

具有循环群作用的周期量子图Fermi面可约性

韩雨婷, 赵佳*

河北工业大学理学院, 天津

收稿日期: 2025年3月6日; 录用日期: 2025年4月16日; 发布日期: 2025年4月29日

摘要

本文通过将给定的单层周期量子图与具有循环群作用的正三边形做笛卡尔积构造了一类“三层”量子图, 其中正三边形被称为连接图, 得到“三层”量子图的函数空间分解和算子分解, 证明了其Fermi面可约, 并将结论推广到连接图为具有循环群作用的正 n 边形情况。

关键词

量子图, 周期算子, 函数空间分解, 可约Fermi面

Reducibility of the Fermi Surface for Periodic Quantum Graphs with Cyclic Group Actions

Yuting Han, Jia Zhao*

School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin

Received: Mar. 6th, 2025; accepted: Apr. 16th, 2025; published: Apr. 29th, 2025

* 通讯作者。

Abstract

This paper constructs a class of “three-layer” quantum graphs by taking the Cartesian product of a given single-layer periodic quantum graph with an equilateral triangle (referred to as the connecting graph) endowed with a cyclic group action. The function space decomposition and operator decomposition of the resulting “three-layer” quantum graphs are derived. It is proven that their Fermi surfaces are reducible. Furthermore, the conclusions are generalized to the case where the connecting graph is a regular n -gon with a cyclic group action.

Keywords

Quantum Graph, Periodic Operator, Function Space Decomposition, Reducible Fermi Surface

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

定义在度量图上的微分算子和度量图本身所组成的整体, 在数学物理研究领域被称为量子图 [1]. 周期度量图与周期微分算子组成的整体称为周期量子图, 在固体物理学、材料科学和纳米科技中的应用十分广泛. 本文关注的图上微分算子为 Schrödinger 算子 $A = -\Delta + q(x)$, Schrödinger 算子 A 为图上的周期微分算子当且仅当势函数 $q(x)$ 为周期函数, 此时其谱具有带隙结构 [2-4], 也就是谱可以表示为封闭区间即谱带(能带)的并, 两个相邻谱带之间的间隔称为谱间隙(能隙), 能隙是能量范围内没有能级的区域.

在固体物理中, Fermi面是动量空间中绝对零度下电子占据态与非占据态的分界面, 其能量对应于Fermi能级(E_F), 即在绝对零度下Fermi能级处的等能面 [5,6], 是理解金属和半金属电子态的核心物理概念. 它直接反映了材料的能带结构及电子填充特性, 并决定了低能激发下的电子行为, 如电导、热输运和磁响应等. Fermi 面的形状(如球面、多连通结构或拓扑保护的 Dirac 点)由能带色散关系 $E_n(\mathbf{k})$ 和电子关联效应共同决定, 可通过量子振荡实验观测. 在电子输运中, Fermi 面的几何特征(如载流子浓度、有效质量和态密度梯度)直接影响电导率、霍尔效应和热电性能; 而在强关联体

系中(如铜基超导体),电子相互作用可能导致Fermi面重建或展能隙opening. 研究Fermi 面不仅为揭示材料的量子行为提供了关键依据,也为调控物性(如超导、拓扑态)奠定了理论基础. 在谱理论中,一般考虑的Fermi面是任意能级处的等能面,包含固体物理中 Fermi 能级处的等能面. 此外, Fermi 面的可约性与嵌入特征值的存在性密切相关.周期性介质常受到额外的杂质势函数 $v(x)$ 的扰动,这种扰动只能产生有限重数的离散特征值(点谱),称为杂质特征值 [7]. 由于周期算子的谱具有带隙结构,杂质特征值出现的位置只有两种选择:出现在谱间隙中,或者嵌入到谱带中,当杂质特征值出现在谱带中,我们称之为嵌入特征值. 在凝聚态物理中,嵌入特征值是一种特殊状态,揭示了束缚态和散射态之间的微妙平衡 [8]. 对量子图Fermi面可约性的研究可用来进一步研究嵌入特征值的存在性和对应特征函数的相关性质,有助于理解量子系统的微观行为并应用于核物理、光学和电子器件设计中.

迄今为止,所有具有可约 Fermi 面的量子图的构造都涉及多个耦合层. Shipman在2014年 [9]研究了一类具有对称结构的量子图的 Fermi 面可约性问题. 他通过将两个相同的周期量子图副本的对应顶点连接,构造了一种对称的双层量子图,其中连接边上的周期 Schrödinger 算子的势函数关于连接边的中点对称. 研究证明,对于所有能级 λ ,该双层量子图的 Fermi 面均具有可约性,并且扰动产生的嵌入特征值所对应的特征函数的支撑集是无界的. 在此基础上,Shipman于2019年 [10]进一步推广了上述结果,将连接边上周期 Schrödinger 算子的势函数从对称条件放宽到非对称条件,证明只要连接边上的势函数属于同一不对称类,则对于任意能级 λ , Fermi面仍然具有可约性. 2021年,Shipman与 Fisher、Wei Li [11]进一步扩展了这一研究方向,构造了两类多层量子图,并证明其色散函数可以表示为单层色散函数的多项式. 这一性质导致多层量子图的Fermi面在任何能级下均可分解为若干分量,每个分量为图算子的谱贡献一组独立的谱带.

