

マス・フォア・インダストリ研究 No.6



結晶のらせん転位の数理

Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

編集 松谷 茂樹
佐伯 修
中川 淳一
上坂 正晃
濱田 裕康

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

About the Mathematics for Industry Research

The Mathematics for Industry Research was founded on the occasion of the certification of the Institute of Mathematics for Industry (IMI), established in April 2011, as a MEXT Joint Usage/Research Center – the Joint Research Center for Advanced and Fundamental Mathematics for Industry – by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) in April 2013. This series publishes mainly proceedings of workshops and conferences on Mathematics for Industry (MfI). Each volume includes surveys and reviews of MfI from new viewpoints as well as up-to-date research studies to support the development of MfI.

October 2014

Yasuhide Fukumoto

Director

Institute of Mathematics for Industry

結晶のらせん転位の数理

Mathematics for Industry Research No.6, Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University
ISSN 2188-286X

Editors: Shigeki Matsutani, Osamu Saeki, Junichi Nakagawa, Masaaki Uesaka, Hiroyasu Hamada

Date of issue: 10 January 2017

Publisher:

Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

Motooka 744, Nishi-ku, Fukuoka, 819-0395, JAPAN

Tel +81-(0)92-802-4402, Fax +81-(0)92-802-4405

URL <http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>

Printed by

Social Welfare Service Corporation Fukuoka Colony

1-11-1, Midorigahama, Shingu-machi Kasuya-gun, Fukuoka, 811-0119, Japan

TEL +81-(0)92-962-0764 FAX +81-(0)92-962-0768

結晶のらせん転位の数理

編集 : 松谷 茂樹
佐伯 修
中川 淳一
上坂 正晃
濱田 裕康

はじめに

2016年9月1日ー2日にマス・フォア・インダストリ研究所で開催した本研究集会「結晶のらせん転位の数理」は、2015年7月末から8月にかけて開催されたスタディグループ・ワークショップ (SGW2015) にて新日鐵住金 (株) から問題提起された、「らせん転位の数学的表現」を更に発展させることを目的としたものである。

SGW2015 の後、SC格子 (単純立方格子)、BCCG格子 (体心立方格子) の結晶に付随するアーベル群の群環に対する加群構造と、格子のファイバー構造とを検討することで、らせん転位をファイバー構造の欠陥として離散的な幾何学の枠内で表現可能であることが判った。また、らせん転位のエネルギーについては、 Γ 収束などの変分法の方法を用いて、発散の状況をより詳細に評価する研究が進められ、エネルギーを格子和として評価することでゼータ関数と関連させた定式化も進んでいた。しかしながら、この問題は、一部は初等的とはいえ、解析学、グラフ理論、格子和、代数的位相幾何、環の表現論、群論など広範囲な数学分野に関わっているため、数学的に厳密な取り扱いができていない。特に転位のエネルギーは発散するという問題点を内在している。より広範な視点からの議論を行うことにより、格子長の有限性や、転位範囲の有限性を数学モデルとして取り込むことが可能となり、そのことによるエネルギーの正当な評価など、更なる発展が期待されている。転位のエネルギーの正当な評価が可能となると、実際の材料の生成プロセスの設計にフィードバックできるようになるなど、産業への貢献も期待できる。そのために、本研究集会を開催することで、集中した議論を行うことを考え、実施した。

本研究集会を開催することにより、結晶レベルでのらせん転位の新たな数学的表現方法の確立と、らせん転位のエネルギーの新たな取り扱いの確立とが成果として期待された。

目的に従って、本研究を高めるために、格子系から数学的に厳密に物理量を算出する研究の専門家である鹿島洋平氏 (東京大学、特任助教)、計算科学も利用したトポロジカル欠陥の新たな研究で活躍されている小林未知数氏 (京都大学、助教)、整数論を応用して、結晶のリードベルグ解析のアルゴリズム開発を近年精力的に実施されている富安 (大石) 亮子氏 (山形大学/JST さきがけ 准教授) を招待して、近年の研究成果について講演して頂いた。

また、2015年のSGWのメンバー (本研究会組織委員メンバー、中川淳一 (新日鐵住金 (株) 先端技術研究所) 佐伯修 (九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所) 上坂正晃 (東京大学 数理科学研究科) 松谷茂樹 (佐世保工業高等専門学校)) からは、現状と現状の問題点など提案的な発表がなされ、目的に沿った研究会になったと考えている。

参加者にはらせん転位を長年実験的手法により研究されてきた東田賢二氏 (九州大学名誉教授、佐世保高専校長) をはじめとするらせん転位の研究者 (中谷彰宏氏 (大阪大学教授)、

雷霄雯氏（福井大学講師）にも参加して頂き、また、数学側からも多くの分野に跨る数学者に、IMI 内外を問わず、参加して頂き、深い議論ができた。

問題の解決にまでは至ることはなかったが、講演の質問、コメントにおいて、また講演期間中の研究者同士の議論や、その後の交流により、当初予想したものより遥かに大きな議論がかわされ、十分な成果を得たものと考えている。また、本課題に関して、異分野研究者の間の、今後の交流のきっかけになり、いくつか、情報交換が開始されている。

このような解析、代数、幾何の横断的な分野が融合することで実際の自然現象に関わるという問題は、従来あまり取り上げられてこなかったもので、その関心の高さが伺われる。萌芽的な内容も含み、今後大きく発展することが期待され、そのきっかけを作ったことも、本研究会の成果であると考えている。

組織委員：

松谷茂樹（佐世保工業高等専門学校）

佐伯修（九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所）

中川淳一（新日鐵住金（株）先端技術研究所）

上坂正晃（東京大学 数理科学研究科）

濱田裕康（佐世保工業高等専門学校）

2016年11月

研究集会：結晶のらせん転位の数理

日時： 2016年9月1日 13:00–2日 12:40

場所：九州大学 伊都キャンパス

IMI コンファレンスルーム（ウエスト1号館 D棟 4階 414号室）

9/1(木)

13:00-14:00 中川淳一（新日鐵住金）

鉄鋼材料の転位に関わる問題提起

14:10-15:10 佐伯修（九州大学）

らせん転位の数学的表現の現状とその問題点

15:10-15:40 休憩

15:40-16:40 小林未知数（京都大学）

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

16:50-17:50 富安(大石)亮子（山形大学/JST さきがけ）

粉末結晶構造解析の格子決定問題への代数学の応用

9/2(金)

10:00-10:50 上坂正晃（東京大学）

らせん転位のエネルギーの定式化について： S^1 に値を取る離散系の Γ 極限

11:00-11:50 鹿島洋平（東京大学）

格子上の多体電子系の厳密な構成

12:00-12:40 松谷茂樹（佐世保高専）

自然現象の代数的表現：

平方剰余の相互法則，ガウスの和と光学現象，らせん転位

September 1

13:00-14:00 Junichi Nakagawa (Nippon Steel & Sumitomo Metal Co.)

On mathematical problems concerning dislocation in steel materials

14:10-15:10 Osamu Saeki (Kyushu University)

A mathematical description of screw dislocations

15:40-16:40 Michikazu Kobayashi (Kyoto University)

Effective theory for crystals and dynamics of topological defects based on a symmetry breaking

16:50-17:50 Ryoko Oishi-Tomiyasu (Yamagata University/JST PRESTO)

Application of algebra to a lattice determination problem in powder crystal structure analysis

September 2

10:00-10:50 Masaaki Uesaka (The University of Tokyo)

On formulation of the energy of screw dislocations: Γ -limit of the S^1 -valued discrete system

11:00-11:50 Yohei Kashima (The University of Tokyo)

Rigorous construction of many-electron lattice systems

12:00-12:40 Shigeki Matsutani (Nat. Inst. of Tec., Sasebo College)

Algebraic descriptions of nature

(Gauss sum, quadratic reciprocity and optics, zeta function and screw dislocations)

尚、当初予定していた難波時永氏（東京大学）の発表「螺旋転位の出現/消滅に関する数学的問題」は、ご本人のやむないご都合によりキャンセルとなった。発表予定の概要から類推すると、実現していれば、研究会がより実りの多いものとなったことは疑いのないことで、極めて残念である。

Table of contents

1. On mathematical problems concerning dislocation in steel materials.....	1
<i>Junichi Nakagawa (Nippon Steel & Sumitomo Metal Co.)</i>	
2. A mathematical description of screw dislocations.....	27
<i>Osamu Saeki (Kyushu University)</i>	
3. Effective theory for crystals and dynamics of topological defects based on a symmetry breaking.....	49
<i>Michikazu Kobayashi (Kyoto University)</i>	
4. Application of algebra to a lattice determination problem in powder crystal structure analysis.....	89
<i>Ryoko Oishi-Tomiyasu (Yamagata University/JST PRESTO)</i>	
5. On formulation of the energy of screw dislocations: Γ -limit of the SI-valued discrete system.....	107
<i>Masaaki Uesaka (The University of Tokyo)</i>	
6. Rigorous construction of many-electron lattice systems.....	113
<i>Yohei Kashima (The University of Tokyo)</i>	
7. Algebraic descriptions of nature (Gauss sum, quadratic reciprocity and optics, zeta function and screw dislocations).....	119
<i>Shigeki Matsutani (Nat. Inst. of Tec., Sasebo College)</i>	

鉄鋼材料の転位に関わる問題提起

On mathematical problems concerning dislocation in steel materials

中川 淳一 (新日鐵住金株式会社 技術開発本部 先端技術研究所 数理科学研究部)*¹

Junichi Nakagawa (Nippon Steel & Sumitomo Metal Corporation, Advance Technology Research Laboratories, Mathematical Science & Technology Research Lab.)

概要

A crystal is a solid material whose constituent, such as atom, molecules are arranged in a highly ordered microscopic structure, forming a crystal lattice that extends in all directions. Disordered structures in a crystal, such as dislocations and lattice defects, are a primary factor in determining the mechanical properties of materials. It is a great challenge in material research to describe theoretically and quantitatively the relationship between the disordered degree of crystal lattices in nano-scale and the mechanical properties of materials in macro-scale.

In this workshop, I will use a screw dislocation in the body-centered cubic (BCC) lattice in Fe crystals as an example and discuss the following “theme: Describing the movement and the mechanical behavior of screw dislocation in the BCC lattice using mathematics”

Dislocations are areas where the atoms are out of position in the crystal structure. Dislocations are generated and move when stress is applied. The motion of dislocations allows slip-plastic deformation to occur. The slip step associated with the movement of a screw dislocation is parallel to the dislocation line. Movement of the screw dislocation produces a displacement b parallel to the dislocation line. In body-centered cubic metals, slip occurs in close-packed $\langle 111 \rangle$ directions. The shortest lattice vector, i.e. the Burgers vector of the perfect slip dislocation, is of the type $1/2\langle 111 \rangle$.

I aim to describe the principle of disordered structures in material crystals by “think from zero,” which means integrating a series of observed facts and physical theories in material science thorough consistent logic using mathematics.

1. 本報告

当日報告した内容を次ページ以降に示す：

*¹ 新日鐵住金株式会社 (〒292-8511 千葉県富津市新富20-1)
E-mail: nakagawa.q9p.junichi@jp.nssmc.com

研究集会：結晶のらせん転位の数理

鉄鋼材料の転位に関わる問題提起

On Mathematical Problems Concerning Dislocation
in Steel Materials

2016.9.1-2

九州大学

マス・フォア・インダストリ研究所

新日鐵住金株式会社

先端技術研究所 数理科学研究部

中川 淳一

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



1

問題の背景

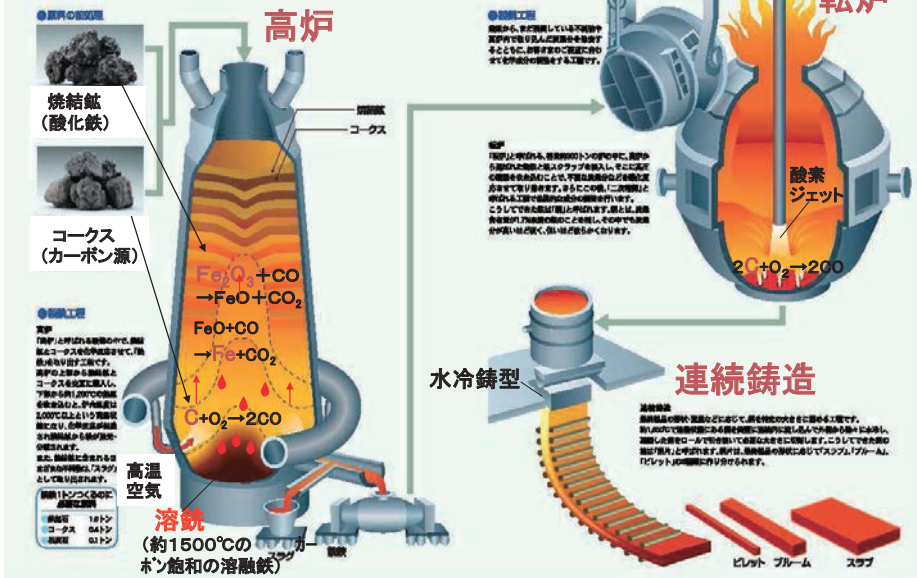
- 結晶とは、原子、分子が規則正しく配列している固体であり、離散的な空間並進対称性をもつ理想的な物質のことです。結晶材料において、転位、格子欠陥、析出物、等の結晶格子の乱れが材料の諸性質（強度や延性等）を決定する重要因子となっていることが知られています。
- ナノの世界における結晶の原子配列の乱れの程度が、マクロな世界で観察される材料の機械的性質に、如何に寄与するかを定量的に記述することは材料研究の大きな課題です。
- 本研究集会では、過去のスタディグループ等で数年以上に亘り議論してきました内容を題材にして、「結晶の対称性」と「対称性の乱れ」に起因し発現する材料の諸性質について、1次元の格子欠陥である転位に焦点をあて、数学でゼロから考えるための議論の場とできれば幸いです。

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.

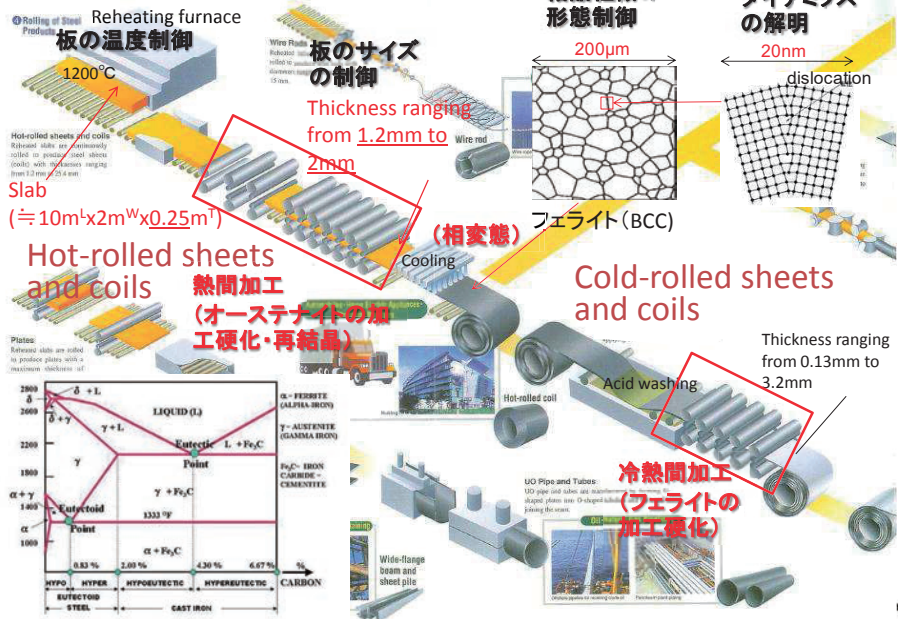


2

鉄鉱石から製品ができるまでの【製鉄工場&製鋼工場】 工程をご紹介します。

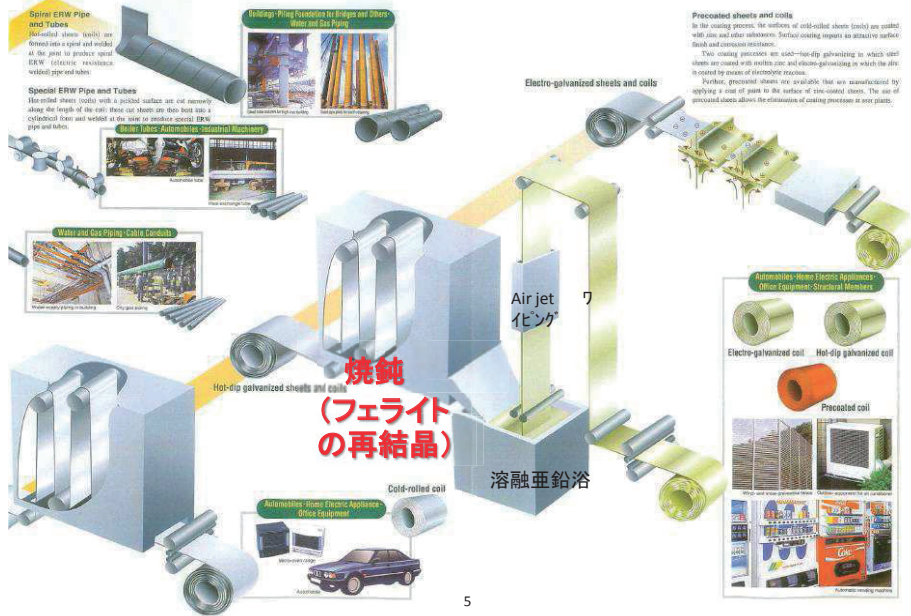


圧延工程



熱処理・表面処理工程

from brochure of Nippon Steel



5

5

結晶の対称性

The 7 Lattice System and The 14 Bravais Lattice

	Triclinic 三斜晶	Monoclinic 单斜晶	Orthorhombic 直方晶	Tetragonal 正方晶	Trigonal 三方晶	Hexagonal 六方晶	Cubic 立方晶
P 単純	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 	$\beta \neq 90^\circ$ $\alpha, \gamma = 90^\circ$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq c$ 	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ 		
C 底心		$\beta \neq 90^\circ$ $\alpha, \gamma = 90^\circ$ 	$a \neq b \neq c$ 				
I 体心			$a \neq b \neq c$ 	$a \neq c$ 			鉄の結晶 BCC
F 面心			$a \neq b \neq c$ 				FCC

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved. NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL

7

対称性による結晶の分類

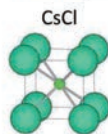
結晶の対称性のタイプを決める空間群の構造は、
3次元空間では230種類存在することが知られている。

Space groups = “point groups” + “translation groups”

立方晶の場合

For a given crystal, our space group is a subgroup of the Euclidean group (isometries of the Euclidean space) $Isom(\mathbb{E}^3) = \mathbb{T} \rtimes O(3)$, where \mathbb{T} is the translation group and $O(3)$ is the orthogonal group.

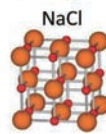
事例 $Pm\bar{3}m$ (221th)



単純格子に
2種類の原子
が配列

平行移動の群は \mathbb{Z}^3

$Fm\bar{3}m$ (225th)

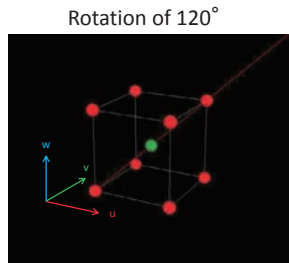
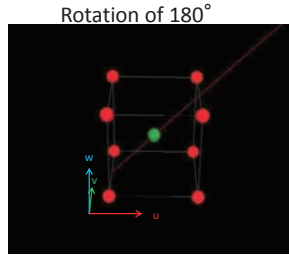


FCC格子に
2種類の原子
が配列

平行移動の群は \mathbb{Z}^6

Symmetry of Cubic Lattice

Rotation symmetry		○
three kinds of 4-fold rotation	無回転	○
	u軸 90度	○
	u軸 180度	○
	u軸 270度	○
	v軸 90度	○
	v軸 180度	○
	v軸 270度	○
	w軸 90度	○
	w軸 180度	○
six kinds of 2-fold rotation	中点(u + w) 180度	○
	中点(u - w) 180度	○
	中点(v + w) 180度	○
	中点(v - w) 180度	○
	中点(u + v) 180度	○
	中点(u - v) 180度	○
four kinds of 3-fold rotation	対角(u + v + w) 120度	○
	対角(u + v + w) 240度	○
	対角(-u + v + w) 120度	○
	対角(-u + v + w) 240度	○
	対角(-u - v + w) 120度	○
	対角(-u - v + w) 240度	○
	対角(u - v + w) 120度	○
	対角(u - v + w) 240度	○
24		
plus mirror image		48



© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



Symmetry of $O(3)$ group for Cubic Lattice

$$O(3) = \left\{ \begin{array}{l} e, a_1, a_1^2, a_1^3, a_2, a_2^2, a_2^3, a_3, a_3^2, a_3^3, \\ d_1, d_1^2, d_2, d_2^2, d_3, d_3^2, d_4, d_4^2, \\ u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6, \\ r, ra_1, ra_1^2, ra_1^3, ra_2, ra_2^2, ra_2^3, ra_3, ra_3^2, ra_3^3, \\ rd_1, rd_1^2, rd_2, rd_2^2, rd_3, rd_3^2, rd_4, rd_4^2, \\ ru_1, ru_2, ru_3, ru_4, ru_5, ru_6 \end{array} \right\}$$

e : identity matrix
 r : reflection matrix

集合上の積 $G \times G \rightarrow G$

$$a_1^4 = a_1, \quad a_2^4 = a_2, \quad a_3^4 = a_3, \quad 90^\circ \text{ rotation matrix } \langle 100 \rangle$$

$$d_1^3 = d_1, \quad d_2^3 = d_2, \quad d_3^3 = d_3, \quad d_4^3 = d_4, \quad 120^\circ \text{ rotation } \langle 111 \rangle$$

$$u_1^2 = u_1, \quad u_2^2 = u_2, \quad u_3^2 = u_3, \quad u_4^2 = u_4, \quad u_5^2 = u_5, \quad u_6^2 = u_6 \quad 180^\circ \text{ rotation } \langle 110 \rangle$$

$$e a_1 = a_1 = a_1 e, \dots$$

$$a_1^{-1} a_1 = e = a_1 a_1^{-1}, \dots$$

$$a_1 (d_1 u_1) = (a_1 d_1) u_1, \dots$$

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



論点

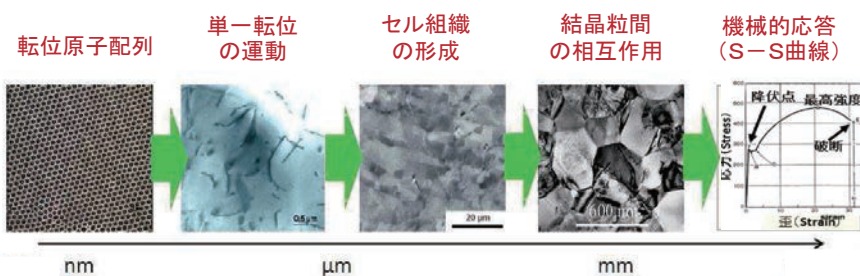
転位による結晶格子の離散で局所的な対称性の乱れの様子を合理的に表現し、塑性という連続で大域的な材料の機械的性質に如何に繋げるか

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



11

材料変形時の転位の挙動



- 十分に焼鈍された金属材料においても転位は $10^6 \sim 10^8 \text{cm/cm}^3$ 程度存在し、変形を加えるとこれらが降伏点近傍で急激に増大し、結晶粒界に転位が蓄積し、その後、転位がつくる歪場が粒界を伝播して材料全体の变形へと発展していきます(降伏現象)。
- また降伏してから材料の破壊に至るまでの材料中で起きている現象はすべて転位の運動に起因するものであり、材料設計における転位運動の統一的理解と制御は構造材料設計における喫緊の課題の一つです。

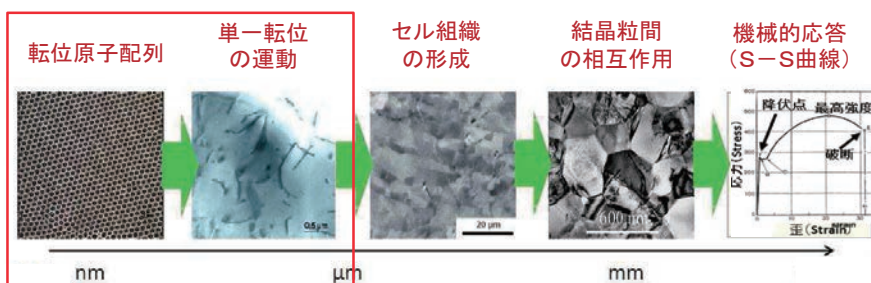
© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



12

第1の視点

BCC格子の螺旋転位の数学表現



© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.

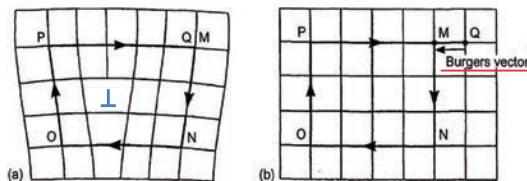


Burgers Vector

- (a) Burgers circuit round a dislocation with positive line sense in the direction.
- (b) The same circuit in a perfect crystal; closure failure is the Burgers vector.

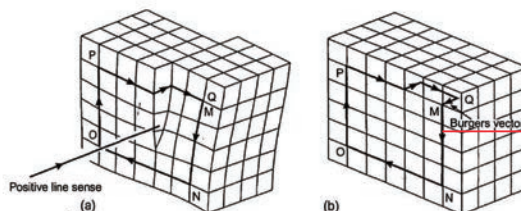
Edge dislocation

The Burgers vector of a dislocation is normal to the dislocation line.



Screw dislocation

The Burgers vector of a dislocation is parallel to the dislocation line.

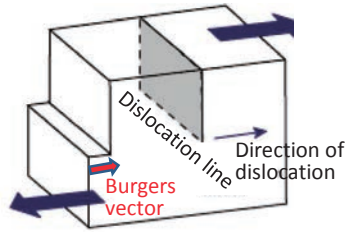


D. Hull and D. J. Bacon, Introduction to Dislocation, Butterworth-Heinemann (2011)

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



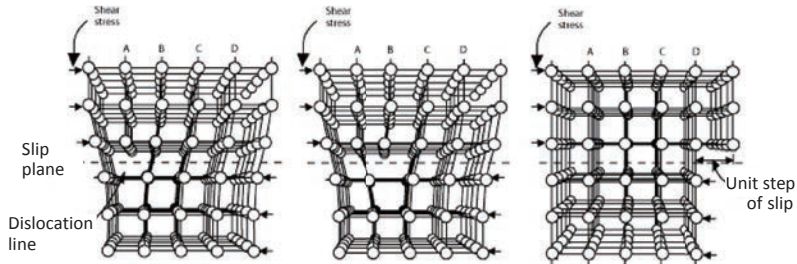
Edge Dislocation



Glide occurs when the dislocation moves in the plane which contains both its line and Burgers vector.

The slip direction is necessary always parallel to the Burgers vector of the dislocation. The glide of one dislocation across the slip plane to the surface of the crystal produces a surface step equal to the Burgers vector.

The Burgers vector of a dislocation is normal to the dislocation line.



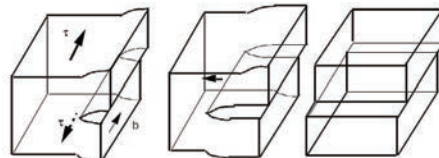
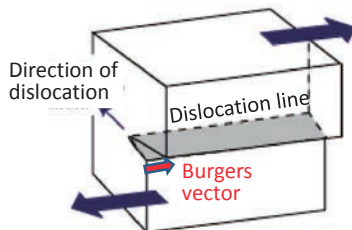
D. Hull and D. J. Bacon, *Introduction to Dislocation*, Butterworth-Heinemann (2011)

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



15

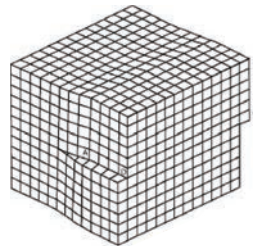
Screw Dislocation



Glide occurs when the dislocation moves in the surface which contains both its line and Burgers vector.

The slip step associated with the movement of a screw dislocation is parallel to the dislocation line. Movement of the screw dislocation produces a displacement b parallel to the dislocation line.

The Burgers vector of a dislocation is parallel to the dislocation line.



D. Hull and D. J. Bacon, *Introduction to Dislocation*, Butterworth-Heinemann (2011)

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



16

Dislocation in Body-Centered Cubic Metal

In body centered cubic metals, slip occurs in close-packed $\langle 111 \rangle$ directions. The shortest lattice vector, i.e. the Burgers vector of the perfect slip dislocation, is of the type $1/2\langle 111 \rangle$.

The crystallographic slip planes are $\{110\}$, $\{112\}$, and so on. Each of these planes contains $\langle 111 \rangle$ slip direction. Thus, if cross slip is easy it is possible for screw dislocations to move in a haphazard way, for example, on different $\{110\}$ planes or combinations of $\{110\}$ and $\{112\}$ planes.

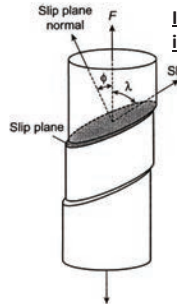
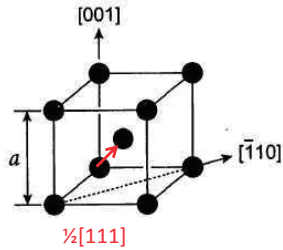


Illustration of the Geometry of Slip in a Cylindrical Crystal

Shear stress resolved on the slip plane in the slip direction

$$\text{resolved shear stress } \tau = \frac{F}{A} \underbrace{\cos \phi \cos \lambda}_{\text{Schmid factor}}$$

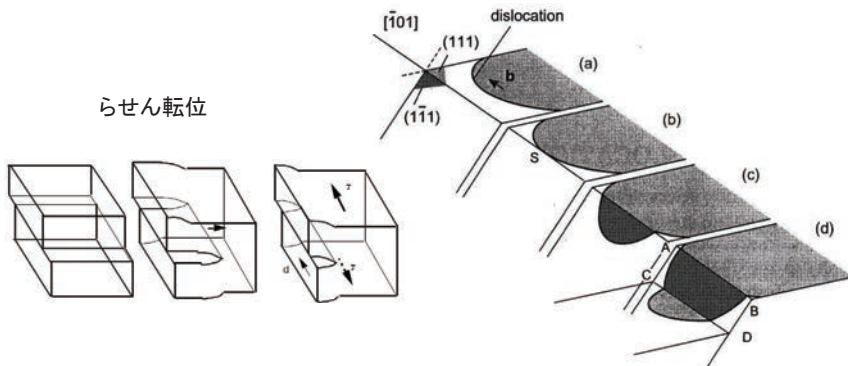
The plane on which Schmid factor takes the maximum value is selected as the slip plane among a group of crystallographic planes.

D. Hull and D. J. Bacon, Introduction to Dislocation, Butterworth-Heinemann (2011)

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



らせん転位の交叉切り



In general, screw dislocations tend to move in certain crystallographic planes. Thus, in face centered cubic metals the screw dislocation move in $\{111\}$ type planes, but can switch from one $\{111\}$ type plane to another if it contains the direction of b .

D. Hull and D. J. Bacon, Introduction to Dislocation, Butterworth-Heinemann (2011)

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



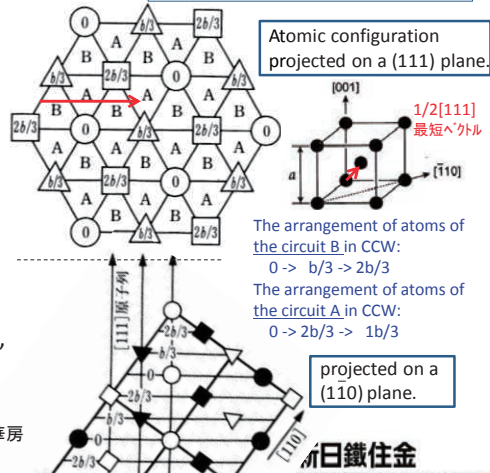
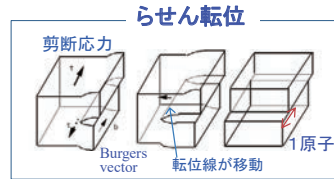
結晶格子の乱れの数学表現の事例(1次元の対称性の乱れ)

【BCC格子のらせん転位の観察事実】

1. The Burgers vector is $\frac{1}{2}[111]$.
2. A dislocation starts at a boundary.
3. The dislocation is more likely to occur at a circuit around a triangle B rather than a triangle A.
4. When the dislocation line is in the triangle B, the arrangement of atoms of the circuit B changes A.
5. After the dislocation line passes B, the arrangement of atoms becomes B.

加藤雅治, 入門転位論(1998), 裳華房

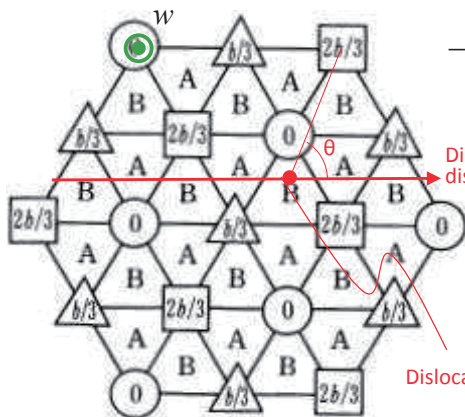
© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION



らせん転位の動きを記述する公式の導出

前述のすべての観察事実を満足させる[111]方向の原子配置を決定する公式

転位で原子が動く方向 [111]



$$w = w_0 + f(x - x_0) \frac{\theta}{2\pi} e_{[111]},$$

$$-\pi \leq \theta \leq \pi, x \in \{\text{dislocation line}\}$$

転位線の位置 x_0 から測った角度 θ のみで原子位置を決めることができる。

$$f(t) = f(-t), t \in \mathbb{R}$$

$$f(t) \geq 0,$$

$e_{[111]}$: unit vector

of the [111] direction

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



東大SG2014の成果

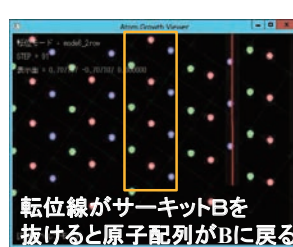
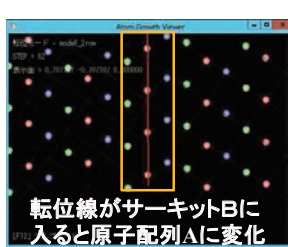
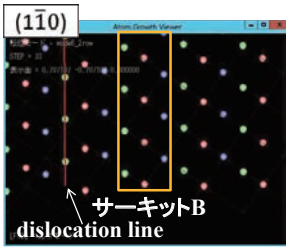
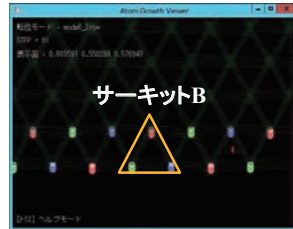
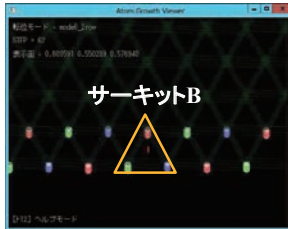
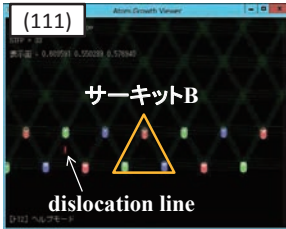
コンピュータシミュレーションによる公式の妥当性の確認

The arrangement of atoms of the circuit B in CCW: $0 \rightarrow b/3 \rightarrow 2b/3$

The arrangement of B

The arrangement of A

The arrangement of B



$0 \rightarrow b/3 \rightarrow 2b/3$
B R G

$0 \rightarrow 2b/3 \rightarrow 1b/3$
B R G



© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.

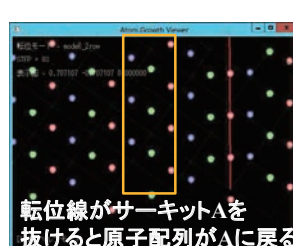
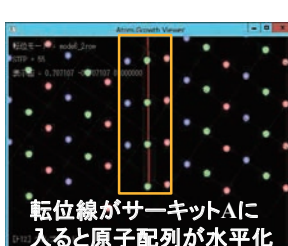
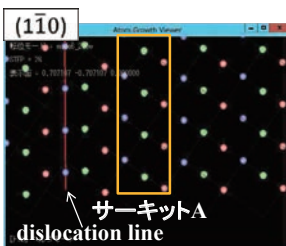
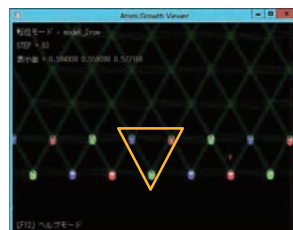
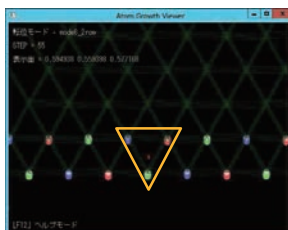
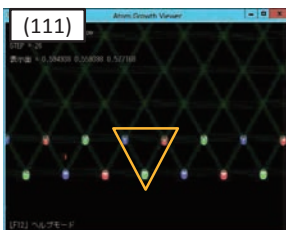
Dislocation at the circuit A

The arrangement of atoms of the circuit A in CCW: $0 \rightarrow 2b/3 \rightarrow 1b/3$

The arrangement of A

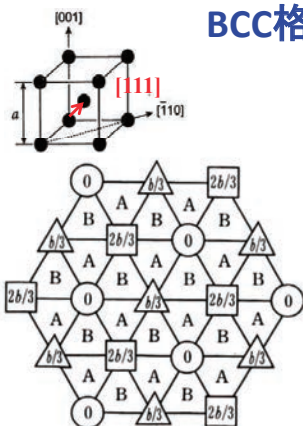
Horizontal

The arrangement of A



© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.

BCC格子のらせん転位の代数表現



P: Atomic configuration projected on a (111) plane.

P : (111) 面への射影による原子配列 := 底空間

L : 底空間の原子上のファイバー

(紙面に垂直な直線上に原子が並んでいる)

モノドロミー: 転位(特異点)の周りで原子がどのように振る舞うのかを記述する。

底空間でのループがなす基本群 π_1 がファイバーに作用し
ファイバーの原子配列を $\{+1, -1, 0\}$ のなかで置き換える準同型写像

$$\{\pi_1(P) \rightarrow \text{Aut}(L)\} = \text{Hom}(\pi_1(P), \mathbb{Z})$$

$$\cong H^1(P; \mathbb{Z}) \supset S$$

図形 P を入力にして整数の集合 S を出力する 1 次元コホモロジーと同型

$$S = \{\varphi \in H^1(P; \mathbb{Z}) \mid \varphi(\Delta) \in \{+1, -1, 0\}\}$$

An element of S expresses an arrangement of dislocations.

