

# On the rotation number and the spectrum of the generalized Kronig-Penney Hamiltonians

(一般化されたクローニッヒ・ペニーハミルトニアン の回転数とスペクトルについて)

首都大学東京 大学院 理工学研究科 数理情報科学専攻 / 日本学術振興会 特別研究員 DC2 数物系科学 新國裕昭

当該研究においては, 周期的な点相互作用に従う 1 次元 Schrödinger 作用素のスペクトルについて考察を行う. R. Kronig, W. Penney は 1931 年に自由粒子のハミルトニアン  $-d^2/dx^2$  に対して, 次のような超関数の摂動を与えた ([7] 参照).

$$L_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + \beta \sum_{k \in \mathbf{Z}} \delta(x - 2\pi k) \quad \text{in } L^2(\mathbf{R}), \quad \beta \in \mathbf{R} \setminus \{0\}.$$

ここで,  $\delta(\cdot)$  は原点にサポートを持つ Dirac のデルタ関数である. 作用素  $L_1$  は, Kronig-Penney Hamiltonian と呼ばれ, 結晶内の電子のハミルトニアンのひとつである ([6] 参照). この作用素は, 格子  $2\pi\mathbf{Z}$  上の境界条件を用いて次のように定義される.

$$(L_1 y)(x) = -\frac{d^2}{dx^2} y(x), \quad x \in \mathbf{R} \setminus 2\pi\mathbf{Z},$$

$$\text{Dom}(L_1) = \left\{ y \in H^2(\mathbf{R} \setminus 2\pi\mathbf{Z}) \left| \begin{array}{l} \begin{pmatrix} y(x+0) \\ \frac{dy}{dx}(x+0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \beta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y(x-0) \\ \frac{dy}{dx}(x-0) \end{pmatrix}, \quad x \in 2\pi\mathbf{Z} \end{array} \right. \right\}.$$

本研究では, 一般化された Kronig-Penney Hamiltonian について考察する. 自然数  $n$  に対して,  $(0, 2\pi)$  の  $n$  分割を  $0 = \kappa_1 < \kappa_2 < \cdots < \kappa_{n+1} = 2\pi$  で与える.  $j = 1, 2, \dots, n$  に対して,  $\Gamma_j = \{\kappa_j\} + 2\pi\mathbf{Z}$  とし,  $\Gamma = \cup_{j=1}^n \Gamma_j$  とおく.  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n \in \mathbf{R}$ ,  $A_1, A_2, \dots, A_n \in SL(2, \mathbf{R})$  に対して,  $L^2(\mathbf{R})$  上の作用素  $H = H(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n, A_1, A_2, \dots, A_n)$  を次で定義する.

$$(Hy)(x) = -\frac{d^2}{dx^2} y(x), \quad x \in \mathbf{R} \setminus \Gamma,$$

$$\text{Dom}(H) = \left\{ y \in H^2(\mathbf{R} \setminus \Gamma) \left| \begin{array}{l} \begin{pmatrix} y(x+0) \\ \frac{dy}{dx}(x+0) \end{pmatrix} = e^{i\theta_j} A_j \begin{pmatrix} y(x-0) \\ \frac{dy}{dx}(x-0) \end{pmatrix}, \\ x \in \Gamma_j, \quad j = 1, 2, \dots, n \end{array} \right. \right\}.$$

作用素  $H$  を一般化された Kronig-Penney Hamiltonian と呼ぶ. 一般化された Kronig-Penney Hamiltonian は R. J. Hughes [4] によって導入された ([1, 2, 12] も参照).  $H$  は自己共役作用素である. また, ポテンシャルの周期性と Floquet-Bloch の定理より,  $H$  のスペクトルはバンド構造を持つ. すなわち,  $\sigma(H)$  は内点を共有しない可算無限個の有界閉区間 (バンド) の和集合として表される. 自然数  $j$  に対して,  $\sigma(H)$  の下から数えて  $j$  番目のバンドを  $B_j = [\lambda_{2j-2}, \lambda_{2j-1}]$  と書く. このとき,  $B_j$  と  $B_{j+1}$  は开区間または空集合によって隔てられている. その隙間を  $G_j$  で表し,  $j$  番目のスペクトラルギャップと呼ぶ. 本研究では, 次の目的のため研究を行った.

