具有优选方向顶点耦合的磁性方格晶格

Marzieh Baradaran[1], Pavel Exner[2,3], 和 Jiří Lipovský[1]

1）物理系，理学院，赫拉德茨-克拉洛韦大学，Rokitanského 62，500 03 赫拉德茨-克拉洛韦，捷克 2）多普勒数学物理与应用数学研究所，捷克技术大学，Břehová 7，11519 布拉格，捷克 3）理论物理系，捷克科学院核物理研究所，25068 布拉格附近的热日

marzie.baradaran@yahoo.com,exner@ujf.cas.cz, jiri.lipovsky@uhk.cz

arXiv:2302.04601v1 [math-ph] 9 Feb 2023

摘要

我们分析处于磁场中的方格晶格图，并假设顶点耦合具有一种会破坏时间反演不变性的特定类型。通过数值计算每个晶格 plaquette 磁通量为有理数时的谱，我们展示了这两种效应如何相互竞争；在高能区，磁场占主导地位，使熟悉的霍夫施塔特蝴蝶图样渐近恢复。

1 引言

处于均匀磁场中的晶格量子图属于一类具有有趣且高度非平凡谱性质的系统。正如阿兹贝尔 [1]最早指出、并由霍夫施塔特 [2]广为人知的那样，这些谱性质源于两个内禀长度——晶格间距和回旋半径——之间的（非）公度性。问题的设定可能有所不同：量子（度量）图通过对偶性 [3–6] 与离散晶格 [7], 相关联，而离散晶格又可以转化为 Harper 方程（或临界几乎 Mathieu 方程）。尤其是，无理磁通量值下谱具有康托尔集性质，这一所谓的“十马提尼问题”曾是数十年来重大的数学挑战之一。最终，阿维拉和吉托米尔斯卡娅 [8]证明了这一点；此后，研究者又揭示了谱更微妙的性质，参见例如 [9, 10]。在磁场沿一维阵列线性变化且斜率为无理数的情形下，也观察到了类似效应 [11]。

量子图 [12] 通常是在假设波函数在图顶点处连续的前提下进行研究的，尤其是采用通常称为基尔霍夫耦合的情形。然而，这远非唯一的可能性 [13], ，也不是唯一有趣的可能性。继尝试利用晶格量子图 [14, 15] 模拟反常霍尔效应之后，人们注意到，

并通过一个简单例子加以说明：顶点耦合本身可能是时间反演破缺的来源 [16]。研究发现，这种顶点耦合具有一些有趣的性质，其中之一是，此类顶点在高能区的输运性质关键取决于其宇称，并由此导致了各种后果 [17–20]。此外，尽管相应的哈密顿量是自伴的 [22]，它仍表现出非平庸的$\mathcal{PT}$对称性。

由于磁场是导致时间反演不变性破缺的主要因素，在具有所述耦合的图中，这两种效应可能相互增强，也可能彼此抵消。本文旨在分析一个磁性方格晶格图模型，探究优选取向的顶点耦合如何影响其谱性质。我们将针对磁通量的各种有理数值进行数值计算，求出谱；结果将表明，在高能区，主导行为仅由磁场决定。顶点耦合的影响在渐近情况下会受到抑制，但永远不会完全消失。

本文结构如下。首先，我们回顾磁性量子图的哈密顿量通常具有何种形式（第 2 节）。随后，在第 3 节中，我们详细研究“单位磁通胞”包含两个和三个顶点的情形（第 3.1 和第 3.2 小节），并介绍一般模型的性质（第 3.3 小节）。

2 具有优选方向耦合的磁图

在通常的设定下， [12] 我们为度量图关联一个态希尔伯特空间，其中包含图的各条边上的 L^2 函数（的等价类）。存在磁场时，粒子的哈密顿量在该空间上作用为磁拉普拉斯算子，即在每条图边上作用为 $(-i\nabla - \mathbf{A})^2$。这里我们自然采用有理单位制 $\hbar = 2m = 1 = e = c$；如果有人坚持认为精细结构常数不等于 1，我们便将相应的乘法因子纳入磁场强度单位。换言之，由于图边上的运动是一维的，第 j条边上的算子作用为 $\psi_j \mapsto -\mathcal{D}^2\psi_j$，其中 $\mathcal{D}$ 是拟导数算子

$$\mathcal{D} := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - i\,A_j \tag{1}$$

其中 A_j 是对应于该边上给定磁场的矢势的切向分量；和通常一样，我们可以自由选择符合自身需要的规范。

为了使这样的磁拉普拉斯算子成为自伴算子，每个顶点 v 处连接 n 条边的函数都必须通过耦合条件 [23] 进行匹配

$$(U_v - I_v)\Psi_v + i\ell(U_v + I_v)(\mathcal{D}\Psi)_v = 0, \tag{2}$$

其中， $\ell \in \mathbb{R}_+$ 是确定长度尺度的参数；为简便起见，此处令 $\ell = 1$ 。此外， U_v 是一个 $n \times n$ 酉矩阵， Ψ_v 而 $(\mathcal{D}\Psi)_v$ 分别是边界

值函数 ψ_j（x）及其拟导数的向量，按照惯例，后者均取向外方向。这是一个很大的族，其中的元素显然可由 n^2个实参数刻画。使波函数连续的耦合，即所谓的 δ耦合，构成其中的一个单参数子族。

这里我们将考虑 [16], 中引入的一种特殊且截然不同的匹配条件，它对应于一个 U_v 为循环矩阵型的矩阵，即

$$U_v = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} . \tag{3}$$

将条件 (2) 中的矩阵 U_v 代入并按分量书写，可得

$$(\psi_{j+1} - \psi_j) + i \left(\mathcal{D}\psi_{j+1} + \mathcal{D}\psi_j \right) = 0, \quad j = 1, \dots, n, \tag{4}$$

其中， ψ_j 是函数 ψ_j 在顶点处的边界值， $\mathcal{D}\psi_j$也类似。指标j 标记汇聚于该顶点的边，编号按循环顺序排列；对于 $k \in \mathbb{Z}$，我们令 ψ_{n+k} 与 ψ_k等同。这种耦合破坏了时间反演不变性，并呈现出一种优选方向，在动量 $k = \ell^{-1}$处这种特征最为显著。要看出这一点，只需回想 U_v 不过是壳上散射矩阵 $S(\ell^{-1})$ [12]。这种破坏也与上述矩阵 U_v 显然不具有转置不变性 [22]这一事实有关。

3 模型

经过上述预备讨论，我们可以更详细地描述所关注的系统。我们考虑一个置于均匀磁场中的方格晶格，该磁场$\mathbf{B} = (0,0,B)$垂直于晶格平面；不失一般性，为简便起见，我们仍假设晶格元胞的边长为单位长度。