本文在文献 [10]和文献 [12]的基础上,将循环性与周期性结合起来,通过给定周期量子图与具有循环群作用的正三角形笛卡尔积构造出“三层”量子图,对“三层”量子图进行函数空间分解和算子分解,由此证明了“三层”量子图的Fermi面可约,并将结论推广到与具有循环群作用的正 n 边形笛卡尔积构造出的“ n 层”量子图,为进一步研究这类笛卡尔积图的嵌入特征值的存在性和相关特征函数的性质打下基础.

2. 预备知识

本章简要介绍本文所涉及到的基本概念.

图 Γ 是一个有序二元组 $(\mathcal{V}, \mathcal{E})$,其中 $\mathcal{V}$ 是顶点集, $\mathcal{E}$ 是边集. 通过给底层图的每条边 $e = \{v, w\} \in \mathcal{E}$ 定义一个长度 L_e , 将 e 与区间 $[0, L_e]$ 联系起来, Γ 成为了度量图. 有向边 $\vec{e} = (v, w)$ 与坐标 $x_{\vec{e}} \in [0, L_e]$ 之间, $x_{\vec{e}} = 0$ 对应顶点 v , $x_{\vec{e}} = L_e$ 对应顶点 w . 对边赋予长度后,便可以在 Γ 的任意边 e 上定义标准函数空间. 定义 Γ 上的函数空间 $H^2(\Gamma)$ 为

$$\begin{aligned} H^2(\Gamma) = \{f = \{f_e\}_{e \in \mathcal{E}} : & \text{函数 } f \text{ 是连续的;} \\ & \text{对于所有的 } e \in \mathcal{E}, f_e \in H^2(e); \\ & f, f', f'' \in L^2(\Gamma)\}, \end{aligned}$$

其中 f' 和 $f'' = D^2 f$ 在每条边上对坐标求导如上所述. 在度量图上定义 Schrödinger 算子 A , Γ 此时成为量子图. 算子 A 在每条边 e 上的作用形式为 $-D^2 + q_e(x)$, 其中 $D^2 = d^2/dx_e^2$, x 是 e 上任意一点. 令 $q = \{q_e\}_{e \in \mathcal{E}}$, 每个 $e \in \mathcal{E}(\Gamma)$ 的 $q_e \in L^2(e)$ 都是实值势函数. 算子 A 作用于所有定义在 Γ 上的函数 $f = \{f_e\}_{e \in \mathcal{E}}$, 并且在每个顶点处满足 Robin 顶点条件

$$\sum_{e \in \mathcal{E}(v)} f'_e(v) = \alpha_v f(v), \quad (1)$$

其中, f_e 表示 Γ 上的 f 限制在 e 上, 如果 $e = (v, w)$, 那么 $f'_e(v)$ 是 f_e 在顶点 v 处从 v 指向 w 的导数, 即 $f'_e(v)$ 是在 $x_e = 0$ 处 f_e 关于坐标 x_e 的右导数. 于是下面给出算子 A 的定义域及其作用形式,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A) &= \{f \in H^2(\Gamma) : \text{对于所有的 } v \in \mathcal{V}(\Gamma), f \text{ 满足 Robin 顶点条件}\}, \\ (Af)(x) &= -f''(x) + q(x)f(x). \end{aligned}$$

此时 A 在 $L^2(\Gamma)$ 上是自伴的.

假设这个度量结构在 $\mathbb{Z}^n$ 作用下保持不变, 并设 $g \in \mathbb{Z}^n$ 对 Γ 中的点 x 的作用记为 $x \mapsto gx$ (x 可以在边的内部, 也可以在端点处), 此时度量图成为周期度量图. 算子 A 作用在周期图上意味着对于所有的 $v \in \mathcal{V}(\Gamma)$, $x \in e \in \mathcal{E}(\Gamma)$, 和所有的 $g \in \mathbb{Z}^n$, 有 $\alpha_{gv} = \alpha_v$, $q_{ge}(gx) = q_e(x)$.

Floquet 变换是关于图 Γ 上的 $\mathbb{Z}^n$ 作用的傅立叶变换. 给定一个函数 f , 其定义域 Γ 在度量图中包含边上的点(或者在组合图中只包含图的顶点集), 定义 f 的 Floquet 变换为

$$\hat{f}(z, x) := \sum_{g \in \mathbb{Z}^n} f(gx) z^{-g} \quad \text{对于 } z = (z_1, \dots, z_n) \in (\mathbb{C}^*)^n,$$

其中对于 $h \in \mathbb{Z}^n$ 有 $z^h = z^{h_1} \dots z^{h_n}$. 这是一个关于 z 的 Laurent 级数形式, 其系数是 f 的位移. 对于 f 经过 Floquet 变换得到的函数 $\hat{f}$, 最重要的性质是它关于 x 的准周期性:

$$\hat{f}(z, gx) = \hat{f}(z, x) z^g,$$

这使得 $\hat{f}(z, \cdot)$ 是具有特征值 z^g 的 $\mathbb{Z}^n$ 作用的特征函数, $f \in \mathbb{Z}^n$. 算子 A 的 Floquet modes (A 和 $\mathbb{Z}^n$ 的同时特征函数)所在函数空间为

$$\begin{aligned} H_{loc}^{2R}(\Gamma) &= \{f = \{f_e\}_{e \in \mathcal{E}} : f \text{ 是连续的; 对于所有的 } e \in \mathcal{E}, \\ &\quad f_e \in H^2(e); \text{ 对于所有的 } v \in \mathcal{V}, \\ &\quad f \text{ 满足 Robin 顶点条件}\}. \end{aligned}$$