(I) バンド端を回転数によって特徴付ける.

(II) 与えられた自然数  $j$  に対して,  $G_j$  が空か非空かを判定する.

初めに, (I) の概要について述べる.  $H$  に対応する回転数は以下で定義される.  $\lambda \in \mathbf{R}$  に対して, 方程式

$$-\frac{d^2y}{dx^2}(x, \lambda) = \lambda y(x, \lambda), \quad x \in \mathbf{R} \setminus \Gamma, \quad (0.1)$$

$$\begin{pmatrix} y(x+0, \lambda) \\ \frac{dy}{dx}(x+0, \lambda) \end{pmatrix} = A_j \begin{pmatrix} y(x-0, \lambda) \\ \frac{dy}{dx}(x-0, \lambda) \end{pmatrix}, \quad x \in \Gamma_j, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (0.2)$$

の非自明解を  $y(x, \lambda)$  とし,  $(r, \omega)$  を  $(y', y)$  の極座標とする. このとき,  $\omega = \omega(x, \lambda)$  を  $y(x, \lambda)$  の Prüfer 変換と呼ぶ. 各  $j = 1, 2, \dots, n$  に対し, 行列  $A_j$  の成分を次のように書き表す.

$$A_j = \begin{pmatrix} a_j & b_j \\ c_j & d_j \end{pmatrix}.$$

$\omega$  は, 方程式

$$\frac{d}{dx}\omega(x, \lambda) = \cos^2 \omega(x, \lambda) + \lambda \sin^2 \omega(x, \lambda), \quad x \in \mathbf{R} \setminus \Gamma, \quad (0.3)$$

を満たし, (0.2) から, 任意の  $x \in \Gamma_j, j = 1, 2, \dots, n$  に対して,

$$\begin{aligned} & \sin \omega(x+0, \lambda)(c_j \sin \omega(x-0, \lambda) + d_j \cos \omega(x-0, \lambda)) \\ &= \cos \omega(x+0, \lambda)(a_j \sin \omega(x-0, \lambda) + b_j \cos \omega(x-0, \lambda)), \end{aligned} \quad (0.4)$$

$$\operatorname{sgn}(\sin \omega(x+0, \lambda)) = \operatorname{sgn}(a_j \sin \omega(x-0, \lambda) + b_j \cos \omega(x-0, \lambda)), \quad (0.5)$$

$$\operatorname{sgn}(\cos \omega(x+0, \lambda)) = \operatorname{sgn}(c_j \sin \omega(x-0, \lambda) + d_j \cos \omega(x-0, \lambda)) \quad (0.6)$$

を満たすことがわかる. 各  $x \in \Gamma$  に対し,  $\omega(x+0, \lambda)$  の値を一意的に定めるために,  $\omega(x+0, \lambda)$  の枝を条件

$$\omega(x+0, \lambda) - \omega(x-0, \lambda) \in [-\pi, \pi), \quad x \in \Gamma \quad (0.7)$$

を満たすように選ぶ. 初期条件  $\omega(+0, \lambda) = \omega_0 \in \mathbf{R}$  を満たす (0.3) ~ (0.7) の解を  $\omega(x, \lambda, \omega_0)$  と書く. このとき,  $k \in \mathbf{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$  として, 回転数  $\rho(\lambda)$  を次で定義する.

$$\rho(\lambda) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\omega(2k\pi + 0, \lambda, \omega_0) - \omega_0}{2k\pi}. \quad (0.8)$$

右辺の極限は存在し,  $\rho(\lambda)$  は初期値  $\omega_0$  に依らない. また,  $\rho(\lambda)$  は  $\mathbf{R}$  上の非減少連続関数である.

$$l = \#\{j \in \{1, 2, \dots, n\} \mid (b_j < 0) \text{ または } (b_j = 0, d_j < 0)\}$$

とおく. ここで, 有限集合  $S$  に対して,  $\#S$  は  $S$  の元の個数を表す. 論文 [10] では, 次の結果が成り立つことを証明した.