我们关注可采用为周期系统设计的方法处理的情形，因此假设每个晶格面元的磁通量 Φ 是磁通量子的有理倍数；在所选单位制下，磁通量子为 $\Phi_0 = 2\pi$，更具体地说，无量纲磁通量比 $\frac{\Phi}{\Phi_0}$ 等于有理数 $0 < \frac{p}{q} < 1$，其中 $q \geq 2$和 $p = 1$、2、.....、$q-1$是互质的正整数。因此，对应于单位磁通的晶格部分由 q 个基本方格组成。

为了利用 Floquet-Bloch分解定理 [12, 第 4]章求出谱，我们因此必须选择一种平面铺砌，其定义域的面积为 q。自然，这可以通过多种方式实现；我们选择最简单的一种，其中“铺块”是由 q 基本

晶胞组成的阵列。在这种情况下，采用朗道规范 $\mathbf{A} = B(0, x, 0)$ 是合适的，这样 $A_x = 0$ 在水平边上成立，而竖直边上的 A_y 则呈线性变化，其斜率为 B 的整数倍。另一个不确定之处在于基本胞的选择；由于我们主要关注的对象是晶格，因此选取顶点的对称十字形邻域作为基本胞。因此，如图 1 所示，“单位磁通胞”将包含 q 个四度顶点。

如图所示，坐标应当“从左向右”和“从下向上”递增。在这种情况下，式 (1) 中 A_j 的常数分量在竖直边上为正号，而磁性单位胞中此类边上的磁拉普拉斯算子作用为 $-\mathcal{D}_v^2 := -\left(\frac{d}{dy} - ivB\right)^2$，其中 $v = 1, 2, \ldots\ldots, q$ 为顶点索引。另一方面，在水平边上，式 (1) 中不存在 A_j 的常数分量，算子作用为通常拉普拉斯算子，即 $-\frac{d^2}{dx^2}$。

—

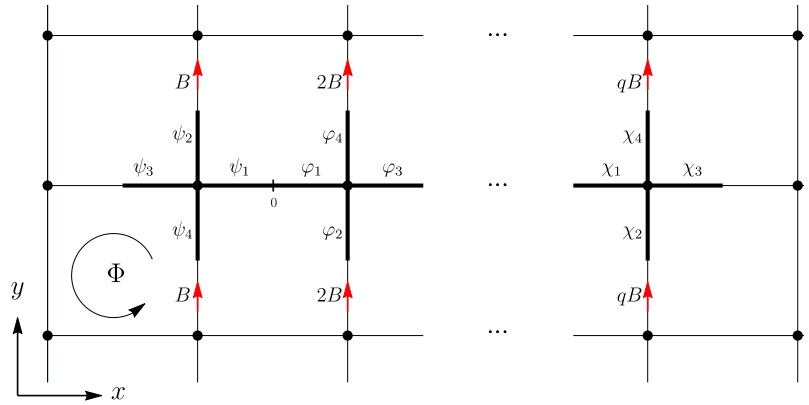

图 1. 均匀磁场中方格晶格的一个基本胞，其每个基本方格的磁通量值为 $\Phi = 2\pi\frac{p}{q}$，由 q 个四度顶点的邻域构成，这些邻域以粗黑线标出；竖直边上的箭头表示矢势。

Floquet-Bloch 分解中的纤维算子具有纯离散谱；能量为 $E = k^2 > 0$ 时，特征函数的每个分量在水平边上都是函数 $e^{\pm ikx}$ 的线性组合，在顶点索引为 v的竖直边上则是函数 $e^{ivBy}e^{\pm iky}$ 的线性组合。至于负谱，其解是实指数函数的组合；只需将 k替换为 $i\kappa$，其中 $\kappa > 0$，如下文第 3.1.2 节和第 3.2.2 节所述。纤维算子由准动量分量 θ_1，$\theta_2 \in [-\pi, \pi)$ 标记，它们表示波函数在单位磁通胞两端的相位如何关联；沿 x方向跨越 q个基本晶胞时，相位变化为 $\exp(i\theta_1)$；沿 y方向跨越一个晶胞大小时，相位变化为 $\exp(i\theta_2)$。

要确定给定每个晶格面元磁通量值为 $\Phi = 2\pi\frac{p}{q}$ 时纤维算子的谱，并将其表示为准动量的函数，进而求出系统的谱带，这一过程虽然直接明了，却相当繁琐；随着 q 的数值增大，所需时间也会越来越长。这是因为顶点的度数为四，因此，为了推导谱条件，对于给定的 $q \geq 2$，必须处理一个由 $4q$ 个线性方程组成的方程组，

并要求该方程组对应的行列式 $4q \times 4q$ 为零。

本文研究并报告了所有互素比 $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{p}{q}$ with$q \in \{2, ..., 12\}$ 和 $p = 1$，..... $q-1$ 的相关结果，所有计算均使用 Wolfram Mathematica 12 完成。在接下来的两节中，我们详细推导前两种情况 $q = \{2, 3\}$ 的谱性质，它们对应的每个晶格面元磁通值分别为 $\Phi = \pi$ 和 $\Phi = 2\pi\frac{p}{3}$，其中 $p = \{1, 2\}$。对于更大的 q 值，行列式也以类似方式求得；这些行列式是显式的，但函数形式日益复杂，因此本文仅报告所得谱带，而不列出决定这些谱带的庞大表达式。

3.1 Φ = π 的情形

我们从最简单的非平凡情况 $q = 2$ 开始，并将图 1 所示波函数分量的试探形式指定如下：

$$
\begin{aligned}
&\psi_j(x) = a_j^+ \mathrm{e}^{ikx} + a_j^- \mathrm{e}^{-ikx}, && x \in [-\tfrac{1}{2}, 0],\\
&\psi_2(y) = \big(a_2^+ \mathrm{e}^{iky} + a_2^- \mathrm{e}^{-iky}\big)\mathrm{e}^{iBy}, && y \in [0, \tfrac{1}{2}],\\
&\psi_4(y) = \big(a_4^+ \mathrm{e}^{iky} + a_4^- \mathrm{e}^{-iky}\big)\mathrm{e}^{iBy}, && y \in [-\tfrac{1}{2}, 0],\\
&\varphi_j(x) = b_j^+ \mathrm{e}^{ikx} + b_j^- \mathrm{e}^{-ikx}, && x \in [0, \tfrac{1}{2}],\\
&\varphi_2(y) = \big(b_2^+ \mathrm{e}^{iky} + b_2^- \mathrm{e}^{-iky}\big)\mathrm{e}^{2iBy}, && y \in [-\tfrac{1}{2}, 0],\\
&\varphi_4(y) = \big(b_4^+ \mathrm{e}^{iky} + b_4^- \mathrm{e}^{-iky}\big)\mathrm{e}^{2iBy}, && y \in [0, \tfrac{1}{2}],
\end{aligned}
\tag{5}
$$

