

六角格子上の離散シュレディンガー方程式に対する分散型評価

只野 之英 (兵庫県立大学)*

$\Lambda = \Lambda_\bullet := \mathbb{Z}\mathbf{v}_1 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{v}_2$ を $\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} \cos \frac{\pi}{6} \\ \sin \frac{\pi}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$, $\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} \cos(-\frac{\pi}{6}) \\ \sin(-\frac{\pi}{6}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$ で生成された三角格子 (黒点), Λ_\bullet を $\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{bmatrix}$ だけ平行移動した三角格子 (白点) を $\Lambda_\circ := \Lambda_\bullet + \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{bmatrix}$ とすると, 六角格子は $\mathbf{H} = \Lambda_\bullet \cup \Lambda_\circ$ で定義される.

グラフェン内の電子状態の標準的モデルとして用いられる六角格子 \mathbf{H} 上の離散シュレディンガー方程式を考える.

$$\begin{cases} i\partial_t u = -\Delta_{\mathbf{H}} u, \\ u|_{t=0} = u_0 \end{cases} \quad (1)$$

ただし, $u : \mathbb{R} \times \mathbf{H} \rightarrow \mathbb{C}$ は波動関数, $\Delta_{\mathbf{H}}$ は \mathbf{H} における標準的な最近接ハミルトニアン (の定数倍)

$$\Delta_{\mathbf{H}} u(\mathbf{x}) = \begin{cases} 4\{u(\mathbf{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_1) + u(\mathbf{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_1 - \mathbf{v}_1) + u(\mathbf{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_1 - \mathbf{v}_2) - 3u(\mathbf{x})\}, & \mathbf{x} \in \Lambda_\bullet \\ 4\{u(\mathbf{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_1) + u(\mathbf{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_1 + \mathbf{v}_1) + u(\mathbf{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_1 + \mathbf{v}_2) - 3u(\mathbf{x})\}, & \mathbf{x} \in \Lambda_\circ \end{cases}$$

($u \in \ell^2(\mathbf{H})$) である.

本講演では, (1) の解 $u = e^{it\Delta_{\mathbf{H}}} u_0$ に対する $\ell^1 \rightarrow \ell^\infty$ 評価 (分散型評価) を, 運動量空間に関して局所的に得られたことを報告する [1]. その準備として, $u \in \ell^2(\mathbf{H})$ と $\mathbf{u} \in \ell^2(\Lambda; \mathbb{C}^2)$ の間の自然な同一視

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} u_\bullet(\mathbf{x}) \\ u_\circ(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u(\mathbf{x}) \\ u(\mathbf{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_1) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \in \Lambda. \quad (2)$$

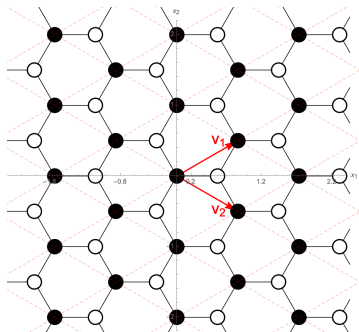


図1 六角格子 \mathbf{H}

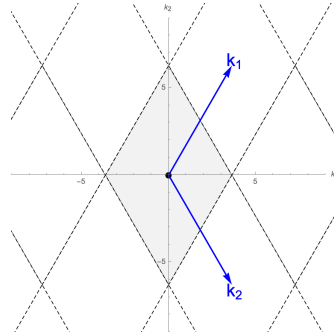


図2 運動量空間 \mathbb{R}^2/Λ

* 〒671-2280 兵庫県姫路市書写 2167 兵庫県立大学姫路工学キャンパス

e-mail: tadano@u-hyogo.ac.jp

本研究は科研費 (課題番号:23K12991) の助成を受けたものである。

により，元の六角格子 \mathbf{H} 上の方程式 (1) を三角格子 Λ 上の方程式

$$\begin{cases} i\partial_t \mathbf{u} = -\Delta \mathbf{u}, \\ \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0 \end{cases} \quad (3)$$

