ISSN 2188-286X

マス・フォア・インダストリ研究 No.26

材料科学における幾何と代数IV

編集　松谷　茂樹
緒方　勇太
落合　啓之
加葉田雄太朗
佐伯　　修
濵田　裕康
松江　　要

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 2022
Kenji Kajiwara
Director
Institute of Mathematics for Industry

Off-Shell Mathematical Science Toward System's Analysis and Designing

Mathematics for Industry Research No.26, Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University
ISSN 2188-286X
Editors: Shigeki Matsutani, Yuta Ogata, Hiroyuki Ochiai, Yutaro Kabata, Osamu Saeki, Kaname Matsue, Hiroyasu Hamada
Date of issue: 28 November 2023
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 IV

編集　：　松谷　茂樹
緒方　勇太
落合　啓之
加葉田雄太朗
佐伯　　修
濵田　裕康
松江　　要

はじめに

本研究集会 II は，研究集会 II「結晶のらせん転位の数理」(2016 年)，研究集会 I「結晶の界面，転位，構造の数理」(2017 年)，研究集会 II「結晶の転位の先進数理解析」(2018 年)，研究集会 II「結晶の界面，転位，構造の先進数理解析」(2019 年)，研究集会 II「材料科学における幾何と代数 I」(2020 年)，研究集会 II「材料科学における幾何と代数 II」(2021 年）研究集会 I「材料科学における幾何と代数 III」(2022 年）の継続と位置付けられる研究会である．

2020 年から実施している「材料科学における幾何と代数 I,II,III」に引き続き，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た．この背景には，1)技術の発展により産業界では求められる仕様が大きく変貌したこと，2)観測装置や材料の製造装置･方法が発展し，例えば原子レベルでの構造の乱れの観測や，原子レベルでの材料の制御などが可能となったこと，3)それらにより，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．現在，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，交流は限られたものとなっている．そこで，幾何学，代数学的手法に関わる数学者を迎えて，材料科学の研究者と議論する場を提供し，相互理解のきっかけを得ることが本研究集会の目的とした．

本研究会では 46 名の参加者を得，次に示す方々に講演をして頂いた．l) オープニングとして， 2022 年の研究集会「材料科学における幾何と代数 III」の成果である「A novel symmetry in nanocarbons: pre-constant discrete principal curvature structure 」Kabata,Matsutani, Noda, Ogata, Onoe の概要を述べ、今回のテーマについて，松谷茂樹（金沢大学）． 2) 曲がった量子系の量子効果を発言する新規ナノカーボンでの実験的実証について，尾上順氏（名古屋大）． 3) 尾上氏が対象としているナノカーボンの第一原理計算による考察について，野田祐輔氏（岡山県立大学）． 4) III の成果でもある新たな離散幾何学的対称性に関して(arXiv:2306.15846)， 緒方勇太氏（京都産業大学）， 5) カーボングラフに関わる離散力学系のソボレフ不等式に関して，山岸弘幸氏（都立産技高専）， 6) カーボングラフに関わる分子力学系としての安定性と離散幾何に関して，雷霄雯氏（東工大），7) C60 が持つ群論的な高次の対称性について，落合啓之氏(IMI)、 8) 材料科学と数学の共同研究のあり方や成果に関して，中村振一郎氏（熊本大）．

また、講演の後の質疑応答やフリーディスカッションなどにより，今回も，本研究集会の目的は達成されたと考えている．

材料科学においては，近年，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更なる加速が期待される．本研究会はその礎・足場として期待に応えるものとなったと考え，ここに報告をする．

組織委員代表　松谷茂樹
2023 年 10 月 30 日

組織委員

松谷茂樹	金沢大学
緒方勇太	京都産業大学
落合啓之	九州大学
加葉田雄太朗	長崎大学
佐伯修	九州大学
濵田裕康	佐世保高専
松江要	九州大学

Contents

はじめに ・・ i
プログラム ・・ v
集合写真 ・・・ vii

オープニング：幾何，代数，ナノカーボン
(On a theme in the workshop, Geometry and slgebra in material science IV)
松谷茂樹 , Shigeki Matsutani (Kanazawa University) ・・・・・・・・・・・・・・ 1

１次元凹凸 C_{60} ポリマーを用いた幾何曲率効果の理論予想と実験的検証
(Theoretical prediction and experimental demonstration of geometry-driven curvature effects using 1D uneven structured C_{60} polymer)
尾上順 , Jun Onoe (Nagoya University) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 20

ピーナッツ型フラーレンポリマーのエネルギー的安定性の第一原理的考案
(A first-principles consideration of energetic stability of peanut-shaped) fullerene polymer
野田祐輔 , Yusuke Noda (Okayama Prefectural University) ・・・・・・・・・・・・ 37

格子欠陥の階層性に着目した低次元ナノ炭素材料の数理解析
(Mathematical analysis of low-dimensional nanocarbon materials focusing on the hierarchy of lattice defects)
雷霄雯 , Xiao-Wen Lei (Tokyo Institute of Technology) ・・・・・・・・・・・・・・ 52

C_{60} の数理 I, II
(Math behind C_{60} I , II)
落合啓之 , Hiroyuki Ochiai (Kyushu Univ ersity) ・・・・・・・・・・・・・・・・・ 69

境界値問題のグリーン関数とソボレフ不等式の最良定数
(Green function of boundary value problem and the best constant of Sobolev inequality)
山岸弘幸 , Hiroyuki Yamagishi (Tokyo Metro. Col. of Ind. Tec) ・・・・・・・・・ 112

On discrete constant principal curvature surfaces
緒方勇太 , Yuta Ogata (Kyoto Sangyo University) ・・・・・・・・・・・・・・・・ 142

自然界にある分子と材料の振る舞いを決めている数理と計算科学
(Mathematical and computational science governing the functions of molecules and materials in nature)
中村振一郎 , Shinichiro Nakamura (Kumamoto University) ・・・・・・・・・・・ 152

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

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
ハイブリッド 研究会 (2023 年 9 月 4 日 (月)-5 日 (火))

1 Program

9 月 4 日 (月)

12:45-13:05	松谷茂樹 (金沢大学)	オープニング／幾何と代数とナノカーボン材料
13:10-14:10	尾上順（名古屋大学）	１次元凹凸 C_{60} ポリマーを用いた幾何曲率効果の理論予想と実験的検証
14:25-15:25	野田祐輔（岡山県立大学）	ピーナッツ型フラーレンポリマーのエネルギー的安定性の第一原理的考察
15:40-16:40	雷霄雯(東京工業大学)	格子欠陥の階層性に着目した低次元ナノ炭素材料の数理解析
16:55-17:55	落合啓之 (九州大学)	C_{60} の数理 I

9 月 5 日 (火)

9:50-10:50	山岸弘幸 (都立産業技術高等専門学校)	境界値問題のグリーン関数とソボレフ不等式の最良定数
11:05-12:05	緒方勇太（京都産業大学）	On discrete constant principal curvature surfaces
12:05-14:05	昼休憩	
14:05-15:05	落合啓之 (九州大学)	C_{60} の数理 II
15:20-16:20	中村振一郎（熊本大学）	自然界にある分子と材料の振る舞いを決めている数理と計算科学
16:20-16:25	クロージング	

IMI Workshop II: Geometry and Algebra in Material Science IV

Hybrid conference (Zoom & West W1-D-413 room in Kyushu University)
September 4 (Mon) - 5 (Tue), 2023

September 4 (Mon)

12:45-13:05	Shigeki Matsutani (Kanazawa Univ.)	Opening: Geometry, algebra and nanocarbon
13:10-14:10	Jun Onoe（Nagoya Univ）	Theoretical prediction and experimental demonstration of geometry-driven curvature effects using 1D uneven structured C_{60} Polymer
14:25-15:25	Yusuke Noda (Okayama Pref. Univ)	A first-principles consideration of energetic stability of peanut-shaped fullerene polymer
15:40-16:40	Xiao-Wen Lei (Tokyo Inst. Technology)	Mathematical analysis of low-dimensional nanocarbon materials focusing on the hierarchy of lattice defects
16:55-17:55	Hiroyuki Ochiai (Kyushu Univ.)	Math behind C_{60}I

September 5 (Tue)

9:50-10:50	Hiroyuki Yamagishi (Tokyo Metro. Col. of Ind. Tech.)	Green function of boundary value problem and the best constant of Sobolev inequality
11:05-12:05	Yuta Ogata（Kyoto Sangyo Univ.）	On discrete constant principal curvature surfaces
12:05-14:05	Lunch	
14:05-15:05	Hiroyuki Ochiai (Kyushu Univ.)	Math behind C_{60}II
15:20-16:20	Shinichiro Nakamura（Kumamoto Univ.）	Mathematical and computational science governing the functions of molecules and materials in nature
16:20-16:25	Closing	

On a theme in the workshop, Geometry and Algebra in Material Science IV

Shigeki MATSUTANI
Kanazawa University

I will give an overview of our workshops "Geometry and Algebra in Material Science I-IV" and describe the theme of this meeting based on [1].

[1] Y. Kabata, S. Matsutani, Y. Noda., Y. Ogata, and J. Onoe, A novel symmetry in nanocarbons: Pre-constant discrete principal curvature structure, arXiv:2306.15839, 2023.

IMI Workshop II
材料科学における代数と幾何IV

九州大学 伊都キャンパス ウエスト1号館 D棟
4階 IMIオーディトリアム（W1-D-413）

２０２３年９月４日（月）－ ５日（火）

９月４日 12:50開始

2016年　研究集会II「結晶のらせん転位の数理」

2017年　研究集会I「結晶の界面，転位，構造の数理」

2018年　研究集会II「結晶の転位の先進数理解析」

2019年　研究集会II「結晶の界面，転位，構造の先進数理解析」

2020年　研究集会II「材料科学における幾何と代数I」

2021年　研究集会II「材料科学における幾何と代数II」

2022年　研究集会I「材料科学における幾何と代数III」

2023年　研究集会I「材料科学における幾何と代数IV」

2

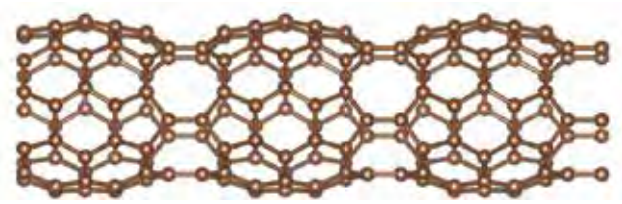
今回の研究会の背景

“A novel symmetry in nanocarbons: Pre-constant discrete principal curvature structure”
arXiv:2306.15839, 2023
Y. Kabata, S.M., Y. Noda., Y. Ogata, J. Onoe

Background

1. Development of Carbon manufacturing technology

Onoe et al. have generated and studied the C_{60} polymers extending linearly from C_{60} thin films.

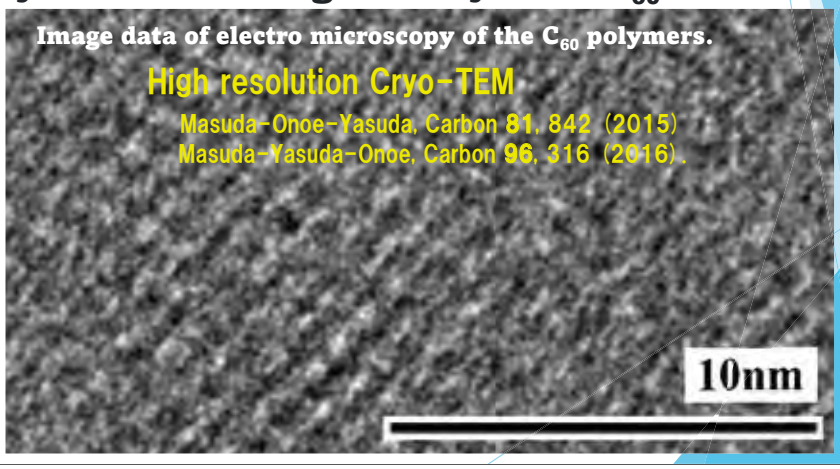


- Onoe, Nakayama, Aono, Hara, Appl. Phys. Lett., 2003.
- Ueda, Ohno, Noguchi, Ishii, Onoe, J. Phys. Chem. B, 2006.
- Onoe, Ito, Shima, Yoshioka, Kimura, Eur. Phys. Lett., 2012.
- Beu and Onoe, Phys. Rev. B, 2006.

Background

1. Development of Carbon manufacturing technology

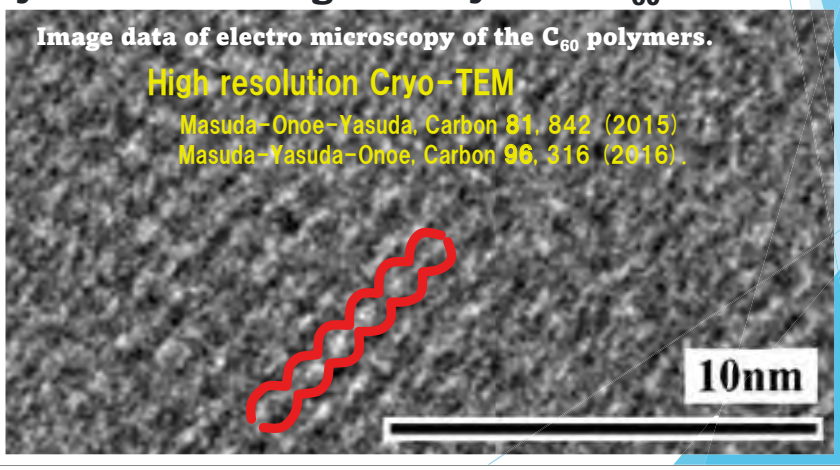
Onoe et al. have generated and studied the C_{60} polymers extending linearly from C_{60} thin films.



Background

1. Development of Carbon manufacturing technology

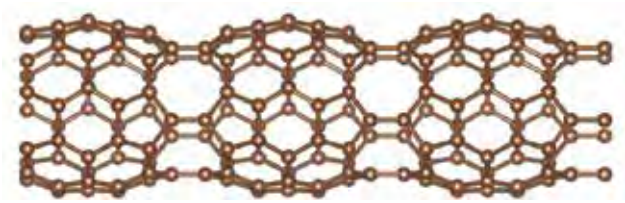
Onoe et al. have generated and studied the C_{60} polymers extending linearly from C_{60} thin films.



Background

1. Development of Carbon manufacturing technology

Onoe et al. have generated and studied the C_{60} polymers extending linearly from C_{60} thin films.



- Onoe, Nakayama, Aono, Hara, Appl. Phys. Lett., 2003.
- Ueda, Ohno, Noguchi, Ishii, Onoe, J. Phys. Chem. B, 2006.
- Onoe, Ito, Shima, Yoshioka, Kimura, Eur. Phys. Lett., 2012.
- Beu and Onoe, Phys. Rev. B, 2006.

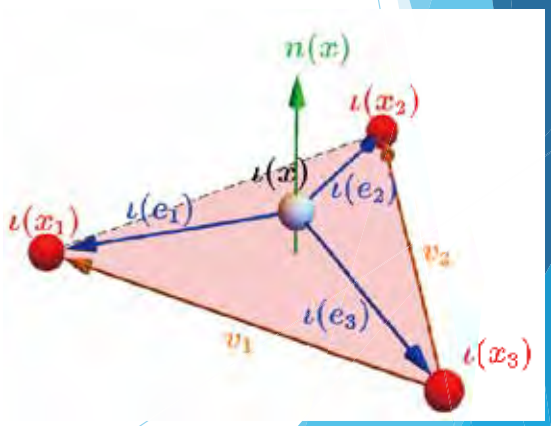
Background

2. Development of discrete surface theory

Kotani, Naito, Omori (KNO), Comp. Aided Geome. Design 2017

Let a trivalent oriented graph G embedded into E^3, $\iota : G \to E^3$

For each vertex ι (x), the triangle with the vector v1, v2, and the normal vector n(x) is defined by the figure:



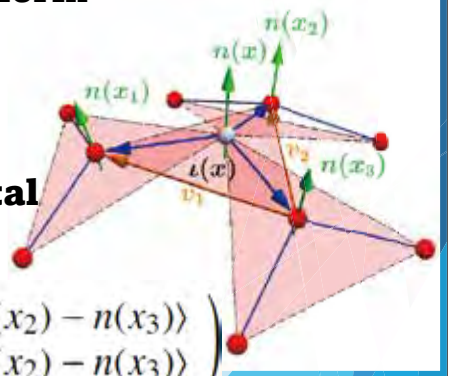
Background

2. Development of discrete surface theory

Kotani, Naito, Omori (KNO), , CAGD 2017

The discrete first fundamental form

$$I = \begin{pmatrix} \langle v_1, v_1 \rangle & \langle v_1, v_2 \rangle \\ \langle v_2, v_1 \rangle & \langle v_2, v_2 \rangle \end{pmatrix}$$



The discrete second fundamental form

$$II = -\begin{pmatrix} \langle v_1, n(x_1) - n(x_3) \rangle & \langle v_1, n(x_2) - n(x_3) \rangle \\ \langle v_2, n(x_1) - n(x_3) \rangle & \langle v_2, n(x_2) - n(x_3) \rangle \end{pmatrix}$$

Background

2. Development of discrete surface theory

Kotani, Naito, Omori (KNO), , CAGD 2017

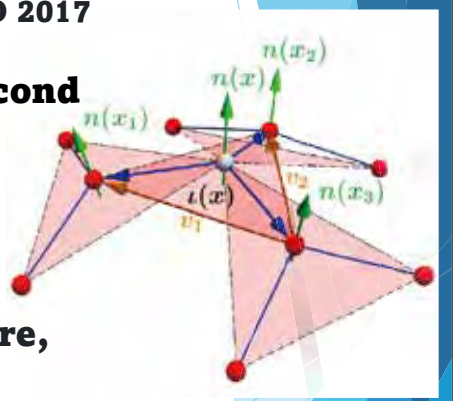
By the discrete first and the second fundamental forms, we define

the discrete mean curvature,

$$H(x) = \mathrm{tr}(I^{-1} II)$$

and the discrete Gauss curvature,

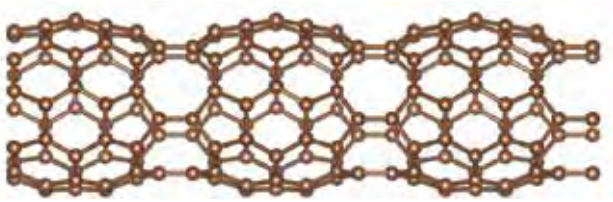
$$K(x) = \det(I^{-1} II)$$



Note that these values don't depend on the choice of v1 and v2, and thus are geometrical values.

Geometrical analysis of C_{60} polymers

Motivation:

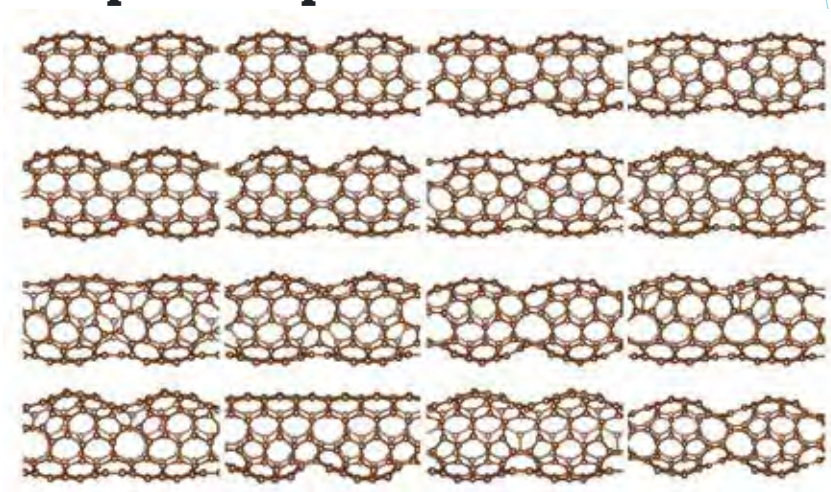


The shape of C_{60} polymers reminds us of Delaunay surfaces.

Delaunay surface,
constant mean curvature surface

Geometrical analysis of C_{60} polymers

The shape (C-configurations) of the C_{60} polymers can be determined by the first principles computations:



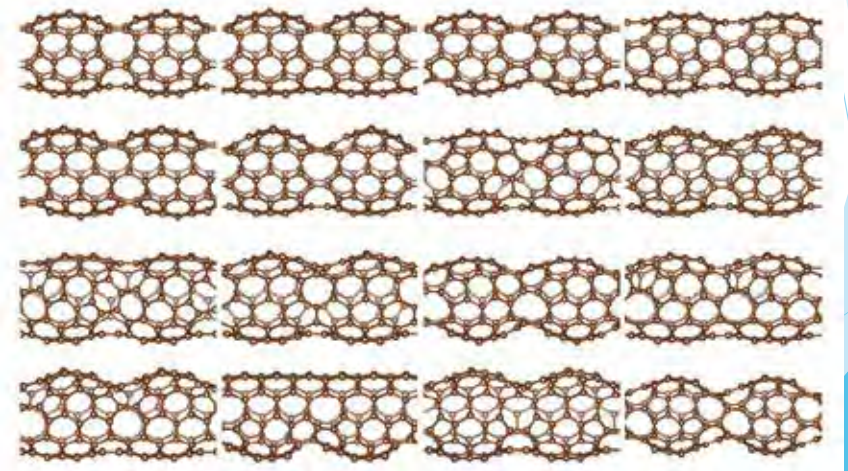
Noda, Ono, Ohno, J. Phys. Chem. A 2015.

Geometrical analysis of C_{60} polymers

The shape (C-configurations) of the C_{60}

Several local minimum points of the t

semi-stable configurations exist.



Noda, Ono, Ohno, J. Phys. Chem. A 2015.

Geometrical analysis of C_{60} polymers

The shape (C-configurations) of the C_{60} polymers can be determined by the first principles computations:

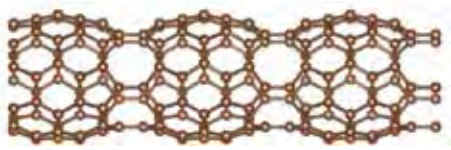
Several local minimum points of the semi-stable configurations exist.
We basically focus on the minimal one

Noda, Ono, Ohno, J. Phys. Chem. A 2015.

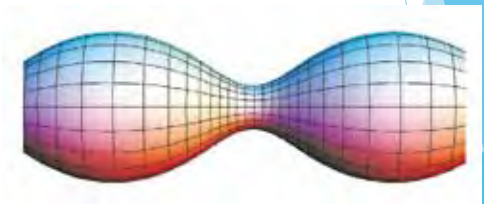
Geometrical analysis of C_{60} polymers

Problem:

To find whether the shape of the C_{60} polymers has constant mean curvature given by KNO-scheme!



C_{60} polymer



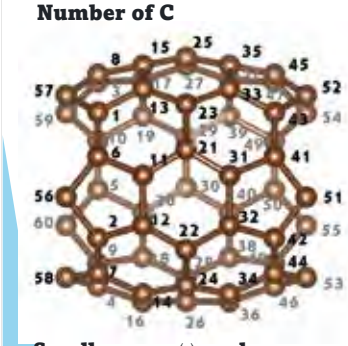
Delaunay surfaces:
constant mean curvature surface

Geometrical analysis of C_{60} polymers

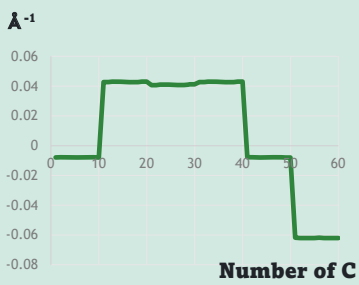
Problem:

To find whether the shape of the C_{60} polymers has constant mean curvature!

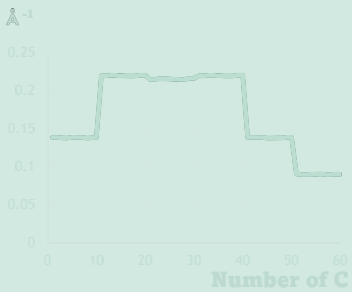
Number of C



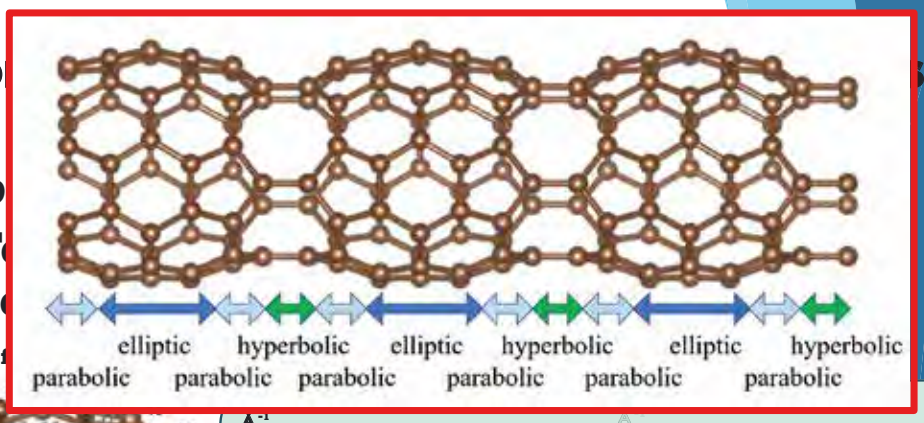
Smaller ⇔ larger



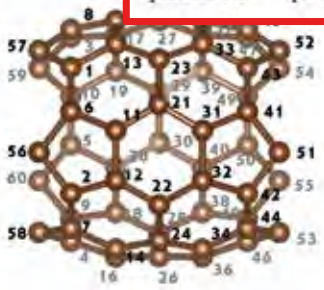
Gauss curvature



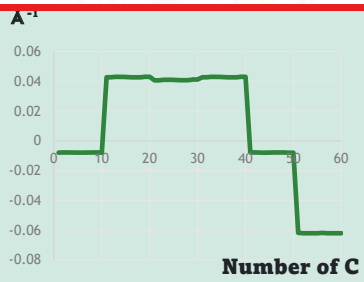
mean curvature



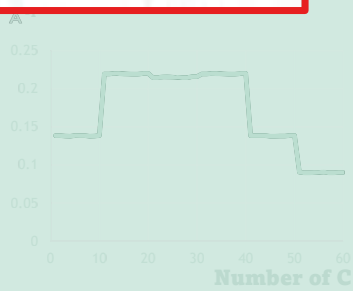
Number of



Smaller ⇔ larger



Gauss curvature



mean curvature

Geometrical analysis of C_{60} polymers

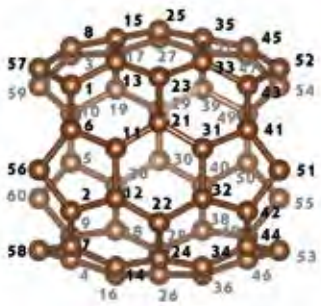
Problem:

To find whether the shape of the C_{60} polymers has constant mean curvature!

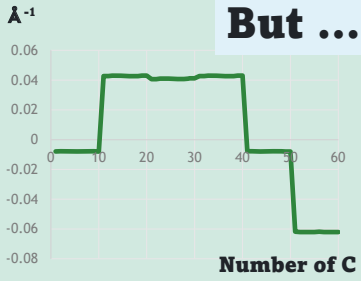
The answer is No!

But .....

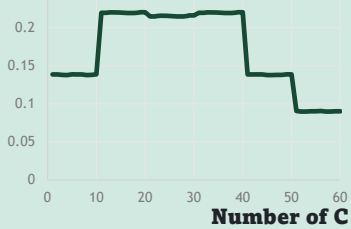
Number of C



Smaller ⇔ larger



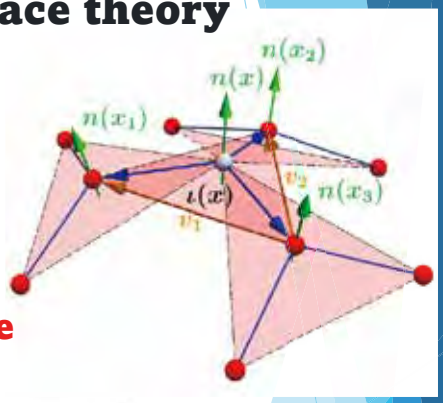
Gauss curvature



mean curvature

Geometrical analysis of C_{60} polymers

2. Revision of discrete surface theory



The mean curvature,

$$H(x) = \mathrm{tr}(I^{-1}II)$$

and the Gauss curvature,

$$K(x) = \det(I^{-1}II)$$

naturally induce the discrete principal curvature

$$k_i(x) = \frac{H(x) \pm \sqrt{H(x)^2 - 4K(x)}}{2}.$$

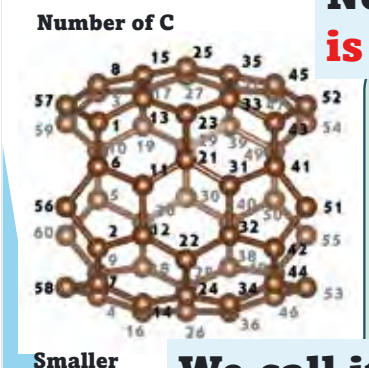
$|k_1| \geqq |k_2|$

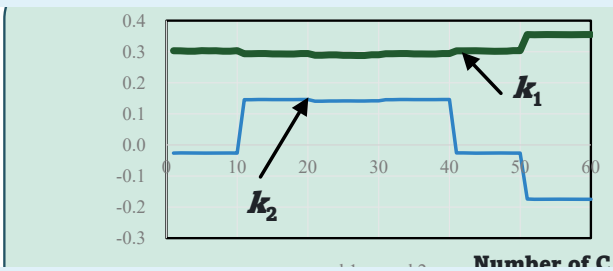
Geometrical analysis of C_{60} polymers

Problem:

To find whether the shape of the C_{60} polymers has constant mean curvature!

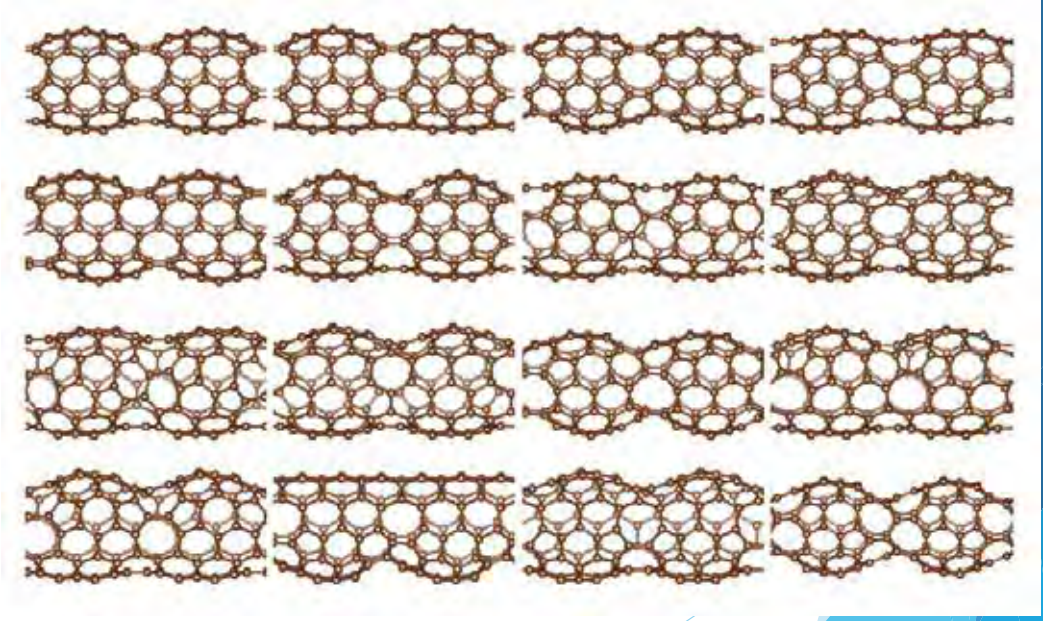
No, but the 1st principal curvature is almost constant!





We call it a pre-constant discrete principal curvature surface!

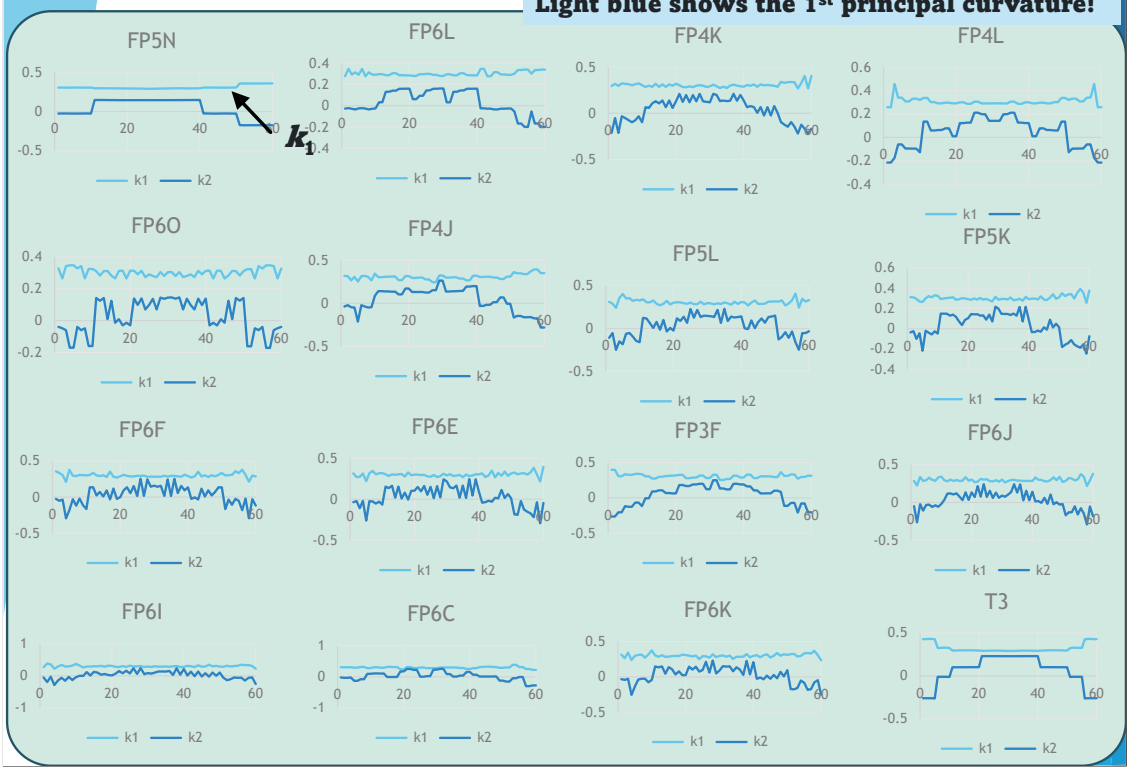
Geometrical analysis of C_{60} polymers



Noda, Ono, Ohno, J. Phys. Chem. A 2015.

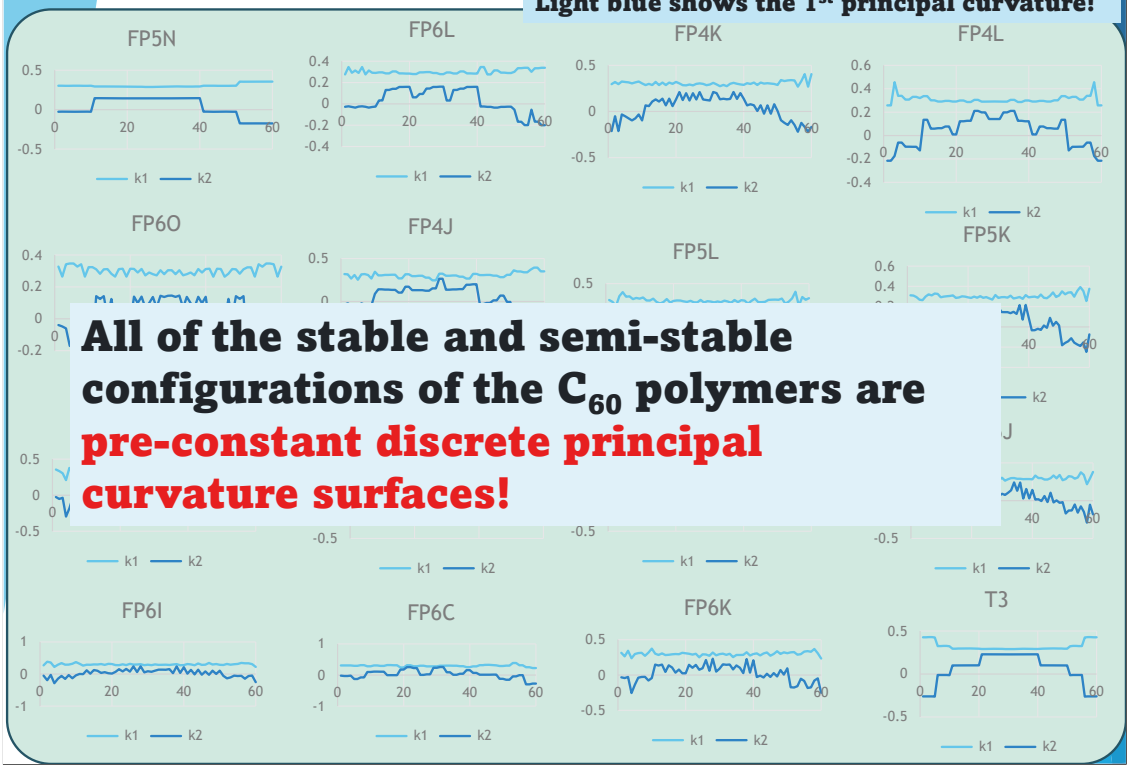
Geometrical analysis of C_{60} polymers

Light blue shows the 1st principal curvature!



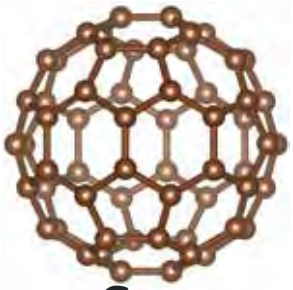
Geometrical analysis of C_{60} polymers

Light blue shows the 1st principal curvature!

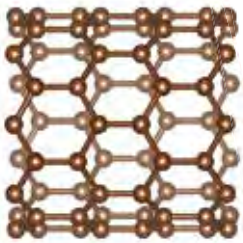


All of the stable and semi-stable configurations of the C_{60} polymers are pre-constant discrete principal curvature surfaces!

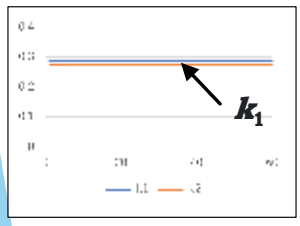
Geometrical analysis of C_{60} polymers

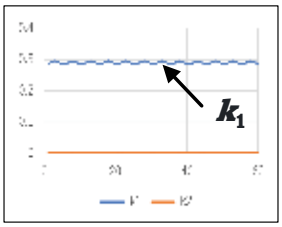


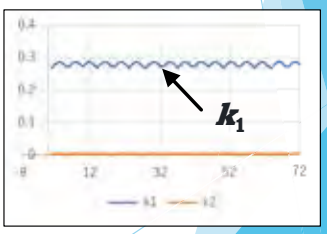
C_{60},



nanotubes

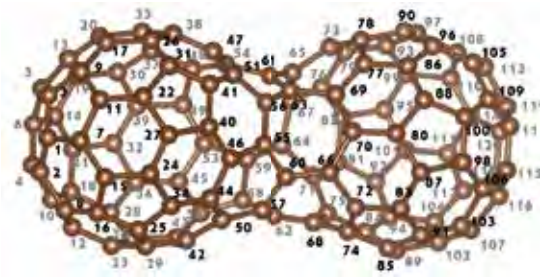


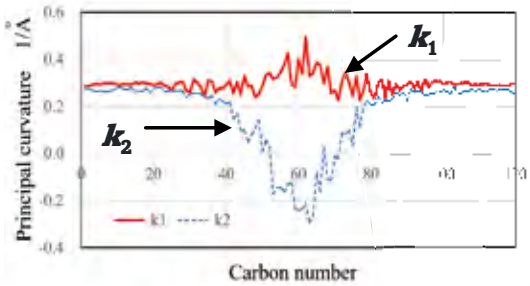




C_{60}, and nanotubes have the constant first principal curvature.

Geometrical analysis of C_{60} polymers





C_{60}-dimer

C_{60}-dimer also has the pre-constant first principal curvature.

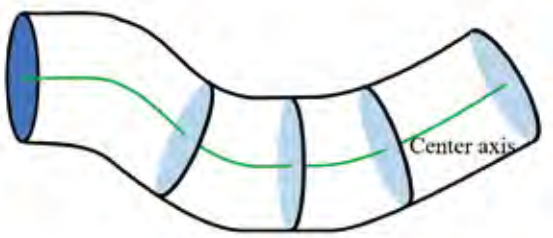
Geometrical analysis of C_{60} polymers

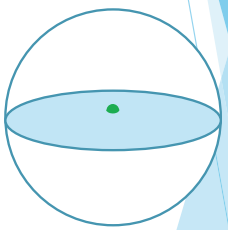
Concerned nanocarbons have the novel symmetry, i.e., the **pre-constant discrete principal curvature** including constant principal curvature cases.

Geometrical analysis of C_{60} polymers

Why?

Geometrical answer is not clear!
In continuum picture, constant principal curvature surfaces have the center axes.





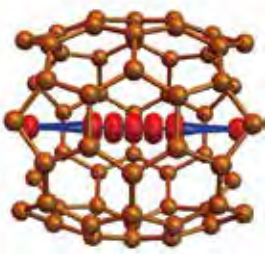
Center axis is given by $-k_1^{-1} \times$ the normal vector, $\boldsymbol{n}$.

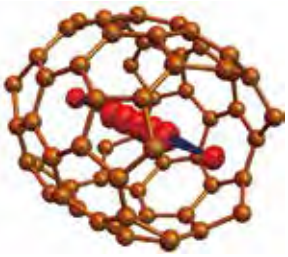
Not tube type shape cannot have the constant principal curvature.

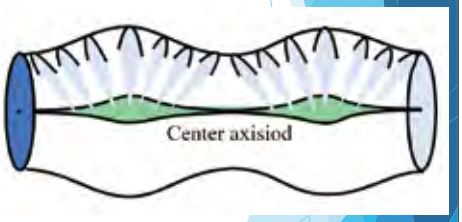
Geometrical analysis of C_{60} polymers

Why?

In discrete picture, the set of the "center axis" given by "$-k_1^{-1} \times$ the normal vector $\boldsymbol{n}$ from each vertex" does not form a curve in general.





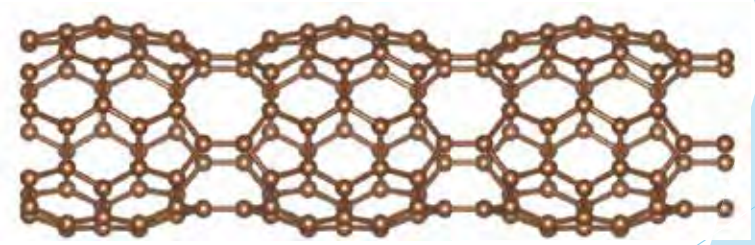


We call it the center axisoid.

Geometrical analysis of C_{60} polymers

Why?

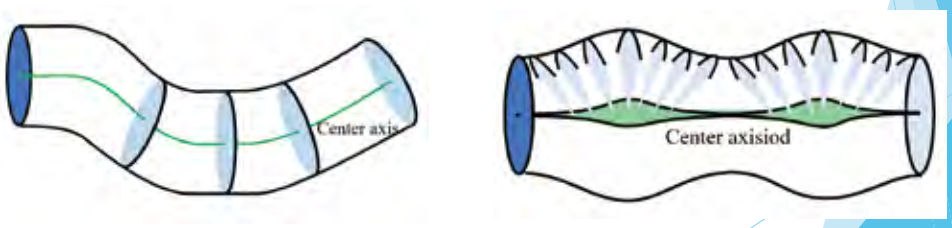
Due to "not strictly constant" principal curvature, discreteness, center axisoid, and not-strictly equi-bond length, we have a non-trivial pre-constant principal curvature surface:



Geometrical analysis of C_{60} polymers

Why?

The center axisoid, discrete analogue of the center axis, is not on a curve in general, though, in continuum picture, constant principal curvature surfaces have the center axes. It is a profound problem what is a constant discrete principal curvature surface in discrete differential geometry!

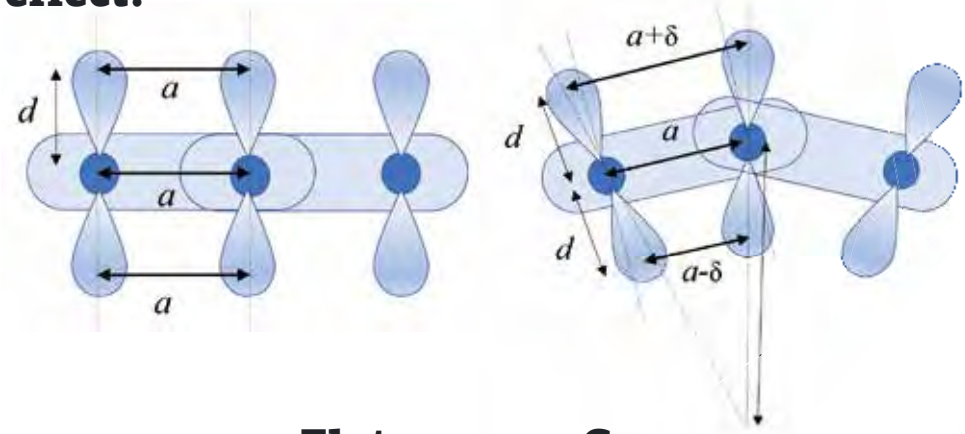


continuum picture vs discrete picture

Geometrical analysis of C_{60} polymers

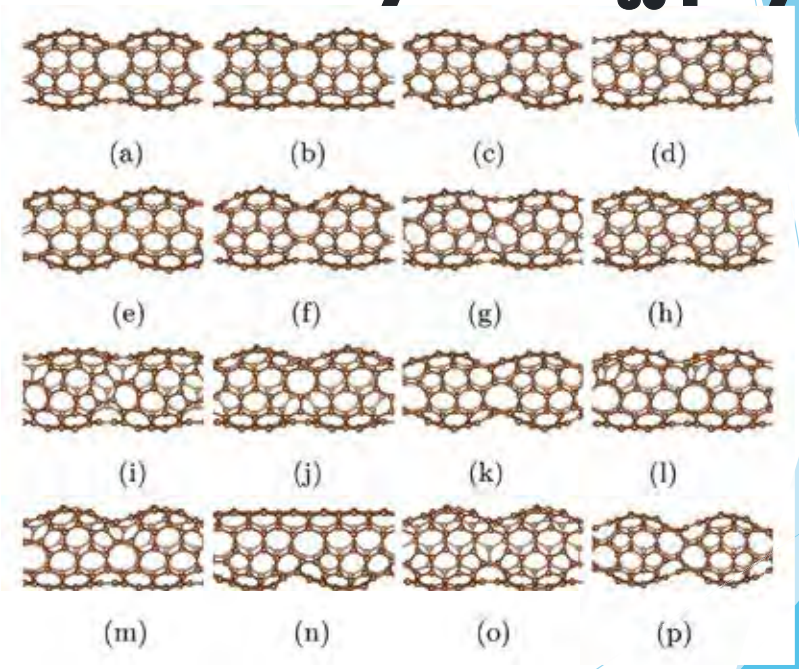
Why?

Physically, it may be related to the overlap integrals of the wave functions as the curved effect.



