

令和 4 年 5 月 6 日現在

機関番号：22303

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2021

課題番号：17K14221

研究課題名(和文)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

研究課題名(英文)Studies on spectral band structures on carbon nanotubes and their related topics

研究代表者

新國 裕昭(Niikuni, Hiroaki)

前橋工科大学・工学部・准教授

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)：本研究課題を通して、量子グラフの観点から様々な種類の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解析を行ってきた。第1のモデルは、周期的に破損したカーボンナノチューブ、第2のモデルは、カルビン結合を含むカーボンナノチューブ、第3のモデルは多重結合を有するカーボンナノチューブ、そして第4のモデルは不純物を含有するカーボンナノチューブである。また、バルクは伝導体だがエッジは絶縁体と表現されるトポロジカル絶縁体的な性質を量子グラフの手法で考察するため、グラフェン上のバルクハミルトニアン・エッジハミルトニアンのスペクトルの比較をする研究も行っている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

カーボンナノチューブ・グラフェンは、現代の科学技術において欠くことのできない材料であり、その性質を解明することは現代産業を支える社会的意義を有する。特に、それらの電気伝導性の性質は、対応するシュレディンガー方程式のスペクトルの性質を調べることで数学的に解明される。

研究成果の概要(英文)：Throughout this project, we studied spectral structure of Schroedinger operators on various types of carbon nanotubes from the point of view of the corresponding quantum graph (the differential operators on the metric graphs). The first model is a periodically broken carbon nanotube. The second one is a zigzag supergraphene-based carbon nanotube. The third one is zigzag carbon nanotube with multiple bonds. The last one is a zigzag carbon nanotube with impurities.

In the field of the solid states physics, topological insulators are outstanding materials, which behave as an insulator in their interior but contain conducting states on their surfaces. In order to consider this nature by the method of quantum graph, we compared the spectra of Schrodinger operators on graphene as the whole space with graphene with zigzag boundaries.

研究分野：数学

キーワード：シュレディンガー方程式・作用素 スペクトル理論 周期ポテンシャル 量子グラフ カーボンナノチューブ グラフェン 埋蔵固有値 Shnol 型定理

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

円筒構造を持つ炭素の同素体であるカーボンナノチューブは、1991年の飯島澄男氏による発見以降、その優れた材料的特性が注目され、数学・物理学・化学・工学等の各分野からカーボンナノチューブに対する量子力学の理論が構築されることに対して多くの関心が寄せられていた。一方、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対して、解が具体的に構成できるモデルの1つとして点相互作用(零距离型ポテンシャル)がある。ディラックのデルタ関数はその代表的なポテンシャルであり、それを含む一般点相互作用の理論が進む中、1995年の Pavel Exner 氏の論文以降、量子グラフの分野が立ち上がることとなった。量子グラフは、グラフ(辺と頂点の集合)上の(微分作用素としての)シュレディンガー作用素のことである。頂点において適切な境界条件を課すことにより、グラフ上のシュレディンガー作用素は自己共役作用素となる。グラフ上のシュレディンガー作用素を自己共役にする頂点条件の豊富さは新たに豊富な量子力学を生み出すこととなった。その流れの中で、2007年には、Evgeny Korotyaev 氏と Igor Lobanov 氏のグループと Peter Kuchment 氏と Olaf Post 氏によるグループがそれぞれ個別に、量子グラフの手法を用いてカーボンナノチューブを表現し、そのスペクトル解析の結果を与えることとなった。前者は、ジグザグ型カーボンナノチューブに限定しながらも、スペクトルのバンド構造、バンド端の漸近挙動、スペクトル逆問題など豊富な結果を有し、更には磁場下のカーボンナノチューブ等研究を深化させる方向へ進めていた。一方、後者は、ジグザグ型に限定しないあらゆる種類(ジグザグ型・アームチェア型・カイラル型)のカーボンナノチューブに対してスペクトルの構造を明らかにし、ひし形の層も織り交ぜるなど現実ではまだ見つかっていない分子構造に対しても数学的に先行して物性の性質を明らかにすることの重要性を訴える姿勢を見せ、研究を広げる方向に進めていた。

