

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24年5月14日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008～2011

課題番号：20540204

研究課題名（和文）シュレーディンガー作用素のスペクトル解析に基づく超格子構造の解析

研究課題名（英文）Analysis of superlattice structure using spectral analysis of Schroedinger operator

研究代表者

小栗 修 (OGURISU OSAMU)

金沢大学・数物科学系・准教授

研究者番号：80301191

研究成果の概要（和文）：超格子デバイスの各種の数学的モデルのスペクトル構造について研究し、以下の結果を得た。点相互作用のシュレーディンガー作用素の固有状態の個数について、1次元の場合に結合係数が正值という制約下で知られていた結果を一般の場合に拡張した。さらに従来は未知であった2次元3次元の場合にも拡張できた。また自然に離散シュレーディンガー作用素の問題へと拡張できるが、1次元では類似の結果を得て、高次元では双曲性に依存した結果となることが判った。

研究成果の概要（英文）：We studied spectral structure of some mathematical model of superlattice semiconductor device. Our results are as follows; we studied the number of eigenvalues of Schroedinger operator with point interactions. In one dimensional case, we extended the known results under some restrictions to the ones without the restrictions. In two and three dimensional cases, though any results are unknown, we obtained the new results. We can treat discrete version of these models. We obtained similar results in one dimensional case and proved the dependence on the hyperbolicity in multidimensional cases.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
2009年度	700,000	210,000	910,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
2011年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	2,900,000	870,000	3,770,000

研究分野：関数方程式論

科研費の分科・細目：数学・大域解析学

キーワード：超格子、シュレーディンガー作用素、点相互作用

1. 研究開始当初の背景

超格子デバイスは半導体薄膜を積層させて製造される半導体デバイスである。電子波フィルターとして用いるときに透過域と遮断域が生成されることが知られていたが、その他に準透過域という制御の難しい領域も生

じる。超格子デバイス効率的な設計のためにもその生成の原理の解明が必要とされているが、その解析は逆散乱問題の一つでもあり、困難な問題である。

数学的モデルとして超格子構造を考えるとときに重要なモデルとして、点相互作用のシュ

レーディンガー作用素のモデルならびに摂動を受けた離散シュレーディンガー作用素のモデルがあり、本研究でもこの2つのモデルを扱った。

点相互作用のモデルは、数理物理における古典と言ってよいものであり、S. Albeverio, F. Gesztesy らによる著書「Solvable Models in Quantum Mechanics」が良く知られているが、主に順問題のみが扱われていて、超格子デバイスとの対応を考える上では十分に研究されているとは言い難い状況である。

また離散シュレーディンガーのモデルは、これも古典的であるとともに、近年、B. Simon や M. Zinchenko を始め、G. Teschl など、多くの数学者が様々な状況を設定して研究が進展しているものである。ただし、これも超格子モデルと関連づけた研究はみられなかった。

2. 研究の目的

超格子モデルの解析は、数学的には階段状のポテンシャルを伴う1次元のシュレーディンガー作用素の散乱問題・逆散乱問題である。しかしながら、階段状のポテンシャルはその形状の単純さに反してパラメータが多過ぎて、順問題においてさえも、直接の解析には不向きである。

そこで、理想化されたモデルとしての有限個の点相互作用のシュレーディンガー作用素ならびに有限の摂動を受けた離散シュレーディンガー作用素のスペクトル解析を行う。特に、固有値（束縛状態）の個数ならびに共鳴状態の存在について詳しく調べることを目標とする。さらに離散シュレーディンガーで超格子に対応する場合は、世界的にもまだ手つかずの領域であり、Albeverio らの連続版に対応する結果との対応・関連を調べることを目標とする。

3. 研究の方法

点相互作用の場合、超格子モデルとの関連では有限個のポテンシャルの場合が重要である。多くの先行研究はむしろ無限個のポテンシャルの場合が中心の研究対象となっており、有限個の場合には束縛状態や共鳴状態の個数さえも未確定であり、まずはその詳しい評価を得る事を目的とした。

