ISSN 2188-286X

マス・フォア・インダストリ研究 No.20

# 材料科学における幾何と代数 I

編集　松谷　茂樹
井上　和俊
加葉田雄太朗
佐伯　　修
垂水　竜一
内藤　久資
中川　淳一
濵田　裕康

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

**Geometry and Algebra in Material Science I**

Mathematics for Industry Research No.20, Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

ISSN 2188-286X

Editors: Shigeki Matsutani, Hiroyasu Hamada, Kazutoshi Inoue, Yutaro Kabata, Hisashi Naito, Junichi Nakagawa, Osamu Saeki, Ryuichi Tarumi

Date of issue: 24 November 2020

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 https://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

# 材料科学における幾何と代数 I

編集　：　松谷　茂樹
井上　和俊
加葉田雄太朗
佐伯　　修
垂水　竜一
内藤　久資
中川　淳一
濵田　裕康

# はじめに

本研究集会 II「材料科学における幾何と代数 I」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)，研究集会 II「結晶の界面，転位，構造の先進数理解析」（2019 年）を発展させたものである．

これまでの研究会の成果を踏まえ，本研究会は材料科学と幾何学や代数学との交流を目指し開催した．この背景には，1)技術の発展により求められる製品仕様が大きく変貌したこと，2)観測装置が発展し，例えば原子レベルでの構造の乱れが観測可能になったこと，3)従来，材料科学で使われてきた数学だけでは表現できていない新たな観測事実や現象が生じていることがある．科学・技術の言葉として，より高度な数学が望まれている．解析分野においては，既に材料科学者と数学者の交流が行われているようであるが，幾何学や代数学では，材料科学者と数学者の交流は限られたものとなっている．そこで，材料科学の研究者と，幾何学，代数学的手法に関わる数学者を迎えて，議論する場を提供し，相互理解のきっかけを得ることを目的に本研究集会を開催した．

これにより，21 世紀に入って材料科学において急速に必要となっている幾何・代数の材料科学への適応に関わる研究の加速が期待される．これらの新しい動きは研究分野としては確立されていないが，その礎・足場として位置づけられる．

この目的に従い，川原一晃助教(東京大学)，熊野知二氏(日本製鉄(株))，小林舜典氏(大阪大学)，下川智嗣教授(金沢大学)，田中良巳准教授(横浜国立大学)，山岸弘幸准教授(都立高専)，關戸啓人氏(京都大学)，田中守講師(都城高専)，松江要助教(IMI)，中川淳一特任教授(東大数理）に発表して頂いた．

より詳しくは，川原一晃助教からは「界面接合の実験と数理」，熊野知二氏(日本製鉄(株))からは「材料技術者のための四元数と行列を用いた対応格子関係の導出」として結晶界面での対応格子と整数論の関係を紹介して頂いた．また，小林舜典氏(大阪大学)からは「Geometrical modeling and numerical analysis on dislocations in solid」として，転位の甘利・近藤模型を基礎として数値解析の話題を，また，下川智嗣教授(金沢大学)からは「Relationship between the development of lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations」として，分子動力学による結晶界面や転位の様子の話題を，それぞれ紹介して頂き，材料科学における数学活用の可能性について議論して頂いた．田中良巳准教授(横浜国立大学)からは「ゲルの破壊と浸透圧の力学」として，ゲル材料の力学的性質を例とした材料科学における物理モデル（数学モデル）の構築の方法を紹介して頂いた．山岸弘幸准教授(都立高専)と關戸啓人氏(京都大学)からはそれぞれ「正多面体における離散ソボレフ不等式の最良定数」「C60 フラーレンにおける離散ソボレフ不等式の最良定数」として，グラフ上のラプラス作用素に関するソボレフ不等式を基礎とする炭素分子に関わる材料の特性について，数学的視点からの議論を紹介して頂いた．同様にグラフ理論

を基礎として田中守講師(都城高専)からは「結晶構造に近いアモルファス構造のモデル化とパーコレーション」として光学的効果による材料の変質の特性解析について紹介して頂いた．松江要助教(IMI)からは「有限時間特異性: 力学系的アプローチ」として，時間発展方程式において破壊現象を如何に取り扱うべきかという原理的な課題に関する解析学的な研究状況について紹介して頂いた．中川淳一特任教授(東大数理)からは，東京大学大学院数理科学研究科におけるＦＭＳＰ社会数理実践研究として大学院の学生による研究状況について「結晶と準結晶に動機付けられた数学の問題 II」として，最近の進展を紹介して頂いた．

コロナ禍の影響により，オンラインでの開催となったが，そのお陰で 50 名を超える研究者に参加して頂くことができた．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，それらの方向性を共有することができたと考えている．

共有した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

2020 年 10 月 27 日

組織委員

| | |
|---|---|
| 松谷茂樹 | 金沢大学 |
| 井上和俊 | 東北大学 |
| 加葉田雄太朗 | 長崎大学 |
| 佐伯修 | 九州大学 |
| 垂水竜一 | 大阪大学 |
| 内藤久資 | 名古屋大学 |
| 中川淳一 | 東京大学 |
| 濵田裕康 | 佐世保高専 |

## Contents

**IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数 I**
**(Geometry and Algebra in Material Science I)**

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所　On-line 研究会 (Zoom)
(2020 年 9 月 7 日 (月)-8 日 (火))

# 1　Program

9 月 7 日 (月)

| | | |
|---|---|---|
| 11:00-11:05 | オープニング | |
| 11:05-11:45 | 川原一晃 (東京大学) | 界面接合の実験と数理 |
| 11:45-13:30 | 昼休憩 | |
| 13:30-14:10 | 熊野知二 (日本製鉄 (株)) | 材料技術者のための四元数と行列を用いた対応格子関係の導出 |
| 14:30-15:10 | 小林舜典 (大阪大学) | Geometrical modeling and numerical analysis on dislocations in solid |
| 15:30-16:10 | 下川智嗣 (金沢大学) | Relationship between the development of lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations |
| 16:30-17:10 | 田中良巳 (横浜国立大学) | ゲルの破壊と浸透圧の力学 |

9 月 8 日 (火)

| | | |
|---|---|---|
| 11:00-11:30 | 山岸弘幸 (都立高専) | 正多面体における離散ソボレフ不等式の最良定数 |
| 11:35-12:05 | 關戸啓人 (京都大学) | $C_{60}$ における離散ソボレフ不等式の最良定数 |
| 12:05-14:00 | 昼休憩 | |
| 14:00-14:40 | 田中　守 (都城高専) | 結晶構造に近いアモルファス構造のモデル化とパーコレーション |
| 15:00-15:40 | 松江要 (IMI) | 有限時間特異性: 力学系的アプローチ |
| 16:00-16:30 | 中川淳一 (東大数理) | 東京大学大学院数理科学研究科ＦＭＳＰ社会数理実践研究：結晶と準結晶に動機付けられた数学の問題 II |
| 16:30-16:35 | クロージング | |

# 界面接合の実験と数理
**(Experiments and mathematics of interface structure)**

**川原一晃, Kazuaki Kawahara**

東京大学
The Univ. of Tokyo

(joint work with Kazutoshi Inoue[2,3], Mitsuhiro Saito[1], Ryuichi Arafune[4], Chun-Liang Lin[5], Noriaki Takagi[6], Maki Kawai[7], Yuichi Ikuhara[1,3]
1. Inst. of Engineering Innovation, The Univ. of Tokyo, 2. JST-PRESTO, 3. WPI Research Center, Advanced Inst. for Materials Research, Tohoku Univ., 4. Nat. Inst. for material science, 5. Nat. Chiao Tung Univ., 6. Garduate school of human and environmental studies, Kyoto Univ., 7. Institute for molecular science )

Interface between a two-dimensional (2-D) material such as graphene and silicene with the substrate, as well as grain boundaries in polycrystalline functional materials have a great influence on the function and electronic state of the material [1,2]. To elucidate the properties and electronic states, it is necessary to determine the interface atomic structure. Since 2-D lattices are in contact with each other at a 2-D plane, the concept of 2-D lattice matching is used for structural analysis. In this study, 2-D lattice matching is classified by the ideal class group that is an invariant of algebraic number field [3]. The period and symmetry of superstructure formed by two 2-D lattices is determined by the ideal class group. As an application of this theory, an algorithm to construct a structural model for a superstructure is derived. We will discuss the application of the 2-D lattice matching theory to the structural analysis of 2-D honeycomb sheet grown on metal substrate and grain boundary of cubic polycrystalline materials.

## References

[1] C.-L. Lin, et al., Phys. Rev. Lett. 110, 076801 (2013).
[2] K. Inoue, et al., J. Mater. Sci. 52, 4278 (2017).
[3] K. Kawahara, et al., e-J. Surf. Sci. Nanotech. 13, 365 (2015).

IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数I 2020/9/7

# 界面接合の実験と数理

川原一晃[1]、井上和俊[2,3]、斎藤光浩[1]、荒船竜一[4]、Chung-Liang Lin[5]
高木紀明[6]、川合眞紀[7]、幾原雄一[1,3]
*[1]東京大学総合研究機構、[2]JSTさきがけ、*
*[3]東北大学材料科学高等研究所、[4]物質・材料研究機構、*
*[5]National Chiao Tung University 、[6]京都大学人間・環境学研究科、*
*[7]分子科学研究所*

1

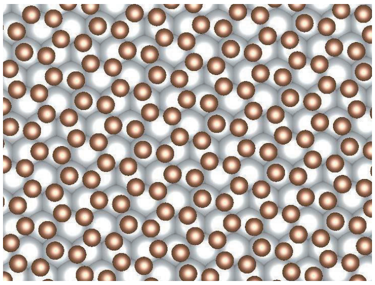
# Contents



2

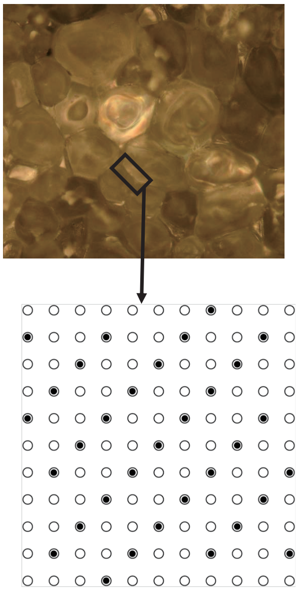
# Introduction

2D materials: graphene [1], silicene [2], transition metal dichalcogenites [3]



Dirac fermion, high mobility, topological insulator, etc.
Grown on substrate and lattice matching with substrate is often discussed.

Functional materials: $Al_2O_3$, $ZrO_2$, MgO, $CeO_2$, $TiO_2$, etc.



Used in the form of polycrystals

Grains contact at a 2-D plane


[1] A. Geim & K. S. Novoselov, Nat. Mater. 6, 183 (2007).
[2] P. Vogt *et. al.,* Phys. Rev. Lett. 108, 155501 (2012).
[3] A. A. Soluyanov, Nature 527, 495 (2015).


3

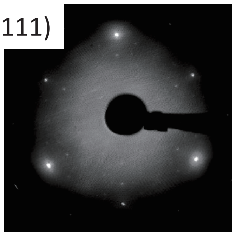
# Introduction

2-D Lattice matching

Important for structural analysis and designing the artificial lattices

Structural analysis

Silicene/Ag(111)

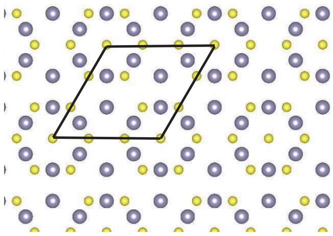


Experimentally observed period

Construct a structural model where the 2-D sheet and substrate are commensurate

Atomic position determination by using low energy electron diffraction, etc.

Designing of artificial lattice



Can Exist stably?

Construct a structural model where the 2-D sheet and substrate are commensurate, and has small unit cell

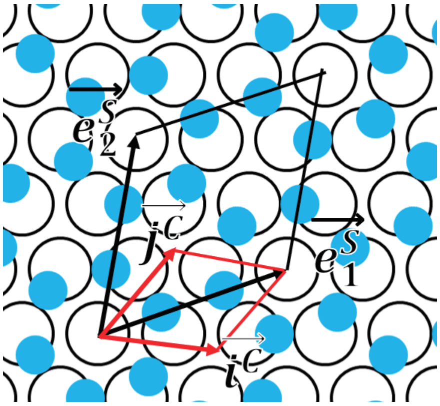
Discuss stability and electronic states by using first-principles calculations.

4

# Introduction

Vector formularization

$$\begin{cases} \overrightarrow{e_1^S} = a\overrightarrow{i^C} + b\overrightarrow{j^C} \\ \overrightarrow{e_2^S} = c\overrightarrow{i^C} + d\overrightarrow{j^C} \end{cases} \quad \det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \neq 0$$




Vector space：not ring or field

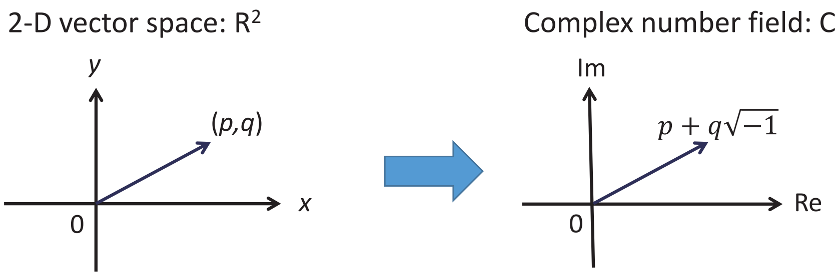
Multiplication and division are not defined

example；
Can we put a 2D lattice A commensurately on a 2D lattice B?

Difficult to judge by using vector.

5

# Introduction




addition

$$p_1 + q_1\sqrt{-1} + p_2 + q_2\sqrt{-1} = p_1 + p_2 + (q_1 + q_2)\sqrt{-1} \in \mathrm{C}$$

multiplication

$$(p_1+q_1\sqrt{-1})(p_2 + q_2\sqrt{-1}) = p_1p_2 - q_1q_2 + (p_1q_2 + p_2q_1)\sqrt{-1} \in \mathrm{C}$$

division

$$\frac{p_1 + q_1\sqrt{-1}}{p_2 + q_2\sqrt{-1}} = \frac{p_1p_2 + q_1q_2 + (p_2q_1 - p_1q_2)\sqrt{-1}}{p_2^2 + q_2^2} \in \mathrm{C}$$


[1] H. Mitani and K. Niizeki, J. Phys. C 20 1017 (1987). Triangular lattice
[2] M. Baake and U. Grimm, Z. Kristallogr. 221, 571 (2006). Same lattice
[3] K. Kawahara, et al., e-J. Surf. Sci. Nanotech. 13, 361 (2015).

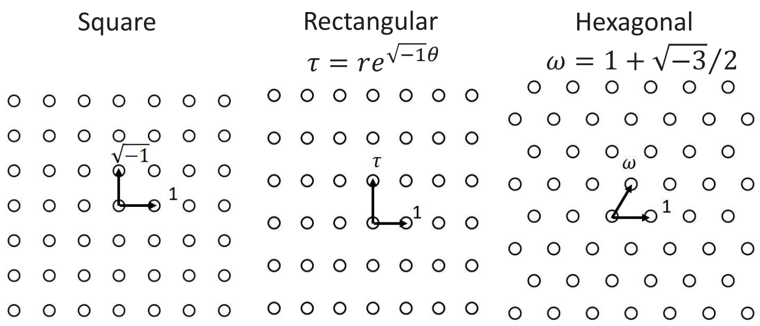

6

# Theory on lattice matching

Definition 1. lattice group
A lattice group is a subgroup of C, described as $\Gamma = \{\gamma(a + b\tau) \mid a, b \in Z\} \equiv \gamma\Gamma_\tau$, where $\gamma \in C^\times, \tau \in H$.

$\gamma$ ; Lattice constant and rotation angle relative to real axis.

$\tau$ ; Ratio of two unit vectors. Invariant that describe the symmetry of the lattice.




Oblique: $r \neq 1, \theta \neq \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}$
Rhombic: $r = 1, \theta \neq \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}$
Rectangular: $r \neq 1,\ \theta = \frac{\pi}{2}$
Square: $r = 1, \theta = \frac{\pi}{2}$
Hexagonal: $r = 1, \theta = \frac{\pi}{3}$

Bravais lattice and lattice group

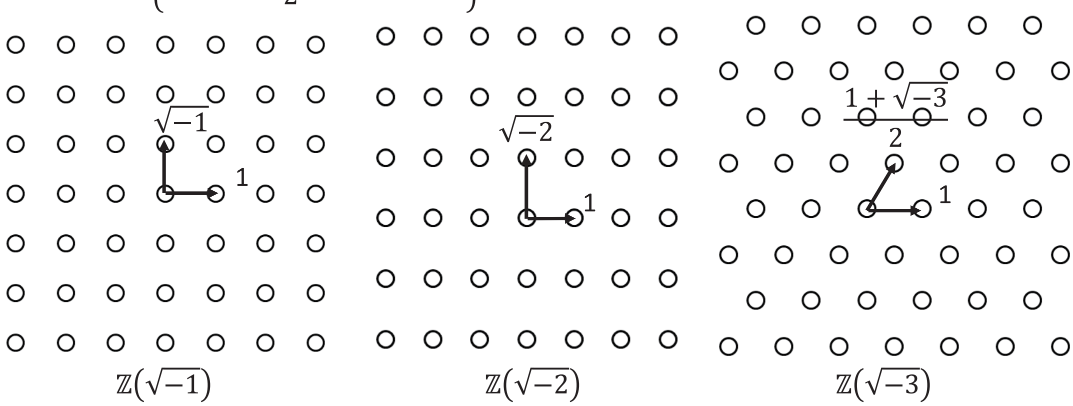
7

# Theory on lattice matching

Imaginary quadric field: $\mathbb{Q}(\sqrt{-m}) = \{\, p + q\sqrt{-m} \mid p, q \in \mathbb{Q}\,\}$
Closed under addition, multiplication and division.

Ring of integers:

$$\mathbb{Z}(\sqrt{-m}) = \begin{cases} \{a + b\sqrt{-m} \mid a, b \in \mathbb{Z}\} & m \equiv 1,2 \bmod 4 \\ \left\{a + b\dfrac{1+\sqrt{-m}}{2} \mid a, b \in \mathbb{Z}\right\} & m \equiv 3 \bmod 4 \end{cases}$$




$\mathbb{Z}(\sqrt{-1})$ Cubic (100) plane

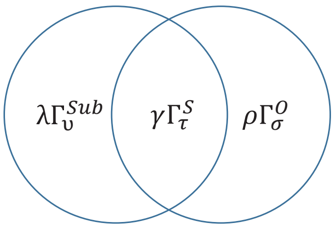
$\mathbb{Z}(\sqrt{-2})$ Cubic (110) plane

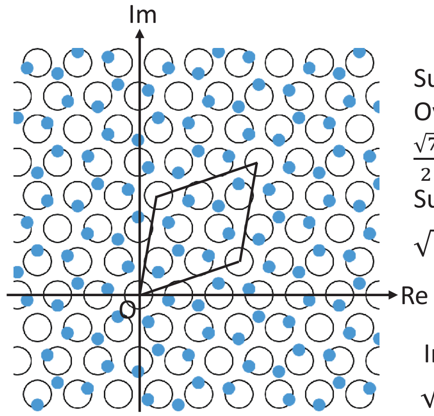
$\mathbb{Z}(\sqrt{-3})$ Cubic (111) plane

8

# Theory on lattice matching

**Definition 2. commensurate**
Consider two lattice group, $\lambda\Gamma_{\upsilon}^{Sub}$ and $\rho\Gamma_{\sigma}^{O}$, if $\gamma\Gamma_{\tau}^{S}$ exist such that $\lambda\Gamma_{\upsilon}^{Sub} \cap \rho\Gamma_{\sigma}^{O} = \gamma\Gamma_{\tau}^{S}$, $\rho\Gamma_{\sigma}^{O}$ is commensurate with $\lambda\Gamma_{\upsilon}^{Sub}$.




Substrate: $\Gamma_{\omega}^{Sub}$
Over-layer:
$\frac{\sqrt{7}}{2}\exp(\sqrt{-1}\tan^{-1}\frac{\sqrt{3}}{5})\Gamma_{\omega}^{O}$
Superstructure:
$\sqrt{7}\exp(\sqrt{-1}\tan^{-1}\frac{\sqrt{3}}{5})\Gamma_{\omega}^{S}$

In surface science,
$\sqrt{7}\times\sqrt{7}R19.1°$

○ substrate, ● Over-layer

9

# Theory on lattice matching

$$\lambda\Gamma_{\upsilon}^{Sub} \cap \rho\Gamma_{\sigma}^{O} = \gamma\Gamma_{\tau}^{S}$$

$$\Gamma_{\tau}^{S} \cap k_0{}^{-1}\Gamma_{\upsilon}^{Sub} = \Gamma_{\tau}^{S}, k_0 = \gamma/\lambda \qquad \Gamma_{\tau}^{S} \cap k^{-1}\Gamma_{\sigma}^{O} = \Gamma_{\tau}^{S}, k = \gamma/\rho$$

Complex number $k$ exist such that $\Gamma_{\tau}^{S} \cap k^{-1}\Gamma_{\sigma}^{O} = \Gamma_{\tau}^{S}$
$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in GL(2,Z)$ exists such that $\tau = \frac{a\sigma+b}{c\sigma+d}$ ⟺ Vector condition: $\begin{cases} \overrightarrow{e_1^S} = a\overrightarrow{i^O} + b\overrightarrow{j^O} \\ \overrightarrow{e_2^S} = c\overrightarrow{i^O} + d\overrightarrow{j^O} \end{cases}$

Example; We cannot put honeycomb lattice commensurately on fcc(100).

$$\Gamma_{\tau}^{S} \cap k_0{}^{-1}\Gamma_{\sqrt{-1}}^{Sub} = \Gamma_{\tau}^{S} \to \tau = \frac{a+b\sqrt{-1}}{c+d\sqrt{-1}} \in Q(\sqrt{-1}), a,b,c,d \in Z$$

$$\Gamma_{\tau}^{S} \cap k^{-1}\Gamma_{\omega}^{O} = \Gamma_{\tau}^{S} \to \tau = \frac{a'+b'\omega}{c'+d'\omega} \in Q(\sqrt{-3}), a',b',c',d' \in Z$$

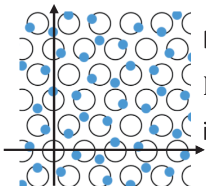
Inconsistent with $\tau \in H$

10

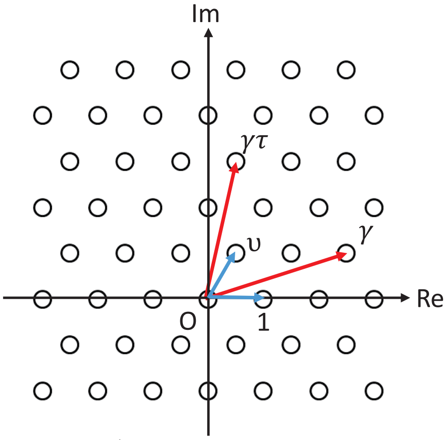
# Theory on lattice matching

Assumption

1. $\sigma = \upsilon$ in $\lambda\Gamma_\upsilon^{Sub} \cap \rho\Gamma_\sigma^{O} = \gamma\Gamma_\tau^{S}$
2. $\Gamma_\upsilon$ is ring of integer of $\mathbb{Q}(\sqrt{-m})$

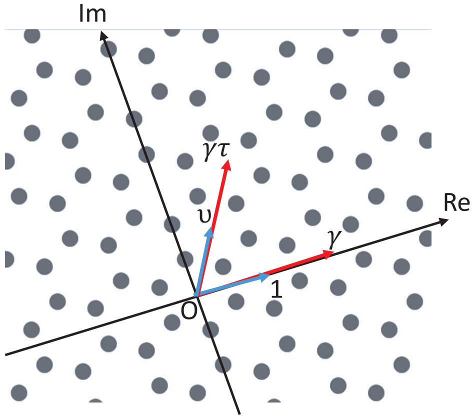


Ex. Honeycomb/triangular lattice $\Gamma_\omega$ where $\omega = \frac{1+\sqrt{-3}}{2}$ is ring of integer of $\mathbb{Q}(\sqrt{-3})$




$\Gamma_\tau^S \cap k_0{}^{-1}\Gamma_\upsilon^{Sub} = \Gamma_\tau^S, k_0 = \gamma/\lambda = \gamma \in \Gamma_\upsilon$

(Set $\lambda = 1$)




$\Gamma_\tau^S \cap k^{-1}\Gamma_\upsilon^{O} = \Gamma_\tau^S, k = \gamma/\rho = \gamma \in \Gamma_\upsilon$

(Set $\rho = 1$)



# Ideal class group and lattice matching

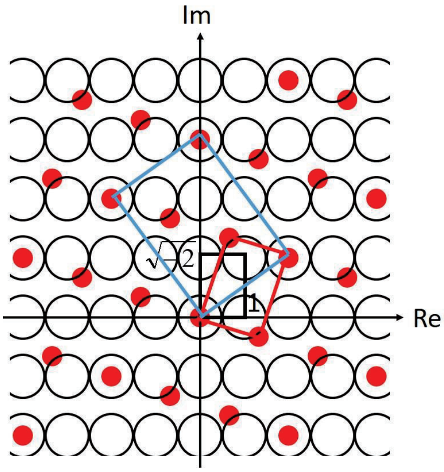
Theorem

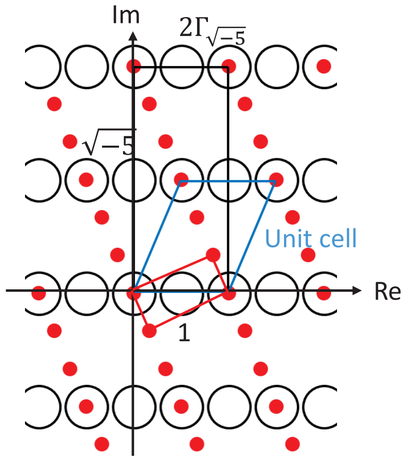
Let $\Gamma_\upsilon$ be the ring of integers of $Q(\sqrt{-m})$ which ideal class group of $Q(\sqrt{-m})$ is trivial. If the over layer ($\rho\Gamma_\upsilon^O$) is commensurate with the substrate ($\lambda\Gamma_\upsilon^{Sub}$), i.e. $\chi$ and $\tau$ exist such that $\lambda\Gamma_\upsilon^{Sub} \cap \rho\Gamma_\upsilon^O = \chi\Gamma_\tau^S$, then $\tau = \upsilon$.

$\tau, \upsilon$; describe the symmetry of lattices.

The symmetry of superstructure is determined with the ideal class group.

# Ideal class group and lattice matching




$$\Gamma_{\sqrt{-2}} \cap \frac{4-\sqrt{-2}}{3}\Gamma_{\sqrt{-2}} = (2+\sqrt{-2})\Gamma_{\sqrt{-2}}$$

$$Cl\left(Q(\sqrt{-2})\right) = \{e\}$$

$$\Gamma_{\sqrt{-5}} \cap \frac{1-\sqrt{-5}}{3}\Gamma_{\sqrt{-5}} = 2\Gamma_{\frac{1+\sqrt{-5}}{2}}$$

$$Cl\left(Q(\sqrt{-2})\right) \cong Z/2Z$$

13

# Ideal class group and lattice matching

$$\lambda\Gamma_{\upsilon}^{Sub} \cap \rho\Gamma_{\upsilon}^{O} = \gamma\Gamma_{\tau}^{S}$$

$$\Gamma_{\tau}^{S} \cap k_0{}^{-1}\Gamma_{\upsilon}^{Sub} = \Gamma_{\tau}^{S} \qquad \Gamma_{\tau}^{S} \cap k^{-1}\Gamma_{\upsilon}^{O} = \Gamma_{\tau}^{S}$$

$$k_0 = \gamma/\lambda \qquad k = \gamma/\rho$$

$$\Downarrow$$

$$k_0, k \in \Gamma_{\upsilon}$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda\Gamma_{\upsilon}^{Sub} \cap \frac{k_0}{k}\lambda\Gamma_{\upsilon}^{O} = k_0\lambda\Gamma_{\tau}^{S}$$

Let $\lambda = k$

$$k\Gamma_{\upsilon}^{Sub} \cap k_0\Gamma_{\upsilon}^{O} = k_0 k\Gamma_{\tau}^{S}$$

$k\Gamma_{\upsilon}$: Set of multiples of $k$.
$k_0\Gamma_{\upsilon}$: Set of multiples of $k_0$. $\Rightarrow$ Ideal of ring, $\Gamma_{\upsilon}$

$\Gamma_{\upsilon}$ is the ring of integers of $Q(\sqrt{-m})$ which ideal class group of $Q(\sqrt{-m})$ is trivial

$$\Downarrow$$

Every ideal of ring, $\Gamma_{\upsilon}$ is principal ideal

$$\Downarrow$$

$$\tau = \upsilon$$

$$k\Gamma_{\upsilon}^{Sub} \cap k_0\Gamma_{\upsilon}^{O} = k_0 k\Gamma_{\upsilon}^{S}$$

$$\Downarrow$$

$$\gcd(k_0, k) = 1$$

gcd: greatest common divisor

14

## Application to honeycomb sheet grown on fcc metal substrate

One observes a superstructure experimentally.

Step 1; constructs a trial model by tuning the lattice constant of the over layer and rotating the over layer relatively to the substrate to reproduce the superstructure.

Step 2; the positions of atoms inside the unit cell of the trial model are fully relaxed and optimized in the quantitative analysis.

**Step 1 is key to structural analysis**

## Application to honeycomb sheet grown on fcc metal substrate

Theorem

Let $\Gamma_\upsilon$ be the ring of integers of $Q(\sqrt{-m})$ which ideal class group of $Q(\sqrt{-m})$ is trivial. If the over layer ($\rho\Gamma_\upsilon^O$) is commensurate with the substrate ($\lambda\Gamma_\upsilon^{Sub}$), i.e. χ and ξ exist such that $\lambda\Gamma_\upsilon^{Sub} \cap \rho\Gamma_\upsilon^O = \chi\Gamma_\tau^S$, then $\tau = \upsilon$.

The ideal class group of $Q(\sqrt{-3})$ is trivial.

If the honeycomb lattice is commensurate with the triangular lattice, the superstructure is always described as $\sqrt{n} \times \sqrt{n}R\varphi_S$

16

# Superstructure of honeycomb/triangular lattice

| System | Superstructure |
|---|---|
| Graphene/Pt(111) [1] | $3 \times 3$, $\sqrt{52} \times \sqrt{52}R13.9°$ |
| Graphene/Pd(111) [2] | $\sqrt{39} \times \sqrt{39}R16°$, $7 \times 7$, $\sqrt{63} \times \sqrt{63}R19.1°$ |
| Graphene/Ru(0001) [3] | $12 \times 12$ |
| Graphene/Ir(111) [4] | $\sqrt{7} \times \sqrt{7}R19.1°$, $4 \times 4$, $9 \times 9$ |
| Silicene/Ag(111) [5,6] | $4 \times 4$, $\sqrt{13} \times \sqrt{13}R13.9°$, $\sqrt{133} \times \sqrt{133}R4.3°$ |
| Silicene/$ZrB_2$(0001) [7] | $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30°$ |
| Germanene/Au(111) [8] | $\sqrt{7} \times \sqrt{7}R19.1$ |
| Hf/Ir(111) [9] | $2 \times 2$ |
| $PtSe_2$/Pt(111) [10] | $4 \times 4$ |

[1] M. Gao, et al., Appl. Phys. Lett. 98, 033101 (2011). [2] Y. Murata, et al., Appl. Phys. Lett. 97, 143114 (2010). [3] W. Moritz, et al., Phys. Rev. Lett. 104, 136102 (2010). [4] L. Meng, et al., J. Phys. Condens. Matter 24, 314214 (2012). [5] R. Arafune, et al., Surf. Sci. 608, 297 (2013). [6] M. S. Rahman, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 54, 015502 (2015). [7] A. Fleurence, et al., Phys. Rev. Lett. 108, 245501 (2012). [8] M. E. Davila, et al., New J. Phys. 16, 095002 (2014). [9] L. Li, et al., Nano Lett. 13, 4671 (2013). [10] Y. Wang, et al., Nano Lett. 15, 4013 (2015).



# Example; honeycomb lattice/triangular lattice

Superstructure: $\sqrt{n} \times \sqrt{n}R\varphi_S$

$$a_{sub}\Gamma_\omega^{sub} \cap a_h e^{\sqrt{-1}\delta}\Gamma_\omega^O = \sqrt{n}a_{sub}e^{\sqrt{-1}\varphi_S}\Gamma_\omega^S$$

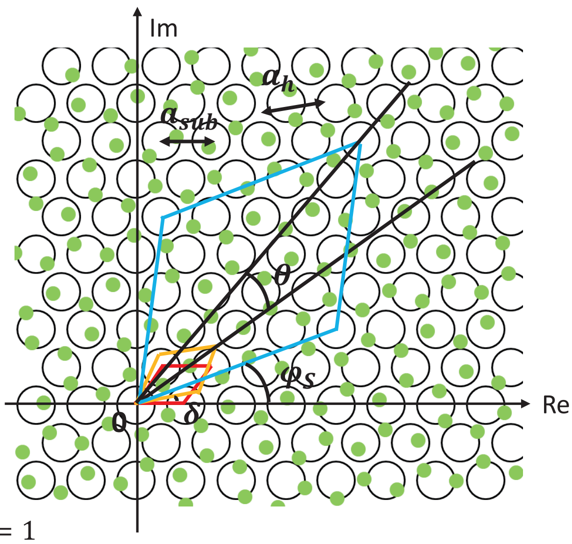
$$k = \frac{\sqrt{n}a_{sub}e^{\sqrt{-1}\varphi_S}}{a_h e^{\sqrt{-1}\delta}} \in \Gamma_\omega$$

$$\Rightarrow \quad a_h = \sqrt{\frac{n}{K_{xy}}}a_{sub}$$

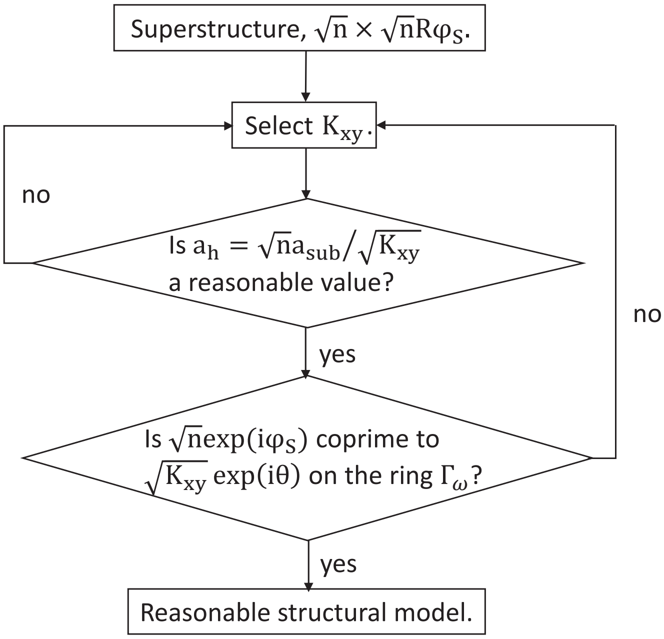
$$K_{xy} = x^2 + xy + y^2 = 1,3,4,7,9,12,13,\ldots$$

$$\theta = \tan^{-1}\frac{\sqrt{3}y}{2x+y}$$

$$\gcd\left(\sqrt{n}\exp(\sqrt{-1}\varphi_S), \sqrt{K_{xy}}\exp(\sqrt{-1}\theta)\right) = 1$$



# Algorithm




19

# Example; honeycomb lattice/triangular lattice

Ex. $\sqrt{52} \times \sqrt{52} R13.9°$ graphene/Pt(111)

Pt(111); $a_{sub} = 2.77$ Å

$$a_H = \sqrt{\frac{n}{K_{xy}}} a_{sub}, K_{xy} = x^2 + xy + y^2 = 1,3,4,7,9, \ldots$$

Graphite; $a_h = 2.46$ Å

See Ref. [1] Fig. 3(f)

STM image of $\sqrt{52} \times \sqrt{52}$ graphene on Pt(111) [1]

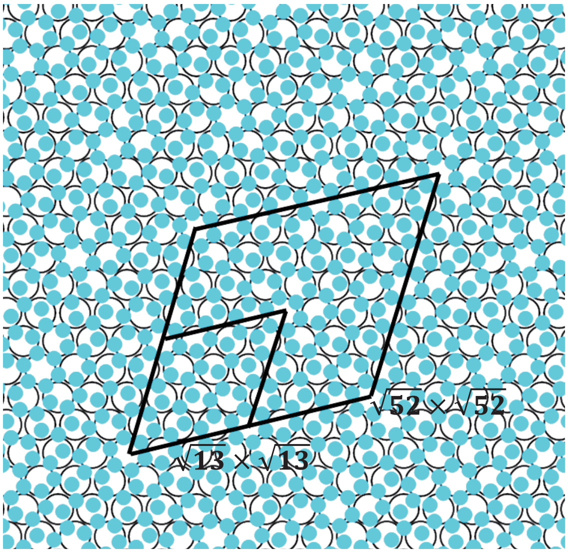
| $K_{xy}$ | $a_h$ (Å) | $\theta$ | comment |
|---|---|---|---|
| 64 | 2.50 | 0° | $\gcd(\sqrt{52}\exp(\sqrt{-1}\tan^{-1}\sqrt{3}/7), \sqrt{64}) = 2$ |
| 67 | 2.44 | 12.2° | Good |
| 73 | 2.34 | 7.3° | small |


[1] M. Gao *et. al.,* Appl. Phys. Lett. 98, 033101 (2011).


20

## Example; honeycomb lattice/triangular lattice

K=64



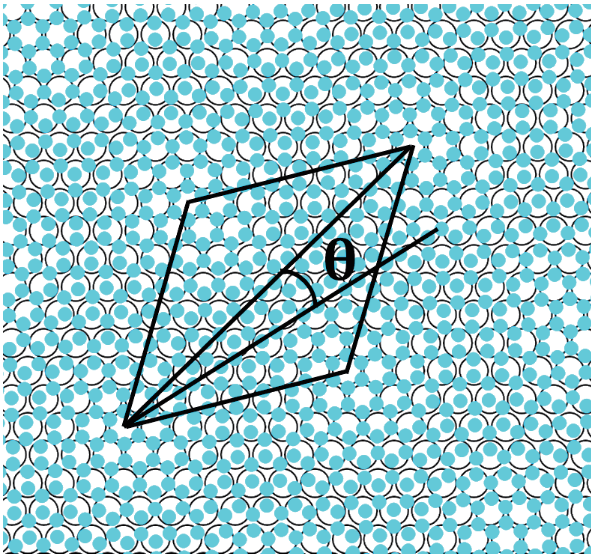

blue ; C
white ; Pt
Small lattice; $\sqrt{13} \times \sqrt{13}R13.9°$
Large lattice; $\sqrt{52} \times \sqrt{52}R13.9°$
$\sqrt{52} \times \sqrt{52}$ : Not unitcell.

Incorrect model



## Example; honeycomb lattice/triangular lattice

K=67




blue ; C
white ; Pt
black ; $\sqrt{52} \times \sqrt{52}R13.9°$ unitcell

$$a_H = 2.44\ \text{Å}$$
$$\theta_{theo.} = 12.2°$$
$$\theta_{exp.} = 12° \ [1]$$

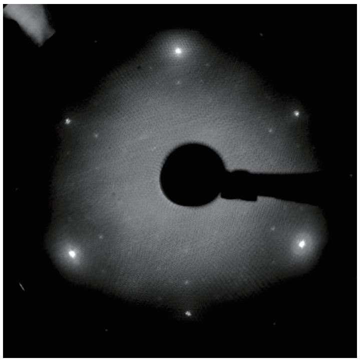
Reproduce moire pattern.

Structure model of $\sqrt{52} \times \sqrt{52}$ graphene

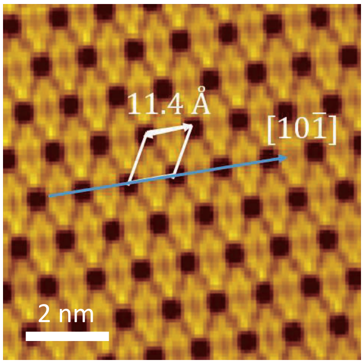
[1] M. Gao *et. al.,* Appl. Phys. Lett. 98, 033101 (2011).

# Silicene on Ag(111)

Deposit Si on Ag(111) that is kept at 550 K.
⇒Silicene grows [1].



4x4 LEED pattern
E=60 eV. Room temp.




STM image of 4x4 silicene
8.6 nm x 8.6 nm. taken at 6 K

Individual Si atoms are not resolved by STM.

[1] C.-L. Lin, *et. al.,* Appl. Phys. Exp. 5, 045802 (2012).

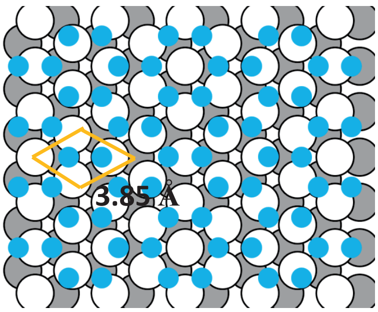


# Structural model construction

Reasonable value of Si-Si length: 2.1 Å ~2.4 Å [1] ⇒ $3.6\ \text{Å} \leq a_H = \dfrac{n a_{sub}}{\sqrt{K_{xy}}} \leq 4.1\ \text{Å}$

$$K_{xy} = x^2 + xy + y^2 = 1,3,4,7,9,12,13,16,19, \ldots$$

| K | $a_H$ (Å) | $\theta$ | Comment |
|---|---|---|---|
| 7 | 4.36 | 19.1° | × Long |
| 9 | 3.85 | 0° | ○ Reasonable |
| 12 | 3.33 | 30° | × $\gcd\left(4, \sqrt{12}\exp\left(\frac{\sqrt{-1}\pi}{6}\right)\right) = 2$ |
| 13 | 3.20 | 13.9° | × Short |

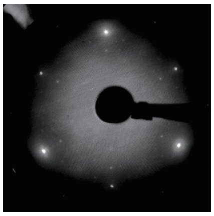



Structure model of 4x4 silicene

Optimized the atomic positions by using I-V LEED

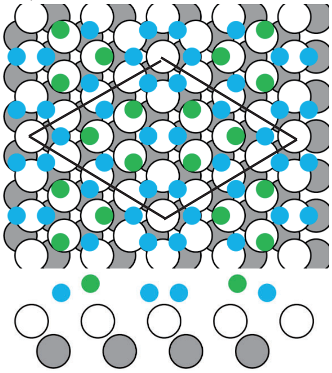
[1] Y. Wang *et. al.,* Science 321, 1069 (2008).

# I-V LEED analysis



I-V LEED; plot the spot intensity as a function of incident electron energy.

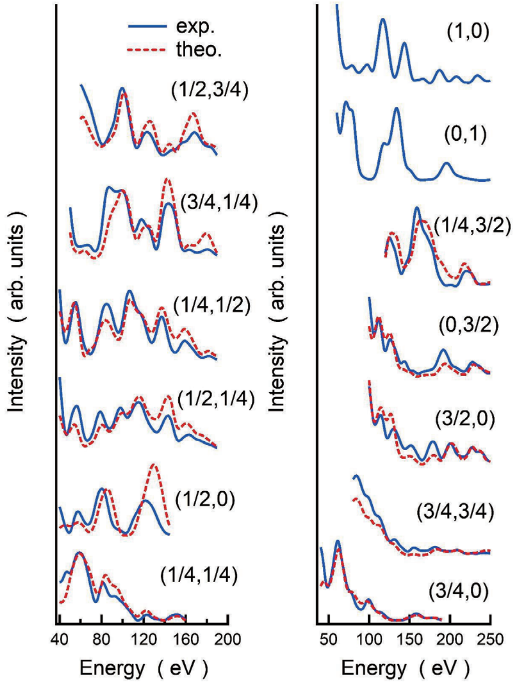
4x4 LEED pattern
E=60 eV, T=80 K



●,● Si ●,○ Ag

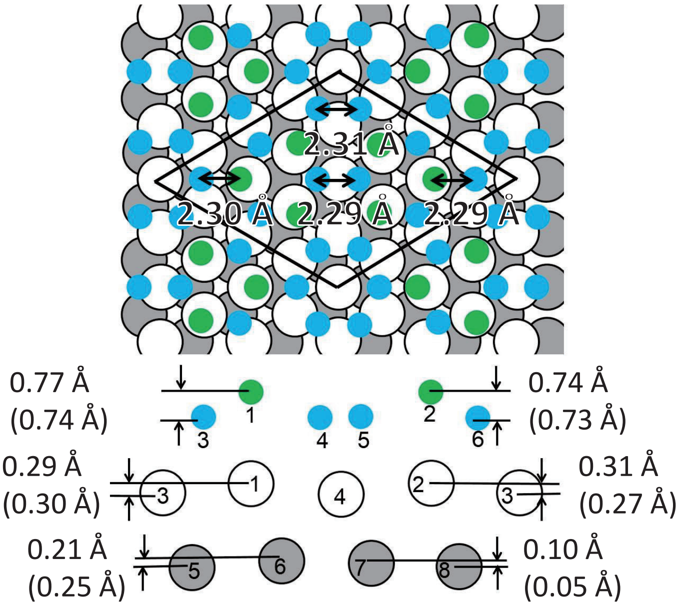
buckled honeycomb structure model.

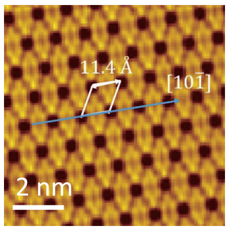
$R_p = 0.17$






# Best fit structure



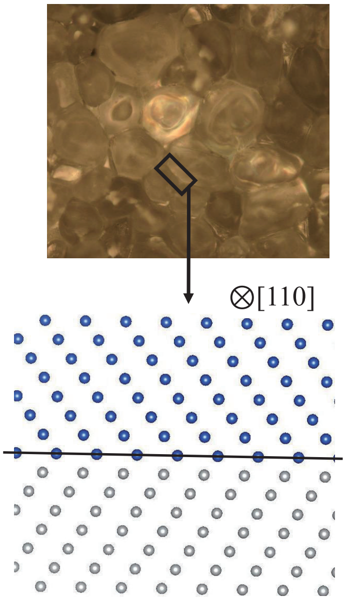

STM image of 4x4 silicene
8.6 nm×8.6 nm,taken at 6 K

緑で示した高い位置にあるSiがSTM像の輝点として現れている。

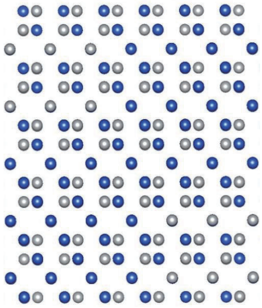
LEED result matches with DFT calculation [1].

[1] K. Kawahara, et al., Surf. Sci. 623, 25 (2014).

# Application of 2D lattice matching theory to 3D




coincidence-site lattice (CSL)



$$\mathrm{L_I} \cap A\mathrm{L_I} = \mathrm{L_{CSL}}$$

$$\mathrm{L_I} = \{\sum_{i=1}^{3} n_i \vec{a}_i \,|n_i \in \mathbb{Z}\}$$

$$A \in \mathrm{SO}(3)$$

$$\Sigma = \#(L_I/L_{CSL}) = \frac{\text{Volume of unitcell of CSL}}{\text{Volume of unitcell of } \mathrm{L_I}}$$

Rotate 109.47° around (110) axis

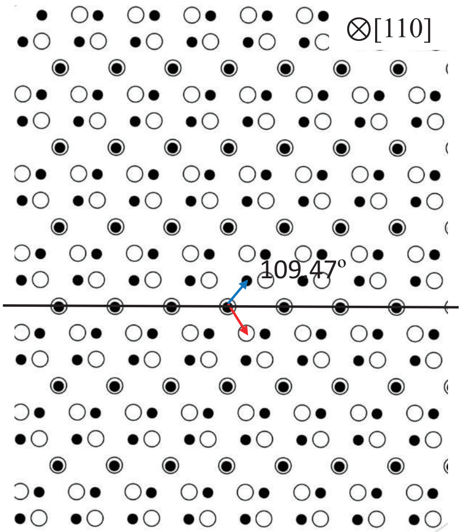
$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \vec{a}_{CSL,1} = \begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}, \vec{a}_{CSL,2} = \begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}, \vec{a}_{CSL,3} = \begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix}$$

$$\Sigma = \frac{V(CSL)}{V(L_I)} = 3$$

27

# Coincidence-site lattice




Dichromatic pattern

$$\Sigma = \frac{x^2 + (h^2 + k^2 + l^2)y^2}{2^t} = \frac{x^2 + 2y^2}{2^t} = 3$$

Rotation angle:

$$\theta = 2\tan^{-1}\frac{\sqrt{2}y}{x} = 2\tan^{-1}\sqrt{2} = 109.47°$$

How to construct grain boundary model

Determine (*hkl*)

⬇

Determine rotation angle

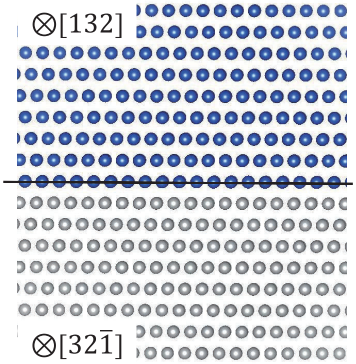
⬇

Calculate Σ

28

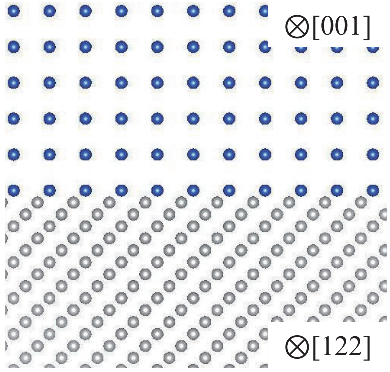
# Coincidence-site lattice

$\Sigma = 3$




Plane symmetry

$\Sigma = 3$

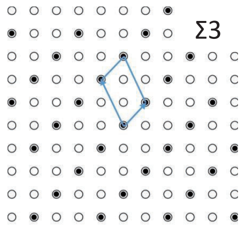



Interface plane $(1\bar{1}1)$

Interface plane ○ [010]
○ $[2\bar{2}1]$

$$\Sigma = \frac{x^2 + (h^2 + k^2 + l^2)y^2}{2^t} = \frac{x^2 + 14y^2}{2^t}$$

*x, y, t* do not exist such that Σ=3




(001) plane matches with (122) plane



# Application of 2D lattice matching theory to 3D

Construct grain boundary model

Determine Σ

Calculate rotation matrix

Determine interface plane (*hkl*)

$$L_{sc}^{3D} = \left\{ \sum_{i=1}^{3} n_i \vec{a}_i | n_i \in Z \right\}$$

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$L_S^{3D} = \left\{ \sum_{i=1}^{3} n_i \vec{b}_i | n_i \in Z \right\} \subset L_{sc}^{3D}$$

The lattice points of $L_S^{3D}$ on $hx + ky + lz = 0$ ((hkl)plane of $L_{sc}^{3D}$) have two-dimensional period

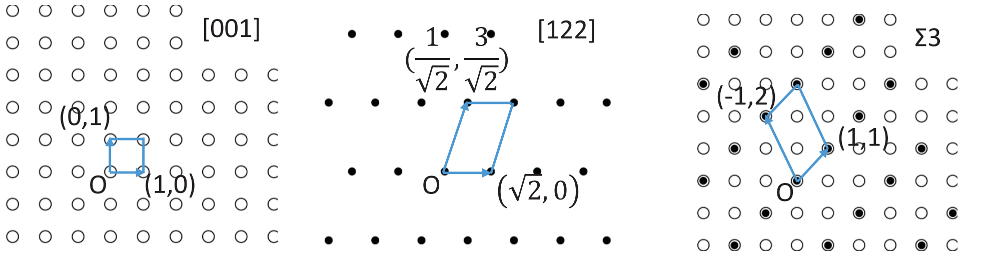
$L_{sc}^{3D} \cap AL_{sc}^{3D} = L_{CSL}^{3D}$ ➡ (001) plane of $L_{sc}^{3D}$ should match with (hkl) plane of $AL_{sc}^{3D}$

Complex number *k* exist such that $\Gamma_\tau \cap k^{-1}\Gamma_{\sqrt{-1}} = \Gamma_\tau$
$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in GL(2, Z)$ exists such that $\tau = \frac{a\sqrt{-1}+b}{c\sqrt{-1}+d}$ ➡ $\tau \in Q(\sqrt{-1})$.
$h^2 + k^2 + l^2$ should be a square number.

