

強い磁場中の Schrödinger 作用素のスペクトルについての話題

東京大学・数理科学 中村 周 (Shu Nakamura)

1 序

我々が考える Schrödinger 作用素は磁場を含む物で、

$$H(\lambda A, V) = (p - \lambda A(x))^2 + V(x), \quad \text{on } L^2(\mathbf{R}^n)$$

である。ここで、 $p = -i\partial_x$ は運動量作用素、 $A(x)$ はベクトルポテンシャル、 $V(x)$ はスカラーポテンシャル、 $\lambda > 0$ は磁場の強さのパラメーターとする。このとき、電場、磁場はそれぞれ

$$E(x) = \nabla V(x), \quad B(x) = dA(x)$$

で与えられる。よく知られているように、 H のスペクトルの性質には、電場 $E(x)$ ではなくて、ポテンシャル $V(x)$ の形が直接反映する。では、磁場 $B(x)$ についてはどうか、というと、ベクトルポテンシャル $A(x)$ が直接 H のスペクトルに反映することは有り得ない。なぜなら、ゲージ不変性から、ある関数 $\phi(x)$ があって、

$$A_1(x) - A_2(x) = \nabla\phi(x)$$

と書けるならば、 $H(\lambda A_1, V)$ と $H(\lambda A_2, V)$ はユニタリー同値となる。従って、磁場を持つ Schrödinger 作用素のスペクトルの解析とは、磁場 $B(x)$ が、 H のスペクトルにどう反映するかを調べる、という事になる。(しかし、考えている領域が単連結ではない場合には $A(x)$ が直接現れることもある。これが Aharonov-Bohm 効果である。)

R. Hempel と I. Herbst は、最近の論文 [2] において $V(x) = 0$ の場合に、 $H(\lambda A, 0)$ の $\lambda \rightarrow \infty$ での極限を考察した。彼らは、

$$M = \{x \mid B(x) = 0\}, \quad M_A = \{x \mid A(x) = 0\}$$

とにおいて、差集合の測度 $|M \ominus M_A| = 0$ ならば、 $\lambda \rightarrow \infty$ の時、 $H(\lambda A, 0)$ は M 上の Dirichlet Laplacian $-\Delta_M$ に strong resolvent sense で収束する事を示した。さらに、考えている領域が有界、あるいは $A(x)$ が周期的、等の有限的な仮定の下では、この収束は norm resolvent 収束であることも示した。すると、 $H(\lambda A, 0)$ のスペクトルも (集合の距離の意味で、コンパクト集合上一様に) $-\Delta_M$ のスペクトルに収束することがわかる。特に、 $A(x)$ が周期的で上の条件を満たし、 M が、コンパクト集合 K の平行移動の交わりのない加算和になっていれば、 $H(\lambda A, 0)$ のスペクトルは $-\Delta_K$ の (離散的な) スペクトルに収束することになる。従って、 λ が十分大きいとき $H(\lambda A, 0)$ のスペクトルはギャップを持つ事を彼らは結論として得た。

この理論の背後にあるアイデアは、強い磁場があればそれは粒子の運動の障壁として働き、磁場のないところだけの運動に帰着される、という事である。従って、これは本質的

に準古典近似の問題であり、トンネル効果の理論を用いればより一般的で精密な結果が得られるのではないかと考えられる。それについて論じるのが、この講演の目標である。

以下では、記号を簡単にするために、次元を $n = 3$ として固定する。この場合は、

$$B(x) = \text{rot } A(x), \quad B_i = \partial_j A_k(x) - \partial_k A_j(x),$$

$(i, j, k) = (1, 2, 3)$ 、等、となる。ポテンシャル $V(x)$ は有界、ベクトルポテンシャル $A(x)$ は C^1 -級で、 $B(x)$ は有界連続であるとする。また、 $B(x)$ 、 $V(x)$ は整数格子 \mathbf{Z}^3 に関して周期的：

$$V(x+n) = V(x); \quad B(x+n) = B(x) \quad x \in \mathbf{R}^3, n \in \mathbf{Z}^3,$$

