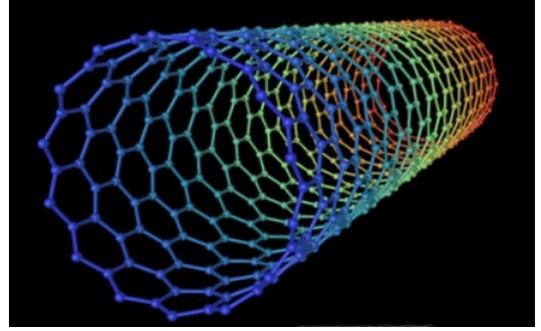
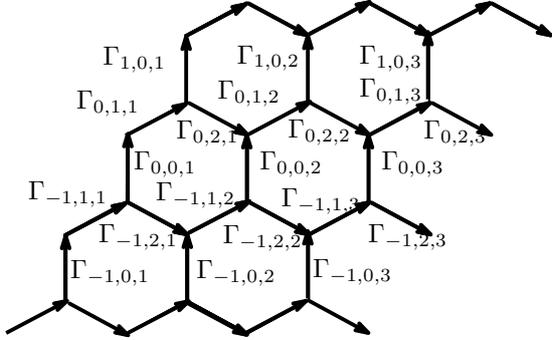


# ジグザグナノチューブに付随する量子グラフ上の 周期的シュレディンガー作用素のスペクトルについて

新國裕昭 (前橋工科大学 工学部)

本講演では、ジグザグナノチューブに付随する量子グラフ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結果を紹介する。ジグザグナノチューブとは、カーボンナノチューブのひとつであり、炭素原子からなる六角格子（グラフェンシート）をシリンドラ状に丸めたものである（右下図（[3] からの引用）参照）。



$N \in \mathbb{N}$  を任意に固定し、 $\mathbb{Z}_N = \mathbb{Z}/(N\mathbb{Z})$ ,  $\mathbb{J} = \{0, 1, 2\}$  とおく。右上図の1周あたりに  $N$  個の六角形があるものとし、1本1本の線分（長さはすべて1とする）には、左上図のように番号と向きが付けられているものとする。そのもとで、 $\omega = (n, j, k) \in \mathcal{Z} := \mathbb{Z} \times \mathbb{J} \times \mathbb{Z}_N$  に対し、 $\Gamma^N = \bigcup_{\omega \in \mathcal{Z}} \Gamma_\omega$  とおく。詳しくは、各  $\Gamma_{n,j,k}$  は以下のようにして定義される。 $R_N = \frac{\sqrt{3}}{4 \sin \frac{\pi}{2N}}$  とし  $(n, j, k) \in \mathcal{Z}$  に対して、

$$c_k = \cos \frac{\pi k}{N}, \quad s_k = \sin \frac{\pi k}{N}, \quad \kappa_k = R_N(c_k, s_k, 0), \quad \mathbf{e}_{n,0,k} = \mathbf{e}_0 = (0, 0, 1), \quad \mathbf{e}_{n,1,k} = \kappa_{n+2k+1} - \kappa_{n+2k} + \frac{\mathbf{e}_0}{2},$$

$$\mathbf{e}_{n,2,k} = \kappa_{n+2k+2} - \kappa_{n+2k+1} - \frac{\mathbf{e}_0}{2}, \quad \mathbf{r}_{n,0,k} = \kappa_{n+2k} + \frac{3n}{2}\mathbf{e}_0, \quad \mathbf{r}_{n,1,k} = \mathbf{r}_{n,0,k} + \mathbf{e}_0, \quad \mathbf{r}_{n,2,k} = \mathbf{r}_{n+1,0,k}$$

とおく。このとき、 $\omega \in \mathcal{Z}$  に対して、 $\Gamma_\omega = \{\mathbf{x} = \mathbf{r}_\omega + t\mathbf{e}_\omega \mid 0 \leq t \leq 1\}$  とする。 $\Gamma^N$  はジグザグナノチューブと呼ばれている。 $\beta_A, \beta_B \in \mathbb{R}$  および  $q \in L^2(0, 1)$  に対して、ヒルベルト空間  $L^2(\Gamma^N) = \bigoplus_{\omega \in \mathcal{Z}} L^2(\Gamma_\omega)$  上のシュレディンガー作用素

$$(\tilde{H}f_\omega)(x) = -f''_\omega(x) + q(x)f_\omega(x), \quad x \in (0, 1),$$

