

概要

8月30日(月)

1. 松谷茂樹 (金沢大学) 部分多様体の量子力学とパーコレーションの電気伝導の数理

(Mathematics in submanifold quantum mechanics and conductivity of continuum percolation)

2012年に実証された部分多様体の量子力学の代数解析的な側面と、有機絶縁体内に埋め込められた伝導粒子の密度等により電気伝導性を制御する機能性材料の数理について述べる。

前者の部分多様体の量子力学は、 \mathbb{E}^3 で定義されたシュレディンガー作用素から定まるヒルベルト空間を部分多様体に制限することによって、構成される量子系である。制限の際、ヒルベルト空間の構造を保つために、Hörmanderの半密度形式が重要な役割をする事を示す。また、関連する方法をディラック作用素に置き換えると、部分多様体のディラック作用素は法束に関わる指数定理やソリトン理論の逆散乱法で現れる量子系に一致すること、やPinkall-Peditらが提唱した四元数 Riemann-Roch などに関連することなどに触れる。

後者はポアソン点過程によって定まる連続パーコレーションのブール模型にに対して、ブール値に応じた電気伝導度を定義する数理モデルで電気伝導の幾つかの性質を再現し、材料設計の指針を提示できることを示す。定義した電気伝導度の極限を取ると、これらはフラクタル境界での擬共形写像や共形写像などに関わることも述べる。

In this talk, I show the algebraic analysis associated with the submanifold quantum mechanics which was experimentally observed 2012, and the mathematics associated with the conductivity of the functional materials controlled by the properties, e.g, density, of the conductive fine particles embedded in the organic insulating materials.

The submanifold quantum mechanics is a quantum system given by the restriction of the Schrödinger operator defined in \mathbb{E}^3 to a subspace associated with the lower dimensional submanifolds. I show that the Hörmander half-density form plays important roles so that the restriction preserves some properties in the Hilbert space related to the Schrödinger operator. Further I give some comments; by replacing the Schrödinger operator with the Dirac operator, we have the submanifold Dirac operator which is related to the index theorem of the normal bundles of the submanifold, the quantum system appearing the nonlinear integrable systems as the inverse scattering method, and quotation Riemann-Roch proposed by Pinkall-Pedit.

On the other hand, it is known that the properties of the conductivity of the functional materials are described well by the mathematical model which is given by the binary conductive distribution associated with the bool model studied in the continuous percolation theory. I show that in terms of the model, the several properties related to the fractal geometry are clarified well and using the fact, we can design the materials. Further I give some comments that point the relations between the model and the quasi-conformal and the conformal maps.

2. 尾上順 (名古屋大学工学研究科) 1次元周期的凹凸曲面上の電子挙動～部分多様体量子力学の実験検証～

(Behavior of electrons propagating on 1D periodic concave-convex curved surface “First observation of physical properties predicted by quantum mechanics of submanifold”)

これまで、フラーレン C_{60} 薄膜に電子線 (3-7 keV) を照射することで、一般化 Stone-Wales 転移反応を介して凹凸周期曲面構造を有する 1次元 (1D) C_{60} ポリマー膜が生成することを見出し、1D 金属に特徴的な物

性を示すことを見出してきた [1]。曲面上の電子の挙動は、次式のハミルトン演算子で与えられる。

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

ここで、 $g = \det[g_{ij}]$ は計量テンソルを表す。第 1 項は電子の運動エネルギーの演算子であるが、第 2 項に平均曲率 h とガウス曲率 k があたかもスカラーポテンシャルのように加わっている（1D 平面では第 2 項は現れない）ことが知られているが、この曲率項が電子の挙動に影響するか否かはこれまで謎であった。我々は、上記 1D C₆₀ ポリマーの電子挙動における幾何曲率項の影響を理論的に予測 [2] した上で、実験的に実証したので紹介する [3]。

Electron-beam-irradiation (3-7 keV) of a C₆₀ film results in formation of a 1D C₆₀ polymer film with a concavo-convex periodic curved structure via the generalized Stone-Wales transformation, which exhibits physical properties arising from 1D metal [1]. The behavior of the electron on the curved surface is given by the Hamilton operator of the following equation.

