

# ELEKTRONISCHE EIGEN- SCHAFTEN EINDIMENSIONALER APERIODISCHER STRUKTUREN

*Einführung der Ortsraum Pfad-Renormierung  
tridiagonaler Jacobi-Operatoren und orthogonaler  
Polynome*

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN  
der Fakultät für Physik der  
Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte

DISSERTATION

von

**Dipl.-Phys. Dieter Walther**

aus Karlsruhe

Tag der mündlichen Prüfung: 6. Juni 2003

Hauptreferent: Prof. Dr. R. v. Baltz

Koreferenten: Prof. Dr. F. Herrlich

Prof. Dr. J. Kroha (Bonn)



# Inhaltsverzeichnis

<b>EINLEITUNG</b>	<b>iii</b>
<b>I STRUKTUR-MODELL — und seine Beschreibung</b>	<b>1</b>
I.1 1-D Strukturmodell . . . . .	1
I.1.1 Brevier der kombinatorischen Gruppentheorie . . . . .	1
I.1.2 Topologische und abstrakte dynamische Systeme . . . . .	11
I.2 Einige Beispiele — Eine Perspektive auf Kapitel <b>III</b> . . . . .	16
I.2.1 Spezies aus dem Zoo der Substitutionen . . . . .	17
I.2.2 Andere Struktur-Typen . . . . .	21
I.3 Hierarchische Bäume und Automaten . . . . .	23
<b>II PHYSIKALISCHES MODELL UND 1-D TRANSPORT</b>	<b>51</b>
II.1 Der Hamilton-Operator $\hat{\mathcal{H}}$ , seine Resolvente $\hat{\mathcal{G}}(z)$ und ihre Ortsraum-Darstellung . . . . .	52
II.2 Optische Leitfähigkeit in 1-D . . . . .	62
II.3 Kubo-Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ und $\Gamma(\mathcal{E}, \omega)$ in diskreter und kontinuierlicher Darstellung . . . . .	64
II.3.1 $\Gamma(\mathcal{E}, \omega)$ in Poincaré-Darstellung . . . . .	64
II.3.2 $\Gamma(\mathcal{E}, \omega)$ in Tight-Binding-Darstellung . . . . .	67
II.4 Kubo-Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ in Matrizen-Form . . . . .	68
<b>ANHÄNGE ZU KAPITEL II</b>	<b>76</b>
<b>II.A Poincaré-Abbildung und Fundamentallösungen</b>	<b>77</b>
II.A.1 Einige Eigenschaften der Poincaré-Darstellung . . . . .	80
II.A.2 Fundamentallösungen $P_\mu$ und $\mathcal{P}_\mu$ der diskreten Schrödinger-Gleichung . . . . .	90
<b>II.B Herleitung von <math>\Xi_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)</math></b>	<b>105</b>
<b>III ORTSRAUM PFAD-RENORMIERUNG und BEISPIELE AUS DEM ZOO DER SUBSTITUTIONEN: Renormierungsgruppe — (lokale) Zustandsdichte und Kubo-Leitfähigkeit <math>\sigma(\omega)</math></b>	<b>117</b>
III.1 Strukturertaltende Morphismen, Feshbach-Operatoren im $\ell_2$ und verallgemeinerte Ortsraum-Dezimierung . . . . .	118
III.2 Verallgemeinerte Fibonacci-Folgen . . . . .	132
III.2.1 Kombinatorisch-gruppentheoretische Betrachtungen . . . . .	133

<b>III.2.2</b>	RTs für die Green'sche Funktion . . . . .	140
<b>III.2.3</b>	RTs für Kubo-Leitfähigkeit — Rekursionen für $\mathbf{T}$ , $\mathbf{\Delta}$ und die Spur $\mathbf{Sp}\{\mathbf{T}\}$ . . . . .	148
<b>III.3</b>	Non-Pisot Folgen . . . . .	156
<b>III.4</b>	Period-Doubling und Thue-Morse Folge . . . . .	160
<b>III.5</b>	Rudin-Shapiro Folge . . . . .	169
<b>ANHÄNGE ZU KAPITEL III</b>		<b>173</b>
<b>III.A</b>	<b>Strukturbeschreibung zu <math>\Phi_2(\mathbb{F}(\mathcal{A}_2))</math> und <math>\mathcal{RG}(\Phi_2)</math></b>	<b>173</b>
<b>III.A.1</b>	Verallgemeinerte Ortsraum-Dezimierung und definierende Relationen . .	173
<b>III.A.2</b>	Darstellung von $\Phi_2^+$ und hierarchische Graphen . . . . .	180
<b>III.A.3</b>	$\mathcal{RG}_{ \Pi_{x,y}}$ und geliftete hierarchische Graphen in $\mathfrak{G}^\Gamma(\mathcal{RG}, \mathcal{RG} \times \mathcal{RG})$ . . . . .	190
<b>III.B</b>	<b>Brevier der Zahlentheorie — Farey-Baum <math>\mathfrak{F}_F^\Gamma(V, E)</math></b>	<b>201</b>
<b>III.B.1</b>	Farey-Baum $\mathfrak{F}_F^\Gamma(V, E)$ und Nielsen-Transformationen . . . . .	201
<b>III.B.2</b>	Formen der Irrationalität . . . . .	208
<b>ZUSAMMENFASSUNG und AUSBLICK</b>		<b>211</b>
<b>LITERATURVERZEICHNIS</b>		<b>213</b>

# EINLEITUNG

*“If there is any message to all this work, it perhaps should be that we are on the edge of a huge subject which has many layers of complexity and subtlety and which is not going to be contained comfortably within any simple formalism.”* — R. V. Moody  
[Moo97]

Quasikristalle und ihre periodischen Approximanten besitzen elektronische Eigenschaften, die sich in vielerlei Hinsicht von denen ungeordneter oder periodischer Systeme unterscheiden. Seit der Entdeckung quasiperiodischer Strukturen durch Shechtman *et al.* [She84] in der Mitte der 80er Jahre findet die Strukturklasse der Quasikristalle ein reges wissenschaftliches Interesse<sup>1</sup>. Herausragendstes Charakteristikum quasikristalliner Strukturen sind wohl ihre eindrucksvollen Beugungsbilder, welche eine scharfe Bragg-Struktur aufweisen, die für die reinsten Quasikristalle mit denen der Kristalle vergleichbar ist, aber sich von letzteren durch die kristallographisch verbotene Punktsymmetrie unterscheiden. Ungeordnete Strukturen weisen dagegen ein diffuses Fourierspektrum auf. Letztlich sollte diese Tatsache einen ersten Hinweis darauf geben, in welcher Richtung man allein durch die “geordnete Unordnung” induzierte Effekte, d.h. durch die Aperiodizität implizierte signifikante Unterschiede zu den periodischen (= “geordneten”) Strukturen auf der einen Seite und den amorphen (= “ungeordneten”) Strukturen auf der anderen, erwarten kann. Je lokaler ein physikalischer Prozeß abläuft, desto unempfindlicher wird er auf die Subtilitäten der Aperiodizität reagieren. Obwohl die Untersuchung des Übergangs von der aperiodischen Struktur zur ungeordneten Strukturen ein reizvolles Unterfangen darstellt, wollen wir uns in dieser Arbeit mit der “reinen Lehre” befassen. Das Ziel dieser Arbeit besteht darin, einen Beitrag zum Studium des Wechselspiels zwischen der geometrischen und elektronischen Struktur in dem “Extremfall” eindimensionaler Strukturen zu liefern, d.h. wir interessieren uns dafür, wie sich die geometrischen Struktureigenschaften konkret in die physikalischen Eigenschaften transformieren lassen und wie die geometrische Struktur das physikalische Geschehen beeinflusst.

Natürlich weiß jeder, wie man eine periodische Struktur erzeugen kann. Man wählt sich eine endliche Struktur, den sog. Fundamentalbereich, und wendet auf diesen die gewöhnliche Translationsoperation an, wobei die Symmetrieeigenschaften des Fundamentalbereiches mit denen der Translationsgruppe verträglich sein müssen. Neben der Periodizität ist die

---

<sup>1</sup>Inzwischen gibt es eine Reihe brauchbarer einführender Literatur. Exemplarisch seien genannt [Suc2002, Sta99, Axe95, Hip94, Jan91]. Die operatortheoretischen Aspekte eindimensionaler aperiodischer Strukturen findet man z.B. in [Cyc87, Pas92] ausführlich diskutiert. Schließlich wollen wir noch ein weiteres interessantes neues Buch [Tes2000] zu dem hier betrachteten Thema erwähnen.

Selbstähnlichkeit ein weiteres fundamentales Ordnungsprinzip. Paradebeispiel einer entsprechenden Konstruktionsregel sind die Substitutionsfolgen. Eine Substitutionsregel legt der Folge von Symbolen (= Fundamentalbereiche) eine Ordnungsstruktur auf, die es klar von ungeordneten Systemen unterscheidet. Zum einen geht die Ordnung, die sich in einem diskreten Fourierspektrum manifestiert, mit regulären Eigenschaften der zugrundeliegenden Struktur bezüglich *Translationen* (mit einer trivialen Selbstähnlichkeit) einher. Andererseits besitzen die durch Substitutionen erzeugten Strukturen eine nichttriviale “Selbstähnlichkeitssymmetrie”, welche mit einer diskreten *Dilatation* einhergeht. Beides sind Formen von *Repetitivitäten*, aber eben nicht dieselben [Luc93–1]. Obwohl die hier betrachteten *aperiodischen* Strukturen keine Translationssymmetrie besitzen, können sie ein *diskretes* Fourierspektrum  $S(k)$  besitzen, die sog. Fibonacci-Folge [Fib1202] ist ein derartiger Kandidat (siehe z.B. [Jan94], S. 24ff.). Wir werden andere Substitutionen kennen lernen, die ein singular–stetiges oder ein absolut–stetiges Fourierspektrum  $S(k)$  aufweisen. Letztere haben eine Dilatations–Symmetrie, aber sind nicht mehr hinreichend regulär bezüglich der Translationssymmetrie.

Man kann die geometrische Situation vielleicht wie folgt charakterisieren. Man nennt diejenigen Strukturen, welche nicht periodisch sind, aber trotzdem ein diskretes *Fourierspektrum* im strengen Sinne besitzen **fastperiodisch**<sup>2</sup> [Bes32, Boh32]. Sie zeichnen sich dadurch aus, daß sich ihre Fouriertransformierte durch eine *abzählbare* Summe von  $\delta$ –Distributionen darstellen lassen. Ist die Summe *endlich*, so nennt man  $f(x)$  **quasiperiodisch**, d.h.  $f(x) = g(\alpha_1 x, \dots, \alpha_n x)$ , wobei  $g$  eine *periodische* Funktion in  $\mathbb{R}^n$  ist. Die  $\alpha_i$  sind zueinander paarweise inkommensurabel. Eine weitere Abschwächung regulärer Eigenschaften bezüglich Translationssymmetrie ergibt sich, wenn die “globale” Fastperiodizität durch eine nur noch “lokal” (d.h. in einem *endlichen* Ausschnitt von  $\mathbb{R}$ ) vorhandene Fastperiodizität ersetzt wird (sog. **schwach periodische** Folgen, s. [Jan95]). Hier sind die strukturellen Korrelationen schon so schwach, daß das zugehörige Fourierspektrum absolut–stetig ist, wie man es von den amorphen und randomisierten Strukturen kennt.

- **Periodisch:** Charakteristisch sind Begriffe wie 3–D Gitter, Einheitszelle, Brillouin–Zone und ein diskretes Fourierspektrum mit einem Fourier–Modul vom Rang drei. Bekanntes Beispiel sind natürlich die Kristalle.
- **Quasiperiodisch:** Hier gibt es kein Gitter, keine Brillouin–Zone, aber noch ein diskretes Fourierspektrum mit Fourier–Modul vom Rang  $n > D$ , wobei  $n$  aber immer noch endlich ist. Beispiele sind zum einen die sog. inkommensurable Kristalle (mit kristallographisch erlaubter Punktsymmetrie), in 1–D gehören die verallgemeinerten Fibonacci–Folgen dazu, zum anderen die Quasikristalle (mit kristallographisch verbotene Punktsymmetrie), die sich z.B. durch das Penrose–Muster geometrisch beschreiben lassen.
- **Allgemein Fastperiodisch:** Die Strukturen besitzen ein diskretes Fourierspektrum mit einem Fourier–Modul vom Rang  $n = \infty$ . Beispiele hierfür sind reguläre Fraktale

---

<sup>2</sup>Eine Menge  $\omega \subset \mathbb{R}$  heißt **relativ dicht**, wenn ein  $\epsilon > 0$  existiert, so daß jedes Intervall der Länge  $\epsilon$  mindestens ein  $x \in \omega$  enthält. Eine stetige Funktion  $f(x) \in \mathbb{C}$  heißt **fastperiodisch**, wenn die Menge der Zahlen  $\tau$ , für die  $|f(x + \tau) - f(x)| < \epsilon$ , mit  $\epsilon > 0$ , gilt, relativ dicht ist. Beispiel: Die Funktion  $f(x) = \sin(2\pi x) + \sin(2\pi\alpha x)$  ist nicht periodisch, wenn  $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ . Die Vielfachen von  $\alpha \bmod 1$  überdecken den Einheitskreis dicht, so daß zu jedem  $\epsilon > 0$  ein  $N_\epsilon$  derart existiert, daß  $|\sin(2\pi\alpha N_\epsilon)| < \epsilon$  gilt. Damit ist die Existenz einer relativ dichten Menge von Zahlen  $\tau$  gesichert, für die  $|f(x + \tau) - f(x)| < \epsilon$  gilt.

(oft sog. **grenz-periodische**<sup>3</sup> Strukturen), wie die sog. Sierpinski-Dreiecke, oder in 1-D die sog. periodenverdoppelnden Ketten.

- **“Kritisch”**: Das Fourierspektrum ist nicht mehr diskret, sondern singulär stetig. Ein typisches Beispiel in 1-D ist die Thue-Morse-Folge.
- **Amorph**: Nur kurzreichweitige Ordnungskorrelationen, absolut stetiges Fourierspektrum. **Random**: Keine Korrelationen, absolut stetiges Fourierspektrum.

Wenden wir unsere Aufmerksamkeit der uns in dieser Arbeit interessierenden eindimensionalen physikalischen Welt der *elektronischen* Eigenschaften zu und beginnen mit der quantenmechanischen Beschreibung eines Elektrons in einem effektiven elektrostatischen Potential, das durch alle anderen Elektronen und die Atomkerne erzeugt wird. Die **Schrödinger-Gleichung** hat die allgemein vertraute Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}} \Psi(x, t), \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{x}}) \text{ auf } \mathbf{G} = (x_{-M}, x_N) \subseteq \mathbb{R}, \quad (1)$$

wobei  $\hat{\mathbf{p}}$  der Impuls- und  $\hat{\mathbf{x}}$  der Ortsoperator sein mögen. Die ersten systematischen mathematischen Untersuchungen dieses Modells gehen wohl auf Weyl [**Wey10**] und Titchmarsh [**Tit46**] zurück. Erstes Interesse von Seiten der Physik findet man in den beginnenden Dreißiger Jahren bei Kronig und Penney [**Kro31**], die eine *periodische* Anordnung von identischen Potentialbarrieren betrachteten. Die wohl erste systematische Verallgemeinerung auf beliebige Potentiale mit *periodischen* Randbedingung<sup>4</sup> findet man bei Hill [**Hil1886**]. Als einige typische Anwendungsbeispiele seien hier genannt: Bandstrukturbetrachtungen und Untersuchungen zur Dynamik von Elektronen in geordneten Festkörpern, Lokalisierungsphänomene in ungeordneten Festkörpern und Flüssigkeiten (s. z.B. [**Lie66**, **Mat93**]) oder Halbleitermikrostrukturen [**Jar89**, **Tun92**]. Neben Untersuchungen zu den physikalischen Eigenschaften geschichteter Supraleitern [**Tan89**] findet sich auch eine Anwendung beim “Quark-Tunnel” eindimensionaler Kernmodelle [**Cle90**]. Trotz seiner augenscheinlichen Einfachheit sind die Eigenschaften des **“aperiodischen Kronig-Penney-Modells”** bei weitem nicht in allen ihren Facetten vollständig verstanden. Im Lauf dieser Arbeit werden wir auf eine Fülle weiterer Arbeiten stoßen, die für ihre Modellrechnungen verschiedene Formen des Kronig-Penney-Modells zugrundelegen. In diesem Zusammenhang werden wir auf eine Reihe von “modernen” Fragestellungen zu sprechen kommen, die sich um dieses Modell ranken. Eigentlich sind nur die mathematischen Werkzeuge zur Beschreibung *perfekt geordneter* Strukturen (abgesehen vom Vakuum, wird dieses Idealbild mit der kristallinen – also periodischen – Phase assoziiert) einerseits<sup>5</sup> und den vollständig *ungeordneten* (Random-) Strukturen am anderen Ende der Ordnungshierarchie, zu deren Beschreibung sich statistische Methoden hervorragend eignen, weit ausgereift. Dagegen befinden sich die Methoden zur Beschreibung

<sup>3</sup>Das sind Funktionen, die gleichmäßig gegen eine periodische Funktion konvergieren, gegebenenfalls mit einer immer länger werdenden Periode. Ein bekanntes Beispiel ist die Funktion  $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(2\pi x/2^n)$  mit  $\sum_{n=1}^{\infty} |a_n| < \infty$ . Sie ist Limes einer Funktion mit der Periode  $n \rightarrow \infty$ . Unser Beispiel spielt eine gewisse Rolle bei der Beschreibung des Übergangs zum Chaos via Perioden-Verdoppelung.

<sup>4</sup>(1) nennt man deshalb (v.a. in der mathematischen Literatur) auch die **Hill’sche Gleichung**.

<sup>5</sup>Hier ist v.a. die Theorie der *endlichen* Gruppen zu nennen.

des Terrains der “Zwischenwelten”, sofern man sich nicht mit Oberflächlichem begnügen will, noch in den Kinderschuhen [Moo97].

Man kann die stationäre Schrödinger–Gleichung zu (1) auf die Form eines **kontinuierlichen dynamischen Systems**

$$\frac{d\vec{\Psi}(x)}{dx} = \mathbf{T}(\vec{\Psi}(x)) = \mathbf{T}(x, \varepsilon)\vec{\Psi}(x) \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ U(x) - \varepsilon & 0 \end{pmatrix} \vec{\Psi}(x), \quad \vec{\Psi}(x) = \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi'(x) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

bringen, welches bei verschiedenen Fragekomplexen eine Schlüsselrolle spielen wird. Im Folgenden können wir uns aber ruhigen Gewissens ausschließlich auf die Untersuchung seines *diskreten* Pendant beschränken. Der Begründung hierfür werden wir den Anhang II.A widmen, wo wir zeigen werden wie sich das *kontinuierliche* Modell auf folgendes, zu (2) praktisch äquivalentes *diskretes* Modell abbilden läßt (sog. Poincaré–Abbildung). Den Preis, den man hierfür zu zahlen hat, ist, daß nun die Platz–Energien  $\epsilon_\mu$  und Hüpf–Terme  $t_\mu$  explizit von der Energie  $\varepsilon$  der kontinuierlichen Gleichung als Schar–Parameter abhängen. Die auf dem Intervall  $\mathbf{G} = [-M, N - 1] \subseteq \mathbf{Z}$  der “Länge”  $|\mathbf{G}| := M + N$  definierte 1–D diskrete Form der Schrödinger–Gleichung (“Poincaré–Darstellung” der zu (1) gehörenden stationären Gleichung) ist gegeben durch

$$(\hat{\mathcal{H}}(\varepsilon)\Psi)_\mu := t_{\mu+1}(\varepsilon)\Psi_{\mu+1} + t_\mu(\varepsilon)\Psi_{\mu-1} + \epsilon_\mu(\varepsilon)\Psi_\mu = E(\varepsilon)\Psi_\mu, \quad \Psi_\mu := \Psi(x_\mu), \quad \mu \in \mathbf{G}. \quad (3)$$

Die allgemeinen Lösungen dieser Fixpunktgleichung werden wir im Anhang II.A zum Kapitel II noch ausführlich besprechen<sup>6</sup>. Die Lösungen  $\Psi_\mu$  aus (3) sind gleich den Wellenfunktionen an den Orten  $x_\mu$ , d.h. es gilt  $\Psi_\mu = \Psi(x_\mu)$  für eine beliebige, streng monotone Folge  $(x_\mu)_{\mu \in \mathbf{G}}$ . Die formale Kenntnis der Lösungen  $\Psi_\mu$  von (3) wird es uns ermöglichen, wesentliche Aspekte der uns interessierenden **Ortsraum–Renormierung** besser in ihren Zusammenhängen zu verstehen. Äquivalent zu (3) ist die Matrix–Gleichung (“**Transfer–Matrizen Darstellung**”)

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}_{\mu+1}(\varepsilon) &\equiv \begin{pmatrix} \Psi_{\mu+1} \\ \Psi_\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_\mu(\varepsilon) & -\tau_\mu(\varepsilon) \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_\mu \\ \Psi_{\mu-1} \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{T}_\mu(\varepsilon)\vec{\Psi}_\mu(\varepsilon) \equiv \mathbf{T}_{-M \rightarrow \mu} \vec{\Psi}_{-M}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (4)$$

mit den Anfangswerten  $\vec{\Psi}_{-M}$ , den “Parametern”

$$s_\mu(\varepsilon) := \frac{E(\varepsilon) - \epsilon_\mu(\varepsilon)}{t_{\mu+1}(\varepsilon)} \quad \text{und} \quad \tau_\mu(\varepsilon) := \frac{t_\mu(\varepsilon)}{t_{\mu+1}(\varepsilon)}, \quad (5)$$

sowie der sog. **Transfer Matrix**

$$\mathbf{T}_{-M \rightarrow \mu}(\varepsilon) := \prod_{\alpha=-M}^{\mu} \mathbf{T}_\alpha(\varepsilon) \equiv \mathbf{T}_\mu(\varepsilon)\mathbf{T}_{\mu-1}(\varepsilon) \cdots \mathbf{T}_{-M}(\varepsilon). \quad (6)$$

---

<sup>6</sup>Die diskrete Schrödinger–Gleichung (3) sollte nicht mit der Tight–Binding–Approximation gleich gesetzt werden. Bei letzterem sind alle Parameter  $\epsilon_\mu, t_\mu$  und die Energie  $E$  von dem Schar–Parameter  $\varepsilon$  unabhängig! Die Lösungen  $\Psi_\mu$  sind nun nicht gleich dem Wert der Wellenfunktion  $\Psi$  am Ort  $x_\mu$ , sondern geeignete gewählte Wannier–Funktionen, die am Ort  $x_\mu$  lokalisiert sind.

Formal hat man es beim diskreten Modell mit einer sog. *Poincaré-Abbildung* (engl. “*first return map*”) für das kontinuierliche dynamische System zu tun. Man hat das Eigenwertproblem (1) auf ein diskretes Fixpunktproblem abgebildet. Die Eigenschaften des “**Stromes**”  $T(x)$  in (2) werden weitgehend durch diejenigen des “**Diffeomorphismus**”  $T_\mu$  aus (4) bestimmt.

Ortsraum-Renormierung ist auf der, einem *physikalischen* Problem zuordenbaren, *geometrischen* Ebene Ausdruck einer zugrundeliegenden *fraktalen Struktur* (s. z.B. [Nij98]). Auf dieser Ebene wird ihre “Dynamik” (diskrete “Zeit”<sup>7</sup>  $n$ ) durch eine Abfolge von Morphismen  $\mathcal{M}_n$  beschrieben, die ein geometrisches Objekt in ein neues überführt, welches zum ursprünglichen in einem noch genauer zu definierenden Sinne “*selbstähnlich*” ist. Die uns interessierenden elektronischen Eigenschaften, beschrieben z.B. durch die (lokale) Zustandsdichte und Kubo-Leitfähigkeit, werden vollständig durch das “Langzeitverhalten” eines der Schrödinger-Gleichung (1) entsprechenden *dynamischen Systems* bestimmt. Letzteres wird durch die Eigenschaften der Trajektorie  $\{\vec{x}^{(n)} \in \Pi \mid n \in \mathbb{N}\}$  eines gegebenen Parametertuples  $\vec{x}^{(n)}$  auf einer differenzierbaren Manigfaltigkeit  $\Pi$  (**Phasenraum**) beschrieben, welche durch eine Folge  $({}^R\mathcal{M}_n)_n$  von “**elementaren Diffeomorphismen**”<sup>8</sup>

$${}^R\mathcal{M}_n : \Pi \rightarrow \Pi, \quad \vec{x}^{(n)} \mapsto {}^R\mathcal{M}_n(\vec{x}^{(n)}) = \vec{x}^{(n+1)},$$

erzeugt werden, deren geometrisches Pendant gerade die durch die erwähnten Morphismen  $\mathcal{M}_n$  induzierten Trajektorien von Worten  $\{w^{(n)} \in \mathcal{A}^G \mid n \in \mathbb{N}\}$  im “**Adress-Raum**”  $\mathcal{A}^G$  sind. Ist die Folge  $({}^R\mathcal{M}_n)_n$  periodisch, d.h. gilt  ${}^R\mathcal{M}_n = {}^R\mathcal{M}$  für alle  $n$ , dann existiert unter bestimmten Umständen ein (oder mehrere) Fixpunkt(e)  ${}^R\mathcal{M}(\vec{x}^*) = \vec{x}^*$ . Im Kontext der Renormierungstheorie bestimmt er die entsprechenden Renormierungsgleichungen<sup>9</sup>, und damit die Physik am “kritischen Punkt”. In unserem Falle entspricht dem Fixpunkt die aperiodische Struktur  $\omega = \mathcal{M}(\omega)$  mit dem unendlichen Wort  $\omega \in \mathcal{A}^G$ . Im Sinne der Renormierungstheorie kritischer Phänomene untersucht man die freie Energie eines *Ensembles*  $\{\hat{\mathcal{H}}_\omega\}_{\omega \in \Omega}$  von Realisationen  $\omega \in \Omega$ . Man hat hierbei zwei Objekte gleichzeitig im Auge zu behalten, den Hamilton-Operator *und* die entsprechende Verteilungsfunktion. So ist es z.B. möglich, eine Renormierungstransformation für die Verteilungsfunktion (Gibbs-Maß) aufzustellen, aber der zugehörige renormierte Hamilton-Operator muß nicht automatisch das renormierte Maß reproduzieren. Dies bringt uns auf den zentralen Begriff des Orbits  $\Omega = \overline{\mathcal{O}[\omega]}$  und die sog. Hülle<sup>10</sup>  $\hat{\Omega} := \text{Hull}(\hat{\mathcal{H}}_\omega)$  eines homogenen Operators  $\hat{\mathcal{H}}_\omega \in \hat{\Omega} \subseteq \mathcal{B}(\mathbb{H})$ , dem Banach-Raum der beschränkten Operatoren auf dem (hier als separabel angenommenen) Hilbert-Raum  $\mathbb{H}$ .<sup>11</sup> Übernimmt man für  $\hat{\Omega}$  die entsprechende Operator-Topologie von  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$ , so ist  $(\hat{\Omega}, \mathfrak{T})$  ein to-

<sup>7</sup>Es sollte im Folgenden kaum die Gefahr bestehen, dieses mit der Dynamik der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung zu verwechseln.

<sup>8</sup>Im Gegensatz zu Strömen ist hier die “Zeitvariable” diskret. Ein **Diffeomorphismus** ist eine stetig differenzierbare Abbildung mit stetig differenzierbarem Inversen.

<sup>9</sup>S. z.B. [Nie76, Wil83] und die einschlägige Literatur. In [Wal2003] haben wir einige der uns interessierenden Aspekte hierzu zusammengetragen.

<sup>10</sup>Wir “überladen” hier zugegebenermaßen das Symbol  $\hat{\Omega}$ , um die direkte Entsprechung zum Original  $\Omega$  zu betonen. Es sollte aber kein Grund zu möglichen Konfusionen sein.

<sup>11</sup>Für die Grundlagen der Topologie und Operator-Theorie sei auf die entsprechende einschlägige Literatur verwiesen (s. z.B. [Dun57, Ree72-I, Heu86, Meg98]). In [Wal2003] findet man eine Zusammenfassung dessen, was uns davon als wichtig erschien.

pologischer Unterraum von  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  bezüglich der relativen Topologie  $\mathfrak{T}$ . Auf  $\Omega$  läßt sich unter gewissen Voraussetzungen ein normiertes *Borel-Maß*  $\mu$  (Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathfrak{B}, \mu)$ ,  $\mathfrak{B}$  ist die  $\sigma$ -Algebra aller Borel-Mengen) erklären, eines der wichtigsten Werkzeuge zur Charakterisierung verschiedener Klassen von Strukturen.

**Definition 1** ([Bel86], [Pas92, S. 18]) *Ein Random-Feld  $f_g$ , mit  $g \in \mathbb{Z}$ , nennt man **homogen**, wenn es eine Gruppe<sup>12</sup>  $G = \{\mathcal{T}_g \mid g \in \mathbb{Z}\}$  von Automorphismen auf dem Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathfrak{B}, \mu)$  derart gibt, daß gilt: (a):  $G$  isomorph zu  $\mathbb{Z}$  ist, d.h. es gilt  $\mathcal{T}_{g_1+g_2} = \mathcal{T}_{g_1}\mathcal{T}_{g_2}$  für alle  $g_1, g_2 \in \mathbb{Z}$ , und  $\mathcal{T}_g = \text{id} \Leftrightarrow g = 0$ ; (b):  $\mu(\mathcal{T}_g(\Omega_1)) = \mu(\Omega_1)$  für alle  $\Omega_1 \in \mathfrak{B}$ ; (c):  $f_{g_1+g_2}(\omega) = f_{g_1}(\mathcal{T}_{g_2}(\omega))$  für alle  $g_1, g_2 \in \mathbb{Z}$  und alle  $\omega \in \Omega$ .*

*Einen beschränkten Operator  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$  nennt man **homogen**, wenn die Familie seiner Translante  $\{\mathcal{T}^\xi \cdot \hat{\mathcal{H}}_\omega := \hat{\mathcal{U}}_\xi \hat{\mathcal{H}}_\omega \hat{\mathcal{U}}_\xi^* \mid \xi \in G\}$  eine bezüglich der starken Operator-Topologie  $\mathfrak{T}_s$  kompakte Abschluß<sup>13</sup> besitzt.  $\diamond$*

Die durch Substitutionsregeln erzeugten aperiodischen Strukturen sind homogen im Sinne dieser Definition. Wir haben hier somit ein nichttriviales Beispiel von unmittelbarer physikalischer Relevanz vorliegen, bei dem verschiedenste mathematische Konzepte miteinander in ein interessantes Zusammenspiel treten:

- **Topologische Dynamik:** In dem topologischen Raum  $\langle \mathcal{A}^G, \mathfrak{T} \rangle$ , wobei im Falle unendlicher Orbits  $G = \mathbb{Z}$  oder  $G = \mathbb{N}$  gilt<sup>14</sup>, werden die Eigenschaften der **Orbits**

$$\mathcal{O}[\omega] := \{\mathcal{T}^\xi(\omega) \mid \xi \in G\} \subseteq \mathcal{A}^G, \quad \omega \in \mathcal{A}^G,$$

untersucht.  $\mathcal{A}^G$  ist die Menge aller Symbol-Folgen (Worte) über einem gegebenen Alphabet  $\mathcal{A} = \{x_1, \dots, x_\Lambda\}$ . Sie wird versehen mit der Produkt-Topologie<sup>15</sup>  $\mathfrak{T}$ .  $\mathcal{T}$  ist der Translationsoperator (engl. *shift operator*)  $\mathcal{T}(\omega^{[\mu]}) = \omega^{[\mu+1]}$ ,  $\mu \in G$ , der für endliches  $|G|$  gerade eine zyklische Permutation induziert. Jedem dieser abgeschlossenen Orbits entspricht in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  ein bezüglich der starken Operator-Topologie abgeschlossenes *Ensemble* von Hamilton-Operatoren  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$ , bzw. allgemeiner ein Ensemble von Resolventen  $\hat{\mathcal{G}}_\omega(z)$  mit

$${}^R\hat{\mathcal{T}}^\xi \cdot \hat{\mathcal{G}}_\omega(z) := \hat{\mathcal{T}}^\xi \hat{\mathcal{G}}_\omega(z) (\hat{\mathcal{T}}^\dagger)^\xi = \hat{\mathcal{G}}_{\omega'}(z), \quad \omega' = \mathcal{T}^\xi(\omega) \in \mathcal{O}[\omega] \subseteq \mathcal{A}^G.$$

Diese Situation ist bekanntlich Ausgangspunkt für verschiedene Formen von Konfigurationsmittlungen, sowie bei der Konstruktion der irreduziblen Darstellungen eines gegebenen Hamilton-Operators  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$ . Das Paar  $\Sigma = (\langle \mathcal{A}^G, \mathfrak{T} \rangle, \mathcal{T})$  läßt sich als topologisches dynamisches System (sog. **“Bernoulli-Shift”**, oder *“full-shift”*) auffassen, dessen Orbits jeweils ein sog.<sup>16</sup> **“symbolisches dynamisches System”** (oder *“sub*

<sup>12</sup>Statt  $\mathbb{Z}^D$  kann man auch den kontinuierlichen Fall mit  $\mathbb{R}^D$  auf analoge Weise betrachten, d.h. man betrachte  $G = \{\mathcal{T}_g \mid g \in \mathbb{R}^D\}$ .

<sup>13</sup>Den Abschluß der Familie von Translanten bezüglich der *starken* Operator-Topologie ist *per definitionem* die Hülle  $\text{Hull}(\hat{\mathcal{H}})$  von  $\hat{\mathcal{H}}$ .

<sup>14</sup>Der kontinuierliche Fall  $G = \mathbb{R}$  soll hier, trotz seiner zentralen Bedeutung für die allgemeine Zeitentwicklung von Zuständen (Dichte-Operatoren), nicht betrachtet werden.

<sup>15</sup>Auf dem Alphabet  $\mathcal{A} = \{x_1, \dots, x_\Lambda\}$  (mit endlichem  $\Lambda$ ) selbst ist die diskrete Topologie erklärt.

<sup>16</sup>Das ist eine spezielle Form eines diskreten dynamischen Systems, definiert auf dem Raum abstrakter Symbole.

shift")  $\Sigma = (\langle \Omega, \mathfrak{T} \rangle, \mathcal{T})$  bilden, wobei  $\Omega = \overline{\mathcal{O}[\omega]}$  der Abschluß von  $\mathcal{O}[\omega]$  bezüglich der induzierten Produkt-Topologie ist. Klassenbildung (irreduzible Darstellung für die Observable  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$ ) und Konvergenzbegriff sind in diesem Zusammenhang wichtige Begriffe, die uns im Laufe dieser Arbeit beschäftigen werden. Kombinatorische Eigenschaften, wie das Auftreten von Potenzen von Faktoren und Palindrome<sup>17</sup>) spielen eine wichtige Rolle bei der Bestimmung des Spektraltyps. Diese Beziehung zwischen den kombinatorischen Eigenschaften der geometrischen Struktur und den physikalischen Eigenschaften sind letztendlich immer auf die enge Beziehung zwischen dem topologischen dynamischen System<sup>18</sup>  $\Sigma = (\Omega, \mathcal{T})$  und der zugehörigen einhüllenden  $C^*$ -Algebra<sup>19</sup>  $C^*(\Sigma) = C(\Omega) \rtimes_\alpha G$  zurückzuführen, d.h. dem verschränkten Produkt von  $C(\Omega)$  (= Menge aller stetigen Funktionen über dem kompakten Hausdorff-Raum  $\Omega$ ) und der diskreten Gruppe  $G = \mathbb{Z}$ .  $C^*(\Sigma)$  besitzt eine Darstellung in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$ . Jedem Element  $\omega \in \Omega$  kann auf diese Weise ein Hamilton-Operator  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$ , oder allgemeiner (im Falle, daß  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$  ein unbeschränkter Operator ist) eine Resolvente  $\hat{\mathcal{G}}_\omega(z)$  zugeordnet werden.

- **Abstrakte Dynamik** ( $\Phi = (\Omega, \mathfrak{B}, \mu, \mathcal{T})$  ist der Maß-Raum,  $\mu$  das  $\mathcal{T}$ -invariante Haar-Maß). “Metrische” Aspekte, wie die *Häufigkeit* bestimmter Buchstaben-Teilfolgen  $(y_\mu)_\mu$  im jeweiligen (unendlichen) Wort  $\omega \in \Omega$  spielen eine wichtige Rolle bei der Charakterisierung elektronischer Eigenschaften (z.B. “gap-labelling”-Theorem [Cla79, Joh82, Bel83, Bel92, Bel93, Bel2000]). Das auf dem Maß-Raum  $\langle \Omega, \mathfrak{B} \rangle$  erklärte Maß  $\mu$  auf der einen Seite und die Autokorrelationsfunktion (“Fourierspektrum”, das Spektrum eines *unitären* Operators, Strukturfaktor) bzw. die integrierte Zustandsdichte (IDOS) (Spektrum des *selbstadjungierten* Hamilton-Operators, inverses Spektralproblem) auf der anderen, sind auf das engste miteinander verknüpft. Die relevanten Operator-Algebren (projektor-wertige Maßfunktionen  $\hat{\mathcal{E}}_\omega$ , vgl. z.B. [Ree72-I, S. 267/367]) sind hier die von Neumann-Algebren<sup>20</sup> (=  $W^*$ -Algebren).
- **Differenzierbare Dynamik** ( $\Pi$  = differenzierbare Mannigfaltigkeit,  ${}^R\mathcal{M}$  = Diffeomorphismus). Jeder Substitution  $\mathcal{M}$  entspricht ein “Super-Operator”  ${}^R\hat{\mathcal{M}}$  auf  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$ , welcher in unserem Falle den tridiagonalen tight-binding-artigen Hamilton-Operator  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$  auf einen neuen, wiederum tight-binding-artigen und tridiagonalen *effektiven Hamilton-Operator*  $\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{M}(\omega)}^{\text{eff}}[z]$  abbildet, dessen Parameter  $\vec{x}$  (= Parametertupel als Element im Phasenraum  $\Pi$ ) durch den Diffeomorphismus  ${}^R\mathcal{M}$  aus den alten hervorgehen. Der Zusammenhang mit der Theorie der “*iterierenden Funktionensysteme*” (IFS) ist evident (s. z.B. [Kie2002, Fu2000] und die dort zitierte Literatur).

<sup>17</sup>Das Auftreten von Palindromen (lax formuliert sind das Worte, die vorwärts wie rückwärts gelesen das Gleiche ergeben, Bsp. *abba*) sind ein hinreichendes Kriterium für das Auftreten von singulär stetigem Spektrum, falls  $\sigma_{\text{ac}} = \emptyset$  ist. Zum Gordon’sches Argument s. z.B. [Gor76, Dan2000-2, Dan2000-3], zum Konzept der semiprimitiven Substitutionen s. [Bov93]. Beide laufen darauf hinaus die Existenz von Eigenwerten (Punktspektrum). Palindrome und ihre Bedeutung für das Spektrum sind in [Hof95-2, All97, Dan2000-4, Dan2002] behandelt. Vgl. auch [Wal2003].

<sup>18</sup>Wir lassen im Folgenden die Referenz auf die zugrundeliegende Topologie in  $\Sigma = (\langle \Omega, \mathfrak{T} \rangle, \mathcal{T})$  der Einfachheit halber weg und schreiben  $\Sigma = (\Omega, \mathcal{T})$ .

<sup>19</sup>S. z.B. [Tom87, Bel88, Her92, And98] und die dort zitierte Literatur, sowie [Min97, Jeo2000]. Vgl. a. [Wal2003].

<sup>20</sup>S. z.B. [Tom87, Gio95, Len2002]. Einige der wichtigsten Fakten findet man auch im [Wal2003] zusammengetragen.

Ist  $\Omega$  ein kompakter Hausdorff–Raum (was für alle uns interessierenden Orbits der Fall ist) und  $\Sigma = (\Omega, \mathcal{T})$  ein topologisches dynamisches System, dann gibt es ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu(\cdot)$  der Borel'schen  $\sigma$ –Algebra in  $\Omega$  derart, daß  $\mu(\mathcal{T}^{-1}\omega) = \mu(\omega)$  für alle Borel-meßbaren Mengen  $\omega$  aus  $\Omega$  gilt [Bro76, S. 44]. Dies bedeutet, das Tupel  $\Phi = (\Omega, \mathfrak{B}, \mu, \mathcal{T})$  ist ein abstraktes dynamisches System. In unserem Falle ist diese Zuordnung sogar eindeutig, da das System  $\Sigma$  minimal ist. Die Verhältnisse sind in folgendem Diagramm zusammengefaßt.

$$\begin{array}{ccccccc}
 \Omega & \longleftrightarrow & \mathbf{C}(\Omega) & \xleftarrow{*} & \mathbf{C}(\Omega)^* & \xrightarrow{\cong} & \mathbf{rca}(\Omega) & \longleftrightarrow & (\Omega, \mu) \\
 \updownarrow \mathcal{T} & & \updownarrow R\hat{\mathcal{T}} & & \updownarrow R\hat{\mathcal{T}}^* & & & & \updownarrow \mathcal{T} \\
 \Omega & \longleftrightarrow & \mathbf{C}(\Omega) & \xleftarrow{*} & \mathbf{C}(\Omega)^* & \xrightarrow{\cong} & \mathbf{rca}(\Omega) & \longleftrightarrow & (\Omega, \mu)
 \end{array}$$

Hierbei ist  $\mathbf{C}(\Omega)$  der Banach–Raum (Abel'sche  $C^*$ –Algebra) aller stetigen Funktionen auf dem kompakten Hausdorff–Raum  $\Omega$ .  $\mathbf{C}(\Omega)^*$  ist der zugehörige Dual–Raum aller stetigen Funktionale auf  $\mathbf{C}(\Omega)$ . Nach dem Darstellungssatz von Riesz–Markoff ist er isometrisch isomorph zum Raum aller komplexwertigen Baire–Maße  $\mathbf{rca}(\Omega)$  auf  $\Omega$ .<sup>21</sup>  $R\hat{\mathcal{T}}^*$  ist der zu  $R\hat{\mathcal{T}}$  adjungierte Super–Operator. Bemerkenswerter Weise ist  $R\hat{\mathcal{T}}$  genau dann ein  $*$ –Isomorphismus, wenn  $\mathcal{T}$  ein Homöomorphismus ist<sup>22</sup>.

Die Abbildung der geometrischen Struktur auf die entsprechende physikalische Struktur ist ein kontravarianter Funktor

$$\mathcal{T}: \mathbf{Comp}\mathfrak{T}_2\mathfrak{Spd} \rightarrow C^*\mathbf{Alg}, \quad \Omega \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z} \mapsto C^*(\mathbf{C}(\Omega), \mathbb{Z}, \alpha) = \mathbf{C}(\Omega) \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z},$$

von der Kategorie<sup>23</sup> der kompakten Gruppoiden  $\Omega \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z}$  in die Kategorie der  $C^*$ –Algebren. Der Grund dafür, daß wir statt der kompakten Hausdorff–Räume  $\Omega = \mathcal{O}[\omega]$  das komplexere Konstrukt des kompakten Gruppoids  $\Omega \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z}$  benutzen, ist darin zu suchen, daß es, sowohl dem Orbit  $\mathcal{O}[\omega]$  als einem kompakten Hausdorff–Raum, als auch der durch den Shift–Operator  $\mathcal{T}$  implizierten inneren Struktur von  $\mathcal{O}[\omega]$ , gleichermaßen Rechnung trägt. Die *Struktur* des dynamischen Systems  $\Sigma = (\Omega, \mathcal{T})$  wird somit durch das entsprechende Gruppoid vollständig beschrieben. Auf ihm wird die sog. einhüllende  $C^*$ –Algebra  $C^*(\Sigma)$  eingeführt, deren Darstellung<sup>24</sup> (=  $*$ –Homomorphismus) in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  alle uns interessierenden Hamilton–Operatoren  $\hat{\mathcal{H}}_{\omega}$ , bzw. deren Resolventen  $\hat{\mathcal{G}}_{\omega}(z)$ , als Elemente enthält. In [Ren80] findet man die zugehörige Theorie der  $C^*$ –Algebren auf Gruppoiden entwickelt<sup>25</sup>. Die hier

<sup>21</sup>S. z.B. [Ree72–I, S. 107] und [Dun57, S. 265] oder die Ausführungen in [Wal2003].

<sup>22</sup>S. [Dun57, S. 278] oder auch [Wal2003].

<sup>23</sup>Eine **Kategorie** besteht aus einer Ansammlung von Objekten (z.B. Gruppen, Banach–Räume oder  $C^*$ –Algebren) und einer Menge von strukturerhaltenden Morphismen (Gruppen–Homomorphismen, beschränkte lineare Transformationen bzw.  $*$ –Morphismen), welche die innere Struktur der Objekte respektieren und dem Assoziativgesetz genügen. Ein **Gruppoid** ist eine sog. kleine Kategorie, in der sämtliche Morphismen Isomorphismen sind. Ein Funktor ist ein strukturerhaltender Morphismus zwischen Kategorien. Zu den einzelnen Details s. z.B. [Her73, Adá90] und die Artikel [Ren80, Bro87] für weitere Informationen zum Gruppoid. Die für uns wichtigsten Zusammenhänge findet man im ersten Teil von [Wal2003] zusammengetragen.

<sup>24</sup>Wenn man will, kann man die Darstellung wieder als ein Funktor auffassen, welcher  $C^*$ –**Alg** in **Ban**, d.h. in die Kategorie der Banach–Räume der auf einem Hilbert–Raum erklärten beschränkten Operatoren, abbildet.

<sup>25</sup>Das entsprechende, für unsere Belange ausreichende, abgespeckte Programm, findet man auch in [Bel93]

favorisierte Beschreibungsform durch Kategorien und Funktoren trägt dem Ziel Rechnung, die Transformation gefundener Strukturen aus der einen Welt (die der Worte, d.h. in unserem Falle der Welt der geometrischen Strukturen) in die entsprechenden Strukturen der anderen Welt (die der Hamilton–Operatoren bzw. deren Resolventen) auf eine transparente Weise zu transformieren bzw. zu übersetzen. Ein entscheidender Punkt hierbei ist, daß der Funktor  $\mathbb{T}$  bestimmte strukturelle Eigenschaften erhält. Ein Beispiel ist die Erhaltung des Produkts<sup>26</sup>. Das bedeutet, daß die natürliche Produkt–Topologie der punktweisen Konvergenz in  $\Omega$  in “natürlicher Weise” auf das entsprechende Pendant, der Produkt–Topologie  $\mathfrak{T}_s$  (= starke Operator–Topologie) in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$ , dem Banach–Raum aller beschränkter Operatoren auf dem Hilbert–Raum  $\mathbb{H}$ , “transformiert” wird. Fixpunkte sind eine topologische Eigenschaft, die durch strukturerhaltende Funktoren vererbt werden und vieles andere mehr.

Wir werden im Folgenden etwas lax die Schreibweise

$$\mathbb{T}: \overline{\mathcal{O}[\omega]} \rightarrow \mathcal{B}(\mathbb{H}), \quad \omega \mapsto \hat{\mathcal{G}}_\omega(z)$$

benutzen, obwohl der Funktor  $\mathbb{T}$  eine Abbildung des Gruppoids, also eines gegebenen Objekts aus  $\mathbf{Comp}\mathfrak{T}_2\mathcal{Gpd}$ , in ein Objekt aus  $C^*\text{-Alg}$ , d.h. die  $C^*$ –Algebra<sup>27</sup>  $C^*(\Sigma) \cong C(\Omega) \rtimes_\alpha \mathbb{Z}$ , ist. Man kann den Funktor als die Grundlage des allgemeinen Prozedere betrachten, welches man gewöhnlich als Konfigurationsmittelung bezeichnet. In diesem Sinne lassen sich periodische, aperiodische und amorphe Strukturen einheitlich durch die innere Struktur (= Gruppoid–Struktur) des zugehörigen Orbits  $\Omega = \overline{\mathcal{O}[\omega]}$  bzw. seinem Pendant in  $C^*\text{-Alg}$ , der linearen Hülle  $\text{Hull}(\mathfrak{H}_\omega)$  des Operators  $\mathfrak{H}_\omega$  bzw. seiner Resolventen  $\hat{\mathcal{G}}_\omega(z)$  beschreiben.

Was hat aber die kurz gestreifte, sehr weit ausgereifte Theorie der (topologischen/abstrakten) dynamischen Systeme und ihr Pendant in  $C^*\text{-Alg}$ , die sog.  $C^*$ –dynamische Systeme, mit der Theorie der Ortsraum–Renormierung zu tun, d.h. was haben die oben genannten ersten beiden Typen dynamischer Systeme mit dem dritten, den Diffeomorphismen gemein? Es ist wohl nicht verwunderlich, daß man die physikalischen Eigenschaften selbstähnlicher Strukturen gerade mit den Methoden der Renormierungstheorie besonders gut beschreiben kann. Aus dem oben Gesagten sollte man eigentlich erwarten, daß dies ein allgemeiner Zusammenhang ist. Hierbei ist es unerheblich, daß man i.a. Renormierung im  $k$ –Raum (bzw. Impuls–Raum) betreibt, wobei die Reskalierung der Felder und die geeignete Wahl von *cutoffs* im Vordergrund stehen, wenn man bedenkt, daß dies nur ein duales Bild zur Ortsraum–Renormierung ist, also im gewissen Sinne sich die zugrundeliegenden Strukturen durch einen geeigneten Funktor von der Kategorie der Ortsraum–Darstellungen in die Kategorie der Impulsraum–Darstellungen abbilden lassen und umgekehrt. Es wäre interessant eine “darstellungsfreie” Form der Renormierungstheorie zu entwickeln und alle strukturellen Eigenschaften der durch Kadanoff, Widom und Wilson entwickelte Renormierungstheorie im Sinne der Kategorien–Theorie auszudrücken. Doch zurück zu der im Raum stehenden Frage! Es ist eines der wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit aufzuzeigen, wie man für eine spezielle Klasse von Orbits

---

dargestellt. Letztlich läßt sich jedem topologischen dynamischen System  $\Sigma = (\Omega, \mathfrak{T})$  ein  $C^*$ –dynamisches System  $(\mathfrak{A}, \mathbf{G}, \alpha)$  zuordnen, dessen kovariante Darstellung die Hamilton–Operatoren  $\mathfrak{H}_\omega$  zu jedem  $\omega \in \Omega$  als Elemente enthält. Analog läßt sich jedem abstrakten dynamischen System ein  $W^*$ –dynamisches System  $(\mathfrak{M}, \mathbf{G}, \alpha)$  zuordnen, wobei nun, anstatt der  $C^*$ –Algebra  $\mathfrak{a}$  die von Neumann–Algebra  $\mathfrak{m}$  zu stehen kommt. Details findet man in [Ped79, Tom87]. Im ersten Teil von [Wal2003] wurden die notwendigsten Fakten hierzu zusammengetragen.

<sup>26</sup>D.h. in unserem Falle das topologische Produkt. S. hierzu die Diskussion in [Wal2003].

<sup>27</sup>S. [Bel93] oder auch die Zusammenfassung aus [Wal2003].

$\mathcal{O}[\omega]$ ,  $\omega \in \mathcal{A}^G$ , jedes Element  $\omega' \in \mathcal{O}[\omega]$  nicht nur in der bekannten Form  $\omega' = \mathcal{T}^\xi(\omega)$  darstellen kann, sondern auch durch eine (unendliche) Folge  $(\mathcal{M}_{n,k_n})_{n \in \mathbb{N}}$  von elementaren (expandierenden) Substitutionen (= “*Inflation*”)  $\mathcal{M}_{n,k_n}$ . Wir haben oben gesehen, daß ein Fixpunkt  $\mathcal{M}(\omega) = \omega$  (transferiert durch den Funktor  $\mathcal{T}$ ) unter gewissen Umständen (auf die wir noch nicht eingegangen sind) die Renormierungsgleichungen bestimmt und umgekehrt. In unserem Verständnis sind beide nur die zwei verschiedenen Seiten ein und derselben Münze. Es kommt daneben aber ein weiteres Phänomen hinzu, welches in der uns bisher zugänglichen Literatur noch nirgends diskutiert wurde: Das Konzept der Super-Inflation. Hierbei verstehen wir unter diesem Begriff das Transformationsverhalten des *gesamten Orbits* unter einem Ensemble von Substitutionen, d.h. wir interessieren uns für den “Super-Orbit”  $\{\mathcal{O}[w^{(n)}]\}_{n \in \mathbb{N}}$ , wobei  $\mathcal{M}_{n,k}(\mathcal{O}[w^{(n-1)}]) \subseteq \mathcal{O}[w^{(n)}]$  gelten möge, und seine Fixpunkteigenschaften im Sinne von  $\mathcal{M}_{n,k}(\mathcal{O}[\omega]) \subseteq \mathcal{O}[\omega]$  für gewisse (oder sogar alle)  $\mathcal{M}_{n,k} \in \{\mathcal{M}_{n,k}\}_k$ . Wir werden sehen, daß die von uns im folgenden eingeführten “hierarchischen” Graphen einen ersten Zugang zu dieser Problematik bieten. Man kann letztere als eine “Darstellung” des Gruppoids  $\mathcal{O}[\omega] \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z}$ , bzw. genauer seines ihm zugrundeliegenden Graphen, auffassen in dem jedem Element  $\mathcal{T}_g$  aus der oben definierten Gruppe  $\mathcal{G} = \{\mathcal{T}_g \mid g \in \mathbb{Z}\}$  eine Folge von elementaren Substitutionen  $\prod_n \mathcal{M}_{n,k_n}$  derart zugeordnet werden kann, daß  $\mathcal{T}_g \cdot \prod_n \mathcal{M}_n(x_1) = \prod_n \mathcal{M}_{n,k_n}(x_1)$ ,  $x_1 \in \mathcal{A}$  gilt. Damit gelingt es uns — zumindest für die in dieser Arbeit betrachteten Strukturen — das Konzept der Renormierung mit dem der ( $C^*$ -)dynamischen Systeme zu verknüpfen. Das Ergebnis bezeichnen wir mit dem Begriff der **Pfad-Renormierung**.

## Die Struktur dieser Arbeit

Nachdem wir uns einen kleinen Einblick in einige der inneren Zusammenhänge und Strukturen der großen Welt unseres Seins gestatteteten, wollen wir auf die Struktur dieser Arbeit zu sprechen kommen. Betrachten wir Abb. 1. **Ziel dieser Arbeit** ist es, einige Aspekte der elektronischen Einteilchen-Eigenschaften derjenigen eindimensionalen Ketten zu untersuchen, die sich auf eindeutige Art und Weise durch die Elemente  $\omega$  von sog. **DOL-Sprachen** beschreiben lassen, d.h. denen eine eindimensionale deterministische (**D**) geometrische Struktur zugrunde liegt, die sich durch Anwendung *ad infinitum* einer (oder allgemeiner einer beliebigen Folge von) Substitutionsregel(n)  $\mathcal{M}$  auf ein Ausgangssymbol<sup>28</sup>  $\mathbf{0}$  (= ein gegebener Buchstaben eines Alphabetes  $\mathcal{A}_\Lambda$ ) ergibt. Durch die Einführung des abstrakten Begriffes der Kategorie gelingt es einen “Durchbruch”, eben eine “Tür<sup>29</sup>”  $\mathcal{T}$ , zu finden, welcher einen for-

<sup>28</sup>Diese Nomenklatur wurde so ursprünglich von A. Lindenmayer eingeführt, der die heute mit **DOL-Sprachen** bezeichneten Mengen zum Studium spezieller biologischer Prozesse einführte [Lin68]. Der dritte Buchstaben in der Bezeichnung **DOL** wurde zu seinen Ehren so gewählt. — Ein **DOL-System** (s. z.B. [Roz80]) ist somit ein Tripel  $\mathfrak{g} = (\mathcal{A}_\Lambda, \mathcal{M}, w)$ , wobei  $\mathcal{A}_\Lambda$  ein Alphabet über  $\Lambda$  Buchstaben ist,  $\mathcal{M}$  ein Morphismus und  $w \in \mathcal{A}^*$  ( $\mathcal{A}^*$  = Menge aller Worte über  $\mathcal{A}_\Lambda$ ) ein Ausgangswort in den Buchstaben von  $\mathcal{A}_\Lambda$ , auf das der Morphismus  $\mathcal{M}$  wirkt. Die Sprache  $\mathcal{L}(\mathfrak{g})$  (“*language*”) von  $\mathfrak{g}$  ist definiert durch den Orbit  $\mathcal{L}(\mathfrak{g}) = \{\mathcal{M}^n(w) \mid n \in \mathbb{N}\}$ .

<sup>29</sup>Man kann natürlich auch von einer Verankerung der physikalischen Welt in der zugrundeliegenden geometrischen Struktur ausgehen. Dann müßten wir sinniger Weise eher den sechsten Buchstaben des hebräischen Alphabetes (bekanntlich ist jeder hebräische Buchstabe gleichzeitig eine bestimmte Zahl  $\aleph = 1, \beth = 2$  usw. bis 10, die Zehner bis 100 und die Hunderter bis 400 = “*teth*”, dem letzten Buchstaben im Alphabet), das hebräische  $w$  (“*waw*” = 6 = “und”) anstatt des vierten Buchstabens  $\beth$  benutzen. Als Hieroglyphe hat “*waw*” die Bedeutung eines “Pflocks” oder “Hakens”, welcher zwei (getrennte) Dinge miteinander verbindet. Der wohl bekannteste “Haken”, welcher die unterschiedlichsten Menschen miteinander verbindet ist wohl das

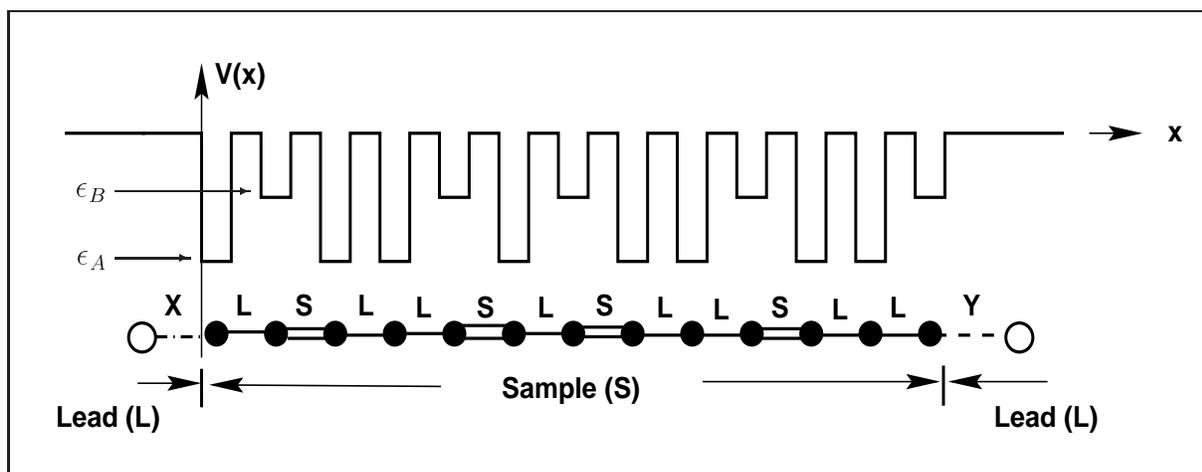


Abbildung 1: Tight-Binding artiges Modell: Eine mögliche Anordnung von Atomen mit zwei verschiedenen Transfer-Energien  $L \Leftrightarrow t_L$  und  $S \Leftrightarrow t_S$  wird auf das Wort  $w(L, S) = LSLLSLSLLSLL$  abgebildet. Darüber ein Beispiel für ein Kronig-Penney Modell mit zwei verschiedenen Potential-tiefen  $\epsilon_A$  und  $\epsilon_B$  (Zwischenräume sind für das Folgende ohne jeglichen Belang) wird auf das Wort  $w(A, B) = ABAABABAABAAB$  abgebildet.

malen und tragfähigen Durchgang von der geometrischen Welt der räumlichen Anordnung in die physikalische Welt gestattet.

Im ersten Kapitel wollen wir uns zunächst kurz mit einigen Aspekten der kombinatorischen Gruppentheorie und mit der topologischen/abstrakten Dynamik in  $\Omega$  beschäftigen, soweit es uns im Rahmen dieser Arbeit zum Verständnis unserer Untersuchungen und der Einordnung unserer Ergebnisse in einen allgemeineren Kontext als notwendig erscheint. Hierbei geht es vor allem um die *symbolische Beschreibung* verschiedener Ordnungsstrukturen, die im Bereich zwischen “periodisch” und “amorph” liegen. Startpunkt unserer eigenen Überlegungen sind dann die Objekte der Kategorie  $\mathbf{Comp}\mathfrak{T}_2$  bzw.  $\mathbf{Comp}\mathfrak{T}_2\mathfrak{Spd}$  der kompakten Hausdorff-Räume  $\Omega = \overline{\mathfrak{O}[\omega]}$ , d.h. den jedem beliebigen unendlichen **DOL**-Wort zugeordneten Orbits und den auf ihnen wirkenden Transformationsgruppen  $\mathcal{G}$ . *Das Kernresultat unserer Untersuchungen hierzu besteht darin, daß wir die formale Grundlage für einen Darstellungswechsel legen, bei dem jedes Element in  $\mathfrak{O}[\omega]$  durch eine Folge von elementaren Substitutionen erzeugt wird. Wir werden dies die “RG-Darstellung”<sup>30</sup> zu  $\mathfrak{O}[\omega]$  nennen. Diese Folgen elementarer Substitutionen, sind durch einzelne Pfade in gewissen hierarchischen  $\Phi$ - bzw.  $\Gamma$ -Graphen<sup>31</sup> gegeben, die wir mit dieser Arbeit in ihrer vollen Allgemeinheit der Öffentlichkeit vorstellen wollen<sup>32</sup>.*

Im zweiten Kapitel wollen wir auf die Elemente der zugehörigen Objekte in  $C^*$ - $\mathfrak{Alg}$ ,

“world wide web” = www = 666. Der Buchstabe “*waw*” scheint aber noch nicht in die Fonts von Latex eingegangen zu sein, so daß wir statt dessen den vierten Buchstabens  $\daleth$  (“*Daleth*” = “Tür”) benutzen, dem als Hieroglyphe die Bedeutung einer “Tür” (= **Funktor**) zukommt, durch die man von einer Kategorie zu einer anderen gelangen kann.

<sup>30</sup>Renormierungsgruppendarstellung deshalb, weil die einzelnen Substitutionen unmittelbar mit entsprechenden Renormierungstransformatinen (sog. Feshbach-Operatoren) in Verbindung gebracht werden können.

<sup>31</sup> $\Phi$  bzw.  $\Gamma$  steht hier für die Menge aller Substitutionen  $\mathfrak{M}$  bzw. die Menge der Nielsen-Transformationen  $M$ .

<sup>32</sup>Der Spezialfall der verallgemeinerten Fibonacci-Worte wurde in [Wal97] veröffentlicht (s. Kapitel III.2).

der  $C^*$ -Algebren, deren kovariante Darstellung in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  jedem Wort aus  $\Omega$  die Resolvente  $\hat{\mathcal{G}}_\omega(z) = (z - \hat{\mathcal{H}}_\omega)^{-1}$  zuordnet, eingehen, um im dritten Kapitel schließlich auf die zugehörigen (struktureerhaltenden) *Morphisms* (Feshbach–Operatoren) ausführlich zu sprechen kommen. Nachdem wir in Kapitel II.1 die Ortsraum–Darstellung des Hamilton–Operators und der Green’schen Funktion abgehandelt haben, werden wir uns den uns interessierenden physikalischen Größen der lokalen, integrierten und gewöhnlichen Zustandsdichte zuwenden. Erstere liefert ein den zyklischen Vektoren  $\vec{\delta}_\mu$  zugeordnetes *lokales* Maß, während die integrierte Zustandsdichte die eigentliche, in unserem Falle translations–invariante, Maßfunktion darstellt. Da sämtliche Orbits  $\mathcal{O}[\omega] \cong \mathcal{O}[\hat{\mathcal{H}}_\omega]$  minimal sind, ist sie *eindeutig* festgelegt. Die integrierte Zustandsdichte ist als die auf der  $C^*$ -Algebra  $C^*(\Sigma)$  von  $\hat{\mathcal{H}}$  erklärte Spur<sup>33</sup> pro Volumen<sup>34</sup>

$$\mu(E) = \lim_{V \uparrow \mathbb{R}} \frac{1}{V} \mathbf{Sp}(\chi(\hat{\mathcal{H}} \leq E)) = \lim_{V \uparrow \mathbb{R}} \frac{1}{V} \int_{-\infty}^E \langle\langle \mathbf{1} | \frac{1}{\pi} \mathfrak{Im}(\hat{\mathcal{G}}^+(E')) \rangle\rangle dE', \quad (7)$$

(**Shubin’sche Formel**<sup>35</sup>) eine der wichtigsten Invarianten (sog. **integrierte Zustandsdichte** (IDOS)).  $\langle\langle \hat{\mathcal{H}}_1 | \hat{\mathcal{H}}_2 \rangle\rangle := \mathbf{Sp}(\hat{\mathcal{H}}_1^* \cdot \hat{\mathcal{H}}_2)$  ist das Skalarprodukt auf dem Liouville’schen Raum  $\mathcal{B}^{(2)}(\mathbb{H})$ , d.h. dem Hilbert–Raum aller Hilbert–Schmidt–Operatoren. Auf den algebraischen Eigenschaften der Spur baut das im Rahmen der K–Theorie abgeleitete sog. Gap–Labelling–Theorem auf [Bel92, Bel93], eines der zentralen Säulen im Gebäude der Quasikristall–Forschung. Der Ausdruck unter dem Integral in (7) ist natürlich die **Zustandsdichte** (DOS). Wählt man in (7) statt  $\mathbf{1}$  den Rang–Eins Operator  $\hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ , mit einem beliebigen Zustand  $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$ , so ergibt sich unmittelbar für das dem Zustand  $|\psi\rangle$  zugeordnete Spektralmaß von  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$  (**lokale Zustandsdichte** (LDOS))

$$\rho_\psi(E) = \langle\langle \hat{\rho}_\psi | \frac{1}{\pi} \mathfrak{Im}(\hat{\mathcal{G}}^+(E)) \rangle\rangle, \quad \hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Es gibt eine weitere “spurbehaftete” Größe, die Kubo–Leitfähigkeit. Dieses Mal spielt das auf dem Liouville’schen Raum  $\mathcal{B}^{(2)}(\mathbb{H})$  definierte **Mori’sche Skalarprodukt** [Fic90, Rau96]

$$\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_\rho := \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \mathbf{Sp}(\hat{\rho}_\beta \hat{\mathcal{A}}^\dagger e^{-\alpha \hat{\mathcal{J}} t} \hat{\mathcal{B}} e^{\alpha \hat{\mathcal{J}} t}) d\alpha, \quad \hat{\rho}_\beta = \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{J}}}}{Z}, \quad (8)$$

die zentrale Rolle zu. Hier ist  $\beta = 1/kT$  die inverse Temperatur und  $\hat{\rho}_\beta$  der kanonische statistische Operator mit der Zustandssumme  $Z = \mathbf{Sp}\{e^{-\beta \hat{\mathcal{J}}}\}$ . Der zu oben analoge Ausdruck für das Mori–Skalarprodukt des Eins–Operators  $\mathbf{1}$  mit einer gegebenen Observablen  $\hat{\mathcal{H}}$  liefert nun den *Erwartungswert*

$$\langle\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle\rangle_\beta := \langle\langle \mathbf{1} | \hat{\mathcal{H}} \rangle\rangle_\rho = \langle\langle \hat{\rho}_\beta | \hat{\mathcal{H}} \rangle\rangle, \quad \hat{\rho}_\beta = \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}}{Z}.$$

Diese Spur–pro–Volumen–Ausdrücke kann man ebenfalls als Mittelwert (genommen über den vollständigen Orbit  $\mathcal{O}[\omega]$ ) im Sinne der Birkhoff’schen Ergodentheorie verstehen. Daß dies

<sup>33</sup>D.h.  $\mathcal{N}(E)$  ist ein lineares Funktional auf  $C^*(\Sigma)$ , und somit ein Element des zugehörigen Dual–Raumes. Vgl. hierzu die Ausführungen in [Wal2003].

<sup>34</sup> $\chi$  ist die charakteristische Funktion, d.h. ein Projektor in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$ .

<sup>35</sup>S. [Bel93] oder vgl. die Zusammenfassung aus [Wal2003]. Um auf den rechtsstehenden Ausdruck in (7) zu gelangen, verwende man die Stone’sche Formel.

kein Zufall ist, ergibt sich aus der folgenden einfachen Beobachtung. Während  $\mathbf{O}[\omega]$  ein Orbit bezüglich der *Orts*koordinate ist (Shift-Operator mit dem “verallgemeinerten Impuls” als “Generator”), steht beim Begriff der statistischen Mittelung im Sinne der Quantenstatistik der (infinitesimale) Energie-Operator als Generator der unitären Gruppe  $\mathcal{U}(\mathbb{H})$   $\hat{\mathbf{U}}(t) = e^{it\hat{\mathcal{L}}}$  als Erzeuger des Orbits über der *Zeit*koordinate im Mittelpunkt des Interesses. Im Rahmen der linearen Antworttheorie findet man für die Antwortfunktion, die in dem uns interessierenden Falle des Elektronentransportes die Kubo-Suszeptibilität ist, [Fic90, S. 113]

$$\chi(\omega) = \beta \lim_{V \uparrow \mathbb{R}} \frac{1}{V} \langle\langle \delta \hat{\mathcal{J}} | \hat{\mathcal{L}} \hat{\mathcal{G}}_{<}(\omega) \delta \hat{\mathcal{J}} \rangle\rangle_{\rho}, \quad \hat{\mathcal{G}}_{<}(\omega) := \frac{1}{\omega + i\eta + \hat{\mathcal{L}}} \Big|_{\eta \rightarrow 0+}.$$

Hier ist  $\delta \hat{\mathcal{J}} := \hat{\mathcal{J}} - \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle_{\beta}$ , mit dem Stromoperator  $\hat{\mathcal{J}}$ , und  $\hat{\mathcal{L}} := \hbar^{-1}[\hat{\mathcal{H}}, \cdot]$  der **Liouville’sche (Super-)Operator**. Ist die integrierte Zustandsdichte direkt mit der “gewöhnlichen” Resolvente  $\hat{\mathcal{G}}_{\omega}(z) := (z - \hat{\mathcal{H}}_{\omega})^{-1}$  verknüpft, so erkennt man nun, daß die Strom-Strom-Korrelationsfunktion  $\sigma(\omega)$ , d.h. die Kubo-Suszeptibilität, direkt mit Super-Operator  $\hat{\mathcal{G}}_{<}(\omega)$ , der Resolventen des Liouville-Operators, verknüpft ist. Ihr, und somit den Transportphänomenen in 1-D, wollen wir uns anschließend an die Besprechung der Ortsraum-Darstellung von  $\hat{\mathcal{H}}_{\omega}$  zuwenden. Im Abschnitt **II.2** werden wir die entsprechende Kubo-Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$ , sowohl für das diskrete, als auch für das kontinuierliche Modell, auf eine zur allgemein bekannten und extrem nützlichen Transfer-Matrizen-Darstellung der Schrödinger-Gleichung analogen Transfer-Matrizen Darstellung bringen. Damit gelingt es uns, erstmalig einen direkten Zugang zu einem Renormierungsverfahren in Analogie zum Transfer-Matrizen Fall aufzuzeigen.

Das dritte Kapitel ist schließlich der Idee der **Pfad-Renormierung** gewidmet. Hier werden wir auf die notwendigsten Grundlagen und einige Anwendungsbeispiele zu sprechen kommen. Einige numerische Berechnungen werden wir zu Illustrationszwecken anfügen. Letztere gibt es in der Literatur zuhauf. Wir interessieren uns hier vorzugsweise für die diesen Berechnungen zugrundeliegenden gemeinsamen abstrakten Strukturen.

Es gehört zu den Verdiensten von K. Iguchi [Igu91] wohl als erster Berührungspunkte zwischen der Strukturbeschreibung einer Klasse eindimensionaler Quasikristalle und deren physikalischen Eigenschaften (unter Verwendung der *Methode der Transfer-Matrizen*) einerseits, und den Ergebnissen über die algebraischen Struktur der Automorphismengruppe  $\Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$  über der freien Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  von J. Nielsen [Nie17/24] aus den 20er Jahren, sowie den Untersuchungen zu Markoffschen Geodäten auf Fricke’schen Torus-Überdeckungen durch H. Cohn<sup>36</sup> [Coh72] auf der anderen Seite, aufgezeigt zu haben. Dabei wurde bisher wenig von der *Darstellung* von  $\mathbf{Aut}(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$ , d.h. von der algebraischen Struktur von  $\mathbf{Aut}(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$ , konkret Gebrauch gemacht. Der Grund hierfür ist wohl darin zu suchen, daß diejenigen Arbeiten, welche die Schrödinger-Gleichung auf das Transfer-Matrizen-Modell abbilden, sich praktisch ausschließlich für die *Spur*  $\Delta_{\tilde{N}}$  der resultierenden Transfer-Matrix  $\mathbf{T}_{0 \rightarrow \tilde{N}-1}$  interessieren, welche das Energie-Spektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}})$  kontrolliert. Die Situation ändert sich nachhaltig,

---

<sup>36</sup>Bemerkenswerterweise findet man schon in der zitierten Arbeit — zumindest im Prinzip — den vollständigen Zusammenhang zwischen Klasse der durch Automorphismen erzeugten Zwei-Buchstaben-Worte auf der einen Seite und einer Form von Einbettung der zugehörigen geometrischen Strukturen in höherdimensionale periodische Gitter ( $D = 2$ ) aufgezeigt. Letzteres ist heute unter dem Begriff des “*cut and project Verfahren*” allgemein bekannt. Bei H. Cohn übernimmt in diesem Zusammenhang die Geodätenforderung dieselbe Auswahlrolle wie die sog. “*Fensterfunktion*” beim *cut-and-project* Verfahren.

wenn man neben den “globalen” Eigenschaften auch an “lokalen” Eigenschaften des physikalischen Systems interessiert ist. Nach unserer Kenntnis ist die Bedeutung algebraischer Struktur von  $\mathbf{Aut}(\mathbb{F}(A))$ , bzw. allgemeiner von  $\mathbf{Hom}(\mathbb{F}(A_\lambda))$ , für die Untersuchung lokaler physikalischer Größen zugrundegelegten *Ortsraum-Dezimirungstechniken* [Wie88] (v.a. zur Berechnung der *Diagonalelemente* der Green’schen Funktion verwendet, wobei man die Dyson-Gleichung als Ausgangspunkt wählt, vgl. z.B. [Ash88, Cha89, Zho91–1] u.v.a.m.) erst in [Wal97] erkannt worden. Ziel dieser Arbeit ist es, durch die Entdeckung und Ausarbeitung von allgemein gültigen Konstruktionsvorschriften eine systematische Konstruktion von hierarchischen Graphen im Sinne von [Wal97] vorzustellen, deren Kenntnis notwendige Voraussetzung dafür ist, die konkrete Abfolge *sämtlicher* Renormierungsschritte explizit durchführen zu können, deren Kenntnis bei der Berechnung physikalischer Größen von grundlegendem Interesse sind. Abschließend verweisen wir auf das Brevier [Wal2003], in dem wir sämtliche, der hier nun vorgelegten Arbeit zugrundeliegenden mathematischen und physikalischen Konzepte (mit den entsprechenden Literaturstellen) zusammenfassen und auf die verschiedene, hier teilweise nur wage angedeuteten, bisher teilweise noch unerkannten Zusammenhänge näher eingehen und ausführen wollen.

## Danksagung

Nach so vielen Jahren, die ich nun am *Institut der Kondensierten Materie* (TKM) verbracht habe, will ich mich bei allen Freunden und den Kollegen am TKM herzlich bedanken, mit denen ich hier so angenehm zusammenarbeiten durfte und die mich durch die vergangenen Jahre begleitet, unterstützt und immer wieder davon abgebracht haben, meine Zeit allein mit dem Erstellen dieser Arbeit zu verbringen.

In ganz besonderer Weise möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Ralph v. Baltz für die über die Jahre gewährte Begleitung und Freiheit danken, durch die ich die einzigartige Gelegenheit hatte, meinen Forschungsleidenschaften völlig freien Lauf zu lassen. Es ist mir eine große Freude, daß sich Prof. Dr. Frank Herrlich vom *Mathematischen Institut II* der Universität Karlsruhe, sowie Prof. Dr. Hans Kroha vom *Physikalischen Institut* der Universität Bonn, bereit erklärt haben, das Korreferat meiner Arbeit zu übernehmen. Markus Döblinger, Joachim Hermison, Rolf Wittmann und Eeuwe Zijlstra möchte ich für zahlreiche Diskussionen über die weite Quasikristall-Welt danken, sowie Achim Mildenerger für die *Multiple Precision-Software-Fährte* und der anhaltend geduldigen Unterstützung bei der Installation und den damit verbundenen Problemen, sowie seine ständige Bereitschaft, meine Poster abzuschicken. Dank geht auch an D. H. Bailey und die NASA Ames deren *Multiple Precision Floating Point Computation Package* [Bai93] wir verwenden durften. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG möchte ich für die Finanzierung eines Teiles dieser Arbeit im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 195 und des Schwerpunktprogramms “Quasikristalle” danken. Bei Kurt Busch möchte ich auch auf diesem Wege für sein anhaltendes freundschaftliches Interesse an meinem Treiben hier am TKM bedanken.

Schließlich muß und will ich mich bei meinen Eltern und der ganzen Familie bedanken, ohne deren vielfältige Unterstützung diese Arbeit nie abgeschlossen worden wäre. Und damit komme ich zu meiner geliebten Frau Carola Burgdorf. Ihr sei hier für die mir entgegengebrachte Geduld, sowie für die große Hilfe, Myriaden von Schreibfehlern in dieser Arbeit zu

entdecken und auszumerzen, von Herzen gedankt.



# Kapitel I

## STRUKTUR–MODELL — und seine Beschreibung

### I.1 1–D Strukturmodell

#### I.1.1 Brevier der kombinatorischen Gruppentheorie

Um etwas konkretes vor Augen zu haben, wollen wir uns kurz noch einmal mit der Abb. 1 befassen.<sup>1</sup> Eine auf einer geraden Linie irgendwie angeordneten Abfolge von Atomen führt zu einer resultierenden Potentiallandschaft  $V(x)$ . Im Folgenden nehmen wir an, daß es eine endliche Anzahl von verschiedenen “Motiven” bzw. “Bausteinen” gibt, welche durch entsprechende Hintereinanderreihung zu der gewünschten Potentiallandschaft und der ihr zugrundeliegenden geometrischen Struktur führt. Allein die *Reihenfolge*, mit der die “Potentialmotive” aufeinander folgen, ist entscheidend (d.h. die Wahl des Ursprungs des Koordinatensystems ist belanglos, das entspricht der Forderung nach Homogenität der Probe). Es genügt somit, jedem Motiv–*Typ* eine Bezeichnung zu geben, wozu wir die “**Buchstaben**”  $x_i$  eines gegebenen,  $\Lambda$  verschiedene Buchstaben umfassenden “**Alphabetes**”  $\mathcal{A} = \{x_1, \dots, x_\Lambda\}$  benutzen wollen. In unserem Beispiel von Abb. 1 nennen wir die Buchstaben z.B.  $L$  (“**L**ong bound”) und  $S$  (“**S**hort bound”), so daß  $\mathcal{A} = \{L, S\}$ . In einem zweiten Schritt spezifiziert man, in welcher Reihenfolge die Potentialmotive, bzw. Buchstaben, auftreten. Eine derartige *endliche* Folge von Buchstaben aus  $\mathcal{A}$ ,

$$w(x_1, \dots, x_\Lambda) := (y_0, y_1, \dots, y_{N-1}), \quad y_\mu \in \mathcal{A}$$

nennt man ein “**Wort**” . Wir setzen somit eine gegebene *geometrische Struktur* mit einem Wort gleich. Eine Teilmenge von Worten aus der Menge aller möglichen Worte  $\mathcal{A}^*$  in den Buchstaben eines Alphabets  $\mathcal{A}$  bezeichnet man auch als eine “**Sprache**”<sup>28</sup>  $\mathcal{L}$  (“*language*”) aus  $\mathcal{A}^*$ . Mit  $w^{[\mu]} := y_\mu$  bezeichnen wir den  $(\mu + 1)$ -ten Buchstaben von  $w$ , und mit  $w^{[\mu, \nu]} := (y_\mu, y_{\mu+1}, \dots, y_\nu), \mu < \nu$ , den entsprechenden **Faktor** von  $w$ . Die **Menge aller endlichen Worte** in den Buchstaben von  $\mathcal{A}$  schreibt man als  $\mathcal{A}^* = \bigcup_{\mu \geq 1} \mathcal{A}^\mu$ . Diese Menge stattet man

---

<sup>1</sup>Für weitergehende Informationen zu den in diesem und dem folgenden Abschnitt referierten Konzepten, siehe z.B. [Bou66, Bro76, Fur81, Pet83] für die topologischen und ergodischen Aspekte, in [Mag66, Lot83, Lot2001] findet man die kombinatorischen Methoden schön beschrieben.

mit dem Produkt  $\mathcal{A}^* \times \mathcal{A}^* \mapsto \mathcal{A}^*$ :

$$(y_0, \dots, y_{N-1}) \cdot (z_0, \dots, z_{M-1}) := (y_1, \dots, y_{N-1}, z_0, \dots, z_{M-1}) \quad (\text{I.1})$$

(sog. “concatenation”) aus. Dieses Produkt ist offensichtlich assoziativ, so daß sich schreiben läßt

$$y_0 \cdot y_1 \cdot \dots \cdot y_{N-1} := (y_0, y_1, \dots, y_{N-1}),$$

wobei man den Buchstaben  $y \in \mathcal{A}$  mit der Folge  $(y)$  identifiziert. Im Folgenden werden wir der Einfachheit halber das Produktzeichen weglassen. Fügt man zu  $\mathcal{A}^*$  noch das **neutrale Element**  $\mathbb{1} := ()$  (“leeres Wort”) hinzu, so definiert  $\mathcal{A}^* \cup \{\mathbb{1}\}$  zusammen mit dem assoziativen Produkt (I.1) ein **freies Monoid**<sup>2</sup>  $\mathbb{M}(\mathcal{A})$  über der Erzeugendenmenge  $\mathcal{A}$ . Sei  $\mathcal{A}^+$  die Menge aller nicht leeren Worte über  $\mathcal{A}$ . Ausgestattet mit dem assoziativen Produkt (I.1) definiert dies gerade die sog. **freie Halbgruppe**<sup>2</sup>  $\mathbb{F}^+(\mathcal{A})$  über  $\mathcal{A}$ .

Mit jedem Wort  $w = y_0 y_1 \dots y_{N-1} \in \mathbb{M}$ , für das  $N \geq 2$  gilt, kann man auf eindeutige Weise ein “**duales Wort**”  $\Sigma = (\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N-2})$  in den “**dualen Symbolen**” (“**dualen Buchstaben**”)  $\sigma_\mu$  verknüpfen, indem man jedem Faktor  $w^{[\mu, \mu+1]} = y_\mu y_{\mu+1}$  von  $w$  ein  $\sigma_\mu = (y_\mu, y_{\mu+1}) = (x_i, x_j) =: \sigma^{(ij)}$  mit  $y_\mu = x_i, y_{\mu+1} = x_j \in \mathcal{A}$  zuordnet. So ist z.B. das zu  $w = abca$  gehörende duale Wort  $\Sigma = (\sigma^{(ab)}, \sigma^{(bc)}, \sigma^{(ca)})$ . Zur Motivation ihrer Bedeutung wollen wir aber schon hier vermerken, daß jedem *dualen* Wort auf praktisch eineindeutige Weise ein tight-binding-artiger Hamilton-Operator (3), siehe S. vi, zugeordnet werden kann, so daß man die in (6) definierte Transfer-Matrix  $\mathbf{T}_{-M \rightarrow \mu}$  auf der einen Seite, und das duale Wort  $\Sigma^{[0, \mu]}$  auf der anderen, als zwei Seiten ein und derselben Medaille auffassen kann.

Damit kommen wir zu dem Begriff, welchem in dieser Arbeit auf verschiedene Art und Weise zentrale Bedeutung zukommt. Ein **Morphismus**<sup>3</sup> (hier im Sinne einer **Substitution**)  $\mathcal{M} : \mathbb{M} \mapsto \mathbb{M}$  ersetzt jeden Buchstaben  $x_k \in \mathcal{A}$  durch ein *endliches* Wort

$$\mathcal{M} : x_k \mapsto w_k(x_1, \dots, x_\Lambda), \quad k = 1, \dots, \Lambda, \quad (\text{I.2})$$

Angewandt auf ein gegebenens Wort  $w$  führt das zu

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(w(x_1, \dots, x_\Lambda)) &= w(\mathcal{M}(x_1), \dots, \mathcal{M}(x_\Lambda)) \\ &= w(w_1(x_1, \dots, x_\Lambda), \dots, w_\Lambda(x_1, \dots, x_\Lambda)) = w'(x_1, \dots, x_\Lambda), \\ \mathcal{M}_2 \mathcal{M}_1(w) &= \mathcal{M}_2(\mathcal{M}_1(w)) = \mathcal{M}_2(w'). \end{aligned}$$

Mit S. Mozes nennt man  $\mathcal{M}$  auch einen *deterministischen* Morphismus [Moz89]. Verallgemeinern läßt sich (I.2) durch die *statistische* Variante:

$$\mathcal{M} : x_k \mapsto w_k^{(i_k)}(x_1, \dots, x_\Lambda), \quad \text{mit Wahrscheinlichkeit } \mathcal{P}_{i_k}, \quad k = 1, \dots, \Lambda.$$

Wir werden im Folgenden aber keinen Gebrauch davon machen.

<sup>2</sup>Das Monoid  $\mathbb{M}$ , bzw. die Halbgruppe  $\mathbb{F}^+$ , heißt **frei**, wenn es zwischen den Buchstaben  $x_k \in \mathcal{A}$  keine Relation gibt, d.h. insbesondere gibt es kein Wort  $\mathcal{A}^* \ni w(x_1, \dots, x_\Lambda) = \mathbb{1}$ , außer dem leeren Wort selbst.

<sup>3</sup>Ein *Morphismus*  $\mathcal{M}$  (hier eigentlich ein *Homomorphismus*) eines Monoids  $\mathbb{M}_1$  in das Monoid  $\mathbb{M}_2$  ist eine “produkterhaltende” Abbildung  $\mathcal{M} : \mathbb{M}_1 \mapsto \mathbb{M}_2$  derart, daß für alle  $w_1, w_2 \in \mathbb{M}_1$  gilt  $\mathcal{M}(w_1 w_2) = \mathcal{M}(w_1) \mathcal{M}(w_2)$  und  $\mathcal{M}(\mathbb{1}_{\mathbb{M}_1}) = \mathbb{1}_{\mathbb{M}_2}$ . Ist  $\mathbb{M}_1 = \mathbb{M}_2$  so nennt man  $\mathcal{M}$  auch einen **Endomorphismus**.

**C ▶ Beispiel:**<sup>4</sup> Betrachten wir die **symbolische Fibonacci-Folge**  $\mathcal{L}^n(L)$ : Sie ergibt sich durch Hintereinanderausführen der Substitutionsvorschrift<sup>5</sup>

$$\mathcal{L} \equiv \mathcal{PA} : \begin{cases} L \mapsto LS \\ S \mapsto L \end{cases}, \quad \mathcal{L} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{PA}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{S}_{\mathcal{PA}}) = -1,$$

ad infinitum angewandt auf den Buchstaben L:

$$w^{(0)} = L \xrightarrow{\mathcal{L}} w^{(1)} = LS \xrightarrow{\mathcal{L}} w^{(2)} = LSL \xrightarrow{\mathcal{L}} w^{(3)} = LSLLS \xrightarrow{\mathcal{L}} \dots \xrightarrow{\mathcal{L}} \omega = LSLLS \dots$$

Die *Anzahlen*  $f_n := |w^{(n)}|$ ,  $n = 0, 1, \dots$ , der Buchstaben  $L$  und  $S$  in den Approximanten  $w^{(n)}$  der symbolischen Fibonacci-Folge sind die sog. *Fibonacci-Zahlen* (also 1,2,3,5,8, ...) (benannt nach *Leonardo Pisano alias Fibonacci*, welcher sie ganz nebenbei in einer wissenschaftshistorisch fundamentalen Arbeit zu Beginn des 13. Jahrhunderts in das "öffentliche" Bewußtsein rückte [**Fib1202**]). Sie genügen dem Rekursionsgesetz  $f_{n+1} = f_n + f_{n-1}$ ,  $f_{-1} = f_0 = 1$ , wie es durch die Substitutions-Matrix  $\mathbf{S}_{\mathcal{PA}}$  festgelegt wird (s. unten). Das Verhältnis zweier aufeinanderfolgender Fibonacci-Zahlen  $f_n/f_{n-1}$  ergibt im Grenzfall  $n \rightarrow \infty$  den bekannten Wert für den *goldenen Schnitt*  $\tau = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$ .

Bei der statistischen Variante hat man beispielsweise

$$\mathcal{L}^{(p)} \equiv \mathcal{PA}^{(p)} : \begin{cases} L \mapsto \begin{cases} LS, & \text{mit Wahrscheinlichkeit } p \\ SL, & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1-p \end{cases} \\ S \mapsto L \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{PA}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Interesse finden derartige Substitutionen bei der Untersuchung des Einflusses von bestimmten Typen von Unordnung (sog. "Phasonenflips", z.B. für Phasonenflips bei Fibonacci-Folgen [**Vel00**] und für den Fall der sog. *periodenverdoppelnden* Ketten [**Hu95**]). Allerdings sind diese Ketten (in dem obigen Beispiel ist die Substitutionsmatrix unabhängig von der Wahrscheinlichkeit  $p$ ) nicht stark mischend (vgl. die Ausführungen S. 15), also nicht eigentlich random. Interessanter wird es vielleicht, wenn man nicht nur verschiedene zyklische Permutationen  $w_{i_k}^{(k)} = \text{Per}(w^{(k)})$  eines Wortes betrachtet, sondern beliebige  $w_{i_k}^{(k)}$ .

Sei nun die Struktur unseres Interesses rekursiv definiert durch das ("positive" <sup>7</sup>) Wort

$$w(x_1, \dots, x_\Lambda) := \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k(x_1) \equiv \mathcal{M}_n \mathcal{M}_{n-1} \dots \mathcal{M}_1(x_1). \quad (\text{I.3})$$

Wir wollen im Folgenden die für uns zentrale Frage klären, wie man den zugehörigen Orbit

$$\mathcal{O}[w] = \{\mathcal{J}^\xi(w) \mid \xi = 0, 1, \dots, |w| - 1\} \subseteq \mathbf{IM}(\mathcal{A}) \quad (\text{I.4})$$

mit

$$\mathcal{J}^\xi \mathcal{O}[w] \rightarrow \mathcal{O}[w], \quad w \mapsto \mathcal{J}^\xi(w) = w^{[\xi, |w|]} w^{[0, \xi-1]}, \quad \text{für alle } w \in \mathbf{IM}(\mathcal{A}), \xi \in \mathbf{IN}, \quad (\text{I.5})$$

<sup>4</sup>Das Symbol **C ▶** bezeichnet im Folgenden immer ein Complement.

<sup>5</sup>Die Bedeutung der beiden Substitutionen  $\mathcal{P} : L \mapsto S, S \mapsto L$  und  $\mathcal{A} : L \mapsto SL, S \mapsto S$  wird später klar werden.

durch eine Folge geeigneter, *elementarer* Substitutionen  $\mathcal{M}_k, \cdot$  in der Form von einfachen Produkten aus  $\mathcal{T}_{x_i}$ ,  $\mathcal{T}_{x_i}(w) = x_i^{-1}wx_i$ , und  $\mathcal{M}_k$  angewandt auf das ‐Ausgangswort‐  $x_i$  erzeugen kann. Dabei trifft man unmittelbar auf fundamentale Probleme. Es ist schon lange bekannt, daß man durch positive elementare Substitutionen i.a. gerade *nicht alle* Elemente von  $\mathcal{O}[w]$  erzeugen kann (s. z.B. [Weiß69]). Damit muß das bisher vorgestellte Konzept notwendigerweise erweitert werden. Es zeigt sich, daß der Generator  $\mathcal{T}$  der zyklischen Permutationen auf das engste mit den *inneren Automorphismen* der sog. *freien Gruppe*  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  verknüpft ist.

In einem ersten Schritt bettet man das freie Monoid  $\mathbb{M}(\mathcal{A})$  in die freie Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  ein (man vergl. hierzu z.B. [Mag66]). Es sei  $\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{A} \cup \bar{\mathcal{A}}$ , mit  $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{x}_k | x_k \in \mathcal{A}\}$ , ein um die Elemente  $\bar{x}_k, k = 1, \dots, \Lambda$ , **erweitertes Alphabet**. Durch die Abbildung  $\pi(\bar{x}_k) = x_k^{-1}$  für alle  $x_k \in \mathcal{A}$  definiert man einen surjektiven Monoid-Morphismus  $\pi : \mathbb{M}(\tilde{\mathcal{A}}) \rightarrow \mathbb{F}(\mathcal{A})$  auf die **freie Gruppe**  $\mathbb{F}(\mathcal{A}) = \langle x_1, \dots, x_\Lambda \rangle$ , indem man die Abbildung  $\pi : x_k \rightarrow \bar{x}_k$  auf  $\tilde{\mathcal{A}}^* \rightarrow \tilde{\mathcal{A}}^*$  durch die Forderungen  $\bar{\mathbb{1}} = \mathbb{1}$ ,  $\overline{wx_k} = \bar{x}_k \bar{w}$  und  $\overline{w\bar{x}_k} = x_k \bar{w}$  für alle  $w \in \mathcal{A}^*$  und  $x_k \in \mathcal{A}$  erweitert. Worte  $w \in \mathcal{A}^*$ , die keinen Faktor von der Form  $x_k \bar{x}_k$ , bzw.  $\bar{x}_k x_k$ , besitzen, nennt man **frei reduziert**. Bezeichnet man die Menge aller frei reduzierten Worte mit  $\tilde{\mathcal{A}}_\rho^*$ , so ergibt sich folgendes Diagramm

$$\begin{array}{ccc}
 \tilde{\mathcal{A}}^* & \xrightarrow{\pi} & \mathbb{F}(\mathcal{A}) = \langle x_1, \dots, x_\Lambda \rangle \\
 \searrow \rho & & \nearrow \pi' \\
 & \tilde{\mathcal{A}}_\rho^* &
 \end{array}
 \tag{I.6}$$

wobei  $\rho : \tilde{\mathcal{A}}^* \rightarrow \tilde{\mathcal{A}}_\rho^*$  jedes Wort aus  $\tilde{\mathcal{A}}^*$  in das zugehörige frei reduzierte Wort abbildet<sup>6</sup> (Bsp.  $\rho(aba\bar{c}) = abc$ ). Bei einer freien Gruppe gibt es zwischen den Generatoren  $x_k$ , außer der ‐trivialen Relation‐  $x_k^{-1}x_k = x_kx_k^{-1} = \mathbb{1}$ , keine definierenden Relationen. Die Elemente (= Worte) aus  $\mathbb{M}(\mathcal{A})$  sind somit nichts anderes, als die sog. positiven<sup>7</sup> Worte aus  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$ .

► Die Erweiterung der Monoid- auf Gruppenstruktur wirkt sich natürlich auch auf die Menge der dualen Worte aus. Allerdings ist hier die Lage etwas verwickelter. Der Grund für die Unannehmlichkeiten ist, daß die Herleitung der Definition des Reduktionsprozesses für *dual*e Worte aus derjenigen für gewöhnliche Worte zu nichttrivialen Relationen zwischen den Generatoren  $\sigma^{(ij)}$  führt. Die Motivation dafür sich trotzdem mit ihnen näher zu befassen,

<sup>6</sup>Seien  $n \geq 0$  **definierende Relation**  $R_i(x_1, \dots, x_\Lambda) = \mathbb{1}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , in den Generatoren  $x_k$  gegeben, d.h. es existiert eine (bis auf Isomorphismen) eindeutig bestimmte Gruppe mit der Darstellung  $\mathfrak{G} = \langle x_1, \dots, x_\Lambda | R_1(x_1, \dots, x_\Lambda) = \mathbb{1}, \dots, R_n(x_1, \dots, x_\Lambda) = \mathbb{1} \rangle$ . Zwei Worte sind **äquivalent** (d.h.  $w_1 \sim w_2$ ), wenn man durch endlich vieles Einsetzen oder Entfernen eines der Worte  $R_k$ ,  $k = 1, \dots, n$ , oder der trivialen Relation  $(x_k^{\pm 1}x_k^{\mp 1} = \mathbb{1})$  von dem Wort  $w_1$  zu  $w_2$  und umgekehrt gelangt. Mit  $\{w\}$  bezeichnen wir die Klasse aller Worte aus  $\mathfrak{G}$ , welche äquivalent zu  $w$  sind. Letzteres ist ein **Repräsentant** der Äquivalenzklasse  $\{w\}$ . Das **Produkt zweier Äquivalenzklassen** wird durch  $\{w_1\} \cdot \{w_2\} = \{w_1w_2\}$  definiert. Die Menge  $\mathfrak{G} \sim \cong \mathfrak{G}$  aller Äquivalenzklassen ist bezüglich diesem Produkt eine Gruppe (s. [Mag66], Kapitel I.2). Im Folgenden werden wir als Repräsentanten der Elemente  $\{w\}$  von  $\mathfrak{G} \sim$  das jeweils frei reduzierte Wort gebrauchen und  $\mathfrak{G} \sim$  mit  $\mathfrak{G}$  identifizieren. Wir werden später jedem Wort  $w(x_1, \dots, x_\Lambda)$  aus  $\mathbb{F}$  ein Element  $|\mathfrak{H}_w\rangle$  (Hamilton-Operator) bzw. der zugehörigen Resolventen aus  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  zuordnen. Dabei werden wir wieder auf den Begriff der Äquivalenzklassen treffen: *alle* Elemente  $|\mathfrak{H}_w\rangle \in \mathcal{B}(\mathbb{H})$  sollen *dieselben* Eigenschaften wie  $|\mathfrak{H}_{w'}\rangle \in \mathcal{B}(\mathbb{H})$ , mit  $w' = \rho(w)$  haben.

<sup>7</sup>Man bezeichnet ein Wort  $w$  als ‐positiv‐ (‐negativ‐), wenn seine Buchstaben nur positive (negative) Exponenten besitzen. Beispiel:  $abcac$  ist positiv,  $abc^{-1}ac^3$  dagegen nicht, obwohl beide dieselben Exponentensummen haben.

liegt darin begründet, daß die Transfer-Matrizen i.a. den dualen und nicht den gewöhnlichen Buchstaben  $x_i \in \mathcal{A}$  zugeordnet werden. Gemäß unseren Ausführungen gehört zu jedem Wort  $w \in \mathbb{F}(\mathcal{A})$  der Länge  $\ell(w) \geq 2$  (was bedeutet, daß  $\ell(\Sigma) \geq 1$ ) genau ein **duales Wort**  $\Sigma$

$$\Sigma = (\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}) \iff w = y_0 y_1 \cdots y_N, \quad N \geq 1,$$

mit  $\sigma_\mu := (y_\mu, y_{\mu+1}) \in \{\sigma^{(ij)}\} \subset \mathcal{A}^{(\sigma)}$  (s. weiter unten (I.10)), wobei jedem dualen Erzeugenden-Element  $\sigma^{(ij)} \in \mathcal{A}^{(\sigma)}$  genau ein *Paar* von Erzeugenden-Elementen aus  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$

$$\sigma^{(ij)} \equiv (\sigma^{(ij)}) := (x_i, x_j), \quad i, j \in I_\Lambda := \{\pm 1, \pm 2, \dots, \pm \Lambda\}, \quad (\text{I.7})$$

mit  $x_{-|k|} = x_{|k|}^{-1}$ ,  $x_{|k|} \in \mathcal{A}$ , entspricht. Sei  $\pi_\ell$  bzw.  $\pi_r$  der **Projektor** auf das entsprechende linke bzw. rechte Symbol:  $\pi_\ell(\sigma^{(ij)}) = x_i$ ,  $\pi_r(\sigma^{(ij)}) = x_j$  und  $\pi_\ell(\Sigma) = y_0$ ,  $\pi_r(\Sigma) = y_N$ . Wir bezeichnen die Menge aller dualen Worte  $\Sigma$  mit

$$\mathbb{F}^*(\mathcal{A}) := \left\{ (\sigma_\mu)_\mu \in \bigcup_{\alpha \geq 1} (\tilde{\mathcal{A}} \times \tilde{\mathcal{A}})^\alpha \mid \pi_r(\sigma_\beta) = \pi_\ell(\sigma_{\beta+1}), \forall \beta \right\}.$$

Eine der wesentlichsten Eigenschaften der *Menge*  $\mathbb{M}(\mathcal{A})$ , deren Elemente uns die Beschreibung der geometrischen Strukturen als durch Substitutionen erzeugte **DOL**-Worte erlaubte, ist die Existenz eines assoziativen Produkts in  $\mathbb{M}(\mathcal{A})$ , was die Menge  $\mathbb{M}(\mathcal{A})$  zu einem Monoid machte, bzw. durch Einführung des inversen Elements zur *freien* Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$ . Diese Eigenschaft wollen wir auf die Menge  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  der dualen Worte ausdehnen und definieren hierzu das  **$\wedge$ -Produkt**  $\wedge : \mathbb{F}^*(\mathcal{A}) \times \mathbb{F}^*(\mathcal{A}) \rightarrow \mathbb{F}^*(\mathcal{A})$ . Seien  $\Sigma_1 = (\sigma_0^{(1)}, \dots, \sigma_{m-1}^{(1)})$  und  $\Sigma_2 = (\sigma_0^{(2)}, \dots, \sigma_{n-1}^{(2)})$  zwei beliebige Elemente aus  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$ . Dann gelte *per definitionem*

$$\begin{aligned} \Sigma_1 \wedge \Sigma_2 &:= (\sigma_0^{(1)}, \dots, \sigma_{m-1}^{(1)}, \sigma, \sigma_0^{(2)}, \dots, \sigma_{n-1}^{(2)}) = (\sigma_\mu)_{\mu=0}^{m+n+1} \equiv \Sigma, \\ \pi_\ell(\sigma) &:= \pi_r(\Sigma_1), \quad \pi_r(\sigma) := \pi_\ell(\Sigma_2). \end{aligned} \quad (\text{I.8})$$

Man beachte, daß der duale Buchstabe  $\sigma$  durch die Definition (I.8) des Produkts eindeutig festgelegt wird. Das Produkt  $\wedge$  ist offensichtlich assoziativ. Es drängt sich nun aber sofort die unangenehme Frage nach dem Verbleib der dualen Worte der Länge  $\ell(\Sigma) = 2$  auf. Sie lassen sich nicht als Produkt aus den  $\sigma^{(ij)}$  erzeugen. Deshalb nehmen wir neben  $\sigma^{(ij)}$ ,  $i, j \in I_\Lambda$ , noch die dualen Worte

$$\sigma^{(ijk)} \equiv (\sigma^{(ij)}, \sigma^{(jk)}) := (x_i, x_j, x_k), \quad i, j, k \in I_\Lambda := \{\pm 1, \pm 2, \dots, \pm \Lambda\}, \quad (\text{I.9})$$

zu der Erzeugendenmenge  $\mathcal{A}^{(\sigma)}$  von  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  hinzu. Man macht sich leicht klar, daß sich nun *alle* dualen Worte  $\Sigma$  aus  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  als ein Produkt in den “Generatoren” (I.7) und (I.9) von  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  schreiben lassen, d.h. es gilt

$$\Sigma = \bigwedge_{\mu=m}^0 \sigma_\mu^* \equiv \sigma_0^* \wedge \sigma_1^* \wedge \cdots \wedge \sigma_m^*, \quad \sigma_\mu^* \in \{\sigma^{(ij)}, \sigma^{(ijk)} \mid i, j, k \in I_\Lambda\} =: \mathcal{A}^{(\sigma)}. \quad (\text{I.10})$$

Diese sind offensichtlich nicht vollständig unabhängig voneinander. Wir schreiben  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  in folgender Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbb{F}^*(\mathcal{A}) = \langle & \sigma^{(ij)}, \sigma^{(ijk)} \mid \sigma^{(i,-i)} = \sigma^{(j,-j)}, \quad \sigma^{(ij)} \wedge \sigma^{(pqr)} = \sigma^{(ijp)} \wedge \sigma^{(qr)}, \\ & \sigma^{(ij)} \wedge \sigma^{(pq)} \wedge \sigma^{(rs)} = \sigma^{(ijp)} \wedge \sigma^{(qrs)}, \\ & \sigma^{(ik)} \wedge \sigma^{(-kj)} = \sigma^{(ij)}, \quad \sigma^{(ijk)} \wedge \sigma^{(-kp)} = \sigma^{(ijp)}, \\ & \sigma^{(ijk)} \wedge \sigma^{(-kpq)} = \sigma^{(ij)} \wedge \sigma^{(pq)}, \quad \sigma^{(ik)} \wedge \sigma^{(-kpq)} = \sigma^{(ipq)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

Das zweite und dritte Relationsystem wird durch die Definition (I.8) des Produkts  $\wedge$  erzwungen. Die weiteren Relationen sind das Gegenstück in  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  zur freien Reduktion  $\rho$  in  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$ . Die Bedeutung des ersten Relationensystems wird weiter unten klar werden. Von der algebraischen Struktur ist  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  eine **Halbgruppe** und kein Monoid, da sie kein “richtiges” neutrales Element (leeres Wort) besitzt. Wir können aber zu jedem  $\sigma^{(ij)}$ , bzw.  $\sigma^{(ijk)}$ , ein “**inverses duales Element**”

$$(\sigma^{(ij)})^{-1} := \sigma^{(-j,-i)} \quad \text{und} \quad (\sigma^{(ijk)})^{-1} := \sigma^{(-k,-j,-i)},$$

mit  $(\Sigma_1 \wedge \Sigma_2)^{-1} := \Sigma_2^{-1} \wedge \Sigma_1^{-1}$  für alle  $\Sigma_i \in \mathbb{F}^*(\mathcal{A})$ , in dem Sinne (man beachte die gleichen Indizes) definieren, daß gilt

$$\sigma^{(ij)} \wedge (\sigma^{(ij)})^{-1} = \sigma^{(i,-i)} \quad \text{und} \quad (\sigma^{(ij)})^{-1} \wedge \sigma^{(ij)} = \sigma^{(-jj)},$$

wobei die  $\sigma^{(i,-i)}$  die Rolle von “**neutralen dualen Elementen**” gemäß

$$\sigma^{(i,-i)} \wedge \sigma^{(ij)} = \sigma^{(ij)} \quad \text{und} \quad \sigma^{(ij)} \wedge \sigma^{(-jj)} = \sigma^{(ij)},$$

spielen. Hierbei wurde von den Relationen in (I.11) Gebrauch gemacht. Völlig analog geht man bei den  $\sigma^{(ijk)}$  vor. Kommen wir noch kurz auf die Bilder der Generatoren  $x_k$  in  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  zu sprechen. Jedem von ihnen entspricht die Menge  $\mathbf{X}_k := \{\sigma^{(i,-i,k)}, \sigma^{(k,i,-i)}, i \in I_\Lambda\}$ . Unsere definierenden Relationen in (I.11) besagen, daß die Elemente aus  $\mathbf{X}_k$  voneinander als *unabhängig* zu betrachten sind. Die Bedeutung unserer Definition von  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$ , wird sich in Kapitel **III.2.3** zeigen, wo wir die Elemente aus  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  mit den Transfer-Matrizen  $\mathbf{T}_\sigma$  aus (6), S. vi, in Verbindung bringen werden. Zusammengefaßt ergibt sich: Die so erklärte **Abbildung**  $\phi$ ,

$$\phi : \mathbb{F}^*(\mathcal{A}) \rightarrow \mathbb{F}(\mathcal{A}) = \langle x_1, \dots, x_\Lambda \rangle, \quad (\text{I.12})$$

von  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  auf die freie Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  ist ein *Homomorphismus* (d.h.,  $\phi(\Sigma_1 \wedge \Sigma_2) = \phi(\Sigma_1)\phi(\Sigma_2) = w_1 w_2$ ). Der Kern von  $\phi$  ist die Menge der “neutralen dualen Elemente” (d.h.,  $\phi(\sigma^{(i,-i)}) = \mathbb{1}$ ,  $i \in I_\Lambda$ ). Das Bild der “inversen dualen Elemente” ist das zugehörige inverse Wort in  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  ( $\phi(\sigma^{-1}) = w^{-1}$ ) und schließlich ist  $\phi(\mathbf{X}_k) = x_k$ .

Wir wollen nun die in (I.2) betrachteten Substitutionen  $\mathcal{M} : \mathbb{M}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathbb{M}(\mathcal{A})$  als Homomorphismen der freien Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  in sich selbst betrachten. Da diese  $\mathcal{M}$  positive Worte wieder auf positive Worte abbilden, wollen wir sie im Folgenden gelegentlich auch als “**positive Substitutionen**” bezeichnen. Neben diesen Morphismen werden uns im Folgenden insbesondere die *Automorphismen*, d.h. invertierbare Homomorphismen, der freien Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  auf sich beschäftigen (zur allgemeinen Theorie s. z.B. [Mag66]). Hier kann es, im Gegensatz zu den positiven Substitutionen, zur Abbildung von positiven Worten auf Worte kommen, die auch inverse Buchstaben enthalten (z.B.  $\mathbf{u}^{-1}(x_1 x_3 x_2) = x_1 x_2^{-1} x_3 x_2$ ). Betrachten wir die sog. “**elementaren Automorphismen**”  $\mathcal{P}, \mathcal{Q}, \mathcal{O}$  und  $\mathcal{U}$ , definiert durch die Permutationen

$$\begin{aligned} \mathcal{P} & : x_1 \rightarrow x_2, \quad x_2 \rightarrow x_1, \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq 1, 2, \\ \mathcal{Q} & : x_k \rightarrow x_{k+1}, \quad x_\Lambda \rightarrow x_1, \quad k \neq \Lambda, \\ \mathcal{O} & : x_1 \rightarrow x_1^{-1}, \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq 1, \end{aligned} \quad (\text{I.13})$$

und der “expansiven” Substitution

$$\mathbf{u}^{\pm 1} : x_1 \rightarrow x_1 x_2^{\pm 1}, \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq 1. \quad (\text{I.14})$$

Im Verlauf des Kapitels werden wir des Öfteren neben  $\mathbf{u}$  noch einem weiteren „elementaren Automorphismus“

$$\mathcal{A}^{\pm 1} = \mathcal{O}\mathbf{u}^{\mp 1}\mathcal{O} \quad : \quad x_1 \rightarrow x_2^{\pm 1}x_1, \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq 1. \quad (\text{I.15})$$

begegnen. Die Bedeutung der Automorphismen (I.13) und (I.14) liegt in der Tatsache begründet, daß sie *alle* Automorphismen von  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  erzeugen. Hierzu hatte J. Nielsen [Nie17/24] im Jahre 1924 in seinem Artikel über „Die Isomorphismengruppe der freien Gruppe“ folgendes Theorem bewiesen:

**Theorem I.1 (Nielsen, [Nie17/24])** *Die Substitutionen  $\mathcal{P}, \mathcal{Q}, \mathcal{O}$  und  $\mathbf{u}$  generieren eine Gruppe  $\Phi_\Lambda := \Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$ , die Automorphismengruppe über der freien Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$ , mit der Darstellung*

$$\begin{aligned} \Phi_\Lambda = \langle \mathcal{P}, \mathcal{O}, \mathcal{Q}, \mathbf{u} \mid & \mathcal{P}^2 = \mathcal{O}^2 = (\mathcal{P}\mathcal{Q})^{\Lambda-1} = \mathcal{Q}^\Lambda = \mathbf{1}, \quad \mathcal{P} \rightleftharpoons \mathcal{Q}^i \mathcal{P} \mathcal{Q}^{-i}, \\ & \mathcal{O} \rightleftharpoons (\mathcal{Q}\mathcal{P}\mathcal{Q}^{-1}, \mathcal{P}\mathcal{Q}, \mathcal{Q}\mathcal{O}\mathcal{Q}^{-1}), \quad \mathcal{O}\mathcal{P}\mathcal{O}\mathbf{u}\mathcal{O}\mathcal{P}\mathbf{u}\mathcal{P}\mathbf{u}^{-1} = \mathbf{1}, \\ & (\mathcal{P}\mathcal{O}\mathcal{P}\mathbf{u})^2 = \mathbf{1}, \quad \mathbf{u}^{-1}\mathcal{O}\mathbf{u}^{-1}\mathcal{Q}^{-1}\mathbf{u}(\mathcal{O}\mathbf{u}\mathcal{Q}^{-1}\mathcal{P})^2 = \mathbf{1}, \\ & \mathbf{u} \rightleftharpoons (\mathcal{O}\mathbf{u}\mathcal{O}, \mathcal{Q}^2\mathcal{P}\mathcal{Q}^{-2}, \mathcal{Q}\mathcal{P}\mathcal{Q}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{Q}, \mathcal{Q}^2\mathcal{O}\mathcal{Q}^{-2}, \mathcal{Q}^2\mathbf{u}\mathcal{Q}^{-2}, \\ & \mathcal{P}\mathcal{Q}\mathcal{O}\mathbf{u}\mathcal{O}\mathcal{Q}^{-1}\mathcal{P}, \mathcal{P}\mathcal{Q}\mathcal{P}\mathcal{Q}^{-1}\mathcal{P}\mathbf{u}\mathcal{P}\mathcal{Q}\mathcal{P}\mathcal{Q}^{-1}\mathcal{P}) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{I.16})$$

wobei  $i = 2, 3, \dots, [\Lambda/2]$  und  $[x]$  der ganzzahlige Teil von  $x$  ist.  $\mathcal{A}_1 \rightleftharpoons \mathcal{A}_2$  bedeutet, daß  $\mathcal{A}_1$  und  $\mathcal{A}_2$  miteinander vertauschen, d.h.  $\mathcal{A}_1\mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_2\mathcal{A}_1$ . ♣

Eine äquivalente Darstellung von  $\Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$  findet man bei B. Neumann, [Neu33]. Man beachte, daß wir hier als Generatoren die Substitutionen (I.13) und (I.14) benutzt haben, und nicht die gleich zu definierenden Nielsen–Transformationen. Deshalb ist die Reihenfolge der Operatoren im Vergleich zum Original [Nie17/24] gerade vertauscht.

Das Pendant zu den Substitutionen  $\mathcal{M}$  bilden die **Nielsen–Transformationen (NT)**  $\mathbf{M}$ . Hier handelt es sich um “Substitutionen” von *Worten*, anstelle von Buchstaben  $x_i \in \mathcal{A}$ : Sei  $w(x_1, \dots, x_\Lambda) = W(w_1, \dots, w_\Lambda)$ , wobei  $w_k = w_k(x_1, \dots, x_\Lambda)$  Worte in den Buchstaben  $x_k \in \mathcal{A}$  sind. Dann gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{M} : \quad w_k & \mapsto w'_k(w_1, \dots, w_\Lambda), \quad k = 1, \dots, \Lambda, \quad w_k \in \mathbb{F}, \\ \mathbf{M}(W(w_1, \dots, w_\Lambda)) & := W(w'_1, \dots, w'_\Lambda) = W'(w_1, \dots, w_\Lambda). \end{aligned} \quad (\text{I.17})$$

Wir werden im Folgenden die Bezeichnung Nielsen–Transformation synonym für *alle* “Substitutionen” von *Worten* benutzen, und das Wort Substitution, falls nicht besonders hervorgehoben, ausschließlich im Sinne von “Substitution der einzelnen Generatoren  $x_k$  in den einzelnen Worten  $w(x_1, \dots, x_\Lambda) \in \mathbb{F}(\mathcal{A})$ ” verwenden. Ersetzt man in (I.13) — (I.15) die Buchstaben  $x_k$  durch irgendwelche Worte  $w_k(x_1, \dots, x_\Lambda) \in \mathbb{F}(\mathcal{A})$ , so erhält man die entsprechenden NTs  $\mathbf{M} : (\mathbb{F}(\mathcal{A}))^\Lambda \rightarrow (\mathbb{F}(\mathcal{A}))^\Lambda$  mit der Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(w_1, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda) & = (w_2, w_1, w_3, \dots, w_\Lambda), \\ \mathbf{Q}(w_1, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda) & = (w_2, w_3, w_4, \dots, w_1), \\ \mathbf{O}(w_1, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda) & = (w_1^{-1}, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda), \\ \mathbf{U}^{\pm 1}(w_1, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda) & = (w_1 w_2^{\pm 1}, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda), \end{aligned} \quad (\text{I.18})$$

bzw. für  $V = OU^{-1}O$ :

$$V^{\pm 1}(w_1, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda) = (w_2^{\pm 1}w_1, w_2, w_3, \dots, w_\Lambda). \quad (\text{I.19})$$

Die NTs  $P, Q, O$  und  $U$  generieren die Gruppe  $\Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$  (s. [Nie17/24]), die *anti-isomorph*<sup>8</sup> zur oben definierten Automorphismengruppe ist [Mag66].

◀ Es liegt auf der Hand, daß jede NT  $M : (\mathbb{F}(\mathcal{A}))^\Lambda \rightarrow (\mathbb{F}(\mathcal{A}))^\Lambda$  ein Gegenstück in  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  induziert. Wir wollen annehmen, daß  $\ell(w_k) \geq 2$  für alle  $k \in I_\Lambda$  erfüllt ist, was für das Folgende aber keine wirkliche Einschränkung darstellt. Da wir  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  durch einen Homomorphismus (I.12) erklären konnten, ergibt sich unter der gemachten Voraussetzung aus

$$(w'_1, \dots, w'_\Lambda) = M(w_1, \dots, w_\Lambda), \quad w'_k = w'_k(w_1, \dots, w_\Lambda),$$

zwanglos die induzierte “Nielsen–Transformation”  $M^* : (\mathbb{F}^*(\mathcal{A}))^\Lambda \rightarrow (\mathbb{F}^*(\mathcal{A}))^\Lambda$

$$\begin{aligned} (\Sigma'_1, \dots, \Sigma'_\Lambda) &= M^*(\Sigma_1, \dots, \Sigma_\Lambda) \\ &= \phi^{-1}(w'_1, \dots, w'_\Lambda) = \phi^{-1}\left(M(w_1, \dots, w_\Lambda)\right), \end{aligned}$$

mit  $\Sigma'_k = \Sigma'_k(\Sigma_1, \dots, \Sigma_\Lambda)$ .

**Beispiel:** Betrachten wir die **Thue–Morse–Folge** in  $\mathbb{F}(\mathcal{A}_2)$  mit  $\mathcal{A}_2 = \{L, S\}$ . Sie wird erzeugt durch die Substitution

$$\mathcal{M}_{TM} : \begin{cases} L \mapsto LS \\ S \mapsto SL \end{cases}, \quad L \xrightarrow{\mathcal{M}_{TM}} LS \xrightarrow{\mathcal{M}_{TM}} LSSL \xrightarrow{\mathcal{M}_{TM}} LSSLSLLS \xrightarrow{\mathcal{M}_{TM}} \dots$$

Ihr entspricht die NT  $M_{TM}(w_1^{(n)}, w_2^{(n)}) = (w_1^{(n+1)}, w_2^{(n+1)})$ , mit  $w_1^{(n+1)} = w_1^{(n)}w_2^{(n)}$  und  $w_2^{(n+1)} = w_2^{(n)}w_1^{(n)}$  und  $w_1^{(0)} = L, w_2^{(0)} = S$ . Sei

$$\alpha := \phi^{-1}(LL), \quad \beta := \phi^{-1}(LS), \quad \gamma := \phi^{-1}(SL) \quad \text{und} \quad \delta := \phi^{-1}(SS).$$

Um auf  $\ell(w_k^{(0)}) \geq 2$  zu kommen, wählen wir<sup>9</sup> für die dualen Ausgangsworte  $w_1^{(0)} = L = LLL^{-1}, w_2^{(0)} = S = SSS^{-1}$ , so daß  $\phi^{-1}(LLL^{-1}) = \sigma^{(1,1,-1)} = \Sigma_1^{(0)}$  und  $\phi^{-1}(SSS^{-1}) = \sigma^{(2,2,-2)} = \Sigma_2^{(0)}$  gilt. Dann ist  $M_{TM}^*(\Sigma_1^{(0)}, \Sigma_2^{(0)}) = (\Sigma_1^{(1)}, \Sigma_2^{(1)})$  mit  $\Sigma_1^{(1)} = \Sigma_1^{(0)} \wedge \Sigma_2^{(0)} = \sigma^{(1,1,-1)} \wedge \sigma^{(2,2,-2)} = (\sigma^{(11)} \wedge \sigma^{(-12)}) \wedge \sigma^{(2,-2)} = \sigma^{(12)} \wedge \sigma^{(2,-2)} = \sigma^{(12)} \wedge \sigma^{(-2,2)} = \sigma^{(12)} = \beta$  und  $\Sigma_2^{(1)} = \Sigma_2^{(0)} \wedge \Sigma_1^{(0)} = \gamma$ . Für die nächsten Generationen gilt  $\Sigma_1^{(2)} = \Sigma_1^{(1)} \wedge \Sigma_2^{(1)} = \beta \wedge \gamma = (\beta, \delta, \gamma) = \phi^{-1}(w_1^{(2)})$  mit  $w_1^{(2)}w_1^{(2)} = w_1^{(1)}w_2^{(1)} = LSSL$  und  $\Sigma_2^{(2)} = \Sigma_2^{(1)} \wedge \Sigma_1^{(1)} = \gamma \wedge \beta = (\gamma, \alpha, \beta) = \phi^{-1}(w_2^{(2)})$  mit  $w_2^{(2)}w_2^{(2)} = w_1^{(1)}w_2^{(1)} = SLLS$ . Die weitere rekursive Vorgehensweise zur Erzeugung der dualen Thue–Morse Folge ist offensichtlich.

Wir werden gelegentlich davon Gebrauch machen, daß man in  $\Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$ , durch das Hinzunehmen der neuen Substitution  $\mathcal{A}$  unter der Beachtung der Relation

$$O = U\mathcal{P}U^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A}\mathcal{P}, \quad (\text{I.20})$$

<sup>8</sup>Im Unterschied zu einem Isomorphismus gilt hier  $\phi(\mathcal{A}_1\mathcal{A}_2) = \phi(\mathcal{A}_2)\phi(\mathcal{A}_1)$ .

<sup>9</sup>Unter Zuhilfenahme der definierenden Relationen in (I.11) ergibt sich leicht, daß die Ergebnisse für  $n \geq 2$  unabhängig von unserer Wahl der Anfangsworte  $w_k^{(0)}$  ist.

einen Darstellungswechsel durchführt kann (sog. Tietze–Transformation, vgl. [Mag66], S. 48 ff.) mit dem neuen vollständigen Erzeugendensystem  $\{\mathcal{P}, \mathcal{Q}, \mathcal{U}, \mathcal{A}\}$ . Wir bezeichnen im Folgenden die Menge (Monoid) der Homomorphismen, welche neben den Automorphismen aus  $\Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$  alle anderen Substitutionen enthält, mit  $\mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda))$ , das entsprechende Pendant für die entsprechenden NTs mit  $\mathbf{Hom}^\Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda))$ .

Eine wichtige Größe zur Charakterisierung von Worten ist ihre “**Länge**”  $\ell_{x_i}(w)$  bzw. ihre “**Exponentensumme**”  $\#_{x_i}(w)$ .  $\ell_{x_i}(w)$  ist die *Anzahl* der Buchstaben  $x_i$  in  $w(x_1, \dots, x_\Lambda)$ , während  $\#_{x_i}(w)$  die *Summe* der Exponenten des Buchstabens  $x_i \in \mathcal{A}$  in  $w(x_1, \dots, x_\Lambda)$  ist (Bsp.  $\#_a(aba^{-2}cb^2) = -1$ , aber  $\ell_a(aba^{-2}cb^2) = 3$ ). Schließlich definieren wir  $\ell(w) := \sum_{i=1}^\Lambda \ell_{x_i}(w)$ , bzw.  $|w| := \sum_{i=1}^\Lambda \#_{x_i}(w)$ . Damit kann man jeder NT  $M$  eine “**Substitutions–Matrix**”<sup>10</sup>  $S_M$

$$(S_M)_{ij} := \#_{x_i}(w_j) \geq 0, \quad (w_1, \dots, w_\Lambda) = M(x_1, \dots, x_\Lambda),$$

zuordnen. Sie zählt die *Summe der Exponenten* der Buchstaben  $x_i$  in den Worten  $w_j$ , unabhängig von deren Reihenfolge. Wir können weiter schreiben

$$\vec{w}'' = M_2 M_1(\vec{w}) \mapsto |\vec{w}''| = S_{M_2} S_{M_1} |\vec{w}|,$$

wobei wir den **Längenvektor**  $|\vec{w}|^\Gamma = (|w_1|, \dots, |w_\Lambda|)^\Gamma$  von  $\vec{w}^\Gamma = (w_1, \dots, w_\Lambda)^\Gamma$  eingeführt haben. Sei  $\pi$  die **kanonische Projektion** von  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  auf die **freie Abel’sche Gruppe**  $\mathbb{F}^A(\mathcal{A}) = \mathbb{Z} \oplus \dots \oplus \mathbb{Z}$ , mit den Generatoren  $x_k^A$ , d.h. ein surjektiver Homomorphismus, welcher das auf  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  erklärte *nichtkommutative Produkt* auf die Summe (“kommutatives Produkt”) in  $\mathbb{F}^A(\mathcal{A})$  abbildet, wobei die Exponentensummen alle *ganzen* Zahlen annehmen können. Dadurch induziert  $\pi : \mathbb{F}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathbb{F}^A(\mathcal{A})$ ,

$$\begin{aligned} \pi : w_k(x_1, \dots, x_\Lambda) &= \prod_j (x_1^{S_{k1}^{(j)}} \cdots x_\Lambda^{S_{k\Lambda}^{(j)}}) \mapsto \pi(w_n) := |w_n| = \sum_{m=1}^\Lambda S_{nm} x_m^A, \\ S_{nm} &= \sum_j S_{nm}^{(j)} = \#_{x_n}(w_m) \in \mathbb{Z}, \quad k, m, n = 1, \dots, \Lambda, \end{aligned}$$

den Homomorphismus  $\pi^\Gamma : \mathbf{Hom}^\Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda)) \rightarrow \mathbf{Hom}^\Gamma(\mathbb{F}^A(\mathcal{A}_\Lambda)) \cong \mathbb{M}_\Lambda(\mathbb{Z})$  auf das multiplikative Monoid  $\mathbb{M}_\Lambda(\mathbb{Z})$  aller ganzzahligen  $\Lambda \times \Lambda$ -Matrizen, wobei jede NT  $M \in \mathbf{Hom}^\Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda))$  auf die Substitutions–Matrix  $S_M \in \mathbb{M}_\Lambda(\mathbb{Z})$  abgebildet wird. Speziell ist<sup>11</sup>  $\pi^\Gamma : \Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A})) \rightarrow \mathbb{GL}_\Lambda(\mathbb{Z})$ . Nun ist  $\mathbb{GL}_\Lambda(\mathbb{Z}) \cong \Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A})) / \mathbb{K}$ , wobei  $\mathbb{K} = \text{Kern}(\pi^\Gamma)$  (s. [Mag66], S. 168 ff.). Eine Darstellung von  $\mathbb{GL}_\Lambda(\mathbb{Z})$  ergibt sich aus der Darstellung von  $\Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$ , wenn man die Relation

$$\pi^\Gamma(U) = \pi^\Gamma(A) \tag{I.21}$$

hinzunimmt. Die Generatoren von  $\mathbb{GL}_\Lambda(\mathbb{Z})$  lauten

$$\begin{aligned} S_P &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \oplus \mathbf{1}, \quad S_Q = (\delta_{ij+1} + \delta_{\Lambda 1}), \quad S_O = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \oplus \mathbf{1}, \\ S_{U^{\pm 1}} &= \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \oplus \mathbf{1} = S_{A^{\pm 1}} \end{aligned} \tag{I.22}$$

<sup>10</sup>Man kann  $S_M$  als Substitutionsmatrix von  $\mathfrak{M}$  auffassen. Wir schreiben dann  $S_{\mathfrak{M}}$ . Man beachte, daß nun aber  $S_{\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_1} = S_{\mathfrak{M}_1} S_{\mathfrak{M}_2}$  gilt.

<sup>11</sup> $\mathbb{GL}_\Lambda(\mathbb{Z})$  ist die Gruppe der ganzzahligen  $\Lambda \times \Lambda$ -Matrizen mit  $\det(S) = \pm 1$ .

wobei  $\mathbb{1}$  die  $(\Lambda - 2) \times (\Lambda - 2)$  Einheitsmatrix ist. Aus (I.21) ergibt sich  $\mathbf{S}_{U^{\pm 1}} = \mathbf{S}_{A^{\pm 1}}$ . Der Kern  $\mathbb{K}$  wird durch diejenigen Automorphismen erzeugt, welche sich durch Produkte aus  $\mathcal{A}^{-1}\mathbf{u}$  und  $\mathcal{S} \in \Sigma(\mathcal{A})$  erzeugen lassen, wobei  $\Sigma(\mathcal{A})$  die durch  $\mathcal{P}, \mathcal{Q}$  erzeugte symmetrische Gruppe ist [Nie17/24].

Schließlich wollen wir noch den Homomorphismus  $\pi^{\text{GL}} : \mathbb{G}\mathbb{L}_{\Lambda}(\mathbb{Z}) \rightarrow \mathbb{P}\mathbb{G}\mathbb{L}_{\Lambda}(\mathbb{Z})$  einführen, wobei  $\mathbb{P}\mathbb{G}\mathbb{L}_{\Lambda}(\mathbb{Z}) = \mathbb{G}\mathbb{L}_{\Lambda}(\mathbb{Z})/\{\pm\mathbb{1}\}$  ist. Durch Hinzunahme der (I.21) entsprechenden Relation  $\pi^{\text{GL}}(\mathbf{u}) = \pi^{\text{GL}}(\mathcal{A})$ , und

$$\pi^{\text{GL}}(\mathbf{POPO}) = \mathbb{1}.$$

zu dem Relationensystem von  $\Gamma(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$  erhält man eine passende Darstellung von  $\mathbb{P}\mathbb{G}\mathbb{L}_{\Lambda}(\mathbb{Z})$  [Cox65]. Speziell ist eine mögliche Darstellung der Elemente aus  $\mathbb{P}\mathbb{G}\mathbb{L}_2(\mathbb{Z})$  gegeben durch die **Möbius-Transformationen**<sup>12</sup>

$$S_M(\lambda) = \frac{\lambda S_{11} + S_{12}}{\lambda S_{21} + S_{22}},$$

wobei  $S_{ij}$  die Elemente der entsprechenden Substitutionsmatrix  $\mathbf{S}_M$  sind.

Um möglichen Konfusionen vorzubeugen, fassen wir abschließend die verschiedenen Typen der in diesem Abschnitt betrachteten Relationen kurz zusammen:

- **Definierende Relation** in  $\Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$ :  $\mathcal{M}_1 = \mathcal{M}_2$ , d.h. Wortrelationen  $\mathcal{M}_1(x_k) = \mathcal{M}_2(x_k)$ ,  $k = 1, \dots, \Lambda$ , die *gleichzeitig* für *alle*  $x_k$ ,  $k = 1, \dots, \Lambda$ , aus  $\mathcal{A}$  erfüllt sein müssen. Sie werden sich später direkt auf die Gruppen- bzw. Monoidstruktur der Renormierungsgruppe übertragen lassen.
- Ein Spezialfall bildet der “**Reduktionsprozess**”  $\rho$ .  $\rho$  vertauscht mit allen Substitutionen und definiert eine (triviale) Äquivalenzklassenbildung in  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$ . Er spielt eine wichtige Rolle bei der konkreten Erweiterung der bisher bekannten Form der Ortsraum-Renormierung über der freien Halbgruppe zu einer Renormierungstheorie über der freien Gruppe. Letztere ermöglicht es erstmalig für alle durch Substitutionen erzeugte Worte  $w$  einen Darstellungswechsel für *alle* Translate von  $w$ , d.h. für *alle* Elemente des zugehörigen Orbits  $\mathcal{O}[w]$ , durchzuführen.
- **Wortrelationen**:  $\mathcal{M}_1(x_k) = \mathcal{M}_2(x_k)$  für ein  $x_k \in \mathcal{A}$ . Es ist z.B.  $\mathcal{P}\mathcal{A}(L) = \mathbf{u}(L)$ , aber  $\mathcal{P}\mathcal{A}(S) \neq \mathbf{u}(S)$ . Diese Relation führt dazu, daß in dem in Kapitel I.3 betrachteten Beispiel zur Fibonacci-Folge der Darstellungswechsel von  $\mathcal{T}^{\xi}\mathcal{L}^n(L)$  tatsächlich nur modulo der entsprechenden Wortlänge  $|\mathcal{L}^n(L)|$  zu verschiedenen Worten führt.

Allgemeiner sind Wortrelationen, die für bestimmte Worte in den Generatoren  $x_k \in \mathcal{A}$  gelten. Das prominenteste Beispiel geht auf Nielsen zurück [Nie17/24] (vgl. [Mag66, S. 165]): Sei  $\mathbb{F}(\{L, S\})$  die freie Gruppe vom Rang zwei. Dann gibt es zu jedem  $\mathcal{M} \in \Phi_2$  ein Wort  $w(L, S) \in \mathbb{F}_2$  derart, daß

$$\mathcal{M}([w_1(L, S), w_2(L, S)]) = (w(L, S))^{-1} \cdot [L, S] \cdot w(L, S), \quad (\text{I.23})$$

gilt, d.h. der Kommutator  $[L, S] := LSL^{-1}S^{-1}$  ist invariant bezüglich der Wirkung aller Automorphismen aus  $\Phi_2$ . Die fundamentale Bedeutung dieser Relation besteht u.a.

<sup>12</sup>Vgl. hierzu auch die Ausführungen zur Konstruktion des *Farey-Baumes*  $\mathfrak{F}_F^{\mathbb{F}}(V, \mathbf{E})$  in Anhang III.B.1.

darin, daß sie auf die Existenz von Invarianten für die Renormierungstransformationen  ${}^R\mathcal{M}$  führen. Wir werden in Kapitel III.2.2 darauf zu sprechen kommen. Bemerkenswerter Weise scheint es keine derartigen Verallgemeinerungen auf freie Gruppen vom Rang größer als zwei zu geben (s. z.B. [Mag66]). Es gibt aber eine Reihe von schwächeren Invarianzaussagen. Ausgangspunkt sind hierbei freie Lie-Algebren als die Algebra von Lie-Invarianten<sup>13</sup> ([Mag66], Kap 5, und [Reu93, Wev40, Bur58, Bre98]). Einen damit verwandten Zugang zu diesem Fragenkomplex findet man bei [Igu94–II, Igu95, Igu97–2].

- Beziehungen zwischen verschiedenen Substitutionsmatrizen  $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$ . Damit zwei Substitutionen zum selben Orbit gehören, ist es notwendig, daß sie dieselben Substitutionsmatrizen haben. Viele weitere wichtige Eigenschaften von  $\mathcal{M}$  werden durch  $\mathcal{S}_{\mathcal{M}}$  festgelegt.

Doch wenden wir uns neuen Ufern zu!

## I.1.2 Topologische und abstrakte dynamische Systeme

Die Konstruktion der symbolischen Fibonacci-Kette im Beispiel von S. 3 rückt unweigerlich einen, über die reine kombinatorische Gruppentheorie hinausgehenden, neuen Aspekt bei unserer Form der Strukturbeschreibung in das Rampenlicht: die *unendlichen* Worte und damit den Begriff der Konvergenz von Worten. Es erweist sich somit als zweckmäßig einige elementare topologische Betrachtungen in unser Kalkül mit einzubeziehen. Sei im folgenden Abschnitt  $\mathcal{A} \equiv \mathcal{A}_{2\Lambda} = \{x_1^{\pm 1}, \dots, x_{\Lambda}^{\pm 1}\}$  und  $\mathcal{A}^G$ , mit  $G = \mathbb{N}, \mathbb{Z}$ , die Menge der *frei reduzierten* ein- bzw. zweiseitig unendlichen Worte (d.h. frei reduzierte Worte unendlicher Länge) in den Buchstaben  $x_k \in \mathcal{A}$ . Wir wollen uns im Folgenden ausschließlich mit den Grenzwerten der jeweiligen Repräsentanten<sup>6</sup> von  $\{w\} \in \mathbb{F}^{\sim}$  beschäftigen. Formal kann man  $\mathcal{A}^G$  als unendliches kartesisches Produkt  $\times_{\alpha \in \mathbb{N}} \mathcal{A}_{\alpha}$  mit  $\mathbb{N} = \mathbb{N}$  oder  $\mathbb{Z}$  und  $\mathcal{A}_{\alpha} = \mathcal{A}$  darstellen. Ein **unendliches Wort**  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  ist eine *Abbildung*

$$\omega : \mathbb{N} \mapsto \mathcal{A}, \quad \omega := y_0 y_1 \cdots y_{\mu} \cdots, \quad (\text{I.24})$$

mit  $\omega(\mu) = \omega^{[\mu]} = y_{\mu} \in \mathcal{A}$ . D.h., die Menge aller unendlichen Worte fällt mit der Menge aller *Funktionen* (I.24) zusammen, welche mit der Produktmenge  $\mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  identifiziert werden kann (vgl. z.B. [Bou66], Bd.II, S. 274). Entsprechend definiert man  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  durch  $\omega = \omega_- \cdot \omega_+$  mit  $\omega_-, \omega_+ \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$ , wobei  $\omega_-(\mu) = \omega(-\mu - 1)$  und  $\omega_+(\mu) = \omega(\mu)$  mit  $\mu \in \mathbb{N}$ . Man kann nun die Menge  $\mathcal{A}^G$  der unendlichen Worte vermöge einer geeigneten Topologie  $\mathfrak{T}$  (Produkt-Topologie) zu einem kompakten Hausdorff-Raum  $\langle \mathcal{A}^G, \mathfrak{T} \rangle$  machen, den man darüberhinaus noch mit einer geeigneten Metrik versehen kann, d.h.  $\langle \mathcal{A}^G, \mathfrak{T} \rangle$  ist ein sog. polnischer Raum (s. z.B. [Kit98]). Der so konstruierte topologische Raum  $\langle \mathcal{A}^G, \mathfrak{T} \rangle$  ist total *unzusammenhängend*<sup>14</sup> (“**Cantormenge**”). Man kann sich die Beziehung zwischen den Worten  $w \in \mathcal{A}^*$  und  $\mathcal{A}^{\mathbb{N}}$ , wie folgt verdeutlichen: Sei  $w^{(0)}, w^{(1)}, \dots, w^{(n)}, \dots$  eine Folge von monoton längerwerdenden

<sup>13</sup>Man kann sagen, daß die Kommutatorrelation und Multiplikation in einer Gruppe sich ähnlich wie Multiplikation und Addition in einer freien Lie-Algebra verhalten.

<sup>14</sup>Ein topologischer Raum, dessen topologische Basis (d.i. eine Mengenfamilie, mit der Eigenschaft, daß sich jedes  $\tau_{\alpha} \in \tau$  durch die Vereinigung von Elementen der Mengenfamilie darstellen läßt) aus Mengen besteht, die gleichzeitig offen und abgeschlossen (“*clopen*”) sind, nennt man **total unzusammenhängend** oder **Null-dimensional**, d.h. die einzigen zusammenhängenden Objekte sind Punkte.

Worten aus  $\mathcal{A}^*$ , so daß  $w^{(n-1)}$  Präfix von  $w^{(n)}$  ist, d.h.  $w^{(n)} = w^{(n-1)}u$ ,  $u \in \mathcal{A}^*$ . Das unendliche Wort  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  wird definiert durch

$$\omega^{[0,\mu]} = w^{(n)}, \quad \mu = |w^{(n)}| - 1, \quad n \geq 0. \quad (\text{I.25})$$

Die Konsistenz dieser Definition wird dadurch garantiert, daß  $w^{(m)}$  Präfix von  $w^{(n)}$  für alle  $m \geq n$  ist. In diesem Sinne wird  $\omega$  als **Grenzwert** der Folge  $(w^{(n)})_{n \geq 0}$  definiert, d.h. es gilt

$$w^{(n)} \rightarrow \omega \quad \text{oder} \quad \omega = \lim_{n \rightarrow \infty} w^{(n)}. \quad (\text{I.26})$$

Die Produkt-Topologie  $\mathfrak{T}$  fällt bekanntlich mit der Topologie der **punktweisen Konvergenz** auf der Funktionen-Menge  $\mathcal{A}^{\mathbb{N}} = \mathfrak{F}(\mathbb{N}, \mathcal{A})$  zusammen, d.h. es gilt auf ihr  $w^{(n)} \rightarrow \omega$  mit  $w^{(n)}, \omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  genau dann, wenn  $(w^{(n)})^{[\mu]} \rightarrow \omega^{(\mu)}, \mu \in \mathbb{N}$ . Diese Topologie ist äquivalent zur **metrischen Topologie** auf  $\mathcal{A}^G$ , wenn man auf  $\mathcal{A}^G$  die **(Ultra-)Metrik**<sup>15</sup>

$$\varrho(u, v) := \begin{cases} 2^{-d}, & u, v \in \mathcal{A}^G, \quad d := \min_{\mu} \{u^{[\mu]} = v^{[\mu]}\} \\ 0, & u = v \end{cases}$$

eingführt. Letztere ist die größte Topologie auf  $\mathcal{A}^G$ , welche die offenen Kugeln  $\mathcal{K}_\epsilon(\omega) = \{\omega' \in \mathcal{A}^G \mid \rho(\omega, \omega') < \epsilon\}$  enthält. Betrachten wir eine topologische Basis auf  $\mathcal{A}^G$ , welche diesen Kugeln  $\mathcal{K}_\epsilon(\omega)$  entspricht. Sei  $\mathcal{W}_\ell(\omega)$  die Menge aller Faktoren, d.h. Menge aller  $\omega^{[\mu, \nu]} = y_\mu y_{\mu+1} \cdots y_\nu \in \mathcal{A}^*$ , der Länge  $\ell$  von  $\omega$  und  $\mathcal{W}_\ell(\Omega) = \bigcup_{\omega \in \Omega} \mathcal{W}_\ell(\omega)$  die Menge aller Faktoren der Länge  $\ell$ , die in den Elementen aus  $\Omega \subseteq \mathcal{A}^G$  auftreten. Die sog. **“Zylindermengen”**

$$[u]_t := \{\omega_1 \in \mathcal{A}^G \mid \omega_1^{[t, t+|u|]} = u\}, \quad u \in \mathcal{A}^*,$$

für irgendwelche  $t \in \mathbb{N}$ , sind sowohl offen als auch abgeschlossene Mengen aus  $\Omega$ . Sie bilden eine abzählbare Basis für die Produkt-Topologie  $\mathfrak{T}$  (s. z.B. [Kit98]), d.h. jede offene Menge aus  $\mathcal{A}^G$  ist eine abzählbare Vereinigung von Zylindermengen, die die Produkt-Topologie erzeugen. Damit gelingt es, dem Begriff der *“Approximation”* von unendlichen Worten, der im Folgenden eine zentrale Rolle spielen wird, eine formale Bedeutung zu geben. Zwei Worte nähern sich somit umsomehr aneinander an, je länger das *“Anfangsstück”* ist, in dem sie exakt übereinstimmen. Dieser Konvergenzbegriff macht unter anderem die Approximation von Worten durch periodische fortgesetzte Worte möglich. Betrachtet man ein *periodisches* unendliches Wort, dann gilt ebenso

$$\omega = \lim_{n \rightarrow \infty} w^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \underbrace{\left( \lim_{k \rightarrow \infty} (w^{(n)})^k \right)}_{=: w_\infty^{(n)}}. \quad (\text{I.27})$$

<sup>15</sup>Statt  $\rho = 2^{-d}$  sind auch  $e^{-d}$  oder  $1/(d+1)$  gebräuchlich. Die Ultra-Metrik unterscheidet sich von der gewöhnlichen Metrik durch die stärkere Dreiecks-Ungleichung  $\rho(u, w) \leq \max\{\rho(u, v), \rho(v, w)\}$ . Ausgangspunkt dieser Betrachtungen bildet die diskrete Topologie auf dem Alphabet  $\mathcal{A}$ , welche sich durch Einführung der Metrik  $\rho(x_i, x_j) := 1 - \delta_{ij}$  definiert. Jeder Punkt  $x_k$  in  $\mathcal{A}$  ist *“clopen”* und  $\mathcal{A}$  ist offensichtlich kompakt. Die Produkt-Topologie wird durch die Metrik  $\rho(u, v) := \sum_{\mu=0}^{\infty} (1 - \delta_{u^{[\mu]}, v^{[\mu]}})/2^\mu$  induziert. Kompaktheit (bezüglich der Produkt-Topologie) von  $\mathcal{A}^G = \prod_{\alpha \in G} \mathcal{A}_\alpha$  ergibt sich dann mittels dem Theorem von Tychonoff [Ree72-I, S. 100].

Periodische Orbits liegen dicht in  $\mathcal{A}^G$ , d.h. man kann im Sinne der punktweisen Konvergenz jedes unendliche Wort aus  $\mathcal{A}^G$  genauso gut durch eine Folge von **“periodischen Approximanten”**  $(w_\infty^{(n)})_n$  beliebig genau annähern.

Kommen wir wieder zu dem Ausgangspunkt unserer Betrachtungen zurück! Jedem Wort  $\omega$  entspricht eine geometrische Struktur, die einer gegebenen Potentiallandschaft zugrunde liegt. Mit den eingeführten Begriffen können wir die uns interessierenden Strukturen sehr leicht wie folgt beschreiben. Sei ein durch (I.2) erklärter Morphismus  $\mathcal{M}$  mit folgenden Eigenschaften gegeben:

- I.  $\mathcal{M}(x_i) \neq \mathbf{1}$  für  $x_i \in \mathcal{A}, i = 1, \dots, \Lambda$ ,
- II. Es existiert ein  $x_k \in \mathcal{A}$  derart, daß  $\mathcal{M}(x_k) = x_k w$  für ein  $w \in \mathbb{F}^+(\mathcal{A})$  gilt. (I.28)

Offensichtlich ist hierfür jedes Wort  $w^{(n)} = \mathcal{M}^n(x_k)$  ein echtes Präfix von  $w^{(n+1)} = \mathcal{M}^{n+1}(x_k)$ , so daß der Grenzwert der Folge  $(w^{(n)})_{n \geq 0}$  existiert. Der Untersuchung einiger Eigenschaften der durch die unendlichen Worte

$$\omega = \lim_{n \rightarrow \infty} w^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{M}^n(x_k)$$

beschriebenen Strukturen soll unsere Arbeit gewidmet sein. Man nennt  $w^{(n)}$  den  $n$ -ten **Approximanten** von  $\omega$ . Die Abbildung  $w^{(n+1)} = \mathcal{M}(w^{(n)})$  findet man in der Literatur gelegentlich auch unter dem Begriff der **“Hyper-Inflation”** (s. z.B. [Oda89, Kan93]). Ihr werden wir im Rahmen der Ortsraum-Pfad-Renormierung gewisse Rekursionsformeln (Diffeomorphismen)  $\vec{x}^{(n+1)} = {}^R\mathcal{M}(\vec{x}^{(n)})$  zuordnen. Davon begrifflich zu unterscheiden, wenn auch in vielen Aspekten eng damit verwandt (da er er als Grenzwert der Hyperinflation (“Renormierungsfluß”) aufgefasst werden kann), ist die **“Inflationssymmetrie”** oder **“diskrete Dilatationssymmetrie”**, welche direkt zum eigentlichen Begriff der **“Renormierung”** korrespondiert. Der Morphismus  $\mathcal{M}$  läßt sich in natürlicher Weise auf unendliche Worte  $\omega = y_0 y_1 y_3 \cdots y_\mu \cdots$  übertragen. Es gilt  $\mathcal{M}(\omega) = \mathcal{M}(y_0)\mathcal{M}(y_1)\mathcal{M}(y_2) \cdots \mathcal{M}(y_\mu) \cdots$ . Aus den obigen Betrachtungen ergibt sich, daß das unendliche Wort  $\omega$  invariant (**“Fixpunkt”**) gegenüber dem Morphismus  $\mathcal{M}$  ist, d.h. es gilt

$$\mathcal{M}(\omega) = \omega. \tag{I.29}$$

Damit tritt zu unserer Sammlung von Relationentypen ein weiterer zentraler Typ hinzu:

- **Fixpunkte** in  $\mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  oder  $\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$ : Substitutionen  $\mathcal{M}$  über *endlichen* Worten führen im Phasenraum  $\mathbf{\Pi}_{\epsilon,t}$  zu *Rekursionen/Iterationen*  $\vec{x}^{(n+1)} = {}^R\mathcal{M}(\vec{x}^{(n)})$ . Im Gegensatz zu Wortrelationen und “Operatorrelationen”, welche zu identischen Orbits  $(\vec{x}^{(n)})_n \subset \mathbf{\Pi}_{\epsilon,t}$  im Phasenraum führen, bringt die *asymptotische Äquivalenz* (“Inflationssymmetrie”) von unendlichen Worten gemäß (I.29) den eigentlichen *Renormierungsgedanken* ins Spiel.

Eine wichtige Konsequenz, die sich für uns aus der Einführung einer Topologie ergibt, ist die Möglichkeit der Definition des Begriffes der Stetigkeit und der *stetigen Abbildungen*. Sie sind das zentrale Thema der topologischen Dynamik. Dagegen spielen *maßerhaltende Abbildungen* die zentrale Rolle innerhalb der Ergodentheorie. Beide Aspekte werden im Folgenden von Bedeutung sein. Ein **topologisches dynamisches System** ist *per definitionem*

ein Paar  $\Sigma = (\langle \Omega, \mathfrak{T} \rangle, \mathcal{T})$ , wobei  $\langle \Omega, \mathfrak{T} \rangle$  ein i.a. kompakter Hausdorff-Raum und  $\mathcal{T}$  eine (oder allgemeiner, eine Gruppe von) stetige(n) Abbildung(en) von  $\Omega$  in sich ist. Zu  $\Sigma$  existiert ein normiertes, positives, auf der  $\sigma$ -Algebra  $\mathfrak{B}$  aller Borel-Mengen aus  $\Omega$ , definiertes Maß  $\mu$ , welches  $\mathcal{T}$ -invariant ist (Satz von *Krylov-Bogolioulov*, s. z.B. [Que87, S. 62] oder [Bro76, S. 45]). Man nennt das Tupel  $\Phi = (\Omega, \mathfrak{B}, \mu, \mathcal{T})$  ein **abstraktes dynamisches System**.