バーガーズベクトルの数学表現

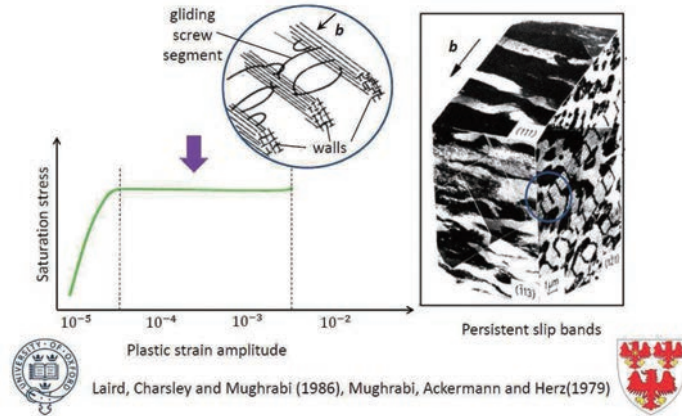
我々は、物質・材料のマクロな性質の重要な決定因子である「結晶格子の乱れに起因して発現するダイナミクス(複数転位間の相互作用等)」を記述するための数学の道具の進化を継続推進中

第2の視点

転位のエネルギー評価

転位エネルギーのマクロ視点の評価（塑性）

外力等によって、結晶がある格子面上を部分的に滑ったとき、滑った部分と滑らない部分との境界線に転位と呼ばれる原子配列の乱れが生じる。転位近傍の原子が再配置されることによって転位の位置が移動し、塑性変形（破壊せずに変形する）を起こし、材料の硬さ（変形のしにくさ）の決定因子になっている。

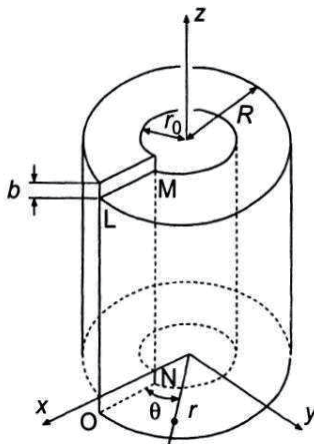


© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.

NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL

25

東大SG2014の成果



• Displacement :
is given.

$$u(x, y, z) = [u_x, u_y, u_z]$$

• Strain : e_{ij}

In linear elasticity, the nine components of strain are given in terms of the first derivatives of

u_x, u_y, u_z .

$$e_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad e_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad e_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$$

$$e_{yz} = e_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right)$$

$$e_{zx} = e_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right)$$

$$e_{xy} = e_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)$$

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.

新日鐵住金
NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL

26

Hooke's law

σ_{ij} is force per unit area exerted in the i direction on a face with outward normal in the j direction by the material outside upon the material inside.



The relationship between stress and strain in linear elasticity is Hooke's Law, in which each stress component is linearly proportional to each strain.

For isotropic solid, only two proportionality constants are required.

$$\sigma_{xx} = 2Ge_{xx} + \lambda(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$

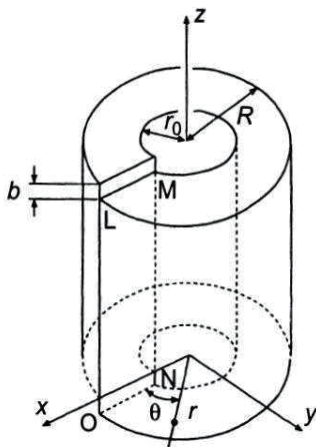
$$\sigma_{yy} = 2Ge_{yy} + \lambda(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$

$$\sigma_{zz} = 2Ge_{zz} + \lambda(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$

$$\sigma_{xy} = 2Ge_{xy} \quad \sigma_{yz} = 2Ge_{yz} \quad \sigma_{zx} = 2Ge_{zx}$$

• λ and G are the lame-constants.

Elastic Energy for our case



$$u = (u_x, u_y, u_z) = \left(0, 0, \frac{b}{2\pi} \theta \right)$$

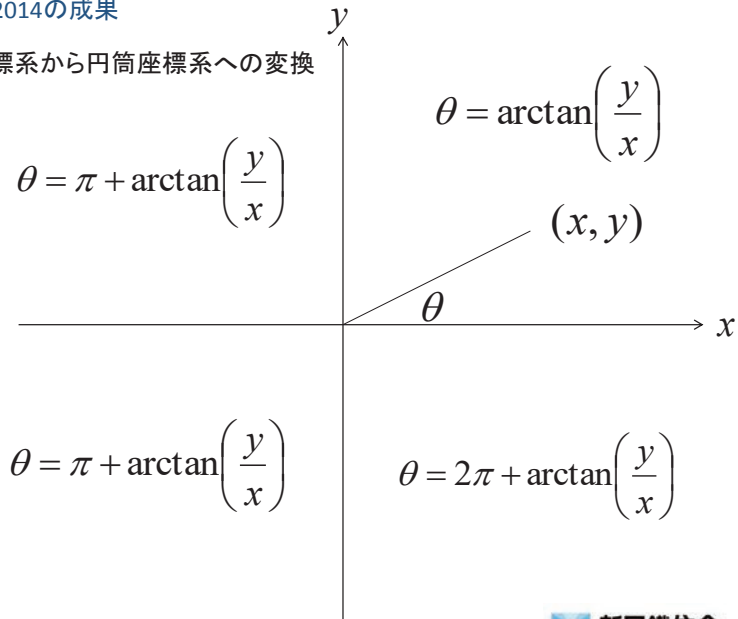
$$e_{ii} = 0 (i = x, y, z), e_{xy} = e_{yx} = 0$$

$$e_{xz} = e_{zx} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial x}, e_{yz} = e_{zy} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial y}$$

$$dE_{el} = \frac{1}{2} dS \sum_{i,j=x,y,z} \sigma_{ij} e_{ij} = \frac{G}{2} dS |\nabla u_z|^2$$

東大SG2014の成果

直交座標系から円筒座標系への変換



© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



東大SG2014の成果

$$\frac{\partial u_z}{\partial x} = -\frac{b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{b}{2\pi} \frac{\sin \theta}{r}$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial y} = \frac{b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{b}{2\pi} \frac{\cos \theta}{r}$$

$$E_{el} = \frac{G}{2} \int |\nabla u_z|^2 dS = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{r_0}^R \frac{Gb^2}{8\pi^2 r^2} r dr = \frac{Gb^2}{4\pi} \log\left(\frac{R}{r_0}\right)$$

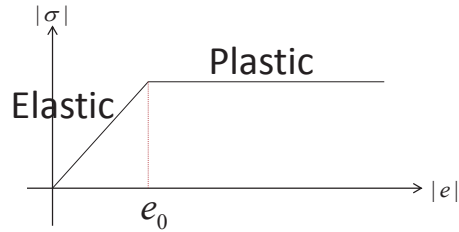
$$r_0 \rightarrow 0 \quad E_{el} \rightarrow \infty$$

Q: Can we define an energy without cut-off,
consistent with crystalline structure?

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



Elastic and Plastic



$$\sigma \in \partial \varepsilon(e), \varepsilon(p) := \begin{cases} |p|^2 / 2e_0 & |p| \leq e_0 \\ |p| - e_0 / 2 & |p| > e_0 \end{cases}$$

$$E(u) := \int_{\Omega} \varepsilon(\nabla u_z) dS$$

$$\text{Elastic part : } dE_{el} = dS |\nabla u_z|^2 / 2e_0$$

$$\text{Plastic part : } dE_{pl} = dS (|\nabla u_z| - e_0 / 2)$$

Strain energy

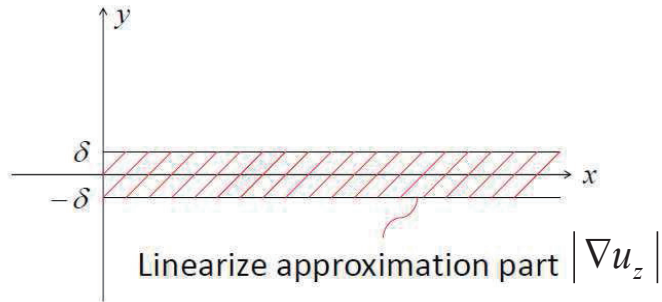
We propose new energy functional by combining Elastic energy and Plastic energy:

$$E_{st} = \int_{\{|\nabla u_z| < e_0\}} dE_{el} + \int_{\{|\nabla u_z| > e_0\}} dE_{pl}$$

To define second term, we approximate

$$\int_{\{|\nabla u_z| > 1\}} (|\nabla u_z| - e_0 / 2) dS \approx bH(\{|\nabla u_z| > 1\}) \approx R$$

東大SG2014の成果



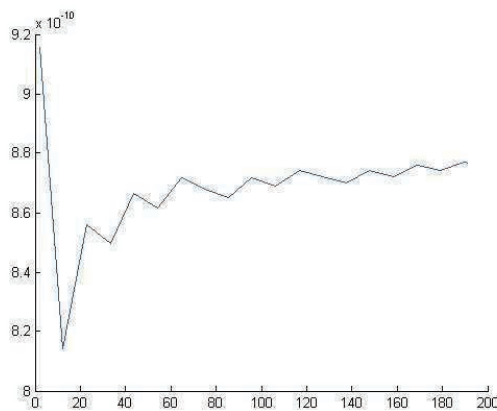
$$\begin{aligned}
 & E_{pl}(u_z) \\
 &= \lim_{r_0 \rightarrow 0} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\delta}^{\delta} \int_{r_0}^R \frac{b}{2\delta} \sqrt{\left(\pi^{-1} \arctan\left(\frac{\delta}{x}\right) - 1\right)^2 + \frac{\delta^2}{\pi^2(x^2 + \delta^2)^2}} y - \frac{e_0}{2} dx dy \\
 &= bR \approx R
 \end{aligned}$$

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



東大SG2014の成果

Numerical Result for Strain Energy;
Elastic-Plastic Case

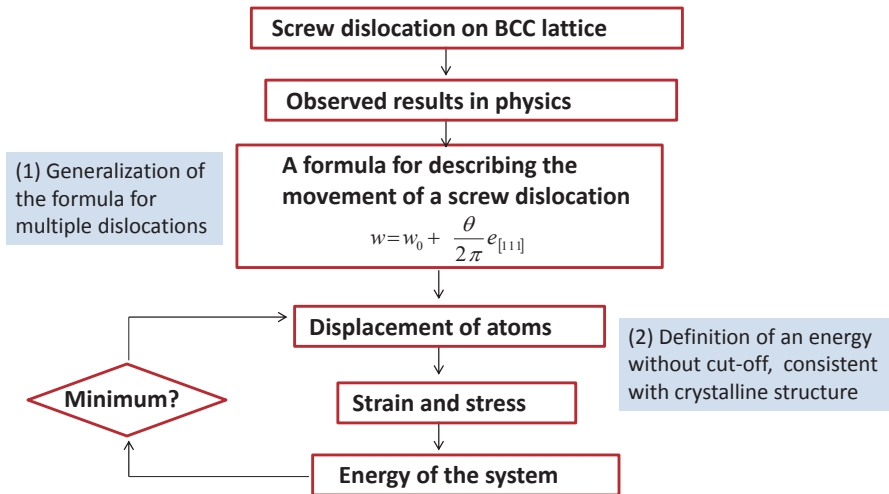


$$\frac{E_{st}(R)}{\log R + 2bR}$$

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



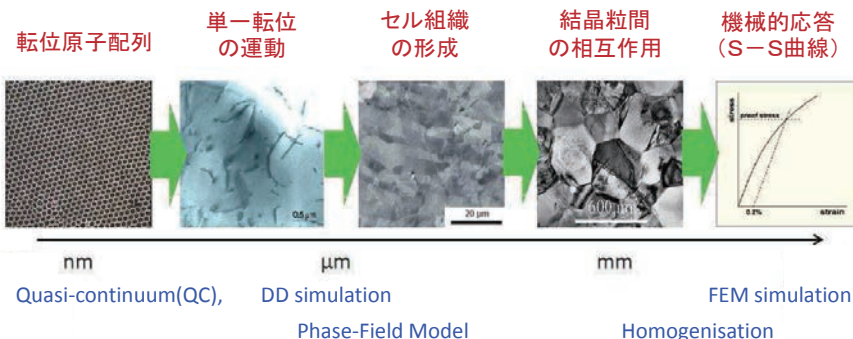
Problem Establishment For Mathematics



第3の視点

ミクロ(離散)とマクロ(連続)を
合理的・明示的に繋ぐための階層構造
の仕組みを数学で記述する。

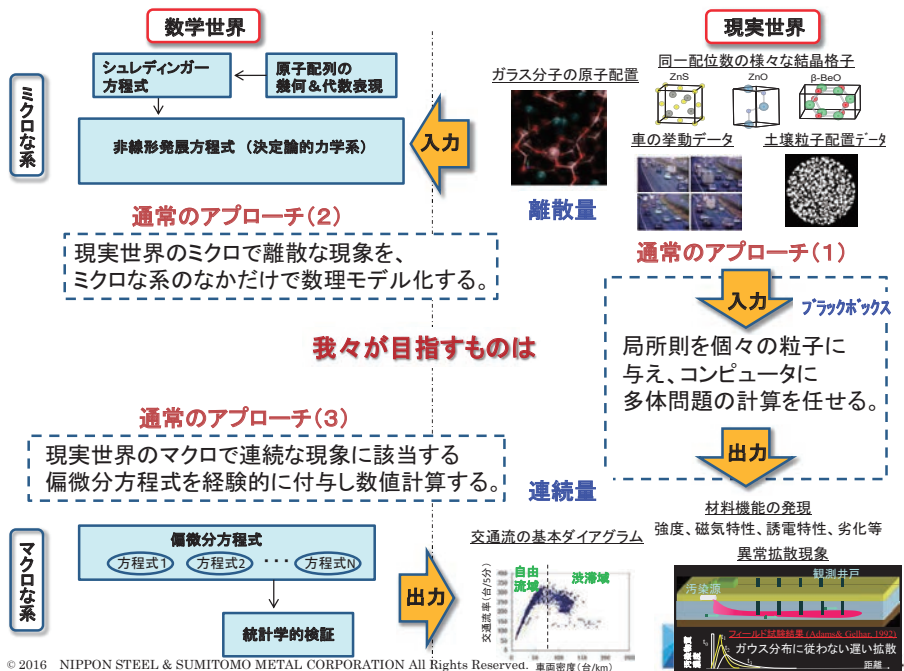
Dislocation Behavior

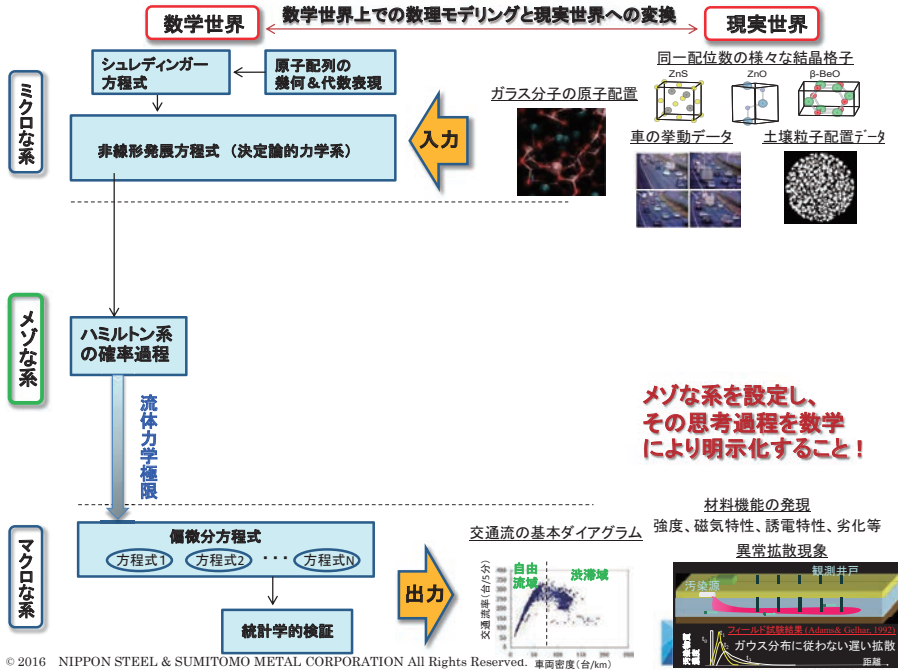


➤計算科学分野では、材料の応力と歪の関係に代表されるマクロスケールな機械的特性をマルチスケールで理解するため、様々な階層での計算科学を用いた研究が進められています。

➤しかし、階層毎に計算前提が異なるため、転位密度を共通記述因子とする段階に止まっており、階層を跨ぎ計測結果を同時に予測できるまでには至っていません。

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.





事例:ミクロ(離散)からマクロ(連続)への橋渡しの数学

交通流の数理モデルの理論体系再構築と高精度予測技術

観測対象区間

- 東名・下り・大和BS付近
- ITV設置・ビデオ映像収録
- 1.2km区間に11台
- 上流1km地点付近に2台
- 13台の映像はGPS同期で時刻情報と共に記録

東大・生産研 大口教授(交通制御工学)

時系列画像データ

画像から各レーンを走る車の速度、位置を同定

種々のデータ融合による交通流現象の可視化技術の進化(断面計測+プローブ)

交通工学者の問題意識: 新しいタイプの計測データの出現により半世紀以上の歴史を有する既存の理論体系見直しの必要性を感じている。

1) 提案は、既存の理論体系の上位概念であることが必要条件(既存理論を包含)
 ⇒ 数学的視点から既存の数理モデル体系をサーベイ
 2) ①個々の車に着目した離散モデル(OVモデル)と②車両流れに着目した連続モデル(LWRモデル)を架ぎ、その第1原理を明確化
 ⇒ 第1原理に焦点をあて、数学で理論を再構築

数学的視点に基づく既存数理モデルの理論体系化

PDEモデル (Conservation law)

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial v(x,t)}{\partial x} \rho(x,t) = 0$$

車両密度 ρ の保存則

ラベル関数の導入

$$M(x,t) = \int_0^x \rho(x',t) dx'$$

H-J方程式

$$\frac{\partial M(x,t)}{\partial t} - v \left(\frac{\partial M(x,t)}{\partial x} \right) = 0$$

代数学公式 (Demand-Supply 解法) とロバートソン

$$M_i^* = M_i^* + \Delta t \min \left(\psi_i \left(\frac{M_i^* - M_i^*}{\Delta x} \right), \psi_i \left(\frac{M_i^* - M_i^*}{\Delta x} \right) \right)$$

PDEシステムのモデル

Aw & Rascle (2000)

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial v(x,t)}{\partial x} (\rho(x,t)) = 0$$

車両密度 ρ の保存則 & 運動量 v の方程式

Lagrangian mass 座標 (M, T) と Eulerian 座標 (x, t) 間の変換

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\rho, \quad \frac{\partial M}{\partial x} = \rho v, \quad T = t$$

離散モデル (Optimal velocity model の一般化)

$$\frac{d}{dt} x(M) = v(M)$$

Bando et al (1995)

$$\frac{d}{dt} x(M) = \frac{1}{\tau} \left[v \left(\frac{\Delta x}{x(M) - x(M)} \right) - v(M) \right]$$

超短期記憶

車両密度 ρ の保存則

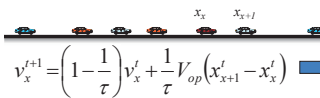
車両密度 ρ の保存則

車両密度 ρ の保存則

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.

新しい数学モデルの発想とインパクト

OV model(既存離散モデル)



SOV model(既存モデル改良版)

v_x^t : probability to proceed on the cell automaton.
 V_{op} returns a value of $[0,1]$.
 $0 < \frac{1}{\tau} < 1$

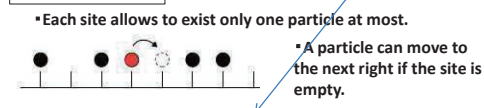
マイクロ(ランダム)とマクロ(決定論的)を繋ぐ数学理論

・[必要最小限の前提条件]
粒子(車)の個数が唯一の保存量
⇒時間と空間(粒子数)を無限大にした場合の時間発展則(偏微分方程式)を導出

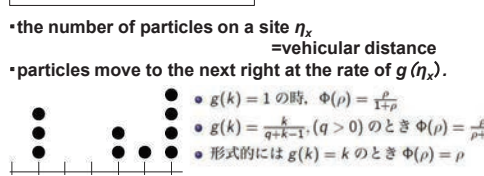
既存モデルの極限状態を粒子(車)でモデル表現

★マイクロ&離散の確率法則(車の挙動の新しい第1原理)

$\frac{1}{\tau} = 0$: $v_x^{t+1} = v_x^t$ TASEP (Totally Asymmetric Simple Exclusion Process)



$\frac{1}{\tau} = 1$: $v_x^{t+1} = V_{op}(x_{x+1}^t - x_x^t)$ ZRP (Zero Range Process)



★流体力学極限

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \{(1-\rho(t,x))\rho(t,x)\} = 0$$

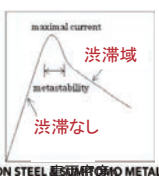
既存のLWR型偏微分方程式(マクロ&連続)

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Psi(\rho(t,x)) = 0$$

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Phi(\rho(t,x)) = 0$$

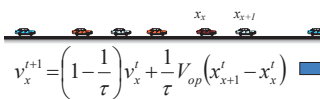
$\Phi(\rho)$ is determined only by a function g .

交通流率の関数形 Ψ が新しい第1原理から明示的に導出可能になった。←従来は計測やコンピュータシミュレーションでのみ求まるもの



新しい数学モデルの発想とインパクト

OV model(既存離散モデル)



SOV model(既存モデル改良版)

v_x^t : probability to proceed on the cell automaton.
 V_{op} returns a value of $[0,1]$.
 $0 < \frac{1}{\tau} < 1$

マイクロ(ランダム)とマクロ(決定論的)を繋ぐ数学理論

・[必要最小限の前提条件]
粒子(車)の個数が唯一の保存量
⇒時間と空間(粒子数)を無限大にした場合の時間発展則(偏微分方程式)を導出

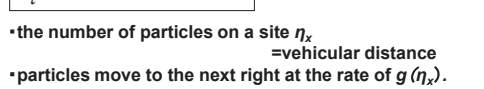
既存モデルの極限状態を粒子(車)でモデル表現

★マイクロ&離散の確率法則(車の挙動の新しい第1原理)

マクロな系の偏微分方程式の構成関数や係数のなかに、マイクロな情報が明示的に組み込まれる。

マイクロとマクロを繋ぐ強力な数学の道具！
熱伝導率、電気伝導率等、物質・材料への展開が可能

$\frac{1}{\tau} = 1$: $v_x^{t+1} = V_{op}(x_{x+1}^t - x_x^t)$ ZRP (Zero Range Process)



★流体力学極限

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \{(1-\rho(t,x))\rho(t,x)\} = 0$$

既存のLWR型偏微分方程式(マクロ&連続)

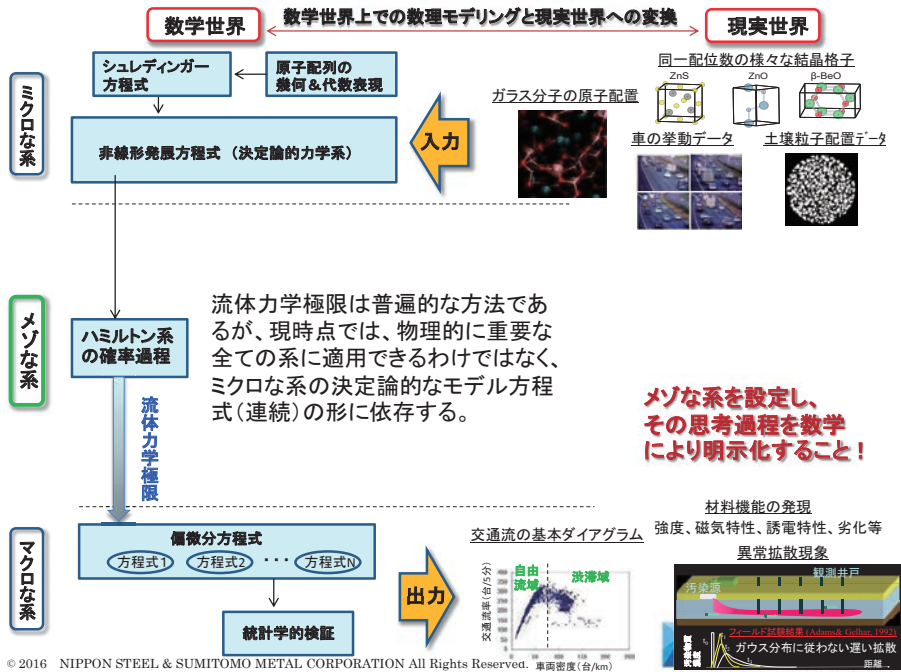
$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Psi(\rho(t,x)) = 0$$

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Phi(\rho(t,x)) = 0$$

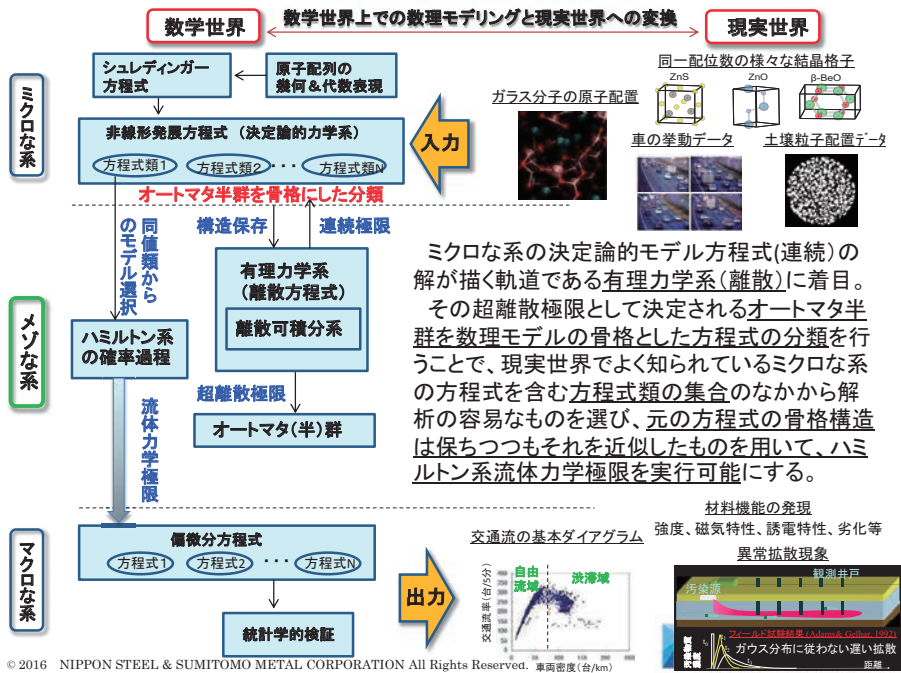
$\Phi(\rho)$ is determined only by a function g .

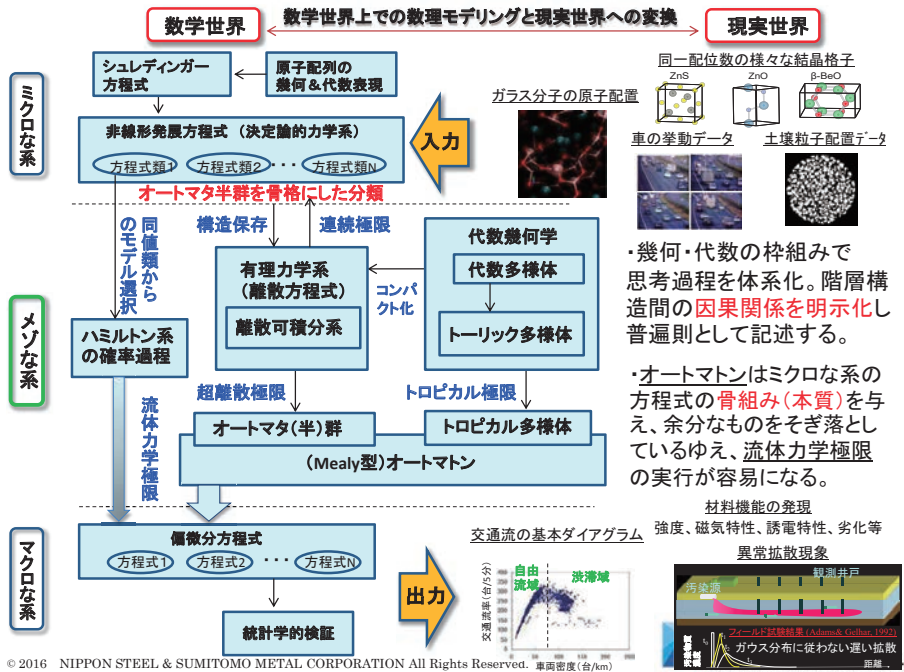
交通流率の関数形 Ψ が新しい第1原理から明示的に導出可能になった。←従来は計測やコンピュータシミュレーションでのみ求まるもの





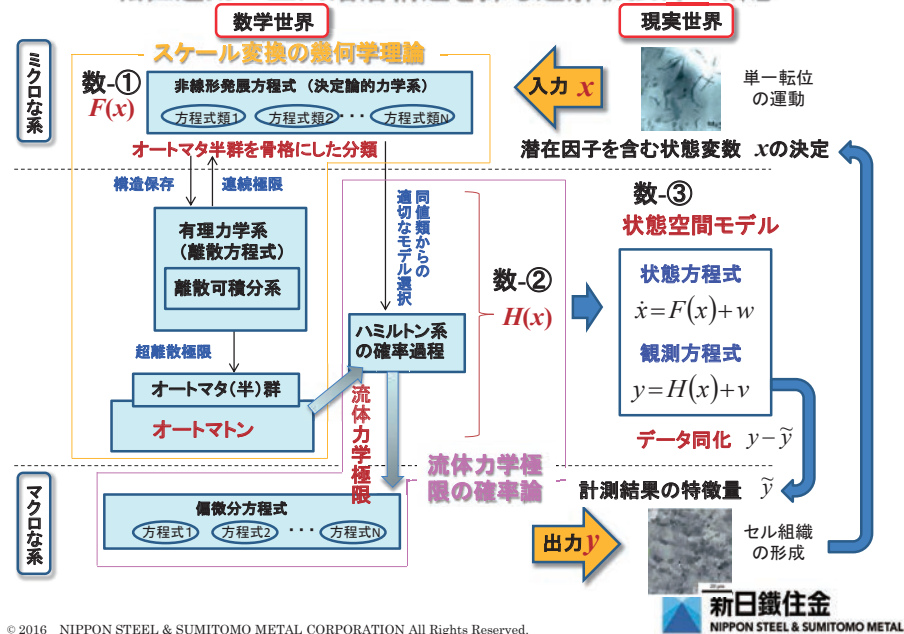
メソな系を設定し、その思考過程を数学により明示化すること!





45

転位運動の空間階層構造を探る逆解析技術の構想



46

ご清聴ありがとうございました。

© 2016 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



らせん転位の数学的表現の現状とその問題点

A Mathematical Description of Screw Dislocations

佐伯修 (九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所)*¹
Osamu Saeki (Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University)

概 要

The talk is based on the paper entitled “An algebraic description of screw dislocations in SC and BCC crystal lattices”, arXiv:1605.09550 [math-ph], which is a joint work with Hiroyasu Hamada, Shigeki Matsutani, Junichi Nakagawa and Masaaki Uesaka.

Mathematical descriptions of dislocations in crystal lattices have been studied extensively mainly in the framework of differential geometry. However, lattice structures are usually given as discrete geometry and are controlled by discrete groups.

In this talk, we give algebraic descriptions of screw dislocations in the simple cubic (SC) and the body centered cubic (BCC) crystal lattices in terms of certain “fibrations” involving group rings. Using such fibration structures, we embed the continuum geometric picture of a screw dislocation in the euclidean space, and then we use algebraic structures of lattices to embed their “discrete dislocations” in the continuum description. Our key idea is to use certain sections of S^1 -bundles to control the behavior of dislocations, both in continuum and discrete pictures.

We also show that the energy of a screw dislocation based on the spring model is given by the Epstein zeta function in its first order approximation. This will be shown by using our algebraic and topological description of a screw dislocation.

It should be noted that the results presented in this talk arose in our attempt to solve the following problems proposed in the Study Group Workshop at Kyushu University and the University of Tokyo, held during July 29–Aug 4, 2015.

1. To find a proper mathematical description of a screw dislocation in the BCC lattice.
2. To find a proper mathematical description of the energy of a screw dislocation in the BCC lattice.

1. 本報告

当日報告した内容を次ページ以降に示す：

*¹ 〒819-0395 福岡市西区元岡744, 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

らせん転位の数学的表現 の現状とその問題点

佐伯 修

(九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所)

Joint work with

濱田 裕康, 松谷 茂樹 (佐世保工業高等専門学校),
中川 淳一 (新日鐵住金 (株) 先端技術研究所),
上坂 正晃 (東京大学 数理科学研究科)

2016年9月1日 (木) 結晶のらせん転位の数理
於 マス・フォア・インダストリ研究所

1

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

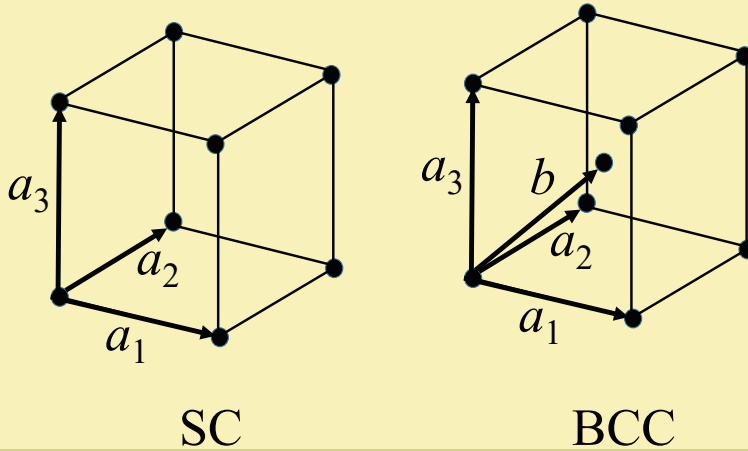
§0. Introduction

2

SC and BCC lattices

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

Simple Cubic Lattice and Body-Centered Cubic Lattice

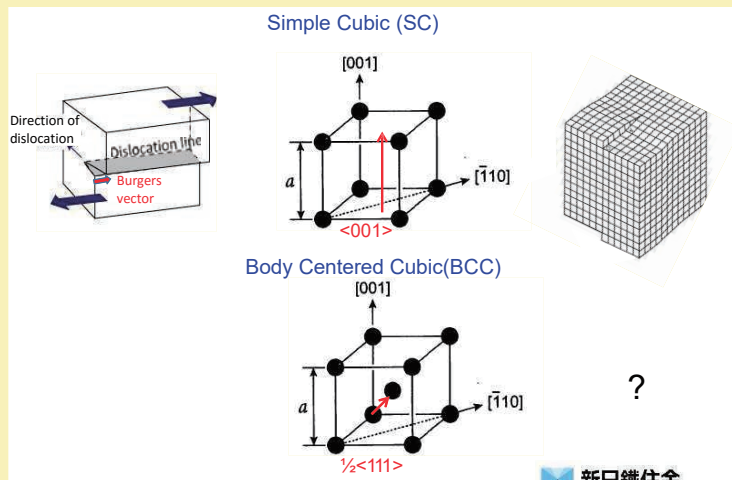


3 / 39

らせん転位 (screw dislocation)

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

Study Group Workshop 2015: "Mathematical description of disordered structures in crystal"



© 2015 NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION All Rights Reserved.



2015SGW 新日鐵住金 (株) 中川氏資料より

4 / 39

講演概要

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

結晶格子のらせん転位の数学的研究

⇒ 主に、微分幾何や連続体幾何の観点から行われてきた。
一方、結晶格子は離散群で制御され、離散幾何的側面もある。

【本講演の流れ】

1. らせん転位の連続体幾何をユークリッド空間内に実現。
 S^1 束の切断を用いて **monodromy** を制御。
2. SC 格子, BCC 格子を代数的に記述。
群環を用いたファイバー構造が鍵。
3. 格子の代数構造 ⇒ 離散的らせん転位を連続的対象に埋め込む。
4. らせん転位エネルギーの近似計算。
格子構造を用いたスプリング・モデル ⇒ **Epstein Zeta** 関数

5 / 39

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

§1. らせん転位の連続体幾何の記述

指数関数の導く完全系列

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

SC 格子のらせん転位の記述のため、まず次の**完全系列**を考える。

$$0 \longrightarrow \mathbb{Z} \xrightarrow{\iota} \mathbb{R} \xrightarrow{\exp 2\pi\sqrt{-1}} U(1) \longrightarrow 1$$

これを少し scaling-shift したものを考える。(以下、**格子間距離** $d > 0$ を固定。 $\delta > 0$ は「ずれ」に相当し重要。いずれ動かす。)

$$\mathbb{Z} \xrightarrow{\varphi_\delta} \mathbb{E} \xrightarrow{\psi} S^1$$

ここで、 $\varphi_\delta(n) = d \cdot n + \delta$, $\psi(y) = \exp(2\pi\sqrt{-1}y/d)$ 。

なお、集合としては $\mathbb{E} = \mathbb{R}$, $S^1 = U(1)$ だが、群構造を忘れていたときは敢えて \mathbb{E} , S^1 と書く。

このとき完全性から、 $\varphi_\delta(\mathbb{Z}) = \psi^{-1}(\exp(2\pi\sqrt{-1}\delta/d))$ が成立。

$\gamma = \exp(2\pi\sqrt{-1}\delta/d) \in S^1$ とおく。

7 / 39

7

らせん転位が起こる前の状態

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

\mathbb{E}^2 上の**自明束** : $\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2}$, $\mathbb{E}_{\mathbb{E}^2}$, $S^1_{\mathbb{E}^2}$

$$\text{束写像 } \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2} \xrightarrow{\widehat{\varphi}_\delta} \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2} \xrightarrow{\widehat{\psi}} S^1_{\mathbb{E}^2}.$$

($\widehat{\varphi}_\delta$, $\widehat{\psi}$ はそれぞれ φ_δ , ψ から自然に誘導されるもの。)

$\gamma \in S^1$ に対し、自明な**切断** $\sigma_\gamma : \mathbb{E}^2 \rightarrow S^1_{\mathbb{E}^2}$ を

$$\sigma_\gamma(z) = (\gamma, z) \in S^1_{\mathbb{E}^2} = S^1 \times \mathbb{E}^2 \quad (z \in \mathbb{E}^2)$$

で定義。すると、各ファイバー上での「完全性」より、

$$\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2, \gamma} := \widehat{\psi}^{-1}(\sigma_\gamma(\mathbb{E}^2)) = \widehat{\varphi}_\delta(\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2}) \subset \mathbb{E}^3 = \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2}.$$

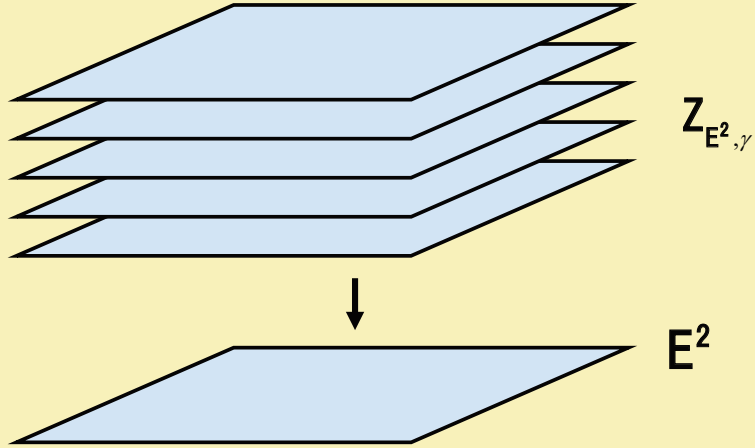
らせん転位が起こる前の状態: $\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2, \gamma}$ は \mathbb{E}^2 の**自明な被覆空間**。

8 / 39

8

自明な被覆空間

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー



9 / 39

9

単独のらせん転位の記述

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

以下, $\mathbb{E}^2 = \mathbb{C}$ と同一視. $z_0 \in \mathbb{E}^2 = \mathbb{C}$.

