

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 4 月 28 日現在

機関番号：34310

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2011～2012

課題番号：23840042

研究課題名（和文）周期的シュレディンガー作用素のスペクトル理論の研究

研究課題名（英文）A Study in the spectral theory of the periodic Schrödinger operators

研究代表者

新國 裕昭 (NIIKUNI HIROAKI)

同志社大学・理工学部・助教

研究者番号：90609562

研究成果の概要（和文）：「周期的一般点相互作用に従う 1 次元シュレディンガー作用素の退化したスペクトラルギャップの同定」および「 δ 型頂点条件に従う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構造とバンド端の漸近挙動」に関する結果を得た。

研究成果の概要（英文）：In this research, I identified the degenerate spectral gaps of the one-dimensional Schrödinger operator with periodic generalized point interactions. Moreover, it turned out that the spectrum of periodic Schrödinger operators on a zigzag nanotube with δ type vertex conditions and I obtained the asymptotics of the band edges.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|---------|-----------|---------|-----------|
| 2011 年度 | 1,300,000 | 390,000 | 1,690,000 |
| 2012 年度 | 1,200,000 | 360,000 | 1,560,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 2,500,000 | 750,000 | 3,250,000 |

研究分野：解析学

科研費の分科・細目：研究活動スタート支援

キーワード：シュレディンガー作用素，周期ポテンシャル，点相互作用，スペクトル理論，スペクトラルギャップ，モノドロミー行列，回転数，量子グラフ，ジグザグナノチューブ。

1. 研究開始当初の背景

原子や分子などの微小な粒子の振る舞いは、シュレディンガー方程式と呼ばれる偏微分方程式で記述される。 Δ を通常のラプラス作用素、 $V(x)$ をポテンシャルと呼ばれる関数とすれば、粒子の取りうるエネルギーの範囲は、ヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R}^d)$ (d は空間次元) 上の作用素 $-\Delta + V(x)$ のスペクトルと数学的に

解釈される。 $V(x)$ が何らかの意味で遠方で減衰する場合のスペクトル・散乱理論について多くの研究がなされている一方で、 $V(x)$ が周期的である場合のスペクトル・散乱理論について調べることも固体物理学と密接に関わる重要な研究課題である。ヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R})$ 上のシュレディンガー作用素 $H = -d^2/dx^2 + V(x)$ において、 $V(x)$ が周期関数である場合、Floquet-Bloch の定理に

より, H のスペクトル $\sigma(H)$ はバンド構造を持つ. すなわち, $\sigma(H)$ は内点を共有しない可算無限個の有界閉区間 (バンド) の和集合として表される. 各バンドは, 自然にスペクトルの下から数えて添字付られ, j 番目のバンドを $B_j = [\lambda_{2j-2}, \lambda_{2j-1}]$ と書けば, $\sigma(H) = \bigcup_{j=1}^{\infty} B_j$ が成り立つ. また, 各自然数 j に対して, $\lambda_{2j-2} < \lambda_{2j-1} \leq \lambda_{2j}$ が成り立つ. さらに, j 番目と $j+1$ 番目の連続する 2 つのバンドは, 开区間 $G_j = (\lambda_{2j-1}, \lambda_{2j})$ によって隔てられており, この隙間は H の j 番目のスペクトラルギャップと呼ばれる. 退化したスペクトラルギャップが存在する場合, すなわち, G_k が空集合であるような自然数 k が存在する場合, その退化点 $\lambda = \lambda_{2k-1}$ において, H に対応するシュレディンガー方程式 $H\phi = \lambda\phi$ の 2 つの線形独立な解はともに周期関数となる. その為, 「退化したスペクトラルギャップの存在/非存在を調べる問題」(coexistence problem)は, ポテンシャルの周期性が微分方程式の解の周期性に反映されるか否かを調べる問題となる. 「与えられた自然数 j に対して, j 番目のスペクトラルギャップが空集合か否かを調べる問題」は, Mathieu 作用素などの周期的シュレディンガー作用素に対して古くから研究されている. ディラックのデルタ関数で表されるデルタ型点相互作用が周期的に配列されたポテンシャルに従うシュレディンガー作用素 (クローニツヒ・ペニーハミルトニアン) について, F. Gesztesy 氏, H. Holden 氏, W. Kirsch 氏により coexistence problem が解析され, その後, 吉富和志氏が行った基本周期内に 2 個の点相互作用がある場合の coexistence problem を

