

The number of spectral bands for discrete Laplacians on crystal lattices

By

YUSUKE HIGUCHI *

Abstract

While a monolayer in graphite, graphene, is the hexagonal lattice, a synthesized hydrogenated graphene, “graphane”, can be considered as the deformed hexagonal lattice by a graph-operation. It is known that the physical properties of these carbon based materials are different. For example, while graphene is a semi-metal, “graphane” turns out to be an insulator. Here we consider such a change of electronic structure mainly depends on a change of geometrical structure, so we focus a difference/similarity of graph-spectra by some graph-operation. In this talk, we introduce some graph-operations and show how the spectra change under these operations.

§ 1. 序

グラフという離散図形を対象とし、その上で定義される作用素、とくにラプラス作用素、のスペクトルを観察すると、リーマン多様体の離散類似物として自然なものもある一方で、類似物とは到底思えないような不思議な特性を見せることもある。これまでに多くの分野の研究者が、それぞれの切り口で、離散ラプラス作用素のスペクトルとグラフの幾何の関係を特徴付けてきたが、本講演では物性でみられる性質 ([1, 2, 7]) を、非常に簡略化したといえるモデルの上で再現することを目指し、グラフの変形がなされたときに、スペクトルのどの部分が“遺伝”するか、そして同時にどの部分が新たな“発生”となるかを、可能な範囲で特徴づけてみる。

§ 2. 設定：離散ラプラシアン

グラフ $G = (V(G), E(G))$ は連結かつ局所有限で、 $V(G)$ は頂点集合、 $E(G)$ は無向辺集合を表わす。本講演ではグラフ G は無限グラフ、つまり $V(G)$ が可算集合である

Received April 1, 2012. Revised April 9, 2013.

2000 Mathematics Subject Classification(s):

This work was partially supported by the Grant-in-Aid for Scientific Research (C) 20540133 and (B) 21340039 from JSPS.

*Showa University.

e-mail: higuchicas.showa-u.ac.jp

ものを中心に扱う．便宜上， $E(G)$ の各辺に対して 2 通りの有向辺を対応させて得られる有向辺集合を $A(G)$ で表し，また各有向辺 $e \in A(G)$ に対して， e の始点，終点をそれぞれ $o(e)$ と $t(e)$ で，さらに e の逆辺を $\bar{e}$ で表す．ここでグラフ G の頂点 x に対して， $A_x(G) = \{e \in A(G); o(e) = x\}$ と置くと， $m(x) = \#A_x(G)$ はいわゆる頂点 x の“次数”となる．さて $V(G)$ 上の関数空間として

$$C^0(G) = \{f : V(G) \rightarrow \mathbf{C}\}$$

を，さらにグラフ上の作用素として次で定義される**推移作用素** T_G および **離散ラプラシアン** Δ_G を考える (I は単位作用素)：

$$T_G f(x) = \frac{1}{m(x)} \sum_{e \in A_x(G)} f(t(e)), \quad \Delta_G f(x) = (T_G - I)f(x).$$

ここで内積を

$$\langle f_1, f_2 \rangle_V = \sum_{x \in V(G)} f_1(x) \overline{f_2(x)} m(x)$$

とし，ヒルベルト空間を

$$\ell^2(V(G)) = \{f \in C^0(G) \mid \langle f, f \rangle_V < \infty\},$$

と定めると， T_G および $-\Delta_G$ は $\ell^2(V(G))$ においてともに有界作用素であり， T_G および $-\Delta_G$ の ℓ^2 -スペクトル集合をそれぞれ $\text{Spec}(T_G)$ および $\text{Spec}(-\Delta_G)$ で表すと， $\text{Spec}(T_G) \subset [-1, 1]$ および $\text{Spec}(-\Delta_G) \subset [0, 2]$ であることはすぐ確認できる．ここでは，基本的に無限グラフ G は“有限グラフが周期的に繰り返されるもの”に限定する．より正確には

「**仮定** ～周期性～」局所有限かつ連結な無限グラフ G はグラフ同型写像 Γ を持ち，**(1)** Γ は G 上自由に作用し **(2)** $M = \Gamma \backslash G$ は有限グラフとする．