と仮定する。

仮定：基本領域 $\Omega \subset \subset \mathbf{R}^3$ が存在して、

$$\inf_{x \in \partial\Omega} |B(x)| = \gamma > 0,$$

を満たす。

ここで、 Ω が基本領域であるとは、 Ω は連結な有界開集合で、任意の $n \in \mathbf{Z}^3 \setminus \{0\}$ に対して $\Omega \cap (\Omega + n) = \emptyset$ 、しかも $\bigcup_n (\Omega + n) = \mathbf{R}^3$ であることとする。この Ω について、

$$H^\Omega = (p - \lambda A(x))^2 + V(x) \quad \text{on } L^2(\Omega)$$

を、Dirichlet 境界条件を付けた Ω 上の Schrödinger 作用素とする。もちろん、 H^Ω は離散的なスペクトルを持つ。それを、 $\Sigma = \sigma(H^\Omega)$ と書くことにする。次が、ここでの主結果である。

定理 1 ([3]) 上の仮定の下で、 $0 < \beta < \gamma$ とすると、 $\alpha, C > 0$ が存在して、任意の $\lambda > 0$ に対し、

$$\sigma(H(\lambda A, V)) \cap (-\infty, \beta\lambda] \subset \{s \in (-\infty, \beta\lambda] \mid \text{dist}(s, \Sigma) < C \exp(-\alpha\sqrt{\lambda})\}$$

が成立する。ここで、 $\text{dist}(\cdot, \cdot)$ は、実数上の (普通の) 距離とする。

つまり、 $H(\lambda A, V)$ のスペクトルは Σ の点の周りの、幅 $O(\exp(-\alpha\sqrt{\lambda}))$ のバンドの中に含まれていることになる。特に、 $M = \{B(x) = 0\}$ が空でない内点を持てば、スペクトルのギャップの存在が得られ、Hempel-Herbst の結果の一般化が証明されたことになる。上では、 $A(x)$ の周期性は仮定しなかったが、 $A(x)$ が周期的ならば Bloch-Floquet 理論が使えるから、次の系を得る：

系 2 上の定理の仮定の下で、さらに $A(x)$ が周期的ならば $\sigma(H) \cap (-\infty, \beta\lambda]$ は有限個のバンドから成り、それぞれのバンドの幅は $O(\exp(-\alpha\sqrt{\lambda}))$ 以下である。

証明のアイデアは、以下のような物である。Avron-Herbst-Simon の評価 (補題 3) によれば、

$$(p - \lambda A)^2 \geq \pm \lambda B_j, \quad j = 1, 2, 3$$

である。従って、大まかに言えば、

$$H(\lambda A, V) \geq \lambda |B(x)| + V - (\text{lower order terms})$$

となっている。そこで、 $\lambda |B| + V$ をポテンシャルだと思って Agmon estimate を応用して、古典的な粒子が入れない領域でのレゾルベントの指数型の評価を得ることができる。これと、切り貼り (cut and paste) の計算を組み合わせると定理の証明ができる。

2 トンネル効果の評価

この節では、任意の有界領域 Ω 上の Dirichlet 境界条件を付けた Schrödinger 作用素: $H = H(\lambda A, V)$ について考える。古典粒子に対して磁場がバリアーとして働く、という事は次の Avron, Herbst, Simon によるよく知られた評価によって示される。

