

平成 30 年 4 月 17 日現在

機関番号：22303

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2017

課題番号：25800085

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ラルギャップの解析

研究課題名(英文) Analysis of Spectral Gaps of Periodic Schroedinger Operators

研究代表者

新國 裕昭(Hiroaki, Niikuni)

前橋工科大学・工学部・講師

研究者番号：90609562

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、量子力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式に関連するスペクトル理論についての研究を行った。本研究で得られた成果の大部分は、カーボンナノチューブと呼ばれる炭素分子に関連する、円筒状の六角格子上に定義された周期的シュレディンガー作用素に対するスペクトルの結果である。本研究では、作用素をグラフ上の自己共役微分作用素として定義をし、量子グラフの観点からそのスペクトルを解析した。周期的に破損したカーボン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についての研究を代表とし、研究実施期間中に6編の本文を出版し成果発表を行った。

研究成果の概要(英文)：In this study, we dealt with the spectral theory on Schroedinger equations, which is a fundamental equation in the field of quantum mechanics. Most of the results on this study are the results on spectra of periodic Schroedinger operators on a hexagonal lattice with cylindrical nanostructure, corresponding to a carbon molecule called a carbon nanotube. In this study, H. Niikuni defined the operator as a self-adjoint differential operators on graph, and examined its spectrum from the point of view of the theory of a quantum graph. On behalf of the paper on the spectra of Schroedinger operators on periodically broken carbon nanotubes, H. Niikuni published 6 related papers during the period of this study.

研究分野：解析学

キーワード：関数解析学 微分方程式論 シュレディンガー方程式 量子グラフ カーボンナノチューブ 周期ポテンシャル バンド構造 スペクトラルギャップ

1. 研究開始当初の背景

ナノサイズの円筒構造を持つ炭素原子のチューブ(カーボンナノチューブ)は、1991年の飯島澄男氏の発見以来、その豊富な機械的特性(電気伝導性・熱伝導性・強度等)が注目され、材料としての可能性が期待されて実用化が進んできた。数学においても、ヨーロッパ数学会会長の Pavel Exner 氏の 1995年の研究をきっかけに定式化が進んだ量子グラフの観点から、カーボンナノチューブに対応する量子力学が登場している状況にあった。

量子グラフは、Pavel Exner 氏のグループを中心にさかんに研究がされていた点相互作用に従うシュレディンガー作用素の理論を、グラフの場合に拡張したものである。量子グラフは、グラフとその上の微分作用素(通常、シュレディンガー作用素)、そしてその微分作用素を自己共役にする頂点条件の3つ組からなる。Korotyaev 氏・Lobanov 氏のグループと Kuchment 氏・Post 氏のグループは 2007 年に個別にカーボンナノチューブに対する量子グラフを解析し、スペクトル理論の基礎を打ち立てることに成功した。前者は、ジグザグ型に分類されるカーボンナノチューブを取り扱っており、カーボンナノチューブ上の周期ポテンシャルを持つシュレディンガー作用素のスペクトルの構造はバンド構造を持つ事を証明するばかりでなく、バンド端の漸近挙動やスペクトラルギャップの存在・非存在、スペクトル逆問題などを扱っている。この場合、バンド構造は1次元の場合とは異なり、可算無限個の有界閉区間の和の部分に加えて、多重度無限大の固有値がスペクトラルギャップの閉包に現れることにより、可算無限個の固有関数の存在がカーボンナノチューブの構造の強度を説明することになる。また、後者のグループは、広くカーボンナノチューブの種類を扱っており、ジグザグ・アームチェア・カイラルの型を問わず、理想的なカーボン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理論を確立させた。

このような研究背景の最中、カーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素に付随する頂点条件は、上記のグループが扱っているキルヒホッフ型以外にも、型や型など多くのものが存在し、多様な量子力学の解明が未解決問題として残されている状況であった。また、現実にカーボンナノチューブが販売されている様子を見ると、純度が100%のものは精製が難しく不純物や炭素原子の欠損・他原子の付着などが発生させるを得ない。しかしながら、それらの状況に対応できるモデルについてスペクトル理論が解明されていない状況にあった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、