Definieren wir auf  $\mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  die (diskrete) Translation  $\mathcal{T}$  durch

$$(\mathcal{T}\omega)_\mu = \omega^{[\mu+1]}, \quad \mu \geq 0.$$

$\mathcal{T}$  ist zwar stetig und surjektiv, aber nicht injektiv (da  $\mathcal{T}$  eine  $(\Lambda$ -zu-1)-Abbildung ist). In  $\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  ist  $\mathcal{T}$  dagegen ein Isomorphismus.

Eine Substitutionsregel  $\mathcal{M}$  legt einer Folge von Symbolen in dem durch  $\mathcal{M}$  erzeugten Wort  $w(x_1, \dots, x_\Lambda)$  eine Fernordnung auf, die es klar von ungeordneten Systemen unterscheidet. Zum einen kann eine weitreichende Ordnung mit den regulären Eigenschaften einer zugrundeliegenden *Translationssymmetrie* einhergehen. Sie manifestiert sich in einem diskreten Fourierspektrum (d.h. der Träger der Autokorrelationsfunktion besteht aus einer diskreten Punktmenge). Eine durch (positive) Substitutionen erzeugte Struktur besitzt naturgemäß zusätzlich eine nichttriviale “Selbstähnlichkeitssymmetrie”, welche einer Invarianz bezüglich einer diskreten *Dilatation* entspricht. Beides sind *verschiedene* Formen von *Repetitivitäten*, d.h. jeder Ausschnitt eines gegebenen Musters wiederholt sich mit gleichmäßiger Dichte auf dem gesamten Muster [Dan91, Luc93–1]. Beschränken wir uns auf den metrischen Raum  $\mathcal{A}^G$  symbolischer Folgen, nennt man ein unendliches Wort  $\omega \in \mathcal{A}^G$  **repetitiv** (= engl. “*recurrent*”), wenn jeder Faktor  $\omega^{[\mu, \nu]}$  von  $\omega$  unendlich oft in  $\omega$  auftritt. Ein unendliches Wort  $\omega$  ist genau dann repetitiv, wenn es eine streng monoton wachsende Folge  $(n_k)_k$ ,  $n_k \in \mathbb{N}$ , gibt, so daß

$$\omega = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{T}^{n_k}(\omega) \tag{I.30}$$

gilt. Für den Fall, daß  $(n_k)_k$  eine beschränkte Folge von ganzen Zahlen ist, d.h. (I.30) die Form  $\omega = \mathcal{T}^{\tilde{N}}(\omega)$  hat, läßt sich auf die Schrödinger-Gleichung (3), s. S. vi, unmittelbar das Bloch’sche Theorem mit allen seinen wohlbekanntenen Konsequenzen anwenden. Es gibt nun verschiedene Arten, wie man sich von der Periodizität entfernen kann, ohne sofort in das andere Extrem der randomisierten Strukturen zu verfallen. Die Repetitivität ist eine davon. Ist der Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Blöcken  $\omega^{[\mu, \nu]}$  endlich, so spricht man von einem **stark repetitiven** (= **minimalen**) Wort<sup>16</sup>. Offensichtlich ist jedes periodische Wort auch stark repetitiv<sup>17</sup>. Die Thue-Morse Folge ist ein Beispiel für eine stark repetitive Folge, die nicht periodisch<sup>18</sup> ist [Lot2001, S. 27]. Der Ausgangspunkt der Bloch-Theorie besteht im Wesentlichen darin, die gemeinsamen Eigenzustände von  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$  und  ${}^R\hat{\mathcal{T}}^{\tilde{N}}$ , wobei  $\tilde{N}$

<sup>16</sup>Der Begriff “*Minimalität*” kommt aus der symbolischen Dynamik: Ein unendliches Wort (oder eine Folge)  $\omega$  ist genau dann *minimal*, wenn es das dynamische System  $(\overline{\mathfrak{O}[\omega]}, \mathcal{T})$  ist.

<sup>17</sup>Dieser Fall ist in der ursprünglichen geometrischen (auf  $\mathbb{R}^D$  statt auf  $\mathcal{A}^G$  erklärten) Definition der *Repetitivität* in [Dan91] *per definitionem* ausgeschlossen. Wir verwenden hier *Repetitivität* synonym zum englischen Begriff “*recurrence*”.

<sup>18</sup>**Aperiodische** Folgen bzw. unendliche Worte werden am einfachsten dadurch erklärt, was sie *nicht* sind: periodisch bzw. schließlich periodisch. Hierbei versteht man unter (**schließlich**) **periodisch**, es existiert eine positive ganze Zahl  $\tilde{N}$  derart, daß für alle  $\mu \in \mathbb{N}$  (bzw. für alle  $\mu_0 \leq \mu \in \mathbb{N}$ ) gilt:  $\omega^{[\mu]} = \omega^{[\mu+\tilde{N}]}$ .

die Länge der Einheitszelle ist, zu bestimmen. Der **Orbit**

$$\mathcal{O}[\omega] := \{\mathcal{T}^\xi(\omega) \mid \xi = 0, 1, \dots, \tilde{N}\}, \quad \omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}},$$

liefert die zugehörige vollständige Brioullin-Zone, d.h. die zugehörigen irreduziblen Darstellungen von  $\mathfrak{H}_\omega$ . Im Folgenden lassen wir nun  $\tilde{N}$  gegen Unendlich gehen. Dies führt zu einer Reihe von “neuen” Konzepten (s. hierzu z.B. [Bro76, Pet83, Que87]), auf die wir kurz hier eingehen wollen:

- (i) Ein abstraktes dynamisches System  $\Phi = (\langle \Omega, \mathfrak{B} \rangle, \mu, \mathcal{T})$  ist **ergodisch**, wenn  $\mathcal{T}^{-1}(\omega) = \omega$ ,  $\omega \in \mathfrak{B}$  impliziert, daß entweder  $\mu(\omega) = 0$  oder  $\mu(\omega) = 1$  gilt, d.h. die einzigen  $\mathcal{T}$ -invarianten Mengen sind die trivialen Unterräume  $\emptyset$  und  $\Omega$  von  $\Omega$ . Es ist somit nicht möglich, den zugehörigen Phasenraum in kleinere Teile derart aufzuteilen und dort das System unabhängig vom Rest des Phasenraumes zu betrachten. Das topologische dynamische System  $\Sigma$  heißt **minimal (stark repetitiv)**, wenn aus  $\mathcal{T}(\omega) \subseteq \omega$ , für abgeschlossenes  $\omega$  entweder  $\omega = \Omega$  oder  $\omega = \emptyset$  folgt, oder äquivalent hierzu, wenn  $\overline{\mathcal{O}[\omega]} = \Omega$  für alle  $\omega \in \Omega$  folgt. Daraus ergibt sich unmittelbar, daß  $\Sigma$  genau dann minimal ist, wenn der Orbit  $\mathcal{O}[\omega]$  in  $\Omega$  dicht ist für alle  $\omega \in \Omega$ . Ersetzt man “alle  $\omega \in \Omega$ ” durch das schwächere “einige  $\omega \in \Omega$ ”, so nennt man  $\mathcal{T}$  topologisch **transitiv** auf  $\Omega$ .
- (ii)  $\Phi$  ist **schwach mischend**, wenn der Grenzwert  $\mu(\omega_1 \cap \mathcal{T}^{-n}(\omega_2)) \rightarrow \mu(\omega_1)\mu(\omega_2)$  für  $n \rightarrow \infty$ ,  $n \notin \mathbb{J}$  für alle  $\omega_1, \omega_2 \in \mathfrak{B}$  gilt, wobei<sup>19</sup>  $\mathbb{J}$  eine Menge verschwindender Dichte ist.
- (iii)  $\Phi$  ist **stark mischend**, wenn  $\mu(\omega_1 \cap \mathcal{T}^{-n}(\omega_2)) \rightarrow \mu(\omega_1)\mu(\omega_2)$  für  $n \rightarrow \infty$ , ohne Ausnahme, für alle  $n$  und alle  $\omega_1, \omega_2 \in \mathfrak{B}$  gilt.

Es gilt (iii)  $\Rightarrow$  (ii)  $\Rightarrow$  (i) (s. [Pet83], S. 210, [Ban97–I]). Jenseits starker Mischung gibt es weitere Stufen hinab zum Chaos. Da nach einem Satz von *Dekking* und *Keane* [Dek78] ein dynamisches System, welches durch eine primitive Substitution erzeugt wird, *nicht* stark mischend sein kann, können wir im Rahmen dieser Arbeit auf weitere Details hierzu verzichten. In demselben Artikel (vgl. a. [Ber93]) zeigen die Autoren, daß die Substitution  $\mathcal{M}_{DK} : L \rightarrow LSLSL, S \rightarrow LSS$  schwach mischend ist<sup>20</sup>. Die Bedeutung der eingeführten Begriffe liegt letztendlich darin begründet, daß es für die in dieser Arbeit betrachteten Substitutionsfolgen gelingt, ein eindeutig gegebenes, normiertes und  $\mathcal{T}$ -invariantes Maß anzugeben, d.h.  $\mu$  ist charakteristisch für die Eigenschaften des gesamten Orbits  $\overline{\mathcal{O}[\omega]}$ . Dieses Maß tritt als Korrelationsmaß (Spektrum eines unitären Operators, “Fourier-Spektrum”), oder als integrierte Zustandsdichte (für den selbstadjungierten Hamilton-Operator  $\mathfrak{H}$ ) in Erscheinung. Letztere übernimmt die Rolle, die für den periodischen Fall die Quantenzahl  $k$  spielt [Avr83]. Definieren wir weiter: Das dynamische System  $\Sigma$  heißt **eindeutig ergodisch**, wenn es genau ein  $\mathcal{T}$ -invariantes, normiertes Borel-Maß  $\mu$  auf  $\Omega$  gibt.  $\Sigma$  ist **streng ergodisch**, wenn es eindeutig ergodisch und minimal ist.

<sup>19</sup>D.h. die Anzahl der Menge  $\mathbb{J} \cap \{1, \dots, n\}$  dividiert durch  $n$  geht für  $n \rightarrow \infty$  gegen Null.

<sup>20</sup>Im Sinne der Baire’schen Kategorie sind fast alle maßerhaltenden Transformationen schwach mischend, aber nicht stark mischend... [Pet83, S. 209].

Um konkreter zu werden, setzen wir nun

$$\mathcal{A}^{\mathbb{N}} \supset \Omega := \overline{\mathcal{O}[\omega]} = \text{LI}[\omega], \quad \mathcal{O}[\omega] := \{\mathcal{T}^\xi(\omega) \mid \xi \in \mathbb{N}\}, \quad (\text{I.31})$$

wobei  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  das in (I.1.2) durch die Folge  $(\mathcal{M}^n(x_i))_n$  primitiver Substitutionen approximierte unendliche Wort ist.  $\text{LI}(\omega)$  ist die sog. LI-Klasse<sup>21</sup> von  $\omega$  [Baa99–I]. Der Abschluß des Orbits  $\mathcal{O}[\omega]$  ist ein metrischer, kompakter (vgl. z.B. [Ree72–I, S. 99]) nulldimensionaler Hausdorff–Raum mit der relativen Topologie  $\mathfrak{T}_\circ := \{\omega \cap \overline{\mathcal{O}} \mid \omega \in \mathfrak{T}\}$ . Der *endliche* Orbit aus (I.30) und die zugehörige Transformationsgruppen- $C^*$ -Algebra<sup>22</sup>  $C(\Omega) \otimes \mathcal{K}$  [Bel93] sind die Grundlage der Bloch–Floquet–Theorie. Für den allgemeinen Fall repetitiver Strukturen bilden das topologische dynamische System  $\Sigma_\circ = (\overline{\mathcal{O}}, \mathfrak{T}_\circ, \mathcal{T})$  und die separable (s. z.B. [Tom2001]) Transformationsgruppen  $C^*$ -Algebra  $\mathcal{A}(\Sigma) = C(\Omega) \rtimes_\alpha G$  das Fundament einer allgemeinen Spektraltheorie (vgl. z.B. [Tom87, Tom96]). In ihr ist die entsprechende Verallgemeinerung der Bloch–Floquet’schen Theorie begründet, für die wir eine RG–Darstellung finden wollen. Deshalb gilt unser Interesse den Eigenschaften des symbolischen dynamischen Systems (“*sub-shift*”)  $\Sigma_\circ$ .

Es gibt im Falle dieser “*sub-shifts*” ein sehr einfaches Kriterium, um die Minimalität von  $\Sigma_\circ$  für die uns interessierenden Substitutionsfolgen nachzuprüfen.  $\Sigma_\circ$  ist nämlich genau dann minimal, wenn die zugehörige Substitution  $\mathcal{M}$  “**primitiv**” ist [Que87, S. 89], d.h. wenn es für jedes  $x_i \in \mathcal{A}$  eine ganze Zahl  $k \geq 1$  derart gibt, daß das Wort  $\mathcal{M}^k(x_i)$  den Buchstaben  $x_1$  enthält. Letzteres ist äquivalent dazu, daß die zugehörige Substitutionsmatrix  $S_{\mathcal{M}}^k$  nur Einträge enthält, die größer Null sind. Aus der Minimalität von  $\Sigma_\circ$  ergibt sich aber, daß das dynamische System auch eindeutig ergodisch und somit streng ergodisch ist. Es existiert somit für alle uns interessierenden Substitutionen ein eindeutig gegebenes,  $\mathcal{T}$ -invariantes Maß, d.h. für alle  $f \in C(\Omega)$  ist<sup>23</sup>

$$\int f d\mu = \lim_{\tilde{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\tilde{N}} \sum_{\xi < \tilde{N}} f(\mathcal{T}^\xi(\omega)),$$

$$\mu([u]_0) = \lim_{\tilde{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\tilde{N}} \text{Card}(\{\xi < \tilde{N} \mid \omega^{[\xi, \xi+|u|-1]} = u\}), = \lim_{\tilde{N} \rightarrow \infty} \frac{\#_u(\mathcal{M}^{\tilde{N}}(x_i))}{|\mathcal{M}^{\tilde{N}}(x_i)|}.$$

mit  $u \in \bigcup_{\ell \geq 1} \mathcal{W}_\ell(\omega)$ . Alle Limites existieren und sind unabhängig von  $x_i \in \mathcal{A}$ . Für weitere Details sei auf [Que87, S. 95–103] oder [Bel92] verwiesen. Eine direkte Anwendung ergibt sich daraus für die Ableitung des sog. *gap-labelling*–Theorems [Bel92].

## I.2 Einige Beispiele — Eine Perspektive auf Kapitel III

Bevor wir im nächsten Abschnitt die Idee der hierarchischen Graphen einführen werden, wollen wir einige konkrete Beispiele von fastperiodischen Strukturen betrachten, die uns

<sup>21</sup>Zwei Elemente  $\omega_1, \omega_2 \in \mathcal{A}^G$ ,  $G = \mathbb{N}, \mathbb{Z}$ , sind **lokal ununterscheidbar** (“*lokal indistinguishable*”), wenn jeder Faktor in  $\omega_1$  auch in  $\omega_2$  auftritt und umgekehrt (weitere Details, s. z.B. [Baa97, Her97]).

<sup>22</sup> $\mathcal{K}(\mathbb{H})$  ist der Banach–Raum aller auf dem Hilbert–Raum  $\mathbb{H}$  erklärten kompakten Operatoren [Ree72–I, S. 200].

<sup>23</sup> $\text{Card}(\omega)$  ist die Kardinalität von  $\omega$ .

im Verlauf dieser Arbeit beschäftigen werden. Ihre Klasseneinteilung ergibt sich hier aus dem Korrelationsmaß (Fourier-Spektrum). Sie deckt sich nicht vollständig mit derjenigen bezüglich des elektronischen Spektrums. Während das dynamische Spektrum der Rudin-Shapiro-Folge absolut-stetige Anteile enthält, die grenz-periodischen Folgen, wie z.B. die periodenverdoppelnde Kette, ein singular-stetiges und die verallgemeinerten Fibonacci-Worte ein rein diskretes Spektrum aufweisen, ist ihr jeweiliges elektronisches Eigenwert-Spektrum  $\sigma(\mathcal{H}_\omega)$  durchweg singular-stetig. Solange man sich mit dem Fourier-Spektrum befaßt, ergeben sich folgende Unterscheidungskriterien [Luc93-1]:

- Pisot- gegenüber Nicht-Pisot-Ketten (s. Anhang III.B.2 zur Definition der Pisot-Eigenschaft), d.h. diskretes vs. kontinuierliches Fourierspektrum.
- Unter den Pisot-Ketten, also den im klassischen Sinne fastperiodischen Folgen, die dadurch gekennzeichnet sind, daß sie nicht periodisch sind, aber trotzdem ein diskretes Fourierspektrum im strengen Sinne besitzen, d.h. ihre Fourier-Transformierte ist eine *abzählbare* Summe von  $\delta$ -Distributionen, kann man unterscheiden in **quasiperiodische** Ketten, mit einem Fourier-Modul mit *endlichem* Rang und **schließlich-periodischen** (Fourier-Modul mit unendlichem Rang) und **schließlich-quasiperiodischen** (mit unendlichdimensionalem Orthogonalraum) Ketten.
- Unter den quasiperiodischen Folgen gibt es eine Klasse mit glatten Hyperatomflächen und eine Klasse, die durch Hyperatomflächen mit fraktalem Rand charakterisiert ist.

## I.2.1 Spezies aus dem Zoo der Substitutionen

Betrachten wir einige konkrete Beispiele von Substitutionsketten<sup>24</sup>. Ihnen gehört das Interesse unserer Arbeit:

### 1. Kreis-Potentiale: Es gilt ( $\lambda \neq 0$ )

$$\epsilon_\mu = \lambda \chi_A(\{\mu\lambda + \omega\}), \quad A = \bigcup_i [a_i, b_i) \subset [0, 1), \quad t_\mu = 1, \quad (\text{I.32})$$

mit der charakteristischen Funktion  $\chi_A(x) = 1$ , wenn  $x \in A$  und  $\chi_A(x) = 0$  sonst.  $\{x\} := x - [x]$  ist der dezimale Anteil von  $x$ , während  $[x]$  das sog. Gaußsche Symbol ist.  $[a_i, b_i)$  sind paarweise disjunkte Intervalle auf  $\mathbb{R}$ .

Ein wichtige Klasse von Kreispotentialen (I.32) bildet die Menge der sog. **Sturm-Folgen**

$$\chi_{[0,\lambda)}(\{\mu\lambda + \theta\}) = [\mu\lambda + \theta] - [(\mu - 1)\lambda + \theta] \in \{0, 1\}.$$

Sie wurden zuerst in [Mor40] und [Hed44] untersucht und finden seither reges Interesse sowohl in Physik, Biologie und Mathematik (s. z.B. [Ber96, Lot2001] und die dort zitierte Literatur). Sie sind definitionsgemäß Folgen minimaler Komplexität, d.h.

---

<sup>24</sup>Eine interessante Zusammenstellung verschiedener Aspekte "symbolischer Darstellung" physikalischer Systeme findet man z.B. in dem Buch [Bad97]. Eine einigermaßen vernünftige Übersicht über die Myriaden von Substitutionen und deren Eigenschaften würde leicht ein eigenes Buch füllen. Wir wollen es an dieser Stelle mit einigen wenigen Zitaten bewenden lassen [Que87, Luc93-1, Luc93-2]. Schließlich wollen wir auf die bemerkenswerte Web-Seite verweisen: <http://www.research.att.com/~njas/>.

es gilt<sup>25</sup>  $p(\mu) := \text{Card}(\mathcal{W}_\mu(\omega)) = \mu + 1$ . Das Auftreten von Palindromen in Sturm-Folgen wird in [Dro99] gezeigt. Das hat weitreichende Konsequenzen für das elektronische Spektrum. Sie implizieren, daß das Spektrum singular-stetig wird [Hof95–1, All97, Bel2000]. Die sie generierende Substitutionen werden wir in Kapitel III.2.1 besprechen (vgl. a. [Wal97]) und die zugehörigen Renormierungstransformationen einführen. Für rationale  $\lambda = p/q \in \mathbb{Q}$  besteht  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_\lambda)$  aus  $q$  Bändern (Bloch-Theorem). Im Gegensatz zu dem weiter unten betrachteten kontinuierlich-wertigen Modell, sind hier die Bandkanten keine stetigen Funktionen von  $\lambda$ . Es gilt

$$\lim_{\lambda \uparrow p/q} \sigma(\hat{\mathcal{H}}_\lambda) \neq \lim_{\lambda \downarrow p/q} \sigma(\hat{\mathcal{H}}_\lambda)$$

[Bel89], vgl. auch [Dan2000–1]. Die beiden Grenzwerte unterscheiden sich um diskrete Niveaus, welche man als Störstellenniveaus interpretieren kann. Geometrische Ursache hierfür ist, daß sich die beiden Grenzfolgen um *endliche* Teilfolgen voneinander unterscheiden.

**$\alpha$ .** Klassisches Beispiel von Sturm-Folgen sind die **verallgemeinerten Fibonacci-Folgen (gF)**<sup>26</sup> (s. Kapitel III.2):

$$\mathcal{L}_n := \mathcal{P}\mathcal{A}^n : \begin{cases} L \mapsto L^n S \\ S \mapsto L \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{P}\mathcal{A}^n} = \begin{pmatrix} n & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_{\pm} = \frac{n \pm \sqrt{n^2 + 4}}{2}, \quad (\text{I.33})$$

mit den *Eigenwerten*  $\lambda_{\pm}$ ,  $\det(\mathbf{S}_{\mathcal{P}\mathcal{A}^n}) = -1$  (unimodular, quadratisch irrationale Zahlen), den *Frequenzen*  $p_L = \lambda_+ / (\lambda_+ + 1)$  und  $p_S = 1 - p_L$ , der *Komplexität*  $p(\mu) = \mu + 1$  (Sturm-Folge!). Die zugehörigen Folgen sind quasiperiodisch mit einem Fourier-Modul vom Rang 2. Der Akzeptanzbereich im Orthogonalraum  $\mathbf{E}_{\perp}$  (“atomare Hyperflächen”) ist kompakt. Die Abbildung der geometrischen auf die symbolische Darstellung (und umgekehrt) ist der sog. Farey-Baum  $\mathfrak{F}_F^T(V, \mathbf{E})$  (s. Anhang III.B.1). Die Substitutionen sind invertierbar, jedes  $\mathcal{L}_n$  ist ein Automorphismus der freien Gruppe auf sich (vgl. [Zhi95, Lam98] zur Beziehung zwischen invertierbaren Substitutionen und der Einbettungsmethode). Die möglichen Verallgemeinerungen der Sturm-Folgen auf  $\Lambda$ -Buchstabenalphabeten ( $\Lambda \geq 3$ ) sind auch unter dem Namen **Arnoux–Rauzy Folgen** [Arn2001] bekannt.

**$\beta$ .** Im allgemeinen sind die atomaren Hyperflächen selbst für Substitutionsfolgen mit beschränkten Fluktuationen fraktal. Beispiele hierzu findet man in [Luc93–1]. Betrachten wir die positiven Substitutionen  $\mathcal{M}$ , welche zu einer gegebenen Substitutionsmatrix  $\mathbf{S}_{\mathcal{M}}$  gehören. Sämtliche positiven Substitutionen (nämlich  $\mathcal{L}, \mathcal{R}$ ) mit der Substitutionsmatrix  $\mathbf{S}_{\mathcal{P}\mathcal{A}} \equiv \mathbf{S}_{\mathcal{L}}$  haben wir schon kennen gelernt. Betrachten wir den Fall  $\mathbf{S}_{\mathcal{L}}^2$ . Nun gibt es sechs verschiedene positive Substitutionen:

$$\mathcal{L}^2, \quad \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2 = \mathcal{R} \mathcal{L}, \quad \mathcal{T}_S \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2 = \mathcal{L} \mathcal{R}, \quad \mathcal{T}_L \mathcal{T}_S \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2 = \mathcal{R}^2 \quad (\text{I.34})$$

<sup>25</sup>“Card” ist die Abkürzung für “Kardinalität” (= Anzahl der Elemente einer Menge). Zur Definition von  $\mathcal{W}_\mu(\omega)$ , siehe S. 12 oder [Que87, S. 104].

<sup>26</sup>In der englischsprachigen Literatur als “precious-mean”- oder “metallic-mean”-Ketten bekannt.

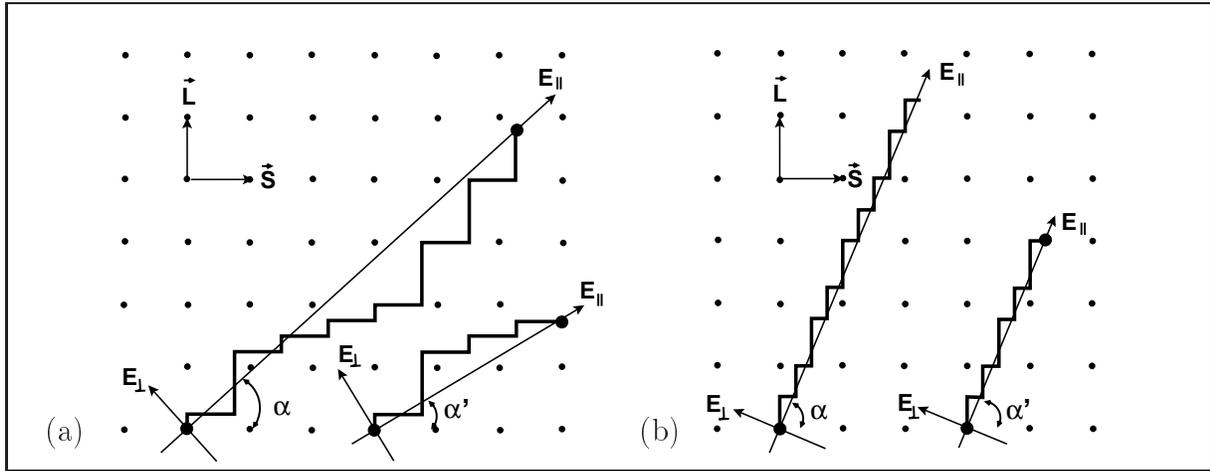


Abbildung I.1: Einbettungsmethode für (a) Non-Pisot Folge  $\mathcal{L}_3^n(L) = (\mathcal{P}\mathcal{E}_3\mathcal{U})^n(L)$  mit Fluktuationen, (b) zum Vergleich die verallgemeinerte Fibonacci Folge  $(\mathcal{P}\mathcal{A}^2)^n(L)$ .

und

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\mathcal{L}_1} : L \rightarrow LLS, \quad S \rightarrow SL &\longrightarrow \mathbf{S}_{\mathcal{L}}^2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{M}_{\mathcal{L}_2} : L \rightarrow SLL, \quad S \rightarrow LS, & \end{aligned} \quad (\text{I.35})$$

welche zu derselben Substitutionsmatrix  $\mathbf{S}_{\mathcal{L}}^2$  gehören. Aber die Morphismen in (I.35) gehören nicht zu demselben Orbit wie diejenigen aus (I.34). Während die Substitutionen (I.34) als Akzeptanzbereich (“*window function*”) ein Intervall in  $\mathbf{E}_{\perp}$  besitzen, gehört zu beiden Substitutionen aus (I.35) derselbe *fraktale* Akzeptanzbereich<sup>27</sup>

**2. Die Period-Doubling (PD-)Ketten** (s. Kapitel III.4) werden durch die folgende Substitutionsvorschrift definiert:

$$\mathcal{M}_{PD} := \mathcal{P}\mathcal{E}_2\mathcal{P}\mathcal{A}\mathcal{P} : \begin{cases} L \mapsto LS \\ S \mapsto LL \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{M}_{PD}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = 2, \lambda_2 = 1, \quad (\text{I.36})$$

wobei wir den elementaren Morphismus

$$\mathcal{E}_n : \begin{cases} L \mapsto L^n \\ S \mapsto S \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{E}_n} = \begin{pmatrix} n & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.37})$$

eingeführt haben. Bei  $\mathcal{M}_{PD}$  sind die Frequenzen gleich  $p_L = 2/3$  und  $p_S = 1/3$ . Hier ist das Fourierspektrum wieder rein diskret, aber der Rang ist *unendlich*, d.h. hier liegt ein Beispiel einer grenzperiodischen Kette vor [All95]. Eine Anwendung der Period-Doubling-Folge findet man bei der Kodierung (symbolische Dynamik) der Zyklenstruktur der logistischen Abbildung  $x \mapsto rx(1-x)$  an der Grenze zum chaotischen Verhalten.

<sup>27</sup>Details und weitere Beispiele s. [Luc93–1]. Die analoge Situation findet man auch in höheren Dimensionen, s. z.B. [God93, Arn2001].

3. **Binäre nicht–Pisot Ketten** (s. Kapitel III.3): Aus den Myriaden von Beispielen hierzu sei folgende Klasse erwähnt:

$$\mathcal{M}_{nonPV} := \mathcal{PE}_n \mathcal{A}^m : \begin{cases} L \mapsto L^m S^n \\ S \mapsto L \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{PE}_n \mathcal{A}^m} = \begin{pmatrix} m & n \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.38})$$

$\det(\mathbf{S}_{\mathcal{PE}_n \mathcal{A}^m}) = -n$ , mit den Eigenwerten

$$\lambda_{\pm} = \frac{-m \pm \sqrt{m^2 + 4n}}{2},$$

und den *Frequenzen*  $p_L = \lambda_+ / (\lambda_+ + 1)$  und  $p_S = 1 - p_L$ . Die verallgemeinerten Fibonacci-Folgen sind somit in dieser Menge als Teilmenge enthalten. Das Fourierspektrum besitzt stetige Anteile [All95]. Setzt man  $m = 1$ , so erhält man wieder die verallgemeinerten Fibonacci-Folgen. Die Substitutionen sind invertierbar, aber nicht innerhalb der *freien* Gruppe.

4. Für die **Thue–Morse (TM–) Folge** gilt (s. Kapitel III.4):

$$\mathcal{M}_{TM} : \begin{cases} L \mapsto LS \\ S \mapsto SL \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{M}_{TM}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = 2, \lambda_2 = 0, \quad (\text{I.39})$$

mit den Frequenzen  $p_L = p_S = 1/2$  und der Komplexität  $3\mu < p(\mu) < 4\mu$ .  $\mathcal{M}_{TM}$  ist ein weiterer elementarer Morphismus, d.h. er läßt sich nicht auf die bisher eingeführten Morphismen zurückführen. Er gehört zu den **singulären Substitutionen**, d.h. es ist  $\det(\mathbf{S}_{\mathcal{M}_{TM}}) = 0$ . Es existiert keine inverse Substitution. Das Fourierspektrum ist bei bestimmter Wahl der Entwicklungskoeffizienten rein singulär–stetig und enthält ansonsten diskrete Anteile [Que87]. Ersetzt man in (I.39)  $S \mapsto SL$  durch  $S \mapsto LS$ , so erhält man eine periodische Kette  $w^{(n)} = (LS)^n$ . Beschränkt man sich auf die allein aus der Substitutionsmatrix deduzierbaren Aussagen, so unterscheidet sich die *aperiodische* TM-Folge in keiner Weise von der *periodischen* Folge.

Bisher haben wir nur 2–Buchstaben Alphabete betrachtet. Prominentes Beispiel eines 4–Buchstaben Alphabets ist die sog. Rudin–Shapiro–Folge:

5. **Rudin–Shapiro (RS–)Folge** (s. Kapitel III.5):

$$\mathcal{M}_{RS} : \begin{cases} A \mapsto AB \\ B \mapsto AC \\ C \mapsto DB \\ D \mapsto DC \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{M}_{RS}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.40})$$

mit den Eigenwerten  $\lambda_1 = 2, \lambda_{2,3} = \pm\sqrt{2}$  und  $\lambda_4 = 0$ . Die Projektion  $A, B \mapsto 1$  und  $C, D \mapsto -1$  liefert die sog. *binäre* RS-Folge. Auch diese Substitution ist singulär, d.h. die Determinante der Substitutionsmatrix verschwindet. Die Frequenzen der quarternären RS-Folge sind alle gleich  $1/4$ , die Komplexität der binären RS-Folge ist  $8\mu - 8$  ( $\mu \geq 8$ ). Das Fourierspektrum der binären RS-Folge ist rein absolut stetig. Dies war die Motivation für Bestrebungen, die Eigenschaften unkorrelierter Zufallsfolgen durch die einer deterministischen Folge zu reproduzieren [All95, S. 298].

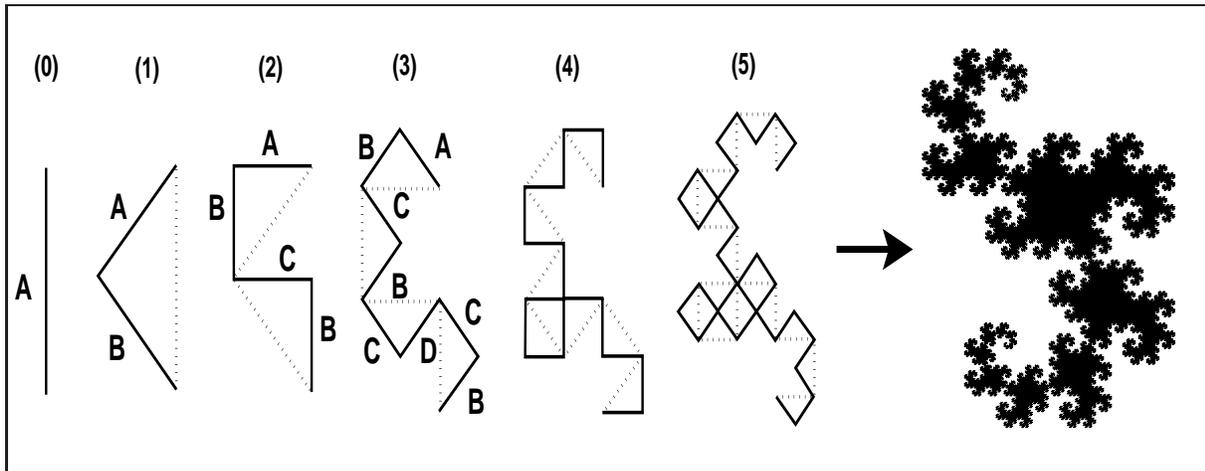


Abbildung I.2: Bsp. einer Heighway'schen Drachen-Kurve, erzeugt durch die Substitution (I.41).

### 6. Heighway'sche Drachen-Kurve (s. [Dav70, Dek82]):

$$\mathcal{M}_H : \begin{cases} A \mapsto AB \\ B \mapsto BC \\ C \mapsto CD \\ D \mapsto AD \end{cases} \mapsto \mathbf{S}_{\mathcal{M}_H} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.41})$$

mit  $\det(\mathbf{S}_{\mathcal{M}_H}) = -2$ . Eine andere *geometrische Darstellung* von Substitutionen liefert eine Form des sog. "Random-Walk" (s. z.B. [Dek95]). In Abb.<sup>28</sup> I.2 sind die den Buchstaben aus  $\mathcal{A}_\Lambda$  zugeordneten Vektoren nicht linear unabhängig im  $\mathbb{R}^4$ , sondern liegen in  $\mathbb{R}^2$ , wobei, bis auf eine für alle vier Vektoren jeweils gleiche affine Transformation,  $\vec{A} = (1, 0) = -\vec{C}$  und  $\vec{B} = (0, 1) = -\vec{D}$  gilt. Typisch hierbei ist, daß sich die topologische Dimensionen der Approximanten von der des Grenzwertes unterscheidet. Ausgehend von  $D = 1$  ergeben sich bekanntlich z.B. für die Cantormenge  $D = 0.631$ , die Koch-Kurve  $D = 1.2626$ , die Drachen- und Peano-Kurven jeweils  $D = 2.0$  und für das Sierpinski-Dreieck  $D = 1.5849$ . Alle diese Beispiele sind geometrische Darstellungen von durch Substitutionen  $\mathcal{M}$  erzeugten Worten über einem endlichen Alphabet.

Eines der wichtigsten elektronischen Merkmale dieser durch eine *endliche* Anzahl verschiedener  $\epsilon_k$  beschreibbaren *aperiodischen* Strukturen ist, daß sie ein *singuläres* elektronisches Eigenwert-Spektrum aufweisen, d.h. für sie ist  $\sigma_{ac} = \emptyset$  [Kot89]. Es gibt keinen Metall-Isolator-Übergang. Charakteristisch für derartige durch Substitutionen erzeugte Strukturen ist, daß auch  $\sigma_{pp} = \emptyset$  gilt, d.h. für sie ist das Energie-Spektrum  $\sigma(\mathcal{H}) = \sigma_{sc}$  generisch rein singular-stetig [Rio94, Sim95]. Sein Träger  $\text{supp}(\sigma_{sc})$  ist eine Cantor-Menge vom Lebesgue'schen Maß Null. Die zugehörigen Wellenfunktionen sind algebraisch lokalisiert.

### I.2.2 Andere Struktur-Typen

Wir wollen kurz auf einige der wichtigsten im *Umfeld* dieser Arbeit auftretenden Strukturen zu sprechen kommen und exemplarisch einige charakteristische Unterschiede zu den uns

<sup>28</sup>Das Bild des "Drachen" in der Abb. I.2 stammt aus <http://www.math.okstate.edu/mathdept/dynamics/dragon.html>.

interessierenden **DOL**-Strukturen aufzeigen.

- **Anderson Modell** (Random-Modell, s. z.B. [**Cyc87, Pas92**]) Hier nehmen die Platzenergien  $\epsilon_\mu$  mit einer entsprechenden Wahrscheinlichkeitsverteilung (z.B. Gauß'sche Verteilung) bestimmte Werte aus einem gegebenen Intervall an. Interessante Effekte findet man auch bei Systemen mit **korrelierter Unordnung** (s. z.B. [**Sou94, Gom99, IZR99, Car2002**]).
- **Kontinuierlichwertige, fastperiodische Potentiale**, bzw. genauer, fastperiodisch verteilte Orbital-Energien. Man setzt in (5), siehe S. vi,

$$\epsilon_\mu = \sum_{k=1}^K \lambda_k \cos [2\pi(\mu\alpha + \omega)], \quad t_\mu = 1, \quad \text{mit } \omega \in [0, 1], \alpha \in \mathbb{R}.$$

Für den Spezialfall  $K = 1$  erhält man gerade die **diskrete Mathieu-Gleichung** ("almost Mathieu equation")

$$(\hat{\mathcal{H}}_{\lambda, \alpha, \omega} \Psi)_\mu := \Psi_{\mu+1} + \Psi_{\mu-1} + \lambda \cos [2\pi(\mu\alpha + \omega)] \Psi_\mu = E \Psi_\mu, \quad \lambda \neq 0. \quad (\text{I.42})$$

Für irrationales  $\alpha$  liegen die Werte von  $\epsilon_\mu = \lambda \cos [2\pi(\mu\alpha + \omega)]$  *dicht* auf dem Intervall  $[-\lambda, \lambda]$ . Daher die Bezeichnung "kontinuierlichwertiges Potential". Dies hat weitreichende Konsequenzen für die Eigenschaften des Modells. Im Gegensatz zu den "diskretwertigen" Modell ( $\epsilon_\mu$  nimmt nur eine *endliche* Anzahl von verschiedenen Werten an) weist  $\hat{\mathcal{H}}_{\lambda, \alpha, \omega}$  ein Metall-Isolator-Übergangs-Verhalten auf.

Eingeführt von Peierls [**Pei33**] ("*Peierls-Substitution*") wurde diese Gleichung von Harper [**Hap55**] für den speziellen Fall  $\lambda = \lambda_c = 2$  ("**Harper-Gleichung**") als Modell-Gleichung zur Beschreibung von 2-D Bloch-Elektronen im Magnetfeld benutzt. Für *rationales*  $\alpha \in \mathbb{Q}$  ist das Energie-Spektrum absolut stetig, alle Zustände sind ausgedehnt (Bloch-Theorem). Für *irrationales*  $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$  weist das Energie-Spektrum von  $\hat{\mathcal{H}}_{\lambda, \alpha, \omega}$  für  $\lambda = 2$  einen Metall-Isolator-Übergang auf: alle Zustände sind für  $\lambda < 2$  ( $\lambda > 2$ ) ausgedehnt (exponentiell lokalisiert,  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_\alpha)$  ist ein dichtes Punkt-Spektrum). Dieser Übergang vom diskreten zum absolut-stetigen Spektrum ergibt sich aus einer der Schrödinger-Gleichung (I.42) inherenten Symmetrie<sup>29</sup>: (I.42) geht unter einer diskreten Fouriertransformation in sich selbst über, jedoch mit reskalierten Parametern  $\lambda' = 4/\lambda$  und  $E' = 2E/\lambda$  und einem neuen Phasenfaktor  $\omega$ . Für  $\lambda = 2$  ist die Gleichung gegenüber dieser sog. Aubry-Transformation invariant, was die höhere Symmetrie des Quadratgitters gegenüber dem Rechteckgitter widerspiegelt [**Man91**]). Das Spektrum ist für irrationales  $\alpha$  unabhängig von der Phase  $\omega$  [**Rüd98**, S. 61]. Für  $\lambda = 2$  sind alle Zustände "kritisch", d.h. weder exponentiell lokalisiert noch ausgedehnt (singulär-stetiges Spektrum für alle  $\alpha$ , s. hierzu [**Jit99**] und dort zitierte Literatur). Das Spektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_{\lambda, \alpha, \omega})$  als Funktion von  $\alpha$  ist unter dem Begriff **Hofstadter Schmetterling** [**Hof76**] bekannt geworden.

Für  $K \geq 2$  ist der Metall-Isolator-Übergang nicht mehr *unabhängig* von der Energie, d.h. nun ist i.a.  $\lambda_c = \lambda_c(E)$ . S. z.B. [**Hir89**] für den Fall  $K = 2$  und [**Joh90**] für  $K = 3$ . Für  $K = 3$  treten mehrere Mobilitätskanten auf, die Zustände sind in den Bandmitten lokalisiert.

- **Nichtlineare Modelle**: Hier hängen die Platzenergien  $\epsilon'_\mu$  zusätzlich direkt von der Wellenfunktion selbst an diesem Ort ab, d.h. im einfachsten Falle hat die nichtlineare Schrödinger-Gleichung die Form

$$(\hat{\mathcal{H}}_\lambda \Psi)_\mu := \Psi_{\mu+1} + \Psi_{\mu-1} + (\epsilon_\mu + \lambda |\Psi_\mu|^2) \Psi_\mu = E \Psi_\mu.$$

<sup>29</sup>Sog. **Aubry-Dualität** [**Aub80**], einen entsprechenden Beweis findet man in [**Avr83, Fig84**].

Nun wird durch die Nichtlinearität die *geometrische* aperiodische Struktur (gegeben durch die Folge  $(\epsilon_\mu)_\mu$ ) durch die Wellenfunktion selbst moduliert. Im hier betrachteten Fall wird die Kybernetik durch die *Aufenthaltswahrscheinlichkeit* des Elektrons am Platz  $\mu$  erzeugt. Dabei hat man tendentiell den Sachverhalt, daß die Nichtlinearität die Beweglichkeit von lokalisierten (delokalisierten) Anregungen begünstigt (blockiert) (s. z.B. [Mol98] und dort zitierte Literatur). Die für die Beschreibung von Transporteigenschaften wichtige Elektron–Phonon–Wechselwirkung manifestiert sich in semiklassischer Näherung ebenfalls durch das Auftreten von Nichtlinearitäten (s. z.B. [Kop94, Kop95]). Wir wollen aber hier nicht weiter darauf eingehen.

### I.3 Hierarchische Bäume und Automaten

Nach diesen allgemeinen Betrachtungen wollen wir den durch die symbolische Dynamik bestimmten Anteil am Fundament der *Pfad–Renormierung* konkret ausarbeiten und erstmalig in einer für eindimensionale **DOL**–Strukturen vollständigen Weise präsentieren. Der Spezialfall der verallgemeinerten Fibonacci–Ketten wurde von uns in [Wal97] ausgearbeitet und wird in Kapitel **III.2** ausführlich vorgestellt.

Kommen wir wieder zum Ausgangspunkt unserer Überlegungen auf S. 3 zurück! Folgendes Lemma legt die Grundlage für die Darstellung der Operatoren  $\mathfrak{T}^k$ ,  $k = 0, 1, \dots, |w| - 1$  des Orbits  $\mathfrak{O}(w)$  in (I.4), durch Kombinationen der in (I.3) benutzten Substitutionen  $\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_n$ , und speziellen inneren Automorphismen aus  $\Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$ :

**Lemma I.1** *Sei  $w = y_0 y_1 \cdots y_{N-1} \in \mathbb{F}(\mathcal{A})$  das erzeugende Wort des Orbits  $\mathfrak{O}(w)$  (I.4) und*

$$\mathfrak{N}_{ij} := \begin{cases} \mathfrak{Q}^{i-1}(\mathfrak{P}\mathfrak{Q})^{j-i-1}, & i < j \\ \mathfrak{Q}^{i-1}(\mathfrak{P}\mathfrak{Q})^{j-i}, & i > j \end{cases},$$

( $\mathfrak{N}_{12} = \mathbf{1}$  und  $\mathfrak{N}_{21} = \mathfrak{P}$ ). Definieren<sup>30</sup> wir, für alle<sup>31</sup>  $j = 1, \dots, i-1, i+1, \dots, \Lambda$ ,

$$\mathfrak{T}_{x_i} := \prod_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{\Lambda} \mathfrak{K}_{ij} = \mathfrak{K}_{\Lambda i} \cdots \mathfrak{K}_{i+1, i} \mathfrak{K}_{i-1, i} \cdots \mathfrak{K}_{1i} : \quad x_i \rightarrow x_i, \quad x_j \rightarrow x_i^{-1} x_j x_i, \quad (\text{I.43})$$

mit der Abkürzung  $\mathfrak{K}_{ij} := \mathfrak{N}_{ij} \mathcal{A}^{-1} \mathfrak{U} \mathfrak{N}_{ij}^{-1}$ . Dann gilt (beachte  $\mathfrak{T}_z = \mathfrak{T}_v \mathfrak{T}_u$ ,  $z = uv$ )

$$\mathfrak{T}_{w^{[0, \mu]}}(w) = (w^{[0, \mu]})^{-1} w w^{[0, \mu]} \in \mathfrak{O}[w], \quad \text{mit} \quad \mathfrak{T}_{w^{[0, \mu]}} := \prod_{\alpha=0}^{\mu-1} \mathfrak{T}_{y_\alpha}, \quad (\text{I.44})$$

d.h.  $\mathfrak{T}_{w^{[0, \mu]}}$  erzeugt für  $\mu = 0, \dots, |w| - 1$ , sämtliche zyklische Permutationen von  $w$ .

☞ **Beweis:** Es genügt darauf hinzuweisen, daß

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_{ij} &= \mathfrak{N}_{ij} \mathfrak{P} \mathfrak{N}_{ij}^{-1} & : \quad x_i \rightarrow x_j, \quad x_j \rightarrow x_i \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq i, j, \\ \mathfrak{U}_{ij}^{\pm 1} &= \mathfrak{N}_{ij} \mathfrak{U}^{\pm 1} \mathfrak{N}_{ij}^{-1} & : \quad x_i \rightarrow x_i x_j^{\pm 1}, \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq i, \end{aligned}$$

<sup>30</sup>Wir definieren für nichtkommutative Größen  $\mathbf{X}_k$  das **Produktsymbol** für diese Arbeit durchgehend durch  $\prod_{k=1}^n \mathbf{X}_k := \mathbf{X}_n \mathbf{X}_{n-1} \cdots \mathbf{X}_1$ . Außerdem setzen wir  $W^{-1} \cdot (w_1, \dots, w_\Lambda) \cdot W \equiv (W^{-1} w_1 W, \dots, W^{-1} w_\Lambda W)$ .

<sup>31</sup>D.h. durch  $\mathfrak{T}_{x_i}$  werden in einem Wort jeweils alle Buchstaben  $x_j \in \mathcal{A}_\Lambda$  außer  $x_i$  gemäß der Substitutionsvorschrift  $x_j \rightarrow x_i^{-1} x_j x_i$  simultan ersetzt.

und  $\mathcal{A}_{ij} = \mathcal{O}\mathbf{u}_{ij}^{-1}\mathcal{O} = \mathcal{N}_{ij}\mathcal{A}\mathcal{N}_{ij}^{-1}$  gilt (s. [Nie17/24]). Aus diesen Relationen ergibt sich unmittelbar

$$\mathcal{K}_{ij} := \mathcal{A}_{ij}^{-1}\mathbf{u}_{ij} : x_i \rightarrow x_j^{-1}x_ix_j, x_k \rightarrow x_k, k \neq i,$$

woraus (I.43) und damit schließlich (I.44) folgt.  $\clubsuit$

Dieses Lemma gibt uns somit die Gewissheit, daß wir für *alle* uns interessierenden Strukturen, d.h. alle **DOL**-Worte  $w^{(n)} := (\prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k)(x_1)$ , auch jeweils den kompletten Orbit  $\mathcal{O}[w]$ , also *alle* zyklischen Permutationen  $(\mathcal{J}^\xi \cdot \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k)(x_1)$ , durch eine Folge von Substitutionen erzeugen können.

Um dies einzusehen, konstruieren wir uns einen “**hierarchischen Graphen**”, den wir als “ **$\Phi$ -Graph**” bezeichnen wollen. Er liefert gerade diejenige Abfolge von “elementaren” Substitutionen  $\mathcal{M}_k$ , aus einem passenden (minimalen) Erzeugendensystem  $\mathcal{A}^\Phi := \{\mathcal{M}_k, \cdot\}$ , so daß

$$\mathcal{O}[w] \equiv \{ \mathcal{J}^\xi(\omega) \mid \xi \in \mathbb{N} \} \cong \left\{ \left( \lim_{n_\xi \rightarrow \infty} \prod_{k_\xi=1}^{n_\xi} \mathcal{M}_{k_\xi, \cdot} \right) (x_1) \mid \mathcal{M}_{k_\xi, \cdot} \in \mathcal{A}^\Phi, \xi \in \mathbb{N} \right\},$$

$$\text{mit } \omega = \lim_{n \rightarrow \infty} w^{(n)} = \left( \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k \right) (x_1), \quad (\text{I.45})$$

einen wohldefinierten Sinn bekommen. Die Idee der hierarchischen Graphen basiert auf der einfachen Tatsache, daß sich eine Gruppen- bzw. Monoidstruktur isomorph auf einen Graphen abbilden lassen, welcher selbst eine rekursive Struktur besitzt (s. unten). Dabei versteht man unter einem **Graph** (oder *ein-dimensionalem Komplex*) eine Menge  $\mathfrak{G}(V, \mathbf{E})$  mit zwei Typen von Elementen die man als **Punkte** (**Vertizes**  $\sigma_\xi \in V$ ) und **Kanten**  $e \in \mathbf{E}$  bezeichnet, und die folgende Eigenschaften besitzen [Mag66]: Zu jeder Kante gehört genau ein geordnetes Paar von Punkten  $(\sigma_\xi, \sigma_{\xi'})$ . Ebenso existiert, im Falle einer zugrundeliegenden Gruppenstruktur, zu jeder Kante genau eine inverse Kante  $e^{-1} \neq e$  mit  $(e^{-1})^{-1} = e$ . Ist  $\sigma_\xi$  der Anfangspunkt und  $\sigma_{\xi'}$  der Endpunkt von  $e$ , dann beginnt  $e^{-1}$  mit  $\sigma_{\xi'}$  und endet mit  $\sigma_\xi$ .  $e$  ist die Kante, die sich von  $e^{-1}$  nur durch ihre Orientierung unterscheidet. Unter einem **Pfad** des Graphen versteht man eine Folge von Kanten  $\Pi_{1 \rightarrow n} = e_n \dots e_2 e_1$ , wobei der Endpunkt  $\sigma_{\xi'}$  von  $e_k$ , für  $k = 1, \dots, n-1$ , mit dem Anfangspunkt  $\sigma_\xi$  von  $e_{k+1}$  übereinstimmt. Sind  $\Pi_{1 \rightarrow k}^{(1)} = e_k \dots e_2 e_1$  und  $\Pi_{k+1 \rightarrow n}^{(2)} = e_n \dots e_{k+2} e_{k+1}$  zwei Pfade in  $\mathfrak{G}(V, \mathbf{E})$ , wobei der Endpunkt  $\sigma_{\xi'}$  von  $e_k$  mit dem Anfangspunkt  $\sigma_\xi$  von  $e_{k+1}$  zusammenfällt, so versteht man unter dem **Produkt** der beiden Pfade den Pfad  $\Pi_{1 \rightarrow n} = \Pi_{k+1 \rightarrow n}^{(2)} \circ \Pi_{1 \rightarrow k}^{(1)} = e_n \dots e_{k+1} e_k \dots e_1$ . Unter dem zu  $\Pi$  inversen Pfad  $\Pi^{-1}$  versteht man den Pfad  $(e_1)^{-1} \dots (e_n)^{-1}$ . Wir bezeichnen den zur Gruppe/Monoid<sup>32</sup>  $\mathbf{G}$  isomorphen Graphen  $\pi_{\mathfrak{G}}(\mathbf{G}) = \mathfrak{G}^G(V, \mathbf{E})$  als die “**graphische Darstellung**”  $\pi_{\mathfrak{G}}$  von  $\mathbf{G}$ . Den verschiedenen Punkten  $\sigma_\xi \in V$  entsprechen gerade die einzelnen Gruppen- oder Monoidelemente.

In  $\mathfrak{G}^G(V, \mathbf{E})$  fassen wir zwei durch eine Kante verknüpfte Vertizes mit dieser Kante zu

<sup>32</sup>I.a. ist  $\mathbf{G} = \Phi, \Gamma$ . Man möge im Folgenden das Alphabet  $\mathcal{A}^G$ , mit  $\mathbf{G} = \Phi, \Gamma$ , nicht mit dem Adress-Raum  $\mathcal{A}^G$ , mit  $\mathbf{G} = \mathbb{N}, \mathbb{Z}$ , verwechseln.

einem “VKV–Tripel”<sup>33</sup>

$$M_{\cdot}^{(\xi\xi')} := (\sigma'_{\xi}, \mathcal{M}_{\cdot}, \sigma_{\xi}), \quad \mathcal{M}_{\cdot} \in \mathcal{A}^G, \quad \text{bzw.} \quad M_{\cdot}^{(\xi\xi')} := \begin{array}{c} \sigma_{\xi} \quad \mathcal{M}_{\cdot} \quad \sigma_{\xi'} \\ \bullet \longrightarrow \bullet \end{array} \quad (\text{I.46})$$

mit  $\sigma_{\xi} := \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{\xi})$ ,  $\sigma_{\xi'} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{\xi'}) \in V$  zusammen, wobei  $\mathcal{M}_{\cdot} \in \mathcal{A}^G$  dasjenige Element aus  $\mathcal{G}$  ist, für das  $\sigma_{\xi'} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{\cdot})\sigma_{\xi}$  gilt. Sei  $\mathcal{J} = \{\sigma_{\xi(0)}\}$ ,  $\sigma_{\xi(0)} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathbb{1})$  (“initial states”),  $\mathcal{T} \subseteq V \setminus \mathcal{J}$  (“terminal states”) und  $M_{\cdot}^{(\xi\xi')} \in \mathbf{E} \subset V \times \mathcal{A}^G \times V$ , wobei  $\mathbf{E}$  die Menge der Kanten oder “Übergänge”  $M_{\cdot}^{(\xi\xi')}$  ist. Man nennt die Menge  $\mathfrak{A}^G(V, \mathbf{E}, \mathcal{J}, \mathcal{T})$  einen **Automaten** über dem Alphabet  $\mathcal{A}^G$ . Ein Pfad  $\Pi_{\xi(0) \rightarrow \xi(n)}$  in  $\mathfrak{A}^G$ ,

$$\Pi_{\xi(0) \rightarrow \xi(n)} := (\sigma_{\xi(n)}, \mathcal{M}_{n, \cdot}, \sigma_{\xi(n-1)}) \times (\sigma_{\xi(n-1)}, \mathcal{M}_{n-1, \cdot}, \sigma_{\xi(n-2)}) \times \dots \times (\sigma_{\xi(1)}, \mathcal{M}_{1, \cdot}, \sigma_{\xi(0)}),$$

ist die Folge von Kanten  $M_{\cdot}^{(\xi\xi')} \in \mathbf{E}$  aus  $\mathbf{E}$ . Das Wort  $\mathcal{M}_{n, \cdot} \mathcal{M}_{n-1, \cdot} \dots \mathcal{M}_{1, \cdot}$  ist das “Label” von  $\mathfrak{A}^G$ . Der Automat entspricht offensichtlich gerade  $\mathfrak{G}^G(V, \mathbf{E})$ .

Sei  $(\mathcal{M}_k)_k$  eine Folge positiver Substitutionen aus  $\Phi^+ \subset \Phi := \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_{\Lambda}))$ , mit  $\mathcal{M}_k = \mathcal{M}_{k \bmod \kappa}$ , d.h. wir wollen Folgen von Substitutionen  $\mathcal{M}_k$  mit der Periode  $\kappa$  betrachten. Für *endliche*  $\kappa$  werden wir später die Folge  $(\mathcal{M}_k)_{k=1}^{\kappa}$  in einen direkten Kontext zur Ortsraum–Renormierung stellen. Wir werden aber bei unseren Betrachtungen aperiodische Orbits (d.h.  $\kappa = \infty$ ) nicht ausschließen und somit, falls nicht anders vereinbart, alle ganzzahligen Werte für  $\kappa$  zulassen.  $\Phi^+$  ist die Menge aller positiven Substitutionen aus  $\mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_{\Lambda}))$ . Analog werden wir später mit  $\Gamma^+ \subset \Gamma$  die Menge aller positiven NTs aus  $\mathbf{Hom}^{\Gamma}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_{\Lambda}))$  bezeichnen. Sei weiter  $(\mathcal{O}[w^{(n)}])_{n \geq 1}$  die Folge von Orbits, wobei  $(w^{(n)})_{n \geq 1}$  gegen das unendliche Wort  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  konvergieren möge. Der zu dem Orbit  $\mathcal{O}[\omega]$  gehörende  $\Phi$ –Graph ist *per definitionem* die Menge  $\mathfrak{G}^{\Phi}(V, \mathbf{E})$ , wobei

$$V = \bigcup_{n \geq 0} V^{(n)}, \quad V^{(n)} := \{\sigma_{\xi(n)} \mid \xi(n) = 0, \dots, \max(\xi(n))\} \quad (\text{I.47})$$

mit der Wurzel  $V^{(0)} := \{\sigma_{\xi(0)}\}$ ,  $\sigma_{\xi(0)} := \pi_{\mathfrak{G}}(\mathbb{1})$ , und den Vertizes

$$V^{(n)} \ni \sigma_{\xi(n)} := \pi_{\mathfrak{G}}\left(\mathcal{J}^{\xi(n)} \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k\right), \quad \max(\xi(n)) \geq |w^{(n)}|.$$

Die Abbildung  $V^{(n)} \rightarrow \mathcal{O}[w^{(n)}]$  ist surjektiv, aber i.a. nicht injektiv, da aus  $\mathcal{M}(x_1) = \mathcal{M}'(x_1)$  nicht automatisch  $\mathcal{M} = \mathcal{M}'$  folgt<sup>34</sup>. Die Menge  $\mathbf{E}$  der Kanten in  $\mathfrak{G}^{\Phi}$  wird definiert durch

$$\mathbf{E} := \bigcup_{n \geq 1} \left\{ (\sigma_{\xi(n)}, \sigma_{\xi(n-1)}) \in V^{(n)} \times V^{(n-1)} \mid \sigma_{\xi(n)} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{n, \cdot})\sigma_{\xi(n-1)}, \mathcal{M}_{n, \cdot} \in \mathcal{A}_n^{\Phi} \right\}.$$

Die Schichtstruktur, welche allen unseren  $\Phi$ –Graphen gemein ist, wird daraus evident. Wir nennen<sup>35</sup>

$$\mathcal{A}^{\Phi} := \bigcup_{n \geq 1} \mathcal{A}_n^{\Phi \bmod \kappa}, \quad \mathcal{A}_n^{\Phi} \subset \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_{\Lambda})),$$

<sup>33</sup>Die Abkürzung “VKV” steht für “Vertex–Kante–Vertex”. Zur allgemeinen Theorie der “Sprachen” und Automaten s. z.B. [Lot2001, Med2000].

<sup>34</sup>Ein Beispiel sind die verallgemeinerten Fibonacci Folgen. Neben den definierenden Relationen existiert eine unabhängige “Wortrelation”  $\mathcal{PA}(L) = \mathbf{u}(L)$ , so daß für die Cardinalitäten  $|V^{(n)}| > |\mathcal{O}[w^{(n)}]|$  gilt.

<sup>35</sup>Man beachte, daß die Substitutionen  $\mathcal{M}_{k, \cdot} \in \mathcal{A}^{\Phi}$  im Gegensatz zu  $\mathcal{M}_k$  i.a. gerade *nicht* positiv sind. D.h., will man das gesamte symbolische dynamische System  $(\Omega, \mathcal{T})$  in einer passenden “RG–Darstellung” haben, dann ist es i.a. unerlässlich den “Ortsraum” von der Halbgruppe  $\mathbb{F}^+(\mathcal{A})$  auf die volle freie Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  zu erweitern.

ein vollständiges “**Alphabet erzeugender Substitutionen**” von  $\mathfrak{G}^\Phi$ , mit der Periode  $\kappa \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ , und die noch konkret zu definierende Abbildung

$$\Lambda_{\mathcal{M}} : \mathfrak{G}^\Phi(V_{k-1}, \mathbf{E}_{k-1}) \rightarrow \mathfrak{G}^\Phi(V_k, \mathbf{E}_k)$$

eine durch die Substitution (= Inflation)  $\mathcal{M}$  induzierte “**Super-Inflation**”. Sie wird durch die “projizierten  $\Phi$ -Automaten”  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi$  beschrieben. Definieren wir für alle  $\sigma_\xi := \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_\xi) \in V$  die Abbildung

$$\tau : V \rightarrow \{\sigma^{(ij)}\}, \quad \tau(\sigma_\xi) = \sigma := \left( (\mathcal{M}_\xi(x_1))^{[N-1]}, (\mathcal{M}_\xi(x_1))^{[0]} \right), \quad (\text{I.48})$$

mit der Länge  $N := |\mathcal{M}_\xi(x_1)|$ , und bezeichnen  $\sigma \in \{\sigma^{(ij)}\}$  als den “**Typ**” von  $\sigma_\xi \in V$ , d.h. der Typ von  $\sigma_\xi$  definiert sich durch den letzten und den ersten Buchstaben des *Wortes*  $\mathcal{M}_\xi(x_1)$ . Aus diesem Grunde schreiben wir auch  $\tau(w)$ ,  $w = \mathcal{M}_\xi(x_1) \in \mathbb{F}(\mathcal{A}_\lambda)$  und bezeichnen analog  $\tau(w)$  als den Typ von  $w$ . Insbesondere setzen wir  $\tau(x_i) = \sigma^{(ii)}$ . Offensichtlich entspricht jedem Vertex  $\sigma_\xi \in V$  das Wort  $w = \mathcal{M}_\xi(x_1) \in \mathbb{F}(\mathcal{A}_\lambda)$ . Die Bedeutung dieser auf den ersten Blick vielleicht merkwürdig erscheinenden Definition wird später klar werden. Das “**projizierte VKV-Tripel**” ergibt sich dann aus (I.46)

$$M_{k,\cdot}^{(pq)} := (\sigma_{q,m(k)}, \mathcal{M}_{k,\cdot}, \sigma_{p,m(k-1)}), \quad m(k) := k \bmod \kappa, \quad \mathcal{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^\Phi, \quad (\text{I.49})$$

mit  $\sigma_{p,m(k)} = \tau(\sigma_{\xi^{(k)}})$ ,  $\sigma_{q,m(k+1)} = \tau(\sigma_{\xi^{(k+1)}})$ . Der “**projizierte  $\Phi$ -Automat (vom Typ **A**)**”  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$  ergibt sich dann aus  $\mathfrak{A}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$ , indem man sämtliche Vertizes  $\sigma_\xi \in V^{(k \bmod \kappa)}$ ,  $k = 1, \dots, \kappa$ , durch ihre Typen  $\sigma_{p,m(k)} = \tau(\sigma_{\xi^{(k)}})$  ersetzt (für jedes  $k \bmod \kappa$  auf  $\mathcal{A}^{(\sigma)}$  “projiziert”). Faßt man die projizierten VKV-Tripel statt als Kanten als Vertizes auf, d.h. es ist  $\tilde{V}_\tau := \{M_{\cdot}^{(pq)}\}$ , und bildet die Menge aller Kanten durch

$$\tilde{\mathbf{E}}_\tau := \left\{ (M_{\cdot}^{(q'p')}, M_{\cdot}^{(qp)}) \in V_\tau \times V_\tau \mid q = p' \right\}, \quad M_{\cdot}^{(pq)} := (\sigma_q, \mathcal{M}_{\cdot}, \sigma_p),$$

für alle  $\mathcal{M}_{\cdot} \in \mathcal{A}^\Phi$ , so nennen wir  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi(\tilde{V}_\tau, \tilde{\mathbf{E}}_\tau)$  den “**projizierten Automaten vom Typ **B****”. Für ihn genügt es nur die Typen  $\sigma_p = \tau(\sigma_\xi)$  selbst, ohne Referenz auf  $m(k)$ , zu betrachten.

Die Frage, welche sich nun unmittelbar aufdrängt, ist natürlich, ob das konstatierte vollständige Alphabet  $\mathcal{A}^\Phi$  erzeugender Substitutionen tatsächlich existiert und wie man es bestimmen kann, oder pointiert formuliert, ob der von uns propagierte  $\Phi$ -Graph überhaupt existiert. Der wohl einfachste Weg zur Klärung dieser Frage besteht darin das Problem zu geometrisieren. Man zeichne sich hierzu die Worte  $w_1^{(k)}$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$  übereinander (Abb. I.3(a<sub>1</sub>)) und lasse sich durch Abb. I.3 leiten.

**C** ► In Abb. I.3 findet man ein Beispiel für die Konstruktion von  $\mathfrak{G}^\Phi(V_3, \mathbf{E}_3)$  für die Substitutionsfolge  $\mathcal{L} \mathcal{M}_{\mathcal{L}_1} \mathcal{L} \in \Phi^+$ , mit den Substitutionen  $\mathcal{L}(L, S) = (LS, L)$  und  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}_1}(L, S) = (LLS, SL)$ . In (a<sub>1</sub>) sind die ersten drei Worte  $w^{(1)} = \mathcal{L}(L)$ ,  $w^{(2)} = \mathcal{M}_{\mathcal{L}_1} \mathcal{L}(L)$  und  $w^{(3)} = \mathcal{L} \mathcal{M}_{\mathcal{L}_1} \mathcal{L}(L)$  aufgetragen. Wendet man die Übersetzungsregeln von (b<sub>1</sub>)—(b<sub>3</sub>) auf (a<sub>1</sub>) an so ergibt sich der zugehörige Graph  $\mathfrak{G}^\Phi(V_3, \mathbf{E}_3)$  aus (a<sub>2</sub>). In (b<sub>1</sub>) ist die geometrische Darstellung von  $\mathcal{M}_k(x_i) = u_{k,i}$  bzw. dem zugehörigen dualen Wort  $\Sigma_{k,i} = (\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N_{ki}-2})$ ,  $N_{ki} := |u_{k,i}|$ , angegeben. (b<sub>2</sub>) zeigt, wie man sich für alle  $x_i$  und  $\mathcal{M}_k$  die neuen Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,i,\ell_{ik}} \in \mathcal{A}_k^\Phi$ ,

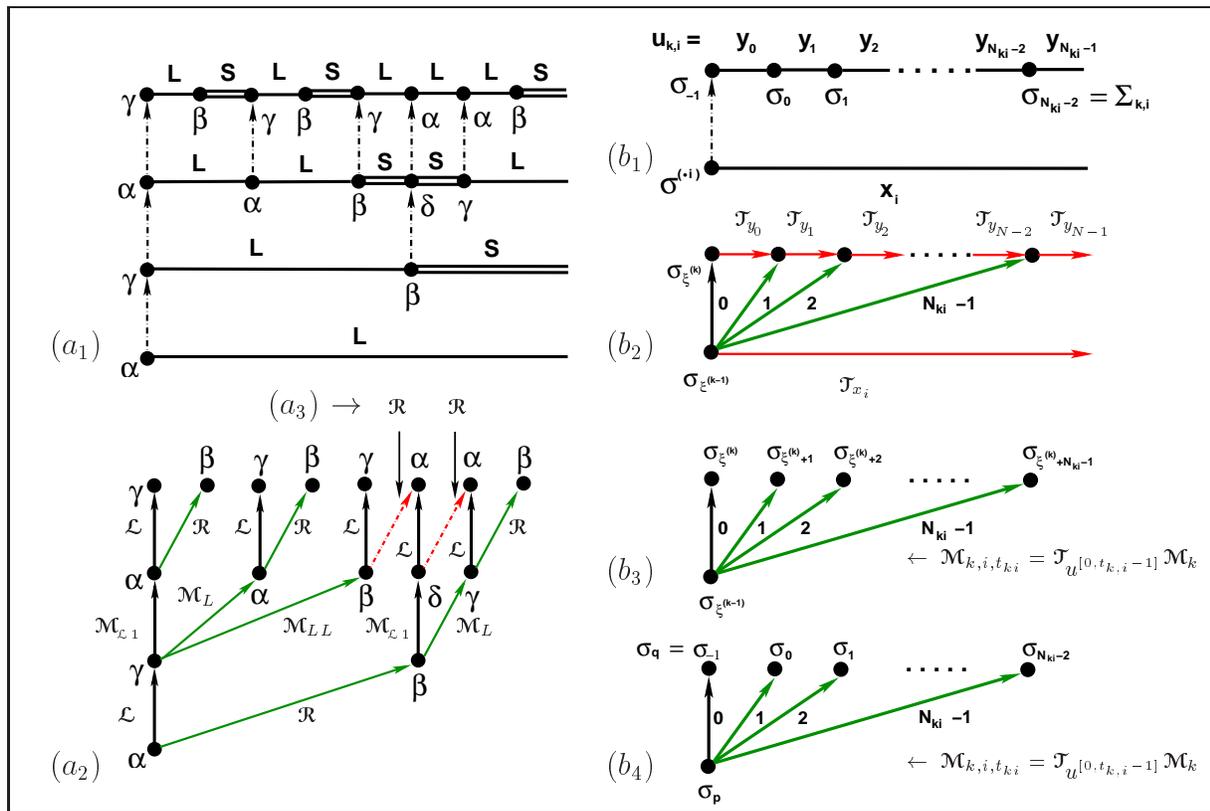


Abbildung I.3: (“Übersetzungsregeln”) Ein Beispiel für die Konstruktion von  $\mathfrak{G}^\Phi(V_3, E_3)$  für  $\mathcal{L} \mathcal{M}_{\mathcal{L}_1} \mathcal{L} \in \Phi^+$ : (a<sub>1</sub>) Folge von  $w^{(k)}$ ,  $k = 1, 2, 3$ , mit den Substitutionen  $\mathcal{L}(L, S) = (LS, L)$  und  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}_1}(L, S) = (LLS, SL)$ .

mit  $t_{ki} = 0, 1, 2, \dots, N_{ki} - 1$ , aus  $\mathcal{M}_k$  und  $\mathcal{J}_{y_\mu}$  beschafft. Das Resultat ist hier  $\mathcal{A}_{1,3}^\Phi = \{\mathcal{L}, \mathcal{R}\}$  und  $\mathcal{A}_2^\Phi = \{\mathcal{M}_{\mathcal{L}_1}, \mathcal{M}_{\mathcal{L}}, \mathcal{M}_{\mathcal{L}\mathcal{L}}\}$ . (a<sub>3</sub>): Die beiden Substitutionen  $\mathcal{R}$  leitet man eigentlich nicht direkt aus der Übersetzungsregel (b<sub>2</sub>) her, da hier  $x_i = S$  gemäß (b<sub>2</sub>) nur auf die Substitution  $\mathcal{L}$  führt. Sie gehören aber offensichtlich zu  $\mathcal{A}_3^\Phi$ , da  $\mathcal{A}_3^\Phi \ni \mathcal{R} = \mathcal{J}_S \mathcal{L}$  gilt. Deshalb sind sie mit in den Graphen  $\mathfrak{G}^\Phi(V_3, E_3)$  eingezeichnet. Dies ist genau die Situation, bei der *definierende Relationen* auftreten, d.h. wenn Relationen zwischen den einzelnen Substitutionen aus  $\mathcal{A}^\Phi$  auftreten. Man sollte im Gedächtnis behalten, daß die Konstruktion des  $\Phi$ -Graphen gemäß der Übersetzungsregel (b<sub>2</sub>) grundsätzlich zu dem Baum  $\mathfrak{T}^\Phi(V_n, E_n)$  führt, d.h. es treten dadurch noch keine definierende Relationen zwischen den einzelnen Substitutionen aus  $\mathcal{A}^\Phi$  in Erscheinung. Erst wenn man für die von  $\sigma_p$  ausgehenden erzeugenden Substitutionen auch diejenigen Substitutionen mit einbeziehen kann, welche für einen anderen dualen Buchstaben  $\sigma'_p$  abgeleitet wurden, kann es zu dem Auftreten definierender Relationen kommen. (b<sub>3</sub>) zeigt die geometrische Darstellung der Abbildung  $\Lambda_{\mathcal{M}}(\sigma_{\xi^{(n)}})$  und ihr “reduziertes” Pendant in (b<sub>4</sub>). Es ist  $\tau(\sigma_{\xi^{(k)+q}}) = \sigma_{q-1} \in \{\sigma^{(ij)}\}$ , mit  $\sigma_{\xi^{(k)+q}} \in V$  für  $q = 1, 2, \dots, N_{ki} - 1$ . Obwohl die einzelnen Typen  $\sigma_q$  gleich sein können, sind alle zugehörigen reduzierten VKV-Tripel verschieden.

Jedem Buchstaben  $x_i$  in  $w_1^{(k-1)}$  wird durch die Substitution  $\mathcal{M}_k$  eindeutig der Faktor  $u_{ki}(x_1, \dots, x_\lambda) = \mathcal{M}_k(x_i)$  in  $w_1^{(k)} = w_1^{(k-1)}(\mathcal{M}_k(x_1), \dots, \mathcal{M}_k(x_\lambda))$  zugeordnet (s. (b<sub>1</sub>)). In einem weiteren Schritt ersetzt man die Buchstaben  $x_i$  und  $y_\mu$ ,  $\mu = 0, \dots, N_{ki} - 1$ , durch die Translationsub-

stitutionen  $\mathfrak{J}_{x_i}$  und  $\mathfrak{J}_{y_\mu}$  und führt gemäß  $(b_2)$  die neuen Substitutionen

$$\mathfrak{M}_{k,i,t_{ki}} := \mathfrak{J}_u \mathfrak{M}_k, \quad u := (\mathfrak{M}_k(x_i))^{[0,t_{ki}-1]}, \quad N_{ki} := |\mathfrak{M}_k(x_i)|, \quad (\text{I.50})$$

für  $t_{ki} = 1, \dots, N_{ki} - 1$ , und  $\mathfrak{M}_{k,i,t_{ki}} := \mathfrak{M}_k$  für  $t_{ki} = 0$  ein. Aus den dualen Buchstaben  $\sigma_p, \sigma_q$  in  $(b_1)$  werden in  $(b_3)$  die Vertizes  $\sigma_{\xi^{(n)}} \in V$ , deren Typen  $\tau(\sigma_{\xi^{(n)}})$  gerade gleich den dualen Buchstaben aus  $(b_1)$  sind, und die zusammen mit den Kanten  $\pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathfrak{M}_{k,i,t_{ki}})$  die entsprechenden reduzierten VKV-Tripel festlegen. Nun gilt aber

**Lemma I.2** Sei  $w_{1,(r_n^0 \dots r_1^0)} := (\prod_{k=1}^n \mathfrak{M}_k)(x_1) \in \mathbb{F}^+(A)$  und

$$w_{1,(r_n \dots r_1)} := \mathfrak{M}_{(r_n \dots r_1)}(x_1), \quad \mathfrak{M}_{(r_n \dots r_1)} := \prod_{k=1}^n \mathfrak{M}_{k,i_{k-1},t_{ki_{k-1}}}$$

mit  $i_0 = 1$  und den in (I.49) definierten Substitutionen aus  $\Phi$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} w_{1,(r_n \dots r_1)} &= (W^{(n)})^{-1} w_{1,(r_n^0 \dots r_1^0)} W^{(n)} \equiv \mathfrak{J}_{W^{(n)}}(w_{1,(r_n^0 \dots r_1^0)}) \\ &= \mathfrak{J}^{\xi^{(n)}}(w_{1,(r_n^0 \dots r_1^0)}), \quad \text{mit } \xi^{(n)} := |W^{(n)}|. \end{aligned}$$

$w_{1,(r_n \dots r_1)}$  ist positiv und  $W^{(n)}$  durch

$$W^{(n)} := \left[ \prod_{k=n-1}^1 \mathfrak{M}_{(r_n^0 \dots r_{k+1}^0)} \left( (\mathfrak{M}_k(x_{i_{k-1}}))^{[0,t_{ki_{k-1}}-1]} \right) \right] (\mathfrak{M}_n(x_{i_{n-1}}))^{[0,t_{ni_{n-1}}-1]} \quad (\text{I.51})$$

gegeben, wobei  $\xi^{(n)} = 0, \dots, \max(\xi^{(n)})$  mit  $\max(\xi^{(n)}) \geq |w_{1,(r_n^0 \dots r_1^0)}| - 1$  für alle  $n \in \mathbb{N}$  erfüllt wird.

☞ **Beweis:** Für beliebiges  $u = u(x_1, \dots, x_\lambda) \in \mathbb{F}^+(A)$  gilt

$$\mathfrak{M} \mathfrak{J}_u = \mathfrak{J}_{\mathfrak{M}(u)} \mathfrak{M}, \quad \mathfrak{M}(u) \equiv u(\mathfrak{M}(x_1), \dots, \mathfrak{M}(x_\lambda)).$$

Durch vollständige Induktion folgt

$$\prod_{k=1}^n \mathfrak{M}_{k,i,t_{ki}} \equiv \prod_{k=1}^n (\mathfrak{J}_{u_{k,\cdot}} \mathfrak{M}_k) = \mathfrak{J}_{W^{(n)}} \cdot \prod_{k=1}^n \mathfrak{M}_k$$

mit

$$W^{(k)} = \mathfrak{M}_k(W^{(k-1)}) \cdot u_{k,\cdot}, \quad W^{(1)} = u_{1,\cdot}, \quad (\text{I.52})$$

für alle  $k = 2, \dots, n$ . Daraus ergibt sich aber (I.51).

Es sei im Folgenden der **Index**  $i(\mu)$  definiert durch die Beziehung  $w^{[\mu]} = x_i$ , d.h. der  $\mu$ -te Buchstabe in einem gegebenen Wort  $w(x_1, \dots, x_\lambda)$  ist  $x_i$ . Sei  $W^{(k)} := (w_{1,(r_k \dots r_1)})^{[0,\xi^{(k)}-1]}$ . Man prüft leicht nach, daß  $\xi^{(k)}$  für die ersten  $k = 1, 2, \dots$  tatsächlich *alle* ganzzahligen Werte aus dem Intervall  $[0, \max(\xi^{(k)})]$ ,  $\max(\xi^{(k)}) \geq |w_{1,(r_k^0 \dots r_1^0)}| - 1$ , annehmen kann. Beachtet man, daß

per definitionem  $u_{k+1,\bullet} = (\mathcal{M}_{k+1}(x_{i_k}))^{[0, t_{k i_k}]}$  mit  $x_{i_k} = (w_{1, (r_k \dots r_1)})^{[\xi^{(k)}]}$  gilt, dann leitet man aus (I.51) direkt die Beziehungen

$$\begin{aligned} \xi^{(k+1)} &= \left| \mathcal{M}_{k+1} \left( (W^{(k)})^{[0, \xi^{(k)} - 1]} \right) \right| + |u_{k+1, i(\xi^{(k)})}, t_{k+1, i(\xi^{(k)})}| \\ &= \sum_{j=1}^{\Lambda} \#x_j \left( (W^{(k)})^{[0, \xi^{(k)} - 1]} \right) N_{k j} + t_{k+1, i(\xi^{(k)})} \\ &= \sum_{\mu=0}^{\xi^{(k)} - 1} N_{k, i(\mu)} + t_{k+1, i(\xi^{(k)})}, \end{aligned}$$

mit  $t_{k+1, i(\xi^{(k)})} = 0, \dots, N_{k, i(\xi^{(k)})} - 1$ , ab. Für jedes feste  $\xi^{(k)}$  nimmt somit  $\xi^{(k+1)}$  alle ganzzahligen Werte im Intervall

$$\sum_{\mu=0}^{\xi^{(k)} - 1} N_{k, i(\mu)} \leq \xi^{(k+1)} < \sum_{\mu=0}^{\xi^{(k)}} N_{k, i(\mu)}, \quad (\text{I.53})$$

und damit alle ganzzahligen Werte im Intervall

$$0 \leq \xi^{(k+1)} < \sum_{\mu=0}^{\max(\xi^{(k)})} N_{k, i(\mu)} = \max(\xi^{(k+1)}), \quad (\text{I.54})$$

an. Damit ist das Lemma bewiesen. ♣

Damit wurde gezeigt, daß die Folge von Substitutionen  $\mathcal{M}_{(r_k \dots r_1)}$  sämtliche zyklischen Permutationen von  $\mathcal{M}_{(r_k^0 \dots r_1^0)}(x_1)$  erzeugt, und

$$\mathcal{M}_{(r_{k+1} r_k \dots r_1)} = \mathcal{J}^{\xi^{(k+1)}} \cdot \mathcal{M}_{(r_{k+1}^0 r_k^0 \dots r_1^0)} = \mathcal{M}_{k+1, i_k, t_{k i_k}} \mathcal{J}^{\xi^{(k)}} \mathcal{M}_{(r_k^0 \dots r_1^0)},$$

d.h.  $\sigma_{\xi^{(k+1)}} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{k+1, i_k, t_{k i_k}}) \sigma_{\xi^{(k)}}$ , für alle  $k \in \mathbb{N}$  gilt. Damit haben wir schon die erste Hälfte des folgenden Theorems bewiesen, dessen zweiter Teil die hierarchischen Eigenschaften der hier betrachteten Graphen manifestiert. Letztere sind unmittelbarer Ausdruck der Selbstähnlichkeit der zugrundeliegenden **DOL**-Worte, wenn auch auf einer hintergründigeren Ebene:

**Theorem I.2 ( $\Phi$ -Graph  $\mathfrak{G}^{\Phi}(V_n, E_n)$  — Konstruktion)** Sei  $(\mathcal{M}_k)_{k \geq 1}$ ,  $\mathcal{M}_k \in \Phi^+$  eine beliebige Folge positiver Substitutionen mit der Periode  $\kappa$  (endlich oder unendlich) und  $\mathcal{M}_{(r_n^0 \dots r_1^0)} = \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k$  und  $I_{\Lambda}^{(k)} := \{i \in \{1, \dots, \Lambda\} \mid \#x_i(w_{1, (r_k^0 \dots r_1^0)}) > 0\}$ . Durch

$$\mathcal{A}^{\Phi} = \bigcup_{k=1}^n \mathcal{A}_k^{\Phi}, \quad \mathcal{A}_k^{\Phi} := \{ \mathcal{M}_k, \mathcal{M}_{k, i, t_{k i}} \mid i \in I_{\Lambda}^{(k)}, t_{k i} = 1, \dots, N_{k i} - 1 \},$$

mit den in (I.50) definierten Substitutionen<sup>36</sup>  $\mathcal{M}_{k, i, t_{k i}}$ , wird für alle  $n \in \mathbb{N}$  ein vollständiges Alphabet erzeugender Substitutionen derart gegeben, daß für alle  $\xi^{(k)} = 0, \dots, |w_{1, (r_k^0 \dots r_1^0)}| - 1$

$$\mathcal{J}^{\xi^{(k)}} \cdot \mathcal{M}_{(r_k^0 \dots r_1^0)} = \prod_{m=1}^k \mathcal{M}_{m, \bullet} =: \mathcal{M}_{\xi^{(k)}},$$

<sup>36</sup>Ganz korrekt hat man zu schreiben  $x_i = x_{i_{k-1}}$ , wegen  $u = (\mathcal{M}_k(x_{i_{k-1}}))^{[0, t_{k i_{k-1}}]}$ . Da aber der konkrete Index  $i_{k-1}$  immer eindeutig durch  $\sigma_p$  definiert wird, unterlassen wir im Folgenden die Referenz mit  $k-1$ , da sie automatisch richtig gemacht werden wird.

gilt. Die konkrete Abfolge von Morphismen  $\mathcal{M}_{m,\cdot} \in \mathcal{A}^\Phi$  wird für alle  $\xi^{(k)}$  eindeutig durch denjenigen Pfad  $\Pi_{\xi^{(0)} \rightarrow \xi^{(k)}}$  in  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  gegeben, der die Wurzel  $\pi_{\mathfrak{G}}(\mathbf{1}) = \sigma_{\xi^{(0)}} \in V_n := \bigcup_{k=1}^n V^{(k)}$  mit dem Vertex  $\pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{\xi^{(n)}}) = \sigma_{\xi^{(n)}} \in V_n$  verbindet.

Die durch den zugehörigen projizierten Automaten  $\mathfrak{PA}^\Phi(\tilde{V}_\tau, \tilde{\mathbf{E}}_\tau)$  (vom Typ<sup>37</sup> B) festgelegte Super-Inflation  $\Lambda_{\mathcal{M}_{k+1}} : \mathbf{E}_k \rightarrow \mathbf{E}_{k+1}$  hat die geometrische Darstellung<sup>38</sup>

$$\Lambda_{\mathcal{M}_{k+1}} : \begin{array}{c} \sigma_{\xi^{(k)}} \xrightarrow{J_{x_i}} \sigma_{\xi^{(k)}} \\ \uparrow L_k^{(pq)}, R_{k,j,t_{kj}} \quad \sigma_{\xi^{(k-1)}} \\ \sigma_{\xi^{(k)}} \xrightarrow{L_{k+1}^{(p,*)}, R_{k+1,i,t_{k+1,i}}} \sigma_{\xi^{(k+1)}+1} \xrightarrow{\dots} \sigma_{\xi^{(k+1)}+N_{ki}-1} \end{array} \quad (I.55)$$

für  $j = 1, \dots, \Lambda$ , wobei alle VKV-Tripel der Form  $\bullet \rightarrow \bullet$  unverändert bleiben.  $L_k^{(pq)}, R_{k,i,t_{ki}}$ ,  $k = 1, \dots, n$ , steht für die projizierten VKV-Tripel

$$L_k^{(pq)} := (\sigma_p, \mathcal{M}_k, \sigma_q) \quad \text{und} \quad R_{k,i,t_{ki}}^{(pq)} := (\sigma_p, \mathcal{M}_{k,i,t_{ki}}, \sigma_q), \quad (I.56)$$

mit  $\sigma_p = \tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}})$  und  $\sigma_q = \tau(\sigma_{\xi^{(k)}})$ . Die Indizes  $i, j$  sind durch  $x_j = \pi_r(\tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}}))$ ,  $x_i = \pi_r(\tau(\sigma_{\xi^{(k)}}))$  eindeutig festgelegt. Dann läßt sich der hierarchische Graph  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  durch die ‘‘Einbettung’’

$$\Lambda_{\mathcal{M}_{k+1}} : \mathfrak{G}^\Phi(V_k, \mathbf{E}_k) \hookrightarrow \mathfrak{G}^\Phi(V_{k+1}, \mathbf{E}_{k+1}) = \Lambda_{\mathcal{M}_{k+1}}(\mathfrak{G}^\Phi(V_k, \mathbf{E}_k)),$$

für alle  $k = 0, 1, \dots, n-1$ , rekursiv erzeugen, so daß gilt

$$\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n) := \left( \prod_{k=2}^n \Lambda_{\mathcal{M}_k} \right) \left[ \begin{array}{c} \sigma_{-1} \xrightarrow{\dots} \sigma_0 \xrightarrow{\dots} \sigma_1 \xrightarrow{\dots} \sigma_{N-2} \\ \uparrow L_1^{(1,q)} \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow R_{1,1,t_{11}}^{(1,q,t_{11})} \\ \alpha_0 \end{array} \right], \quad (I.57)$$

wobei  $L_1^{(1,q)} = (\alpha, \mathcal{M}_1, \sigma_q)$  und  $R_{1,1,t_{11}}^{(1,q,t_{11})} = (\alpha, \mathcal{M}_{1,1,t_{11}}, \sigma_{q_{t_{11}}})$  ist, mit  $t_{11} = 0, 1, \dots, N_{11}$ .

**C ▶ Beweisskizze:** Der erste Teil ist das Resultat der oben besprochenen Übersetzungsregeln. Für den zweiten Teil betrachte man nun Abb. I.3(b<sub>3,4</sub>). Dort wurde das ‘‘Konstruktionsgerüst’’ der Translationssubstitutionen aus (b<sub>2</sub>) entfernt. Der Typ  $\tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}})$  legt die konkrete Wahl der Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,i,t_{ki}}$  aus  $\mathcal{A}_k^\Phi$  eindeutig fest. Man sieht weiter, daß die Typen  $\tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}+t_{ki}}) = (\Sigma_{ki})^{[t_{ki}-1]}$ ,  $t_{ki} = 1, \dots, N_{ki} - 1$ , allein aus der Vorgabe von  $x_i = \pi_r(\tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}}))$  und  $\mathcal{M}_{k,i,t_{ki}}$  festgelegt wird. Um  $\sigma_{-1} = \tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}})$  festlegen zu können, bedarf es dagegen<sup>39</sup> der Kenntnis von

<sup>37</sup>Dieselbe Informationen liefert auch der Typ A Automat. Hierbei sollte man im Gedächtnis behalten, daß die projizierten Vertextypen i.a. von der Form  $\sigma_{p,m^{(k)}}$  sind, d.h. zusätzlich immer noch vom Index  $m^{(k)}$  explizit abhängen. Wir werden bei unseren Beispielen i.a. beide präsentieren.

<sup>38</sup>Es ist  $\pi_\ell(\sigma^{(ij)}) = x_i$  und  $\pi_r(\sigma^{(ij)}) = x_j$  (s. Absatz nach Gl. (I.7), S. 5). Somit ist hier  $x_i = \pi_r(\sigma_p)$  und  $x_j = \pi_r(\sigma_q)$ . Die Definition der Projektoren wird in offensichtlicher Weise verallgemeinert, wenn man statt  $x_i \in \mathcal{A}_\Lambda$  das allgemeinere Alphabet  $\mathcal{A}_\Lambda^{(k)} := (w_1^{(k)}, \dots, w_\Lambda^{(k)})$  mit irgendwelchen geeigneten Worten  $w_m^{(k)} = w_m^{(k)}(x_1, \dots, x_\Lambda)$  betrachtet, und die Definition der dualen Buchstaben durch  $\sigma^{(ij)} := (w_i^{(k)}, w_j^{(k)})$  entsprechend verallgemeinert.

<sup>39</sup>Dies ist letztlich der Grund dafür, daß wir der Definition der reduzierten VKV-Tripel die dualen Buchstaben  $\sigma^{(ij)}$ , statt der normalen Buchstaben  $x_i$  zugrundelegen. Wir werden später noch auf die Bedeutung der reduzierten VKV-Tripel eingehen.

$\mathcal{M}_k$  und  $\sigma_p = \tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}})$ . Aus der Konstruktion entnimmt man weiter, daß  $\Lambda_{\mathcal{M}_k} : V^{(k-1)} \rightarrow V^{(k)}$  surjektiv<sup>40</sup> ist, wobei jedem  $\sigma_{\xi^{(k-1)}} \in V^{(k-1)}$  mittels (I.55) (vgl. Abb. I.3( $b_3$ )) auf eindeutige Weise die Vertizes

$$\Lambda_{\mathcal{M}_k}(\sigma_{\xi^{(k-1)}}) := \left\{ \sigma_{\xi^{(k)}} \in V^{(k)} \mid \sigma_{\xi^{(k)}} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{k,i,t_{ki}})\sigma_{\xi^{(k-1)}}, \right. \\ \left. i : \pi_r(\tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}})) = x_i, t_{ki} = 0, \dots, N_{ki} - 1 \right\}$$

zugeordnet werden.  $\Lambda_{\mathcal{M}_k}(\sigma_{\xi^{(k-1)}}) \cap \Lambda_{\mathcal{M}_k}(\sigma_{\tilde{\xi}^{(k-1)}}) = \emptyset$  gilt genau dann, wenn  $\xi^{(k-1)} \neq \tilde{\xi}^{(k-1)}$ . Startet man von einer gegebenen Wurzel  $\sigma_{\xi^{(0)}} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathbb{I})$  und einem gegebenen Alphabet  $\mathcal{A}_1^{\Phi}$ , so ist der Wurzelgraph  $\mathfrak{G}^{\Phi}(V_1, \mathbf{E}_1)$  in (I.57) bestimmt. Rekursives Anwenden von (I.55) liefert somit in der Tat den kompletten  $\Phi$ -Graphen  $\mathfrak{G}^{\Phi}(V_n, \mathbf{E}_n)$  für jedes  $n \in \mathbb{N}$ . Der Rest folgt formal durch vollständige Induktion. ♣

Somit haben wir für alle eindimensionalen **DOL**-Worte  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  auf konstruktivem Wege gezeigt, wie sich der *komplette* Orbit  $\mathfrak{O}[\omega] = \{\mathcal{T}^{\xi}(\omega) \mid \xi \in \mathbb{N}\}$  eines gegebenen symbolischen dynamischen **DOL**-Systems  $(\mathfrak{O}[\omega], \mathcal{T})$ , durch elementare Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^{\Phi}$  erzeugen läßt. Dies war für den allgemeinen Fall aber nur deshalb möglich, weil wir unseren Betrachtungen statt der Halbgruppe  $\mathbb{F}^+(\mathcal{A}_{\Lambda})$  die gesamte *freie Gruppe*  $\mathbb{F}(\mathcal{A}_{\Lambda})$  zugrunde legten. Dies hat weitreichende Konsequenzen für die bisher bekannten Formen der Ortsraum-Renormierung. Wurde bisher der Ortsraum — um es in dem hier favorisierten Jargon auszudrücken — immer nur durch die Halbgruppe  $\mathbb{F}^+(\mathcal{A}_{\Lambda})$  beschrieben, so wollen wir erstmalig in dieser Arbeit den Ortsraum durch die volle freie Gruppe beschreiben.

Um für das bisher Gesagte etwas Konkretes vor Augen zu haben, betrachten wir exemplarisch die beiden Substitutionen  $\mathcal{L}^2$  und  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}1}$ .

☞ **Beispiel:** Exemplarisch für die allgemeine Vorgehensweise wollen wir uns mit den Orbits  $\mathfrak{O}[w^{(n)}]$  der **Fibonacci Folge**  $\mathcal{L}^n(L)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , und der  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}1}$ -Folge  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}1}$ ;  $L \rightarrow LLS$ ,  $S \rightarrow SL$ , in aller Ausführlichkeit beschäftigen. In beiden Fällen ist  $\kappa = 1$  (s. Kapitel **III.2**, **III.3** für Beispiele mit  $\kappa > 1$ ).

Beginnen wir mit der Fibonacci Folge. In einem ersten Schritt suchen wir uns ein passendes vollständiges Erzeugendensystem  $\mathcal{A}^{\Phi} := \{\mathcal{M}_{k,\cdot}\}$  aus Kombinationen von  $\mathcal{T}^{\xi}$  und der  $\mathcal{L}^n(L)$  erzeugenden Substitution  $\mathcal{L}$ , so daß

$$\mathfrak{O}[w^{(n)}] = \left\{ \mathcal{T}^{\xi}(w^{(n)}) \mid \xi = 0, 1, \dots, |w^{(n)}| - 1 \right\}, \quad w^{(n)}(L, S) = \mathcal{L}^n(L), \\ \cong \left\{ \left( \prod_{i_{\xi}=1}^{n_{\xi}} \mathcal{M}_{i_{\xi},\cdot} \right) (L) \mid \mathcal{M}_{i_{\xi},\cdot} \in \mathcal{A}^{\Phi}, \xi = 0, 1, \dots, |w^{(n)}| - 1 \right\},$$

erfüllt ist. Gemäß unserer Übersetzungsregel ergibt sich  $\mathcal{A}^{\Phi} := \{\mathcal{L}, \mathcal{R}\}$ , mit der neuen Substitution  $\mathcal{R} := \mathcal{P}\mathcal{U} = \mathcal{T}_L \mathcal{L}$ . Es ist  $\mathcal{S}_R = \mathcal{S}_L$ . In einem weiteren Schritt suchen wir alle (notwendigen) definierenden Relationen der Form<sup>41</sup>  $\mathbf{R}_i(\mathcal{M}'_1, \dots) = \mathbf{Q}_j(\mathcal{M}'_1, \dots)$ , d.h. wir bestimmen alle

<sup>40</sup>Solange wir uns mit primitiven Substitutionen beschäftigen, ist der zugehörige Orbit minimal und somit repetitiv, d.h. es ist  $\lim \mathcal{T}^{\xi_i}(\omega) = \omega$  (s. (I.30)). Daraus ergibt sich, daß  $\mathcal{T} : \overline{\mathfrak{O}} \subseteq \overline{\mathfrak{O}}$  [Que87, S. 70] voraus man auf die entsprechende Eigenschaft für die Super-Inflation schließt. Es ist bemerkenswert, daß es zwei Klassen von Substitutionen gibt (a):  $\mathcal{M}_{k,\cdot}(\mathfrak{O}[w^{(k-1)}]) \subseteq \mathfrak{O}[w^{(k)}]$  und (b):  $\mathcal{M}_{k,\cdot}(\mathfrak{O}'[w^{(k-1)}]) \subseteq \mathfrak{O}[w^{(k)}]$ , wobei  $\mathfrak{O}'[w^{(k-1)}] \subset \mathfrak{O}[w^{(k-1)}]$  eine echte Teilmenge von  $\mathfrak{O}[w^{(k-1)}]$  ist. Letzteres Phänomen ist auf das Engste mit dem Auftreten von "virtuellen" Vertizes verknüpft, auf die wir weiter unten zu sprechen kommen werden.

<sup>41</sup>Hat man es mit ausschließlich mit invertierbaren Substitutionen zu tun, so kann man sie immer in der Standardform  $\mathbf{R}_i(\mathcal{M}'_1, \dots) \mathbf{Q}_j^{-1}(\mathcal{M}'_1, \dots) = \mathbb{I}$  schreiben.

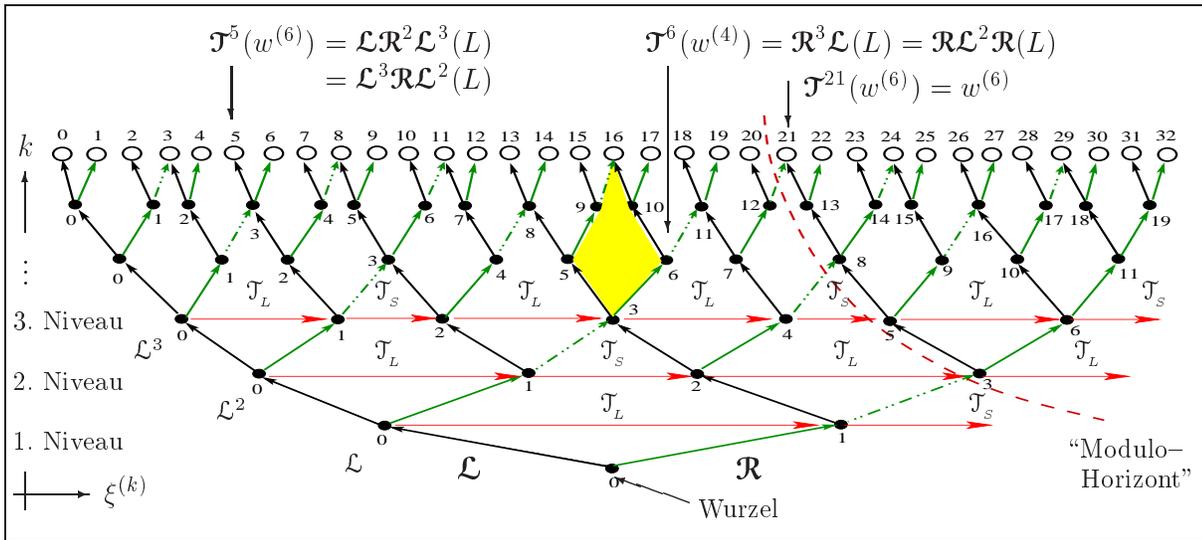


Abbildung I.4: Mittels der Rekursionsformel (I.60) erzeugter Fibonacci-Graph  $\mathfrak{G}^\Phi(V_6, E_6)$ . Jeder Vertex  $\mathcal{T}^{\xi^{(k)}} \mathcal{L}^k(L) \in V_6$  hat zwei "Koordinaten":  $(k, \xi^{(k)})$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Hier ist  $\xi^{(k)} = 0, \dots, |w^{(k)}| + |w^{(k-1)}| - 2$ . Die Substitutionen  $\mathcal{L}$  bzw.  $\mathcal{R}$  werden jeweils durch einen nach links bzw. nach rechts geneigten Pfeil in  $\mathfrak{G}^\Phi(V_6, E_6)$  dargestellt. Jeder Pfad welcher die Wurzel mit dem  $\xi^{(k)}$ -ten Vertex auf dem  $k$ -ten Niveau (= horizontal angeordnete Folge von Vertices in  $\mathfrak{G}^\Phi(V_6, E_6)$ ) verbindet, codiert  $\mathcal{T}^{\xi^{(k)}} \mathcal{L}^k(L)$ . Für die ersten drei Niveaus wurden außerdem noch die entsprechenden Translationssubstitutionen  $\mathcal{T}_L$  und  $\mathcal{T}_S$  entsprechend der Abfolge von Buchstaben in  $w^{(k)}(L, S)$  eingezeichnet. Weitere Details findet man im Text.

Vertauschungsrelationen der Form  $\mathcal{T}_{x_p} \mathcal{M}'_r = \mathcal{M}'_s \mathcal{T}_{x_q}$ . Zunächst finden wir

$$\mathcal{R}^2 \mathcal{L} = \mathcal{L}^2 \mathcal{R} \quad (\text{I.58})$$

als ein Spezialfall der in Anhang III.A.1 auf S. 177 bewiesenen Relation (III.A.1). In diesem Beispiel treten nur die beiden **Translationssubstitutionen**

$$\mathcal{T}_L = \mathcal{P} \mathcal{A}^{-1} \mathcal{U} \mathcal{P} = \mathcal{R} \mathcal{L}^{-1}, \quad \mathcal{T}_S = \mathcal{A}^{-1} \mathcal{U} = \mathcal{L} \mathcal{R} \mathcal{L}^{-1} \mathcal{R}^{-1}$$

in Erscheinung. Damit ersetzt man sukzessive sämtliche  $\mathcal{T}^{\xi} \cdot \mathcal{L}^n \equiv \mathcal{T}_{w^{[0, \xi]}} \cdot \mathcal{L}^n = \prod_k \mathcal{M}_{k, \cdot}$ , mit  $\mathcal{M}_{k, \cdot} \in \{\mathcal{L}, \mathcal{R}\}$ , vermöge der Relationen

$$\mathcal{T}_L \mathcal{L} = \mathcal{R}, \quad \mathcal{T}_L \mathcal{R} = \mathcal{R} \mathcal{T}_S \quad \text{und} \quad \mathcal{T}_S \mathcal{R} = \mathcal{L} \mathcal{T}_L. \quad (\text{I.59})$$

Es bleibt nun noch die Relation  $\mathcal{T}_S \mathcal{L} = \mathcal{L}^{-1} \mathcal{R} \mathcal{L} \notin \mathcal{A}^\Phi$ . Da sie nicht auf positive Worte in den Substitutionen  $\mathcal{L}, \mathcal{R}$  führt, werden wir sie im Folgenden nicht verwenden. Die Kenntnis der Relationen (I.58) und (I.59) ist für unsere Zwecke völlig ausreichend. Für die ersten drei Generationen (Niveaus in Abb. I.4) sind die Orbits  $\mathcal{O}[\mathcal{L}^n(L)]$ ,  $n = 1, 2, 3$ , gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(L) &= LS & \mathcal{T}_L \mathcal{L} &= \mathcal{R}, \\ & & \rightarrow \mathcal{O}[LS] &= \{\mathcal{L}(L), \mathcal{R}(L)\}, \\ \mathcal{L}^2(L) &= LSL & \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2 &= \mathcal{R} \mathcal{L}, \quad \mathcal{T}_S \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2 = \mathcal{T}_S \mathcal{R} \mathcal{L} = \mathcal{L} \mathcal{R}, \quad \mathcal{T}_L \mathcal{T}_S \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2 = \mathcal{T}_L \mathcal{L} \mathcal{R} = \mathcal{R}^2, \end{aligned}$$

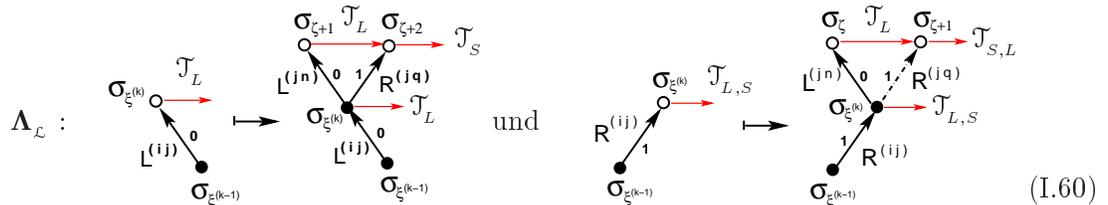
$$\begin{aligned}
 &\rightarrow \mathcal{O}[LSL] = \{\mathcal{L}^2(L) = \mathcal{R}^2(L), \mathcal{R}\mathcal{L}(L), \mathcal{L}\mathcal{R}(L)\} \\
 \mathcal{L}^3(L) = LSLLS &\quad \mathcal{J}_L \mathcal{L}^3 = \mathcal{R}\mathcal{L}^2, \quad \mathcal{J}_S \mathcal{R}\mathcal{L}^2 = \mathcal{L}\mathcal{R}\mathcal{L}, \quad \mathcal{J}_L \mathcal{L}\mathcal{R}\mathcal{L} = \mathcal{R}^2\mathcal{L} = \mathcal{L}^2\mathcal{R}, \\
 &\quad \mathcal{J}_L \mathcal{L}^2\mathcal{R} = \mathcal{R}\mathcal{L}\mathcal{R}, \quad \mathcal{J}_S \mathcal{R}\mathcal{L}\mathcal{R} = \mathcal{L}\mathcal{R}^2, \quad \mathcal{J}_L \mathcal{L}\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}^3 \\
 &\rightarrow \mathcal{O}[LSLLS] = \{\mathcal{L}^3(L) = \mathcal{L}\mathcal{R}^2(L), \mathcal{R}\mathcal{L}^2(L) = \mathcal{R}^3(L), \mathcal{L}\mathcal{R}\mathcal{L}(L), \\
 &\quad \mathcal{R}^2\mathcal{L}(L) = \mathcal{L}^2\mathcal{R}(L), \mathcal{R}\mathcal{L}\mathcal{R}(L)\}.
 \end{aligned}$$

Sämtliche Relationen sind in Abb. I.4 eingezeichnet. Jeder gerichteten Kante in Abb. I.4 entspricht genau eine der Substitutionen  $\mathcal{L}$ ,  $\mathcal{R}$ ,  $\mathcal{J}_L$  oder  $\mathcal{J}_S$ . In dem hier betrachteten Fall lassen sich alle (positiven) Kombinationen in den Substitutionen  $\mathcal{L}$ ,  $\mathcal{R}$  gewisse zyklische Permutationen zuordnen. Wir haben hier ein Beispiel vorliegen, bei dem

$$\mathcal{L}(\mathcal{O}[w^{(n)}]) \subseteq \mathcal{O}[w^{(n+1)}] \quad \text{und} \quad \mathcal{R}(\mathcal{O}[w^{(n)}]) \subseteq \mathcal{O}[w^{(n+1)}]$$

für alle  $n \in \mathbb{N}$  erfüllt wird.  $\mathcal{J}^\xi(w)$  erzeugt nur modulo der Wortlänge  $|w|$  verschiedene Worte, kann aber verschiedene *nicht* äquivalente Darstellungen in Form eines Produktes  $\prod_i \mathcal{M}'_i$  in  $\Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$  haben. Ein Beispiel ist  $\mathcal{J}^6(LSLLS) = \mathcal{R}^3(L) = \mathcal{J}^1(LSLLS) = \mathcal{R}\mathcal{L}^2(L)$ , aber  $\mathcal{R}^3 \neq \mathcal{R}\mathcal{L}^2$ . Die weitere Vorgehensweise ist klar. Entsprechend der Abfolge der Buchstaben  $L, S$  in dem Wort  $\mathcal{L}^n(L)$  wendet man  $\mathcal{J}_L, \mathcal{J}_S$  sukzessive auf  $\mathcal{L}^n$  an, und erhält die gewünschten Substitutionen  $\prod_i \mathcal{M}'_i$ , welche in Abb. I.4 gerade diejenigen Pfade sind, die einen gegebenen **Vertex**  $\mathcal{J}^\xi \mathcal{L}^k(L) \in V_n$  mit dem Ursprung verbinden. So ist z.B.  $V_n \ni \mathcal{J}^5(w) = \mathcal{J}_{w^{[0,4]}}(w) = \mathcal{L}\mathcal{R}^2\mathcal{L}^3(L) = w^{[5, |w|-1]}w^{[0,4]}$ ,  $w = \mathcal{L}^6(L)$ , oder  $V_n \ni \mathcal{J}^6(w) = \mathcal{J}_{w^{[0,5]}}(w) = \mathcal{R}^3\mathcal{L}(L) = w^{[6, |w|-1]}w^{[0,5]}$ ,  $w = \mathcal{L}^4(L)$ . Um die beiden “Entartungen” aufzuheben, d.h. jeder Vertex aus  $V_n$  wird mit dem Ursprung durch genau einen Pfad verbunden, läßt man alle gestrichelten Kanten und den Teil des Graphen, welche rechts vom “Modulo-Horizont” in Abb. I.4 gezeichnet sind, weg. Das Resultat bezeichnen wir als den **Baum**  $\mathfrak{F}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$ .

Einen entscheidenden Fortschritt liefert die Erkenntnis, daß sich der Graph  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  *rekursiv* erzeugen läßt. Erst damit läßt sich der Darstellungswechsel  $\mathcal{J}_{w^{[0,\xi]}} \cdot \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k = \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k$ , für beliebiges  $n \in \mathbb{N}$  vollziehen. Ausgangspunkt bildet die Einführung einer durch das Produkt  $\prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k$  induzierten Substitutionsvorschrift *auf dem Graph*  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$ . Sei  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  gegeben. Dann läßt sich daraus  $\mathfrak{G}^\Phi(V_{n+1}, \mathbf{E}_{n+1})$  konstruieren, indem man die Abbildungsvorschrift ( $\zeta := \xi^{(k)} + \xi^{(k-1)}$ )



welche alle VKV-Tripel der Form  $\bullet \rightarrow \bullet$  unberührt läßt, auf  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  anwendet, d.h. es ist  $\mathfrak{G}^\Phi(V_{k+1}, \mathbf{E}_{k+1}) = \Lambda_{\mathcal{L}}(\mathfrak{G}^\Phi(V_k, \mathbf{E}_k))$ ,  $k = 1, \dots, n-1$ . Die zugehörigen projizierten VKV-Tripel  $L^{(pq)}$  bzw.  $R^{(pq)}$  sind

$$L^{(pq)} := (\sigma_q, \mathcal{L}, \sigma_p) \quad \text{und} \quad R^{(pq)} := (\sigma_q, \mathcal{R}, \sigma_p) \quad (\sigma_1 = \alpha, \sigma_2 = \beta, \sigma_3 = \gamma, \sigma_4 = \delta). \quad (\text{I.61})$$

Ihre Abfolge wird durch den in Abb. I.5(b) dargestellten projizierten Automaten  $\mathfrak{PA}^\Phi(\tilde{V}_\tau, \tilde{\mathbf{E}}_\tau)$  vom Typ B eindeutig festgelegt. Man kann I.5(b) durch die Kontraktion  $L^{(pq)} \rightarrow L$  und  $R^{(pq)} \rightarrow R$  in den kontrahierten Automaten  $\mathfrak{PA}^\Phi(\tilde{V}_\tau, \tilde{\mathbf{E}}_\tau)$  in Abb. I.5(c) überführen. Man erkennt, daß in I.5(b) zwischen verschiedenen  $L^{(pq)}$  ausschließlich 0-Kanten und zwischen

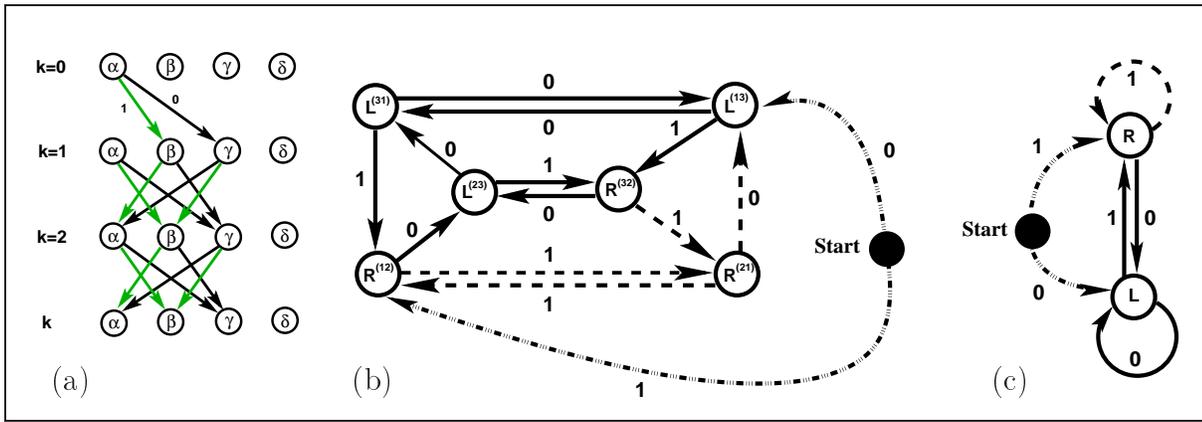


Abbildung I.5: (a) Sei die Folge  $(r_1, \dots, r_n)$  von Zahlen mit  $r_k \in \{0, 1\}$  gegeben. Ausgehend von einem Start-Punkt (in (a)  $\alpha$ , in (b,c) “Start”) läßt sich ihr in jedem der drei projizierten Automaten genau eine Kantenfolge  $(\pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{k,\cdot}))_k$  zuordnen, welche die Abfolge der gesuchten Substitutionen  $\prod_k \mathcal{M}_{k,\cdot}$ ,  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \{\mathcal{L}, \mathcal{R}\}$  liefert. (a) Projizierter  $\Phi$ -Automat  $\mathfrak{BA}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$  vom Typ A, bzw. in (b) vom Typ B. Der  $\Phi$ -Automat vom Typ B in (b) läßt sich durch die Kontraktion  $L^{(pq)} \rightarrow L, R^{(pq)} \rightarrow R$  weiter vereinfachen (c). Man prüft leicht nach, daß die Kantenfolge dadurch nicht verändert wird. Werden die definierenden Relationen (I.58) wie im Text beschrieben (s. (I.62)) eliminiert, so hat man in jeweils sämtliche gestrichelte Kanten und in (b) den von ihnen eingeschlossenen Vertex  $R^{(21)}$  zu streichen. Details s. Text.

den verschiedenen  $R^{(pq)}$  ausschließlich 1-Kanten auftreten. Die beiden Subgraphen, welche nur Vertices einer Sorte haben sind “einfach zusammenhängend”. Fasst man sie jeweils zu einem Vertex zusammen, dann bleiben sämtliche Label erhalten, d.h. die Folge  $(r_k)_k$  liefert in beiden Fällen dieselben Label und somit dieselbe Lösung des Kodierungsproblems. Wir definieren für einen gegebenen<sup>42</sup> Baum  $\mathfrak{T}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  die **Übergangsmatrix**

$$U_{\alpha\beta} := \begin{cases} 1, & (M_\alpha, M_\beta) \in \tilde{\mathbf{E}}_\tau \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}, \quad M_\alpha, M_\beta \in \tilde{V}_\tau := \{M_{k,\cdot}^{(pq)}\},$$

als die **Matrix-Darstellung des projizierten Automaten  $\mathfrak{BA}^\Phi(\tilde{\mathbf{E}}_\tau, \tilde{V}_\tau)$  vom Typ B**. Ist die konkrete Reihenfolge der  $M_\beta \in \tilde{V}_\tau$  gewählt, dann ist die Beziehung zwischen (I.3) und (I.60) offenbar eindeutig. Eine Matrixdarstellung existiert in dieser Form nur für den Typ B. Für unser Beispiel ist für den in Abb. I.5(b) dargestellten Automaten die Vertex-Menge durch  $\tilde{V}_\tau = \{L^{(13)}, L^{(31)}, L^{(23)}, R^{(12)}, R^{(32)}\}$  und für I.5(c) durch  $\tilde{V}_\tau = \{L, R\}$  festgelegt, so daß für letzteren  $\mathbf{U} = \mathcal{S}_{\mathfrak{p},\mathcal{A}}$ , mit der Substitutionsmatrix von  $\mathcal{L}$ , gilt.

Der (definierenden) Relation (I.58) entspricht dabei jeweils ein *geschlossener* Pfad in  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$ . Wir berücksichtigen diese durch eine “Verknüpfungsregel<sup>43</sup>”

$$(I.62)$$

<sup>42</sup>Für eine sinnvolle Definition der Übergangsmatrix ist es wesentlich, daß in  $\mathfrak{T}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  keine definierenden Relationen mehr auftreten, d.h. zwischen jedem Vertex und der Wurzel gibt es genau einen Pfad.

<sup>43</sup>Vgl. z.B. in Abb. I.4 diejenigen Pfade, welche den schattierten Bereich umranden.

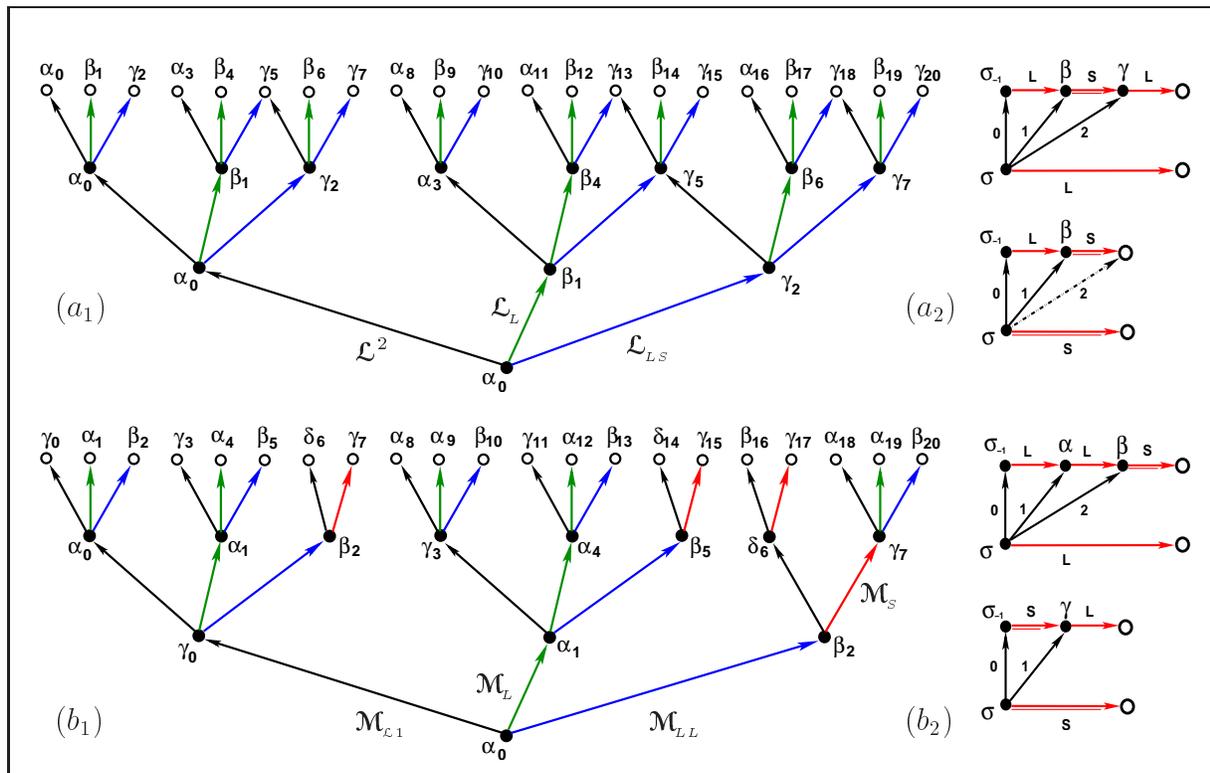


Abbildung I.6:  $\Phi$ -Graphen für (a) die durch  $\mathcal{L}^2$  erzeugten Approximanten  $w^{(2n)}(L,S)$  der Fibonacci-Folge und (b) für die durch  $\mathcal{L}_{L1}$  erzeugten Approximanten  $\tilde{w}_1^{(n)}(L,S) = \mathcal{M}_{L1}^n(L)$ . Der wesentliche “topologische” Unterschied zwischen beiden Graphen besteht hier darin, daß die definierenden Relationen in (a) wegfallen, und statt den jeweiligen zwei Kanten  $\mathcal{L}_L, \mathcal{L}_{LS}$  in (b) an diesen Stellen nur eine Kante  $\mathcal{L}_S$  auftritt. Rechts sind jeweils die konkreten Übersetzungsregeln im Sinne von Abb. I.3 angegeben. Man liest ab, daß  $\mathcal{L}_L := \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2$  ( $t = 1$ ),  $\mathcal{L}_{LS} := \mathcal{T}_S \mathcal{T}_L \mathcal{L}^2$  ( $t = 2$ ) und  $\mathcal{M}_L := \mathcal{T}_L \mathcal{M}_{L1}$  ( $t = 1$ ),  $\mathcal{L}_{LL} := \mathcal{T}_L^2 \mathcal{M}_{L1}$  ( $t = 2$ ),  $\mathcal{L}_S := \mathcal{T}_S \mathcal{M}_{L1}$  ( $t = 1$ ) gilt. Den Substitutionen  $\mathcal{L}^2, \mathcal{L}_{L1}$  wird jeweils  $t = 0$  zugeordnet (Zu den Details siehe Text).

Der in Abb. I.4 gezeigte Graph läßt sich somit rekursiv erzeugen:

$$\mathfrak{G}^\Phi(V_n, E_n) = \Lambda_{\mathcal{L}}^n \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \mathcal{T}_L \quad \beta_1 \quad \mathcal{T}_S \\ \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \\ \sigma \quad \sigma_1 \quad \sigma_2 \quad \sigma_3 \\ \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \\ \alpha_0 \end{array} \right]. \quad (I.63)$$

Seine Selbstähnlichkeit ist evident. Wir sprechen deshalb von “**hierarchischen Graphen**”. Läßt man die in (I.62) gestrichelt gezeichneten Kanten weg, so liefert (I.63) den Baum  $\mathfrak{T}^\Phi(V_n, E_n)$ .

► Es ist vor allem für die spätere Konstruktion der  $\Gamma$ -Graphen instruktiv noch ein weitere Beispiel näher zu betrachten. Betrachten wir  $\mathcal{M}_{L1}$ -Folge  $(w^{(n)})_{n \geq 1}$ ,  $w^{(n)} = \mathcal{M}_{L1}^n(L)$ . Im ersten Schritt bestimmt man das erzeugende Alphabet  $\mathcal{A}^\Phi$ . Aus den in Abb. I.6(b<sub>2</sub>) dargestellten Übersetzungsregel liest man ab, daß  $u_{k,1,t_{k,1}} = (LLS)^{[0,t_{k,1}-1]}$ ,  $u_{k,2,t_{k,2}} = (SL)^{[0,t_{k,2}-1]}$  mit  $t_{k,1} = 0, 1, 2$ ,  $t_{k,2} = 0, 1$ , gilt. Ausgehend von der Wurzel  $\alpha$  ergibt sich  $\mathcal{A}_1^\Phi = \{\mathcal{M}_{L1}, \mathcal{M}_L, \mathcal{M}_{LL}\}$  und  $\mathcal{A}_{k \geq 2}^\Phi = \{\mathcal{M}_{L1}, \mathcal{M}_L, \mathcal{M}_{LL}, \mathcal{M}_S\}$ . Um den entsprechenden  $\Phi$ -Graphen *rekursiv* konstruieren zu

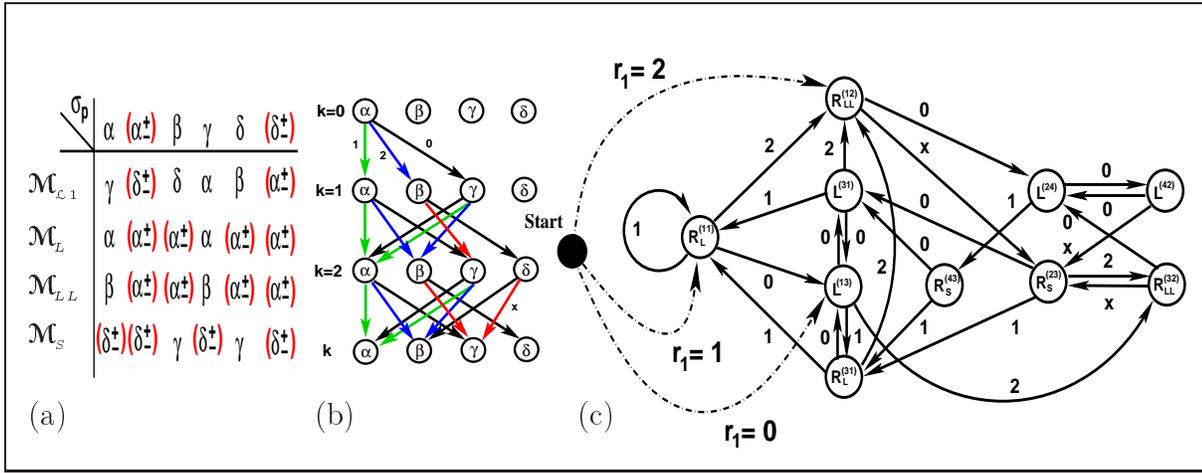


Abbildung I.7: Projizierte Automaten  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^{\Phi}$  zu  $\mathfrak{G}^{\Phi}(V_n, \mathbf{E}_n)$  für die  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}_1}$ -Folge: (a) Wertetabelle für alle auftretenden "Zustände"  $\sigma_q$  mit  $\sigma_q = \pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathcal{M})\sigma_p$  für die erzeugenden Substitutionen  $\mathcal{M}' \in \mathcal{A}^{\Phi}$ , Projizierter  $\Phi$ -Automat  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^{\Phi}(V_{\tau}, \mathbf{E}_{\tau})$  vom Typ A (b) bzw. Typ B (c) (Details s. Text).

können, benötigen wir  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^{\Phi}(V_{\tau}, \mathbf{E}_{\tau})$ . Hierzu verschafft man sich zunächst gemäß Abb. I.3(b<sub>2</sub>) die auftretenden projizierten VKV-Tripel. Der *Typ*  $\tau(\sigma_{\xi^{(k)}})$  des Vertex  $\sigma_{\xi^{(k)}} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{\xi^{(k)}}) \in V_n$  wird jeweils durch den letzten und ersten Buchstaben des Wortes  $\mathcal{M}_{\xi^{(k)}}(L)$  festgelegt (s. Gl. (I.48)). Ist  $\mathcal{M}_{\xi^{(k)}} = \mathcal{M}_{k, \cdot} \mathcal{M}_{\xi^{(k-1)}}$ , dann gilt

$$\sigma_{\xi^{(k)}} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{k, \cdot})\sigma_{\xi^{(k-1)}}, \quad \text{und} \quad \sigma_q = \pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathcal{M}_{k, \cdot})\sigma_p, \quad (\text{I.64})$$

$\sigma_p = \tau(\sigma_{\xi^{(k-1)}}), \sigma_q = \tau(\sigma_{\xi^{(k)}})$ , wobei die Wirkung von  $\pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\cdot) : \mathcal{A}^{(\sigma)} \rightarrow \mathcal{A}^{(\sigma)}$  in (I.64) definiert wird durch<sup>38</sup>

$$\pi_{\ell}(\sigma_q) := (\mathcal{M}_{k, \cdot}(\pi_{\ell}(\sigma_p)))^{[N-1]}, \quad \pi_r(\sigma_q) := (\mathcal{M}_{k, \cdot}(\pi_r(\sigma_p)))^{[0]},$$

$N = |\mathcal{M}_{k, \cdot}(\pi_{\ell}(\sigma))|$ . So ist z.B.  $\sigma_q = \pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathcal{M}_{\mathcal{L}_1})\beta = ((LLS)^{[2]}, (SL)^{[0]}) = (S, S) \equiv \delta$  oder  $\sigma_q = \pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathcal{M}_{\mathcal{L}})\beta = ((LSL)^{[2]}, (L^{-1}SLL)^{[0]}) = (L, L^{-1}) \equiv \alpha^{\pm}$ . In der Tabelle in Abb. I.7(a) weiter unten findet man sämtliche auftretenden Paarungen  $M^{(pq)} = (\sigma_q, \pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathcal{M}), \sigma_p)$ ,  $\sigma_p = \sigma_{p,1}, \sigma_q = \sigma_{q,1}$  (wegen  $m(k) = 1, \forall k$ , da  $\kappa = 1$ ) eingetragen. Da wir nur die Orbits positiver Worte betrachten wollen, ist der **Vertextyp** der Wurzel  $\sigma_{\xi^{(0)}}$  immer **positiv** (= "gewöhnlicher Vertex"), d.h. es ist  $\tau(\sigma_{\xi^{(0)}}) = \sigma^{(ij)}$ ,  $i, j > 0$ . Nun kommt es vor — es ist eigentlich die Regel —, daß durch  $\pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathcal{M}_{n, \cdot})$  ein positiver Vertex auf einen "gemischten" (= "virtueller Vertex", d.h. in  $\tau(\sigma_{\xi}) = \sigma^{(ij)}$  sind nicht alle  $i, j > 0$ ) "Vertextyp" führt. Man sieht leicht ein, daß dies *nicht* rechtfertigt das zugehörige VKV-Tripel auszuschließen, falls es irgendwann später wieder eine Transformation gibt, welche wieder auf einen positiven Vertex führt! Die Begründung hierfür liefert die oben gewonnene Erkenntnis, daß alle durch die elementaren Substitutionen aus  $\mathcal{A}^{\Phi}$  erzeugten Worte die Form

$$w_{1, (r_n \dots r_1)} = (W^{(n)})^{-1} w_{1, (r_n^0 \dots r_1^0)} W^{(n)}$$

besitzen, wobei sowohl  $W^{(n)}$  als auch  $w_{1, (r_n^0 \dots r_1^0)}$  positive Worte sind. Ist  $|W^{(n)}| \leq |w_1^{(n)}|$ , dann ist der zu  $\sigma = \tau(\sigma_{\xi^{(n)}})$  gehörenden Vertex genau dann positiv, wenn  $w_{1, (r_n \dots r_1)} = \mathcal{M}_{\xi^{(n)}}(L)$  eine zyklische Permutation von  $w_{1, (r_n^0 \dots r_1^0)}$  und somit ein Element des Orbits  $\mathcal{O}[w^{(n)}]$  ist. Nur Vertices, die *nie* mehr auf ein positiven Vertextyp transformiert werden können,

müssen generell ausgeschlossen werden, da die zugeordneten Worte nie ein Element von einem  $\mathcal{O}[w^{(n)}]$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , sein werden. In unserem Falle sieht man, daß  $\sigma_p \in \{\alpha_{\pm}^+, \delta_{\pm}^+\}$  sich unter allen Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^{\Phi}$  wieder in einen gemischten Vertextyp  $\sigma_q \in \{\alpha_{\pm}^+, \delta_{\pm}^+\}$  transformieren. Deshalb kann man die kompletten zugehörigen Spalten streichen. Aus unserer Konstruktion des  $\Phi$ -Graph durch die sukzessive Anwendung der Übersetzungsregeln von Abb. I.3, ergibt sich unmittelbar, daß in  $\mathfrak{G}^{\Phi}(V_n, \mathbf{E}_n)$  niemals Vertizes mit gemischtem Vertextyp auftreten können. Man könnte somit diese Diskussion *ad acta* legen, wenn ihr Auftreten nicht bei den zugehörigen  $\Gamma$ -Graphen fast die Regel wäre. Eine wichtige Ausnahme hiervon bildet z.B. die Klasse der verallgemeinerten Fibonacci-Worte. Die zugehörigen  $\Gamma$ -Graphen besitzen nur gewöhnliche Vertizes. — Wir bekommen somit das Resultat  $\{M_u^{(pq)}\} = \{L^{(13)}, L^{(31)}, L^{(42)}, L^{(24)}, R_L^{(11)}, R_L^{(31)}, R_{LL}^{(12)}, R_{LL}^{(32)}, R_S^{(23)}, R_S^{(43)}\}$  (vgl. Tabelle in Abb. I.7), mit

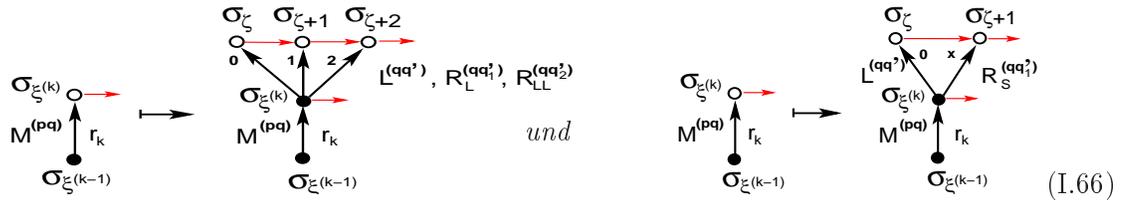
$$L^{(pq)} := (\sigma_q, \mathcal{M}_{L_1}, \sigma_p), \quad R_u^{(pq)} := (\sigma_q, \mathcal{M}_u, \sigma_p), \quad \mathcal{M}_u := \mathcal{T}_u \mathcal{M}_{L_1},$$

$u = L, LL, S$ ,  $L^{(pq)} := M_u^{(pq)}$ ,  $u = \mathbb{I}$ , und  $\sigma_1 = \alpha$ ,  $\sigma_2 = \beta$ ,  $\sigma_3 = \gamma$ ,  $\sigma_4 = \delta$ . Man erkennt, daß für dieses Beispiel alle “projizierten” Größen unabhängig vom Index  $k$  sind! Die Resultate für die  $\Phi$ -Automaten  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^{\Phi}(V_{\tau}, \mathbf{E}_{\tau})$  vom Typ A bzw. B findet man in Abb. I.7(b,c). Es folgt

**Korollar I.1** Seien die erzeugenden Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^{\Phi}$  definiert durch

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{L_1} &: L \rightarrow LLS, S \rightarrow SL \\ \mathcal{M}_{L^n} &:= \mathcal{T}_L^n \mathcal{M}_{L_1} : L \rightarrow L^{2^n} SL^n, S \rightarrow L^{-n} SL L^n \xrightarrow{\pi'} \mathbf{S}_{\mathcal{M}_{L_1}} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.65}) \\ \mathcal{M}_S &:= \mathcal{T}_S \mathcal{M}_{L_1} : L \rightarrow S^{-1} LLS, S \rightarrow LS \end{aligned}$$

mit  $n = 1, 2$ . Der erzeugende Automat  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^{\Phi}$  ist in Abb. I.7(b) gegeben. Es entspricht dort  $r_k = 0, 1, 2, x$  den Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} = \mathcal{M}_{L_1}, \mathcal{M}_L, \mathcal{M}_{LL}, \mathcal{M}_S$ , wobei  $x = 1 + \tau_k$ ,  $\tau_k := \Lambda_{n-k-1}^{(n-k-1)} / \Lambda_{n-k}^{(n-k)}$  gilt, mit den Längen  $\Lambda_n^{(n)} := |\mathcal{M}_{L_1}^k(L)|$  (s. weiter unten). Die geometrische Darstellung der Super-Inflation  $\Lambda_{L_1}$  hat die Form<sup>44</sup>



Der zu  $\mathcal{O}[w^{(n)}(L, S)]$ ,  $w^{(n)}(L, S) := \mathcal{M}_{L_1}^n(L)$ , gehörenden hierarchische Graph  $\mathfrak{G}_{L_1}^{\Phi}(V_n, \mathbf{E}_n)$  (s. Abb. I.6 (b<sub>1</sub>)) läßt sich dann rekursiv erzeugen, d.h.  $\mathfrak{G}_{L_1}^{\Phi}(V_{k+1}, \mathbf{E}_{k+1}) = \Lambda_{L_1}(\mathfrak{G}_{L_1}^{\Phi}(V_k, \mathbf{E}_k))$ ,  $k = 1, \dots, n-1$ , so daß

$$\mathfrak{G}_{L_1}^{\Phi}(V_n, \mathbf{E}_n) = \Lambda_{L_1}^{n-1} \left[ \begin{array}{ccc} 0 & 1 & 2 \\ \circ & \circ & \circ \\ \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ L^{(13)} & R^{(11)}, R^{(12)} & \end{array} \right], \quad (\text{I.67})$$

<sup>44</sup>Aus der Tabelle in Abb. I.7(a) bzw. dem projizierten  $\Phi$ -Graphen in Abb. I.7(b) entnimmt man die Super-Inflationen  $\Lambda_{\mathcal{M}_{L_1}}$

$$\begin{aligned} M_u^{(p1)} &\mapsto (L^{(13)}, R_L^{(11)}, R_{LL}^{(12)}), & M_u^{(p2)} &\mapsto (L^{(14)}, R_S^{(23)}), \\ M_u^{(p3)} &\mapsto (L^{(31)}, R_L^{(31)}, R_{LL}^{(32)}), & M_u^{(p4)} &\mapsto (L^{(42)}, R_S^{(43)}), \end{aligned}$$

für alle  $M_u^{(pq)} \in \tau(\mathbf{E}_n)$ , deren geometrische Darstellung in (I.66), bzw. zusammengefaßt in Abb. I.7(c), angegeben ist.

für alle  $n \in \mathbb{N}$  gilt. ♣

Exemplarisch für (I.67) findet man in Abb. I.6( $b_1$ ) den Graphen  $\mathfrak{G}_{\mathcal{L}_1}^\Phi(V_3, \mathbf{E}_3)$  und zum Vergleich in Abb. I.6( $a_1$ ) den Fibonacci-Graphen  $\mathfrak{G}_{\mathcal{L}_2}^\Phi(V_3, \mathbf{E}_3)$  dargestellt.

Nachdem wir gesehen haben, daß für jeden Orbit  $\mathfrak{O}[\omega]$  eines **D0L**-Wortes eine “**RG-Darstellung**”<sup>45</sup> von<sup>46</sup>  $\mathfrak{O} \rtimes_\alpha \mathbf{G}$  existiert, ist natürlich die Frage nach der Lösbarkeit und darüber hinaus nach der konkreten **Lösung des Kodierungsproblems** von größtem Interesse. Hierbei geht es um die Existenz und konkrete Form eines Algorithmus, der es gestattet aus der Vorgabe der *Zahl*  $\xi^{(n)} \in \mathbb{N}$  und der Folge von positiven Substitutionen  $(\mathfrak{M}_k)_{k=1}^n$  eine passende Folge von Substitutionen  $\mathfrak{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^\Phi$  derart zu finden, daß

$$\mathfrak{J}^{\xi^{(n)}} \mathfrak{M}_{(r_n^0 \dots r_1^0)} = \prod_{k=1}^n (\mathfrak{J}_{u_{k,\cdot}} \mathfrak{M}_k) \quad \text{mit} \quad \xi^{(n)} = \sum_{k=1}^n r_k \Lambda_{n-k}^{(n)}, \quad \Lambda_{n-k}^{(n)} := |\mathfrak{M}_{(r_n^0 \dots r_{k+1}^0)}(x_1)|, \quad (\text{I.68})$$

für alle  $\xi^{(n)} = 0, \dots, \max(\xi^{(n)})$  gilt. Der Zusammenhang zwischen der Folge von Zahlen  $(r_k)_k$  einerseits, der Folge von Worten  $(u_{k,\cdot})_k$ , und damit dem gesuchten Produkt in (I.68) andererseits, ergibt sich aus dem folgenden Theorem.

**Theorem I.3 (Lösung des Kodierungsproblems)** *Sei  $\mathcal{A}^\Phi$  das in Theorem I.2, auf S. 30, gegebene Alphabet eines vollständigen Satzes von erzeugenden Substitutionen,*

$$\Lambda_{n-k}^{(i,n)} := |\mathfrak{M}_{(r_n^0 \dots r_{k+1}^0)}(x_i)| \equiv |w_{i,(r_n^0 \dots r_{k+1}^0)}| \in \mathbb{N}_0$$

die jeweilige Länge des positiven Wortes  $w_{i,(r_n^0 \dots r_{k+1}^0)}$  und<sup>47</sup>

$$r_{k,i_{k-1},j} := \#_{x_j}(u_{k,i_{k-1},t_{k,i_{k-1}}}), \quad u_{k,i_{k-1},t_{k,i_{k-1}}} := (\mathfrak{M}_k(x_{i_{k-1}}))^{[0,t_{k,i_{k-1}}-1]}, \quad (\text{I.69})$$

die Anzahl des jeweiligen Buchstabens  $x_j \in \mathcal{A}_\Lambda$  in  $u_{k,i_{k-1},t_{k,i_{k-1}}} \in \mathbb{F}^+(\mathcal{A})$  ist. Dann gilt

$$w_{1,(r_n \dots r_1)} = \mathfrak{J}^{\xi^{(n)}}(w_{1,(r_n^0 \dots r_1^0)}) \iff \xi^{(n)} = \sum_{k=1}^n r_k \Lambda_{n-k}^{(n)}, \quad (\text{I.70})$$

$$\text{mit} \quad r_k \equiv r_{k,i_{k-1}} := r_{k,i_{k-1},1} + \sum_{j=2}^\Lambda r_{k,i_{k-1},j} \frac{\Lambda_{n-k}^{(j,n)}}{\Lambda_{n-k}^{(n)}}, \quad \Lambda_{n-k}^{(n)} := \Lambda_{n-k}^{(1,n)}. \quad (\text{I.71})$$

$\xi^{(n)}$  nimmt alle ganzen Zahlen in dem Intervall  $[0, \max(\xi^{(n)})]$  an, wobei immer  $\max(\xi^{(n)}) \geq |w_{1,(r_n^0 \dots r_1^0)}|$  gilt.  $\mathfrak{R}_k$  sei für jedes  $k$  die Menge aller Werte, die  $r_k$  annehmen kann. Sind

<sup>45</sup>D.h. jedes Element von  $\mathfrak{O}[\omega]$  läßt sich durch elementare (expandierende) Substitutionen des Alphabetes  $\mathcal{A}^\Phi$  erzeugen. Später wird sich zeigen, daß die Substitution  $\mathfrak{M}^{-1}$  eine Feshbach-Transformation  ${}^R\mathfrak{M}^{-1}$  im entsprechenden Hilbert-Raum, bzw. einen Diffeomorphismus  ${}^R\mathfrak{M}^{-1}$  in einem entsprechenden Parameterraum, impliziert. Der zugehörigen Nielsen Transformation (NT)  $\mathbf{M}$  entspricht dann die Renormierungstransformation (RT)  ${}^R\mathbf{M}$  in der Transfer-Matrizen-Darstellung. Da beide Zugänge zueinander anti-isomorph sind, verwenden wir beide Begriffe i.a. synonym.

<sup>46</sup>Zur Definition des sog. “verschränkten Produkts” (bzw. Gruppoids)  $\mathfrak{O} \rtimes_\alpha \mathbf{G}$  s. z.B. [Wal2003].

<sup>47</sup>Man beachte, daß  $(\mathfrak{M}_k(x))^{[0,t-1]} = \mathbb{1}$  für  $t = 0$  und  $\#_{x_i}(\mathbb{1}) = 0$  für alle  $x_i \in \mathcal{A}_\Lambda$  gilt.

$(r_1^{(p)}, \dots, r_n^{(p)})$ ,  $p = 1, 2, \dots$ , verschiedene Lösungen von (I.70) für ein gegebenes  $(n, \xi^{(n)})$  und gegebener Folge  $(\mathcal{M}_k)_{k=1}^n$ , dann gilt

$$\mathcal{M}_{(r_n^{(p)} \dots r_1^{(p)})} = \mathcal{M}_{(r_n^{(q)} \dots r_1^{(q)})}, \quad \forall p, q, \quad (\text{I.72})$$

so daß alle Pfade  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n) \ni \Pi_{\xi^{(0)} \rightarrow \xi^{(n)}} = \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{\xi^{(n)}})$ , mit

$$\mathcal{M}_{\xi^{(n)}} \in \left\{ \mathcal{M}_{(r_n \dots r_1)} \mid \sum_{k=1}^n r_k \Lambda_{n-k}^{(n)} = \xi^{(n)}, r_k \in \mathcal{R}_k \right\}, \quad (\text{I.73})$$

auf dieselbe Substitution führen. Folgender Algorithmus liefert eine Lösung  $(r_k)_k$  von (I.70):

$$\begin{aligned} & \mathbf{Fix } n; \quad \mathbf{Suppose } 0 \leq \xi^{(n)} < \Lambda_n^{(n)} \\ & \mathbf{For } k = n \mathbf{ to } 1 \mathbf{ do} \\ & \quad \mathbf{begin} \\ & \quad \quad r_k = \max_{\rho_k \in \mathcal{R}_k} \left\{ \xi^{(k)} - \rho_k \Lambda_{n-k}^{(n)} > 0 \right\}, \\ & \quad \quad \xi^{(k-1)} := \xi^{(k)} - r_k \Lambda_{n-k}^{(n)} \\ & \quad \mathbf{end.} \end{aligned} \quad (\text{I.74})$$

Geht man mit den so gefundenen  $(r_k)_k$  in einen der beiden (Typ A oder B) oben definierten projizierten  $\Phi$ -Automaten  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$  ein, so ergibt sich die Folge von Substitutionen  $\mathcal{M}_{k, i_{k-1}, t_k, i_{k-1}} \in \mathcal{A}^\Phi$ , welche in  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  den Kantenzug  $\Pi_{\xi^{(0)} \rightarrow \xi^{(n)}}$  definieren (s. Bemerkung im Anschluß zum Beweis!).

**C ▶ Beweis:** Aus Lemma I.2 und (I.52) folgt

$$\begin{aligned} \xi^{(n)} & := |W(n)| = \sum_{k=1}^{n-1} |\mathcal{M}_{(r_n^0 \dots r_{k+1}^0)}(u_k, \cdot)| + |u_{u, \cdot}| \\ & = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{p=1}^{\Lambda} \left[ \#_{x_p}(u_k, \cdot) \cdot |\mathcal{M}_{(r_n^0 \dots r_{k+1}^0)}(x_p)| \right] + |u_{u, \cdot}| \\ & = \sum_{k=1}^n r_k \Lambda_{n-k}^{(n)}, \quad r_k := \sum_{i=1}^{\Lambda} \#_{x_p}(u_k, \cdot) \frac{\Lambda_{n-k}^{(i, n)}}{\Lambda_{n-k}^{(n)}} \end{aligned} \quad (\text{I.75})$$

mit  $\Lambda_{n-k}^{(n)} = \Lambda_{n-k}^{(1, n)}$ . Letztere genügen der Rekursionsformel

$$\Lambda_{n-k+1}^{(i, n)} = \sum_{j=1}^{\Lambda} (\mathcal{S}_{\mathcal{M}_k})_{i, j} \Lambda_{n-k}^{(j, n)}, \quad \Lambda_0^{(i, n)} = 1, \quad i = 1, \dots, \Lambda. \quad (\text{I.76})$$

$\mathcal{S}_{\mathcal{M}_k}$  ist die Substitutionsmatrix von  $\mathcal{M}_k$ . Der Algorithmus (I.74) ergibt sich aus der Struktur des  $\Phi$ -Graphen  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  und den Abschätzungen (I.53) (sukzessive Intervallschachtelung!, vgl. Abb. I.3(a)). Aus der Konstruktion von  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  folgt weiter, daß nur dann mehrere Pfade zum selben  $\pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{\xi^{(n)}})$  führen, wenn es definierende Relationen in  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  (bzw. später in  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$ ) gibt, d.h. es treten verschiedenen Lösungen von (I.70) genau dann auf,

wenn es eine definierende Relation zwischen den zugehörigen Substitutionen gibt, d.h. (I.72) gilt<sup>48</sup>. ♣

Es ist klar, daß die Abbildung  $r : r_k \rightarrow \mathcal{M}_{k,i_{k-1},t_{k,i_{k-1}}}$  aus (I.71) i.a. nicht eindeutig ist, da sie *keine* Information über das konkrete  $i_{k-1}$  liefert. Sie liefert für gegebenes  $i_{k-1}$  nur eine direkte Beziehung zum Index  $t_{k,i_{k-1}}$ . Es brauchen zu verschiedenen  $i_{k-1}$ , aber gleichem  $t_{k,i_{k-1}}$ , trotzdem noch keine verschiedene Werte für  $r_k$  auftreten. Exemplarisch hierfür seien die singulären Thue–Morse oder Rudin–Shapiro Substitutionen (s. Kapitel **I.2.1** bzw. **III.4f.**) für die  $\Lambda_k^{(i,n)} = \Lambda_k^{(n)}$ ,  $i = 1, 2$ , gilt. — Der Algorithmus (I.74) liefert nur die Zahlenfolge  $(r_k)_k$ . Um die konkreten  $i_{k-1}$  bestimmen zu können bedarf es der Kenntnis der projizierten VKV–Tripel  $M_{k,i_{k-1},t_{k,i_{k-1}}}^{(pq)}$ , wobei, wie oben beschrieben,  $\sigma_p = \pi_r(x_{i_{k-1}})$  gilt. Diese Information liefert der projizierte  $\Phi$ –Automat  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi$ . Er erlaubt es nach den obigen Ergebnissen *immer*, aus der durch den Algorithmus (I.74) erhaltenen Lösung  $(r_k)_k$  der Gleichung (I.70) die gesuchte Folge von Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,i,t_{ki}} \in \mathcal{A}^\Phi$  eindeutig zu bestimmen.