束縛状態はグリーン関数の極に対応し、共鳴状態はグリーン関数の解析接続の特異点と

して定義され、都合の良いことにこのモデルのグリーン関数が古典的結果として既に知られている。本研究では、Gersgorin's circle と呼ばれる、数値解析で良く知られた評価を用いたのが特徴である。また、グリーン関数と固有関数の境界条件の非自明な関係を導き、それを用いた評価を行った。

離散シュレーディンガー作用素の場合、まずは1次元、つづけて多次元の正方格子での考察を行った。これらの場合も摂動のない場合のグリーン関数は知られていたが、摂動をかけた場合にその極や特異点を調べるのに適した表現は知られておらず、その構成をまず行なった。特に多次元の場合は積分表示しか得られないので、点相互作用とは異なる評価手法が必要となった。

4. 研究成果

(1) 点相互作用の場合

① 超格子の問題は Albeverio たちの研究で有名なシュレーディンガー作用素の点相互作用のモデルとの関係が深いので、そのスペクトル構造を調べることは有用である。その連続スペクトルは $[0, \infty)$ で、その他に点相互作用の効果により負の固有値を持つと知られている。特に点相互作用の強度が全て負の場合には、Albeverio と L. Nizhnik の研究により負の固有値の個数と点ポテンシャルの個数が一致する必要十分条件が見い出されている(2005年)が、相互作用の強度が全て負でない場合については未知であった。研究代表者は、まず固有値の個数の上限が負の強度をもつ点相互作用の個数で抑えられ、また点相互作用の強度とその配置で固有値の個数の上限が評価できることを、Gersgorin's circle を用いた評価を構成して示した。その結果は2008年の Letters in Mathematical Physics に掲載された。

② さらに、Albeverio-Nizhnik の2005年の結果である必要十分条件の大前提であった「すべての点相互作用の強度が負である」という条件を除去した場合においても、研究代表者は固有値の個数が負の強度をもつ点相互作用の個数に一致するための必要十分条件を得た。グリーン関数から定義される行列の行列式の零点が固有値に対応するのであるが、その行列式がある漸化式を満たすことを見つけることで十分条件を得、またそれを Albeverio-Nizhnik のアルゴリズムと関

連付けることで必要条件が得られた。この結果は 2010 年の *Methods of Functional Analysis and Topology* に掲載された。

- ③ また、空間 2 次元や空間 3 次元の場合には Albeverio-Nizhnik の必要十分条件のような結果はまったく知られていなかったが、研究代表者は 1 次元で開発した手法を拡張することにより、多次元においても固有値の個数を厳密に計算する手法を構成した。すなわち上述の行列のある種の極限で定義される行列の固有値の分布と作用素の固有値の分布の関連を見出して、そこから計算手法を与えることができた。その結果も 2010 年の *Methods of Functional Analysis and Topology* に掲載された。

(2) 離散シュレーディンガー作用素の場合

- ① 1 次元正方格子の場合：摂動をかけた場合にその極や特異点を調べるのに適したグリーン関数の新しい表現を構成して、それを用いて点相互作用の場合の (1) の ①に対応する「固有値の個数の上限の評価」ならびに (1) の ②に対応する「固有値の個数が負の強度をもつ点相互作用の個数に一致するための必要十分条件」を得ることができた。金沢大学大学院数物科学専攻修士課程(当時)の松本智徳氏と昭和大学の樋口雄介氏との共同研究による成果であり、その結果は 2012 年の *Linear and Multilinear Algebra* に掲載された。
- ② 多次元正方格子の場合：グリーン関数が積分表示となるが、この場合にも点相互作用の (1) の ③に対応する結果を得ている。積分表示ゆえに 1 次元正方格子の場合とは異なる解析手法を必要とした。これはさらに一般の無限グラフ(結晶格子)上に一般化可能であり、愛媛大学の野村祐司氏との共同研究として、投稿論文を準備中である。
- ③ 共鳴状態について：1 次元の、しかも限定された場合であるが、共鳴状態の配置やポテンシャルパラメータへの依存性を詳しく調べた。束縛状態と異なり、共鳴状態の個数はポテンシャルの個数が上限とならないなど興味深い現象が見られた。これも愛媛大学の野村祐司氏との共同研究として、投稿論文を準備中である。これらの離散シュレーディンガー作用素の研究において、昭和大学の樋口雄介氏が

