

定数磁場と周期的ポテンシャルを持つ

Schrödinger Operator の状態密度関数について

京都大・理 峯 拓矢 (MINE TAKUYA)

Schrödinger Operator の状態密度関数 (Integrated Density of States, 以下 IDS) は物理的要請から考案された量であるが, 数学的にも様々な興味深い性質を持つ事が知られており, 既に多くの数学者によって研究されている。ここでは特に定数磁場と周期的ポテンシャルを持つ Schrödinger Operator の IDS についての考察を行う。まず, 次の operator を考える。

$$H_B := \sum_{j=1}^d \left(\frac{1}{i} \partial_{x_j} + A_j(x) \right)^2 + V(x) \quad , \text{ on } L^2(\mathbb{R}^d) .$$

$$A_j(x) := \frac{1}{2} \sum_{k=1}^d b_{kj} x_k \quad , \quad b_{kj} = -b_{jk} \in \mathbb{R}$$

$$V \in C^\infty(\mathbb{R}^d), \text{ real-valued function } ,$$

$$V(x+y) = V(x) \quad , \text{ for } \forall x \in \mathbb{R}^d, \forall y \in \Gamma .$$

但し, $A_j(x)$ は定数磁場 $\beta = (b_{kj})_{k,j} \in \mathbb{R}^{d(d-1)/2}$ に対応する vector potential であり, $V(x)$ は $\mathbb{R}^d$ の Lattice Γ に周期を持つ scalar potential である。Lattice Γ とは, $\mathbb{R}^d$ の d 個の一次独立な元の

組 $\{e_j\}_{j=1}^d$ を用いて,

$$\Gamma = \sum_{j=1}^d \mathbb{Z} e_j$$

と表せる $\mathbb{R}^d$ の discrete additive subgroup である。 $\{e_j\}_{j=1}^d$ を Lattice の base と呼ぶ。Lattice Γ の fundamental domain E を,

$$E := \{c_1 e_1 + \dots + c_d e_d \in \mathbb{R}^d \mid 0 \leq c_j < 1, j=1, \dots, d\}$$

と定義する。この時, H_B は $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ を operator core に持つ $L^2(\mathbb{R}^d)$ 上の self-adjoint operator として実現される事が知られている ([I-II 参照])。

H を Schrödinger Operator とする。 H の IDS は次の2通りの方法により定義される。但し次では Λ は $\mathbb{R}^d$ の有界な開集合を表し, $\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^d$ は Λ がある程度の regularity を保ちつつ $\mathbb{R}^d$ 全体に広げていく極限を表すものとする。定義は [C-L] を参照した。

i) H を $L^2(\Lambda)$ 上に制限して何らかの境界条件 (A) をつける事により self-adjoint operator として実現したものを $H_\Lambda^{(A)}$, $\lambda \in \mathbb{R}$ に対し $H_\Lambda^{(A)}$ の λ 以下の固有値を重複を込めて数えたものを $N_\Lambda^{(A)}(\lambda)$ とする。この時, 次の limit

$$\rho^{(A)}(\lambda) := \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^d} \frac{N_\Lambda^{(A)}(\lambda)}{\text{vol}(\Lambda)}$$

が存在するならば, $\rho^{(A)}(\lambda)$ を境界条件 (A) に対する IDS と定

義する。

ii) $C_0(\mathbb{R})$ で $\mathbb{R}$ 上の compact support を持つ連続関数を表す。 $C_0(\mathbb{R})$ 上の linear functional Φ_Λ を,

$$\Phi_\Lambda : C_0(\mathbb{R}) \ni f \mapsto \frac{\text{tr}(\chi_\Lambda f(H) \chi_\Lambda)}{\text{vol}(\Lambda)}$$

により定義する。但し χ_Λ は領域 Λ の特性関数であり, $f(H)$ は self-adjoint operator H に関し functional calculus を行って得られた operator である。 Φ_Λ は $C_0(\mathbb{R})$ 上の positive linear functional (i.e. $f \geq 0 \Rightarrow \Phi_\Lambda f \geq 0$) である。 Riesz's representation theorem ([Ru] 参照) を適用すると, $\mathbb{R}$ 上の Borel measure $d\rho_\Lambda$ が存在して,

$$\Phi_\Lambda f = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\rho_\Lambda(\lambda) \quad , \text{ for } f \in C_0(\mathbb{R})$$

