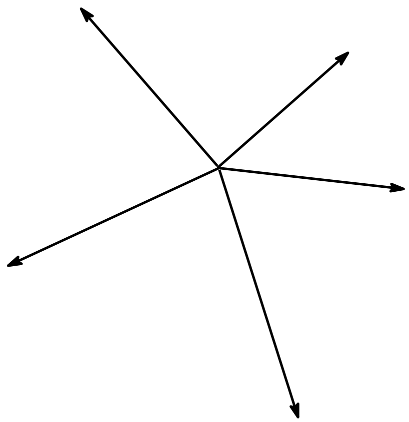
ジグザグナノチューブに付随する量子グラフ上の周期的シュレディンガー作用素のスペクトルについて

新國 裕昭(前橋工科大学)

2013/10/29/Tue/15:30 $\sim$ 16:30
信州数理物理セミナー

§1. Introduction

星型グラフ上の Schrödinger 作用素とその境界条件



星型グラフ上のヒルベルト空間 $\mathcal{H} = \oplus_{j=1}^{n} L^2(\mathbf{R}_+)$ における自由なシュレディンガー作用素 $\psi_j \longmapsto -\psi_j''$ を考える.

$$\Psi(0) = \begin{pmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \\ \vdots \\ \psi_n(0) \end{pmatrix} \text{ および } \Psi'(0) = \begin{pmatrix} \psi_1'(0) \\ \psi_2'(0) \\ \vdots \\ \psi_n'(0) \end{pmatrix}$$

とおく.

Theorem (Kostrykin–Schrader '99) A, B を「rank$(A \quad B) = n$」 かつ「AB^* が自己共役」を満たす $n \times n$ 行列とする. このとき, 作用素

$$T\psi_j(x) = -\psi_j''(x), \quad x \in \mathbf{R}_+, \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

$$\mathrm{Dom}(T) = \{\{\psi_j(x)\}_{j=1}^{n} \in \mathcal{H} | \quad A\Psi(0) + B\Psi'(0) = 0\}$$

は自己共役作用素となる.

Proposition (Harmer '00, Kostrykin-Schrader, '00) A, B は$n \times n$ ユニタリ行列 U を用いて $A = U - I$, $\quad B = i(U + I)$ と表される.

Example: δ type vertex condition

J を成分がすべて 1 の $n \times n$ 行列とし, $U = \frac{2}{n+i\beta}J - I$ とおくと, δ 型頂点条件を得る:

$$\psi_j(0) = \psi_k(0) =: \psi(0), \quad j,k = 1,2,\ldots,n,$$

$$\sum_{j=1}^{n} \psi_j'(0) = \beta\psi(0).$$

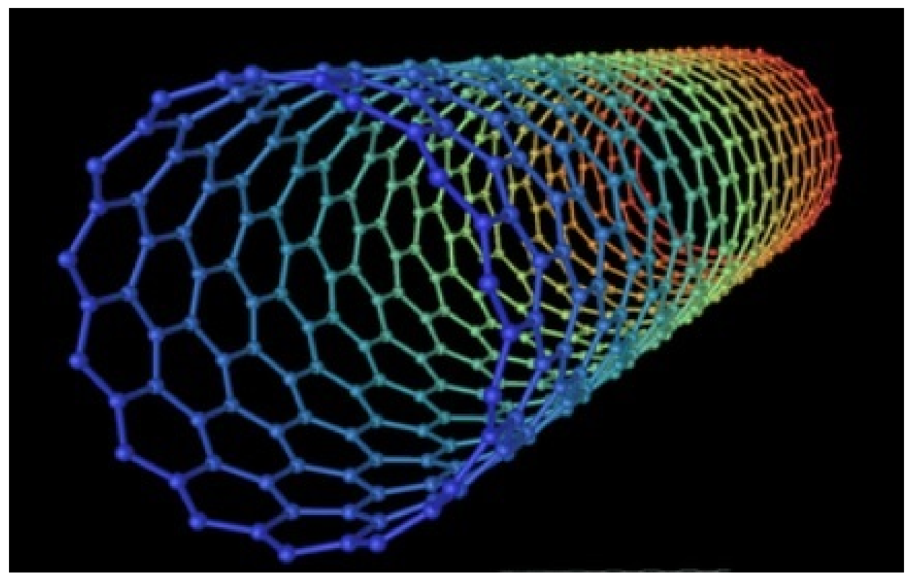
([Cheon–Exner–Turek, '09 (The case of $n = 3$)] では, これを δ-δ-δ 型と呼んでいる.)

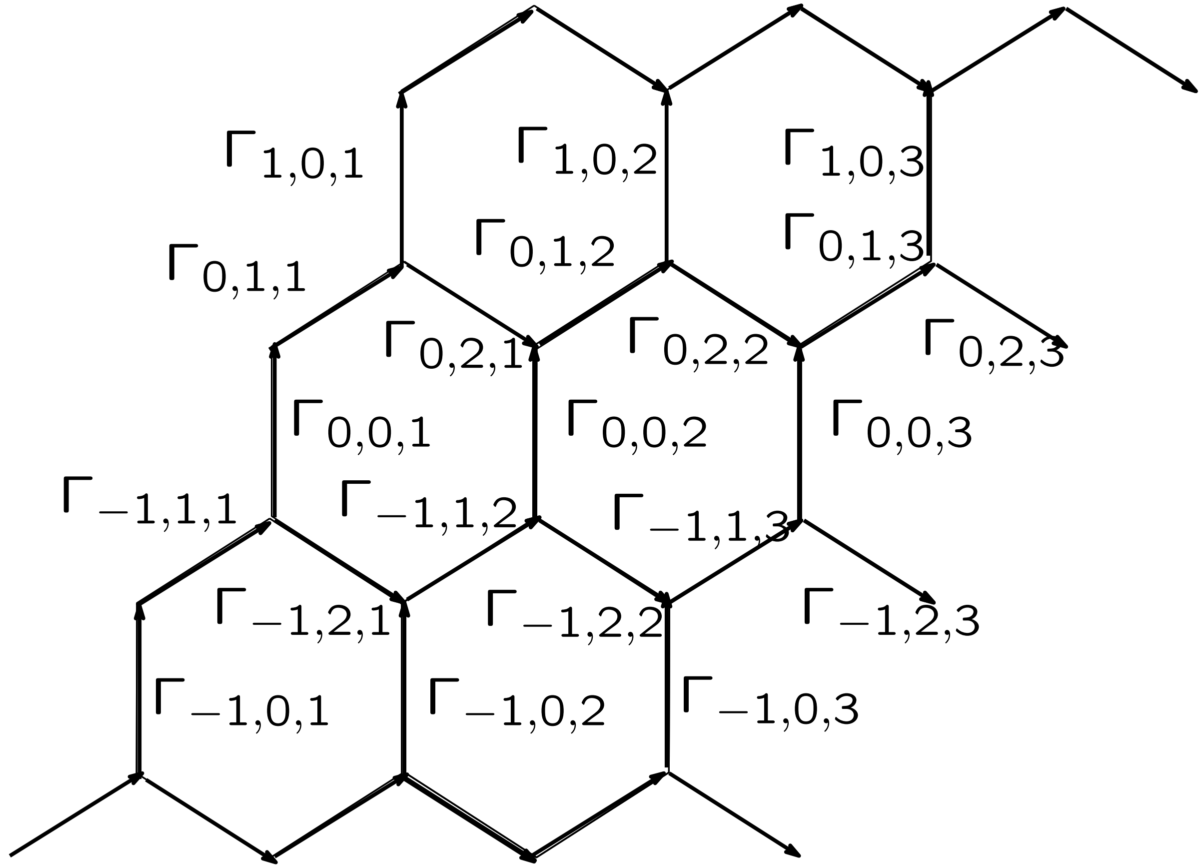
目的：
ジグザグナノチューブ上の周期的シュレディンガー作用素のスペクトルを調べる.

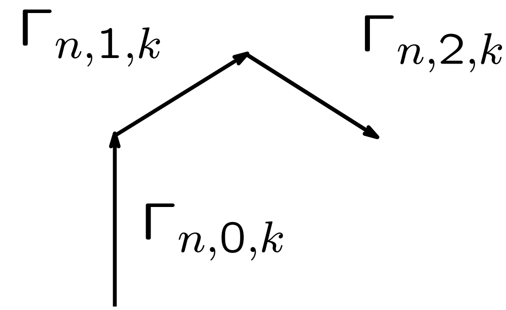
カーボンナノチューブ…炭素によって作られる六員環ネットワーク（グラフェンシート）が単層あるいは多層の同軸管状になった物質(Wikipedia)。

カーボンナノチューブの幾何学構造

- アームチェア型
- ジグザグ型
- カイラル型







$N \in \mathbf{N}$ を任意に固定し,

$$\mathbb{J} = \{0, 1, 2\}, \quad \mathbb{Z}_N = \mathbb{Z}/(N\mathbb{Z}), \quad \mathcal{Z} := \mathbb{Z}\times\mathbb{J}\times\mathbb{Z}_N$$

とおく. このとき,

$$\Gamma^N = \bigcup_{\omega=(n,j,k)\in\mathcal{Z}} \Gamma_\omega$$

を**ジグザグナノチューブ**という.

ジグザグナノチューブの定義

$R_N = \frac{\sqrt{3}}{4\sin\frac{\pi}{2N}}$ とおく．また，$(n,j,k) \in \mathcal{Z} := \mathbb{Z} \times \mathbb{J} \times \mathbb{Z}_N$，に対して，

$$c_k = \cos\frac{\pi k}{N}, \quad s_k = \sin\frac{\pi k}{N}, \quad \kappa_k = R_N(c_k, s_k, 0), \quad \mathbf{e}_{n,0,k} = \mathbf{e}_0 = (0,0,1),$$
$$\mathbf{e}_{n,1,k} = \kappa_{n+2k+1} - \kappa_{n+2k} + \frac{\mathbf{e_0}}{2}, \quad \mathbf{e}_{n,2,k} = \kappa_{n+2k+2} - \kappa_{n+2k+1} - \frac{\mathbf{e}_0}{2},$$
$$\mathbf{r}_{n,0,k} = \kappa_{n+2k} + \frac{3n}{2}\mathbf{e}_0, \quad \mathbf{r}_{n,1,k} = \mathbf{r}_{n,0,k} + \mathbf{e}_0, \quad \mathbf{r}_{n,2,k} = \mathbf{r}_{n+1,0,k}$$

とおく．また，$\omega \in \mathcal{Z}$ に対して，

$$\Gamma_\omega = \{\mathbf{x} = \mathbf{r}_\omega + t\mathbf{e}_\omega | \quad 0 \le t \le 1\}$$

とし，

$$\Gamma^N = \bigcup_{\omega \in \mathcal{Z}} \Gamma_\omega$$

とおく．

ジグザグナノチューブ上の周期的シュレディンガー作用素

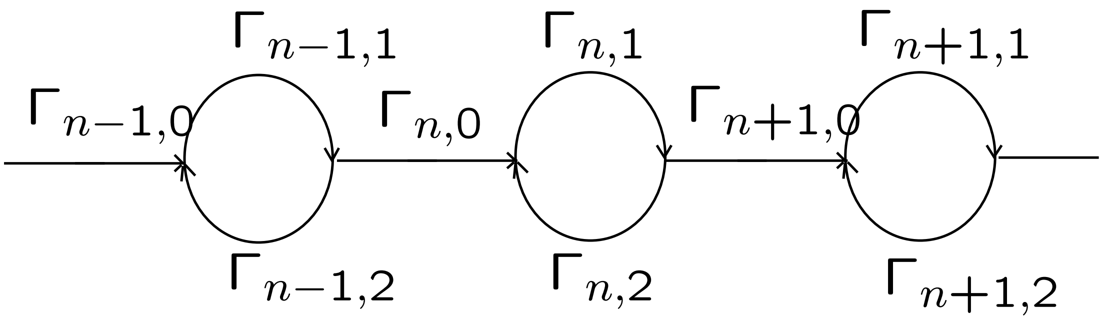
$\beta_A, \beta_B \in \mathbb{R}$ および $q \in L^2(0,1)$ に対して，ヒルベルト空間 $L^2(\Gamma^N) = \oplus_{\omega \in \mathcal{Z}} L^2(\Gamma_\omega)$ 上のシュレディンガー作用素を次で定義する:

$$(\tilde{H} f_\omega)(x) = -f_\omega''(x) + q(x) f_\omega(x), \quad x \in (0,1), \quad \omega \in \mathcal{Z},$$

$$\begin{aligned}&\mathrm{Dom}(\tilde{H})\\ &= \left\{ \bigoplus_{\omega \in \mathcal{Z}} f_\omega \in L^2(\Gamma^N) \;\middle|\; \begin{array}{l} \oplus_{\omega \in \mathcal{Z}}(-f_\omega'' + q f_\omega) \in L^2(\Gamma^N), \\ -f_{n,0,k}'(1) + f_{n,1,k}'(0) - f_{n,2,k-1}'(1) = \beta_A f_{n,1,k}(0), \\ f_{n,1,k}(0) = f_{n,0,k}(1) = f_{n,2,k-1}(1), \\ f_{n+1,0,k}'(0) - f_{n,1,k}'(1) + f_{n,2,k}'(0) = \beta_B f_{n,1,k}(1), \\ f_{n,1,k}(1) = f_{n+1,0,k}(0) = f_{n,2,k}(0) \\ \text{for} \quad n \in \mathbb{Z} \text{ and } k \in \mathbb{Z}_N \end{array} \right\}.\end{aligned}$$

※ $\beta_A = \beta_B = 0$（キルヒホッフ型の頂点条件）の場合は，E. Korotyaev 氏，I. Lobanov 氏 が研究済み.