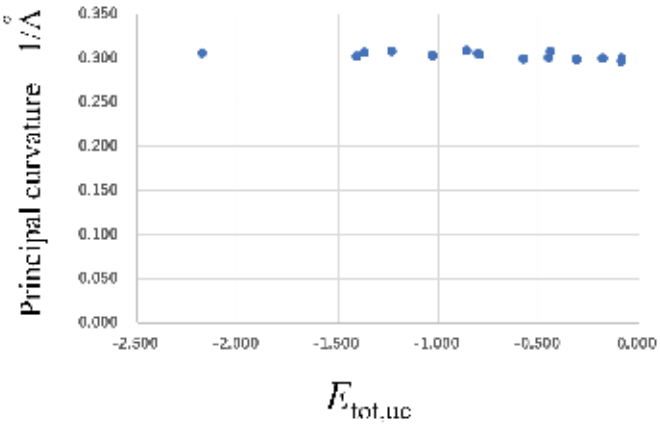
Flat vs Curves

Geometrical analysis of C_{60} polymers



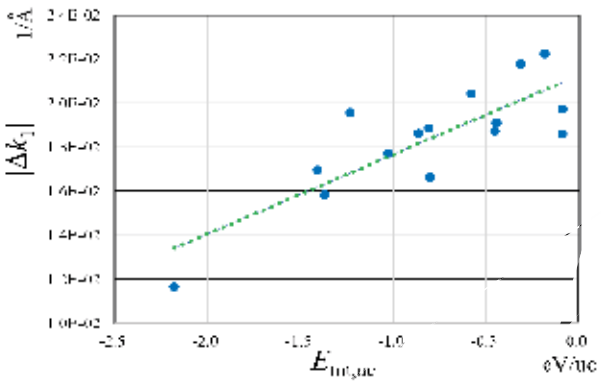
Geometrical analysis of C_{60} polymers

Average of the 1st principal curvature is irrelevant to the total energy of the first priciples computations.



Geometrical analysis of C_{60} polymers

Average of the absolute value of the graph laplacian, $(\Delta f)(x) = f(x) - \frac{1}{3}(f(x_1) + f(x_2) + f(x_3))$, **of the first principal curvature** $\overline{|\Delta k_1|}$ **is strongly relevant to the total energy in the 1st principles computation!**



本研究会の問題点

1. 着目したナノカーボンはすべて離散主曲率概一定曲面となっている
   これらの物理的、数学的、背景は何か？
   ・実験的物理的な問題か？
   ・第一原理計算的な問題か？
   ・古典分子動力学と幾何の問題か？
   ・C_{60}の群論的な性質からの影響はあるか？
   （C_{60}の対称性の群の部分群と並進対称群の影響？）
   ・3正則グラフの力学的問題か？
   ・微分幾何的な問題か？

2. そもそも材料科学において、第一原理と数学を融合することで新たな発見をするとはどのようなことか？

Theoretical prediction and experimental demonstration of geometry-driven curvature effects using 1D uneven structured C_{60} Polymer

Jun ONOE

Nagoya University

We have reported that 1D C_{60} polymer with a concavo-convex periodic curved structure [1-3] formed from electron-beam-irradiation (3-7 keV) of a C_{60} film exhibits physical properties arising from 1D metal [4]. The behavior of the free electrons on the curved surface is characterized by the Hamilton operator of the following equation (quantum mechanics of submanihold).

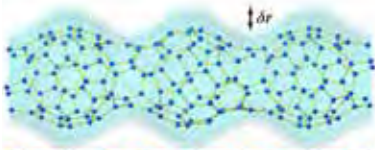
$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}g^{ij}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) + (h^2 - k)\right]$$

Here, $g = \det[g_{ij}]$ represents the metric tensor. The first term is an operator corresponding to the kinetic energy of electrons, and the second term consisting of the mean curvature h and the Gaussian curvature k appears like a scalar potential (the second term does not appear in the 1D plane surface). It has been unclear whether or not this curvature term affects the behavior of electrons since 1950s. We theoretically predict the effect of the geometric curvature term on the electronic behavior of the above 1D C_{60} polymer [5] and then experimentally demonstrate it [6]. In this talk, I will introduce the quantum mechanics of submanihold of the 1D C_{60}polymer when compared to the other nanocarbons such as fullerenes, nanotubes, and grephene.

References

[1] J. Onoe et al., Appl. Phys. Lett. 82, 595 (2003).
[2] A. Takashima, J. Onoe, and T. Nishii, J. Appl. Phys. 108, 033514 (2010).
[3] H. Masuda, H. Yasuda, and J. Onoe, Carbon 96, 316 (2016).
[4] H. Shima and J. Onoe, “The Role of Topology in Materials” (S. Gupta and A. Saxena eds.), Springer, Chap. 3, pp. 53-84 (2018) and references therein.
[5] H. Shima, H. Yoshioka, and J. Onoe, Phys. Rev. B 79, 201401 (R) (2009).
[6] J. Onoe, T. Ito, H. Shima, H. Yoshioka, and S. Kimura, Europhys. Lett. 98, 27001 (2012) [Press release]

1 次元凹凸C_{60} ポリマーを用いた 幾何曲率効果の理論予想と実験的検証



One dimensional peanut-shaped C_{60} polymer

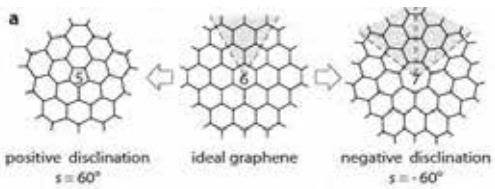
Jun Onoe*

Department of Energy Science and Engineering

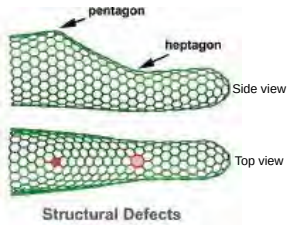
Nagoya University

****E-mail: j-onoe@energy.nagoya-u.ac.jp***

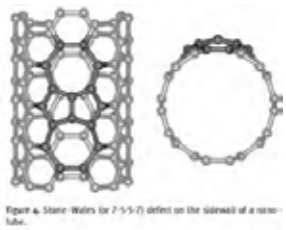
Topology-induced geometry in graphitic carbon network



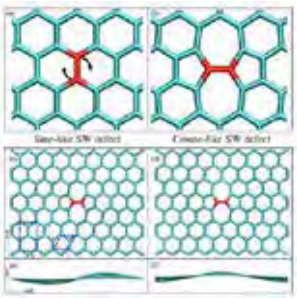
O.V. Yazyev and S.G. Louie: *PRB* **81**, 195420 (2010)



M. Terrones: *ACS Nano* **4**, 1775 (2010)

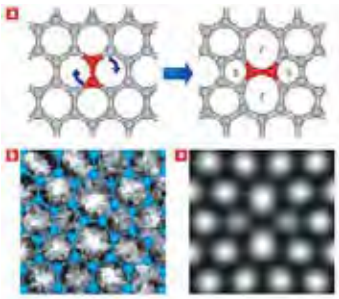


K. Balasubramanian *et al.*, *Small* **1**, 180 (2005)

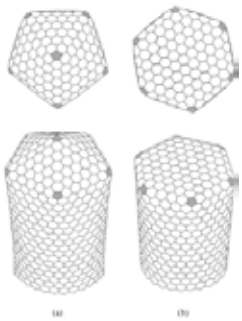


The structure of two buckled Stone-Wales defects in graphene.

J. Ma *et al.*: *PRB* **80**, 033407 (2009)



K. Suenaga *et al.*, *Nat. Nanotech.* **2**, 358 (2007)

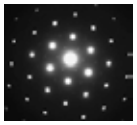


Only six pentagon insertion is allowed for capping a CNT regardless of its tube radius and chirality (Gauss-Bonnet theorem).

Y. Saito *et al.*, *JJAP* **39**, L271 (2000)

How do we produce 1D uneven (凹凸) C_{60} polymer ?

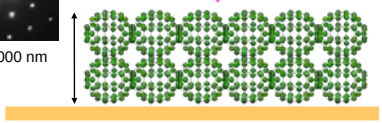
Carbon **81**, 842 (2015).



5-1000 nm

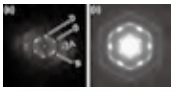
Electron beam (3-10 kV)

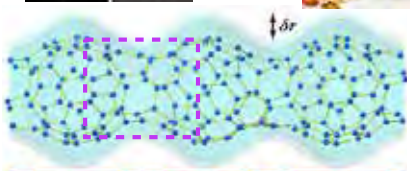
10^{15}–10^{17} $cm^{-2}s^{-1}$



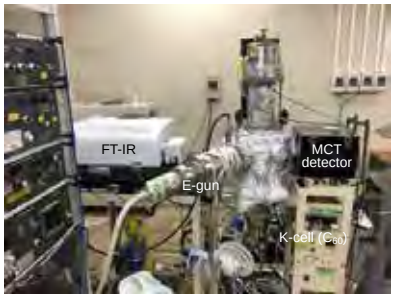
CsI/Si/Cu/Mica/SiO_2 substrates

C_{60} film
: insulator (10^8–10^{14} Ωcm)/soluble

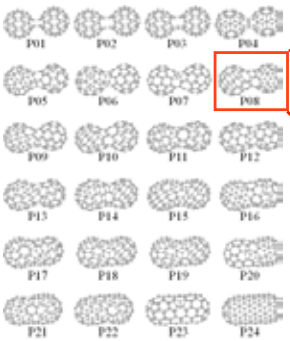




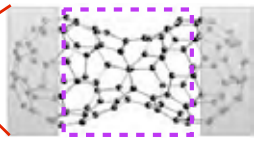
1D peanut-shaped C_{60} polymer
: metal (<10^{-2} Ωcm)/insoluble



***In situ* UHV FT-IR apparatus**



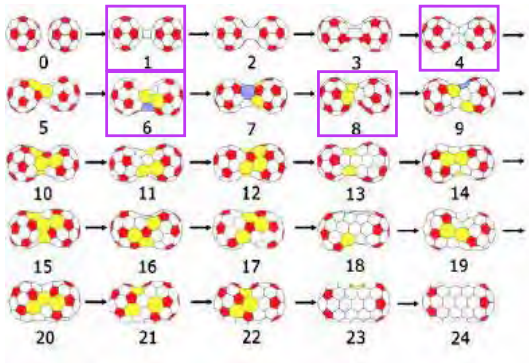
Optimized structure of GSW C_{120} isomers obtained using Gaussian09



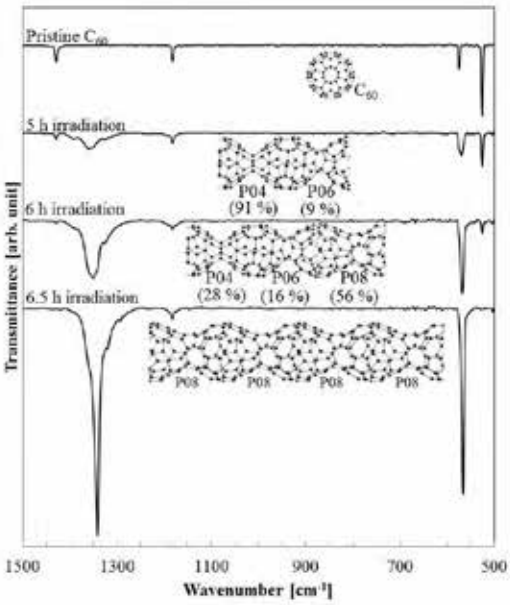
The cross-linked structure of P08 C_{120} isomer

APL **82**, 595 (2003); *APL* **85**, 2741 (2004); *PRB* **72**, 155416 (2005); *PRB* **74**, 195426 (2006); *JPCB* **110**, 22374 (2006); *PRB* **75**, 233410 (2007); *APL* **92**, 094102 (2008); *JAP* **104**, 103706 (2008); *PRB* **79**, 201401 (R) (2009); *JAP* **108**, 033514 (2010); *APL* **97**, 241911 (2010); *EPL* **98**, 27001 (2012); *JPCM* **24**, 175405 (2012); *APL* **104**, 113301 (2014); *PRB* **90**, 155435 (2014); *Carbon* **81**, 842 (2015); *Carbon* **96**, 316 (2016); *Carbon* **152**, 882 (2019); *Adv. Sustain. Sys.* **5**, 2000156 (2021)

The formation processes of the 1D 凹凸 C_{60} polymer



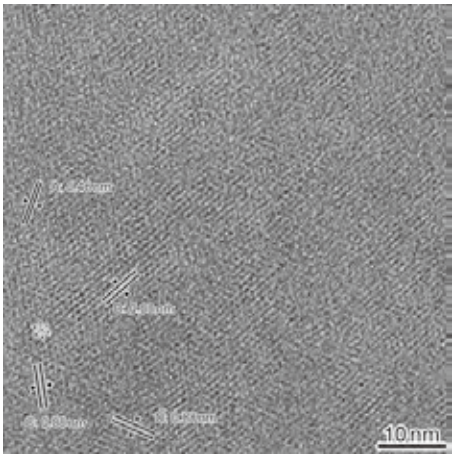
GSW reaction model

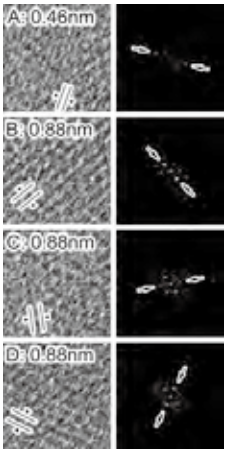


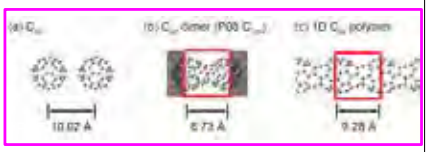
J. Phys, D: Appl. Phys. **2012**

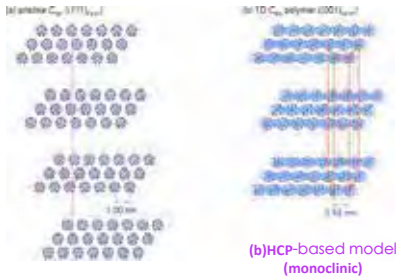
1D structure evidenced using cryo-HRTEM

FFT image

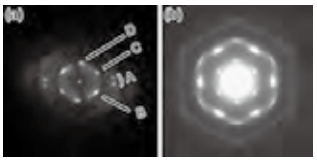








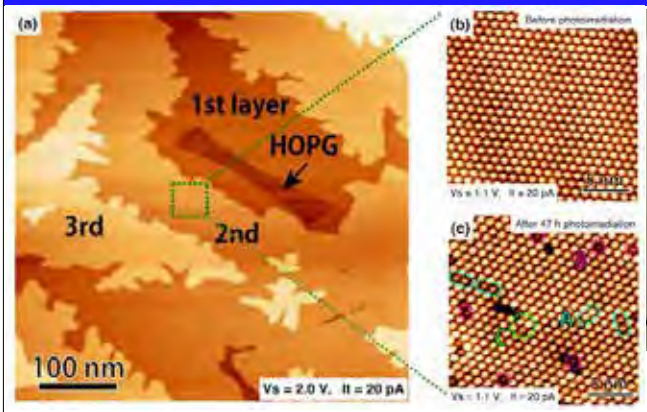
three equivalent directions for 1D polymerization

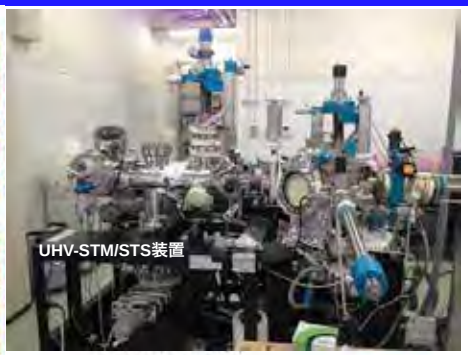


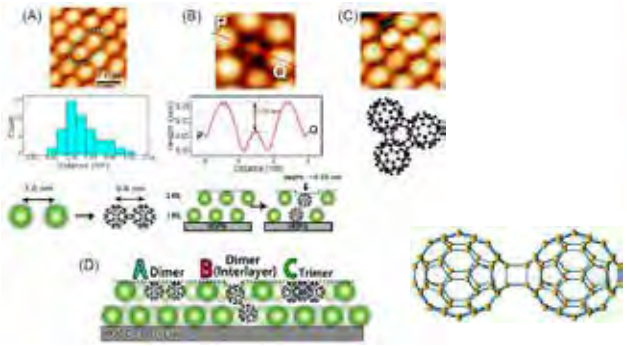
cryo-TEM (Osaka Univ.)

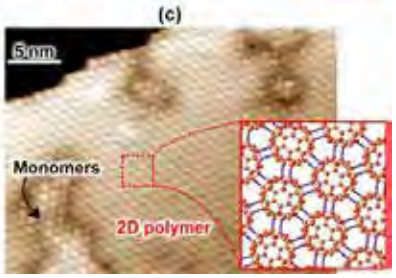
Carbon **81**, 842 (2015). *Carbon* **96**, 316 (2016).

フラーレン固体の光重合



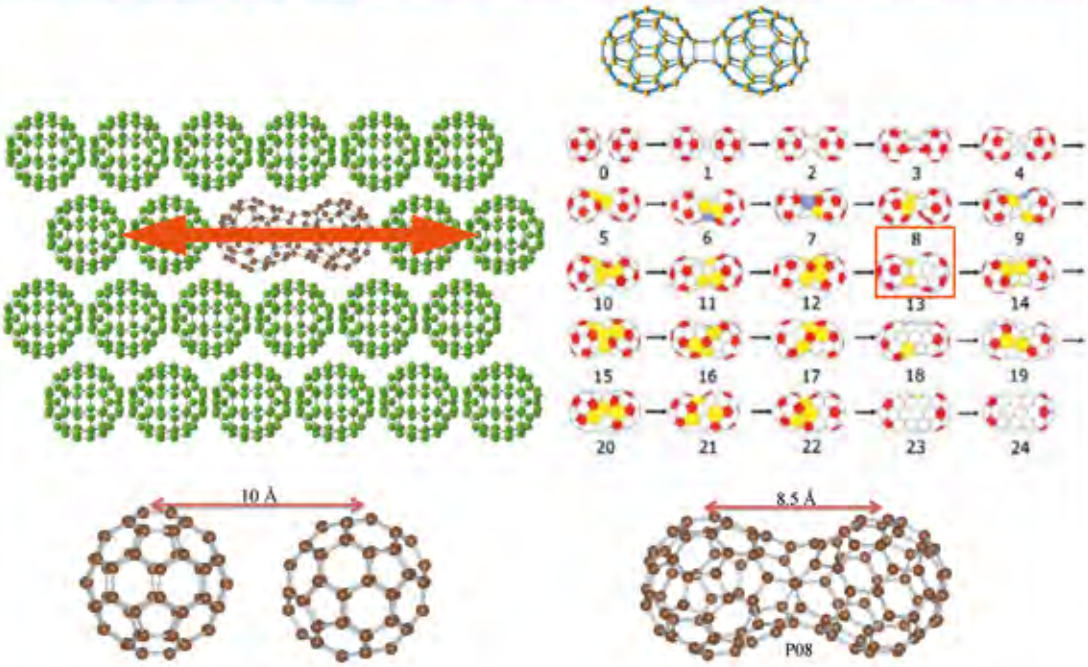






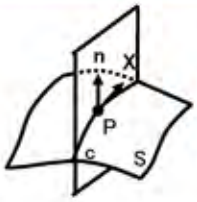
PRB **1996**, *PRB* **1997**, *PRL* **1997**
Surf. Rev. Lett. **1999**
AIP Adv. **10**, 085212 (2020) [**Editor's pick**]

What is the formation mechanism of the 1D structure?



Nanocarbons classified using Gaussian curvature

Johann Carl Friedrich Gauss
(1777-1855)



The curvature of curve "C" passing through point "P"

convex ⌂: κ < 0

concave ⌓: κ > 0

Maximum curvature: κ_1

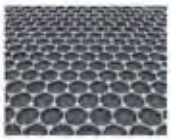
Minimum curvature: κ_2

Gaussian curvature $k = \kappa_1\kappa_2$

Mean curvature $h = (\kappa_1+\kappa_2)/2$

A.L. Mackay
(1926-)

Nanocarbon family	Gaussian curvature
(1) graphene	0
(2) fullerenes	+
(3) nanotubes	0, +
(4) Mackay crystal (hypothetical)	−
(5) 1D exotic-nanocarbons	+,−

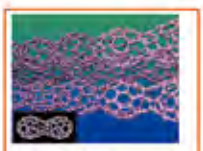


(1)

(2)

(3)

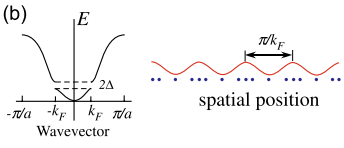
(4)

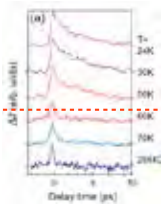


(5)

Physical properties arising from 1D metal

Peierls transition

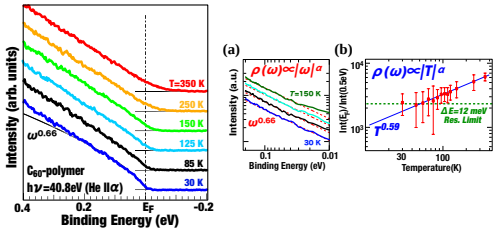




$2\Delta = 3.52 k_B T_p \sim$ **15 meV** ($T_p \sim 50$ K)

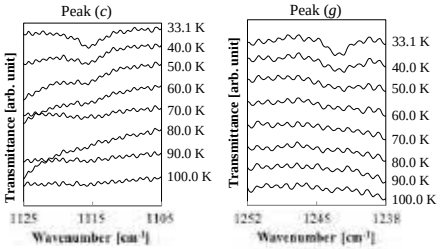
Appl. Phys. Lett. **92**, 094102 (2008).

Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states



Europhys. Lett. **98**, 27001 (2012).
Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

Charge-Density-Wave (CDW) phonon mode



Appl. Phys. Lett. **97**, 241911 (2010).

1D van Hove Singularity

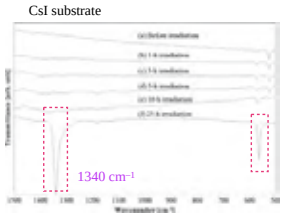
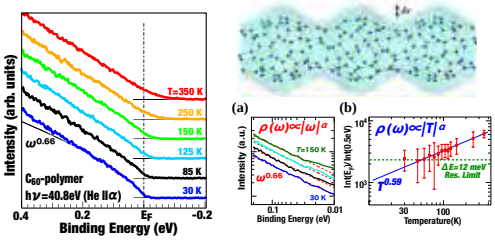


FIG. 3. Irradiation-time evolution of *in situ* IR spectra of an EB irradiated C_{60} film.

J. Appl. Phys. **108**, 033514 (2010)
J. Phys.: Condens. Matter **24**, 175405 (2012).

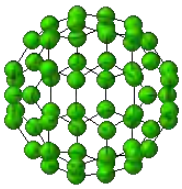
Novel properties different from those of the other nanocarbons

Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states



Europhys. Lett. **98**, 27001 (2012).
Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

Fullerenes



H.W. Kroto *et al.*, *Nature* **318**, 162 (1985)

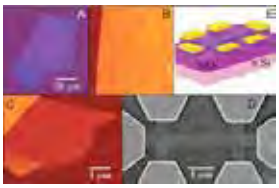
1996 Nobel prize in chemistry

Nanotubes

HR-STM image of SWCNT (Dekker's group, Delft)

S. Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991)

Graphenes



K.S. Novoselov et al., *Science* **306**, 666 (2004).

2010 Nobel prize in Physics

What happens to free electrons when they propagate in 1D uneven (凹凸) curved space?

Are they affected by the geometric curvatures?

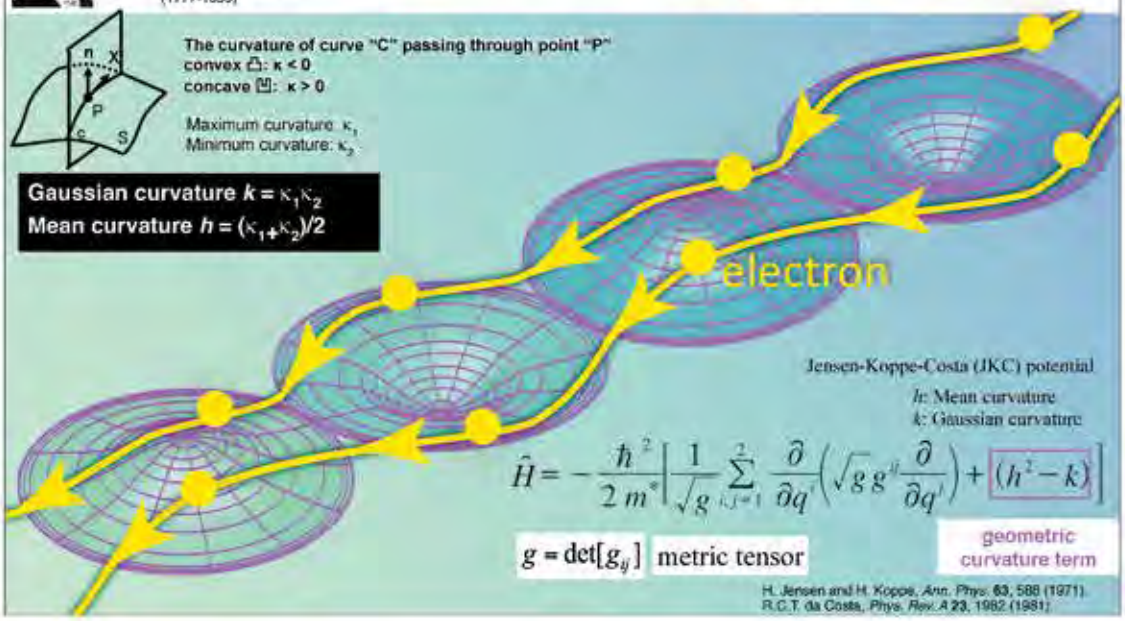
A big puzzle since 1950s

Johann Carl Friedrich Gauss (1777-1855)

The curvature of curve "C" passing through point "P"
convex 凸: $\kappa < 0$
concave 凹: $\kappa > 0$

Maximum curvature: κ_1
Minimum curvature: κ_2

Gaussian curvature $k = \kappa_1\kappa_2$
Mean curvature $h = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$



Jensen-Koppe-Costa (JKC) potential

h: Mean curvature
k: Gaussian curvature

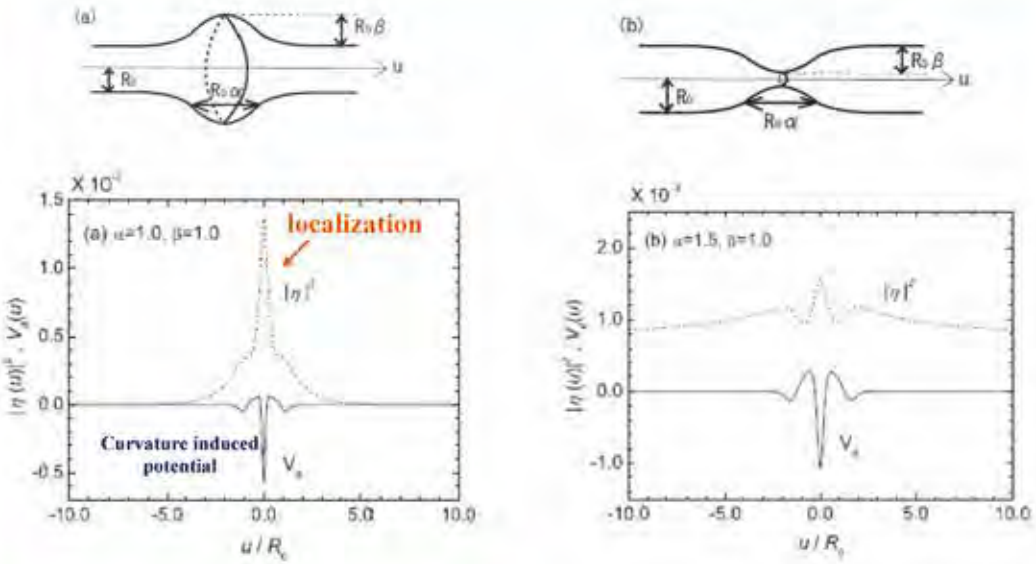
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}\,g^{ij}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) + \boxed{(h^2-k)}\right]$$

$g = \det[g_{ij}]$ metric tensor

geometric curvature term

H. Jensen and H. Koppe, *Ann. Phys.* **63**, 586 (1971).
R.C.T. da Costa, *Phys. Rev. A* **23**, 1982 (1981).

Curvature effects : localization of electron wave function

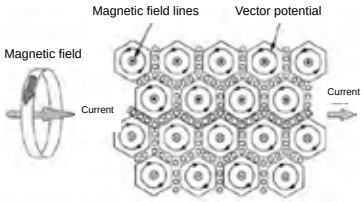


Electron bound states by curvatures

H. Taira and H. Shima, *J. Phys.Conf. Ser.* **61** (2007) 1142.

Vector potential（AB effect）

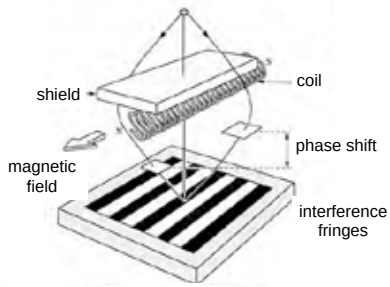
$$B = \mathrm{rot}A$$
$$E = -\frac{\partial A}{\partial t}$$



Vector potential *A* was thought to be introduced mathematically, but its physical meaning was given by **Aharonov** and **Bohm**.

Y. Aharonov and D. Bohm: *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959)

Aharonov-Bohm (AB) effect



$$\Delta\phi = \frac{e}{\hbar}\oint A ds = \frac{e}{\hbar}\int B dS$$

superconductive coil

Electron-beam holography

phase difference = 0

phase difference = 1/2 λ

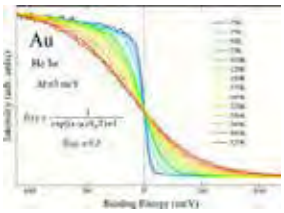
A. Tonomura *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **56**, 792 (1986)

Prediction of the geometric curvature effects on Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states

2-3 D metal

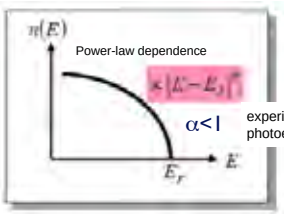
Fermi Liquids (FL)

$$f(E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)\right]^{-1}$$



1D metal

Tomonaga-Luttinger Liquids (TLL)



experimentally determined using photoelectron spectroscopy

$$n(\omega) \propto |\hbar\omega - E_F|^{\alpha}, \quad \alpha = \frac{K + K^{-1}}{2} - 1,$$

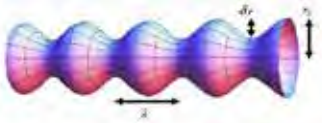
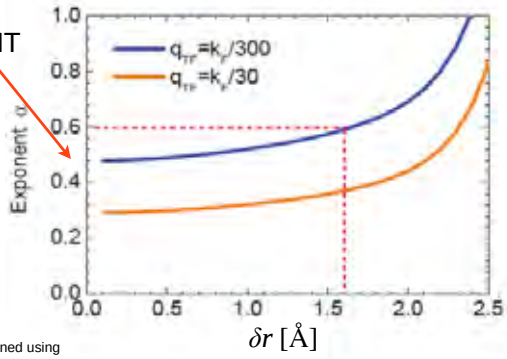


FIG. 1: (color online) Schematic illustration of a quantum hollow cylinder with periodic radius modulation.

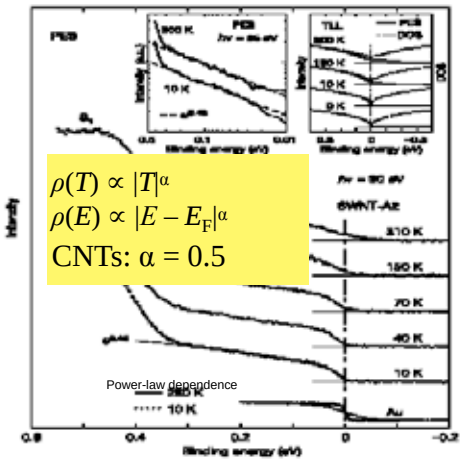
CNT



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}\, g^{ij}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) + \boxed{(h^2 - k)}\right]$$

Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

Prediction of the geometric curvature effects on Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states



H. Ishii, H. Yoshioka *et al.*, *Nature* **426**, 540 (2003).

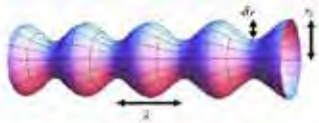
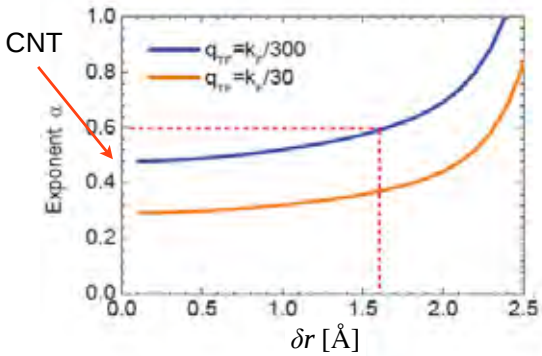


FIG. 1: (color online) Schematic illustration of a quantum hollow cylinder with periodic radius modulation.



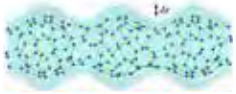
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}\,g^{ij}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) + \boxed{(h^2-k)}\right]$$

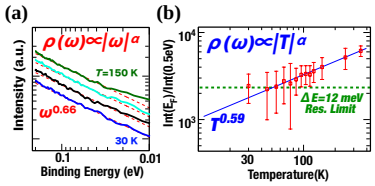
Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

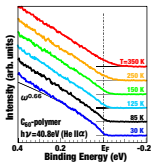
Evidence for the geometric curvature effects on electronic properties

In situ high-resolution PES

δr = 1.4 Å







$\rho(T) \propto |T|^{\alpha}$
$\rho(E) \propto |E - E_F|^{\alpha}$
[Ⅱ]Ⅰ[Ⅱ]periodic: α ~ 0.6
CNT: α ~0.5

Europhys. Lett. **98**, 27001 (2012).

good agreement

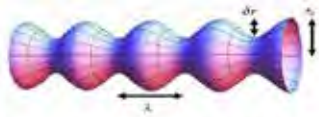
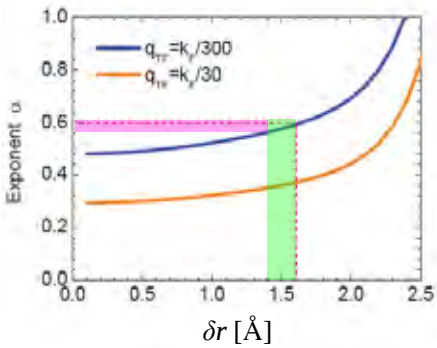


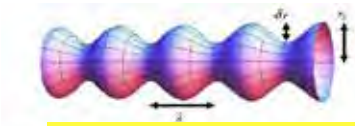
FIG. 1: (color online) Schematic illustration of a quantum hollow cylinder with periodic radius modulation.



Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

Summary & Perspectives

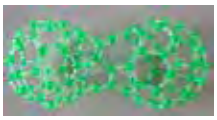
A potential driven by a periodic uneven (凹凸) geometry has been curious to affect electronic properties of materials since 1950s.

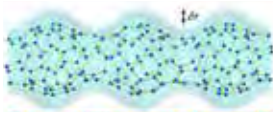


$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}\,g^{ij}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) + \boxed{(h^2-k)}\right]$$

First observation of geometric curvature effects on electron behaviors (Quantum mechanics in submanihold)

5-9 membered rings get together to form a curved surface





Discrete Geometry Analysis

Physical quantities ⟷ Geometric quantities

quantitative or qualitative correlation ?

現代幾何学と物質科学

数学 Libre：2020 年 9 月
64. 部分多様体の量子力学 IV
松谷茂樹

前回，Jensen-Koppe, da Costa (JKdC) が示した部分多様体の量子力学が数理物理的にとても自然な対象であることを示しました．とはいえ，その正当性は実験的に検証されるべきです．それが物理学の王道です．それを行ったのが尾上・伊藤・島・吉岡・木村です [1,2]．これは画期的なことです．私自身はその内容を完全に把握する力を持ちあわせていませんが，[1-4] に従いその実験の内容を概観したいと思います．

尾上らは数珠状に C_{60} を連ねた擬一次元鎖を構成し，その電子状態と構造について観察，考察しました．C_{60} は直径 0.71 nm 程度のサッカーボール型の分子です．

超高真空下で作製した C_{60} 薄膜 (膜厚 20〜30 nm) に 3 keV, 0.5 mA の電子線を 16 時間，照射すると C_{60} が連なった 1 次元的な C_{60} ポリマーが生成されます．その長さは cryo-TEM（低温透過型電子顕微鏡）の観察によると数百 nm 程度であり [5]，形状は下図のようになっています．

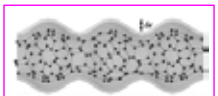


図 1: 1D エキゾチックナノカーボンと δr [1]

この 1 次元的ナノカーボンを 1D エキゾチックナノカーボンと尾上らは呼んでいます[1]．ここでは 1DEC と略します．δr がその歪み具合の指標となっています．

[1] ミルナーのエキゾチック球面にインスパアーされて，命名されたとのことです．

エキゾティックでなくとも，円筒型のカーボンナノチューブの電子は一次元量子力学系として振る舞うことが知られています．1 次元系の特徴はその量子的揺らぎが極めて大きいということです．そのため，電子状態は，3 次元空間でのフェルミ流体とは異なる朝永・ラッティンジャー流体となります．

この 1DEC でも自由電子が大域的に存在し，その絶対温度零においてもフェルミエネルギー E_F における電子状態密度 $n(\omega)$ が不連続ではなく，連続的な

$$n(\omega) \propto |\hbar\omega - E_F|^{\alpha}$$

となります．

朝永振一郎
(1906-1979)

島・吉岡・尾上は連続した凹凸曲面モデルの構造を用いて，1DEC の α が幾何学形状 δr と関連することを解明しました [3]．JKdC に沿って，δr を持つ図 1 の幾何学的な形状により定まる負のポテンシャルの効果を加味した結果です．ラッティンジャー流体とこの幾何効果を結びつけたことで，JKdC の理論は大きく飛躍したのです [4]．その依存性 $\alpha(\delta r)$ は対象とする区間では連続で単調増加となります．

他方，高分解能紫外光電子分光計測によって光吸収スペクトルの強度の依存性を観察すると，α を直接，評価することができます．尾上らはそれらの観察により 1DEC の場合，$\alpha = 0.6$ であることを実験的に示しました．関数 $\alpha(\delta r)$ の単調増加性により実験結果の $\alpha = 0.6$ は $\delta r = 0.16$ nm に対応することが判りました．

これに対して，赤外の分光された光を照射し，その吸収スペクトルを見ることで，構造が判ることが知られています．尾上らは更に，カーボンネットワークを考慮して，2 つの C_{60} に対する結合した分子に対する第一原理計算による構造計算[2]と，赤外分光スペクトルの吸収スペクトルによる比較により，対象とした 1DEC の構造を評価し，$\delta r = 0.14$ nm となることを同定しました [2]．更に，電子の波動関数の分布により分極による電子状態への影響が無視できることも示し，そのことにより，朝永・ラッティンジャー流体のパラメータ α の変位は純粋に幾何学的効果であることを示しました．

この電子に関わる実験と理論計算による評価値 $\delta r = 0.16$ nm と，赤外分光スペクトルによる構造の評価値である $\delta r = 0.14$ nm の両者がほぼ一致することで，電子が幾何学から受けた効果，それは JKdC の効果ですが，それが実証されたのです [1-4]．

フォン・ノイマン
(1903-1957)

JKdC [I1,I2] 池田・長岡 [II1] の考察からそれぞれ 40 年，30 年，20 年を経て，ナノカーボンの材料科学の発展と，朝永・ラッティンジャー流体との融合という理論の飛躍によって，ついにそれが実証されました．鋭い着眼点と深い洞察の賜物と考えます．

フォン・ノイマンは「数学は経験に即したその発生の原点から遠く離れ，「現実」から乖離した第二，第三世代になると，致命的な危機に陥ります．……危機とは摩擦を避けた安直な発展であり，原点を忘れることによる学問の無意味な分岐であり，瑣末な精密化や複雑化を意味します．」[6]（著者訳）と書きました．

炭素系からなる化合物は，幾何学形状と直接つながり豊かな物理的現象を提供することが知られています．[7] で尾上，島は，物質科学は数学・幾何との新たな連携のステージに移行したとして，数学と物理の更なる協力により新たな物理学を構築することを提案しています．

一時期研究に関わった者として，部分多様体の量子力学が新たなパラダイムを提示する学問分野として成長することを願ってやみません[3]．

[2] 幾つかの仮定は入りますが，量子力学に従って，経験的なパラメータを利用することなく，化合物の構造（形状，構造の固有振動など）や電子状態（波動関数の位置的，エネルギー的分布）を決定する計算方法です．

参考文献
[1] 尾上順, 電子物性におけるリーマン幾何学効果 表面科学 **34** (2013) 38-43.
[2] J. Onoe, T. Ito, H. Shima, H. Yoshioka and S. Kimura, Observation of Riemannian geometric effects on electronic states EPL (Europhys. Lett.) **98** (2012) 27001.
[3] H. Shima, H. Yoshioka and J. Onoe, Geometry-driven shift in the Tomonaga-Luttinger exponent of deformed cylinders, Phys. Rev. B **79** (2009) 201401(R).
[4] 島弘幸，小野頌太，平久夫　曲面量子系の基礎と物質科学への適用　表面科学　**30** (2009) 652-658.
[5] H. Masuda, H. Yasuda, J. Onoe, Two-dimensional arrangement of one-dimensional polymerized C_{60} evidenced by high-resolution cryo-transmission electron microscopy, Carbon **96** (2016) 316-319.
[6] J. von Neumann, The Mathematician, The Works of the Mind edited by R. B. Heywood, Univ. Chicago Press 1947.
[7] H. Shima and J. Onoe, Chapter 3 : Topology-Induced Geometry and Properties of Carbon Nanomaterials, in *The Role of Topology in Materials* Springer 2018, S. Gupta, A. Saxena 編.

松谷茂樹 教授
（金沢大学）

（まつたにしげき
／金沢大学 電子情報通信学系）

[3] 謝辞：この記事を書くに当たって，尾上順教授から様々なことをご教授頂きました．

1　　2

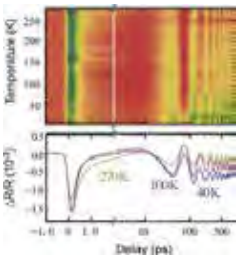
現代数学9月号（2020）

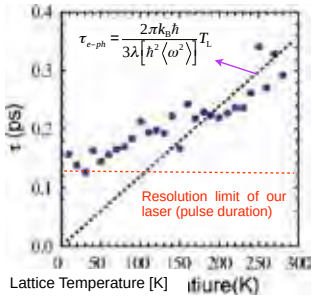
Geometric shape effects on electron-phonon coupling strength

PHYSICAL REVIEW B **90**, 155435 (2014)

Unified understanding of the electron-phonon coupling strength for nanocarbon allotropes

Shota Ono,[1,*] Yasunori Toda,[2] and Jun Onoe[3]
[1]*Department of Physics, Graduate School of Engineering,Yokohama National University, Yokohama 240-8501, Japan*
[2]*Division of Applied Physics, Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo 060-8628, Japan*
[3]*Department of Physical Science and Engineering, Nagoya University, Nagoya 464-8603, Japan*
(Received 8 April 2014; revised manuscript received 3 September 2014; published 21 October 2014)





π-electron conjugated system

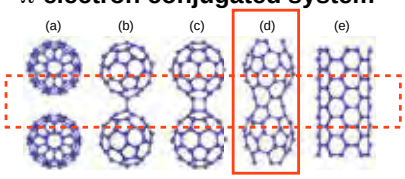
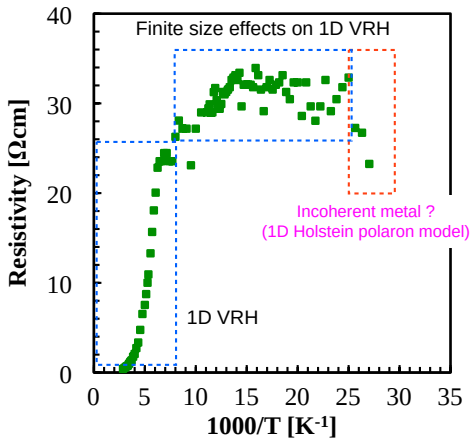


FIG. 4. (Color online) Schematic illustration of nanocarbon allotropes: two C_{60} between which are connected via (a) van der Waals interaction, (b) single C-C σ-bond, (c) $2+2$ cycloadditional bond, (d) 1D C_{60} polymer having coalesced GSW bond, and (e) single-walled CNT.

TABLE I. Electron-phonon coupling constant λ of nanocarbon allotropes. The kind of chemical bonding between C_{60} is also shown.

	C_{60} compound	λ	Bonding (C_{60}-C_{60})
(a)	A_3C_{60} (A = K, Rb)	0.6 (0.5)	van der Waals
(b)	Na_4C_{60}	0.3	Single C-C σ bond
(c)	AC_{60} (A = K, Rb)	~0.1	$2+2$ cycloadditional bond
(d)	1D C_{60} polymer	0.02	Coalesced GSW bond
(e)	Single-walled CNT	0.006	–
	Multiwalled CNT	5.4×10^{-4}	–

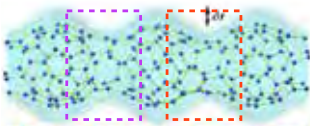
Anomaly in the resistivity at temperatures below 50 K



$$\rho \propto \exp\left(\frac{2L}{\xi}\right)$$

L: the length of the 1D disordered system
ξ: electron localization length

[E. N. Economou, *PRB* **31**, 6172 (1985)]



Appl. Phys. Lett. **104**, 113301 (2014)

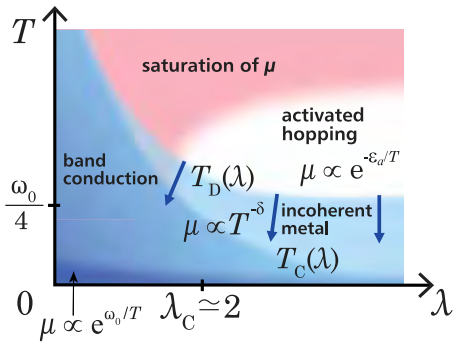


FIG. 1 (color online). Transport regimes of polaron. Schematic phase diagram showing the four different regimes of polaron mobility μ in the plane of λ-T (λ: EPC strength, T: temperature). Here, the unit of energy is $t=1$, and ω_0 is the phonon frequency. Arrows show the direction of shift of the borderlines between different regimes when the phonon frequency decreases.

A. S. Mishchenko et al., *PRL* **114**, 146401 (2015)

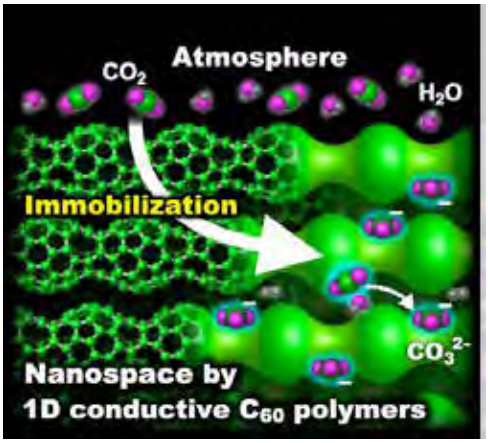
Application to environmental issues: CO_2 immobilization

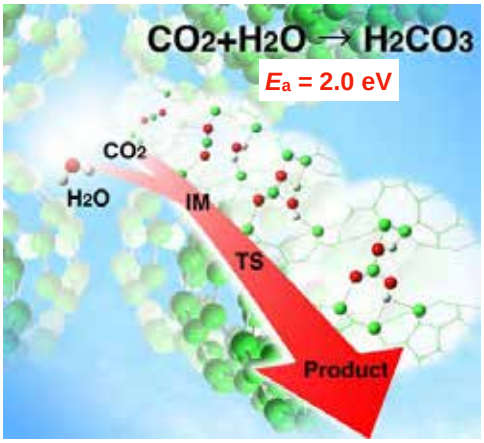
COMMUNICATION

ADVANCED SUSTAINABLE SYSTEMS
www.advsustainsys.com

Immobilization of CO_2 at Room Temperature Using the Specific Sub-NM Space of 1D Uneven-Structured C_{60} Polymer Film

Masato Nakaya, Yasutaka Kitagawa, Shinta Watanabe, Rena Teramoto, Iori Era, Masayoshi Nakano, and Jun Onoe**



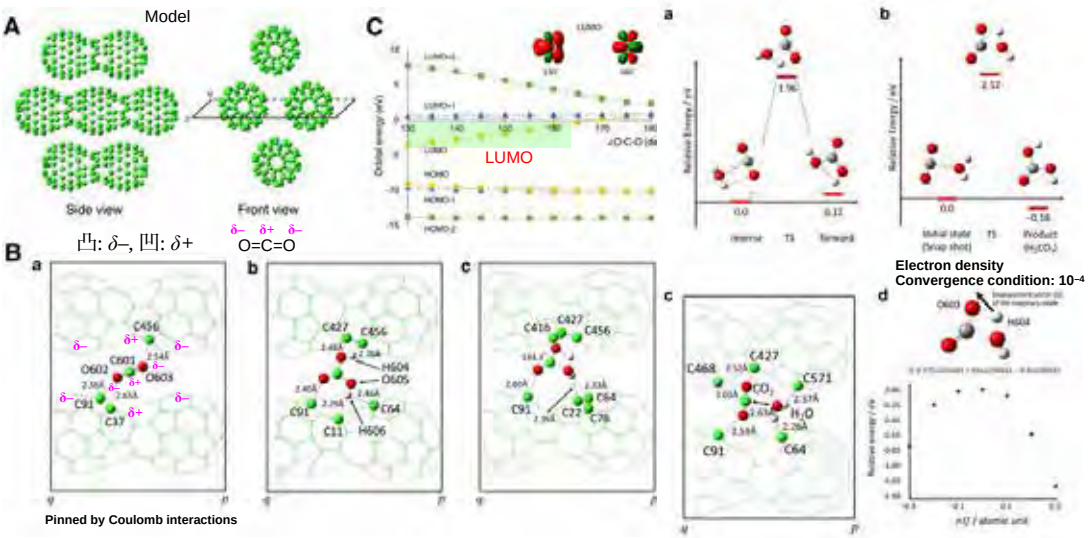


CO_3^{2-}: carbonate ion

科研費 KAKENHI

Adv. Sustain. Sys. **5**, 2000156 (2021)

Reaction Mechanisms



(1) **Locally induced Coulomb interactions due to mirror image effects** increase positive and negative charges on the C (1D polymer) and O (CO_2) atoms, respectively, which play roles not only in **weakening the CO_2 double-bond slightly** but also in **stabilizing the TS of the CO_2 + H_2O reaction**.