**Theorem 0.1.** 任意の  $j \in \mathbf{N}$  に対し, 次が成り立つ.

$$\lambda_{2j-2} = \max \left\{ \lambda \in \mathbf{R} \mid \rho(\lambda) = \frac{j-1}{2} - \frac{l}{2} \right\},$$

$$\lambda_{2j-1} = \min \left\{ \lambda \in \mathbf{R} \mid \rho(\lambda) = \frac{j}{2} - \frac{l}{2} \right\}.$$

R. Johnson, J. Moser は, 1982 年に概周期ポテンシャルに従う 1 次元 Schrödinger 作用素に対して, スペクトルと回転数の間に次のような関係が成り立つことを示した ([5, 8] 参照). 振動数加群  $\mathcal{M}$  を持つ概周期関数  $q$  に対して,  $L = -d^2/dx^2 + q$  とおく. また,  $L$  の回転数を  $\alpha(\lambda)$  とし,  $I$  を  $L$  のレゾルベント集合に含まれる任意の开区間とする. R. Johnson, J. Moser は,  $\lambda \in I$  に対して,  $2\alpha(\lambda) \in \mathcal{M}$  であることを証明した. 特に,  $q$  が周期  $2\pi$  の周期関数であるとし,  $\sigma(L)$  の  $j$  番目のバンドを  $[E_{2j-2}, E_{2j-1}]$  とおくと, 彼らの結論は,  $E_{2j-2} = \max \{ \lambda \in \mathbf{R} \mid \rho(\lambda) = (j-1)/2 \}$ ,  $E_{2j-1} = \min \{ \lambda \in \mathbf{R} \mid \rho(\lambda) = j/2 \}$  であることを意味する. Theorem 0.1 の結論は, これら 2 つの等式とは異なり, 点相互作用の特異性を反映したものになっている.

次に, (II) の概要について述べる.  $\Lambda = \{j \in \mathbf{N} \mid G_j = \emptyset\}$  とおく.  $n = 2$ ,  $\kappa_2 \neq \pi$  を仮定する. また,  $A_1 A_2 = \pm E$  かつ  $A_1, A_2 \in SL(2, \mathbf{R}) \setminus \{E, -E\}$  を仮定する. このとき, 次が成り立つ.

**Theorem 0.2.** ([11, Theorem 1.2])

(a)  $\kappa_2/\pi \notin \mathbf{Q}$  ならば, 次の結論が成り立つ.

$$\Lambda = \begin{cases} \{k+1\} & d_1 = a_1, \quad b_1 \neq 0, \text{ かつ, ある } k \in \mathbf{N} \text{ が存在して,} \\ & -c_1/b_1 = k^2/4 \text{ となる場合,} \\ \emptyset & \text{それ以外.} \end{cases}$$

(b)  $\kappa_2/2\pi = q/p$ ,  $(p, q) \in \mathbf{N}^2$ ,  $\gcd(p, q) = 1$  ならば, 次の結論が成り立つ.

$$\Lambda = \begin{cases} \{pj \mid j \in \mathbf{N}\} & b_1 = 0 \text{ のとき,} \\ \{1 + pj \mid j \in \mathbf{N}\} \cup \{1 + k\} & d_1 = a_1, \quad b_1 \neq 0, \text{ かつ, ある } k \in \mathbf{N} \text{ が存在して} \\ & -c_1/b_1 = k^2/4, \quad k \not\equiv 0 \pmod{p} \text{ が成り立つとき,} \\ \{1 + pj \mid j \in \mathbf{N}\} & \text{それ以外.} \end{cases}$$

論文 [9] は,  $A_1, A_2 \in SO(2) \setminus \{E, -E\}$  の場合に集合  $\Lambda$  の解析を行ったものであり, 論文 [11] はその結果を拡張したものになっている.

