

IMI 研究集会 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 (Zoom & 九州大学 IMI オーディトリウム (ウエスト 1 号館 D 棟 4 階 413 号室))
(2023 年 9 月 4 日 (月)-5 日 (火))

1 Program

9 月 4 日 (月)

12:55-13:15	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
13:20-14:20	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
14:35-15:35	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
15:50-16:50	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
17:05-18:05	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	

参加にあたっては、下記の参加申込をお願いします。

<https://forms.gle/1aVHTjXNjfqjZdbV8>

9/4 懇親会を予定しております。参加を希望される方は松谷まで連絡ください。～8/10

s-matsutani@se.kanazawa-u.ac.jp

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)

12:55-13:15	Shigeki Matsutani (Kanazawa Univ.)	Opening: Geometry, algebra and nanocarbon
13:20-14:20	Jun Onoe (Nagoya Univ)	Theoretical prediction and experimental demonstration of geometry-driven curvature effects using 1D uneven structured C_{60} Polymer
14:35-15:35	Yusuke Noda (Okayama Pref. Univ)	A first-principles consideration of energetic stability of peanut-shaped fullerene polymer
15:50-16:50	Xiao-Wen Lei (Tokyo Inst. Technology)	Mathematical analysis of low-dimensional nanocarbon materials focusing on the hierarchy of lattice defects
17:05-18:05	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	

To participate this conference, please apply below

<https://forms.gle/1aVHTjXNjfqjZdbV8>

2 概要

9月4日(月)

1. 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
(Opening: geometry, algebra and nanocarbons)

本研究会「材料科学における幾何と代数 I-IV」の振り返りと、今回の研究集会のテーマに関して述べる。

I will review our workshop "Geometry and Algebra in Material Science I-IV" and describe the theme of this meeting.

2. 尾上順 (名古屋大学工学研究科) 1次元凹凸 C₆₀ 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 C₆₀ Polymer)

C₆₀ 薄膜に電子線 (3-7 keV) を照射することで生成する凹凸周期曲面構造を有する 1次元 (1D) C₆₀ ポリマー [1-3] が、1D 金属に特徴的な物性を示すことを見出した [4]。この 1D 凹凸曲面上を自由電子が動く挙動 (部分多様体の量子力学) は、次式のハミルトン演算子

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

で与えられる。 $g = \det[g_{ij}]$ は計量テンソルを表す。第 1 項は電子の運動エネルギーに対応する演算子である。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る (1D 平面では第 2 項は現れない) ことが知られていたが、実際に電子に影響を与えるかは不明であった。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 [5] した上で、実験的に検証することに成功した [6]。本講演では、他のナノカーボンでは見られない部分多様体の量子力学について紹介する。

We have reported that 1D C₆₀ polymer with a concavo-convex periodic curved structure [1-3] formed from electron-beam-irradiation (3-7 keV) of a C₆₀ 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 submanifold).

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

Here, $g = \det[g_{ij}]$ represents the metric tensor. The first term is an operator 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 C₆₀ polymer [5] and then experimentally demonstrate it [6]. In this talk, I will introduce the quantum mechanics of submanifold of the 1D C₆₀ polymer when compared to the other nanocarbons such as fullerenes, nanotubes, and graphene.

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]

3. 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
(A first-principles consideration of energetic stability of peanut-shaped fullerene polymer)

実験の先行研究において、 C_{60} 薄膜に電子線を照射することで擬一次元構造のピーナッツ型フラーレンポリマー (PSFP) が生成されることが報告された。しかし、PSFP の原子レベルの構造は明らかになっておらず、理論計算の先行研究において様々な PSFP モデルが提案されている。本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を実行して様々な PSFP モデルのエネルギー的安定性を評価した。計算結果から PSFP のエネルギー的安定性と幾何構造の関係を明らかにした。

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.

