

内96-1

早稲田大学大学院理工学研究科

博 士 論 文 概 要

論 文 題 目

多結晶の位相構造に関する研究

申 請 者

中 村 修 一

Shuichi Nakamura

資源及材料工学専攻・数理材料設計学研究

1996 年 5 月

伝統的な結晶学は鉱物の結晶外形の分類に始まり、18世紀後半には、面角一定の法則や有理面指数の法則が経験則として得られていた。これらの法則から1787年にはHaüyが結晶の格子構造（単位構造が周期的に連なった構造）を既に洞察してはいたが、実際にその存在が確かめられたのは、実験装置も発達した20世紀初頭のLaueによるX線の結晶による回折の発見によってである。このLaueの発見によって、様々な物質の固体状態の多くは格子構造を有することが確かめられた。このことにより、今日の「結晶」という言葉は格子構造を有する物質という意味を持つこととなった。こうした歴史的背景から、伝統的な結晶学は単結晶の空間群の決定や格子定数の決定を目的とする結晶構造解析に専ら従事してきた。結晶のもつ空間群の決定や格子定数の決定は、通常、結晶によるX線、電子線等の回折における回折斑点の分布と強度に基づき行われるが、このために、Patterson関数を用いる方法や、Uda-Rietveld法等が開発された。このように、伝統的な結晶学は数学的には群論やFourier解析等に立脚したものであった。従って、現実の固体物質の多くは多結晶として存在しているにもかかわらず、多結晶を議論する際において最も基本的と考えられる多結晶中の単結晶の集まり方等については数学的に厳密な議論はほとんどなされてこなかった。それどころか多結晶の数学的定義すらされておらず、多結晶を扱うための数学的方法論は未だに整備されていない。多結晶が数学的に定義され、多結晶のもつ構造や性質を明確に議論することが可能となれば、新しい材料を開発するという観点から材料設計学の裾野を大きく広げることになると考えられる。例えば、多結晶を位相空間（topological space）として扱うことができれば、多結晶中の単結晶に対する物性値を、多結晶を定義域とする関数の値として扱うことが可能となり、多結晶体である複合材料のもつ物性の予測、またそれとは逆に、好ましい物性をもつためにはどのような多結晶を作成すればよいか等の議論ができるようになると考えられる。このことから、多結晶を数学的議論の対象となるように明確に定義し、それを扱うことは材料設計学上有意義であると考えられる。そこで本研究では、多結晶を数学的に取り扱う一つの方法論を提案し、この提案が空虚なものでないことの証として、その方法論に基づき多結晶中にある特殊な構造が存在することを証明する。

本論文は第1章「緒言」、第2章「多結晶の位相化」、第3章「コンパクトな多結晶とその応用」、第4章「多結晶の位相化再論」、第5章「結言」の全5章により構成される。以下、各章毎の概要を述べる。

第1章「緒言」においては、結晶学の歴史的流れについて簡単に触れ、伝統的な結晶学がほとんど取り扱っていなかった多結晶を扱う数学的方法論を本報において新たに提案することを目的とした必然性を述べる。また、本論文の概要についても述べる。

第2章「多結晶の位相化」においては、多結晶を扱う数学的議論の場として位相空間「多結晶」を提案する。ここでは、多結晶の位相化として三つの異なる位相化が示されている。まず、一つ目の多結晶の位相化について述べる。従来、単結晶はベクトル空間を用いて定義されていたが、ここでは今後の議論の一般性も考慮し、格子点の位置という概念が意味を持つアフィン空間を用いて単結晶を定義し直す。アフィン座標枠 Σ を定めた k 次元アフィン空間 (X, \vec{X}, θ) を考える。 \vec{X} の各順序基に対し、単結晶を定義し、それら単結晶全体の集まりとして多結晶 P を定義する。この多結晶 P に自然な形で \vec{X} のノルム $\|\cdot\|$ による距離 ρ を導入する。この距離 ρ による距離位相 τ_ρ

により P は位相空間「多結晶 (P, τ_ρ) 」として位相化される。次に、二つ目の多結晶の位相化について述べる。単結晶を生成する順序基の順序を無視することによって、単結晶の全体 P を同値類に類別する。このことは、集合としては互いに等しい基から生成される単結晶の集まりを一つの単結晶として扱うことに相当する。この同値類としての単結晶全ての集まりは P の商集合 P/\sim であり、この P/\sim に ρ からある一定の手段によって得られる距離 $\tilde{\rho}$ による距離位相 $\tau_{\tilde{\rho}}$ を与えることにより、 P/\sim は位相化され、位相空間「多結晶 $(P/\sim, \tau_{\tilde{\rho}})$ 」となる。一方、 P/\sim は標準射影 $f: P \rightarrow P/\sim$ による商位相 $\tau(f)$ により、自然な形で位相化されるが、この商位相 $\tau(f)$ は距離位相 $\tau_{\tilde{\rho}}$ と等しくなることを示すことができる。このことから距離 $\tilde{\rho}$ による位相化が P/\sim において本質的であることがわかる。最後に、三つ目の多結晶の位相化について述べる。同一と見なす単結晶の集まりを広げるという意味において二つ目の多結晶の位相化をさらに一般化する。 X 内における格子点の配列が同じであるということだけに基づいて、 P を同値類に類別する。このことは格子模様が同じである単結晶を同じ単結晶として扱うことに相当する。この同値類としての単結晶全ての集まりは P の商集合 P/\sim' となっている。この P/\sim' において、有効点族に関する真偽の定まるある「判断」によって P/\sim' 内の部分集合の閉包を定義することができる。従って、 P/\sim' はその「判断」によって位相化される。この位相を τ' で表せば、 P/\sim' は位相空間「多結晶 $(P/\sim', \tau')$ 」となる。この「判断」に基づく位相 τ' は標準射影 $g: P \rightarrow P/\sim'$ による商位相 $\tau(g)$ と一致することが示され、その結果、有効点族に関する「判断」がこの有効点族の $(P/\sim', \tau')$ における収束の概念と一致することが示される。以上、第2章における多結晶の位相化によって、多結晶中の単結晶列の収束等を議論することが可能となる。