この仮定の下では， G は被覆変換群として Γ を持つ，有限グラフ M の無限正則被覆グラフとも見られる．それによって， Γ が可換群のとき， G は M の可換被覆グラフと呼ばれ，さらに $\Gamma = H_1(M, \mathbf{Z})$ のときは， G は M の**極大可換被覆グラフ**と呼ばれ， M^{ab} と表すこともある．可換被覆グラフにおいては，いわゆる“Bloch analysis”が適用できるため ([3, 4, 5])，細かい情報が引き出せる可能性を秘めている．例えば，極大可換被覆グラフのスペクトル構造に関しては，以下の 2 つを掲げておく．前者は「**スペクトル充足性** (Full Spectral Property, FSP)」，後者は「**固有値の非存在性** (No Eigenvalue Property, NEP)」に関するものである：

Theorem 2.1 ([4]). $G = M^{ab}$ を有限グラフ M の極大可換被覆グラフとする．このとき M が**偶正則**グラフ，もしくは“1-因子”をもつ**奇正則**グラフならば， $\text{Spec}(-\Delta_G) = [0, 2]$ ，したがって $\text{Spec}(T_G) = [-1, 1]$ ，が成立する．

Theorem 2.2 ([3]). $G = M^{ab}$ を有限グラフ M の極大可換被覆グラフとする. このとき M が “2-因子” を持つならば, $\text{Spec}(-\Delta_G)$ および $\text{Spec}(T_G)$ は絶対連続スペクトルのみからなる. とくに固有値は存在しない.

上記両主張には, いくつかグラフ理論での用語が用いられているので補足しておく. まず「グラフ G が正則」であるとは, 次数が頂点によらず一定である, つまり任意の $x \in V(G)$ に対して $m(x) = d$, ということの意味し, 一定値 d を明示して “ d -正則” ということもある. さらに, その一定値 d が偶数, 奇数のとき, それぞれグラフが **偶正則**, **奇正則** という. 一方, 有限グラフ M の「 k -因子 F 」とは, “ $V(F) = V(M)$ となる M の部分グラフ (M の全域部分グラフ) F で, F が k -正則” となるものをいう. 「正則性」と比較して「1- もしくは 2-因子を持つ」という性質はいささか分かりにくいので, グラフ理論の基本的定理を用いた, 上記の結果をまとめた系として以下を挙げておこう. なお, 「2 部グラフ」とは, 頂点集合を 2 つに分割して各集合内の頂点同士を結ぶ無向辺がないようにできるグラフである.

Corollary 2.3 ([3, 4]). $G = M^{ab}$ を有限グラフ M の極大可換被覆グラフとする. このとき M が **偶正則** グラフ, もしくは **奇正則 2 部グラフ** ならば, $\text{Spec}(-\Delta_G) = [0, 2]$ が成立し, さらに $\text{Spec}(-\Delta_G)$ には固有値は存在しない.

Corollary 2.3 は M が単に「正則グラフ」で成立すると (希望を込めて) 予想しているが現段階では肯定的にも否定的にも解決されていない. なお Theorem 2.1 に関しては, M の正則性を外してもすぐには反例が見つからないため, かなり広いグラフの族に対して成立することが期待されている. 一方 Theorem 2.2 における「グラフ M が “2-因子” を持つための十分条件」としては, Corollary 2.3 に掲げた正則性を用いたものが古典的にも有名であり, また簡潔な表現にもなっている. いささか多少特殊な族に限定されている気もするが, ここで M の正則性を外すと直ちに反例, つまり M^{ab} に固有値が存在する例, が構成できてしまう. もちろんグラフ理論において “2-因子” をもつグラフの族の特徴付けは, 各種研究されているが, いささか表現が繁雑になってしまうものが多い. これらの背景から, ここでは条件の詳細には触れずに, 「**スペクトル充足性**」と「**固有値の非存在性**」にまつわる目標ともいえる予想を述べて次の節に移ることにする.

Conjecture 2.4 ([4]). “2 辺連結” の任意の有限グラフ M に対して, その極大可換被覆グラフ M^{ab} は**スペクトル充足性**を持つ: つまり $\text{Spec}(-\Delta_G) = [0, 2]$ もしくは同値であるが $\text{Spec}(T_G) = [-1, 1]$ が成り立つ.

Conjecture 2.5 ([3]). 任意の有限正則グラフ M に対して, その極大可換被覆グラフ M^{ab} は**固有値を持たず絶対連続スペクトル**のみからなる.

