

マス・フォア・インダストリ研究 No.15

結晶の界面, 転位, 構造の 先進数理解析

編集 松谷 茂樹
佐伯 修
中川 淳一
濱田 裕康
富安 亮子

Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

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 2018

Osamu Saeki

Director

Institute of Mathematics for Industry

Advanced Mathematical Analysis for Dislocation, Interface and Structure in Crystals

Mathematics for Industry Research No.15, Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University
ISSN 2188-286X

Editors: Hiroyasu Hamada, Junichi Nakagawa, Ryoko Tomiyasu, Osamu Saeki, Shigeki Matsutani

Date of issue: 2 December 2019

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

Kijima Printing, Inc.

Shirogane 2-9-6, Chuo-ku, Fukuoka, 810-0012, Japan

TEL +81-(0)92-531-7102 FAX +81-(0)92-524-4411

結晶の界面，転位，構造の先進数理解析

編集 : 松谷 茂樹
佐伯 修
中川 淳一
濱田 裕康
富安 亮子

はじめに

本研究集会 II は、研究集会 II「結晶のらせん転位の数理」(2016 年)、研究集会 I「結晶の界面、転位、構造の数理」(2017 年)、研究集会 II「結晶の転位の先進数理解析」(2018 年)の成果を発展させるものである。

先の研究会の成果などを踏まえ、再度結晶の界面、構造、転位の代数的性質にフォーカスして、先進数理解析の視点での研究会を目指した。この背景には観測装置の発展により、原子レベルでの構造の乱れが観測できるようになる事と、従来の結晶学で使われた数学だけでは、それらを表現できていない事がある。科学・技術の言葉としてより高度な数学が望まれている。他方、現象をよく理解しないと、高度な数学を利用して、現象の本質を射抜けられない。そこで、結晶に関わる数学者と、結晶の代数的解析もされている結晶学者を迎えて、議論する場を提供し、より本質的理解を得ることが本研究集会の目的である。

この目的に従い、結晶に関わる研究者としては、内藤久資氏(名古屋大学)、井上和俊氏(東北大学)、大森俊明氏(東京理科大学)に講演を頂いた。井上和俊氏には界面における結晶配置パターンの数学的表現に関するもの、内藤久資氏、大森俊明氏には、砂田利一氏・小谷元子氏の研究から始まるグラフとエネルギー関数を活用した結晶の新たな数学表現の概観とその発展について講演して頂いた。また、新学術領域研究 2018 年-2022 年「ミルフィュー構造の材料科学 - 新強化原理に基づく次世代構造材料の創製」の活動の一環として、結晶分野の新たな数学的表現を目指して研究をされている垂水竜一氏(大阪大学)を招待し、実際の物質に対する格子欠陥の力学解析の現状をお話頂いた。本研究会の話題に関心を持って頂いている上記新学術領域研究の関係者には、研究集会への参加の声かけをして頂いたが、スケジュールの関係から、佐世保高専の東田賢二氏のみ参加となった。上記新学術領域研究との交流は今後の課題となった。

また、組織委員からは、中川淳一氏から企業からの問題提起と、現在、東京大学数理科学研究科博士課程の社会数理実践研究における検討内容などについて講演頂き、富安亮子氏(九州大学)からも日本製鉄の若手奨学金寄付(2017-19)により実施された EBSD の受託研究の成果に関する講演をして頂いた。組織委員代表である松谷が、体心立方格子に対する転位のエネルギーとゼータ関数の関係についての新たな結果を発表した。

尚、当初予定していた上坂正晃氏(東京大学)の講演は本人のご意向により 8 月末の時点で、中止とした。また、当日、関東地方を襲った台風 15 号の問題により、発表の順序を急遽変更したが、影響を受けた講演者の尽力により、プログラムの順序の修正のみで、9 月時点で予定していた講演はすべて実施することができ、活発な議論につながった。

参加者による活発な議論や交流により、本研究集会に関わる課題において数学と材料科学の新たな連携の方向性が提示された。また、参加者がそれら方向性を共有することができたと考えている。

共有した極めて有益な議論の内容を公開することで更に新たな展開を期待して，研究集会の報告を行うものである。

組織委員代表 松谷茂樹

2019年11月8日

組織委員

松谷茂樹 金沢大学

佐伯修 九州大学 IMI

中川淳一 東京大学

濱田 裕康 佐世保高専

富安亮子 九州大学 IMI

Contents

はじめに	i
プログラム	iv
集合写真	v
初等整数論の転位論への応用 (Application of elementary number theory to dislocation) 松谷茂樹, Shigeki Matsutani (Kanazawa University)	1
転位論に基づくキンク変形の表現とその数値解析 (Dislocation-based modeling and numerical analysis of kink deformation) 垂水竜一, Ryuichi Tarumi (Osaka University)	15
結晶格子の標準実現とその物質科学への応用 (Standard realizations of crystal lattices and their applications to material sciences) 内藤久資, Hisashi Naito (Nagoya University)	37
Analysis of the arrangement of grain-boundary structural units and their hierarchy 井上和俊, Kazutoshi Inoue (Tohoku University)	67
東京大学大学院数理科学研究科 社会連携講座「データサイエンスにおける数学イノベーション」が指すもの (Propulsion of Collaboration between Mathematics and Industry by the Social Cooperation Program “Mathematical Innovation in Data Science” in the University of Tokyo) 中川淳一, Junichi Nakagawa (The University of Tokyo)	75
社会数理実践研究(東大数理) (FMSP mathematical research on real world problems of the University of Tokyo) 中川淳一, Junichi Nakagawa (The University of Tokyo)	83
3および4分岐有限グラフのGoldberg-Coxeter構成のラプラシアン固有値について (On the eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for 3- and 4-valent finite graphs) 大森俊明, Toshiaki Omori (Cifra Co., Ltd.)	91
EBSD(電子線後方回折) 菊池パターンの ab-initio indexing (Ab-initio indexing of Kikuchi patterns obtained by EBSD (electron backscattering diffraction)) 富安亮子, Ryoko Oishi-Tomiyasu (Kyushu University)	103

9 月 9 日(月)

13:00-13:05 オープニング

13:05-13:55 松谷茂樹(金沢大学)

初等整数論の転位論への応用

14:10-15:00 垂水竜一(大阪大学)

転位論に基づくキンク変形の表現とその数値解析

15:00-15:30 休憩

15:30-16:20 内藤久資(名古屋大学)

結晶格子の標準実現とその物質科学への応用

16:30-17:20 井上和俊(東北大学)1

粒界構造ユニットの 3 次元配列の解析

19:00 研究交流会

9 月 10 日(火)

10:00-10:30 中川淳一(東大数理)

東京大学 大学院数理科学研究科 社会連携講座

「データサイエンスにおける数学イノベーション」が目指すもの

10:30-11:20 中川淳一(東大数理)

社会数理実践研究(東大数理) 東京大学

11:45-12:35 大森俊明((株) シフラ)

3 および 4 分岐有限グラフの Goldberg-Coxeter 構成のラプラシアン固有値について

12:35-14:30 昼休憩

14:30-15:20 富安亮子(IMI)

EBSD(電子線後方回折) 菊池パターンの ab-initio indexing

15:20-15:25 クロージング



集合写真 2019.9.10

初等整数論の転位論への応用
(Application of elementary number theory to dislocation)

松谷茂樹, Shigeki Matsutani

金沢大学 大学院自然科学研究科

Graduate School of Natural Science & Technology, Kanazawa University

In crystallography, algebra plays essential roles to describe properties of the crystals and functions over there. On the other hand, the dislocation has been studied in the framework of algebraic topology and differential geometry because we could take a continuum limit of a system including dislocations by regarding the discrete nature as its inner space.

However due to the recent rapid development of technology, it is required to construct a theory which describes the discrete nature of dislocations more directly. In this talk, we give a novel method based on the elementary number theory by considering the dislocation as a symmetry breaking of the crystal group; for the crystal group G , the action of a subgroup $H \subset G$ on the crystal with a screw dislocation is invariant. We show that the fiber structure and properties of Gauss or Eisenstein numbers describe the screw dislocations [1, 2].

REFERENCES

- [1] H. Hamada, S. Matsutani, J. Nakagawa, O. Saeki, and M. Uesaka, An algebraic description of screw dislocations in SC and BCC crystal lattices, *Pacific J. Math. for Industry* **10** (2018), 3.
- [2] S. Matsutani, A Novel Discrete Theory of a Screw Dislocation in the BCC Crystal Lattice, arXiv:1906.04332

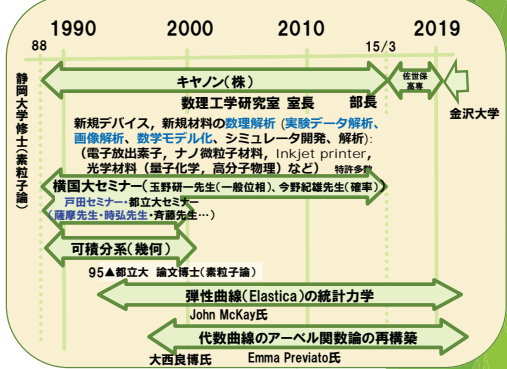
初等整数論の転位論への応用

2018年9月9日
IMI Workshop II: 結晶転位の先進数理解析
九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

松谷茂樹
金沢大学 電子情報通信学系

1

略歴



2

21世紀に入って、科学技術が大きく進歩し、従来の工業数学や物理数学では表現できない現象が増えてきている

純粋数学も含めた様々な数学を利用して、現象を表現する事が求められている
→ 先進数理解析とよびたい

・先進数理解析の事例は増えている

3

- 研究会II「結晶のらせん転位の数理」 (2016年)
- 研究会I「結晶の界面、転位、構造の数理」(2017年)
- 研究会II「結晶の転位の先進数理解析」 (2018年)
- 研究会II「結晶の界面、転位、構造の先進数理解析」 (2019年)

4

先進数理解析:

1. 数学が判れば、科学や技術が、すくにわかるとい
うことはない

数学者が、科学・技術をゼロから学ぶことで、
大きな発展に寄与できる可能性がある

2. 技術者、科学者自身が、数学を勉強することで、
大きく進歩することがある

「2つ以上の専門を持つこと」がとても大切

5

現場の課題

インタープリター

数学専門家

・丸投げはNG
・インタープリターは、両者の論文を執筆できるレベルのスキルがある者でなければ、非自明なことはできないのではないのか？

・そういうスキルを持った人材を育てる
・10年くらいかけて、自分がそういうスキルを持つ

6

先進数理解析:

1. 数学が判れば、科学や技術が、すくにわかるとい
うことはない

数学者が、科学・技術をゼロから学ぶことで、
大きな発展に寄与できる可能性がある

2. 技術者、科学者自身が、数学を勉強することで、
大きく進歩することがある

「2つ以上の専門を持つこと」がとても大切



イベントで、何かが大きく科学や技術が
発展することはない!

イベントが、1や2のきっかけになれば、
大きな発展につながる可能性がある。

7

先進数理解析:

らせん転位への初等整数論の応用

1. らせん転位の代数的表現

2. 対称性の破れとしての結晶、らせん転位

3. 単純格子でのらせん転位

4. BCC格子でのらせん転位

8

らせん転位の代数的表現

中川・佐伯・上坂・濱田・松谷
2015-2018

Hamada et al. Pacific Journal of Mathematics for Industry (2018) 10:3
https://doi.org/10.1186/s13067-018-00272-8

Pacific Journal of
Mathematics for Industry

ORIGINAL ARTICLE

Open Access

An algebraic description of screw dislocations in SC and BCC crystal lattices

Hiroyasu Hamada¹, Shigeaki Matsuura^{1*}, Junichi Nakagawa², Osamu Saeki³ and Masaaki Uesaka^{4,5}

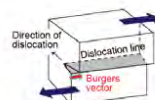
Abstract

We give an algebraic description of screw dislocations in a crystal, especially simple cubic (SC) and body centered cubic (BCC) crystals, using free abelian groups and fibering structures. We also show that the strain energy of a screw dislocation based on the Ising model is expressed by the Epstein-Hurwitz zeta function approximately.

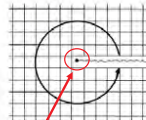
Keywords: Crystal lattice; Screw dislocation; Topological defect; Monodromy; Grouping of abelian group; Dislocation energy; Epstein-Hurwitz zeta function

9

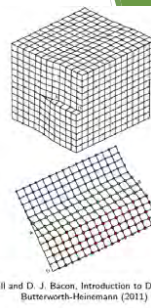
らせん転位



Burgers Vector: (ズレの方向)と転位の
軸の方向が並行となっている。

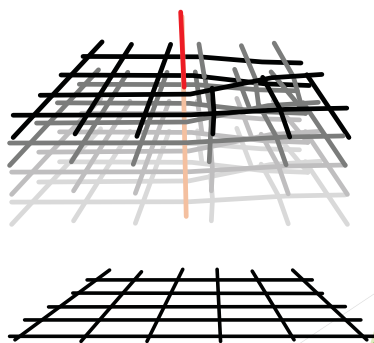


転位の軸: 転位線



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

10



11

転位の研究の状況 (2015)

2000年代まで

連続描像での理論モデルの構築

- ・位相幾何的な考察

- ・微分幾何的な考察

Amari, Kondo 1960's

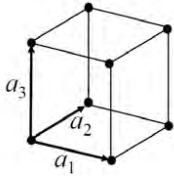
Nabarro 1967

Mermin Rev. Mod. Phys 1979

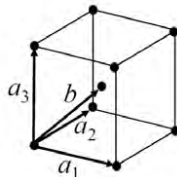
12

2015年のSGW (Study Group Workshop) の課題

BCC格子でのらせん転位を数学的に表現しそれをエネルギー論的に論ぜよ by 中川氏



単純格子

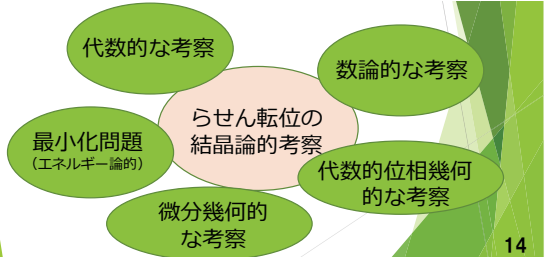


体心立方格子(BCC)

転位の研究の状況

2015年の状況:

離散的な考察(結晶の型)と位相的な考察、エネルギー(不変量)の考察の組み合わせは未検討課題



先進数理解析:

らせん転位への初等整数論の応用

1. らせん転位の代数的表現
2. 対称性の破れとしての結晶, らせん転位
3. 単純格子でのらせん転位
4. BCC格子でのらせん転位

群 G と X の対称性

G : 群, X : 集合, $G \times X \rightarrow X ((g, x) \mapsto gx)$
 s.t. 1) $(gh)x = g(hx)$, 2) $ex = x$ のとき X に G の作用があるという。

軌道

$x \in X$ に対し $Gx := \{gx \mid g \in G\}$ を軌道と呼ぶ。
 $X = Gx$ のとき, G は X に推移的に働く

対称性

G 群, $X = Gx$ と, G の真部分群 $S \subsetneq G$ とがある $x \in X$ に対し $X \neq X' := Sx$ のとき

- 1) 「 X に対して X' は対称性が低い」
- 2) 「 X の対称性が破れ X' となる」
- 3) 「 G/S を破れた対称性」という。

結晶は対称性の破れと見ることができる

$SE(3) := \{ \text{ユークリッド変換, 反転なし} \}$

$SE(3) \supset \mathbb{R}^3$: 並行移動の群

$x \in \mathbb{E}^3, X = \mathbb{E}^3 = \mathbb{R}^3x$

$E^3 = \{x\} + \mathbb{R}^3$ $\{x\}$ は位置vector
 $\{\text{位置vector}\} = \{\text{位置vector}\} + \{\text{vector}\}$
 $E^3 = E^3 + \mathbb{R}^3$

結晶は対称性の破れと見ることができる

$SE(3) := \{ \text{ユークリッド変換, 反転なし} \}$
 $SE(3) \supset \mathbb{R}^3$: 並行移動の群
 $x \in \mathbb{E}^3, X = \mathbb{E}^3 = \mathbb{R}^3 x$

$S = \mathbb{Z}^3 \subsetneq \mathbb{R}^3$ に対して, $\mathbb{E}^3 \neq X' = \mathbb{Z}^3 x$

**結晶: ユークリッド空間より低い対称性を持つが
高い対称性の離散集合**

19

結晶は対称性の破れと見ることができる

$SE(3) := \{ \text{ユークリッド変換, 反転なし} \}$
 $SE(3) \supset \mathbb{R}^3$: 並行移動の群
 $x \in \mathbb{E}^3, X = \mathbb{E}^3 = \mathbb{R}^3 x$

$S = \mathbb{Z}^3 \subsetneq \mathbb{R}^3$ に対して, $\mathbb{E}^3 \neq X' = \mathbb{Z}^3 x$

$$\mathbb{E}^3 = \bigcup_{x \in (\mathbb{E}^3/\mathbb{Z}^3)} \mathbb{Z}^3 x = \bigcup_{g \in (\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)} \mathbb{Z}^3 g x$$

- 格子の原点をどこに置くかという対称性の破れ
- 連続群 $(T^3 = \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$ が推移的に作用する
- ⇨ **この対称性に対応するNambu-Goldstone Boson
が音響phonon**

20

結晶は対称性の破れと見ることができる
 $SE(3) := \{ \text{ユークリッド変換, 反転なし} \}$
 $SE(3) \supset \mathbb{R}^3$: 並行移動の群
 $x \in \mathbb{E}^3, X = \mathbb{E}^3 = \mathbb{R}^3 x$

$S = \mathbb{Z}^3 \subsetneq \mathbb{R}^3$ に対して, $\mathbb{E}^3 \neq X' = \mathbb{Z}^3 x$
 $\mathbb{E}^3 = \bigcup_{x \in (\mathbb{E}^3/\mathbb{Z}^3)} \mathbb{Z}^3 x = \bigcup_{g \in (\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)} \mathbb{Z}^3 g x$

結晶: \mathbb{E}^3 より低いが高い対称性の離散集合

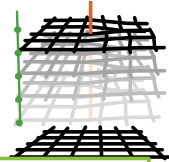
結晶の転位も対称性を低くするが

1. ある対称性は高いまま保った離散的な集合
2. 位相幾何的な不変量を持つ

21

結晶は対称性の破れと見ることができる
 $SE(3) := \{ \text{ユークリッド変換, 反転なし} \}$
 $SE(3) \supset \mathbb{R}^3$: 並行移動の群
 $x \in \mathbb{E}^3, X = \mathbb{E}^3 = \mathbb{R}^3 x$

$S = \mathbb{Z}^3 \subsetneq \mathbb{R}^3$ に対して, $\mathbb{E}^3 \neq X' = \mathbb{Z}^3 x$
 $\mathbb{E}^3 = \bigcup_{x \in (\mathbb{E}^3/\mathbb{Z}^3)} \mathbb{Z}^3 x = \bigcup_{g \in (\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)} \mathbb{Z}^3 g x$



1. 結晶の転位も対称性の破れと見る:
残っている対称性は何か?

• 転位線に平行方向には1次元格子が残る

→ **ファイバー(被覆)構造で表現する**

初等代数構造

• 転位線に垂直方向の2次元格子はSC,BCCの特性が残る

→ **ガウス整数, アイゼンシュタイン整数で表現する**

初等整数論

2. 位相幾何的不変量と整合を持つ:

→ **位相的量は \mathbb{E}^3 の特異性を利用する**

初等代数的位相幾何

3. \mathbb{E}^3 の部分集合として実現される

→ **\mathbb{E}^3 の中への射をbuilt-inした枠組みを利用する**

カルテシアン軸2

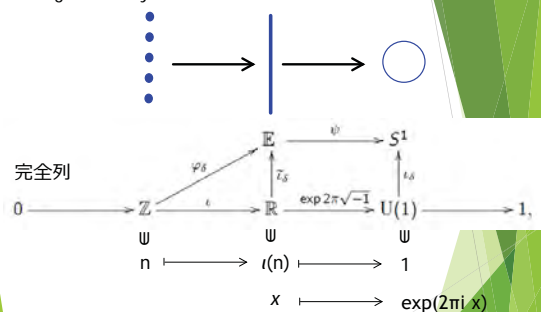
先進数理解析:

らせん転位への初等整数論の応用

1. らせん転位の代数的表現
2. 対称性の破れとしての結晶, らせん転位
3. 単純格子でのらせん転位
4. BCC格子でのらせん転位

23

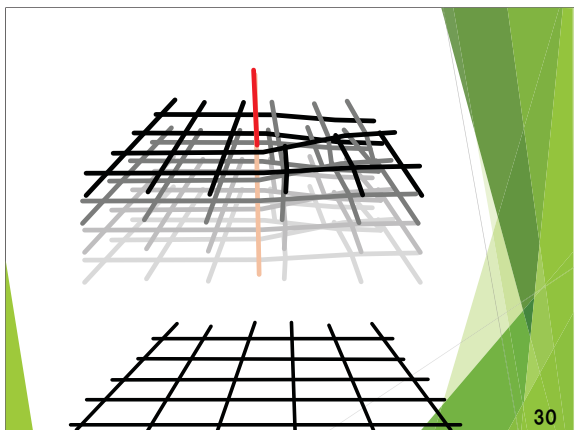
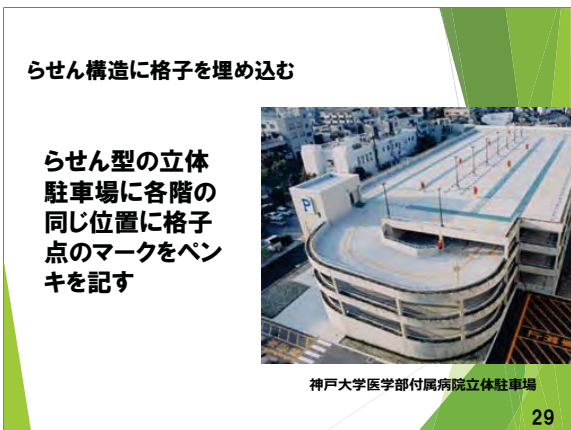
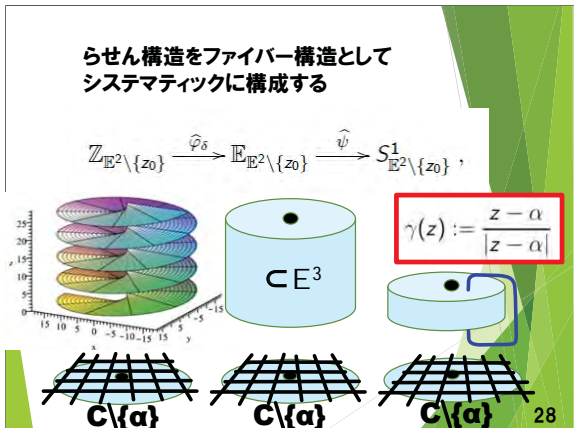
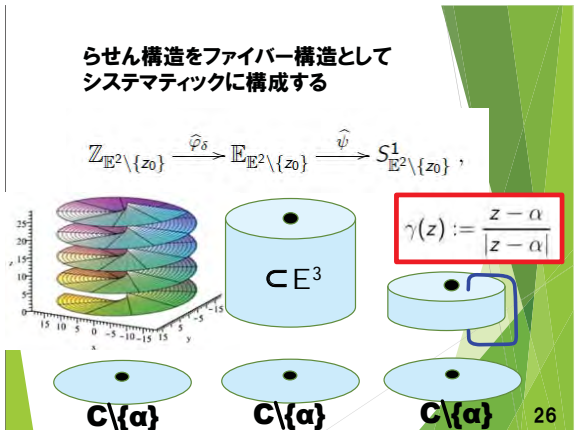
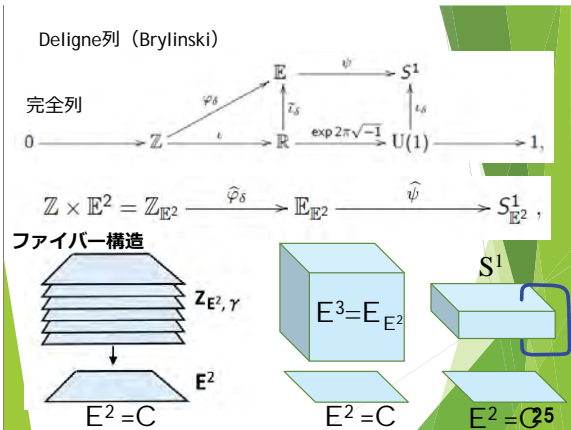
Deligne列 (Brylinski)



$U(1) = \mathbb{R}/\mathbb{Z}$

$S^1 = \mathbb{E}/\mathbb{Z}$

24



らせん構造に格子を埋め込む

数学的にはファイバー射を考えること

$$S = \{z_0\} = \{\alpha\}$$

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus S} & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus S} & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus S} \\ \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} \\ \mathbb{Z}_{A_p} & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{A_p} & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{A_p} \end{array}$$

$$A_p \approx \mathbb{Z}^2 \subset \mathbb{E}^2$$

31

らせん構造に格子を埋め込む

数学的にはファイバー射を考えること

ほぼユークリッド空間

$$S = \{z_0\} = \{\alpha\}$$

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus S} & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus S} & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus S} \\ \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} \\ \mathbb{Z}_{A_p} & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{A_p} & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{A_p} \end{array}$$

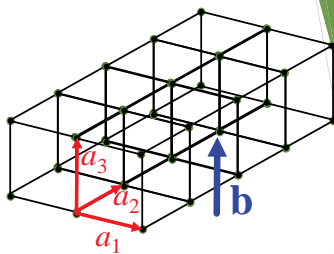
$$A_p \approx \mathbb{Z}^2$$

らせん結晶格子

ユークリッド空間内にらせん格子が構成できている!

結晶学者が発見・伝承してきたものが明確な言葉(数学)になった

32

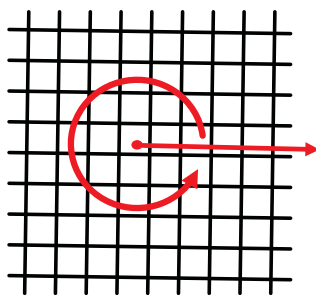


33

転位のエネルギーを評価する

- ・転位が存在しないときの格子間の節点環の距離が安定と仮定する
- ・摂動パラメータに対しての展開の1次はゼロ
 - 展開は2次から始まる
 - = バネ近似ができる
 - (安定状態の長さ = 自然長)
- ・転位が存在した場合、存在していない場合に比較して、どれくらいエネルギーが増加するか?
 - 各バネの自然長のズレからくるエネルギーの格子和を求める (長さはユークリッド長さ)

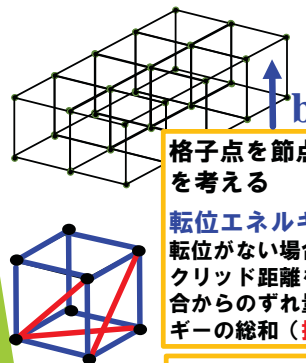
34



$$\mathbb{Z}[\sqrt{-1}] = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}\sqrt{-1}$$

ガウス整数

35



格子点を節点として無限グラフを考える

転位エネルギー：
転位がない場合のグラフの辺のユークリッド距離を自然長としてその場合からのずれ量による局所エネルギーの総和 (摂動の1次を評価)

- ・ - エネルギーに寄与しない
- ・ - エネルギーに寄与する

36

単純格子でのらせん転位のエネルギー

単純格子においては、バネモデルに従ってらせん転位によるエネルギーの増加分を評価できる

$$E_p(x_0, y_0) = \frac{1}{8\pi^2} k_d a^2 \sum_{(\ell_1, \ell_2) \in D_p} \frac{a^2}{(\ell_1 a - x_0)^2 + (\ell_2 a - y_0)^2} + (1/l) \text{について高次の項}$$

切断Epstein-Hurwitz と関数と関連する

「物理現象はリーディング項によって定まる」
(統計力学、場の理論……)

37

$$\zeta_A^{\sqrt{-1}}(s, z_0) = \sum_{\ell \in AC\mathbb{Z}[\sqrt{-1}]} \frac{1}{|\ell + z_0|^s}$$

$$E(x_0, y_0) = \alpha_0 \zeta_A^{\sqrt{-1}}(2, -x_0 - y_0 \sqrt{-1})$$

「物理現象はリーディング項によって定まる」
(統計力学、場の理論……)

38

先進数理解析： らせん転位への初等整数論の応用

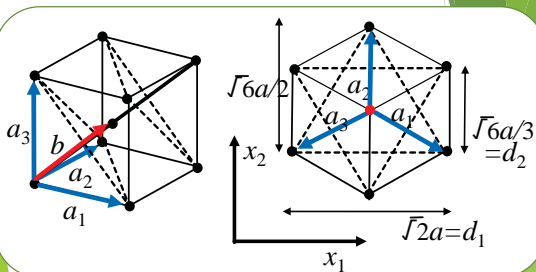
1. らせん転位の代数的表現
2. 対称性の破れとしての結晶、らせん転位
3. 単純格子でのらせん転位
4. BCC格子でのらせん転位

39

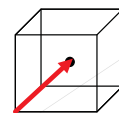
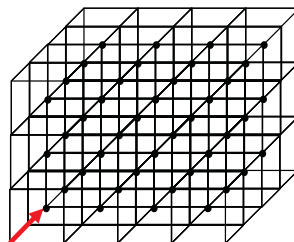
BCC格子のらせん転位

- BCC格子 (1,1,1) での三層構造
- BCC格子 (1,1,1) での無限グラフ
- BCC格子 (1,1,1) でのらせん転位
- BCC格子のらせん転位のエネルギー

40

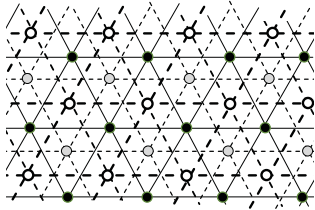


41



42

(1,1,1) 方向では三層の周期構造が現れることが知られている



- $\mathbb{B}^{(0)}$
- $\mathbb{B}^{(1)}$
- $\mathbb{B}^{(2)}$

$$\pi_{(1,1,1)} : \mathbb{L}_{\text{BCC}} \rightarrow \mathbb{C}$$

43

(1,1,1) 方向の三層構造を代数で表現する

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

$$\mathbb{A}_4 := \{ \alpha_1^{\ell_1} \alpha_2^{\ell_2} \alpha_3^{\ell_3} \beta^{\ell_4} \mid \text{abelian}, \ell_1, \ell_2, \ell_3, \ell_4 \in \mathbb{Z} \}$$

$$\mathbb{B} = \mathbb{A}_4 / \langle \beta^2 \alpha_1^{-1} \alpha_2^{-1} \alpha_3^{-1} \rangle$$

$$\mathcal{R}_6 := \mathbb{C}[\mathbb{B}]$$

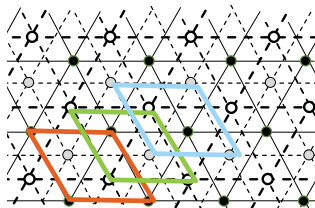
$$\mathbb{B}_H := \{ (\alpha_1 \alpha_3^{-1})^{\ell_1} (\alpha_2 \alpha_3^{-1})^{\ell_2} \mid \ell_1, \ell_2 \in \mathbb{Z} \}$$

$\mathbb{C}[\mathbb{B}_H]$ -加群としての分解

$$\mathcal{R}_6 / (\beta - 1) \cong \mathbb{C}[\mathbb{B}_H] \oplus \mathbb{C}[\mathbb{B}_H] \alpha_1 \oplus \mathbb{C}[\mathbb{B}_H] \alpha_1 \alpha_2$$

44

(1,1,1) 方向の三層構造を代数で表現する



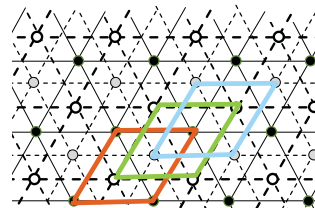
- $\mathbb{B}^{(0)}$
- $\mathbb{B}^{(1)}$
- $\mathbb{B}^{(2)}$

$$\mathbb{Z}[\omega_3] = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}\omega_3 \oplus \mathbb{Z}\omega_3^2 \quad \text{アイゼンシュタイ整数}$$

$$\omega_3 = e^{2\pi\sqrt{-1}/3} = \frac{-1 + \sqrt{-3}}{2}$$

45

(1,1,1) 方向の三層構造を代数で表現する



- $\mathbb{B}^{(0)}$
- $\mathbb{B}^{(1)}$
- $\mathbb{B}^{(2)}$

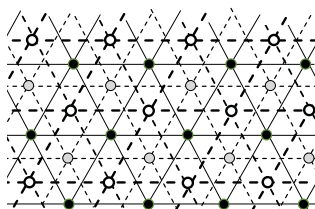
$$\mathbb{Z}[\omega_3] = \mathbb{Z}[\omega_6]$$

アイゼンシュタイ整数

$$\omega_6 = e^{2\pi\sqrt{-1}/6} = \frac{1 + \sqrt{-3}}{2} = \omega_3 + 1$$

46

(1,1,1) 方向の三層構造を代数で表現する



- $\mathbb{B}^{(0)}$
- $\mathbb{B}^{(1)}$
- $\mathbb{B}^{(2)}$

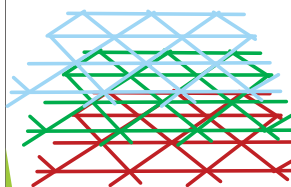
$$\mathbb{B}^{(0)} := \mathbb{Z}[\omega_6]$$

$$\mathbb{B}^{(1)} := \mathbb{Z}[\omega_6] + \frac{1}{3}\omega_6$$

$$\mathbb{B}^{(2)} := \mathbb{Z}[\omega_6] + \frac{2}{3}\omega_6$$

47

3層が繰り返して、被服構造を作る



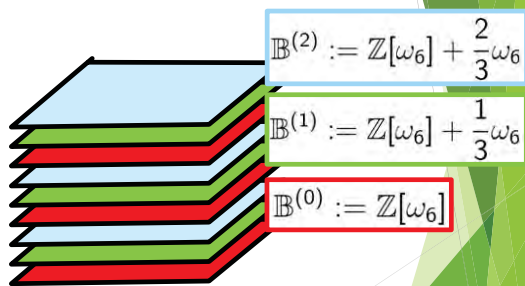
$$\mathbb{B}^{(2)} := \mathbb{Z}[\omega_6] + \frac{2}{3}\omega_6$$

$$\mathbb{B}^{(1)} := \mathbb{Z}[\omega_6] + \frac{1}{3}\omega_6$$

$$\mathbb{B}^{(0)} := \mathbb{Z}[\omega_6]$$

48

3層が繰り返して、被服構造を作る



49

補題

For a point $\tau \in \mathbb{H} := \{x + \sqrt{-1}y \in \mathbb{C} \mid y \geq 0\}$, the subgroup G_τ of $SL(2, \mathbb{Z})$ such that $\{g \in SL(2, \mathbb{Z}) \mid g\tau = \tau\}$ becomes a cyclic group \mathcal{C}_n of the order n , i.e.,

- $\tau \in SL(2, \mathbb{Z})\omega_4, \omega_4 := \sqrt{-1}, G_\tau = \mathcal{C}_4$
- $\tau \in SL(2, \mathbb{Z})\omega_6, \omega_6 := \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{-3}}{2}, G_\tau = \mathcal{C}_6$,
- otherwise, $G_\tau = \mathcal{C}_2$.