定义每条边上的 Dirichlet-to-Neumann (DtN) 映射: 对于给定方向为 v 到 w 的边 e , 其上有参数 $x \in [0, 1]$, 令 $c_q(x)$ 与 $s_q(x)$ 是 $(-\frac{d^2}{dx^2} + q(x) - \lambda)u = 0$ 的基解, 且满足初值条件:

$$\begin{aligned} c_q(0, \lambda) &= 1 \quad s_q(0, \lambda) = 0, \\ c'_q(0, \lambda) &= 0, \quad s'_q(0, \lambda) = 1, \end{aligned}$$

定义

$$\begin{aligned} c_{v,w}(\lambda) &= c(\lambda) := c_q(1, \lambda), \quad s_{v,w}(\lambda) = s(\lambda) := s_q(1, \lambda), \\ c'_{v,w}(\lambda) &= c'(\lambda) := c'_q(1, \lambda), \quad s'_{v,w}(\lambda) = s'(\lambda) := s'_q(1, \lambda), \end{aligned}$$

对于满足 $-u'' + q(x)u = \lambda u$ 的 $u(x)$, 有

$$\begin{bmatrix} c(\lambda) & s(\lambda) \\ -c'(\lambda) & -s'(\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(0) \\ u'(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u(1) \\ -u'(1) \end{bmatrix}.$$

定义 DtN 矩阵 $G_q(\lambda)$ 为将 Dirichlet 数据 $(u(v), u(w))$ 变为 Neumann 数据 $(u'(v), u'(w))$ 的矩阵, 即

$$\underbrace{\frac{1}{s(\lambda)} \begin{bmatrix} -c(\lambda) & 1 \\ 1 & -s'(\lambda) \end{bmatrix}}_{G_q(\lambda)} \begin{bmatrix} u(v) \\ u(w) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u'(v) \\ u'(w) \end{bmatrix}. \quad (2)$$

定义2.1 对于谱变量 $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \sigma_D(A)$ 的任意固定值, λ 处的 Floquet 面定义为

$$\Phi_\lambda := \{z \in (\mathbb{C}^*)^n : \hat{\mathfrak{A}}(\lambda, z)\bar{u} = 0 \text{ 存在非平凡解}\},$$

将其考虑为准动量 k 的函数时, 它被称为 Fermi 面. $k = (k_1, \dots, k_n) \in \mathbb{C}^n$, 满足 $z = (z_1, \dots, z_n) = e^{ik} = (e^{ik_1}, \dots, e^{ik_n}) \in (\mathbb{C} \setminus \{0\})^n$, 且 $g \cdot k = 2\pi\mathbb{Z}$, $g \in \mathbb{Z}^n$.

3. 构造量子图

单层周期量子图 $(\mathring{\Gamma}, \mathring{A})$ 如前所述, 有顶点集 $\mathring{\mathcal{V}}$, 边集 $\mathring{\mathcal{E}}$ 以及势函数 $\{q_e\}_{e \in \mathring{\mathcal{E}}}$. 算子 $\mathring{A}$ 作用于定义在 $\mathring{\Gamma}$ 上的函数 $f = \{f_e\}_{e \in \mathring{\mathcal{E}}}$, 在每个顶点处满足 Robin 顶点条件:

$$\sum_{e \in \mathring{\mathcal{E}}(v)} f'_e(v) = \alpha_v f(v).$$

由 $(\mathring{\Gamma}, \mathring{A})$ 的三个不相交副本通过正三角形连接起来构造出的新的周期量子图 (Γ, A) , 称为“三层”周期量子图, 同时也可以认为“三层”图是通过单层周期图与正三角形作笛卡尔积得到的. 其边集与顶点集分别为

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &:= \mathring{\mathcal{V}} \cup \mathring{\mathcal{V}} \cup \mathring{\mathcal{V}} = \mathring{\mathcal{V}} \times \{1, 2, 3\}, \\ \mathcal{E} &:= \mathring{\mathcal{E}} \cup \mathring{\mathcal{E}} \cup \mathring{\mathcal{E}} \cup \mathcal{E}_c, \end{aligned}$$

其中 $\mathcal{E}_c$ 是所有顶点处连接图正三角形上的边的集合, 记顶点 $v \in \mathring{\mathcal{V}}$ 处的连接图为正三角形 Υ_v , Υ_v 是由 v 对应的三个顶点 $(v, 1), (v, 2), (v, 3)$ 相连得到的. 将顶点 v 处的连接图 Υ_v 上的三条边分别记为 $\{(v, 1), (v, 2)\}$, $\{(v, 1), (v, 3)\}$ 和 $\{(v, 2), (v, 3)\}$. 图 Γ 继承了 $\mathbb{Z}^n$ 的群作用.

对于任意的 $v_1 \in \mathring{\mathcal{V}}$, 三个顶点 $(v_1, 1), (v_1, 2), (v_1, 3)$ 相连得到的正三角形记作连接图 Υ_{v_1} , 在 Υ_{v_1} 的三条边中点处分别加上一个虚拟顶点, 于是原三条边此时成为六条边. 在连接图上定

义 Schrödinger 算子, 将六条边上的势函数分别记为 $q_{11}, q_{12}, q_{13}, q_{14}, q_{15}, q_{16}$, 虚拟顶点分别记为 $v_{a_1}, v_{b_1}, v_{c_1}$. 同理, 对于与 v_1 不同的顶点 $v_2 \in \mathring{\mathcal{V}}$, 三个顶点 $(v_2, 1), (v_2, 2), (v_2, 3)$ 相连得到的连接图 Υ_{v_2} 上六条边的势函数分别为 $q_{21}, q_{22}, q_{23}, q_{24}, q_{25}, q_{26}$, 虚拟顶点分别记为 $v_{a_2}, v_{b_2}, v_{c_2}$. 如图 1.