$N=1$ のときのジグザグナノチューブ（基本領域）



$\mathbb{J}=\{0,1,2\}$, $\mathcal{Z}_1=\mathbb{Z}\times\mathbb{J}$ とおき，$(n,j)\in\mathcal{Z}_1$ に対して，$\Gamma_{n,j}=\Gamma_{n,j,1}$ とし，

$$\Gamma^1=\bigcup_{(n,j)\in\mathcal{Z}_1}\Gamma_{n,j}$$

とおく．

$s = e^{i\frac{2\pi}{N}}$ とおく. $k = 1, 2, \ldots, N$ に対して, $L^2(\Gamma^1)$ 上の作用素

$$(\tilde{H}_k f_\alpha)(x) = -f_\alpha''(x) + q(x) f_\alpha(x), \quad x \in (0,1), \quad \alpha \in \mathcal{Z}_1,$$

$$\begin{aligned} &\mathrm{Dom}(\tilde{H}_k) \\ &= \left\{ \bigoplus_{\alpha \in \mathcal{Z}_1} f_\alpha \in L^2(\Gamma^1) \;\middle|\; \begin{array}{l} \bigoplus_{\alpha \in \mathcal{Z}_1} (-f_\alpha'' + q f_\alpha) \in L^2(\Gamma^1), \\ -f_{n,0}'(1) + f_{n,1}'(0) - s^k f_{n,2}'(1) = \beta_A f_{n,1}(0), \\ f_{n,1}(0) = f_{n,0}(1) = s^k f_{n,2}(1), \\ f_{n+1,0}'(0) - f_{n,1}'(1) + f_{n,2}'(0) = \beta_B f_{n,1}(1), \\ f_{n,1}(1) = f_{n+1,0}(0) = f_{n,2}(0) \quad \text{for} \quad n \in \mathbb{Z} \end{array} \right\} \end{aligned}$$

とおくと,

$$\bigoplus_{k=1}^{N} \tilde{H}_k \cong \tilde{H}$$

が成り立つ.

$\underline{\bigoplus_{k=1}^{N} \tilde{H}_k \cong \tilde{H}}$ について

$f=(f_{n,j,k})_{(n,j,k)\in\mathcal{Z}}=(f_{n,j})_{(n,j)\in\mathcal{Z}_1}=\left(\begin{pmatrix} f_{n,j,1}\\ f_{n,j,2}\\ \vdots\\ f_{n,j,N}\end{pmatrix}\right)_{(n,j)\in\mathcal{Z}_1}$ とベクトルの列とみなすことで，作用素 $\tilde{H}$ は

$$(\tilde{H}f_\alpha)(x)=\begin{pmatrix} -f''_{n,j,1}(x)+q(x)f_{n,j,1}(x)\\ -f''_{n,j,2}(x)+q(x)f_{n,j,2}(x)\\ \vdots\\ -f''_{n,j,N}(x)+q(x)f_{n,j,N}(x)\end{pmatrix},\quad \alpha=(n,j)\in\mathcal{Z}_1,$$

$$\begin{aligned}&\mathrm{Dom}(\tilde{H})\\ &=\left\{\bigoplus_{\alpha\in\mathcal{Z}_1} f_\alpha\in L^2(\Gamma^N)\;\middle|\;\begin{array}{l}\bigoplus_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}(-f''_\alpha+qf_\alpha)\in L^2(\Gamma^N),\\ -f'_{n,0}(1)+f'_{n,1}(0)-Sf'_{n,2}(1)=\beta_A f_{n,1}(0),\\ f_{n,1}(0)=f_{n,0}(1)=Sf_{n,2}(1),\\ f'_{n+1,0}(0)-f'_{n,1}(1)+f'_{n,2}(0)=\beta_B f_{n,1}(1),\\ f_{n,1}(1)=f_{n+1,0}(0)=f_{n,2}(0)\quad\text{for}\quad n\in\mathbb{Z}\end{array}\right\}\end{aligned}$$

とも書ける．但し，S は次の行列である:

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

行列 S の固有値は，$s = e^{i\frac{2\pi}{N}}$ を用いて，$\{s^k\}_{k=1}^{N}$ と表され，各 k に対して s^k に対応する固有ベクトルは，

$$v_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\ {}^t(1, s^{-k}, s^{-2k}, \cdots, s^{-(n-1)k})$$

となる.

$$\mathcal{P}_k u = (u, v_k) v_k \qquad (u \in \mathbf{C})$$

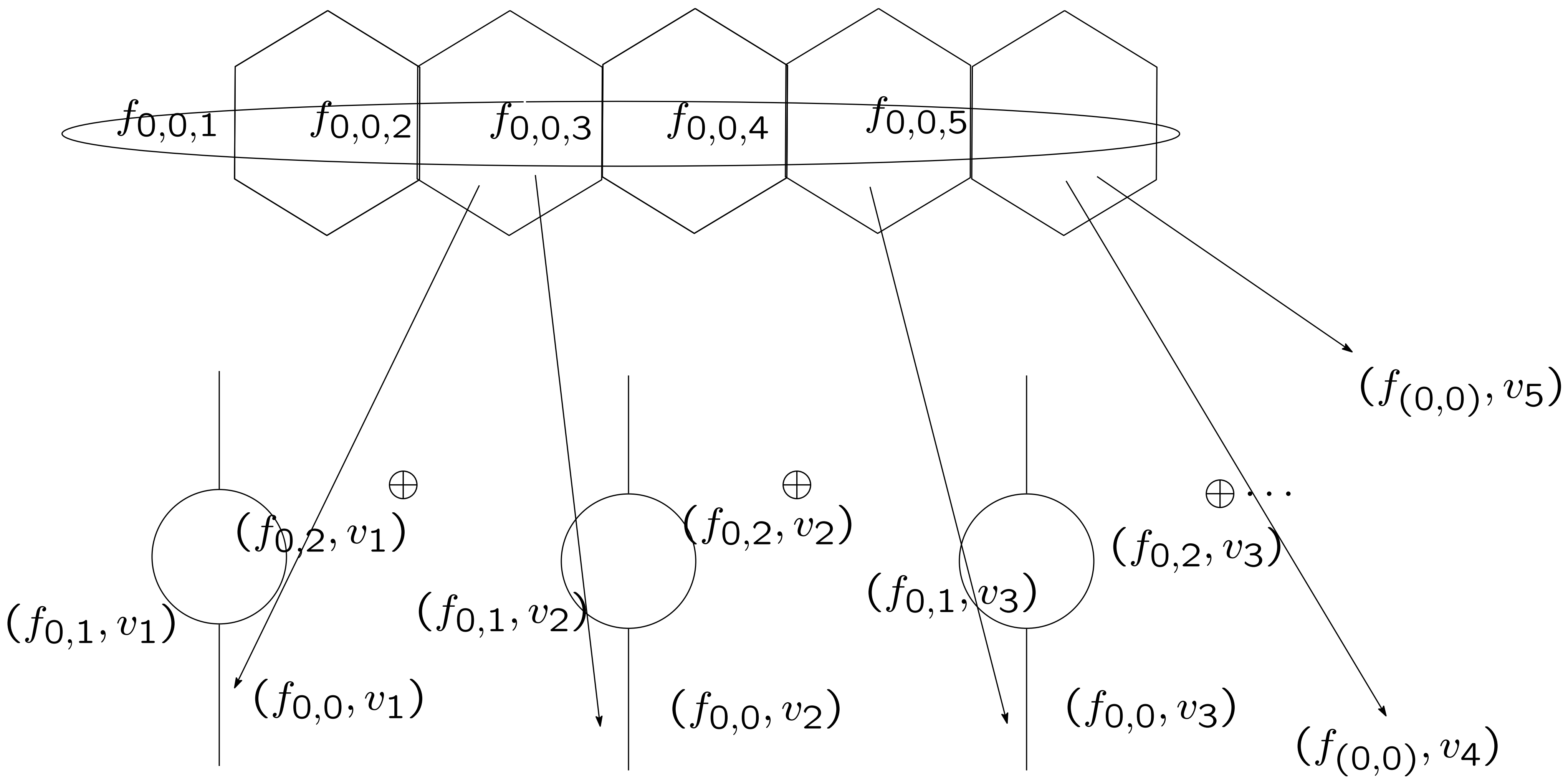
を満たす行列 $\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \ldots, \mathcal{P}_N$ によって，

$$I = \mathcal{P}_1 + \cdots + \mathcal{P}_N, \quad S = s\mathcal{P}_1 + s^2\mathcal{P}_2 + \cdots + s^N \mathcal{P}_N$$

とスペクトル分解される.

$$
\begin{pmatrix} f_{n,j,1} \\ f_{n,j,2} \\ \vdots \\ f_{n,j,N} \end{pmatrix} = \mathcal{P}_1 \begin{pmatrix} f_{n,j,1} \\ f_{n,j,2} \\ \vdots \\ f_{n,j,N} \end{pmatrix} + \cdots + \mathcal{P}_N \begin{pmatrix} f_{n,j,1} \\ f_{n,j,2} \\ \vdots \\ f_{n,j,N} \end{pmatrix}
$$

$$
= (f_{n,j}, v_1)v_1 + \cdots + (f_{n,j}, v_N)v_N
$$



$U : L^2(\Gamma^N) \to \oplus_{k=1}^N L^2(\Gamma^1)$ を

$$Uf = ((f_\alpha, v_1)_{\alpha \in \mathcal{Z}_1}, \dots, (f_\alpha, v_N)_{\alpha \in \mathcal{Z}_1}), \qquad f = (\begin{pmatrix} f_{\alpha,1} \\ f_{\alpha,2} \\ \vdots \\ f_{\alpha,N} \end{pmatrix})_{\alpha \in \mathcal{Z}_1}$$

によって定義すると, U はユニタリ作用素で,

$$U\tilde{H}U^{-1} = \oplus_{k=1}^N \tilde{H}_k$$

を満たす.

- U がユニタリ作用素であることを示す($\mathcal{H} := L^2(\Gamma^N)$, $\mathcal{H}' := \oplus_{k=1}^N L^2(\Gamma^1)$).

$$f = (f_\alpha)_{\alpha \in \mathcal{Z}_1} = (\begin{pmatrix} f_{n,j,1} \\ f_{n,j,2} \\ \vdots \\ f_{n,j,N} \end{pmatrix})_{(n,j) \in \mathcal{Z}_1} \in L^2(\Gamma_N)$$ を任意に取る.

$$\begin{aligned}
||Uf||^2_{\mathcal{H}'} &= \sum_{k=1}^N ||((f_\alpha, v_k))_\alpha||^2_{L^2(\Gamma^1)} \\
&= \sum_{k=1}^N \sum_{\alpha \in \mathbb{Z} \times \mathbb{J}} ||(f_\alpha, v_k)||^2_{L^2(0,1)} \\
&= \sum_{\alpha \in \mathbb{Z} \times \mathbb{J}} \int_0^1 \sum_{k=1}^N |(f_\alpha, v_k)|^2 dx \\
&= \sum_{\alpha \in \mathbb{Z} \times \mathbb{J}} \sum_{k=1}^N \int_0^1 |f_{\alpha,k}(x)|^2 dx \\
&= \sum_{(n,j,k) \in \mathcal{Z}} ||f_{n,j,k}||^2_{L^2(\Gamma_{n,j,k})} \\
&= ||f||^2_{\mathcal{H}} < \infty.
\end{aligned}$$

よって, $U : \mathcal{H} \to \mathcal{H}'$ は well-defined. また, U は等長である.

- $U:\mathcal{H}\to\mathcal{H}'$ が全射であることを示す.

$f=(f_\alpha)_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}=(\begin{pmatrix} f_{\alpha,1}\\ f_{\alpha,2}\\ \vdots \\ f_{\alpha,N}\end{pmatrix})_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}\in L^2(\Gamma^N)$ から $(\begin{pmatrix} (f_\alpha,v_1)\\ (f_\alpha,v_2)\\ \vdots \\ (f_\alpha,v_N)\end{pmatrix})_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}$ への対応は,

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}}(f_{\alpha,1}+s^{-1}f_{\alpha,2}+\cdots+s^{-(N-1)}f_{\alpha,N})=(f_\alpha,v_1), \\ \frac{1}{\sqrt{N}}(f_{\alpha,1}+s^{-2}f_{\alpha,2}+\cdots+s^{-2(N-1)}f_{\alpha,N})=(f_\alpha,v_2), \\ \qquad\qquad\vdots \\ \frac{1}{\sqrt{N}}(f_{\alpha,1}+s^{-N}f_{\alpha,2}+\cdots+s^{-N(N-1)}f_{\alpha,N})=(f_\alpha,v_N) \end{cases}$$

を解けば求められる. 実際,

$$\underline{\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix} 1 & s^{-1} & s^{-2} & \cdots & s^{-(N-1)} \\ 1 & s^{-2} & s^{-4} & \cdots & s^{-2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & s^{-N} & s^{-2N} & \cdots & s^{-N(N-1)} \end{pmatrix}}\begin{pmatrix} f_{\alpha,1}\\ f_{\alpha,2}\\ \vdots \\ f_{\alpha,N}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} (f_\alpha,v_1)\\ (f_\alpha,v_2)\\ \vdots \\ (f_\alpha,v_N)\end{pmatrix}$$

である. よって, U は全射である. 波線部分の行列を V とおく.

- $U(\mathrm{Dom}(\tilde{H})) \subset \mathrm{Dom}(\oplus_{k=1}^{N} \tilde{H}_k)$ を確認する.