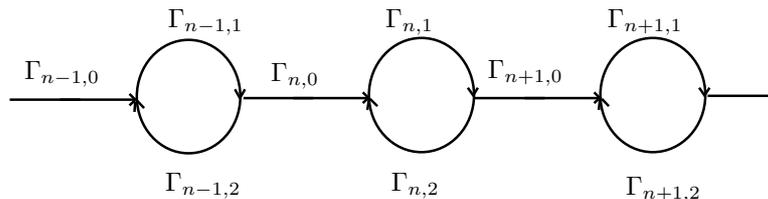
$$\text{Dom}(\tilde{H}) = \left\{ \bigoplus_{\omega \in \mathcal{Z}} f_\omega \in L^2(\Gamma^N) \mid \begin{array}{l} \bigoplus_{\omega \in \mathcal{Z}} (-f''_\omega + qf_\omega) \in L^2(\Gamma^N), \\ -f'_{n,0,k}(1) + f'_{n,1,k}(0) - f'_{n,2,k-1}(1) = \beta_A f_{n,1,k}(0), \\ f_{n,1,k}(0) = f_{n,0,k}(1) = f_{n,2,k-1}(1), \\ f'_{n+1,0,k}(0) - f'_{n,1,k}(1) + f'_{n,2,k}(0) = \beta_B f_{n,1,k}(1), \\ f_{n,1,k}(1) = f_{n+1,0,k}(0) = f_{n,2,k}(0) \text{ for } n \in \mathbb{Z} \text{ and } k \in \mathbb{Z}_N \end{array} \right\}.$$

のスペクトルは、線形代数で学ぶスペクトル分解定理を用いることにより、 $L^2(\Gamma^1)$  上の作用素

$$(\tilde{H}_k f_\alpha)(x) = -f''_\alpha(x) + q(x)f_\alpha(x), \quad x \in (0, 1),$$

$$\text{Dom}(\tilde{H}_k) = \left\{ \bigoplus_{\alpha \in \mathbb{Z}_1} f_\alpha \in L^2(\Gamma^1) \mid \begin{array}{l} \bigoplus_{\alpha \in \mathbb{Z}_1} (-f''_\alpha + qf_\alpha) \in L^2(\Gamma^1), \\ -f'_{n,0}(1) + f'_{n,1}(0) - s^k f'_{n,2}(1) = \beta_A f_{n,1}(0), \\ f_{n,1}(0) = f_{n,0}(1) = s^k f_{n,2}(1), \\ f'_{n+1,0}(0) - f'_{n,1}(1) + f'_{n,2}(0) = \beta_B f_{n,1}(1), \\ f_{n,1}(1) = f_{n+1,0}(0) = f_{n,2}(0) \text{ for } n \in \mathbb{Z} \end{array} \right\}$$

の直和  $\bigoplus_{k=1}^N \tilde{H}_k$  とユニタリ同値となる（ここで、 $s = e^{i\frac{2\pi}{N}}$  とおいた）。 $\Gamma^1$  は次のようなネックレス状の量子グラフとなる<sup>1</sup>：



従って、作用素  $\tilde{H}$  のスペクトルを解析するためには、作用素  $\tilde{H}_k$  のスペクトルを調べればよいことになる<sup>2</sup>。本研究では、 $\tilde{H}_N$  に対するスペクトルを調べた。作用素  $\tilde{H}$  に現れる頂点の条件は、論文 [1] では  $\delta$ - $\delta$ - $\delta$  型の頂点条件と名付けられている（単に  $\delta$  型と呼ぶ文献もある）。自己共役作用素になる頂点条件は他にも  $\delta$ - $\delta$ - $\delta'$  型等様々なものが紹介されている。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解析は、Korotyaev 氏、Lobanov 氏 [2] によるキルヒホッフの頂点条件<sup>3</sup>下の結果が先行する。

<sup>1</sup> $N = 1$  のため、 $\Gamma_{n,k,1}$  の末尾の添字は落とした。

<sup>2</sup> $\sigma(\tilde{H}) = \bigcup_{k=1}^N \sigma(\tilde{H}_k)$  である為。

<sup>3</sup> $\beta_A = \beta_B = 0$  としたものを指す。

$H := \tilde{H}_N$  の絶対連続スペクトルは、 $L^2(\mathbb{R})$  上のシュレディンガー作用素  $L := -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$  と密接に関係がある<sup>4</sup>。実際、 $-y''(x, \lambda) + q(x)y(x, \lambda) = \lambda y(x, \lambda)$  の初期条件

$$\theta(0, \lambda) = 1, \quad \theta'(0, \lambda) = 0 \quad \text{および} \quad \varphi(0, \lambda) = 0, \quad \varphi'(0, \lambda) = 1$$

を満たす解を  $\theta(x, \lambda), \varphi(x, \lambda)$  とし、

$$\Delta(\lambda) := \frac{\theta(1, \lambda) + \varphi'(1, \lambda)}{2}$$

とおけば、関数

$$F(\lambda) = 2\Delta^2(\lambda) + \frac{\theta(1, \lambda)\varphi'(1, \lambda)}{4} - \frac{5}{4} + \frac{1}{4}\{(2\beta_A + \beta_B)\varphi(1, \lambda)\theta(1, \lambda) + (\beta_A + 2\beta_B)\varphi(1, \lambda)\varphi'(1, \lambda) + \beta_A\beta_B\varphi^2(1, \lambda)\}$$