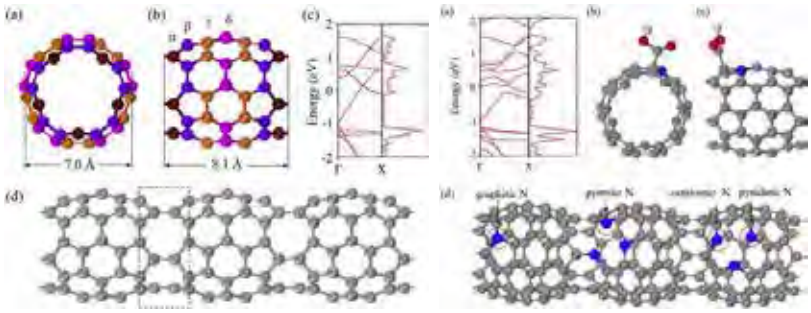
(2) In addition, the O atom of H_2O easily approaches the C atom of **CO_2 when activated by the bending motion**.

Adv. Sustain. Sys. **5**, 2000156 (2021)

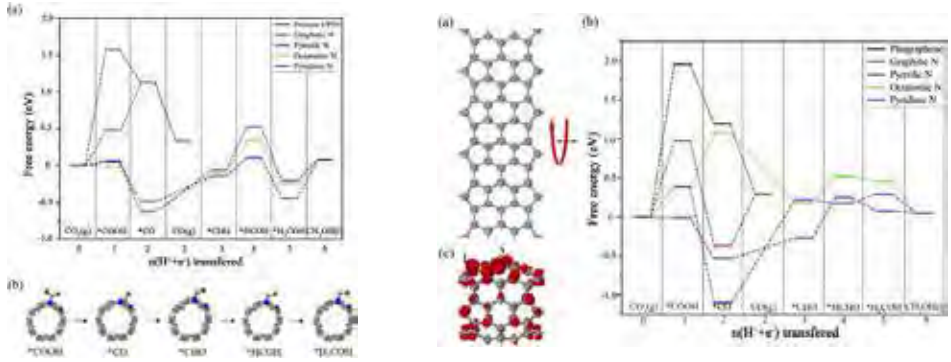
CO_2 activation methods

Conventional	1D凹凸C_{60} Polymer
・ Radiochemical ・ Thermochemical ・ Biochemical ・ Photochemical ・ Electrochemical ・ Catalysts B. Khezri *et al.*, *J. Mater. Chem. A* **5**, 8230 (2017)	**CO_2 pinning** **Angular vibration: LUMO energy decreases**
↓	↓
Reduction To add electrons to LUMO (antibonding orbital) Weakening O=C=O bonds	**Not reduction** **LUMO electron affinity up↑** **Increasing electron withdrawing**

N-doped 1D 凹凸 C_{60} polymer exhibiting CO_2 reduction efficiently



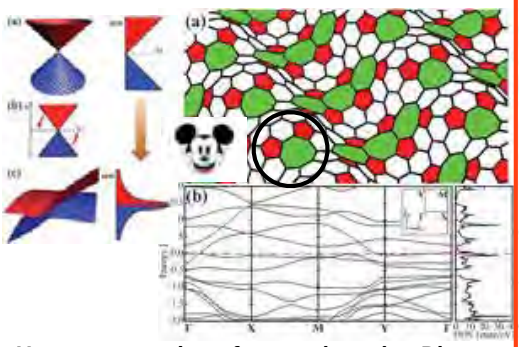
Several kinds of substitution position



W. Zhou, H. Shen, Q. Wang, J. Onoe, Y. Kawazoe, and P. Jena, *Carbon* **152**, 241 (2019)

Curvature-driven new functional nanocarbons
(theoretical prediction)

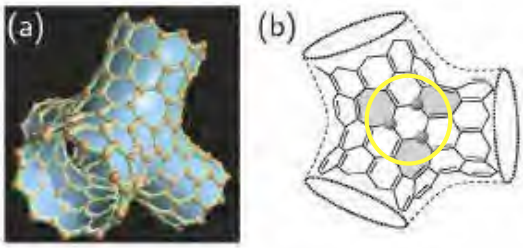
2D exotic-nanocarbons



Uneven curved surface makes the Dirac-cone inclined to form an intense flat band at the Fermi level (like Pt)

Y. Noda et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 7102 (2014)

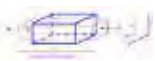
3D exotic-nanocarbons



three C atoms has an unpaired electron

Concave surface induces magnetic properties

N. Park et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 237204 (2003)



Penta-graphene: A new carbon allotrope

Shunhong Zhang, Jian Zhou, Qian Wang, Xiaoshuang Chen, Yoshiyuki Kawazoe, and Puru Jena

Negative Poisson's Ratio

PNAS **112**, 2372 (2015)

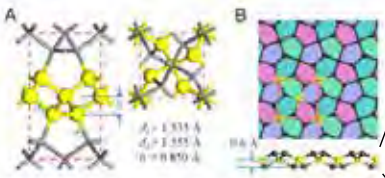
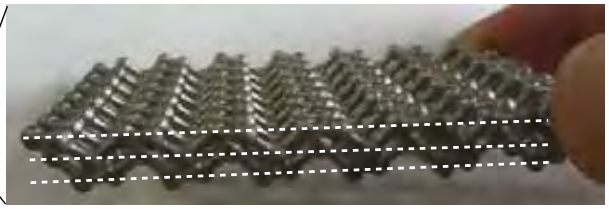
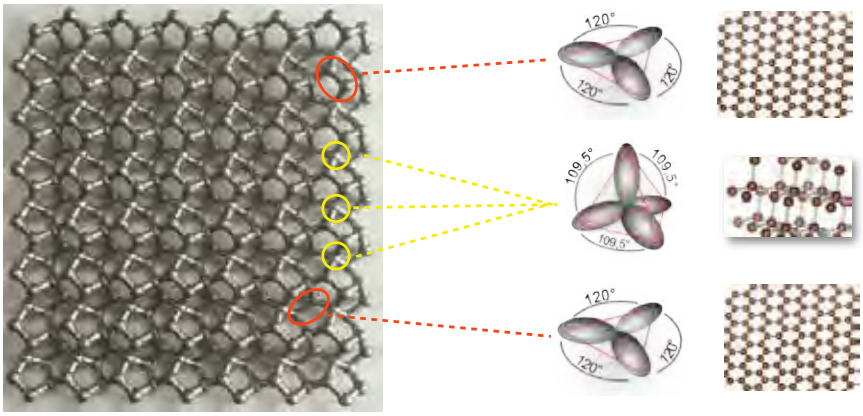


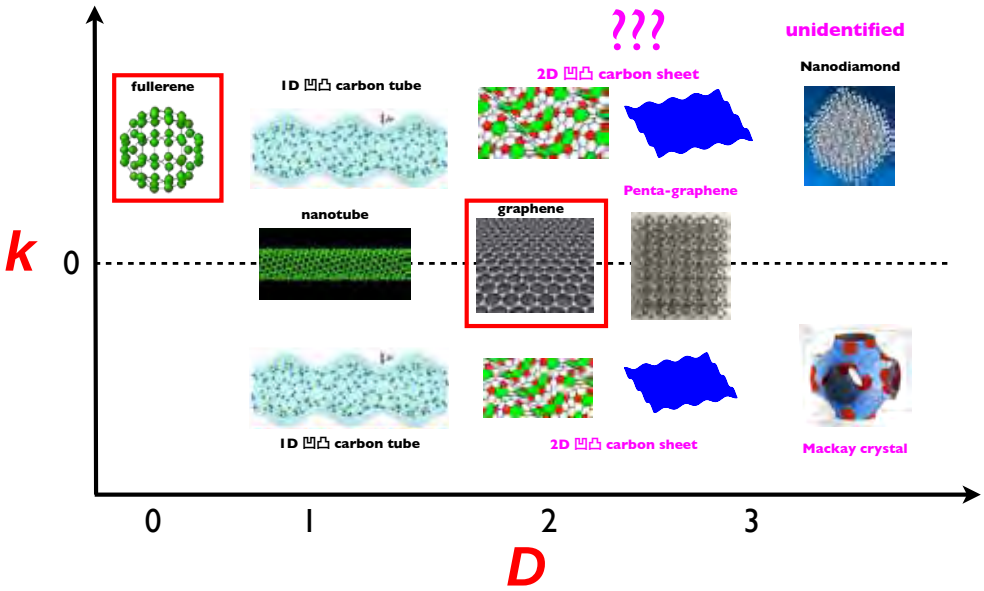
Fig. 1. (A) Crystal structure of T12-carbon viewed from the [100] and [001] directions, respectively. (B) Top and side views of the atomic configuration of penta-graphene. The square marked by red dashed lines denotes a unit cell, and the high-lighted balls represent the sp^3 hybridized C atoms.



Structural model made using a 3D printer (given by Prof. Kawazoe)



Mapping of nanocarbons using Gaussian curvature (k) and dimension (D)

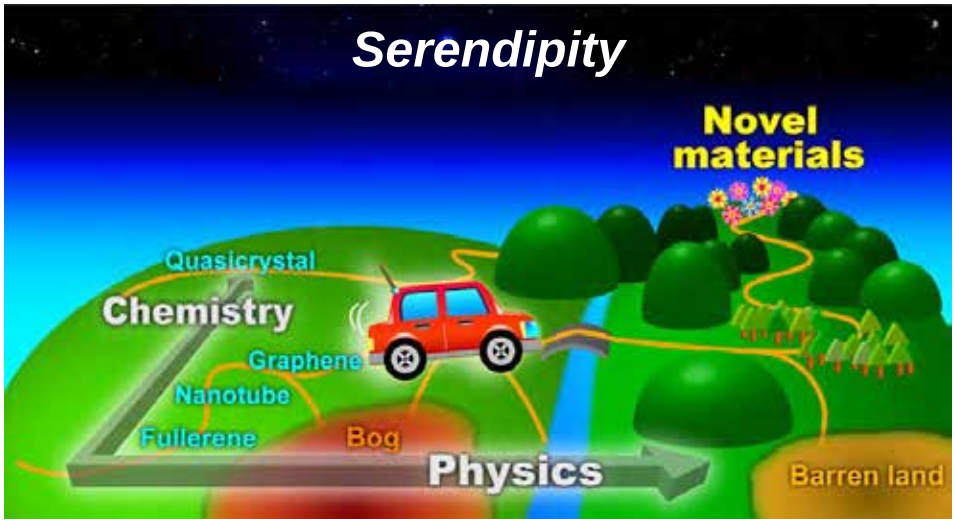


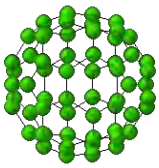
What happens twice happens three times !?

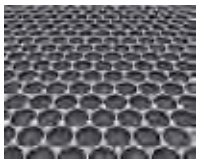
Japanese Maxim

Discovery of new novel materials

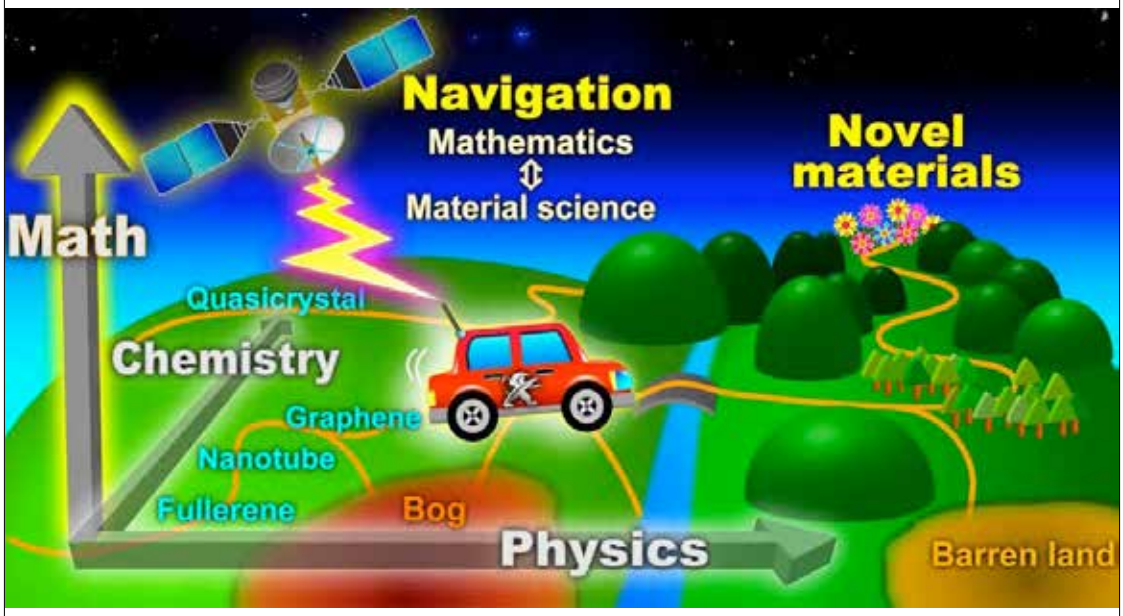
based on (1) knowledge (literature), (2) experience, and (3) intuition/inspiration

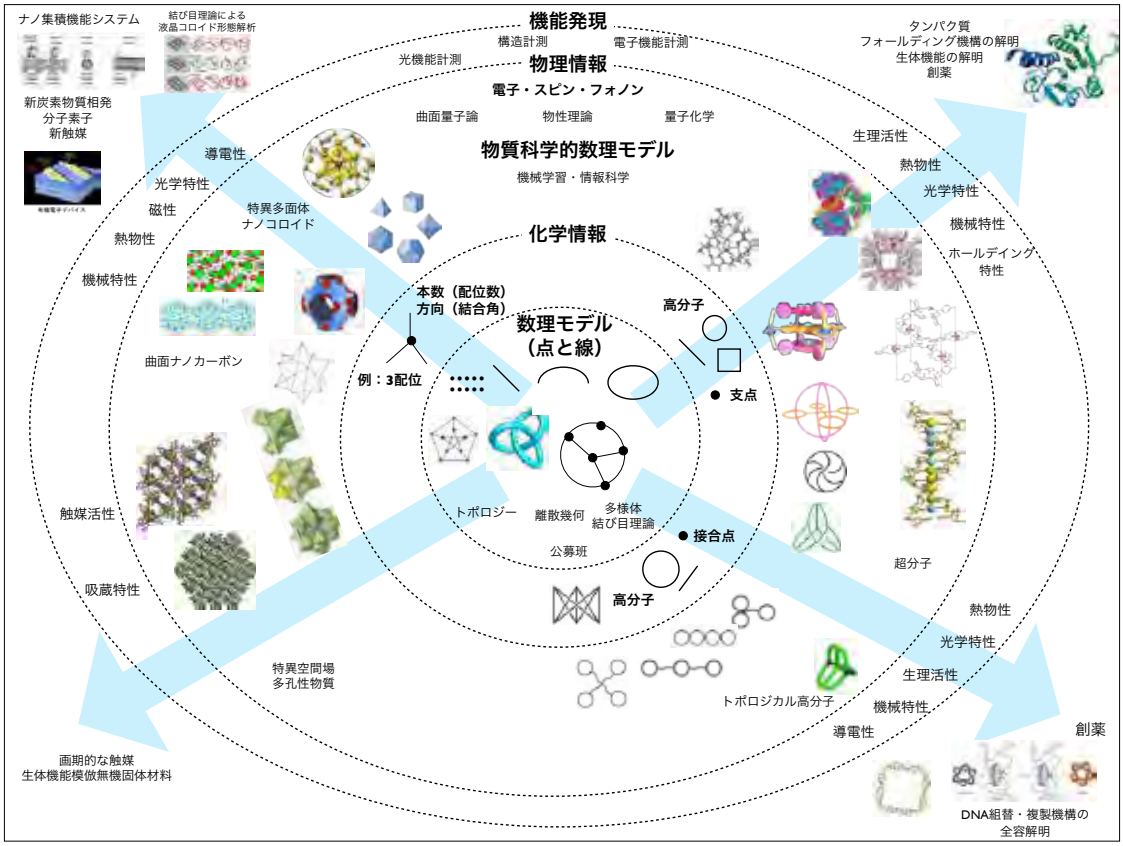






“Beyond serendipity”





伊達な大学院

「TANSO：古くて新しい炭素材料」

講義配信中

https://brainnavi-online.com/contents/category/bacademy

☜ここから新規登録（無料）すると視聴可能となります。

Acknowledgments

Onoe Lab.

Masato Nakaya, associate professor
Shinta Watanabe, research associate (Tokyo Inst. Technol.)
Takuya Kawai (Former master student)
Shintaro Umeda (Former master student)
Shu Hosono (Former master student)
Kentaro Yashiro (Former master student)

Collaborators

Prof. Yasutaka Kitagawa (Osaka Univ.)
Prof. Kaoru Ohno (Yokohama National Univ.)
Prof. Yusuke Noda (Okayama Prefect. Univ.)
Dr. Tomonobu Nakayama (NIMS, WPI-MANA)
Prof. Hiroyuki Shima (Yamanashi Univ.)
Prof. Hideo Yoshioka (Nara Women's Univ.)
Prof. Shin-ichi Kimura (Osaka Univ.)
Prof. Takahiro Ito (Nagoya Univ.)
Prof. Qian Wang (Peking Univ.)
Prof. Yoshiyuki Kawazoe (Tohoku Univ.)
Prof. Hirohide Yasuda (Osaka Univ.)
Dr. Hideki Masuda (JEOL)
Prof. Shigeki Matsutani (Kanazawa Univ.)
Prof. Yutaro Kabata (Nagasaki Univ.)
Prof. Yuta Ogata (Kyoto Sangyo Univ.)

Research grants

文部科学省　中部電力　科研費 KAKENHI　NEDO　さきがけ PRESTO　CREST

A first-principles consideration of energetic stability of peanut-shaped fullerene polymer

Yusuke NODA
Okayama Prefectural University

In a previous experimental study, it was reported that a peanut-shaped fullerene polymer (PSFP) with a pseudo-one-dimensional structure can be formed by electron-beam irradiation to C_{60} thin films. However, atomic-level structure of the PSFP is still unclear, and various PSFP models have been proposed in previous theoretical studies. In this study, we performed first-principles calculations based on density functional theory, and evaluated energetic stability of various PSFP models. The relationship between the energetic stability and geometrical structure of the PSFP was revealed by computational results.

九州大学IMI 研究集会II「材料科学における幾何と代数IV」
九州大学IMIオーディトリアム & Zoom
2023年9月4日(月) ~ 9月5日(火)

ピーナッツ型フラーレンポリマーの エネルギー的安定性の第一原理的考察

A first-principles consideration of
energetic stability of peanut-shaped fullerene polymer

野田 祐輔

岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科

Yusuke Noda (Okayama Prefectural University)

自己紹介

野田 祐輔（博士（工学）2015年3月取得）
岡山県立大学
情報工学部 情報通信工学科
応用物理学研究室 准教授

専門分野, 関連キーワード

- 物性物理学・材料科学
- 計算材料科学／第一原理計算
- マテリアルズ・インフォマティクス
- 機械学習，多変量回帰分析

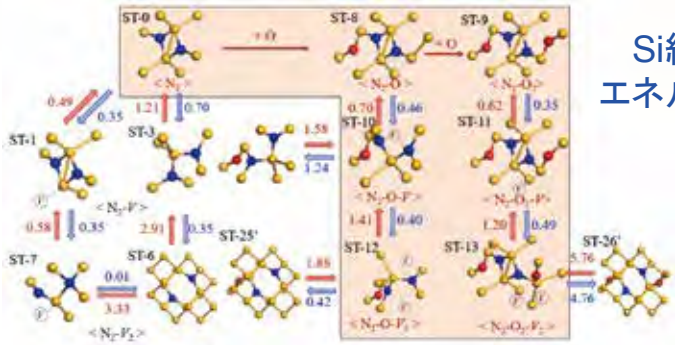
2

略歴

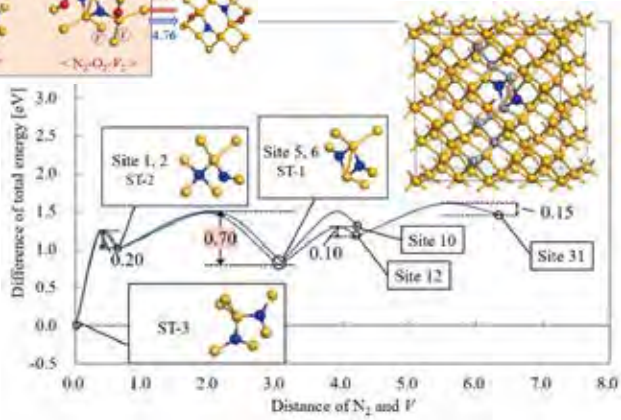
- 2006.04−2010.03
  - 横浜国立大学 工学部 知能物理工学科
- 2010.04−2015.03
  - 横浜国立大学 大学院工学府 物理情報工学専攻
    物理工学コース 博士課程前期／博士課程後期
- 2014.04−2016.03
  - 日本学術振興会 特別研究員（DC2）：横浜国立大学 大野かおる研究室
  - 日本学術振興会 特別研究員（PD）：理化学研究所 中村特別研究室
- 2016.04−2018.03
  - 物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 蓄電池材料グループ
    ポスドク研究員
- 2018.04−2020.03
  - 名古屋大学 大学院工学研究科 物質科学専攻 特任助教（CREST研究員）
- 2020.04−2021.03
  - 金沢学院大学 経済情報学部 経済情報学科 講師
- 2021.04−現在
  - 岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科 准教授

3

研究事例（1）

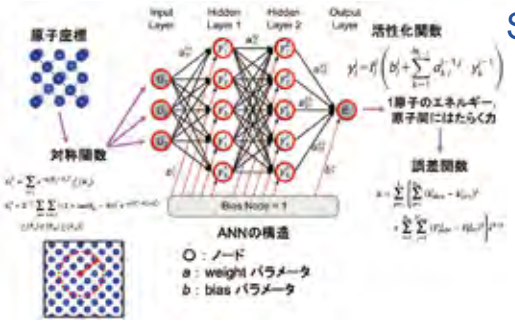


Si結晶中の欠陥構造の
エネルギー的安定性の比較

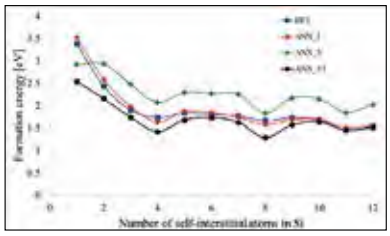


Si結晶中の不純物欠陥の
構造変化シミュレーション

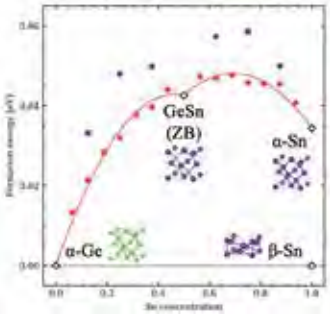
研究事例(2)

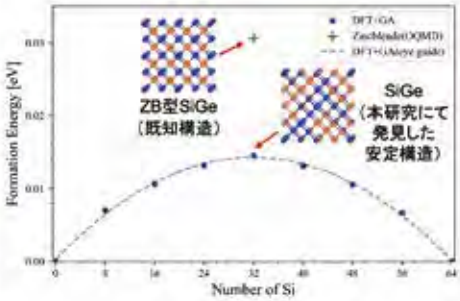


Si結晶中の欠陥構造解析に向けた機械学習ポテンシャルの開発



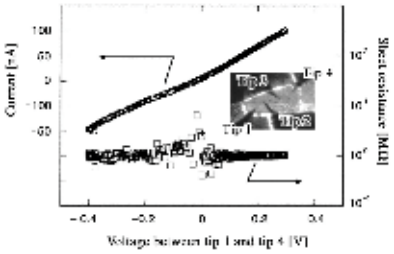
半導体物質の原子配列最適化(組み合わせ最適化アルゴリズムの応用)



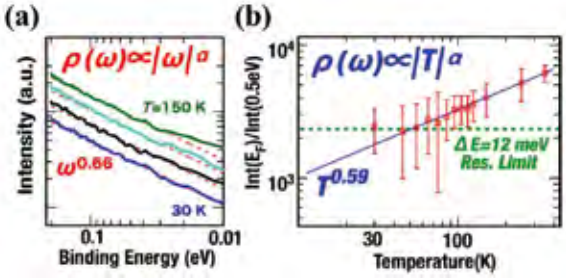


C_{60}フラーレンポリマー

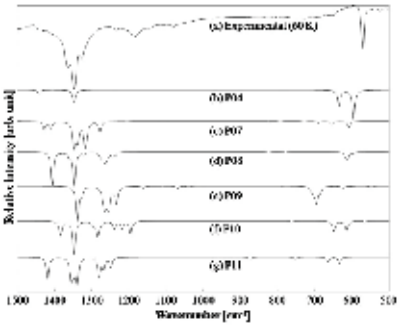
- 先行研究(実験)

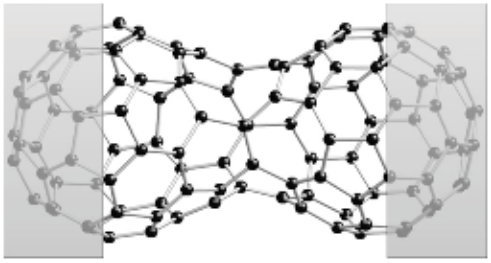


J. Onoe et al., *Appl. Phys. Lett.* **82**, 27 (2003).



J. Onoe et al., *Euro. Phys. Lett.* **98**, 27001 (2012).



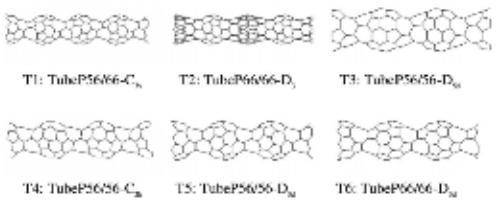


A. Takashima et al., J. *Appl. Phys.* **108**, 033514 (2010).

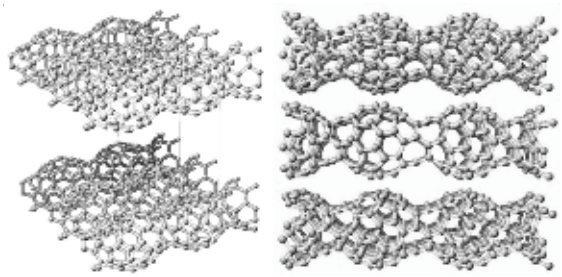
C_{60}フラーレンポリマー

- 先行研究（理論計算：第一原理計算）

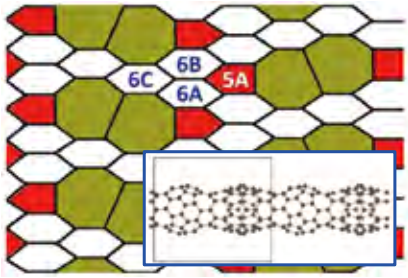
T. A. Beu et al., *Phys. Rev. B* **72**, 155416 (2005).



G. Wang et al., *J. Phys. Chem. B* **109**, 10957 (2005).



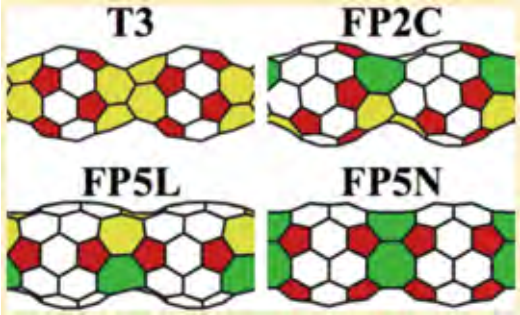
S. Ueda et al., *J. Phys. Chem. B* **110**, 22374 (2006).



Y. Noda et al., *Synth. Met.* **161**, 1546 (2011).

研究目的

- 理論計算（第一原理計算）に基づいてピーナッツ型フラーレンポリマー（Peanut-Shaped Fullerene Polymer：PSFP）の電子状態解析を行い，PSFPモデルの電子状態と構造（幾何学的特徴）との関係を明らかにする

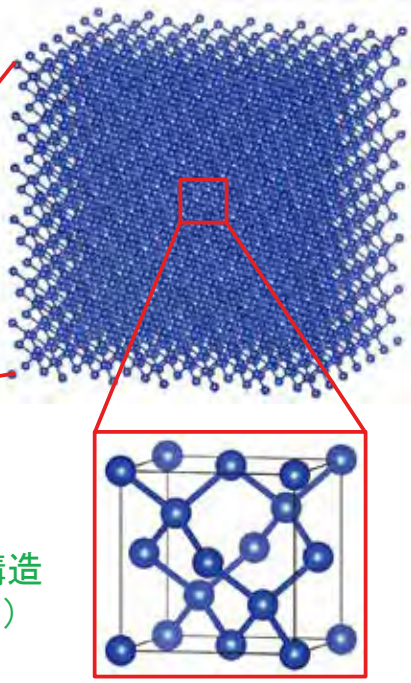


Y. Noda et al., *J. Phys. Chem. A* **119**, 3048 (2015).

8

物質と原子

物質（シリコンウェーハ）

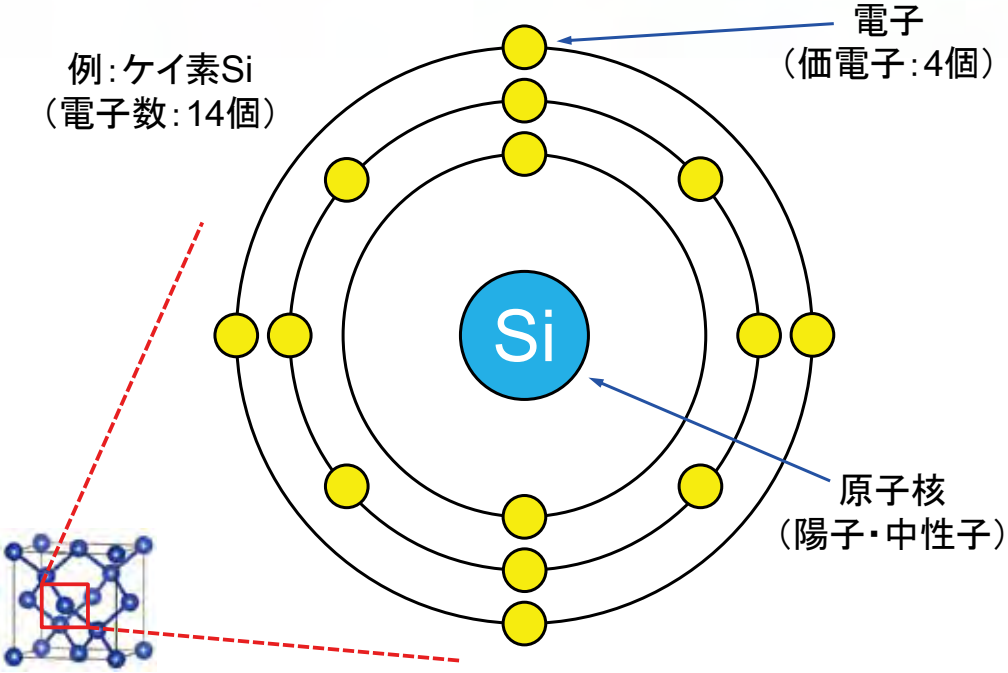


シリコン（ケイ素 Si）の結晶構造
（原子が周期的に並ぶ状態）
大きさ：nmオーダー

9

原子構造

例：ケイ素Si
（電子数：14個）



第一原理計算

- 経験的なパラメータを用いず（非経験的），対象物質の電子状態を求めるナノスケールシミュレーション
- 組成式（元素の種類）と原子座標（原子同士の位置関係）が決まると，対応する電子状態の計算結果が得られる
- 最も主流の第一原理計算は，Hohenberg，Kohnが提案した密度汎関数理論（DFT）に基づく計算である

Schrödinger方程式

（時間に依存しない）Schrödinger方程式

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

正確なハミルトニアン $\hat{H}$

$$\hat{H} = \underbrace{-\sum_{I}\frac{\hbar^2}{2M_I}\nabla_I{}^2}_{T_n} \underbrace{-\sum_{i}\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i{}^2}_{T_e} \underbrace{+\sum_{I,J}\frac{Z_I Z_J}{R_{IJ}} - \sum_{I,i}\frac{Z_I e}{r_{Ii}} + \sum_{i,j}\frac{e^2}{r_{ij}}}_{V}$$

T_n：原子核の運動エネルギー（演算子）
T_e：電子の運動エネルギー（演算子）
V：ポテンシャルエネルギー

Born–Oppenheimer近似

原子核を固定した場合のハミルトニアン $\hat{H}_e$

$$\hat{H}_e = \underbrace{\cancel{-\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I}\nabla_I{}^2}}_{T_n} \underbrace{-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i{}^2}_{T_e} \underbrace{+\sum_{I,J}\frac{Z_I Z_J}{R_{IJ}} - \sum_{I,i}\frac{Z_I e}{r_{Ii}} + \sum_{i,j}\frac{e^2}{r_{ij}}}_{V}$$

原子核の運動を止めて電子の運動のみを考慮し、
原子核の運動エネルギー（演算子）を無視する近似
（Born−Oppenheimer近似）

⇩

原子核の座標を固定した時のSchrödinger方程式

$$\boxed{\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e}$$

密度汎関数理論

- 密度汎関数理論（DFT）
  - Hohenberg，Kohnによって提案された，ハミルトニアン演算子を電子密度に関する汎関数として取り扱う多電子系の電子状態計算の理論
- Hohenberg−Kohnの第1定理
  - ある系の基底状態の電子状態$\rho(\boldsymbol{r})$が決まると，その基底状態に対応する外部ポテンシャル（1電子ポテンシャル）$v(\boldsymbol{r})$が一意的に決まる
- Hohenberg−Kohnの第2定理
  - 電子密度ρのエネルギー汎関数$E[\rho]$は，真の基底状態の電子密度ρ_0であるとき最小値を持ち，基底状態のエネルギーを与える（エネルギーの変分原理が成り立つ）

Kohn-Sham方程式(1)

- Kohn-Sham方程式
  - DFTにおいて，相互作用のある電子系と同じ電子密度を持つ，相互作用のない電子からなる仮想的な系におけるSchrödinger方程式

Kohn-Sham方程式

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{r})\right]\Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i$$

Kohn-Shamポテンシャル

$$v_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{r}) = v(\boldsymbol{r}) + \int \frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} d\boldsymbol{r}' + v_{\mathrm{XC}}(\boldsymbol{r})$$

交換相関ポテンシャル

$$v_{\mathrm{XC}}(\boldsymbol{r}) = \frac{\delta E_{\mathrm{XC}}[\rho]}{\delta \rho(\boldsymbol{r})}$$

Kohn-Sham方程式(2)

- Kohn-Sham方程式における全エネルギー
  - Kohn-Sham軌道エネルギーε_iの総和を考慮して，全エネルギーを計算する

全エネルギー

$$E = \sum_i^N \varepsilon_i - \frac{1}{2}\int \frac{\rho(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{r}' - \int \frac{\delta E_{\mathrm{XC}}[\rho]}{\delta \rho(\boldsymbol{r})} \rho(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r} + E_{\mathrm{XC}}[\rho]$$

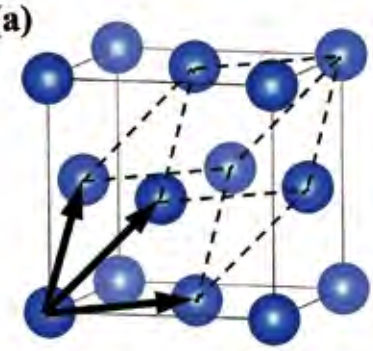
$E_{\mathrm{XC}}[\rho]$: 交換相関エネルギー

入力パラメータ

- 物質の構造を決定するデータ
  - 元素・原子数
  - 原子座標
  - ユニットセル（格子ベクトル）（※周期境界条件を課す場合）

格子ベクトルの可視化（例）シリコン（ダイヤモンド構造）

(a)



(b) 格子ベクトル

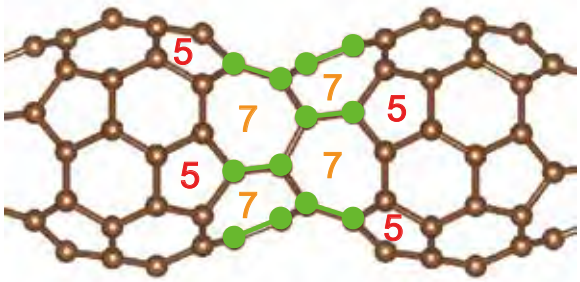
```
0.0000 2.7188 2.7188
2.7188 0.0000 2.7188
2.7188 2.7188 0.0000
```

(c) 原子座標

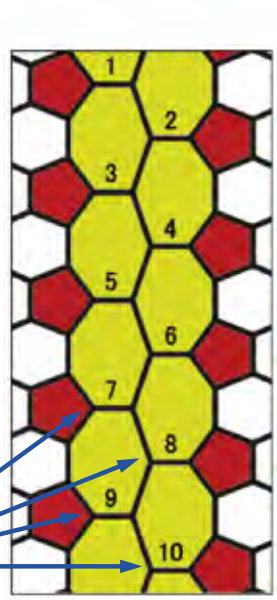
```
Si 0.0000 0.0000 0.0000
Si 0.2500 0.2500 0.2500
```


PSFPモデル（1）

T3モデル（G. Wang et al. (2005)）

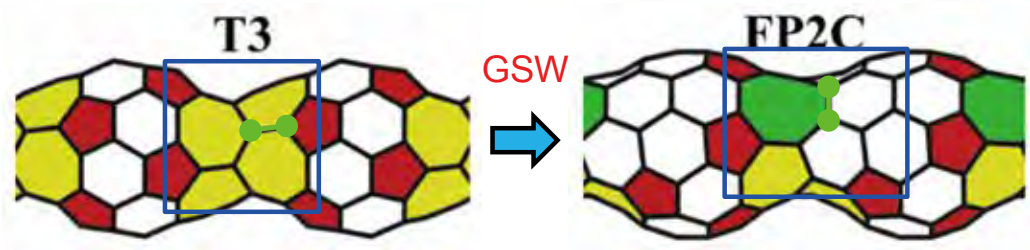


展開



一般化Stone-Wales（GSW）変換を行う炭素結合（10ヶ所）

PSFPモデル(2)



モデル名:FPnX

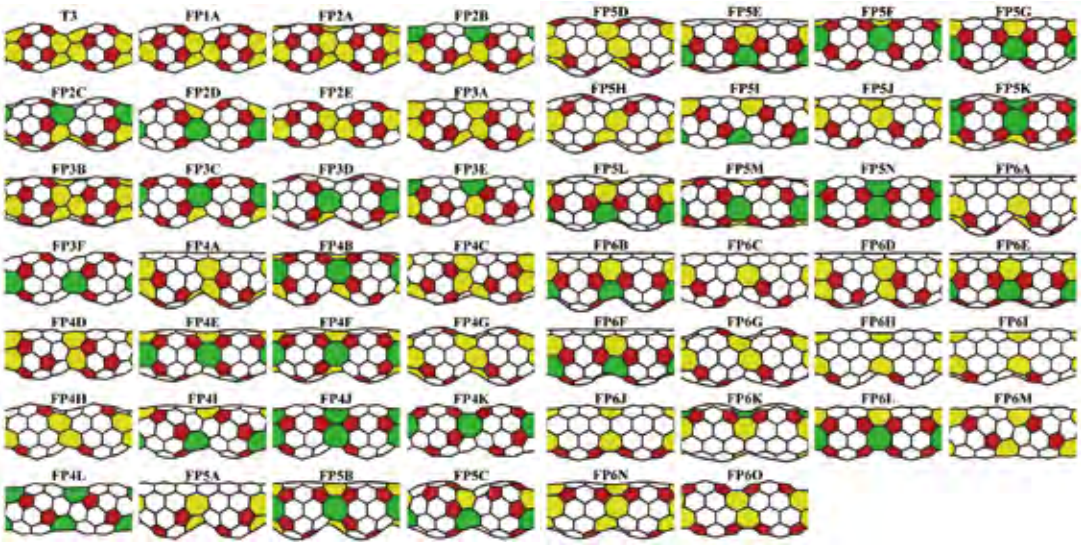
n:GSWの回数
X:ラベル(A, B, C, …)

PSFPモデルの共通項目

炭素原子数:60個(単位セルあたり)
配位数:3
軸方向:周期境界条件
円周方向:周期境界条件(真空領域あり)

PSFPモデル(3)

PSFPモデル(T3+新規53種類)



赤:5員環, 白:6員環, 黄:7員環, 緑:8員環

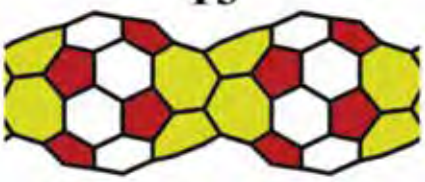
PSFPモデルのエネルギー的安定性(1)

PSFP	P	L (Å)	E_{tot} (eV)	E_g (eV)	F_4	F_6	F_7	F_8	E_{56}	E_{57}	E_{58}	E_{66}	E_{67}	E_{68}	E_{77}	E_{78}	E_{88}
FP5N	D_{16}	8.131	−2.188		10	15	0	5	30	0	20	25	0	10	0	0	5
FP6L	C_1	7.981	−1.421		8	17	2	3	24	4	12	32	8	6	0	2	2
FP4K	C_1	8.250	−1.354		8	18	0	4	28	0	12	32	0	16	0	0	2
FP4L	C_{2h}	8.248	−1.248	0.03	8	18	0	4	28	0	12	32	0	16	0	0	2
FP6O	C_{2h}	8.000	−1.053		8	16	4	2	24	8	8	28	12	4	2	4	0
FP4J	C_1	8.213	−0.875	0.03	9	16	1	4	29	2	14	27	3	10	0	2	3
FP5L	C_1	8.111	−0.821	0.13	8	17	2	3	26	4	10	30	6	10	1	2	1
FP5K	C_1	8.111	−0.810	0.15	8	17	2	3	26	3	11	30	8	8	1	1	2
FP6F	C_2	7.921	−0.598	0.19	6	20	2	2	20	4	6	42	8	8	0	2	0
FP6E	C_1	7.924	−0.464	0.09	6	20	2	2	20	3	7	42	10	6	0	1	1
FP3F	C_1	8.340	−0.415		7	19	1	3	27	2	6	34	3	16	0	2	0
FP6J	C_1	7.939	−0.330	0.16	6	19	4	1	20	7	3	37	16	4	2	1	0
FP6I	C_1	7.944	−0.205	0.14	6	19	4	1	20	7	3	37	16	4	2	1	0
FP6K	C_1	7.942	−0.101	0.07	6	19	4	1	20	6	4	37	18	2	1	2	0
FP6C	C_1	7.866	−0.069		4	23	2	1	16	2	2	52	12	6	0	0	0
T3	D_{3d}	8.696	0.000	1.17	10	10	10	0	30	20	0	10	10	0	20	0	0
FP6N	C_2	7.957	0.009	0.10	6	18	6	0	20	10	0	33	22	0	5	0	0
FP3D	C_1	8.327	0.043		8	17	2	3	28	4	8	28	6	12	1	2	1
FP5F	C_1	8.071	0.061		6	20	2	2	22	3	5	39	10	10	0	1	0
FP3E	C_1	8.307	0.100		8	17	2	3	28	4	8	29	6	10	0	4	1

全エネルギー　炭素環(面)の数　炭素環の共有辺の数

PSFPモデルのエネルギー的安定性(2)

T3



全エネルギー:0.000 eV

FP5N

全エネルギー:−2.188 eV
(1原子あたり:−0.036 eV)

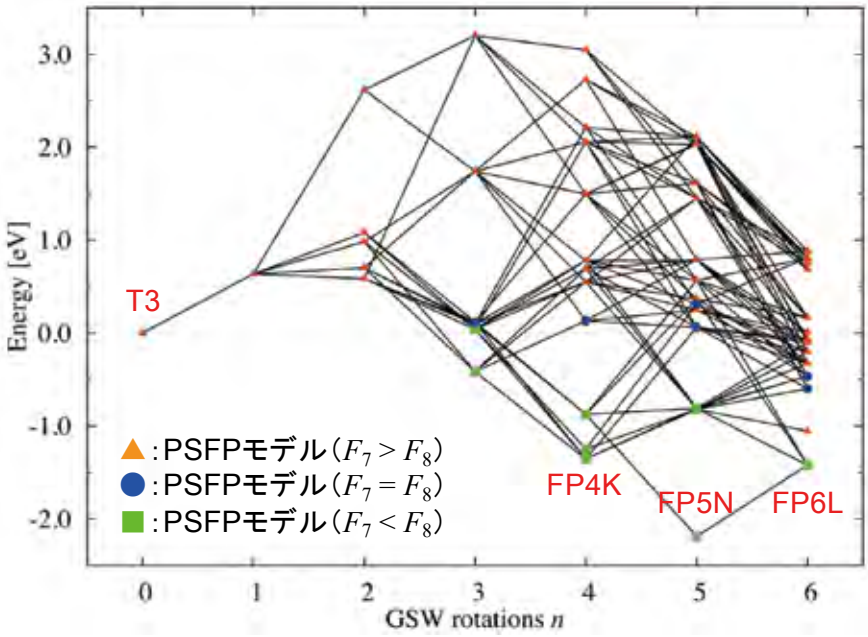
FP6L

全エネルギー:−1.421 eV
(1原子あたり:−0.024 eV)

FP4K

全エネルギー:−1.354 eV
(1原子あたり:−0.023 eV)

PSFPモデルのエネルギー的安定性(3)



全エネルギーと構造の相関関係

相関係数
(全エネルギー vs .炭素環(面)の数)

	F_5	F_6	F_7	F_8
CC	−0.36	0.07	0.67	−0.73

8員環の数が多いほど, 全エネルギーは減少しやすい(安定化しやすい)
7員環の数が多いほど, 全エネルギーは増加しやすい(不安定化しやすい)

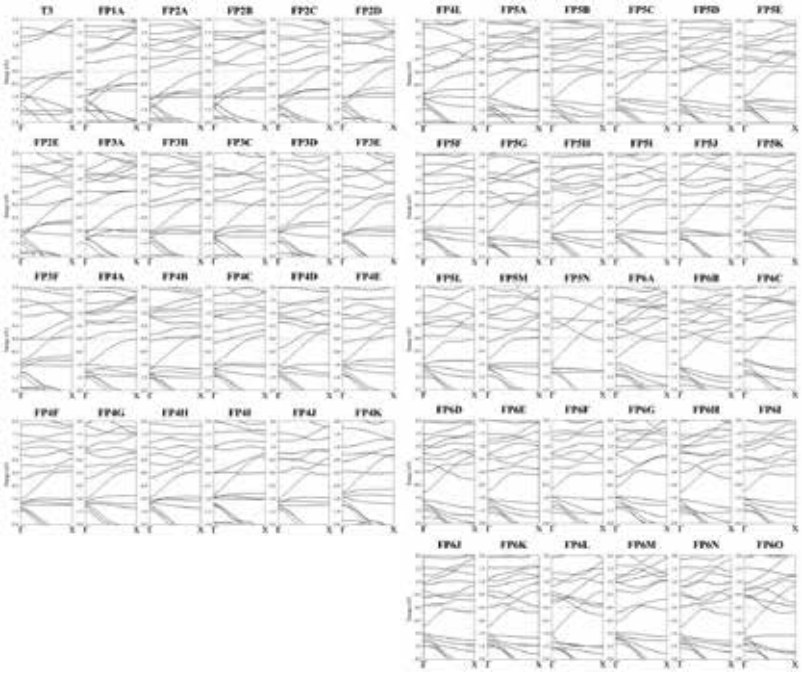
相関係数
(全エネルギー vs. 炭素環の共有辺の数)

	E_{56}	E_{57}	E_{58}	E_{66}	E_{67}	E_{68}	E_{77}	E_{78}	E_{88}
CC	−0.31	0.52	−0.76	0.04	0.71	−0.60	0.43	−0.19	−0.60

5員環−8員環の共有辺の数が多いほど,
全エネルギーは減少しやすい(安定化しやすい)
6員環−7員環の共有辺の数が多いほど,
全エネルギーは増加しやすい(不安定化しやすい)

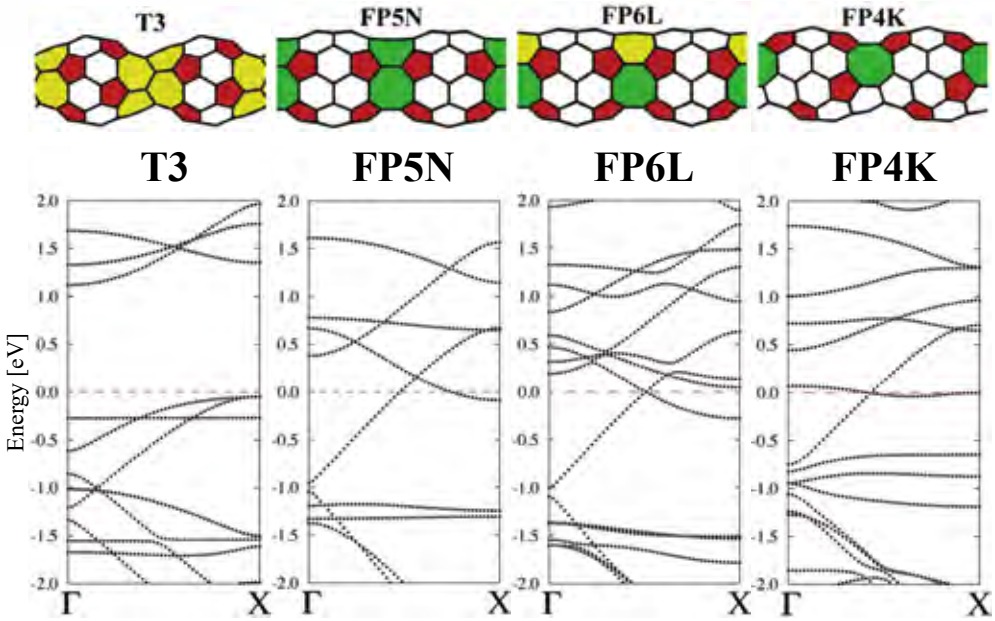
24

PSFPモデルのバンド構造（1）



25

PSFPモデルのバンド構造（2）



本講演のまとめ

- DFTに基づく第一原理計算を用いてPSFPモデルの電子状態計算を行った
- 新たに提案した53種類のモデルの中から，エネルギー的最安定モデルであるFP5Nモデルを発見した
- PSFPの全エネルギーと，炭素環(面)の数・炭素環の共有辺の数との相関関係を明らかにした

研究論文

Y. Noda, S. Ono, and K. Ohno, *J. Phys. Chem. A* **119**, 3048 (2015).

共同研究者（論文共著者）

大野 かおる（横浜国立大学 名誉教授）
小野 頌太（東北大学 金属材料研究所 准教授）

Thank you for your attention!!