に変換する．ただし， $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) : \mathbb{R} \times \Lambda \rightarrow \mathbb{C}^2$ で，

$$(\Delta \mathbf{u})(\mathbf{x}) = 4 \begin{bmatrix} u_o(\mathbf{x}) + u_o(\mathbf{x} - \mathbf{v}_1) + u_o(\mathbf{x} - \mathbf{v}_2) - 3u_\bullet(\mathbf{x}) \\ u_\bullet(\mathbf{x}) + u_\bullet(\mathbf{x} + \mathbf{v}_1) + u_\bullet(\mathbf{x} + \mathbf{v}_2) - 3u_o(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_\bullet \\ u_o \end{bmatrix} : \Lambda \rightarrow \mathbb{C}^2.$$

$\mathbf{u} \in \ell^2(\Lambda; \mathbb{C}^2)$ に対して，フーリエ変換を

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = \frac{\sqrt{3}}{2} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \mathbf{u}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

で定めると逆格子ベクトル $\mathbf{k}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} \cos \frac{\pi}{3} \\ \sin \frac{\pi}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \\ 2\pi \end{bmatrix}$, $\mathbf{k}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} \cos(-\frac{\pi}{3}) \\ \sin(-\frac{\pi}{3}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \\ -2\pi \end{bmatrix}$ による平行移動に関して不変 ($\Lambda^* = \mathbb{Z}\mathbf{k}_1 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{k}_2$ -周期的) だから，フーリエ変換は $\ell^2(\Lambda; \mathbb{C}^2)$ から $L^2(\mathbb{R}^2/\Lambda^*; \mathbb{C}^2)$ へのユニタリ作用素である．このフーリエ変換により，(2) の解は

$$\boxed{e^{it\Delta} \mathbf{u}_0 = e^{-12it} \mathbf{O}(i\nabla_{\mathbf{x}}) \begin{bmatrix} e^{-4it\varphi(i\nabla_{\mathbf{x}})} & 0 \\ 0 & e^{4it\varphi(i\nabla_{\mathbf{x}})} \end{bmatrix} \mathbf{O}(i\nabla_{\mathbf{x}})^* \mathbf{u}_0,} \quad (4)$$

と表される．ただし， $z(\mathbf{k}) = 1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2}$ とおくと

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{k}) &= |z(\mathbf{k})| = \sqrt{3 + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2))}, \\ \mathbf{O}(\mathbf{k}) &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\overline{z(\mathbf{k})}}{\sqrt{2}|z(\mathbf{k})|} \\ -\frac{z(\mathbf{k})}{\sqrt{2}|z(\mathbf{k})|} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

解の時間減衰を求めるには位相関数 $\pm\varphi(\mathbf{k})$ に関する振動積分の計算が必要であるが， $\varphi(\mathbf{k})$ がディラック点とよばれる 2 点 $[0 \pm \frac{4\pi}{3}]^T + \Lambda^*$ で特異性を持つことに注意する．

定理 1 (退化点の特徴づけ) $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2/\Lambda^*$ がディラック点でないとき

$$(\nabla^2 \varphi)(\mathbf{k}) = \frac{1}{\varphi(\mathbf{k})^3} \mathbf{V} \begin{bmatrix} -\alpha_2(\mathbf{k})(\alpha_1(\mathbf{k}) + \alpha_{12}(\mathbf{k})) & \alpha_1(\mathbf{k})\alpha_2(\mathbf{k}) \\ \alpha_1(\mathbf{k})\alpha_2(\mathbf{k}) & -\alpha_1(\mathbf{k})(\alpha_2(\mathbf{k}) + \alpha_{12}(\mathbf{k})) \end{bmatrix} \mathbf{V}^T,$$

ただし $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2]$, $\alpha_1(\mathbf{k}) = 1 + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2))$, $\alpha_2(\mathbf{k}) = 1 + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2))$, $\alpha_{12}(\mathbf{k}) = 1 + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2)$. また，

$$\det(\nabla^2 \varphi)(\mathbf{k}) = \frac{3\alpha_1(\mathbf{k})\alpha_2(\mathbf{k})\alpha_{12}(\mathbf{k})}{4\varphi(\mathbf{k})^4}. \quad (5)$$

特に， $\det(\nabla^2 \varphi)(\mathbf{k}) = 0 \iff (\alpha_1(\mathbf{k}) = 0, \alpha_2(\mathbf{k}) = 0 \text{ or } \alpha_{12}(\mathbf{k}) = 0)$.

