

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 17 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24540208

研究課題名(和文)非線型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 non-linear  
Schroedinger operator

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：超格子の各種数学的モデルについて以下の結果を得た。連続モデルでは入射波と反射波の確率振幅の比と完全透過なエネルギー順位Eの関係に特異性、離散モデルではRT効果(Eと散乱波の位相変化の関係)の不成立を見出した。さらに離散モデルにおいて共鳴順位・埋蔵固有値が厳密に計算できることを示し、埋蔵固有値ならびに共鳴順位を保つ安定擬多様体を導入することでより深い解析を行なった。また応用として高次元量子ウォークを単体複体上に構築した。

研究成果の概要(英文)：We studied spectral structure of some mathematical models of superlattice semiconductor devices. We studied the relation between the ratio of in-coming and out-going waves and the energy level E for perfect transmission, and found a kind of singularity. We also found that the relation between E and the phase factor, which is mentioned by RT effect, is broken. In another aspect, we introduced and studied the pseudo manifold of potentials for sustainability of resonances or embedded eigenvalues of discrete Schroedinger operator. In addition, we constructed quantum walks on simplicial complex as an application.

研究分野：関数方程式論

キーワード：スペクトル解析 シュレーディンガー作用素 離散シュレーディンガー作用素 点相互作用 量子ウォーク

## 1. 研究開始当初の背景

超格子は半導体薄膜を積層させて製造される量子効果デバイスである。電子波フィルターとして用いると透過域と遮断域が生成されるが、その他に準透過域という制御の難しい領域も生じることも知られている。超格子デバイスの効果的な設計のためにもその生成の原理の解明が必要であるが、その解析は逆散乱問題の一つであり数学的にも困難な課題である。

数学のモデルとして超格子を考えるとときに重要なものに点相互作用のシュレーディンガー（微分）作用素ならびに摂動を受けた離散シュレーディンガー作用素がある。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 S. Albeverio らによる著書が良く知られているが、超格子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。離散シュレーディンガーのモデルもまた古典的であるとともに、特に2000年代以降、Simon を始め多くの数学者が様々な状況を設定して研究を進展させている。ただ、これらも超格子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あまりに多くて理論的な解析にはむいていない。本研究では理想化されたモデルとして点相互作用のシュレーディンガー（微分）作用素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スペクトル解析を行う。特に固有値（束縛状態）ならびに共鳴状態について詳しく調べ、RT 効果や Bloch 振動、量子ウォークなどの新しい領域への応用をめざす。

## 3. 研究の方法

(1) 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が、束縛状態の値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。本研究ではこのグリーン関数のうまい表現を探すことから始めて、RT 効果を基礎においた準透過域の解析を行った。

(2) 離散シュレーディンガー作用素の場合、まずは1次元格子、つづけて多次元の正方格子上での考察を行った。これらの場合には極や特異点を調べるのに適したグリーン関数の表現は知られていなかったが、研究代表者と野村祐司氏(兵庫県立大学)・樋口雄介氏(昭和大学)との共同で開発した表示を用いて詳しい解析を行った。

(3) 新領域への応用として、量子ウォークの高次元化などを瀬川悦生氏(東北大学)・松江要氏(統計数理研究所)との共同で行った。

## 4. 研究成果

### (1) 点相互作用の場合

超格子の問題は前述の Albeverio たちの著書で有名なシュレーディンガー（微分）作用素の点相互作用のモデルとの関係が深いので、その挙動を調べることは有用である。加えて、廣川真男氏(広島大学)より、junction を持つ1次元シュレーディンガー作用素における RT 効果とその波動

関数の境界条件の関連についての示唆をいただき(廣川氏ほか3名の論文がある)、点相互作用の場合におけるRT効果の計算を試み、入射波と反射波の確率振幅の比と完全透過なエネルギー順位の関係を調べた結果、ある種の特異性を見いだした。これは通常の階段ポテンシャル (junction の一番簡単な形)によるRT効果では見られない結果である。

このRT効果の問題を離散シュレーディンガー作用素の場合におきかえることは自然な問題であり、また量子ウォークへの応用(3)を考えるにあたって必要な考察の一部である。この研究の結果として、連続モデルで良く知られた、完全透過なエネルギー順位であることと入射波と反射波の位相差が円周率の整数倍であることの対応(RT効果の一部)が離散モデルでは成立しないことを見出した。これは直感からずれた結果であり非常に興味深い。これらの研究結果について研究集会「量子系の数理と物質制御への展開」(2014年、東北大学)において講演を行なった。