$f = (f_{n,j})_{(n,j)\in\mathcal{Z}_1} = (\begin{pmatrix} f_{n,j,1} \\ f_{n,j,2} \\ \vdots \\ f_{n,j,N} \end{pmatrix})_{(n,j)\in\mathcal{Z}_1} \in \mathrm{Dom}(\tilde{H})$ を任意に取る.

$$f_{n,j} = (f_{n,j}, v_1)v_1 + \cdots + (f_{n,j}, v_N)v_N$$

と分解し,

$$-f'_{n,0}(1) + f'_{n,1}(0) - Sf'_{n,2}(1) = \beta_A f_{n,1}(0), \qquad n \in \mathbf{Z}$$

に代入すると,

$$\sum_{k=1}^{N}(f'_{n,0}(1), v_k)v_k + \sum_{k=1}^{N}(f'_{n,1}(0), v_k)v_k - S\sum_{k=1}^{N}(f'_{n,2}(1), v_k)v_k$$
$$= \beta_A \sum_{k=1}^{N}(f_{n,1}(0), v_k)v_k, \qquad n \in \mathbf{Z}.$$

$Sv_k = s^k v_k \ (k = 1, 2, 3, \ldots, N)$であるから,

$$\sum_{k=1}^{N}(f'_{n,0}(1), v_k)v_k + \sum_{k=1}^{N}(f'_{n,1}(0), v_k)v_k - \sum_{k=1}^{N}s^k(f'_{n,2}(1), v_k)v_k$$
$$= \beta_A \sum_{k=1}^{N}(f_{n,1}(0), v_k)v_k, \qquad n \in \mathbf{Z}.$$

よって，$k=1,2,3,\ldots,N$ に対して，

$$-(f_{n,0}(1),v_k)'+(f_{n,1}(0),v_k)'-s^k(f_{n,2}(1),v_k)'=\beta_A(f_{n,1}(0),v_k)$$

が成り立つ．したがって，$((f_{n,j},v_k))_{(n,j)\in\mathcal{Z}_1}$ は $\mathrm{Dom}(\tilde{H}_k)$ が満たすべき境界条件のひとつ目を満たす．他の３つの境界条件についても同様に確認できる．よって，

$$Uf\in\mathrm{Dom}(\oplus_{k=1}^N\tilde{H}_k)$$

である. よって，

$$U(\mathrm{Dom}(\tilde{H}))\subset\mathrm{Dom}(\oplus_{k=1}^N\tilde{H}_k).$$

- $U : \mathrm{Dom}(\tilde{H}_k) \to \oplus_{k=1}^{N} \mathrm{Dom}(\tilde{H}_k)$ の全射性について

$f = ((f_{\alpha,1})_{\alpha \in \mathcal{Z}_1}, \cdots, (f_{\alpha,N})_{\alpha \in \mathcal{Z}_1}) \in \oplus_{k=1}^{N} \mathrm{Dom}(\tilde{H}_k)$ を任意に取る．$(g_\alpha)_{\alpha \in \mathcal{Z}_1} = (\begin{pmatrix} g_{n,j,1} \\ g_{n,j,2} \\ \vdots \\ g_{n,j,N} \end{pmatrix})_{\alpha \in \mathcal{Z}_1}$ を

$$(g_\alpha) = \begin{pmatrix} g_{n,j,1} \\ g_{n,j,2} \\ \vdots \\ g_{n,j,N} \end{pmatrix} = V^{-1} f_\alpha = V^{-1} \begin{pmatrix} f_{n,j,1} \\ f_{n,j,2} \\ \vdots \\ f_{n,j,N} \end{pmatrix}$$

によって定義する．$(g_\alpha)_{\alpha \in \mathcal{Z}_1} \in \mathrm{Dom}(\tilde{H})$ を示せば良い．

ここでは,

$$-g'_{n,0}(1)+g'_{n,1}(0)-Sg'_{n,2}(1)=\beta_A g_{n,1}(0)$$

のみ示す.

$k=1,2,\ldots,N$ に対して, $(f_{\alpha,k})_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}\in\mathrm{Dom}(\tilde{H}_k)$ であるので,

$$-f'_{n,0,k}+f'_{n,1,k}(0)-s^k f'_{n,2,k}(1)=\beta_A f_{n,1,k}(0)$$

を満たす. $g_\alpha=f_{\alpha,1}v_1+\cdots+f_{\alpha,N}v_n$ であるので,

$$\begin{aligned}
&-g'_{n,0}(1)+g'_{n,1}(0)-Sg'_{n,2}(1)\\
=\ &-(f'_{n,0,1}(1)v_1+\cdots+f'_{n,0,N}(1)v_N)\\
&\qquad+(f'_{n,1,1}(0)v_1+\cdots+f'_{n,1,N}(0)v_N)\\
&\qquad\qquad-S(f'_{n,2,1}(1)v_1+\cdots+f'_{n,2,N}(1)v_N)\\
=\ &(-f'_{n,0,1}(1)+f'_{n,1,1}(0)-sf'_{n,2,1}(1))v_1\\
&\qquad+\cdots+(-f'_{n,0,N}(1)+f'_{n,1,N}(0)-s^N f'_{n,2,N}(1))v_N\\
=\ &\beta_A(f_{n,1,1}(0)v_1+\cdots+f_{n,1,N}(0)v_N)\\
=\ &\beta_A g_{n,1}(0).
\end{aligned}$$

他の３つの境界条件についても同様なので, $(g_\alpha)_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}\in\mathrm{Dom}(\tilde{H})$ が確かめられる.

§2. 主結果について

主結果の内容: $H = \tilde{H}_N$ のスペクトルについて次の事を示した.

(i) H は自己共役作用素.

(ii) $\sigma(H)$ はバンド構造を持つ.

(iii) $\sigma(H)$ のバンド端の漸近挙動.

- $\sigma(H)$ と $L^2(\mathbf{R})$ 上の作用素 $L := -\frac{d^2}{dx^2} + q$ のスペクトルとの関係

L に対応するシュレディンガー方程式

$$-y''(x,\lambda) + q(x)y(x,\lambda) = \lambda y(x,\lambda) \tag{1}$$

の初期条件

$$\theta(0,\lambda) = 1, \quad \theta'(0,\lambda) = 0$$

および

$$\varphi(0,\lambda) = 0, \quad \varphi'(0,\lambda) = 1$$

を満たす解をそれぞれ $\theta(x,\lambda)$, $\varphi(x,\lambda)$ をおく．このとき

$$\Delta(\lambda) := \frac{\theta(1,\lambda) + \varphi'(1,\lambda)}{2}$$

を $\sigma(L)$ の判別式という．

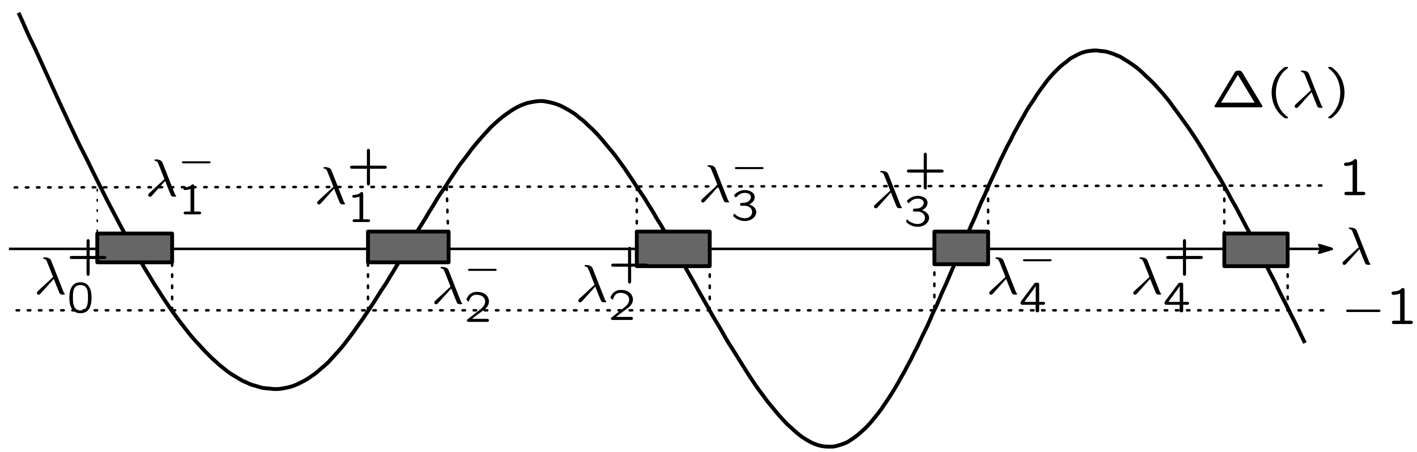
$\Delta(\lambda) \pm 1$ は可算無限個の零点を持ち, それらを重複度を込めて増大順に並べると,

$$\lambda_0^+ < \lambda_1^- \leq \lambda_1^+ < \lambda_2^- \leq \lambda_2^+ < \lambda_3^- \leq \lambda_3^+ < \dots$$

となる. $\sigma(L)$ は

$$\sigma(L) = \{\lambda \in \mathbf{R} | \quad |\Delta(\lambda)| \leq 1\} = \bigcup_{j=1}^{\infty} [\lambda_{j-1}^+, \lambda_j^-]$$

と表される. $j \in \mathbf{N}$ に対して, $G_j := (\lambda_j^-, \lambda_j^+)$ を L の j 番目のスペクトラルギャップと呼ぶ.



(1) の Dirichlet eigenvalue 全体の集合を $\sigma_D(L) = \{\mu_n\}_{n=1}^{\infty}$ とおくと,

$$\sigma_D(L) = \{\lambda \in \mathbf{R} | \quad \varphi(1, \lambda) = 0\} \quad \text{かつ} \quad \mu_n \in [\lambda_n^-, \lambda_n^+] \quad (n \geq 1).$$

定義 (H のスペクトルの判別式)　$\lambda \in \mathbf{C}$ に対して,

$$F(\lambda) = 2\Delta^2(\lambda) + \frac{\theta(1,\lambda)\varphi'(1,\lambda)}{4} - \frac{5}{4} + \frac{1}{4}\{(2\beta_A + \beta_B)\theta(1,\lambda) + (\beta_A + 2\beta_B)\varphi'(1,\lambda) + \beta_A\beta_B\varphi(1,\lambda)\}\varphi(1,\lambda)$$

とおく.

記号　$\sigma_\infty(H)$: H の多重度 ∞ の固有値全体の集合（**flat band** という）

定理 1　$\sigma(H) = \sigma_\infty(H) \cup \sigma_{ac}(H)$ が成り立つ. ここで,

$$\sigma_\infty(H) = \sigma_D(L) \qquad \text{および} \qquad \sigma_{ac}(H) = \{\lambda \in \mathbb{R} | \quad F(\lambda) \in [-1, 1]\}$$

である.

定理２　$q(x)$ が偶関数で，$\beta_A\beta_B \le 0$ であると仮定する．このとき，次の (i)〜(v) が成り立つ．

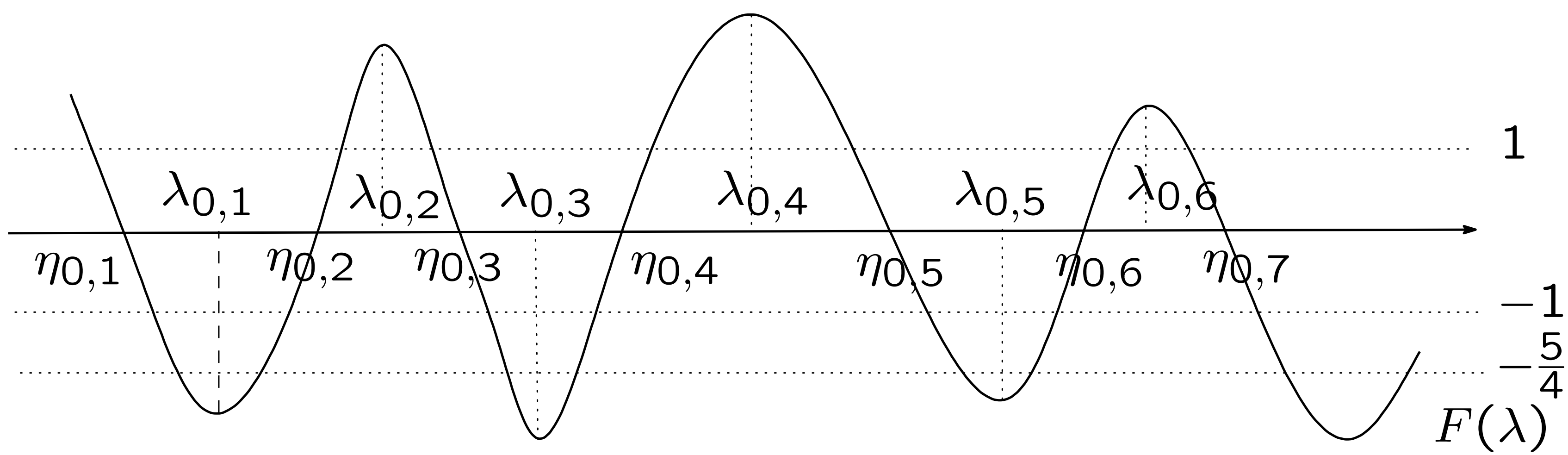
(i)　$F'(\lambda)$ および $F(\lambda)$ は単純な実零点のみを持つ．それらを $\lambda_{0,1}, \lambda_{0,2}, \lambda_{0,3}, \ldots$ および $\eta_{0,1}, \eta_{0,2}, \eta_{0,3}, \ldots$ と書くと，次のように互いに分離される:

$$\eta_{0,1} < \lambda_{0,1} < \eta_{0,2} < \lambda_{0,2} < \eta_{0,3} < \lambda_{0,3} < \cdots . \tag{2}$$