$\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}$ 上の**自明束**: $\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}}, \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}}, S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}}$

$$\text{束写像 } \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}} \xrightarrow{\widehat{\varphi}_\delta} \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}} \xrightarrow{\widehat{\psi}} S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}}.$$

z_0 のまわりで**非自明な切断** $\sigma_{z_0, \gamma} : \mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\} \rightarrow S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}}$ を

$$\sigma_{z_0, \gamma}(z) = \left(\gamma \frac{z - z_0}{|z - z_0|}, z \right), \quad z \in \mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\} = \mathbb{C} \setminus \{z_0\}$$

で定義. そして

$$\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}, \gamma} := \widehat{\psi}^{-1}(\sigma_{z_0, \gamma}(\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\})) \subset \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}} \subset \mathbb{E}^3$$

とおき, $\pi_{z_0, \gamma} : \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}, \gamma} \rightarrow \mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}$ を自然な射影とする.

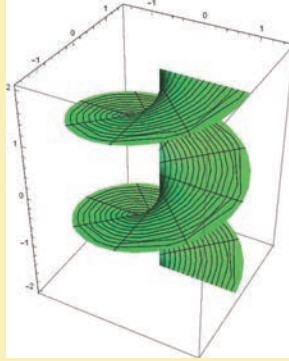
10 / 39

10

$\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}$ の普遍被覆の \mathbb{E}^3 での実現

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

補題 1.1 $\pi_{z_0, \gamma} : \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}, \gamma} \rightarrow \mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}$ は $\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}$ の普遍被覆.



$z_0 = (0, 0)$, $d = 2$, $\delta = 0$, $\gamma = 1$ の場合

これが SC 格子の単独ならせん転位の連続体幾何の記述.

11 / 39

11

複数の平行ならせん転位

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

$\mathcal{S} = \mathcal{S}_+ \amalg \mathcal{S}_- \subset \mathbb{E}^2$: 転位線の「位置」

$\mathcal{S}_+ = \{z_1, z_2, \dots, z_s\}$ 右ねじり, $\mathcal{S}_- = \{z_{s+1}, z_{s+2}, \dots, z_{s+t}\}$ 左ねじり.

$\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}$ 上の自明束: $\mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}}^1, S_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}}^1$ 束写像 $\hat{\psi} : \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}}^1 \rightarrow S_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}}^1$

切断 $\sigma_{\mathcal{S}, \gamma} : \mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S} \rightarrow S_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}}^1$ を以下で定義:

$$\sigma_{\mathcal{S}, \gamma}(z) = \left(\gamma \prod_{z_i \in \mathcal{S}_+} \frac{z - z_i}{|z - z_i|} \cdot \prod_{z_j \in \mathcal{S}_-} \frac{\overline{z - z_j}}{|z - z_j|}, z \right), \quad z \in \mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S} = \mathbb{C} \setminus \mathcal{S}.$$

$$\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}, \gamma} := \hat{\psi}^{-1}(\sigma_{\mathcal{S}, \gamma}(\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S})) \subset \mathbb{E}^3 \setminus \pi_{\mathbb{E}}^{-1}(\mathcal{S}) \subset \mathbb{E}^3$$

とおく.

$\pi_{\mathcal{S}, \gamma} : \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}, \gamma} \rightarrow \mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}$ を自然な射影とすると, $\pi_{\mathcal{S}, \gamma}$ は被覆写像.

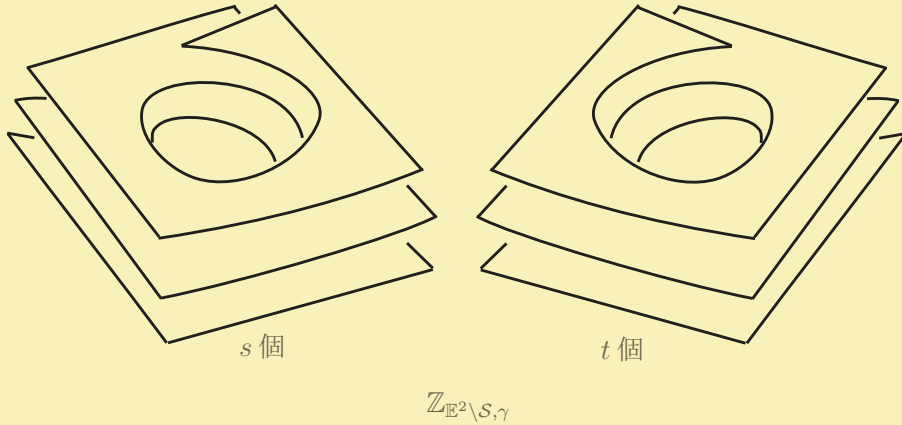
被覆空間は \mathbb{E}^3 内に実現されている.

12 / 39

12

らせん転位に対応する被覆空間

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー



13 / 39

13

基本群との関係

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

$x_0 \in \mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}$ を固定.

基本群 $\pi_1(\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}, x_0)$ は階数 $n = s + t$ の自由群.

m_k : 点 z_k のまわりを左周りに1周する基点付きループ.

$\pi_1(\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}, x_0)$ は $m_1, \dots, m_s, m_{s+1}, \dots, m_{s+t}$ で生成される.

準同型 $h : \pi_1(\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}, x_0) \rightarrow \mathbb{Z}$ を以下で定める :

$$h(m_k) = \begin{cases} 1, & 1 \leq k \leq s, \\ -1, & s+1 \leq k \leq s+t. \end{cases}$$

補題 1.2 被覆 $\pi_{\mathcal{S}, \gamma} : \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}, \gamma} \rightarrow \mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}$ は $\pi_1(\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}, x_0)$ の部分群 $\text{Ker } h$ に対応する.

($\text{Ker } h$ のループ上では被覆は自明.)

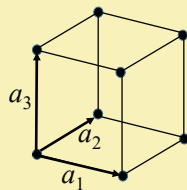
14 / 39

14

§2. らせん転位の離散モデル

15

SC 格子の代数構造



SC 格子 = 加法群 : $\mathbb{A}_3^a := \mathbb{Z}a_1 + \mathbb{Z}a_2 + \mathbb{Z}a_3 = \langle a_1, a_2, a_3 \rangle_{\mathbb{Z}}$.

$a > 0$ を格子間距離として, $a_1 = (a, 0, 0)$, $a_2 = (0, a, 0)$, $a_3 = (0, 0, a)$.

$\implies \iota_{\mathbb{A}_3} : \mathbb{A}_3^a \hookrightarrow \mathbb{R}^3$.

$\delta = (\delta_1, \delta_2, \delta_3) \in \mathbb{E}^3$ を固定し, $\iota_{\mathbb{A}_3, \delta} : \mathbb{A}_3^a \hookrightarrow \mathbb{E}^3$ を以下で定義 :

$$\iota_{\mathbb{A}_3, \delta}(n_1a_1 + n_2a_2 + n_3a_3) = (n_1a, n_2a, n_3a) + (\delta_1, \delta_2, \delta_3), \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}.$$

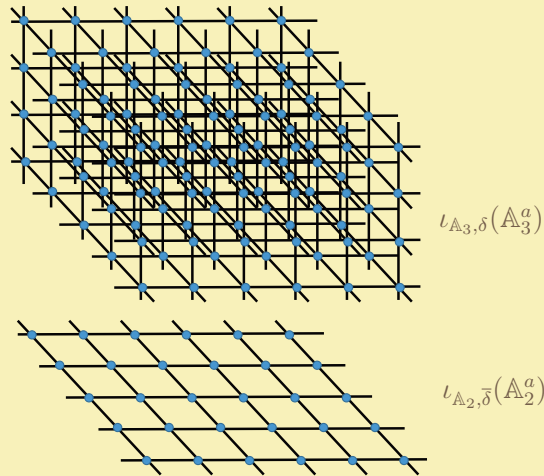
以下, $\iota_{\mathbb{A}_3, \delta}(\mathbb{A}_3^a)$ の $(0, 0, 1)$ -方向へのらせん転位を記述しよう.

16 / 39

16

らせん転位前のSC格子

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー



17 / 39

17

SC格子の群環

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

乗法群 $\mathbb{A}_3 := \{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2} \alpha_3^{n_3} \mid \text{abelian}, n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}\} (\cong \mathbb{A}_3^a)$

\mathbb{A}_3 や \mathbb{A}_3^a の **ファイバー構造** を記述するため、**群環** を考える：

$$\mathbb{C}[\mathbb{A}_3] = \mathbb{C}[\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_1^{-1}, \alpha_2^{-1}, \alpha_3^{-1}].$$

$(0, 0, 1)$ -方向に沿った2次元空間への**射影**には、以下の**商**が対応：

$$\mathbb{C}[\mathbb{A}_3]/(\alpha_3 - 1) = \mathbb{C}[\alpha_1, \alpha_2, \alpha_1^{-1}, \alpha_2^{-1}] =: \mathbb{C}[\mathbb{A}_2].$$

乗法群 $\mathbb{A}_2 := \{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2} \mid \text{abelian}, n_1, n_2 \in \mathbb{Z}\} (\cong \mathbb{Z}a_1 + \mathbb{Z}a_2 =: \mathbb{A}_2^a)$

商に $\mathbb{C}[\mathbb{A}_2]$ -factor が1つしかないことに注意。

注意： $(0, 0, 1)$ -方向のらせん転位だけであれば、実は**群環**を導入しなくても良い。方向を変えたときに威力を発揮する。

18 / 39

18

SC 格子の (001)-方向のらせん転位

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

射影 $\mathbb{C}[\mathbb{A}_3] \rightarrow \mathbb{C}[\mathbb{A}_3]/(\alpha_3 - 1)$ は **ファイバー構造** を誘導 :

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{Z} & \longrightarrow & \mathbb{A}_3 \\ & & \downarrow \varpi \\ & & \mathbb{A}_2. \end{array}$$

$$\mathcal{A}_p := \{(n_1 a + \delta_1, n_2 a + \delta_2) \mid n_1, n_2 \in \mathbb{Z}\} \quad \text{とおく.}$$

(平面 \mathbb{E}^2 内の離散点集合. “p” = plane).

あとは連続体のらせん転位の記述と同様に,

$$\text{束写像 } \mathbb{Z}_{\mathcal{A}_p} \longrightarrow \mathbb{E}_{\mathcal{A}_p} \xrightarrow{\hat{\psi}} S^1_{\mathcal{A}_p}, \text{ 切断 } \mathcal{A}_p \rightarrow S^1_{\mathcal{A}_p}$$

を用いて, SC 格子の (0, 0, 1)-方向への離散的ならせん転位の記述が得られる.

(ただし, 底空間は $\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}$ ではなく, \mathcal{A}_p .)

19 / 39

(111)-方向のファイバー構造

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

BCC 格子のらせん転位の準備 :

SC 格子の (111)-方向のファイバー構造 を考える.

群環の **商** を考える :

$$\mathcal{R}_d = \mathbb{C}[\mathbb{A}_3]/(\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 - 1)$$

$a_1 + a_2 + a_3 \in \mathbb{A}_3^a \subset \mathbb{R}^3$ の直交補空間の基底 : $a_1 - a_3, a_2 - a_3$.

そこで \mathbb{A}_3 の **部分群** を考える (“d” = diagonal) :

$$\mathbb{A}_d := \{(\alpha_1 \alpha_3^{-1})^{\ell_1} (\alpha_2 \alpha_3^{-1})^{\ell_2} \mid \ell_1, \ell_2 \in \mathbb{Z}\}.$$

その群環 $\mathbb{C}[\mathbb{A}_d] = \mathbb{C}[\alpha_1 \alpha_3^{-1}, \alpha_2 \alpha_3^{-1}, \alpha_1^{-1} \alpha_3, \alpha_2^{-1} \alpha_3]$ が \mathcal{R}_d に対応するものと期待される.

20 / 39

C[A_d]-加群としての R_d

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

ところが、実際には以下が成立.

補題 2.1 C[A_d]-加群として、以下の自然な同型がある：

$$\mathcal{R}_d \cong \mathbb{C}[A_d] \oplus \mathbb{C}[A_d]\alpha_1 \oplus \mathbb{C}[A_d]\alpha_1\alpha_2$$

幾何的説明

立方体 $[0, a]^3$ に 3 次対称群が自然に作用 (正 8 面体群の部分群).

この作用の軌道は以下に対応：

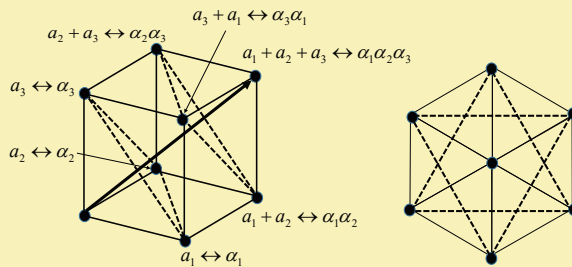
$$\{1\}, \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}, \{\alpha_1\alpha_2, \alpha_2\alpha_3, \alpha_3\alpha_1\}, \{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\}$$

これは次数による分類に一致.

1 と $\alpha_1\alpha_2\alpha_3$ を同一視することで、上の補題の **3 つのクラス** を得る.

3 枚の sheets

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー



射影により **3 枚の sheets** が \mathbb{R}^3 内に生じる：

各 sheet は、加法群 $\langle \alpha_1\alpha_3^{-1}, \alpha_2\alpha_3^{-1} \rangle_{\mathbb{Z}}$ と集合として同一視できる.

\mathcal{A}_d を、3 枚の sheets に対応する A_d^3 の部分集合とすると、以下が成立：

$$\mathcal{A}_d := \mathcal{A}_d^{(0)} \amalg \mathcal{A}_d^{(1)} \amalg \mathcal{A}_d^{(2)}.$$

3枚の2次元格子

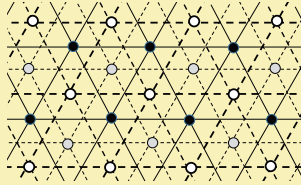
§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

$$\mathcal{A}_d^{(0)} := \{\ell_1(a_1 - a_3) + \ell_2(a_2 - a_3) \mid \ell_1, \ell_2 \in \mathbb{Z}\},$$

$$\mathcal{A}_d^{(1)} := \{\ell_1(a_1 - a_3) + \ell_2(a_2 - a_3) + a_1 \mid \ell_1, \ell_2 \in \mathbb{Z}\},$$

$$\mathcal{A}_d^{(2)} := \{\ell_1(a_1 - a_3) + \ell_2(a_2 - a_3) + a_1 + a_2 \mid \ell_1, \ell_2 \in \mathbb{Z}\}.$$

Sheet 間の距離は $\sqrt{3}a/3$.



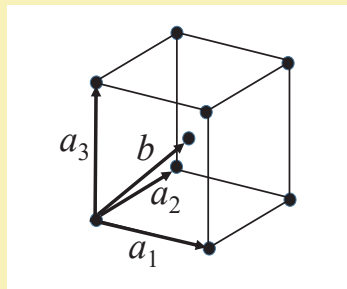
SC 格子でも, $(0, 0, 1)$ -方向のファイバー構造は底空間が「1枚の格子」でないのでやっかい!

23 / 39

23

BCC 格子の代数構造

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー



BCC 格子を記述する**加法群** :

$$\mathbb{B}^a := \langle a_1, a_2, a_3, b \rangle_{\mathbb{Z}} / \langle 2b - a_1 - a_2 - a_3 \rangle_{\mathbb{Z}}$$

SC 格子と同様, $a_1 = (a, 0, 0)$, $a_2 = (0, a, 0)$, $a_3 = (0, 0, a)$ として \mathbb{E}^3 に埋め込まれる. b は $(a_1 + a_2 + a_3)/2$ に対応.

24 / 39

24

BCC 格子の群環

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

対応する **乗法群** :

$$\mathbb{B} := \{\alpha_1^{\ell_1} \alpha_2^{\ell_2} \alpha_3^{\ell_3} \beta^{\ell_4} \mid \text{abelian}, \ell_1, \ell_2, \ell_3, \ell_4 \in \mathbb{Z}, \beta^2 \alpha_1^{-1} \alpha_2^{-1} \alpha_3^{-1} = 1\}.$$

\mathbb{B} の **群環** を考える :

$$\mathcal{R}_3 := \mathbb{C}[\mathbb{B}] = \mathbb{C}[\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_1^{-1}, \alpha_2^{-1}, \alpha_3^{-1}, \beta, \beta^{-1}] / (\beta^2 - \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3).$$

\mathbb{B} の部分群 : $\mathbb{B}_d := \{(\alpha_1 \alpha_3^{-1})^{\ell_1} (\alpha_2 \alpha_3^{-1})^{\ell_2} \mid \ell_1, \ell_2 \in \mathbb{Z}\}.$

命題 2.2 商 $\mathcal{R} := \mathcal{R}_3 / (\beta - 1)$ は, $\mathbb{C}[\mathbb{B}_d]$ -加群として以下に同型 :

$$\mathcal{R} \cong \mathbb{C}[\mathbb{B}_d] \oplus \mathbb{C}[\mathbb{B}_d] \alpha_1 \oplus \mathbb{C}[\mathbb{B}_d] \alpha_1 \alpha_2.$$

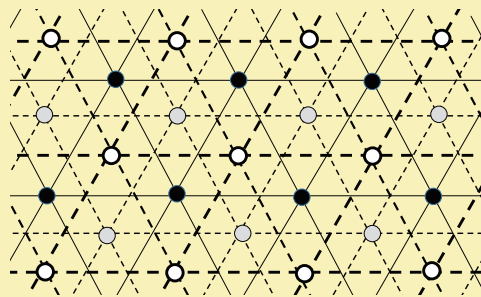
再び **3 枚の sheets** が現れる !

25 / 39

25

BCC の 3 枚の sheets

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー



SC と同様 3 枚の sheets ができるが, sheet 間距離は半分の $\sqrt{3}a/6$.
 $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$ を 3 枚の sheets とすると以下が成立 :

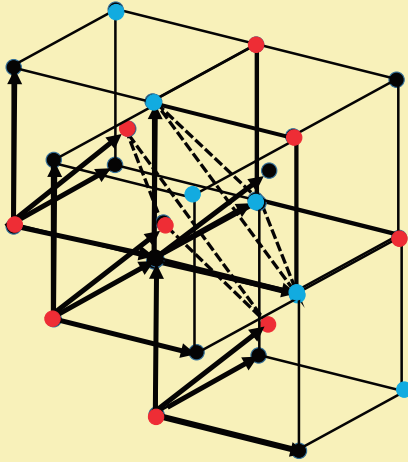
$$\mathcal{B} := \mathcal{B}^{(0)} \amalg \mathcal{B}^{(1)} \amalg \mathcal{B}^{(2)}.$$

26 / 39

26

BCC 格子の 3 枚の sheets

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー



27 / 39

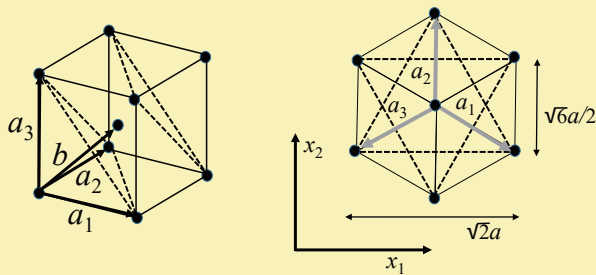
27

BCC 格子を回転

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

$\eta : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$: 転位線を垂直にする直交変換

$$a_1, a_2, a_3 \mapsto a \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{6}/6 \\ \sqrt{3}/3 \end{pmatrix}, a \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{6}/3 \\ \sqrt{3}/3 \end{pmatrix}, a \begin{pmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{6}/6 \\ \sqrt{3}/3 \end{pmatrix}.$$



$\delta = (\delta_1, \delta_2, \delta_3) \in \mathbb{E}^3$ に対して, 埋め込み $\iota_\delta^{\text{BCC}} : \mathbb{B}^a \hookrightarrow \mathbb{E}^3$ を, $x \mapsto \eta(x) + \delta$, $x \in \mathbb{B}^a \subset \mathbb{R}^3$, で定義.

28 / 39

28

各 $\mathcal{B}^{(c)}$ 上の束写像, $c = 0, 1, 2$

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

$\pi : \mathbb{E}^3 \rightarrow \mathbb{E}^2$ 最初の 2 成分への射影

$$l_{\delta}^{\text{BCC},c} = \pi \circ l_{\delta}^{\text{BCC}}|_{\mathcal{B}^{(c)}} : \mathcal{B}^{(c)} = \mathbb{Z}^2 \hookrightarrow \mathbb{E}^2, \quad c = 0, 1, 2.$$

$\mathcal{S} = \mathcal{S}_+ \amalg \mathcal{S}_- \subset \mathbb{E}^2$, $l_{\delta}^{\text{BCC},c}(\mathcal{B}^{(c)}) \cap \mathcal{S} = \emptyset$, $c = 0, 1, 2$, を仮定.

$c = 0, 1, 2$ に対して以下の可換図式を得る.

$$\begin{array}{ccc}
 \mathbb{E}_{\mathcal{B}^{(c)}} & \xrightarrow{l_{\delta}^{\text{BCC},c}} & \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}} \\
 \downarrow & & \downarrow \\
 \mathcal{B}^{(c)} & \xrightarrow{l_{\delta}^{\text{BCC},c}} & \mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S} \\
 \uparrow & & \uparrow \\
 S_{\mathcal{B}^{(c)}}^1 & \xrightarrow{l_{\delta}^{\text{BCC},c}} & S_{\mathbb{E}^2 \setminus \mathcal{S}}^1
 \end{array}$$

$\widehat{\psi}$ は ψ が導く束写像

$\widehat{\psi}$ は ψ が導く束写像 ($d = \sqrt{3}a/2$).

29 / 39

29

らせん転位が起こる前

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

命題 2.3 $\gamma = \exp(4\pi\sqrt{-1}\delta_3/(\sqrt{3}a)) \in S^1$ とおく.

切断 $\check{\sigma}_{\gamma,c} : \mathcal{B}^{(c)} \rightarrow S_{\mathcal{B}^{(c)}}^1$, $c = 0, 1, 2$, を一定値 $\gamma\zeta_3^{-c}$ を取る写像とする ($\zeta_3 = \exp(2\pi\sqrt{-1}/3)$) と, 以下が成立.

$$l_{\delta}^{\text{BCC}}(\mathbb{B}^a) = \bigcup_{c=0}^2 l_{\delta}^{\text{BCC},c} \left(\widehat{\psi}^{-1} \left(\check{\sigma}_{\gamma,c}(\mathcal{B}^{(c)}) \right) \right) \subset \mathbb{E}^3.$$

つまり, $\mathcal{B}^{(0)}$, $\mathcal{B}^{(1)}$, $\mathcal{B}^{(2)}$ 上でそれぞれ切断と束写像を用いて格子を作っておいて, union を取る.

これは, BCC 格子を回転したものの記述.

30 / 39

30

BCC 格子のらせん転位

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

命題 2.4 $z_0 = x_0 + \sqrt{-1}y_0 \in \mathbb{C} = \mathbb{E}^2$ に転位線を持つ単独らせん転位

$$\bigcup_{c=0}^2 \hat{\iota}_{\delta}^{\text{BCC},c} \left(\hat{\psi}^{-1} \left((\gamma \zeta_3^{-c} \check{\sigma}_{z_0})(\mathcal{B}^{(c)}) \right) \right)$$

は \mathbb{E}^3 に実現される. ここで, 切断 $\check{\sigma}_{z_0} : \mathcal{B} \rightarrow S_B^1$ は:

$$\begin{aligned} \check{\sigma}_{z_0}(x) &= \left(\frac{\sqrt{2}\ell_1 a + \sqrt{2}\ell_2 a/2 - x_0 + \sqrt{-1}(\sqrt{6}\ell_2 a/2 - y_0)}{|\sqrt{2}\ell_1 a + \sqrt{2}\ell_2 a/2 - x_0 + \sqrt{-1}(\sqrt{6}\ell_2 a/2 - y_0)|}, x \right) \\ &\quad \text{for } x = \ell_1(a_1 - a_3) + \ell_2(a_2 - a_3) \in \mathcal{B}^{(0)}, \\ \check{\sigma}_{z_0}(x) &= \left(\frac{\sqrt{2}\ell_1 a + \sqrt{2}a/2 + \sqrt{2}\ell_2 a/2 - x_0 + \sqrt{-1}((\sqrt{6}\ell_2 a - \sqrt{6}a/3)/2 - y_0)}{|\sqrt{2}\ell_1 a + \sqrt{2}a/2 + \sqrt{2}\ell_2 a/2 - x_0 + \sqrt{-1}((\sqrt{6}\ell_2 a - \sqrt{6}a/3)/2 - y_0)|}, x \right) \\ &\quad \text{for } x = \ell_1(a_1 - a_3) + \ell_2(a_2 - a_3) + a_1 - b \in \mathcal{B}^{(1)}, \\ \check{\sigma}_{z_0}(x) &= \left(\frac{\sqrt{2}\ell_1 a + \sqrt{2}a/2 + \sqrt{2}\ell_2 a/2 - x_0 + \sqrt{-1}((\sqrt{6}\ell_2 a + 2\sqrt{6}a/3)/2 - y_0)}{|\sqrt{2}\ell_1 a + \sqrt{2}a/2 + \sqrt{2}\ell_2 a/2 - x_0 + \sqrt{-1}((\sqrt{6}\ell_2 a + 2\sqrt{6}a/3)/2 - y_0)|}, x \right) \\ &\quad \text{for } x = \ell_1(a_1 - a_3) + \ell_2(a_2 - a_3) + a_1 + a_2 - b \in \mathcal{B}^{(2)}. \end{aligned}$$

31 / 39

31

BCC 格子の平行な複数のらせん転位

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

命題 2.5 BCC 格子の平行ならせん転位の族

$$\begin{aligned} &\bigcup_{c=0}^2 \hat{\iota}_{\delta}^{\text{BCC},c} \left(\hat{\psi}^{-1} \left(\left(\gamma \zeta_3^{-c} \prod_{z_i \in \mathcal{S}_+} \check{\sigma}_{z_i} \prod_{z_j \in \mathcal{S}_-} \bar{\check{\sigma}}_{z_j} \right) (\mathcal{B}^{(c)}) \right) \right) \\ &= \bigcup_{c=0}^2 \hat{\iota}_{\delta}^{\text{BCC},c} \left(\frac{\sqrt{3}a}{12\pi\sqrt{-1}} \exp^{-1} \left(\left(\gamma \zeta_3^{-c} \prod_{z_i \in \mathcal{S}_+} \check{\sigma}_{z_i} \prod_{z_j \in \mathcal{S}_-} \bar{\check{\sigma}}_{z_j} \right) (\mathcal{B}^{(c)}) \right) \right) \end{aligned}$$

は \mathbb{E}^3 内に実現される.

これは, **BCC 格子を回転したもの**に対する, 平行な複数個のらせん転位の記述.

32 / 39

32

§3. らせん転位のエネルギー

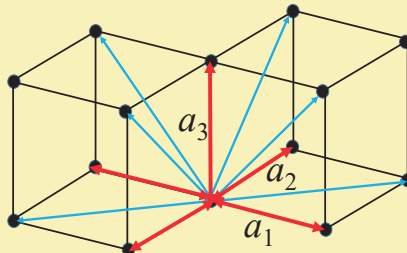
33

SC 格子のスプリング・モデル

SC 格子の (001)-方向の単独らせん転位を考える。

転位線の位置： $z_0 = x_0 + \sqrt{-1}y_0$ (格子点とぶつからないように取る)

スプリング・モデル：格子間の“edge”をスプリングとみなす (長さは a または $\sqrt{2}a$)。



SC 格子自体は安定な位置にあると仮定。

らせん転位により生じるエネルギーを計算。

34 / 39

34

スプリングの長さの変化

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

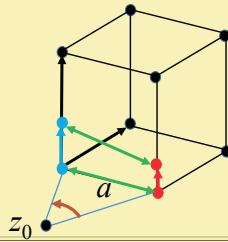
たとえば, edge $[(l_1, l_2, l_3), (l_1 + 1, l_2, l_3)]$ の場合 :

$$(\text{転位後の長さ}) - (\text{転位前の長さ}) = \sqrt{a^2 + (\varepsilon_{l_1, l_2}^{(1)})^2} - a.$$

ただし,

$$\varepsilon_{l_1, l_2}^{(1)} = \frac{a}{2\pi\sqrt{-1}} (\log(\check{\sigma}_{z_0, \gamma}(l_1 + 1, l_2)) - \log(\check{\sigma}_{z_0, \gamma}(l_1, l_2))),$$

$$\check{\sigma}_{z_0, \gamma}(l_1 a, l_2 a) = \gamma \frac{l_1 a - x_0 + \sqrt{-1}(l_2 a - y_0)}{|l_1 a - x_0 + \sqrt{-1}(l_2 a - y_0)|}.$$



35 / 39

35

近似計算のための仮定

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

以下,

$$\frac{a}{\sqrt{(l_1 a - x_0)^2 + (l_2 a - y_0)^2}}$$

は 十分小さい と仮定.

すなわち, 格子点 $(l_1 a, l_2 a) \in \mathbb{E}^2$ は, 格子点間距離 a に比較して, 転位の中心 $z_0 = (x_0, y_0)$ から十分に離れている.

あるいは, 十分大きな $\rho > 0$ に対して, **非有界領域**

$$A_\rho := \left\{ (l_1, l_2) \in \mathbb{Z}^2 \mid \rho a \leq \sqrt{(l_1 a - x_0)^2 + (l_2 a - y_0)^2} \right\}$$

上で計算する.

注意 :

中心領域 $\mathbb{Z}^2 \setminus A_\rho$ では, 以下のエネルギー近似計算は一般に不成立.

36 / 39

36

結果

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

Truncated Epstein zeta function $\zeta_\rho(s, z_0)$ を以下で定義：

$$\zeta_\rho(s, z_0) := \sum_{(\ell_1, \ell_2) \in A_\rho} \frac{1}{((\ell_1 + x_0)^2 + (\ell_2 + y_0)^2)^{s/2}}.$$

定理 3.1 $a/((\ell_1 + x_0)^2 + (\ell_2 + y_0)^2)$ の 2 次以上の *order* を無視すれば, **SC 格子** の $(0, 0, 1)$ -方向への**弾性エネルギー**は以下で与えられる：

$$E_\rho(x_0, y_0) = \frac{1}{8\pi^2} k_d a^2 \zeta_\rho(2, -z_0/a).$$

k_d : 対角線方向のスプリング定数

37 / 39

37

注意

§0. Introduction §1. らせん転位の連続体幾何の記述 §2. らせん転位の離散モデル §3. らせん転位のエネルギー

注 3.2 (1) **連続体に対する弾性エネルギー**の計算をらせん転位に適用すると, 円環領域 $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid r_0 < \sqrt{x^2 + y^2} < R\}$ で：

$$c \times \log R/r_0 \quad (c \text{ はある定数}).$$

(2) 他の格子間 **edge** (たとえば $[(\ell_1, \ell_2, \ell_3), (\ell_1 + 1, \ell_2 + 1, \ell_3 + 1)]$ 等) のエネルギーを加えても本質的に得られる結果は変わらない。

(3) $x'_0 - x_0$ と $y'_0 - y_0$ が a の整数倍であれば $E_\rho(x_0, y_0) = E_\rho(x'_0, y'_0)$
 \implies らせん転位の**並進対称性**に対応。

(4) **Epstein zeta 関数**

$$\zeta(s, z_0) = \sum_{(\ell_1, \ell_2) \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{((\ell_1 + x_0)^2 + (\ell_2 + y_0)^2)^{s/2}}$$

は $s = 2$ で発散する。**弾性エネルギーの発散**は本質的。

(5) 同様の計算が **BCC 格子のらせん転位**でも可能。

38 / 39

38

ご清聴ありがとうございました

Reference:

H. Hamada, S. Matsutani, J. Nakagawa, O. Saeki and M. Uesaka,
An algebraic description of screw dislocations in SC and BCC crystal lattices,
arXiv:1605.09550 [math-ph].

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築および トポロジカル欠陥の動力学

Effective theory for crystals and dynamics of topological defects based on a symmetry breaking

小林未知数 (京都大学大学院理学研究科物理学宇宙物理学専攻非線形動力学分科)*1
Michikazu Kobayashi (Kyoto University)

概 要

Crystals are systems with spontaneously broken translational and rotational symmetries which couple each other with the semi-direct product. In this work, focusing on the spontaneous breaking of the rotational symmetry, I try to construct an effective theory for crystals. One of powerful mathematical tools to treat the breaking of the rotational symmetry of crystals is the bond-orientational order which is l -dimensional real vector. The bond-orientational order is originally defined for each particle as the summation of the l -th spherical harmonics $\sum_i Y_{l,m}(\theta_i, \phi_i)$ with angles (θ_i, ϕ_i) of the neighbor particles. With $SO(3)$ -invariant Clebsch-Gordan coupling coefficients, I can construct the rotational invariant effective Hamiltonian. The spontaneous symmetry breaking $G \rightarrow H$ occurs at low temperatures, where $G \simeq SO(3)$ and $H \subset SO(3)$ are symmetries of the Hamiltonian and the order parameter respectively. I show two demonstrative results of the stochastic Langevin equation for the properties of the symmetry breaking in equilibrium and non-equilibrium dynamics of topological disclinations.

The symmetry breaking in equilibrium can be described as the thermodynamic phase transition. Although the phase transition from fluid to crystal is usually first order, I can control the order of the phase transition. If I make transitions second order, corresponding critical exponents depends on symmetries H of the order parameters, suggesting the universality class of the symmetry breaking depends on dimensions of the space and the order parameter but also the topology of the order parameter.

The topological charge of the disclinations can be classified by the double cover of H or discrete subgroup of H , and usually non-Abelian group. Its non-Abelian property can show unconventional collision dynamics of disclinations. When topological charges of two colliding disclinations are same, they usually reconnect at low temperatures $T \lesssim 0.8T_c$ and pass through at high temperatures $T \gtrsim 0.8T_c$. They also pass through for different but commutative topological charges. However, topological charges are non-commutative, both reconnection and pass through are topologically forbidden and a new disclination is formed between two colliding disclinations.

