



物質構造解析における数理科学的手法の構築

富安(大石) 亮子

学位: 博士(数理科学) 東京大学

専門分野: 格子・2次形式論、数論、数理最適化、数理結晶学

結晶学は、種々の実験データから物質中の原子の並びに関わる情報を得る様々な実験手法に関わる学際分野である。これまでの私の応用は、この分野の問題に動機づけられている。

結晶学と数論の関係と言えば、準結晶とH. Bhorlによるalmost periodic functionの研究のつながりが代表的によく知られているが、結晶学の創始期から、調和解析、表現論を含む群論、格子などに関わる数学がこの分野で駆使されてきた。結晶学的手法開発研究の中に、数論的問題がしばしば現れるのは、離散構造に対する一般的な手法構築という面で共通点があるからと考えている。

(1) 格子決定に関わるCONOGRAPHの方法

様々な回折・散乱データの解析で、ab-initio indexingと呼ばれる格子決定のプロセスが必要となる。Indexingは実験データに現れる輝点に対応する逆格子ベクトルを求めることを指し、ab-initioは既知の装置パラメータ以外の初期情報を前提としないことを指す。これまで粉末回折・電子線後方回折用のab-initio indexingソフトウェア(CONOGRAPH)を開発したが、その手法の基盤となる、大きな観測誤差下での格子対称性(ブラベー格子)決定方法、ピークサーチの方法、よく合う解の検出に使われるfigure of meritの開発、トポグラフを用いて記述される消滅則の一般的性質の導出[1]なども行った。

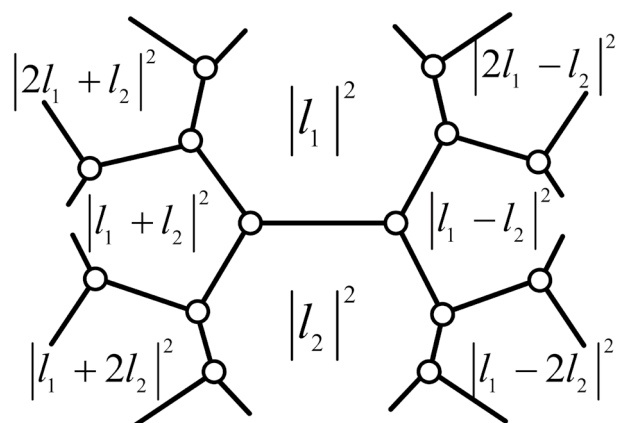


図1: CONOGRAPHが格子の議論を視覚化するために用いているトポグラフ[1]

得られたソフトウェアCONOGRAPHは解析の成功率を向上させた。また得られた数学的結果から、様々なab-initio indexingの問題に対応できるようになったと言える。

(2) 半正定値計画緩和法(SDR)に基づく、結晶・磁気構造解析で得られた構造の保証

非線形最適化により求められる結晶・磁気構造解析の構造情報の保証は、ローカルミニマムの問題から不可能であると、物質構造解析の分野では考えられていた。しかし、大域的最適化の需要は高く、そのために実施した研究になる。当初は一般的な位相回復に関わる数学研究として始めたが、実験家との共同研究により役に立つ出口となる解析も見つかった。

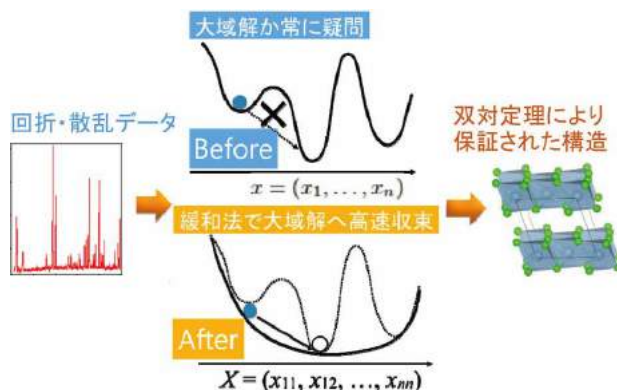


図2: SDRを用いた構造解析法の概要

具体的には、強度情報に基づく磁気モーメントや原子占有率・原子種の決定は、短時間での大域的最適化に加えて解の一意的性の保証や複数解の取得をSDRによりほとんどの場合に実施できることが、本研究で初めて見出された[2]。

さらに原子座標まで決められると、一般的な位相回復(昔からある問題だが、近年、数学でも議論が再燃している)の完全な解決になるが、今のところ本手法でできることは、決められた範囲の原子座標の中から「voidの座標を指摘する」というかなり限られた状況での解析になる。将来的にどこまで拡張できるかは面白い課題と言える。

[1] Acta Cryst. A69 (2013), p.603—610.

[2] Scientific Reports (2018) 8:16228.