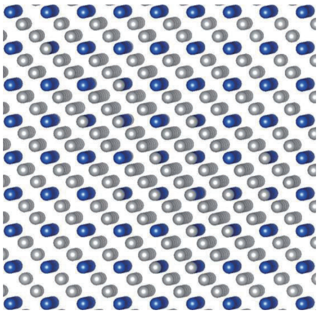
# Ex. Σ3 grain boudary

Area of unit cell of $\Gamma^{2D}_{(hkl)} = \sqrt{h^2+k^2+l^2}$

Only (122) plane is a candidate that matches with (001) plane




Lattice match: $\theta = \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}$



Number of equivalent plane with (122): 24

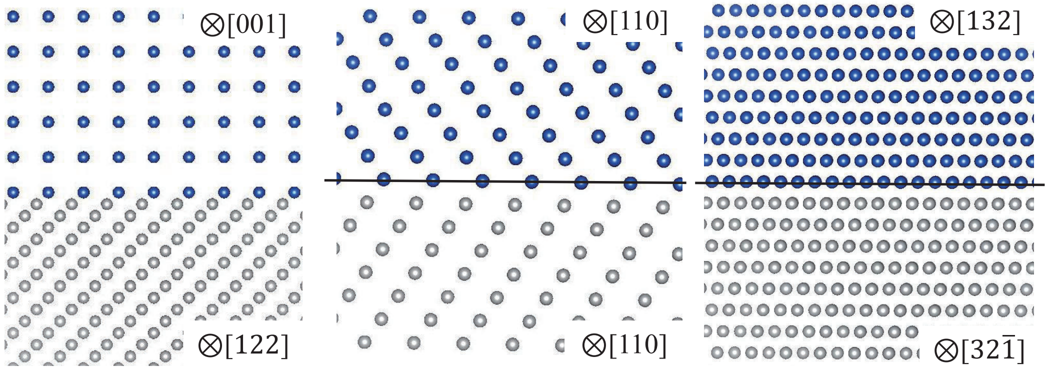
Number of rotation matrix: 96

96 matrices are all equivalent.

Left figure contains all Σ3 grain boundary



# Ex. Σ3 grain boundary




$x = 0$ | $x - y + z = 0$ | $x - y + z = 0$

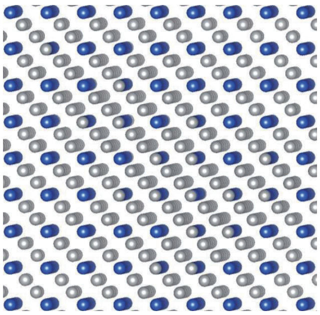
Interface: ○ (010) ○ (21$\bar{2}$) | Interface: (1$\bar{1}$1) | Interface: (1$\bar{1}$1)

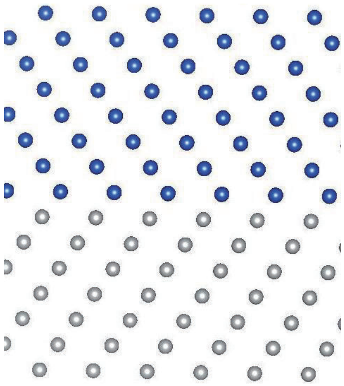
Equivalent

Σ3 grain boundaries exist infinitely

# Ex. Σ3 grain boundary

Symmetrical grain boundaries are often discussed experimentally and theoretically as model grain boundaries

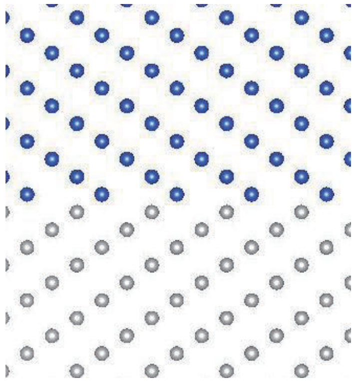




$[110](1\bar{1}1)$

$x - y + z = 0$

Symmetrical



$[110](\bar{1}12)$

$-x + y + 2z = 0$

Symmetrical

Number of Σ3 symmetrical grain boundary: 2

33

# Conclusion

・2次元の格子整合を複素平面で議論した。

・2つの2次元格子を重ねてできる超構造の対称性は代数体の不変量であるイデアル類群によって決まる。

・格子整合理論を用いて金属基板上のグラフェン、シリセンの構造モデルを構築した。

・構築したモデルを実験的に検証し、銀上のシリセンはSiがバックルしたハニカムシートであることを見出した。

・2次元格子整合理論を対応格子理論に応用し、Σ3粒界は1つの3次元パターンで過不足なく網羅でき、また粒界面について対称なものは2種類存在することを示した。

34

# 材料技術者のための 四元数と行列を用いた対応格子関係の導出

**(A derivation of coincidence site lattice relations utilizing quaternion and matrix for material engineers)**

**熊野知二, Tomoji Kumano**

日本製鉄 (株)
Nippon Steel Corp.

Grain-oriented silicon steel is mainly used as the core material of transformers, and it is manufactured by applying secondary recrystallization phenomena. The driving force of this phenomena is the grain boundary energy, which would be characterized by coincidence site lattice (CSL) relations. CSL relations are determined by the arrangement of lattice points in three-dimensional space and have already been shown mathematically by using advanced mathematics. However, their derivation processes are difficult for material engineers to understand due to their abstractness. Therefore, in this study, a derivation of CSL relations is attempted in order to enable them to easily understand the derivation. This study contributes to industrial mathematics by helping them understand the essence of the mathematical method in order to apply the relations appropriately.

A derivation method for CSL relations is proposed using the hexagonal lattice in the case of an axial ratio of $\sqrt{(8/3)}$ as an example. This method involves applying the scale rotation of a quaternion, and it is thus named the quaternion-matrix method.

The matrix specifying the ΣN-CSL relation of a certain lattice system is expressed by a similarity transformation using the matrix comprising its primitive translation vectors and is given as the following transformation matrix: $\mathbf{H}_i = \mathbf{E}_i^{-1}\mathbf{E}_R\mathbf{E}_i$. Based on the rational number properties for elements of the transformation matrix, the following formula is derived:

$N = N_0^2 + 2N_1^2 + 6N_2^2 + 3N_3^2$, $N_i$: non-negative integer, $N : \Sigma$ value.

Here, $(N_0N_1N_2N_3)$ is specified by the integrality (lattice point) and irreducibility (unit cell) among the elements of $\mathbf{H}_i$.

Finally, a quaternion for the CSL relation formation is thus derived, and based on the polar form of the quaternion, the CSL relation could be derived.

NIPPON STEEL

# 材料科学における代数と幾何　I

# 材料技術者のための四元数と行列を用いた対応関係の導出

## A derivation of coincidence site lattice relations utilizing quaternion and matrix for material engineers

Tomoji KUMANO and Junichi NAKAGAWA
Nippon Steel Corporation
熊野知二　中川淳一

2020年09月7日

九州技術研究部、数理科学研究部

International Journal of Mathematics for Industry Vol.11, No.1(2019)

日本製鉄株式会社



Abstract

Grain-oriented silicon steel is mainly used as the core material of transformers, and it is manufactured by applying secondary recrystallization phenomena. The driving force of this phenomena is the grain boundary energy, which would be characterized by **coincidence site lattice (CSL) relations**. CSL relations are determined by the arrangement of lattice points in three-dimensional space and have already been shown mathematically by using advanced mathematics. However, their derivation processes are difficult for material engineers to understand due to their abstractness. Therefore, in this study, a derivation of CSL relations is attempted in order to enable them to easily understand the derivation. This study contributes to industrial mathematics by helping them understand the essence of the mathematical method in order to apply the relations appropriately.

A derivation method for CSL relations is proposed using the hexagonal lattice in the case of an axial ratio of √(8/3) as an example. This method involves applying the scale rotation of a quaternion, and it is thus named the quaternion-matrix method.

The matrix specifying the ΣN-CSL relation of a certain lattice system is expressed by a similarity transformation using the matrix comprising its primitive translation vectors and is given as the following transformation matrix: $\boldsymbol{H}_i = \boldsymbol{E}_i^{-1}\boldsymbol{E}_R\boldsymbol{E}_i$. Based on the rational number properties for elements of the transformation matrix, the following formula is derived:

$N = N_0^2 + 2N_1^2 + 6N_2^2 + 3N_3^2$, $N_i \in N^0$, N : Σ value.

Here, $(N_0N_1N_2N_3)$ is specified by the integrality (lattice point) and irreducibility (unit cell) among the elements of $\boldsymbol{H}_i$.

Finally, a quaternion for the CSL relation formation is thus derived, and based on the polar form of the quaternion, the CSL relation could be derived.

NIPPON STEEL

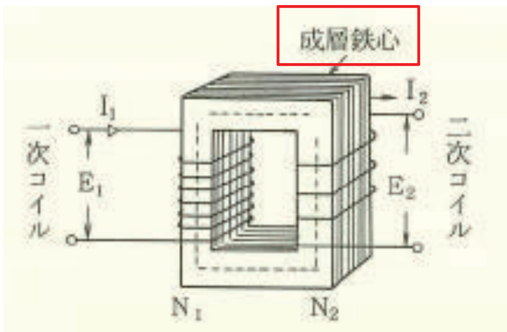
目次








# Ⅰ はじめに
## Ⅰ-1.方向性電磁鋼板:用途
(Grain Oriented Silicon Steel:GO)
変圧器用鉄芯(電磁誘導を利用)




$$\frac{E_1}{E_2}=\frac{N_1}{N_2}\qquad \frac{I_1}{I_2}=\frac{N_2}{N_1}$$

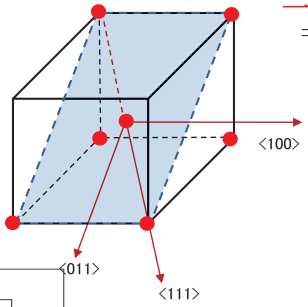
E：電圧(v)
I：電流(I)
N：巻数(回)

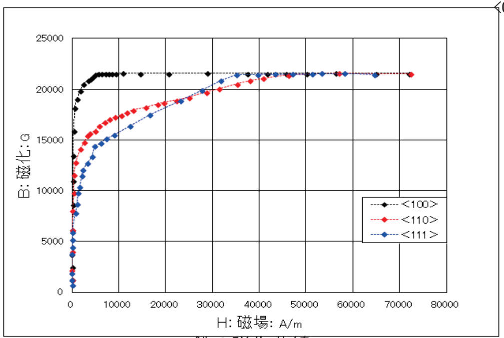
世界の生産量≒300万ton/年. 我が国≒50万トン.中国≒100万トン.
技術力は世界でtop.

日本製鉄㈱カタログ等

## Ⅰ-2.鉄(BCC)の結晶磁気異方性:適用原理

特異な性質
　結晶方位により磁化挙動が異なる
　　＜100＞:磁化容易軸
　　＜111＞:磁化困難軸



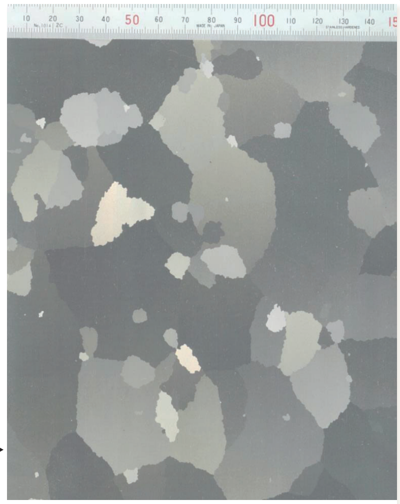




鉄の磁化曲線

(K.Honda and S.Kaya:Sci.Repts Tohoku Uni.,15(1926),721)

二次再結晶組織の例
　⇒特別な製造条件で具現

圧延方向 ⇕ ＜100＞



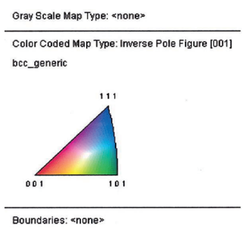

{011}＜100＞集合組織:Goss方位
　圧延面:{011}
　圧延方向:＜100＞






## Ⅰ-3. 二次再結晶

*一次再結晶:
　変形歪エネルギーを駆動力とする(通常の)再結晶
*正常結晶粒成長:
　歪が消失した鋼板に　更に熱を与えると総粒界エネルギが減るべく,
　平均的に粒成長する現象.
*二次再結晶:(異常結晶粒成長)
　正常粒成長過程において**“ある条件”**が満たされると、少数の結晶粒が他
　より急速に成長する現象.駆動力:粒界エネルギの粒界性格依存性


二次再結晶過程:975℃,C断面

【注意】“ある条件”には”集合組織”と“微細析出物(正常粒成長抑制剤:インヒビター)”であるが,
　　　後者については述べない.

## Ⅰ-4.方向性電磁鋼板(GO)における
## 対応格子関係(coincident site lattice relation)の位置づけ

方向性電磁鋼板の特定方位巨大粒組織形成(Goss方位:{011}＜100＞)

:二次再結晶現象活用:(低)粒界エネルギーを駆動力とする**選択**成長

粒成長速度 dR/dt∝MP＝(易動度)・(駆動力:粒界エネルギ)

易動度・粒界エネルギの“**粒界性格**”依存性により特定の粒界が**優先的**に移動(成長)

**粒界性格** を“**対応格子関係**”で規定

対応格子関係の導出:高等数学⇒平易な導出!

例Goss:{011}＜100＞のΣ9:{411}＜148＞,{45 11}＜184＞,{101}＜474＞,{787}＜474＞

**業務:一次再結晶集合組織においてGoss方位粒とそのΣ9方位粒分布を**

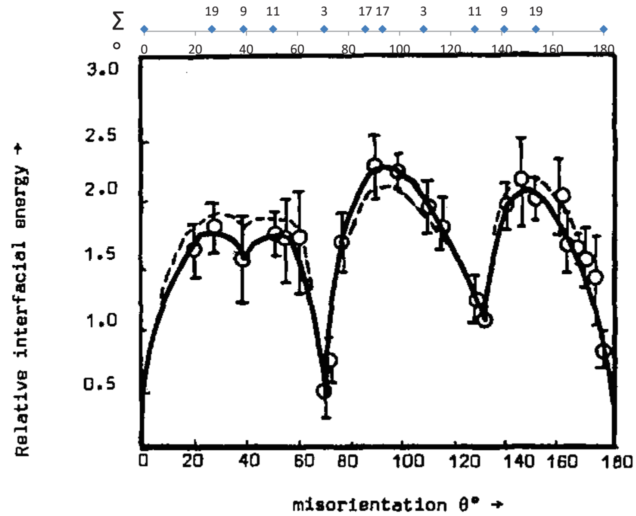
**(コストを含め)工業的に制御すること!**






**例**:粒界エネルギーの方位依存性

＜110＞軸周りのAlの対称傾角粒界エネルギーの実験値




Δ粒界エネルギー:
100～500m J /$m^2$
0.1～0.5 J /$m^2$
4.2J =1calの世界から見ると。
粒径を10μmとし,表面積は
～1000(μm)$^2$ =1×$10^{-9}$$m^2$

我々の認識の世界の
～1×$10^{-8}$

FIG. 2

Measured relative energies of [110] tilt boundaries in aluminium as a function of the misorientation θ (between [001] directions)
The 129° 30' [110] tilt boundary is used as reference for the energies.

G.C.Hasson and C. Goux;Scripta Metallurgica, 1971;vol.5:p889

## Ⅰ-5.本報告のターゲット

六方晶の場合のCSL関係

回転角,回転軸を求め、CSLを理解

| θ° | Σ |
|---|---|
| 〈100〉 Axis | |
| 22·62 | 13a |
| 28·07 | 17a |
| 36·87 | 5 |
| 53·13 | 5 |
| 61·93 | 17a |
| 67·38 | 13a |
| 112·62 | 13a |
| 118·07 | 17a |
| 〈110〉 Axis | |
| 26·53 | 19a |
| 27·80 | 13b |
| 38·21 | 7 |
| 46·83 | 19b |
| 60·00 | 3 |
| 73·17 | 19b |
| 81·79 | 7 |
| 92·20 | 13b |
| 147·80 | 13b |
| 158·21 | 7 |
| 166·83 | 19b |
| 180·00 | 3 |
| 〈210〉 Axis | |
| 48·19 | 15 |
| 73·40 | 7 |
| 96·38 | 9 |
| 131·81 | 3 |
| 180·00 | 5 |
| 〈211〉 Axis | |
| 62·96 | 11 |
| 78·46 | 15 |
| 101·54 | 5 |
| 135·58 | 7 |
| 180·00 | 3 |

| θ° | Σ |
|---|---|
| 〈221〉 Axis | |
| 61·93 | 17b |
| 90·00 | 9 |
| 112·62 | 13b |
| 143·13 | 5 |
| 180·00 | 9 |
| 〈310〉 Axis | |
| 76·66 | 13b |
| 〈311〉 Axis | |
| 50·70 | 15 |
| 180·00 | 13a |
| 〈321〉 Axis | |
| 86·18 | 15 |
| 123·75 | 9 |
| 150·07 | 15 |
| 180·00 | 7 |
| 〈322〉 Axis | |
| 107·92 | 13a |
| 152·73 | 9 |
| 180·00 | 17b |
| 〈331〉 Axis | |
| 63·82 | 17b |
| 82·16 | 11 |
| 110·92 | 7 |
| 154·16 | 5 |
| 180·00 | 19a |
| 〈332〉 Axis | |
| 99·08 | 19a |
| 133·81 | 13a |
| 180·00 | 11 |

| θ° | Σ |
|---|---|
| 〈410〉 Axis | |
| 107·92 | 13b |
| 152·73 | 9 |
| 180·00 | 17a |
| 〈411〉 Axis | |
| 93·37 | 17a |
| 129·52 | 11 |
| 153·47 | 19b |
| 113·58 | 15 |
| 157·38 | 11 |
| 〈430〉 Axis | |
| ·07 | 17b |
| ·38 | 13b |
| 〈431〉 Axis | |
| ·17 | 15 |
| ·00 | 13b |
| 〈432〉 Axis | |
| ·76 | 19a |
| ·96 | 15 |
| 〈433〉 Axis | |
| 142·14 | 19a |
| 180·00 | 17b |
| 〈441〉 Axis | |
| 160·25 | 17a |
| 〈510〉 Axis | |
| 137·17 | 15 |
| 180·00 | 13a |
| 〈511〉 Axis | |
| 73·17 | 19a |
| 92·20 | 13a |
| 120·00 | 9 |
| 158·21 | 7 |
| 〈520〉 Axis | |
| 121·76 | 19b |
| 158·96 | 15 |
| 〈521〉 Axis | |
| 139·88 | 17b |
| 180·00 | 15 |

| θ° | Σ |
|---|---|
| 〈522〉 Axis | |
| 160·25 | 17b |
| 〈530〉 Axis | |
| 142·14 | 19b |
| 180·00 | 17a |
| 〈531〉 Axis | |
| | 15 |
| | 11 |
| | 9 |
| 〈532〉 Axis | |
| 180·00 | 19b |
| 〈533〉 Axis | |
| 105·35 | 17a |
| 130·83 | 13b |
| 162·66 | 11 |
| 〈551〉 Axis | |
| 110·01 | 19b |
| 134·43 | 15 |
| 164·06 | 13a |
| 〈553〉 Axis | |
| 137·33 | 17a |
| 165·16 | 15 |
| 〈610〉 Axis | |
| 161·33 | 19a |
| 〈611〉 Axis | |
| 180·00 | 19a |
| 〈711〉 Axis | |
| 110·01 | 19a |
| 134·43 | 15 |
| 164·06 | 13b |
| 〈731〉 Axis | |
| 137·33 | 17b |
| 165·16 | 15 |
| 〈733〉 Axis | |
| 139·74 | 19b |
| 166·07 | 17b |
| 〈751〉 Axis | |
| 166·83 | 19a |

*立方晶では“体の拡大”は不要で一般化とは言えない。*

従来:高等数学を用いるので材料技術者には理解し難い。

材料研究者は結果だけの流用:お手上げ状態

⇒非数学者がもう少しイメージできる説明は無いのか?

・Pumphrey and Bowkett:ScriptaMet.356((1971)

この表はCubicの場合







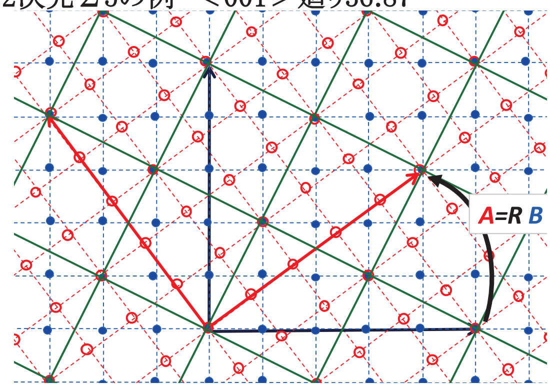
## Ⅱ.対応格子関係導出

### Ⅱ-1. 対応格子(CSL)の定義

★H.Grimmerら(Acta. Cryst.(1974).A30,p197)

“Two interpenetrating point lattices contain under certain conditions a common sublattice,i.e. a ‘coincidence-site lattice.’・・・・・・The CSL is the finest common sublattice of the crystal lattices 1 and 2.”

2次元Σ5の例 ＜001＞廻り36.87°




○と● の関係:B(●)を回転(R)すると重なる格子点が規則的に生じる.

:sublatticeとなり“対応格子”と云う.重なり具合をΣ値(密度の逆数)と云う.

## Ⅱ-2.定理①

### 3次元空間で七つの“格子”(幾何ベクトル)を定義

- **標準格子**:標準基底で張られる格子:正規直交系の基底:$E_s$ [100],[010],[001]
- **回転格子**:標準格子を直交行列$R$で回転した格子:$RE_s$
- **単位胞標準格子**:格子iの単位胞:基本並進ベクトル:$E_i$
- **単位胞回転格子**:同上を回転したもの:$RE_i$
- **拡大標準格子**:標準格子を N(自然数)倍してできる(拡大)格子:$NE_sE_i \equiv$A,
- **拡大回転格子**:回転格子をN(自然数)倍してできる(拡大)格子:$NRE_sE_i \equiv$B
- 対応格子

$\boxed{\text{対応格子は2つの拡大格子の共通格子}}$

$$E_S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad N = \begin{pmatrix} N & 0 & 0 \\ 0 & N & 0 \\ 0 & 0 & N \end{pmatrix}$$

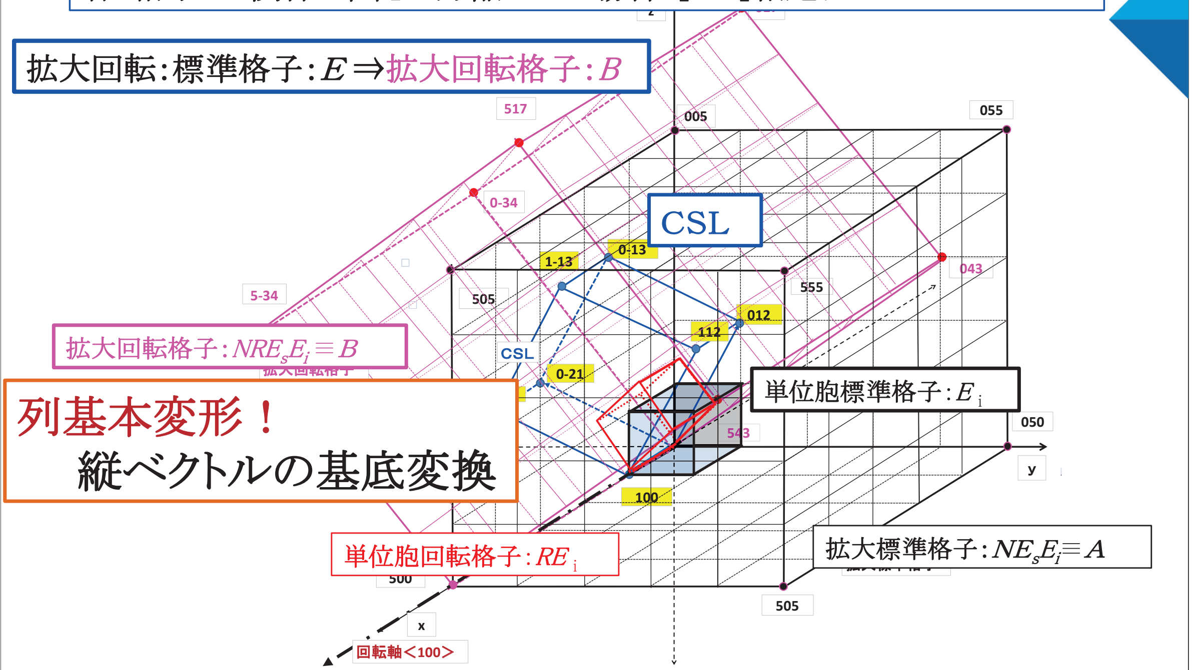
$R$ : 直交行列(回転)






## 各“格子”の関係:単純立方晶Σ5の場合:[100]軸廻りの36.87°

拡大回転:標準格子:$E \Rightarrow$拡大回転格子:$B$




拡大回転格子:$NRE_sE_i \equiv B$

列基本変形!
縦ベクトルの基底変換

単位胞標準格子:$E_i$

単位胞回転格子:$RE_i$

拡大標準格子:$NE_sE_i \equiv A$

両拡大格子はCSL基本並進ベクトルの整数係数線型結合で表される.

## Ⅱ-3.定理①の証明



命題:両拡大格子は対応格子の基本並進ベクトルの整数係数線型結合で表わされる.
**＊対応格子は、両拡大格子の共通格子点.**

CSLの定義より

・$NE_sE_i \equiv A$,
$NRE_sE_i \equiv B$ は $E_sE_i$と$RE_sE_i$ のそれぞれの整数係数の線型結合で表現できる.

・CSL点は元の格子の格子点でもあるので,$E_sE_i$,$RE_sE_i$の整数係数の線型結合$K$,$L$で表される:$C = E_sE_iK = RE_sE_iL$

$CK^{-1} = E_sE_i \quad \Rightarrow CNK^{-1} = A,$
$CL^{-1} = RE_sE_i \quad \Rightarrow CNL^{-1} = B$

即ち, 拡大格子$A$, $B$ は、線型結合係数を夫々$NK^{-1}$,$NL^{-1}$ とする
CSLの基本並進ベクトル($C$)の線型結合で形成
ここで、$NK^{-1}$,$NL^{-1}$ の要素はすべて整数*)となる.従って
両拡大格子$A$,$B$ ともにCSLの基本並進ベクトル($C$)の整数係数線型結合

$NE_sE_i = A = CNK^{-1}$
$NRE_sE_i = B = CNL^{-1}$

Q. E. D.

＊det($K$)=det($L$)=N
＊$K^{-1}$,$L^{-1}$ :の各要素は,$K$, $L$の余因子行列/det($K$),det($L$)
⇒$NK^{-1}$,$NL^{-1}$ の要素はすべて整数.

$$E_S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad N = \begin{pmatrix} N & 0 & 0 \\ 0 & N & 0 \\ 0 & 0 & N \end{pmatrix}$$

拡大格子の列基本変形(正則行列:det≠0).
det=Nの格子点がΣN-CSLを形成する





$$E_S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad N = \begin{pmatrix} N & 0 & 0 \\ 0 & N & 0 \\ 0 & 0 & N \end{pmatrix}$$

$E_i$:注目格子の基本並進ベクトル

## Ⅱ-4.単位胞標準格子($E_sE_i$)と拡大回転格子(N$RE_sE_i$)の関係:$H_i$

$E_i$:単位胞標準格子:格子iの単位胞:基本並進ベクトル
$E_s$:標準(正規直交)座標系の基底($^t$[100],$^t$[010],$^t$[001])
$E_R$:$E_s$の拡大・回転:N$RE_sE_i$

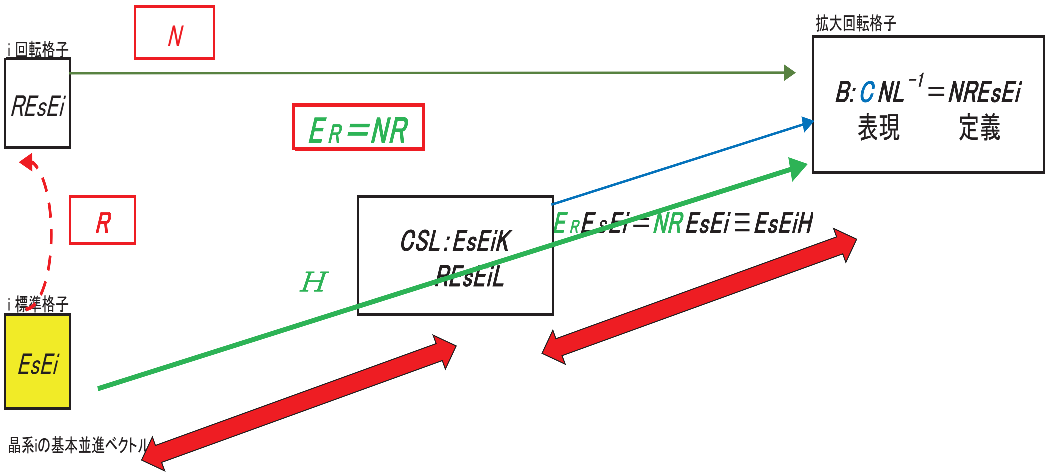
定理①より
拡大格子に対する基本並進ベクトル$E_i$の整数係数の(CSLを通して)線型結合
その係数行列を$H_i$ とする(定義).

$$NRE_sE_i = E_sE_iH_i \quad \Rightarrow \quad E_i^{-1}E_RE_i = H_i \,,$$

$E_s$ : Einheit
$R$ : 直交行列(回転)
$NR$: $E_R$

$\boxed{H_i\text{の整数性,可約性}}$

## Ⅱ−5.単位胞標準格子 と拡大回転格子の関係:図示




定義:整数係数 ＋ 定理:整数係数 ＝ ***H*:整数要素**

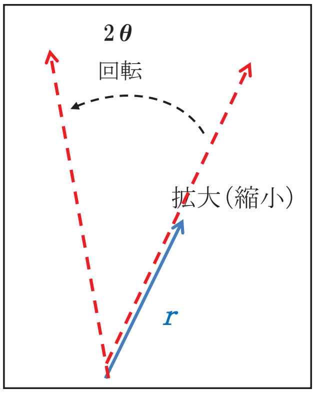






## Ⅱ−6.四元数:複素数の拡張
## 回転の表現

二次元回転：複素数,
三次元回転：四元数




四元数

定義: $\boldsymbol{a}=a_0+\boldsymbol{i}a_1+\boldsymbol{j}a_2+\boldsymbol{k}a_3,\ a_i\in\mathbb{R}$

$\boldsymbol{ijk}=\boldsymbol{i}^2=\boldsymbol{j}^2=\boldsymbol{k}^2=-1\ ,\ \boldsymbol{ij}=-\boldsymbol{ji}=\boldsymbol{k}\ ,\ \boldsymbol{j\,k}=-\boldsymbol{kj}=\boldsymbol{i}\ ,\ \boldsymbol{ki}=-\boldsymbol{ik}=\boldsymbol{j}$

極形式: $\sqrt{(a_0^2+a_1^2+a_2^2+a_3^2)}\,\{\cos\theta+\sin\theta\,(\,h\boldsymbol{i}+k\boldsymbol{j}+l\,\boldsymbol{k}\,)\,/\mathrm{R}\}$

$,0\leqq\theta\leqq\pi,\ h^2+k^2+l^2=\mathrm{R}^2$

スケール回転：回転+拡大

$q=\boldsymbol{a}\ \boldsymbol{r}\ \boldsymbol{a}^*$ （共軛変換）：

ベクトル $\boldsymbol{r}$ を $V(\boldsymbol{a})$ の廻りに2arg（$\boldsymbol{a}$）＝2θ　回転させ,

長さを｜$\boldsymbol{a}$｜$^2$倍に伸ばしたベクトルを表す.

$\boldsymbol{r}=[\mathrm{u}_1,\mathrm{u}_2,\mathrm{u}_3]$:被回転ベクトル

$V(\boldsymbol{a})$:$\boldsymbol{a}$のベクトル成分$[a_1:a_2:a_3]=[h/\mathrm{R}\ :\ k/\mathrm{R}\ :\ l/\mathrm{R}]$,　$h^2+k^2+l^2=\mathrm{R}^2$

$|\,\boldsymbol{a}\,|^2=a_0^2+a_1^2+a_2^2+a_3^2\equiv\mathrm{N},\ \ a_i\in\mathbb{R}$

## Ⅱ-7.拡大回転格子の四元数表現

$\boldsymbol{a}=a_0+a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}$ $,a_i\in\mathbb{R}$

$\boldsymbol{a}^t[100]\boldsymbol{a}^*,\ \boldsymbol{a}^t[010]\boldsymbol{a}^*,\ \boldsymbol{a}^t[001]\boldsymbol{a}^*$ :

$E_R$(≡標準格子$E_s$の拡大回転:$NRE_s$)の四元数係数$a_i$ 表示

正規直交基底 [100] [010] [001]

$$\begin{pmatrix} a_0^2+a_1^2-a_2^2-a_3^2 & 2(a_1a_2-a_0a_3) & 2(a_1a_3+a_0a_2) \\ 2(a_2a_1+a_0a_3) & a_0^2-a_1^2+a_2^2-a_3^2 & 2(a_2a_3-a_0a_1) \\ 2(a_3a_1-a_0a_2) & 2(a_3a_2+a_0a_1) & a_0^2-a_1^2-a_2^2+a_3^2 \end{pmatrix}$$






## Ⅱ-8.定理②

整数全体:$\mathbb{Z}$,
ゼロを除く整数全体:$\mathbb{Z}^\times$

四元数 $\boldsymbol{a}=a_0+a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}$ , $a_i\in\mathbb{R}$ において,
$|\boldsymbol{a}|^2=a_0^2+a_1^2+a_2^2+a_3^2\equiv N$, $N\in\mathbb{N}$ (自然数) のとき、

四元数の係数は、$a_i=b_i\sqrt{m_i}$ であらわされる。
$b_i\in\mathbb{Q}^\times$ (ゼロを除く有理数)
$m_i$:(平方因子を含まない)非負整数($\mathbb{Z}^\times$)

(2-1)N(自然数)倍のとき,四元数の係数$a_i^2\in\mathbb{Q}$ :有理数:$a_i^2$
∵もし無理数ならば,逆符号の$a_j^2$がある. $a_i,a_j$は実数⇒ $a_i^2,a_j^2\geqq 0$ 矛盾!
(2-2) ゼロでない任意の有理数(整数)Aは,相異なる素数の積mと平方数$B^2$の積$B^2m$で一意的に表される ($A=B^2m$) .
∵ Aの 素因数分解より明らか.

以上より,四元数の係数の2乗$a_i^2$は有理数で
$a_i=b_i\sqrt{m_i}$
$m_i$:(平方因子を含まない)非負整数
と表される.

# Ⅲ.六方晶の場合

## Ⅲ-1. $H_h = E_h^{-1} E_R E_h$ 行列

h:hexagonal 軸比$c/a=\sqrt{(8/3)}=2\sqrt{6}/3$

HCPの基本並進ベクトル:基底

$$E_h = \begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{6}/3 \end{pmatrix}$$

- $H_h = E_h^{-1} E_R E_h$

$$\begin{pmatrix} (a_0^2+a_1^2-a_2^2-a_3^2)+2\sqrt{3}/3(a_1a_2+a_0a_3) & -a_1^2+a_2^2+2\sqrt{3}/3\,(a_1a_2-2a_0a_3) & 4/3\{\sqrt{6}(a_1a_3+a_0a_2)+\sqrt{2}(a_2a_3-a_0a_1)\} \\ 4(a_1a_2+a_0a_3)\sqrt{3}/3 & \{-(a_1a_2+a_0a_3)\,2\sqrt{3}/3+(a_0^2-a_1^2+a_2^2-a_3^2) & 8\sqrt{2/3}\,(a_2a_3-a_0a_1) \\ (a_1a_3-a_0a_2)\sqrt{6}/2 & \{-(a_1a_3-a_0a_2)+\sqrt{3}(a_2a_3+a_0a_1)\}\sqrt{6}/4 & (a_0^2-a_1^2-a_2^2+a_3^2) \end{pmatrix}$$

既約整数

$\mathbb{Q}(\sqrt{2},\sqrt{3})$ : $a+b\sqrt{2}+c\sqrt{3}+d\sqrt{6}$ ,$(a,b,c,d)\in\mathbb{Q}$ で、

$H_h$ の要素$H$ijは整数なので 定理②より$a_i \in \mathbb{Q}(\sqrt{2},\sqrt{3})$






# Ⅲ-2. $H_{ij}$の有理数性:$H_{ij}$の全ての要素について検討

**一度に整数まで行けない。**
有理数 $a=b^2m$ のとき
$\boldsymbol{Q}(\sqrt{a}) = \boldsymbol{Q}(\sqrt{m})$ なので、

・例えば,$H_{11}$: $(a_0^2+a_1^2-a_2^2-a_3^2)+2\sqrt{3}/3\,(a_1a_2+a_0a_3)$

定理②より四元数の係数は $a_i=\pm b_i\sqrt{m_i}$ なので,

1と$\sqrt{3}$を基底とするベクトル空間を考えると

二乗項は有理数で, 残り $2\sqrt{3}/3\,(a_1a_2+a_0a_3)\in\boldsymbol{Q}$ なので

$\boldsymbol{Q}(a_1a_2\pm a_0a_3)=\boldsymbol{Q}\{\sqrt{(m_1 m_2)}, \sqrt{(m_0 m_3)}\}=\boldsymbol{Q}(\sqrt{3})$より、

$$m_1m_2=3p^2_{12}\ ,\ m_0m_3=3p^2_{03}$$

他の要素についても

$\boldsymbol{Q}(a_2a_3\pm a_0a_1)=\boldsymbol{Q}\{\sqrt{(m_2m_3)}, \sqrt{(m_0 m_1)}\}=\boldsymbol{Q}(\sqrt{2})$

$\boldsymbol{Q}(a_1a_3\pm a_0a_2)=\boldsymbol{Q}\{\sqrt{(m_1 m_3)}, \sqrt{(m_0 m_2)}\}=\boldsymbol{Q}(\sqrt{6})$

$$m_2m_3=2p^2_{23}\ ,\ m_0m_1=2p^2_{01}$$

$$m_1m_3=6p^2_{13}\ ,\ m_0m_2=6p^2_{02}$$ $p_{ij}$:整数

即ち、

$m_1m_2m_0m_3=9p^2$ (a)

$m_2m_3m_0m_1=4q^2$ (b)

$m_0m_2m_1m_3=36r^2$ (c) p,q,r整数 が得られる。

ここで、(4,9)＝1だから、(a),(b),(c)を満たすためには

$m_0m_1m_2m_3 \equiv 0 \pmod{36}$

次に、この最小値は 36 で、(十分条件)

- $m_0m_1m_2m_3 = 36 = 1\cdot2\cdot2\cdot3\cdot3$ で$m_i$は1以外に平方因子を含まない整数だから

$36 = (m_0m_1m_2m_3) = (1\cdot1\cdot6\cdot6) = (1\cdot2\cdot3\cdot6)$の組のうち、

(a)(b)(c)すべてを満たす組は$(m_0m_1m_2m_3)$は(1263)＝(2136)＝(6312)＝(3621)のみ

①＝ $b_0^2+2b_1^2+6b_2^2+3b_3^2$

②＝ $2b_0^2+b_1^2+3b_2^2+6b_3^2$

③＝ $6b_0^2+3b_1^2+b_2^2+2b_3^2$

④＝ $3_0^2+6b_1^2+2b_2^2+b_3^2$　　となる.

また、4 つの 表現は六方晶の対称性に含まれるので、どれか一つで良い.

① $N = (N_0/M_0)^2+2(N_1/M_1)^2+6(N_2/M_2)^2+3(N_3/M_3)^2$ とする.

NIPPON STEEL






## Ⅲ-3. $H_{ij}$の整数性(Nの整数性より)

添加元$\sqrt{2}$, $\sqrt{3}$, として 拡大体$\mathbb{Q}(\sqrt{2},\sqrt{3})$ において,

$a_0 = N_0/M_0$,

$a_1 = \sqrt{2}N_1/M_1$,

$a_2 = \sqrt{6}N_2/M_2$,

$a_3 = \sqrt{3}N_3/M_3$ , $N \in \mathbb{N}$ なので,

$N = a_0^2+a_1^2+a_2^2+a_3^2 = \{N_0^2(M_1M_2M_3)^2+2N_1^2(M_0M_2M_3)^2+6N_2^2(M_0M_1M_3)^2+3N(M_0M_1M_2)^2\}$
$/(M_0M_1M_2M_3)^2$, $N_i \in \mathbb{Z}$, $M_i \in \mathbb{N}$

また$H_{33}$: $(a_0^2-a_1^2-a_2^2+a_3^2)$

$= \{N_0^2(M_1M_2M_3)^2-2N_1^2(M_0M_2M_3)^2-6N_2^2(M_0M_1M_3)^2+3N_3^2(M_0M_1M_2M_3)^2\}/(M_0M_1M_2M_3)^2$,

$N_i \in \mathbb{Z}$, $M_i \in \mathbb{N}$

同様なことが他の$H_{ij}$についても成立.

$H_{ij}$とNが任意の$N_i \in \mathbb{Z}$ に対して整数であるためには,

$(M_0M_1M_2M_3)^2=1$, $M_i \in \mathbb{N}$より, $M_0 = M_1 = M_2 = M_3 = 1$ (十分条件)

$\therefore N = a_0^2+a_1^2+a_2^2+a_3^2 = N_0^2+2N_1^2+6N_2^2+3N_3^2$ , $N_i \in \boldsymbol{Z}$ 基礎式

NIPPON STEEL

# N≦50の場合

$H_{ij}$が有理数とΣ値Nが整数：$N=N_0^2+2N_1^2+6N_2^2+3N_3^2$を満たす整数の組$(N_0,N_1,N_2,N_3)\geqq 0$
：N≦50の全ての場合(248cases)：腕力（合同式でも可）材料工学的に50で十分
$0\leqq N_0<[\sqrt{N}], N_1<[\sqrt{(N/2)}], N_2<[\sqrt{(N/6)}], N_3<[\sqrt{(N/3)}]$

| | 有理数性 | | | |
|---|---|---|---|---|
| | $N_0$ | $N_1$ | $N_2$ | $N_3$ |
| N | 1 | 2 | 6 | 3 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 3 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| 5 | 0 | 1 | 0 | 1 |
| 6 | 2 | 1 | 0 | 0 |
| 6 | 1 | 1 | 0 | 1 |
| 6 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 7 | 2 | 0 | 0 | 1 |
| 7 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 8 | 0 | 2 | 0 | 0 |
| 8 | 0 | 1 | 1 | 0 |
| 9 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 9 | 1 | 2 | 0 | 0 |
| 9 | 2 | 1 | 0 | 1 |
| 9 | 1 | 1 | 1 | 0 |
| 9 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| 10 | 2 | 0 | 1 | 0 |
| 10 | 1 | 0 | 1 | 1 |
| 11 | 3 | 1 | 0 | 0 |
| 11 | 0 | 2 | 0 | 1 |
| 11 | 0 | 1 | 1 | 1 |
| 12 | 2 | 2 | 0 | 0 |

～

| | 有理数性 | | | |
|---|---|---|---|---|
| | $N_0$ | $N_1$ | $N_2$ | $N_3$ |
| N | 1 | 2 | 6 | 3 |
| 47 | 6 | 2 | 0 | 1 |
| 47 | 3 | 4 | 1 | 0 |
| 47 | 6 | 1 | 1 | 1 |
| 47 | 3 | 1 | 2 | 2 |
| 48 | 4 | 4 | 0 | 0 |
| 48 | 6 | 0 | 0 | 2 |
| 48 | 2 | 4 | 0 | 2 |
| 48 | 0 | 0 | 0 | 4 |
| 48 | 4 | 2 | 2 | 0 |
| 48 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 49 | 7 | 0 | 0 | 0 |
| 49 | 2 | 3 | 0 | 3 |
| 49 | 1 | 0 | 0 | 4 |
| 49 | 5 | 3 | 1 | 0 |
| 49 | 4 | 0 | 1 | 3 |
| 49 | 5 | 0 | 2 | 0 |
| 49 | 2 | 3 | 2 | 1 |
| 50 | 0 | 5 | 0 | 0 |
| 50 | 6 | 1 | 0 | 2 |
| 50 | 0 | 1 | 0 | 4 |
| 50 | 6 | 2 | 1 | 0 |
| 50 | 3 | 4 | 1 | 1 |
| 50 | 0 | 4 | 1 | 2 |
| 50 | 3 | 2 | 1 | 3 |

⇒各組について $H_{ij}$ の整数性　　⇒$H_{13},H_{23},H_{32}$の既約性で選択

NIPPON STEEL






# Ⅲ−4.$N_i$を用いた$H_{ij}$ の表現

| | |
|---|---|
| $N=a_0^2+a_1^2+a_2^2+a_3^2=(N_0)^2+2(N_1)^2+6(N_2)^2+3(N_3)^2$ | ：$a_0=N_0, a_1=\sqrt{2}N_1, a_2=\sqrt{6}N_2, a_3=\sqrt{3}N_3$ |
| $H_{11}$:$a_0^2+a_1^2-a_2^2-a_3^2+2\sqrt{3}/3\,(a_1a_2+a_0a_3)$ | $3(-2N_2^2-N_3^2)+4N_1N_2+2N_0N_3+N_0^2+2N_1^2$<br>：整数,偶奇判断$-3N_3^2+N_0^2$ |
| $H_{12}$:$-a_1^2+a_2^2+2\sqrt{3}/3\,(a_1a_2-2a_0a_3)$ | $2(2N_1N_2-2N_0N_3-N_1^2+3N_2^2)$：偶数 |
| $H_{13}$:$4/3\{\sqrt{6}\,(a_1a_3+a_0a_2)+\sqrt{2}\,(a_2a_3-a_0a_1)\}$ | $8(N_1N_3+N_0N_2+N_2N_3)-8/3N_0N_1$ |
| $H_{21}$:$+4(a_1a_2+a_0a_3)\sqrt{3}/3$ | $4(2N_1N_2+N_0N_3)$：偶数 |
| $H_{22}$:$-(a_1a_2+a_0a_3)2\sqrt{3}/3+(a_0^2-a_1^2+a_2^2-a_3^2)$ | $3(+2N_2^2-N_3^2)-4N_1N_2-2N_0N_3+N_0^2-2N_1^2$<br>：整数,偶奇判断$-3N_3^2+N_0^2$ |
| $H_{23}$: $8\sqrt{2}/3\,(a_2a_3-a_0a_1)$ | $16N_2N_3-16/3N_0N_1$ |
| $H_{31}$: $(a_1a_3-a_0a_2)\sqrt{6}/2$ | $3(N_1N_3-N_0N_2)$：整数 |
| $H_{32}$:$\{-\sqrt{6}(a_1a_3-a_0a_2)+3\sqrt{2}(a_2a_3+a_0a_1)\}/4$ | $3(-N_1N_3+N_0N_2+3N_2N_3+N_0N_1)/2$ |
| $H_{33}$:$(a_0^2-a_1^2-a_2^2+a_3^2)$ | $3(-2N_2^2+N_3^2)+N_0^2-2N_1^2$：整数,偶奇判断$+3N_3^2+N_0^2$ |
| 有理数 | 整数へ |

要素が整数の場合の$N_i$条件

$$N_0N_1\equiv 0 \pmod{3},$$
$$(-N_1N_3+N_0N_2+3N_2N_3+N_0N_1)\equiv 0 \pmod{2}$$

NIPPON STEEL

## Ⅲ-5.可約性(単位胞):必要条件

N≦50を検討

①2による可約性:

($N_0$と$N_3$の偶奇が一致) and ($N_1$と$N_2$奇で一致) を除く

②3による可約性

$N_0 \equiv 0 \quad (\mathrm{mod}\ 3)$

$N_2 N_3 \equiv 0 \quad (\mathrm{mod}\ 3)$

$N_1 \equiv 0 \quad (\mathrm{mod}\ 3)$ を除く

③0が3つあるとき:回転が無く延長(拡大標準格子)のみなので除く.

④その他の数字に依る可約性:そもそも計算すれが良いのだが・・・

- 4での可約性は2の場合に含まれる.
- 6の可約性は2,3の場合に含まれる.
- 5,7は実際に各要素を計算して全てが5,7で除されるか判断.
- 8は2に含まれ、9は3に含まれる。それ以上は不要.