さらに，任意の $n \in \mathbf{N}$ に対して，

$$F(\lambda_{0,2n}) \ge 1 \quad \text{and} \quad F(\lambda_{0,2n-1}) \le -\frac{5}{4}$$

が成り立つ．



(ii) 作用素 H の periodic spectrum を $\lambda_{0,0}^{+}, \lambda_{0,2}^{-}, \lambda_{0,2}^{+}, \lambda_{0,4}^{-}, \lambda_{0,4}^{+}, \ldots$, anti-periodic spectrum を $\lambda_{0,1}^{-}, \lambda_{0,1}^{+}, \lambda_{0,3}^{-}, \lambda_{0,3}^{+}, \ldots$ とおくと,

$$F(\lambda_{0,n}^{+}) = (-1)^n \quad \text{for } n \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \qquad F(\lambda_{0,n}^{-}) = (-1)^n \quad \text{for } n \in \mathbb{N}$$

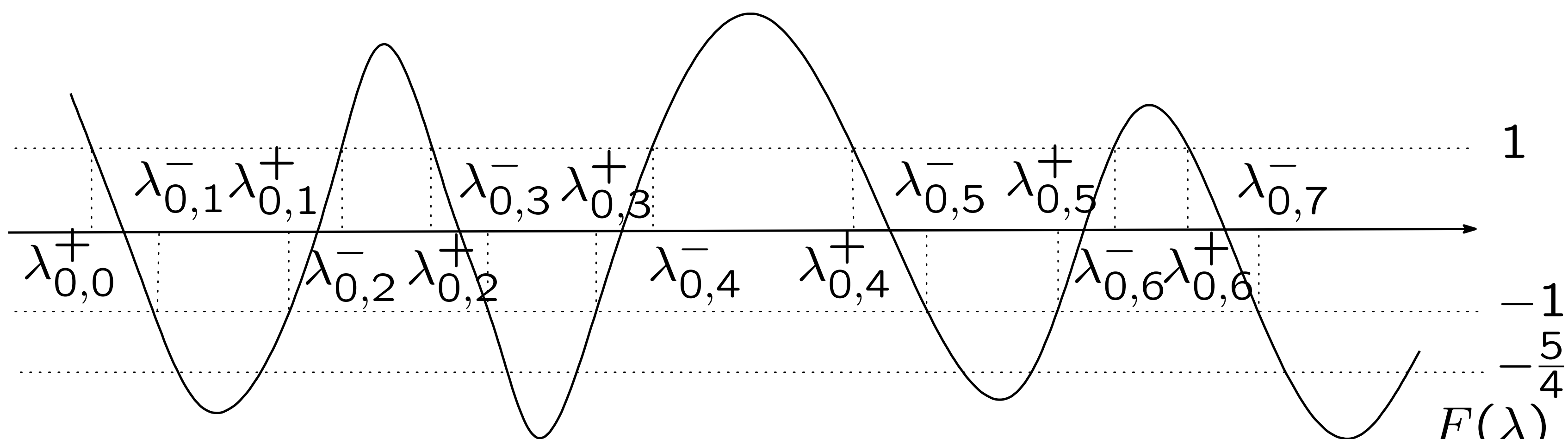
および

$$\lambda_{0,0}^{+} < \lambda_{0,1}^{-} < \lambda_{0,1}^{+} < \lambda_{0,2}^{-} \le \lambda_{0,2}^{+} < \lambda_{0,3}^{-} < \lambda_{0,3}^{+} < \lambda_{0,4}^{-} \le \lambda_{0,4}^{+} < \ldots \tag{3}$$

が成り立つ.

(iii) 作用素 H の絶対連続スペクトルは次のように書ける:

$$\sigma_{ac}(H) = \bigcup_{j=1}^{\infty} [\lambda_{0,j-1}^{+}, \lambda_{0,j}^{-}].$$



(iv) $j \in \mathbb{N}$ に対し，$\gamma_j = (\lambda_{0,j}^-, \lambda_{0,j}^+)$ を $\sigma(H)$ の j 番目のギャップと呼ぶ．この時，任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して，$\gamma_{2k-1} \neq \emptyset$ が成り立つ．

(v) $\sigma(H)$ のバンド端に対して次の漸近挙動が成り立つ:

$$\lambda_{0,2n-1}^{\pm} = \left\{ n\pi - \frac{\pi}{2} \pm \arcsin\frac{1}{3} \right\}^2 + \int_0^1 q(x)dx + \frac{\beta_A + \beta_B}{3} + o(1),$$

$$\lambda_{0,2n}^{\pm} = n^2\pi^2 + \int_0^1 q(x)dx + \frac{\beta_A + \beta_B}{3} + o(1) \quad \text{as } n \to \infty.$$

定理３ $q \equiv 0$, $\beta_A \beta_B \leq 0$ のとき，偶数番目のスペクトラルギャップはすべて閉じる．

§.3 証明

定義 3.1（多重度無限大の固有値に対する固有関数について）

$c=\varphi'(1,\lambda)$, $\eta=1-c^2$ とし，$\Psi^{(0)}=(\Psi^{(0)}_\alpha)_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}$ を次で定義する．

(1) $\eta\neq 0$ のとき

$$\Psi^{(0)}_{n,j}=0 \quad \text{for all} \quad (n,j)\in(\mathbb{Z}\setminus\{-1,0\})\times\mathbb{J},$$

$$\Psi^{(0)}_{0,0}=\eta\varphi, \quad \Psi^{(0)}_{0,1}=c\varphi, \quad \Psi^{(0)}_{0,2}=c^2\varphi,$$

$$\Psi^{(0)}_{-1,0}=0, \quad \Psi^{(0)}_{-1,1}=-c\varphi, \quad \Psi^{(0)}_{-1,2}=-\varphi.$$

(2) $\eta=0$ のとき

$$\Psi^{(0)}_{n,j}=0 \quad \text{for all} \quad (n,j)\in(\mathbb{Z}\setminus\{0\})\times\mathbb{J},$$

$$\Psi^{(0)}_{0,0}=0, \quad \Psi^{(0)}_{0,1}=\varphi, \quad \Psi^{(0)}_{0,2}=c\varphi.$$

さらに，$\Psi^{(n)}=(\Psi^{(0)}_{m-n,j})_{(m,j)\in\mathcal{Z}_1}(\in \mathrm{Dom}(H))$ とおく．

補題 3.2　$\lambda\in\sigma_D(L)$ ならば $\lambda\in\sigma_\infty(H)$ であり，λ に対応する固有関数は $\{\Psi^{(n)}\}_{n\in\mathbb{Z}}$ で与えられる．

定理１の証明　$\mu \in [0, 2\pi)$ に対し，ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_\mu := \oplus_{j=0}^2 L^2(\Gamma_{0,j})$ 上のファイバー $H(\mu)$ を次で定義する:

$$(H(\mu)f_j)(x) = -f_j''(x) + q(x)f_j(x), \quad j = 0, 1, 2, \quad x \in (0, 1),$$

$$\mathrm{Dom}(H(\mu)) = \left\{ \bigoplus_{j=0}^{2} f_j \in \mathcal{H}_\mu \;\middle|\; \begin{array}{l} \bigoplus_{j=0}^2(-f_j'' + qf_j) \in \mathcal{H}_\mu, \\ -f_0'(1) + f_1'(0) - f_2'(1) = \beta_A f_1(0), \\ f_1(0) = f_0(1) = f_2(1), \\ e^{i\mu} f_0'(0) - f_1'(1) + f_2'(0) = \beta_B f_1(1), \\ f_1(1) = e^{i\mu} f_0(0) = f_2(0) \end{array} \right\}.$$

さらに，ヒルベルト空間

$$\mathcal{H} = \int_{[0,2\pi)}^{\oplus} \mathcal{H}_\mu \frac{d\mu}{2\pi} = L^2\left([0, 2\pi), \mathcal{H}_\mu, \frac{d\mu}{2\pi}\right)$$

と次で定義されるユニタリ作用素 $U : L^2(\Gamma^1) \to \mathcal{H}$ を考える:

$$(Uf)(\mu) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{in\mu} f_n, \quad f = (f_n)_{n \in \mathbb{Z}} = (f_{n,j})_{(n,j) \in \mathcal{Z}_1} \in L^2(\Gamma^1).$$

このとき，H は次のように表される:

$$UHU^{-1} = \int_{[0,2\pi)}^{\oplus} H(\mu) \frac{d\mu}{2\pi}.$$

各 $\mu \in [0, 2\pi)$ に対して，$\{E_n(\mu)\}_{n\in\mathbb{N}}$ を $H(\mu)$ の固有値を重複度を込めて増大順に並べたものとする．このとき，

$$\sigma(H) = \sigma_\infty(H) \cup \sigma_{ac}(H) = \bigcup_{n=1}^{\infty} \bigcup_{\mu\in[0,2\pi)} \{E_n(\mu)\}.$$

但し，$\mathcal{N} = \{n \in \mathbf{N} | \quad E_n(\mu) \text{ does not depend on } \mu\}$ とおくと，

$$\sigma_\infty(H) = \bigcup_{n\in\mathcal{N}} \{E_n(\mu)\}, \quad \sigma_{ac}(H) = \bigcup_{n\in\mathcal{N}^c} \bigcup_{\mu\in[0,2\pi)} \{E_n(\mu)\}.$$

$\sigma_D(L) \subset \sigma_\infty(H)$ なので，$\sigma(H) \setminus \sigma_D(L)$ の部分を調べる．$\lambda \notin \sigma_D(L)$ とし，固有方程式

$$H(\mu)f = \lambda f, \quad f \in \mathrm{Dom}(H(\mu)) \setminus \{0\}$$

を考える．

$$w(x,\lambda) = \theta(x,\lambda) - \frac{\theta(1,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}\varphi(x,\lambda)$$

とおくと，$-y''(x,\lambda) + q(x)y(x,\lambda) = \lambda y(x,\lambda)$ の任意の解は次のように書ける:

$$y(x,\lambda) = w(x,\lambda)y(0,\lambda) + \frac{\varphi(x,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}y(1,\lambda).$$

$f = (f_0, f_1, f_2) \in \mathrm{Dom}(H(\mu)) \setminus \{0\}$ に対して，$X = f_0(0,\lambda)$，$Y = f_0(1,\lambda)$ とおく． 境界条件 $f_1(0,\lambda) = f_0(1,\lambda) = f_2(1,\lambda)$ と $f_1(1,\lambda) = e^{i\mu} f_0(0,\lambda) = f_2(0,\lambda)$ から，次が成り立つ:

$$
\begin{aligned}
f_0(x,\lambda) &= w(x,\lambda)X + \frac{\varphi(x,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}Y, && (4)\\
f_1(x,\lambda) &= w(x,\lambda)Y + \frac{\varphi(x,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}e^{i\mu}X, && (5)\\
f_2(x,\lambda) &= w(x,\lambda)e^{i\mu}X + \frac{\varphi(x,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}Y. && (6)
\end{aligned}
$$

これらを境界条件 $-f_0'(1,\lambda) + f_1'(0,\lambda) - f_2'(1,\lambda) = \beta_A f_0(1,\lambda)$ に代入すると，

$$
\begin{aligned}
&-\left(w'(1,\lambda)X + \frac{\varphi'(1,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}Y\right) + \left(w'(0,\lambda)Y + \frac{\varphi'(0,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}e^{i\mu}X\right)\\
&\quad -\left(w'(1,\lambda)e^{i\mu}X + \frac{\varphi'(1,\lambda)}{\varphi(1,\lambda)}Y\right) = \beta_A Y.
\end{aligned}
$$

これを整理すると次の式を得る:

$$
(1 + 2e^{i\mu})X - \{2\varphi'(1,\lambda) + \theta(1,\lambda) + \beta_A \varphi(1,\lambda)\}Y = 0. \qquad (7)
$$

次に，(4)-(6) を境界条件 $e^{i\mu}f_0'(0,\lambda)-f_1'(1,\lambda)+f_2'(0,\lambda)=\beta_B e^{i\mu}f_0(0,\lambda)$ に代入すると，

$$-(2\theta(1,\lambda)+\varphi'(1,\lambda)+\beta_B\varphi(1,\lambda))X+(1+2e^{-i\mu})Y=0 \tag{8}$$

を得る．(7) と (8) から，斉次一次方程式

$$M(\lambda,\mu)\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を得る．ここで，$M(\lambda,\mu)$ は次の行列である:

$$\begin{aligned}
M(\lambda,\mu) &= \begin{pmatrix} m_{11}(\lambda,\mu) & m_{12}(\lambda,\mu) \\ m_{21}(\lambda,\mu) & m_{22}(\lambda,\mu) \end{pmatrix}, \\
m_{11}(\lambda,\mu) &= 1+2e^{i\mu}, \\
m_{12}(\lambda,\mu) &= -(2\varphi'(1,\lambda)+\theta(1,\lambda)+\beta_A\varphi(1,\lambda)), \\
m_{21}(\lambda,\mu) &= -(2\theta(1,\lambda)+\varphi'(1,\lambda)+\beta_B\varphi(1,\lambda)), \\
m_{22}(\lambda,\mu) &= 1+2e^{-i\mu}.
\end{aligned}$$

f は $H(\mu)f=\lambda f$ の非自明解なので，det $M(\lambda,\mu)=0$ である．従って，

$$\begin{aligned}0 &= 5+4\cos\mu-(4\theta(1,\lambda)\varphi'(1,\lambda)+2\theta^2(1,\lambda)+2\beta_A\theta(1,\lambda)\varphi(1,\lambda)\\ &\quad +2\varphi'(1,\lambda)^2+\theta(1,\lambda)\varphi'(1,\lambda)+\beta_A\varphi(1,\lambda)\varphi'(1,\lambda)\\ &\quad +2\beta_B\varphi(1,\lambda)\varphi'(1,\lambda)+\beta_B\varphi(1,\lambda)\theta(1,\lambda)+\beta_A\beta_B\varphi^2(1,\lambda))\end{aligned}$$

を得る．$\Delta^2(\lambda)=2\theta(1,\lambda)^2+4\theta(1,\lambda)\varphi'(1,\lambda)+2\varphi'(1,\lambda)^2$ より，

$$\begin{aligned}\cos\mu &= 2\Delta^2(\lambda)+\frac{\theta(1,\lambda)\varphi'(1,\lambda)}{4}-\frac{5}{4}\\ &\quad +\frac{1}{4}\{(2\beta_A+\beta_B)\theta(1,\lambda)+(\beta_A+2\beta_B)\varphi'(1,\lambda)+\beta_A\beta_B\varphi(1,\lambda)\}\varphi(1,\lambda).\end{aligned}$$

を得る．よって，$\{E_n(\mu)\}_{n\in\mathcal{N}^c}=\{\lambda\in\mathbb{R}|\quad F(\lambda)=\cos\mu\}$．以上により，

$$\sigma_{ac}(H)=\{\lambda\in\mathbb{R}|\quad F(\lambda)\in[-1,1]\}$$

が成り立つ． $\square$

次の目標: 定理２ (i) の証明と $F(\lambda)$ の挙動について考える.