1. 本報告

当日報告した内容を次ページ以降に示す：

*1 〒 606-8502 京都市左京区北白川追分

対称性の破れに基づく結晶の 有効理論の構築および トポロジカル欠陥の動力学

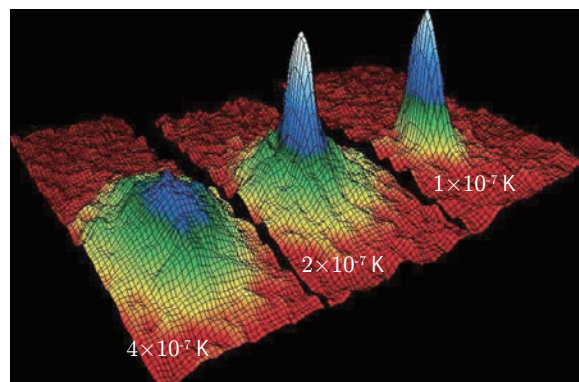
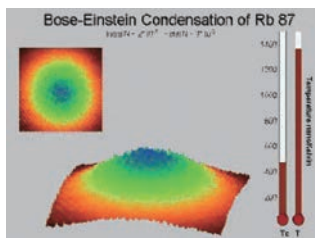
京都大学大学院理学研究科
小林未知数

2016年9月1日 IMI研究集会「結晶のらせん転移の数理」

1

原子気体BEC

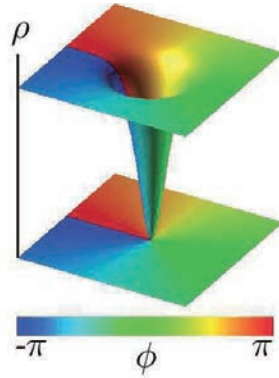
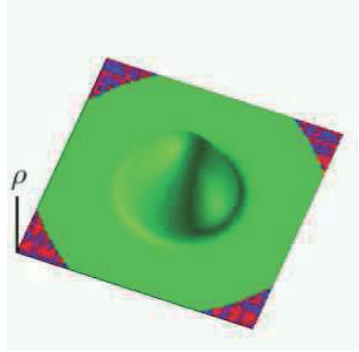
BEC of ^{87}Rb



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

2

量子渦



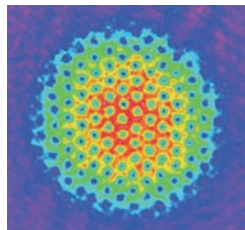
$$\Psi(\mathbf{x}) = |\Psi(\mathbf{x})| \exp[i\phi(\mathbf{x})]$$
$$\rho(\mathbf{x}) = |\Psi(\mathbf{x})|^2 : \text{流体の数密度}$$
$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{m} \nabla \phi(\mathbf{x}) : \text{流体の流速}$$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

3

量子渦

原子気体BECにおける渦格子の観測



Vortex lattice in ^{87}Rb BEC

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

4

発表の流れ

- 流体・結晶転移における対称性の破れ
- Bond-orientational order: 定義と性質
- Bond-orientational orderを用いた結晶秩序の分類法
- Bond-orientational orderを用いた結晶の有効模型
- 有効模型のダイナミクス(トポロジカル欠陥)
- 有効模型の熱力学的性質
- Phase orderingプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

5

発表の流れ

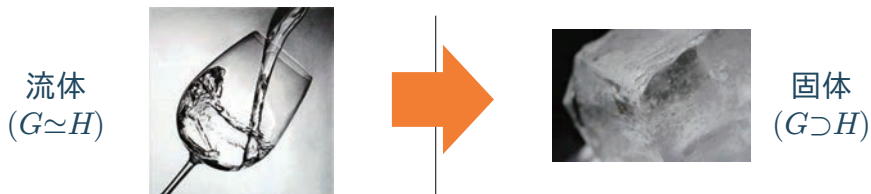
- 流体・結晶転移における対称性の破れ
- Bond-orientational order: 定義と性質
- Bond-orientational orderを用いた結晶秩序の分類法
- Bond-orientational orderを用いた結晶の有効模型
- 有効模型のダイナミクス(トポロジカル欠陥)
- 有効模型の熱力学的性質
- Phase orderingプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

6

流体・結晶転移における対称性の破れ

流体→結晶の相転移(自発的対称性の破れ)



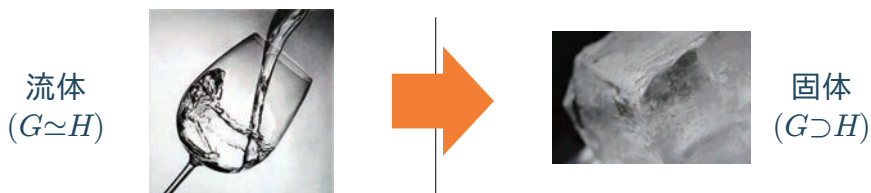
並進・回転対称性(ユークリッド変換対称性)の破れ

- | | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • 系全体を回転させても自由エネルギーは変わらない(対称性G) • 系全体を並進・回転させても状態が変わらない(対称性H) • 系を局所的に並進・回転させても周囲は影響を受けない | <ul style="list-style-type: none"> • 系全体を回転させても自由エネルギーは変わらない • 系全体を並進・回転させると状態が変わる • 系を局所的に並進・回転させると周囲も変化する |
|---|--|

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

流体・結晶転移における対称性の破れ

流体→結晶の相転移(自発的対称性の破れ)



並進・回転対称性(ユークリッド変換対称性)の破れ

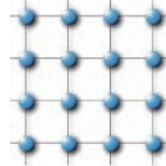
$$\begin{array}{ccc}
 G \simeq \mathbb{R}^3 \times SO(3) \times \mathbb{Z}_2 & \xrightarrow{\text{緑}} & H : \text{symmetry of crystal structure} \\
 \text{並進} \quad \text{回転} \quad \text{鏡映} & & \text{ex. } \mathbb{Z}^3 \times O_8 \times \mathbb{Z}_2 \text{ for cubic lattice}
 \end{array}$$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

流体・結晶転移における対称性の破れ



原子の位置・配向は他の原子からの影響を(ほとんど)受けない

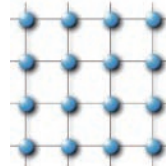


原子の位置・配向が、他の原子の影響を受け、ある決まった変位・配向を持つ。しかし、具体的な変位・配向は自由エネルギーからは決まらない(自発的並進・回転対称性の破れ)

結晶を特徴づける秩序変数(状態を変える自由度)
: 結晶の変位・配向

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

流体・結晶転移における対称性の破れ



結晶を特徴づける秩序変数(状態を変える自由度)
: 結晶の変位・配向

$$\frac{G}{H} \simeq \frac{\mathbb{R}^3 \times SO(3) \times \mathbb{Z}_2}{\mathbb{Z}^3 \times O_8 \times \mathbb{Z}_2} \simeq \mathbb{T}^3 \times \frac{SO(3)}{O_8} \text{ for cubic lattice}$$

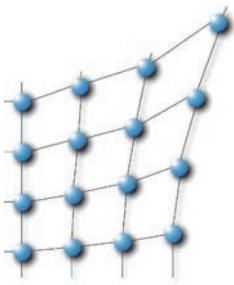
\mathbb{R}
 \mathbb{Z}

\mathbb{T}

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

結晶の低エネルギー励起状態

結晶の励起状態(非平衡状態):
結晶の変位・配向の空間依存性を導入する。



系全体の並進・回転対称性は失われているが、局所的(原子1個よりはずっと大きいスケールで)に結晶変位・配向が定義できるような(低エネルギーの)励起状態を考える(長波長極限はゴールドストーンモード)。

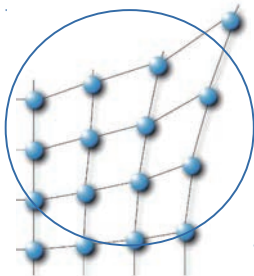
液体にはそもそも位置・配向の概念がなく、これは固体に特有である

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

11

結晶の低エネルギー励起状態(並進方向)

結晶の励起状態(非平衡状態):結晶の変位(並進対称性の破れ)の空間依存性を導入する。



$$\psi = |\psi| e^{i\phi} \in \mathbb{C}$$

$|\psi|$: 固体の並進対称性に対する局所的なオーダー
 ϕ : 局所的な平衡位置からの並進方向のずれ(x 方向)

並進方向のずれ運動に対する有効ラグランジアン

$$L = \int d^3x \left[\frac{|\dot{\psi}|^2}{c^2} - \{ |\partial_x \psi|^2 + \alpha (|\partial_y \psi|^2 + |\partial_z \psi|^2) \} + s|\psi|^2 + g|\psi|^4 - h|\psi|^6 \right]$$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

12

結晶の低エネルギー励起状態(並進方向)

並進方向のずれ運動に対する有効ラグランジアン

$$L = \int d^3x \left[\frac{|\dot{\psi}|^2}{c^2} - \{|\partial_x \psi|^2 + \alpha(|\partial_y \psi|^2 + |\partial_z \psi|^2)\} + s|\psi|^2 + g|\psi|^4 - h|\psi|^6 \right]$$

$$\ddot{\phi} = c^2 \{ \partial_x^2 + \alpha(\partial_y^2 + \partial_z^2) \} \phi + O(\phi^2)$$

$$\omega^2 = c^2 \{ k_x^2 + \alpha(k_y^2 + k_z^2) \} \xrightarrow{|k| \rightarrow 0} 0$$

長波長極限は系全体の結晶の平衡位置からのずれ ϕ を
一様にシフトするモード: エネルギーコストゼロ(結晶中のフォノン)

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

13

結晶の低エネルギー励起状態(並進方向)

3方向のモードへ拡張

$$\mathcal{L} = \sum_{i=x,y,z} \left[\frac{|\dot{\psi}_i|^2}{c^2} - \sum_{j=x,y,z} \{ \delta_{ij} + \alpha(1 - \delta_{ij}) \} |\partial_i \psi_j|^2 \right] \\ + s \left(\sum_{i=x,y,z} |\psi_i|^2 \right) + g \left(\sum_{i=x,y,z} |\psi_i|^2 \right)^2 - h \left(\sum_{i=x,y,z} |\psi_i|^2 \right)^3$$

$$\omega_i^2 = c^2 \sum_{j=x,y,z} \{ \delta_{ij} + \alpha(1 - \delta_{ij}) \} k_j^2 \quad : 3\text{つのゴールドストーンモード}$$

一般に連続対称性が破れると、その対称性の破れに対応した
ゴールドストーンモードが現れる($\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{Z}^3$ で3つ)

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

14

並進対称性の破れを特徴づける秩序変数 : 構造因子

Fourier transformation of density : $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|<\varepsilon} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_i}$

Structure factor : $S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \langle |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2 \rangle_{\text{eq}}$

\mathbf{x}_i : 粒子の座標

$\langle \dots \rangle_{\text{eq}}$: 平衡状態におけるアンサンブル平均

- 流体相: 平均粒子間距離に対応した波数に等方的になだらかなピークが現れる
- 結晶相: 結晶の逆格子ベクトルに対応した波数に(異方的に)鋭いピークが現れる

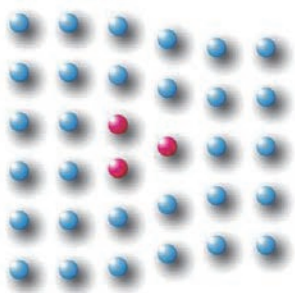
対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

15

トポロジカル欠陥

秩序変数(結晶変位・配向)の
連続変形によって基底状態へと移せないような励起

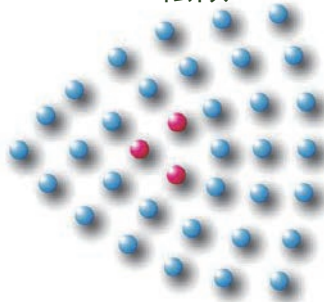
転移



- 2次元では
点欠陥
- 3次元では
線欠陥

並進対称性の破れに対応した
トポロジカル欠陥

転傾



回転対称性の破れに対応した
トポロジカル欠陥

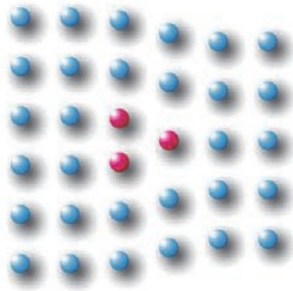
対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

16

トポロジカル欠陥

トポロジカル励起のトポロジカルチャージ(励起を特徴付ける離散的な不変量)は秩序変数空間の基本群になる

転移



$$\pi_1\left(\frac{G}{H}\right) \simeq \pi_1\left(\frac{\mathbb{R}^3}{\mathbb{Z}^3}\right) \simeq \pi_0(\mathbb{Z}^3) \simeq \mathbb{Z}^3$$

並進対称性の破れに対応した
トポロジカル欠陥

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

17

トポロジカル欠陥のダイナミクス

トポロジカル欠陥は対称性の破れを起源とし、その定義にはオーダーパラメータの概念を必要とする(少数の原子分子で定義できない)。

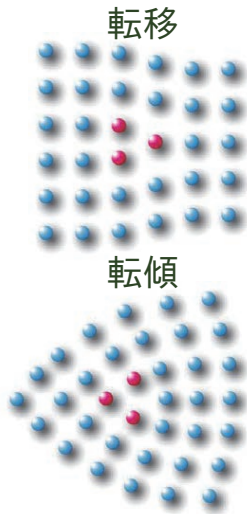
→トポロジカル欠陥自体もそのダイナミクスもメゾスコピック(あるいはマクロ)なスケールで起こり、観測スケールとの分離が不可能な現象である。

このようなトポロジカル欠陥の興味深いダイナミクスとして色々なものが研究されているが、今回は固体中のトポロジカル欠陥に焦点を当てて、興味深いと思える物理を再考する。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

18

固体中のトポロジカル欠陥



固体中のトポロジカル欠陥は固体の塑性変形等のダイナミクスの一端を担う現象として長く研究されている



今回はトポロジカル欠陥の「トポロジー」に着目し、その物理を考える。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

並進・回転対称性の破れ

破れる対称性: $\mathbb{R}^3 \times O(3)$

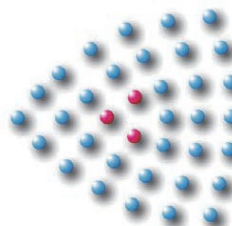
\mathbb{R}^3 : 並進対称性の破れ

$O(3)$: 回転+鏡映対称性の破れ

$\mathbb{R}^3 \times O(3)$ が全て破れるのは大変なので、本発表では回転対称性の破れと、それに伴う転傾に焦点を当てて考える。



転移: 離散的な並進対称性に伴う欠陥

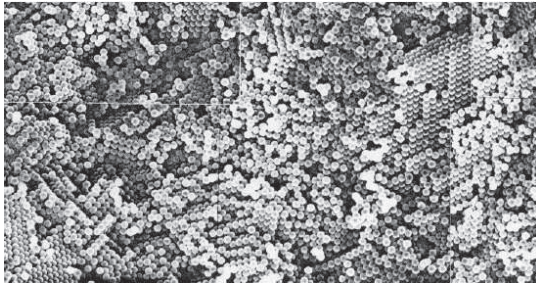


転傾: 離散的な回転対称性に伴う欠陥

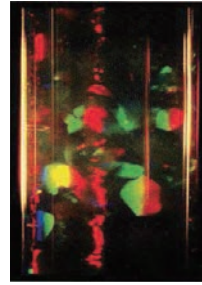
対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

コロイド系における流体・結晶

溶媒中に分散する分散コロイド系:コロイド粒子の濃度、溶媒の種類、電解質濃度を調節することでコロイド粒子の密度や粒子間相互作用を容易に調節することができ、流体・結晶の振る舞いをダイナミカルに調べることができる



シリカ粒子によるコロイド

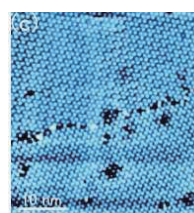
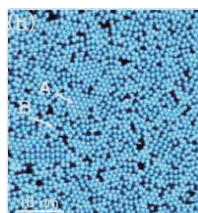
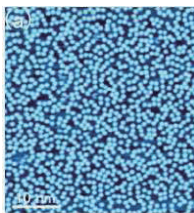


コロイド結晶が示す構造色

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

金属表面および内部構造の直接観測

近年、金属の表面から内部までの結晶の局所的な構造を調べることも容易になってきている



表面からの深さ

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

発表の流れ

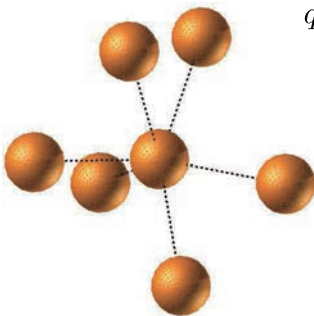
- 流体・結晶転移における対称性の破れ
- Bond-orientational order: 定義と性質
- Bond-orientational orderを用いた結晶秩序の分類法
- Bond-orientational orderを用いた結晶の有効模型
- 有効模型のダイナミクス(トポロジカル欠陥)
- 有効模型の熱力学的性質
- Phase orderingプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

23

対称性の破れを特徴づける秩序変数 : Bond-orientational order (q^l ベクトル)

ある粒子の最近接粒子すべてに対して、方向によって
決まる球面調和関数の和



$$q_m^l(\mathbf{x}) = \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \sum_{j=\text{N.N.}} Y_m^l(\theta_{i,j}, \phi_{i,j})$$

$$\mathbf{q}^l = (q_{-l}^l, q_{-l+1}^l, \dots, q_l^l)^T$$

q^l ベクトルは局所的な秩序変数となり得る

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

24

対称性の破れを特徴づける秩序変数 : Bond-orientational order (q^l ベクトル)

q^l ベクトルの大きさ

$$Q^l = \left\langle \left| \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} q^l(\mathbf{x}) \right| \right\rangle_{\text{eq}}$$

平衡状態における対称性の破れを
特徴づける量となる

流体相 : $Q^l = 0$
結晶相 : $Q^l \neq 0$

結晶相を特徴づける量として q^l ベクトルから他に
何が分かるだろうか？

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

25

q^l ベクトルとは何か? : 拡張密度場

密度場

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad \rho_1 = \left\langle \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} \rho(\mathbf{x}) \right\rangle_{\text{eq}}$$

密度場 $\rho(\mathbf{x})$ 、あるいはその平均 ρ_1 は対称性の破れを
特徴づける量にはなり得ない
(流体相・結晶相ともに値を持つ)。



密度場に内部自由度を持たせた拡張密度場を導入し、
オーダーパラメータとしての性質を持たせる。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

26

q^l ベクトルとは何か?: 拡張密度場

密度場に内部自由度を導入した拡張密度場を定義する

$$\rho(\mathbf{x}, \theta, \phi) = \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \sum_{j=\text{N.N.}} \frac{\delta(\theta - \theta_{i,j}) \delta(\phi - \phi_{i,j})}{\sin \theta}$$

拡張密度場をある粒子の座標近傍で積分すると、最近接粒子数が得られる

$$\int d\theta d\phi \sin \theta \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i| < \varepsilon} d^3x \rho(\mathbf{x}, \theta, \phi) \approx N_{\text{N.N.}}(\mathbf{x}_i)$$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

27

q^l ベクトルとは何か?: 拡張密度場

拡張密度場は対称性の破れを特徴づける
オーダーパラメータとなり得る

$$\rho(\theta, \phi) = \left\langle \frac{1}{V} \int d^3x \rho(\mathbf{x}, \theta, \phi) \right\rangle_{\text{eq}}$$

流体相: $\rho(\theta, \phi)$ が等方的
結晶相: $\rho(\theta, \phi)$ が異方的

$\rho(\mathbf{x}, \theta, \phi)$ は局所的なオーダーパラメータとなり得る

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

28

q^l ベクトルと拡張密度場の関係

拡張密度場は q^l ベクトルを用いて記述される

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, \theta, \phi) &= \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \sum_{J=\text{N.N.}} \frac{\delta(\theta - \theta_{i,j})\delta(\phi - \phi_{ij})}{\sin \theta} \\ &= \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m=-l}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(\theta, \phi)\end{aligned}$$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

29

発表の流れ

- 流体・結晶転移における対称性の破れ
- Bond-orientational order: 定義と性質
- Bond-orientational orderを用いた結晶秩序の分類法
- Bond-orientational orderを用いた結晶の有効模型
- 有効模型のダイナミクス(トポロジカル欠陥)
- 有効模型の熱力学的性質
- Phase orderingプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

30

系に対する回転操作

拡張密度場 $\rho(\mathbf{x}, \theta, \phi)$ に対する回転操作 R

$R = e^{\mathbf{E} \cdot \mathbf{n} \alpha}$: rotation matrix around \mathbf{n} -axis by angle α

$$E_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad E_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad E_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho(R\mathbf{x}, R(\theta, \phi)) = \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - R\mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m=-l}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(R(\theta, \phi))$$

↑
個々の粒子配置に
対する回転操作

↑
局所的な結晶配向に
対する回転操作

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

31

系に対する回転操作

拡張密度場 $\rho(\mathbf{x}, \theta, \phi)$ に対する回転操作 R

$$\begin{aligned} \rho(R\mathbf{x}, R(\theta, \phi)) &= \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - R\mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m=-l}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(R(\theta, \phi)) \\ &= \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - R\mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m, m'=-l}^l R_{m, m'}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

$$R_{m, m'}^l = e^{-i\mathbf{S}_{m, m'}^l \cdot \mathbf{n} \alpha} \quad \mathbf{S}_{m, m'}^l : l\text{-th spin matrix}$$

例: $l=1$ の場合

$$S_x^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y^1 = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_z^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

空間の回転は q^l ベクトルの回転に対応づけられる

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

32

結晶の離散回転対称性と q^l ベクトル

結晶は回転対称性全てが破れているのではなく、
ある離散回転対称性を残している。

$$\begin{aligned} \rho(R\mathbf{x}, R(\theta, \phi)) &= \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - R\mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m=-l}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(R(\theta, \phi)) \\ &= \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - R\mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m, m'=-l}^l R_{m, m'}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(\theta, \phi) \\ &= \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - R\mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m=-l}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

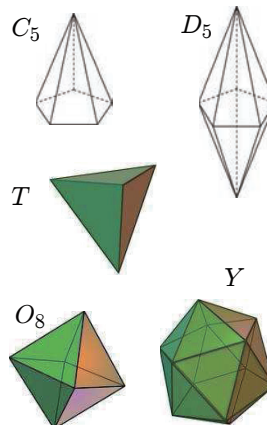
33

結晶の離散回転対称性

3次元回転の集合は群 $SO(3)$ を構成する
→ある結晶を不変に保つ離散回転の集合
は $SO(3)$ の離散部分群を構成する

$SO(3)$ の離散部分群

- C_n : Cyclic group (n 角錐回転対称性)
- D_n : Dihedral group (n 角柱回転対称性)
- T : Tetrahedral group (正4面体回転対称性)
- O_8 : Octahedral group (立方体回転対称性)
- Y : Icosahedral group (正20面体回転対称性)



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

34

結晶の離散回転対称性

$SO(3)$ の離散部分群

- C_n : Cyclic group (n 角錐回転対称性)
- D_n : Dihedral group (n 角柱回転対称性)
- T : Tetrahedral group (正4面体回転対称性)
- O_8 : Octahedral group (立方体回転対称性)
- Y : Icosahedral group (正20面体回転対称性)

空間充填できるもの: $C_2, C_3, C_4, C_6, D_1, D_2, D_3, D_4, D_6, T, O, Y$

結晶系との関係

単斜晶系: C_2, D_1 斜方晶系: D_2 正方晶系: C_4, D_4
 三方晶系: C_3, D_3 六方晶系: C_6, D_6 立方晶系: T, O_4

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

結晶の離散回転対称性と q^l ベクトル

q^l ベクトルが、どの離散回転対称性を持っているか
 → l によって決まっている

$l=6$ までの全ての計算結果をまとめると

l	C_2	C_3	C_4	C_6	D_1	D_2	D_3	D_4	D_6	T	O	Y
1	×	×	×	×	○	×	×	×	×	×	×	×
2	×	×	×	×	○	○	×	×	×	×	×	×
3	○	○	×	×	○	○	○	×	×	○	×	×
4	○	×	×	×	○	○	○	○	×	×	○	×
5	○	○	○	×	○	○	○	○	×	×	×	×
6	○	○	×	×	○	○	○	○	○	○	○	○

C_n : odd $l \geq n$, even $l \geq 2n$ D_n : $l \geq n$ T : $l \geq 3$ except $l = 4, 5, 8$

O : $l \geq 4$ except $l = 5, 7, 11$ Y : $l = 6, 10, 12$ and $l \geq 11$ except $l = 17, 19, 23, 29$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

結晶の離散回転対称性と q^l ベクトル

$$\rho(\mathbf{x}, \theta, \phi) = \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \sum_l \sum_{m=-l}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(\theta, \phi)$$



$$\rho^l(\mathbf{x}, \theta, \phi) = \sum_i \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \sum_{m=-l}^l q_m^l(\mathbf{x}) Y_m^{l*}(\theta, \phi)$$

ある離散回転対称性を残している状態に対して拡張密度場を計算すると、その離散対称性を表現できる q^l ベクトルのみで構成される

うまく l を指定することにより、破れずに残っている離散的な回転対称性を表現することができる。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

37

具体的な例

$l=6$ の場合: $C_2, C_3, D_1, D_2, D_3, D_4, D_6, T, O_8, Y$

$$O: \frac{c}{4\sqrt{2}} (0 \ 0 \ \sqrt{14} \ 0 \ 0 \ 0 \ 2 \ 0 \ 0 \ 0 \ \sqrt{14} \ 0 \ 0)^T$$

$$D_6: \frac{c}{4\sqrt{346}} (\sqrt{77} \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 8\sqrt{3} \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \sqrt{77})^T$$

	point group	
square lattice	O	$c = 3\sqrt{13}/(2\sqrt{2\pi})$
bcc lattice	O	$c = 16\sqrt{26}/(9\sqrt{\pi})$
fcc lattice	O	$c = -39\sqrt{13}/(8\sqrt{2\pi})$
hcp lattice	D_6	$c = 13\sqrt{2249}/(24\sqrt{6\pi})$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

38

発表の流れ

- 流体・結晶転移における対称性の破れ
- Bond-orientational order: 定義と性質
- Bond-orientational orderを用いた結晶秩序の分類法
- Bond-orientational orderを用いた結晶の有効模型
- 有効模型のダイナミクス(トポロジカル欠陥)
- 有効模型の熱力学的性質
- Phase orderingプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

39

q^l ベクトルからスカラーを作る

結晶構造を解析するのにベクトルデータではなく、
回転不変なスカラーが使われることが多い

Spin-singlet pair amplitude $C_{(l,m),(l,m')}^{(L,m+m')}$: Clebsch-Gordan coefficient

$$A_{2,0}^l = \sum_m C_{(l,m),(l,-m)}^{(0,0)} q_m^l q_{-m}^l$$

Spin-singlet trio amplitude

$$A_{3,0}^l = \sum_{m_1, m_2} C_{(l,m_1),(l,m_2)}^{(l,m_1+m_2)} C_{(l,m_1+m_2),(l,-m_1-m_2)}^{(0,0)} q_{m_1}^l q_{m_2}^l q_{-m_1-m_2}^l$$

Spin-quartet pair amplitude $A_{2,2}^l = \sum_M \left(\sum_m C_{(l,m),(l,M-m)}^{(2,M)} q_m^l q_{M-m}^l \right)^2$

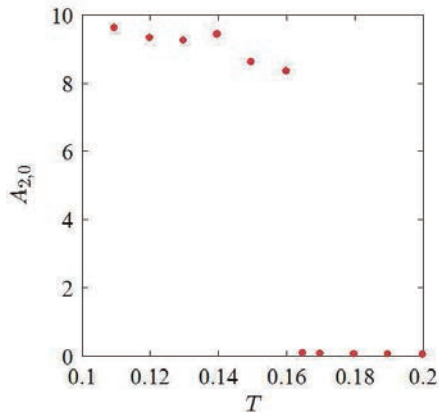
対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

40

q^l ベクトルからスカラーを作る

レナードジョーンズ粒子のシミュレーション

	$A_{2,0}^6$	$A_{3,0}^6$	$A_{2,2}^6$
square lattice	1.29	0.132	0.00
bcc lattice	7.25	1.76	0.00
fcc lattice	13.6	-4.54	0.00
hcp lattice	9.71	-2.58	2.51



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

41

非平衡状態: q^l ベクトルの空間依存性



結晶配向の空間変化は q^l ベクトルの空間依存性として表現することができる
→結晶の(低励起な)非平衡状態を記述することができる

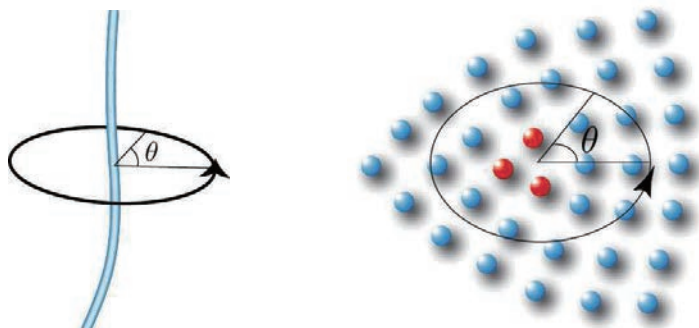
$A_{2,0}$ や $A_{3,0}$ のようなスカラーの空間依存性を考えても、配向の空間依存性は考えられない
→ q^l ベクトルそのものの空間依存性を考える必要がある

例としてトポロジカル欠陥のダイナミクスを考える

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

42

転傾 (線欠陥) の記述



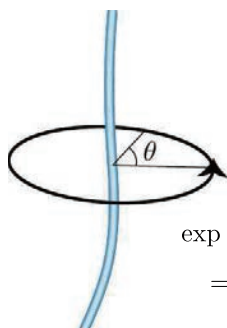
欠陥の周りを1周すると配向が非自明な変化をする (2π の分数値)

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

43

転傾 (線欠陥) の記述

正方格子 (点群: O) の場合



θ が0から 2π に変化することで配向が $\pi/4$ 変化する

$$\begin{aligned} & \exp(iS_z^6 \theta/4) (0 \ 0 \ \sqrt{14} \ 0 \ 0 \ 0 \ 2 \ 0 \ 0 \ 0 \ \sqrt{14} \ 0 \ 0)^T \\ & = (0 \ 0 \ \sqrt{14}e^{-i\theta} \ 0 \ 0 \ 0 \ 2 \ 0 \ 0 \ 0 \ \sqrt{14}e^{i\theta} \ 0 \ 0)^T \end{aligned}$$

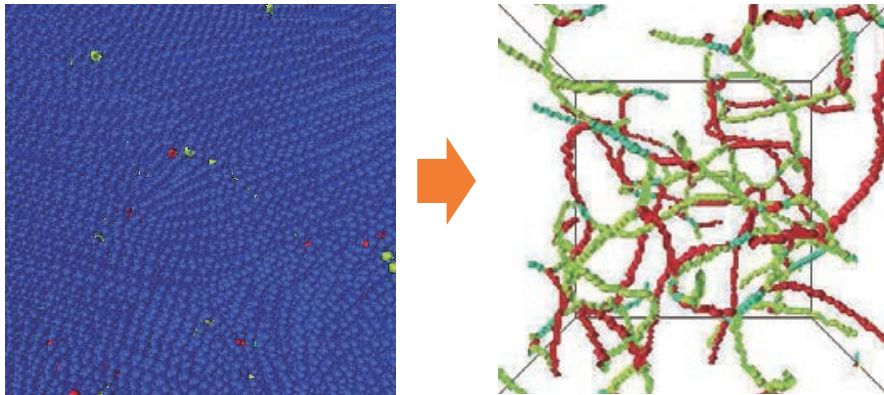
- (任意の) 転傾を記述する q' ベクトルの関数形が得られる。
- 関数の特異点上に転傾が存在する。
- q' ベクトルはそのままでは結晶変位を記述できないので転移は記述できない (転傾-反転傾ペアのような記述はできる)

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

44

q^l ベクトルの特異点から転傾の位置が分かる

粒子配置→ q^l ベクトルの計算→特異点の計算→転傾の位置

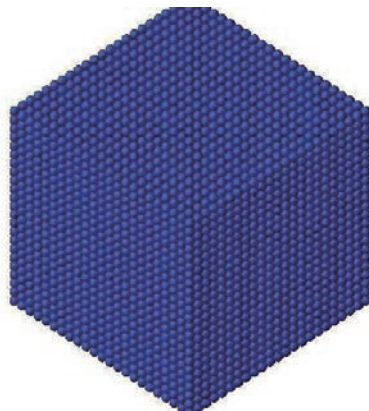


対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

45

固体中の転傾

基本: 完全立方格子

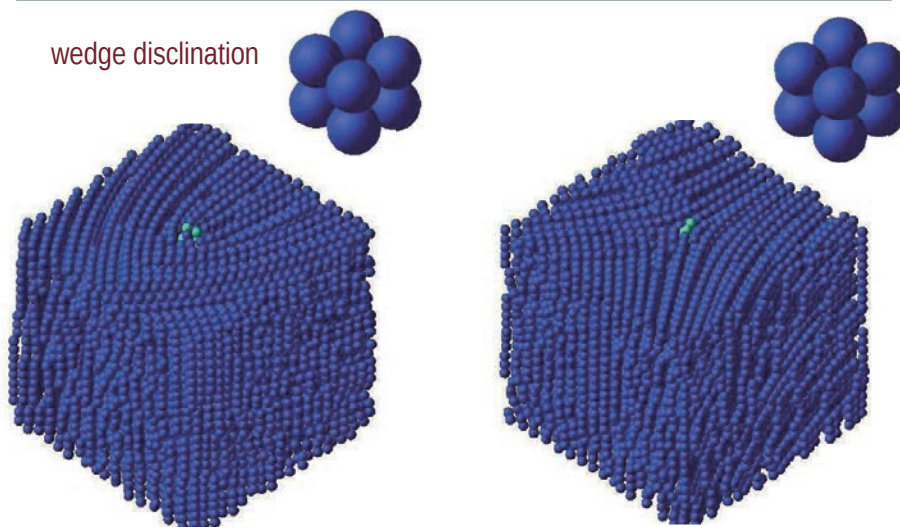


対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

46

固体中の転傾

wedge disclination

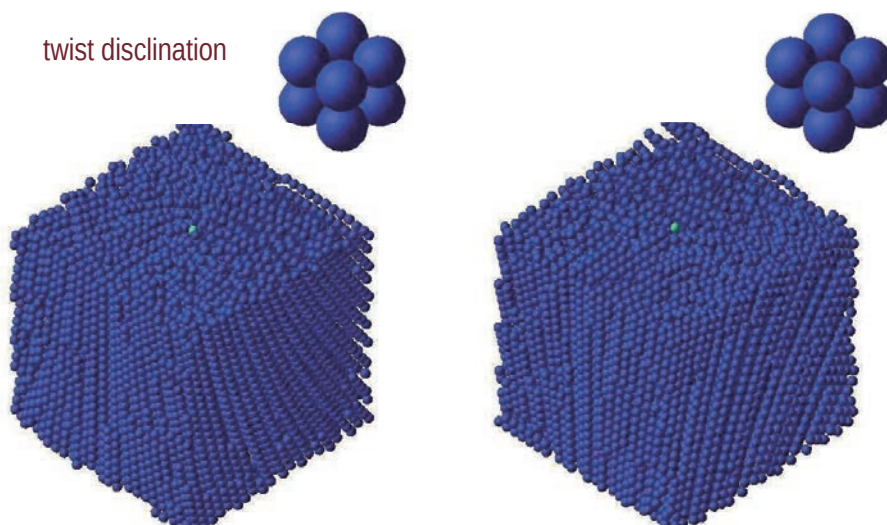


対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

47

固体中の転傾

twist disclination

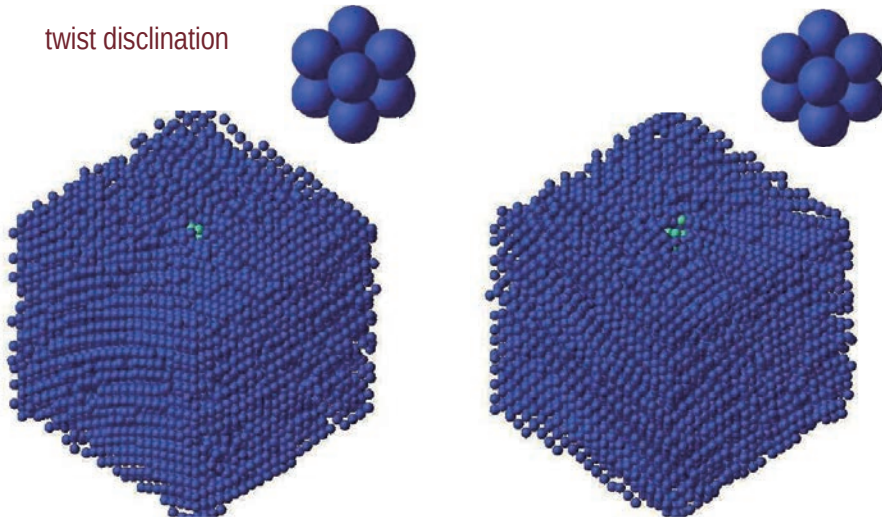


対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

48

固体中の転傾

twist disclination



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

49

発表の流れ

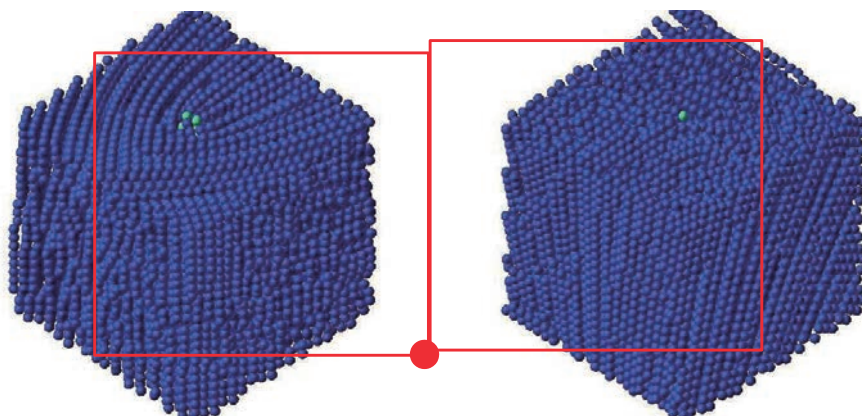
- 流体・結晶転移における対称性の破れ
- Bond-orientational order: 定義と性質
- Bond-orientational orderを用いた結晶秩序の分類法
- Bond-orientational orderを用いた結晶の有効模型
- 有効模型のダイナミクス(トポロジカル欠陥)
- 有効模型の熱力学的性質
- Phase orderingプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

50

欠陥の非可換性

固体中の、異なる軸で回転する2本の欠陥はほぼ非可換である。



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

51

欠陥のダイナミクス

欠陥の可換・非可換性は欠陥同士の相互作用およびダイナミクスを大きく変える

固体変形のシミュレーションから直接に調べることもできるが、今回は q ベクトルの有効理論を構成し、そのダイナミクスを調べた。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

52

結晶系の有効モデル

結晶系のハミルトニアンは拡張密度場を用いて書き直すことができる

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_i \frac{\dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \\ &\simeq \sum_l \int d\mathbf{x} d\theta d\phi \sin\theta \left[\alpha^l (\dot{\rho}^l)^2 + \sum_n \beta_n^l |\nabla \rho^l|^{2n} + \sum_n d_n^l (\rho^l)^n \right] \\ &\simeq \sum_l \int d\mathbf{x} \left[c^l \sum_m (\dot{q}_m^l)^2 + \sum_{n,m} d_n^l |\nabla q_m^l|^{2n} + \sum_{n,N,L} f_n^{l,N,L} (A_{N,L}^l)^n \right] \end{aligned}$$

特定の l, n, N, L に限定した粒子系の有効モデルを構成する

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

53

$(2l+1)$ 次元 $SO(3)$ 線型シグマモデル

$$\mathcal{H}^l = c^l \sum_m |\dot{q}_m^l|^2 + d^l \sum_m |\nabla q_m^l|^2 + f^l \left(\sum_m |q_m^l|^2 - 1 \right)^2 + g^l A_{2,2}$$



q^l ベクトルは $(2l+1)$ 次元実ベクトルと等価なので、
 $(2l+1)$ 次元球形モデル (S^{2l+1} モデル) を構成する。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

54

(2l+1)次元SO(3)線型シグマモデル

$$\mathcal{H}^l = c^l \sum_m |\dot{q}_m^l|^2 + d^l \sum_m |\nabla q_m^l|^2 + f^l \left(\sum_m |q_m^l|^2 - 1 \right)^2 + g^l A_{2,2}$$

この項はSO(3)対称性しか持っていないので、ハミルトニアン
の対称性はSO(3)となり、SO(3)対称性の破れが実現する。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

55

(2l+1)次元SO(3)線型シグマモデル

$$\mathcal{H}^l = c^l \sum_m |\dot{q}_m^l|^2 + d^l \sum_m |\nabla q_m^l|^2 + f^l \left(\sum_m |q_m^l|^2 - 1 \right)^2 + g^l A_{2,2}$$