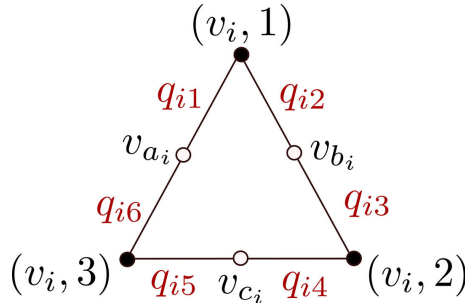


Figure 1. Virtual vertices and potential functions defined on the connection graph Υ

图 1. 在连接图 Υ 上定义虚拟顶点与势函数

定义 3.1 (“三层”量子图) 给定一个具有群 $\mathbb{Z}^n$ 作用的量子图 $(\mathring{\Gamma}, \mathring{A})$, 势函数 $\{q_{v_i} = \{q_{i1}, q_{i2}, q_{i3}, q_{i4}, q_{i5}, q_{i6}\}, v_i \in \mathring{\mathcal{V}}\}$ 定义在连接图 Υ_{v_i} 的边上. 令势函数 q_{v_i} 在 $\mathbb{Z}^n$ 作用下保持不变. 通过边上具有单位长度和势函数 q_{v_i} 的正三角形连接 $(\mathring{\Gamma}, \mathring{A})$ 的三个不相交副本得到的周期量子图 (Γ, A) 称为与 $(\mathring{\Gamma}, \mathring{A})$ 和势 q_{v_i} 相关的“三层”周期量子图.

4. Fermi 面可约定理

通常通过将量子图简化为其对应组合图上的非线性 λ 相关的特征值问题 $\mathfrak{A}(\lambda)\bar{u} = 0$ 来研究关于 $u \in H_{loc}^{2R}(\Gamma)$ 的特征值问题 $(A - \lambda)u = 0$, 同时要求 λ 不是任意边上的 Dirichlet 特征值, 即对于所有的 $e \in \mathcal{E}(\Gamma)$, $s_e(\lambda) := s_{q_e}(\lambda) \neq 0$. 量子图 (Γ, A) 的 Dirichlet 谱是由所有边上的 Dirichlet 特征值组成的集合. 对于周期量子图, 其基本域由有限个顶点和边组成, 其 Dirichlet 特征值组成的集合是离散的,

$$\sigma_D(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} : \text{存在 } e \in \mathcal{V}(\Gamma) \text{ 使得 } s_e(\lambda) = 0\}.$$

对于 $\lambda \notin \sigma_D(A)$, 方程 $(A - \lambda)u = 0$ 与 $\mathfrak{A}(\lambda)\bar{u} = 0$ 等价, 其中 $\bar{u}$ 是指将 u 限制在 $\mathcal{V}(\Gamma)$ 上, 且 $\mathfrak{A}(\lambda)$ 是作用于定义在 $\mathcal{V}(\Gamma)$ 上的函数的周期算子(即具有 $\mathbb{Z}^n$ 不变性). 这种简化是通过调用 DtN 映射来完成的, 对于每个边 e , 仅根据函数 u 在 v 及其所有相邻顶点处的值来重写 Robin 条件. 可以得到,

$$[\mathfrak{A}(\lambda)\bar{u}](v) := \sum_{e=(v,w) \in \mathcal{E}(\vec{v})} \frac{1}{s_e(\lambda)} \bar{u}(w) - \left(\alpha_v + \sum_{e \in \mathcal{E}(\vec{v})} \frac{c_e(\lambda)}{s_e(\lambda)} \right) \bar{u}(v) = 0.$$

由于算子 $\mathfrak{A}(\lambda)$ 的定义, 可以认为 $\bar{u} : \mathcal{V}(\Gamma) \rightarrow \mathbb{C}$ 是任意的. 综上, 有

$$(A - \lambda)u = 0 \Leftrightarrow \mathfrak{A}(\lambda)\bar{u} = 0,$$

$\mathfrak{A}(\lambda)$ 称为量子图算子 A 的 λ 相关的简化组合图算子.

当势函数在连接图正三角形上是对称的, 即对于 $v_i \in \mathring{\mathcal{V}}$, 势函数 q_{v_i} 满足 $q_{i1} = q_{i3} = q_{i5}$, $q_{i2} = q_{i4} = q_{i6}$. 此时, 连接图作为正多边形, 由于每条边加了一个虚拟顶点, 总边数成为偶数, 因此属于中心对称图, 具有循环群 G_n 作用.

下面进行函数空间和算子的分解. 对于具有循环群作用的中心对称图, 根据循环群的不可约表示, 可将图上的平方可积函数空间进行分解 [12].

n 阶循环群有 n 个一次复表示, 记 ω 为 n 次单位根, 其不可约表示如下表:

	e	a	a^2	a^3	$\dots$	a^{n-1}
ρ_1	1	1	1	1	$\dots$	1
ρ_2	1	ω	ω^2	ω^3	$\dots$	ω^{n-1}
ρ_3	1	ω^2	ω^4	ω^6	$\dots$	$\omega^{2(n-1)}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$
ρ_n	1	ω^{n-1}	$\omega^{2(n-1)}$	$\omega^{3(n-1)}$	$\dots$	ω

当 $n = 3$ 时, 正三角形具有群 G_3 作用, 下面对正三角形进行函数空间分解. G_3 的不可约表示如下:

	e	a	a^2
ρ_1	1	1	1
ρ_2	1	ω	ω^2
ρ_3	1	ω^2	ω

对于任意 $v \in \mathring{\mathcal{V}}$ 对应的连接图 Υ , 见图 2, 图上的函数 u_i 对应势函数 q_i , $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$, 且满足 $q_1 = q_3 = q_5$, $q_2 = q_4 = q_6$.