§ 3. 金属 vs. 絶縁体: そしてスペクトル

金属と絶縁体・半導体の違いは, いわゆるバンド理論においては, 伝導帯 (Conduction band) と 価電子帯 (Valence band) の間に 禁制帯 (Band gap) の有無によって区別され

ている：禁制帯がないものを「金属 (metal)」，“狭い”ものの禁制帯があるものを「半導体 (semiconductor)」，“広い”禁制帯があるものを「絶縁体 (insulator)」．ここでは半導体と絶縁体の区別をせず，禁制帯のあるものをまとめて「絶縁体」と称することにする．今，我々は恐れ多くも複雑な電子配置構造を簡略化して，グラフの持つスペクトル構造で金属と絶縁体を区別しようとする試みを行う．その概略図を Figure 1 に掲げる：

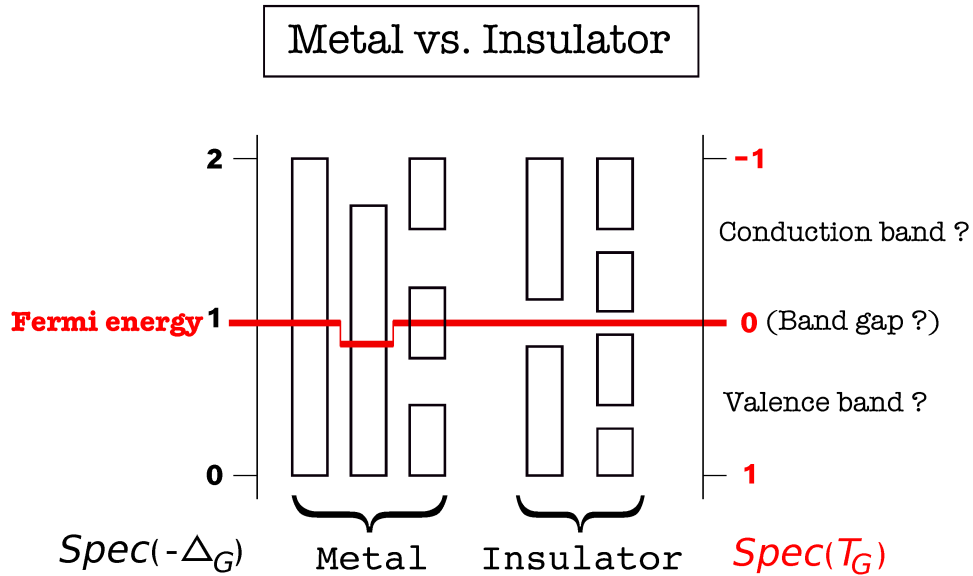
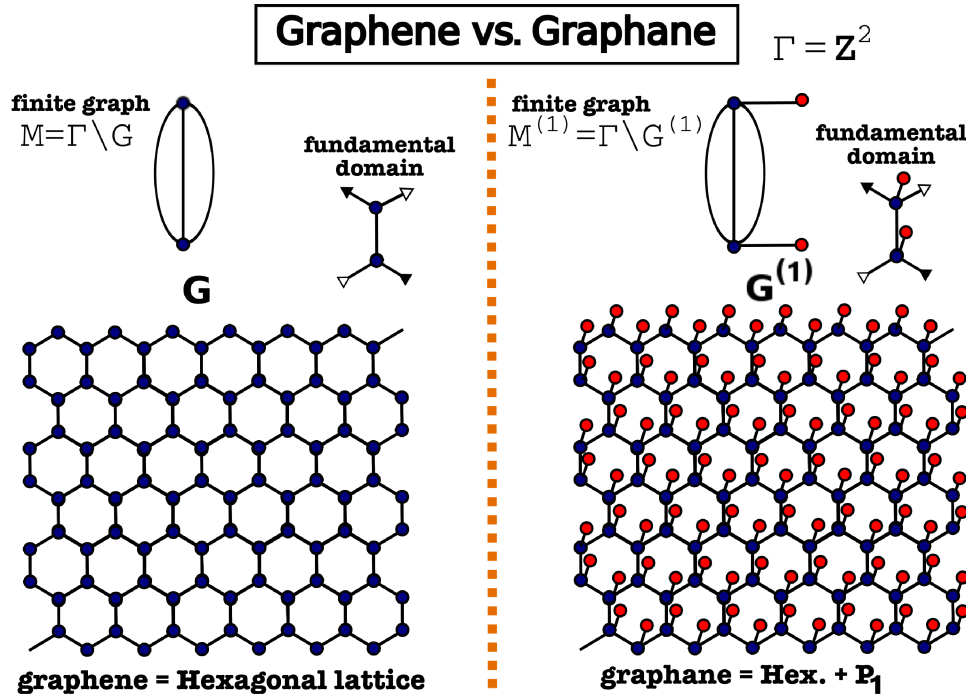