其中 $j = 1$，3；由于两个基本晶胞中的 y 坐标相同，出于计算上的考虑，我们分别考虑每个边段的 x 坐标范围。函数 ψ_1 和 φ_1 必须在边段中点处光滑匹配；再结合 Floquet-Bloch 分解在单位磁通胞端点处施加的条件，可得

$$
\begin{aligned}
\psi_1(0) &= \varphi_1(0), & \psi_1'(0) &= \varphi_1'(0),\\
\varphi_3\big(\tfrac{1}{2}\big) &= \mathrm{e}^{i\theta_1}\,\psi_3\big(-\tfrac{1}{2}\big), & \varphi_3'\big(\tfrac{1}{2}\big) &= \mathrm{e}^{i\theta_1}\,\psi_3'\big(-\tfrac{1}{2}\big),\\
\psi_2\big(\tfrac{1}{2}\big) &= \mathrm{e}^{i\theta_2}\,\psi_4\big(-\tfrac{1}{2}\big), & \mathcal{D}_1\psi_2\big(\tfrac{1}{2}\big) &= \mathrm{e}^{i\theta_2}\,\mathcal{D}_1\psi_4\big(-\tfrac{1}{2}\big),\\
\varphi_4\big(\tfrac{1}{2}\big) &= \mathrm{e}^{i\theta_2}\,\varphi_2\big(-\tfrac{1}{2}\big), & \mathcal{D}_2\varphi_4\big(\tfrac{1}{2}\big) &= \mathrm{e}^{i\theta_2}\,\mathcal{D}_2\varphi_2\big(-\tfrac{1}{2}\big),
\end{aligned}
\tag{6}
$$

其中算子 $\mathcal{D}_1$ 和 $\mathcal{D}_2$，如上文所述，为 $\mathcal{D}_v := \frac{d}{dy} - ivB$，其中 $v \in \{1, 2\}$。接下来，在「磁性单位胞」的两个顶点处施加匹配条件 (4)，并考虑到导数必须沿向外方向取值，我们得到

以下方程组

$$
\begin{aligned}
&\psi_2(0)-\psi_1\left(-\tfrac{1}{2}\right)+i\left(\mathcal{D}_1\psi_2(0)+\psi_1'\left(-\tfrac{1}{2}\right)\right)=0,\\
&\psi_3(0)-\psi_2(0)+i\left(-\psi_3'(0)+\mathcal{D}_1\psi_2(0)\right)=0,\\
&\psi_4(0)-\psi_3(0)+i\left(-\mathcal{D}_1\psi_4(0)-\psi_3'(0)\right)=0,\\
&\psi_1\left(-\tfrac{1}{2}\right)-\psi_4(0)+i\left(\psi_1'\left(-\tfrac{1}{2}\right)-\mathcal{D}_1\psi_4(0)\right)=0,
\end{aligned}
\tag{7}
$$

$$
\begin{aligned}
&\varphi_2(0)-\varphi_1\left(\tfrac{1}{2}\right)+i\left(-\mathcal{D}_2\varphi_2(0)-\varphi_1'\left(\tfrac{1}{2}\right)\right)=0,\\
&\varphi_3(0)-\varphi_2(0)+i\left(\varphi_3'(0)-\mathcal{D}_2\varphi_2(0)\right)=0,\\
&\varphi_4(0)-\varphi_3(0)+i\left(\mathcal{D}_2\varphi_4(0)+\varphi_3'(0)\right)=0,\\
&\varphi_1\left(\tfrac{1}{2}\right)-\varphi_4(0)+i\left(-\varphi_1'\left(\tfrac{1}{2}\right)+\mathcal{D}_2\varphi_4(0)\right)=0.
\end{aligned}
$$

将 (5) 代入 (6)，即可用 $a_3^{\pm},a_4^{\pm},b_2^{\pm}$和 $b_1^{\pm}$表示系数 $b_3^{\pm}$,$a_2^{\pm}$,$b_4^{\pm}$和 $a_1^{\pm}$；再将 (5) 代入 (7)，得到一个包含八个线性方程的方程组，其可解的条件是行列式为零。经过简单变换，并略去无关紧要的乘法因子 $-2048\,k^6\,e^{i(2\theta_2+\theta_1)}$，我们得到谱条件

$$
4k^2-\left(k^2-1\right)^2\cos 2k+\left(k^2+1\right)^2\cos 4k+\left(k^2-1\right)^2\Theta_2\,\sin^2 k=0,
\tag{8}
$$

其中，准动量相关量 $\Theta_2:=\cos 2\theta_2+\cos\,\theta_1$的取值范围为区间$[-2,2]$。我们分别讨论谱的正部分和负部分。

3.1.1 正谱

与研究周期量子图的其他情形一样 [16–20,24], ，我们首先考察该系统是否会出现平带。这种情况发生在谱条件 (8) 存在一个与准动量分量 θ_1 和 θ_2，或等价地，与量 Θ_2无关的解时。然而容易验证，当 $k=1$ 和 $k=n\pi$时， $n\in\mathbb{N}$，方程 (8) 的左端分别化简为 $8\cos^2 2\neq 0$ 和 $8\pi^2n^2\neq 0$。因此，不存在平带，谱是绝对连续的，并具有带隙结构；由条件 (8)，考虑到 $\Theta_2\in[-2,2]$，我们发现数 k^2 属于谱带当且仅当它满足条件

$$
-2\le\frac{-4k^2+\left(k^2-1\right)^2\cos 2k-\left(k^2+1\right)^2\cos 4k}{\left(k^2-1\right)^2\,\sin^2 k}\le 2.
\tag{9}
$$

带隙图样（其中还包含将在下文讨论的负谱）如图2所示。在转向负谱部分之前，让我们先考察高能区中谱带的渐近

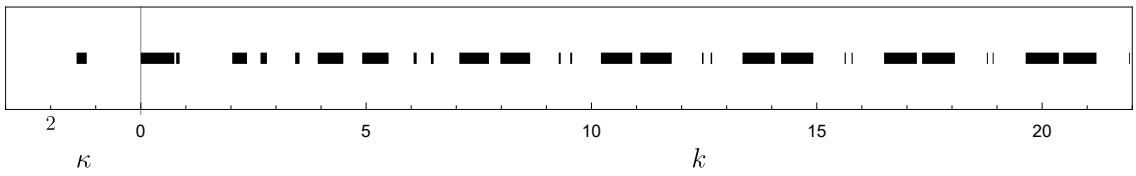

图 2. 磁通量值为每个晶格面元 $\Phi = \pi$ 的方格晶格谱带。此处以及后续的图 3 和图 4 中，正谱和负谱分别简单地由 k^2 和 $-\kappa^2$ 给出。