♣ ► **Beispiel (Forts.):** Damit kommen wir für unsere Beispielfolgen zu dem zugehörigen **Kodierungsproblem**. Betrachten wir zunächst wieder die Fibonacci–Folge. Um eine Folge von Morphismen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^\Phi$  zu bestimmen, für die  $\prod_k \mathcal{M}_{k,\cdot}(L) = \mathcal{T}^{\xi^{(n)}} \cdot \mathcal{L}^n(L)$ ,  $\xi^{(n)} \leq \Lambda_{n-1}^{(n)} - 1$ , gilt, sucht man zunächst eine Lösung  $(r_1, \dots, r_n) \in \{0, 1\}^n$  der Gleichung (I.70). Aus der Struktur von  $\mathfrak{G}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  ergab sich, daß mindestens eine derartige Lösung existiert. Für den Fall der Fibonacci–Folge fanden wir noch zusätzlich die definierende Relation (I.58), so daß i.a. *mehrere* Lösungen auftreten können. Eine davon ergibt sich aber immer aus dem in (I.74) gegebenen Algorithmus. Es ist  $\Lambda_n^{(2,n)} = \Lambda_{n-1}^{(1,n-1)}$ . Die in (I.50) definierten Substitutionen lauten hier  $\mathcal{M}_{k,i,t_{ki}} = \mathcal{T}_{u_i,t_i} \mathcal{L}$ , mit  $u_i,t_i = (\mathcal{L}(x_i))^{[0,t_i-1]}$ , d.h. es ist  $u_{L,t_L} = (LS)^{[0,t_L-1]}$ ,  $t_L = 0, \dots, |LS| - 1 = 0, 1$ , also  $u_{L,t_L} = \mathbf{1}, L$ , und  $u_{S,t_S} = (L)^{[0,t_S]}$ ,  $t_S = 0, \dots, |L| - 1 = 0$ , also  $u_{S,t_S} = \mathbf{1}$ . Damit ergibt sich für (I.69)  $r_{j=L} = \#_L(u_{L,t_L}) = t_L = 0, 1$  bzw.  $r_{j=L} = \#_L(u_{S,t_S}) = 0$  und  $r_{j=S} = \#_S(u_{L,t_L}) = 0$ ,  $x_i = L, S$ . Daraus folgt, daß  $r_k = 0$  ( $= 1$ ) äquivalent zu  $\mathcal{M}_{k,i,t_{ki}} = \mathcal{L}$  ( $= \mathcal{R} = \mathcal{T}_L \mathcal{L}$ ) ist. Da  $r_k$  ganzzahlig ist, läßt sich in (I.74) die einfachere Beziehung

$$r_k = \text{int} \left[ \frac{\xi^{(k)} \bmod \Lambda_{n-k+1}^{(n)}}{\Lambda_{n-k}^{(n)}} \right], \quad \xi^{(k-1)} = \xi^{(k)} - r_k \Lambda_{n-k}^{(n)}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (\text{I.77})$$

aus [Wal97] verwenden, wobei  $\text{int}(x)$  der ganzzahlige Teil von  $x$  ist. Damit bilden die Fibonacci–Zahlen  $(f_k)_{k \in \mathbb{N}}$ ,  $f_k = \Lambda_k^{(k)}$ , analog wie  $(2^k)_{k \in \mathbb{N}}$  für Binärkodierung, eine **Basis**, in der sich jede natürliche Zahl  $\xi^{(n)}$  darstellen läßt.

Mit der mittels (I.74) gefundenen Lösung  $(r_1, \dots, r_n)$  geht man in den projizierten Automaten  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$  ein (s. Abb. I.5): In (a) startet man mit dem Vertex  $\alpha$  in (b,c) geht man vom jeweiligen “Start–Vertex” aus. Man erkennt, daß es genau einen Pfad gibt, dessen Kanten (a)/Vertizes (b) den jeweiligen Werten von  $r_k$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots, n$ , zugeordnet werden können. Dieser Pfad legt seinerseits eindeutig eine Folge von projizierten VKV–Vertizes  $\{L^{(13)}, L^{(23)}, L^{(31)}, R^{(12)}, R^{(21)}, R^{(32)}\}$  fest. Damit ist das Kodierungsproblem vollständig gelöst. Ein Beispiel mag das Gesagte verdeutlichen: Wir wollen die Abfolge von Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \{\mathcal{L}, \mathcal{R}\}$  bestimmen, welche zu dem Wort  $\mathcal{T}^6(w^{(4)})$  führen. In einem ersten Schritt suchen wir die Lösungen der Gleichung  $6 = r_1 f_3 + r_2 f_2 + r_3 f_1 + r_4 f_0 = r_1 \cdot 5 + r_2 \cdot 3 + r_3 \cdot 2 + r_4 \cdot 1$ .

<sup>48</sup>Solche Relationen trifft man z.B. bei den verallgemeinerten Fibonacci–Folgen an, während bei der  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}1}$ –Folge keine derartigen Relationen auftreten.

Aus (I.74) ergibt sich die Lösung  $(r_1, r_2, r_3, r_4) = (0, 1, 1, 1)$ . Aus Abb. I.5(b) liest man somit ab: Start:  $S \xrightarrow{0} L^{(12)} \xrightarrow{1} R^{(32)} \xrightarrow{1} R^{(21)} \xrightarrow{1} R^{(12)}$ , d.h. es ist  $\mathcal{T}^6(w^{(4)}) = \mathcal{R}^3 \mathcal{L}(L)$  (s. Abb. I.4!). Offensichtlich gelangt man zu demselben Ergebnis, wenn man mit der Zahlenfolge  $(r_k)_k$  in Abb. I.5(a) bzw. (c) eingeht. Für alle anderen Lösungen  $(r_1, r_2, r_3, r_4)$  der Gleichung  $6 = r_1 f_3 + \dots$  liefert  $\mathfrak{PA}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$  die entsprechenden zu  $\mathcal{R}^3 \mathcal{L}$  äquivalenten Substitutionen.

► **C** Kommen wir zur  $\mathcal{M}_{\mathcal{L}_1}$ -Folge. Wir sahen, daß sich aus den in Abb. I.6(b<sub>2</sub>) dargestellten Übersetzungsregeln unmittelbar  $u_{1,t_{k,1}} = (LLS)^{[0,t_1-1]}$ ,  $t_{k,1} = 0, 1, 2$ , und  $u_{2,t_2} = (SL)^{[0,t_2-1]}$ ,  $t_2 = 0, 1$  unabhängig von  $k$  ergibt. Für die Zahlen  $r_{k,i_{k-1},j}$  aus (I.69) ergibt sich somit  $r_{k,1,j} = \#_{x_j}(u_{1,t_1}) = t_1 \delta_{j,1}$ ,  $k \geq 1$  und  $r_{k,1,j} = \#_{x_j}(u_{2,t_2}) = t_2 \delta_{j,2}$ ,  $k \geq 2$ . Letzteres folgt aus der Annahme, daß wir  $x_{i_0} = x_1$  setzen. Sei  $\tau_k := \Lambda_k^{(2,n)} / \Lambda_k^{(1,n)}$  mit  $\Lambda_k^{(i,n)} = |\mathcal{M}_{\mathcal{L}_1}(x_i)|$ . Dann gilt

$$\tau_{k+1} = S_{\mathcal{L}_1}(\tau_k) = \frac{1 + \tau_k}{2 + \tau_k}, \quad \tau_0 = 1, \quad S_{\mathcal{L}_1} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

wobei  $S_{\mathcal{L}_1}(\cdot)$  die zur Substitutionsmatrix  $S_{\mathcal{L}_1}$  gehörende Möbius-Transformation ist. Damit gilt für (I.71)

$$r_{k,1} = t_1 + 0 \cdot \frac{\Lambda_{n-k}^{(2,n)}}{\Lambda_{n-k}^{(n)}} = t_1 \quad \text{und} \quad r_{k,2} = 0 + t_2 \frac{\Lambda_{n-k}^{(2,n)}}{\Lambda_{n-k}^{(n)}} = t_2 \tau_{n-k},$$

d.h. es ist  $r_1 \in \{r_{k,1}\} = \{0, 1, 2\}$  und  $r_k \in \{r_{k,1}\} \cup \{r_{k,2}\} = \{0, 1, 2, \tau_{n-k}\}$  für alle  $k \geq 2$  (da wir  $x_{i_0} = x_1$  setzten), so daß alle Mengen  $\mathcal{R}_k$  in (I.74) festgelegt sind. Aus dem Algorithmus läßt sich nun wieder eine Folge von Zahlen  $(r_k)_k$  bestimmen. Geht man mit der so gewonnenen Lösung in einen der zugehörigen projizierten  $\Phi$ -Automaten  $\mathfrak{PA}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$  aus Abb. I.7 ein, so findet man für jedes gegebenen  $\xi^{(n)}$  die zugehörige Folge von erzeugenden Substitutionen. Die Notwendigkeit mit den Zahlen  $(r_k)_k$  durch den “Filter”  $\mathfrak{PA}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$  gehen zu müssen, zeigt folgendes einfache Beispiel. Sei  $n = 3$ . Dann ist  $r_1 = r_{1,1} \in \{0, 1, 2\}$  ( $\tau_2 = 5/8$  fehlt, da  $x_{i_0} = x_1$  sein soll),  $r_2 \in \{r_{2,1}\} \cup \{r_{2,2}\} = \{0, 1, 2\} \cup \{0, \tau_1 = 2/3\} = \{0, 1, 2/3, 2\}$  und  $r_3 \in \{r_{3,1}\} \cup \{r_{3,2}\} = \{0, 1, 2\} \cup \{0, \tau_0 = 1\} = \{0, 1, 2\}$ . Aus letzterem erkennt man sofort, daß  $r_3 = 1$  beiden Substitutionen  $\mathcal{M}_L$  und  $\mathcal{M}_S$  zugeordnet werden kann! Erst die Eigenschaft von  $\mathfrak{PA}^\Phi(V_\tau, \mathbf{E}_\tau)$ , zwischen  $r_{k,1}$  und  $r_{k,2}$  zu unterscheiden, erlaubt die eindeutige Lösung des Kodierungsproblems.

Invertiert man alle Pfade eines  $\Phi$ -Graphen, so läßt sich wieder ein hierarchisch aufgebauter Graph konstruieren, den wir mit  $\Gamma$ -Graph bezeichnen wollen, da er neben der Abfolgen der zu den Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot}$  gehörenden inversen Morphismen  $\mathcal{M}_{k,\cdot}^{-1}$  auch die Abfolge der entsprechenden Nielsen-Transformationen  $M_{k,\cdot}$  festlegt, d.h. es ist  $\mathbf{G} = \mathbf{\Gamma}$ . Da die inversen Morphismen direkt den späteren Dezimierungstransformationen (DTs) und die NTs in der Transfer-Matrizen-Darstellung den Renormierungstransformationen (RTs) zugeordnet werden können, wollen wir uns nun ausführlich mit der Konstruktion des zu dem jeweiligen  $\Phi$ -Graphen gehörigen  $\Gamma$ -Graphen beschäftigen. Bei der Konstruktion des zu den Orbits  $\mathcal{O}[w_1^{(n)}]$  gehörenden, allgemeinen, hierarchischen  $\Gamma$ -Graphen<sup>49</sup>  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  gehen wir analog zu der des entsprechenden  $\Phi$ -Graphen vor, wobei sich sofort einige charakteristische Unterschiede aufzeigen.

<sup>49</sup>Hierbei steht “ $\mathbf{\Gamma}$ ” in  $\mathfrak{G}^\Gamma$  wieder für “Nielsen-Transformationen”.

Betrachten wir hierzu zunächst die nun *nicht* notwendigerweise positiven Worte

$$w_i^{(s_n \cdots s_1)} := \mathbf{M}_{(s_n \cdots s_1)}(x_i), \quad \mathbf{M}_{(s_n \cdots s_1)} := \prod_{k=1}^n \mathbf{M}_{k, i_k, t_{k i_k}}, \quad \mathbf{M}_{k, i_k, t_{k i_k}} \in \mathcal{A}^\Gamma, \quad (\text{I.78})$$

wobei das Alphabet  $\mathcal{A}^\Gamma$  mit dem von oben für jedes feste  $n$  durch  $\mathcal{A}_k^\Gamma \cong \mathcal{A}_{n-k+1}^\Phi$ ,  $k = 1, \dots, n$ , verknüpft ist. Nun ist<sup>30</sup>

$$\mathbf{M}_{k+1} \mathbf{T}_{u_{k+1}} \cdot \mathbf{M}_{\xi^{(k)}}(x_1, \dots, x_\Lambda) = \overline{W}_{k+1}^{-1} \cdot \left( \mathbf{M}_{k+1} \mathbf{M}_{\xi^{(k)}}(x_1, \dots, x_\Lambda) \right) \cdot \overline{W}_{k+1} \quad (\text{I.79})$$

mit  $u_{k+1} = (\mathbf{M}_{k+1}(x_i))^{[0, t_{k+1}, i]}$ , wobei wir  $u_{k+1}$  im Folgenden immer als ein positives Wort voraussetzen wollen, und

$$\overline{W}_{k+1} := u_{k+1} \left( w_1^{(s_k \cdots s_1)}, \dots, w_\Lambda^{(s_k \cdots s_1)} \right). \quad (\text{I.80})$$

$\mathbf{M}_{k, i, t} = \mathbf{M}_k \mathbf{T}_{u_k}$  ist jeweils die der in (I.50) definierten Substitution  $\mathbf{M}_{k, i, t}$  entsprechende NT. Iteriert man (I.79) mit (I.80) sukzessiv für alle  $k = 1, 2, \dots$ , so ergibt sich die Folge von Worten  $(W^{(k)})_{k \geq 1}$ , so daß (vgl. Lemma I.2 auf S. 28)

$$\begin{aligned} \mathfrak{J}_{W^{(n)}} \left( \mathbf{M}_{\xi^{(n)=0}}(x_1, \dots, x_\Lambda) \right) &\equiv (W^{(n)})^{-1} \cdot \left( \mathbf{M}_{\xi^{(n)=0}}(x_1, \dots, x_\Lambda) \right) \cdot W^{(k)} \\ &= \mathbf{M}_{(s_k \cdots s_1)}(x_1, \dots, x_\Lambda), \end{aligned} \quad (\text{I.81})$$

mit  $\mathbf{M}_{\xi^{(n)=0}} := \prod_{k=1}^n \mathbf{M}_k$ , gilt, wobei die Worte  $W^{(n)}$  rekursiv durch

$$W^{(n)} = W^{(n-1)} \overline{W}_n = W_n W^{(n-1)} = \prod_{k=1}^n W_k, \quad W_k := u_k(w_1^{(k-1)}, \dots, w_\Lambda^{(k-1)}) \quad (\text{I.82})$$

gegeben sind. Aus (I.82) entnimmt man, daß sämtliche Worte  $W^{(n)}$  positiv sind, da alle  $w_i^{(k)}$  und  $u_k$ , als positiv vorausgesetzt wurden. Dies steht nicht im Widerspruch dazu, daß die in (I.78) definierten Worte nicht positiv zu sein brauchen. Man erkennt sofort das Problem, das bei der Übertragung der Aussage von Theorem I.3, S. 39, auftritt. Nur wenn für positives  $W^{(n)}$  und  $\mathbf{M}_{\xi^{(n)=0}}(x_1) = w_1^{(s_n \cdots s_1)}$  auch das zugehörige Wort (I.78) positiv ist, folgt aus (I.82) unmittelbar, daß letztere durch eine *zyklische Permutation* (bzw. mittels einer “*Shift-Operation*”) aus vorherigem erzeugt werden kann, d.h. nur dann folgt aus (I.82) das entsprechende Pendant von Theorem I.4 auf S. 47 für die NTs. Da sowohl  $w_i^{(k)}$  als auch  $u_k$ , positiv sind, ergibt sich aus (I.82) die bemerkenswerte Tatsache, daß  $w_1^{(s_n \cdots s_1)}$  genau dann ein Element des Orbits  $\mathfrak{O}[w_1^{(s_n^0 \cdots s_1^0)}]$  ist, wenn der Vertextyp  $\tau(w_1^{(s_n \cdots s_1)}) = \sigma^{(i'_1 j'_1)}$  positiv ist, d.h. wenn  $i'_1, j'_1 > 0$  gilt. Wir müssen somit, im Unterschied zum  $\Phi$ -Fall, nun auch Vertizes vom gemischtem Typ explizit betrachten. Es stellt sich die Frage, *welche* der Folgen (I.78) die gesuchten Elemente des Orbits  $\mathfrak{O}[w_1^{(s_n^0 \cdots s_1^0)}]$  liefern.

Um die aufgetauchten Fragen zu klären, wollen wir unsere bisher benutzten Strategien für die Konstruktion des gesuchten  $\Gamma$ -Graphen  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  in einigen Punkten modifizieren. Da die NTs Substitutionen von Worten statt Buchstaben sind, beginnen wir damit, unseren Betrachtungen statt eines *einzelnen*, bezüglich der Wirkung der Substitutionen “invarianten” Alphabetes  $\mathcal{A}_\Lambda$ , nun für jede Folge  $(\mathbf{M}_k)_{k \geq 1}$  positiver NTs die **Folge von Alphabeten**

$\sigma_p^\Gamma$	p= 1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
	$(\alpha, \alpha^\pm)$	$(\alpha, \delta)$	$(\alpha^\pm, \alpha)$	$(\alpha^\pm, \beta)$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$(\beta, \alpha^\pm)$	$(\gamma, \beta)$	$(\gamma, \delta^\pm)$	$(\delta, \delta^\pm)$	$(\delta^\pm, \gamma)$	$(\delta^\pm, \delta)$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$
$M_{L_1}$	$(\alpha, \alpha^\pm)$	$(\gamma, \beta)$	$(\alpha^\pm, \alpha)$	$(\alpha^\pm, \beta)$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$(\beta, \alpha^\pm)$	$(\alpha, \delta)$	$(\gamma, \delta^\pm)$	$(\delta, \delta^\pm)$	$(\delta^\pm, \gamma)$	$(\delta^\pm, \delta)$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$
$M_L$	$(\alpha, \alpha^\pm)$	$(\alpha, \alpha^\pm)$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$(\beta, \alpha^\pm)$	$(\gamma, \delta^\pm)$	$(\gamma, \delta^\pm)$	$(\delta, \delta^\pm)$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$
$M_{L_L}$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$(\beta, \alpha^\pm)$	$(\alpha, \alpha^\pm)$	$(\beta, \alpha^\pm)$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$(\delta, \delta^\pm)$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$	$(\gamma, \delta^\pm)$	$(\delta, \delta^\pm)$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$
$M_S$	$(\alpha^\pm, \alpha)$	$(\delta^\pm, \gamma)$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$((\alpha^\pm, \alpha^\pm))$	$(\alpha^\pm, \beta)$	$(\alpha^\pm, \alpha)$	$(\delta^\pm, \gamma)$	$(\delta^\pm, \delta)$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$	$((\delta^\pm, \delta^\pm))$

Abbildung I.8:  $\Gamma$ -Automat zu  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_n, E_n)$  für die  $\mathcal{M}_{L_1}$ -Folge: Wertetabelle für alle auftretenden “Zustände”  $\sigma_q^\Gamma$  mit  $\sigma_q^\Gamma = \pi_{\mathfrak{G}}^\Gamma(\mathbf{M})\sigma_p^\Gamma$  für die erzeugenden Substitutionen  $\mathbf{M} \in \mathcal{A}^\Gamma$ . Der zugehörige projizierte Automat vom Typ A  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Gamma(V_\tau, E_\tau)$  ist weiter unten in Abb. I.11(b) dargestellt (Details s. Text).

$(\mathcal{A}_\Lambda^{(k)})_{k \geq 1}$ , mit  $\mathcal{A}_\Lambda^{(k)} := (w_1^{(k)}, \dots, w_\Lambda^{(k)}) = \mathbf{M}_k(w_1^{(k-1)}, \dots, w_\Lambda^{(k-1)})$  und  $\mathcal{A}_\Lambda^{(0)} := (x_1, \dots, x_\Lambda)$ , zuzuordnen und erweitern die ursprüngliche Bedeutung der dualen Buchstaben dahingehend, daß wir für jedes dieser Alphabete  $\mathcal{A}_\Lambda^{(k)}$  durch

$$\sigma^\Gamma := (\sigma^{(i_1 j_1)}, \dots, \sigma^{(i_\Lambda j_\Lambda)}), \quad \sigma^{(i_m j_m)} := \tau(w_m^{(k)}), \quad m = 1, \dots, \Lambda, \quad (\text{I.83})$$

die entsprechenden “**verallgemeinerten dualen Buchstaben**”  $\sigma^\Gamma$  einführen. Die einzelnen Symbole  $\sigma^{(i_m j_m)} \in \mathcal{A}^{(\sigma)}$  werden durch den jeweiligen Typ der Worte  $w_m^{(k)}$  (“Buchstaben” des Alphabetes  $\mathcal{A}_\Lambda^{(k)}$ !) festgelegt. Ein konkretes Beispiel findet man in Abb. I.8 dargestellt, auf das wir gleich noch näher eingehen werden. Mit diesen neuen Definitionen können wir (fast) so vorgehen, wie für den  $\Phi$ -Fall. Bei der Konstruktion der reduzierten VKV-Tripel für die NTs werden wir für die erweitert definierten dualen Buchstaben  $\sigma^\Gamma \in \mathcal{A}^{(\sigma)} \times \dots \times \mathcal{A}^{(\sigma)}$  den Index  $k$  nicht explizit anschreiben, wenn man sich über das jeweilige “aktuelle” Alphabet im Klaren ist. Es ist leicht einzusehen, daß bei der Definition der Super-Inflationen nur die Typen  $\sigma^\Gamma$  eine Rolle spielen. Man wende hierzu eine einzelne NT auf das Tupel  $\mathcal{A}_\Lambda^{(k)}$  von Worten an, welche die Rolle von Buchstaben haben, d.h. sie ist eine Substitution dieser “Wortbuchstaben”. Ersetzt man nun in Abb. I.3 (Übersetzungsregel) die Buchstaben durch die Worte aus dem entsprechenden “aktuellen” Alphabet  $\mathcal{A}_\Lambda^{(k)}$ , mit der entsprechenden Verallgemeinerung der Vertextypen gemäß  $\sigma^{(i_m j_m)} := \tau(w_m^{(k)})$ , dann besteht dieselbe Eindeutigkeit der Beziehung zwischen  $\mathcal{A}_\Lambda^{(k)}$  und  $(\mathcal{A}^{(\sigma)})^\Lambda$ , wie ursprünglich zwischen den Buchstaben aus  $\mathcal{A}_\Lambda$  und  $\mathcal{A}^{(\sigma)}$ . Damit sind wir in der Lage sämtliche reduzierten VKV-Tripel auch für den  $\Gamma$ -Fall zu bestimmen. Wir definieren einen **gewöhnlichen/virtuellen Vertex** in  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_n, E_n)$  durch

$$\sigma_{\xi^{(k)}}^\Gamma := \pi_{\mathfrak{G}}(\mathbf{M}_{\xi^{(k)}}), \quad \mathbf{M}_{\xi^{(k)}}(x_1) := \mathfrak{J}^{\xi^{(k)}} \cdot \mathbf{M}_{(s_k^0 \dots s_1^0)}(x_1)$$

$$\sigma_{\mathbb{N}, \xi^{(k)}}^\Gamma := \pi_{\mathfrak{G}}(\mathbf{M}_{(s_k \dots s_1)}), \quad \mathbf{M}_{(s_k \dots s_1)} := \mathfrak{J}_{W_{\mathbb{N}}^{(k)}} \mathbf{M}_{(s_k^0 \dots s_1^0)}, \quad \xi^{(k)} = |W_{\mathbb{N}}^{(k)}|,$$

d.h. einem gewöhnlichen Vertex kann eine zyklische Permutation von  $\mathbf{M}_{(s_k^0 \dots s_1^0)}(x_1)$  zugeordnet werden, dem virtuellen *nicht*. Erster repräsentiert ein Element aus dem Orbit  $\mathfrak{O}[w_1^{(k)}]$ ,

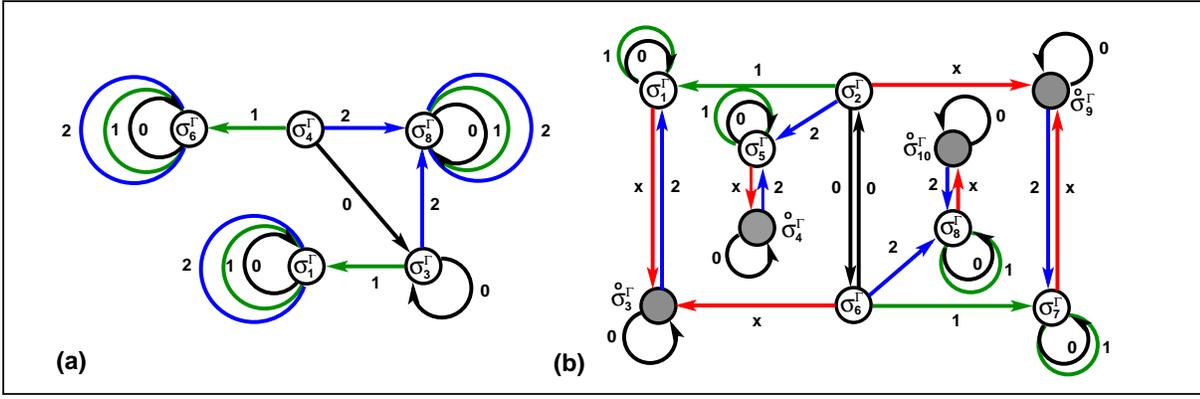


Abbildung I.9:  $\Gamma$ -Automaten  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^{\Gamma}(V_{\tau}, E_{\tau})$  vom Typ A zu  $\mathfrak{G}^{\Gamma}(V_n, E_n)$  (a) für die Fibonacci-Folge  $L^{2n}$  (Vertextypen wie in Abb. I.10(a)) und zum Vergleich für die  $\mathcal{M}_{L-1}$ -Folge in (b) (Vertextypen in Abb. I.8 definiert). Man vergleiche den Automaten in (a) mit dem in Abb. I.10(a) für die Fibonacci-Folge  $L^n$  (Details s. Text).

der zweite nicht. Er dient nur als “Übergangszustand” der notwendig ist, um vermöge einer Abfolge von elementaren NTs zu einem konkreten Element aus  $\mathcal{O}[w_1^{(k)}]$  gelangen zu können. Man beachte, daß unser Ausgangspunkt  $\mathfrak{G}^{\Phi}(V_n, E_n)$  war<sup>50</sup>, d.h. es ist natürlich  $\mathcal{M}_{(r_n \dots r_1)} \cong \mathcal{M}_{(s_n \dots s_1)}$ , aber i.a.  $\mathcal{M}_{(r_k \dots r_1)} \not\cong \mathcal{M}_{(s_k \dots s_1)}$  für  $k = 1, 2, \dots, n-1$ . Der Index  $\aleph$  möge zur Unterscheidung der verschiedenen NTs  $\mathcal{M}_{(s_k \dots s_1)}$  mit demselben  $\xi^{(k)}$  Rechnung tragen. Die Kanten in  $\mathfrak{G}^{\Gamma}(V_n, E_n)$  werden dann wieder in gewohnter Weise definiert. Es ist

$$\begin{aligned} \sigma_{\xi^{(k+1)}}^{\Gamma} &= \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{k+1, \cdot})\sigma_{\xi^{(k)}}^{\Gamma}, & \sigma_{\xi^{(k+1)}}^{\Gamma} &= \pi_{\mathfrak{G}}(\mathcal{M}_{k+1, \cdot})\sigma_{\aleph, \xi^{(k)}}^{\circ\Gamma} \quad \text{usw.}, \\ \sigma_q^{\Gamma} &= \pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\mathcal{M}_{k+1, \cdot})\sigma_p^{\Gamma}, \end{aligned} \quad (\text{I.84})$$

genau dann, wenn  $\mathcal{M}_{(s_k, s_{k-1} \dots s_1)} = \mathcal{M}_k \cdot \mathcal{M}_{(s_{k-1} \dots s_1)}$  gilt. Die Wirkung von  $\pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\cdot) : (\mathcal{A}^{(\sigma)})^{\Lambda} \rightarrow (\mathcal{A}^{(\sigma)})^{\Lambda}$  auf den Typ  $\sigma_p^{\Gamma} := (\sigma^{(i_1 j_1)}, \dots, \sigma^{(i_{\Lambda} j_{\Lambda})})$  von  $\sigma_{\xi^{(k)}}^{\Gamma}$  bzw.  $\sigma_{\aleph, \xi^{(k)}}^{\circ\Gamma}$ , mit  $\pi_{\ell}(\sigma^{(i_m j_m)}) = w_{i_m}^{(k)}$ ,  $\pi_r(\sigma^{(i_m j_m)}) = w_{j_m}^{(k)}$ , in (I.84) wird nun definiert durch<sup>38</sup>

$$\sigma_q^{\Gamma} := (\sigma^{(i'_1 j'_1)}, \dots, \sigma^{(i'_{\Lambda} j'_{\Lambda})}), \quad \pi_{\ell}(\sigma^{(i'_m j'_m)}) := w_{i'_m}^{(k+1)}, \quad \pi_r(\sigma^{(i'_m j'_m)}) := w_{j'_m}^{(k+1)}.$$

mit  $\sigma_q^{\Gamma} = \tau(\sigma_{\xi^{(k+1)}}^{\Gamma})$  bzw.  $\sigma_q^{\Gamma} = \tau(\sigma_{\aleph, \xi^{(k+1)}}^{\circ\Gamma})$ . Der erste Vertextyp ist immer positiv, während letzter immer gemischt ist, d.h. in  $\sigma_q^{\Gamma}$  ist  $\sigma^{i_1 j_1}$  gemischt, d.h. mindestens ein Index kleiner Null.

**C ▶ Beispiel (Forts.):** Mit diesen Definitionen sind wir in der Lage, die gesuchten projizierten  $\Gamma$ -Automaten  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^{\Gamma}(V_{\tau}, E_{\tau})$  für unsere Beispielfolgen zu konstruieren. Betrachten wir zunächst die  $\mathcal{M}_{L-1}$ -Folge. Für  $n \geq 2$  ist das Pendant zu  $\mathcal{A}^{\Phi}$  gerade  $\mathcal{A}^{\Gamma} = \mathcal{A}_{k \geq 1}^{\Gamma}$  mit<sup>51</sup>  $\mathcal{A}_{k \geq 1}^{\Gamma} = \{\mathcal{M}_{L-1}, \mathcal{M}_L, \mathcal{M}_{LL}, \mathcal{M}_S\}$ . Der Vertextyp  $\sigma^{\Gamma}$  der Wurzel  $\sigma_{\xi^{(0)}}$  des  $\Gamma$ -Graphen ist  $\tau(\sigma_{\xi^{(0)}}) = (\tau(w_1^{(0)}), \tau(w_2^{(0)})) \equiv (\tau(L), \tau(S)) = (\alpha, \delta)$ . In der Tabelle aus Abb. I.8 sind alle durch  $\pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\cdot)$  erzeugten Indexpaarungen eingetragen. Man erkennt, daß  $\pi_{\mathfrak{G}}^{\tau}(\cdot)\sigma^{\Gamma}$ ,  $\sigma^{\Gamma} \in \{(\alpha^{\pm}, \alpha^{\pm}), (\delta^{\pm}, \delta^{\pm})\}$  für

<sup>50</sup>Wir bezeichnen die Vertex- und Kantenmengen von  $\mathfrak{G}^{\Phi}$  genau so wie diejenigen von  $\mathfrak{G}^{\Gamma}$ . Das sollte aber keine ernstzunehmende Gefahr zu Verwechslungen darstellen.

<sup>51</sup>Für  $n = 1$  wäre  $\mathcal{A}^{\Gamma} = \{\mathcal{M}_{L-1}, \mathcal{M}_L, \mathcal{M}_{LL}\}$ .

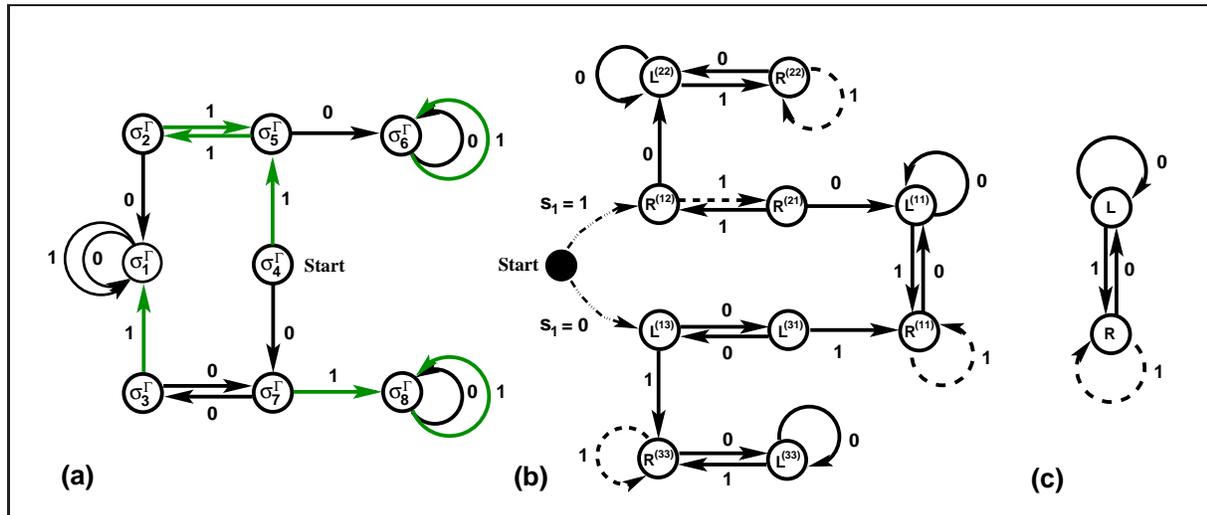


Abbildung I.10: Projizierte  $\Gamma$ -Automaten  $\mathfrak{A}^\Gamma(V_\tau, E_\tau)$  vom Typ A (a) und Typ B (b) zur Generation des  $\Gamma$ -Graphen für die Fibonacci-Folge. Man beachte, daß in der Lösung des Algorithmus (I.74)  $(r_k)_k$  jeweils  $s_{k+1} = r_{n-k}$  zu ersetzen ist (umgekehrte Reihenfolge der gesuchten NTs  $M_{k,\cdot} \in \{L, R\}$ !). Die gestrichelten Kanten in (b,c) hat man zu streichen, wenn man statt dem  $\mathfrak{G}^\Gamma$  nur an dem zugehörigen Baum  $\mathfrak{T}^\Gamma$  interessiert ist. (c) Auch hier läßt sich eine weiter vereinfachte Darstellung der Automaten zur Lösung des Kodierungsproblems finden (Details s. Text).

alle NTs aus  $\mathcal{A}^\Gamma$  wieder auf diese gemischte Vertextypen führt. Deshalb hat man in Abb. I.8 alle  $\sigma^\Gamma \in \{(\alpha_\pm^+, \alpha_\pm^+), (\delta_\pm^+, \delta_\pm^+)\}$  zu streichen. Alle in der Tabelle verbleibenden  $\sigma^\Gamma$  können durch  $\pi_\mathfrak{G}^\tau(\cdot)$  wieder auf positive Vertextypen abgebildet werden. Ihre Gesamtheit legt die Menge der projizierten VKV-Tripel  $\{L^{(11)}, L^{(26)}, L^{(33)}, \dots\}$  und damit die zugehörigen  $\mathfrak{A}^\Gamma(V_\tau, E_\tau)$  vollständig fest. Das Ergebnis für den projizierten Automat vom Typ A ist in Abb. I.9(b) zu finden.

► Analog geht man für die Fibonacci-Folge vor. Hier findet man die Vertextypen

$$\begin{aligned} \sigma_1^\Gamma &= (\alpha, \alpha), & \sigma_2^\Gamma &= (\alpha, \beta), & \sigma_3^\Gamma &= (\alpha, \gamma), & \sigma_4^\Gamma &= (\alpha, \delta) \text{ (Wurzelvertex)}, \\ \sigma_5^\Gamma &= (\beta, \alpha), & \sigma_6^\Gamma &= (\beta, \beta), & \sigma_7^\Gamma &= (\gamma, \alpha), & \sigma_8^\Gamma &= (\gamma, \gamma). \end{aligned}$$

Es treten nur positive NTs und somit nur gewöhnliche projizierte VKV-Tripel  $(\sigma_q^\Gamma, \mathbf{M}, \sigma_p^\Gamma)$  mit  $\mathbf{M} \in \{L, R\}$  auf. Beide Typen projizierter  $\Gamma$ -Automaten findet man in Abb. I.10 dargestellt. Dieser Fall läßt zur Lösung des Kodierungsproblems weitere Vereinfachungen zu (s. Abb. I.10(c)). Der Grund besteht letztlich darin, daß hier jedem  $r_k = 0$ , ( $= 1$ ) die NT  $L$ , ( $= R$ ) eineindeutig zugeordnet werden kann.

Sei  $\mathcal{S}_k = \mathcal{R}_{n-k+1}$  diejenige Menge von Zahlen, welche  $s_k = r_{n-k+1}$  in (I.71) annehmen kann. In  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_n, E_n)$  ist die Vertexmenge  $V_n$  gegeben durch

$$V_n = \bigcup_{k=1}^n \{ \pi_\mathfrak{G}(\mathbf{M}_{(s_k \dots s_1)}) \mid s_{k'} \in \mathcal{S}_{k'}, k' = 1, 2, \dots, k \} \cup \{ \mathbb{I} \}$$

und  $E_n$  ist wieder die Menge Kanten

$$E_n = \bigcup_{k=1}^n \{ (\pi_\mathfrak{G}(\mathbf{M}_{(s_k, s_{k-1} \dots s_1)}), \pi_\mathfrak{G}(\mathbf{M}_{(s_{k-1} \dots s_1)})) \mid \mathbf{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}_k^\Gamma \}.$$





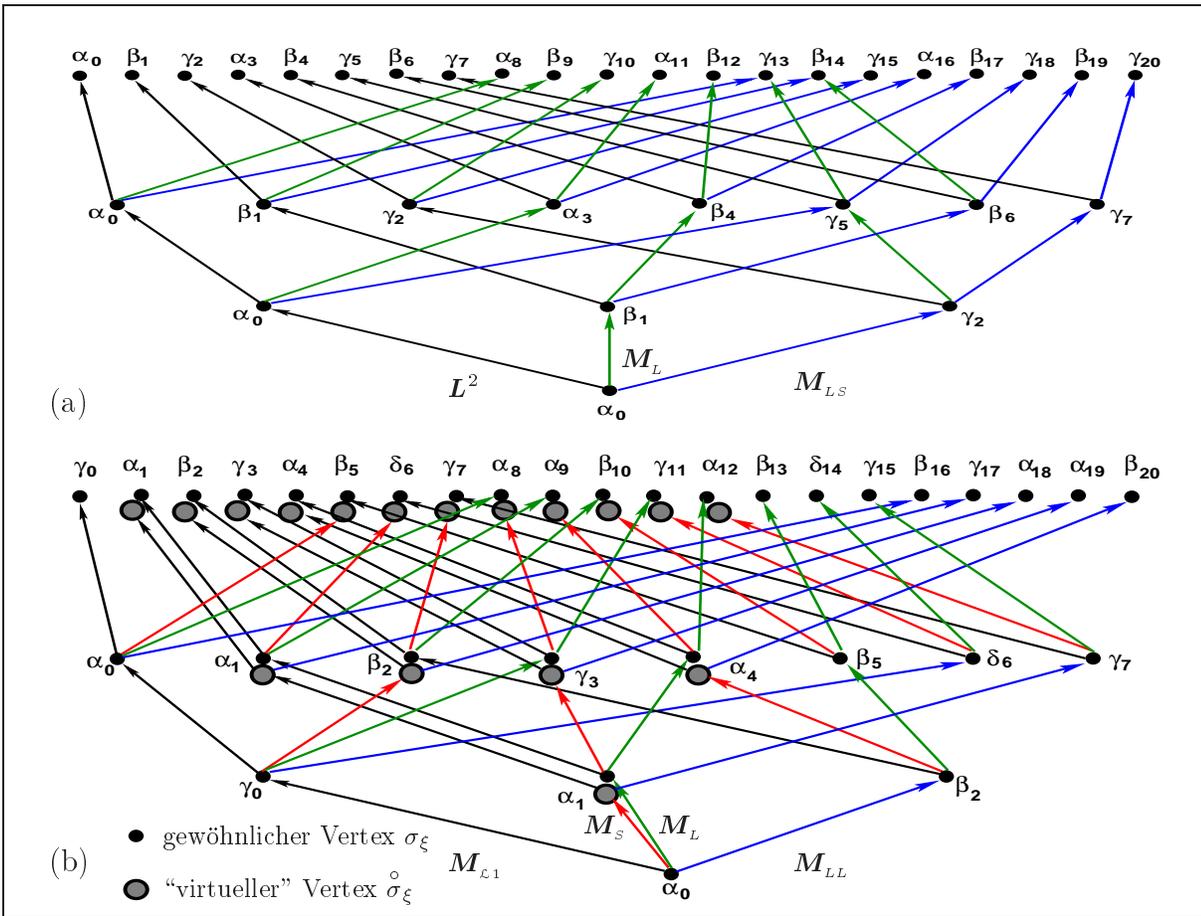


Abbildung I.12: Die ersten drei Niveaus der  $\Gamma$ -Graphen für (a) die durch die NT  $L^2$  erzeugten Approximanten der Fibonacci Folge und (b) für die durch  $L_{L1}$  erzeugten Approximanten.

mit  $W^{(k+1)} = \bar{u}_{k+1, \cdot}(w_1^{(k)}, \dots, w_\Lambda^{(k)})$ , wobei  $w_i^{(k)} = M_{(s_k^0, s_1^0)}(x_i)$  ist. Daraus folgt aber, daß

$$\begin{aligned} \xi^{(k+1)} &:= |W^{(k+1)}| = |\bar{u}_{k+1, \cdot}(w_1^{(k)}, \dots, w_\Lambda^{(k)})| + |W^{(k)}| \\ &= \xi^{(k)} + \sum_{j=1}^{\Lambda} \underbrace{\#_{x_j}(u_{k+1, \cdot}(x_1, \dots, x_\Lambda))}_{=: s_{k+1, i_k, t_{k+1, i_k}}} \cdot |w_i^{(k)}| \end{aligned} \tag{I.92}$$

mit  $f_k^{(i)} = |w_i^{(k)}|$ , und somit die Relation (I.89) tatsächlich erfüllt ist. ♣

Es ist bemerkenswert, daß schon unmittelbar aus der Struktur der Super-Inflation (I.87) für diejenigen NTs mit der zu (I.28) analogen Eigenschaft gilt, daß es eine ganze Zahl  $k_0$  derart gibt, daß für alle  $k \geq k_0$  und alle  $\xi^{(k)} \leq |w_1^{(k_0)}| - 1$  nur noch die NTs aus der Folge  $(M_k)_k$  auftreten, mit weitreichenden Konsequenzen für Konvergenzfragen, die Bedeutung von bestimmten Zyklen von RTs usw. .

☞ **Beispiel I.1 (Forts.)** Abschließend wollen wir noch die  $\Gamma$ -Graphen unserer beiden Beispielfolgen betrachten (“Inverse des  $\Phi$ -Graphen”). In Abb. I.11 ist der zu Abb. I.4

gehörende  $\Gamma$ -Graph abgebildet. Auch er weist eine hierarchische Struktur auf, allerdings haben wir gesehen, daß sich im allgemeinen Fall diese Eigenschaft in einer etwas verwickelteren Form manifestiert, als es für den  $\Phi$ -Graphen der Fall war. Zu guter Letzt sind auch noch in Abb. I.12 die beiden den in Abb. I.6 gezeigten  $\Phi$ -Graphen entsprechenden  $\Gamma$ -Graphen dargestellt. Ihre konkrete Konstruktion sollte nun aber keine Probleme mehr bereiten, so daß wir hier getrost auf weitere Details verzichten können.

Fassen wir die bisherigen Ergebnisse zusammen! Sei ein durch eine Folge  $(\mathcal{M}_k)_{k \in \mathbb{N}}$  von positiven<sup>54</sup> Substitutionen  $\mathcal{M}_k \in \mathbf{Hom}^\Phi(\mathbb{F}^+(\mathcal{A}_\Lambda))$  definiertes **DOL**-Wort

$$\omega(x_1, \dots, x_\Lambda) := \lim_{n \rightarrow \infty} w^{(n)}(x_1, \dots, x_\Lambda), \quad w^{(n)} \equiv w_{1, (r_n^0 \dots r_1^0)} := \left( \prod_{k=1}^n \mathcal{M}_k \right) (x_1), \quad (\text{I.93})$$

über einem endlichen  $\Lambda$ -Buchstaben Alphabet  $\mathcal{A}_\Lambda$  gegeben. In Theorem I.2 haben wir durch die Konstruktion des zugehörigen  $\Phi$ -Graphen gezeigt, wie man einen vollständigen Satz von Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,i,t} \in \mathcal{A}^\Phi$  gewinnt und damit *immer* die Folge der *vollständigen* Orbits  $\mathcal{O}[w^{(n)}]$  für alle  $n \in \mathbb{N}$  rekursiv konstruieren kann, d.h. wir haben für alle  $n \in \mathbb{N}$  und alle  $0 \leq \xi^{(n)} < f_n$  das entsprechende Element  $\mathcal{T}^{\xi^{(n)}}(w^{(n)}) \in \mathcal{O}[w^{(n)}]$  durch eine Folge von “elementaren” Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,i,t} \in \mathcal{A}^\Phi$  erzeugt. Theorem I.3 gibt ein Algorithmus, welcher es nun umgekehrt gestattet, bei der Vorgabe von  $(n, \xi^{(n)})$  und der das **DOL**-Wort (I.93) erzeugenden Folge von Substitutionen (oder NTs)  $(\mathcal{M}_k)_{k \in \mathbb{N}}$  eine Folge von “elementaren” Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,i,t} \in \mathcal{A}^\Phi$  zu bestimmen, so daß  $\prod_k \mathcal{M}_{k,\cdot} = \mathcal{T}^{\xi^{(n)}}(w^{(n)})$  gilt. Schließlich sehen wir, daß sich zu jedem  $\Phi$ -Graph genau ein  $\Gamma$ -Graph konstruieren läßt. Letzterer legt die abstrakten Grundlage des Konzeptes der Pfad-Renormierung vollständig fest. Damit können wir nun die in [Wal97] (bzw. in Kapitel III.2) für die Klasse der verallgemeinerten Fibonacci-Worte gefundenen Resultate auf alle **DOL**-Worte erweitern. Wir werden uns im letzten Kapitel dieser Arbeit anhand verschiedener weiterer Beispiele von der Allgemeinheit der hier vorgestellten Vorgehensweise überzeugen können.

---

<sup>54</sup>Eigentlich reicht die Forderung, daß die entsprechenden Ausgangsworte frei reduziert sein sollen für alle Betrachtungen vollständig aus.



# Kapitel II

## PHYSIKALISCHES MODELL UND 1-D TRANSPORT

Nachdem wir im ersten Kapitel die eindimensionalen geometrischen Strukturen durch das Konzept der freien Gruppen und das jeweils dazugehörige topologische dynamische System  $\Sigma = \langle \mathcal{O}[\omega], \mathcal{T} \rangle$  als entsprechendes Gruppoid der Form  $\mathcal{O}[\omega] \rtimes_{\alpha} \mathbf{G}$ , d.h. als ein bestimmtes Objekt aus der Kategorie  $\mathfrak{Spd}$ , beschrieben haben, sowie letzteres durch den “Vergiss-Funktor”  $U : \mathfrak{Spd} \rightarrow \mathfrak{Graph}$

$$U(\mathcal{O}[\omega] \rtimes_{\alpha} \mathbf{G}) \cong \mathfrak{G}^{\Phi}(V, \mathbf{E}), \quad \mathfrak{G}^{\Phi}(V, \mathbf{E}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathfrak{G}^{\Phi}(V_n, \mathbf{E}_n),$$

jeweils mit einem entsprechenden  $\Phi$ -Graphen verknüpften, wollen wir nun auf die entsprechenden Erzeugenden-Elemente<sup>1</sup>  $\hat{\mathcal{H}}_{\tilde{\omega}} \in \text{Hull}(\hat{\mathcal{H}}_{\omega})$ , mit  $\tilde{\omega} \in \mathcal{O}[\omega]$ , der jeweiligen (“konkreten”)  $C^*$ -Algebra  $\mathcal{C}(\overline{\mathcal{O}[\omega]}) \rtimes_{\alpha} \mathbf{G} \subset \mathcal{B}(\mathbb{H})$ , d.h. dem entsprechenden Objekt aus  $C^*$ - $\mathfrak{Alg}$ , in ihrer Ortsraum-Darstellung zu sprechen kommen. Wir werden uns hierbei auf die *diskrete* Ortsraum-Darstellung beschränken. Die Beziehung zur kontinuierlichen Ortsraum-Darstellung kann für das eindimensionale Problem durch die sog. Poincaré-Abbildung einzu-eins wiedergegeben werden. Darauf wollen wir in Anhang **II.A.1** zu diesem Kapitel eingehen.

Anschließend an die Besprechung der Ortsraum-Darstellung von  $\hat{\mathcal{H}}_{\omega}$ , bzw. seiner Resolventen  $\hat{\mathcal{G}}_{\omega}(z)$ , werden wir in Abschnitt **II.2** die entsprechende Kubo-Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$ , sowohl für das diskrete als auch für das kontinuierliche Modell, auf eine zur allgemein bekannten und außerordentlich nützlichen Transfer-Matrizen-Darstellung der Schrödinger-Gleichung analogen Matrizen-Darstellung bringen. Damit gelingt es uns erstmalig auch für die Kubo-Formel einen direkten Zugang zu einem Renormierungsverfahren in Analogie zur Transfer-Matrizen-Renormierung aufzuzeigen.

---

<sup>1</sup>Im Falle unbeschränkter Operatoren hat man es mit den entsprechenden Resolventen zu tun.

## II.1 Der Hamilton–Operator $\hat{\mathcal{H}}$ , seine Resolvente $\hat{\mathcal{G}}(z)$ und ihre Ortsraum–Darstellung

Die zur Einteilchen–Schrödinger–Gleichung (1), auf S. v, gehörende Poincaré–Abbildung<sup>2</sup> ist der Ausgangspunkt unserer Untersuchungen, d.h. die auf dem Intervall  $\mathbf{G} := [-M, N-1] \subseteq \mathbf{Z}$  definierte Differenzgleichung zweiter Ordnung, bzw. Scharen (Scharparameter  $\varepsilon$ ) davon, mit

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{H}}(\varepsilon)\psi)_\mu &:= t_{\mu+1}(\varepsilon)\Psi_{\mu+1} + t_\mu(\varepsilon)\Psi_{\mu-1} + \epsilon_\mu(\varepsilon)\Psi_\mu = z\Psi_\mu, \quad \mu \in \mathbf{G}, \\ \Psi_\mu^\pm(z) &= N(z)(\mathcal{P}_\mu(z) + m^\pm(z)P_\mu(z)), \end{aligned} \quad (\text{II.1})$$

(**diskrete Schrödinger–Gleichung**).  $(\Psi_\mu)_\mu$  sind die Komponenten von  $|\psi\rangle$  in der diskreten “**Ortsbasis**  $\{|\mu\rangle\}_{\mu \in \mathbf{G}}$ , mit  $\vec{\delta}_\mu \equiv |\mu\rangle := (\delta_{-M,\mu}, \delta_{-M+1,\mu}, \dots, \delta_{N-1,\mu})^\top$ . Im allgemeinen Fall gibt es zwei linear unabhängige Lösungen  $\Psi_\mu^\pm(z)$ . Die **Fundamentallösungen** von  $\hat{\mathcal{H}}$  bezeichnen wir mit  $(P_\mu)_{\mu \in \mathbf{G}}$ , wobei  $P_\mu := P_{M+\mu}^{(-M)}$  gilt, und mit  $(\mathcal{P}_\mu)_{\mu \in \mathbf{G}}$ , wobei  $\mathcal{P}_\mu := P_{M+\mu-1}^{(-M+1)}$  ist. Die Polynome in  $E$ ,  $(P_\mu^{(\nu)})_{\mu \in \mathbf{G}^+}$ ,  $\mathbf{G}^+ := [0, |\mathbf{G}| - 1] \subseteq \mathbf{Z}^+$ , sind die Lösungen der drei–gliedrigen Rekursionsgleichung

$$P_{\mu+1}^{(\nu)}(E) = s_{\mu+\nu}(E)P_\mu^{(\nu)}(E) - \tau_{\mu+\nu}P_{\mu-1}^{(\nu)}(E), \quad P_{-1}^{(\nu)} = 0, \quad P_0^{(\nu)} = \frac{1}{t_\nu},$$

mit den in (5) (s. S. vi) definierten Parametern  $s_\mu(\varepsilon)$  und  $t_\mu(\varepsilon)$ . In der diskreten Ortsdarstellung hat  $\hat{\mathcal{H}}$  je nach Randbedingung (s. unten) die Matrix–Darstellung

$$\mathcal{H}_\omega := \begin{pmatrix} \epsilon_{-M} + t_{-M}\lambda_\ell & t_{-M+1} & & & t_{-M}\xi_\ell \\ t_{-M+1} & \epsilon_{-M+1} & t_{-M+2} & & \\ & t_{-M+2} & \epsilon_{-M+2} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ & & & \epsilon_{N-2} & t_{N-1} \\ t_N\xi_r & \cdots & & t_{N-1} & \epsilon_{N-1} + t_N\lambda_r \end{pmatrix} \quad \xleftrightarrow{\xi_{\ell,r}=0} \begin{array}{c} \textcircled{\sigma_{-M} + \lambda_\ell t_{-M}} \\ t_{-M+1} \\ \textcircled{\sigma_{-M+1}} \\ t_{-M+2} \\ \textcircled{\sigma_{-M+2}} \\ \vdots \\ t_{N-2} \\ \textcircled{\sigma_{N-2}} \\ t_{N-1} \\ \textcircled{\sigma_{N-1} + \lambda_r t_N} \end{array} \quad (\text{II.2})$$

Da wir im Folgenden in  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda_{\ell,r}; \xi_{\ell,r})$  immer entweder  $\xi_{\ell,r}$  oder  $\lambda_{\ell,r}$  gleich Null setzen werden, was bekanntlich gerade der Wahl von Cauchy– bzw. Bloch–artigen Randbedingungen entspricht, werden wir die Notation  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda_\ell, \lambda_r) := \hat{\mathcal{H}}(\lambda_{\ell,r}; 0)$  und  $\hat{\mathcal{H}}(\xi_\ell, \xi_r) := \hat{\mathcal{H}}(0; \xi_{\ell,r})$  benutzen<sup>3</sup>. Für  $\lambda_{\ell,r} = \xi_{\ell,r} = 0$  ist (II.2) die allgemein bekannte tridiagonale **Jacobi–Matrix**.

In Kapitel I hatten wir die geometrischen Strukturen symbolisch durch duale Worte  $\omega \in \mathcal{A}^G$  in den Buchstaben  $y_\mu \in \mathcal{A}$  bzw. den dualen Buchstaben  $\sigma_\mu \in \{\sigma^{(ij)}\}$  beschrieben.

<sup>2</sup>Im Anhang II.A zu diesem Kapitel werden wir sehen, daß sich trotz aller Unterschiede sowohl das kontinuierliche als auch das diskrete Modell auf weiten Strecken mit ein und demselben *Algorithmus* auswerten lassen, der sich *allein* auf einer dreigliedrigen Struktur der zugrundeliegenden diskreten Gleichung stützt, ohne von der konkreten Form der Parameter selbst Gebrauch zu machen. Damit lassen sich viele Überlegungen und Resultate (bei geeigneter Modifikation) vom Tight–Binding–Modell auf die kontinuierliche Schrödinger–Gleichung übertragen.

<sup>3</sup>Zur Unterscheidung werden wir die Parameter entweder durch ein Komma oder ein Semikolon trennen.

Rechts in (II.2) ist die “**graphische Darstellung**” von  $\hat{\mathcal{H}}_\omega(\lambda_\ell, \lambda_r)$  gezeichnet, wie wir sie in dieser Arbeit gelegentlich benutzen wollen. Hierzu definieren wir durch

$$V_\omega := \{\delta_\mu \mid \mu \in \mathbb{Z}\} \quad \text{und} \quad \mathbf{E}_\omega := \{(\delta_\mu, \delta_\nu) \mid \delta_\mu = e_{\mu\nu} \cdot \delta_\nu\} \subseteq V_\omega \times V_\omega,$$

mit der Vertexmenge (“Objekte”)  $V_\omega$  und der Menge  $\mathbf{E}_\omega$  aller gerichteten Kanten (“Morphismen”)  $e_{\mu\nu}$  den **Graph**  $\omega(V_\omega, \mathbf{E}_\omega)$ , wobei wir  $e_{\mu\nu} = ()$  (“leeres Wort”) setzen, wenn zwischen dem Vertex  $\delta_\mu$  und  $\delta_\nu$  keine Verbindung existiert. Wir werden im Folgenden ausschließlich **symmetrische Graphen** betrachten, d.h. wir setzen ausschließlich  $e_{\mu\nu} = e_{\nu\mu}$  für alle Indizes  $\mu$  und  $\nu$  voraus. Betrachtet man die Vertizes als Objekte, dann bedeutet dies, daß der jeweilige Morphismus (“Kante”) zwischen den entsprechenden Objekten ein Isomorphismus ist, also gerade der einem entsprechend gewählten Gruppoid<sup>4</sup> via Vergiss–Funktoren zugrundeliegende Graph. Zwei verschiedene Vertizes sollen maximal durch *eine*<sup>5</sup> (nach beiden Seiten gerichtete) Kante miteinander verbunden sein. Ein Vertex kann natürlich auch mit sich selbst verbunden sein.

Da  $\ell_2$  separabel ist, läßt sich ein linearer Operator für alle  $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}}) \subseteq \ell_2$  in der Form<sup>6</sup>

$$\hat{\mathcal{H}}_\omega |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad \hat{\mathcal{H}}_\omega = \sum_{\mu, \nu \in \mathbb{Z}} \mathcal{H}_{\mu\nu} |\mu\rangle \langle \nu|, \quad (\text{II.3})$$

schreiben. Es ist  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}}_\omega) := \{|\psi\rangle \in \mathbb{H} \mid \hat{\mathcal{H}}_\omega |\psi\rangle \in \mathbb{H}\}$  der **Wertebereich** (engl. “*domain*”) von  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$ .  $(\mathcal{H}_{\mu\nu})$  ist die  $\ell_2$ –**Darstellung** von  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$  in  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}}_\omega)$  oder auch eine **Matrix–Darstellung** von  $\omega := \omega(V_\omega, \mathbf{E}_\omega)$ .

◻ ► Die gerade dargestellte Konzeption läßt sich natürlich unmittelbar dahingehend erweitern, daß man in (II.3) diejenigen Matrixelemente einander gleich setzt, welche im Sinne der starken Topologie hinreichend nahe beieinander liegen. In einem weiteren Schritt setzt man alle hinreichend kleine  $\mathcal{H}_{\mu\nu}$  gleich Null oder erweitert gar (II.3) derart, daß immer noch  $\|\hat{\mathcal{H}}' - \hat{\mathcal{H}}\| < \epsilon$  hinreichend klein ist, aber nun für das neue  $\hat{\mathcal{H}}'$  via der Abbildung  $\Upsilon$  ein vereinfachter bzw. erst jetzt renormierbaren Graph  $\omega(V_\omega, \mathbf{E}_\omega)$  existiert. Exemplarisch sei die in [Bel86] präsentierte Feshbach–Transformation von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  auf die zugehörige Tight–Binding–“Darstellung”

<sup>4</sup>Dieser stellt somit die Verallgemeinerung des Konzeptes der freien Gruppe dar, während das im ersten Kapitel betrachtete Gruppoid  $\mathcal{O}[\omega] \rtimes_\alpha \mathcal{G}$  das Konzept der auf einer freien Gruppe erklärten Automorphismengruppe entsprechend verallgemeinert.

<sup>5</sup>D.h. wir wollen den Verbindungen zwischen zwei Vertizes keine *inneren* Freiheitsgrade (“*Farben*”) zugestehen, da wir hier weder an Multi–Orbital–Modellen noch an wechselwirkenden Systemen interessiert sind.

<sup>6</sup>Statt der “Ortsraum–Darstellung” kann man natürlich im Sinne der zweiten Quantisierung die “N–Darstellung” zugrunde legen (hier steht N für den Teilchenzahl–Operator  $\hat{N} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$  [Ree72–I, S. 141ff.]). Dann entsprechen den Ket–Vektoren gewisse Hermit’sche Funktionen (kohärente Zustände). Wichtig im Sinne einer *diskreten* Ortsraum–Renormierung ist nur, daß sich eine *abzählbare* Basis finden läßt. Hierbei ist es nur von nachgeordneter Bedeutung, daß wir hier nur eindimensionale Strukturen betrachten. Formal kann man im Folgenden überall mit der Entsprechungsregel  $|\mu\rangle \langle \nu| = (|\mu\rangle \langle \text{vac}|) (|\text{vac}\rangle \langle \nu|) \leftrightarrow e_\mu^\dagger e_\nu$  in den Formalismus der **zweiten Quantisierung** und somit in das entsprechende Teilchenbild übergehen (vgl. hierzu z.B. [Tay2002, Kap. 2.2f. & 3.1]). Obwohl die Fockraum–Darstellung und der damit verbundenen formalen Struktur der physikalischen Theorie im Rahmen der hier vorgestellten Pfad–Renormierung von großem Interesse ist, wollen wir sie in dieser Arbeit nicht benutzen (s. aber [Wal2003]).

genannt. Im graphischen Bild bedeutet dies, daß durch die Feshbach–Transformation die komplizierte 2–D graphische Darstellung von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{akP}}$  näherungsweise auf eine einfachere 1–D graphische Darstellung  $\omega_{1d}(V_\omega, \mathbf{E}_\omega)$  abgebildet wird. Hier sind nun die Renormierungstransformationen äquivalent zu den einfachen Substitutionen  $\mathcal{M}^{-1}$  aus Kapitel I.

Die Eigenlösungen der diskreten Schrödinger–Gleichung sind für endliches  $\mathbf{G}$  Elemente des Prä–Hilbert–Raumes  $\ell_{2,0}$  aller *endlichen* Folgen<sup>7</sup>. Ist  $|\mathbf{G}|$  beliebig groß, aber endlich, so hat  $\hat{\mathcal{H}}$  offensichtlich ein rein diskretes Spektrum und einen vollständigen Satz von  $\ell_2$ –normierbarer Eigenvektoren. Sei im Folgenden  $\mathbb{H} = \ell_2(\mathbf{G}, m_\mu)$  der (mit einem Gewicht  $\{m_\mu\}_{\mu \in \mathbf{G}}$  versehene) Hilbert–Raum aller (endlichen wie unendlichen) quadratsummablen Folgen mit dem **Skalarprodukt**<sup>8</sup>

$$\langle \phi | \psi \rangle_{\mathbb{H}} := \sum_{\mu \in \mathbf{G}} \Phi_\mu^* \Psi_\mu m_\mu < \infty, \quad \mathbf{G} = \mathbf{Z}^\pm \text{ oder } \mathbf{Z}, \quad (\text{II.4})$$

und der **Norm**  $\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle_{\mathbb{H}}}$ .  $m_\mu$  spielt die Rolle einer diskreten Verteilungsfunktion. Es ist  $\ell_2(\mathbf{G}) = \ell_2(\mathbf{G}, 1)$ .

◻ ► Das kontinuierliche Pendant zu  $\ell_2(\mathbf{Z})$  ist  $L^2(\mathbb{R}, d\mu(x))$ , mit der Maßfunktion  $d\mu(x)$ . Das Skalarprodukt ist durch  $\int_{\mathbb{R}} \Phi^*(x) \Psi(x) d\mu(x)$  definiert. Man kann zeigen, daß beide Räume normisomorph zueinander sind [Heu86].

Im allgemeinen Fall ist  $\hat{\mathcal{H}}$  weder beschränkt, noch besitzt er (selbst wenn er beschränkt ist) einen *vollständigen* Satz von Eigenfunktionen *in*  $\mathbb{H}^\times = \mathbb{H}$  (d.h.  $\mathbb{H}$ –normierbare Funktionen), wenn das zugehörige Spektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}})$  stetige Anteile besitzt, d.h. kein reines Punktspektrum ist. Ein hermitischer Operator, der auf ganz  $\mathbb{H}$  definiert ist, ist notwendigerweise ein beschränkter Operator<sup>9</sup>. Dies bedeutet umgekehrt, daß der Wertebereich  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$  eines allgemeinen hermitischen Operators  $\hat{\mathcal{H}}$  nur eine dichte Teilmenge des Hilbert–Raumes  $\mathbb{H}$  umfaßt und der adjungierte Operator einen Wertebereich hat, der echt größer ist als  $\mathbb{H}$ . Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen kann für diesen Fall die Dirac’sche Darstellung (“*Bra/Ket*–Darstellung”) der Quantenmechanik, auch für Operatoren, deren Spektrum nicht ausschließlich ein Punktspektrum ist, durch das Konzept der Gelfand’schen Raumtripel<sup>10</sup>

$$\Phi \subset \mathbb{H} \subset \Phi^\times \quad (\text{II.5})$$

(“**rigged Hilbert–Space**” = RHS–Formalismus) korrekt beschrieben werden. Hierbei ist  $\Phi$  entweder ein abzählbar–normierter Hilbert–Raum [Gel65–IV] oder ein (gewichteter) Hilbert–Raum positiver Norm [Ber68].  $\Phi^\times$  ist der entsprechende duale Raum<sup>11</sup>. Im all-

<sup>7</sup>Das sind diejenigen unendlichen Folgen  $(\Psi_\mu)_{\mu \in \mathbb{N}}$ , für die *fast alle* Elemente gleich Null sind.

<sup>8</sup>Es ist  $\mathbf{Z}^+ := \mathbb{N}_0 \equiv \{0, 1, 2, \dots\}$  und  $\mathbf{Z}^- := -\mathbb{N} \equiv \{-1, -2, -3, \dots\}$ .

<sup>9</sup>Dies besagt der Satz von **Hellinger und Toeplitz** [Ree72–I, S. 84]. Außerdem ist ein hermitischer Operator abschließbar [Ree72–I].

<sup>10</sup>S. z.B. [Gel65–IV, Ber68, Boh89, Boh98], eine sehr schöne, gut lesbare und mit konkreten Beispielen versehene Arbeit ist die Dissertation von R. de la Madrid [Mad2001]. In [Wal2003] findet man die wichtigsten Tatsachen zum Thema kurz zusammengestellt.

<sup>11</sup>Zu den drei verschiedenen Räumen in (II.5) gehören drei verschiedene Topologien  $\mathfrak{T}_{\Phi^\times} \preceq \mathfrak{T}_{\mathbb{H}} \preceq \mathfrak{T}_\Phi$ , wovon aber nur  $\mathfrak{T}_{\mathbb{H}}$  eine metrische (gleichförmige) Topologie ist, während  $\mathfrak{T}_\Phi$  und  $\mathfrak{T}_{\Phi^\times}$  lokal–konvexe (punktweise) Topologien sind. Die auf dem Basisraum  $\Phi$  erklärte Topologie  $\mathfrak{T}_\Phi$  ist am stärksten (oder am feinsten, d.h. sie hat die meisten offenen Mengen) von allen. So folgt z.B. aus der  $\mathfrak{T}_\Phi$ –Konvergenz einer (verallgemeinerten) Folge, daß sie auch  $\mathfrak{T}_{\mathbb{H}}$ –konvergent ist, aber i.a. nicht umgekehrt, d.h.  $\mathfrak{T}_{\mathbb{H}}$  ist gröber (schwächer) als  $\mathfrak{T}_\Phi$ . Die schwächste Topologie ist  $\mathfrak{T}_{\Phi^\times}$ .

gemeinen erklärt man einen aperiodischen Operator durch eine Folge endlicher Operatoren. Konvergiert diese Folge in der Norm–Topologie  $\mathfrak{T}_{\mathbb{H}}$ , so ist der Grenzwert notwendigerweise ein kompakter Operator [Ree72–I]. Da die uns interessierenden Operatoren nicht immer kompakt sind, ist man i.a. gezwungen, Konvergenzfragen in  $\Phi$  im Rahmen der lokal–konvexen starken Operator–Topologie abzuhandeln<sup>12</sup>. In dem uns konkret interessierenden Fall wollen wir uns im jeweils passenden topologischen Raum aus der Kette topologischer Inklusionen<sup>13</sup>

$$\ell_{2,0}^{\times}(\mathbf{G}) \supseteq \mathfrak{s}^{\times} \supseteq \ell_2\left(\mathbf{G}, \frac{1}{m_{\mu}}\right) \supseteq \ell_2^{\times}(\mathbf{G}) = \ell_2(\mathbf{G}) \supseteq \ell_2(\mathbf{G}, m_{\mu}) \supseteq \mathfrak{s} \supseteq \ell_{2,0}(\mathbf{G}),$$

bewegen, wobei der Fréchet–Raum  $\langle \mathfrak{s}, \rho_s \rangle$  durch

$$\mathfrak{s} = \left\{ \Psi \mid \lim_{\mu \rightarrow \infty} \mu^p \Psi_{\mu} = 0, \forall p \in \mathbb{N} \right\}, \quad \rho_s(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{\mu} \frac{1}{2^{|\mu|}} \frac{|x_{\mu} - y_{\mu}|}{1 + |x_{\mu} - y_{\mu}|},$$

mit der Metrik  $\rho_s(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  definiert wird. Konkret wählt man den Basisraum  $\Phi$  derart, daß  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$  topologisch zwischen  $\mathbb{H}$  und  $\Phi$  zu liegen kommt, d.h. es soll gelten  $\Phi \subseteq \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}}) \subseteq \mathbb{H}$ , wobei natürlich  $\Phi$  möglichst nahe an  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$  sein soll, da man andernfalls mögliche Lösungen “verschenkt”<sup>14</sup>. Die Räume links von  $\ell_2(\mathbf{G})$  sind die jeweiligen konjugierten Räume zu den rechts stehenden. Im Folgenden werden wir für die diskrete Schrödinger–Gleichung v.a.  $\Phi = \ell_{2,0}(\mathbf{G})$  als Basisraum benutzen. Für die kontinuierliche Schrödinger–Gleichung wählt man als Basisraum  $\Phi$  i.a. den Schwartz’schen Raum  $\mathcal{S}(\mathbb{R})$  der  $C^{\infty}$ –Funktionen und den Hilbert–Raum  $\mathbb{H} = L^2(\mathbb{R})$ . Der Dualraum  $\mathcal{S}^{\times}(\mathbb{R})$  ist bekanntlich gerade der Raum der temperierten Distributionen [Ree72–I, S. 133ff.]. Das diskrete Pendant zu Letzterem ist der Raum<sup>15</sup>  $\mathfrak{s}$ .

Ist  $\hat{\mathcal{H}}^+ := \hat{\mathcal{H}}|_{\Phi}$ , die Restriktion von  $\hat{\mathcal{H}}$  auf  $\Phi$ , ein zyklischer<sup>16</sup>, wesentlich selbstadjungierter und  $\mathfrak{T}_{\Phi}$ –stetiger Operator, dann besitzt er die folgende **verallgemeinerte Spektralzerlegung  $\hat{\mathcal{E}}(E)$  des Einselements**<sup>17</sup>

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{E_n \in \sigma_{pp}} \langle E_n | \psi \rangle_{\mathbb{H}} |E_n\rangle + \int_{\sigma_{\text{cont}}} \sum_{i=1}^{N_E} \langle E^{(i)} | \psi \rangle_{\mathbb{H}} |E^{(i)}\rangle d\rho(E) \\ &=: \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{\mathcal{E}}(E) |\psi\rangle \quad \text{für alle } |\psi\rangle \in \Phi, \end{aligned} \tag{II.6}$$

wobei  $d\rho(E)$  eine eindeutig auf  $\sigma_{\text{cont}}(\hat{\mathcal{H}})$  (= kontinuierliches Spektrum) definierte Verteilungsfunktion und  $\langle \cdot | \cdot \rangle_{\mathbb{H}}$  das auf  $\mathbb{H}$  erklärte Skalarprodukt ist.  $\hat{\mathcal{E}}(E) := \hat{\mathcal{E}}_{(-\infty, E]}$  ist ein auf den Borel–Mengen von  $\mathbb{R}$  definiertes operatorwertiges Borel–Maß [Ree72–I].

<sup>12</sup>Die nötigen Einzelheiten findet man in [Wal2003] zusammengefaßt.

<sup>13</sup>S. hierzu z.B. [Wal2003], oder die entsprechende einschlägige Literatur. Wir vermerken hier nur, daß  $\ell_{2,0} \subset \mathfrak{s} \subset \ell_p \subset \mathfrak{e}_0 \subset \ell_{\infty}$  gilt, wobei  $\ell_{2,0}$  dicht in  $\ell_p$ ,  $p < \infty$  (bezüglich der  $\|\cdot\|_p$ –Norm) und in  $\mathfrak{e}_0 := \{(\psi_{\mu})_{\mu} \mid \lim_{\mu \rightarrow \infty} \psi_{\mu} = 0\}$  (bezüglich der  $\|\cdot\|_{\infty}$ –Norm) liegt [Ree72–I, S. 69].

<sup>14</sup>Man sieht hier unmittelbar, daß die konkrete Wahl des Basisraumes  $\Phi$  der Wahl geeigneter Randbedingungen entspricht.

<sup>15</sup>D.h. die oben genannte “ $N$ –Darstellung” von  $\mathcal{S}(\mathbb{R})$  [Ree72–I, S. 141ff.].

<sup>16</sup>Es ist  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}$  in  $\ell_2(\mathbb{Z}^{\pm})$  und  $\hat{\mathcal{H}}$  (Hamburger–Fall) in  $\ell_2(\mathbb{Z}) = \ell_2(\mathbb{Z}^+) \oplus \ell_2(\mathbb{Z}^-)$  ein zyklischer Operator.

<sup>17</sup>Gelfand–Maurin’sches nukleares Spektral–Theorem, s. [Gel65–IV], [Boh89, S. 24 ff.].

► Für den speziellen Fall, daß sämtliche Eigenvektoren  $\mathbb{H}$ -normierbar sind, ist natürlich  $\Phi^\times = \mathbb{H} = \Phi$  und man kann in (II.4) in vertrauter Weise  $m_\mu = 1$  für alle  $\mu$  setzen. Die zugehörigen Eigenwerte definieren das sog. Punktspektrum. Zu dem kontinuierlichen Spektrum, bestehend aus dem singular-stetigen und absolut-stetigen Spektrum, gehören Eigenfunktionen, die nicht  $\mathbb{H}$ -normierbar<sup>18</sup> sind. Ein **verallgemeinerter Eigenvektor** ist *per definitionem* das anti-lineare *Funktional*  $\ell(\phi) := \langle \phi | \psi_\ell \rangle_{\mathbb{H}}$  über  $\Phi$ , welches der Gleichung  $\ell(\hat{\mathcal{H}}^+ \phi) = E \ell(\phi)$ , d.h.

$$\ell((\hat{\mathcal{H}}^+ - E)\phi) \equiv \langle (\hat{\mathcal{H}}^+ - E)\phi | \psi_\ell \rangle_{\mathbb{H}} = 0, \quad \text{für alle } |\phi\rangle \in \Phi,$$

genügt<sup>19</sup>, wobei  $|\psi_\ell\rangle \in \Phi^\times$  das erzeugende Element von  $\ell(\cdot)$  ist. Da  $\Phi$  per Konstruktion dicht in  $\Phi^\times$  liegt und  $\hat{\mathcal{H}}^\times \ell(\phi) = \ell(\hat{\mathcal{H}}^+ \phi)$  gilt, kann man auch schreiben<sup>19</sup>

$$\hat{\mathcal{H}}^* |E_n\rangle = E_n^* |E_n\rangle \quad \text{und} \quad \hat{\mathcal{H}}^\times |E^{(i)}\rangle = E |E^{(i)}\rangle, \quad i = 1, \dots, N_E \leq \infty,$$

mit  $|E_n\rangle \in \mathbb{H}$  und  $|E^{(i)}\rangle \in \Phi^\times \setminus \mathbb{H}$ , sowie dem Entartungsgrad  $N_E$ . Aus dieser Konstruktion ergibt sich, daß jeder *verallgemeinerte* (d.h. nicht  $\mathbb{H}$ -normierbare) Eigenvektor von  $\hat{\mathcal{H}}^*$  ein *gewöhnlicher* Eigenvektor von  $\hat{\mathcal{H}}^\times$  in  $\Phi^\times$ , d.h.  $\Phi^\times$ -normierbar ist. Da  $\Phi^\times$  in den uns interessierenden Fällen separabel ist, ist die Menge der linear unabhängigen Eigenvektoren  $|E^{(i)}\rangle$  zu einem gegebenen Eigenwert  $E$  (Entartung) abzählbar. Die Bedeutung der geschilderten Herangehensweise liegt darin begründet, daß obwohl  $\hat{\mathcal{H}}$  in  $\mathbb{H}$  *unbeschränkt* sein kann, die zugehörigen Operatoren  $\hat{\mathcal{H}}^+$  in  $\Phi$  (bzw.  $\hat{\mathcal{H}}^\times$  in  $\Phi^\times$ ) per Konstruktion der zugehörigen (nuklearen) Räume immer *stetige Operatoren* sind [Boh89].

Die Operatoren  $\hat{\mathcal{H}}_\pm$  sind selbstadjungiert in  $\mathbb{H} = \ell_2(\mathbb{Z}^\pm)$  [Ber68, S. 503 ff.]. Deshalb existiert jeweils ein eindeutiges Spektral-Maß  $\rho_\pm(E)$ . Die Eigenlösungen  $|\psi^\pm\rangle$  von  $\hat{\mathcal{H}}_\pm$  genügen nun für  $\rho_\pm$ -fast alle  $E \in \mathbb{R}$  der Abschätzung (s. [Ber68, S. 360 ff.] oder [Pas92, S. 296/396])

$$|\Psi_\mu^\pm(E)| \leq c(E, \delta)(1 + |\mu|)^{\delta+1/2}, \quad \mu \in \mathbb{Z}^\pm, \quad \text{mit } \delta > 0,$$

d.h. die **verallgemeinerten Eigenfunktionen** von  $\hat{\mathcal{H}}_\pm$  in  $\Phi^\times \setminus \mathbb{H}$  sind (im Gegensatz zu den *gewöhnlichen*, exponentiell abfallenden Eigenlösungen aus  $\mathbb{H}$ ) polynomial im “Ort”  $\mu$  beschränkt<sup>20</sup>. *Das Spektrum von  $\hat{\mathcal{H}}_\pm$  ist somit der Abschluß der Menge von Energiewerten  $E \in \mathbb{R}$ , für die die Schrödinger-Gleichung polynomial gebundene Lösungen besitzt*

<sup>18</sup>Ein einfaches Beispiel sind die *verallgemeinerten* Eigenwerte des Impuls-Operators  $\hat{p}$  in  $L^2(\mathbb{R})$ . Die zugehörigen verallgemeinerten Eigenfunktionen  $\Psi(x) = e^{ikx}$  liegen bekanntlich nicht in  $L^2(\mathbb{R})$ . Man kann aber eine Folge von Wellenpaketen  $\Psi^{(n)}(x) \in L^2(\mathbb{R})$  finden, die  $e^{ikx}$  für  $n \rightarrow \infty$  approximieren, so daß, wie erwartet,  $k \in \sigma_{\text{ac}}(\hat{p}) = \mathbb{R}$  gilt [His96, S. 71]. Die Bloch’schen Eigenfunktionen sind ebenso Beispiele nicht- $\ell_2$ -normierbarer Eigenfunktionen. Nach dem **Weyl’schen Kriterium** [Ree72-I, S. 237] ist für einen selbstadjungierten, beschränkten Operator  $\hat{\mathcal{H}}^*$  genau dann  $E \in \sigma_{\text{ess}}(\hat{\mathcal{H}}^*)$ , wenn in  $\Phi$  eine Folge  $(|\Psi^{(n)}\rangle)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}}^*)$  mit  $|\Psi^{(n)}\rangle \in \Phi$  und  $\|\Psi^{(n)}\|_\Phi = 1$  derart existiert, daß bezüglich der Topologie  $\mathfrak{T}_\Phi$  auf  $\Phi$  die Folge  $(\hat{\mathcal{H}} - E)^* |\Psi^{(n)}\rangle \xrightarrow{s} 0$  sowohl stark (d.h.  $E$  ist ein gewöhnlicher oder verallgemeinerter Eigenwert) als auch  $|\Psi^{(n)}\rangle \xrightarrow{w} 0$  schwach konvergiert (d.h. anschaulich, daß dieselbe Folge  $(|\Psi^{(n)}\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$  in  $\Phi^\times$  gegen einen Vektor  $|\Psi\rangle \in \Phi^\times \setminus \Phi$  konvergiert, der orthogonal auf ganz  $\Phi$  steht).

<sup>19</sup>Ist  $|\psi_\ell\rangle$  ein *gewöhnlicher* Eigenvektor, d.h. ist er aus  $\mathbb{H}$ , dann ergibt sich aus (II.1)  $\langle (\hat{\mathcal{H}}^+ - E)\phi | \psi_\ell \rangle_{\mathbb{H}} = \langle \phi | (\hat{\mathcal{H}}^+ - E)^* \psi_\ell \rangle_{\mathbb{H}} = 0$ . Da  $\Phi$  dicht in  $\mathbb{H}$  liegt, folgt daraus  $(\hat{\mathcal{H}}^+)^* |\psi_\ell\rangle = E^* |\psi_\ell\rangle$  die gewöhnliche Eigenwertgleichung.

<sup>20</sup>Als ein konkretes Beispiel wollen wir [Koh86-I] zitieren. Dort wird gezeigt, daß für das *tight-binding*-Modell für die Standart Fibonacci-Folge für den Eigenwert  $E = 0$  gilt  $\Psi_\mu \sim \mu^\beta$  mit  $\beta = \ln R / \ln \sigma_G^3$ , wobei  $R = t_S / t_L$  und  $\sigma_G^3$  ein Reskalierungsparameter ist.

[Ber68, Sim82–1]. Aus dieser Tatsache heraus, kann man in (II.4)  $m_\mu = (1 + |\mu|)^{1+2\delta}$ ,  $\delta > 0$  mit  $\sum_{\mu \in \mathbb{Z}^\pm} 1/p_\mu < \infty$  wählen<sup>21</sup>.

Eine Spektraltheorie von Operatoren auf topologischen Räumen, welche keine Hilbert-Räume sind, ist aus vielen Gründen heraus problematisch. Der wohl wichtigste Ausweg besteht darin, nicht die Hamilton-Operatoren selbst, sondern die zugehörigen Resolventen zu betrachten<sup>22</sup>. Die **Resolvente**

$$\hat{\mathfrak{G}}(z) \equiv (z - \hat{\mathfrak{H}})^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z - E} d\hat{\mathfrak{E}}(E)$$

des selbstadjungierten (beschränkten oder unbeschränkten<sup>23</sup>) Operators  $\hat{\mathfrak{H}}$  auf dem Hilbert-Raum  $\mathbb{H}$  ist für alle  $z \in \rho(\hat{\mathfrak{H}})$  ein *beschränkter*<sup>24</sup> und holomorpher Operator [Kat95, S. 174]. Für die Schrödinger-Gleichung (II.16) lautet die **Dyson-Gleichung** in der diskreten Ortsdarstellung

$$(z - \epsilon_\mu) \tilde{G}_{\mu,\nu}(\lambda_{\ell,r}; z) = \delta_{\mu,\nu} + t_\mu \tilde{G}_{\mu-1,\nu}(\lambda_{\ell,r}; z) + t_{\mu+1} \tilde{G}_{\mu+1,\nu}(\lambda_{\ell,r}; z), \quad \mu, \nu \in \mathbf{G}, \quad (\text{II.7})$$

mit

$$\tilde{G}_{\mu\nu}(\lambda_{\ell,r}; z) := \langle \hat{\mathfrak{G}}(\lambda_{\ell,r}; z) \vec{\delta}_\mu | \vec{\delta}_\nu \rangle, \quad \hat{\mathfrak{G}}(\lambda_{\ell,r}; z) = (z - \hat{\mathfrak{H}}(\lambda_{\ell,r}; 0))^{-1},$$

und den Randbedingungen  $\tilde{G}_{-M-1,\nu} = \tilde{G}_{\nu,-M-1} = 0$  und  $\tilde{G}_{N,\nu} = \tilde{G}_{\nu,N} = 0$ . Seien  $|\tilde{\psi}^{(i)}\rangle$ ,  $i = 1, 2$ , zwei Lösungen<sup>25</sup> der Schrödinger-Gleichung (II.16), welche den Randbedingungen

$$\tilde{\Psi}_N^{(1)} = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{\Psi}_{-M-1}^{(2)} = 0 \quad (\text{II.8})$$

genügen mögen. Dann ist

$$\tilde{G}_{\mu\nu}(\lambda_{\ell,r}; z) = \frac{1}{W(z)} (\Theta_{\mu-\nu} \tilde{\Psi}_\mu^{(1)} \tilde{\Psi}_\nu^{(2)} + \Theta_{\nu-\mu} \tilde{\Psi}_\nu^{(1)} \tilde{\Psi}_\mu^{(2)}), \quad (\text{II.9})$$

mit der Wronsky'schen Determinante und der diskreten Stufenfunktion

$$W \equiv W(\tilde{\Psi}_\nu^{(1)}, \tilde{\Psi}_\nu^{(2)}) := t_{\nu+1} (\tilde{\Psi}_\nu^{(1)} \tilde{\Psi}_{\nu+1}^{(2)} - \tilde{\Psi}_{\nu+1}^{(1)} \tilde{\Psi}_\nu^{(2)}),$$

$$\Theta_\alpha := \begin{cases} 1 & \text{für } \alpha \geq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},$$

für festes  $\nu \neq \mu$  offensichtlich eine Lösung der homogenen Gleichung (II.16). Daß (II.10) auch der inhomogenen Gleichung (II.7) genügt, ergibt sich aus der einfachen Tatsache, daß wegen (II.1)

$$W(\tilde{\Psi}_\mu^{(1)}, \tilde{\Psi}_\mu^{(2)}) = (z - \epsilon_\mu) \tilde{\Psi}_\mu^{(1)} \tilde{\Psi}_\mu^{(2)} - t_{\mu+1} \tilde{\Psi}_{\mu+1}^{(1)} \tilde{\Psi}_{\mu+1}^{(2)} - t_\mu \tilde{\Psi}_\mu^{(1)} \tilde{\Psi}_{\mu-1}^{(2)}.$$

<sup>21</sup>S. hierzu [Ber68, S. 359 f.], für den kontinuierlichen Fall, s. [Ber68, S. 352]. Zu einer Klassifizierung Eigenlösungen von  $\hat{\mathfrak{H}}_\omega$  im Sinne des Lebesgue'schen Zerlegungssatzes und einigen weiteren Eigenschaften verweisen wir auf die entsprechende Literatur oder auf unser kleines Brevier [Wal2003].

<sup>22</sup>Einige weitere konkrete Details hierzu findet man in unserem Brevier [Wal2003]. Erwähnt sei, daß man auf weiten Strecken auch mit der Cayley-Transformierten von  $\hat{\mathfrak{H}}$  arbeiten kann.

<sup>23</sup>In diesem Falle werden wir immer vorausgesetzt, daß er abgeschlossen und dicht auf  $\mathbb{H}$  definiert ist.

<sup>24</sup> $z \in \rho(\hat{\mathfrak{H}})$  gilt genau dann, wenn  $z - \hat{\mathfrak{H}}$ ,  $\hat{\mathfrak{H}} \in \mathcal{C}(\mathbb{H})$  (= topologischer Vektorraum der abschließbaren linearen Operatoren, s. z.B. [Kat95]), eine bijektive Abbildung von  $\mathcal{D}(\hat{\mathfrak{H}})$  auf  $\mathbb{H}$  mit *beschränkter* Inverse ist [Ree72–I, S. 253 und Anm. zu Probl. 2, S. 312].

<sup>25</sup>Die beiden Lösungen  $|\tilde{\psi}^{(i)}\rangle$ ,  $i = 1, 2$ , sind aber keine Eigenfunktionen von  $\hat{\mathfrak{H}}(\lambda_{\ell,r}; 0)$ , denn sie genügen nicht gleichzeitig den Randbedingungen (II.16), d.h. es ist  $\tilde{\Psi}_{-M-1}^{(1)}(E) \neq 0$  und  $\tilde{\Psi}_N^{(2)}(E) \neq 0$  für  $E \notin \sigma(\hat{\mathfrak{H}}(\lambda_{\ell,r}; 0))$ .

gilt. Somit ist (II.9) die allgemeine Lösung der Dyson–Gleichung (II.7). Im periodischen Falle (beliebig große Einheitszelle) gilt somit

$$\tilde{G}_{\mu\nu}(\lambda_{\ell,r}; z) = \sum_{i,j=1}^2 \mathcal{M}_{ij} P_{\mu;i} P_{\nu;j} - \frac{1}{2} \text{sign}(\mu - \nu) P_{\mu-\nu-1}^{(\nu+1)}, \quad \mu, \nu \in \mathbb{Z}, \quad (\text{II.10})$$

mit  $P_{\mu;1} := P_{\mu}$  und  $P_{\mu;2} := P_{\mu-1}^{(1)}$ , sowie

$$(M_{ij}) := \frac{t_0}{m^- - m^+} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2}(m^+ + m^-) \\ -\frac{1}{2}(m^+ + m^-) & m^+ m^- \end{pmatrix}. \quad (\text{II.11})$$

$m^{\pm}(z)$  sind die sog. Weyl’sche  $m(z)$ –Funktionen. In unserem Falle ist

$$m^+(z) := \frac{P_{N-1}^{(1)}}{P_N}, \quad m^-(z) := \frac{P_M^{(-M)}}{P_{M-1}^{(-M)}}. \quad (\text{II.12})$$

Diese Formel für die Green’sche Funktion werden wir im Folgenden allen unseren Berechnungen zugrunde legen.

Abschließend wollen wir noch eine Anmerkungen zu Konvergenzfragen anfügen. Da wir mehr an den Bulk–Eigenschaften als an möglichen Oberflächenzuständen<sup>26</sup> interessiert sind — letztere lassen sich gegebenenfalls mittels einer Störstelle im Ursprung simulieren — wollen wir in dieser Arbeit die *unendliche aperiodische* Struktur weniger als den Grenzwert einer Folge *endlicher*  $(w^{(n)})_n$  (Cauchy’sche Randbedingungen) auffassen, sondern als den<sup>27</sup> Grenzwert einer Folge (unendlicher,  $N^l = \infty$ )  $(w_{\infty}^{(n)})_n$  periodischer Strukturen mit *endlicher* Einheitszelle (Bloch’sche Randbedingung) “definieren” (s. Abb. II.1). Diese Vorgehensweise ergibt sich in natürlicher Weise aus der **verallgemeinerten Bloch–Floquet–Theorie**, die schon in der Arbeit von G. Scharf [**Sch65**] (für fastperiodische Systeme) vorgezeichnet und später v.a. durch Arbeiten von S. Kotani auf wesentlich größere Strukturklassen (inklusive ergodische Random–Systeme) erweitert wird. Für weitere Details, v.a. die Einbeziehung statistisch ungeordneter Systeme, sei auf die Originalliteratur verwiesen<sup>29</sup>. Im Gegensatz zu den gerade zitierten Arbeiten wollen wir hier das diskrete Modell untersuchen. Wir unterscheiden zwei Fälle von Randbedingungen<sup>30</sup>:

<sup>26</sup>Eine nette Untersuchung einiger Eigenschaften von Oberflächenzuständen findet man bei [**Zij2001**].

<sup>27</sup>Falls der Grenzwert (= Fixpunkt bezüglich der generierenden Substitution  $\mathfrak{M}$ ) eindeutig ist. So besitzt die Thue–Morse–Folge zwei Fixpunkte, dagegen ist z.B. der Fixpunkt der Fibonacci–Folge eindeutig.

<sup>28</sup>Daß die Eigenfunktionen zum singular–stetigen Spektrum genauso wie diejenigen des Punktspektrums nur einfach entartet sind ist ein Ergebnis von Kac et. al., s. z.B. in [**Pas92**].

<sup>29</sup>S. z.B. [**Joh82, Kot82, Kot85, Kot97**] und [**Lan91**], v.a. Kap. 6.

<sup>30</sup>Vgl. hierzu die Diskussionen in z.B. [**Ric78, 198ff.**] und [**Bim93, Kra93–I**]. Wir gehen im Folgenden von Cauchy– bzw. Dirichlet–Randbedingungen aus, welche durch sog. Herglotz–Funktionen  $m(z)$  parametrisiert werden (sog. **Titchmarsh–Weyl–Theorie**, [**Wey10, Tit46**], vgl. a. die Arbeit von C. T. Fulton [**Ful77**]). Dadurch kann dem in unserem Falle oft verwendeten operatortheoretischen Zugang zur Beschreibung von Randwertproblemen (s. z.B. [**Dun57**]) eine funktionentheoretische Alternative zur Seite gestellt, welche sich im Rahmen der Theorie Sturm–Liouvilleschen Differential– bzw. Differenzgleichungen auch noch in neuster Zeit als sehr nützlich erweist (s. z.B. [**Gil89, Ges97, Kot97**]). Außerdem läßt sie sich unmittelbar mit unseren Ausführungen zur Renormierungsgruppe in Verbindung bringen.

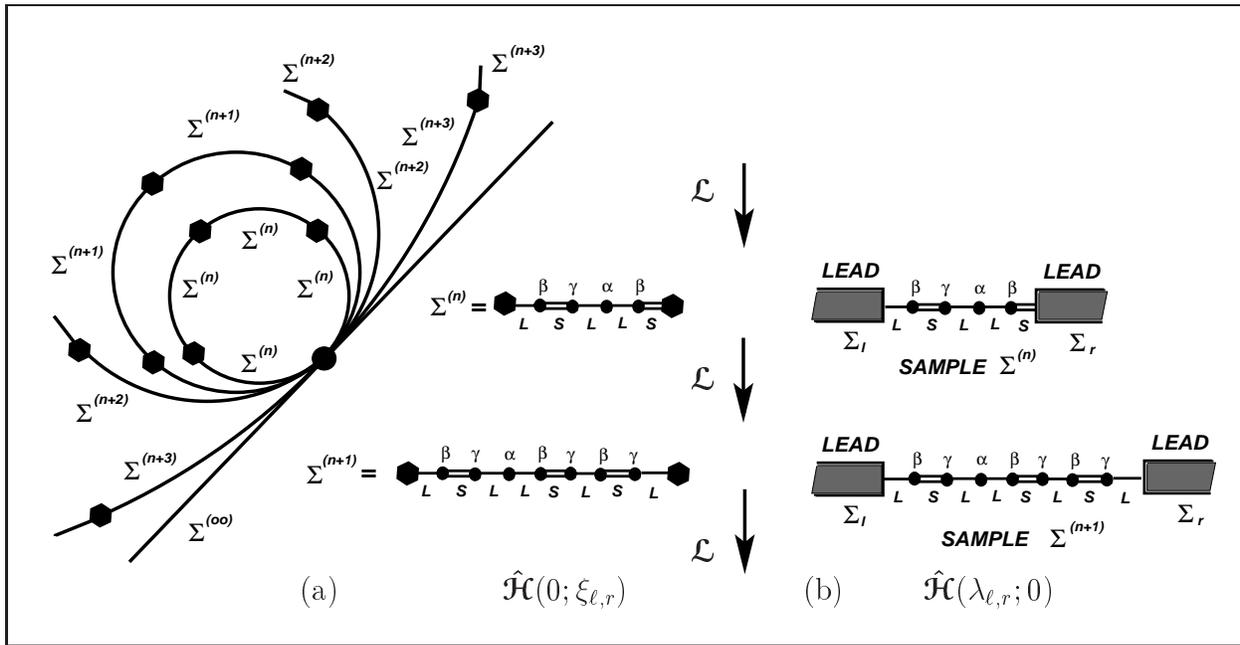


Abbildung II.1: Zwei Strukturrealisationen (vgl. Abb. 1, S. xiii): (a) Superkristall  $\Sigma^G = (\Sigma^{(n)})^{2N'}$  (periodische ( $N' = 1$ ) oder Bloch'sche ( $2N' \rightarrow \infty$ ) Randbedingungen). Die Einheitszelle  $\Sigma^{(n)}$  ist Träger der aperiodischen Struktur (hier z.B.  $w^{(4)} = LSLLS$  und  $\Sigma^{(4)} = (\beta, \gamma, \alpha, \beta)$ ). Um eine mit der Einbettungsmethode (vgl. Abb. I.1, S. 19, oder III.4, S. 136) kompatible Grenzwertbetrachtung durchzuführen, werden immer  $2 \cdot N'$  Einheitszellen betrachtet. Ist der Grenzwert aperiodisch, dann verschwindet diese Entartung im Limes  $n \rightarrow \infty$ ! D.h., das zweifach entartete Spektrum (periodischer Fall,  $\sigma_{ac}(\hat{\mathcal{H}}) \neq \emptyset$ ) geht in den nur noch einfach<sup>29</sup> entarteten Fall über für den  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}) = \sigma_{sc} \cup \sigma_{pp}$  gilt. (b)  $\Sigma^G \equiv \Sigma^{(lsl)} = \Sigma_\ell \wedge \Sigma^{(n)} \wedge \Sigma_r$  für  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}(\lambda_\ell, \lambda_r)$  (Cauchy'sche Randbedingungen). Diese Anordnung entspricht eher dem gewöhnlichen mesoskopischen Szenarium. Da wir hier im Prinzip an großen Systemen interessiert sind, werden wir uns nur mit der Realisation (a) beschäftigen.

- **Cauchy'sche Randbedingungen** (Typ I, Fall (b) in Abb. II.1): Sei  $\vartheta_\mu = \text{sign}(t_\mu)\theta_\mu \in \mathbb{R}$ ,  $\theta_\mu \in [0, \pi)$ , und

$$\sin(\vartheta_\mu)\Psi_{\mu-1} - \cos(\vartheta_\mu)\Psi_\mu = 0, \quad \mu = -M, N, \quad (\text{II.13})$$

Dann ist  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(\lambda_{\ell,r}; 0)$ ,  $\lambda_{\ell,r} \in \mathbb{R}$  mit

$$\lambda_\ell := \frac{\Psi_{-M-1}}{\Psi_{-M}} = \cot(\vartheta_{-M}) \quad \text{und} \quad \lambda_r := \frac{\Psi_N}{\Psi_{N-1}} = \tan(\vartheta_N). \quad (\text{II.14})$$

Im Folgenden setzen wir  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}$ , für den auf  $G = \mathbb{Z}^{\pm}$  erklärten Operator, und bezeichnen das zugehörige Eigenwertproblem als den **Stieltjes'scher Fall**, und wenn  $G = \mathbb{Z}$ , d.h.  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{(-\infty, \infty)}$  gilt, als den **Hamburger-Fall** (vom zugehörigen Stieltjes'schen bzw. Hamburger-Momenten-Problem).

- **Periodische bzw. Bloch'sche Randbedingung** (Typ II, Fall (a) in Abb. II.1): Seien  $\xi_{\ell,r}$  definiert durch

$$\Psi_N := \xi_r \Psi_{-M}, \quad \Psi_{N-1} := \frac{1}{\xi_\ell} \Psi_{-M-1}, \quad (\text{II.15})$$

wobei für die periodischen Randbedingungen  $\xi_{\ell,r} = 1$  zu wählen ist, und die Bloch'sche Randbedingungen durch  $|\xi_{\ell,r}| = 1$  definiert werden. Es ist  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(0; \xi_{\ell,r})$ , wobei  $\xi_r = \xi_\ell$  gelten muß.

Man hat somit das neue, zum alten natürlich äquivalente Eigenwertproblem

$$(\hat{\mathcal{H}}(\lambda_{\ell,r}; 0)\tilde{\psi})_\mu = z\tilde{\psi}_\mu, \quad \tilde{\psi}_{-M-1} = \tilde{\psi}_N = 0, \quad (\text{II.16})$$

mit den entsprechend modifizierten Randbedingungen vorliegen. Nun definiert der *Grenzwert* einer gegebenen Folge endlicher Stücke bzw. unendlicher Super-Kristalle mit entsprechender Einheitszelle zunehmender Länge die aperiodische Struktur, die sich auch als der Fixpunkt eines gegebenen, expandierenden Morphismus  $\mathcal{M}$ ,  $\mathbf{Sp}(\mathcal{S}_{\mathcal{M}}) > 1$ , auffassen läßt. Die Definition der Konvergenz via der zugehörigen Resolventenkonvergenz legt die Reihenfolge der einzelnen Limites fest. Um etwas Konkretes vor Augen zu haben, werden wir die beiden in Abb. II.1 dargestellten geometrischen Realisationen periodischer Approximanten  $w^{(n)}$  einer beliebigen (aperiodischen) Struktur  $\Sigma^{(lsl)}$  betrachten, d.h. wir betten den Approximanten entweder zwischen zwei halboneudlichen Zuleitungen  $\Sigma_\ell$  und  $\Sigma_r$  ein (Fall (a)), bzw. betrachten ihn als Einheitszelle eines "Superkristalls" im Sinne einer Ring-Geometrie (Fall (b)):

$$(a) \quad \Sigma^{(lsl)} = \Sigma_\ell \wedge \underbrace{\Sigma^{(n)} \wedge \Sigma^{(n)} \wedge \cdots \wedge \Sigma^{(n)}}_{2 \cdot N' \text{ mal}} \wedge \Sigma_r \equiv \tilde{\Sigma}^- \wedge \tilde{\Sigma}^+,$$

$$(b) \quad \Sigma^G = (\Sigma^{(n)})^{2 \cdot N'} \equiv \Sigma^- \wedge \Sigma^+.$$

Sei  $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$  eine nichtreelle Zahl. Um verschiedene Subtilitäten des thermodynamischen Limes, insbesondere bei der Berechnung der Kubo-Leitfähigkeit, zu vermeiden, legen wir bei unseren Betrachtungen immer den **thermodynamischen Limes**  $|\mathcal{G}| \rightarrow \infty$  in der *Reihenfolge*

$$\hat{\mathcal{G}}_+(z) := \text{s-lim}_{\tilde{N} \rightarrow \infty} \left( \text{s-lim}_{N' \rightarrow \infty} \hat{\mathcal{G}}_{w^{[0, \tilde{N}, N'-1]}}(z; \lambda_{\ell,r}) \right) = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \hat{\mathcal{G}}_{w^{(n)}}(z; \lambda_\ell, \lambda_+^{(n)}),$$

für den Halbachsen-Fall (Stieltjes-Fall) und für den Hamburger-Fall

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}_{(-\infty, \infty)}(z, ; \lambda_\pm^{(n)}) &:= \text{s-lim}_{\tilde{N} \rightarrow \infty} \left( \text{s-lim}_{N' \rightarrow \infty} \hat{\mathcal{G}}_{w^{[-\tilde{N}, N', \tilde{N}, N'-1]}}(z; \lambda_{\ell,r}) \right) = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \hat{\mathcal{G}}_{w^{(n)} \wedge w^{(n)}}(z; \lambda_\pm^{(n)}) \\ &= \hat{\mathcal{G}}_{w^{(n)} \wedge w^{(n)}}(z; \xi_{\ell,r}), \end{aligned}$$

zugrunde, wobei  $\lambda_\pm^{(n)}$  der Grenzwert von  $\lambda_{\ell,r}^{(n)}(N'; z)$  für  $N' \rightarrow \infty$  ist. *Danach* führt man schließlich den Grenzwert<sup>31</sup>  $\eta \rightarrow 0$ . Der hierzu gehörende Hamilton-Operator  $\hat{\mathcal{H}}_{w^{(n)} \wedge w^{(n)}}(\lambda_\pm^{(n)}; 0) \cong \hat{\mathcal{H}}_{w^{(n)} \wedge w^{(n)}}(0; \xi_{\ell,r})$  bzw. sein Halbachsenpendant  $\hat{\mathcal{H}}_{w^{(n)}}(\lambda_\ell, \lambda_+^{(n)})$  definiert den Begriff des **periodischen Approximanten**, wie er in dieser Arbeit benutzt werden soll. Dies bedeutet für den Hamburger-Fall konkret, daß z.B. das (essentielle) elektronische Spektrum  $\sigma_{\text{ess}}(\hat{\mathcal{H}})$  der *aperiodischen* Struktur durch eine Folge von *Bandstrukturen*, d.h. durch eine Folge von *absolut stetigen* Spektren  $\sigma_{\text{ac}}(\hat{\mathcal{H}}_{w^{(n)}})$  mit in  $E$  *stetigen* Wellenzahlen [**Avr83**]

$$k^{(n)}(E) = \lim_{N' \rightarrow \infty} k_{N'}^{(n)}(E) = \lim_{\tilde{L} \rightarrow \infty} \frac{1}{2\tilde{L} + 1} \mathbf{Sp} \{ \hat{\mathcal{E}}^{(n)}(E) \}$$

<sup>31</sup>Bzw. ggf. für die Temperatur  $T \rightarrow 0$ . Ganz zum Schluß setzt man zur Bestimmung der **Gleichstromleitfähigkeit**  $\sigma_{\text{dc}} := \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(\omega)$  die Frequenz  $\omega \rightarrow 0$ . Man beachte, daß mit dieser Definition i.a. nicht  $\sigma_{\text{dc}} = \sigma(0)$  zu gelten braucht.

der entsprechenden *periodischen* Approximantenstrukturen und die Zustände  $|\psi\rangle$  durch eine Folge von Bloch-artigen Zuständen  $(|\psi_{k(n)}\rangle)_n$  angenähert wird. Letzteres ist nur dann sinnvoll, wenn man das Auftreten von diskreten Eigenwerten auch für den uns interessierenden aperiodischen Operator  $\hat{\mathcal{H}}$  ausschließen kann.

Es ist klar, daß der jeweilig konkret gewählte *Abstands-* bzw. *Umgebungsbegriff* als Maß und Kriterium für die Konvergenz und den Begriff des Fixpunktes<sup>32</sup> die zentrale Rolle spielt und verschiedene (nicht-äquivalente) Metriken bzw. Topologien zu einer voneinander abweichenden Bedeutung dieser Begriffe führt, was sich wiederum auf die physikalische Begriffsbildung auswirkt<sup>33</sup>.

◀ Für quasiperiodische Strukturen kann man den eben geschilderten Zugang als komplementär zu einer *globalen* Definition aperiodischer Struktur sehen. Man definiert hierbei die quasiperiodische Struktur als das Resultat einer Schnittes eines entsprechend eingebetteten  $d$ -dimensionalen ( $d = 1, 2, 3$ ) “*physikalischen* Raumhyperebene”  $\mathbf{E}_{\parallel}$  mit einer geeignet “dekorierten” höherdimensionalen (periodischen) Struktur. Letztere ist ein (i.a. periodischen)  $D$ -dimensionales ( $D > \dim(\mathbf{E}_{\parallel}) \equiv d$ ) Gitter, das mit irgendwelchen Atomhyperflächen gefaltet wurde (zur Konzeption der Einbettungsmethode s. z.B. [Sta99] und die dort zitierte Literatur). Es ist bemerkenswert, daß dieser “*globale*” Zugang für das konkrete Verständnis physikalischer Eigenschaften in der uns bisher zugänglichen Literatur praktisch keine Rolle spielt<sup>34</sup>.

In [Wal2003] findet man die notwendigen, allgemein bekannten Fakten zusammengestellt, die den Zusammenhang zwischen der  $\mathfrak{T}_{\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}}$ -Konvergenz  $w^{(n)} \rightarrow \omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  in  $\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  und der Operator- bzw. Resolventen-Konvergenz in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  konkretisieren. Der entscheidende Punkt ist, daß

$$\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{Z}} \rightarrow V_{\omega} \in \ell_{\infty} \quad \text{und} \quad V_{\omega} \in \ell_{\infty} \rightarrow \hat{\mathcal{G}}_{\omega}(z) = \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_0 - \hat{V}_{\omega}} \in \mathcal{B}(\ell_2)$$

für  $z \in \rho(\hat{\mathcal{H}})$  (= Resolventenmenge von  $\hat{\mathcal{H}}$ ) eine *stark*-stetige Abbildung von  $\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  ist. Hierbei ist nur der zweite Schritt nicht-trivial und wurde für den kontinuierlichen Fall z.B. in [Bel93] bewiesen. Damit gilt für jede konvergente Folge in  $\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$

$$w^{(n)} \xrightarrow{\mathfrak{T}_{\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}}} \tilde{\omega} \in \mathcal{O}[\omega] \quad \implies \quad \hat{\mathcal{G}}_{w^{(n)}}(z) \xrightarrow{\mathfrak{T}_{rs}} \hat{\mathcal{G}}_{\tilde{\omega}}(z), \quad \forall z \in \bigcap_n \rho(\hat{\mathcal{H}}_{w^{(n)}}).$$

Die Aussagekraft der starken Resolventen-Konvergenz (=  $\mathfrak{T}_{rs}$ -Konvergenz) gegenüber der Norm-Konvergenz ist in ihrer Schärfe natürlich reduziert. Die starke Operator-Konvergenz ist praktisch gesehen das Maximum dessen, was man erwarten darf. Die (kontravariante Funktor-) Abbildung

$$\mathfrak{T} : \overline{\mathcal{O}[\omega]} \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z} \rightarrow \mathcal{C}(\overline{\mathcal{O}[\omega]}) \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z}, \quad \omega \mapsto \hat{\mathcal{G}}_{\omega}(z)$$

<sup>32</sup>Ein Fixpunkt einer (stetigen) Abbildung ist eine topologische Eigenschaft (vgl. z.B. [Kei99]).

<sup>33</sup>Ein konkretes Beispiel findet man bei [Elg2001].

<sup>34</sup>Einige wenige Veröffentlichungen, in denen versucht wird den Einbettungsgedanken direkt auf die zugehörige Schrödinger-Gleichung zu übertragen, sind z.B. [DeL84, Lu87].

von  $\mathbf{Comp}\mathfrak{T}_2\mathfrak{Spd}$  in  $C^*$ -Alg “transformiert” somit die Abschließung  $\overline{\mathfrak{O}[\omega]}$  von  $\mathfrak{O}[\omega]$  bezüglich der Produkt-Topologie in  $\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  in eine (lokal-konvexe) starke Abschließung in  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$ . Die fehlende Norm-Konvergenz kann unter Umständen zu relativ dramatischen Implosionen des Spektrums führen [Ree72–I, S. 291]. Dagegen bleibt man von “explosiven” Überraschungen verschont.

## II.2 Optische Leitfähigkeit in 1-D

Dieses Kapitel ist der Untersuchung von Transporteigenschaften (Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$ ) von *Approximanten* aperiodischer Strukturen im Rahmen der linearen Antworttheorie (*Kubo-Formel* [Kub57]) gewidmet. Hierbei interessieren wir uns speziell für den in-Phase Anteil der frequenzabhängigen Antwortfunktion (dissipativer Anteil).

☞ Im Sinne der linearen Antworttheorie<sup>35</sup> entwickelt man sowohl den Hamilton-Operator,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}(t) &\equiv \hat{\mathcal{H}}(H_1^0 + h_1(t), H_2^0 + h_2(t), \dots) \\ &= \hat{\mathcal{H}}|_{h=0} + \sum_i \frac{\delta \hat{\mathcal{H}}}{\delta h_i} \Big|_{h=0} \cdot h_i(t) + \sum_{i,j} \frac{\delta^2 \hat{\mathcal{H}}}{\delta h_i \delta h_j} \Big|_{h=0} \cdot h_i(t) h_j(t) + \dots\end{aligned}$$

nach den entsprechenden Feldern  $h_\alpha(t)$ , als auch den (in unserem Falle großkanonischen) statistischen Operator<sup>36</sup>

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\rho}_n(t), \quad \hat{\rho}_n(t) = \hat{\mathbf{u}}_n(t, t_0) \hat{\rho}(t_0), \quad \hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_\beta \equiv \frac{e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N})}}{\mathbf{Sp}\{e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N})}\}},$$

wobei der Entwicklungsoperator  $\hat{\mathbf{u}}_n(t, t_0)$  durch die  $n$ -te Ordnung in den Feldern  $h_i(t)$  der Entwicklung der Integralgleichung

$$\hat{\mathbf{u}}(t, t_0) = \hat{\mathbf{u}}_0(t - t_0) - i \int_{t_0}^t \hat{\mathbf{u}}_0(t - t_0) \hat{\mathcal{L}}(t') \hat{\mathbf{u}}(t', t_0) dt', \quad \hat{\mathbf{u}}_0(t - t_0) = e^{-i\hat{\mathcal{L}} \cdot (t - t_0)},$$

gegeben ist. Hierbei gehen wir davon aus, daß der ungestörte Hamilton-Operator nicht explizit von der Zeit abhängt. Die Entwicklung des Hamilton-Operator definiert offenbar die entsprechende Entwicklung des Liouville-Operators<sup>37</sup>  $\hat{\mathcal{L}}(t) = (1/\hbar)[\hat{\mathcal{H}}(t), \cdot] = \sum_n \hat{\mathcal{L}}_n(t)$ . Damit ergibt sich für die durch äußere Felder  $h_i(t)$  induzierte, zeitliche Entwicklung von  $\hat{\mathbf{O}}$

$$\langle \hat{\mathbf{O}} \rangle(t) = \mathbf{Sp}\{\hat{\rho}(t) \hat{\mathbf{O}}\} = \langle \hat{\mathbf{O}} \rangle_\beta + \sum_{n=1}^{\infty} \langle \hat{\mathbf{O}} \rangle_n$$

<sup>35</sup>S. zu den folgenden Ausführungen z.B. [Fic90]. Man konsultiere auch den Übersichtsartikel von B. Kramer und A. MacKinnon [Kra93–II]. Ein, von dem in dieser Arbeit vorherrschenden Blickwinkel aus geschriebes, kurzes Brevier des “*State of Art*” zum Thema 1-D Transport, findet man auch im zweiten Teil von [Wal2003].

<sup>36</sup>Man beachte, daß wir hier nur stationäre Zustände betrachten, d.h. es gilt  $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_\beta$ . Nichtgleichgewichtsprozesse lassen sich bekanntlich durch den Keldysh-Formalismus beschreiben, auf den wir hier aber nicht eingehen wollen.

<sup>37</sup>Einige Eigenschaften des Liouville-Operators findet man z.B. in [Fic90, Ant98] und speziell zu den spektralen Eigenschaften verweisen wir auf [Ant97, Ant99–I].

mit  $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_\beta := \mathbf{Sp}\{\hat{\rho}_\beta \hat{\mathcal{O}}\}$  und  $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_n := \mathbf{Sp}\{\hat{\rho}_n(t) \hat{\mathcal{O}}\}$ . In erster Ordnung ergibt sich mit  $\hat{\mathcal{O}}(t) = \exp(it\hat{\mathcal{L}})\hat{\mathcal{O}} = e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}\hat{\mathcal{O}}e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}$  und

$$\hat{\mathcal{M}}_i^\dagger = -\left. \frac{\delta \hat{\mathcal{H}}}{\delta h_i} \right|_{h=0}, \quad \hat{\mathcal{L}}_1(t) = -\frac{1}{\hbar} \sum_i h_i(t) [\hat{\mathcal{M}}_i^\dagger, \cdot], \quad t \geq t_0,$$

die **Kubo–Formel** [Kub57]

$$\langle \delta \hat{\mathcal{O}} \rangle(t) := \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle(t) - \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_\beta = \int_{-\infty}^t \sum_i h_i(t) \chi_i(t-t'),$$

für die Suszeptibilität<sup>38</sup> (retardierte Matsubara–Green’sche Funktion)

$$\chi_i(t) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [\hat{\mathcal{M}}_i^\dagger, \hat{\mathcal{O}}(t)] \rangle_\beta = -\beta \Theta(t) \langle\langle \delta \hat{\mathcal{M}}_i | \hat{\mathcal{L}} \delta \hat{\mathcal{O}}(t) \rangle\rangle_\rho, \quad (\text{II.17})$$

bzw. ihrer Laplace–Transformierte (mit  $z = \omega + i\eta$ )

$$\chi_i(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^\infty \chi_i(t) e^{izt} dt = \beta \langle\langle \delta \hat{\mathcal{M}}_i | \hat{\mathcal{G}}_<(\omega) \hat{\mathcal{L}} \delta \hat{\mathcal{O}} \rangle\rangle_\rho, \quad \hat{\mathcal{G}}_<(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega + i\eta + \hat{\mathcal{L}}}, \quad (\text{II.18})$$

wobei bei der zweiten Gleichung in (II.17) das schon auf Seite xiv eingeführte Mori’sche Skalarprodukt (8) benutzt wurde<sup>39</sup>.

Wir wollen das zugrundeliegende Modell kurz konkret beschreiben. Ausgangspunkt ist der das Gesamtsystem beschreibende Hamilton–Operator (mit Coulomb–Eichung)

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{tot}}(t) &= \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} A(x, t) \right)^2 + U(x) = \hat{\mathcal{H}}|_{A(x,t)=0} + \hat{\mathcal{H}}_1(A(x, t)) + o(2), \\ \hat{\mathcal{H}}_1(A(x, t)) &= -\frac{1}{c} A(x, t) \hat{\mathbf{J}}(x) \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

(sog. **diamagnetische Koppelung** des Feldes an das System). Wir wählen die Eichung des Vektorpotentials derart, daß der Gradient des zugehörigen skalaren Potentials verschwindet. Dann gilt für das elektrische Feld<sup>40</sup>

$$E(x, t) = -\frac{1}{c} \partial_t A(x, t), \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} A(x, t) = 0,$$

wobei wir eine äußere Störung von der Form

$$E(x, t) = E(x) \cos(\omega t) e^{-\delta|t|}, \quad \text{mit } E(x) = E_0 \Theta(x - x_{-N}) \Theta(x_N - x)$$

wählen (mit  $N = 2N'\tilde{N}$ ). Da wir hier nur an der *frequenzabhängigen* Leitfähigkeit interessiert sind, betrachten wir nur den Grenzwert  $x_{\pm N} \rightarrow \pm\infty$  ( $= q \rightarrow 0$ ), d.h. den Fall  $E(x, t) = E_0 \cos(\omega t) e^{-\delta|t|}$ . Den konvergenzerzeugenden Faktor  $\delta$  läßt man i. a. am Ende der Rechnungen zur Herleitung der Kubo–Formel (aber *vor* einem möglichen Grenzübergang  $\omega \rightarrow 0$ ) gegen

<sup>38</sup>Offenbar gilt  $\langle\langle \hat{\mathcal{H}}_1 | i\hat{\mathcal{L}} e^{it\hat{\mathcal{L}}} | \hat{\mathcal{H}}_2 \rangle\rangle_\rho = \langle\langle \delta \hat{\mathcal{H}}_1 | i\hat{\mathcal{L}} e^{it\hat{\mathcal{L}}} | \delta \hat{\mathcal{H}}_2 \rangle\rangle_\rho$  [Fic90, S. 110].

<sup>39</sup>Außerdem verwendet man hier die sog. **Kubo–Identität**  $\beta \langle\langle \hat{\mathcal{H}}_1 | \hat{\mathcal{L}} \hat{\mathcal{H}}_2 \rangle\rangle_\rho = (1/\hbar) \langle [\hat{\mathcal{H}}_1^\dagger, \hat{\mathcal{H}}_2] \rangle_\beta$  [Fic90, S. 98].

<sup>40</sup>Vgl. z.B. [Sto88, Bar89] und [Nöc93].

Null gehen. Das Ergebnis der Berechnungen ist allgemein bekannt und soll somit nur in einer uns passend erscheinenden Form referiert werden. Für die Leitfähigkeit  $(i/\omega)\chi(\omega)$  gilt<sup>41</sup>:

$$\sigma(\omega + i\delta) = i \frac{ne^2}{m(\omega + i\delta)} + \frac{i}{\omega + i\delta} \frac{1}{L} \sum_{\alpha\beta} |J_{\alpha\beta}|^2 (f(E_\alpha) - f(E_\beta)) \cdot \frac{1}{\hbar\omega - E_{\alpha\beta} + i\delta}, \quad (\text{II.20})$$

wobei  $f(E) = (e^{\beta(E-\mu)} + 1)^{-1}$  die **Fermi–Funktion** und  $E_{\alpha\beta} = E_\alpha - E_\beta$  ist.  $J_{\alpha\beta}$  sind die Matrixelemente des Stromoperators in der Eigenbasis des Hamilton–Operators  $\hat{\mathcal{H}}$ . Der Realteil (dissipative Anteil) läßt sich in folgender Form schreiben:

$$\sigma_D(x, x'|\omega) = \Re\{\sigma(x, x'|\omega)\} = \frac{\pi}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\mathcal{E}) - f(\mathcal{E} + \hbar\omega)}{\omega} \Gamma(x, x'|\mathcal{E}, \omega) d\mathcal{E} \quad (\text{II.21})$$

mit

$$\Gamma(x, x'|\mathcal{E}, \omega) = \mathbf{Sp}\{\hat{\mathcal{J}}(x) \delta(\mathcal{E} - \hat{\mathcal{H}}) \hat{\mathcal{J}}(x') \delta(\mathcal{E} + \hbar\omega - \hat{\mathcal{H}})\}. \quad (\text{II.22})$$

Der zugehörige Imaginärteil läßt sich via Kramers–Kronig–Relation daraus ableiten.

## II.3 Kubo–Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ und $\Gamma(\mathcal{E}, \omega)$ in diskreter und kontinuierlicher Darstellung

Wir wollen uns in diesem Kapitel mit dem Realteil  $\Re\{\sigma(\omega)\}$  eingehend befassen. Dazu betrachten wir den folgenden Grenzwert

$$\begin{aligned} \Re\{\sigma(\omega)\} &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \iint_L dx dx' \Re\{\sigma(x, x'|\omega)\} \\ &= \frac{\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\mathcal{E}) - f(\mathcal{E} + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \Gamma(\mathcal{E}, \omega) d\mathcal{E}, \end{aligned}$$

mit

$$\Gamma(\mathcal{E}, \omega) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \iint_L dx dx' \Gamma(x, x'|\mathcal{E}, \omega). \quad (\text{II.23})$$

Den Ausdruck  $\Gamma(\mathcal{E}, \omega)$  werden wir nun zum einen im Rahmen der *Poincaré–Abbildung* und zum anderen für das *tight–binding* Modell konkret ausrechnen. Es wird sich zeigen, daß die zugrundeliegenden mathematischen Strukturen beider Resultate weitgehende Analogien aufweisen. Für *beide* finden wir erstmalig (vgl. Kapitel **III.2.3**) ein *Renormierungsverfahren*.

### II.3.1 $\Gamma(\mathcal{E}, \omega)$ in Poincaré–Darstellung

Wir wollen in diesem Abschnitt unsere Untersuchungen der Poincaré–Abbildung aus dem Anhang **II.A** zu diesem Kapitel wieder aufnehmen und auf die Leitfähigkeit ausdehnen. Wir werden die *Kubo–Formel* für die *kontinuierliche* Schrödinger–Gleichung (1) (s. S. v) auf

<sup>41</sup>S. z.B. [Czy2000, S. 225] oder [Fic90].

eine Form bringen, die unseren Renormierungsideen zugänglich sein wird. In der Eigenbasis  $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$  von  $\mathfrak{H}_{\text{aKP}}$  ist

$$\Gamma(x, x'|\mathcal{E}, \omega) = \iint d\alpha d\beta j_{\alpha\beta}(x)\delta(\mathcal{E} + \hbar\omega - \mathcal{E}_\beta)j_{\beta\alpha}(x')\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_\alpha),$$

mit den Matrixelementen des Stromoperators  $\hat{\mathbf{J}}(x)$

$$J_{\alpha\beta}(x) = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi(x|\mathcal{E}_\beta)\partial_x\Psi^*(x|\mathcal{E}_\alpha) - \Psi^*(x|\mathcal{E}_\alpha)\partial_x\Psi(x|\mathcal{E}_\beta)).$$

Integration liefert aufgrund der periodischen Randbedingungen, und  $\epsilon_{\mu+N} = \epsilon_\mu$  usw.,

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathcal{E}, \omega) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \iint_L dx dx' \Gamma(x, x'|\mathcal{E}, \omega) \\ &= -\left(\frac{e\hbar}{m\pi}\right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \iint_L dx dx' \mathfrak{Im}\{G_x^+(x, x'|\mathcal{E})\} \mathfrak{Im}\{G_x^+(x, x'|\mathcal{E}')\}. \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

wobei  $\mathcal{E}' = \mathcal{E} + \hbar\omega$  und  $G_x^+(x, x'|\mathcal{E}) = \partial_x G^+(x, x'|\mathcal{E})$  ist. Für die beiden linear unabhängigen Lösungen der Hill-Gleichung (1), auf S. v, gilt

$$\Psi^{(1)}(x|\mathcal{E}) = (\Psi^{(2)}(x|\mathcal{E}))^*, \quad \alpha^{(\mu)}(x|\mathcal{E}), \beta^{(\mu)}(x|\mathcal{E}) \in \mathbb{R}.$$

Dann ist

$$\mathfrak{Im}\{G^+(x, x'|\mathcal{E})\} = -i \frac{\Psi^{(1)}(x|\mathcal{E})\Psi^{(2)}(x'|\mathcal{E}) + \Psi^{(1)}(x'|\mathcal{E})\Psi^{(1)}(x|\mathcal{E})}{\det \mathbf{W}(x|\mathcal{E})}.$$

Diesen Ausdruck setzt man in (II.24) ein. Nach einiger Rechnung ergibt sich

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathcal{E}, \omega) &= \left(\frac{e\hbar}{m\pi}\right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{\mu, \nu = -N}^{N-1} \\ &\left[ \mathfrak{Im}\{G_{\mu-1, \nu-1}^+\} \left( \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu-1}^+\} \mathcal{A}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{A}_{ki}^{(\nu)} - \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu}^+\} \mathcal{A}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu-1}^+\} \mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{A}_{ki}^{(\nu)} - \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu}^+\} \mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} \right) \right. \\ &\quad \left. + \mathfrak{Im}\{G_{\mu-1, \nu}^+\} \left( \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu-1}^+\} \mathcal{A}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} - \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu}^+\} \mathcal{A}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{B}_{ki}^{(\nu)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu-1}^+\} \mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} + \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu}^+\} \mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{B}_{ki}^{(\nu)} \right) \right. \\ &\quad \left. + \mathfrak{Im}\{G_{\mu, \nu-1}^+\} \left( -\mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu-1}^+\} \mathcal{C}_{ki}^{(\mu)} \mathcal{A}_{ki}^{(\nu)} + \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu}^+\} \mathcal{C}_{ki}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu-1}^+\} \mathcal{B}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{A}_{ki}^{(\nu)} - \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu}^+\} \mathcal{B}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} \right) \right. \\ &\quad \left. + \mathfrak{Im}\{G_{\mu, \nu}^+\} \left( -\mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu-1}^+\} \mathcal{C}_{ki}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} - \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu-1, \nu}^+\} \mathcal{C}_{ki}^{(\mu)} \mathcal{B}_{ki}^{(\nu)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu-1}^+\} \mathcal{B}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{C}_{ki}^{(\nu)} + \mathfrak{Im}\{\bar{G}_{\mu, \nu}^+\} \mathcal{B}_{ik}^{(\mu)} \mathcal{B}_{ki}^{(\nu)} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{II.25})$$

wobei  $\overline{G}_{\mu,\nu}^+ = G_{\mu,\nu}^+(\mathcal{E} + \hbar\omega)$ ,

$$\mathcal{A}_{ik}^{(\mu)} = \int_{x_{\mu-1}}^{x_\mu} \alpha^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_i) \partial_x \alpha^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_k) dx, \quad \mathcal{B}_{ik}^{(\mu)} = \int_{x_{\mu-1}}^{x_\mu} \beta^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_i) \partial_x \beta^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_k) dx$$

und

$$\mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} = \int_{x_{\mu-1}}^{x_\mu} \alpha^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_i) \partial_x \beta^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_k) dx = - \int_{x_{\mu-1}}^{x_\mu} \beta^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_k) \partial_x \alpha^{(\mu)}(x|\mathcal{E}_i) dx.$$

Unter Zuhilfenahme der Dyson–Gleichung (II.7) läßt sich die Summe (II.25) auf folgende Form bringen

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathcal{E}, \omega) &= \left( \frac{e\hbar}{m\pi} \right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{\mu, \nu = -N}^{N-1} \\ &\quad \left[ (\dots) \mathfrak{S}m\{G_{\mu-1, \nu}^+\} \mathfrak{S}m\{\overline{G}_{\mu, \nu-1}^+\} + (\dots) \mathfrak{S}m\{G_{\mu+1, \nu}^+\} \mathfrak{S}m\{\overline{G}_{\mu, \nu-1}^+\} \right. \\ &\quad \left. + (\dots) \mathfrak{S}m\{G_{\mu-1, \nu}^+\} \mathfrak{S}m\{\overline{G}_{\mu, \nu+1}^+\} + (\dots) \mathfrak{S}m\{G_{\mu+1, \nu}^+\} \mathfrak{S}m\{\overline{G}_{\mu, \nu-1}^+\} \right] \\ &= \Gamma_1(\mathcal{E}, \omega) + \Gamma_2(\mathcal{E}, \omega) + \Gamma_3(\mathcal{E}, \omega), \end{aligned}$$

mit den Summanden ( $\mathcal{E}_k = \mathcal{E}_i + \hbar\omega$ )

$$\Gamma_n(\mathcal{E}_i, \omega) = \left( \frac{e\hbar}{m\pi} \right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \mathbf{Sp} \left[ \sum_{\mu, \nu = -N}^{N-1} \mathbf{\Gamma}_n^{(\mu\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) \cdot \mathbf{\Gamma}_n^{(\nu\mu)}(\mathcal{E}_k, \mathcal{E}_i) \right], \quad (\text{II.26})$$

( $n = 1, 2, 3$ ) mit den Matrizen  $\mathbf{\Gamma}_n^{(\mu\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k)$

$$\mathbf{\Gamma}_n^{(\mu\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) = \mathbf{V}_n^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) \cdot \mathfrak{S}m\{G_{\mu-1, \nu}^+(\mathcal{E}_i)\} - \mathbf{W}_n^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) \cdot \mathfrak{S}m\{G_{\mu+1, \nu}^+(\mathcal{E}_i)\}.$$

Dabei haben wir die folgenden Matrizen eingeführt.

$$\mathbf{V}_1^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) = \begin{pmatrix} \frac{t_\mu(\mathcal{E}_k)(\mathcal{A}_{ik}^{(\mu)} + \mathcal{B}_{ik}^{(\mu-1)})}{\mathcal{E}_k - \epsilon_{\mu-1}(\mathcal{E}_k)} & 0 \\ 0 & \mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.27})$$

$$\mathbf{W}_1^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) = \begin{pmatrix} -\frac{t_{\mu+1}(\mathcal{E}_k)(\mathcal{A}_{ik}^{(\mu+1)} + \mathcal{B}_{ik}^{(\mu)})}{\mathcal{E}_k - \epsilon_{\mu+1}(\mathcal{E}_k)} & 0 \\ 0 & \mathcal{C}_{ki}^{(\mu+1)} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.28})$$

sind vom *Diagonaltyp*. Dagegen sind

$$\mathbf{V}_2^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) = \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} \\ \frac{t_\mu(\mathcal{E}_k)(\mathcal{A}_{ki}^{(\mu)} - \mathcal{A}_{ik}^{(\mu)})}{\mathcal{E}_k - \epsilon_{\mu-1}(\mathcal{E}_k)} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{W}_2^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{t_{\mu+1}(\mathcal{E}_k)(\mathcal{A}_{ki}^{(\mu)} - \mathcal{A}_{ik}^{(\mu)})}{\mathcal{E}_k - \epsilon_{\mu+1}(\mathcal{E}_k)} & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_3^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{t_\mu(\mathcal{E}_k)(\mathcal{B}_{ki}^{(\mu-1)} - \mathcal{B}_{ik}^{(\mu-1)})}{\mathcal{E}_k - \epsilon_{\mu-1}(\mathcal{E}_k)} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{W}_3^{(\mu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k) &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{t_{\mu+1}(\mathcal{E}_k)(\mathcal{B}_{ki}^{(\mu)} - \mathcal{B}_{ik}^{(\mu)})}{\mathcal{E}_k - \epsilon_{\mu+1}(\mathcal{E}_k)} \\ -\mathcal{C}_{ki}^{(\mu+1)} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

vom *Nichtdiagonaltyp*.

► **C** Kommen wir auf das im Anhang **II.A.1** zu diesem Kapitel betrachteten Beispieelpotential (bestehend aus einer Folge von gewichteten Dirac'schen  $\delta$ -Funktionen, sog. Dirac-Kamm) zu sprechen. Hierfür finden wir

$$\mathcal{A}_{ik}^{(\mu)} = \frac{\mathcal{E}_k}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_k} - \frac{t_\mu(\mathcal{E}_i)t_\mu(\mathcal{E}_k)}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_k} (1 - \cos(k_i^{(\mu)}) \cos(k_k^{(\mu)})) = -\mathcal{B}_{ik}^{(\mu)},$$

wobei  $k_i^{(\mu)} = \Delta_\mu \sqrt{\mathcal{E}_i}$  gilt, und

$$\mathcal{C}_{ik}^{(\mu)} = t_\mu(\mathcal{E}_i)t_\mu(\mathcal{E}_k) \frac{\cos(k_i^{(\mu)}) - \cos(k_k^{(\mu)})}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_k} = \mathcal{C}_{ki}^{(\mu)}.$$

Für  $\omega = 0$  gilt

$$\mathcal{A}_{ii}^{(\mu)} = \frac{(t_\mu(\mathcal{E}_i))^2 (\cos(2k_i^{(\mu)}) - 1)}{4\mathcal{E}_i}, \quad \text{und} \quad \mathcal{C}_{ii}^{(\mu)} = \frac{1}{2} t_\mu(\mathcal{E}_i).$$

Nach diesen Betrachtungen zur Poincaré-Abbildung wollen wir uns nun dem Tight-Binding Modell zuwenden. Dabei werden wir auf einige interessante Analogien zu unseren bisherigen Ergebnissen stoßen. Es wird sich herausstellen, daß diese Analogien dazu führen, daß man nicht nur für das *diskrete* Modell, sondern auch für den gerade betrachteten *kontinuierlichen* Fall ein *Renormierungsverfahren* finden kann.

### II.3.2 $\Gamma(\mathcal{E}, \omega)$ in Tight-Binding-Darstellung

Betrachten wir nun den Fall des diskreten Modells. Es ist üblich (z.B. [Bar89, Kra93-I]) den Tight-Binding Stromoperator  $\hat{\mathbf{J}}_{\text{TB}}$  gemäß

$$\hat{\mathbf{J}}_{\text{TB}} = \frac{ie\hbar}{m} \sum_{\mu, \nu=-N}^{N-1} V_{\mu\nu} |\mu\rangle \langle \nu|, \quad V_{\mu\nu} = -V^{(\mu+1)} \delta_{\mu\nu-1} + V^{(\mu)} \delta_{\mu\nu+1},$$

mit  $V^{(\mu)} = t_\mu(x_\mu - x_{\mu-1})$ , zu definieren. Hierbei ist vielleicht eine Bemerkung zu den Einheiten angebracht. Die Hopping-Elemente  $t_\mu$  (ebenso wie die Energie  $E(\mathcal{E})$ ) der diskreten Schrödinger-Gleichung in der Poincaré-Darstellung haben die Dimension 1/Länge, da die entsprechenden Vorfaktoren im Potential und der Energie absorbiert wurden<sup>42</sup>. Um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wählen wir auch hier dieselben Einheiten.

<sup>42</sup>S. hierzu die Ausführungen zum Kontinuumsimes in Anhang **II.A.1**.

Für das *diskrete* Pendand zu (II.23) finden wir ( $\overline{G}_{\mu\nu} = G_{\mu\nu}(E + \hbar\omega)$ )

$$\begin{aligned}
\Gamma(E, \omega) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \mathbf{Sp} \left\{ \hat{\mathbf{J}}_{\text{TB}} \delta(E + \hbar\omega - \hat{\mathcal{H}}_{\text{TB}}) \hat{\mathbf{J}}_{\text{TB}} \delta(E - \hat{\mathcal{H}}_{\text{TB}}) \right\} \\
&= \left( \frac{e\hbar}{m\pi} \right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{\mu, \nu, \sigma, \tau = -N}^{N-1} V_{\mu\nu} \mathfrak{Sm} \{ \overline{G}_{\nu\sigma}^+ \} V_{\sigma\tau} \mathfrak{Sm} \{ G_{\tau\mu}^+ \} \\
&= \left( \frac{e\hbar}{m\pi} \right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{\mu, \nu = -N}^{N-1} \Gamma_0^{(\mu\nu)}(E + \hbar\omega) \cdot \Gamma_0^{(\nu\mu)}(E), \tag{II.29}
\end{aligned}$$

mit den *skalaren* Funktionen  $\Gamma_0^{(\mu\nu)}(E)$

$$\Gamma_0^{(\mu\nu)}(E) = V^{(\mu)} \mathfrak{Sm} \{ G_{\mu-1, \nu}^+(E) \} - W^{(\mu)} \mathfrak{Sm} \{ G_{\mu+1, \nu}^+(E) \}, \quad W^{(\mu)} := V^{(\mu+1)}.$$

Ersetzt man in (II.29)  $V^{(\mu)} \rightarrow V_0^{(\mu)} \mathbf{1}/2$  usw., so kann man (II.29) in der Form (II.26) schreiben. Wir bezeichnen deshalb (II.29) ebenfalls als “*Diagonaltyp*”. Alle im Folgenden ausgeführten Rechnungen, welche für den “*Diagonaltyp*” (vgl. (II.27) und (II.28)) gelten, sind somit wörtlich auf (II.29) anwendbar.

## II.4 Kubo–Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ in Matrizen–Form

Im Zentrum unseres Interesses steht nun der Ausdruck (II.26) bzw. (II.29). Setzt man in ihn den Ausdruck (II.10) für die Green’sche Funktion ein, so ergibt sich für  $n = 0, 1, 2, 3$  und  $|\Delta_N|, |\overline{\Delta}_N| < 2$

$$\begin{aligned}
\Gamma_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \left( \frac{e\hbar}{m\pi} \right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \mathbf{Sp} \left[ \sum_{\mu, \nu = -N}^{N-1} \Gamma_n^{(\mu\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdot \Gamma_n^{(\nu\mu)}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \right] \\
&= \left( \frac{e\hbar}{m\pi} \right)^2 \frac{\varsigma \overline{\varsigma} \Theta(2 - |\Delta_{\tilde{N}}|) \Theta(2 - |\overline{\Delta}_{\tilde{N}}|)}{\tilde{L} \sqrt{(4 - \Delta_{\tilde{N}}^2)(4 - \overline{\Delta}_{\tilde{N}}^2)}} \times \\
&\quad \times \mathbf{Sp} \sum_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu} = 0}^{\tilde{N}-1} \left\{ \chi_1 \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \cdot \overline{\mathbf{X}}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\mu})} - \varsigma \overline{\varsigma} \chi_2 \mathbf{Y}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \cdot \overline{\mathbf{Y}}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\mu})} \right\}. \tag{II.30}
\end{aligned}$$

Alle auftretenden Größen sind Funktionen in den Argumenten  $\mathcal{E}_i$  und  $\mathcal{E}_j$ . Wir wollen für alle zukünftigen Rechnungen die Schreibweisen  $f := f(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  ( $f := f(\mathcal{E}_i)$ ) bzw.  $\overline{f} := f(\mathcal{E}_k, \mathcal{E}_i)$  ( $\overline{f} := f(\mathcal{E}_j)$ ) vereinbaren. Es erweist sich hierbei als zweckmäßig, die Wurzel als positive Größe zu behandeln und ihr korrektes, energieabhängiges Vorzeichen mit der Größe  $\varsigma(E)$  separat zu bezeichnen.

Das Ergebnis (II.30) ist erklärungsbedürftig. Aufgrund der Struktur der Green’schen Funktion (II.10), sowie der periodischen Eigenschaften der Matrizen ( $\mathbf{V}_n^{(\mu)} = \mathbf{V}_n^{(\tilde{\mu})}$ , usw.), ergibt sich eine Faktorisierung der Doppelsumme über die Indizes  $\mu = \tilde{\mu} + m\tilde{N}, \nu = \tilde{\nu} + n\tilde{N}$  in *zwei* Doppelsummen, die eine über die Indizes  $\tilde{\mu}, \tilde{\nu}$ , die zweite über  $m, n$  (es sollte kaum

möglich sein im jeweiligen Kontext die Bedeutung des Index  $n$  hier mit dem Index von  $\Gamma_n$  usw. zu verwechseln). In einem nächsten Schritt haben wir die Matrizen

$$\mathbf{X}_{n,\mu}^{(\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \mathbf{W}_n^{(\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) A_{\nu+1,\mu}(\mathcal{E}_i) - \mathbf{V}_n^{(\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) A_{\nu-1,\mu}(\mathcal{E}_i) \quad (\text{II.31})$$

$$\mathbf{Y}_{n,\mu}^{(\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \mathbf{W}_n^{(\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) P_{\nu-\mu}^{(\mu+1)}(\mathcal{E}_i) - \mathbf{V}_n^{(\nu)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) P_{\nu-\mu-2}^{(\mu+1)}(\mathcal{E}_i) \quad (\text{II.32})$$

mit  $A_{\mu,\nu} = P_{N+\mu-\nu-1}^{(\nu+1)} + P_{N-\mu+\nu-1}^{(\mu+1)}$  eingeführt. Diejenigen Summen in (II.30) mit gemischt auftretenden trigonometrischen Funktionen verschwinden identisch, während für die verbleibenden Summen gilt

$$\begin{aligned} \chi_1(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \lim_{N' \rightarrow \infty} \frac{1}{2N'} \sum_{m,n=-N'}^{N'-1} \cos \bar{\phi}_{mn} \cos \phi_{mn} \\ &= \pi \sum_{p=-\infty}^{\infty} \left[ \delta(L\bar{k} - Lk - 2\pi p) + \delta(L\bar{k} + Lk - 2\pi p) \right] \\ &= \pi \sqrt{4 - \bar{\Delta}_{\tilde{N}} \Delta_{\tilde{N}}} \delta(\bar{\Delta}_{\tilde{N}} - \Delta_{\tilde{N}}), \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \chi_2(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \lim_{N' \rightarrow \infty} \frac{1}{2N'} \sum_{m,n=-N'}^{N'-1} \sin \bar{\phi}_{mn} \sin \phi_{mn} \\ &= \pi \sum_{p=-\infty}^{\infty} \left[ \delta(L\bar{k} - Lk - 2\pi p) - \delta(L\bar{k} + Lk - 2\pi p) \right] \\ &= \pi \varsigma \bar{\varsigma} \sqrt{4 - \bar{\Delta}_{\tilde{N}} \Delta_{\tilde{N}}} \delta(\bar{\Delta}_{\tilde{N}} - \Delta_{\tilde{N}}) \end{aligned}$$

mit  $\phi_{mn} = (m-n)Nk(\mathcal{E}_i)$ . Dabei haben wir benutzt, daß

$$\begin{aligned} &\lim_{N' \rightarrow \infty} \frac{1}{2N'} \sum_{m,n=-N'}^{N'-1} e^{i(\tilde{L}\bar{k} \pm \tilde{L}k)(m-n)} \\ &= \lim_{N' \rightarrow \infty} \frac{1}{2N'} \sum_{q=-N'}^{N'-1} \sum_{p=-N'-q}^{N'-1-q} e^{i(\tilde{L}\bar{k} \pm \tilde{L}k)p} = \lim_{N' \rightarrow \infty} \frac{1}{2N'} 2N' \sum_{p=-N'}^{N'-1} e^{i(\tilde{L}\bar{k} \pm \tilde{L}k)p} \\ &= 2\pi \sum_{p=-\infty}^{\infty} \delta(\tilde{L}\bar{k} \pm \tilde{L}k - 2\pi p) = 2\pi \delta(\tilde{L}k^{(k)} \pm \varsigma \bar{\varsigma} \tilde{L}k^{(i)}), \end{aligned}$$

mit

$$\tilde{L}k^{(i)} = \arccos \left( \frac{\Delta_N(\mathcal{E}_i)}{2} \right) \in [0, \pi).$$

Den Übergang von der zweiten zur dritten Zeile findet man z.B. mit [Jon66, S. 135, Gl. (29)]. Für  $\Delta_N \in (-2, 2)$  ergibt sich schließlich

$$\delta(\tilde{L}k^{(k)} - \tilde{L}k^{(i)}) = \sqrt{4 - \bar{\Delta}_{\tilde{N}} \Delta_{\tilde{N}}} \delta(\bar{\Delta}_{\tilde{N}} - \Delta_{\tilde{N}}).$$

Da  $\tilde{L}k(\mathcal{E}_i) + \tilde{L}k(\mathcal{E}_j) = 0$  genau dann gilt, wenn  $\Delta_{\tilde{N}}(\mathcal{E}_i) = \Delta_{\tilde{N}}(\mathcal{E}_j) = 2$ , fällt dieser Term für  $\Delta_{\tilde{N}} \in (-2, 2)$  weg. Man kann zeigen, daß der Fall  $\Delta_{\tilde{N}} = 2$  in der Formel (II.30) für die Leitfähigkeit durch die entsprechende Grenzwertbildung korrekt beschrieben wird. (II.30) geht somit über in

$$\Gamma_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 \pi} \frac{\varsigma \bar{\varsigma} \Theta(2 - |\Delta_{\tilde{N}}|)}{\tilde{L} \sqrt{4 - \Delta_{\tilde{N}}^2}} \delta(\bar{\Delta}_{\tilde{N}} - \Delta_{\tilde{N}}) \Xi_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \quad (\text{II.33})$$

mit ( $\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_i + \hbar\omega$ )

$$\begin{aligned} \Xi_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \frac{1}{2} \mathbf{Sp} \sum_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu}=0}^{\tilde{N}-1} \left\{ \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \cdot \bar{\mathbf{X}}_{n, \tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})} - (4 - \bar{\Delta}_N \Delta_N) \mathbf{Y}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \cdot \bar{\mathbf{Y}}_{n, \tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})} \right\} \\ &= \mathbf{Sp} \left\{ \overset{r}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \mathbf{T}^\top(\mathcal{E}_i) \overset{l}{\Theta}_n(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \mathbf{T}^\top(\mathcal{E}_j) - 2 \overset{r}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \overset{l}{\Theta}_n(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \right. \\ &\quad \left. + \overset{r}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) (\mathbf{T}^{-1}(\mathcal{E}_i))^\top \overset{l}{\Theta}_n(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) (\mathbf{T}^{-1}(\mathcal{E}_j))^\top \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II.34})$$

► Hier wurden wieder eine Reihe von Abkürzungen eingeführt, die wir der Vollständigkeit halber dem geeigneten Leser nicht vorenthalten wollen. Es ist

$$\overset{l,r}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \mathbf{A}_n^{(0)} \hat{\otimes} \left( \overset{l,r}{\mathbf{g}}_n^{(\tilde{N})} \right)^\top + \mathbf{B}_n^{(0)} \hat{\otimes} \left( \overset{l,r}{\mathbf{h}}_n^{(\tilde{N})} \right)^\top, \quad \mathbf{T}(\mathcal{E}_i) := \mathbf{T}_{0 \rightarrow \tilde{N}-1} \otimes \mathbf{1},$$

wobei das Tensorprodukt zweier Matrizen zu bilden ist, deren Komponenten im ersten Fall Matrizen (Symbol  $\hat{\otimes}$ ), im zweiten Skalare (Symbol  $\otimes$ ) sind.  $\mathbf{T}_{0 \rightarrow \tilde{N}-1}$  ist die in der Einleitung eingeführte Transfer-Matrix. Die matrizenwertige Komponenten von  $\Theta_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  sind durch

$$\begin{aligned} \overset{l}{\mathbf{g}}_{n,1}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \left( \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)} \right)_{1,1} + \left( \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)} \right)_{1,2}, & \overset{l}{\mathbf{g}}_{n,2}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \left( \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)} \right)_{1,4}, \\ \overset{l}{\mathbf{h}}_{n,1}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \left( \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)} \right)_{1,5}, & \overset{l}{\mathbf{h}}_{n,2}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \left( \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)} \right)_{1,1}, \end{aligned}$$

definiert, wobei  $\left( \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \right)_{p,q}$ ,  $p, q = 1, \dots, 5$ , die Komponenten der durch

$$\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_n^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \prod_{\tilde{\mu}=1}^{\tilde{N}} \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n, \tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \equiv \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n, \tilde{N}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n, \tilde{N}-1}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdots \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n, 1}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$$

mit

$$\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n, \tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \begin{pmatrix} \bar{s}_{\tilde{\mu}} \xi_{n, \tilde{\mu}} + 1 & \bar{\tau}_{\tilde{\mu}} \phi_{n, \tilde{\mu}} - \bar{s}_{\tilde{\mu}} \xi_{n, \tilde{\mu}} & -\bar{\tau}_{\tilde{\mu}} \phi_{n, \tilde{\mu}} & -\bar{s}_{\tilde{\mu}} \phi_{n, \tilde{\mu}} & -\bar{\tau}_{\tilde{\mu}} \xi_{n, \tilde{\mu}} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \bar{s}_{\tilde{\mu}} \mathbf{1} & -\bar{s}_{\tilde{\mu}} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\bar{\tau}_{\tilde{\mu}} \mathbf{1} \\ \xi_{n, \tilde{\mu}} & -\xi_{n, \tilde{\mu}} & \mathbf{0} & -\phi_{n, \tilde{\mu}} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

gegebenen Matrix ist. Die entsprechenden  $r$ -Vektoren  $\overset{r}{\mathbf{g}}_n^{(\tilde{N})}$  und  $\overset{r}{\mathbf{h}}_n^{(\tilde{N})}$  erhält man durch ( $k = 1, 2$ )

$$\begin{aligned} \overset{r}{\mathbf{g}}_{n,k}^{(\tilde{N})} &= \overset{l}{\mathbf{g}}_{n,k}^{(\tilde{N})}, & \overset{r}{\mathbf{h}}_{n,k}^{(\tilde{N})} &= \overset{l}{\mathbf{h}}_{n,k}^{(\tilde{N})}, & \text{für } n &= 0, 1, \\ \overset{r}{\mathbf{g}}_{n,k}^{(\tilde{N})} &= \mathcal{P} \cdot \overset{l}{\mathbf{g}}_{n,k}^{(\tilde{N})} \cdot \mathcal{P}, & \overset{r}{\mathbf{h}}_{n,k}^{(\tilde{N})} &= \mathcal{P} \cdot \overset{l}{\mathbf{h}}_{n,k}^{(\tilde{N})} \cdot \mathcal{P}, & \mathcal{P} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \text{für } n &= 2, 3. \end{aligned}$$

Weiter sind die Komponenten von  $\mathbf{A}_n^{(0)}$  und  $\mathbf{B}_n^{(0)}$  gegeben durch

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_{n,1}^{(0)} &= \frac{1}{t_0} \mathbf{V}_n^{(0)} + \frac{1}{t_1} \mathbf{W}_n^{(0)}, & \mathbf{A}_{n,2}^{(0)} &= \frac{\sigma_0}{t_0 t_1} \mathbf{V}_n^{(0)}, \\ \mathbf{B}_{n,1}^{(0)} &= \frac{\sigma_1}{t_1 t_2} \mathbf{W}_n^{(1)}, & \mathbf{B}_{n,2}^{(0)} &= \frac{1}{t_1} \mathbf{V}_n^{(1)} + \frac{1}{t_2} \mathbf{W}_n^{(1)}.\end{aligned}$$

Schließlich sind die *matrixwertigen* Komponenten von  $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n,\bar{\mu}}$  durch

$$\begin{aligned}\xi_{n,\bar{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \mathbf{W}_n^{(\bar{\mu}+1)} \cdot (s_{\bar{\mu}+1} \tau_{\bar{\mu}} \mathbb{I} + s_{\bar{\mu}-1} \mathbf{S}_n^{(\bar{\mu})} \cdot (\mathbf{R}_n^{(\bar{\mu})})^{-1}) \cdot (\mathbf{U}_n^{(\bar{\mu})})^{-1}, \\ \phi_{n,\bar{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \tau_{\bar{\mu}-1} \mathbf{W}_n^{(\bar{\mu}+1)} \cdot \mathbf{S}_n^{(\bar{\mu})} \cdot (\mathbf{V}_n^{(\bar{\mu}-1)} \cdot \mathbf{R}_n^{(\bar{\mu})})^{-1},\end{aligned}$$

definiert, mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}\mathbf{R}_n^{(\bar{\mu})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &:= (\mathbf{V}_n^{(\bar{\mu}-1)})^{-1} \cdot \mathbf{U}_n^{(\bar{\mu}-1)} - s_{\bar{\mu}-1} s_{\bar{\mu}} (\mathbf{U}_n^{(\bar{\mu})})^{-1} \cdot \mathbf{W}_n^{(\bar{\mu})}, \\ \mathbf{S}_n^{(\bar{\mu})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &:= (\mathbf{W}_n^{(\bar{\mu}+1)})^{-1} \cdot \mathbf{U}_n^{(\bar{\mu}+1)} - s_{\bar{\mu}} s_{\bar{\mu}+1} (\mathbf{U}_n^{(\bar{\mu})})^{-1} \cdot \mathbf{V}_n^{(\bar{\mu})},\end{aligned}$$

und

$$\mathbf{U}_n^{(\bar{\mu})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \tau_{\bar{\mu}} \mathbf{W}_n^{(\bar{\mu})} + \mathbf{V}_n^{(\bar{\mu})}.$$

Den Rechenschritten, die sich beim Übergang von (II.34a) nach (II.34b) ansammeln, ist der zweite Anhang zu diesem Kapitel (Anhang **II.B**) gewidmet. Der entscheidende Vorteil des von uns in (II.34b) gefundenen Ausdruckes für  $\Xi_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_k)$ , und damit der Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$ , besteht darin, daß die in (II.34b) auftretenden Matrizen  $\Theta_n$  und  $\mathbf{T}$  die Entwicklung eines *Renormierungsverfahrens* zulassen, welches wir im nächsten Kapitel vorstellen wollen.