補題 3 (Avron-Herbst-Simon estimate) $i \neq j$ に対して、

$$H(\lambda A, V) \geq \lambda(\partial_i A_j(x) - \partial_j A_i(x)) + V$$

証明: この証明は、(よく知られているかもしれないが、) 磁場の効果によってスペクトルが上昇する理由をよく示しており教訓的なので記しておく。

$$k_j = p_j - \lambda A_j(x), \quad j = 1, 2, 3,$$

とおくと、それらの交換子は

$$[k_i, k_j] = i\lambda(\partial_i A_j - \partial_j A_i)$$

となる。一方、

$$(k_i + ik_j)^*(k_i + ik_j) = k_i^2 + k_j^2 - i[k_i, k_j] \geq 0$$

なので、

$$k_i^2 + k_j^2 \geq -i[k_i, k_j] = \lambda(\partial_i A_j(x) - \partial_j A_i(x))$$

を得る。結論はこれから容易に導かれる。■

実際に用いるのには、次の形に書き換えた方が使いやすい。証明は 1 の分割を用いて切り貼りをすればよいので、省略する。

補題 4 任意の $\varepsilon > 0$ に対して、 $C > 0$ が存在して次を満たす。

$$H(\lambda A, V) \geq \lambda(|B(x)| - \varepsilon) - C$$

注意: この評価の中の ε は不自然な感じがする。果たして、 $\varepsilon = 0$ とした評価が成立するのか、というのは興味深い問題だと思われる。

この補題を見ると、 $\lambda(|B(x)| - \varepsilon) - C$ をポテンシャルだと思って Agmon の指数的評価が使えるそうなのがわかる。そこで、 λ が大きいときの主要項をとって、以下のように Agmon-type の metric, 距離を定義する。

定義: (Agmon metric, Agmon distance) $\beta \in \mathbf{R}$ に対して、

$$ds_\beta^2 \equiv (|B(x)| - \beta)_+ dx^2, \quad (\cdot)_+ = \max(\cdot, 0)$$

とおき、この (pseudo) metric を Agmon metric と呼ぶ。更に、この metric に付随する(擬)距離を $d_\beta(\cdot, \cdot)$ とする。すなわち、

$$d_\beta(x, y) = \inf_\gamma \int_\gamma \sqrt{(|B(x)| - \beta)_+} d\gamma, \quad \gamma(0) = x, \gamma(1) = y.$$

次の定理がこの節の主結果である。

定理 5 $\beta > 0$ 、 D は Ω の閉部分集合で、

$$\inf_{x \in D} |B(x)| > \beta$$

を満たすとする。このとき、任意の $\varepsilon > 0$ と $M > 0$ に対し $C > 0$ が存在して、 $\operatorname{Re} z \leq \beta\lambda$ 、しかも

$$\|(H - z)^{-1}\| \leq M \exp\left((d_\beta(D, \Omega_\beta) - \varepsilon)\sqrt{\lambda}\right)$$

ならば、

$$\|\chi_D(H - z)^{-1}\| \leq C\lambda^{-1}$$

が成立する。ただしここで、 χ_D は D の定義関数、また

$$\Omega_\beta = \{x \in \Omega \mid |B(x)| \leq \beta\}$$

と書いた。

この定理の証明は、ポテンシャルの場合の証明と似ているのでここでは詳しくは述べない。(例えば、[1] を見よ。) ひとつのポイントは、以下のような計算にある。 $\rho(x)$ をなめらかな関数とすると、簡単な計算で、

$$\begin{aligned} e^{\sqrt{\lambda}\rho(x)} H(\lambda A, V) e^{-\sqrt{\lambda}\rho(x)} &= \sum_j (k_j + i\sqrt{\lambda}\partial_j\rho(x))^2 + V(x) \\ &= H(\lambda A, V) + i\sqrt{\lambda} \sum_j ((\partial_j\rho)k_j + k_j(\partial_j\rho)) - \lambda|\nabla\rho|^2 \end{aligned}$$

となる。そこで、補題 4 と組み合わせると、

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left[e^{\sqrt{\lambda}\rho(x)} (H(\lambda A, V) - z) e^{-\sqrt{\lambda}\rho(x)} \right] &= (H(\lambda A, V) - \operatorname{Re} z) - \lambda|\nabla\rho|^2 \\ &\geq \lambda(|B(x)| - \beta - \varepsilon) - C - \lambda|\nabla\rho(x)|^2 \end{aligned}$$