が成り立つ。 $\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^d$ とした時, measure $d\rho_\Lambda$ がある $\mathbb{R}$ 上の measure $d\rho$ に $C_0(\mathbb{R})$ 上の linear functional としての weak topology で収束するならば, この $d\rho$ の事を density of states measure と呼ぶ。この時, $\lambda \in \mathbb{R}$ に対し $\mathbb{R}$ 上の単調非減少関数 $\rho(\lambda)$ を

$$\rho(\lambda) := \int_{\mathbb{R}} \chi_{(-\infty, \lambda]}(\mu) d\rho(\mu)$$

により定義する。この $\rho(\lambda)$ を IDS と定義する。

IDS の定義の正当性に関して次の3つの点が問題となる。

1) i) 及び ii) における limit の存在

2) i) の定義において $\lim_{\lambda \rightarrow \infty}$ が境界条件に依存しない事

3) i) と ii) の定義が一致する事

まず、磁場が無く random potential を持つ Schrödinger Operator の場合についてこれら点について多くの研究がなされており、 Λ の広げ方や potential の形に適當な条件を付ければ肯定的に解決されている ([B-P], [C-L], [K-M], [Sh] 参照)。operator H_B については, Herffter, Sjöstrand [H-S], [S_J] においてはその IDS の定義に ii) を採用しており、その存在を示している。 H_B の IDS を i) の方法で定義した結果は、著者の調べた範囲内では無いと思われたため、著者は H_B の IDS の i) の定義における存在と境界条件に依存しない事を示した、i) と ii) が一致する事は今のところ示されていないと思われるが、おそらくは一致すると思われる。

IDS の定義 i) と ii) の内、物理的には i) の定義の方が意味を理解しやすい。 i) の定義において、 $N_A^{(\lambda)}(\lambda)$ は領域 Λ における λ 以下のエネルギーを持つ電子の数と考えられる為、 $\rho^{(\lambda)}(\lambda)$ は単位体積中の λ 以下のエネルギーを持つ電子の数の平均値と考えられる。数学的には ii) の定義の方が取り扱いやすく、また ii) の定義から IDS と operator の spectrum の関係を表す次の事が導かれる。すなわち Schrödinger Operator H に対し H の density of state measure を $d\rho$, H の spectrum を $\sigma(H)$ とおいた時、

$$\text{supp}(d\rho) = \sigma(H). \quad (1)$$

但し $\text{supp}(d\rho)$ は measure としての support を表している。従って $\rho(\lambda)$ は λ についての関数と見た時, H の spectral gap 上では一定値を取る事が分かる。特に periodic, almost periodic の potential を持つ Schrödinger Operator の場合, この一定値は potential の周期に関係した特別な値しか取らない事が知られている ([Be] 参照)。 H_B の IDS については, Herff, Sjöstrand がその gap 上で取り得る値についての結果を得ている ([H-S], [S, J])。以下では彼らの結果を解説し, その多少の精密化を行う。

Magnetic Floquet-Bloch theory ([M-R], Floquet-Bloch theory については [R-S] 参照) によると, $\sigma(H_B)$ は次の条件

$$\langle B, \Gamma \wedge \Gamma \rangle := \{ \langle B, \alpha \wedge \beta \rangle \mid \alpha \in \Gamma, \beta \in \Gamma \} \subset 2\pi\mathbb{Q} \quad (2)$$

が成り立つ時, band 構造を持つ事が知られている。(但し, $\langle B, \alpha \wedge \beta \rangle$ は B を 2-form, α, β を tangent vector と見た時の coupling を表す。)つまり, (2) が成り立つ時,

$$\sigma(H_B) = \bigcup_{k=1}^{\infty} I_{k,B} \quad (3)$$

と表せる。 $I_{k,B}$ は Energy band と呼ばれる $\mathbb{R}$ 上の閉区間である。

(2) が成り立たない時は $\sigma(H_B)$ は almost periodic の場合に近い複雑

な構造を持つ事が知られており, (2) が成り立たない場合の $\sigma(H_B)$ を調べる為に, その spectral gap における IDS の値を調べる事は意義を持つと思われる.

次に, ある定数磁場 B_0 , 閉区間 $[a, b]$ について,

$$[a, b] \subset \sigma(H_{B_0})^c$$

が成立したと仮定する. この時, ある正数 ε が存在して,

$$[a, b] \subset \sigma(H_B)^c, \quad \text{for } |B - B_0| < \varepsilon$$

が成り立つ事が知られている ([A-S] 参照). 以下, H_B の IDS を $\rho(\lambda, B)$ で表す. $[a, b] \ni \lambda_0$ を取ると, $\rho(\lambda_0, B)$ なる値は λ_0 の取り方に依らない事が (1) より分かる. この意味で $\rho(\lambda_0, B)$ は gap $[a, b]$ に対応する IDS の値と言える.

Helffer, Sjöstrand は $\rho(\lambda_0, B)$ の取り得る値を計算した. [H-S], [S_j] における彼らの結果は次の通りである.