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

Here, $g = \det[g_{ij}]$ represents the metric tensor. The first term is an operator of 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). So far, it has been a mystery 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 C₆₀ polymer [2] and then experimentally demonstrate it [3].

[1] H. Shima and J. Onoe, “The Role of Topology in Materials” (S. Gupta and A. Saxena eds.), Springer, Chap. 3, 53–84 (2018) and references therein.

[2] H. Shima, H. Yoshioka, and J. Onoe, Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

[3] J. Onoe, T. Ito, H. Shima, H. Yoshioka, and S. Kimura, Europhys. Lett. **98**, 27001 (2012) [Press release]

3. 荒尾修（デンソー（株）） 導電性接着剤内部のパーコレーションネットワークの解析

(The Percolation Network Analysis inside Electrically Conductive Adhesive)

接着剤内部に分散させた導電フィラを介して導電が行われる導電性接着剤において、実装後の抵抗測定などの巨視的な研究や、フィラ間界面での抵抗評価といった微視的な研究は進みつつある。しかし、接着剤内部の導電メカニズムという両者の間に位置する研究はあまり進んでおらず、導電信頼性の検証がされていない。これは、通常の平面観察に対し、導電接着剤内部の導電フィラ間では 3 次元的にパーコレーションネットワークと呼ばれる導電経路を形成するため、これを正確に観察する手法が無かったことに起因する。今回、正確な研磨と観察を繰返すことで立体的観察を行う FIB-SEM を用いて導電経路の 3 次元的な可視化を行った。また、この結果を利用することにより、実機に極めて近いモデルでの導通解析が可能となったので、これを報告する。

The conductive adhesive is conducted through a conductive filler dispersed inside the adhesive. In the research of this material, macroscopic research such as resistance measurement after mounting and microscopic research such as resistance evaluation at the interface between fillers are advancing. However, research on the conduction mechanism inside the adhesive, which is located between these two research,

has not progressed much, and the conductivity reliability has not been verified. This is due to the fact that there was no technique to observe accurately the conductive path (Percolation Network) between conductive fillers inside conductive adhesives in order to form 3D conductive path for usual planar observation. In this study, 3D visualization of the conductive path was carried out using FIB-SEM which carries out 3D observation by repeating accurate polishing and observation. And, the conduction analysis in the model which was very close to the real machine became possible by using this result.

4. 下川航也（埼玉大学）共連続構造と 3次元トポロジー (Polycontinuous structure and 3-dimensional topology)

ブロックコポリマー溶融体のミクロ相分離構造として現れる共連続構造を、3次元トポロジーを用いて解析する。ブロックコポリマーは化学的性質が異なるモノマーから構成され、溶融体において相分離構造が現れる。その様子を数学的にモデル化すると、3次元トーラスの分解に対応する。この講演では、3次元多様体のハンドル体による分解の研究の共連続構造の特徴付けの研究への応用について扱う。

We will analyze polycontinuous patterns of the microphase separation of a block copolymer melt using the 3-dimensional topology. Block copolymers are composed of monomers with different chemical properties and exhibit a microphase separation in the melt state. The mathematical model of this corresponds to a decomposition of the 3-dimensional torus. In this talk, we will discuss the study of handlebody decompositions of 3-manifolds and its application to the characterization of polycontinuous structures.