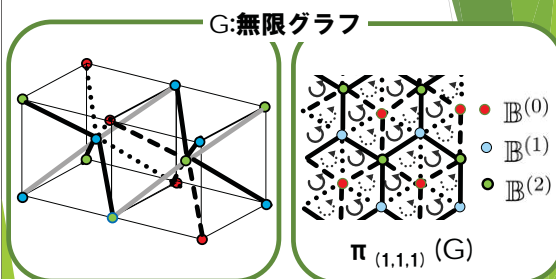
50

BCC格子のらせん転位

- BCC格子 (1,1,1) での三層構造
- BCC格子 (1,1,1) での無限グラフ
- BCC格子 (1,1,1) でのらせん転位
- BCC格子のらせん転位のエネルギー

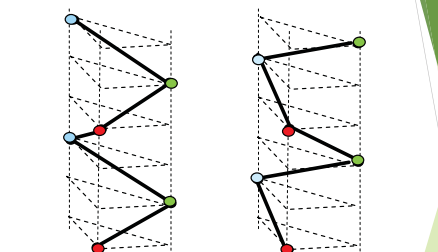
51

最近接を辺で繋げることで得られる無限グラフ



52

最近接を辺で繋げることで得られる無限グラフ



らせん構造がbuilt-inされている

53

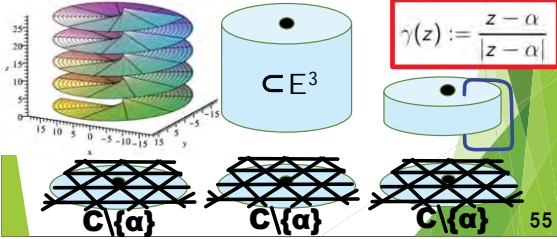
BCC格子のらせん転位

- BCC格子 (1,1,1) での三層構造
- BCC格子 (1,1,1) での無限グラフ
- BCC格子 (1,1,1) でのらせん転位
- BCC格子のらせん転位のエネルギー

54

らせん構造をファイバー構造として
システマティックに構成する

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



55

らせん構造に格子を埋め込む

数学的にはファイバー射を考えること

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2} \setminus S & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2} \setminus S & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{\mathbb{E}^2} \setminus S \\ \uparrow \hat{\iota}_\delta^{SC} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{SC} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{SC} \\ \mathbb{Z}_{A_p} & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{A_p} & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{A_p} \end{array}$$

$$A_p = \mathbb{Z}[\omega_3] + \omega' \subset \mathbb{E}^2$$

56

らせん構造に格子を埋め込む

らせん型の
立体駐車場に
各階の同じ位置に
格子点のマークを
ベンキを記す



神戸大学医学部付属病院立体駐車場

57

らせん構造に格子を埋め込む

らせん型の
立体駐車場に
各階の同じ位置に
格子点のマークを
ベンキを記す



神戸大学医学部付属病院立体駐車場

58



らせん構造に格子を埋め込む

らせん型の
立体駐車場に
各階の同じ位置に
格子点のマークを
ベンキを記す



神戸大学医学部付属病院立体駐車場

59



らせん構造に格子を埋め込む

らせん型の
立体駐車場に
各階の同じ位置に
格子点のマークを
ベンキを記す



神戸大学医学部付属病院立体駐車場

60



らせん構造に格子を埋め込む

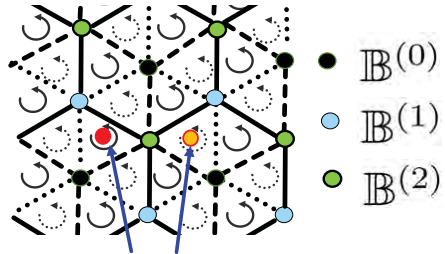
数学的にはファイバー射を考えること

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{Z}_{\mathbb{E}^2 \setminus S} & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{\mathbb{E}^2 \setminus S} & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{\mathbb{E}^2 \setminus S} \\ \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} & & \uparrow \hat{\iota}_\delta^{\text{SC}} \\ \mathbb{Z}_{\mathcal{A}_p} & \xrightarrow{\hat{\phi}_\delta} & \mathbb{E}_{\mathcal{A}_p} & \xrightarrow{\hat{\psi}} & S^1_{\mathcal{A}_p} \end{array}$$

$$\mathcal{A}_p = \mathbb{Z}[\omega_3] + \omega' \subset \mathbb{E}^2$$

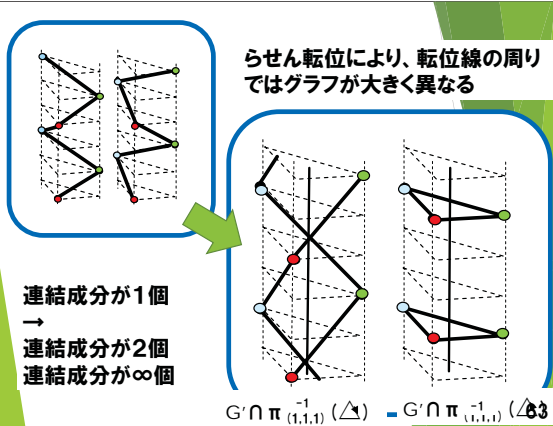
61

転位線がどこを通るかによって
グラフが異なる



転位線がどちらを通るかによって
グラフが異なる

62



らせん転位により、転位線の周り
ではグラフが大きく異なる

連結成分が1個
→
連結成分が2個
連結成分が∞個

$$G \cap \pi_{(1,1,1)}^{-1}(\Delta) \quad - \quad G \cap \pi_{(1,1,1)}^{-1}(\Delta \setminus \{3\})$$

BCC格子のらせん転位

- BCC格子 (1,1,1) での三層構造
- BCC格子 (1,1,1) での無限グラフ
- BCC格子 (1,1,1) でのらせん転位
- BCC格子のらせん転位のエネルギー

64

BCC格子のらせん転位のエネルギー:

B⁽⁰⁾とB⁽¹⁾, B⁽¹⁾とB⁽²⁾, B⁽²⁾とB⁽⁰⁾間の辺の純
結晶での自然長からのらせん転位でのズレに
よる、弾性エネルギーの総和
(円分体の対称性によって結果はシンプル)

$$\zeta_A^{\omega_3}(s, z_0) = \sum_{\ell \in AC\mathbb{Z}[\omega_3]} \frac{1}{|\ell + z_0|^s}$$

$$E(x_0, y_0) = \zeta_A^{\omega_3}(2, x_0 + y_0\sqrt{-1})$$

切断Epstein-Hurwitz ζ関数に比例

65

性質

$$1 + \omega_6^2 + \omega_6^4 = 0, \quad -\omega_6 = \omega_6^4, \quad \overline{\omega_6} = \omega_6^5.$$

性質

$$\nu_i := \frac{1}{3}(\omega_6^i + \omega_6^{i+1}), \quad i = 0, 1, 2, \dots, 5, \text{ に対して}$$

- $\mathbb{Z}[\omega_3] + \nu_0 \ni \nu_2, \nu_4, \mathbb{Z}[\omega_3] + \nu_1 \ni \nu_3, \nu_5.$
- For $z \in \mathbb{E}_{\mathbb{C}},$

$$\sum_{i=0}^2 \left(\frac{\nu_{2i}}{z} - \frac{\nu_{2i}}{\bar{z}} \right)^2 = -2 \frac{1}{|z|^2}.$$

$$\sum_{i=0}^2 \left(\frac{\nu_{2i+1}}{z} - \frac{\nu_{2i+1}}{\bar{z}} \right)^2 = -2 \frac{1}{|z|^2}.$$

66

BCC格子のらせん転位のエネルギー:

B⁽⁰⁾とB⁽¹⁾, B⁽¹⁾とB⁽²⁾, B⁽²⁾とB⁽⁰⁾間の辺の純結晶での自然長からのらせん転位でのズレによる、弾性エネルギーの総和

(円分体の対称性によって結果はシンプル)

$$\zeta_A^{\omega_3}(s, z_0) = \sum_{\ell \in ACZ[\omega_3]} \frac{1}{|\ell + z_0|^s}$$

$$E(x_0, y_0) = \zeta_A^{\omega_3}(2, x_0 + y_0\sqrt{-1})$$

切断Epstein-Hurwitz ζ 関数に比例

67

単純格子のらせん転位のエネルギー

$$\zeta_A^{\sqrt{-1}} = \sum_{\ell \in ACZ[\sqrt{-1}]} \frac{1}{|\ell + z_0|^2}$$

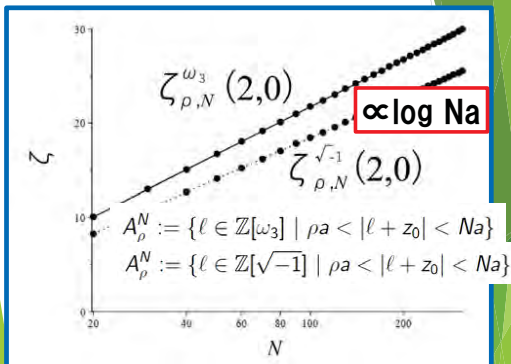
BCC格子のらせん転位のエネルギー

$$\zeta_A^{\omega_3} = \sum_{\ell \in ACZ[\omega_3]} \frac{1}{|\ell + z_0|^2}$$

エネルギーの主要項がとで記述される

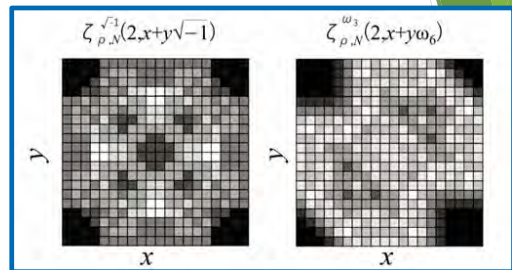
68

ζ のカットオフ半径依存性



69

カットオフ ζ の中心軸 (α, z_0) 依存性



70

まとめ

- 対称性の破れとして格子のらせん転位を表現した。残った対称性を表現するものとして整数論や代数的手法を利用した。
- これにより単純格子とBCC格子のらせん転位の比較など従来できなかった考察ができるようになった。

71

今後の課題

- FCCのらせん転位を表現し、それと比較 (やればできる状態)
- らせん転位だけではなく、刃状転位なども表現できるようにすべき。(対称性の定義は狭すぎる半群まで、拡張すべき(?))

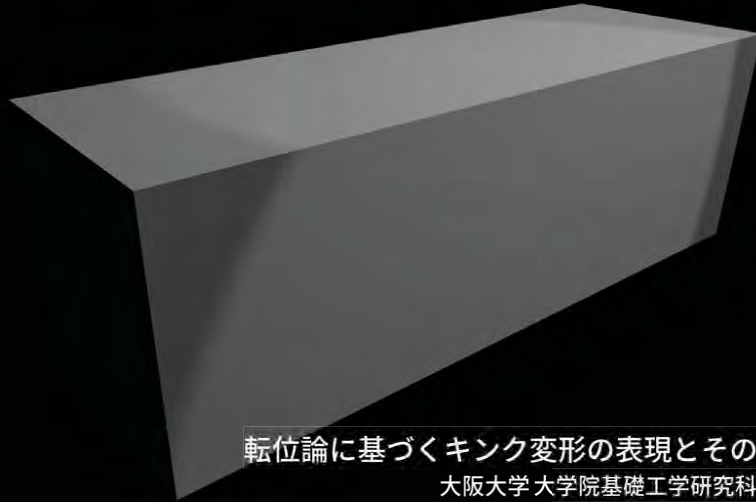
72

転位論に基づくキンク変形の表現とその数値解析
(Dislocation-based modeling and numerical analysis of kink deformation)

垂水竜一, **Ryuichi Tarumi**

大阪大学 大学院基礎工学研究科
Graduate School of Engineering Science, Osaka University

Recently, long period stacking-ordered magnesium (LPSO-Mg) and related alloys attract much attention due to a unique deformation mechanism called kink band. A pioneering work by Hess and Barrett suggests that morphology of the kink band is explained by collective glide of edge dislocations on different basal planes. However, quantitative verification is not yet conducted and further investigation is required. The aim of this study is to verify the Hess and Barrett model on the basis of continuum mechanics. A special attention is paid to the formation of kink band from dislocation loops.



転位論に基づくキンク変形の表現とその数値解析
大阪大学 大学院基礎工学研究科 垂水 竜一

謝辞

– 共同研究者

- 小林 舜典（阪大・基礎工，D2）
- 鈴木 厚（阪大・サイバーメディアセンター）

– 共同研究プロジェクト

- 新学術領域研究：ミルフィーユ構造の材料科学
- JHPCN共同研究：格子欠陥力学場のアイソジオメトリック解析



ミルフィーユ構造の材料科学

– 地層のキンク変形

- 地質学で頻繁に観察される
- マクロスケールな現象
- 層間剥離は生じない
- 比較的緩やかな連続的変形

– MF構造のキンク変形

- キンク変形の結晶学的・形態学的な特徴は？
- キンク変形の形成機構は？
- キンク変形の材料強化機構としての可能性は？



Phil. Trans. R. Soc. A (2012) 370, 1798–1826

November 5, 2019

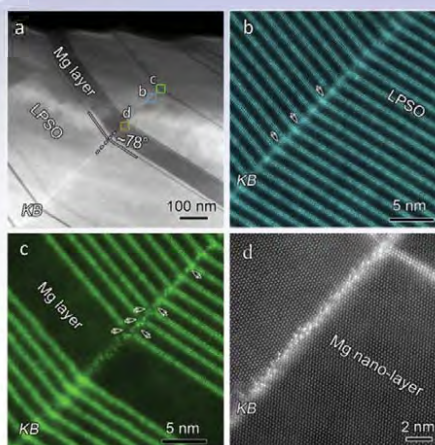
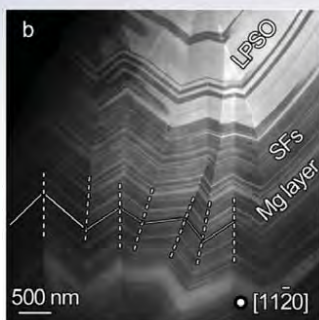
Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

3

ミルフィーユ構造の材料科学

– LPSO-Mg合金のキンク変形

- キンク変形の結晶学・形態学



X.H.Shao et al., Acta Materialia 118 (2016) 177–186

November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

4

ミルフィーユ構造の材料科学

– キンク変形の格子欠陥モデル

- Hess and Barrett: Met. Trans. (1949).

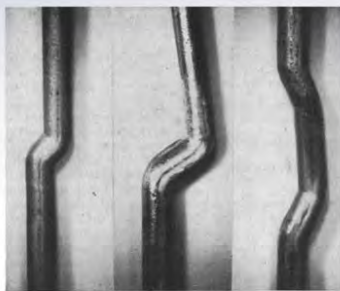
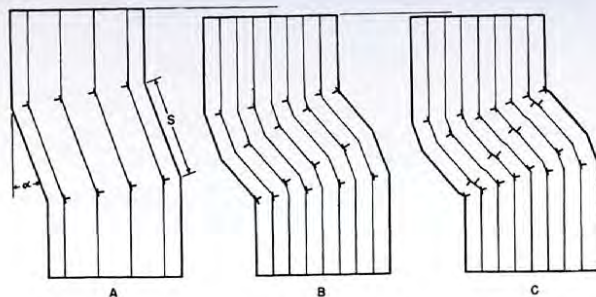


FIG 1—Typical kink bands in compressed single-crystal zinc rod. 3X.



November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

5

キンク変形のモデル化

– 弾性体の構成式

1. 古典弾性体のひずみエネルギー汎関数

$$W[u_i] = \int_{\Omega} \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} dV$$

将来的には2と3を統合した
マルチスケール力学解析を目指す

2. ひずみ勾配弾性体のひずみエネルギー汎関数

$$W[u_i] = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + M_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl,m} + \frac{1}{2} A_{ijklmn} \epsilon_{ij,k} \epsilon_{lm,n} \right) dV$$

3. 非線形弾性体のひずみエネルギー汎関数 (微分幾何学)

$$W[x_{[t]}] = \int_{M_{[0]}} \frac{1}{2} C(E, E) v_{[0]}$$

November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

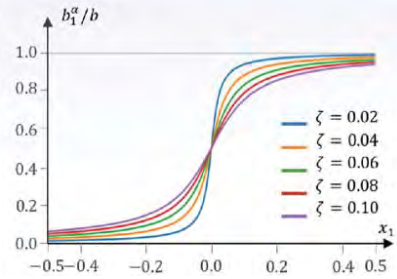
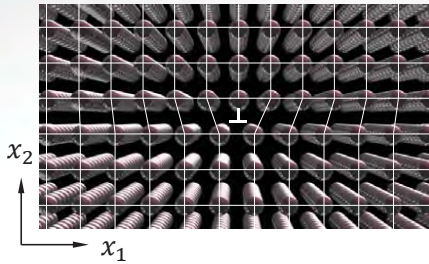
6

古典弾性理論

- Peierls-Nabarroモデル

- 刃状転位のBurgersベクトル分布関数

$$\psi^\alpha(x_1, x_2) = \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{x_1 - x_1^\alpha}{\zeta} \right) \right] H(x_2 - x_2^\alpha)$$



November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

7

古典弾性理論

- 応力の平衡方程式

- 応力の平衡方程式 (弱形式)

$$W[u_i] = \int_{\Omega} \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} dV \longrightarrow \int_{\Omega \setminus \bar{\Gamma}_D} C_{ijkl} \epsilon_{ij} h_{k,l} dV = 0$$

- NURBSを基底としたGalerkin法による弱形式解析

$$u_i = \sum_{I=1}^n N_I(t_1, t_2) a_{Ii} + \sum_{\alpha=1}^m \sum_{J \in S(\bar{\Gamma}_D^\alpha)} N_J(t_1, t_2) b_{Ji}^\alpha \psi^\alpha(x_1, x_2)$$

$$h_i = \sum_{I=1}^n N_I(t_1, t_2) c_{Ii} + \sum_{\alpha=1}^m \sum_{J \in S(\bar{\Gamma}_D^\alpha)} N_J(t_1, t_2) d_{Ji}^\alpha \psi^\alpha(x_1, x_2)$$

November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

8

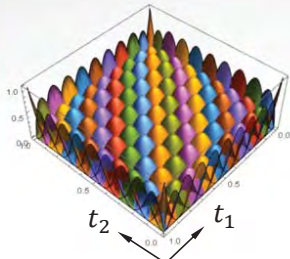
古典弾性理論

- アイソジオメトリック解析

- NURBS (Non-uniform Rational B-Spline)

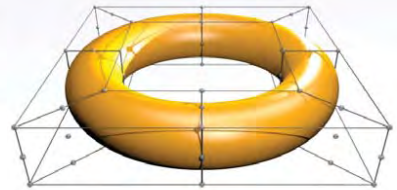
$$B_{(i,0)}(t) := \begin{cases} 1 & \text{if } \xi_i \leq t < \xi_{i+1} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$B_{(i,0)}(t) := \frac{t - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} B_{(i,p-1)}(t) + \frac{\xi_{i+p+1} - t}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} B_{(i+1,p-1)}(t)$$



$$x_i(t_1, t_2) = \sum_{I=1}^m N_I(t_1, t_2) A_{Ii}$$

NURBS写像



November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

9

古典弾性理論

- 応力の平衡方程式

- 応力の平衡方程式 (弱形式)

$$\int_{\Omega \setminus \bar{\Gamma}_D} C_{ijkl} h_{i,j} \epsilon_{kl} dV = 0 \quad \longrightarrow \quad \sum_{I=1}^n \sum_{J=1}^n c_{IJ} (K_{IJJk} a_{Jk} + F_{Ij}) = 0$$

$$K_{Iij} = \int_{\hat{\Omega}} C_{ijkl} \frac{\partial N_I}{\partial t_m} \left(\frac{\partial x_j}{\partial t_m} \right)^{-1} \frac{\partial N_J}{\partial t_n} \left(\frac{\partial x_l}{\partial t_n} \right)^{-1} dV$$

$$F_{Ij} = \int_{\hat{\Omega}} C_{ijkl} \frac{\partial N_I}{\partial t_p} \left(\frac{\partial x_j}{\partial t_p} \right)^{-1} \sum_{\alpha=1}^m \sum_{J \in S(\bar{\Gamma}_D^\alpha)} \left(\frac{\partial N_J}{\partial t_q} \left(\frac{\partial x_l}{\partial t_q} \right)^{-1} \psi^\alpha + N_J \frac{\partial \psi^\alpha}{\partial x_l} \right) dV$$

November 5, 2019

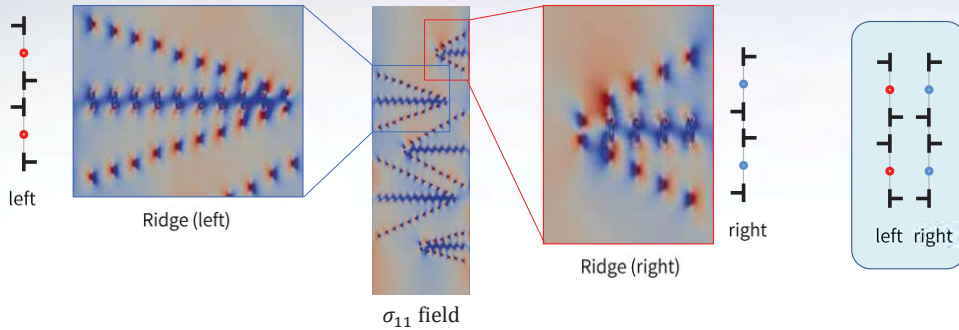
Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

10

古典弾性理論

くさび型キंकモデルの構築

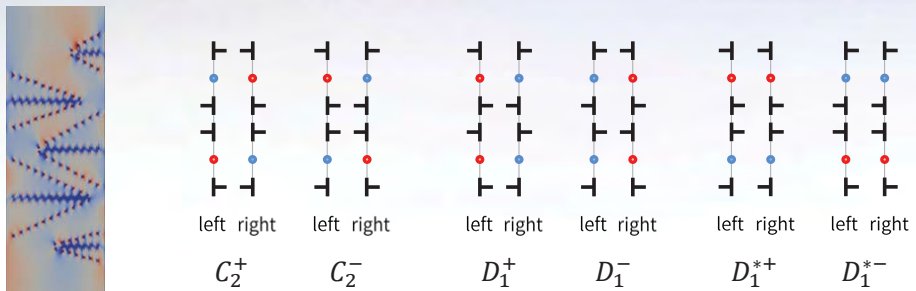
- 4個の転位源から放出される4本の刃状転位対の楔形配置



古典弾性理論

くさび型キंकモデルの構築

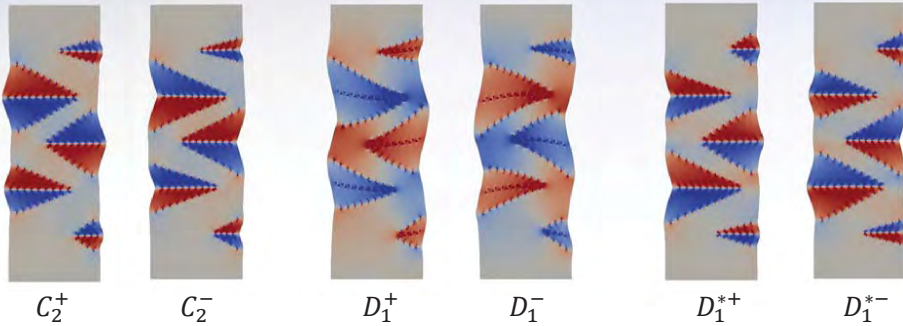
- 4個の転位源から放出される4本の刃状転位対の楔形配置



古典弾性理論

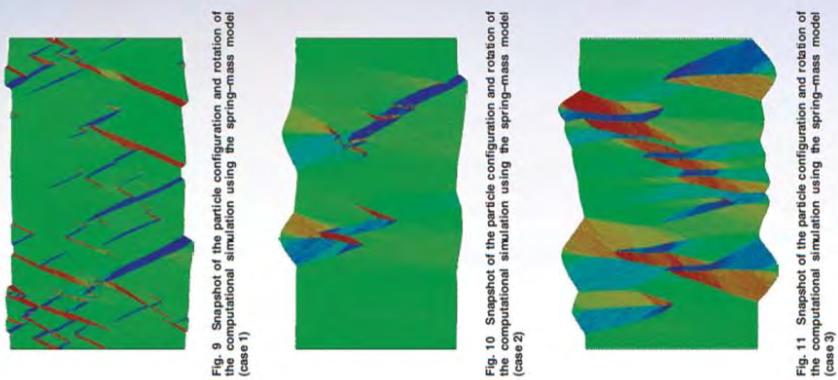
- くさび型数値計算結果

- キンク形状とスピンベクトル場の解析結果



古典弾性理論

- 原子モデルの解析結果：Lei-Nakatani (2015)



キンク変形のモデル化

弾性体の構成式

1. 古典弾性体のひずみエネルギー汎関数

$$W[u_i] = \int_{\Omega} \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} dV$$

将来的には2と3を統合した
マルチスケール力学解析を目指す

2. ひずみ勾配弾性体のひずみエネルギー汎関数

$$W[u_i] = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + M_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl,m} + \frac{1}{2} A_{ijklmn} \epsilon_{ij,k} \epsilon_{lm,n} \right) dV$$

3. 非線形弾性体のひずみエネルギー汎関数 (微分幾何学)

$$W[x_{[t]}] = \int_{M_{[0]}} \frac{1}{2} C(E, E) v_{[0]}$$

November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

15

ひずみ勾配弾性論

転位芯近傍の応力場

A nonsingular solution of the edge dislocation in the gauge theory of dislocations

Markus Lazar

J. Phys. A: Math. Gen. 36 (2003)

1415-1437.

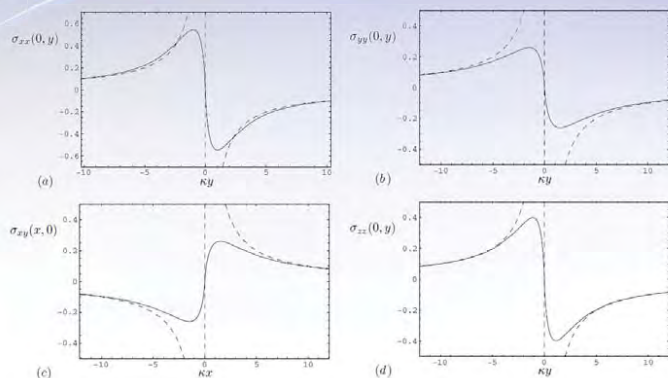


Figure 2. The stress components near the dislocation line: (a) $\sigma_{xx}(0, y)$, (b) $\sigma_{yy}(0, y)$, (c) $\sigma_{xy}(x, 0)$ are given in units of $\mu b \kappa / [2\pi(1-\nu)]$ and (d) $\sigma_{zz}(0, y)$ is given in units of $\mu b \nu \kappa / [\pi(1-\nu)]$. The dashed curves represent the classical stress components.