集合  $\Lambda$  を解析するという問題は, coexistence problem と呼ばれる. この問題は, 対応する Schrödinger 方程式の解空間の基底が周期解のみからなるか否かを決定付ける問題であり, 微分方程式の解の性質を知るための重要な問題である (具体的には, ある自然数  $j$  が存在して,  $G_j = \emptyset$  を満たしているということは,  $\lambda_{2j-1} (= \lambda_{2j})$  というスペクトルパラメータに対して, 2 つの線形独立な周期解が存在するという事柄と同値な条件である). そのため, スペクトラルギャップが存在するか否かを解析することを問題とする coexistence problem は, 周期ポテンシャルに従う Schrödinger 作用素に対して古くから研究がなされた. 例えば, Mathieu 方程式

$$-\frac{d^2}{dx}y(x) + \alpha(\cos x)y(x) = \lambda y(x), \quad x \in \mathbf{R}, \quad \alpha \neq 0$$

の場合には, すべてのスペクトラルギャップが非空であることが知られている. 周期的な点相互作用に従う 1 次元 Schrödinger 作用素に対する coexistence problem は, F. Gesztesy, W. Holden, W. Kirsch が初めに研究を行い,  $\sigma(L_1)$  に対してすべてのスペクトラルギャップが非空であることを証明した ([3] 参照). Theorem 0.2 は, これらの結果とは異なり, 点相互作用のサポートである格子が不等間隔である場合には, 可算無限個のスペクトラルギャップが空になる場合があることを示している. また, 格子の間隔は退化したスペクトラルギャップの数に大きく影響を与えている. そのため, coexistence problem は非常に繊細な問題である事がわかる.

## 参考文献

- [1] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, and H. Holden. *Solvable models in quantum mechanics*, 2nd ed., With an appendix by Pavel Exner, AMS Chelsea publishing, Rhode Island, 2005.
- [2] S. Albeverio and P. Kurasov. *Singular Perturbations of Differential Operators*. London Mathematical Society Lecture Note Series, vol. 271, Cambridge Univ. Press, 1999.
- [3] F. Gesztesy, W. Holden and W. Kirsch. *On energy gaps in a new type of analytically solvable model in quantum mechanics*, J. Math. Anal. Appl. **134** (1988), 9-29.
- [4] R. J. Hughes. *Generalized Kronig-Penney Hamiltonians*, J. Math. Anal. Appl. **222** (1998), no.1, 151-166.
- [5] R. Johnson and J. Moser. *The rotation number for almost periodic potentials*, Comm. Math. Phys. **84** (1982), 403-438; Erratum, Comm. Math. Phys. **90** (1983), 317-318.
- [6] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*, 5th ed., Wiley, New York, 1976.
- [7] R. Kronig and W. Penney. *Quantum mechanics in crystal lattices*, Proc. Royal. Soc. London. **130** (1931), 499-513.
- [8] J. Moser. *Integrable Hamiltonian systems and spectral theory*, Lezioni Fermiane, Accademia Nazionale dei Lincei, Rome, 1983.
- [9] H. Niikuni. *Identification of the absent spectral gaps in a class of generalized Kronig-Penney Hamiltonians*, Tsukuba J. Math. **31** (2007), no.1, 39-65.
- [10] H. Niikuni. *The rotation number for the generalized Kronig-Penney Hamiltonians*, Ann. Henri Poincaré **8** (2007), 1279-1301.
- [11] H. Niikuni. *Absent spectral gaps of the generalized Kronig-Penney Hamiltonians*, Kyushu J. Math. **62** (2008), no.1, 89-105.
- [12] P. Šeba. *The generalized point interaction in one dimension*, Czech J. Phys. B **36** (1986), 667-673.