行为， $k \to \infty$。为此，我们将谱条件（8）改写为以下形式

$$\alpha_1(k) + \frac{\alpha_2(k)}{k^2} = \mathcal{O}(k^{-4}), \tag{10}$$

其中

$$\begin{aligned}\alpha_1(k) &= (-4\cos 2k - 2 + \Theta_2)\ \sin^2 k\ ,\\ \alpha_2(k) &= 2\left(\cos 2k + \cos 4k + 2 - \Theta_2\ \sin^2 k\right).\end{aligned}$$

因此，当 k 取较大值时，解接近首项 $\alpha_1(k)$ 为零的点。这会产生两类谱带：

- 在 $\sin^2 k$ 的根附近成对出现的窄带；这些窄带及其间的带隙在能量尺度上渐近地具有恒定宽度。为此，令 $k = n\pi + \delta$，其中 $n \in \mathbb{N}$，并考虑极限 $n \to \infty$。将其代入 (10)，再将谱条件中的表达式在 $\delta = 0$ 处展开，得到关于 δ 的二次方程，其首阶解为

$$\delta_n = \pm\frac{2\sqrt{2}}{n\pi}\sqrt{\frac{1}{6-\Theta_2}} + \mathcal{O}(n^{-3}).$$

  由于带边对应于 $\Theta_2 = -2$ 和 2，因此能带宽度及其间带隙的宽度（在能量尺度上）分别由 $\triangle E_{n,\ b} = 2(\sqrt{2}-1) + \mathcal{O}(n^{-2})$ 和 $\triangle E_{n,\ g} = 4 + \mathcal{O}(n^{-2})$ 确定，其中下标 b 和 g 分别指能带和带隙。

- 由条件 $-1 \le \cos 2k \le 0$ 确定的宽带对，对应于 $\alpha_1(k)$ 中括号表达式的消失。

这些能带的不同特征如图 2 所示。从以下概率也可以看出：

对于随机选取的动量值 k，某个能量值属于谱的概率，

$$P_\sigma(H) := \lim_{K\to\infty} \frac{1}{K} \left|\sigma(H) \cap [0, K]\right|. \tag{11}$$

这一量由 Band 和 Berkolaiko 引入 [25] ，他们证明了其普适性——也就是说，只要图边长度彼此不可公度，该量就与图边长度无关——这一结论适用于采用基尔霍夫耦合的周期图；最近，这一论断已扩展到采用本文所考虑耦合的图 [20, 21]。对于本文讨论的等边图，普适性自然无从谈起，但概率 (11) 可用于将我们的结果与文献 [7]中关于离散磁拉普拉斯算子的结果进行比较。动量尺度$\triangle k_{n,b} = \frac{\sqrt{2}-1}{n\pi} + \mathcal{O}(n^{-3})$处窄带的宽度为零，因此它们对概率 (11) 的贡献也为零。另一方面，对于宽带，该概率显然等于1 2。

3.1.2 负谱

如前所述，要找到负谱，只需在 (9) 中分别将 k 替换为 $i\kappa$ ，由此得到以下谱条件和能带条件 (8)

$$-4\kappa^2 - (\kappa^2+1)^2 \cosh 2\kappa + (\kappa^2-1)^2 \cosh 4\kappa - (\kappa^2+1)^2\ \Theta_2\ \sinh^2\kappa = 0, \tag{12}$$

$$-1 \le \frac{\kappa^4 - 6\kappa^2 + 2(\kappa^2-1)^2\cosh 2\kappa - 4\kappa^2\,\mathrm{csch}^2\kappa + 1}{(\kappa^2+1)^2} \le 1. \tag{13}$$

更准确地说，负特征值 $-\kappa^2$ 属于某个谱带，当且仅当正数 κ满足带条件 (13)。如图 2 所示，不存在平带；这一点从谱条件 (12) 中显而易见：在最后一个、也是唯一依赖准动量的项中， Θ_2 的系数非零。关于负能带的数量，我们先回顾一下：具有 $N \ge 3$ 条半无限边、并在中心顶点处采用矩阵U_v 所给耦合（见 (3)）的星形图，其负谱部分具有非空离散谱，其中特征值由 [16] 给出，等于

$$E = -\tan^2\frac{m\pi}{N}, \tag{14}$$

其中 m依次取 $1, \cdots, [\frac{N}{2}]$ （ N为奇数时），以及 $1, \cdots, [\frac{N-1}{2}]$（ N为偶数时）；其数量与矩阵 U_v 具有正虚部的特征值数量一致。由于单位磁通胞对 $\Phi = \pi$ 包含两个四度顶点，其中各自对应的矩阵 U_v 在复上半平面内仅有一个负特征值，因此根据 [19] 的定理 2.6，负谱至多有两个谱带。

然而，如图 2 所示，实际上只有一个负 Band，这一点可以通过检查带条件 (13) 来验证。将不等式中的函数记为 $f(\kappa)$，我们发现，每个条件 $f(\kappa) = \pm 1$ 对于 $\kappa > 0$ 都至多有一个解。事实上，首先考虑

条件 $f(\kappa) = -1$，经过简单变形后，可改写为因式分解形式

$$(\kappa - \coth\kappa)(\kappa - \tanh\kappa)(\sinh\kappa + \kappa\cosh\kappa)(\kappa\sinh\kappa + \cosh\kappa)\,\mathrm{csch}^2\kappa = 0\,, \tag{15}$$

其中，我们将 $f(\kappa)+1$ 除以 $4\sinh\kappa\cosh\kappa > 0$，并乘以 $(\kappa^2+1)^2$。容易验证，只有 (15) 中第一个括号内的表达式可能为零，因为它在区间 $\kappa \in (0,\infty)$ 上单调递增（一阶导数 $\coth^2\kappa$ 为正），该区间从 $-\infty$ 延伸至 $+\infty$，这意味着它在定义域内只有一个根。第二项 $\kappa - \tanh\kappa$ 不可能为零，因为它在定义域内也单调递增（一阶导数为 $\tanh^2\kappa > 0$），但其取值范围是从 0 到 $+\infty$；对于 $\kappa > 0$，最后两个括号内的表达式显然不为零。更不用说最后一项 $\mathrm{csch}^2\kappa$ 不可能给出解，因为当 $\kappa \to \infty$ 时，(15) 左边趋于无穷大。现在，我们来考察条件 $f(\kappa) = 1$，经过变形后可将其改写为

$$(\coth^2\kappa + 1)\lambda(\kappa) = 0; \qquad \lambda(\kappa) := (\kappa^2-1)^2\cosh 2\kappa - (\kappa^2+1)^2,$$