## Ⅲ-6.六方晶の四元数による対称性表現

$a_0 + \boldsymbol{i}a_1 + \boldsymbol{j}a_2 + \boldsymbol{k}a_3$

回転角, 回転軸

Z軸周りのπ/3,2π/3,π,4/3π,5/3π,2π回転

$R_1$ : $\sqrt{3}/2 + 1/2\boldsymbol{k} = R_5^{-1} = R_5^*$

$R_2$ : $1/2 + \sqrt{3}/2\boldsymbol{k} = R_4^{-1} = R_4^*$

$R_3$ : $\boldsymbol{k}$

$R_4$ : $1/2 - \sqrt{3}/2\boldsymbol{k} = R_2^{-1} = R_2^*$

$R_5$ : $\sqrt{3}/2 - 1/2\boldsymbol{k} = R_1^{-1} = R_1^*$

$R_6$ : $1 = R_6^{-1} = R_6^*$

向かい合う稜の中心を結ぶ3軸周りのπ回転

$A_1$ : $\boldsymbol{i}$

$B_1$ : $+1/2\boldsymbol{i} + \sqrt{3}/2\boldsymbol{j}$

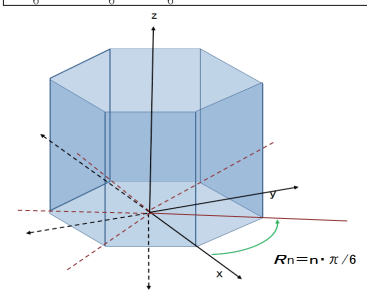
$C_1$ : $-1/2\boldsymbol{i} + \sqrt{3}/2\boldsymbol{j}$

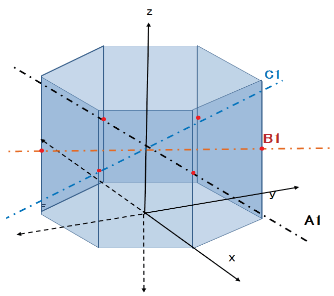
向かい会う面の中心を結ぶ3軸周りのπ回転

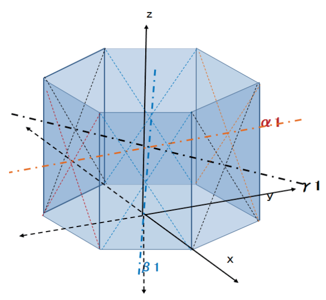
$\alpha_1$ : $\boldsymbol{j}$

$\beta_1$ : $+\sqrt{3}/2\boldsymbol{i} + 1/2\boldsymbol{j}$

$\gamma_1$ : $-\sqrt{3}/2\boldsymbol{i} + 1/2\boldsymbol{j}$




直交変換(ユニタリー変換)

$$R_i^* a R_j$$

# Ⅲ-7. 六方晶(HCP)の対応関係まとめ

P9の表に対応

代表表現

| N | $N_0$ | $N_1$ | $N_2$ | $N_3$ | 回転角度 | h | k | l |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 7 | 2 | 0 | 0 | 1 | 21.79° | 0 | 0 | 1 |
| 10 | 1 | 0 | 1 | 1 | 78.46 | 2 | 1 | 0 |
| 11 | 0 | 2 | 0 | 1 | 62.96 | 2 | 1 | 0 |
| 13 | 1 | 0 | 0 | 2 | 27.80 | 0 | 0 | 1 |
| 14 | 3 | 1 | 0 | 1 | 44.42 | 2 | 1 | 0 |
| 17 | 3 | 2 | 0 | 0 | 86.63 | 1 | 0 | 0 |
| 18 | 0 | 0 | 1 | 2 | 70.53 | 1 | 0 | 0 |
| 19 | 4 | 0 | 0 | 1 | 13.17 | 0 | 0 | 1 |
| 22 | 1 | 3 | 0 | 1 | 50.48 | 1 | 0 | 0 |
| 25 | 1 | 3 | 1 | 0 | 23.07 | 2 | 1 | 0 |
| 26 | 3 | 2 | 1 | 1 | 87.80 | 8 | 0 | 1 |
| 27 | 0 | 3 | 1 | 1 | 38.94 | 1 | 0 | 0 |
| 29 | 3 | 2 | 0 | 2 | 66.64 | 16 | 16 | 3 |
| 31 | 2 | 0 | 0 | 3 | 17.80 | 0 | 0 | 1 |
| 31 | 2 | 3 | 1 | 1 | 56.74 | 5 | -1 | 0 |
| 34 | 5 | 0 | 1 | 1 | 53.97 | 4 | 0 | -1 |
| 35 | 0 | 4 | 0 | 1 | 34.05 | 2 | 1 | 0 |
| 35 | 0 | 2 | 0 | 3 | 57.12 | 1 | 2 | 0 |
| 37 | 5 | 0 | 0 | 2 | 9.42 | 0 | 0 | 1 |
| 37 | 1 | 3 | 1 | 2 | 72.70 | 7 | 2 | 0 |
| 38 | 3 | 1 | 0 | 3 | 26.53 | -1 | 0 | 0 |
| 38 | 3 | 1 | 2 | 1 | 73.17 | 16 | 8 | 3 |
| 41 | 3 | 4 | 0 | 0 | 55.88 | 1 | 0 | 0 |
| 43 | 4 | 0 | 0 | 3 | 15.18 | 0 | 0 | 1 |
| 43 | 4 | 3 | 1 | 1 | 83.32 | 7 | 1 | 0 |
| 45 | 3 | 3 | 1 | 2 | 86.18 | 3 | 1 | 0 |
| 46 | 1 | 3 | 0 | 3 | 79.98 | 8 | 4 | 1 |
| 46 | 1 | 3 | 2 | 1 | 40.46 | -8 | 0 | -3 |
| 47 | 6 | 2 | 0 | 1 | 55.68 | 32 | 16 | 9 |
| 49 | 1 | 0 | 0 | 4 | 16.43 | 0 | 0 | 1 |
| 49 | 5 | 3 | 1 | 0 | 88.83 | 2 | 1 | 0 |
| 50 | 0 | 4 | 1 | 2 | 60.00 | 8 | 0 | 1 |
| 50 | 3 | 2 | 1 | 3 | 63.90 | 2 | -1 | 0 |

同一格子点配置の異なる表現

| h | k | l | | | | N | $N_0$ | $N_1$ | $N_2$ | $N_3$ | h | k | l | h | k | l | | | h | k | l |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | -1 | 0 | | | | 10 | 2 | 0 | 1 | 0 | | | | | | | | | | | |
| 1 | -1 | 0 | | | | 11 | 0 | 1 | 1 | 1 | | | | | | | | | | | |
| -1 | 1 | 0 | | | | 14 | 0 | 1 | 0 | [illegible] | | | | | | | | | | | |
| 1 | 1 | 0 | | | | 17 | 3 | 1 | 1 | 0 | | | | | | | | | | | |
| 1 | 1 | 0 | | | | 18 | 3 | 0 | 1 | 1 | | | | | | | | | | | |
| 1 | 1 | 0 | | | | 22 | 2 | 3 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | |
| -1 | 1 | 0 | | | | 25 | 1 | 0 | 2 | 0 | | | | | | | | | | | |
| -8 | -8 | 1 | | | | 26 | 0 | 2 | 1 | 2 | | | | | | | | | | | |
| -1 | -1 | 0 | | | | 27 | 0 | 0 | 2 | 1 | | | | | | | | | | | |
| -16 | 0 | 3 | | | | 29 | 3 | 1 | 1 | 2 | | | | | | | | | | | |
| 5 | 4 | 0 | | | | 31 | 2 | 0 | 2 | 1 | | | | | | | | | | | |
| 4 | 4 | 1 | | | | 34 | 1 | 0 | 1 | 3 | | | | 34 | 4 | 0 | 1 | 2 | | | |
| 1 | -1 | 0 | | | | 35 | 0 | 2 | 2 | 1 | | | | | | | | | | | |
| -1 | 1 | 0 | | | | 35 | 0 | 1 | 1 | 3 | | | | | | | | | | | |
| 7 | 5 | 0 | | | | 37 | 1 | 0 | 2 | 2 | 5 | 2 | 0 | 7 | 5 | 0 | | | 7 | 2 | 0 |
| 1 | 1 | 0 | | | | 38 | 6 | 1 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | |
| 4 | 4 | 1 | 8 | -8 | 3 | 38 | 0 | 1 | 2 | 2 | | | | | | | | | | | |
| 1 | 1 | 0 | | | | 41 | 3 | 2 | 2 | 0 | | | | | | | | | | | |
| 7 | 8 | 0 | | | | 43 | 4 | 0 | 2 | 1 | 8 | 1 | 0 | 7 | 1 | 0 | | | | | |
| 3 | 2 | 0 | | | | 45 | 3 | 0 | 2 | 2 | | | | | | | | | | | |
| -4 | 4 | 1 | | | | 46 | 5 | 3 | 0 | 1 | | | | 46 | 4 | 3 | 0 | 2 | | | |
| -8 | -8 | -3 | | | | 46 | 2 | 3 | 2 | 0 | | | | | | | | | | | |
| 16 | -16 | 9 | | | | 47 | 6 | 1 | 1 | 1 | | | | | | | | | | | |
| 1 | -1 | 0 | | | | 49 | 5 | 0 | 2 | 0 | | | | | | | | | | | |
| -8 | -8 | -1 | | | | 50 | 3 | 4 | 1 | 1 | | | | | | | | | | | |
| 3 | 1 | 0 | 2 | 3 | 0 | 50 | 6 | 2 | 1 | 0 | | | | | | | | | | | |

NIPPON STEEL






# Ⅲ-8.具体的計算　例Σ7

$N=7=N_0^2+2N_1^2+6N_2^2+3N_3^2, N_0=2, N_1=0, N_2=0, N_3=1$

$\boldsymbol{a}=a_0+a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}$ において、

$$\boxed{\begin{aligned} a_0&=N_0=2\\ a_1&=N_1\sqrt{2}=0\\ a_2&=N_2\sqrt{6}=0\\ a_3&=N_3\sqrt{3}=\sqrt{3}\end{aligned}}$$

四元数は　$\boldsymbol{a}=2+\sqrt{3}\boldsymbol{k}$

・これに144通りの対称性計算$R_i{}^*\mathrm{a}R_j$を行う,

・$R_1{}^*aR_2, R^*{}_2aR_3, R_4{}^*aR_5, R_5{}^*aR_6, R_6{}^*aR_1, B_1a^*\beta_1, C_1{}^*a\alpha_1, \alpha_1{}^*aB_1$, $\beta_1{}^*aA_1, \gamma_1{}^*aC_1$　で　最小回転角21.79°　。

・このうち$a_i\geqq0(i=1,2,3)$は, $R_1aR_2{}^*, R_2aR_3{}^*, R_4aR_5{}^*, R_5aR_6{}^*, R_6aR_1{}^*$　で

$\sqrt{7}(3\sqrt{21}/14+\sqrt{7}/14\boldsymbol{k})$

$\cos(\theta/2)=3\sqrt{21}/14$,　$\theta=21.79°$

$[0\ \ 0\ \ \sqrt{7}/14]$　=<001>

NIPPON STEEL

# Ⅳ.まとめ

高等数学を用いずに格子の対応関係をもとめる一般化を試みた.
*四元数のスケール回転を用いる.
*ΣN対応方位関係を"拡大回転行列:$H$ "で規定.
$H$行列要素の有理数（体)で 基礎式
$N=N_0^2+2N_1^2+6N_2^2+3N_3^2, N_i \in \mathbb{N}^0$ ,N: Σ値 を得,
*更に、整数性(格子点)と可約性(単位胞)で$(N_0N_1N_2N_3)$ 組み合わせを限定.
対応関係対応する 四元数$\boldsymbol{a}=a_0+a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}$ を規定,
* ユニタリー変換対称性考慮:
四元数の極形式より回転軸,回転角を求める.

** 立方晶にも適用可
$N=N_0^2+N_1^2+N_2^2+N_3^2, N_i \in \mathbb{N}^0$, N: Σ値 奇数
CSL形成の四元数をもとめる.

**拡大・回転の演算子(写像)を基底変換して表現**






# エピローグ

*七つの格子(幾何ベクトル)の関係⇔
3次元ベクトル空間での自己同型写像

*HCP:P27の表

基礎式: Σ値$N=N_0^2+2N_1^2+6N_2^2+3N_3^2$, $N_i \in \mathbb{N}^0$, ⇐ $\in \mathbb{Z}$ , 自乗するので非負.
係数の置換は, 六方晶の対称性に含まれる.
整数の組$(N_0, N_1, N_2, N_3)$から, $H_{ij}$の可約条件を除く.

*PC,FCC,BCC
$H_{ij}$ の式は異なるも、同一基礎式:P9の表

基礎式: Σ値$N=N_0^2+N_1^2+N_2^2+N_3^2$, $N_i \in \mathbb{N}^0$,
整数の組$(N_0, N_1, N_2, N_3)$から
(可約性により)N偶数と(明らかな) 非回転を除く

数学的には厳密性には欠けますが・・・・・

ご清聴有難うございます.

# Geometrical modeling and numerical analysis on dislocations in solid

**小林舜典, Shunsuke Kobayashi**
大阪大学
Osaka Univ.

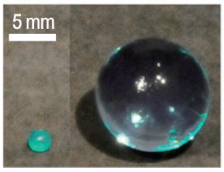
The aim of this study is to construct a framework to calculate the internal stress field of a crystalline solids for an arbitrary distribution of dislocations. Based on the standard assumptions in kinematics, the original problem is divided into the two parts; plastic and elastic defromations. We introduce three diffeomorphic manifolds called the reference, intermediate and equilibrium states. The reference and equilibrium states are in the Euclidean space while the intermediate state is a Riemannian manifold which accompanies an affine connection with non-zero torsion and vanishing curvature. The first part of the problem, *i.e.*, plastic deformation, is to find the Reimannian metric for a given distribution of dislocations. By using the equivalence of torsion and dislocation density tensors, we employ the Cartan first structure equation as a geometrical constraint between the torsion and metric. To simplify the analysis, we take a pullback of the structure equation and consider the constraint condition on the reference state. The solution must satisfy additional constraint conditions required from the Helmholtz decomposition of a vector-valued 1-form. Finally, the conditions are cast into an optimization problem to minimize the residual norm of the structure equation. We obtained the metric as well as affine connection of the intermediate state by solving the variational problem numerically. The second-half of the problem is relatd to the elastic deformation. By definition, the Riemannian metric of the equilibrium state is obtained from the displacement from the reference state. It indicates that Riemannian metric of the intermediate state behaves as a geometric constraint of the elastic part. In the present geometrical framework, elastic deformation is understood as an embedding map of the Riemannian manifold to Euclidean space. We obtained the deformation so that it minimizes the strain energy functional as in usual elasticity. We employed isogeometric analysis to solve the variational problems, *i.e.*, Galerkin method which uses NURBS as the basis function. Numerical analysis is conducted for several configuration of dislocations including dislocation loops, forest dislocations and polygonization structure for kink deformations.

# GEOMETRICAL MODELING AND NUMERICAL ANALYSIS ON DISLOCATIONS IN SOLID

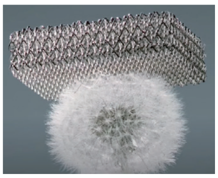
Graduate school of engineering science
Osaka university
Shunsuke Kobayashi

## 研究背景

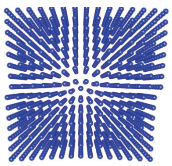
- 非弾性変形に起因する固体の変形
  - 高分子の膨潤
  - アサガオの開花（膨圧）
  - ひまわりの傾性
  - 熱膨張
  - 結晶性固体の格子欠陥




D. Moreau et al., *PNAS*, **113** (2016), 13295–13300



https://youtu.be/k6N_4jGJADY

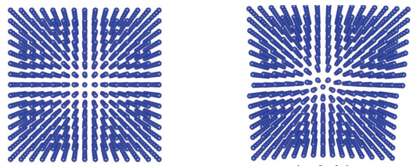


2

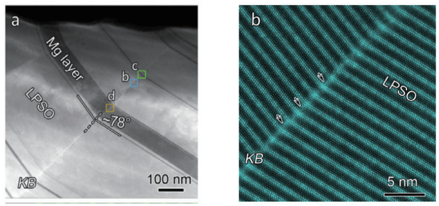
## 転位の幾何学的特徴

- 転位
  - 結晶格子の格子欠陥の一つ
  - 完全結晶の並進対称性を崩す
  - 配列の乱れを連ねた曲線：転位線
- 転位組織
  - 無数の転位が相互作用
  - 転位組織を形成
- 目的

  転位組織による物体の弾性変形と応力場の数値計算



完全結晶　　不完全結晶



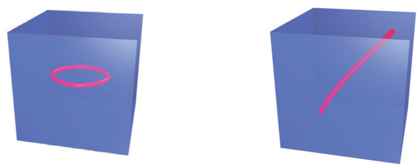

X. G. Shao *et al.*, *Acta Mater.*, **118** (2016), 177−186.

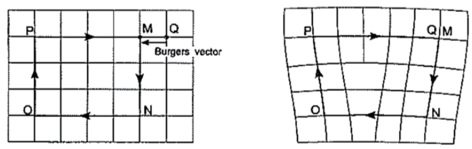
3

## 転位の幾何学的特徴

- 幾何学的特徴
  - 一つの結晶粒内で閉曲線を作るか境界にまで達している
  - Burgersベクトルが転位に沿って一定
- Burgersベクトル
  - 格子配列の乱れの大きさと方向を表す
  - Burgersベクトルの測り方

1. 転位を囲う閉経路MNOPQをとる
2. MNOPQを完全結晶へ写す
3. 始点Mと終点Qの差





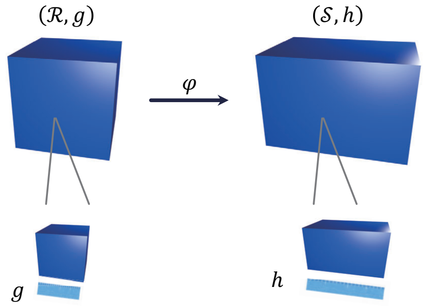

D. Hull & J. Bacon, Introduction to dislocations (4th ed.), Butterworth Heinemann (2001)

4

## 弾性理論：RIEMANN幾何の側面

- Riemann多様体
  - Riemann計量を備えた多様体
  - 多様体：物体
  - Riemann計量：距離を測るものさし
- 弾性変形
  - 変形前の物体：参照状態 $(\mathcal{R}, g)$
  - 変形後の物体：現状態 $(\mathcal{S}, h)$
  - 微分同相写像：$\varphi: \mathcal{R} \to \mathcal{S}$
  - 物体の相対的な変形量を測るひずみテンソル

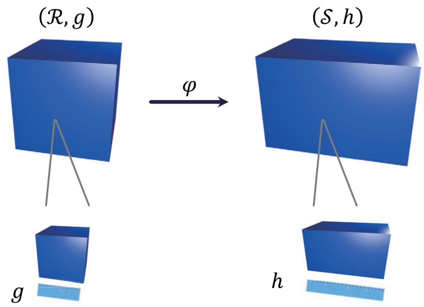
$$E = \frac{\varphi^* h - g}{2} \in T^{(2,0)}(\mathcal{R})$$




5

## 弾性理論：RIEMANN幾何の側面

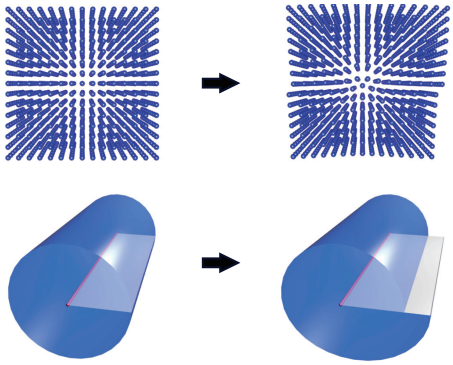
- 物体に生じるエネルギー
  - 応力テンソル：$S = C(E, \cdot) \in T^{(0,2)}(\mathcal{R})$
  - ひずみエネルギー：$W = \int_{\mathcal{R}} S(E) v_{\mathcal{R}}/2$
  - 外力のポテンシャル：$H$
  - 応力の平衡方程式：$\delta W + \delta H = 0$
  - 弾性理論の用途の一例
    - 外力が物体に加わったとき，変形後の物体の形状はどうなるか？を解析
    - 応力の平衡方程式を$\varphi$に関して解けば良い
    - $\varphi$はひずみテンソルを通して方程式に入る
    - 転位の場合はどう考えるか？




6

## VOLTERRA過程による転位の導入

- Volterra過程
  1. 物体を分離しないように切断
  2. 片方の切断面をBurgersベクトル分移動
  3. 切断面を結合
- 弾性理論へVolterra過程を導入？
  - 物体の変形には切断面の移動分が含まれる
  - 切断面の移動に関するひずみはカウントしない（結合する原子がずれるだけ）
  - 切断面を結合した後で弾性変形が生じる
  - 変形前後の状態に対し，新たな状態を加える（Kondo, Bilby, Kröner, Noll…）



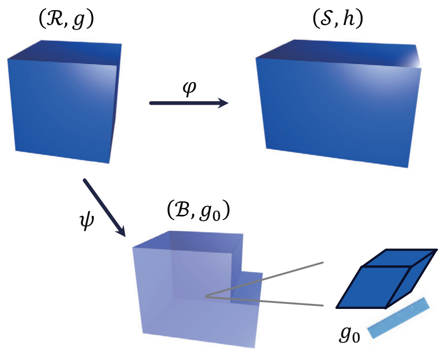
7

## 中間状態の幾何

- 中間状態：$(\mathcal{B}, g_0)$
  - Volterra過程の断面の移動を再現
  - 微分同相写像 $\psi: \mathcal{R} \to \mathcal{B}$
  - Greenひずみテンソル

$$E = \frac{\varphi^* h - \psi^* g_0}{2} \in T^{(2,0)}(\mathcal{R})$$

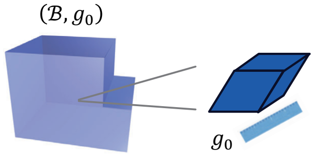
  - 変形量を測る基準を参照状態のRiemann計量から中間状態のRiemann計量に取り直す
  - 中間状態の幾何はどう決定？




8

## 中間状態の幾何

- ひずみを測る基準となる $g_0$を構成
- $g_0 = \delta_{ij}\vartheta^i \otimes \vartheta^j \in T^{(2,0)}(\mathcal{B})$
  - $\vartheta = \vartheta^i e_i \in \Omega^1(\mathcal{B}, \mathbb{R}^3)$はBの正規直交枠の双対枠
  - 逆に $\vartheta$が正規直交なベクトルを定める
- 転位とれい率の対応(Kondo, Bilby, Kröner)
  - れい率2形式 $\tau \in \Omega^2(\mathcal{B}, \mathbb{R}^3)$ ：Euclid空間からの“ずれ”を測る
  - 転位の特徴と対応する性質
    - 転位が物体内部に端点を持たない性質：Bianchiの恒等式 $d\tau = 0$
    - Burgersベクトル：$\mathcal{R}$ 上の閉経路 $\gamma$のclosure failure $b[\psi(\gamma)] = \int_{\psi(\gamma)} \vartheta$
  - Cartanの第一構造方程式：$\tau^i = d\vartheta^i$
    - れい率形式と双対枠の適合条件

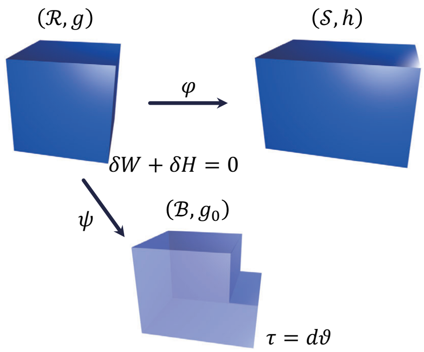



- ➢ $g_0$は転位の分布から決定可能
  - ➢ 転位の分布＝れい率 $\tau$
  - ➢ Cartanの第一構造方程式 $\vartheta$
  - ➢ Riemann計量 $g_0$

9

## 転位による弾性変形解析の流れ

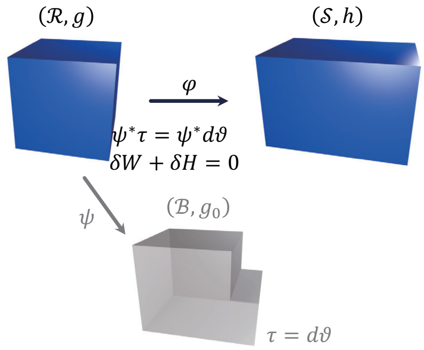
1. 転位の分布 $\tau$ から中間状態のRiemann計量を決定
   - Cartanの第一構造方程式$\tau = d\vartheta$ を満足する$\vartheta$を決定
2. 応力の平衡方程式から物体の変形を決定
   - 応力の平衡方程式$\delta W + \delta H = 0$を満足する$\varphi$を決定




10

## CARTANの第一構造方程式の数値解析

- 従来提案されてきた手法*
  - 転位分布と解析領域の軸対称性
  - 第一構造方程式を解析的に解く
- 引き戻し
  - $\psi^*\tau = \psi^* d\vartheta$
  - 参照状態上で転位の分布 $\psi^*\tau$を入力
- 残差ノルム
  - $\mathcal{L} = \frac{1}{2}\int_{\mathcal{R}} \langle \psi^*\tau - \psi^* d\vartheta, \psi^*\tau - \psi^* d\vartheta \rangle \upsilon_{\mathcal{R}}$



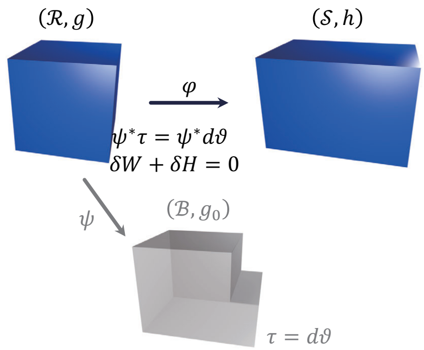

* A. Yavari and A. Goriely, Arch. Ration. Mech. Analysis, **205** (2012), pp. 59--118
A. Yavari and A. Goriely, Math. Mech. Solids, **18** (2013), pp. 91—102
A. Yavari and A. Goriely, Proc. R. Soc. A, **470** (2014), pp. 20140403

11

## CARTANの第一構造方程式の数値解析

- 残差ノルム
  - $\mathcal{L} = \frac{1}{2}\int_{\mathcal{R}} \langle \psi^*\tau - \psi^* d\vartheta, \psi^*\tau - \psi^* d\vartheta \rangle \upsilon_{\mathcal{R}}$
  - Helmholtz分解*
    - $\Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3) = dC^\infty(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3) \oplus \mathcal{D}(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3)$
    - $dC^\infty(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3) \coloneqq \{\omega \in \Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3) \mid d\omega = 0\}$
    - $\mathcal{D}(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3) \coloneqq \{\omega \in \Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3) \mid \delta\omega = 0, \omega(N) = 0\}$
    - $g$に関する余微分$\delta: \Omega^k(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3) \to \Omega^{k-1}(\mathcal{R}, \mathbb{R}^3)$
    - $N$ : $\partial\mathcal{R}$上の単位法線ベクトル場
  - 拘束条件

$$\int_{\mathcal{R}} \delta_{ij}\lambda^i(\delta\vartheta^j)\, \upsilon_{\mathcal{R}}$$

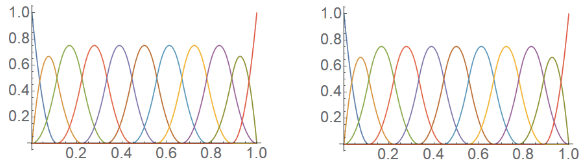


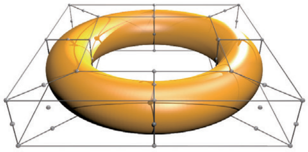

*J. Wenzelburger, J. Geom. Phys., **24** (1998), pp. 334--352

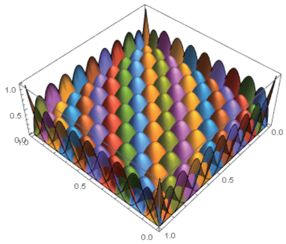
12

## 数値解析手法の紹介

- アイソジオメトリック解析
  - Galerkin法の一種
  - NURBSを物体の形状表現およびGalerkin法の基底関数に利用
  - 物体の形状を厳密に表現

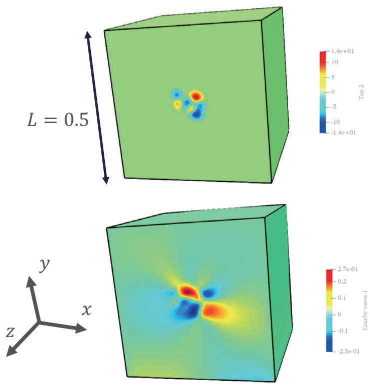






13

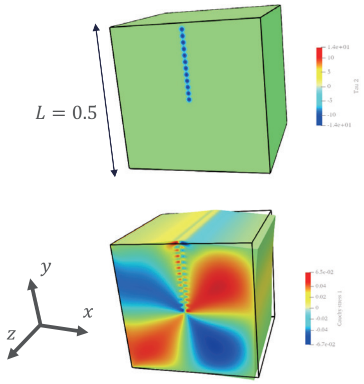
## 解析例1：林転位の応力場解析




- 転位の配置
  - 12個の直線転位を中央付近にランダムに配置
  - Burgersベクトル$b = (\pm 0.02, 0, 0)$
  - 同符号のBurgersベクトルはそれぞれ6個
- 解析結果
  - 個々の転位の応力場は互いに打ち消し合う

14

## 解析例2：転位列の応力場解析




- 転位の配置
  - 直線の転位を12個y方向へ配置
  - Burgersベクトル$b = (0.01, 0, 0)$
- 解析結果
  - 個々の転位の応力場は互いに打ち消し合う
  - 列の先端では大きく応力が集中

15

## まとめ

- 転位による弾性変形は三つのRiemann多様体によって定式化される
- 転位は中間状態のれい率と等価で，Cartanの第一構造方程式を用いてそのRiemann計量を決定することができる
- Cartanの第一構造方程式の残差ノルムを最小化する変分問題を定式化し，その数値計算を行うことで中間状態のRiemann計量を決定することができることを示した
- 中間状態のRiemann計量を用いてひずみを定義し，応力の平衡方程式の数値解析を行うことで林転位と転位列の応力場解析を実施した

16

# Relationship between the development of lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations

**下川智嗣, Tomotsugu Shimokawa**
金沢大学
Kanazawa Univ.

Plastic deformation of solid materials occurs through lattice defects. There are various various morphologies of lattice defects, including vacancy as 0-dimensional, dislocations and disclinations as 1-dimensional, grain boundaries as 2-dimensional defect, and precipitates as 3-dimensional. The mechanism of the release of elastic strain energy stored in the materials due to the motion, development and interaction of these lattice defects governs the mechanical properties of solid materials. Although the indirect interactions of lattice defects through their mechanical fields can be expressed theoretically, the direct interactions between the lattice defects must be expressed explicitly in terms of the structure of the atoms. In this presentation, the relationship between the development of the lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations. First, the fundamental issues of dislocations, grain boundaries, and disclinations are explained, then the mechanism of dislocation generation from grain boundaries as an interaction of lattice defects is described in detail, and the relationship between this phenomenon and the fracture properties of materials is explained. In addition, the method of combining atomic and continuum regions, the problems of lattice defects in new materials (high-entropy alloy), and the relationship between the statistic properties of intermittent plasticity and mechanical properties of materials are discussed.

**IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数 I**
(Geometry and Algebra in Material Science I)

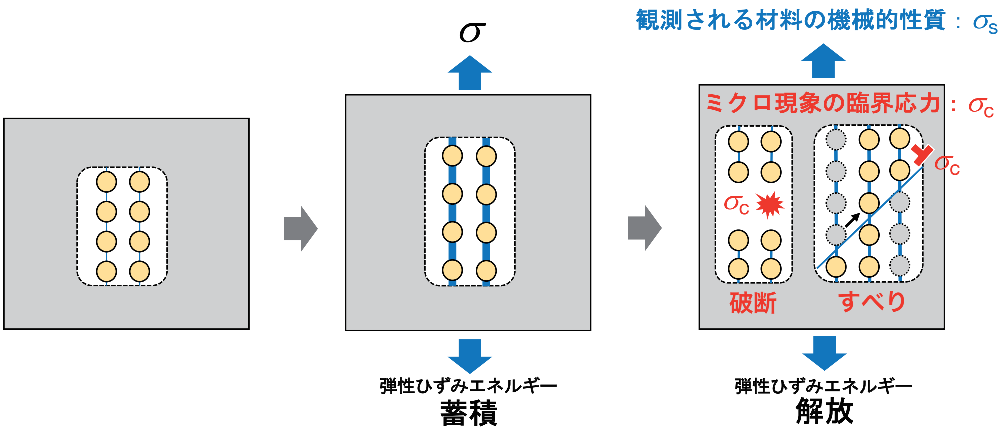
九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 On-line 研究会 (Zoom)
(2020年 9月7日(月) - 8日(火))

Relationship between ***the development of lattice defects*** and ***mechanical properties*** in solid materials through atomic simulations

（原子シミュレーションによる**格子欠陥の発展**と**機械的性質**の関係）


金沢大学 理工研究域 機械工学系
下川智嗣


## 材料の機械的性質




$$\underbrace{\sigma_s}_{\text{機械的性質}} = f(\alpha,\ \underbrace{\sigma_c}_{\text{臨界応力}},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

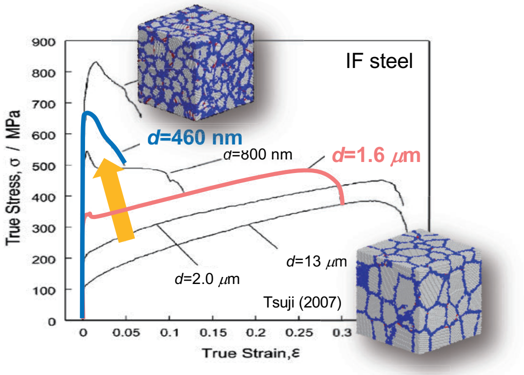
機械的性質　応力不均一性　臨界応力

- 応力不均一性
  - 弾性異方性
  - 結晶粒径
  - 格子欠陥群の組織
  - ・・
- 臨界応力
  - 原子間結合力（粒内，粒界）
  - 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
  - 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
  - ・・

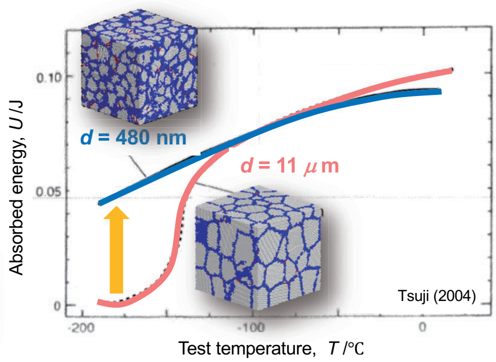
**組織・サイズ依存性**

## 組織と機械的性質

### 結晶粒微細化に伴う高強度化




### 結晶粒微細化に伴う低温での破壊靱性向上




$$\sigma_\mathrm{s} = f(\alpha,\ \sigma_\mathrm{c},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

応力不均一性：弾性異方性、結晶粒径、格子欠陥群の組織、・・

臨界応力：原子間結合力（粒内，粒界）、転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）、転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）、・・

**組織・サイズ依存性**

## 本講演のアウトライン

原子シミュレーションを用いた格子欠陥の発展と機械的性質の関係を紹介する.

- 分子動力学法について
- 格子欠陥の基礎と応用
- 格子欠陥の発展と機械的性質の関係


$$\sigma_\mathrm{s} = f(\alpha,\ \sigma_\mathrm{c},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

応力不均一性：弾性異方性、結晶粒径、格子欠陥群の組織、・・

臨界応力：原子間結合力（粒内，粒界）、転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）、転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）、・・

**組織・サイズ依存性**

## 本講演のアウトライン

原子シミュレーションを用いた格子欠陥の発展と機械的性質の関係を紹介する．

- **分子動力学法について**
- **格子欠陥の基礎と応用**
- **格子欠陥の発展と機械的性質の関係**

$$\sigma_{\mathrm{s}} = f(\alpha,\ \sigma_{\mathrm{c}},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

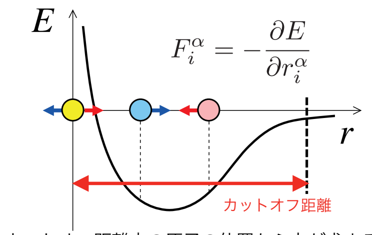
応力不均一性：
- 弾性異方性
- 結晶粒径
- 格子欠陥群の組織
- ・・

臨界応力：
- 原子間結合力（粒内，粒界）
- 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
- 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
- ・・

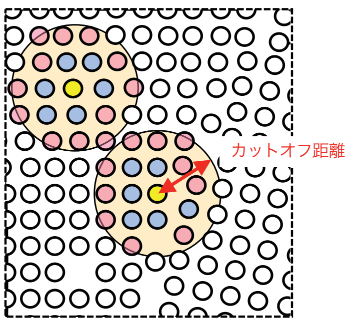
組織・サイズ依存性

## 分子動力学法

### 原子間相互作用（原子間ポテンシャル）

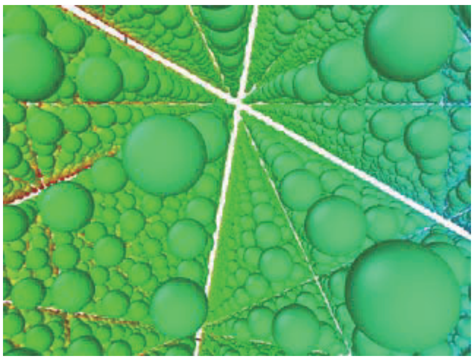



カットオフ距離内の原子の位置から力が求まる




### 原子の運動（ニュートンの運動方程式）

各原子の振動を表現するため，1タイムステップは約1fs($10^{-15}$秒)



### 温度と圧力（応力）

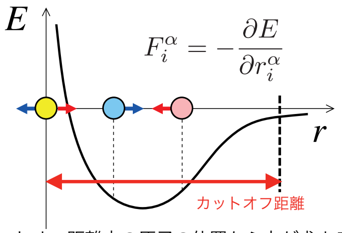
各原子の位置，速度，力

$$T = \frac{1}{3N}\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{m v_i^2}{k_{\mathrm{B}}}$$

$$P = \frac{N k_{\mathrm{B}} T}{V} + \frac{1}{3V}\left\langle \sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{F}^\alpha \cdot \boldsymbol{r}^\alpha \right\rangle$$

## 分子動力学法

### 原子間相互作用（原子間ポテンシャル）




カットオフ距離内の原子の位置から力が求まる

**原子構造やエネルギーの情報**

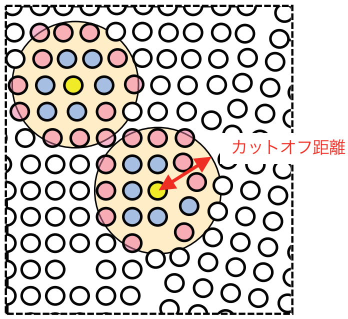
↓

**格子欠陥の識別**

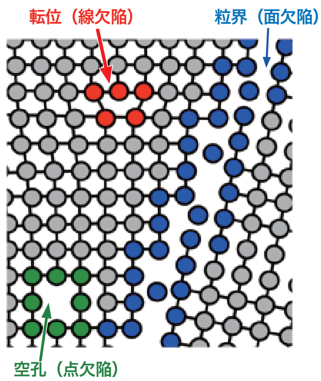
※格子欠陥ごとに原子間ポテンシャルを設定する必要がない

↓

**格子欠陥の原子構造・ダイナミクスを直接表現可能**








## 例：延性・脆性材料の表現

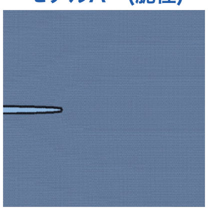
### Morseポテンシャル（2体間力）：パラメーター3個

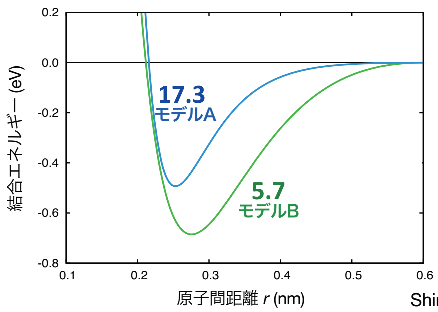
$$U(r) = D\{\exp[-2\alpha(r - r_0)] - 2\exp[-\alpha(r - r_0)]\}$$

基本物性値や欠陥エネルギーを用いてポテンシャル形状を決める
※実験で観測される**降伏応力**や**加工硬化率**等のマクロ力学特性値を用いることができない

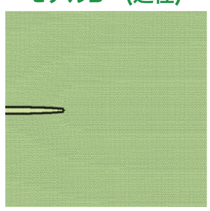
| | 格子定数 $a_0$ (nm) | 凝集エネルギー $E_c$ (eV) | 弾性定数 $C_{11}$ (GPa) | 弾性定数 $C_{12}$=$C_{44}$ (GPa) | ヤング率 $E$ (GPa) (Voigt average) | 横弾性率 $\mu$ (GPa) (Voigt average) | 表面エネルギー $\gamma_s$ (mJ/m²) | $\frac{\mu b}{\gamma_s}$ | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| モデルA | 0.2493 | -1.579 | 307 | 102.5 | 256 | 102.4 | 1473 | **17.3** | **脆性** |
| モデルB | 0.2493 | -2.488 | 182 | 60.7 | 151.7 | 60.7 | 2647 | **5.7** | **延性** |

モデルA　(脆性)






モデルB　(延性)



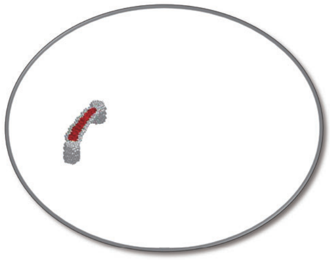
Shimokawa, *Mater. Sci. Eng. A*, **598**(2014).

## 本講演のアウトライン

原子シミュレーションを用いた格子欠陥の発展と機械的性質の関係を紹介する．

- 分子動力学法について
- **格子欠陥の基礎と応用**

  **転位（dislocation）**
- 格子欠陥の発展と機械的性質の関係



$$\sigma_{\mathrm{s}} = f(\alpha,\ \sigma_{\mathrm{c}},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

応力不均一性：
- 弾性異方性
- 結晶粒径
- 格子欠陥群の組織
- ・・

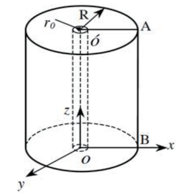
臨界応力：
- 原子間結合力（粒内，粒界）
- 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
- 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
- ・・

**組織・サイズ依存性**

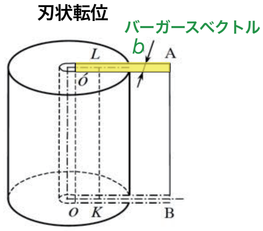
## 線欠陥：転位（dislocation）と回位（disclination）

### 連続体中の線欠陥

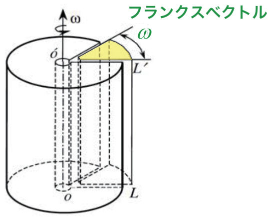
変形していない連続体



刃状転位



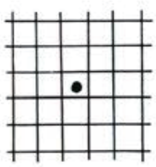

くさび型回位



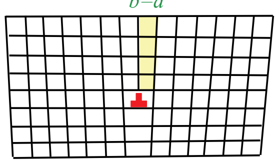

### 結晶体中の線欠陥

4角形格子モデル

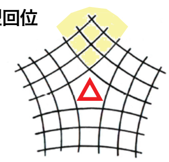
格子定数 $a$



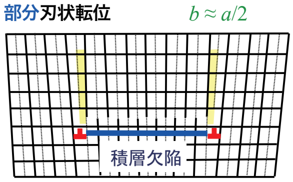
完全刃状転位　$b=a$



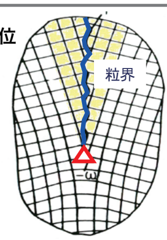
完全くさび型回位　$\omega=\pi/2$



部分刃状転位　$b\approx a/2$



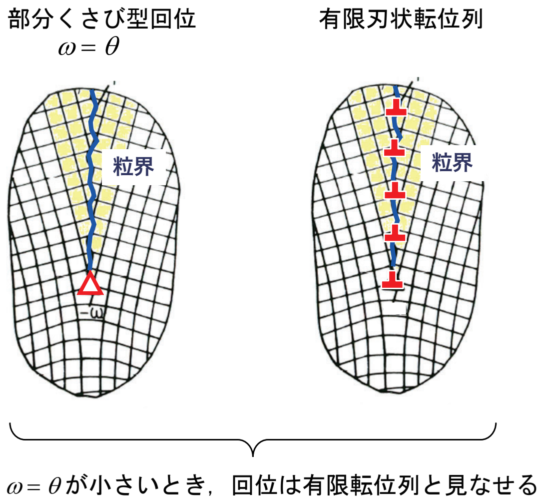

部分くさび型回位　$\omega\neq\pi/2$

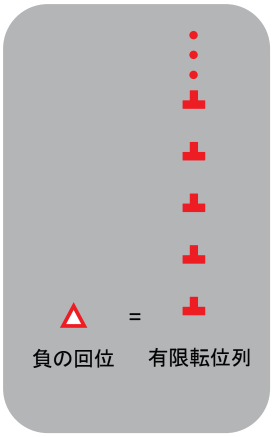



面欠陥を伴う

A. E. Romanov and V. I. Vladimirov, Disclination in Crystalline Solids, (1992).

## 線欠陥と面欠陥の幾何学的な関係

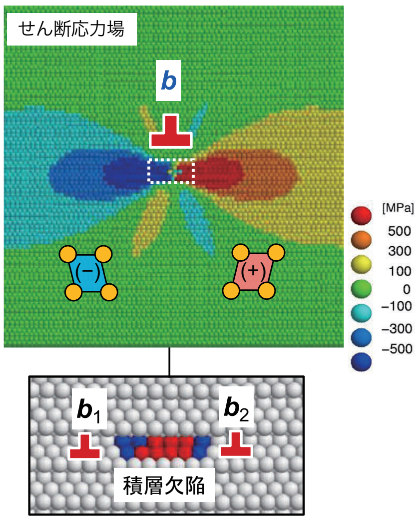



## 転位周りの応力場

### 原子モデル

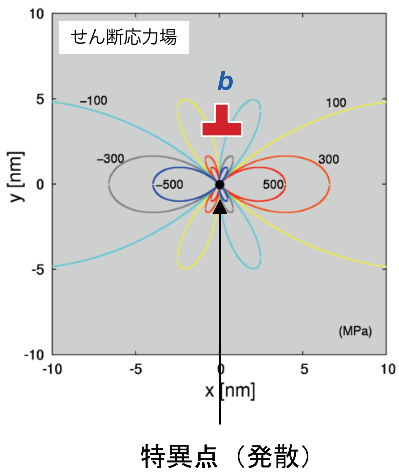
転位芯構造の解像度ある



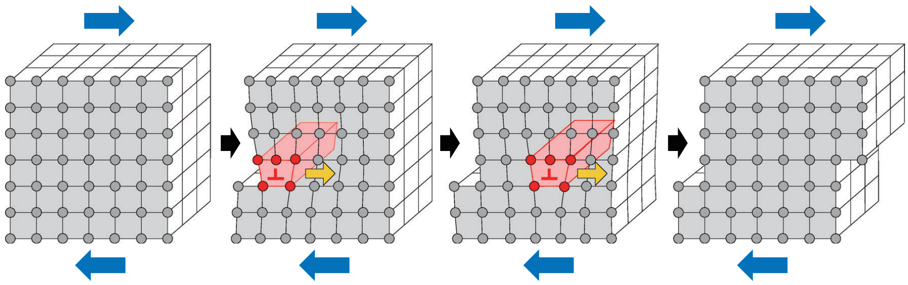

### 転位論（線形弾性論）

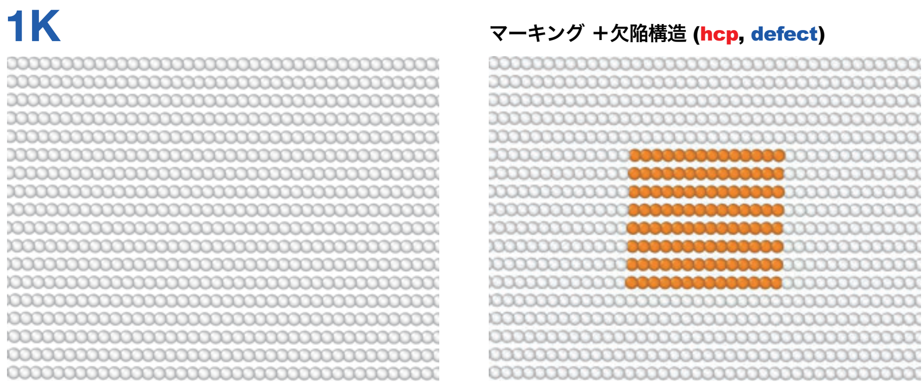
転位芯構造の解像度ない

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

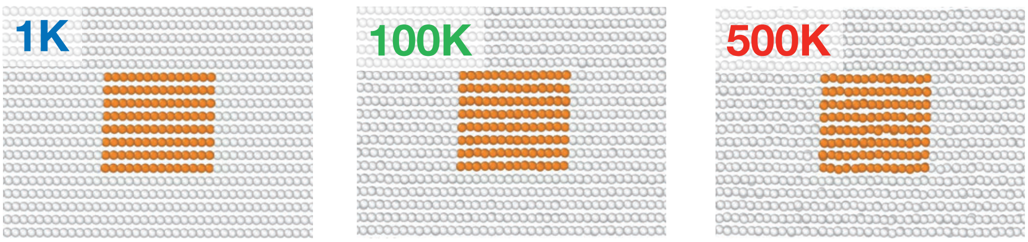


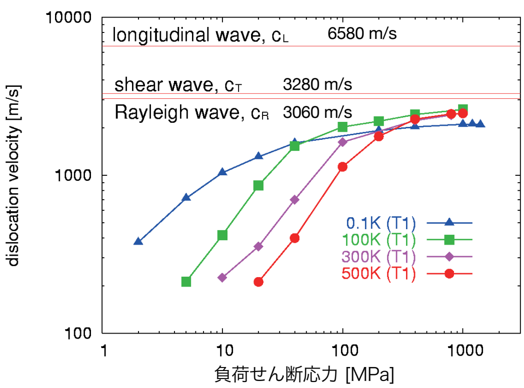
# 転位の運動





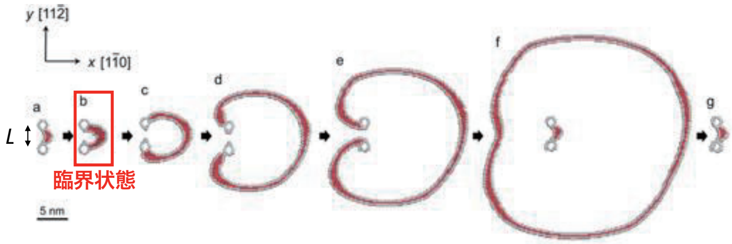

# 転位の運動：外力と運動速度

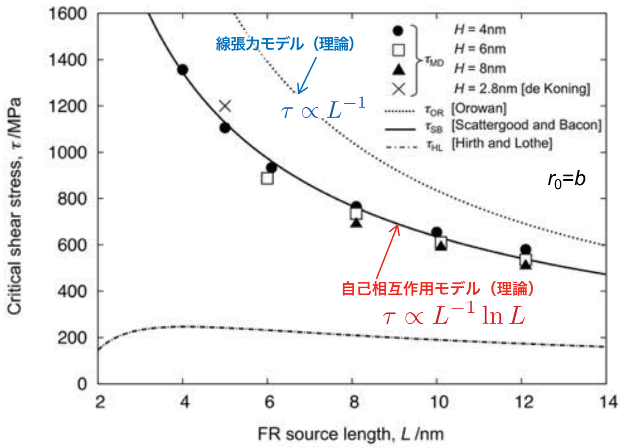


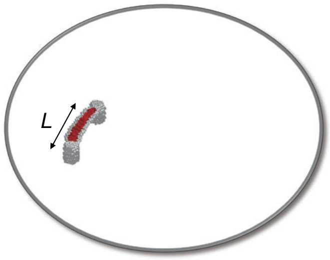




- 外力の上昇に伴い，転位速度の増加
- レイリー波の速度に漸近

## 転位の増殖：フランクリード源



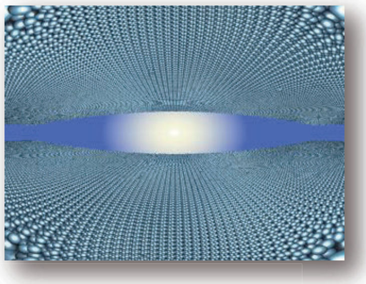




- FR源の臨界応力は，自己相互作用を考慮した理論モデルで表現可能

Shimokawa, *Mater. Trans.*, **55**(2014).