- (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

の大きく2つに分類される。

初めに、(I)について述べる。周期的点相互作用に従う1次元シュレディンガー作用素の代表的なものは Dirac の 関数を周期的に配列したポテンシャルを持つシュレディンガー作用素で、Kronig-Penney モデルと呼ばれる。点相互作用は、原点を除いて滑らかな関数空間上に定義された1次元自由シュレディンガー作用素の自己共役拡張を von Neumann の定理からすべて求める際に、一般点相互作用に拡張される。2012年までに、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はバンド構造を持ち、そのいくつかのクラスに対してスペクトラルギャップの存在/非存在を同定する問題を解決していた。(I)の目的はその研究成果の範囲をさらに広く推し進めることを目的とする。

次に(II)について述べる。(II)は、申請段階で大きく2つの問題を想定していた。1つには、カーボンナノチューブ上の周期的シュレディンガー作用素として、型頂点条件に付随する場合のスペクトル解析、2つ目は辺ごとに異なるポテンシャルを持つ場合のスペクトル解析である。まずは既存の論文から解析方法を勉強し実際のモデルの定式化やスペクトル解析を行う必要があった。

3. 研究の方法

まず、(I)の研究は、モノドロミー行列を用いて行う。実際、一般点相互作用に従う1次元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退化点が存在するか調べる問題は、モノドロミー行列に関する代数方程式の可解性に帰着される。雑誌論文[1]では、基本周期内に4つの型点相互作用を含む場合の1次元周期的シュレディンガーを扱って、モノドロミー方程式を解くことによってスペクトラルギャップの存在/非存在についての解析を行っている。なお、スペクトラルギャップの存在は、対応する分子の電気伝導性と密接に関わる問題である。固体物理学においては、結晶のスペクトラルギャップが存在し、ギャップ内にフェルミ順位があるときには絶縁体として振る舞い、フェルミ順位がバンド内にあるときは金属的に振舞うことが知られている。

次に、(II)の研究は、Korotyaev 氏・Lobanov 氏の手法を活用して行った。彼らの手法は、初めにジグザグ型カーボンナノチューブ上の周期的シュレディンガー作用素の縮退を

行う。実際、ジグザグ型カーボンナノチューブの縮退版として、ネックレスの形状を持つグラフ（退化ジグザグカーボンナノチューブ）を用意し、標的となるジグザグ型カーボンナノチューブのジグザグの個数だけの周期的シュレディンガー作用素を用意する。その直和ともとのシュレディンガー作用素はユニタリ同値となる為、縮退したシュレディンガー作用素のスペクトルを調べる問題へと帰着される。縮退された問題は、1次元に準ずる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問題となり、Hill 方程式の理論との親和性が強くなる。実際、各辺上の微分方程式の解から、スペクトルの判別式（Lyapunov 関数）が構成でき、区間 $[-1,1]$ の Lyapunov 関数による逆像がスペクトルになる。以下の「研究成果」で述べる様々な種類のカーボンナノチューブに対してスペクトルの判別式を構成し、Laguerre の定理・Rouche の定理など関数論的知識と組み合わせることによってスペクトルの構造や、スペクトルギャップの存在/非存在の問題、スペクトルのバンド端の漸近挙動に関する結果を導出していった。

4. 研究成果

論文[1]では、基本周期内に4つの型点相互作用を含む場合（強度や間隔も一般には異なる場合）の周期的シュレディンガー作用素のスペクトルギャップの存在/非存在の問題を扱った。点相互作用の強度や間隔の状況に応じて、スペクトルギャップの存在/非存在を分類し、また、スペクトルギャップが存在する場合は、その番号についての成果も得られた。