を得る。そこで、この右辺が正になるように、なるべく大きな $\rho(x)$ を選んで、再び 1 の分割を用いた議論を経て定理 5 が示される。

この定理は、準古典的な粒子のトンネル効果の評価の、ひとつの(比較的強い)形である。例えば、固有関数の指数型の評価はこれより直ちに導かれる。つまり、

$$H\psi = \mu\psi, \quad \mu \leq \beta\lambda,$$

とするとき、準古典的な描像からするとエネルギー μ では上の定理の領域 D には入れない。それに対応して、

$$z = \mu + iM^{-1} \exp\left(-(d_\beta(D, \Omega_\beta) - \varepsilon)\sqrt{\lambda}\right)$$

とおき、定理を適用することによって、

$$\begin{aligned} \|\chi_D\psi\| &= \|\chi_D(H - z)^{-1}(H - z)\psi\| \leq \frac{C}{\lambda} \|(H - z)\psi\| = \frac{C}{\lambda} |\mu - z| \|\psi\| \\ &= \frac{C}{\lambda\mu} \exp\left(-(d_\beta(D, \Omega_\beta) - \varepsilon)\sqrt{\lambda}\right) \end{aligned}$$

が得られる。以上より、状態 ψ は、古典的に禁じられた領域 D 上では $\lambda \rightarrow \infty$ の時、 $\sqrt{\lambda}$ に関して指数的に減衰することが証明された。

3 空間に関し周期的な Schrödinger 作用素

前節で得られた、トンネル効果に関する一般的な結果を空間について周期的な Schrödinger 作用素に応用し、定理 1 を証明する。このアイデアは、多かれ少なかれ既知の物である。例えば、[4] を見よ。

まず、 Ω を定理 1 の仮定を満たす fundamental domain とし、

$$0 < \beta < \gamma = \inf_{x \in \partial\Omega} |B(x)|$$

を固定する。

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}_\beta(\partial\Omega, \Omega_\beta), \quad \Omega_\beta = \{x \in \Omega \mid |B(x)| \leq \beta\}$$

とにおいて、定理 1 が任意の $\alpha < \mathbf{d}$ に対して成立することを示す。 $\varepsilon > 0$ を十分小さく取り、

$$\mathbf{d}_\beta((\partial\Omega)_\varepsilon, \Omega_\beta) > (\mathbf{d} + \alpha)/2$$

となるようにする。ただし、 $(\partial\Omega)_\varepsilon$ は $\partial\Omega$ の ε -近傍

$$(\partial\Omega)_\varepsilon = \{x \in \mathbf{R}^3 \mid \text{dist}(x, \partial\Omega) < \varepsilon\}$$

とする。そして、

$$\Gamma = \Omega \cap (\partial\Omega)_\varepsilon, \quad D = \overline{(\partial\Omega)_\varepsilon}$$

に対して前節の結果を適用する。

定理の証明のために、 H の、 Γ 上の作用素 (とその平行移動) による近似作用素を構成する。 $j(x)$ を、 Γ の中にサポートを持つ C_0^∞ -級関数で、

$$j(x) \geq 0, \quad \sum_{n \in \mathbf{Z}^3} j(x - n)^2 = 1, \quad x \in \mathbf{R}^3$$

を満たす物とする。 $j_n(x) = j(x - n)$, $x \in \mathbf{R}^3$, $n \in \mathbf{Z}^3$ と書くことにする。また、

$$\mathcal{H}_0 = \bigoplus_n L^2(\Gamma + n),$$

$$H_0 = \bigoplus_n H^n \quad \text{on } \mathcal{H}_0, \quad H^n = H(\lambda A(x - n), V(x - n)),$$

とおく。ただし、 H^n は、 $(\Gamma + n)$ の境界で Dirichlet 境界条件を与えた定義域で定義されているとする。我々は、 H_0 で H を近似する。そのための identification operator を以下のように構成する。仮定より磁場 B は周期的なので、各 $n \in \mathbf{Z}^3$ ごとに、ゲージ変換 $T_n = \exp(i\lambda\Psi_n(x))$ が存在して、(symbol として、)

$$T_n H^n T_n^* = H \quad \text{on } L^2(\Gamma + n)$$

が成立する。そこで、identification operator $J : \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^3)$ を、

$$J(\bigoplus_n \phi_n) = \sum_n j_n(x) T_n \phi_n, \quad \text{for } \bigoplus_n \phi_n \in \mathcal{H}_0$$

とおくと、 J は partial isometry で J^* は isometry、従ってまた、 $JJ^* = 1$ であり、作用素の定義域に関しては $JD(H_0) \subset D(H)$ であることは容易にわかる。定義とこれらの性質より直ちに、

$$(H - z)^{-1} = J(H_0 - z)^{-1}J^* - (H - z)^{-1}M(H - z)^{-1}J^* \quad (1)$$

がわかる。ここで、 $M \equiv HJ - JH_0 : D(H_0) \rightarrow \mathcal{H}$ だが、これは次のように分解される。

$$M(\oplus_n \phi_n) = \sum_n m_n \phi_n, \quad \text{for } \oplus_n \phi_n \in \mathcal{H}_0.$$

更に、各 m_n は次のように書ける。

$$\begin{aligned} m_n \phi_n &= H j_n T_n \phi_n - j_n T_n H^n \phi_n = H j_n T_n \phi_n - j_n H T_n \phi_n = [H, j_n] T_n \phi_n \\ &= -i T_n [(p - \lambda A(x - n)) \cdot (\nabla j_n) + (\nabla j_n) \cdot (p - \lambda A(x - n))] \phi_n. \end{aligned}$$

ここで、最後の微分作用素の係数のサポートは $((\partial\Omega)_\varepsilon + n) = (D + n)$ に含まれることに注意すると、定理 5 より、 $\operatorname{Re} z \leq \beta\lambda$ の時、

$$\|(H^n - z)^{-1}\| \leq M e^{\alpha\sqrt{\lambda}} \implies \|m_n(H^n - z)^{-1}\| \leq C/\sqrt{\lambda}$$

を得る。(右辺が定理 5 より弱いのは、 m_n に微分が入っているから。詳細は省略。) 各 n ごとに、 H^n は H^0 とユニタリー同値であることを思い出すと、

$$\begin{aligned} \operatorname{dist}(z, \sigma(H^0)) \geq \frac{1}{M} e^{-\alpha\sqrt{\lambda}} &\implies \|m_n(H^n - z)^{-1}\| \leq C/\sqrt{\lambda}, \quad \text{for all } n \quad (2) \\ &\implies \|M(H_0 - z)^{-1}\| \leq C'/\sqrt{\lambda} \end{aligned}$$

が得られる。そこで、(2) の左辺が 1 より小さいときは (1) のレゾルベント方程式を解いて、

$$(H - z)^{-1} = J(H_0 - z)^{-1}J^* [1 + M(H_0 - z)^{-1}J^*]^{-1}$$

が作れる。実際これが H のレゾルベントであることはすぐわかり、このとき $z \in \rho(H)$ となる。故に、

$$\sigma(H) \cap (-\infty, \beta\lambda] \subset \left\{ \sigma \in (-\infty, \beta\lambda] \mid \operatorname{dist}(z, \sigma(H^0)) \leq C e^{-\alpha\sqrt{\lambda}} \right\}$$

が得られた。同様の議論によって、

$$\sigma(H^0) \cap (-\infty, \beta\lambda] \subset \left\{ \sigma \in (-\infty, \beta\lambda] \mid \operatorname{dist}(z, \sigma(H^\Omega)) \leq C e^{-\alpha\sqrt{\lambda}} \right\}$$