研究代表者は、これらの背景を受けて、カーボンナノチューブに対応する量子力学の数学的理論を更に広げる研究を若手研究(B)の研究課題「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」の中で行い、カーボンナノチューブに関する4編の論文を執筆していたが、いずれも退化したジグザグ型カーボンナノチューブに対する研究であった。量子グラフとして記述されたジグザグ型カーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素は、1周あたりの六角格子の個数分の退化したジグザグ型カーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素の直和として表される。そのため、一般のジグザグ型カーボンナノチューブとは関連性はあるものの、直和分解された1部に対する考察のみを行っていた状況である。実際に考察していたモデルは、型頂点条件のみを持つジグザグ型カーボンナノチューブ、ひし形の層を複数織り交ぜることに対応する退化したジグザグ型カーボンナノチューブ、辺ごとに異なる2種類のポテンシャルを課した時の退化したジグザグ型カーボンナノチューブなどである。また、周期的に破損したカーボンナノチューブに対する研究を論文に取りまとめ、口頭発表を行いながら出版を待つ段階で、本研究課題へと引き継ぐ形となった。

2. 研究の目的

本研究では、先行する Evgeny Korotyaev 氏と Igor Lobanov 氏の研究と Peter Kuchment 氏と Olaf Post 氏の研究を基盤とし、量子グラフの手法を用いてより複雑な構造を持つカーボンナノチューブ上に定義されるシュレディンガー作用素のスペクトル理論を構築することを目的とする。特に、先行する研究課題「周期的シュレディンガー作用素のスペクトラル」の手法を活用しながら、下記のような対象にスペクトルの構造の解析を行った。

- (I) 周期的に破損したジグザグカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素
 - (II) カルビン結合によるジグザグカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素
 - (III) 多重結合によるジグザグカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素
 - (IV) 型不純物を含有するジグザグ型カーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素
- また、近年「内部(バルク)は絶縁体だが表面(エッジ)は伝導体」の構造を持つとされるトポロジカル絶縁体的な性質を量子グラフの手法を用いて考察する手法を確立するため、
- (V) ジグザグ境界を有するグラフエン上のシュレディンガー作用素
- に対してのスペクトル解析を行い、Peter Kuchment 氏と Olaf Post 氏による全空間の場合とスペクトルの比較を行う研究も行った。

3. 研究の方法

Evgeny Korotyaev 氏と Peter Kuchment 氏の2007年の研究によって、ジグザグ型カーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素は、対応する退化したジグザグ型カーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素の直和とのユニタリ同値であることが示されている。(I)~(III)の研究では、まず、その手法を用いて、それぞれのカーボンナノチューブに対応する退化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を量子グラフとして構成する。その後、退化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に対して、周期性を利用することにより direct integral decomposition を行い、スペクトルの判別式を構成する。次に、得られた

スペクトルの判別式の解析を行う。はじめに、シュレディンガー作用素のポテンシャル項がない場合（非摂動の場合）のスペクトルの判別式を調べる。非摂動の場合は、判別式が具体的に構成できるため、微分法を活用してその挙動を調べることは容易である場合が多い。次に、複素解析的な手法（Rouche の定理、Laguerre の定理）を用いて、摂動がある場合の判別式の挙動を調べる。判別式は、対応する 1 次元周期的シュレディンガー作用素の判別式や基本解を用いて構成されるため、Hill 方程式の理論においてそれらの性質がよく知られていることから一般の摂動がある場合の判別式の解析を行うことができる。また、(IV)は不純物がカーボンナノチューブの周期性を壊すように配列されたモデルを扱っているため、(I)～(III)の手法は用いることができない。(IV)では、不純物のない頂点は通常キルヒホッフ頂点条件によって表現し、不純物に対応する頂点では 型 の頂点条件を課すことで、量子グラフとして不純物を含有するジグザグ型カーボンナノチューブを定式化している。(IV)では、不純物からなる 2 つの輪を空間対称的にジグザグ型カーボンナノチューブに含めたモデルを扱っている。空間対称性を利用することにより、カーボンナノチューブ上の関数を奇関数と偶関数の直和として表すことができることを利用し、Dirichlet および Neumann 境界条件付きのカーボンナノチューブの半空間を解析する問題へと帰着してスペクトル解析を行った。半空間上の量子グラフのスペクトル解析は、2008 年の Pierre Duclos 氏、Pavel Exner 氏、Ondrej Turek 氏の論文の方法を応用することで行っている。(V)では、(IV)で境界付きのカーボンナノチューブのスペクトル解析を行った際に培った方法を活かし、ジグザグ境界付きのグラフエン上のシュレディンガー作用素のスペクトル解析を行い、Peter Kuchment 氏と Olaf Post 氏によって先行して得られていた全空間の場合とスペクトルの構造の比較を行った。