Theorem 1 ([H-S], [S_j]) ある整数の組 $\{m_I\}_{0 \leq |I| \leq d}$ が存在して次が成り立つ.

$$\text{Vol}(E) \cdot \rho(\lambda_0, B) = \sum_{0 \leq |I| \leq d} m_I \cdot p_I(B), \quad \text{for } |B - B_0| < \varepsilon.$$

ここで I は index であり,

$$I = \{j_1, \dots, j_{2m}\}, \quad 1 \leq j_1 < \dots < j_{2m} \leq d, \quad |I| = 2m.$$

$$e_I := e_{j_1} \wedge e_{j_2} \wedge \dots \wedge e_{j_{2m}}.$$

$$p_I(B) := \frac{1}{m!} \left\langle \left(\frac{B}{2\pi} \right)^m, e_I \right\rangle$$

$$I = \emptyset \Rightarrow |I| = 0, \quad p_I(B) := 1$$

但し $\{e_j\}_{j=1}^d$ は Lattice の base であり, $\langle, \rangle$ は form と tangent vector の coupling を表す。この時, $p_I(B)$ は $\{b_j\}_{j=1}^d$ の $\frac{|I|}{2}$ 次 の 同次多項式 となる。

そこで, $B_0 = 0$, つまり 磁場の 小さい 時に Theorem 1 における m_I が どの 程度 決定可能か, という 問題を 考えてみた。というのは, [H-S] では $B_0 = 0$ の時に まず Theorem 1 を 得て いたからである。以下, $B_0 = 0$ を 仮定する。

まず $m_\emptyset$ は $B = 0$ の 時の IDS の 値 であるが, それは Floquet-Bloch theory を 用いて 計算 されている ([B-S] 参照)。その結果は, (3) の 右辺 で $B = 0$ と おいた ものを $I_{B,0}$ で 表すと,

$$m_\emptyset = \text{Vol}(E) \cdot \rho(\lambda_0) = \# \{k \mid I_{B,0} < \lambda_0\}$$

である。ここで,

$$I_{B,0} < \lambda_0 \iff \lambda < \lambda_0 \quad \text{for } \forall \lambda \in I_{B,0}.$$

著者の 得た 結果は,

$$m_I = 0, \quad \text{for } \frac{|I|}{2} : \text{odd} \quad (4)$$

である。この系として特に $d=2, 3$ の時は

$$\rho_0(E) \cdot \rho(\lambda_0, B) = m_g \quad (\text{independent of } B) \quad , \text{ for } |B - B_0| < \varepsilon$$

が分かる。これは次の様に示される。operator H_B と H_{-B} が conjugate unitarily equivalent である事に注意すると、

$$\rho(\lambda_0, B) = \rho(\lambda_0, -B) \quad , \text{ for } B \in \mathbb{R}^{d(d+1)/2}$$

が成り立つ事が分かる。つまり $\rho(\lambda_0, B)$ は B についての偶関数であり、 $P_2(B)$ は $\frac{d+1}{2}$ 次の同次多項式であるから、Theorem 1 と合わせれば(4)が得られる。この結果は二のような比較的容易な理由により示されるが、Helffer, Sjöstrand は $[H-S], [S_j]$ に記していなかった為、ここに書き記しておく。

参考文献

- [A-S] J. Avron and B. Simon, Stability of gaps for periodic potentials under variations of a magnetic field, J. Phys. Math. Gen. 18 (1985), 2199-2205.
- [Be] J. Bellissard, Gap labelling theorems for Schrödinger Operators, in "From Number Theory to Physics", eds. M. Waldschmidt et al. Springer (1992), 538-630.
- [B-P] M.M. Benderskii and L.A. Pastur, On the spectrum of the one-dimensional Schrödinger equation with a random potential, Mat. Sbornik 82 (124) (1970) No.2.
- [B-S] F.A. Berezin and M.A. Shubin, "The Schrödinger equation", Kluwer Academic

Publishers (1991).

- [C-L] R. Carmona and J. Lacroix, "Spectral theory of random Schrödinger operators", Birkhäuser (1990).
- [H-S] B. Helffer and J. Sjöstrand, "Equation de Schrödinger avec champ magnétique et équation de Harper", *Lecture Notes in Phys.* 345 (1989), 118-197.
- [I-K] T. Ikebe and T. Kato, "Uniqueness of the self-adjoint extension of singular elliptic differential operators", *Arch. Rational Mech. Anal.* 9 (1962), 77-92.
- [K-M] W. Kirsch and F. Martinelli, "On the density of states of Schrödinger operators with a random potential", *J. Phys. A. Gen.* 15 (1982), 2139-2156.
- [M-R] A. Mohamed and G. Raikov, "On the spectral theory of the Schrödinger operators with electromagnetic potential", in "Pseudodifferential calculus and mathematical physics", eds. M. Demuth et al., *Advances in P. D. E.* vol. 5, Akademie Verlag (1995), 298-391.
- [R-S] M. Reed and B. Simon, "Methods of modern mathematical physics IV: analysis of operators", Academic Press (1978).
- [Ru] W. Rudin, "Real and Complex analysis", McGrawHill (1987).
- [Sh] M.A. Shubin, "The density of states of selfadjoint elliptic operators with almost periodic coefficients", *Amer. Math. Soc. Transl.* (2) vol. 118 (1982), 307-339.

[Sj] J. Sjöstrand, Microlocal analysis for the periodic magnetic Schrödinger equation and related questions, Lecture Note in Math. 1495 (1989), 237-332.