このモデルで欠陥が現れるのは $l > 3$ のとき→ $l=4$ を考える

$$g^4 > 0 : O(\text{立方晶系}) \quad g^4 < 0 : D_4(\text{正方晶系})$$

このモデルは $A_{3,0}$ のような q^l ベクトルの奇数次の項を含んでいないので、シンプルではあるがやや非現実的

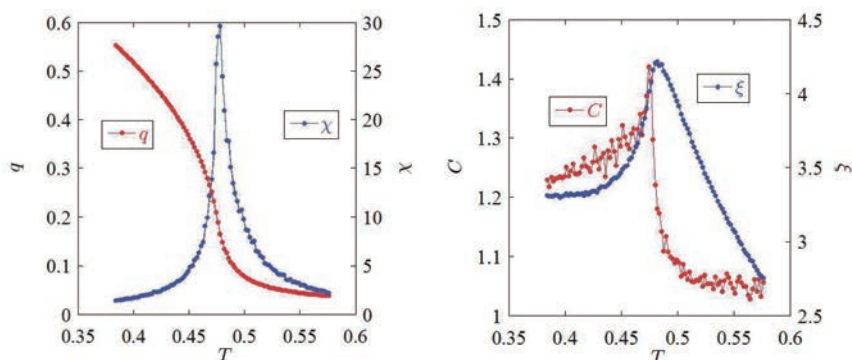
- q^l と $-q^l$ が縮退する(異なる結晶系が縮退する)
- 相転移の次数は2次となる

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

56

(2l+1)次元SO(3)線型シグマモデル

このモデルは2次相転移を示し、臨界指数は q ベクトルのトポロジーだけで決まる



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

57

臨界指数

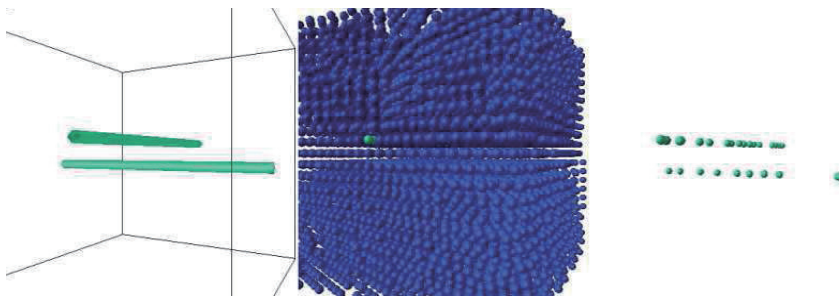
	α	β	γ	δ	ν	η
\mathbb{Z}_2	0.14	0.33	1.2	4.6	0.62	0.065
S^1	0.01	0.35	1.3	4.7	0.67	0.050
S^2	0.06	0.37	1.2	4.2	0.65	0.14
$SO(3)/T$	-0.04	0.37	1.3	4.5	0.68	0.088
$SO(3)/O$	-0.44	0.42	1.6	4.8	0.81	0.033
$SO(3)/D_4$	-0.10	0.35	1.4	5.0	0.70	0.0
S^8	-0.12	0.41	1.3	4.2	0.71	0.16
mean field	0	1/2	1	3	1/2	0

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

58

欠陥の衝突ダイナミクス

欠陥が可換な場合

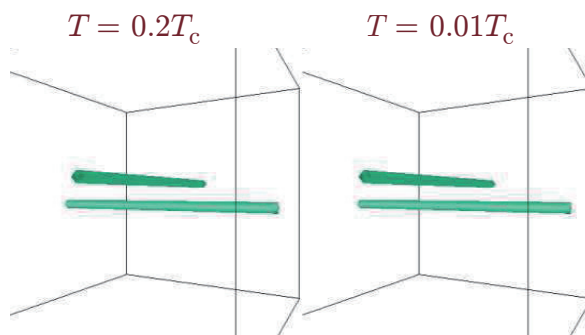


対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

59

欠陥の衝突ダイナミクス

欠陥が可換な場合

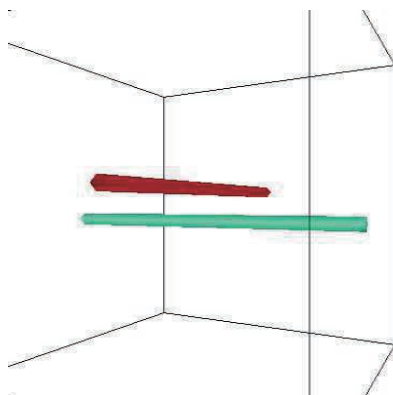


対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

60

欠陥の衝突ダイナミクス

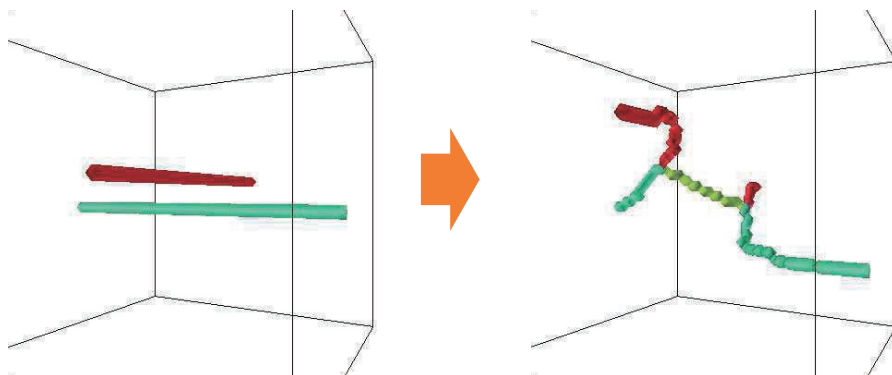
欠陥が非可換な場合



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

61

欠陥の衝突ダイナミクス



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

62

欠陥の衝突:まとめ

可換な欠陥の衝突:再結合もしくはすり抜け

非可換な欠陥の衝突:新しくできた欠陥に束縛される



多数の欠陥が関与するダイナミクス(固体の塑性変形など)において、欠陥が非可換な場合、欠陥が絡まっていくような挙動が予想される。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

63

発表の流れ

- 流体・結晶転移における対称性の破れ
- Bond-orientational order: 定義と性質
- Bond-orientational orderを用いた結晶秩序の分類法
- Bond-orientational orderを用いた結晶の有効模型
- 有効模型のダイナミクス(トポロジカル欠陥)
- 有効模型の熱力学的性質
- Phase orderingプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

64

Phase Ordering Processにおける欠陥動力学

Phase ordering process : $T > T_c$ (液体相) から $T < T_c$ (結晶相) への急冷で起こる、対称性の破れた状態への ordering process



支配的なダイナミクス: トポロジカル欠陥の減衰

Kibbleのイメージ

- 冷却前: 相関長 ξ でオーダーパラメーター一定のドメインが系を満たしている
- 冷却後: ξ のスケールでトポロジカル欠陥ができる (欠陥の密度 $\sim \xi^{-n}$)
→ 他の欠陥と相互作用し、減衰する

T. W. B. Kibble, J. Phys. A : Math. Gen. 9, 1387 (1976)

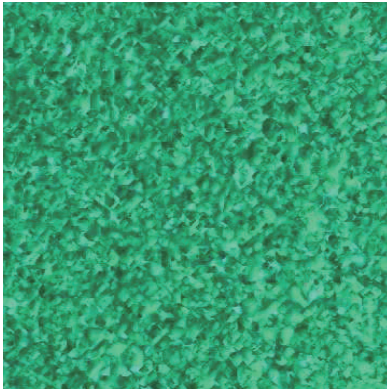
対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

65

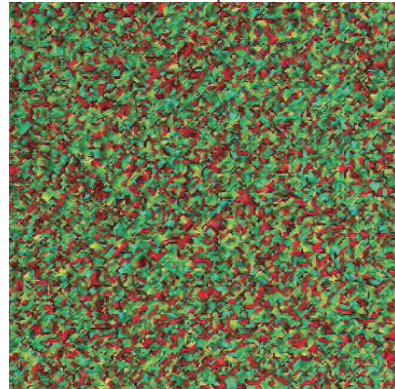
Phase Ordering Processにおける欠陥動力学

q^+ ベクトルモデルにおけるPhase ordering process

可換な欠陥
(S^1)



非可換な欠陥
(D_4)

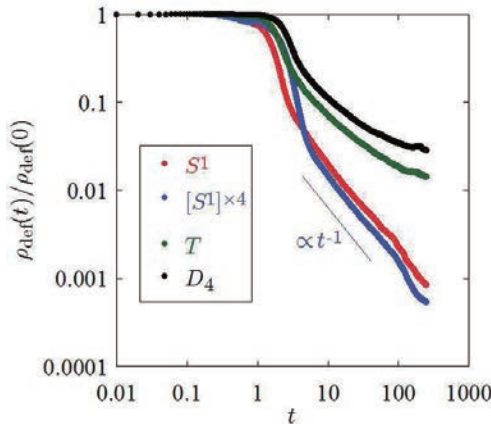


対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

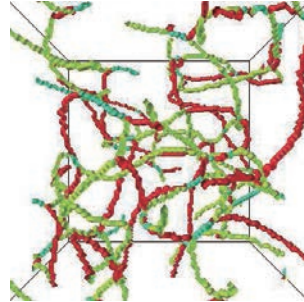
66

Phase Ordering Processにおける欠陥動力学

q^l ベクトル模型におけるPhase ordering process



欠陥が非可換なときはベキ乗則に従っていないようにみえる
欠陥の寿命が長い(絡まるため)



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

67

まとめと今後の課題

- 並進対称性の破れに対する秩序変数
: 構造因子
 - 回転対称性の破れに対する秩序変数
: Bond-orientational order (q^l ベクトル)
- ↓
- 回転対称性の破れに着目し、 q^l ベクトルによって構成された結晶の動力学に対する有効模型を構築した
 - 有効模型を用いて、結晶中のトポロジカル欠陥(転傾)のダイナミクスを調べた。転傾の非可換性を反映して、非自明な転傾の衝突ダイナミクスを得ることができた。
 - 転傾の非可換性は、温度急冷によるphase orderingプロセスにも影響を与える。具体的には秩序化の時間スケールが可換な場合に比べて長くなる。

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

68

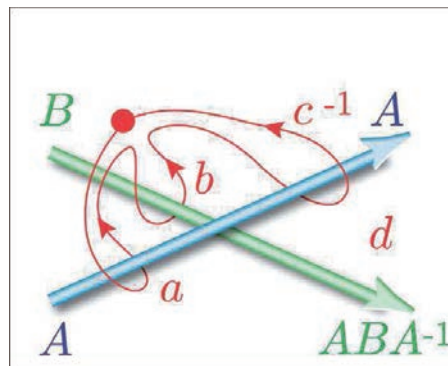
まとめと今後の課題

- 1次相転移を示す、より現実的なモデルへの拡張
→ $A_{3,0}$ 等のハミルトニアンへの導入
- 結晶の空間変化に対する異方性の導入
→ 転傾の種類に対してエネルギーの縮退を解く
- 並進対称性の破れの導入
→ 並進対称性と回転対称性の半直積性をどのように取り込むかが問題
- 転傾と転移の協同現象の解明
→ 転傾と転移も非可換なので、その非可換性を反映したダイナミクスが期待できる。結晶の塑性変形ダイナミクスやガラスとの関係は？

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

69

衝突ダイナミクスのトポロジー

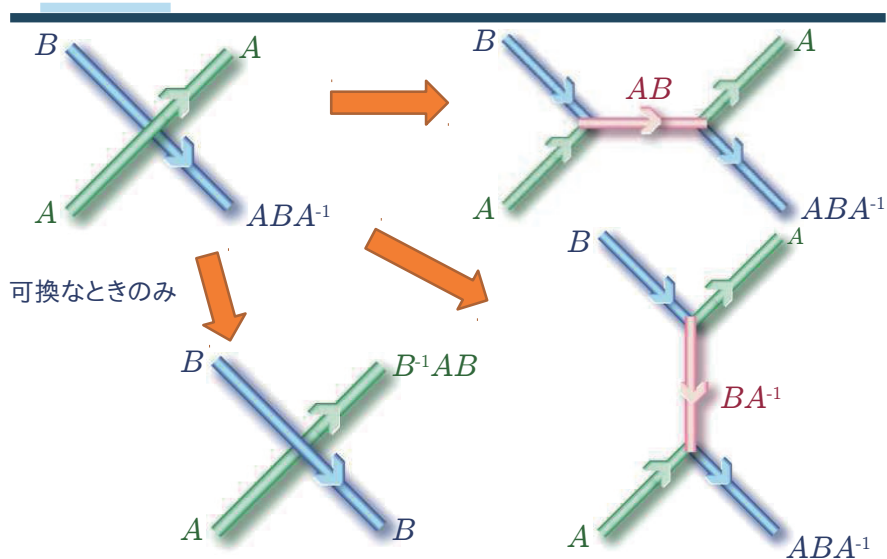


経路 d は欠陥 B を ABA^{-1} とみなす

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

70

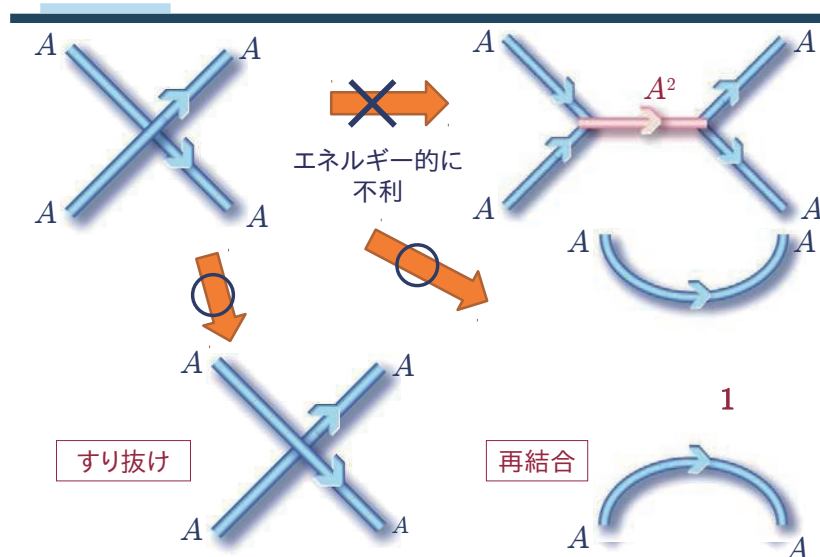
トポロジカル欠陥の衝突



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

71

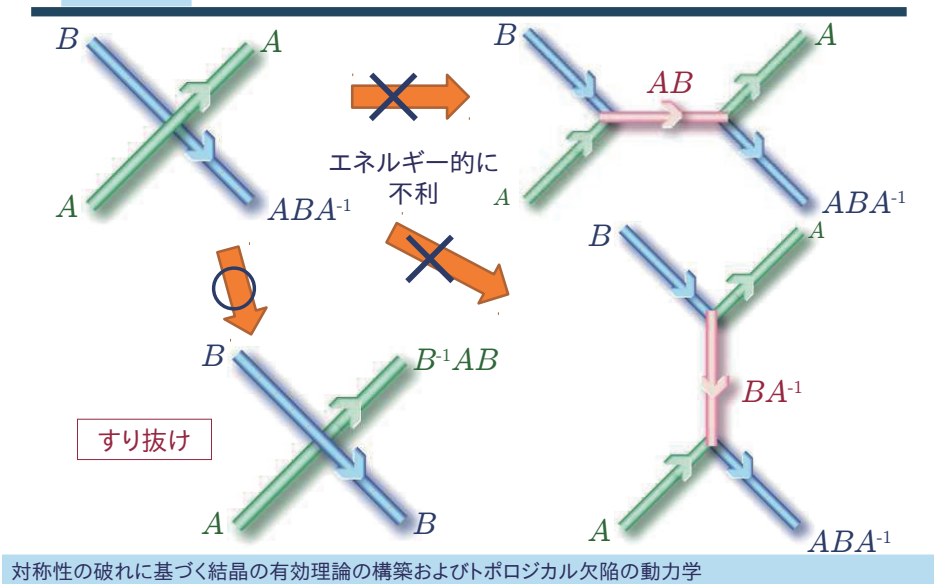
同種の欠陥の場合



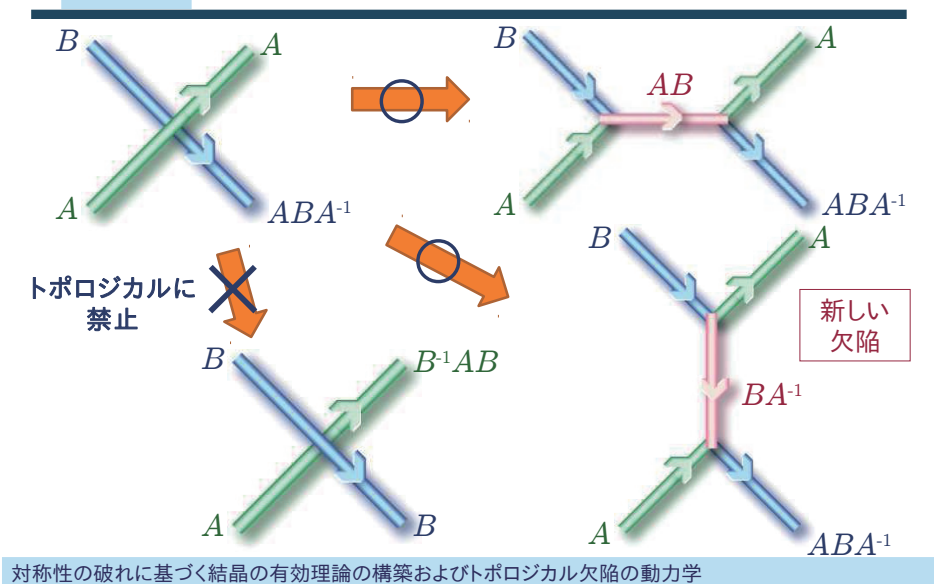
対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

72

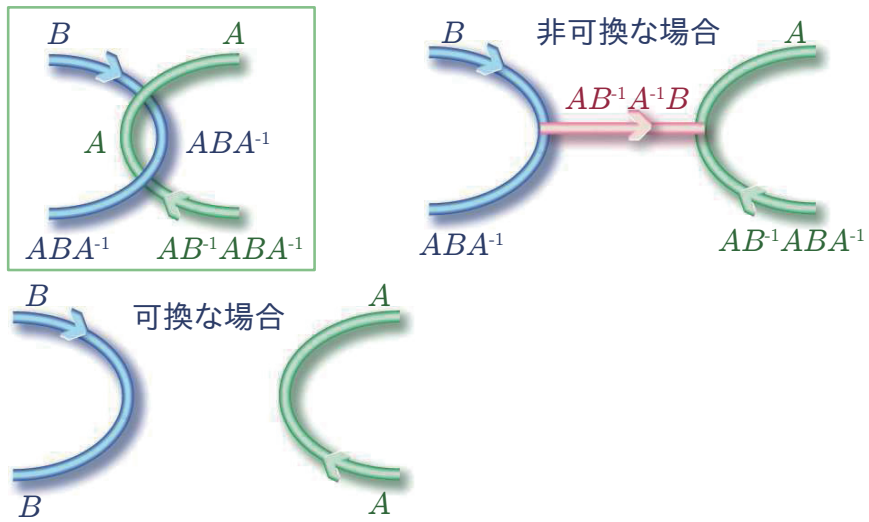
異種で可換な欠陥の場合



非可換な場合



リンクされた欠陥



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

75

1次転移する模型

$$\mathcal{H}^l = c^l \sum_m |\dot{q}_m^l|^2 + d^l \sum_m |\nabla q_m^l|^2 + f^l \left(\sum_m |q_m^l|^2 - 1 \right)^2 + g^l A_{2,2}$$

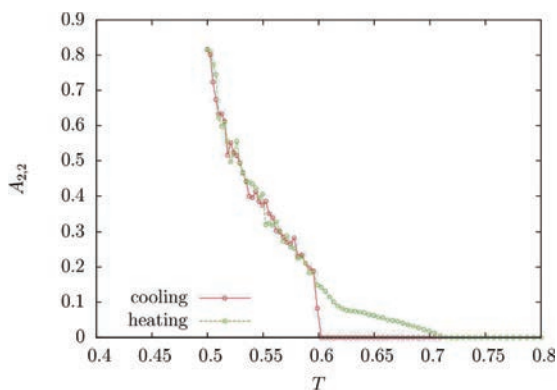
$$\mathcal{H}^l(\mathbf{q}^l) = \mathcal{H}^l(-\mathbf{q}^l)$$

$$\mathcal{H}^l = c^l \sum_m |\dot{q}_m^l|^2 + d^l \sum_m |\nabla q_m^l|^2 + f^l \left(\sum_m |q_m^l|^2 - 1 \right)^2 + g^l A_{2,2} - h^l A_{3,0}$$

対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポロジカル欠陥の動力学

76

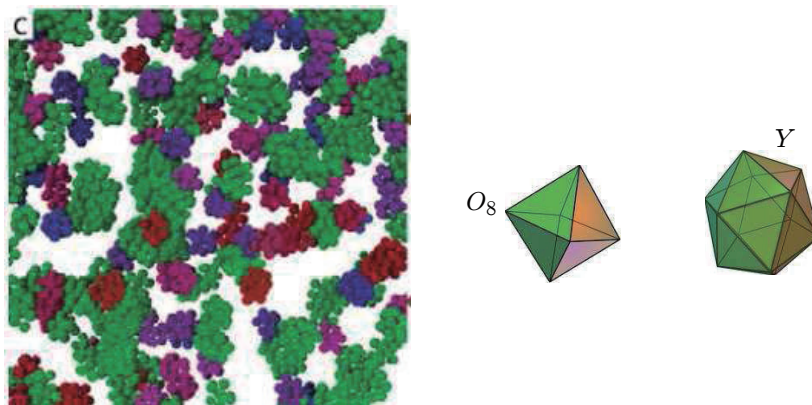
1次転移する模型



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

77

ガラスと q^l ベクトル



対称性の破れに基づく結晶の有効理論の構築およびトポジカル欠陥の動力学

78

粉末結晶構造解析の格子決定問題への代数学の応用

Application of algebra to a lattice determination problem in powder crystal structure analysis

富安 (大石) 亮子 (山形大学/JST さきがけ)*¹

Ryoko Oishi-Tomiyasu (Yamagata Univerisy/JST PRESTO)

概 要

Several mathematical problems required for the foundation of crystal structure determination from diffraction patterns are introduced. In the sense that all the handled values include observational errors, some of those provide new types of algebraic problems. In the determination in powder-crystal structure analysis, problems difficult even from the viewpoint of modern mathematics are involved. It is explained what kinds of mathematical tools are used to solve these problems.

Introduction

本記事中では、私がこれまで関与した数理結晶学の問題をいくつか紹介する。対象とした実験データは、節1の「粉末結晶構造解析における格子決定問題 (粉末指数付け)」では粉末結晶の回折パターンと呼ばれるもの、節2の「単結晶構造解析の解の一意性」の話では、単結晶の回折像になる。とはいえ得られた数学の結果は一般的なものであるので、それぞれ種々多様な格子パラメータの決定問題、位相回復の問題に関連がある。

著者が数理結晶学の研究を始めたのは、2006年頃前後に、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所の粉末回折パターンの解析ソフトウェア開発に関与したことがきっかけである。そこで、数理結晶学という分野があることを始めて知ったが、物理の実験家も用いる結晶学の基盤である群論、表現論、調和解析を始め、充填問題、離散幾何、フィボナッチ数など結晶学に関連する数学はいくらでもある。とはいえ、数理結晶学の中心的課題は計測した実験データの解析であり、そこで生じている数学の問題なので、意味のある研究をするためには、数学者の側が実験家との専門用語や関心の違いをどう解決するかは課題になるかと思われる。

節1の問題に関する著者の主な貢献は、格子基底簡約理論を、誤差のある観測データの解に使うことで、既存の解析手法に残っていた数学上の問題を解決したことである。具体的には、格子定数に観測誤差が含まれている場合のブラベー格子決定問題を高速かつ安定的に解く方法 [8] と、消滅測と呼ばれる現象の一般的な性質を空間群に対して導出した [9]。得られた結果は、結晶学の解析の問題で一般的に使うことができると考えられる。今回、粉末回折を対象にしたのは、粉末指数付けはそもそも3変数2次形式の表現に関する問題でもあるので、著者の専門分野の一つである数論との関わりも深いということがある。節1.2ではそのようなことについても少し触れている。

開発した解析アルゴリズムは *CONOGRAPH* というソフトウェアに実装された。*CONOGRAPH* について、既存の方法との比較は、投稿中の記事 [5]で行っている。この開発を通して、解の一意性が成立しない解析においてはどのような考え方が必要にな

*¹ 山形県山形市 小白川町一丁目 4-12

るか?という経験も得られたが、特に節1.2に述べているように、解の一意性の成立しないケースを与えることができる関数は、数学上の意味だけでなく、実用的な観点から見ても役に立つと考えている。

節2では、このような観点から単結晶構造解析の問題にアプローチした結果を紹介している。具体的には、[4]などで以前から指摘されていた解の一意性の問題について、直接法などの未知結晶構造解析で使われるモデル(2.1)の範囲で解の一意性を計算でチェックできるようにした。今年の粉末の国際会議 EPDIC-15で発表を行ったもので[7]、まだ付け加えたいことも今後やりたいことも色々ある。半正定値計画法を位相回復に適用した既存研究には[1]などがある。この著者も含め、これまで指摘されているように半正定値計画緩和を位相回復に適用すると、変数の数や制約条件の数が大きくなるといった問題が生じてしまう。節2で解いているのは位相回復よりも簡単な問題であるので、今回の結果としては非常にうまく行く半正定値計画法の応用を与えることができたとと言える。

現在、節2の方法を拡張して、粉末結晶回折パターンに拡張できるか?という問題が残っていることについて指摘しておきたい。具体的に述べると、「3次元格子 L で表される周期を持つ \mathbb{R}^3 の点配置について (ただし \mathbb{R}^3/L 内には有限個の点しかないとする)、その任意の2点をつなぐ距離の集合が与えられたときに、同じ距離集合を持つ点配置を全て与えることができるか?」という問題である。このとき、 L も与えられると考えてよい (粉末指数付けと全く同じ原理により、与えられた距離集合から、Hankel 変換により逆格子ベクトルの長さが得られ、 L を含む非常に数の少ない有限集合の中が得られるからである)。このとき、単結晶の場合と異なり、差ベクトルの長さの情報のみ与えられているので、 L から定まる無限個の格子点との間に適切な距離集合を有する差ベクトル集合を構成するというプロセスがまず必要になる。こういった問題から、個人的には、単結晶構造解析より粉末結晶構造解析の方が数学の問題としては面白いと考えているのだが、位相回復という観点からはいずれの数理アルゴリズムもまだ発展途上の問題は残っている。

1. 粉末結晶構造解析における格子決定問題 (粉末指数付け)

研究集会では、粉末回折パターンは、充填問題の議論に用いられる平均テータ級数とフーリエ変換で書き合うことを紹介した。ここで述べる粉末指数付けは、粉末回折パターンの輝点の X 座標を変換することで得られる結晶格子の逆格子ベクトルの長さから、結晶格子 (または逆格子) をパラメトライズする三変数二次形式の問題である。そのため、以下では、逆格子ベクトル長さのことをピーク位置、ピーク座標と呼んでいることもある。

1.1. アルゴリズムの紹介

本節では *CONOGRAPH* による粉末指数付けの方法を紹介する。方法を確立するのに用いた定理の詳細は、Appendix A に記載した。

(入力) Λ^{obs} : 観測された粉末回折パターンから取り出された逆格子ベクトル長さの配列 (粉末回折パターンの観測誤差を含むので、以下で等式が成立するかどうかの判定は観測誤差を考慮して行われている。)

(アルゴリズム) (i) 等式 $2(q_1 + q_2) = q_3 + q_4$ が成立する $q_1, q_2, q_3, q_4 \in \Lambda^{obs}$ それぞれ

に対して、 $q_1 = |l_1^*|^2$, $q_2 = |l_2^*|^2$, $q_3 = |l_1^* + l_2^*|^2$, $q_4 = |l_1^* - l_2^*|^2$ for となる逆格子ベクトル l_1^* , l_2^* が存在すると仮定して、図1のグラフの枝を対応させる。

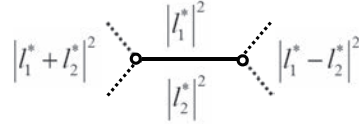


図 1: トポグラフの枝とそれに関連づけられた4つの格子ベクトル長さ

- (ii) 等式 $3q_1 + q_3 = 3q_2 + q_4$ が成立するそれぞれの $q_1, q_2, q_3, q_4 \in \Lambda^{obs}$ に対して、図2の2つの枝を対応させる。ここで、 $2(q_2 + q_?) = q_1 + q_3$ and $2(q_1 + q_?) = q_2 + q_4$ が成立するよう、 $q_?$ の値は $q_? = (q_1 + q_3 - 2q_2)/2 = (q_2 + q_4 - 2q_1)/2$ とする。このとき、 $q_?$ が Λ^{obs} の観測値に含まれなければ、 $q_?$ は消滅測を含む何らかの理由で観測されなかった逆格子ベクトルの長さともみなされる。

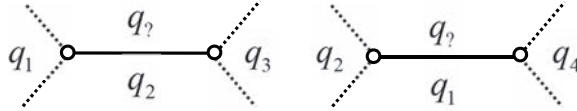


図 2: 等式 $3q_1 + q_3 = 3q_2 + q_4$ を満たす $q_1, q_2, q_3, q_4 \in \Lambda^{obs}$ から作られる枝

- (iii) ここまで得られた枝が同一の頂点を含むとき (2つの頂点は、それを囲む領域に関連づけられたベクトル長さが等しいとき同一とみなす)、図3のように枝を連結する。

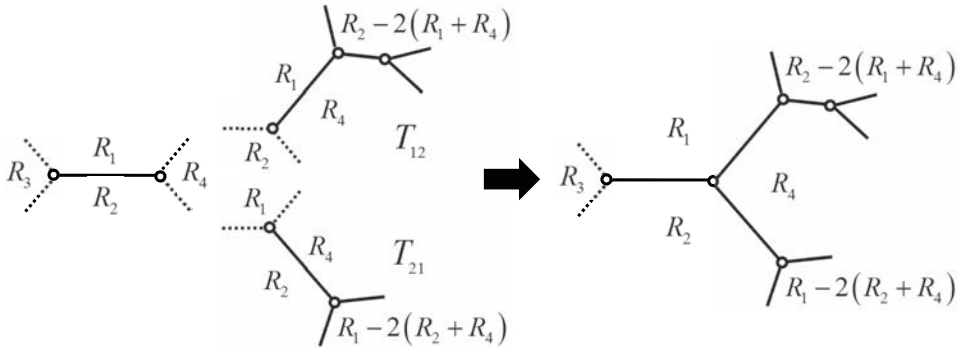


図 3: 同一の頂点を含む2つのグラフを結合する

- (iv) ステップ(3)で得られた各グラフ T を、 T の枝に関連づけられた観測値 (Λ^{obs} の元) の数の降順にソートする。数が一致する T_1, T_2 に対しては、以下の $S(T)$ の値の昇順にソートする。ただし、 $S(T)$ は以下の行列の行列式である。

$$S(T) = \begin{pmatrix} |l_1^*|^2 & l_1^* \cdot l_2^* \\ l_1^* \cdot l_2^* & |l_2^*|^2 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

行列の各成分は、 T が図1のような枝を含む場合に、その長さ、内積として取ってきたものである。 $S(T)$ の理論値は、 T のどの枝を用いるかに依らないことは容易に確認できる。ソートによって、上位に置かれたグラフから優先的に、グラフに含まれる枝を配列 A_2 に格納する。枝の数が指定された数 M を超えたら、そこでストップする。各 $q_6 \in \Lambda^{obs}$ と、 A_2 の2本の枝で図4のように共通の q_1 を含むものとの組み合わせに対して、それぞれ以下を行う (q_2, q_3, q_4, q_5 は図4のように取る) ; 逆格子の基底 $\langle l_1^*, l_2^*, l_3^* \rangle$ で、 $|l_i^*|^2 = q_i$ ($1 \leq i \leq 3$)、 $|l_1^* + l_2^*|^2 = q_4$ 、 $|l_1^* + l_3^*|^2 = q_5$ 、 $|l_1^* + l_2^* + l_3^*|^2 = q_6$ を満たすものが存在すると仮定すると、対応する2次形式 (そして逆格子定数 $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$) は以下ようになる。

$$\begin{pmatrix} (a^*)^2 & a^*b^* \cos \gamma^* & a^*c^* \cos \beta^* \\ a^*b^* \cos \gamma^* & (b^*)^2 & b^*c^* \cos \alpha^* \\ a^*c^* \cos \beta^* & b^*c^* \cos \alpha^* & (c^*)^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1 & \frac{q_4 - q_1 - q_2}{2} & \frac{q_5 - q_1 - q_3}{2} \\ \frac{q_4 - q_1 - q_2}{2} & q_2 & \frac{q_1 + q_6 - q_4 - q_5}{2} \\ \frac{q_5 - q_1 - q_3}{2} & \frac{q_1 + q_6 - q_4 - q_5}{2} & q_3 \end{pmatrix}$$

この行列を候補解として保存する。

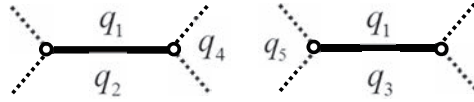


図 4: q_1 をともに含む2つの枝

上記の全てのステップが終了した後、生成された格子のパラメータは、結晶学で定義された種々の指標 ([3], [14], [10]) に従ってソートされ出力される。ステップ (i) は、古くから使われているプログラム ITO の方法 [13] と共通であるが、(i) だけ用いる方法は、消滅測のタイプによっては不十分であることが分かっている (Appendix A, [9])。Appendix で述べている定理より、理論的には (i) の代わりに (ii) を用いれば十分であることが、上で (i), (ii) とともに実行しているのは質の悪い観測データを考慮した結果である。ステップ (v) のパラメータ M の値は、 Λ^{obs} の要素数が n のとき、 $M = n(n+1)/3$ または $n(n+1)/2$ となるが、CONOGRAPH の方法の中で、唯一、経験的に決定されているパラメータになる。

図1-図4に現れるグラフは格子基底簡約理論に起源を有するグラフで、[2] ではトポグラフと呼ばれている。トポグラフ上での消滅測の規則性を与えた理由であるが、primitive な格子ベクトル (すなわちある格子基底を構成し得るベクトル) のみがトポグラフ上に現れることに加え、Bass-Serre理論などで見られる方法によって全ての格子の自己同型群、結晶群とその消滅測を、トポグラフを用いて列挙・類別することも場合分けが多くなるものの理論上は可能であることから、トポグラフ上で消滅測が見つけれられるかという試みは自然な発想と言える。ただし本研究では規則性 (すなわち得られた定理) の探索と証明に計算機を利用しているので、トポグラフの利用という数学上の観点から見れば、まだやり残していることもあると思われる。

1.2. 粉末指数付けの解の一意性をチェックする関数

粉末指数付けにおいては解の一意性が成立しないこと、すなわち形の異なる結晶格子が、完全に一致するピーク位置 (逆格子ベクトル長さの集合) を持つことが知られている。この現象は、結晶学では geometrical ambiguity (GA) と呼ばれ、立方晶、六方

晶、三方晶の晶系に属する対称性の高い格子においては、必ずこの現象が発生することが知られている [6]。他方で、2つの形の異なる結晶格子が、両方とも上記よりも対称性の低い晶系に属するか、または incommensurate な (すなわち、対応する2次形式が \mathbb{Q} 上 equivalent でない) 場合、GA は発生しないと結晶学では考えられていたが、実はそうではなく、それぞれが完全に一致するピーク位置を持つ53個のグループで、151個の格子 (\mathbb{R}^3 の合同変換やスケールを変えることで写りあうものは同一視) からなるものが、著者によって結晶学誌に報告されている [11]。その中には、最も対称性の低い三斜晶からなるグループや、incommensurate な格子からなるグループ (図5など) も多く含まれているまた、図6に、数学の未解決問題とも関係する例を示した。

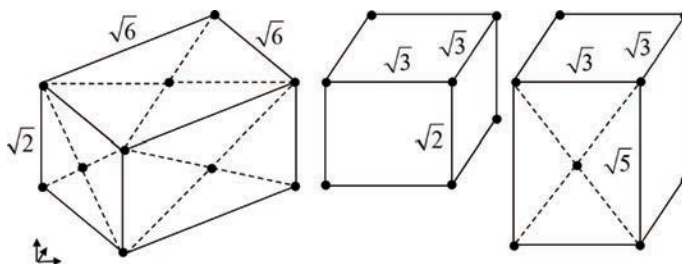


図 5: (Figure 1 of [11]) 同一の格子ベクトル長さ集合を持つ incommensurate でない格子の例; それぞれ面心正方晶、単純正方晶、底心直方晶の対称性を持つ (面心正方晶は通常体心正方晶で表されるが、文献で双対格子 (逆格子の双対格子、つまり結晶格子) を基準にしたため面心正方晶になっている)

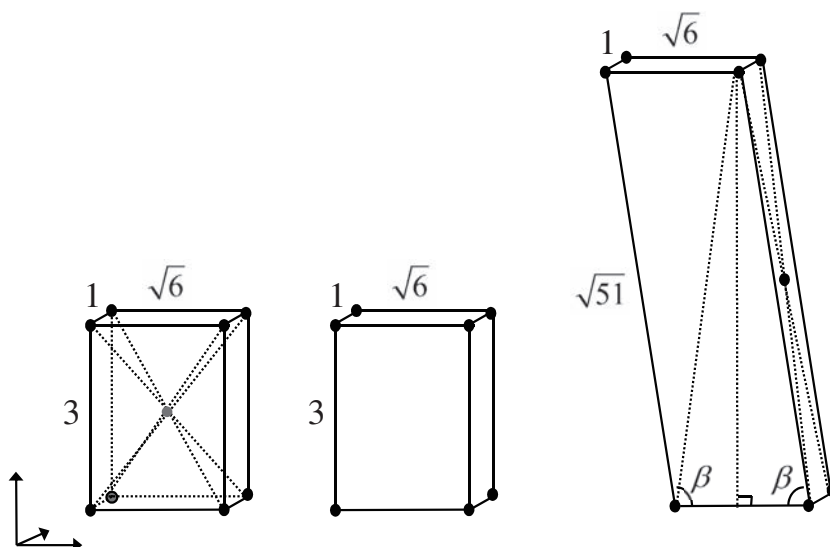


図 6: 同一の格子ベクトル長さ集合を持つ格子の例、ただし、このことは一般化されたリーマン予想の下でのみ証明されており [12]、ある長さ以下の範囲で一致することは計算によって確認されている。それぞれ体心直方晶、単純直方晶、底心単斜晶の対称性を持つ。