論文[2]では、型頂点条件に従うカーボン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理論に関する最初の結果を得た。Korotyaev 氏・Lobanov 氏の手法によって、考察対象の作用素を縮退した周期的シュレディンガー作用素の直和で表し、そのうちの1つの作用素のスペクトルを解析したものである。キルヒホッフ型頂点条件の場合と比較し、スペクトルの判別式には型頂点条件の強度に関するパラメータが含まれて複雑になるが、結果的には、スペクトルはバンド構造を持ち、多重度無限大の固有値をスペクトルギャップの閉包内に有する。また、バンド端の漸近挙動に関する結果も得られ、結果は型頂点条件の強度の分だけ漸近挙動が平行移動することがわかった。

論文[3]では、縮退したカーボンナノチューブの形状を崩したモデルを扱った。本論文で扱っている結果は、縮退したカーボンナノチューブのネックレス構造を一般化し、ダンベル型の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関するものである。このモデルは、六角格子の層にひし形の層を追加したカーボンナノチューブの縮退版と

いうことになる。本研究では、スペクトルギャップの存在/非存在が、グラフの構造と対応している様子が確認された。実際、ダンベル型のグラフは、円・円・線の部品が周期的につながっているグラフであるが、この場合、スペクトルギャップは下から順に非空・非空・空が周期的に繰り返されることになる。本論文では、スペクトルギャップの漸近挙動に関する結果も得た。本研究成果を得るためには、3次方程式の解析的解の表示を用いている。3次方程式は、1の3乗根を用いた解の公式が有名であるが、漸近挙動を得るにあたってその解の表示ではテイラー展開を複雑にさせてしまうという困難が生じる。しかし、3次方程式の解が異なる3つの実数解を持つ場合には、ピエト解と呼ばれる解析的な解の表示があり、テイラー展開との相性が良いことから結論を得るに至った。

論文[4]は、論文[3]の結果をさらに拡張したものである。カーボンナノチューブの構造としては、ひし形の層をさらに多く追加し、縮退させると円・円・円・線が繰り返される周期的グラフとなる。この場合は、論文[3]の結果が拡張され、スペクトルギャップは下から順に非空・非空・非空・空が繰り返される。本論文でもスペクトルのバンド端の漸近挙動に関する結果を含めている。論文[4]では4次方程式を扱うことになるが、奇数べきの項が不在の4次方程式を解析すればよいことがわかり、本質的には2次方程式を解いてその解を漸近展開することになる。つまり、問題は論文[3]より簡略化される。グラフの構造とスペクトルギャップの存在/非存在の対応は、さらに一般化できるか否かが問題になるが、次のステップに進むには5次方程式を解かなければならないため、本研究課題としてはこれ以上先には進めていない状況である。

論文[5]は、カーボンナノチューブの構造ではなく、カーボンナノチューブ上に定義される周期的シュレディンガー作用素の枠組みを広げた結果を得ている。「研究の目的」の(II)で述べた問題のひとつである、辺ごとに異なるポテンシャルを持つ場合のスペクトルに関する結果を得た。縮退したカーボンナノチューブの回転方向と進行方向で異なる周期ポテンシャルを仮定した場合、ポテンシャルを調整することによって、ポテンシャルが共通の場合には決して閉じることがなかった番号のスペクトルギャップを消すことができることがわかった。つまり、カーボンナノチューブのスペクトル構造にさらに多くの可能性を見出したことになる。本研究の結果を得るために、微分方程式的な手法をこれまで以上に用いて解析している。実際、スペクトルの判別式の挙動（1階・2階の導関数の符号）を、対応する Hill 方程式の解を用いて表示し、Magnus-Winkler の Hill 方程式に対する解析方法を拡張して用いることによって結論を得た。