8月31日(火)

1. 堀川由人(大阪大学) **Riemann 多様体上の弾性論と編み紙への応用**

(Elasticity on Riemannian manifold and its application to weaving papers)

通常、弾性論ではベクトルやテンソルの成分のみを用いて定式化がなされる。これは、測定を必要とする工学的な応用を考えれば自然で、さらに Euclid 空間のみを考えるのであれば、このような理論的枠組みで十分である。

しかし幾何学、特に多様体論の立場から考えれば成分を明示的に表す定式化は見通しが悪く、座標系非依存な形で系を記述する方が都合が良い。また、応用上の問題としても、熱応力や残留応力を扱う場合は基準状態の Riemann 計量を与えることで自然な定式化が可能であり、弾性体を Riemann 多様体として記述する意義は大きい。

本講演では Riemann 多様体上の弾性論の応用として、平面材料から曲面形状を高精度に作成する手法(編み紙)を扱う。与えられた滑らかな曲面形状を実際に作成することは、数学的な曲面の可視化においても、工業的な応用としても重要な問題である。本手法では、この問題に対して「薄く細長い形状の材料を編む」ことで曲面形状を形成する。ここで、編む前の細長い形状は平面材料から切り出される形状である。この形状の決定問題に対して歪エネルギー最小化によるアプローチが有効であり、ここで Riemann 多様体上の弾性論が重要な役割を果たす。

以上を踏まえて、本講演では Riemann 多様体上の弾性論の定式化、編み紙への応用、実際に制作した曲面模型の紹介を行う。

Usually, elasticity theory is formulated using only vector or tensor components. This is natural if we consider engineering applications that require measurements, and if we consider only Euclidean spaces, such a theoretical framework is also sufficient.

However, from the standpoint of geometry, especially manifold theory, a theory that explicitly expresses the components is not a good prospect, and it is more convenient to describe the system in a coordinate system independent form. In addition, when dealing with thermal stress or residual stress, it is possible to formulate them naturally by giving the Riemannian metric of the reference state.

As an application of the theory of elasticity on Riemannian manifolds, this talk deals with a method for creating curved surface shapes from planar materials with high accuracy. The actual creation of a given smooth surface shape is an important problem in both mathematical surface visualization and industrial applications. In this method, a curved surface shape is formed by "weaving thin and elongated materials" to solve this problem. Here, the elongated shape before weaving is the shape that is cut out from the planar material. The approach of strain energy minimization is effective for the problem of determining this shape, and the theory of elasticity on Riemannian manifolds plays an important role here.

In this talk, we will present a formulation of the theory of elasticity on Riemannian manifolds, its application to weaving paper strips, and an actual curved surface model.

2. 梶ヶ谷徹(東京理科大学) **An optimal hyperbolic metric for graph embedding**

重み付き有限グラフをユークリッド空間に周期的に埋め込む1つの方法に標準実現と呼ばれる方法がある。これはグラフの埋め込みのディリクレエネルギーを、周期性も考慮に入れて最小化する実現と言えるものである。最近、「双曲版」の標準実現と呼ぶことのできる、重み付き有限グラフから種数2以上の閉曲面への埋め込みが、適切な条件のもと存在することを示したので、これを紹介する。講演では、離散調和写像に関する基本的な性質と、標準実現の様々な具体例も合わせて紹介する。本講演は、田中亮吉氏(東北大学)との共同研究に基づく。

A standard realization is a way to periodically embed a weighted finite graph into the Euclidean space. This can be regarded as an embedding that minimizes the Dirichlet energy of the graph taking into account the periodicity. Recently, we proved an existence of “hyperbolic” version of the standard realization, which is an embedding of a weighted finite graph into a closed surface of genus greater than 2. In this talk, I will explain the result together with fundamental properties of discrete harmonic maps and several examples of standard realizations. This talk is based on a joint work with Ryokichi Tanaka (Tohoku).

3. 嶋田隆広 (京都大学) 格子・電子欠陥による局所対称性の破れとトポロジカル・マルチフェロイクスの創出 (Topological multiferroics induced by local/quantum symmetry breaking via lattice/electron defects)