## 本講演のアウトライン

原子シミュレーションを用いた格子欠陥の発展と機械的性質の関係を紹介する．



- 分子動力学法について
- 格子欠陥の基礎と応用
  - 粒界（grain boundary）
- 格子欠陥の発展と機械的性質の関係

$$\sigma_s = f(\alpha,\ \sigma_c,\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

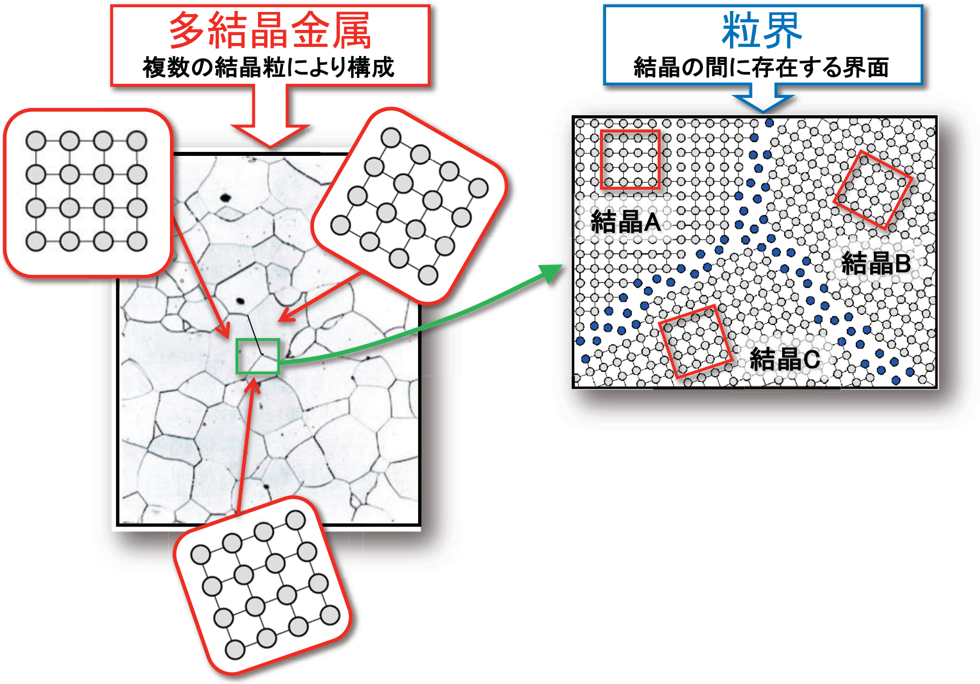
機械的性質　応力不均一性　臨界応力

応力不均一性:
- 弾性異方性
- 結晶粒径
- 格子欠陥群の組織
- ・・

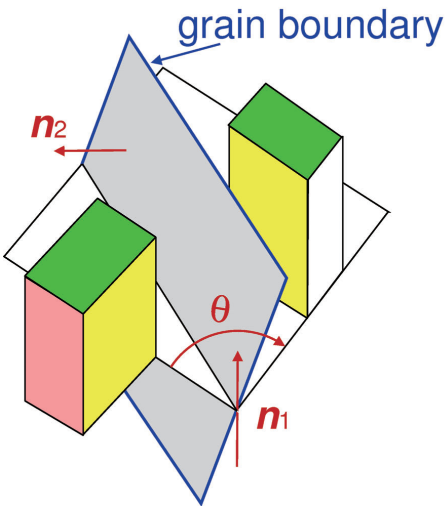
臨界応力:
- 原子間結合力（粒内，粒界）
- 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
- 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
- ・・

**組織・サイズ依存性**

# 粒界（grain boundary）




# 粒界の自由度




**粒界の自由度**

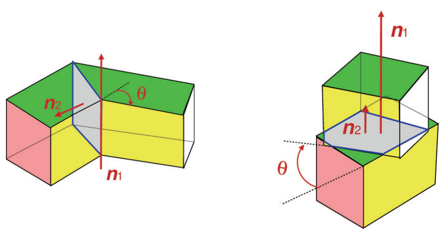
**巨視的**

- $n_1$ : 回転軸 → 2自由度
- $\theta$ : 回転角度 → 1自由度
- $n_2$ : 粒界面 → 2自由度

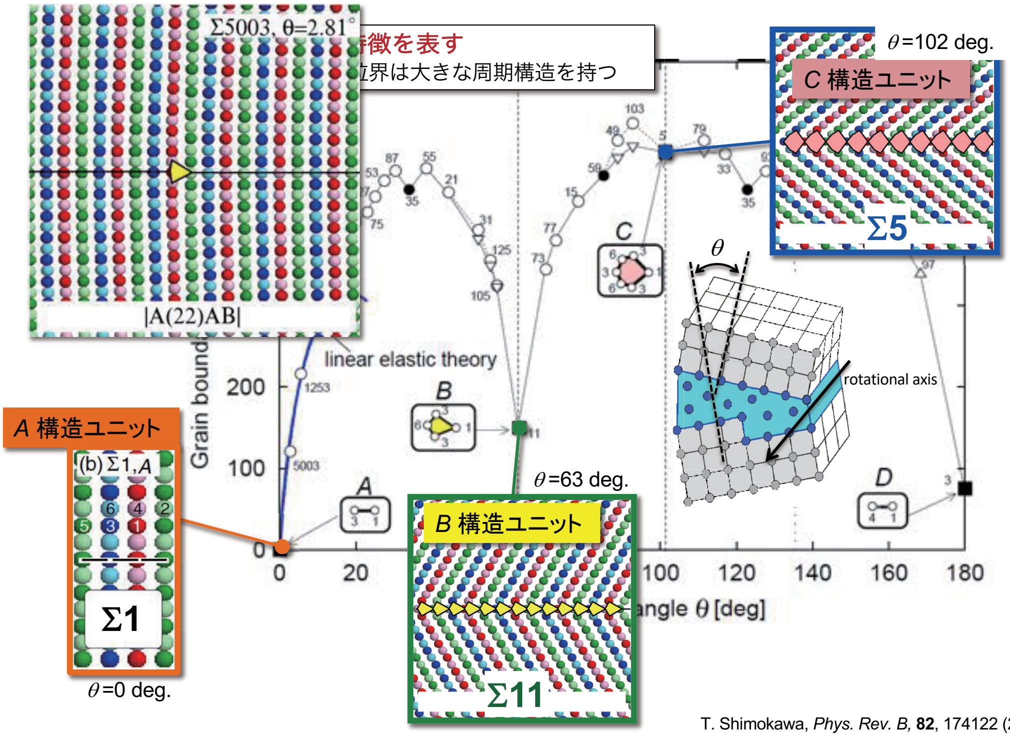
**微視的**

- 格子定数程度の並進量 → 3自由度

$n_1 \cdot n_2 = 0$ → **傾角粒界**　　$n_1 \cdot n_2 = 1$ → **ねじれ粒界**

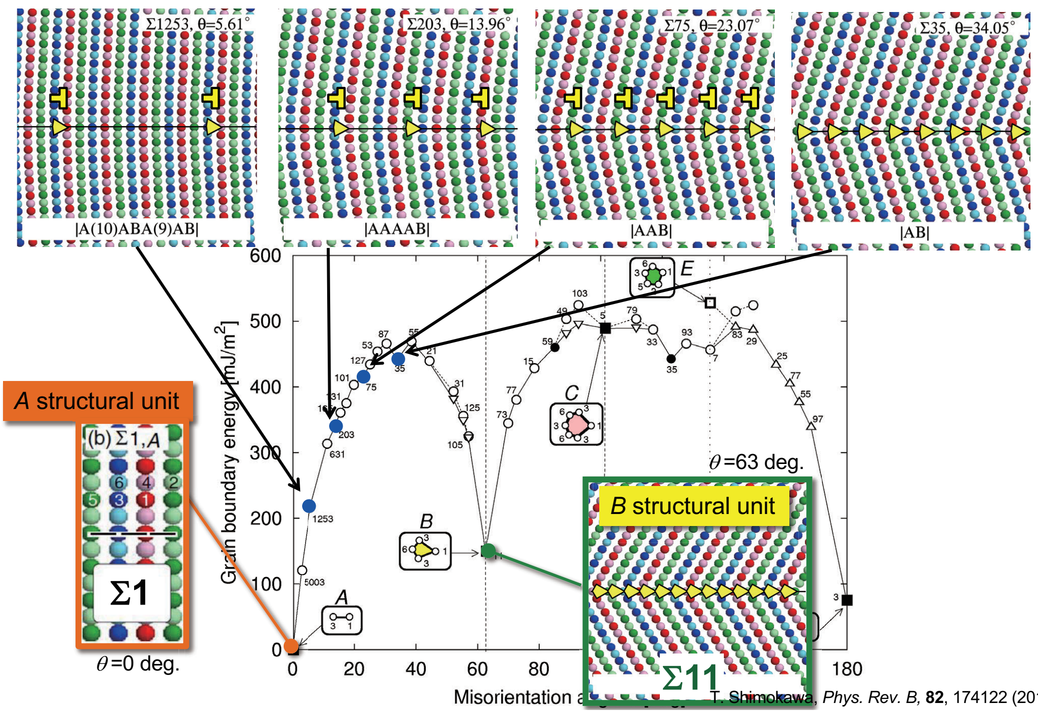


## <112>対称傾角粒界構造とエネルギー（Al）



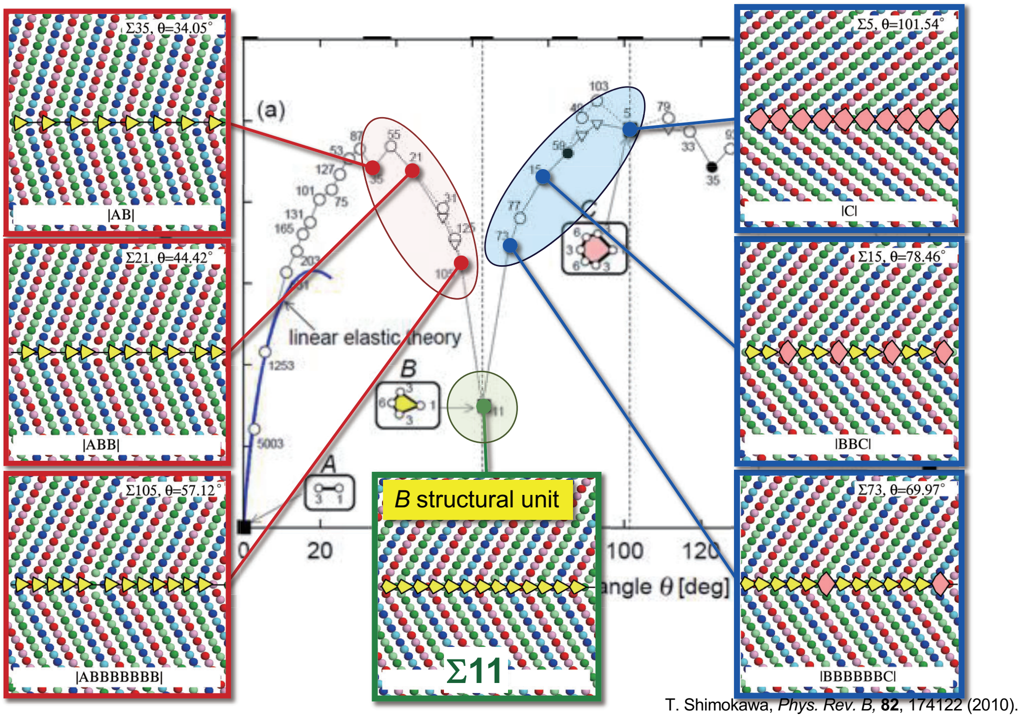

T. Shimokawa, *Phys. Rev. B*, **82**, 174122 (2010).

## 小角粒界



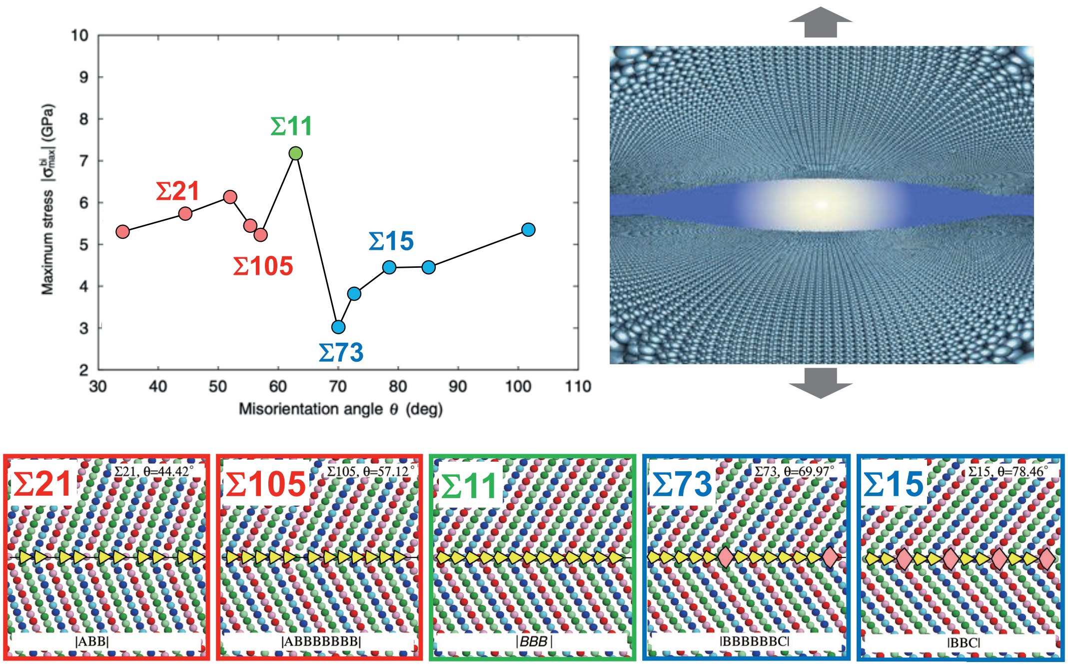

T. Shimokawa, *Phys. Rev. B*, **82**, 174122 (2010).

## 大角粒界：Σ11（安定な粒界）近傍




T. Shimokawa, *Phys. Rev. B*, **82**, 174122 (2010).

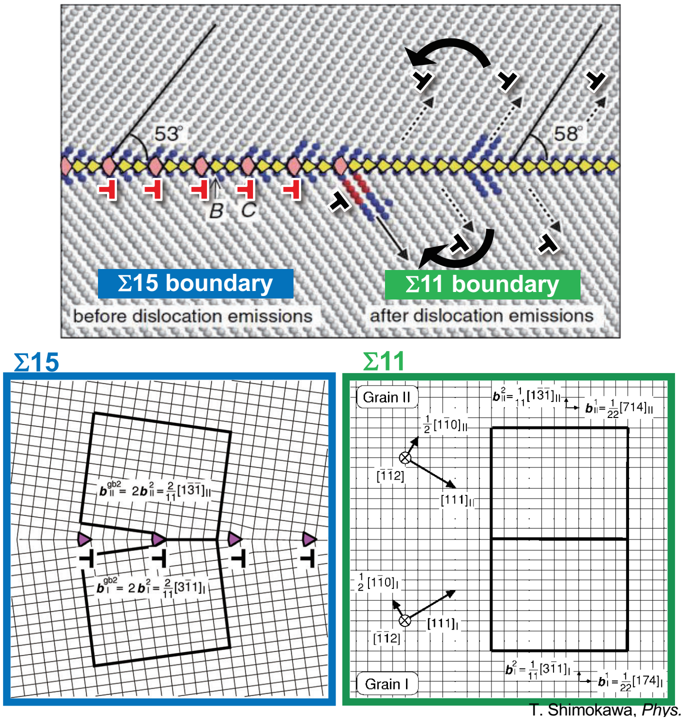
## 粒界から転位を放出する応力（引張変形）




最も放出しにくい　　　転位を放出しやすい

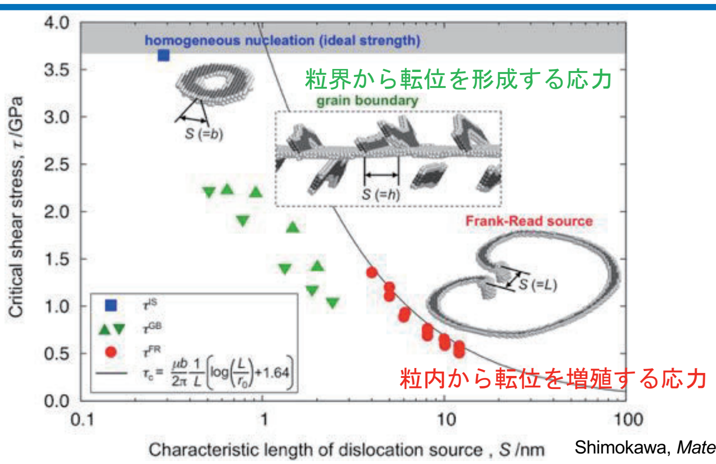
T. Shimokawa, *Phys. Rev. B*, **82**, 174122 (2010).

# 粒界転位を用いた転位の放出現象




T. Shimokawa, *Phys. Rev. B*, **82**, 174122 (2010).

# 転位を形成するために必要な応力のサイズ依存性




Shimokawa, *Mater. Trans.*, **55**(2014).

$$\underbrace{\sigma_{\mathrm{s}}}_{\text{機械的性質}} = f(\underbrace{\alpha}_{\text{応力不均一性}},\ \underbrace{\sigma_{\mathrm{c}}}_{\text{臨界応力}},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　**臨界応力**

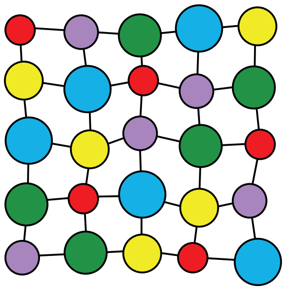
応力不均一性：
- 弾性異方性
- 結晶粒径
- 格子欠陥群の組織
- ・・

臨界応力：
- 原子間結合力（粒内，粒界）
- 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
- 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
- ・・

**組織・サイズ依存性**

## 本講演のアウトライン

原子シミュレーションを用いた格子欠陥の発展と機械的性質の関係を紹介する.



- 分子動力学法について
- 格子欠陥の基礎と応用
  ハイエントロピー合金
- 格子欠陥の発展と機械的性質の関係

$$\sigma_{\mathrm{s}} = f(\alpha,\ \sigma_{\mathrm{c}},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

弾性異方性
結晶粒径
格子欠陥群の組織
・・

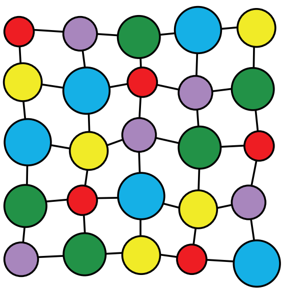
原子間結合力（粒内，粒界）
転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
・・

**組織・サイズ依存性**

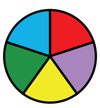
## ハイエントロピー合金：HEA

### ハイエントロピー合金：HEA

**固溶体合金**
等量ずつの多成分元素から構成される

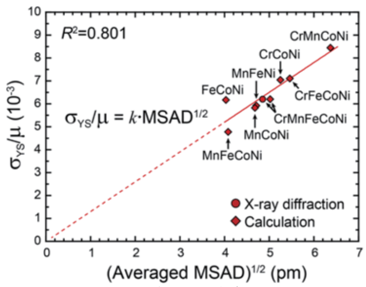


様々な原子サイズ
格子ひずみ



全体の組成比：**等量**

**平均原子変位と降伏応力に正の相関**
格子ひずみが転位の運動に影響



平均原子変位

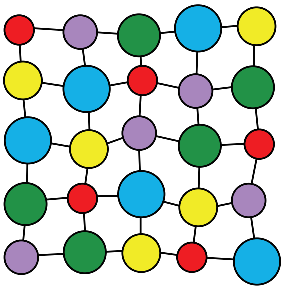
N. L. Okamoto, et al., AIP ADVANCES **6**, 125008 (2016)

「格子のゆがみ」が転位の運動の障壁

## ハイエントロピー合金中の粒界

### ハイエントロピー合金：HEA

**固溶体合金**
等量ずつの多成分元素から構成される

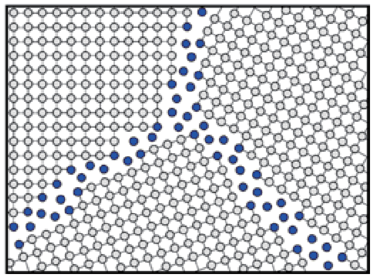


**様々な原子サイズ**

**格子ひずみ**

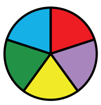
### 粒界

**転位のソース・シンク，転位運動の抵抗**
大小様々な**自由体積**を持つ



✓ 大きな隙間に大きい原子？
✓ 小さな隙間に小さい原子？

**粒界偏析**



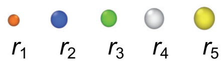
全体の組成比：**等量**

粒界の組成比：**偏析**

**粒界偏析が粒界から転位を放出する現象に及ぼす影響の検討**
**→ 2次元原子シミュレーション**

## ハイエントロピー合金のモデリング：2次元

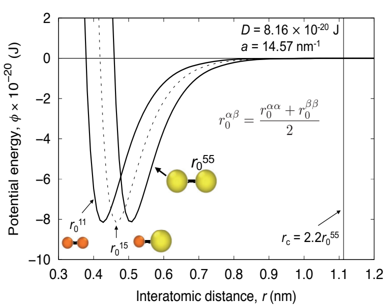
原子サイズの異なる5種類の元素




原子半径差パラメーター: $\delta$

$$\delta = 100\sqrt{\sum_{i=1}^{n} c_i\left(1-\frac{r_i}{\sum_{j=1}^{n} c_j r_j}\right)^2}$$

$n$: number of elements
$r_i$: atomic size
$c_i$ :mole fraction




原子間相互作用：**Morse potential** $\alpha,\ \beta = 1,2,3,4,5$

$$\phi^{\alpha\beta}(r) = D^{\alpha\beta}\{e^{-2a^{\alpha\beta}(r-r_0^{\alpha\beta})} - 2e^{-a^{\alpha\beta}(r-r_0^{\alpha\beta})}\}$$

深さ → 凝集エネルギー
曲率 → 弾性定数
安定位置 → 格子定数

固定パラメーター　　調整パラメーター

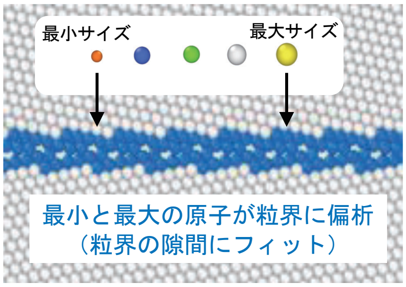
**$\delta$: 0.2～4 までの10種類の5成分モデル**

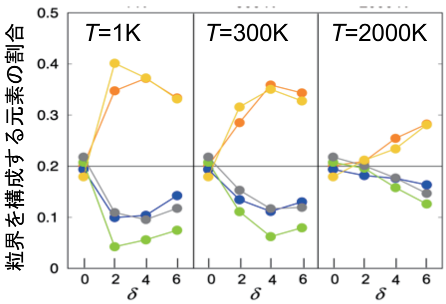
ハイブリッド分子動力学・モンテカルロ法で粒界偏析

粒界から転位を放出するシミュレーション

## ハイエントロピー合金の粒界偏析

18種類の方位差×5種類のδ × 5種類の解析温度 = **450 種類の粒界**



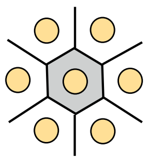

温度が高くなるほどランダム分布になる

**粒界偏析の駆動力：粒界の隙間の埋め合わせ**

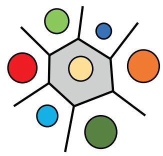
**原子体積ひずみ**
**Atomic volume strain**

$$\varepsilon^{\mathrm{V}} = \frac{V_i^* - V_i}{V_i}$$

単元系における
原子体積 $V_i$



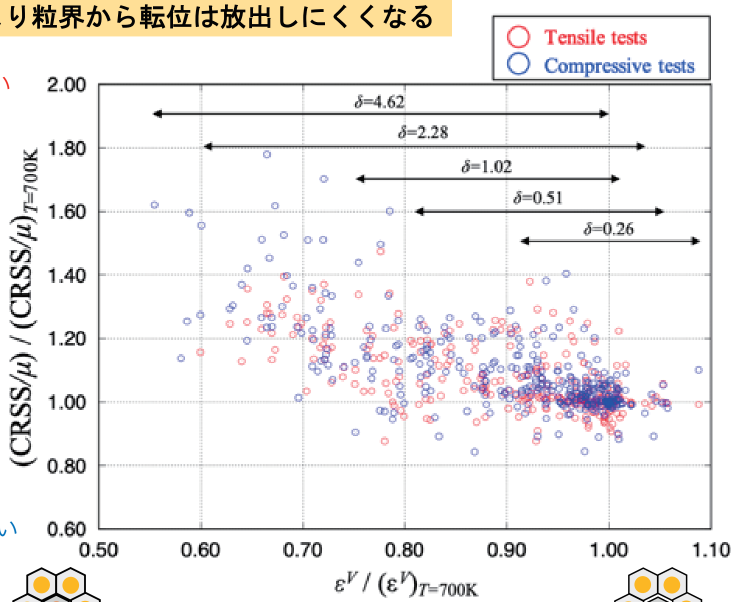
多元系中における
原子体積 $V_i^*$



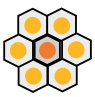
## ハイエントロピー合金の粒界から転位を放出する応力

**粒界偏析により粒界から転位は放出しにくくなる**

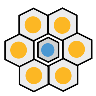
転位を放出しにくい




転位を放出しやすい



粒界偏析により粒界が締まっている



ランダム分布により粒界に隙間あり

## 本講演のアウトライン

原子シミュレーションを用いた格子欠陥の発展と機械的性質の関係を紹介する．

- 分子動力学法について
- 格子欠陥の基礎と応用
- **格子欠陥の発展と機械的性質の関係**

$$\sigma_s = f(\alpha,\ \sigma_c,\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

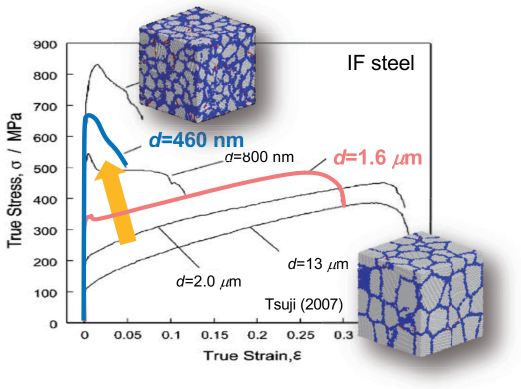
応力不均一性：
- 弾性異方性
- 結晶粒径
- 格子欠陥群の組織
- ・・

臨界応力：
- 原子間結合力（粒内，粒界）
- 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
- 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
- ・・

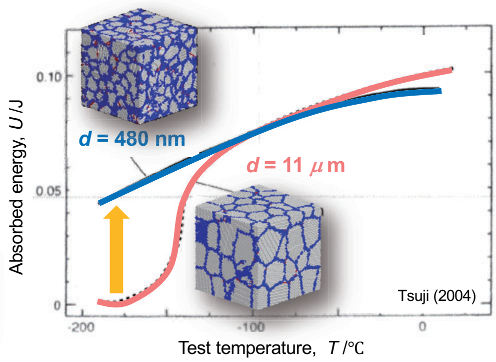
**組織・サイズ依存性**

## 組織と機械的性質

### 結晶粒微細化に伴う高強度化




### 結晶粒微細化に伴う低温での破壊靭性向上




$$\sigma_s = f(\alpha,\ \sigma_c,\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

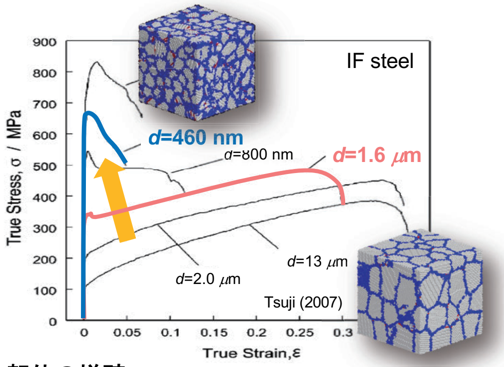
応力不均一性：
- 弾性異方性
- 結晶粒径
- 格子欠陥群の組織
- ・・

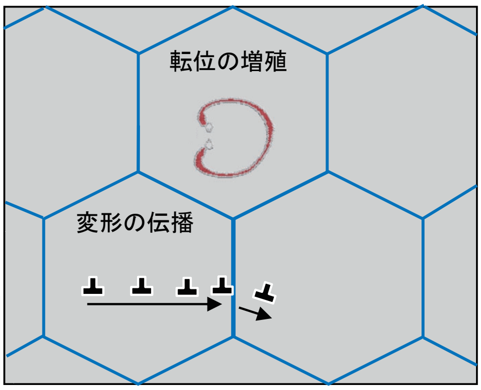
臨界応力：
- 原子間結合力（粒内，粒界）
- 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
- 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
- ・・

**組織・サイズ依存性**

## 強度の粒径依存性

結晶粒微細化に伴う高強度化

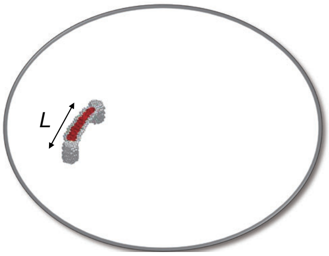



**転位の増殖**

粒径が小さいと増殖応力が大きくなる

$\tau \propto L^{-1}$

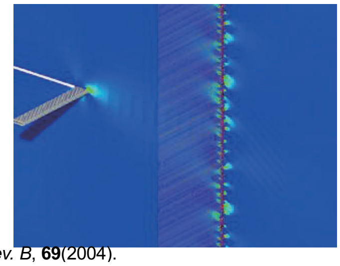



**変形の伝播**

粒径が小さいと粒界に蓄積できる転位数が減少

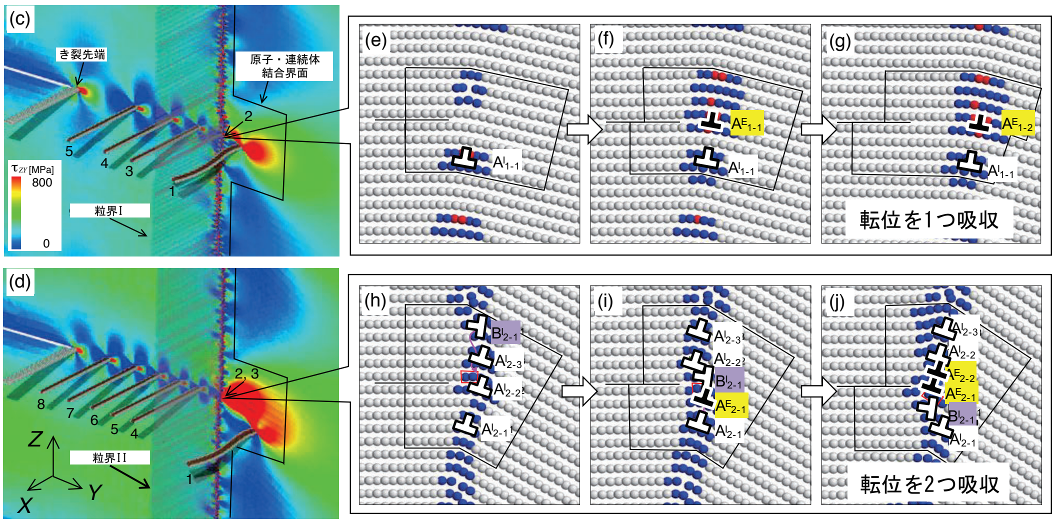
応力集中の低下

高強度化



Shimokawa, *Phys. Rev. B*, **69**(2004).

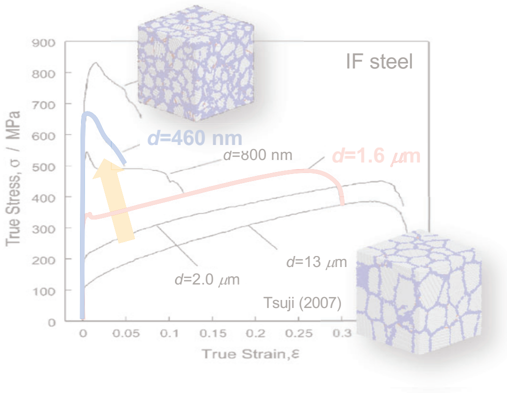
## 転位の蓄積と粒界の関係



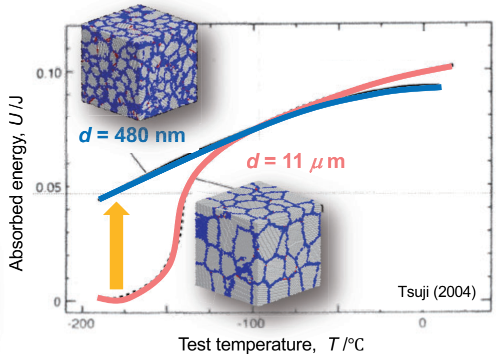

Shimokawa, *Phys. Rev. B*, **69**(2004).

## 組織と機械的性質

結晶粒微細化に伴う高強度化




結晶粒微細化に伴う低温での破壊靭性向上




$$\sigma_\mathrm{s} = f(\alpha,\ \sigma_\mathrm{c},\ T,\ \dot{\varepsilon},\ \cdots)$$

機械的性質　応力不均一性　臨界応力

応力不均一性：
- 弾性異方性
- 結晶粒径
- 格子欠陥群の組織
- ・・

臨界応力：
- 原子間結合力（粒内，粒界）
- 転位の運動（パイエルス応力，第2相との相互作用）
- 転位の増殖（粒内転位源，粒界転位源）
- ・・

**組織・サイズ依存性**

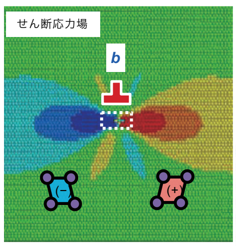
## 転位とき裂の相互作用

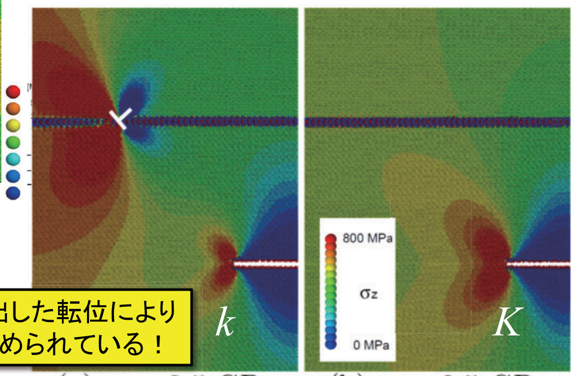
### き裂から放出した転位による遮へい効果

局所応力拡大係数

$$k = K + \sum_{i}^{n_\mathrm{dislo}} k_{\mathrm{dislo},i}$$

外部負荷による応力拡大係数　　転位による応力拡大係数



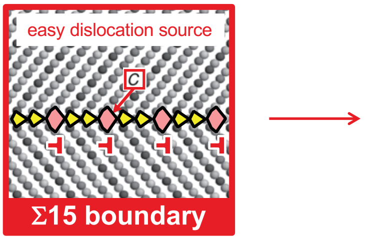



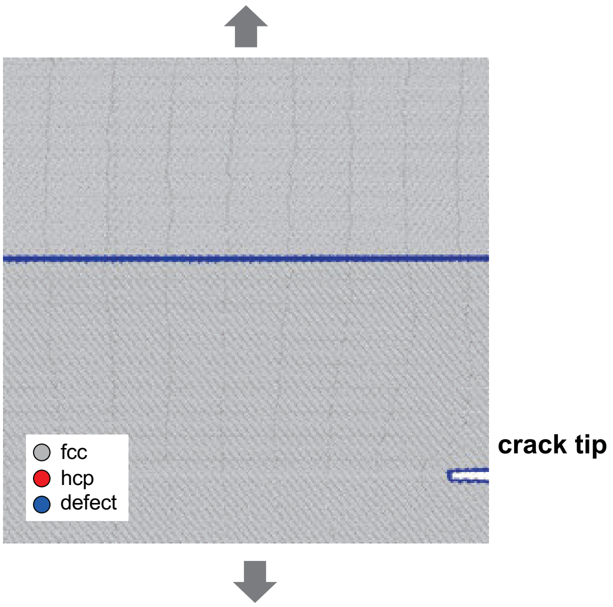

(a)$\sigma_z = 0.5$ GPa　(b)$\sigma_z = 0.5$ GPa

$$K_\mathrm{I} = \sigma\sqrt{\pi a}$$

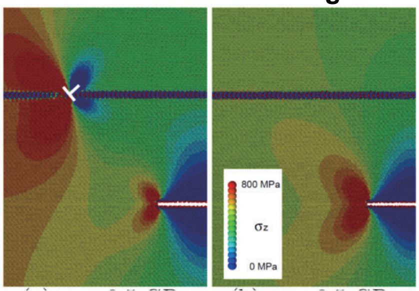
## 転位と粒界とき裂の相互作用

- Al (Mishin’s EAM potential)
- strain rate ($\varepsilon_z$): 2 x $10^7$ 1/s
- $T$=100 K



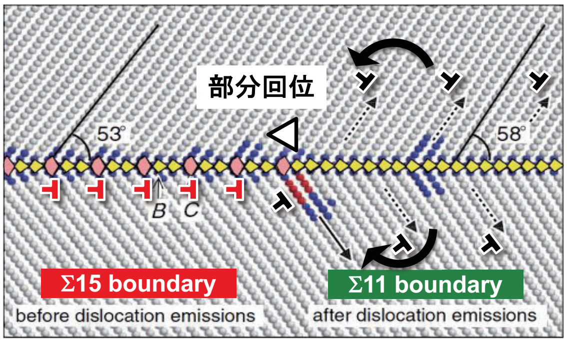

**Dislocation shielding**

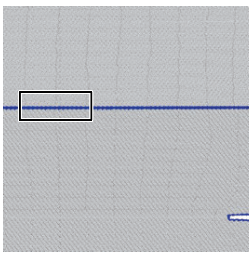



T. Shimokawa, H. Higashida et al., *Phys. Rev. B*, 83 (2011), 214113.

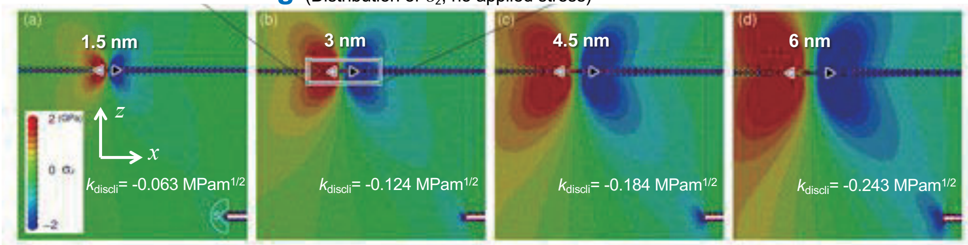
## 粒界から転位の放出に伴う回位対の形成：回位遮蔽

### GB transformation



### Disclination shielding (Distribution of $\sigma_z$, no applied stress)

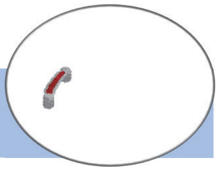



T. Shimokawa, H. Higashida et al., *Phys. Rev. B*, 83 (2011), 214113.

## おわりに

格子欠陥の発展と力学特性の関係の解明に向けた分子動力学シミュレーションを用いた近年の取り組みを紹介した.

**原子シミュレーションの役割**（個人的な考え）



メカニズムのおよそわかっている
**従来理論モデルの定量化**

メカニズムのわかっていない
**格子欠陥の生成，発展，相互作用，消滅の計算機実験**

**決定論的**（初期配置と初速度の決定でそのモデルの変形と強化機構は決まる）

**「原子レベルの材料設計」**
格子欠陥群の個性→サブミクロン領域の力学特性

# ゲルの破壊と浸透圧の力学
## (Fracture of gels and mechanics of osmosis)

**田中 良巳, Yoshimi Tanaka**
横浜国立大学
Yokohama National University

First, I point-out some interesting aspects of the so-called osmosis, emphasizing its roles as driving forces of flow and deformation in multi-component soft matter systems. Then, we describe non-monotonous volume change of gels observed when gel specimens fully swollen with water are moved into a bath of more viscous solvent [1]. Our experiment shows that the unique swelling behavior obeys diffusive dynamics but cannot be explained by the conventional cooperative diffusion mechanism only. We derive a set of time-evolution equations that explains how the mutual diffusion of the two solvents and cooperative diffusion of the gel network couple and the physical origin of the non-monotonous volume change.

### References

[1] Y. Tanaka, M. Seii, J. Sui and M. Doi, “Gel dynamics in the mixture of low and high viscosity solvents: Re-entrant volume change induced by dynamical asymmetry”, The Journal of Chemical Physics, 152, 184901 (2020).

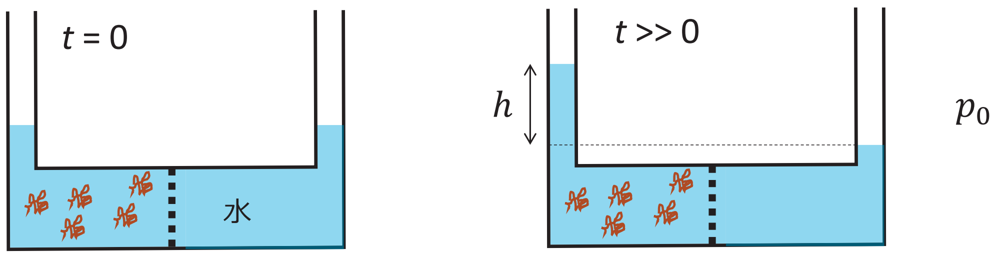
# ゲル$_{\text{の破壊}}$と浸透圧の力学

横浜国大 環境情報研究院

田中良巳

Collaborating with
Prof. M. Doi, Ms. Seii
土井先生，清井さん（M2）

## 浸透圧の不思議




平衡条件 $\mu_w(p_0 + \Pi\,, c) = \mu_w(p_0, 0),\qquad \Pi = \rho g h$

$$l.h.s. = \mu_w(p_0, 0) + v_w \Pi + k_B T \ln\left(1 - \frac{N_p}{N_w}\right)$$

高分子

水

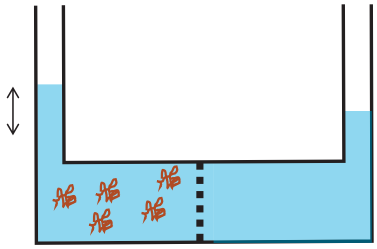
粒子数比

$$\Pi = k_B T c \quad (\rho g h = \Pi = k_B T c)$$

力釣合い　　熱力学関係式

# 途中のダイナミクスは

$h(t)$



現象論的には

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\tau}(h(\infty) - h(t))$$

Depending on
システムサイズ，熱力学的駆動力（どんな形で？）

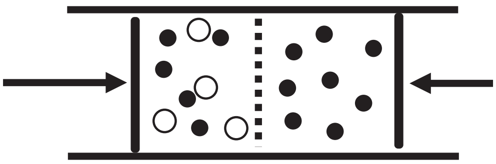
「力釣合い」との関係は？

# 浸透圧の不思議

混合理想気体とアナロジー

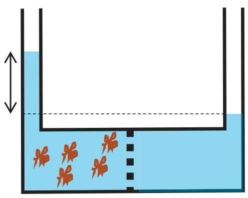
○ ：気体A　●：気体B

$p$



$p_0$

$p_0 + \Pi$



$p_0$

$c_A, c_B = c_{B0}$

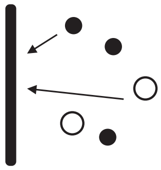
$$p = k_B T\,(c_A + c_B),\quad p_0 = k_B T\,c_{B0}$$

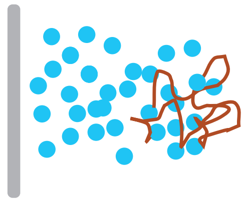
$$\Delta p = p - p_0 = k_B T c_A \quad \overset{?}{\longleftrightarrow} \quad \Pi = k_B T c$$

# 浸透圧の不思議

''統計力学的''説明

~~混合理想気体とアナロジー~~





$$\Delta p = p - p_0 = k_B T c_A$$

$$\Pi = k_B T c$$

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{c_A}{c_B} = \boxed{\frac{N_A}{N_B}}$$

$N_i(i = A, B, w, p)$
：分子 $i$ の個数

$$\frac{\Pi}{p} \gg \frac{N_p}{N_w}$$

高分子

水

圧力は各分子が
平等に担ってる

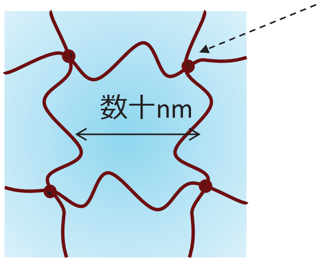
!

圧力は殆ど
水が担ってる

# 浸透圧の不思議

3 Dネットワーク系における浸透圧

ゲル

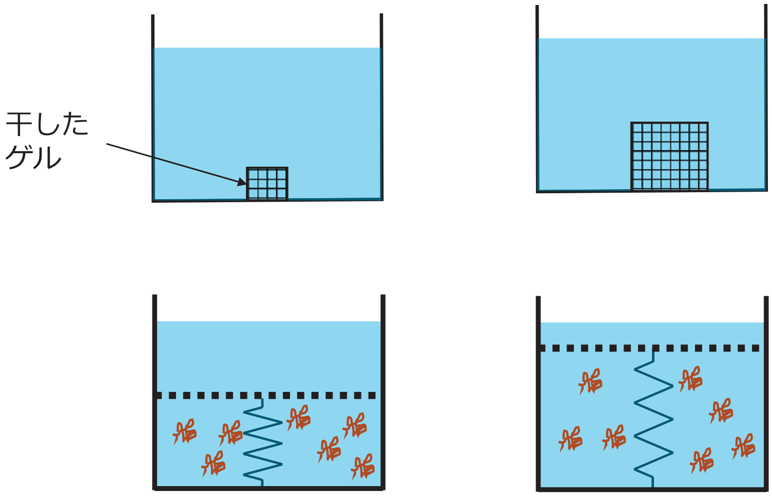



高分子ゲルの例

(Taken from wiki pages)

# 浸透圧の不思議

3Dネットワーク系における浸透圧




Flory：「ゲルにおける高分子網目は膜，溶質，圧力発生装置という何役をもこなしている」（高分子化学下（岡・金丸訳））

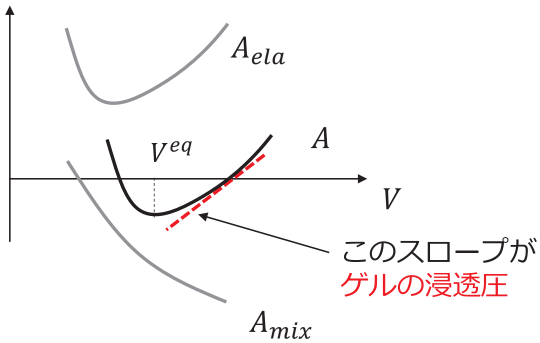
# 弾性拘束による浸透平衡

弾性拘束下での浸透平衡条件は，ゲルでも溶液（with 半透膜）でも共通.

平衡体積$V^{eq}$を決める条件

$$A(V) = A_{ela}(V) + A_{mix}(V)$$

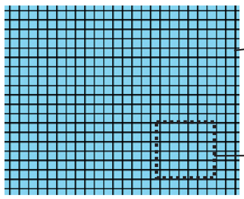
$$\frac{\partial A}{\partial V} = 0$$



## 浸透圧ダイナミクス

しかし，動力学は全く異なる

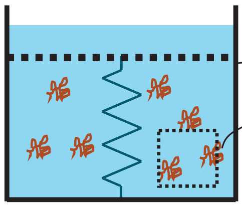
ゲル



表面は境界
→ 境界条件は？

全ての体積要素は
弾性成分を含む

バネ＋膜
＋溶液



境界（半透膜）は
大きな摩擦を伴う

体積要素は溶液

## ゲルの浸透圧とは

{非平衡状態における} 浸透圧の役割は？

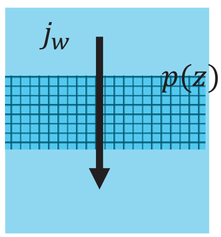
entropic driving force

{主に流体成分が担う} 静水圧の役割は？

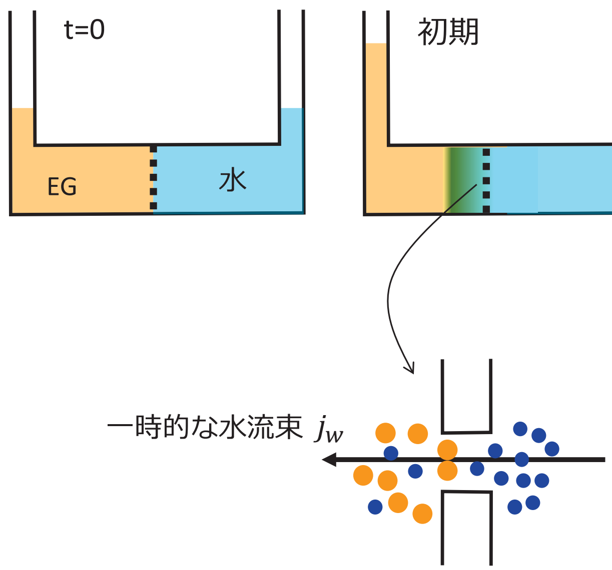
Darcy則

$$j_w \propto \partial_z p$$

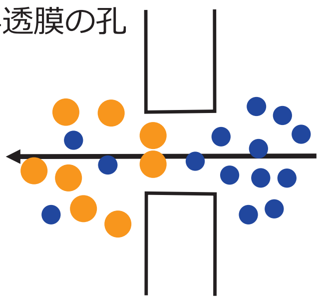
水流束　圧力勾配



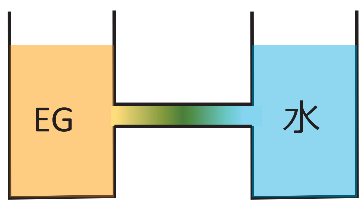
# 浸透圧の不思議
## 非熱力学的浸透圧




# 浸透圧の不思議
## 半透膜って何？




cf. コップ連結（マクロな孔）では...