論文[6]は、周期的に破損したカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素のスペクトルについて調べたものである。なお、論文[2]～[5]では、縮退した量子グラフの一部のみを扱ったが、論文[6]ではすべてを扱っている。カーボンナノチューブの精製過程において、ニッケル・コバルト・イットリウム・鉄などの金属を要する。その為、生成されたカーボンナノチューブにはそれらの金属の粒子が付着してしまい、除去するための酸処理が必要となる。この過程でカーボンナノチューブを構成する炭素原子が剥がれ落ち、実際に出来上がるカーボンナノチューブには欠損が生じているという問題点がある。また、材料として使用されているうちに摩擦によって欠損が生じることもありうる。そこで、理論モデルとしても欠損を持つカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素のスペクトル理論が必要になる。ランダム・概周期などのモデルが適当であると思われるが、本論文では、この時点での研究成果で培った手法を活用するために、特定の周期的な破損をした場合のカーボンナノチューブに対するスペクトル構造の解析を行った。スペクトルはバンド構造を持ち、多重度無限大の固有値を有する。得られた成果は、スペクトラルギャップの存在/非存在に関するものである。ただし、解析の方法は、破損したカーボンナノチューブを扱う場合にはより難しくなる。実際、破損していない場合のスペクトルの判別式のうち正則関数(特に整関数)であるものが特異点を有することになり、結果的に有理型関数となる。そのため、Roucheの定理は有理型関数に対するものを用いる必要が生じ、零点の個数と極の個数に注意しながら解析を行う必要がある。当該研究成果は、日本数学会函数解析分科会の特別講演として発表をしたほか([20])、シンガポールで開催された材料系の研究集会([19])や、ドイツで開催された研究集会「Partial Differential equations on Graph」([26])でも招待講演の機会を得た。

当該研究は、次の科学研究費課題「新しいカーボンナノチューブのバンドスペクトル構造の研究とその周辺」(若手研究(B), 17K14221)に引き継ぐこととなる。

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6件)

- [1] H. Niikuni, On the degenerate spectral gaps of the 1D Schrödinger operators with 4-term periodic delta potentials, *Far East Journal of Mathematical Science*, **78-1** (2013), 131-155.
 [2] H. Niikuni, Spectra of periodic Schrödinger

operators on the degenerate zigzag nanotube with δ type vertex conditions, *Integral Equations and Operator Theory*, **79-4** (2014), 477-505.

[3] H. Niikuni, Decisiveness of the spectral gaps of periodic Schrödinger operators on the dumbbell-like metric graph, *Opuscula Mathematica*, **35-2** (2015), 199-234.

[4] H. Niikuni, Spectral band structure of periodic Schrödinger operators on a generalized degenerate zigzag nanotube, *Tokyo Journal of Mathematics*, **38-2** (2015), 409--438.

[5] H. Niikuni, Spectral band structure of periodic Schrödinger operators with two potentials on the degenerate zigzag nanotube, *Journal of Applied Mathematics and Computing*, **50-1**(2016), 453--482.

[6] H. Niikuni, Schrödinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube, *Proceedings of the Indian Academy of Sciences-Mathematical Science*, Vol. 127, No.3 (June 2017), pp. 471--516.

[学会発表](計29件)

[1] 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、数理解析セミナー、2013年7月4日、首都大学東京。

[2] 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、2013夏の作用素論シンポジウム、2013年9月7日、広島大学。

[3] On the spectrum of periodic Schrödinger operators on a quantum graph with the δ - δ - δ vertex conditions, QMATH 12: Mathematical Results in Quantum Mechanics, 2013年9月10日、Humbolt university of Berlin.

[4] 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、日本数学会 秋季総合文化会(函数方程式論文化会)、2013年9月25日、愛媛大学。