渦・スキルミオン・メロンなど非自明なトポロジカル秩序を有し、かつ、究極的に小さな寸法を有する強誘電体/強磁性体を実現することは、スピントロニクスデバイスなどの次世代技術の基幹として注目を集めている。しかしながら、こうした機能はある臨界寸法に達すると消失することが知られている。例えば、強誘電体では寸法が3-10 nm程度に達すると表面電荷による反電場の影響が支配的となり、強誘電性が消失する。また、電気双極子間には、磁性体中のスピン間に働く Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用のようなトルク作用がないため、強誘電体中でスキルミオンやメロンといったトポロジカル秩序を形成することは物理的に不可能であるとされてきた。本研究では、第一原理解析を用いて、ペロブスカイト型酸化物中の格子欠陥(原子空孔、転位、粒界など)を工学利用することで、究極的に小さい(原子寸法の)磁性強誘電体を創出できることを示した。さらに、原子よりも微小な材料構成要素である「電子」の局在欠陥(ポーラロン)に着目し、表面や粒界等のヘテロ構造部に自己凝集したポーラロンを工学利用することで、強誘電体では不可能とされてきたスキルミオンやメロンといったトポロジカルな分極秩序が実現できることを示した。また、材料に外力を負荷することで、ポーラロンが誘起する秩序のトポロジカル数(スキルミオン数)を力学的に制御できることを示した。これらの成果はいずれも、格子欠陥または電子欠陥(ポーラロン)が自発的に形成する局所的(量子的)力学場によって結晶格子の対称性が局所的に破れることに起因する。これは、格子欠陥やポーラロンの力学場を制御することでより高次のトポロジカル秩序を実現できることを示唆しており、今後、結晶学的・量子力学的な欠陥力場と対称性の破れに起因した新たな機能発現に関する力学・数理を目指すものである。

Realization of ultrasmall ferroics with nontrivial topological field textures such as vortices, skyrmions, and merons holds promise in novel technological paradigms. Such nontrivial ferroelectric orders and their functionalities, however, inevitably disappear below a critical size of several nanometers. In addition, very few topological structures can exist in ferroelectrics due to the lack of non-collinear interaction among electric dipoles, unlike the Dzyaloshinskii-Moriya interaction among spins in ferromagnetics. Here, we demonstrate from first-principles that “Atomic-scale Multiferroics” and “Polar Skyrmions and Merons” can be formed by engineering lattice defects and electron defects (i.e., polarons) in heterostructures of perovskite oxides. Doped (excess) electrons are localized and form a polaronic state in the heterostructures (surfaces and grain boundaries), and give rise to skyrmionic and meronic dipole moments around the polaron formation sites due to the cooperative symmetry breaking of polarons and heterostructures. We further show that the topological number of polaronic state can be tailored by applied mechanical strain, i.e., strain engineering for polar topologies. Our discovery overcomes physical limitations of the critical size of 3-10 nm where ferroelectricity disappears and the inability to form topological field (skyrmions, merons) of polarization due to absence of chiral interaction among electric dipoles, and realizes unique polar topological orders at ultimately electron (polaron)-scale. The clarified mechanism that local symmetry breaking via polaron formation coupled with heterostructures provides a novel approach to realize ultimate miniaturization of ferroic materials and opens up new fields to create the polar topological objects. Our result therefore adds a new class of functional polaron families as “Topological Polarons”.

4. 古田幸三 (京都大学) TBA(トポロジー最適化, 熱伝導の材料設計)

構造最適設計法とは、あらかじめ決められた設計・境界条件から所望の性能を最大限得られる構造・形状を求める方法論である [1]。この設計手法は、寸法最適化、形状最適化、トポロジー最適化の三種類に大別される。寸法最適化とは、パラメトリック最適化とも呼ばれ、梁の高さなどの寸法・パラメータを設計変数として、数学的な最適化手法を用いて構造最適化を行う。形状最適化は、構造の外形形状自体を設計変数とするため、寸法最適化に比べ設計自由度が高くなり、より高い性能を持つ構造の創成が期待できる。そして、トポロジー最適化は、外形形状だけでなく孔の数などの形態を変更可能な最も設計自由度の高い設計手法であり、大幅な性能改善や革新的な機能をもった構造の創成が期待できる。本研究会では、それぞれの最適設計法の歴史や適用事例、研究などの概論、及びここ数年における研究開発動向の紹介を行う。