Mathematical analysis of low-dimensional nanocarbon materials focusing on the hierarchy of lattice defects

Xiao-Wen LEI

Tokyo Institute of Technology

In this study, the objective is to obtain knowledge that will lead to the establishment of a fundamental theory for designing curved surfaces, focusing on the representation of the mechanical properties of graphene sheets (GS) using differential geometry. We create several stable structure models of GS with different lattice defects using molecular dynamics and perform mathematical analysis of their geometric and mechanical properties. For the geometrical properties, we measure the mean curvature and Gaussian curvature of the curved surfaces, and for the mechanical properties, we analyze the internal stress distribution and potential energy distribution. Changes in mechanical properties due to changes in structure and arrangement (especially hierarchy of lattice defects) are also considered. Furthermore, the obtained results will be used to explore the interrelationships between the geometrical and mechanical properties, which will further pioneer the mathematical analysis of nanomaterial mechanics.

格子欠陥の階層性に着目した低次元ナノ炭素材料の数理解析

らい　しょうぶん
雷　霄雯
東京工業大学・物質理工学院

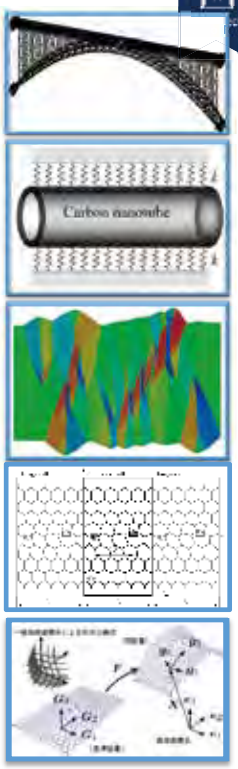
計算力学・材料力学分野で理論計算・シミュレーションを中心にする

IMI 研究集会II:材料科学における幾何と代数IV
令和5年9月4日～5日
九州大学IMI オーディトリアム　ウエスト1 号館D棟4階413号室

研究経歴

力学シミュレーションを用いて、構造と特性の関係を明らかにし、機能を発現する構造設計に役立てる

- 2006-2009
  橋の最適化設計
- 2009-2013
  理想的なナノ炭素材料の動的特性
- 2013-2016
  シンクロ型LPSO構造金属材料の力学特性
- 2014-2017
  低次元ナノ炭素材料の格子欠陥挙動の解明
- 2017-2020
  低次元ナノ炭素材料の自発曲率形成構造の解明
- 2020-2023
  低次元ナノ炭素材料の微分幾何学と力学機能の融合設計論
- 2021-現在
  幾何学と力学融合に基づく回位制御による材料機能設計



2

内容

はじめに

- 低次元ナノ炭素材料
- 格子欠陥

研究内容

- グラフェンシートの変形特性
- カーボンナノチューブの変形特性

おわりに

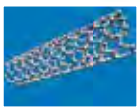
3

ナノ炭素材料発見された構造の多様性

2022年、名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所の伊丹健一郎教授らにより、炭素のメビウスの輪「メビウスカーボンナノベルト」の世界初の合成に成功した。

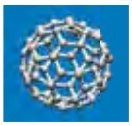
UK 2004

Graphene sheets (GSs)：
グラフェンシート
（Novoselov et al. 2004）2-Dimension
2010年ノーベル物理学賞



Japan 1991

Carbon nanotubes (CNTs)：
カーボンナノチューブ
（Iijima 1991）1-Dimension



USA 1985

C_{60}：フラーレン
（Kroto et al. 1985）0-Dimension
1996年ノーベル化学賞

複雑な幾何学構造をもつ新たなナノカーボン材料の開発に道をひらく画期的な成果

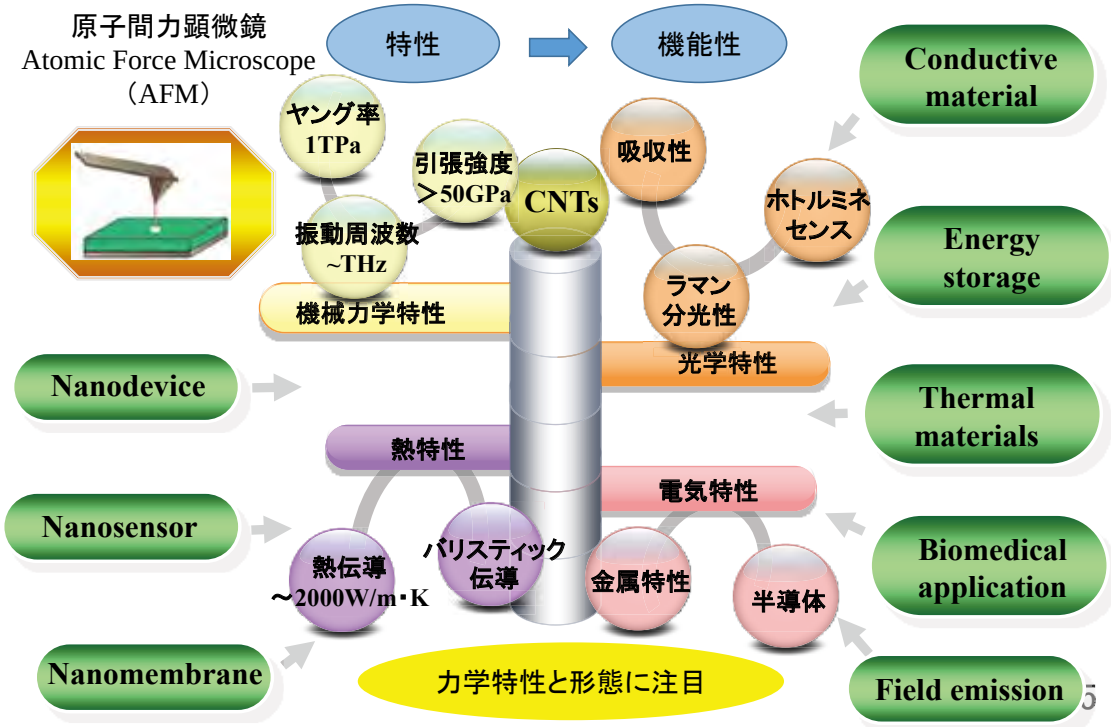
https://www.itbm.nagoya-u.ac.jp/ja/research/2022/05/post-43.php

飯島澄男教授
（名城大）

遠藤守信教授
（信州大）

4

ナノ炭素材料の特性・機能・応用



5

内容

はじめに

- 低次元ナノ炭素材料
- 格子欠陥

研究内容

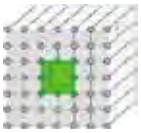
- グラフェンシートの変形特性
- カーボンナノチューブの変形特性

おわりに

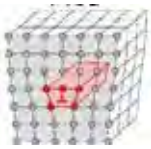
6

格子欠陥

結晶欠陥の種類



点欠陥
原子空孔、格子間原子、
不純物原子

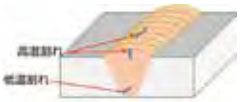


線欠陥
転位、点欠陥の線状配列

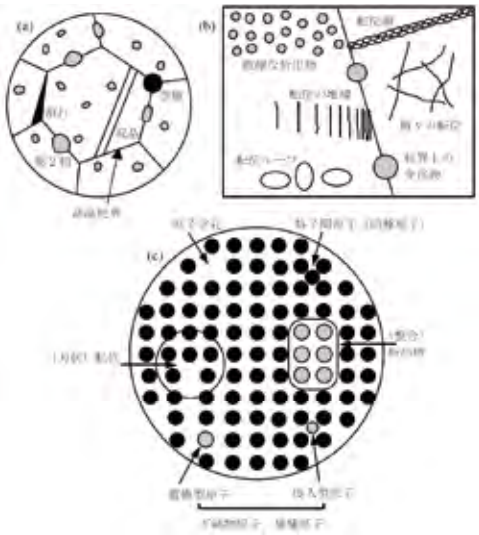
[1]

面欠陥
結晶粒界、双晶境界、積層欠陥、
逆位相境界、界面、表面

体積欠陥
析出物、第2相、割れ、ボイド



[2]



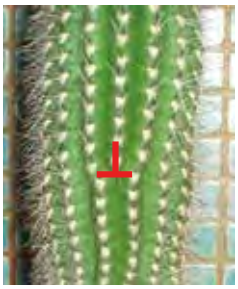
加藤雅治，転位入門論，裳華房，1999

[1] 九州大学カーボン・ニュートラル研究所
[2] アイアール技術者研究研究所

7

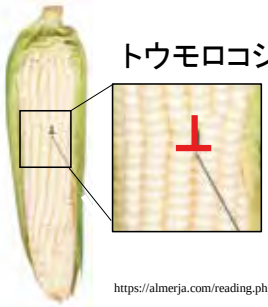
自然の中での格子欠陥

植物



サボテン

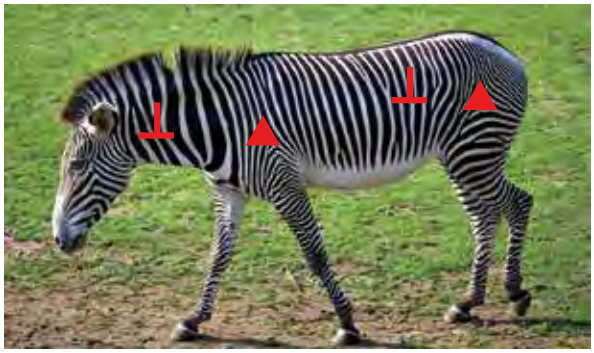
https://www.flickr.com/photos/core-materials/4599222126



トウモロコシ

https://almerja.com/reading.php?idm=115418

動物



シマウマ

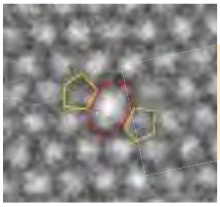
https://ja.wiktionary.org/wiki/Zebra

⊥ 転位
▲ 回位

8

材料中の格子欠陥

ナノ炭素材料



(J. Kotakoski, et. al, *Phys. Rev. B*, 2011)

ミクロ

金属

(https://qiita.com/tktk0430/items/ef15f9ce15c4aa79881d)

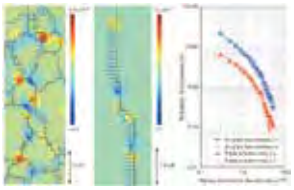
メソ

https://quizlet.com/87802654/ 土地のつくりと変化

マクロ

回位

回位
モデル



回位から岩石を変形させる機構の解明
(Cordier, et. al, *Nature*, 2014)

トポロジカル絶縁体における回位に捕捉された分数電荷
(Poo, Jiang, et. al, *Nature*, 2021)

◆回位制御による高延性・高強度の構造
◆回位から岩石を変形させる機構の解明
◆トポロジカル絶縁体における回位に捕捉された分数電荷
◆etc.

9

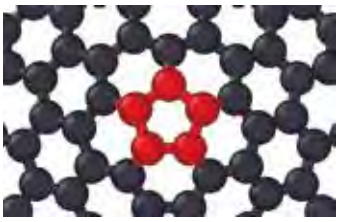
ナノ炭素材料の構造

理想的なグラフェンシート

六員環の炭素原子が規則的に配列する

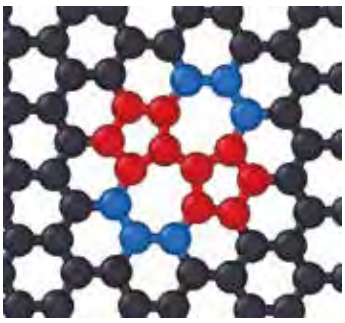
生成
高温
外力

介在物
など



五員環

七員環

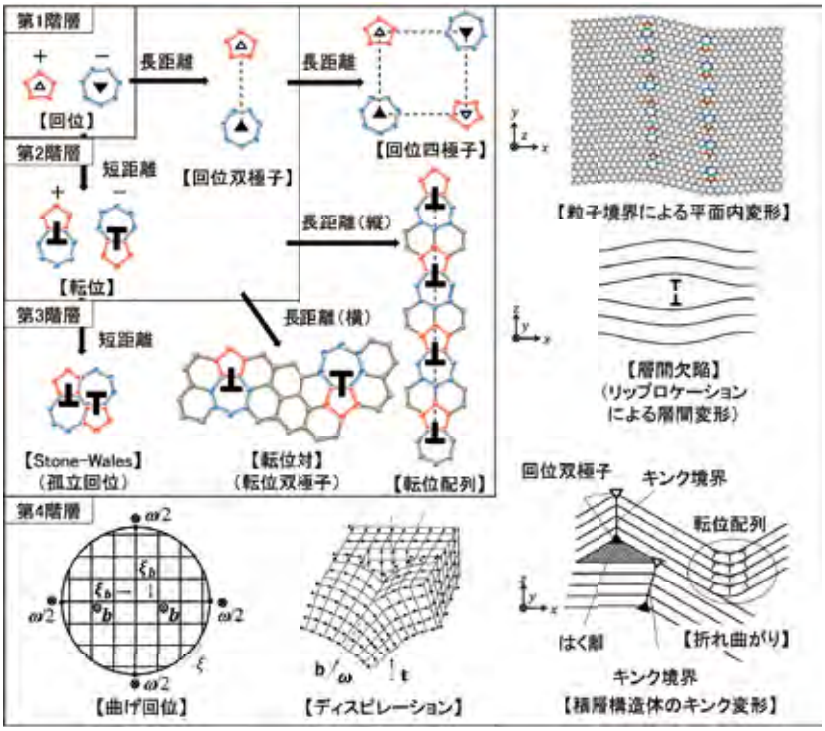


五七員環の組み合わせ

Stone-Wales 欠陥

10

格子欠陥の階層性



雷霄雯，材料，2023 年 72 巻 8 号 p. 568-573

11

内容

はじめに

- 低次元ナノ炭素材料
- 格子欠陥

研究内容

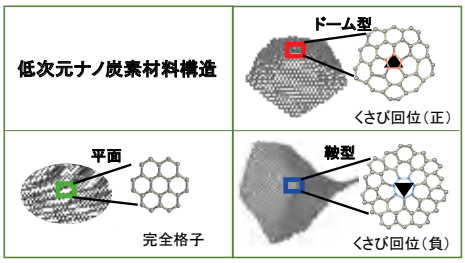
- グラフェンシートの変形特性
- カーボンナノチューブの変形特性

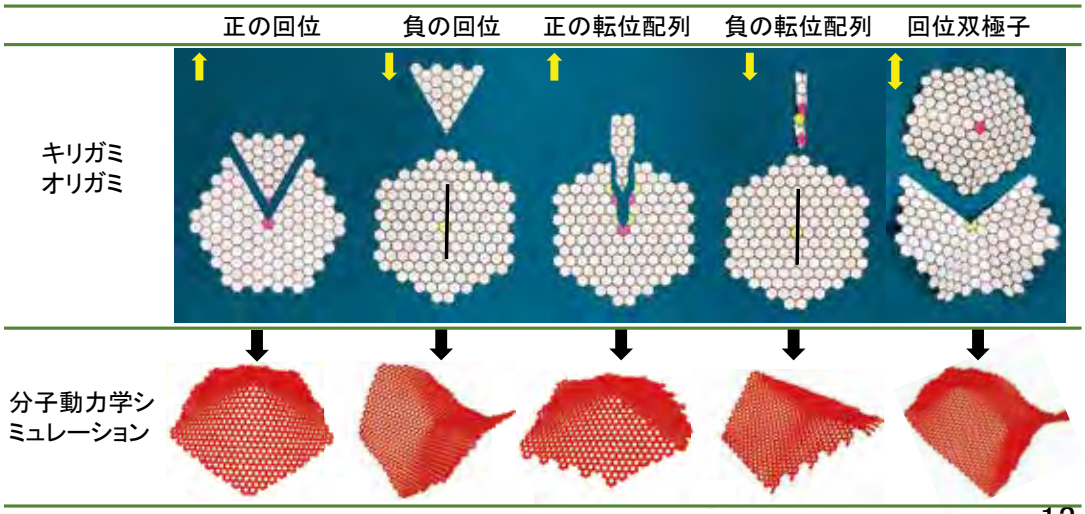
おわりに

12

曲面設計

離散曲面設計（二次元原子薄膜）
- キリガミ・オリガミ
- 分子動力学大規模計算





雷霄雯，低次元ナノ炭素材料における格子欠陥の数理解析，材料，2023 年 72 巻 8 号 p. 568-573

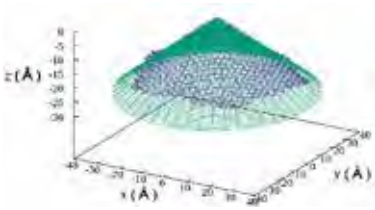
13

回位による構造変形

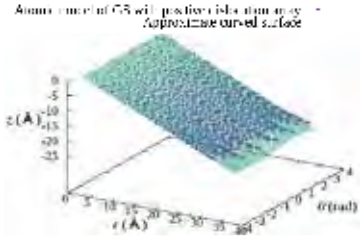
- 面外変形は低次元材料に現れるユニークな性質
- 分子動力学よりシミュレーションできた曲面を関数形で近似することが可能

切り出し
正の回位
（五員環）

デカルト座標



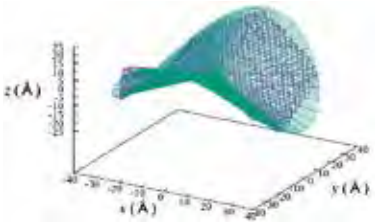
円柱座標 $z = \mathrm{C}\,rf(\theta)$

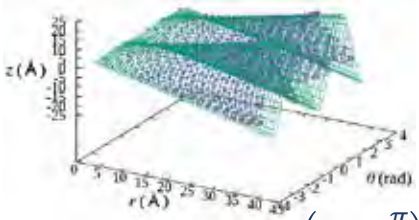


完全な円錐形、角度に依存しない

$z = 0.65r$

挿し込み
負の回位
（七員環）





波を有するポテトチップス状、角度に依存し、周期的に曲面の形状が変化する

$z = 0.54r\sin\left(2\theta - \frac{\pi}{2}\right)$

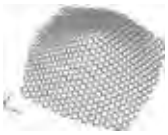
14

ナノ力学特性

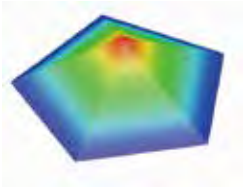
力

初期配置

エネルギー最小化

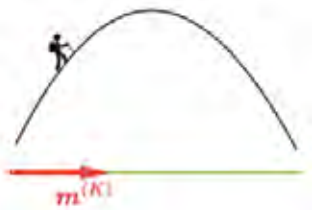


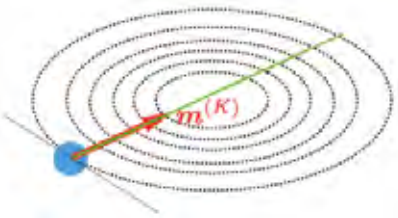
安定構造



数値計算アルゴリズム：共役こう配法（conjugate gradient method：CG法）

式の説明を省略





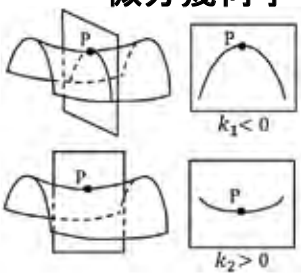
これなら分かる最適化数学 ―基礎原理から計算手法まで―，金谷健一著，共立出版，2005
https://qiita.com/Dason08/items/27559e192a6a977dd5e5

15

幾何学特性：曲率計算

形

微分幾何学



主曲率k_1, k_2

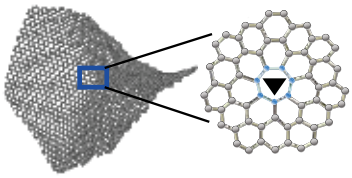
曲面内の曲がり具合の測定

➡平均曲率$H = \frac{k_1+k_2}{2}$

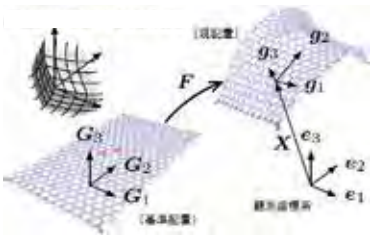
曲面形状の測定

➡ガウス曲率$K = k_1 k_2$

離散曲面



くさび回位（負）



一般曲線座標系による
二次元原子薄膜形状の表現

微分幾何学による離散格子構造の自発曲率の表現

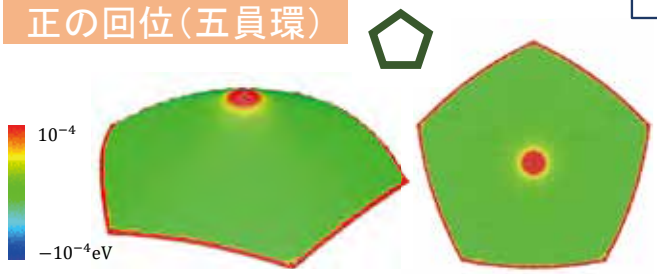
X.-W. Lei*, S. Shimizu, J.-X. Shi, *Nanomaterials*, 2022, 12(6), 903.

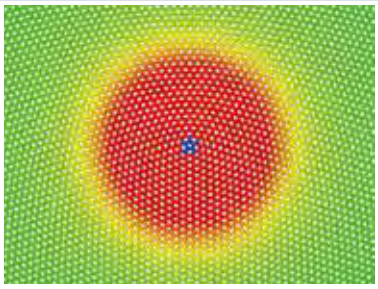
16

回位を有するGS：ポテンシャルエネルギー

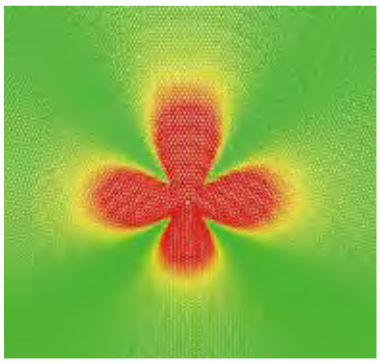
ポテンシャルエネルギー

正の回位（五員環）





負の回位（七員環）

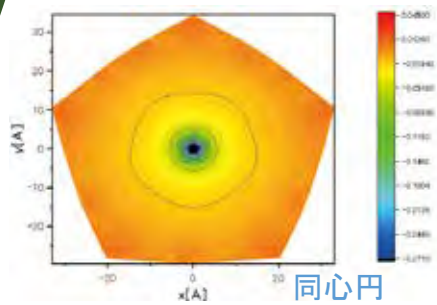


17

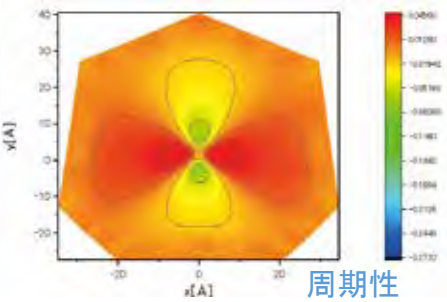
回位を有するGS：平均曲率とガウス曲率

正の回位（五員環）　　負の回位（七員環）

平均曲率

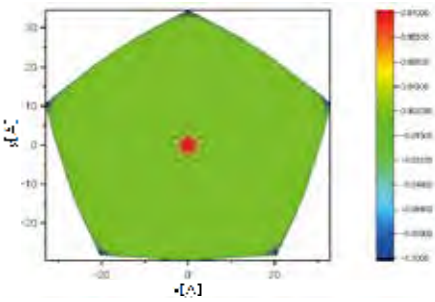


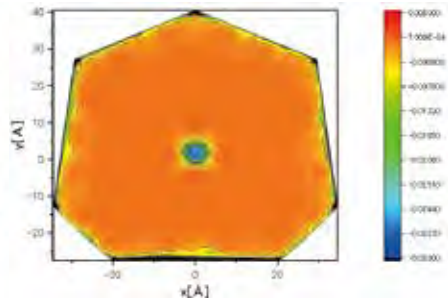
同心円



周期性

ガウス曲率





18

エネルギーと曲率の関係

Helfrich-Hamiltonian理論
（コロイドの物理学）

$$f_c = 2k(H - c_0)^2 + \bar{k}K$$

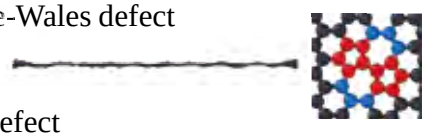
k: 曲げ剛性率
H: 平均曲率
c_0:自発曲率
$\bar{k}$: ガウス剛性
K: ガウス曲率

微分幾何学による離散格子構造の自発曲率の表現
X.-W. Lei*, S. Shimizu, J.-X. Shi, *Nanomaterials*, 2022, 12(6), 903.

- 平均曲率　$H = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$
- ガウス曲率　$K = \kappa_1\kappa_2$

Graphene sheet

Stone-Wales defect



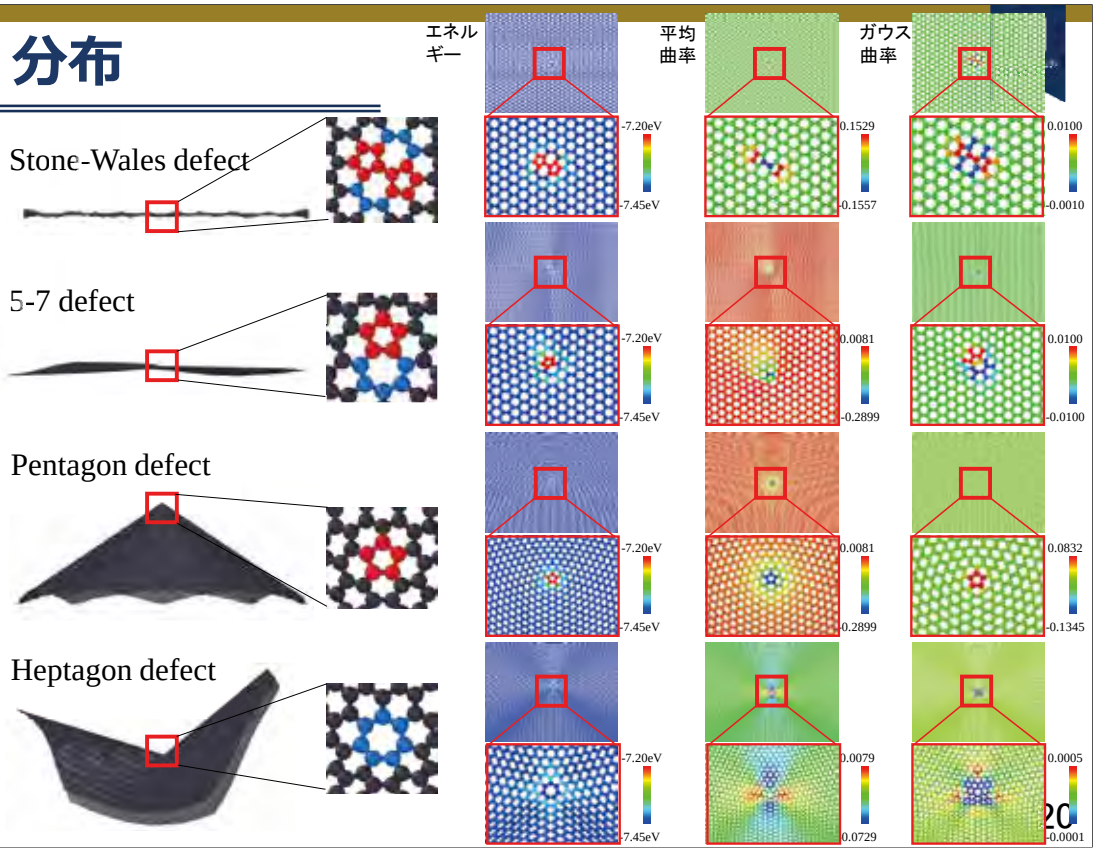
5-7 defect

Pentagon defect

Heptagon defect

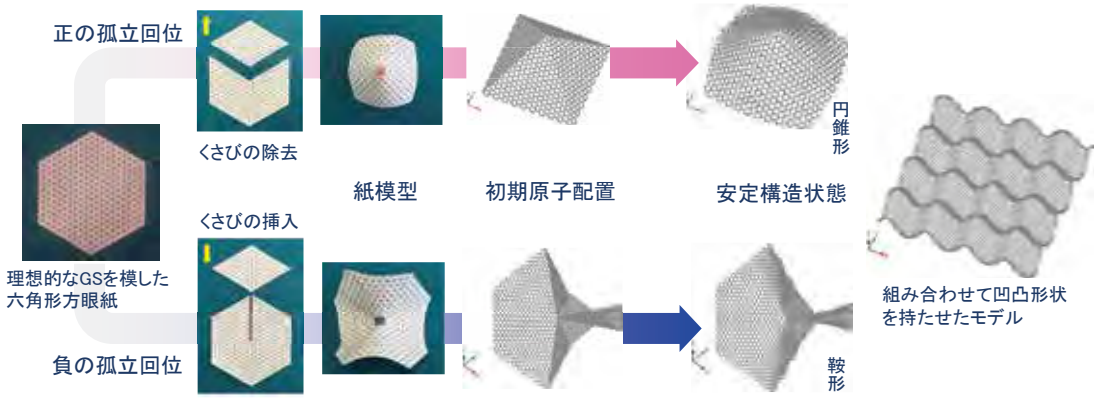
19

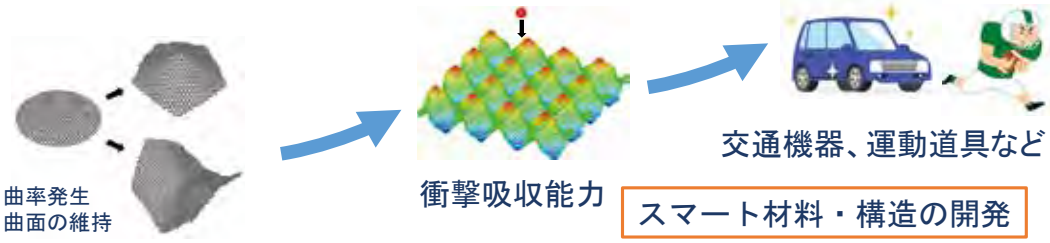
分布



20

曲面維持



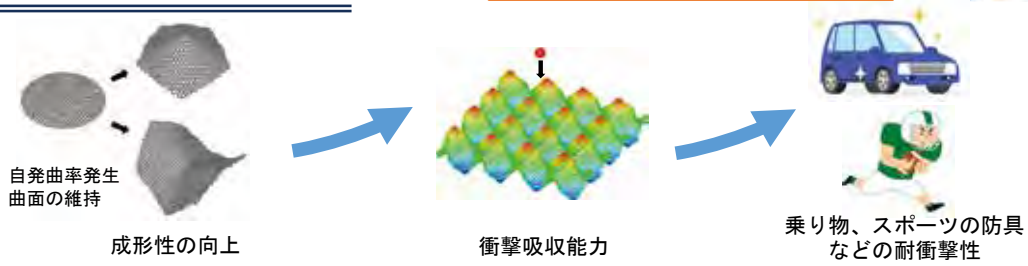


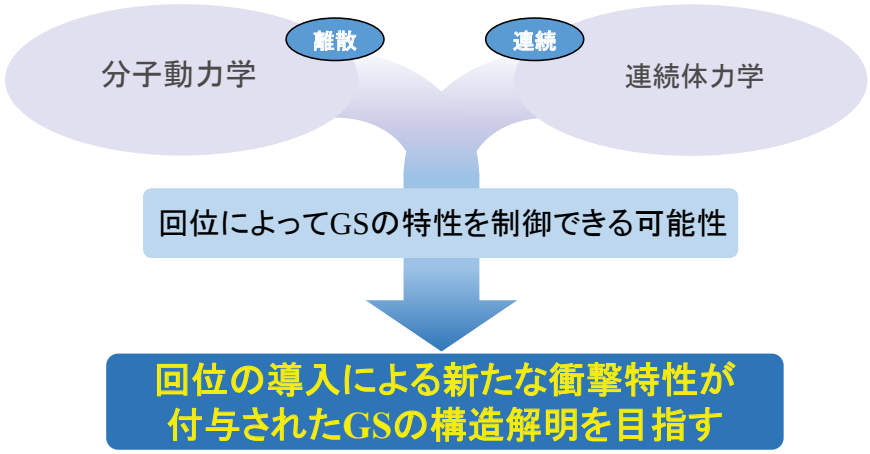
スマート材料・構造の開発

21

曲面維持

スマート材料・構造の開発





22

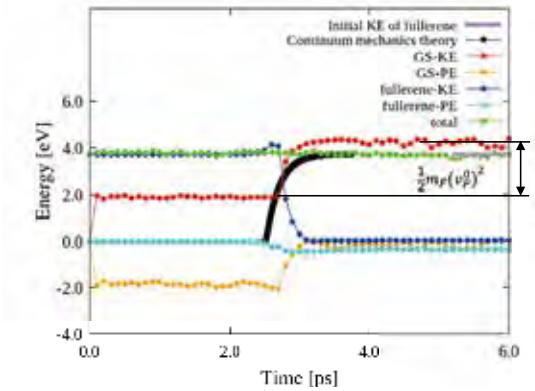
機能材料

運動方程式

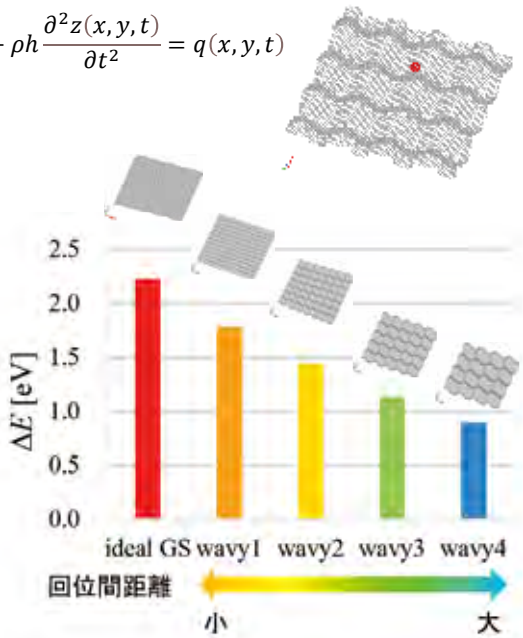
$$D\frac{\partial^4 z(x,y,t)}{\partial x^4}+2D\frac{\partial^4 z(x,y,t)}{\partial x^2\partial y^2}+D\frac{\partial^4 z(x,y,t)}{\partial y^4}+\rho h\frac{\partial^2 z(x,y,t)}{\partial t^2}=q(x,y,t)$$

吸収エネルギー

$$\Psi(t)=\int_0^t F(\tau)\,dw=\int_0^t F(\tau)\,\dot{w}(\tau)d\tau$$



理想的なGS



Y. Tomioka, T. Natsuki, J.-X. Shi, X.-W. Lei*, *Nanomaterials*, 2022, 12(3), 436.

23

内容

はじめに

- 低次元ナノ炭素材料
- 格子欠陥

研究内容

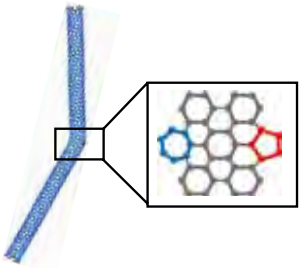
- グラフェンシートの変形特性
- カーボンナノチューブの変形特性

おわりに

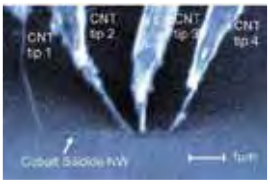
24

曲面設計

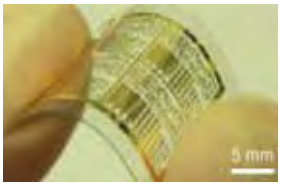

A. Hashimoto, K. Suenaga, A. Gloter, K. Urita, S. Iijima, Direct evidence for atomic defects in graphene layers, *Nature*, **430**, (2004), 870-873

J. H. Lehman, M. Terrones, E. Mansfield, K. E. Hurst, Evaluating the characteristics of multiwall carbon nanotubes, *Carbon*, **49**, (2011), 2581-2602



原子間力顕微鏡の探針[1]



電子ペーパー[2]

自己組織化を利用した曲げCNTの実現[3]

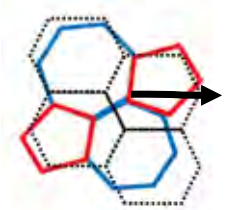
ナノ炭素材料の多様性[4]

[1] jst.go.jp/sentan/result/pdf_file/result001.pdf [2] nanoflex.jp/public-j/research.htm l[3] https://www.azonano.com/news.aspx?newsID=38568 [4] https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.accounts.1c00505

25

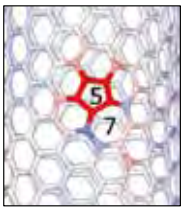
CNTに転位配列を導入

① Stone-Wales（SW）欠陥が生成

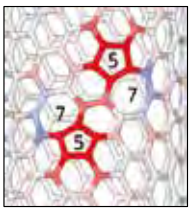


結合が
90度回転

②分離して転位対が生成

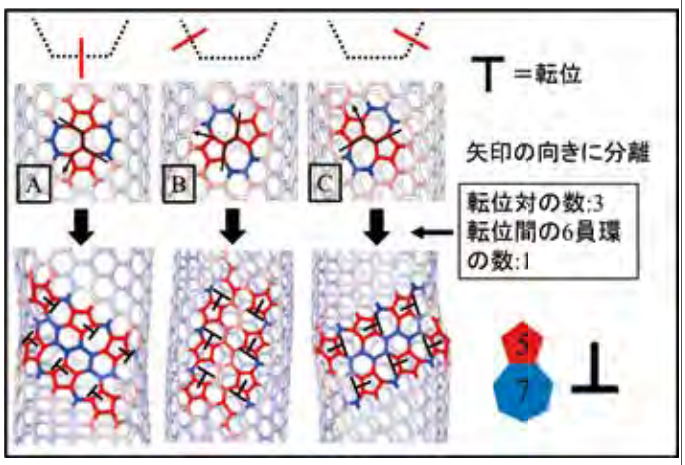


5-7欠陥（転位）



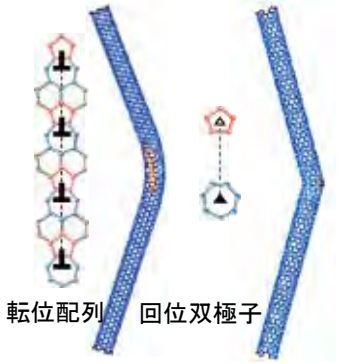
転位対

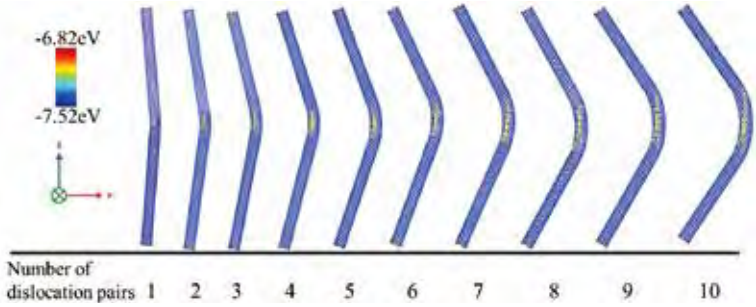
モデルの例

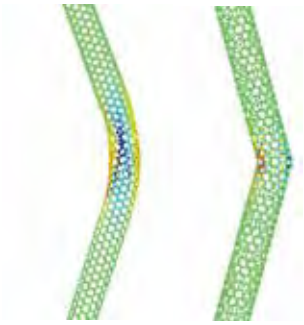


26

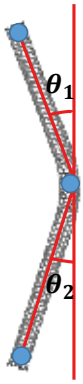
形状変化







(6,6)　(10,2)-(2,10)



曲げ角度＝ $\theta_1 + \theta_2$

●1周分の原子の平均座標

27

力と形の関係

ひずみエネルギー U

変形に対して弾性体に蓄えられるエネルギー

曲率半径[ρ]との関係

連続体理論式（円筒）

$$U = \int_0^l \frac{M^2}{2EI}$$

$$= \frac{1}{2} EI \left(\frac{1}{\rho}\right)^2 \cdot l$$

$$= \frac{1}{2} E \frac{\pi(d^4 - {d_1}^4)}{64} \left(\frac{1}{\rho}\right)^2 \cdot l$$

【CNTのヤング率 E：1TPa】

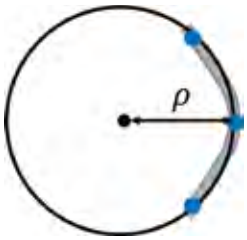
MSシミュレーション

U＝変形後のPE - 初期構造のPE

変形したCNTの3点を通る円を求める

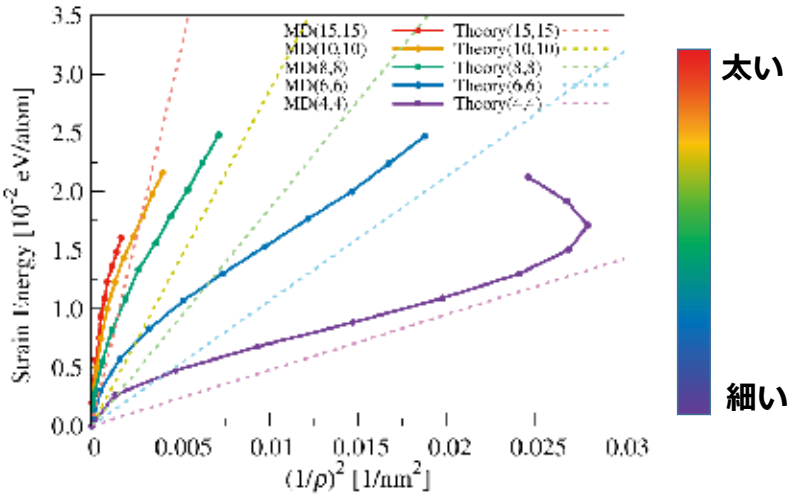
⬇

曲率半径ρを導出



28

ひずみエネルギー



- 理論式とシミュレーションともに増加傾向を示す
- 直径が小さいほど、傾きは小さく、変形しやすいことが分かった。

29

内容

はじめに

- 低次元ナノ炭素材料
- 格子欠陥

研究内容

- グラフェンシートの変形特性
- カーボンナノチューブの変形特性

おわりに

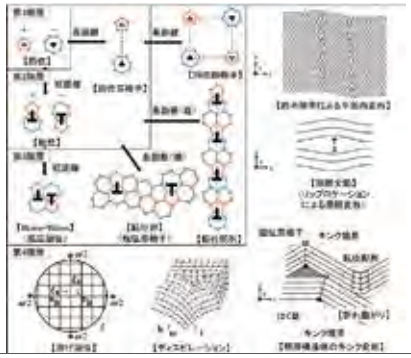
30

おわりに①

- 低次元ナノ炭素材料
  - 優れた特性を有する。
  - 複雑な幾何学構造をもつ新たなナノカーボン材料の開発が期待されている。

https://www.itbm.nagoya-u.ac.jp/ja/research/2022/05/post-43.php

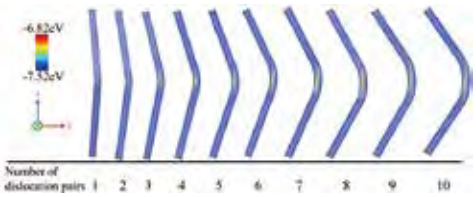
- 格子欠陥
  - 回位を起点とする格子欠陥の階層性がある。
  - 著しい面外変形によって、三次元的な曲面が形成される。

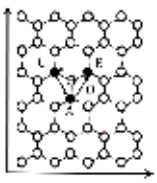


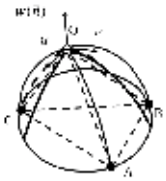
31

おわりに②

- GSとCNTの変形特性
  - 格子欠陥が有するするナノ炭素材料曲面について、分子静力学でのポテンシャルエネルギーを評価、微分幾何学で曲率を評価した。
  - 格子欠陥の種類に応じた曲率と格子欠陥配置から形成される曲面形状が予測可能になると期待される。







32

Math behind C_{60} I, II

Hiroyuki OCHIAI
IMI, Kyushu University

In this two slot, I will review the article of B. Kostant
`https://www.ams.org/notices/199509/kostant.pdf`
with a fascinating title "The Graph of the Truncated Icosahedron and the Last Letter of Galois" appeared in Notice of American Mathematical Society in 1995 July. The organizer of this workshop noticed an intimate relation and suggested me to introduce this paper for broad audience. A topic in this paper is a graph coming from objects like C_{60}, whose symmetry is described in groups. Several special groups play an important role.