解いている. 本研究では点相互作用のクラスを自己共役作用素になる最大限の枠組みに広げた上で, 基本周期内に複数個 (2 個以上) の一般点相互作用がある場合の coexistence problem に関する研究を行ってきた.

2. 研究の目的

本研究の目的は, 周期的シュレディンガー作用素のスペクトルを次の 2 つのテーマに沿って調べることである.

- (I) 周期的一般点相互作用に従う 1 次元シュレディンガー作用素のスペクトルについての研究
- (II) Zigzag nanotube 上のシュレディンガー作用素のスペクトルについての研究

(I)の研究テーマでは, 基本周期内に複数の一般点相互作用がある場合の 1 次元シュレディンガー作用素に対して, coexistence problem を解くことを目的とする. (I)のテーマに関しては, 従来からの継続的な研究である.

(II)の研究テーマでは, zigzag nanotube と呼ばれ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研究を行うことを目的とする. グラフ上のシュレディンガー作用素の研究は, 近年, 光ファイバーや電子回路, 神経回路等の研究において注目を集めており, 特に Zigzag nanotube は, L. Pauling 氏によって 1936 年に芳香分子の数理モデルとして提唱されたもので, 数学的には 1 辺の長さが 1 の六角形の和集合で表されるシリンダー状のグラフを表す. E. Korotyaev 氏および I. Lobanov 氏は, 近年, Zigzag nanotube の各頂点においてキルヒホッフの境界条件を与え, Zigzag nanotube 上の周期的シュレディンガー作用素のスペクトルを解析し, Zigzag nanotube 上の周期的シュレディンガー作用素のスペクトルはバンド構造を持つ事が示され

ている。また、「(1) スペクトラルギャップの幅の漸近的挙動」および「(2) 退化したスペクトラルギャップの存在/非存在」が、Lyapunov 関数, モノドロミー行列等の1次元的な道具を構成して解析されている。また, 近年, T. Cheon氏, P. Exner氏 and O. Turek氏 によって, Y字型に分岐した頂点における境界条件は, キルヒホッフの境界条件以外に δ - δ - δ 型, δ - δ - δ' 型境界条件などに一般化可能であることが提示された。キルヒホッフ境界条件を一般境界条件に置き換えた場合にも同様にスペクトル解析が可能と予想される為, 本研究ではその場合のZigzag nanotube 上のシュレディンガー作用素のスペクトル(特に, (1), (2)の問題)を調べることが目的となる。

3. 研究の方法

当該研究を行うにあたっての主な研究の方法は, 情報の収集とそれをもとにした実際の解析(手計算によるもの)の2種類が挙げられる。従って, 研究の要となる情報収集の手段として次の方法を取り, 研究を進めた。

- (1) 国内外のスペクトル・散乱理論に密接に関連する研究集会に参加し, 最先端の研究成果についての情報を収集した。
- (2) 研究の諸段階において必要な知識を得るために, 数学書を購入した。
- (3) 数学誌に掲載されている論文を読み, 関連分野の情報を取得した。
- (4) スペクトル・散乱理論に関連する研究集会に参加し, 研究発表を行うことで参加者と議論をし, 研究の方針を定めるのに役立てた。特に, ロシアの研究者である Evgeny Korotyaev 先生と2度にわたる議論をできたことは研究の方針を定めるのに大変に役立った。