◻ ► Wir wollen die gemachten Aussagen an der einfachsten physikalischen Situation, der rein periodischen, unendlichen *Tight-Binding*-Kette, etwas konkreter betrachten. Damit das Beispiel rechnerisch nicht zu trivial wird, nehmen wir an, daß die Einheitszelle  $\tilde{N}$  identische Plätze enthält. Dann ist die Geschwindigkeit  $v = \langle k | \hat{v} | k \rangle$ , mit  $E(k) = \epsilon - 2t \cos(k)$  und den Bloch-Zuständen  $|k\rangle$ , gegeben durch

$$\hbar v = \frac{\partial E}{\partial k} \stackrel{\pi}{=} \tilde{L} \frac{\sqrt{4 - \Delta_{\tilde{N}}^2}}{\partial_E \Delta_{\tilde{N}}} \stackrel{\pi}{=} \tilde{L} \frac{\sqrt{4 - \Delta_1^2}}{\partial_E \Delta_1},$$

Dann gilt<sup>43</sup>

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \left( \pi \delta(\omega) + \frac{i}{\omega} \right), \quad \sigma_0 = -2e^2 \int_{E \in \sigma(\mathcal{I})} |v(E)| \frac{\partial f}{\partial E} dE.$$

$f(E) = 1/(1+e^{\beta(E-\mu)})$  ist wieder die Fermi-Funktion mit  $\beta = 1/(k_B T)$ , wobei  $k_B$  die Boltzmann-Konstante und  $\mu$  das chemische Potential ist. Für  $T = 0$  ist  $\sigma_0 = ne^2/m^*$ , wobei  $n$  die Teilchendichte und  $m^*$  (in semiklassischer Näherung) die reduzierte Elektronenmasse ist [**Eco87**, S. 151 f.]. Um dies einzusehen, kann man wie folgt vorgehen. Unter Benutzung der Christoffel-Darboux'sche Formel (s. Lemma II.A.2), S. 92, und den in Lemma II.A.1 gefundenen Relationen ergibt sich ausgehend von (II.34) für  $l = x_{\bar{\mu}+1} - x_{\bar{\mu}}$ ,  $\epsilon_{\mu} = \epsilon$  und  $t_{\mu} = t$  mit leichter

<sup>43</sup>Für die frequenzabhängige Drude-Leitfähigkeit gilt bekanntlich  $\sigma(\omega) = \sigma_0/(1/\tau - i\omega)$  (s. z.B. [**Czy2000**, S. 240]). Im Grenzfall unendlicher Stoßzeit  $\tau$  ergibt sich unmittelbar obiges Ergebnis.

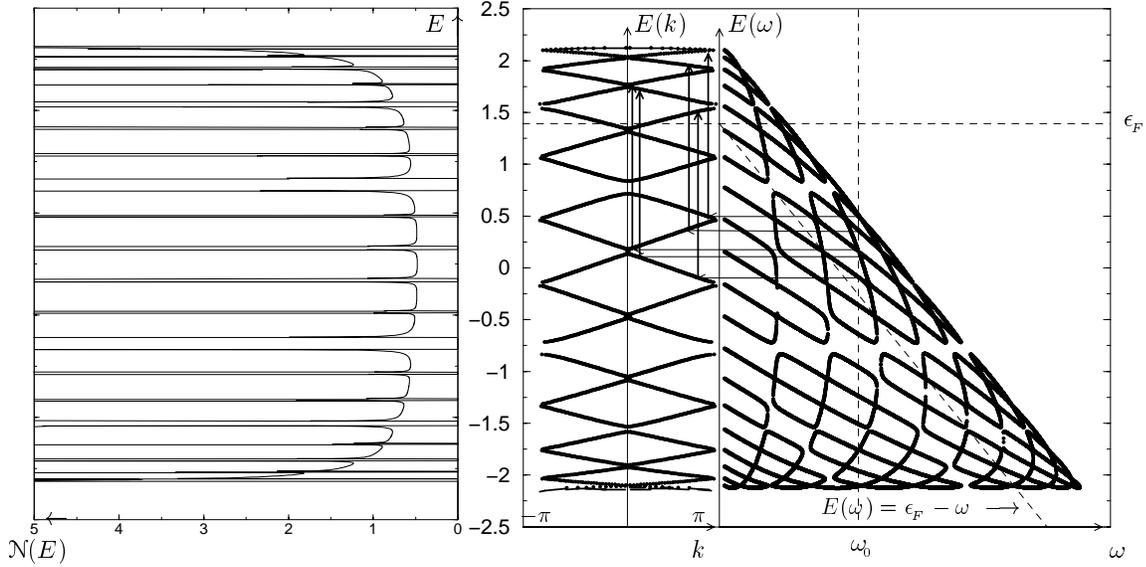


Abbildung II.2: *Links*: Zustandsdichte (DOS)  $N(E)$  für eine Fibonacci-Folge der 6-ten Generation mit  $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = \epsilon_\gamma = 0$  und  $t_L = 1.1$ ,  $t_S = 1.0$ . *Mitte*: Zugehörige Bandstruktur  $E(k)$  mit den  $f_6 = 21$  Bändern. *Rechts*: Nullstellen  $E(\omega)$  (II.37) der Gleichung  $k(E + \hbar\omega) - k(E) = 0$ . In unserem Beispiel erkennt man, daß sie für die gegebene Frequenz  $\omega_0$  und Fermi-Energie  $\epsilon_F$  sechs Lösungen im Intervall  $[\epsilon_F - \hbar\omega, \epsilon_F]$  besitzt (Schnittpunkte der  $(E(\omega), \omega)$ -Kurve mit der Geraden  $\omega = \omega_0$ ). Liegen diese Energiewerte  $E_i$  außerdem noch im Energiespektrum  $\sigma(\mathcal{H})$  von  $\mathcal{H}$  so tragen sie zur Leitfähigkeit mit dem entsprechenden Gewicht  $\Gamma(E_{1/2}(\omega_0), \omega_0)$  bei. Diejenigen Lösungen  $E_3$  aus (II.37), welche in einer Bandlücke liegen, liefern dagegen keinen Beitrag zur Leitfähigkeit.

Geduld

$$\begin{aligned}
\Xi_0(E, E + \hbar\omega) &= \sum_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu}=0}^{\tilde{N}-1} \left\{ \overline{X}_{\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} X_{\tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})} - (4 - \overline{\Delta}_{\tilde{N}} \Delta_{\tilde{N}}) \overline{X}_{\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} X_{\tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})} \right\} \\
&\stackrel{\pi}{=} (lt)^2 t^2 P_{\tilde{N}-1}(s^2 - 4) \left\{ P_{\tilde{N}-1} \sum_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu}=0}^{\tilde{N}-1} (\overline{P}_{\tilde{\mu}-\tilde{\nu}} - \overline{P}_{\tilde{\mu}-\tilde{\nu}-2}) (P_{\tilde{\mu}-\tilde{\nu}} - P_{\tilde{\mu}-\tilde{\nu}-2}) \right. \\
&\quad \left. - \overline{P}_{\tilde{N}-1} (s^2 - 4) \sum_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{P}_{\tilde{\mu}-\tilde{\nu}-1} P_{\tilde{\mu}-\tilde{\nu}-1} \right\} \\
&\stackrel{\pi}{=} 2(lt)^2 t P_{\tilde{N}-1}(s^2 - 4) \left\{ 2\overline{P}_{\tilde{N}-1} P_{\tilde{N}-1} - \overline{s} \overline{P}_{\tilde{N}-1} P_{\tilde{N}-2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{s\overline{s} - 4}{\overline{s} - s} (\overline{P}_{\tilde{N}-2} P_{\tilde{N}-1} - \overline{P}_{\tilde{N}-1} P_{\tilde{N}-2}) \right\} \frac{\overline{\Delta}_{\tilde{N}} - \Delta_{\tilde{N}}}{\overline{s} - s},
\end{aligned}$$

mit  $s = (E - \epsilon)/t$ . Setzt man hier in der ersten oder zweiten Gleichung  $\omega = 0$ , so findet man  $\Xi_0(E, E) = \sum\{\dots\} = -4\tilde{L}^2(4 - \Delta_{\tilde{N}}^2)$ , so daß (mit (II.4))

$$\Xi_0(E, E + \hbar\omega) \delta(\overline{\Delta}_{\tilde{N}} - \Delta_{\tilde{N}}) = \frac{1}{|\Delta'_{\tilde{N}}|} \delta(\hbar\omega) \Xi_0(E, E) = -4\tilde{L} \sqrt{4 - \Delta_{\tilde{N}}^2} \cdot \hbar|v| \delta(\hbar\omega).$$

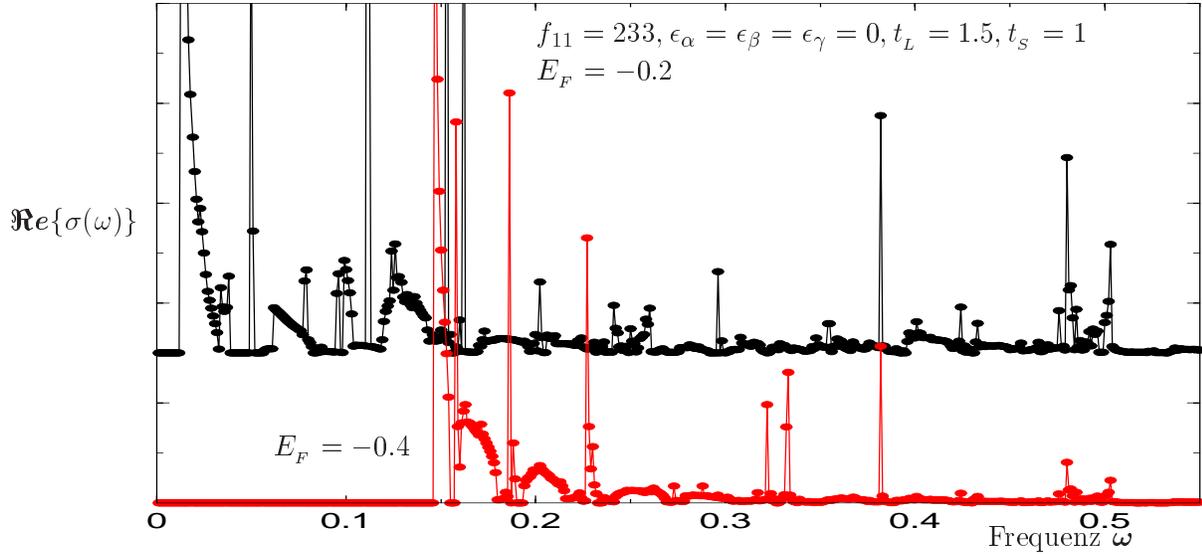


Abbildung II.3: Es ist der Realteil des Leitwertes für die Standard Fibonacci-Folge über der Frequenz  $\omega$  für zwei verschiedene Fermi-Energien  $\epsilon_F$  aufgetragen. Die zugehörige DOS findet man in Abb. III.14, S. 154.

Einsetzen in (II.33) liefert den dissipativen Anteil der Leitfähigkeit, so daß sich mittels Kramers–Kronig-Relation schließlich der Gesamtausdruck (II.4) ergibt.

Fassen wir alle bisher gemachten Schritte zusammen, so läßt sich der dissipative Anteil der Leitfähigkeit für  $T = 0$  wie folgt schreiben

$$\sigma_D(\omega) = \sigma_0 \pi \delta(\hbar\omega) - \frac{e^2}{\hbar^2 \tilde{L} \omega} \int \frac{\zeta \bar{\zeta} \Theta(2 - |\Delta_{\tilde{N}}|)}{\sqrt{4 - \Delta_{\tilde{N}}^2}} \delta(\bar{\Delta}_{\tilde{N}} - \Delta_{\tilde{N}}) \Xi(\mathcal{E}, \mathcal{E} + \hbar\omega) d\rho(\mathcal{E}) \quad (\text{II.35})$$

$$= \sigma_0 \pi \delta(\hbar\omega) - \frac{e^2}{\hbar^2 \tilde{L} \omega} \sum_{\mathcal{E}_i(\omega)} \frac{\zeta(\mathcal{E}) \zeta(\mathcal{E} + \hbar\omega) \Xi(\mathcal{E}, \mathcal{E} + \hbar\omega)}{|\Delta'_{\tilde{N}}(\mathcal{E} + \hbar\omega) - \Delta'_{\tilde{N}}(\mathcal{E})| \sqrt{4 - (\Delta_{\tilde{N}}(\mathcal{E}))^2}} \Bigg|_{\mathcal{E}=\mathcal{E}_i(\omega), \omega>0} \quad (\text{II.36})$$

Je nach Modell ist  $\Xi(\mathcal{E}, \mathcal{E} + \hbar\omega) = \Xi_0$  (tight-binding Modell) bzw.  $= \Xi_1 + \Xi_2 + \bar{\Xi}_2 + \Xi_3$  (Kronig–Penney Modell).  $\{\mathcal{E}_i(\omega)\}_i$  ist für gegebenes  $\omega$  die Menge der Nullstellen

$$\{\mathcal{E}_i(\omega)\}_i := \{\mathcal{E} \in \sigma(\hat{\mathcal{H}}) \cap [\epsilon_F - \hbar\omega, \epsilon_F] \mid \Delta_{\tilde{N}}(\mathcal{E} + \hbar\omega) - \Delta_{\tilde{N}}(\mathcal{E}) = 0\} \quad (\text{II.37})$$

und  $d\rho(\mathcal{E}) = \chi_A(\mathcal{E}) d\mathcal{E}$ , mit der charakteristischen Funktion  $\chi_A$  und  $A = \sigma(\hat{\mathcal{H}}) \cap [\epsilon_F - \hbar\omega, \epsilon_F]$ . Im Ausdruck (II.35) sei der rechte Term *per definitionem* nur für  $\omega > 0$  von Null verschieden. In Abb. II.2 findet man ein konkretes Beispiel für einen möglichen Verlauf der Kurven  $(\mathcal{E}_i(\omega), \omega)$ . Man beachte, daß sich die Linien nirgends schneiden.

In Abb. II.3 haben wir zwei numerische Beispiele für den frequenzabhängigen Leitwert für die Standard Fibonacci-Folge aufgezeichnet. Die Breite der “Frequenzbandlücke” bei  $\omega = 0$  hängt natürlich von der Breite der (Mini-)Bandlücke unter der Fermikante  $\epsilon_F$  in der Zustandsdichte ab. Führt man eine kleine, z.B. durch räumliche Unordnung induzierte, Störung

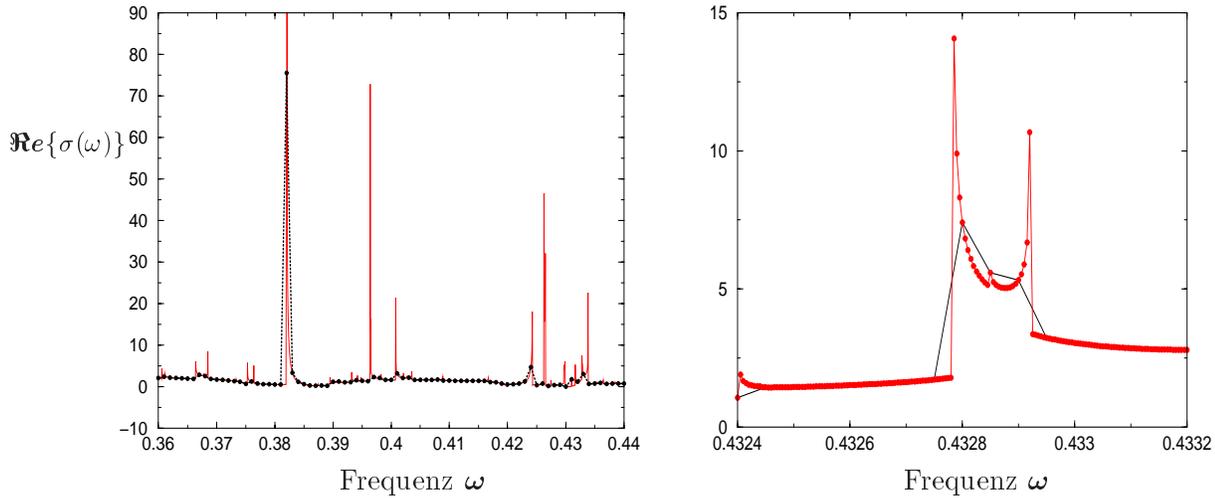


Abbildung II.4: Zwei Beispiele zur numerischen Problematik. Details s. Text.

(dissipativer Mechanismus) ein, was im einfachsten Fall durch die Addition einer komplexen, ortsunabhängigen Selbstenergie zur Energie  $E$  geschehen kann, dann erwartet man eine “Aus-schmierung” des Frequenzgaps, was für kleine “Bandlücken” ein eher metallisches Verhalten (im Sinne einer nicht-verschwindenden Gleichstrom–Leitfähigkeit) vermuten läßt, ansonsten (d.h. im Falle breiter Bandlücken) das “Halbleiter–ähnliche” Verhalten beibehält. Hierbei stellt sich natürlich die interessante Frage nach dem Einfluß des “*gap-closing*”–Phänomens, welches z.B. für die Thue–Morse–Folge auftritt, nicht dagegen im Falle der verallgemeinerten Fibonacci–Folgen (Diagonal–Modell). Man weiß aus numerischen Ergebnissen [Baa92], daß sich für die kontinuierliche Schrödinger–Gleichung die Eigenwerte um spezielle Energiewerte häufen (“clustern”). Was ist davon im Leitwert zu sehen?

Obwohl der von uns gefundene Ausdruck für die Kubo–Leitfähigkeit direkt gewissen Renormierungstransformationen zugänglich ist, wie wir im Kapitel III.2.3 konkret zeigen werden, treten gewisse Unzulänglichkeiten auf, deren Behebung zukünftiger Forschung überlassen werden muß. Das (numerische) Hauptproblem besteht im Auffinden *sämtlicher* Lösungen einer *Polynom*–Gleichung der Ordnung  $\tilde{N}$  (II.37), was im Falle  $\tilde{N} \rightarrow \infty$  natürlicherweise problematisch wird. Wie ein Blick auf Abb. II.2 lehrt, kann man auch nicht mit einer einfachen Struktur dieser Lösungen rechnen. In Abb. II.4 haben wir zwei verschiedene Auflösungsstufen aufgetragen. Die Diskrepanz ist<sup>44</sup> offenbar dramatisch. Die numerische Stabilität ist somit ein echtes Problem. In unserem Falle haben wir ausschließlich mit der numerischen Keule, der “*Multiprecision*”–Software von D. H. Bailey [Bai93] gearbeitet. Der Preis einer *software*–implementierten Numerik ist natürlich der Zeitfaktor. Zum großen Teil haben wir mit einer Stellengenauigkeit von 100 Stellen bei den hier betrachteten Kettenlängen gearbeitet, die notwendig war, um die Stabilität der Prozeduren zu gewährleisten. Zusammen mit der Notwendigkeit  $\sigma(\omega)$  für viele  $\omega$ –Werte bestimmen zu müssen (s. Abb. II.4), erwächst daraus ein erheblicher Zeitaufwand bei den Berechnungen. Ein Ausweg aus diesem Dilemma könnte man dadurch suchen, daß man die Energie komplexwertig macht. Damit wird das Problem der Nullstellenbestimmung zu einer reinen Integration über eine entsprechend geglättete Funktion  $\Gamma_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$ . Das Problem besteht hierbei, daß eine

<sup>44</sup>Dies ist leider ein generelles Problem, wenn man mit auf Null–Mengen (Cantor–Mengen) erklärten Objekten numerisch zu hantieren versucht.

für die konkrete Ableitung der der Ortsraum–Renormierung zugänglichen Matrixstruktur notwendige Faktorisierung (zu den Details vgl. Anhang **II.B**, Lemma II.B.2, S. 107) wohl nicht mehr exakt erfüllt werden kann. Die mathematische Ursache hierfür entnimmt man unmittelbar dem Ausdruck (II.10), S. 58, für die Green’sche Funktion. Der Imaginärteil von  $\frac{1}{2}\text{sign}(\mu-\nu)P_{\mu-\nu-1}^{(\nu+1)}(z)$  verschwindet im allgemeinen Fall komplexer Energien<sup>45</sup>  $z = E + i\eta$  nicht mehr und trägt somit voll zur Leitfähigkeit bei. Die sign–Funktion läßt sich hierbei nicht mehr in  $\mu$ – und  $\nu$ –Komponenten faktorisieren, so daß man im entsprechenden Ausdruck zur Leitfähigkeit anders vorgehen muß, worauf wir im Rahmen dieser Arbeit aber nicht mehr eingehen können. Die physikalische Bedeutung und die entsprechenden Konsequenzen hiervon sind noch nicht vollständig verstanden. Interessant hierbei wäre ein tiefergehender Vergleich unserer Ergebnisse mit denen von [Sán2001]. Von Grundsatz her unterscheiden sich beide Arbeiten in zweierlei Hinsicht. Der Vorgehensweise in [Sán2001] liegen Substitutionen zugrunde, während wir hier Nielsen–Transformationen benutzen, was aber in 1–D kein Unterschied macht<sup>46</sup>. Die Ergebnisse aus [Sán2001] sind Resultat gewisser Approximationen, das Flußverhalten  $t^* \rightarrow 0$  für die renormierten Hopping–Parameter, eine in der Literatur zur Ortsraum–Renormierung zentrale Annahme<sup>47</sup>, spielt hierbei eine wesentliche Rolle<sup>48</sup> bei der Aufstellung der Renormierungsgleichungen, während wir hier ausschließlich exakt vorgehen. Der zweite wesentliche Unterschied besteht darin, daß dort<sup>49</sup> ausschließlich der etwas einfachere Fall<sup>50</sup> von Intraband–Übergänge betrachtet wird, wir hier aber das andere Extrem der Interband–Übergänge untersuchen. Es muss auch in diesem Falle die Lösung dieser Fragestellung einer möglichen, zukünftigen Forschung überlassen bleiben.

---

<sup>45</sup>Im einfachsten Falle von zusätzlicher (statistischer) Unordnung ist  $\eta = \Im m\{\Sigma(E + i\delta)\} = -\hbar/\tau(E)$  unabhängig vom Platzindex  $\mu$  (s. [Czy2000, S. 231] oder unter dem Stichwort “**Virtual Crystal Approximation**” (VCA) in [Eco87, S. 139f.]).  $\tau(E)$  ist wieder die Lebensdauer eines Teilchens und  $\Sigma(z)$  die entsprechende Selbstenergie, die sich aus der Konfigurationsmittelung der Dyson–Gleichung ergibt.

<sup>46</sup>Da Reskalierung, also Substitutionen prinzipiell auch auf höhere Dimensionen ausdehnbar sind, stellt sich natürlich die unmittelbare Frage, welche Rolle den NTs in diese Spiele zukommt. Diese Fragestellung erstreckt sich natürlich auf den gesamten Themenbereich der *Ortsraum–Renormierung*. Aus den Ausführungen in Kapitel **III.1** kann man ersehen, daß der eigentlich von uns favorisierte Zugang derjenige über Substitutionen und den zugehörigen Feshbach–Operatoren ist. Nüchtern betrachtet ist der Zugang zur Leitfähigkeit über die Matrix–Darstellung eher ein “Relikt” der *eigenen* Geschichte... Ein möglicher neuer Ausgangspunkt ist im zweiten Komplement auf S. 121 angedeutet. Wir wollen uns in dieser Arbeit aber nicht weiter damit aufhalten.

<sup>47</sup>Diese Annahme ist durch viele numerische Arbeiten verschiedener Autoren gestützt. Der entscheidende Punkt ist hierbei allerdings nicht so sehr, daß  $t^* \rightarrow 0$  gilt, sondern das Verhältnis von renormiertem Hopping zu den renormierten Orbital–Energien.

<sup>48</sup>Wir wollen uns hiermit nicht näher befassen, da wir die Interpretation dessen, was die Ortsraum–Renormierung in dem in dieser Arbeit betrachteten Fall “wirklich” bewirkt, an dieser Stelle nicht konkretisieren können. Ein Hinweis auf zum einen das weiter unten zu (III.21), auf S. 127, Angedeutete und zum Anderen das konkrete Konvergenzverhalten (Subordinarität, s. z.B. [Gil87, Kha92]) von  $1/t^* \approx P_{N-1}$  mag an dieser Stelle genügen.

<sup>49</sup>Wie im Übrigen in praktisch allen bisher zu diesem Thema vorliegenden Arbeiten.

<sup>50</sup>Da man dort nicht sämtliche Interband–Übergangsenergien zu berechnen braucht.



# Anhang II.A

## Poincaré–Abbildung und Fundamentallösungen

In diesem Anhang werden wir zunächst auf die alles bestimmende *3-gliedrige* Rekursionsrelation<sup>1</sup> (3), S. vi, zu sprechen kommen, welche die Wellenfunktion  $\Psi(x)$  an drei aufeinanderfolgenden Punkten ( $x_{\mu-1} < x_\mu < x_{\mu+1}$ ) miteinander verknüpft, wobei wir annehmen wollen, daß die Folge  $\{x_\mu\}_{\mu \in \mathbb{Z}}$  der Beziehung

$$\bigcup_{\mu \in \mathbb{Z}} [x_{\mu-1}, x_\mu) = \mathbb{R} \quad (\text{II.A.1})$$

genügt. Hierbei sind  $\pm\infty$  Häufungspunkte von  $\{x_\mu\}_{\mu \in \mathbb{Z}}$ . Daran anschließen (siehe hierzu Abschnitt **II.A.1**) wollen wir eine weitergehende Betrachtungen einiger uns im Folgenden interessierenden Eigenschaften der Poincaré’schen Abbildung. In einem zweiten Abschnitt wollen wir auf die Fundamentallösungen der diskreten Schrödinger–Gleichung (3) eingehen und ihre Eigenschaften vor dem Hintergrund der Eigenschaften der Poincaré–Abbildung betrachten. Wir werden zeigen, wie man *alle* uns interessierenden physikalischen Größen des kontinuierlichen Modells (1) aus S. v auf eine *äquivalente, diskrete* Form transformieren und somit viele der Lösungsstrategien, wie sie für das “klassische” *Tight-Binding*–Modell weit hin bekannt sind, bzw. die wir in dieser Arbeit durch die Idee der “*Pfad-Renormierung*” ein Stückchen weiterentwickeln wollen, unmittelbar auf das kontinuierliche Modell verallgemeinern kann.

Zur Herleitung der genannten Rekursionsformel nehmen wir mit [Sán94] an, daß  $f_\mu(x)$  und  $g_\mu(x)$  zwei linear unabhängige Lösungen der stationären Schrödinger–Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}} \Psi(x) &\equiv \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x) = \varepsilon \Psi(x), \\ U(x) &= V(x) + \sum_{\mu \in I} V_\mu^{(\delta)} \delta(x - x_\mu), \end{aligned} \quad (\text{II.A.2})$$

auf dem *offenen* Intervall  $(x_{\mu-1}, x_\mu)$  seien. Mit  $I \subseteq \mathbb{Z}$  erlauben wir, daß nicht alle Stützstellen einen Deltapeak tragen müssen (praktisch realisiert durch  $V_\mu^{(\delta)} = 0$ , für  $\mu \notin I$ ). Wir setzen

---

<sup>1</sup>Man vergleiche hierzu z.B. die Arbeiten von [Sán94] und von [Koh86–II, Bel82–II].

voraus, daß  $V(x)$  höchstens *endliche* Sprungstellen haben möge. Im Gegensatz zu [Sán94] werden wir den  $\delta$ -Funktionsanteil explizit betrachten, da sich bei einigen unserer späteren Überlegungen der in [Sán94] durchgeführte Grenzübergang von einem geeignet gewählten Kastenpotential auf das  $\delta$ -Potential nicht anwenden läßt.

Weiterhin bezeichnen wir mit  $\mathcal{F}_\alpha^{(1)}(x)$  und  $\mathcal{F}_\alpha^{(2)}(x)$  die beiden **Fundamentallösungen** der zu (II.A.2) gehörenden, stationären Schrödinger-Gleichung  $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \mathcal{E}|\psi\rangle$ , welche den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\alpha^{(1)}(x_0) &= \cos(\alpha), & \mathcal{F}_\alpha^{(1)}(x_0) &= \sin(\alpha) & \text{und} \\ \mathcal{F}_\alpha^{(2)}(x_0) &= -\sin(\alpha), & \mathcal{F}_\alpha^{(2)}(x_0) &= \cos(\alpha), \end{aligned}$$

mit  $\alpha \in [0, \pi)$ , und der Abkürzung  $f' = \partial f / \partial x$  genügen. Wir werden im Verlauf dieser Arbeit von zwei Typen selbstadjungierter Erweiterungen von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  in  $\mathbb{H} = \mathbf{L}_2(\mathbb{R})$  Gebrauch machen<sup>2</sup>, welche durch die Definition der **Randbedingungen**

$$\begin{aligned} \text{Typ I:} \quad & \Psi(x_\mu - 0) \cos(\alpha_\mu) + \Psi'(x_\mu - 0) \sin(\alpha_\mu) = 0 \\ & \Leftrightarrow \left. \frac{d \ln(\Psi(x))}{dx} \right|_{x=x_\mu-0} = \cot(\alpha_\mu), \quad \alpha_\mu \in [0, \pi), \quad \mu = -M, N, \quad (\text{II.A.3}) \end{aligned}$$

$$\text{Typ II:} \quad \Psi(x_{-M} - 0) = \Psi(x_N - 0) \text{ und } \Psi'(x_{-M} - 0) = \Psi'(x_N - 0), \quad (\text{II.A.4})$$

festgelegt werden. Man beachte, daß  $\mathcal{F}_\alpha^{(2)}(x)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, welche bei  $x_0$  der Cauchy'schen Randbedingung (Typ I) genügt.

Die wohl einfachste *Näherung* von (II.A.2) ist die **“Tight-Binding-Näherung”**<sup>3</sup>, welche formal dieselbe Struktur besitzt wie die Poincaré-Abbildung (3) auf S. vi, nun aber mit den vom Schar-Parameter  $\mathcal{E}$  unabhängigen Parametern  $\epsilon_\mu$  und  $t_\mu$ . (3) läßt sich als diskrete Approximation von (II.A.2) auffassen, wenn man die Ableitungen entsprechend durch **Differenzen-Operatoren**  $\Delta_l, \Delta_r$  ersetzt: Geht man von der **Sturm-Liouville'schen Differentialgleichung**

$$(\hat{\mathcal{H}}_c \Psi)(x) = \frac{d}{dx} \left( t(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + U(x)\Psi(x) = \mathcal{E} \Psi(x)$$

aus, so findet man mit [Ber68, S. 501 f.], daß gilt

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{H}}_{TB} \Psi)_\mu &= \left( \Delta_l (t \Delta_r \Psi) \right)_\mu + U_\mu \Psi_\mu, \\ (\Delta_l \Psi)_\mu &:= \Psi_{\mu+1} - \Psi_\mu, \quad (\Delta_r \Psi)_\mu := \Psi_\mu - \Psi_{\mu-1}, \end{aligned}$$

<sup>2</sup>Im diskreten Falle ist  $\mathbb{H} = \ell_2(\mathbb{Z})$ .

<sup>3</sup>Die Tight-Binding-Näherung von (II.A.2) läßt sich formal mittels entsprechendem Ausprojizieren ableiten. Dies ist eine weitere Anwendung der uns im Rahmen der Renormierung interessierenden Feshbach-Abbildung. Mit geeigneten Näherungen ist der entsprechende *“effektive Hamilton-Operator”* gerade von der gewünschten Tight-Binding-Gestalt (s. hierzu [Bel86]). Der wichtigste Unterschied zwischen beiden *“Darstellungen”* ist natürlich, daß  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  ein unbeschränkter, während  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{TB}}$  nur ein beschränkter Operator ist. Beschränkt man sich aber auf die lokalen Eigenschaften des Spektrums, so sind beide zueinander äquivalent [Bel86].

wobei man in (3), auf S. vi,  $\epsilon_\mu = -t_\mu - t_{\mu+1} + U_\mu$  mit  $U_\mu = U(x_\mu)$  und  $t_\mu = t(x_\mu)$ , mit äquidistanten  $x_\mu = \mu$ , zu ersetzen hat. Für die Schrödinger-Gleichung (II.A.2) ist  $t(x) \equiv 1$ , so daß alle  $t_\mu = 1$  sind<sup>4</sup> (“**Diagonal-Modell**”). Man akzeptiert bei dieser Vorgehensweise, daß alle Stützstellen äquidistant sind, das Modell somit keine *geometrische* Aperiodizität beschreibt! Das Potential  $\epsilon_\mu$  kann dabei  $n$  (endlich oder unendlich) verschiedene Werte annehmen. Praktisch alle mathematisch exakten Resultate gründen sich auf dieses Modell. Werden dagegen die *Hopping- oder Transfer-Energie-Elemente*  $t_\mu$  variiert, während die Platz- oder Orbital-Energien  $\epsilon_\mu$  konstant ( $\epsilon_\mu = \epsilon$ ) gehalten werden, dann wollen wir vom “**Nicht-Diagonal-Modell**” sprechen. Im Kontext des Nicht-Diagonal-Modelles werden die  $\Psi_\mu$  in der Regel als Amplituden von “geeignet” gewählten *Wannier-Funktionen* interpretiert, mit deren Hilfe sich die eigentliche Wellenfunktion  $\Psi(x)$  durch Linearkombination konstruiert denken läßt (s. z.B. [Kit99, Ash2001]).

◻ ► Betrachten wir kurz die formale Beziehung zwischen beiden Modellen. Sei der (invertierbare und für reelle Hopping-Energien hermitische) Operator

$$\hat{\vartheta} := \sum_{\mu \in G} |\mu\rangle \vartheta_\mu \langle \mu|, \quad \vartheta_\mu = \vartheta_{\mu-2} \frac{t_\mu}{t_{\mu-1}},$$

mit den Anfangswerten<sup>5</sup>  $\vartheta_{-M} = t_{-M}$  und  $\vartheta_{-M+1} = t_{-M+1}$ . Dann sieht man leicht ein, daß unter der Transformation

$$\hat{\mathcal{H}}'_{TB} = \hat{\vartheta} \cdot \hat{\mathcal{H}}_{TB} \cdot \hat{\vartheta}^{-1}, \quad \text{mit } |\psi'\rangle = \hat{\vartheta}|\psi\rangle$$

die (allgemeine) Schrödinger-Gleichung (3), S. vi, in die *Diagonal-Form*

$$((E - \hat{\mathcal{H}}_{TB})\Psi)'_\mu = \sigma'_\mu \Psi'_\mu - \Psi'_{\mu+1} - \Psi'_{\mu-1} = 0, \quad \text{mit } \sigma'_\mu = \frac{E - \epsilon_\mu}{t_{\mu+1}} \frac{\vartheta_{\mu+1}}{\vartheta_\mu},$$

übergeht. Letztere Beziehung läßt sich ausführlich schreiben

$$\sigma'_{2\mu} = \frac{\sigma_{2\mu}}{t_{-M}} \prod_{\alpha=-M+1}^{\mu} \left( \frac{t_{2\alpha-1}}{t_{2\alpha}} \right), \quad \sigma'_{2\mu+1} = \frac{\sigma_{2\mu+1}}{t_{-M}} \prod_{\alpha=-M}^{\mu} \left( \frac{t_{2\alpha}}{t_{2\alpha+1}} \right)$$

und  $\sigma'_{-M} = \sigma_{-M}/t_{-M}$ . Man erkennt sofort, daß beim Übergang vom Nichtdiagonal-Modell auf das Diagonal-Modell eine gegebene Folge  $(\sigma_\mu)_\mu$  durch eine *neue* Folge  $(\sigma'_\mu)_\mu$  ersetzt wird, was die ursprüngliche Symmetrie völlig verändern kann.

Wir wollen nun zeigen, wie man kann im Spezialfall *einer* Raum-Dimension (d.h.  $D = 1$ ) auf eine *exakte* Art und Weise vom kontinuierlichen (nicht notwendig beschränkten) Hamilton-Operator  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  zu einen praktisch *äquivalenten* Tight-Binding-artigen Hamilton-Operator  $\hat{\mathcal{H}}(\mathcal{E})$  gelangt. Man beachte, daß der für gewöhnlich bei  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  auftretende Bandindex *implizit* in den nun von der Energie  $\mathcal{E}$  explizit abhängigen Parametern  $\epsilon_\mu(\mathcal{E})$  und  $t_\mu(\mathcal{E})$

<sup>4</sup>Diese Form der Diskretisierung unterscheidet sich von der Poincaré’schen Form, welche im allgemeinen im Ort variable  $t_\mu$  für die Schrödinger-Gleichung liefert. Dies sollte man beim Konsultieren der im Verlauf unserer Arbeit zitierten Literaturstellen im Gedächtnis behalten, welchen i.a. die oben geschilderte *approximative* Form der Diskretisierung zugrunde liegen. Im Kontinuumsmlimes ergeben sich allerdings aus beiden Formen dieselbe kontinuierliche Schrödinger-Gleichung.

<sup>5</sup>Die Anfangswerte wurden so gewählt, daß für die im Abschnitt II.A.2 eingeführte Fundamentallösung  $P_\mu$  das transformierte Polynom  $P'_\mu = \vartheta_\mu P_\mu = 1 \cdot \det(\dots)$  auf einen zu (II.A.25) analogen Ausdruck führt, wobei entsprechend alle  $t_\mu \rightarrow 1$  und  $\sigma_\mu \rightarrow \sigma'_\mu$  zu ersetzen sind.

enthalten ist. Letzteres sind ganze Funktionen in der Energie  $\mathcal{E}$ , was bedeutet, daß *jedem* festen Wert von  $\epsilon_\mu(\mathcal{E})$  und  $t_\mu(\mathcal{E})$  die Folge von Energiewerte  $(\mathcal{E}_n)_{n \in \mathbb{N}}$  zugeordnet wird. Wir werden später darauf zu sprechen kommen (vgl. Abb. II.A.2 auf S. 85 weiter unten).

$$\mathbf{W}_\mu(x) = \begin{pmatrix} f_\mu(x) & g_\mu(x) \\ f'_\mu(x) & g'_\mu(x) \end{pmatrix}$$

ist die Wronski'sche Matrix mit  $\det(\mathbf{W}_\mu(x)) = W_\mu \neq 0$  (Abel'sche Formel). Offensichtlich ist auf  $(x_{\mu-1}, x_\mu)$

$$\begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi'(x) \end{pmatrix} = \mathbf{W}_\mu(x) \begin{pmatrix} A_\mu \\ B_\mu \end{pmatrix},$$

mit den Konstanten  $A_\mu, B_\mu$ . Aus den Anschlußbedingungen für  $x = x_\mu$  leitet man leicht

$$\begin{pmatrix} \Psi_\mu \\ \Psi'_\mu \end{pmatrix} = \mathcal{K}^{(\mu)} \begin{pmatrix} \Psi_{\mu-1} \\ \Psi'_{\mu-1} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{K}^{(\mu)} = \begin{pmatrix} K_{11}^{(\mu)} & K_{12}^{(\mu)} \\ K_{21}^{(\mu)} + V_\mu^{(\delta)} K_{11}^{(\mu)} & K_{22}^{(\mu)} + V_\mu^{(\delta)} K_{12}^{(\mu)} \end{pmatrix},$$

mit  $\Psi_\mu = \Psi(x_\mu \pm 0) = \Psi(x_\mu)$  und  $\Psi'_\mu = \Psi'(x_\mu + 0)$ , ab. Es ist hierbei

$$\mathbf{K}^{(\mu)}(x) = \mathbf{W}_\mu(x) \mathbf{W}_\mu^{-1}(x_{\mu-1} + 0), \quad \mathbf{K}^{(\mu)} := \mathbf{K}(x_\mu - 0), \quad (\text{II.A.5})$$

mit  $\det(\mathbf{K}^{(\mu)}) = \det(\mathcal{K}^{(\mu)}) = 1$ . Daraus ergibt sich die gewünschte Rekursionsbeziehung ([Sán94], vgl. a. [Bel82–II, Koh86–II]):

$$((E - \hat{\mathcal{H}})\Psi)_\mu \equiv (E(\mathcal{E}) - \epsilon_\mu(\mathcal{E}))\Psi_\mu - t_\mu(\mathcal{E})\Psi_{\mu-1} - t_{\mu+1}(\mathcal{E})\Psi_{\mu+1} = 0, \quad (\text{II.A.6})$$

mit

$$t_\mu(\mathcal{E}) = \frac{1}{\mathcal{K}_{12}^{(\mu)}(\mathcal{E})} \quad \text{und} \quad E(\mathcal{E}) - \epsilon_\mu(\mathcal{E}) = \frac{\mathcal{K}_{11}^{(\mu+1)}(\mathcal{E})}{\mathcal{K}_{12}^{(\mu+1)}(\mathcal{E})} + \frac{\mathcal{K}_{22}^{(\mu)}(\mathcal{E})}{\mathcal{K}_{12}^{(\mu)}(\mathcal{E})}. \quad (\text{II.A.7})$$

Wir betonen nochmals, daß  $\Psi_\mu = \Psi(x_\mu)$  die *exakte* Wellenfunktion der *kontinuierlichen* Schrödinger Gleichung (II.A.2) an der Stelle  $x_\mu$  ist. Man nennt (II.A.6) die zu (II.A.2) gehörende **Poincaré–Abbildung** (engl. “*first return map*”; zur Definition und einigen fundamentalen Eigenschaften, s. z.B. Abb. II.A.1 und [Arr94], Kapitel I.7f.). Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen, hat man eine diskrete Form der Schrödinger–Gleichung (II.A.6) vorliegen, welche allerdings nicht mehr in Form eines typischen *Eigenwert*problems auftritt, sondern als ein (in der Energie  $\mathcal{E}$  nichtlineares) *Fixpunkt*problem. Wir werden gleich darauf zu sprechen kommen, daß diese Nichtlinearität dafür verantwortlich ist, daß wir nun nicht mehr nur mit einem *Einband*–Modell konfrontiert werden, sondern mit der vollen Bandstruktur des kontinuierlichen Hamilton–Operators  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$ .

## II.A.1 Einige Eigenschaften der Poincaré–Darstellung

Man kann leicht zeigen, daß im Grenzfall  $x_\mu - x_{\mu-1} \rightarrow 0$  (II.A.6) unmittelbar in die kontinuierliche Gleichung (II.A.2) übergeht. Im Gegensatz zu der gewöhnlichen Diskretisierung, ist die Poincaré–Abbildung für *beliebige* Abstände  $\Delta_\mu := x_\mu - x_{\mu-1}$  *exakt*. Die Bedingung  $K_{12}^{(\mu)}(\mathcal{E}) \neq 0$  macht aus dem i.a. unbeschränkten Operator  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  einen beschränkten Operator



und

$$\frac{\mathcal{K}_{22}^{(\mu)}}{\mathcal{K}_{12}^{(\mu)}} = \frac{1}{\Delta_\mu} + V_\mu^{(\delta)} - \frac{1}{2}(\mathcal{E} - U(x_\mu))\Delta_\mu + o(2).$$

Dividiert man (II.A.6) durch  $x_{\mu+1} - x_{\mu-1}$  so findet man

$$0 = \frac{2}{x_{\mu+1} - x_{\mu-1}} \left( \frac{\Psi_{\mu+1} - \Psi_\mu}{x_{\mu+1} - x_\mu} - \frac{\Psi_\mu - \Psi_{\mu-1}}{x_\mu - x_{\mu-1}} \right) + \left( \mathcal{E} - V(x_\mu) + \frac{2V_\mu^{(\delta)}}{x_{\mu+1} - x_{\mu-1}} \right) \Psi_\mu + o(1).$$

Setzt man  $\Psi_\mu = \Psi(x_\mu)$ , so ergibt sich mit  $\Delta_\mu = \Delta \rightarrow 0$  aus  $(\hat{\mathcal{H}} - E)|\Psi\rangle = 0$  wieder die kontinuierliche Form  $-(\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}} - \mathcal{E})|\Psi\rangle = 0$  der Schrödinger-Gleichung (II.A.2). Daß der vorletzte Term der obigen Formel tatsächlich gegen  $V_\mu^{(\delta)}\delta(x - x_\mu)\Psi(x_\mu)$  geht, sieht man am einfachsten wie folgt ein: Man setze  $\Psi_\mu \equiv \Psi_\mu(y) = \Theta(y - (x_\mu - x_{\mu-1})/2) - \Theta(y - (x_{\mu+1} - x_\mu)/2)$  und beachtet, daß  $\delta(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0} ((\Theta(x + \eta) - \Theta(x))/\eta)$ .

► **Beispiel:** Wir wollen die in diesem Abschnitt auftretenden Formeln, welche die Beziehung zwischen dem kontinuierlichen und diskreten Problem darstellen, an einem konkreten Fall demonstrieren. Dazu wählen wir in (II.A.2)  $V(x) \equiv 0$ , d.h. wir betrachten einen einfachen **Dirac-Kamm**, dessen Aufpunkte  $x_\mu$  und Gewichte  $V_\mu^{(\delta)}$  beliebig sein mögen. Für das offene Intervall  $(x_{\mu-1}, x_\mu)$  gilt bekanntlich

$$\mathbf{W}_\mu(x) = \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{pmatrix}, \quad k = \sqrt{\mathcal{E}}, \mathcal{E} > 0.$$

Sei  $\Delta_\mu := x_\mu - x_{\mu-1}$ . Mit (II.A.5) findet man für die Parameter (II.A.7)

$$t_\mu(\mathcal{E}) = \frac{k}{\sin(k\Delta_\mu)} \quad \text{und} \quad E(\mathcal{E}) - \epsilon_\mu(\mathcal{E}) = V_\mu^{(\delta)} + k \frac{\cos(k\Delta_{\mu+1})}{\sin(k\Delta_{\mu+1})} + k \frac{\cos(k\Delta_\mu)}{\sin(k\Delta_\mu)}, \quad (\text{II.A.8})$$

falls  $k\Delta_\mu \neq m\pi, m \in \mathbb{Z}$  gilt. Schon dieses sehr einfache Beispiel zeigt, daß eine räumlich aperiodisch angeordnete Folge von  $\delta$ -Funktionen auf einen tight-binding-artigen Hamilton-Operator führt, der sowohl verschiedene “Platz-Energien” als auch verschiedene “Hopping-Elemente” aufweist (vgl. Complement auf S. 79)

Nun wollen wir die Überlegungen der oben genannten Autoren umkehren und bestimmen aus einem gegebenen Satz  $\{\Psi_\mu\}_{\mu \in \mathbb{Z}}$  die volle Lösung  $\Psi(x)$  der kontinuierlichen Schrödinger-Gleichung. Wir finden<sup>8</sup> für  $K_{12}^{(\mu)} \neq 0$

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \left( K_{11}^{(\mu)}(x) - \frac{K_{11}^{(\mu)}}{K_{12}^{(\mu)}} K_{12}^{(\mu)}(x) \right) \Psi_{\mu-1} + \frac{K_{12}^{(\mu)}(x)}{K_{12}^{(\mu)}} \Psi_\mu \\ &\equiv \alpha^{(\mu)}(x) \Psi_{\mu-1} + \beta^{(\mu)}(x) \Psi_\mu, \quad x \in [x_{\mu-1}, x_\mu], \end{aligned} \quad (\text{II.A.9})$$

oder formal

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mu=-M+1}^N \left( \Psi_{\mu-1} |\alpha^{(\mu)}\rangle + \Psi_\mu |\beta^{(\mu)}\rangle \right), \quad \Psi(x) = (x|\Psi) := \int \delta(x - x') \Psi(x') dx,$$

<sup>8</sup>Im offenen Intervall  $(x_{\mu-1}, x_\mu)$  läßt sich daraus  $\Psi'(x) = \partial_x \Psi(x)$  bestimmen.

wobei<sup>9</sup> in Ortsdarstellung

$$(x|\alpha^{(\mu)}) := \begin{cases} \alpha^{(\mu)}(x), & x \in [x_{\mu-1}, x_\mu] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}, \quad (x|\beta^{(\mu)}) := \begin{cases} \beta^{(\mu)}(x), & x \in [x_{\mu-1}, x_\mu] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases},$$

gilt.  $\{\alpha^{(\mu)}(x)\}_\mu, \{\beta^{(\mu)}(x)\}_\mu$  sind wieder zwei linear unabhängige<sup>10</sup> Lösungen der kontinuierlichen Schrödinger-Gleichung (II.A.6). In diesem Zusammenhang seien der Vollständigkeit halber noch einige weitere Relationen erwähnt. Zunächst ist

$$\begin{aligned} \alpha^{(\mu)}(x_\mu - 0) = 0, \quad \alpha^{(\mu)}(x_{\mu-1} + 0) = 1 \quad \text{und} \quad \beta^{(\mu)}(x_\mu - 0) = 1, \quad \beta^{(\mu)}(x_{\mu-1} + 0) = 0, \\ \partial_x \alpha^{(\mu)}(x_\mu - 0) = -t_\mu, \quad \partial_x \alpha^{(\mu)}(x_{\mu-1} + 0) = -t_\mu K_{11}^{(\mu)}, \\ \partial_x \beta^{(\mu)}(x_\mu - 0) = t_\mu K_{22}^{(\mu)}, \quad \partial_x \beta^{(\mu)}(x_{\mu-1} + 0) = t_\mu. \end{aligned}$$

☛ **Beispiel (Forts.):** Es ist vielleicht instruktiv, die Anschlußbedingungen für unser Beispiel konkret abzuleiten.  $\Psi(x_\mu + 0) = \Psi(x_\mu - 0)$  ergibt sich sofort. Für die Ableitungen findet man mit den obigen Ergebnissen

$$\begin{aligned} \Psi'(x_\mu + 0) - \Psi'(x_\mu - 0) &= \alpha^{(\mu+1)}(x_\mu + 0)\Psi_\mu + \beta^{(\mu+1)}(x_\mu + 0)\Psi_{\mu+1} \\ &\quad - \alpha^{(\mu)}(x_\mu - 0)\Psi_{\mu-1} - \beta^{(\mu)}(x_\mu - 0)\Psi_\mu \\ &= -\left(\frac{K_{11}^{(\mu+1)}}{K_{12}^{(\mu+1)}} + \frac{K_{22}^{(\mu)}}{K_{12}^{(\mu)}}\right)\Psi_\mu + \frac{1}{K_{12}^{(\mu+1)}}\Psi_{\mu+1} + \frac{1}{K_{12}^{(\mu)}}\Psi_{\mu-1} \\ &= -(E - \epsilon_\mu - V_\mu^{(\delta)})\Psi_\mu + t_{\mu+1}\Psi_{\mu+1} + t_\mu\Psi_{\mu-1} \\ &= V_\mu^{(\delta)}\Psi_\mu, \quad V_\mu^{(\delta)} = 0, \quad \text{für } \mu \notin I, \end{aligned}$$

und damit das erwartete Resultat. Man findet weiter für  $x \in [x_{\mu-1}, x_\mu]$

$$\Psi(x) = \frac{\sin(k(x_\mu - x))}{\sin(k\Delta_\mu)}\Psi_{\mu-1} + \frac{\sin(k(x - x_{\mu-1}))}{\sin(k\Delta_\mu)}\Psi_\mu, \quad k\Delta_\mu \neq m\pi, m \in \mathbb{Z}. \quad (\text{II.A.10})$$

Dieses Ergebnis ist äquivalent zu dem in [Alb88, S. 259f, Theorem 2.1.5] angegebenen Ausdruck.

Es ergeben sich unter Beachtung der Definitionen von  $K_{ij}^{(\mu)}$  und der Tatsache, daß  $f_\mu(x), g_\mu(x)$  auf dem Intervall  $(x_{\mu-1}, x_\mu)$  Eigenfunktionen von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{akP}}$  sind, sofort weitere nützliche Beziehungen:

$$\begin{aligned} \partial_x K_{11}^{(\mu)}(x) = K_{21}^{(\mu)}(x), \quad \partial_x K_{12}^{(\mu)}(x) = K_{22}^{(\mu)}(x), \\ \partial_x K_{21}^{(\mu)}(x) = (U(x) - \mathcal{E})K_{11}^{(\mu)}(x), \quad \partial_x K_{22}^{(\mu)}(x) = (U(x) - \mathcal{E})K_{12}^{(\mu)}(x). \end{aligned}$$

<sup>9</sup>Wir verwenden in der “Bra-Ket”-Schreibweise *runde* Klammern für das kontinuierliche Modell (Skalarprodukt als Integration) und *spitze* Klammern für das diskrete Modell (Skalarprodukt als Summe).

<sup>10</sup>Für die Wronsky-Determinante findet man  $w(\alpha^{(\mu)}(x), \beta^{(\mu)}(x)) = t_\mu \neq 0$  für  $x \in [x_{\mu-1}, x_\mu]$ .

Ausgehend von der Green'schen Formel (s. z.B. weiter unten (II.A.15)) findet man weiter ( $\mathcal{Z} = \mathcal{E} + i\eta$ )

$$\begin{aligned} (K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1) | K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2)) &\equiv \int_{x_{\mu-1}}^{x_\mu} (K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1, x))^* K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2, x) dx \\ &= \frac{K_{21}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) (K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^* - K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) (K_{21}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^*}{\mathcal{Z}_1^* - \mathcal{Z}_2} \\ (K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1) | K_{12}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2)) &= \frac{K_{22}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) (K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^* - K_{12}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) (K_{21}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^* - 1}{\mathcal{Z}_1^* - \mathcal{Z}_2} \\ (K_{12}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1) | K_{12}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2)) &= \frac{K_{22}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) (K_{12}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^* - K_{12}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) (K_{22}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^*}{\mathcal{Z}_1^* - \mathcal{Z}_2} \end{aligned}$$

(“Bra–Ket”–Schreibweise). Damit ergibt sich unschwer für die entsprechenden Skalarprodukte

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\mu(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2) &:= (\alpha^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1) | \alpha^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2)) \equiv \int_{x_{\mu-1}}^{x_\mu} (\alpha^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1, x))^* \alpha^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2, x) dx \\ &= \frac{t_\mu(\mathcal{Z}_2) K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) - t_\mu^*(\mathcal{Z}_1) (K_{11}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^*}{\mathcal{Z}_1^* - \mathcal{Z}_2}, \\ \mathcal{B}_\mu(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2) &:= (\beta^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1) | \beta^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2)) = \frac{t_\mu(\mathcal{Z}_2) K_{22}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2) - t_\mu^*(\mathcal{Z}_1) (K_{22}^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1))^*}{\mathcal{Z}_1^* - \mathcal{Z}_2}, \\ \mathcal{C}_\mu(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2) &:= (\alpha^{(\mu)}(\mathcal{Z}_1) | \beta^{(\mu)}(\mathcal{Z}_2)) = \frac{t_\mu^*(\mathcal{Z}_1) - t_\mu(\mathcal{Z}_2)}{\mathcal{Z}_1^* - \mathcal{Z}_2}. \end{aligned}$$

Setzt man schließlich  $\mathcal{Z}_1 = \mathcal{Z}_2$  und  $\eta = 0$ , dann ist

$$\mathcal{A}_\mu(\mathcal{E}) = \frac{d(t_\mu K_{11}^{(\mu)})}{d\mathcal{E}}, \quad \mathcal{B}_\mu(\mathcal{E}) = \frac{d(t_\mu K_{22}^{(\mu)})}{d\mathcal{E}} \quad \text{und} \quad \mathcal{C}_\mu(\mathcal{E}) = \frac{dt_\mu}{d\mathcal{E}} \quad (\text{II.A.11})$$

und  $d(E - \epsilon_\mu)/d\mathcal{E} = -\mathcal{A}_{\mu+1} - \mathcal{B}_\mu$ .

Zur Fixpunktgleichung (II.A.6) läßt sich für jedes feste  $\mathcal{E}$  immer eine äquivalente Eigenwertgleichung

$$\hat{\mathcal{H}}'(\mathcal{E}) |\Psi(\mathcal{E})\rangle = E'(\mathcal{E}) |\Psi(\mathcal{E})\rangle, \quad \hat{\mathcal{H}}'(\mathcal{E}) = \sum_\mu |\mu\rangle \epsilon'_\mu(\mathcal{E}) \langle\mu| + \sum_{\mu,\nu} |\mu\rangle t_{\mu\nu}(\mathcal{E}) \langle\nu|, \quad (\text{II.A.12})$$

mit einer dazugehörigen “**Konsistenz–Gleichung**”<sup>11</sup>

$$E'(\mathcal{E}) = \frac{\mathcal{K}_{11}^{(\nu+1)}(\mathcal{E})}{\mathcal{K}_{12}^{(\nu+1)}(\mathcal{E})} + \frac{\mathcal{K}_{22}^{(\nu)}(\mathcal{E})}{\mathcal{K}_{12}^{(\nu)}(\mathcal{E})} \quad (\text{II.A.13})$$

finden (vgl. Abb. II.A.2), mit  $\epsilon'_\mu(\mathcal{E}) := \epsilon_\mu(\mathcal{E}) - \epsilon_\nu(\mathcal{E})$  für ein fest gewähltes, ansonsten beliebiges  $\nu$ , und der Nächste–Nachbar–Wechselwirkung

$$t_{\mu\nu}(\mathcal{E}) = t_{\mu+1}(\mathcal{E}) \delta_{\mu\nu-1} + t_\mu(\mathcal{E}) \delta_{\mu\nu+1} = t_{\nu\mu}(\mathcal{E}). \quad (\text{II.A.14})$$

<sup>11</sup>Dies ist gerade die Beziehung  $E'(\mathcal{E}) := E(\mathcal{E}) - \epsilon_\nu(\mathcal{E})$ .

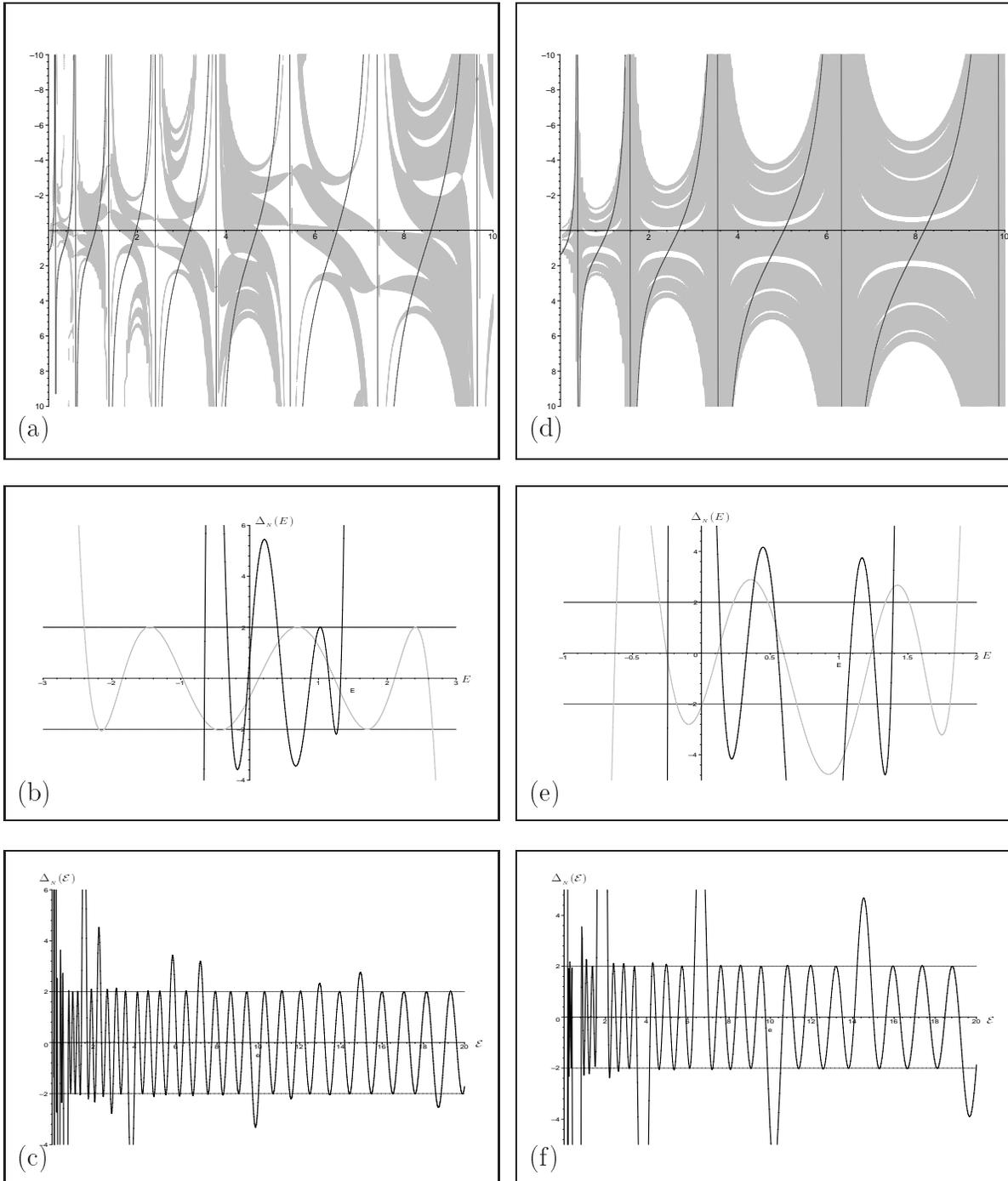


Abbildung II.A.2: Periodisches Kronig–Penney–Modell (Dirac–Kamm, die zugehörigen Parameter sind in (II.A.8) definiert) mit einer Einheitszelle, welche aus  $N = 7$  Plätzen besteht. (a)—(c):  $\Delta_L = \Delta_S = 5$  und  $V_\alpha^{(\delta)} = 1$ ,  $V_\beta^{(\delta)} = 1.5$ ,  $V_\gamma^{(\delta)} = 2$ . (d)—(f):  $\Delta_L = \tau\Delta_S = 8.091$ ,  $\Delta_S = 5$  und  $V_\alpha^{(\delta)} = V_\beta^{(\delta)} = V_\gamma^{(\delta)} = 1$ . Beschreibung s. Text.

$t_\mu(\mathcal{E})$  und  $\epsilon'_\mu(\mathcal{E})$  sind in der “Ortsdarstellung”  $\{|\mu\rangle\}$  durch (II.A.7) gegeben. Die Wahl von  $\nu$  ist natürlich nicht eindeutig. (II.A.12) ist offensichtlich äquivalent zu (II.A.6). Im Gegensatz zu (II.A.6) läßt sich jetzt jedes  $\epsilon'_\mu(\mathcal{E})$  allein aus den  $\mathcal{K}_{ij}^{(\cdot)}$  bestimmen, ohne Referenz auf den “Eigenwert”  $E(\mathcal{E})$ . Da  $\epsilon_\nu(\mathcal{E}) = \text{const}$  für festes  $\mathcal{E}$  gilt, wird durch  $E'(\mathcal{E}) := E(\mathcal{E}) - \epsilon_\nu(\mathcal{E})$  nur der frei wählbare Energienullpunkt entsprechend festgelegt. Wir fassen somit  $E'(\mathcal{E})$  für jedes feste  $\mathcal{E}$  als unabhängigen Parameter, der *Eigenwert* der *Eigenwertgleichung* (II.A.12), auf. Zu jedem  $\mathcal{E}$  hat man somit das entsprechende Eigenwertproblem (II.A.12) zu lösen und bekommt ein von  $\mathcal{E}$  abhängiges Energiespektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}'(\mathcal{E})) = \{E'(\mathcal{E}) \in \mathbb{R} \mid (\hat{\mathcal{H}}'(\mathcal{E}) - E'(\mathcal{E}))\Psi(\mathcal{E}) = 0\}$ . Das Spektrum des *kontinuierlichen* Hamilton-Operators  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}})$  ergibt sich daher aus der Lösung der Gleichung (II.A.12) bei *bekanntem*  $E'(\mathcal{E})$ .

**C ▶ Beispiel (Forts.):** Betrachten wir wieder den periodischen “Dirac-Kamm” mit einer Einheitszelle von sieben Plätzen. Die Parameter  $t_\mu$  und  $\epsilon_\mu$  wurden in (II.A.8) bestimmt. In Abb. II.A.2(a) und (d) ist jeweils die entsprechende, durch  $|\Delta_\tau(E')| \leq 2$  definierte, Bandstruktur des tight-binding-artigen Hamilton-Operators  $\hat{\mathcal{H}}(\mathcal{E})$  (s. (II.A.12)) in Abhängigkeit vom Scharparameter  $\mathcal{E}$  aufgetragen (*grau*). Dazu die jeweiligen Kurven (hier  $E(\mathcal{E}) - \epsilon_\alpha(\mathcal{E})$ ), wie sie durch die rechte Seite der Konsistenz-Gleichung (II.A.13) gegeben werden (*schwarz*). Die Projektion der Schnittmenge von Spektrum und  $(E - \epsilon_\alpha)$ -Kurve auf die  $\mathcal{E}$ -Achse liefert gerade das Spektrum des kontinuierlichen  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$ -Operators. In (c) bzw. (f) sind die zugehörigen  $\Delta_\tau(\mathcal{E})$ -Kurven über  $\mathcal{E}$  aufgetragen, wobei  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}) = \{\mathcal{E} \mid |\Delta_\tau(\mathcal{E})| \leq 2\}$  gilt. Es gibt unendlich viele Bänder. In (b) bzw. (e) sind dagegen die entsprechenden  $\Delta_\tau(E')$ -Kurven über  $E'$  für zwei Werte des Scharparameters ((b):  $\mathcal{E} = 0.1, 0.2$  (*grau*) bzw. (e):  $\mathcal{E} = 0.1, 1.1$  (*grau*)) aufgetragen. Das Spektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}) = \{E' \mid |\Delta_\tau(E')| \leq 2\}$  des entsprechenden tight-binding-artigen Hamilton-Operators besteht gerade aus den 7 erwarteten Bändern.

Damit ist die Äquivalenz des kontinuierlichen Modell und der *Schar* (Scharparameter  $\mathcal{E}$ ) von diskreten Schrödinger-Gleichungen (II.A.12) aufgezeigt. Für jeden Wert des Scharparameters  $\mathcal{E}$  — den wir, falls keine Gefahr für Konfusionen besteht, im Folgenden nicht mehr explizit ausschreiben werden — gibt es eine diskrete Schrödinger-Gleichung, welche gerade die Form der 3-gliedrigen Rekursionsformel (Differenzgleichung 2. Ordnung) (II.A.6) hat, wobei  $\langle \mu | \Psi \rangle \equiv \Psi_\mu := \Psi(x_\mu)$  die Schnittstelle zwischen diskreten und kontinuierlichen Modell bildet. Die angesprochene 3-term Rekursion ist *die* Grundlage aller unserer Untersuchungen. Man beachte, daß  $\Psi(x_\mu)$  *keine* Wannier- oder Atomorbitalfunktionen sind. Eine Untersuchung der sog. LCAO-Näherung zum aperiodischen Kronig-Penney-Modell findet man z.B. in [Dom95]. Wir werden hier aber nicht weiter darauf eingehen.

Wir wollen nun einige interessante Analogien zwischen den beiden Modellen in ihren mathematischen Strukturen aufzeigen. Dazu werden wir im Folgenden die (*lokale*) *Zustandsdichte* (LDOS) und in Kapitel II.2 die *Kubo-Leitfähigkeit*  $\sigma(\omega)$  näher betrachten. Eine für das Folgende bedeutende Relation ist die **Green'sche Formel**. Wir nehmen an, daß  $\Psi_\mathcal{E}(x)$  und  $\Phi_\mathcal{E}(x)$  auf  $\mathbf{G} = [x_{-M}, x_N]$  stückweise stetige zweite Ableitungen besitzen. Dann lautet die Green'sche Formel in unserer Poincaré-Darstellung

$$\int_G \left( \Phi_{\mathcal{E}_1}^*(x) (\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}} \Psi_{\mathcal{E}_2}(x)) - \Psi_{\mathcal{E}_2}(x) (\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}} \Phi_{\mathcal{E}_1}(x))^* \right) dx = W(\Psi_\mu(\mathcal{E}_2), \Phi_\mu^*(\mathcal{E}_1)) \Big|_{\mu=-M-1}^{N-1}, \quad (\text{II.A.15})$$

wobei

$$\begin{aligned} W(\Psi_\mu(\mathcal{E}_2), \Phi_\mu^*(\mathcal{E}_1)) &:= t_{\mu+1}(\mathcal{E}_2)\Psi_\mu(\mathcal{E}_2)\Phi_{\mu+1}^*(\mathcal{E}_1) - \Psi_{\mu+1}(\mathcal{E}_2)t_{\mu+1}^*(\mathcal{E}_1)\Phi_\mu^*(\mathcal{E}_1) \\ &\quad + (\chi_{\mu+1}(\mathcal{E}_2) - \chi_{\mu+1}^*(\mathcal{E}_1))\Psi_{\mu+1}(\mathcal{E}_2)\Phi_{\mu+1}^*(\mathcal{E}_1), \end{aligned} \quad (\text{II.A.16})$$

mit  $\chi_\mu(\mathcal{E}) := t_\mu(\mathcal{E})K_{22}^{(\mu)}(\mathcal{E})$  gilt. Andererseits ist im diskreten Fall<sup>12</sup> (vgl. z.B. [Ber68, S. 502])

$$\sum_{\mu=-M}^{N-1} \left( \Phi_\mu^*(\mathcal{E})(\hat{\mathcal{H}}(\mathcal{E})\Psi(\mathcal{E}))_\mu - \Psi_\mu(\mathcal{E})(\hat{\mathcal{H}}(\mathcal{E})\Phi(\mathcal{E}))_\mu^* \right) = -W(\Psi_\mu(\mathcal{E}), \Phi_\mu^*(\mathcal{E})) \Big|_{\mu=-M-1}^{N-1}$$

erfüllt, d.h. für  $t_\mu \neq 0$  ist  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  genau dann hermitisch, wenn es  $\hat{\mathcal{H}}$  ist, was wiederum der Fall ist, wenn die rechte Seite jeweils gleich Null ist. Dies führt im Übrigen sofort auf mögliche selbstadjungierte Erweiterungen von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  bzw.  $\hat{\mathcal{H}}$ , indem man aus dem Hilbert–Raum  $L^2(\mathbf{G}, d\rho(\mathcal{E}))$  bzw.  $\ell_2([-M, N-1], m_\mu)$  diejenigen Elemente auswählt, welche den in (II.A.3)f., bzw. ihren diskreten Pendanten in (II.13) und (II.15), definierten Randbedingungen genügen. In beiden Fällen verschwinden die zugehörigen Wronsky–Determinanten auf der rechten Seite von (II.A.16) bzw. (II.A.15). Bei der Cauchy–Randbedingung handelt es sich — in der Nomenklatur von Weyl — um den Grenzpunktfall, während die periodischen Randbedingungen nur dann eine selbstadjungierte Erweiterung definieren, wenn der Grenzkreisfall vorliegt.

Nun sind wir in der Lage, die Beziehung zwischen dem in (II.A.3)f. benutzten Winkel  $\alpha_\mu$  und seinem Gegenstück  $\theta_\mu$  aus (II.13) anzugeben. Sei

$$\kappa_\mu(\mathcal{E}) := \sqrt{(K_{12}^{(\mu)})^2 + (K_{22}^{(\mu)})^2}, \quad \beta_\mu(\mathcal{E}) := \arctg \left( \frac{K_{12}^{(\mu)}}{|K_{22}^{(\mu)}|} \right).$$

Dann findet man mit ( $\mathcal{Z} = \mathcal{E} + i\eta$ )

$$\vartheta_\mu(\mathcal{Z}) := \frac{t_\mu(\mathcal{Z})}{\cot(\alpha_\mu) + \chi_\mu(\mathcal{Z})} \in \mathbb{C} \xrightarrow{\eta=0} \vartheta_\mu(\mathcal{E}) = \frac{\kappa_\mu \sin(\alpha_\mu)}{\sin(\text{sign}(K_{22}^{(\mu)})\alpha_\mu + \beta_\mu)} \in \mathbb{R},$$

und für reelles  $\mathcal{E}$  den gesuchten Winkel  $\theta_\mu(\mathcal{E}) = \arctan(\text{sign}(t_N(\mathcal{E}))\vartheta_\mu(\mathcal{E}))$ . Man beachte, daß nun die Randbedingungen, die man an die “Eigenfunktionen” des Fixpunktproblems (II.A.6) zu stellen hat, von dem gewählten Energiewert  $\mathcal{E}$  abhängen. Für komplexes  $\mathcal{Z}$  ist es zweckdienlicher direkt mit  $\vartheta_\mu$  in die entsprechende Cauchy–Randbedingung einzugehen<sup>13</sup>. Man überzeugt sich leicht, daß auch für das so gewählte  $\vartheta \in \mathbb{C}$  der Hamilton–Operator  $\hat{\mathcal{H}}(\mathcal{Z})$  — wie sein Urbild  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  — hermitisch (die entsprechenden Wronsky–Determinanten verschwinden) bleibt.

Wie überträgt sich nun das Skalarprodukt aus der kontinuierlichen Darstellung auf die Poincaré–Darstellung? Hierzu bezeichnen wir wieder mit runden Klammern ( $\Psi$ ) die Bra–Kets des kontinuierlichen Hilbert–Raumes. Um Schreibarbeit zu sparen, wollen wir für sämtliche der folgenden Größen vereinbaren, daß für  $f = f(\mathcal{Z}_1)$  bzw.  $f = f(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2)$  immer  $\bar{f} = f(\mathcal{Z}_2)$  bzw.  $\bar{f} = f(\mathcal{Z}_2, \mathcal{Z}_1)$  gelten soll. Mit dieser Nomenklatur ergibt sich zunächst

$$(\Psi(\mathcal{Z}_2) | \Phi(\mathcal{Z}_1)) \equiv \int_{x_M}^{x_N} \bar{\Psi}^*(x)\Phi(x)dx = \sum_{\mu=-M}^{N-1} \mathcal{D}_\mu \bar{\Psi}_\mu^* \Phi_\mu + \Delta\mathcal{R} + \sum_{\mu=-M+1}^N \tilde{\mathcal{D}}_\mu \bar{\Psi}_\mu^* \Phi_{\mu-1}, \quad (\text{II.A.17})$$

<sup>12</sup>Man beachte das negative Vorzeichen auf der rechten Seite von (II.A.16) gegenüber (II.A.15).

<sup>13</sup>Man erhält somit z.B.  $\Psi_N - \vartheta_N \Psi_{N-1} = 0$ .

wobei (mit  $\sigma_\mu(\mathcal{Z}_1) = E(\mathcal{Z}_1) - \epsilon_\mu(\mathcal{Z}_1)$  usw.)

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_\mu(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2) &= \mathcal{A}_{\mu+1} + \mathcal{B}_\mu + \frac{t_{\mu+1}}{\sigma_{\mu+1}} \mathcal{C}_{\mu+1} + \frac{\bar{\sigma}_\mu^*}{\bar{t}_\mu^*} \mathcal{C}_\mu - \frac{t_\mu \bar{t}_\mu^*}{\bar{t}_{\mu-1}^* \sigma_{\mu-1}} \mathcal{C}_{\mu-1}, \\ \tilde{\mathcal{D}}_\mu(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2) &= \bar{\mathcal{C}}_\mu^* - \frac{\bar{\sigma}_\mu^* t_\mu}{\sigma_\mu \bar{t}_\mu^*} \mathcal{C}_\mu \\ \Delta \mathcal{R}(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2) &= \mathcal{R}_N - \mathcal{R}_{-M},\end{aligned}$$

mit

$$\mathcal{R}_\mu(\mathcal{Z}_1, \mathcal{Z}_2) = \left( \mathcal{C}_\mu \frac{\bar{\sigma}_\mu^*}{\bar{t}_\mu^*} + \mathcal{B}_\mu - \mathcal{C}_{\mu-1} \frac{t_\mu \bar{t}_\mu^*}{\bar{t}_{\mu-1}^* \sigma_{\mu-1}} \right) \bar{\Psi}_\mu^* \Phi_\mu - \mathcal{C}_\mu \frac{t_{\mu+1} \bar{t}_{\mu+1}^*}{\bar{t}_\mu^* \sigma_\mu} \bar{\Psi}_{\mu+1}^* \Phi_{\mu+1}$$

gilt. Bei der Ableitung geht man von der Formel (II.A.9) für die Wellenfunktionen aus und eliminiert Terme der Form  $\bar{\Psi}_\mu^* \Phi_{\mu\pm 1}$  geeignet durch (II.A.6). Schließlich faßt man die so erhaltenen Terme entsprechend zusammen. Man erkennt leicht, daß für Bloch'sche Randbedingungen ( $\Psi_{-M} = \xi \Psi_N$ ,  $\epsilon_{-M} = \epsilon_N$ ,  $\mathcal{A}_{-M} = \mathcal{A}_N$ , usw.)  $\mathcal{R}_N - \mathcal{R}_{-M} = 0$  gilt. Die Cauchy'schen Randbedingungen<sup>14</sup> implizieren, daß  $\mathcal{R}_N - \mathcal{R}_{-M} = \mathcal{D}_N \Psi_N^* \Phi_N$  erfüllt wird, sich somit die Summe in (II.A.17) bis  $N$  erstreckt. Man prüft leicht nach, daß für  $\sigma_\mu \neq 0$  und reelle  $\mathcal{E}$  die rechte Summe in (II.A.17) verschwindet, da  $\tilde{\mathcal{D}}_\mu(\mathcal{E}, \mathcal{E}) = 0$  gilt. Wir kommen somit zu dem Schluß: Es ist

$$(\Psi(\mathcal{E}) | \Phi(\mathcal{E})) \equiv \int_{x_M}^{x_N} \Psi^*(x) \Phi(x) dx = \sum_{\mu=-M}^{N-1} \mathcal{D}_\mu \Psi_\mu^* \Phi_\mu$$

mit (s. (II.A.11))

$$\mathcal{D}_\mu(\mathcal{E}) = \frac{d\sigma_\mu}{d\mathcal{E}} + \frac{t_{\mu+1}}{\sigma_{\mu+1}} \frac{dt_{\mu+1}}{d\mathcal{E}} + \frac{\sigma_\mu}{t_\mu} \frac{dt_\mu}{d\mathcal{E}} - \frac{t_\mu^2}{t_{\mu-1} \sigma_{\mu-1}} \frac{dt_{\mu-1}}{d\mathcal{E}},$$

so daß gilt: Ist  $\mathbf{L}^2(\mathbf{G}, dx)$  der Hilbert-Raum des kontinuierlichen Problems, dessen Elemente den hier betrachteten Randbedingungen genügen, dann ist der Hilbert-Raum zur diskreten Schrödinger-Gleichung für  $K_{12}^{(\mu)} \neq 0$  durch die *Schar* von Hilbert-Räumen  $\ell_2([-M, N(-1)])$ ,  $\mathcal{D}_\mu(\mathcal{E})$  gegeben, deren Elemente den entsprechenden diskreten Randbedingungen genügen, und umgekehrt.

Wenden wir uns nun der Resolvente von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  zu. Neben der Schrödinger-Gleichung wird im Folgenden auch die zugehörige inhomogene Gleichung (Dyson-Gleichung)

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x) + \mathcal{Z} \right) G(x, x' | \mathcal{Z}) = \delta(x - x'), \quad \mathcal{Z} = \mathcal{E} + i\eta, \quad (\text{II.A.18})$$

von entscheidender Bedeutung sein. Seien  $\Psi(x)$  und  $\Phi(x)$  zwei linear unabhängige Lösungen der zugehörigen homogenen Gleichung mit gegebenen Randbedingungen. Dann lautet die allgemeine Lösung von (II.A.18) bekanntlich (z.B. [Gon92], S. 350)

$$G(x, x' | \mathcal{Z}) = \frac{\Psi(x) \Phi(x') \Theta(x' - x) + \Psi(x') \Phi(x) \Theta(x - x')}{\det(\mathbf{W}(x))}. \quad (\text{II.A.19})$$

<sup>14</sup>  $\Psi(x) \equiv 0$  führt für  $x \notin [x_{-M} - 0, x_N + 0]$  auf  $\epsilon_\mu, t_\mu = 0$ , für  $\mu \notin [-M, N]$ , und auf  $\mathcal{A}_\mu = \mathcal{B}_\mu = \mathcal{C}_\mu = 0$ , für  $\mu \notin [-M + 1, N]$ .

Mit (II.A.9) und  $W(\Psi_\mu, \Phi_\mu) = W(\Psi_\nu, \Phi_\nu)$  ergibt sich daraus

$$G_{\mu\nu}(\mathcal{Z}) := G(x_\mu, x_\nu | \mathcal{Z}) = \frac{\Psi_\mu \Phi_\nu \Theta(\nu - \mu) + \Psi_\nu \Phi_\mu \Theta(\mu - \nu)}{W(\Phi_\nu, \Psi_\nu)}.$$

Diese  $G_{\mu\nu}(\mathcal{Z})$  sind die Lösung der *diskreten* Dyson-Gleichung

$$(E(\mathcal{Z}) - \epsilon_\mu(\mathcal{Z}))G_{\mu\nu}(\mathcal{Z}) = \delta_{\mu\nu} + \sum_{\sigma} t_{\mu\sigma}(\mathcal{Z})G_{\sigma\nu}(\mathcal{Z}),$$

mit dem Scharparameter  $\mathcal{Z}$ . Auch diese Gleichung hat man wieder als eine *Fixpunktgleichung* aufzufassen. Den Übergang zur Green'schen Funktion des diskreten Hamilton-Operators aus der *Eigenwertgleichung* (II.A.12) ergibt sich daraus unmittelbar.

Damit kommen wir zu einer ersten physikalischen Anwendung. Offensichtlich gilt

$$\text{LDOS} : \rho(x_\mu | \mathcal{E}) = -\frac{1}{\pi} \Im \mathfrak{m} \{ G^+(x_\mu, x_\mu | \mathcal{E}) \} = -\frac{1}{\pi} \Im \mathfrak{m} \{ G_{\mu\mu}^+(\mathcal{E}) \} = \rho_\mu(\mathcal{E}).$$

Letztere Größe ist die lokale Zustandsdichte für den Fall, daß man formal die Parameter  $t_\mu$  und  $\epsilon'_\mu$  in der diskreten Schrödinger-Gleichung (II.A.12) einerseits, und die Eigenenergien  $E'$  andererseits, als Funktion des Scharparameters  $\mathcal{E}$  auffaßt<sup>15</sup>. Integrieren wir  $\rho(x|\mathcal{E})$  über  $x$ , so erhält man gerade die Zustandsdichte DOS:

$$\begin{aligned} \text{DOS} : \mathcal{N}(\mathcal{E}) &= \int \rho(x|\mathcal{E}) dx = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mu} \int_{x_{\mu-1}}^{x_{\mu}} \Im \mathfrak{m} \{ G^+(x, x | \mathcal{E}) \} dx \\ &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mu} \mathcal{D}_{\mu}(\mathcal{E}) \Im \mathfrak{m} \{ G_{\mu\mu}^+(\mathcal{E}) \} = \sum_{\mu} \mathcal{D}_{\mu}(\mathcal{E}) \rho_{\mu}(\mathcal{E}). \end{aligned}$$

Bei der Ableitung geht man von der Green'schen Funktion (II.A.19) unter Berücksichtigung der uns interessierenden Randbedingungen aus, setzt die entsprechenden Ausdrücke (II.A.9) ein und eliminiert Terme der Form  $\Psi_{\mu} \Phi_{\mu \pm 1}$  geeignet durch (II.A.6). Schließlich faßt man die erhaltenen Terme entsprechend zusammen. Man beachte, daß alle Größen explizit vom Scharparameter  $\mathcal{E}$  abhängen, wie folgendes Beispiel zeigt.

☞ **Beispiel (Forts.):** Betrachten wir wieder unser Beispieldpotential von oben. Man findet für diesen Fall

$$\mathcal{A}_{\mu}(\mathcal{E}) = \mathcal{B}_{\mu}(\mathcal{E}) = \frac{t_{\mu}}{2\mathcal{E}} (\Delta_{\mu} t_{\mu} - \cos(k\Delta_{\mu})) \quad \text{und} \quad \mathcal{C}_{\mu}(\mathcal{E}) = \frac{t_{\mu}}{2\mathcal{E}} (1 - \Delta_{\mu} t_{\mu} \cos(k\Delta_{\mu})). \quad (\text{II.A.20})$$

Zusammen mit (II.A.8) läßt sich somit  $\mathcal{D}_{\mu}(\mathcal{E})$  bestimmen. Leider ist der so gewonnene Ausdruck nicht besonders erhellend, so daß wir diese Fährte nicht weiter verfolgen werden. Es sei nur noch bemerkt, daß im Kontinuumsmlimes  $\mathcal{D}_{\mu} \rightarrow dx$  gilt, die Summe (II.A.20) also korrekt in das entsprechende Integral übergeht.

<sup>15</sup>Es ist hier eigentlich nicht notwendig den Umweg über (II.A.12) zu vollziehen, da in den Ausdruck für die Green'sche Funktion nur Ausdrücke der Form  $E - \epsilon_{\mu}$  und nicht  $E$  bzw.  $\epsilon_{\mu}$  unabhängig voneinander, eingehen, die sich durch (II.A.7) als Funktion von  $\mathcal{E}$  ausdrücken lassen.

Es gibt somit keinen einfach einsichtigen Zusammenhang zwischen der DOS des kontinuierlichen und der DOS des diskreten Modells. Letztere ist bekanntlich durch  $\mathcal{N}(E) = \sum_{\mu} \rho_{\mu}(E)$  gegeben. Der tiefere Grund wird aus der oben abgeleiteten Relationen für die Normierung der Eigenfunktionen deutlich. Im diskreten Fall ist  $\langle \Psi | \Phi \rangle = \sum_{\mu} \Psi_{\mu}^* \Phi_{\mu}$ , so daß in der Regel aus der Normierung  $(\Psi | \Psi) = 1$  gerade *nicht*  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$  folgt.

☞ Folgende einfachen Umformungen sind vielleicht instruktiv, um die oben geschilderten Zusammenhänge von einem anderen Blickwinkel zu beleuchten. Sei  $(\Psi_n | \Psi_n) = 1$ . Der Index  $n$  beziehe sich auf den Eigenwert  $\varepsilon_n$ . Dann gilt für die DOS  $\mathcal{N}(\varepsilon)$  des *kontinuierlichen* Modells wegen (II.A.20)

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\varepsilon) &= \int \rho(x|\varepsilon) dx = \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) (\Psi_n | \Psi_n) = \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \\ &= \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \sum_{\mu} \mathcal{D}_{\mu} \Psi_{\mu}^*(\varepsilon_n) \Psi_{\mu}(\varepsilon_n) = \sum_{\mu} \mathcal{D}_{\mu} \underbrace{\sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \Psi_{\mu}^*(\varepsilon_n) \Psi_{\mu}(\varepsilon_n)}_{=: \rho_{\mu}(\varepsilon)} \\ &\equiv \sum_{\mu} \mathcal{D}_{\mu} \rho_{\mu}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (\text{II.A.21})$$

Die Summe  $\sum_n$  erstreckt sich hier über alle Eigenzustände des *kontinuierlichen* Modells.

## II.A.2 Fundamentallösungen $P_{\mu}$ und $\mathcal{P}_{\mu}$ der diskreten Schrödinger–Gleichung

Betrachten wir die Lösungen (Fundamentallösungen von (II.A.12), d.h. Polynome in  $z$ ) der drei–gliedrigen Rekursionsgleichung<sup>16</sup>

$$P_{\mu+1}^{(\nu)}(z) = s_{\mu+\nu}(z) P_{\mu}^{(\nu)}(z) - \tau_{\mu+\nu} P_{\mu-1}^{(\nu)}(z), \quad P_{-1}^{(\nu)} = 0, \quad P_0^{(\nu)} = \frac{1}{t_{\nu}}, \quad (\text{II.A.23})$$

mit den in (5), S. vi, definierten Parametern  $s_{\mu}$  und  $t_{\mu}$  einwenig näher. Die Rekursionsformel ist äquivalent zu der Eigenwertgleichung

$$E | \mathbf{P}^{(\nu)} \rangle = \hat{\mathcal{H}}_{\Sigma^{[\nu, \infty]}}(0; 0) | \mathbf{P}^{(\nu)} \rangle, \quad | \mathbf{P}^{(\nu)} \rangle = (P_0^{(\nu)}, P_1^{(\nu)}, \dots)^{\top}. \quad (\text{II.A.24})$$

<sup>16</sup>Die **Tschebyscheff'schen Polynome erster Art** genügen der Rekursionsrelation  $\mathcal{T}_{\mu+1}(x) = x\mathcal{T}_{\mu}(x) - \mathcal{T}_{\mu-1}(x)$ , mit den Anfangsbedingungen  $\mathcal{T}_{-1} = x, \mathcal{T}_0 = 1$ , die der **zweiten Art** dem Rekursionsgesetz  $\mathcal{U}_{\mu+1}(x) = 2x\mathcal{U}_{\mu}(x) - \mathcal{U}_{\mu-1}(x)$ , mit den Anfangsbedingungen  $\mathcal{U}_{-1} = 0, \mathcal{U}_0 = 1$ . Speziell ist  $\mathcal{U}_{\mu}(\pm 1) = (\pm 1)^{\mu}(\mu+1)$  und es gilt die Beziehung  $\mathcal{U}_{\mu}^2(x) = \mathcal{U}_{\mu+1}(x)\mathcal{U}_{\mu-1}(x) + 1$ . Zwischen beiden Arten besteht die Beziehung  $\mathcal{T}_{\mu}(x) = \mathcal{U}_{\mu}(x) - x\mathcal{U}_{\mu-1}(x)$ . Sei  $Lk(E) \in (0, \pi)$  für  $|x| < 1$  definiert durch die Beziehung  $x(E) = \cos(Lk)$ . Dann erlauben beide Polynome eine trigonometrische Darstellung

$$\mathcal{T}_{\mu}(x) = \cos(\mu Lk) = \frac{\xi_{+}^{\mu} + \xi_{-}^{\mu}}{\xi_{+} - \xi_{-}} \quad \text{und} \quad \mathcal{U}_{\mu}(x) = \frac{\sin((\mu+1)Lk)}{\sin(Lk)} = \frac{\xi_{+}^{\mu} - \xi_{-}^{\mu}}{\xi_{+} - \xi_{-}} \quad (\text{II.A.22})$$

mit  $\xi_{\pm} = x \pm i\sqrt{1-x^2}$  (s. z.B. [Gra81], Bd. II, S. 439 f.). Es gilt  $\xi_{+}\xi_{-} = 1$  für alle  $x \in \mathbb{R}$ , wobei speziell für  $|x| < 1$  noch  $|\xi_{\pm}| = 1$  gilt. Für  $|x| \geq 1$  definiert man  $x(E) = \pm \cosh(L\gamma)$  und ersetzt in (II.A.22)  $\sin(\mu Lk)$  durch  $i \sinh(\mu L\gamma)$  und  $\cos(\mu Lk)$  durch  $\pm \cosh(\mu L\gamma)$  mit  $L\gamma = iLk \in \mathbb{R} \setminus (-2, 2)$ . Für die Ableitung findet man schließlich  $\partial_x \mathcal{T}_{\mu}(x) = \mu \mathcal{U}_{\mu-1}$ .

Offensichtlich gilt

$$\langle \mu | \mathbf{P}^{(\nu)}(z) \rangle := P_\mu^{(\nu)}(z) = \frac{1}{t_\nu \cdots t_{\nu+\mu}} \det(z \mathbf{1} - \hat{\mathfrak{H}}_{\Sigma^{[\nu, \nu+\mu]}}(0; 0)), \quad \mu \in \mathbb{Z}^+. \quad (\text{II.A.25})$$

$\tilde{P}_\mu^{(\nu)}(\lambda_{\ell, r}; z)$  ergibt sich sinngemäß, wenn man in (II.A.25)  $\hat{\mathfrak{H}}_{\Sigma^{[\nu, \nu+\mu]}}(0; 0)$  durch  $\hat{\mathfrak{H}}_{\Sigma^{[\nu, \nu+\mu]}}(\lambda_{\ell, r}; 0)$  einsetzt. Die Transfer-Matrix (6), S. vi, hat für  $\nu \in \mathbb{Z}$ ,  $\mu \in \mathbb{Z}^+$ , die Form

$$\mathbf{T}_{\nu \rightarrow \mu+\nu}(E) = t_\nu \begin{pmatrix} P_{\mu+1}^{(\nu)}(E) & -P_\mu^{(\nu+1)}(E) \\ P_\mu^{(\nu)}(E) & -P_{\mu-1}^{(\nu+1)}(E) \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{T}_{\nu \rightarrow \mu+\nu}) = \frac{t_\nu}{t_{\mu+\nu+1}}.$$

Durch die Vorgabe von  $\Sigma^{[\nu, \nu+\mu]}$  ist  $P_{\mu+1}^{(\nu)}$  formal offenbar eindeutig bestimmt.

Wenn nicht explizit betont, wollen wir im Folgenden ausschließlich den Stieltjes'schen Fall betrachten, d.h. wir wählen  $\mathbf{G} = [0, n-1] \subseteq \mathbb{Z}^+$ . Am Ende dieses Abschnittes werden wir kurz darauf eingehen, wie sich der Hamburger-Fall auf die beiden Stieltjes'schen Fälle  $\hat{\mathfrak{H}}_\pm$  zurückführen läßt. Für die kontinuierliche Schrödinger-Gleichung (II.A.2) entsprechen den beiden Fundamentallösungen  $\mathcal{F}^{(1)}(x)$  und  $\mathcal{F}^{(2)}(x)$  für jeden Wert des Scharparameters  $\mathcal{E}$  wegen (II.A.9) die Fundamentallösungen  $\mathcal{F}_\mu^{(1)}$  und  $\mathcal{F}_\mu^{(2)}$  der diskreten Schrödinger-Gleichung (II.A.6). Für unsere Zwecke erscheint es uns allerdings sinnvoller

$$P_\mu(\mathcal{E}, \alpha) := K_{12}^{(0)}(\mathcal{E})\mathcal{F}_\mu^{(1)}(\mathcal{E}, \alpha) + K_{22}^{(0)}(\mathcal{E})\mathcal{F}_\mu^{(2)}(\mathcal{E}, \alpha), \quad \mathcal{P}_\mu(\mathcal{E}, \alpha) := \mathcal{F}_\mu^{(2)}(\mathcal{E}, \alpha), \quad (\text{II.A.26})$$

mit den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{-1} &= -\kappa_0 \sin(\text{sign}(K_{22}^{(0)})\alpha + \beta_0), & \mathcal{P}_0 &= -\sin(\alpha) \\ \mathcal{P}_{-1} &= -\kappa_0^2 \sin(\alpha), & \mathcal{P}_0 &= -\kappa_0 \sin(\text{sign}(K_{22}^{(0)})\alpha - \beta_0), \end{aligned}$$

als neue **Fundamentallösungen** unseren Betrachtungen zugrunde zu legen. Für  $\alpha = 0$  ergeben sich wegen  $\kappa_0 \sin(\beta_0) = 1/t_0$  gerade die oben eingeführten Polynome  $\mathcal{P}_\mu(E) := \mathcal{P}_{\mu-1}(E, 0)$  und  $P_\mu(E) := P_\mu(E, 0)$  mit den Anfangsbedingungen  $P_{-1} = 0$ ,  $P_0 = 1/t_0$  bzw.  $\mathcal{P}_{-1} = -1/t_0$ ,  $\mathcal{P}_0 = 0$ . Sie sind in der Tat zwei voneinander linear unabhängigen Lösungen von (II.A.6), da die Wronsky'sche Determinante

$$W(P_\mu, \mathcal{P}_\mu) \equiv t_{\mu+1}(P_\mu \mathcal{P}_{\mu+1} - P_{\mu+1} \mathcal{P}_\mu) = \frac{1}{t_{-\mu}} \neq 0, \quad \mu \in \mathbf{G}, \quad (\text{II.A.27})$$

von Null verschieden ist. Man beachte, daß zwei Lösungen  $\Psi(x)$  und  $\Phi(x)$  der kontinuierlichen stationären Schrödinger-Gleichung (II.A.2) für den Fall  $t_\mu(\mathcal{E}) \neq 0$  genau dann linear unabhängig sind, wenn es ihre diskreten Pendants  $\Psi_\mu$  und  $\Phi_\mu$  sind. Dies ergibt sich wegen  $\det(\mathfrak{K}^{(\mu)}(x)) = 1$  unmittelbar aus

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{W}(x)) &:= \Psi_\mathcal{E}(x)\Phi'_\mathcal{E}(x) - \Psi'_\mathcal{E}(x)\Phi_\mathcal{E}(x) = \frac{1}{\mathfrak{K}_{12}^{(\mu)}}(\Psi_{\mu-1}(\mathcal{E})\Phi_\mu(\mathcal{E}) - \Psi_\mu(\mathcal{E})\Phi_{\mu-1}(\mathcal{E})) \\ &= W(\Psi_{\mu-1}(\mathcal{E}), \Phi_{\mu-1}(\mathcal{E})), \quad x \in (x_{\mu-1}, x_\mu). \end{aligned}$$

Betrachten wir zunächst einige algebraische, d.h. technische Eigenschaften der  $P_\mu^{(\nu)}$ , welche unmittelbar auf die dreigliedrige Rekursion (II.A.23) zurückzuführen sind und somit

sowohl für den kontinuierlichen wie für den diskreten Fall gelten. Sie spielen bei einigen der im Verlauf dieser Arbeit ausgeführten Beweisen eine wichtige Rolle. Wir wollen sie an dieser Stelle aufschreiben, um später darauf verweisen zu können. Man kann somit ohne Gefahr für das weitere Verständnis auch einfach ab S. 95 weiterlesen.

**Lemma II.A.1** *Sei  $\mu, \mu', \nu \in \mathbb{Z}$  (wir erweitern den Wertebereich von  $\mathbb{Z}^+$  auf ganz  $\mathbb{Z}$ ). Es gelten die folgenden Relationen.*

$$P_{\mu-2}^{(\nu+2)} = s_\nu P_{\mu-1}^{(\nu+1)} - \tau_\nu P_\mu^{(\nu)}, \quad P_{-1}^{(\nu)} = 0, \quad P_0^{(\nu)} = \frac{1}{t_\nu}, \quad (\text{II.A.28})$$

$$P_{-\mu}^{(\nu)} = -P_{\mu-2}^{(\nu-\mu+1)}, \quad \mu \in \mathbb{N}, \quad (\text{II.A.29})$$

$$\frac{1}{t_\nu} P_{\mu-\mu'}^{(\nu+\mu')} = P_{\mu'-1}^{(\nu)} P_{\mu-1}^{(\nu+1)} - P_{\mu'-2}^{(\nu+1)} P_\mu^{(\nu)}, \quad (\text{II.A.30})$$

$$\frac{1}{t_{\nu+\mu}} P_{\mu+\mu'}^{(\nu)} = P_{\mu'}^{(\nu+\mu)} P_\mu^{(\nu)} - P_{\mu'-1}^{(\nu+\mu+1)} P_{\mu-1}^{(\nu)}. \quad (\text{II.A.31})$$

♣ ► **Beweis:** Vollständige Induktion ausgehend von Gl. (II.A.23). ♣

Es ist leicht einzusehen, daß die in diesem Lemma gefundenen Relationen ihre Gültigkeit beibehalten, wenn man die Energie  $E$  durch den entsprechenden Hamilton-Operator ersetzt. Ist  $\hat{\mathcal{H}}$  der in (II.A.6) definierte und auf  $\ell_2(\mathbb{Z}) = \ell_2(\mathbb{Z}^+) \oplus \ell_2(\mathbb{Z}^-)$  wirkende Operator, dann gilt<sup>17</sup>

$$\vec{\delta}_{\mu+\nu} = t_\nu \left( P_\mu^{(\nu)} (\hat{\mathcal{H}}) \vec{\delta}_\nu - P_{\mu-1}^{(\nu+1)} (\hat{\mathcal{H}}) \vec{\delta}_{\nu-1} \right), \quad \mu, \nu \in \mathbb{Z}. \quad (\text{II.A.32})$$

Dies zeigt man wieder am einfachsten via vollständiger Induktion. Wegen  $\hat{\mathcal{H}}_\pm = \hat{\mathcal{H}} \upharpoonright \ell_2(\mathbb{Z}^\pm)$  und  $\vec{\delta}_\mu \upharpoonright \ell_2(\mathbb{Z}^\pm) = \vec{0}$  für  $\mu \in \mathbb{Z}^\mp$ , ergibt sich aus (II.A.32) speziell

$$\vec{\delta}_\mu = t_0 P_\mu (\hat{\mathcal{H}}_+) \vec{\delta}_0, \quad \mu \in \mathbb{Z}^+, \quad \text{und} \quad \vec{\delta}_\mu = -t_0 P_\mu (\hat{\mathcal{H}}_-) \vec{\delta}_{-1}, \quad \mu \in \mathbb{Z}^-, \quad (\text{II.A.33})$$

woraus folgt, daß  $\vec{\delta}_0$  (bzw.  $\vec{\delta}_{-1}$ ) ein *zyklischer* Vektor in  $\ell_2(\mathbb{Z}^+)$  (bzw. in  $\ell_2(\mathbb{Z}^-)$ ) ist. Bei der Berechnung eines Spezialfalls der Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$  werden wir folgendes Lemma benutzen:

**Lemma II.A.2 (Christoffel–Darboux Formel)** *Sei  $\overline{P}_\mu^{(\nu)} := P_\mu^{(\nu)}(E + \Omega)$ . Dann gilt:*

$$\sum_{\tau=\alpha}^{\beta} \overline{P}_{\tau-\mu}^{(\mu)} P_{\tau-\nu}^{(\nu)} = \frac{\overline{P}_{\beta-\mu+1}^{(\mu)} P_{\beta-\nu}^{(\nu)} - \overline{P}_{\beta-\mu}^{(\mu)} P_{\beta-\nu+1}^{(\nu)}}{\overline{s}_\beta - s_\beta} - \tau_\alpha \frac{\overline{P}_{\alpha-\mu}^{(\mu)} P_{\alpha-\nu-1}^{(\nu)} - \overline{P}_{\alpha-\mu-1}^{(\mu)} P_{\alpha-\nu}^{(\nu)}}{\overline{s}_\alpha - s_\alpha}. \quad (\text{II.A.34})$$

Setzt man  $\mu = \nu = 0$  und  $\alpha = 0$ , so ergibt sich die bekannte Form der Christoffel–Darboux Formel. Für  $\mu = \nu = \alpha$  findet man im Grenzfall  $\Omega \rightarrow 0$  (vgl. z.B. [Sze39]):

$$\sum_{\tau=0}^{\mu} (P_\tau^{(\nu)}(E))^2 = t_{\mu+\nu+1} (P_{\mu+1}^{(\nu)'}(E) P_\mu^{(\nu)}(E) - P_\mu^{(\nu)'}(E) P_{\mu+1}^{(\nu)}(E)), \quad (\text{II.A.35})$$

wobei  $P_\mu^{(\nu)'}(E) = \partial P_\mu^{(\nu)}(E) / \partial E$ .

<sup>17</sup> Vgl. hierzu [Ber68], S. 512, für den Fall, wenn  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_+$  und  $\nu = 0$ , d.h. für (II.A.33)(a). Analog geht man im allgemeinen Fall vor.

♣ ► **Beweis:** Der Beweis von (II.A.34) verläuft analog dem für die Christoffel–Darboux Formel (s. z.B. [Bre80], S. 50, oder [Ale65], S. 30), nun aber ausgehend von (II.A.23). Entsprechend verfährt man bei (II.A.35). ♣

Der tiefere Grund für die Möglichkeit die gesamte Zustandsdichte (DOS)  $\mathcal{N}(E)$  als eine einfache Funktion in der Größe  $\Delta_{\tilde{N}} := \mathbf{Sp}\{\mathbf{T}_{0 \rightarrow \tilde{N}-1}\}$  (und deren Ableitung) zu schreiben, die sich als Spur der Transfer–Matrix erweist und generell eine höhere Symmetrie bezüglich den einzelnen Renormierungstransformationen  ${}^R\mathcal{M}$  besitzt, ergibt sich aus folgendem Sachverhalt:

**Lemma II.A.3** Sei  $\Delta_{\tilde{N}}(E) = t_0(P_{\tilde{N}}(E) - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}(E))$  und  $\epsilon_{\mu+\tilde{N}} = \epsilon_\mu$ ,  $t_{\mu+\tilde{N}} = t_\mu$  für alle  $\mu \in \mathbf{Z}$ . Dann gilt

$$t_0(P_{\tilde{N}} - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}) = t_\nu(P_{\tilde{N}}^{(\nu)} - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}^{(\nu)}), \quad \text{für alle } \nu = 0, \dots, \tilde{N}-1. \quad (\text{II.A.36})$$

Zwischen  $\Delta_{\tilde{N}}$  und den  $\mathcal{P}_{\tilde{N}}^{(\mu)}$  besteht der folgende Zusammenhang:

$$\frac{\partial \Delta_{\tilde{N}}(E)}{\partial E} = \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} P_{\tilde{N}-1}^{(\mu+1)}(E) \quad (\text{II.A.37})$$

♣ ► **Beweis:** Um (II.A.36) zu zeigen ersetzt man  $P_{\tilde{N}}^{(\nu)}$  via (II.A.23) und  $P_{\tilde{N}-2}^{(\nu+1)}$  mittels (II.A.28). Für alle  $\nu$  folgt dann die Aussage mittels vollständige Induktion.

Die zweite Aussage beweist man am einfachsten mittels Lemma II.A.2. Aus (II.A.35) liest man ab, daß

$$\sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} (P_\mu)^2 = t_0(P_{\tilde{N}}' P_{\tilde{N}-1} - P_{\tilde{N}-1}' P_{\tilde{N}}), \quad \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} (\mathcal{P}_\mu)^2 = t_0(\mathcal{P}_{\tilde{N}}' \mathcal{P}_{\tilde{N}-1} - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}' \mathcal{P}_{\tilde{N}})$$

gilt. Weiter folgt aus der Christoffel–Darboux–Formel (II.A.34) im Grenzfall  $\Omega \rightarrow 0$

$$\sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} P_\mu \mathcal{P}_\mu = t_0(P_{\tilde{N}}' \mathcal{P}_{\tilde{N}-1} - P_{\tilde{N}-1}' \mathcal{P}_{\tilde{N}}) \stackrel{(\text{II.A.27})}{=} t_0(P_{\tilde{N}-1}' \mathcal{P}_{\tilde{N}} - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}' P_{\tilde{N}})$$

Eliminiert aus diesen drei Ausdrücken die entsprechenden Ableitungen, so ergibt sich zunächst (vgl. [Tod89], S. 105, oder [Moe76], S. 47)

$$\frac{\partial \Delta_{\tilde{N}}}{\partial E} = t_0^2 \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} \{ (P_\mu)^2 \mathcal{P}_{\tilde{N}} - P_\mu \mathcal{P}_\mu (P_{\tilde{N}} + \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}) + (\mathcal{P}_\mu)^2 P_{\tilde{N}-1} \}. \quad (\text{II.A.38})$$

Wir werden später noch auf diese Beziehung zurückkommen. Doch nun zum Beweis von (II.A.37)! Mit den in Lemma II.A.1 gefundenen beiden letzten Ausdrücke ergibt sich sofort

$$\frac{\partial \Delta_{\tilde{N}}}{\partial E} = t_0 \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} \{ P_\mu P_{\tilde{N}-\mu-1}^{(\mu+1)} - P_{\mu-1}^{(1)} P_{\tilde{N}-\mu-2}^{(\mu+1)} \} = \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} P_{\tilde{N}-1}^{(\mu+1)},$$

womit unser Lemma bewiesen wäre. ♣

Dieses Lemma läßt sich entsprechend für den kontinuierlichen Fall verallgemeinern. Die sog. **Hill–Diskriminante**  $\Delta(\varepsilon) := \mathcal{F}^{(1)}(x_{\tilde{N}}) + \mathcal{F}^{(2)}(x_{\tilde{N}} - 0)$  (= Spur der Monodromy–Matrix<sup>18</sup>) hat die interessante Eigenschaft, daß

$$\Delta(\varepsilon) := \mathcal{F}^{(1)}(x_{\tilde{N}}) + \mathcal{F}^{(2)}(x_{\tilde{N}} - 0) = t_0(P_{\tilde{N}}(\varepsilon) - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}(\varepsilon)) =: \Delta_{\tilde{N}}(\varepsilon), \quad (\text{II.A.39})$$

gilt, wobei von (II.A.9) und der darauf folgenden Gleichung, sowie von der Definition (II.A.26), Gebrauch gemacht wurde.  $\Delta_{\tilde{N}}(\varepsilon)$  ist aber gerade die Hill’sche Diskriminante der *diskreten* Schrödinger–Gleichung (II.A.6) für ein gegebenes  $\varepsilon$ . Zusammen mit der Kenntnis von (II.A.7) läßt sich somit das *Spektrum*  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}})$  von (II.A.2) allein durch die Untersuchung der Eigenschaften der Diskriminanten  $\Delta_{\tilde{N}}(\varepsilon)$  bestimmen. Dieser Zusammenhang läßt vermuten, daß es ein Analogon zu Lemma II.A.3 für das kontinuierliche Modell geben sollte. In der Tat finden wir

**Lemma II.A.4** *Seien  $\epsilon_{\mu+N} = \epsilon_\mu$  und  $t_{\mu+N} = t_\mu$ . Dann gilt*

$$\frac{\partial \Delta_{\tilde{N}}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = - \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} \mathcal{D}_\mu(\varepsilon) \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}^{(\mu)}(\varepsilon), \quad \Delta_{\tilde{N}}(\varepsilon) = t_0(\varepsilon) (P_{\tilde{N}}(\varepsilon) - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}(\varepsilon)). \quad (\text{II.A.40})$$

► **Beweis:** Der Beweis basiert im Wesentlichen auf unserer “Poincaré–Darstellung” der Green’schen Formel. Seien  $\Psi(x)$  und  $\Phi(x)$  Eigenfunktionen von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{aKP}}$  auf dem Intervall  $[x_0, x_{\tilde{N}}]$ . Dann liefert die Green’sche Formel (II.A.15) ( $\varepsilon' = \varepsilon + \Delta\varepsilon$ )

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{\tilde{N}}} \Psi_\varepsilon(x) \Phi_{\varepsilon'}(x) dx &\stackrel{(\text{II.A.17})}{=} - \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} \mathcal{D}_\mu(\varepsilon) \Psi_\mu(\varepsilon) \Phi_\mu(\varepsilon) + \mathcal{R}_{\tilde{N}} - \mathcal{R}_0 \\ &= \lim_{\Delta\varepsilon \rightarrow 0} \frac{W(\Psi_\mu(\varepsilon), \Phi_\mu(\varepsilon')) \Big|_{-1}^{\tilde{N}-1} - (\chi_\mu(\varepsilon) - \chi_\mu(\varepsilon')) \Big|_0^{\tilde{N}}}{\Delta\varepsilon}. \end{aligned}$$

Damit findet man<sup>19</sup> ( $' \equiv \frac{d}{d\varepsilon}$  und  $\mathcal{R} := \mathcal{R}_{\tilde{N}} - \mathcal{R}_0$ )

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{\tilde{N}}} (P(x))^2 dx &= \sum_{\mu=1}^{\tilde{N}-1} (P_\mu)^2 \mathcal{D}_\mu + \mathcal{R}_A = P_{\tilde{N}}(t_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}-1})' - t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}-1} \mathcal{P}'_{\tilde{N}} - \chi'_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}}, \\ \int_{x_0}^{x_{\tilde{N}}} (\mathcal{P}(x))^2 dx &= \sum_{\mu=1}^{\tilde{N}-1} (\mathcal{P}_\mu)^2 \mathcal{D}_\mu + \mathcal{R}_B = \mathcal{P}_{\tilde{N}}(t_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}-1})' - t_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}-1} \mathcal{P}'_{\tilde{N}} - \chi'_{\tilde{N}} (\mathcal{P}_{\tilde{N}})^2, \\ \int_{x_0}^{x_{\tilde{N}}} P(x) \mathcal{P}(x) dx &= \sum_{\mu=1}^{\tilde{N}-1} P_\mu \mathcal{P}_\mu \mathcal{D}_\mu + \mathcal{R}_C = P_{\tilde{N}}(t_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}-1})' - t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}-1} \mathcal{P}'_{\tilde{N}} - \chi'_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}}. \end{aligned}$$

<sup>18</sup>Die **Monodromy–Matrix**  $M$  ist durch die periodische Randbedingung  $\tilde{\Psi}(x+L) = M\tilde{\Psi}(x)$  definiert. Ihre Einträge sind gerade die Fundamentallösungen  $\mathcal{F}^{(i)}(x_N)$  und deren Ableitungen.

<sup>19</sup>Man beachte, daß sowohl  $P_\mu$  als auch  $\mathcal{P}_\mu$  Eigenfunktionen von  $\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma}(0;0)$  sind. Analoges gilt für ihre kontinuierlichen Pendanten  $P(x)$  und  $\mathcal{P}(x)$ . Deshalb ist die Green’sche Formel anwendbar. Entsprechend kann man zeigen, daß die Christoffel–Darboux–Formel aus Lemma II.A.2 eine direkte Folge der diskreten Form der Green’schen Formel ist. Damit wird auch das negative Vorzeichen klar, welches sich unmittelbar auf das verschiedene Vorzeichen von (II.A.15) und (II.A.16) zurückführen läßt.

Differenziert man die Wronskysche Determinante  $W(P_{\tilde{N}-1}, \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}) = 1$  nach  $\mathcal{E}$  so ergibt sich

$$(t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}-1})' \mathcal{P}_{\tilde{N}} - (t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}})' \mathcal{P}_{\tilde{N}-1} = -\left(P_{\tilde{N}-1} (t_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}})' - P_{\tilde{N}} (t_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}-1})'\right).$$

Aus den letzten vier Gleichungen eliminiert man  $(t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}-1})'$  und  $(t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}})'$  und erhält

$$\begin{aligned} (t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}})' &= t_{\tilde{N}}^2 \left( P_{\tilde{N}} \sum_{\mu=1}^{\tilde{N}-1} P_{\mu} \mathcal{P}_{\mu} \mathcal{D}_{\mu} - \mathcal{P}_{\tilde{N}} \sum_{\mu=1}^{\tilde{N}-1} (P_{\mu})^2 \mathcal{D}_{\mu} \right) \\ &\quad + t_{\tilde{N}}^2 (P_{\tilde{N}} \mathcal{R}_C - \mathcal{P}_{\tilde{N}} \mathcal{R}_A) + \chi'_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}}, \\ (t_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}-1})' &= t_{\tilde{N}}^2 \left( P_{\tilde{N}-1} \sum_{\mu=1}^{\tilde{N}-1} (P_{\mu})^2 \mathcal{D}_{\mu} - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1} \sum_{\mu=1}^{\tilde{N}-1} P_{\mu} \mathcal{P}_{\mu} \mathcal{D}_{\mu} \right) \\ &\quad + t_{\tilde{N}}^2 (P_{\tilde{N}-1} \mathcal{R}_B - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1} \mathcal{R}_C) + \chi'_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}}. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich nach einiger einfacher Rechnung

$$\frac{\Delta_{\tilde{N}}(\mathcal{E})}{\partial \mathcal{E}} = \left( t_{\tilde{N}} (P_{\tilde{N}} - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}) \right)' = -t_{\tilde{N}}^2 \sum_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} \left( \mathcal{P}_{\tilde{N}} (P_{\mu})^2 + P_{\tilde{N}-1} (\mathcal{P}_{\mu})^2 - (P_{\tilde{N}} + \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}) P_{\mu} \mathcal{P}_{\mu} \right) \mathcal{D}_{\mu}. \quad (\text{II.A.41})$$

Die rechte Seite ist aber, abgesehen vom Vorzeichen<sup>20</sup> und dem Gewicht  $\mathcal{D}_{\mu}$ , gerade der Ausdruck (II.A.38). Damit verläuft der Rest des Beweises völlig analog zu dem von Lemma II.A.3, womit die Behauptung gezeigt ist. ♣

Nach diesem kleinen Exkurs technischer Details zurück zu den Eigenwertgleichungen (II.A.24) für die Fundamentallösungen. Man kann sie als Eigenvektoren der Hamilton-Operatoren  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}$  in  $\mathbb{H} = \ell_2(\mathbb{Z}^{\pm})$  für die entsprechenden Halbachsenprobleme auffassen, d.h. es gilt

$$\hat{\mathcal{H}}_{+} |P(z)\rangle = z |P(z)\rangle \quad \text{und} \quad \hat{\mathcal{H}}_{-} |\mathcal{P}(z)\rangle = z |\mathcal{P}(z)\rangle. \quad (\text{II.A.42})$$

<sup>20</sup>Wir wollen kurz die Diskussion des Vorzeichens von  $\Delta'_{\tilde{N}}(E)$ , wie man sie z.B. bei Toda [Tod89, S. 105] findet, auf den kontinuierlichen Fall ausdehnen. Der in Klammern stehende Ausdruck von (II.A.41) läßt sich mit den in Lemma II.A.3 gefundenen Relationen nach etwas Rechnung leicht auf folgende Form bringen (vgl. [Tod89], S. 105):

$$t_{\tilde{N}}^2(\dots) = \mathcal{P}_{\tilde{N}} \left( \frac{(\mathcal{P}_{\tilde{N}-\mu}^{(\mu)} + \mathcal{P}_{\tilde{N}+\mu})^2}{2\mathcal{P}_{\tilde{N}}} - \frac{\mathcal{P}_{\mu}}{4t_{\tilde{N}}^2 (P_{\tilde{N}})^2} (\Delta_{\tilde{N}}^2 - 4) \right).$$

Man erkennt, daß das Vorzeichen von  $(\dots)$  für  $\Delta_{\tilde{N}}^2 - 4 < 0$  (Energie *im* Band) allein durch  $\mathcal{P}_{\tilde{N}}$  bestimmt wird. Außerdem ist in diesem Fall  $\mathcal{P}_{\tilde{N}}$  nie Null, da sonst wegen  $W(P_{\tilde{N}-1}, \mathcal{P}_{\tilde{N}-1}) = 1$  die Beziehung  $P_{\tilde{N}} \mathcal{P}_{\tilde{N}-1} = -1/t_{\tilde{N}}$  gelten würde, aus der aber  $|\Delta_{\tilde{N}}| = |t_{\tilde{N}}(P_{\tilde{N}} - \mathcal{P}_{\tilde{N}-1})| = |t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}} + 1/(t_{\tilde{N}} P_{\tilde{N}})| \geq 2$  im Widerspruch zur Annahme folgt. Diese Aussage gilt sowohl für das Tight-Binding-Modell als auch für das kontinuierliche. Aus dieser Betrachtung ergibt sich weiter für den Tight-Binding-Fall, daß sich das Vorzeichen von  $\Delta'_{\tilde{N}}(E)$  nur in der Region  $\Delta_{\tilde{N}}^2 - 4 \geq 0$  ändern kann. Daraus folgt z.B. die bekannte Tatsache, daß die Energiewerte der Extrema von  $\Delta_{\tilde{N}}(E)$  immer in einem Gap liegen müssen, bzw. im Extremfall wenn sich ein Gap schließt (“*gap-closing*”) bei  $\Delta_{\tilde{N}}(E) = \pm 2$ . Diese Situation ändert sich im kontinuierlichen Fall. Hier ist die für den Tight-Binding-Fall gültige Schlussweise i.a. nicht mehr richtig, da das Vorzeichen von  $\Delta'_{\tilde{N}}(\mathcal{E})$  nun zusätzlich von den Gewichten  $\mathcal{D}_{\mu}$  abhängt.

Zu  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}$  gehören die (verallgemeinerten) Spektralzerlegungen der Einheit<sup>21</sup> (für  $i = 0$  setzt man  $\mu, \nu \in \mathbb{Z}^+$ , für  $i = -1$  dementsprechend  $\mu, \nu \in \mathbb{Z}^-$ )

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{E}}_{\pm}(\omega) &= \int_{\omega} \hat{\mathcal{P}}_{\pm}(E) d\varrho_{\pm}(E), \\ \langle \hat{\mathcal{E}}_{\pm}(\omega) \vec{\delta}_{\mu} | \vec{\delta}_{\nu} \rangle_{\mathbb{H}_0} &= t_0^2 \int_{\omega} P_{\mu+i}^{(-i)}(E) P_{\nu+i}^{(-i)}(E) d\rho_{\pm}(E),\end{aligned}\quad (\text{II.A.43})$$

mit  $d\rho_{\pm}(E) := d\langle \hat{\mathcal{E}}_{\pm}(E) \vec{\delta}_i | \vec{\delta}_i \rangle_{\ell_2} = \langle \hat{\mathcal{P}}_{\pm}(E) \vec{\delta}_i | \vec{\delta}_i \rangle_{\ell_2} d\varrho_{\pm}(E)$ . Beide Radon–Maße sind zueinander äquivalent<sup>22</sup>, d.h. es ist  $\rho_{\pm}(E) \approx \varrho_{\pm}(E)$ . Der Operator  $\hat{\mathcal{P}}_{\pm}(E)$  entspricht dem (verallgemeinerten) Projektor<sup>23</sup>, welcher  $\Phi = \ell_2(\mathbb{Z}^{\pm}, m_{\mu})$  auf die Eigenmannigfaltigkeit von  $E$  im zugehörigen konjugierten Raum  $\Phi^{\times} = \ell_2(\mathbb{Z}^{\pm}, 1/m_{\mu})$  abbildet. Da für  $\rho_{\pm}$ –fast alle Energiewerte  $E$

$$\|P_{\mu+i}^{(-i)}(E)\|_{\Phi^{\times}} = \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^{\pm}} \frac{|P_{\mu+i}^{(-i)}(E)|^2}{(|\mu| + 1)^{1+2\delta}} < \infty, \quad \text{mit } \delta > 0,$$

gilt, kann man  $|\mathcal{P}\rangle$  bzw.  $|\mathcal{P}\rangle$  als den *gewöhnlichen* Eigenvektor von  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}^{\times}$  in  $\ell_2(\mathbb{Z}^{\pm}, 1/m_{\mu})$  auffassen [Ber68, S. 510/359ff.]. In Ortsdarstellung lauten die Resolventen

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{G}}_{\pm}(z) &= (z - \hat{\mathcal{H}}_{\pm})^{-1}, \\ \langle \hat{\mathcal{G}}_{\pm}(z) \vec{\delta}_{\mu} | \vec{\delta}_{\nu} \rangle_{\mathbb{H}_0} &= t_0^2 \int_{\mathbb{R}} \frac{P_{\mu+i}^{(-i)}(E) P_{\nu+i}^{(-i)}(E)}{z - E} d\rho_{\pm}(E).\end{aligned}$$

Die Umkehrung, d.h. die Bestimmung des Maßes bei Vorgabe der Green’schen Funktion, ergibt sich aus der Stone’schen Formel [Ree72–I, S. 237/264]. Somit gilt

**Theorem II.A.1 (Favard [Fav35]<sup>24</sup>)** Sei  $t_{\mu} \neq 0$  und  $\epsilon_{\mu} \in \mathbb{R}$  endlich für alle  $\mu$ , d.h.  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}$  ist selbstadjungiert, und alle<sup>25</sup>

$$P_{\mu+i}^{(-i)}(E) \in \mathbf{L}^2([a, b], d\rho_{\pm}(E)), \quad \text{mit} \quad \int_a^b \frac{d\rho_{\pm}(E)}{1 + |E|} < \infty, \quad \mu \in \mathbb{Z}^{\pm}.\quad (\text{II.A.44})$$

Dann sind folgende Aussagen zueinander äquivalent:

- Die “orthogonalen Polynome”  $P_{\mu}(E) \in \ell_{2,0}$  genügen der dreigliedrigen Rekursionsrelation

$$t_{\mu+1} P_{\mu+i+1}^{(-i)}(E) = (E - \epsilon_{\mu}) P_{\mu+i}^{(-i)}(E) - t_{\mu} P_{\mu+i-1}^{(-i)}(E), \quad P_{i-1}^{(-i)} = 0, \quad P_i^{(-i)} = \frac{1}{t_i}, \quad (\text{II.A.45})$$

<sup>21</sup>Zur Herleitung beachte man, daß in  $\mathbb{H} = \ell_2(\mathbb{Z}^{\pm})$  aus (II.A.33) gerade  $\vec{\delta}_{\mu} = t_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} P_{\mu+i}^{(-i)}(E) d\hat{\mathcal{E}}_{\pm}(E) \vec{\delta}_i$  mit  $\mu \in \mathbb{Z}^{\pm}$  folgt.

<sup>22</sup>D.h. beide Maße besitzen dieselben Nullmengen. Zur Definition s. z.B. [Bau92] oder wieder in unserem kleinen Brevier [Wal2003].

<sup>23</sup>S. [Ber68], oder z.B. [Wal2003].

<sup>24</sup>Vgl. z.B. [Bre80], S. 43, [Ale65], S. 30 oder [Chi78].

<sup>25</sup>Vergleiche hierzu Fußnote 38, auf S. 102.

mit jeweils  $t_i^2 = \langle \hat{\mathcal{E}}_{\pm}(E) \vec{\delta}_i | \vec{\delta}_i \rangle_{t_2}$  und

$$t_{\mu} = \int_a^b P_{\mu+i-1}^{(-i)}(E) P_{\mu+i}^{(-i)}(E) E d\rho_{\pm}(E) = \frac{\int_a^b E^{\mu} P_{\mu+i}^{(-i)}(E) d\rho_{\pm}(E)}{t_0 \cdots t_{\mu-1}},$$

$$\epsilon_{\mu} = \int_a^b (P_{\mu+i}^{(-i)}(E))^2 E d\rho_{\pm}(E), \quad \mu \in \mathbb{Z}^{\pm}. \quad (\text{II.A.46})$$

- Es existiert ein reellwertiges, nichtabnehmendes und beschränktes Radon-Maß<sup>26</sup>  $\rho_{\pm}(E)$ , mit unendlich vielen Wachstumsstellen, bezüglich dessen die Polynome  $P_{\mu+i}^{(-i)}(E)$  zueinander orthogonal sind, d.h. es gilt für  $\mu, \nu \in \mathbb{Z}^{\pm}$ :

$$\left( \int_a^b d\rho_{\pm}(E) | \mathbf{P}^{(-i)} \rangle \langle \mathbf{P}^{(-i)} | \right)_{\mu\nu} \equiv \int_a^b P_{\mu+i}^{(-i)}(E) P_{\nu+i}^{(-i)}(E) d\rho_{\pm}(E) = \delta_{\mu\nu}. \quad \clubsuit \quad (\text{II.A.47})$$

Da alle  $P_{\mu}^{(\nu)}(E)$  der Rekursionsformel (II.A.23) mit den Anfangsbedingungen  $P_0^{(\nu)} = 0, P_1^{(\nu)} = 1/t_{\nu}$  genügen, ergibt sich zusammen mit dem Theorem von Favard, daß jedes  $\{P_{\mu}^{(\nu)}\}_{\mu \in G}$  ein weiteres System von bezüglich dem entsprechenden Maß  $d\rho^{(\nu)}(E)$  orthogonalen Polynomen ist. Polynome mit verschiedenem  $\nu$  sind jedoch nicht zueinander orthogonal.

♣ ► **Beispiel:** Betrachten wir den Fall eines Kristalls mit einer  $\tilde{N}$ -atomigen Einheitszelle. Die meisten Details hierzu findet man bei [Kat83, Kat86] und [Lov91, Lan96]. Dort wird jeweils das Radon-Maß  $d\rho(E)$  zu beliebigen periodischen Approximanten konstruiert, d.h. in der Jacobi-Matrix setzt man  $\epsilon_{\mu+\tilde{N}} = \epsilon_{\mu}$  und  $t_{\mu+\tilde{N}} = t_{\mu}$  (diskrete Hill'sche Gleichung). Sei  $(\hat{\mathcal{T}}\psi)_{\mu} = \Psi_{\mu+1}$ . Dann läßt sich die Bedingung dafür, daß  $\hat{\mathcal{T}}^{\tilde{N}}$  und  $\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma[0, \tilde{N}-1]}(0; \xi^{\pm})$  miteinander vertauschen, durch die offene Riemann'sche Fläche

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_0 &:= \{ (z, \xi) \in \mathbb{C}^2 \mid \hat{\mathcal{T}}^{\tilde{N}} |\psi\rangle = \xi |\psi\rangle, \hat{\mathcal{H}}_{\Sigma[0, \tilde{N}-1]}(\xi, \xi^*) |\psi\rangle = z |\psi\rangle \text{ für } |\psi\rangle \neq 0 \} \\ &= \{ (z, \xi) \in \mathbb{C}^2 \mid t \det(z \mathbf{1} - \hat{\mathcal{H}}_{\Sigma[0, \tilde{N}-1]}(\xi, \xi^*)) = -(\xi + \xi^*) + \Delta_{\tilde{N}} = 0 \} \end{aligned} \quad (\text{II.A.48})$$

parametrisieren, mit  $t = \prod_{\mu=0}^{\tilde{N}-1} t_{\mu}$ . Sei  $\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 \cup \{P, Q\}$ , wobei  $P$  (bzw.  $Q$ ) derjenige Punkt bei  $z = \infty$  auf der Riemannschen Fläche  $\mathcal{R}$  ist, für den  $\xi = \infty$  (bzw.  $= 0$ ) gilt.  $\mathcal{R}$  ist eine hyperelliptische Kurve vom Genus<sup>27</sup>  $\tilde{N} - 1$ , deren reellen Verzweigungspunkte durch die Nullstellen von  $\Delta_{\tilde{N}}(z) \pm 2$  gegeben sind. Zerlegt man  $\mathcal{R}$  gemäß  $\mathcal{R} = \mathcal{R}_+ \cup \mathcal{R}_{\mathbb{R}} \cup \mathcal{R}_-$ , mit  $\mathcal{R}_{\pm} = \{z \in \mathcal{R} \mid |\xi(z)| \geq 1\}$  und  $\mathcal{R}_{\mathbb{R}} = \{z \in \mathcal{R} \mid |\xi(z)| = 1\}$ , so daß  $P \in \mathcal{R}_+$  und  $Q \in \mathcal{R}_-$  gilt, dann sind die Projektionen von  $\mathcal{R}_{\pm}$  auf die komplexe Zahlenebene biholomorph auf der Schnittebene  $(\mathbb{C} \cup \{\infty\}) \setminus \bigcup_{n=1}^{\tilde{N}} [E_{2n-1}, E_{2n}]$ , d.h. jedem  $z$  auf der Schnittebene läßt sich genau ein  $z_+$  auf  $\mathcal{R}_+$  und ein  $z_-$  auf  $\mathcal{R}_-$  zuordnen. Die beiden Lösungen von (II.A.48) lauten

$$\xi_{\pm}(z) = \frac{\Delta_{\tilde{N}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta_{\tilde{N}}}{2}\right)^2 - 1}, \quad (\text{II.A.49})$$

<sup>26</sup>Bekanntlich läßt sich mittels *Gram-Schmidt*'schem Verfahren (s. z.B. [Ach77, S. 16f.] oder [Ree72-I, S. 46]) aus dem Basissystem  $\{E^{\mu}\}_{\mu}$  ein System orthonormaler Polynome  $\{P_{\mu}\}_{\mu}$  konstruieren. Als Kriterium für die Eindeutigkeit des Maßes genügt hier, daß  $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}$  (Stieltjes-Fall) ein selbstadjungierter Operator ist [Nus65], dann konvergiert die zugehörige Kettenbruchentwicklung der Stieltjes-Transformierten  $m^{\pm}(z)$  (s. unten), so daß  $\rho_{\pm}(E)$  bis auf die höchstens abzählbar viele Sprungstellen, eindeutig festgelegt ist.

<sup>27</sup>Den speziellen Fall  $\tilde{N} = \infty$  findet man z.B. bei [McK76] betrachtet, vgl. hierzu auch [Dub76].



**Exkurs:** Bevor wir fortfahren können, müssen wir die wichtigsten Eigenschaften der Nullstellen der Polynome  $\Delta_{\tilde{N}}(E)$  und  $P_{\mu}^{(\nu)}(E)$  zusammentragen. Wir setzen im Folgenden  $t_{\mu} \neq 0, \epsilon_{\mu} \in \mathbb{R}$  für alle  $\mu$  voraus.

**Lemma II.A.5** ([Bre80], S. 58; [Ass87], S. 46, [Tod89], S. 105) *Sei  $\mathcal{E}$  beliebig, aber fest vorgegeben. Dann gilt: Die Nullstellen von  $P_{\mu}(E)$  und  $\mathcal{P}_{\mu}(E)$  sind jeweils reell und einfach. Zwei aufeinanderfolgende Nullstellen von  $P_{\mu}(E)$  sind getrennt durch eine Nullstelle von  $\mathcal{P}_{\mu}(E)$  (die aber mit einer der vorgenannten Nullstellen zusammen fallen kann) und umgekehrt. Zwei aufeinanderfolgende Nullstellen von  $P_{\mu+1}(E)$  ( $\mathcal{P}_{\mu+1}(E)$ ) sind getrennt durch eine Nullstelle von  $\mathcal{P}_{\mu}(E)$  ( $\mathcal{P}_{\mu}(E)$ ) und umgekehrt<sup>29</sup>. Seien  $\{q_n^{\pm}\}_{n=1}^{\tilde{N}}$  die Nullstellen von*

$$\Delta_{\tilde{N}}(E) \pm 2 = \frac{1}{t_0 \cdots t_{\tilde{N}-1}} \det(E\mathbb{I} - \hat{\mathcal{H}}_{\Sigma^{[0, \tilde{N}-1]}}(0; \xi_{\ell, r})), \quad \xi_{\ell} = \xi_r = \pm 1,$$

$\{\delta_n\}_{n=1}^{\tilde{N}}$  mit endlichem  $\tilde{N}$  diejenigen von  $\partial\Delta_{\tilde{N}}/\partial E$ , sowie  $\{p_n^{(\nu)}\}_{n=1}^{\tilde{N}-1}$ ,  $\nu = 0, \dots, \tilde{N}-1$ , die Nullstellen von  $P_{\tilde{N}-1}^{(\nu)}(E)$ . Dann gilt: Die Nullstellen  $\{q_n^{\pm}\}_{n=1}^{\tilde{N}}$  von  $\Delta_{\tilde{N}}(E) \pm 2$  sind sämtlich reell und von höchstens zweiter Ordnung. Die Nullstellen  $\{\delta_n\}_{n=1}^{\tilde{N}}$  von  $\partial\Delta_{\tilde{N}}/\partial E$  sind sämtlich reell und einfach und genügen der folgenden Ordnungskette<sup>30</sup>:

$$\begin{aligned} q_{\tilde{N}}^{-} > q_{\tilde{N}}^{+} \geq p_{\tilde{N}-1}^{(\nu)}, \delta_{\tilde{N}-1} \geq q_{\tilde{N}-1}^{+} > q_{\tilde{N}-1}^{-} \geq p_{\tilde{N}-2}^{(\nu)}, \delta_{\tilde{N}-2} \geq \cdots \\ \cdots \geq p_1^{(\nu)}, \delta_1 \geq \begin{cases} q_1^{-} > q_1^{+}, & \tilde{N} \text{ ungerade} \\ q_1^{+} > q_1^{-}, & \tilde{N} \text{ gerade} \end{cases} \quad \clubsuit \quad (\text{II.A.50}) \end{aligned}$$

Die Intervalle  $I_n = [q_n^{\pm}, q_n^{\mp}]$  sind die oben genannten Bänder im Spektrum, d.h. es gilt  $\sigma_{\text{ac}}(\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma^{[0, \tilde{N}-1]}}(0; \xi_{\ell, r})) = \bigcup_{n=1}^{\tilde{N}} I_n$ . Damit besagt (II.A.50), daß sämtliche Nullstellen  $\{p_n^{\pm}\}_{n=1}^{\tilde{N}-1}$  der Polynome  $P_{\tilde{N}-1}^{(\nu)}(E)$ , mit  $\nu = 0, \dots, \tilde{N}-1$ , in den Bandlücken liegen. Es kann allerdings nicht ausgeschlossen werden, daß einige dieser Nullstellen mit den Bandkanten zusammenfallen. Der Fall  $q_{n-1}^{\pm} = q_n^{\pm}$  entspricht einem Verschmelzen (kein Überlappen) zweier Bänder (sog. “**gap-closing**”<sup>31</sup>). Die Bedingung  $\partial\Delta_{\tilde{N}}/\partial E = 0$  entspricht dem Auftreten von *doppelten* Nullstellen bei den Polynomen  $\Delta_{\tilde{N}} \pm 2$  (“*gap-closing*”). Es ist im allgemeinen keine einfache Frage die Existenz solcher gap-closings zu klären. Exemplarisch seien einige in der Literatur allgemein bekannte Fälle genannt:

- Almost–Mathieu Gleichung: Wenn  $\alpha = p/q \in \mathbb{Q}$  und  $q\omega/\pi \notin \mathbb{Z}$ , dann sind *alle* Bandlücken offen. Ist  $\omega = 0$ ,  $p$  ungerade und  $q = 4m$ , dann ist *eine* Bandlücke geschlossen.
- Bei den periodischen Approximanten der *perioden-verdoppelnden* Kette (Diagonal–Modell) bleiben, ebenso wie für die Fibonacci–Ketten, im Grenzfall  $\tilde{N} \rightarrow \infty$  *sämtliche* Bandlücken geöffnet [Bel91].
- Etwas interessanter sind in dieser Hinsicht die in Kapitel I beschriebenen Thue–Morse Ketten. Die “Spurabbildung” (vgl. Kapitel III.4) hat hier die Form [Axe95]

$$x_{n+2} - 2 = (x_{n+1} - 2)x_n^2, \quad x_n = \mathbf{Sp}\{T_{0 \rightarrow 2^n}\}.$$

<sup>29</sup>Man kann diese Aussagen unmittelbar dahingehend erweitern, daß man die Aussagen entsprechend auf die Paare  $(P_{\mu}^{(\nu)}, P_{\mu-1}^{(\nu+1)})$  überträgt.

<sup>30</sup>In [Ass87] wird der Beweis für  $\nu = 0, 1$ , geführt. Die Verallgemeinerung auf beliebige  $\nu$  ergibt sich aber daraus unschwer wenn man (II.A.36) berücksichtigt.

<sup>31</sup>Das sind Nullstellen zweiter Ordnung, die genau dann auftreten, wenn  $\Delta'_{\tilde{N}}(E) = 0$  gilt.

Man erkennt, daß  $x_n(E)$  ein Polynom der Ordnung  $2^n$  ist und  $x_{n+2} - 2$  doppelte Nullstellen bei den  $2^n$  einfachen Nullstellen von  $x_n$  besitzt. Man kann in der Tat zeigen, daß  $1/4$  aller Gaps geschlossen sind.

Die dazugehörigen Eigenfunktionen besitzen, bis auf die jeweiligen nicht-periodischen Lösungen an den Bandkanten<sup>32</sup>, für alle Energiewerte, die Bloch-Darstellung (vgl. z.B. [Lan96])

$$\phi_\mu^\pm := \xi_{\mp}^{\mu/\tilde{N}} \Psi_\mu^\pm = e^{\mp \mu w(z)} \Psi_\mu^\pm, \quad \phi_{\mu+\tilde{N}}^\pm = \phi_\mu^\pm, \quad (\text{II.A.51})$$

wobei wir  $\tilde{L} = \tilde{N}$  setzten. Für reelles  $E$  zerlegt man die sog.  $w(z)$ -Funktion (Floquet-Exponent) gemäß

$$w(E) := \gamma(E) - ik(E) \in \mathbb{C}, \quad \gamma(E) \geq 0, \quad k(E) \in [-\pi, \pi), \quad (\text{II.A.52})$$

mit reellem  $\gamma(E)$  und  $k(E)$ . Für komplexes  $z$  ergibt sich  $w(z)$  daraus durch entsprechende analytische Fortsetzung. Offensichtlich beschreibt  $\gamma(E)$  (*Ljapunov-Exponent*) die Änderung der Amplitude  $|\Psi_\mu^\pm|$ , wenn  $\mu$  um eine Periode  $\tilde{N}$  vergrößert wird, und  $k(E)$  die entsprechende Phasenänderung.

Nach diesem Exkurs zurück zu unserer periodischen Struktur! Ist  $\rho_n = \text{Res}_{p_n^-} \{m^+(z)\}$  das Residuum von  $m^+(z)$  bei  $p_n^- \in \mathcal{R}_-$ , dann ist [Kat83, Lan96]

$$\rho_i = 0 \quad \text{oder} \quad \rho_i = -\frac{\sqrt{\Delta_N^2(p_i^-) - 4}}{t \prod_{i \neq j} (p_i - p_j)} > 0, \quad i = 1, \dots, \tilde{N}.$$

Die dazu gehörenden Zustände entsprechen den Oberflächenzuständen, während  $d\rho_{ac}(E)$  der Spektralanteil für die Bloch-artigen “*bulk*”-Zustände ist. Das Radon-Maß  $d\rho(E)$ , bezüglich dessen die Polynome  $P_\mu(E)$  orthogonal sind und dessen Stieltjes-Transformierte  $m^+(z)$  ist, ist gegeben durch

$$d\rho(E) = d\rho_{pp}(E) + d\rho_{ac}(E) \quad (\text{II.A.53})$$

mit

$$\begin{aligned} d\rho_{pp}(E) &= \sum_{i=1}^{\tilde{N}} \rho_i \delta(E - p_i) dE \\ d\rho_{ac}(E) &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{i=1}^{\tilde{N}} \chi_{[E_{2i-1}, E_{2i}]}(E) \frac{\sqrt{\Delta_N^2(E) - 4}}{t_0 P_N(E)} dE. \end{aligned} \quad (\text{II.A.54})$$

$\chi_A(E)$  ist wieder die charakteristische Funktion. Vergleicht man dieses Resultat mit (II.A.46) so sieht man unmittelbar ein, daß sich die Parameter  $\epsilon_\mu$  und  $t_\mu$  nicht allein aus den Spektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma[0, N-1]}(0; \xi^\pm)) = \text{supp}(\rho_{ac})$  (Bloch'sche Randbedingungen!) rekonstruierbar ist, sondern zusätzlich der Kenntnis des “*Hilfsspektrums*” bedarf<sup>33</sup>. Diese Tatsache wird uns bei

<sup>32</sup>I.a. gehört zu einer Kante eines Bandes jeweils eine periodische (oder antiperiodische) Lösung, während dann die andere Kante einer nicht-periodischen Lösung zugeordnet werden kann.

<sup>33</sup>Sog. *inverses Spektralproblem*, vgl. hierzu auch [Tod89], Kap 4 bzw. [Dat76, Mar75, Moe79]. In [Moe79] zeigen die Autoren ausserdem den engen Zusammenhang zwischen den hier betrachteten periodischen Jacobi-Matrizen und gewisser orthogonaler Systeme von meromorphen Funktionen (abelsche Integrale) auf bestimmten hyperelliptischen Kurven und der damit einhergehenden (multidimensionalen) Riemannschen Theta-Funktion auf (vgl. a. [Igu92]).

der Untersuchung der Beziehung zwischen Substitutionen und der zugehörigen Ortsraum-Renormierung in anderem Gewande dadurch wieder begeben, daß eine Substitution  $\mathcal{M}$  nicht zur Spur-Abbildung (legt  $\sigma_{ac} = \sigma$  fest), sondern nur zur vollen Renormierungstransformation<sup>34</sup>  ${}^r\mathcal{M}$  äquivalent ist.

Man bezeichnet die zweite, von  $P_\mu(E)$  linear unabhängige Fundamentallösung  $\mathcal{P}_\mu(E)$  auch als das zu  $P_\mu(E)$  **assoziierte Polynom**. Es gilt<sup>35</sup>

$$P_{\mu+i}^{(-i)}(z) = \pm t_0 \int_a^b \frac{P_{\mu+j}^{(-j)}(z) - P_{\mu+j}^{(-j)}(E)}{z - E} d\rho_\pm(E), \quad \mu \in \mathbb{Z}^\pm, \quad (\text{II.A.55})$$

wobei  $j = -1$  ( $= 0$ ), wenn  $i = 0$  ( $= -1$ ) gilt. Man beachte, daß  $\{\mathcal{P}_\mu\}_{\mu \in G}$  ein weiteres System von orthogonalen Polynomen bezüglich der Verteilungsfunktion  $d\rho_+^{(1)}(E) = d\langle \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{E}}_+(E)\hat{\mathcal{T}}^\dagger \vec{\delta}_i | \vec{\delta}_i \rangle_{\ell_2}$  für  $\mu \in \mathbb{Z}^+$  ist. Analoges gilt bei  $d\rho_-(E)$  für  $\mu \in \mathbb{Z}^-$ . Mit dieser Beziehung läßt sich nun leicht die Green'sche Funktion angeben.

Sei nun wieder  $G = [-M, N-1]$ , wobei *nicht beide* Intervallenden im Unendlichen liegen mögen (d.h. keine sog. singuläre Punkte sind).

☛ Es gilt analog zu z.B. [Ber68], S. 522,

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{0\nu}(\lambda_{\ell,r}; z) &= \langle \hat{\mathcal{G}}_\Sigma(\lambda_{\ell,r}; z) \vec{\delta}_{-M} | \vec{\delta}_{-M+\nu} \rangle = -t_{-M} \int_a^b \frac{\tilde{P}_\nu^{(-M)}(E)}{z - E} d\rho_+(E) \\ &= -t_{-M} \int_a^b \frac{\tilde{P}_\nu^{(-M)}(E) - \tilde{P}_\nu^{(-M)}(z)}{z - E} d\rho_+ + t_{-M} \tilde{P}_\nu^{(-M)}(z) \int_a^b \frac{d\rho_+(E)}{z - E} \\ &= -(\tilde{P}_{\nu-1}^{(-M+1)} + t_{-M} m_\Sigma^+(z) \tilde{P}_\nu^{(-M)}) \stackrel{!}{=} \frac{\tilde{\Psi}_0^{(2)} \tilde{\Psi}_\nu^{(1)}}{W(\tilde{\Psi}_\nu^{(1)}, \tilde{\Psi}_\nu^{(2)})} \end{aligned}$$

Damit  $\tilde{G}_{\mu\nu}(\lambda_{\ell,r}; z)$  den bei (II.8) geforderten Randwerten genügt, muß

$$\tilde{\Psi}_N^{(1)} := \tilde{P}_{|G|-1}^{(-M+1)} + t_{-M} m_\Sigma^+(z) \tilde{P}_{|G|}^{(-M)} = 0$$

sein, oder umgeschrieben<sup>36</sup>

$$t_{-M} m_\Sigma^+(z) = -t \frac{\tilde{P}_{|G|-1}^{(-M+1)}}{\det(z - \hat{\mathcal{H}}_\Sigma(\lambda_{\ell,r}; 0))} \quad (\text{II.A.56})$$

gelten. Man erkennt, daß die Singularitäten von  $m_\Sigma^+(z)$  gerade mit den Nullstellen der Determinanten, d.h. den Eigenwerten von  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda_{\ell,r}; 0)$ , zusammenfallen — die Polstruktur von  $m_\Sigma^+(z)$  legt somit das Spektrum fest<sup>37</sup>. Da  $\tilde{P}_\mu^{(-M)}$  die geforderte Randbedingung am linken Rand erfüllt, wählt man  $\tilde{\Psi}_\mu^{(2)} = t_{-M} \tilde{P}_\mu^{(-M)}$ . Wegen  $W(\tilde{\Psi}_\nu^{(1)}, \tilde{\Psi}_\nu^{(2)}) = 1/(t_{-M} m_\Sigma^+)$  ergibt sich (II.A.57).

<sup>34</sup>D.h. auch die RTs der Hopping-Elemente  $t_{|\xi}^* \propto 1/P_{N-1}^{(\xi)}$  sind notwendig.

<sup>35</sup>Für den Fall  $i = -1, j = 0$  und  $\mu \in \mathbb{Z}^+$  s. z.B. [Bre80], S. 53. Den zweiten Fall mit  $i = 0, j = -1$  und  $\mu \in \mathbb{Z}^-$  beweist man analog mittels vollständiger Induktion, indem man den Satz von Favard und die entsprechende Rekursionsformel (II.A.23) unter Berücksichtigung der zugehörigen Anfangswerte benutzt.

<sup>36</sup>Man beachte, daß  $\tilde{P}_{|G|-1}^{(-M+1)}$  und  $\tilde{P}_{|G|}^{(-M)}$  keine gemeinsamen Nullstellen besitzen (s. oben).

<sup>37</sup>Liegen die Nullstellen von  $\tilde{P}_{|G|}^{(-M)}$  beliebig dicht beieinander — dazwischen liegen die Nullstellen von  $\tilde{P}_{N-1}^{(-M+1)}$  (s. oben), treten Verzweigungsschnitte auf.

Die Resolvente zu  $\hat{\mathfrak{H}}_{\Sigma}(\lambda_{\ell,r}; 0)$  lautet in der Ortsraum-Darstellung

$$\begin{aligned} (\hat{\mathfrak{G}}_{\Sigma}(\lambda_{\ell,r}; z))_{\mu\nu} &= -t_{-M}(\tilde{\Psi}_{\mu}\tilde{P}_{\nu}^{(-M)}\Theta_{\mu-\nu} + \tilde{P}_{\mu}^{(-M)}\tilde{\Psi}_{\mu}\Theta_{\nu-\mu}), \\ \tilde{\Psi}_{\mu} &:= t_{-M}m_{\Sigma}^{+}\tilde{P}_{\mu}^{(-M)} + \tilde{P}_{\mu-1}^{(-M+1)}, \quad \mu, \nu = 0, 1, \dots, |G|, \end{aligned} \quad (\text{II.A.57})$$

wobei wir die beiden im Folgenden wichtigen **Herglotz-Funktionen**<sup>38</sup>

$$\begin{aligned} \tilde{m}_{\Sigma}^{+}(\lambda_{\ell,r}; z) &:= \int_a^b \frac{d\rho_{+}(E)}{E-z} = -\langle \hat{\mathfrak{G}}_{\Sigma}(\lambda_{\ell,r}; z)\vec{\delta}_{-M} | \vec{\delta}_{-M} \rangle \\ \tilde{m}_{\Sigma}^{-}(\lambda_{\ell,r}; z) &:= \int_a^b \frac{d\rho_{-}(E)}{E-z} = -\langle \hat{\mathfrak{G}}_{\Sigma}(\lambda_{\ell,r}; z)\vec{\delta}_{N-1} | \vec{\delta}_{N-1} \rangle \end{aligned}$$

eingeführt haben.

**► Beispiel (Forts.):** Seien  $(\epsilon_{\mu})_{\mu \in G}$  und  $(t_{\mu})_{\mu \in G}$  zwei Folgen reeller Zahlen mit  $t_{\mu} \neq 0$  für alle  $\mu \in G$ . Das **Kettenbruchsymbol**  $\overset{\nu}{\mathbf{K}}_{\mu}(\cdot)$  ist definiert durch

$$\begin{aligned} -\frac{1}{t_{\nu}}\overset{\mu}{\mathbf{K}}_{\alpha=\nu} \left( \frac{-t_{\alpha}^2}{z - \epsilon_{\alpha} - t_{\mu}\delta_{\alpha\mu}\lambda} \right) &:= t_{\nu} / \{ z - \epsilon_{\nu} - t_{\nu+1}^2 / [ z - \epsilon_{\nu+1} - \dots - t_{\mu}^2 / ( z - \epsilon_{\mu} - t_{\mu}\lambda ) ] \} \\ &= \frac{\lambda(\mathbf{T}^{-1})_{11} + (\mathbf{T}^{-1})_{12}}{\lambda(\mathbf{T}^{-1})_{21} + (\mathbf{T}^{-1})_{22}} =: T_{\nu \rightarrow \mu}^{-1}(\lambda; z), \end{aligned}$$

wobei  $T_{\nu \rightarrow \mu}(\lambda; z)$  die in (6), S. vi, definierte Transfer-Matrix ist.  $T_{\nu \rightarrow \mu}(\lambda; z)$  läßt sich durch die **Möbius-Transformation**

$$T_{\alpha}(\lambda; z) = \frac{\lambda T_{\alpha;11} + T_{\alpha;12}}{\lambda T_{\alpha;21} + T_{\alpha;22}} \longleftrightarrow \mathbf{T}_{\alpha} = \begin{pmatrix} s_{\alpha} & -\tau_{\alpha} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

rekursiv bestimmen, d.h. es ist  $T_{\mu \rightarrow \nu}(\lambda; z) = T_{\mu \rightarrow \nu-1}(\lambda; T_{\nu}(\lambda; z))$ , also<sup>39</sup> ( $\mu \leq \nu \leq \sigma$ )

$$\begin{aligned} T_{\mu \rightarrow \nu}(\lambda; z) &= T_{\nu} \circ T_{\nu-1} \circ \dots \circ T_{\mu}(\lambda; z) \longleftrightarrow \mathbf{T}_{\mu \rightarrow \nu} = \prod_{\alpha=\nu}^{\mu} \mathbf{T}_{\alpha}, \\ T_{\mu \rightarrow \sigma}(\lambda; z) &= T_{\nu+1 \rightarrow \sigma} \circ T_{\mu \rightarrow \nu}(\lambda; z), \quad T_{\mu \rightarrow \mu}(\lambda; z) := T_{\mu}(\lambda; z). \end{aligned}$$

<sup>38</sup>Die Titchmarsh-Weyl'schen  $m(z)$ -Funktionen gehören zu der gut untersuchten Klasse von sog. **Herglotz-Funktionen** (= **Nevanlinna-Funktionen**) Das sind auf  $\mathfrak{C} \setminus \mathbb{R}$  analytische Funktionen, mit der Eigenschaft  $m^*(z) = m(z^*)$  und  $\Im m\{z\}\Im m\{m(z)\} > 0$  für  $\Im m\{z\} \neq 0$ . Sie sind äquivalent zu den Funktionen der Form [Akh64]

$$m(z) = A + Bz + \int_{\mathbb{R}} \frac{1+tz}{t-z} \frac{d\rho(t)}{1+t^2}, \quad \text{wenn } \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\rho(t)}{1+t^2} < \infty,$$

wobei  $A = \Re\{m(i)\}$  und  $B = \lim_{\eta \rightarrow \infty} (\eta^{-1}\Im m\{m(i\eta)\}) \geq 0$ . Man kann zeigen, daß  $\beta = 0$  (s. [Atk82], S. 2, und die dort zitierte Literatur). Ersetzt man im rechten Integral  $t^2$  durch  $|t|$ , dann sind die Herglotz-Funktionen  $m(z)$  äquivalent zu der Stieltjes-Transformierten von  $\rho(E)$  ([Akh64], oder [Pas92], Anhang A). Die Bedeutung der Herglotz-Funktionen liegt darin begründet, daß ihre analytischen Eigenschaften auf der reellen Achse gerade den Charakter des Spektrums  $\sigma(\mathfrak{H})$  festlegen. Sie bilden eine Schnittstelle zwischen der operatortheoretischen Spektraltheorie von Sturm-Liouville'schen Differential- bzw. Differenzgleichungen und der Funktionentheorie. Darüberhinaus ist die Größe  $m(z)$  eine derjenigen Stellen, welche der Ortsraum-Renormierung direkt zugänglich ist.

<sup>39</sup>In dieser Kettenbruchdarstellung können wir die Randwerte auch in der Form  $\lambda_{\ell}^{(m)}(M'; z) = -(T_{-M \rightarrow -\tilde{M}-1}(1/\lambda_{\ell}; z))^{-1}/t_{-\tilde{M}}$  und  $\lambda_r^{(n)}(N'; z) = T_{\tilde{N} \rightarrow N-1}^{-1}(1/\lambda_r; z)/t_{\tilde{N}}$  schreiben.

Betrachten wir die Lösungen der beiden diskreten Gleichungen vom *Riccati'schen Typ*<sup>40</sup>

$$\begin{aligned} -t_{N-\mu-1} m_{\mu+1}^+(\lambda; z) &= T_{N-\mu-1}^{-1}(z; -t_{N-\mu} m_{\mu}^+(\lambda; z)), \\ \frac{1}{-t_{-M+\mu+1} m_{\mu+1}^-(\lambda; z)} &= T_{-M+\mu} \left( z; \frac{1}{-t_{-M+\mu} m_{\mu}^-(\lambda; z)} \right), \end{aligned}$$

mit  $\mu = 0, 1, \dots, |G|$ , und den Anfangsbedingungen  $m_0^{\pm}(\lambda; z) = 0$ . Offensichtlich gilt

$$\begin{aligned} t_{-M} m_{\Sigma}^+(\lambda_r; z) &= t_{-M} m_{|G|}^+(\lambda_r; z) = T_{-M \rightarrow N-1}^{-1}(z; 1/\lambda_r), & (\lambda_{\ell} = 0), \\ t_N m_{\Sigma}^-(\lambda_{\ell}; z) &= m_{|G|}^-(\lambda_{\ell}; z) = (T_{-M \rightarrow N-1}(z; 1/\lambda_r))^{-1}, & (\lambda_r = 0). \end{aligned}$$

Den Fall  $N \rightarrow \infty$  ergibt sich aus der folgenden Proposition.

**Proposition II.A.1** (Markoff<sup>41</sup>[Mar1896]) *Sei  $\hat{\mathcal{H}}_+$  selbstadjungiert und  $[a, b] \subset \mathbb{R}$ ,  $a < b$ . Dann ist*

$$\begin{aligned} \lim_{\mu \rightarrow \infty} m(z, \mu) &= \lim_{\mu \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{\mu} \frac{\lambda_k^{(\mu)}}{z - E_k^{(\mu)}} = \sum_{i=1}^N \rho_i + \int_a^b \frac{d\rho_{cont}(t)}{z - t} \\ &= \int_a^b \frac{d\rho(t)}{z - t} = m^+(z), \quad z \notin \text{supp}(d\rho) \subseteq [a, b], \end{aligned}$$

wenn  $z = E + i\eta$  ein beliebiger Punkt in der komplexen Ebene  $\mathbb{C} \setminus [a, b]$  ist.  $\lambda_k^{(\mu)} = \mathcal{P}(E_k^{(\mu)}) / P_{\mu}'(E_k^{(\mu)})$  sind die Christoffel-Zahlen,  $E_k^{(\mu)}$  die  $\mu$  reellen Nullstellen von  $P_{\mu}$ . Es gilt auch die Umkehrung (sog. **Perron–Stieltjes Inversions-Formel**<sup>42</sup>): Existiert die Entwicklung von  $m^+(z)$ , dann gilt

$$\rho(E_2) - \rho(E_1) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \downarrow 0} \lim_{\eta \downarrow 0} \int_{E_1+\delta}^{E_2-\delta} \Im m\{m^+(E + i\eta)\} dE, \quad (\text{II.A.58})$$

wobei  $\rho(E) = \frac{1}{2}(\rho(E+0) + \rho(E-0))$  mit  $\rho(E) \equiv \rho((-\infty, E])$  ist. ♣

$m^+(z)$  ist die *Stieltjes-Transformierte* des Radon-Maß  $\rho(E)$ , bezüglich dessen die Polynome  $P_{\mu}(E)$  orthogonal sind. Ist die Verteilungsfunktion  $d\rho(t)$  bekannt, so läßt sich die Kettenbruchentwicklung von  $m^+(z)$  berechnen.

Liegen *beide* Enden im Unendlichen (“singuläre Punkte”, sog. Hamburger-Fall  $\hat{\mathcal{H}}_{(-\infty, \infty)}$ , s. z.B. [Ber68], Kap. VII.3), dann ist das Spektrum gegebenenfalls zweifach entartet, so daß

$$\hat{\mathcal{E}}(\omega) = \int_{\omega} \hat{\mathcal{P}}(E) d\rho(E), \quad \text{mit} \quad \langle \hat{\mathcal{E}}(\omega) \vec{\delta}_{\mu} | \vec{\delta}_{\nu} \rangle_{\mathbb{H}_0} = \sum_{i,j=-1}^0 \int_{\omega} \check{P}_{\mu;i}(E) \check{P}_{\nu;j}(E) d\rho_{ij}(E),$$

<sup>40</sup>Uns interessiert hier die spezielle Form der **Riccati'schen Differentialgleichung**  $\pm m''(x) + m^2(x) + z - U(x) = 0$ . S. [Kam67] S. 21ff. und [Pas92], S. 302. Vgl. auch [Ges97] zur Relevanz der  $m$ -Funktion für das inverse Spektralproblem. Dieser Zusammenhang ist für uns von Interesse, da wir für gewisse  $\mu$  die Polynome  $P_{\mu}$  und  $\mathcal{P}_{\mu}$ , bzw.  $\Delta_N$ , mit den einzelnen Parametern der Renormierungstransformationen verknüpfen werden, welche in einem unmittelbarem Zusammenhang mit den Morphismen der freien Gruppe in sich stehen.

<sup>41</sup>S. z.B. [Jon80], Kap. 7.2 und 9, oder [Hen77], Kap. 11.

<sup>42</sup>Sie ist eine unmittelbare Konsequenz der Stone'schen Formel [Ree72–I, S. 237/264]. S. auch z.B. [Pas92, Anh. A].

mit der **Spektral-Matrix**  $d\rho_{ij}(E) = \langle \hat{\mathcal{P}}(E)\vec{\delta}_i | \vec{\delta}_j \rangle_{\mathbb{H}} d\rho(E)$ , gilt. Die Orthogonalitätsrelation lautet nun

$$\sum_{i,j=-1}^0 \int_{\omega} \check{P}_{\mu;i}(E) \check{P}_{\nu;j}(E) d\rho_{ij}(E) = t_0^2 \delta_{\mu\nu}.$$

Bekanntlich ist nun das Pendant (z.B. [Sch65, Gil89]) zur Perron-Stieltjes-Inversions-Formel

$$\rho_{ij}(E_2) - \rho_{ij}(E_1) = \lim_{\delta \downarrow 0} \lim_{\eta \downarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{E_1+\delta}^{E_2-\delta} \Im m \{ M_{ij}(E + i\eta) \} dE,$$

wobei  $(M_{ij})$  die in (II.11) definierte Spektral-Matrix ist. Das Matrixmaß  $d\rho_{ij}(E)$  ist positiv definit und äquivalent zu dem zu  $\hat{\mathcal{H}}_{(-\infty, \infty)}$  gehörenden Spektralmaß

$$d\rho(E) = \frac{1}{2} (d\rho_{00}(\omega) + d\rho_{11}(\omega)),$$

welches den jeweiligen Spektraltyp von  $\hat{\mathcal{H}}_{(-\infty, \infty)}$  festlegt. Die entsprechende Stieltjes-Transformierte ist

$$m(z) = m_{11}(z) + m_{22}(z) = \frac{1 + m^- m^+}{m^- - m^+}$$

(s. z.B. [Gil89]).

# Anhang II.B

## Herleitung von $\Xi_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$

In diesem Anhang wollen wir uns eingehend mit den in (II.30) auftretenden Summen befassen. Wir formulieren hierzu folgendes zentrale Theorem:

**Theorem II.B.1** Für  $n = 0, \dots, 3$ , gilt

$$\begin{aligned} \Xi_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &:= \text{Sp} \left[ \sum_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu}=0}^{\tilde{N}-1} \left( \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \cdot \overline{\mathbf{X}_{n, \tilde{\nu}}} + (\Delta_{\tilde{N}} \overline{\Delta_{\tilde{N}}} - 4) \mathbf{Y}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \cdot \overline{\mathbf{Y}_{n, \tilde{\nu}}} \right) \right] \\ &= \text{Sp} \left\{ \overset{r}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \mathbf{T}^\top(\mathcal{E}_i) \overset{l}{\Theta}_n(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \mathbf{T}^\top(\mathcal{E}_j) - 2 \overset{r}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \overset{l}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_i) \right. \\ &\quad \left. + \overset{r}{\Theta}_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) (\mathbf{T}^{-1}(\mathcal{E}_i))^\top \overset{l}{\Theta}_n(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) (\mathbf{T}^{-1}(\mathcal{E}_j))^\top \right\}, \end{aligned} \quad (\text{II.B.1})$$

mit den in Kapitel II.4 definierten Größen. Dabei ist wieder  $\bar{f}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) := f(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i)$ , bzw.  $\bar{f}(\mathcal{E}_i) := f(\mathcal{E}_j)$ , auf alle Größen entsprechend anzuwenden.

In diesem Zusammenhang werden wir auf interessante und besonders nützliche rekursive Strukturen stoßen. Die in (II.31) und (II.32) eingeführten Matrizen  $\mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  und  $\mathbf{Y}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  genügen denselben Rekursionsbeziehungen. Zunächst finden wir

$$\mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}+1}^{(\tilde{\nu})} = s_{\tilde{\mu}} \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} - \tau_{\tilde{\mu}} \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}-1}^{(\tilde{\nu})}. \quad (\text{II.B.2})$$

Darüber hinaus gilt aber auch

$$\mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu}+1)} = \overset{l}{\xi}_{n, \tilde{\nu}} \cdot \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} - \overset{l}{\phi}_{n, \tilde{\nu}} \cdot \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu}-1)} = \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \cdot \overset{r}{\xi}_{n, \tilde{\nu}} - \mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu}-1)} \cdot \overset{r}{\phi}_{n, \tilde{\nu}} \quad (\text{II.B.3})$$

(“ $l$ ” bzw. “ $r$ ” stehe für “links” bzw. “rechts” von  $\mathbf{X}_{n, \tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}$ ), wobei, neben den skalaren Parameter  $s_{\tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i)$  und  $t_{\tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i)$ , die *matrixwertige* Parameter durch

$$\begin{aligned} \overset{l}{\xi}_{n, \tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &\equiv \overset{l}{\xi}_{n, \tilde{\mu}} = \mathbf{W}_n^{(\tilde{\mu}+1)} \cdot (s_{\tilde{\mu}+1} \tau_{\tilde{\mu}} \mathbf{I} + s_{\tilde{\mu}-1} \mathbf{S}_n^{(\tilde{\mu})} \cdot (\mathbf{R}_n^{(\tilde{\mu})})^{-1}) \cdot (\mathbf{U}_n^{(\tilde{\mu})})^{-1}, \\ \overset{l}{\phi}_{n, \tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &\equiv \overset{l}{\phi}_{n, \tilde{\mu}} = \tau_{\tilde{\mu}-1} \mathbf{W}_n^{(\tilde{\mu}+1)} \cdot \mathbf{S}_n^{(\tilde{\mu})} \cdot (\mathbf{V}_n^{(\tilde{\mu}-1)} \cdot \mathbf{R}_n^{(\tilde{\mu})})^{-1}, \end{aligned}$$

definiert sind, mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_n^{(\tilde{\mu})}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) &:= (\mathbf{V}_n^{(\tilde{\mu}-1)})^{-1} \cdot \mathbf{U}_n^{(\tilde{\mu}-1)} - s_{\tilde{\mu}-1} s_{\tilde{\mu}} (\mathbf{U}_n^{(\tilde{\mu})})^{-1} \cdot \mathbf{W}_n^{(\tilde{\mu})}, \\ \mathbf{S}_n^{(\tilde{\mu})}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) &:= (\mathbf{W}_n^{(\tilde{\mu}+1)})^{-1} \cdot \mathbf{U}_n^{(\tilde{\mu}+1)} - s_{\tilde{\mu}} s_{\tilde{\mu}+1} (\mathbf{U}_n^{(\tilde{\mu})})^{-1} \cdot \mathbf{V}_n^{(\tilde{\mu})} \end{aligned}$$

und

$$\mathbf{U}_n^{(\tilde{\mu})}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = \tau_{\tilde{\mu}} \mathbf{W}_n^{(\tilde{\mu})} + \mathbf{V}_n^{(\tilde{\mu})}.$$

Man zeigt leicht, daß die Matrizen  $\xi_{n,\tilde{\nu}}^{l,r}$  und  $\phi_{n,\tilde{\nu}}^{l,r}$  diagonal sind und miteinander durch

$$\xi_{n,\tilde{\mu}}^r = \xi_{n,\tilde{\mu}}^l, \quad n = 0, 1, \quad \xi_{n,\tilde{\mu}}^r = \mathcal{P} \cdot \xi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot \mathcal{P}, \quad n = 2, 3, \quad (\text{II.B.4})$$

$$\phi_{n,\tilde{\mu}}^r = \phi_{n,\tilde{\mu}}^l, \quad n = 0, 1, \quad \phi_{n,\tilde{\mu}}^r = \mathcal{P} \cdot \phi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot \mathcal{P}, \quad n = 2, 3, \quad (\text{II.B.5})$$

mit

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

verknüpft sind. Die beiden Rekursionsrelationen (II.B.2) und (II.B.3), mit den Anfangswerten  $\mathbf{X}_{n,\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}$  und  $\mathbf{Y}_{n,\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}$  für  $\tilde{\mu}, \tilde{\nu} = 0, 1$ , erhält man, indem man von den Definitionen (II.31) bzw. (II.32) ausgeht und die in Lemma II.A.1, S. 92, gefundenen Rekursionsbeziehungen benutzt. Dabei werden wir im Folgenden immer davon ausgehen, daß alle auftretenden Größen von den Scharparameter  $\varepsilon_i$  und  $\varepsilon_j$  abhängen.

► Im diskreten Tight-Binding Fall sind alle auftretenden Größen Skalare. Insbesondere entfällt die Unterscheidung in  $l$ - bzw.  $r$ -Fälle. Es gilt

$$\xi_{\tilde{\mu}} = \frac{a_{\tilde{\mu}} s_{\tilde{\mu}-1} V^{(\tilde{\mu}-1)} + a_{\tilde{\mu}-1} s_{\tilde{\mu}+1} \tau_{\tilde{\mu}} V^{(\tilde{\mu}+2)}}{a_{\tilde{\mu}-1} (\tau_{\tilde{\mu}} V^{(\tilde{\mu}+1)} + V^{(\tilde{\mu})})} \quad \text{und} \quad \phi_{\tilde{\mu}} = \frac{\tau_{\tilde{\mu}-1} a_{\tilde{\mu}}}{a_{\tilde{\mu}-1}},$$

mit

$$a_{\tilde{\mu}} = s_{\tilde{\mu}} s_{\tilde{\mu}+1} V^{(\tilde{\mu})} V^{(\tilde{\mu}+2)} - (\tau_{\tilde{\mu}} V^{(\tilde{\mu}+1)} + V^{(\tilde{\mu})}) (\tau_{\tilde{\mu}+1} V^{(\tilde{\mu}+2)} + V^{(\tilde{\mu}+1)}).$$

Die Rekursionsbeziehungen (II.B.3) reduzieren sich auf

$$X_{\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu}+1)} = \xi_{\tilde{\nu}} X_{\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} - \phi_{\tilde{\nu}} X_{\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu}-1)}.$$

Ein erster Schritt hin auf unser Ziel, Theorem II.B.1 zu zeigen, ist das

**Lemma II.B.1** Seien  $\mathbf{X}_{n,1} = \mathbf{X}_{n,0}^{(0)}$ ,  $\mathbf{X}_{n,2} = \mathbf{X}_{n,1}^{(0)}$ ,  $\mathbf{X}_{n,3} = \mathbf{X}_{n,0}^{(1)}$  und  $\mathbf{X}_{n,4} = \mathbf{X}_{n,1}^{(1)}$ , mit  $n = 0, \dots, 3$ , die Anfangswerte von  $\mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})}$ . Dann gilt

$$\mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})} = \sum_{p=1}^4 \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l(p)} \cdot \mathbf{X}_{n,p} = \sum_{p=1}^4 \mathbf{X}_{n,p} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{r(p)}. \quad (\text{II.B.6})$$

Die Matrizen  $\gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(p)}(\varepsilon_i, \varepsilon_j)$ ,  $p = 1, \dots, 4$ , sind definiert durch die Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l(p)} &= \xi_{n,\tilde{\mu}-1}^l \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu}-1,\tilde{\nu}}^{l(p)} - \phi_{n,\tilde{\mu}-1}^l \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu}-2,\tilde{\nu}}^{l(p)} = s_{\tilde{\nu}-1} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}-1}^{l(p)} - \tau_{\tilde{\nu}-1} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}-2}^{l(p)}, \\ \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{r(p)} &= \gamma_{n,\tilde{\mu}-1,\tilde{\nu}}^{r(p)} \cdot \xi_{n,\tilde{\mu}-1}^r - \gamma_{n,\tilde{\mu}-2,\tilde{\nu}}^{r(p)} \cdot \phi_{n,\tilde{\mu}-1}^r = s_{\tilde{\nu}-1} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}-1}^{r(p)} - \tau_{\tilde{\nu}-1} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}-2}^{r(p)}, \end{aligned} \quad (\text{II.B.7})$$

mit den Anfangsbedingungen

$$\gamma_{n,0,0}^{l,r(1)} = \gamma_{n,0,1}^{l,r(2)} = \gamma_{n,1,0}^{l,r(3)} = \gamma_{n,1,1}^{l,r(4)} = \mathbf{1}, \quad \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(p)} = \mathbf{0}, \quad \tilde{\mu}, \tilde{\nu} \in \{0, 1\}, \quad p = 1, \dots, 4. \quad (\text{II.B.8})$$

► **Beweis:** Vollständige Induktion. Man vergewissert sich schnell, daß die Behauptung für  $\tilde{\mu}, \tilde{\nu} = 0, 1, 2, 3$ , erfüllt ist. Ausgehend von den Rekursionsgleichungen (II.B.2) — (II.B.3) für die Matrizen  $\mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})}$  und den durch (II.B.7) definierten Rekursionsrelationen ergibt sich für allgemeine  $\tilde{\mu}, \tilde{\nu}$

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}+1}^{(\tilde{\mu}+1)} &= \xi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu})} - \xi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}-1}^{(\tilde{\mu})} - \phi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}}^{(\tilde{\mu}-1)} + \phi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \mathbf{X}_{n,\tilde{\nu}-1}^{(\tilde{\mu}-1)} \\ &= \sum_{p=1}^4 \left\{ \xi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l(p)} - \xi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}-1}^{l(p)} \right. \\ &\quad \left. - \phi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \gamma_{n,\tilde{\mu}-1,\tilde{\nu}}^{l(p)} + \phi_{n,\tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \gamma_{n,\tilde{\mu}-1,\tilde{\nu}-1}^{l(p)} \right\} \mathbf{X}_p \\ &= \sum_{k=1}^4 \gamma_{n,\tilde{\mu}+1,\tilde{\nu}+1}^{l(p)} \cdot \mathbf{X}_p. \end{aligned}$$

Den  $r$ -Fall zeigt man vollständig analog. ♣

Die Matrizen  $\gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(p)}$  sind diagonal. Der “ $l$ ”-Fall ist mit dem “ $r$ ”-Fall durch

$$\gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{r(p)} = \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l(p)}, \quad n = 0, 1, \quad \text{und} \quad \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{r(p)} = \mathcal{P} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l(p)} \cdot \mathcal{P}, \quad n = 2, 3,$$

verknüpft. Es gelten aber noch weitere Relationen. Die Verhältnisse werden im folgenden Lemma geklärt.

**Lemma II.B.2** Seien  $\tilde{\mu}, \tilde{\nu} \in \mathbb{N}$  und  $n = 0, \dots, 3$ . Dann gelten die folgenden Relationen:

$$\gamma_{n,1,\tilde{\mu}}^{l,r(1)} = \gamma_{n,\tilde{\mu},1}^{l,r(1)} = \gamma_{n,1,\tilde{\mu}}^{l,r(2)} = \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{l,r(2)} = \gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l,r(3)} = \gamma_{n,\tilde{\mu},1}^{l,r(3)} = \gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l,r(4)} = \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{l,r(4)} = \mathbf{0} \quad (\text{II.B.9})$$

und

$$\gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{l,r(1)} = \gamma_{n,\tilde{\mu},1}^{l,r(2)}, \quad \gamma_{n,1,\tilde{\mu}}^{l,r(3)} = \gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l,r(2)}, \quad \gamma_{n,\tilde{\mu},1}^{l,r(4)} = \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{l,r(3)} \quad \text{und} \quad \gamma_{n,1,\tilde{\mu}}^{l,r(4)} = \gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l,r(2)}, \quad (\text{II.B.10})$$

sowie

$$\begin{aligned} \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(1)} &= \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{l,r(1)} \cdot \gamma_{n,0,\tilde{\nu}}^{l,r(1)}, & \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(2)} &= \gamma_{n,\tilde{\mu},1}^{l,r(2)} \cdot \gamma_{n,0,\tilde{\nu}}^{l,r(2)}, \\ \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(3)} &= \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{l,r(3)} \cdot \gamma_{n,1,\tilde{\nu}}^{l,r(3)}, & \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(4)} &= \gamma_{n,\tilde{\mu},1}^{l,r(4)} \cdot \gamma_{n,1,\tilde{\nu}}^{l,r(4)}. \end{aligned} \quad (\text{II.B.11})$$

► **Beweis:** Auch hier ist die Methode der Wahl die vollständige Induktion. Unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen (II.B.8) ergeben sich die Relationen in (II.B.9) und (II.B.10) unmittelbar aus den Rekursionsgleichungen (II.B.7). Bei (II.B.11) wollen wir kurz innehalten.

So ist z.B. (II.B.11a) für  $\mu, \nu = 0, 1$  sicher erfüllt. Für allgemeine  $\tilde{\mu}, \tilde{\nu}$  gilt dann im  $l$ -Fall

$$\begin{aligned} \gamma_{n, \tilde{\mu}+1, \tilde{\nu}+1}^{l(1)} &= \xi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \gamma_{n, \tilde{\mu}, \tilde{\nu}}^{l(1)} - \xi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \gamma_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu}-1}^{l(1)} - \phi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \gamma_{n, \tilde{\mu}-1, \tilde{\nu}}^{l(1)} + \phi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \gamma_{n, \tilde{\mu}-1, \tilde{\nu}-1}^{l(1)} \\ &= \xi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \gamma_{n, \tilde{\mu}, 0}^{l(1)} \cdot \gamma_{n, 0, \tilde{\nu}}^{l(1)} - \xi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \gamma_{n, \tilde{\mu}, 0}^{l(1)} \cdot \gamma_{n, 0, \tilde{\nu}-1}^{l(1)} \\ &\quad - \phi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot s_{\tilde{\nu}} \gamma_{n, \tilde{\mu}-1, 0}^{l(1)} \cdot \gamma_{n, 0, \tilde{\nu}}^{l(1)} + \phi_{n, \tilde{\mu}}^l \cdot \tau_{\tilde{\nu}} \gamma_{n, \tilde{\mu}-1, 0}^{l(1)} \cdot \gamma_{n, 0, \tilde{\nu}-1}^{l(1)} \\ &= \gamma_{n, \tilde{\mu}+1, 0}^{l(1)} \cdot \gamma_{n, 0, \tilde{\nu}+1}^{l(1)}. \end{aligned}$$

Der  $r$ -Fall wird genauso traktiert. Die verbleibenden Gleichungen in (II.B.11) beweist man vollständig analog. ♣

Wir führen zunächst die rekursiv definierte Matrizen  $Q_{n, \tilde{\mu}}^{l, r(\tilde{\nu})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  ein:

$$Q_{n, \tilde{\mu}+1}^{l, r(\tilde{\nu})} = \xi_{n, \tilde{\mu}+\tilde{\nu}}^{l, r} \cdot Q_{n, \tilde{\mu}}^{l, r(\tilde{\nu})} - \phi_{n, \tilde{\mu}+\tilde{\nu}}^{l, r} \cdot Q_{n, \tilde{\mu}-1}^{l, r(\tilde{\nu})}, \quad Q_{n, -1}^{l, r(\tilde{\nu})} = \mathbf{0}, \quad Q_{n, 0}^{l, r(\tilde{\nu})} = \mathbf{1}. \quad (\text{II.B.12})$$

Analog zu den Ergebnissen von Lemma II.A.1, S. 92, findet man auch für  $Q_{n, \tilde{\mu}}^{l, r(\tilde{\nu})}$

$$Q_{n, \tilde{\mu}}^{l, r(\tilde{\nu})} = \xi_{n, \tilde{\nu}}^{l, r} \cdot Q_{n, \tilde{\mu}-1}^{l, r(\tilde{\nu}+1)} - \phi_{n, \tilde{\nu}}^{l, r} \cdot Q_{n, \tilde{\mu}-2}^{l, r(\tilde{\nu}+2)}$$

und

$$\phi_{n, \tilde{\nu}-1}^{l, r} \cdot \dots \cdot \phi_{n, \tilde{\nu}-\tilde{\mu}+1}^{l, r} \cdot Q_{n, -\tilde{\mu}}^{l, r(\tilde{\nu})} = -Q_{n, \tilde{\mu}-2}^{l, r(\tilde{\nu}-\tilde{\mu}+1)}.$$

Aus der Wahl der Anfangsbedingungen ersieht man sofort, daß die Matrizen  $Q_{n, \tilde{\mu}}^{l, r(\tilde{\nu})}$  ebenfalls diagonal sind. Deshalb vertauschen sie mit den Parameter-Matrizen  $\xi_{n, \tilde{\mu}}^{l, r}$  und  $\phi_{n, \tilde{\mu}}^{l, r}$ . Mittels vollständiger Induktion zeigt man, daß zwischen  $P_{\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})} \mathbf{1}$  und  $Q_{\tilde{\mu}}^{l, r(\tilde{\nu})}$  und den in Lemma II.B.1 eingeführten  $\gamma_{n, \tilde{\mu}, \tilde{\nu}}^{l, r(k)}$  die folgenden Beziehungen

$$\gamma_{n, 0, \tilde{\mu}}^{l, r(1)} = -t_1 P_{\tilde{\mu}-2}^{(2)} \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \gamma_{n, 0, \tilde{\mu}}^{l, r(2)} = t_1 P_{\tilde{\mu}-1}^{(1)} \mathbf{1},$$

sowie

$$\gamma_{n, \tilde{\mu}, 0}^{l, r(1)} = -\phi_{n, 1}^{l, r} \cdot Q_{n, \tilde{\mu}-2}^{l, r(2)} \quad \text{und} \quad \gamma_{n, \tilde{\mu}, 0}^{l, r(3)} = Q_{n, \tilde{\mu}-1}^{l, r(1)}$$

bestehen. Nun sind wir bereit für das folgende Lemma:

**Lemma II.B.3** Sei  $\tilde{\mu}, \tilde{\nu} \in \mathbb{N}$  und

$$\mathfrak{G}_{n, p, q}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) := \sum_{\tilde{\mu}, \tilde{\nu}=0}^{\tilde{N}-1} \gamma_{n, \tilde{\mu}, \tilde{\nu}}^{r(p)}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \cdot \gamma_{n, \tilde{\nu}, \tilde{\mu}}^{l(q)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \quad p, q = 1, \dots, 4. \quad (\text{II.B.13})$$

Dann gilt

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathfrak{G}}_n^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \begin{pmatrix} \mathfrak{g}_n^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \hat{\otimes} (\mathfrak{g}_n^{r(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i))^\top & \mathfrak{h}_n^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \hat{\otimes} (\mathfrak{g}_n^{r(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i))^\top \\ \mathfrak{g}_n^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \hat{\otimes} (\mathfrak{h}_n^{r(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i))^\top & \mathfrak{h}_n^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \hat{\otimes} (\mathfrak{h}_n^{r(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i))^\top \end{pmatrix}, \quad (\text{II.B.14})$$

mit der Abkürzung für das Tensorprodukt  $(\mathbf{a} \hat{\otimes} \mathbf{b}^\top)_{p,q} = \mathbf{a}_p \cdot \mathbf{b}_q$ , wobei die Komponenten der Vektoren  $\mathbf{g}_n^{l,r(\tilde{N})}$  und  $\mathbf{h}_n^{l,r(\tilde{N})}$  selbst wieder Matrizen sind:

$$\mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{r(1)} = \bar{t}_1^r \phi_{n,1}^r \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{P_{\tilde{\mu}-2}^{(2)}} \mathbf{Q}_{n,\tilde{\mu}-2}^{r(2)}, \quad (\text{II.B.15})$$

$$\mathbf{g}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l(2)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{r(1)} = -\bar{t}_1^r \phi_{n,1}^r \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{P_{\tilde{\mu}-1}^{(1)}} \mathbf{Q}_{n,\tilde{\mu}-2}^{r(2)}, \quad (\text{II.B.16})$$

$$\mathbf{h}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{r(3)} = -\bar{t}_1^r \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{P_{\tilde{\mu}-2}^{(2)}} \mathbf{Q}_{n,\tilde{\mu}-1}^{r(1)}, \quad (\text{II.B.17})$$

$$\mathbf{h}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l(2)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{r(3)} = \bar{t}_1^r \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{P_{\tilde{\mu}-1}^{(1)}} \mathbf{Q}_{n,\tilde{\mu}-1}^{r(1)}. \quad (\text{II.B.18})$$

Die entsprechenden  $r$ -Vektoren  $\mathbf{g}_n^{r(\tilde{N})}$  und  $\mathbf{h}_n^{r(\tilde{N})}$  erhält man, indem man in den Formeln (II.B.15)–(II.B.18) überall  $l$  und  $r$  miteinander vertauscht oder durch  $(k = 1, 2)$

$$\mathbf{x}_{n,k}^{r(\tilde{N})} = \mathbf{x}_{n,k}^{l(\tilde{N})}, \quad n = 0, 1, \quad \text{und} \quad \mathbf{x}_{n,k}^{r(\tilde{N})} = \mathcal{P} \cdot \mathbf{x}_{n,k}^{l(\tilde{N})} \cdot \mathcal{P}, \quad n = 2, 3, \quad (\text{II.B.19})$$

mit  $\mathbf{x}_{n,k}^{l,r(\tilde{N})} = \mathbf{g}_{n,k}^{l,r(\tilde{N})}, \mathbf{h}_{n,k}^{l,r(\tilde{N})}$ , bestimmt (wegen (II.B.4) und (II.B.5)).

**C ► Beweis:** Der Beweis basiert im Wesentlichen auf den Eigenschaften der Matrizen  $\gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{l,r(k)}$ , wie sie in Lemma II.B.2 zusammengefaßt wurden, sowie auf der einfachen Tatsache, daß die Ausdrücke  $\mathbf{g}_{n,1}^{l,r(\tilde{N})}, \dots, \mathbf{h}_{n,2}^{l,r(\tilde{N})}$  rekursiv bestimmbar sind. Zunächst gilt

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_{n,p,q}^{(0)} &= \overline{\gamma_{n,0,0}^{r(p)}} \cdot \gamma_{n,0,0}^{l(q)} \\ \mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N}+1)} &= \sum_{\tilde{\mu},\tilde{\nu}=0}^{\tilde{N}} \overline{\gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{\nu}}^{r(p)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\nu},\tilde{\mu}}^{l(q)} \quad \tilde{N} \geq 1 \\ &= \mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N})} + \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \left( \overline{\gamma_{n,\tilde{N},\tilde{\mu}}^{r(p)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{N}}^{l(q)} + \overline{\gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{N}}^{r(p)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},\tilde{\mu}}^{l(q)} \right) \\ &\quad + \overline{\gamma_{n,\tilde{N},\tilde{N}}^{r(p)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},\tilde{N}}^{l(q)}. \end{aligned}$$

Nun bleibt es einem nicht erspart, die Zerlegung (II.B.13) für sämtliche Matrixelemente  $\mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}$  zu beweisen. Dabei braucht man sich aufgrund der Eigenschaft

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \mathfrak{G}_{n,q,p}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i), \quad n = 0, 1, \\ \mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \mathcal{P} \cdot \mathfrak{G}_{n,q,p}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \cdot \mathcal{P}, \quad n = 2, 3, \end{aligned}$$

von  $\mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}$  glücklicherweise nur mit einem Teil der Matrixelemente herumzuschlagen. Der nicht unbedeutende Rest kann dann daraus unschwer bestimmt werden. Man überzeugt sich

leicht davon, daß  $\mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}$ ,  $\tilde{N} = 0, 1, 2$ , tatsächlich durch die Beziehung (II.B.14) mit (II.B.15) – (II.B.18) gegeben ist. Um jedoch einer möglicherweise aufkommenden Langeweile vorzubeugen, wollen wir die prinzipielle Vorgehensweise nur an *einem* Matrixelement (welches jeweils selbst wieder eine Matrix ist!) ausführlich demonstrieren. Alle anderen Matrixelemente bekommt man auf analoge Art und Weise.

Sind wir zur Überzeugung gelangt, daß z.B.  $\mathfrak{G}_{n,1,4}^{(\tilde{N})} = \mathfrak{g}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \cdot (\mathfrak{h}_{n,1}^{r(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j))^\top$  tatsächlich erfüllt ist, so ergibt sich unter Berücksichtigung der in Lemma II.B.2 aufgeführten Beziehungen und der Tatsache, daß die entsprechenden Matrizen diagonal sind,

$$\begin{aligned}
\mathfrak{G}_{n,1,4}^{(\tilde{N}+1)} &= \mathfrak{G}_{n,1,4}^{(\tilde{N})} + \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \left( \overline{\gamma_{n,\tilde{N},\tilde{\mu}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{N}}^{l(4)} + \overline{\gamma_{n,\tilde{\mu},\tilde{N}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},\tilde{\mu}}^{l(4)} \right) + \overline{\gamma_{n,\tilde{N},\tilde{N}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},\tilde{N}}^{l(4)} \\
&= \mathfrak{G}_{n,1,4}^{(\tilde{N})} + \overline{\gamma_{n,\tilde{N},0}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,1,\tilde{N}}^{l(4)} \cdot \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},1}^{l(4)} + \overline{\gamma_{n,0,\tilde{N}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},1}^{l(4)} \cdot \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,1,\tilde{\mu}}^{l(4)} \\
&\quad + \overline{\gamma_{n,\tilde{N},0}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,1,\tilde{N}}^{l(4)} \cdot \overline{\gamma_{n,0,\tilde{N}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},1}^{l(4)} \\
&= \mathfrak{G}_{n,1,4}^{(\tilde{N})} + \overline{\gamma_{n,\tilde{N},0}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,0,\tilde{N}}^{l(2)} \cdot \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{l(3)} + \overline{\gamma_{n,0,\tilde{N}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},0}^{l(3)} \cdot \sum_{\tilde{\mu}=0}^{\tilde{N}-1} \overline{\gamma_{n,\tilde{\mu},0}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,0,\tilde{\mu}}^{l(2)} \\
&\quad + \overline{\gamma_{n,\tilde{N},0}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,0,\tilde{N}}^{l(2)} \cdot \overline{\gamma_{n,0,\tilde{N}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},0}^{l(3)} \\
&= \left( \mathfrak{g}_{n,2}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) + \overline{\gamma_{n,\tilde{N},0}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,0,\tilde{N}}^{l(2)} \right) \cdot \left( \mathfrak{h}_{n,1}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) + \overline{\gamma_{n,0,\tilde{N}}^{r(1)}} \cdot \gamma_{n,\tilde{N},0}^{l(3)} \right)^\top \\
&= \mathfrak{g}_{n,2}^{(\tilde{N}+1)}(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \cdot (\mathfrak{h}_{n,1}^{(\tilde{N}+1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j))^\top.
\end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung für das Matrixelement  $\mathfrak{G}_{n,1,4}^{(\tilde{N})}$  bewiesen. Dabei wollen wir es beenden lassen. ♣

Die Ausdrücke  $\mathfrak{g}_{n,1}^{l,r(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \dots, \mathfrak{h}_{n,2}^{l,r(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  haben eine bemerkenswerte und für das Gesamtwerk dieser Arbeit geradezu grundlegende Eigenschaft, die wir wie folgt zusammenfassen wollen.

**Lemma II.B.4** *Sei*

$$\overleftrightarrow{\Delta}_{n,\tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \begin{pmatrix} \overline{s_{\tilde{\mu}} \xi_{n,\tilde{\mu}}} + 1 & \overline{\tau_{\tilde{\mu}} \phi_{n,\tilde{\mu}}} - \overline{s_{\tilde{\mu}} \xi_{n,\tilde{\mu}}} & -\overline{\tau_{\tilde{\mu}} \phi_{n,\tilde{\mu}}} & -\overline{s_{\tilde{\mu}} \phi_{n,\tilde{\mu}}} & -\overline{\tau_{\tilde{\mu}} \xi_{n,\tilde{\mu}}} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \overline{s_{\tilde{\mu}} \mathbf{1}} & -\overline{s_{\tilde{\mu}} \mathbf{1}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\overline{\tau_{\tilde{\mu}} \mathbf{1}} \\ \xi_{n,\tilde{\mu}} & -\xi_{n,\tilde{\mu}} & \mathbf{0} & -\phi_{n,\tilde{\mu}} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

und

$$\overleftrightarrow{\Delta}_n^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \prod_{\tilde{\mu}=1}^{\tilde{N}} \overleftrightarrow{\Delta}_{n,\tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \equiv \overleftrightarrow{\Delta}_{n,\tilde{N}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \overleftrightarrow{\Delta}_{n,\tilde{N}-1}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdots \overleftrightarrow{\Delta}_{n,1}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j).$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= (\overleftrightarrow{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j))_{1,1} + (\overleftrightarrow{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j))_{1,2}, \\ \mathbf{g}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= (\overleftrightarrow{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j))_{1,4}, \end{aligned} \quad (\text{II.B.20})$$

sowie

$$\mathbf{h}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = (\overleftrightarrow{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j))_{1,5}, \quad \mathbf{h}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = (\overleftrightarrow{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j))_{1,1}.$$

► **Beweis:** Betrachten wir die erste der beiden Gleichungen aus (II.B.20). Aus (II.B.15) folgt

$$\mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N}-1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) + t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-2}^{(2)}(\mathcal{E}_j) \phi_{n,1}^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdot \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-2}^{r(2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j).$$

Definieren wir noch

$$\begin{aligned} \mathbf{1g}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-2}^{(2)}(\mathcal{E}_j) \phi_{n,1}^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdot \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-3}^{r(2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \\ \mathbf{2g}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-3}^{(2)}(\mathcal{E}_j) \phi_{n,1}^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdot \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-2}^{r(2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \end{aligned} \quad (\text{II.B.21})$$

und

$$\mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N})} \\ \mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N}-1)} \\ \mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N}-2)} \\ \mathbf{1g}_{n,1}^{l(\tilde{N})} \\ \mathbf{2g}_{n,1}^{l(\tilde{N})} \end{pmatrix},$$

so findet man mit den Rekursionsrelationen aus Lemma II.A.1, S. 92, und (II.B.12)

$$\mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \overleftrightarrow{\Delta}_{n,\tilde{N}-2}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \mathbf{g}_{n,1}^{l(\tilde{N}-1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \overleftrightarrow{\Delta}_n^{(\tilde{N}-2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \mathbf{g}_{n,1}^{l(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \quad (\text{II.B.22})$$

mit  $\mathbf{g}_{n,1}^{l(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = (1, 1, 0, 0, 0)^\top$ . Daraus folgt unmittelbar die erste Relation in (II.B.20). Völlig analog geht man die anderen drei Fälle an, wobei man entsprechend

$$\begin{aligned} \mathbf{1g}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= -t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-1}^{(1)}(\mathcal{E}_j) \phi_{n,1}^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdot \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-3}^{r(2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \\ \mathbf{2g}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= -t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-2}^{(1)}(\mathcal{E}_j) \phi_{n,1}^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdot \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-2}^{r(2)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \\ \mathbf{1h}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= -t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-2}^{(2)}(\mathcal{E}_j) \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-2}^{r(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \\ \mathbf{2h}_{n,1}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= -t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-3}^{(2)}(\mathcal{E}_j) \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-1}^{r(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \\ \mathbf{1g}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-1}^{(1)}(\mathcal{E}_j) \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-2}^{r(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j), \\ \mathbf{2g}_{n,2}^{l(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= t_1(\mathcal{E}_j) P_{\tilde{N}-2}^{(1)}(\mathcal{E}_j) \mathbf{Q}_{n,\tilde{N}-1}^{r(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \end{aligned}$$

anstelle von (II.B.21) und die zugehörigen Anfangsbedingungen anstelle von  $\mathbf{g}_{n,1}^{l(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  in (II.B.22) einzusetzen hat. ♣

Da  $\mathbf{Y}_{n,\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}$  denselben Rekursionsrelationen wie  $\mathbf{X}_{n,\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}$  genügen, können wir alle bisher gewonnenen Ergebnisse dieses Abschnittes wörtlich für  $\mathbf{Y}_{n,\tilde{\mu}}^{(\tilde{\nu})}$  übernehmen.

Kommen wir nun wieder auf das Objekt (II.B.1) unseren Interesses selbst zu sprechen! Setzt man (II.B.6) in (II.B.1) ein, so ergibt sich mit (II.B.13), (II.B.19) und der Tatsache, daß die Matrizen  $\mathbf{X}_p \cdot \overline{\mathbf{X}}_q$  bzw.  $\mathbf{Y}_p \cdot \overline{\mathbf{Y}}_q$  diagonal sind,

$$\Xi_n(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) = \mathbf{Sp} \left[ \sum_{p,q=1}^4 \mathbf{X}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \cdot \mathfrak{G}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \right] = \mathbf{Sp} \left[ (\overleftrightarrow{\mathbf{X}}_n^{(\tilde{N})})^\top \overleftrightarrow{\mathfrak{G}}_n^{(\tilde{N})} \right],$$

mit den diagonalen Matrizen

$$\mathbf{X}_{n,p,q}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \equiv (\overleftrightarrow{\mathbf{X}}_n^{(\tilde{N})})_{p,q} = \mathbf{X}_{n,p} \cdot \overline{\mathbf{X}}_{n,q} + (\Delta_{\tilde{N}} \overline{\Delta}_{\tilde{N}} - 4) \mathbf{Y}_{n,p} \cdot \overline{\mathbf{Y}}_{n,q}.$$

Es lohnt sich, die Komponenten von  $\overleftrightarrow{\mathbf{X}}_n^{(\tilde{N})}$  noch etwas genauer zu untersuchen.

**Lemma II.B.5** *Es gilt*

$$\overleftrightarrow{\mathbf{X}}_n^{(\tilde{N})} = 2 \sum_{k,l=1}^2 \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{A}}_{n,k} \cdot \mathbf{A}_{n,l} & \overline{\mathbf{A}}_{n,k} \cdot \mathbf{B}_{n,l-1}^{(1)} \\ \overline{\mathbf{B}}_{n,k-1}^{(1)} \cdot \mathbf{A}_{n,l} & \overline{\mathbf{B}}_{n,k-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,l-1}^{(1)} \end{pmatrix} \hat{\otimes} \mathfrak{X}_{k,l}^{(\tilde{N})}.$$

Hierbei ist (s. allgemeine Definition in (II.B.25))

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{n,0} &= \frac{1}{t_0} \mathbf{V}_n^{(0)} + \frac{1}{t_1} \mathbf{W}_n^{(0)}, & \mathbf{A}_{n,1} &= \frac{\sigma_0}{t_0 t_1} \mathbf{V}_n^{(0)}, \\ \mathbf{B}_{n,-1}^{(1)} &= \frac{\sigma_1}{t_1 t_2} \mathbf{W}_n^{(1)}, & \mathbf{B}_{n,0}^{(1)} &= \frac{1}{t_1} \mathbf{V}_n^{(1)} + \frac{1}{t_2} \mathbf{W}_n^{(1)}. \end{aligned}$$

Die Matrix  $\mathfrak{X}_{k,l}^{(\tilde{N})}$  ist gemäß

$$\mathfrak{X}_{k,l}^{(\tilde{N})} = \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{T}}_{1,k} \\ \overline{\mathbf{T}}_{2,k} \end{pmatrix} \hat{\otimes} (\mathbf{T}_{1,l}, \mathbf{T}_{1,l}) + \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{T}}_{1,k}^{-1} \\ \overline{\mathbf{T}}_{2,k}^{-1} \end{pmatrix} \hat{\otimes} (\mathbf{T}_{1,l}^{-1}, \mathbf{T}_{2,l}^{-1}) - 2 \begin{pmatrix} \delta_{1,k} \\ \delta_{2,k} \end{pmatrix} \hat{\otimes} (\delta_{1,l}, \delta_{2,l}) \quad (\text{II.B.23})$$

definiert, wobei die Matrizen  $\mathbf{T}_{k,l} := T_{k,l} \mathbf{1}$  durch die Komponenten  $T_{k,l} = (\mathbf{T}_{1 \rightarrow \tilde{N}-1})_{k,l}$  der Transfer-Matrix

$$\mathbf{T}_{1 \rightarrow \tilde{N}-1}(\mathcal{E}_i) = \prod_{\mu=1}^{N-1} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\tau_\mu & s_\mu \end{pmatrix} = t_1 \begin{pmatrix} -P^{(2)} & P^{(1)} \\ -P_{\tilde{N}-1}^{(2)} & P_{\tilde{N}}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \det \mathbf{T} = 1, \quad (\text{II.B.24})$$

bestimmt werden. Ausserdem ist  $\delta_{k,l} := \delta_{k,l} \mathbf{1}$ . Auch hier wird das Tensorprodukt durch  $(\mathbf{a} \hat{\otimes} \mathbf{b}^\top)_{k,l} = \mathbf{a}_k \cdot \mathbf{b}_l$  definiert.

**C ► Beweis:** Um das Lemma zu zeigen, wollen wir zunächst die Komponenten von  $\mathfrak{X}_{n,k,l}^{(\tilde{N})}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j)$  weiter umformen, für die ebenfalls die zu (II.B.20) analoge Relation (ersetze  $\mathfrak{G}$  durch  $\mathfrak{X}$ ) gilt, so daß sich die lästige Rechen- und Schreibearbeit angenehm verkürzt. Ausgehend von den

Definitionen (II.31) und (II.32) findet man mit (II.A.23) und den in Lemma II.A.1, S. 92, gefundenen Rekursionsrelationen

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,1,1}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{X}}_{n,0}^{(0)} \cdot \mathbf{X}_{n,0}^{(0)} + (\overline{\Delta}_{\tilde{N}} \Delta_{\tilde{N}} - 4) \overline{\mathbf{Y}}_{n,0}^{(0)} \cdot \mathbf{Y}_{n,0}^{(0)} \\
&= \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(0)} \left( P_{\tilde{N}} \overline{P}_{\tilde{N}} + P_{\tilde{N}-2}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} \right) + \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(0)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(0)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}} \right) - \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(0)} \left( P_{\tilde{N}-2}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) \\
&\quad - 2 \left( \frac{1}{t_0} \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} + \frac{1}{t_1} \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \right) \cdot \left( \frac{1}{t_0} \mathbf{V}_n^{(0)} + \frac{1}{t_1} \mathbf{W}_n^{(0)} \right) \\
&= \overline{\mathbf{A}}_{n,\tilde{N}} \cdot \mathbf{A}_{n,\tilde{N}} + \overline{\mathbf{A}}_{n,-\tilde{N}} \cdot \mathbf{A}_{n,-\tilde{N}} - 2\overline{\mathbf{A}}_{n,0} \cdot \mathbf{A}_{n,0} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,1,2}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{V}}_{n,0} \cdot \mathbf{V}_{n,0} \left( P_{\tilde{N}+1} \overline{P}_{\tilde{N}} + P_{\tilde{N}-3}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} \right) + \overline{\mathbf{W}}_{n,0} \cdot \mathbf{W}_{n,0} P_{\tilde{N}-1}^{(2)} \left( \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} + \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{W}}_{n,0} \cdot \mathbf{V}_{n,0} \left( P_{\tilde{N}-3}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}+1} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) - \overline{\mathbf{V}}_{n,0} \cdot \mathbf{W}_{n,0} P_{\tilde{N}-1}^{(2)} \left( \overline{P}_{\tilde{N}} + \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} \right) \\
&\quad - \left( \frac{1}{t_0} \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} + \frac{1}{t_1} \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \right) \cdot \frac{\sigma_0}{t_0 t_1} \mathbf{V}_n^{(0)} \\
&= \overline{\mathbf{A}}_{n,\tilde{N}} \cdot \mathbf{A}_{n,\tilde{N}+1} + \overline{\mathbf{A}}_{n,-\tilde{N}} \cdot \mathbf{A}_{n,-\tilde{N}+1} - 2\overline{\mathbf{A}}_{n,0} \cdot \mathbf{A}_{n,1} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,1,3}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} P_{\tilde{N}-1}^{(1)} \left( \overline{P}_{\tilde{N}} + \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} \right) - \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} P_{\tilde{N}-1}^{(1)} \left( \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} + \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}-3}^{(3)} \overline{P}_{\tilde{N}} + P_{\tilde{N}+1}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} \right) + \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}+1}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}-3}^{(3)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) \\
&\quad - 2 \left( \frac{1}{t_0} \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} + \frac{1}{t_1} \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \right) \cdot \frac{\sigma_1}{t_1 t_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \\
&= \overline{\mathbf{A}}_{n,\tilde{N}} \cdot \mathbf{B}_{n,\tilde{N}-1}^{(1)} + \overline{\mathbf{A}}_{n,-\tilde{N}} \cdot \mathbf{B}_{n,-\tilde{N}-1}^{(1)} - 2\overline{\mathbf{A}}_{n,0} \cdot \mathbf{B}_{n,-1}^{(1)} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,1,4}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} \right) - \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \overline{P}_{\tilde{N}} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} \right) + \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \overline{P}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) \\
&\quad - 2 \left( \frac{1}{t_0} \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} + \frac{1}{t_1} \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \right) \cdot \left( \frac{1}{t_1} \mathbf{V}_n^{(1)} + \frac{1}{t_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \right) \\
&= \overline{\mathbf{A}}_{n,\tilde{N}} \cdot \mathbf{B}_{n,\tilde{N}}^{(1)} + \overline{\mathbf{A}}_{n,-\tilde{N}} \cdot \mathbf{B}_{n,-\tilde{N}}^{(1)} - 2\overline{\mathbf{A}}_{n,0} \cdot \mathbf{B}_{n,0}^{(1)} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,2,2}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(0)} \left( P_{\tilde{N}+1} \overline{P}_{\tilde{N}+1} + P_{\tilde{N}-3}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}-3}^{(2)} \right) + 2\overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(0)} P_{\tilde{N}-1}^{(2)} \overline{P}_{\tilde{N}-1}^{(2)} \\
&\quad - \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(0)} P_{\tilde{N}-1}^{(2)} \left( \overline{P}_{\tilde{N}+1} + \overline{P}_{\tilde{N}-3}^{(2)} \right) - \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(0)} \overline{P}_{\tilde{N}-1}^{(2)} \left( P_{\tilde{N}+1} + P_{\tilde{N}-3}^{(2)} \right) \\
&\quad - 2 \frac{\overline{\sigma}_0}{t_0 t_1} \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \frac{\sigma_0}{t_0 t_1} \mathbf{V}_n^{(0)} \\
&= \overline{\mathbf{A}}_{n,\tilde{N}+1} \cdot \mathbf{A}_{n,\tilde{N}+1} + \overline{\mathbf{A}}_{n,-\tilde{N}+1} \cdot \mathbf{A}_{n,-\tilde{N}+1} - 2\overline{\mathbf{A}}_{n,1} \cdot \mathbf{A}_{n,1} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,2,3}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} P_{\tilde{N}-1}^{(1)} \left( \overline{P}_{\tilde{N}+1} + \overline{P}_{\tilde{N}-3}^{(2)} \right) + \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}-1}^{(2)} \left( P_{\tilde{N}+1}^{(1)} + P_{\tilde{N}-3}^{(3)} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}-3}^{(3)} \overline{P}_{\tilde{N}+1} + P_{\tilde{N}+1}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}-3}^{(2)} \right) - 2\overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} P_{\tilde{N}-1}^{(1)} \overline{P}_{\tilde{N}-1}^{(2)} \\
&\quad - 2 \frac{\overline{\sigma}_0}{t_0 t_1} \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \frac{\sigma_1}{t_1 t_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \\
&= \overline{\mathbf{A}}_{n,\tilde{N}+1} \cdot \mathbf{B}_{n,\tilde{N}-1}^{(1)} + \overline{\mathbf{A}}_{n,-\tilde{N}+1} \cdot \mathbf{B}_{n,-\tilde{N}-1}^{(1)} - 2\overline{\mathbf{A}}_{n,1} \cdot \mathbf{B}_{n,-1}^{(1)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,2,4}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}+1} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-3}^{(2)} \right) - \overline{\mathbf{V}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}+1} + P_{\tilde{N}}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-3}^{(2)} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-1}^{(2)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) + \overline{\mathbf{W}}_n^{(0)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-1}^{(2)} \left( P_{\tilde{N}}^{(2)} + P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \right) \\
&\quad - 2 \frac{\overline{\sigma}_0}{\overline{t}_0 \overline{t}_1} \mathbf{V}_n^{(0)} \cdot \left( \frac{1}{\overline{t}_1} \mathbf{V}_n^{(1)} + \frac{1}{\overline{t}_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \right) \\
&= \overline{\mathbf{A}}_{n,\tilde{N}+1} \cdot \mathbf{B}_{n,\tilde{N}}^{(1)} + \overline{\mathbf{A}}_{n,-\tilde{N}+1} \cdot \mathbf{B}_{n,-\tilde{N}}^{(1)} - 2 \overline{\mathbf{A}}_{n,1} \cdot \mathbf{B}_{n,0}^{(1)} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,3,3}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}+1}^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}+1}^{(1)} + P_{\tilde{N}-3}^{(3)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-3}^{(3)} \right) + 2 \overline{\mathbf{V}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} P_{\tilde{N}-1}^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-1}^{(1)} \\
&\quad - \overline{\mathbf{V}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-1}^{(1)} \left( P_{\tilde{N}+1}^{(1)} + P_{\tilde{N}-3}^{(3)} \right) - \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} P_{\tilde{N}-1}^{(1)} \left( \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}+1}^{(1)} + \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-3}^{(3)} \right) \\
&\quad - 2 \frac{\overline{\sigma}_1}{\overline{t}_1 \overline{t}_2} \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \cdot \frac{\sigma_1}{t_1 t_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \\
&= \overline{\mathbf{B}}_{n,\tilde{N}-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,\tilde{N}-1}^{(1)} + \overline{\mathbf{B}}_{n,-\tilde{N}-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,-\tilde{N}-1}^{(1)} - 2 \overline{\mathbf{B}}_{n,-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,-1}^{(1)} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,3,4}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}+1}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-3}^{(3)} \right) - \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{V}_n^{(2)} \left( P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}+1}^{(1)} + P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-3}^{(3)} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{V}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-1}^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(2)} + P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \right) + \overline{\mathbf{V}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-1}^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) \\
&\quad - 2 \frac{\overline{\sigma}_1}{\overline{t}_1 \overline{t}_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \cdot \left( \frac{1}{\overline{t}_1} \mathbf{V}_n^{(2)} + \frac{1}{\overline{t}_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \right) \\
&= \overline{\mathbf{B}}_{n,\tilde{N}-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,\tilde{N}}^{(1)} + \overline{\mathbf{B}}_{n,-\tilde{N}-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,-\tilde{N}}^{(1)} - 2 \overline{\mathbf{B}}_{n,-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,0}^{(1)} \\
\frac{1}{2}\mathbf{x}_{n,4,4}^{(\tilde{N})} &= \overline{\mathbf{V}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}}^{(1)} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-2}^{(2)} \right) - \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{V}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(1)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-2}^{(3)} + P_{\tilde{N}-2}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}}^{(2)} \right) \\
&\quad - \overline{\mathbf{V}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-2}^{(2)} + P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}}^{(1)} \right) + \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \cdot \mathbf{W}_n^{(1)} \left( P_{\tilde{N}}^{(2)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}}^{(2)} + P_{\tilde{N}-2}^{(3)} \overline{\mathbf{P}}_{\tilde{N}-3}^{(3)} \right) \\
&\quad - 2 \left( \frac{1}{\overline{t}_1} \overline{\mathbf{V}}_n^{(1)} + \frac{1}{\overline{t}_2} \overline{\mathbf{W}}_n^{(1)} \right) \cdot \left( \frac{1}{\overline{t}_1} \mathbf{V}_n^{(1)} + \frac{1}{\overline{t}_2} \mathbf{W}_n^{(1)} \right) \\
&= \overline{\mathbf{B}}_{n,\tilde{N}}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,\tilde{N}}^{(1)} + \overline{\mathbf{B}}_{n,-\tilde{N}}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,-\tilde{N}}^{(1)} - 2 \overline{\mathbf{B}}_{n,0}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,0}^{(1)},
\end{aligned}$$

wobei wir

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_{n,\tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \mathbf{V}_n^{(0)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) P_{\tilde{\mu}}(\mathcal{E}_i) - \mathbf{W}_n^{(0)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) P_{\tilde{\mu}-2}^{(2)}(\mathcal{E}_i) \\
\mathbf{B}_{n,\tilde{\mu}}^{(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) &= \mathbf{V}_n^{(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) P_{\tilde{\mu}}^{(1)}(\mathcal{E}_i) - \mathbf{W}_n^{(1)}(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) P_{\tilde{\mu}-2}^{(3)}(\mathcal{E}_i). \quad (\text{II.B.25})
\end{aligned}$$

eingeführt haben. Sei

$$\vec{\mathbf{A}}_n^{(\tilde{\mu})} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{n,\tilde{\mu}} \\ \mathbf{A}_{n,\tilde{\mu}+1} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{\mathbf{B}}_n^{(\tilde{\mu})} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{n,\tilde{\mu}-1}^{(1)} \\ \mathbf{B}_{n,\tilde{\mu}}^{(1)} \end{pmatrix}.$$

Es ist leicht einzusehen, daß aufgrund der Periodizität der Parameter ( $\epsilon_{N+\mu} = \epsilon_\mu$  usw.)

$$\begin{aligned}
\vec{\mathbf{A}}_n^{(\tilde{N})} &= (\mathbf{T}_{1 \rightarrow \tilde{N}} \otimes \mathbb{I}) \vec{\mathbf{A}}_n^{(0)}, & \vec{\mathbf{A}}_n^{(-\tilde{N})} &= (\mathbf{T}_{1 \rightarrow \tilde{N}}^{-1} \otimes \mathbb{I}) \vec{\mathbf{A}}_n^{(0)} \\
\vec{\mathbf{B}}_n^{(\tilde{N})} &= (\mathbf{T}_{1 \rightarrow \tilde{N}} \otimes \mathbb{I}) \vec{\mathbf{B}}_n^{(0)}, & \vec{\mathbf{B}}_n^{(-\tilde{N})} &= (\mathbf{T}_{1 \rightarrow \tilde{N}}^{-1} \otimes \mathbb{I}) \vec{\mathbf{B}}_n^{(0)}
\end{aligned}$$

erfüllt ist, wobei  $\mathbf{T}_{1 \rightarrow \tilde{N}}$  die in (II.B.24) eingeführte Transfer-Matrix ist. Damit sind wir am Ziel unserer Bemühungen angelangt. Setzen wir  $\vec{\mathbf{x}}_n^{(\tilde{\mu})} = \vec{\mathbf{A}}_n^{(\tilde{\mu})} \oplus \vec{\mathbf{B}}_n^{(\tilde{\mu})}$ , dann gilt gerade

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{X}}_n^{(\tilde{N})} &= \vec{\mathbf{x}}^{(\tilde{N})} \hat{\otimes} (\vec{\mathbf{x}}^{(\tilde{N})})^\top + \vec{\mathbf{x}}_n^{(-\tilde{N})} \hat{\otimes} (\vec{\mathbf{x}}_n^{(-\tilde{N})})^\top - 2\vec{\mathbf{x}}_n^{(0)} \hat{\otimes} (\vec{\mathbf{x}}_n^{(0)})^\top \\ &= \sum_{k,l=1}^2 \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{A}}_{n,k} \cdot \mathbf{A}_{n,l} & \overline{\mathbf{A}}_{n,k} \cdot \mathbf{B}_{n,l-1}^{(1)} \\ \overline{\mathbf{B}}_{n,k-1}^{(1)} \cdot \mathbf{A}_{n,l} & \overline{\mathbf{B}}_{n,k-1}^{(1)} \cdot \mathbf{B}_{n,l-1}^{(1)} \end{pmatrix} \hat{\otimes} \mathbf{x}_{k,l}^{(\tilde{N})}, \end{aligned}$$

mit der in (II.B.23) eingeführten Matrix  $\mathbf{x}_{k,l}^{(\tilde{N})}$ .  $\clubsuit$

Nach diesem Zwischenaufenthalt, der uns  $\overleftrightarrow{\mathbf{X}}_n^{(\tilde{N})}$  etwas näher bringen sollte, müssen wir wieder zurück zu unserer eigentlichen Aufgabe, die Summe (II.B.1a) in die in (II.B.1b) geforderte Form zu zwingen. Da man Nebendiagonalelemente bei der Spurbildung weglassen kann, erhalten wir mit

$$\boldsymbol{\vartheta}_{n,k,l}^{(\tilde{N})} := \sum_{p=1}^2 \delta_{l,p} \left( \mathbf{A}_{n,k}^{(\tilde{N})} \cdot \mathbf{g}_{n,p}^{r(\tilde{N})} + \mathbf{B}_{n,k}^{(\tilde{N})} \cdot \mathbf{h}_{n,p}^{l(\tilde{N})} \right),$$

unter Beachtung der gerade abgeleiteten Resultate, sowie den Bezeichnungen aus Lemma II.B.3

$$\begin{aligned} \mathbf{Sp} \left[ \left( \overleftrightarrow{\mathbf{X}}_n^{(\tilde{N})} \right)^\top \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_n^{(\tilde{N})} \right] &= 2 \sum_{k,l} \mathbf{Sp} \left[ \overline{\boldsymbol{\vartheta}_{n,k,l}^{(\tilde{N})}} \cdot \boldsymbol{\vartheta}_{n,l,k}^{(\tilde{N})} + \overline{\boldsymbol{\vartheta}_{n,k,l}^{(-\tilde{N})}} \cdot \boldsymbol{\vartheta}_{n,l,k}^{(-\tilde{N})} - 2\overline{\boldsymbol{\vartheta}_{n,k,l}^{(0)}} \cdot \boldsymbol{\vartheta}_{n,l,k}^{(0)} \right] \\ &= 2\mathbf{Sp} \left[ \overline{\boldsymbol{\Theta}}_n^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \mathbf{T}^\top(\mathcal{E}_i) \boldsymbol{\Theta}_n^l(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \mathbf{T}^\top(\mathcal{E}_j) - 2\overline{\boldsymbol{\Theta}}_n^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) \boldsymbol{\Theta}_n^l(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) \right. \\ &\quad \left. + \overline{\boldsymbol{\Theta}}_n^r(\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j) (\mathbf{T}^{-1}(\mathcal{E}_i))^\top \boldsymbol{\Theta}_n^l(\mathcal{E}_j, \mathcal{E}_i) (\mathbf{T}^{-1}(\mathcal{E}_j))^\top \right]. \end{aligned}$$

Damit haben wir schließlich den Übergang von (II.B.1a) nach (II.B.1b) bewerkstelligt und somit das Theorem II.B.1 bewiesen.  $\clubsuit$



# Kapitel III

## ORTSRAUM

## PFAD–RENORMIERUNG und BEISPIELE AUS DEM ZOO DER SUBSTITUTIONEN:

## Renormierungsgruppe — (lokale)

## Zustandsdichte und Kubo–

## Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$

In diesem Kapitel wollen wir die im ersten Kapitel für den allgemeinen Fall eindimensionaler **DOL**–Worten eingeführten hierarchischen Graphen für verschiedene Substitutionsklassen konkret betrachten. Dabei werden wir nicht enzyklopädisch vorgehen, sondern wir wollen bei jeder Substitutionsklasse bestimmte Akzente setzen, die uns für den jeweiligen Fall als wichtig erscheinen. Hierbei werden die konkreten Konstruktionsvorschriften für die **hierarchische Graphen**  $\mathfrak{G}^\Phi$  bzw.  $\mathfrak{G}^\Gamma$  von zentraler Bedeutung sein. Zusammen mit den zugehörigen projizierten Automaten  $\mathfrak{PA}^\Phi$  bzw.  $\mathfrak{PA}^\Gamma$  lösen sie das Kodierungsproblem und definieren die Aufeinanderfolge der einzelnen Renormierungstransformationen (RT). Der allgemeinen Definition dieser RTs gilt unser Interesse im ersten Abschnitt dieses Kapitels. Sie *legen die algebraischen Eigenschaften der Ortsraum Renormierung vollständig fest*. Die in Kapitel **I.3** auf der Ebene der symbolischen Dynamik gefundenen Resultate legen (impliziert durch die stark–Stetigkeit der Abbildung  $\Upsilon : \mathcal{A}^{\mathbb{Z}} \rightarrow \mathcal{B}_s(\mathbb{H})$ ,  $\omega \mapsto \hat{\mathfrak{G}}_\omega(z)$ ) die algebraische Struktur der Diffeomorphismen  ${}^R\mathcal{M}$  des zugehörigen diskreten dynamischen Systems fest. Darauf werden wir im Verlauf dieses Kapitels für die verschiedenen Substitutionsklassen eingehen und uns den entsprechenden physikalisch relevanten Größen, wie dem elektronischen Spektrum und den Zustandsdichten (LDOS, DOS), zuwenden, sowie die den elektronischen Transport charakterisierende Größe. Schließlich wollen wir die optische Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$  insbesondere vor dem Hintergrund der zugrundeliegenden selbstähnlichen geometrischen Struktur näher betrachten.

Der Untersuchung der verallgemeinerten Fibonacci–Folgen wollen wir in diesem Kapitel

bei weitem den breitesten Raum einräumen. Sie haben in der Klasse aller Substitutionsfolgen eine ausgezeichnete Stellung, die darin begründet ist, daß ihre erzeugenden Substitutionen die *Automorphismen* auf der freien Gruppe sind. Daraus ergibt sich insbesondere, daß diese Substitutionen im Gegensatz zu allen anderen invertierbar sind. Im ersten Anhang **III.A** zu diesem Kapitel wollen wir uns darüberhinaus exemplarisch mit der konkreten Gruppen– bzw. Monoidstrukturen derjenigen Parameter–Transformationen beschäftigen, die man braucht, um auch sämtlichen *Nicht–Diagonal–Elemente* der Green’schen Funktion berechnen zu können bzw. um nicht–periodische Randbedingungen zu beschreiben. Aus der entsprechenden Gruppen–Darstellung (bestehend aus einem Satz von Generatoren und einem vollständigen<sup>1</sup> Satz von definierenden Relationen) werden wir anschließend die zugehörigen *hierarchischen  $\Phi$ – bzw.  $\Gamma$ –Graphen* konkret deduzieren. Im zweiten Anhang **III.B** wollen wir die Farey–Zerlegung des Intervalls  $[0, 1]$  mit denjenigen Nielsen–Transformationen (NTs) in Zusammenhang bringen, welche die verallgemeinerten Fibonacci–Ketten generieren. Das Resultat ist der sog. **Farey–Baum**  $\mathfrak{F}_F^\Gamma(V, \mathbf{E})$ , der jeder reellen Zahl eine Folge von NTs zuordnet. Dieser Zugang kann als komplementär zu der in Kapitel **III.2** dargestellten *geometrischen* Charakterisierung der verallgemeinerten Fibonacci–Folgen gesehen werden. Wir werden zu *jedem* dieser Pfade in  $\mathfrak{F}_F^\Gamma(V, \mathbf{E})$  den zugehörigen hierarchischen  $\Gamma$ –Baum/Graphen  $\mathfrak{G}^\Gamma(V, \mathbf{E})$  konstruieren. In diesem Sinne lassen sich unsere  $\Gamma$ –Bäume als die bisher unbekannte dritte Dimension von  $\mathfrak{F}_F^\Gamma(V, \mathbf{E})$  auffassen.

Im dritten Abschnitt dieses Kapitels betrachten wir dann exemplarisch eine spezielle Klasse von sog. Nicht–Pisot–Ketten, in Kapitel **III.4** interessieren wir uns für die bekannte periodenverdoppelnde Substitution und die singuläre Thue–Morse–Kette. Der letzte Abschnitt ist schließlich der Rudin–Shapiro–Folge gewidmet.

### III.1 Strukturertretende Morphismen, Feshbach–Operatoren im $\ell_2$ und verallgemeinerte Ortsraum–Dezimierung

Im Folgenden werden wir explizit zeigen, wie den *Substitutionen*  $\mathcal{M}$  auf der physikalischen Seite gewissen *Ortsraum–Renormierungstransformationen* (im Sinne von z.B. [Nie76, Bur82]) oder *Dezimierungstransformationen*  ${}^R\mathcal{M}$  (im Sinne von z.B. [Wie88]) entsprechen. Die NTs sind hingegen auf das Engste mit der *Transfer–Matrizen–Methode* verknüpft. Beim erstgenannten Verfahren steht das aus der Quantenfeldtheorie bekannte erzeugende Funktional (“freie Energie”)  $\mathcal{F}[\phi]$  im Vordergrund, während man bei dem zweiten Verfahrenstypus der Schrödinger– bzw. Dyson–Gleichung selbst zu Leibe rückt. Letztere Herangehensweise geht wohl auf eine Arbeit von *Gonçalves de Silva und Koiller* [Gon81] zurück. Wir werden es im Folgenden in der wesentlich allgemeineren Form von Feshbach–Abbildungen in der entsprechenden *Ortsraum–Darstellung* benutzen und mit den genannten Ortsraum–Renormierungstechniken in Übereinstimmung bringen. In diesem Kontext wird der zentrale Begriff der “*Reskalierung*” kritisch zu untersuchen sein.

Im Wesentlichen ist den ersten beiden Verfahren gemein, daß sie das Problem der Lösung der zugrunde liegenden Gleichungen durch Reduktion der (Orts–)Freiheitsgrade auf ein im

<sup>1</sup> *De facto* wird nur eine Teilmenge des Relationensystems benötigt.

Prinzip einfacheres Problem transformieren. Damit einher geht ein (diskretes) dynamisches System von der Form

$$\vec{x}^{(n+1)} = {}^R\mathcal{M}(\vec{x}^{(n)}) =: (\vec{x}^{(n)})_{|\mathcal{M}}, \quad \vec{x}^{(k)} \in \Pi_{\epsilon,t}, \quad (\text{III.1})$$

für alle  $k \in \mathbb{N}$ , welches die funktionale Abhängigkeit der neuen Parameter von den alten Parameter angibt, d.h. die Eigenschaften des durch die Schrödinger-Gleichung vermittelten Eigenwertproblems werden durch die Eigenschaften des durch den Diffeomorphismus<sup>2</sup>  ${}^R\mathcal{M}: \Pi_{\epsilon,t} \rightarrow \Pi_{\epsilon,t}$  definierten dynamischen Systems festgelegt. Die Reduktion der Freiheitsgrade geschieht entweder durch Ausführen von Gauß'schen Integrationen oder durch geeignetes Eliminieren<sup>3</sup> von Gleichungen aus dem gegebenen linearen Gleichungssystem. Beide Methoden sind zueinander äquivalent. Im Vergleich zur Transfer-Matrizen-Methode<sup>4</sup> haben sie den Vorteil relativ einfach auch auf höherdimensionale Modelle anwendbar zu sein<sup>5</sup>. Anwendungen beider Verfahren im Rahmen 1-D aperiodischer Systeme findet man des Öfteren<sup>6</sup>.

Im Fall von selbstähnlichen Strukturen liegt es natürlich nahe, die Selbstähnlichkeit der zugrunde liegenden Strukturen bei der Reduktion von Freiheitsgraden *explizit* zu berücksichtigen. Letztendlich fassen wir eine beliebige Renormierungstransformation als eine Darstellung (z.B. Ortsraum- oder Impulsraum-Darstellung) einer Selbstähnlichkeitstransformation, einer Fixpunkttransformation einer kontrahierenden (partiell isometrischen) Abbildung auf. Konkret bedeutet dies, daß jeder Substitution eine *Deflationsoperation* (s. unten) zugeordnet wird, die ein Eliminationsschritt eindeutig festlegt. Der Vorteil ist offensichtlich: Die Anzahl der auftretenden Parameter (in unserem Fall  $\epsilon_{\sigma(11)}, \dots, t_{x_\lambda}$ ) bleibt *konstant*. Wir werden hier die bisher bekannten Formen dieser Strategie in zwei wesentlichen Punkten erweitern:

- (i) Die allen uns zugänglichen Publikationen zu unserem Thema zugrunde liegende Klasse der durch *positive* Worte  $w \in \mathbb{F}_\Lambda^+$  definierten Strukturen wollen wir um diejenigen Strukturen erweitern, die durch Elemente der ganzen *Gruppe*  $\mathbb{F}_\Lambda$  beschrieben werden. Dadurch ordnen wir der Wirkung  $\mathcal{A}[\phi]$ , bzw. dem Gleichungssystem  $(z - \epsilon_\mu)G_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \dots$  (für alle  $\nu$  dasselbe (!)), das duale Wort  $\Sigma = \phi^{-1}(w)$ ,  $w \in \mathbb{F}_\Lambda$  zu. Der "nichttriviale" Aspekt dieser Zuordnung, sofern man die zugeordneten Gleichungssysteme betrachtet, ist hierbei der "*Reduktionsprozess*" (s. unten). Wir erweitern somit für unser Verfahren die ursprüngliche Menge der durch positive Worte beschreibbaren Ketten und der zugehörigen Hamilton-Operatoren, bzw. der entsprechenden Resolventen, um die Menge der "virtuellen" Ketten<sup>7</sup>, deren Hopping-Elemente nun auch aus den "*Hilfs-Hopping-Elemente*"  $t_{x_1^{-1}}, \dots, t_{x_\lambda^{-1}}$ , bestehen können. Entsprechend wird die Menge der

<sup>2</sup>Ein **Diffeomorphismus** ist ein differenzierbarer, invertierbarer Homomorphismus (produkterhaltende Abbildung) des Parameterraumes  $\Pi_{\epsilon,t}$  in sich.

<sup>3</sup>Dem entspricht operatortheoretisch ein Ausprojizieren (Renormierungstransformation = eine *partiell isometrische* Abbildung (Fixpunkt einer kontrahierenden Abbildung), im Gegensatz zur klassischen "*Symmetrie*", der eine echte isometrische (= unitäre Abbildung) entspricht) von Freiheitsgraden, was direkt auf den jeweiligen Feshbach-Operator führt.

<sup>4</sup>Auch hier gibt es Beispiele, für die eine Ausdehnung auf höhere Dimensionen gelungen ist. Es wäre eine eigene Studie wert, vor diesem Hintergrund über die Verallgemeinerung der entsprechenden Zusammenhänge auf höherdimensionalen Strukturen nachzudenken.

<sup>5</sup>Einige Untersuchungen zu fraktalen oder quasiperiodischen Strukturen mit  $D = 2$  findet man z.B. bei [Mag86, Sir90-II, You93] und [Zho94].

<sup>6</sup>Frühere Arbeiten hierzu sind z.B. [Sou83-1, Sou83-2, Tre83, Ash89].

<sup>7</sup>Es ist eigentlich naheliegend, hier die Darstellung der zweiten Quantisierung einzuführen und diese

Platz–Energien  $\epsilon_{\sigma(ij)}$  um die Menge der zugehörigen “*Hilfs–Orbital–Energien*” erweitert. Erst damit gelingt uns eine formale Einführung der zu den Substitutionen  $\mathbf{O}$  und  $\mathbf{u}^{\pm 1}$  gehörenden Diffeomorphismen  ${}^R\mathbf{O}$  und  ${}^R\mathbf{u}_0^{\pm 1}$ . Dabei kann es vorkommen (was der allgemeine Fall ist!), daß eine Substitution gerade nicht einen Graphen  $\omega(V_\omega, \mathbf{E}_\omega)$  in einen *echten Untergraphen* (= induzierter Untergraph mit  $V'_\omega \subset V_\omega$ ) überführt, wie es bei der “gewöhnlichen” Ortsraum–Reskalierung der Fall ist (vgl. Abb. III.3), sondern nur eine Abbildung ist, die ein Wort  $w(x_1, \dots, x_\Lambda)$  in  $\Lambda$  Buchstaben wieder auf ein neues Wort mit *derselben Anzahl*  $\Lambda$  von Buchstabentypen überführt, so daß die Anzahl der Parameter konstant bleibt. Wir werden uns von der Nützlichkeit dieser Erweiterung im Folgenden konkret überzeugen können. Im Falle der verallgemeinerten Fibonacci–Folgen (s. Kapitel III.2) kann man formal alle interessierenden zyklischen Permutationen (Elemente des Orbits  $\mathbf{O}[\omega]$ ) allein durch positive Substitutionen erzeugen. Dies gilt interessanterweise auch für die (in  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$  nicht invertierbare) periodenverdoppelnde Folge  $\mathcal{M}_{PD}^n(L)$  (s. Kapitel III.4). Diese einfache Situation ändert sich aber nachhaltig, wenn man zu den anderen, in diesem Kapitel zu besprechenden, Substitutionen übergeht.

- (ii) Für die Berechnung der *Nichtdiagonal*–Elemente der Green’schen Funktion  $G_{\mu\nu}(z)$  sind die Polynome  $P_\mu^{(\nu)}$ , für  $\mu = 0, \dots, 2|w| - 1$ , von entscheidender Bedeutung (s. II.10, S. 58). Lassen sich diese ebenfalls in einer gewissen Form renormieren? Eine Fragestellung, die nach unseren Erkenntnissen in der Literatur noch nirgends angedacht wurde. Um sie zu beantworten, erweitern wir die Ortsraum–Dezimierung auf die Ortsraum–Dezimierung der ganzen *inhomogenen* Dyson–Gleichung. Dadurch gelingt es nicht nur die Diagonalterme der Green’schen Funktion zu bestimmen, sondern auch alle *Nichtdiagonalterme*. Dieser Fragestellung werden wir uns ausführlich in Anhang III.A zuwenden.

Betrachten wir ein Wort  $w'(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda) = w(w_{-\Lambda}(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda), \dots, w_\Lambda(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda))$ . Offensichtlich kann man sich  $w'$  als durch eine gewisse Substitution  $\mathcal{M} : w \rightarrow w'$  erzeugt vorstellen. Wir ordnen nun jeder *Substitution/Morphismus*  $\mathcal{M} \in \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda))$

$$\mathcal{M} : x_k \rightarrow w_k(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda), \quad k \in I_\Lambda \quad (\text{III.2})$$

( $x_{-k} = x_k^{-1}$ ), eine *Deflation*  $\overline{\mathcal{M}}^{-1}$  zu, indem wir in (III.2) die Pfeilrichtung umkehren, d.h. wir definieren

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{M}}^{-1} : w_k(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda) &\rightarrow x_k, \quad k \in I_\Lambda, \\ \overline{\mathcal{M}}^{-1} : w(w_{-\Lambda}(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda), \dots, w_\Lambda(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda)) &\rightarrow w(x_{-\Lambda}, \dots, x_\Lambda). \end{aligned}$$

Man beachte, daß  $w_{-k} = w_k^{-1}$  gilt. Eine Deflation ist *keine* inverse Substitution im Sinne Nielsens, welche *jedem* Wort aus der freien Gruppe wieder ein Wort aus  $\mathbb{F}_\Lambda$  zuordnet. Der Definitionsbereich einer Deflation besteht dagegen *nur* auf eine für jede gegebene Deflation spezifischen echten *Teilmenge* aus  $\mathbb{F}_\Lambda$ . Ein Beispiel mag das verdeutlichen: Den Substitutionen  $\mathbf{u}^{\pm 1}$  entsprechen die Deflationen

$$\overline{\mathbf{U}}^{\mp 1} : x_1 x_2^{\mp 1} \rightarrow x_1, \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq 1. \quad (\text{III.3})$$

Erweiterung in Form einer definierenden Algebra von “Hilfsteilchen” bzw. Teilchen auf “virtuellen Plätzen” auszudrücken (z.B. in  $\mathcal{F}$  durch  $\epsilon_{\delta^+} c^\dagger c$ , auf dem virtuellen Platz  $\cdot$  usw.).

Dann ist z.B.  $\mathbf{u}^{-1}(LSSLS) = LS^{-1}SSLS^{-1}S = LSL = \overline{\mathbf{U}}^{-1}(\underline{LSSLS})$ , aber  $\mathbf{u}^{-1}(LSSLL) = LSL S^{-1} LS^{-1}$  und  $\overline{\mathbf{U}}^{-1}(LSSLL) = \emptyset$ .

◻ ► Aus den folgenden Betrachtungen ergibt sich, daß sämtliche von uns in diesem Kapitel entwickelten Konzepte der Ortsraum–Renormierung ohne Weiteres auf den allgemeineren Fall des *block*–tridiagonalen Tight–Binding–Modells

$$(\hat{\mathcal{H}}_{TB} \vec{\Psi})_{\mu} := \epsilon_{\mu} \cdot \vec{\Psi}_{\mu} + t_{\mu+1} \cdot \vec{\Psi}_{\mu+1} + t_{\mu}^{\dagger} \cdot \vec{\Psi}_{\mu-1} = E \vec{\Psi}_{\mu},$$

mit den hermiteschen Matrizen  $\epsilon_{\mu}$  und  $t_{\mu}$ ,  $\det(t_{\mu}) \neq 0$ , verallgemeinern läßt. Zur allgemeinen Spektral–Theorie von block–tridiagonalen Matrizen vergl. [Ber68, Kap. VII.2–4]. Einige interessante Anwendungen findet man beispielsweise in [Cha90, Mol97] und in der dort zitierten Literatur.

◻ ► Wir betrachten als eine weitere Anwendung noch kurz eine interessante Beziehung zwischen der in diesem Kapitel dargestellten Ortsraum–Dezimierung und der Berechnung der Leitfähigkeit, der sich unmittelbar aus den folgenden Gleichungen erschließt. Sei

$$\mathcal{G}_{o\mu}^{\pm}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0} (E \pm i\eta - \epsilon_{\mu})^{-1}$$

Die Dyson–Gleichung (II.7) hat dann die Form

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}^{\pm}(E) = \mathcal{G}_{o\mu}^{\pm}(E) \delta_{\mu\nu} + \sum_{\sigma} \mathcal{G}_{o\mu}^{\pm}(E) t_{\mu\sigma} \mathcal{G}_{\sigma\nu}^{\pm}(E). \quad (\text{III.4})$$

Definieren wir mit z.B. Yeyati et al [Yey89] und Latgé et. al. [Lat90]

$$\mathbf{P}_{\mu\nu}^{\pm}(E, \omega) := \sum_{\tau, \sigma} \mathcal{G}_{\mu\tau}^{+}(E + \hbar\omega) V_{\tau\sigma} \mathcal{G}_{\sigma\nu}^{\pm}(E), \quad (\text{III.5})$$

mit  $V_{\mu\nu} := (x_{\mu} - x_{\nu}) t_{\mu\nu}$ , wobei wir die erwähnten Literaturstellen dadurch erweitern, daß wir die volle Frequenzabhängigkeit berücksichtigen wollen. Geht man mit (III.4) in (III.5) ein, so erhält man folgende Bewegungsgleichung für  $\mathbf{P}_{\mu,\nu}^{\pm}$

$$\mathbf{P}_{\mu,\nu}^{\pm}(E, \omega) = \mathcal{G}_{o\mu}^{+}(E + \hbar\omega) \sum_{\sigma} [V_{\mu,\sigma} \mathcal{G}_{\sigma,\nu}^{\pm}(E) + t_{\mu,\sigma} \mathbf{P}_{\sigma,\nu}^{\pm}(E, \omega)] \quad (\text{III.6})$$

Die beiden Gleichungen (III.4) und (III.6) lassen sich zu einer Matrixgleichung — wieder vom Dyson–Typ — zusammenfassen

$$\hat{\mathcal{G}}_{\mu,\nu} = \hat{\mathcal{G}}_{o\mu} \delta_{\mu,\nu} + \sum_{\sigma} \hat{\mathcal{G}}_{o\mu} t_{\mu,\sigma} \hat{\mathcal{G}}_{\sigma,\nu}, \quad (\text{III.7})$$

wobei nun

$$\hat{\mathcal{G}}_{\mu,\nu} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{\mu,\nu}^{\pm}(E) & 0 \\ \mathbf{P}_{\mu,\nu}^{\pm}(E, \omega) & \mathcal{G}_{\mu,\nu}^{+}(E + \hbar\omega) \end{pmatrix},$$

sowie

$$\hat{\mathcal{G}}_{o\mu} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{o\mu}^{\pm}(E) & 0 \\ 0 & \mathcal{G}_{o\mu}^{+}(E + \hbar\omega) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad t_{\mu,\nu} = \begin{pmatrix} t_{\mu,\nu} & 0 \\ V_{\mu,\nu} & t_{\mu,\nu} \end{pmatrix}$$

gilt. Damit läßt sich der Ausdruck (II.23) mit (II.22) auf die folgende Form bringen:

$$\Gamma(E, \omega) = \sum_{\mu,\nu} V_{\mu,\nu} \Re e [\mathbf{P}_{\mu,\nu}^{+}(E, \omega) - \mathbf{P}_{\mu,\nu}^{-}(E, \omega)] \quad (\text{III.8})$$

(vgl. z.B. [Yey89, Lat90]). Aufgrund der Nächste–Nachbar Näherung sind nur die  $T_{\mu,\mu\pm 1}$  von Null verschieden, so daß zur Berechnung der Leitfähigkeit nur die  $2N$  Terme  $\mathbf{P}_{\mu,\mu\pm 1}^\pm(E,\omega)$  benötigt werden anstatt sämtlicher  $N(N-1)/2$  Nichtdiagonalterme und außerdem die Doppelsumme in eine Einfachsumme kollabiert. Die Lösung der Gleichung (III.7) erlaubt somit die gleichzeitige Berechnung von Zustandsdichte und Leitfähigkeit und macht beides der Ortsraum–Renormierung unmittelbar zugänglich. Der Nachteil — alles hat seinen Preis! — dieser Vorgehensweise besteht vor allem darin, daß die Matrizen  $\hat{\mathbf{G}}_{o\mu}$  und  $\mathbf{t}_{\mu,\nu}$  nicht kommutieren, was aber im Kontext der Dezimierungstransformationen kein prinzipielles Problem darstellt. Die Behandlung von Nicht–Diagonal–Elementen wird in Anhang III.A.3 betrachtet.

Jeder Substitution  $\mathbf{M}$  entspricht eine Deflation  $\overline{\mathbf{M}}^{-1}$ , zu der wiederum eindeutig eine **Dezimierungstransformation (DT)**  ${}^R\overline{\mathbf{M}}^{-1}$  korrespondiert, die den zugrundeliegenden Hilbertraum  $\mathbb{H} = \mathbb{H}^\parallel \oplus \mathbb{H}^\perp$  in zwei zueinander orthogonale Räume zerlegt:

$$|\psi\rangle = |\psi^\parallel\rangle \oplus |\psi^\perp\rangle, \quad \text{mit} \quad |\psi^{(i)}\rangle = \sum_{\alpha \in \mathcal{L}_i} \psi_\alpha^{(i)} |\alpha\rangle, \quad \Psi_\alpha^{(i)} = \langle \alpha | \psi^{(i)} \rangle, \quad i = \parallel, \perp. \quad (\text{III.9})$$

$\mathcal{L}_\parallel := \{\alpha_\mu\}_{\mu \in G_\parallel}$  ist die Index–Menge der Folge von Symbolen  $(\sigma_{\alpha_\mu})_{\mu \in G_\parallel}$ , welche die Deflation  $\overline{\mathbf{M}}^{-1}$  überlebt haben, und  $\mathcal{L}_\perp := \{\alpha_\mu\}_{\mu \in G_\perp}$  die Index–Menge der traurigen Verlierer  $(\sigma_{\alpha_\mu})_{\mu \in G_\perp}$ , so daß  $\mathbf{G} = \mathbf{G}_\parallel \oplus \mathbf{G}_\perp$  gilt. Man kann die Zerlegung (III.9) durch die beiden Operatoren

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{M}}_\parallel^{-1} : \mathbb{H} &\rightarrow \mathbb{H}^\parallel & \text{und} & & \hat{\mathbf{M}}_\perp^{-1} : \mathbb{H} &\rightarrow \mathbb{H}^\perp, \\ \hat{\mathbf{M}}_i^{-1} |\psi\rangle &= |\psi^{(i)}\rangle, & \hat{\mathbf{M}}_i^{-1} &= \sum_{\alpha_\mu \in \mathcal{L}_i} |\alpha_\mu\rangle \langle \mu|, & i &= \parallel, \perp, \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

beschreiben, wobei die  $\mathbb{Z}$ –wertige Abbildung

$$\alpha : \mathbf{G} \rightarrow \mathcal{L}_i, \quad \mu \mapsto \alpha_\mu := \begin{cases} \alpha_\mu^\parallel \in \mathcal{L}_\parallel & \Leftrightarrow \mu \in \mathbf{G}_\parallel \\ \alpha_\mu^\perp \in \mathcal{L}_\perp & \Leftrightarrow \mu \in \mathbf{G}_\perp \end{cases},$$

jedem  $\mu \in \mathbf{G}$  eine ganze Zahl in einem der beiden Gitter  $\mathcal{L}_i$  derart zuordnet, daß  $\alpha^{(i)}(\mathbf{G}_i) = \mathcal{L}_i$  bijektiv ist und  $\alpha^{(i)}(\mathbf{G} \ominus \mathbf{G}_i) = \emptyset$  gilt. Die Vektoren  $|\alpha^{(i)}\rangle$  sind die neu indizierten Einheitsvektoren  $\vec{\delta}_\alpha^{(i)}$ ,  $\alpha \in \mathcal{L}_i$ , in  $\mathbb{H}_i$ , d.h. es gilt

$$|\alpha_\mu\rangle = \begin{cases} |\alpha_\mu^\parallel\rangle \oplus |0\rangle, & \mu \in \mathbf{G}_\parallel \\ |0\rangle \oplus |\alpha_\mu^\perp\rangle, & \mu \in \mathbf{G}_\perp \end{cases}, \quad \langle \alpha_\mu | \alpha_\nu \rangle_{\mathbb{H}} = \begin{cases} \delta_{\alpha_\mu, \alpha_\nu} = \delta_{\mu\nu}, & (\mu, \nu) \in \mathbf{G}_i \times \mathbf{G}_i \\ 0, & (\mu, \nu) \in \mathbf{G}_i \times (\mathbf{G} \ominus \mathbf{G}_i) \end{cases},$$

wobei  $|0\rangle$  der Nullvektor ist.  $\{\vec{\delta}_\alpha^{(i)}\}_{\mu \in \mathcal{L}_i}$  sind die *neuen* Ortsbasen in  $\mathbb{H}_i$ . Die Operatoren  $\hat{\mathbf{M}}_i^{-1}$  haben die leicht nachprüfbaren Eigenschaften

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{M}}_\parallel^{-1} + \hat{\mathbf{M}}_\perp^{-1} &= \sum_{\mu \in \mathbf{G}} |\alpha_\mu\rangle \langle \mu| \neq \mathbf{1}_{\mathbb{H}} (!), \\ (\hat{\mathbf{M}}_i^{-1})^\dagger \hat{\mathbf{M}}_j^{-1} &= \hat{\mathbf{0}}, \quad i \neq j, \\ \hat{\mathbf{Q}}_i &:= \hat{\mathbf{M}}_i^{-1} (\hat{\mathbf{M}}_i^{-1})^\dagger = \mathbf{1}_{\mathbb{H}_i}, \quad \mathbf{1}_{\mathbb{H}_\parallel} \oplus \mathbf{1}_{\mathbb{H}_\perp} = \mathbf{1}_{\mathbb{H}}, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} ((\hat{\mathcal{M}}_i^{-1})^\dagger \hat{\mathcal{M}}_i^{-1})^2 &= (\hat{\mathcal{M}}_i^{-1})^\dagger \hat{\mathcal{M}}_i^{-1} \quad \text{und} \quad (\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1})^\dagger \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1} + (\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1})^\dagger \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} = \mathbb{1}_{\mathbb{H}}, \\ ((\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1})^\dagger \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}) ((\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1})^\dagger \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}) &= \hat{\mathbf{0}}. \end{aligned}$$

Man erkennt aus den gemachten Relationen, daß nicht  $\hat{\mathcal{M}}_i^{-1}$  selbst, sondern

$$\hat{\mathcal{P}}_i := (\hat{\mathcal{M}}_i^{-1})^\dagger \hat{\mathcal{M}}_i^{-1} = \sum_{\mu \in G_i} |\mu\rangle\langle\mu|, \quad \hat{\mathcal{P}}_i^\dagger \equiv \hat{\mathcal{Q}}_i = \sum_{\alpha_\mu \in \mathcal{L}_i} |\alpha_\mu\rangle\langle\alpha_\mu|$$

orthonormal und idempotent, d.h. **Projektoren**, sind.  $\hat{\mathcal{M}}_i^{-1}$  sind also partielle Isometrien. Man nennt  $\hat{\mathcal{P}}_i$  gelegentlich eine Support–Projektion und  $\hat{\mathcal{Q}}_i$  ein Range–Projektion von  $\hat{\mathcal{M}}_i^{-1}$  [Weg93, S. 86]. Für einen beliebigen Operator  $\hat{\mathcal{H}} \in \mathcal{B}(\mathbb{H})$  gilt

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij} := \hat{\mathcal{M}}_i^{-1} \hat{\mathcal{H}} (\hat{\mathcal{M}}_j^{-1})^\dagger = \sum_{\mu \in G_i} \sum_{\nu \in G_j} \mathcal{H}_{\mu\nu} |\alpha_\mu\rangle\langle\alpha_\nu| \quad i = 1, 2, \quad (\text{III.11})$$

wobei die Eins für “ $\parallel$ ” und die Zwei für “ $\perp$ ” steht.

► Mit z.B. [Edw76, Lan83] und [Lem87] gehen wir von dem **erzeugenden Funktional**<sup>8</sup> (“freie Energie”)

$$\tilde{\mathcal{F}}(\lambda_{\ell,r}; E, J_\mu) = \ln \mathcal{Z}(\lambda_{\ell,r}; E, J_\mu)$$

aus, mit der “Zustandssumme” ( $z = E + i\eta$ )

$$\tilde{\mathcal{Z}}(\lambda_{\ell,r}; z, J_\mu) = \int \mathcal{D}\tilde{\varphi} e^{i\tilde{\mathcal{A}}[\tilde{\varphi}]}, \quad \int \mathcal{D}\tilde{\varphi} = \prod_{\mu=-M}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{i} d\tilde{\varphi}_\mu, \quad (\text{III.12})$$

und der “Wirkung”

$$\tilde{\mathcal{A}}[\tilde{\varphi}] = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu=-M}^{N-1} \tilde{\varphi}_\mu (z\delta_{\mu\nu} - \mathcal{H}_{\mu\nu}(\lambda_{\ell,r}; 0)) \tilde{\varphi}_\nu - \sum_{\mu=-M}^{N-1} J_\mu \tilde{\varphi}_\mu.$$

$\tilde{\varphi}_\mu$  sind platzabhängigen Felder, die je nach Modell vom Scharparameter  $\mathcal{E}$  abhängen mögen. Man erhält den bekannten Ausdruck für die Green’sche Funktion

$$\tilde{G}_{\mu\nu}(\lambda_{\ell,r}; z) = i \left. \frac{\delta^2 \tilde{\mathcal{F}}(\lambda_{\ell,r}; z, J_\tau)}{\delta J_\mu \delta J_\nu} \right|_{J_\tau=0} = -i \left. \frac{\int \mathcal{D}\tilde{\varphi} \tilde{\varphi}_\mu \tilde{\varphi}_\nu e^{i\tilde{\mathcal{A}}} }{\int \mathcal{D}\tilde{\varphi} e^{i\tilde{\mathcal{A}}} } \right|_{J_\tau=0}. \quad (\text{III.13})$$

Die Zerlegung des Hilbert–Raumes  $\mathbb{H} = \mathbb{H}_{\parallel} \oplus \mathbb{H}_{\perp}$  impliziert die der Felder  $\vec{\phi} = \vec{\phi}_{\parallel} \oplus \vec{\phi}_{\perp}$  und  $\vec{J} = \vec{J}_{\parallel} \oplus \vec{J}_{\perp}$ . Integration (Gauß’sche Integrale, quadratische Ergänzung) über die Komponenten  $\vec{\phi}_{\perp} = \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{\phi}$  liefert

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{M}^{-1}(\mathcal{F}[\vec{\phi}]) &= {}^R\mathcal{M}^{-1} \left( \int e^{i\mathcal{A}[\vec{\phi}_{\parallel}, \vec{\phi}_{\perp}]} \mathcal{D}\phi_{\parallel} \mathcal{D}\phi_{\perp} \right) \\ &= \int e^{i{}^R\overline{\mathcal{M}}^{-1}(\mathcal{A}[\vec{\phi}_{\parallel}])} \mathcal{D}\phi_{\parallel}, \quad e^{i{}^R\overline{\mathcal{M}}^{-1}(\mathcal{A})} := \int e^{i\mathcal{A}[\vec{\phi}_{\parallel}, \vec{\phi}_{\perp}]} \mathcal{D}\phi_{\perp}, \\ &= \mathcal{F}[\vec{\phi}] - \mathcal{C}(\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{J}, z), \end{aligned}$$

<sup>8</sup>Diese Methode hat natürlich den Vorteil, auch auf höhere Dimensionen anwendbar zu sein (vgl. z.B. [Sir90–II, You93, Zho94]).

wobei

$${}^R\mathcal{M}^{-1}(\mathcal{A}[\vec{\phi}^{\parallel}]) = \frac{1}{2}(\vec{\phi}^{\parallel})^\dagger \left( z - \hat{\mathcal{H}}_{11} - \hat{\mathcal{H}}_{12} \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{22}} \hat{\mathcal{H}}_{21} \right) \vec{\phi}^{\parallel} + (\vec{\phi}^{\parallel})^\dagger {}^R\mathcal{M}^{-1}(\vec{J})$$

mit

$$\vec{\phi}^{\parallel} = \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1} \vec{\phi} \quad \text{und} \quad {}^R\mathcal{M}^{-1}(\vec{J}) = \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1} \vec{J} + \hat{\mathcal{H}}_{12} \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{22}} \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{J} \quad (\text{III.14})$$

gilt. Die “Konstante”  $\mathcal{C}$  ist durch

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{J}, z) &= \frac{i}{2} (\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{J})^\dagger \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{22}} \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{J} \\ &+ \frac{i}{2} \ln \left( \det(z - \hat{\mathcal{H}}_{22}) \right) - \frac{M_{\perp} + N_{\perp}}{2} \ln(2\pi) \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

gegeben. Da in (III.13) nach den Komponenten von  $\vec{J}$ , und nicht nach den Projektionen  $\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{J}$ , abgeleitet wird, muß man jeweils rekursiv das Transformationsgesetz (III.14) auswerten, um

$${}^R\mathcal{M}^{-1}(G_{\mu\nu}(z)) = i \left. \frac{\partial^2 [{}^R\mathcal{M}^{-1}(\mathcal{F}[\vec{\phi}^{\parallel}])]}{\partial J_{\mu} \partial J_{\nu}} \right|_{J_{\tau}=0}, \quad {}^R\mathcal{M}^{-1}(\mathcal{F}[\vec{\phi}^{\parallel}]) = \mathcal{F}[\vec{\phi}^{\parallel}] - \mathcal{C}(\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \vec{J}, z), \quad (\text{III.16})$$

zu berechnen.

In Abbildung III.1 haben wir die Zusammenhänge schematisch aufgezeigt, wie sie im Rahmen einer allgemeinen Ortsraum–Renormierung auftreten. Der entscheidende Punkt ist nun, daß im Allgemeinen die partielle Isometrie  $\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}$  im **Energie–Bild**<sup>9</sup> zu der gewünschten RG–Transformation (“Super–Operator”) für den *Hamilton–Operator*

$${}^{\varepsilon R} \hat{\mathcal{M}}^{-1} : \mathcal{B}(\mathbb{H}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathbb{H}), \quad \hat{\mathcal{H}} \mapsto {}^{\varepsilon R} \hat{\mathcal{M}}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{H}} := \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1} \hat{\mathcal{H}} (\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1})^\dagger$$

führt. Wir schreiben für den “Super–Operator”  ${}^{\varepsilon R} \hat{\mathcal{M}}^{-1}$ , um die Energie–Darstellung zu betonen. Man erhält sie aus den oben gemachten Aussagen für die Projektoren unmittelbar dadurch, indem man die hier gewählte  $\ell_2$ –Darstellung (d.h. in der Form  $\hat{\mathcal{P}}_G = \sum_{\mu \in G} |\mu\rangle\langle\mu|$ ,  $G \subseteq \mathbb{Z}$ ) durch die Energie–Darstellung (d.h. durch  $\hat{\mathcal{E}}_{\omega} = \int_{\omega} d\mu(E) |E\rangle\langle E|$ ) ersetzt. In diesem Falle hat man es mit den in (II.6), auf S. 55, eingeführten projektorwertigen Borel–Funktionen  $\hat{\mathcal{E}}_{\omega}$  zu tun. Dagegen gilt in der **Ortsraum–Darstellung** für die *Resolvente*<sup>10</sup>

$${}^R \hat{\mathcal{M}}^{-1} : \mathcal{B}(\mathbb{H}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathbb{H}), \quad \hat{\mathcal{G}}(z; \vec{x}) \mapsto {}^R \hat{\mathcal{M}}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{G}}(z; \vec{x}) := \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1} \hat{\mathcal{G}}(z; {}^R \mathcal{M}(\vec{x})) (\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1})^\dagger,$$

<sup>9</sup>Zu den hier interessierenden Eigenschaften von Projektoren s. z.B. [Weg93, Mag2002], zu den Eigenschaften der Spektral–Projektoren  $\hat{\mathcal{E}}$  s. [Ped89], zu ihrer Bedeutung im Rahmen von  $C^*$ –Algebren bzw. von Neumann–Algebren vgl. z.B. [Tak79, Mur90]. Für weitere Details und Eigenschaften zum Themenkomplex “Projektoren”, soweit sie für uns hier von Interesse sind, sowie für Näheres zu den relevanten Eigenschaften von  $\hat{\mathcal{E}}_{\omega}$ , und der sie enthaltenden von Neumann–Algebren verweisen wir ebenfalls wieder auf [Wal2003]. Ebenso verschieben wir den Themenkomplex kohärenter Zustände, erzeugender Funktionale (vgl. z.B. [Neg88]) und der entsprechenden Algebren (vgl. z.B. [Bra79, Ree72–II, Kri65]) kurzerhand in das Brevier.

<sup>10</sup>Zur Erinnerung, es gilt  $\vec{x} = (\epsilon, t)$ , vgl. (III.1)

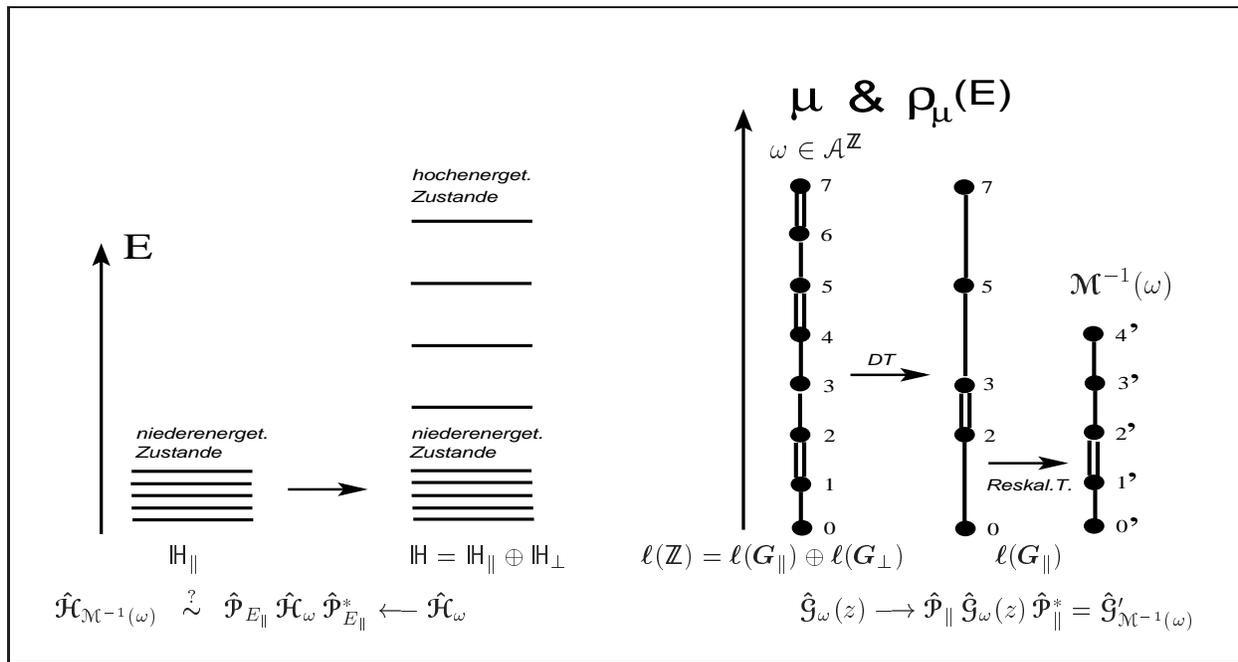


Abbildung III.1: Ein Vergleich des Renormierungsverfahrens (*links*) in der Energie-Darstellung und (*rechts*) in der Ortsdarstellung. In beiden Fällen ist  ${}^R\hat{\mathcal{M}}^{-1}$  ein Feshbach-Operator, wobei er im einen Fall in  $\Phi^\times$  (Energie-Darstellung, von  $|E\rangle$  aufgespannter Dual-Raum) im anderen Falle in  $\Phi$  (Ortsraum, z.B. von  $|x\rangle$  aufgespannter Schwartz-Raum) wirkt.

für alle  $z \in \rho(\hat{\mathcal{H}}) \cup \rho(\hat{\mathcal{M}}_\perp^{-1} \cdot \hat{\mathcal{H}})$ , auf die (und nicht den Hamilton-Operator!) nun die entsprechende Form der RG-Transformation anzuwenden ist.  $\rho(\hat{\mathcal{H}})$  ist wieder die entsprechende Resolventenmenge von  $\hat{\mathcal{H}}$ . Zwischen beiden besteht der folgende (leider) hochgradig nicht triviale Zusammenhang<sup>11</sup>:

$${}^R\hat{\mathcal{M}}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{G}}(z) \longleftrightarrow \hat{\mathcal{G}}(z) = \int \frac{1}{z - E} d\hat{\mathcal{E}}(E)$$

$${}^{\varepsilon R}\hat{\mathcal{M}}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{H}} \text{ bzw. } {}^{\varepsilon R}\hat{\mathcal{M}}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{E}}_\omega \longleftrightarrow \hat{\mathcal{E}}_{(a,b)} + \hat{\mathcal{E}}_{[a,b]} = \frac{2i}{\pi} \int_a^b \Im m \{ \hat{\mathcal{G}}^+(E) \} dE.$$

Der letzte Ausdruck ist die bekannte **Stone'sche Formel**<sup>12</sup>. Bezüglich der Ortsraum-Darstellung hat die RG-Transformation des Hamilton-Operators die Form

$${}^R\hat{\mathcal{M}}_i^{-1}[z] \cdot \hat{\mathcal{H}} := \hat{\mathcal{H}}_{ii} + \hat{\Sigma}_i(z), \quad \hat{\Sigma}_i(z) := \hat{\mathcal{H}}_{ij} \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{jj}} \hat{\mathcal{H}}_{ji}, \quad i \neq j. \quad (\text{III.17})$$

Man beachte, daß  ${}^R\hat{\mathcal{M}}^{-1} \equiv {}^R\hat{\mathcal{M}}_\perp^{-1} \in \mathbf{Mor}_{\mathfrak{S}\text{an}}(\mathcal{B}(\mathbb{H}), \mathcal{B}(\mathbb{H}))$  (bzw.  ${}^R\hat{\mathcal{M}}_\perp^{-1} \in \mathbf{Mor}_{\mathfrak{S}\text{an}}(\mathcal{B}(\mathbb{H}), \mathcal{B}(\mathbb{H}))$ ) derjenige Super-Operator auf  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  ist, welcher auf der freien Gruppe  $\mathbb{F}_\Lambda$  der Substitution  $\mathcal{M} \equiv \mathcal{M}_\perp^{-1} \in \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda))$  (bzw. der Substitution  $\mathcal{M}_\perp^{-1} \in \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda))$ ) entspricht<sup>13</sup>. Man

<sup>11</sup>Ein erster Zugang bildet der Fragenkomplex nach Orbit-Äquivalenz zwischen topologischem und abstrakten dynamischen System. K-theoretische Methoden bieten hier einen weiteren Zugang (vgl. die in der Einleitung zu dieser Arbeit zitierte Literatur und ggf. [Wal2003].

<sup>12</sup>S. z.B. [Ree72-I, S. 237/264] oder auch in [Wal2003].

nennt  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}[z] := \hat{\mathcal{H}}_{11} + \hat{\Sigma}_{\parallel}(z)$  den Wilson'schen **effektiven Hamilton–Operator** oder die Feshbach–Transformierte (= **Feshbach–Abbildung**) von  $\hat{\mathcal{H}}$ . Man erhält unmittelbar das zentrale Ergebnis<sup>14</sup>, daß für  $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(\hat{\mathcal{H}}_{22})$  die (komplexe) Zahl  $z$  genau dann zum Spektrum von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}[z]$  gehört, wenn  $z$  zum Spektrum des ursprünglichen Hamilton–Operators  $\hat{\mathcal{H}}$  gehört, d.h.  $E$  ist genau dann ein Eigenwert von  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}[z]$  mit dem Eigenvektor  $\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}|\psi\rangle = |\psi^{\parallel}\rangle \in \mathbb{H}_{\parallel}$ , wenn  $E$  Eigenwert von  $\hat{\mathcal{H}}$  ist mit dem Eigenvektor  $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$  ist. Der ursprüngliche Eigenvektor  $|\psi\rangle = |\psi^{\parallel}\rangle \oplus |\psi^{\perp}\rangle \in \mathbb{H}$  läßt sich somit aus  $|\psi^{\parallel}\rangle \in \mathbb{H}_{\parallel}$  und

$$|\psi^{\perp}\rangle = \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}|\psi\rangle = \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{22}} \hat{\mathcal{H}}_{21}|\psi^{\parallel}\rangle$$

vollständig rekonstruieren

◻ ► Die Substitution  $\mathcal{M}^{-1} \in \text{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_{\lambda}))$  impliziert den Super–Operator  $\mathcal{T}(\mathcal{M}^{-1}) = {}^R\mathcal{M}^{-1}[z]$ . Damit geht der ursprüngliche Schrödinger–Gleichung  $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  über in die beiden entkoppelten Schrödinger–Gleichung ( $z = E + i\eta$ )

$$\begin{pmatrix} {}^R\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}[z] \cdot \hat{\mathcal{H}} & \hat{0} \\ \hat{0} & {}^R\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}[z] \cdot \hat{\mathcal{H}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}\Psi \\ \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}\Psi \end{pmatrix} = z \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}\Psi \\ \hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}\Psi \end{pmatrix}.$$

Dies sieht man leicht ein<sup>15</sup>: Wendet man  $\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}$  auf die Schrödinger–Gleichung an, so ergibt sich  $\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}\hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}|\psi^{\parallel}\rangle + \hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}\hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}|\psi^{\perp}\rangle = z|\psi^{\parallel}\rangle$ . Analog verfährt man mit  $\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}$ . Damit erhält man zwei Gleichungen, die durch geeignetes Eliminieren auf die gewünschte Form führen.  ${}^R\overline{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{H}}$  ergibt sich aus (III.17), indem man die Projektoren  $\hat{\mathcal{M}}_{\parallel}^{-1}$  und  $\hat{\mathcal{M}}_{\perp}^{-1}$  gegeneinander austauscht.

Dieselbe Strategie wendet man auf die Dyson–Gleichung  $(z - \hat{\mathcal{H}})\hat{\mathcal{G}}(z) = \mathbb{1}_{\mathbb{H}}$  an und erhält die neue Gleichungen

$$(z - {}^R\hat{\mathcal{M}}_i^{-1}[z] \cdot \hat{\mathcal{H}}) \hat{\mathcal{G}}_{ii}(z) = \mathbb{1}_{\mathbb{H}_i}, \quad (\text{III.18})$$

$$\hat{\mathcal{G}}_{ij}(z) = \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{ii}} \hat{\mathcal{H}}_{ij} \hat{\mathcal{G}}_{jj}(z), \quad i \neq j, \quad \hat{\mathcal{G}}_{\perp}(z) = \hat{\mathcal{G}}_{\parallel} (\mathbb{1} - \hat{\mathcal{H}}_{21} \hat{\mathcal{G}}_{12}(z)), \quad (\text{III.19})$$

wobei  $\hat{\mathcal{G}}_{ij} := \hat{\mathcal{M}}_i^{-1} \hat{\mathcal{G}}(z) (\hat{\mathcal{M}}_j^{-1})^{\dagger}$ ,  $i, j = 1, 2$ , ist. Aus (III.18) ergibt sich die Dyson–Gleichung

$$\hat{\mathcal{G}}_{\parallel}(z) = \hat{\mathcal{G}}_{\parallel}^{(0)}(z) (\mathbb{1} + \hat{\Sigma}_{\perp}[z] \hat{\mathcal{G}}_{\parallel}(z)) \quad (\text{III.20})$$

mit<sup>16</sup>  $\hat{\mathcal{G}}_{\parallel}(z) := \hat{\mathcal{G}}_{11}(z)$  und

$$\hat{\mathcal{G}}_i^{(0)}(z) := \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{ii}}, \quad \hat{\Sigma}_{\perp}[z] := \hat{\mathcal{H}}_{21} \hat{\mathcal{G}}_{\parallel}^{(0)}(z) \hat{\mathcal{H}}_{12}.$$

Sind die Resolventen  $\hat{\mathcal{G}}_i^{(0)}(z)$ , und damit die Selbstenergie  $\hat{\Sigma}_{\perp}[z]$  gegeben, dann läßt sich aus der Lösung  $\hat{\mathcal{G}}_{\parallel}(z)$  von (III.20) gemäß (III.19) die komplette Green'sche Funktion  $\hat{\mathcal{G}}(z)$  bestimmen.

<sup>13</sup>Diese sollten nicht mit den Operatoren (III.10) aus  $\mathcal{B}(\mathbb{H})$  verwechselt werden.

<sup>14</sup>S. hierzu z.B. [Bel88, Bac98] und [Wal2003].

<sup>15</sup>Dies ist ein einfaches Beispiel einer sog. **Schur–Rotation**, s. z.B. [Fes58/62, Bel88]). Man sieht es gibt viele Namen, welche letztlich das Gleiche meinen.

<sup>16</sup>Man sollte  $\hat{\mathcal{G}}_{11}$  nicht mit der 11–Komponente  $G_{11}$  von  $\hat{\mathcal{G}}$  verwechseln.

Die bisherigen Zusammenhänge sind allgemein anwendbar, sofern man sich auf separable Hilbert–Räume beschränkt. Wir bekommen auf diese Art und Weise eine Zerlegung des Hilbert–Raumes  $\mathbb{H}$  in der Form<sup>17</sup>(vgl. hierzu auch die Beziehungen (III.24) weiter unten)

$$\mathbb{H} \rightarrow \bigoplus_{\tilde{\omega} \in \overline{\mathcal{O}[\omega]}} \mathbf{L}^2(\mathbb{R}, d\rho_{\tilde{\omega}}) \cong \bigoplus_{\tilde{\omega} \in \overline{\mathcal{O}[\omega]}} \mathbb{H}_{\tilde{\omega}}, \quad \rho_{\tilde{\omega}}(E) = \frac{1}{\pi} \int^E \mathfrak{S}m\{G_{\tilde{\omega};00}^+(E';0)\} dE', \quad (\text{III.21})$$

wobei  $G_{\tilde{\omega};00}^+(z;0) := ((z - \hat{\mathcal{H}}_{\tilde{\omega}}(0;0))^{-1})_{00}$  gilt. Man beachte, daß hier keine Spektralzerlegung der Form  $\Phi^\times \rightarrow \bigoplus_{E \in \sigma(\hat{\mathcal{H}})} \Phi_E^\times$  vorliegt, wobei  $\Phi_E^\times$  die zum (verallgemeinerten) Eigenwert gehörende Eigenmannigfaltigkeit in  $\Phi^\times$  ist. Dies wäre dann der Fall, wenn man die Ortsraum–Renormierung im Energie–Bild durchgeführt hätte. Die Interpretation von (III.21) führt über den Begriff der sog. GNS–Konstruktion (Gelfand–Naimark–Segal–Konstruktion<sup>18</sup>) zu der Darstellung des Shift–Operators<sup>19</sup> bzw. zu der, auf dem durch den *Orbit*  $\mathcal{O}[\omega]$  (d.h. durch das *Ensemble* von Operatoren  $\{\hat{\mathcal{G}}_{\tilde{\omega}}\}_{\tilde{\omega} \in \overline{\mathcal{O}[\omega]}}$ ) bestimmten Gruppoid erklärten, konkreten  $C^*$ –Algebra, der linearen Hülle der Resolventen  $\hat{\mathcal{G}}_{\tilde{\omega}}(z)$ . Man erkennt an dieser Stelle schön den aller Ortsraum–Renormierung zugrundeliegende wesentliche Charakteristikum: Die Menge der erlaubten RG–Transformationen erzeugen die vollständige lineare Hülle  $\text{Hull}(\hat{\mathcal{H}})$  von  $\hat{\mathcal{H}}$ . Dem Energiespektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}})$  als Objekt (lokal kompakter Hausdorff–Raum und Abel’sche  $C^*$ –Algebra) steht der Orbit  $\text{Hull}(\hat{\mathcal{H}})$  (als “Ensemble”) als Objekt gegenüber. Dem Ensemble  $\text{Hull}(\hat{\mathcal{H}})$  steht (zumindest im Falle von Bloch’schen Randbedingungen) aber auch die Wellenfunktion, betrachtet als Ensemble  $\{\Psi_\mu\}_{\mu \in \mathbf{Z}}$  gegenüber. Darin begründet sich z.B. der “unmittelbare” Bezug unserer Graphen auf der einen Seite und den (multifraktalen) Eigenschaften von Spektrum und Wellenfunktion auf der anderen [Wal2003].

Beschränken wir uns im Folgenden auf den 1–D Fall, d.h. auf die Menge der durch (unendliche) tridiagonale Matrizen darstellbare Operatoren. Es ist eine bemerkenswerte, und für das Folgende wesentliche Tatsache, daß der einer Substitution  $\mathcal{M}^{-1} \in \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(A_\lambda))$  entsprechende Super–Operator  ${}^R\hat{\mathcal{M}}^{-1} = \mathfrak{T}(\mathcal{M}^{-1})$  die tridiagonale Struktur von  $\hat{\mathcal{H}}$  erhält, d.h. es gilt

$$\begin{aligned} {}^R\hat{\mathcal{M}}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{H}}_\omega &= \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}[z] := \hat{\mathcal{H}}_{\parallel}(\epsilon, \mathbf{t}) + \hat{\mathcal{H}}_{12}(\epsilon, \mathbf{t}) \frac{1}{z - \hat{\mathcal{H}}_{\perp}(\epsilon, \mathbf{t})} \hat{\mathcal{H}}_{21}(\epsilon, \mathbf{t}) \\ &= \sum_{\alpha_\mu \in \mathcal{L}_{\parallel}} |\alpha_\mu\rangle \epsilon_{\alpha_\mu|_{\mathcal{M}^{-1}}}(z) \langle \alpha_\mu| + \sum_{\alpha_\mu, \alpha_\nu \in \mathcal{L}_{\parallel}} |\alpha_\mu\rangle t_{\alpha_\mu \beta_\nu|_{\mathcal{M}^{-1}}}(z) \langle \beta_\nu| \\ &=: \hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{M}^{-1}(\omega)}(\epsilon|_{\mathcal{M}^{-1}}, \mathbf{t}|_{\mathcal{M}^{-1}}). \end{aligned}$$

<sup>17</sup>Zur Beziehung zwischen  $\rho_{\tilde{\omega}}(E)$  und den lokalen Zustandsdichten  $\rho_\mu(E) = (1/\pi)\mathfrak{S}m\{G_{\tilde{\omega};\mu\mu}^+(E;\xi_\pm)\} = (1/\pi)\mathfrak{S}m\{G_{\tilde{\omega};\mu;00}^+(E;\xi_\pm)\}$  vgl. man die Diskussion des entsprechenden Beispielles auf S. 97ff. . Vermerkt sei, daß wir dort der Behandlung des singular–stetigen Anteils aus dem Wege gingen. Die dort angegebenen Formeln sind in trivialerweise auf alle uns hier interessierenden zyklischen Permutation übertragbar.

<sup>18</sup>Zum Begriff der GNS–Konstruktion s. z.B. [Bra79] und ggf. [Wal2003].

<sup>19</sup>Es gibt für den Orbit des Zeitentwicklungsoperators eingehende Untersuchungen zu dessen Darstellung, wobei wir hier exemplarisch [Ped79, Bra79] und insbesondere die Arbeit [Ant99–II] anführen wollen. In gewisser Analogie hierzu geht man auch in dem uns hier interessierenden Falle vor. Einiges hiervon findet man auch in [Wal2003] zusammengetragen.

Für die neuen Parameter  $\epsilon_{\alpha|_{\mathcal{M}^{-1}}}(z)$  und  $t_{\alpha\beta|_{\mathcal{M}^{-1}}}(z) = t_{\alpha+1|_{\mathcal{M}^{-1}}}\delta_{\alpha,\beta-1} + t_{\alpha|_{\mathcal{M}^{-1}}}\delta_{\alpha,\beta+1}$  finden wir die durch die Deflation (III.2) induzierten allgemeinen Rekrusionsformeln ( $t_{|w_k|}^{(k)} := t_0^{(p)}$ )

$$\epsilon_{\sigma^{(kp)}|_{\mathcal{M}^{-1}}} = \epsilon_{|w_k|^{-1}}^{(k)} + \prod_{\mu=|w_k|^{-1}}^0 \left( \frac{-(t_{\mu}^{(k)})^2}{\sigma_{\mu-1}^{(k)}} \right) + \prod_{\mu=0}^{|w_p|^{-1}} \left( \frac{-(t_{\mu}^{(p)})^2}{\sigma_{\mu}^{(p)}} \right), \quad (\text{III.22})$$

$$\frac{1}{t_{x_k|_{\mathcal{M}^{-1}}}} = \frac{1}{t_0^{(k)} t_1^{(k)} \cdots t_{|w_k|^{-1}}^{(k)}} \prod_{\nu=0}^{|w_k|^{-2}} \left[ \prod_{\nu=0}^{\mu} \left( \frac{-(t_{\nu}^{(k)})^2}{\sigma_{\nu}^{(k)}} \right) \right]. \quad (\text{III.23})$$

► Man macht sich leicht klar, daß<sup>20</sup> für die beiden Parameter  $x_{\alpha} = (z - \epsilon_{\alpha})/t_L$  und  $y_L = 1/t_L$  die Beziehungen

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{M}_{\xi}((x_{\alpha}, y_L)) \equiv (x_{\alpha}, y_L)|_{\xi} &= (\Delta_{|w|}, P_{|w|^{-1}}^{(\xi-1)}) \\ &\sim \left( \mathbf{Sp}\{T_{0 \rightarrow |w|^{-1}}\}, \frac{1}{t} \det(z - \hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}^{\xi}(\omega)}(0; 0)) \right), \end{aligned} \quad (\text{III.24})$$

erfüllt werden, wobei  $\omega = \mathcal{M}(L)$  und  ${}^R\mathcal{M}_{\xi} = \mathcal{F}^{\xi} \cdot \mathcal{M}(L)$  ist. Man sieht hierdurch eine weitere Facette des Orbits  $\mathcal{O}[\omega]$ .

Wir wollen nun die geschilderten Zusammenhänge dahingehend erweitern, daß wir erstmals nicht nur Deflationen  $\overline{\mathcal{M}}^{-1}$ , sondern den allgemeineren Begriff der inversen Substitution  $\mathcal{M}^{-1}$  in die Theorie der Ortsraum–Renormierung einführen. Betrachten wir die Menge der Substitutionen  $\mathcal{M} \in \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(A_{\lambda}))$ . Sie zerfallen in zwei Klassen: Die der in *ganz*  $\mathbb{F}(A)$  invertierbaren<sup>21</sup> Substitutionen (= **Automorphismen** über der freien Gruppe  $\mathbb{F}(A)$ ) und dem “Rest”, der nur auf spezifischen Teilmengen aus  $\mathbb{F}(A)$  invertierbaren Substitutionen. Letztere kann man wiederum in nichtsinguläre und singuläre ( $\det(\mathcal{S}_{\mathcal{M}}) = 0$ ) Substitutionen unterscheiden. Allen positiven Substitutionen  $\mathcal{M}$  sind, *wenn* man sich bei ihren Wertebereichen auf die oben genannten spezifischen Teilmengen (“Sprachen”) aus  $\mathbb{F}(A)$  beschränkt, die entsprechenden Deflationen  $\overline{\mathcal{M}}^{-1}$  zugeordnet, die auf die zugehörigen Diffeomorphismen  ${}^R\overline{\mathcal{M}}^{-1}$  (III.22)f. führen. Wir haben in Kapitel I.3 die Bedeutung der zyklischen Permutationen kennengelernt und gesehen, daß sie sich i.a. *nicht* in eine Folge positiver Substitutionen zerlegen lassen. Die zugehörigen Generatoren bedürfen zu ihrer Definition der *inversen Substitutionen*  $\mathcal{M}^{-1}$  aus der Automorphismengruppe  $\Phi(\mathbb{F}(A))$ . Deshalb wollen wir Letztere nun einer weiteren Betrachtung unterziehen. Der Schlüsselbegriff, welcher die Konzepte der Substitution einerseits und den der Deflation andererseits miteinander verbindet, ist die *freie Reduktion*  $\rho$ . Bisher wurde noch an keiner Stelle von der Tatsache Gebrauch gemacht, daß jedes Wort aus  $\mathbb{F}(A)$  äquivalent (bezüglich dem Gruppenprodukt in  $\mathbb{F}(A)$ ) zu dem zugehörigen frei reduzierten Wort ist. So ist z.B.  $LS^{-2}L^{-3}SL^2$  frei reduziert,  $LS^3S^{-3}L^{-1}S$  dagegen nicht, aber äquivalent zu dem frei reduzierten Wort  $S$ . Es ist somit plausibel zu fordern, daß zwei *physikalische* Systeme zueinander *äquivalent* sein sollen, wenn die freie Reduktion  $\rho$  der

<sup>20</sup>Zur Bezeichnungsweise vgl. (I.73), S. 39.

<sup>21</sup>Hierzu ein Beispiel: Würde man zu den Elementen der Freien Gruppe  $\mathbb{F}(A_2) = \langle L, S \rangle$  alle Elemente der Form  $x_n^n = L$  und  $y_n^n = S$  hinzunehmen, wobei  $n$  alle Primzahlen annehmen kann, dann wäre beispielsweise die in (I.38), auf S. 20, definierte non–Pisot Substitution in der so erweiterten Gruppe invertierbar:  $\epsilon_n^{-1} : L \rightarrow L^{1/n}, S \rightarrow S$  (zur Definition von  $\epsilon_n$  s. (I.37)).

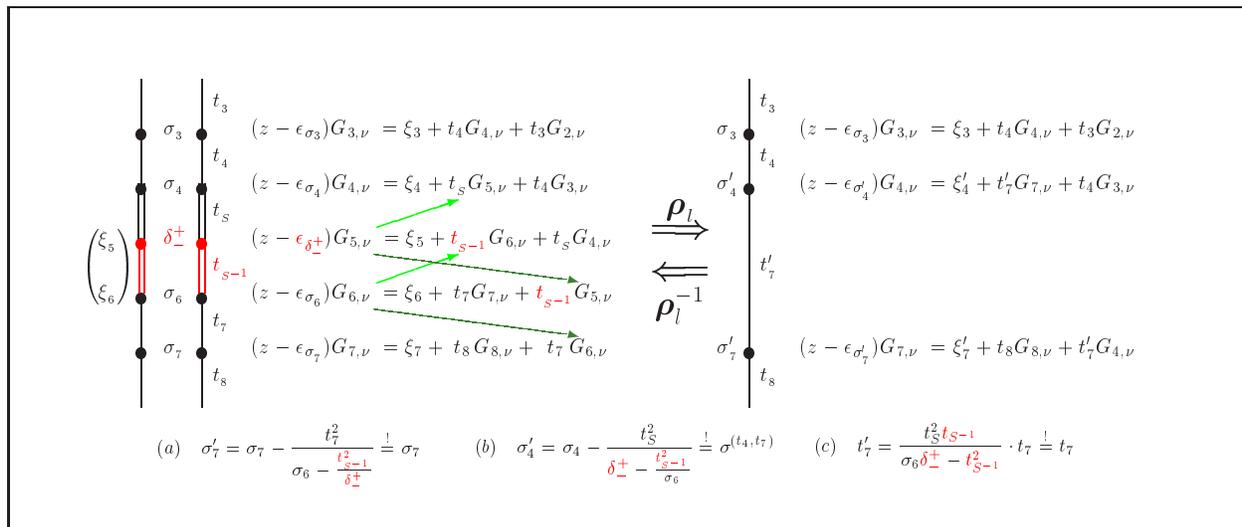


Abbildung III.2: Für gegebenes  $\nu$  entspricht jedem Symbol  $\sigma_\mu$  in dem  $w$  entsprechenden dualen Wort genau eine Gleichung  $(z - \epsilon_\mu)G_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \dots$ . Offensichtlich gilt  $w = \dots y_2 y_3 S^{-1} S y_6 y_7 \dots = \dots y_2 y_3 y_6 y_7 \dots = w' = \rho(w)$ . Der *homogene* Anteil der Dyson–Gleichung (= Schrödinger–Gleichung), der dem Wort  $w$  entspricht, muß zum *homogenen* Teil der Dyson–Gleichung, der dem *frei reduzierten* Wort  $w' = \rho(w)$  entspricht, äquivalent sein. Die Reduktion–Deflation (III.26) impliziert im gezeigten Beispiel die Parametertransformationen (a)—(c) (linke Gleichungen, Pfeile sollen andeuten, welche Gleichungen wo einzusetzen sind), wobei wir  $\sigma_\mu := E - \epsilon_\mu$  setzten. Die zugehörigen *Fixpunktgleichungen* (a)—(c) (rechte Gleichungen) müssen für alle  $\sigma_6, t_7$  gleichermaßen erfüllt sein. Sie führen deshalb auf die Bedingungen (III.28)ff.: (a) liefert<sup>23</sup>  $\delta_+^2 = 0$ , so daß sich aus (c)  $t_{S-1} = t_S$  ergibt. Aus (b) ergeben sich die entsprechenden Gleichungen aus (III.29). Das Transformationsverhalten des *inhomogenen* Anteils wird im Text näher erklärt. Es sind immer nur *zwei* der Inhomogenitäten  $\xi_\mu$  von Null verschieden (hier z.B.  $\xi_4, \xi_5$ ). Um diese hervorzuheben, schreiben wir sie neben die zu betrachtende Kette (vgl. linke Kette).

zugehörigen Worte  $w$  und  $w'$  dasselbe Wort ergibt. Dies wollen wir durch die Forderung nach Invarianz der entsprechenden Dyson–Gleichungen konkretisieren. In Abb. III.2 findet man die Situation dargestellt. Wir werden jede Substitution  $\mathfrak{M} \in \Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}))$  in eine Deflation  $\overline{\mathfrak{M}}$ , einen geeignet zu wählenden Erweiterungs– und einen Reduktionsprozess der Form

$$\mathfrak{M} := \rho \cdot \overline{\mathfrak{M}} \cdot \rho^{-1}, \quad \rho \in \{\mathbb{1}, \rho_l, \rho_r, \dots\}, \quad (\text{III.25})$$

zerlegen, wobei die **Reduktion–Deflationen** (RD)  $\rho_{l,r}$  durch

$$\rho_l : x_1 x_2^{-1} x_2 \rightarrow x_1, \quad x_k \rightarrow x_k \quad \text{und} \quad \rho_r : x_1 x_2 x_2^{-1} \rightarrow x_1, \quad x_k \rightarrow x_k, \quad k \neq 1, \quad (\text{III.26})$$

definiert sind. Alle freie Reduktionen  $\rho$  lassen sich als Produkte in  $\rho_{l,r}$  und den Generatoren  $\mathcal{P}, \mathcal{O}$  und  $\mathcal{Q}$  der symmetrischen Gruppe  $\Sigma(\mathcal{A})$  darstellen. Die *inversen RDs* (= “*inflations*”)  $\rho_{l,r}^{-1}$  ergeben sich aus (III.26) durch Umkehrung der Pfeilrichtungen. Der Reduktionsprozess ist ein spezieller Typ einer Deflation. Der Erweiterungsprozeß entspricht dagegen einem geeigneten “*Liften*” des Hamilton–Operators. Ein Beispiel für die konkrete Vorgehensweise findet man in Abb. III.2. Wir finden zunächst

$$t_{x_i} = -t_{x_i^{-1}} \quad \text{und} \quad \epsilon_{\sigma^{(i,-i)}} = z, \quad i \in I_\Lambda. \quad (\text{III.27})$$

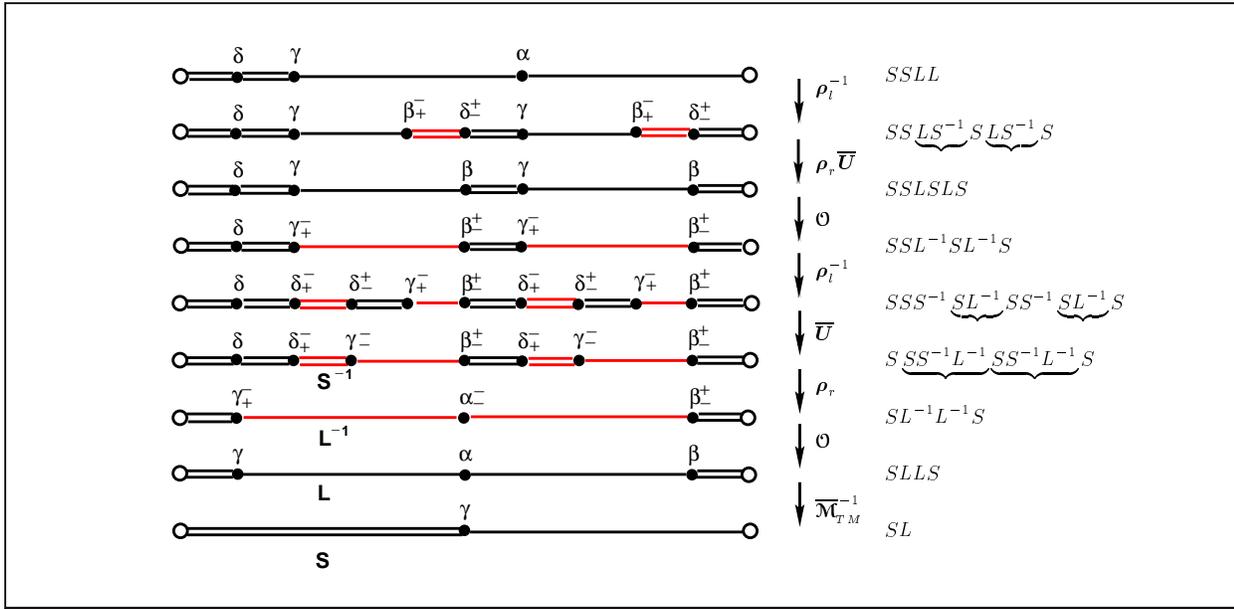


Abbildung III.3: Die Substitution  $\mathbf{u}^{-1} \mathcal{A} \bar{\mathcal{M}}_{TM}^{-1} \in \mathbf{Hom}(\mathbb{F}(A_\Lambda))$  erzeugt  $SLL = \mathbf{u}^{-1} \mathcal{A} \bar{\mathcal{M}}_{TM}^{-1}(SL)$ . Ihr entspricht die “inversen” Substitution  $\bar{\mathcal{M}}_{TM}^{-1} \cdot \mathcal{A}^{-1} \cdot \mathbf{u}$ , mit  $\mathcal{A}^{-1} = \mathcal{O} \mathbf{U} \mathcal{O}$ . Aus der elementaren Deflation  $\bar{\mathcal{M}}_{TM}^{-1}$ , den Substitutionen  $\mathcal{O}$  und  $\bar{\mathbf{U}}$ , sowie den RD  $\rho_l, \rho_r$  setzt man die zugehörige Deflation  $\bar{\mathcal{M}}_{TM}^{-1} \cdot \mathcal{O} \rho_r \bar{\mathbf{U}} \rho_l^{-1} \mathcal{O} \cdot \rho_r \bar{\mathbf{U}} \rho_l^{-1}$  zusammen, der nun auf eindeutige Weise eine DT  ${}^R(\mathbf{u}^{-1} \mathcal{A} \bar{\mathcal{M}}_{TM}^{-1})$  zugeordnet werden kann.

Daraus ergibt sich aber notwendigerweise für  $i \neq j, i, j \in I_\Lambda$

$$\begin{aligned}
z - \epsilon_\alpha &= \epsilon_{\alpha^-} - z, & z - \epsilon_\delta &= \epsilon_{\delta^-} - z, & z - \epsilon_{\sigma(ii)} &= \epsilon_{\sigma(-i,-i)} - z, \\
z - \epsilon_{\beta^\pm} &= \epsilon_{\gamma^\pm} - z, & z - \epsilon_{\sigma(i,-j)} &= \epsilon_{\sigma(-j,i)} - z, \\
z - \epsilon_{\beta^\pm} &= \epsilon_{\gamma^\mp} - z, & z - \epsilon_{\sigma(ij)} &= \epsilon_{\sigma(-j,-i)} - z, \\
\epsilon_{\delta^\pm} &= \epsilon_{\beta^\pm} + \epsilon_{\gamma^\pm} - z, & \epsilon_{\sigma(ii)} &= \epsilon_{\sigma(ij)} + \epsilon_{\sigma(-j,i)} - z
\end{aligned} \tag{III.28}$$

sowie

$$\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta + \epsilon_\gamma - \epsilon_\delta, \quad \epsilon_{\sigma(ii)} = \epsilon_{\sigma(ij)} + \epsilon_{\sigma(ji)} - \epsilon_{\sigma(jj)} \tag{III.29}$$

Gleichungen (III.27) und (III.28) liefern das beruhigende Resultat, daß keiner der “*Slave-Parameter*” ein eigenständiges Dasein führt. Dagegen offenbart (III.29) die erstaunliche Erkenntnis, daß die Invarianz unter freier Reduktion  $\rho$  impliziert, daß nur die Parameter  $t_{x_i}$  und  $\epsilon_{\sigma(ij)}$  mit  $i \neq j, i, j = 1, 2, \dots, \Lambda$  und  $\epsilon_{\sigma(11)}$  (oder *ein* anderes  $\epsilon_{\sigma(ii)}$ ) frei wählbar sind.