補題 3.3

$$\tilde{F}_0(\lambda) = \frac{9\cos 2\sqrt{\lambda} - 1}{8}, \quad q_0 = \int_0^1 q(t)dt$$

とおくと,

$$F(\lambda) = \tilde{F}_0(\lambda) + \frac{9q_0 + 3(\beta_A + \beta_B)}{8} \cdot \frac{\sin 2\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} + \mathcal{O}\left(\frac{e^{2|\mathrm{Im}\sqrt{\lambda}|}}{|\lambda|}\right) \text{ as } |\lambda| \to \infty$$

が成り立つ.

証明の要点 「Pöschel, Trubowitz. Inverse Spectral Theory」 にて, 次の漸近挙動が知られている: $|\lambda| \to \infty$ のとき, $[0,1] \times L^2(0,1)$ の有界な部分集合上一様に

$$
\begin{aligned}
\theta(x,\lambda) &= \cos\sqrt{\lambda}x + \frac{1}{2\sqrt{\lambda}}\int_0^x (\sin\sqrt{\lambda}x + \sin\sqrt{\lambda}(x-2t))q(t)dt \\
&\quad + \mathcal{O}\left(\frac{e^{|\mathrm{Im}\sqrt{\lambda}|x}}{|\lambda|}\right), \qquad (9) \\
\theta'(x,\lambda) &= -\sqrt{\lambda}\sin\sqrt{\lambda}x + \frac{1}{2}\int_0^x (\cos\sqrt{\lambda}x + \cos\sqrt{\lambda}(x-2t))q(t)dt \\
&\quad + \mathcal{O}\left(\frac{e^{|\mathrm{Im}\sqrt{\lambda}|x}}{|\lambda|^{1/2}}\right), \qquad (10) \\
\varphi(x,\lambda) &= \frac{\sin\sqrt{\lambda}x}{\sqrt{\lambda}} + \frac{1}{2\lambda}\int_0^x (-\cos\sqrt{\lambda}x + \cos\sqrt{\lambda}(x-2t))q(t)dt \\
&\quad + \mathcal{O}\left(\frac{e^{|\mathrm{Im}\sqrt{\lambda}|x}}{|\lambda|^{3/2}}\right), \qquad (11) \\
\varphi'(x,\lambda) &= \cos\sqrt{\lambda}x + \frac{1}{2\sqrt{\lambda}}\int_0^x (\sin\sqrt{\lambda}x + \sin\sqrt{\lambda}(x-2t))q(t)dt \\
&\quad + \mathcal{O}\left(\frac{e^{|\mathrm{Im}\sqrt{\lambda}|x}}{|\lambda|}\right). \qquad (12)
\end{aligned}
$$

これらを用いて $F(\lambda)$ を評価すると補題の主張を得る. □

補題 3.4　次の (i)〜(iii) が成り立つ.

(i) $\lambda \in \sigma_D(L)$ ならば, $F(\lambda) \geq 1$.

(ii) $\displaystyle\lim_{\lambda \to -\infty} F(\lambda) = \infty$.

(iii) q は偶関数で $\beta_A\beta_B \leq 0$ を仮定する．このとき, $\Delta(\lambda) = 0$ ならば, $F(\lambda) \leq -\frac{5}{4}$.

証明. (i) $\lambda \in \sigma_D(L)$ を仮定すると, $\varphi(1,\lambda) = 0$ である．また, 各 $n \in \mathbb{N}$ に対して $\mu_n \in [\lambda_n^-, \lambda_n^+]$ であるから $|\Delta(\lambda)| \geq 1$．よって, $F(\lambda) = 2\Delta(\lambda)^2 - 1 \geq 1$.

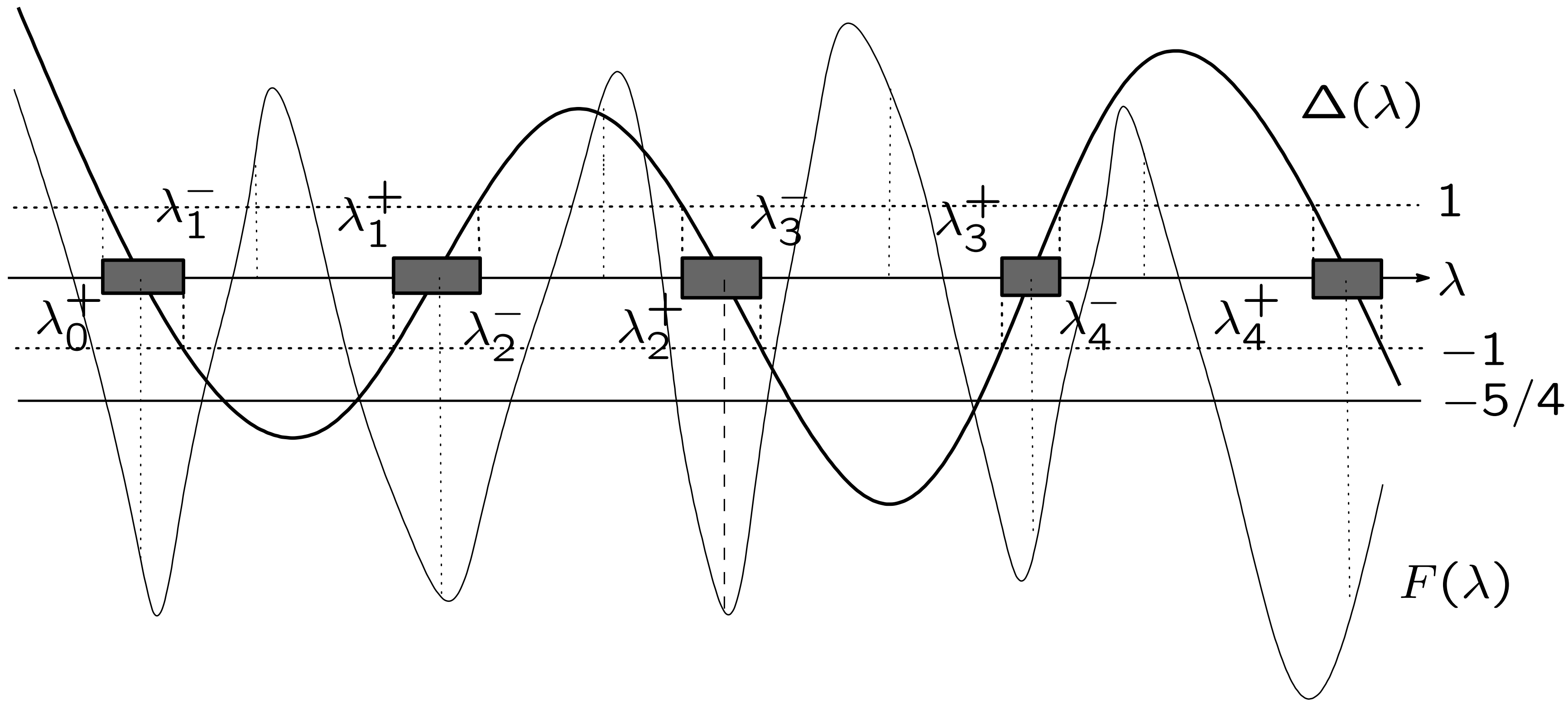
(ii) 補題 3.3 から,

$$F(\lambda) = \tilde{F}_0(\lambda) + o(\tilde{F}_0(\lambda)) \quad \text{as} \quad \lambda \to -\infty.$$

よって, $F(\lambda) \to \infty$ as $\lambda \to -\infty$.

(iii) q が偶関数なので, $\theta(1,\lambda) = \varphi'(1,\lambda)$ である (see [Magnus, Winkler, Hill's Equation, Theorem 1.1])．一方, $\Delta(\lambda) = 0$ より, $\theta(1,\lambda) = -\varphi'(1,\lambda)$．よって, $F(\lambda) = -\frac{5}{4} + \frac{\beta_A\beta_B}{4}\varphi(1,\lambda)^2$．従って, $\beta_A\beta_B \leq 0$ から $F(\lambda) \leq -\frac{5}{4}$ を得る．　□

$\Delta(\lambda)$ と $F(\lambda)$ の（大まかな）関係



（以下，ルーシェの定理とラゲールの定理を用いて，実際にこのような概形となることを示す.）

さらに，補題 3.3 と ルーシェの定理を用いると次の補題を得る:

補題 3.5　(i) ある自然数 n_0 が存在して，$F(\lambda)-1$ は領域 $\{\lambda \in \mathbb{C}|\quad |\sqrt{\lambda}| < \pi(n_0+\frac{1}{2})\}$ 内に（重複度を込めて）$2n_0+1$ 個，任意の $n > n_0$ に対して領域 $\{\lambda \in \mathbb{C}|\quad |\sqrt{\lambda}-n\pi| < \frac{\pi}{4}\}$ 内に 2 個の零点を持つ．また，その他に零点を持たない．

(ii) ある自然数 n_0 が存在して，$F(\lambda)+\frac{5}{4}$ は領域 $\{\lambda \in \mathbb{C}|\quad |\sqrt{\lambda}| < \pi(n_0+\frac{1}{2})\}$ 内に $2n_0$ 個，任意の $n > n_0$ に対して領域 $\{\lambda \in \mathbb{C}|\quad |\sqrt{\lambda}-\pi(n-\frac{1}{2})| < \frac{\pi}{4}\}$ 内に 2 個の零点を持つ．また，その他に零点を持たない．

(iii) 各 $c \in (-\frac{5}{4},1)$, $n \in \mathbb{N}$ に対して，$u_n^{\pm}(c) = n\pi \pm u_0^{+}(c)$, $u_0^{+}(c) = \frac{1}{2}\arccos A_c$, $A_c = \frac{1+8c}{9}$ とおく．このとき，ある自然数 n_0 が存在して，$F(\lambda)-c$ は領域 $\{\lambda \in \mathbb{C}|\quad |\sqrt{\lambda}| < \frac{u_{n_0}^{+}(c)+u_{n_0+1}^{-}(c)}{2}\}$ 内に $2n_0+1$ 個，任意の $n > n_0$ と十分小さい $r > 0$ に対して，領域 $\{\lambda \in \mathbb{C}|\quad |\sqrt{\lambda}-u_n^{\pm}(c)| < r\}$ 内に 1 個の零点を持つ．また，その他に零点を持たない．

証明 (i) を示す．$C_0(n+\frac{\pi}{2}) := \{\lambda \in \mathbf{C} | \quad |\sqrt{\lambda}| = \pi(n+\frac{1}{2})\}$ において Rouché の定理を用いる． $m \in \mathbf{N}$ を任意にとると，

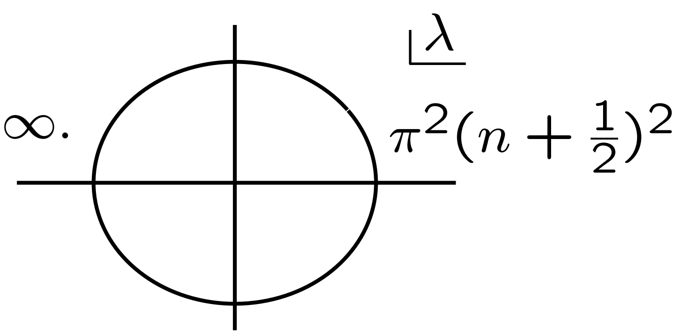
$$|\lambda - \pi m| \geq \frac{\pi}{4} \quad \Rightarrow \quad e^{|\mathrm{Im}\ \sqrt{\lambda}|} < 4|\sin\sqrt{\lambda}|$$

が成り立つ．従って，補題 3.3 より，

$$\begin{aligned} & |(F(\lambda)-1)-(\tilde{F}_0(\lambda)-1)| \\ = & \left| \frac{9q_0 + 3(\beta_A+\beta_B)}{8} \cdot \frac{\sin 2\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} + \mathcal{O}\left(\frac{e^{2|\mathrm{Im}\sqrt{\lambda}|}}{|\lambda|}\right)\right| \\ = & \ o(e^{2|\mathrm{Im}\ \sqrt{\lambda}|}) \\ = & \ |\sin\sqrt{\lambda}|^2 o(1) \quad \text{as} \quad |\lambda| \to \infty. \end{aligned}$$

$\tilde{F}_0(\lambda) - 1 = \frac{9\cos 2\sqrt{\lambda} - 1}{8} - 1 = -\frac{9}{4}\sin^2\sqrt{\lambda}$ より，

$$|(F(\lambda)-1)-(\tilde{F}_0(\lambda)-1)| = o(1)|\tilde{F}_0(\lambda)-1| \quad \text{as } |\lambda| \to \infty.$$



よって， n_0 を十分大きく取れば， $F(\lambda) - 1$ と $\tilde{F}_0(\lambda) - 1$ の $C_0(n+\frac{\pi}{2})$ 内の零点の個数は等しい ($2n_0 + 1$ 個である).