November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

16

ひずみ勾配弾性論

– ひずみ勾配弾性体の構成式

- ひずみエネルギー密度関数

$$\mathcal{W} = \underbrace{\frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}}_{\text{古典弾性項}} + \underbrace{M_{ijklm} \epsilon_{ij} \eta_{klm}}_{\text{相互作用項}} + \underbrace{\frac{1}{2} A_{ijklmn} \eta_{ijk} \eta_{lmn}}_{\text{ひずみ勾配項}}$$

- 弾性定数テンソル M_{ijklm} , A_{ijklmn} は特性長さを含む
- 多数の弾性定数 (一般: $21 + 108 + 171 = 300$, 等方・中心対称: $2 + 0 + 5 = 7$)
- 従来研究では5個のひずみ勾配弾性定数を現象論的に削減

November 5, 2019

Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

17

ひずみ勾配弾性論

– 応力の平衡方程式の単純化

- 等方なひずみ勾配弾性体の平衡方程式

$$\left[(\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right] - \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \left[l_1^2 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_j} + l_2^2 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right] = 0$$

$$l_1^2 = (4a_1 + 4a_2 + 3a_3 + 2a_4 + 3a_5)/2, \quad l_2^2 = a_3 + 2a_4 + a_5$$

- Ru & Aifantis: simplified SGE of Laplacian type (1996)

$$\left(1 - l^2 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \left[(\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right] = 0 \quad l_1^2 = (\lambda + \mu)l^2, \quad l_2^2 = \mu l^2$$

November 5, 2019

Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

18

ひずみ勾配弾性論

- ひずみ勾配弾性体の構成式

- ひずみエネルギー密度関数

$$\mathcal{W} = \underbrace{\frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}}_{\text{古典弾性項}} + \underbrace{M_{ijklm} \epsilon_{ij} \eta_{klm}}_{\text{相互作用項}} + \underbrace{\frac{1}{2} A_{ijklmn} \eta_{ijk} \eta_{lmn}}_{\text{ひずみ勾配項}}$$

- 弾性定数テンソル M_{ijklm} , A_{ijklmn} は特性長さを含む
- 多数の弾性定数 (一般: $21 + 108 + 171 = 300$, 立方体: $2 + 0 + 5 = 7$)
- 従来研究では5個のひずみ勾配弾性定数を現象論的に削減
→ 群論 (代数学) を用いて必要な弾性定数テンソルを非現象論的に削減

November 5, 2019

Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

19

ひずみ勾配弾性論

- ひずみ勾配弾性体の構成式

- 対称群の群環 (フロベニウス代数)
- アイデア : 弾性定数テンソルを一般線形群 $SO(3, \mathbb{R})$ 下で既約分解
- 方法 : シューア・ワイルの双対律*とヤング対称子 (原始冪等元)

$$\alpha_{ij} = \epsilon_{ij} + \omega_{ij}$$

$$\begin{cases} \epsilon_{ij} = \text{Sym } \alpha_{ij} = \frac{\alpha_{ij} + \alpha_{ji}}{2} \\ \omega_{ij} = \text{Asym } \alpha_{ij} = \frac{\alpha_{ij} - \alpha_{ji}}{2} \end{cases}$$



* f 階テンソルと f 次対称群の群環の既約表現の双対性

November 5, 2019

Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

20

ひずみ勾配弾性論

- 対称群の群環 (フロベニウス代数)

- ヤング対称子を用いた既約分解
- ヤング対称子の定義と原始冪等性

$$y_j^{(\lambda_i)} := \frac{h^{(\lambda_i)}}{f!} N_j^{(\lambda_i)} P_j^{(\lambda_i)}, \quad y_j^{(\lambda_i)} y_k^{(\lambda_i)} = y_k^{(\lambda_i)} y_j^{(\lambda_i)} = \begin{cases} y_j^{(\lambda_i)} & j = k \\ 0 & j \neq k \end{cases}$$

- 具体例：ヤング盤，ヤング対称子，既約分解

$$\Theta^{\{2\}} = \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \rightarrow y_1^{(2)} = \frac{1}{2}[e + (12)][e] \rightarrow y_1^{(2)} \alpha_{ij} = \frac{\alpha_{ij} + \alpha_{ji}}{2} = \epsilon_{ij}$$

$$\Theta^{\{1^2\}} = \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \rightarrow y_2^{(1^2)} = \frac{1}{2}[e - (12)][e] \rightarrow y_2^{(1^2)} \alpha_{ij} = \frac{\alpha_{ij} - \alpha_{ji}}{2} = \omega_{ij}$$

November 5, 2019

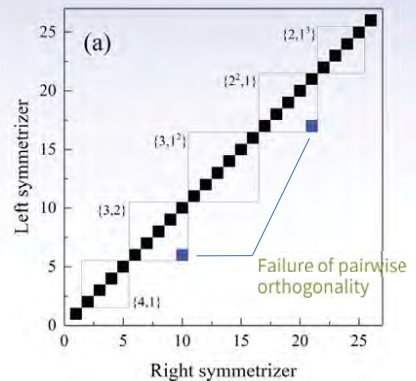
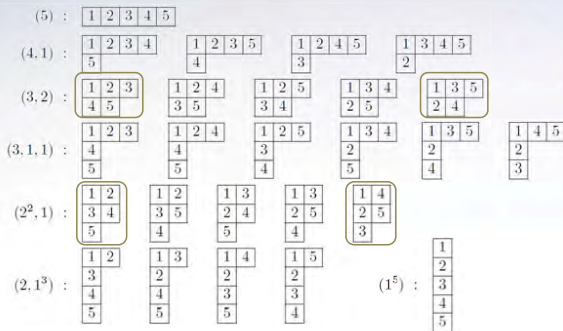
Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

21

ひずみ勾配弾性論

- 対称群の群環 (フロベニウス代数)

- 5階テンソルの既約分解



November 5, 2019

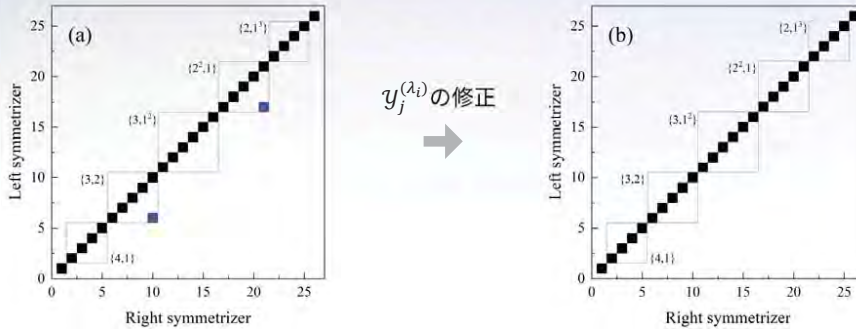
Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

22

ひずみ勾配弾性論

– 対称群の群環（フロベニウス代数）

- 5階テンソルの既約分解（26個のヤング対称子 $y_j^{(\lambda_i)}$ ）



November 5, 2019

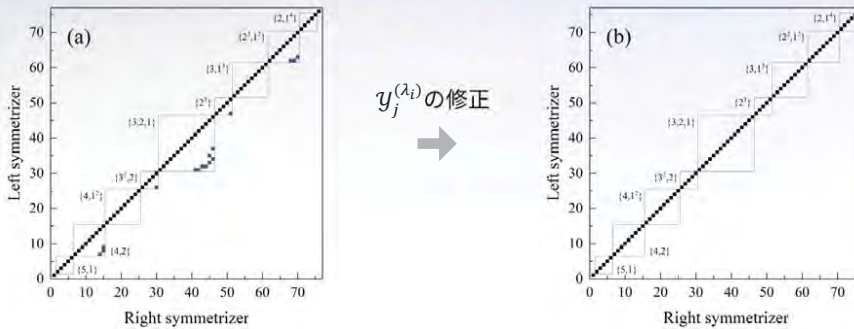
Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

23

ひずみ勾配弾性論

– 対称群の群環（フロベニウス代数）

- 6階テンソルの既約分解（76個のヤング対称子 $y_j^{(\lambda_i)}$ ）



November 5, 2019

Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

24

非局所弾性理論

– ひずみ勾配弾性体の構成式

- ひずみエネルギー密度関数

$$\mathcal{W} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + M_{ijklm} \epsilon_{ij} \eta_{klm} + \frac{1}{2} A_{ijklmn} \eta_{ijk} \eta_{lmn}$$

- 弾性定数テンソルの既約分解結果

$$C_{ijkl} = C_{ijkl}^{(4)} + C_{ijkl}^{(2^2)}$$

$$M_{ijklm} = M_{ijklm}^{(5)} + M_{ijklm}^{(4,1)} + M_{ijklm}^{(3,2)} + M_{ijklm}^{(3,1^2)} + M_{ijklm}^{(2^2,1)}$$

$$A_{ijklmn} = A_{ijklmn}^{(6)} + A_{ijklmn}^{(5,1)} + A_{ijklmn}^{(4,2)} + A_{ijklmn}^{(4,1^2)} + A_{ijklmn}^{(3,2,1)} + A_{ijklmn}^{(2^3)}$$

ひずみ勾配弾性論

– 構成式の再構成

- 等方性と中心対称性の導入：2 + 0 + 5 = 7

Cauchy solid : $\lambda = \mu$

$$\mathcal{W} = \frac{1}{2} C_{ijkl}^{(4)} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \frac{1}{2} C_{ijkl}^{(2^2)} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \frac{1}{2} A_{ijklmn}^{(6)} \eta_{ijk} \eta_{lmn} + \frac{1}{2} A_{ijklmn}^{(4,2)} \eta_{ijk} \eta_{lmn} + \frac{1}{2} A_{ijklmn}^{(3,2,1)} \eta_{ijk} \eta_{lmn}$$

generalized Cauchy solid

couple-stress elasticity

elastic null-Lagrangian

ひずみ勾配弾性論

– 構成式の再構成

- Cauchy型ひずみ勾配弾性体

- Primitive Symmetry Class (ボゾン表現) : $C_{ijkl}^{(4)}, A_{ijklmn}^{(6)}$

$$\mathcal{W} = \frac{1}{2} C_{ijkl}^{(4)} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \frac{1}{2} A_{ijklmn}^{(6)} \eta_{ijk} \eta_{lmn}$$

- 応力の平衡方程式 (ナビエ形式)

$$\mu \left[\left(2 \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) - l^2 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \left(4 \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) \right] = 0$$

ひずみ勾配弾性論

– 構成式の再構成

- 過去の研究との比較

- Cauchy型ひずみ勾配弾性論 (本研究)

$$\mu \left[\left(2 \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) - l^2 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \left(4 \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) \right] = 0$$

- ラプラシアン型ひずみ勾配弾性論 (Ru & Aifantis, 1996)

$$\left(1 - l^2 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \left[(\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right] = 0$$

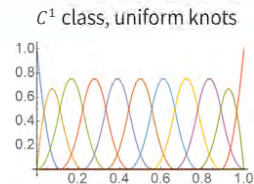
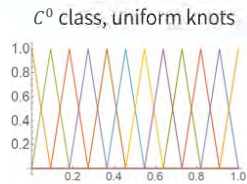
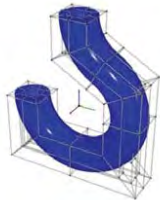
アイソジオメトリック解析

– アイソジオメトリック解析 (IGA)

- ガラーキン法による数値解析
 - 応力の平衡方程式 (弱形式)

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial u_{i,j}} \delta u_{i,j} + \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial u_{i,j,k}} \delta u_{i,j,k} \right) dV - \int_{\Omega} F_i \delta u_i dV - \int_{\partial\Omega} p_i \delta u_i dS - \int_{\partial\Omega} R_i D \delta u_i dS = 0$$

- NURBSによる弾性体の表現と C^1 級の滑らかな基底関数



November 5

29

アイソジオメトリック解析

- **Large-scale Computation**
 - OCTOPUS (CMC@Osaka Univ.)
 - 2 nodes (16.38 TFLOPS)
 - CPU: 128 core
 - **Memory: 6TB!**
- **Stiffness Matrix**
 - 2 nodes MPI: ~ 3 hours
 - Sparse matrix analysis (1 node, iterative method) : ~ 1 hours
 - (2 Level Addidice Schwarz)

November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka Univ.

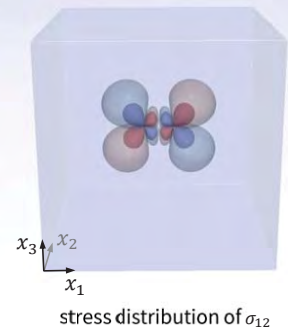
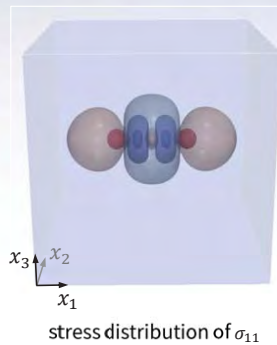


30

アイソジオメトリック解析

- 格子欠陥対近傍の応力場

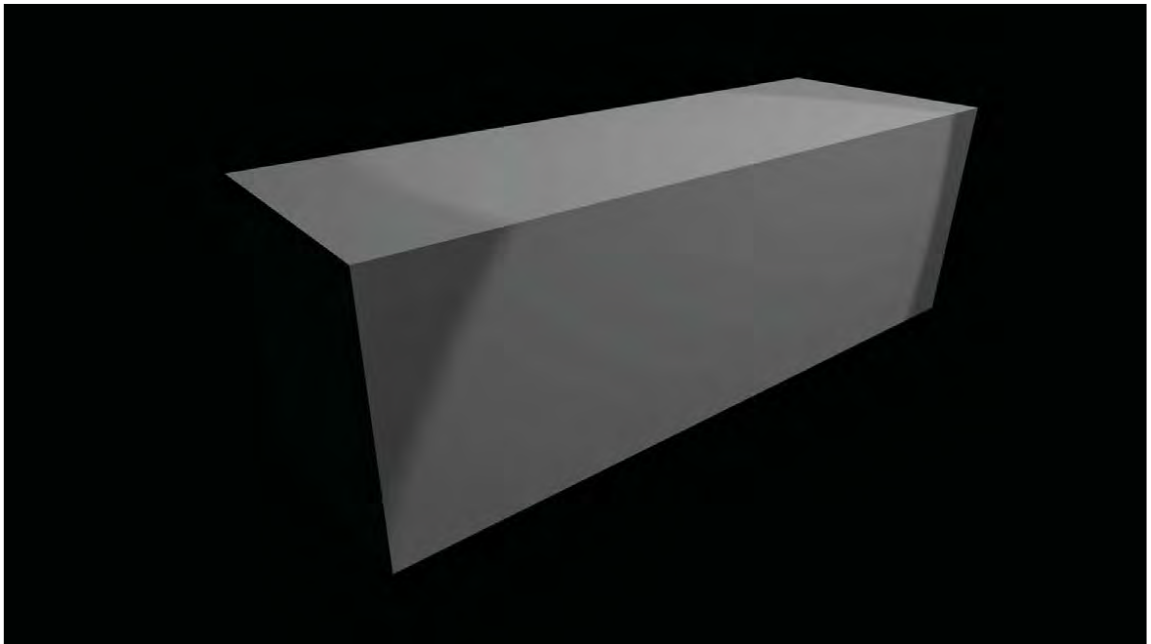
- \mathcal{W} : Cauchy type S.G.E.
- l : $l = 1.0 \times 10^{-4}$
- NURBS : order $p = 2$ (C^1 class)
- Knots : 150^3 (uniform knots)
- DOF : $3 \times 150^3 \approx 10,125,000$
- B.C. : Dirichlet
- Solver : own code (iterative)
- Machine: OCTOPUS (@CMC)
- Iteration: 1,034 times
- Elapsed : 2,093 s



November 5, 2019

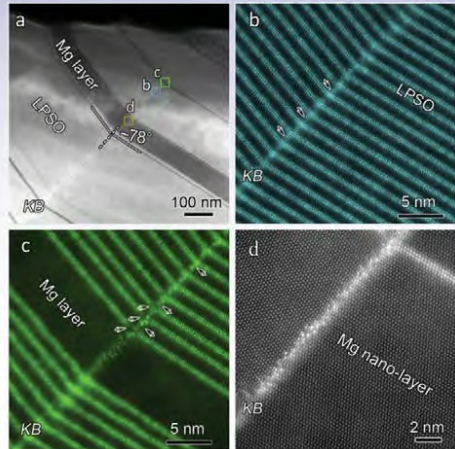
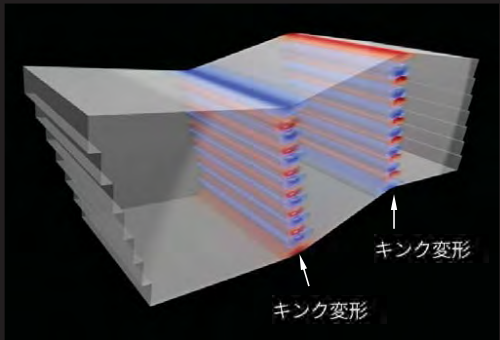
Nonlinear Solid Mechanics @ Osaka University

31



ミルフィーユ構造の材料科学

• キンク変形の数値解析結果

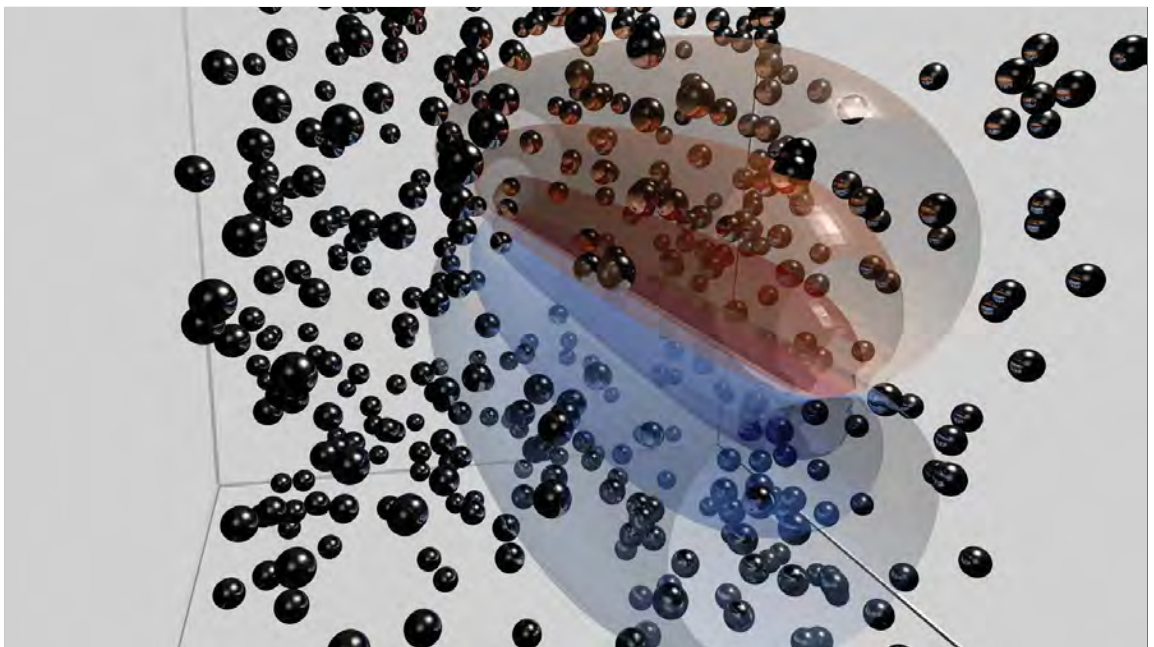


X.H. Shao *et al.*, *Acta Materialia* 118 (2016) 177-186

November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

33



キンク変形のモデル化

弾性体の構成式

1. 古典弾性体のひずみエネルギー汎関数

$$W[u_i] = \int_{\Omega} \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} dV$$

将来的には2と3を統合した
マルチスケール力学解析を目指す

2. ひずみ勾配弾性体のひずみエネルギー汎関数

$$W[u_i] = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + M_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl,m} + \frac{1}{2} A_{ijklmn} \epsilon_{ij,k} \epsilon_{lm,n} \right) dV$$

3. 非線形弾性体のひずみエネルギー汎関数 (微分幾何学)

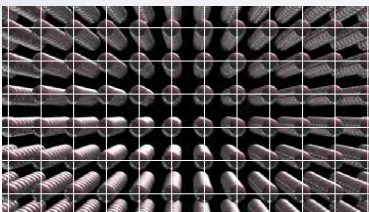
$$W[x_{[t]}] = \int_{M_{[0]}} \frac{1}{2} C(E, E) v_{[0]}$$

微分幾何学の導入

弾性体の運動学

- 三つの状態の導入：初期状態，中間状態（参照状態），現状態

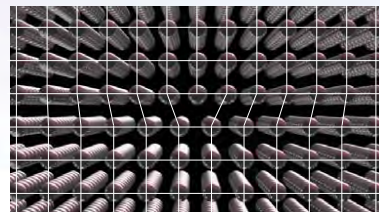
$$(M_{[0]}, g_{[0]}, \nabla_{[0]}) \xrightleftharpoons{\text{微分同相}} (M_{[0]}, g_{[0]}, \nabla_{[0]}) \xrightleftharpoons{\text{微分同相}} (M_{[t]}, g_{[t]}, \nabla_{[t]})$$



無ひずみ (完全結晶)

?

塑性ひずみ



弾性ひずみ + 塑性ひずみ

微分幾何学の導入

– 微分幾何学による格子欠陥の表現

- 振率テンソルと転位密度テンソル

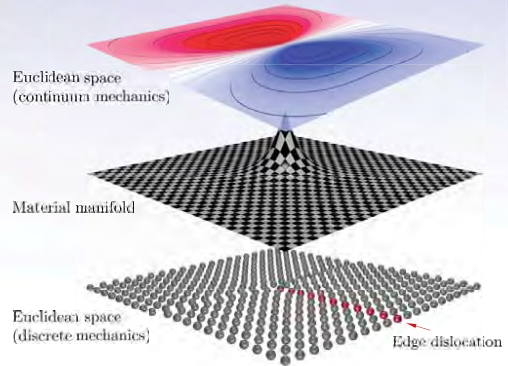
$$T = T_{jk}^i \frac{\partial}{\partial x^i} \otimes dx^j \otimes dx^k$$

$$\alpha = \alpha^{ij} \frac{\partial}{\partial x^i} \otimes \frac{\partial}{\partial x^j}$$

- 曲率テンソルと回位密度テンソル

$$R = R_{jkl}^i \frac{\partial}{\partial x^i} \otimes dx^j \otimes dx^k \otimes dx^l$$

$$\theta = \theta^{ij} \frac{\partial}{\partial x^i} \otimes \frac{\partial}{\partial x^j}$$



微分幾何学の導入

– 中間状態の計量テンソル

- Cartanの構造方程式

$$\begin{cases} \tau^i = d\vartheta^{(0)i} + \omega_j^i \wedge \vartheta^{(0)j} \\ \Omega_j^i = d\omega_j^i + \omega_k^i \wedge \omega_j^k \end{cases}$$

- 接続, 曲率, 振率の微分形式

$$\begin{cases} \omega_j^i = \omega_{kj}^i \vartheta^{(0)k} \\ \Omega_j^i = R_{jkl}^i \vartheta^{(0)k} \wedge \vartheta^{(0)l} \\ \tau^i = T_{jk}^i \vartheta^{(0)j} \wedge \vartheta^{(0)k} \end{cases}$$

- 正規直交枠と双対枠

- $p \in M_{[0]}$ での $T_p M_{[0]}$ の正規直交枠 $e^{(0)}|_p$ と余接空間 $T_p^* M_{[0]}$ の双対枠

$$g_{[0]p} = \left(e_i^{(0)} \Big|_p, e_j^{(0)} \Big|_p \right) = \delta^{ij}$$

$$\vartheta^{(0)i} \Big|_p \left(e_j^{(0)} \Big|_p \right) = e_j^{(0)} \Big|_p \vartheta^{(0)i} \Big|_p = \delta_j^i$$

- 計量テンソル

$$g_{[0]} = \delta_{ij} \vartheta^{(0)i} \otimes \vartheta^{(0)j}$$

A. Yavari & A. Goriely, Riemann-Cartan geometry of nonlinear dislocation mechanics, Arch. Rat. Mech. Anal., 2012

微分幾何学の導入

– 材料多様体上の弾性理論

- 弾性定数テンソル場とひずみエネルギー汎関数

$$W = \int_{M_{[0]}} \frac{1}{8} C^{ijkl} \left(\delta_{pq} \frac{\partial x_{[t]}^p}{\partial x_{[0]}^i} \frac{\partial x_{[t]}^q}{\partial x_{[0]}^j} - g_{[0]ij} \right) \left(\delta_{rs} \frac{\partial x_{[t]}^r}{\partial x_{[0]}^k} \frac{\partial x_{[t]}^s}{\partial x_{[0]}^l} - g_{[0]kl} \right) v_{[0]}$$

- 応力の平衡方程式（弱形式）

$$\delta W = \int_{M_{[0]}} C^{ijkl} \left(\delta_{pq} \frac{\partial x_{[t]}^p}{\partial x_{[0]}^i} \frac{\partial x_{[t]}^q}{\partial x_{[0]}^j} - g_{[0]ij} \right) \left(\delta_{rs} \frac{\partial x_{[t]}^r}{\partial x_{[0]}^k} \frac{\partial v^s}{\partial x_{[0]}^l} \right) v_{[0]} = 0$$

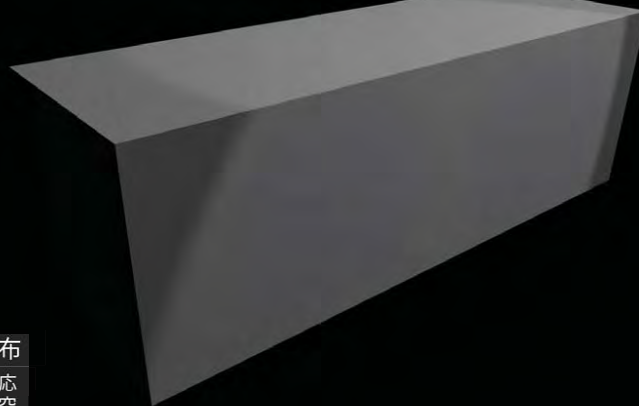
November 5, 2019

Nonlinear solid mechanics @ Osaka University

39

研究例：転位ループの応力場

- 微分幾何学の導入によって転位ループの数理モデル化・解析も可能
- 従来の離散転位動力学法を発展させた新しい連続転位動力学法の開発が期待される



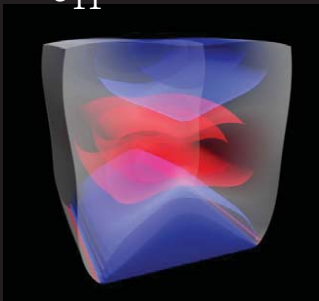
コーシー応力 σ_{11} の分布

第二ピオラ・キルヒホッフ応力テンソルのユークリッド空間³へのPush Forward

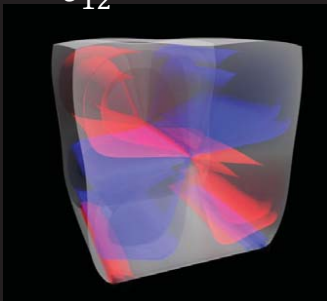
研究例：回位の応力場

- 微分幾何学の導入によって、転位とは異なる欠陥である回位の数理モデル化・数値解析も可能

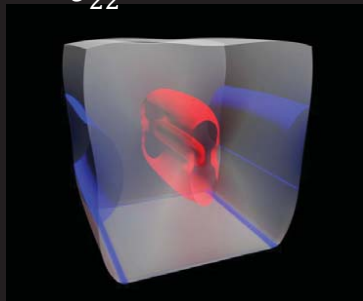
σ_{11}



σ_{12}



σ_{22}



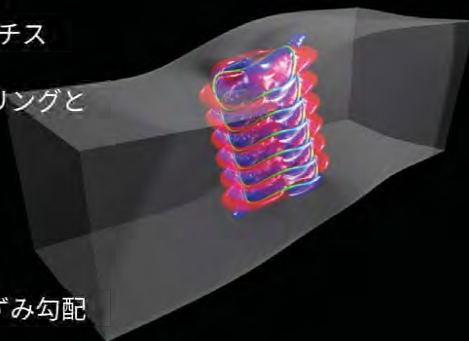
まとめ

- キンク変形のモデリング

- ✓ Peierls-Nabarroモデルを用いた古典弾性論
- ✓ Cauchy型ひずみ勾配弾性理論を用いたマルチスケール解析
- ✓ 幾何学的弾性理論を用いた格子欠陥のモデリングと大規模数値解析
- キンク変形の動力学解析

- 格子欠陥の連続体力学解析

- マルチスケールな幾何学的弾性理論の構築
(非局所性 (微分幾何学) と非線形性 (ひずみ勾配理論) の融合)



結晶格子の標準実現とその物質科学への応用
(Standard realizations of crystal lattices and their applications to material
sciences)

内藤久資, Hisashi Naito

名古屋大学 大学院多元数理科学研究科
Graduate School of Mathematics, Nagoya University

Crystal structures are usually described by crystallographic groups, which represent the symmetry of the structure. However, such a group is only describes the symmetry of atoms in the crystal, and does not describe chemical bonds between atoms.

A crystal lattice (a topological crystal), which is defined by M.Kotani and T.Sunada, is a locally finite graph with an action of an abelian group, and describes both of symmetry of atoms and chemical bonds between atoms of the crystal. However, crystal lattices are defined as abstract graph, we can not define positions of atoms in the crystal. Kotani and Sunada also define the energy of a crystal lattice, defined the notion of standard realizations of crystal lattices via a variational problem for the energy, and they prove the existence standard realizations for any crystal lattices

In this talk, we give an overview of the theory of crystal lattices, and discuss K4-carbon and negatively curved carbon crystals by using the theory.

REFERENCES

- [1] M.Itoh, M.Kotani, H.Naito, T.Sunada, Y.Kawazoe, T.Adschiri, New Metallic Carbon Crystal, *Physical Review Letters*, **102**, 055703, (2009).
- [2] M.Kotani, T.Sunada, Standard realization of crystal lattice via harmonic maps, *Trans. AMS*, **353**, 1-20, (2000).
- [3] M.Kotani, H.Naito, T.Omori, A discrete surface theory, *Computer Aided Geometric Design* **58**, 24-54, (2017).
- [4] M.Kotani, H.Naito, C.Tao, Construction of continuum from a discrete surface by its iterated subdivisions, (arXiv:1806.03531).
- [5] H.Naito, Visualization of Standard Realized Crystal Lattices, *Contemporary Mathematics*, **484**, 153-164, (2009).
- [6] H.Naito, Construction of Negatively Curved Cubic Carbon Crystals via Standard Realizations, *Springer Proc. Math. Stat.*, **166**, 83-100, (2016).
- [7] T.Omori, H.Naito, T.Tate, Eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for 3- and 4-valent graphs, *Electron. J. Combin.*, **26(3)**, #P3.7., (2019).
- [8] T.Sunada, *Topological Crystallography*, Springer, 2013
- [9] T.Sunada, Crystals that nature might miss creating *Notices AMS*, **55**, 208-215, (2008).
- [10] M.Tagami, Y.Y.Liang, H.Naito, Y.Kawazoe, M.Kotani, Negatively curved cubic carbon crystals with octahedral symmetry, *Carbon*, **76**, 266-274, (2014).