其中 $\coth^2\kappa + 1$ 显然非零；此外，我们看到 $\lambda(\kappa)$ 在 $\kappa \in (0,1]$ 时为负，因为 $0 \le (\kappa^2-1)^2\cosh 2\kappa < 1$，而 $(\kappa^2+1)^2 > 1$，注意到对于 $\kappa > 0$，$\cosh 2\kappa > 1$。因此，只需考察区间 $\kappa \in (1,\infty)$；为此，我们将条件 $\lambda(\kappa) = 0$ 改写为以下形式：$\xi(\kappa) := \cosh 2\kappa - \frac{(\kappa^2+1)^2}{\kappa^2-1} = 0$，由此可得 $\xi'(\kappa) = 2\sinh 2\kappa + \frac{8\kappa(\kappa^3+\kappa)}{(\kappa^2-1)^3} > 0$，对于$\kappa > 1$成立，这意味着 $\xi(\kappa)$ 在定义域上单调递增。另一方面，我们有 $\lim_{\kappa\to 1}\xi(\kappa) = -\infty$，且 $\lim_{\kappa\to\infty}\xi(\kappa) = +\infty$；结合 $\xi(\kappa)$ 的单调性，可知它在上述定义域内至多有一个根，从而证明了这一结论。

3.2 $\Phi = 2\pi\frac{p}{3}$ 的情形

接下来考虑每个晶格面元的磁通量值为 $\Phi = 2\pi\frac{p}{3}$ 的情形，其中 $p = \{1,2\}$；此时基本胞包含三个四度顶点。通过采用适当的试探形式，并像推导（8）时那样在每个顶点处进行匹配，可以类似于第3.1节推导出谱条件；注意，在这种情况下，还必须考虑穿过第三个顶点的竖直边所对应的拟导数 $\underline{\mathcal{D}}_3 := \frac{d}{dy} - 3iB$ 寻找相应的十二个线性方程组的非平凡解，我们得到谱条件

$$g(k) + (k^2-1)^3\,\Theta_3\,\sin^3 k = 0, \tag{16}$$

其中 $\Theta_3 := \cos 3\theta_2 + \cos\ \theta_1 \in [-2, 2]$ 以及

$$\begin{aligned} g(k) :=\ & 6(k^2-1)^2(k^2+1)\sin k\ \cos^3 k - (k^2+1)^3 \sin 6k \\ & - 8k\Big((k^4+6k^2+1)\cos 2k - (k^2-1)^2\Big)\sin^3\frac{\pi p}{3}\ \cos\frac{\pi p}{3} \\ & - 3(k^2+1)\Big((k^2-1)^2\cos 2k - (k^2+1)^2\Big)\sin 2k\ \cos\frac{2\pi p}{3}. \end{aligned}$$

3.2.1 正谱

与第3.1.1节一样，我们首先考察谱条件 (16) 是否会产生平带；需要考察的值仍为 $k = 1$ 和 $k = n\pi$ ，其中 $n \in \mathbb{N}$，此时谱条件中与准动量相关的部分消失。在相应能量处计算函数 $g(k)$，得到以下表达式： $-8\sin\ 6 - 64\cos 2\sin^3\frac{\pi p}{3}\cos\ \frac{\pi p}{3} + 24\sin 2\cos\ \frac{2\pi p}{3}$和$-64\pi^3 n^3 \sin^3\frac{\pi p}{3}\cos\ \frac{\pi p}{3}$；容易验证，对于$p = \{1, 2\}$，这两个表达式均不为零，因此不存在平带。因此，该谱是绝对连续的，并具有带隙结构，如图 3 所示。更明确地说，利用 (16)，并考虑准动量相关量 Θ_3 的取值范围，我们发现，当且仅当能量 k^2 满足以下条件时，它才属于一个谱带：

$$-2 \le \frac{g(k)}{-(k^2-1)^3\ \sin^3 k} \le 2. \tag{17}$$

和之前一样，我们关注 高能区能带的渐近行为，

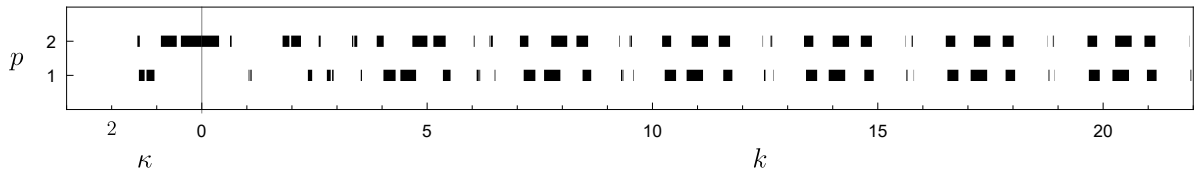

图 3. 每个晶格 plaquette 的磁通量为 $\Phi = 2\pi\frac{p}{3}$、 $p = \{1, 2\}$ 时方格晶格的谱带。

$k \to \infty$。为此，我们将谱条件 (16) 改写为以下形式

$$\beta_1(k) + \frac{\beta_2(k)}{k} + \frac{\beta_3(k)}{k^2} + \frac{\beta_4(k)}{k^3} = \mathcal{O}(k^{-4}), \tag{18}$$

其中

$$\begin{aligned}
\beta_1(k) &= \Big(\Theta_3 + 6\cos\big(k+\frac{2\pi p}{3}\big) + 6\cos\big(k-\frac{2\pi p}{3}\big) + 18\cos k + 8\cos 3k\Big)\sin^3 k\ ,\\
\beta_2(k) &= 8\sin^2\frac{\pi p}{3}\ \sin\frac{2\pi p}{3}\ \sin^2 k\ ,\\
\beta_3(k) &= \frac{3}{2}(6\sin 2k + \sin 4k)\cos\frac{2\pi p}{3} - 3\Theta_3\sin^3 k - 3\sin 6k - 6\sin k\ \cos^3 k\ ,\\
\beta_4(k) &= -16(3\cos 2k+1)\sin^3\frac{\pi p}{3}\ \cos\frac{\pi p}{3}.
\end{aligned} \tag{19}$$

