

国際数理物理会議 ICMP 2018 YRS に於ける研究成果発表報告†

新國裕昭*

1 はじめに

新國裕昭は、重点研究費（海外短期研修費）の支援を受け、平成30年7月20日（金）・7月21日（土）に国際数理物理連合 (International Association on Mathematical Physics) がカナダ・モントリオールのマギル大学 (McGill University) で開催した国際研究集会「The XIX International Congress on Mathematical Physics」(ICMP 2018) の「Young Researchers Symposium」(YRS) に参加し、研究の成果発表（講演タイトルは「On the eigenvalue embedded in the spectral bands of Schrödinger operators on carbon nanotubes with impurities」）ならびに情報収集を行った。ISMP2018YRS では、出張者の講演以外にも最新の数理物理の研究発表が多く行われ、特にプリンストン大学の Mihalis Defermos 氏によるアインシュタイン方程式についての基調講演では、ブラックホールの存在に関する数学的説明がなされており、興味深いものであった。

本論文では、当該研究会場にて行った研究成果を数式は用いずに概観的に報告する。なお、詳細の記述は、類似のタイトルでの論文に譲る。

2 研究成果の紹介

2・1 カーボンナノチューブと量子グラフ

新國裕昭が上記研究集会で行った研究発表は、不純物を含むカーボンナノチューブに対応する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。ここでは、問題の定式化と得られた研究成果を概観的に解説する。

まず、カーボンナノチューブとは、炭素原子の同素体で六角格子（グラフェンシート）を円筒状に丸めた構造を有する分子のことを指す。1991年の飯島澄男氏の発見以来、カーボンナノチューブは高性能の電気伝導性、熱伝導性、強度などの機械的特性が注目され、現在は既に多くの応用を持つ材料として知られている。カーボンナノチューブの電気伝導性は、固体物理学における研究対象であり、対応するシュレディンガー方程式のスペクトル理論・散乱理論として量子力学的に調査が行われてきた。その手法のひとつとして、ヨーロッパ数学会会長の P. Exner 氏とその周辺のグループによって培われてきた量子グラフの手法がある。

量子グラフとは、グラフ（辺と頂点の集合）とグラフ上の微分作用素、そしてそれを自己共役にするための頂点条件の3つ組のことを指す。この手法は1936年に L. Pauling 氏によって構成されたが、1995年の P. Exner 氏による再発見以降多くの発展が見られた手法である。カーボンナノチューブに適応するためには、グラフとし

てカーボンナノチューブを選択し、微分作用素にはシュレディンガー作用素を設定する。頂点条件は、V. Kostrikin 氏、R. Schrader 氏によって対応するシュレディンガー作用素を自己共役とするための多くの条件が発見されている。最も基本的な頂点条件は、キルヒホッフ（ノイマン）条件と呼ばれるもので、波動関数の連続性と頂点からの電子の出入りを塞ぐ条件を課す。カーボンナノチューブは六角格子の丸め方に応じ、ジグザグ型・アームチェア型・カイラル型の3種類に分類がなされる。量子グラフによる手法として最も基礎となる論文は2種類あり、ひとつはジグザグ型に特化した E. Korotyaev 氏と I. Lobanov 氏によるもの(2007年)、もうひとつは型にとらわれない P. Kuchment 氏と O. Post 氏によるもの(2007年)である。この2つの論文において、量子グラフの手法によるキルヒホッフ条件に従う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は概ね基本的なところが完成している状況である。

新國裕昭は、近年カーボンナノチューブに対応するより複雑な量子グラフに対するスペクトル理論の研究を行ってきた。今回、ICMP2018 YRS において発表した物理モデルは、カーボンナノチューブに有限個の不純物を含む場合である。実際、カーボンナノチューブを構成する炭素原子のいくつかを他の原子に交換した量子グラフを考えて研究を行った。不純物を数学的に記述するために、頂点条件の交換を行った。その時に用いたのが δ 型の頂点条件である。これは、1次元のハミルトニアンの場合には、ディラックのデルタ関数をポテンシャルとする場合に波動関数が満たす境界条件のグラフ版として解釈できる。今回は、不純物を伴うシュレディンガー方程式系の初めての研究だったため、自由シュレディンガー作用素を考えている。このとき、対応するシュレディンガー作用素のスペクトルは以下の3つの部分の和集合となる。

- ① 可算無限個の有界閉区間の和（バンド構造）
- ② 多重度無限大の固有値（フラットバンド）
- ③ 不純物の影響に伴うバンド内の埋蔵固有値

特筆すべき点は、不純物のない周期構造を持った分子の場合に見られない固有値の存在で、しかもそれがスペクトルギャップではなくバンド内にも発生し、埋蔵固有値を構成することである。ICMP2018YRS では、さらにバンド内の埋蔵固有値の個数に関する評価についても報告を行った。証明は、不純物の配置の特殊な対称性を利用した簡易作用素を構成して行った。本研究内容は、当該国際会議やその他の研究集会において参加者で行った議論をもとに執筆内容を再確認し、数学誌に投稿する予定である。

† 原稿受理 平成31年2月28日 Received February 28, 2019

* 総合デザイン工学科 (Department of Integrated Design Engineering)・基礎教育センター (Center for Liberal Arts and Sciences)