切頭 20 面体のグラフとガロアの最後の手紙 — Kostant の論文 (1995, Notice AMS) の読み方

落合 啓之 (Hiroyuki Ochiai)

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所

2023 年 9 月 4,5 日
IMI 共同利用
材料科学における幾何と代数 IV(代表者：松谷茂樹)

趣旨

松谷先生からこの論文の紹介を依頼され快諾しました。
今回の講演の目標は、

- この論文に何が書いてあるかを survey する。
- この論文を読むための手がかりを与える。
- この論文を各自が読む際の障害（つまづきの石）を取り除く。

従って、どんな些細なことでも、わからないことを質問していただくと説明やノートが充実します。ご協力をお願いします。
遠慮なく質問してください。講演中でも良いですし、休憩時間や食事中でもメールやメッセージなどでも歓迎です。

書誌

- 著者：Bertram Kostant (1928-2017).
  MIT の表現論の研究者。
- 出典：Notice of American Mathematica Society,
  Volume 42, Number 9, pages 959–968.
- Notice はアメリカ数学会が発行しているものの、
  日本数学会編集の雑誌「数学」よりも、
  「数学セミナー」や「数理科学」に近い趣旨の雑誌。
- 従って記事は専門用語の使用などに配慮されている。しかし、意外にポロッと説明なしにそういう用語が出てきている。これが非専門家にとっての読みづらさの遠因になっているか？

全体の構成

節のタイトルは論文にあるが、節の番号は論文にはない。
ここでは説明の便利のために私が勝手に番号付けした。

- p959L 序節。[節のタイトルはない。式はない。]
- p960L 2 節。正 20 面体のグラフ [1] と A_5 の共役類。
- p964L 3 節。$PSL(2,5)$ の $PSL(2,11)$ への埋め込みと、
  Chevalier へのガロアの手紙
- p965R 4 節。 切頭正 20 面体のグラフと、
  $PSL(2,11)$ の共役類 M
- p968 参考文献

2 段組なので左, 右のページをそれぞれ L,R で表した。

[1] 頂点と辺だけからなる図形をグラフといい、それを扱う分野をグラフ理論という。高校で学習した $y = x^2$ のグラフという言葉遣いとは別のもの。

元となる Kostant の論文

この論文が引用している Kostant 自身の論文は３つ。

[3] Kostant らの論文 1994, 30pages. with Chung, Sternberg.
[12] Kostant の論文 1994, 4pages.
[13] Kostant の論文 1995, 33pages.

ここで [3][12][13] はこの論文の参考文献での番号。
第２節から第４節は、ほぼこの３つの論文の紹介と言ってよい。

定理や注や図のリスト

p962L 図 1
p962R 定理 1. [13]
p962R 注 2
p963L 注 3
p963L 定理 2. 出典は [13] Theorem 1.18
p963R 図 2, 図 3
p964R 図 4
p965R 注 5
p966L 定理 7. 出典は [3] Theorem 1, [13] Theorem 2.10
p966R 注 9, 注 10
p967L 図 5
p967R 図 6
p968L 定理 11. 出典は [13] Theorem 3.30

定理と注の番号は通し番号と思われるものの、なぜか欠番がある。

概略：５分でわかる：大河ドラマ風

この論文をスライド１枚でまとめると次のようになる。

- C_{60} とその簡易化である正 20 面体を同時並行的に扱う。
- C_{60} のグラフ構造を群論の言葉で記述することが目標。
- グラフ構造、つまり頂点と辺のつながり具合だけを見る。従って例えば、長さや計量などは議論されていない。
- 群の表現論は使わない。フーリエ解析や調和解析も使わない。匂わせているけれど。
- 主人公は $PSL(2,11)$ とその部分群 $PSL(2,5) \cong A_5$.
- 脇役の部分群がたくさん登場する。
- この群でしか成り立たない特殊事情をふんだんに使う。
- 個数や元の具体的データはかなり書いてあり、助かる。
- 横道や寄り道もたくさん盛り込まれている。

講演のビデオ

この講演のビデオを IMI 共同利用のこの研究集会のページで公開しています。計算の手順や口頭での説明が欲しい方はこの文章と合わせてそちらも参照してください。また、それぞれのビデオの最後の部分には質疑も採録されています。

序節

ここから論文に即して段落ごとに内容を追ってみよう。まずは

序節。

第 1 段落 (p959L) The use of group theory by chemists ...

- 化学者が群論を活用して分子の性質の決定することは、既に十分に開発された分野であり文献も豊富である。
- 一つの分子 [2] に対する対称群 (symmetry group) は $O(3)$ の部分群である [3]。有限群である [4]。
- 対称群と $SO(3)$ との共通部分をその分子の固有対称群 (proper) と呼ぶ。
- 固有対称群は対称群の最も特徴的な部分である。(説明なし)
- 固有対称群を G と書く。ただし、文章全体でその記号が固定されてはいない。

未定義で使用されている用語

$O(3)$, $SO(3)$, 群, 有限群

[2] この文章では numerator は出てこないので、分子は全て molecule
[3] 共役を除いて
[4] 分子が自明である場合を除いては

補足：対称群

- ここで現れる対称群は、対称性の群、ともいうべきものであり、「与えられた図形などの対称性全てを合わせたもの」と定義されるものである。これが数学的に自然な定義であろう。
- ところが、歴史的にはもっと古く、n 文字の置換 (入れ替え) の全体を対称群 S_n と定める、という慣習も今も広く使われている。
- この 2 つの混乱が起こらないことを期待したい。
- S_n の元の個数 (つまり位数) は $n!$。
- S_n の元のちょうど半分が偶置換。これを集めたものを交代群 A_n と呼ぶ。位数は $n!/2$。A_n は S_n の指数 2 の正規部分群。

補足：群

- 定義：結合法則、単位元、逆元のあるような代数系。
- ガロアが代数方程式の分析で発見したとされているが、まあ、上のような現代風の定義を書いたわけではない。
- 定義だけ見て群が何であるかがわかるわけではない。
- ここでの典型例は、対称群 S_n や直交群 $O(n)$.
- この例はどちらも非可換[5]。
- 部分集合が群になっている時に部分群という。
- 割り算をする時には、正規部分群 (normal) が鍵。
  部分群 $H \subset G$ が正規である $\Leftrightarrow \forall g \in G, \forall h \in H, ghg^{-1} \in H$
  $\Leftrightarrow \forall g \in G, gH = Hg.$
- 有限集合が群であるとき、有限群という。
- 群は抽象的。群よりも群作用の方がわかりやすい。
- 一方で、群は抽象的なので簡単 (込み入ってない)。

[5] S_n は $n \geq 3$ で。$O(n)$ は $n \geq 2$ で

補足：直交群

- n 次直交行列の全体を $O(n)$ と書く。
- ランダウの記号と一致しているが何の関係もない。
- AA^T が単位行列の時に直交行列という。
- ２つの直交行列の積は直交行列、直交行列の逆行列は直交行列。
- それを言い換えると $O(n)$ は群。
- 直交行列の行列式は ± 1.
- 行列式が 1 の直交行列全体を $SO(n)$ と書く。
- S は特殊 (special) の頭文字。
- $SO(n)$ は $O(n)$ の正規部分群。
- 幾何学的には $O(n)$ はユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ の等長変換全体。
- $SO(n)$ はそのうちの向きを保つものの全体。回転群ともいう。

第２段落 (p959LR) From the point of view of math...

数学的には、１つの分子の対称性の群 G は可解群であり、構成も容易であり、さして面白くない、たった一つの例外を除いて。
この例外の群がこの文章の主人公である。それは、

(1) 正 20 面体の固有対称群。正 12 面体の固有対称群でもある。
(2) 群として５次交代群 A_5 と同型である。

という性質を持つ。群 A_5 は次の性質を持つ。

(3) 交換子群と一致する。
(4) 非可換単純群である。
(5) 非可換有限単純群の族 (family) の最初のメンバーとも思える。
(6) A_5 の二重被覆群が McKay 対応で例外型リー群 E_8 と対応。

逆に性質 (3) や (4) は特徴付けにもなっている：
$SO(3)$ の有限部分群で性質 (3) を持つものは一意。
$SO(3)$ の有限部分群で性質 (4) を持つものは一意。[6]

[6] いつものように、共役を除いて。

未定義用語：同型。交換子群、単純群、McKay 対応

- 同型。２つの群 G, G' の間の全単射写像 $f : G \to G'$ が積を保つ：すなわち、$f(ab) = f(a)f(b)$ を満たすときに、群の同型という。
- ここでのニュアンスは、ものとしては異なるけれども、群としての性質が共通している。
- 捨てている (無視している) 情報と着目している情報。
- 交換子群。交換子 $aba^{-1}b^{-1}$ の生成する群。生成の定義が必要。とりあえず使わないので無視。
- 単純群。非自明な正規部分群を持たない群。ある種の群論の最小単位だが、これも使わないので無視。
- McKay 対応。有限群の既約表現の特別なテンソル積の分解とコンパクトリー群の Dynkin 図形を関連づけるあっと驚く定理。今回の話にもう全然関係ないので無視。
- この辺、面白いので触れたくなるけれども、ここに捕まっていると C_{60} にたどり着かない。

第 3 段落 (p959R) A group isomorphic to A_5 will be ...

この段落はほぼ無情報。

- A_5 と同型な群を正 20 面体群とよぶ。
- 正 20 面体群の対称性はいつも注目の的であり、この文章でもそういう構造を１つ挙げるよ、ということを予告している。

第 4 段落 (p959R-960L) Prior to the discovery of Fullere...

フラーレンの歴史でよく語られる逸話 = 五角形と六角形からなる凸多面体の五角形が 12 枚であることを
　　オイラー数から導く

第 5 段落 (p960L) Fullerenes exhibit remarkable chemical ...

フラーレンの物理や化学に言及。

第 6 段落 (p960L) Among the many Fullerene molecules ...

C_{60} の説明。

- C_{60} はフラーレンの代表者。最もよく研究されている。
- フラーレンと言った時に C_{60} のみを指すことすらある。
- なおこの文章では序節以外ではフラーレンは出てこない。
- C_{60} = 切頭 20 面体。切頂 20 面体。
- サッカーボール。
- 面は 32 枚。
- 五角形が 12 枚。従って、六角形が 20 枚。(5 員環、6 員環)
- 五角形は互いに隣り合っていない。という著しい性質がある。
  $\longrightarrow$ それに関する蘊蓄。

第 7 段落 (p960L) The truncated icosahedron is also ...

ウイルスの話。

第 8 段落 (p960L-R) There are ninety edges in ...

ここから数学。まず、C_{60} の辺の性質 (易しい)。

- 辺は 90 本。$90 = 60 + 30$.
- 60 本の辺は 12 枚の五角形を囲んでいる。$5 \times 12 = 60$.
- 残りの 30 本の辺は 2 つの六角形を区切っている。
- 六角形の周りは、これら二種類の辺が互い違いに現れる。
  $20 \times 3/2 = 30$.

第 9 段落 (p960R) The truncated icosahedron has sixty ...

C_{60} の頂点の性質 (易しい)。

- 頂点は 60 点。
- 各頂点はただ一つの五角形に属している。$60 = 5 \times 12$.
- 頂点を 12 個の同値類に類別できる。
  どの五角形に属しているかで。

第 10 段落 (p960R) One also notes that at each ...

記号の定義：

- 頂点と辺から構成したグラフを Γ とする。
- G を C_{60} の対称群とする。
- グラフの隣接行列を H とする[7]。

性質

- C_{60} の各頂点には 3 本の辺がある。
- 内訳：2 本が五角形を囲む辺。1 本は六角形を区切る辺。
- Γ から切頭 20 面体の構造が完全に[8] 決まる。
- 群 G は正 20 面体群である。位数 60。
- G は V に単純推移的に作用する。

グラフ Γ 上の調和解析を群 G に即して行う、という至極もっともな提案がなされているが、具体的には何も述べられていない。

[7] 後半では、アルファベット H は $PSL(2,11)$ の部分群、という別の意味で用いている。

[8] どういう意味でなのかは説明なし。

補足：未定義用語：単純推移的

群 G が集合 X に作用している時、次は同値。

- G の X への作用は単純推移的。
- X は G の主等質空間。
- $\forall x, y \in X$, $\exists! g \in G$, $y = gx$.
- $\exists x \in X$, 写像 $G \ni g \mapsto gx \in X$ は全単射。
- $\forall x \in X$, 写像 $G \ni g \mapsto gx \in X$ は全単射。

例：時刻が X, 時間が G.

第 11 段落 (p961L) If p is a prime number let $\mathbb{F}_p$ ...

ここから急に素数が登場する。

- p を素数とする。この文章では奇素数しか使わない。
- $\mathbb{F}_p = \mathbb{Z}/p\mathbb{Z} = \{0, 1, \ldots, p-1\}$ を p 個の元からなる体とする。
- p を法として、加減乗除を考えるだけ。
- $Sl(2,p)$ を、$\mathbb{F}_p$ を成分とする 2 次正方行列で行列式が 1 のもの全体とする。群になる。特殊線形群という。
- 記号 $Sl(2,p) = SL(2,p) = SL(2,\mathbb{F}_p)$ も広く用いられている。
- $PSL(2,p)$: 射影特殊線形群 [9]。$SL(2,p)$ を単位行列の ± 1 倍で「割った」群。
- $p \geq 5$ ならば、$PSL(2,p)$ は単純群。
- $PSL(2,5)$ は 20 面体群。
- 予告：$PSL(2,5)$ は $PSL(2,11)$ に埋め込める。
- $\mathbb{F}_5$ は $\mathbb{F}_{11}$ の部分集合ではないので、何か当たり前でないことが発生している。
- その事実はガロアの最後の手紙に関係している：予告。

[9] なぜかこの文章には特殊線形群や射影特殊線形群という用語が登場しない。

第 11 段落 (p961L) の続き

- $PSL(2,11)$ の位数 11 の元は 120 個ある。
- ２つの共役類に分かれる。それぞれの元の個数は 60 個。
- その共役類の一つを M とする。
- 予告：M にグラフ構造が入り、切頭 20 面体のグラフと同型。
- すると、C_{60} の頂点を $PSL(2,11)$ の位数 11 の元を用いて記述できる。
- 予告：グラフの辺 (= 炭素の結合) も $PSL(2,11)$ の群の用語で書ける！
- 12 個の五角形 [10] は M と $PSL(2,11)$ の 12 個のボレル部分群との交わりである。

[10] 5 員環という用語はこの論文には現れない。

未定義用語：ボレル部分群

- 典型的なのは、後の式 (2) $B = \left\{ \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & a^{-1} \end{pmatrix} \middle| a \in \mathbb{F}_p^\times, b \in \mathbb{F}_p \right\}$ で与えられるような上三角行列のなす部分群[11]。
- その部分群と共役な部分群もボレル部分群である。
- 一般の代数群でのボレル部分群の定義は「極大連結可解閉部分群」だが、そんなこと言われてもよくわからないのでこの定義は無視して良い。
- ルート系や主系列表現などの表現論を展開する土台として重要な群であるので、既知の人にはボレルと言われた方がわかりやすいが、未知の人をこの用語で振るい落とす必要はない。
- 顕著な性質は、抽象的に定義したボレル部分群が全て共役であることだが、これとて、上三角行列全体で定義した標準的なボレル部分群と共役な部分群をここでは考える、という理解で、損なわれるものはない。そう思って読んでください。
- なお、ボレルは人名。測度論（ルベーグ）で登場するボレル集合のボレルとは別人。

[11] なお、p961R の式 (2) の行列の左括弧が抜けているという tyop。

第 2 節

第 2 節：正 20 面体のグラフと A_5 の共役類。

第 1 段落 (p961LR) Let $\tau = (1+\sqrt{5})/2$ be the golden ...

まず、正 20 面体の一つの実現を挙げている。
ただしこの記述は見かけ上は以下の群論的な記述で使われない。

- 黄金比 $\tau = 1.6180....$
- 辺の長さの比が黄金比 τ の長方形を黄金長方形と呼ぶ。
- 2D の例：$\mathbb{R}^2$ の 4 頂点 $\{(\pm 1, \pm\tau)\}$.
- 3D の例：$V = \{(\pm 1, \pm\tau, 0), (0, \pm 1, \pm\tau), (\pm\tau, 0, \pm 1)\}$.
  3 枚の直交する黄金長方形。式 (1)。
- V を頂点とする多面体 P は正 20 面体。
- $c, d \in V$ に対して、$\{c, d\}$ が辺 $\Leftrightarrow \langle c|d\rangle = \tau$.

第 2 段落 (p961R) Let $A \subset SO(3)$ be the group of ...

- $A \subset SO(3)$ を V を保つ回転の全体とする。V の対称群。
- a^j が単位元になる最小の自然数 j を $a \in A$ の位数という。
- $A(j)$ を A の位数 j の元の全体とする。
- A の元の位数は $1, 2, 3, 5$ のいずれか。
- それぞれの元の個数は
  $|A(1)| = 1,\ |A(2)| = 15,\ |A(3)| = 20,\ |A(5)| = 24.$
- $1 + 15 + 20 + 24 = 60.$

第 3 段落 (p961R) For any prime p ...

p を素数[12] とする。

- $PSL(2,p)$ は $\mathbb{F}_p \cup \{\infty\}$ に一次分数変換で作用する。
- 行列 $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ の定める一次分数変換 $x \mapsto \frac{ax+b}{cx+d}$.
- $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p) := \mathbb{F}_p \cup \{\infty\}$ を射影直線[13] と呼ぶ。元の個数は $p+1$ 個。
- 1 点 $x = \infty \in \mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p)$ の固定部分群 B は、条件 $c = 0$ で与えられる。式 (2)：$B = \left\{ \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & a^{-1} \end{pmatrix} \middle| a \in \mathbb{F}_p^\times, b \in \mathbb{F}_p \right\}$.
- これらは $\mathbb{F}_p$ を他の体に変更しても成立する幾何学的な性質。

[12] 素数の冪でもよい、と書かれているが、知らない人には戸惑いを呼ぶ寄り道なので無視して良い。この文章では p は素数しか出てこない。

[13] 射影直線は旗多様体の特別な場合との言及がある。正しいけれど今の話と関係ないので無視する。

2 日目：後半

昨日の質問のいくつか。

- 表現論とは何か。
- 図形の性質を調べるときに、その上の関数を用いる。
- 例：グラフの性質を調べるときに、グラフの各頂点に実数（または複素数）を割り当てた関数を調べる。
- 幾何学：山や川の形、降水量など。
  表現論：森林、農業など生えているものを調べる。
- ラプラシアンや隣接行列の固有関数に展開、熱方程式など情報などの流れの記述。
- 群や等質空間上の非可換調和解析、フーリエ解析。
- 行列要素や球関数などの特殊関数
- 対称性を利用した変数分離

第 3 段落 (961R) 続き。

3 つの群が同型であることが宣言されている。

- $SO(3)$ の有限部分群 A. 正 20 面体の頂点集合 V を保つ回転全体.
- 射影変換群 $PSL(2,5)$.
- 交代群 A_5.

どのように実現されているかどうかによって自然に作用できる集合の見やすさが異なる。

- $PSL(2,5)$ は 6 点集合 $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_5)$ に自然に作用。
- 正 20 面体 P の原点対称な頂点のペアは 6 ペアである。
- A_5 は 5 点集合 $\{1,2,3,4,5\}$ に自然に作用。

補足：部分群の記号のリスト

- $A \subset SO(3)$: V を保つ回転全体。第 2 節第 2 段落。位数は $60 = 1 + 15 + 20 + 24$. 群としては A は $PSL(2,5)$ と同型。
- $PSL(2,p)$。第 1 節第 11 段落。論文では $PSl(2,p)$ と書かれている。$PSL(2,\mathbb{F}_p)$ ともしばしば書く。位数は $(p^2-1)(p^2-p)/(2(p-1)) = (p+1)p(p-1)/2$.
- $B \subset PSL(2,p)$。第 2 節第 3 段落。Borel 部分群。[14] 位数は $p(p-1)/2$.
- $\mathbb{F}_p^\times$。第 2 節第 3 段落。一般には可逆元 [15] の全体を表す記号だが、体 $\mathbb{F}_p$ の場合には 0 を取り除いた集合となる。従って、元の個数は $p-1$。掛け算で可換群になる。論文では $\mathbb{F}_p^*$ と書かれている。

[14] B は p に依存するがそれは明記されていない。
[15] 紛らわしい用語だが、可逆元を単元と呼ぶことがある。

第 3 段落 (p961R) の続きの続き

- 承前：A_5 は S_5 の部分群なので 5 つの元の集合に作用する。
- 幾何的には？
- 答え：辺は 30 本。平行な辺は 15 ペア。黄金長方形は 15 枚。直交する 3 枚の黄金長方形は五種類。これが 5 つ！
- 代数的には？
- $A(2)$ に関係 $\sim$ を、$\sigma \sim \rho \Leftrightarrow \sigma\rho = \rho\sigma$ と定義。
- 驚き：$\sim$ は同値関係。それぞれの同値類は 3 つの元からなる。
- その同値類の集合を $\mathcal{F}$ とする。同値類の個数は 5 個。つまり $\mathcal{F}$ の元の個数は 5 つ。$15 = 3 \times 5$.
- 幾何と代数の関係：$\sigma \in A(2)$ は黄金長方形の 180 度回転。

第 4 段落 (p962L) To what extent does A "see" ...

後に出てくる定理 1 の位置付けを述べている。

- 問題：A は正 20 面体を「見る」ことができるか？
- 問題の言い換え：正 20 面体グラフは A の部分グラフか？
- 定理 1 がその答えである。
- 定理 1 はこの文章の主定理の Toy model(プロトタイプ) である。

共役類に関する性質

- $A(2)$ や $A(3)$ はそれぞれ一つの共役類である。
- $A(5)$ は 2 つの共役類に分かれる。$A(5) = C \cup C'$。
- C, C' の元の個数はどちらも 12。
- C, C' のそれぞれは逆元をとる操作で閉じている。
- 写像 $\sigma \mapsto \sigma^2$ は、全単射 $C \to C'$ を与える。

第 5 段落 (p962LR) Consider one of the two ...

共役類 $C \subset A(5)$ を頂点とするグラフ Δ を次で定義する。式 (4)。

- $u, v \in C$ に対して、$\{u, v\}$ が辺 $\Leftrightarrow uv \in C \Leftrightarrow vu \in C$.

注目すべき点は C は群ではないので、掛け算したもの uv は一般には C の元とは限らないこと。

このように定義したグラフが期待したものであることを次の定理で示す。

定理 1(p962R) The graph Δ is ...

グラフ Δ は正 20 面体である。
u, u^{-1} は正 20 面体の中での対称点である。

第 6 段落 (p962R) If c and d...

- 定義：グラフの 2 頂点 c, d に対して、$\{c, d\}$ が辺であるとき、c, d は隣接していると呼ぶ。
- 性質：正 20 面体グラフの 1 つの頂点の隣接頂点は 5 つある。
- 定義：c の対称点 c^{-1} の隣接頂点を、c の余隣接頂点と呼ぶ。
- 性質：与えられた頂点 c に対して、c でも c^{-1} でもない頂点 d は、隣接か余隣接かのいずれかである。さらに隣接かつ余隣接とはならない。

第 7 段落 (p962R) With an example,...

A_5 の具体的な元で、上記の性質 (辺になるかどうか) の例を挙げている。簡単に計算できるのでとても良い。

- $u = (1, 2, 3, 4, 5)$.
- $w = (1, 5, 2, 4, 3)$.
- $v = w^{-1} = (1, 3, 4, 2, 5)$.
- u, w, v は同じ共役類 C に含まれる。
- $uw = (1, 4, 2) \notin C$.
- $uv = (1, 5, 3, 2, 4) \in C$.

注 2(p962R)

ちょっとした補足の性質[16]。
$u, w \in C$ が余隣接 $\Leftrightarrow$ uw の位数が 3.

[16] ちょっとした誤植：u and u は u and w

第 8 段落 (p962R) Being a polyhedron...

- 図 1 の説明。
- 正 20 面体の面である三角形の u, v による群論的な記述。
- 性質：三角形を面とする多面体なので各辺に対してそれを含む面はちょうど 2 つある。
  今の場合、C の辺 $\{u, v\}$ に対して、u, v のどちらにも隣接する頂点は $u^{-1}v^{-1}$ と $v^{-1}u^{-1}$ の 2 点である。
- これを図示したのが図 1。
  大きな図を書くほどのことはないような図。

第 9 段落 (p962R-963L) Starting with the edge ...

三角形の「向きづけ」を適切に与える。すなわち、図 2 の説明。
なお、ここの 1 重線と 2 重線は第 1 章第 8 段落の 1 重結合・2 重結合とは無関係。

第 10 段落 (p963L) Of course five coneighbors ...

1 行のみ。
余隣接頂点 (= 逆元の隣接頂点) は隣接頂点の逆元である。

注 3,p963L

群を生成元と関係式で表示するやり方。基本群の表示でしばしば用いられる。

- 図 1 と図 2 から導かれる関係式 (5) $u^2vu^{-2} = u^{-1}v^{-1}$ と、u の位数が 5 であるという性質を用いると、$x := u^{-2}v$ の位数は 2 であることがわかる。
- 証明：
  $x^2 = u^{-2}vu^{-2}v = u^{-4}u^2vu^{-2}v = u^{-4}u^{-1}v^{-1}v = u^{-5} = e.$
- 注 2 より、$ux = u^{-1}v$ の位数は 3。
- 実は正 20 面体群は $\langle u, x \mid u^5 = x^2 = (ux)^3 = e\rangle$ と表示できる。これを標準表示という：式 (12)。
- 後に定理 7 で、切頭正 20 面体のグラフをケーリーグラフとして定義するときにこの標準表示を用いる、と予告している。

第 11 段落 (p963L) For non-solvable...

まずは前置き。非可解群での交換子の扱い。A_5 は交換子群と自分自身が一致する最小位数の群である。従って、普通は交換子に注目しない。しかし、ここでは注目する。

- 共役類 C の隣接頂点 $u, v \in C$ をとる。
- この時、 $\{u, v, u^{-1}, v^{-1}\}$ は黄金長方形。
- 交換子は 8 通りある。この 8 つの交換子と元の 4 の元を合わせた $4 + 8 = 12$ 個の元を次のように並べる。式 (6)

$$\begin{array}{ccc} u & uvu^{-1}v^{-1} & uv^{-1}u^{-1}v \\ v & v^{-1}u^{-1}vu & vu^{-1}v^{-1}u \\ u^{-1} & vuv^{-1}u^{-1} & v^{-1}uvu^{-1} \\ v^{-1} & u^{-1}v^{-1}uv & u^{-1}vuv^{-1} \end{array}$$

定理 2(p963L)

C や直交黄金長方形の群論的な記述。

- その 12 個は異なる元であり、集合 C と一致。
- ３つの列は直交する黄金長方形。
- なお、１つの黄金長方形に直交する２つの黄金長方形は一通り。

第 12 段落 (p963L) This theorem is proved as ...

１行。定理 2 の出典が書かれているだけ。

第 13 段落 (p963L) The following diagram (Figure 3) ...

定理 2 を図示したのが図 3 である。

- 12 個の頂点座標を $\{u, v\}$ で書き表した。頂点座標の複数の表示も書かれている。
- ２重線は手前側、１重線は陰線を意味している。

p963R は図 2 と図 3 のみ。

第 3 節

第 3 節：$PSL(2,5)$ の $PSL(2,11)$ への埋め込みと、
Chevalier へのガロアの手紙

第 1 段落 (p964L) A major theme in what ...

この節の予告。

- $PSL(2,5)$ が $PSL(2,11)$ に埋め込める。
- 埋め込みの方法は (共役を除いて) 2 通り。
- 2 通りも $PSL(2,11)$ の外部自己同型で移り合える。
- $PSL(2,11)$ とその部分群 $PSL(2,5)$ の関係は特別なものであり、ガロアの手紙に遡る。

第 2 段落 (p964L) As we noted before ...

射影直線の間の埋め込み $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_5) \subset \mathbb{P}^1(\mathbb{F}_{11})$ の構成。

- 射影直線 $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p) = \mathbb{F}_p \cup \{\infty\}$ を考える。元の個数は $p+1$.
- 論文では $Proj_1(\mathbb{F}_p) = \mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p)$ という記号が使われている。
- 群 G が集合 X に作用する (第 2 節第 3 段落) 時、X を G 集合と呼ぶ。[主客の逆転]。
- まず、正 20 面体の 12 頂点を対称点とペアにしたものは 6 ペア。これは $PSL(2,5)$ の作用込みで $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_5)$ と対応させる。
- 次に、$PSL(2,11)$ の作用込みで正 20 面体の頂点の集合 V と $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_{11})$ を対応させる。
- 定理：$\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_{11})$ の 12 個の元を 2 つずつの 6 ペアに上手に分けると、その 6 ペアを保つ $PSL(2,11)$ の元の全体が $PSL(2,5)$ と同型になる。
- これが話のポイント。
- このようにして $PSL(2,5)$ の $PSL(2,11)$ への埋め込みが得られる。

第 2 段落 (p964L) 続き

紹介記事の宿命だが、ここの説明だけでは理解できるだけの情報は与えられていない。詳細を知るには原論文 [3] を参照する必要がある。

- 正 20 面体の頂点の集合と射影直線の対応はここでは具体的に与えられていないので [3] を見る必要がある。
- 論文 [3] では射影直線 $\mathbb{P}^1(\mathbb{R}_{11})$ の複比から正 20 面体グラフの頂点と辺を表示している。複比は射影直線の対称性を加味した幾何を行う際の正統的な方法。
- 射影直線 $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p)$ への $PSL(2,p)$ の作用はよくわかるのだが、正 20 面体への $PSL(2,11)$ や $PSL(2,5)$ の作用の具体形も [3] を見る必要がある。
- ６ペアへの分け方は２通りあり、それに対応して埋め込みも２通りある。

第 3 段落 (p964L) We are concerned here ...

- 前の段落の正 20 面体のグラフの話は前座であって、本命は切頭正 20 面体のグラフである。
- と言いつつ、話は余談へと流れる。
- 正多面体 (プラトン多面体) の固有な対称性の群は A_4, S_4, A_5 と同型である。それぞれ、正 4 面体、正 6 面体と正 8 面体、正 12 面体と正 20 面体。
- 逆に、$\mathbb{R}^3$ へ既約に作用する $SO(3)$ の有限部分群は、A_4, S_4, A_5 のいずれかと同型なものに限られる。
- なお、A_4, S_4, A_5 は例外型単純リー群 E_6, E_7, E_8 と McKay 対応によって対応する。McKay 対応の説明はないし、この文章の今後でも用いない。なお、E_6, E_7, E_8 は $78, 133, 240$ 次元のリー群 (コンパクトな実多様体であり群) である。
- これは３つの群 A_4, S_4, A_5 が次の段落に登場することの前振りなのだが、しかし登場する理由にはなっていないので、現時点では思わせぶりにとどまっている。

第 4 段落 (p964LR) Now if p is a prime number ...

射影直線 $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p)$ へ $PSL(2,p)$ の作用は、小さくない素数 p では特別な性質「それより少ない集合への作用はない」を持つ (ガロア)。なお、この段落の説明は充実している。

- 素数 $p \geq 5$ の時、$PSL(2,p)$ は単純群。
- $PSL(2,p)$ は $\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p)$ へ自然に作用している。$\mathbb{P}^1(\mathbb{F}_p)$ の元の個数は $p+1$.
- 素数 $p > 11$ の時、$PSL(2,p)$ は p 個以下の集合へ非自明には [17] 作用できない。

[17] 全ての元を動かさない作用はいつも存在するのでそれを取り除いている。

第 4 段落 (p964LR) 続き

- $Z_p = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \middle| x \in \mathbb{F}_p \right\}$ と定義 [18]。式 (7)。
- Z_p は $\mathbb{Z}_p$ と群として同型。紛らわしい記号だが異なるもの。
- Z_p の位数は p.
- Z_p は第 2 章第 3 段落の式 (2) のボレル部分群 B の正規部分群。
- Z_p は $PSL(2,p)$ の p シロー部分群。正規部分群ではない。
- $PSL(2,p)$ の部分群 F が $PSL(2,p) = F \times Z_p$ を満たすときに、Z_p の補部分群であるという。
- ここで右辺の記号は直積群と紛らわしいがここでは直積群ではなく、単に集合としての積を考えている。岩澤分解などで頻用される記号の習慣の踏襲。すなわち、積写像 $F \times Z_p \in (f,z) \mapsto fz \in PSL(2,p)$ が集合として全単射であることと定義する。
- ガロア：$p > 11$ の時、Z_p の補部分群は存在しない。

[18] なお行列の左括弧の欠落という単純な typo

第 4 段落 (p963LR) さらに続き

この文章の主眼は、むしろガロアの主張では除外した $p \leq 11$ の場合にある。

- $p = 5, 7, 11$ の時、$PSL(2, p)$ の中に Z_p の補部分群が存在する。それはそれぞれ前の段落で脈絡なく言及した A_4, S_4, A_5 である。式 (8)：
- $PSL(2, 5) = A_5 \times Z_5$.
- $PSL(2, 7) = S_4 \times Z_7$.
- $PSL(2, 11) = A_5 \times Z_{11}$.

第 5 段落 (p963R-964L) These exceptional ...

この節も余談である。

$PSL(2, 5)$ が 5 点に作用することは 961R で述べた。復習すると：

- $A(2)$ の可換な 3 元の組が 5 つあった。
- この 5 つの元の入れ替えが A_5 との同型を与える。

次は $PSL(2, 7)$.

- 群としての同型 $PSL(2, 7) = PSL(3, 2)$.
- $PSL(3, 2)$ は射影平面 $\mathbb{P}^2(\mathbb{F}_2)$ に作用する。
- $\mathbb{P}^2(\mathbb{F}_2)$ は 7 つの点と 7 本の直線を持つ。図 4 に描画。$1 + 2 + 4 = 7 = (2^3 - 1)/(2 - 1)$。
- これによって $PSL(2, 7)$ は 7 点集合に作用する。
- 7 の話は 11 や 5 の話からすると余談なのだが深入りしている。

第 6 段落 (964L) Of course our main interest ...

そしていよいよ、興味の対象である $PSL(2,11)$ の場合。
$PSL(2,11)$ が 11 点集合に作用することを幾何学的に示す。

- $\mathbb{F}_{11}^{\times} = \{1,2,3,4,5,6,7,8,9,10\}$ の元は 2 乗する写像 $x \mapsto x^2$ によって、それぞれ $\{1,4,9,5,3,3,5,9,4,1\}$ に写る。つまり像は $\ell_0 := \{1,3,4,5,9\}$ である。$\mathbb{F}_{11}^{\times} \to \ell_0$ は $2:1$ 写像である。
- 集合 ℓ_0 を $i \in \mathbb{F}_{11}$ 平行移動した集合を $\ell_i := \{i + y \mid y \in \ell_0\}$ と定め、直線と呼ぶ。11 本の直線が定まった。
- $\ell_1 = \{2,4,5,6,10\}$, $\ell_2 = \{3,5,6,7,11\}$, $\ell_3 = \{1,4,6,7,8\}$, $\ell_4 = \{2,5,7,8,9\}$, $\ell_5 = \{3,6,8,9,10\}$, $\ell_6 = \{4,7,9,10,11\}$, $\ell_7 = \{1,5,8,10,11\}$, $\ell_8 = \{1,2,6,9,11\}$, $\ell_9 = \{1,2,3,7,10\}$, $\ell_{10} = \{2,3,4,8,11\}$. 式 (9)。

第 7 段落 (964L) If we regard these sets ...

双平面幾何。

- ２本の直線の共通部分は２点。
- 逆に２点を通る直線はちょうど２本。
- ２直線の選び方も、２点の選び方も、共に $\binom{11}{2} = 55$ 個。
- 対称群 S_{11} は 11 個の点集合 $\mathbb{F}_{11}$ に作用するので、この直線たちを動かす。
- 定理：この直線たちを保つ群が $PSL(2,11)$ と同型である。証明はここには書かれていない。
- $PSL(2,11)$ は 11 本の直線の入れ替えとして作用。目的達成。
- 定理：$PSL(2,11)$ 元のうち１点を固定するもののなす群が $PSL(2,5)$ と同型。
- 定理：$PSL(2,11)$ 元のうち１直線を固定するもののなす群も $PSL(2,5)$ と同型。
- この２つの埋め込み $PSL(2,5) \to PSL(2,11)$ は異なる。
- 証明はここには書かれていない。

第 8 段落 (964LR) The biplane geometry ...

アダマール行列との対応。

- $\mathcal{H}_n$: n 次のアダマール行列全体。
- 成分は 1 か -1 で全ての列が直交。
- 行の入れ替え、列の入れ替え、行の符号反転、列の符号反転から作られる群を G_n とする。
- G_n は左右からの掛け算で $\mathcal{H}_n$ に作用する。

$n = 12$ とする。$R \in \mathcal{H}_n$ からスタート。最後の行と列に着目して G_n の元のうち符号変化を左右から上手に掛け算して、最後の行と列がどちらも 1 だけからなるように変形したものを考える。左上の $(n-1)$ 次の小行列を R' と書く。
各列ベクトルは、all 1 ベクトルとの直交条件から、11 個の成分のうち、5 つが -1、6 つが 1 である。この -1 の場所を抜き出すと 5 つの元からなる部分集合ができる。これが双平面幾何の直線である。式 (10)。

注 5

寄り道。12 以外の n に対して、アダマール行列は (対称性を法として) どのぐらいたくさんあるか？

- G_{12} の $\mathcal{H}_{12}$ への作用は推移的である (Andrew Gleason)。
  すなわち、$\mathcal{H}_{12}$ は単一の G_{12} 軌道である。
- 彼の予想：$\mathcal{H}_n$ が空でなく、G_n の軌道となるような n は 12 以下である。
  つまり、$n > 12$ の場合には、アダマール行列が一つでも存在すれば、本質的に異なるものが他にもある、という予想。

双平面幾何はデザイン理論との関連を、アダマール行列は符号理論との関連を強く示唆するが踏み込んだ言及はない。

第 4 節

第 4 節：切頭正 20 面体のグラフと、
$PSL(2,11)$ の共役類 M

第 1 段落 (p965R-966L) Now returning to (8), ...

分解 $PSL(2,11) = A_5 \times \mathbb{Z}_{11}$ を利用して左と右から割る。

- これまでは $PSL(2,11)/A_5$ を考えてきた。元の個数は 11。
- ここからは $PSL(2,11)/\mathbb{Z}_{11}$ を考える。元の個数は 60.
- $X := PSL(2,11)/\mathbb{Z}_{11} = PSL(2,11)/H$ と置く。
- 問題：X は切頭正 20 面体のグラフとなるか？
- 補題：式 (2) のボレル部分群 B は $PSL(2,11)$ の中の $\mathbb{Z}_{11}$ の正規化群：$B = \left\{g \in PSL(2,11) \mid gzg^{-1} \in \mathbb{Z}_{11}, \forall z \in \mathbb{Z}_{11}\right\}$.
- 補題：剰余群 $B/\mathbb{Z}_{11}$ は $X = PSL(2,11)/\mathbb{Z}_{11}$ に右から忠実に作用。
- 補題：群 $B/\mathbb{Z}_{11}$ は $\mathbb{Z}_{11}^{\times}/\{\pm 1\} = \mathbb{Z}_5$ と同型。
- 系：X は $PSL(2,11)$ の作用込みで 12 枚の「五角形」に分けられた。
- 課題：６員環の間の辺（５員環を繋ぐ辺）の情報が欲しい。

第 2 段落 (p966L) A graph, namely a Cayley ...

ケーリーグラフ。

- 群からグラフを作る良くある方法。
- 生成系を与えるごとに (一般には異なる) グラフができる。
- 正 20 面体群 A' の場合は 2 つ元からなる生成系が 3 通り、良く使われている。
- その位数が 2 と 5, 2 と 3, 3 と 5 の 3 通り。
- 2 と 5 の場合の関係式 (12)：
  $\phi^5 = 1, \quad \tau^2 = 1, \quad (\phi\tau)^3 = 1.$

第 3 段落 (p966L) Theorem 7 is just a more ...

次の定理 7 の出典を述べている。

定理 7(p966LR) 3 つの段落

- M: 60 個の元からなる集合。
- S_{60}: M の置換の全体のなす群。
- $\phi, \tau \in S_{60}$ は式 (12) の基本関係式を満たすと仮定。
- $\phi, \tau, \phi\tau$ は M に固定点を持たないと仮定。
- この時、ϕ, τ の生成する群 A' は正 20 面体群。
- A を A' と可換な元全体とすると、A も正 20 面体群。
- A と A' は互いに中心化群。
- M は A' の主等質空間であり、A の主等質空間でもある。
- M を頂点集合とし、頂点 $x \in M$ からの辺を $\{x, \phi x\}$, $\{x, \phi^{-1}x\}$, $\{x, \tau x\}$ とするグラフ Γ は、切頭正 20 面体のグラフ。
- $\{x, \phi x\}$, $\{x, \phi^{-1}x\}$ が 5 面体辺、$\{x, \tau x\}$ が 6 面体辺。
- A は Γ の固有対称群。

第 4 段落 (p966R) If we apply Theorem 7 ...

定理 7 を $X = PSL(2, 11)/\mathbb{Z}_{11}$ に適用。

- ϕ はトーラス $B/Z_{11} = \mathbb{F}_5$ の生成元。
- τ は？

第 5 段落 (p966R) Let A be a fixed choice of ...

- A を $PSL(2,11)$ の正 20 面体部分群とする。2 通りの選択肢があった。
- 勝手なボレル部分群の冪単根基を Z_{11} とする。この定義は難しそうに見えるが、式 (7) の標準的な Z_{11} に対して、$g \in PSL(2,11)$ を用いて $gZ_{11}g^{-1}$ と書けるものを考えれば良い。
- この時、$PSL(2,11) = A \times Z_{11}$ と直積集合に分解できる。群の同型ではない。
- $Z_{11}^{\times}$ を Z_{11} の単位元以外の元の全体とする。位数 11 の元の全体と言っても良い。記号は論文では Z_{11}^{*} と書かれている。
- $Z_{11}^{\times}$ の元の個数は 10 個である。
- $PSL(2,11)/B = \mathbb{P}^1(\mathbb{F}_1 1)$ は 12 個の元を含むので、ボレル部分群の選び方も Z_{11} の選び方も 12 通りある。これらの $Z_{11}^{\times}$ に重なりがないので、$PSL(2,11)$ には合計で $12 \times 10 = 120$ 個の位数 11 の元が含まれている。
- B は $Z_{11}^{\times}$ に 2 つの軌道を持つので、$PSL(2,11)$ の位数 11 の元の全体は 2 つの共役類に分かれる。これを M, M' とする。それぞれは半分、つまり 60 個の元を持つ。

注 9(p966LR)

後の定理 11 を援用すると、$PSL(2,11)$ の外部自己同型によって、A の 2 通りの選択肢は移り合い、M と M' も移り合う。

第 6 段落 (p966R) Since the centralizer of ...

- $PSL(2,11)$ の作用込みで M と X は同型。式 (14)。
- M の 12 個の五角形は、$PSL(2,11)$ の 12 個のボレル部分群 B' に対する $B' \cap M$ のそれぞれと一致。式 (15)。
- 簡約群のボレル部分群の綺麗な構造が次々と反映されていて美しい。

注 10(p966LR)

- M の五角形は極大可換部分集合と特徴づけることができる。
- M 内の元の可換性は同値関係を定める。
- 思い出してみると $A(2)$ の時もそうだった。

入れ物	共役類	位数	形	個数
$PSL(2,5)$	$A(2)$	2	三角形	5
$PSL(2,11)$	M	11	五角形	12

第 7 段落 (p966R-967L) If p is a prime ...

一般の素数 p の時。

- $M_p \subset PSL(2,p)$ を位数 p の元のなす集合とする。
- M_p の位数は $p^2 - 1$.
- ガロア：$p > 11$ の場合、M_p は $PSL(2,p)$ の部分群の主等質空間にはできない。
- ケーリーグラフ構造が M_p に入れられるかどうかも群作用がないのでわからない状態。
- つまり、小さい p だからうまく行った。

第 8 段落 (p967L) The use of the term ...

補足：巡回群 $\mathbb{F}_5$ にケーリーグラフの構造は 2 通り入る。
一つは五角形、一つは五角形の星形。図 5。

第 9 段落 (p967L) The action of this $\mathbb{Z}_5$ ...

２通りの五角形に対応した M 上の五角形構造も $PSL(2,11)$ の群の積で表せる。こういったことができるのがこの記述のご利益。

- ある方法での五角形辺は、頂点 $x \in M$ に対して、$\{x, x^3\}$ と $\{x, x^4\}$. なお、$3, 4 \in \ell_0$ であり、$3 \times 4 = 12 \equiv 1 \mod 11$.
- 別の方法での五角形辺は、頂点 $x \in M$ に対して、$\{x, x^9\}$ と $\{x, x^5\}$. なお、$9, 5 \in \ell_0$ であり、$9 \times 5 = 45 \equiv 1 \mod 11$.

これらが ϕ の具体形。

第 10 段落 (p967LR) Finding the graph of ...

M を $PSL(2,11)$ の中に見つけられた発見的理由

１つ目は以下の対比。これは似ているのでわかりやすい。

入れ物	位数	個数	分解	個数	頂点
$PSL(2,5)$	5	24	$A(5) = C \cup C'$	12	正 20 面体
$PSL(2,11)$	11	120	$M_{11} = M \cup M'$	60	切頭正 20 面体

第 10 段落 (p967LR) 続き

2 つ目。こちらはかなりイってる。

- 正 20 面体の頂点集合は $PSL(2,11)$ の旗多様体と同一視できる。
- 旗多様体は $PSL(2,11)$ のボレル部分群 B' の全体と思える。
- さて、多面体の切頭の操作を代数幾何のブローアップに対比して考える。
- ブローアップは 1 点をその接空間に置き換えるものとみなす。
- さらに接空間を余接空間に置き換える。これは簡約リー群や軌道を扱う際に symplectic 構造を考える常套手段。
- 半単純リー群の主冪単元の軌道は旗多様体の余接束に自然に埋め込まれる。これらの登場人物はリー群の表現論では代表的な登場人物。
- 有限体の設定で主冪単元の軌道に相当するのが M。
- 以上をまとめると、切頭の操作としては、各点 B' に対して、$B' \cap M$ の元たちを割り当てるのが良かろう、という提案を思いつく。

第 11 段落 (p967R-968L) The subtle point in ...

τ の決め方には解明されていない点があることが述べられている。

第 12 段落 (p968L) (Of course, to represent ...

図 6 での 2 重線 1 重線の使い方が炭素の結合と逆になっていることを注意している。
数学者が犯しがちな行為。

第 13 段落 (p968L) In the notation of ...

次の定理 11 の出典を書いている。
また、証明には計算機を使わないものの、発見には Maple による計算を長く行ったと書かれている。

定理 11(p968LR)

この定理の内容はこのレジュメでは再録しない。興味がある場合は原文を見られたい。

- ここまでに説明で軽く触れていた A や M の 2 通りの取り方に $C = C_A$ がどのように依存するか、などの細かく正確な記述。写像 $M \to C_A$ の存在。
- 懸案の τ の選び方。$\tau(x) = \rho_x x$ と書いたときに、$\exists! \sigma_x \in A(2)$ を用いて、$\rho_x = x^{-1}\sigma_x x \sigma_x$ と書けること。一般に位数 2 の自己同型 τ を調べるときに、群の元 $x \in PSL(2,11)$ に対して $\rho_x = \tau(x)x^{-1} \in PSL(2,11)$ を考えるのは対称空間 G/G^τ や軌道分解における常套手段。定義体やガロア群の作用など多くの研究への結びつきがある視点。
- 六角形辺 $\{x, \rho_x\}$ の記述。
- 存在する写像を具体的にどのように構成するかは、論文に委ねている。しかも論文の記述では場合ごとの記述を要するように見える箇所もある。
- 端的に言えば、この定理、まだバージョンアップの可能性があるように思う。

第 14 段落 (p968R) Tables, which among ...

