), \partial_\beta f^0_\mu(H) \right] \right\} \\ &= 0.\end{aligned}$$