- [5] 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, 信州数理解析セミナー, 2013 年 10 月 29 日, 信州大学工学部若里キャンパス.
- [6] 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, Linear and Nonlinear Waves, No.11, 2013 年 11 月 1 日, ピアザ淡海 滋賀県立県民交流センター.
- [7] 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, 学習院大学スペクトル理論セミナー, 2013 年 11 月 9 日, 学習院大学.
- [8] 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, 微分方程式の総合的研究, 2013 年 12 月 22 日, 東京大学 数理解析研究所.
- [9] 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, スペクトル・散乱鹿児島シンポジウム, 2014 年 1 月 12 日, 鹿児島大学.
- [10] 一般退化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について, 愛媛大学解析セミナー, 2014 年 6 月 21 日, 愛媛大学.
- [11] Spectral band structure of periodic Schrödinger operators on generalized degenerate zigzag nanotubes, Operator Theory Analysis and Mathematical Physics (OTAMP 2014), 2014 年 7 月 8 日, Department of Mathematics Stockholm University (Sweden).
- [12] 一般退化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について, 2014 年夏の作用素論シンポジウム, 2014 年 9 月 8 日, セミナー・カルチャーセンター臨湖(勤労者福祉会館).
- [13] Spectral band structure of periodic Schrödinger operators on generalized degenerate zigzag nanotubes, 日本数学会 秋季総合文化会(函数解析学文化会), 2014 年 9 月 25 日, 広島大学.
- [14] 一般退化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について, 信州関数解析シンポジウム, 2014 年 12 月 1 日, 信州大学.
- [15] Schrödinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube, XVIII International Congress on Mathematical Physics, Young Researchers Symposium, 2015 年 7 月 25 日(土), Pontificia Universidad Catolica de Chile (チリ).
- [16] 周期的に破損したカーボンナノチューブのスペクトルについて, 2015 年夏の作用素論シンポジウム, 2015 年 9 月 6 日(日), フェニックス・プラザ(福井市田原).
- [17] Spectral structure of periodic Schrödinger operators with two potentials on the degenerate zigzag nanotubes, 日本数学会 秋季総合分科会(函数解析学分科会), 2015 年 9 月 13 日, 京都産業大学.
- [18] Schrödinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube, Kochi Quantum Week, Autumn 2015, 2015 年 10 月 12 日, 高知工科大学.
- [19] Schrödinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube, WCSM-2016(BIT's 2nd Annual World Congress of Smart Materials-2016), 2016 年 3 月 5 日, Grand Copthorne Waterfront Hotel (シンガポール).
- [20] 特別講演「カーボンナノチューブのバンドギャップスペクトル構造」, 日本数学会 春期総合分科会(函数解析学分科会), 2016 年 3 月 16 日, 筑波大学.
- [21] Schrödinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube, 東京大学解析学火曜セミナー, 2016 年 6 月 14 日, 東京大学.
- [22] Schrödinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube, 偏微分方程式セミナー(北大 PDE セミナー), 2016 年 7 月 1 日,

北海道大学.

[23] Schrödinger operators on a zigzag supergraphene-based carbon nanotube, QMath13: Mathematical Results in Quantum Mechanics, 2016年10月8日, Georgia Institute of Technology (アメリカ合衆国・アトランタ).

[24] スーパーカーボンナノチューブのスペクトルについて, 愛媛大学スペクトル・散乱セミナー, 2016年12月22日, 愛媛大学.

[25] On the spectra of periodic Schrödinger operators on a super carbon nanotube, 日本数学会 春期総合分科会(函数解析学分科会), 2017年3月24日, 首都大学東京.

[26] Spectral analysis of periodic Schrödinger operators on a broken carbon nanotube, Nonlinear Partial Differential Equations on Graphs, 2017年6月19日, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach (ドイツ・フランクフルト).

[27] Spectral problem for periodic Schrödinger operators with two distinct potentials on the degenerate zigzag carbon nanotube, Equadiff 2017, 2017年7月24日, The Slovak University of Technology (スロバキア・ブラチスラバ).

[28] 多重結合からなる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について, 日本数学会函数解析学分科会, 2017年9月11日, 山形大学.

[29] On the spectra of periodic Schrödinger operators on a super carbon nanotube, Differential Equations and Networks, 2018年1月7日, 東北大学.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

新國 裕昭 (Niikuni, Hiroaki)

前橋工科大学・総合デザイン工学科・講師

研究者番号: 90609562