注釈：具体的なデータが原論文に掲載されていることを一文で述べている。

参考文献 (p968)

15 の文献が挙げられているが、この手のサーベイにしては少ない。しかも、非専門家がこの文章の内容をより詳しく勉強するときに参考文献に挙げられている文献は著者自身の直接関係する仕事 [3][12][13] 以外はおそらく手助けになっていない。

雑感

まとめにはなっていないが。

- グラフを作るときに辺のリストを羅列するのではなく、頂点や辺を群の言葉で作りたい、という願望に対する C_{60} の場合の一つの回答。
- すぐに思いつく、群そのものでケーリーグラフとして作る方法では作れないので、群の中の共役類という部分集合や群の等質空間のような商集合などを上手に使うところがミソ。
- ボレル部分群や射影直線の余接束などのリー群論の幾何学的手法を縦横無尽に使う。これらを用いる動機を知りたいのであればリー群論に遡るのが正統的であり、一方で定義して性質を調べるだけであれば、そういう来歴は不要。構える必要はない。これらは $p = 11, 5$ という特殊性とは無縁。
- 小さい p であることや正 20 面体であることの特殊性がどこでどう生かされるのかは明瞭に説明されているのでストーリーを理解しやすい。
-

Green function of boundary value problem and the best constant of Sobolev inequality

Hiroyuki YAMAGISHI
Tokyo Metropolitan College of Industrial Technology

The Sobolev inequality shows that the supremum of a function is estimated from above by a constant multiple of the potential energy. We have found the best constant and function, which attain the equality. In the background, there is a boundary value problem of the linear differential equation corresponding to a bending problem of a string or a beam. The solution is expressed by using the Green function. The Green function is the reproducing kernel for a suitable set of a Hilbert space and an inner product. Applying the Schwarz inequality to the reproducing relation, we have the Sobolev inequality. The best constant and function of the inequality are also expressed by using the Green function. As an application, we consider the discrete version of the Sobolev inequality corresponding to a classical mechanical model of the carbon molecular C_{60} fullerene. The discrete Sobolev inequality shows that the square of the maximum of the deviation is estimated from above by constant multiples of the potential energy. In the background, there is a bending problem of a classical mechanical model. The solution is expressed by using the Green matrix. Using the Green matrix, we have the best constant and the vector, which attain the equality. It is considered that the best constant represents the rigidity of the mechanical model.

境界値問題のグリーン関数と
ソボレフ不等式の最良定数

山岸 弘幸（都立高専）

亀高 惟倫（阪大）

渡辺 宏太郎（防衛大）

永井 敦（津田塾大）

武村 一雄（日大）

關戸 啓人（京大）

2023/08/31 11:14　　＜書籍紹介＞　グリーン関数（亀高惟倫・永井　敦・山岸弘幸 共著）【数学】

一つ前に戻る　書籍目録　購入案内　メールマガジン　サイトマップ　home

グリーン関数
GREEN FUNCTION

グリーン関数

Green function

大阪大学名誉教授　理学博士　亀高惟倫・
津田塾大学教授　博士（数理科学）　永井　敦・
東京都立産業技術高等専門学校准教授　博士（理学）　山岸弘幸 共著

在庫あり

Ａ５判／200頁／定価3850円（本体3500円＋税10%）／2022年11月発行
ISBN 978-4-7853-1597-9　C3041

微分方程式の境界値問題の中心をなし、応用上も重要なグリーン関数について、大学１、２年生の微分積分学の知識を前提に解説する。

本書では、簡単かつ重要な問題に限定し、グリーン関数の具体的な構成法を述べる。第１章では２階常微分方程式の境界値問題である糸のたわみ問題、第２章では４階常微分方程式の境界値問題である棒のたわみ問題、第３章では $2M$ 階単純型常微分方程式の境界値問題を記述する。第４章では２階差分方程式の境界値問題である離散糸のたわみ問題、第５章では $2M$ 階単純型差分方程式の周期境界値問題、第６章では正多面体や $C60$ フラーレンのたわみ問題を扱う。最後の第7章においては N 次元ユークリッド空間全体での高階楕円型偏微分方程式のグリーン関数について述べる。

購入案内

Amazon
楽天ブックス
セブンネットショッピング
honto
Knowledge Worker
紀伊國屋書店
ヨドバシ・ドット・コム
TSUTAYA
ローチケHMV
e-hon
Honya Club

丸善，ジュンク堂書店，文教堂
紀伊國屋書店（新宿本店）
三省堂書店
有隣堂
TSUTAYA

ツイート　0

著作者紹介

亀高 惟倫
かめたか よしのり
1940年 生まれ。1963年 京都大学理学部数学科卒業、大阪大学教授などを歴任。主な著書に『非線型偏微分方程式』（産業図書）などがある。

永井　敦
ながい あつし
1968年 広島県に生まれる。東京大学工学部卒業、東京大学大学院数理科学研究科博士課程修了。大阪大学助手、日本大学専任講師・准教授・教授などを経て現職。主な著書に『基礎数学』『理工系の数理 線形代数』『可積分系の応用数理』（以上 共著、裳華房）、『工学基礎 微分積分』『工学基礎 微分方程式 第２版』（以上 共著、サイエンス社）などがある。

山岸 弘幸
やまぎし ひろゆき
1977年 長野県に生まれる。金沢大学理学部卒業、大阪大学大学院基礎工学研究科博士後期課程修了。東京都立産業技術高等専門学校助教などを経て現職。専門分野は微分方程式論。主な著書に『原理と現象』（共著、培風館）などがある。

（情報は初版刊行時のものから一部修正しています）

この著作者の本

基礎数学

https://www.shokabo.co.jp/mybooks/ISBN978-4-7853-1597-9.htm　　1/3

微分方程式の境界値問題

解の積分核がグリーン関数

グリーン関数=再生核

ソボレフ不等式

最良定数はグリーン関数の対角成分の最大値

最良関数はグリーン関数の断面

高階楕円型偏微分方程式と
ソボレフ不等式の最良定数

$$\nabla = \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \vdots \\ \partial_{x_N} \end{pmatrix}$$

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla = \partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2 + \cdots + \partial_{x_N}^2$$

$$P(z) = \prod_{j=0}^{M-1} \left(z + a_j^2\right) = \sum_{j=0}^{M} p_{M-j} z^j$$

$$0 < a_0 < a_1 < \cdots < a_{M-1}$$

$$p_0 = 1,$$

$$p_1 = a_0^2 + a_1^2 + \cdots + a_{M-1}^2,$$

$$\cdots,$$

$$p_N = a_0^2 a_1^2 \cdots a_{M-1}^2$$

BVP $\quad 2M > N \ (N = 1, 2, 3, \cdots, 2M-1)$

$P(-\Delta)u = f(x) \quad (x \in \mathrm{R}^N)$

$\Updownarrow$

$$u(x) = \int_{\mathrm{R}^N} G(x-y) f(y) dy \quad (x \in \mathrm{R}^N)$$

$$G(x) = \frac{(-1)^{M-1} \left| \dfrac{a_j^{2i}}{G_j(x)} \right|_{0 \le i \le M-2,\ 0 \le j \le M-1}}{\left| a_j^{2i} \right|_{0 \le i, j \le M-1}}$$

$$G_j(x) = \int_0^\infty e^{-a_j^2 t} H(x,t) dt \qquad (0 \le j \le M-1,\ x \in \mathrm{R}^N)$$

$$H(x,t) = \left(\frac{1}{4\pi t}\right)^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} \qquad (x \in \mathrm{R}^N,\ 0 < t < \infty)$$

$$H = W^M(\mathrm{R}^N)$$

$$(u, v)_H =$$

$$\int_{\mathrm{R}^N} \left[\sum_{j=0}^{\lfloor \frac{M}{2} \rfloor} p_{M-2j} \left(\Delta^j u(x)\right) \overline{\left(\Delta^j v(x)\right)} + \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{M-1}{2} \rfloor} p_{M-2j-1} \left(\nabla \Delta^j u(x)\right) \cdot \overline{\left(\nabla \Delta^j v(x)\right)} \right] dx$$

$$\|u\|_H^2 = (u, u)_H$$

$$u(y) = (u(\cdot), G(\cdot - y))_H$$

$$\left(\sup_{y\in\mathbf{R}^N}|u(y)|\right)^2 \le C\|u\|_H^2 \equiv$$

$$C\int_{\mathbf{R}^N}\left[\sum_{j=0}^{\lfloor\frac{M}{2}\rfloor} p_{M-2j}\left|\Delta^j u(x)\right|^2 + \sum_{j=0}^{\lfloor\frac{M-1}{2}\rfloor} p_{M-2j-1}\left|\nabla\Delta^j u(x)\right|^2\right]dx$$

$$C_0 = \max_{y\in\mathbf{R}^N} G(y-y) = G(0)$$

$$u(x) = G(x-y_0)$$

$N = 2n+1 \quad (n = 0,1,2,\cdots,M-1) \quad \Rightarrow$

$G(0) =$

$$\frac{(-1)^{M-1+n}\Gamma(1/2)}{2(4\pi)^n\Gamma(n+1/2)}\left|\frac{a_j^{2i}}{a_j^{2n-1}}\right|_{0\le i\le M-2,\,0\le j\le M-1}\Big/\left|a_j^{2i}\right|_{0\le i,j\le M-1}$$

$N = 2n+2 \quad (n = 0,1,2,\cdots,M-2) \quad \Rightarrow$

$G(0) =$

$$\frac{(-1)^{M+n}}{(4\pi)^{n+1}n!}\left|\frac{a_j^{2i}}{a_j^{2n}\log(a_j^2)}\right|_{0\le i\le M-2,\,0\le j\le M-1}\Big/\left|a_j^{2i}\right|_{0\le i,j\le M-1}$$

BVP $\quad M = 1,2,3,\cdots, \quad N = 1 \quad D = d/dx$

$$\left(-D^2+a_0^2\right)\cdots\left(-D^2+a_{M-1}^2\right)u = f(x) \quad (x\in\mathbf{R})$$

$\Updownarrow$

$$u(x) = \int_{\mathbf{R}} G(x-y)f(y)dy \quad (x\in\mathbf{R})$$

$$G(x) = \frac{(-1)^{M-1}\left|\dfrac{a_j^{2i}}{G_j(x)}\right|_{0\le i\le M-2,\ 0\le j\le M-1}}{\left|a_j^{2i}\right|_{0\le i,j\le M-1}}$$

$$G_j(x) = \frac{1}{2a_j}e^{-a_j|x|} \qquad (0\le j\le M-1,\ x\in\mathbf{R})$$

$$\left(\sup_{y\in\mathrm{R}}|u(y)|\right)^2 \le C\|u\|_H^2 \equiv C\int_{\mathrm{R}}\sum_{j=0}^{M} p_{M-j}\left|u^{(j)}(x)\right|^2 dx$$

$$(u \in H = W^M(\mathrm{R}))$$

$$C_0 = G(0) =$$

$$\frac{(-1)^{M-1}}{2a_0\cdots a_{M-1}}\cdot\frac{\left|\dfrac{a_j^{2i+1}}{1}\right|_{0\le i\le M-2,\,0\le j\le M-1}}{\left|a_j^{2i}\right|_{0\le i,j\le M-1}}$$

$$u(x) = G(x-y_0)$$

BVP $\quad M=2, \quad N=2,3$

$$\left(\Delta^2 - \left(a_0^2+a_1^2\right)\Delta + a_0^2a_1^2\right)u = f(x) \quad (x\in\mathrm{R}^N)$$

$$\Updownarrow$$

$$u(x) = \int_{\mathrm{R}^N} G(x-y)f(y)dy \quad (x\in\mathrm{R}^N)$$

$$G(x) = -\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ G_0(x) & G_1(x)\end{vmatrix} \Big/ \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ a_0^2 & a_1^2\end{vmatrix}$$

$$G_j(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\pi}K_0(a_j|x|) & (N=2) \\ \dfrac{1}{4\pi|x|}e^{-a_j|x|} & (N=3)\end{cases} \quad (j=0,1)$$

$$\left(\sup_{y\in\mathrm{R}}|u(y)|\right)^2 \le C\|u\|_H^2 \equiv$$

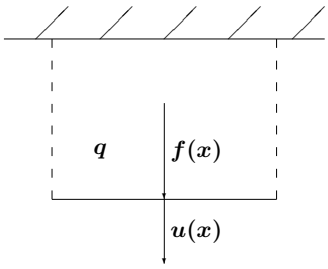
$$C\int_{\mathrm{R}^N}\left[|\Delta u(x)|^2 + (a_0^2+a_1^2)\,|\nabla u(x)|^2 + a_0^2a_1^2\,|u(x)|^2\right]dx$$

$$(u\in H = W^2(\mathrm{R}^N))$$

$$C_0 = G(0) = \begin{cases} \dfrac{1}{4\pi}\dfrac{\log(a_1^2)-\log(a_0^2)}{a_1^2-a_0^2} & (N=2) \\ \dfrac{1}{4\pi}\dfrac{1}{a_0+a_1} & (N=3)\end{cases}$$

$$u(x) = G(x-y_0)$$

糸のたわみ問題と
ソボレフ不等式の最良定数



$f(x)$	:	荷重密度
$u(x)$	:	糸のたわみ
$q = a^2$	:	バネ定数

$0 < a < \infty$

IBVP

$$\begin{cases} \left(\partial_t^2 - \partial_x^2 + a^2\right) u = f(x,t) & (x \in \Omega, \quad 0 < t < \infty) \\ \mathrm{IC}, \quad \mathrm{BC}(\Omega) \end{cases}$$

$t \to +\infty$

BVP

$$\begin{cases} -u'' + a^2 u = f(x) & (x \in \Omega) \\ \mathrm{BC}(\Omega) \end{cases}$$

$\mathrm{BVP}(\mathrm{P}; a)$

$$\begin{cases} -u'' + a^2 u = f(x) & (0 < x < L) \\ u^{(i)}(L) - u^{(i)}(0) = 0 & (i = 0, 1) \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$u(x) = \int_0^L G(\mathrm{P}; a; x, y)\, f(y)\, dy$$

$$G(\mathrm{P}; a; x, y) = \frac{\mathrm{ch}(a(|x-y| - L/2))}{2a\,\mathrm{sh}(aL/2)}$$

$\mathrm{BVP}(m, n; a)$

$$\begin{cases} -u'' + a^2 u = f(x) & (0 < x < L) \\ u^{(m)}(0) = u^{(n)}(0) = 0 & (m, n = 0, 1) \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$u(x) = \int_0^L G(m, n; a; x, y)\, f(y)\, dy$$

$$G(m, n; a; x, y) = \frac{K_m(x \wedge y)\, K_n(L - x \vee y)}{K_{m+n}(L)}$$

$$K_0(x) = a^{-1}\mathrm{sh}(ax), \quad K_1(x) = \mathrm{ch}(ax), \quad K_2(x) = a\mathrm{sh}(ax)$$

$$H = \left\{ u \,\middle|\, u, u' \in L^2(0, L), \begin{cases} u(L) - u(0) = 0 & (\mathrm{P}) \\ u(0) = u(L) = 0 & (m, n) = (0, 0) \\ u(0) = 0 & (m, n) = (0, 1) \\ u(L) = 0 & (m, n) = (1, 0) \\ \text{なし} & (m, n) = (1, 1) \end{cases} \right\}$$

$$(u, v)_H = \int_\Omega \Big[u'(x)\overline{v}'(x) + a^2 u(x)\overline{v}(x) \Big] dx$$

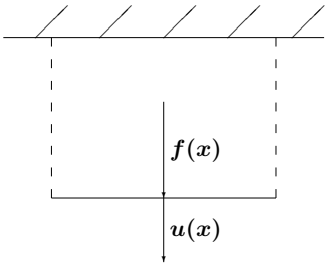
$$u(y) = (u(\cdot), G(\cdot, y))_H =$$
$$\int_\Omega \Big[u'(x)\partial_x G(x, y) + a^2 u(x) G(x, y) \Big] dx$$

$$\left(\sup_{0\le y\le L}|u(y)|\right)^2 \le C\,\|u\|_H^2 \equiv C\int_0^L \left[\,|u'(x)|^2 + a^2\,|u(x)|^2\right]dx$$

$$C_0 = \sup_{0\le y\le L} G(\mathrm{X};a;y,y) = G(\mathrm{X};a;y_0,y_0) =$$

$$\begin{cases} G(\mathrm{P};a;y_0,y_0) & = \dfrac{1}{2a\,\mathrm{th}(aL/2)} \\ G(0,0;a;L/2,L/2) & = \dfrac{\mathrm{th}(aL/2)}{2a} \\ G(0,1;a;L,L) = G(1,0;a;0,0) & = \dfrac{\mathrm{th}(aL)}{a} \\ G(1,1;a;0,0) = G(1,1;a;L,L) & = \dfrac{1}{a\,\mathrm{th}(aL)} \end{cases}$$

$$u(x) = G(\mathrm{X};a;x,y_0) \qquad (0 < x < L)$$



$f(x)$: 荷重密度

$u(x)$: 糸のたわみ

BVP(P;0)

$$\begin{cases} -u'' = f(x) & (0 < x < L) \\ u^{(i)}(L) - u^{(i)}(0) = 0 & (i = 0,1) \\ f(x)\text{と}u(x)\text{は}\varphi_0(x) = 1/\sqrt{L}\text{と直交} \end{cases}$$

$\Updownarrow$

$$u(x) = \int_0^L G(\mathrm{P};0;x,y)\,f(y)\,dy$$

$$G(\mathrm{P};0;x,y) =$$

$$\frac{1}{2L}|x-y|^2 - \frac{1}{2}|x-y| + \frac{1}{12}L = L\,b_2\left(\frac{|x-y|}{L}\right)$$

$$\mathrm{BVP}(m,n;0)$$

$$\begin{cases} -u'' = f(x) & (0<x<L) \\ u^{(m)}(0) = u^{(n)}(L) = 0 & (m,n=0,1) \\ (1,1):\ f(x)\text{と}u(x)\text{は}\varphi_0(x)=1/\sqrt{L}\text{と直交} \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$u(x) = \int_0^L G(m,n;0;x,y)\,f(y)\,dy \quad (0<x<L)$$

$$G(0,0;0;x,y) = \frac{1}{L}(x\wedge y)\,(L-x\vee y)$$

$$G(0,1;0;x,y) = x\wedge y$$

$$G(1,0;0;x,y) = L-x\vee y$$

$$G(1,1;0;x,y) =$$

$$-\frac{1}{2}|x-y| + \frac{1}{4L}\Big[x^2+(L-x)^2+y^2+(L-y)^2\Big] - \frac{L}{6}$$

$$H = \Big\{u\Big|u'\in L^2(0,L),$$

$$\left.\begin{cases} u(L)-u(0)=0, \quad \displaystyle\int_0^L u(x)\varphi(x)dx = 0 & (\mathrm{P}) \\ u(0)=u(L)=0 & (0,0) \\ u(0)=0 & (0,1) \\ u(L)=0 & (1,0) \\ \displaystyle\int_0^L u(x)\varphi(x)dx = 0 & (1,1) \end{cases}\right\}\Big\}$$

$$(u,v)_A = \int_0^L u'(x)\overline{v}'(x)dx, \quad \|u\|_A^2 = (u,u)_A$$

$$u(y) = (u(\cdot),G(\cdot,y))_A = \int_0^L u'(x)\partial_x G(x,y)dx$$

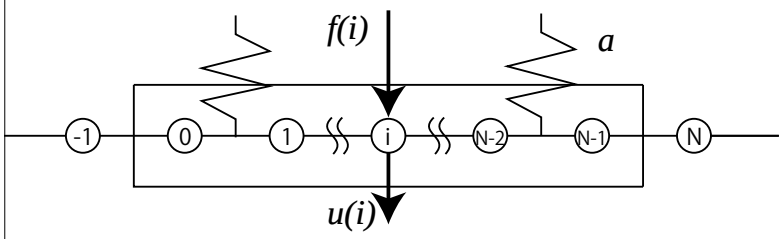
$$\left(\sup_{0\le y\le L}|u(y)|\right)^2 \le C\,\|u\|_A^2 \equiv C\int_0^L \left|u'(x)\right|^2 dx$$

$$C_0 = \sup_{0\le y\le L} G(\mathrm{X};0;y,y) = G(\mathrm{X};0;y_0,y_0) =$$

$$\begin{cases} G(\mathrm{P};0;y_0,y_0) & = \dfrac{L}{12} \\ G(0,0;0;L/2,L/2) & = \dfrac{L}{4} \\ G(0,1;0;L,L) = G(1,0;0;0,0) & = L \\ G(1,1;0;0,0) = G(1,1;0;L,L) & = \dfrac{L}{3} \end{cases}$$

$$u(x) = G(\mathrm{X};0;x,y_0) \qquad (x\in\Omega)$$

離散糸のたわみ問題



$$\mathrm{DBVP}(\mathrm{X};a)$$

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

$$\Updownarrow$$

$$u(i)=\sum_{j=0}^{N-1} G(\mathrm{X};a;i,j)\,f(j) \quad (0\le i\le N-1)$$

$$G(\mathrm{P};a;i,j)=\frac{U_{N-|i-j|}\left(\frac{a+2}{2}\right)+U_{|i-j|}\left(\frac{a+2}{2}\right)}{2(T_N\left(\frac{a+2}{2}\right)-1)}$$

$$G(m,n;a;i,j)=$$

$$\frac{\left(U_{i\wedge j+1}\left(\frac{a+2}{2}\right)-mU_{i\wedge j}\left(\frac{a+2}{2}\right)\right)\left(U_{N-i\vee j}\left(\frac{a+2}{2}\right)-nU_{N-1-i\vee j}\left(\frac{a+2}{2}\right)\right)}{U_{N+1}\left(\frac{a+2}{2}\right)-(m+n)U_N\left(\frac{a+2}{2}\right)+mnU_{N-1}\left(\frac{a+2}{2}\right)}$$

$\mathrm{DBVP}(\mathrm{X}; a)$

$(A + aI)u = f$

$$A(\mathrm{P}) + aI = \begin{pmatrix} 2+a & -1 & & & -1 \\ -1 & 2+a & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2+a & -1 \\ -1 & & & -1 & 2+a \end{pmatrix}_{N\times N}$$

$$A(m,n) + aI = \begin{pmatrix} 2+a-m & -1 & & & \\ -1 & 2+a & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2+a & -1 \\ & & & -1 & 2+a-n \end{pmatrix}_{N\times N}$$

$\Updownarrow$

$u = G(a)f$

$$G(a) = (A + aI)^{-1} = \Big(G(\mathrm{X}; a; i, j)\Big)_{0\le i,j\le N-1},$$

$$G(\mathrm{P}; a; i, j) = \frac{U_{N-|i-j|}\left(\frac{a+2}{2}\right) + U_{|i-j|}\left(\frac{a+2}{2}\right)}{2\left(T_N\left(\frac{a+2}{2}\right) - 1\right)}$$

$$G(m, n; a; i, j) = \frac{\left(U_{i\wedge j+1}\left(\frac{a+2}{2}\right) - mU_{i\wedge j}\left(\frac{a+2}{2}\right)\right)\left(U_{N-i\vee j}\left(\frac{a+2}{2}\right) - nU_{N-1-i\vee j}\left(\frac{a+2}{2}\right)\right)}{U_{N+1}\left(\frac{a+2}{2}\right) - (m+n)U_N\left(\frac{a+2}{2}\right) + mnU_{N-1}\left(\frac{a+2}{2}\right)}$$

$$T_N(\cos(\theta)) = \cos(N\theta), \qquad U_N(\cos(\theta)) = \frac{\sin(N\theta)}{\sin(\theta)}$$

$(u, v) = v^* u$

$\|u\|^2 = (u, u) = \sum_{i=0}^{N-1} |u(i)|^2$

$(u, v)_H = ((A + aI)u, v) = v^*(A + aI)u$

$\|u\|_H^2 = (u, u)_H =$

$$\left\{\begin{array}{ll} \sum_{i=0}^{N-2} |u(i) - u(i+1)|^2 + |u(N-1) - u(0)|^2 & (\mathrm{P}) \\ |u(0)|^2 + \sum_{i=0}^{N-2} |u(i) - u(i+1)|^2 + |u(N-1)|^2 & (0,0) \\ |u(0)|^2 + \sum_{i=0}^{N-2} |u(i) - u(i+1)|^2 & (0,1) \\ \sum_{i=0}^{N-2} |u(i) - u(i+1)|^2 + |u(N-1)|^2 & (1,0) \\ \sum_{i=0}^{N-2} |u(i) - u(i+1)|^2 & (1,1) \end{array}\right\} + a\sum_{i=0}^{N-1} |u(i)|^2$$

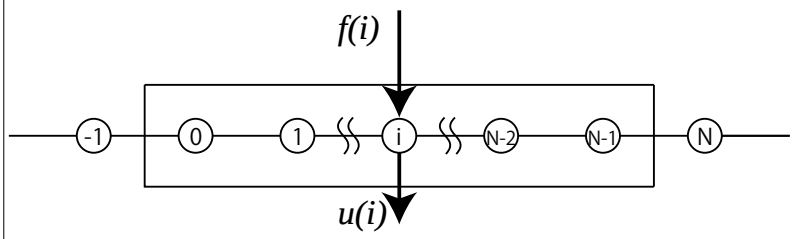
$u(j) = (u, G(a)\delta_j)_H \quad (u \in \mathrm{C}^N), \qquad \delta_j = {}^t(\cdots, \delta_{ij}, \cdots)_{0\le i\le N-1}$

$$\left(\max_{0\le j\le N-1} |\, u(j)\,|\right)^2 \le C \,\|\, u \,\|_H^2 \qquad (u \in \mathrm{C}^N)$$

$$C_0(a) = \max_{0\le j\le N-1} {}^t\delta_j G(a)\delta_j = G(\mathrm{X}; a; j_0, j_0) =$$

$$\begin{cases} G(\mathrm{P}; a; j_0, j_0) = & \dfrac{U_N\left(\frac{2+a}{2}\right)}{2\left(T_N\left(\frac{2+a}{2}\right)-1\right)} \\[2ex] G(0,0;a;j_0,j_0)\Big|_{j_0=\lfloor\frac{N-1}{2}\rfloor} = & \dfrac{U_{\lfloor\frac{N+1}{2}\rfloor}\left(\frac{2+a}{2}\right)\, U_{\lfloor\frac{N+2}{2}\rfloor}\left(\frac{2+a}{2}\right)}{U_{N+1}\left(\dfrac{2+a}{2}\right)} \\[2ex] G(0,1;a;j_0,j_0)\Big|_{j_0=N-1} = & \dfrac{U_N\left(\dfrac{2+a}{2}\right)}{U_{N+1}\left(\frac{2+a}{2}\right)-U_N\left(\frac{2+a}{2}\right)} \\[2ex] G(1,0;a;j_0,j_0)\Big|_{j_0=0} = & \dfrac{U_N\left(\frac{2+a}{2}\right)}{U_{N+1}\left(\frac{2+a}{2}\right)-U_N\left(\frac{2+a}{2}\right)} \\[2ex] G(1,1;a;j_0,j_0)\Big|_{j_0=0,N-1} = & \dfrac{U_N\left(\frac{2+a}{2}\right)-U_{N-1}\left(\frac{2+a}{2}\right)}{U_{N+1}\left(\frac{2+a}{2}\right)-2U_N\left(\frac{2+a}{2}\right)+U_{N-1}\left(\frac{2+a}{2}\right)} \end{cases}$$

$$u = G(a)\delta_{j_0} = {}^t(\qquad G(\mathrm{X}; a; i, j_0) \qquad)_{0\le i\le N-1}$$



DBVP(X; 0)

$$\begin{cases} -u(i-1)+2u(i)-u(i+1) = f(i) \quad (0 \le i \le N-1) \\ \begin{cases} u(-1)=u(N-1), & u(0)=u(N) & (\mathrm{X})=(\mathrm{P}) \\ u(-1)=0, & u(N)=0 & (\mathrm{X})=(0,0) \\ u(-1)=0, & u(N-1)-u(N)=0 & (\mathrm{X})=(0,1) \\ u(-1)-u(0)=0, & u(N)=0 & (\mathrm{X})=(1,0) \\ u(-1)-u(0)=0, & u(N-1)-u(N)=0 & (\mathrm{X})=(1,1) \end{cases} \\ (\mathrm{P})\text{と}(1,1)\text{：}u\text{と}f\text{は}\varphi_0=(1/\sqrt{N})^t(1,\cdots,1)\in\mathrm{C}^N\text{と直交} \end{cases}$$

$\Updownarrow$

$$u(i) = \begin{cases} \displaystyle\sum_{j=0}^{N-1} G(\mathrm{X}; 0; i, j)\, f(j) & (\mathrm{X}) = (0,0), (0,1), (1,0) \\ \displaystyle\sum_{j=0}^{N-1} G_*(\mathrm{X}; i, j)\, f(j) & (\mathrm{X}) = (\mathrm{P}), (1,1) \end{cases}$$

$$G(m,n;0;i,j) = \frac{(i\wedge j+1-m(i\wedge j))\,(N-i\vee j-n(N-1-i\vee j))}{N+1-(m+n)N+mn(N-1)}$$

$$G_*(\mathrm{P}; i, j) = b_2(N; |i-j|), \quad b_2(N; i) = \frac{1}{2N}i^2 - \frac{1}{2}i + \frac{N^2-1}{12N}$$

$$G_*(1,1;i,j) = b_2(2N; |i-j|) + b_2(2N; 1+i+j)$$

$\mathrm{DBVP(X;0)}$

$$\begin{cases} \boldsymbol{Au = f} \\ \mathrm{(P)}\text{と}(1,1)\text{：}\boldsymbol{u}\text{と}\boldsymbol{f}\text{は}\varphi_0 = (1/\sqrt{N})^t(1,\cdots,1) \in \mathrm{C}^N \text{と直交} \end{cases}$$

$$\boldsymbol{A}(\mathrm{P}) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & -1 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ -1 & & & -1 & 2 \end{pmatrix}_{N\times N}$$

$$\boldsymbol{A}(m,n) = \begin{pmatrix} 2-m & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2-n \end{pmatrix}_{N\times N}$$

$$\Updownarrow$$

$$\boldsymbol{u} = \begin{cases} \boldsymbol{G}(0)\boldsymbol{f} & (\mathrm{X}) = (0,0),(0,1),(1,0) \\ \boldsymbol{G}_*\boldsymbol{f} & (\mathrm{X}) = (\mathrm{P}),(1,1) \end{cases}$$

$$\boldsymbol{G}(0) = \boldsymbol{A}^{-1} = \Big(\boldsymbol{G}(\mathrm{X};0;i,j)\Big)_{0\le i,j\le N-1},$$

$$\boldsymbol{G}(m,n;0;i,j) =$$

$$\frac{(i\wedge j + 1 - m(i\wedge j))\,(N - i\vee j - n(N-1-i\vee j))}{N+1-(m+n)N+mn(N-1)}$$

$$\boldsymbol{G}_* = \lim_{a\to 0}\Big(\boldsymbol{G}(a) - a^{-1}\boldsymbol{E}_0\Big) = \Big(\boldsymbol{G}_*(\mathrm{X};i,j)\Big)_{0\le i,j\le N-1}$$

$$\boldsymbol{E}_0 = {}^t\varphi_0\varphi_0$$

$$\boldsymbol{G}_*(\mathrm{P};i,j) = \boldsymbol{b}_2(N;|i-j|), \quad \boldsymbol{b}_2(N;i) = \frac{1}{2N}i^2 - \frac{1}{2}i + \frac{N^2-1}{12N}$$

$$\boldsymbol{G}_*(1,1;i,j) = \boldsymbol{b}_2(2N;|i-j|) + \boldsymbol{b}_2(2N;1+i+j)$$

$$(\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})_{\boldsymbol{A}} = (\boldsymbol{Au},\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{v}^*\boldsymbol{Au}$$

$$\|\boldsymbol{u}\|_{\boldsymbol{A}}^2 = (\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})_{\boldsymbol{A}} =$$

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{i=0}^{N-2}|\boldsymbol{u}(i)-\boldsymbol{u}(i+1)|^2 + |\boldsymbol{u}(N-1)-\boldsymbol{u}(0)|^2 & (\mathrm{P}) \\ \displaystyle|\boldsymbol{u}(0)|^2 + \sum_{i=0}^{N-2}|\boldsymbol{u}(i)-\boldsymbol{u}(i+1)|^2 + |\boldsymbol{u}(N-1)|^2 & (0,0) \\ \displaystyle|\boldsymbol{u}(0)|^2 + \sum_{i=0}^{N-2}|\boldsymbol{u}(i)-\boldsymbol{u}(i+1)|^2 & (0,1) \\ \displaystyle\sum_{i=0}^{N-2}|\boldsymbol{u}(i)-\boldsymbol{u}(i+1)|^2 + |\boldsymbol{u}(N-1)|^2 & (1,0) \\ \displaystyle\sum_{i=0}^{N-2}|\boldsymbol{u}(i)-\boldsymbol{u}(i+1)|^2 & (1,1) \end{cases}$$

$$\boldsymbol{u}(j) = \begin{cases} (\boldsymbol{u},\boldsymbol{G}(0)\boldsymbol{\delta}_j)_{\boldsymbol{A}} & (\boldsymbol{u}\in\mathrm{C}^N) & (0,0),(0,1),(1,0) \\ (\boldsymbol{u},\boldsymbol{G}_*\boldsymbol{\delta}_j)_{\boldsymbol{A}} & (\boldsymbol{u}\in\mathrm{C}_0^N) & (\mathrm{P}),(1,1) \end{cases}$$

$$\mathrm{C}_0^N = \mathrm{C}^N \cap \{{}^t\varphi_0\boldsymbol{u} = 0\}$$

$$\left(\max_{0\le j\le N-1} |\,u(j)\,|\right)^2 \le C\,\|\,u\,\|_A^2 \qquad \left\{\begin{array}{ll} (u\in \mathrm{C}^N) & (0,0),(0,1),(1,0) \\ (u\in \mathrm{C}_0^N) & (\mathrm{P}),(1,1) \end{array}\right\}$$

$$C_0 = \left\{\begin{array}{ll} \max_{0\le j\le N-1} {}^t\boldsymbol{\delta}_j G(0)\boldsymbol{\delta}_j & (0,0),(0,1),(1,0) \\ \max_{0\le j\le N-1} {}^t\boldsymbol{\delta}_j G_*\boldsymbol{\delta}_j & (\mathrm{P}),(1,1) \end{array}\right\} =$$

$$\left\{\begin{array}{ll} G_*(\mathrm{P};j_0,j_0) = & \dfrac{N^2-1}{12N} \\ G(0,0;0;j_0,j_0)\Big|_{j_0=\lfloor\frac{N-1}{2}\rfloor} = & \dfrac{1}{N+1}\left\lfloor\dfrac{N+1}{2}\right\rfloor\left\lfloor\dfrac{N+2}{2}\right\rfloor \\ G(0,1;0;j_0,j_0)\Big|_{j_0=N-1} = & N \\ G(1,0;0;j_0,j_0)\Big|_{j_0=0} = & N \\ G_*(1,1;j_0,j_0)\Big|_{j_0=0,N-1} = & \dfrac{1}{6N}(N-1)(2N-1) \end{array}\right.$$

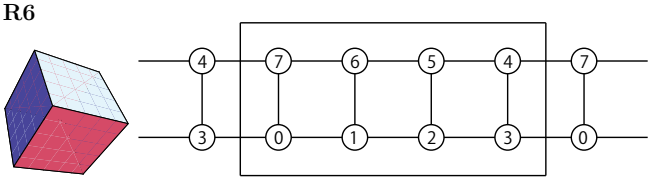
$$u = \left\{\begin{array}{lll} G(0)\boldsymbol{\delta}_{j_0} = {}^t(& G(\mathrm{X};0;i,j_0) &)_{0\le i\le N-1} \quad (0,0),(0,1),(1,0) \\ G_*\boldsymbol{\delta}_{j_0} = {}^t(& G_*(\mathrm{X};i,j_0) &)_{0\le i\le N-1} \quad (\mathrm{P}),(1,1) \end{array}\right.$$

正多面体と
離散ソボレフ不等式の最良定数

多面体	記号	面 F	頂点 N	辺 E	炭素
正4面体	R4	4	4	6	
正6面体	R6	6	8	12	
正8面体	R8	8	6	12	
正12面体	R12	12	20	30	C_{20}
正20面体	R20	20	12	30	
切頂正4面体	T4	8	12	18	
切頂正6面体	T6	14	24	36	
切頂正8面体	T8	14	24	36	
切頂正12面体	T12	32	60	90	
切頂正20面体	T20	32	60	90	C_{60}

$$F + N = E + 2$$

R6



$$e = \{(0,1),\ (0,3),\ (0,7),\ (1,2),\ (1,6),\ (2,3),$$
$$(2,5),\ (3,4),\ (4,5),\ (4,7),\ (5,6),\ (6,7)\}$$

R6

$$Bu = \begin{pmatrix} u(0)-u(1) \\ u(0)-u(3) \\ u(0)-u(7) \\ u(1)-u(2) \\ u(1)-u(6) \\ u(2)-u(3) \\ u(2)-u(5) \\ u(3)-u(4) \\ u(4)-u(5) \\ u(4)-u(7) \\ u(5)-u(6) \\ u(6)-u(7) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(0) \\ u(1) \\ u(2) \\ u(3) \\ u(4) \\ u(5) \\ u(6) \\ u(7) \end{pmatrix}$$

$$\|Bu\|^2 = (Bu)^*(Bu) = u^*B^*Bu = u^*Au = \|u\|_A^2 =$$
$$|u(0)-u(1)|^2 + |u(0)-u(3)|^2 + |u(0)-u(7)|^2 + |u(1)-u(2)|^2 +$$
$$|u(1)-u(6)|^2 + |u(2)-u(3)|^2 + |u(2)-u(5)|^2 + |u(3)-u(4)|^2 +$$
$$|u(4)-u(5)|^2 + |u(4)-u(7)|^2 + |u(5)-u(6)|^2 + |u(6)-u(7)|^2$$

R6

$$A = B^*B = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 3 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} & a(i,j) & \end{pmatrix}_{0 \le i,j \le N-1},$$

$$a(i,j) = \begin{cases} d & (i = j) \\ -1 & (i,j),(j,i) \in e \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

$$d = \begin{cases} 3 & (\mathrm{R4}, \mathrm{R6}, \mathrm{R12}, \mathrm{T4}, \mathrm{T6}, \mathrm{T8}, \mathrm{T12}, \mathrm{T20}) \\ 4 & (\mathrm{R8}) \\ 5 & (\mathrm{R20}) \end{cases}$$

DEVP

$$A\varphi_k = \lambda_k \varphi_k \qquad (0 \le k \le N-1)$$

$$0 = \lambda_0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_{N-1}$$

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} {}^t(1, \cdots, 1) \in \mathrm{C}^N$$

DBVP

$$\begin{cases} Au = f \\ {}^t\varphi_0 u = 0, \quad {}^t\varphi_0 f = 0 \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$u = G_* f$$

$$G_* = \lim_{a \to +0} \left(G(a) - a^{-1} E_0 \right)$$

$$G(a) = (A + aI)^{-1}, \qquad E_0 = \varphi_0 {}^t\varphi_0$$

$$\mathbf{C}_0^N = \left\{ \ u \in \mathbf{C}^N \ | \ {}^t\varphi_0 u = 0 \right\}$$

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

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

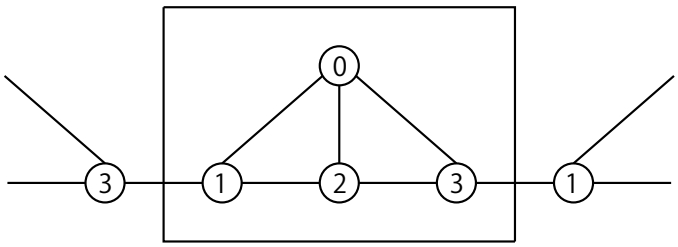
$$\delta_j = {}^t(\cdots, \delta_{ij}, \cdots)_{0 \le i \le N-1}$$

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

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

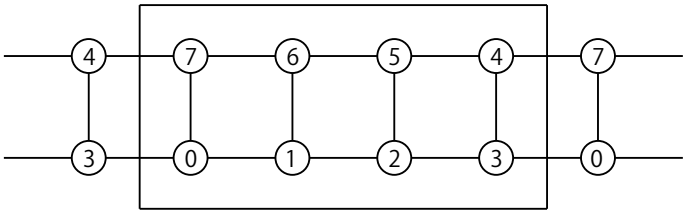
$$u = G_* \delta_{j_0} \in \mathbf{C}^N$$

正４面体



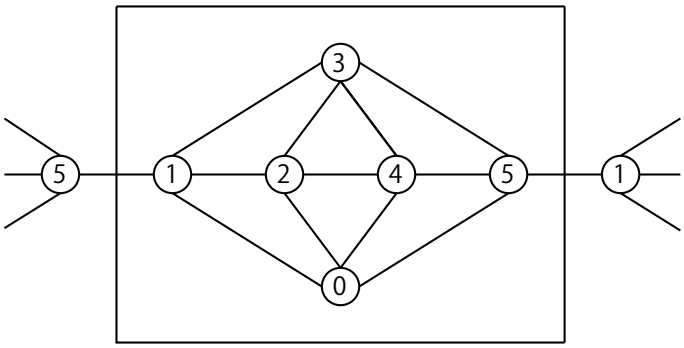
$$C_0(\mathrm{R4}) = \frac{3}{16} = 0.187 \cdots$$

正6面体



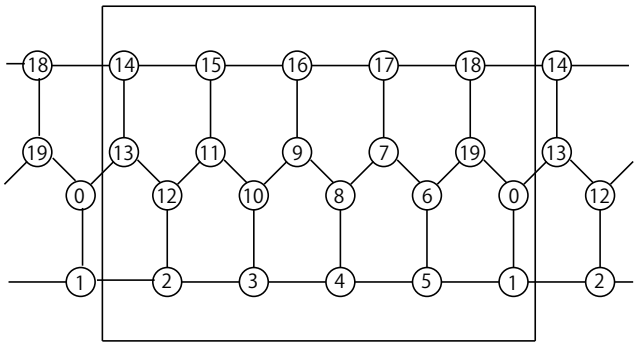
$$C_0(\mathrm{R6}) = \frac{29}{96} = 0.302\cdots$$

正8面体



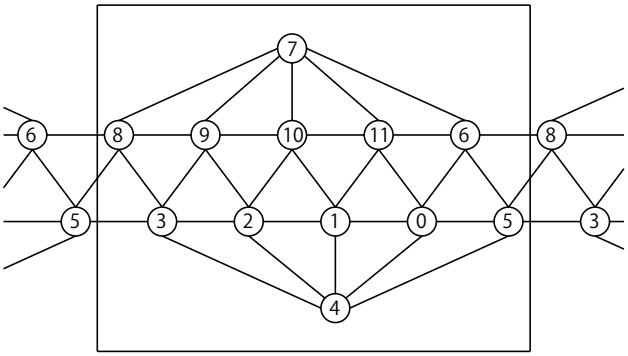
$$C_0(\mathrm{R8}) = \frac{13}{72} = 0.180\cdots$$

正12面体（C20）



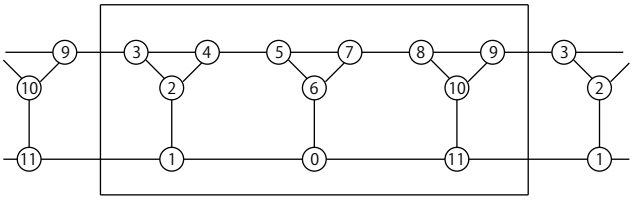
$$C_0(\mathrm{R12}) = \frac{137}{300} = 0.456\cdots$$

正20面体



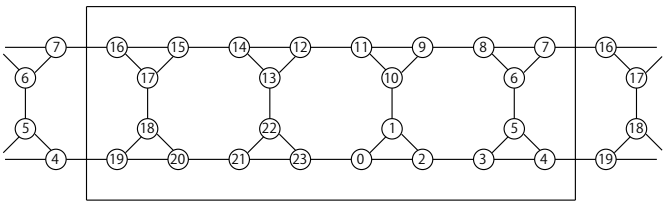
$$C_0(\mathrm{R20}) = \frac{7}{36} = 0.194\cdots$$

切頂正4面体



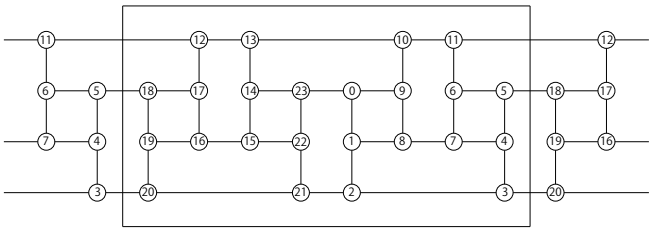
$$C_0(\mathrm{T4}) = \frac{301}{720} = 0.418\cdots$$

切頂正6面体



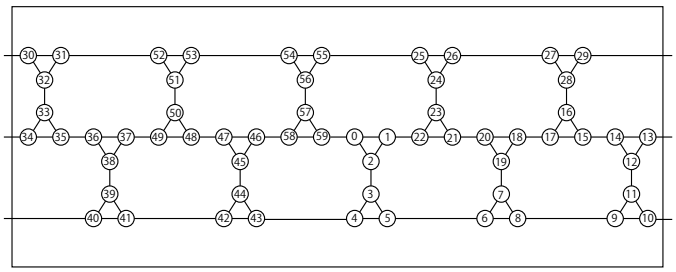
$$C_0(\mathrm{T6}) = \frac{173}{288} = 0.601\cdots$$

切頂正８面体



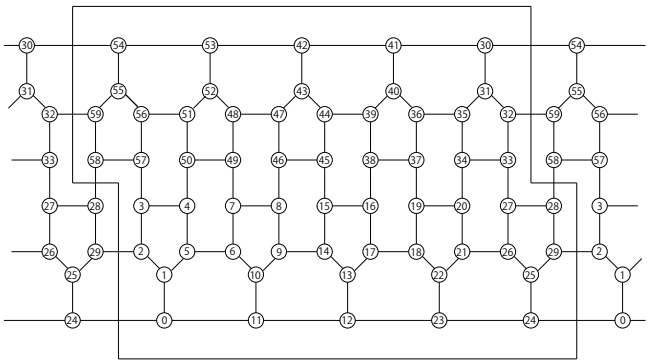
$$C_0(\mathrm{T8}) = \frac{1019}{2016} = 0.505\cdots$$

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　$F + N = E + 2$

フラーレンと
離散ソボレフ不等式の最良定数

C_nフラーレン

炭素原子n個　５員環１２個，６員環０個以上で球状に構成

C_{20}，C_{24}，C_{26}，C_{28}，C_{30}，$\cdots$，C_{60}，$\cdots$

C_{20}＝正１２面体，　C_{60}バッキーボール＝切頂正２０面体

C_nフラーレンの異性体

５員環と６員環の模様が異なる

C_{20}	1	C_{32}	6	C_{42}	45	C_{52}	437
C_{24}	1	C_{34}	6	C_{44}	89	C_{54}	580
C_{26}	1	C_{36}	15	C_{46}	116	C_{56}	924
C_{28}	2	C_{38}	17	C_{48}	199	C_{58}	1205
C_{30}	3	C_{40}	40	C_{50}	271	C_{60}	1812

