

令和2年度共同利用研究報告書

2020年09月29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 理学研究域 電子情報通信学系・教授

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	20200012	
1. 研究計画題目	材料科学における幾何と代数 I			
2. 新規・継続	継続			
3. 種別	一般研究			
4. 種目	研究集会 (II)			
5. 研究代表者	氏名	松谷 茂樹		
	所属 部局名	金沢大学 理学研究域 電子情報通信学系	職名	教授
	連絡先			
	email		TEL	
6. 研究実施期間	2020年09月07日(月曜日)～2020年09月08日(火曜日)			
7. キーワード	結晶、らせん転位、結晶構造、トポロジカル欠陥、キンク現象、破壊、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、幾何学の材料学への応用			
8. 参加者人数	52人			

9. 本研究で得られた成果の概要

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)を発展させるものである。

これまでの研究会の成果を踏まえ、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開催した。この背景には、1)技術の発展により求められる製品仕様が大きく変貌したこと、2)観測装置が発展し、例えば原子レベルでの構造の乱れが観測可能になったこと、3)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。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、材料科学者と数学者の交流は限られたものとなっている。そこで、材料科学の研究者と、幾何学、代数学的手法に関わる数学者を迎えて、議論する場を提供し、相互理解のきっかけを得ることを目的に本研究集会を開催した。

これにより、21世紀に入って材料科学において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加速が期待される。これらの新しい動きは研究分野としては確立されていないが、その礎・足場となると考えられる。

本研究集会においては、川原一晃助教(東京大学)、熊野知二氏(日本製鉄(株))、小林舜典氏(大阪大学)、下川智嗣教授(金沢大学)、田中良巳准教授(横浜国立大学)、山岸弘幸准教授(都立高専)、關戸啓人氏(京都大学)、田中守講師(都城高専)、松江要助教(IMI)、中川淳一特任教授(東大数理)の発表や、参加者による活発な議論、交流により、上記目的は達成されたと考えており、これが本研究会の成果である。

また、1998年の成果であるキンク問題に関わる弾性曲線モデルの研究は S. Matsutani, H. Nishiguchi, K. Higashida, A. Nakatani and H. Hamada, On  $\Lambda$ -Elastica J. Geom. Symm. Phys., 54 (2019) 13-35 として出版されている。また、1998年の成果であるBCC結晶のらせん転位に関わる研究に関してはarXiv: 1906.04332に公開をしている。本研究会の結果も将来、発展的に新たな研究テーマとなることを期待している。

## 題名：「材料科学における幾何と代数 I」

### 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)、研究集会 II「結晶の界面、転位、構造の先進数理解析」(2019 年)を発展させるものである。

これまでの研究会の成果を踏まえ、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開催した。この背景には、1)技術の発展により求められる製品仕様が大きく変貌したこと、2)観測装置が発展し、例えば原子レベルでの構造の乱れが観測可能になったこと、3)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。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、材料科学者と数学者の交流は限られたものとなっている。そこで、材料科学の研究者と、幾何学、代数学的手法に関わる数学者を迎えて、議論する場を提供し、相互理解のきっかけを得ることを目的に本研究集会を開催した。

これにより、21 世紀に入って材料科学において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加速が期待される。これらの新しい動きは研究分野としては確立されていないが、その礎・足場として位置づけられる。

この目的に従い、川原一晃助教(東京大学)、熊野知二氏(日本製鉄(株))、小林舜典氏(大阪大学)、下川智嗣教授(金沢大学)、田中良巳准教授(横浜国立大学)、山岸弘幸准教授(都立高専)、關戸啓人氏(京都大学)、田中守講師(都城高専)、松江要助教(IMI)、中川淳一特任教授(東大数理)に発表して頂いた。

