

令和元年度 共同利用研究報告書

令和 1年 9月 26日

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所長 殿

所属・職名

金沢大学 電子情報通信学系 教授

提案者 氏名

松谷 茂樹

下記の通り共同研究の報告をいたします。 記

	整理番号	20190003		
1.研究計画題目	「結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析」			
2.種目(○で囲む)	a. プロジェクト研究 b. 若手研究 (c.) 一般研究			
3.種別(○で囲む)	a. 研究集会 I (b.) 研究集会 II c. 短期共同研究 d. 短期研究員			
4.研究代表者	氏名	松谷 茂樹		
	所属 部局名	金沢大学 電子情報通信学系	職名	教授
	連絡先			
	e-mail		TEL	
5.研究実施期間	令和 1年 9月 9日(月曜日)～令和 1年 9月 10日(火曜日)			
6.キーワード (複数可)	結晶, らせん転位, 結晶構造, トポロジカル欠陥, キンク現象, ゼータ関数, 初等整数論の材料学への応用, 代数学の材料学への応用,			
7.参加者数	19人 *1			

*1 短期研究員は九大の共同研究者も含める。
研究集会 I, II, 短期共同研究は事務局から送った参加者データを元に記入。

8.本研究で得られた成果の概要(成果報告書を別途要添付 枚数は次頁参照)

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

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

目的にそった8つの講演により, 本研究集会に関わる課題において数学と材料科学の新たな連携の方向性が得られ, それらを参加者の間で共有できた。つまり, 本研究集会が, 材料関係の研究者と数学者との交流の有用性を認識し, 今後新たな発展に向けたきっかけとなった。

題名：「結晶の界面，転位，構造の先進数理解析」

報告書

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

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

この目的に従い，結晶に関わる研究者としては，内藤久資氏（名古屋大学），井上和俊氏（東北大学），大森俊明氏（東京理科大学）に講演を頂いた．井上和俊氏には界面における結晶配置パターンの数学的表現に関するもの，内藤久資氏，大森俊明氏には，砂田利一氏・小谷元子氏の研究から始まるグラフとエネルギー関数を活用した結晶の新たな数学表現の概観とその発展について講演して頂いた．また，新学術領域研究 2018 年-2022 年「ミルフィーユ構造の材料科学・新強化原理に基づく次世代構造材料の創製」の活動の一環として，結晶分野の新たな数学的表現を目指して研究をされている垂水竜一氏（大阪大学）を招待し，実際の物質に対する格子欠陥の力学解析の現状をお話頂いた．本研究集会の話題に関心を持って頂いている上記新学術領域研究の関係者には，研究会への参加の声かけをして頂いたが，スケジュールの関係から，佐世保高専の東田賢二校長先生のみ参加となった．上記新学術領域研究との交流は今後の課題となった．

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

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

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

昨年の成果であるキंक問題に関わる弾性曲線モデルの研究と，上記に述べた研究会の成果でもある BCC 結晶のらせん転位に関わる研究に関しては，arXiv:1909.01553 と arXiv: 1906.04332 にそれぞれ公開をしている．

研究会代表
松谷茂樹

2019.9.26

9 月 9 日(月)

13:00-13:05 オープニング

13:05-13:55 松谷茂樹(金沢大学)

初等整数論の転位論への応用

14:10-15:00 垂水竜一(大阪大学)

転位論に基づくキルク変形の表現とその数値解析

15:00-15:30 休憩

15:30-16:20 内藤久資(名古屋大学)

結晶格子の標準実現とその物質科学への応用

16:30-17:20 井上和俊(東北大学)1

粒界構造ユニットの 3 次元配列の解析

19:00- 研究交流会

9 月 10 日(火)

10:00-10:50 中川淳一(東大数理) 1)

東京大学 大学院数理科学研究科 社会連携講座

「データサイエンスにおける数学イノベーション」が目指すもの

11:00-11:30 社会数理実践研究(東大数理) 東京大学

「結晶、準結晶を動機付けとする数学の問題」

11:45-12:35 大森俊明((株) シフラ)

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

12:35-14:30 昼休憩

14:30-15:20 富安亮子(IMI)

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

15:20-15:25 クロージング