もわかるので、これらを組み合わせて定理 1 の結論が得られる。

更に、 $\beta\lambda$ 以下のスペクトルの (部分) 集合に対応する spectral projection をそれぞれ P 、 P_0 とすると、同様の方法で、

$$\|J^* P J - P_0\| \leq C e^{-\alpha\sqrt{\lambda}}$$

であることもわかる。 λ が十分大で、右辺が 1 より小さければ、spectral projection の次元は等しい。 P_0 の spectral projection の次元は、常に (0 でなければ) 無限大なので、 P の次元もそうなる。

4 これからの問題

以上述べてきたような、周期的な磁場中の Schrödinger 作用素のスペクトルや、磁場が強いつきの漸近挙動については多くの未解決の問題がある。ここでは、幾つかの今回の問題に密接に関連する問題について紹介する。

絶対連続スペクトル: よく知られているように、 V が周期的なとき $H(0, V)$ は Bloch 理論によりバンド状のスペクトルを持つ。更に Thomas の結果 [5] からこれらのバンドは決して縮退せず、 $H(0, V)$ のスペクトルは絶対連続になる。ベクトルポテンシャル A が周期的な場合も、Bloch 理論は適用できて、バンドスペクトルの存在は証明できる。しかし、Thomas の示したように一般に絶対連続になるかどうかは知られていない。Hempel と Herbst は、Thomas の議論を用いて A が周期的で λ が小さいときには $H(\lambda A, V)$ は絶対連続であることを示した。また、open dense な λ については絶対連続な事も示されている (Hempel, Herbst, to appear)。従って、一般に成立するだろうと予想されているが、未解決の問題となっている。

スペクトルの収束: Hempel-Herbst の結果に依れば、適当な条件の下で $\lambda \rightarrow \infty$ の時、 $H(\lambda A, 0)$ のスペクトルは $-\Delta_M$ のスペクトルに収束する。しかし、このために、 $M = M_A$ の条件は明らかに強すぎる。実際、スペクトルの収束はゲージ不変な性質だが、 $M = M_A$ はゲージに依存する性質であり、これを満たさない Schrödinger 作用素でスペクトルが収束する物は容易に作れる。では、「スペクトルが収束するのは、 $M = M_A$ を満たすような作用素と、ゲージ変換で同値な場合に限られるか？」という問題が考えられる。この問題は、 M のトポロジカルな性質や Aharonov-Bohm 効果に関係し、まだ現時点では完全な回答は与えられていない。

トンネル効果の評価: 定理 1 の評価は、 $O(\exp(-\alpha\sqrt{\lambda}))$ の形で与えられているが、これが最善な結果とは考えにくい。実際、WKB-近似解を構成すると、 $\exp(-\psi(x)\lambda)$ の形の項が現れ、最善な結果は $O(\exp(-\alpha\lambda))$ の形のはずである。磁場が球対称、等の特定の状況の下ではこのことは示されるようだが、一般に (WKB-解が構成できていない状況下で) 定理 1 のような結果が成立するかどうかは分かっていない。

References

- [1] Briet, Ph., Combes, J. M., Duclos, P.: Spectral stability through tunneling, Commun. Math. Phys. **126**, 133–156 (1989)
- [2] Hempel, R., Herbst, I.: Strong magnetic fields, Dirichlet boundaries and spectral gaps, preprint 1994. (to appear in Commun. Math. Phys.)
- [3] Nakamura, S.: Band spectrum for Schrödinger operators with strong magnetic fields, to appear in Proceeding of Holzgau conference 1994.
- [4] Nakamura, S., Bellissard, J.: Low energy bands do not contribute to the quantum Hall effect, Commun. Math. Phys. **131**, 283–305 (1990)
- [5] Thomas, L. E.: Time dependent approach to scattering theory from impurities in a crystal, Commun. Math. Phys. **33**, 335–343 (1973)