## (2) 離散シュレーディンガー作用素の場合

1次元の離散シュレーディンガー作用素の離散固有値の個数についての知見を研究代表者は樋口雄介氏と松本智徳氏(金沢大学大学院)との研究で、また一方で連続版の場合に多次元の知見を研究代表者の研究ですでに得ていた。これらの結果を組み合わせることで離散版(多次元正方格子)の場合にも固有値の個数について調べられる可能性があり、樋口雄介氏と野村祐司氏の協力を得て離散固有値の個数を解析的に書きくだすことができた。この結果はRIMS研究会「多様体・格子・グラフ上のシュレーディンガー方程式のスペクトル散

乱理論」(2014年9月)などにおいて講演し、また専門誌に投稿中である。

共鳴順位・埋蔵固有値についても樋口雄介氏と野村祐司氏との共同で研究をすすめて、共鳴順位ならびに埋蔵固有値が厳密に計算できることがわかり、さらにはそれらの値を保つポテンシャルがなす安定擬多様体を導入した。この結果を2015年夏の作用素論シンポジウム福井で発表した。

## (3) 量子ウォークへの応用について

(1)でのRT効果の計算について、瀬川悦生氏から量子ウォークとの関連について指摘を受け、RT効果関連の結果を先に述べたように「量子系の数理と物質制御への展開」において講演し公表した。この研究会で松江要氏とも知遇を得て、瀬川氏・松江氏とで量子ウォークの高次元化に取り組み、単体複体上での構成に成功し、その成果を国際会議 Workshop of Quantum Simulation and Quantum Walks 2015などで公表し、Quantum Information Processing 誌に掲載された(査読有)。また量子ウォークとランダムウォークと結びつける基本定理の一つであるスペクトル写像定理を抽象量子ウォークのレベルで適用できることを示し、スペクトル解析の手法の応用範囲をひろげることができた。この結果は投稿中である。

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1件)

Kaname Matsue, Osamu Ogurisu, Etsuo Segawa, Quantum walks on simplicial complexes, Quantum Information Processing, 2015, 15, p1865-1896, doi:10.1007/s11128-016-1247-6, <http://hdl.handle.net/2297/44895>  
査読有り

〔学会発表〕(計 10 件)

松江要、小栗栖修、瀬川悦生；Quantum walks on simplicial complexes, Workshop of Quantum Simulation and Quantum Walks 2015、2015 年 11 月 16-18 日、横浜国立大学（神奈川県横浜市）

瀬川悦生、松江要、小栗栖修；単体複体上の量子ウォークの構成、RIMS 研究集会「量子場の数理とその周辺」、2015 年 10 月 5-7 日、京都大学数理解析研究所（京都府京都市）

松江要、小栗栖修、瀬川悦生；単体的量子ウォーク：構築と問題定義、日本数学会秋季総合分科会応用数学分科会、2015 年 9 月 13-16 日、京都産業大学（京都府京都市）

野村祐司、小栗栖修、樋口雄介；離散シュレーディンガー作用素の埋め込まれた固有値について、2015 年夏の作用素論シンポジウム、2015 年 9 月 5-7 日、フェニックス・プラザ（福井県福井市）

松江要、小栗栖修、瀬川悦生；量子ウォーク - ダイナミクスと帰化構造 - 、RIMS 共同研究「デザイン、符号、グラフおよびその周辺」、2015 年 7 月 8-10 日、京都大学数理解析研究所（京都府京都市）

小栗栖修；離散シュレーディンガー方程式の共鳴散乱と位相について、量子系の数理と物質制御への展開、2014 年 9 月 17 日、東北大学（宮城県仙台市）

小栗栖修；点相互作用の負固有値の個数とその離散版について、多様体・格子・グラフ上のシュレーディンガー方程式のスペクトル・散乱理論、2014 年 9 月 11-12 日、京都大学数理解析研究所（京都府京都市）

小栗栖修；グラフの局所最適性について、札幌数理物理研究集会、2014 年 9 月 1 日、北海道大学（北海道札幌市）

小栗栖修；点相互作用の負固有値の個数、スペクトル・散乱松山シンポジウム、2013 年 1 月 12-14 日、愛媛大学愛大ミュージズ（愛媛県松山市）

小栗栖修；有限個の点相互作用の離散版の研究、離散数学セミナー2012 in 小山、2012 年 8 月 8 日、小山工業高等専門学校（栃木県小山市）

(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