半透膜であるための孔径は？　多分，分子間力の到達距離

しかし，その役割・機構は？

## 多様な非平衡浸透圧研究の意義

非平衡状態での浸透圧（的なもの）の力学は
細胞運動や成長の力学を考える上で本質的

## おまけ
## ここからが本論

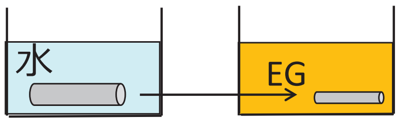
**Gel dynamics in the mixture of low and high viscosity solvents: Re-entrant volume change induced by dynamical asymmetry**

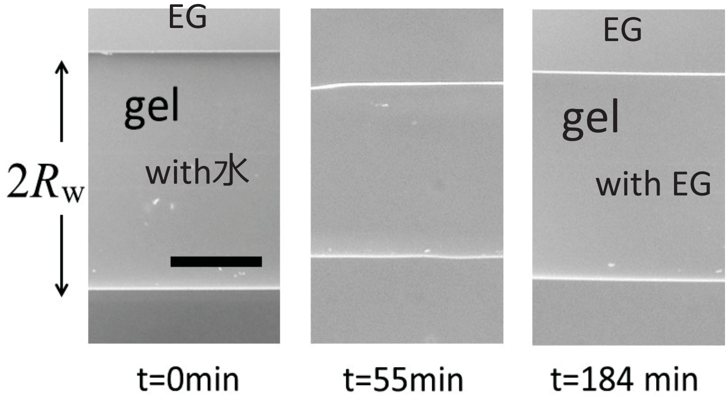
Cite as: J. Chem. Phys. **152**, 184901 (2020); https://doi.org/10.1063/5.0002266
Submitted: 26 January 2020 . Accepted: 19 April 2020 . Published Online: 08 May 2020

Yoshimi Tanaka, Miyu Seii, Jize Sui, and Masao Doi

# 実験結果

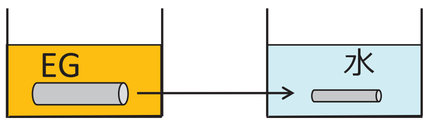
非単調な体積変化

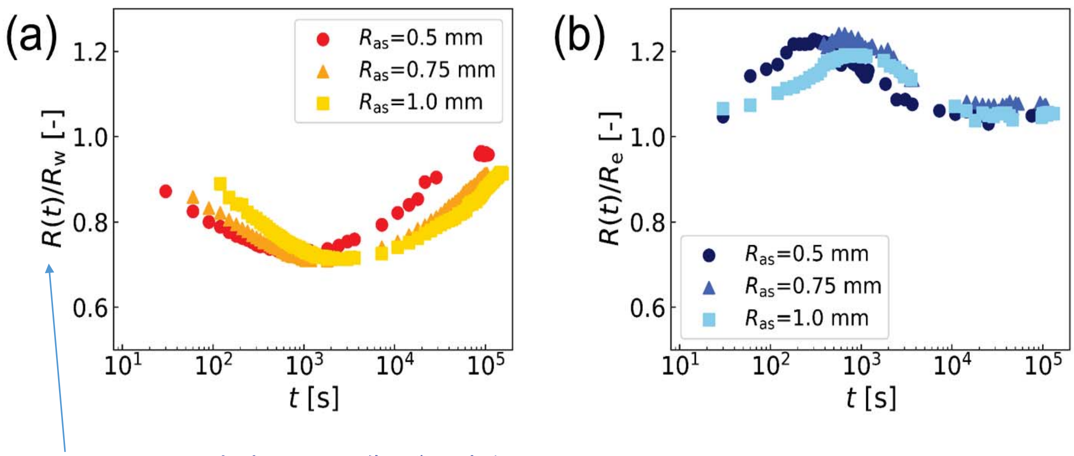



# 実験結果

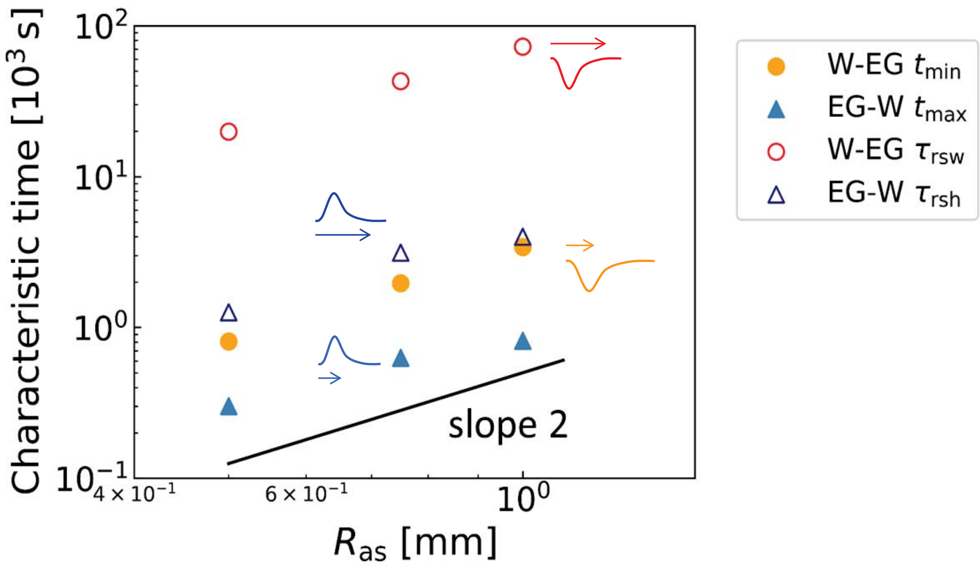
ゲル直径の時間変化



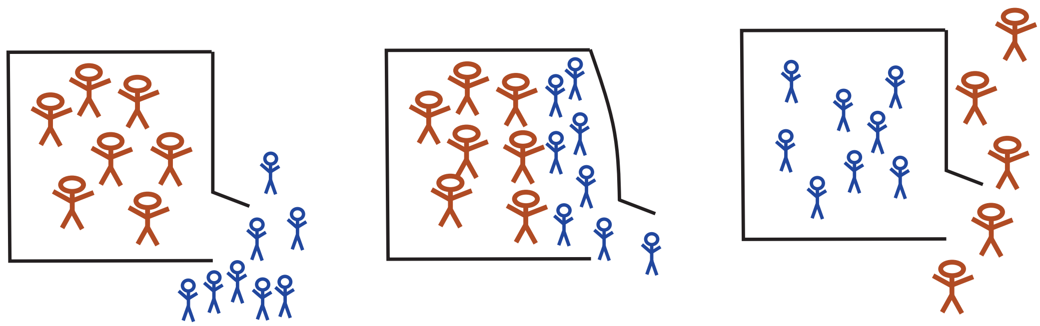

サイズ比　$R_w$：水中での平衡ゲル半径

## 実験結果

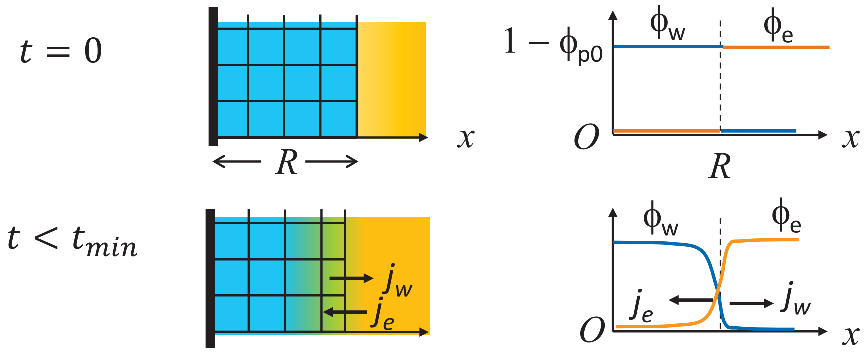



## 玩具モデル

1限目終了！



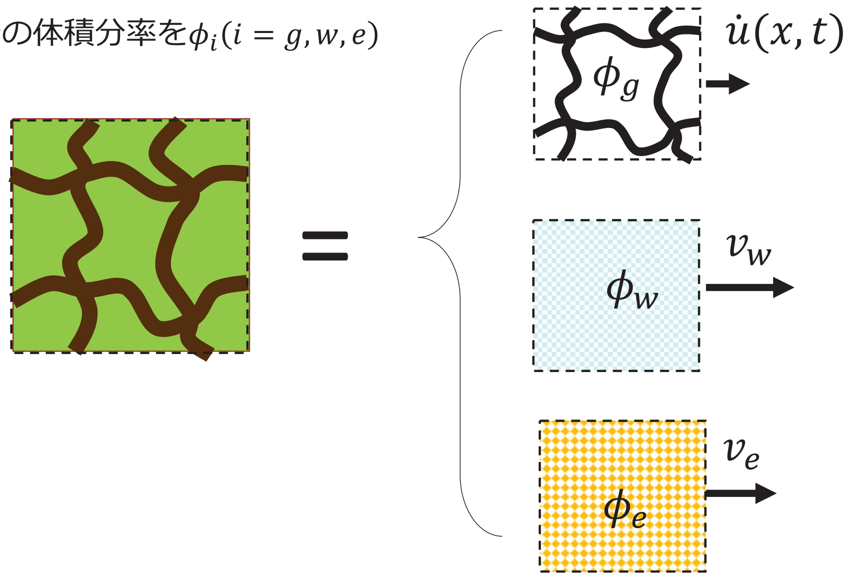
# 図的解釈




EGの流束 $j_e$ は，水より大きな摩擦力を網目に及ぼす

# 連続体モデルで書くと

各成分の体積分率を$\phi_i (i = g, w, e)$



# 自由エネルギー

系の自由エネルギー

1Dでは$\partial_x$

$$A = \int dx\ [f_{mix}(\phi_w, \phi_e) + \frac{1}{2}k(\nabla u)^2]$$

Mixing free ene.

elastic constant

Ideal solution-type:

$$f_{mix}(\phi_w, \phi_e) = \frac{k_B T}{V_s}(\phi_w ln\phi_w + \phi_e ln\phi_e)$$

*Common* volume of solvent molecules

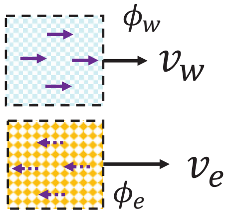
# 散逸関数

$$\Phi = \frac{1}{2}\int dx\ [\, \xi_{we}(v_w - v_e)^2 + \xi_{wg}\,(v_w - \dot{u})^2 + \xi_{eg}(v_e - \dot{u})^2\,]$$

$\xi_{we}\ (v_e - v_w)$

Friction force

*per volume*




$$\xi_{we}\ (\phi_w, \phi_e) \rightarrow \zeta_{we}\phi_w\phi_e$$

$$\Phi = \frac{1}{2}\int dx\ [\, \zeta_{we}\ \phi_w\ \phi_e(v_w - v_e)^2 + \zeta_{wg}\ \phi_w\ \phi_g\,(v_w - \dot{u})^2$$
$$+\zeta_{eg}\ \phi_e\ \phi_g(v_e - \dot{u})^2\,]$$

## オンサーガーの変分原理

レイリーアン

Lagrange係数 :その意味は静水圧

$$R = \dot{A} + \Phi + \int dx \left(-p(x,t)\right) \underbrace{\nabla(\phi_w v_w + \phi_e v_e + \phi_g \dot{u})}_{\text{非圧縮拘束}}$$

$$\frac{\delta R}{\delta v_i} = 0 \qquad \text{ただし，} \; i = w, e, g \; (v_g = \dot{u})$$

## 発展方程式


$$-\xi_{wg}\,(\dot{u} - v_w) - \xi_{eg}(\dot{u} - v_e) + k\nabla^2 u - \phi_g \nabla p = 0$$

$$-\xi_{wg}\,(v_w - \dot{u}) - \xi_{we}(v_w - v_e) - \phi_w \nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_w}\right) - \phi_w \nabla p = 0$$

$$-\xi_{eg}\,(v_e - \dot{u}) - \xi_{we}(v_e - v_w) - \phi_e \nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_e}\right) - \phi_e \nabla p = 0$$

化学ポテンシャル
の空間勾配
→浸透駆動力

$$\dot{\phi}_w + \nabla(\phi_w v_w) = 0$$

$$\dot{\phi}_e + \nabla(\phi_e v_e) = 0$$

$$\dot{\phi}_g + \nabla(\phi_g \dot{u}) = 0$$

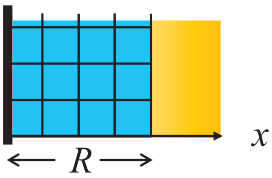
$$\phi_g + \phi_w + \phi_e = 1$$

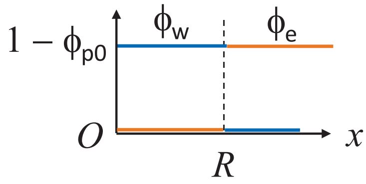
Above 7 eqs. determine 7 variables of $\{\phi_p, \phi_w, \phi_e, u, v_w, v_e, p\}$.

# 近似方程式の導出

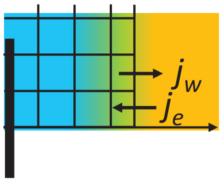
先ほどの描像

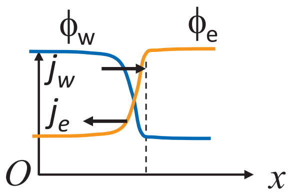
$t = 0$




$t < t_{min}$




言語化すると：

(i) ゲルは希薄で硬く，水-EGの混合過程を乱さない

(ii) 各溶媒の流速 $j_i$ ($i$=w, e)は，個別に網目に摩擦力を及ぼす

# 溶媒の相互拡散

(i) より：

$$j_w(x,t) + j_e(x,t) + \cancel{j_g(x,t)} = 0$$

$$j_w(x,t) + j_e(x,t) = 0,\ \phi_g = \phi_{g0} \text{ :const.}$$

$$\left(\frac{k_B T}{V_s}\right)\frac{\nabla\phi_i}{\phi_i}$$

$$\left\{\begin{array}{l} \boxed{\begin{array}{l} \zeta_{wp}\phi_{g0}(v_w - \cancel{\dot{u}}) + \zeta_{we}\phi_e(v_w - v_e) = -\nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_w}\right) - \nabla p \\ \zeta_{eg}\phi_{g0}(v_e - \dot{u}) + \zeta_{we}\phi_w(v_e - v_w) = -\nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_e}\right) - \nabla p \end{array}} \\ \zeta_{wg}\phi_w(\dot{u} - v_w) + \zeta_{eg}\phi_e(\dot{u} - v_e) = \frac{k}{\phi_{g0}}\nabla^2 u - \nabla p \end{array}\right.$$

$$\left\{\begin{array}{l} \nabla p = \frac{\zeta_{eg} - \zeta_{wg}}{1 - \phi_{g0}}\phi_{g0} j_w \\ j_w = \phi_w v_w \approx -\left(\frac{k_B T}{V_s}\right)\frac{1}{\zeta_{we}}\nabla\phi_w \end{array}\right.$$

← Darcy law

$$\dot{\phi}_w + \nabla j_w = 0 \longrightarrow \boxed{\dot{\phi}_w = D_{we}\nabla^2\phi_w,\quad D_{we} = \left(\frac{k_B T}{V_s}\right)\frac{1}{\zeta_{we}}}$$

## 網目の変形の拡散

$$\begin{cases} \zeta_{wg}\phi_{g0}(v_w - \dot{u}) + \zeta_{we}\phi_e(v_w - v_e) = -\nabla\left(\dfrac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_w}\right) - \nabla p \\ \zeta_{eg}\phi_{g0}(v_e - \dot{u}) + \zeta_{we}\phi_w(v_e - v_w) = -\nabla\left(\dfrac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_e}\right) - \nabla p \\ \zeta_{wg}\phi_w(\dot{u} - v_w) + \zeta_{eg}\phi_e(\dot{u} - v_e) = \dfrac{k}{\phi_{g0}}\nabla^2 u - \nabla p \end{cases}$$

$$\begin{cases} j_w = \phi_w v_w \approx \left(\dfrac{k_B T}{V_s}\right)\dfrac{1}{\zeta_{we}}\nabla\phi_w \\ \nabla p = \dfrac{\zeta_{ep}-\zeta_{wp}}{1-\phi_{p0}}\phi_{p0} j_w \end{cases}$$

$$\boxed{\frac{\partial u}{\partial t} = D_g(\phi_w)\nabla^2 u + \beta D_{we}\nabla\phi_w}$$

$$D_g(\phi_w) = \frac{1}{(\zeta_{wg}\phi_w + \zeta_{eg}\phi_e)}\frac{k}{\phi_{g0}} \qquad \beta \approx \frac{\zeta_{eg} - \zeta_{wg}}{(\zeta_{wg}\phi_w + \zeta_{eg}\phi_e)} \qquad D_{we} = \left(\frac{k_B T}{V_s}\right)\frac{1}{\zeta_{we}}$$

## まとめると

$$\frac{\partial \phi_w}{\partial t} = D_{we}\nabla^2\phi_w$$

Solvent mixing

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \underline{D_g(\phi_w)\nabla^2 u} + \underline{\beta D_{we}\nabla\phi_w}$$

Network motion

$$D_g(\phi_w) = \frac{1}{(\zeta_{wg}\phi_w + \zeta_{eg}\phi_e)}\frac{k}{\phi_{g0}}$$

Cooperative diffusion

：共同拡散係数

$$D_{we} = \left(\frac{k_B T}{V_s}\right)\frac{1}{\zeta_{we}}$$

Mutual diffusion

：相互拡散係数

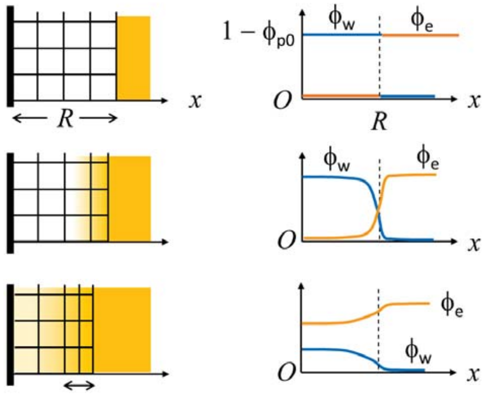
$$\beta \approx \frac{\zeta_{eg} - \zeta_{wg}}{(\zeta_{wg}\phi_w + \zeta_{eg}\phi_e)} > 0$$

# 非単調膨潤の定性的説明

初期段階:

$$\nabla^2 u \approx 0, \nabla \phi_w < 0$$

➔ $\dot{u} < 0$ : gel は縮む




後期段階:

$$\nabla \phi_w \approx 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = D_g(\phi_w)\nabla^2 u$$

$$D_g(\phi_w) = \frac{k}{\zeta_{ep}\phi_{p0}}$$

➔ 網目の弾性応力を駆動力としてゲル体積が回復

# 考察：浸透駆動力

各成分の運動方程式（簡約化前の）にもどる：


$$-\xi_{wg}\,(\dot{u}-v_w) - \xi_{eg}(\dot{u}-v_e) + k\nabla^2 u - \phi_g \nabla p = 0$$

$$-\xi_{wg}\,(v_w-\dot{u}) - \xi_{we}(v_w-v_e) - \phi_w \nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_w}\right) - \phi_w \nabla p = 0$$

$$-\xi_{eg}\,(v_e-\dot{u}) - \xi_{we}(v_e-v_w) - \phi_e \nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_e}\right) - \phi_e \nabla p = 0$$

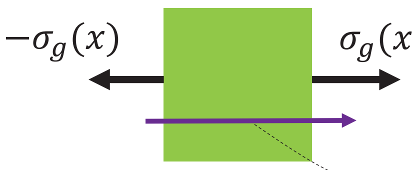
辺々足すと

$$\underbrace{\nabla(k\nabla u - p)}_{\text{ゲルの総応力}\sigma_g} - \underbrace{\left(\phi_w \nabla\left(\underline{\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_w}}\right) + \phi_e \nabla\left(\underline{\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_e}}\right)\right)}_{\text{浸透駆動力：body force}} = 0$$

化学ポテンシャル勾配の➔ 力

# 考察：浸透駆動力

混合自由エネルギーはbody forceを生む
（この効果は純溶媒では殆ど存在しないことに注意）




$$g_{os} = -\left(\phi_w \nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_w}\right) + \phi_e \nabla\left(\frac{\partial f_{mix}}{\partial \phi_e}\right)\right)$$

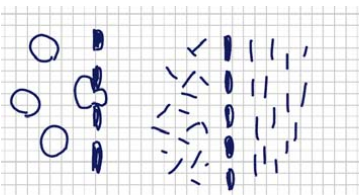
# まとめ・課題

浸透圧概念の深さ，非平衡状態での重要性

浸透効果は一般的には体積力を生む

課題： 数値計算 → ゲル表面の境界条件

別の設定への展開



emulsion　　nematic ordered

Osmologyの構築

# 正多面体における離散ソボレフ不等式の最良定数
**(The best constant of discrete Sobolev inequality on regular polyhedra)**

**山岸弘幸, Hiroyuki Yamagishi**
都立高専
Tokyo Metro. Col. of Ind. Tech.

The best constants of discrete Sobolev inequalities corresponding to regular polyhedra are found. We treat a classical mechanical model of regular polyhedra. Its neighboring two atoms are connected by a linear spring with uniform spring constant. The best constants stand for rigidities of these polyhedra. Thus we can expect the best constant of Sobolev inequalities have connections with physical properties of materials with crystal structure. The discrete Sobolev inequality shows that the maximum of deviation of a polyhedron is estimated from above by a constant multiples of the potential energy. That is, if the best constant is smaller, the model is more rigid. In the background, there is a discrete version of a bending problem. The solution is expressed by using Moore-Penrose generalized inverse matrix (pseudo Green matrix) of discrete Laplacian. Using a pseudo Green matrix, we have the best constant and the vector, which attain the equality.

# 正多面体における
# 離散ソボレフ不等式の最良定数

山岸 弘幸 (都立高専)

離散ソボレフ不等式の最良定数

1次元格子
Funkcial. Ekvac. 2008

2階微分方程式の周期境界値問題
Kumamoto J. Math. 2012

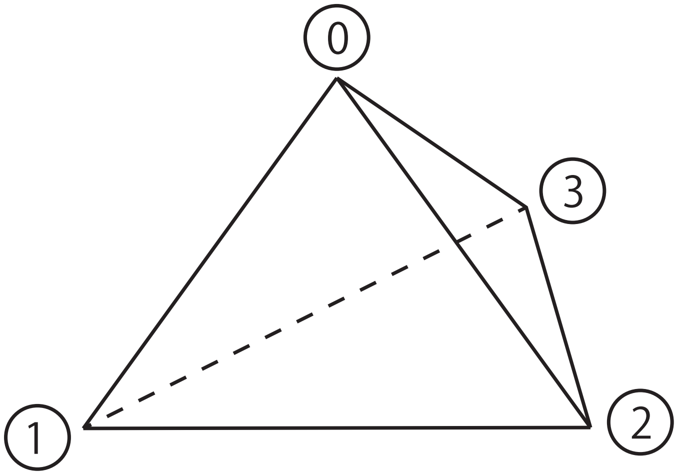
完全グラフ
Kodai Math. J. 2014

正多面体
日本応用数理学会論文誌 2011, 2017, 2020
Tokyo J. Math. 2013

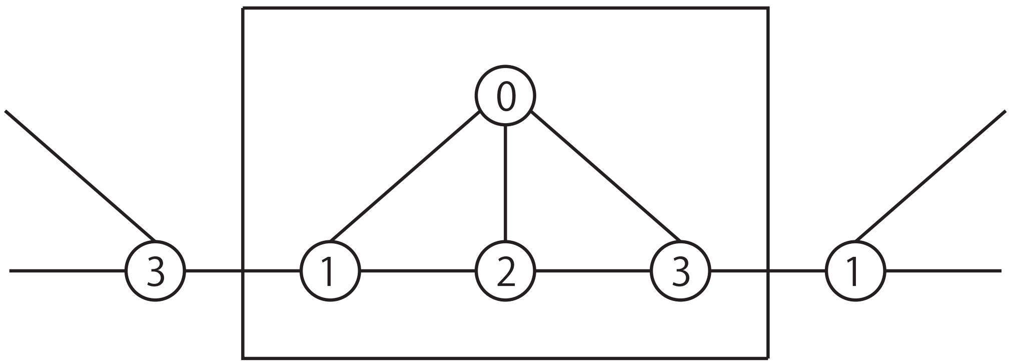
切頂正多面体
日本応用数理学会論文誌 2015, 九大応力研 2015,
J. Phys. Soc. Jpn. 2015

C60の異性体1812個
JSIAM Letters. 2020

正４面体




正４面体　平面グラフ




$$e = \{(i,j) \mid (0,1),(0,2),(0,3),(1,2),(1,3),(2,3)\}$$

正$4$面体状分子の古典力学モデル

頂点$i$ $(0 \le i \le 3)$に同一種の原子

辺$(i, j)$にバネ定数$1$のバネ

頂点$i$に加わる外力$f(i)$

頂点$i$の定常状態からの変位$u(i)$

バネの伸び

$$\boldsymbol{Bu} = \begin{pmatrix} u(0)-u(1) \\ u(0)-u(2) \\ u(0)-u(3) \\ u(1)-u(2) \\ u(1)-u(3) \\ u(2)-u(3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(0) \\ u(1) \\ u(2) \\ u(3) \end{pmatrix}$$

バネのポテンシャルエネルギー

$$\|\boldsymbol{Bu}\|^2 = (\boldsymbol{Bu})^* \boldsymbol{Bu} = \boldsymbol{u}^* \boldsymbol{B}^* \boldsymbol{Bu} = \sum_{(i,j) \in e} |u(i) - u(j)|^2$$

正４面体の離散ラプラシアン

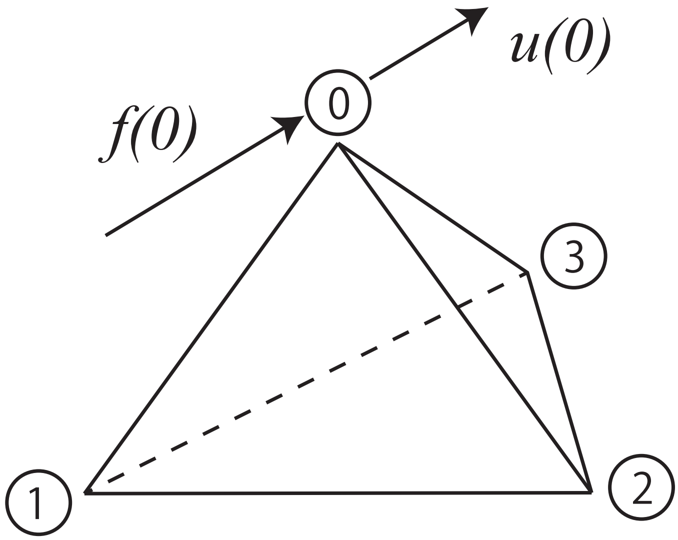
$$\boldsymbol{A = B^* B = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}}$$

固有値問題

$$\boldsymbol{A\varphi_k = \lambda_k \varphi_k}$$

$$\boldsymbol{\begin{cases} \lambda_0 = 0 & \varphi_0 = \dfrac{1}{2}\,{}^t(1,1,1,1) \\ \lambda_1 = 4 & \varphi_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\,{}^t(1,0,-1,0) \\ \lambda_2 = 4 & \varphi_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\,{}^t(0,1,0,-1) \\ \lambda_3 = 4 & \varphi_3 = \dfrac{1}{2}\,{}^t(1,-1,1,-1) \end{cases}}$$

正４面体




## 正４面体状分子のたわみ問題と擬グリーン行列

$$\boldsymbol{Au = f}, \qquad {}^t\boldsymbol{\varphi_0 f = 0}, \qquad {}^t\boldsymbol{\varphi_0 u = 0},$$

$$\Updownarrow$$

$$\boldsymbol{u = G_* f}$$

$$\boldsymbol{G_* = \lim_{a \to +0} \left((A + aI)^{-1} - a^{-1}\varphi_0\varphi_0^*\right) =}$$

$$\boldsymbol{\frac{1}{16}\begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix} = \frac{1}{16}A}$$

擬グリーン行列の性質

$$G_* = \frac{1}{16}\begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$AG_* = G_*A = I - \varphi_0\varphi_0^*$$

$$G_*\varphi_0\varphi_0^* = \varphi_0\varphi_0^*G_* = O$$

ベクトル空間

$$u \in \mathrm{C}_0^4 = \left\{u \in \mathrm{C}^4 \ \ \text{and} \ \ {}^t\varphi_0 u = 0\right\}$$

エネルギー形式

$$(u,\, v)_A = v^* A u$$

エネルギー

$$\|\, u\,\|_A^2 = u^* A u = \|Bu\|^2$$

デルタベクトル

$$\delta_j = {}^t(0, \cdots, 0, \underset{\smile}{\overset{j}{1}}, 0, \cdots, 0) \in \mathrm{C}^N$$

再生等式

$$(\boldsymbol{u},\, \boldsymbol{G_*\delta_j})_A = (\boldsymbol{Au},\, \boldsymbol{G_*\delta_j}) =$$

$$(\boldsymbol{G_*\delta_j})^* \boldsymbol{Au} = {}^t\boldsymbol{\delta_j G_* Au} =$$

$${}^t\boldsymbol{\delta_j}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\varphi_0\varphi_0^*})\boldsymbol{u} = {}^t\boldsymbol{\delta_j u} - {}^t\boldsymbol{\delta_j\varphi_0\varphi_0^* u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{j}),$$

$$\|\boldsymbol{G_*\delta_j}\|^2 = (\boldsymbol{G_*\delta_j},\, \boldsymbol{G_*\delta_j})_A = {}^t\boldsymbol{\delta_j G_*\delta_j}$$

再生等式

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{j}) = (\boldsymbol{u},\, \boldsymbol{G_*\delta_j})_A$$

擬グリーン行列のエネルギー

$${}^t\boldsymbol{\delta_j G_*\delta_j} = \|\boldsymbol{G_*\delta_j}\|^2$$

シュワルツ不等式

$$|u(j)|^2 = |(u,\, G_*\delta_j)_A|^2 \le \|u\|_A^2 \|G_*\delta_j\|_A^2 = {}^t\delta_j G_*\delta_j \|u\|_A^2$$

擬グリーン行列の対角成分の最大値

$$C_0 = \max_{0 \le j \le 3} {}^t\delta_j G_*\delta_j = {}^t\delta_{j_0} G_*\delta_{j_0} = \frac{3}{16}$$

離散ソボレフ不等式

$$\left(\max_{0 \le j \le 3} |u(j)|\right)^2 \le C_0 \|u\|_A^2$$

最良ベクトル

$$u = G_*\delta_{j_0} \qquad \Rightarrow$$

$$\left(\max_{0 \le j \le 3} |{}^t\delta_j G_*\delta_{j_0}|\right)^2 \le C_0 \|G_*\delta_{j_0}\|_A^2 = C_0^2,$$

$$\left(\max_{0 \le j \le 3} |{}^t\delta_j G_*\delta_{j_0}|\right)^2 \ge |{}^t\delta_{j_0} G_*\delta_{j_0}|^2 = C_0^2,$$

$$\left(\max_{0 \le j \le 3} |{}^t\delta_j G_*\delta_{j_0}|\right)^2 = C_0 \|G_*\delta_{j_0}\|_A^2$$

**定理　正4面体**

$$u \in \mathrm{C}_0^4 = \left\{ u \in \mathrm{C}^4 \ \text{ and } \ {}^t\varphi_0 u = 0 \right\} \qquad \Rightarrow$$

$$\left( \max_{0 \le j \le 3} |u(j)| \right)^2 \le C \|u\|_A^2$$

$$C_0 = \max_{0 \le j \le 3} {}^t\delta_j G_* \delta_j = {}^t\delta_{j_0} G_* \delta_{j_0} = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{3} \frac{1}{\lambda_k} = \frac{3}{16}$$

$$u = G_* \delta_{j_0} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \frac{1}{16} \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \frac{1}{16} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 3 \\ -1 \end{pmatrix}, \frac{1}{16} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

**定理　正4面体**

$$u(0) + u(1) + u(2) + u(3) = 0 \qquad \Rightarrow$$

$$\max \left\{ |u(0)|^2, |u(1)|^2, |u(2)|^2, |u(3)|^2 \right\} \le$$

$$\frac{3}{16} \Big[ |u(0) - u(1)|^2 + |u(0) - u(2)|^2 + |u(0) - u(3)|^2 +$$

$$|u(1) - u(2)|^2 + |u(1) - u(3)|^2 + |u(2) - u(3)|^2 + \Big]$$

Equality holds for

$(3, -1, -1, -1)$, $(-1, 3, -1, -1)$,

$(-1, -1, 3, -1)$, $(-1, -1, -1, 3)$

**定理**　頂点数 $N$，辺の集合 $e$ のグラフ

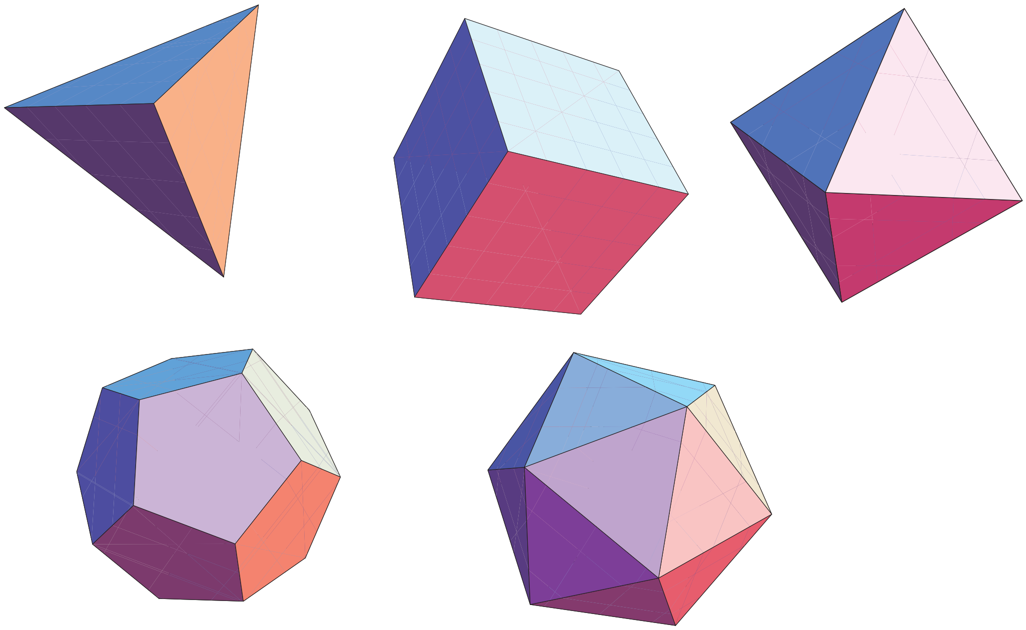
$$u \in \mathbf{C}_0^N = \{u \in \mathbf{C}^N \ \ \text{and} \ \ {}^t\varphi_0 u = 0\} \qquad \Rightarrow$$

$$\left(\max_{0 \le j \le N-1} |u(j)|\right)^2 \le C\|u\|_A^2 = C \sum_{(i,j) \in e} |u(i) - u(j)|^2$$

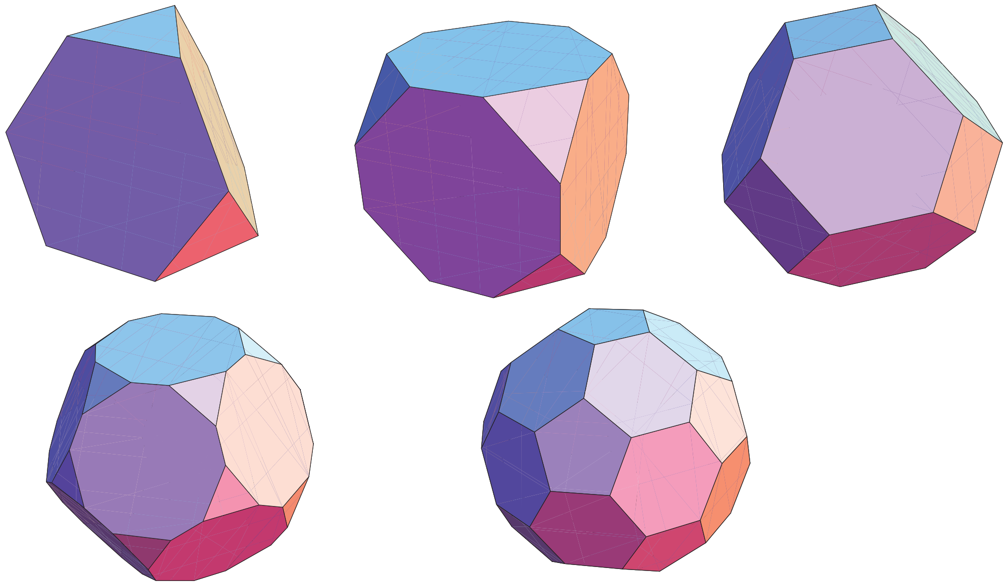
$$C_0 = \max_{0 \le j \le N-1} {}^t\delta_j G_* \delta_j = {}^t\delta_{j_0} G_* \delta_{j_0}$$

Equality holds for $u = G_* \delta_{j_0}$

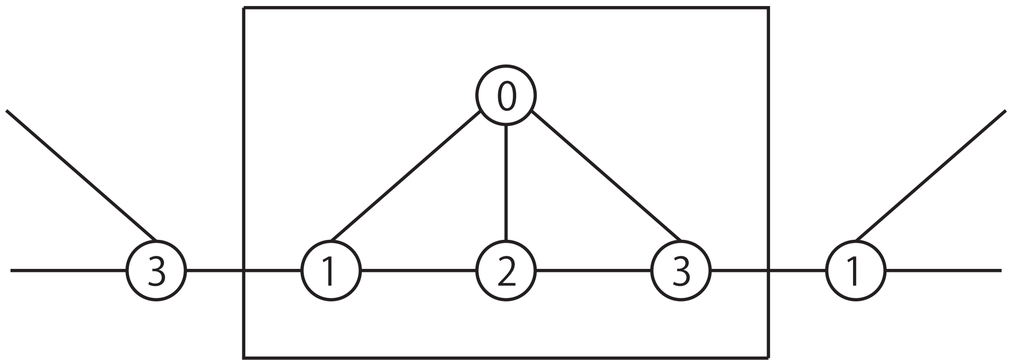
**正4,6,8,12,20面体**



切頂正4,6,8,12,20面体

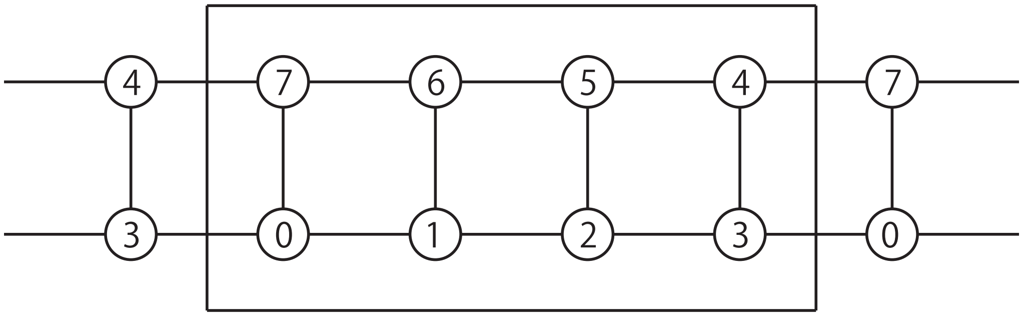


正4面体



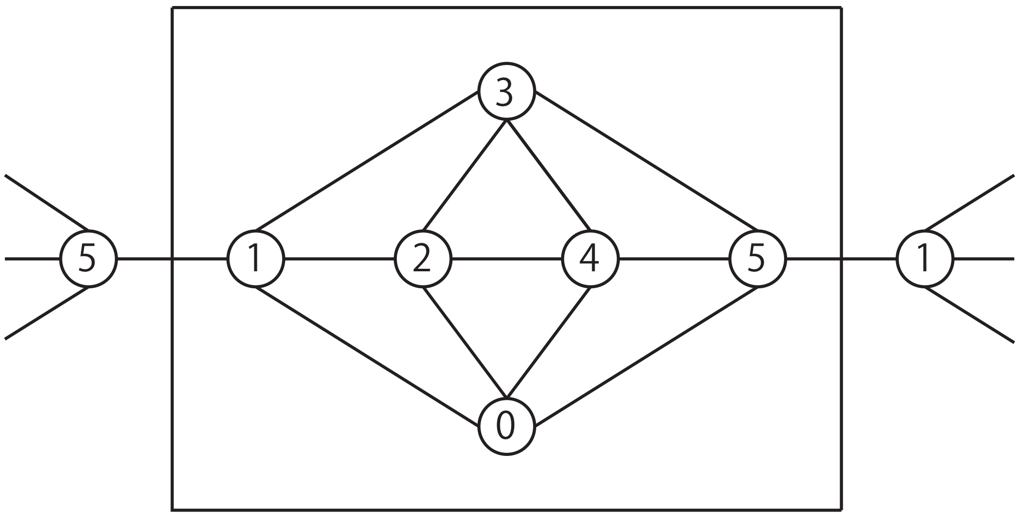

$$C_0(\mathrm{R4}) = \frac{3}{16} = 0.187\cdots$$

正６面体



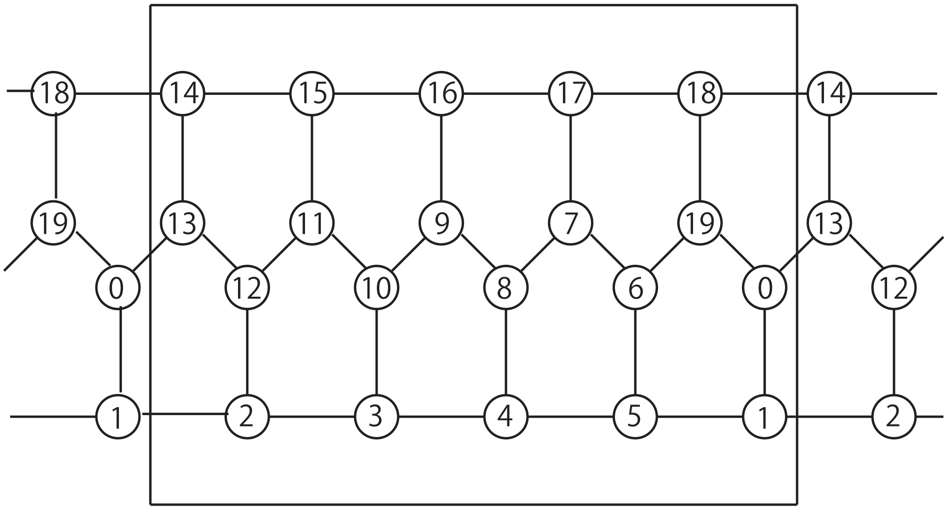

$$C_0(\mathrm{R6}) = \frac{29}{96} = 0.302\cdots$$

正８面体



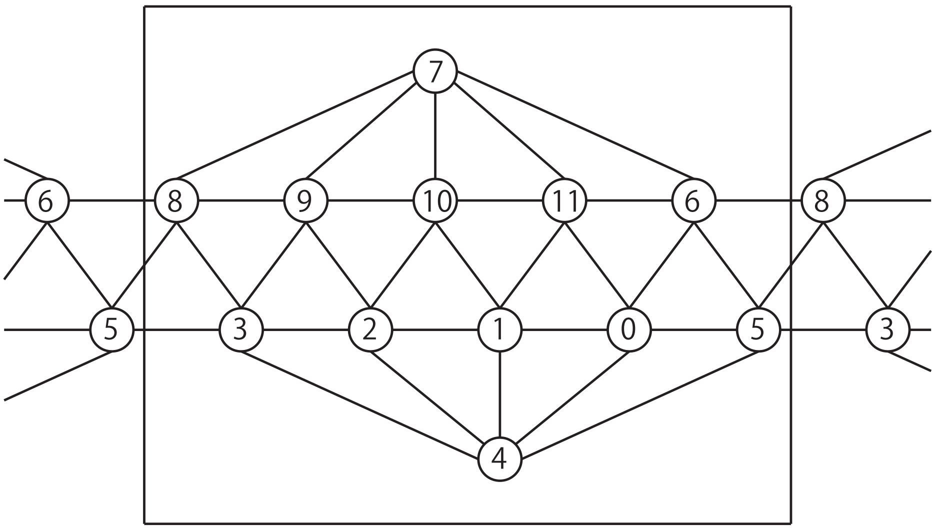

$$C_0(\mathrm{R8}) = \frac{13}{72} = 0.180\cdots$$

**正12面体（C20）**



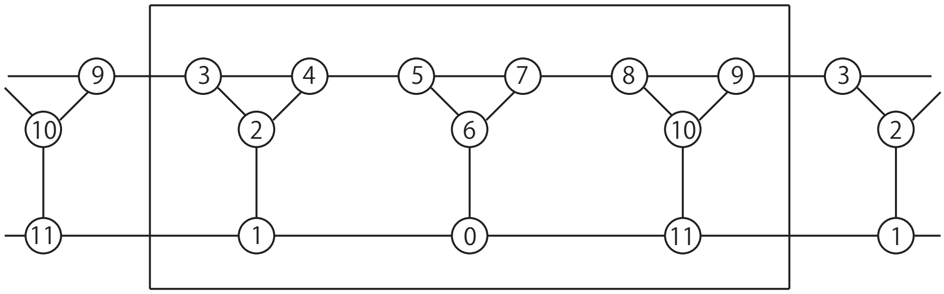

$$C_0(\mathbf{R12}) = \frac{\mathbf{137}}{\mathbf{300}} = \mathbf{0.456}\cdots$$

**正20面体**



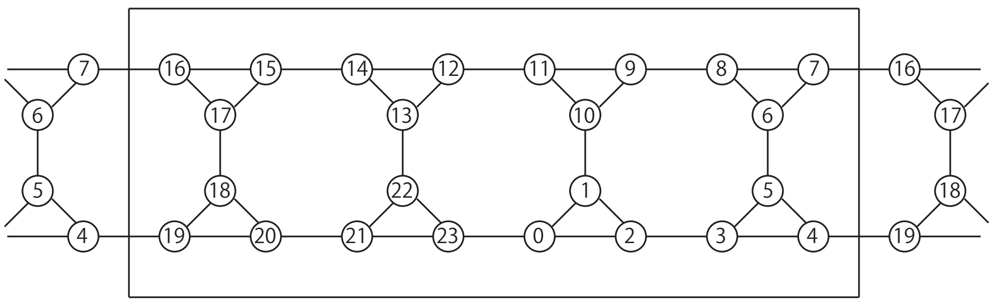

$$C_0(\mathbf{R20}) = \frac{\mathbf{7}}{\mathbf{36}} = \mathbf{0.194}\cdots$$

切頂正４面体



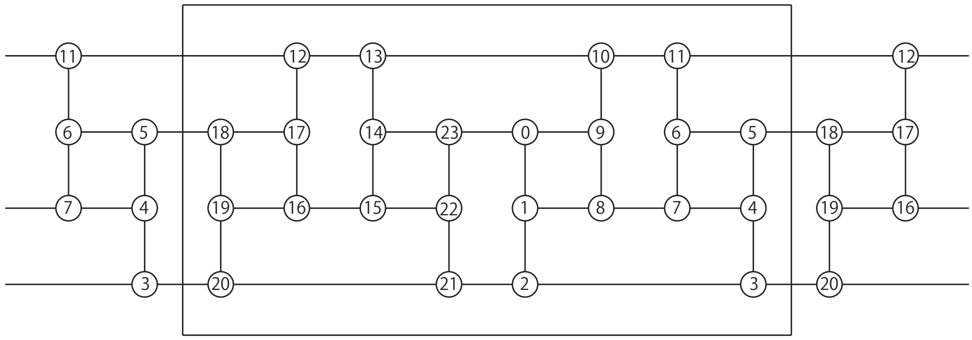

$$C_0(\mathrm{T4}) = \frac{\mathbf{301}}{\mathbf{720}} = \mathbf{0.418}\cdots$$

切頂正６面体



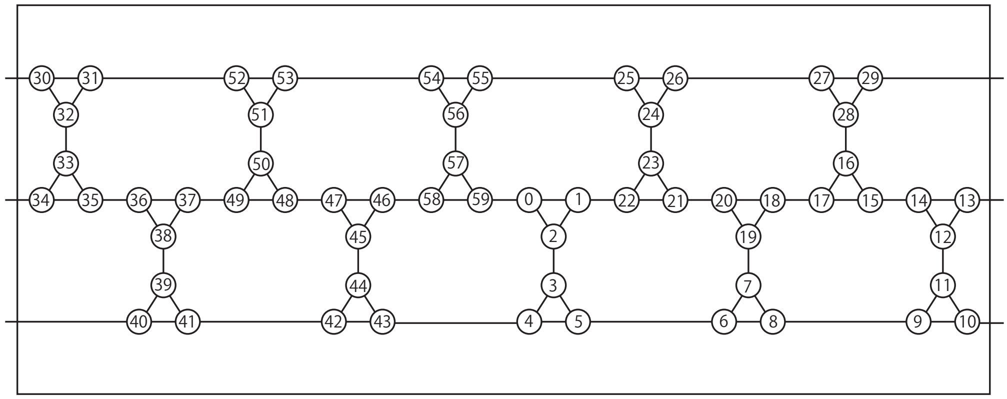

$$C_0(\mathrm{T6}) = \frac{\mathbf{173}}{\mathbf{288}} = \mathbf{0.601}\cdots$$

切頂正８面体



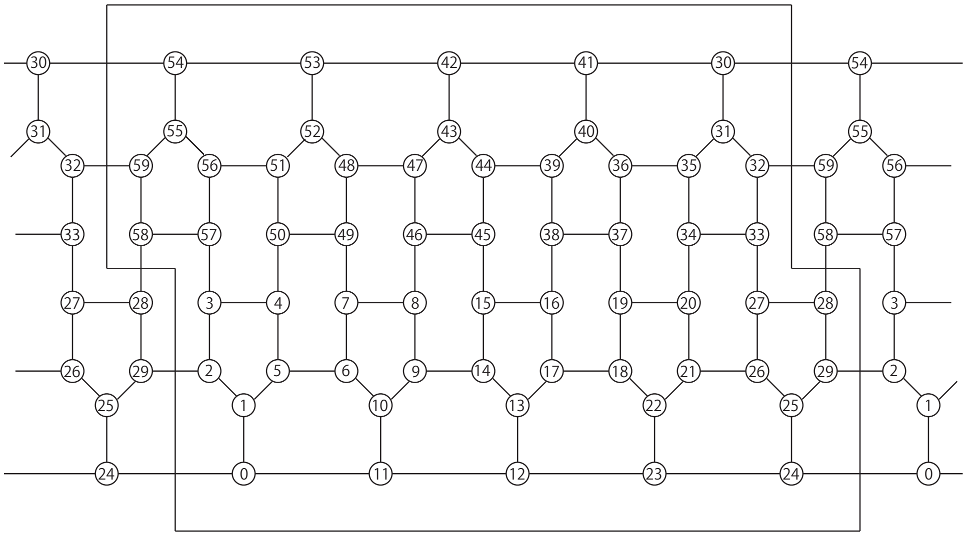

$$C_0(\mathrm{T8}) = \frac{1019}{2016} = 0.505\cdots$$

切頂正１２面体




$$C_0(\mathrm{T12}) = \frac{64}{75} = 0.853\cdots$$

切頂正20面体（C60）

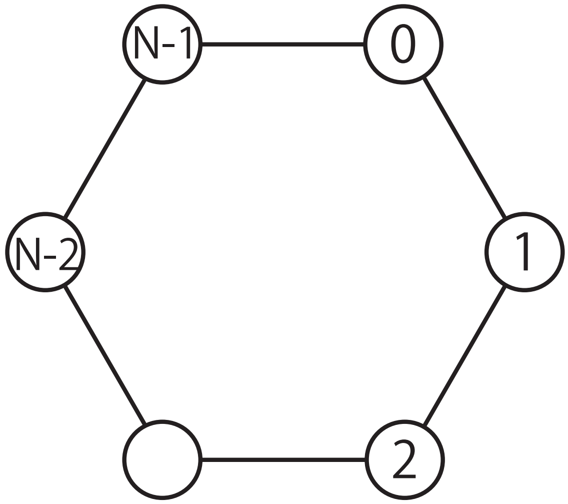


$$C_0(\mathrm{T20}) = \frac{239741}{376200} = 0.637\cdots$$

| 多面体 | 記号 | 頂点 | 面 | 辺 | 最良定数 | 近似値 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 正4面体 | R4 | 4 | 4 | 6 | 3/16 | $0.187\cdots$ |
| 正6面体 | R6 | 8 | 6 | 12 | 29/96 | $0.302\cdots$ |
| 正8面体 | R8 | 6 | 8 | 12 | 13/72 | $0.180\cdots$ |
| 正12面体 | R12 | 20 | 12 | 30 | 137/300 | $0.456\cdots$ |
| 正20面体 | R20 | 12 | 20 | 30 | 7/36 | $0.194\cdots$ |
| 切頂正4面体 | T4 | 12 | 8 | 18 | 301/720 | $0.418\cdots$ |
| 切頂正6面体 | T6 | 24 | 14 | 36 | 173/288 | $0.601\cdots$ |
| 切頂正8面体 | T8 | 24 | 14 | 36 | 1019/2016 | $0.505\cdots$ |
| 切頂正12面体 | T12 | 60 | 32 | 90 | 64/75 | $0.853\cdots$ |
| 切頂正20面体 | T20 | 60 | 32 | 90 | 239741/376200 | $0.637\cdots$ |

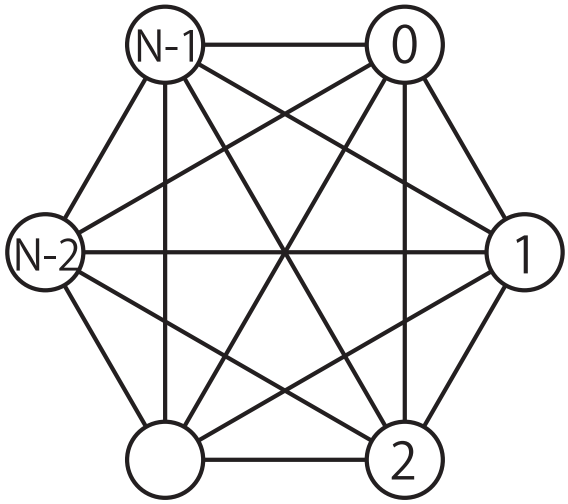
オイラーの多面体定理　$F + N = E + 2$

正 $N$ 角形（頂点数 $N$，辺数 $N$）



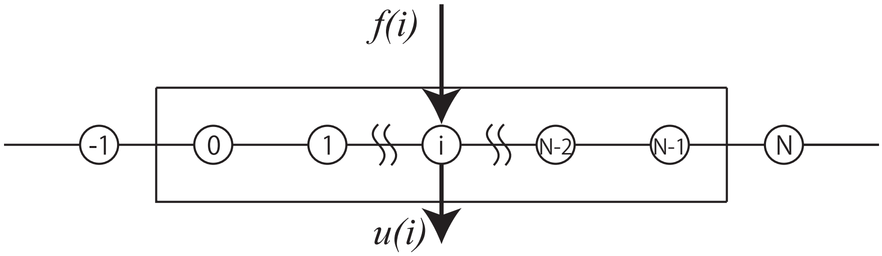

$$C_0(N) = \frac{N^2 - 1}{12N}$$

完全グラフ $K_N$（頂点数 $N$，辺数 $N(N-1)/2$）




$$C_0(K_N) = \frac{N - 1}{N^2}$$

糸のたわみ（頂点数 $N$，辺数 $N$）




BVP

$$\begin{cases} -u(i-1)+2u(i)-u(i+1)=f(i) \quad (0 \le i \le N-1) \\ \begin{cases} u(-1)=0, & u(N)=0 & (0,0) \\ u(-1)=0, & u(N-1)-u(N)=0 & (0,1) \\ u(-1)-u(0)=0, & u(N)=0 & (1,0) \\ u(-1)-u(0)=0, & u(N-1)-u(N)=0 & (1,1) \\ u(-1)=u(N-1), & u(0)=u(N) & (\mathrm{P}) \end{cases} \end{cases}$$

$$C_0(0,0)=\frac{1}{N+1}\left\lfloor\frac{N+1}{2}\right\rfloor\left\lfloor\frac{N+2}{2}\right\rfloor$$

$$\lfloor x \rfloor = \sup\{n \in \mathrm{Z} \mid n \le x\}$$

$$C_0(0,1)=N$$

$$C_0(1,0)=N$$

$$C_0(1,1)=\frac{1}{6N}(N-1)(2N-1)$$

$$C_0(\mathrm{P})=\frac{N^2-1}{12N}$$

頂点数４　[辺数]

$$
\begin{array}{llll}
C_0(K_4) = \dfrac{3}{16} & = 0.1875 & [6] & \text{完全グラフ} \\
C_0(\mathrm{R4}) = \dfrac{3}{16} & = 0.1875 & [6] & \text{正４面体} \\
C_0(\mathrm{P}) = \dfrac{5}{16} & \fallingdotseq 0.312\cdots & [4] & \text{正４角形} \\
C_0(1,1) = \dfrac{7}{8} & = 0.875 & [4] & \\
C_0(0,0) = \dfrac{6}{5} & = 1.2 & [4] & \\
C_0(0,1) = 4 & = 4 & [4] &
\end{array}
$$

頂点数６　[辺数]

$$
\begin{array}{llll}
C_0(K_6) & \fallingdotseq 0.138\cdots & [15] & \text{完全グラフ} \\
C_0(\mathrm{R8}) & \fallingdotseq 0.180\cdots & [12] & \text{正８面体} \\
C_0(\mathrm{P}) & \fallingdotseq 0.486\cdots & [6] & \text{正６角形} \\
C_0(1,1) & \fallingdotseq 1.527\cdots & [6] & \\
C_0(0,0) & \fallingdotseq 1.714\cdots & [6] & \\
C_0(0,1) & = 6 & [6] &
\end{array}
$$

頂点数８　[辺数]

| | | | |
|---|---|---|---|
| $C_0(K_8)$ | $\fallingdotseq 0.109\cdots$ | [28] | 完全グラフ |
| $C_0(\mathrm{R6})$ | $\fallingdotseq 0.302\cdots$ | [12] | 正６面体 |
| $C_0(\mathrm{P})$ | $\fallingdotseq 0.656\cdots$ | [8] | 正８角形 |
| $C_0(1,1)$ | $\fallingdotseq 2.187\cdots$ | [8] | |
| $C_0(0,0)$ | $\fallingdotseq 2.222\cdots$ | [8] | |
| $C_0(0,1)$ | $= 8$ | [8] | |

頂点数１２　[辺数]

| | | | |
|---|---|---|---|
| $C_0(K_{12})$ | $\fallingdotseq 0.076\cdots$ | [66] | 完全グラフ |
| $C_0(\mathrm{R20})$ | $\fallingdotseq 0.194\cdots$ | [30] | 正２０面体 |
| $C_0(\mathrm{T4})$ | $\fallingdotseq 0.418\cdots$ | [18] | 切頂正４面体 |
| $C_0(\mathrm{P})$ | $\fallingdotseq 0.993\cdots$ | [12] | 正１２角形 |
| $C_0(0,0)$ | $\fallingdotseq 3.230\cdots$ | [12] | |
| $C_0(1,1)$ | $\fallingdotseq 3.513\cdots$ | [12] | |
| $C_0(0,1)$ | $= 12$ | [12] | |

頂点数20　[辺数]

| | | | |
|---|---|---|---|
| $C_0(K_{20})$ | $\fallingdotseq 0.047\cdots$ | [190] | 完全グラフ |
| $C_0(\mathrm{R12})$ | $\fallingdotseq 0.456\cdots$ | [30] | C20（正12面体） |
| $C_0(\mathrm{P})$ | $\fallingdotseq 1.662\cdots$ | [20] | 正20角形 |
| $C_0(0,0)$ | $\fallingdotseq 5.238\cdots$ | [20] | |
| $C_0(1,1)$ | $= 6.175$ | [20] | |
| $C_0(0,1)$ | $= 20$ | [20] | |

頂点数24　[辺数]

| | | | |
|---|---|---|---|
| $C_0(K_{24})$ | $\fallingdotseq 0.0399\cdots$ | [276] | 完全グラフ |
| $C_0(\mathrm{T8})$ | $\fallingdotseq 0.505\cdots$ | [36] | 切頂正８面体 |
| $C_0(\mathrm{T6})$ | $\fallingdotseq 0.601\cdots$ | [36] | 切頂正６面体 |
| $C_0(\mathrm{P})$ | $\fallingdotseq 1.996\cdots$ | [24] | 正24角形 |
| $C_0(0,0)$ | $= 6.24$ | [24] | |
| $C_0(1,1)$ | $\fallingdotseq 7.506\cdots$ | [24] | |
| $C_0(0,1)$ | $= 24$ | [24] | |

| 頂点数60 | | [辺数] | |
|---|---|---|---|
| $C_0(K_{60})$ | $\fallingdotseq 0.016\cdots$ | [1770] | 完全グラフ |
| $C_0(\mathrm{T20})$ | $\fallingdotseq 0.637\cdots$ | [90] | C60（切頂正20面体） |
| $C_0(\mathrm{T12})$ | $\fallingdotseq 0.853\cdots$ | [90] | 切頂正12面体 |
| $C_0(\mathrm{P})$ | $\fallingdotseq 4.998\cdots$ | [60] | 正60角形 |
| $C_0(0,0)$ | $\fallingdotseq 15.245\cdots$ | [60] | |
| $C_0(1,1)$ | $\fallingdotseq 19.502\cdots$ | [60] | |
| $C_0(0,1)$ | $= 60$ | [60] | |

# $C_{60}$ フラーレンにおける離散ソボレフ不等式の最良定数

**(The best constant of discrete Sobolev inequality on $C_{60}$ fullerenes)**

**關戸啓人, Hiroto Sekido**

京都大学
Kyoto Univ.