より詳しくは、川原一晃助教からは「界面接合の実験と数理」、熊野知二氏(日本製鉄(株))からは「材料技術者のための四元数と行列を用いた対応格子関係の導出」として結晶界面での対応格子と整数論の関係を紹介して頂いた。また、小林舜典氏(大阪大学)からは「Geometrical modeling and numerical analysis on dislocations in solid」として、転位の甘利・近藤模型を基礎として数値解析の話題を、また、下川智嗣教授(金沢大学)からは「Relationship between the development of lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations」として、分子動力学による結晶界面や転位の様子の話題を、それぞれ紹介して頂き、材料科学における数学活用の可能性について議論して頂いた。田中良巳准教授(横浜国立大学)からは「ゲルの破壊と浸透圧の力学」として、ゲル材料の力学的性質を例とした材料科学における物理モデル(数学モデル)の構築の方法を紹介して頂いた。山岸弘幸准教授(都立高専)と關戸啓人氏(京都大学)からはそれぞれ「正多面体における離散ソボレフ不等式の最良定数」「 $C_{60}$ における離散ソボレフ不等式の最良定数」として、グラフ上のラプラス作用素に関するソボレフ不等式を基礎とす

る炭素分子に関わる材料の特性について、数学的視点からの議論を紹介して頂いた。同様にグラフ理論を基礎として田中守講師(都城高専)からは「結晶構造に近いアモルファス構造のモデル化とパーコレーション」として光学的効果による材料の変質の特性解析について紹介して頂いた。松江要助教(IMI)からは「有限時間特異性：力学系的アプローチ」として、時間発展方程式において破壊現象を如何に取り扱うべきかという原理的な課題に関する解析学的な研究状況について紹介して頂いた。中川淳一特任教授(東大数理)からは、東京大学大学院数理科学研究科におけるFMS P社会数理実践研究として大学院の学生による研究状況について「結晶と準結晶に動機付けられた数学の問題 II」として、最近の進展を紹介して頂いた。

コロナ禍の影響により、オンラインでの開催となったが、そのお陰で50名を超える研究者に参加して頂くことができた。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、それらの方向性を共有することができたと考えている。

1998年の成果であるキンク問題に関わる弾性曲線モデルの研究は

S. Matsutani, H. Nishiguchi, K. Higashida, A. Nakatani and H. Hamada, On  $\Lambda$ -Elastica  
J. Geom. Symm. Phys., 54 (2019) 13-35

として出版されている。また、1998年の成果であるBCC結晶のらせん転位に関わる研究に関してはarXiv:1906.04332に公開をしている。本研究会の結果も将来、発展的に新たな研究テーマとなることを期待している。

研究集会代表

松谷茂樹

2020.9.21

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

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 On-line 研究会 (Zoom)  
(2020年9月7日(月)-8日(火))

### 1 Program

9月7日(月)

11:00-11:05 オープニング

11:05-11:45 川原一晃 (東京大学) 界面接合の実験と数理

11:45-13:30 昼休憩

13:30-14:10 熊野知二 (日本製鉄(株)) 材料技術者のための四元数と行列を用いた対応格子関係の導出

14:30-15:10 小林舜典 (大阪大学) Geometrical modeling and numerical analysis on dislocations in solid

15:30-16:10 下川智嗣 (金沢大学) Relationship between the development of lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations

16:30-17:10 田中良巳 (横浜国立大学) ゲルの破壊と浸透圧の力学

9月8日(火)

11:00-11:30 山岸弘幸 (都立高専) 正多面体における離散ソボレフ不等式の最良定数

11:35-12:05 關戸啓人 (京都大学)  $C_{60}$  における離散ソボレフ不等式の最良定数

12:05-14:00 昼休憩

14:00-14:40 田中 守 (都城高専) 結晶構造に近いアモルファス構造のモデル化とパーコレーション

15:00-15:40 松江要 (IMI) 有限時間特異性: 力学系的アプローチ

16:00-16:30 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:  
結晶と準結晶に動機付けられた数学の問題 II

16:30-16:35 クロージング