Figure 1. 金属 vs. 絶縁体 (半導体)

つまり， G が 2 部グラフであるときは， $\text{Spec}(-\Delta_G)$ は 1 に関して， $\text{Spec}(T_G)$ は 0 に関してそれぞれ対称であることから，“Fermi energy” はごく自然に (あやしいところではあるが) それぞれ 1, 0 に対応させ，それらがスペクトル集合に入っているなら「金属」，入っていなければ「絶縁体」と解釈することにする．なお Figure 1 ではおおらかに記したように，Fermi energy を挟んで，どちらが 伝導帯 でどちらが 価電子帯 であるかは気にしないことにする．一方， G が 2 部グラフでないときは，一般に $\text{Spec}(-\Delta_G)$ の 1 に関する対称性 (同値ではあるが $\text{Spec}(T_G)$ の 0 に関する対称性) は保証されず，たとえば G が有限グラフ M の可換被覆グラフであるときは， $0 \in \text{Spec}(-\Delta_G)$ であるが $2 \notin \text{Spec}(-\Delta_G)$ となる．それゆえ “Fermi energy” をどこに設定するのが自然なのかは明らかではない．ただ，なんらかの “中央” にあたるだろう，という予測と，さらにそれでも $\text{Spec}(-\Delta_G)$ が単一区間から成っていれば「金属」であろう，という気持ちを込めたものが Figure 1 の左から 2 番目とさせていただきたい．

バンド理論に関しては非専門家たちの議論の帰結，という意味では大層危険ではあるものの，グラフとして六角格子である graphene が金属の性質をもち，一方で，graphene 中の “2 重結合” を分断すべく各炭素原子に水素原子を付与したという “graphane” が半導体の性質をもつことを，それぞれのスペクトル構造を通して見られる状態になっているのである．Figure 2 における graphene G と graphane $G^{(1)}$ はどちらも 2 部グラフで

Figure 2. グラフとしての graphene G と graphane $G^{(1)}$.

あるが、それぞれもう少し補足を加えておく． graphene G は グラファイトの単一層であり、金属（ただし semi-metal）としての物性をもつ（cf. [1, 2, 7]）：グラフとしては良く知られた六角格子の構造をもち、ゆえに図中の M の極大可換被覆グラフになっている．一方、graphene G の炭素原子（いわば各頂点）に水素を付与（いわば頂点を付与）したものが graphane $G^{(1)}$ と呼ばれ、半導体としての物性をもつ（cf. [1, 2, 7]）：グラフとしては図中の $M^{(1)}$ の極大可換被覆グラフになっている．両者ともに被覆変換群は $\mathbf{Z}^2$ である．このとき六角格子である graphene G に関しては

$$\text{Spec}(-\Delta_G) = [0, 2], \quad \text{Spec}(T_G) = [-1, 1]$$

となり、前述したように、 $-\Delta_G$ の Fermi energy である “1” (T_G の Fermi energy である “0”) を含むので「金属」といっても良いだろう．なお、 $-\Delta_G$ の Fermi energy である “1” においては、状態密度関数の値が 0 になっていて、全体で単一区間ではあるが、真ん中の Fermi energy のところでは “薄く” 繋がっていることを付記しておく．さて一方で graphane $G^{(1)}$ に関しては

$$\text{Spec}(-\Delta_{G^{(1)}}) = [0, 3/4] \cup [5/4, 2], \quad \text{Spec}(T_{G^{(1)}}) = [-1, -1/4] \cup [1/4, 1].$$

となり、前述したように、 $-\Delta_G$ の Fermi energy である “1” (T_G の Fermi energy である “0”) を含まないで「絶縁体」といっても良いだろう．

もちろんこれ以上「バンド理論」における安易な解釈をするつもりはないが、少なくとも、スペクトルが単一区間からなる六角格子が、各頂点にそれぞれ 1 個ずつ頂点を

付与する変形によって、スペクトルが2つの区間に割れる，ということが，金属から絶縁体への遷移とも繋っていることは興味深い．したがって「バンド理論」を意識しながらも，グラフの変形によるスペクトルバンドの数の変化を主題として，いわば graphene から graphane への変形の一般化などを次の節で紹介する．