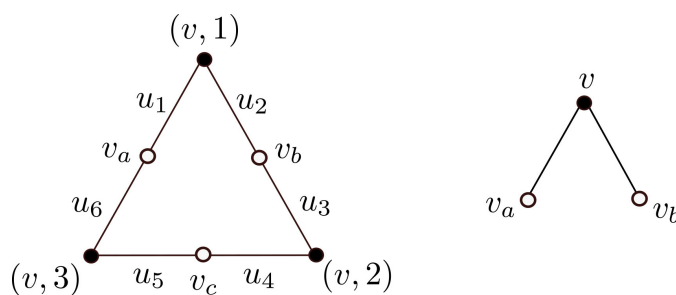


Figure 2. (a) The connector graph Υ for any $v \in \mathring{\mathcal{V}}$ (b) The fundamental domain of Υ

图 2. (a) 任意顶点 $v \in \mathring{\mathcal{V}}$ 对应的连接图 Υ (b) Υ 的基本域

根据 G_3 的全部不可约表示可以得到图上平方可积函数空间 $L^2(\Upsilon)$ 的分解:

$$L^2(\Upsilon) = \sum_{t=1}^3 \oplus \mathcal{F}_t,$$

其中函数

$$\begin{aligned} F &= \{u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6\} \in L^2(\Upsilon), \\ F_1 &= \left\{ \frac{u_1 + u_3 + u_5}{3}, \frac{u_2 + u_4 + u_6}{3}, \frac{u_3 + u_5 + u_1}{3}, \dots, \frac{u_6 + u_2 + u_4}{3} \right\} \in \mathcal{F}_1, \\ F_2 &= \left\{ \frac{u_1 + \omega u_3 + \omega^2 u_5}{3}, \frac{u_2 + \omega u_4 + \omega^2 u_6}{3}, \frac{u_3 + \omega u_5 + \omega^2 u_1}{3}, \dots, \frac{u_6 + \omega u_2 + \omega^2 u_4}{3} \right\} \in \mathcal{F}_2, \\ F_3 &= \left\{ \frac{u_1 + \omega^2 u_3 + \omega u_5}{3}, \frac{u_2 + \omega^2 u_4 + \omega u_6}{3}, \frac{u_3 + \omega^2 u_5 + \omega u_1}{3}, \dots, \frac{u_6 + \omega^2 u_2 + \omega u_4}{3} \right\} \in \mathcal{F}_3, \end{aligned}$$

满足 $F = F_1 + F_2 + F_3$.

根据函数空间分解, 可以将定义在 Υ 上的 Schrödinger 算子 A 进行分解.

定理4.1 定义在连接图正三角形 Υ 上的 Schrödinger 算子 A 定义域为

$$\mathcal{D}(A) = \{F, F', F'' \in L^2(\Upsilon) : F \text{ 在 } \Upsilon \text{ 的虚拟顶点处满足 Kirchhoff 顶点条件,} \\ \text{在剩余的顶点处满足 Robin 顶点条件}\},$$

算子 A 西等价于定义在空间 $\mathcal{F}_t$ 上的 Schrödinger 算子 A_t 的直和, 即

$$A = \sum_{t=1}^3 \oplus A_t,$$

算子 A_t 的定义域为

$$\mathcal{D}(A_t) = \{F_t, F'_t, F''_t \in \mathcal{F}_t : F_t \text{ 在 } \Upsilon \text{ 的虚拟顶点处满足 Kirchhoff 顶点条件,} \\ \text{在剩余的顶点处满足 Robin 顶点条件}\}.$$

Proof. 因为

$$\mathcal{D}(A) \subset L^2(\Upsilon),$$

且 $\mathcal{D}(A_t)$ 满足

$$\mathcal{D}(A_t) = \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{F}_t,$$

于是算子定义域存在直和分解

$$\mathcal{D}(A) \cong \sum_{t=1}^3 \oplus \mathcal{D}(A_t).$$

算子的作用形式不变. 对任意 $F_t \in \mathcal{F}_t$, A_t 需满足 $A_t F_t \in \mathcal{F}_t$. 对于 $F_1 \in \mathcal{F}_1$,

$$\begin{aligned} A_1 F_1 &= A_1 \left\{ \frac{u_1 + u_3 + u_5}{3}, \frac{u_2 + u_4 + u_6}{3}, \dots, \frac{u_6 + u_2 + u_4}{3} \right\} \\ &= \left\{ A_1 \frac{u_1 + u_3 + u_5}{3}, A_1 \frac{u_2 + u_4 + u_6}{3}, \dots, A_1 \frac{u_6 + u_2 + u_4}{3} \right\} \end{aligned}$$

$$= \left\{ - \left(\frac{u_1 + u_3 + u_5}{3} \right)'' + q_1 \frac{u_1 + u_3 + u_5}{3}, - \left(\frac{u_2 + u_4 + u_6}{3} \right)'' + q_1 \frac{u_2 + u_4 + u_6}{3}, \dots \right\},$$