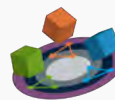
結晶格子の標準実現とその物質科学への応用

内藤 久資

名古屋大学多元数理科学研究科

Sept. 09, 2019

結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析
九州大学 IMI ワークショップ



Discrete Geometric
Analysis for
Materials Design

全体の流れ

- ① 結晶格子と標準実現
- ② 炭素構造
- ③ 離散曲面論

結晶の古典的な記述

- 結晶構造：空間内の「規則的」な原子の配置
- 原子の配置を「群」を用いて記述する（空間群）
- $\Gamma \subset G$ が n 次元結晶群 \iff
 - ① $G : \mathbb{R}^n$ の合同変換群, $T : \mathbb{R}^n$ の平行移動全体のなす群
 - ② $\Gamma \subset G$: 離散部分群
 - ③ $\Gamma \cap T \cong \mathbb{Z}^n$

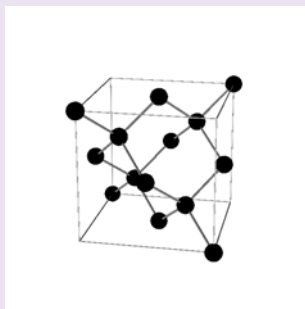
3次元結晶構造

- 3次元結晶：3方向への「平行移動で不変」な図形
- 3次元結晶群：230種類（20世紀前半）
- 回転対称性：(2回) 3回, 4回, 6回に限る

Example: ダイヤモンドの空間群 $Fd\bar{3}m$

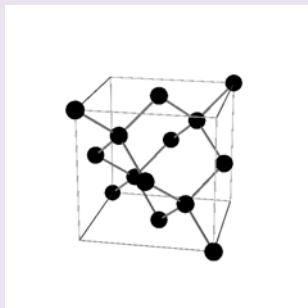
- F : 体心立方格子
- d : ダイヤモンドグライド面をもつ
- $\bar{3}$: 3回反転対称軸をもつ
- m : 3回反転対称軸に垂直な鏡映面をもつ

cf. <http://nc-imr.imr.tohoku.ac.jp/HERMES/Analysis/SPGroup.html>



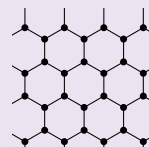
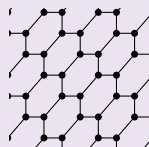
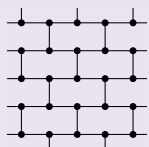
ダイヤモンド構造

- 各炭素原子は4つの炭素原子と共有結合で結合
 - ▶ 炭素の最外殻電子数は4
 - ▶ sp^3 混成軌道での結合（他の4つの炭素原子と結合）



結晶群で結晶の構造は分かったのか？

- 結晶群：原子配置の対称性のみを記述している
- 原子同士の結合も含めた結晶の記述を考えたい
- 自然界にあらわれる構造：
 - ▶ 対称性の高い構造が出てくるだろう
 - ▶ 「エネルギー」の低い構造が出てくるだろう
- 抽象的な六角格子



この中でもっとも対称性の高い配置は？

結晶格子の数学的記述

- 「結晶格子の標準実現」 (Kotani-Sunada [2])
- 与えられたグラフ構造の中で最も対称性の高い配置を求める
- $E = \sum_{\text{頂点 } v \text{ の隣接点}} |v_i - v|^2$
- 標準実現：
 - ▶ 「格子」の体積を一定に保つ条件の下で E を最小とする配置
 - ▶ E を最小とする配置を平行移動することによって得られる
 - ▶ 最も対称性が高い配置

定義：結晶格子 (Kotani-Sunada [2])

局所有限グラフ $X = (V, E)$ が d 次元結晶格子であるとは

- ある有限グラフ $X_0 = (V_0, E_0)$ が存在して,
 X は X_0 の covering
- $\Gamma = X/X_0$ はアーベル群, $\text{rank } \Gamma = d$

Remark

- $\Gamma = H_1(X, \mathbb{Z})$ のとき, X は X_0 の極大アーベル被覆
- 以下 $\rho: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^d$ を ρ の忠実な表現とする
このとき $\rho(\Gamma)$ は \mathbb{R}^d の格子

結晶格子の実現

- $X = (V, E)$: d 次元結晶格子, X_0 : X の base graph,
 $\Gamma = X/X_0$
- $\Phi: X \rightarrow \mathbb{R}^d$ を結晶格子の**実現**と呼ぶ
- X の**実現** Φ が

$$\Phi(\sigma v) = \Phi(v) + \rho(\sigma), \quad v \in V, \sigma \in \Gamma$$

をみたすとき Φ を X の**周期的実現**と呼ぶ

結晶格子の標準実現

- X の**周期的実現** Φ の**エネルギー**

$$E(\Phi) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V_0} \sum_{v_i \in E(v)} |v - v_i|^2$$

- Φ が X の**標準実現**:

$\text{Vol}(\rho(\Gamma)) = 1$ の条件の下での E の**臨界点**

定理 (Kotani-Sunada [2])

任意の d 次元結晶格子 X に対して、
 X の標準実現が（運動群の作用を除いて）一意的に存在する

標準実現の性質

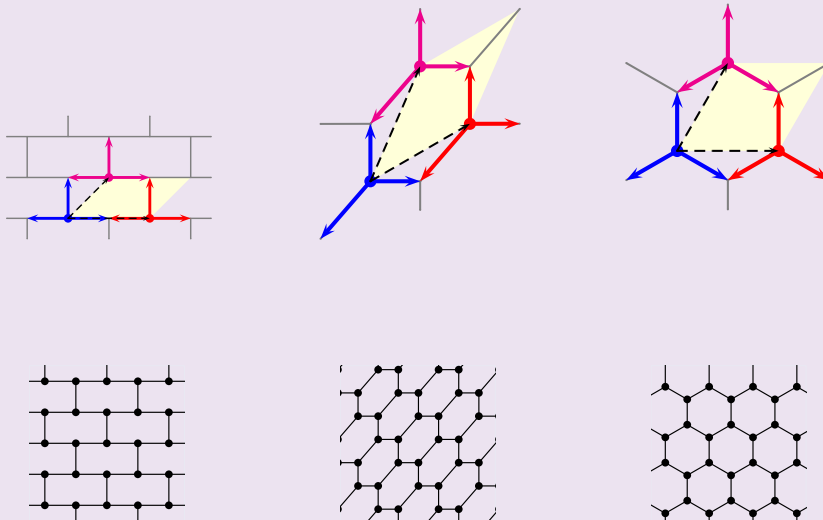
- 「最も対称性が高い」

- ▶ $\text{Aut}(X)$: X の自己同型群（グラフとしての自己同型）
- ▶ $\text{Aut}(\Phi(X))$: $\Phi(X)$ の自己同型群（運動群の部分群）
- ▶ Φ が標準実現

⇔

$\sigma \in \text{Aut}(X)$ に対して $\Phi \circ \sigma \in \text{Aut}(\Phi(X))$ が成り立つ

Example



標準実現の特徴付け

- ① $\sum_{e \in E_x} \langle \mathbf{x}, \mathbf{v}(e) \rangle = 0$ (調和実現)
- ② $\sum_{e \in E_0} \langle \mathbf{y}, \mathbf{v}(e) \rangle^2 = |\mathbf{y}|^2, \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$

その他の平面結晶格子

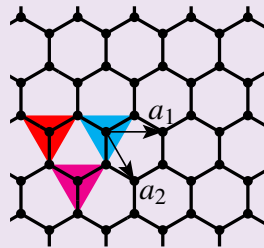
- 正方格子：2-bouquet graph の max. abelian cover
- 三角格子：3-bouquet graph の射影
 - ▶ 3-bouquet graph の max. abelian cover: 立方格子
 - ▶ 立方格子 E_0 を $ve_1 + e_2 + e_3 = 0$ に射影

強等方性結晶 (Sunada [9])

- 結晶格子 $X = (V, E)$ が強等方的とは
 - ① X は degree d の正則グラフ
 - ② 任意の $x, y \in V$ と任意の $\sigma \in \mathfrak{S}_d$ に対して、ある $g \in \text{Aut}(X)$ が存在して、 $gx = y, ge_i = f_\sigma(i)$ が成り立つ
 $e_i \in E_x, f_j \in E_y$
- 強等方的結晶の例
 - ▶ 2次元：正六角格子
 - ▶ 3次元：ダイヤモンド格子, K4 格子

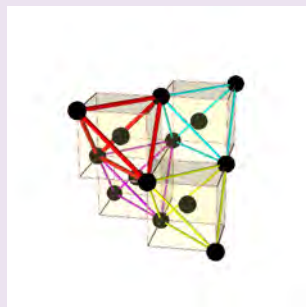
グラフェン構造

- 各炭素原子は3つの炭素原子と共有結合で結合
 - ▶ sp^2 混成軌道での結合
 - ▶ 各炭素原子につき一つの電子が余っている \implies 電気伝導性
- グラフェンの構造：2次元空間群 $p6mm$
 - ▶ 正三角形の頂点と重心にある4原子を平行移動した構造

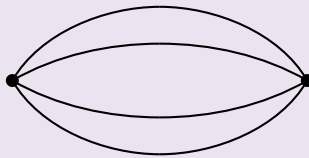


ダイヤモンド構造

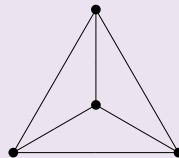
- 各炭素原子は4つの炭素原子と共有結合で結合
 - ▶ 炭素の最外殻電子数は4
 - ▶ sp^3 混成軌道での結合
- ダイヤモンドの構造：3次元空間群 $Fd\bar{3}m$
 - ▶ 正四面体の頂点と重心にある5原子を平行移動した構造



基本有限グラフ (3次元の例)



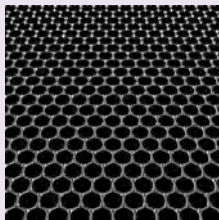
ダイヤモンド格子



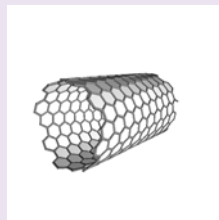
K4格子

炭素構造

近年発見された炭素同素体



グラフェン



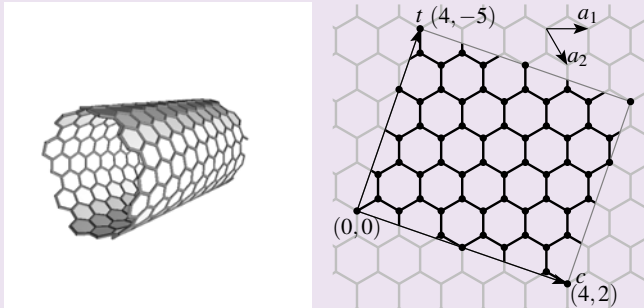
カーボンナノチューブ



フラーレン (C60)

単層カーボンナノチューブ

- 各炭素原子は3つの炭素原子と sp^2 混成軌道での共有結合で結合
- 単層ナノチューブの構造：
 - ▶ グラフェン構造を「円筒形に丸めた」もの
 - ▶ $c = (c_1, c_2)$ ：カイラル指数
(原点と c の位置にある原子を同一視する)

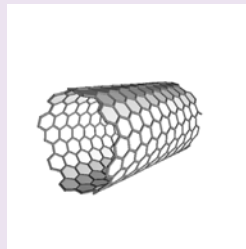


単層ナノチューブのカイラル指数

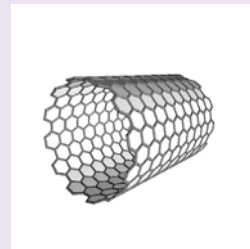
- カイラル指数 (カイラルベクトル) (c_1, c_2)
 - ▶ $c_1 \equiv c_2 \pmod{3} \implies$ 金属
 - ▶ $c_1 \not\equiv c_2 \pmod{3} \implies$ 半導体
 - ▶ $(c_1, c_2) = (n, n) \implies$ アームチェア型
 - ▶ $(c_1, c_2) = (n, 0) \implies$ ジグザグ型



$c = (12, 0)$
ジグザグ型



$c = (12, 8)$
カイラル型



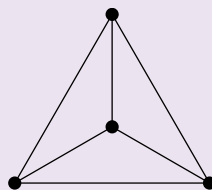
$c = (12, 12)$
アームチェア型

新しい炭素構造の可能性を探る

- 幾何学的な視点から新しい構造を探す
 - ▶ 高い対称性をもつ構造を探す
 - ▶ いろいろな幾何学的視点から新しい構造を探す
- 第一原理計算
 - ▶ コンピュータによって物質の性質を計算する
 - ▶ 物質が安定に存在するかを知ることができる
 - ▶ 物質の電気伝導性などの性質がわかる

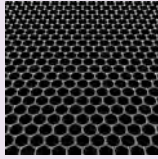
炭素 K4 構造

- K4 構造は srs-net として比較的以前から知られていた
 - ▶ Gyroid 構造の「骨組み」となる構造
- 強等方的なので安定な構造が出てくる可能性があった
- 炭素 K4 は電気伝導性をもつ準安定構造 (第一原理計算)
(Itoh-Kotani-N-Sunada-Kawazoe-Adschiri [1])



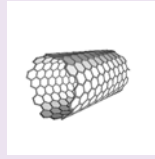
炭素構造と離散幾何学

- いくつかの炭素構造は「曲面」を作っているように見える



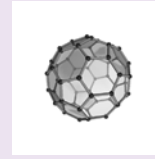
グラフェン
平面

$$K = 0, (\chi = 0)$$



カーボンナノチューブ
円筒

$$K = 0, (\chi = 0)$$



フラーレン (C60)
球面

$$K > 0, (\chi = 2)$$

- これら炭素構造の作る「曲面」を「離散曲面」と呼ぼう
- これら炭素構造はすべて sp^2 構造：「三分岐離散曲面」
- $K < 0$ の曲面に対応する三分岐離散曲面は存在するか？

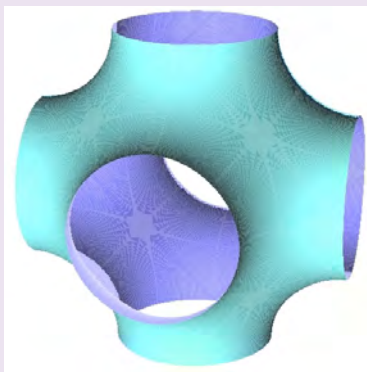
炭素構造とオイラー数

- 離散曲面に対して $\chi = V - E + F$ をオイラー数と呼ぶ
- 三分岐離散曲面が k 角形を N_k 個もつと
 - $V = \sum_k (k/3)N_k$, $E = \sum_k (k/2)N_k$, $F = \sum_k N_k$
 - $\sum_k (1 - k/6)N_k = 2 - 2g = \chi = \frac{1}{2\pi}K$
 - 六角形はオイラー数に影響を与えない
- 炭素構造のオイラー数

	N_5	N_6	V	E	F	χ	K
C60	12	60	60	90	32	2	正
単層ナノチューブ $c = (6, 6)$	0	12	24	36	12	0	0

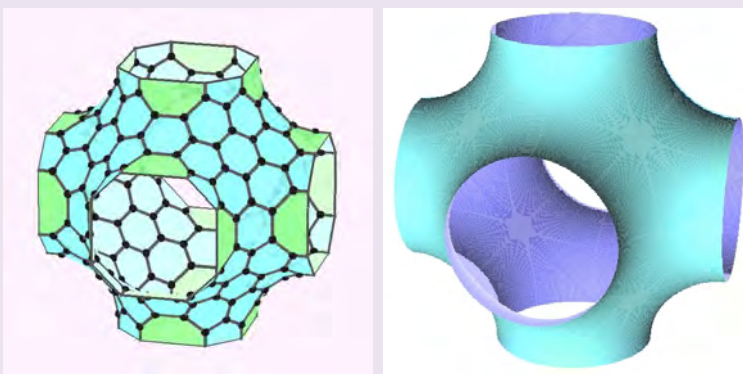
周期的な極小曲面

- シュワルツ P 曲面
 - ▶ 三重周期的な極小曲面
 - ▶ $g = 3, \chi = -4, K < 0$



負曲率炭素構造

- 負曲率炭素構造のモデルとなる曲面：
 - ▶ シュワルツ P 曲面 (三重周期極小曲面)
- Mackay 結晶 (Mackay-Terrones (1994)) (Schwartzie)



Mackay 結晶

- Mackay 結晶のオイラー数

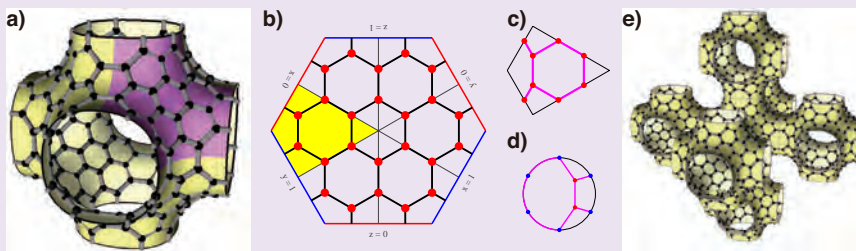
N_6	N_8	V	E	F	χ	K
90	12	192	288	102	3	負

- 安定な半導体構造 (第一原理計算)

問題

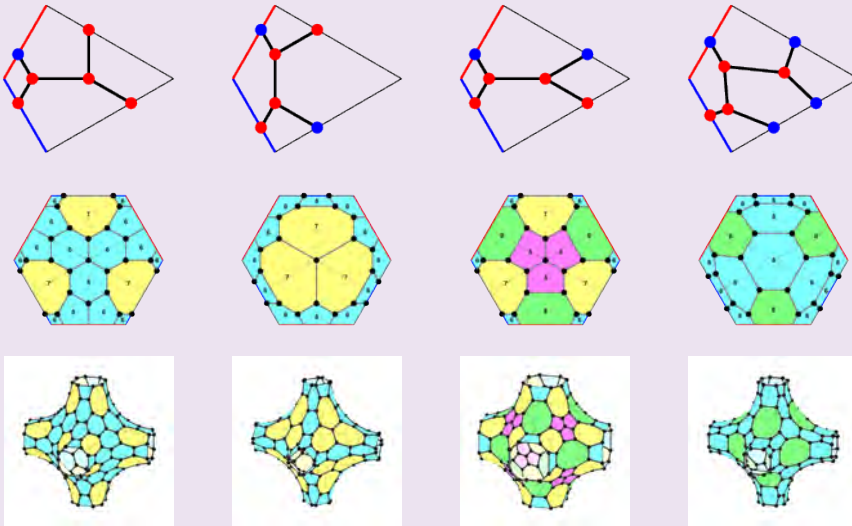
他には「負曲率炭素構造」は存在するか？

Mackay 結晶の構成方法 (Tagami-Liang-N-Kawazoe-Kotani [10])

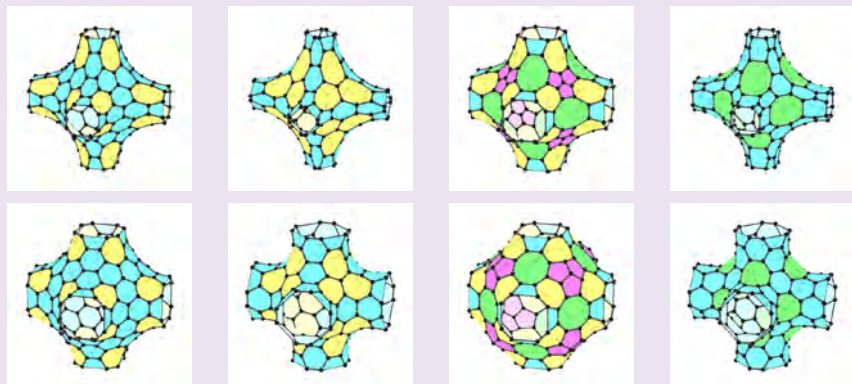


- a) \Leftarrow b) (“hexagonal region”) の 8 枚の張り合わせ
- b) \Leftarrow c) (“kite region”) の 6 枚の張り合わせ
- d) の領域に適切なグラフを構成する

Mackay 型結晶の構成



Mackay 型結晶の構成



metal

$$\#V = 176$$

$$N_6 = 60, N_7 = 24$$

metal

$$\#V = 152$$

$$N_6 = 48, N_7 = 24$$

metal

$$\#V = 152$$

$$N_5 = 24, N_6 = 12$$

$$N_7 = 24, N_8 = 12$$

semi-conductor

$$\#V = 158$$

$$N_6 = 68, N_8 = 12$$

上段：標準実現, 下段：安定構造

Mackay 型結晶の標準実現を求める方法

- $\{\mathbf{x}_i\}$: 頂点座標
- $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$: 格子ベクトル ($\det(\mathbf{e}_x \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z) = 1$)
- E : エネルギー

$$E = \sum_{(p_i, p_j) \in E_0} |\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|^2 + \sum_{(p_i, p_j) \in E_{(0,+)}} |\mathbf{x}_j + \mathbf{e}_\alpha - \mathbf{x}_i|^2 \\ + \sum_{(p_i, p_j) \in E_{(0,-)}} |\mathbf{x}_j - \mathbf{e}_\alpha - \mathbf{x}_i|^2$$

- 標準実現を求めるには, $\det(\mathbf{e}_x \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z) = 1$ の条件の下で \mathbf{x}, \mathbf{e} に関する変分問題を解けばよい

Theorem ([10])

- 標準実現を求めるための連立一次方程式 $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{b}$
 - ▶ $b_i = \pm \mathbf{e}_\alpha$ (v_i が隣接セルの頂点に隣接する場合)
 - ▶ $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{b}$ が可解 $\iff \sum b_i = 0$
- 標準実現を与える格子ベクトルは立方格子
 - ▶ \mathbf{e} が標準実現の格子ベクトルならば, $\mathbf{e}^T \mathbf{e} = \mathbf{E}$
 - ▶ 標準実現 $\iff X$ の自己同型が $\Phi(X)$ の自己同型に延びる

離散幾何学

- 「離散幾何学」：離散曲面に対する幾何学
 - ▶ 「離散曲面の曲率」
 - ▶ 「離散曲面の収束」
- 従来の離散曲面：連続曲面の「離散化」または「近似」
 - ▶ 四分岐離散曲面, 三角形分割を考えることが多い
 - 四分岐離散曲面：「通常の離散化」
 - 三角形分割：有限要素法で使われる
- 三分岐離散曲面はあまり考察されていない
- 結晶構造から離散幾何学：本質的に離散な対象を考察

離散曲面の曲率

- 古典的な「離散ガウス曲率」：“angle defect”
 - ▶ $p \in M$ のまわりにあつまる多角形を考え

$$K = 2\pi - \sum \theta_i$$
 と定義する
 - ▶ Mackay 結晶では, 各点とその近傍3点は co-planar

$$K = 0$$
 - ▶ Mackay 結晶は「負曲率」になってほしい
 - Euler number から得られる「離散全曲率」は負
- angle defect にかわるガウス曲率の定義が必要

滑らかな曲面の曲率

- 曲面: $p: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$,
- $n(p)$: p における unit normal vector
- $I = \langle dp, dp \rangle$: 第一基本形式
- $II = -\langle dn, dp \rangle$: 第二基本形式
- $III = \langle dn, dn \rangle$: 第三基本形式
- $K(p) = \det(I^{-1} II)$: ガウス曲率
- $H(p) = \frac{1}{2} \text{tr}(I^{-1} II)$: 平均曲率
- $K(p) I - 2H(p) II + III = 0$

三分岐離散曲面の曲率

- 各点ごとに “unit normal vector” を決めることができれば
なんとかなりそう
- C^∞ 曲面の場合の各点の周りでの normal vector の動き
 - ▶ $S: p$ の近傍の circle
 - ▶ $d: n: S \rightarrow n(S) \subset S^2$ の写像度
 - ▶ d の符号と K の符号は一致

三分岐離散曲面の定義 (Kotani-N-Omori [3])

- $\Phi: X \rightarrow \mathbb{R}^3$: 三分岐離散曲面
 - ▶ $X = (V, E)$ は trivalent graph,
 - ▶ $x \in V$ に対して,
少なくとも2つの $\{\Phi(e) : e \in E_x\}$ が一次独立
 - ▶ “locally orientable”
 - normal vector を compatible に決めることができる
- この定義では K4 結晶も曲面になってしまう
 - ▶ K4 結晶はとてもじゃないけど曲面にはみえない
 - ▶ とりあえずがまんしておこう

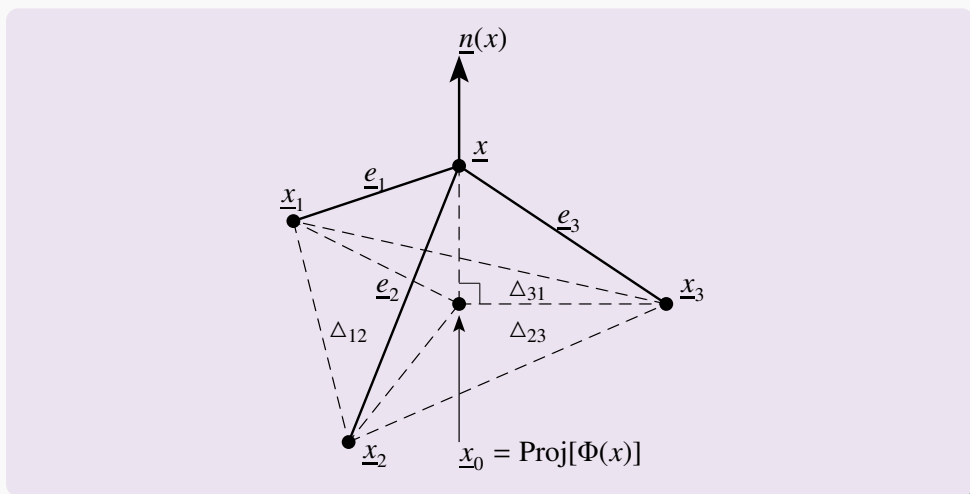
三分岐離散曲面の normal vector と共変微分

- x_0 の隣接3点を x_1, x_2, x_3 ,
 $e_i = \Phi(x_i) - \Phi(x_0)$
- normal vector: 隣接3点を作る平面の normal vector にとる

$$\begin{aligned} n(x) &= \frac{(e_2 - e_1) \times (e_3 - e_1)}{|(e_2 - e_1) \times (e_3 - e_1)|} \\ &= \frac{e_1 \times e_2 + e_2 \times e_3 + e_3 \times e_1}{|e_1 \times e_2 + e_2 \times e_3 + e_3 \times e_1|} \end{aligned}$$

- 共変微分:

$$\nabla_e \Phi(x) = \text{Proj}(\Phi(e)) = e - \langle e, n(x) \rangle n(x), \quad e \in E_x$$



三分岐離散曲面の曲率の定義

- 第一基本形式, 第二基本形式の定義 : に対して

$$I(x) = \begin{pmatrix} \langle e_2 - e_1, e_2 - e_1 \rangle & \langle e_2 - e_1, e_3 - e_1 \rangle \\ \langle e_3 - e_1, e_2 - e_1 \rangle & \langle e_3 - e_1, e_3 - e_1 \rangle \end{pmatrix}$$

$$II(x) = \begin{pmatrix} \langle e_2 - e_1, n_2 - n_1 \rangle & \langle e_2 - e_1, n_3 - n_1 \rangle \\ \langle e_3 - e_1, n_2 - n_1 \rangle & \langle e_3 - e_1, n_3 - n_1 \rangle \end{pmatrix}$$

- 注意 : $II(x)$ は対称ではない

三分岐離散曲面の曲率の定義

- $K(x) = \det(\mathbf{I}(x)^{-1} \mathbf{II}(x))$:
- $H(x) = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{I}(x)^{-1} \mathbf{II}(x))$:

Theorem ([3])

$$\nabla_i n \times \nabla_j n = K(e_i \times e_j)$$

面積変分公式

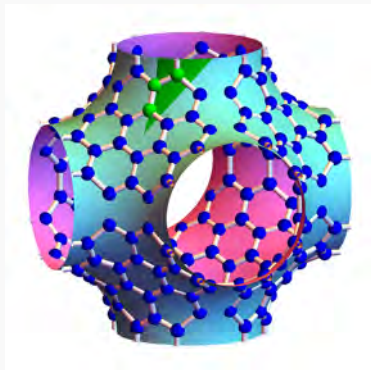
- $A(x) = e_1 \times e_2 + e_2 \times e_3 + e_3 \times e_1$:
- $\mathcal{A}(\Phi) = \sum_{x \in V} A(x)$
- $\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \mathcal{A}(\Phi + tn) = -2 \sum_{x \in V} H(x) A(x)$

Theorem ([3])

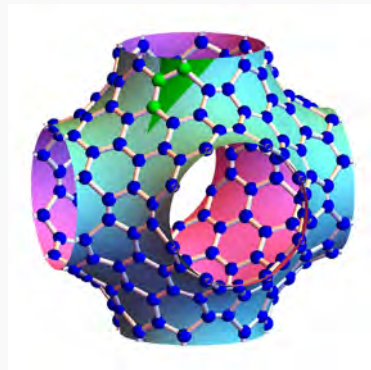
離散曲面が minimal \iff

$$\nabla_{e_2 - e_3} n \times \nabla_{e_1} \Phi + \nabla_{e_3 - e_1} n \times \nabla_{e_2} \Phi + \nabla_{e_1 - e_2} n \times \nabla_{e_3} \Phi = 0$$

(linear equation)



Standard realization



Minimal realization

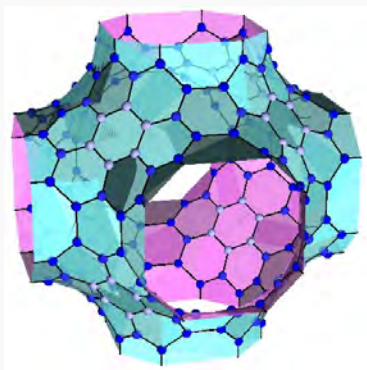
Kotani-N-Omori [3]

Theorem ([3])

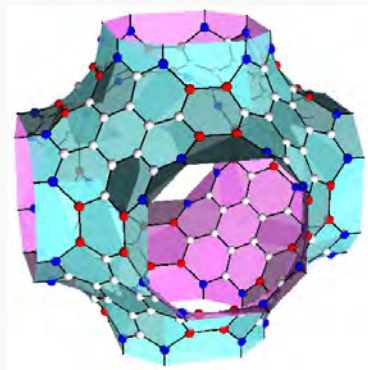
- ① $\Phi(X)$ が平面グラフならば $K \equiv 0, H \equiv 0$.
- ② 任意の $x \in V$ に対して $\Phi(x) = rn(x)$ ならば
 $K \equiv 1/r^2, H \equiv -1/r$ (Sphere shaped)
 - ▶ regular tetrahedron, regular dodecahedron, C60, ...