古典力学モデル（炭素原子のたわみ問題）

炭素原子同士の距離が1

バネ定数1の線形バネで結ばれる

離散ソボレフ不等式の最良定数 ＝ 古典力学モデルの「かたさ」

値が小さいほど「かたい」

DBVP

$$\begin{cases} Au = f \\ {}^t\varphi_0 u = 0, \quad {}^t\varphi_0 f = 0, \quad \varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}{}^t(1, \cdots, 1) \in \mathrm{C}^N \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$u = G_* f, \quad G_* = \lim_{a \to +0} \left(G(a) - a^{-1} E_0 \right)$$

$$G(a) = (A + aI)^{-1}, \qquad E_0 = \varphi_0 {}^t\varphi_0$$

$$u = {}^t(u(0), \cdots, u(N-1)), \quad f = {}^t(f(0), \cdots, f(N-1))$$

$$A = \begin{pmatrix} a(i,j) \end{pmatrix}_{0 \le i,j \le N-1}, \quad a(i,j) = \begin{cases} 3 & (i = j) \\ -1 & (i,j), (j,i) \in e \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

$$\mathrm{C}_0^N = \left\{ \ u \in \mathrm{C}^N \ | \ {}^t\varphi_0 u = 0 \right\}$$

$$(u, v) = v^* u,$$

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

$$\|u\|_A^2 = (u, u)_A = u^* A u = \sum_{(i,j) \in e} |u(i) - u(j)|^2$$

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

$$\delta_j = {}^t(\cdots, \delta_{ij}, \cdots)_{0 \le i \le N-1}$$

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

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

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

フラーレンの安定性に関する研究成果

孤立５員環則　→　昔の手法

離散ラプラシアンの固有値による評価　→　いくかある

離散ソボレフ不等式の最良定数で評価する先行研究 → ない

離散ソボレフ不等式の最良定数で評価する利点

離散ラプラシアンの固有値を調べる必要がない

計算がMathematica で簡単に実行できる

C60フラーレン

炭素原子60個　５員環12個と６員環20個

代表はバッキーボール（切頂正20面体，孤立５員環則）

異性体は1812個

1970年 大澤映二が存在を予言

1985年 クロトー，スモーリーらが存在を確認

1996年 ノーベル化学賞

カーボンナノチューブ

グラフェンを円筒にしたもの

側面が６員環，両端はフラーレンを２つに割った半球

ねじり方の違いで導体や半導体になる
アームチェア型，ジグザグ型，カイラル型

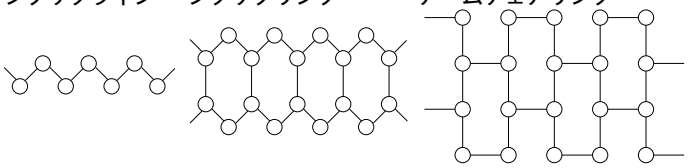
人間がつくる最も細いチューブ

1991年 飯島澄男が発見

対称フラーレン

平面グラフの中央横軸

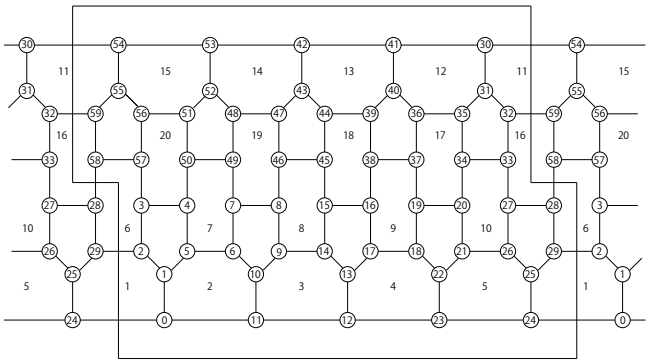
ジグザグライン　　ジグザグリング　　アームチェアリング



L　　**R**　　**A**

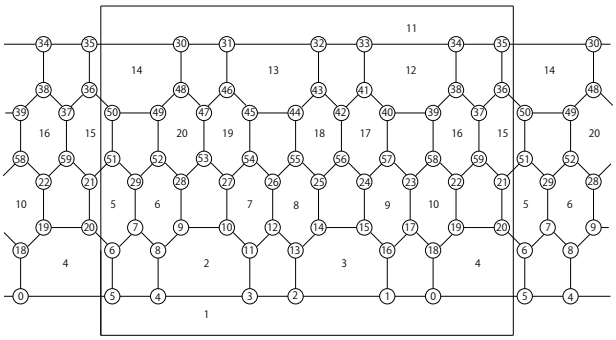
平面グラフの中央横軸上の１点について点対称

A60A1（バッキーボール）　　長さ**10**アームチェアリング**6**本
長さ**18**ジグザグライン**10**本



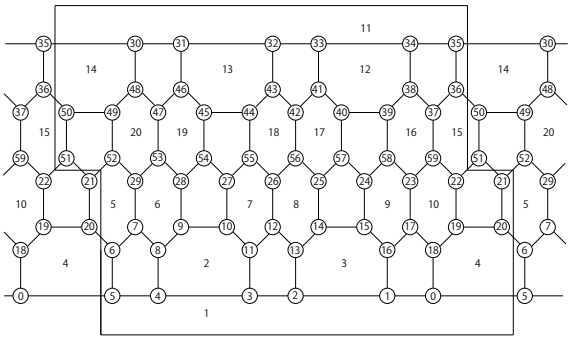
$C_0(\mathrm{A60A1}) \fallingdotseq 0.63727$　　$1/1812$

L60A1（バッキーボール）　　長さ18ジグザグライン10本
長さ10アームチェアリング6本



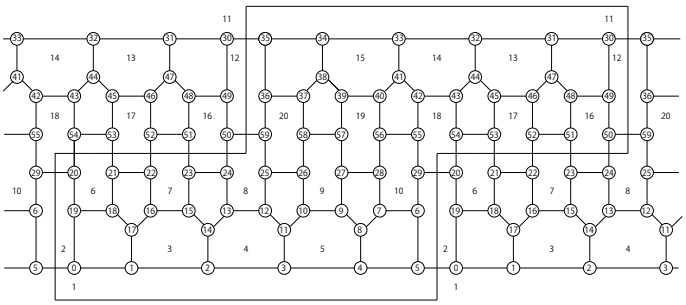
C_0(L60A1) ≒ 0.63727　　1/1812

L60A2（ツイステッドバッキーボール）　　長さ18ジグザグライン10本
長さ10アームチェアリング6本



C_0(L60A2) ≒ 0.657729　　2/1812

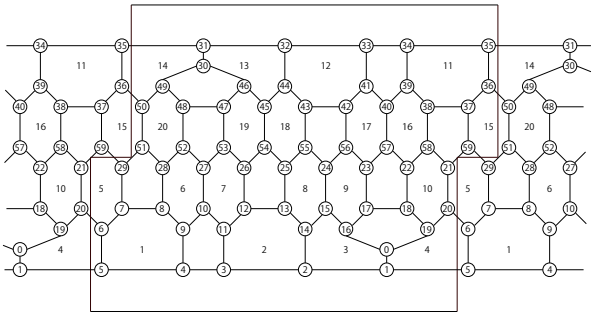
A60B1（カメボール）　　長さ10アームチェアリング2本
長さ18ジグザグライン6本
長さ20ジグザグライン2本
長さ8ジグザグリング1本



C_0(A60B1) ≒ 0.659416　　12/1812

L60B1（カメボール）

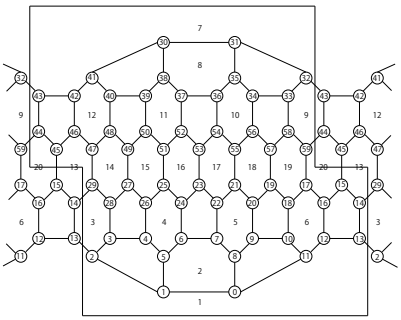
長さ18ジグザグライン6本
長さ20ジグザグライン2本
長さ8ジグザグリング1本
長さ10アームチェアリング2本



C_0(L60B1) ≒ 0.659416　　12/1812

R60A1（カメボール）

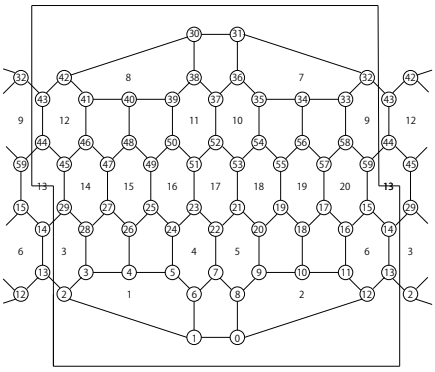
長さ8ジグザグリング1本
長さ18ジグザグライン6本
長さ20ジグザグライン2本
長さ10アームチェアリング2本



C_0(R60A1) ≒ 0.659416　　12/1812

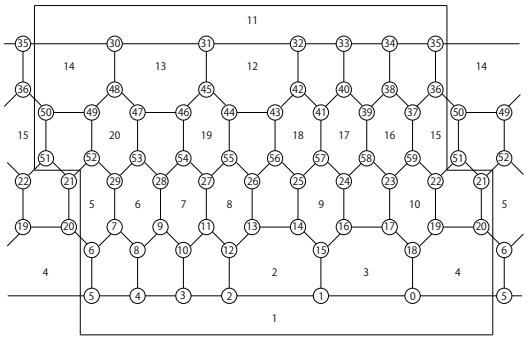
R60B1（大車輪）

平行でない長さ8ジグザグリング3本



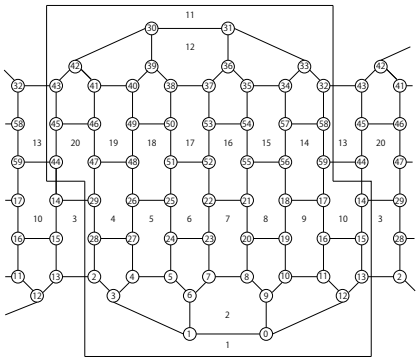
C_0(R60B1) ≒ 0.666969　　42/1812

L60ZK1（ヒフミクン）　　孤立長さ18ジグザグライン3本
孤立長さ8ジグザグリング2本



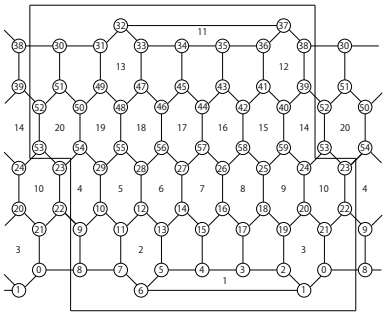
C_0(L60ZK1) ≒ 0.67196　　166/1812

AAA60A1（トリプルA）　　長さ8アームチェアリング3本
長さ20ジグザグライン1本



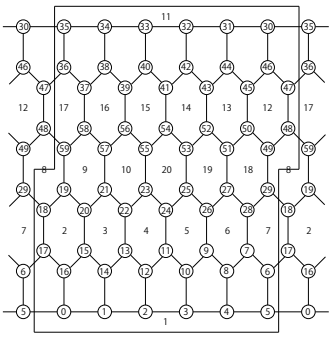
C_0(AAA60A1) ≒ 0.68392　　387/1812

RR60A1（カーボンナノチューブ）　　長さ7ジグザグリング3本



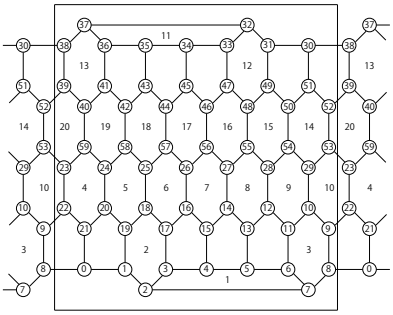
C_0(RR60A1) ≒ 0.702064　　1025/1812

RRR60A1（カーボンナノチューブ）　　長さ６ジグザグリング３本



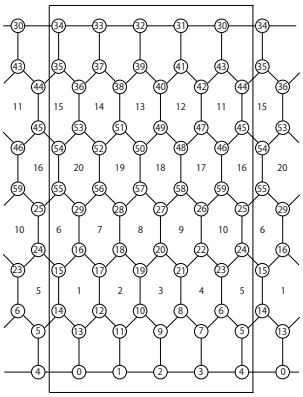
C_0(RRR60A1) ≒ 0.735247　　1690/1812

RR60B1（カーボンナノチューブ）　　長さ７ジグザグリング２本



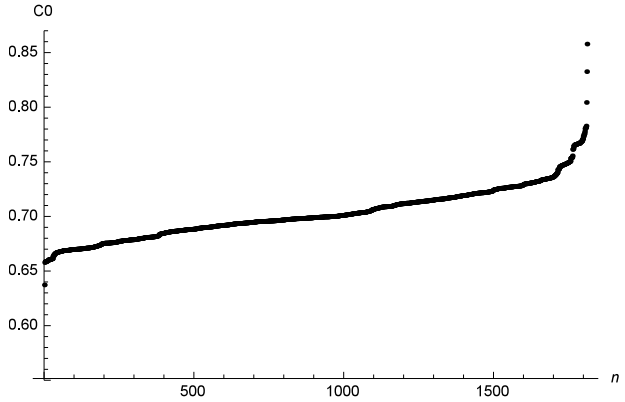
C_0(RR60B1) ≒ 0.77329　　1800/1812

RRRR60A1（カーボンナノチューブ）　　長さ５ジグザグリング４本



C_0(RRRR60A1) ≒ 0.857813　　1812/1812

n	$C_0(n)$		
1	0.6372700691	バッキーボール	
2	0.6577294008	ツイステッドバッキーボール	
⋮	⋮		
12	0.6594161135	カメボール	
⋮	⋮		
42	0.6669694342	大車輪	
⋮	⋮		
166	0.6719601465	ヒフミクン	
⋮	⋮		
387	0.6839200228	トリプルスリー	AAA60A1
⋮	⋮		
1025	0.7020639322	カーボンナノチューブ	RR60A1
⋮	⋮		
1690	0.7352465097	カーボンナノチューブ	RRR60A1
⋮	⋮		
1800	0.7732895993	カーボンナノチューブ	RR60B1
⋮	⋮		
1811	0.8325592565		
1812	0.8578134657	カーボンナノチューブ	RRRR60A1



C_{60}

On discrete constant principal curvature surfaces

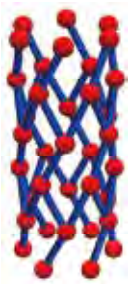
Yuta OGATA
Kyoto Sangyo University

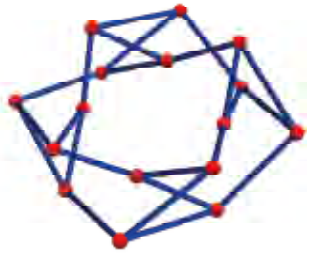
In this talk, we will study the discrete surface theory on a full 3-ary oriented tree and introduce the notion of discrete principal curvatures on them. In order to investigate the geometric meaning of discrete principal curvatures, we will also define a discrete analog of principal directions on discrete surfaces. At the end of the talk, we also show some examples of discrete constant principal curvature surfaces.

On discrete constant principal curvature surfaces

Yuta Ogata
Kyoto Sangyo University

IMI 研究集会 II, 材料科学における幾何と代数IV
(九州大学)
2023.09.05





Outline of Talk

§1. Review of (smooth) constant principal curvature surfaces in $\mathbb{R}^3$.

§2. Discrete surfaces on a full 3-ary oriented tree.

§3. Discrete principal directions.

§4. Existence of discrete surfaces with the discrete principal directions and constant bond length.

§5. Examples of discrete constant principal curvature surfaces.

References

[1] R. Garcia, J. Llibre and J. Sotomayor, *Lines of principal curvature on canal surfaces in* $\mathbf{R}^3$, An. Acad. Brasil. Ciênc., 78 (3), 405–415 (2006).

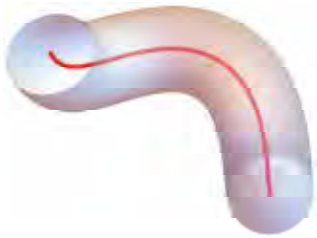
[2] Y. Kabata, S. Matsutani, Y. Noda, Y. Ogata and J. Onoe, *A novel symmetry in nanocarbons: pre-constant discrete principal curvature structure*, submitted, arXiv:2306.15839.

[3] Y. Kabata, S. Matsutani and Y. Ogata, *On discrete constant principal curvature surfaces*, submitted, arXiv:2306.15846.

[4] M. Kotani, H. Naito and T. Omori, *A discrete surface theory*, Comput. Aided Geom. Design, 58, 24–54 (2017).

§1. Review of (smooth) constant principal curvature surfaces in $\mathbb{R}^3$.

In this section, we review the classical theory of constant principal curvature (CPC) surfaces in $\mathbb{R}^3$. They are also called the *tubular surfaces, pipe surfaces* or *canal surfaces*, as introduced in [Garcia et al. (2006)], etc.



Let Σ be a domain in $\mathbb{R}^2$, and let $f : \Sigma \to \mathbb{R}^3$ be a regular surface with curvature line coordinates (u, v) as follows:

$$\langle f_u, f_v \rangle = 0, \ \nu_u = -k_1 f_u \text{ and } \nu_v = -k_2 f_v$$

for the standard Euclidean inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, the unit normal vector $\nu \in \mathbb{S}^2$, and the principal curvatures k_1, k_2. Then, we have the following classical fact.

Fact 1 (CPC surfaces)

Let $f : \Sigma \to \mathbb{R}^3$ be an umbilic-free regular surface with curvature line coordinates (u, v) has constant principal curvature $k_1 \neq 0$. Then,

$$f(u, v) = \gamma(v) - \frac{1}{k_1}\left(\cos\theta(u) b_1(v) + \sin\theta(u) b_2(v)\right),$$

where $\theta(u)$ is a function in u, $\gamma(v)$ is a regular space curve, and $b_1(v), b_2(v)$ are orthonomal basis in the normal space of $\gamma(t)$.

Example 1: We show an example of smooth CPC $k_1 \neq 0$ surfaces. By the above fact, they can converge to a space curve γ via the parallel transform $P(t, f) := f + t\nu$ for the unit normal vector $\nu \in \mathbb{S}^2$ (When $t = \frac{1}{k_1}$, $P(1/k_1, f) = \gamma$).

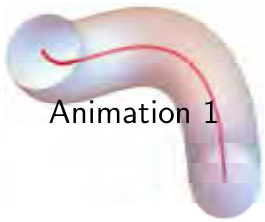


Figure: CPC surface and its parallel transformation.

§2. Discrete surfaces on a full 3-ary oriented tree.

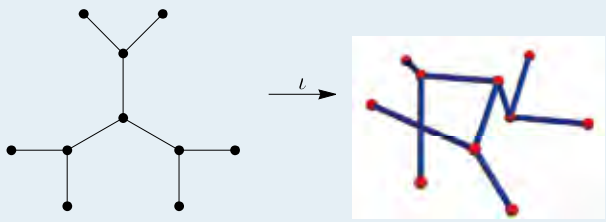
Here we consider the discrete surfaces theory.

We will define discrete surfaces using a full 3-ary (ternary) oriented tree which is defined as a rooted tree in which each node has either 0 or 2 children.

Definition ([Kabata, Matsutani, O, submitted], c.f. [Kotani, Naito, Omori(2017)])

Let $X = (V_X, E_X)$ be a full 3-ary oriented tree in $\mathbb{R}^2$; V_X is a set of vertices (root, node and leaf) and E_X is a set of oriented edges. For a root or node $x \in V_X$, x has three edges $E_x = \{e_1, e_2, e_3\} \subset E_X$.

A map $\iota : X \to \mathbb{R}^3$ is said to be a discrete surface if at least two vectors in $\{\iota(e) \mid e \in E_x\}$ are linearly independent for each $x \in V$, and $\iota(x)$ is locally oriented, that is, the order of the three edges is assumed to be assigned to each vertex of X.

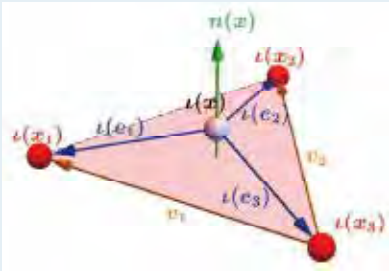


We will define the curvatures for discrete surfaces $\iota(X)$. Let $\iota : X \to \mathbb{R}^3$ be a discrete surface on a full 3-ary oriented tree X. Fix a root or node $x \in V_X$ and set x_i $(i = 1, 2, 3)$ as adjacent vertices with x. Then, the oriented edges at $\iota(x)$ are determined as $\iota(e_i) = \iota(x_i) - \iota(x)$ for $i = 1, 2, 3$. As in [KNO(2017)], we call $v_1(x) = \iota(e_1) - \iota(e_3) = \iota(x_1) - \iota(x_3)$ and $v_2(x) = \iota(e_2) - \iota(e_3) = \iota(x_2) - \iota(x_3)$ as tangent vectors.

Definition ([Kabata, Matsutani, O, submitted], c.f. [Kotani, Naito, Omori(2017)])

Let $\iota : X \to \mathbb{R}^3$ be a discrete surface on a full 3-ary oriented tree X. At the root or node $x \in V_X$, we define the unit normal vector $n(x)$ as

$$n(x) := \frac{v_1(x) \wedge v_2(x)}{||v_1(x) \wedge v_2(x)||} = \frac{\iota(e_1) \wedge \iota(e_2) + \iota(e_2) \wedge \iota(e_3) + \iota(e_3) \wedge \iota(e_1)}{||\iota(e_1) \wedge \iota(e_2) + \iota(e_2) \wedge \iota(e_3) + \iota(e_3) \wedge \iota(e_1)||}.$$



Definition (continued)

The differences of the unit normal vectors are denoted by

$$dn(x) = n(x_1) - n(x_3) \quad \text{and} \quad d'n(x) = n(x_2) - n(x_3).$$

Then we define the first fundamental form I and second fundamental form II as follows:

$$I = \begin{pmatrix} \langle v_1(x), v_1(x) \rangle & \langle v_1(x), v_2(x) \rangle \\ \langle v_2(x), v_1(x) \rangle & \langle v_2(x), v_2(x) \rangle \end{pmatrix}, \quad II = -\begin{pmatrix} \langle v_1(x), dn(x) \rangle & \langle v_1(x), d'n(x) \rangle \\ \langle v_2(x), dn(x) \rangle & \langle v_2(x), d'n(x) \rangle \end{pmatrix}.$$

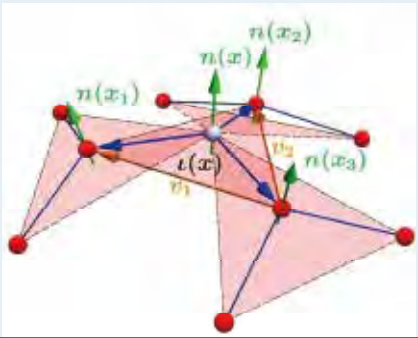
As in [KNO(2017)], *the discrete mean curvature $H(x)$ and Gaussian curvature $K(x)$ are defined as*

$$H(x) = \mathrm{tr}(I^{-1}II), \quad \text{and} \quad K(x) = \det(I^{-1}II).$$

We also define the principal curvatures $k_i(x)$ $(i = 1, 2)$ by

$$k_i(x) = \frac{H(x) \pm \sqrt{H(x)^2 - 4K(x)}}{2},$$

where the signs are defined as $+$ (resp. $-$) when $i = 1$ (resp. $i = 2$).



§3. Discrete principal directions.

Here we introduce the discrete principal directions for discrete surfaces.

Definition ([Kabata, Matsutani, O, submitted])

Let $\iota : X \to \mathbb{R}^3$ be a discrete surface on a full 3-ary oriented tree X. For a fixed point $x \in V_X$, at the root or node $\iota(x)$, we call $v_1(x)$ (resp. $v_2(x)$) as the discrete principal $k_1(x)$-direction (resp. $k_2(x)$-direction) if

$$dn(x) = -k_1(x)v_1(x) \quad (\text{resp. } d'n(x) = -k_2(x)v_2(x))$$

for the principal curvatures $k_1(x)$, $k_2(x)$, the difference of unit normal vectors $dn(x) = n(x_1) - n(x_3)$ and $d'n(x) = n(x_2) - n(x_3)$.

Using these notions, we have the following results.

Theorem 1

Let $\iota : X \to \mathbb{R}^3$ be a discrete surface on a full 3-ary oriented tree X. At any root or node $\iota(x)$, set x_i $(i = 1, 2, 3)$ as adjacent vertices with x, and assume $v_1(x)$ as the discrete principal $k_1(x)$-direction. Define $P(t, x)$ as the parallel transformation with a parameter $t \in \mathbb{R}$.

(1) *If $t = \frac{1}{k_1(x)}$ for $k_1(x) \neq 0$, two points $P\left(\frac{1}{k_1(x)}, x_1\right)$ and $P\left(\frac{1}{k_1(x)}, x_3\right)$ degenerate to a same point p. We can regard p as a center of the curvature sphere in the $k_1(x)$-direction.*

(2) *Let $d'n(x) = \beta_1(x)v_1(x) + \beta_2(x)v_2(x) + \beta_3(x)n(x)$. If $\iota(x)$ is a discrete constant principal curvature k_1 (CPC k_1) surface with $\beta_3(x) = 0$, then for any t, $P(t, x)$ also becomes a discrete CPC $\frac{k_1}{1-tk_1}$ with the discrete principal $k_1(x)$-direction v_1. Moreover, $P(t, x)$ also has its unit normal vector as $n(P(t, x)) = n(x)$.*

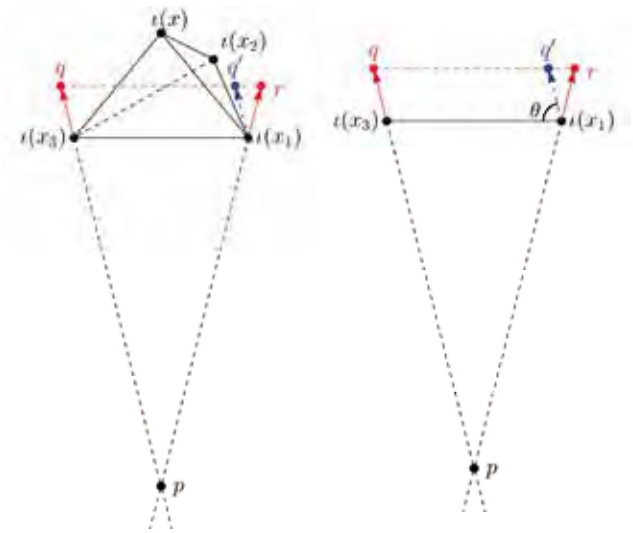


Figure: Parallel transformation of $\iota(x)$.

§4. Existence of discrete surfaces with the discrete principal directions and constant bond length.

Theorem 2

Let $r \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ be a constant, and X be a full 3-ary oriented tree. Under the given $k_1,\ k_2 : V_X \to \mathbb{R}$, there exist at most 3-parameter families of discrete surfaces $\iota(X)$ in the both discrete principal $k_i(x)$-directions and with the constant bond length r, up to the rigid motions and choices of $v_1(x),\ v_2(x)$ at every $x \in V_X$.

Proof.

We will show it as the following steps:

Step 1: Up to rigid motions, we can fix $\iota(x_0)$ and one of its adjacent vertex $\iota(x_3)$ uniquely.

Step 2: We define the unit normal vector $n(x_0)$ arbitrary, i.e. $n(x_0) = (\cos(\theta_1)\cos(\phi_1), \cos(\theta_1)\sin(\phi_1), \sin(\theta_1))$, and up to the rotation with the $\iota(x_0)\iota(x_3)$-axis, without loss of generality, we can fix $\phi_1 = 0$. Similarly, we can define $n(x_3) = (\cos(\theta_2)\cos(\phi_2), \cos(\theta_2)\sin(\phi_2), \sin(\theta_2))$. (continued.)

Theorem 3

Let $r \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ be a constant, and X be a full 3-ary oriented tree. Under the given $k_1,\ k_2 : V_X \to \mathbb{R}$, there exist at most 3-parameter families of discrete surfaces $\iota(X)$ in the both discrete principal $k_i(x)$-directions and with the constant bond length r, up to the rigid motions and choices of $v_1(x),\ v_2(x)$ at every $x \in V_X$.

Proof (continued).

Step 3: Next we can define other adjacent vertices $\iota(x_1)$ and $\iota(x_2)$ uniquely, by the following restrictions.

- on the plane with the unit normal vector $n(x_0)$
- on the sphere with the center $\iota(x_0)$ and radius r
- satisfying the equations $k_1(x_0) = \frac{2\langle v_1(x_0), n(x_3)\rangle}{||v_1(x_0)||^2}$, $k_2(x_0) = \frac{2\langle v_2(x_0), n(x_3)\rangle}{||v_2(x_0)||^2}$.

Step 4: Similarly, we can apply the same procedure of Step 3 in order to determine the adjacent vertices $\iota(x_{31})$ and $\iota(x_{32})$ of $\iota(x_3)$.
Step 5: By the property of the discrete principal directions, $n(x_{31})$ and $n(x_{32})$ are uniquely determined.
Step 6: Apply the same procedure of Step 3 again, in order to determine adjacent vertices of $\iota(x_{31})$ and $\iota(x_{32})$. □

§5. Examples of discrete constant principal curvature surfaces.

First we introduce the discrete round cylinders.

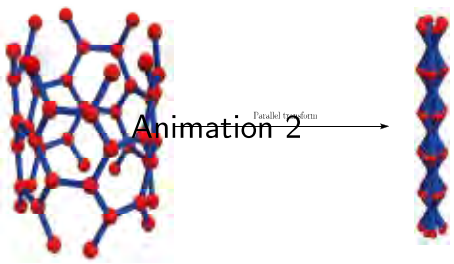


Figure: Discrete CPC cylinder (standard armchair-type carbon nanotube). It has constant bond length, but does not satisfy the condition of the $k_1(x)$-principal direction.

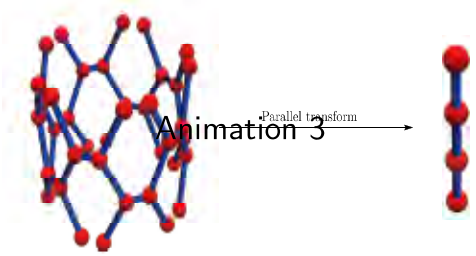


Figure: Discrete CPC cylinder in [KNO(2017)]. It has non-constant bond length and satisfies Theorem 1(2).

Q. How to construct the discrete CPC cylinder which satisfies Theorem 2?

Theorem 4

There exists a chiral-type discrete round cylinder having $k_1(x) \equiv -\frac{1}{r}$ and $k_2(x) \equiv 0$, in the both discrete principal k_i-directions and with constant bond length $d \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$.

Figure: Discrete CPC cylinder in [Kabata, Matsutani, O].

At the end of this talk, we introduce the discrete CPC torus.

Figure: Discrete CPC torus. It has non-constant bond length and satisfies Theorem 1 (2).

Thank you for listening!

Mathematical and computational science governing the functions of molecules and materials in nature

Shinichiro NAKAMURA
Kumamoto University

The author has been involved in the design of molecules and materials in the fields of industry, government, and academia. The methods are quantum chemistry, molecular dynamics, and first-principles calculations. Recently also applied is a data science (DS) approach. From that experience, I have been fascinated by photosynthesis that embodies "natural intelligence" and the splendor of pigment molecules that exist in nature. “Natural intelligence” is beyond the current artificial intelligence. Aiming at this understanding, the authors will present the results on the as yet unexplored mechanism by which photosynthesis generates oxygen from water and converts CO_2 into starch. In addition, I will report on research that attempted to design by learning from the naturally occurring pigment called porphyra-334. I would also like to touch on strategies guided by category theory.

2023Sept5

自然界にある分子と材料の振る舞いを決めている数理と計算科学

中村　振一郎

熊本大学・大学院先導機構・特任教授
「フロンティアデータサイエンス化血研寄附講座」

理化学研究所・客員主幹研究員
九州大学IMI訪問教授・応用数理学会フェロー

元三菱化学フェロー

1

結論から先に

IMI（話ができる人々）へのエール

産官学で応用数理・計算科学・データサイエンスに携わった老兵からのメッセージ

分野横断・専門を逸脱など気にせず
（その課題のイデアに向かって）
解を探す知こそ数学の
真価です。

2

目次

1　自己紹介　と　私たちの研究領域

2　研究の基本哲学　あるいは　Keynote
　～　自然知能　に　学ぶ（真似ぶ）　～
　　→　圏論へ

3　応用数理・計算科学・DS (DX)の実際
　3−1　民間企業の実例とまだ未踏の課題、リスト
　3−2　自然知能の理解を求めて
　　～　理解するとは造ることである　～
　　その1　ハスの葉の表面を造る
　　その2　藻の中にある色素分子を造る

4　結論に変えて

3

自己紹介

J .M.Lehn先生
（1987ノーベル賞）

1980　早稲田大学理工学部

1980-84 ストラスブール大学（仏）　フランス国家博士号（理学博士）

1984-86 分子科学研究所　研究員　（諸熊奎治　教授）

1986　三菱化成（現三菱ケミカル）　途中入社

2000　計算科学研究所長

2007　三菱化学フェロー

2009-13 東工大生命理工・教授

2011-22 理研・特別招聘研究員

2022~　熊本大学・特任教授

Shin　Gabin　Paul

主な公的活動：

フォトクロミック動作系の徹底解剖

（1999~2002 **ACT-JST** 代表研究者）

フォトクロミック分子を機能させる場の研究

（2004～2008　**CREST**　代表研究者）

4

理研時代の

中村特別研究室

焦点１：　基礎研究　光合成に学ぶ自然知能

ハードとソフトが融合している実体

「ものづくり」と「ことづくり」の　止揚　を目指して

－－－－－－　－－－－－－－　－－－－－－－

焦点２：　民間と共同研究

「産業界にある　“超難問”　を頂いてきました。」

エネルギー、環境、健康課題への具体的な解

特別顧問
故・牧野内　昭武　先生

主宰
中村　振一郎

全く意図せず、、、

産：三菱化学
官：分子研、理研
学：東工大教授・熊大

において計算科学を実践してきました。

<u>連携企業</u>：三菱ケミカル、トヨタ自動車株式会社、
株式会社ヤクルト、広栄化学株式会社、**トプコン、**
株式会社カーブスジャパン、株式会社村田製作所、
三菱ガス化学株式会社、日東電工株式会社
トクヤマ、**三菱重工**、東京海上、**ELECOM**、、、

5

熊大で行っている研究

1　地域にBayes統計を活かす

未病・健康のためのデータサイエンス
→　宇城市のデータ解析・継続

2　民間企業に量子科学・分子科学・数理統計を活かす

分子（含・医療医薬）と材料（含・半導体）
のデザインと最適化を目指したデータサイエンス

3　方法論的基礎　“圏論”　ふうに現世をとらえる試み

→　データ（数値）を出現させる実体

Schubert Calculus?

POIE 大学院先導機構
Priority Organization for Innovation and Excellence

大学院先導機構（機構長：学長）
拠点形成研究部門
フロンティアデータサイエンス化血研寄附講座

【教員組織の構成】

中村 振一郎 特任教授

理学博士：Strasbourg大
応用数理学会フェロー
九州大学IMI訪問教授
元三菱化学フェロー

量子化学・計算科学
データサイエンス

沈　君偉　特任准教授

博士（工学）：京都大学
分子科学・統計熱力学

原田　祐希　特任助教

博士（工学）：東京工大
データサイエンス・
機械学習

（国）理化学研究所　中村特別研究室
から3名　揃って　熊大に移籍

目次

1　自己紹介　と　私たちの研究領域

2　研究の基本哲学　あるいは　Keynote
～　自然知能　に　学ぶ（真似ぶ）　～
→　自然に圏論へ

3　応用数理・計算科学・DS (DX)の実際
3-1　民間企業の実例とまだ未踏の課題、リスト
3-2　自然知能の理解を求めて
～　理解するとは造ることである　～

その1　ハスの葉の表面を造る
その2　藻の中にある色素分子を造る

4　結論に変えて

8

自然知能

9

自然知能を真似（学）ぶ

自然知能（ヨ人工知能）
を徹底的に学ぶ

ノーベル賞の大村 智　先生が 山梨大のご講演で

**「一晩で糖をアルコールに変えられる化学者は
どこにもいないけどワイン酵母はみんなやってます」**

**No chemist can turn sugar into alcohol
overnight, while wine yeast does !**

とおっしゃってました。
山梨大　堀裕和先生
(中村の「圏論」の師匠)
のメイルから許可を
得て引用

Prof.S.Omura 2015 Nobel Laureate

10

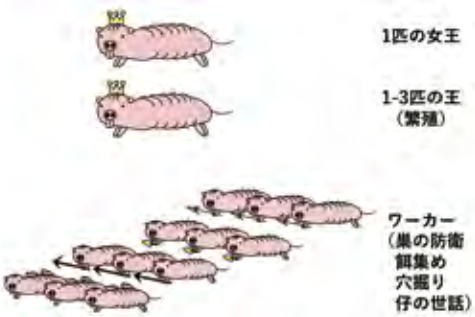
「不老長寿!？　がんにならない!？
社会性げっ歯類　ハダカデバネズミ」

三浦 恭子　教授
（熊本大学）

ハダカデバネズミ（Naked mole-rat (NMR), Heterocephalus glaber）はエチオピア
ケニア、ソマリアのサバンナの地中で暮らす齧歯類です。

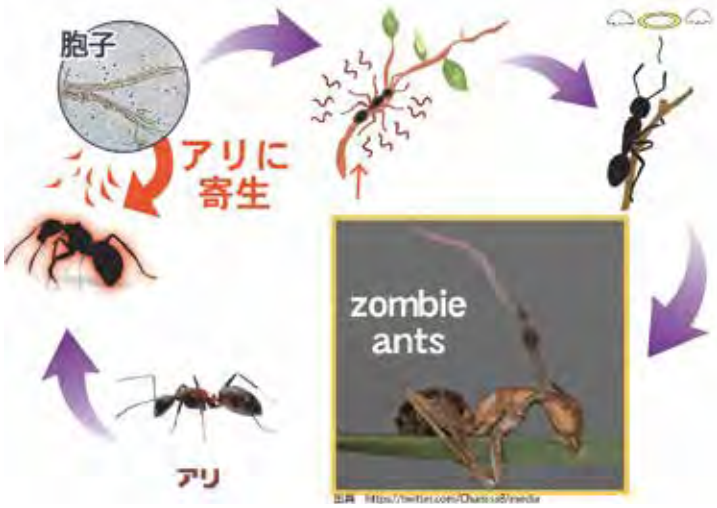
地下の低酸素環境（7-8% O2)と地上の通常酸素環境の両方に適応しています。
マウスと同等の大きさながら異例の長寿(最大寿命37年以上)であり、**自発的な腫瘍形成がほとんど認められないというがん化耐性を持っています。**また、
アルツハイマー病や代謝疾患などの加齢性疾患への抵抗性をもつことが知
られています。

ハダカデバネズミは野生では、地下のトンネルの中で、
数十～最大300頭弱もの大規模な集団でコロニーを形成し、生活しています。
自然下では、ハダカデバネズミは地下植物や植物の根茎を食べています。



https://debalab.org/

すさまじい　自然の役割分担
胞子を遠くに飛ばすために菌がやっていること



熊本市　上の裏　の和食屋さんでいただいた　アワビ

自然（知能）が
金属を用いないで
実現した

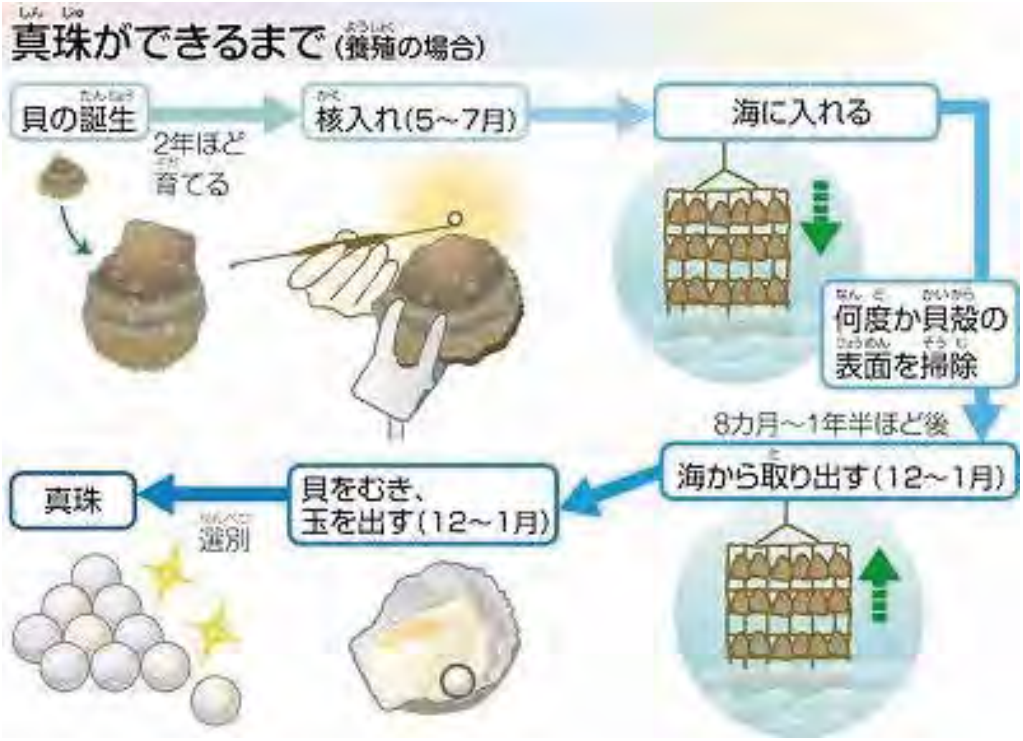
輝くタンパク質

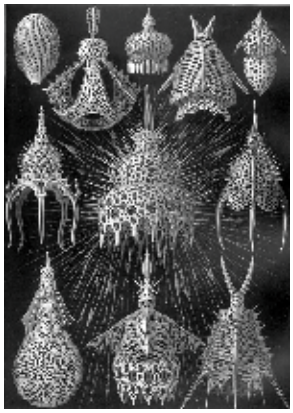
三重県伊勢志摩出身
御木本幸吉
真珠の養殖技術を確立

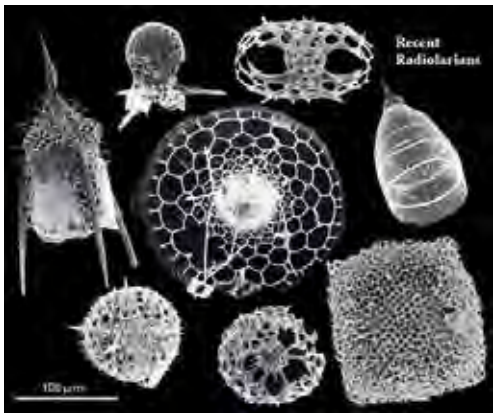
自然知能
に学（真似）ぶ
実例

7月11日は、明治26年（1893）
半円真珠の養殖に成功した日です。

真珠裁判の決着後、幸吉はアメリカへ視察に行き、実業家渋沢栄一の紹介で、世紀の発明家エジソンと面会します。エジソンは今までの幸吉の功績を称えこう言いました。
「これは養殖ではなく真の真珠だ。私の研究所でできなかったものが二つある。一つはダイヤモンド、いま一つは真珠である。あなたが動物学上からは不可能とされていた真珠を発明完成されたことは、世界の驚異である。」この言葉に幸吉は感銘を受けながらも謙虚に「あなたは巨星のような存在だが、私は多くの発明家の一人にすぎない。」と答えたのは常に少年時代から地に足を付けて努力し続けてきた幸吉らしい一面ではないでしょうか。







放散虫Radiolaria

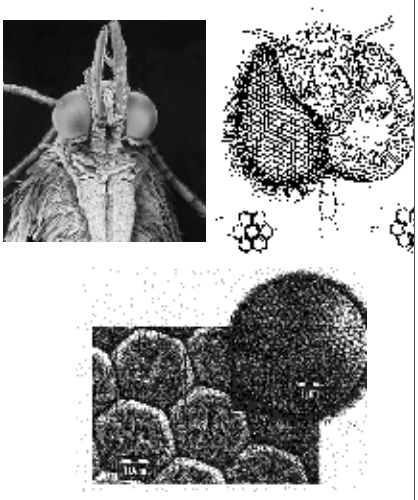
という不思議な生き物の骨
（新潟大　松岡篤先生　提供）

原生生物の一群,海のプランクトン
単細胞生物で、珪酸質などからなる骨格
を持ち、そのため微化石としても発見される。

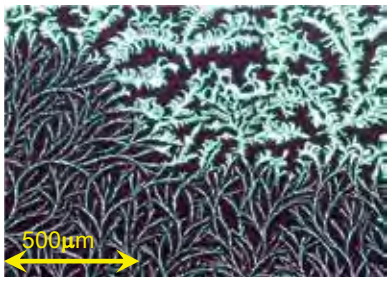
Typical Examples of Natural Intelligenece

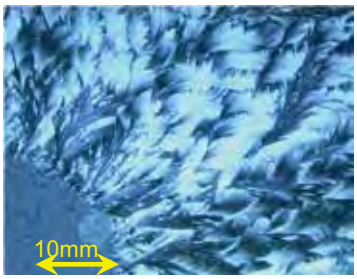
omni-existing fractal surfaces !

Lotus effect **Petal effect** **Moth eye effect**



17





アラベスク模様　　フラクタル模様

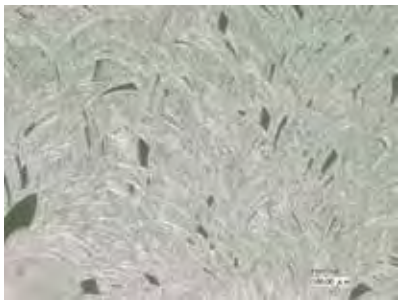
「有機分子の結晶成長（自己組織化）」 模様です。

（大阪教育大学　辻岡強先生　提供）

Fractal Shapes by Crystal-Growth of Organic Molecules

龍谷大学　内田研究室　DAEのフラクタル成長

約230 °C 2時間



(×150)

約240 °C 3時間

(×50)

拡大

約240 °C 0.5時間

(×100)

(×200)

マイカ基盤への蒸着膜の作成

数学者の先見性
畑政義の樹木集合

複素漸化式の係数(a,b,c,d)のきめ方
次第で所望のフラクタル図形が出t現

$$f_1(Z) = aZ + b\bar{Z}$$

$$f_2(Z) = c(Z-1) + d(\bar{Z}-1) + 1$$

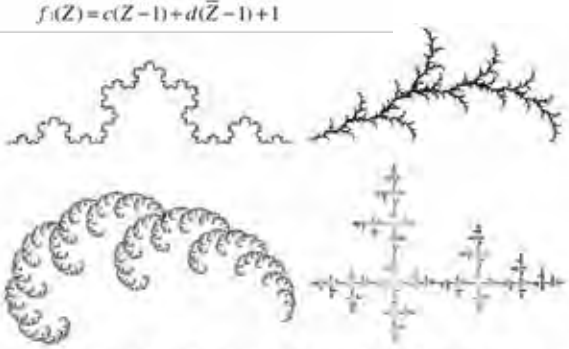


図7　畑政義の樹木集合。係数（a,b,c,d）の変化で出現する多様な形。左上・コッホ(0.0,0.5+0.28871i, 0.0, 0.5-0.28871i)、右上・樹木、(0.0, 0.4614+0.4614i, 0.622-0.196i, 0.0) 左下・蜘(0.4614+0.4614i, 0.0, 0.622-0.196i, 0.0)、右下・氷(0.7071i, 0.0, 0.5, 0.0)

数学解も
実験事実も
出揃っている、、、
化学徒は
まだ設計できない
まだ遠い、、、！

自然知能　　人工知能

Natural Intelligence
PSII RUBISCO

Artificial Intelligence

21

～私たちの研究領域～

圏論（Category Theory)

Data Science

機械学習　AI 活用技術

Bayes統計活用技術
（推測統計学・戦略的意思決定論）

計算科学
＋
第一原理計算・量子化学による材料設計技術

人が分けた専門性は　産業界（「商品」）には　極めて　“いびつ”　よって圏論へ

22

圏論のflavour（イデア）

圏論の師匠
堀裕和先生（山梨大）
の講義メモから

ある行動を起こすときの都合を数学でコホモロジーという.

↓

都合が行動や機能を決める.
行動や機能は数学では代数に相当する.
コホモロジーは代数構造を決める.

↓

「ものごとが起きる」（化学反応などなど森羅万象） とは
ある主体が起こそうとした行為を環境が許容することである.

↓

コホモロジーは環境系が主体（世界の部分）に何を許すかの表現で,
環境とは世界から主体を除く全てを指す.

数学の先生方、サロン風議論に
気軽に熊大においでください。

若山先生

24

目次

1　自己紹介　と　私たちの研究領域

2　研究の基本哲学　あるいは　Keynote

～　自然知能　に　学ぶ（真似ぶ）　～

→　自然に圏論へ

3　応用数理・計算科学・DS (DX)の実際

3−1　民間企業の実例とまだ未踏の課題、リスト

3−2　自然知能の理解を求めて

～　理解するとは造ることである　～

その1　ハスの葉の表面を造る

その2　藻の中にある色素分子を造る

4　結論に変えて

25

民間企業で（DX・DSという言葉がない頃から）

応用数理・計算科学　の　仕事をしてきました、、、、

Shin　Gabin　Paul

三菱化学横浜キャンパスでの仕事風景

三菱化学・計算科学陣の貢献跡事例
（抜粋：見果てぬ夢も含）

信号処理・製品化

C1-Rh錯体解析

Beckmann-Re法触媒探索

CD-R色素設計

分子メモリー素子

オキソ触媒

TPA不純物同定

Li電池添加剤探索支援

青色Tm蛍光体探索

GaAs-LPVPE最適化

メタロセン触媒

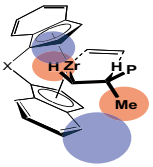
感熱色素CatalyticFadeout解析

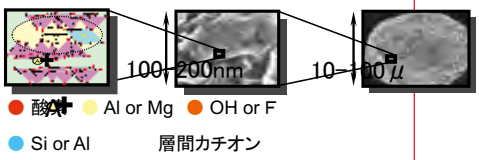
フラーレン新規誘導体提案

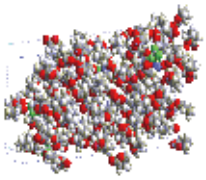
蛾の目（モスアイ）ポリマ

有機EL色素設計

Bio-Informatics







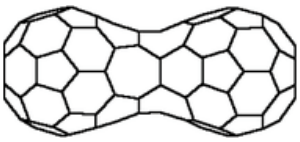
•Published: 19 February 2009

Fusing C_{60} units without Stone–Wales bond rotations

Gabin Treboux & Shinichiro Nakamura

Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly **vol 140**, pages 839–843 (2009)

Using ab-initio calculation, we have explored new chemical paths for the coalescence of C_{60} units into higher fullerenes and novel structures. Besides the Stone–Wales paradigm used for rationalizing the fusion of fullerenes and nanotubes, we demonstrated that an alternative path exists for the fusion of two C_{60} units. This path uses successive “π–π” additions and subsequent bond reorganizations to lead to a specific C_{120} peanut-like structure.