は  $H$  の絶対連続スペクトルの判別式となる。作用素  $L$  のディリクレスペクトルを  $\sigma_D(L)$ ,  $H$  の多重度無限大の固有値を  $\sigma_\infty(H)$  と表すことにすれば、次の事が成り立つ。

**定理 1.**  $\sigma(H) = \sigma_\infty(H) \cup \sigma_{ac}(H)$  が成り立つ。ここで、 $\sigma_\infty(H) = \sigma_D(L)$ ,  $\sigma_{ac}(H) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid F(\lambda) \in [-1, 1]\}$  である。

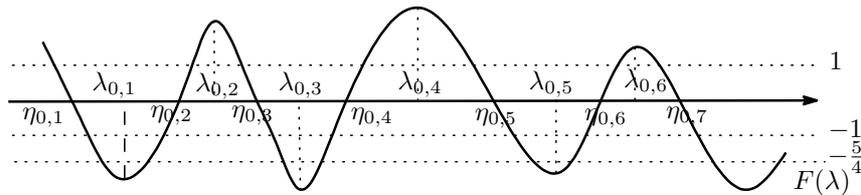
以下に、 $H$  の絶対連続スペクトルについて得た結果を紹介する。

**定理 2.**  $q(x)$  が偶関数で、 $\beta_A\beta_B \leq 0$  であると仮定する。このとき、次の (i) ~ (v) が成り立つ。

(i)  $F'(\lambda)$  および  $F(\lambda)$  は単純な実零点のみを持つ。それらを  $\lambda_{0,1}, \lambda_{0,2}, \lambda_{0,3}, \dots$  および  $\eta_{0,1}, \eta_{0,2}, \eta_{0,3}, \dots$  と書くと、次のように互いに分離される：

$$\eta_{0,1} < \lambda_{0,1} < \eta_{0,2} < \lambda_{0,2} < \eta_{0,3} < \lambda_{0,3} < \dots$$

さらに、任意の  $n \in \mathbb{N}$  に対して、 $F(\lambda_{0,2n}) \geq 1$  かつ  $F(\lambda_{0,2n-1}) \leq -\frac{5}{4}$  が成り立つ。また、 $F(\lambda)$  は次のような挙動をする：



(ii)  $H$  の *periodic spectrum* を  $\lambda_{0,0}^+, \lambda_{0,2}^-, \lambda_{0,2}^+, \lambda_{0,4}^-, \lambda_{0,4}^+, \dots$ , *anti-periodic spectrum* を  $\lambda_{0,1}^-, \lambda_{0,1}^+, \lambda_{0,3}^-, \lambda_{0,3}^+, \dots$  とおくと、

$$F(\lambda_{0,n}^+) = (-1)^n \quad \text{for } n \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \quad F(\lambda_{0,n}^-) = (-1)^n \quad \text{for } n \in \mathbb{N}$$

および

$$\lambda_{0,0}^+ < \lambda_{0,1}^- < \lambda_{0,1}^+ < \lambda_{0,2}^- \leq \lambda_{0,2}^+ < \lambda_{0,3}^- < \lambda_{0,3}^+ < \lambda_{0,4}^- \leq \lambda_{0,4}^+ < \dots$$

が成り立つ。

(iii) 作用素  $H$  の絶対連続スペクトルは次のように書ける： $\sigma_{ac}(H) = \bigcup_{j=1}^{\infty} [\lambda_{0,j-1}^+, \lambda_{0,j}^-]$ .

(iv)  $j \in \mathbb{N}$  に対し、 $\gamma_j = (\lambda_{0,j}^-, \lambda_{0,j}^+)$  を  $\sigma(H)$  の  $j$  番目のギャップと呼ぶ。任意の  $k \in \mathbb{N}$  に対して、 $\gamma_{2k-1} \neq \emptyset$  が成り立つ。

(v)  $\sigma(H)$  のバンド端に対して次の漸近挙動が成り立つ：

$$\lambda_{0,2n-1}^\pm = \left\{ n\pi - \frac{\pi}{2} \pm \arcsin \frac{1}{3} \right\}^2 + \int_0^1 q(x)dx + \frac{\beta_A + \beta_B}{3} + o(1),$$

$$\lambda_{0,2n}^\pm = n^2\pi^2 + \int_0^1 q(x)dx + \frac{\beta_A + \beta_B}{3} + o(1) \quad \text{as } n \rightarrow \infty.$$

また、自由なハミルトニアンの場合には次の事が成り立つ：

**定理 3.**  $q \equiv 0$ ,  $\beta_A\beta_B \leq 0$  のとき、偶数番目のスペクトラルギャップはすべて閉じる。

## 参考文献

- [1] T. Cheon, P. Exner and O. Turek, Spectral filtering in quantum Y-junction, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 124004.
- [2] E. Korotyaev and I. Lobanov, Schrödinger Operators on Zigzag Nanotubes, Ann. Henri Poincaré 8 (2007), 1151-1176.
- [3] <http://ja.wikipedia.org/wiki/>

<sup>4</sup>但し、 $q(x)$  は周期 1 の周期関数として実数全体に定義域を拡張している。