単純閉曲線 $\{\lambda \in \mathbf{C} | \quad |\sqrt{\lambda} - \pi n| = \frac{\pi}{4}\}$ においても同様にして，内部にちょうど 2 個の零点を持つことがわかる． □

以下，q は偶関数，$\beta_A \beta_B \leq 0$ を仮定する．

補題 3.6 $c \in [-\frac{5}{4}, 1]$ に対して，$F(\lambda) - c$ は実零点のみを持つ．

証明 (A) $\theta(1,\lambda), \theta'(1,\lambda), \varphi(1,\lambda), \varphi'(1,\lambda), \Delta(\lambda)$ は 整関数で，$\lambda \in \mathbf{R}$ ならば $\theta(1,\lambda), \theta'(1,\lambda), \varphi(1,\lambda), \varphi'(1,\lambda), \Delta(\lambda) \in \mathbf{R}$ である． よって，$F(\lambda)$ も 整関数で，$\lambda \in \mathbf{R}$ のとき，$F(\lambda) \in \mathbf{R}$ である．

(B) 任意の $q \in L^2(0,1)$ に対して，$\{a_n\}_{n=1}^{\infty} \in \ell^2(\mathbb{N})$ が存在して，

$$\lambda_n^{\pm} = n^2\pi^2 + \int_0^1 q(x)dx + a_n$$

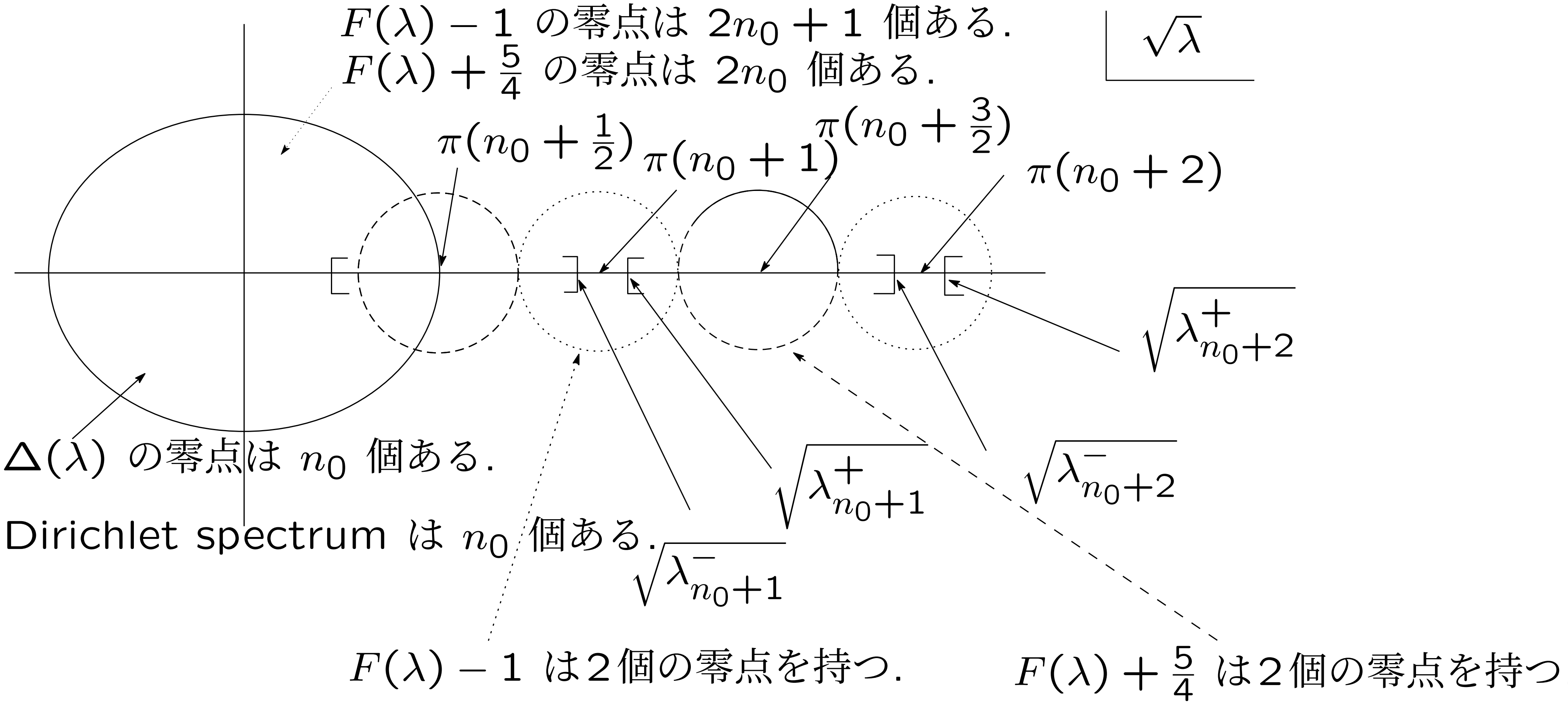
を満たす．証明は

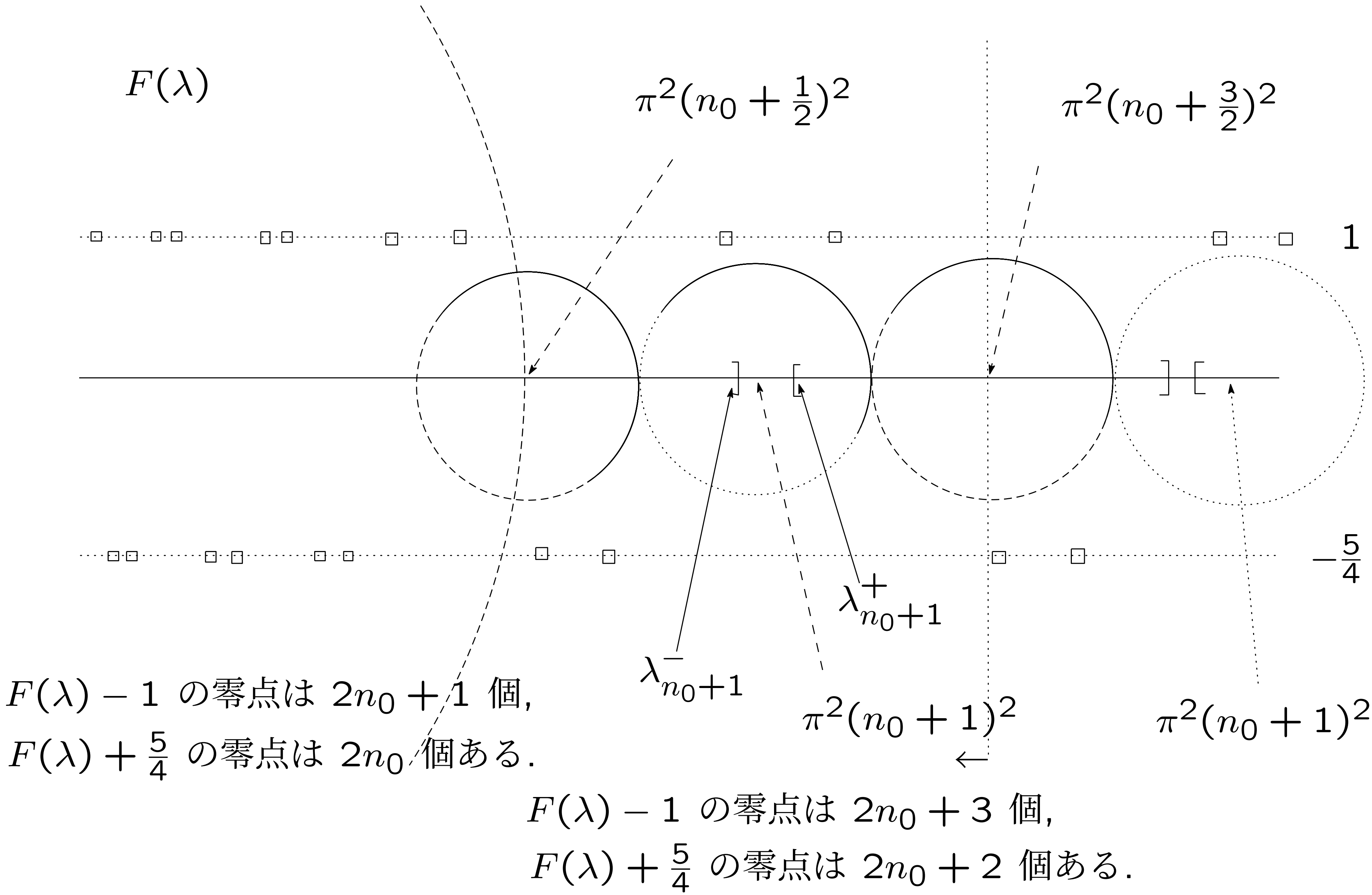
- Garnett, Trubowitz, Commnent. Math. Helv.(1884) の pp. 262

- Pöschel, Trubowitz, Inerse spectral Theory

にある．よって，n_0 を十分大きく取ると，任意の $n \geq n_0$ に対して，$|\sqrt{\lambda_n^{\pm}} - n\pi| < \frac{\pi}{4}$ が成り立つ．

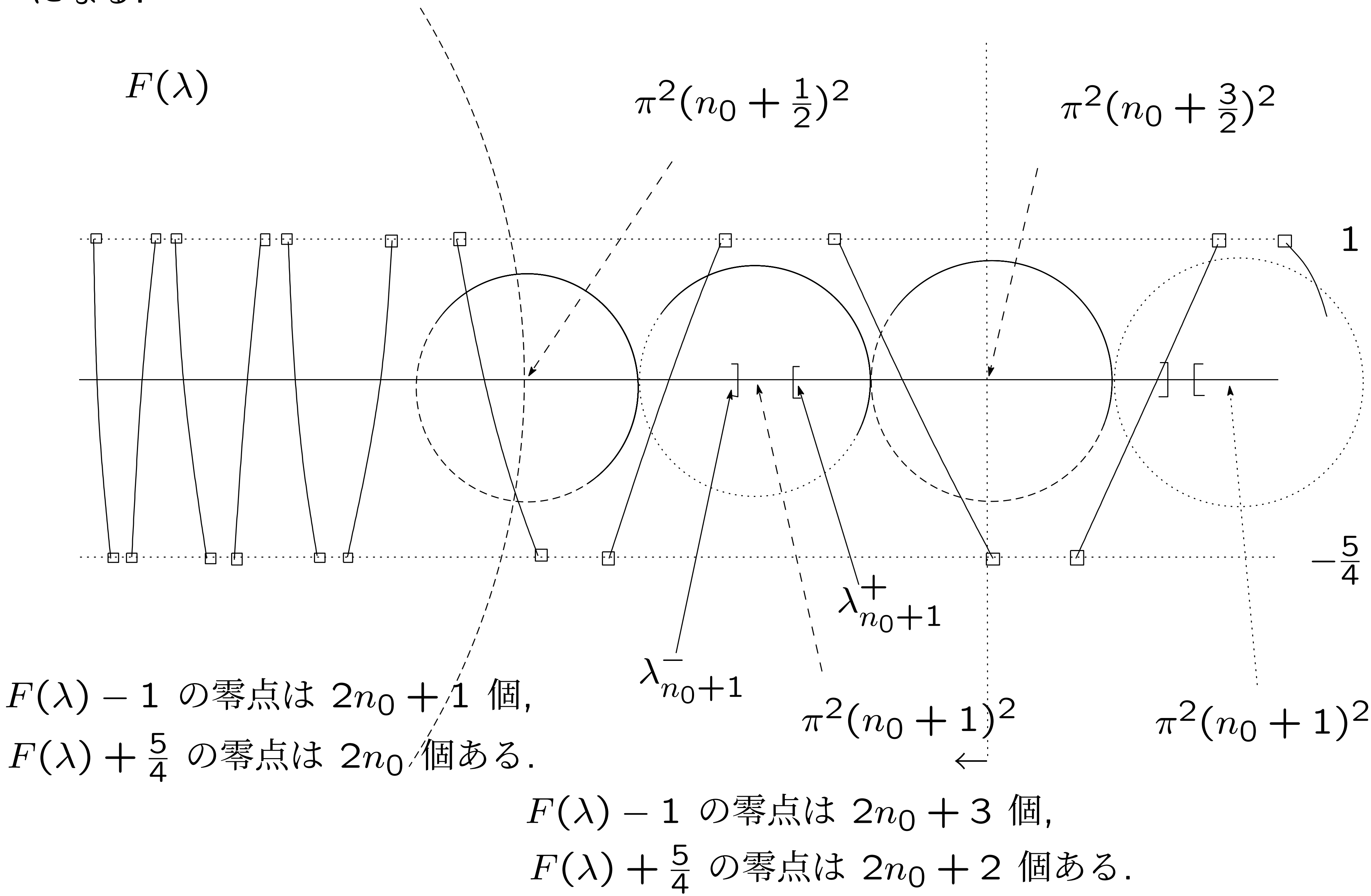
零点についての情報 (補題 3.5 からわかる.)