K4 の曲率

- $H \equiv 0, K > 0$
- 「主曲率」が虚数
- 「曲面」とはおもえないことの原因？



Gauss



Mean

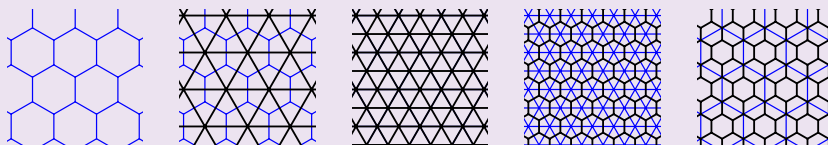
Curvature of Mackay crystal
Kotani-N-Omori [3]

離散曲面の細分

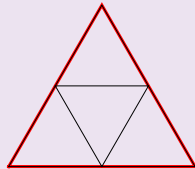
- 三分岐離散曲面に対する「細分」を定義したい
- 三分岐離散曲面の細分列は連続曲面に収束するか？
- 三角形分割された曲面なら「重心細分」すればよい
- 三分岐離散曲面の細分は？

Goldberg-Coxeter construction

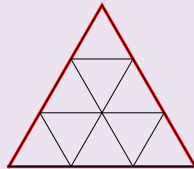
- trivalent graph に対する抽象的なグラフの細分
Goldberg (1937), Deza-Dutour (2004)



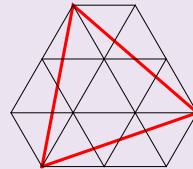
Goldberg-Coxeter construction



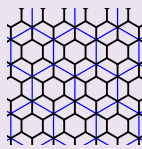
$(k, \ell) = (2, 0)$



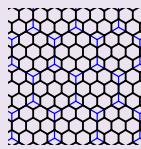
$(k, \ell) = (3, 0)$



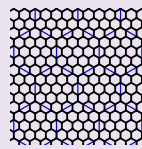
$(k, \ell) = (2, 1)$



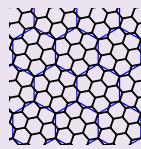
$GC_{2,0}(X)$



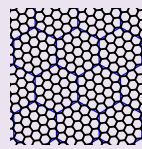
$GC_{3,0}(X)$



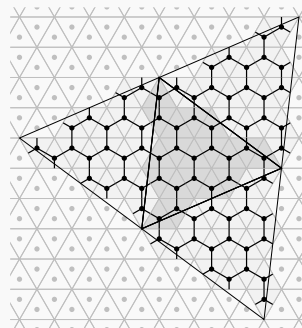
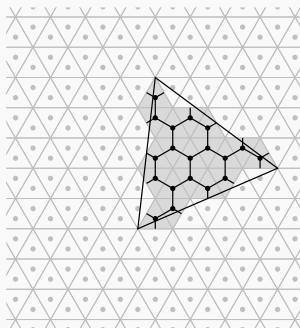
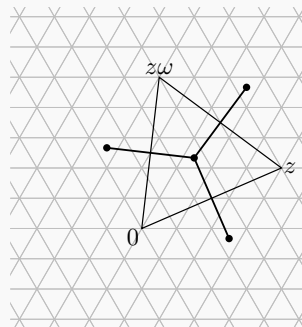
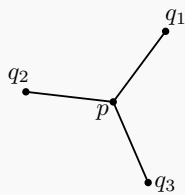
$GC_{4,0}(X)$



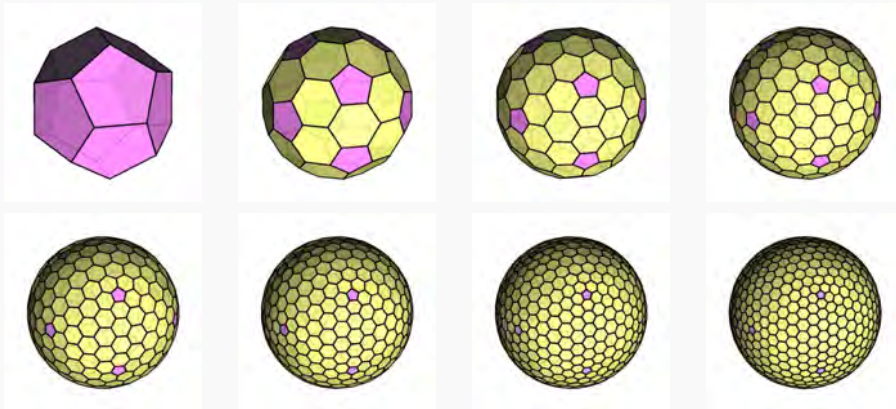
$GC_{2,1}(X)$



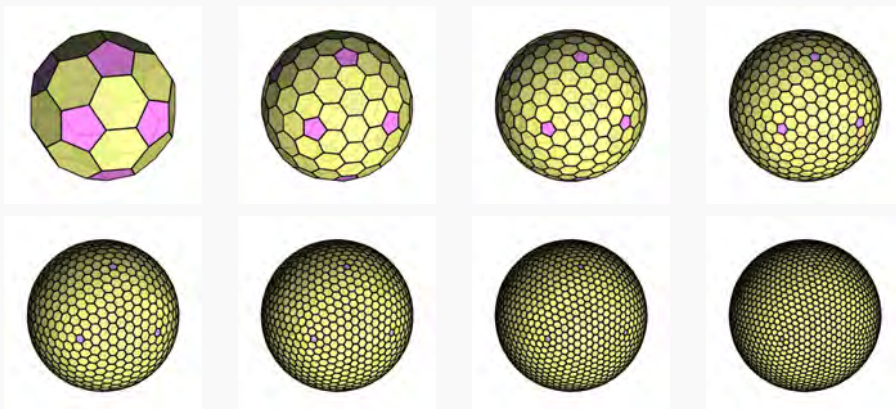
$GC_{3,2}(X)$



Omori-N-Tate [7]



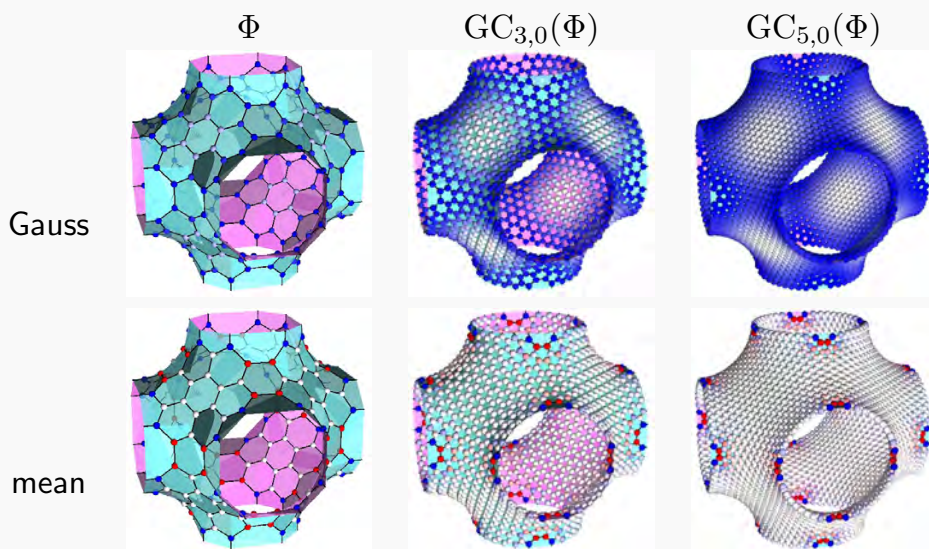
Goldberg polyhedra
dodecahedron の細分



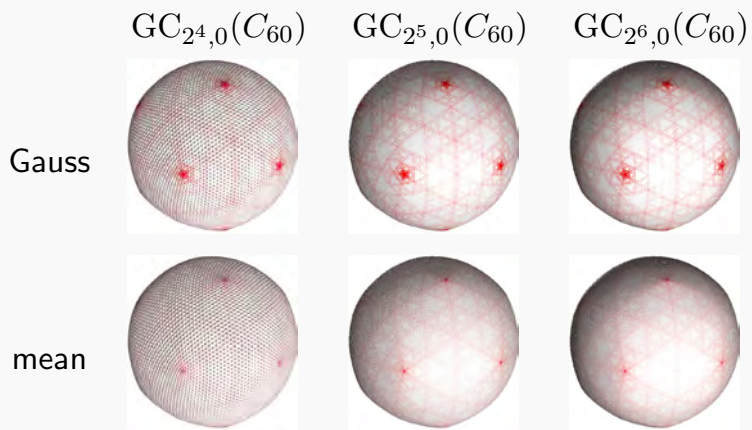
Goldberg polyhedra
truncated-icosahedron の細分

Theorem (CNT の細分 [3])

- $\{\text{CNT}(\lambda_n, c_n)\}$ を $\text{CNT}(\lambda, c)$ の細分列とする
- $\text{CNT}(\lambda_n, c_n) = \text{GC}_{k_n, \ell_n}(\text{CNT}(\lambda, c))$, $k_n \geq 2, \ell_n \geq 0$.
- このとき $K_n \rightarrow 0, H_n \rightarrow -1/2r(\lambda, c)$ が成り立つ



Φ_k : standard realizations
 $\{\Phi_k\}$ converges a continuous object
 Kotani-N-Omori [3]



Φ_k : locally minimizing energy
 $\{\Phi_k\}$ converges a continuous object
 Kotani-N-Tao [4]

Analysis of the arrangement of grain-boundary structural units and their hierarchy

Kazutoshi Inoue^{1,2}

Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University / JST-PRESTO

(joint work with Kazuaki Kawahara³, Mitsuhiro Saito³, Motoko Kotani¹,
and Yuichi Ikuhara^{1,3})

1. INTRODUCTION

Solid-state materials have been used by their polycrystalline form over the long history, and their macroscopic properties strongly depend on defects by which crystalline structures are disordered. Historically, theoretical studies have been developed in a continuum setting since more than a century ago. In recent years, technological developments have enabled us to observe atomic structures, and it is necessary to discuss atomic structures from a viewpoint of discrete analysis. Grain boundary (GB) is defined to be an interface formed by two adjacent crystal grains. Most of the studies have mainly focused on special commensurate GBs with relatively short periodicity defined by the coincidence-site lattice (CSL) theory which have been classified by the coincidence index Σ [1–4]. Until recent years, rather a simplified system of low Σ symmetrical tilt GBs have been intensively investigated in order to unveil the one-to-one correspondence between various components around GB and macroscopic properties. A GB deviated from a specific commensurate orientation with short periodicity can exhibit a long periodicity. The structural-unit model has been proposed to interpolate the atomic structures between low Σ GBs [5–7]. A general principle for the arrangement of structural units has been proposed in 1980's, assuming that the GB structure can be described by a combination of two reference structures, and the structure may change as continuously as possible according to the misorientation though they were restricted to the 2-dimensional description [8–10]. It can be concluded that even a high Σ CSL GB can be described by an array of structural units showing, at worst, a quasi-periodicity. Recently, direct observation of GB atomic structures is becoming possible due to the development of aberration-corrected scanning transmission electron microscopy (STEM) [11, 12]. According to the tremendous developments in experiment and computation, an effective mathematical framework has been required for the systematic prediction of stable GB structures and their relationship to macroscopic properties. We found that the periodicity and the arrangement of structural units in symmetrical tilt GBs are closely related to the distribution of rational numbers, which is well represented by the Farey sequence. The arrangement of structural units in various types of GBs were systematically predicted by utilizing the Farey diagram which nicely agreed with STEM observations in atomic-resolution [13–16]. In this report, we

¹WPI Research Center, Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University, Katahira 2-1-1, Aoba-ku, Sendai; 980-8577

²JST-PRESTO, Honcho 4-1-8, Kawaguchi, Saitama 332-0012

³Institute of Engineering Innovation, School of Engineering, The University of Tokyo, 2-11-16, Yayoi, Bunkyo-ku, Tokyo; 113-8656

show that the atomic structure and periodicity of GBs in a face-centered cubic (FCC) crystal can be described by a modified version of the Farey diagram.

2. PRELIMINARIES

2.1. The CSL theory. The first step to obtain a GB model is to overlay a crystal to the other. Let L be an n -dimensional lattice, and $O(n)$ be the group of orthogonal transformations in \mathbb{R}^n . One of the lattice points in L is chosen to be the origin, and RL be the transformation of L by $R \in O(n)$. Then, $R \in O(n)$ is said to be a coincidence isometry if the intersection $L \cap RL$ forms a sublattice of full rank. Let $\text{Isom}_{\mathbb{C}}(n)$ denote the group of coincidence isometries in \mathbb{R}^n . Then, $R \in SO(n) \cap \text{Isom}_{\mathbb{C}}(n)$ is called a coincidence rotation [17]. From now on, we assume that the R denotes a coincidence rotation. The index Σ can be defined as a group index $\Sigma := [L : L \cap RL]$. Then, the sublattice $L \cap RL$ is called the coincident-site lattice (CSL), which is the maximal sublattice contained in both L and RL . There are several equivalent ways to obtain the index Σ . One way is to calculate the ratio $|L \cap RL|/|L|$ where $|L \cap RL|$ and $|L|$ denote the volume of the unit cells of $L \cap RL$ and L , respectively. It is also equivalent to the reciprocal density of CSL points if L belongs to the Bravais class. Another way is given by the determinant of the transformation matrix $A : L \rightarrow L \cap RL$. Since $L \cap RL$ is contained in L and RL , the change of basis A belongs to $GL(n, \mathbb{Z})$ and $\Sigma = |\det A|$ is obtained. In a CSL configuration, the union $L \cup RL$ may form so-called the dichromatic pattern [18]. In the 2-dimensional case, the CSL theory can be formulated by the theory of quadratic forms. Namely, the integer ring $L_{\tau} = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}\tau$ ($\tau \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$) can be identified to a lattice spanned by $\{1, \tau\}$. For instance, a square lattice can be identified with a ring of Gauss integers $\mathbb{Z}(\sqrt{-1})$, and a triangular lattice as a ring of Eisenstein integers $L_{\omega} = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}\omega$ ($\omega = (-1 + \sqrt{-3})/2$). The intersection $L_{\tau} \cap e^{2\sqrt{-1}\theta} L_{\tau} \setminus \{o\}$ is nonempty, and $L_{\tau} \cap e^{2\sqrt{-1}\theta} L_{\tau}$ may form a lattice if L_{τ} is the integer ring of an imaginary quadratic field with $e^{2\sqrt{-1}\theta} = \lambda/|\lambda|$ for some $\lambda \in L_{\tau}$. The problem of 2-dimensional lattice matching can be deduced to the calculation of ideals of integer rings [19, 20].

2.2. Hierarchical structure of rational numbers. It is known that irreducible rational numbers may form so-called the Farey sequence. The Farey sequence of the order N is defined to be an increasing sequence of irreducible rational numbers in between 0 and 1 whose denominator is not bigger than N . It is denoted by F_N , and the sequence F_{N+1} can be produced by applying the operation \boxplus (the Farey summation) defined by

$$(1) \quad \frac{a}{b} \boxplus \frac{c}{d} = \frac{a+c}{b+d}$$

to adjacent rational numbers in F_N . Here, the summation is assumed to be non-commutative but cyclic permutations are allowed. Then, $\{F_N\}_{N \geq 1}$ may form a binary tree called the Farey diagram shown in Fig.1(a). By setting $F_1 = \{0/1, 1/1\}$, the Farey diagram can be inductively obtained, and the diagonal line segments in Fig.1(a) indicate the Farey summation defined in Eq.(1). Note that an adjacent pair of rational numbers p_1/q_1 and p_2/q_2 can satisfy

$$(2) \quad \det \begin{pmatrix} p_1 & p_2 \\ q_1 & q_2 \end{pmatrix} = -1.$$

Now, we consider rational approximants for a real number, and the track-back algorithm in the Farey sequence. Firstly, for any $x \in \mathbb{R}$ and a positive integer t , there exist coprime positive integers p and q which can satisfy $|x - p/q| < 1/tq$, indicating that an arbitrarily close approximation p/q exists under a controlled tolerance. One of the efficient ways for the approximation can be realized by the continued fraction expansion. The principal continued-fraction expansion of a positive real number x is given by

$$(3) \quad x = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \frac{1}{\ddots}}}}$$

which can be denoted by $x = [a_0; a_1, a_2, a_3, \dots]$ with a non-negative integer a_0 and positive integers a_i 's ($i \geq 1$). Here, the Möbius transformation of $x \in \mathbb{R}$ by a real matrix $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ is defined by

$$(4) \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} x = \frac{ax + b}{cx + d},$$

for $cx + d \neq 0$. Now we set $M_n = \begin{pmatrix} P_n & P_{n-1} \\ Q_n & Q_{n-1} \end{pmatrix}$ with $M_1 = \begin{pmatrix} a_0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ for sequences $\{P_n\}$ and $\{Q_n\}$ ($n \geq 0$), inductively defined by $M_{n+1} = M_n \begin{pmatrix} a_n & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Then the n -th order of the expansion $x_n = [a_0; a_1, \dots, a_n] = P_n/Q_n$ satisfies $M_1 M_2 \dots M_{n-1} a_n = x_n$. It can be proved that P_n and Q_n are coprime and satisfy $|x - P_n/Q_n| < 1/Q_n Q_{n+1}$, from which an approximating sequence $\{P_n/Q_n\}$ of x can be obtained. If x is irrational, the procedure can be infinite. In that case, we may give the tolerance ϵ so that the procedure can be terminated when $|x - P_n/Q_n| < \epsilon$ is achieved.

One of the interesting properties of the Farey sequence is that the ancestors of a rational number can be tracked back. For $p_0/q_0 = [a_0; a_1, \dots, a_n]$, the equation

$$(5) \quad [a_0; a_1, \dots, a_n] = [a_0; a_1, \dots, a_{n-1}] \boxplus [a_0; a_1, \dots, a_{n-1}, a_n - 1],$$

indicates that the rational number $[a_0; a_1, \dots, a_n]$ is composed by $[a_0; a_1, \dots, a_{n-1}]$ and $[a_0; a_1, \dots, a_{n-1}, a_n - 1]$. It can be derived from Eq.(5) that

$$(6) \quad [a_0; a_1, \dots, a_n] = (a_n - 1) \circ [a_0; a_1, \dots, a_{n-1}] \boxplus [a_0; a_1, \dots, a_{n-1} + 1],$$

is satisfied where \circ represents a multiplication, i.e., addition of copies of a rational number.

3. APPLICATION TO THE GB STRUCTURE

3.1. Farey sequence and GB structure. Although the CSL theory can perfectly describe the problem of lattice matching, it cannot predict any relationships between two CSL configurations. Therefore, the structural unit model has been proposed to interpolate the structures between two CSL orientations with low Σ [5–7]. Suppose that structures of symmetrical tilt GBs for tilt angles θ_1 and θ_2 are described by an array of single type structural units that are denoted by A and B, respectively. Then, intermediate GBs in between them can be described by their combination. For instance,

the structure corresponding to the one-to-one combination of A and B is denoted by AB, and the structure composed of an extra A unit with the AB structure is denoted by AAB, and so forth. In such a combinatorial way, all the intermediate GBs can be described by the arrangement of two types of structural units, forming a binary tree. Note that the tilt angle $(\theta_1 + \theta_2)/2$ may not correspond to the structure of AB, the one-to-one combination of the A-unit and the B-unit.

In general, the composition of the $(p_0 q_0 r_0)$ -GB can be given by

$$(7) \quad (p_0 q_0 r_0) = n_1(p_1 q_1 r_1) + n_2(p_2 q_2 r_2),$$

where n_1 and n_2 are coprime positive integers, and $(p_i q_i r_i)$ ($i = 0, 1, 2$) are the plane indices which are perpendicular to the tilt axis. Let θ_i ($i = 0, 1, 2$) be corresponding misorientation angles, the *lever rule* has been proposed, asserting

$$(8) \quad \frac{n_1}{n_2} = \frac{l_2 \sin \theta_2}{l_1 \sin \theta_1} \left(-1 + \frac{\cot \theta_1 - \cot \theta_2}{\cot \theta_1 - \cot \theta_0} \right),$$

where $l_i = r_0 \sqrt{p_i^2 + q_i^2 + r_i^2}$ ($i = 1, 2$) stands for the length of the ideal structural unit along the GB, and r_0 is the lattice constant [21, 22].

For the case of [001]-symmetrical tilt GBs, Eq.(7) deduces to the decomposition of the $(q_0 p_0 0)$ -structures since an in-plane vector perpendicular to the [001]-axis in a cubic crystal can be of the form $q_0[0 \bar{1} 0] + p_0[1 0 0]$, where q_0 and p_0 are coprime positive integers. A structural unit of the symmetrical $(q_0 p_0 0)$ -GB can be defined to be a kite-shaped tetragon which is made by attaching a pair of right triangles of a group of atoms at their hypotenuses whose sides in the right angles are $q_0 r_0$ and $p_0 r_0$ [13]. Previous investigations have shown that symmetrical tilt GBs can be composed of an integral linear combination of two types of reference structures [23–36]. If the misorientation of the GB is 2θ , $\tan \theta = p/q$ can be satisfied in a CSL configuration. Here, we set $f(\theta) = \tan \theta$ to relate the tilt angle 2θ with a rational number. The hierarchical nature of structural units become clearer if we assign a rational number to each misorientation. Even for a non-CSL GB, one may assign an irreducible rational number by the approximation algorithm shown in the previous subsection. Note that rational numbers corresponding to the low energy boundaries can appear in the early order of the Farey sequence. If $f(\theta)$ is irrational, the corresponding structures can be described by a quasi-periodic arrangement of structural units.

Let p_i and q_i be coprime, positive integers (except the case $q_i = 1$ and $p_i = 0$), respectively for $i = 0, 1, 2$. The $(q_0 p_0 0)$ -structure is said to be in between the $(q_1 p_1 0)$ and the $(q_2 p_2 0)$ -structures if $p_1/q_1 < p_0/q_0 < p_2/q_2$ is satisfied. Then, the composition of the [001] symmetrical tilt GBs of the $(q_0 p_0 0)$ -structure can be given by

$$(9) \quad (q_0 p_0 0) = n_1(q_1 p_1 0) + n_2(q_2 p_2 0)$$

for coprime positive integers n_1 and n_2 . Once two reference structures are determined, the positive integral coefficients n_1 and n_2 are uniquely obtained for each GB. Note that $n_1 + n_2 = p_0$ gives the periodicity of the structural units. The ratio of the number of the structural units can be given by

$$(10) \quad \frac{n_2}{n_1} = -\frac{p_1}{p_2} + \frac{1}{p_2(p_2 \cot \theta - q_2)},$$

whose continuity should be assured by that of the GBs. If p_1/q_1 and p_2/q_2 are adjacent rational numbers in the Farey sequence, the determinant condition in Eq.(2) can be satisfied. Therefore, the value of $f(\theta)$ corresponding to the reference configurations

can be chosen from adjacent rational numbers of the certain order (especially the early order) in the Farey sequence. An important principle for the GB structure is that it should vary as continuously as possible with respect to the misorientation. The most stable structure should be chosen from a number of possibilities so that the GB dislocations are maximally separated in order to minimize the mutual interactions [8]. Their algorithm was based on the Euclidean division and applicable when the ratio of the number of structural units were provided. After the misorientation $2\theta_0$ is given, a rational number $\tilde{f}(\theta_0)$ can be found to approximate $f(\theta_0)$ according to the procedure explained above. By utilizing this method, structures of [001]-symmetrical tilt GBs in MgO and [110]-symmetrical tilt GBs in cubic zirconia were analyzed [15,16]. We remark that the Farey diagram shown in Fig.1(a) can cover GBs in the simple cubic crystal, or 2-dimensionally projected images of GBs in cubic crystals. For [001]-symmetrical tilt GBs, 0/1 and 1/1 may correspond to the (100), “ $\Sigma 1$ GB at 0° ” and the (110), “ $\Sigma 1$ GB at 90° ”, respectively. Then, for instance, $1/3 \boxplus 1/2 = 2/5$ implies that the structure of $\Sigma 29$ (5 2 0) GB can be composed of a one-to-one combination of the $\Sigma 5$ (3 1 0) and the $\Sigma 5$ (2 1 0) structural units. Conversely, since the tilt angle $2\theta_0$ and the plane index $(q_0 p_0 0)$ are related by $\tan \theta_0 = p_0/q_0$, we may estimate the rational approximant for a given tilt angle, and then track back the Farey diagram by utilizing Eq.(5) and (6) in order to obtain the arrangement of structural units [14–16].

However, it is necessary to modify the Farey diagram in order to consider the 3-dimensional atomic structures even for cubic crystals. Now, we focus on symmetrical tilt GBs in FCC crystal. Fig.1(b) shows a modified version of the Farey diagram describing the hierarchy of [001] GBs in FCC crystal. We set 0/2 in Fig.1(b) may correspond to the (100), “ $\Sigma 1$ GB at 0° ” instead of 0/1 in Fig.1(a). Then, $1/3 \boxplus 2/4 = 3/10$ implies that the structure of $\Sigma 109$ (10 3 0) GB can be composed of a one-to-one combination of the $\Sigma 5$ (3 1 0) and the $\Sigma 5$ (2 1 0) structural units. In this way, the modified Farey diagram can represent the hierarchical structure of GB periodicity in

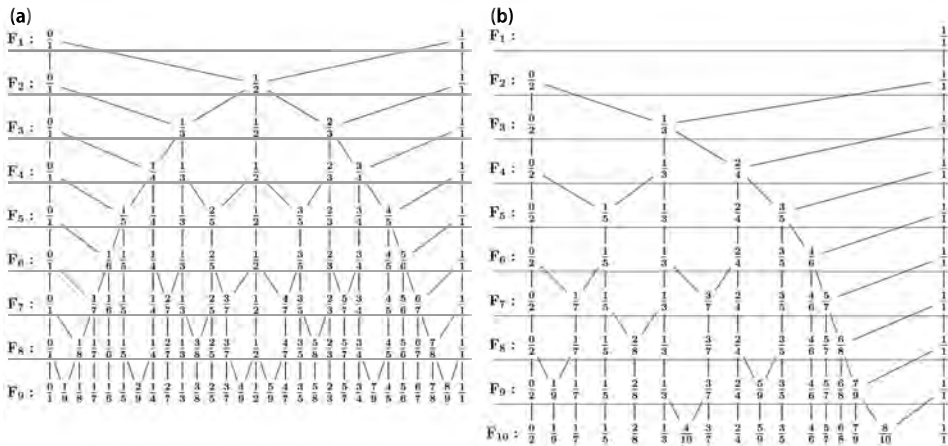


FIGURE 1. (a) The Farey diagram of irreducible rational numbers describing the hierarchy of [001] and [110] GBs in simple-cubic crystal, and (b) a modified version of the Farey diagram describing the hierarchy of [001] and [110] GBs in face-centered cubic crystal.

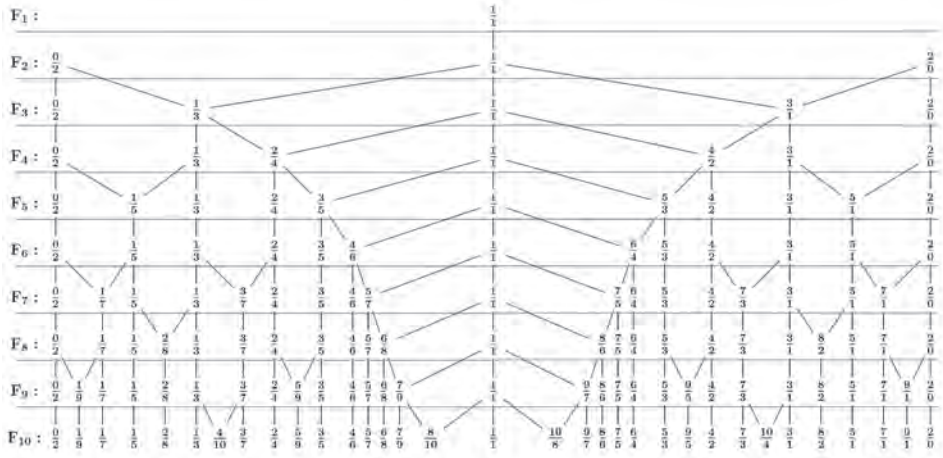


FIGURE 2. The extended version of the modified Farey diagram describing the hierarchy of [001] and [110] GBs in face-centered cubic crystal.

FCC crystal. For the case of [110] GBs in FCC crystal, 0/2 and 1/1 may correspond to the (110), “ $\Sigma 1$ GB at 0° ” and to the (111), $\Sigma 3$ GB at 109.5° . In order to relate the tilt angle 2ϕ to a rational number, we may define $f(\phi) = \sqrt{2}\tan\phi$. Then, how can we cover the rest of the tilt angles greater than 109.5° ? One way is to extend the modified Farey diagram in Fig.1(b) mirror symmetrically as shown in Fig.2. Then, 2/0 can correspond to the (001) “ $\Sigma 1$ GB at 180° ”. We also found a similarity of the atomic structures between [001] and [110] symmetrical tilt GBs in the FCC crystal. The formula of corresponding tilt angles can be given by

$$(11) \quad \sqrt{2}\tan\theta_{[001]} = \tan\phi_{[110]}$$

for tilt angles $2\theta_{[001]}$ and $2\phi_{[110]}$ of [001] and [110] GBs, respectively.

4. DISCUSSIONS

Atomic structure of symmetrical tilt GBs are analyzed and the hierarchy of GB structures and rational numbers is discussed. Under the assumption that GB structure may change as continuously as possible as a function of misorientations, two types of structural units are arranged so that minority units where GB dislocations are introduced are maximally separated. Because of this property, the structures of symmetrical tilt GBs can be described by a part of quasi-periodical arrangements of structural units as a realization of the lowest energy structure. Then, reference structures can linearly interpolate intermediate GBs. The major structures were well predicted by a simple decomposition formula of symmetrical tilt GBs with an algorithm due to the Farey sequence. In previous studies, structural units have been classified by the atomic coordination around the GB based on the 2-dimensionally projected STEM images. It has been common in many studies that a structural unit is defined as an atomic polygon which reflect the GB periodicity. However, the 2-dimensional model may fail to describe the atomic periodicity since it does not fully reflect the 3-dimensional atomic structure of GBs. The 3-dimensional structural-unit model has been proposed which describes the GB atomic structures by a combination of coordination polyhedrons [37–39]. We

propose that symmetrical tilt GBs in FCC crystal can be described by 3-dimensional structural units which may follow the hierarchy described by the Farey diagram. A modified version of the Farey diagram can be used to estimate the arrangement of GB structural units in FCC crystal. By utilizing this method, the 3-dimensional arrangement of structural units should be further investigated in order to unveil the origin of the stable atomic structure of GBs.

ACKNOWLEDGEMENTS

This study was partly supported by PRESTO (grant number JPMJPR17N3) from the Japan Science and Technology Agency; Specially Promoted Research (grant number 17H06094) from the Japan Society for the Promotion of Science; by the "Nanotechnology Platform" (project number 12024046) from the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology.

REFERENCES

- [1] Friedel G (1911) *Leçons de cristallographie*. (Blanchard, Paris).
- [2] Krönberg ML and Wilson FH (1949) Secondary recrystallization in copper. *Trans. AIME*. **185**, 501–514.
- [3] Ranganathan S (1966) On the geometry of coincidence-site lattices. *Acta Cryst.* **21**, 197–199.
- [4] Brandon DG (1966) The structure of high-angle grain boundaries. *Acta Metall.* **14**, 1479–1484.
- [5] Bishop GH and Chalmers B (1968) A coincidence ledge - dislocation description of grain boundaries. *Scripta Metall.* **2**, 133–140.
- [6] Pond RC, Smith DA and Vitek V (1979) Computer simulation of $\langle 110 \rangle$ tilt boundaries: structure and symmetry. *Acta Metall.* **27**, 235–241.
- [7] Sutton AP and Vitek V (1980) On the coincidence site lattice and DSC dislocation network model of high angle grain boundary structure. *Scripta Metall.* **14**, 129–132.
- [8] Sutton AP and Vitek V (1983) On the structure of tilt boundaries in cubic metals I. Symmetrical tilt boundaries. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*. **309**, 1–36.
- [9] Sutton AP and Vitek V (1983) On the structure of tilt boundaries in cubic metals II. Asymmetrical tilt boundaries. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*. **309**, 37–54.
- [10] Sutton AP and Vitek V (1983) On the structure of tilt boundaries in cubic metals III. Generalizations of the structural study and implications for the properties of grain boundaries. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*. **309**, 55–68.
- [11] Ikuhara Y (2011) Grain boundary atomic structures and light-element visualization in ceramics: combination of Cs-corrected scanning transmission electron microscopy and first-principles calculations. *J. Elect. Microscopy.* **60**(S1), S173–S188.
- [12] Pennycook SJ and Nellist PD, ed. (2011) *Scanning Transmission Electron Microscopy*. Springer-Verlag, New York.
- [13] Inoue K, Saito M, Wang Z, Kotani M and Ikuhara Y (2015) On the periodicity of $\langle 001 \rangle$ symmetrical tilt grain boundaries. *Mater. Trans.* **56**(3), 281–287.
- [14] Inoue K, Saito M, Wang Z, Kotani M and Ikuhara Y (2015) On the decomposition formula of $\langle 001 \rangle$ symmetrical tilt grain boundaries. *Mater. Trans.* **56**(12), 1945–1952.
- [15] Inoue K, Saito M, Chen C, Kotani M and Ikuhara Y (2016) Mathematical analysis and STEM observations of arrangement of structural units in $\langle 001 \rangle$ symmetrical tilt grain boundaries. *Microscopy.* **65**(6), 479–487.
- [16] Inoue K, Feng B, Shibata N, Kotani M and Ikuhara Y (2016) Structure of $\langle 110 \rangle$ tilt boundaries in cubic zirconia. *J. Mat. Sci.* **52**, 4278–4287.
- [17] Baake M and Zeiner P (2008) Coincidences in four dimensions. *Philos. Mag.* **88**, 2025–2032.
- [18] Pond RC and Bollmann W (1979) The symmetry and interfacial structure of bicrystals. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*. **292**(1395), 449–472.
- [19] Mitani H and Niizeki K (1987) An analysis of two-dimensional modulated structures on a triangular lattice in terms of a quadratic field. *J. Phys. C*. **20**, 1017.