► Wir wollen diesen allgemeinen Tatbestand kurz am Beispiel von  $\mathcal{A}_2$  konkret betrachten. In diesem Falle kann man nur  $t_L, t_S, \epsilon_\beta, \epsilon_\gamma$  und  $\epsilon_\alpha$  (oder  $\epsilon_\delta$ ) frei wählen; gibt man sie vor, so sind alle anderen Parameter in unserer „gelifiteten“ Gleichung festgelegt. Dabei ist es neben der Tatsache, daß *keiner* der Hilfsparameter eine wesentliche Rolle spielt, zunächst überraschend, daß man *nicht alle vier* Parameter  $\epsilon_\alpha, \epsilon_\beta, \epsilon_\gamma, \epsilon_\delta$  frei wählen kann. Um die Bedeutung von (III.29) besser zu verstehen, müssen wir auf die durch (II.A.7) gegebene Beziehung zu dem kontinuierlichen Modell zurückkommen. Wir setzen zunächst  $V_\mu^{(0)} = 0$ . Dann ist gemäß Konstruktion  $\mathcal{K}_{mn}^{(\mu)} \in \{\mathcal{K}_{mn}^{(L)}, \mathcal{K}_{mn}^{(S)}\}$ , wenn  $\Delta_\mu = x_\mu - x_{\mu-1} = L$ , bzw.  $\Delta_\mu = S$ . Deshalb ergibt sich

mit (II.A.7)

$$\begin{aligned} (E - \epsilon_\delta) &:= \left( \frac{\mathcal{K}_{11}^{(S)}}{\mathcal{K}_{12}^{(S)}} + \frac{\mathcal{K}_{22}^{(S)}}{\mathcal{K}_{12}^{(S)}} \right) = \left( \frac{\mathcal{K}_{11}^{(S)}}{\mathcal{K}_{12}^{(S)}} + \frac{\mathcal{K}_{22}^{(L)}}{\mathcal{K}_{12}^{(L)}} \right) + \left( \frac{\mathcal{K}_{11}^{(L)}}{\mathcal{K}_{12}^{(L)}} + \frac{\mathcal{K}_{22}^{(S)}}{\mathcal{K}_{12}^{(S)}} \right) - \left( \frac{\mathcal{K}_{11}^{(L)}}{\mathcal{K}_{12}^{(L)}} + \frac{\mathcal{K}_{22}^{(L)}}{\mathcal{K}_{12}^{(L)}} \right) \\ &= (E - \epsilon_\beta) + (E - \epsilon_\gamma) - (E - \epsilon_\alpha), \end{aligned}$$

womit wir (III.29) auf eine ganz andere Art und Weise wiederentdeckt haben. Läßt man nun  $V_\mu^{(\delta)} \neq 0$  zu, so fordert die “Konsistenzgleichung” (III.29), daß

$$V_\delta^{(\delta)} = V_\beta^{(\delta)} + V_\gamma^{(\delta)} - V_\alpha^{(\delta)},$$

d.h. sie verbietet die freie Wahl *aller vier* Parameter  $V_\sigma^{(\delta)}$ ,  $\sigma \in \{\alpha, \beta, \gamma, \delta\}$ . An dieser Stelle wird deutlich, daß das duale Wort  $\Sigma$ , welches die  $V_\sigma^{(\delta)}$  festlegt, von  $w(L, S)$  abgeleitet ist und nicht umgekehrt. Dies hat man z.B. zu beachten, wenn man wie in [Sán94]  $V_\sigma^{(\delta)}$  als Grenzwert von Kastenpotentialen betrachtet. Um Mißverständnissen vorzubeugen sei noch betont, daß man natürlich im allgemeinen Fall alle vier  $V_\sigma^{(\delta)}$  frei vorgeben, aber man benötigt zur Erzeugung des entsprechenden Wortes *durch Substitutionen*, welches die allgemeinere “Symmetrie” des dualen Wortes beschreiben kann, ein entsprechend größeres Alphabet  $\mathcal{A}$ .

Betrachten wir das Transformationsverhalten der Parameter  $\vec{x} \in \mathbf{\Pi}_{\epsilon, t}$ . Die Wirkung der Substitutionen  $\mathcal{P}, \mathcal{Q}$  und  $\mathcal{O}$  auf das Gleichungssystem sind unmittelbar einsichtig. Dabei kann man sich auf die Betrachtung der “relevanten” Parameter beschränken, wobei wir der Bequemlichkeit halber sowohl  $\epsilon_\alpha$  als auch  $\epsilon_\delta$  einbeziehen wollen. Die Substitution  $\mathcal{P}$  induziert  ${}^R\mathcal{P} = {}^R\mathcal{P}^{-1}$  mit der Darstellung

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha|\mathcal{P}} &= \epsilon_\delta, \quad \epsilon_{\beta|\mathcal{P}} = \epsilon_\gamma, \quad \epsilon_{\gamma|\mathcal{P}} = \epsilon_\beta, \quad \epsilon_{\delta|\mathcal{P}} = \epsilon_\alpha \quad \text{und} \quad \epsilon_{\sigma(ij)|\mathcal{P}} = \epsilon_{\sigma(ij)}, \quad i, j \neq 1, 2, \\ t_{L|\mathcal{P}} &= t_S, \quad t_{S|\mathcal{P}} = t_L, \quad \text{und} \quad t_{x_i|\mathcal{P}} = t_{x_i}, \quad i \neq 1, 2, \end{aligned}$$

während  $\mathcal{O}$  zu  ${}^R\mathcal{O} = {}^R\mathcal{O}^{-1}$  führt, mit

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha|\mathcal{O}} &= -\epsilon_\alpha, \quad \epsilon_{\beta|\mathcal{O}} = \epsilon_\delta - \epsilon_\gamma + z, \quad \epsilon_{\gamma|\mathcal{O}} = \epsilon_\delta - \epsilon_\beta + z, \quad \epsilon_{\delta|\mathcal{O}} = \epsilon_\delta, \\ \epsilon_{\sigma(i1)|\mathcal{O}} &= \epsilon_{\sigma(ii)} - \epsilon_{\sigma(i1)} + z, \quad \epsilon_{\sigma(i1)|\mathcal{O}} = \epsilon_{\sigma(ii)} - \epsilon_{\sigma(i1)} + z \quad \text{und} \quad \epsilon_{\sigma(ij)|\mathcal{O}} = \epsilon_{\sigma(ij)}, \quad i, j \neq 1, \\ t_{L|\mathcal{O}} &= -t_L, \quad t_{S|\mathcal{O}} = t_S \quad \text{und} \quad t_{x_i|\mathcal{O}} = t_{x_i}, \quad i \neq 1, 2, \end{aligned}$$

wobei wir von (III.28) Gebrauch machten. Für  ${}^R\mathcal{Q}$  ergibt sich

$$\epsilon_{\sigma(ij)|\mathcal{Q}} = \epsilon_{\sigma(pq)}, \quad t_{x_i|\mathcal{Q}} = t_{x_p} \quad \text{mit} \quad p = (i+1) \bmod \Lambda, \quad q = (j+1) \bmod \Lambda,$$

und  $i, j = 1, \dots, \Lambda$ . Man beachte, daß in  $\Phi_2$  die Substitutionen  $\mathcal{P} = \mathcal{Q}$  identisch sind.

Um die Wirkung der Substitution  $\mathbf{u}^{\pm 1}$ , im Gegensatz zu den oben betrachteten Deflationen  $\bar{\mathbf{u}}^{\pm 1}$ , zu verstehen, müssen wir mit der Zerlegung  $\mathbf{u}^{\pm 1} = \rho \bar{\mathbf{U}}^{\pm 1} \rho^{-1}$  ernst machen (vgl. Abb. III.2). Die RD  $\rho$  bzw.  $\rho^{-1}$  führt auf ein jeweils neues Gleichungssystem mit den durch (III.27) bis (III.29) gegebenen Parametern. Die zwischengeschaltene Deflation (III.3) induziert die eigentliche PT. Vom Grundsatz her sind auch  $\rho$  bzw.  $\rho^{-1}$  nichts anderes als

speziell gewählte Deflationen, die eine bestimmte PT induzieren, welche auf die “Fixpunkt–Gleichungen” (III.27)–(III.29) führten (s. Abb. III.2). Zusammengefaßt findet man für die durch  $\mathbf{u}^{-1}$  induzierte DT<sup>24</sup>  ${}^R\mathbf{u}_0^{-1}$  durch entsprechende Anwendung von (III.23):

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha|u^{-1}} &= \epsilon_{\gamma} + \frac{t_L^2 + t_S^2}{z - \epsilon_{\beta}}, & \epsilon_{\beta|u^{-1}} &= \epsilon_{\delta} + \frac{t_S^2}{z - \epsilon_{\beta}}, \\ \epsilon_{\gamma|u^{-1}} &= \epsilon_{\gamma} + \frac{t_L^2}{z - \epsilon_{\beta}}, & \epsilon_{\delta|u^{-1}} &= \epsilon_{\delta}, & \epsilon_{\sigma^{(ij)}|u^{-1}} &= \epsilon_{\sigma^{(ij)}}, \quad i, j \neq 1, 2, \\ t_L|u^{-1} &= \frac{t_L t_S}{z - \epsilon_{\beta}}, & t_S|u^{-1} &= t_S, & t_{x_i}|u^{-1} &= t_{x_i}, \quad i \neq 1, 2. \end{aligned} \quad (\text{III.30})$$

${}^R\mathcal{A}_0^{-1}$  erhält man aus (III.30), indem man überall die Indizes  $\beta$  und  $\gamma$  miteinander vertauscht. Analog zur Herleitung von  $\mathbf{u}^{-1}$  findet man aus (III.23) für  ${}^R\mathbf{u}_0$ :

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha|u} &= \epsilon_{\gamma} - \epsilon_{\delta} + z + \frac{t_L^2 + t_S^2}{\epsilon_{\beta} - \epsilon_{\delta}}, & \epsilon_{\beta|u} &= \frac{t_S^2}{\epsilon_{\beta} - \epsilon_{\delta}} + z, \\ \epsilon_{\gamma|u} &= \epsilon_{\gamma} + \frac{t_L^2}{\epsilon_{\beta} - \epsilon_{\delta}}, & \epsilon_{\delta|u} &= \epsilon_{\delta}, & \epsilon_{\sigma^{(ij)}|u} &= \epsilon_{\sigma^{(ij)}}, \quad i, j \neq 1, 2, \\ t_L|u &= -\frac{t_L t_S}{\epsilon_{\beta} - \epsilon_{\delta}}, & t_S|u &= t_S, & t_{x_i}|u^{-1} &= t_{x_i}, \quad i \neq 1, 2. \end{aligned}$$

Es ist interessant zu vermerken, daß sich durch die einfache Transformation

$$\sigma^{(ij)} := \epsilon'_{\sigma^{(ij)}} = z - \epsilon_{\sigma^{(ij)}}, \quad t'_{x_i} = t_{x_i}, \quad i, j \in I_{\Lambda},$$

die explizite Energieabhängigkeit der Homomorphismen  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{Q}$ ,  ${}^R\mathcal{O}$  und  ${}^R\mathbf{u}_0^{\pm 1}$  eliminieren läßt. Mit den gefundenen DTs sind wir in der Lage, die zu allen Generatoren der zyklischen Permutationen  $\mathcal{T}_{x_i}$  und deren Inversen die gehörenden Parametertransformation zu bestimmen, und damit für sämtliche Elemente eines gegebenen Orbits  $\mathcal{O}[\omega]$ .

## III.2 Verallgemeinerte Fibonacci–Folgen

In diesem Abschnitt wollen wir die Klasse der verallgemeinerten Fibonacci–Worte über dem 2–Buchstabenalphabet ausführlich untersuchen. Vorweg wollen wir auf die enge Beziehung zwischen den folgenden (zusammen mit Anhang III.B) Ausführungen auf der einen Seite und den sog. irrationalen Rotationsalgebren<sup>25</sup>  $\mathfrak{A}_{\alpha} = C(\Pi) \rtimes_{\tau_{\alpha}} \mathbb{Z}$ , mit dem Torus  $\Pi = \mathbb{R}/\mathbb{Z}$ , auf der anderen, aufmerksam machen. Unsere Ausführungen basieren hierbei auf denen in

<sup>24</sup>Wir schreiben i.a. für die zu  $\mathbf{u}^{\pm 1}$  gehörenden Parametertransformationen (PTs)  ${}^R\mathbf{u}_0^{\pm 1}$  anstatt  ${}^R\mathbf{u}^{\pm 1}$ . Der Grund hierfür ergibt sich aus der in Anhang III.A.3 zu besprechenden Verallgemeinerung der Ortsraum–Dezimierung auf die Nicht–Diagonalelemente, welche der Substitution  $\mathbf{u}^{\pm 1}$  mehrere verschiedene PTs  ${}^R\mathbf{u}_k^{\pm 1}$  zuordnet.

<sup>25</sup>S. [Wal2003]. Die Klasse von  $C^*$ –Algebren der irrationalen Rotationsalgebren haben seit ihrer (wohl erstmaligen) systematischen Untersuchungen durch Rieffel (1981) einiges an Beachtung in den letzten beiden Jahrzehnten gefunden. S. z.B. [Dav96, Kap. VI und S. 219] und die dort zitierte Originalliteratur. Wir wollen darüberhinaus auf die Arbeiten von J. A. Mingo [Min97] und auf den Preprint [Jeo2000] aufmerksam machen.

[Wal97] veröffentlichten Ergebnissen, wobei der Autor gestehen muß, damals, als er den Artikel verfaßte, noch einen ziemlich weiten Bogen um die Theorie der  $C^*$ -Algebren gemacht zu haben, was ihm heute, zumindest vom rein *fachlichen* Standpunkt aus gesehen, nicht mehr so ganz nachvollziehbar erscheint.

### III.2.1 Kombinatorisch-gruppentheoretische Betrachtungen

Sei  $\mathcal{A}_2 = \{L, S\}$ . Das Theorem I.2 lautet dann

**Proposition III.1** (Nielsen, [Nie17/24]) *Die Substitutionen  $\mathcal{P}, \mathcal{O}$  und  $\mathcal{U}$  generieren die Automorphismengruppe*

$$\Phi_2 \equiv \Phi(\mathbb{F}(\mathcal{A}_2)) = \langle \mathcal{P}, \mathcal{O}, \mathcal{U} \mid \mathcal{P}^2 = \mathbf{1}, \mathcal{O}^2 = \mathbf{1}, (\mathcal{O}\mathcal{P})^4 = \mathbf{1}, (\mathcal{P}\mathcal{O}\mathcal{P}\mathcal{U})^2 = \mathbf{1}, (\mathcal{U}\mathcal{O}\mathcal{P})^3 = \mathbf{1}, [\mathcal{U}, \mathcal{O}\mathcal{U}\mathcal{O}] = \mathbf{1} \rangle. \quad (\text{III.31})$$

$[x, y] \equiv xyx^{-1}y^{-1}$  bezeichnet den Kommutator von  $x$  und  $y$ . ♣

Die Bedeutung dieser Automorphismengruppe für unser Thema ergibt sich daraus, daß die Menge der sog. **verallgemeinerten Fibonacci Folgen** im wesentlichen gerade mit der Menge der symbolischen Worte  $w(L, S) = \mathcal{M}(L) \in \mathbb{F}^+(\mathcal{A}_2)$ , mit  $\mathcal{M} \in \Phi_2^+$ , zusammenfällt, wobei  $\Phi_2^\pm \subset \Phi_2$  die durch sämtliche positiven bzw. negativen Worte über  $\mathcal{P}, \mathcal{A}$  und  $\mathcal{U}$  von  $\Phi_2$  definierte Halbgruppen sind. Es gilt das

**Theorem III.1** *Die Menge der positiven Worte in  $\mathcal{P}, \mathcal{A}$  und  $\mathcal{U}$  generieren eine Halbgruppe mit folgender Darstellung*

$$\Phi_2^+ = \langle \mathcal{P}, \mathcal{A}, \mathcal{U} \mid \mathcal{P}^2 = \mathbf{1}, \mathcal{U}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{U}, \mathcal{U}\mathcal{P}\mathcal{U}^k\mathcal{P}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P}\mathcal{A}^k\mathcal{P}\mathcal{U}, k \in \mathbb{N}^+ \rangle, \quad (\text{III.32})$$

und erzeugen die Menge der verallgemeinerten Fibonacci Folgen.

☞ **Beweis:** Siehe Anhang III.A.2 zu diesem Kapitel. ♣

Diese Darstellung sei im Folgenden der Ausgangspunkt für die Konstruktion der uns interessierenden hierarchischen Bäume  $\mathfrak{T}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n) \subset \mathfrak{G}^\Phi(\Phi_2^+, \Phi_2^+ \times \Phi_2^+)$ . Sie nimmt bei unseren Untersuchungen zu den einzelnen Substitutionsklassen eine Sonderstellung ein. Wir werden sehen, daß *alle* zyklischen Permutationen der uns in diesem Abschnitt interessierenden Worte durch die Elemente aus  $\Phi_2^+$ , d.h. allein durch positive Automorphismen, erzeugt werden können.

Da  $\mathcal{P}^2 = \mathbf{1}$  und  $\mathcal{A}$  mit  $\mathcal{U}$  vertauscht, hat jeder Automorphismus  $\mathcal{M} \in \Phi_2^+$  die Form  $\mathcal{P}\mathcal{X}_{(r_n \dots r_1)}\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{X}_{(r_n \dots r_1)}\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{P}\mathcal{X}_{(r_n \dots r_1)}$  oder  $\mathcal{X}_{(r_n \dots r_1)}$ , wobei

$$\mathcal{X}_{(r_n \dots r_1)} := \prod_{k=1}^n \mathcal{X}_{N_k - r_k, r_k} \equiv \mathcal{X}_{N_n - r_n, r_n} \cdots \mathcal{X}_{N_1 - r_1, r_1} \in \Phi_2^+, \quad (\text{III.33})$$

mit  $r_k \in \{0, 1, \dots, N_k\}$ ,  $N_k \in \mathbb{N}$ , das entsprechende Produkt in den Automorphismen

$$\mathcal{X}_{N-r, r} = \mathcal{P}\mathcal{A}^{N-r}\mathcal{U}^r : L \rightarrow L^{N-r}SL^r, S \rightarrow L, \quad (\text{III.34})$$

ist, mit

$$\mathbf{X}_{N_k - r_k, r_k} (w^{(k-1)}(L, S)) = w^{(k-1)}(L^{N_k - r_k} S L_1^{r_k}, L) =: w^{(k)}(L, S). \quad (\text{III.35})$$

Die uns interessierenden Strukturen werden somit durch die Worte  $w^{(n)}(L, S) = \mathbf{X}_{(r_n \dots r_1)}(L)$  beschrieben. Die zugehörigen NTs ergeben sich wie folgt. Sei  $M_n \in \mathbb{N}^+$  und  $s_k \in \{0, 1, \dots, M_k\}$ . Die (III.34) entsprechenden NTs  $\mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k} = \mathbf{UAP}$  lauten

$$\mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k} (w^{(k-1)}, w^{(k-2)}) = (w^{(k)}, w^{(k-1)}) \xrightarrow{\pi} \mathbf{S}_{M_k} = \begin{pmatrix} M_k & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \forall s_k,$$

( $\det(\mathbf{S}_{M_k}) = -1$ ) wobei

$$w^{(k)} = (w^{(k-1)})^{M_k - s_k} w^{(k-2)} (w^{(k-1)})^{s_k}, \quad w^{(-1)} = S, \quad w^{(0)} = L.$$

Analog zu (III.33) definieren wir das Produkt

$$\mathbf{X}_{(s_n \dots s_1)} := \prod_{k=1}^n \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k} \equiv \mathbf{X}_{M_n - s_n, s_n} \cdots \mathbf{X}_{M_1 - s_1, s_1}$$

und die zugehörige Substitutionsmatrix

$$\mathbf{X}_{(s_n \dots s_1)} \xrightarrow{\pi} \mathbf{S}_{1 \rightarrow n} = \prod_{k=1}^n \mathbf{S}_{M_k} \equiv \mathbf{S}_{M_n} \cdots \mathbf{S}_{M_1} = \begin{pmatrix} P_n & Q_n \\ P_{n-1} & Q_{n-1} \end{pmatrix} \quad (\text{III.36})$$

( $\det(\mathbf{S}_{1 \rightarrow n}) = (-1)^n$ ).  $P_n$ , bzw.  $Q_n$ , geben die jeweilige Anzahl der Symbole  $L$  bzw.  $S$  im Wort  $w^{(n)}(L, S)$  und genügen dem Rekursionsgesetz  $(P_k, Q_k) = M_k(P_{k-1}, Q_{k-1}) + (P_{k-2}, Q_{k-2})$ , wobei  $(P_{-1}, Q_{-1}) = (0, 1)$ ,  $(P_0, Q_0) = (1, 0)$ . Die durch die NTs  $\mathbf{P}, \mathbf{O}$  und  $\mathbf{U}$  generierte Gruppe bezeichnet man mit  $\Gamma_2$ . Sie ist *anti-isomorph*<sup>26</sup> zu  $\Phi_2$  [Mag66]. Eine unmittelbare Konsequenz ist die *umgekehrte* Reihenfolge ( $k = 0, \dots, n-1$ )

$$\mathcal{N}_n := (N_1, N_2, \dots, N_n) = (M_n, M_{n-1}, \dots, M_1) \quad \text{und} \quad r_{n-k} = s_{k+1} \quad (\text{III.37})$$

zwischen den auf das Tupel  $(w^{(1)}, w^{(0)}) = (L, S)$  anzuwendenden NTs  $\mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k} \in \Gamma_2$  einerseits und den auf das Paar  $L, S$  wirkenden Substitutionen  $\mathbf{X}_{N_k - r_k, r_k} \in \Phi_2$  andererseits, wenn man *dasselbe* Wort  $w^{(n)}(L, S)$  erzeugen will.

Wenden wir uns der geometrischen Struktur der zunächst nur symbolisch definierten verallgemeinerten Fibonacci Worte

$$w_{(r_n \dots r_1)}(L, S) := \mathbf{X}_{(r_n \dots r_1)}(L) \quad \text{bzw.} \quad w^{(s_n \dots s_1)}(L, S) := \mathbf{X}_{(s_n \dots s_1)}(L) \quad (\text{III.38})$$

zu. Beide Beschreibungen sind natürlich äquivalent, wobei wir zur Unterscheidung für die durch Substitutionen (NTs) erzeugten Worte die “**kodierenden Indizes**”  $(r_k)_k$  ( $(s_k)_k$ ) wieder tiefstellen (hochstellen) wollen. Man beachte, daß  $w_{(r_n \dots r_1)} = w^{(s_n \dots s_1)}$  nur dann gilt, wenn  $r_{n-k} = s_{k+1}$  für *alle*  $k = 0, 1, \dots, n-1$ . Auf diese Weise können alle für NTs gewonnenen Aussagen unmittelbar auf die zugehörigen Substitutionen angewandt werden und umgekehrt.

Eine Kombination der Ergebnisse von [Coh72, Igu91] und [Luc93–1] führt nun auf eine passende geometrische Strukturbeschreibung der verallgemeinerten Fibonacci Worte

<sup>26</sup>D.h. es gilt  $\phi: \Phi_n \rightarrow \Gamma_n$ ,  $\mathcal{M} \mapsto M$  mit  $\phi(\mathcal{M}_2 \mathcal{M}_1) = \phi(\mathcal{M}_1) \phi(\mathcal{M}_2) = M_1 M_2$  und  $\phi(\mathbb{I}_{\Phi_n}) = \mathbb{I}_{\Gamma_n}$ .

**Proposition III.2** ([Coh72, Igu91, Luc93–1]) Sei  $(w^{(k)})_{k \geq 1}$  die durch

$$(w^{(k)}, w^{(k-1)}) = \begin{cases} \mathbf{X}_{M_k, 0}(w^{(k-1)}, w^{(k-2)}), & k \text{ gerade} \\ \mathbf{X}_{0, M_k}(w^{(k-1)}, w^{(k-2)}), & k \text{ ungerade} \end{cases},$$

mit den Anfangsbedingungen  $w^{(-1)} = S$  und  $w^{(0)} = L$ , erzeugte Folge von Worten aus  $\mathbb{F}(A_2)$ . Dann gilt für alle  $n \geq 1$

$$w^{(n)} \equiv w_{P_n, Q_n}(L, S) := \prod_{\mu=1}^{Q_n} SL^{S_\mu}, \quad \text{mit } S_\mu = [\mu\lambda^{(n)}] - [(\mu-1)\lambda^{(n)}] \in \{M_1, M_1 + 1\} \quad (\text{III.39})$$

( $P_n \geq 0, Q_n > 0$  und  $ggT(P_n, Q_n) = 1$ ), wobei

$$\lambda^{(n)} = \frac{P_n}{Q_n} = M_1 + \frac{1}{M_2 + [1/M_3 + \dots + (1/M_n)]} =: [M_1; M_2, \dots, M_n],$$

die Kettenbruchentwicklung von  $\lambda^{(n)}$  ist. ♣

Diese Proposition kann man als die geometrische Interpretation der Kettenbruchentwicklung einer reellen Zahl  $\lambda$  sowie als Ausgangspunkt für die Beziehung zu den oben erwähnten Rotationsalgebren  $\mathfrak{A}_\alpha$  ansehen. Einigen interessanten, weiteren Betrachtungen hierzu ist der Anhang **III.B.1** gewidmet. Es stellt den Zusammenhang zwischen dem bekannten *Streifen-Projektions-Modell* und den *Nielsen-Transformationen* dar (s. Abb. III.4).

☞ Die Koordinaten der durch Projektion erzeugten Punkte im “Parallel-Raum”  $E^{\parallel}$  werden durch

$$x_\mu = \mu + \alpha + \frac{1}{\rho}[\lambda\mu + \beta], \quad \alpha, \rho, \beta \in \mathbb{R}. \quad (\text{III.40})$$

bestimmt (s. z.B. [Soc86]).  $[x]$  ist das **Gaußsche Symbol**, das ist die größte ganze Zahl, welche kleiner oder gleich  $x$  ist. Man beachte, daß  $-[-x] = [x] + 1$ . Der Abstand zweier aufeinanderfolgender Punkte  $x_\mu$  ist gegeben durch die sog. **Sturm-Folge** [Ber96, Lot2001]  $S_\mu(\lambda, \beta) := [\lambda(\mu + 1) + \beta] - [\lambda\mu + \beta]$

$$\Delta_\mu = x_{\mu+1} - x_\mu = 1 + \frac{1}{\rho} S_\mu(\lambda, \beta) = \begin{cases} \ell(SL^{M_1}) = 1 + \frac{M_1}{\rho} \\ \ell(SL^{M_1+1}) = 1 + \frac{M_1+1}{\rho} \end{cases}.$$

In diesem Sinne ist der Zusammenhang zwischen den Folgen  $(x_\mu)$  und den Worten  $w_{P_n, Q_n}$  aus Proposition III.2 zu verstehen. Ist  $\lambda = \lambda^{(n)}$ , dann ist  $S_\mu(\lambda^{(n)}, \beta)$  periodisch, d.h. es ist  $S_\mu(\lambda^{(n)}, \beta) = S_{\mu+Q_n}(\lambda^{(n)}, \beta)$ . Ist  $\lambda$  irrational, dann beschreibt die Folge  $(x_\mu)_\mu$  eine *quasiperiodische* Struktur, denn es ist

$$\rho(x) = \sum_{\mu} \delta(x - x_\mu) \quad \bullet \circ \quad F(Q) = \sum_{h, h'} F_{h, h'} \delta(Q - Q_{h, h'}), \quad Q_{h, h'} = \frac{2\pi\tau^2}{\tau^2 + 1} \left( h + h' \frac{1}{\tau} \right),$$

mit  $\tau = 1/\lambda$  (s. [Jan94], S. 24 ff.). Der zugehörige Fourier-Modul ist somit diskret, vom Rang zwei und der Dimension eins. Nach den Ausführungen von Kapitel **I.3** sind unsere Strukturen (III.2) somit quasiperiodisch. Ist  $\lambda$  rational, so sind  $h$  und  $h'$  rational abhängig, (III.2) somit periodisch. Aus Abb. III.4 erkennt man die Bedeutung von  $\lambda$  als die Steigung von

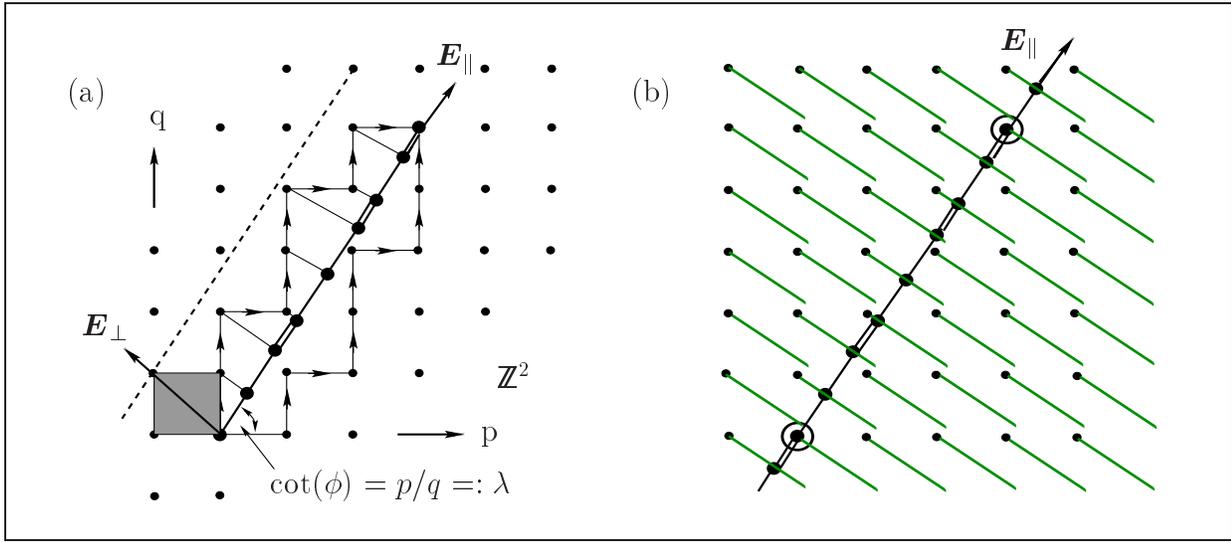


Abbildung III.4: Geometrische Darstellung von Worten über einem Alphabet, hier ist  $\mathcal{A} = \{L, S\}$ . (a) Fibonacci Kette  $w^{(4)} = \mathcal{T}_L^{-1} \mathcal{L}^4(L)$  erzeugt mittels der “cut and project”-Methode. Jedem Punkt (modulo Periodenlänge) in  $\mathbf{E}_{\parallel}$  entspricht genau ein Punkt in  $\mathbf{E}_{\perp}$ . Eine Translation in  $\mathbf{E}_{\perp}$  erzeugt eine zyklische Permutation. Man beachte, daß die nach  $\mathbf{E}_{\perp}$  projizierte Punktmenge in unserem Beispiel (Fibonacci Kette) für  $n \rightarrow \infty$  zu einer kompakten Menge (halboffenes beschränktes Intervall) wird. (b) Äquivalent hierzu die Erzeugung derselben Struktur mittels Schnitt des 1-D “physikalischen Raumes”  $\mathbf{E}_{\parallel}$  mit den an jedem Punkt von  $\mathbb{Z}^2$  angehefteten “atomaren Hyperflächen” (hier nach rechts offene Intervalle, d.h. die rechten Intervallenden gehören nicht mehr zum jeweiligen Hyperatom).

$\mathbf{E}_{\parallel}$ . Offensichtlich beschreibt  $\alpha$  in (III.40) eine konstante Translation der gesamten Struktur in  $\mathbf{E}_{\parallel}$ -Richtung. Um die Bedeutung von  $\beta$  zu verstehen, betrachte man die Transformation (s. [Soc86])

$$\tilde{\mathcal{T}}^p : \alpha \rightarrow \alpha + p + \frac{q}{\rho}, \quad \beta \rightarrow \beta - q + \lambda p.$$

Sie führt auf  $\tilde{\mathcal{T}}^p : S_{\mu}(\lambda^{(n)}, \beta) \rightarrow S_{\mu+p}(\lambda^{(n)}, \beta)$  und somit zu  $\tilde{\mathcal{T}}^p : \Delta_{\mu} \rightarrow \Delta_{\mu+p}$  für alle  $\mu$ , d.h.  $\tilde{\mathcal{T}}$  entspricht einer zyklischen Permutation  $\mathcal{T}^{M_1+1}$  bzw.  $\mathcal{T}^{M_1+2}$ .

Für die algebraische Struktur der Ortsraum–Renormierung spielt im folgenden der  $\Gamma$ -Graph die zentrale Rolle. Es ist die hierarchische Struktur von  $\mathfrak{G}^{\Gamma}(V_n, \mathbf{E}_n)$ , welche Ausdruck der selbstähnlichen Struktur der *physikalischen* Größen ist.

► Wir betrachten die Folge  $(\mathcal{M}_k)_{k \in \mathbb{N}}$  mit  $\mathcal{M}_k = \mathfrak{X}_{N_k, 0}$  mit natürlichen  $N_k$ . Hier haben wir somit ein Beispiel vorliegen, bei dem die Periodizität  $\kappa$  der Folge  $(\mathcal{M}_k)_{k \in \mathbb{N}}$  beliebig, also auch unendlich sein kann. Konstruieren wir zunächst das zugehörige erzeugende Alphabet  $\mathcal{A}^{\Phi}$ . Aus Abb. III.5 entnimmt man, daß die in (I.50), S. 28, definierten Worte  $u_{k,i,t_{k,i}} = (\mathcal{M}_k(x_i))^{[0,t_{k,i}-1]}$  hier die folgende Gestalt annehmen. Es gilt  $u_{k,1,t_{k,1}} = (L^{N_k} S)^{[0,t_{k,1}-1]}$  mit  $t_{k,1} = 0, \dots, |L^{N_k} S| - 1$ , also  $u_{k,1,t_{k,1}} = L^{t_{k,1}}$ ,  $t_{k,1} = 0, \dots, N_k$ , und  $u_{k,2,t_{k,2}} = (L)^{[0,t_{k,2}-1]}$  mit  $t_{k,2} = 0, \dots, |L| - 1$ , also  $u_{k,2,t_{k,2}} = \mathbb{I}$ ,  $t_{k,2} = 0$ . Wegen  $\mathcal{T}_L^{t_{k,i}} \mathfrak{X}_{N_k, 0} = \mathfrak{X}_{N_k - t_{k,i}, t_{k,i}}$  ist das erzeugende Alphabet durch

$$\mathcal{A}^{\Phi} = \bigcup_{k \in \mathbb{N}} \mathcal{A}_{m(k)}^{\Phi}, \quad \text{mit } \mathcal{A}_k^{\Phi} = \{ \mathfrak{X}_{N_k - t_{k,1}, t_{k,1}} \mid t_{k,1} = 0, \dots, N_k, N_k \in \mathbb{N} \},$$



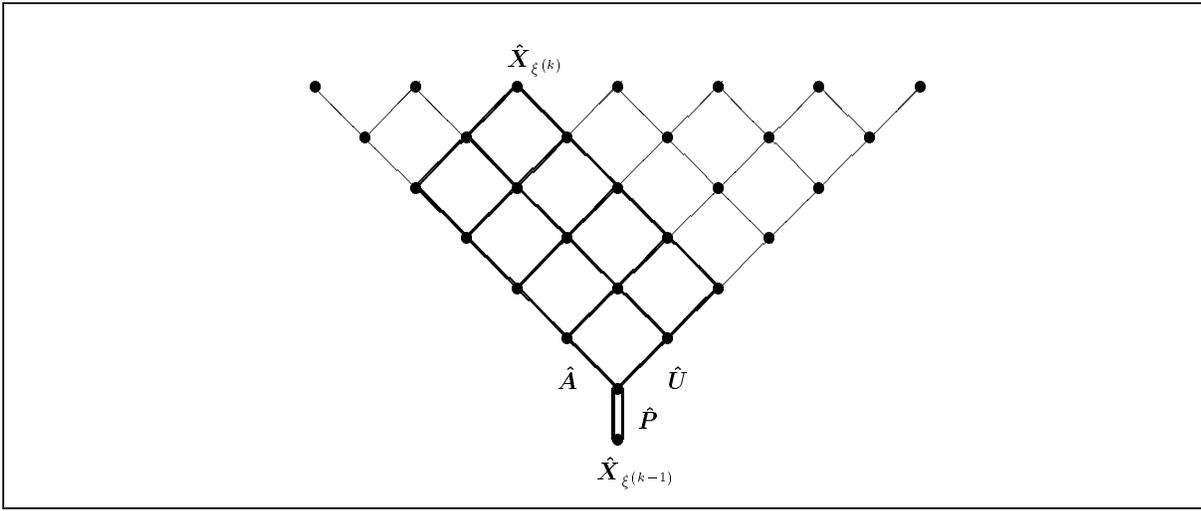


Abbildung III.6: Dem Subgraph (fett) von  $\mathfrak{G}^\Gamma(\Gamma_2^+, \Gamma_2^+ \times \Gamma_2^+)$ , der die Punkte  $\mathbf{X}_{\xi^{(k-1)}}$  und  $\mathbf{X}_{\xi^{(k)}}$  miteinander verbindet, entspricht im induzierten Subgraph  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$  die Kante  $\mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k}$ .

**Theorem III.2** Die Menge der erzeugenden NTs von  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$  ist  $\mathcal{A}^\Gamma = \{\mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k} \mid M_k \in \mathcal{N}_n, s_k = 0, \dots, M_k\}$ . Die Super–Inflationen  $\Upsilon_{M_k}$ ,  $M_k \in \mathcal{N}_n$ , seien definiert durch<sup>28</sup>

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \xrightarrow{s_k=0} \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_u \\
 \end{array} \quad \mapsto \quad \begin{array}{c} \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \sigma_w \quad \begin{array}{c} \circ \\ \dots \\ \circ \end{array} \tilde{\sigma}_y \quad \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \tilde{\sigma}_z \\
 \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \tilde{\sigma}_v \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_u \\
 \leftarrow s_{k+1}=0, 1, \dots, M_{k+1} \\
 \text{mit } (\sigma, \tilde{\sigma}) \in \{(\alpha, \gamma), (\gamma, \alpha)\}
 \end{array} \quad \text{(III.42)}$$

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \xrightarrow{s_k=M_k} \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \tilde{\sigma}_v \\
 \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_u \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_u^{s_k=M_k} \\
 \end{array} \quad \mapsto \quad \begin{array}{c} \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \tilde{\sigma}_w \quad \begin{array}{c} \circ \\ \dots \\ \circ \end{array} \tilde{\sigma}_y \quad \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \sigma_z \\
 \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \tilde{\sigma}_v \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_u \\
 \leftarrow s_{k+1}=0, \dots, M_{k+1}-1, M_{k+1} \\
 \text{mit } (\sigma, \tilde{\sigma}) \in \{(\alpha, \beta), (\beta, \alpha)\}
 \end{array} \quad \text{(III.43)}$$

und

$$\begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \xrightarrow{s_k \neq 0, M_k} \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_u \\
 \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \sigma_v \\
 \end{array} \quad \mapsto \quad \begin{array}{c} \begin{array}{c} \circ \\ \swarrow \\ \circ \end{array} \sigma_w \quad \begin{array}{c} \circ \\ \dots \\ \circ \end{array} \sigma_z \\
 \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_v \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \\ \bullet \end{array} \sigma_u \\
 \leftarrow s_{k+1}=0, \dots, M_{k+1} \\
 \text{mit } \sigma \in \{\alpha, \beta, \gamma\}
 \end{array} \quad \text{(III.44)}$$

Sämtliche Kanten der Form  $\sigma_{\xi^{(i-1)}} \xrightarrow{s_i} \sigma_{\xi^{(i)}}$ , mit  $i = 1, \dots, k-1$ , sollen wieder unverändert bleiben. Es ist  $u = \xi^{(k-1)}, v = \xi^{(k)}, w = \xi^{(k)}, x = \xi^{(k)} + f_k, \dots, y = \xi^{(k)} + (M_{k+1} - 1)f_k$  und  $z = \xi^{(k)} + M_{k+1}f_k$ , wobei

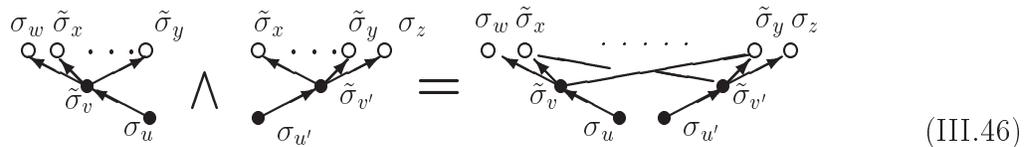
$$\xi^{(k)} = \sum_{k=1}^n s_k f_{k-1} = s_k f_{k-1} + \xi^{(k-1)}, \quad \xi^{(1)} = s_1 f_0 \quad \text{mit } s_k \in \{0, \dots, M_k\}, \quad \text{(III.45)}$$

<sup>28</sup>Die Ersetzungsregeln (III.42)–(III.44) bedeuten wieder, daß man ein gegebenes Vertex–Kante–Vertex Tripel  $X_{k, s_k}^{(pq)} = (\sigma_p, \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k}, \sigma_q)$  das der linken Seite entspricht durch den auf der jeweils rechten Seite stehenden “Substitutionsgraphen” zu ersetzen hat. Man beachte hierbei den Unterschied zwischen offenen (o) und gefüllten Kreisen (•)!

für alle ganzen Zahlen  $\xi^{(n)}$  im Intervall  $I_n : 0 \leq \xi^{(n)} \leq f_n + f_{n-1} - 2$  gilt. Die Zahlen  $f_k$  sind die **verallgemeinerten Fibonacci-Zahlen**,  $f_k := |w^{(s_k^0 \dots s_1^0)}|$ , die der Rekursionsformel

$$f_k = M_k f_{k-1} + f_{k-2}, \quad f_{-1} = f_0 = 1,$$

genügen. Jeder definierenden Relation in (III.32) entspricht dabei ein geschlossener Pfad in  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$ , berücksichtigt durch die “Verknüpfungsregel”.



Bei letzterer haben wir  $u = \xi^{(k-1)}$ ,  $u' = \xi^{(k-1)} + s_{k-1}f_{k-2}$ , mit  $s_{k-1} = 1, \dots, M_{k-1}$ , und  $v = \xi^{(k-1)}$ ,  $v' = u' + M_k f_{k-1}$ , sowie  $w = \xi^{(k-1)}$ ,  $x = \xi^{(k-1)} + f_k, \dots, y = \xi^{(k-1)} + (M_{k+1} - 1)f_k$  und  $z = \xi^{(k-1)} + M_{k+1}f_k$  gesetzt. Dann ist der induzierte Subgraph  $\mathfrak{G}_{gF}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$  von  $\mathfrak{G}^\Gamma(\Gamma_2^+, \Gamma_2^+ \times \Gamma_2^+)$  gegeben durch

$$\mathfrak{G}_{gF}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n}) = \prod_{k=2}^n \Upsilon_{M_k} \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \alpha_1 \quad \dots \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circ \quad \circ \quad \dots \quad \circ \quad \circ \\ \swarrow \quad \searrow \quad \swarrow \quad \searrow \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \alpha_0 \end{array} \right] \leftarrow s_1=0,1,\dots,M_1,$$

wobei  $y = M_1 - 1$  und  $z = M_1$  gilt.

☞ **Beweis:** Vollständige Induktion. Vgl. Anhang III.A.2 zu diesem Kapitel. ♣.

Aus diesem Theorem folgt unmittelbar, daß die in (III.38) definierten Worte gerade sämtliche zyklischen Permutationen zu den Worten  $w_{P_n Q_n}(L, S)$  sind.

**Korollar III.1** Sei  $\mathcal{N}_n = (M_1, \dots, M_n)$ ,  $M_k \in \mathbb{N}$ . Dann gilt für alle  $s_k \in \{0, \dots, M_k\}$  und  $k \in \mathbb{N}$

$$w^{(s_n \dots s_1)}(L, S) = \mathfrak{J}^{\xi^{(n)}}(w^{(s_n^0 \dots s_1^0)}), \quad \text{wobei } w_{P_n Q_n}(L, S) = w^{(s'_n \dots M_4, 0, M_2, 0)},$$

mit  $s_k^0 = 0$  für alle  $k$ . Es ist  $s'_n = 0$  ( $= M_n$ ) wenn  $n$  ungerade (gerade) ist. Zwischen den  $s_k$  und  $\xi^{(n)}$  besteht der durch Gleichung (I.89), S. 46, gegebene Zusammenhang.

☞ **Beweis:** Die rechte Gleichung (III.A.3) folgt unmittelbar aus der Proposition III.2. ♣

Die Bedeutung dieses Korollars geht weit über die reine Behauptung zur Beziehung zwischen den  $w_{P_n Q_n}(L, S)$  und den Worten (III.38) hinaus. Man kann es als Verallgemeinerung des **Zeckendorf-Theorem** [Bro64] auffassen. Jede natürliche Zahl läßt sich nicht nur nach Fibonacci-Zahlen (alle  $M_k = 1$ , wie in [Bro64]) entwickeln, sondern auch nach den *verallgemeinerten* Fibonacci Zahlen, d.h.  $\{f_k \mid k \in \mathbb{N}\}$  bildet für gegebenes festes  $\mathcal{N}_n = (M_1, \dots, M_n)$ ,  $M_k \in \mathbb{N}$ , jeweils eine “Zahlenbasis”, vergleichbar der Binärdarstellung mit dem Zahlensystem  $\{2^k \mid k \in \mathbb{N}\}$ . Es ist somit das Fundament für die Lösung des für unsere Arbeit so zentralen Kodierungsproblems!

Bisher haben wir nur Relationen zwischen verschiedenen Substitutionen als solche betrachtet, d.h. definierende Relationen im Sinne von S. 10. Bisweilen will man aber sämtliche

Relationen zwischen den durch Substitutionen erzeugten *Worten* (III.38)  $w_{(r_n \dots r_1)}(L, S)$  kennen<sup>29</sup>. In diesem Falle kommt eine weitere, nicht aus dem Relationensystem (III.32) ableitbare Beziehung

$$\mathcal{P}\mathcal{U}(L) = \mathcal{A}(L) \quad (\text{III.47})$$

hinzu. Die Konsequenz dieser Gleichung besteht darin, daß aus  $\mathcal{M} \neq \mathcal{M}' \in \Phi_2^+$  *nicht* immer  $\mathcal{M}(L) \neq \mathcal{M}'(L) \in \mathbb{F}^+(\mathcal{A}_2)$  folgen muß. Zusammen mit dem Relationensystem (III.32) haben wir somit sämtliche, voneinander unabhängigen Relationen zwischen den einzelnen *Worten*  $w(L, S) \in \mathbb{F}^+(\mathcal{A}_2)$  gefunden. Wir werden darauf noch im Anhang III.A zu diesem Kapitel zu sprechen kommen. Wir erhalten somit  $\mathcal{X}_{\xi^{(n)}}(L) = \mathcal{X}_{\xi^{(n)}+f_n}(L)$ , falls  $\xi^{(n)}+f_n \in I_n$ . Die Elemente der Menge der Worte  $\mathcal{X}_{\zeta^{(n)}}(x_1)$  beschreiben für gegebenes  $\mathcal{N}_n$  und  $\zeta^{(n)} \equiv \xi^{(n)} \pmod{f_n}$  *dieselbe* Struktur. Wir wollen dies in unsere Konstruktionsvorschrift für die Graphen  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$  berücksichtigen.

**Korollar III.2** Sei  $\tilde{\Upsilon}_{M_k}$  diejenige Abbildungsvorschrift, welche man aus (III.42) — (III.44) durch das Streichen des Bogens  $\tilde{\sigma}_v \xrightarrow{S_k} \tilde{\sigma}_z$  in (III.42) sowie der Kante  $\sigma_v \xrightarrow{S_k} \sigma_z$  in (III.43) erhält. Dann ist

$$\mathfrak{X}_{gF}^\Gamma(\bar{V}_{\mathcal{N}_n}, \bar{\mathbf{E}}_{\mathcal{N}_n}) = \prod_{k=2}^n \tilde{\Upsilon}_{M_k} \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \alpha_1 \quad \dots \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circ \quad \circ \quad \dots \quad \circ \quad \circ \\ \swarrow \quad \downarrow \quad \searrow \\ \bullet \\ \alpha_0 \end{array} \right] \leftarrow s_1=0,1,\dots,M_1, \quad \leftarrow$$

ein zusammenhängender, kreisfreier<sup>30</sup> Sub-Graph („gerichteter Baum“) von  $\mathfrak{G}_{gF}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$  mit dem Zentrum  $\alpha_0$ , wobei

$$\bar{V}_{\mathcal{N}_n} = \bigcup_{k=1}^n \{ \mathbf{X}_{\xi^{(k)}} \mid 0 \leq \xi^{(k)} < f_n \} \subset V_{\mathcal{N}_n}.$$

$\bar{\mathbf{E}}_{\mathcal{N}_n} \subset \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n}$  ist analog zu  $\mathbf{E}_{\mathcal{N}_n}$  definiert.

◻ ► **Beweis:** Diese Eigenschaft folgt unmittelbar aus der Definition der Abbildung  $\tilde{\Upsilon}_{M_k}$ , wodurch die definierenden Relationen systematisch „aufgebrochen“ werden. Außerdem macht man sich leicht klar, daß diese Definition zusätzlich alle Vertizes  $\sigma_{\xi^{(k)}}$  mit  $\xi^{(k)} \geq f_k$  eliminiert. ♣

### III.2.2 RTs für die Green'sche Funktion

**Theorem III.3** Die Parameter-Transformationen  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{O}$  und  ${}^R\mathbf{u}$  generieren die Gruppe

$$\begin{aligned} \mathcal{R}\mathcal{G}_{|\Pi_{xy}}(\Phi_2) = \langle & {}^R\mathcal{P}, {}^R\mathcal{O}, {}^R\mathbf{u}_0 \mid {}^R\mathcal{P}^2 = \mathbf{1}, {}^R\mathcal{O}^2 = \mathbf{1}, ({}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O})^4 = \mathbf{1}, \\ & ({}^R\mathbf{u}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P})^2 = \mathbf{1}, ({}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u})^3 = \mathbf{1}, \\ & [{}^R\mathbf{u}, {}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}{}^R\mathcal{O}] = \mathbf{1} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{III.48})$$

d.h.  $\mathcal{R}\mathcal{G}_{|\Pi_{xy}}(\Phi_\Lambda)$  ist anti-isomorph zu  $\Phi_\Lambda$  mit  $\Lambda = 2$ . Diese Aussage gilt auch für allgemeines (endliches)  $\Lambda$ .

<sup>29</sup>Gemäß der Einteilung von S. 10 sind das sämtliche „Wort-Relationen“.

<sup>30</sup>D.h., es gibt keine geschlossene Pfade in  $\mathfrak{X}_{gF}^\Gamma(\bar{V}_{\mathcal{N}_n}, \bar{\mathbf{E}}_{\mathcal{N}_n})$ .

♣ ► **Beweis:** Dies folgt unmittelbar aus dem Nielsen'schen Satz III.3: Die Abbildung  $\phi : \Phi_2 \rightarrow \mathcal{RG}(\Phi_2)$ ,  $\mathcal{M} \mapsto {}^R\mathcal{M}$  ist offensichtlich ein surjektiver Anti-Homomorphismus mit  $\phi(\mathbb{1}_{\Phi_2}) = \mathbb{1}_{\mathcal{RG}}$ , von  $\Phi_2$  auf  $\mathcal{RG}(\Phi_2)$ , wobei die Parameter-Darstellung der Generatoren  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{O}$  und  ${}^R\mathcal{U}$  im Kapitel III.1 definiert wurde. Schließlich prüft man leicht nach, daß  $\phi^{-1}({}^R\mathcal{M}_1 \cdot {}^R\mathcal{M}_2) = \phi^{-1}({}^R\mathcal{M}_2) \cdot \phi^{-1}({}^R\mathcal{M}_1) = \mathcal{M}_2 \cdot \mathcal{M}_1$  für alle Generatoren und somit für alle Elemente aus  $\mathcal{RG}(\Phi_2)$  gilt, d.h.  $\phi$  ist invertierbar und injektiv. Dieses Resultat gilt offenbar auch für  $\Phi_\Lambda$  mit beliebigem (endlichem)  $\Lambda$ . ♣

Als Beispiele mögen hier die Verweise auf Arbeiten aus der "Gründerzeit" der Ortsraum-Renormierung im Kontext der Quasikristallforschung von [Ash88, Mak90]:  ${}^R\mathcal{A}_0^{-1R}\mathcal{P}$ , [Cha89]:  ${}^R\mathcal{A}_0^{-1R}\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{U}_0^{-1R}\mathcal{P}$  und [Zho91-1] mit  $\mathcal{T}_\alpha = {}^R\mathcal{A}_0^{-1R}\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_0^{-2R}\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{T}_\beta = {}^R\mathcal{A}_0^{-1R}\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_0^{-1R}\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{T}_\gamma = {}^R\mathcal{U}_0^{-1R}\mathcal{P}{}^R\mathcal{A}_0^{-1R}\mathcal{P}$  genügen.

Bevor die rationale Parameter-Darstellung von  $\mathcal{RG}_{\mathbb{I}_{xy}}(\Phi_2)$  auf eine polynomiale Form bringen wollen, sei noch die Gruppenstruktur der entsprechenden, erweiterten Parameter-Transformationen angegeben. Zu den weiteren Details hierzu verweisen wir auf den Anhang III.A.

**Behauptung III.1** Die Renormierungsgruppe  $\mathcal{RG}(\Phi_2)$  wird durch die in Kapitel III.1 definierten Generatoren  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{O}$ ,  ${}^R\mathcal{U}_0$ ,  ${}^R\mathcal{U}_1$  und  ${}^R\mathcal{U}_4$  erzeugt und hat folgende Darstellung:

$$\begin{aligned}
\mathcal{RG}(\Phi_2) = \langle & {}^R\mathcal{P}, {}^R\mathcal{O}, {}^R\mathcal{U}_0, {}^R\mathcal{U}_1, {}^R\mathcal{U}_4 \mid {}^R\mathcal{P}^2 = {}^R\mathcal{O}^2 = ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P})^4 = \mathbf{1} \\
& {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0 = {}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}, \\
& {}^R\mathcal{O} \cdot {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1 \cdot {}^R\mathcal{O} \cdot {}^R\mathcal{U}_4^{-1R} \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4 = \\
& \quad {}^R\mathcal{U}_4^{-1R} \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4 \cdot {}^R\mathcal{O} \cdot {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1 \cdot {}^R\mathcal{O}, \\
& ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_0)^3 = \mathbf{1}, \\
& ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1)^6 = ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4)^6 = \mathbf{1}, \\
& (({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1)^2 \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4)^2 = (({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4)^2 \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1)^2 = \mathbf{1}, \\
& {}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1 = {}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4, \\
& [{}^R\mathcal{O}, {}^R\mathcal{P} \cdot {}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1] = \mathbf{1}, \\
& [{}^R\mathcal{P}, {}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1 \cdot {}^R\mathcal{O}] = \mathbf{1}, \\
& ({}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1)^2 = ({}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O})^2, \\
& ({}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_0^{-1R}\mathcal{U}_1)^2 = ({}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_0^{-1R}\mathcal{U}_4)^2 = \mathbf{1}, \\
& ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0^{-1R}\mathcal{U}_1 \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1^{-1R}\mathcal{U}_0) = ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0^{-1R}\mathcal{U}_4 \cdot {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4^{-1R}\mathcal{U}_0) = \mathbf{1}, \\
& {}^R\mathcal{U}_1^{-1R}\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1 = {}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_1^{-1R}\mathcal{P}, \\
& {}^R\mathcal{U}_4^{-1R}\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4 = {}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_4^{-1R}\mathcal{P}, \\
& ({}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{U}_0)^2 = \mathbf{1}, \dots \rangle \tag{III.49}
\end{aligned}$$

Dabei schreiben wir wieder  $[x, y] = xyx^{-1}y^{-1}$  für den Kommutator. ♣

Die Punkte sollen nur der besseren Übersichtlichkeit dienen. Ein Vollständigkeitsbeweis geht weit über den Rahmen dieser Arbeit hinaus und soll deshalb den folgenden Generationen

überlassen werden. Es ist bisher noch nicht geklärt, ob dieser Gruppe ebenfalls eine geometrische Interpretation zukommt, wie es bei  $\mathcal{RG}(\Phi_2)$  durch die Interpretation als Automorphismengruppe auf der freien Gruppe der Fall ist. Ein Blick auf (III.49) läßt eine “Invarianz” des Relationensystems gegenüber einer Vertauschung von  ${}^R\mathbf{u}_1$  mit  ${}^R\mathbf{u}_4$  erkennen. Darüberhinaus ist es leicht einzusehen, daß eine Restriktion des Relationensystems  ${}^R\mathbf{u}_0, {}^R\mathbf{u}_1, {}^R\mathbf{u}_4 \rightarrow {}^R\mathbf{u}_0$  gerade auf das Relationensystem von  $\mathcal{RG}_{|\Pi_{xy}}$  führt.

Die Kenntnis der Darstellung in Form von Generatoren und definierenden Relationen ist insofern entscheidend, als die uns interessierenden hierarchischen Graphen ohne die Existenz einer derartigen algebraischen Struktur nicht denkbar sind. Wir haben gesehen, daß zu ihrer Konstruktion glücklicherweise in der Regel nur Teile der Darstellung von  $\mathcal{RG}(\Phi_2)$  oder von deren Restriktionen auf Unterräumen von  $\Pi_{\epsilon,t}$  bekannt sein müssen, was die Sache natürlich erheblich erleichtert.

Wir wollen nun die in Kapitel III.1 eingeführten (rationalen) Parameter–Transformationen auf eine polynomiale Form bringen und einige ihrer Eigenschaften studieren. Sei der Parameterraum

$$\Pi_x := \{ \mathbf{x} = (x_\delta, x_\alpha, x'_\alpha) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{C}^3 \}$$

und die Abbildung

$$\downarrow_{\Pi_x} : \Pi_{\epsilon,t} \rightarrow \Pi_x, \quad (\epsilon, t) \mapsto \mathbf{x} = (x_\delta, x_\alpha, x'_\alpha),$$

mit

$$\begin{aligned} x_\delta[z] &= \frac{z - \epsilon_\delta}{t_S}, & x_\alpha[z] &= \frac{z - \epsilon_\alpha}{t_L}, \\ x'_\alpha[z] &= \frac{(z - \epsilon_\beta)(z - \epsilon_\gamma) - t_L^2 - t_S^2}{t_L t_S} = x_\alpha|_{u^{-1}} = x_\alpha|_{\mathcal{A}^{-1}}. \end{aligned} \quad (\text{III.50})$$

gegeben. Man prüft leicht nach, daß

$$\begin{aligned} \mathbf{x}|_{\mathcal{P}} &= (x_\alpha, x_\delta, x'_\alpha) \\ \mathbf{x}|_{\mathcal{O}} &= (x_\delta, x_\alpha, x_\delta x_\alpha - x'_\alpha) \\ \mathbf{x}|_{u^{-1}} &= (x_\delta, x'_\alpha, x_\delta x'_\alpha - x_\alpha) = \mathbf{x}|_{\mathcal{A}^{-1}} \\ \mathbf{x}|_u &= (x_\delta, x_\delta x_\alpha - x'_\alpha, x_\alpha) = \mathbf{x}|_{\mathcal{A}} \end{aligned} \quad (\text{III.51})$$

gilt. Die Beziehung  $\mathbf{x}|_u = \mathbf{x}|_{\mathcal{A}}$  bedeutet, die Existenz einer zusätzlichen definierenden Relation für die PTs, d.h. es ist  ${}^R\mathcal{A}|_{\Pi_x} := {}^R\mathcal{O}|_{\Pi_x} {}^R\mathbf{u}|_{\Pi_x}^{-1} {}^R\mathcal{O}|_{\Pi_x} = {}^R\mathbf{u}|_{\Pi_x}$ . Es ist bekannt, daß das Hinzufügen der Relation  $\mathcal{OUO} = \mathbf{u}$  zu dem Relationensystem (III.31) der Automorphismengruppe  $\Phi_2$  den Homomorphismus  $\Phi_2 \rightarrow \mathbb{G}\mathbb{L}(2, Z)$  induziert [Cox65]. Man erkennt weiter, daß  $({}^R\mathcal{P}|_{\Pi_x} {}^R\mathcal{P}|_{\Pi_x})^2 = \mathbf{1}$  (aber  ${}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O} = -\mathbf{1}$ ) gilt. Nimmt man auch diese Relation zu dem Relationensystem hinzu, dann gilt  $\Phi_2 \rightarrow \mathbb{P}\mathbb{G}\mathbb{L}(2, Z)$  [Cox65]. Somit ist die Restriktion  $\mathcal{RG}_{|\Pi_x}(\Phi_2)$  von  $\mathcal{RG}_{|\Pi_{xy}}(\Phi_2)$  auf den Parameterraum  $\Pi_x$  isomorph zu  $\mathbb{P}\mathbb{G}\mathbb{L}(2, Z)$ . Sei

$$\Lambda = x_\delta^2 + x_\alpha^2 + (x'_\alpha)^2 - x_\delta x_\alpha x'_\alpha. \quad (\text{III.52})$$

Diese Größe hat die wichtige Eigenschaft<sup>31</sup>, *invariant* gegenüber den Transformationen  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{A}^{-1}$  und  ${}^R\mathbf{u}^{-1}$  zu sein (nicht dagegen bezüglich  ${}^R\mathcal{O}$ ,  ${}^R\mathcal{A}$  und  ${}^R\mathbf{u}$ ) und damit auch gegenüber

<sup>31</sup>Spezialfälle hierzu findet man bei [Ash88] für  $N_\kappa = 1, \forall \kappa$  (Standart–Fibonacci Folge) und bei [Cha91] für  $N_\kappa = 2, \forall \kappa$ .

jeder Kombination der Transformationen  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{A}^{-1}$  und  ${}^R\mathbf{u}^{-1}$ . Wir haben oben gesehen, daß sich alle verallgemeinerten Fibonacci-Worte durch eine Kombination der entsprechenden Substitutionen  $\mathcal{O}$ ,  $\mathcal{A}$  und  $\mathbf{u}$  erzeugen lassen, so daß (III.52) für alle diese Strukturen eine Invariante darstellt. Man beachte die formale Korrespondenz der Gleichungen (III.51)(a,c) und (III.52) zu der bei dem *Transfer-Matrizen-Modell* auftretenden dynamischen *Spur-Abbildung* sowie der zugehörigen Invarianten<sup>32</sup>. Im Unterschied zum Transfer-Matrizen-Modell ist hier die Invariante i.a. von der (komplexen) Energie abhängig. Eine Ausnahme bildet das sog. *off-diagonal-Modell* ( $\epsilon_\alpha = \dots = \epsilon_\delta = \epsilon$ ), falls die Parameter selbst nicht von der Energie abhängen<sup>33</sup>, für das  $\Lambda = \left(\frac{t_L}{t_S} + \frac{t_S}{t_L}\right)^2 \geq 2$  gilt.

Um das ganze System von Parameter-Transformationen aus  $\mathcal{R}\mathcal{G}_{|\Pi_{xy}}(\Phi_2)$  in polynomiale Form bringen zu können, definieren wir noch den Parameterraum

$$\mathbf{\Pi}_y := \{ \mathbf{y} = (y_S, y_L, y_\beta, y_\gamma) \mid \mathbf{y} \in \mathbb{C}^4 \}$$

und die Abbildung

$$\downarrow_{\Pi_y} : \mathbf{\Pi}_{\epsilon,t} \rightarrow \mathbf{\Pi}_y, \quad (\epsilon, t) \mapsto \mathbf{y} = (y_S, y_L, y_\beta, y_\gamma),$$

mit

$$y_\beta[z] = \frac{z - \epsilon_\beta}{t_L t_S}, \quad y_\gamma[z] = \frac{z - \epsilon_\gamma}{t_L t_S}, \quad y_L = \frac{1}{t_L}, \quad y_S = \frac{1}{t_S} \quad (\text{III.53})$$

erklärt. Man zeigt durch einfaches Nachrechnen, daß die folgenden Rekursionsformeln erfüllt sind

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{|p} &= (y_L, y_S, y_\gamma, y_\beta) \\ \mathbf{y}_{|o} &= (y_L, y_S, x_\alpha y_S - y_\gamma, x_\alpha y_S - y_\beta) \\ \mathbf{y}_{|u^{-1}} &= (y_S, y_\gamma, x_\delta y_\beta - y_L, x'_\alpha y_S + y_L), \\ \mathbf{y}_{|u} &= (y_S, y_L x_\delta - y_\beta, y_L, x_\delta y_\gamma - y_S x'_\alpha - y_L), \\ \mathbf{y}_{|\mathcal{A}^{-1}} &= (y_S, y_\gamma, x'_\alpha y_S + y_L, x_\delta y_\gamma - y_L) \\ \mathbf{y}_{|\mathcal{A}} &= (y_S, x_\delta y_L - y_\gamma, x_\delta y_\beta - x'_\alpha y_S - y_L, y_L) \end{aligned}$$

wobei die Parameter wegen  $y_\beta + y_\gamma = y_S x_\alpha + y_L x_\delta$  (s. (III.29), S. 130) nicht sämtlich voneinander unabhängig sind. Offenbar gilt  $\mathbf{\Pi}_{\epsilon,t} \cong \mathbf{\Pi}_x \times \mathbf{\Pi}_y =: \mathbf{\Pi}_{xy}$ , wenn man beachtet, daß  $x'_\alpha$  keine unabhängige Größe ist, denn (III.50)(c) kann natürlich zu  $x'_\alpha = (y_\beta y_\gamma - y_L^2 - y_S^2)/(y_L y_S)$  umgeschrieben werden.

**Theorem III.4** Sei  $\tilde{\Upsilon}_{M_k}$  die in Theorem III.2 definierte Super-Inflation, wobei man statt den NTs  $M \in \Gamma_2$  nun die entsprechenden RTs  ${}^R\mathcal{M} \in \mathcal{R}\mathcal{G}_{|\Pi_{xy}}(\Phi_2)$  einsetzt, mit der "natürlichen" Zuordnung

$$\sigma_\xi \longleftrightarrow (x_\alpha | x_\xi^{-1}, y_L | x_\xi^{-1}) \sim (x_\alpha | x_\xi^{-1}, \rho_\xi) \quad \text{mit } \xi \equiv \xi^{(k)} \in I_k, \quad (\text{III.54})$$

<sup>32</sup>S. [Koh84, Koh87] und z.B. [Igu91, Igu97-1].

<sup>33</sup>Dies ist für ein gewöhnliches Tight-Binding Modell erfüllt, nicht dagegen für die Poincaré-Darstellung der kontinuierlichen Schrödinger-Gleichung.

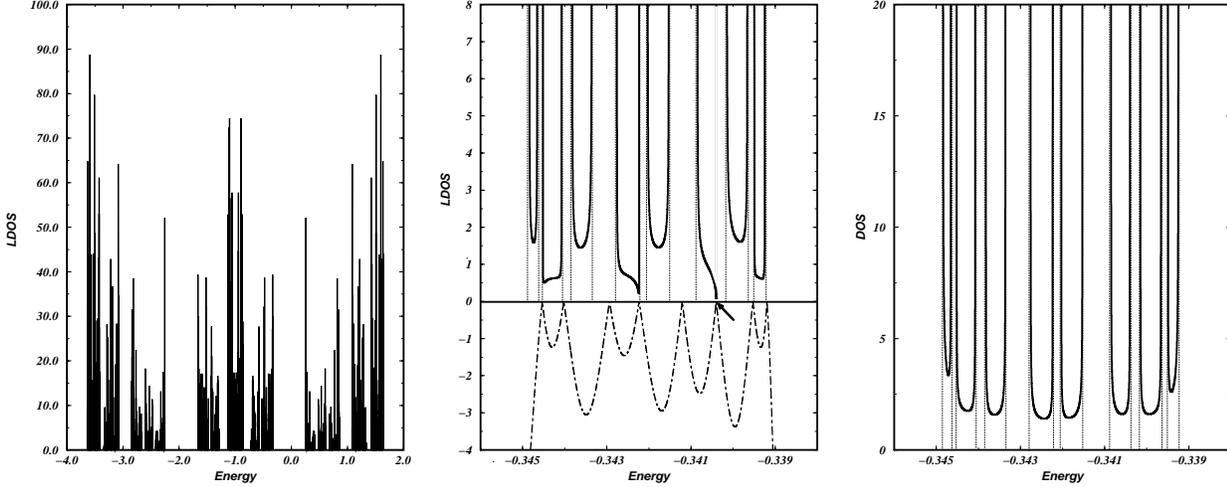


Abbildung III.7: Links: LDOS  $\rho_{\xi^{(15)}}(E)$  der Standard–Fibonacci–Folge  $w_{15}(L, S) = \mathcal{L}^{15}(L)$  für den Platz  $\xi^{(15)} = 111$  mit den Parametern  $t_L = 1.5$ ,  $t_S = 1$  und  $\epsilon_\mu = -1$ . Mitte: Ein vergrößerter Ausschnitt der LDOS (ausgezeichnete Linie) und der Verlauf des iterierten Hoppingelementes  $-|y_L|_{\xi^{(15)}}$  (gestrichelt). Rechts: Verlauf der entsprechenden DOS. Bis auf den mit dem Pfeil gekennzeichneten Punkt stimmen die Träger von LDOS und DOS miteinander überein. Die auftretenden Wurzelsingularitäten und die *Bandstruktur* des Spektrums sind eine reine Remineszenz an die periodischen Randbedingungen, wobei die Gesamtbandbreite mit zunehmendem  $n$  gegen Null strebt.

wobei wir die Formel

$$\rho_\xi(E) = \frac{1}{\pi} \Im m(G_{\xi\xi}^+(E)) = \frac{|y_L| x_\xi^{-1}(E)|}{2\pi \sqrt{1 - (x_\alpha| x_\xi^{-1}(E))^2}} \quad (\text{III.55})$$

für die lokale Zustandsdichte (LDOS)  $\rho_\xi(E)$  benutzt haben. Dann legt<sup>34</sup> der zusammenhängende, kreisfreie Sub–Graph (“gerichtete Baum”) von  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$  mit dem Zentrum  $\alpha_0$

$$\mathfrak{T}^\Gamma(\bar{V}_{\mathcal{N}_n}, \bar{\mathbf{E}}_{\mathcal{N}_n}) = \prod_{k=2}^n \tilde{\Upsilon}_{M_k} \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \alpha_1 \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circ \quad \circ \quad \dots \quad \circ \\ \swarrow \quad \downarrow \quad \searrow \\ \bullet \quad \alpha_0 \end{array} \right] \leftarrow s_1=0,1,\dots,M_1, \quad (\text{III.56})$$

sämtlichen Renormierungspfade eindeutig fest.

◻ ► **Beweis:** Die Strukturaussage ist wegen Theorem III.3 eine fast triviale Konsequenz von Theorem III.2 und dem zugehörigen Korollar III.2. Notwendig für die Existenz der konstanten *Baum–Struktur* ist noch die leicht nachprüfbare Tatsache, daß die beiden Parameter

<sup>34</sup>Ein unmittelbarer numerischer Vorteil dieser Konstruktion ergibt sich aus der folgenden Abschätzung. Sollen die  $f_n$  Diagonalterme  $G_{\xi\xi}$  bestimmt werden, so benötigt man offensichtlich  $n\Lambda_n^{(n)}$  Iterationsschritte. Benutzt man dagegen direkt den Baum (III.56) und rechnet “parallel”, so sind es nur noch  $\sum_{\mu=1}^n \Lambda_\mu^{(n)}$  Iterationsschritte. Im schlechtesten Fall sind dies etwa  $3f_n$  Schritte (dieser Fall tritt bei der *Fibonacci–Sequenz* auf).

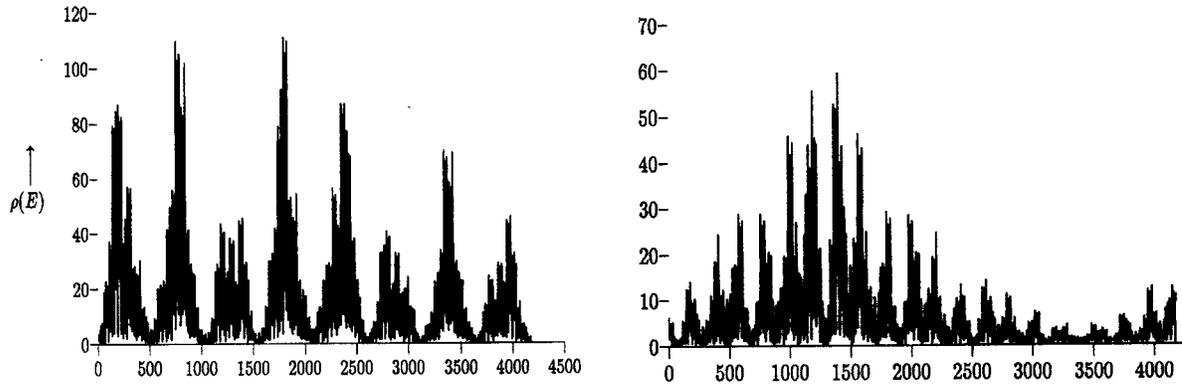


Abbildung III.8: Lokale Zustandsdichte  $\rho_{\mu}^{(17)}(E) = (1/\pi)\Im m\{G_{\mu\mu}^{(17)}(E + i\eta)\} \propto |\Psi_{\mu}^+|^2$ , aufgetragen über der Platznummer  $\xi$ , einer Standard-Fibonacci-Folge der Länge  $f_{17} = 4181$  für zwei Energiewerte (*links*)  $E = 2.791$  und (*rechts*)  $E = 2.759$  ( $\eta = 5 \cdot 10^{-7}$ ). Hierbei ist  $\epsilon_{\alpha} = -\epsilon_{\beta} = \epsilon_{\gamma} = 1$  und  $t_L = 1$ ,  $t_S = 1.5$  (bel. Einheiten).

$x_{\alpha}$  und  $y_L$  zusätzlich zu den definierenden Relationen von  $\mathcal{RG}_{|\Pi_{xy}}(\Phi_2)$ , noch die (III.47) entsprechenden Relation erfüllen, d.h. es gilt für beliebiges  ${}^R\mathcal{M} \in \mathcal{RG}_{|\Pi_{xy}}(\Phi_2)$

$$x_{\alpha|A^{-n}PA^{-1}M^{-1}} = x_{\alpha|U^{-n}PU^{-1}M^{-1}} \quad y_L|A^{-n}PA^{-1}M^{-1} = y_L|U^{-n}PU^{-1}M^{-1}$$

Es gibt keine vergleichbaren Beziehungen für die Parameter  $y_{\beta}$  und  $y_{\gamma}$ . Interessant an diesem Theorem ist die Aussage, daß sich das Paar  $\sigma_{\xi} = (x_{\alpha|x_{\xi}^{-1}}, y_L|x_{\xi}^{-1})$  allein aus der Kenntnis der auf dem Pfad vorangehenden Paaren bestimmen läßt, wodurch sich die Hierarchie des Graphen auf die Eigenschaften der physikalischen Größen vererbt, d.h. wir wollen zeigen, daß

$$\tilde{\Upsilon}_{M_k} : (\sigma_{\xi^{(k-1)}}, \sigma_{\xi^{(k-2)}}) \mapsto (\sigma_{\xi^{(k)}}, \sigma_{\xi^{(k-1)}})$$

gilt, wobei (mit  $x = x_{\alpha|\xi^{(k-1)}/2}$ )

$$x_{\alpha|\xi^{(k)}} \equiv x_{\alpha|x_{\xi}^{-1}} = x'_{\alpha|\xi^{(k-1)}} \mathcal{U}_{M_k}(x) - x_{\alpha|\xi^{(k-2)}} \mathcal{U}_{M_{k-1}}(x), \quad k \geq 2, \quad (\text{III.57})$$

$$y_L|\xi^{(k)} \equiv y_L|x_{\xi}^{-1} = y_L|\xi^{(k-1)} R_{s_{k-1}} + y_L|\xi^{(k-2)} \mathcal{J}_{M_{k-2s_k}}(x) \pm \sqrt{Y_{|\xi^{(k-1)}}} \mathcal{U}_{M_{k-2s_k}}(x) \quad (\text{III.58})$$

mit den Anfangsbedingungen  $x_{\alpha|\xi^{(0)}} = x_{\alpha}$ ,  $x_{\alpha|\xi^{(1)}} = \Delta_{M_1}$ , sowie  $y_S, y_L$  und  $y_L|x_{M_1-s_1, s_1}^{-1}$ ,  $s_1 = 0, \dots, M_1$ . Wir haben in (III.58) eine Reihe von Abkürzungen benutzt ( $Y^2 := (y_{\beta} - y_{\gamma})^2$ ):

$$Y_{|\xi^{(k)}} = y_L|\xi^{(k)} \left[ y_L|\xi^{(k)} \left( \left( \frac{x}{2} \right)^2 - 1 \right) - y_L|\xi^{(k-1)} Q_k \right] + \frac{1}{4} \left( x_{\alpha|\xi^{(k)}} y_L|\xi^{(k-1)} \right)^2 - \left( y_L|\xi^{(k-2)} \right)^2,$$

mit ( $x = x_{\alpha|\xi^{(k-1)}/2}$ )

$$R_{s_{k-1}} = Q_{k-1} \mathcal{U}_{M_{k-1-s_{k-1}}}(x) \mathcal{U}_{s_{k-1}}(x) + \frac{x_{\alpha|\xi^{(k-2)}}}{2} \mathcal{U}_{M_{k-1}}(x)$$

und

$$Q_k = x'_{\alpha|\xi^{(k)}} - \frac{1}{2} x_{\alpha|\xi^{(k)}} x_{\alpha|\xi^{(k-1)}}.$$

Es ist nützlich zwei weitere Parameter

$$y_\epsilon = y_\beta + y_\gamma, \quad y_\eta = y_\beta y_\gamma \quad (\text{III.59})$$

einzuführen. Für die Umkehrabbildung gilt offensichtlich

$$y_\beta = \frac{1}{2} [y_\epsilon \pm \sqrt{y_\epsilon^2 - 4y_\eta}], \quad y_\gamma = \frac{1}{2} [y_\epsilon \mp \sqrt{y_\epsilon^2 - 4y_\eta}]. \quad (\text{III.60})$$

Das obere (untere) Vorzeichen ist bei  $y_\beta \geq y_\gamma$  ( $y_\beta < y_\gamma$ ) zu wählen. Man bestimmt leicht die entsprechenden RTs  ${}^R\mathbf{x}_{i,j}$  ( $M = i + j$ )

$$\begin{aligned} x_{\alpha|\mathbf{x}_{j,i}^{-1}} &= \Delta_M \\ y_{\epsilon|\mathbf{x}_{j,i}^{-1}} &= x_{\alpha}\Pi_{i,j} + y_L\Delta_M \\ y_{\eta|\mathbf{x}_{j,i}^{-1}} &= \Pi_{i,j}(\Pi_{i,j} + y_L\Delta_{M+1}) + y_S^2 \\ x_{\delta|\mathbf{x}_{j,i}^{-1}} &= x_{\alpha} \\ y_{L|\mathbf{x}_{j,i}^{-1}} &= \Pi_{i,j} \quad \text{und} \quad y_{S|\mathbf{x}_{j,i}^{-1}} = y_L \end{aligned} \quad (\text{III.61})$$

Bei der Herleitung dieser und einiger der folgenden Formeln erweist sich die durch eine einfache, aber etwas längliche Rechnung verifizierbare Beziehung

$$\Pi_{i+1,j}\Pi_{i,j+1} - \Pi_{i,j}^2 - y_S^2 = y_L\Pi_{i,j}\Delta_{M+1}$$

als hilfreich, wobei ( $x = x_\alpha/2$ )

$$\begin{aligned} \Pi_{i,j} &:= (y_\gamma\mathcal{U}_i(x) - y_S\mathcal{U}_{i-1}(x))(y_\beta\mathcal{U}_j(x) - y_S\mathcal{U}_{j-1}(x)) - y_L^2\mathcal{U}_i(x)\mathcal{U}_j(x), \\ \Delta_i &:= \frac{y_\eta - y_L^2 - y_S^2}{y_L y_S} \mathcal{U}_i(x) - \frac{y_\epsilon - y_S x_\alpha}{y_L} \mathcal{U}_{i-1}(x) \end{aligned}$$

Aus den Gleichungen (III.70) erhält man mit (III.71) und der Beziehung<sup>35</sup>  $\mathcal{T}_i = \mathcal{U}_{i+1} - \mathcal{U}_{i-1}$  die gewünschten Gleichungen (III.58). Man findet folgende Rekursionsformel für  $\pm\sqrt{Y_{|\xi^{(k)}}}$  und  $x'_{\alpha|\xi^{(k)}}$ . Es gilt

$$\begin{aligned} \pm\sqrt{Y_{|\xi^{(k)}}} &= \left[ \frac{y_{L|\xi^{(k-1)}} Q_{k-1}}{2} - y_{L|\xi^{(k-2)}} \left( \left( \frac{x}{2} \right)^2 - 1 \right) \right] \mathcal{U}_{M_k - 2s_k}(x) \\ &\mp \frac{1}{2} \sqrt{Y_{|\xi^{(k-1)}}} \mathcal{T}_{M_k - 2s_k}(x) \end{aligned}$$

mit dem Anfangswert  $\pm\sqrt{Y_{|\xi^{(0)}}} = \frac{1}{2}(y_\beta - y_\gamma)$ , und die Rekursionsformel

$$\begin{aligned} x'_{\alpha|\xi^{(k)}} &= \left[ \frac{y_\eta - y_L^2 - y_S^2}{y_L y_S} \right] |_{\mathbf{x}_{(M_1 \dots M_k)}^{-1}} \\ &= x'_{\alpha|\xi^{(k-1)}} \mathcal{U}_{M_k+1}(x) - x_{\alpha|\xi^{(k-2)}} \mathcal{U}_{M_k}(x) \end{aligned}$$

<sup>35</sup>Für die Chebyshev-Polynome erster Art gilt die Rekursionsformel  $\mathcal{T}_{i+1} = x\mathcal{T}_i - \mathcal{T}_{i-1}$  und  $\mathcal{T}_0 = 1, \mathcal{T}_1 = x$ .

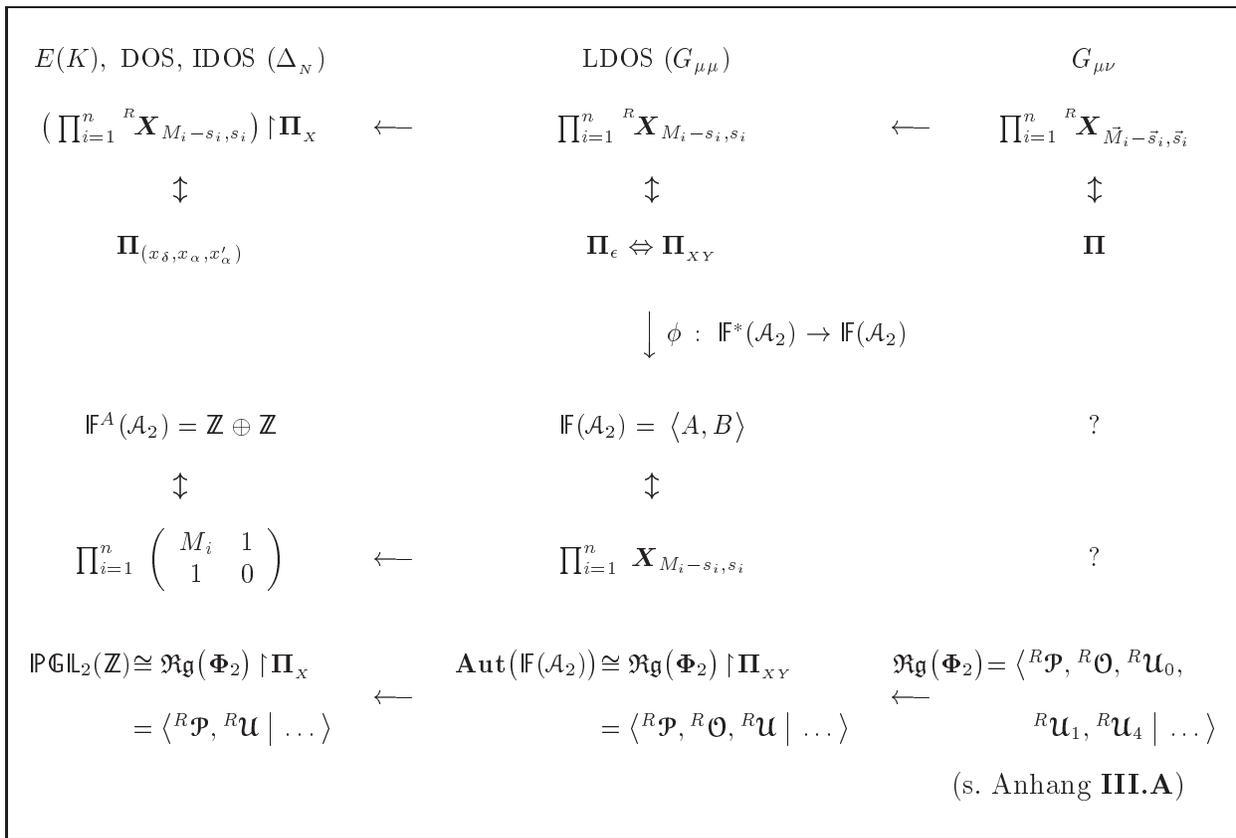


Abbildung III.9:

mit den Anfangsbedingungen  $x'_\alpha|_{\xi^{(0)}} = \Delta_1$  und  $x'_\alpha|_{\xi^{(1)}} = \Delta_{M_1}$ . Um den Beweis abzuschließen, vermerken wir, daß sich aufgrund der Invarianten (III.52) der Parameter  $x'_\alpha$  eliminieren läßt, denn es gilt offenbar

$$x'_\alpha = \frac{x_\delta x_\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(x_\delta^2 - 4)(x_\alpha^2 - 4) + \tilde{\Lambda}}, \quad \tilde{\Lambda} := \Lambda - 4,$$

und  $x_\delta|_{\xi^{(k)}} = x_\alpha|_{\xi^{(k-1)}}$ , so daß in der Tat die beiden Ausdrücke in (III.58) nur von  $x_\alpha|_{\xi^{(k-1)}}$ ,  $x_\alpha|_{\xi^{(k-2)}}$  und  $y_L|_{\xi^{(k-1)}}$ ,  $y_L|_{\xi^{(k-2)}}$  abhängen. ♣

Damit lassen sich nun alle uns interessierenden physikalischen Größen ausrechnen. Einige numerische Beispiele sind in Abb. III.10 und in den folgenden Abschnitten gezeigt. Wir wollen unsere strukturellen Ergebnisse in dem Diagramm Abb. III.9 schematisch zusammenfassen. In der erste Zeile findet man diejenigen physikalischen Größen, welche sich durch die entsprechenden Parameter der angegebenen Parameterräume (zweite Zeile) berechnen lassen. Darunter sind die entsprechenden Renormierungsgruppen eingetragen. Die entsprechenden geometrischen Pendanten findet man darunter aufgelistet. Hierbei wollen wir auf eine bemerkenswerte Folgerung aus der Formel (III.71)(a) aufmerksam machen. Wir haben gesehen, daß für ein gegebenes  $\mathcal{N}_n$  die Substitutionen  $\mathfrak{X}_{(r_n \dots r_1)}$  mit  $r_k = 0, 1, \dots, N_k$ ,  $k = 1, \dots, n$  die Generatoren sämtlicher zyklischer Permutationen der durch die Worte  $w_{(r_n^0 \dots r_1^0)}^{(n)}(L, S)$  definierten 1-D quasiperiodischen Strukturen sind. Die Gleichung (III.71) lehrt nun, daß für gegebenes

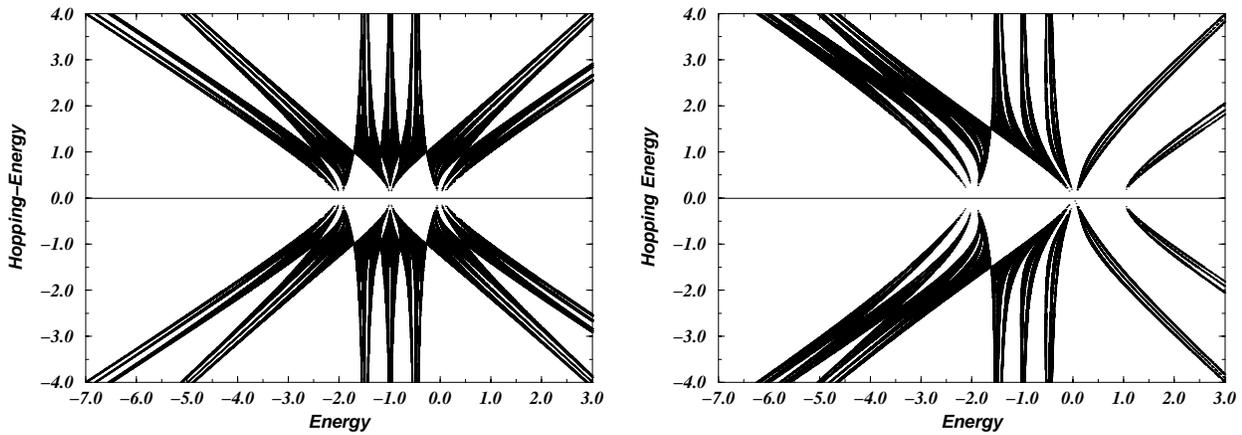


Abbildung III.10: Durch die Bedingung  $|x_\alpha|_{\xi^{(s)}} \leq 2$  wird das Spektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}})$  festgelegt. Aufgetragen sind das Spektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}})$  als Funktion der Hopping-Energie  $t_L$  mit  $t_S = 1$  für die Standard-Fibonacci-Folge  $\mathcal{L}^8(L)$  Links: Diagonal-Modell mit  $\epsilon_\mu = -1$ . Man erkennt das (triviale) *gap-closing* für  $t_L = 1$  (periodische Struktur). Rechts: Nicht-Diagonal-Modell mit  $\epsilon_\alpha = -\epsilon_\beta = -\epsilon_\gamma = 1$  mit nicht-trivialem *gap-closing*.

$\mathcal{N}_n$

$$x_\alpha | x_{(r_n \dots r_1)}^{-1} = x_\alpha | x_{(N_n \dots N_1)}^{-1} \equiv x_\alpha | \xi^{(n)} \quad \forall r_k \in \{0, \dots, N_k\}, k = 1, \dots, n, \quad (\text{III.62})$$

bzw. alle Werte von  $\xi^{(n)}$  gilt<sup>36</sup>. Die Iteration des Parameters  $x_\alpha$  ist — im Gegensatz zu  $y_L$  — auf dem Graph  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_{\mathcal{N}_n}, \mathbf{E}_{\mathcal{N}_n})$  *pfadunabhängig*, und somit ist für ein gegebenes  $\mathcal{N}_n$  der das Energiespektrum  $\sigma(\hat{\mathcal{H}})$  bestimmende Faktor<sup>37</sup>  $1/\sqrt{1 - x_\alpha | \xi^{(n)}}^2$  in (III.55) unabhängig vom Index  $\xi^{(n)}$ .

### III.2.3 RTs für Kubo–Leitfähigkeit — Rekursionen für $T$ , $\Delta$ und die Spur $\text{Sp}\{T\}$

In diesem Abschnitt wollen wir von der Transfer-Matrix-Darstellung der Schrödinger-Gleichung (4), S. vi, sowie von der Matrix-Form (II.34) der Kubo-Formel (II.36) konkreten Gebrauch machen, d.h. wir werden benutzen, daß in *einer* Dimension Substitutionen und Nielsen-Transformationen unmittelbar äquivalent zueinander sind. Darin liegt letztlich auch die Möglichkeit begründet, die entsprechenden Gleichungen auf eine Matrix-Form zu bringen, welche die zugrundeliegende 1-D Struktur reflektiert. Da wir die Ästhetik der Graphen lieb gewonnen haben, werden wir uns auch hier der Graphenschreibweise bedienen, um unsere Ideen auf das Papier zu bringen. Es ist für das Verständnis des Folgenden entscheidend, sich immer wieder die vielfache Bedeutung der Kanten und Vertizes ins Gedächtnis zu rufen. Man wird hierbei ein weiteres Beispiel für die Nützlichkeit der hier verwandten Methode der hierarchischen Graphen finden.

<sup>36</sup> Vgl. mit [Wij89] für das Transfer-Matrizen Modell.

<sup>37</sup> Wir sind hier natürlich von den Bloch-Randbedingungen ausgegangen.

Oben wurde gezeigt, daß im wesentlichen alle Elemente  $\mathbf{M} \in \Gamma_2^+$  durch die Nielsen-Transformationen (NT)

$$\mathbf{X}_{M_k-s_k, s_k} : w^{(k-1)} \mapsto w^{(k)} = (w^{(k-1)})^{M_k-s_k} w^{(k-2)} (w^{(k-1)})^{s_k} \quad (\text{III.63})$$

erzeugt werden können. Wir wollen zunächst die zugehörigen Rekursionsformeln für die Transfer-Matrizen  $\mathbf{T}_{-M \rightarrow N-1}(\mathcal{E}) := \mathfrak{T}(\Sigma^G)$  bestimmen.

☞ Durch die Abbildung  $\mathfrak{T}$  kann man jedem (dualen) Wort eine Folge von Transfer-Matrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{-M \rightarrow N-1}(\mathcal{E}) &:= \prod_{\mu=-M}^{N-1} \mathbf{T}_{\sigma_\mu}(\mathcal{E}) \equiv \mathbf{T}_{\sigma_{N-1}}(\mathcal{E}) \mathbf{T}_{\sigma_{N-2}}(\mathcal{E}) \cdot \dots \cdot \mathbf{T}_{\sigma_{-M}}(\mathcal{E}) \\ &= \prod_{\mu=-M}^{N-1} \mathfrak{T}(\sigma_\mu) = \mathfrak{T}\left(\bigwedge_{\mu} \sigma_\mu^*\right) = \mathfrak{T}(\Sigma^G) \end{aligned}$$

mit  $\Sigma^G = (\sigma_{-M}, \sigma_{-M+1}, \dots, \sigma_{N-1})$  zuordnen. Die Abbildung  $\mathfrak{T}$  wird hier in offensichtlicher Weise formal durch  $\mathfrak{T}(\Sigma_1 \wedge \Sigma_2) = \mathfrak{T}(\Sigma_2) \cdot \mathfrak{T}(\sigma) \cdot \mathfrak{T}(\Sigma_1)$  mit  $\pi_\ell(\sigma) = \pi_r(\Sigma_1), \pi_r(\sigma) = \pi_\ell(\Sigma_2)$ , definiert, wobei

$$\begin{aligned} \mathfrak{T}(\sigma^{(ij)}) &:= \mathbf{T}_{\sigma^{(ij)}} = \begin{pmatrix} s^{(ij)} & -\tau^{(ij)} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad x_i \in \mathcal{A}, \\ \mathbf{T}_{\sigma^{(ij)}}^{-1} &= \tau^{(ji)} \begin{pmatrix} 0 & \tau^{(ij)} \\ -1 & s^{(ij)} \end{pmatrix} \neq \mathbf{T}_{\sigma^{(-i, -j)}} \\ \mathfrak{T}(\sigma^{(ijk)}) &:= \mathbf{T}_{\sigma^{(ijk)}} = \mathbf{T}_{\sigma^{(jk)}} \cdot \mathbf{T}_{\sigma^{(ij)}}, \end{aligned}$$

mit  $s^{(ij)} := t_{x_j}^{-1} \cdot (z - \epsilon_{\sigma^{(ij)}})$  und  $\tau^{(ij)} := t_{x_j}^{-1} \cdot t_{x_i}$ , gilt. Man beachte, daß die  $\mathfrak{T}$  die Reihenfolge des Produktes *umdreht*. In der “mathematischen” Literatur wird dagegen praktisch ausschließlich das einfachere Modell betrachtet, bei dem alle  $t_\mu = 1$  gesetzt werden. In diesem Falle kann man von der vereinfachten Abbildung

$$\mathfrak{T} : \Omega \rightarrow \Omega_\epsilon \ni W_\epsilon := (\mathbf{y}_\mu)_\mu, \quad \mathbf{y}_\mu := z - \epsilon_\mu, \quad \epsilon_\mu \in \{\epsilon_{x_i} \mid x_i \in \mathcal{A}\},$$

ausgehen.  $\mathfrak{T}$  wird nun formal durch  $\mathfrak{T}(w_1 \cdot w_2) = \mathfrak{T}(w_2) \cdot \mathfrak{T}(w_1)$  definiert, wobei

$$\begin{aligned} \mathfrak{T}(x_i) &:= \mathbf{T}_{x_i} = \begin{pmatrix} z - \epsilon_{x_i} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{T}_{-M \rightarrow N-1}(\mathcal{E}) &:= \prod_{\mu=-M}^{N-1} \mathbf{T}_{y_\mu}(\mathcal{E}) = \prod_{\mu=-M}^{N-1} \mathfrak{T}(y_\mu) = \mathfrak{T}(w) \end{aligned}$$

gilt. Zusammengefaßt ergibt sich, daß das Diagonalmmodell ( $t_\mu = 1$ ) durch die Elemente aus der freien Gruppe  $\mathbb{F}(\mathcal{A})$ , das allgemeinere Modell dagegen durch die Elementen aus  $\mathbb{F}^*(\mathcal{A})$  beschrieben werden kann.

Für die Aussage der beiden folgenden Sätze lasse man sich von Abb. III.11 leiten. Wir haben im zweiten Kapitel gesehen, daß in die Formel für die Kubo-Leitfähigkeit die Transfer-Matrix  $\mathbf{T}_{0 \rightarrow f_{n-1}}$  eingeht und *nicht*  $\mathbf{T}_{0 \rightarrow f_{n-2}} = \mathfrak{T}(\Sigma)$ , wobei  $\Sigma = \phi^{-1}(\mathbf{X}_{\xi^{(n)}=0}(L))$  (s. Gl. (I.12), S. 6) das der verallgemeinerten Fibonacci-Folge  $\mathbf{X}_{\xi^{(n)}=0}(L)$  entsprechende duale Wort ist. Dasselbe

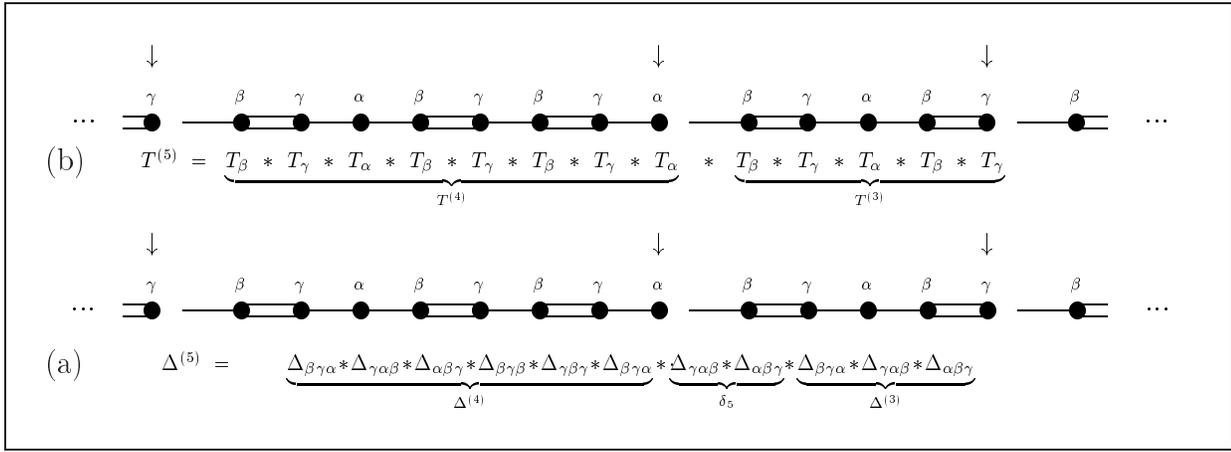


Abbildung III.11: RT für die Transfer–Matrix  $\mathbf{T}_{\sigma_\mu}$  bzw. für  $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n,\mu} = \Delta_{\sigma_{\mu-1}\sigma_\mu\sigma_{\mu+1}}$  am Beispiel eines Approximanten fünfter Generation der Fibonacci–Kette.

gilt für den Ausdruck für die Spur  $\Delta_{f_n} := \mathbf{Sp}(\mathbf{T}_{0 \rightarrow f_n - 1})$ . Da wir periodische Randbedingungen für die Platz– und Transfer–Energien zugrunde legten, ergibt sich unmittelbar

$$\mathbf{T}_{0 \rightarrow f_n - 1} := \mathfrak{T}(\tilde{\Sigma}^{(n)}) = \mathfrak{T}(\sigma) \cdot \mathfrak{T}(\Sigma^{(n)}), \quad \sigma := \tau(\phi(\Sigma^{(n)})), \quad \tilde{\Sigma}^{(n)} := (\Sigma^{(n)}, \sigma),$$

wobei  $\tau(\phi(\Sigma^{(n)}))$  der in (I.48), S. 26, definierte *Typ* des Wortes  $w^{(n)} = \phi(\Sigma^{(n)})$  ist. In Abb. III.11 haben wir über die jeweiligen Vertizes  $\sigma := \tau(\phi(\Sigma^{(n)}))$  einen Pfeil angebracht. Man macht sich leicht klar, daß

$$\phi^{-1}(\omega) := \Sigma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \lim_{k \rightarrow \infty} (\tilde{\Sigma}^{(n)})^k \right), \quad \tilde{\Sigma}^{(n)} := (\Sigma^{(n)}, \sigma),$$

der zu (I.27), S. 12, duale Ausdruck ist. Mit den gemachten Definitionen gilt nun

**Theorem III.5** *Sei  $\mathbf{X}_{\xi^{(n)}} = \prod_{k=1}^n \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k}$  und  $\mathbf{T}^{(k)} := \mathbf{T}_{0 \rightarrow f_k - 1} = \mathfrak{T}(\tilde{\Sigma}^{(k)})$  mit  $\Sigma^{(k)} = \phi^{-1}(w^{(k)})$  für alle  $k = 1, \dots, n$ . Dann existiert für alle  $\xi^{(n)}$  mit  $0 \leq \xi^{(n)} < f_n$ , mindestens eine Folge von NTs der dualen Worte, so daß*

$$\mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k}(w^{(k-1)}, w^{(k-2)}) = (w^{(k)}, w^{(k-1)}) \Leftrightarrow {}^R \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k}(\mathbf{T}^{(k-1)}, \mathbf{T}^{(k-2)}) = (\mathbf{T}^{(k)}, \mathbf{T}^{(k-1)})$$

gilt, mit der zu (III.63) äquivalenten Rekursionsbeziehung

$$\mathbf{T}^{(k)} = \left( \mathbf{T}^{(k-1)} \right)^{s_k} \cdot \mathbf{T}^{(k-2)} \cdot \left( \mathbf{T}^{(k-1)} \right)^{M_k - s_k}. \quad (\text{III.64})$$

und den Anfangswerten  $\mathbf{T}^{(1)}$  und  $\mathbf{T}^{(2)}$ . Eine mögliche Folge  $\{s_k\}$  ist dabei durch den Algorithmus (I.74), S. 39, gegeben.

☞ **Beweis:** Das rekursive Verhalten des Produkts von Transfer–Matrizen ist, wenn man den oben geschilderten Fall des *Diagonal*–Modells betrachtet, natürlich die unmittelbare Folge der Beziehung  $\mathfrak{T}(w_1 \cdot w_2) = \mathfrak{T}(w_2) \cdot \mathfrak{T}(w_1)$  und man bräuchte kein weiteres Wort darüber verlieren.

Wenden wir uns dem Fall der dualen Worte zu. Notwendig und hinreichend für die Aussage des Theorems ist offenbar die Gültigkeit der Beziehung

$$\begin{aligned} \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma_1 \wedge \Sigma_2}) &= \mathfrak{T}((\Sigma_1 \wedge \Sigma_2, \sigma_{12})) = \mathfrak{T}(\sigma_{12}) \cdot \mathfrak{T}(\Sigma_1 \wedge \Sigma_2), & \sigma_{12} &:= \tau(\phi(\Sigma_1 \wedge \Sigma_2)), \\ &\stackrel{!}{=} \mathfrak{T}(\sigma_2) \mathfrak{T}(\Sigma_2) \cdot \mathfrak{T}(\sigma_1) \mathfrak{T}(\Sigma_1) = \mathfrak{T}((\Sigma_2, \sigma_2)) \cdot \mathfrak{T}((\Sigma_1, \sigma_1)) \\ &= \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma_2}) \cdot \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma_1}), & \sigma_1 &:= \tau(\phi(\Sigma_1)), \quad \sigma_2 := \tau(\phi(\Sigma_2)), \end{aligned}$$

was genau dann erfüllt ist, wenn  $\sigma_2 = \sigma_{12}$  gilt, da  $\sigma_1$  eindeutig durch<sup>38</sup>  $\mathfrak{T}(\Sigma_1 \wedge \Sigma_2) = \mathfrak{T}(\Sigma_2) \cdot \mathfrak{T}(\sigma_1) \cdot \mathfrak{T}(\Sigma_1)$ , mit  $\pi_\ell(\sigma_1) = \pi_r(\Sigma_1)$ ,  $\pi_r(\sigma_1) = \pi_\ell(\Sigma_2)$ , festgelegt ist. Das duale Pendant zu (III.63) ist

$$\Sigma^{(k)} := \phi^{-1}(w^{(k)}) = \phi^{-1}((w^{(k-1)})^{M_k - s_k} w^{(k-2)} (w^{(k-1)})^{s_k}).$$

Wir setzen wieder  $\widetilde{\Sigma}^{(i)} := (\Sigma^{(i)}, \sigma^{(i)})$  und definieren  $\sigma^{(ij)}$  durch die Beziehungen  $\pi_\ell(\sigma^{(ij)}) := \pi_r(\Sigma^{(i)})$ ,  $\pi_r(\sigma^{(ij)}) = \pi_\ell(\Sigma^{(j)})$ . Dann rechnet man leicht nach, daß

$$\begin{aligned} \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(k)}) &= \mathfrak{T}(\sigma^{(k)}) \cdot \mathfrak{T}(\Sigma^{(k)}) \\ &= \mathfrak{T}(\sigma^{(k)}) \mathfrak{T}(\Sigma^{(k-1)}) \cdot (\mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(k-1)}))^{s_k - 1} \cdot \mathfrak{T}(\sigma^{(k-2, k-1)}) \mathfrak{T}(\Sigma^{(k-2)}) \cdot \\ &\quad \cdot \mathfrak{T}(\sigma^{(k-1, k-2)}) \mathfrak{T}(\Sigma^{(k-1)}) \cdot (\mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(k-1)}))^{M_k - s_k - 1} \\ &\stackrel{!}{=} (\mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(k-1)}))^{s_k} \cdot \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(k-2)}) \cdot \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(k-1)})^{M_k - s_k} \end{aligned}$$

und somit die gewünschte Beziehung (III.64) liefert, falls

$$\sigma^{(k)} = \sigma^{(k-1)} = \sigma^{(k-1, k-2)} \quad \text{und} \quad \sigma^{(k-2, k-1)} = \sigma^{(k-2)}, \quad s_k \neq 0, M_k, \quad (\text{III.65})$$

bzw.

$$\begin{aligned} \sigma^{(k)} = \sigma^{(k-2)} \quad \text{und} \quad \sigma^{(k-1)} = \sigma^{(k-1, k-2)}, & \quad s_k = 0, \\ \sigma^{(k)} = \sigma^{(k-1)} \quad \text{und} \quad \sigma^{(k-2)} = \sigma^{(k-2, k-1)}, & \quad s_k = M_k, \end{aligned} \quad (\text{III.66})$$

für alle  $k \in \{1, \dots, n\}$  erfüllt wird<sup>39</sup>. Nachdem wir ein notwendiges und hinreichendes Kriterium für die Gültigkeit der Rekursionsformel (III.64) gefunden haben, kann man unter Zuhilfenahme der Substitutionsgraphen (III.42)–(III.44) von Theorem III.2 leicht zeigen, daß (III.64) für alle  $\xi^{(n)}$  mit  $0 \leq \xi^{(n)} < f_n$  in der Tat erfüllt ist. Hierzu betrachte man den in Korollar III.2 definierten Baum  $\mathfrak{F}_{gF}^\Gamma(\overline{V}_{N_n}, \overline{E}_{N_n})$  und die reduzierte Form der Substitutionsgraphen und wende auf letztere die Bedingungen (III.65) und (III.66) konkret an, woraus sich die Behauptung ergibt. ♣

<sup>38</sup>Hier werden wieder die nach der Gleichung (I.7) auf S. 5, definierten Projektoren  $\pi_{\ell, r}$  benutzt. Zur Erinnerung: Das ‘‘Produkt’’ dualer Buchstaben ist das kartesische Produkt, also es gilt z.B.  $\phi^{-1}(LLSL) = \alpha\beta\gamma \equiv (\alpha, \beta, \gamma)$ . Deshalb machen Ausdrücke der Form  $(\alpha\beta, \gamma) \equiv \alpha\beta\gamma \equiv (\alpha, \beta\gamma)$  durchaus Sinn.

<sup>39</sup>Dies ist i.a. nicht der Fall wie das folgende, einfache Beispiel zeigt: Es ist  $\mathbf{R}(w^{(3)}, w^{(2)}) = (w^{(4)}, w^{(3)})$ , wobei  $w^{(2)} = SL$ ,  $w^{(3)} = LSL$ ,  $w^{(4)} = w^{(2)}w^{(3)} = SL.LSL$  ist. Daraus ergeben sich  $\widetilde{\Sigma}^{(2)} = (\gamma, \beta)$ ,  $\widetilde{\Sigma}^{(3)} = (\beta\gamma, \alpha)$  und  $\widetilde{\Sigma}^{(4)} = (\gamma\alpha\beta\gamma, \beta)$ . Schließlich findet man  $\sigma^{(23)} = \alpha$  und  $\sigma^{(32)} = \beta$ . Die oben genannte Bedingungen sind nun offenbar nicht erfüllt, da  $\sigma^{(4)} := \beta \neq \alpha := \sigma^{(3)}$ . Man sieht hier natürlich auch sofort, daß zwar  $\Sigma^{(4)} = \gamma\alpha\beta\gamma = \gamma \wedge \beta\gamma = \Sigma^{(2)} \wedge \Sigma^{(3)}$  gilt, aber  $\mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(4)}) = \mathfrak{T}(\beta\gamma\beta) \cdot \mathfrak{T}(\gamma\alpha) \neq \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(3)}) \cdot \mathfrak{T}(\widetilde{\Sigma}^{(2)})$  ist, obwohl  $w^{(4)} = w^{(2)}w^{(3)}$  gilt. Man vergleiche hierzu z.B. den in Abb. I.11, auf der S. 47, dargestellten  $\Gamma$ -Graphen. Ausgehend von der Wurzel  $\alpha_0$  sind die oben genannten Bedingungen auf den mit den Vertizes  $(\alpha_0, \beta_1, \alpha_3)$ , oder äquivalent hierzu mit den Kanten  $\mathbf{R}^2$  beginnenden Pfaden nicht für alle  $k$  erfüllt, die Aussage des Theorems gilt somit für diese Pfade nicht.

Numerische Untersuchungen von Spezialfällen des durch (III.64) definierten dynamischen Systems gibt es in der Literatur zuhauf. In diesem Zusammenhang wollen wir kurz auf die viel zelebrierte sog. *Spur–Abbildung* zu sprechen kommen. Die Rekursionsformeln für die Spuren<sup>40</sup> fallen mit denen des Tripels  $\mathbf{x} \in \mathbf{\Pi}_x$  zusammen, d.h. es gilt

$$\mathbf{x}|_{x_{M-s,s}^{-1}} \equiv \begin{pmatrix} x'_\alpha \\ x_\alpha \\ x_\delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x'_\alpha \mathcal{J}_{M+1}(x_\alpha) - x_\delta \mathcal{J}_M(x_\alpha) \\ x'_\alpha \mathcal{J}_M(x_\alpha) - x_\delta \mathcal{J}_{M-1}(x_\alpha) \\ x_\alpha \end{pmatrix}, \quad \forall s = 0, 1, \dots, M,$$

d.h. unabhängig von dem Index  $s$ .

☞ Interessanterweise genügt die Spur  $\Delta_{|w|}(w) := \mathbf{Sp}\{\mathbf{T}_{0 \rightarrow |w|-1}\}$  den Gleichungen

$$\Delta_{|w|}(\mathbf{u}(w)) = \Delta_{|w|}(\mathcal{A}(w)), \quad \text{und} \quad \Delta_{|w|}((\mathcal{P}\mathcal{O})^2(w)) = \Delta_{|w|}(w),$$

für alle  $w \equiv w(L, S) \in \mathbb{F}(\mathcal{A})$  mit der Länge  $|w| = |\mathbf{u}(w)| = |\mathcal{A}(w)|$ , bzw.  $|w| = |(\mathcal{P}\mathcal{O})^2(w)|$ . Es gibt keine analoge Beziehung für die Transfer–Matrix  $\mathbf{T}_{0 \rightarrow |w|-1}$  selbst. Die die Spur der Transfer–Matrix hat somit (erwartungsgemäß) eine höhere Symmetrie<sup>41</sup> als das Gesamtsystem; sie ist bezüglich zyklischer Permutation der zugrundeliegenden Struktur “entartet”. Dies hat Auswirkungen insbesondere für die allgemeinen Spur–Abbildungen, welche für *alle* Elemente eines gegebenen Orbits  $\mathcal{O}[w]$  gleich sind. Dies ergibt sich aus der einfachen Tatsache, daß sämtliche zyklische Permutationen  $w \in \mathbb{F}(\mathcal{A})$  auf ein und dasselbe Element  $w^A \in \mathbf{GL}(\Lambda, \mathbb{Z})$  abgebildet werden.

Wir haben somit gesehen, daß zwischen  $\mathbf{T}_\mu = \mathbf{T}_{\sigma_\mu}$  und *einem* dualen Buchstaben  $\sigma_\mu$  eines gegebenen dualen Wortes  $\Sigma$  ein eindeutiger Zusammenhang besteht (vgl. Abb. III.11). Dagegen bedarf es für eine eindeutige Charakterisierung von  $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n,\mu} = \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{n,\sigma_{\mu-1}\sigma_\mu\sigma_{\mu+1}}$  drei aufeinanderfolgende Symbole  $\sigma_\mu$  des zugrundeliegenden dualen Wortes. Betrachten wir zur Orientierung die Abb. III.11. Man erkennt sofort das Problem. Einer Verkettung zweier dualer Worte  $\Sigma \cdot \Sigma' = \sigma_0\sigma_1 \dots \sigma_{N-2}\sigma_{N-1} \cdot \sigma'_0\sigma'_1 \dots \sigma'_{N'-2}\sigma'_{N'-1}$  entspricht nicht das gewöhnliche Matrizenprodukt der zugehörigen  $\Delta$ –Matrizen. Man muß zwischen den Faktoren noch eine „Sandwich–Matrix“

$$\delta = \Delta_{\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}\sigma'_0} \Delta_{\sigma_{N-1}\sigma'_0\sigma'_1} \quad (\text{III.67})$$

einfügen. Im Fall der Transfer–Matrizen war es wegen der allgemeinen Beziehung  $\mathfrak{T}(\Sigma_1 \wedge \Sigma_2) = \mathfrak{T}(\Sigma_2) \mathbf{T}_\sigma \mathfrak{T}(\Sigma_1)$  die Matrix  $\mathbf{T}_\sigma = \mathfrak{T}(\sigma)$ , wobei wir  $\sigma := (\pi_r(\Sigma_1), \pi_\ell(\Sigma_2))$  gesetzt haben. Im Gegensatz zu  $\mathbf{T}_\sigma$ , welches nur von dem ersten bzw. letzten Buchstaben des Wortes  $w_2 = \phi(\Sigma_2)$  bzw.  $w_1 = \phi(\Sigma_1)$  (vgl. (I.12) auf S. 6) abhängt, sind die „Sandwich–Matrizen“ von den letzten beiden Symbolen des ersten dualen Wortes und von den ersten beiden Symbolen des darauffolgenden dualen Wortes abhängig. Damit wird es notwendig in  $\mathfrak{G}^\Gamma(V, \mathbf{E})$  die bisher praktizierte Verknüpfung von Vertex und Wort–Typus  $\sigma = \tau(w) := (w^{[|w|-1]}, w^{[0]})$  geeignet zu erweitern. Dazu vereinbaren wir folgende Schreibweise. Wenn ein duales Wort

<sup>40</sup>Von den Myriaden an Arbeiten seien zum Transfer–Matrizen–Modell und der durch NTs induzierten Spur–Abbildungen seien exemplarisch genannt [Baa93, Igu94–II, Igu94–III, Avi97, Baa99–II]. Man prüft leicht nach, daß  $x'_\alpha = \mathbf{Sp}(\mathbf{T}_\gamma \mathbf{T}_\beta)$ ,  $x_\alpha = \mathbf{Sp}(\mathbf{T}_\alpha)$  und  $x_\delta = \mathbf{Sp}(\mathbf{T}_\delta)$  gilt.

<sup>41</sup>Es ist bekannt, daß sie mit der von  $\mathbf{PGL}_2(\mathbb{Z})$ , zusammenfällt. Vgl. S. 10.

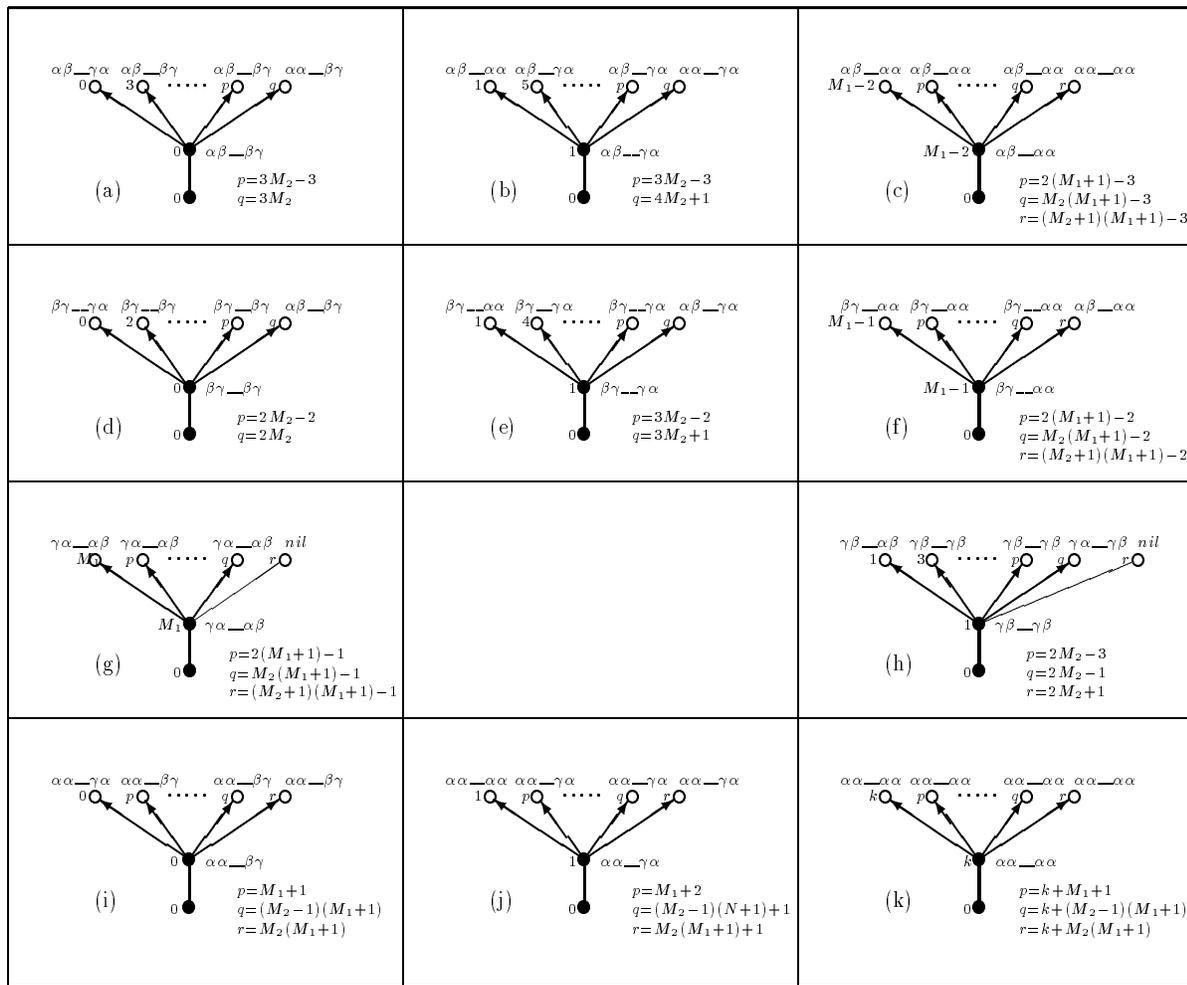


Abbildung III.12: Verallgemeinerte **Substitutionsgraphen** zur Erzeugung der *zweiten* Generation (d.h. es ist  $k = 2$ ) in den verschiedenen  $\Gamma$ -Graphen. Zusammen mit den Wurzeln definieren sie einen **Wurzelgraphen** (vgl. Beispiel).

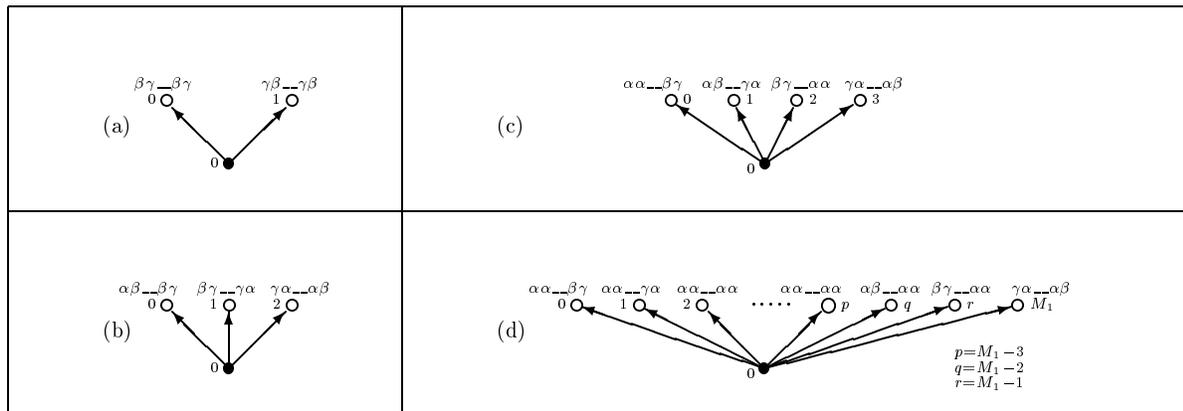


Abbildung III.13: **Wurzeln**: (a):  $M_1 = 1, M_2 \geq 2$  und (b):  $M_1 = 2, M_2 \geq 1$ . In dem zu (a) gehörenden Wurzel entfallen für  $M_2 = 2$  die Kanten  $\gamma\beta\text{-}\gamma\beta \rightarrow \gamma\beta\text{-}\gamma\beta$  (vgl. Abb. III.12 Graph (h)). (c):  $M_1 = 3, M_2 \geq 1$  und (d): Wurzel für  $M_1 \geq 4, M_2 \geq 1$ . Hier entfallen für  $M_1 = 4$  die Kanten  $\alpha\alpha\text{-}\alpha\alpha \rightarrow \alpha\alpha\text{-}\alpha\alpha$  (vgl. Abb. III.12 Graph (k)).

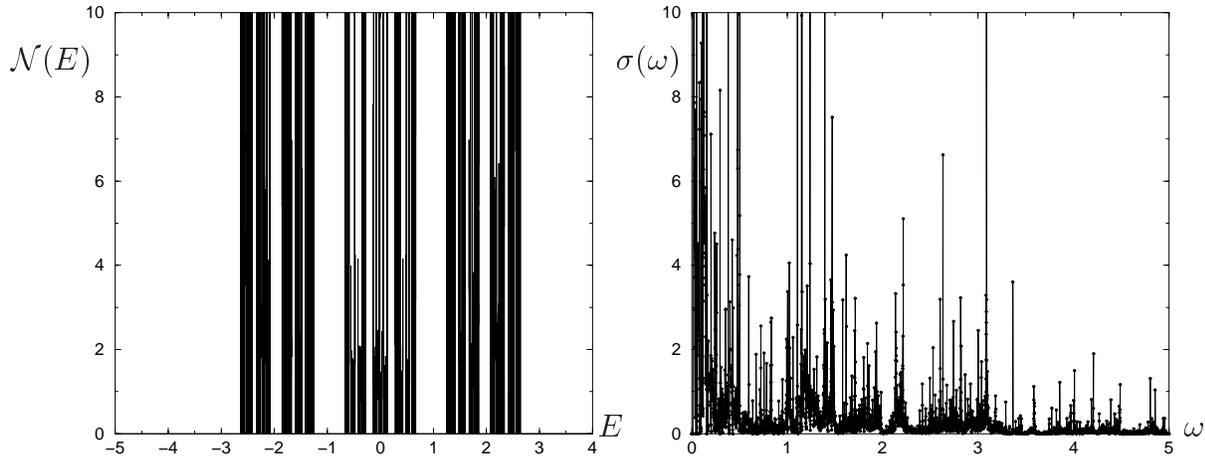
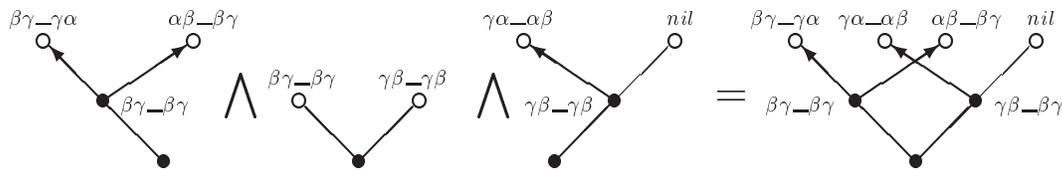


Abbildung III.14: Zustandsdichte  $\mathcal{N}^{(11)}$  (*links*) und Leitfähigkeit  $\sigma^{(11)}(\omega)$  (*rechts*) für die Standard-Fibonacci-Folge der 11-ten Generation (d.h.  $f_{11} = 233$ ) Plätze. Die Fermi-Energie ist  $\epsilon_F = 0$ , den Hopping-Termen  $t_S = 1.0$ ,  $t_L = 1.5$  und den Platz-Energien  $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = \epsilon_\gamma = 0.0$ .

$\Sigma = (\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N-3}, \sigma_{N-2})$  mit den Symbolen  $\sigma_0\sigma_1$  beginnt und mit den Symbolen  $\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}$  endet, so schreiben wir dies kurz als  $\Sigma = \sigma_0\sigma_1\text{--}\sigma_{N-3}\sigma_{N-2}$ . Wir wollen die Vertizes an einem  $\Gamma$ -Graphen  $\mathfrak{G}^\Gamma(V, \mathbf{E})$ , die wir bisher nur mit dem Typ  $\sigma = \tau(w)$  kennzeichneten nun jeweils mit dem Vierer-Tupel  $\sigma_0\sigma_1\text{--}\sigma_{N-3}\sigma_{N-2}$  versehen. Da wir im folgenden nur an den Vertizes interessiert sind, die zur Gültigkeit der Beziehung (III.65)f. beitragen, kennzeichnen wir sämtliche “unnützen” Zweige im Graph pauschal mit dem Symbol „**nil**”, d.h. die Kante zeigt ins „Nichts“<sup>42</sup>. In Abb. III.12f. sind die Wurzeln und die Substitutionsgraphen eingezeichnet, welche zusammen ein Objekt definieren, das wir als Wurzelgraphen in den induzierten Subgraphen von  $\mathfrak{G}^\Gamma(\Gamma_2^+, \Gamma_2^+ \times \Gamma_2^+)$  nennen wollen. Alle Einträge sind hier *a priori* gesetzt.

☞ **Beispiel:** Als ein einfaches Beispiel für die Konstruktion eines Wurzelgraphen betrachten wir wieder unsere Standard-Fibonacci-Folge (d.h.  $M_1 = M_2 = 1$ ). Wir definieren den zugehörigen Wurzelgraphen durch die Vereinigung einer „Wurzel“ mit den zwei zugehörigen „Substitutionsgraphen“



Den linksstehenden findet man als Spezialfall des Substitutionsgraphen (d) in Abb. III.12. Der rechte Substitutionsgraph ist dagegen spezifisch für den Fibonacci’schen Standardfall  $M_1 = M_2 = 1$ . Völlig analog definiert man sämtliche anderen Wurzelgraphen, indem man die entsprechenden Substitutionsgraphen aus Abb. III.12 mit den Wurzeln aus Abb. III.13 zusammenfügt.

<sup>42</sup>Diese Bezeichnungsweise ist der Programmiersprache PASCAL entlehnt.

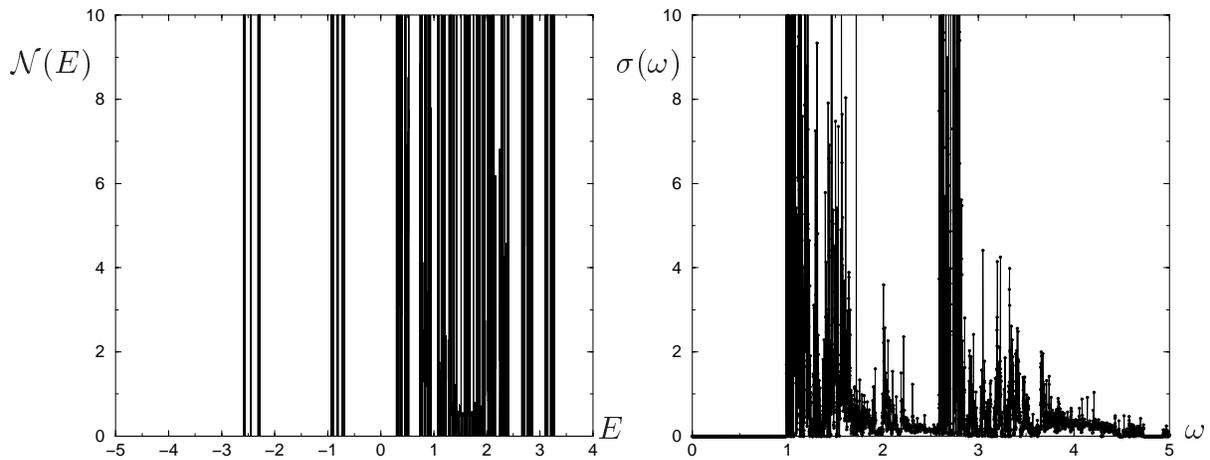


Abbildung III.15: DOS und Leitfähigkeit für dieselbe Fibonacci-Kette, nun aber mit verschiedener Fermi-Energie  $\epsilon_F = -0.2$  und Platz-Energien  $-\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = \epsilon_\gamma = 1.0$

**Theorem III.6** Die Definition der  $\Upsilon_{M_k}$ -Abbildung aus (III.42)-(III.44) sei wie folgt erweitert

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{w} \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma''\tau''}{x} \circ \quad \dots \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma''\tau''}{z} \circ \\
 \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \\
 v \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma''\tau''}{\bullet} \quad \tau'' \\
 \uparrow \\
 s_k \circ \\
 \uparrow \\
 u \bullet \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{\bullet} \quad \tau'
 \end{array}
 \quad \mapsto \quad
 \begin{array}{c}
 \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{w} \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma''\tau''}{x} \circ \quad \dots \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma''\tau''}{z} \circ \\
 \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \\
 v \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma''\tau''}{\bullet} \quad \tau'' \\
 \uparrow \\
 s_k \circ \\
 \uparrow \\
 u \bullet \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{\bullet} \quad \tau'
 \end{array}
 \end{array}
 \quad \leftarrow s_{k+1}=0,1,\dots,M_{k+1}
 \tag{III.68}$$

und

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \sigma''\tau'' \text{---} \overset{\sigma\tau}{w} \circ \quad \dots \quad \sigma''\tau'' \text{---} \overset{\sigma\tau}{y} \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{z} \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{\bullet} \quad \tau' \\
 \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \\
 v \circ \quad \sigma''\tau'' \text{---} \overset{\sigma\tau}{\bullet} \quad \tau'' \\
 \uparrow \\
 s_k \circ \\
 \uparrow \\
 u \bullet \quad \sigma'\tau' \text{---} \overset{\sigma\tau}{\bullet} \quad \tau'
 \end{array}
 \quad \mapsto \quad
 \begin{array}{c}
 \sigma''\tau'' \text{---} \overset{\sigma\tau}{w} \circ \quad \dots \quad \sigma''\tau'' \text{---} \overset{\sigma\tau}{y} \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{z} \circ \quad \sigma\tau \text{---} \overset{\sigma'\tau'}{\bullet} \quad \tau' \\
 \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \\
 v \circ \quad \sigma''\tau'' \text{---} \overset{\sigma\tau}{\bullet} \quad \tau'' \\
 \uparrow \\
 s_k \circ \\
 \uparrow \\
 u \bullet \quad \sigma'\tau' \text{---} \overset{\sigma\tau}{\bullet} \quad \tau'
 \end{array}
 \end{array}
 \quad \leftarrow s_{k+1}=0,\dots,M_{k+1}-1,M_{k+1}
 \tag{III.69}$$

wobei  $u = \xi^{(k-1)}, v = \xi^{(k)}, w = \xi^{(k)}, x = \xi^{(k)} + f_k, y = \xi^{(k-1)} + (M_{k+1} - 1)f_k$  und  $z = \xi^{(k-1)} + M_{k+1}f_k$ , sowie  $\sigma, \sigma', \dots, \tau'' \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$  gilt. Dann legt der zusammenhängende, kreisfreie Sub-Graph ("gerichtete Baum") von  $\mathfrak{G}^\Gamma(V_{N_n}, E_{N_n})$

$$\mathfrak{X}^\Gamma(\overline{V}_{N_n}, \overline{E}_{N_n}) = \prod_{k=3}^n \tilde{\Upsilon}_{M_k} [\mathbf{Wurzelgraph}]
 \tag{III.70}$$

sämtliche Renormierungspfade eindeutig fest. Darüber hinaus gilt: Sei  $\mathbf{X}_{\xi^{(n)}} = \prod_{k=1}^n \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k}$  und

$$\tilde{\Delta}^{(n)} := \Delta^{(f_n - 2)}, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Dann existiert für alle  $\xi^{(n)}, 0 \leq \xi^{(n)} < f_n$ , mindestens eine zugehörige Folge von NTs der dualen Worte derart, daß die  $\Upsilon$ -Abbildung eine NT der dualen Worte vermittelt

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k} \circ \phi(w_{k-1}, w_{k-2}) &\Leftrightarrow \\
 {}^R \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k} \left( \tilde{\Delta}^{(k-1)}, \tilde{\Delta}^{(k-2)} \right) &= \left( \tilde{\Delta}^{(k)}, \tilde{\Delta}^{(k-1)} \right)
 \end{aligned}
 \tag{III.71}$$

mit den Anfangswerten  $(\tilde{\Delta}^{(2)}, \tilde{\Delta}^{(3)}) = (\Delta^{(f_2-2)}, \Delta^{(f_3-2)})$  für  $M_1 = 1$  und  $(\tilde{\Delta}^{(1)}, \tilde{\Delta}^{(2)}) = (\Delta^{(f_1-2)}, \Delta^{(f_2-2)})$  sonst. Dabei findet man für (III.68)

$$\tilde{\Delta}^{(k)} = \begin{cases} \tilde{\Delta}^{(k-1)} (\delta \tilde{\Delta}^{(k-1)})^{s_k-1} \cdot \delta' \tilde{\Delta}^{(k-2)} \cdot (\delta \tilde{\Delta}^{(k-1)})^{M_k-s_k}, & 1 \leq s_k \leq M_k \\ \tilde{\Delta}^{(k-2)} \cdot (\delta \tilde{\Delta}^{(k-1)})^{M_k}, & s_k = 0 \end{cases} \quad (\text{III.72})$$

wobei die „Sandwich–Matrizen“ gegeben werden durch

$$\delta = \Delta_{\sigma''\tau''\sigma} \Delta_{\tau''\sigma\tau} \quad \text{und} \quad \delta' = \Delta_{\sigma'\tau'\sigma} \Delta_{\tau'\sigma\tau}. \quad (\text{III.73})$$

Für (III.69) findet man entsprechend

$$\tilde{\Delta}^{(k)} = \begin{cases} (\tilde{\Delta}^{(k-1)} \delta)^{s_k} \cdot \tilde{\Delta}^{(k-2)} \delta' \cdot (\tilde{\Delta}^{(k-1)} \delta)^{M_k-s_k-1} \tilde{\Delta}^{(k-1)}, & 0 \leq s_k \leq M_k - 1 \\ (\tilde{\Delta}^{(k-1)} \delta)^{M_k} \cdot \tilde{\Delta}^{(k-2)}, & s_k = M_k \end{cases} \quad (\text{III.74})$$

wobei nun die „Sandwich–Matrizen“ gegeben werden durch

$$\delta = \Delta_{\sigma\tau\sigma''} \cdot \Delta_{\tau\sigma''\tau''} \quad \text{und} \quad \delta' = \Delta_{\sigma\tau\sigma'} \cdot \Delta_{\tau\sigma'\tau'}. \quad (\text{III.75})$$

□ ► **Beweis:** Ausgehend von der Struktur der Wurzelgraphen ist leicht einzusehen, daß nur die beiden genannten Typen (III.68)f. von  $\Upsilon_{M_k}$ –Abbildung auftreten können, wenn wir Kanten, die auf einen nil–Vertex führen, systematisch ignorieren. Näheres Betrachten der Graphen zeigt darüber hinaus, daß die Fortsetzung dieser Kanten immer entweder auf einen Vertex  ${}^R\mathbf{M} \in V$ , der auch von einem „gesunden“ Pfad erreicht wird<sup>43</sup>, oder aber auf einen Vertex  $\sigma_\xi$  mit<sup>44</sup>  $\xi = f_n + f_{n-1} - 2 > f_n, n \geq 2$  trifft. Dieser Vertex kann nun aber auf einem „gesunden“ Pfad erreicht werden. Folglich darf man auf fast allen Ästen der Bäume ohne Bedenken entlang klettern. Man kann *jedes duale* Wort  $\Sigma = \phi(\mathcal{M}(L))$  für alle  $\mathcal{M} \in \Phi_2^+$  entlang „gesunder“ Äste durch entsprechende NTs der *dualen* Worte erzeugen.

Bei der Herleitung der Rekursionsbeziehungen lasse man sich durch Abb. III.11, der Konstruktion der Substitutionsgraphen (III.68)f., sowie der Definition der „Sandwich–Matrizen“ leiten. ♣

Den Spezial–Fall der Standart Fibonacci–Folge haben wir in [Wal2002] veröffentlicht.

### III.3 Non–Pisot Folgen

Das in (I.38), S. 20, gegebene Beispiel einer Klasse von **Non–Pisot Folgen** (für  $n \geq 2$ ) läßt sich durch die Substitutionen  $\mathcal{A}, \mathcal{U}$ , die wir schon bei den verallgemeinerten Fibonacci–Folgen kennen lernten, und die Morphismen der Form  $\mathcal{L}_N := \mathcal{P}\mathcal{E}_N\mathcal{A}$ ,  $N \geq 2$  generieren<sup>45</sup>.

<sup>43</sup>D.h. ein derartiger Pfad ist aufgrund der definierenden Relationen in  $\Gamma_2^+$  immer äquivalent zu einem „gesunden“ Pfad.

<sup>44</sup>D.h. jedes Wort, das einem Vertex  $\sigma_\xi$ , mit  $\xi > f_n$ , entspricht, läßt sich auch durch einen Vertex  $\sigma_{\tilde{\xi}}$ , mit  $\tilde{\xi} = \xi \bmod f_n$ , im „Inneren“ des Baumes darstellen.

<sup>45</sup> $\mathcal{E}_N$  wurde in (I.37), S. 19, definiert.

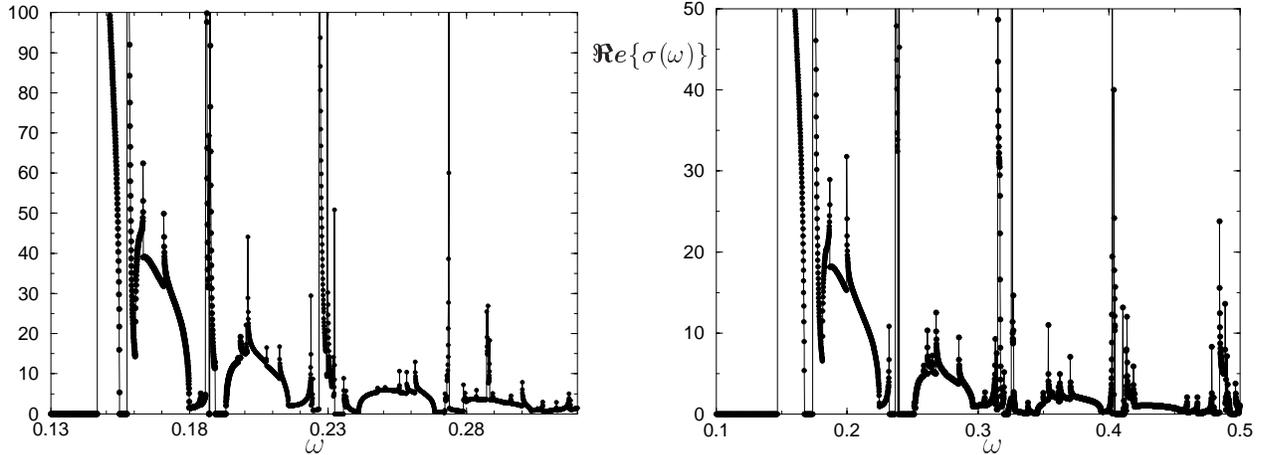


Abbildung III.16: Ein vergrößerter Ausschnitt aus der Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$  für die Standard-Fibonacci-Kette der 11-ten (*links*) bzw. der 10-ten (*rechts*) Generation. Die Ursachen für die Singularitäten sind die van-Hoove Singularitäten der Zustandsdichte bzw. der Beziehung  $\overline{\Delta}'_N - \Delta'_N \rightarrow 0$ . Man beachte die ähnliche Struktur, bei entsprechender Reskalierung.

Im Folgenden wollen wir uns nun letzteren ausführlich widmen. Ausgangspunkt unserer Betrachtungen ist die Konstruktion des zu den Orbits  $\Theta[w^{(n)}(L, S)]$  gehörenden hierarchischen Graphen, wobei

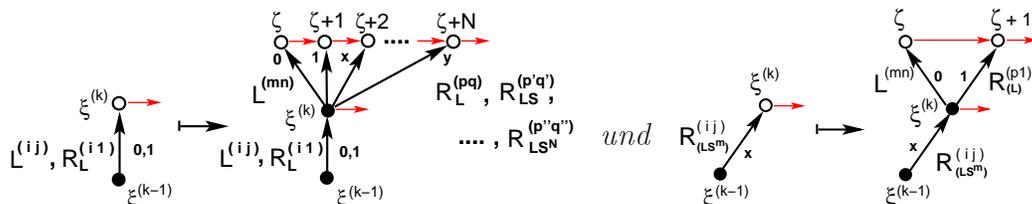
$$w^{(n)}(L, S) \equiv w_{(r_1^{(0)} \dots r_n^{(0)})}(L, S) := \left( \prod_{k=1}^n \mathcal{L}_{N_k} \right) (L), \quad \mathcal{L}_{N_k} = \mathcal{P}\mathcal{E}_{N_k}\mathcal{A}, \quad N_k \geq 2,$$

wieder die zugehörigen Approximanten des entsprechenden unendlichen Wortes sind. Es gilt das

**Theorem III.7** *Seien die erzeugenden Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \{\mathcal{L}_{N_k}, \mathcal{M}_{LS^{m_k}} \mid m_k = 0, 1, \dots, N_k, k \in \mathbb{N}\}$ , gegeben, wobei*

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{N_k} = \mathcal{P}\mathcal{E}_{N_k}\mathcal{A} : \quad & L \rightarrow LS^{N_k}, \quad S \rightarrow L \\ \mathcal{M}_{k,L} := \mathcal{J}_L \mathcal{L}_{N_k} : \quad & L \rightarrow S^{N_k}L, \quad S \rightarrow L, \quad \xrightarrow{\pi'} \quad \mathcal{S}_{\mathcal{L}_{N_k}} = \begin{pmatrix} 1 & N_k \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{M}_{k,LS^{m_k}} := \mathcal{J}_S^{m_k} \mathcal{J}_L \mathcal{L}_{N_k} : \quad & L \rightarrow S^{N_k - m_k}LS^{m_k}, \quad S \rightarrow L, \quad m_k = 1, 2, \dots, N_k - 1. \end{aligned}$$

Die Super-Inflation  $\Lambda_{\mathcal{L}_{N_k}}$  ist definiert durch<sup>46</sup>



<sup>46</sup>Wir schreiben hier kurz  $m \equiv m_k$ .

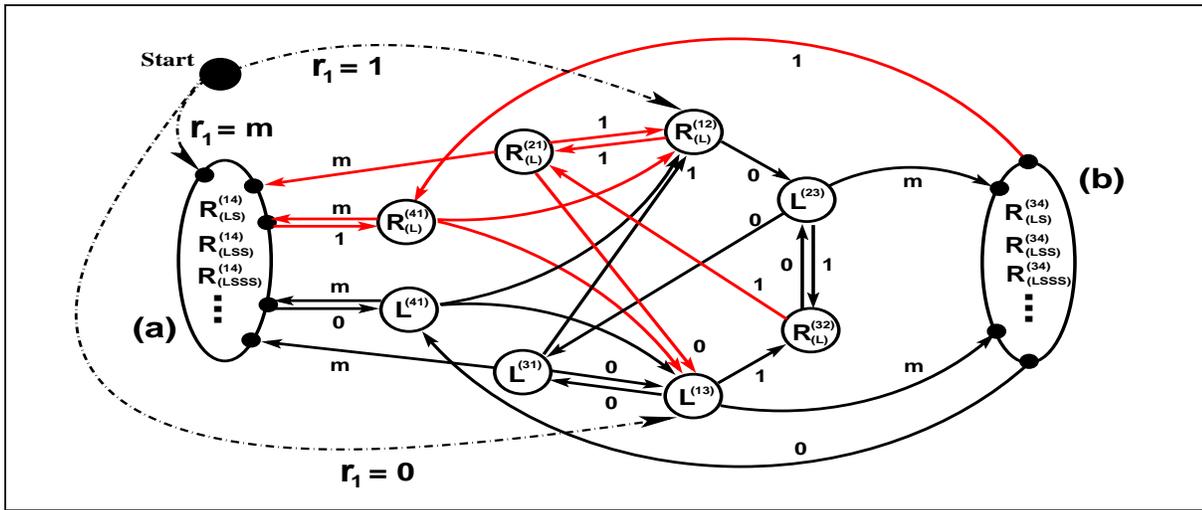


Abbildung III.17: Projizierter  $\Phi$ -Automat  $\mathfrak{PA}^\Phi(V, E)$  für Non–Pisot Folgen (III.3). (a) und (b) entsprechen der Gesamtheit der Vertices  $R_{LS^{m_k}}^{(14)}$  bzw.  $R_{LS^{m_k}}^{(34)}$  für  $m_k = 0, 1, \dots, N_k$ . Jeder der einzelnen Vertices  $R_{LS^{m_k}}^{(14)}$  bzw.  $R_{LS^{m_k}}^{(34)}$  aus (a) bzw. (b) ist für sich so mit den anderen Vertices des Graphen verknüpft, wie es hier für die Gesamtheit (a) bzw. (b) dargestellt wurde.

wobei alle Vertex–Kanten–Tripel<sup>47</sup>

$$L_k^{(pq)} := (\sigma_q, \mathcal{L}_{N_k}, \sigma_p), \quad R_{k, LS^{m_k}}^{(pq)} := (\sigma_q, \mathcal{M}_{k, LS^{m_k}}, \sigma_p),$$

mit  $\sigma_1 = \alpha, \sigma_2 = \beta, \sigma_3 = \gamma, \sigma_4 = \delta$ , der Form  $\bullet \rightarrow \bullet$  unverändert bleiben sollen. Es ist  $x = 1 + \tau_k$  und  $y = 1 + N_k \tau_k$  mit<sup>48</sup>

$$\tau_k := \Lambda_{n-k-1}^{(n)} / \Lambda_{n-k}^{(n)}, \quad \Lambda_{k+1}^{(n)} = \Lambda_k^{(n)} + N_{n-k} \Lambda_{k-1}^{(n)}, \quad \Lambda_{-1}^{(n)} = \Lambda_0^{(n)} = 1.$$

Der erzeugende projizierte  $\Phi$ -Automat  $\mathfrak{PA}^\Phi(V, E)$  ist in Abb. III.17 dargestellt. Der zu  $\mathcal{O}[w^{(n)}(L, S)]$  gehörenden hierarchische Graph  $\mathfrak{G}_{nonPV}^\Phi(V_n, E_n)$  (s. Abb. III.18) läßt sich dann rekursiv erzeugen, d.h.  $\mathfrak{G}_{nonPV}^\Phi(V_{n+1}, E_{n+1}) = \Lambda_{\mathcal{L}_{N_{n+1}}}^\Phi(\mathfrak{G}_{nonPV}^\Phi(V_n, E_n))$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ , so daß gilt

$$\mathfrak{G}_{nonPV}^\Phi(V_n, E_n) = \left( \prod_{k=2}^n \Lambda_{\mathcal{L}_{N_k}} \right) \left[ \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} 0 & 1 & 2 & \dots & N \\ \circ & \circ & \circ & \dots & \circ \\ \uparrow & \rightarrow & \rightarrow & \dots & \rightarrow \\ L^{(13)} & & & & R_{LS^{m_1}}^{(pq)} \\ & \uparrow & \uparrow & & \uparrow \\ & 1 & x & & y \end{array} \end{array} \right],$$

mit  $R_{LS^{m_1}}^{(pq)} \Leftrightarrow R_L^{(12)}, R_{LS}^{(14)}, \dots, R_{LS^{N_1}}^{(14)}$ . Das der Kodierung zugrunde liegende Zahlensystem ist  $\{f_k \mid k \in \mathbb{N}\}$  mit  $f_{k+1} = f_k + M_k f_{k-1}$  und den Anfangswerten  $f_{-1} = f_0 = 1$ , wobei wieder die

<sup>47</sup>Der Index  $k$  ist in Abb. III.17 nicht explizit angeschrieben.

<sup>48</sup>Die Definition der natürlichen Zahlen  $\Lambda_k^{(n)}$  ist analog zu der in (III.A.17) und (III.A.19), S. 182, in Anhang III.A.2.