$F(\lambda)$
$\pi^2(n_0+\frac{1}{2})^2$
$\pi^2(n_0+\frac{3}{2})^2$
1
$-\frac{5}{4}$
$\lambda^+_{n_0+1}$
$\lambda^-_{n_0+1}$
$\pi^2(n_0+1)^2$
$\pi^2(n_0+1)^2$
$F(\lambda)-1$ の零点は $2n_0+1$ 個,
$F(\lambda)+\frac{5}{4}$ の零点は $2n_0$ 個ある.
$\leftarrow$
$F(\lambda)-1$ の零点は $2n_0+3$ 個,
$F(\lambda)+\frac{5}{4}$ の零点は $2n_0+2$ 個ある.

中間値の定理と補題3.4, 3.5(iii) より, $F(\lambda) \in [-1, 1]$ のグラフの概形は次のようになる.



よって, $F(\lambda)-c$ の零点がすべて実軸上で見つかる. $\square$

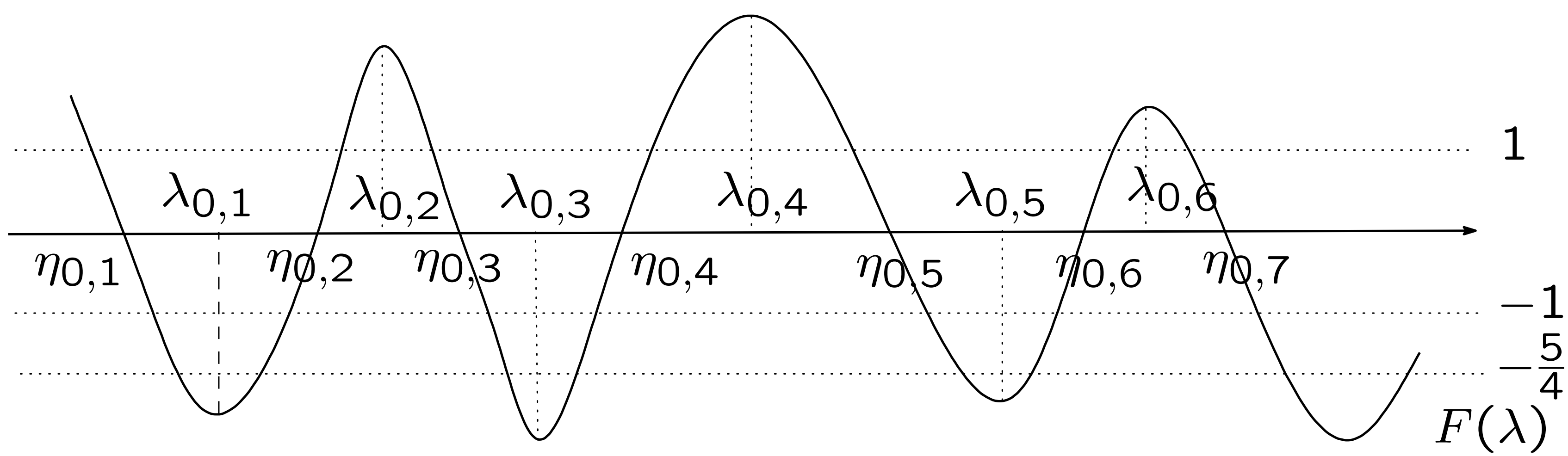
定義 整関数 $f(z)$ が有限位数であるとは，ある正定数 A が存在して，次を満たすことである:

$$f(z) = \mathcal{O}(e^{r^A}) \quad \text{as} \quad |z| = r \to \infty.$$

A の下限 ρ を $f(z)$ の位数であるという．

定理(Laguerre, see [Titchmarsh, The theory of functions, Section 8.52]) $f(z)$ は整関数で，$z \in \mathbf{R}$ に対して $f(z) \in \mathbf{R}$ となり，位数が 2 より小さく，実零点のみを持つとする．このとき，$f'(z)$ も実零点のみを持ち，$f'(z)$ の零点は $f(z)$ の零点によって分離される．

定理２ (i) の証明　補題3.3 より，$F(\lambda) = \mathcal{O}(e^{|\lambda|^{1/2}})$ as $|\lambda| \to \infty$．よって，補題3.6 と Laguerre の定理 より，定理２ (i) が成り立つ． □



定義 (モノドロミー行列)　 $\alpha \in \mathcal{Z}_1$ に対し, $\Theta(x,\lambda) = \{\Theta_\alpha(x,\lambda)\}_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}$, $\psi(x,\lambda) = \{\Psi_\alpha(x,\lambda)\}_{\alpha\in\mathcal{Z}_1}$ をそれぞれ, 初期条件

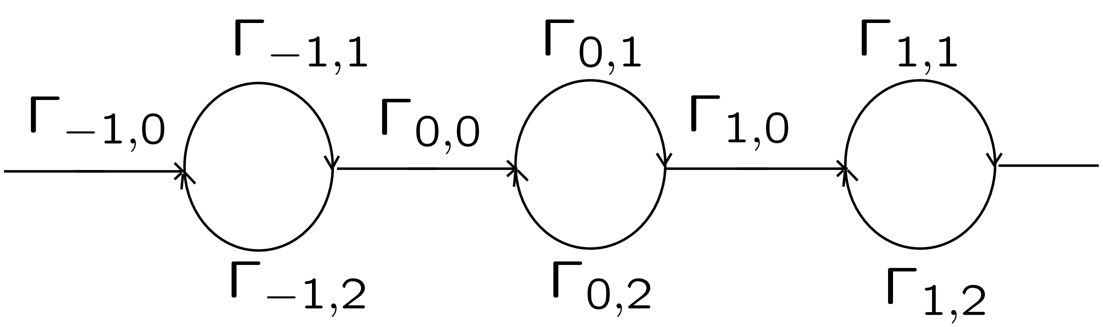
$$\Theta_{0,0}(0,\lambda) = 1, \quad \Theta'_{0,0}(0,\lambda) = 0, \quad \Psi_{0,0}(0,\lambda) = 0, \quad \Psi'_{0,0}(0,\lambda) = 1$$

を満たす方程式

$$-f''_\alpha + qf_\alpha = \lambda f_\alpha, \tag{13}$$
$$-f'_{n,0}(1) + f'_{n,1}(0) - f'_{n,2}(1) = \beta_A f_{n,1}(0), \tag{14}$$
$$f_{n,1}(0) = f_{n,0}(1) = f_{n,2}(1), \tag{15}$$
$$f'_{n+1,0}(0) - f'_{n,1}(1) + f'_{n,2}(0) = \beta_B f_{n,1}(1), \tag{16}$$
$$f_{n,1}(1) = f_{n+1,0}(0) = f_{n,2}(0), \quad n \in \mathbb{Z} \tag{17}$$

の解とする．このとき, モノドロミー行列を次で定義する:

$$\mathcal{M}(\lambda) = \begin{pmatrix} \Theta_{1,0}(0,\lambda) & \Psi_{1,0}(0,\lambda) \\ \Theta'_{1,0}(0,\lambda) & \Psi'_{1,0}(0,\lambda) \end{pmatrix}.$$



補題 3.7. モノドロミー行列の成分は次で与えられる:

$$\Theta_{1,0}(0,\lambda) = \frac{\varphi_1\theta_1'}{2} + \frac{2\Delta+\beta_A\varphi_1}{2}\theta_1, \tag{18}$$

$$\Theta_{1,0}'(0,\lambda) = \frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4}{2\varphi_1}\theta_1 + \frac{2\Delta+\beta_B\varphi_1}{2}\theta_1', \tag{19}$$

$$\Psi_{1,0}(0,\lambda) = \frac{\varphi_1\varphi_1'}{2} + \frac{2\Delta+\beta_A\varphi_1}{2}\varphi_1, \tag{20}$$

$$\Psi_{1,0}'(0,\lambda) = \frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4}{2\varphi_1}\varphi_1 + \frac{2\Delta+\beta_B\varphi_1}{2}\varphi_1'. \tag{21}$$

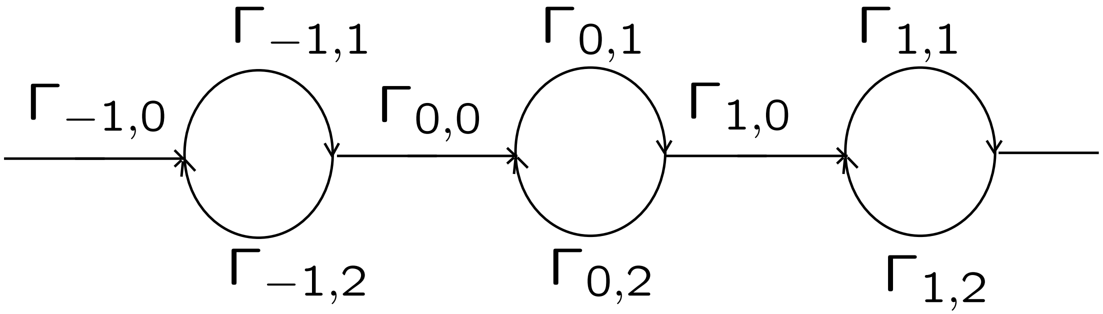
但し, $\varphi_1=\varphi(1,\lambda)$, $\varphi_1'=\varphi'(1,\lambda)$, $\theta_1=\theta(1,\lambda)$, $\theta_1'=\theta_1'(1,\lambda)$, $\Delta=\Delta(\lambda)$ を意味するものとする.

証明 方程式 $-f''+qf=\lambda f$ の任意の解は, $(0,1)$ 上で

$$f(x) = f(0)\theta(x,\lambda) + \frac{f(1)-\theta_1 f(0)}{\varphi_1}\varphi(x,\lambda)$$

を満たし, さらに次も満たす:

$$f'(0) = \frac{f(1)-\theta_1 f(0)}{\varphi_1}, \qquad f'(1) = \frac{\varphi_1' f(1) - f(0)}{\varphi_1}.$$



$f_{0,1} = f|_{\Gamma_{0,1}}$, $f_{0,2} = f|_{\Gamma_{0,2}}$ とおくと, $j = 1, 2$ に対して

$$f'_{0,j}(0) = \frac{f_{0,j}(1) - \theta_1 f_{0,j}(0)}{\varphi_1}, \quad f'_{0,j}(1) = \frac{\varphi'_1 f_{0,j}(1) - f_{0,j}(0)}{\varphi_1} \tag{22}$$

を満たす．これを (14) に代入して $n = 0$ とおけば,

$$-f'_{0,0}(1) + \frac{f_{0,1}(1) - \theta_1 f_{0,1}(0)}{\varphi_1} - \frac{\varphi'_1 f_{0,2}(1) - f_{0,2}(0)}{\varphi_1} = \beta_A f_{0,0}(1)$$

を得る．さらに $f_{0,1}(0) = f_{0,0}(1) = f_{0,2}(1)$ と $f_{0,1}(1) = f_{1,0}(0) = f_{0,2}(0)$ を代入すれば次が成り立つ:

$$f_{1,0}(0) = \frac{\varphi_1}{2} f'_{0,0}(1) + \frac{\theta_1 + \varphi'_1 + \beta_A \varphi_1}{2} f_{0,0}(1). \tag{23}$$

一方，(22) を (16) に代入して $n=0$ とおけば，

$$f'_{1,0}(0)-\frac{\varphi'_1 f_{0,1}(1)-f_{0,1}(0)}{\varphi_1}+\frac{f_{0,2}(1)-\theta_1 f_{0,2}(0)}{\varphi_1}=\beta_B f_{1,0}(0)$$

を得る．さらに $f_{1,0}(0)=f_{0,0}(1)=f_{0,2}(1)$ と $f_{0,1}(1)=f_{1,0}(0)=f_{0,2}(0)$ を代入すれば次が成り立つ:

$$f'_{1,0}(0)=-\frac{2f_{0,0}(1)}{\varphi_1}+\frac{\varphi'_1+\theta_1+\beta_B\varphi_1}{\varphi_1}f_{1,0}(0).$$

これに (23) を代入すると次が成り立つ:

$$f'_{1,0}(0)=\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4}{2\varphi_1}f_{0,0}(1)+\frac{2\Delta+\beta_B\varphi_1}{2}f'_{0,0}(1). \tag{24}$$

$\Theta_{0,0}(x,\lambda)=\theta(x,\lambda)$ より，$f=\Theta$ を (23) と (24) に代入すれば (18) と (19) を得る．同様にして，$\Psi_{0,0}(x,\lambda)=\varphi(x,\lambda)$ に注意すれば，(20) と (21) が $f=\Psi$ を (23) と (24) に代入して成り立つ． □

補題 3.8. $\det(\mathcal{M}(\lambda)-I)=-2(F(\lambda)-1)$, $\det(\mathcal{M}(\lambda)+I)=2(F(\lambda)+1)$ が成り立つ.