とはいえ、GAが数学的にみても稀な現象であることは間違いなく、上記は、もっとずっと広い範囲を徹底探索して見つかったものが、たった151個しかなかったということである。入力された格子に、そのような別の格子があるかどうかを判定するアルゴリズムの構築には、格子基底簡約理論とHasse-Minkowskiの定理から導出される諸事実を用いたが、それまで結晶学で用いられていた限定的な探索を行う手法と異なり、同一なピーク位置を持つ全ての格子を出力できる。

このような関数を作ろうと思った当初の動機は、以下に述べるような実用的な観点からである。前節で紹介した粉末指数付けアルゴリズムであるが、GAが発生した場合、原理上全ての解を取ってくることができ(解の有限性は証明できる)、実際の計算でもそれが確かめられている。しかし、ソフトウェアのユーザがそのことに気づきにくいという問題があった。観測値から抽出されたピークは、観測誤差だけでなく、ピーク位置情報の欠損や誤りの混入が発生している可能性があるため、観測値との整合性が高いものから順に解はソートされ、GUI上では多数の格子定数を見ることが可能になっているためである。ソフトウェアとしては、GAの発生を示唆できた方が親切なので、解の一意性をチェックする関数は、最初、ソフトウェアの関数として導入された(図7)。

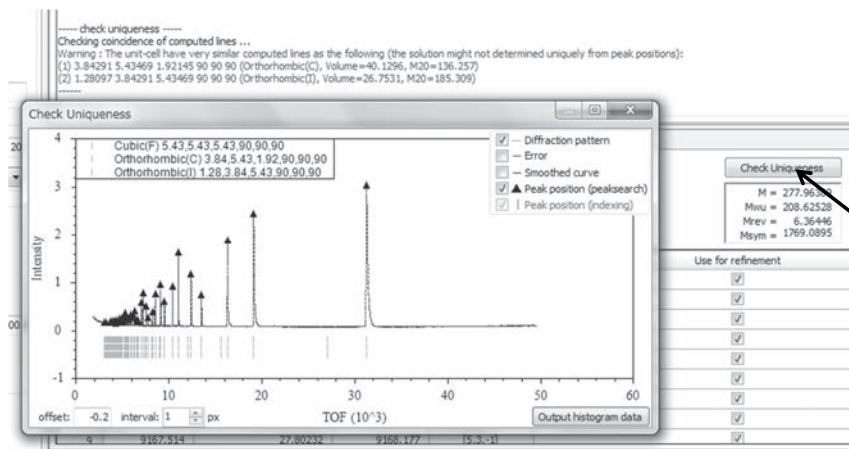


図7: 粉末指数付けの解の一意性をチェックする関数; 入力された面心立方晶の格子に対して、同じピーク位置を有する単純立方晶と面心立方晶の格子を出力している。

上記の経験は、観測値からの回復アルゴリズムの開発を行うとき、理論値からの回復アルゴリズムの開発は、両者を対照させるという以上の使い方ができるということを示唆している。以下の単結晶構造解析の話は上記のような経緯から生まれている。

2. 単結晶構造解析の解の一意性に対する半正定値計画緩和の応用

2.1. 問題の紹介

以下では、結晶構造のモデルとして、以下の ρ を用いる。

$$\rho(x) = \sum_{l \in L} \sum_{i=1}^n C_i \delta(x - x_i). \quad (2.1)$$

ここで、 L は結晶格子、 x_i ($1 \leq i \leq n$)は単位胞 \mathbb{R}^3/L 内の原子座標である。中性子線回折の場合、 C_i は各原子の散乱長である。 X 線回折の場合の散乱因子のモデルは、

格子面間隔 d を変数とする指数関数の和によって与えられる。

$$C_i(d) = \sum_{k=1}^4 a_{ik} \exp(-b_{ik}/2d) + c_i. \quad (2.2)$$

上記は、 $S_X(x) = (4\pi) \sum_{k=1}^4 a_{ik} b_{ik} (b_{ik}^2 + 16\pi^2|x|^2)^{-2} + c_i \delta(x)$ のフーリエ変換に等しい。ただし、 a_{ik}, b_{ik} は実数、 c_i は異常分散を考慮すれば、実部と比較して相対的に小さい虚部を持つ複素数で具体的な値は文献等でみることができ。式 $\int_{\mathbb{R}^3} S_X(x) dx = (8\pi^2)^{-1} \sum_{k=1}^4 a_{ik} + c_i$ より、ピークの積分面積 $(8\pi^2)^{-1} \sum_{k=1}^4 a_{ik} + \text{Real}(c_i)$ を C_i とすれば、X線でも、中性子と共通の式(2.1)を用いることができる。 $\rho(x)$ のフーリエ変換、すなわちパターン関数は以下に等しい。

$$\sum_{l \in L} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_i \bar{C}_j \delta(x - x_i + x_j). \quad (2.3)$$

ここで、 \bar{C}_j は C_j の複素共役で、今、 C_j は実数だと仮定しているので、 $\bar{C}_j = C_j$ である。このことから、2つの結晶構造が同一の回折パターンを持つことの同値条件は以下のようになる。

- 結晶格子が合同（つまり直交群の作用で写り合う）。
- 差ベクトル集合 $\Lambda := \{x_i - x_j : 1 \leq i, j \leq n\}$ (図8) が一致する。
- 各差ベクトル $\Delta \in \Lambda$ について、 $\sum_{x_i - x_j = \Delta} C_i \bar{C}_j$ の値は一致する（ Δ に対応するパターン関数のピーク近傍でパターン関数を積分した値に等しいことから）。

以下では、結晶格子は常に結晶の並進対称性を全て含むものとし、その部分格子を指すことはないとする特に、格子 L が、結晶学で用いられるブラベー格子を指すことはない。加えて、基本領域 \mathbb{R}^3/L （結晶学で単位胞と呼ばれる）に含まれる有限の座標点 $\{x_1, \dots, x_n\}$ を「配置(configuration)」と呼び、通常結晶構造から原子種に関する情報を除いたものとみなす。また、後述するように、実際の計算においては回折像以外から得られる有力な情報である化学式も用いられている。さらに、 $x_i - x_j = x_k - x_l$ の判定は誤差を常に考慮して行う。理論上は、丸め誤差程度のものしか生じないはずだが、処理される結晶構造は観測誤差を含むため、大き目の誤差を用いた評価が必要になるからである。

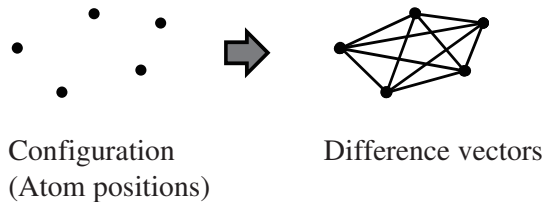


図 8: 配置に対し定まる差ベクトル

そこで、同じ回折像を持つ結晶構造を得るための計算ステージを以下の2つに分ける。

- (i) 入力された結晶構造と同一の差ベクトル集合を持つ \mathbb{R}^3/L 上の配置を全て出力する (この差ベクトル集合を $\Delta_0 = 0, \pm\Delta_1, \dots, \pm\Delta_N$ とする)。
- (ii) (i) で得られた各配置に対し、同一の回折像を持つよう散乱因子を割り当てることで、各座標の原子種を推定する。より具体的には、以下の連立方程式を解く。

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{j=1}^m C_j, \\ \sum_{v_i-v_j=\Delta_k} x_i x_j = \sum_{u_i-u_j=\Delta_k} C_i C_j (0 \leq k \leq N). \end{cases} \quad (2.4)$$

ただし、 C_j, u_j ($1 \leq j \leq m$) は入力された結晶構造の散乱因子と座標であり、 x_i, v_i ($1 \leq i \leq n$) は求める散乱因子と原子種を推定する配置の座標である。得られた x_i が C_j の値に近ければ、 v_i にも u_j と同じ原子種が割り当てられることになる。

連立方程式 (2.4) を解くことは、割り当てを行う結晶構造のパターソン関数にピークオーバーラップが生じていない場合、すなわち、 $v_i - v_j$ ($1 \leq i, j \leq n$) がそれぞれ異なっている場合は全く難しくない。しかし、結晶の群対称性のためか、ピークオーバーラップは割と頻繁に起きるようである (表5参照)。2次以上の連立方程式を一般的に解く方法としては、グレブナー基底も候補の一つだが、グレブナー基底は多項式係数が exact である代数学の問題ではよく使われているものの精度保証付きグレブナー基底の研究は発展途上であることと、今回だけでなく将来的なことも含め、観測誤差を含む結晶構造に適用したいことから、以下のような最適化問題に帰着する方法を用いることにした。

$$\begin{cases} \text{Minimize } \sum_{k=0}^N \left| \sum_{v_i-v_j=\Delta_k} x_i x_j - \sum_{u_i-u_j=\Delta_k} c_i c_j \right| \\ \text{subject to: } \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{j=1}^m c_j. \end{cases} \quad (2.5)$$

次節では、上記の最小化問題を半正定値緩和と呼ばれる方法によって解く。上記では、二乗和ではなくて絶対値の和を最小化しているが、これは、半正定値緩和による方法を試みる場合、問題に現れる多項式次数は2次以下となることが望ましいからである。4次以上の多項式を含む最適化問題の緩和は、変数の数が非常に少ない場合を除いて現実的には解くことが難しい。

2.2. 今回実装した方法

2.2.1. 同じ差ベクトルを持つ $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ 上配置を全て与える方法

今回採用したアルゴリズムを以下に述べる。

入力: ある結晶構造の差ベクトル集合 $\Lambda = \{\pm\Delta_1, \dots, \pm\Delta_N\}$ 、ただし0は除いている。

出力: Λ を差ベクトルの集合に持つ全ての $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ 上配置。

アルゴリズム: (1) 計算のステージを $s = 1$ に設定する。ステージ1では、最初に図11のような $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ 上の配置を作成する。

- (2) ステージ $s = k$ では、それまでに作られた各配置と、その各頂点 (v とする) に対し、以下の処理 (a), (b) を繰り返すことで新しい配置を生成する:

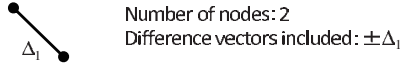


図 9: 差ベクトル Δ_1 を持つ 2 つの原子からなる配置

- (a) 図 10 上のように、 v と Δ_k の端点を結合する。
- (b) 図 10 下のように、 v と Δ_k の端点を、ある Δ_l ($k < l$) を介して結合する。

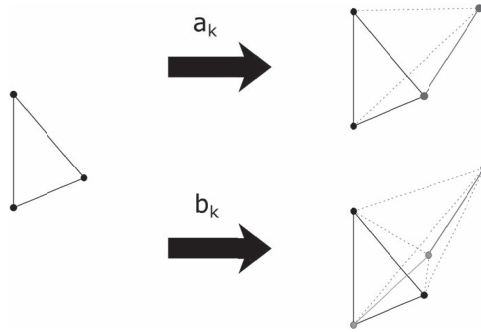


図 10: ステージ k で新たに形成される $\mathbb{R}^3 / \mathbb{Z}^3$ 上の配置

得られた配置は、その差ベクトルが全て Λ に含まれていれば、同じ配置が生成されていないかチェックした上で保存する。差ベクトル集合が Λ の元である、という制約下で、これ以上新たな Δ_k が追加できないことが分かったら、次のステージ $s = k + 1$ に進む。

原理上、差ベクトルの順序はどのようにソートされていてもよいはずだが、現状はメモリ使用量を抑える経験上の工夫として、長さの長い順にソートしている。以下で、アルゴリズムの概要を簡単に説明する。

異なる頂点のどのようなペアに対しても、それらをつなぐ枝がただ一つ存在するようなグラフは、完全グラフと呼ばれる。今、差ベクトルの集合が Λ に一致する全ての配置を C_1, \dots, C_m とする。各 C_i に対して、その原子座標を頂点とするような完全グラフ G_i を定めることができる。各頂点をつなぐ辺は、差ベクトルとして、 Λ の元 $\pm\Delta_1, \dots, \pm\Delta_N$ のうち一つに対応している。 G_i の頂点のうち、 $\pm\Delta_1, \dots, \pm\Delta_k$ のいずれかの端点となっているもの全てを頂点集合とする完全グラフを $H_{i,k} \subset G_i$ とする。このとき上記のアルゴリズムのステージ k では、全ての $H_{1,k}, \dots, H_{m,k}$ を含むグラフの集合を得ることを目指している。

メモリ使用量の発散を抑えるには各ステージで、 G_i の相違なる部分グラフがともにメモリ上に保存されている状況とを可能な限り回避する必要がある。このことが、各 G_i に対して一意に定まる $H_{i,k}$ が各ステージで探索されている理由である。ここで述べた方法は、結晶構造解析において medium size とされる数十程度の原子を含む単位胞に対して、家庭用のパソコンで十分実行可能である（テストはメモリサイズ 4GB のパソコンを用いて行った）。しかし、原子数が 100 を超えたぐらいから、メモリ確保エラーが生じることが確認されている。

2.2.2. 2次最適化問題への半正定値緩和の適用

以下では、 $\Delta_0 = 0$ を含む、与えられた結晶構造の全ての差ベクトルからなる集合を、 $\Lambda = \{\Delta_0, \pm\Delta_1, \dots, \pm\Delta_N\}$ とする。(2.5) が以下の問題と同値であることは容易に確かめられる:

$$\begin{cases} \text{minimize } \sum_{k=0}^N \epsilon_k \\ \text{subject to: } \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{j=1}^m c_j, \\ \quad -\epsilon_k \leq \sum_{v_i-v_j=\Delta_k} x_i x_j - \sum_{u_i-u_j=\Delta_k} c_i c_j \leq \epsilon_k \quad (1 \leq k \leq N). \end{cases} \quad (2.6)$$

ここで、 $\epsilon_{1,k} = \epsilon_k + \sum_{v_i-v_j=\Delta_k} x_i x_j + \sum_{u_i-u_j=\Delta_k} c_i c_j$, $\epsilon_{2,k} = \epsilon_k - \sum_{v_i-v_j=\Delta_k} x_i x_j + \sum_{u_i-u_j=\Delta_k} c_i c_j$ とおくと、問題(2.5) は以下と同値になる:

$$\begin{cases} \text{minimize } \sum_{k=0}^N (\epsilon_{1,k} + \epsilon_{2,k})/2 \\ \text{subject to: } \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{j=1}^m c_j, \\ \quad \sum_{v_i-v_j=\Delta_k} x_i x_j - \sum_{u_i-u_j=\Delta_k} c_i c_j = (\epsilon_{1,k} - \epsilon_{2,k})/2, \\ \quad \epsilon_{1,k} \geq 0, \epsilon_{2,k} \geq 0 \quad (1 \leq k \leq N). \end{cases} \quad (2.7)$$

目的関数、制約条件がともに2次以下の多項式であることから、上記の問題は2次最適化問題 (QP) と呼ばれるクラスに属す。半正定値緩和は、QP の問題を効率的に解くことができる方法の一つである。以下では、記号 \bullet は対称行列 $X = (X_{ij})$ and $Y = (Y_{ij})$ の内積を表すのに使用される。

$$X \bullet Y \stackrel{\text{def}}{=} \text{Trace}(XY) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_{ij} y_{ij}. \quad (2.8)$$

また、 $X \succeq 0$ は、 X が半正定値であることを表す。最適化問題は、以下のいずれかの形に表現されるとき半正定値計画問題 (SDP) と呼ばれる。

$$\begin{cases} \text{minimize } C \bullet X \\ \text{subject to: } A_k \bullet X = b_k \quad (k = 1, \dots, N), X \succeq 0. \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\begin{cases} \text{maximize } \sum_{k=1}^N b_k y_k \\ \text{subject to: } Y + \sum_{k=1}^N y_k A_k = C, Y \succeq 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

(2.9), (2.10) において対称行列 A_k ($k = 1, \dots, N$), C とベクトル b_1, \dots, b_N が共通のとき、問題(2.10)を主問題(2.9)の双対問題、(問題(2.10)が主問題のときは、(2.9)を(2.10)の双対問題)と呼ぶ実際、以下の事実が成立している。

Theorem 1 (弱双対定理). $X, (Y, y_1, \dots, y_N)$ が、それぞれ(2.9), (2.10)の制約条件を満たすならば、 $C \bullet X \geq \sum_{k=1}^N b_k y_k$ が成立する。 \square

Theorem 2 (強双対定理). ある $X, (Y, y_1, \dots, y_N)$ が(2.9), (2.10)の制約条件を満足するとする。このとき、

- X が正定値ならば、問題(2.10)は最適解 $(Y^*, y_1^*, \dots, y_N^*)$ を持ち、その最適値は(2.9)の制約条件下での $C \bullet X$ の下限に等しい。

対称行列 A_k と $b_k \in \mathbb{R}$ は以下の制約条件と、 x と X の関係から一意的に定まるものである。

$$\sum_{v_i - v_j = \Delta_k} x_i x_j - \sum_{u_i - u_j = \Delta_k} c_i c_j = \frac{\epsilon_{1,k} - \epsilon_{2,k}}{2}. \quad (2.14)$$

Z は $(1, 1)$ 成分が 1 で、他の成分が 0 の行列である。したがって、 $Z \bullet \tilde{X} = 1$ は $\tilde{X}_{11} = 1$ の制約条件を表している。ランク 1 の制約条件を外して得られる問題 (2.12) は (2.9) と同じ形で表されるので SDP に属している。凸性によって、SDP の局所最適解は大域的最適解でもある。したがって、内点法によって、問題 2.9) とその双対問題の目的関数が同じ値に収束し、0 より有意に大きければ、元の問題 (2.5) は解なしであることが計算によって確かめられたことになる。他方で、目的関数の収束値がほとんど 0 に等しく、得られた最適解 \tilde{X} のランクが 1 となった場合は、 $\tilde{X} = x^T x$ を満たすベクトル $x = (1, x_1, \dots, x_{N-1})$ が唯一の解であることが示される。

一般に、SDP 緩和を適用する際に発生しやすい問題の一つは、変数 X, Y のサイズ n と制約条件の数 N が非常に大きくなり計算の実行が現実的に困難になりやすいことであるが、今回のケースでは大部分のケースで $n < 60$ and $N < 2000$ 程度なので、オンラインで配布されている SDPA ソルバーを用いて家庭用 PC でも十分実行できる範囲である。もう一つ起こりやすい問題として、 \tilde{X} のランクが > 1 となった場合、そこからランク 1 の最適解を得ることが、状況に応じて様々な方法はあるものの簡単にはできないということがある。グレブナー基底と組み合わせるそれを実行することも可能ではあるが、見込まれる誤差が大きいときにはやはり問題が生じる。

2.3. Implementation and results

本節では、節 2.2.1、2.2.2 に述べた方法を実装したプログラムの結果を述べる。実装は C++ を用いて行った。このプログラムは、SDP の solver として、SDPA [15] を使用している。今回用意した結晶構造は、NaCl (単位胞に 2 つのみの座標を含む特別な場合として)、および 2000 以上の CIF ファイルから構成される結晶構造データベースからランダムに抽出された 10 個の結晶構造である。Table 1 に 2.2.1 のアルゴリズムの結果を示す。

テストに使用したコンピュータは i7-6500 CPU@2.50GHz と 8 GB のメモリを有する。計算時間は、表中のデータを用いたとき、どれも 5 秒を超えることはなかった。この際、メモリ不足によるエラーは生じなかったが、原子座標数が 100 に近づくにつれメモリ使用量の負荷が非常に大きくなり、100 を超えた単位胞を用いたテストでメモリ割り当てエラーが起きたことを確認している。多数のデータを用いたテストは今後の予定である。サンプル 6 を除けば、同じ差ベクトルを持つ配置は存在しないことが計算結果からは示唆されている。生成された配置は html によって 3D 表示される (Figure 11)。

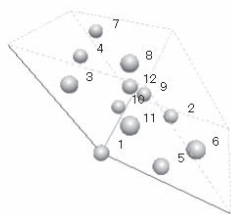
サンプル 6 については、得られた配置は元の配置の部分集合なので、化学式は明らかに異なる。よって、それらを候補解から外すことは実際の実験データの解析において難しいことではない。

次に、2.2.2 の方法でサンプル 1–10 の結晶構造を入力する配置として結晶構造割り当てを行った結果を示す。この状況では、もとの結晶構造の散乱因子が最適解の一つである。加えて、NaCl のケースでは座標が二つしかないので、それぞれの散乱因子 x_1, x_2 を交換することで同じぐらい良い最適解が得られることから、少なくとも 2 つの最適解が存在することになる。

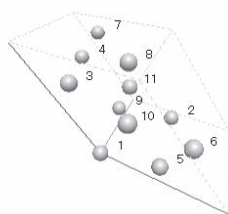
表 1: アルゴリズム 2.2.1 の結果 ($\epsilon = 0.001$ を使用); 任意の座標 $(v_1, v_2, v_3) \in \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ は、 $|\sum_{i=1}^3 \exp(2\pi\sqrt{-1} - 1) < \epsilon$ を満たすとき 0 に等しいと判定される。パターンソン関数においてどの程度のピークオーバーラップが起きているかは、表中の $N(N-1)/2$ の値と実際に検出された差ベクトルの値と比較すると分かる。

No.	物質 (空間群)	\mathbb{R}^3/L 内の原子座標数 N の値 ($N(N-1)/2$ の値)	差ベクトルの数	出力された配置の数
1	NaCl ($F m \bar{3} m$)	2 (1)	1	1
2	BaFBr ($P 4/n m m$)	6 (15)	9	1
3	SrFCl ($P 4/n m m$)	6 (15)	9	1
4	TaCl4 ($C 1 2/m 1$)	10 (45)	25	1
5	NiAs ($C m c 2_1$)	12 (66)	54	1
6	Y(PO4) ($I 4_1/a m d$)	12 (66)	34	3
7	CsI3 ($P m c n$)	16 (120)	64	1
8	BaCrO4 ($P n m a$)	24 (276)	141	1
9	Be2 (SiO4) ($R \bar{3}$)	42 (861)	441	1
10	Co2V2O7 ($P 2_1/c$)	44 (946)	484	1

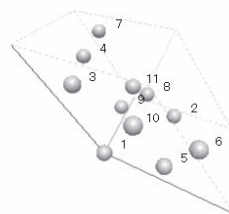
No. 1



No. 2



No. 3



```
[Atoms] 12
[Positions] (x y z)
[Atom 1] 0 0 0
[Atom 2] 0.5706 0.7204 0.1498
[Atom 3] 0.1455 0.1455 0.6498
[Atom 4] 0 0.6498 0.6498
[Atom 5] 0.4957 0.1455 0
[Atom 6] 0.9103 0.2352 0.3249
[Atom 7] 0.1603 0.9852 0.8249
[Atom 8] 0.6603 0.4852 0.8249
[Atom 9] 0.4103 0.7352 0.3249
[Atom 10] 0.0749 0.5749 0.1498
[Atom 11] 0.5706 0.0706 0.5
[Atom 12] 0.4251 0.5749 0.5
[Edges] (begin-end)
[Delta 1] 1-2
```

```
[Atoms] 11
[Positions] (x y z)
[Atom 1] 0 0 0
[Atom 2] 0.5706 0.7204 0.1498
[Atom 3] 0.1455 0.1455 0.6498
[Atom 4] 0 0.6498 0.6498
[Atom 5] 0.4957 0.1455 0
[Atom 6] 0.9103 0.2352 0.3249
[Atom 7] 0.1603 0.9852 0.8249
[Atom 8] 0.6603 0.4852 0.8249
[Atom 9] 0.0749 0.5749 0.1498
[Atom 10] 0.5706 0.0706 0.5
[Atom 11] 0.4251 0.5749 0.5
[Edges] (begin-end)
[Delta 1] 1-2
[Delta 2] 11-3
```

```
[Atoms] 11
[Positions] (x y z)
[Atom 1] 0 0 0
[Atom 2] 0.5706 0.7204 0.1498
[Atom 3] 0.1455 0.1455 0.6498
[Atom 4] 0 0.6498 0.6498
[Atom 5] 0.4957 0.1455 0
[Atom 6] 0.9103 0.2352 0.3249
[Atom 7] 0.1603 0.9852 0.8249
[Atom 8] 0.4103 0.7352 0.3249
[Atom 9] 0.0749 0.5749 0.1498
[Atom 10] 0.5706 0.0706 0.5
[Atom 11] 0.4251 0.5749 0.5
[Edges] (begin-end)
[Delta 1] 1-2
[Delta 2] 11-3
```

図 11: サンプル 6 に対する計算結果 (表示は html, three.js による); No. 1 は入力した結晶構造で、その部分集合で同じ差ベクトルを持つ配置 No.2 and 3 が存在する。

数値計算の結果を表2に示す。全てのケースで、SDPAは1秒もかからずに大域的最適化を終了させている。NaClの場合を除けば得られた解の \tilde{X} は全てランク1となり、さらに、 \tilde{X} から求められる散乱因子は、元の結晶構造のものと一致した。このことは、散乱因子が変われば、対応する回折像が大きく異なることを示唆している。

表 2: 2.2.2のアルゴリズムの計算結果

No.	物質 (空間群)	主問題 (2.12) の最適値 (双対問題の最適値)	最適値 X のランク
1	NaCl ($F m \bar{3} m$)	5.11e-09 (-6.64e-09)	2
2	BaFBr ($P 4/n m m$)	2.08e-08 (-6.03e-08)	1
3	SrFCl ($P 4/n m m$)	2.72e-09 (-7.91e-09)	1
4	TaCl4 ($C 1 2/m 1$)	5.15e-09 (-1.91e-08)	1
5	NiAs ($C m c 2_1$)	9.01e-08 (-4.98e-07)	1
6	Y(PO4) ($I 4_1/a m d$)	5.34e-08 (-2.42e-07)	1
7	CsI3 ($P m c n$)	8.03e-08 (-4.76e-07)	1
8	BaCrO4 ($P n m a$)	1.76e-07 (-1.62e-06)	1
9	Be2 (SiO4) ($R \bar{3}$)	6.95e-07 (-8.04e-06)	1
10	Co2V2O7 ($P 2_1/c$)	1.01e-06 (-1.18e-05)	1

NaClの場合、散乱因子の解が一意に決まっていないが、この場合座標数が2個なので、1変数の2次方程式を解けばいいだけである。ランク2となる場合のより詳細な調査を行うためには、まずそのようなケースを探して見つけてくる必要があるだろう。以上により、単結晶回折像を用いた結晶構造解析の解の一意性について調べるプログラムの初期開発はうまく行ったと言ってよい。将来の研究としては以下のようなことを予定している。

- 結晶構造データベースを用いた、解の一意性の成立しない場合の徹底探索。
- 粉末回折データの場合への手法の拡張。
- (2.12) の最適値が0に収束しランク > 1 の \tilde{X} が得られた場合に対応する手法の開発。

A. 粉末指数付けの手法構築に用いられた定理の紹介

以下では、結晶格子 L は、結晶構造の持つ並進対称性を与える全てのベクトルを含むものとする、すなわち、 \mathbb{R}^3/L の基本領域に対応するのは、結晶学において conventional cellと呼ばれるものではなく primitive cellと呼ばれる方で、 L と底心・体心・面心の決定後に定まるブラベー格子は必ずしも一致しないものとする。 L の逆格子は L^* と記述する。格子ベクトルの集合は、更にいくつかの格子ベクトルを付け加えることで、その格子の基底が得られるとき、primitiveと呼ばれる。

Theorem 3 (Theorem 2 of Oishi-Tomiyasu (2013b)). 消滅測のタイプに関わらず、 $l_1^*, l_2^*, l_1^* + 2l_2^*, 2l_1^* + l_2^*$ のいずれにおいても消滅測が成立していないような L^* の primitive な集合 $\{l_1^*, l_2^*\}$ が無限個存在する。□

Note that the lengths of the lattice vector l_1^* , l_2^* , $l_1^* + 2l_2^*$, $2l_1^* + l_2^*$ satisfy:

$$3|l_1^*|^2 + |l_1^* + 2l_2^*|^2 = 3|l_2^*|^2 + |2l_1^* + l_2^*|^2. \quad (\text{A.1})$$

以下の Theorem 2 の主張は、Theorem 1 を含む:

Theorem 4 (Theorem 3 of Oishi-Tomiyasu (2013b)). 消滅測のタイプに関わらず、全ての整数 m について $ml_1^* + (m-1)l_2^*$ で消滅測が成立していないような、 L^* の primitive な集合 $\{l_1^*, l_2^*\}$ が無限個存在する。また、そのような $\{l_1^*, l_2^*\}$ によって張られる L^* の部分格子も無限個存在する。□

以下は、 $ml_1^* + (m-1)l_2^*$ (m : integer) の形の格子ベクトル長さの間に成立する不等式である:

$$3|ml_1^* + (m-1)l_2^*|^2 + |(m+2)l_1^* + (m+1)l_2^*|^2 = 3|(m+1)l_1^* + ml_2^*|^2 + |(m-1)l_1^* + (m-2)l_2^*|^2 \quad (\text{A.2})$$

Theorem 2 は、各 m に対する (A.2) の式に対応する部分グラフを Figure 7 のようにつなげることで、大きなグラフが観測値から形成されるということを述べている。

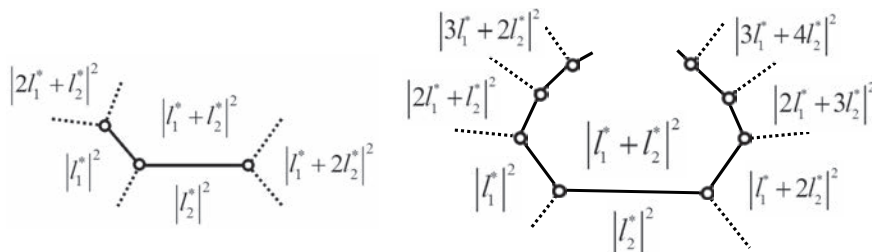


図 12: 観測値から構成されるトポグラフの連結な鎖

Theorem 5 (Theorem 4 of Oishi-Tomiyasu (2013b)). 消滅測のタイプに関わらず、以下がともに成立するような L^* の基底 $\{l_1^*, l_2^*, l_3^*\}$ が無限個存在する (Figure 9 を参照):

- $\pm l_1^* + l_2^* + l_3^*$ においては消滅測が成立しない。
- $i = 2, 3$ のそれぞれについて、全ての $m \in \mathbb{Z}$ において $ml_1^* + (m-1)(-l_1^* + l_i^*)$ で消滅測が成立していないか、または、全ての非負整数 $m \geq 0$ において $ml_i^* + (m-1)(l_1^* - l_i^*)$ で消滅測が成立していない。

参考文献

- [1] E.J. Candès, T. Strohmer, and V. Voroninski. Phaselift: Exact and stable signal recovery from magnitude measurements via convex programming. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 66(8):1241–1274, 2013.
- [2] J. H. Conway. *The sensual (quadratic) form*. Carus Mathematical Monographs 26, Mathematical Association of America, 2006.
- [3] P. M. de Wolff. A simplified criterion for the reliability of a powder pattern indexing. *J. Appl. Cryst.*, 1:108–113, 1968.
- [4] P. Engel. Mathematical problems in modern crystallography. *Comput. Math. Applic.*, 16:425–436, 1988.

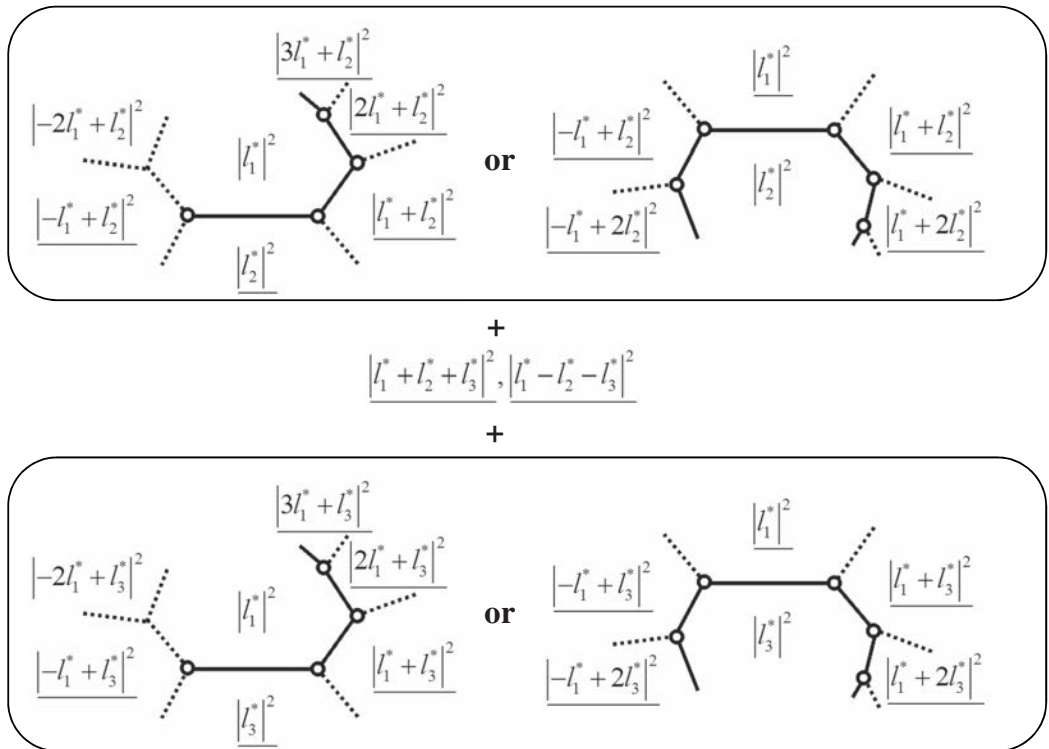


図 13: 3次元格子のパラメータを復元するのに用いる逆格子ベクトル長さ (下線付きの格子ベクトルにおいては、どれも消滅測が成立しないため観測値の集合に含まれることが期待できる)

- [5] A. Esmaeili, Kamiyama T., and R. Oishi-Tomiyasu. New functions and graphical user interface attached to powder indexing software conograph. *submitted*.
- [6] A. D. Mighell and A. Santoro. Geometrical ambiguities in the indexing of powder patterns. *J. Appl. Cryst.*, 8:372–374, 1975.
- [7] R. Oishi-Tomiyasu. Application of convex optimization to identification of atomic species from diffraction patterns. *submitted (EPDIC-15 proceedings)*.
- [8] R. Oishi-Tomiyasu. Rapid bravais-lattice determination algorithm for lattice parameters containing large observation errors. *Acta Cryst. A.*, 68:525–535, 2012.
- [9] R. Oishi-Tomiyasu. Distribution rules of systematic absences on the conway topograph and their application to powder auto-indexing. *Acta Cryst. A.*, 68:603–610, 2013.
- [10] R. Oishi-Tomiyasu. Reversed de Wolff figure of merit and its application to powder indexing solutions. *J. Appl. Cryst.*, 46(5):593–598, 2013.
- [11] R. Oishi-Tomiyasu. A table of geometrical ambiguities in powder indexing obtained by exhaustive search. *Acta Cryst. A.*, 72:73–80, 2016.
- [12] R. J. L. Oliver. Representation by ternary quadratic forms. *Bull. London Math. Soc.*, 46:1237–1247, 2014.
- [13] J. W. Visser. A fully automatic program for finding the unit cell from powder data. *J. Appl. Cryst.*, 2:89–95, 1969.
- [14] E. Wu. A modification of the de wolff figure of merit for reliability of powder pattern indexing. *J. Appl. Cryst.*, 21:530–535, 1988.
- [15] M. Yamashita, K. Fujisawa, K. Nakata, M. Nakata, M. Fukuda, K. Kobayashi, and K. Goto. A high-performance software package for semidefinite programs: Sdpa 7. *Research Report B-460, Dept. of Math. and Comp. Science, Tokyo Institute of Technology*, 2010.

らせん転位のエネルギーの定式化について: S^1 に値を取る離散系の Γ 極限

On formulation of the energy of screw dislocations: Γ -limit of the S^1 -valued discrete system

上坂正晃 (東京大学大学院数理科学研究科)*1
Masaaki Uesaka (The University of Tokyo)

概 要

As the energy model of the screw dislocation, We propose the discrete system in which the points take values in S^1 . This model is naturally imagined from the mathematical structure of the screw dislocation. We explain this relationships between our energy model and the geometric description and introduce the result for Γ -convergence of this discrete system.