4. 研究成果

(1) 下記の論文[2]は(I)のテーマに関する研究成果である。論文(I)では, 基本周期内に3個の点相互作用がある場合の1次元シュレディンガー作用素のスペクトルに関する coexistence problem についての成果を発表した。点相互作用は, δ 型および回転行列によって与えられるものを調べた。研究の手法はモノドロミー行列と回転数を用いた。この枠組みでは, モノドロミー行列についての代数方程式を従来の方法で解くことで coexistence problem が解決できた。

(2) 下記の論文[1]は(I)のテーマに関する研究成果である。論文(I)では, 基本周期内に4個の点相互作用がある場合の1次元シュレディンガー作用素のスペクトルに関する coexistence problem についての成果を発表した。点相互作用は, 回転行列で与えられるものを調べた。研究の手法はモノドロミー行列と回転数を用いたが, この枠組みでは, モノドロミー行列の各成分が非常に複雑であり, 従来の方法ではモノドロミー行列に関する代数方程式を解くことが困難であった。そこで, モノドロミー行列を8個の行列に因数分解し, 代数方程式の個数を1つ増やすことで問題を解決するという工夫をした。

(3) (II)の研究テーマに関しては, 1編の論文を執筆し数学誌に投稿を行った段階である。ここではその内容の概要について触れる。当該研究の初段階(1年目)で Korotaev 氏, Lobanov 氏の論文を読み, キルヒホッフの境界条件を持つ Zigzag nanotube 上の周期的シュレディンガー作用素は, 線形代数学で学ぶスペクトル分解定理を用いることにより, ネットレス状の最も基本的な zigzag nanotube の直和とユニタリ同値になることがわかった。この性質は, zigzag nanotube

の各頂点における境界条件を δ 型に変えても変わらなかったため、本研究（2 年目）では、最も基本的な zigzag nanotube において、Carlson 氏（1997 年）、Cheon 氏、Exner 氏、Turek 氏（2009 年）の論文で見られるデルタ型の頂点条件に従う周期的シュレディンガー作用素のスペクトルについて調べることとした。得られた結果は、特別な条件下で、スペクトルがバンド構造を持つことと、バンド端の漸近挙動に関する結果である。

5. 主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 2 件）（すべて査読あり）

[1] H. Niikuni, A periodic Schrödinger operator with two degenerate spectral gaps, *Far East Journal of Mathematical Science*, **71-2** (2012), 205-246.

[2] H. Niikuni, On the degenerate spectral gaps of the one-dimensional Schrödinger operator with periodic point interactions, *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, **44-4** (2012), 2847-2870.

〔学会発表〕（計 7 件）

[1] An example of the periodic Schrödinger operators with two degenerate spectral gaps, 阪大微分方程式セミナー, 2012 年 7 月 6 日, 大阪大学.

[2] An example of the periodic Schrödinger operators with two degenerate spectral gaps, 日本数学会 春季総合分科会(函数方程式論分科会), 2012 年 3 月 26 日, 東京理科大学.

[3] An example of the periodic Schrödinger operators with two degenerate spectral gaps, スペクトル・散乱あきう(秋保)シンポジウム, 2012 年

1 月 9 日, 仙台 秋保温泉 ばんじ家.

[4] A periodic Schrödinger operator with two degenerate spectral gaps, スペクトル・散乱理論とその周辺, 2011 年 12 月 16 日, 京都大学数理解析研究所.

[5] A periodic Schrödinger operator with two degenerate spectral gaps, ランダム作用素のスペクトルと関連する話題, 2011 年 12 月 1 日, 京都大学 人間・環境学研究科棟.

[6] A periodic Schrödinger operator with exactly two degenerate spectral gaps, 2011 夏の作用素論シンポジウム, 2011 年 9 月 3 日, 熊本市国際交流会館 第一会議室.

[7] A periodic Schrödinger operator with exactly two degenerate spectral gaps, 作用素論セミナー, 2011 年 6 月 24 日, 京都大学数理解析研究所.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

新國 裕昭 (NIIKUNI HIROAKI)
同志社大学・理工学部・助教
研究者番号 : 90609562

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし