

# 平成29年度 共同利用研究報告書

平成29年 9月 30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 佐世保工業高等専門学校 教授

提案者 氏名 <sup>(ふりがな)</sup> 松谷 <sup>まつたに</sup> 茂樹 <sup>しげき</sup>

下記の通り共同研究の報告をいたします。 記

		※整理番号		20170004		
1.研究計画題目	結晶の界面、転位、構造の数理					
2.種別 (○で囲む)	a.研究集会 I		b.研究集会 II		c.短期共同研究	
3.研究代表者	氏名 <sup>(ふりがな)</sup>	松谷 <sup>まつたに</sup> 茂樹 <sup>しげき</sup>				
	所 属	佐世保工業高等専門学校			職 名	教授
	部局名	一般科目 数理情報科				
	連絡先					
e-mail			TEL			
4.研究実施期間	平成29年 8月28日 (月曜日) ~平成29年 8月 30日 (水曜日)					

5.参加者数・参加者リスト (\*別紙「共同利用研究報告書作成上の注意」参照)

(a,b は参加者数のみ記入し, 集会参加者リストを添付. c.の非公開プログラム参加者と d.は参加者リストに記入. c.は公開プログラムを含めた全参加者数を記入し, 公開プログラム参加者リストを添付.)

参加者数: 29 人

参加者リスト (a,b は記入不要, c.は非公開プログラム参加者, d.は共同研究参加者を記入)

氏名 <sup>(ふりがな)</sup>	所属	職名	氏名 <sup>(ふりがな)</sup>	所属	職名

6.本研究で得られた成果の概要

本研究集会は2014年から2017年にIMIで開催されたSGWにて、新日鐵住金(株)から問題提起された課題を更に発展させることを目的としたものである。課題は、それぞれ、結晶グラフの階層性を利用した結合エネルギーの計算方法(2014)、らせん転位(2015)、界面(2016)、結晶の構造変位後の観測データから変位前の状態を予測する解析方法(2017)、である。本研究集会では、課題に関連する様々な数学分野の研究者と、実験や実験解析を行っている研究者が集い、広い視野からこれらの研究課題を議論し、新たな解決手段を得ることを目指した。界面に関連して、数値計算、非線形な時間発展方程式、整数論を援用した離散幾何学など、多岐に亘る視点からの講演があった。Γ収束を利用した転位の解析に関しては、3つの講演があり、全く異なるアプローチによる様々な階層での解析が可能であることが明らかにされた。幾何学、代数学からのアプローチに関しては、講演も多数あり、3次元空間内の新たな離散幾何や転位の表現、結晶の構造に関する解析が可能となることも示された。また、数学者が生の実験データに触れることは通常ほとんどないため、実験データに関する講演もして頂いた。このように本研究集会の趣旨に沿った描像がそれぞれ提示され、それらに沿った議論がなされた。各研究者の中で、それぞれの研究分野へのフィードバックがかかったものと確信する。今回のテーマではないが、実際、キルク現象に関しては、実験データを再現する新たな解析手法が提案でき、現在、論文化に向けた検討を行っている。他のテーマにおいても今回の研究集会により大きく前進し、当初予定した成果を得ることができたものと考えている。

## 研究集会 I 「結晶の界面、転位、構造の数理」 2017/8. 28-30 (20170004) の報告書

本研究集会は SGW2015、SGW2016 にて新日鐵住金（株）から問題提起された、「結晶構造の秩序乱れの数学的表現」と「金属の結晶粒界エネルギーの異方性の数学的表現」を発展させることを目的とし、2016 年 9 月に実施した研究集会 II 「結晶のらせん転位の数理」を拡大し、発展させるものである。

結果的には、SGW2014 で取り上げられた「結晶グラフの階層性を利用した結合エネルギーの計算方法」や、本年の SGW2017 に取り上げられた「結晶の構造変位後の観測データから変位前の状態を予測する解析方法」に関するものも課題として含めて、本研究集会のテーマとした。