§ 4. グラフの変形と主結果

グラフの変形によるラプラス作用素もしくは推移作用素のスペクトルの変化については，いろいろな種類が知られている (cf. [4, 6]) が，ここでは新たな2種類の変形によるスペクトルの遺伝性/特異性 について紹介する．

「変形 1」 n -細分グラフ $S_n(G)$. グラフ G に対して，その各無向辺を長さ $n+1$ のパスに置きかえて (=各無向辺に n 個の頂点を置いて細分して) 得られるグラフを n -細分グラフ $S_n(G)$ と呼ぶ．

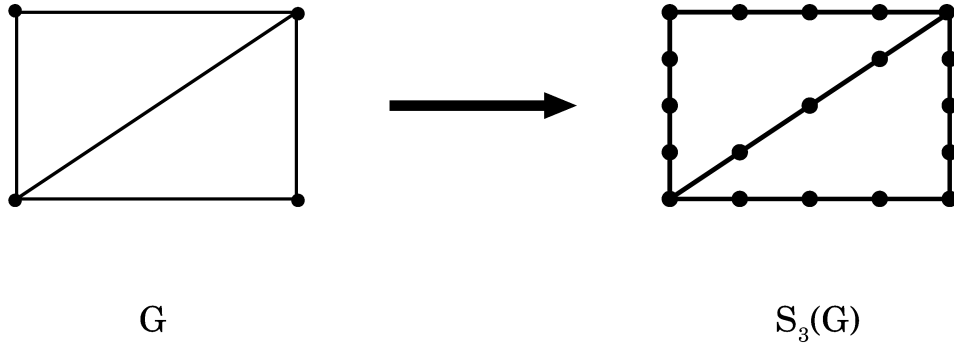


Figure 3. G と その n -細分グラフ $S_n(G)$ ($n = 3$).

Theorem 4.1 (T. Shirai and Yu. H, 2010+). 有限グラフ M の可換被覆グラフ G (ただし $\text{rank } \Gamma \geq 2$) に対し， $S_n(G)$ を G の n -細分グラフとする．このとき

$$\text{Spec}(T_{S_n(G)}) = \bigcup_{k=0}^n f_k(\text{Spec}(T_G)) \cup \bigcup_{k=1}^n \{\lambda_k\},$$

ただし λ_i 達は固有値である．なお，この固有値達は $\text{rank } \Gamma = 1$ のときは現れない．ここで f_i は the $(n+1)$ -th Chebyshev polynomial $Ch_{n+1}(x) = \cos((n+1) \arccos(x))$ の逆関数の各 branch であり，さらに λ_i は $Ch_n(x)$ の1階微分の零点となる．

さて，「変形 1」に対する Theorem 4.1 のような現象 (とくに固有値の出現) に関する物性論的解釈は，残念ながら現在のところ与えることができない．これはひとえに筆者の知識不足によるものである．なお“1-細分グラフ”は，「フェリ磁性を示す half-filled の Hubbard 模型」として例示されることもあるので，たとえば「変形 1」は“鉄の結晶格子

から四酸化三鉄への遷移の数学的一般化”，などと巨大な看板を掲げてみたいところではあるが，副格子の構造はみられるものの，「フェリ磁性」と「定理 A の結論」との関連の有無すら言及できない現状では単なる大ボラになるだけであろう．一方，次の「変形 2」は，前節で状況証拠を論じたように，graphene から graphane への遷移の数学的一般化，と宣言するものである．

「変形 2」 n -Graphane $G^{(n)}$. グラフ G に対して，その各頂点に長さ n のパスを attach させて得られるグラフを “ n -Graphane” $G^{(n)}$ と呼ぶ．

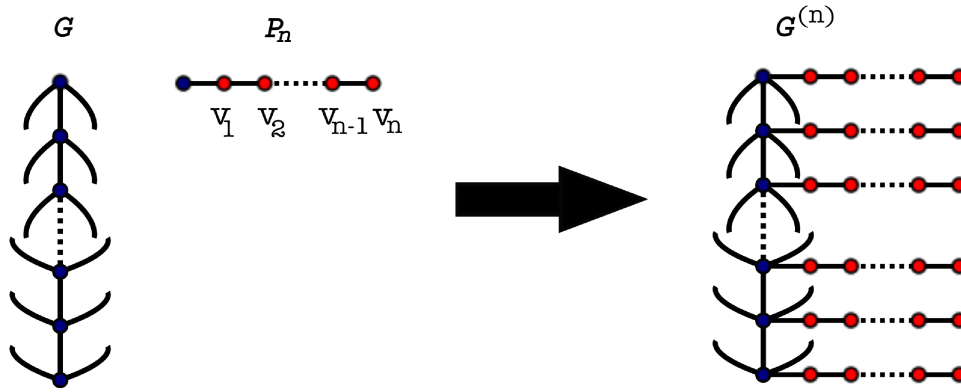


Figure 4. G と その n -Graphane $G^{(n)}$.