28

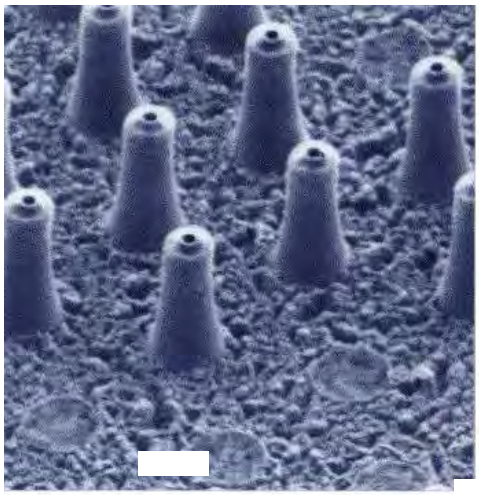


図３　反応性イオンエッチングで出現した金属の微細構造（下部径１μm、高さ２μm）［４］

上野、中村（特開2002）

企業の超難問をご紹介

民間企業時代に遭遇した未到課題

ナノ表面を造る時でした

突然に銅鐸？が出てきた

We call it "Penne !"

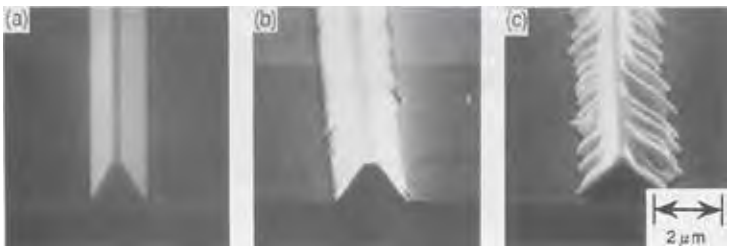
未到課題その３

波打つ表面！！

分子$Ga(CH_3)_3$を触って制御せよ

MOCVD：GaAsウエハ成長を制御せよという課題でした　！

Multi-Scale　Simulation　の典型的問題



(a) GaAs,　(b) AlGaAs,　(c) AlAs

目次

1　自己紹介　と　私たちの研究領域
2　研究の基本哲学　あるいは　Keynote
　～　自然知能　に　学ぶ（真似ぶ）　～
　　→　自然に圏論へ
3　応用数理・計算科学・DS (DX)の実際
　3−1　民間企業の実例とまだ未踏の課題、リスト
　3−2　自然知能の理解を求めて
　　～　理解するとは造ることである　～
　　その1　ハスの葉の表面を造る
　　その2　藻の中にある色素分子を造る

4　結論に変えて

31

自然知能　を　分子レベルで理解を試みる

理解　⟷　自分で創り出せる

1）　Learning from Lotus

Fractal Surface

ロータス効果

2）　Insight from Plants, Porphyra-334

How to mange the excess energy ?

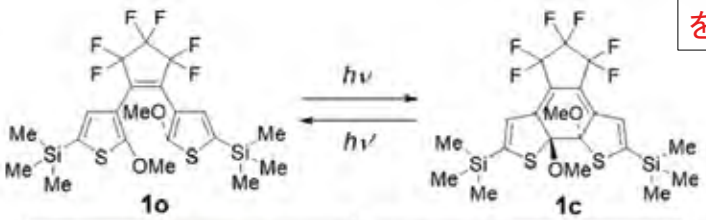
ポルフィラ334

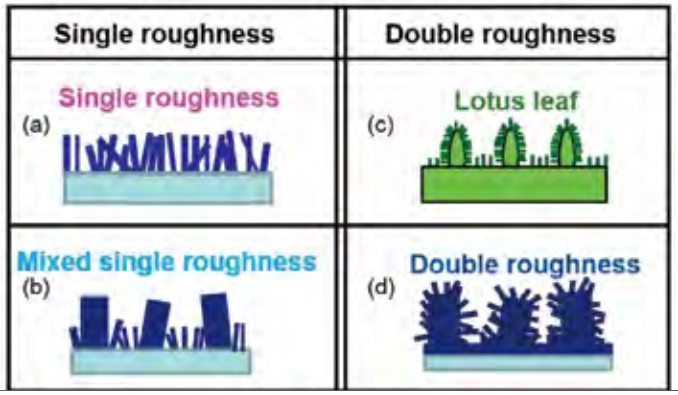
32

Via Crystal growth, superhydrophobic Fractal Surface !

光応答分子の結晶成長を用いてフラクタル表面を構築！

アモルファス　　結晶性あり

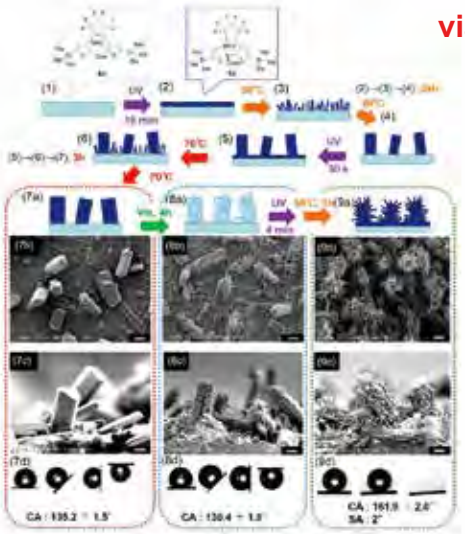


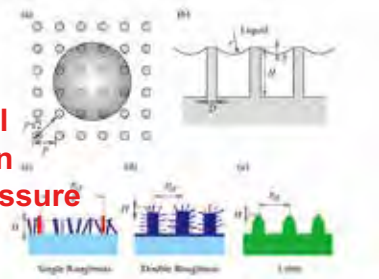


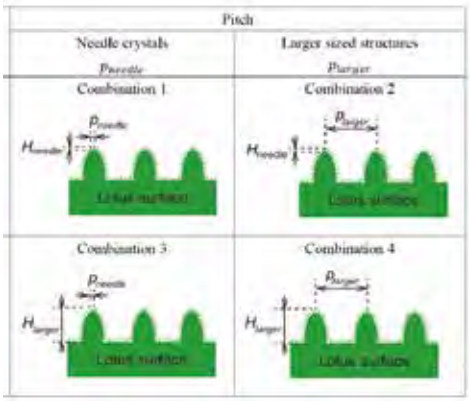
33

$$P_L = \frac{2\gamma_L}{r} = \frac{16\gamma_L\delta}{(\sqrt{2}p-D)^2}$$

Computational Fractal Design via Laplace pressure







34

On single roughness surface

On double roughness surface

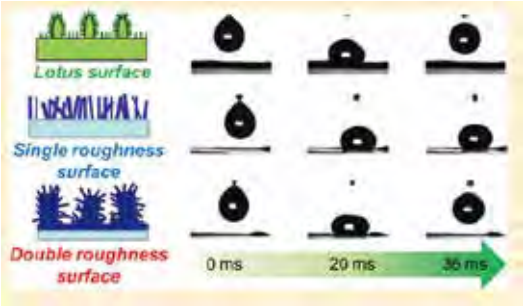
35

JACS
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
Article
pubs.acs.org/JACS
2016, 138, 10299.

Fractal Surfaces of Molecular Crystals Mimicking Lotus Leaf with Phototunable Double Roughness Structures

Ryo Nishimura,[†] Kengo Hyodo,[†] Haruna Sawaguchi,[‡] Yoshiaki Yamamoto,[‡] Yoshimune Nonomura,[‡] Hiroyuki Mayama,[*,∥] Satoshi Yokojima,[§,⊥] Shinichiro Nakamura,[⊥] and Kingo Uchida[*,‡]

[†]Department of Materials Chemistry, Ryukoku University, Seta, Otsu, Shiga 520-2194, Japan
[‡]Department of Biochemical Engineering, Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University, 4-3-16, Jo-nan, Yonezawa, Yamagata 992-8510, Japan
[∥]Department of Chemistry, Asahikawa Medical University, 2-1-1-1, Midorigaoka-higashi, Asahikawa, Hokkaido 078-8510, Japan
[§]School of Pharmacy, Tokyo University of Pharmacy and Life Sciences, 1432-1 Horinouchi, Hachioji, Tokyo 192-0392, Japan
[⊥]RIKEN Innovation Center, Nakamura Laboratory, 2-1 Hirosawa, Wako, Saitama 351-0198, Japan



Understanding is making!

理解するとは
物にする（創出）こと！

36

ポルフィラ334

37

自然知能の権化porphyra-334を用いたCase Study

How to mange the excess energy ?

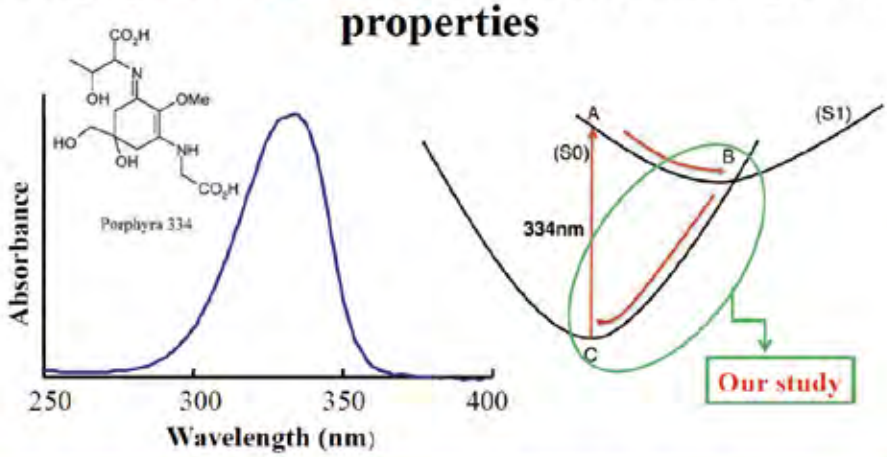
海草中の色素は過剰UVエネルギーを如何に処理しているか？

Motivation:

- Sunlight is the primary energy source of living organisms on the earth (photosynthesis)
- Yet, the solar spectrum is wide
  includes harmful high-energy ultra-violet (UV) radiation
- development and exploitation of UV absorbing substances such as **mycosporine-like amino acids (MAA)** is an efficient physiological solution against UV adopted by algae

A. Torres et al. *Photochem. Photobiol. Sci.* **5**, 432 (2006)

Porphyra-334 (MAA) : structure and optical properties



~2% of water is already sufficient to dissipate the excess energy acquired by porphyra-334 upon photon adsorption

L-F. Chuang et al. *Marine Drugs* **12**, 4732 (2014)

39

アプローチ　1　CASSCF計算：　量子化学

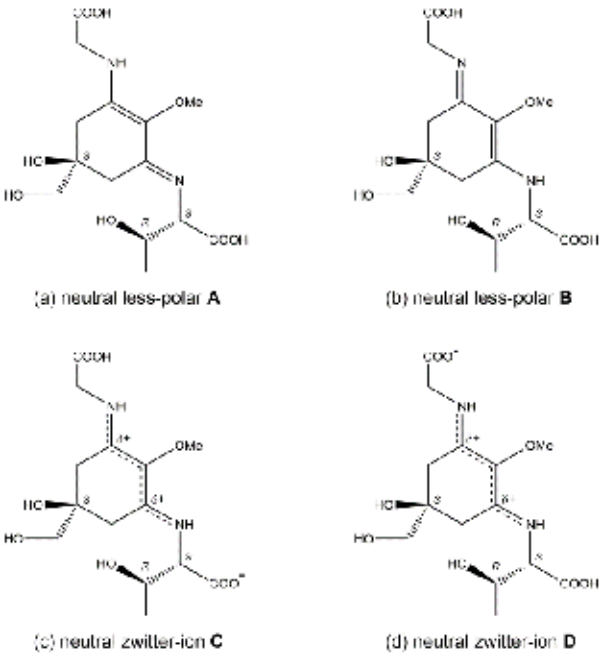
この色素分子の光励起状態の特徴を徹底的に調べた！

アプローチ　2　Car Parrinello MD計算

励起した分子が水の中で、いかなる仕組みでエネルギーを外に逃がしているのか、量子論（半古典）分子動力学で調べた！

2

アプローチ1の結果　要約



水中

Zwitter-ion　C,D が　安定

Nのローンペア

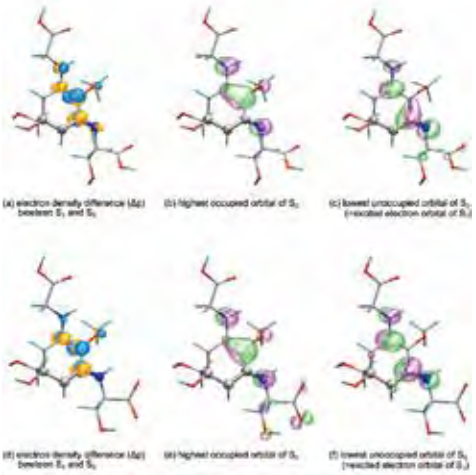
⇒　NH　となって

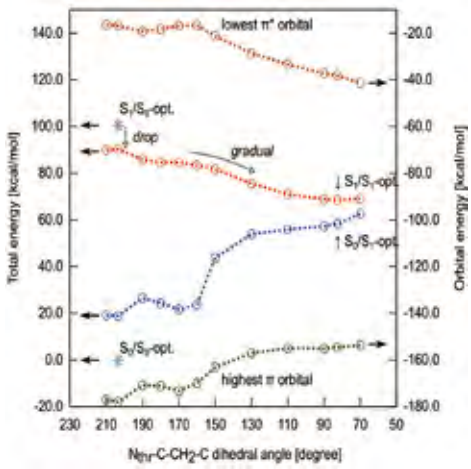
n-π＊　励起　を遮蔽
Spin-Orbit が効かない

⇒　三重項へのパスが遮蔽

41

アプローチ1の　詳細





42

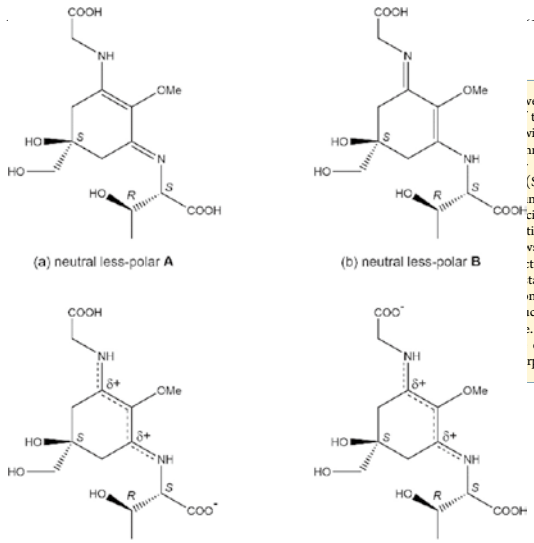
THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B
Article
Cite This: J. Phys. Chem. B 2019, 123, 7649−7656
pubs.acs.org/JPCB

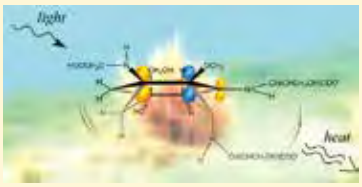
Unique Structural Relaxations and Molecular Conformations of Porphyra-334 at the Excited State

Makoto Hatakeyama,[*,†,‡] Kenichi Koizumi,[‡] Mauro Boero,[¶] Katsuyuki Nobusada,[§,⊥] Hirokazu Hori,[#] Taku Misonou,[#] Takao Kobayashi,[∥] and Shinichiro Nakamura[‡,□]

[†]Sanyo-Onoda City University, 1-1-1 Daigakudori, Sanyo-Onoda, Yamaguchi 756-0884, Japan
[‡]Cluster for Science, Technology and Innovation Hub, RIKEN, 2-1 Hirosawa, Wako, Saitama 351-0198, Japan
[§]Department of Theoretical and Computational Molecular Science, Institute for Molecular Science, Myodaiji, Okazaki 444-8585, Japan

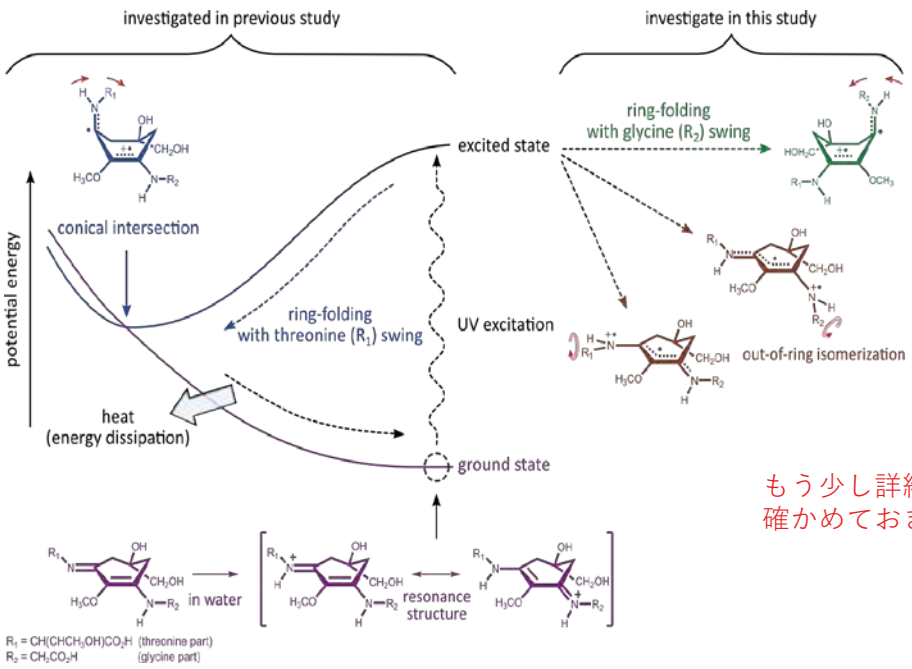
J.Phys.Chem.B.
2019, 123,7649





were
the
vide
ree
its
(S_0)
nits
cine
tion
vs a
ter;
tate
ne, S_1, especially at the carbon−nitrogen (CN) groups linking the
ced nonplanarity can be ascribed to the fact that the carbon atoms of
. At the singlet state, these processes are unlikely to be trapped by
occur in the hydrophilic zwitter-ion forms of porphyra-334. These
rpretation of the stability of porphyra-334 upon UV irradiation.

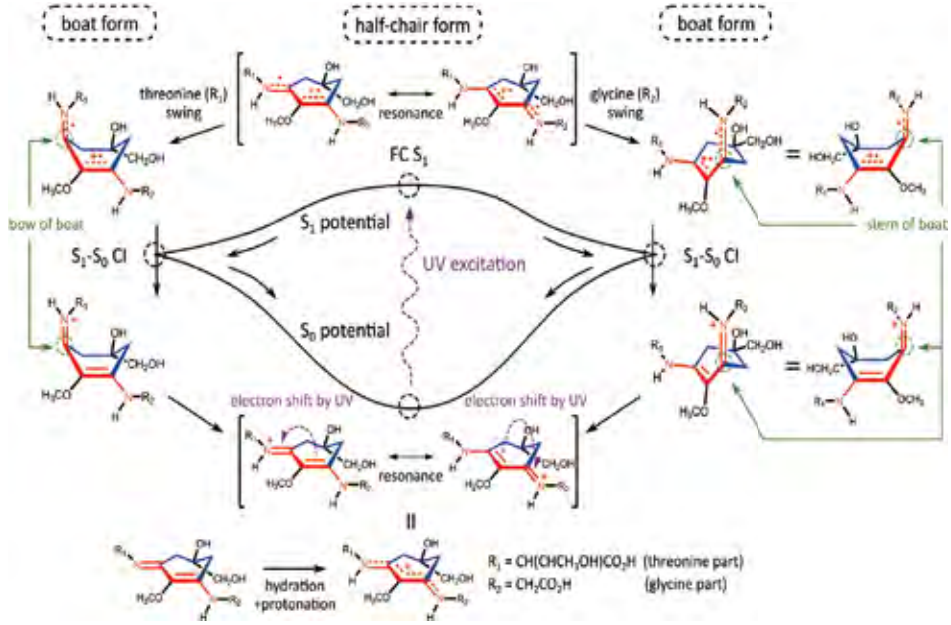
43



もう少し詳細を
確かめておきたい

Schematic representation of the ground state of porphyra-334 (bottom in green), the ring-folding deexcitation pathway[25] (upper left in blue) and the new pathways (upper right in purple and brown).

励起状態の量子化学を進めています

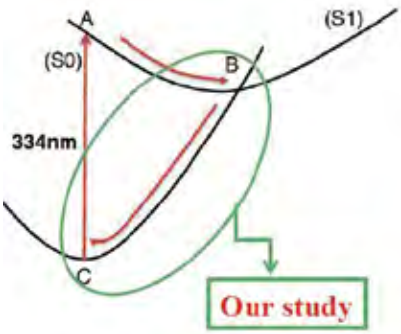


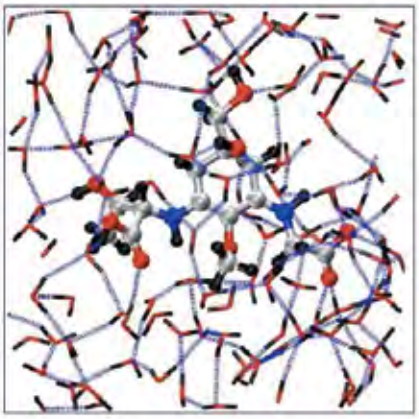
Schematic representation of the S_0 state, FC S_1 state, S_1-S_0 CIs and potential energy profile of the ring-deformation pathways.

J .Phys.Chem A 126 , 7460 （2022）

Computational methods II

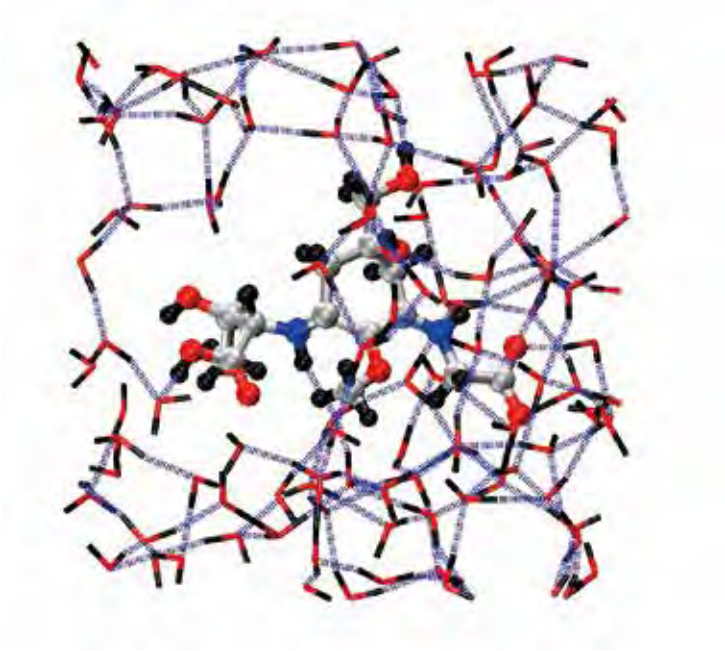
- CPMD dynamical simulations within BLYP + Grimme vdW
- Norm-conserving Hartwigsen-Goedecker-Hutter (HGH) PPs
- PW basis set (E_{cut}=80 Ry) + PBC
- 120/125 solvating H_2O
- (i) NVT (solvent) equilibration with porphyra-334 frozen to its excited state
  (ii) NVE full equilibration





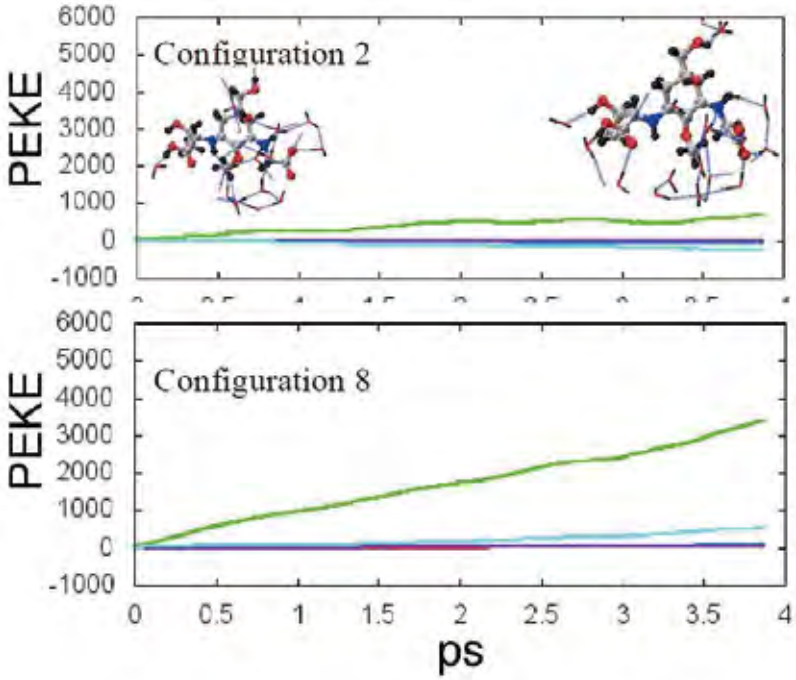
46

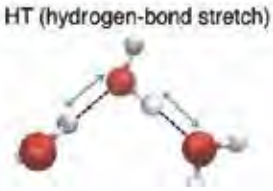
アプローチ2の要約



47

Time evolution of the various PEKE contributions averaged over all the seven independent simulations





LT = red
HT = green
LR = blue
HR = pink
VIB = cyan

48

Phys.Chem.Chem.Phys., 2017, 19, 15745

How seaweeds release the excess energy from sunlight to surrounding water

Kenichi Koizumi*, Mauro Boero#, Makoto Hatakeyama§, Shin-Ichiro Nakamura§, Katsuyuki Nobusada*, Hirokazu Hori¶, Taku Misonou¶

*IMS, Okazaki, Japan

#IPCMS University of Strasbourg-CNRS, Strasbourg, France

§Nakamura Lab. RIKEN, Wako-shi, Japan

¶Faculty of Life and Environmental Sciences University of Yamanashi, Yamanashi, Japan

次の疑問？

このようなインテリジェント分子を設計できないか？

→ VAE で試行

49

このような　自然知能の産物を
人の手で創ることが
可能だろうか？

Chem-VAE（Chemical Variational Auto encoder）を駆使すれば天然色素ポルフィラ334を超える新しい分子が設計できるか？？

～Conventional分子設計法（類似検索）と比較～

原田 祐希, 畠山 允, 前田 修一,
Gao Qi (三菱ケミカル), 小泉 健一, 坂本 裕紀,
小野 祐樹 (三菱ケミカル), 中村 振一郎

51

有機合成の達人・熟練者に迫る試み

新たな化合物・材料の候補を機械学習で出すことは無謀だろうか？

これまで

1. 経験論　合成・評価しながら開発
2. DB探索 → 類似検索
3. Rational Design:

Know Why（デカルト・ニュートンパラダイム）から

～ それで十分ならば, 環境問題は無い筈である ～

今回

ChemVAE = 機械学習（NLP）による分子探索

52

地上に化合物は幾つある？

現在まで

～10^8　位は合成された

潜在的に（薬品のような）化合物は

10^{23}～10^{60}　は存在し得る

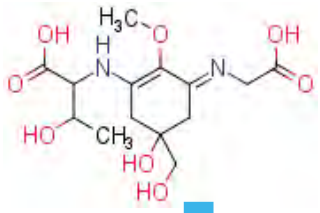
ならば機械学習に懸けてみる価値はある？？

分子を Computer に載せる

分子式：構造式　（人間にとって最もわかりやすく、細かい情報も与えてくれる表記方法　だが　不便！）

SMILES
構造を反映した表記(線形表記方法)；

SDF(MOLの変法)
原子位置座標も含めた表記(行列表記法)：



SMILES

CC(C(C(=O)O)NC1=C(C(=NCC(=O)O)CC(C1)(CO)O)OC)O

```
24 24  0  0  1  0  0  0  0  0999 V2000
    6.3671    1.9145    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    6.8671   -1.9515    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    8.3671    1.9145    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    2.5369   -0.4515    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    3.4030    1.0485    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    5.1350    1.0485    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
   11.1972   -0.4515    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
   10.3312   -1.9515    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    5.1350   -0.9515    0.0000 N   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    8.5991   -0.9515    0.0000 N   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    6.8671    1.0485    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    6.0010    0.5485    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    7.7331    0.5485    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    6.0010   -0.4515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    7.3671    1.9145    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    7.7331   -0.4515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    6.8671   -0.9515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.2690   -0.4515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    3.4030   -0.9515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.2690    0.5485    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    3.4030   -1.9515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    9.4651   -0.4515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    7.7331   -2.4515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
   10.3312   -0.9515    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
11  1  1  1
 2 17  1  0
 2 23  1  0
 3 15  1  0
19  4  1  0
 5 20  1  0
 6 20  2  0
 7 24  1  0
 8 24  2  0
 9 14  1  0
18  9  1  1
10 16  2  0
10 22  1  0
11 12  1  0
11 13  1  0
11 15  1  0
12 14  1  0
13 16  1  0
14 17  2  0
16 17  1  0
18 19  1  0
18 20  1  0
19 21  1  1
22 24  1  0
M  END
```

SDF(MOL)

Alan先生のChem-VAE

ACS central science

Research Article

Automatic Chemical Design Using a Data-Driven Continuous Representation of Molecules

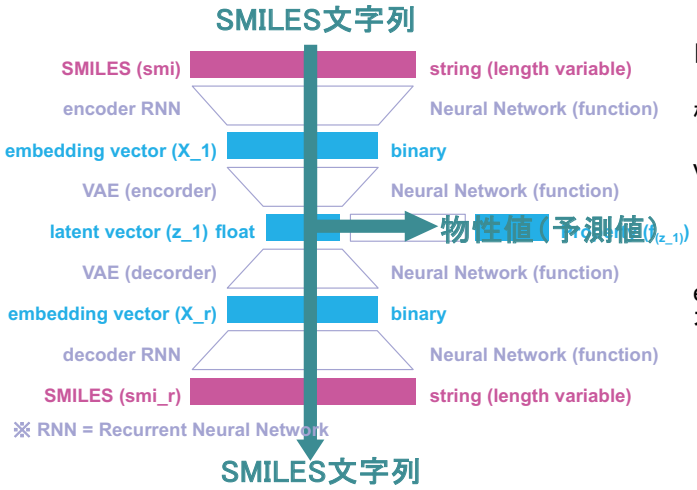
Rafael Gómez-Bombarelli,[1,#] Jennifer N. Wei,[1,#] David Duvenaud,[2,#] José Miguel Hernández-Lobato,[3,#] Benjamin Sánchez-Lengeling,[1] Dennis Sheberla,[1] Jorge Aguilera-Iparraguirre,[1] Timothy D. Hirzel,[1] Ryan P. Adams,[2,4] and Alán Aspuru-Guzik*[1,5,6]

[1]Kvantor North America Inc., 10 Post Office Square, Suite 800, Boston, Massachusetts 02109, United States
[2]Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University, Cambridge, Massachusetts 02138, United States
[3]Department of Computer Science, University of Toronto, 6 King's College Road, Toronto, Ontario M5S 3H5, Canada
[4]Department of Engineering, University of Cambridge, Trumpington Street, Cambridge CB2 1PZ, U.K.
[5]Google Brain, Mountain View, California, United States
[6]Princeton University, Princeton, New Jersey, United States
[7]Biologically-Inspired Solar Energy Program, Canadian Institute for Advanced Research (CIFAR), Toronto, Ontario M5S 1M1, Canada

Supporting Information

ABSTRACT: We report a method to convert discrete representations of molecules to and from a multidimensional continuous representation. This model allows us to generate new molecules for efficient exploration and optimization through open-ended spaces of chemical compounds. A deep neural network was trained on hundreds of thousands of existing chemical structures to construct three coupled functions: an encoder, a decoder, and a predictor. The encoder converts the discrete representation of a molecule into a real-valued continuous vector, and the decoder converts these continuous vectors back to discrete molecular representations. The predictor estimates chemical properties from the latent continuous vector representation of the molecule. Continuous representations of molecules allow us to automatically generate novel chemical structures by performing simple operations in the latent space, such as decoding random vectors, perturbing known chemical

ChemVAE
物性予測ツールを新規構造作成ツールとして活用を試みた！



トレーニングされたオートエンコーダー

機械学習の入出力；Smiles

VAE本体
　数値情報空間の次元圧縮

encoder/decoder RNN
不定長文字列⇔固定長ベクトル変換
自然言語処理(=NLP)

57

Autoencorder とは

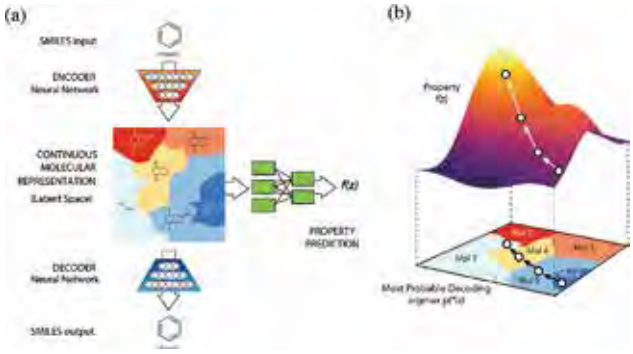


Figure 1. (a) A diagram of the autoencoder used for molecular design, including the joint property prediction model. Starting from a discrete molecular representation, such as a SMILES string, the encoder network converts each molecule into a vector in the latent space, which is effectively a continuous molecular representation. Given a point in the latent space, the decoder network produces a corresponding SMILES string. A mutilayer perceptron network estimates the value of target properties associated with each molecule. (b) Gradient-based optimization in continuous latent space. After training a surrogate model $f(z)$ to predict the properties of molecules based on their latent representation z, we can optimize $f(z)$ with respect to z to find new latent representations expected to have high values of desired properties. These new latent representations can then be decoded into SMILES strings, at which point their properties can be tested empirically.

教師なし学習： ある化合物をEncode→ Decode　すると
Latent 部分が抽出できる
同じ（同型？） そのエッセンスを　使ってみよう！

encoder / decoder RNN@ChemVAE

「不定長文字列⇔固定長ベクトル」 変換するツール

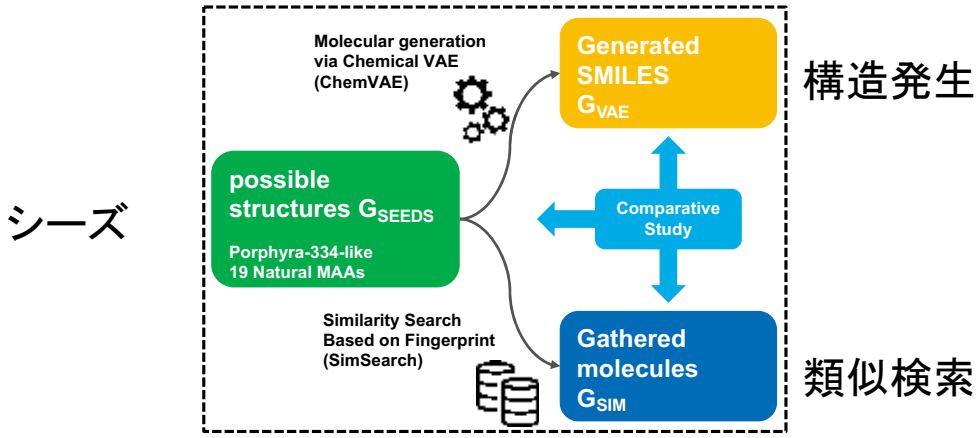
従来のフィンガープリント　ならば：
　部分構造を設定したり、
　部分構造を抽出するアルゴリズム設定が　必要

encoder / decoder RNN　ならば
～画像処理ツールの流用です～

RNN recurrent neural net
明示的に「化学」の知識を使用しない
機械学習（NLP）

59

シーズ、構造発生、類似検索
この3群のデータ比較



60

類似検索

得られた構造数	Set詳細	注釈
1,458,577,582	Zinc15 dataset (All)	ダウンロード5/11
175665	370構造いずれかに対する類似度閾値を満たす (MACCS, ECFP, FCFP 各タニモト係数; 0.745, 0.31, 0.40)	スクリプト上一時的に出力
3474	タニモト係数(各上位1200・異性体など排除前)	スクリプト上一時的に出力
1125	タニモト係数(各上位1200・異性体など排除後)	Gaussian計算前
1094	構造最適化・Gaussian計算が正常に可能	**Mappingで使用**

1094　分子

61

VAE によって発生させた構造

得られた構造数	Set詳細	注釈
370	シーズ(SMILES文字列)	※重複排除して使用
550784	構造当たり2000回構造発生したのち 文字列の重複排除	スクリプト上一時的に出力
2454	RDKITでエラーが生じない	スクリプト上一時的に出力
1572	RDKITで3次元構造が立ち上がる	Gaussian計算前
882	構造最適化・Gaussian計算が正常に可能	Mappingで使用

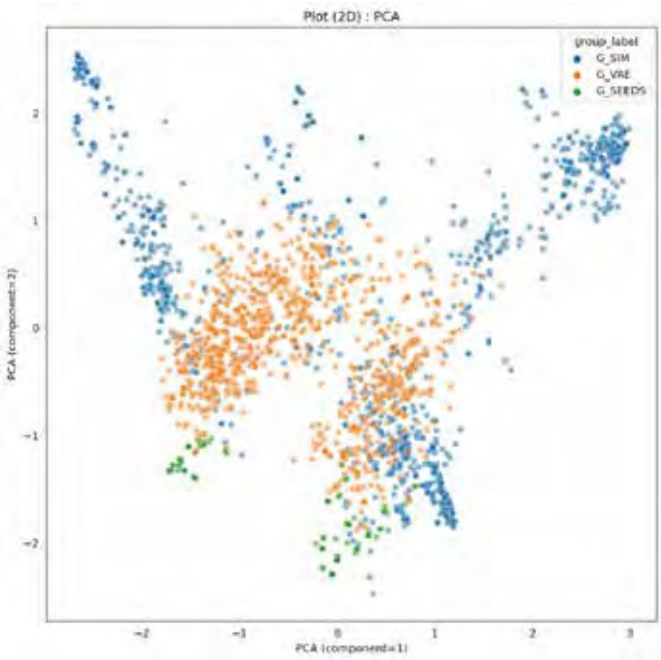
882分子

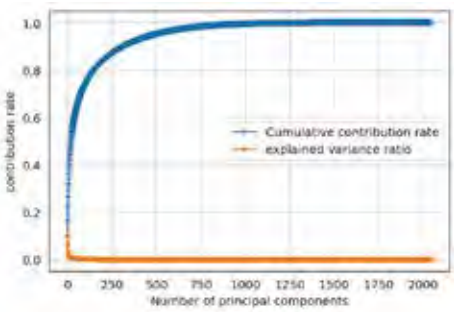
Seeds	370	（自然知能）
DB類似	1094	（従来の方法）
VAE	882	（機械学習）

この3群を比較
VAEは差別化
技術となるか？

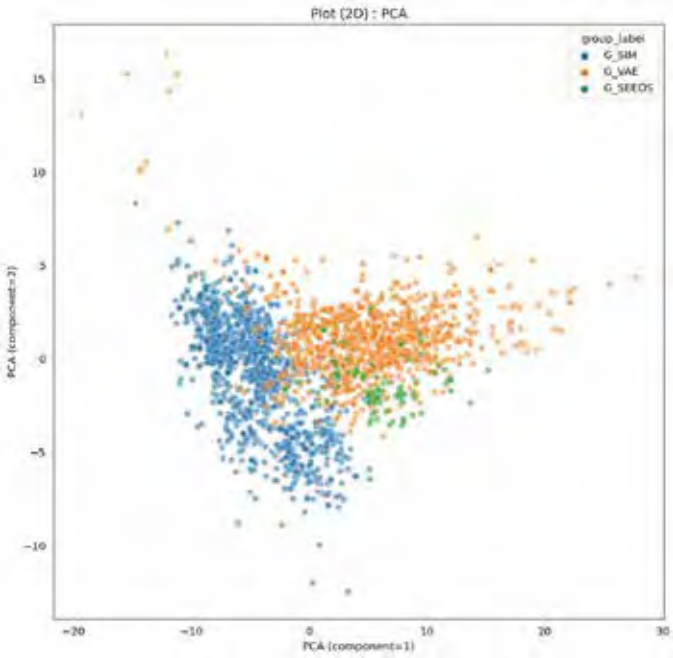
62

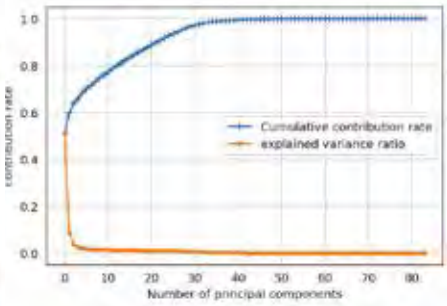
(II) Cheminformatics (FCFP)





(III) 量子化学計算結果を要素とした分子ベクトル

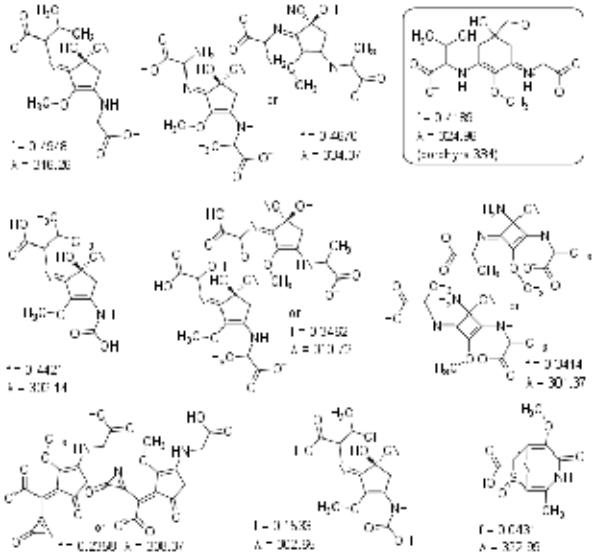




量子化学計算のoutputを要素とする分子ベクトルが最も鮮明な弁別能を示した

Seeds を包含しつつ、Simirarity では行けない空間に存在

かつて有機色素・新ビジネスをMCCで開拓なさった **“あるOBの目に適った“** 構造 （G_{VAE} からの選抜）



ChemVAEによる構造発生された化合物のうち、
f > 0.1, 300 < λ < 350を満たし

各マッピングでもSeedsの近くにマッピングされた構造

ユニークな5員環構造　有り
ACS –Omega
7,8581 (2022)

大学は、ここで一息ですが、、
産業界なら　ここが始まり！！

65

結論

産官学で応用数理・計算科学・データサイエンス
に携わった老兵からのメッセージ

分野横断・専門の逸脱を気にすることなく
（その課題のイデアに向かって）
解を求める知性が数学の
真価です。

66

「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 IV

マス・フォア・インダストリ研究 No.26, IMI，九州大学
ISSN 2188-286X
発行日　2023 年 11 月 28 日
編　集　松谷茂樹，緒方勇太，落合啓之，加葉田雄太朗，佐伯修，濵田裕康，松江要
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 安田　貴徳 Xavier Dahan 櫻井　幸一	Functional Encryption as a Social Infrastructure and Its Realization by Elliptic Curves and Lattices	26 February 2015
マス・フォア・インダストリ研究　No.2	滝口　孝志 藤原　宏志	Collaboration Between Theory and Practice in Inverse Problems	12 March 2015
マス・フォア・インダストリ研究　No.3	筧　三郎	非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先 (Various aspects of nonlinear mathematical models : continuous, discrete, ultra-discrete, and beyond)	24 March 2015
マス・フォア・インダストリ研究 No.4	穴田　啓晃 安田　貴徳 櫻井　幸一 寺西　勇	Next-generation Cryptography for Privacy Protection and Decentralized Control and Mathematical Structures to Support Techniques	29 January 2016
マス・フォア・インダストリ研究 No.5	藤原　宏志 滝口　孝志	Mathematical Backgrounds and Future Progress of Practical Inverse Problems	1 March 2016
マス・フォア・インダストリ研究 No.6	松谷　茂樹 佐伯　修 中川　淳一 上坂　正晃 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 藤原　宏志	Collaboration among mathematics, engineering and industry on various problems in infrastructure and environment	1 March 2017
マス・フォア・インダストリ研究 No.8	藤原　宏志 滝口　孝志	Practical inverse problems based on interdisciplinary and industry-academia collaboration	20 February 2018
マス・フォア・インダストリ研究 No.9	阿部　拓郎 高島　克幸 縫田　光司 安田　雅哉	代数的手法による数理暗号解析 Workshop on analysis of mathematical cryptography via algebraic methods	1 March 2018
マス・フォア・インダストリ研究 No.10	阿部　拓郎 落合　啓之 高島　克幸 縫田　光司 安田　雅哉	量子情報社会に向けた数理的アプローチ Mathematical approach for quantum information society	26 December 2018

Issue	Author ／ Editor	Title	Published
マス・フォア・インダストリ研究 No.11	松谷　茂樹 佐伯　修 中川　淳一 濵田　裕康 上坂　正晃	結晶転位の先進数理解析 Advanced Mathematical Investigation for Dislocations	7 January 2019
マス・フォア・インダストリ研究 No.12	滝口　孝志	Non-destructive inspection for concrete structures and related topics	13 February 2019
マス・フォア・インダストリ研究 No.13	宇波　耕一 長野　智絵 吉岡　秀和 田上　大助 白井　朋之	数理農学における時系列データのモデル化と解析 Modeling and Analysis of Time Series Data in Math-Agro Sciences	28 February 2019
マス・フォア・インダストリ研究 No.14	佐久間　弘文 大津　元一 小嶋　泉 福本　康秀 山本　昌宏 納谷　昌之	ドレスト光子に関する基礎的数理研究	18 March 2019
マス・フォア・インダストリ研究 No.15	松谷　茂樹 佐伯　修 中川　淳一 濵田　裕康 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 Yasuhiko Ikematsu Koji Nuida Yutaka Shikano Katsuyuki Takashima 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 津曲　紀宏 西澤　弘毅 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 Motoichi Ohtsu Masayuki Naya Izumi Ojima Yasuhide Fukumoto	Basic mathematical studies on dressed photon phenomena	19 March 2020

マス・フォア・インダストリ研究 No.20	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	材料科学における幾何と代数 I	24 November 2020
マス・フォア・インダストリ研究 No.21	Daisuke Sakurai Shigeo Takahashi Naoki Hamada Osamu Saeki Hamish Carr Takahiro Yamamoto	Fiber Topology Meets Applications	10 March 2021
マス・フォア・インダストリ研究 No.22	巴山　竜来 中丸　　啓 大垣　真二	数理的生成手法による CG とデジタルファブリケーション	15 March 2021
マス・フォア・インダストリ研究 No.23	松谷　茂樹 井上　和俊 落合　啓之 佐伯　　修 垂水　竜一 内藤　久資 中川　淳一 濵田　裕康 松江　　要	材料科学における幾何と代数 II	11 November 2021
マス・フォア・インダストリ研究 No.24	櫻井　大督 佐伯　　修 高橋　成雄 Hamish Carr 山本　卓宏 濱田　直希	Fiber Topology Meets Applications 2	15 March 2022
マス・フォア・インダストリ研究 No.25	佐久間弘文 大津　元一 小嶋　　泉 福本　康秀	解析から設計に向けたオフシェル数理科学	28 March 2022

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