4. 研究成果

(I) 周期的に破損したジグザグカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素

論文「Schrödinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube」において、周期的に辺が破損したジグザグ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の構造を明らかにした。なお、辺の破損は、破損後のカーボンナノチューブの基本領域ができるだけ小さくなるものを選んでいく。辺の欠損がない場合、対応するスペクトルの判別式は正則関数となる。一方で、本研究のような辺の欠損がある場合、対応するスペクトルの判別式は特異性を有し、有理型関数となる。従って、Rouche の定理を用いる際には、零点の個数のみならず極の個数にも気を配りながら解析を行う必要がある。スペクトルの判別式が有理型関数となる場合のカーボンナノチューブのスペクトル解析は本研究が最初に扱った例であり、解析の手法が先行研究と異なる点があることが本研究の独創的な点である。得られた成果は、ドイツの Oberwolfach 研究所で開催された研究集会「Nonlinear Partial Differential Equations on Graphs」などで口頭発表を行い、国内外で成果の周知を行った。

(II) カルビン結合によるジグザグカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素

論文「Schrödinger operators on a zigzag supergraphene-based carbon nanotube」において、炭素が鎖状に (1~3 重結合によって) つなげたカルビン結合を考慮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解析を行った。なお、カルビン結合を考慮したグラフエンはスーパーグラフエンとして周知されていたが、カーボンナノチューブの場合を考察したのは本研究が初めてであると思われる。カルビン結合の複雑さから、本研究の場合にスペクトルの判別式を導出する移動行列は 8 次正方行列となった。その行列式を注意深く計算し、スペクトルの判別式を得る必要があった。また、得られたスペクトルの判別式は、対応する 1 次元 Hill 方程式の判別式の 6 次式として表された。スペクトラルギャップが規則的に (ポテンシャルに依らずに) 必ず閉じる部分があること、また、スペクトラルギャップの端点の漸近挙動に関する結果も得られた。得られた成果は、東北大学で開催された研究集会「Differential Equations and Networks」など国内外の研究集会で成果の周知を行った。

(III) 多重結合によるジグザグカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素

論文「On the spectra of Schrödinger operators on zigzag nanotubes with multiple bonds」において、基本領域内の 3 辺が一般の N 重結合を持つ場合のジグザグ型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解析の研究を行った。量子グラフとして記述されるカーボンナノチューブの研究において、多重結合を考慮して行われた研究は当該研究のみである。特に、炭素がカーボンナノチューブの分子構造を持つ場合には、必ず 2 重結合が含まれることや、炭素に変わる原子が含まれたナノチューブを考察する場合には、一般の多重結合を考慮に入れておくことは重要であると考えられる。先行研究を拡張する位置付けでありながら、多重結合の本数を様々に設定することにより、通常ジグザグ型カーボンナノチューブとは異なるスペクトル構造の結果が得られた。得られた成果は、日本数学会関数解析学分会において口頭での成果の周知を行った。2017 年に論文掲載受理となり、2019 年に掲載されたが、どちらのタイミングにおいても研究成果として報告を漏らしてしまったため、ここで報告する。

(IV) 型不純物を含有するジグザグ型カーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素

論文「Existence of eigenvalues embedded in the spectral bands of Schrödinger operators on carbon nanotubes with impurities」において、空間対称的に配置された 型不純物の輪を 2 つ含有するカーボンナノチューブのスペクトル解析を行った。空間対称性を利用することにより、考察対象のカーボンナノチューブ上のシュレディンガー作用素を、Dirichlet および Neumann

境界条件の課された半空間のシュレディンガー作用素の直和に分解することにより、バンド内に埋蔵固有値が存在する場合があることを示した。特に、スペクトルのバンドの指数に応じて型不純物の強度を調節するとバンド内の埋蔵固有値の個数の下限の評価が得られることを示した。得られた成果は、ポルトガルのリスボン大学で開催された研究集会「IWOTA 2019」等、国内外の研究集会での口頭発表を通じて周知を行った。