議論に加わってくださり、多くの有益な指摘や示唆を与えてくださったことに感謝したい。

(3) まとめ

一般にシュレーディンガー作用素の固有値は、その個数でさえも厳密に計算することは難しいが、本研究で与えた計算手法は、ポテンシャルのパラメータをある単純な配置に置くことで得られる行列の固有値分布を求めれば良いというもので計算量も少なく初等的であることが特徴である。厳密解を得られるモデルを新しく提示できたことの意味は大きいと考える。

さらには先行研究のとぼしかった有限の摂動をうけた離散シュレーディンガー作用素の固有値・スペクトル散乱問題についても一定の成果を得ることができた。今後は離散系に特有の現象が見つかることが(共鳴状態の研究からも)期待できると考えている。

国内外における位置づけだが、本研究に前後して、立命館大学の若手研究者の新國裕昭氏による一般化点相互作用の研究がよく知られており、それとの関係も興味深い。また M. Malmud を中心とするグループにより無限個の点相互作用の場合の研究成果も同時期に発表されており、彼らとは相互に論文の引用をしている。また、この研究中にウクライナの点相互作用の研究の第一人者である L. Nizhnik 氏と知己を得て、議論ならびに情報交換を行なうようになった。

今後の展開であるが、Nizhnik 氏や Malmud 氏を始め、東欧に点相互作用の研究者が集中しており、彼らとの連携を深めることも重要であると思われる。また、さらに一般の状況下、例えば周期外場下での研究をすすめていきたい。

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 4 件)

- ① Yuusuke Higuchi, Tomonori Matsumoto, Osamu Ogurisu, On the spectrum of a discrete Laplacian on Z with finitely supported potential, *Linear and Multilinear Algebra*, 2011, 59, p.917-92. 査読有。
- ② Osamu Ogurisu, On the Number of

Negative Eigenvalues of a Schroedinger Operator with δ Interactions, Methods of Functional Analysis and Topology, 2010, 16, p.42-50. 査読有.

- ③ Osamu Ogurisu, On the Number of Negative Eigenvalues of a Multi-dimensional Schroedinger Operator with Point Interactions, Methods of Functional Analysis and Topology, 2010, 16, p.383-392. 査読有.
- ④ Osamu Ogurisu, On the Number of Negative Eigenvalues of a Schroedinger Operator with Point Interactions, Letters in Mathematical Physics, 2008, 85, (2-3), p.1573-530. 査読有.

[学会発表] (計5件)

- ① 小栗栖修, 樋口雄介, 野村祐司; 有限個のポテンシャルを伴う離散ラプラシアン
の固有値 III, 2010年12月15日, 応用
数学合同研究集会, 龍谷大学(滋賀県).
- ② 小栗栖修, 樋口雄介, 松本知徳; 有限個
のポテンシャルを伴う離散ラプラシアン
の固有値 II, 2009年12月16日, 応用
数学合同研究集会, 龍谷大学(滋賀県).
- ③ 浅倉邦彦, 小栗栖修, 真田博文, 鈴木正
清; 散乱による電子波減衰を考慮した変
調超格子の透過特性, 2009年3月17日,
電子情報通信学会総合大会, 愛媛大学.
(愛媛県)
- ④ 浅倉邦彦, 小栗栖修, 真田博文, 鈴木正
清; 回路理論の応用による変調超格子の
準通過域情報の抽出, 2009年3月3日,
電子情報通信学会 回路とシステム研究
会, 長良川国際会議場(岐阜県).
- ⑤ 小栗栖修, 樋口雄介, 松本知徳; 有限個
のポテンシャルを伴う離散ラプラシアン
の固有値, 2008年12月15日, 応用数学
合同研究集会, 龍谷大学(滋賀県).

6. 研究組織

- (1) 研究代表者
小栗栖 修 (OGURISU OSAMU)
金沢大学・数物科学系・准教授
研究者番号: 80301191