証明 直接計算により,

$$
\begin{aligned}
&\det(\mathcal{M}(\lambda)-I)\\
=\;& \frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4}{4}\varphi_1\theta_1' + \frac{2\Delta+\beta_B\varphi_1}{4}\varphi_1\varphi_1'\theta_1' - \frac{\varphi_1\theta_1'}{2}\\
&+\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)\{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4\}}{4}\theta_1\\
&+\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)}{4}\theta_1\varphi_1' - \frac{2\Delta+\beta_A\varphi_1}{2}\theta_1\\
&-\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4}{2\varphi_1} - \frac{2\Delta+\beta_B\varphi_1}{2}\varphi_1' + 1\\
&-\Bigg[\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4}{4}\theta_1\varphi_1' + \frac{2\Delta+\beta_B\varphi_1}{4}\varphi_1\varphi_1'\theta_1'\\
&+\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)\{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)-4\}}{4}\theta_1\\
&+\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)}{4}\theta_1'\varphi_1\Bigg]
\end{aligned}
$$

が成り立つ．$\theta_1\varphi_1' - \theta_1'\varphi_1 = 1$ を用いると，

$$
\begin{aligned}
& \det(\mathcal{M}(\lambda) - I) \\
= \; & -\frac{(2\Delta + \beta_A\varphi_1)(2\Delta + \beta_B\varphi_1) - 4}{4} + \frac{(2\Delta + \beta_A\varphi_1)(2\Delta + \beta_B\varphi_1)}{4} \\
& -\frac{\varphi_1\theta_1'}{2} - \frac{2\Delta + \beta_A\varphi_1}{2}\theta_1 - \frac{(2\Delta + \beta_A\varphi_1)(2\Delta + \beta_B\varphi_1) - 4}{2} \\
& -\frac{2\Delta + \beta_B\varphi_1}{2}\varphi_1' + 1 \\
= \; & -\frac{(2\Delta + \beta_A\varphi_1)(2\Delta + \beta_B\varphi_1)}{2} + 4 \\
& -\frac{\varphi_1\theta_1'}{2} - \frac{2\Delta + \beta_A\varphi_1}{2}\theta_1 - \frac{2\Delta + \beta_B\varphi_1}{2}\varphi_1'.
\end{aligned}
$$

次に $\theta_1+\varphi_1'=2\Delta$ を用いて,

$$
\begin{aligned}
&\det(\mathcal{M}(\lambda)-I)\\
=\ & -\frac{(2\Delta+\beta_A\varphi_1)(2\Delta+\beta_B\varphi_1)}{2}+4-\frac{\varphi_1\theta_1'}{2}-2\Delta^2-\frac{\beta_A}{2}\theta_1\varphi_1-\frac{\beta_B}{2}\varphi_1\varphi_1'\\
=\ & -4\Delta^2-\beta_B\varphi_1\cdot\frac{\theta_1+\varphi_1'}{2}-\beta_A\varphi_1\cdot\frac{\theta_1+\varphi_1'}{2}\\
&\quad -\frac{\beta_A\beta_B}{2}\varphi_1^2+4-\frac{\varphi_1\theta_1'}{2}-\frac{\beta_A}{2}\theta_1\varphi_1-\frac{\beta_B}{2}\varphi_1\varphi_1'\\
=\ & -4\Delta^2-\frac{\varphi_1\theta_1'}{2}+4-\frac{1}{2}(2\beta_A+\beta_B)\theta_1\varphi_1-\frac{1}{2}(\beta_A+2\beta_B)\varphi_1\varphi_1'-\frac{\beta_A\beta_B}{2}\varphi_1^2
\end{aligned}
$$

を得る．再度 $\theta_1\varphi_1'-\theta_1'\varphi_1=1$ を用いると，$\det(\mathcal{M}(\lambda)-I)=-2(F(\lambda)-1)$ を得る．$\det(\mathcal{M}(\lambda)+I)=2(F(\lambda)+1)$ についても同様. $\square$

$F(\lambda)-1$ の零点を重複度を込めて増大順に並べたものを

$$z_0^+(1) < z_1^-(1) \leq z_1^+(1) < z_2^-(1) \leq z_2^+(1) < \ldots,$$

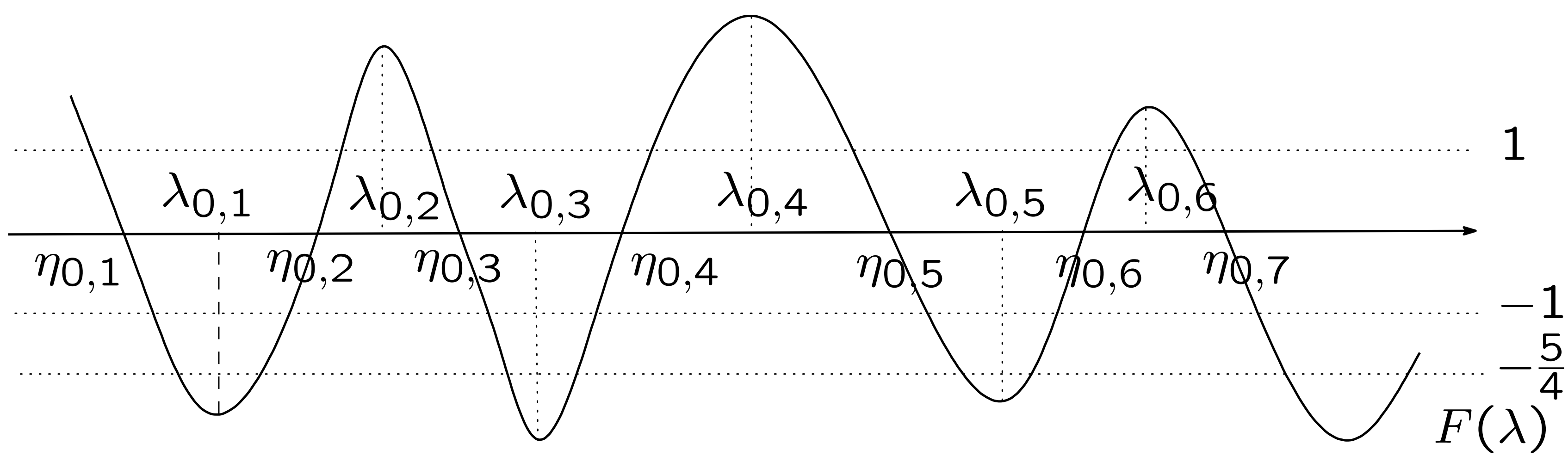
$F(\lambda)+1$ の零点を重複度を込めて増大順に並べたものを

$$z_1^-(-1) < z_1^+(-1) < z_2^-(-1) < z_2^+(-1) < \ldots$$

とおく．このとき，

$$z_0^+(1) < z_1^-(-1) < z_1^+(-1) < z_1^-(1) \leq z_1^+(1) < \\ z_2^-(-1) < z_2^+(-1) < z_2^-(1) \leq z_2^+(1) < \ldots$$

が成り立つ(定理 2 (i) から従う.).



補題 3.9　作用素 H の periodic spectrum を $\lambda_{0,0}^+, \lambda_{0,2}^-, \lambda_{0,2}^+, \lambda_{0,4}^-, \lambda_{0,4}^+, \ldots,$ anti-periodic spectrum を $\lambda_{0,1}^-, \lambda_{0,1}^+, \lambda_{0,3}^-, \lambda_{0,3}^+, \ldots$ とおく．このとき，$\lambda_{0,0}^+ = z_0^+(1)$, $\lambda_{0,2n}^\pm = z_n^\pm(1)$, $\lambda_{0,2n-1}^\pm = z_n^\pm(-1)$ ($\forall n \in \mathbb{N}$) が成り立つ.

証明. $\lambda \in \mathbb{R}$ とする.

$$\lambda \in \{\lambda_{0,2n}^{+}\}_{n=0}^{\infty} \cup \{\lambda_{0,2n}^{-}\}_{n=1}^{\infty} \Longleftrightarrow \lambda \in \{z_n^{+}(1)\}_{n=0}^{\infty} \cup \{z_n^{-}(1)\}_{n=1}^{\infty}$$

となることを示す.

初めに, $\lambda \in \{\lambda_{0,2n}^{+}\}_{n=0}^{\infty} \cup \{\lambda_{0,2n}^{-}\}_{n=1}^{\infty}$ を仮定する. このとき, ある $y(x,\lambda) = (y_{0,j}(x,\lambda))_{j\in\mathbb{J}} \neq 0$ が存在して,

$$-y'' + qy = \lambda y, \tag{25}$$

$$-y'_{0,0}(1) + y'_{0,1}(0) - y'_{0,2}(1) = \beta_A y_{0,1}(0), \tag{26}$$

$$y_{0,1}(0) = y_{0,0}(1) = y_{0,2}(1), \tag{27}$$

$$y'_{1,0}(0) - y'_{0,1}(1) + y'_{0,2}(0) = \beta_B y_{0,1}(1), \tag{28}$$

$$y_{0,1}(1) = y_{1,0}(0) = y_{0,2}(0), \tag{29}$$

および

$$\begin{pmatrix} y_{1,0}(0) \\ y'_{1,0}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_{0,0}(0) \\ y'_{0,0}(0) \end{pmatrix} \tag{30}$$

を満たす. 一方, モノドロミー行列の性質から, 次が成り立つ:

$$\begin{pmatrix} y_{1,0}(0,\lambda) \\ y'_{1,0}(0,\lambda) \end{pmatrix} = \mathcal{M}(\lambda) \begin{pmatrix} y_{0,0}(0,\lambda) \\ y'_{0,0}(0,\lambda) \end{pmatrix}. \tag{31}$$

(30), (31) より,

$$(\mathcal{M}(\lambda)-I)\begin{pmatrix} y_{0,0}(0,\lambda) \\ y'_{0,0}(0,\lambda) \end{pmatrix}=0.$$

$y(x,\lambda)=y_{0,0}(0,\lambda)\Theta(x,\lambda)+y'_{0,0}(0,\lambda)\Psi(x,\lambda)$ は非自明解なので, $\det(\mathcal{M}(\lambda)-I)=0$ である．補題 3.8 より, $F(\lambda)-1=0$ である．よって, $\lambda\in\{z_n^+(1)\}_{n=0}^{\infty}\cup\{z_n^-(1)\}_{n=1}^{\infty}$ を得る.

逆に， $\lambda\in\{z_n^+(1)\}_{n=0}^{\infty}\cup\{z_n^-(1)\}_{n=1}^{\infty}$ であると仮定する．$\det(\mathcal{M}(\lambda)-I)=0$ であるから,

$$(\mathcal{M}(\lambda)-I)\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=0 \tag{32}$$

は非自明解 (c_1,c_2) を持つ．(25)–(29) および

$$\begin{pmatrix} y_{0,0}(0,\lambda) \\ y'_{0,0}(0,\lambda) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \tag{33}$$

の解 $y(x,\lambda)$ を考える．すなわち, $y(x,\lambda)=c_1\Theta(x,\lambda)+c_2\Psi(x,\lambda)$ とする．(31), (32), (33) より, (30) を得る． よって, λ は the periodic spectrum に属する. つまり, $\lambda\in\{\lambda_{0,2n}^+\}_{n=0}^{\infty}\cup\{\lambda_{0,2n}^-\}_{n=1}^{\infty}$ である.

同様にして, 次の事もわかる.

$$\lambda\in\{\lambda_{0,2n-1}^{\pm}\}_{n=1}^{\infty}\Longleftrightarrow\lambda\in\{z_n^{\pm}(-1)\}_{n=1}^{\infty}.$$

□

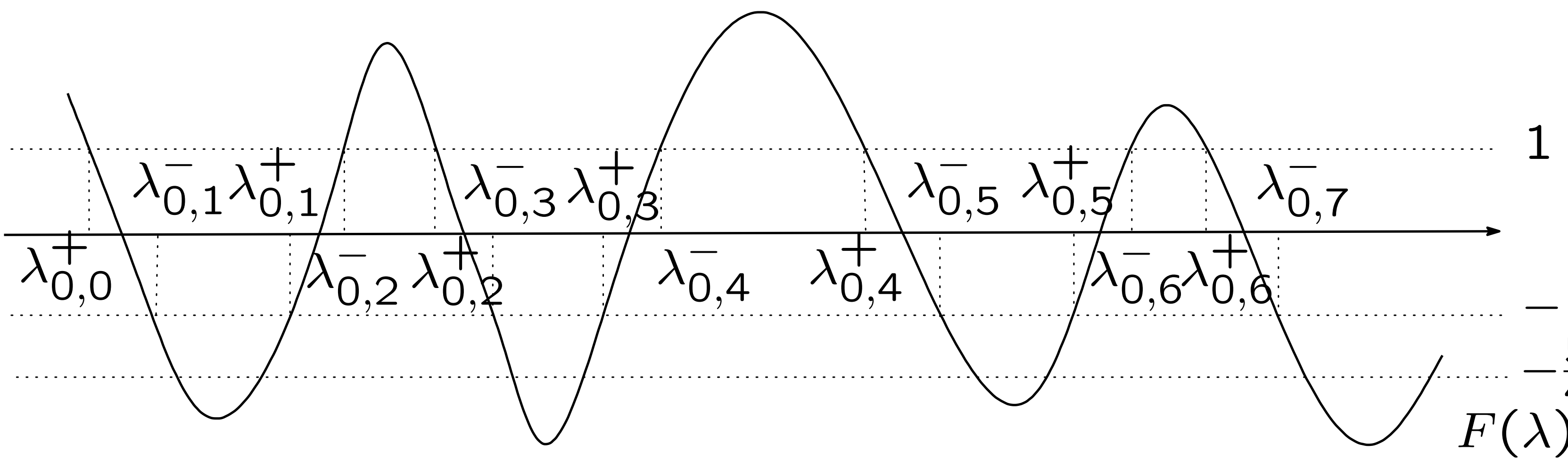
補題 3.9 より,

$$\sigma_{ac}(H) = \bigcup_{j=1}^{\infty} [\lambda^+_{0,j-1}, \lambda^-_{0,j}].$$

が成り立つ．各バンド端は,

$$\lambda^+_{0,0} < \lambda^-_{0,1} < \lambda^+_{0,1} < \lambda^-_{0,2} \le \lambda^+_{0,2} < \lambda^-_{0,3} < \lambda^+_{0,3} < \lambda^-_{0,4} \le \lambda^+_{0,4} < \cdots$$

を満たす.



Thank you for your attention.

本研究は, 日本学術振興会科学研究費補助金（若手研究(B)）「周期的シュレディンガー作用素のスペクトラルギャップの解析」の援助を受けて行っています.