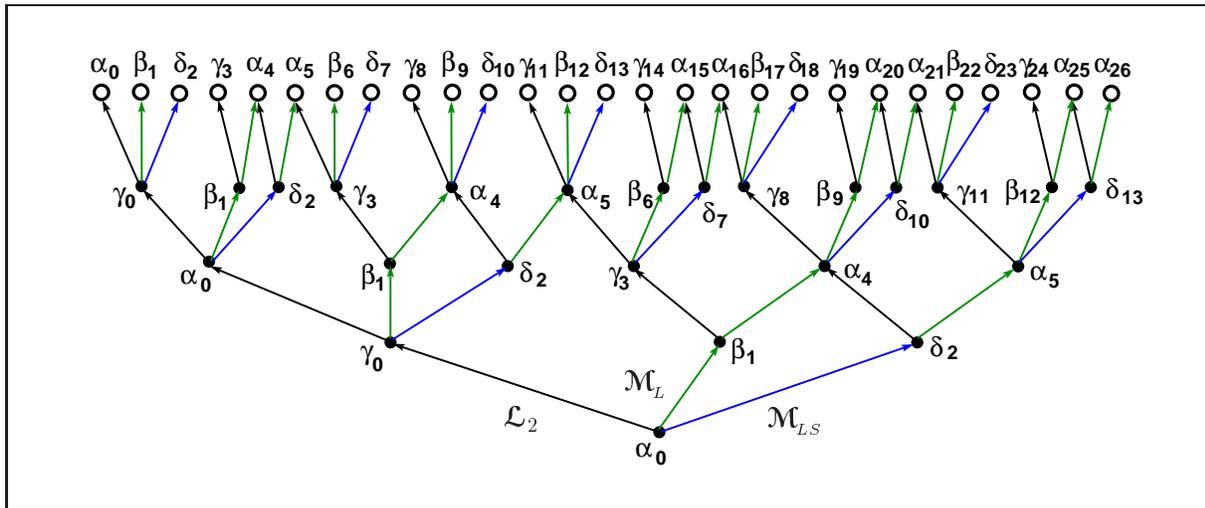


Abbildung III.18:  $\Phi$ -Graph für den Orbit  $\mathcal{O}[w^{(4)}(L, S)]$  zum Approximanten der Non-Pisot-Kette  $w^{(4)}(L, S) = \mathcal{L}_2^4(L)$ , mit den erzeugenden Morphismen  $\mathcal{L}_2$ ,  $\mathcal{M}_L$  und  $\mathcal{M}_{L,S}$ .

Beziehung (III.37) zum tragen kommt, so daß

$$\mathfrak{T}^{\xi^{(n)}}(w^{(n)}(L, S)) = \left( \prod_k \mathcal{M}_{k,\cdot} \right)(L), \quad \Leftrightarrow \quad \xi^{(n)} = \sum_{k=1}^n r_{n-k+1} \Lambda_{k-1}^{(n)},$$

$$r_k \in \left\{ 0, 1 + m_{n-k-1} \frac{\Lambda_{n-k-1}^{(n)}}{\Lambda_{n-k}^{(n)}} \mid m_k = 0, 1, \dots, N_k - 1 \right\}$$

gilt. Hierbei läßt sich  $r_k = 0$  eindeutig  $\mathcal{L}_{N_k}$  und  $r_k = 1 + m_k \tau_k$  entsprechend den  $\mathcal{M}_{k,LS^{m_k}}$  zuordnen. Die jeweilige Folge von Morphismen  $\prod_k \mathcal{M}_{k,\cdot}$  wird hierbei eindeutig durch denjenigen Pfad in  $\mathfrak{S}_{nonPV}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  gegeben, der die Wurzel mit dem Vertex  $\sigma_{\xi^{(n)}} \in V_n$  verbindet.

☞ **Beweis:** Vollständige Induktion. ♣

Jede natürliche Zahl  $\xi^{(n)}$  läßt sich eindeutig in der Basis  $\{f_k\}$ ,  $f_k := |w^{(k)}|$  darstellen, so daß sich durch Vorgabe von  $\xi^{(n)}$  die Lösung  $(s_1, \dots, s_n)$  von (III.7) finden läßt<sup>49</sup>. Geht man damit in den projizierten  $\Phi$ -Automat Abb. III.17 ein, so erhält man gerade diejenige Abfolge von Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^\Phi$ , für die (III.7) erfüllt wird. Aufgrund der Existenz der definierenden Relationen

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{k+2,L} \mathcal{M}_{k+1,LS^{N_{k+2}-1}} \mathcal{L}_{N_k} &= \mathcal{L}_{N_{k+2}} \mathcal{L}_{N_{k+1}} \mathcal{M}_{k,L} \\ \mathcal{M}_{k+1,L} \mathcal{M}_{k,LS^{m_k}} &= \mathcal{L}_{N_{k+1}} \mathcal{M}_{k,LS^{m_k+1}}, \quad m_k = 0, 1, \dots, N_k - 2, \end{aligned} \quad (III.76)$$

gibt es für gegebenes  $\xi^{(n)}$  wieder verschiedene Lösungen  $(r_1, \dots, r_n)$  der Gleichung (III.7). Streicht man im entsprechenden  $\Phi$ -Graph die Vertizes  $R^{(21)}, R^{(41)}$  (im  $\Phi$ -Automaten  $\mathfrak{PA}^\Phi(V, \mathbf{E})$  streicht man entsprechend alle roten Kanten), so erhält man den entsprechenden Baum  $\mathfrak{S}_{nonPV}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$ , d.h. es gibt genau einen Pfad, welcher einen gegebenen Vertex  $\sigma_{\xi^{(n)}}$  mit dem Ursprung verbindet.

<sup>49</sup>Man benutze hierzu den Algorithmus aus Theorem I.3, S. 39.

### III.4 Period–Doubling und Thue–Morse Folge

Der folgende Abschnitt ist einigen weiteren prominenten Beispielen von Morphismen in der freien Gruppe  $\mathbb{F}_2$  über ein 2–Buchstabenalphabet gewidmet.

Ausgangspunkt unserer Betrachtungen über die in (I.36), S. 19, definierten Approximanten  $w^{(n)}(L, S) = \mathcal{M}_{PD}^n(L)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , der **Period–Doubling–Folge** ist die Konstruktion des zu den Orbits  $\mathcal{O}[w^{(n)}(L, S)]$  gehörenden hierarchischen Graphen:

**Theorem III.8** *Seien die erzeugenden Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} \in \mathcal{A}^\Phi = \{\mathcal{M}_{PD}, \mathcal{M}_L\}$  gegeben, wobei*

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{PD} &= \mathcal{P}\mathcal{E}_2\mathcal{P}\mathcal{A}\mathcal{P} : & L &\rightarrow LS, S \rightarrow LL \\ \mathcal{M}_L &:= \mathcal{J}_L\mathcal{M}_{PD} : & L &\rightarrow SL, S \rightarrow LL, \quad \xrightarrow{\pi'} \quad \mathbf{S}_{\mathcal{M}_{PD}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Super–Inflation  $\Lambda_{PD}$  sei definiert durch



wobei alle Vertex–Kanten–Tripel  $L^{(ij)}, R^{(ij)}$  der Form  $\bullet \rightarrow \bullet$  unverändert bleiben sollen. Der erzeugende projizierte  $\Phi$ –Automat  $\mathfrak{B}\mathfrak{A}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  ist derselbe wie bei der Fibonacci–Kette (s. Abb. I.5, S. 34), wenn man dort statt (I.61), S. 33, die Vertizes  $L^{(ij)} := (\sigma_i, \mathcal{M}_{PD}, \sigma_j)$  und  $R^{(ij)} := (\sigma_i, \mathcal{J}_L\mathcal{M}_{PD}, \sigma_j)$  einsetzt<sup>50</sup>. Der zu  $\mathcal{O}(w^{(n)}(L, S))$  gehörende **hierarchische Graph**  $\mathfrak{T}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  (s. Abb. III.19) läßt sich dann rekursiv erzeugen, d.h. es ist  $\mathfrak{T}_{PD}^\Phi(V_{n+1}, \mathbf{E}_{n+1}) = \Lambda_{PD}(\mathfrak{T}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n))$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ , so daß gilt

$$\mathfrak{T}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n) = \Lambda_{PD}^{n-1} \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \beta_1 \\ \swarrow \quad \searrow \\ L^{(13)} \quad R^{(12)} \\ \swarrow \quad \searrow \\ \alpha_0 \end{array} \right]. \quad (\text{III.77})$$

Das der Kodierung zugrundeliegende Zahlensystem ist das Binärsystem<sup>51</sup>  $\{2^k \mid k \in \mathbb{N}\}$ , so daß für jedes  $\xi^{(n)} \leq |w^{(n)}|$ ,  $n \in \mathbb{N}$ ,

$$\mathfrak{T}^{\xi^{(n)}}(w^{(n)}(L, S)) = \left( \prod_k \mathcal{M}_{k,\cdot} \right)(L), \quad \xi^{(n)} = \sum_{k=0}^{n-1} r_{n-k} \cdot 2^k = 2\xi^{(n-1)} + r_n, \quad (\text{III.78})$$

<sup>50</sup> Auch hier existiert wieder ein reduzierter projizierter  $\Phi$ –Automat, den man aus dem  $\Phi$ –Automat in Abb. I.5(b), S. 34 erhält, indem man nun  $L$  (bzw.  $R$ ) mit  $\mathcal{M}_{PD}$  (bzw.  $\mathcal{J}_L \cdot \mathcal{M}_{PD}$ ) identifiziert.

<sup>51</sup> Der Graph  $\mathfrak{T}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  ist ein echter binärer Baum, d.h. es gibt keine positiven Relationen (d.h. es treten nur positive Exponenten auf) zwischen den beiden Substitutionen  $\mathcal{M}_{PD}$  und  $\mathcal{M}_L$ . Dies ist der entscheidende Unterschied zum  $\Phi$ –Graph der Fibonacci–Folge. Betrachtet man die zugehörigen projizierten  $\Phi$ –Automaten unter dem Aspekt der Orbit–Äquivalenz, so hat man für die Fibonacci–Folge in Abb. I.5(b), S. 34, die roten Pfeile und den Vertex  $R^{(21)}$  zu entfernen. Dann ist es offenbar, daß beide Graphen, und somit die Fibonacci– und PD–Folge, nicht zueinander äquivalent sind.

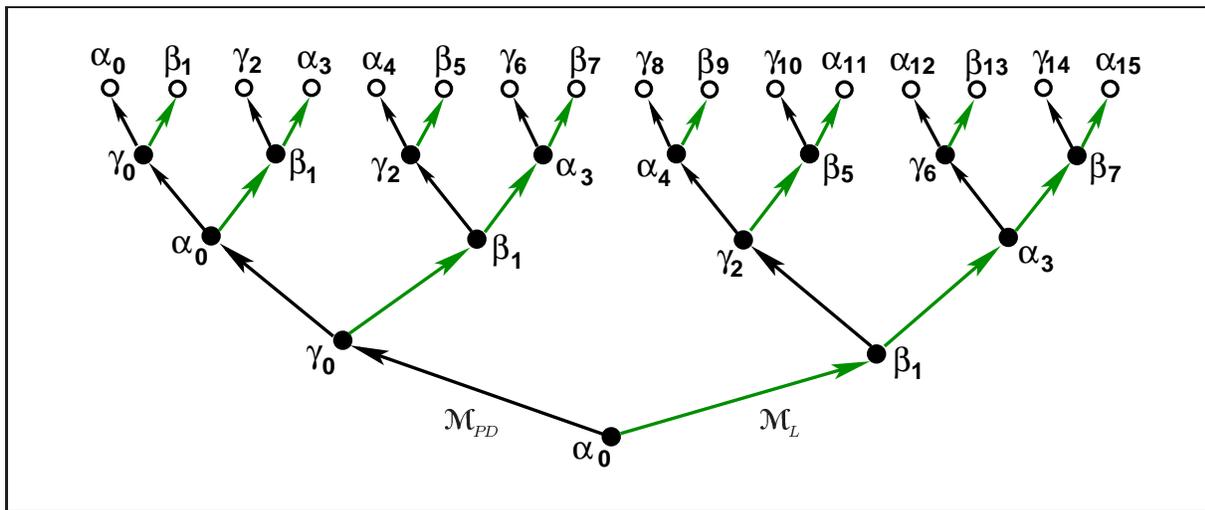


Abbildung III.19:  $\Phi$ -Graph für den Orbit  $\mathcal{O}[w^{(4)}(L, S)]$  zum Approximanten der Period–Doubling–Folge  $w^{(4)}(L, S) = \mathcal{M}_{PD}^4(L)$ , mit den erzeugenden Morphismen  $\mathcal{M}_{PD}, \mathcal{M}_L$ .

mit  $r_k \in \{0, 1\}$ , gilt. Die jeweilige Folge von Morphismen  $\prod_k \mathcal{M}_k$ , wird hierbei eindeutig durch denjenigen Pfad in  $\mathfrak{X}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  gegeben, der die Wurzel mit dem Vertex  $\sigma_{\xi^{(n)}} \in V_n$  verbindet.

♣ ► **Beweis:** Vollständige Induktion. ♣

Jede natürliche Zahl  $\xi^{(n)}$  läßt sich eindeutig in der Binär–Basis  $\{f_k\}$ ,  $f_k := |w^{(k)}| = 2^k$  darstellen, so daß sich durch Vorgabe von  $\xi^{(n)}$  die Lösung  $(r_1, \dots, r_n)$  von (III.78) finden läßt. Geht man damit in den projizierten  $\Phi$ -Automaten  $\mathfrak{X}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  aus Abb. I.5(b), S. 34, für die Fibonacci–Folge ein, so erhält man mit den oben genannten Ersetzungen der Vertizes  $L^{(ij)}, R^{(ij)}$  diejenige Abfolge von Substitutionen  $\mathcal{M}_{k_i} \in \{\mathcal{M}_{PD}, \mathcal{M}_L\}$ , für die (III.78) erfüllt wird.

Wir wollen nun wieder den zu  $\mathfrak{X}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  gehörenden  $\Gamma$ -Graphen konstruieren. Er gibt uns die gesuchten Abfolgen der entsprechenden Nielsen–Transformationen  $\mathbf{M}_{PD}$  und  $\mathbf{M}_L$ , und somit auch alle Informationen zu den Folgen von Renormierungstransformationen  ${}^R\mathcal{M}_{PD}^{-1}$  und  ${}^R\mathcal{M}_L^{-1}$ . Da  $\mathfrak{X}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  ein reiner Binärgraph ist die Lösung denkbar einfach. Sei

$$L^{(pq)} := (\sigma_q, {}^R\mathcal{M}_{PD}^{-1}, \sigma_p), \quad \text{und} \quad R^{(pq)} := (\sigma_q, {}^R\mathcal{M}_{PD}^{-1} \mathcal{J}_L^{-1}, \sigma_p),$$

wobei wieder  $\sigma_1 = \alpha, \sigma_2 = \beta, \sigma_3 = \gamma$  und  $\sigma_4 = \delta$  gilt. Definieren wir die Super–Inflation  $\Upsilon_{PD}$  analog zu  $\Lambda_{PD}$  in (III.77) mit der Ausnahme, daß wir anstatt  $r_k$  nun  $s_k$  in (III.77) einsetzen und (III.4) verwenden, dann gilt

**Theorem III.9** Der zu  $\mathcal{O}[w^{(n)}(L, S)]$  gehörenden hierarchische Graph  $\mathfrak{X}_{PD}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  (s. Abb. III.21) läßt sich rekursiv erzeugen, d.h. es ist  $\mathfrak{X}_{PD}^\Gamma(V_{n+1}, \mathbf{E}_{n+1}) = \Upsilon_{PD}(\mathfrak{X}_{PD}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n))$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ , so daß gilt

$$\mathfrak{X}_{PD}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n) = \Upsilon_{PD}^n \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \beta_1 \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \alpha_0 \end{array} \right],$$



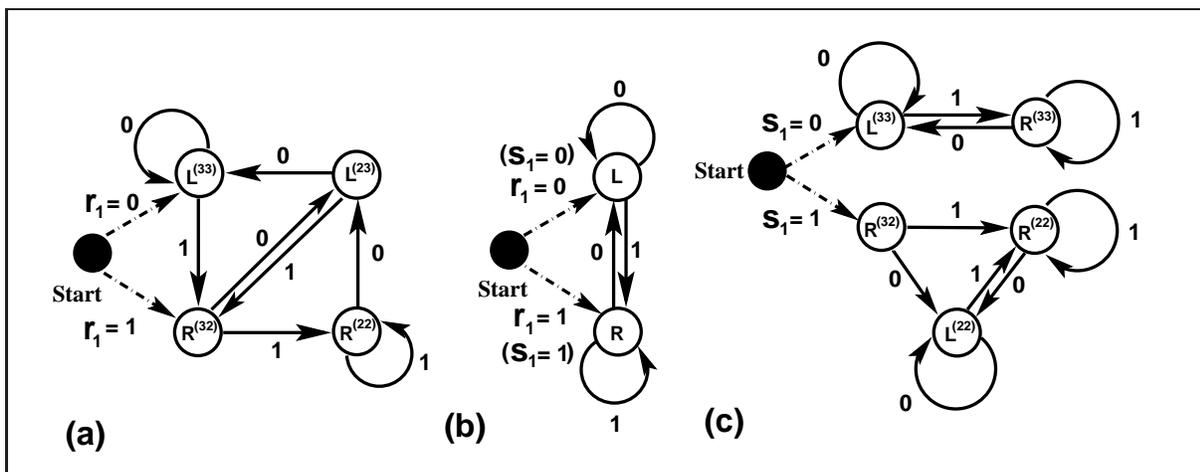


Abbildung III.21:  $\Phi$ -Automat  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  für den  $\Phi$ -Graph zur periodischen (LS)-Folge: (a) voller  $\Phi$ -Automat mit den Vertices  $L^{(ij)} = (\sigma_i, \mathcal{M}_\pi, \sigma_j)$  und  $R^{(ij)} = (\sigma_i, \mathcal{J}_L \mathcal{M}_\pi, \sigma_j)$ . (b) *reduzierter*  $\Phi$ - bzw.  $\Gamma$ -Automat für den  $\Phi$ - bzw. auch für den  $\Gamma$ -Graphen, (c) voller  $\Gamma$ -Automat  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  für den  $\Gamma$ -Graphen. Nun sind die Vertices durch  $L^{(pq)} = (\sigma_p, \mathbf{M}_\pi, \sigma_q)$  und  $R^{(pq)} = (\sigma_p, \mathbf{M}_\pi \mathbf{T}_L, \sigma_q)$  gegeben.

Zusammen mit der Parameter-Transformation  $\mathcal{J}_L^{-1}$  läßt sich daraus unmittelbar  ${}^R\mathcal{M}_L^{-1} := {}^R\mathcal{M}_{PD}^{-1} \mathcal{J}_L^{-1}$  bestimmen. An dieser Stelle kann man natürlich davon Gebrauch machen, daß  ${}^R\mathcal{M}_L^{-1}$  auf die *positive* Deflationssubstitution  $\overline{{}^R\mathcal{M}_L^{-1}} : LS \rightarrow L, LL \rightarrow S$  führt.

Bevor wir zur Thue–Morse Folge kommen, sei noch eine kurze Anmerkung zur **periodischen Kette** mit zwei Buchstaben eingefügt. Sie läßt sich durch die erste der beiden singulären Substitutionen

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\pi : \quad L &\rightarrow LS, \quad S \rightarrow LS \\ \mathcal{M}_L := \mathcal{J}_L \mathcal{M}_\pi : \quad L &\rightarrow SL, \quad S \rightarrow SL, \quad \xrightarrow{\pi'} \quad \mathbf{S}_{\mathcal{M}_\pi} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

erzeugen. Sie hat dieselbe Substitutionsmatrix (und soweit die Eigenschaften allein durch  $\mathbf{S}_{\mathcal{M}_\pi}$  bestimmt werden, dieselben Eigenschaften) wie die im Folgenden zu betrachtenden Thue–Morse–Folge. Außerdem besitzt sie ebenfalls einen reinen Binärgraph<sup>53</sup> wie die PD–Folge. Im letzteren Fall wird der Unterschied erst durch Vergleich der zugehörigen  $\Phi$ -Automaten<sup>54</sup>  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  Abb. III.21. erkennbar.

Kommen wir zur **Thue–Morse– (TM–)Folge** mit den Approximanten  $w^{(n)} = \mathcal{M}_{TM}^n(L)$ . Wir wollen die zu den Orbits  $\mathcal{O}[\mathcal{M}_{TM}^n(L)]$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , gehörenden Substitutionen bestimmen, indem wir den zugehörigen hierarchischen Graph konstruieren. Dazu formulieren wir folgendes

<sup>53</sup>D.h. hier ist  $r_k = 0$  (bzw.  $r_k = 1$ ) äquivalent zu  $\mathcal{M}_{k,\cdot} = \mathcal{M}_\pi$  (bzw.  $\mathcal{M}_{k,\cdot} = \mathcal{M}_L$ ). Bei der PD–Folge war  $r_k = 0$  (bzw.  $r_k = 1$ ) äquivalent zu  $\mathcal{M}_{k,\cdot} = \mathcal{M}_{PD}$  (bzw.  $\mathcal{M}_{k,\cdot} = \mathcal{J}_L \mathcal{M}_{PD}$ ).

<sup>54</sup>Man beachte, daß der zugehörige reduzierte  $\Phi$ -Automat mit dem der PD–Folge noch übereinstimmt. Erst die Kenntnis von jeweils zwei aufeinanderfolgenden Buchstaben (von den dualen Buchstaben) unterscheidet beide voneinander.

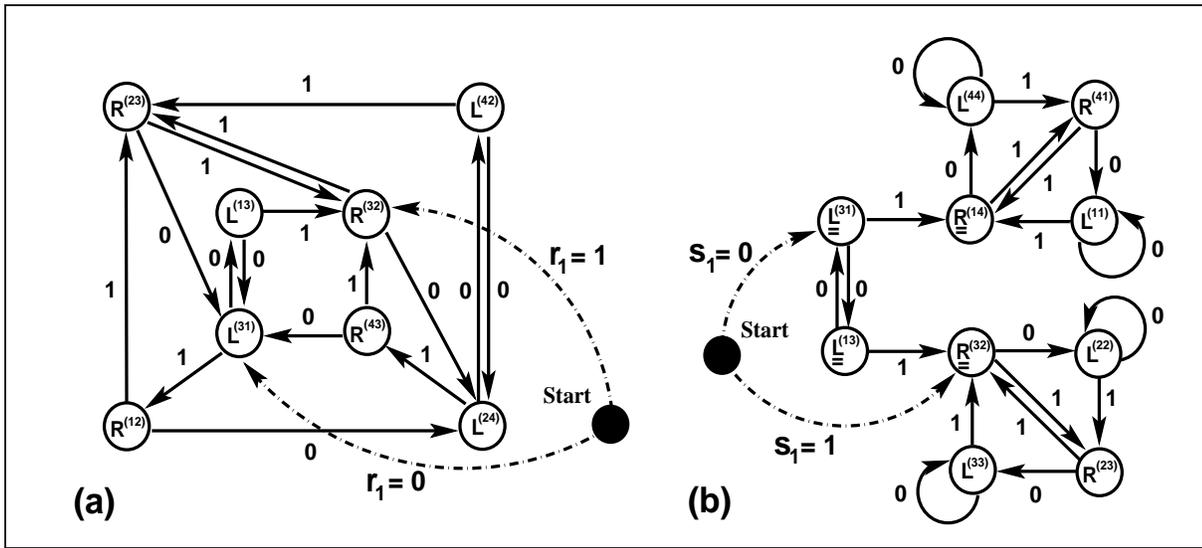


Abbildung III.22: Erzeugende Automaten  $\mathfrak{PA}(V_n, E_n)$  für den (a)  $\Phi$ -Graph bzw. (b)  $\Gamma$ -Graph der TM-Folge.

**Theorem III.10** Seien die folgenden Substitutionen

$$\mathcal{M}_{TM} : L \rightarrow LS, S \rightarrow SL$$

$$\mathcal{M}_L := \mathcal{J}_L \mathcal{M}_{TM} : L \rightarrow SL, S \rightarrow L^{-1} S L L, \quad \xrightarrow{\pi'} \quad \mathcal{S}_{\mathcal{M}_{TM}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{M}_S := \mathcal{J}_S \mathcal{M}_{TM} : L \rightarrow S^{-1} L S S, S \rightarrow L S$$

sowie folgende Iterationsvorschrift  $\Lambda_{TM}$  völlig analog zu (III.77) definiert, wobei aber nun die Vertizes gemäß

$$\begin{aligned} L^{(pq)} &:= (\sigma_p, \mathcal{M}_{TM}, \sigma_q), \quad p, q \in \{1, 2, 3, 4\}, \\ R^{(pq)} &:= (\sigma_p, \mathcal{J}_L \mathcal{M}_{TM}, \sigma_q), \quad (p, q) \in \{(1, 2), (3, 2)\}, \\ R^{(pq)} &:= (\sigma_p, \mathcal{J}_S \mathcal{M}_{TM}, \sigma_q), \quad (p, q) \in \{(2, 3), (4, 3)\}, \end{aligned}$$

definiert sind, und der zugehörige  $\Phi$ -Automat  $\mathfrak{PA}^\Phi(V_n, E_n)$  durch Abb. III.23(a) gegeben ist. Dann ist für alle  $n \in \mathbb{N}$  die Relation  $\mathfrak{T}_{TM}^\Phi(V_{n+1}, E_{n+1}) = \Lambda_{TM}(\mathfrak{T}_{TM}^\Phi(V_n, E_n))$ . Der  $\Phi$ -Graph  $\mathfrak{T}_{TM}^\Phi(V_n, E_n)$  (s. Abb. III.23) läßt sich somit rekursiv erzeugen:

$$\mathfrak{T}_{TM}^\Phi(V_n, E_n) = \Lambda_{TM}^{n-1} \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \xrightarrow{1} \beta_1 \\ \downarrow 0 \quad \uparrow 1 \\ \alpha_0 \end{array} \begin{array}{c} L^{(13)} \\ R^{(12)} \end{array} \right].$$

Das der Kodierung zugrundeliegende Zahlensystem ist ebenfalls das Binärsystem  $\{2^k \mid k \in \mathbb{N}\}$ , so daß für jedes  $\xi^{(n)} \leq |w^{(n)}|$ ,  $n \in \mathbb{N}$ ,

$$\mathfrak{T}^{\xi^{(n)}}(w^{(n)}(L, S)) = \left( \prod_k \mathcal{M}_{k, \cdot} \right)(L), \quad \xi^{(n)} = \sum_{k=0}^{n-1} r_{n-k} \cdot 2^k,$$

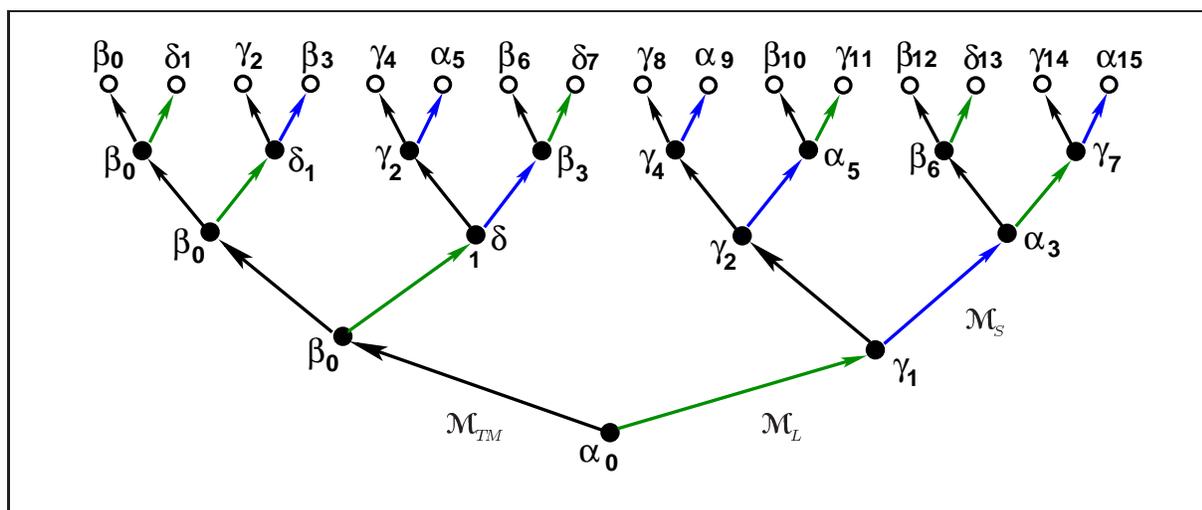


Abbildung III.23:  $\Phi$ –Graph für die TM–Kette mit den erzeugenden Morphismen  $\mathcal{M}_{TM}, \mathcal{M}_L, \mathcal{M}_S$ .

mit  $r_k \in \{0, 1\}$ , gilt. Die jeweilige Folge von Morphismen  $\prod_k \mathcal{M}_k$ , wird hierbei eindeutig durch denjenigen Pfad in  $\mathfrak{A}_{PD}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  (s. Abb. III.24) gegeben, der die Wurzel mit dem Vertex  $\sigma_{\xi^{(n)}} \in V_n$  verbindet. Hierbei ist die Beziehung zwischen der Folge  $(r_k)_k$  und den Morphismen  $\mathcal{M}_k \in \{\mathcal{M}_{TM}, \mathcal{M}_L, \mathcal{M}_S\}$  eindeutig durch den in Abb. III.23(a) dargestellten  $\Phi$ –Automaten gegeben. ♣

Man kann sich von der Gültigkeit dieses Theorems leicht durch vollständige Induktion überzeugen, worauf wir hier aber nicht näher eingehen wollen. Ist  $\xi^{(n)}$  gegeben, so liefert die Binärzerlegung unmittelbar die Zahlen  $(r_k)_k$ , woraus sich mit Hilfe des  $\Phi$ –Automaten in Abb. III.23(a) unmittelbar  $\prod_k \mathcal{M}_k$  ergibt. Man erkennt sofort, daß in diesem Fall die Kenntnis des vollen  $\Phi$ –Automaten  $\mathfrak{A}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  entscheidend ist, da  $r_k = 1$  nun  $\mathcal{M}_L$  und  $\mathcal{M}_S$  zugeordnet werden kann, die Beziehung zwischen den Werten von  $r_k$  und den Substitutionen  $\mathcal{M}_k$  ist nicht mehr ein–eindeutig, was sich als der Regelfall herausstellt. Angemerkt sei, daß sich der  $\Phi$ –Graph auch auf die verallgemeinerte Thue–Morse Folgen (Def. s. z.B. [Kea68, All99]) verallgemeinern läßt, was aber an dieser Stelle ebenfalls unterbleiben soll.

Dagegen wollen wir uns nun mit der Konstruktion des zugehörigen  $\Gamma$ –Graphen näher beschäftigen. Hierbei stößt man auf die Schwierigkeit, daß die TM–Substitution (singuläre Substitutionsmatrix) nicht “echt” invertierbar ist. Trotzdem läßt sich der zugehörige  $\Gamma$ –Graph konstruieren. Da allgemein (auch für nichtsinguläre Substitutionen) zwischen der die Kodierung bestimmenden Folge  $(r_k)_k$  und den gesuchten Substitutionen  $(\mathcal{M}_k)_k$  keine Eindeutigkeit besteht, wird man vermuten, daß die in Kapitel I.3 benutzte Strategie zur “Invertierung” des  $\Phi$ –Graphen, die bisher für alle betrachteten  $\Gamma$ –Graphen problemlos funktionierte, nicht mehr ohne weiteres zum Ziel führt. Man betrachte hierzu den in Abb. III.25(1) gezeichneten  $\Gamma$ –Graphen. Man sieht leicht, daß nur die  $\bullet$ –Vertizes den uns interessierenden Worten  $\mathfrak{T}^{\xi^{(n)}} \cdot \mathcal{M}_{TM}(L)$  entsprechen, während den  $\circ$ –Vertizes wieder den virtuellen Vertizes  $\sigma_N^\Gamma$  entsprechen. Es erweist sich als zweckmäßig die Konzeption des Graphen dahingehend zu erweitern, daß wir statt einem Vertex nun jeweils einen **Multi–Vertex**, statt einer einzelnen Kante jeweils ein **Kanten–Bündel** einführen. Für den hier betrachteten Fall ist ihre Konkretisierung in Abb. III.25(2,3) dargestellt. Dann gilt folgendes

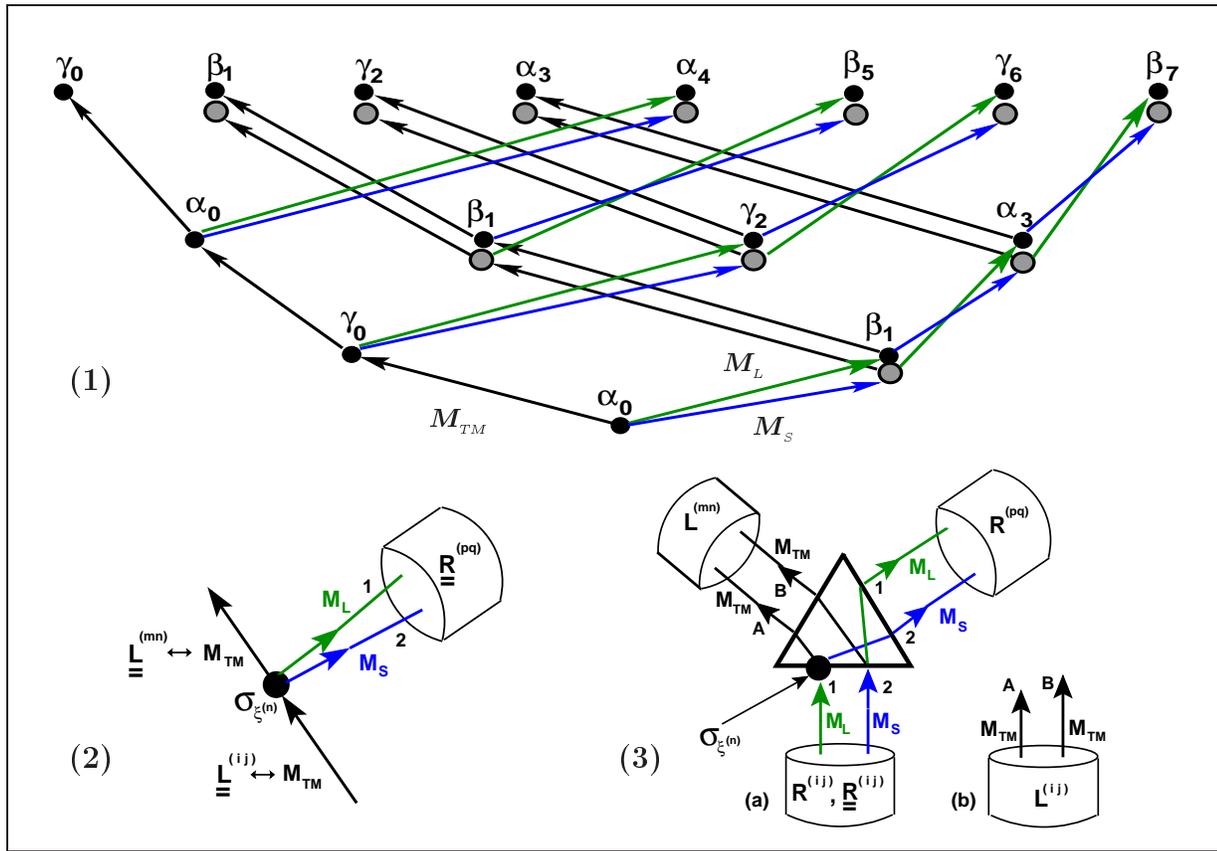
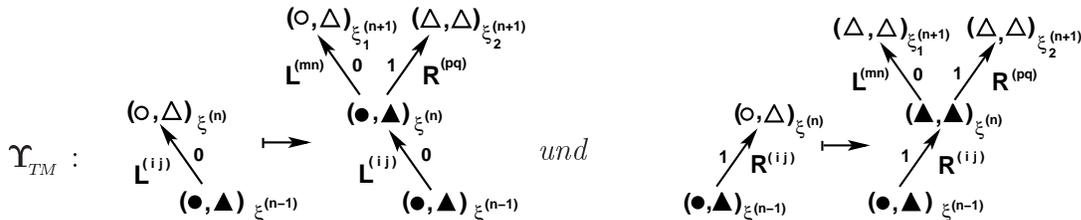


Abbildung III.24: (1)  $\Gamma$ -Graph für die Thue-Morse-Kette mit den erzeugenden NTs  $M_{TM}$ ,  $M_L$  und  $M_S$  bzw. den inversen Substitutionen  $M_{TM}^{-1}$ ,  $M_L^{-1}$  und  $M_S^{-1}$ .

**Theorem III.11** Sei<sup>55</sup>

$$\begin{aligned}
 L^{(pq)} &:= (\sigma_p, M_{TM}, \sigma_q), & (p, q) \in \{(1, 3), (3, 1)\} \\
 L^{(pq)} &:= (\sigma_p, (M_{TM}, M_{TM}), \sigma_q), & p \in \{1, 2, 3, 4\} \\
 R^{(pq)} &:= (\sigma_p, (M_L, M_S), \sigma_q), & (p, q) \in \{(1, 4), (2, 3), (3, 2), (4, 1)\}
 \end{aligned}$$

und die Iterationsvorschrift  $\Upsilon_{TM}$  analog zu oben gegeben:



mit den den Vertex-Kanten Tripel  $\bullet \rightarrow \bullet$  sowie den (Multi-)Vertex-Kantenbündel Tripel  $\bullet \rightarrow \blacktriangle$  und  $\blacktriangle \rightarrow \blacktriangle$  usw.. Hierbei ist  $\bullet$  (bzw.  $\bullet$ ) der in Abb. III.25(2) dargestellte Vertex und  $\blacktriangle$  (bzw.  $\Delta$ ) der Multi-Vertex aus Abb. III.25(3). Dann ist  $\mathfrak{T}^\Gamma(V_{n+1}, E_{n+1}) = \Upsilon_{TM}(\mathfrak{T}^\Gamma(V_n, E_n))$ . Der Graph  $\mathfrak{T}^\Gamma(V_n, E_n)$  (s. Abb. III.25) läßt sich somit rekursiv erzeugen:

<sup>55</sup>Auch hier reicht es wieder, sich auf die ersten Komponenten der Vertizes  $\sigma^\Gamma$  zu beschränken.

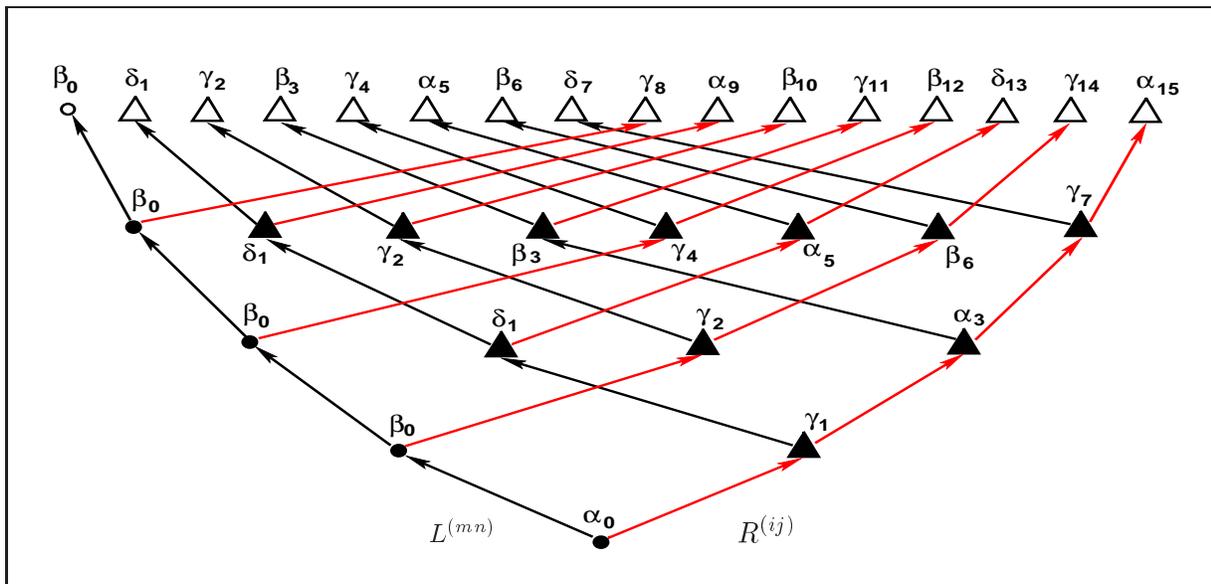


Abbildung III.25:  $\Gamma$ -Graph für die Thue–Morse–Kette

$$\mathfrak{A}_{TM}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n) = \Upsilon_{TM}^{n-1} \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \xrightarrow{0} \beta_1 \\ \downarrow L^{(13)} \quad \downarrow R^{(12)} \\ \alpha_0 \end{array} \right].$$

Das der Kodierung zugrunde liegende Zahlensystem ist ebenfalls das Binärsystem  $\{2^k \mid k \in \mathbb{N}\}$ , so daß für jedes  $\xi^{(n)} \leq |w^{(n)}|$ ,  $n \in \mathbb{N}$ ,

$$\mathfrak{J}^{\xi^{(n)}} \cdot M_{TM}^n(L) = \left( \prod_{k=1}^n M_{k,\cdot} \right)(L), \quad \xi^{(n)} = \sum_{k=1}^n s_k \cdot 2^{k-1},$$

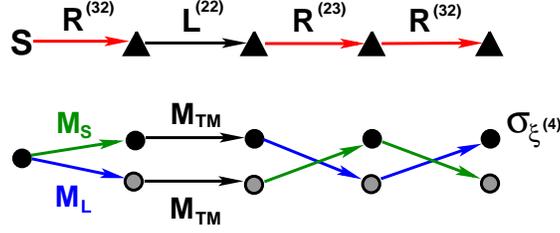
mit  $s_k \in \{0, 1\}$ , gilt. Die Beziehung zwischen der Folge  $(s_k)_k$  und den zu den Tupeln von NTs gehörenden Kanten–Bündeln ist eindeutig durch den in Abb. III.22(b) dargestellten  $\Gamma$ -Automaten  $\mathfrak{A}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  gegeben. Aus der entsprechenden Folge von Kanten–Bündel ergibt sich die jeweilige Folge von NTs  $\prod_k M_{k,\cdot}$  eindeutig durch denjenigen Kantenzug, welcher den Ursprung mit dem Vertex  $(s. \text{ Abb. III.24}(2,3)) \sigma_{\xi^{(n)}} \in V_n$  verbindet.

☞ **Beweis:** Vollständige Induktion. ♣

Man beachte, daß nun beliebig lange, ausschließlich über virtuelle Vertizes verlaufende Kantenzüge auftreten können, die zwei gewöhnliche Vertizes im  $\Gamma$ -Graphen  $\mathfrak{A}_{TM}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  miteinander verbinden (vgl. Abb. III.25).

☞ Wir wollen die Aussage des vorangegangenen Theorems an einem Beispiel verdeutlichen. Sei  $\xi^{(4)} = 13$ . Die zugehörige Binärzerlegung ist  $13 = 1 \cdot 2^0 + 0 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^3$ , so daß man  $(s_1, s_2, s_3, s_4) = (1, 0, 1, 1)$  findet. Damit liest man von dem  $\Gamma$ -Automaten in Abb. III.22(b) die Folge von Kanten–Bündel ab: Start =  $S \rightarrow R^{(32)} \rightarrow L^{(22)} \rightarrow R^{(23)} \rightarrow R^{(32)}$ . Dem entspricht die Folge von NT-Tupeln: Start =  $S \rightarrow (M_L, M_S) \rightarrow (M_{TM}, M_{TM}) \rightarrow$

$(M_S, M_L \rightarrow (M_L, M_S):$



Hierbei haben wir stur die Multi–Vertizes vermöge den Definitionen in Abb. III.24(2,3) in Einzelvertizes zerlegt.

Nachdem die Struktur des  $\Gamma$ –Graphen auch für die TM–Folge geklärt ist, verbleibt noch anzumerken, daß der Deflationssubstitution  $\overline{\mathcal{M}}_{TM}^{-1} : LS \rightarrow L, SL \rightarrow S$  die Parametertransformation  ${}^R\overline{\mathcal{M}}_{TM}^{-1}$

$$\begin{aligned} \epsilon_\alpha |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= \epsilon_\gamma + \frac{t_L^2 + t_S^2}{z - \epsilon_\beta}, & \epsilon_\beta |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= \epsilon_\delta + \frac{t_S^2}{z - \epsilon_\beta} + \frac{t_S^2}{z - \epsilon_\gamma}, \\ \epsilon_\gamma |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= \epsilon_\alpha + \frac{t_L^2}{z - \epsilon_\beta} + \frac{t_L^2}{z - \epsilon_\gamma}, & \epsilon_\delta |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= \epsilon_\beta + \frac{t_L^2 + t_S^2}{z - \epsilon_\gamma} \end{aligned}$$

und

$$t_L |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} = \frac{t_L t_S}{z - \epsilon_\beta}, \quad t_S |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} = \frac{t_L t_S}{z - \epsilon_\gamma}$$

entspricht. Man zeigt leicht, daß die Transformation  $(\vec{\epsilon}, \vec{t}) \mapsto (\mathbf{x}, \mathbf{y})$  auf die neue DT

$$x_\alpha |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} = x_{\alpha'}, \quad x_\delta |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} = x_{\alpha'} \quad \text{und} \quad x_{\alpha'} |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} = x_{\alpha'} x_\alpha x_\delta - x_\alpha^2 - x_\delta^2 + 2$$

und

$$\begin{aligned} y_L |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= y_\beta, & y_S |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= y_\gamma, \\ y_\beta |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= y_L (x_\delta x_{\alpha'} - x_\alpha) + y_S x_\delta, & y_\gamma |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} &= y_S (x_\alpha x_{\alpha'} - x_\delta) + y_L x_\alpha \end{aligned}$$

führt, wobei die Parameter  $x_\alpha, \dots, y_\gamma$  aus (III.50) und (III.53) eingeführt wurden. Bei der Herleitung dieser Beziehungen wurde von der Relation  $\epsilon_\delta = \epsilon_\beta + \epsilon_\gamma - \epsilon_\alpha$  (s. (III.29)) Gebrauch gemacht. Ohne die Berücksichtigung dieser Relation läßt sich aus dem gekoppelten dynamische System  $(\mathbf{x}', \mathbf{y}') = {}^R\overline{\mathcal{M}}_{TM}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  keine “reine” Spur–Abbildung (d.h. ein diskretes dynamisches System der Form  $\mathbf{x}' = {}^R\overline{\mathcal{M}}_{TM}^{-1}(\mathbf{x})$ ) finden. Man hat im letzten Fall die Parameter von  $\mathbf{x}$  zusammen mit den von  $\mathbf{y}$  zu betrachten. Es ist sehr leicht, die entsprechenden Rekursionsbeziehungen aus (III.79) und (III.77) zu gewinnen, so daß wir hier auf deren Anschreiben leichten Herzens verzichten können (vgl. z.B. [Gho98]).

Aus (III.4) ist ersichtlich, daß die DT  ${}^R\overline{\mathcal{M}}_{TM}^{-1}$  nicht invertierbar ist, was aufgrund des singulären Charakters der Substitution  $\mathcal{M}_{TM}$  zu erwarten war. Wegen  $x_\alpha |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}} = x_\delta |_{\mathcal{M}_{TM}^{-1}}$  geht (III.4) über in

$$x_\alpha |_{\mathcal{M}_{TM}^{-n}} = x_\alpha^2 |_{\mathcal{M}_{TM}^{-n+2}} (x_\alpha |_{\mathcal{M}_{TM}^{-n+1}} - 2) + 2, \quad n \geq 2.$$

Dies kann man als die (z.B. in [Oh99] gesuchte) Verallgemeinerung der in [Axe86] für das Diagonal–Modell (sämtliche Hopping–Elemente  $t_\mu = 1$ ) gefundenen Spur–Abbildung auf das allgemeine Modell (Platz–Energien und Hopping–Elemente (fast) frei wählbar) auffassen.

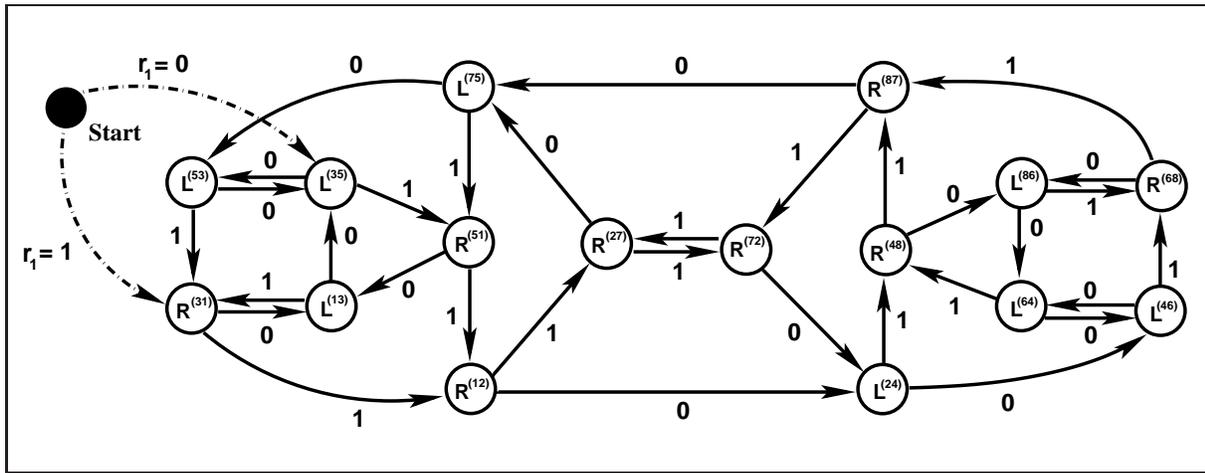


Abbildung III.26: Projizierter  $\Phi$ -Automat  $\mathfrak{P}\mathfrak{A}^\Phi(V_n, E_n)$  für den  $\Phi$ -Graphen der Rudin–Shapiro–Folge

### III.5 Rudin–Shapiro Folge

Ausgangspunkt unserer Betrachtungen über die in (I.40), S. 20, definierten Approximanten  $w^{(n)} = \mathcal{M}_{RS}^n(A)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , der **Rudin–Shapiro Folge** ist wieder die Konstruktion des zu den Orbits  $\mathcal{O}[w^{(n)}]$  gehörenden hierarchischen Graphen. Sei

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \sigma^{(AB)}, \sigma_2 = \sigma^{(AC)}, \sigma_3 = \sigma^{(BA)}, \sigma_4 = \sigma^{(BD)}, \\ \sigma_5 &= \sigma^{(CA)}, \sigma_6 = \sigma^{(CD)}, \sigma_7 = \sigma^{(DB)}, \sigma_8 = \sigma^{(DC)}. \end{aligned}$$

Wir setzen

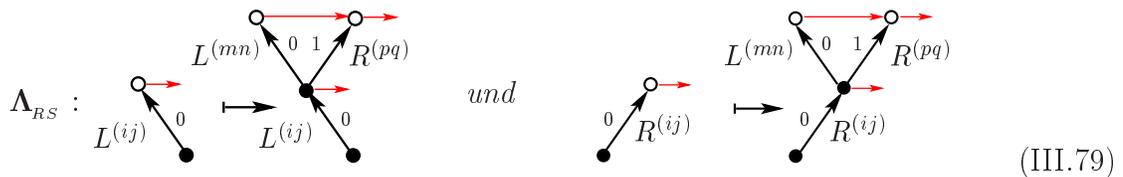
$$\begin{aligned} L^{(pq)} &:= (\sigma_p, \mathcal{M}_{RS}, \sigma_q), \quad p, q = 1, \dots, 8, \\ R^{(pq)} &:= (\sigma_p, \mathcal{J}_A \mathcal{M}_{RS}, \sigma_q), \quad (p, q) \in \{(1, 2), (3, 1), (5, 1), (7, 2)\}, \\ R^{(pq)} &:= (\sigma_p, \mathcal{J}_D \mathcal{M}_{RS}, \sigma_q), \quad (p, q) \in \{(2, 7), (4, 8), (6, 8), (8, 7)\}. \end{aligned}$$

Der hierarchische  $\Phi$ -Graph ergibt sich dann aus folgendem

**Theorem III.12** Seien die Substitutionen  $\mathcal{M}'_k \in \{\mathcal{M}_{RS}, \mathcal{M}_A, \mathcal{M}_D\}$  gegeben, wobei<sup>56</sup>

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{RS} &: \quad A \rightarrow AB, B \rightarrow AC, C \rightarrow DB, D \rightarrow DC \\ \mathcal{M}_A &:= \mathcal{J}_A \mathcal{M}_{RS} : \quad A \rightarrow BA, B \rightarrow CA, C \rightarrow A^{-1}DBA, D \rightarrow A^{-1}DCA, \\ \mathcal{M}_D &:= \mathcal{J}_D \mathcal{M}_{RS} : \quad A \rightarrow D^{-1}ABD, B \rightarrow D^{-1}ACD, C \rightarrow BD, D \rightarrow CD. \end{aligned}$$

Die Super-Inflation  $\Lambda_{RS}$  ist gegeben durch



<sup>56</sup>Wieder gehört zu allen Substitutionen  $\mathcal{M}_{RS}, \mathcal{M}_A, \mathcal{M}_D$  dieselbe Substitutionsmatrix  $S_{\mathcal{M}_{RS}}$ .

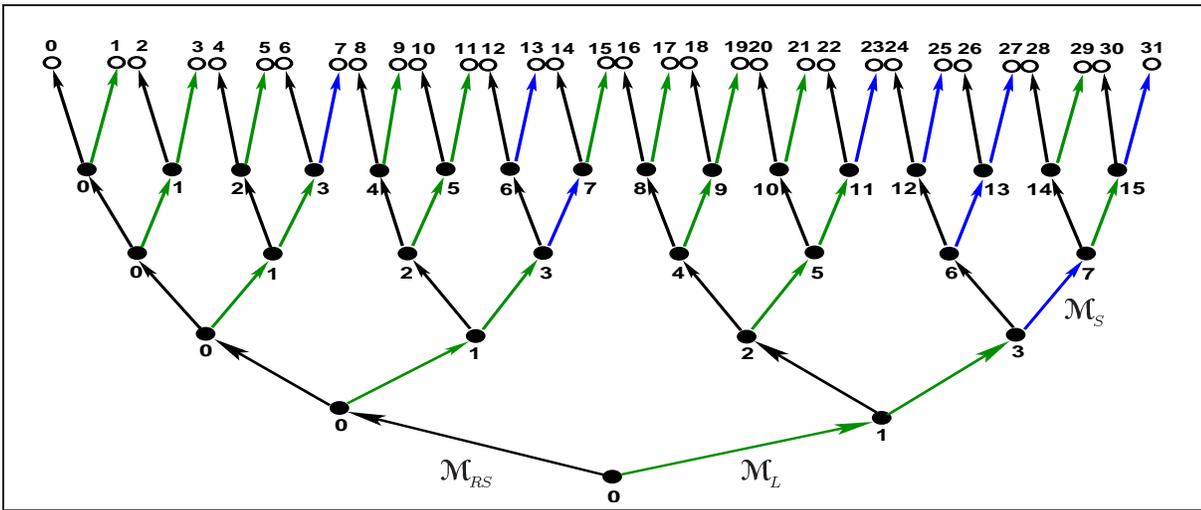


Abbildung III.27:  $\Phi$ –Graph für den Orbit  $\mathcal{O}[w^{(5)}(A, B, C, D)]$  zum Approximanten der Rudin–Shapiro–Kette  $w^{(5)}(A, B, C, D) = \mathcal{M}_{RS}^5(A)$ , mit den erzeugenden Morphismen  $\mathcal{M}_{PD}$ ,  $\mathcal{M}_L$  und  $\mathcal{M}_S$ .

wobei alle Vertex–Kanten–Tripel  $L^{(pq)}, R^{(pq)}$  der Form  $\bullet \rightarrow \bullet$  unverändert bleiben sollen. Der erzeugende projizierte  $\Phi$ –Automat  $\mathfrak{PA}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  ist in Abb. III.26 dargestellt. Damit läßt sich der zu  $\mathcal{O}[w^{(n)}]$  gehörende hierarchische Graph  $\mathfrak{T}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  rekursiv erzeugen  $\mathfrak{T}^\Phi(V_{n+1}, \mathbf{E}_{n+1}) = \Lambda_{RS}(\mathfrak{T}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n))$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ , so daß gilt

$$\mathfrak{T}_{RS}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n) = \Lambda_{PD}^n \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \xrightarrow{\quad} \beta_1 \\ \swarrow \quad \searrow \\ \alpha_0 \end{array} \right].$$

Das der Kodierung zugrunde liegende Zahlensystem ist wieder das Binärsystem  $\{2^k \mid k \in \mathbb{N}\}$ , so daß für jedes  $\xi^{(n)} \leq |w^{(n)}|$ ,  $n \in \mathbb{N}$ ,

$$\mathfrak{T}^{\xi^{(n)}} \cdot \mathcal{M}_{RS}^n(A) = \left( \prod_k \mathcal{M}_{k, \cdot} \right)(A), \quad \xi^{(n)} = \sum_{k=1}^n r_k \cdot 2^{n-k}, \quad (\text{III.80})$$

mit  $r_k \in \{0, 1\}$ , gilt. Die jeweilige Folge von Morphismen  $\prod_k \mathcal{M}'_k$  wird hierbei eindeutig durch denjenigen Pfad in  $\mathfrak{T}_{RS}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  gegeben, der die Wurzel mit dem Vertex  $\sigma_{\xi^{(n)}} \in V_n$  verbindet.

☞ **Beweis:** Vollständige Induktion. ♣

Analog zur Vorgehensweise in Kapitel III.4 läßt sich durch Vorgabe von  $\xi^{(n)}$  sofort wieder die Lösung  $(r_1, \dots, r_n)$  von (III.80) finden. Geht man damit in den in Abb. III.26 dargestellten projizierten  $\Phi$ –Graphen  $\mathfrak{PA}^\Phi(V_n, \mathbf{E}_n)$  ein, so ergibt sich unmittelbar die gesuchte Abfolge von Substitutionen  $\mathcal{M}_{k, \cdot} \in \{\mathcal{M}_{RS}, \mathcal{M}_A\}$  und  $\mathcal{M}_D$ , für die (III.80) erfüllt wird.

Bei der Konstruktion des zugehörigen  $\Gamma$ –Graphen geht man völlig analog vor wie bei der Konstruktion des  $\Gamma$ –Graphen für die TM–Folge im vorangegangenen Abschnitt. Die entsprechenden Multi–Vertizes und den zugehörigen projizierten  $\Gamma$ –Automaten  $\mathfrak{PA}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$



findet man in Abb. III.28 dargestellt. Hat man eine Binärdarstellung  $(s_1, s_2, \dots, s_n)$  einer gegebenen Zahl  $\xi^{(n)}$  gemäß den oben gemachten Ausführungen bestimmt, geht man hiermit in  $\mathfrak{A}^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  ein und erhält wieder die gesuchte Folge von NTs, bzw. RTs.

*So you see!  
There's no end  
To the things you might know,  
Depending how far beyond Zebra you go!*  
— Dr. Seuss<sup>57</sup>

---

<sup>57</sup>Aus “*On Beyond Zebra*”, Random House, Inc. (1955). Zitiert nach [Her73, S. 331].

# Anhang III.A

## Strukturbeschreibung zu $\Phi_2(\mathbb{F}(\mathcal{A}_2))$ und $\mathcal{RG}(\Phi_2)$

Im folgenden Anhang wollen wir sämtlichen Detailfragen nachgehen, welchen wir in Kapitel **III.2** geflissentlich aus dem Wege gingen. Ausgangspunkt aller folgenden Überlegungen wird die in der Behauptung III.1 eingeführte Darstellung der Renormierungsgruppe  $\mathcal{RG}(\Phi_2)$  sowie die in Theorem III.1 gefundenen Klassifikation der Elemente von  $\Phi_2^+$  sein. In einem ersten Abschnitt soll das, der Definition der uns hier interessierenden hierarchischen Graphen zugrunde liegende, Relationensystem hergeleitet werden. Ihm folgt eine eingehende Untersuchung des gefundenen Relationensystems, sowie die Einführung spezieller Subgraphen von  $\mathfrak{G}^\Phi(\Phi_2, \Phi_2 \times \Phi_2)$ . Im darauf folgenden Abschnitt verallgemeinern wir diese Gedanken auf entsprechende „geliftete“ Subgraphen von  $\mathfrak{G}^\Phi(\Phi_2, \Phi_2 \times \Phi_2)$ . Abschließen wollen wir diesen Anhang mit der Übertragung der gefundenen Resultate auf die zugehörigen  $\Gamma$ -Graphen  $\mathfrak{G}^\Gamma(\mathcal{RG}(\Phi_2), \mathcal{RG}(\Phi_2) \times \mathcal{RG}(\Phi_2))$ . Dabei sollte das Ziel nicht aus den Augen verloren werden, daß wir hier die theoretischen Grundlagen zur Lösung des *Kodierungsproblem*es erarbeiten wollen. Damit schaffen wir die formale Grundlage für eine Vielzahl zum Thema der Ortsraum-Reskalierung eindimensionaler linearer Ketten vorliegenden Arbeiten.

### III.A.1 Verallgemeinerte Ortsraum-Dezimierung und definierende Relationen

Wir wollen mit einer Erweiterung des Dezimierungsverfahrens aus Kapitel **III.1** auf die Nicht-Diagonal-Elemente der Green'schen Funktion beginnen. Zu diesem Zweck soll der Parameterraum, auf dem die Dezimierungstransformationen (DTs) als Diffeomorphismen wirken, um zwei Parameter  $\xi$  und  $\eta$  erweitert werden. Betrachten wir zunächst wieder die Auswirkungen der Eichtransformationen  $\rho$  auf den erweiterten Parametersatz und betten den Parameterraum  $\mathbf{\Pi}_{\epsilon,t}$  in den um zwei Dimensionen erweiterten Raum  $\mathbf{\Pi}_\pi = \{(\vec{x}|\eta, \xi) | (\vec{x}|\eta, \xi) \in \mathbb{C}^{\Lambda(\Lambda+1)} \times \mathbb{C}^2\}$  ein. Wir wollen uns den wesentlichen Schritt anhand eines Beispiels klar machen. Durch Eliminieren von  $G_{5\nu}$  und  $G_{4\nu}$  in Abb. III.2, S. 129, erhalten wir mit (III.27)

$$\xi'_3 = -\frac{t_3}{t_4}\xi_5 + \xi_3, \quad \xi'_6 = \xi_6 + \frac{\sigma_4}{t_4}\xi_5 + \xi_4 \quad \text{und} \quad \xi'_\mu = \xi_\mu \quad \text{sonst,}$$

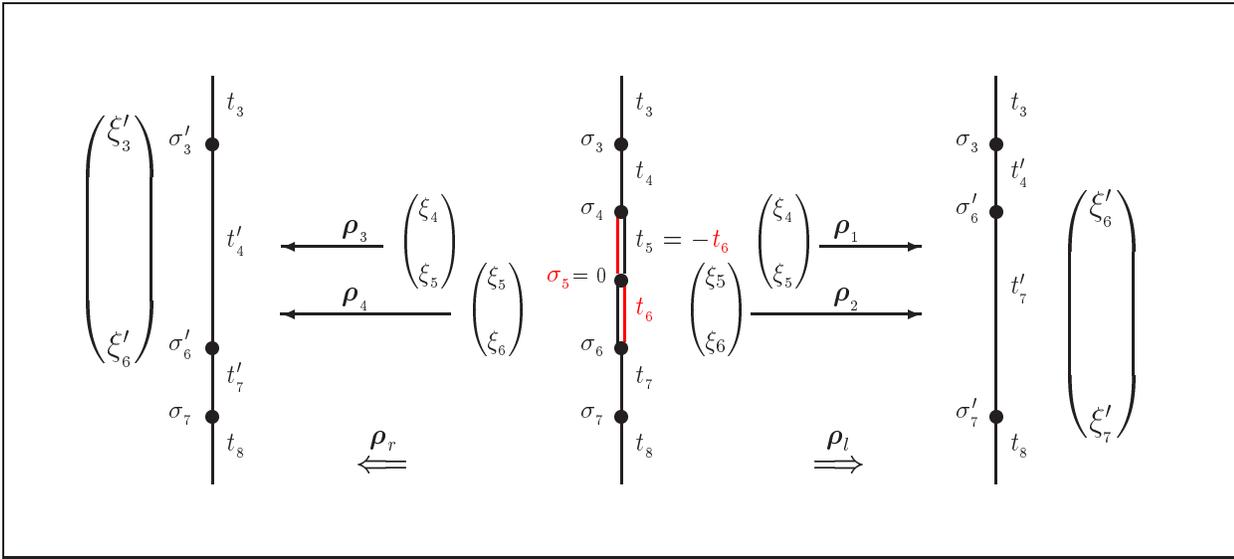


Abbildung III.A.1: Mögliche Realisationen der Reduktionsprozesse  $\rho_k$ . Die zugehörigen *inversen* Reduktionsprozesse  $\rho_k^{-1}$  erhält man durch Richtungsumkehr der entsprechenden Pfeile.

oder durch Eliminieren von  $G_{5\nu}$  und  $G_{6\nu}$

$$\xi'_6 = \xi_6 - \frac{\sigma_6}{t_4} \xi_5 + \xi_4, \quad \xi'_7 = \xi_7 + \frac{t_6}{t_4} \xi_6 \quad \text{und} \quad \xi'_\mu = \xi_\mu \quad \text{sonst}.$$

Man kann eine DT  ${}^R\mathbf{M}$  immer so wählen, daß *maximal zwei aufeinanderfolgende* Inhomogenitäten  $\xi = \xi_\tau, \eta = \xi_{\tau+1}$  von Null verschieden sind. Wir finden (siehe Abb. III.A.1)

$$\begin{pmatrix} \eta' \\ \xi' \end{pmatrix} = \rho_k \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix},$$

wobei die Matrizen  $\rho_k$  gegeben sind durch  $\rho_0 = \mathbb{1}$ ,

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1 & \frac{z - \epsilon \sigma_4}{t_4} \\ 0 & -\frac{t_3}{t_4} \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} \frac{z - \epsilon \sigma_4}{t_4} & 1 \\ -\frac{t_3}{t_4} & 0 \end{pmatrix},$$

und

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{t_6}{t_5} \\ 1 & \frac{z - \epsilon \sigma_6}{t_5} \end{pmatrix}, \quad \rho_4 = \begin{pmatrix} -\frac{t_6}{t_5} & 0 \\ \frac{z - \epsilon \sigma_6}{t_5} & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{III.A.1})$$

Es ist naheliegend, die Diffeomorphismen  ${}^R\mathcal{P}, {}^R\mathcal{Q}$  und  ${}^R\mathcal{O}$  wie folgt zu verallgemeinern. Sei  $\vec{\pi} = (\vec{x}|\eta, \xi)$ , dann definieren wir

$${}^R\mathcal{P}(\vec{\pi}) := (\vec{x}|_{\mathcal{P}}|\eta, \xi), \quad {}^R\mathcal{Q}(\vec{\pi}) := (\vec{x}|_{\mathcal{Q}}|\eta, \xi) \quad \text{und} \quad {}^R\mathcal{O}(\vec{\pi}) := (\vec{x}|_{\mathcal{O}}|\eta, \xi). \quad (\text{III.A.2})$$

Die zu  $\mathbf{u}^{\pm 1}$  gehörenden verallgemeinerten RTs  ${}^R\mathbf{u}_k$  erweisen sich dagegen als etwas komplizierter. Ausgehend von der Zerlegung (III.25), aus S. 129, bestimmt man, analog zu der für

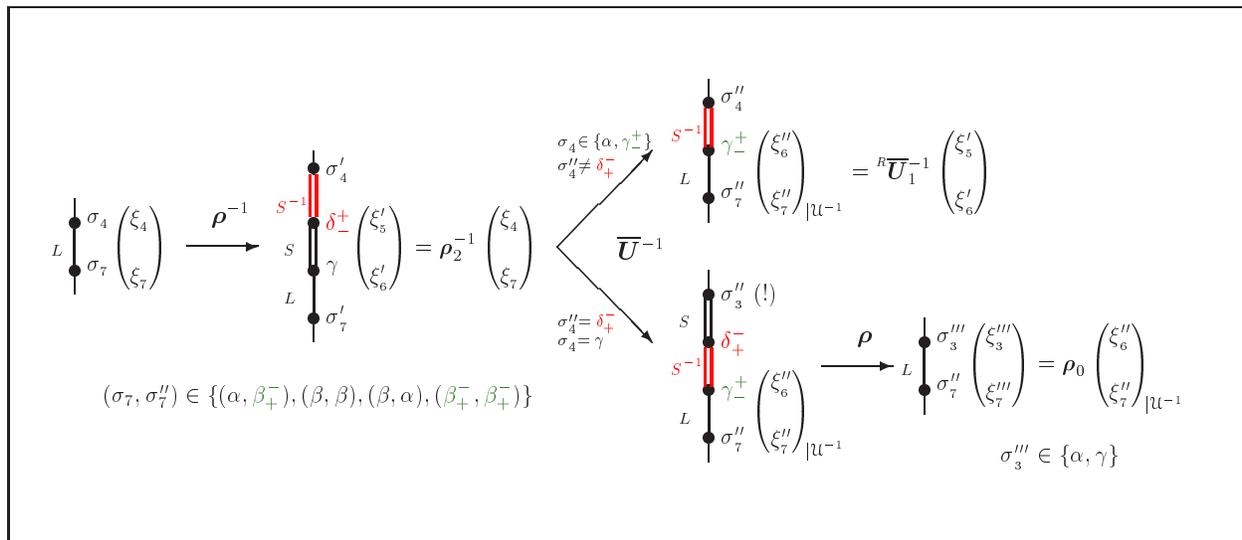


Abbildung III.A.2: Die Substitution  $\mathbf{u}^{-1}$  induziert eine Abfolge von Transformationen  $\rho^{\pm 1}$ ,  ${}^R\overline{\mathbf{U}}_k^{-1}$  der Parameter. Hier ist die prinzipielle Vorgehensweise bei der Herleitung von  ${}^R\mathbf{u}_2^{-1}$  skizziert. Man beachte, daß  ${}^R\overline{\mathbf{U}}_2^{-1} = \rho_{0|\mathbf{u}^{-1}} {}^R\overline{\mathbf{U}}_1^{-1} \rho_2^{-1}$ .

${}^R\mathbf{u}_2^{-1}$  in Abb. III.A.2 exemplarisch graphisch skizzierten Auswertung, sämtliche  ${}^R\mathbf{u}_k^{\pm 1}$ . Das Resultat ist

$$\mathbf{u}^{-1} = \rho \overline{\mathbf{U}}^{-1} \rho^{-1} \quad \longrightarrow \quad {}^R\mathbf{u}_k^{-1}(\vec{\pi}) = \left( \vec{x}_{|\mathbf{u}^{-1}} \mid {}^R\overline{\mathbf{U}}_k^{-1} \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix} \right),$$

und

$$\mathbf{u} = \rho \overline{\mathbf{U}} \rho^{-1} \quad \longrightarrow \quad {}^R\mathbf{u}_k(\vec{\pi}) = \left( \vec{x}_{|\mathbf{u}} \mid {}^R\overline{\mathbf{U}}_{k|\mathbf{u}} \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix} \right),$$

mit  $k = 0, \dots, 6$ , wobei die Matrizen  ${}^R\overline{\mathbf{U}}_k^{-1}$  wie folgt gegeben sind  ${}^R\overline{\mathbf{U}}_0^{-1} = \mathbb{I}$ ,

$${}^R\overline{\mathbf{U}}_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{t_S}{z - \epsilon_\beta} \\ 0 & \frac{t_L}{z - \epsilon_\beta} \end{pmatrix}, \quad {}^R\overline{\mathbf{U}}_2^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{t_S}{z - \epsilon_\beta} & 0 \\ \frac{t_L}{z - \epsilon_\beta} & 1 \end{pmatrix},$$

$${}^R\overline{\mathbf{U}}_3^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{t_L}{z - \epsilon_\beta} \\ 0 & \frac{t_S}{z - \epsilon_\beta} \end{pmatrix}, \quad {}^R\overline{\mathbf{U}}_4^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{t_L}{z - \epsilon_\beta} & 0 \\ \frac{t_S}{z - \epsilon_\beta} & 1 \end{pmatrix},$$

und

$${}^R\overline{\mathbf{U}}_5^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{z - \epsilon_\beta}{t_L} \\ 0 & -\frac{t_S}{t_L} \end{pmatrix}, \quad {}^R\overline{\mathbf{U}}_6^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{t_S}{t_L} & 0 \\ \frac{z - \epsilon_\beta}{t_L} & 1 \end{pmatrix}.$$

Es ist leicht einzusehen, daß sich die Anzahl der zunächst unabhängig eingeführten “elementaren” DTs  ${}^R\mathbf{u}_k$ ,  $k = 1, \dots, 6$ , verringern läßt, wenn man beachtet, daß folgende Relationen

gelten:

$${}^R\mathbf{u}_2 = {}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}_4^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}_4{}^R\mathcal{O} \quad (\text{III.A.3})$$

$${}^R\mathbf{u}_4 = {}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}_1^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}_1{}^R\mathcal{O} \quad (\text{III.A.4})$$

$${}^R\mathbf{u}_5 = {}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathbf{u}_1^{-1}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P} \quad (\text{III.A.5})$$

$${}^R\mathbf{u}_6 = {}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathbf{u}_4^{-1}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}. \quad (\text{III.A.6})$$

Eingehende Untersuchungen unter Zuhilfenahme des Computeralgebraprogramms MAPLE legen die folgende Behauptungen nahe:

**Behauptung III.A.1** Die Generatoren  ${}^R\mathbf{u}_0$ ,  ${}^R\mathbf{u}_1$  und  ${}^R\mathbf{u}_4$  generieren eine freie Gruppe vom Rang drei, d.h. es gilt

$$\langle {}^R\mathbf{u}_0, {}^R\mathbf{u}_1, {}^R\mathbf{u}_4 \rangle \cong \mathbf{F}_3. \quad \clubsuit \quad (\text{III.A.7})$$

Somit kommen wir zu dem Ergebnis, daß der Substitution  $\mathbf{u}$  drei unabhängige DTs  ${}^R\mathbf{u}_k$ ,  $k = 0, 1, 4$ , zugeordnet werden müssen, will man auch die durch die Parameter  $\xi, \eta$  mitbestimmten Nichtdiagonalelemente der Green'schen Funktion  $G_{\mu\nu}(z)$  nach der Dezimierungsmethode berechnen.

♣ ► Aus Abb. III.A.2 entnimmt man, daß  ${}^R\mathbf{u}_2^{-1}$  die Parameter  $(\eta, \xi)$  nach dem Schema

$$\begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix}_L \begin{array}{c} \bullet \\ \sigma_1 \\ \bullet \\ \sigma_2 \end{array} \mapsto \begin{array}{c} \bullet \\ \sigma'_1 \\ \dots \\ \sigma'_2 \end{array} \begin{pmatrix} \eta' \\ \xi' \end{pmatrix}_L = {}^R\overline{\mathcal{U}}_2^{-1} \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix} \Leftrightarrow \textcircled{L} \xrightarrow[\text{(2)}]{{}^R\mathbf{u}_2^{-1}} \textcircled{L} \quad (\text{III.A.8})$$

abbildet. Dabei steht das linke „L“ für das von den Symbolen  $\sigma_1$  und  $\sigma_2$  eingeschlossene „L“ der Ausgangskette und das rechte „L“ für das entsprechende der transformierten Kette. Man beachte, aus sich aus Abb. III.A.3 ergibt, daß diese Abbildung *unabhängig* von den unmittelbar vor bzw. nach den besagten Symbolen „L“ auftretenden Symbolen  $y_p \in \{L, S, S^{-1}, x_k\}$  ist. Dies gilt analog für alle  ${}^R\mathbf{u}_k^{\pm 1}$ ,  $k = 0, \dots, 6$ , so daß der „Graph“ in Abb. III.A.3 tatsächlich eindeutig definiert ist. In Klammern schreiben wir, welcher von den zu den Parametern  $\eta$  und  $\xi$  gehörenden Vertizes, bei dieser Transformation *nicht* eliminiert wurde ( $\sigma_1$  und/oder  $\sigma_2$ , hier  $\sigma_2$ ). In Abb. III.A.3 haben wir sämtliche der auftretenden Schemata zusammengefaßt. Dabei ist zu beachten, daß dieser „Graph“ *keine* Relationen zwischen den verschiedenen RTs  ${}^R\mathbf{u}_k^{\pm 1}$  selbst beschreibt! Diese Zusammenhänge spielen bei der konkreten Konstruktion hierarchischer Graphen zu Bestimmung der Parameter  $\xi$  und  $\eta$  eine wichtige Rolle.

Wir wollen noch anfügen, daß sich via folgender Tietze–Transformation die DT  ${}^R\mathcal{O}$  durch

$${}^R\mathcal{O} = {}^R\mathbf{u}_0{}^R\mathcal{P}{}^R\mathbf{u}_0^{-1}{}^R\mathcal{P}{}^R\mathcal{A}_0{}^R\mathcal{P}$$

aus dem Relationensystem von  $\mathcal{RG}(\mathbf{Hom}_\Lambda)$  eliminieren läßt, wenn wir gleichzeitig die DTs

$${}^R\mathcal{A}_k = {}^R\mathcal{O}{}^R\mathbf{u}_k^{-1}{}^R\mathcal{O}, \quad k = 0, 1, 4, \quad (\text{III.A.9})$$

eingeführen. Hierbei ist  $\mathcal{RG}(\mathbf{Hom}_\Lambda)$  die Menge — tatsächlich ein Monoid — aller durch die Substitutionen aus  $\mathbf{Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_\Lambda))$  induzierten DTs  ${}^R\mathcal{M}$  auf die wir nun zu sprechen kommen wollen. In (III.22)f., S. 128, haben wir die allgemeinen, durch die Deflation  ${}^R\overline{\mathcal{M}}^{-1}$

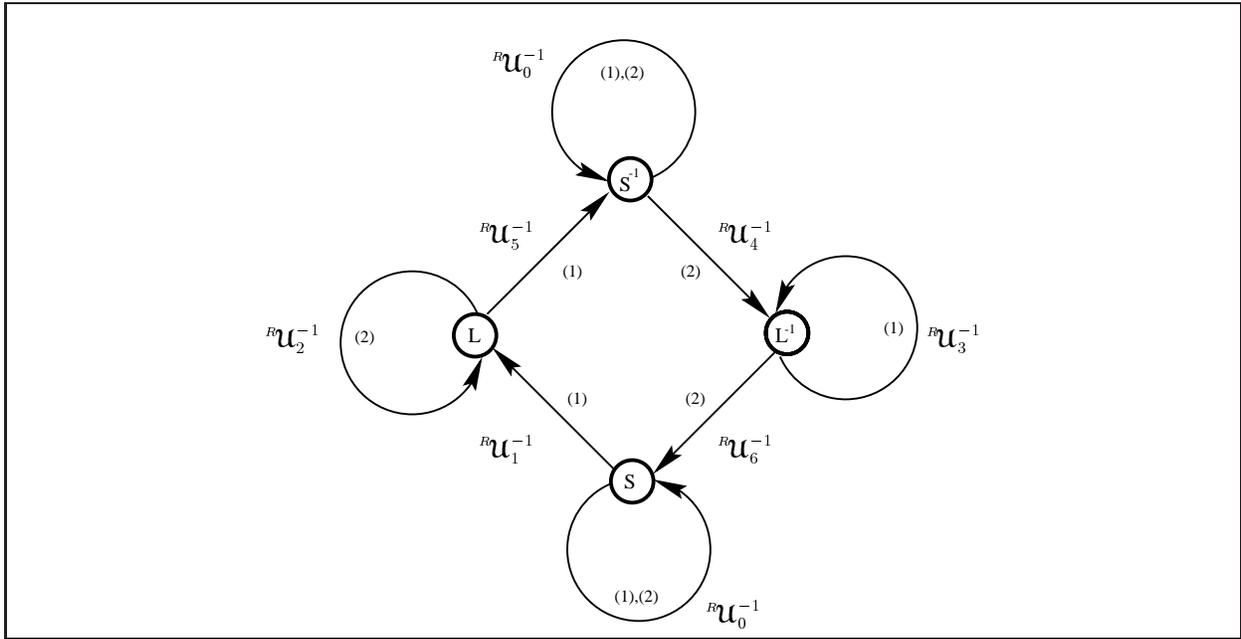


Abbildung III.A.3: Zusammenfassung sämtlicher Abbildungsvorschriften, wie sie im Text exemplarisch beschrieben werden. Die inversen RTs ergeben sich durch Richtungsumkehr der Pfeile.

induzierten Parametertransformationen (PT)  ${}^R\mathcal{M}^{-1} : \mathbf{\Pi}_{\epsilon,t} \rightarrow \mathbf{\Pi}_{\epsilon,t}$  eingeführt. Erweitert man den Parameterraum  $\mathbf{\Pi}_{\epsilon,t}$  auf den vollen Parameterraum  $\mathbf{\Pi}_{\pi}$ , so finden wir die folgenden Relationen

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi_{|\mathcal{M}^{-1}}} &= \frac{1}{t_1^{(i)} t_2^{(i)} \cdots t_\nu^{(i)}} \prod_{\mu=1}^{\nu} \left[ \mathbf{K}_{\nu=0}^{\mu} \left( \frac{-(t_\nu^{(i)})^2}{\sigma_\nu^{(i)}} \right) \right], \\ \frac{1}{\eta_{|\mathcal{M}^{-1}}} &= \frac{1}{t_{\nu+1}^{(i)} t_{\nu+2}^{(i)} \cdots t_{|w_i|}^{(i)}} \prod_{\mu=\nu}^{|w_i|-1} \left[ \mathbf{K}_{\mu=|w_i|-1}^0 \left( \frac{-(t_\mu^{(i)})^2}{\sigma_{\mu-1}^{(i)}} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{III.A.10})$$

als die allgemeinste Rekursionsrelation für die Parameter  $\xi$  und  $\eta$ .

Zwischen den PTs  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{A}_i$  und  ${}^R\mathfrak{u}_i$  bestehen bestimmte Relationen, die für die Konstruktion der entsprechenden hierarchischen Graphen von zentraler Bedeutung sind. Es gilt:

**Lemma III.A.1** *Sei  $n \in \mathbb{N}$  dann gelten folgende Relationen zwischen den RTs  ${}^R\mathcal{P}$ ,  ${}^R\mathcal{A}_i$  und  ${}^R\mathfrak{u}_i$  mit  $i \in \{0, \dots, 6\}$ :*

$${}^R\mathfrak{u}_{i_0} {}^R\mathcal{P} \left( \prod_{k=1}^n {}^R\mathfrak{u}_{i_k} \right) {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_{i_{n+1}} = {}^R\mathcal{A}_{j_0} {}^R\mathcal{P} \left( \prod_{k=1}^n {}^R\mathcal{A}_{j_k} \right) {}^R\mathcal{P} {}^R\mathfrak{u}_{j_{n+1}} \quad (\text{III.A.11})$$

für spezielle Indexkombinationen  $i_k, j_k = 0, \dots, 6$  (siehe Indextabelle). Durch Restriktion  $\mathcal{R}\mathcal{G} \rightarrow \mathcal{R}\mathcal{G}_{|\Pi_{xy}}$  ergibt sich

$$\mathfrak{u}_0 \mathcal{P} \mathfrak{u}_0^n \mathcal{P} \mathcal{A}_0 = \mathcal{A}_0 \mathcal{P} \mathcal{A}_0^n \mathcal{P} \mathfrak{u}_0, \quad \text{für } n \in \mathbb{Z}.$$

$(i_0, j_0)$	$(i_k, j_k)$	$\mapsto$	$\{(i_{k+1}, j_{k+1})\}, k \geq 1$
$(0^{(a)}, 0^{(a)})$	$(i_k^{(a)}, j_k^{(a)})$	$\mapsto$	$(3^{(f)}, 1^{(k)}), (2^{(n)}, 4^{(i)}), (0^{(a)}, 0^{(a)}), (5^{(m)}, 3^{(p)})$ $(5^{(l)}, 4^{(h)}), (6^{(h)}, 1^{(l)}), (6^{(j)}, 2^{(r)})$
$(0^{(d)}, 5^{(q)})$	$(i_k^{(b)}, j_k^{(g)})$	$\mapsto$	$(3^{(a)}, 5^{(a)}), (3^{(b)}, 0^{(g)})$
$(0^{(e)}, 6^{(2)})$	$(i_k^{(c)}, j_k^{(o)})$	$\mapsto$	$(2^{(a)}, 6^{(a)}), (2^{(c)}, 0^{(o)})$
$(5^{(p)}, 3^{(l)})$	$(i_k^{(f)}, j_k^{(k)})$	$\mapsto$	$(3^{(f)}, 0^{(k)}), (6^{(h)}, 0^{(l)})$
$(2^{(h)}, 3^{(l)})$	$(i_k^{(h)}, j_k^{(l)})$	$\mapsto$	$(1^{(a)}, 6^{(a)}), (1^{(c)}, 0^{(o)}), (0^{(g)}, 6^{(d)})$
$(2^{(i)}, 4^{(n)})$	$(i_k^{(j)}, j_k^{(r)})$	$\mapsto$	$(0^{(h)}, 1^{(l)}), (0^{(j)}, 2^{(r)})$
$(3^{(l)}, 2^{(h)})$	$(i_k^{(l)}, j_k^{(h)})$	$\mapsto$	$(4^{(a)}, 5^{(a)}), (4^{(b)}, 0^{(g)}), (0^{(s)}, 5^{(e)})$
$(3^{(k)}, 1^{(f)})$	$(i_k^{(m)}, j_k^{(p)})$	$\mapsto$	$(0^{(m)}, 3^{(p)}), (0^{(l)}, 4^{(h)})$
$(6^{(r)}, 2^{(j)})$	$(i_k^{(n)}, j_k^{(i)})$	$\mapsto$	$(2^{(n)}, 0^{(i)}), (5^{(l)}, 0^{(h)})$
$(1^{(g)}, 0^{(b)})$	$(i_k^{(q)}, j_k^{(d)})$	$\mapsto$	$(1^{(a)}, 3^{(a)}), (0^{(q)}, 3^{(d)})$
$(4^{(o)}, 0^{(c)})$	$(i_k^{(s)}, j_k^{(e)})$	$\mapsto$	$(4^{(a)}, 2^{(a)}), (0^{(s)}, 2^{(e)})$

Indexpaarungen: $(i_n, j_n) \mapsto (i_{n+1}, j_{n+1})$		
$(i_n^{(b)}, j_n^{(g)}) \mapsto (5, 3)$	$(i_n^{(s)}, j_n^{(e)}) \mapsto (2, 4)$	$(i_n^{(j)}, j_n^{(r)}) \mapsto (4, 0)$
$(i_n^{(a)}, j_n^{(a)}) \mapsto (0, 0)$	$(i_n^{(l)}, j_n^{(h)}) \mapsto (2, 3)$	$(i_n^{(h)}, j_n^{(l)}) \mapsto (3, 2)$
$(i_n^{(n)}, j_n^{(i)}) \mapsto (0, 6)$	$(i_n^{(m)}, j_n^{(p)}) \mapsto (1, 0)$	$(i_n^{(q)}, j_n^{(d)}) \mapsto (3, 1)$
$(i_n^{(f)}, j_n^{(k)}) \mapsto (0, 5)$	$(i_n^{(c)}, j_n^{(o)}) \mapsto (6, 2)$	

**Indextabelle:** Mögliche Anfangswerte sind  $(i_0, j_0) \in \{(5^{(p)}, 3^{(m)}), (6^{(r)}, 2^{(j)}), (0^{(a)}, 0^{(a)}), (0^{(e)}, 6^{(s)}), (0^{(d)}, 5^{(q)}), (2^{(i)}, 4^{(n)}), (2^{(h)}, 3^{(l)}), (1^{(g)}, 0^{(b)}), (3^{(k)}, 1^{(f)}), (3^{(l)}, 2^{(h)}), (4^{(o)}, 0^{(c)})\}$ .

Aus der Indextabelle bestimmt man, ausgehend von den angegebenen Anfangswerten, sukzessive sämtliche möglichen Indexkombinationen, welche in (III.A.11) auftreten können. Die hochgestellten Indizes dienen ausschließlich dazu gleiche Indexwerte bezüglich ihrem in der Indextabelle dargestellten Transformationsverhalten zu unterscheiden. Damit kommen wir zum Beweis des Lemmas III.A.1.

☞ **Beweis:** Sei zunächst  $n = 0$ . Ausgehend von dem Relationensystem (III.49) auf S. 141 und den die RTs  ${}^R\mathcal{U}_i, i = 2, 3, 5, 6$ , definierenden Relationen (III.A.3) — (III.A.6) sowie (III.A.9) für  ${}^R\mathcal{A}_k$  finden wir zunächst

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_0 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_0, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_5 &= {}^R\mathcal{A}_5 {}^R\mathcal{U}_3, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_6 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2, \\ {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{A}_3 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_1, & {}^R\mathcal{U}_2 {}^R\mathcal{A}_3 &= {}^R\mathcal{A}_3 {}^R\mathcal{U}_2, & {}^R\mathcal{U}_2 {}^R\mathcal{A}_4 &= {}^R\mathcal{A}_4 {}^R\mathcal{U}_0, \\ {}^R\mathcal{U}_3 {}^R\mathcal{A}_1 &= {}^R\mathcal{A}_1 {}^R\mathcal{U}_0, & {}^R\mathcal{U}_3 {}^R\mathcal{A}_2 &= {}^R\mathcal{A}_2 {}^R\mathcal{U}_3, & {}^R\mathcal{U}_4 {}^R\mathcal{A}_2 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_4, \\ {}^R\mathcal{U}_5 {}^R\mathcal{A}_0 &= {}^R\mathcal{A}_3 {}^R\mathcal{U}_5, & {}^R\mathcal{U}_6 {}^R\mathcal{A}_0 &= {}^R\mathcal{A}_2 {}^R\mathcal{U}_6. \end{aligned} \quad (\text{III.A.12})$$

Wir können uns bei der Herleitung dieser Relationen auf die Wiedergabe folgender Umformungen<sup>1</sup> beschränken.

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{U}_2 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_3 {}^R\mathcal{O} &= {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_4^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_4 {}^R\mathcal{O} \cdot {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_1 \\ &= {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_1 \cdot {}^R\mathcal{O} \cdot {}^R\mathcal{U}_4^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_4 {}^R\mathcal{O} = {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_3 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_2. \end{aligned}$$

Die zweite Relation, mit der wir uns kurz beschäftigen müssen ist

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{U}_5 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} &= {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} \cdot {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} \\ &= {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0^{-1R} ({}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O})^2 \\ &= {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} \cdot {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} \\ &= {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} \cdot {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} \\ &= {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_1 \cdot {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} \\ &= {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_3 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_5. \end{aligned}$$

Dabei haben wir einige Male von den Relationen  ${}^R\mathcal{P}^2 = ({}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O})^4 = \mathbb{I}$  Gebrauch gemacht. Wir vermerken, daß sich  ${}^R\mathcal{U}_6 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} = {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_2 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_6$  analog zu den eben gemachten Umformungen ergibt, indem man entsprechend die Indizes 1 und 4 miteinander vertauscht. Der verbleibende Rest ergibt sich in nahezu offensichtlicher Weise, so daß wir uns hier die Schreibarbeit getrost ersparen können. Damit ist der Fall  $n = 0$  vollständig abgehandelt.

Bevor wir auf den allgemeinen Fall eingehen können, ist es sinnvoll, sich einige weitere Relationen zu vergegenwärtigen. Es gilt

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{U}_1^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_3^{-1R} &= {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P}, & {}^R\mathcal{U}_4^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_2^{-1R} &= {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P}, \\ {}^R\mathcal{U}_3^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_5^{-1R} &= {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P}, & {}^R\mathcal{U}_2^{-1R} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{U}_6^{-1R} &= {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} \\ & & ({}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_2)^2 &= ({}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{O} {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_3)^2 = 1. \end{aligned} \quad (\text{III.A.13})$$

<sup>1</sup>Die Punkte dienen im folgenden immer nur zur besseren Übersichtlichkeit.

Die links stehenden Relationen findet man gemäß (wieder mit  ${}^R\mathcal{P}^2 = {}^R\mathcal{O}^2 = ({}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O})^4 = \mathbb{1}$ )

$$\begin{aligned}
{}^R\mathcal{U}_1^{-1}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_3^{-1} &= {}^R\mathcal{U}_1^{-1}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_1^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{O} = {}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O} \\
&= {}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0^{-1}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P} = {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}. \\
{}^R\mathcal{U}_3^{-1}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_5^{-1} &= {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P} \\
&= {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0^{-1}{}^R\mathcal{U}_1{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P} = {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}. \\
({}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_2)^2 &= ({}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O})^2 {}^R\mathcal{U}_4^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4 ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P})^2 {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{O} \\
&= ({}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O})^2 {}^R\mathcal{U}_4^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_4^{-1}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O} \\
&= ({}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O})^2 {}^R\mathcal{U}_4^{-1}{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0{}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_4{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0^{-1}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O} = 1.
\end{aligned}$$

Die verbleibenden Relationen in (III.A.13) erhält man im wesentlichen analog zu den entsprechenden linksstehenden Relationen durch Vertauschen der Indizes 1 und 4.

Nun können wir uns der allgemeinen Formel (III.A.11) widmen. Bei ihrer Herleitung werden wir u.a. von (III.A.12)–(III.A.13) und  $({}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{U}_0)^3 = ({}^R\mathcal{P}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_0)^2 = \mathbb{1}$  Gebrauch machen. Für  $n \geq 1$  gilt:

$$\begin{aligned}
{}^R\mathcal{U}_{i_0}{}^R\mathcal{P}^R\left(\prod_{k=1}^n {}^R\mathcal{U}_{i_k}\right) {}^R\mathcal{P}^R\mathcal{A}_{i_{n+1}} &= {}^R\mathcal{U}_{i_0}{}^R\mathcal{A}_{s_1} \cdot \prod_{k=1}^n \left( {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{A}_{t_k} \cdot ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P})^2 {}^R\mathcal{A}_{s_{k+1}} \right) \\
&= {}^R\mathcal{U}_{i_0}{}^R\mathcal{A}_{s_1} \cdot \prod_{k=1}^n \left( {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{A}_{t_k} {}^R\mathcal{U}_{u_{k+1}} \cdot ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P})^2 \right) \\
&= {}^R\mathcal{A}_{j_0}{}^R\mathcal{U}_{x_0} \cdot \prod_{k=1}^{n-1} \left( {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_{v_{k+1}} {}^R\mathcal{A}_{w_k} ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P})^2 \right) \\
&= {}^R\mathcal{A}_{j_0} \cdot \prod_{k=1}^{n-1} \left( {}^R\mathcal{U}_{x_{k-1}} {}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_{v_{k+1}} ({}^R\mathcal{O}{}^R\mathcal{P})^2 \right) {}^R\mathcal{U}_{j_{n+1}} \\
&= {}^R\mathcal{A}_{j_0}{}^R\mathcal{P}^R\left(\prod_{k=1}^n {}^R\mathcal{A}_{j_k}\right) {}^R\mathcal{P}^R\mathcal{U}_{j_{n+1}} \tag{III.A.14}
\end{aligned}$$

Wir wollen hier nicht auf die möglichen Indexpaarungen innerhalb der einzelnen Rechenschritte eingehen, sondern nur das Endergebnis in der Indextabelle zusammenfassen. Die hier gefundenen Resultate sind bei der Konstruktion der im Kapitel IV benutzten hierarchischen Graphen von entscheidender Bedeutung.

Restriktion liefert offensichtlich gerade (III.A.1). Der Fall negativer  $n$  ergibt sich leicht durch analog durchgeführte Umformungen. Damit ist das Lemma bewiesen. ♣

## III.A.2 Darstellung von $\Phi_2^+$ und hierarchische Graphen

Bevor wir uns mit den hierarchischen Subgraphen von  $\mathcal{RG}(\Phi_2)$  beschäftigen können, müssen wir uns etwas in die Struktur der Automorphismengruppe  $\Phi_2$  und den durch ihre Elemente generierten primitiven Worte vertiefen! Dabei wird es sich als sehr nützlich erweisen, neben der Automorphismengruppe  $\Phi_2$  auch die Gruppe der sog. *Nielsen-Transformationen* (NT)  $\Gamma_2$  vom Rang zwei [Nie17/24] zu betrachten. Die durch  $\mathcal{M} \mapsto M$ ,  $\mathcal{M} \in \Phi_2$ ,  $M \in \Gamma_2$  definierte Abbildung erzeugt einen *Anti-Isomorphismus* der Automorphismengruppe  $\Phi_2$  auf die

Gruppe der NTs  $\Gamma_2$ , d.h. insbesondere, daß  $\mathfrak{M}_1\mathfrak{M}_2 \Leftrightarrow \mathfrak{M}_2\mathfrak{M}_1$  gilt!<sup>2</sup>

Zur Einstimmung wollen wir kurz zwei andere Darstellung von  $\Phi_2$  erwähnen. Es ist

$$\mathcal{A} = \mathcal{O}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{O} \quad \text{und} \quad \mathcal{O} = \mathcal{U}\mathcal{P}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A}\mathcal{P}. \quad (\text{III.A.15})$$

Damit läßt sich die Substitution  $\mathcal{O}$  aus der in Theorem I.1 zitierten Nielsen-Darstellung von  $\Phi_2$  eliminieren (sog. *Tietze-Transformation*, s. [Mag66, S. 48 ff.]). Es ist

$$\begin{aligned} \Phi_2 &= \langle \mathcal{P}, \mathcal{O}, \mathcal{A}, \mathcal{U} \mid \mathcal{P}^2, \dots, [\mathcal{U}, \mathcal{O}\mathcal{U}\mathcal{O}], \mathcal{A} = \mathcal{O}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{O} \rangle \\ &= \langle \mathcal{P}, \mathcal{O}, \mathcal{A}, \mathcal{U} \mid \mathcal{P}^2, \dots, [\mathcal{U}, \mathcal{O}\mathcal{U}\mathcal{O}], \mathcal{O} = \mathcal{U}\mathcal{P}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A}\mathcal{P}, \\ &\quad \mathcal{A} = \mathcal{O}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{O}, \mathcal{U}\mathcal{P}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P}\mathcal{A}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{U} \rangle \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} \Phi_2 &= \langle \mathcal{P}, \mathcal{A}, \mathcal{U} \mid \mathcal{P}^2, (\mathcal{P}\mathcal{U}\mathcal{P}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A})^2, ((\mathcal{U}\mathcal{P})^2\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A})^2, (\mathcal{U}^2\mathcal{P}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A})^3, \\ &\quad (\mathcal{U}\mathcal{P}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A})^4, \mathcal{U}\mathcal{P}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P}(\mathcal{U}^{-1}\mathcal{P}\mathcal{A})^{-1}, [\mathcal{U}, \mathcal{A}] \rangle \end{aligned}$$

Entsprechend kann man mit einer weiteren Tietze-Transformation, durch die Einführung der Substitutionen  $\mathcal{L} = \mathcal{P}\mathcal{A}$  und  $\mathcal{R} = \mathcal{P}\mathcal{U}$ , eine weitere äquivalente Darstellung von  $\Phi_2$  finden, deren Generatoren nun  $\mathcal{P}$  und die Erzeuger  $\mathcal{L}$  und  $\mathcal{R}$  der gewöhnlichen Fibonacci-Kette, bzw. deren zyklischen Permutationen sind. Daher kann man die durch die Substitutionen aus  $\Phi_2$  erzeugten (sog. *positiven primitiven*<sup>3</sup>) Worte der freien Gruppe  $\mathbb{F}(A_2)$  auch als *verallgemeinerte Fibonacci-Folgen* auffassen.

Im Folgenden sollen nun konkret diejenigen Schritte skizziert werden, die auf das Theorem III.A.2 führen. Dabei werden wir Methoden verwenden, die sich für diese Arbeit als besonders brauchbar, weil anwendungsnah und konzeptionell einfach, erweisen werden.

In Lemma III.A.1 haben wir uns von der Gültigkeit des Relationensystems (III.32) überzeugt. Die Tatsache, daß  $\mathcal{P}^2 = \mathbf{1}$  und  $\mathcal{A}\mathcal{U} = \mathcal{U}\mathcal{A}$  ist, erspart uns bei der Suche nach weiteren, von (III.A.11) unabhängigen Relationen viel Mühe. Offensichtlich brauchen wir uns bei der Suche nach möglichen weiteren Relationen nur auf Relationen zwischen den verschiedenen Automorphismen der Form  $\mathfrak{X}_{N-r,r} = \mathcal{P}\mathcal{A}^{N-r}\mathcal{U}^r$  beschränken<sup>4</sup>. Man betrachte hierzu die Worte

$$w^{(n)} := w_{(r_n \dots r_1)}(L, S) = \mathfrak{X}_{(r_n \dots r_1)}(L), \quad w^{(0)} = L, \quad w^{(-1)} = S. \quad (\text{III.A.16})$$

Man zeigt leicht, daß dann

$$\Gamma_2 \ni \mathbf{X}_{M_k - s_k, s_k}(w_{(s_1 \dots s_{k-1})}, w_{(s_1 \dots s_{k-2})}) = (w_{(s_1 \dots s_k)}, w_{(s_1 \dots s_{k-1})})$$

gilt, wobei

$$w^{(s_1 \dots s_k)} = (w^{(s_1 \dots s_{k-1})})^{M_k - s_k} w^{(s_1 \dots s_{k-2})} (w^{(s_1 \dots s_{k-1})})^{s_k}.$$

<sup>2</sup>Zur Terminologie vergleiche man z.B. [Mag66, S.129 ff.].

<sup>3</sup>Das sind Worte der Form  $w(L, S) = \mathfrak{M}(L)$ ,  $\mathfrak{M} \in \Phi_2^+$ .

<sup>4</sup>Dies folgt aus einer einfachen Längenbetrachtungen und der Tatsache, daß  $\text{ggT}(P_k, Q_k) = 1$ ,  $k \geq 3$ .

Bei den hier betrachteten Worten findet man für die Längen (**verallgemeinerte Fibonacci-Zahlen**)

$$f_k := |w^{(s_1^0 \dots s_k^0)}| \equiv |w^{(r_n^0 \dots r_{n-k+1}^0)}| =: \Lambda_k^{(n)}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (\text{III.A.17})$$

( $s_i^0 = 0 = r_{n-i+1}^0$ ), die Rekursionsformeln

$$f_k = M_k f_{k-1} + f_{k-2}, \quad f_{-1} = f_0 = 1, \quad (\text{III.A.18})$$

bzw. für gegebenes  $n$

$$\Lambda_k^{(n)} = N_{n-k+1} \Lambda_{k-1}^{(n)} + \Lambda_{k-2}^{(n)}, \quad \Lambda_{-1}^{(n)} = \Lambda_0^{(n)} = 1 \quad (\text{III.A.19})$$

$$= N_n \sum_{\mu=0}^{k-1} (-1)^{k+\mu+1} \Lambda_{\mu}^{(n-k+\mu)} + \Lambda_{k-1}^{(n-1)} \quad (\text{III.A.20})$$

Um möglichen Konfusionen vorzubeugen, behalte man bei allen folgenden Ausführungen die Beziehung (III.37) im Gedächtnis! Die zwei Varianten der verallgemeinerten Fibonacci-Zahlen  $f_n$ , bzw.  $\Lambda_k^{(n)}$ , sind Ausdruck der zwei gleichwertigen Möglichkeiten zur Erzeugung von Worten der Form  $w^{(s_1 \dots s_k)}$  entweder durch *Substitutionen* aus  $\Phi_2$  ( $\Lambda_k^{(n)}$ ) oder durch *Nielsen-Transformationen* aus  $\Gamma_2$  ( $f_k$ ).

☞ **Beweis von Gl. (III.A.20):** Wir wollen die Gleichung (III.A.20) mittels vollständiger Induktion zeigen. Für  $k = 1, 2, 3$ , rechnet man die Behauptung leicht nach. Für  $k \geq 3$  ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \Lambda_{k+1}^{(n)} &= N_{n-k} \Lambda_k^{(n)} + \Lambda_{k-1}^{(n)} \\ &= N_n \left( (-1)^{k+1} N_{n-k} \Lambda_0^{(n-k)} + \sum_{p=1}^{k-1} (-1)^{k+p+1} \left( N_{n-k} \Lambda_p^{(n+p-k)} + \Lambda_{p-1}^{(n+p-k)} \right) \right) \\ &\quad + N_{n-k} \Lambda_{k-1}^{(n-1)} + \Lambda_{k-2}^{(n-1)} \\ &= N_n \left( (-1)^{k+1} \left( \Lambda_1^{(n-k)} - \Lambda_0^{(n-k-1)} \right) + \sum_{p=1}^{k-1} (-1)^{k+p+1} \Lambda_{p+1}^{(n+p-k)} \right) + \Lambda_k^{(n-1)} \\ &= N_n \sum_{p=0}^k (-1)^{k+p} \Lambda_p^{(n+p-k-1)} + \Lambda_k^{(n-1)} \end{aligned}$$

womit (III.A.20) bewiesen ist. ♣

**Lemma III.A.2** Sei ein festes  $n$ -Tupel  $\mathcal{N}_n = (M_1, \dots, M_n)$  gegeben, derart, daß

$$\mathbf{X}_{(s_1 \dots s_n)} \mapsto \mathbf{S}_{X_{(s_1 \dots s_n)}} = \prod_{p=1}^n \begin{pmatrix} M_p & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_n & Q_n \\ P_{n-1} & Q_{n-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{GL}(2, \mathbb{Z}),$$

wobei  $P_k = M_k P_{k-1} + P_{k-2}$  ( $Q_k$  analog) mit  $(P_{-1}, Q_{-1}) = (0, 1)$  und  $(P_0, Q_0) = (1, 0)$ .<sup>5</sup> Dann gilt für die zu zwei gegebenen Tupeln  $\mathcal{N}_n$  und  $\mathcal{N}'_m$  gehörenden Substitutionsmatrizen

$$\mathbf{S}_{X_{(s_1 \dots s_n)}} = \mathbf{S}_{X_{(s'_1 \dots s'_m)}} \Leftrightarrow \mathcal{N}_n = \mathcal{N}'_m. \quad (\text{III.A.21})$$

<sup>5</sup>Es gilt  $f_k = P_k + Q_k$ .  $P_k$  ist die Anzahl der  $L$  und  $Q_k$  die der  $S$  in dem Wort  $w_{(s_1 \dots s_k)}(L, S)$ . Diese Polynome haben die Eigenschaft, daß  $\det(\mathbf{S}_{X_{(s_1 \dots s_n)}}) = (-1)^n$  gilt.

**C ► Beweis:** Die Beziehung  $\Leftarrow$  ist trivial. Aus  $\mathcal{S}_{x_{(s_1 \dots s_n)}} = \mathcal{S}_{x_{(s'_1 \dots s'_m)}}$  folgt, unter Beachtung der Rekursionsformel (III.A.18) mit den zugehörigen Anfangswerten, daß

$$\frac{f_n}{f_{n-1}} = M_n + \alpha^{(n)} = \tilde{M}_m + \tilde{\alpha}^{(m)} = \frac{\tilde{f}_m}{\tilde{f}_{m-1}}$$

mit den Kettenbrüchen

$$\alpha^{(k)} = \frac{1}{M_{k-1} + [1/M_{k-2} + \dots + (1/(M_1 + 1))]} \equiv [0; M_{k-1}, \dots, M_2, M_1 + 1].$$

Offensichtlich ist  $0 < \alpha_k \leq 1$ , wobei das Gleichheitszeichen genau dann gilt, wenn  $M_p = 0$ ,  $p = 1, \dots, k$ . Aus  $M_n, \tilde{M}_m \in \mathbb{N}$  folgt

$$0 \leq |M_n - \tilde{M}_m| = |\alpha^{(n)} - \tilde{\alpha}^{(m)}| < 1,$$

woraus sich sofort  $M_n = \tilde{M}_m$  ergibt. Sei  $n \geq m$ . Man erhält sukzessive  $M_{n-p} = \tilde{M}_{m-p}$ ,  $p = 0, \dots, m-2$ . Für  $p = m-1$  folgt aus

$$0 < \alpha^{(n-p)} = \tilde{M}_1 - M_{n-p} + 1 \leq 1,$$

daß  $\alpha^{(n-p)} = 1$ , also  $M_p = 0$ ,  $p = m, \dots, n-1$  im Widerspruch zu  $M_p \in \mathbb{N}$ . Daraus folgt, daß  $m = n$  und  $\tilde{M}_p = M_p$  für  $p = 1, \dots, n$ . ♣

In unseren Bemühungen, die von uns gefundene Darstellung (III.32) von  $\Phi_2^+$  zu rechtfertigen, gelangen wir einen Schritt weiter durch das folgendes Lemma. Multiplizieren wir zunächst (III.A.1) von links mit  $\mathcal{P}\mathcal{A}^{M_i - s_i - 1} \mathbf{u}^{s_i}$  und von rechts mit  $\mathcal{A}^{M_{i+2} - s_{i+2} - 1} \mathbf{u}^{s_{i+2}}$ . Man findet

$$\mathcal{X}_{M_i - s_i - 1, s_i + 1} \mathcal{X}_{0, M_{i+1}} \mathcal{X}_{M_{i+2} - s_{i+2}, s_{i+2}} = \mathcal{X}_{M_i - s_i, s_i} \mathcal{X}_{M_{i+1}, 0} \mathcal{X}_{M_{i+2} - s_{i+2} - 1, s_{i+2} + 1}. \quad (\text{III.A.22})$$

In Lemma III.A.2 haben wir gesehen, daß zwei *Substitutionsmatrizen*  $\mathcal{S}_{(\mathcal{N}_n)}$  genau dann gleich sind, wenn die zugehörigen  $\mathcal{N}_n$ , d.h. die entsprechenden verallgemeinerten Fibonacci-Zahlen, gleich sind. Nun wollen wir eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Gleichheit von *Substitutionen* herleiten, die zu einem gegebenen  $\mathcal{N}_n$  gehören. Wir werden sehen, daß zwei Substitutionen  $\mathcal{X}_{(s_1^{(\mu)} \dots s_n^{(\mu)})}$ ,  $\mu = 1, 2$ , zu *einem* gegebenem  $\mathcal{N}_n$ , genau dann gleich sind, wenn sie *innerhalb*  $\Phi_2^+$  (!) durch Relationen der Form (III.A.22) auseinander hervorgehen.

**Lemma III.A.3** Seien  $(s_1^{(\mu)}, \dots, s_n^{(\mu)})$ ,  $\mu = 1, 2$ , zwei Lösungen von

$$\xi_\mu^{(n)} = \sum_{i=1}^n s_i^{(\mu)} f_{i-1}, \quad (\text{III.A.23})$$

für gegebene  $\xi_\mu^{(n)}$ ,  $\mu = 1, 2$ , bei festem  $\mathcal{N}_n$ . Dann gilt für die zugehörigen Automorphismen

$$\mathcal{X}_{(s_1^{(1)} \dots s_n^{(1)})} \stackrel{(\text{III.A.22})}{=} \mathcal{X}_{(s_1^{(2)} \dots s_n^{(2)})} \iff \xi_1^{(n)} = \xi_2^{(n)},$$

wobei *innerhalb*  $\Phi_2^+$  sämtliche Äquivalenzumformungen zwischen den Automorphismen in (III.A.3) auf die Relationen (III.A.22) und  $\mathcal{P}^2 = \mathbf{1}$  zurückführbar sind.

☞ **Beweis:** Die Beziehung  $\Rightarrow$  ist trivial. Man erkennt sofort, daß in (III.A.23) (vgl. mit (III.A.22))

$$(s_i + 1)f_{i-1} + M_{i+1}f_i + s_{i+2}f_{i+1} = s_i f_{i-1} + s_{i+1}^0 f_i + (s_{i+2} + 1)f_{i+1}$$

mit  $s_i^0 = 0, \forall i$ , erfüllt ist.

Wenden wir uns nun der Umkehrung  $\Leftarrow$  zu. Wir werden zeigen, daß, für gegebenes  $k$ , die Anzahl  $\Delta_k$  der unter *alleiniger* Berücksichtigung der Relationen (III.A.22) *nicht* ineinander überführbaren und in diesem Sinne verschiedenen  $\mathfrak{X}_{(s_1, \dots, s_k)}$  gerade gleich  $\Delta_k = \max(\xi^{(k)}) + 1, k = 1, \dots, n$ , ist. Zusammen mit Lemma I.2, S. 28 (s. (I.54)), ergibt sich dann die Behauptung.  $\nabla$

Bevor wir im Beweis fortfahren, wollen wir die Konstruktion der  $\Phi$ -Graphen für die verallgemeinerten Fibonacci-Folgen einführen. Hierzu wollen zwei zunächst Beziehungen für  $\xi^{(n)}$  herleiten. Mit (III.A.20) ergibt sich

$$\begin{aligned} \xi^{(k)} &= \sum_{p=1}^k r_p \Lambda_{k-p}^{(k)} \\ &= r_k \Lambda_0^{(k)} + N_k \sum_{p=1}^{k-1} \sum_{q=0}^{k-p-1} (-1)^{k+p+q+1} r_p \Lambda_q^{(p+q)} + \sum_{p=1}^{k-1} r_p \Lambda_{k-p-1}^{(k-1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \xi^{(k)} &= r_k + (-1)^{k+1} N_k \sum_{p=1}^{k-1} \sum_{q=p}^{k-1} (-1)^q r_p \Lambda_{q-p}^{(q)} + \xi^{k-1} \\ &= r_k + (-1)^{k+1} N_k \sum_{p=1}^{k-1} (-1)^p \xi^{(p)} + \xi^{(k-1)} \end{aligned} \quad (\text{III.A.24})$$

$$\begin{aligned} &= r_k + (-1)^{k+1} N_k \left( (-1)^k \frac{\xi^{(k-1)} - \xi^{(k-2)} - r_{k-1}}{N_{k-1}} + (-1)^{k-1} \xi^{(k-1)} \right) + \xi^{(k-1)} \\ &= \left( N_k + 1 - \frac{N_k}{N_{k-1}} \right) \xi^{(k-1)} + \frac{N_k}{N_{k-1}} (\xi^{(k-2)} + r_{k-1}) + r_n \equiv \zeta^{(k)} + r_k. \end{aligned} \quad (\text{III.A.25})$$

Es sei vermerkt, daß beim Übergang von (III.A.24) zur folgenden Gleichung die Summe vermöge (III.A.24), mit  $k \rightarrow k-1$ , eliminiert wurde.

**Theorem III.A.1** Sei  $\mathbf{V}_{\mathcal{N}_n}^* = \bigcup_{k=1}^n \{\mathfrak{X}_{\xi^{(k)}} \mid \xi^{(k)} \in I_k\}$  und  $\mathbf{E}_{\mathcal{N}_n}^*$  die Menge aller Kanten<sup>6</sup>  $\mathfrak{X}_{N_k - r_k, r_k} \in P\text{Alph}_k$  mit  $r_k \in \{0, \dots, N_k\}$ ,  $k = 1, \dots, n$ . Die Super-Inflation  $\Lambda_{\mathcal{N}_k}$ ,  $N_k \in \mathbb{N}$  werde

<sup>6</sup>Die Situation ist vollständig analog zu den in Kapitel III.2.1 beschriebenen Verhältnissen, welche auf das Theorem III.2, S. 139, führten. Die Kanten genügen wieder der Relation  $\mathfrak{X}_{\xi^{(k)}} = \mathfrak{X}_{N_k - r_k, r_k} \mathfrak{X}_{\xi^{(k-1)}}$  für alle Paare  $(\mathfrak{X}_{\xi^{(k)}}, \mathfrak{X}_{\xi^{(k-1)}}) \in \mathbf{V}_{\mathcal{N}_n}^* \times \mathbf{V}_{\mathcal{N}_n}^*$ .

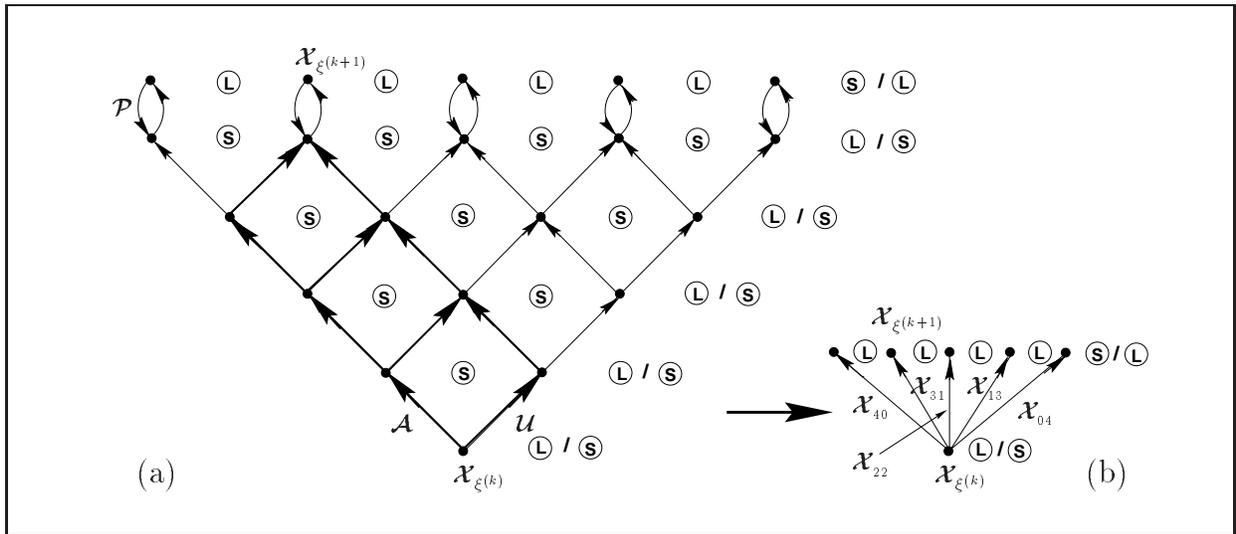


Abbildung III.A.4: Dem Subgraph von  $\mathfrak{G}^\Phi(\Phi_2^+, \Phi_2^+ \times \Phi_2^+)$ , der die Punkte  $\mathcal{X}_{\xi^{(k)}}$  und  $\mathcal{X}_{\xi^{(k+1)}}$  miteinander verbindet (in (a) fett), wird im angegebenen Beispiel auf die Kante  $\mathcal{X}_{31}$  im induzierten Subgraph  $\mathfrak{G}^\Phi(V_{N_n}^*, E_{N_n}^*)$  (s. (b)) abgebildet.

wie folgt erklärt:

$$\begin{array}{c} \gamma_v \circlearrowleft r_k = 0 \\ \bullet \tilde{\sigma}_u \end{array} \mapsto \begin{array}{c} \alpha_w \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \\ \gamma_v \bullet \tilde{\sigma}_u \in \{\alpha, \beta\} \end{array} \leftarrow r_{k+1}=0, \dots, N_{k+1}-1, N_{k+1} \quad (\text{III.A.26})$$

$$\begin{array}{c} r_k = N_k \circlearrowleft \beta_v \\ \bullet \tilde{\sigma}_u \end{array} \mapsto \begin{array}{c} \gamma_w \quad \alpha_x \quad \alpha_z \\ \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \\ r_k = N_k \bullet \tilde{\sigma}_u \in \{\alpha, \gamma\} \end{array} \leftarrow r_{k+1}=0, 1, \dots, N_{k+1} \quad (\text{III.A.27})$$

$$\begin{array}{c} r_k \neq 0, N_k \circlearrowleft \alpha_v \\ \bullet \tilde{\sigma}_u \end{array} \mapsto \begin{array}{c} \gamma_w \quad \alpha_x \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \\ r_k \neq 0, N_k \bullet \tilde{\sigma}_u \end{array} \leftarrow r_{k+1}=0, 1, \dots, N_{k+1}-1, N_{k+1} \quad (\text{III.A.28})$$

mit  $\sigma \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$  für  $r_k = 1, \dots, N_k - 1$ ,  $\sigma = \gamma$  für  $r_k = 0$  und  $\sigma = \beta$  für  $r_k = N_k$ . Außerdem wurden die Abkürzungen  $u = \xi^{(k-1)}$ ,  $v = \xi^{(k)}$ ,  $w = \zeta^{(k+1)}$ ,  $x = \zeta^{(k+1)} + 1, \dots, y = \zeta^{(k+1)} + N_{k+1} - 1$  und  $z = \zeta^{(k+1)} + N_{k+1}$  benutzt und

$$\sigma_{\xi^{(k)}} \longleftrightarrow \mathcal{X}_{\xi^{(k)}}. \quad (\text{III.A.29})$$

miteinander identifiziert. Dann gilt

$$\mathfrak{G}^\Phi(V_{N_n}^*, E_{N_n}^*) = \prod_{k=2}^n \Lambda_{N_k} \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \alpha_1 \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \quad \circlearrowleft \\ \bullet \alpha_0 \end{array} \right]$$

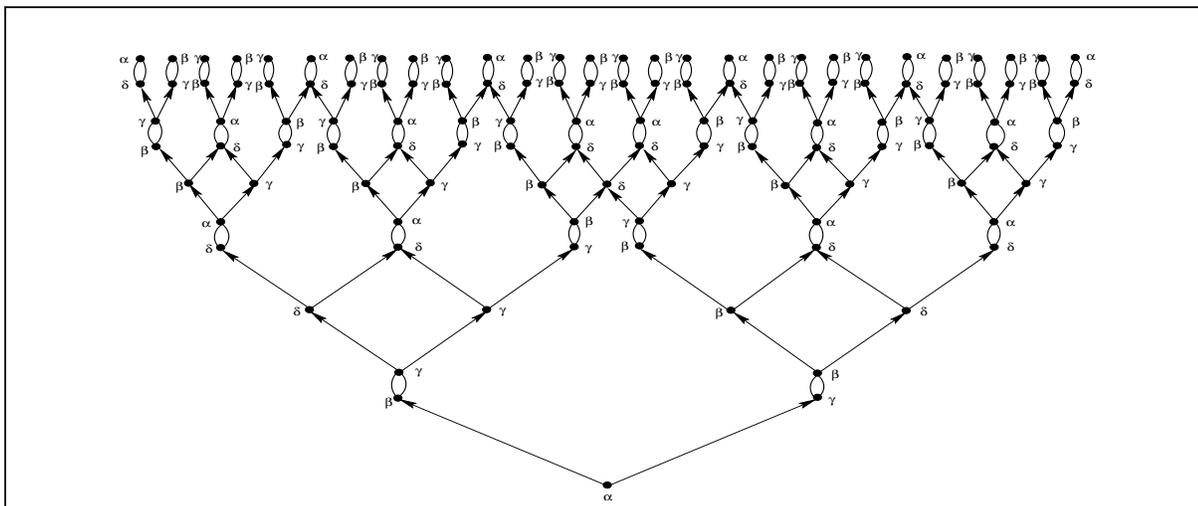
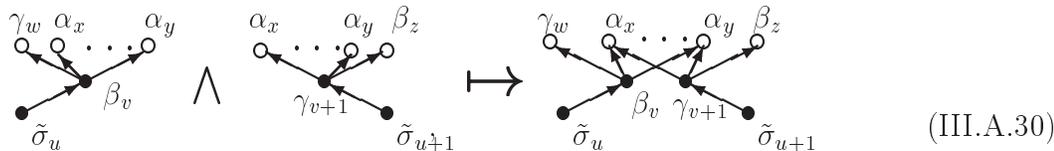


Abbildung III.A.5: Subgraph von  $\mathfrak{G}^\Phi(\Phi_2^+, \Phi_2^+ \times \Phi_2^+)$ : verallgemeinerte Fibonacci-Folge mit  $N_4 = (1, 2, 2, 1)$ . Der Substitution  $\mathcal{A}$  bzw.  $\mathcal{U}$  entsprechen jeweils links bzw. rechts geneigte Kanten.  $\mathcal{P}$  entspricht jeweils ein Loop. Der zugehörige induzierte Subgraph ist in Abb III.A.6 abgebildet.

wobei  $y = N_1 - 1$  und  $z = N_1$  ( $\zeta^{(-1)} = \zeta^{(0)} = 0!$ ). Durch die definierenden Relationen (III.A.22) werden dabei die „Verknüpfungsregel“



mit den Abkürzungen<sup>7</sup>  $u = \xi^{(k-1)}$ ,  $v = \xi^{(k)} < \max(\xi^{(k)})$ ,  $w = \zeta^{(k+1)}$ ,  $x = \zeta^{(k+1)} + 1, \dots, y = \zeta^{(k+1)} + N_{k+1} - 1$  und  $z = \zeta^{(k+1)} + N_{k+1}$ , impliziert.

☞ **Beweis:** Vollständige Induktion, ausgehend vom Relationensystem (III.A.22) und Theorem I.2, S. 30. ♣

Damit kommen wir wieder auf den Beweis von Lemma III.A.3 zurück.

☞ **Beweis (Forts.):** Fassen wir zunächst in der Abbildungsvorschrift  $\Lambda_{N_k}$  die Punkte, für die mit festem  $N_n$  die Relationen  $\mathfrak{X}_{(r_n \dots r_1)} = \mathfrak{X}_{(r'_n \dots r'_1)}$  gilt, wobei  $r_k, r'_k$  Lösungen von (III.A.23) für dasselbe  $\xi^{(k)}$  sind, nicht zu einem Punkt  $\mathfrak{X}_{\xi^{(k)}}$  zusammen (d.h., wir ignorieren für einen Moment die Verknüpfungsregel (III.A.30)), so erkennt man sofort, daß die Anzahl der  $\mathfrak{X}_{(r_k \dots r_1)}$  mit verschiedenen  $k$ -Tupeln mit  $(r_k, \dots, r_1)$ ,  $r_p = 0, \dots, N_p$  gerade gleich  $\prod_{p=1}^n (N_p + 1)$  ist. Verbinden wir nun die entsprechenden Kanten gemäß der Verknüpfungsregel (III.A.30), so sieht man, daß die Anzahl der Gleichungen der Form (mit festem  $N_n$ )

$$\mathfrak{X}_{(r_k, r_{k-1}, r_{k-2}, r_{k-3} \dots r_1)} \stackrel{(III.A.22)}{=} \mathfrak{X}_{(r'_k, r'_{k-1}, r'_{k-2}, r'_{k-3} \dots r_1)} = \mathfrak{X}_{\xi^{(k)}}$$

gerade gleich der Anzahl derjenigen  $\alpha^{(k+1)}$  ist, die über je eine Kante mit  $\beta_v^{(k)}$  und  $\gamma_{v+1}^{(k)}$  verknüpft sind. Für die Anzahl  $a_{k+1}$  dieser  $\alpha^{(k+1)}$  erhält man ( $a_1 = a_2 = 0$ )

$$a_k = N_k b_{k-1} \quad k \geq 3$$

<sup>7</sup>Wir betonen, daß zu einem  $\beta_v^{(k)}$  mit  $v = \max(\xi^{(k)})$  keine definierende Relation zugeordnet werden kann.

wobei  $b_k$  die Anzahl der  $\beta_v^{(k)}$  mit  $v < \max(\xi^{(k)})$  für gegebenes  $k$  ist. Alle anderen  $\sigma^{(k+1)}$  sind nur mit *einem*  $\sigma^{(k)}$  der vorangehenden Generation verknüpft. Aus der Struktur der Abbildungen (III.A.26)—(III.A.28) erkennt man, daß

$$b_k = \max(\xi^{(k-1)}) - b_{k-1}.$$

Damit kann man  $a_k$  schreiben als

$$a_k = N_k \sum_{p=2}^{k-1} (-1)^p \max(\xi^{(k-p)}) = (-1)^k N_k \sum_{p=1}^{k-2} (-1)^p \max(\xi^{(p)}) \quad k \geq 3$$

Nun sind wir in der Lage die Anzahl  $\Delta_k$  der im obigen Sinne verschiedenen  $\sigma^{(k)}$  zu berechnen. Es gilt

$$\Delta_k = \prod_{p=1}^k (N_p + 1) - A_k \quad k \geq 3$$

mit

$$A_k = (N_k + 1)A_{k-1} + a_k \quad A_2 = 0, \quad k \geq 3.$$

Wir wollen nun mittels vollständiger Induktion zeigen, daß gilt

$$\prod_{p=1}^k (N_p + 1) = \max(\xi^{(k)}) + 1 + A_k \quad k \geq 3 \quad (\text{III.A.31})$$

Für  $k = 3, 4$ , prüft man die Behauptung leicht nach. Sei  $k > 4$  und (III.A.31) für alle  $3 \leq p \leq k$  erfüllt, dann gilt

$$\begin{aligned} \prod_{p=1}^{k+1} (N_p + 1) &= (N_{k+1} + 1) \left( \max(\xi^{(k)}) + 1 + A_k \right) \\ &= N_{k+1} + N_{k+1} \max(\xi^{(k)}) + \max(\xi^{(k)}) + 1 + (N_{k+1} + 1)A_k \\ &= -(-1)^k N_{k+1} \sum_{p=1}^{k-1} (-1)^p \max(\xi^{(p)}) + \max(\xi^{(k+1)}) + 1 + (N_{k+1} + 1)A_k \\ &= \max(\xi^{(k+1)}) + 1 + (N_{k+1} + 1)A_k + a_k \\ &= \max(\xi^{(k+1)}) + 1 + A_{k+1} \end{aligned}$$

Damit ist die Gültigkeit der Behauptung (III.A.31) gezeigt. Aus (III.A.31) folgt unmittelbar, daß

$$\Delta_k = \max(\xi^{(k)}) + 1,$$

so daß das Lemma III.A.3 bewiesen ist. ♣

Lemma I.2, S. 28, besagt, daß für gegebenes  $\mathcal{N}_n$  die Menge der Substitutionen  $\{\mathfrak{X}_{\xi^{(n)}} | \xi^{(n)} \in I_n\}$  sämtliche zyklischen Permutationen von (III.39) aus Proposition III.2, S. 135, erzeugen. Da  $\max(\xi^{(n)}) > f_n$ ,  $n \geq 2$ , ist offensichtlich, daß einige zyklischen Permutationen von (III.39) mehrfach auftreten müssen. Aus der Ungleichheit der Substitutionen  $\mathfrak{M} \neq \mathfrak{M}' \in \Phi_2^+$  folgt somit *nicht* immer die Verschiedenheit der *Worte*  $\mathfrak{M}(L) \neq \mathfrak{M}'(L) \in \mathbb{F}_2^+$ . Der Grund hierfür



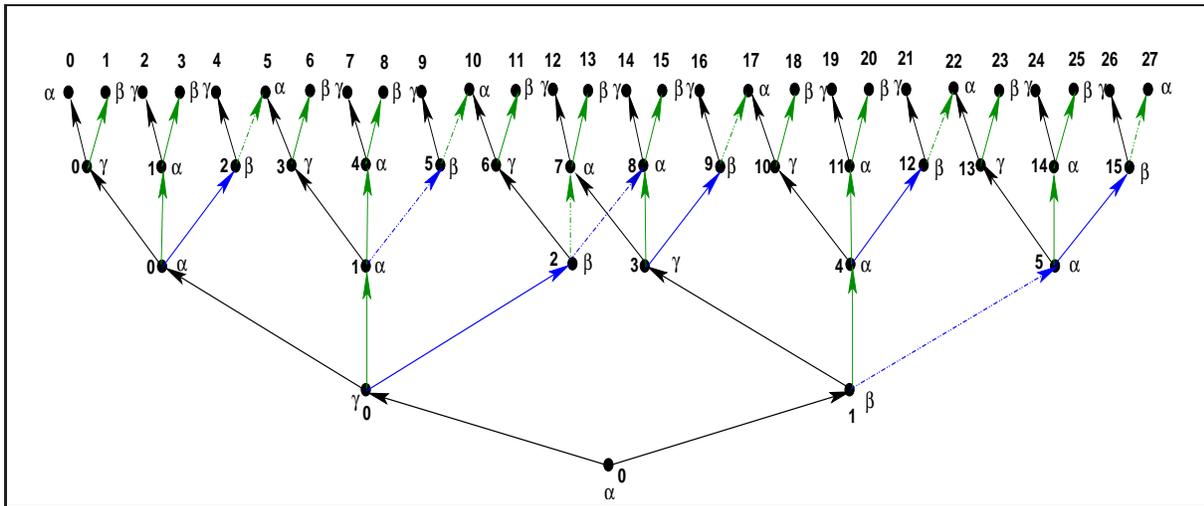


Abbildung III.A.6:  $\Phi$ -Graph: Induzierter Subgraph von Abb. III.A.5. Entfernt man sämtlichen blauen Kanten, so findet man den zugehörigen  $\Phi$ -Baum, wie er in (III.A.33) definiert wurde.

**Lemma III.A.4** Jedes Wort (III.A.16), mit gegebenem  $\mathcal{N}_n$ , hat genau  $f_n$  voneinander verschiedene zyklische Permutationen.

☞ **Beweis:** Dies folgt aus der geometrischen Interpretation der Worte, wie wir sie in der Proposition III.2 und Korollar III.1 in Kapitel III.2.1 diskutiert haben. ♣

Man erhält somit den folgenden Satz, aus dem sich sofort ergibt, daß außer den oben gefundenen definierenden Relationen keine weiteren, davon unabhängigen Relationen existieren können.

**Theorem III.A.2** Sei  $N_k \in \mathcal{N}_n$  und  $N'_k \in \mathcal{N}'_m$ . Dann gilt

$$\mathcal{X}_{\xi^{(n)}} = \mathcal{X}_{\zeta^{(m)}} \iff \mathcal{N}_n = \mathcal{N}'_m \text{ und } \xi^{(n)} = \zeta^{(m)}.$$

☞ **Beweis:** Sei  $\mathcal{X}_{\xi^{(n)}}(L, S) = (w_n, w_{n-1})$  und  $\mathcal{X}_{\zeta^{(m)}}(L, S) = (v_m, v_{m-1})$ . Für  $\mathcal{X}_{\xi^{(n)}} = \mathcal{X}_{\zeta^{(m)}}$  folgt aus Lemma III.A.2, daß  $\mathcal{N}_n = \mathcal{N}'_m$ , woraus sich insbesondere  $n = m$  ergibt. Für diesen Fall wurde in Lemma I.2, S. 28, gezeigt, daß

$$\mathcal{J}^{\xi^{(n)}}(w_n^{r_n^0} \dots r_1^0) = w_n = v_n = \mathcal{J}^{\zeta^{(n)}}(w_n^{r_n^0} \dots r_1^0),$$

woraus mit Lemma III.A.4 und (III.A.35)  $\xi^{(n)} = \zeta^{(m)}$  folgt. Betrachten wir den umgekehrten Fall. Sei  $\mathcal{N}_n = \mathcal{N}'_m$  und  $\xi^{(n)} = \zeta^{(m)}$ . Dann folgt aus Lemma III.A.3  $\mathcal{X}_{\xi^{(n)}} = \mathcal{X}_{\zeta^{(m)}}$ , womit unser Theorem bewiesen ist. ♣

Abschließend wollen wir natürlich noch auf die uns eigentlich interessierenden  $\Gamma$ -Graphen zu sprechen kommen. Hierbei können wir uns sehr kurz fassen, da der Übergang von den  $\Phi$ -Graphen zu den  $\Gamma$ -Graphen denkbar einfach ist. Nachdem man den vollständigen  $\Phi$ -Graphen konstruiert hat<sup>10</sup>, kennt man natürlich auch  $\mathcal{A}^\Gamma = \bigcup_k \mathcal{A}_k^\Gamma$ . Ebenfalls kann man

<sup>10</sup>D.h. man kennt das ganze Alphabet  $\mathcal{A}^\Phi = \bigcup_k \mathcal{A}_k^\Phi$  und sämtliche Relationen zwischen den einzelnen elementaren Substitutionen  $\mathfrak{M} \in \mathcal{A}_k^\Phi$ .

unmittelbar alle Relationen zwischen ihnen aus den bekannten Relationen zwischen den  $\mathcal{M} \in \mathcal{A}_k^\Phi$  aufstellen, wobei man beachtet, daß die Abbildung  $\Phi \rightarrow \Gamma$  ein Anti-Isomorphismus ist, d.h. man hat die Reihenfolge der Produkte zu vertauschen.

◻ ► Ein einfaches Beispiel ist die **Fibonacci-Folge**. Hier ist die einzige definierende Relation  $\mathcal{R}^2\mathcal{L} = \mathcal{L}^2\mathcal{R}$  (s. Gl. (I.58), S. 32). Außerdem gilt noch die Wort-Relation  $\mathcal{U}(L) = \mathcal{P}\mathcal{A}(L)$  (s. III.A.32). Da hier die einzelnen Alphabete  $\mathcal{A}_k^\Phi = \mathcal{A}^\Phi$  alle gleich sind, kann man sofort beginnen, indem man  $\{\mathcal{L}, \mathcal{R}\} \rightarrow \{\mathbf{L}, \mathbf{R}\}$  und  $\mathcal{R}^2\mathcal{L} = \mathcal{L}^2\mathcal{R} \rightarrow \mathbf{L}\mathbf{R}^2 = \mathbf{R}\mathbf{L}^2$  übersetzt und ausgehend von der Wurzel  $\alpha_0$  sukzessive in dem durch  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{R}$  erzeugten Binärbaum diejenigen Vertizes derart zusammenfaßt, daß jedem  $\mathbf{L}\mathbf{R}^2 = \mathbf{R}\mathbf{L}^2$  ein geschlossener Pfad entspricht. Analog baut man die Wort-Relation ein. Das Resultat dieser Bemühungen sollte der Übergang von dem in Abb. I.4, S. 32, gezeigten Fibonacci  $\Phi$ -Graphen in den entsprechenden  $\Gamma$ -Graphen aus Abb. I.11, S. 47, sein. Mathematisch korrekt garniert man das Ganze noch mit einem Induktionsbeweis.

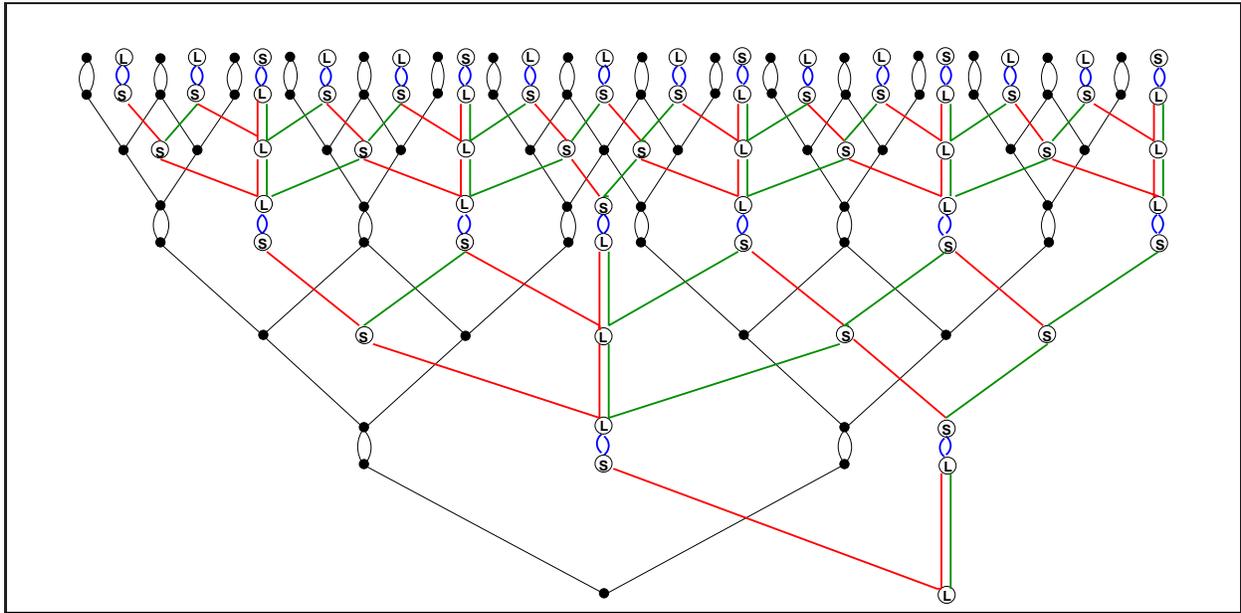
Der Rest geht dann in der Tat mit vollständiger Induktion.

### III.A.3 $\mathcal{RG}_{\downarrow \Pi_{xy}}$ und geliftete hierarchische Graphen in $\mathcal{G}^\Gamma(\mathcal{RG}, \mathcal{RG} \times \mathcal{RG})$

In diesem Abschnitt wollen wir die gemachten Strukturanalysen auf die volle Renormierungsgruppe  $\mathcal{RG}$  verallgemeinern. Im wesentlichen bedeutet dies, daß wir auf die hierarchischen Subgraphen von  $\mathcal{G}^\Gamma(\mathcal{RG}, \mathcal{RG} \times \mathcal{RG})$  zu sprechen kommen wollen, die den im Kapitel III.2.2 besprochenen  $\Gamma$ -Graphen entsprechen. Dort haben wir in Theorem III.3 festgestellt, daß  $\Gamma_2 \cong \mathcal{RG}_{\downarrow \Pi_{xy}}$  gilt. Deshalb lassen sich alle im vorherigen Abschnitt für  $\Phi_2$  gefundenen Eigenschaften entsprechend wörtlich auf  $\mathcal{RG}_{\downarrow \Pi_{xy}}$  übertragen. Wir werden uns deshalb im Folgenden wieder primär um die Verallgemeinerung der  $\Phi$ -Graphen mühen und erst am Schluß, nachdem wir die vollständige Struktur erarbeitet haben, den Übergang zu den entsprechenden  $\Gamma$ -Graphen, und damit zu den für die Festlegung der konkreten Abfolge der RTs entscheidenden Graphen, vollziehen. Einige Aspekte hiervon wurden schon in [Wal98] veröffentlicht.

Wir wollen zunächst den  $\Phi$ -Graphen in Abb. III.A.5 in einer etwas geänderten Form in Abb. III.A.7 aufzeichnen. Anstatt die Vertizes  $\sigma \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$  anzuschreiben sind nun die sie „verbindenden“ Buchstaben  $L$  und  $S$  eingezeichnet. Aus (III.A.8) entnimmt man die Bedeutung der die Vertizes  $L$  und  $S$  verbindenden Kanten und den Zusammenhang mit den Vertizes  $\sigma \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$ . Den Kanten wird gemäß Abb. III.A.3 in eineindeutiger Weise eine RT  ${}^R\mathcal{U}_k$  (*grün*) bzw.  ${}^R\mathcal{A}_k$  (*rot*) zugeordnet (vgl. Abb. III.A.8(a)–III.A.13(a)) Man erkennt sehr rasch, daß einem geschlossenen Pfad in dem so konstruierten rot-grünen<sup>11</sup> Graphen i.a. *nicht* einer Relation in  $\mathcal{RG}$  entspricht. Wie läßt sich dieser Widerspruch lösen? Wir werden nun zeigen, daß Abb. III.A.7 in Wirklichkeit eine 2-D Projektion eines 3-D Objektes ist!

<sup>11</sup>Als die Graphen in Tex gesetzt wurden war sich der Autor noch nicht über die politischen Konsequenzen seiner Wahl der Farben im Klaren. ...


 Abbildung III.A.7: Der “Rohling” eines gelifteten  $\Phi$ -Graphen.

Aus später ersichtlichen Gründen wollen wir in unserem Graphen noch folgende Kanten (eigentlich sind es Kantenzüge)

$${}^R\mathbf{A}_0 := {}^R\mathbf{A}_6 {}^R\mathbf{A}_3 {}^R\mathbf{A}_6^{-1} = {}^R\mathbf{O}^R \mathbf{U}_0^{-1R} \mathbf{O}, \quad {}^R\mathbf{A}_6 := {}^R\mathbf{A}_0 {}^R\mathbf{u}_1 {}^R\mathbf{u}_2^{-1}, \quad (\text{III.A.36})$$

$${}^R\mathbf{U}_0 := {}^R\mathbf{u}_1 {}^R\mathbf{u}_2 {}^R\mathbf{u}_1^{-1}, \quad {}^R\mathbf{U}_1 := {}^R\mathbf{u}_0 {}^R\mathbf{A}_6 {}^R\mathbf{A}_3^{-1}, \quad (\text{III.A.37})$$

einbauen, wobei  ${}^R\mathbf{A}_k$  (rot) und  ${}^R\mathbf{U}_k$  (grün) durch gestrichelte Kanten dargestellt werden. Zunächst sollen drei wichtige Relationen aus dem Relationensystem von  $\mathcal{RS}$  abgeleitet werden. Es gilt

$$\begin{aligned} {}^R\mathbf{u}_1 {}^R\mathbf{u}_2 {}^R\mathbf{u}_1^{-1} &= {}^R\mathcal{P}^R \mathbf{O}^R \mathbf{u}_3^{-1R} \mathcal{P}^R \mathbf{O}^R \mathbf{u}_0^{-1R} ({}^R\mathcal{P}^R \mathbf{O})^2 {}^R\mathbf{u}_6^{-1R} \mathbf{u}_3^{-1R} \mathbf{O}^R \mathcal{P}^R \\ &= {}^R\mathbf{O}^R \mathcal{P}^R \mathbf{u}_2^{-1R} \mathbf{u}_1^{-1R} ({}^R\mathcal{P}^R \mathbf{O})^2 {}^R\mathbf{u}_0^{-1R} \mathcal{P}^R \mathbf{O}^R \mathbf{u}_2^{-1R} \mathcal{P}^R \mathbf{O} \\ &= {}^R\mathbf{u}_6^{-1R} \mathbf{u}_3 {}^R\mathbf{u}_6 \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Relationen (III.A.12)–(III.A.13) und folgende darauf zurückführbaren Umformungen

$$\begin{aligned} &({}^R\mathcal{P}^R \mathbf{O})^2 {}^R\mathbf{u}_1^{-1R} ({}^R\mathcal{P}^R \mathbf{O})^2 {}^R\mathbf{u}_0^{-1R} \mathcal{P}^R \mathbf{O}^R \mathbf{u}_2^{-1R} ({}^R\mathcal{P}^R \mathbf{O})^2 {}^R\mathbf{A}_3^{-1} \\ &= {}^R\mathbf{A}_5^{-1R} \mathbf{u}_0^{-1R} \mathbf{O}^R \mathcal{P}^R \mathbf{A}_2^{-1R} \mathbf{u}_3^{-1R} = {}^R\mathbf{u}_3^{-1R} \mathbf{A}_5^{-1R} \mathbf{O}^R \mathcal{P}^R \mathbf{u}_3^{-1R} \mathbf{A}_2^{-1R} \\ &= {}^R\mathbf{u}_3^{-1R} \mathbf{A}_2^{-1R} \mathbf{O}^R \mathcal{P}^R \mathbf{u}_6^{-1R} \mathbf{A}_2^{-1R} = {}^R\mathbf{A}_2^{-1R} \mathbf{u}_3^{-1R} \mathbf{O}^R \mathcal{P}^R \mathbf{A}_0^{-1R} \mathbf{u}_6^{-1R} \end{aligned}$$

benutzt. Die zweite Relation ist

$${}^R\mathbf{u}_0 {}^R\mathbf{u}_1 {}^R\mathbf{u}_2 {}^R\mathbf{u}_1^{-1} = {}^R\mathbf{u}_1 {}^R\mathbf{u}_2 {}^R\mathbf{u}_1^{-1} {}^R\mathbf{u}_0 \quad (\text{III.A.38})$$

und schließlich finden wir

$${}^R\mathbf{O}^R \mathbf{u}_0^{-1R} \mathbf{u}_1 {}^R\mathbf{u}_2 {}^R\mathbf{u}_1^{-1} = {}^R\mathbf{u}_0^{-1R} \mathbf{u}_1 {}^R\mathbf{u}_2 {}^R\mathbf{u}_1^{-1} \mathbf{O}. \quad (\text{III.A.39})$$

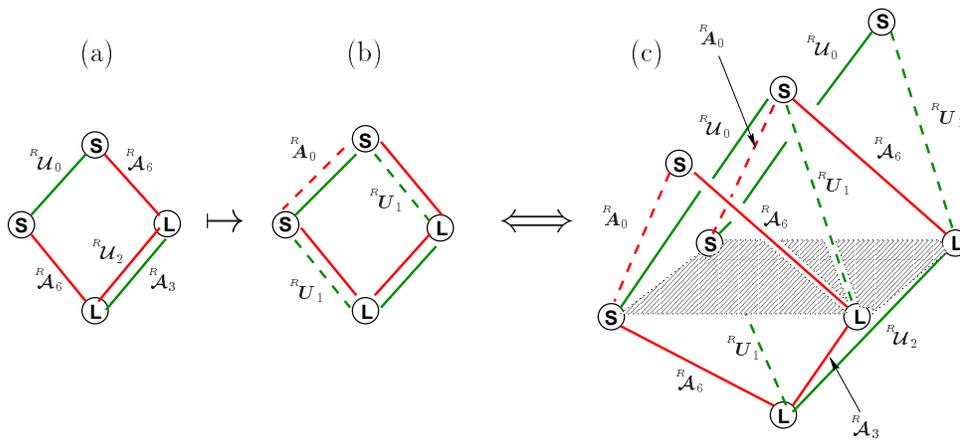


Abbildung III.A.8: Subgraph zu den Relationensystem (III.A.40).

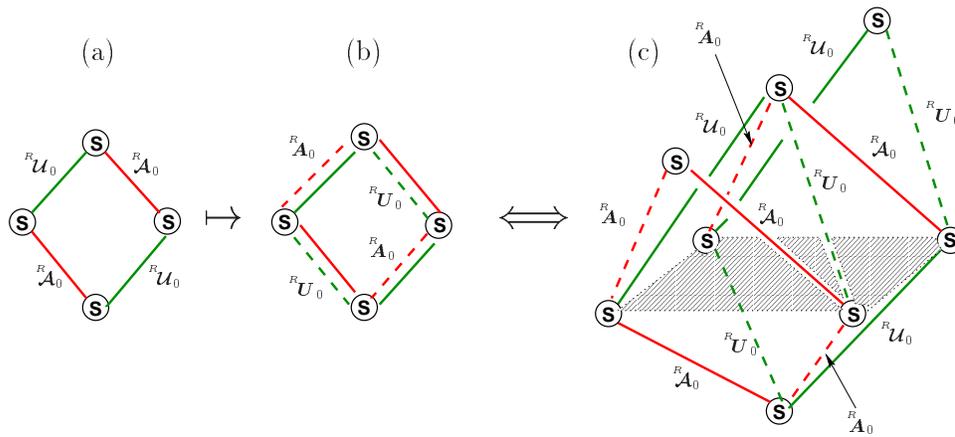


Abbildung III.A.9: Subgraph zu den Relationensystem (III.A.41).