- [20] Kawahara K, Arafune R, Kawai M and Takagi N (2015) Pragmatic application of abstract algebra to two-dimensional lattice matching. *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **13**, 361–365.
- [21] Nazarov AA and Romanov AE (1987) On the average misorientation angle of general tilt boundaries. *Philos. Mag. Lett.* **60**(5), 187–193.
- [22] Sutton AP and Balluffi RW (1995) *Interfaces in Crystalline Materials*. (Clarendon Press, Oxford).
- [23] Wang G-J, Sutton AP and Vitek V (1984) A computer simulation study of $\langle 001 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ tilt boundaries: the multiplicity of structures. *Acta Metall.* **32**(7), 1093–1104.
- [24] Wang G-J and Vitek V (1986) Relationships between grain boundary structure and energy. *Acta Metall.* **34**(5), 951–960.
- [25] Chen SP, Srolovitz DJ and Voter AF (1989) Computer simulation on surfaces and $[001]$ symmetric tilt grain boundaries in Ni, Al, and Ni_3Al . *J. Mat. Res.* **4**, 62–77.
- [26] Tsurekawa S, Tanaka T and Yoshinaga H (1994) Grain boundary structure, energy and strength in molybdenum. *Mat. Sci. Eng. A.* **176**, 341–348.
- [27] Browning ND, Pennycook SJ, Chisholm MF, McGibbon MM and McGibbon AJ (1995) Observation of structural units at symmetric $[001]$ tilt boundaries in SrTiO_3 . *Interface Sci.* **2**, 397–423.
- [28] Morita K and Nakashima H (1997) Atomic periodicity of $\langle 001 \rangle$ symmetric tilt boundary in molybdenum. *Mat. Sci. Eng. A.* **234-236**, 1053–1056.
- [29] Nakashima H and Takeuchi M (2000) Grain boundary energy and structure of $\alpha\text{-Fe}$ $\langle 110 \rangle$ symmetric tilt boundary. *Tetsu-to-Hagane.* **86**(5), 357–362.
- [30] Takata N, Mizuguchi T, Ikeda K and Nakashima H (2004) Atomic and electronic structure of $\langle 110 \rangle$ symmetric tilt boundaries in palladium. *Mater. Trans.* **45**(7), 2099–2105.
- [31] Ohno T, Ii S, Shibata N, Matsunaga K, Ikuhara Y, and Yamamoto T (2004) High Resolution Microscopy Study for $[001]$ Symmetric Tilt Boundary with a Tilt Angle of 66 DEG. in Rutile-type TiO_2 Bicrystal. *Mater. Trans.* **45**(7), 2117–2121.
- [32] Tschopp MA and McDowell DL (2007) Structures and energies of $\Sigma 3$ asymmetric tilt grain boundaries in copper and aluminium. *Philos. Mag.* **87**(22), 3147–3173.
- [33] Tschopp MA and McDowell DL (2007) Asymmetric tilt grain boundary structure and energy in copper and aluminium. *Philos. Mag.* **87**(25), 3871–3892.
- [34] Rhodes NR, Tschopp MA and Solanki KN (2013) Quantifying the energetics and length scales of carbon segregation to $\alpha\text{-Fe}$ symmetric tilt grain boundaries using atomistic simulations. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **21**, 035009.
- [35] Saito M, Wang Z, Tsukimoto S and Ikuhara Y (2013) Local atomic structure of a near-sigma 5 tilt grain boundary in MgO . *J. Mater. Sci.* **48**, 5470–5474.
- [36] Saito M, Wang Z and Ikuhara Y (2014) Selective impurity segregation at a near- $\Sigma 5$ grain boundary in MgO . *J. Mater. Sci.* **49**, 3956–3961.
- [37] Ashby M, Spaepen F, and Williams S (1978) The structure of grain boundaries described as a packing of polyhedra. *Acta Metallurgica.* **26**(11), 1647–1663.
- [38] Pond, RC and Vitek, V and Smith, DA (1979) Grain boundary structures in fcc and bcc metals and sites for segregated impurities. *Acta Cryst.* **35**(4), 689–693.
- [39] Banadaki AD and Patala S (2017) A three-dimensional polyhedral unit model for grain boundary structure in fcc metals. *npj Computational Materials.* **3**(1), 13.

東京大学大学院数理科学研究科 社会連携講座「データサイエンスにおける数学イノベーション」が目指すもの
(Propulsion of Collaboration between Mathematics and Industry by the Social Cooperation Program “Mathematical Innovation in Data Science” in the University of Tokyo)

中川淳一, Junichi Nakagawa

東京大学 大学院数理科学研究科
Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo

The Social Cooperation Program “Mathematical Innovation in Data Science” in the University of Tokyo has been started up sponsored by Nippon Steel Corporation since April on 2018. In the presentation, I show principles for problem-solving collaboration and educational study focusing on mathematics.

IMI Workshop II: 結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析

東京大学 大学院数理科学研究科 社会連携講座「データサイエンス における数学イノベーション」 の目指すもの

2019年9月10日

日本製鉄株式会社 先端技術研究所 数理科学研究部、
東京大学 大学院数理科学研究科
特任教授 中川淳一



社会連携講座の目指すもの

- 1) データサイエンスに焦点をあて、数学との関わりを明確にしながら、データ解析に関する**数学理論**の体系構築を行うことを目標とする。

目標達成の具体的な方策として、

- 2) 企業との**共同研究**により、数学研究テーマを設定し、上記数学理論体系構築の具現化を行う。

⇒「**既存数学理論を背景に、ニーズに適合する新規手法を開発し、迅速な問題解決に導く**」のが、この範疇

- 3) 諸科学・産業との連携を担える若手数学者の人材育成のため、**教育研究**を行い、一見応用とは無縁に思える純粋数学専攻の学生・教員が現実問題に興味を持つ場を創出し、彼らから斬新な発想を引き出し、社会連携の問題解決にフィードバックすること

⇒「**3年先以降の問題解決を想定し、世の中に無い理論を創出する**」のが、こちらの範疇



数学は、いろいろな専門分野の実験結果 & 理論を、
一貫性のある論理で統合する科学・技術の共通言語体系

「公理から始まるスタイルの厳密な数学」は、
紀元前3世紀から現代に至るまで、
数学者が築き上げてきた思考体系であり、
数学で一度証明されたものは永遠の真理であることから、
我々は膨大な叡智のリソースを手に入れている。



そのため、多岐にわたる数学の理論体系全体を自在に使いこなすこと
に真正面から向き合う必要があり、数学連携を行う意義がある。

数学で何が出来るか

1) 数学は普遍的であるがゆえに、個別の現象やデータに依存せずとも理論が成立し、世界中から有能な人材を見出し、適宜協力を仰ぐことは数学ゆえに容易

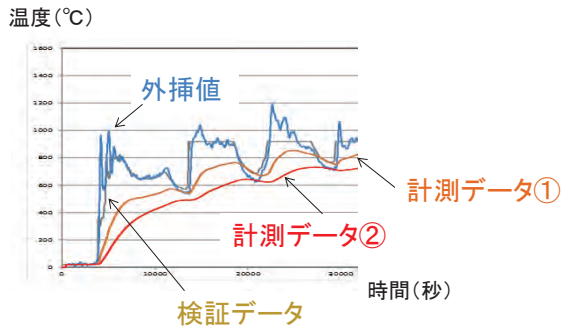
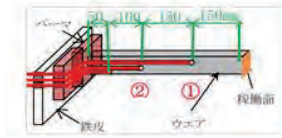
2) 観察事実(データ)の背後にあるべき数学理論を見出し、
その理論体系を活用することで、「**一部を知り全体を把握する**」ことが可能

社会連携講座「データサイエンスにおける数学イノベーション」
の根底にある技術コンセプト

学習対象は観察事実(データ)でなく、その背後にある原理・原則！

3) その結果、諸事実間の因果関係が合理的に繋がれば、既存技術のブレークスルーに導く着想を得るのは比較的容易

事例：「一部を知り全体を把握する」



観測データ： ①、②

背後にある原理・原則： 非常常熱伝導の物理

数学理論： 放物型偏微分方程式の理論

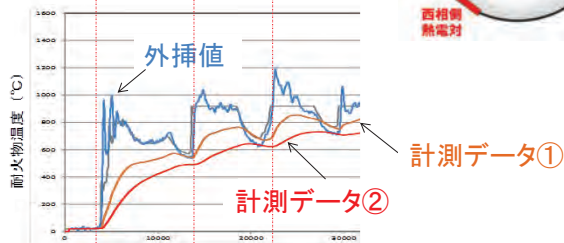
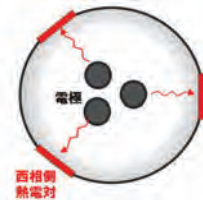
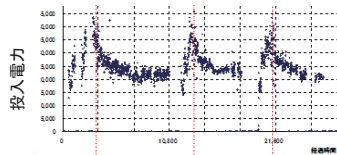
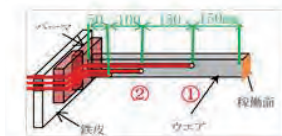
外挿の方法： 2個所の温度の時間変化から、初期値と未知境界条件を同時に求める逆問題 (コーシー問題の理論体系を使用)

18年前の日本製鉄-東大との共同研究成果

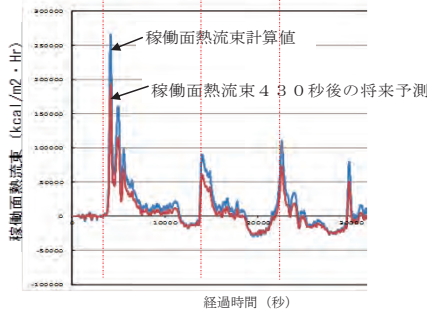


製鉄所での実用化例

逆問題で算出した熱流束で
投入電力量を制御
⇒耐火物の溶損防止



①、②の温度測定値から
稼働面の熱流束を決定(外挿)



数学によるイノベーション

研究現場・製造現場の技術文化の変革

共同研究の範疇

数学へのイノベーション

データの定義を変えて
純粋数学者が参画できる議論の場を創出

教育研究の範疇



数学によるイノベーションを起こすための要件

【イノベーションの担い手としての企業側の要件】

- ✓ データ提供者のニーズに向き合い、**最速で**、納得を得る問題解決の提案をし続けること、その結果として、データ提供者との信頼関係が構築され、当該分野変革の**動機付けのベクトルが揃う**。
- ✓ その際、既存手法を単にもってくるだけでは大抵の場合上手くいかない。
ニーズに適合する方法をゼロベースから考え構築し、臨機応変に対応することは必須要件



膨大な智慧の源泉が必要：現場ニーズに応え、潜在ニーズを引き出す

【発想にサイエンスとしての普遍性を付与すること】

- ✓ 数学による発想の数式化
- ✓ あらゆる専門分野の数学を道具として使いこなす懐の深さと、応用スキルの鍛錬



東京大学大学院数理科学研究科 初 の社会連携講座開設の意義⁹

1. 学内に入り込み、産学でWin-Winになる共同研究の運用形態を、産学で模索・構築、
2. 共同研究・教育研究を支援する講義を適宜設定し、多様な数学専門領域の学生と教員の興味を喚起し、斬新な発想を社会連携課題にフィードバック



外部(共同研究、数学実践の教育研究)からの刺激で、新しい数学のテーマが生まれ、諸科学・産業の連携を担える数学者の人口が増えること、その結果、数学イノベーションの推進が図れること



産学間のWin-Winの関係構築

10

コンセプト

数学がイノベーションの源泉である！
体系化された「知」に基づく数学者の自由な発想が、
科学・技術のブレークスルーの鍵になる。

【1】フィードバックが機能するコミュニケーションの場

互いの隠れた才能を引き出し、一緒に考え行動をおこすための
人材育成の場&問題解決の場の創出

【2】個々の数学者の研究スタイル重視と成果顕在化の両立

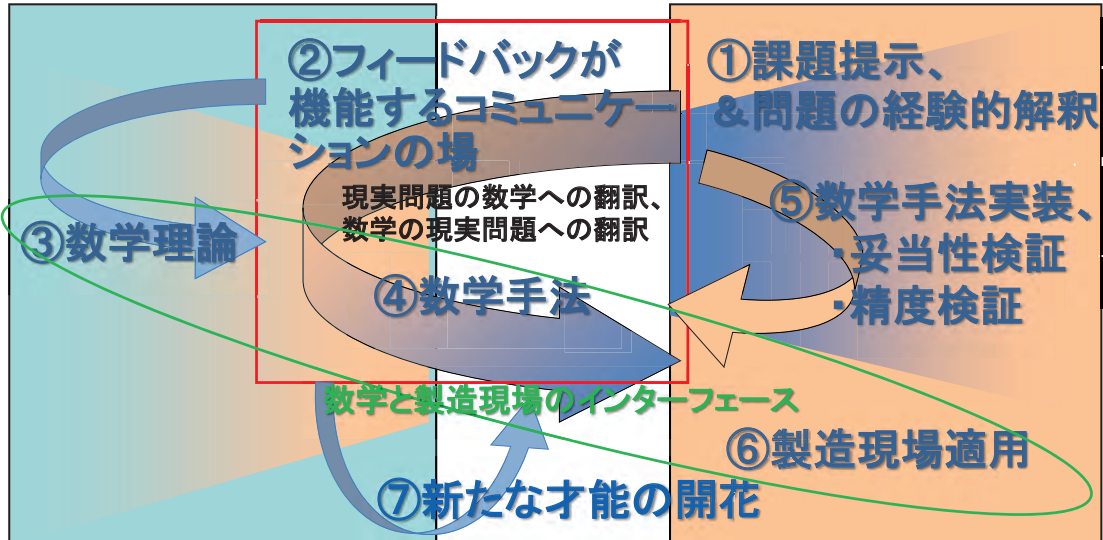
数学者の自由な発想重視の水平分業型のビジネスモデルの展開
数学ゆえに、産学の役割分担が明確！

【3】異分野融合(数学・諸科学・産業)の人材マグネット

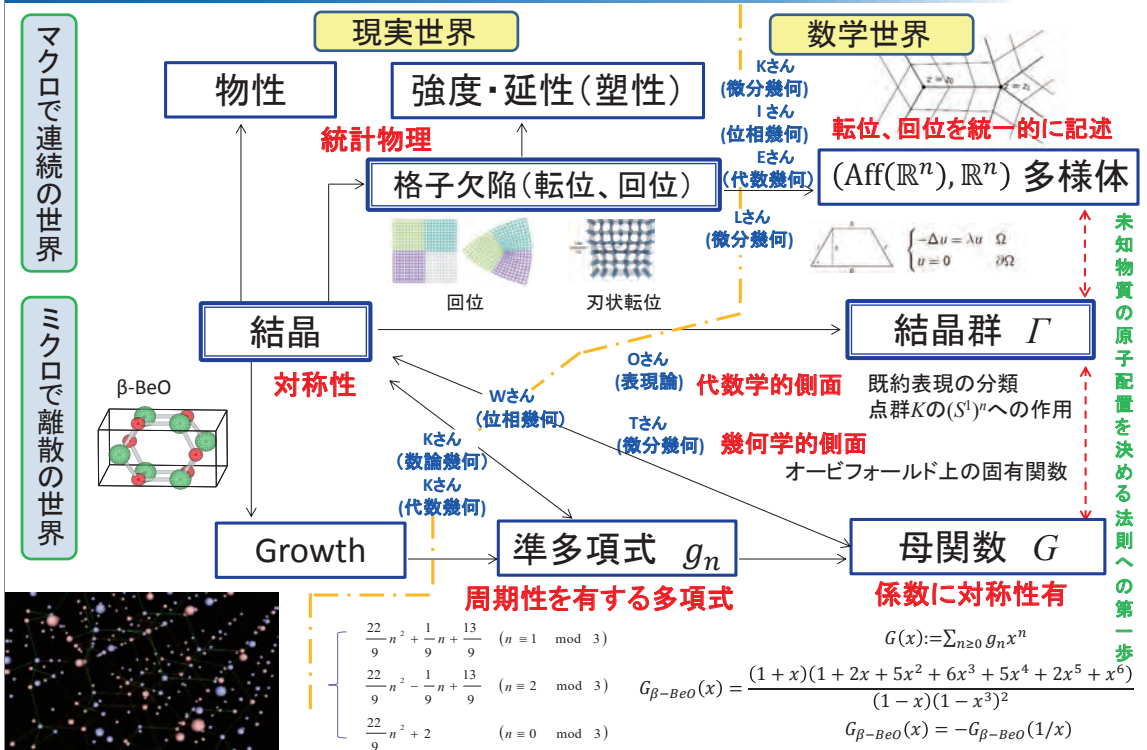
アカデミアの研究者が参画に魅力を感じるチームになること。
数学力による科学・技術の社会への出口の多様化



【アカデミアの数学者】 **タスクフォースチーム** 【企業研究者】



教育研究：結晶を中心にした純粋数学駆動のマテリアルズインフォマティクス



データサイエンスの分野で、若手数学者(特に、応用とは無縁とされている代数学、幾何学専攻の学生)が活躍できるよう、
データの定義を変える！



「実験研究者による実験結果の一連の考察もデータ」



多様な専門性の多数の若手数学者がデータサイエンスに興味をもち、全く新しい切り口から斬新な発想が出ることで、データサイエンスの理論を一気に進化させることを目指す。 **データサイエンスにおける数学イノベーション！**

社会数理実践研究 (東大数理)

(FMSP mathematical research on real world problems of the University of Tokyo)

中川淳一, Junichi Nakagawa

東京大学 大学院数理科学研究科

Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo

The mathematical research on real world problems is an educational program for doctorate course students in FMSP (Leading Graduate Course Frontiers of Mathematical Science and Physics) of the University of Tokyo. Nippon Steel Corporation proposes themes for the program, and has provided several themes for students who major in geometry or algebra. In this presentation, problems in mathematics motivated by crystals and quasi-crystals are highlighted as two themes of interest in mathematics and important in materials.

In the first theme, a quasi-crystal, is a structure that is ordered but not periodic. A quasi-crystalline pattern can continuously fill all available space, but it lacks translational symmetry. We try to grasp the problem as a difference in quasi-polynomial type compared with crystal and as the mathematical way of tiling in space by atoms.

In the second theme, we focus on the properly discontinuous action on \mathbb{R}^n by a discrete subgroup such as a crystal group, Lie group $O(2,1)$ on a pseudo-Riemannian manifold having the 0 curvature and the metric signature 2,1 and an anti de-Sitter space AdS3 having the negative curvature and the metric signature 2,1.

IMI Workshop II: 結晶の界面，転位，構造の先進数理解析

東京大学
大学院数理科学研究科
社会数理実践研究

FMSP mathematical research on real world
problems of the University of Tokyo

2019年9月10日

東京大学 大学院数理科学研究科
特任教授 中川淳一



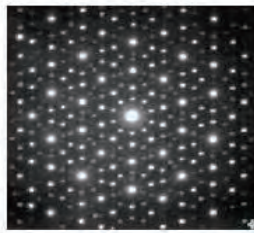
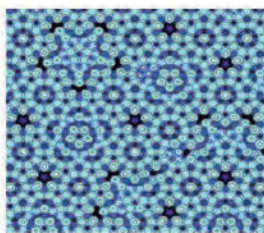
2019年度FMSP社会数理実践研究

2

課題 1 : Quasi-Crystal

A quasi-crystal, is a structure that is ordered but not periodic. A quasi-crystalline pattern can continuously fill all available space, but **it lacks translational symmetry**.

While crystals, according to the classical crystallographic restriction theorem, can possess only two, three, four, and six-fold rotational symmetries, the Bragg diffraction pattern of quasi-crystals shows sharp peaks with other symmetry orders, for instance **five-fold**. (Wikipedia)

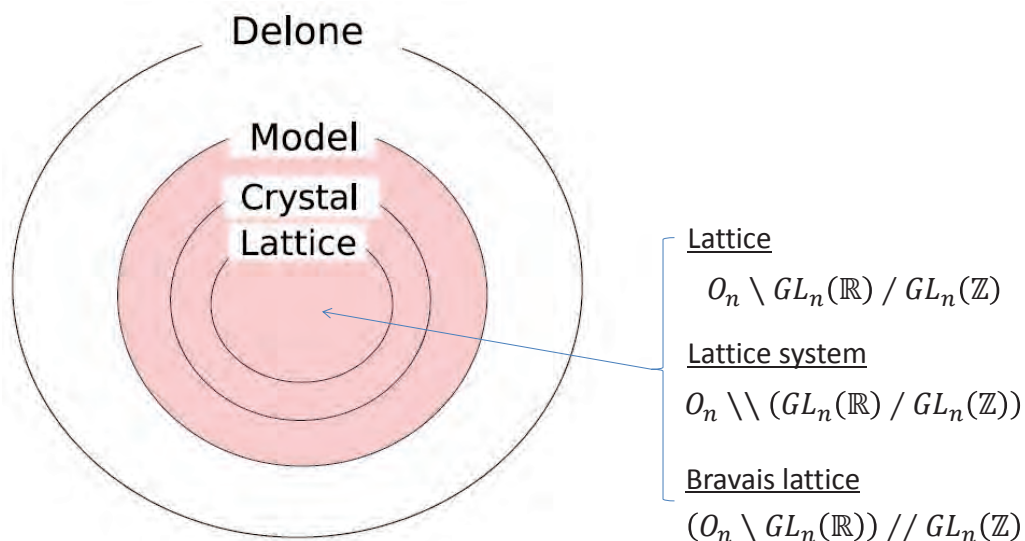


Al-Pd-Mn quasi-crystal surface and the diffraction pattern

(J.W. Evans, Atomic model of fivefold icosahedral-Al-Pd-Mn quasicrystal surface., 2007)



Topological Spaces



K. Maeta (東京大学 東大数理科学 博士課程2年)



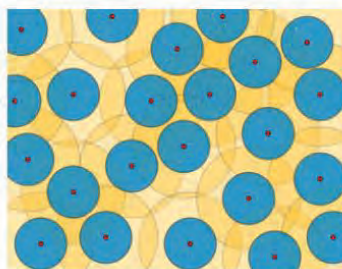
Delone set

Delone set

$D \subset \mathbb{R}^n$ is Delone set $\iff D$ is **uniformly discrete** and **relatively dense**

D is **uniformly discrete** $\iff \exists r > 0 \forall d \in D \ B_r(d) \cap D = \{d\}$

D is **relatively dense** $\iff \exists R > 0 \forall x \in \mathbb{R}^n \ B_R(x) \cap D \neq \emptyset$



(This figure is quoted from Wikipedia)

K. Maeta (東京大学 東大数理科学 博士課程2年)



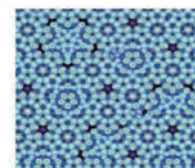
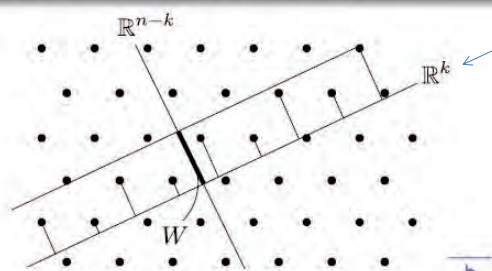
Model SET

Model set

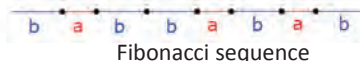
Crystal $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$, Bounded subset $(\mathbb{R}^n \supset) \mathbb{R}^{n-k} \supset W \supset O$ (open set)

$$\Lambda = \left\{ \text{pr}_{\mathbb{R}^k}(x) \in \mathbb{R}^k \mid x \in \Gamma, \text{pr}_{\mathbb{R}^{n-k}}(x) \in W \right\}$$

W : window, \mathbb{R}^n : Entire space, Λ : Model set



Al-Pd-Mn quasi-crystal



Fibonacci sequence

K. Maeta (東京大学 東大数理科学 博士課程2年)



Problem

For a model set Λ , find the minimum dimension of the entire space n .

K. Maeta (東京大学 東大数理科学 博士課程2年)



Proposal of an Invariant

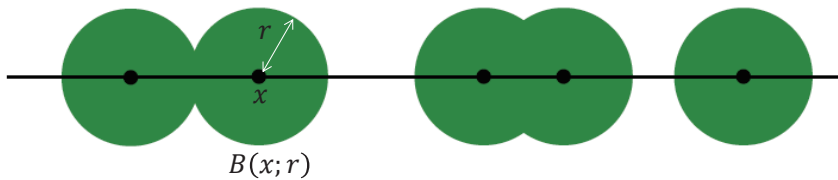
Definition(Kato 2019): an Invariant function $p_k(r)$

a model set $\Lambda \in \mathbb{R}^N$, $r \in \mathbb{R}: r > 0$, $k \in \mathbb{Z}: k \geq 0$

$U_1 \subset U_2 \subset \dots$, $\cup_{n=1}^{\infty} U_n = \mathbb{R}^N$

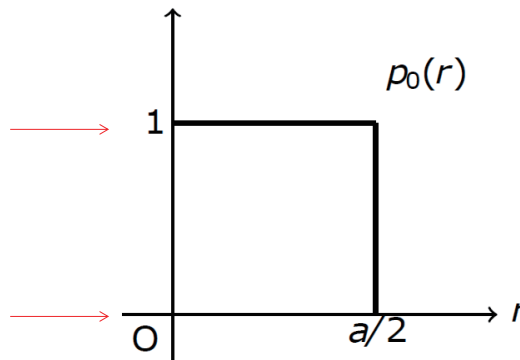
H_k : k dimensional homology

$$p_k(r) := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\dim H_k(\cup_{x \in U_n \cap \Lambda} B(x; r); \mathbb{R})}{\#(U_n \cap \Lambda)}$$



S. Kato (東京大学大学院数理科学博士課程2年)

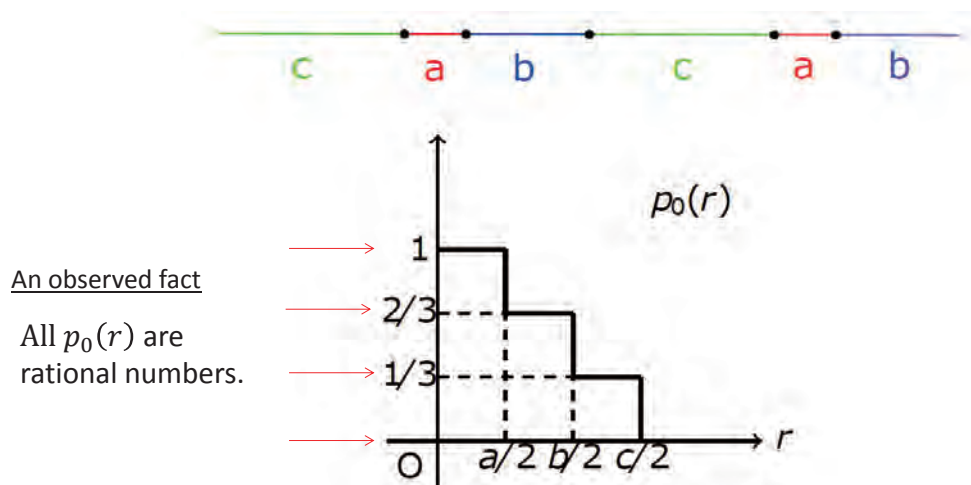
Example (1): 1D Crystal



An observed fact
All $p_0(r)$ are
integr numbers.

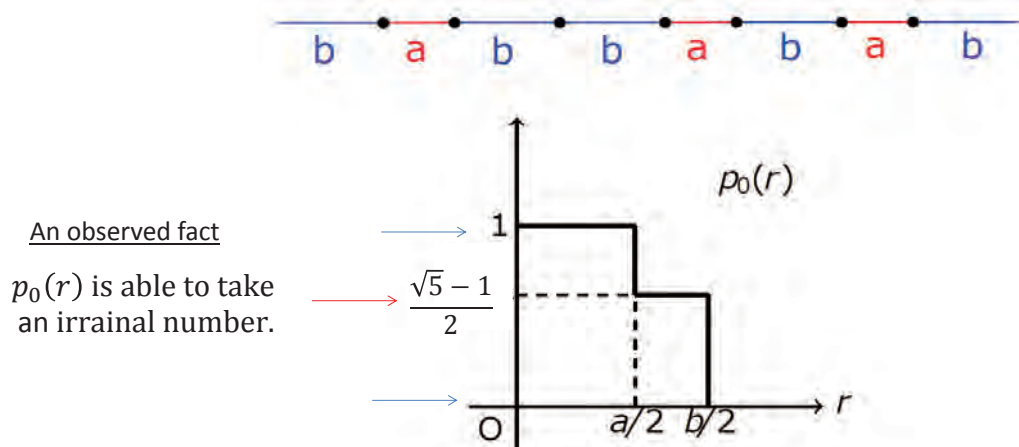
S. Kato (東京大学大学院数理科学博士課程2年)

Example (2): 1D Crystal + Finite Set



S. Kato (東京大学大学院数理科学博士課程2年)

Example (3): Fibonacci sequence (Q-Crystal)



S. Kato (東京大学大学院数理科学博士課程2年)

課題2: 群によって統制される \mathbb{R}^3 内の離散的分布

K. Kannaka (東京大学大学院数理科学博士課程2年)

結晶=結晶群の軌道として得られる離散的集合

例

\mathbb{R}^3 の格子点 = \mathbb{Z}^3 の \mathbb{R}^3 への自然な作用の原点を通る軌道

定義 (結晶群)

\mathbb{R}^3 の距離を保つ群 $O(3) \ltimes \mathbb{R}^3$ の離散かつ余コンパクトな部分群を \mathbb{R}^3 の結晶群と呼ぶ.

目的

結晶群の定義をより一般化して, 結晶を一般化する.

結晶群の重要な性質—固有不連続性

何故, 結晶群の軌道 (=結晶) は離散集合なのか?
 $B(r)$... 原点を中心とする半径 r の球.

定義 (固有不連続な作用)

\mathbb{R}^3 への離散群 Γ の作用が固有不連続であるとは,
 $\{\gamma \in \Gamma \mid (\gamma \cdot B(r)) \cap B(r) \neq \emptyset\}$ が任意の $r > 0$ に対して有限.