其中第一项,

$$\begin{aligned} A_1 \frac{u_1 + u_3 + u_5}{3} &= - \left(\frac{u_1 + u_3 + u_5}{3} \right)'' + q_1 \frac{u_1 + u_3 + u_5}{3} \\ &= \frac{1}{3} (-u_1'' + q_1 u_1 - u_3'' + q_1 u_3 - u_5'' + q_1 u_5) \\ &\stackrel{q_1=q_3=q_5}{=} \frac{1}{3} (-u_1'' + q_1 u_1 - u_3'' + q_3 u_3 - u_5'' + q_5 u_5) \\ &= \frac{Au_1 + Au_3 + Au_5}{3}, \end{aligned}$$

第二项,

$$\begin{aligned} A_1 \frac{u_2 + u_4 + u_6}{3} &= - \left(\frac{u_2 + u_4 + u_6}{3} \right)'' + q_1 \frac{u_2 + u_4 + u_6}{3} \\ &= \frac{1}{3} (-u_2'' + q_2 u_2 - u_4'' + q_2 u_4 - u_6'' + q_2 u_6) \\ &\stackrel{q_2=q_4=q_6}{=} \frac{1}{3} (-u_2'' + q_2 u_2 - u_4'' + q_4 u_4 - u_6'' + q_6 u_6) \\ &= \frac{Au_2 + Au_4 + Au_6}{3}, \end{aligned}$$

后面四项同理. 于是 $A_1 F_1 \in \mathcal{F}_1$, 因此有 $A_t F_t \in \mathcal{F}_t$. $\square$

算子 A_1, A_2, A_3 分别酉等价于定义在连接图 Υ 的基本域 Υ_0 上的算子 $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \tilde{A}_3$, 其中 $\tilde{A}_1$ 的定义域为 $\mathcal{D}(A_1)$ 限制在 Υ_0 上, $\tilde{A}_2$ 的定义域为 $\mathcal{D}(A_2)$ 限制在 Υ_0 上, $\tilde{A}_3$ 的定义域为 $\mathcal{D}(A_3)$ 限制在 Υ_0 上.

下面考虑自由顶点 v_a 和 v_b 处的顶点条件, 由于基本域 Υ_0 在旋转过程中, v_a 与 v_b 粘合起来, 因此考虑 $v_{a(b)}$ 点处的顶点条件需要考虑三种不可约表示对应的三个商图:

以第二种不可约表示为例推导商图的顶点条件, 因为群元作用在函数上相当于它的表示与函数相乘, 所以

$$\begin{cases} au_3(v_b) := \omega u_3(v_b) = u_1(v_a), \\ au'_3(v_b) := \omega u'_3(v_b) = u'_1(v_a), \end{cases}$$

由 F 在 v_b 处满足 Kirchhoff 顶点条件可以得到

$$\begin{cases} u_2(v_b) = u_3(v_b), \\ u'_2(v_b) + u'_3(v_b) = 0, \end{cases}$$

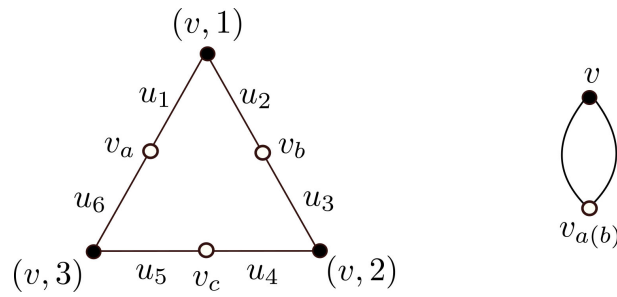


Figure 3. (a) The connector graph Υ for any $v \in \mathcal{V}(\mathring{\Gamma})$
(b) The quotient graph of Υ

图 3. (a) 任意顶点 $v \in \mathcal{V}(\mathring{\Gamma})$ 对应的连接图 Υ (b) Υ 的商图

于是得到 $v_{a(b)}$ 处的顶点条件为

$$\begin{cases} u_1(v_a) - \omega u_2(v_b) = 0, \\ u'_1(v_a) + \omega u'_2(v_b) = 0, \end{cases}$$

顶点 v 在原“三层”图中满足 Robin 顶点条件, 由三种不可约表示对应的三个商图(见图 3), 分别得到在 $v_{a(b)}$ 处三种不同顶点条件的商图, 由 ρ_1 得:

$$\begin{cases} u_1(v_{a(b)}) - u_2(v_{a(b)}) = 0, \\ u'_1(v_{a(b)}) + u'_2(v_{a(b)}) = 0, \end{cases}$$

由 ρ_2 得:

$$\begin{cases} u_1(v_{a(b)}) - \omega u_2(v_{a(b)}) = 0, \\ u'_1(v_{a(b)}) + \omega u'_2(v_{a(b)}) = 0, \end{cases}$$

由 ρ_3 得:

$$\begin{cases} u_1(v_{a(b)}) - \omega^2 u_2(v_{a(b)}) = 0, \\ u'_1(v_{a(b)}) + \omega^2 u'_2(v_{a(b)}) = 0. \end{cases}$$

现在可以将连接图正三角形的函数空间分解与算子分解和“三层”周期量子图的函数空间分解与算子分解结合在一起. 当连接图上的势函数满足 $q_{i1} = q_{i3} = q_{i5}, q_{i2} = q_{i4} = q_{i6}$ 时, 对于任意 $v_i \in \mathring{\mathcal{V}}$, 先将 v_i 连接的正三角形根据循环群的不可约表示进行函数空间分解和算子分解, 将算子分解到连着悬挂边的 $\mathring{\Gamma}$ 上, 然后对其进行 Floquet 变换, 将算子分解到连着悬挂边的 W 上, 其中悬挂边为每个顶点 $v_i \in W$ 在 Υ_0 中连着的边, 且悬挂边连接着的虚拟顶点为自由顶点.

