数理解析研究所講究録
969巻 1996年 118-127

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．

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

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

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

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

但し，$A_j(x)$ は定数磁場 $B = (b_{kj})_{k<j} \in \mathbb{R}^{d(d-1)/2}$ 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,

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

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-H] 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,$\Lambda \to \mathbb{R}^d$ は Λ をある程度の 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

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

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，

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

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，

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

が成り立つ。$\Lambda \to \mathbb{R}^d$ 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limit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の場合についてはこれらの点について多くの研究がなされており，Λの広げ方やpotentialの形に適当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，Herffer, 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，$N_\Lambda^{(A)}(\lambda)$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，$\rho^{(A)}(\lambda)$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，

$$\mathrm{supp}(d\rho) = \sigma(H) . \tag{1}$$

但し $\mathrm{supp}(d\rho)$ 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，Herffer, 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], [Sj]）。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

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

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，

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

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]，[Sj]における彼らの結果は次の通りである．

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

$$\mathrm{vol}(E)\cdot\rho(\lambda_0,B) = \sum_{0\le|I|\le d} m_I \cdot \rho_I(B) \quad , \text{for } |B-B_0|<\varepsilon .$$

ここでIは index であり，

$$I = \{j_1, \cdots, j_{2m}\},\ 1 \le j_1 < \cdots < j_{2m} \le d,\ |I| = 2m.$$

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

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

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

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 $\{b_{kj}\}_{k<j}$ 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_ϕ 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 $I_{k,0}$ で表すと，

$$m_\phi = \mathrm{vol}(E)\cdot\rho(\lambda_0, 0) = \#\{k \mid I_{k,0} < \lambda_0\}$$

である。ここで，

$$I_{k,0} < \lambda_0 \underset{\mathrm{def}}{\Leftrightarrow} \lambda < \lambda_0 \quad \text{for } \forall\lambda \in I_{k,0}.$$

著者の得た結果は，

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

である。この系として特に $d=2,3$ の時は

$$\mathrm{vol}(E)\cdot\rho(\lambda_0,B)=m_\phi \quad (\text{independent of } B)\quad ,\text{for } |B-B_0|<\varepsilon$$

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，

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

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，$P_I(B)$ は $\frac{|I|}{2}$ 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．この結果はこ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]，[Sj] 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. Bellisard, 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 Note 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", McGraw Hill (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.