Γ が結晶群 $\Rightarrow \Gamma$ の作用は固有不連続 $\Rightarrow \Gamma$ の軌道は離散集合.

目的

\mathbb{R}^3 へ固有不連続に作用する離散群を, 結晶群の一般化として考え,
その軌道として得られる離散集合を結晶の一般化と考える.

K. Kannaka (東京大学大学院数理科学博士課程2年)

\mathbb{R}^3 の構造

\mathbb{R}^3 と内積 $\langle x, y \rangle_3 := x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3$ の組... ユークリッド空間.
結晶群... $O(3) \ltimes \mathbb{R}^3 (= \langle \cdot, \cdot \rangle_3$ を保つ群) の離散かつ余コンパクトな部分群.

\mathbb{R}^3 と $\langle x, y \rangle_{2,1} := x_1y_1 + x_2y_2 - x_3y_3$ の組... ミンコフスキー空間.
本研究... $O(2, 1) \ltimes \mathbb{R}^3 (= \langle \cdot, \cdot \rangle_{2,1}$ を保つ群) の離散部分群で \mathbb{R}^3 に固有不連続に作用するものを探す.

K. Kannaka (東京大学大学院数理科学博士課程2年)



さらなる目的

$\Gamma \dots \mathbb{R}^3$ に固有不連続に作用する離散群.
 $B(r) \dots \mathbb{R}^3$ 内の原点を中心とする球.
 $N_\Gamma(r) := \#(\Gamma \cdot 0 \cap B(r))$.

事実

Γ が結晶群の時,

$$N_\Gamma(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\text{vol}(B(r))}{\text{vol}(\Gamma \backslash \mathbb{R}^3)} = \frac{1}{\text{vol}(\Gamma \backslash \mathbb{R}^3)}$$

例 $\Gamma = \mathbb{Z}^3$ の時, $N_\Gamma(r) = \#(\mathbb{Z}^3 (= \text{格子点}) \cap B(r)) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \text{vol}(B(r))$

問題

Γ が一般化された結晶群の場合, $N_\Gamma(r)$ の増大度は $\text{vol}(B(r))$ を超えることができるか出来ないかを判定する.

K. Kannaka (東京大学大学院数理科学博士課程2年)



3 および 4 分岐有限グラフの Goldberg-Coxeter 構成のラ プリアン固有値について

(On the eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for
3- and 4-valent finite graphs)

大森俊明, Toshiaki Omori

(株) シフラ (Cifra Co., Ltd.)

(joint work with 内藤久資氏 (名古屋大学) と 楯辰哉氏 (東北大学))

The Goldberg-Coxeter constructions $GC(k, \ell)(X)$ of a graph X have two integral parameters (k, ℓ) , have $O(k^2 + \ell^2)$ vertices and are considered as a kind of “subdivisions” of X . GC constructions often appear in the field of physical physics and fullerenes such as C_{60} and carbon nanotubes are the most typical examples. A motivation to study their eigenvalues comes not only from the pure mathematical viewpoints but also from the chemical viewpoints in the light of the stability of materials. In this talk we will discuss “distributions” of the Laplacian eigenvalues of GC constructions when the parameters k and ℓ are larger and larger, whose case corresponds to the case that the subdivision becomes finer and finer. More precisely, we will explain, in the case that $\ell = 0$, that the first and the last $o(k^2)$ eigenvalues tend to 0 and 6 or 8, respectively, as k tends to infinity, and that an arbitrary real number in $[0, 6]$ or $[0, 8]$ is approximated by a sequence of the eigenvalues of the GC constructions of an arbitrary X .

研究集会 (II) 「結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析」

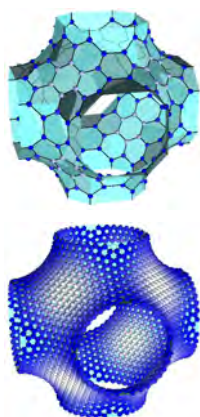
3 および 4 分岐有限グラフの Goldberg-Coxeter 構成の
ラプラシアン固有値について

大森俊明

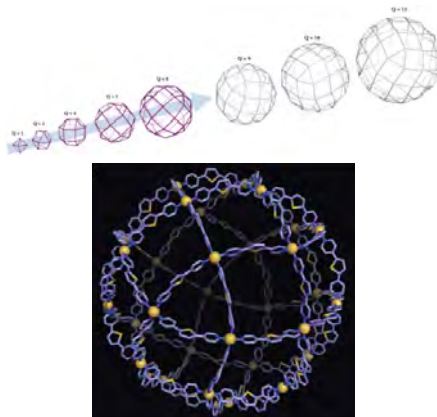
シフラ株式会社

令和元年 9 月 10 日

研究の動機



Tao-Kotani-Naito (2018)
Mackay 結晶の Goldberg-Coxeter 構成列の収束



Fujita et al. (2016)
4 分岐 Goldberg 多面体構造を持つ
金属有機化合物の自己組織化

物質の安定性は固有値によって説明できる (e.g. Hückel 法)
⇨ 有限グラフの Goldberg-Coxeter 構成列の固有値とその極限

本講演の内容

Electron. J. Combin. **26** (2019)

内藤久資氏（名大）と楯辰哉氏（東北大）との共同研究

 X : 連結, 有限かつ単純な 3 分岐グラフ (常に仮定する)に対する Goldberg-Coxeter 構成 $GC_{k,0}(X)$ のラプラシアン

$$\Delta f(x) = \deg(x)f(x) - \sum_{y \sim x} f(y) = 3f(x) - \sum_{y \sim x} f(y)$$

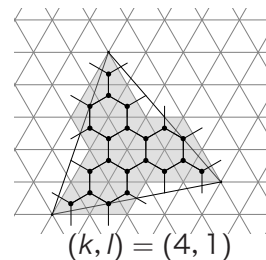
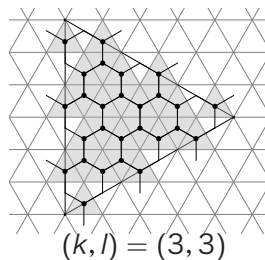
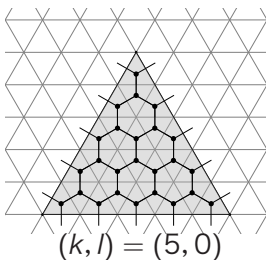
の固有値の $k \rightarrow \infty$ での漸近挙動, および, 固有値 2, 4 の重複度と X のグラフ構造との関係 (具体例)

- ① Goldberg-Coxeter 構成の定義, 例および基本性質
- ② クラスタの固有空間
- ③ 主結果とその証明の概略

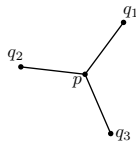
Goldberg-Coxeter 構成 (GC 構成)

定義 (Deza-Dutour, Naito-Tate-O.)

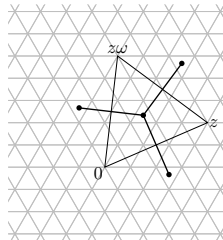
- X : 有向曲面上の単連結面を持つ 3 分岐グラフ
 - $k \geq l \geq 0, (k, l) \neq (0, 0)$
- ① X の各頂点 p に以下のような**クラスタ** $\Delta_{k,l}(p)$ を付随させる
 - ② X の各頂点に備わる向きに従って, クラスタの境界の頂点をつなぎ合わせる

得られたグラフ $GC_{k,l}(X)$ は 3 分岐であり, 同じ曲面の上に乗っている

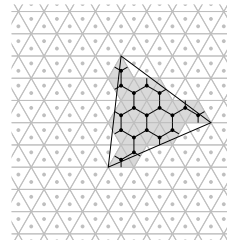
GC 構成の手順



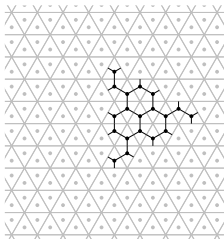
頂点 p とその隣接点 $\{q_1, q_2, q_3\}$



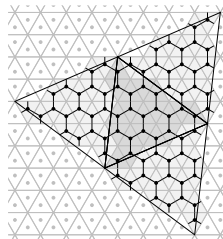
双対グラフは三角形グラフ



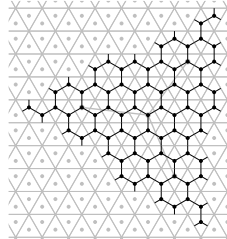
分割された三角形の重心を結ぶ



点 p に付随するクラスタ $\Delta_{3,2}(p)$

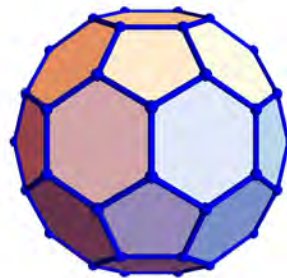
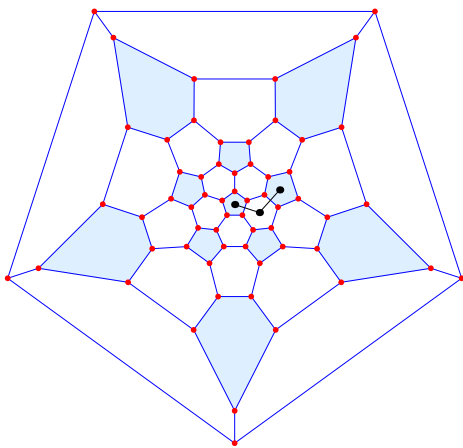


隣接クラスタとつなぎ合わせる



$\Delta_{3,2}(p) \cup \Delta_{3,2}(q_i)$

$GC_{1,1}$ (十二面体) = 切頂十二面体, C_{60}



十二面体の $GC_{1,1}$ 細分

十二面体と立方体 GC 構成 (第 1, 2, 3 固有函数での埋め込み)

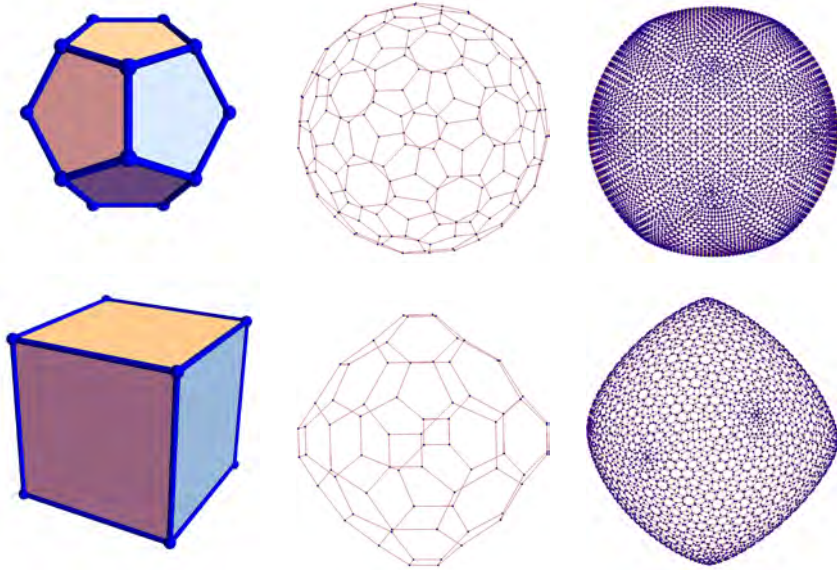
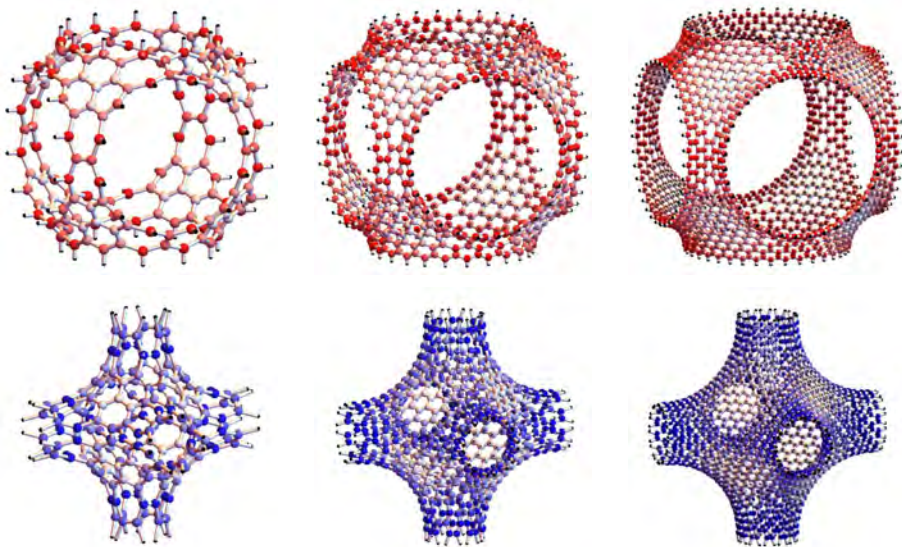


図: 中央列は $GC_{3,0}$ 細分, 右列は $GC_{20,0}$ 細分

Mackay-like 結晶 (田上氏等) の $GC_{k,0}$ 構成 (標準的実現での埋め込み)



K_4 格子の $GC_{k,l}$ 細分 (標準的実現)

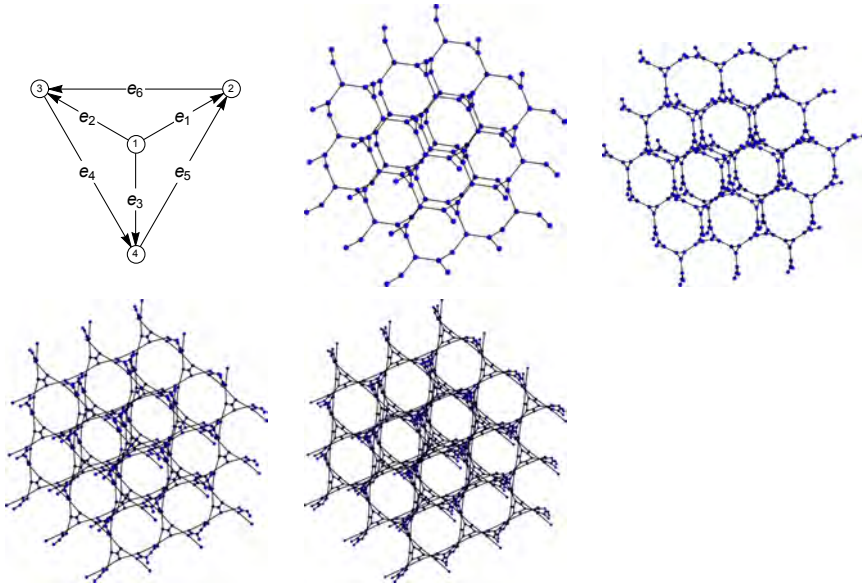


図: $(k, l) = (1, 0), (1, 1), (2, 0), (3, 0), (4, 0)$

GC 構成の基本性質

- $X = (V, E)$: 有向曲面上の単連結面を持つ 3 分岐有限グラフ

命題 (Deza-Dutour, Naito-Tate-O.)

- ① $GC_{k,l}(X)$ は同一曲面に埋め込まれる 3 分岐有限グラフ
よってラプラシアン固有値は $[0, 6]$ に含まれる
- ② $GC_{k,l}(X) \simeq GC_{l,k}(X) \simeq GC_{-l,k+l}(X)$, etc. (グラフ同型)
- ③ $z, z' \in \mathbb{Z}[\omega]$ ($\omega^3 = 1$) に対して $GC_z(GC_{z'}(X)) = GC_{zz'}(X)$
但し, $z = k + l\omega$ に対して $GC_z := GC_{k,l}$
- ④ $GC_{k,l}(X)$ の頂点数 $= (k^2 + kl + l^2)|V| = |z|^2|V|$
- ⑤ X が二部グラフならば $GC_{k,l}(X)$ も二部グラフであり, よって $GC_{k,l}(X)$ の固有値は 3 に関して対称に分布している

主結果 A

定理 (Kelner-Lee-Price-Teng)

種数 g の有向曲面に埋め込まれたグラフ $X = (V, E)$ の i 番目の固有値は $O\left((g+1)\log^2(g+1)i/|V|\right)$ で上から評価される

GC 構成に対しては、種数 g に依らないだけでなく、上限固有値への収束についても言及することができる:

定理 A (Naito-Tate-O.)

- $X = (V, E)$: 有向曲面上の単連結面を持つ 3 分岐有限グラフ
- $o(k^2)$: $o(k^2)/k^2 \rightarrow 0$ ($k \rightarrow \infty$) を満たす整数

このとき、 $GC_{k,0}(X)$ (頂点数 $\sim k^2$) の最初および最後の $o(k^2)$ 個の固有値は $k \rightarrow \infty$ のとき 0 および 6 にそれぞれ収束する

主結果 B

定理 B (Naito-Tate-O.)

任意の $\lambda \in [0, 6]$ に対して、 $GC_{k,0}(X)$ の固有値の列 $(\lambda_k)_k$ で、 $\lambda_k \rightarrow \lambda$ ($k \rightarrow \infty$) となるものが存在する

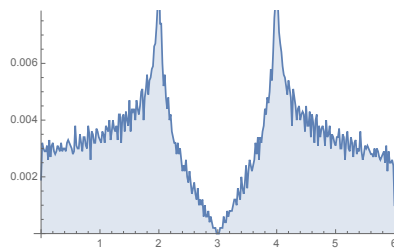


図: 3 分岐クラスタの固有値分布

主結果 A, B の証明

補題

$(k, 0)$ クラスタ $\Delta_{k,0}$ の固有値・固有函数は、重複度も込めて全て具体的に表示可能

実際、固有値は以下の形で表される:

$$\lambda_{s,t}^{\pm} = 3 \pm \sqrt{3 + 2 \cos \frac{2\pi s}{3k} + 2 \cos \frac{2\pi t}{3k} + 2 \cos \frac{2\pi(s-t)}{3k}}$$

補題 (Interlacing Property & Courant-Weyl 不等式)

- $Q: \mathbb{C}^m \rightarrow \mathbb{C}^n: {}^tQQ = I_m$ なる線型写像
- $A, B: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$: Hermite 対称変換

$1 \leq j \leq m, 1 \leq t \leq i \leq s \leq n$ に対して

$$\begin{aligned} \nu_j(A) &\leq \nu_j({}^tQAQ) \leq \nu_{n-m+j}(A), \\ \nu_s(A) + \nu_{i-s+1}(B) &\leq \nu_i(A+B) \leq \nu_t(A) + \nu_{t-i+n}(B) \end{aligned}$$

クラスタのラプラシアン不変・交代固有空間

定義

$\lambda \geq 0$ がクラスタ $\Delta_{k,0}$ の D_3 -不変固有値 (resp. D_3 -交代固有値) であるとは、次を満たす非自明函数 $u: V(\Delta_{k,0}) \rightarrow \mathbb{C}$ が存在するときをいう:

- ① u は固有函数: $\Delta u = \lambda u$ ($x \in V(\Delta_{k,0})$)
- ② $u(\sigma x) = u(x)$ (resp. $u(\sigma x) = \text{sgn}(\sigma)u(x)$) ($\sigma \in D_3$)

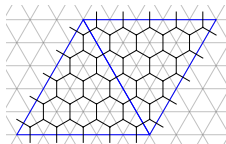
u を D_3 -不変固有函数 (resp. D_3 -交代固有函数) と呼ぶ

各クラスタに同一の D_3 -不変固有函数 u を割り当てることにより、 $\text{GC}_{k,0}(X)$ の固有値 λ の固有函数が得られる

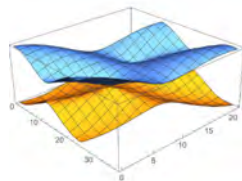
↪ クラスタの不変固有値は $\text{GC}_{k,0}(X)$ の固有値

クラスタ $\Delta(k)$ の固有値

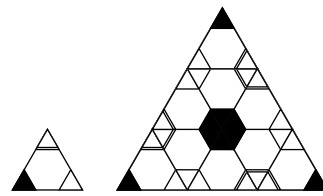
- クラスタ $\Delta(k)$ を二つ並べて境界にトロイダル条件を課したトーラスの固有値は簡単に計算できる
- $\Delta(k)$ の自己同型 D_3 の作用で不変および交代な固有空間をそれぞれ U_k および W_k で表す
- D_3 -不変固有値および D_3 -交代固有値はトーラスの固有値から求めることができる
- 自然な単射 $\mathbb{C}^{\Delta(k)} \rightarrow U_{3k} \oplus W_{3k}$ があり, この像を調べることで $\Delta(k)$ の固有値を具体的に全て求めることができる



トーラス (対辺のみ出た辺同士を繋ぐ)



トーラスの固有値 (バンド構造)



$\Delta(k)$ の固有関数を $\Delta(3k)$ のそれに埋め込む

主結果 C

クラスタの不変固有値 2, 4 の重複度を数えることで次が分かる:

系

- X : 有向曲面上の単連結面を持つ 3 分岐有限グラフ
- ① $GC_{2k,0}(X)$ の固有値 4 の重複度は $\lceil k/2 \rceil$ 以上
- ② $GC_{2k,0}(X)$ の固有値 2 の重複度は $\lfloor k/2 \rfloor$ 以上

X のグラフ構造に以下の仮定を付加すると重複度は更に増え得る:

定理 C (Naito-Tate-O.)

- X : 各面の境界の辺の数が 3 の倍数である平面グラフ
- ① $GC_{2,0}(X)$ の固有値 4 の重複度は 3 以上
- ② $GC_{k,0}(X)$ および $GC_{k,k}(X)$ の固有値 4 (resp. 2) の重複度は $\lceil k/2 \rceil$ (resp. $\lfloor k/2 \rfloor$) 以上

グラフ彩色と固有値 2, 4 の重複度

- X : 3 分岐有限平面グラフ

について次の 3 条件を考える:

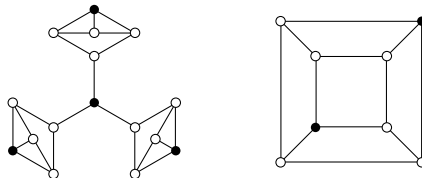
- (F) 各面の境界の辺の数は 3 の倍数である
- (N) 各頂点 p の周りの 3 本の辺に競合なく 1, 2, 3 を正の向きに振り分けることができる
- (C) $V(X)$ は次を満たすように 2 色 (黒と白) で塗り分けられる:
 - (C-i) 黒の頂点の隣接 3 頂点は白である
 - (C-ii) 白の頂点は丁度 1 個の黒頂点と隣り合う
 - (C-iii) 距離 3 だけ離れた二つの黒頂点 x, y に対して, 2 回の右折, または 2 回の左折のみで x から y に移動できる

命題

- ① (F) と (N) は互いに同値である
- ② (F) ならば (C) が成り立つ

いくつかの例

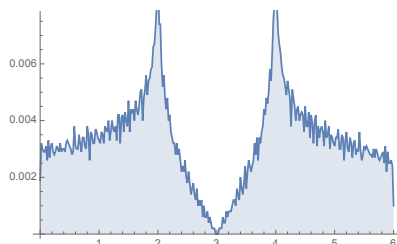
- 四面体はいずれの条件も満たす
- 立方体は (C-i), (C-ii) を満たすが (C-iii) は満たさない
- 十二面体はいずれの条件も満たさない



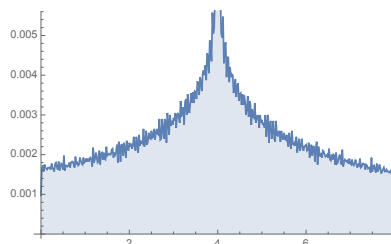
X	(1, 0)	(2, 0)	(3, 0)	(4, 0)	(5, 0)	(6, 0)
四面体	3	6	9	12	15	18
立方体	3	4	3	12	3	20
十二面体	0	6	0	18	0	30

固有値分布の極限分布

- 頂点数が発散する、あるクラススの有限正則グラフ列に対する固有値分布の極限分布は普遍的な形で求まっている
- 跡公式を用いたその幾何学的証明も得られているが、それが通用するのは girth (最小閉路) が非有界であるものに限る
- $GC(X)$ は girth が一様に有界である



3 分岐クラスタの固有値分布



4 分岐クラスタの固有値分布

問

3 または 4 分岐有限グラフ X に対して、 $GC_{k,0}(X)$ の固有値分布の極限分布 ($k \rightarrow \infty$) は普遍的か？

EBSD(電子線後方回折)菊池パターンの ab-initio indexing

(Ab-initio indexing of Kikuchi patterns obtained by EBSD (electron
backscattering diffraction))

富安亮子, Ryoko Oishi-Tomiyasu

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所
Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

EBSD indexing is a technique that can determine the orientation of the crystal lattice in each crystal grain and collect the distribution of the orientations for texture analysis. In this case, knowledge of the unit-cell parameters (equivalently, the ternary quadratic forms) of the crystal lattice is assumed, and a basis of a 3 dimensional lattice in \mathbb{R}^3 is output as a result of indexing.

We developed a method for EBSD ab-initio indexing that does not assume knowledge of the unit-cell parameters, by using three mathematical techniques, originally developed for ab-initio indexing of powder diffraction patterns. Firstly, distribution rules of prohibited reflections that can be used without knowledge on space groups and a method. This is because it is known that very small structure factors influences on the band widths of visible bands. Secondly, an algorithm for error-stable Bravais lattice determination. Thirdly, a new figure of merit obtained by generalizing the definition of the de Wolff figure of merit that has been used for powder indexing in order to see which candidate solution is the most plausible. All of them are general in the sense of mathematics, hence, are useful for developing efficient ab-initio indexing algorithms of various kinds of experimental data.

This study was carried out as a collaborative research with T. Tanaka and J. Nakagawa of Nippon Steel Corporation.

EBSD(電子線後方回折) 菊池パターンの ab-initio indexing 結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析@IMI, 九州大学

Ryoko Oishi-Tomiyasu

September 11, 2019

2016 年に本集会で粉末回折パターンの ab-initio indexing を紹介
→ 2017-8: 中川氏・田中氏と共同研究開始 (日本製鉄 (株) 若手奨学金寄付)

- 本研究は上記期間に実施したもの (論文は結晶学ジャーナルに投稿中)
- 今年度より EBSD の数理解析に関する共同研究契約締結.

◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶

今日の話: 数理結晶学

私の専門分野: 整数論 (格子・2次形式), 数理結晶学

数理結晶学とは何か?

- もともと結晶学の中に数理結晶学と呼ばれるものがあるが, 結晶学者にとっての数学, を指したはず (数学とも物理とも化学ともつかない非常に学際的なもの).
- 私が自分の数学の専門に数理結晶学を入れたきっかけは, AIMR にいたとき西浦先生が, 私の研究をそう呼び始めたこと.
- 代数と調和解析と計測データ解析手法の融合が, 数理結晶学? と自分では考えている.

ab-initio indexing は, 典型的な数理結晶学のテーマの一つと言える.

◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶

2 / 26

Ab-initio indexing (autoindexing) に関して

- ab-initio: 求めたい物質構造に仮定を置かず，構造を決定する解析.
- ab-initio indexing では，回折データから，結晶格子の形を求める.

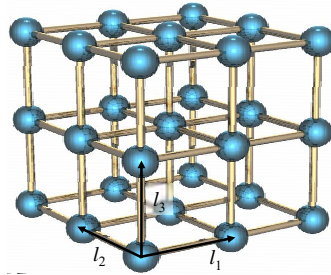


Figure: 結晶格子 =3 次元格子

すなわち，ある格子基底 l_1, l_2, l_3 のグラム行列ををを求める，格子決定を実施する.

$${}^tMM = (l_i \cdot l_j)_{i,j=1,2,3}, \quad M := (l_1 \quad l_2 \quad l_3)$$

- どの格子基底を用いるかは，格子基底簡約理論による.

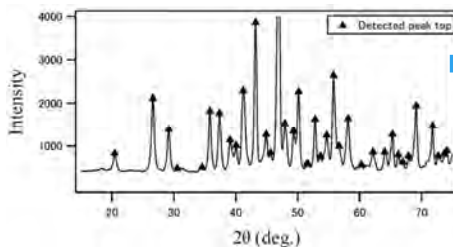
結晶学では，Eisenstein の方法 (\approx 3 次元の Minkowski 簡約) が用いられ，Niggli 簡約と呼ばれる.



3/26

様々な実験系における ab-initio indexing (粉末回折パターンの場合)

格子 L の逆格子 L^* とは，ある格子基底について， L のグラム行列の逆行列を，グラム行列として持つような格子 L^* のこと.



以下の平均テータ級数の定数倍

変換 $\Theta(z) = \sum_{j=1}^s \sum_{k=1}^s \sum_{l \in L} e^{\pi i z |l+u_j-u_k|^2}$

抽出(ピークサーチ)

結晶格子 L の逆格子のベクトル長さ

Figure: 粉末回折 ab-initio indexing の概要; (一部) の格子ベクトルの長さが分かった状況で，格子決定を行う.

この分野における私の研究 (主に高エネ研で実施)

- ソフトウェア CONOGRAPH の開発 <https://z-code.kek.jp/zrg/>
- 複数のアルゴリズム開発 (→ 今日の話)
- Kapalansky 予想と呼ばれる，3 変数 2 次形式の問題 (= 粉末回折 ab-initio indexing の解の一意性) がある. これについて部分的な結果を得て (数論, <https://arxiv.org/abs/1703.08854>), 両分野で発表した.



4/26

様々な実験系における ab-initio indexing (電子線後方回折の場合)

菊池パターン: 電子線後方回折 (EBSD) で得られる画像データ (2次元)

粉末回折と異なり, 菊池パターンは格子の形だけではなく, 向き情報も含む.
具体的には, 以下の目的に使用できる.

- 各結晶粒における結晶方位の決定,
- テクスチャ解析 (結晶方位の分布に見られる傾向を解析する),
- 結晶相の同定 (各結晶粒に対して格子定数などの構造に関わる情報を同定).

最後の3つめが今日のテーマ.

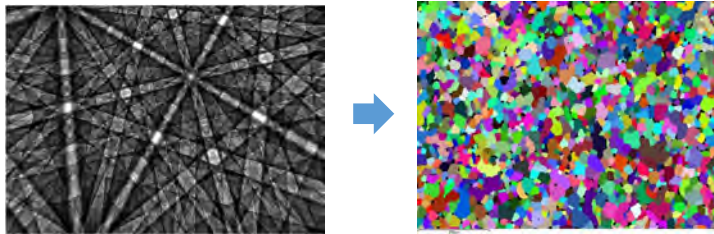


Figure: 左: steel のシミュレーションパターン, 右: テクスチャ解析結果

菊池パターンの indexing は, 通常, 既知の格子定数を用いて実施する.



5/26

EBSD ab-initio indexing の問題設定 (1/2)

- 後述するように, バンドの中心線の位置座標は, ある逆格子ベクトルの向き情報に変換される.
- また, バンド幅は, 同じ方向を向く格子ベクトル ma^* ($m = 1, 2, \dots$) の, どれかの長さに変換される.
- 観測バンド幅が, 最も短い格子ベクトルの長さに対応することは限らない. (反射強度が大きいものが観測されやすいため, そういう場合が多いとは考えられる.)