Schrödinger 算子 A 定义在“三层”周期量子图 Γ 上, $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \tilde{A}_3$ 分别表示定义在图 4(b)上的算子, 根据定理 4 可知, A 酉等价于三个算子 $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \tilde{A}_3$ 的直和,

$$A \cong \sum_{t=1}^3 \oplus \tilde{A}_t,$$

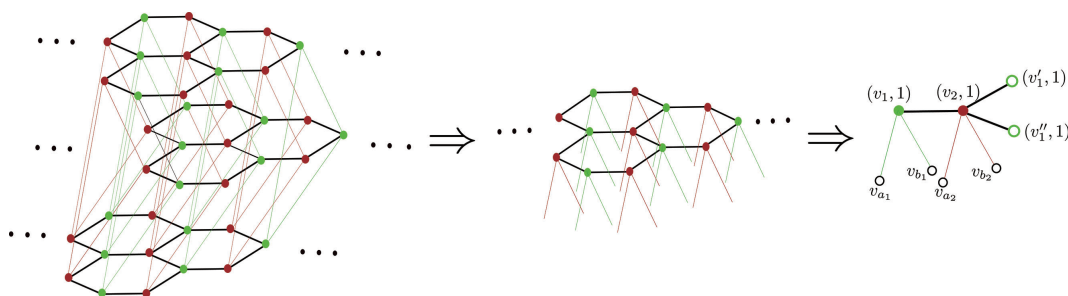


Figure 4. (a) The three-layer quantum graph (b) After decomposing the connector graph (c) Applying the Floquet transform

图 4. (a) “三层”量子图 (b) 对连接图进行分解 (c) 进行Floquet变换

令 $\mathfrak{A}_1(\lambda), \mathfrak{A}_2(\lambda), \mathfrak{A}_3(\lambda)$ 分别表示 $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \tilde{A}_3$ 对应的经过 DtN 映射简化后得到的与 λ 相关的组合图算子, 并对其进行 Floquet 变换, 得到算子 $\mathfrak{A}_1(\lambda, z), \mathfrak{A}_2(\lambda, z), \mathfrak{A}_3(\lambda, z)$. 于是 A 在 λ 处的 Fermi 面为:

$$\Phi_\lambda = \{z \in (\mathbb{C}^*)^n : (\det \mathfrak{A}_1(\lambda, z))(\det \mathfrak{A}_2(\lambda, z))(\det \mathfrak{A}_3(\lambda, z)) = 0\},$$

即约简为三个量子图算子 $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \tilde{A}_3$ 的 Fermi 面的并, 得到以下定理:

定理4.2 令 $(\tilde{\Gamma}, \tilde{A})$ 为周期量子图, (Γ, A) 为 $(\tilde{\Gamma}, \tilde{A})$ 的三个副本根据定义 3 构造出的“三层”量子图. 令连接图具有循环群作用, 得到算子分解: $A \cong \sum_{t=1}^3 \oplus \tilde{A}_t$, 对于所有的 $\lambda \notin \sigma_D(A)$, (Γ, A) 的 Fermi 面 Φ_λ 可约为三个 Fermi 面的并集,

$$\Phi_\lambda = \{z \in (\mathbb{C}^*)^n : (\det \mathfrak{A}_1(\lambda, z))(\det \mathfrak{A}_2(\lambda, z))(\det \mathfrak{A}_3(\lambda, z)) = 0\},$$

其中 $\mathfrak{A}_1(\lambda, z), \mathfrak{A}_2(\lambda, z), \mathfrak{A}_3(\lambda, z)$ 分别为 $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \tilde{A}_3$ 化简到组合图上再经过 Floquet 变换得到的算子.

将“三层”量子图可约性进行推广. 通过单层周期量子图与具有循环群作用的正 n 边形作笛卡尔积得到新的周期量子图 ($n \geq 3$). 将底边平行于 x 轴记为正 n 边形的初始位置, 在正 n 边形绕中心逆时针旋转一定角度 θ 后, 再将其与单层周期量子图作笛卡尔积, 得到的“ n 层”图均为三维图形, 旋转的角度 θ 满足 $\theta \in (0, \pi/n)$ 中, 如图 5 所示, 虚线均表示单层周期量子图.

在正 n 边形每条边中点处引入一个虚拟顶点, 正 n 边形的基本域为图 5 中红色线段及其连接的顶点, 并且正 n 边形上的势函数满足对称条件, 因此可以通过 n 阶循环群的不可约表示对正 n 边形进行函数空间分解和算子分解, 根据上面对正三角形 Fermi 面分解的分析知, 对于单层周期量子图与正 n 边形作笛卡尔积得到的“ n 层”周期量子图, Schrödinger 算子 A 作用在“ n 层”周期图上, 算子 A 在 λ 处的 Fermi 面为:

$$\Phi_\lambda = \{z \in (\mathbb{C}^*)^n : (\det \mathfrak{A}_1(\lambda, z))(\det \mathfrak{A}_2(\lambda, z)) \cdots (\det \mathfrak{A}_n(\lambda, z)) = 0\}.$$

于是可以得到关于定理 4 的以下推论:

推论4.3 令 $(\tilde{\Gamma}, \tilde{A})$ 为周期量子图, (Γ, A) 为 $(\tilde{\Gamma}, \tilde{A})$ 与 n 个副本根据定义 3 构造出的“ n 层”量

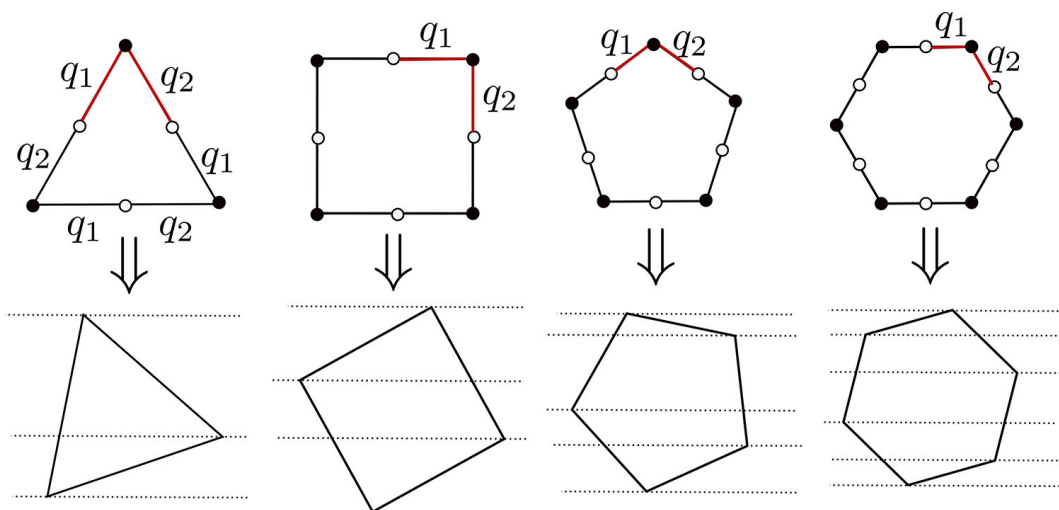


Figure 5. Counterclockwise rotation by angle θ of a regular n -gon, $n = 3, 4, 5, 6$

图 5. 正 n 边形逆时针旋转 θ , $n = 3, 4, 5, 6$

子图. 令连接图具有 n 阶循环群作用, 得到算子分解:

$$A \cong \sum_{t=1}^n \oplus \tilde{A}_t,$$

对于所有的 $\lambda \notin \sigma_D(A)$, (Γ, A) 的 Fermi 面 Φ_λ 可约为 n 个 Fermi 面的并集,

$$\Phi_\lambda = \{z \in (\mathbb{C}^*)^n : (\det \mathfrak{A}_1(\lambda, z))(\det \mathfrak{A}_2(\lambda, z)) \cdots (\det \mathfrak{A}_n(\lambda, z)) = 0\},$$

其中 $\mathfrak{A}_1(\lambda, z), \mathfrak{A}_2(\lambda, z), \dots, \mathfrak{A}_n(\lambda, z)$ 分别为 $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \dots, \tilde{A}_n$ 化简到组合图上再经过 Floquet 变换得到的算子.

基金项目

河北省自然科学基金面上项目(A2024202017)。

参考文献

- [1] 赵佳. 无穷度量图上 Sturm-Liouville 算子的谱性质[D]: [博士学位论文]. 天津: 天津大学, 2016.
- [2] Eastham, M.S.P. (1967) Gaps in the Essential Spectrum Associated with Singular Differential Operators. *The Quarterly Journal of Mathematics*, **18**, 155-168.
<https://doi.org/10.1093/qmath/18.1.155>
- [3] Eastham, M.S.P. (1969) On the Gaps in the Spectrum Associated with Hill's Equation. *Proceedings of the American Mathematical Society*, **21**, 643. <https://doi.org/10.2307/2036438>

-
- [4] Eastham, M.S.P. (1973) The Spectral Theory of Periodic Differential Equations.
- [5] 吴代鸣. 固体物理基础[M]. 北京: 高等教育出版社, 2007.
- [6] 陆栋, 蒋平, 徐至中. 固体物理学[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 2003.
- [7] Kuchment, P. and Vainberg, B. (1998) On Embedded Eigenvalues of Perturbed Periodic Schrödinger Operators. In: Ramm, A.G., Ed., *Spectral and Scattering Theory*, Springer US, 67-75. https://doi.org/10.1007/978-1-4899-1552-8_5
- [8] 曾谨言. 量子力学教程[M]. 北京: 科学出版社, 2003.
- [9] Shipman, S.P. (2014) Eigenfunctions of Unbounded Support for Embedded Eigenvalues of Locally Perturbed Periodic Graph Operators. *Communications in Mathematical Physics*, **332**, 605-626. <https://doi.org/10.1007/s00220-014-2113-y>
- [10] Shipman, S.P. (2019) Reducible Fermi Surfaces for Non-Symmetric Bilayer Quantum-Graph Operators. *Journal of Spectral Theory*, **10**, 33-72. <https://doi.org/10.4171/jst/285>
- [11] Fisher, L., Li, W. and Shipman, S.P. (2021) Reducible Fermi Surface for Multi-Layer Quantum Graphs Including Stacked Graphene. *Communications in Mathematical Physics*, **385**, 1499-1534. <https://doi.org/10.1007/s00220-021-04120-z>
- [12] 张凯, 赵佳. n 次中心对称量子图的可约性[J]. 应用数学进展, 2024, 13(4): 1862-1874. <https://doi.org/10.12677/AAM.2024.134175>