(V) ジグザグ境界を有するグラフェン上のシュレディンガー作用素

近年、物性物理学の分野において、内部（バルク）は絶縁体だが表面（エッジ）は伝導体であると表現されるトポロジカル絶縁体が注目を集めている。2013年の Gian Michele Graf 氏と Marcello Porta 氏の論文の解釈に依れば、この性質は全空間上に定義されたシュレディンガー作用素（バルクハミルトニアン）と境界付きの半空間上に定義されたシュレディンガー作用素（エッジハミルトニアン）のスペクトルの比較によって行われる。特に、バルクハミルトニアンにおいてはレゾルベント集合に属すエネルギー準位が、エッジハミルトニアンの絶対連続スペクトルに属す様相が観測されれば、数学的にトポロジカル絶縁体の性質をとらえたと考えられるであろう。本研究では、論文「Edge states of Schrödinger equations on graphene with zigzag boundaries」において、グラフェンの対応するバルクハミルトニアンとエッジハミルトニアンのスペクトルの比較を行った。ここで、バルクハミルトニアンは Peter Kuchment 氏と Olaf Post 氏の先行論文で概ね解析が行われていたため、主な解析対象はジグザグ境界を有するグラフェンのスペクトルである。得られた結果は、バルクハミルトニアンにおいては絶対連続スペクトルの埋蔵固有値ではなかったエネルギー準位が、エッジハミルトニアンにおいては埋蔵固有値として観測されるというもので、トポロジカル絶縁体の性質とは異なるが、量子グラフの観点からバルクハミルトニアンとエッジハミルトニアンのスペクトルを比較する最初の例が得られたため、今後は量子グラフの手法でトポロジカル絶縁体の性質を有する分子構造を探することを検討したい。得られた成果は、オンライン開催された国際研究集会「姫路偏微分方程式研究」などにおいて口頭発表による周知を行った。

本研究の内容は、次期研究課題「不均質なグラフェン・カーボンナノチューブの量子グラフ描像」へと継続する。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hiroaki Niikuni	4. 巻 76
2. 論文標題 Edge States of Schroedinger Equations on Graphene with Zigzag Boundaries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Results in Mathematics	6. 最初と最後の頁 55-81
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s00025-021-01361-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroaki Niikuni	4. 巻 110
2. 論文標題 Existence of eigenvalues embedded in the spectral bands of Schroedinger operators on carbon nanotubes with impurities	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Letters in Mathematical Physics	6. 最初と最後の頁 387-420
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s11005-019-01220-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroaki Niikuni	4. 巻 23, 5
2. 論文標題 Schroedinger operators on a Zigzag Supergraphene-Based Carbon Nanotube	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Communications in Computational Physics	6. 最初と最後の頁 1434-1475
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.4208/cicp.120715.080517a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroaki Niikuni	4. 巻 127, No.3
2. 論文標題 Schroedinger operators on a periodically broken zigzag carbon nanotube	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Proceedings of the Indian Academy of Sciences-Mathematical Science	6. 最初と最後の頁 471-516
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s12044-017-0342-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroaki Niikuni	4. 巻 62
2. 論文標題 On the spectra of Schroedinger operators on zigzag nanotubes with multiple bonds	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Funkcialaj Ekvacioj	6. 最初と最後の頁 255-283
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1619/fesi.62.255	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計15件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 Edge states of Schroedinger equations on graphene with zigzag boundaries
3. 学会等名 Himeji Conference on Partial Differential Equations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 On the eigenvalues in the spectral bands for carbon nanotubes with impurities
3. 学会等名 Equadiff2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 Embedded eigenvalues in the spectral bands for carbon nanotubes with impurities
3. 学会等名 Iwota2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 On the eigenvalues embedded in the spectral bands for carbon nanotubes with impurities
3. 学会等名 Qmath14 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 Spectral analysis for quantum graphs with periodicity and symmetric impurities -Overview and New results- I
3. 学会等名 幾何構造がもたらすスペクトル解析における新展開 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 Spectral analysis for quantum graphs with periodicity and symmetric impurities -Overview and New results- II
3. 学会等名 幾何構造がもたらすスペクトル解析における新展開) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 型不純物を含有するカーボンナノチューブの埋蔵固有値の個数評価
3. 学会等名 The 17th Linear and Nonlinear Waves (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 Estimates of the number of the eigenvalues embedded inside the spectral bands of Schroedinger operators on carbon nanotubes with impurities
3. 学会等名 グラフ上の逆問題、スペクトル解析と関連課題研究ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 On the eigenvalue embedded in the spectral bands of Schroedinger operators on carbon nanotubes with impurities
3. 学会等名 XIX International Congress on Mathematical Physics (ICMP)- Young Researchers Symposium
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 型不純物を含有するカーボンナノチューブのスペクトルについて
3. 学会等名 2018夏の作用素論シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 シュレディンガー方程式を解いて、カーボンナノチューブ内の電子を探る
3. 学会等名 筑波大学付属駒場高等学校 数学特別講座
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 Spectral analysis of periodic Schroedinger operators on a broken carbon nanotube
3. 学会等名 Nonlinear Partial Differential Equations on Graphs (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 Spectral problem for periodic Schroedinger operators with two distinct potentials on the degenerate zigzag carbon nanotube
3. 学会等名 Equadiff 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本数学会函数解析学分会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroaki Niikuni
2. 発表標題 On the spectra of periodic Schroedinger operators on a super carbon nanotube
3. 学会等名 Differential Equations and Networks (招待講演)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------