在首项 $\beta_1(k)$ 为零的点附近求解，可再次得到两种类型的能带：

- 在 $\sin^3 k$ 的根附近有一组三条窄带；随着 $k\to\infty$，这些窄带在能量尺度上的宽度再次渐近趋于常数。与前一种情况一样，为估算这些能带的宽度，我们令 $k = n\pi+\delta$，其中 $n\in\mathbb{N}$，并考虑极限 $n\to\infty$；将其代入式（18），再在 $\delta = 0$ 处展开所得方程，得到关于 δ 的首阶三次方程，由此可得 δ 的三个解，其形式由卡尔丹公式给出，且渐近形式为

$$\delta_{n,j} = \frac{\mathcal{G}(p,\Theta_3)}{n} + \mathcal{O}(n^{-3}), \qquad j = 1,2,3.$$

  然后，考虑到带边对应于 $\Theta_3 = -2$ 和 2，这三条能带 $\triangle E_{n,\,j}(p)$，$j = 1$，2，3 在能量尺度上的宽度为

$$\begin{aligned}
\triangle E_{n,1}(1) &= \triangle E_{n,3}(2) = \frac{1}{\sqrt{3}} + \mathcal{O}(n^{-2})\ ,\\
\triangle E_{n,2}(1) &= \triangle E_{n,2}(2) = \frac{1}{22}\Big(3\sqrt{3} - 11\sqrt{19} + 48\Big) + \mathcal{O}(n^{-2})\ ,\\
\triangle E_{n,3}(1) &= \triangle E_{n,1}(2) = \frac{1}{22}\Big(3\sqrt{3} + 11\sqrt{19} - 48\Big) + \mathcal{O}(n^{-2}).
\end{aligned}$$

  结果正如预期，与图 3 中的窄带模式一致，证实这些能带在交换 p 和 $q-p$ 后并不对称；更多详情请参阅第 3.3 节的第四个要点。

- 由以下条件确定的三条宽带系列

$$-1 \le\ -3\cos\big(k+\frac{2\pi p}{3}\big) - 3\cos\big(k-\frac{2\pi p}{3}\big) - 9\cos k - 4\cos 3k\ \le 1, \tag{20}$$

  指 $\beta_1(k)$ 中“较大”括号的消失，并考虑到 $\Theta_3\in[-2,2]$；注意，对于 $q = 3$，容易验证不等式中的函数对于 $p = 1$，2 是相同的

且条件（20）简化为

$$-1 \le -6\cos k - 4\cos 3k \le 1. \tag{21}$$

窄带同样不会对 (11) 有贡献。对于宽带，容易在不等式 (21) 中函数的一个周期内，计算满足条件的 k 区间总长度与周期之比；由此可知，对于随机选取的 k，属于谱的概率 (11) 为 $P_\sigma(H) = -\frac{1}{3} + \frac{4}{\pi}\arctan\sqrt{6-\sqrt{33}} \approx 0.262498$。结果与 p 无关；下文将看到，对于更高的 q 值，情况不再如此。

3.2.2 负谱

相应的谱条件同样可以通过将 (16) 和 (17) 中的动量变量 k 替换为 $i\kappa$ 得到。谱是绝对连续的；如同第 3.1.2 节中的类似方法所示，这里没有平带。单位磁通胞现在包含三个顶点，因此根据 [19] 的定理 2.6，负谱最多可有三个谱带；如图 3 所示，$p = 2$ 时确实如此，而 $p = 1$ 时则只有两个负能带。

3.3 $\Phi = 2\pi\frac{p}{q}$ 为 $q = \{2, 3, ..., 12\}$ 的情形

处理完两个最简单的情形后，我们转而讨论磁通值为 $\Phi = 2\pi\frac{p}{q}$ 的情况，其中所有互素比为 $\frac{p}{q}$，且 $q \in \{2, ..., 12\}$ 和 $p = 1, \ldots, q-1$。正如我们已经提到的，q 越大，谱条件就越复杂；在这里，我们推进到了计算上可处理的极限，即达到由48个线性方程组成的系统。方案保持不变；谱条件通常呈现为以下形式

$$h(k; p, q) + (k^2 - 1)^q \, \Theta_q \, \sin^q k = 0, \tag{22}$$

其中，准动量相关量 $\Theta_q := \cos\, q\theta_2 + \cos\theta_1$ 再次遍历区间 $[-2, 2]$。后者很简单，并且如第3.2节和第3.1节中那样只依赖于 q，但对于任意 p 和 q，我们仍未能找到函数 $h(k; p, q)$ 的一般表达式。

可以验证，$h(k; p, q)$ 在 $k = 1$ 和 $k = n\pi$ 处不为零，因此谱是绝对连续的，具有带隙结构。图 4 展示了所考虑磁通值下的计算结果，呈现出复杂的谱图案：

- 鉴于 $\Theta_q \in [-2, 2]$，远离 $k = 1$ 和 $k = n\pi$ 的一个正数 k^2 属于谱，当且仅当

$$-2 \le \frac{h(k; p, q)}{(k^2 - 1)^q \, \sin^q k} \le 2\,; \tag{23}$$

鉴于函数 $h(\cdot; p,\ q)$ 的形式日益复杂，能带数量会随着 q 的增加而增多，因此可以推测，对于 $\Phi \notin 2\pi\mathbb{Q}$，谱可能是分形，事实上是一个康托尔集。随着动量 k 增大，谱中占主导地位的部分——为简洁起见，出于显而易见的原因，我们将其称为蝴蝶图案 ——可以在非磁性晶格的谱带中找到；请回想，在这种情况下，谱带主导着谱 [16]。

• 非磁性谱的带隙中也存在一些“窄”能带。与 $q = 2,\ 3$ 的情形相同，可以验证它们在动量尺度上覆盖的区间量级为 $\mathcal{O}(n^{-1})$，因此这部分谱的权重——我们称之为 非蝴蝶部分——会随着 k 的增大而减小。然而，其各组成部分仍然可见，因为它们在能量尺度上的宽度渐近为常数，并由线性增大的蝴蝶图案分隔。数值结果还表明，这些部分中的能带数会随 q 增大而增加；可以推测，当 $\Phi \notin 2\pi\mathbb{Q}$ 时，这部分谱又会呈现康托尔集特征。

• 负谱也具有一种带隙结构，它源自条件 (23)，其中k 被 $i\kappa$ 替换，且 $\kappa > 0$；根据 [19] 中的定理 2.6，对于每个基本方格上的磁通量值 $\Phi = 2\pi\frac{p}{q}$，它至多有 q 条谱带。

• 从图 4 可以看出，顶点耦合对谱的最低部分（包括负能量部分）的谱图案影响很大；在较高能量处，磁场的作用则占主导。不过，顶点效应从未完全消失。具体而言，谱中的非蝴蝶部分虽然很小，却由成对的能带簇组成；与谱的其余部分不同，即使在高能区，这些能带簇相对于交换 p 和 $q - p$仍明显不对称，而这种交换等同于翻转磁场方向。