Theorem 4.2 (Yu. H, 2010+). 有限 d -正則グラフ M の可換被覆グラフ G に対し， $G^{(n)}$ を G の “ n -Graphane” とする．このとき

$$\text{Spec}(T_{G^{(n)}}) = \bigcup_{k=0}^n g_k(\text{Spec}(T_G)).$$

ただし g_i 達は 次の $F(d, n; x)$ の逆関数の各 branch である：

$$F(d, n; x) = \frac{1}{d} \left((d+1)x - \frac{Ch_{n-1}(x)}{Ch_n(x)} \right)$$

ここで $Ch_n(x)$ は n -th Chebyshev polynomial.

両定理ともに，証明の鍵となるのは，被覆変換群が可換群であるために Bloch 解析が行えることと ([4, 5])，商グラフにおける長さ n のパスから導出される Chebyshev polynomial である．

なお G において $\text{Spec}(T_G) = [-1, 1]$ ，もしくは同値ではあるが $\text{Spec}(-\Delta_G) = [0, 2]$ のようにスペクトルが充足されているとき，([3, 4] で言葉遣いを用いれば “Full Spectral Property” を持つとき）は，上記に記した Theorems 4.1, 4.2 より：

- 「変形 1」による変形に対しては，スペクトルギャップは発生せず，埋蔵固有値が “新たに” 生ずる；

- 「変形 2」による変形に対しては、スペクトルは $n+1$ の区間に分割されるが、新たな固有値の発生はない

という結論が得られる. このことから, 「変形 1」は“金属”を“金属”に変移するもの; 「変形 2」は“金属”を“半導体” (n が奇数) もしくは“金属” (n が偶数) に変移させるもの, と標語として表現したら言いすぎであろうか.

§ 5. おわりに

「バンド理論」を背景に, スペクトルバンドの数を制御できるグラフの変形や, 固有値の種類を制御できるグラフの変形を紹介したが, いささか toy model の感は否めない. とはいえ, 当該研究を通して, 2 部グラフである可換被覆グラフの Fermi energy での状態密度関数の挙動を商グラフの幾何と被覆変換群で特徴付けるという課題, および, 2 部グラフでない可換被覆グラフのスペクトル構造の解明も具体性を増してきたように思われる. 一方で, 埋蔵固有値の扱いや, 固有値を持つグラフの幾何的特徴付けなど, 従来からの課題の重要性にも光を当てているので, 懸案となっている Conjecture 2.4 と Conjecture 2.5 の完全解決の期は熟したのかもしれない.

References

- [1] P. Chandrachud, B. S. Pujari, S. Haldar, B. Sanyal and D. G. Kanhere, *A systematic study of electronic structure from graphene to graphane*, J. Phys: Condens. Matter **22** (2010), 465502 (11pp).
- [2] A. K. Geim and K. Novosolov, *The rise of graphene*, Nat. Mat. **6** (2007), 183–191.
- [3] Yu. Higuchi and Y. Nomura, *Spectral structure of the Laplacian on a covering graph*, European J. Combin. **30** (2009), 570–585.
- [4] Yu. Higuchi and T. Shirai, *Some spectral and geometric properties for infinite graphs*, AMS Contemp. Math. **347** (2004), 29–56.
- [5] M. Kotani, T. Shirai and T. Sunada, *Asymptotic behavior of the transition probability of a random walk on an infinite graph*, J. Funct. Anal. **159** (1989), 664–689.
- [6] T. Shirai *The spectrum of infinite regular line graphs*, Trans. Amer. Math. Soc. **352** (2000), 115–132.
- [7] J. O. Sofo, A. S. Chaudhari and G. D. Barber, *Graphane: A two-dimensional hydrocarbon* Phys. Rev. B **75** (15) (2007), 153401–153404.