$C_{60}$ fullerene is a molecule composed of 60 carbon atoms in the form of a hollow sphere. Kroto, Curl, and Smalley found the first $C_{60}$ fullerenes called "buckyball" with the shape of a truncated icosahedron. We assume that each carbon atom bonds to 3 other atoms, and fullerenes contain only pentagonal and hexagonal faces. In this assumption, it is known that there are 1812 non-isomorphic $C_{60}$ fullerenes. We consider the classical mechanical model, that is, we consider that carbon atoms are connected by uniform linear springs. Then we introduce the best constant of the discrete Sobolev inequality for the criteria of rigidity. We calculate the best constants of the discrete Sobolev inequality for all the $C_{60}$ isomers, and we show the most rigid $C_{60}$ fullerene is backyball.

# $C_{60}$ フラーレンにおける離散ソボレフ不等式の最良定数

京都大学 国際高等教育院

せきど ひろと
關戸 啓人

sekido.hiroto.7a@kyoto-u.ac.jp

Joint work with 亀高 惟倫（大阪大学）
山岸 弘幸（東京都立産業技術高等専門学校）

1

## 目次

★ フラーレンとは

★ ソボレフ不等式の最良定数

★ $C_{60}$ フラーレンのソボレフ不等式の最良定数

★ $C_n$ フラーレンのソボレフ不等式の最良定数

## フラーレンとは

3

## フラーレンとは

★ 本講演では，$C_n$ **フラーレン**とは，以下を満たすものとする

- ★ 炭素原子 $n$ 個のみからなる球状の分子
- ★ 各炭素原子はちょうど他の3つの炭素原子と結合している
- ★ 5員環・6員環のみからなる

---

★ 数学的に（グラフとして）解釈すると：

- ★ **節点数 $n$ の平面的グラフ**
- ★ **次数3の正則グラフ**（全ての頂点の次数が3，各節点につながっている枝の数が3）
- ★ **各面は5角形と6角形のどちらか**

材料科学における幾何と代数 I （2020年09月08日） 4

## バッキーボール（バックミンスターフラーレン）

- ★ **バッキーボール**（バックミンスターフラーレン）
  - ★ 最初に発見されたフラーレン
  - ★ 1970 年大澤映二により存在が予想
  - ★ 1985 年ハロルド・クロトー，リチャード・スモーリー，ロバート・カールらにより発見
- ★ 名前の由来はジオデシック・ドームの建築家**リチャード・バックミンスター・フラー**より
  - ★ 1967 年のモントリオール万博のアメリカ館

材料科学における幾何と代数 I （2020 年 09 月 08 日） 5

## バッキーボール（バックミンスターフラーレン）

- ★ **バッキーボール**の性質
  - ★ $C_{60}$ フラーレンの一種
    - ★ 5 員環が 12 個，6 員環が 20 個
  - ★ 形は**切頂二十面体**
  - ★ **IPR（Isolated Pentagon Rule）ルールを満たす** $n \leq 60$ で唯一のフラーレン
    - ★ IPR ルール：5 角形が隣り合わない
    - ★ IPR ルールを満たす 2 番目に小さいフラーレンは $n = 70$
  - ★ 10 個の**ジグザグライン**と 6 個の**アームチェアリング**を持つ
  - ★ **ソボレフ不等式の最良定数**の意味で，$C_{60}$ フラーレンの中で**最も「かたい」**

材料科学における幾何と代数 I （2020 年 09 月 08 日） 6

## 5員環・6員環の数と $C_n$ フラーレン

★ **オイラーの多面体定理** $v - e + f = 2$

★ $v$ は節点の数，$e$ は枝の数，$f$ は面の数

★ $C_n$ フラーレンにおいて，5員環を $x$ 個，6員環を $y$ 個とする

★ $v = n$

★ 3正則より $e = \frac{3n}{2}$，枝は2つの面に属すから $e = \frac{5x+6y}{2}$

★ $f = x + y$

★ これらを $x, y$ について解いて

★ **5員環の数** $x = 12$

★ **6員環の数** $y = \frac{n-20}{2}$

★ $C_n$ フラーレンは $n$ が20以上の偶数でなければ存在しない

★ 実際には $n = 22$ 以外なら存在し $n = 20, 24, 26, 28, \ldots$ **について** $C_n$ **フラーレンが存在する**



## フラーレンの異性体

★ $C_n$ フラーレンで**グラフが同型でないもの**を**異性体**とする

★ 異性体の列挙アルゴリズムの例

★ spiral algorithm

★ patch-stitching method

★ 本研究では fullgen (`https://users.cecs.anu.edu.au/~bdm/plantri/`) を利用する

★ fullgen では patch-stitching method を用いてフラーレンの異性体を列挙する

★ $C_n$ の全異性体に通し番号をつけて扱うときは fullgen の出力順に番号をつけている

## フラーレンの異性体の個数

★ **フラーレンの異性体の個数**は以下の通り

★ オンライン整数列大辞典の A007894

| $n$ | 異性体 |
|---|---|
| 20 | 1個 |
| 24 | 1個 |
| 26 | 1個 |
| 28 | 2個 |
| 30 | 3個 |
| 32 | 6個 |
| 34 | 6個 |
| 36 | 15個 |
| 38 | 17個 |
| 40 | 40個 |
| 42 | 45個 |
| 44 | 89個 |
| 46 | 116個 |

| $n$ | 異性体 |
|---|---|
| 48 | 199個 |
| 50 | 271個 |
| 52 | 437個 |
| 54 | 580個 |
| 56 | 924個 |
| 58 | 1205個 |
| 60 | 1812個 |
| 62 | 2385個 |
| 64 | 3465個 |
| 66 | 4478個 |
| 68 | 6332個 |
| 70 | 8149個 |
| 72 | 11190個 |
| 74 | 14246個 |
| 76 | 19151個 |
| ⋮ | ⋮ |

材料科学における幾何と代数 I　（2020 年 09 月 08 日）　9

## ソボレフ不等式の最良定数

10

## 記法とモデル

★ フラーレン $F \in \mathrm{C}_n$ に対して

★ $V = V(F) = \{1, 2, \ldots, n\}$ は節点の集合

★ $E = E(F)$ は枝の集合

★ $M = M(F)$ は隣接行列

★ $A = A(F) = 3I - M$ はグラフのラプラシアン

---

★ **古典力学モデル**を仮定

★ 枝の両端の炭素原子は線形バネで結合

★ バネ定数は一様とする

---

★ $i \in V$ に対して，定常位置からの変位を表すスカラー量 $u_i \in \mathbb{C}$

★ $u = (u_1\ u_2\ \cdots\ u_n)^{\mathrm{T}}$



## 離散ソボレフ不等式

★ バネのエネルギー：$\left|u_i - u_j\right|^2$，$(i, j) \in E$

★ ソボレフエネルギー：$U(u) = \sum_{(i,j)\in E} \left|u_i - u_j\right|^2 = u^* A u$

---

★ **離散ソボレフ不等式**

★ 全体の平行移動を除いて **変位の大きさの二乗** は **エネルギーの総和** の定数倍で抑えられる

$$
{}^{\exists}C \in \mathbb{R}, \quad {}^{\forall}u = (u_1\ u_2\ \cdots\ u_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}^n,
$$
$$
\sum_{i=1}^{n} u_i = 0 \implies \|u\|_\infty^2 \le C U(u)
$$

---

★ 離散ソボレフ不等式を満たす最小の定数 $C$ を**最良定数**といい $C_0 = C_0(F)$ と書く

★ **最良定数が小さいほど，そのフラーレンは「かたい」**

## 離散ソボレフ不等式の最良定数

★ 離散ソボレフ不等式の最良定数はMoore–Penroseの一般逆行列を計算すると求まる

$$C_0 = \max_{i=1,\ldots,n} \left(A^+\right)_{ii}$$

★ 最良定数は有理数で，数式処理ソフトを使うと**無誤差で計算可能**

★ 本研究では，Maple または Mathematica で計算

---

★ **バッキーボールの最良定数**（Kametaka, Nagai, Yamagishi, Takemura, Watanabe, 2015）

$$C_0(\text{バッキーボール}) = \frac{239741}{376200} = 0.63727\cdots$$

---

★ fullgen で$C_{60}$フラーレンの全異性体1812通りを生成

★ 全ての異性体に対して，ソボレフ不等式の最良定数を求めると

$$^\forall F \in C_{60}, \quad C_0(\text{バッキーボール}) = \frac{239741}{376200} \leq C_0(F)$$

★ $C_{60}$フラーレンの中で，**バッキーボールが一番「かたい」**



## 補足：離散ソボレフ不等式の最良定数

★ グラフラプラシアン$A$の固有値を$0 = \lambda_1 < \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \cdots \leq \lambda_n$とする

★ バッキーボールに対して，離散ソボレフ不等式の最良定数は

$$C_0 = \frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{\lambda_3} + \cdots + \frac{1}{\lambda_n}$$

---

★ （一般的に）無限大ノルムの代わりに2ノルムを使う，つまり

$$^\exists C' \in \mathbb{R}, \quad ^\forall u = (u_1 \ u_2 \ \cdots \ u_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}^n,$$

$$\sum_{i=1}^{n} u_i = 0 \implies \|u\|_2^2 \leq C' U(u)$$

の場合の離散ソボレフ不等式の最良定数は

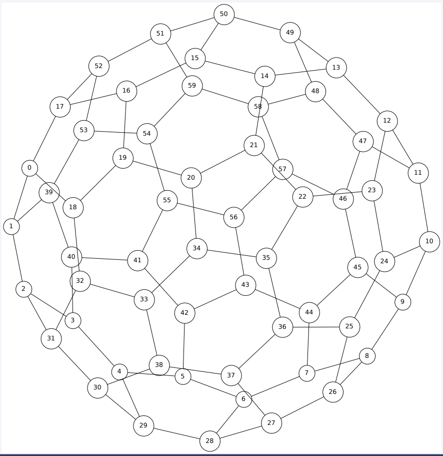
$$C_0' = \frac{1}{\lambda_2}$$

★ グラフのスペクトラルクラスタリングなどと対応：Ratio cut，Normalized cut

## バッキーボールの最良定数

★ **バッキーボール** (index 936)

★ $C_0 \approx 0.6372700691$：$C_{60}$ の中で1番目に最良定数が小さい

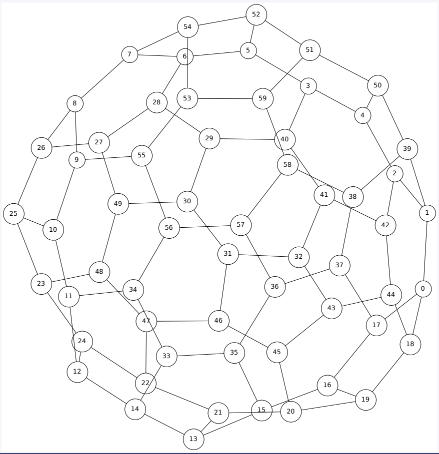




## ツイステッドバッキーボールの最良定数

★ **ツイステッドバッキーボール** (index 830)

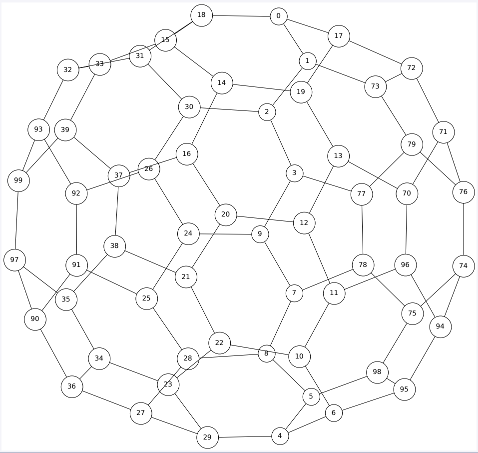
★ $C_0 \approx 0.6577294008$：$C_{60}$ の中で2番目に最良定数が小さい



## カメボールの最良定数

★ **カメボール** (index 145)

★ $C_0 \approx 0.6594161135$：$C_{60}$ の中で12番目に最良定数が小さい

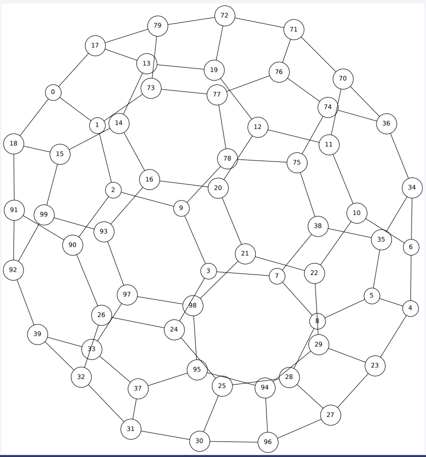




## 大車輪の最良定数

★ **大車輪** (index 154)

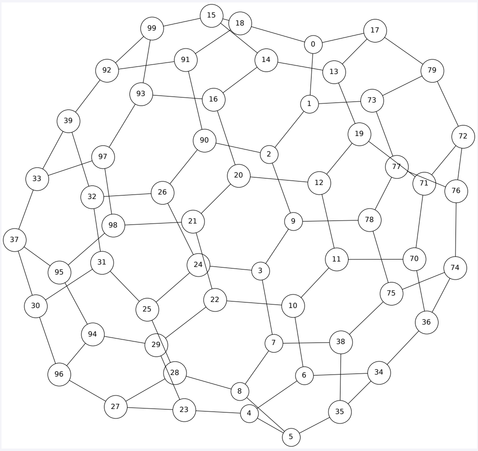
★ $C_0 \approx 0.6669694342$：$C_{60}$ の中で42番目に最良定数が小さい



## ヒフミクンの最良定数

★ **ヒフミクン** (index 161)

★ $C_0 \approx 0.6719601465$：$C_{60}$ の中で166番目に最良定数が小さい

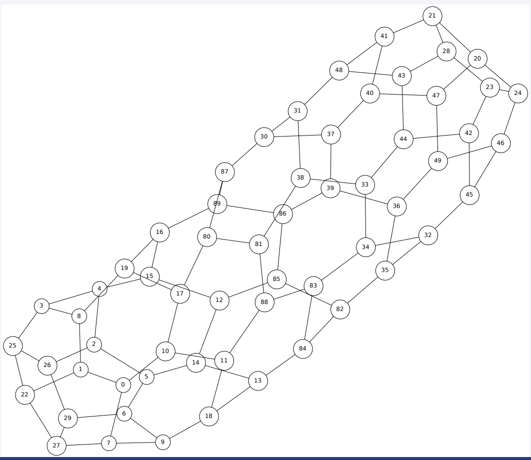




## スモールカーボンナノチューブの最良定数

★ **スモールカーボンナノチューブ** (index 1)

★ $C_0 \approx 0.8578134657$：$C_{60}$ の中で1812番目に最良定数が小さい



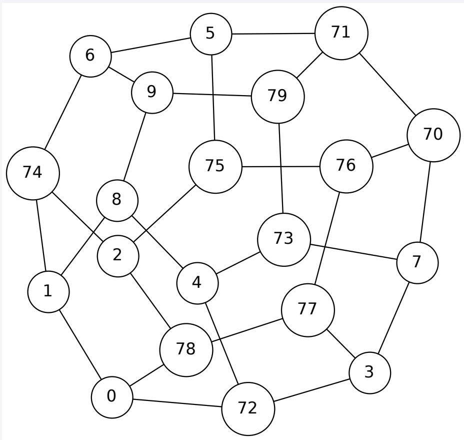
## $C_{60}$ フラーレンの最良定数

| 順位 | index | $C_0$ | |
|---|---|---|---|
| **1** | 936 | **0.6372700691** | **バッキーボール** |
| 2 | 830 | 0.6577294008 | ツイステッドバッキーボール |
| 3 | 937 | 0.6584547998 | |
| 4 | 759 | 0.6584726279 | |
| 5 | 1518 | 0.6585412337 | |
| 6 | 970 | 0.6586209934 | |
| 7 | 144 | 0.6587461750 | |
| 8 | 746 | 0.6588778809 | |
| 9 | 955 | 0.6589523100 | |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | |
| 12 | 145 | 0.6594161135 | カメボール |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | |
| 42 | 154 | 0.6669694342 | 大車輪 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | |
| 166 | 161 | 0.6719601465 | ヒフミクン |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | |
| 1812 | 1 | 0.8578134657 | スモールカーボンナノチューブ |



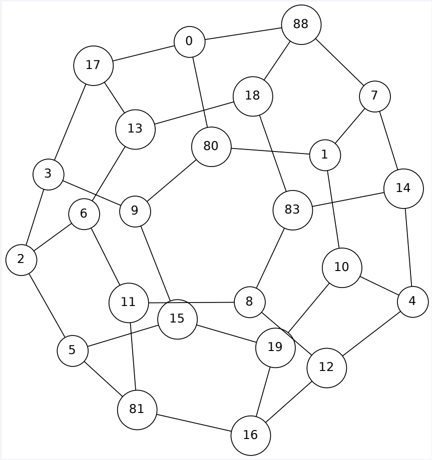
## 最も「かたい」$C_{20}$ フラーレン

| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.4566666667 |



## 最も「かたい」$C_{24}$ フラーレン

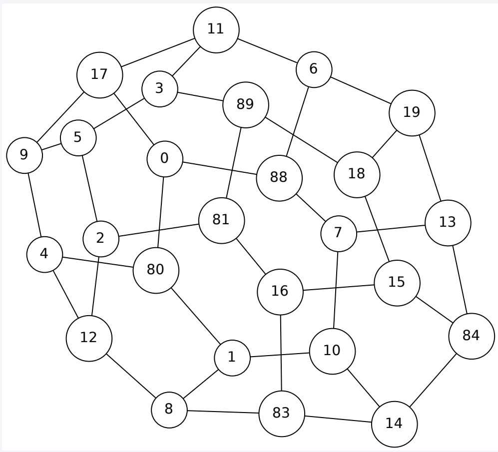
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.4972832723 |





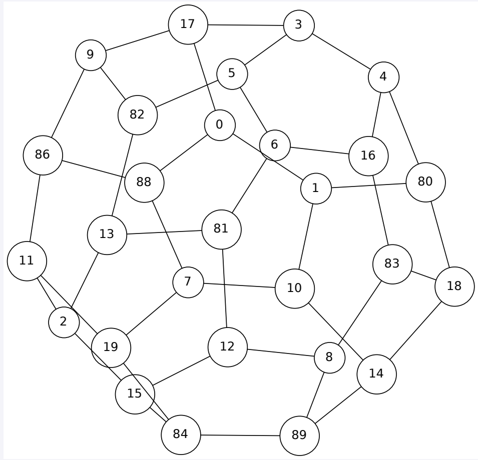

## 最も「かたい」$C_{26}$ フラーレン

| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5197238659 |



## 最も「かたい」$C_{28}$ フラーレン

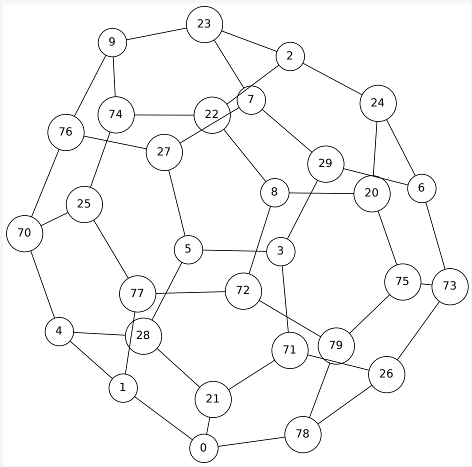
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5242346939 |
| 2 | 0.5358119450 |





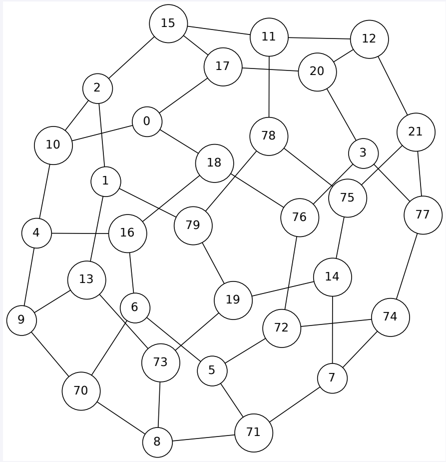

## 最も「かたい」$C_{30}$ フラーレン

| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5436395087 |
| 2 | 0.5504906084 |
| 3 | 0.5576876490 |



## 最も「かたい」$C_{32}$ フラーレン

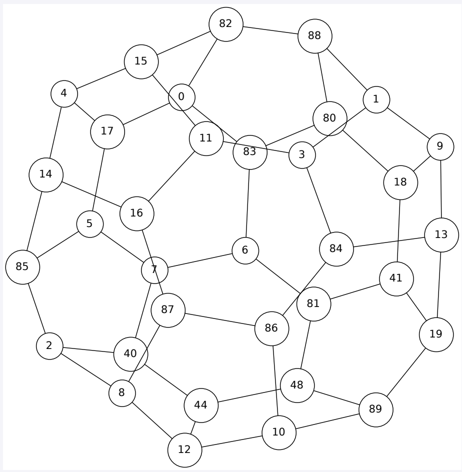
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5592447917 |
| 2 | 0.5608323198 |
| ⋮ | ⋮ |
| 6 | 0.5800781250 |





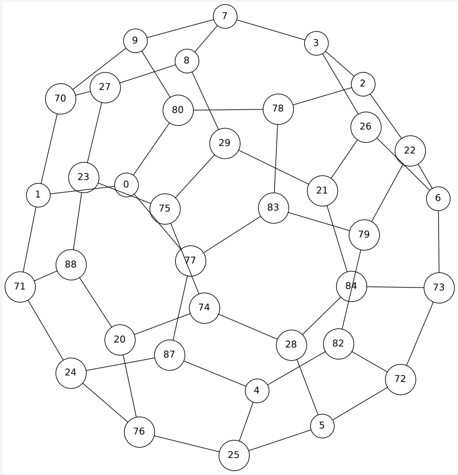

## 最も「かたい」$C_{34}$ フラーレン

| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5700577909 |
| 2 | 0.5701287088 |
| ⋮ | ⋮ |
| 6 | 0.5855505511 |



## 最も「かたい」$C_{36}$ フラーレン

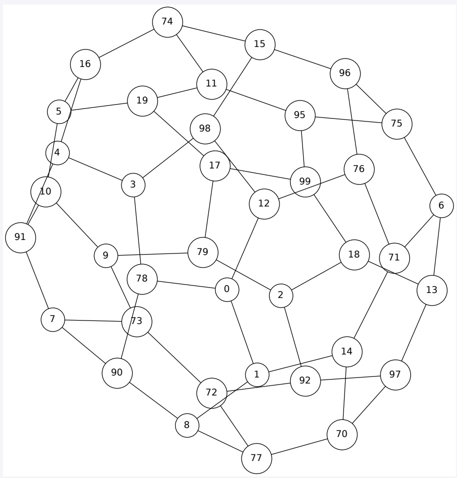
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5647718958 |
| 2 | 0.5683201058 |
| ⋮ | ⋮ |
| 15 | 0.6118859172 |




材料科学における幾何と代数 I (2020 年 09 月 08 日) 29

## 最も「かたい」$C_{38}$ フラーレン

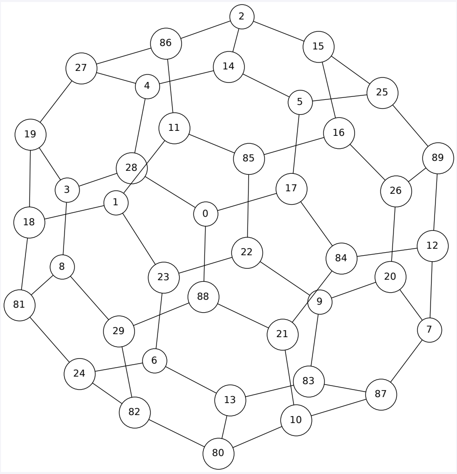
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5787031784 |
| 2 | 0.5855647892 |
| ⋮ | ⋮ |
| 17 | 0.6389658356 |




材料科学における幾何と代数 I (2020 年 09 月 08 日) 30

## 最も「かたい」$C_{40}$ フラーレン

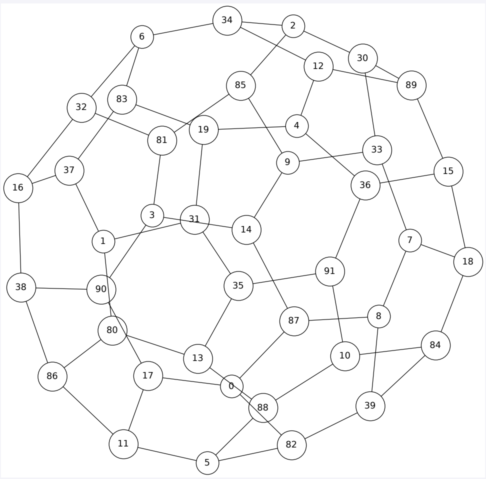
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5866833252 |
| 2 | 0.5868515742 |
| ⋮ | ⋮ |
| 40 | 0.6577995825 |



材料科学における幾何と代数 I　（2020 年 09 月 08 日）　31

## 最も「かたい」$C_{42}$ フラーレン

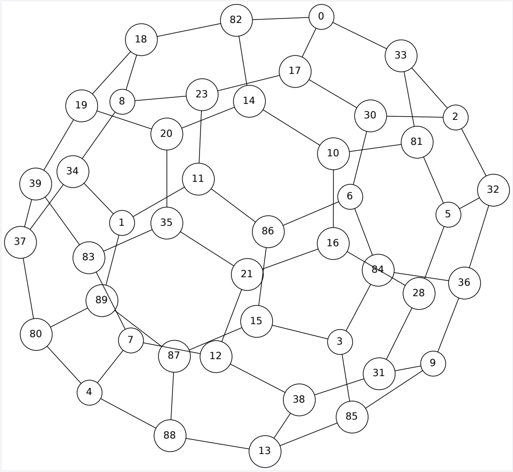
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.5962474951 |
| 2 | 0.6008872132 |
| ⋮ | ⋮ |
| 45 | 0.6534405371 |



材料科学における幾何と代数 I　（2020 年 09 月 08 日）　32

## 最も「かたい」$C_{44}$ フラーレン

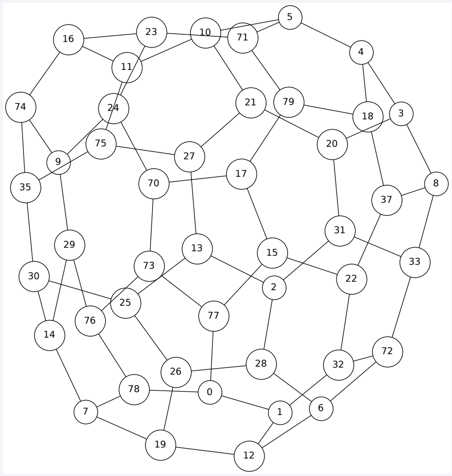
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6022272183 |
| 2 | 0.6072838388 |
| ⋮ | ⋮ |
| 89 | 0.6969696970 |





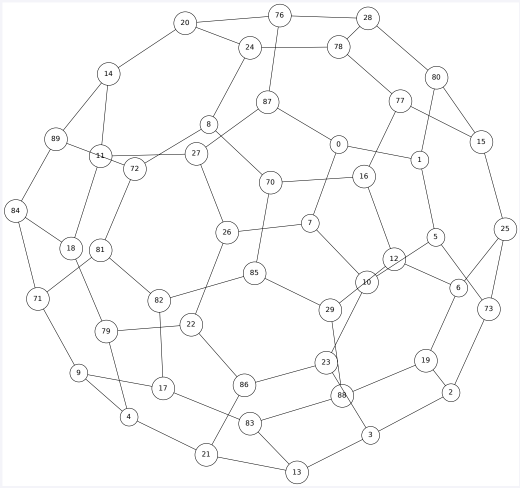

## 最も「かたい」$C_{46}$ フラーレン

| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6117622062 |
| 2 | 0.6185668998 |
| ⋮ | ⋮ |
| 116 | 0.6875116962 |



## 最も「かたい」$C_{48}$ フラーレン

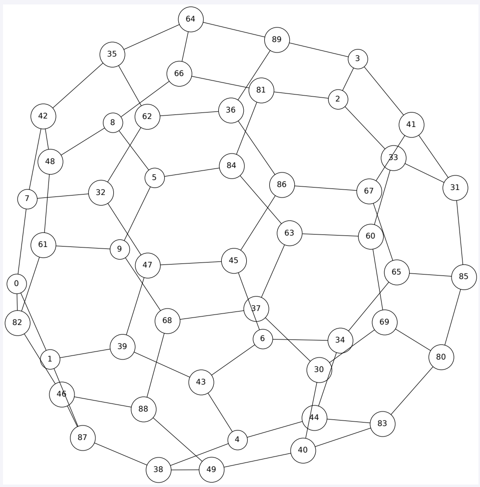
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6209522097 |
| 2 | 0.6221103120 |
| ⋮ | ⋮ |
| 199 | 0.7229862781 |



材料科学における幾何と代数 I　（2020 年 09 月 08 日）　35

## 最も「かたい」$C_{50}$ フラーレン

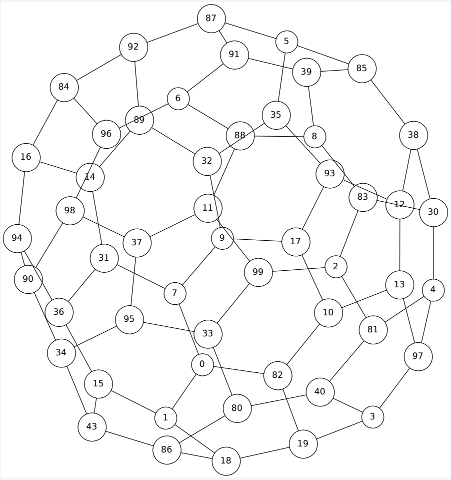
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6222702929 |
| 2 | 0.6240955921 |
| ⋮ | ⋮ |
| 271 | 0.7578120708 |



材料科学における幾何と代数 I　（2020 年 09 月 08 日）　36

## 最も「かたい」$C_{52}$ フラーレン

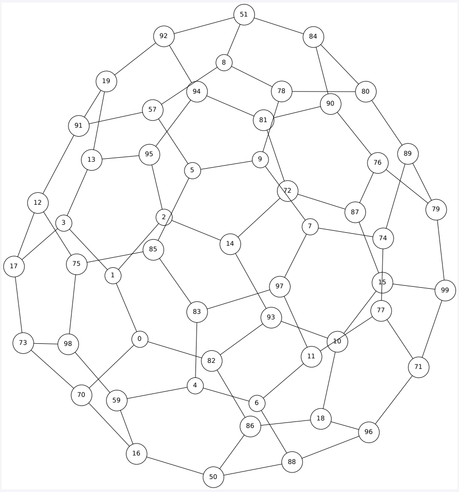
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6275764830 |
| 2 | 0.6344439355 |
| ⋮ | ⋮ |
| 437 | 0.7596291864 |





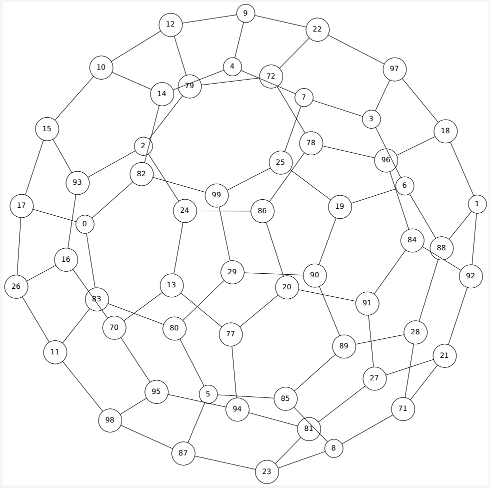
## 最も「かたい」$C_{54}$ フラーレン

| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6354455468 |
| 2 | 0.6408052862 |
| ⋮ | ⋮ |
| 580 | 0.7544222078 |



## 最も「かたい」$C_{56}$ フラーレン

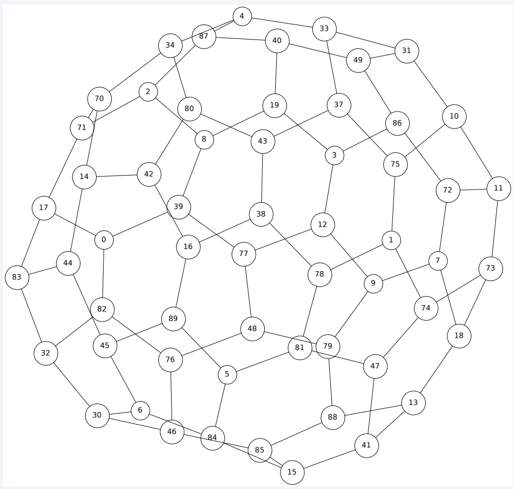
| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6434289232 |
| 2 | 0.6434409273 |
| ⋮ | ⋮ |
| 924 | 0.8114370748 |





## 最も「かたい」$C_{58}$ フラーレン

| 順位 | $C_0$ |
|---|---|
| 1 | 0.6504099071 |
| 2 | 0.6514876581 |
| ⋮ | ⋮ |
| 1205 | 0.7877674222 |



## 最も「かたい」$C_n$ フラーレンの最良定数

| $n$ | min $C_0$ |
|---|---|
| 20 | 0.4566666667 |
| 24 | 0.4972832723 |
| 26 | 0.5197238659 |
| 28 | 0.5242346939 |
| 30 | 0.5436395087 |
| 32 | 0.5592447917 |
| 34 | 0.5700577909 |
| 36 | 0.5647718958 |
| 38 | 0.5787031784 |
| 40 | 0.5866833252 |
| 42 | 0.5962474951 |
| 44 | 0.6022272183 |
| 46 | 0.6117622062 |

| $n$ | min $C_0$ |
|---|---|
| 48 | 0.6209522097 |
| 50 | 0.6222702929 |
| 52 | 0.6275764830 |
| 54 | 0.6354455468 |
| 56 | 0.6434289232 |
| 58 | 0.6504099071 |
| 60 | 0.6372700691 |
| ⋮ | ⋮ |



## まとめ

★ 本講演では，フラーレンに対してソボレフ不等式の最良定数を計算した

★ $C_{60}$ フラーレンのソボレフ不等式の最良定数
- ★ バッキーボールが最もかたいことがわかった

★ $C_n$ フラーレンのソボレフ不等式の最良定数
- ★ $n \leq 60$ に対して，それぞれ，最もかたい $C_n$ フラーレンがわかった

# 結晶構造に近いアモルファス構造のモデル化とパーコレーション

**(A model of amorphous structure similar to crystal structure and percolation)**

**田中 守, Mamoru Tanaka**
都城高専
Nat. Inst. of Tech., Miyakonojo Col.

Phase-change recording materials are used for recording media such as rewritable compact discs (CD), digital versatile discs (DVD), and blu-ray discs (BD). The recording/erasing mechanism is driven by fast " amorphous-crystal " structural change, because the reflectivity of crystal is quite different from that of amorphous in these materials. Previously some studies suggested that local atomic configurations in amorphous phase is largely similar to that in crystalline phase. In this talk, we introduce a model of phase change materials which has amorphous structure and crystal structure. This is a collaborative research with Professor A. Hirata. We also consider the expected number of infinite clusters, and the exponential tail decay of the radius and the size of a cluster in a percolation of planer graphs related to this model.

# 結晶構造に近いアモルファス構造のモデル化とパーコレーション

田中　守

都城高専

平田 秋彦氏（早稲田大学）との共同研究

IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数 I
2020年 9 月 8日
九州大学マス・フォア・インダストリ研究所　On-line 研究会 (Zoom)

# 目次

# GeTe-$Sb_2Te_3$ (GST)

GST は、結晶相とアモルファス相をもつ相変化材料の1つ
レーザーを当てる強さと時間を変えることで、それぞれの相に瞬時に変化させること
ができる。それぞれの相の光の反射性の違いを用いて、CD、DVD、BDなどに利用さ
れている。 特に、$(GeTe)_2(Sb_2Te_3)$ が一般的に使われている。

## 研究の目的

- GST のアモルファス構造の単純なモデルを与えること
- GST : $(GeTe)_n(Sb_2Te_3)_m$ の組成比 n:m と構造の関係について考察すること
- 数学的に興味深い研究対象を創出すること

松永・児島・山田・小原・高田, まてりあ (Materia Japan) - 第52巻　第2号, (2013).
松永・児島・山田・他, SPring-8 利用者情報（2011年5月）

Ge : ゲルマニウム
Sb : アンチモン
Te : テルル

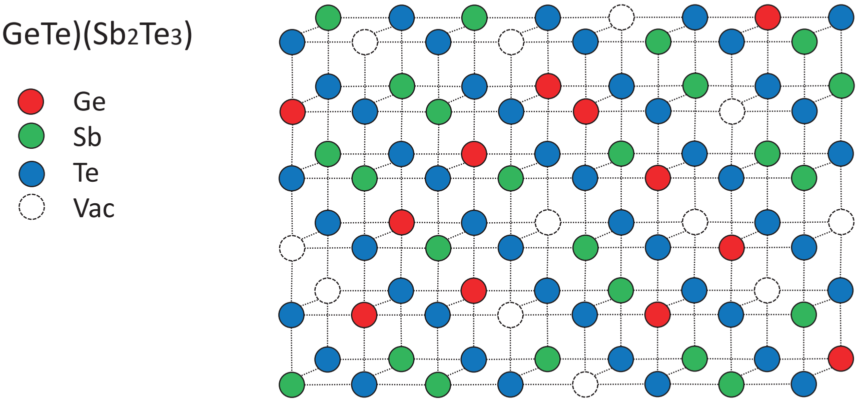
**Periodic Table of the Elements**

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 H | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 He |
| 3 Li | 4 Be | | | | | | | | | | | 5 B | 6 C | 7 N | 8 O | 9 F | 10 Ne |
| 11 Na | 12 Mg | | | | | | | | | | | 13 Al | 14 Si | 15 P | 16 S | 17 Cl | 18 Ar |
| 19 K | 20 Ca | 21 Sc | 22 Ti | 23 V | 24 Cr | 25 Mn | 26 Fe | 27 Co | 28 Ni | 29 Cu | 30 Zn | 31 Ga | 32 Ge | 33 As | 34 Se | 35 Br | 36 Kr |
| 37 Rb | 38 Sr | 39 Y | 40 Zr | 41 Nb | 42 Mo | 43 Tc | 44 Ru | 45 Rh | 46 Pd | 47 Ag | 48 Cd | 49 In | 50 Sn | 51 Sb | 52 Te | 53 I | 54 Xe |
| 55 Cs | 56 Ba | 57~71 La-Lu | 72 Hf | 73 Ta | 74 W | 75 Re | 76 Os | 77 Ir | 78 Pt | 79 Au | 80 Hg | 81 Tl | 82 Pb | 83 Bi | 84 Po | 85 At | 86 Rn |
| 87 Fr | 88 Ra | 89~103 Ac-Lr | 104 Rf | 105 Db | 106 Sg | 107 Bh | 108 Hs | 109 Mt | 110 Ds | 111 Rg | 112 Cn | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | 57 La | 58 Ce | 59 Pr | 60 Nd | 61 Pm | 62 Sm | 63 Eu | 64 Gd | 65 Tb | 66 Dy | 67 Ho | 68 Er | 69 Tm | 70 Yb | 71 Lu |
| | | | 89 Ac | 90 Th | 91 Pa | 92 U | 93 Np | 94 Pu | 95 Am | 96 Cm | 97 Bk | 98 Cf | 99 Es | 100 Fm | 101 Md | 102 No | 103 Lr |

# 結晶相における GST の特徴

GeTe から $Sb_2Te_3$ の割合を増やしていって $(GeTe)(Sb_2Te_3)_2$ までは
NaCl 型構造として単一相として結晶化させることができる。

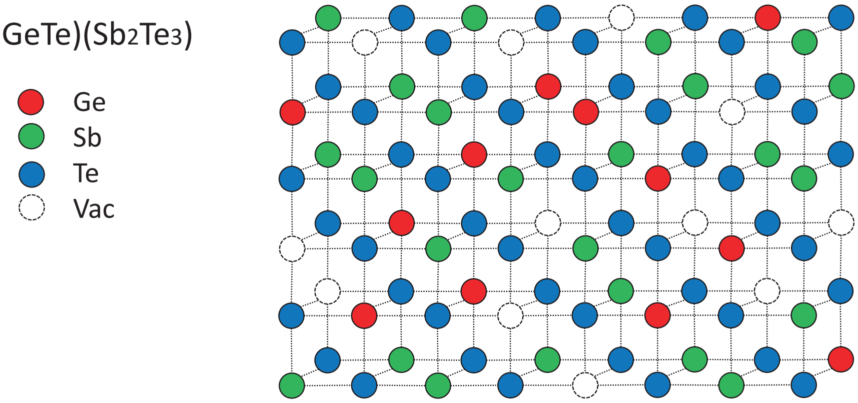
例：$(GeTe)(Sb_2Te_3)$




# 結晶相における GST の特徴

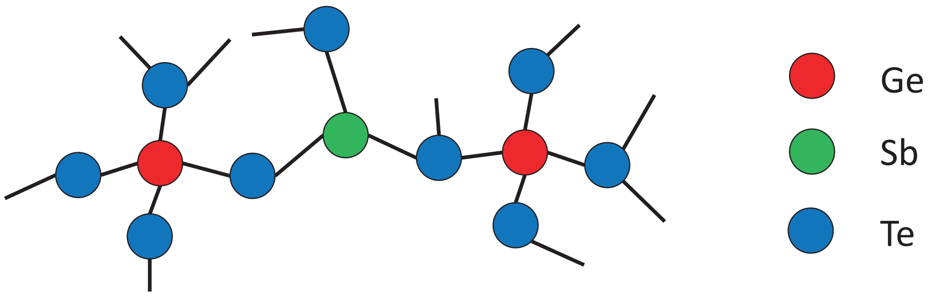
結晶相では、Cl-サイトは Te によって占有されており、
Na-サイトは Ge、Sb、または Vac (空孔)によってランダムに占有されている。

例：$(GeTe)(Sb_2Te_3)$



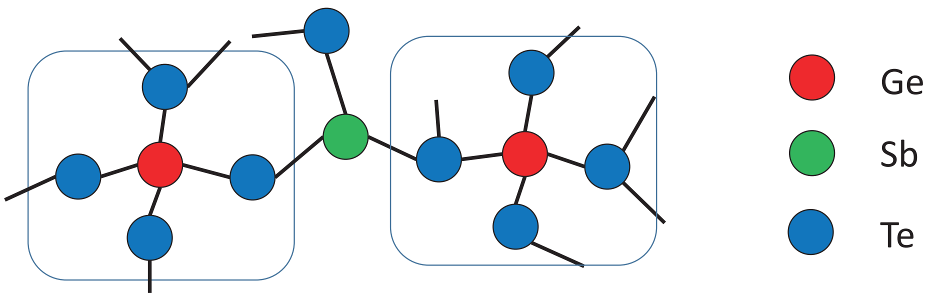
# アモルファス相における GST の特徴

- 共有結合の腕の数は、
  Ge は 4、 Sb は 3、 Te は 2 か 3。



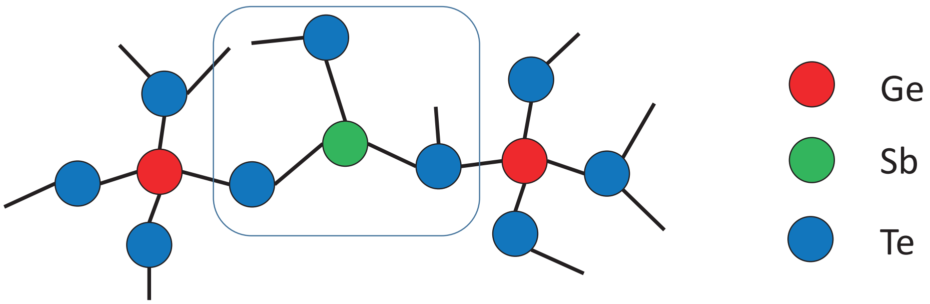

# アモルファス相における GST の特徴

- アモルファス構造は、
  $GeTe_4$ と $SbTe_3$ の組み合わせとみなすことができる。



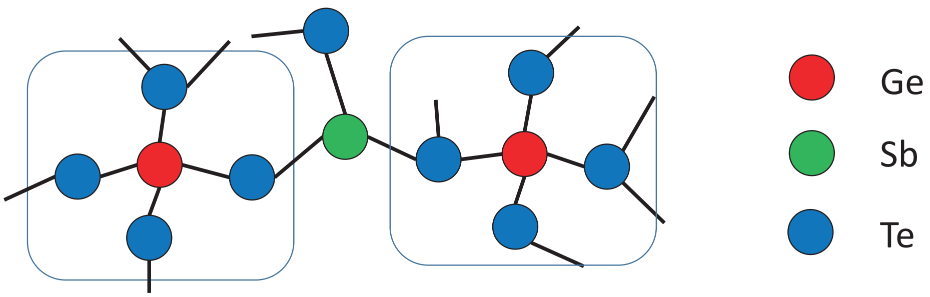
# アモルファス相における GST の特徴

- アモルファス構造は、
  $GeTe_4$ と $SbTe_3$ の組み合わせとみなすことができる。



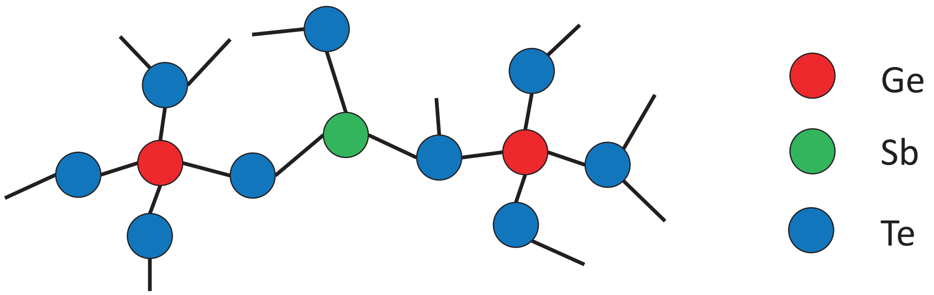

# アモルファス相における GST の特徴

- アモルファス相における Ge-Te 共有結合は、結晶相におけるものより特に短い。この、Ge-Te 共有結合の構造が、アモルファス相の安定性に重要であることが信じられている。