第3章「コンパクトな多結晶とその応用」においては、第2章にて提案された多結晶 (P, τ_ρ) の部分空間としてコンパクトな多結晶を考える。このコンパクトな多結晶における応用として、単結晶の集まり方に関して自己相似性をもつコンパクト部分集合の存在を示す。多結晶 (P, τ_ρ) の部分空間がコンパクトとなるための十分条件として、格子定数（順序基）に関する一定の条件、(C-1)(C-2)条件を提示する。すなわち、この(C-1)(C-2)条件を満たす順序基から生成される単結晶全ての集まり \hat{P} を考えれば (P, τ_ρ) の部分空間 $(\hat{P}, \tau_\rho \cap \hat{P})$ はコンパクトとなる。この $(\hat{P}, \tau_\rho \cap \hat{P})$ は孤立点をもたないことを示すことができる。従って、 \hat{P} の濃度に関して、 P と同様に連続体濃度をもつことが理解される。このコンパクトな多結晶 $(\hat{P}, \tau_\rho \cap \hat{P})$ における単結晶の集まり方の予測に関する応用として自己相似性を取り上げる。通常の自己相似性は「距離空間の部分集合 S に対して、有限個（2個以上）の縮小写像が存在し、それらの縮小写像による S の像の和が S と等しくなるとき S は自己相似性をもつ」として定義される。ここでは、通常、定数である縮小写像における縮小係数を実数値関数に拡張することにより縮小写像の概念を一般化する。この一般化された自己相似性をもつコンパクト部分集合の $(\hat{P}, \tau_\rho \cap \hat{P})$ 内における存在は、 $(C(\hat{P}), d_H)$ 上で定義される集合力学系の不動点の存在を証明することにより示される。ここで、 $C(\hat{P})$ は $(\hat{P}, \tau_\rho \cap \hat{P})$ の空でないコンパクト部分集合すべての集まりを表し、 d_H はHausdorff距離を表す。また、 $(P/\sim, \tau_{\tilde{\rho}})$ のコンパクトな部分空間 $(f(\hat{P}), \tau_{\tilde{\rho}} \cap f(\hat{P}))$ に対しても全く平行な議論によって、自己相似性をもつコンパクト部分集合の存在を示すことができる。以上、第3章の議論によって、第2章で提案された位相

空間としての多結晶中に自己相似構造をもつ部分が存在することが示された。

第4章「多結晶の位相化再論」においては、様々な物理的状況下での多結晶の位相化を提案する。具体的には、逆格子の集まりに関する位相化、向きづけられた単結晶の集まりに関する位相化、および、長周期構造をもつ単結晶の集まりに関する位相化を提案する。まず、逆格子の集まりに関する位相化について述べる。第2章で定義した単結晶の一つ一つに対して逆格子が一つずつ定まる。いま、単結晶を生成する順序基を考えれば、この順序基の各ベクトルとの内積が Kronecker の δ となるような順序基が唯一存在する。従って、この順序基から生成される単結晶として逆単結晶(逆格子)を定義することができる。この逆格子全ての集まり P^* は、 P と同様 ρ による距離位相 τ_ρ により位相化され、位相空間 (P^*, τ_ρ) となる。この (P^*, τ_ρ) に対しては (P, τ_ρ) に関する第2章、第3章の議論がそのまま適用できる。次に、向きづけられた単結晶の集まりに関する位相化について述べる。いま、歪対称 p 次形式を一つ考える。すると多結晶 (P, τ_ρ) に属する各単結晶はそれを生成する順序基を代入した歪対称 p 次形式の値の符号により、その符号が正のもの、負のものという二つの仲間に分類することができる。すなわち、 P はその値が正となる単結晶の集まり全体 P^+ と負となるものの全体 P^- に直和分解できるということである。こうしてできる二つの部分空間 $(P^+, \tau_\rho \cap P^+)$, $(P^-, \tau_\rho \cap P^-)$ に関しても第2章、第3章と平行な議論を適用することが可能である。最後に、長周期構造をもつ単結晶の集まりに関する位相化について述べる。ここでいう長周期構造とは格子点が母体となるものと異なるもの(置換、欠陥等)によって周期的に占められている構造のことを意味する。いま、長周期構造を表すベクトルを用いて長周期構造の全体に距離 ρ' を導入することができる。この距離 ρ' を用いて長周期構造をもつ単結晶の全体 \check{P} における距離 $\check{\rho}$ を ρ と ρ' の和として与えることができる。従って、 \check{P} は位相化され、位相空間 $(\check{P}, \tau_{\check{\rho}})$ となる。この $(\check{P}, \tau_{\check{\rho}})$ において長周期構造を表すベクトルのノルムの大きさに対してある一定の条件を付与することによって、 $(\check{P}, \tau_{\check{\rho}})$ のコンパクトな部分空間を考えることができる。従って、このコンパクトな部分空間に対しても第3章と平行な議論が適用できる。以上、第4章において、いくつかの物理的状況における多結晶の取り扱いについて言及し、第2章や第3章と平行な議論が適用できることを示した。

第5章「結言」においては、本論文の総括を行い、本研究で得られた結果について要約する。また、本研究の材料工学への実践についても言及する。