同種の問題は、東京大学大学院数理科学研究科博士課程での社会数理実践研究においても学生が検討を行っており、それらとの交流も図るものとなった。

結晶は特殊ユークリッド変換群  $SE(3)$  の離散部分群の作用で不変な集合として特徴づけられる。2016 年 9 月の研究集会では、らせん転位をこの離散群による対称性の破れとして捉え、代数的な考察による離散幾何の表示と  $\Gamma$  収束との関係や、 $\Gamma$  収束によるモデル化に関する話題にフォーカスして議論を行った。

他方、2016 年の SGW での話題である粒界の研究においても、境界条件の下でエネルギー最小を与える状態として、この  $SE(3)$  の離散群の、半群を含めた代数的な考察が求められている。特に、近年、界面の形状を直接、電子顕微鏡等で観察することが可能となってきており、離散的、代数的取り扱いとメゾスケールとの関係の解明が求められている。

これらの状況より、本研究集会では

- 1) 結晶の界面に関わる数値解析、非線形時間発展方程式、整数論を援用した離散幾何学などの数学手法に関する知見の共有
  - 2) 代数的考察に基づく離散群による対称性の破れを伴う幾何構造の数学的記述に関する知見の共有
  - 3) 対称性の破れに対する ill-posed あるいは特異的な摂動を考慮した  $\Gamma$  収束などによるエネルギー論的な数学モデルの構築
  - 4) ナノとマイクロの間を橋渡しするマルチスケール的な数学モデルの構築
  - 5) 近年の計測技術の発展による実際の結晶構造に関する知見の共有
- を目指し、様々な分野の専門家が集い、議論を行うこととなった。

このような多岐にわたる高度な数学モデルの議論は従来なされてこなかった。しかし、今後、実験技術の急速な発展と、産業界における要求仕様の高度化とにより、そうした数学モデルの必要性が増すものと予想される。我々は、本研究集会をそのモデルケースとして位置づけ、議論を行った。

実際、

1. 界面に関して、数値計算、非線形な時間発展方程式、整数論を援用した離散幾何学など、多岐に亘る視点からの講演があった。

2.  $\Gamma$ 収束を利用した転位の解析においては、3つの講演があり、全く異なるアプローチによる様々な階層での解析が可能であることが明らかにされた。
3. 幾何学、代数学からのアプローチに関しては、講演も多数あり、3次元空間内の新たな離散幾何や転位の表現、結晶の構造に関する解析が可能となることも示された。
4. 数学者が生の実験データに触れることは通常ほとんどないため、実験データに関する講演もして頂いた。

このように本研究集会の趣旨に沿った描像がそれぞれ提示され、それらに沿った議論がなされた。

本研究集会では、1日目にウェルカム・パーティーとしてワン・コイン・パーティーを開催し、2日目、3日目には自由に各自の興味あるテーマを議論するためのディスカッション・タイムを設けた。ワン・コイン・パーティーでは一人当たり500円でビールなどを飲みながらの議論であったが、それぞれで、異なる分野の研究者が有意義に交流することができた。

これらにより、各研究者の中で、それぞれの研究分野へのフィードバックがかかったものと確信する。今回のテーマではないが、実際、キンク現象に関しては、実験データを再現する新たな解析手法が提案でき、現在、論文化に向けた検討を行っている。

本研究集会の開催により、各分野の専門家が現状とその課題を提示し合い、議論することによって、これらの高度な数学モデルの構築の進展に寄与できたものと考えている。

組織委員：

佐伯修	九州大学 IMI
中川淳一	新日鐵住金
田上 大助	九州大学 IMI
上坂正晃	北海道大学
Pierluigi Cesana	九州大学 IMI
濱田 裕康	佐世保高専
松谷茂樹	佐世保高専 (代表)

2017年9月30日