• 在高能区，$k \to \infty$，可以将谱条件 (22) 改写为多项式形式

$$k^{2q}\left(\Theta_q + w(k; p, q)\right)\sin^q k + \mathcal{O}(k^{2q-1}) = 0, \tag{24}$$

其中 $w(\cdot;\ p,\ q)$ 是一个周期函数，它推广了上文的函数 $\frac{\alpha_1}{(k)\sin^2 k} - \Theta_2$，$\frac{\beta_1}{(k)\sin^3 k} - \Theta_3$，这意味着蝴蝶部分关于动量变量渐近地呈 π 周期。图 5 展示了在一个区间 $n\pi \le k \le (n+1)\pi$ 内，使 (24) 中的大括号项为零所得到的图案。尽管 q 的取值受到计算限制，我们仍能清楚地看到霍夫施塔特图案逐渐显现。

• 鉴于渐近周期性，以及随着 $n \to \infty$ 非蝴蝶部分变得可以忽略这一事实，由 (11) 给出的概率 $P_\sigma(H)$ 等于区间 $(n\pi,\ (n+1)\pi)$ 上归一化为 1 的带谱的勒贝格测度。我们在图6中绘出了该量随所考虑的磁通值的变化；随着 q 增大，它逐渐减小，这与以下预期相符：当 $\Phi \notin 2\pi\mathbb{Q}$ 时，谱的测度为零。还需回顾

尽管有理 Harper 算子的“总带宽”通常并不为人所知，但对于越来越复杂的互素比，我们有 Thouless 猜想 [26, 27]，该猜想指出

$$\lim_{\substack{q\to\infty \\ p\wedge q=1}} q\left|\sigma\left(\Phi = 2\pi\tfrac{p}{q}\right)\right| = \frac{16\,C_{\mathrm{Cat}}}{\pi} \tag{25}$$

其中卡塔兰常数为 $C_{\mathrm{Cat}} = \sum_{n\in\mathbb{N}}(-1)^n(2n+1)^{-2} \approx 0.9159...$。我们可以将这一说法与式 (11) 进行比较。考虑到绘制霍夫施塔特蝴蝶图的标准区间为 $[-2, 2]$，根据图 7，$\frac{4C_{\mathrm{Cat}}}{\pi q}$的归一化测度值即使在本文考察的相对较小的 q 取值下，也与 $P_\sigma(H)$相差不远。

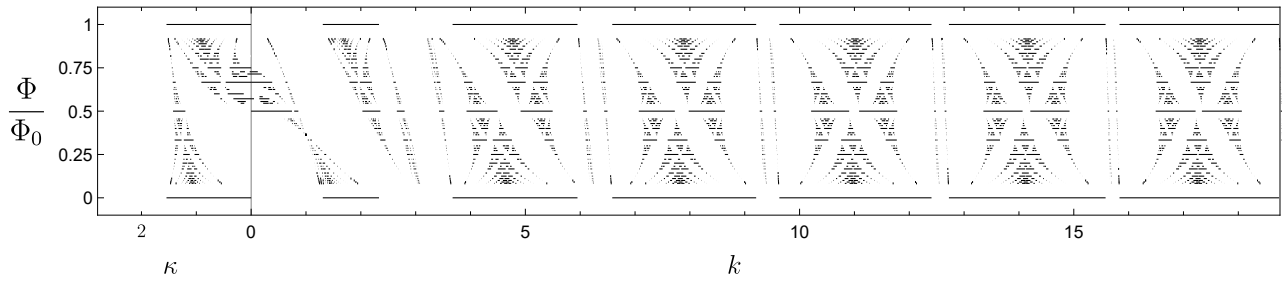

图 4. 边长为单位长度的方格晶格在每个晶格 plaquette 的磁通比为 $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{p}{q}$ 时的谱，其中 $q \in \{2, ..., 12\}$ 且 $p = 1, ..., q-1$。顶部和底部显示的是对应于非磁性情形 [16] 的 $\Phi \in 2\pi\mathbb{Z}$谱带。