# アモルファス相における GST の特徴

- アモルファス相における GST も、
  局所的には NaCl 結晶のような原子構造をもつこと
  が分かってきた。*

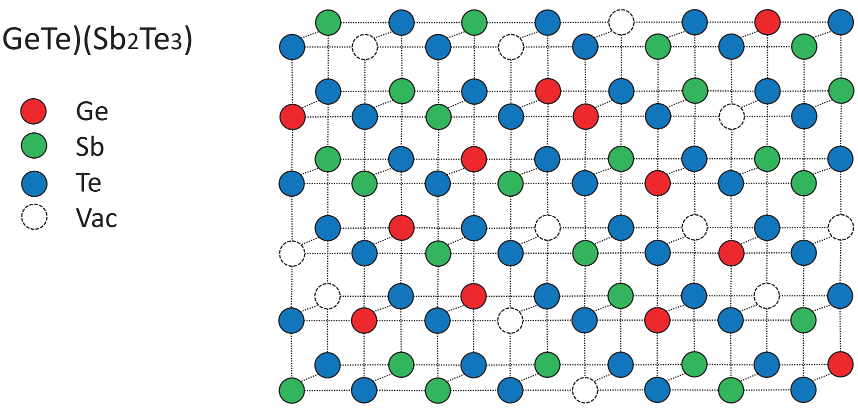



* A. Hirata et al, Phys. Rev. Lett. 120 (2018)

# アモルファス構造のモデル

結晶相の配置をもとにアモルファス相の構造をモデル化したい。

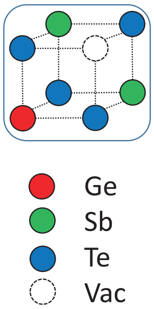
例：(GeTe)($Sb_2Te_3$)

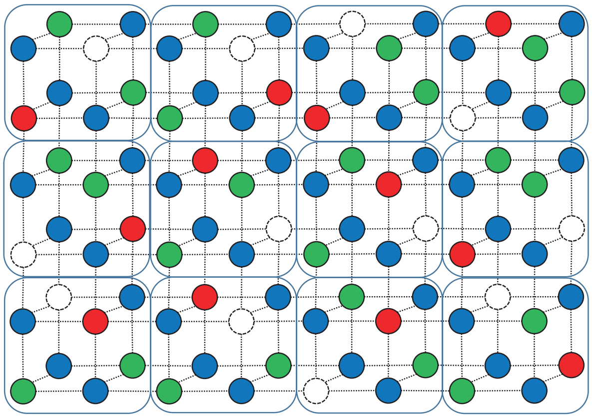


# アモルファス構造のモデル

（1）　基本ユニットをいくつか決めて、ランダムに反転や回転をして配置する。

例：$(GeTe)(Sb_2Te_3)$



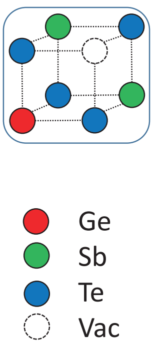



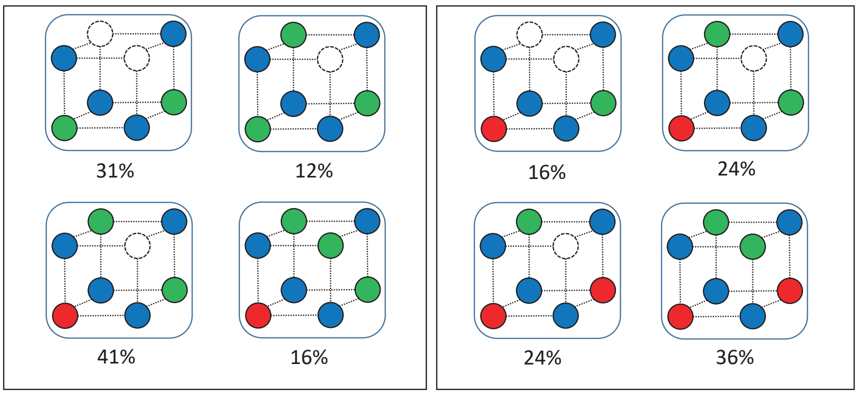
# アモルファス構造のモデル

（1の補足）ここでは、組成比に応じた必要最小限の基本ユニットを用いる。
組成比のほとんどでは基本ユニットが複数必要である。

基本ユニットの例：

$(GeTe)(Sb_2Te_3)$　　$(GeTe)(Sb_2Te_3)_2$　　$(GeTe)_2(Sb_2Te_3)$

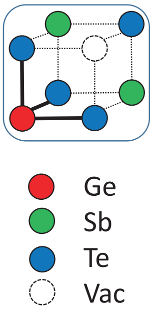


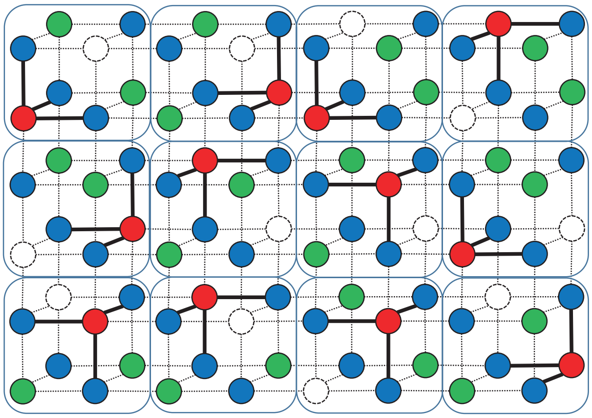



# アモルファス構造のモデル

（2）アモルファス相の安定性に重要と考えられる Ge-Te 共有結合について、
　まず同じユニット内において Ge と近くにある Te が共有結合するとする。

例：$(GeTe)(Sb_2Te_3)$

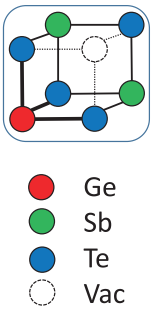


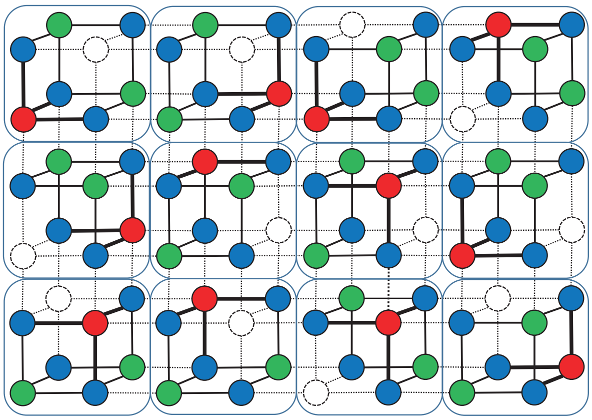



# アモルファス構造のモデル

（3）Sb も同じユニット内の Te と共有結合させておく。
　（ただし、この後の操作で組み変わることもある。）

例：$(GeTe)(Sb_2Te_3)$

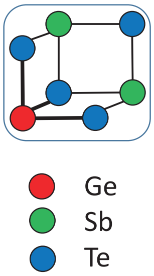


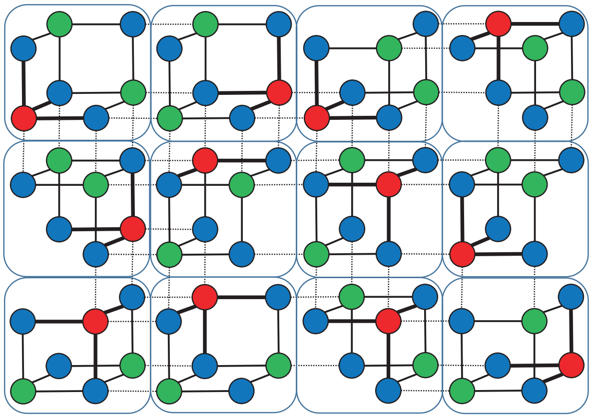



## アモルファス構造のモデル

（3）Sb も同じユニット内の Te と共有結合させておく。
（ただし、この後の操作で組み変わることもある。）

例：(GeTe)($Sb_2Te_3$)

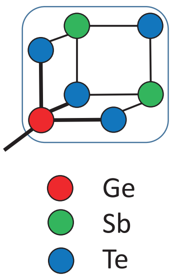


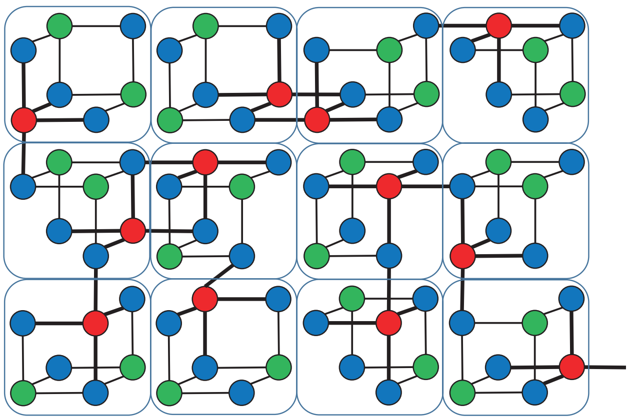



## アモルファス構造のモデル

（4-1）Ge は共有結合の腕が残っているので、
周りのユニットからランダムに Te を選び共有結合させる。

例：(GeTe)($Sb_2Te_3$)

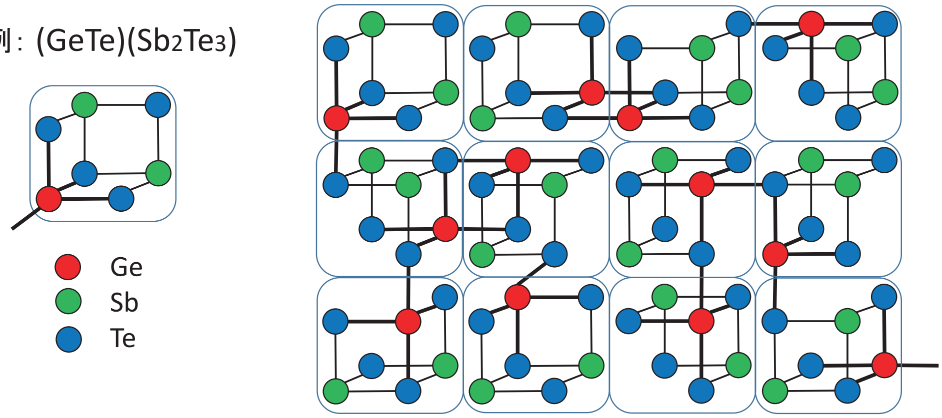


# アモルファス構造のモデル

（4-2）Te との共有結合で足りない場合は、Sb と Te の結合を切って組み直すこととする。
それでも足りないときはSbと結合させる。

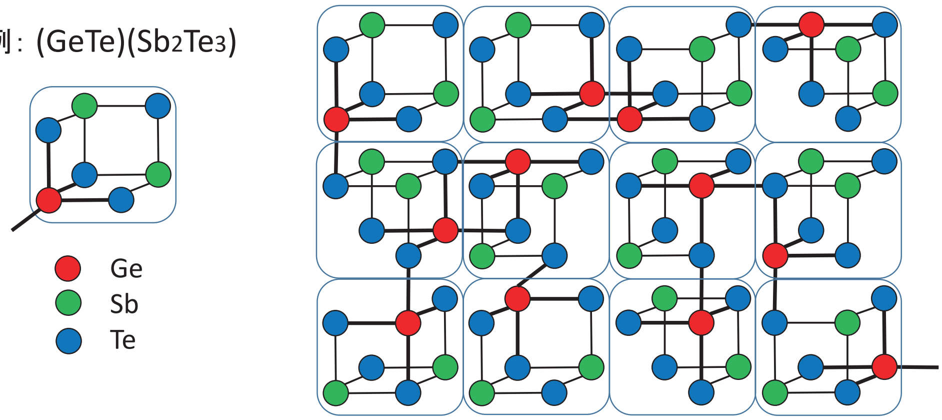
例：(GeTe)($Sb_2Te_3$)




# アモルファス構造のモデル

（4-3）さらにそれでも足りない場合は、Ge と Te との結合を切って組み直すこととする。
それでも足りないときは Ge と結合させる。

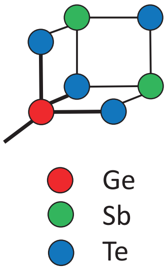
例：(GeTe)($Sb_2Te_3$)

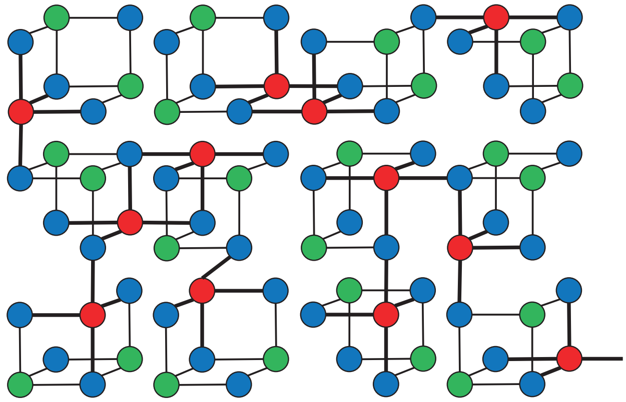


# アモルファス構造のモデル

（5） これをゆがませた形がアモルファス構造を近似していると考える。
ここでは、このモデルを用いて、基本ユニット当たりの4員環の数を数えることで、
局所的に結晶構造に近いかどうかを考察する。

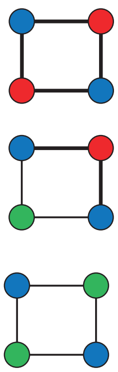
例：$(GeTe)(Sb_2Te_3)$

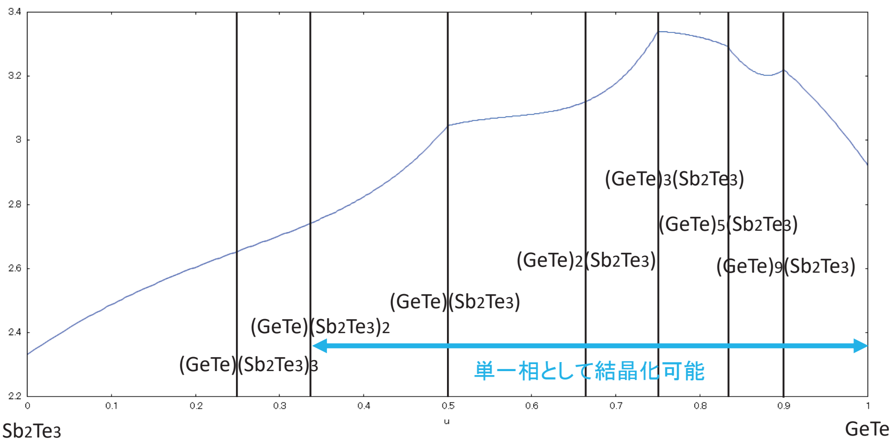


# 結晶に近い局所構造

組成比に対する基本ユニット当たりの4員環の数






$Sb_2Te_3$ GeTe

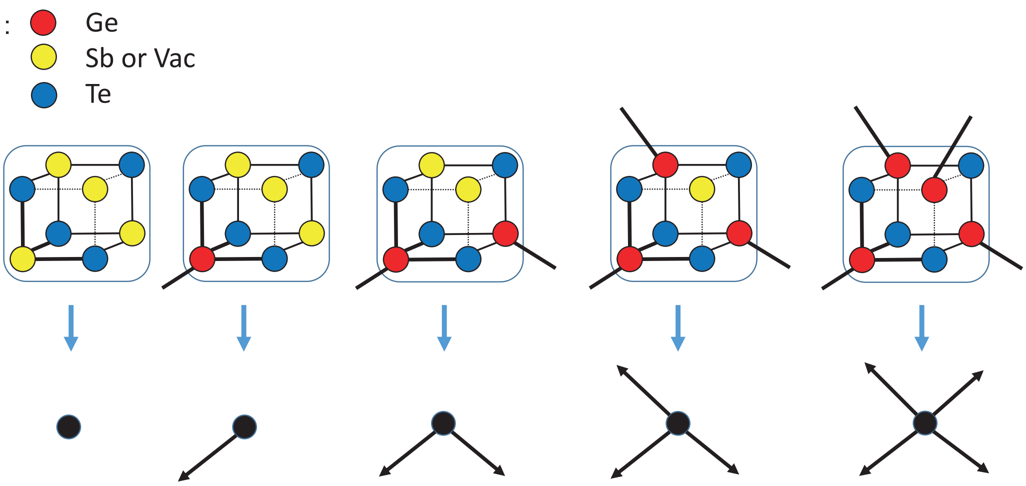
局所的に結晶構造に近くない　　局所的に結晶構造に近い

# 局所構造と大域構造

- GSTのモデルを与え、局所的に結晶に近いかどうかの性質を考察した。
- しかし、相変化において大域的な性質（共有結合している原子のクラスターの大きさ）が関係しているとも考えられる。
- そこで、このモデルの大域的な性質についても考察したい。

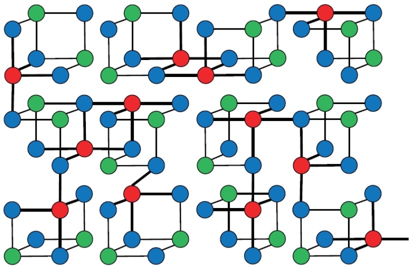
# アモルファス構造のモデル

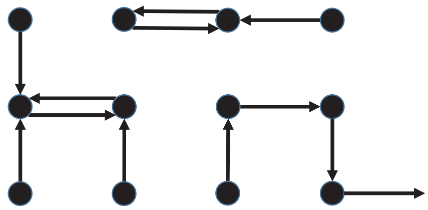
大域構造を考察するためにモデルの基本ユニットを、シンプルにする。

例：


# アモルファス構造のモデル

黒丸：　各ユニットの位置
出ていく矢印の数：　各ユニット内の Ge の数
矢印の向き：　ランダム　（単純化のため、矢印は別々の方向に向かうとする。）
知りたいこと：
　組成比によって、小さなクラスターの集合を形成するか、
　大域的につながった大きなクラスターを形成するかを判別したい。

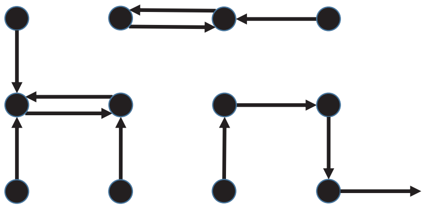




# 周辺選択パーコレーション

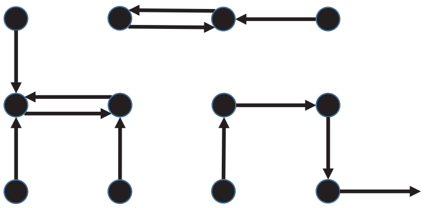
パーコレーションとは、無限にサイトが並んでいるときに、それらの間に結合が存在する確率を変え、無限に大きいクラスターが存在するかしないか（相変化）の境目の確率を計算（または評価）する研究分野である。

GST のモデルの大域構造を調べるために、
各サイトが周りのサイトをいくつかランダムに選ぶパーコレーションを考える。



# 周辺選択パーコレーション

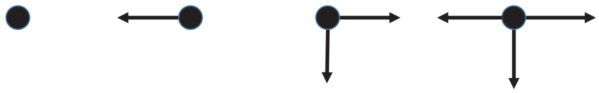
V: 結晶格子
E: 結合できるサイトの組の集合
d: 周りの結合できるサイトの個数（NaCl結晶構造だと d = 6）
数学的には、G=(V,E) は無限有向頂点推移的d-正則グラフでよい。



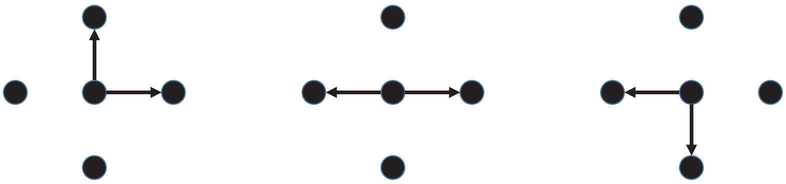
# 周辺選択パーコレーション

$p_k$: 各サイトが周りのサイトを k 個だけ選ぶ確率（Ge の個数が k の割合）

k = 0　k = 1　k = 2　k = 3　…



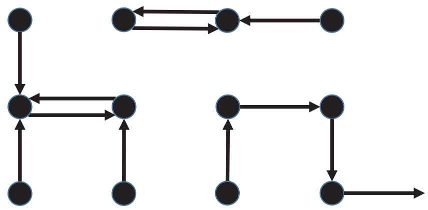
周りのどのサイトを選ぶかは同確率とする。



# 周辺選択パーコレーション

<u>定理</u>

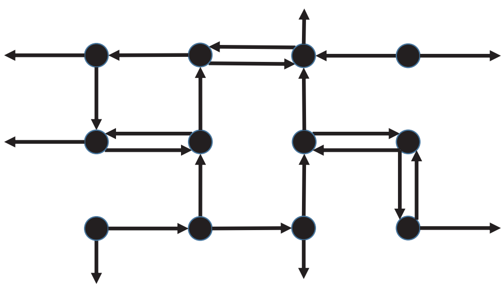
確率 $p_0+p_1$ が十分 1 に近いならば、
つまり、単位ユニット当たり Ge の数がほぼ1つ以下ならば、
大域的につながったクラスターは存在しない。
つまり、小さなクラスターの集合である。



# 周辺選択パーコレーション

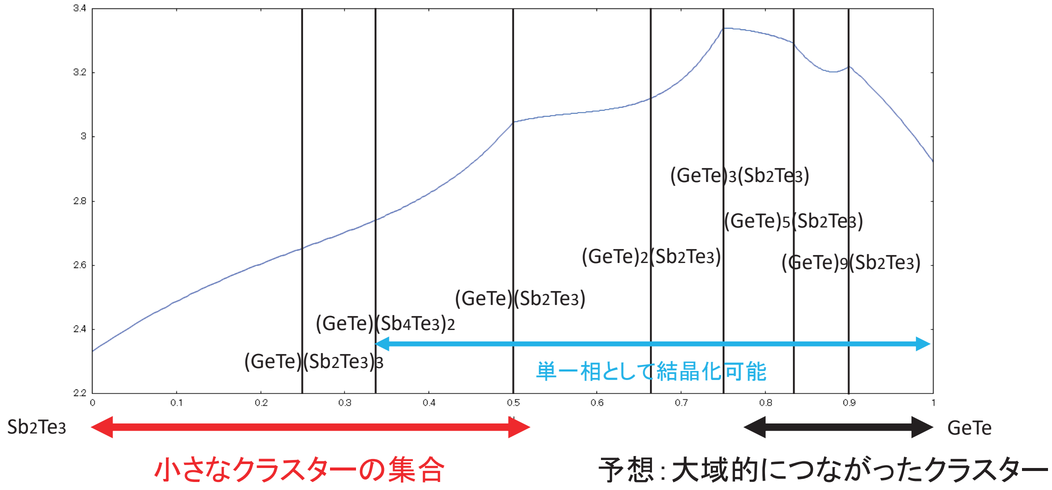
<u>定理</u>

<u>平面の正方格子、三角格子、六法格子に限る</u>と、
確率 $p_2+p_3+ \ldots + p_d$ が十分 1 に近いならば、
つまり、単位ユニット当たり Ge の数がほぼ2つ以上ならば、
大域的につながったクラスターが存在する。



# 大域的な構造

組成比に対する基本ユニット当たりの4員環の数




# まとめ

- GSTのアモルファス相のモデルを、Ge, Sb, Te の共有結同の数と局所的な結晶構造に基づいて与えた。
- そのモデルから $(GeTe)_3(Sb_2Te_3)$ が最も局所的に結晶構造に近いことが示唆された。
- $(GeTe)(Sb_2Te_3)_m$ の m が 1 以上であれば、アモルファス相では、小さいクラスターの集合であることが示唆された。
- 数学的に興味深いと考えた周辺選択パーコレーションを定義した。
  （同様のパーコレーションを専門家に聞いても見つからなかった。）
- 周辺選択パーコレーションについては、より一般のグラフにおいて、いくつかの定理を与えている (arXiv:1604.00371)

# 有限時間特異性: 力学系的アプローチ
**(Finite-time singularity: a dynamical system approach)**

**松江要, Kaname Matsue**
九州大学 IMI
Kyushu Univ. IMI

This talk aims at describing finite-time singularities for solutions of ordinary differential equations. We mainly prove that appropriate desingularizations of time and space variables (including compactifications) with standard theory of dynamical systems provide comprehensive description of blow-up solutions, finite-time extinction as well as their secondary objects such as compacton and quenching solutions which are difficult to describe the behavior both mathematically and numerically. Our characterization also enables qualitative and quantitative descriptions of these phenomena through (rigorous) numerics, which will provide a fundamental idea to study time-dependent “singularities” of various kinds.

松江　要
九州大学　マス・フォア・インダストリ研究所
九州大学　カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所
科学技術振興機構　研究開発戦略センター

# 有限時間特異性

## - 力学系的アプローチ -

2020. 9. 8

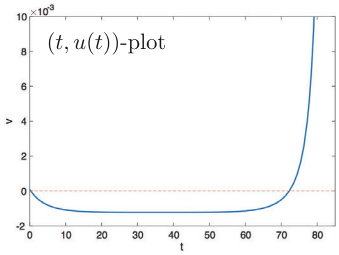
材料科学における幾何と代数 I@IMI Zoom

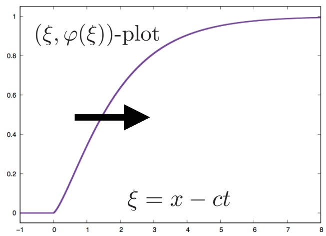
ILLINOIS　I²CNER　KYUSHU UNIVERSITY　Institute of Mathematics for Industry Kyushu University　CRDS JST

## お断り：材料科学と完全に独立した話

以下のような設定に「還元」できる問題が
あるかどうかは数学の外の問題.
知恵を拝借したく.

# “時間”により生じる特異性




**<u>例1</u>**

$$\begin{cases} u' = u^2 \\ u(0) = a > 0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \boxed{u(t) = \frac{1}{a^{-1} - t}}$$

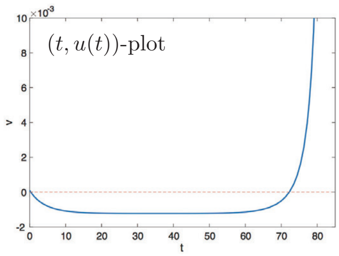
**<u>例2</u>**

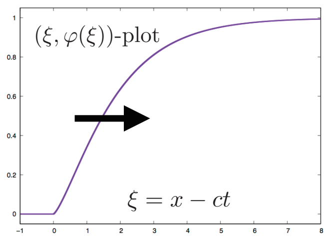
$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + \lambda e^u \\ u(0,x) = u_0(x) \end{cases} \quad + \text{b.c.}$$

固体燃料の燃焼モデル

「発火」⇔ $\lim_{t \to t_{\max}} \|u(t,\cdot)\|_\infty = \infty$

# “時間”により生じる特異性



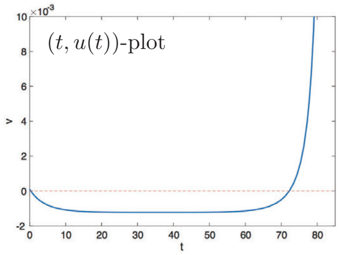



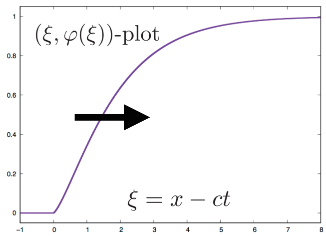

$$\begin{cases} u' = u^2 \\ u(0) = a > 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} u_t = u_{xx} + \lambda e^u \\ u(0,x) = u_0(x) \end{cases} \quad + \text{b.c.}$$

一般に、初期段階では判断できない

予測・制御が容易でない

# “時間”により生じる特異性




## いつ？ どこで？ どのように？

「爆発」「絶滅」「コンパクトン」「急冷」etc.

キー：“無限”“時間”の取り扱い

# 1. 爆発解

“擬斉次”ベクトル場
“無限”
“時間”
力学系より
“爆発解”

# 2. 絶滅

有限進行波
退化性と“時間”
絶滅・コンパクトン・デッドコア

# 3. 双曲性を越える

$$y' = f(y), \ \ y(0) = y_0 \qquad (※)$$

$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, 滑らか

8

## “擬斉次”ベクトル場

**定義** [e.g., Dumortier, 1993]

- $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ が型 $\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$ 、次数 k を持つ擬斉次関数

  $\Leftrightarrow \ f(r^{\alpha_1}x_1, \cdots, r^{\alpha_n}x_n) = r^k f(x_1, \cdots, x_n), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, \quad r \in \mathbb{R}.$

- $f = (f_1, \cdots, f_n) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ が型 $\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$、$(\alpha_i \in \mathbb{Z}_{>0})$ 次数 k+1 を持つ 擬斉次ベクトル場

  $\Leftrightarrow \ \forall f_j$ は型 $\alpha$、次数 $k + \alpha_j$ を持つ擬斉次関数

**例**

型(1,2), 次数2の擬斉次ベクトル場

$$\dot{u} = u^2 - v$$

$$\dot{v} = \frac{1}{3}u^3$$

$$u = r\bar{u}, \ \ v = r^2\bar{v}$$

$$\Rightarrow \quad (r\bar{u})^2 - r^2\bar{v} = r^{1+1}(\bar{u}^2 - \bar{v})$$

$$\frac{1}{3}(r\bar{u})^3 = r^{1+2}\frac{1}{3}\bar{u}^3$$

9

# “擬斉次”ベクトル場

**定義** [M., SIADS, 17(2018), 2249-2288]

・ $f=(f_1,\cdots,f_n):\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ が型 $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$、
**次数 k+1 を持つ (無限大における)漸近的擬斉次ベクトル場**

⇔ $\exists\{f_{\alpha,k}\}_{j=1}^n$ ：型 $\alpha$、次数 $k+1$ を持つ擬斉次ベクトル場 s.t.

$$\lim_{r\to+\infty} r^{-(k+\alpha_j)}\left\{f_j(r^{\alpha_1}x_1,\cdots,r^{\alpha_n}x_n)-r^{k+\alpha_j}(f_{\alpha,k})_j(x_1,\cdots,x_n)\right\}=0$$

$(x_1,\cdots,x_n)\in S^{n-1}$ **について一様**

**例**

$$u'=u^2-v$$
$$v'=\frac{1}{3}u^3-u$$

$$u=r\bar{u},\ v=r^2\bar{v}$$

$$(r\bar{u})^2-r^2\bar{v}=r^{1+1}(\bar{u}^2-\bar{v})$$
$$\frac{1}{3}(r\bar{u})^3=r^{1+2}\frac{1}{3}\bar{u}^3$$
$$f_1(u,v)\equiv u^2-v,\ f_2(u,v)\equiv\frac{1}{3}u^3$$

**型(1,2), 次数2の擬斉次成分**

$$\lim_{r\to+\infty} r^{-2}\left\{(r\bar{u})^2-(r^2\bar{v}))-r^2f_1(\bar{u},\bar{v})\right\}\equiv 0,$$

$$\lim_{r\to+\infty} r^{-3}\left\{\frac{1}{3}(r\bar{u})^3-(r\bar{u})-r^3f_2(\bar{u},\bar{v})\right\}=\lim_{r\to+\infty} r^{-2}\bar{u}=0$$

**×(-1)**

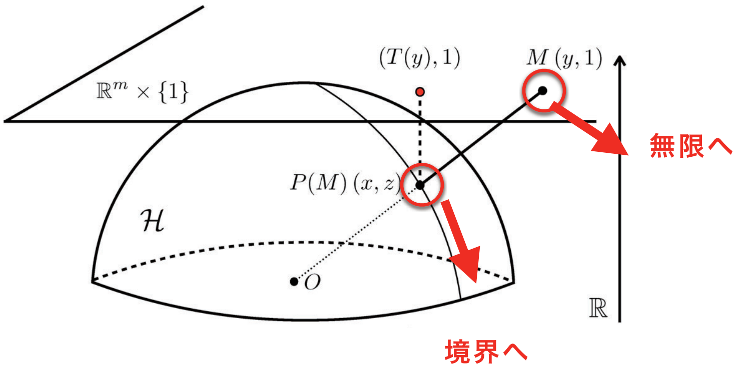
10

$$y'=f(y),\ y(0)=y_0 \qquad (※)$$

$f$ ：型 $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$ 、次数 $k+1$ の
なめらかな漸近的擬斉次ベクトル場

11

## “無限” コンパクト化




$$T(y) = x := \frac{y}{\kappa(y)}$$

$$\kappa(y) = \left(1 + \sum_{i=1}^{n} y_i^2\right)^{1/2}$$

“ポアンカレコンパクト化”

H. Poincare, 1881

J. Hell, 2011

A. Takayasu, K. M., et. al., JCAM, 314(2017), 10-29



## “無限” コンパクト化

- $\alpha_1\beta_1 = \alpha_2\beta_2 = \cdots = \alpha_n\beta_n \equiv c \in \mathbb{N}.$
- $a_1, \cdots, a_n \geq 1$

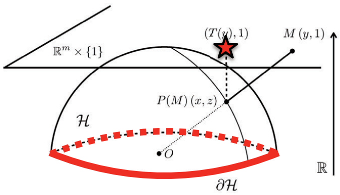
$\alpha = (1,1)$

**定義** [M., SIADS, 17(2018), 2249-2288, cf. Elias-Gingold, JMAA (2006)]

型 $\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$ の**擬ポアンカレコンパクト化**：

$T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $\quad p(y) = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i y_i^{2\beta_i}\right)^{1/2c}$, $\quad \kappa(y) := (1 + p(y)^{2c})^{1/2c}$

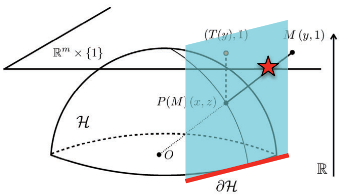
$T(y) = x, \quad x_i := \dfrac{y_i}{\kappa(y)^{\alpha_i}}$




**無限遠** ⇔ $\{p(x) = 1\}$

型 $\alpha$ の**指向的コンパクト化**：

$$y_1 = \frac{1}{s^{\alpha_1}}, y_2 = \frac{x_2}{s^{\alpha_2}}, \cdots, y_n = \frac{x_n}{s^{\alpha_n}}.$$




$\{p(x) = 1\}$ or $\{s = 0\}$ : **地平線**

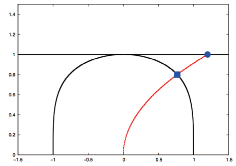
**無限遠** ⇔ $\{s = 0\}$

## “無限” コンパクト化

$T$ は $\mathbb{R}^n$ を $\mathcal{D} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p(x) < 1\}$ に移す.

$p(y) \to \infty \Leftrightarrow p(x) \to 1$

$$T_{qP}(y) = x, \quad x_i := \frac{y_i}{\kappa(y)^{\alpha_i}}.$$



**定義** [M., SIADS, 17(2018), 2249-2288]

・軌道 $\{y(t)\}_{t\in(a,b)} \subset \mathbb{R}^n$ が**方向** $x_* \in \mathcal{E}$ **に向かって発散する**

$\underset{\text{def}}{\Leftrightarrow}$

$$p(y(t)) \to \infty, \quad \left(\frac{y_1}{\kappa(y)^{\alpha_1}}, \cdots, \frac{y_n}{\kappa(y)^{\alpha_n}}\right) \to x_* \in \mathcal{E} \quad \text{as } t \to a+0 \text{ or } b-0$$

14

## “時間” 時間スケール特異点解消

$y' = f(y), \ y(0) = y_0$ (※)

$f$ : 型 $\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$ 、次数 $k+1$ の
なめらかな漸近的擬斉次ベクトル場

**定義**

(※)の**爆発解** $\Leftrightarrow$ $p(y(t)) \to \infty$ as $t \to t_{\max} < \infty$

$p(y) := \left(\sum_{i=1}^n a_i y_i^{2\beta_i}\right)^{1/2c}$ となる解

15

## “時間” 時間スケール特異点解消

$$y' = f(y),\ y(0) = y_0$$ (※)

型 $\alpha$ の擬ポアンカレコンパクト化を適用

$$\tilde{f}_j(x_1,\cdots,x_n) := \kappa^{-(k+\alpha_j)} f_j(\kappa^{\alpha_1}x_1,\cdots,\kappa^{\alpha_n}x_n),\quad j=1,\cdots,n$$

$$(\mathrm{Note}:\ y_i = \kappa^{\alpha_i}x_i)$$

$$x_i' = \frac{\kappa^{k+\alpha_i}\tilde{f}_i(x)}{\kappa^{\alpha_i}} - \frac{\kappa^{\alpha_i}x_i}{\beta_i\kappa^{\alpha_i+2c}}\left(\sum_{j=1}^{n}\beta_j(\kappa^{\alpha_j}x_j)^{2\beta_j-1}\kappa^{k+\alpha_j}\tilde{f}_j(x)\right)$$

$$x_i(0) = \frac{y_{0i}}{\kappa(y_0)^{\alpha_i}}$$

**地平線にて発散**

16

## “時間” 時間スケール特異点解消

$$x_i' = \frac{\kappa^{k+\alpha_i}\tilde{f}_i(x)}{\kappa^{\alpha_i}} - \frac{\kappa^{\alpha_i}x_i}{\beta_i\kappa^{\alpha_i+2c}}\left(\sum_{j=1}^{n}\beta_j(\kappa^{\alpha_j}x_j)^{2\beta_j-1}\kappa^{k+\alpha_j}\tilde{f}_j(x)\right)$$

$$x_i(0) = \frac{y_{0i}}{\kappa(y_0)^{\alpha_i}}$$

**補題** [M., SIADS, 17(2018), 2249-2288]

上記右辺のベクトル場は、$\kappa \to \infty$ の時 $O(\kappa^k)$ である。
特に、**このオーダーは i に依らず決まる。**

**Note :** $\alpha_1\beta_1 = \alpha_2\beta_2 = \cdots = \alpha_n\beta_n \equiv c \in \mathbb{N}.$

17

$$\frac{d\tau}{dt} = \kappa(T^{-1}(x(t)))^k$$

18

## “時間” 時間スケール特異点解消

$y' = f(y),\ y(0) = y_0$ (※)

$$\tilde{f}_j(x_1, \cdots, x_n) := \kappa^{-(k+\alpha_j)} f_j(\kappa^{\alpha_1} x_1, \cdots, \kappa^{\alpha_n} x_n), \quad j = 1, \cdots, n$$

(Note : $y_i = \kappa^{\alpha_i} x_i$)

$\frac{d\tau}{dt} = \kappa(T^{-1}(x(t)))^k$

$$\dot{x}_i \equiv \frac{dx_i}{d\tau} = \tilde{f}_i - \left( \sum_{j=1}^{n} \beta_j x_j^{2\beta_j - 1} \tilde{f}_j \right) \frac{x_i}{\beta_i} \equiv g_i(x)$$

$$x_i(0) = \frac{y_{0i}}{\kappa(y_0)^{\alpha_i}}$$

(☆)

$\overline{\mathcal{D}}$ 上特異点解消ベクトル場

19

## “時間” 時間スケール特異点解消

**定義** [M., cf. Elias-Gingold, JMAA (2006)]

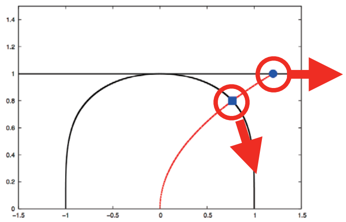
・(※) が方向 $x_* \in \mathcal{E}$ に**無限遠平衡点**を持つ
$\underset{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ $x_*$ は (☆) の平衡点である.

**命題** [M., cf. Elias-Gingold, JMAA (2006)]

・ $y(t) : (a, b) \to \mathbb{R}^n$ : (※) の解

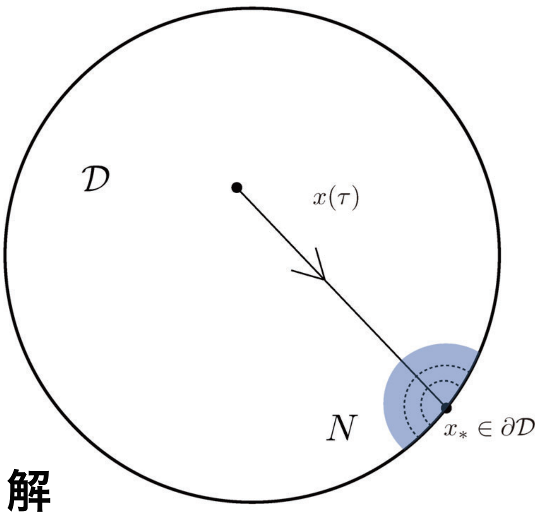
・ $y(t)$ は $t \to b-0$ あるいは $t \to a+0$ の時
方向 $x_*$ へ発散する

$\Rightarrow$ $x_*$ は (☆) の $\partial\mathcal{D}$ 上平衡点である。






## 無限遠ダイナミクス




**命題**

**地平線は(☆)の不変多様体である。**

$y' = f(y)$ **の発散する解**

$\Longleftrightarrow$

$\dfrac{dx}{d\tau} = g(x)$ **に対する** $x_* \in \partial\mathcal{D}$ **の安定多様体上の軌道**

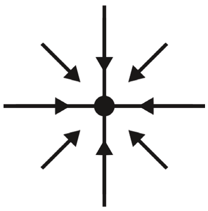
# 力学系より

$$x' = f(x, \nu), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^n \ : \ \mathrm{smooth}$$

**<u>定義</u>**（平衡点）
$(x, \nu)$ が **平衡点** ⇔ $f(x, \nu) = 0$ $\square$

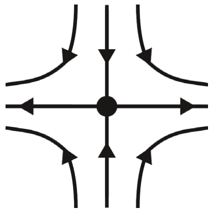
**<u>定義</u>**（双曲型平衡点）
ベクトル場 $\dot{x} = f(x)$ の平衡点 $x_*$ が**双曲型** ⇔ $\mathrm{Spec}(Df(x_*)) \cap i\mathbb{R} = \emptyset.$ $\square$

$\dot{x} = ax \ (a < 0)$
$\dot{y} = by \ (b < 0)$



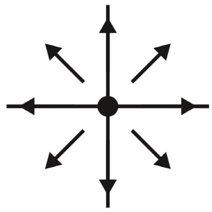
**シンク**
**(安定)**

$\dot{x} = ax \ (a > 0)$
$\dot{y} = by \ (b < 0)$



**サドル**
**(不安定)**

$\dot{x} = ax \ (a > 0)$
$\dot{y} = by \ (b > 0)$



**ソース**
**(不安定)**

22

# 力学系より

$$x' = f(x, \nu), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^n \ : \ \mathrm{smooth}$$

**<u>定義</u>**（平衡点）
$(x, \nu)$ が **平衡点** ⇔ $f(x, \nu) = 0$ $\square$

**<u>定義</u>**（双曲型平衡点）
ベクトル場 $\dot{x} = f(x)$ の平衡点 $x_*$ が**双曲型** ⇔ $\mathrm{Spec}(Df(x_*)) \cap i\mathbb{R} = \emptyset.$ $\square$

**<u>定理</u> (Hartman - Grobman)**
$\mathbb{R}^n$上ベクトル場 $\dot{x} = f(x)$ の**双曲型平衡点** $x_*$に対して、近傍Uが存在してUにおけるベクトル場は線型化ベクトル場 $\dot{x} = Df(x_*)x$ と $C^0$ 位相共役。
即ち、同相写像 $h : U \to h(U)$ が存在して、次の可換図式が成立する：

$$\begin{array}{ccc} U & \xrightarrow{\varphi(t,\cdot)} & U \\ {\scriptstyle h}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle h} \\ h(U) & \xrightarrow{e^{tDf(x_*)}} & h(U) \end{array}$$

$t \in \mathbb{R}$ は
$\varphi(t, x) \in U, \ e^{tDf(x_*)}x \in h(U)$
なる範囲で。 $\square$

23

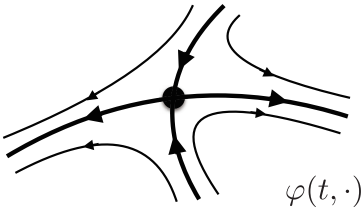
# 力学系より

<u>**定理**</u> **(Hartman - Grobman)**

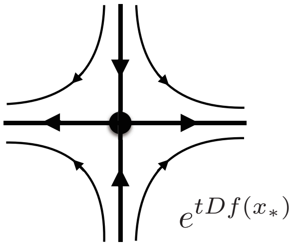
$\mathbb{R}^n$上ベクトル場$\dot{x}=f(x)$の**双曲型平衡点**$x_*$に対して、近傍Uが存在してUにおけるベクトル場は線型化ベクトル場$\dot{x}=Df(x_*)x$と$C^0$位相共役。
即ち、同相写像 $h:U\to h(U)$ が存在して、次の可換図式が成立する：

$$\begin{tikzcd} U \arrow[r, "\varphi(t,\cdot)"] \arrow[d, "h"'] & U \arrow[d, "h"] \\ h(U) \arrow[r, "e^{tDf(x_*)}"] & h(U) \end{tikzcd}$$

$t\in\mathbb{R}$は
$\varphi(t,x)\in U,\ e^{tDf(x_*)}x\in h(U)$
なる範囲で。

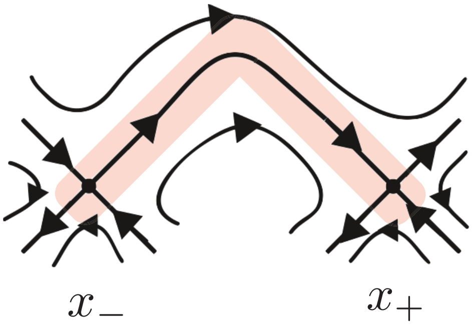



**“ = ”**




**双曲型平衡点周りでは、線型化方程式の解がダイナミクスを記述する**

# 力学系より




$$\boxed{\lim_{t\to\pm\infty}}\varphi(t,x)=x_\pm$$

**「漸近挙動」の表現**

<u>**定義**</u>　平衡点　$x_*$ の“**安定多様体**”

$\Leftrightarrow\ W^s(x_*):=\{x\mid d(\varphi(t,x),x_*)\to 0 \text{ as } t\to+\infty\}$

平衡点　$x_*$ の“**不安定多様体**”

$\Leftrightarrow\ W^u(x_*):=\{x\mid d(\varphi(t,x),x_*)\to 0 \text{ as } t\to-\infty\}$

25

$$\boxed{\frac{d\tau}{dt} = \kappa(T^{-1}(x(t)))^k}$$

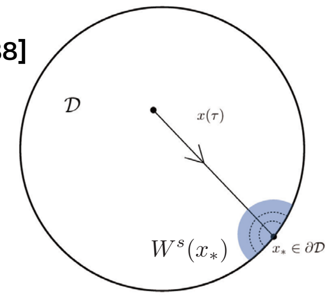
$$t_{\max} = \int_0^\infty \frac{d\tau}{\kappa(T^{-1}(x(\tau)))^k} = ?$$

26

# 爆 発 解

**定理** [定常爆発. M., SIADS, 17(2018), 2249-2288]

- $g$ : (☆)右辺は $\overline{\mathcal{D}}$ 上で $C^1$
- $x_* \in \partial\mathcal{D}$ : (☆)の **双曲型平衡点**




⇒ (※)の解 $y(t)$ で、$\{x(\tau) \equiv T(y(\tau))\}_{\tau \geq 0} \subset W^s(x_*)$ なるものは爆発解。

さらに、$p(y(t)) \sim c(t_{\max} - t)^{-1/k} \quad \text{as} \quad t \to t_{\max},$

$$y_i(t) \sim c(t_{\max} - t)^{-\alpha_i/k} \quad \text{as} \quad t \to t_{\max}$$

( $x_{*i} \neq 0$ の時) □

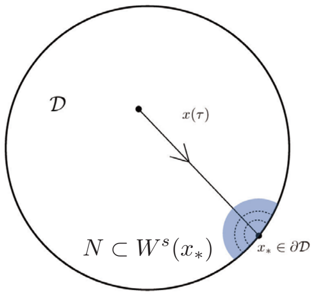
**アイデア**: Hartman-Grobmanの定理を経由して $t_{\max} - t$ の漸近挙動を記述.