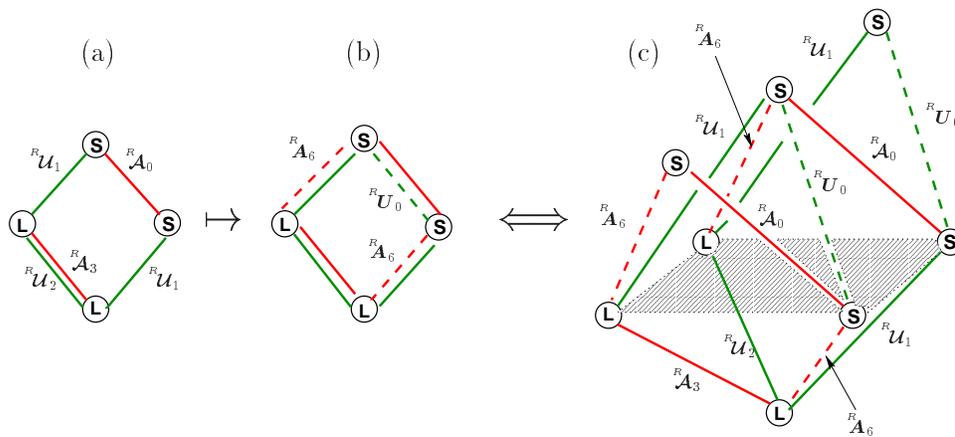


Abbildung III.A.10: Subgraph zu den Relationensystem (III.A.42).

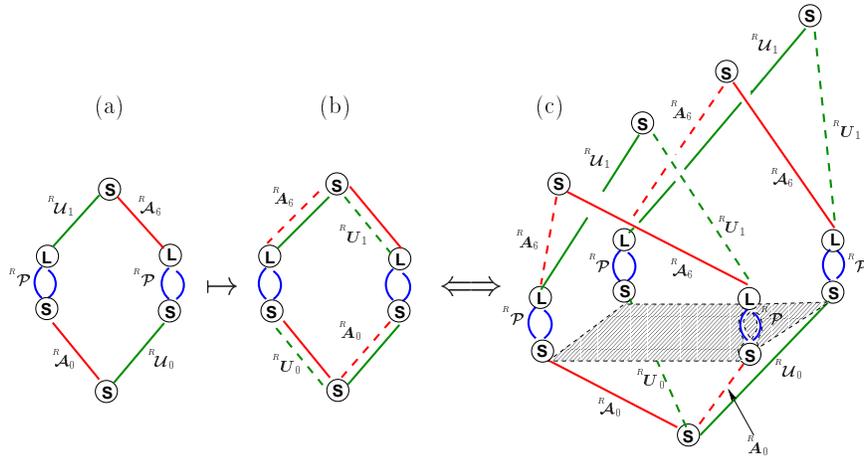


Abbildung III.A.11: Subgraph zu den Relationensystem (III.A.43).

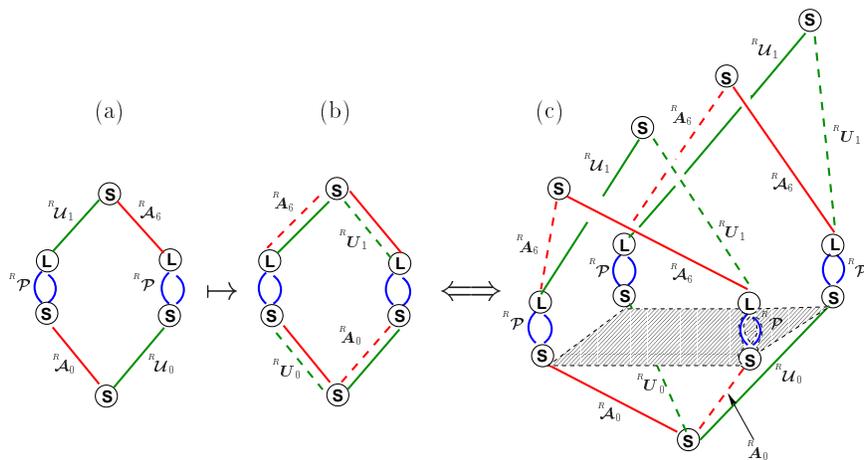


Abbildung III.A.12: Subgraph zu den Relationensystem (III.A.44).

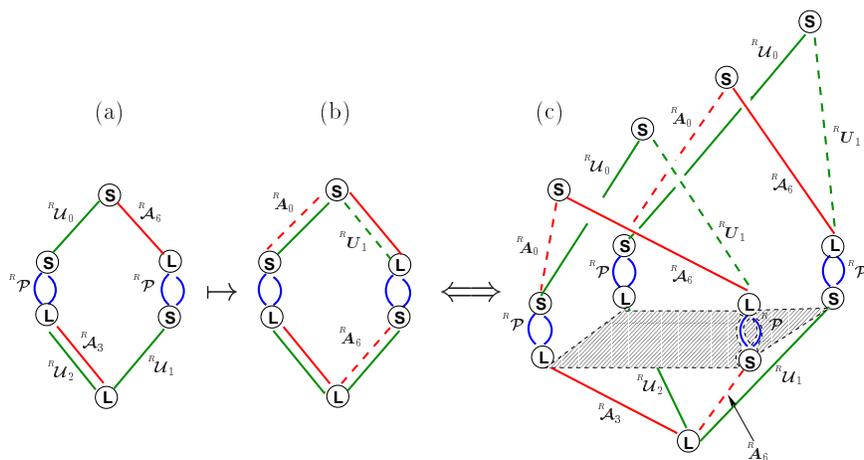


Abbildung III.A.13: Subgraph zu den Relationensystem (III.A.45).

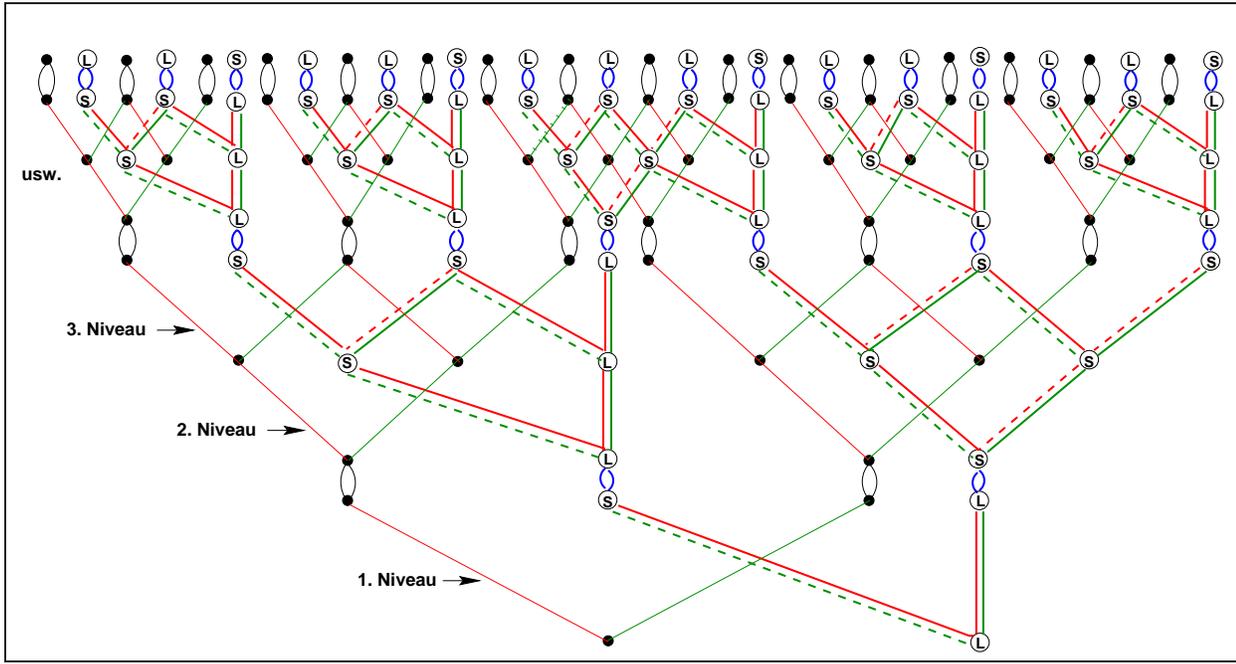


Abbildung III.A.14: *Gelifteter  $\Phi$ -Graph* (Projektion auf die Zeichenebene).

Zusammen mit den Definitionen (III.A.36)–(III.A.37), sowie (III.A.12) und (III.A.13) benutzt man diese Ergebnisse bei der Ableitung der nun folgenden Relationen. Zunächst finden wir

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{A}_6 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{A}_3, & {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_1 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2, & {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{U}_2 &= {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{U}_1, \\ {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_6 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{A}_3, & {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{A}_3 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2, & {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_1 &= {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_6. \end{aligned} \quad (\text{III.A.40})$$

Man erkennt, daß dem zugehörigen Loop in Abb. III.A.13 (s. Abb. III.A.14(a)) in der Tat der in Abb. III.A.8(c) dargestellte 3-D Subgraph von  $\mathcal{RG}$  entspricht. In demselben Stil rechnet man aus, daß

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{A}_0 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{A}_0, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{U}_0 &= {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{U}_0, \\ {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_0 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_0 = {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_0 = {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_0 \end{aligned} \quad (\text{III.A.41})$$

(vgl. Abb. III.A.9(c)). Schließlich findet man

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{A}_3 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{A}_6, & {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_1, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{U}_1 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{U}_2, \\ {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{A}_3 &= {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_6, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_6 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_1, & {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{A}_3 \end{aligned} \quad (\text{III.A.42})$$

(vgl. Abb. III.A.10(c)). Die zugehörigen Projektionen sind in den jeweiligen (b)– bzw. (a)–Teilen der genannten Abbildungen dargestellt.

Die zweite Klasse von Relationen, welche in Abb. III.A.3 auftreten, enthalten zusätzlich die RT  ${}^R\mathcal{P}$ . Man rechnet leicht nach, daß

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_0 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_0, & {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0, \\ {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_0 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_0, & {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_0, \end{aligned} \quad (\text{III.A.43})$$

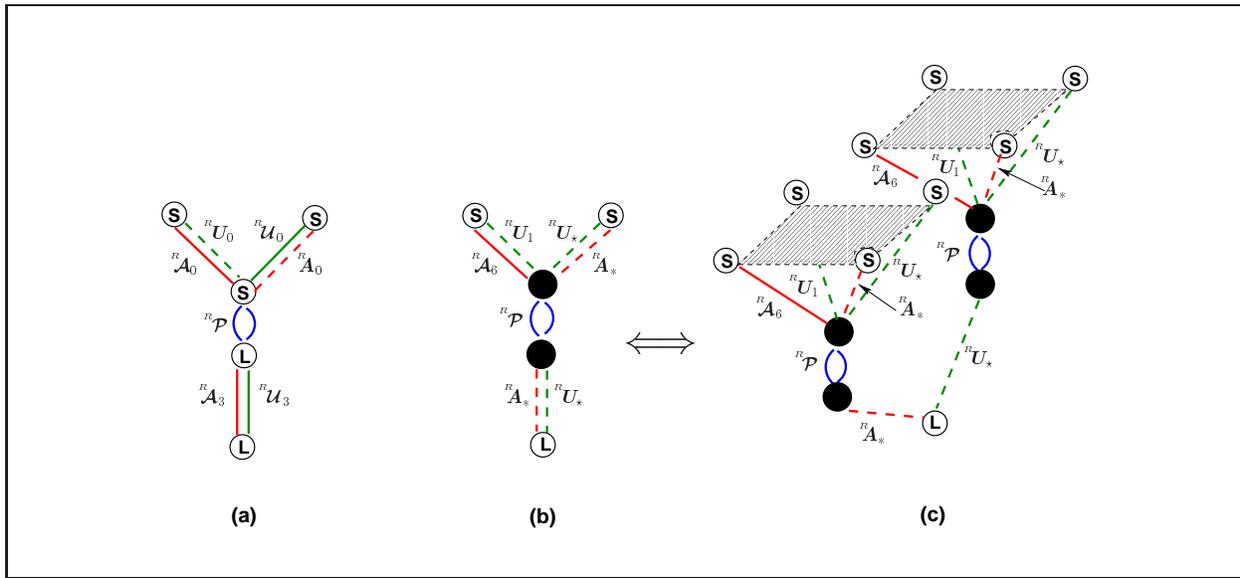


Abbildung III.A.15: Der  $\Phi$ -Graph lässt sich mittels des gezeigten “lokalen Darstellungswechsels” strukturell faktorisieren.

(s. Abb. III.A.11(c)) und

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_3 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_6, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_2 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1, \\ {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_2 &= {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_3 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_6, \end{aligned} \quad (\text{III.A.44})$$

(s. Abb. III.A.12(c)), und schließlich

$$\begin{aligned} {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_6 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_3, & {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_2 &= {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1, \\ {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_1 &= {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{U}_2, & {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_6 &= {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{P} {}^R\mathcal{A}_3, \end{aligned} \quad (\text{III.A.45})$$

(s. Abb. III.A.13(c)).

Die dritte Klasse von Relationen, die wir bei der Konstruktion unserer 3-D Subgraphen von  $\mathcal{RG}$  benötigen, werden durch Lemma III.A.1 festgelegt. Damit haben wir sämtliche Bausteine definiert. Ausgehend von Abb. III.A.3 kann man nun mittels der in den Abb. III.A.8(c)–III.A.13(c) dargestellten Subgraphen das zu Abb. III.A.3 gehörende 3-D Original konstruieren. Da der Autor etwas weniger versiert ist, was die bildenden Künste betrifft, soll das Erstellen der entsprechenden Bilder dem interessierten Leser überlassen bleiben.

Um unserem Ziel einen Schritt näher zu kommen, streichen wir aus den soeben konstruierten rot-grünen Subgraphen sämtliche Kanten  ${}^R\mathcal{U}_1$  und Kantenzüge  ${}^R\mathcal{A}_6$ . Es ist leicht einzusehen, daß dadurch der Zusammenhang der Subgraphen nicht gefährdet wird, d.h. es ist immer noch *jeder* Vertex mit der Wurzel verbunden. Das Resultat findet man in Abb. III.A.14 abgebildet. Hinterlegt ist dabei wieder die bekannte Struktur des  $\Phi$ -Graphen, nun aber mit einer *anderen* Bedeutung. Aus den oben aufgeführten Relationen (s. a. die Indextabelle zu Lemma III.A.1) leitet man folgenden Zusammenhang her. Im 2-D Graph ist jeder Vertex mit je einem roten und einem grünen Kantenzug mit der Wurzel verbunden. Diesen beiden Kantenzügen entspricht im 3-D Original jeweils *ein*  $\Phi$ -Graph (orthogonal zur Zeichenebene),



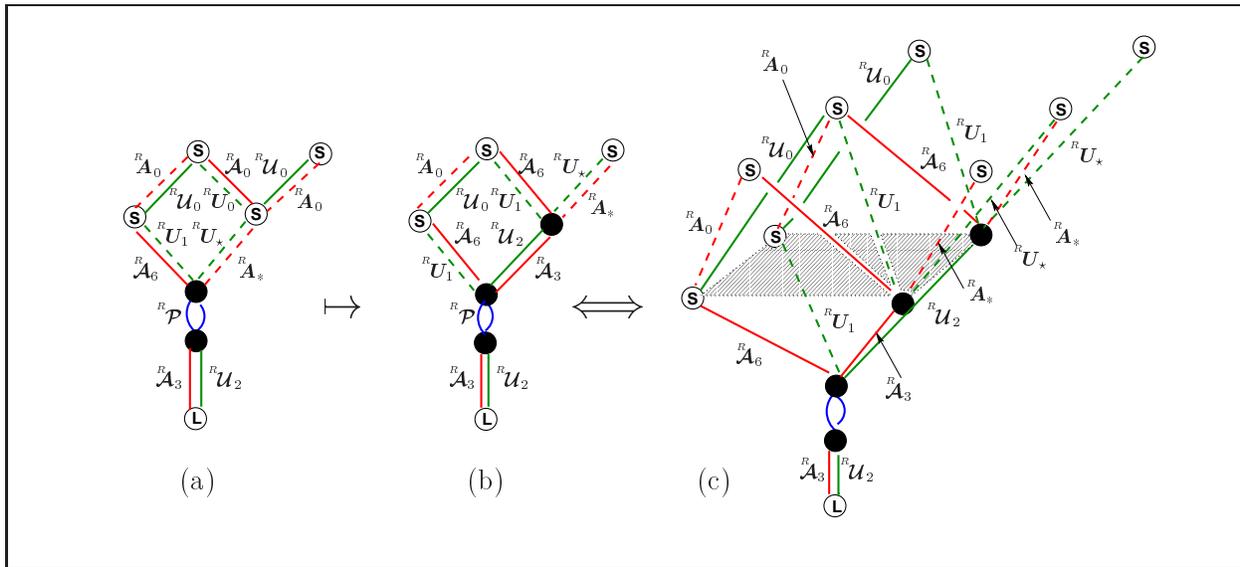


Abbildung III.A.17:

Gebrauch gemacht. Weiterhin gilt

$$\begin{aligned}
 {}^R U_* {}^R \mathcal{P} {}^R A_* &= {}^R \mathcal{P} {}^R A_6^{-1R} A_0 {}^R \mathcal{P} {}^R U_2 {}^R A_6^{-1R} A_0 {}^R \mathcal{P} {}^R A_3 \\
 &= {}^R A_0 {}^R A_0^{-1R} U_0 {}^R A_6 {}^R A_3^{-1R} A_6^{-1R} A_0 {}^R \mathcal{P} {}^R A_3 \\
 &= {}^R A_0 {}^R U_0 {}^R A_0^{-1R} \mathcal{P} {}^R A_3 = {}^R U_0 {}^R \mathcal{P} {}^R A_3 \\
 {}^R U_* {}^R \mathcal{P} {}^R U_* &= {}^R A_0 {}^R A_0^{-1R} U_0 {}^R \mathcal{P} {}^R U_2 = {}^R U_0 {}^R \mathcal{P} {}^R U_2 \\
 {}^R U_1 {}^R \mathcal{P} {}^R A_* &= {}^R U_0 {}^R \mathcal{P} {}^R A_6^{-1R} A_6 {}^R A_3 = {}^R U_0 {}^R \mathcal{P} {}^R A_3 \\
 {}^R A_6 {}^R \mathcal{P} {}^R U_* &= {}^R A_6 {}^R A_3 {}^R A_6^{-1R} \mathcal{P} {}^R A_6^{-1R} A_6 {}^R U_2 \\
 &= {}^R A_0 {}^R U_0 {}^R U_0^{-1R} U_2 = {}^R A_0 {}^R \mathcal{P} {}^R U_2
 \end{aligned} \tag{III.A.46}$$

Unsere Erweiterung hat somit zur Folge, daß neben dem Subgraphen in Abb. III.A.9(c) noch der in Abb. III.A.17(a) abgebildete Subgraph zu berücksichtigen ist. Bei der Konstruktion von Abb. III.A.17(a) haben wir benutzt, daß

$$\begin{aligned}
 {}^R A_0 {}^R A_6 &= {}^R A_0 {}^R A_* \\
 {}^R U_0 {}^R A_6 &= {}^R A_6 {}^R A_3 {}^R U_2 {}^R A_3^{-1R} = {}^R A_0 {}^R U_1 \\
 &= {}^R U_0 {}^R A_0^{-1R} A_6 {}^R A_3 = {}^R U_0 {}^R A_* \\
 &= {}^R A_0 {}^R U_* \\
 {}^R U_0 {}^R U_1 &= {}^R U_0 {}^R A_6 {}^R U_2 {}^R A_3^{-1R} = {}^R U_0 {}^R A_0^{-1R} A_6 {}^R U_2 = {}^R U_0 {}^R U_* \\
 {}^R A_0 {}^R U_* &= {}^R U_0 {}^R A_6 {}^R A_3 {}^R A_6^{-1R} A_0^{-1R} A_6 = {}^R U_0 {}^R A_*.
 \end{aligned} \tag{III.A.47}$$

Um schließlich zur Abb. III.A.16 zu gelangen, brauchen wir noch die Relationen

$$\begin{aligned}
 {}^R A_0 {}^R A_* &= {}^R A_6 {}^R A_3, & {}^R U_0 {}^R A_* &= {}^R U_0 {}^R A_6 = {}^R U_1 {}^R A_3 \\
 {}^R U_0 {}^R A_* &= {}^R U_* {}^R A_3, & {}^R U_0 {}^R U_* &= {}^R U_* {}^R U_2, & {}^R A_0 {}^R U_* &= {}^R A_6 {}^R U_2,
 \end{aligned} \tag{III.A.48}$$

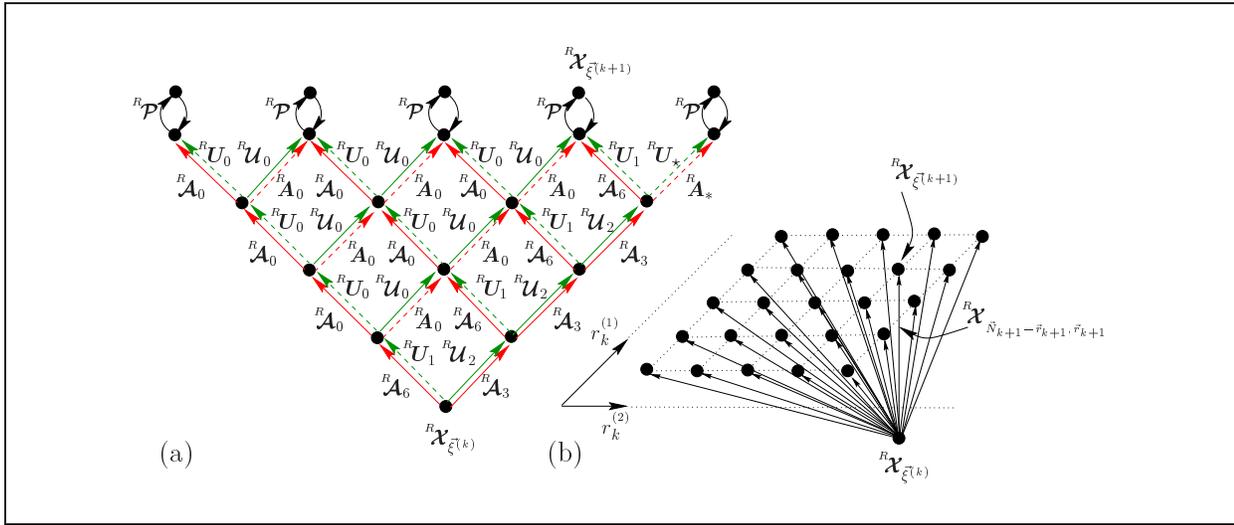


Abbildung III.A.18: Dem Subgraphen von  $\mathfrak{G}^\Phi(\mathcal{R}\mathcal{G}, \mathcal{R}\mathcal{G} \times \mathcal{R}\mathcal{G})$ , der die Punkte  ${}^R\mathcal{X}_{\vec{\xi}^{(k)}}$  und  ${}^R\mathcal{X}_{\vec{\xi}^{(k+1)}}$  miteinander verbindet (in (a)), wird im angegebenen Beispiel auf die Kante  ${}^R\mathcal{X}_{\vec{N}_{k+1}-\vec{r}_{k+1}, \vec{r}_{k+1}}$ , mit  $\vec{N}_{k+1} = N_{k+1}(1, 1) = (4, 4)$  und  $\vec{r}_{k+1} = (r_{k+1}^{(1)}, r_{k+1}^{(2)}) = (3, 3)$  im induzierten Subgraph  $\mathfrak{G}^\Phi({}^R V_{N_n}^*, {}^R E_{N_n}^*)$  (s. (b)) abgebildet.

sowie

$$\begin{aligned}
 {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{A}_* &= {}^R\mathcal{A}_1^{-1R} {}^R\mathcal{A}_2 {}^R\mathcal{A}_1 {}^R\mathcal{A}_0^{-1R} {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{A}_3 = {}^R\mathcal{A}_* {}^R\mathcal{U}_2, \\
 {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{U}_* &= {}^R\mathcal{U}_0 {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2 = {}^R\mathcal{U}_1 {}^R\mathcal{U}_2, \\
 {}^R\mathcal{A}_0 {}^R\mathcal{U}_* &= {}^R\mathcal{A}_1^{-1R} {}^R\mathcal{A}_2 {}^R\mathcal{A}_1 {}^R\mathcal{A}_0^{-1R} {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2 = {}^R\mathcal{A}_0^{-1R} {}^R\mathcal{A}_1^{-1R} {}^R\mathcal{A}_2 {}^R\mathcal{A}_1 {}^R\mathcal{A}_6 {}^R\mathcal{U}_2 \\
 &= {}^R\mathcal{A}_* {}^R\mathcal{U}_2..
 \end{aligned} \tag{III.A.49}$$

Jetzt sind wir in der Lage den Subgraphen Abb. III.A.17(a) durch Abb. III.A.17(b) zu ersetzen. Das 3-D Original findet man wieder im (c)-Teil der Abbildung. Diesen Schritt wiederholt man, bis man zu einem  ${}^R\mathcal{P}^2$ -Loop kommt — damit sind wir bei der in Abb. III.A.16 gezeigten Situation angelangt.

Die Bedeutung der gemachten Schritte erkennt man bei der Betrachtung der zugehörigen induzierten gelifteten  $\Phi$ -Graphen. Analog zu unseren Betrachtungen im vorhergegangenen Abschnitt oder in Kapitel III.2.1, S. 137, definieren wir wieder ein Alphabet

$${}^R\mathcal{A}^\Phi := \bigcup_k {}^R\mathcal{A}_k^\Phi, \quad {}^R\mathcal{A}_k^\Phi := \left\{ {}^R\mathcal{X}'_{\vec{N}_k-\vec{r}_k, \vec{r}_k} \mid \vec{r}_k \in \{0, 1, \dots, N_k\}^2 \right\},$$

wobei die einzelnen  ${}^R\mathcal{X}'_{\vec{N}_k-\vec{r}_k, \vec{r}_k}$  jeweils in Form eines Produktes

$${}^R\mathcal{X}'_{\vec{N}_k-\vec{r}_k, \vec{r}_k} = \prod_{i=1}^{N_k} {}^R\mathcal{M}_{k,i}$$

in den RTs  ${}^R\mathcal{A}_m$ ,  ${}^R\mathcal{U}_m$ ,  ${}^R\mathcal{A}_m$  und  ${}^R\mathcal{U}_m$ , mit  $m = 1, \dots, 6$  und dem Index  $*$ , gemäß Abb. III.A.18 derart definiert werden, daß zwischen den Zahlen  $\vec{r}_k$  und den genannten Substitutionen der

folgende Zusammenhang besteht

$$\vec{N}_k = N_k \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{r}_k = \sum_{i=1}^{N_k} \begin{pmatrix} r_{k,i}^{(1)} \\ r_{k,i}^{(2)} \end{pmatrix},$$

wobei  $r_{k,i}^{(1)} := 0$  (bzw.  $r_{k,i}^{(1)} := 1$ ) genau dann gilt, wenn die Farbe der  $i$ -ten Kante  ${}^R\mathcal{M}_{k,i}$  (von  ${}^R\mathcal{X}_{\vec{\xi}^{(k)}}$  beginnend) *rot* (d.h.  ${}^R\mathcal{M}_{k,i} \in \{{}^R\mathcal{A}_m, {}^R\mathcal{A}_m\}$ ) (bzw. die Kante *grün* (d.h.  ${}^R\mathcal{M}_{k,i} \in \{{}^R\mathcal{U}_m, {}^R\mathcal{U}_m\}$ )) ist und  $r_{k,i}^{(2)} := 0$  (bzw.  $r_{k,i}^{(2)} := 1$ ) genau dann gilt, wenn die zugehörige Kante *linksgeneigt* (d.h.  ${}^R\mathcal{M}_{k,i} \in \{{}^R\mathcal{A}_m, {}^R\mathcal{U}_m\}$ ) (bzw. die Kante *rechtsgeneigt* (d.h.  ${}^R\mathcal{M}_{k,i} \in \{{}^R\mathcal{A}_m, {}^R\mathcal{U}_m\}$ )) ist. Unter der Berücksichtigung der Graphen Abb. III.A.8 — III.A.13, III.A.15 und III.A.17 erkennt man leicht, daß diese Zuordnung konsistent ist. Es ist wichtig im Gedächtnis zu behalten, daß wir aufgrund des lokalen Darstellungswechsels statt den zu  $\mathcal{X}_{\xi^{(k)}}$  gehörenden RTs  ${}^R\mathcal{X}_{\vec{\xi}^{(k)}}$  die leicht modifizierten RTs  ${}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k)}}$  betrachten! Aus der Struktur der genannten Graphen folgt weiter, daß die Relation (III.A.22) von S. 183 interessanterweise folgendes Pendant besitzt

$${}^R\mathcal{X}'_{\vec{M}_k - \vec{s}_k - 1, \vec{s}_k + 1} \quad {}^R\mathcal{X}'_{0, \vec{M}_k + 1} \quad {}^R\mathcal{X}'_{\vec{M}_k + 2 - \vec{s}_k + 2, \vec{s}_k + 2} = {}^R\mathcal{X}'_{\vec{M}_k - \vec{s}_k, \vec{s}_k} \quad {}^R\mathcal{X}'_{\vec{M}_k + 1, 0} \quad {}^R\mathcal{X}'_{\vec{M}_k + 2 - \vec{s}_k + 2 - 1, \vec{s}_k + 2 + 1}, \quad (\text{III.A.50})$$

wobei  $\vec{M}_k$  und  $\vec{s}_k$  die offensichtliche Verallgemeinerung von  $M_k$  und  $s_k$  ist. Damit können wir in Analogie zum letzten Abschnitt die entsprechenden induzierten Subgraphen  $\mathfrak{G}_{gF}^\Phi({}^R V_{\mathcal{N}_n}^\star, {}^R E_{\mathcal{N}_n}^\star) \subset \mathfrak{G}^\Phi(\mathcal{R}\mathfrak{G}, \mathcal{R}\mathfrak{G} \times \mathcal{R}\mathfrak{G})$  definieren. Sei

$${}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(n)}} := \prod_{k=1}^n {}^R\mathcal{X}'_{\vec{N}_k - \vec{r}_k, \vec{r}_k}, \quad \text{mit} \quad \vec{\xi}^{(n)} := \begin{pmatrix} \xi_1^{(n)} \\ \xi_2^{(n)} \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^n \vec{s}_k f_{k-1}.$$

${}^R V_{\mathcal{N}_n}^\star$ , ist für ein gegebenes  $\mathcal{N}_n$ , die Punktmenge

$${}^R V_{\mathcal{N}_n}^\star := \bigcup_{k=1}^n {}^R V_{\mathcal{N}_n}^{(k)\star} \cup \{\mathbf{1}\} = \bigcup_{k=1}^n \{ {}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k)}} \mid \vec{\xi}^{(k)} \in \mathbb{I}_2^{(k)} \times \mathbb{I}_2^{(k)} \} \cup \{\mathbf{1}\},$$

mit  $\mathbb{I}_2^{(k)} := \{0, 1, \dots, f_k + f_{k-1} - 2\}$  und  ${}^R E_{\mathcal{N}_n}^\star$  die Menge der Kanten  $e_{\vec{s}_k} := ({}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k)}}, {}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k-1)}})$

$${}^R E_{\mathcal{N}_n}^\star := \bigcup_{k=1}^n \left\{ {}^R\mathcal{X} \in {}^R\mathcal{A}_k^\Phi \mid {}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k)}} = {}^R\mathcal{X}' \cdot {}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k-1)}}, ({}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k)}}, {}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k-1)}}) \in {}^R V_{\mathcal{N}_n}^{(k)\star} \times {}^R V_{\mathcal{N}_n}^{(k-1)\star} \right\}$$

**Theorem III.A.3** Seien die Super-Inflationen  $\Lambda_{N_k}$ ,  $N_k \in \mathbb{N}$  wie in (III.A.26)–(III.A.28) aus Theorem III.A.1 definiert, wobei wir nun statt (III.A.29) jeweils ein Paar

$$\sigma_{\vec{\xi}^{(k)}} := \sigma_{\xi_1^{(k)}} \times \sigma_{\xi_2^{(k)}} \equiv (\sigma_{\xi_1^{(k)}}, \sigma_{\xi_2^{(k)}}) \longleftrightarrow {}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k)}}.$$

mit  ${}^R\mathcal{X}'_{\vec{\xi}^{(k)}}$ ,  $\xi^{(k)} = 0, 1, \dots, f_k - 1$ , identifiziert, dann kann man formal schreiben (= “**strukturelle Faktorisierung**” in zwei in ihrer topologischen Struktur gleichen  $\Phi$ -Graphen  $\mathfrak{G}^\Phi(V_{\mathcal{N}_n}^\star, E_{\mathcal{N}_n}^\star)$ )

$$\mathfrak{G}^\Phi({}^R V_{\mathcal{N}_n}^\star, {}^R E_{\mathcal{N}_n}^\star) = \prod_{k=2}^n (\Lambda_{N_k} \times \Lambda_{N_k}) \left[ \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \alpha_1 \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circ \quad \circ \quad \cdots \quad \circ \\ \circ \quad \circ \quad \cdots \quad \circ \\ \alpha_0 \end{array} \times \begin{array}{c} \gamma_0 \quad \alpha_1 \quad \alpha_y \quad \beta_z \\ \circ \quad \circ \quad \cdots \quad \circ \\ \circ \quad \circ \quad \cdots \quad \circ \\ \alpha_0 \end{array} \right].$$

Durch die definierenden Relationen (III.A.50) sind hierbei wieder durch zu (III.A.30) analoge „Verknüpfungsregeln“ zusammen mit der entsprechenden Anwendung der Wort-Relation (III.A.34) zu berücksichtigen. ♣

Damit sind wir fast am Ende dieser langen Graphenodyssee angelangt. Es verbleiben noch zwei wichtige Bemerkungen anzufügen. Aus vorangegangenem Theorem kann man gemäß der Ausführungen am Ende des vorherigen Abschnittes aufgrund der Faktorisierungseigenschaften unmittelbar den zugehörigen  $\Gamma$ -Graphen konstruieren. Man kann nun zweitens zeigen, daß immer

$$\left({}^R\mathcal{X}'_{\tilde{\xi}^{(k)}}\right)^{-1}(\vec{x}|1, 0) = \left({}^R\mathcal{X}_{\tilde{\xi}^{(k)}}\right)^{-1}(\vec{x}|1, 0)$$

erfüllt wird, *deshalb* ist die Faktorisierung, wie sie durch den lokalen Darstellungswechsel erreicht wurde, in der Tat der Schlüssel zu einer vollständigen Lösung des Kodierungsproblems bei der rekursiven Bestimmung sämtlicher Nicht-Diagonal-Elemente der Green'schen Funktion bzw. der rekursiven Berechnung von Wellenfunktionen mit nicht-periodischen Randbedingungen, ein nach unserem Wissen in der Literatur bisher völlig unbekanntes, neue Möglichkeit.

# Anhang III.B

## Brevier der Zahlentheorie — Farey–Baum $\mathfrak{T}_F^\Gamma(V, E)$

Wir wollen uns in diesem Anhang mit einigen wichtigen Eigenschaften von Kettenbrüchen und deren Beziehung zu den Nielsen–Transformationen über 2–Buchstabenalphabeten befassen<sup>1</sup>. Hierbei spielt die Approximation einer irrationalen Zahl  $\lambda$  durch eine Folge von Kettenbrüchen  $(\lambda^{(n)})_{n \geq 1}$  eine wichtige Rolle. Es ist bekannt, daß die zahlentheoretische Eigenschaft der Irrationalität die Natur des Spektrums  $\sigma(\mathfrak{H})$  verschiedener quasiperiodischer Hamilton–Operatoren beeinflussen kann. Deshalb werden wir die für uns wichtigsten Fakten hierzu im zweiten Abschnitt dieses Anhangs kurz zusammenstellen. Die meisten der im Folgenden geschilderten Ergebnisse sind im Prinzip bekannt. Deshalb können wir für weitergehende Aussagen getrost auf die einschlägige Literatur verweisen (s. z.B. [Per54/57, Jon80]). Im ersten Abschnitt wollen wir den sog. **Farey–Baum** vorstellen. Dieser binäre Baum liefert eine binäre Codierung aller reellen Zahlen im Intervall  $(0, 1]$ . Wir werden sehen, daß sich alle Pfade durch Worte aus  $\pi(\Phi_2^+)$  (s. Kapitel III.2.1) darstellen lassen. Die von uns in Kapitel III.2.1 vorgestellten hierarchischen Graphen bilden somit die “*dritte Dimension*” des Farey–Graphen.

Der Leser sei ermuntert, sich im Folgenden immer wieder die Analogien zu unseren Diskussionen am Schluß von Anhang II.A.2 zu vergegenwärtigen, ohne jedoch den fundamentalen Unterschied zu übersehen. Während die Parameter  $\sigma^{(ij)}, t_{x_k}$ , bzw. die Matrizen  $T_{\sigma^{(ij)}}$ , im Ortsraum selbst leben, sind hier  $b_k, a_k$  bzw.  $S_{M_k}$  (s. unten) unzertrennlich mit speziellen *Renormierungstransformationen* der Parameter  $\sigma^{(ij)}, t_{x_k}$ , verknüpft.

### III.B.1 Farey–Baum $\mathfrak{T}_F^\Gamma(V, E)$ und Nielsen–Transformationen

In Kapitel I.1.1 (s. S. 9) haben wir uns mit der “kanonischen Projektion”  $\pi$  beschäftigt, wobei

$$\Gamma\text{-Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_2)) \xrightarrow{\pi} \mathbb{M}_2(\mathbb{Z}) \xrightarrow{\pi'} \mathbb{P}\mathbb{M}_2(\mathbb{Z}).$$

---

<sup>1</sup>Eine Betrachtung zu möglichen Verallgemeinerungen der Kettenbruchentwicklung auf  $\Lambda$ –Buchstaben–Alphabete findet man bei [Yos96].

Sei  $\mathbf{M} \in \Gamma\text{-Hom}(\mathbb{F}(\mathcal{A}_2))$ . Mit  $\mathbb{M}_2(\mathbb{Z})$  bezeichnen wir das Monoid aller ganzzahligen  $(2 \times 2)$ -Substitutionsmatrizen

$$\mathbf{S}_M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{Z}.$$

$\mathbb{P}\mathbb{M}_2(\mathbb{Z})$  sei das Monoid der *linearen rationalen Transformationen* (gelegentlich als **Möbius-Transformationen** bezeichnet)

$$S_M(\lambda) = \frac{a\lambda + b}{c\lambda + d} \in \mathbb{P}\mathbb{M}_2(\mathbb{Z}) = \mathbb{M}_2(\mathbb{Z})/\{\pm \mathbf{I}\}, \quad (\text{III.B.1})$$

d.h.  $\alpha'$  ordnet jedem Paar  $\pm \mathbf{S}_M$  aus  $\mathbb{M}_2(\mathbb{Z})$  ein Element  $S_M(\lambda)$  aus  $\mathbb{P}\mathbb{M}_2(\mathbb{Z})$  zu. Wir werden in diesem Anhang durchweg  $ad - bc \neq 0$  annehmen<sup>2</sup>. Die Menge der  $\mathbf{S}_M$  (bzw.  $S_M(\lambda)$ ) mit  $ad - bc = \pm 1$  bilden die Gruppe  $\mathbb{G}\mathbb{L}_2(\mathbb{Z}) \subset \mathbb{M}_2(\mathbb{Z})$  (bzw.  $\mathbb{P}\mathbb{G}\mathbb{L}_2(\mathbb{Z}) \subset \mathbb{P}\mathbb{M}_2(\mathbb{Z})$ ). Die Möbius-Transformationen (III.B.1) sind auf das Engste mit den Kettenbrüchen verknüpft. Seien  $(a_k)_{k \geq 1}$  und  $(b_k)_{k \geq 1}$  zwei Folgen ganzer Zahlen mit  $a_k \neq 0$  für alle  $k$ , und

$$\lambda^{(n)} = S^{(n)}(0), \quad n \in \mathbb{N}, \quad (\text{III.B.2})$$

wobei

$$S^{(1)}(\lambda) = S_{M_1}(\lambda), \quad S^{(k)}(\lambda) = S^{(k-1)}(S_{M_k}(\lambda)) = S_{M_1} \circ S_{M_2} \circ \dots \circ S_{M_k}(\lambda)$$

für  $k = 2, \dots, n$ , mit

$$\begin{aligned} S_{M_1}(\lambda) &= b_1 + \lambda \xleftarrow{\pi'} \mathbf{S}_{M_1} = \mathbf{S}_A = \mathbf{S}_{A^{b_1 P}}^\top \mathbf{S}_P \xleftarrow{\pi} \mathbf{M}_1 = \mathbf{A}^{b_1}, \mathbf{U}^{b_1}, \\ S_{M_k}(\lambda) &= \frac{a_k}{b_k + \lambda} \xleftarrow{\pi'} \mathbf{S}_{M_k} = \mathbf{S}_P \mathbf{S}_{A^{b_k E_{a_k P}}}^\top \mathbf{S}_P \xleftarrow{\pi} \mathbf{M}_k = \mathbf{E}_{a_k} \mathbf{P} \mathbf{A}^{b_k}, \mathbf{E}_{a_k} \mathbf{P} \mathbf{A}^{b_k}. \end{aligned} \quad (\text{III.B.3})$$

Die Substitutions-Matrizen  $\mathbf{S}_A$  und  $\mathbf{S}_P$  wurden in (I.22), S. 9,  $\mathbf{S}_{E_a}$  in (I.37), S. 19, definiert. Aus

$$\mathcal{P}\mathcal{E}_a \mathcal{A}^b : L \rightarrow L^b S^a, S \rightarrow L \xrightarrow{\pi} \mathbf{S}_{A^{b E_a P}} = \begin{pmatrix} b & a \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

ergibt sich der Zusammenhang zwischen den Substitutionen aus Kapitel **III.2** und Kapitel **III.3** auf der einen Seite und den Möbius-Transformationen (III.B.3) auf der anderen. Es ergibt sich unmittelbar, daß (III.B.2) den Kettenbruch

$$\lambda^{(n)} = b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \dots \frac{a_n}{b_n}}}, \quad (\text{III.B.4})$$

definiert. Hier ist  $\mathbf{K}_{k=1}^n(a_k/b_k)$  das sog. **Kettenbruchsymbol**. Seien (vgl. die analogen Konstruktionsvorschriften der Fundamentallösungen in Anhang **II.A.2**)

$$P_k = b_k P_{k-1} + a_k P_{k-2}, \quad Q_k = b_k Q_{k-1} + a_k Q_{k-2}, \quad a_1 = 1, \quad k = 1, 2, \dots,$$

<sup>2</sup>Damit werden singuläre Substitutionen, wie z.B. die Thue-Morse-Folge, ausgeschlossen.

mit den Anfangsbedingungen  $(P_{-1}, Q_{-1}) = (0, 1)$  und  $(P_0, Q_0) = (1, 0)$ . Dann gilt (vgl. [Jon80, S. 20])

$$S^{(n)}(\lambda) = \frac{P_n + \lambda P_{n-1}}{Q_n + \lambda Q_{n-1}} \stackrel{\pi'}{\leftarrow} \mathbf{S}^{(n)} = \mathbf{S}_{M_1} \mathbf{S}_{M_2} \cdots \mathbf{S}_{M_n} = \mathbf{S}_{1 \rightarrow n}^\top \mathbf{S}_P.$$

( $\det(\mathbf{S}^{(n)}) = (-1)^{-1} \prod_{k=1}^n a_k$ ), wobei  $\mathbf{S}_{1 \rightarrow n}$  in (III.36) für den Spezialfall  $a_k = 1$  definiert wurde. Auch die Umkehrung hiervon ist gültig, d.h., sind  $(P_k)_{k \geq -1}$  und  $(Q_k)_{k \geq -1}$  zwei Folgen ganzer Zahlen mit  $(P_{-1}, Q_{-1}) = (0, 1)$ ,  $(P_0, Q_0) = (1, 0)$  und  $P_k Q_{k-1} - P_{k-1} Q_k \neq 0$  für alle  $k$ , dann existiert eine eindeutig bestimmte Folge von Kettenbrüchen (III.B.4) mit  $\lambda^{(k)} = P_k/Q_k$  für alle  $k \geq 1$ , wobei  $b_1 = P_1$ ,  $a_2 = P_2 - P_0 Q_1$ ,  $b_2 = Q_2$  und

$$a_k = \frac{P_{k-1} Q_k - P_k Q_{k-1}}{P_{k-1} Q_{k-2} - P_{k-2} Q_{k-1}}, \quad b_k = \frac{P_k Q_{k-2} - P_{k-2} Q_k}{P_{k-1} Q_{k-2} - P_{k-2} Q_{k-1}}, \quad k \geq 2.$$

Ein bedeutender Spezialfall von (III.B.4) ist der sog. **reguläre Kettenbruch**, für den  $a_k = 1$  für alle  $k$  gilt (wir wollen uns auf den spezielleren Fall  $b_k \in \mathbb{N}, k \geq 2$ , beschränken):

$$\lambda^{(n)} = b_1 + \mathbf{K}_{k=2}^n \left( \frac{1}{b_k} \right) \equiv [b_1; b_2, b_3, \dots, b_n], \quad b_1 \in \mathbb{Z}, b_k \in \mathbb{N}, k \geq 2. \quad (\text{III.B.5})$$

Die zugehörigen Möbius-Transformationen sind nun Elemente von  $\mathbf{GL}_2(\mathbb{Z})$ . Reguläre Kettenbrüche haben eine Reihe von bemerkenswerten Eigenschaften, von denen wir folgende erwähnen wollen (s. [Per54/57] oder z.B. [Har60], Kapitel X, XI):

- Die **reguläre Kettenbruchentwicklung** (III.B.5) einer positiven reellen Zahl  $\lambda$  ist rekursiv durch (Euklidischer Algorithmus)

$$\lambda^{(k)} = [\lambda^{(k)}] + \{\lambda^{(k)}\} =: b_k + \frac{1}{\lambda^{(k+1)}}, \quad \text{mit } 0 \leq \{\lambda^{(k)}\} =: \frac{1}{\lambda^{(k+1)}} < 1$$

für  $k = 1, 2, \dots$  definiert, wobei  $\lambda^{(1)} := \lambda$ .  $[\lambda]$ , bzw.  $\{\lambda\}$ , der ganzzahlige, bzw. dezimale, Anteil von  $\lambda$  ist. Das Verfahren bricht ab, wenn  $\{\lambda^{(n)}\} = 0$ . Jede *irrationale* Zahl  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$  läßt sich in eindeutiger Weise in einen *unendlichen*, konvergenten regulären Kettenbruch entwickeln, d.h. zu jeder irrationalen Zahl gehört genau eine unendliche Folge  $(b_k)_{k \geq 1}$ , mit  $b_1 \in \mathbb{Z}$  und  $b_k \in \mathbb{N}^+$  für  $k \geq 2$ . Umgekehrt konvergiert jeder unendliche reguläre Kettenbruch gegen eine irrationale Zahl, deren reguläre Kettenbruchentwicklung er ist. Jede *rationale* Zahl hat eine *endliche* reguläre Kettenbruchentwicklung und umgekehrt. Insbesondere läßt sich jeder Kettenbruch (III.B.4) mit beliebigen  $a_k$  in einen regulären Kettenbruch überführen. Die Eindeutigkeit der Kettenbruchentwicklung geht für endliches  $n$  verloren, wie man der Beziehung

$$[\dots, b_{n-1}, b_n] = \begin{cases} [\dots, b_{n-1} + 1], & b_n = 1 \\ [\dots, b_{n-1}, b_n - 1, 1], & b_n > 1 \end{cases}.$$

entnimmt. Durch die zusätzliche Forderung  $1/\lambda^{(n)} < 1$  läßt sich auch hier Eindeutigkeit erzwingen. Damit gleichbedeutend ist die Forderung, daß  $b_n \geq 2$ . So wird dann beispielsweise  $\frac{1}{2}$  durch  $[0; 2]$  und nicht durch  $[0; 1, 1]$  dargestellt.

- *Gesetz der besten Approximation*: Es gelten immer die Ungleichungen  $\lambda^{(2n-2)} < \lambda^{(2n)} < \lambda < \lambda^{(2n+1)} < \lambda^{(2n-1)}$  für  $n \geq 1$ , d.h. die Folgen  $(\lambda^{(2n)})_{n \geq 1}$ , bzw.  $(\lambda^{(2n+1)})_{n \geq 1}$ , sind streng monoton zunehmend, bzw. abnehmend. Der Grenzwert für beide Folgen ist gleich, d.h. es existiert

$\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda^{(n)} = \lambda$ . Man bezeichnet die durch den regulären Kettenbruch (III.B.5) gegebenen rationalen Approximanten  $\lambda^{(n)} = P_n/Q_n$ , mit  $P_n \in \mathbb{Z}$  und  $Q_n \in \mathbb{N}$  als die **beste Approximation** der irrationalen Zahl  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ , denn es gilt

$$\left| \lambda - \frac{P_n}{Q_n} \right| < \left| \lambda - \frac{p}{q} \right|, \quad \text{für alle } p \in \mathbb{Z}, q \in \mathbb{N} \text{ mit } q \leq Q_n.$$

Ein Ergebnis von Hurwitz (s. [Niv72], S. 164 ff.) lehrt, daß man zu jedem irrationalen (rationalen)  $\lambda$  unendlich (endlich) viele Lösungen der Ungleichung  $|\lambda - \lambda^{(n)}| < 1/(\sqrt{5}Q_n^2)$  finden kann, wobei die Konstante  $\sqrt{5}$  die bestmögliche ist, d.h. ist die Konstante größer als  $\sqrt{5}$ , so gibt es irrationale Zahlen, für die die Ungleichung nur noch endlich viele Lösungen besitzt. Ein Beispiel hierzu ist wieder die goldene Zahl  $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{2}(\sqrt{5}+1)$ ! Zu einer weitergehenden Diskussion vgl. auch [Cas57]. Zur Verdeutlichung der Aussage der Ungleichung diene die Kettenbruchentwicklung von  $\pi = [3; 7, 15, 1, 292, 1^3, \dots]$ . Es ist  $P^{(2)}/Q^{(2)} = [3; 7] = 22/7$ . Die Aussage der “besten Approximation” bedeutet, daß es keine rationale Zahl  $p/q$  mit  $q \leq 7$  gibt, welche  $\pi$  besser approximiert, als  $22/7$ .

- Eine Äquivalenzrelation ([Har60, S. 141 ff.] oder [Per54/57, S. 54 ff.](a)): Zwei Zahlen  $\lambda, \eta \in \mathbb{R}$  heißen **äquivalent** ( $\lambda \sim \eta$ ), wenn<sup>3</sup>

$$\lambda = S_M(\eta) = \frac{a\eta + b}{c\eta + d}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{Z}, \quad ad - bc = \pm 1.$$

Dann gilt:  $\lambda \sim \eta$  für alle rationalen  $\lambda, \eta \in \mathbb{Q}$ . Sind  $\lambda, \eta \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ , d.h. irrational, mit  $\lambda = [a_1; a_2, \dots]$  und  $\eta = [b_1; b_2, \dots]$ , dann ist  $\lambda \sim \eta$  genau dann, wenn  $a_{n_1+k} = b_{n_2+k} =: c_k$ , für alle  $k \geq 1$  und endliche  $n_1, n_2$ , d.h., wenn

$$\lambda = [a_1; a_2, \dots, a_{n_1}, \xi], \quad \eta = [b_1; b_2, \dots, b_{n_2}, \xi], \quad \text{mit } \xi = [c_1; c_2, c_3, \dots].$$

So gilt z.B.  $\sqrt{2} = [1; \bar{2}] \sim [\bar{2}] = \sqrt{2} + 1$ , aber  $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{2}(\sqrt{5} + 1) = [\bar{1}] \not\sim [2; \bar{4}] = \sqrt{5}$ .

Eine mögliche Überdeckung des Einheitskreises in nahezu gleichförmig verteilte Intervalle  $(\frac{p}{q} - \frac{1}{\sqrt{5}q^2}, \frac{p}{q} + \frac{1}{\sqrt{5}q^2})$  durch rationale Zahlen geht auf Farey zurück. Eine **Farey-Folge**  $\mathcal{F}_p$  der Ordnung  $p$  ist eine streng monoton wachsende Folge aller irreduziblen rationalen Zahlen  $F_\mu = p_\mu/q_\mu \in (0, 1]$ , wobei  $0 < q_\mu \leq p_\mu \leq p$ , mit  $p_\mu, q_\mu \in \mathbb{N}$  und  $\text{ggT}(p_\mu, q_\mu) = 1$ . So gilt z.B.

$$\mathcal{F}_5 = (F_\mu)_\mu = \left( \frac{1}{5}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{1}{2}, \frac{3}{5}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}, \frac{4}{5}, \frac{1}{1} \right).$$

Die Anzahl der Elemente in  $\mathcal{F}_p$  ist  $\Phi(p) = \sum_{k=1}^p \phi(k) \approx 3p^2/\pi^2$  [Har60, S. 268], wobei  $\phi(k)$  die Eulersche Funktion<sup>4</sup> (s. z.B. [Har60, S. 52 ff.]), ist. Farey-Folgen haben einige interessante Eigenschaften (s. z.B. [Har60], Kapitel III oder [Niv72], Kapitel 6):

- Man bezeichnet als “**Mediant**” (oder “**Farey-Addition**”) (&) zweier Brüche  $\frac{a}{b} < \frac{c}{d}$  den Ausdruck

$$\frac{a}{b} \& \frac{c}{d} := \frac{a+c}{b+d} \in \left( \frac{a}{b}, \frac{c}{d} \right).$$

<sup>3</sup>Man zeigt leicht, daß  $\sim$  in der Tat reflexiv, transitiv und symmetrisch ist [Har60, S. 142].

<sup>4</sup> $\phi(m)$  ist gleich der Anzahl der natürlichen Zahlen  $n$ , für die  $0 < n \leq m$  und  $\text{ggT}(n, m) = 1$  gilt.

Ist nun  $\mathcal{F}_p = (F_\mu)_{\mu=0}^{\Phi(p)-1}$ ,  $F_\mu = p_\mu/q_\mu$ , dann gilt für alle  $F_{\mu-1}, F_{\mu+1} \in \mathcal{F}_p$

$$F_{\mu-1} \& F_{\mu+1} = F_\mu \in \mathcal{F}_p, \quad \mu = 1, \dots, \Phi(p) - 1.$$

Äquivalent hierzu gilt  $|p_\mu q_{\mu-1} - p_{\mu-1} q_\mu| = 1$ , und  $q_{\mu+1} + q_\mu > p$  für alle  $\mu = 1, \dots, \Phi(p) - 1$ . Es ist  $F_\mu \& F_{\mu+1} \in \mathcal{F}_{p'}$  mit  $p' \geq q_{\mu+1} + q_\mu > p$ . Alle Elemente aus  $\mathcal{F}_p$  erscheinen in allen Folgenreihen  $\mathcal{F}_{p'}$ ,  $p' \geq p$ .

- Zu jedem  $\lambda \in (0, 1]$  existiert ein  $F_\mu \in \mathcal{F}_p$  mit  $|\lambda - F_\mu| \leq 1/(q_\mu(p+1))$ ,  $0 < q_\mu \leq p$ , d.h., jedes  $\lambda \in (0, 1]$  kann durch ein Element aus einer Faray-Serie beliebig genau approximiert werden, wenn man nur  $p$  hinreichend groß wählt. Das oben erwähnte Resultat von Hurwitz gilt auch hier [Niv72, S. 138 ff.].

Farey-Folgen erfreuen sich gerade auch in neuerer Zeit einiger Beliebtheit<sup>5</sup>. In diesem Zusammenhang steht vor allem die sog. Kreis-Abbildungen (“circle-map”) im Zentrum des Interesses (s. z.B. [Ost84, Cvi85]). Was haben aber Farey’s Zahlen  $F_\mu$  und die von Nielsen eingeführten Transformationen gemeinsam? Um diese Frage zu klären, wollen wir die  $F_\mu$  auf einen binären Baum “liften”, den man gewöhnlich als **Farey-Baum** bezeichnet (s. Abb. III.B.1). Sei<sup>6</sup>  $\mathbf{T}_n = (\tau_\mu^{(\cdot, n)})_{\mu=0}^{2^n-1}$  die Menge der Vertizes, die auf dem binären Baum vom Ursprung  $\tau_0^{(1,0)} \rightarrow \frac{1}{2}$  den Abstand  $n$  haben<sup>7</sup>. Der Baum wird so konstruiert, daß die Vertizes  $\tau_{2^\mu}^{(\cdot, n)}$ , bzw.  $\tau_{2^{\mu+1}}^{(\cdot, n)}$ , rechts, bzw. links, über  $\tau_\mu^{(\cdot, n-1)} \in \mathbf{T}_{n-1}$  angebracht werden, so daß die “Projektion”  $\pi'$  auf die  $x$ -Achse  $\pi'(\tau_{2^\mu}^{(\cdot, n)}) < \pi'(\tau_\mu^{(\cdot, n-1)}) < \pi'(\tau_{2^{\mu+1}}^{(\cdot, n)})$  liefert. Mit jedem dieser Vertizes wird genau eine Farey-Zahl  $F_\mu$  wie folgt verknüpft. Man setzt  $\mathbf{T}_{-1} := (\tau_0^{(1,-1)}, \tau_1^{(1,-1)}) \xrightarrow{\pi'} (\frac{0}{1}, \frac{1}{1})$ . Durch Mediantenbildung der beiden Elemente aus  $\mathbf{T}_{-1}$  ergibt sich  $\tau_0^{(1,0)} = \tau_0^{(1,-1)} \& \tau_1^{(1,-1)} \xrightarrow{\pi'} \frac{0}{1} \& \frac{1}{1} = \frac{1}{2}$ , so daß  $\mathbf{T}_0 = (\tau_0^{(1,0)}) \xrightarrow{\pi'} (\frac{1}{2})$ . Zusammen bilden die Elemente aus  $\mathbf{T}_{-1}$  und  $\mathbf{T}_0$  wieder eine streng monoton wachsende Folge  $\mathbf{T}_{-1} \& \mathbf{T}_0 := (\tau_0^{(1,-1)}, \tau_0^{(1,0)}, \tau_1^{(1,-1)}) \xrightarrow{\pi'} (\frac{0}{1}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1})$ . Nun bilden wir *sämtliche* Medianten aller aufeinanderfolgenden Elemente aus  $\mathbf{T}_{-1} \& \mathbf{T}_0$  und erhalten zusammen mit ihren Elementen eine neue, wiederum streng monoton wachsende Folge, wenn wir den jeweiligen Mediant zweier aufeinanderfolgender Glieder  $\tau^{(\cdot, \cdot)}, \tau^{(\cdot, \cdot)'}$  in der neuen Folge zwischen  $\tau^{(\cdot, \cdot)}$  und  $\tau^{(\cdot, \cdot)'}$  einfügen:  $(\mathbf{T}_{-1} \& \mathbf{T}_0) \& \mathbf{T}_1 := (\tau_0^{(1,-1)}, \tau_0^{(1,-1)'}, \tau_0^{(1,0)} = \tau_0^{(1,1)}, \tau_0^{(1,0)'}, \tau_0^{(1,0)}, \tau_1^{(1,-1)} = \tau_1^{(1,1)}, \tau_1^{(1,-1)'}) \xrightarrow{\pi'} (\frac{0}{1}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{1}{1})$ , woraus sich unmittelbar  $\mathbf{T}_1 = (\tau_0^{(1,1)}, \tau_1^{(1,1)}) \xrightarrow{\pi'} (\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$  ergibt. Analog bildet man sukzessive  $(\mathbf{T}_{-1} \& \dots \& \mathbf{T}_{n-1}) \& \mathbf{T}_n$  mit  $n = 1, 2, 3, \dots$ , wodurch man  $\mathbf{T}_n$  bestimmen kann und die einzelnen  $\tau_\mu^{(\cdot, n)} \in \mathbf{T}_n$  mit den zugehörigen Farey-Zahlen  $\pi'(\tau_\mu^{(\cdot, n)})$  auf dem Farey-Graphen festgelegt sind. Interessanter weise kann man die Elemente der so gewonnenen “Niveaus”  $\mathbf{T}_n = (q_\mu/p_\mu)_\mu$  auch durch diejenigen regulären Kettenbrüche erzeugen, deren Einträge  $b_k \geq 1$ ,  $k = 1, 2, \dots, m-1$  und  $b_m \geq 2$  mit  $\sum_{k=1}^m b_k = n+2$  genügen (s.

<sup>5</sup>S. z.B. [Rad77, Kao96]

<sup>6</sup>Der Punkt in  $x^{(\cdot)}$  kürzt bekanntlich die entsprechende Dummy-Variable (“dot”) ab, die jeweils dem Kontext entsprechend einzusetzen ist. Hier ist es die Variable  $m$ .

<sup>7</sup>D.h. die Pfade  $\Pi = e_n \dots e_1$  haben die Länge  $|\Pi| = n$ .

[Cvi85, Cvi89]). So gilt zum Beispiel für<sup>8</sup>  $n = 3$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_3 &= \left( \frac{q_\mu^{(3)}}{p_\mu^{(3)}} \right)_{\mu=0}^{2^3-1} = \left( \frac{1}{5}, \frac{2}{7}, \frac{3}{8}, \frac{3}{7}, \frac{4}{7}, \frac{5}{8}, \frac{5}{7}, \frac{4}{5} \right) \\ &= \left( [0; 5], [0; 3, 2], [0; 2, 1, 2], [0; 2, 3], [0; 1^2, 3], [0; 1^3, 2], [0; 1, 2^2], [0; 1, 4] \right). \end{aligned}$$

Auf jede rationale Zahl  $q_\mu^{(n-1)}/p_\mu^{(n-1)} \in \mathbf{T}_{n-1}$  folgen auf dem Farey–Baum je zwei Zahlen aus  $\mathbf{T}_n$ , wobei  $\Theta : [\dots, b_m] \rightarrow ([\dots, b_m - 1, 2], [\dots, b_m + 1])$ . Iteration dieser Vorschrift weist jeder rationalen Zahl einen eindeutig bestimmten Platz auf dem binären<sup>9</sup> Farey–Baum zu (s. z.B. [Cvi89, Cvi92]). Vor dem Hintergrund unserer Diskussion bei Lemma I.3 auf S. 39 erhebt sich sofort die Frage nach der Beziehung zu den in Kapitel III.2 eingeführten NT’s  $\mathbf{X}_{b-r,r}$ . In diesem Kontext prägten die Autoren von [Kan93, Oda89] den Begriff der “Hyperinflation”, das sind durch Möbius–Transformationen induzierte Abbildung von Farey–Folgen, welche speziellen NT’s entsprechen. Basierend auf der in [Cvi89] gefundenen Iterationsvorschrift  $\Theta$ , wollen wir einen direkteren Zugang aufzeigen. Sei<sup>10</sup> für  $k = 1, \dots, m - 1, m$ ,

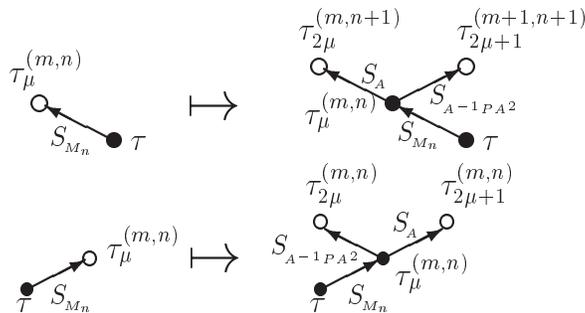
$$\tau^{(m,n)}(\lambda) := [0; b'_1, \dots, b'_m + 1 + \lambda], \quad b'_k = b_{m-k+1} \geq 1, \quad \sum_{k=1}^m b'_k = n + 2. \quad (\text{III.B.6})$$

Die so definierten rationalen Zahlen  $\tau^{(m,n)}(0) = q^{(n)}/p^{(n)}$  sind offenbar die oben eingeführten Elemente aus  $\pi'(\mathbf{T}_n)$ . Es ist  $p^{(n)} = f_m$  und  $q^{(n)} = f_{m-1}$ .  $f_m$  sind die verallgemeinerten Fibonacci–Zahlen, wobei  $f_k = b_k f_{k-1} + f_{k-2}$ , mit den Anfangswerten  $f_{-1} = f_0 = 1$ , für  $k = 1, \dots, m$ . Man erkennt sofort, daß  $\Theta$  den Möbius–Transformationen

$$\begin{aligned} S_{A^{-1}} \circ S_{PA^2}(\lambda) = -1 + \frac{1}{2 + \lambda} &\xleftarrow{\pi'} \mathbf{S}_{A^{-1}PA^2} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \xleftarrow{\pi} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{A}^2, \mathbf{A}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{U}, \dots, \\ &\mathbf{U}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{U}^2, \\ S_{A^{\pm 1}}(\lambda) = \pm 1 + \lambda &\xleftarrow{\pi'} \mathbf{S}_{A^{\pm 1}} = \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \xleftarrow{\pi} \mathbf{A}^{\pm 1}, \mathbf{U}^{\pm 1}, \end{aligned} \quad (\text{III.B.7})$$

entspricht, denn es ist  $\Theta_n; \tau^{(\cdot,n)}(\lambda) \rightarrow (\tau^{(\cdot,n)}(\mathbf{S}_{A^{-1}PA^2}(\lambda)), \tau^{(\cdot,n)}(\mathbf{S}_A(\lambda)))$ . Wir wollen somit das Ergebnis aus [Cvi85, Cvi89] mit Hilfe der Nielsen–Transformationen neu formulieren:

**Theorem III.B.1** *Seien die Substitutionsgraphen  $\Theta_n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , definiert durch*



<sup>8</sup>Bemerkung zur Nomenklatur: Wir schreiben  $[0; 2, \bar{1}] = [0; 2, 1, 1, \dots]$  und  $[2; 3, 1^2, 5] = [2; 3, 1, 1, 5]$  usw..

<sup>9</sup>Für  $n \rightarrow \infty$  ist das eine binäre Codierung aller reellen Zahlen aus  $(0, 1]$ !

<sup>10</sup>Der “Transformation”  $b'_k \rightarrow b_{m-k+1}$  sind wir schon in (III.33) auf S. 133 begegnet! Hierbei wird das jeweilige  $m$  über die Summe in (III.B.6) definiert!

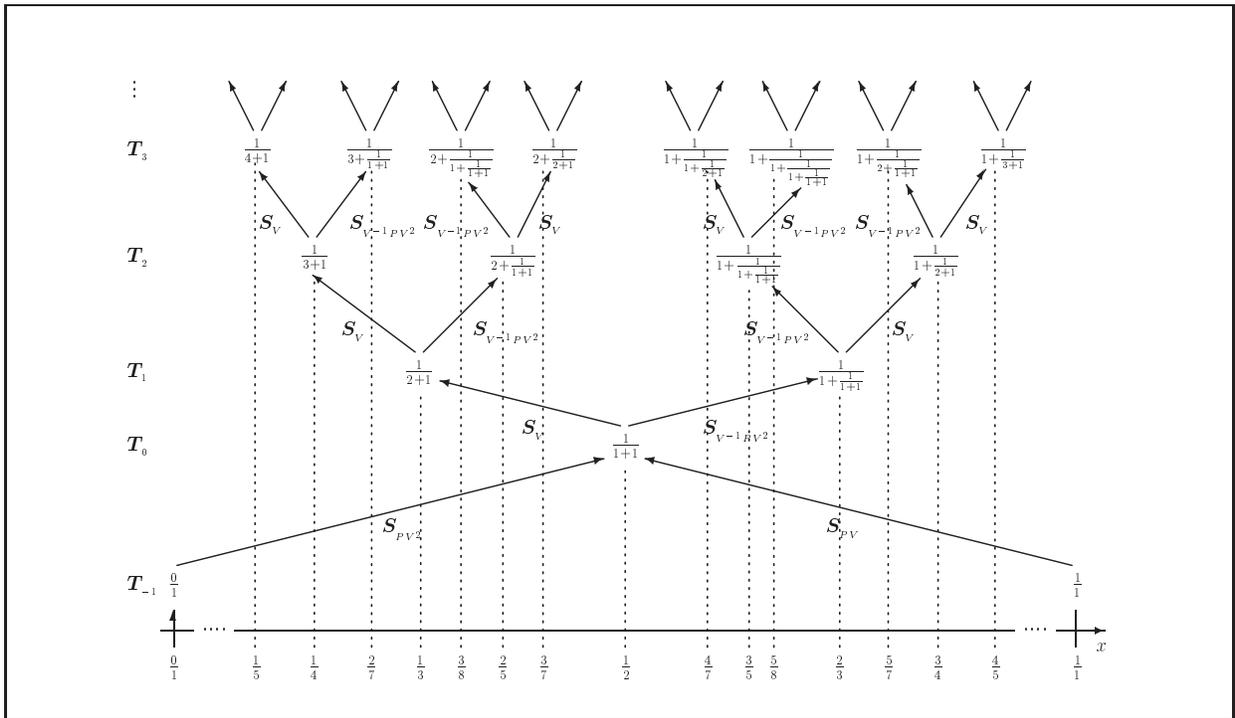


Abbildung III.B.1: Farey-Graph  $\mathfrak{F}_F^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n) \subset \mathfrak{G}(\text{PGIL}_2(\mathbb{Z}), \text{PGIL}_2(\mathbb{Z}) \times \text{PGIL}_2(\mathbb{Z}))$ . Jeder reellen Zahl  $\tau \in [0, 1]$  wird eindeutig ein Pfad, und damit eine binäre “Adresse”, zugewiesen. In der Abb. ist  $V \equiv A$ .

wobei  $\Theta_n$  alle Kanten der Form  $\tau^{(\cdot, \cdot)} \xrightarrow{S_{M_k}} \tau^{(\cdot, \cdot)'}$  unverändert läßt.  $\tau_\mu^{(\cdot, n)} \in T_n$  ist gegeben durch

$$\tau_\mu^{(\cdot, n)} = \prod_{k=n}^0 S_{M_k} = S_{M_0} S_{M_1} \cdots S_{M_n}, \quad S_{M_k} \in \{S_A, S_{A^{-1}PA^2}\}, S_{M_0} = S_{PA^2},$$

so daß  $\pi'(\tau_\mu^{(m, \cdot)}) = \tau_\mu^{(m, \cdot)}(\frac{0}{1}) = f_{m-1}/f_m$ , mit  $f_k = b_k f_{k-1} + f_{k-2}$ ,  $f_{-1} = f_0 = 1$ , für  $k = 1, \dots, m$ . Dann kann der Farey-Baum  $\mathfrak{F}_F^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$ , mit der Menge der Vertizes  $V_n = \bigcup_{k=0}^n T_k$  und der Menge der Kanten

$$\mathbf{E}_n = \bigcup_{k=0}^{n-1} \left\{ (\tau_\mu^{(\cdot, k)} S_V, \tau_\mu^{(\cdot, k)}), (\tau_\mu^{(\cdot, k)} S_{V^{-1}PV^2}, \tau_\mu^{(\cdot, k)}) \mid \mu = 0, \dots, 2^k - 1 \right\},$$

durch die Iteration

$$\mathfrak{F}_F^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n) = \prod_{k=0}^n \Theta_k \left[ \begin{array}{c} \tau_0^{(1,1)} \quad \tau_1^{(2,1)} \\ \circ \quad \swarrow \quad \searrow \quad \circ \\ \quad S_A \quad \quad S_{A^{-1}PA^2} \\ \tau_0^{(1,0)} \end{array} \right]$$

erzeugt werden, wobei  $\tau^{(1,0)}(\frac{0}{1}) = 1/2$  und  $\tau^{(1,1)}(\frac{0}{1}) = 1/3, \tau^{(2,1)}(\frac{0}{1}) = 2/3$  ♣.

Damit ist der Zusammenhang zwischen den Farey-Zahlen auf der einen Seite und den Nielsen-Transformationen auf der anderen offensichtlich, wie folgendes Korollar zeigt:

**Korollar 1** *Es gilt*

$$\tau^{(m,n)} = \mathbf{S}_P \mathbf{S}_{1 \rightarrow m} \mathbf{S}_P \mathbf{S}_V \xleftarrow{\pi'} \mathbf{P} \mathbf{X}_{(s_m, \dots, s_1)} \mathbf{P} \mathbf{A} \in \Gamma_2 \quad (\text{III.B.8})$$

mit  $s_k = 0, \dots, b_k$ , für alle  $k = 1, \dots, m$ .

☞ **Beweis:** Aus der Konstruktion des Farey-Graphen entnimmt man, daß

$$\tau^{(m,n)} = \prod_{k=n}^0 \mathbf{S}_{M_k} = \left( \prod_{k=m-1}^1 \mathbf{S}_{PA^{b'_k}} \right) \mathbf{S}_{PA^{b'_m+1}} = \mathbf{S}_P \left( \prod_{k=1}^m \mathbf{S}_{A^{b_k P}} \right) \mathbf{S}_P \mathbf{S}_A,$$

und somit ergibt sich gerade (III.B.8). ♣

Das Korollar lehrt, daß jedem *Pfad* im Farey-Baum  $\mathfrak{F}_F^\Gamma(V_n, \mathbf{E}_n)$  genau ein in Theorem III.2, S. 139, eingeführter  $\Gamma$ -Graph  $\mathfrak{F}_{gF}^\Gamma(V_{N_n}, \mathbf{E}_{N_n})$  entspricht, wobei die Entsprechung  $b_k \rightarrow M_k$  gilt. In diesem Sinne stellt unser Theorem III.2 die “dritte Dimension” des Farey-Graphen dar.

☞ In diesem Zusammenhang ist es vielleicht instruktiv, sich die Beziehung zwischen den beiden in diesem Anhang benutzten Kettenbruchentwicklungen (III.B.4) und (III.B.6) konkret zu vergegenwärtigen. Für  $a_k = 1$ ,  $k = 1, \dots, m$  gilt  $\lambda^{(m)} = S^{(m)}(0) = [b_1; b_2, \dots, b_m]$ , mit  $\mathbf{S}^{(n)} = \mathbf{S}_{1 \rightarrow m}^\top \mathbf{S}_P = \mathbf{S}_{m \rightarrow 1} \mathbf{S}_P \xleftarrow{\pi} \mathcal{P}\mathbf{X}_{(r_m, \dots, r_1)}$ . Andererseits ist aber wegen (III.B.8)  $\mathbf{S}_P \tau^{(m, \cdot)} \mathbf{S}_{V_{-1}} = \mathbf{S}_{1 \rightarrow m} \mathbf{S}_P \xleftarrow{\pi} \mathbf{X}_{(s_m, \dots, s_1)} \mathbf{P}$ , wobei nun  $\mathbf{S}_P \tau^{(m, \cdot)} \mathbf{S}_{V_{-1}}(\lambda) = \mathbf{S}_P \tau^{(m, \cdot)}(-1 + \lambda) = \mathbf{S}_P([0; b_m, \dots, b_1 + \lambda]) = [b_m, \dots, b_1 + \lambda]$ . Man erkennt, daß die Kettenbruchentwicklung von  $\lambda^{(m)}$  den *Substitutionen* entsprechen, diejenige von  $\mathbf{S}_P \tau^{(m, \cdot)} \mathbf{S}_{V_{-1}}(0)$  dagegen den *Nielsen-Transformationen*.

Es ist instruktiv den Träger  $\text{supp}(\sigma(\mathcal{H}_\lambda))$  in Abhängigkeit von  $\lambda$  der diskreten Mathieu-Gleichung (“Hofstadter Schmetterling”, s. [Hof76]) mit dem entsprechenden Träger für die verallgemeinerten Fibonacci-Worte in Abhängigkeit vom Steigungswinkel (s. z.B. [Rüd98]) zu vergleichen.

## III.B.2 Formen der Irrationalität

Wir wollen in diesem Abschnitt einige elementare Eigenschaften über irrationale Zahlen zusammentragen, soweit sie für das Verständnis dieser Arbeit von Bedeutung sind. Für Einzelheiten und Beweise sei auf die entsprechende Literatur verwiesen (s. z.B. [Per60, Niv72, Bun92]).

Eine komplexe Zahl  $\lambda$  nennt man eine **algebraische Zahl** vom Grade  $n$ , wenn sie der irreduziblen Gleichung

$$\sum_{k=0}^n a_k \lambda^k = \lambda^n + a_{n-1} \lambda^{n-1} + \dots + a_1 \lambda + a_0 = 0, \quad a_n = 1, \quad (\text{III.B.9})$$

mit Koeffizienten  $a_k \in \mathbb{Q}$ , genügt, d.h. die Potenzen  $\lambda^k$ ,  $k = 0, \dots, n$  sind rational voneinander unabhängig. Sind sämtliche  $a_k \in \mathbb{Z}$ , dann nennt man  $\lambda \in \mathbb{C}$  eine **algebraisch ganze Zahl**. Unter den rationalen Zahlen  $\mathbb{Q}$  sind die ganzen Zahlen  $\mathbb{Z}$  (“rational integers”) die einzigen

algebraisch ganzen Zahlen. Die Menge (Klasse) von algebraischen (algebraisch ganzen) Zahlen bilden ein Feld (Ring) [Niv72, S. 193 ff.]. Eine Zahl, die nicht algebraisch ist, nennt man **transzendent** (Bsp.  $\pi, e$ ). Die Menge der (komplexen) algebraischen Zahlen ist abzählbar, während die Menge der transzendenten reellen Zahlen überabzählbar ist [Bun92, S. 212].

Wir haben im vorherigen Abschnitt die unendliche, reguläre Kettenbruchentwicklung als Darstellung der irrationalen Zahlen betrachtet. Man sagt, daß eine Approximation einer reellen Zahl von der **Ordnung**  $n$  sei, wenn die Ungleichung

$$\left| \frac{p}{q} - \lambda \right| < \frac{K(\lambda)}{q^n} \quad (\text{III.B.10})$$

unendlich viele Lösungen besitzt, wobei  $K(\lambda)$  nur von  $\lambda$  abhängt. Jede Approximation einer rationalen Zahl ist von der Ordnung eins, die einer irrationalen Zahl von der Ordnung zwei. Wenn  $\lambda$  eine **quadratische** Irrationalität (d.h. Lösung einer quadratischen Gleichung mit ganzzahligen Koeffizienten) ist, dann ist die Approximation höchstens von der Ordnung zwei. **Satz von Liouville** ([Per60, S. 178 ff.]: *Ist  $\lambda$  eine algebraische Zahl vom Grade  $m > 1$  (also  $\lambda$  irrational), so hat die Ungleichung (III.B.11) für  $n = m + 1$  nur endlich viele rationale Lösungen der Form  $p/q$ .* Daraus ergibt sich, daß eine durch einen “hinreichend schnell” konvergierenden regulären Kettenbruch darstellbare irrationale Zahl notwendig transzendent ist. Man nennt  $\lambda$  eine **Liouville’sche Zahl**, wenn zu jedem  $k \in \mathbb{N}$  ein rationaler Bruch  $p_k/q_k$  mit  $q_k > 1$  und  $|\lambda - p_k/q_k| < 1/q_k^k$  gefunden werden kann. Liouville’sche Zahlen sind transzendent. Ein regulärer Kettenbruch  $[b_1; b_2, b_3, \dots]$  mit den rationalen Approximanten  $p_k/q_k$  stellt genau dann eine Liouville’sche Zahl dar, wenn es zu jedem noch so großen  $m$  ein Index  $k$  gefunden werden kann, für den  $b_{k+1} > q_k^m$  ist. Um ein Beispiel für eine Liouville’sche Zahl zu konstruieren, braucht man in der zugehörigen Kettenbruchentwicklung nur  $b_{k+1} > q_k^k$  für unendlich viele  $k$  zu wählen. Liouville selbst betrachtete exemplarisch die Zahl  $\lambda = \sum_{k=1}^{\infty} (1/10^{k!})$ . Neben den Liouville’schen Zahlen gibt es noch eine zweite Klasse von transzendenten Zahlen, die zuerst von E. Maillet 1906 studierten *quasiperiodischen* Kettenbrüche [Per54/57, S. 130 ff.](a).

Eine irrationale Zahl  $\lambda$  heißt **Roth’sche Zahl**, falls es für alle  $\delta > 0$  ein  $K(\delta)$  gibt, so daß  $|\lambda - p/q| > K(\delta)/q^{2+\delta}$  für alle  $p \in \mathbb{Z}$  und  $q \in \mathbb{N}$  gilt. Anschaulich formuliert, liegen Rothsche Zahlen “weit weg” von den rationalen Zahlen, während die Liouville’sche Zahlen sich gerade durch eine besondere Nähe auszeichnen.

Die algebraischen Zahlen sind die “einfachsten” ( $b_k$  “möglichst klein” und “regelmäßig” verteilt) irrationalen Zahlen und zugleich am schlechtesten durch rationale Zahlen approximierbar. Unser treuer Weggefährte, die goldene Zahl  $\tau = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1) = [\overline{1}]$ , für den alle  $b_k = 1$  die kleinsten der möglichen Werte annehmen, wird deshalb auch lax als die “irrationalste” Zahl bezeichnet<sup>11</sup>. Vom Blickwinkel der Renormierungstheorie aus gesehen, ist ein **Satz von Euler und Lagrange** (s. z.B. [Bun92, S. 226 ff.]) von zentraler Bedeutung: *Ein Kettenbruch ist genau dann periodisch, wenn sein Grenzwert eine algebraische Zahl vom Grade zwei ist*, d.h., mit den klassischen Methoden der Renormierung sind nur diejenigen Strukturen

<sup>11</sup>Andererseits gehört  $\tau$  zu der Familie der “noblen” (deshalb auch “golden”) Zahlen, das sind irrationale Zahlen, deren Kettenbruchentwicklung mit unendlich vielen Einsen endet. Nach [Sch97], S. 69, stammt diese Bezeichnung von der Tatsache, daß in nichtlinearen Systemen diejenigen Windungszahlen, welche zu den noblen Zahlen gehören, am “widerstandsfähigsten” gegenüber chaotischen Anregungen sind, d.h.  $\tau$  ist somit nicht nur die “irrationalste” aller irrationalen Zahlen, sondern auch die “nobelste” aller noblen Zahlen.

in Kapitel **III.2.1** zu erfassen, die einem Steigungswinkel (s. S. 135) aufweisen, der einer quadratisch irrationalen Zahl entspricht. Dies ergibt sich aus der einfachen Tatsache, daß Periodizität der Kettenbruchentwicklung zu der Existenz der Fixpunkte von ( $ad - bc = \pm 1$ )

$$S_M(\lambda) := \frac{a\lambda + b}{c\lambda + d} = [b_1; b_2, \dots, b_n, \lambda] = \lambda \quad \Leftrightarrow \quad c\lambda^2 + (d - a)\lambda - b = 0 \quad (\text{III.B.11})$$

äquivalent ist. Eine Diskussion des Konvergenzverhaltens findet man in [**Jon80**], Kapitel III. Die Kettenbrüche für algebraische Zahlen vom Grad eins (rationale Zahlen, endlicher Kettenbruch) und vom Grad zwei (periodisch unendlicher Kettenbruch) sind relativ einfach zu handhaben. Dagegen scheint es noch keine bekannte Kettenbruchentwicklung einer algebraischen Zahl vom Grade drei zu geben [**Bun92**], S. 229. Einige Eigenschaften periodischer Kettenbrüche findet man in [**Sie88**, S. 313 ff.]: Sei  $D \in \mathbb{N}$  keine Quadratzahl. Dann gilt exemplarisch

- $\sqrt{D} = [b_1; \overline{b_2, b_3, \dots, b_m, 2b_1}]$  mit der Periode  $m \leq 2D$  und der symmetrischen (d.h. invariant gegenüber Umkehr der Reihenfolge) Folge  $b_2, \dots, b_m$ .
- $\sqrt{D}$  hat die Periode 1 genau dann, wenn  $D = n^2 + 1$ ,  $n \in \mathbb{N}$ . Es ist dann  $\sqrt{n^2 + 1} = [n; \overline{2n}]$
- $\sqrt{D}$  hat die Periode 2 genau dann, wenn  $D = n^2 + k$ ,  $k > 1$ , wobei  $k$  Teiler von  $2n$  ist.
- Es existieren für alle  $m \in \mathbb{N}$  unendlich viele  $D \in \mathbb{N}$  derart, daß  $\sqrt{D}$  die Periode  $m$  besitzt.

Eine algebraisch ganze Zahl  $\theta_1 > 1$  vom Grade  $n$  heißt **Pisot–Vijayaraghavan–Zahl** (kurz **Pisot–Zahl** oder **PV–Zahl**), wenn alle zugehörigen konjugierten Lösungen  $\theta_k$ ,  $k = 2, \dots, n$ , von (III.B.9) die Ungleichung  $|\theta_k| < 1$ ,  $k = 2, \dots, n$ , erfüllen. Sie zeichnen sich dadurch aus, daß  $\|\lambda\theta^n\| \rightarrow 0$ , für  $n \rightarrow \infty$  und  $\lambda \in \mathbb{R}$  gilt, wobei  $\|x\|$  der Abstand von  $x$  zu der nächstliegenden ganzen Zahl ist [**Cas57**].

# ZUSAMMENFASSUNG und AUSBLICK

Eindimensionale lineare Ketten können durch Worte  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  über einem (endlichen) Alphabet  $\mathcal{A}$  beschrieben werden. Jedem dieser Worte wird in eindeutiger Art und Weise ein Einteilchen–Hamilton–Operator  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$ , bzw. zu jedem gegebenen  $z \in \rho(\hat{\mathcal{H}}_\omega)$  (Resolventen–Menge) die zugehörige Resolvente  $\hat{\mathcal{G}}_\omega(z)$  zugeordnet, d.h. Operatoren aus  $\hat{\mathcal{G}}_\omega(z) \in \mathcal{B}(\mathbb{H})$  sind in dem hier betrachteten Falle (stark–stetige) Funktionen in den Worten  $\omega \in \mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$ . Wir haben die Bedeutung des Orbits  $\mathcal{O}[\omega]$  und der ihn erzeugenden Gruppe  $\mathbf{G} = \{\mathcal{T}_g \mid g \in \mathbb{Z}\}$ , die Ingredienzien zur Bildung der Objekte in **Comp $\mathfrak{T}_2$ Spd**, sowie ihr Gegenstück in **Ban**, der jeweiligen vollständigen Hülle  $\text{Hull}(\hat{\mathcal{H}}_\omega)$  von  $\hat{\mathcal{H}}_\omega$  (bzw. der zugehörigen Resolventen) diskutiert<sup>12</sup>. Man kann  $\mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  durch Einführung eines Produkts die algebraische Struktur einer Halbgruppe aufprägen, für die wir schreiben  $\mathbb{F}_\Lambda^+ = \langle \mathcal{A}^{\mathbb{Z}}, \cdot \rangle$ . Unser Ziel in dieser Arbeit war es, jedes Element von  $\overline{\mathcal{O}[\omega]}$  durch eine Folge  $(\mathcal{M}_{k,\cdot})_k$  elementarer Substitutionen zu erzeugen<sup>13</sup>. Jeder dieser Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot} : \mathcal{A}^{\mathbb{Z}} \rightarrow \mathcal{A}^{\mathbb{Z}}$  entspricht ein (nichtlinearer) Feshbach–Operator  ${}^R\hat{\mathcal{M}}_{k,\cdot} : \mathcal{B}(\mathbb{H}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathbb{H})$ , welcher die Reskalierungstransformationen  ${}^R\mathcal{M}_{k,\cdot} : \Pi_{x,y} \rightarrow \Pi_{x,y}$  induziert. Die Fixpunktgleichung  $\mathcal{M}(\omega) = \omega$  definiert die aperiodische Struktur, ihr Pendant in **Ban** definiert die zugehörigen Renormierungstransformationen<sup>14</sup>

$${}^R\hat{\mathcal{M}} : \mathcal{B}(\mathbb{H}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathbb{H}), \quad \hat{\mathcal{G}}_\omega(z; \vec{x}) \mapsto \hat{\mathcal{P}}_{\parallel} \hat{\mathcal{G}}_\omega(z; {}^R\mathcal{M}(\vec{x})) \hat{\mathcal{P}}_{\parallel} = \hat{\mathcal{G}}_{\mathcal{M}(\omega)}(z; {}^R\mathcal{M}(\vec{x})) \sim \hat{\mathcal{G}}_\omega(z; \vec{x}).$$

Die Erweiterung der zur Beschreibung der geometrischen Struktur benutzten Halbgruppe  $\mathbb{F}_\Lambda^+$  auf die entsprechende volle freie Gruppe  $\mathbb{F}_\Lambda$ , und der damit einhergehenden Erweiterung der Erzeugendenmenge der entsprechenden  $C^*$ –Algebra  $C^*(\Omega, \mathbf{G}) = C(\Omega) \rtimes_{\alpha} \mathbb{Z}$  um virtuelle Hilfselemente, ermöglicht es uns erstmals den *ganzen* Orbit  $\overline{\mathcal{O}[\omega]}$  für jede **DOL**–Struktur durch eine Folge von Substitutionen  $(\mathcal{M}_{k,\cdot})_{k \in \mathbb{N}}$  zu erzeugen, denen die Folge von Feshbach–Operatoren zugeordnet werden kann. Das zugehörige Konzept nennen wir **Pfad–Renormierung**, den Renormierungstransformationen entsprechen die Zyklen (Fixpunkte) periodischer Orbits (= Pfade) in den in dieser Arbeit eingeführten hierarchischen  $\Gamma$ –Graphen. Letzteres läßt die unmittelbare Relevanz dieser Graphen für Multifraktalanalysen erkennen.

<sup>12</sup>Vgl. hierzu einige detailliertere Informationen in [Wal2003]. Als einschlägige Literatur sei hier nur exemplarisch [Bel193, Tom87] und [Ren80, Her73] erwähnt.

<sup>13</sup>Es gibt ein analoges Vorgehen, welches allgemein bekannt ist die Dezimalzerlegung einer beliebigen reellen Zahl oder die Cantor’sche Zerlegung des Intervalls  $[0, 1]$ , welches eine Zerlegung  $x = \sum s_{k-1} 3^{-k}$  liefert. Dem Intervall entspricht nun der Orbit  $\overline{\mathcal{O}[\omega]}$ , den Koeffizienten  $s_k$  der (Dezimal–)Zerlegung die Substitutionen  $\mathcal{M}_{k,\cdot}$ .

<sup>14</sup>Eine Ortsraum–Renormierung entspricht somit immer einer “Resolventen–Renormierung”, welche nur in den wenigsten Fällen *direkt* mit einer Hamilton–Operator–Renormierung zusammenfällt. Der Zusammenhang zwischen beiden kann recht subtil sein und kann hier leider nicht weiter untersucht werden.

Wir haben nach unserem Wissen erstmals ein vollständiges Verfahren zur Renormierung sämtlicher Elemente  $G_{\mu\nu}(z)$  der Resolvente  $\hat{\mathfrak{G}}(z)$  in ihrer Ortsdarstellung für die Klasse der verallgemeinerten Fibonacci-Folgen konkret entwickelt und ausgearbeitet. Analog hierzu lassen sich wiederum alle **DOL**-Strukturen behandeln.

Ursprünglich war die Entwicklung von den Renormierungstechniken zugänglichen Darstellung der ganzen Green'schen Funktion dazu gedacht, die Kubo-Leitfähigkeit mit Renormierungsmethoden zu studieren. Später ist es uns aber gelungen eine Matrixform für die Kubo-Formel zu finden, welche es erstmals gestattet, in Analogie zum Transfer-Matrizen-Modell für die Schrödinger-Gleichung Renormierungstransformationen für alle in die Kubo-Formel eingehenden Größen anzugeben.

Es bleiben natürlich viele Fragen offen. Was ist z.B. die konkrete Beziehung zwischen der Renormierung der (verallgemeinerten) Eigenwerte und der Ortsraum-Renormierung? Wie erweitert man konkret der hier vorgeschlagenen Methode der Pfad-Renormierung auf höhere Dimensionen und was sind ihre Eigenschaften? Außerdem bliebe das endliche Alphabet zu einem unendlichen Alphabet (allgemeine diskrete Mathieu-Gleichungen) zu erweitern. Dies sind nur einige wenige Weiterführungen, für die diese Arbeit Anknüpfungspunkt und Grundlage darstellen möchte.

# Literaturverzeichnis

- [Ach77] **N. I. Achiezer** und **I. M. Glazman**: “*Theorie der linearen Operatoren im Hilbert-Raum*”, Verlag Harry Deutsch, Thun (1977)
- [Adá90] **J. Adámek**, **H. Herrlich** und **G. E. Strecker**: “*Abstrakt and Concrete Categories*”, John Wiley & Sons, Inc. (1990)
- [Akh64] **N. I. Akhiezer**: “*The Classical Moment Problem*”, Oliver and Boyd, London (1964)
- [Alb88] **S. Albeverio**, **F. Gesztesy**, **R. Høegh-Krohn** und **H. Holden**: “*Solvable Models in Quantum Mechanics*”, Springer-Verlag (1988)
- [Ale65] **G. Alexits**: “*Konvergenzprobleme der Orthogonalreihen*”, VEB DVW Berlin, (1965)
- [All95] **J.-P. Allouche** und **M. M. France**: “*Automata and Automatic Sequences*”, in [Axe95], S. 293–367
- [All97] **J.-P. Allouche**: “*Schrödinger Operators with Rudin-Shapiro Potentials are Not Palindromic*”, J. Math. Phys. **38**, 1843 (1997)
- [All99] **J.-P. Allouche** und **J. Shallit**: “*The Ubiquitous Prouhet-Thue-Morse Sequence*”, in: C. Ding, T. Helleseth, und H. Niederreiter Hrsg., “*Sequences and their applications*”, Proceedings of SETA'98, S. 1-16. Spinger-Verlag (1999)
- [And98] **J. E. Anderson** und **I. F. Putnam**: “*Topological Invariants for Substitution Tilings and their associated  $C^*$ -Algebras*”, Ergod. Th. & Dynam. Sys. **18**, 509 (1998)
- [Ant97] **I. Antoniou**, **M. Gadella** und **Z. Suchanecki**: “*Spectral Properties of the Liouville Operator*”, Int. J. Theor. Phys. **37**, 1641 (1997)
- [Ant98] **I. Antoniou**, **M. Gadella** und **Z. Suchanecki**: “*Some General Properties of the Liouville Operator*”, aus “*Irreversibility and Causality: Semigroups and Rigged Hilbert Spaces*”, Hrsg. A. Bohm, H.-D. Doebner und P. Kielanowski, Springer-Verlag (1998)
- [Ant99–I] **I. Antoniou**, **S. A. Shkarin** und **Z. Suchanecki**: “*The Spectrum of the Liouville-von Neumann Operator in the Hilbert-Schmidt Space*”, J. Math. Phys. **40**, 4106 (1999)
- [Ant99–II] **I. Antoniou**, **V. A. Sadovnichii** und **S. A. Shkarin**: “*Time Operators and Shift Representation of Dynamical Systems*” Physica A **269**, 299 (1999)
- [Arn2001] **P. Arnoux**, **V. Brethè**, **H. Ei** und **S. Ito**: “*Tilings, Quasicrystals, Discrete Planes, Generalized Substitutions, and Multidimensional Continued Fractions*”, Discrete Math. and Theoret. Computer Sci. Proc. AA (DM-CCG), 059–078 (2001)

- [Arr94] **D. K. Arrowsmith** und **C. M. Place**: “*Dynamische Systeme*”, Spektrum Akademischer Verlag (1994)
- [Ash88] **J. A. Ashraff** und **R. B. Stinchcombe**: “*Exact Decimation Approach to the Green’s Functions of the Fibonacci-chain Quasicrystal*”, Phys. Rev. **B 37**, 5723 (1988)
- [Ash89] **J. A. Ashraff** und **R. B. Stinchcombe**: “*Dynamic Structure Factor for the Fibonacci-Chain Quasicrystal*”, Phys. Rev. **B 39**, 2670 (1989)
- [Ash2001] **N. W. Ashcroft** und **N. D. Mermin**: “*Festkörperphysik*”, Oldenbourg (2001)
- [Ask84] **R. Askey** und **M. Ismail**: “*Recurrence relations, continued fractions and orthogonal polynomials*”, Memoirs of the Amer. Math. Soc. Vol. **49**, Nr. 300, 1 (1984)
- [Ass87] **W. van Assche**: “*Asymptotics for Orthogonal Polynomials*”, Lecture Notes in Math. **1265**, Springer-Verlag (1987)
- [Atk82] **F. V. Atkinson**: “*On the Asymptotic Behaviour of the Titchmarsh-Weyl  $m$ -Coefficient and the Spectral Functions for Scalar Second-Order Differential Expressions*”, in “*The Ordinary and Partial Differential Equations*”, Lecture Notes in Mathematics **964**, eds. A. Dold und B. Eckmann, Springer-Verlag (1982)
- [Aub80] **G. Aubry** und **G. Andre**: “*Analyticity Breaking and Anderson Localization in Incommensurate Lattices*”, Ann. Israel Phys. Soc. **3**, 133 (1980)
- [Avi97] **Y. Avishai**, **D. Berend** und **V. Tkachenko**: “*Trace Maps*”, Int. J. Mod. Phys. **B 11**, 3525 (1997)
- [Avr83] **J. Avron** und **B. Simon**: “*Almost Periodic Schrödinger Operators II. The Integrated Density of States*”, Duke Math. J. **50**, 369 (1983)
- [Axe86] **F. Axel**, **J. P. Allouche**, **M. Kleman**, **M. Mendes-France** und **J. Peyrière**: “*Vibrational Modes in 1-D “Quasi-Alloy”: The Morse Case*”, J. de Phys. (France) **C3 47**, 181 (1986)
- [Axe95] **F. Axel** und **D. Gratias**, eds., “*Beyond Quasicrystals*”, Springer-Verlag (1995)
- [Baa92] **M. Baake**, **D. Joseph** und **P. Kramer**: “*Periodic Clustering in the Spectrum of Quasiperiodic Kronig-Penney Models*”, Phys. Lett. **A 168**, 199 (1992)
- [Baa93] **M. Baake**, **U. Grimm** und **D. Joseph**: “*Trace maps, invariants, and some of their applications*”, Int. J. Mod. Phys. **B 7**, 1527 (1993)
- [Baa97] **M. Baake**, **J. Hermisson** und **P. Pleasants**: “*The Torus Parametrization of quasiperiodic LI-Classess*”, J. Phys. **A 30**, 3029 (1997)
- [Baa99-I] **M. Baake**: “*A Note on Palindromicity*”, arXiv<sup>15</sup>:math-ph/9907011 (1999)
- [Baa99-II] **M. Baake** und **J. A. G. Roberts**: “*Symmetries and Reversing Symmetries of Trace-Maps*”, arXiv:math.DS/9901124 v1 (1999)

---

<sup>15</sup>Siehe unter <http://xxx.lanl.gov/>

- [Bac98] **V. Bach, J. Fröhlich und I. M. Sigal:** “*Renormalization Group Analysis of Spectral Problems in Quantum Field Theory*”, Adv. in Math. **137**, 205 (1998)
- [Bad97] **R. Badii und A. Politi:** “*Complexity — Hierarchical Structures and Scaling in Physics*”, Cambridge University Press (1997)
- [Bai93] **D. H. Bailey:** “*Multiprecision Translation and Execution of Fortran Programs*”, ACM Transactions on Mathematical Software, **19**, no. 3, Sept. 1993, p. 288–319
- [Ban97–I] **O. F. Bandtlow:** “*Spectral Analysis of Dynamical Systems*”, Dissertation, Uni. Cambridge 1997 (s. a. <http://www2.elec.qmul.ac.uk/~oscar/publ/publ.html>)
- [Bar89] **H. U. Baranger und A. D. Stone:** “*Electrical Linear-Response Theory in an Arbitrary Magnetic Field: A new Fermi-Surface Formation*”, Phys. Rev. **B 40**, 8169 (1989)
- [Bau92] **H. Bauer:** “*Maß- und Integrationstheorie*”, De Gruyter-Verlag (1992)
- [Bel82–II] **J. Bellissard, A. Formoso, R. Lima und D. Testard:** “*Quasiperiodic Interaction with a Metall-Insulator Transition*”, Phys. Rev. **26**, 2024 (1982)
- [Bel83] **J. Bellissard, R. Lima und D. Testard:** “*A Metal-Insulator Transition for the Almost Mathieu Model*”, Commun. Math. Phys. **88**, 207 (1983)
- [Bel86] **J. Bellissard:** “*K-Theory of  $C^*$ -Algebras in Solid State Physics*”, in “*Statistical Mechanics and Field Theory, Mathematical Aspects*”, Hrsg. T. C. Dorlas, M. N. Hugenholtz und M. Winnink, Lecture Notes in Physics **257**, Springer-Verlag (1986), S. 99ff.
- [Bel88] **J. Bellissard:** “ *$C^*$ -Algebras in Solid State Physics: 2-D Electrons in a Uniform Magnetic Field*”, in “*Operator-Algebras and Applications*”, Eds. D. E. Evans und M. Takesaki, London Math. Soc. Lecture Notes Series, **139**, Cambridge University Press, Cambridge (1988), S. 49ff.
- [Bel89] **J. Bellissard, B. Iochum, E. Scoppola und D. Testard:** “*Continuity Properties of the Electronic Spectrum of 1-D Quasicrystals*”, Commun. Math. Phys. **125**, 527 (1989)
- [Bel91] **J. Bellissard, A. Bovier und J. M. Ghez:** “*Spectral Properties of a Tight-Binding Hamiltonian with Period Doubling Potential*”, Commun. Math. Phys. **135**, 379 (1991)
- [Bel92] **J. Bellissard, A. Bovier und J.-M. Ghez:** “*Gap Labelling Theorems for One Dimensional Discrete Schrödinger Operators*”, Rev. Math. Phys. **4**, 1 (1992)
- [Bel93] **J. Bellissard:** “*Gap Labelling Theorems for Schrödinger’s Operators*”, in “*From Number Theory to Physics*”, J. M. Luck, P. Moussa, M. Waldschmidt Hrsg., Les Houches March 89, Springer-Verlag, S. 538 (1993)
- [Bel2000] **J. Bellissard, D. Hermmann und M. Zarrouati:** “*Hull of Aperiodic Solids and Gap Labelling Theorems*”, in “*Directions in Mathematical Quasicrystals*”, CRM Monograph Series, Volume 13, M.B. Baake and R.V. Moody Eds., AMS Providence, S. 207 (2000)
- [Ber68] **Ju. M. Berezanskii:** “*Expansions in Eigenfunctions of Self-Adjoined Operators*”, A. M. S. Translations of Mathematical Monographs **17**, Providence, RI (1968)

- [Ber93] **D. Berend** und **C. Radin**: “*Are There Chaotic Tilings*”, Commun. Math. Phys. **152**, 215 (1993)
- [Ber96] **J. Berstel**: “*Recent Results in Sturmian Words*”, S. 13–24, in “*Developments in Language Theory*”, Hrsg. J. Dassow und A. Salomaa, World Scientific (1996)
- [Bes32] **A. S. Besicovitch**: “*Almost Periodic Functions*”, Cambridge U., London (1932), Neuauflage: Dover Publ., New York (1954)
- [Bim93] **G. Bimonte** und **E. Ercolessi**: “*Discretized Laplacians on an Intervall and their Renormalization Group*”, arXiv:hep-lat/9310017v1, Okt. 1993
- [Boh32] **H. Bohr**: “*Fastperiodische Funktionen*”, Reihe Ergebnisse der Math. **1**, Nr. 5, Springer-Verlag (1932)  
s. auch Acta Math. **45**, 29 (1924); **46**, 101 (1923); **52**, 127 (1928)
- [Boh89] **A. Bohm** und **M. Gadella**: “*Dirac Kets, Gamow Vectors and Gel’fand Triplets*”, in Lecture Notes in Physics Bd. **348**, Springer-Verlag, Berlin (1989)
- [Boh98] **A. Bohm** und **N. L. Harshman**: “*Quantum Theory in the Rigged Hilbert Space — Irreversibility from Causality*”, arXiv:quant-ph/9805063 (1998). Erschienen in “*Irreversibility and Causality in Quantum Theory: Semigroups and Rigged Hilbert Space*”, Hrsg. A. Bohm, H. D. Doebner und P. Kielanowski, Springer Lecture Notes in Physics Vol. **504**
- [Bov93] **A. Bovier** und **J. M. Ghez**: “*Spectral Properties of 1-D Schrödinger Operators with Potentials Generated by Substitutions*”, Commun. Math. Phys. **158**, 45 (1993); Erratum in: Commun. Math. Phys. **166**, 431 (1994)
- [Bou66] **N. Bourbaki**: “*General Topology*”, Bde. I und II, Addison-Wesley (1966)
- [Bra79] **O. Bratteli** und **D. W. Robinson**: “*Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics*”, Bde. I und II Springer-Verlag (1979)
- [Bre80] **C. Brezinski**: “*Padé-Type Approximation and General Orthogonal Polynomials.*”, Birkhäuser-Verlag (1980)
- [Bre98] **M. Bremner**: “*Lie Invariants of Degree Ten*”, Int. J. Mathematics, Game Theory and Algebra **8**, 115 (1998)
- [Bro64] **J. L. Brown, Jr.**: “*Zeckendorf’s Theorem and some Applications*”, Fibonacci Quarterly **2.2**, 163 (1964); **3.1**, 1 (1965)
- [Bro76] **J. R. Brown**: “*Ergodic Theory and Topological Dynamics*”, Academic Press (1976)
- [Bro87] **R. Brown**: “*From Groups to Groupoids: A brief Survey*”, Bull. London Math. Soc. **19**, 113 (1987)
- [Bun92] **P. Bundschuh**: “*Einführung in die Zahlentheorie*, 2. Aufl., Springer-Verlag (1992)
- [Bur58] **M. D. Burrow**: “*Invariants of Free Lie Rings*, Comm. Pure Appl. Math. **11**, 419 (1958)

- [Bur82] **T. W. Burkhardt** und **J. M. J. van Leeuwen**: Hrsg., “*Real-Space Renormalization*”, Springer-Verlag (1982)
- [Car2002] **P. Carpena**, **P. Bernaola-Galván**, **P. Ch. Ivanov** und **H. E. Stanley**: “*Metal-Insulator Transition in Chains with Correlated Disorder*”, *Nature* **418**, 955 (2002); Erratum S. 764
- [Cas57] **J. W. S. Cassels**: “*An Introduction to Diophantine Approximation*”, University Press (1957)
- [Cha89] **A. Chakrabarti**, **S. N. Karmakar** und **R. K. Moitra**, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 1017 (1989); *Phys. Rev. B* **39**, 9730 (1989)
- [Cha90] **A. Chakrabarti**, **S. N. Karmakar** und **R. K. Moitra**: “*Two-Band Fibonacci Quasicrystal with Hybridization: Exact Local Green’s Function using the Renormalization-Group Method*” *Mod. Phys. Lett. B* **4**, 795 (1990)
- [Cha91] **A. Chakrabarti**, **S. N. Karmakar** und **R. K. Moitra**: *Phys. Rev. B* **44**, 896 (1991)
- [Chi78] **T. S. Chihara**: “*An Introduction to Orthogonal Polynomials*”, Gordon and Breach (New York 1978)
- [Cla79] **F. H. Claro** und **G. H. Wannier**: “*Magnetic Subband Structure of Electrons in Hexagonal Lattices*”, *Phys. Rev. B* **19**, 6068 (1979)
- [Cle90] **G. J. Clerk** und **B. H. McKellar**: “*Quark tunneling in a One-Dimensional Nuclear Model*”, *Phys. Rev. C* **41**, 1198 (1990)
- [Coh72] **H. Cohn**: “*Markoff Forms and Primitive Words*”, *Math. Ann.* **196**, 8 (1972); s. auch “*Approach to Markoff’s Minimal Forms through Modular Functions*”, *Ann. Math.* **61**, 1 (1955),  
“*Representation of Markoff’s Binary Quadratic Forms by Geodesics on a Perforated Torus*” *Acta Arith.* **18**, 125 (1971)  
“*Some Direct Limits of Primitive Homotopy Words and of Markoff Geodesics*”, in “*Discontinuous Groups and Riemann Surfaces*”, Princeton University Press, Princeton (1974),  
“*Minimal Geodesics on Fricke’s Torus-Covering*”, in “*Riemann Surfaces and Related Topics*” Princeton University Press, Princeton (1980)
- [Cox65] **H. S. M. Coxeter** und **W. O. J. Moser**: “*Generators and Relations for Discrete Groups*”, *Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete, New Series Vol. 14*, Springer-Verlag (1965)
- [Cvi85] **P. Cvitanović**, **B. Shraiman** und **B. Söderberg**: “*Scaling Laws for Mode Lockings of Circle Maps*”, *Phys. Scripta* **32**, 263 (1985)
- [Cvi89] **P. Cvitanović** und **J. Myrheim**: “*Complex Universality*”, *Commun. Math. Phys.* **121**, 225 (1989)
- [Cvi92] **P. Cvitanović**: “*Circle-Maps: Irrationally Winding*”, in [Wal92]

- [Cyc87] **H. L. Cycon, R. G. Froese, W. Kirsch und B. Simon:** “*Schrödinger Operators: With Application to Quantum Mechanics and Global Geometry*”, Springer–Verlag (1987)
- [Czy2000] **G. Czycholl:** “*Theoretische Festkörperphysik*”, Vieweg–Verlag (bzw. Springer–Verlag) (2000)
- [Dan91] **L. Danzer:** “*Quasiperiodicity: Local and Global Aspects*”, in: Proc. 18th Int. Coll. Group Theor. Meth. Phys. (Lect. Notes in Physics Bd. **328**), Hrsg. V. Dodonov und V. Man’ko, Springer–Verlag (1991), S. 561ff.
- [Dan2000–1] **D. Damanik, R. Killip und D. Lenz:** “*Uniform spectral properties of one-dimensional quasicrystals, III.  $\alpha$ -continuity*”, Commun. Math. Phys. **212**, 191 (2000)
- [Dan2000–2] **D. Damanik:** “*Gordon–type Arguments in the Spectral Theory of One-dimensional Quasicrystals*”, in “*Directions in Mathematical Quasicrystals*”, CRM Monograph Series, Volume 13, M.B. Baake and R.V. Moody Eds., AMS Providence (2000), oder arXiv:math-ph/9912005
- [Dan2000–3] **D. Damanik und G. Stolz:** “*A Generalization of Gordons’s Theorem and Applications to Quasiperiodic Schrödinger Operators*”, arXiv:math-ph/0005015 (Mai 2000)
- [Dan2000–4] **D. Damanik und D. Zare:** “*Palindrome Complexity Bounds for Primitive Substitution Sequences*”, Discrete Math. **222** (2000), 259–267
- [Dan2002] **D. Damanik, J.–P. Allouche, M. Baake und J. Cassaigne:** “*Palindrome Complexity*”, Preprint 2002, erscheint bei: Theoret. Comput. Sci.
- [Dat76] **E. Date und S. Tanaka:** “*Analogue of Inverse Scattering Theory for the Discrete Hill’s Equation and Exact Solutions for the Periodic Toda Lattice*”, Progr. Theor. Phys. **55**, 457 (1976) und “*Periodic Multi–Soliton Solutions of Korteweg–de Vries Equation and Toda Lattice*”, Suppl. Progr. Theor. Phys. **50**, 107 (1976)
- [Dav70] **C. Davis und D. Knuth:** “*Number Representations and Dragon Curves I, II*”, J. Recreational Math. **3**, 61 und 133 (1970)
- [Dav96] **K. R. Davidson:** “ *$C^*$ -Algebras by Example*”, Providence, RI: American Mathematical Society (1996)
- [Dek78] **F. M. Dekking und M. Keane:** “*Mixing Properties of Substitutions*”, Zeit. Wahr. **42**, 23 (1978)
- [Dek82] **F. M. Dekking:** “*Recurrent Sets*”, Adv. Math. **44**, 78 (1982)
- [Dek95] **F. M. Dekking:** “*Random and Automatic Walks*”, in [Axe95], S. 415
- [DeL84] **C. De Lange und T. Janssen:** “*Modulated Kronig–Penney Model in Superspace*”, Physica **127A**, 125 (1984)
- [Dom95] **F. Dominguez-Adame, E. Macia, A. Khan und Cl. Roy:** “*LCAO approach to non-relativistic and relativistic Kronig–Penney models*”, Physica **B 212**, 67 (1995)
- [Dro99] **X. Droubay und G. Pirillo:** “*Palindromes and Sturmian Words*”, Theoret. Comput. Sci. **223**, 73 (1999)

- [Dub76] **B. A. Dubrovin, V. B. Matveev und S. P. Novikov:** “*Non-linear Equations of Korteweg–de Vries Type, Finite-Zone Linear Operators, and Abelian Varieties*”, Russian Math. Surveys **31**, 59 (1976)
- [Dun57] **N. Dunford und J. T. Schwarz:** “*Linear Operators*”, Bd. I und II, John Wiley & Sons (1957); Reprint: Wiley Classics Library Ed. Pub. 1988
- [Eco87] **E. N. Economou:** “*Green’s Functions in Quantum Physics*”, Springer–Verlag 1987
- [Edw76] **S. F. Edwards und R. C. Jones:** J. Phys. A: Math. Gen. **9**, 1595 (1976)
- [Elg2001] **A. Elgart und J. H. Schenker:** “*A strong operator topology adiabatic theorem*”, arXiv:math-ph/0110002 (Okt. 2001)
- [Fav35] **J. Favard:** “*Sur les polynomes de Tchebicheff*”, Comptes Rendus de l’Académie des Sciences, Paris, Vol. **200**, 2052 (1935)
- [Fes58/62] **H. Feshbach:** “*Unified Theory of Nuclear Reactions*”, Ann. Phys. **5**, 357 (1958), *ibid.* **19**, 287 (1962).
- [Fib1202] **Leonardo Pisano (1170–1250), alias Fibonacci** (von *filius BONACCI*): “*Liber abbaci*” (1202). Die Bedeutung von Fibonacci beruht auf der Tatsache, daß er der indisch–arabischen Zifferschreibweise im mittelalterlichen Europa zum Durchbruch verhalf. Einen kurzen historische Überblick findet man z.B. in <http://www-groups.dcs.st-and.ac.uk/~history/Mathematicians/Fibonacci.html>
- [Fic90] **E. Fick und G. Sauer mann:** “*The quantum statistics of dynamic processes*”, Springer series in solid–state sciences **86**, Springer–Verlag (1990)
- [Fig84] **A. L. Figotin und L. A. Pastur:** “*The Positivity of Lyapunov Exponent and Absence of Absolutely Continuous Spectrum for Almost Mathieu Equation*”, J. Math. Phys. **25**, 774 (1984)
- [Fu2000] **X. Fu, W. Lu, P. Ashwin und J. Duan:** “*Symbolic Representations of Iterated Maps*”, Preprint Nov. 2000
- [Ful77] **C. T. Fulton:** “*Parametrizations of Titchmarsh’s  $m(\lambda)$ –Functions in the Limit Circle Case*”, Trans. Amer. Math. Soc. **229**, 51 (1977), bzw. mit demselben Titel ausführlich als Dissertation, Rheinisch–Westfälische Tech. Hochschule Aachen, 1973.
- [Fur81] **H. Furstenberg:** “*Recurrence in Ergodic Theory and Combinatorial Number Theory*”, Princeton University Press (1981)
- [Gel65–IV] **I. M. Gelfand und N. J. Wilenkin:** “*Verallgemeinerte Funktionen (Distributionen)*”, Bd. IV: “*Einige Anwendungen der harmonischen Analyse, Gelfand’sche Raumtripel*”, DVW Berlin (1964)
- [Ges97] **F. Gesztesy und B. Simon:** “ *$m$ –Functions and Inverse Spectral Analysis for Finite and Semi-Infinite Jacobi Matrices*”, J. D’Anal. Math. **73**, 267 (1997)
- [Gil87] **D. J. Gilbert und D. B. Pearson:** “*On Subordinacy and Analysis of the Spectrum of 1–D Schrödinger Operators*”, J. Math. Anal. Appl. **128**, 30 (1987)

- [Gil89] **D. J. Gilbert:** “*On Subordinacy and Analysis of the Spectrum of Schrödinger Operators with two Singular Endpoints*”, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh* **112A**, 213 (1989)
- [Gio95] **T. Giordano, I. F. Putnam und C. F. Skau:** “*Topological Orbit Equivalence and  $C^*$ -crossed Products*”, *J. reine angew. Math.* **469**, 51 (1995)
- [Gho98] **A. Ghosh und S. N. Karmakar:** “*Trace Map of a General Aperiodic Thue–Morse Chain: Electronic Properties*”, *Phys. Rev. B* **58**, 2586 (1998)
- [God93] **C. Godrèche, J. M. Luck, A. Janner und T. Janssen:** “*Fractal Atomic Surfaces of Self-similar Quasiperiodic Tilings of the Plane*”, *J. Phys. I France* **3**, 1921 (1993)
- [Gom99] **I. Gómez und I. I. Satija:** “*Breakup of a Dimer: A New Approach to Localization Transition*”, arXiv:cond-mat/9906109, Juni 1999
- [Gon81] **C. E. T Gonçalves da Silva und B. Koiller:** “*Local Density of States in a Disordered Chain: A Renormalization Group Approach*”, *Solid State Commun.* **40**, 215 (1981)
- [Gon92] **A. Gonis:** “*Green Functions for Ordered and Disordered Systems*”, North-Holland (1992)
- [Gor76] **A. Ya. Gordon:** “*On the Point Spectrum of the One-dimensional Schrödinger Operator*”, *Usp. Math. Nauk.* **31**, 257 (1976)
- [Gra81] **I. S. Gradstein und I. M. Ryshik:** “*Summen-, Produkt- und Integraltafeln*”, 2 Bde., Verlag Harri Deutsch (1981)
- [Hap55] **P. G. Haper:** “*Single Band Motion of Conducting Electrons in a Uniform Magnetic Field*”, *Proc. Phys. Soc. London* **68**, 874 (1955)
- [Har60] **G. H. Hardy und E. M. Wright:** “*An Introduction to the Theory of Numbers*”, Oxford, Clarendon Press (1960)
- [Hed44] **G. A. Hedlund:** “*Sturmian Minimal Sets*”, *Amer. J. Math.* **66**, 695 (1944)
- [Hen77] **P. Henrici:** “*Applied and Computational Complex Analysis*”, Bd. II: “*Special Functions, Integral Transformations, Asymptotics and Continued Fractions*”, Wiley, New York (1977)
- [Her73] **H. Herrlich und G. E. Strecker:** “*Category Theory*”, Allyn and Bacon, Inc., Boston (1973)
- [Her79] **H. Herrlich und G. E. Strecker:** “*Category Theory: an Introduction*”, 2. Aufl., Sigma Series in Pure Mathematics **Vol. 1**, Heldermann-Verlag, Berlin (1979)
- [Her92] **R. H. Herman, I. F. Putnam und C. F. Skau:** “*Ordered Bratteli Diagrams, Dimension Groups and Topological Dynamics*”, *Int. J. Math.* **3**, 827 (1992)
- [Her97] **J. Hermisson, C. Richard und M. Baake:** “*A Guide to the Symmetry Structure of Quasiperiodic Tiling Classes*”, *J. Phys. I (France)* **7**, 1003 (1997)
- [Heu86] **H. Heuser:** “*Funktionalanalysis*”, B. G. Teubner Stuttgart (1986)

- [Hil1886] **G. W. Hill**: “*On the Part of Motion of the Lunar Perigee*”, *Acta Math.* **8**, 1 (1886)
- [Hip94] **F. Hippert** und **D. Gratias**, Hrsg., “*Lectures on Quasicrystals*”, Les Éditions de Physique, Les Ulis (France) (1994)
- [Hir89] **H. Hiramoto** und **M. Kohmoto**: “*Scaling Analysis of Quasiperiodic Systems: Generalized Haper Model*”, *Phys. Rev. B* **40**, 8225 (1989)
- [His96] **P. D. Hislop** und **I. M. Sigal**: “*Introduction in Spectral Theory*”, Springer-Verlag (1996)
- [Hof76] **D. R. Hofstadter**: “*Energy Levels and Wave Functions of Bloch Elektrons in Rational and Irrational Magnetic Fields*”, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976)
- [Hof95–1] **A. Hof**: “*On Diffraction by Aperiodic Structures*”, *Commun. Math. Phys.* **169**, 25 (1995)
- [Hof95–2] **A. Hof**, **O. Knill** und **B. Simon**: “*Singular Continuous Spectrum for Palindromic Schrödinger Operators*”, *Commun. Math. Phys.* **174**, 149 (1995)
- [Hu95] **Y. Hu**, **D. Tian** und **L. Wang**: “*Renormalization Group Approach to the Random Period Doubling Lattice*”, *Physica A* **207**, 293 (1995)
- [Igu91] **K. Iguchi**: “*Theory of Quasiperiodic Lattices I: Scaling Transformation for a Quasiperiodic Lattice*”, *Phys. Rev. B* **43**, 5915 (1991)
- “*II. Generic Trace Map and Invariant Surface*”, *Phys. Rev. B* **43**, 5919 (1991)
- [Igu92] **K. Iguchi**: “*Exact Wave Functions of an Electron on a Quasiperiodic Lattice: Definition of an Infinite-Dimensional Riemann Theta Function*”, *J. Math. Phys.* **33**, 3938 (1992)
- [Igu94–II] **K. Iguchi**: “*A Class of New Invariant Surfaces under the Trace Maps for N-ary Fibonacci Lattices*”, *J. Math. Phys.* **35**, 1008 (1994)
- [Igu94–III] **K. Iguchi**: “*Trace Map for an N-ternary Fibonacci Lattice*”, *Phys. Lett. A* **190**, 243 (1994)
- [Igu95] **K. Iguchi**: “*What is the meaning of the Avishai-Berend-Glaubman’s Trace Identity for Matrices in  $SL(2, \mathbb{R})$ ? The Grammians for Vectors in a Three-Dimensional Non-Euclidean Space*”, *Phys. Lett. A* **205**, 25 (1995)
- [Igu97–1] **K. Iguchi**: “*The Saxon-Hutner Theorem, its Converse Theorem and their Applications to Localization and Delocalization Problems in Binary Quasiperiodic Lattices*”, *Int. J. Mod. Phys. B* **11**, 2157 (1997)
- [Igu97–2] **K. Iguchi**: “*Universal Algebraic Varieties and Ideals: Field Theory on Algebraic Varieties*”, *Int. J. Mod. Phys. B* **11**, 2533 (1997)
- [Izr99] **F. M. Izrailev** und **A. A. Krokhnin**: “*Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder*”, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999)
- [Jan91] **C. Janot**: “*Quasicrystals: A Primer*”, Clarendon Press, Oxford (1994)

- [Jan94] **M. Janssen**: “*Multifractal Analysis of Broadly-Distributed Observables and Criticality*”, Int. J. Mod. Phys. **B 8**, 943 (1994)
- [Jan95] **T. Janssen**: “*From Quasiperiodic to More Complex Systems*”, in [Axe95]
- [Jar89] **M. Jaros**: “*Physics and Application of Semiconductor Microstructures*”, Clarendon Press, Oxford, 1989.
- [Jeo2000] **H.-C. Jeong, E. Kim und C.-Y. Lee**: “*Noncommutative Torus from Fibonacci Chains via Foliation*”, arXiv: math-ph/0008028, Aug. 2000
- [Jit99] **S. Ya. Jitomirskaya**: “*Metall-Insulator Transition for the Almost-Mathieu Operator*”, Ann. Math. **150**, 1159 (1999)
- [Joh82] **R. Johnson und J. Moser**: “*The Rotation Number for Almost Periodic Potentials*”, Commun. Math. Phys. **84**, 403 (1982)
- [Joh90] **M. Johansson und R. Riklund**: “*Mobility Edges and Multifractal Properties in a 1-D System with tree Incommensurate Frequencies*”, Phys. Rev. **42**, 8244 (1990)
- [Jon66] **D. S. Jones**, “*Generalized Functions*”, McGraw-Hill (1966)
- [Jon80] **W. B. Jones und B. J. Thron**: “*Continued Fraction: Analytic Theory and Applications*”, in: “*Enzyklopedia of Mathematics and its Applications*”, **Vol. 11**, Addison-Wesley Pub. Comp. (1980)
- [Kam67] **E. Kamke**: “*Differentialgleichungen — Lösungsmethoden und Lösungen*”, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig (1967)
- [Kan93] **M. Kaneko und T. Odagaki**: “*Selfsimilarity in a Class of Quadratic Quasiperiodic Chains*”, J. Phys. Soc. Japan **62**, 1147 (1993)
- [Kao96] **H.-C. Kao, S.-C. Lee und W.-J. Tzeng**: “*Farey Tree and the Frenkel-Kontorova Model*”, arXiv:solv-int/9604001 (1996)
- [Kat83] **Y. Kato**: “*On the Spectral Density of Periodic Jacobi Matrices*”, in *Proc. RIMS Symposium on Non-Linear Integrabel Systems — Classical Theory and Quantum Theory, Kyoto, Japan May 1981*, Hrsg. M. Jimbo und T. Miwa, World Science Pub. Co., Singapore, 1983
- [Kat86] **Y. Kato**: “*Mixed Periodic Jacobi Continued Fractions*”, Nagoya Math. J. **104**, 129 (1986)
- [Kat95] **T. Kato**: “*Perturbation Theory for Linear Operators*”, Classics in Mathematics, korrigierter Reprint der zweiten Auflage von 1980, Springer-Verlag (1995)
- [Kea68] **M. Keane**: “*Generalized Morse Sequences*”, Z. Wahrscheinlichkeitstheorie Verw. Geb. **10**, 335 (1968)
- [Kei99] **K. Keimel**: “*Allgemeine Topologie*”, Vorlesung zum SS 1999, (s. die Web-Seite: <http://www.mathematik.tu-darmstadt.de/ags/ag14/vorlesungen/>)

- [Kha92] **S. Khan** und **D. B. Pearson**: “*Subordinacy and Spectral Theory for Infinite Matrices*”, *Helv. Phys. Acta* **65**, 505 (1992)
- [Kie2002] **K. Kiener**: “*Iterierte Funktionensysteme und Fraktale*”, Vorlesungsskript, Johannes Kepler Universität Linz (Österreich), s. <http://shrimp.bayou.uni-linz.ac.at/Teach/Scriptum/fraktal.ps.gz>
- [Kit98] **B. P. Kitchens**: “*Symbolic Dynamics: one-sided, two-sided, and countable state Markov shifts*”, (Univeritext) Springer-Verlag (1998)
- [Kit99] **C. Kittel**: “*Einführung in die Festkörperphysik*”, 12., vollst. überarb. und aktualisierte Aufl., Oldenbourg (1999)
- [Koh84] **M. Kohmoto** und **Y. Oono**: “*Cantor spectrum for an Almost Periodic Schrödinger Equation and a Dynamical Map*”, *Phys. Lett.* **102 A**, 145 (1984)
- [Koh86-I] **M. Kohmoto** und **J. R. Banavar**: “*Quasiperiodic Lattice: Electronic Properties, Phonon Properties, and Diffusion*”, *Phys. Rev.* **B 34**, 563 (1987)
- [Koh86-II] **M. Kohmoto**: “*Localization Problem and Mapping of One-Dimensional Wave Equations in Random and Quasiperiodic Media*”, *Phys. Rev.* **B 34**, 5043 (1986)
- [Koh87] **M. Kohmoto**, **B. Sutherland** und **C. Tang**: “*Critical Wave Functions and a Cantor-set Spectrum of a One-dimensional Quasicrystal Model*”, *Phys. Rev.* **B 35**, 1020 (1987)
- [Kop94] **G. Kopidakis**, **C. M. Soukoulis** und **E. N. Economou**: “*Electron-Phonon Interactions and Recurrence Phenomena in One-dimensional Systems*”, *Phys. Rev.* **B 49**, 7036 (1994)
- [Kop95] **G. Kopidakis**, **C. M. Soukoulis** und **E. N. Economou**: “*Electron-Phonon Interaction, Localization, and Polaron Formation in One-dimensional Systems*”, *Phys. Rev.* **B 51**, 15038 (1995)
- [Kot82] **S. Kotani**: “*Ljapunov Indices Determine Absolutely Continuous Spectra of Stationary Random One-Dimensional Schrödinger Operators*”, *Taniguchi Symp. SA Katata*, 225 (1982)
- [Kot85] **S. Kotani**: “*One-Dimensional Random Schrödinger Operators and Herglotz Functions*”, *Taniguchi Symp. PMMP Katata*, 219 (1985)
- [Kot89] **S. Kotani**: “*Jacobi Matrices with Random Potentials Taking Finitely Many Values*”, *Rev. Math. Phys.* **Vol. 1**, 129 (1989)
- [Kot97] **S. Kotani**: “*Generalized Floquet Theory for Stationary Schrödinger Operators in One Dimension*”, *Chaos, Solitons & Fractals* **Vol. 8**, 1817 (1997)
- [Kra93-I] **P. Kramer**: “*Algebraic Structures for 1-D Quasiperiodic Systems*”, *J. Phys.* **A 26**, 213 (1993)
- [Kra93-II] **B. Kramer** und **A. MacKinnon**: “*Localization: Theory and Experiment*”, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1569 (1993)

- [Kri65] P. Kristensen, L. Mejlbo und E. Thue Poulsen: “*Tempered Distributions in Infinitely Many Dimensions*”, Commun. math. Phys. **1**, 175 (1965)
- [Kro31] R. de L. Kronig und W. G. Penney: Proc. R. Soc. London, Ser. A **130**, 499 (1931).
- [Kub57] R. Kubo: Can. J. Phys. **34**, 1274 (1956) und J. Phys. Soc. Japan **12**, 570 (1957)
- [Lam98] J. S. W. Lamb: “*On the Canonical Projection Method for One-dimensional Quasicrystals and Invertible Substitution Rules*”, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, L331 (1998)
- [Lan83] J. M. Langlois, A. M. S. Tremblay und B. W. Southern: “*Chaotic Scaling Trajectories and Hierarchical Lattice Models of Disordered Binary Harmonic Chains*”, Phys. Rev. B **28**, 218 (1983)
- [Lan91] R. Lang: “*Spectral Theory of Random Schrödinger Operators*”, Lecture Notes in Mathematics **1498**, Springer Verlag (1991)
- [Lan95] S. Lang: “*Algebra*”, 3. Aufl., korr. Reprint, Addison–Wesley Pub. Comp. 1995
- [Lan96] W. Lang: “*The Measure of the Orthogonal Polynomials Related to Fibonacci Chains: The Periodic Case*”, J. Phys. A **29**, 4196 (1996)
- [Lat90] A. Latgé und E. V. Anda: “*DC Conductivity Calculation and the Percolation Threshold in Dilute Bethe Lattices*”, Solid State Commun. **76**, 1387 (1990)
- [Len2002] D. Lenz, N. Peyerimhoff und I. Veselić: “*Groupoids, von Neumann Algebras and the Integrated Density of States*”, Preprint März, 2002
- [Lie66] E. Lieb und D. C. Mattis: “*Mathematical Physics in One Dimension*”, Academic Press, New York, 1966
- [Lin68] A. Lindenmayer: “*Mathematical Models for Cellular Interactions and Development*”, J. Theor. Biol. **18**, 280 (1968)
- [Lem87] M. A. Lemieux und A. M. S. Tremblay: “*Densities of States, Projected Densities of States, and Transfer–Matrix Methods from a Unified Point of View*”, Phys. Rev. B **36**, 1463 (1987)
- [Lot83] M. Lothaire: “*Combinatorics on Words*”, in “*Encyclopedia of Mathematics and its Applications*”, Vol.17, Addison–Wesley Pub. Comp. (1983)
- [Lot2001] M. Lothaire: “*Algebraic Combinatorics on Words*”, erscheint bei Cambridge University Press voraussichtlich Mai 2002 (s.a. <http://www-igm.univ-mlv.fr/~berstel/Lothaire/>)
- [Lov91] S. W. Lovesey, G. I. Watson und D. R. Westhead: “*Theory of Dynamic Response Functions of Periodically Modulated Physical Systems*”, Int. J. Mod. Phys. B **5**, 1313 (1991)
- [Lu87] J. P. Lu und J. L. Birman: “*Electronic Structure of a Quasiperiodic System*”, Phys. Rev. B **36**, 4471 (1987)

- [Luc93–1] **J. M. Luck, C. Godr che, A. Janner und T. Janssen:** “*The Nature of the Atomic Surfaces of Quasiperiodic Self-Similar Structures*”, *J. Phys. A* **26**, 1951 (1993)
- [Luc93–2] **J. M. Luck:** “*Critical Behavior of the Aperiodic Quantum Ising Chain in a Transverse Magnetic Field*”, *J. Stat. Phys.* **72**, 417 (1993)
- [Mad2001] **R. de la Madrid Modino:** “*Quantum Mechanics in Rigged Hilbert Space Language*”, Dissertation, Universit t Valladolid, Spanien (Mai 2001)
- [Mag66] **W. Magnus, A. Karrass und D. Solitar:** “*Combinatorial Group Theory*”, John Wiley & Sons, Inc. 1966
- [Mag86] **A. C. Maggs und R. B. Stinchcombe:** “*Calculating Dynamic Structure Factors with the Real-Space Renormalization Group*”, *J. Phys. A* **19**, 2637 (1986)
- [Mag2002] **B. A. Magurn:** “*An Algebraic Introduction to K-Theory*”, Cambridge Uni. Press (2002)
- [Man91] **V. A. Mandelshtam und A. Ya. Zhitomirskaya:** “*1-D Quasiperiodic Operators. Latent Symmetries*”, *Commun. Math. Phys.* **139**, 589 (1991)
- [Mak90] **S. S. Makler und J. P. Gaspard:** “*Hume-Rothery Stable Fibonacci Alloys*”, *Solid State Commun.* **75**, 401 (1990)
- [Mar1896] **A. Markoff:** “*Differenzenrechnung*”, Leipzig (1896)
- [Mar75] **V. A. Mar enko und I. V. Ostrovskii:** “*A Charakterization of the Spectrum of Hill’s Operator*”, *Math. USSR Sbornik* **4**, 493 (1975)
- [Mat93] **D. C. Mattis:** “*The Many-Body Problem*”, World Scientific (1993)
- [McK76] **H. P. McKean und E. Trubowitz:** “*Hill’s Operator and Hyperelliptic Function Theory in the Presence of Infinite Many Branch Points*”, *Commun. Pure Appl. Math.* **24**, 143 (1976)
- [Med2000] **A. Meduna:** “*Automata and Languages — Theory and Applications*”, Springer-Verlag (2000)
- [Meg98] **R. E. Megginson:** “*An Intruduction to Banach Space Theory*”, Graduate Texts in Math. **183**, Springer-Verlag (1998)
- [Min97] **J. A. Mingo:** “*The Classification of One Dimensional Almost Periodic Tilings Arising from the Projektion Mehod*”, Preprint  
“*C\*-Algebras associated with One Dimensional Almost Periodic Tilings*”, *Commun. Math. Phys.* **183**, 307 (1997)
- [Moe76] **P. van Moerbeke:** “*The Spektrum of Jacobi-Matrices*”, *Invent. Math.* **37**, 45 (1976)
- [Moe79] **P. van Moerbeke und D. Mumford:** “*The Spectrum of Difference Operators and Algebraic Curves*”, *Acta Math.* **143**, 93 (1979)
- [Mol97] **L. Molinari:** “*Transfer Matrices and Tridiagonal-block Hamiltonians with Periodic and Scattering Boundary Conditions*”, *J. Phys. A* **30**, 983 (1997)

- [Mol98] **M. I. Molina:** “*Transport of Localized and Extended Excitations in a Nonlinear Anderson Model*”, *Phys. Rev. B* **58**, 12547 (1998)
- [Moo97] **R. V. Moody**, Hrsg., “*The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order*”, Kluwer Academic Pub. (1997)
- [Mor40] **M. Morse** und **G. A. Hedlund:** “*Symbolic Dynamics II: Sturmian Trajectories*”, *Amer. J. Math.* **62**, 1 (1940)
- [Moz89] **S. Mozes:** “*Tilings, Substitution Systems, and Dynamical Systems Generated by Them*”, *J. d’Anal. Math.* **53**, 139 (1989)
- [Mur90] **G. J. Murphy:** “*C\*-Algebras and Operator Theory*”, Academic Press, Inc. (1990)
- [Neg88] **J. W. Negele** und **H. Orland:** “*Quantum many-particle systems*”, (Frontiers in Physics **68**), Addison-Wesley (1988)
- [Neu33] **B. Neumann:** “*Die Automorphismengruppe der freien Gruppe*”, *Math. Ann.* **107**, 367 (1932)
- [Nie17/24] **J. Nielsen:** “*Die Isomorphismen der allgemeinen, unendlichen Gruppe mit zwei Erzeugenden*”, *Math. Ann.* **78**, 385 (1917)  
 “*Die Isomorphismengruppe der Freien Gruppen*”, *Math. Ann.* **91**, 169 (1924)
- [Nie76] **Th. Niemeijer** und **J. M. J. van Leeuwen:** “*Renormalization Theory for Ising-like Spin Systems*”, in “*Phase Transitions and Critical Phenomena*”, Vol. **6**, Hrsg. C. Domb und M. S. Green, Academic Press (1976)
- [Nij98] **M. den Nijs:** “*Real-space Renormalization from a Geometric Fractal Perspective*”, *Physica A* **251**, 52 (1998)
- [Niv72] **I. Niven** und **H. S. Zuckerman:** “*An introduction to the Theory of Numbers*”, John Wiley & Sons Inc. (1972)
- [Nöc93] **J. U. Nöckel**, **A. D. Stone** und **H. U. Baranger:** “*Adiabatic Turn-on and the Asymptotic Limit in Linear-Response Theory for Open Systems*”, *Phys. Rev. B* **48**, 17569 (1993)
- [Nus65] **A. E. Nussbaum:** “*Quasi-analytic Vectors*”, *Arkiv För Matematik*, **6**, 179 (1965);  
 “*A Note on Quasi-analytic Vectors*”, *Stud. Mathe.* **23**, 305 (1969)
- [Oda89] **T. Odagaki** und **H. Aoyama:** “*Self-Similarities in One-Dimensional Periodic and Quasiperiodic Systems*”, *Phys. Rev. B* **39**, 475 (1989)
- [Oh99] **G.-Y. Oh:** “*Electronic and Dynamic Properties of a 1-D Thue-Morse-Chain*”, arXiv: cond-mat/9901156 (1999)
- [Ost84] **S. Ostlund** und **S. Kim:** “*Renormalization of Quasiperiodic Mappings*”, *Physica Scripta* **T9**, 193 (1985)
- [Pas92] **L. A. Pastur** und **A. Figotin:** “*Spectra of Random and Almost-Periodic Operators*”, Reihe: “*Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*”, Bd. **297**, Springer-Verlag (1992)

- [Ped79] **G. K. Pedersen:** “*C\*-Algebras and their Automorphism Groups*”, Academic Press, New York (1979)
- [Ped89] **G. K. Pedersen:** “*Analysis Now*”, Springer-Verlag (1989)
- [Pei33] **R. Peierls:** “*Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen*”, *Z. Phys.* **80**, 763 (1933)
- [Per54/57] **O. Perron:** “*Die Lehre von den Kettenbrüchen*”, Bde. I (1954) und II (1957), jeweils 3. Aufl., B. G. Teubner, Stuttgart
- [Per60] **O. Perron:** “*Irrationalzahlen*”, 4. Aufl., de Gruyter & Co. (1960)
- [Pet83] **K. Petersen:** “*Ergodic Theory*”, Cambridge Studies in Advanced Mathematics **2**, Cambridge Uni. Press (1983)
- [Que87] **M. Queffélec:** “*Substitution Dynamical Systems — Spectral Analysis*”, *Lecture Notes in Mathematics* **1294**, Springer-Verlag, Berlin (1987)  
“*Spectral Study of Automatic and Substitutive Sequences*”, in [Axe95]
- [Rad77] **C. M. Rader:** “*Recovery of Undersampled Periodic Waveforms*”, *IEEE Trans-ASSP* **25**, 242 (1977)
- [Ram86] **R. Rammal, G. Toulouse und M. A. Virasoro:** “*Ultrametricity for Physicists*”, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 765 (1986)
- [Rau96] **J. Rau und B. Müller:** “*From Reversible Quantum Microdynamics to Irreversible Quantum Transport*”, *Phys. Rep.* **272**, 1 (1996)
- [Ree72–I] **M. Reed und B. Simon:** “*Methods of modern mathematical physics*”, Bd. I: “*Functional Analysis*”, Academic Press, Inc. (1972)
- [Ree72–II] **M. Reed und B. Simon:** “*Methods of modern mathematical physics*”, Bd. II: “*Fourier Analysis, Self-adjointness*”, Academic Press, Inc. (1975)
- [Ren80] **J. Renault:** “*A Groupoid Approach to C\*-Algebras*”, *Lecture Notes in Mathematics* **763**, Springer-Verlag (1980)
- [Reu93] **C. Reutenauer:** “*Free Lie Algebras*”, Clarendon Press, Oxford (1993)
- [Ric78] **R. D. Richtmyer:** “*Principles of Advanced Mathematical Physics*”, Vol. 1, Springer-Verlag (1978)
- [Rio94] **R. del Rio, S. Jitomirskaya, N. Makarov und B. Simon:** “*Singular Continuous Spectrum is Generic*”, *Bullet. Am. Math. Soc.* **31**, 208 (1994)
- [Roz80] **O. Rozenberg und A. Salomaa:** “*The Mathematical Theory of L Systems*”, Academic Press, New York (1980)
- [Rüd98] **A. Rüdinger:** “*Multifraktale Analyse der Spektren quasiperiodischer Hamilton-Operatoren*”, Dissertation, Uni Stuttgart (Shaker, Aachen 1998)

- [Sán94] **A. Sánchez, E. Maciá und F. Dominguez-Adame:** “*Suppression of Localization in Kronig–Penney Models with Correlated Disorder*”, Phys. Rev. **B 49**, 147 (1994)
- [Sán2001] **V. Sánchez, L. A. Pérez, P. Oviedo–Roa und C. Wang:** “*Renormlization Approach to the Kubo Formula in Fibonacci Systems*”, Phys. Rev. **B 64**, 174205 (2001)
- [Sch65] **G Scharf:** “*Fastperiodische Potentiale*”, Hel. Phys. Acta **38**, 573 (1965)
- [Sch97] **M. R. Schroeder:** “*Number theory in Science and Communication: With Applications in Cryptography, Physics, Digital Information, Computing and Self-similarity*”, (Springer series in information sciences **7**) 3. Aufl., Springer–Verlag (1997)
- [She84] **D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias und J. Cahn:** “*Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and no Translation Symmetry*”, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984)
- [Sie88] **W. Sierpinski:** “*Elementary Theory of Numbers*”, North–Holland, Amsterdam (1988)
- [Sim82–1] **B. Simon:** “*Schrödinger–Semigroups*”, Bull. Amer. Math. Soc. **7**, 447 (1982)
- [Sim95] **B. Simon:** “*Operators with Singular Continuous Spectrum: I. General Operators*”, *Annals Math.* **141**, 131 (1995)
- [Sir90–II] **C. Sire und J. Bellissard:** “*Renormalization Group for the Octagonal Quasi–Periodic Tiling*”, Europhys. Lett. **11**, 439 (1990)
- [Soc86] **J. E. S. Socolar und P. J. Steinhardt:** “*Quasicrystals II: Unit–cell Configurations*”, Phys. Rev. **B 34**, 616 (1986)
- [Sou83–1] **B. W. Southern, A. A. Kumar, P. D. Loly und A.–M. S. Tremblay:** Phys. Rev. **B 27**, 1405 (1983)
- [Sou83–2] **B. W. Southern, A. A. Kumar und J. A. Ashraff:** Phys. Rev. **B 28**, 1785 (1983)
- [Sou94] **C. M. Soukoulis, M. J. Velgakis und E. N. Economou:** “*One–Dimensional Localization with Correlated Disorder*”, Phys. Rev. **B 50**, 5110 (1994)
- [Sta99] **Z. M. Stadnik, Hrsg.,** “*Physical Properties of Quasicrystals*”, Springer Series in Solid–State Sciences **126**, Springer–Verlag (1999)
- [Sto88] **A. D. Stone und A. Szafer:** IBM J. Dev. **32**, 384 (1988)
- [Suc2002] **J.–B. Suck, M. Schreiber und P. Hussler (Hrsg.):** “*Quasicrystals: An Introduction to Structure, Physical Properties, and Applications*”, Springer–Verlag (2002)
- [Sze39] **G. Szegő:** “*Orthogonal Polynominals*”, Gordon and Breach, New York (1939)
- [Tak79] **M. Takesaki:** “*Theory of Operator Algebras I*”, Springer–Verlag (1979)
- [Tan89] **Y. Tanaka und M. Tsukada:** “*Superconductivity of the Kronig–Penney Model*”, Phys. Rev. **B 40**, 4482 (1989)
- [Tay2002] **P. L. Taylor und O. Heinonen:** “*A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*”, Cambridge, Uni. Press (2002)

- [Tes2000] **G. Teschl**: “*Jacobi Operators and Completely Integrable Nonlinear Lattices*”, Mathematical Surveys and Monographs Bd. **72**, AMS (2000). Eine Kapitelauswahl gibt es unter <http://www.mat.univie.ac.at/~gerald/ftp/book-jac/>
- [Tit46] **E. C. Titchmarsh**: “*Eigenfunction Expansions Associated with Second-Order Differential Equations*”, Oxford, University Press (1946)  
“*Eigenfunction Expansions*”, Part I (1962), Part II (1958), Oxford, University Press
- [Tod89] **M. Toda**: “*Theory of Nonlinear Lattices*”, Springer Series in Solid State Sciences **20**, 2. Aufl., Springer Verlag (1989)
- [Tom87] **T. Tomiyama**: “*Invitation to  $C^*$ -Algebras and Topological Dynamics*”, Adv. Ser. Dyn. Syst. **3**, World Scientific (1987)
- [Tom96] **T. Tomiyama**: “ *$C^*$ -Algebras and Topological Dynamical Systems*”, Rev. Math. Phys. **8**, 741 (1996)
- [Tom2001] **M. Tomforde**: “*The modern Theory of  $C^*$ -Algebras*”, Preprint, July 2001
- [Tre83] **A. M. S. Tremblay** und **B. W. Southern**: “*Scaling and Density of States of Fractal Lattices from a Generating Function Point of View*”, J. Phys. Lett. (France) **44**, L843 (1983)
- [Tun92] **E. Tuncel** und **L. Pavesi**: “*Disorder-Induced Localization in Superlattices*”, Philos. Mag. **B 65**, 213 (1992)
- [Vel00] **M. T. Velinho** und **I. R. Pimental**: “*Liapunov Exponent for Pure and Random Fibonacci-Chains*”, arXiv: cond-mat/0001060 (2000)
- [Wal92] **M. Waldschmidt**, **P. Moussa**, **J. M. Luck** und **C. Itzykson**, Hrsg., “*From Number Theory to Physics*”, Springer-Verlag (1992)
- [Wal97] **D. Walther** und **R. v. Baltz**: “*Path Renormalization of Quasiperiodic Generalized Fibonacci Chains*”, Phys. Rev. **B 55**, 8852 (1997)
- [Wal98] **D. Walther** und **R. v. Baltz**: “*Path Renormalization of a Class of 1-D Quasiperiodic Chains*”, in *Aperiodic '97*, eds. M. de Boissieu, J.-L. Verger-Gaugry und R. Currat, World Scientific (1998)
- [Wal2002] **D. Walther** und **R. v. Baltz**: “*Frequency Dependent Conductivity of the Fibonacci-Chain*”, Journ. Low Temp. Phys. **126**, 1211 (2002)
- [Wal2003] **D. Walther**: “*Mathematisches & physikalisches Brevier — Über die mathematischen und physikalischen Grundlagen der Pfad-Renormierung*”, unveröffentlichtes Preprint 2003
- [Wei69] **C. M. Weinbaum**: “*Partitioning a Primitive Word into a Generating Set*”, Math. Ann. **181**, 157 (1969)
- [Weg93] **E. N. Wegge-Olsen**: “ *$K$ -Theory and  $C^*$ -Algebras — A Friendly Approach*”, Oxford Uni. Press (1993)

- [Wev40] **F. Wever**: “Über Invarianten in Lie’schen Ringen”, Math. Ann. **120**, 563 (1949)
- [Wey10] **H. Weyl**: “Über gewöhnliche Differentialgleichungen mit Singularitäten und die zugehörige Entwicklung willkürlicher Funktionen”, Ann. Math. **68**, 220 (1910)
- [Wie88] **C. Wiecko** und **H. E. Roman**: “Localization Properties in Linear Models through Decimation”, Phil. Mag. **B 57**, 149 (1988)
- [Wij89] **F. Wijnands**: “Energy Spectra for 1-D Quasiperiodic Potentials: Bandwidth, Skaling, Mapping and Relation with Lokal Isomorphism”, J. Phys. **A: Math. Gen.** **22**, 3267 (1989)
- [Wil83] **Wilson**: “The Renormalization Group and Critical Phenomena”, Rev. Mod. Phys. **55**, 583 (1983)
- [Yey89] **A. L. Yeyati**, **M. Weissmann** und **E. Anda**: J. Phys.: Condens. Matter **1**, 5429 (1989)
- [Yos96] **T. Yoshikawa** und **K. Iguchi**: “Relation between a Class of Quasiperiodic Lattices Generated by the Substitution Method and the Generalized Continued Fraction Expansion”, Int. J. Mod. Phys. **B10**, 2081 (1996)
- [You93] **J. Q. You** und **F. Nori**: “The Real-Space Renormalization Group and Generating Function for Penrose Lattices”, J. Phys.: Cond. Matt. **5**, 9431 (1993)
- [Zij2001] **E. S. Zijlstra**: “Electronic Properties of Quasicrystals — A Tight-Binding Study”, Dissertation, Kath. Uni. Nijmegen, Niederlande (2001)
- [Zhi95] **W. Zhi-Ying**: “Singular Words, Invertible Substitutions and lokal Isomorphisms”, in [Axe95], S. 433
- [Zho91–1] **J. X. Zhong**, **J. Q. You**, **J. R. Yan** und **X. H. Yan**: “Local Electronic Properties of One-Dimensional Quasiperiodic Systems”, Phys. Rev. **B 43**, 13778 (1991);
- [Zho94] **J. X. Zhong** und **R. Mosseri**: “Electronic Properties of the Octagonal Tiling: A new Renormalization-Group Calculation”, J. Phys. I (France) **4**, 1513 (1994)