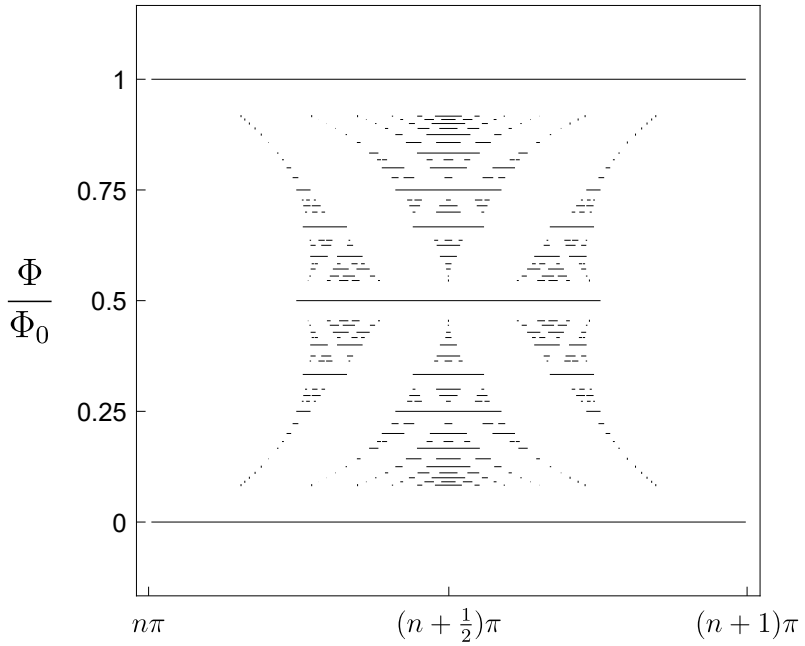

图5。 谱的蝴蝶部分的渐近形状。顶部和底部再次显示了非磁性情形下的谱带。

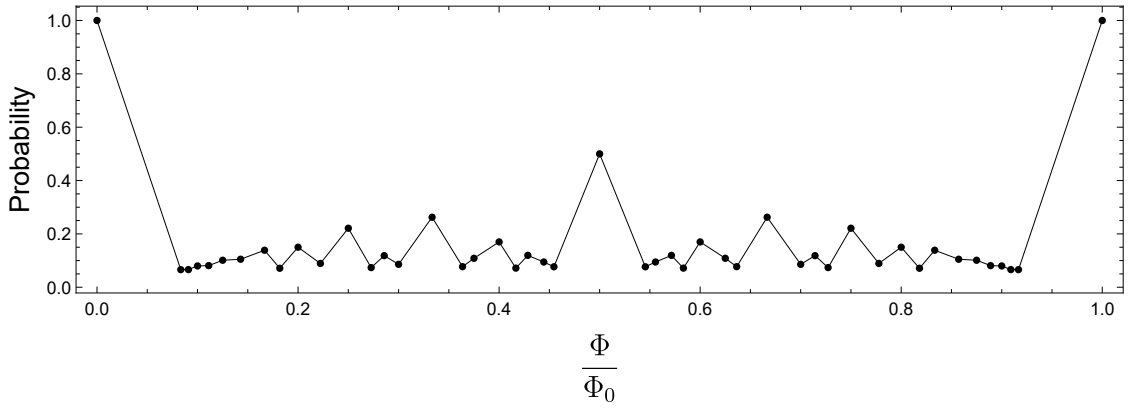

图6。 随机选取的 k值属于谱的概率（11）。为了使图案更加清晰，我们将对应于$\frac{\Phi}{\Phi_0}$相邻值的点连接起来。

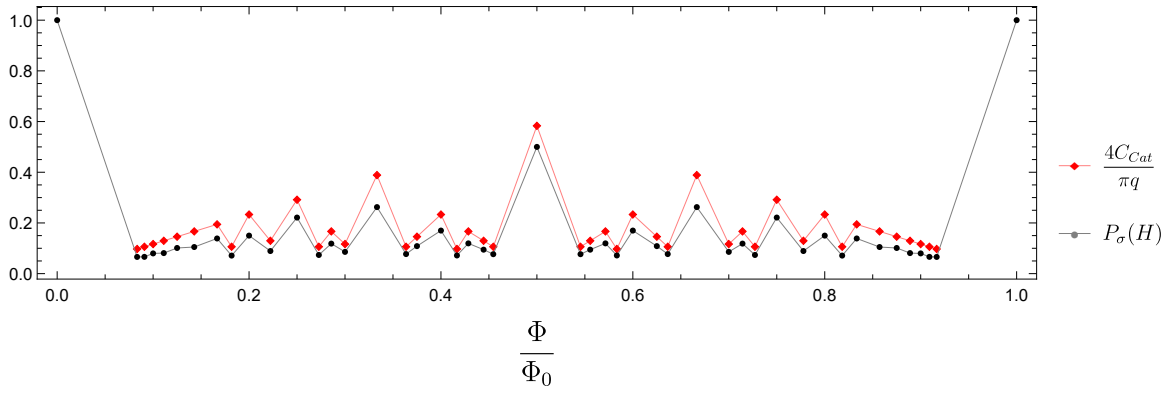

图 7。 式（11）与红色菱形标示的 Thouless 猜想值的比较。

数据可用性声明

数据见本文。

利益冲突

作者不存在利益冲突。

致谢

M.B. 和 J.L. 获捷克科学基金会项目 22-18739S 资助。P.E. 的研究工作获捷克科学基金会项目 21-07129S 及欧盟项目 CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000778 资助。

参考文献

[1] M.Ya. Azbel：磁场中传导电子的能谱，苏联物理学报**19** （1964），634–644。[2] D.R. Hofstadter：有理与无理磁场中布洛赫电子的能级和波函数，*Phys. Rev.* **B14** （1976），2239–2249。[3] J. von Below：与 c^2-网络上的特征值问题相关的特征方程，《线性代数及其应用》**71** （1985），309–325。[4] C. Cattaneo：图上连续拉普拉斯算子的谱，《数学月刊》**124**（1997）215–235。[5] P. Exner：图上的薛定谔算子与某些雅可比矩阵之间的对偶性，《庞加莱研究所年刊：理论物理》**66** （1997）359–371。[6] K. Pankrashkin：一类自伴扩张的酉维数约化及其在类图结构中的应用，*J. Math. Anal. Appl.* **396** （2012），640–655。[7] M.A. Shubin：离散磁性拉普拉斯算子，《数学物理通讯》**164** （1994），259–275。[8] A. Avila, S. Jitomirskaya：十马提尼问题，*Ann. Math*。**170** （2009），303–342。[9] Y. Last, M. Shamis：几乎马丢算子的零豪斯多夫维数谱，《数学物理通讯》**348** （2016），729–750。[10] B. Helffer, Qinghui Liu, Yanhui Qu, Qi Zhou：临界几乎马丢算子的正豪斯多夫维数谱，《数学物理通讯》**368** （2019），369–382。

[11] P. Exner, D.Vašata：磁性链图的康托尔谱，J. Phys. A: Math. Theor. 50（2017），165201。[12] G. Berkolaiko, P. Kuchment：《量子图导论》，AMS，罗得岛州普罗维登斯，2013。[13] V. Kostrykin, R. Schrader：量子线的基尔霍夫规则，J. Phys. A: Math. Gen. 32（1999），595–630。[14] P. Středa, J. Kučera：轨道动量与拓扑相变，Phys. Rev. B92（2015），235152。[15] P. Středa, K. Výborný：反常霍尔电导率与量子摩擦，arXiv:2206.03470[16] P. Exner, M. Tater：具有优选取向顶点的量子图，Phys. Lett. A382（2018），283–287。[17] P. Exner, J. Lipovský：柏拉图立体图上拉普拉斯算子的谱渐近，J. Math. Phys. 60（2019），122101。[18] M. Baradaran, P. Exner, M. Tater：具有优选方向顶点耦合的环链，Rev. Math. Phys. 33（2021），2060005。[19] M. Baradaran, P. Exner, M. Tater：具有时间反演非不变顶点耦合的周期链图的谱，Ann. Phys. 443（2022），168992。[20] M. Baradaran, P. Exner：具有优选方向顶点耦合的笼目网络，J. Math. Phys. 63（2022），083502。[21] M. Baradaran, P. Exner, J. Lipovský：具有优选方向顶点耦合的磁性环链，J. Phys. A: Math. Theor. 55（2022），375203。[22] P. Exner, M. Tater：量子图：自伴，却呈现非平凡的 $\mathcal{PT}$-对称性，Phys. Lett. A416（2021），127669。[23] V. Kostrykin, R. Schrader：具有磁通量的量子线，《数学物理通讯》237（2003），161–179。[24] P. Exner, S. Manko：磁性链图的谱性质，Ann. H. Poincaré 18（2017），929–953。[25] R. Band, G. Berkolaiko：周期网络动量带密度的普适性，Phys. Rev. Lett. 113（2013），13040。[26] D.J. Thouless：准周期紧束缚模型的带宽，Phys. Rev. B28（1983），4272–4276

[27] B. Helffer, Ph. Kerdelhué：关于有理 Harper 方程的总带宽，《数学物理通讯》**173**（1995），335–356。