1. はじめに

本稿では、らせん転位が持つエネルギーを計算するためのモデルを、 S^1 に値を持つような離散相互作用系として記述するというアプローチについて説明する。

らせん転位のエネルギーを、弾性エネルギーを用いて定式化しようとする、転位線付近でのエネルギー密度は距離に対して対数オーダーで発散することが単純な計算によりすぐわかる。これは、転位線付近での変形がHookeの法則の成り立つような微小変形ではないことに起因している。こうした発散を回避する方法として、転位線の近傍部分をcore部分として一度カットオフしておき、対数オーダーの発散を「繰り込んだ」エネルギーを考えるというアプローチもある([1, 2, 6, 7])。

一方で、らせん転位とはもともと結晶の格子欠陥であるので、格子という離散的な構造からエネルギーを定義し直せないかと考えることは極めて自然である。発表者は最近、松谷茂樹氏(佐世保高専)、濱田裕康氏(佐世保高専)、佐伯修氏(九州大学)、中川淳一氏(新日鐵住金)との共同研究で、らせん転位の構造を数学的に記述する方法論を構築した([9])。発表者はさらにこの共同研究をもととして、離散格子モデルとしてらせん転位のエネルギーを再定義する方法として、 S^1 に値を持つような離散モデルについて本発表において提案した。

以下ではこの離散モデルについて以下の流れで説明をする。まず、[9]で考察されているらせん転位の数学的な記述について概観する。そして次に、発表者のアイデアであるらせん転位の離散格子モデルについて説明する。さらに、この離散格子モデルを連続的、マクロ的な理論に持ち上げるため、 Γ 極限によるスケール極限について考察する。

2. らせん転位の数学的記述

ここでは、[9]にあるらせん転位の数学的記述について概観する。本報告書の佐伯修氏(九州大学)の記事も合わせてご参照頂きたい。

*1 〒153-8914 東京都目黒区駒場3-8-1. e-mail: muesaka@ms.u-tokyo.ac.jp

まず離散格子を考える前に、連続的な描像で転位を考える． n 次元 Euclid 空間を \mathbb{E}^n で書くことにする．らせん転位の中心を $z_0 \in \mathbb{E}$ として， $\gamma \in S^1$ と $a > 0$ を固定しておく．このとき，写像の列

$$\mathbb{Z} \xrightarrow{\varphi_\delta} \mathbb{E} \xrightarrow{\psi_a} S^1$$

を考える．ここで， $\varphi_\delta(n) := an + \delta$ and $\psi_a(y) := \exp(2\pi\sqrt{-1}y/a)$ とする．この写像の列は，自明なファイバー束の間の束写像の列

$$\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}} \xrightarrow{\widehat{\varphi}_\delta} \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}} \xrightarrow{\widehat{\psi}_a} S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}}$$

を導く．ここで， $S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}}$ の切斷 $\sigma_{z_0, \gamma} \in \Gamma(\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}, S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}})$ を，

$$\sigma_{z_0, \gamma}(z) := \left(\gamma \frac{z - z_0}{|z - z_0|}, z \right), \quad (z \in \mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\})$$

と選ぶと， $\mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}, \gamma} := \widehat{\psi}_a^{-1}(\sigma_{z_0, \gamma}(\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}))$ は， $\mathbb{E} \setminus \{z_0\}$ の普遍被覆を与えることがわかる．

次に結晶格子上のらせん転位を考えるために，上の連続描像を「離散化」することを考える．ここでは単純格子上で， x_3 軸方向に転位線がある場合を考える．今，3次元の単純格子 \mathcal{A} と，2次元の単純格子 \mathcal{A}_p を，

$$\mathcal{A} := \{(n_1 a, n_2 a, n_3 a); n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}\}$$

$$\mathcal{A}_p := \{(n_1 a, n_2 a); n_1, n_2 \in \mathbb{Z}\}$$

で定義する． \mathcal{A}_p は， \mathcal{A} を $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 方向に射影してできる格子になっている．格子 \mathcal{A}_p を \mathbb{E}^2 に埋め込む写像 $\iota_\delta: \mathcal{A}_p \rightarrow \mathbb{E}^2$ を， $\iota_\delta(n_1 a, n_2 a) := (n_1 a + \delta_1, n_2 a + \delta_2)$ で定義する．ここで $\delta := \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{pmatrix}$ は， \mathcal{A}_p を \mathbb{E}^2 内に埋め込む際の「中心位置」を示すものである．このとき，次の図式は可換になる：

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{E}_{\mathcal{A}_p} & \xrightarrow{\widehat{\iota}_\delta} & \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}} \\ \downarrow \widehat{\psi}_a & & \downarrow \widehat{\psi}_a \\ \mathcal{A}_p & \xrightarrow{\iota_\delta} & \mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\} \\ \uparrow \widehat{\psi}_a & & \uparrow \widehat{\psi}_a \\ S^1_{\mathcal{A}_p} & \xrightarrow{\widehat{\iota}_\delta} & S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus \{z_0\}} \end{array}$$

ただし， $\widehat{\iota}_\delta$ と $\widehat{\psi}_a$ はそれぞれ， ι_δ と ψ_a から誘導される自明なファイバー束間の写像であり， $z_0 \notin \mathcal{A}_p$ はらせん転位の中心である． $S^1_{\mathcal{A}_p}$ の切斷 $\check{\sigma}_{z_0, \gamma} \in \Gamma(\mathcal{A}_p, S^1_{\mathcal{A}_p})$ を，

$$\check{\sigma}_{z_0, \gamma}(l_1 a, l_2 a) := \left(\gamma \frac{(l_1 a + l_2 a \sqrt{-1}) - z}{|(l_1 a + l_2 a \sqrt{-1}) - z|}, (l_1 a, l_2 a) \right), \quad (l_1 a, l_2 a) \in \mathcal{A}_p$$

と定義すると，

$$\mathcal{D}_{z_0} := \widehat{\iota}_\delta \left(\widehat{\psi}_a^{-1}(\check{\sigma}_{z_0, \gamma}(\mathcal{A}_p)) \right)$$

は，らせん転位を持つような \mathbb{E}^3 内での原子配置の実現となっている．

3. S^1 に値を持つ離散系としての定式化

上の議論において、らせん転位の原子配置が、自明なファイバー束 $S^1_{A_p}$ の切断 $\tilde{\sigma}_{z_0, \gamma} \in \Gamma(A_p, S^1_{A_p})$ の、 $\widehat{\psi}_a$ による引き戻しで決まることに注目する。つまり、らせん転位における原子配置を決めるには、 A_p の各点において S^1 の元を一つずつ指定すれば良いということになる。この S^1 の元というのは、 A_p の各点 $(\ell_1 a, \ell_2 a)$ の上に「載っている」原子の列 (= \mathbb{Z} ファイバー) の「ずれ」を表すものである。従って、らせん転位のエネルギーのモデルを構築する際、 A に関する2点間相互作用を考えるのではなくて、 A_p 上の各点に S^1 の値が与えられているとして、 A_p 上での2点間相互作用を考えようとすることは自然である。

この状況を詳しく説明するため、問題を1次元にして考えよう。 $[0, 1]$ 区間上の等間隔な原子格子を考える。 $N \in \mathbb{N}$ として、 $\varepsilon := 1/N$ と置き、原子格子を $\varepsilon\mathbb{Z} := \{\varepsilon n | n \in \mathbb{Z}\}$ と表現しておく。また、ここでは S^1 を $S^1 = \left\{ \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \middle| \theta \in \mathbb{R} \right\}$ とパラメーターづけし、 S^1 上の普遍被覆写像 $\iota: \mathbb{R} \rightarrow S^1$ を、 $\iota(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$ で定める。

原子配置を与える関数を $u: \varepsilon\mathbb{Z} \rightarrow S^1$ として、 $u_j := u(j\varepsilon) = u(j/N)$ と書く。そして、隣接する格子間のエネルギーを与える写像 $f_N: S^1 \rightarrow \mathbb{R}$ は、以下の性質¹を満たすとする:

- f_N は非負関数で、 $f_N(\iota(0)) = 0$ である。
- f_N は $\iota(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ で最小値を取る。

そして、格子系のエネルギー $E_N(u)$ を次で定義する:

$$E_N(u) = \sum_{j=1}^N f_N(\iota(\theta_j - \theta_{j-1})), \quad (3.1)$$

ここで θ_j は $\iota(\theta_j) = u_j$ を満たすように取る。 $E_N(u)$ は θ_j の取り方には依存しないことは明らかである。

4. 離散系の Γ 極限について

エネルギーが (3.1) で与えられるような離散系において、 $N \rightarrow \infty$ とする連続極限を考える。これはつまり、原子格子レベルのミクロな系のエネルギーを、マクロな系にスケールアップするということであり、らせん転位がマクロな物質の性質に与える影響を考える上で重要である。

この際、エネルギーの「極限」の概念を明確にしなければならないが、これは以下の Γ 極限によって定式化される。

定義 1 X を距離空間とする。 X 上の関数列 $F_j: X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ ($j \in \mathbb{N}$) が、 $F_\infty: X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ に Γ 収束するとは、任意の $x \in X$ について以下が成立することである:

¹後で Γ 極限に関する定理を述べる際に仮定を追加する。

1. (liminf inequality) x に収束する任意の X の元の列 (x_j) に対して,

$$F_\infty(x) \leq \liminf_{j \rightarrow \infty} F_j(x_j)$$

である.

2. (recovery sequence の存在) x に収束する X の元の列 (x_j) で,

$$F_\infty(x) \geq \limsup_{j \rightarrow \infty} F_j(x_j)$$

となるものが存在する.

Γ 収束の一般論とその応用については [3] が詳しい. Γ 収束を考える理由として重要なものは, 「 Γ 収束は最小化点の収束を与える」ということである. 実際次の定理が成り立つ. (証明は [3] を参照のこと.)

定理 1 (F_j) が X 上 equi-mildly coercive² であるとする. 各 $j \in \mathbb{N}$ について, x_j を F_j の最小化点とし, 列 (x_j) は precompact であるとする. このとき, (x_j) の任意の集積点は F_∞ の最小化点である.

こうして, 問題は (3.1) で与えられる離散系の $N \rightarrow \infty$ における Γ 極限を考察する問題となる. 一般に, S^1 値ではなく, \mathbb{R} に値を取るような離散系の Γ 極限については, [4, 5] を皮切りに多くの研究がある. その中でも特に本稿において重要な [4] の結果について説明する.

$u: \varepsilon\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$ とし, $u_j := u(j/N)$ とする. エネルギー $E_N(u)$ を,

$$E_N(u) = \sum_{j=1}^N f_N(u_j - u_{j-1}) =: \sum_{j=1}^N \varepsilon \psi_N \left(\frac{u_j - u_{j-1}}{\varepsilon} \right) \quad (4.1)$$

と定義する. この ψ_N が次のような形をしていると仮定する:

$$\psi_N(z) := \begin{cases} F_N(z) & z \in [T_N^-, T_N^+] \\ NG_N \left(\frac{z - T_N^{\text{sign } z}}{N} \right) & z \notin [T_N^-, T_N^+] \end{cases}$$

ただし, T_N^\pm は $N \rightarrow \infty$ のとき $T_N^\pm \rightarrow \infty$ かつ $T_N^\pm/N \rightarrow 0$ であるとし, さ $T_N^+ > 0$ かつ $T_N^- < 0$ であるとする. また, F_N は凸で, G_N は凹関数であるとする. すなわち, ψ_N は T_N^\pm を変曲点として持つ関数である. このとき, 次が成り立つ. (詳細は [4] を参照.)

定理 2 (Braides & Gelli [4]) F_N, G_N に関するいくつかの仮定のもと, E_N は次で与えられる E に, $L^1(0, 1)$ での in measure 収束の意味で Γ 収束する:

$$E(u) = \begin{cases} \int_0^1 F(u'(x)) dx + \sum_{t \in S(u)} G([u](t)) & u \in SBV(0, 1), \\ +\infty & \text{otherwise,} \end{cases}$$

ここで $S(u)$ は u の jump set を表し, $[u](t)$ は $t \in S(u)$ での jump の大きさを表す. また, $F := \Gamma\text{-lim}_N F_N^{**}$, $G := \Gamma\text{-lim}_N \text{sub}^- G_N$ である.³

²ここで, (F_j) が equi-mildly coercive であるとは, 空でないコンパクト集合 $K \subset X$ で, 任意の $j \in \mathbb{N}$ に対して, $\inf_X f_j = \inf_K f_j$ となるものが存在することを言う.

³ここで, F_N^{**} は F_N の lower semi-continuous envelope であり, $\text{sub}^- G_N$ は G_N の subadditive envelope である.

このように、変曲点を持つようなエネルギー汎関数の場合、 Γ 極限として得られるエネルギー汎関数は、BV関数の空間上の汎関数となることがわかる。

5. S^1 値離散格子系の Γ 極限

ここでは、第3節で定式化された S^1 値離散系の Γ 極限についての結果を示す。(3.1) で定義されるエネルギー汎関数を考える。 $\psi_N: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ を、

$$\psi_N(z) = \begin{cases} Nf_N\left(\iota\left(\frac{z}{N}\right)\right) & z \in [-N/2, N/2], \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

と定義する。このとき、(3.1) は ψ_N に関するエネルギー汎関数として、

$$E_N(u) = \sum_{j=1}^N \varepsilon \psi_N\left(\frac{\theta_j - \theta_{j-1}}{\varepsilon}\right)$$

と書き直せる。ここで θ_j は、 $\iota(\theta_j) = u_j$ かつ $\theta_j - \theta_{j-1} \in [-1/2, 1/2]$ となるように選んでいる。

ψ_N については以下の仮定を置く。

- T_N^\pm は、 $N \rightarrow \infty$ のとき $T_N^\pm \rightarrow \infty$ かつ $T_N^\pm/N \rightarrow 0$ を満たす列とする。また、 $T_N^+ > 0$ かつ $T^- < 0$ であるとする。

•

$$\psi_N(z) := \begin{cases} F_N(z) & z \in [T_N^-, T_N^+], \\ NG_N\left(\frac{z - T_N^{\text{sign } z}}{N}\right) & z \notin [T_N^-, T_N^+]. \end{cases}$$

である。ここで、 F_N は凸、 G_N は凹である。

- ある $p > 1$ で、任意の $z \in \mathbb{R}$ について $F_N(z) \geq |z|^p$ であるものが存在する。
- ある $c > 0$ で、任意の $z \neq 0$ について $G_n(z) \geq c > 0$ であるものが存在する。

また、離散格子上の関数 $u: \varepsilon\mathbb{Z} \rightarrow S^1$ を、次で与えられる $[0, 1]$ 上の区分的定数関数と同一視することにする:

$$u(x) = u_j \text{ if } x \in \left[\frac{j}{N}, \frac{j+1}{N}\right), \quad j = 0, 1, \dots, N-1.$$

以上の仮定のもと、以下を示した。

定理 3 (U.) 以上の仮定に加えて、 $F = \Gamma\text{-}\lim_N F_N^{**}$ と $G = \Gamma\text{-}\lim_N \text{sub}^- G_N$ が存在するならば、 E_N は $L^1(0, 1)$ で次のようなエネルギー汎関数 E_∞ に Γ 収束する: $u \in L^1(0, 1)$ に対して、 $\iota \circ \theta = u$ となるような $\theta \in SBV(0, 1)$ が存在するならば、

$$E_\infty(u) = \int_0^1 F(u'(x)) dx + \inf \left\{ \sum_{t \in S(\theta)} G([\theta](t)) \mid \begin{array}{l} \theta \in SBV(0, 1) \\ \iota \circ \theta = u \end{array} \right\} \quad (5.1)$$

であり、それ以外は $E_\infty(u) = +\infty$ である。

上の定理のポイントは、 E_∞ の表示式 (5.1) の右辺第2項である。ℝ 値の場合とは異なり、 S^1 値の場合は jump part のエネルギーの形が複雑であるが、これは、与えられた u に対応する θ が複数存在することに起因する。実際、 $\theta \in SBV(0, 1)$ を、ほとんど至る所整数値のみを取る関数であるとする、ほとんど至る所で $\iota \circ \theta$ の値は $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ になる。

こうした不定性があるため、(5.1) の右辺第2項では、同じ u を与える関数全体についての下限を取る必要があるのである。

証明は省略するが、 S^1 値関数における有界変動関数に相当する Cartesian current の理論を用いる。これについては [8] を参照していただきたい。

6. 最後に

本報告では、らせん転位のエネルギーの定式化として、 S^1 に値を取るような離散系を用いる方法について紹介した。しかしながら、本報告で示した結果はまだ初歩的な結果にとどまっている。特に本来であれば、らせん転位は第2節で紹介したように、 \mathcal{A}_p という2次元の格子上で考えるべきものであるため、これらの結果の高次元化の課題は急務であると言える。今後こうした高次元化を含めた拡張に取り組んでいく予定である。

参考文献

- [1] Alicandro R., De Luca L., Garroni A., and Ponsiglione M. Metastability and dynamics of discrete topological singularities in two dimensions: A Γ -convergence approach. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, Vol. 214, No. 1, pp. 269–330, 2014.
- [2] Blass T., Fonseca I., Leoni G., and Morandotti M. Dynamics for systems of screw dislocations. *SIAM J. Appl. Math.*, Vol. 75, No. 2, pp. 393–419, 2015.
- [3] Braides A. Γ -convergence for beginners, Vol. 22 of *Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications*. Oxford University Press, Oxford, 2002.
- [4] Braides A. and Gelli M. S. Continuum limits of discrete systems without convexity hypotheses. *Math. Mech. Solids*, Vol. 7, No. 1, pp. 41–66, 2002.
- [5] Braides A. and Gelli M. S. From discrete systems to continuous variational problems: an introduction. In *Topics on concentration phenomena and problems with multiple scales*, Vol. 2 of *Lect. Notes Unione Mat. Ital.*, pp. 3–77. Springer, Berlin, 2006.
- [6] Cermelli P. and Gurtin M. E. The motion of screw dislocations in crystalline materials undergoing antiplane shear: Glide, cross-slip, fine cross-slip. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, Vol. 148, No. 1, pp. 3–52, 1999.
- [7] Cermelli P. and Leoni G. Renormalized energy and forces on dislocations. *SIAM J. Math. Anal.*, Vol. 37, No. 4, pp. 1131–1160, 2005.
- [8] Giaquinta M., Modica G., and Souček J. Variational problems for maps of bounded variation with values in S^1 . *Calc. Var. Partial Differential Equations*, Vol. 1, No. 1, pp. 87–121, 1993.
- [9] Hamada H., Matsutani S., Nakagawa J., Saeki O., and Uesaka M. An algebraic description of screw dislocations in sc and bcc crystal lattices. arXiv:1605.09550, 2016.

格子上の多体電子系の厳密な構成

Rigorous construction of many-electron lattice systems

鹿島洋平 (東京大学大学院数理科学研究科)*1
Yohei Kashima (The University of Tokyo)

概要

本講演では正の温度下で格子上の多体電子系を有限次元グラスマン積分表示を用いて厳密に構成する方法を説明する。その枠組みにおいてシングルスケール解析、マルチスケール解析により得られる結果をそれぞれ説明する。時間の最後にマルチスケール解析（繰り込み群の方法）が機能し、系の自由エネルギー密度の無限体積・絶対零度極限の解析性がしたがう具体例をいくつか紹介する。

In this talk we explain how to construct many-electron lattice systems at positive temperatures rigorously within the framework of finite-dimensional Grassmann integration. We show some mathematical results obtained by the single-scale analysis and the multi-scale analysis. In the end of the talk we present some examples of many-electron models where the multi-scale integration (renormalization group method) works to conclude the analyticity of the infinite-volume, zero-temperature limit of the free energy density of the system.

1. 本報告

本講演では、正の温度下で格子上を移動し、相互作用する電子たちからなる量子多体系をグラスマン積分表示に基づいて解析する方法について平易に解説する。

多体電子系のモデルは数学的にはフェルミオンフォック空間上の自己共役演算子として定義される。 d, L を自然数とし、 Γ を周期境界条件を課した超立方格子とする。 $\Gamma := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ 。 n 個のフェルミ粒子の状態のヒルベルト空間は以下のように定義される。

$$L_{as}^2((\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\})^n) \\ := \{\phi : (\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\})^n \rightarrow \mathbb{C} \mid \phi(X_{\pi(1)}, \dots, X_{\pi(n)}) = \text{sgn}(\pi)\phi(X_1, \dots, X_n), (\pi \in \mathbb{S}_n)\}.$$

ここで \mathbb{S}_n は n 文字の置換である。また $L_{as}^2((\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\})^0) := \mathbb{C}$ と決める。フェルミオンフォック空間 $F_f(L^2(\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\}))$ は n 粒子の状態のヒルベルト空間の直和である。

$$F_f(L^2(\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\})) := \bigoplus_{n=0}^{2L^d} L_{as}^2((\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\})^n).$$

多体電子系のハミルトニアンを構成するのは生成・消滅演算子と呼ばれるフェルミオンフォック空間上の作用素である。 $(\mathbf{x}, \sigma) \in \Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\}$ に対して、線型作用素 $\psi_{\mathbf{x}\sigma} : L_{as}^2((\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\})^{n+1}) \rightarrow L_{as}^2((\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\})^n)$ を以下のように定義する。

$$(\psi_{\mathbf{x}\sigma}\phi)(X_1, \dots, X_n) := \sqrt{n+1}\phi(\mathbf{x}\sigma, X_1, \dots, X_n).$$

*1 〒153-8914 東京都目黒区駒場3-8-1

また $\psi_{x\sigma}|_C := 0$ と決める. 線型性により $\psi_{x\sigma}$ は $F_f(L^2(\Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\}))$ 上の作用素として定義され, これを消滅演算子と呼ぶ. その共役作用素 $\psi_{x\sigma}^*$ を生成演算子と呼ぶ. 本講演では多体電子系の典型的な模型であるハバード模型に焦点をしばって話を進める. ハバード模型の自由な項は以下のように与えられる.

$$H_0 := t \sum_{x \in \Gamma} \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} \sum_{j=1}^d (\psi_{x\sigma}^* \psi_{x+e_j\sigma} + \psi_{x\sigma}^* \psi_{x-e_j\sigma}).$$

ここで t は各電子の最近接格子点間の飛び移りによる系のエネルギーの変化の大きさを決める実数のパラメーターである. また e_j ($j = 1, \dots, d$) は \mathbb{R}^n の標準的な基底である. 相互作用項は以下で与えられる.

$$V := U \sum_{x \in \Gamma} \psi_{x\uparrow}^* \psi_{x\downarrow}^* \psi_{x\downarrow} \psi_{x\uparrow}.$$

ここで U は各格子点上における電子間のクーロン相互作用の大きさを決める実数のパラメーターで結合定数と呼ばれる. ハバード模型 H は $H := H_0 + V$ と定義される.

フェルミオンフォック空間上のトレース演算を通して模型から導かれる熱力学的諸量・相関関数を, 有限次元グラスマン代数上のグラスマンガウシアン積分の連続極限として表現することが本研究における基本補題となる. 熱力学的物理量の一例として自由エネルギー密度と相関関数の一例としてクーパー対相関関数の定義を挙げておく. 自由エネルギー密度は以下のように定義される.

$$F_{\beta,L}(U) := -\frac{1}{\beta L^d} \log(\text{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)}).$$

ここで β は温度の逆数に比例する正の実数, μ は化学ポテンシャル, N は個数演算子と呼ばれる作用素である.

$$N := \sum_{x \in \Gamma} \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} \psi_{x\sigma}^* \psi_{x\sigma}.$$

クーパー対相関関数は以下のように定義される.

$$\frac{\text{Tr}(e^{-\beta(H-\mu N)} \psi_{x\uparrow}^* \psi_{x\downarrow}^* \psi_{y\downarrow} \psi_{y\uparrow})}{\text{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)}}.$$

熱力学的諸量のグラスマン積分表示を導くためにここで一度フェルミオンフォック空間上の作用素による具体的な表示を離れ, 抽象的なグラスマン代数を導入する. 分配関数の摂動展開にあらわれる $[0, \beta)$ 上の多重積分をリーマン和に置き換えることにより分配関数と有限次元グラスマン積分表示との関連付けが可能となる. 人工的なパラメーター $h \in \frac{2}{\beta}\mathbb{N}$ を取り,

$$[0, \beta)_h := \left\{ 0, \frac{1}{h}, \frac{2}{h}, \dots, \beta - \frac{1}{h} \right\}$$

とおく. これは区間 $[0, \beta)$ の離散化である. なお h を $\frac{1}{\beta}\mathbb{N}$ からではなく $\frac{2}{\beta}\mathbb{N}$ から取ることは技術的な理由による. [3, Appendix C] でこの条件の下で $[0, \beta)_h$ 上のフーリエ解析がなされ, その結果を用いるため続く論文 (例えば [4], [5]) でもこの条件をおいた. 興味があるのは $h \rightarrow \infty$ とした極限值であるからこの条件は本質的な制限にはならない. さらに

$$I_0 := \Gamma \times \{\uparrow, \downarrow\} \times [0, \beta)_h, \quad I := I_0 \times \{1, -1\}$$

とおく. I はこれから導入するグラスマン代数の添え字集合である. W を基底 $\{\psi_X\}_{X \in I}$ によって張られる複素線型空間とする. ここで ψ_X はフェルミオン消滅演算子ではなく, あくまで抽象的な元である. $\bigwedge^n W$ を W の n 階反対称テンソル積とし,

$$\bigwedge W := \bigoplus_{n=0}^{\sharp I} \bigwedge^n W$$

とおく. $\bigwedge W$ を $\{\psi_X\}_{X \in I}$ によって生成されるグラスマン代数とよぶ. なおフェルミ量子場の理論に現れるグラスマン代数の基本的な性質を厳密にまとめた文献として [1] を挙げる. ここで $\bigwedge W$ 上の線型汎関数としてグラスマンガウシアン積分を定義しよう. 定義に必要な共分散行列は自由な 2 点相関関数と等しい. $(\mathbf{x}, \sigma, s), (\mathbf{y}, \tau, t) \in I_0$ に対して,

$$C(\mathbf{x}\sigma s, \mathbf{y}\tau t) := \frac{1_{\sigma=\tau}}{L^d} \sum_{\mathbf{k} \in \Gamma^*} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{x}-\mathbf{y})} e^{(s-t)E(\mathbf{k})} \left(\frac{1_{s \geq t}}{1 + e^{\beta E(\mathbf{k})}} - \frac{1_{s < t}}{1 + e^{-\beta E(\mathbf{k})}} \right)$$

とおく. ここで $\Gamma^* := (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}/2\pi\mathbb{Z})^d$ であり, $E(\mathbf{k}) := 2t \sum_{j=1}^d \cos k_j - \mu$ である. Γ^* は運動量変数が属する格子, $E(\mathbf{k})$ は自由な分散関係である. C を共分散行列とするグラスマンガウシアン積分 $\int \cdot d\mu_C(\psi) : \bigwedge W \rightarrow \mathbb{C}$ を以下のように定義する.

$$\int \bar{\psi}_{X_1} \cdots \bar{\psi}_{X_m} \psi_{Y_1} \cdots \psi_{Y_n} d\mu_C(\psi) := \begin{cases} \det(C(X_i, Y_j))_{1 \leq i, j \leq m} & \text{if } m = n, \\ 0 & \text{else.} \end{cases}$$

ただし $\bar{\psi}_X := \psi_{(X,1)}$, $\psi_X := \psi_{(X,-1)}$ ($X \in I_0$) とした. グラスマン代数の反対称性と線型性により $\int \cdot d\mu_C(\psi)$ は $\bigwedge W$ 上の線型汎関数として定義される. W のかわりに直和の空間 $W_1 \oplus W_2$ を考えることで, グラスマンガウシアン積分を $\bigwedge(W_1 \oplus W_2)$ から $\bigwedge W_1$ への線型写像として定義することができる. 実際マルチスケール解析ではグラスマン代数からグラスマン代数への線型写像としてのグラスマンガウシアン積分が重要である. 分配関数の相互作用項に関する摂動級数展開を時間変数に関して離散化し, それをグラスマンガウシアン積分に対応させ, 分配関数への局所一様収束を証明したのが [3] である. 続く論文 (例えば [4], [5]) でも同様のグラスマン積分表示に基づいて解析が進められている. その典型的な主張を以下に述べる. 証明は [3] にある.

[補題] 任意の $r > 0$ に対して,

$$\lim_{\substack{h \rightarrow \infty \\ h \in \frac{2}{\beta} \mathbb{N}}} \sup_{\substack{U \in \mathbb{C} \\ |U| \leq r}} \left| \int e^{-V(\psi)} d\mu_C(\psi) - \frac{\text{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)}}{\text{Tr} e^{-\beta(H_0-\mu N)}} \right| = 0.$$

ここで $V(\psi) := \frac{U}{h} \sum_{\mathbf{x} \in \Gamma, s \in [0, \beta)_h} \bar{\psi}_{\mathbf{x}\uparrow s} \bar{\psi}_{\mathbf{x}\downarrow s} \psi_{\mathbf{x}\downarrow s} \psi_{\mathbf{x}\uparrow s} (\in \bigwedge W)$.

グラスマンガウシアン積分の共分散行列は理論を解析的に正当化できるパラメータ領域を大きく左右する重要な対象であるが, カットオフの挿入などを行わずにそれを直接的に評価してグラスマン積分表示の解析性を証明する方法をシングルスケール解析と呼ぶ. 結合定数が十分に小さいならば以下のようなテイラー展開が可能である.

$$\log \left(\int e^{-V(\psi)} d\mu_C(\psi) \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{d}{dz} \right)^n \log \left(\int e^{-zV(\psi)} d\mu_C(\psi) \right) \Big|_{z=0}.$$

右辺の各次の項を評価することにより右辺の結合定数に関する L, h によらない領域での解析性が証明される. さらに各次の項は $L, h \rightarrow \infty$ として収束することが証明される. それらにより右辺 (左辺の解析接続) の時間連続・無限体積極限の解析性が従う. 一方で左辺は実軸を含んだ細長い領域で解析的であるから, 一致の定理により, 左辺の時間連続・無限体積極限の実解析性が従う. これがシングルスケール解析の内容である. テイラー展開の各次の項を木に関する有限和として表現する公式が 1980 年代から作られている. 木公式の自己完結的な証明を載せている文献として [7] を挙げる. さらに共分散行列の行列式の温度・体積によらない有界性が 2008 年に Pedra と Salmhofer によって与えられ ([6]), シングルスケール解析の明示的な評価が可能となった. グラスマン積分の対数のテイラー級数の各項の組み合わせ論的に最適な上界は [3] で与えられている. [3] で与えられたのは相関関数のグラスマン積分表示に対する評価であるが, 以下の評価も [3] と同様の議論で導かれる.

[命題]

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{\beta L^d n!} \left(\frac{d}{dz} \right)^n \log \left(\int e^{-zV(\psi)} d\mu_C(\psi) \right) \Big|_{z=0} \right| \\ & \leq \frac{4^{n+2}}{(3n+1)(3n+2)} \binom{3n+2}{n} D^{n-1} |U|^n. \end{aligned}$$

ここで $D := \frac{1}{h} \sum_{\mathbf{x} \in \Gamma, s \in [-\beta, \beta]_h} |C(\mathbf{x} \uparrow s, \mathbf{0} \uparrow \mathbf{0})|$, $[-\beta, \beta]_h := \{-\beta, -\beta + \frac{1}{h}, \dots, \beta - \frac{1}{h}\}$.

以下の主張が従う.

[系] 関数 $U \mapsto \lim_{L \rightarrow \infty} F_{\beta, L}(U)$ は区間 $(-c\beta^{-d-1}, c\beta^{-d-1})$ で実解析的である. ここで c は d, t のみに依存する正定数である.

明示的な評価が可能なシングルスケール解析であるが, 共分散行列が内包する特異性を考慮せずに上界を求めることが原因となって, 結合定数に関する解析性は温度に関して冪乗のオーダーで収縮する原点の近傍でのみ保証される. これは低温では厳しい制限である. 近年理論の温度依存性を改良する目的でマルチスケール解析の方法が開発されてきた. 共分散行列の運動量空間における特異点 (自由なフェルミ面と等しい) を取り巻く殻上の台をもつカットオフ関数を挿入してシングルスケール展開を行い, その結果を台のエネルギースケールに関する帰納法によりまとめ, カットオフを入れられない熱力学的諸量の解析性を証明することがマルチスケール解析の内容である. マルチスケール解析は以下の式変形の反復により構成される. $C = C_1 + C_2$ と分解されるとして,

$$\begin{aligned} & \log \left(\int e^{-V(\psi)} d\mu_C(\psi) \right) = \log \left(\int e^{-V(\psi)} d\mu_{C_1+C_2}(\psi) \right) \\ & = \log \left(\int \int e^{-V(\psi+\psi^1)} d\mu_{C_1}(\psi^1) d\mu_{C_2}(\psi) \right) = \log \left(\int e^{V^2(\psi)} d\mu_{C_2}(\psi) \right), \\ & V^2(\psi) := \log \left(\int e^{-V(\psi+\psi^1)} d\mu_{C_1}(\psi^1) \right). \end{aligned}$$

グラスマン代数上の変換として形式的には半群性を示すことからマルチスケール解析を繰り込み群の方法とも呼ぶ. 繰り込み群の方法により格子上の多体電子系の物理量

は対数のオーダーで温度に依存する原点の近傍あるいは温度に依存しない原点の近傍で結合定数に関して解析的であることが示される。時間の都合上本講演では繰り込み群の方法の技術的な詳細には立ち入らないが、各スケールに依存した重み付きのノルム評価が重要となる調和解析的な構成が可能である。繰り込み群の方法により2次元以上の多体電子系で温度に依存しない領域での解析性を示した結果は [2], [4], [5] で報告されている。

本講演ではさらに [2], [4], [5] の繰り込み群の枠組みの中で自由エネルギー密度の無限体積・絶対零度極限

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} F_{\beta, L}(U)$$

の解析性が示される例を平方格子に近い2次元の格子上の模型に限っていくつか紹介する。特にハミルトニアン²の2次の項に属するパラメーター（ホッピングの有無、ブラケットを貫く磁束の符号、各格子点上の化学ポテンシャルの符号）が交互に入れ替わる例を挙げ、これらの場合はいずれも解析性が成り立つことを通して物質が弱い電子間相互作用に有無に依らずに安定して存在するための条件について考える。時間の最後に繰り込み群の方法が機能する具体例の構成について説明する。

謝辞

本研究は科学研究費助成事業（若手研究(B), 課題番号26870110）の助成を受けている。

参考文献

- [1] J. Feldman, H. Knörrer and E. Trubowitz, Fermionic functional integrals and the renormalization group, CRM monograph series No. 16. American Mathematical Society, Providence, R.I., 2002.
- [2] A. Giuliani and V. Mastropietro, The two-dimensional Hubbard model on the honeycomb lattice, *Commun. Math. Phys.* **293** (2010), 301–346.
- [3] Y. Kashima, A rigorous treatment of the perturbation theory for many-electron systems, *Rev. Math. Phys.* **21** (2009), 981–1044.
- [4] Y. Kashima, Renormalization group analysis of multi-band many-electron systems at half-filling, “the special issue for the 20th anniversary”, *J. Math. Sci. Univ. Tokyo.* **23** (2016), 1–288.
- [5] Y. Kashima, The zero-temperature limit of the free energy density in many-electron systems at half-filling, submitted, arXiv:1508.07543.
- [6] W. de Siqueira Pedra and M. Salmhofer, Determinant bounds and the Matsubara UV problem of many-fermion systems, *Commun. Math. Phys.* **282** (2008), 797–818.
- [7] M. Salmhofer and C. Wiecekowsk, Positivity and convergence in fermionic quantum field theory, *J. Stat. Phys.* **99** (2000), 557–586.

自然現象の代数的表現：
平方剰余の相互法則，ガウスの和と光学現象，
らせん転位
Algebraic descriptions of nature
(Gauss sum, quadratic reciprocity and optics, zeta
function and screw dislocations)

松谷茂樹 (佐世保工業高等専門学校)*¹
Shigeki Matsutani (National Institute of Technology, Sasebo College)

概 要

In this talk, I showed the fractional Talbort phenomena as a typical example of algebraic descriptions of nature, in which the Gauss sum and the quadratic reciprocity appear to describe the phenomena. The description is very similar to the situation in which the zeta function appears in the algebraic description of the screw dislocation. I gave comments on the similarity.