27

## 爆発解

$$\{x(\tau)\} \subset W^s(x_*)$$
$$t = t_{\max}$$

“いつ”




$$x_*$$

“どこで”

$$\sim (t_{\max} - t)^{-\alpha_i/k}$$

“どのように”

28

## 爆発解

$$\{x(\tau)\} \subset W^s(S)$$
$$t = t_{\max}$$

“いつ”

平衡点以外の不変集合

$$S$$

“どこで”

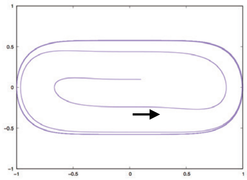
**?**

“どのように”

29

# 爆発解

**定理** [周期爆発. M., SIADS, 17(2018), 2249-2288]

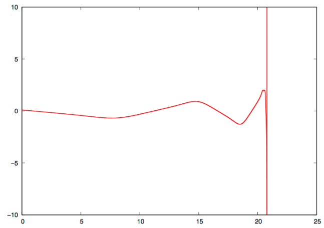


- $g$ : (☆)右辺は $\overline{\mathcal{D}}$ 上で $C^1$
- $\gamma_* = \{x_\gamma(\tau)\} \subset \partial\mathcal{D}$ : (☆)の **双曲型周期軌道**

⇒ (※)の解 $y(t)$ で、$\{x(\tau) \equiv T(y(\tau))\}_{\tau \geq 0} \subset W^s(\gamma_*)$ なるものは爆発解。

さらに、$p(y(t)) \sim c(t_{\max} - t)^{-1/k} \quad \text{as} \quad t \to t_{\max}$

$$y_i(t) \sim c(t_{\max} - t)^{-\alpha_i/k} x_{\gamma,i}(-c' \ln(t_{\max} - t)) \quad \text{as} \quad t \to t_{\max} \quad \square$$



30

# 例：定常爆発

例1
$$\begin{cases} u' = u^2 - v \\ v' = \frac{1}{3}u^3 \end{cases}$$

**型(1,2), 次数2の擬斉次ベクトル場**

擬ポアンカレコンパクト化：
$$x_1 = \frac{u}{\kappa}, \quad x_2 = \frac{v}{\kappa^2},$$
$$\kappa = \kappa(u,v) = (1 + u^4 + 2v^2)^{1/4}, \quad (a_1, a_2) = (1, 2)$$

特異点解消ベクトル場：擬ポアンカレ

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = (x_1^2 - x_2) - x_1 \left\{ x_1^3(x_1^2 - x_2) + \frac{1}{3}x_1^3 x_2 \right\}, \\ \dot{x}_2 = \frac{1}{3}x_1^3 - 2x_2 \left\{ x_1^3(x_1^2 - x_2) + \frac{1}{3}x_1^3 x_2 \right\}, \end{cases} \quad \dot{} = \frac{d}{d\tau}.$$

31

# 例：定常爆発

例1
$$\begin{cases} u' = u^2 - v \\ v' = \frac{1}{3}u^3 \end{cases}$$

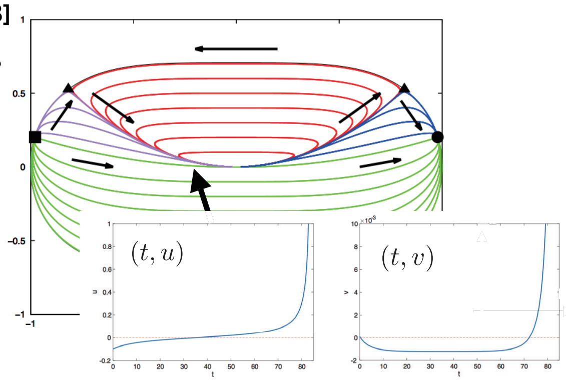
**4つの無限遠平衡点** $(x_1, x_2)$

$$x_1 = \pm\sqrt[4]{\frac{15-3\sqrt{3}}{22}} \approx \pm 0.81704027943, \quad \pm\sqrt[4]{\frac{15+3\sqrt{3}}{22}} \approx \pm 0.97883950723$$

$$x_2 = \sqrt{\frac{7+3\sqrt{3}}{44}} \approx 0.52648388611, \quad \sqrt{\frac{7-3\sqrt{3}}{44}} \approx 0.20247601301$$

**命題** [M., SIADS, 17(2018), 2249-2288]
**4つの無限遠平衡点はすべて双曲型。**
**特に、**
**●：シンク**
**▲：サドル**
**■：ソース**

**赤 ⇔ 時間大域解**
**青・紫・緑 ⇔ 爆発解**






# 例：周期爆発

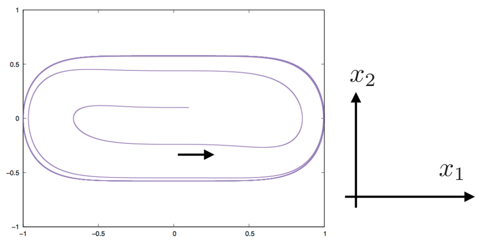
例2
(Li)
$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = -y_1^{2n+1} - y_1^n y_2. \end{cases}$$

**Lienard方程式**
**(e.g., Dumortier-Herssens, JDE, 1999)**

↑ **型: (1, n+1), 次数: n+1**

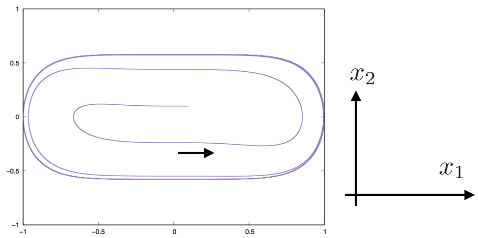
**擬ポアンカレコンパクト化、型：(1,n+1)**
$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 + x_1^{n+1}x_2^2, \\ \dot{x}_2 = -x_1^{2n+1} - x_1^n x_2 + (n+1)x_1^n x_2^3 \end{cases}$$

**こんな解がある(時間反転)：**



# 例：周期爆発

こんな解がある(時間反転)：



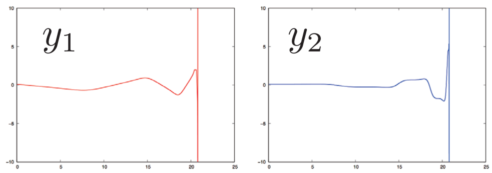

**命題** [Dumortier-Herssens, JDE, 1999]

n：偶数の時，無限遠周期軌道は双曲型

**定理** [M., SIADS, 17(2018), 2249-2288]

(Li)は、nが偶数の時

不安定周期爆発解を持つ。




(時間反転)周期爆発解

34

# 1．爆発解

“擬斉次”ベクトル場
“無限”
“時間”
力学系より
“爆発解”

# 2．絶滅

有限進行波
退化性と“時間”
絶滅・コンパクトン・デッドコア

# 3．双曲性を越える

## 進行波

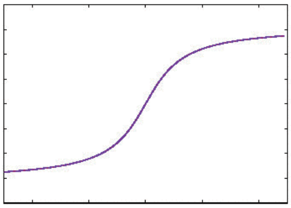
反応拡散系 $\dfrac{\partial U}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2} + F(U)$ などにおける

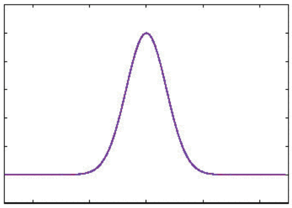
一定のプロファイルを持つ解 $U(t,x) = \varphi(x - ct)$

$x - ct \equiv \xi$ ➡ $-c\varphi' = \varphi'' + F(\varphi), \quad ' = \dfrac{d}{d\xi}$

$$\lim_{\xi \to \pm\infty} \varphi(\xi) = \varphi_\pm$$

“ **フレーム座標 $\xi$** に対するODEの境界値問題 ”





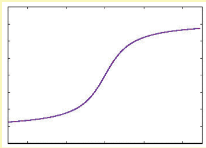
36

## 有限進行波

$\lim_{\xi \to \pm\infty} \varphi(\xi) = \varphi_\pm$ “ **無限遠のみの情報** ”

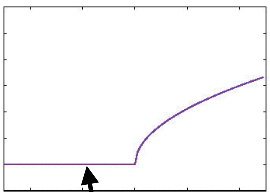
(ソリトンを含む) 進行波は通常

$\mathrm{supp}\varphi = \mathbb{R}$ を仮定している.



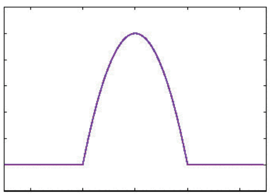
**“特異”な進行波** “**有限進行波**” [e.g., Laister-Peplow-Beardmore, AML, 2004]

**絶滅**



**恒等的にゼロ**

**コンパクトン**



**コンパクト台**を持つ進行波

37

## 退化性・特異性を発現する集合

$$\lim_{\xi\to\pm\infty}\varphi(\xi)=\varphi_\pm$$

“ 無限遠のみの情報 ”

**有限フレーム特異性の起源・・・ 「退化性」**

**例. 退化拡散** [e.g., Laister-Peplow-Beardmore, AML, 2004]

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}(u^{1+m})+u^p(1-u)(u-a),\quad (t,x)\in(0,\infty)\times\mathbb{R}$$

$m>0$ , $p>0$ with $m+p\geq 1$

→ 進行波方程式

$u(t,x)=\phi(x-ct)$

$$\phi^m\phi'=\psi$$
$$\phi^m\psi'=-c\psi-\phi(1-\phi)(\phi-a)$$

**$\phi$=0 で退化している**

38

---

$$\phi^m\phi'=\psi$$
$$\phi^m\psi'=-c\psi-\phi(1-\phi)(\phi-a)$$

**$\phi$=0 で退化している**

⬇ $$\frac{d\xi}{dz}=\phi(\xi)^m$$

(☆) $$\dot\phi=\psi$$
$$\dot\psi=-c\psi-\phi(1-\phi)(\phi-a)$$
$$\dot{}=\frac{d}{dz}$$

**特異点解消系**

39

**(☆)**

$$\dot{\phi} = \psi$$
$$\dot{\psi} = -c\psi - \phi(1-\phi)(\phi - a) \qquad \dot{} = \frac{d}{dz}$$

$\varphi(z)$ $(z \in \mathbb{R})$ ：**(☆) の** $\varphi_\pm$**をつなぐ大域解**

$$\Updownarrow$$

$\varphi(\xi)$ $\quad \xi \in (\xi_{\min}, \xi_{\max})$

40

## 計算ステップ ： 有限進行波

1. 進行波方程式を作る

$$\textbf{(*)} \quad -c\varphi' = \varphi'' + F(\varphi), \quad {}' = \frac{d}{d\xi} \quad \lim_{\xi \to \pm\infty} \varphi(\xi) = \varphi_\pm$$

2. (*)が退化しているなら、$\frac{d\xi}{dz} = \phi(\xi)^m$ などにより
   (*)を特異点解消する

3. 特異点解消系 (☆) の大域解を計算する

4. $\xi_{\min}$ と $\xi_{\max}$ を計算する

e.g., $\xi_{\min} = -\int_{-\infty}^{0} \phi(z)^m dz, \quad \xi_{\max} = \int_{0}^{\infty} \phi(z)^m dz$

41

## 計算ステップ：有限進行波

3. 特異点解消系 (☆) の大域解を計算する

4. $\xi_{\min}$ と $\xi_{\max}$ を計算する

$$\text{e.g.,}\quad \xi_{\min} = -\int_{-\infty}^{0} \phi(z)^m dz, \quad \xi_{\max} = \int_{0}^{\infty} \phi(z)^m dz$$

$\xi_{\min}, \xi_{\max}$ のいずれかが有限なら、関数

$$\phi(\xi) := \begin{cases} \varphi_- & \xi \in (-\infty, \xi_{\min}] \\ \varphi(\xi) & \xi \in (\xi_{\min}, \xi_{\max}) \\ \varphi_+ & \xi \in [\xi_{\max}, \infty) \end{cases}$$

は ( 弱解の意味で ) **有限進行波解** となる。

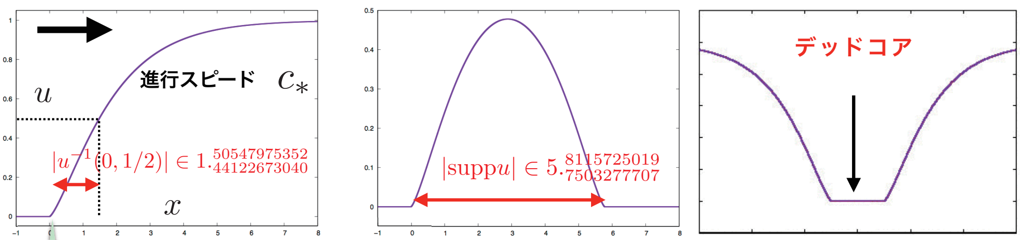
42

## 絶滅・コンパクトン・デッドコア

$$u_t = \frac{1}{m+1}(u^{m+1})_{xx} + u^p(1-u)(u-a), \quad (t,x) \in (0,\infty) \times \mathbb{R}$$

$$m = 3/4,\ p = 1/4,\ a = 0.3$$

$c_* \in 0.282842^{99}_{72}$ $\qquad$ $c_* \in 1.5 \times 10^{-6} \times [-1,1]$ $\qquad$ $c_* \in 0.282842^{99}_{72}$




絶滅プロファイル $\qquad$ コンパクトン進行波 $\qquad$ 広がる「デッドコア」

$$\sim C(\xi - \xi_{\min})^{1/(1-p)}$$

Laister-Peplow-Beardmore, AML, 2004
M., arXiv: 1711.01911

43

絶滅：有界領域での「特異性解消系」の双曲型不変集合

# 1. 爆発解

“擬斉次”ベクトル場
“無限”
“時間”
力学系より
“爆発解”

# 2. 絶滅

有限進行波
退化性と“時間”
絶滅・コンパクトン・デッドコア

# 3. 双曲性を越える

[M.] 地平線での双曲型不変集合
↓
“Type 1”爆発

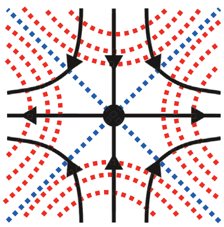
絶滅：有界領域での「特異性解消系」の双曲型不変集合
→ “Type 1”絶滅

# それ以外！

[M.] 地平線での双曲型不変集合
↓
“Type 1”爆発

## 双曲性を越える

1. 双曲型 $\sim \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}$



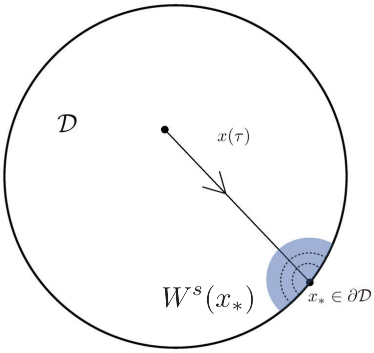
2. 半双曲型 $\sim \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

3. ベキ零 $\sim \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

非双曲型
平衡点

4. 線型零 $\sim \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

## 双曲性を越える




$x_*$ ： **双曲型**

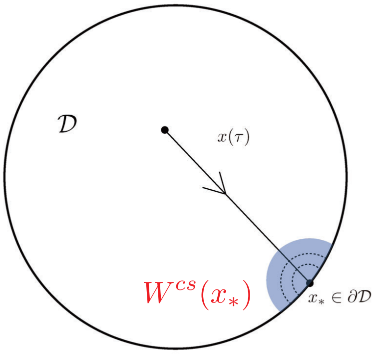
→ **タイプ-I**

$x_*$ ： **非双曲型**

→ **??**

48

## 双曲性を越える




$x_*$ ： **双曲型**

→ **タイプ-I**

$x_*$ ： **非双曲型**

→ **非線型ダイナミクスを通した漸近解析**

$$W^s(x_*) \mapsto W^{cs}(x_*)$$

“中心安定多様体”の構造

M., JDE, 267(2019), 7313-7368

M.-Takayasu, arXiv: 1902.01842, JCAM (2020), 112607
Ichida-M.-Sakamoto, arXiv: 2008.00174, to appear in JSIAM Letters

49

## 双曲性を越える

$$u_0' = \frac{1}{\sin\theta}u_1u_0^2 - \frac{2a\cos\theta}{\sin\theta}u_0^3,\qquad \left(a\in(0,1),\theta\in(0,\tfrac{\pi}{2})\right)$$
$$u_1' = \frac{a}{\sin\theta}u_0u_1^2 + \frac{1-a}{\sin\theta}\frac{u_0u_1^3}{u_1+2\cos\theta u_0}\qquad u_0(0),u_1(0)>0$$

$$\frac{dv_0}{dt} = a{v_0}^{\frac{a+1}{a}}v_1,\quad \frac{dv_1}{dt} = a{v_1}^{\frac{a+1}{a}}v_0$$
$$a\in\mathbb{R},\ v_0(0)\neq v_1(0)>0$$

$$\frac{du_0}{dt} = u_1{u_0}^{-2},\quad \frac{du_1}{dt} = u_1^2u_0^{-1}$$
$$u_0(0)>0,\ u_1(0)>0$$

$$\begin{cases} x' = y \\ y' = -(x^{2n+1}+x^{2n}) - x^n y \end{cases}$$

n：奇数 → 周期爆発・増大

M., JDE, 267(2019), 7313-7368

**PDE（指数関数非線型性）の有限差分近似**

$$\begin{cases} u_t = u_{yy} + \lambda e^{u^m}, & (t,y)\in(0,T)\times(0,1), \\ u(0,y) = u_0(y), & y\in(0,1), \\ u(t,y) = 0 & \text{at } y=0,1,\quad t\in[0,T) \end{cases}$$

**急冷進行波**

$$u_t = u_{xx} + (1-u)^{-\alpha},$$
$$t>0,\ x\in\mathbb{R},\alpha\in\mathbb{N}$$

**コンパクトン進行波**

$$u_t + (u^m)_x + (u^n)_{xxx} = 0,\quad m>0,\ 1\le n\le 3$$

**MEMS方程式の進行波**

$$u_t = u^p(u_{xx}+u) - u,\quad p\in 2\mathbb{N}$$

M.-Takayasu, arXiv: 1902.01842,
JCAM (2020), 112607
Ichida-M.-Sakamoto, arXiv: 2008.00174,
to appear in JSIAM Letters

50

## まとめ

- コンパクト化，時間スケール特異点解消
- 有限時間特異性 ⇔ 特異点解消ベクトル場の(中心)安定多様体
- 爆発解 ⇔ 地平線上不変集合の安定多様体上の軌道
- (厳密な解のプロファイル＋爆発・絶滅時刻: 精度保証付き数値計算 )

## 展望：一例

? 解析的展望: 格子力学系 （無限次元系への拡張）

Takayasu-M. et.al., JCAM, 314(2017), 10-29
M., SIADS, 17(2018), 2249-2288
松江 要，日本シミュレーション学会誌「シミュレーション」, 37(2018), 188-196
M., JDE, 267(2019), 7313-7368
M.-Takayasu, JCAM (2020), 112607
M.-Takayasu, Numerische Mathematik, 145(2020), 605-654
Ichida-M.-Sakamoto, to appear in JSIAM Letters

Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

I²CNER

# 東京大学大学院数理科学研究科ＦＭＳＰ社会数理実践研究：結晶と準結晶に動機付けられた数学の問題 II

**(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 : Problems in Mathematics Motivated by Crystals and Quasi-Crystals II)**

**中川淳一, Junichi Nakagawa**

東京大学 数理科学

The Univ. of Tokyo

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. The academic-Industry collaboration Program ‘Mathematical Innovation in Data Science’ has started up in April 2018 provided Nippon Steel Corporation with funds, affiliated with the Graduate School of Mathematical Science, the University of Tokyo has proposed themes for the program, and provided several themes for doctoral students who mainly major in algebra or geometry.

We have discussed problems in mathematics motivated by crystals and quasi-crystals are highlighted as themes of interest in mathematics and important in materials for several years. I am going to speak at this workshop on the outcomes regarding 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. 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.

研究集会　材料科学における幾何と代数I

# 東京大学大学院数理科学研究科
# 社会数理実践研究の紹介
# 「結晶、物質、材料を動機付けとする数学の問題」

2020.9.7～8　九州大学　マス・フォア・インダストリ研究所

**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」**
**特任教授**

**中川淳一**

Graduate School of Mathematical Sciences
The University of Tokyo

## 東京大学大学院数理科学研究科　FMSP社会数理実践研究とは

東京大学大学院数理科学研究科のFMSP (Leading Graduate Course Frontiers of Mathematical Science and Physics)のコース教育のひとつ

・FMSPコース生の必須科目

・7月に5～6企業が問題を提案

・7月の問題提案をきいた後、博士課程1年生が希望する班を申請、9月に班分け完了。1班に2～3名

・各企業の問題に取り組むための体制は、助教2名（テーマ担当主査、同副主査）、指導教授1～2名からなる。

・10月から1年間かけて、学生が研究した結果を、6月に中間報告、10月に成果報告、3月に数理科学実践レターとして論文化（査読あり）

Graduate School of Mathematical Sciences
The University of Tokyo

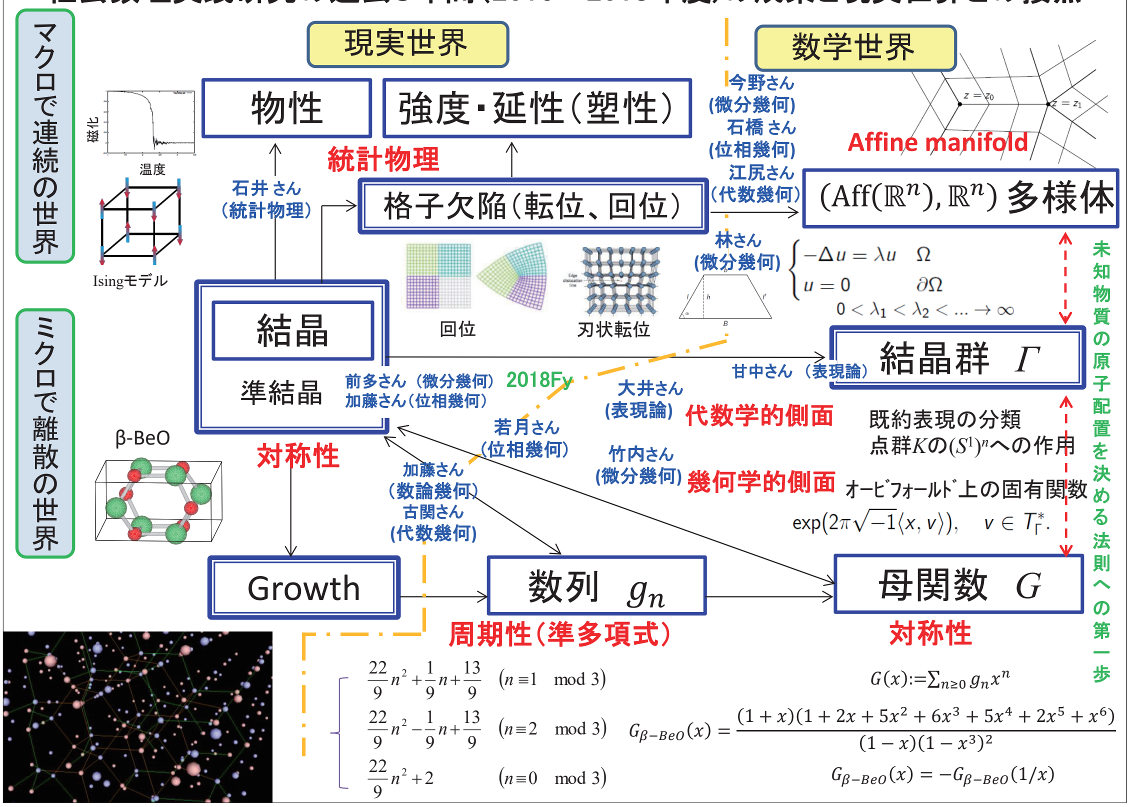
# 東大数理社会連携講座からの課題概要

結晶とは、原子，分子が規則正しく配列している固体であり、離散的な空間並進対称性をもつ理想的な物質のことです。結晶材料において、格子欠陥、析出物、転位等の結晶格子の乱れが材料の諸性質（強度や延性等）を決定する重要因子となっていることが知られています。

本研究会では、過去のスタディグループと社会数理実践研究で議論してきた内容を当面の題材にして、「結晶の対称性」、「対称性の乱れ」と「ミクロ（離散）からマクロ（連続）への階層構造」に起因し発現する物質・材料の諸性質を数学でゼロから考えるための議論の場とします。

> 今後重要性を増してゆく異分野連携の視点から、**自分の数学の専門性をフルに発揮できるような「数学の問題設定」を如何におこなうか**を一緒に考えませんか！

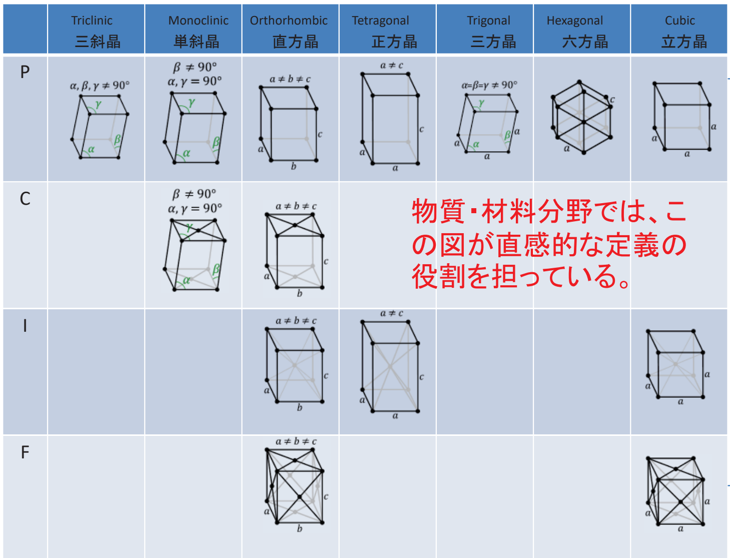
## 社会数理実践研究の過去3年間(2016～2018年度)の成果と現実世界との接点



九州大学・富安先生を
東大に招聘し講義を開催(2019.1.28)

# 格子系，ブラベー格子の数学の定義に関する動機付け

格子系とブラベー格子の数学的な意味を、厳密性を損なわず、判り易く説明した文献は殆どない。物質・材料の問題を数学の問題にするため、まず、これらの数学による定義付けを行った。




← 7種の格子系

14種のブラベー格子



九州大学・富安先生の講義
（2019.1.28）

# Latticeの定義

- Let $\underbrace{B=(b_1,\cdots,b_n)}_{\text{格子基底}} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ be a lattice basis. Lattice $L\subset\mathbb{R}^n$ is defined as follows:

$$L := \left\{ \sum_{i=1}^{n} n_i b_i \,\middle|\, n_i \in \mathbb{Z} \right\}$$

格子$L$とは、1次独立なベクトル$b_1, b_2, \cdots b_n$を用いて表せる集合

- $B$ is regarded as $B \in GL_n(\mathbb{R})$. $B_1$ and $B_2$ are equivalent if

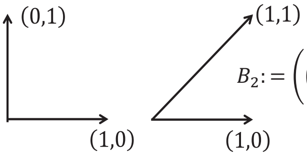
$$B_2 \in B_1 \cdot GL_n(\mathbb{Z})$$

$B_1, B_2$が同じ格子の格子基底を与える必要十分条件は、$B_2$が$B_1$ の左剰余類$B_1 GL_n(\mathbb{Z})$に含まれる

This means $\{L\subset\mathbb{R}^n | L: \text{lattice}\} \leftrightarrow GL_n(\mathbb{R})/GL_n(\mathbb{Z})$

An example

$B_1 := \left(\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right)$




$B_2 := \left(\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\right)$

$B_2 = B_1 \cdot \boxed{\begin{pmatrix}1 & 1\\0 & 1\end{pmatrix}},$

$\begin{pmatrix}1 & 1\\0 & 1\end{pmatrix} \in GL_2(\mathbb{Z}) \subset GL_2(\mathbb{R})$

- A function which maps $L$ to $\sigma(L)$ by $\sigma\in O_n$ induces the action of $O_n$ on $GL_n(\mathbb{R})/GL_n(\mathbb{Z})$ such that

$$B\cdot GL_n(\mathbb{Z}) \mapsto \sigma B \cdot GL_n(\mathbb{Z})$$

原点を固定する合同変換で移りあう格子を同一視
$B\cdot GL_n(\mathbb{Z})$の右剰余類$\sigma B\cdot GL_n(\mathbb{Z})$

This means
$\{L\subset\mathbb{R}^n | L: \text{lattice up to coordinate changes}\} \leftrightarrow O_n \setminus GL_n(\mathbb{R})/GL_n(\mathbb{Z})$

Graduate School of MATHEMATICAL SCIENCES THE UNIVERSITY OF TOKYO

九州大学・富安先生の講義
(2019.1.28)

## Lattice System and Bravais Latticeの定義

格子の群対称性の分類の代表的なものが、格子系とブラベー格子である。いずれも、「$L_B$の固定部分群Stab($L_B$)が群として同型」という分類を細分化したものになる。

$$\mathrm{Stab}(L_B) \coloneqq \{(\tau,\sigma) \in O(n) \times GL_n(\mathbb{Z}) \mid \tau L_B \sigma^{-1} = L_B\}$$

格子系の定義

$n$次元格子$L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^n$が同じ格子系に属するとは、$\mathrm{Stab}(L_1), \mathrm{Stab}(L_2) \subset O(n)$ が共役、すなわち、或る$\tau \in O(n)$ が 存在して、以下が成立すること

$$\tau \mathrm{Stab}(L_1) \tau^{-1} = \mathrm{Stab}(L_2)$$

ブラベー格子の定義

$n$次元格子$L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^n$が同じブラベー格子に属するとは、それぞれの格子基底の(※1)グラム行列$S_1, S_2 \in S_n^+$をとったとき、$\mathrm{Stab}(S_1), \mathrm{Stab}(S_2) \subset GL_n(\mathbb{Z})$が共役、すなわち、ある$\sigma \in GL_n(\mathbb{Z})$ が 存在し、以下が成立すること

$$\sigma \mathrm{Stab}(S_1) \sigma^{-1} = \mathrm{Stab}(S_2)$$

※1) 正定値対称行列$B^tB$を、$(b_1, b_2, \cdots b_n)$のグラム行列と呼ぶ。

$$B = (b_1, b_2, \cdots b_n) \mapsto B^tB = \left(b_i \cdot b_j\right)_{i,j=1,\cdots,n}$$

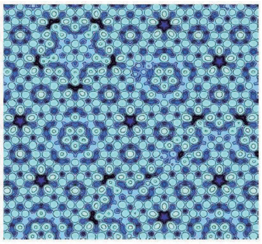
Graduate School of Mathematical Sciences The University of Tokyo

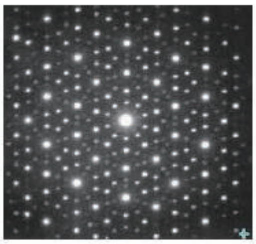
前多さん、加藤さん(2018Fy)

## 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)





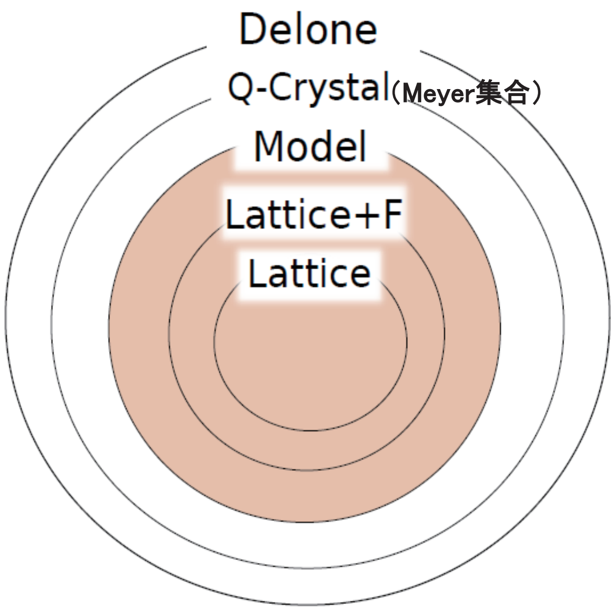
Al-Pd-Mn quasi-crystal surface and the diffraction pattern

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

Graduate School of Mathematical Sciences The University of Tokyo

前多さん、加藤さん(2018Fy)

# 位相空間における格子の概念




Graduate School of Mathematical Sciences
The University of Tokyo

前多さん、加藤さん(2018Fy)

# Delone 集合

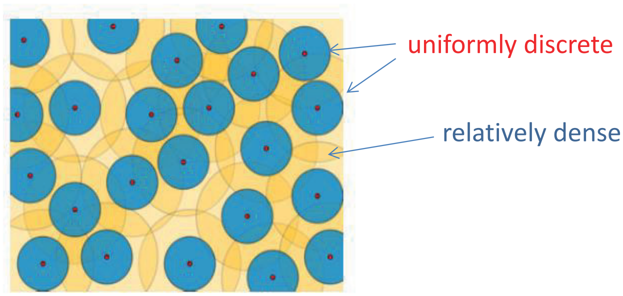
原子は、近すぎず(uniformly discrete)、遠すぎず(relatively dense)
という概念を、数学的厳密に定義したもの

**Delone set**

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

$D$ is uniformly deiscrete $\Longleftrightarrow$ $\exists r > 0\ \forall d \in D\ B_r(d) \cap D = \{d\}$

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




(This figure is quoted from Wikipedia)

Graduate School of Mathematical Sciences
The University of Tokyo

前多さん、加藤さん(2018Fy)

## Q-Crystal 集合 (Meyer 集合)

Dlone集合は万遍なく、ある程度離れて原子が存在していることだけを課した部分集合であった。以下に、$X$をユークリッド距離空間$\mathbb{R}^n$として、もう少し扱い易いクラスであるMeyer集合を定義する。

【Meyer集合の定義】

Delone集合$\Lambda \subset X$に対して、或る有限集合$F \subset X$ が 存在して、以下条件を満たす。

$$\Lambda - \Lambda \subset \Lambda + F$$

Meyer集合の特別な場合として、格子、結晶、準結晶（モデル集合）が定義される。

【格子、結晶】

$X$ の余コンパクトな離散部分群$\Gamma$を格子と呼ぶ。有限部分集合$F \subset X$ と格子$\Gamma$に対し、$\Gamma + F$と書ける集合を結晶という。

Graduate School of MATHEMATICAL SCIENCES THE UNIVERSITY OF TOKYO

前多さん、加藤さん(2018Fy)

## Model 集合

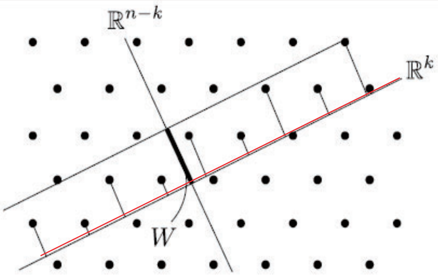
準結晶の存在する$n$次元空間$\mathbb{R}^n$を、2つの空間$\mathbb{R}^{n-k}$, $\mathbb{R}^k$ に分割し、$\mathbb{R}^{n-k}$の部分空間$W$に在る原子を$\mathbb{R}^k$空間に射影したものである。

**Model set**

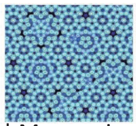
Crystal $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$, Bounded subset $(\mathbb{R}^n \supset)\mathbb{R}^{n-k} \supset W \supset O$(open set)

$$\Lambda = \left\{ \mathrm{pr}_{\mathbb{R}^k}(x) \in \mathbb{R}^k \;\middle|\; x \in \Gamma,\ \mathrm{pr}_{\mathbb{R}^{n-k}}(x) \in W \right\}$$

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

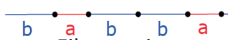



【モデル集合（準結晶）の事例】



$k$=2

Al-Pd-Mn quasi-crystal




$k$=1

Fibonacci sequence

Graduate School of MATHEMATICAL SCIENCES THE UNIVERSITY OF TOKYO

加藤さん（2018Fy）

# Proposal of an Invariant

Definition: an Invariant function $p_k(r)$

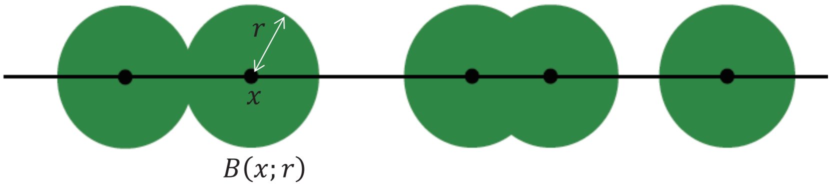
パーシステントホモロジーにインスパイアされた「不変量」を導入

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

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

$H_k$: $k^{\text{th}}$ Betti number

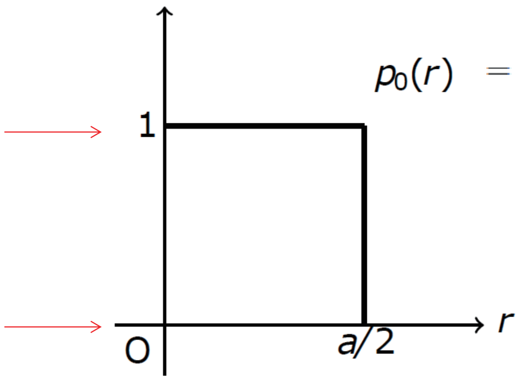
$$p_k(r) := \lim_{n\to\infty} \frac{\dim H_k\left(\cup_{x \in U_n \cap \Lambda} B(x;r); \mathbb{R}\right)}{\#(U_n \cap \Lambda)}$$




Graduate School of Mathematical Sciences
The University of Tokyo

加藤さん（2018Fy）

# Example (1)： 1D Crystal


$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{a}{2}) \\ 0 & (\frac{a}{2} \leq r) \end{cases}$$

An observed fact

$p_0(r)$ is 1.

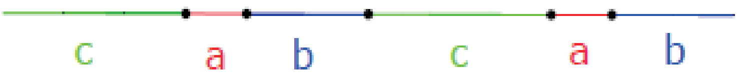
半径$r$のボールを膨らませていくと、$r = a/2$ですべてのボールが連結する。

Graduate School of Mathematical Sciences
The University of Tokyo

加藤さん（2018Fy）

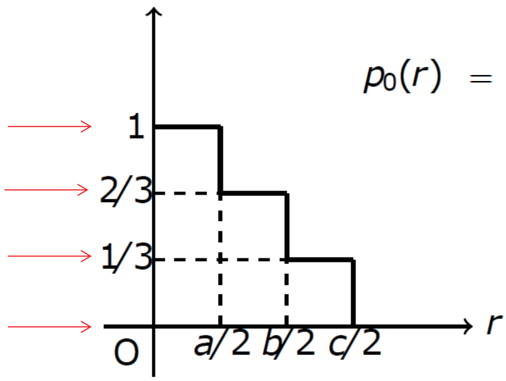
## Example (2) :　1D Crystal + Finite Set

$a < b < c$




An observed fact

All $p_0(r)$ are rational numbers.




$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{a}{2}) \\ \frac{2}{3} & (\frac{a}{2} \leq r < \frac{b}{2}) \\ \frac{1}{3} & (\frac{b}{2} \leq r < \frac{c}{2}) \\ 0 & (\frac{c}{2} \leq r) \end{cases}$$

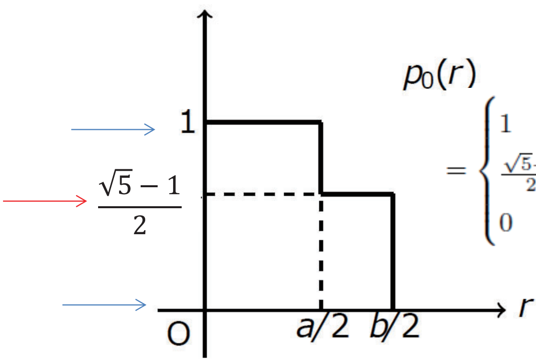
Graduate School of Mathematical Sciences The University of Tokyo

加藤さん（2018Fy）

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


An observed fact

$p_0(r)$ is able to take an irrainal number.




$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{a}{2}) \\ \frac{\sqrt{5}-1}{2} & (\frac{a}{2} \leq r < \frac{b}{2}) \\ 0 & (\frac{b}{2} \leq r) \end{cases}$$

Graduate School of Mathematical Sciences The University of Tokyo

加藤さん（2018Fy）

## Example (4)： 2D-Crystal

$$L(\tau) := \mathbb{Z} + \mathbb{Z}\tau$$

$$D := \{\tau \in \mathbb{C} | 0 \le \mathrm{Re}(\tau) \le 1, |\tau| \ge 1\}$$

原点と1と$\tau$を頂点とする三角形の外心の半径を$r(\tau)$とする。

（1）$\tau = (1+\sqrt{3}i)/2$の場合

六方格子

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \le r) \end{cases} \qquad p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 2 & (\frac{1}{2} \le r < \frac{1}{\sqrt{3}}) \\ 0 & (\frac{1}{\sqrt{3}} \le r) \end{cases}$$

（2）$\tau = i$ の場合　正方格子

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \le r) \end{cases} \qquad p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 1 & (\frac{1}{2} \le r < \frac{\sqrt{2}}{2}) \\ 0 & (\frac{\sqrt{2}}{2} \le r) \end{cases}$$

（3）$|\tau| = 1$ かつ$\tau \neq \frac{1+\sqrt{3}i}{2}, i$の場合

面心長方格子

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \le r) \end{cases} \qquad p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 1 & (\frac{1}{2} \le r < \frac{\sqrt{|1-\tau|}}{2}) \\ 2 & (\frac{|1-\tau|}{2} \le rr(\tau)) \\ 0 & (r(\tau) \le r) \end{cases}$$

加藤さん（2018Fy）

## Example (4)： 2D-Crystal

（4）$\mathrm{Re}(\tau) = 1$ かつ $\tau \neq \frac{1+\sqrt{3}i}{2}, i$の場合　面心長方格子

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \le r) \end{cases} \qquad p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{|\tau|}{2}) \\ 2 & (\frac{|\tau|}{2} \le r < r(\tau) \\ 0 & (r(\tau) \le r) \end{cases}$$

（5）$\mathrm{Re}(\tau) = 0$ かつ $\tau \neq i$の場合　長方格子

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \le r) \end{cases} \qquad p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{|\tau|}{2}) \\ 1 & (\frac{|\tau|}{2} \le r < r(\tau)) \\ 0 & (r(\tau) \le r) \end{cases}$$

（6）$\tau$が$D$ の内部に属する場合　斜方格子

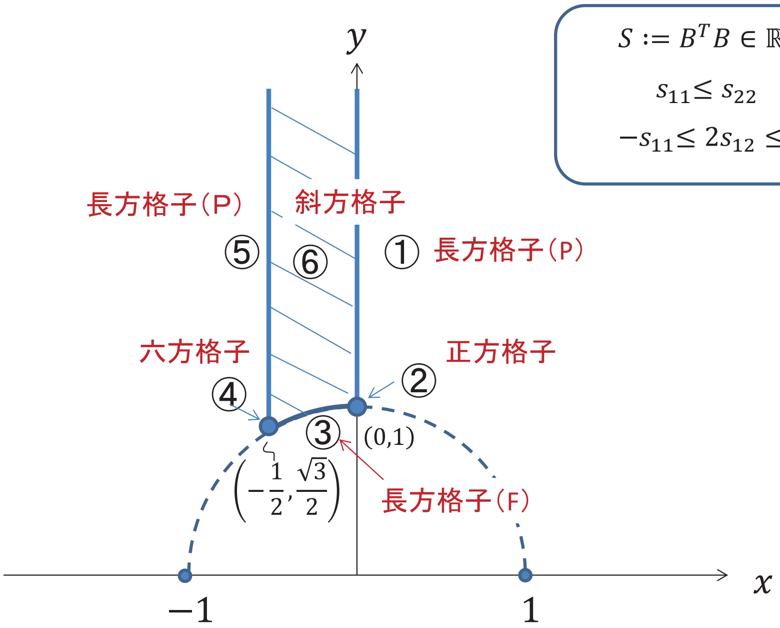
$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \le r) \end{cases} \qquad p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{|\tau|}{2}) \\ 1 & (\frac{|\tau|}{2} \le r < \frac{|1-\tau|}{2}) \\ 2 & (\frac{|1-\tau|}{2} \le r < r(\tau)) \\ 0 & (r(\tau) \le r) \end{cases}$$

# 参考：　格子簡約理論による2D Bravais格子の分類

$$S := B^T B \in \mathbb{R}^{2\times 2}$$

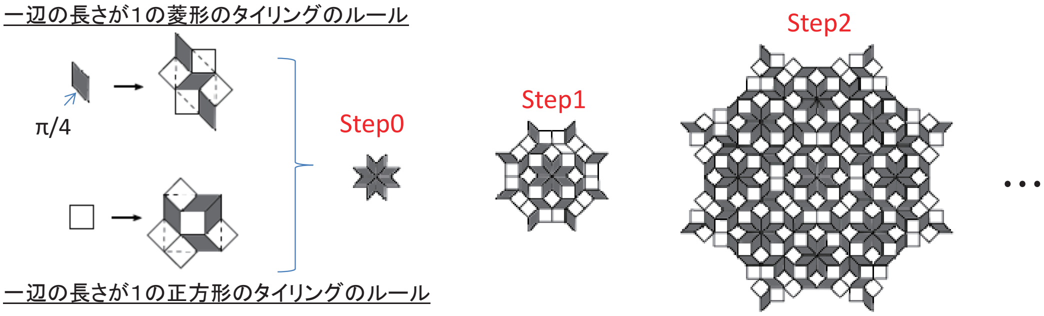
$$s_{11} \leq s_{22}$$

$$-s_{11} \leq 2s_{12} \leq 0$$




加藤さん（2018Fy）

# Example (5)：　Amman-Beenker Q-Crystal




Step $n \to \infty$

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & \left(0 < r < \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}\right) \\ 16 - 11\sqrt{2} & \left(\frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{2}\right) \\ 0 & \left(\frac{1}{2} \leq r\right) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & \left(0 < r < \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}\right) \\ 17 - 12\sqrt{2} & \left(\frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{2}\right) \\ 3 - \sqrt{2} & \left(\frac{1}{2} \leq r < \frac{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}{2}\right) \\ \sqrt{2} - 1 & \left(\frac{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \\ 0 & \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \leq r\right) \end{cases}$$

加藤さん（2018Fy）

予想１

すべての非負整数kについて、結晶の $p_k$ は無理数値をとらない。

→ 不変量 $p_k$ が無理数値をとるかどうかによって、
準結晶かどうかを判断できることがわかるのでは？

前多さん（2018Fy）

**Problem**

For a model set $\Lambda$, find the minimum dimension of the entire space $n$.

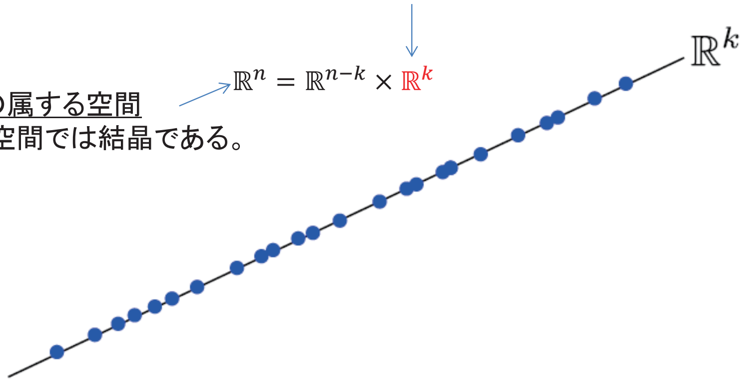
モデル集合 $\Lambda$ が与えられたとき、全体空間 $\mathbb{R}^n$ の次元の最小値を求めよ。

我々が準結晶を観察する空間

$\mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{n-k} \times \mathbb{R}^k$

結晶 $\Gamma$ の属する空間

準結晶は高次元空間では結晶である。



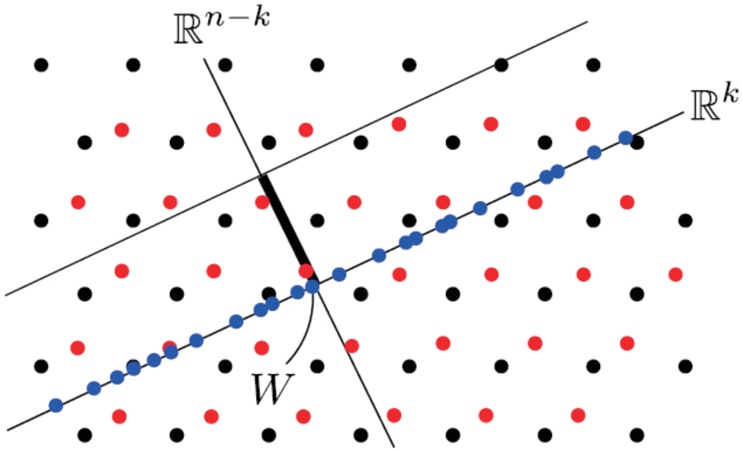
前多さん（2018Fy）

**Model set**

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

$$\Lambda = \left\{ \mathrm{pr}_{\mathbb{R}^k}(x) \in \mathbb{R}^k \;\middle|\; x \in \Gamma,\ \mathrm{pr}_{\mathbb{R}^{n-k}}(x) \in W \right\}$$

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




前多さん（2018Fy）

【定理】 無理数的モデル集合Λに対し、最小次元$d(\Lambda)$は全体空間の次元$d$と一致する。

$$d(\Lambda) \coloneqq \min_{(N,S)\in Web-set} \#S$$

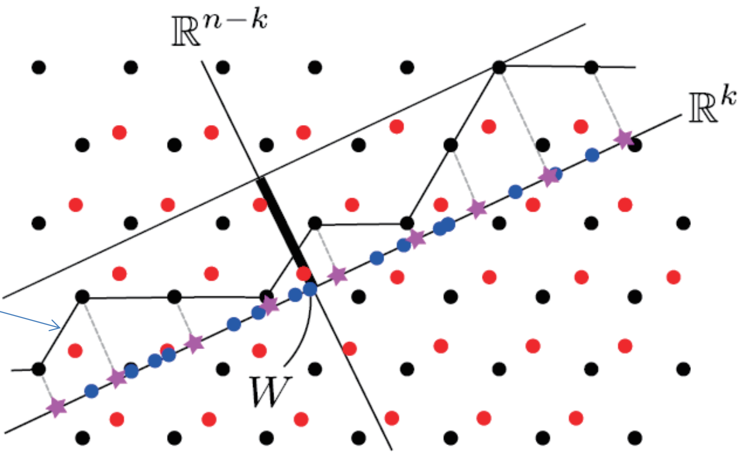
【$S$-連結の定義】 $S \subset \Delta\Lambda$とする。Λの部分集合$\Lambda_0$がS-連結であるとは、

$$\forall x_0, x_1 \in \Lambda_0, \exists\{y_n\} \in \Lambda,\ y_0 = x_0, y_n = x_1, y_i - y_{i-1} \in \pm S$$

【Web集合の定義】 $\Lambda_0 \subset \Lambda, S \subset \Delta\Lambda$に対し、$\Lambda_0$はrelatively denseで$S$-連結であること

全体空間での
S-連結の様相

$d\,(\Lambda) = 2$



前多さん（2018Fy）

モデル集合の全体次元は、幾何学的な情報の一つであり、全体次元をモデル集合から復元することは　数学的な問いとしては自然である。

本稿（東大数理科学実践レター）では、無理数的モデル集合の全体次元を考えたが、射影が無理数的であるというのはかなり強い条件であり、そうでない場合については未解決である。

ただし，例えば、2 次元から1 次元への射影を考えた場合、格子からは有理数的射影をしても結晶しかできないので、本質的には全体次元に与える影響が大きくないように思える。さらなる課題として、

・有理数的射影に関する全体次元の評価があげられる。

・さらに、元のモデル集合から、全体空間の結晶や格子などを構成できるような手法に発展していくことを期待する。

Graduate School of MATHEMATICAL SCIENCES THE UNIVERSITY OF TOKYO

「マス・フォア・インダストリ研究」シリーズ刊行にあたり

本シリーズは，平成 23 年 4 月に設立された九州大学マス・フォア・インダストリ研究所(IMI)が，平成 25 年 4 月に共同利用・共同研究拠点「産業数学の先進的・基礎的共同研究拠点」として，文部科学大臣より認定を受けたことにともない刊行するものである．本シリーズでは，主として，マス・フォア・インダストリに関する研究集会の会議録，共同研究の成果報告等を出版する．各巻はマス・フォア・インダストリの最新の研究成果に加え，その新たな視点からのサーベイ及びレビューなども収録し，マス・フォア・インダストリの展開に資するものとする．

平成 30 年 10 月
マス・フォア・インダストリ研究所
所長 佐伯　修


材料科学における幾何と代数 I

マス・フォア・インダストリ研究 No.20, IMI，九州大学

ISSN 2188-286X

発行日　2020 年 11 月 24 日

編　集　松谷　茂樹，井上　和俊，加葉田雄太朗，佐伯　　修，垂水　竜一，内藤　久資，中川　淳一，濵田　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 https://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<br>安田　貴徳<br>Xavier Dahan<br>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<br>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 | 筧　三郎 | 非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先<br>(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<br>安田　貴徳<br>櫻井　幸一<br>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<br>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<br>佐伯　修<br>中川　淳一<br>上坂　正晃<br>濵田　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<br>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<br>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<br>高島　克幸<br>縫田　光司<br>安田　雅哉 | 代数的手法による数理暗号解析<br>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<br>落合　啓之<br>高島　克幸<br>縫田　光司<br>安田　雅哉 | 量子情報社会に向けた数理的アプローチ<br>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<br>佐伯　修<br>中川　淳一<br>濵田　裕康<br>上坂　正晃 | 結晶転位の先進数理解析<br>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<br>長野　智絵<br>吉岡　秀和<br>田上　大助<br>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<br>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<br>大津　元一<br>小嶋　泉<br>福本　康秀<br>山本　昌宏<br>納谷　昌之 | ドレスト光子に関する基礎的数理研究 | 18 March 2019 |
| マス・フォア・インダストリ研究 No.15 | 松谷　茂樹<br>佐伯　修<br>中川　淳一<br>濵田　裕康<br>富安　亮子 | 結晶の界面，転位，構造の先進数理解析 | 2 December 2019 |
| マス・フォア・インダストリ研究 No.16 | Takuro Abe<br>Yasuhiko Ikematsu<br>Koji Nuida<br>Yutaka Shikano<br>Katsuyuki Takashima<br>Masaya Yasuda | Quantum computation, post-quantum cryptography and quantum codes | 17 January 2020 |
| マス・フォア・インダストリ研究 No.17 | 河村　彰星<br>津曲　紀宏<br>西澤　弘毅<br>溝口　佳寛 | 代数・論理・幾何と情報科学―理論から実世界への展開 | 10 February 2020 |
| マス・フォア・インダストリ研究 No.18 | Takashi Takiguchi | New technologies for non-destructive and non-invasive inspections and their applications | 21 February 2020 |
| マス・フォア・インダストリ研究 No.19 | Hirofumi Sakuma<br>Motoichi Ohtsu<br>Masayuki Naya<br>Izumi Ojima<br>Yasuhide Fukumoto | Basic mathematical studies on dressed photon phenomena | 19 March 2020 |

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

https://www.imi.kyushu-u.ac.jp