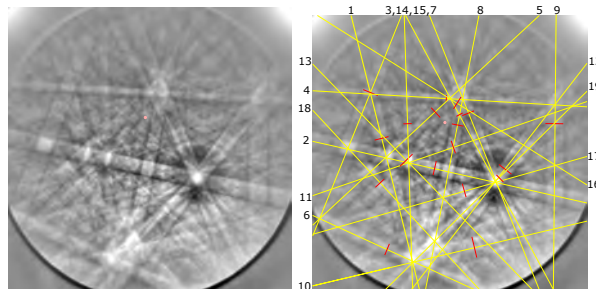


Figure: 左: Cementite の実験パターン, 右: Cementite の実験パターンから抽出されたバンドの中心線と幅

問題: この状況で, 一般的に, 格子の形を (一意に) 決定できるか?



6/26

EBSD ab-initio indexing の問題設定 (2/2)

答え: 真の解と, その部分格子・超格子を判別する根拠が弱い.

対称性が高い格子は決定できることもある. 一般には多数の解が発生しやすい.

- 格子 L の部分格子・超格子をあわせて, L の derivative 格子と呼ぶ.
- 解の一意性の問題は, derivative 格子を同一視することによれば起きない.
- しかし, 格子定数としては全然違うものを同一視するので, 数学者以外には, 不満は残る解決になる.

上記のような課題はあるが, 本研究では, 格子定数 (とそのブラベー格子), 結晶方位を事前情報なしに決定する菊池パターンの ab-initio indexing 手法を構成し, 実装した.

研究動機: ソフトウェア CONOGRAPH の中身 (理論) の宣伝. 特に, ソフトウェア CONOGRAPH の方法と, de Wolff figure of merit と呼ばれるソート基準が, 粉末回折だけでなく, 一般の ab-initio indexing の方法で利用可能なことを紹介できる.

1. 空間群が未知でも使える, 消滅則の一般則.
2. 未知の観測誤差を含む格子パラメータの, ブラベー格子決定.
3. de Wolff figure of merit の任意次元対応.

計測分野は, 解析手法が横に広がりにくいコミュニティの構造がある.

7/26

消滅則

- 反射強度がちょうど 0 になる現象を指す (すなわち以下の構造因子 $F(K) = 0$).

反射強度 $I(K)$ = 構造因子 $F(K)$ の絶対値の 2 乗 $|F(K)|^2$,
構造因子 $F(K)$ = 結晶構造を $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ 上の密度関数と考えたときの
各フーリエ係数.

- 対称性 (ブラベー格子か空間群) による以外の消滅則は頻度が少ない.
- 対称性による消滅則は, 反射の半数が消えるなど結構な頻度で起きることもあり, 個別に考慮するとアルゴリズムが複雑になりやすい.

例: 空間群 G の作用 (右作用) による $x \in \mathbb{R}^3$ の軌道 xG を結晶構造と考える. $H \subset G$ を x の固定部分群としたとき, 以下が成立すれば, $K \in L^*$ において $F(K) = 0$ となる.

$$\sum_{\sigma \in H \backslash G/L} e^{2\pi i x^\sigma \cdot K} = 0. \quad \text{タイプ } (G, H) \text{ の消滅則}$$

結晶学では, 「消滅則 = 何百頁にわたる長いリスト」と考えられていたせいか, シンプルな消滅則の法則を見つければ, indexing のアルゴリズムもシンプルになるという考え方を誰もしていなかった.

8/26

Ab-initio indexing のため消滅則について導出した定理 (T, 2013) (1/4)

- $\Gamma_{ext}(G, H)$ をタイプ (G, H) の消滅則で観測されない反射に対応する逆格子ベクトルの集合とする.
- $\{l_1^*, l_2^*\}$ が primitive というのは, ある $l_3^* \in L^*$ を加えると L^* の基底に拡張できること.

以下は, $\Gamma_{ext}(G, H)$ に含まれない観測反射から, 2次元部分格子を構成する議論に用いることができる定理.

Theorem 1

Regardless of the type of systematic absence, there are infinitely many primitive sets $\{l_1^*, l_2^*\}$ of L^* such that none of $l_1^*, l_2^*, l_1^* + 2l_2^*, 2l_1^* + l_2^*$ are contained in $\Gamma_{ext}(G, H)$.

Theorem 2

Regardless of the type of systematic absence, there are infinitely many primitive sets $\{l_1^*, l_2^*\}$ of L^* such that $ml_1^* + (m-1)l_2^*$ does not belong to $\Gamma_{ext}(G, H)$ for any integer m . Furthermore, there exist infinitely many 2D sublattices L_2^* of L^* such that L_2^* is expanded by a primitive set $\{l_1^*, l_2^*\}$ of L^* satisfying this property.

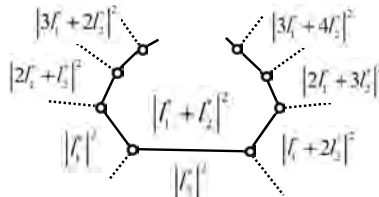
定理 1 は定理 2 の特殊な場合になっている.



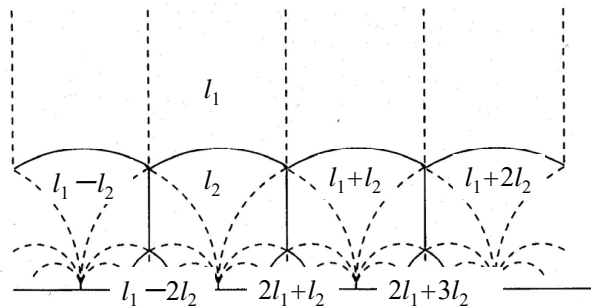
9/26

Ab-initio indexing のため消滅則について導出した定理 (T, 2013) (2/4)

定理 2 は, 図の真ん中の $l_1^* + l_2^*$ を除いて, ここに出てきている逆格子ベクトルが全部観測される ($= \Gamma_{ext}(G, H)$ に含まれない) ような逆格子ベクトルは, (G, H) に関わらずたくさんある, ということを行っている.



上図のグラフは, 格子基底簡約理論から導出される, 各頂点・枝に格子ベクトルの集合が対応するグラフ (topograph, spine) になる.



10/26

Ab-initio indexing のため消滅則について導出した定理 (T, 2013) (3/4)

以下は、 $\Gamma_{ext}(G, H)$ に含まれない観測反射を用いて、3次元の格子基底をどうやって構成するか、という議論に用いることができる。

Theorem 3

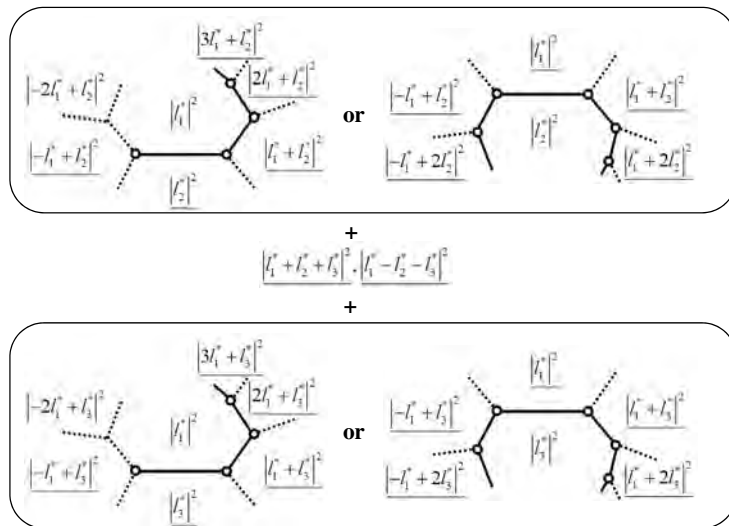
Regardless of the type of systematic absence, there are infinitely many bases $\langle l_1^*, l_2^*, l_3^* \rangle$ of L^* such that the following hold:

- (a) $\pm l_1^* + l_2^* + l_3^*$ do not belong to Γ_{ext} .
- (b) For both $i = 2, 3$, $ml_1^* + (m-1)(-l_1^* + l_i^*)$ do not belong to Γ_{ext} for any integer m , or $ml_1^* + (m-1)(l_1^* - l_i^*)$ do not belong to Γ_{ext} for any integer $m \geq 0$.

11/26

Ab-initio indexing のため消滅則について導出した定理 (T, 2013) (4/4)

3番目の定理が言っているのは、図で下線が引かれた逆格子ベクトルが観測反射に含まれるような格子基底 l_1^*, l_2^*, l_3^* はたくさんある、という話。



- これらの定理は証明はしたものの、しらみつぶしに計算機を使用している。
- 平面群の消滅則については、結晶群 G の元が $\{\tau|v_\tau\}$ (v_τ は 1-cocycle 条件 $v_{\sigma\tau} = v_\sigma^\tau + v_\tau$ を満たす) の形になることから、非常に容易に同様の定理が証明できたことが、この話のきっかけ。

12/26

菊池パターンの数理

定理を用いて得られた格子決定の方法を述べる前に背景を説明する。
以下の用語はこの分野で基本的である。

- Projection center (PC): electron probe の座標,
- パターンセンター: PC から蛍光板に下した垂線の足の座標,
- カメラ長: PC とパターンセンターの距離 (簡単のため, = 1 に規格化.)

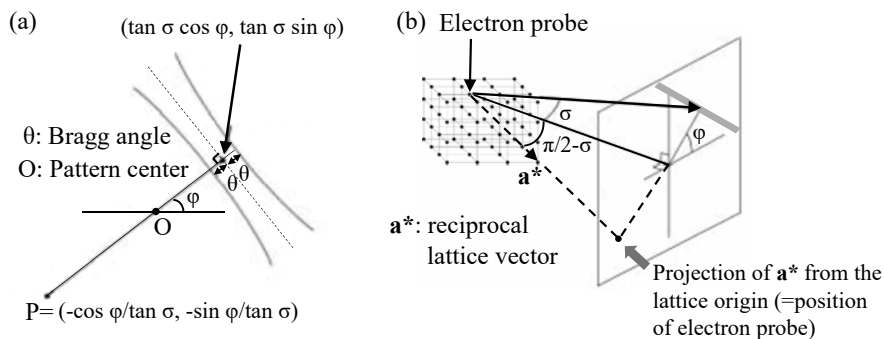


Figure: 菊池パターンの中心線と対応する逆格子ベクトルの向き

13/26

逆格子ベクトルの向きのバンド情報からの導出 (1/2)

2つの線に挟まれる明るい帯を(菊池)バンドとよぶ。バンドの中心線を菊池線と呼ぶ。

菊池パターンのバンド座標は以下のように記述される:

- 図 (b) にみえる蛍光板は, 図 (a) において紙面と平行と考える。
- 図 (a) において, パターンセンター O からとバンドの中心線に垂線を下したときの垂線の足の座標 $(\tan \sigma \cos \varphi, \tan \sigma \sin \varphi)$ から求まる, 座標 $P = (-\cos \varphi / \tan \sigma, -\sin \varphi / \tan \sigma)$ は図 (b) のように, ある逆格子点 \mathbf{a}^* を蛍光板に射影させて得られる点座標に一致する。

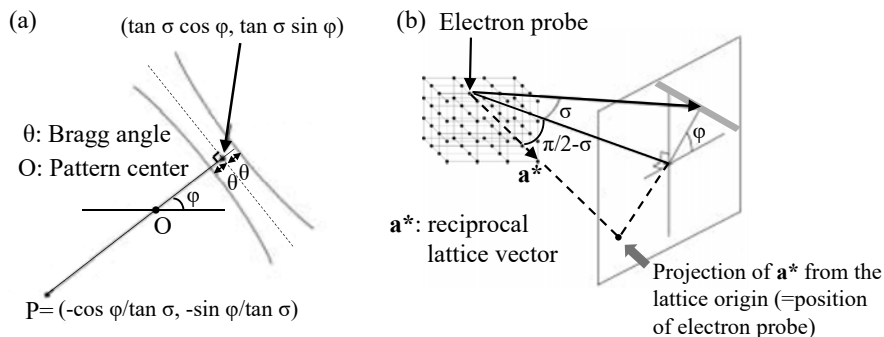


Figure: 菊池パターンの中心線と対応する逆格子ベクトルの向き

14/26

逆格子ベクトルの向きのバンド情報からの導出 (2/2)

- 逆格子ベクトル \mathbf{a}^* と同じ向きのベクトル $m\mathbf{a}^*$ ($m = 1, 2, \dots$) に対応するバンドは全て完全にオーバーラップするので、バンド座標 (= 下した垂線の足の座標) の消滅則は、ほぼ考える必要がない。
- 下図のように 3 本以上のバンドが (x_0, y_0) で交わる時、対応する逆格子ベクトル $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ の射影点 P_1, P_2, P_3 は同一の直線 $x_0X + y_0Y = -1$ に載る (よって、 \mathbf{a}_i^* と原点は coplanar)。

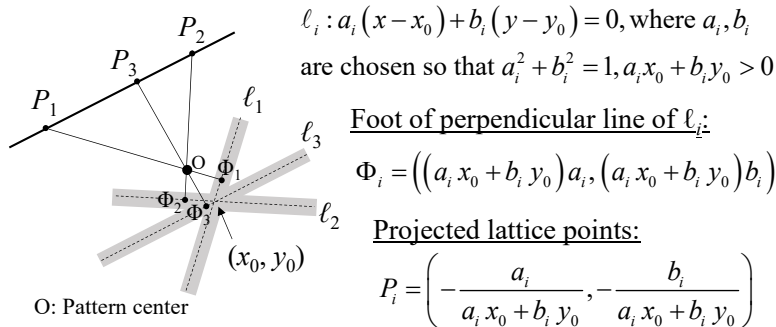
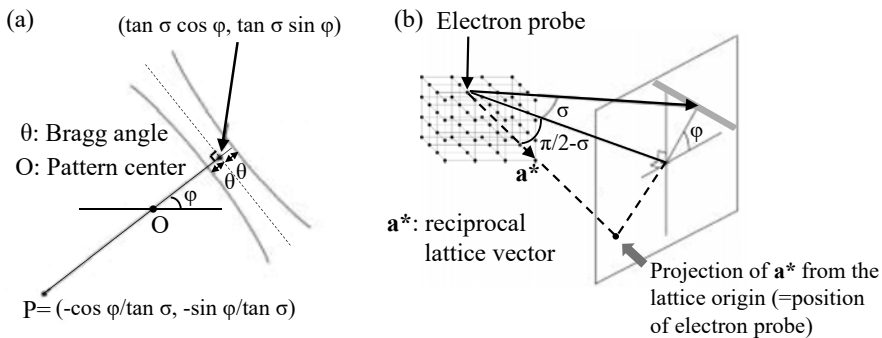


Figure: 菊池バンドの中心線 ℓ_i ($i = 1, 2, 3$) が (x_0, y_0) で交わる時、対応する格子点の射影座標は直線 $x_0X + y_0Y = -1$ 上に載る

逆格子ベクトルの長さのバンド情報からの導出



- バンド幅 $\beta = \tan(\sigma + \theta) - \tan(\sigma - \theta)$ からは、ブラッグ角 θ , よって逆格子ベクトル $m\mathbf{a}^*$ の長さが得られる。しかし実験データのバンドはあまり鮮明でなく、精度よい値を得るのは難しい。

$$d^* = 1/d = 2 \sin \theta / \lambda \quad (\lambda: \text{電子ビームの波長}).$$

- また $m\mathbf{a}^*$ ($m = 1, 2, \dots$) のバンドは重なるため、鮮明に見えるバンド幅が $m = 1$ (一番短い) とは限らない。さらに消滅則の影響も受ける。

よって「バンド幅を使う」と得られる格子パラメータの精度が悪くなる。
他方で、「バンド幅を使わない」と異なる解が多数発生する。

EBSD ab-initio indexing のフローチャート

解析手法は、以下のフローチャートにしたがって実施される。

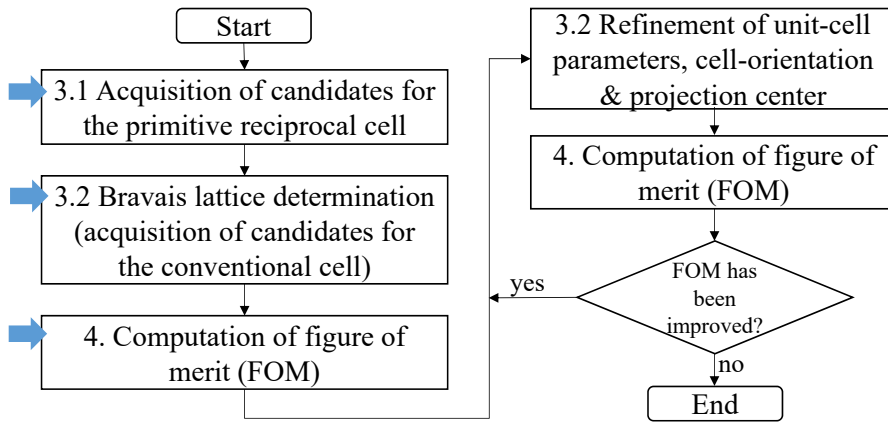


Figure: EBSD ab-initio indexing の解析手順

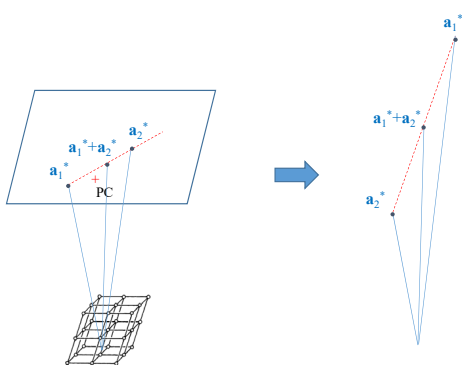
各⇒の箇所、どのような手法を用いているか説明する。

消滅則定理を考慮して開発した格子定数の構成法 (1/2)

1 点に交わるバンド l_1, l_2, l_3 に対応する逆格子ベクトル \mathbf{a}_i^* ($i = 1, 2, 3$) は coplanar ⇒以下を満たす有理数 p, q がある。

$$\mathbf{a}_3^* = p\mathbf{a}_1^* + q\mathbf{a}_2^*. \quad (1)$$

この状況で p, q が既知なら、バンド座標から、 \mathbf{a}_i の長さの比を求められる (以下は $p = q = 1$ の場合)。



そこで (p, q) を以下の範囲とし、用いるバンドの組 (l_1, l_2, l_3) の方を任意に動かすことを考える。

$$(p, q) = (1, 1), (2, 1), (1, 2).$$

$\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*$ の長さの比が得られれば、 $p\mathbf{a}_1^* + q\mathbf{a}_2^*$ の形の全ての逆格子ベクトルに対応するバンドが特定できるので、逆格子の 2 次元部分格子が複数求められる。

3 次元の逆格子は、得られた 2 次元格子を二つ組み合わせて作る。

消滅則定理を考慮して開発した格子定数の構成法 (2/2)

全プロセスをまとめると、バンドの組が図 (i)–(iii) のいずれかのように交わるとき、逆格子基底 l_1^*, l_2^*, l_3^* , もしくはその和のバンド座標に対応すると考え、格子基底 l_1^*, l_2^*, l_3^* の長さの比と向きをバンド座標から求める。

→ l_1^*, l_2^*, l_3^* のグラム行列がスケールを除いて求まる。

次に、灰色のバンドのどれかの幅は、同じ向きの非零格子ベクトルの中で最短のものに対応すると考え、スケールを求める。

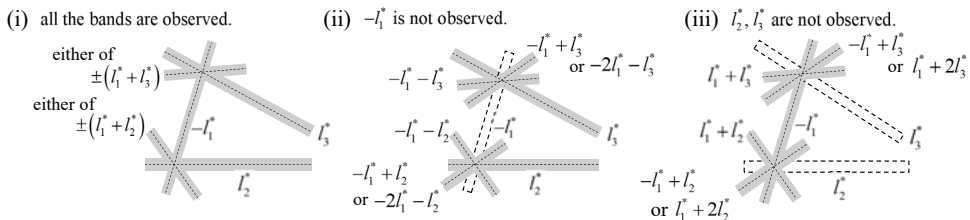


Figure: 3次元格子の構成に用いるバンドの組と各バンドに割り当てる逆格子ベクトル; 図中で灰色のバンドは実験データから検出されたもの、白色のバンドは検出されていないが他のバンドの交点から存在が推定できるもの。(灰色の観測されたバンドには、定理3で消滅則の非成立が示された方の格子ベクトルが割り当てられている)

上図のように交わる全てのバンドの組、それぞれから一つのグラム行列が得られる。あとはブラベー格子決定を行い、解をソート基準にしたがいソートする。



19/26

観測誤差下でのブラベー格子決定 (T, 2012)

2次元格子…5種類のブラベー格子

3次元格子…14種類のブラベー格子

- ブラベー格子決定を行うには、格子基底を辺に持つ基本領域が、格子基底を何通りか取り直して、ある定められた形に近くなるかチェックすればよい。
→見積り誤差がおおきいとき、意外と時間がかかる。
- 観測誤差下でのブラベー格子決定は、結晶学で議論されてきたテーマになるが、既存文献は間違いが目立つ、数学分野では誰もやってないという状況があった。

そこで証明に基づく手法を構築した。

構成した手法では、以下のようにかなり大きめの誤差範囲を仮定している。

(仮定 C_d) S を n 次の正定値対称行列、 S^{obs} をその観測値とする。観測誤差 $S^{obs} - S$ は、任意の n 次対称行列 T において以下が成り立つ程度に大きくないと仮定する。

$$S \bullet T \geq S \bullet d \begin{pmatrix} m_1^2 & m_1 m_2 \\ m_1 m_2 & m_2^2 \end{pmatrix} (> 0) \text{ for some } 0 \neq (m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2 \Rightarrow S^{obs} \bullet T > 0$$

ここで、 $S \bullet T := \text{Trace}(ST)$ とする。

仮定 C_d ($n=2$ のとき $d=1$, $n=3$ のとき $d=1/2$) の成立下では、適切な格子基底簡約 (Minkowski or Selling 簡約) を選択 & 実施すると、誤差が全くない場合と同じアルゴリズムで (i.e., 高速に), 正しいブラベー格子が検出できることを示した。



20/26

新しい figure of merit (FOM, 実験データと合致する格子の検出, 1/2)

格子定数の候補が複数得られた後は、最も実験データと合致度が高いものはどれかを判定する必要がある。

- De Wolff M_n は、粉末回折において、この目的のために長年使用されている優れた FOM. 1 次元空間に分布する反射の座標点集合 a, b を比較し、より合致度が高い場合に大きな値をとる.
- a. $0 < Q_1^{obs} < \dots < Q_n^{obs}$: 観測された反射の座標,
- b. $0 < q_1 < \dots < q_N$: 格子定数から計算される反射の座標.
- De Wolff M_n は以下で定義される: $M_n = \bar{\epsilon}/\delta$.
ただし、 $\bar{\epsilon}, \delta$ はそれぞれ *average discrepancy*, *actual discrepancy* と呼ばれるもの。以下で定義される。

$$\bar{\epsilon} := Q_n^{obs}/2N,$$

$$\delta := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Q_i^{obs} - Q_i^{cal}|,$$

Q_i^{cal} : computed line closest to the observed line Q_i^{obs} .

- q_1, \dots, q_{N-1} が $0 < q_1 < \dots < q_{N-1} < q_N$ を満たしつつ、 $[0, q_N]$ の範囲を一様分布するとすれば、 δ の期待値 $E[\delta] = q_N/2(N+1)$ となる。
- このことから、 $M_n < 3$ なら、 Q_i^{obs} と q_j の間に相関は見られず、逆に、 $M_n > 10$ となる格子は非常に合致度が高いとされる (経験則)。

21/26

新しい figure of merit (FOM, 実験データと合致する格子の検出, 2/2)

菊池パターンでは 2 次元画像にバンドが分布するため、 \mathbb{R}^2 (バンド座標だけでなく、バンド幅も考慮すれば \mathbb{R}^3) の有界領域にバンド座標が分布していると考えられる。

例えば、バンド座標のみの比較なら以下の a, b を比較すればよい。

- $P_i^{obs} = (X_i^{obs}, Y_i^{obs})$ ($i = 1, \dots, n$): 検出バンドの座標,
- (X_j^{cal}, Y_j^{cal}) ($j = 1, \dots, N$): 格子定数から求めた計算バンドの座標.

そこで、de Wolff の考え方を高次元に一般化し、データの次元によらない FOM を作成した。

\mathbb{R}^2 の点座標の比較の場合、 $M_{n,N} = \bar{\epsilon}/\delta$ は下式で求められる。

$$\bar{\epsilon} := E \left[\min_{i=1, \dots, N} \{|X - x_i|\} \right] \sim \frac{1}{2} (V/N)^{1/2},$$

(\sim はベータ関数の asymptotic formula $B(x, y) \sim \Gamma(y)x^{-y}$ に由来)

$$\delta := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |P_i^{obs} - P_i^{cal}|,$$

ただし、 V は EBSD 画像の面積、 P_i^{cal} は最も P_i^{obs} に近い計算バンド座標。

一般の s 次元では、 $\bar{\epsilon}$ の式を以下で置き換えればよい。

$$E \left[\min_{1 \leq i \leq N} \{|X - x_i|\} \right] \sim \frac{\Gamma(1/s)}{s} \frac{R}{N^{1/s}},$$

22/26

解析結果 (1/2)

- C++でソフトウェアを実装し、3つのシミュレーションパターン、2つの実験パターンを用いてコード試験を行った。
- バンド幅を用いなかった場合の結果を示す (この場合、格子パラメータのスケールは得られない)。

Table: 解析結果 (quick search/exhaustive search の解析の成功・失敗と、最高位の FOM 値)

Number of used bands	Success/Failure in quick search (time (sec.), $M_{n,N}$)	Success/Failure in exhaustive search (time (sec.), $M_{n,N}$)	1位の解の Bravais type
Ni (simulated, cubic(F)):			
20	S (7.40, $M_{20,41} = 46.60$)	S (243.83, $M_{20,41} = 47.56$)	cubic (F)
Fe (simulated, cubic(I)):			
23	S (11.78, $M_{23,57} = 57.73$)	S (426.62, $M_{23,58} = 59.03$)	cubic (I)
Zn (simulated, hexagonal):			
23	S (3.17, $M_{23,107} = 39.47$)	S (144.68, $M_{23,105} = 39.85$)	hexagonal
Spheroidal cementite (experimental, orthorhombic (P)):			
19	F (0.91)	S (20.03, $M_{19,271} = 16.73$)	orthorhombic (P)
Silico-ferrite of calcium and aluminum (experimental, triclinic):			
21	F (0.77)	F [‡] (53.67, $M_{21,347} = 7.75$)	triclinic

4つのパターンで正しい格子定数を取得・最も高い FOM 値を付けることに成功した。残りの1つも近い格子定数は得られたが、projection centerの精度が悪いためか、文献値から5%以上異なっている。



23 / 26

解析結果 (2/2)

格子定数の精度は以下ようになった。
低対称の格子では、実験データの精度も下がる傾向にある。

Table: 最も FOM 値の高かった格子定数と文献値との比較

Number of used bands	a/c	b/c	α (deg.)	β (deg.)	γ (deg.)
Ni の文献値: $a/c = b/c = 1$, cubic(F)					
20	1	1	90	90	90
Fe の文献値: $a/c = b/c = 1$, cubic(I)					
23	1	1	90	90	90
Zn の文献値: $a/c = b/c = 0.5387$, hexagonal					
23	0.540	0.540	90	90	120
Spheroidal cementite, orthorhombic(P) の文献値: $a/c = 0.6711$, $b/c = 0.7546$					
19	0.663	0.745	90	90	90
SFCA の文献値: $a/c = 0.881$, $b/c = 0.897$, $\alpha = 94.11$, $\beta = 111.4$, $\gamma = 110.3$, triclinic					
21	0.764	0.829	91.37	100.36	102.29



24 / 26

- 粉末回折 ab-initio indexing, EBSD ab-initio indexing において、どのような数学の結果が有用であったか紹介した。
- EBSD ab-initio indexing においては、特に、対称性の低い格子の場合に、解の一意性の問題が起きることを、EBSD のコミュニティで初めて指摘。
- その一方で、低対称性の結晶における実験データからの格子定数の決定に成功した。

残る課題

- バンド抽出: 中心線と幅の抽出。

EBSD ab-initio indexing の論文は、他の研究者も、手で抽出している。

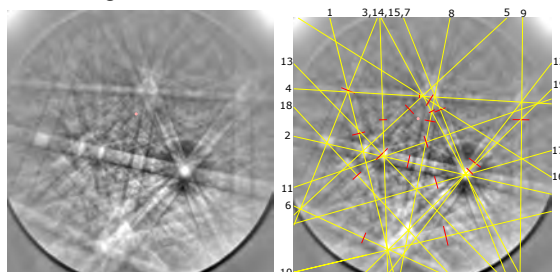


Figure: 左: Cementite の実験パターン, 右: Cementite の実験パターンから抽出されたバンドの中心線と幅

- 様々な ab-initio indexing に適用する議論:
 - 例: 多相 (複数の結晶相) の回折パターン
 - 例: 準結晶やなど変調構造など、高次元の射影格子
- 4次元以上の格子パラメータの観測誤差下でのブラベー格子決定アルゴリズム。
- 対称性が未知でも成立する、消滅則の一般的性質の計算機を用いない証明。

「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 30 年 10 月
マス・フォア・インダストリ研究所
所長 佐伯 修

結晶の界面，転位，構造の先進数理解析

マス・フォア・インダストリ研究 No.15, IMI, 九州大学

ISSN 2188-286X

発行日 2019 年 12 月 2 日

編集 松谷 茂樹, 佐伯 修, 富安 亮子, 中川 淳一, 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 城島印刷株式会社

〒810-0012 福岡市中央区白金 2 丁目 9 番 6 号

TEL 092-531-7102 FAX 092-524-4411

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 啓晃 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	笈 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 啓晃 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
マス・フォア・インダストリ 研究 No.6	松谷 茂樹 佐伯 修 中川 淳一 上坂 正晃 濱田 裕康	結晶のらせん転位の数理	10 January 2017
マス・フォア・インダストリ 研究 No.7	滝口 孝志 藤原 宏志	Collaboration among mathematics, engineering and industry on various problems in infrastructure and environment	1 March 2017
マス・フォア・インダストリ 研究 No.8	藤原 宏志 滝口 孝志	Practical inverse problems based on interdisciplinary and industry-academia collaboration	20 February 2018
マス・フォア・インダストリ 研究 No.9	阿部 拓郎 高島 克幸 縫田 光司 安田 雅哉	代数的手法による数理暗号解析 Workshop on analysis of mathematical cryptography via algebraic methods	1 March 2018
マス・フォア・インダストリ 研究 No.10	阿部 拓郎 落合 啓之 高島 克幸 縫田 光司 安田 雅哉	量子情報社会に向けた数理的アプローチ Mathematical approach for quantum information society	26 December 2018

Issue	Author / Editor	Title	Published
マス・フォア・インダストリ 研究 No.11	松谷 茂樹 佐伯 修 中川 淳一 濱田 裕康 上坂 正晃	結晶転位の先進数理解析 Advanced Mathematical Investigation for Dislocations	7 January 2019
マス・フォア・インダストリ 研究 No.12	滝口 孝志	Non-destructive inspection for concrete structures and related topics	13 February 2019
マス・フォア・インダストリ 研究 No.13	宇波 耕一 長野 智絵 吉岡 秀和 田上 大助 白井 朋之	数理農学における時系列データのモデル化と解析 Modeling and Analysis of Time Series Data in Math- Agro Sciences	28 February 2019
マス・フォア・インダストリ 研究 No.14	佐久間 弘文 大津 元一 小嶋 泉 福本 康秀 山本 昌宏 納谷 昌之	ドレスト光子に関する基礎的数理研究	18 March 2019



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

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