1. 本報告

当日報告した内容を次ページ以降に示す：

*¹ 〒 857-1193 長崎県佐世保市沖新町 1 - 1

自然現象の代数的表現： 平方剰余の相互法則，ガウスの和と光学現象， らせん転位

松谷茂樹

佐世保高等工業専門学校 産業数理

2016/09/02

Joint work with

濱田裕康 (佐世保工業高等専門学校),
中川淳一 (新日鐵住金 (株) 先端技術研究所),
佐伯修 (九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所),
上坂正晃 (東京大学数理科学研究科),
大西良博 (名城大学)

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則，

2016/09/02

1 / 54

1

概要

今回の発表の概要

現実の物理現象の，数論などの代数的表現は，ストリング理論などを
持ち出さずとも，オイラー，ガウスの時代から行われてきた。

1. ガウスの和の平方剰余の相互法則の物理学的な証明を光学の現象
で紹介する。(分数タルボット効果)

⇒ なぜか？

ガウス光学 ($SL(2, \mathbb{R})$) とガウスの二次体の理論 ($PSL(2, \mathbb{Z})$ の話) にお
いて，ガウス括弧が背景にあり，ヴェイユ表現などを鑑みれば自然な
こと。

2. らせん転位でのゼータ関数の由来を概観し考察する。

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則，

2016/09/02

2 / 54

2

本日のメニュー

- ① 平方剰余の相互法則と分数タルボット効果
 - ① 平方剰余の相互法則
 - ② 分数タルボット効果
 - ③ 分数タルボット効果：波動描像
 - ④ 分数タルボット効果：粒子描像
 - ⑤ 分数タルボット効果：相補性と平方剰余の相互法則
 - ⑥ その背景：整数論と光学
- ② 結晶のらせん転位と関数
 - ① 結晶のらせん転位 2次元モデル
 - ② 結晶のらせん転位と関数
 - ③ 自発的対称性の破れと結晶
 - ④ 結晶のらせん転位と対称性

平方剰余

平方剰余の相互法則とは —
 p, q を互いに素な正の奇数とする。素数 s に対して、ルジャンドル記号

$$\left(\frac{p}{s}\right) := \begin{cases} +1, & n^2 = p \pmod{s} \text{ となる} \\ & \text{整数 } n \text{ が存在するとき,} \\ -1, & \text{それ以外} \end{cases} \quad (1)$$

とし、素数 s_j に対する合成数 $q = s_1 \cdots s_n$ に対しヤコビ記号を $\left(\frac{p}{q}\right) := \left(\frac{p}{s_1}\right) \left(\frac{p}{s_2}\right) \cdots \left(\frac{p}{s_n}\right)$ としたときに、平方剰余の相互法則とは

$$\left(\frac{p}{q}\right) \left(\frac{q}{p}\right) = (-1)^{\frac{p-1}{2} \frac{q-1}{2}} \quad (2)$$

となるものである、

ガウスの和

ガウスの和

q が奇数の場合、ガウスの和は、

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{q-1} e^{\frac{2\pi\sqrt{-1}}{q}n^2} &= \sum_{\ell=0}^{q-1} \left(1 + \binom{\ell}{q}\right) e^{\frac{2\pi\sqrt{-1}}{q}\ell} \\ &= \sum_{\ell=0}^{q-1} \binom{\ell}{q} e^{\frac{2\pi\sqrt{-1}}{q}\ell} \\ &= \begin{cases} \sqrt{q} & (q \equiv 1 \pmod{4}), \\ \sqrt{-q} & (q \equiv 3 \pmod{4}). \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

と表される

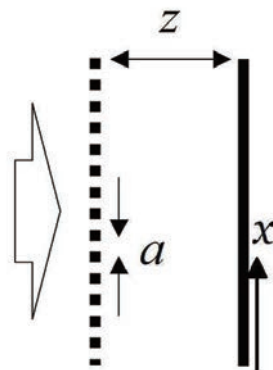
分数タルボット効果

分数タルボット効果 (Winthrop-Worthington 1965, Talbot 1836)

左から平行光がスリットに入射、スクリーンに映し出す光学現象

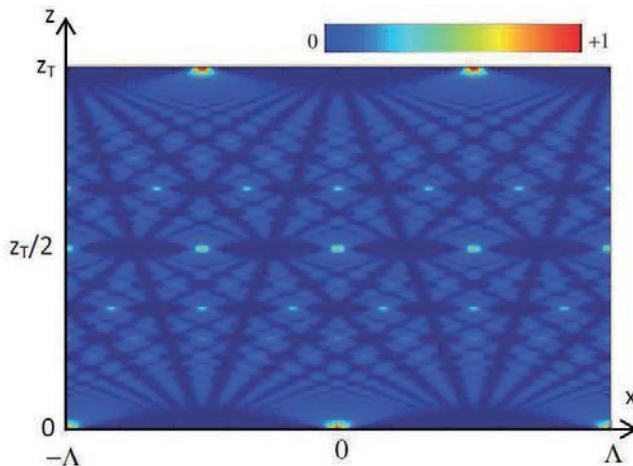
- ① a : スリット間隔,
- ② λ : 光の波長
- ③ z : スクリーンとスリットの間
の距離
- ④ $\xi := \frac{x}{a}$
- ⑤ $z_T := \frac{a^2}{\lambda}$: タルボット距離
- ⑥ $\zeta := \frac{z}{z_T} = \frac{z\lambda}{a^2}$

ζ が有理数の場合： $\zeta = p/q$ のとき
(p, q は互いに素な正の整数) 分数タルボット効果と呼ぶ。



分数タルボット効果

分数タルボット効果



Phases of Talbot patterns in angular selfimaging
Hugues Guillet de Chatellus, Eric Lacot, Olivier Hugon, Olivier Jacquin, Naïma Khebbache, and José Azaña (2015)

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則

2016/09/02

7 / 54

7

分数タルボット効果：波動描像

分数タルボット効果のヘルムホルツ方程式：境界条件

δ -楕型スリットが $\zeta = 0$ に存在 \Rightarrow 境界条件はポアソン総和則により

$$\psi_{comb}(\xi, 0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i \xi n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(\xi - m). \quad (4)$$

\Rightarrow ヘルムホルツ方程式 $\left(\xi = \frac{x}{a}, \zeta = \frac{z\lambda}{a^2}\right)$ を以下の展開で解く

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\right) \psi_{comb} = 0, \quad (5)$$

$$\psi_{comb}(\xi, \zeta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \eta(\zeta) \exp(2\pi i \xi n), \quad (\eta(0) = 1) \quad (6)$$

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則

2016/09/02

8 / 54

8

分数タルボット効果：波動描像

分数タルボット効果の分布関数（波動描像）Berry-Klein 1996

ヘルムホルツ方程式 $\left(\xi = \frac{x}{a}, \zeta = \frac{z\lambda}{a^2}\right)$ を以下の展開で解く

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\right) \psi_{comb} = 0. \quad (7)$$

$$\psi_{comb}(\xi, \zeta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \eta(\zeta) \exp(2\pi i \xi n), \quad (\eta(0) = 1), \quad (8)$$

ヘルムホルツ方程式の解は以下となる：

$$\psi_{comb}(\xi, \zeta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i \xi n) \exp\left(2\pi i \zeta \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{n\lambda}{a}\right)^2\right]^{1/2}\right).$$

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則，

2016/09/02

9 / 54

分数タルボット効果：波動描像

分数タルボット効果の分布関数（波動描像）

ヘルムホルツ方程式の解

$$\psi_{comb}(\xi, \zeta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i \xi n) \exp\left(2\pi i \zeta \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{n\lambda}{a}\right)^2\right]^{1/2}\right).$$

に近軸近似を適用：

$$\left[1 - \left(\frac{n\lambda}{a}\right)^2\right]^{1/2} \approx \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{n\lambda}{a}\right)^2\right]$$

$$\Rightarrow \psi_{comb}(\xi, \zeta) \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i \xi n) \exp\left(2\pi i \zeta \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{n\lambda}{a}\right)^2\right]\right).$$

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則，

2016/09/02

10 / 54

分数タルボット効果：波動描像

分数タルボット効果の分布関数（波動描像）

$$\psi_{comb}(\xi, \zeta) = \sqrt{q} e^{ikz} \sum_{n=-\infty}^{\infty} A(n; q, p) \delta\left(\xi - \frac{1}{2} e_{qp} - \frac{n}{q}\right), \quad (10)$$

但し, $\zeta = p/q, k = 2\pi/\lambda,$

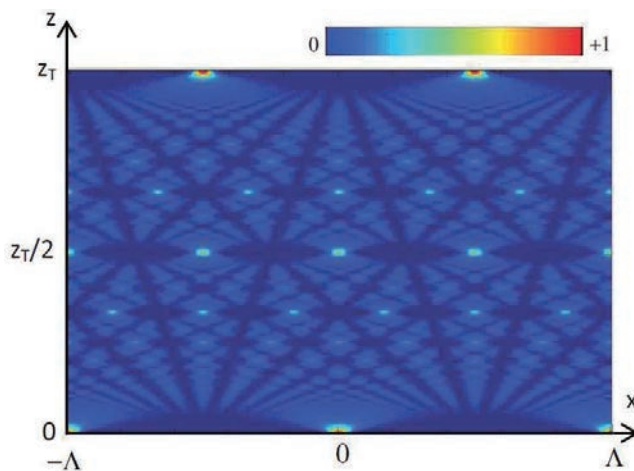
$$e_{qp} := \begin{cases} 1, & \text{if } qp \text{ odd,} \\ 0, & \text{if } qp \text{ even,} \end{cases} \quad (11)$$

$$A(n; q, p) = \frac{1}{\sqrt{q}} \sum_{s=0}^{q-1} \exp\left(i\pi \left[(2n + qe_{qp})s - ps^2 \right] / q\right). \quad (12)$$

Navigation icons: back, forward, search, etc.

分数タルボット効果

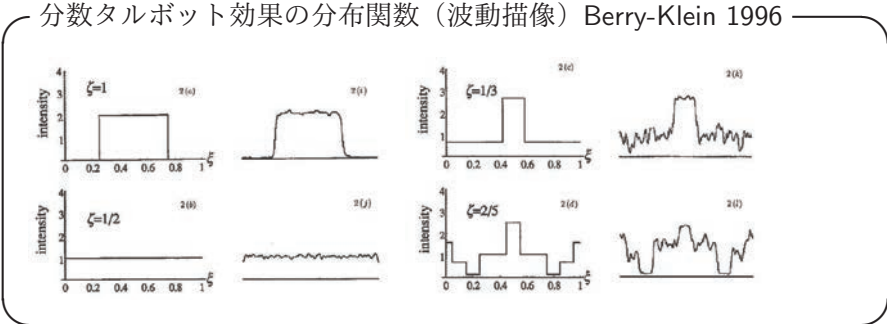
分数タルボット効果



Phases of Talbot patterns in angular selfimaging
Hugues Guillet de Chatellus, Eric Lacot, Olivier Hugon, Olivier Jacquin, Naïma Khebbache, and José Azaña (2015)

Navigation icons: back, forward, search, etc.

分数タルボット効果：波動描像



分数タルボット効果：波動描像

分数タルボット効果の分布関数（波動描像）(O-M 2003)

$$A(n; q, p) = \begin{cases} \binom{p}{q} \exp \left(i\pi \left[\frac{1}{4}(q-1) + \frac{p}{q} \left(\left[\frac{1}{p} \right]_q \right)^2 n^2 \right] \right), & p \text{ even, } q \text{ odd,} \\ \binom{q}{p} \exp \left(-i\pi \left[\frac{1}{4}p - \frac{p}{q} \left(\left[\frac{1}{p} \right]_q \right)^2 n^2 \right] \right), & p \text{ odd, } q \text{ even,} \\ \binom{p}{q} \exp \left(i\pi \left[\frac{1}{4}(q-1) + \frac{2p}{q} \left[\frac{1}{2} \right]_q \left(\left[\frac{1}{2p} \right]_q \right)^2 (2n+q)^2 \right] \right), & p \text{ odd, } q \text{ odd.} \end{cases} \quad (13)$$

分数タルボット効果：波動描像

分数タルボット効果の分布関数（波動描像） $SL(2, \mathbb{Z})$ の元

$\begin{bmatrix} 1 \\ p \end{bmatrix}_q$ は次を満たす正の整数：

$$0 < \begin{bmatrix} 1 \\ p \end{bmatrix}_q < q, \quad p \begin{bmatrix} 1 \\ p \end{bmatrix}_q \equiv 1 \pmod{q}, \quad (14)$$

このとき

$$p \begin{bmatrix} 1 \\ p \end{bmatrix}_q + q \begin{bmatrix} 1 \\ q \end{bmatrix}_p \equiv 1 \pmod{qp}$$

分数タルボット効果：粒子描像

分数タルボット効果の方程式：粒子描像 (Winthrop-Worthington)

δ 櫛型スリットに対する Fresnel 積分による複素分布関数 ψ_{comb} は (ξ, ζ) 点で,

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{comb}(\xi, \zeta) &= \int \frac{a d\xi'}{\sqrt{(\xi - \xi')^2 a^2 + z^2}} \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \sqrt{(\xi - \xi')^2 a^2 + z^2}\right) \\ &\quad \psi_{comb}(\xi', 0) (\cos \theta + 1), \end{aligned}$$

ここで $\cos \theta = z / \sqrt{(\xi - \xi')^2 a^2 + z^2}$. 以下で $\mathcal{O}(\lambda / \sqrt{(\xi - \xi')^2 a^2 + z^2})$ とすることで, Helmholtz 微分作用素の核関数としてふるまう. (Winthrop-Worthington 1965)

分数タルボット効果の方程式：波動描像と粒子描像

- ① 波動描像 \Leftrightarrow 微分方程式 (ヘルムホルツ方程式)
- ② 粒子描像 \Leftrightarrow 積分方程式 (経路積分, フレネル積分)

分数タルボット効果：粒子描像

分数タルボット効果の方程式：粒子描像

$$\frac{1}{\lambda} \sqrt{(\xi + n)^2 a^2 + z^2}, \quad (15)$$

は近軸光学では,

$$\frac{1}{\lambda} z + \frac{1}{2} n^2 \frac{1}{\zeta} + \frac{\xi}{\zeta} n + \frac{1}{2} \frac{\xi^2}{\zeta}. \quad (16)$$

分数タルボット効果の分布関数：粒子描像 (Winthrop-Worthington)

$$\tilde{\psi}_{comb}(\xi, \zeta) \approx i^{-1/2} e^{ikz} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi iz/\lambda) \exp\left(\pi i \left(\frac{2\xi n}{\zeta} + \frac{n^2}{\zeta} + \frac{\xi^2}{\zeta}\right)\right), \quad (17)$$

分数タルボット効果：粒子描像

分数タルボット効果の分布関数：粒子描像 (Onishi-M 2003)

粒子描像における係数の決定：

$$\tilde{\psi}_{comb} = i^{-1/2} \sqrt{p} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{A}(n; q, p) \delta\left(\xi - \frac{1}{2} e_{qp} - \frac{n}{q}\right), \quad (18)$$

但し,

$$\begin{aligned} & \tilde{A}(n; q, p) \\ & := \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{s=0}^{q-1} \exp\left(i\pi \left[(2n + qe_{qp})s + qs^2\right] / p + (2n + qe_{qp})^2 / 4pq\right). \end{aligned} \quad (19)$$

分数タルボット効果：粒子描像

分数タルボット効果の分布関数：粒子描像

$$\tilde{A}(n; q, p) = \begin{cases} \binom{p}{q} \exp \left(i\pi \left[\frac{1}{4}q - \left(\frac{q}{p} \left(\left[\frac{1}{q} \right]_p \right)^2 - \frac{1}{qp} \right) n^2 \right] \right), & p \text{ even, } q \text{ odd,} \\ \binom{q}{p} \exp \left(-i\pi \left[\frac{1}{4}(p-1) + \left(\frac{q}{p} \left(\left[\frac{1}{q} \right]_p \right)^2 - \frac{1}{qp} \right) n^2 \right] \right), & p \text{ odd, } q \text{ even,} \\ \binom{q}{p} \exp \left(-i\pi \left[\frac{1}{4}(p-1) + \left(\frac{2q}{p} \left[\frac{1}{2} \right]_p \left[\frac{1}{2q} \right]_p - \frac{1}{4qp} \right) (2n+q)^2 \right] \right), & p \text{ odd, } q \text{ odd.} \end{cases}$$

分数タルボット効果：相補性と平方剰余の相互法則

分数タルボット効果の分布関数：粒子描像と波動描像 (O-M 2003)

p even, q odd のとき $\sqrt{i}\tilde{A}(n; q, p)$ と $A(n; q, p)$ は完全に一致している：

$$A(n; q, p) = \binom{p}{q} \exp \left(i\pi \left[\frac{1}{4}(q-1) + \frac{p}{q} \left(\left[\frac{1}{p} \right]_q \right)^2 n^2 \right] \right),$$

$$\tilde{A}(n; q, p) = \binom{p}{q} \exp \left(i\pi \left[\frac{1}{4}q - \left(\frac{q}{p} \left(\left[\frac{1}{q} \right]_p \right)^2 - \frac{1}{qp} \right) n^2 \right] \right),$$

分数タルボット効果： 相補性と平方剰余の相互法則

分数タルボット効果の分布関数：粒子描像と波動描像 (O-M 2003)
 p odd, q even のとき $\sqrt{i}\tilde{A}(n; q, p)$ と $A(n; q, p)$ は完全に一致している：

$$A(n; q, p) = \binom{q}{p} \exp \left(-i\pi \left[\frac{1}{4}p - \frac{p}{q} \left(\left[\frac{1}{p} \right]_q \right)^2 n^2 \right] \right),$$

$$\tilde{A}(n; q, p) = \binom{q}{p} \exp \left(-i\pi \left[\frac{1}{4}(p-1) + \left(\frac{q}{p} \left(\left[\frac{1}{q} \right]_p \right)^2 - \frac{1}{qp} \right) n^2 \right] \right),$$

分数タルボット効果： 相補性と平方剰余の相互法則

分数タルボット効果の分布関数：粒子描像と波動描像 (O-M 2003)
 p odd, q odd: 雑に言って $\sqrt{i}\tilde{A}(n; q, p)$ と $A(n; q, p)$ では p と q とが逆になっている

$$A(n; q, p) = \binom{p}{q} \exp \left(i\pi \left[\frac{1}{4}(q-1) + \frac{2p}{q} \left[\frac{1}{2} \right]_q \left(\left[\frac{1}{2p} \right]_q \right)^2 (2n+q)^2 \right] \right),$$

$$\tilde{A}(n; q, p) = \binom{q}{p} \exp \left(-i\pi \left[\frac{1}{4}(p-1) + \left(\frac{2q}{p} \left[\frac{1}{2} \right]_p \left[\frac{1}{2q} \right]_p - \frac{1}{4qp} \right) (2n+q)^2 \right] \right),$$

分数タルボット効果： 相補性と平方剰余の相互法則

分数タルボット効果の分布関数：粒子描像と波動描像 (O-M 2003)

これらは同じ物理現象を表現しているはずなので、一致すべきである。
(相補性の要請) i.e., $\sqrt{i} \tilde{A}(n; q, p) = A(n; q, p)$
 p, q が奇数のとき、この要請から次が導かれる

相補性からの要請

$$\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = (-1)^{\frac{p-1}{2} \frac{q-1}{2}} \quad (20)$$

⇒ 平方剰余とその相互法則が得られる。

相補性からの要請

タルボット効果では「波動描像と粒子描像の一致（相補性）が平方剰余の相互法則と一致した」

整数論と自然

整数論と自然

なぜか？

整数論と自然

整数論と自然

なぜか？

答え

ポアソン総和則

$$\sum_k \hat{f}(k) = \sum_n f(n)$$

整数論と自然

整数論と自然

なぜ整数論と光学現象が結びついたか？

その背景：整数論と光学

ガウス括弧

$A = \alpha, B = \beta A + 1, C = \gamma B + A$, に対して以下をガウス括弧と呼ぶ
 $[\alpha] := A, [\alpha, \beta] := B, [\alpha, \beta, \gamma] := C$
 $[\alpha_1, \dots, \alpha_n] = [\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}] \alpha_n + [\alpha_1, \dots, \alpha_{n-2}]$

ガウス括弧：ガウス「数論」(1800) 27章の一部

Si quantitates A, B, C, D, E etc. ita ab his $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ etc. pendent, ut habeatur

$A = \alpha, B = \beta A + 1, C = \gamma B + A, D = \delta C + B, E = \varepsilon D + C$ etc.

brevitatis gratia ita eas designamus,

$A = [\alpha], B = [\alpha, \beta], C = [\alpha, \beta, \gamma], D = [\alpha, \beta, \gamma, \delta]$ etc. *)

*) Multo generalius haec relatio considerari potest, quod negotium alia forsitan occasione suscipimus. Hic duas tantum propositiones adicimus, quae usum suum in praesenti investigatione habent; scilicet,

1°. $[\alpha, \beta, \gamma, \dots, \lambda, \mu], [\beta, \gamma, \dots, \lambda] - [\alpha, \beta, \gamma, \dots, \lambda] [\beta, \gamma, \dots, \lambda, \mu] = \pm 1,$
 ubi signum superius accipiendum quando numerorum $\alpha, \beta, \gamma, \dots, \lambda, \mu$ multitudo par, inferius quando impar.

2°. Numerorum α, β, γ etc. ordo inverti potest, $[\alpha, \beta, \gamma, \dots, \lambda, \mu] = [\mu, \lambda, \dots, \gamma, \beta, \alpha].$

Demonstrationes quae non sunt difficiles hic supprimimus.

その背景：整数論と光学

実2次体，虚2次体とガウス括弧

ガウス括弧により連分数

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{\alpha_1 + \frac{1}{\alpha_2 + \dots + \frac{1}{\alpha_n}}}$$

は $p = [\alpha_n, \dots, \alpha_2], q = [\alpha_n, \dots, \alpha_1]$ と表現できる。

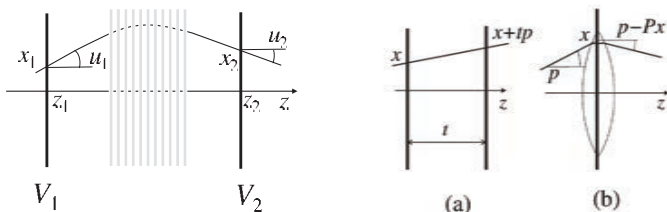
実2次体，虚2次体とガウス括弧

ガウスはこのガウス括弧を利用し2次体の研究をおこなった：
 ($\mathbb{Z}[\sqrt{p}]$ など)

e.g., $\omega = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \omega = \frac{1}{1 + \omega}$ より $\omega = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}$

その背景：整数論と光学

近軸光学系（ガウス）シンプレクティック構造



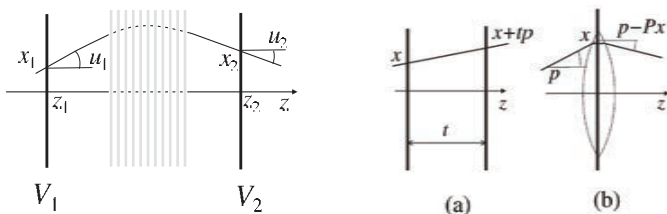
$p = nu$, t をレンズ間の距離, P をレンズのパワーに対応!

$$\begin{pmatrix} x' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + tp \\ p \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -P & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ p - Px \end{pmatrix}$$

その背景：整数論と光学

近軸光学系（ガウス）シンプレクティック構造



$SL(2, \mathbb{R}) = \left\langle T_t := \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, Q_P := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -P & 1 \end{pmatrix} \right\rangle_{t, P \in \mathbb{R}}$ により近軸光学系は定まる.

但し, $p = nu$, t がレンズ間の距離, P がレンズのパワーに対応

その背景：整数論と光学

近軸光学系（ガウス）シンプレクティック構造

光軸からの距離 b と角度 b_0 として

$$\begin{pmatrix} b^* \\ b^* \end{pmatrix} = O \begin{pmatrix} b_0 \\ b_0 \end{pmatrix}, \quad O := \begin{pmatrix} g & h \\ k & l \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2, \mathbb{R})$$

その背景：整数論と光学：シンプレクティック構造

近軸光学系（ガウス）はガウス括弧により定まる

$\begin{pmatrix} b^* \\ b^* \end{pmatrix} = O \begin{pmatrix} b_0 \\ b_0 \end{pmatrix}$, $O := \begin{pmatrix} g & h \\ k & l \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2, \mathbb{R})$ はガウス括弧により定まる：

Dioptrische Untersuchungen ガウスの光学論文 1840

$$\left. \begin{aligned} b^* &= g b^0 + h \bar{b}^0 \\ \bar{b}^* &= k b^0 + l \bar{b}^0 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4)$$

setzt, in der von EULER (*Comment. Nov. Acad. Petropol. T. IX*) eingeführten Bezeichnung sein wird

$$\left. \begin{aligned} g &= (u^0, t', u', t'', u'' \dots t^*) \\ h &= (t', u', t'', u'' \dots t^*) \\ k &= (u^0, t', u', t'', u'' \dots u^*) \\ l &= (t', u', t'', u'' \dots u^*) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5)$$

その背景：整数論と光学

整数論と自然：ガウス

① $\mathrm{PSL}(2, \mathbb{Z})$ $z = \frac{q}{p} \Leftrightarrow$ 整数論

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q + tp \\ p \end{pmatrix} \Leftrightarrow z \mapsto z + t,$$

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p \\ q \end{pmatrix} \Leftrightarrow z \mapsto -1/z$$

$$\mathrm{SL}(2, \mathbb{Z}) = \left\langle T_t := \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, S := \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle_{t \in \mathbb{Z}}$$

② 連分数による2次体(2次形式の整数論)を解明

\Leftrightarrow ガウスの和の相互法則の解明

③ $\mathrm{SL}(2, \mathbb{R})$ (シンプレクティック構造)

\Leftrightarrow 近軸光学系(2次形式の理論)

これらはガウスの括弧で記述される。

その背景：整数論と光学

整数論と自然：Weil 表現 Weil(1964)

- ① 量子力学を代数的構造に解明した。(波動力学の構造の解明：ハイゼンベルグ群)
- ② シンプレクティック群の二重被覆としてメタプレクティック群を提示した。(ガウスの和の符号問題と対応)
- ③ 群の無限表現を与えた。
- ④ ガウスの和の符号問題をそれらを通して再定式化した。

整数論と自然：Weil 表現 (M-2008)

タルボット効果は光学での Weil 表現の一つの実現となっている。

$$\left[\frac{d}{dx}, x \right] = 1 \Leftrightarrow \text{相補性}$$

$$pq' - p'q = 1 \Leftrightarrow \text{相互法則}$$

結晶のらせん転位とく関数

[I] 整数論と自然 結晶のらせん転位とく関数

結晶のらせん転位とく関数

整数論と自然

数学者，物理学者が考えるより，自然現象は整数論をも含む純粋数学と相性がよい。

- ① らせん転位:く関数や初等代数，経路空間，カルテシアン図形
- ② DNA の形状：超楕円関数，ループ空間のモデュライ，結び目
- ③ シャボン玉：Dirac 作用素，く正規化，超楕円関数
- ④ 3 相界面：コーン型の特異点の理論
- ⑤ 微粒子伝導材料： Γ 収束，点過程，擬等角写像
- ⑥ カーボンファイバーの電気伝導：ランダム行列理論
- ⑦ 光学の焦線問題（プールの水面の反射）：
点理論，カタストロフィー理論 特異
- ⑧ 発色現象（化粧品）：量子ウォーク

⋮
⋮
⋮

結晶のらせん転位とく関数

整数論と自然

数学者，物理学者が考えるより，自然現象は整数論をも含む純粋数学と相性がよい。
プロトタイプは

鶴亀算

⇔

連立一次方程式
⇒線形代数学

放物運動
単なる2次多項式

⇔

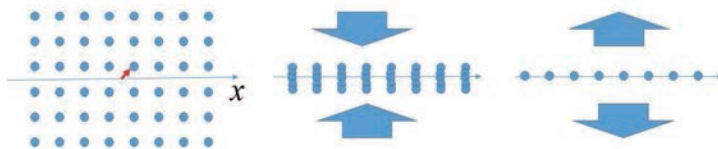
ニュートン方程式
⇒微分方程式論

常に牛刀割鶏!! しかし，本質を見ている

結晶のらせん転位 1次元モデル

格子系でのく関数

なぜく関数が現れたのか？
問題を簡単にするために次元を落として考察する。



$$R := \mathbb{C}[\alpha, \beta, \alpha^{-1}, \beta^{-1}] \longrightarrow R/(\beta)$$

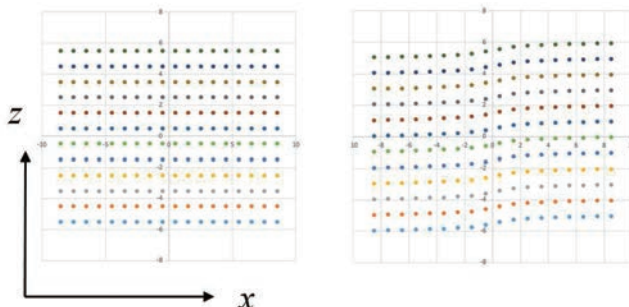
結晶のらせん転位 2次元モデル

格子系でのζ関数

トイ模型：(x 水平方向, n は垂直方向の座標)

$$z_n(x) := a \frac{x - \delta}{|x - \delta|} \log |x - \delta| + n, \quad n \in \mathbb{Z}$$

2次元の格子系 (2次元の結晶のらせん転位)



松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則

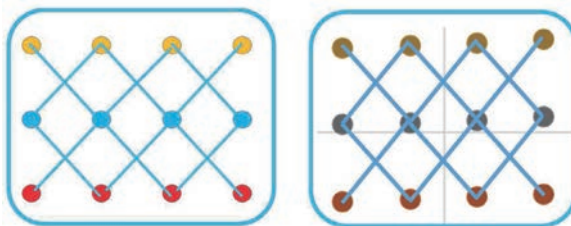
2016/09/02

39 / 54

結晶のらせん転位とζ関数

格子系でのζ関数

自然長からのズレが格子の欠陥のエネルギーとなる。



◀ ▶ ⏪ ⏩ 🔍 🔄

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則

2016/09/02

40 / 54

結晶のらせん転位とく関数

格子エネルギー：自然長の伸び縮み

自然長の伸び $\ell \gg 1$, $\delta \in (0, 1)$ のとき

$$\sqrt{a^2 + \left(a + \alpha a \frac{\ell - \delta}{|\ell - \delta|} \log |\ell - \delta| - \alpha a \frac{\ell + 1 - \delta}{|\ell + 1 - \delta|} \log |\ell + 1 - \delta| \right)^2}$$

$$\sim a \sqrt{2 + 2\alpha a \log \frac{|\ell + 1 - \delta|}{|\ell - \delta|}} \sim a \sqrt{2 + 2\alpha a \frac{1}{\ell - \delta}} \sim \sqrt{2}a + \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha a \frac{1}{\ell - \delta}$$

\Rightarrow 自然長 $\sqrt{2}a$ からのずれ： $\delta_\ell = a \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\alpha}{\ell - \delta}$

結晶のらせん転位とく関数

格子エネルギー：自然長の伸び縮み

自然長 $\sqrt{2}a$ からのずれ： $\delta_\ell = a \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\alpha}{\ell - \delta}$ が与えられた際：

\Rightarrow 弾性エネルギーは $A_D := \{\ell \in \mathbb{Z} \mid |\ell| > D\}$

$$\Delta E \approx \frac{1}{2} \sum_{\ell \in A_D \subset \mathbb{Z}} \kappa' \delta_\ell^2 = \frac{1}{2} \sum_{\ell \in A_D \subset \mathbb{Z}} \kappa \frac{1}{(\ell - \delta)^2} = \frac{1}{2} \kappa \zeta_{\delta, D}(2)$$

但し

$$\zeta_{\delta, D}(s) := \sum_{\ell \in A_D \subset \mathbb{Z}} \frac{1}{(\ell - \delta)^s}$$

このようにく関数が登場するのは2次元の場合と同じ，

結晶のらせん転位と関数

格子エネルギーの問題

このとき、 $\zeta_{\delta,0}(s) = B_s \zeta_{\delta,0}(1-s)$ のような関係式が存在して、物理的意味を持つか？

自発的対称性の破れと結晶

格子と自発的対称性の破れ

結晶をユークリッド空間内で定めるとは ($\delta \in \mathbb{E}$)

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & \mathbb{E} & \xrightarrow{\psi} & S^1 & \\
 & & \nearrow \varphi_\delta & \uparrow \tilde{\iota}_\delta & & \uparrow \iota_\delta & \\
 0 & \longrightarrow & \mathbb{Z} & \xrightarrow{\iota} & \mathbb{R} & \xrightarrow{\exp 2\pi\sqrt{-1}} & U(1) \longrightarrow 1,
 \end{array}$$

$\tilde{\iota}_\delta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{E} \quad (x \mapsto d \cdot x + \delta, x \in \mathbb{R},)$
 $\varphi_\delta : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{E} \quad (n \mapsto d \cdot n + \delta)$
 $\iota_\delta : U(1) \rightarrow S^1 \quad (\exp(\sqrt{-1}\theta) \mapsto \exp \sqrt{-1}(\theta + 2\pi\delta/d), \theta \in \mathbb{R}),$

となることである。 \mathbb{E} の元 δ を modulo a で定めることである。
 結晶とは並進対称性の群の自発的対称性の破れである (高橋康)

自発的対称性の破れと結晶

格子と南部・ゴールドストーンモード

高橋康：「結晶に関わる自発的対称性の破れのゴールドストーンモードは音響フォノンである」

格子と南部・ゴールドストーンモード

南部・ゴールドストーンモードとは

$$\mathcal{M} := \{\varphi_\delta \mid \delta \in \mathbb{E} \bmod a\}$$

を考え、この接空間 $T_\delta \mathcal{M}$ のことである。

ψ を局所定数層 $S^1_{\mathbb{E}}$ の大局切断 $\Gamma(\mathbb{E}, S^1_{\mathbb{E}})$ の元とし、 \mathbb{Z} 上の逆層 $\varphi_\delta^{-1} S^1_{\mathbb{E}}$ (\mathbb{Z} 上の S^1 束の層) に群 $G = \prod_{\mathbb{Z}} U(1)$ が作用しているとみる。この作用のリー環の元と接空間 $T_\delta \mathcal{M}$ を同一視する

$$G^{-1}dG|_{G=e} = \bigoplus_{\ell \in \mathbb{Z}} \mathbb{R} \approx T_\delta \mathcal{M}$$

自発的対称性の破れと結晶

ζ 関数、音響フォノンと調和写像

このとき、 \mathbb{Z} 上の切断 $\varepsilon = (v_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ に対する調和写像 ($v_\ell \ll a$)

$$E = \frac{1}{2} k \int_{\mathbb{Z}} G_\varepsilon^{-1} dG_\varepsilon * (G_\varepsilon^{-1} dG_\varepsilon) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2} k v_\ell^2$$

となる。(2次形式が現れた)

φ_δ の像の G_ε による作用を $(x_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ とすると、

$$v_\ell = x_\ell - x_{\ell-1} - a$$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} k(x_\ell - x_{\ell-1} - a)^2 = \frac{1}{2} \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} k(x_\ell - x_{\ell-1})^2 + \text{定数}$$

となる弾性 (バネの) エネルギーが存在する。

このバネの力学系を量子化したものが音響フォノンである。

自発的対称性の破れと結晶

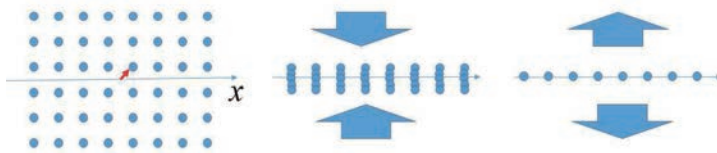
格子系での ζ 関数

なぜ、 ζ 関数が現れたのか？

上述の2次元版 \mathbb{Z}^2 版の（正確にはそのファイバー構造を保存する） $T_\delta \mathcal{M}$ から定まる調和写像の安定値からのズレとして計算された。射影した後，ユークリッド空間での被覆空間の実現と考えていると，結晶のらせん転位のパラメータ空間も

$$T_\delta \mathcal{M} \approx \bigoplus_{l \in \mathbb{Z}^2} \mathbb{R}$$

とベクトル空間として等価，



松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現：平方剰余の相互法則，

2016/09/02

47 / 54

自発的対称性の破れと結晶

ζ 関数の関数等式 $\zeta_{\delta,A}(s) = B_s \zeta_{\delta,A}(1-s)$ に物理的対応はあるか？

- ① 音響フォノンを量子化すると，量子統計力学の枠組みでその分配関数（比熱など）を計算すると線形近似でリーマン ζ 関数が現れる。
- ② 真空のエネルギー（音響フォノンのカシミール効果）が ζ で書かれる(?)。

自発的対称性の破れと結晶

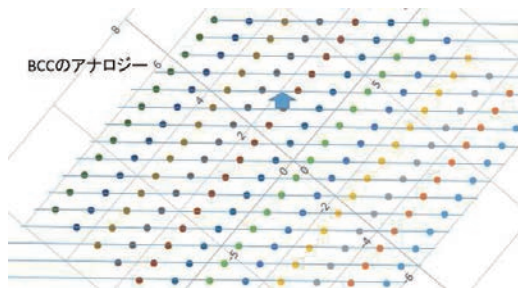
その他のトピックス

- ① BCC のエネルギーと数論
- ② 結晶の不整合問題と数論

自発的対称性の破れと結晶

整数論と自然 II

BCC の Burgers ベクトル (SC の (111)) の類似物としては

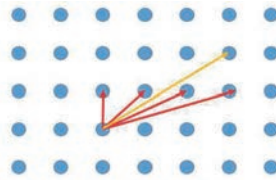


を考え, これらを被覆空間としてとらえ, 構成すればよい.
この際, 欠陥のエネルギーは単純格子の場合と因子倍値が異なる (?).
因子倍に結晶の対称性の違いが現れる.

結晶のらせん転位と対称性

結晶のらせん転位と対称性

Burgers ベクトルは数学的には様々な種類が定義できる。それによって、算出される位相関数に因子倍されることが予想される。



グリーン関数の格子和からの発散の問題を解決したのはエバルド!. (ヒルベルトの物理現象の数学的表現のプロジェクトの一環)
格子の違いによる補正係数マーデルング定数

(Epstein zeta とマーデルング定数の関係 2000 年頃: 金光滋, 谷川好男, 吉元昌己)

ミンコフスキーの数の幾何などによって記述されるもの!
(イデアルと平面, 二次形式と整数, 体積的評価と格子点の関係)

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現: 平方剰余の相互法則,

2016/09/02

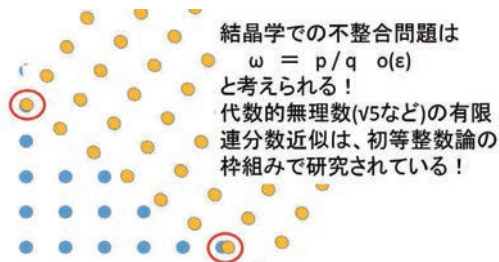
51 / 54

51

結晶と数論

整数論と自然 II (不整合現象)

異なる結晶間の接合などで現れる不整合問題 (incommensurate structure)



⇒ 結晶を (初等) 整数論を利用して考えることは有用!

松谷茂樹 (佐世保高専)

自然現象の代数的表現: 平方剰余の相互法則,

2016/09/02

52 / 54

52

概要

今回の発表の概要

解析的な手法と融合することで、(初等)整数論, 代数により現実の自然現象(ラボの中でない自然現象)が表現できた。

(オイラー, ガウスの時代は普通にやられていたこと!)

1. ガウスの和の平方剰余の相互法則の物理学的な証明を光学の現象で紹介した。(分数タルボット効果)

⇒ ガウス括弧 ($SL(2, \mathbb{R})$, $PSL(2, \mathbb{Z})$, $Mp(2, \mathbb{R})$) が系を支配していた。

2. らせん転位でのゼータ関数の由来を概観し, 考察する。

⇒ 幾何、代数、函数、初等整数論が融合して現象を支配している。

(初等)整数論, 代数と自然現象

- ・抽象的だからと言って, 現実の現象と無関係とは限らない!
- ・現実の現象だからと言って, その本質が数学的に深くないわけではない! ⇒ 現代数学を利用して記述されるべきモノはたくさんある!

ご清聴ありがとうございました。

「マス・フォア・インダストリ研究」シリーズ刊行にあたり

本シリーズは、平成 23 年 4 月に設立された九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 (IMI) が、平成 25 年 4 月に共同利用・共同研究拠点「産業数学の先進的・基礎的共同研究拠点」として、文部科学大臣より認定を受けたことにともない刊行するものである。本シリーズでは、主として、マス・フォア・インダストリに関する研究集会の会議録、共同研究の成果報告等を出版する。各巻はマス・フォア・インダストリの最新の研究成果に加え、その新たな視点からのサーベイ及びレビューなども収録し、マス・フォア・インダストリの展開に資するものとする。

平成 26 年 10 月
マス・フォア・インダストリ研究所
所長 福本康秀

結晶のらせん転位の数理

マス・フォア・インダストリ研究 No.6, IMI, 九州大学

ISSN 2188-286X

発行日 2017 年 1 月 10 日

編集 松谷茂樹, 佐伯修, 中川淳一, 上坂正晃, 濱田裕康

発行 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

〒819-0395 福岡市西区元岡 744

九州大学数理・IMI 事務室

TEL 092-802-4402 FAX 092-802-4405

URL <http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>

印刷 社会福祉法人 福岡コロニー

〒811-0119 福岡県糟屋郡新宮町緑ヶ浜 1 丁目 11 番 1 号

TEL 092-962-0764 FAX 092-962-0768

シリーズ既刊

Issue	Author / Editor	Title	Published
マス・フォア・インダストリ 研究 No.1	穴田 啓見 安田 貴徳 Xavier Dahan 櫻井 幸一	Functional Encryption as a Social Infrastructure and Its Realization by Elliptic Curves and Lattices	26 February 2015
マス・フォア・インダストリ 研究 No.2	滝口 孝志 藤原 宏志	Collaboration Between Theory and Practice in Inverse Problems	12 March 2015
マス・フォア・インダストリ 研究 No.3	寛 三郎	非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散， その先 (Various aspects of nonlinear mathematical models : continuous, discrete, ultra-discrete, and beyond)	24 March 2015
マス・フォア・インダストリ 研究 No.4	穴田 啓見 安田 貴徳 櫻井 幸一 寺西 勇	Next-generation Cryptography for Privacy Protection and Decentralized Control and Mathematical Structures to Support Techniques	29 January 2016
マス・フォア・インダストリ 研究 No.5	藤原 宏志 滝口 孝志	Mathematical Backgrounds and Future Progress of Practical Inverse Problems	1 March 2016



Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

〒819-0395 福岡市西区元岡744
URL <http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>