4. 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
(Mathematical analysis of low-dimensional nanocarbon materials focusing on the hierarchy of lattice defects)

本研究では、微分幾何学的手法を用いてグラフェンシート (Graphene Sheet: GS) の力学的特性を表現することに着目しながら曲面設計に必要な基礎論の確立に繋がる知識を獲得することを目的とし、分子動力学法を用いて異なる格子欠陥を有する GS の安定構造モデルを数種類作成し、その幾何学的特性と力学的特性の数理解析を行う。幾何学特性においては曲面の平均曲率とガウス曲率、力学特性においては内部応力分布とポテンシャルエネルギー分布の解析を行う。また、構造や配置の変化 (特に格子欠陥の階層性) による力学特性の変化を考察する。さらに、解析によって得られたデータから、幾何学的特性と力学的特性の相互関係の探索を試み、ナノ材料力学の数理解析をより一層開拓すると考える。

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.

5. 落合啓之 (九州大学) C_{60} の数理 I, II
(Math behind C_{60} I, II)

コスタントの論文

<https://www.ams.org/notices/199509/kostant.pdf>

を2回に分けて紹介する。これはアメリカ数学会の Notice の 1995 年 9 月号に出版された「切頭正 20 面体のグラフとガロアの最後の手紙」という表題の 10 頁の記事である。松谷先生が今回の研究集会のいくつかの講演とこの論文との繋がりに気がつき、それに基づいてこの論文を今回の集会で理解することになった。Notice は必ずしも数学を専門としない読者を意識して書かれてはいるものの、この短いページでは表題にあるような幅広い内容を詳述するには限界もある。今回は、異分野交流でもあるので、黒板で丁寧に説明する。講演中もどしどし質問して欲しいし、1 コマ目と 2 コマ目の間にも時間がたくさんあるので質問や議論してほしい。なるべく 2 コマ目にフィードバックできるようにする。

少しは話の中身も書いておこう。主題の一つは C_{60} のように対称性の高い 3 次元立体を頂点と辺からなるグラフとして理解することである。対称性の記述に群を利用することはよく行われる。ここでは一般の群ではなく、特別な数字に関係する群がたくさん登場している。なるべく込み入らないように工夫して説明したい。

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.

9月5日(火)

1. 山岸弘幸 (東京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

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

ソボレフ不等式は、関数の上限を関数のポテンシャルエネルギーの定数倍で評価する不等式である。不等式の等号を達成する最良定数と最良関数を求めた。背景には糸や棒のたわみを記述する線形微分方程式の境界値問題がある。解の積分核にグリーン関数が登場する。グリーン関数は適切なヒルベルト空間と内積を設定すると、再生核としての性質を有する。再生等式にシュワルツ不等式を適用することで、ソボレフ不等式が導出される。最良定数と最良関数はグリーン関数で記述できる。この研究をさらに発展させて、 C_{60} フラーレンの古典力学モデルに対応する離散版のソボレフ不等式を考えた。離散ソボレフ不等式は、原子の平衡状態からの変位を、 C_{60} 全体のポテンシャルエネルギーの定数倍で評価する不等式である。背景には、 C_{60} のたわみ問題が存在する。解はグリーン行列を用いて表される。離散ソボレフ不等式の等号を達成する最良定数と最良ベクトルはグリーン行列で表される。最良定数は古典力学モデルの「かたさ」を示すものと考えられる。

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.

2. 緒方勇太 (京都産業大学) On discrete constant principal curvature surfaces

本講演では、完全三分木上の離散曲面を考え、その離散主曲率を導入する。また、離散主曲率の幾何学的な意味付けのため、離散曲面上の主方向を定義する。講演の最後には、離散主曲率一定曲面の具体例をいくつか構成したので、図を見せながら紹介したい。

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.

3. 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

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

筆者は産官学の全てにおいて分子と材料の設計に携わってきた。そこで用いたのは量子化学と分子動力学そして第一原理計算であり、最近ではデータサイエンス (DS) 的なアプローチも行っている。その経験から「自然知能」が具現化した光合成や天然に存在する色素分子のすばらしさに魅されてきた。「自然知能」とは現在世界中で喧しい人工知能の先に在るものである。この理解を目指して、光合成が水から酸素を発生させ、 CO_2 をデンプンにする未踏のメカニズムに関して筆者らの研究結果をのべよう。さらに天然にあるポルフィラ-334 という色素に学んで設計を試みた研究について報告する。さらに圏論に導かれた攻略にも触れてみたい。

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.