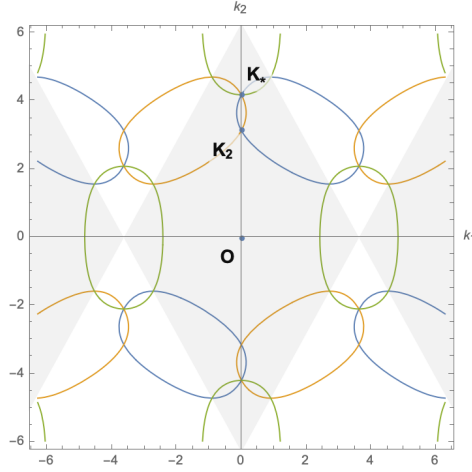


図3 ヘッシアンが退化する運動量

定理1 および図3 を基に, \mathbb{R}^2/Λ^* を曲線の交点の数に応じて4つの部分集合に分割する.

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_0 &= \left\{ \mathbf{k} \in (\mathbb{R}^2/\Lambda^*) \setminus \mathcal{K}_3 : \det(\nabla^2 \varphi)(\mathbf{k}) \neq 0 \right\}, \\
\mathcal{K}_1 &= \left\{ \mathbf{k} \in \mathbb{R}^2/\Lambda^* : \det(\nabla^2 \varphi)(\mathbf{k}) = 0 \right\} \setminus (\mathcal{K}_2 \cup \mathcal{K}_3), \\
\mathcal{K}_2 &= \left\{ \left(\frac{\sqrt{3}\pi}{2}, \pm \frac{\pi}{2} \right), \left(\frac{\sqrt{3}\pi}{6}, \pm \frac{3\pi}{2} \right), (0, \pm \pi) \right\} + \Lambda^*, \\
\mathcal{K}_3 &= \left(0, \pm \frac{4\pi}{3} \right) + \Lambda^* \quad (\text{Dirac points}).
\end{aligned} \tag{6}$$

このとき, 各 \mathcal{K}_j ごとに分散型評価が得られる.

定理2 (運動量局所的な分散型評価) 任意の $\mathbf{K} \in \mathcal{K}_j$ ($j = 0, 1, 2, 3$) に対して, ある定数 $C_j = C_j(\mathbf{K}) > 0$ および smooth cut-off $\chi_{\approx \mathbf{K}}$ が存在して, $\chi_{\approx \mathbf{K}} = 1$ near \mathbf{K} かつ

$$\| \mathbf{O}(i\nabla_{\mathbf{x}})^* e^{it\Delta} \mathbf{O}(i\nabla_{\mathbf{x}}) P_{\approx \mathbf{K}} \mathbf{u}_0 \|_{\ell_x^\infty(\Lambda; \mathbb{C}^2)} \leq \frac{C_j}{(1+|t|)^{a_j}} \| \mathbf{u}_0 \|_{\ell_x^1(\Lambda; \mathbb{C}^2)}, \tag{7}$$

が成り立つ. ここで $P_{\approx \mathbf{K}} = \chi_{\approx \mathbf{K}}(i\nabla_{\mathbf{x}})$, $a_j = \begin{cases} 1 & \text{if } j = 0, \\ \frac{5}{6} & \text{if } j = 1, \\ \frac{2}{3} & \text{if } j = 2, \\ \frac{5}{6} & \text{if } j = 3. \end{cases}$

参考文献

- [1] Y. Hong, Y. Tadano, C. Yang, *On the dispersive estimates for the discrete Schrödinger equation on a honeycomb lattice*, Preprint (2025), arXiv:2503.08996.