さらに、筆者の研究グループでは数年前より、トポロジー最適設計法をナノ・サブミクロンメートルスケールの熱伝導材料設計への適用を行ってきた。いわゆる一般的な熱伝導は、ポアソン方程式で記述され、熱は等方的に拡散・伝導する。しかしながら、系が十分小さくなると、この拡散的な伝導から弾道的な伝導に変化し、さらに材料界面では温度が不連続になることが知られている。このような系による熱伝導特性の違いは、フォノン粒子の伝搬として捉えることができ、フォノン粒子のボルツマン輸送方程式による数値解析手法の構築が行われてきた [2]。そこで本研究グループでは、このボルツマン輸送方程式を用いることで、ナノ・サブミクロンスケールにおける熱伝導材料創成のための構造最適設計法の構築を行ってきた。本研究会では、これまでの成果、さらに熱整流性をもったいわゆる熱のダイオード創成のための設計手法の構築に関する進捗の紹介を行う。

[1] 西脇眞二, 泉井一浩, 菊池昇, “ 計算力学レクチャーコース トポロジー最適化 ”, 丸善出版, 2013 年

[2] Joshi, A. A., and A. Majumdar. “Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin films”, *Journal of Applied Physics* **74.1** (1993): 31-39.

Introduction of the structural optimization methods and study of an innovative material design method

Structural optimization method can be defined as a design method which enables us to obtain a maximized performance structure based on the design settings and boundaries [1]. This design method can be divided into three types, the size or parametric optimization method, the shape optimization method and the topology optimization method. These types are defined via the design variables. In this sense, the topology optimization has the largest degrees of freedom which changes not only external shapes but also the numbers of holes. Then, this topology optimization method can be expected to obtain a structure which has an innovative performance. Here, the history of the structural optimization methods and the recent trend would be introduced.

In recent years, our group has been focused on applying a structural optimization method to nano or submicron meter-scale design of a heat conduction material. In the conventional phenomenon of a heat conduction can be described as a Poisson's equation and its property is isotropic. On the other hand, when the system size becomes enough small, the heat conduction becomes a ballistic conduction and the temperature discontinuity can be observed at the material interface. This unique phenomenon can be regarded as a phonon's transportation and the analytical methods based on the Boltzmann transport equation have been proposed [2]. By utilizing this analysis method, we have constructed an optimum design method for nanoscale heat conduction problem. In this study, the design method and several results will be introduced. Moreover, our current work, which is to propose a design method of a thermal diode material is also shown.

[1] 西脇眞二, 泉井一浩, 菊池昇, “ 計算力学レクチャーコース トポロジー最適化 ”, 丸善出版, 2013 年

[2] Joshi, A. A., and A. Majumdar. “Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin films”, *Journal of Applied Physics* **74.1** (1993): 31-39.

5. 中川淳一 (東大数理) 東京大学大学院数理科学研究科 F M S P 社会数理実践研究 : 結晶の配位数列は準多項式型

(Mathematical research on real-world problems is an educational program for doctorate course students in FMSP (Leading Graduate Course Frontiers of Mathematical Science and Physics) of the University of Tokyo : Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type)

Mathematical research on real-world problems is an educational program for doctorate course students in FMSP (Leading Graduate Course Frontiers of Mathematical Science and Physics) of the University of Tokyo. The academic-Industry collaboration Program ‘ Mathematical Innovation in Data Science ’ has started up in April 2018 provided Nippon Steel Corporation with funds, affiliated with the Graduate School of Mathematical Science, the University of Tokyo has proposed themes for the program, and provided several themes for doctoral students who mainly major in algebra or geometry.

We have discussed problems in mathematics motivated by crystals and quasi-crystals are highlighted as themes of interest in mathematics and important in materials for several years. I am going to speak at this workshop on the outcomes with respect to the coordination sequence of crystals. The coordination sequence of a graph measures how many vertices the graph has at each distance from a fixed vertex and is a generalization of the coordination number. Here it is proved that the coordination sequence of the graph obtained from a crystal is of quasi-polynomial type, as had been postulated by Grosse-Kunstleve et al. [Acta Cryst. (1996), **A52**, 879-889].