

数理科学実践研究レター 2019–9 November 28, 2019

特異アフィン多様体を用いた格子欠陥の幾何学的な記述

by

石橋 典



UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

特異アフィン多様体を用いた格子欠陥の幾何学的な記述

石橋典¹ (東京大学大学院数理科学研究科)

Tsukasa Ishibashi (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概要

格子欠陥 (lattice defect) とは、外力などの影響により結晶構造に局所的な歪みをもつ結晶格子である。これは特に製鉄の過程においては典型的な現象であるが、このような結晶は弾性体理論の範疇外であり物理的な理解が難しい。本稿では格子欠陥を特異アフィン多様体 (singular affine manifold) を用いて幾何学的に記述する。特に 2 次元格子の場合にリーマン面上の有理型微分を用いて変形理論を考察する。

1 格子欠陥の例

はじめに格子欠陥の典型的な例について触れておく。

1.1 刃状転位

刃状転位 (edge dislocation) のモデル図を図 1 に示す。頂点は原子、その間の辺は原子の結合を表す。このような欠陥は横方向に強い力を加えた時に原子の結合がずれることにより発生する。中央の転位が”発生している”と思われる点において紙面に垂直方向な直線を描き、これを転位線 (dislocation line) と呼ぶ。また、”ずれの方向”を Burgers ベクトルと呼ぶ。刃状転位の場合には転位線と Burgers ベクトルは垂直である。Burgers ベクトルの数学的な定式化については 3.1 節を見よ。

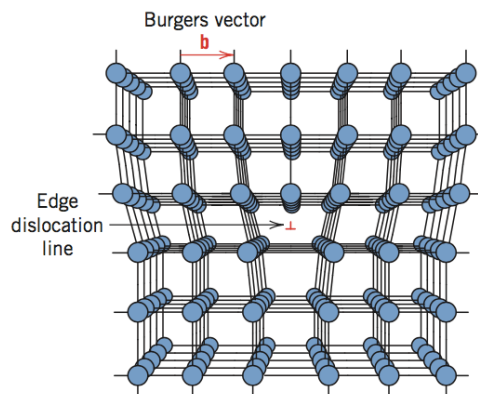


図 1: 刃状転位. A. G. Guy, Essentials of Materials Science, McGraw-Hill Book Company, 1976, p. 153 より引用。

1.2 螺旋転位

螺旋転位 (screw dislocation) のモデル図を図 2 に示す。ここでは原子は点として描かれている。この場合には転位線と Burgers ベクトルは平行である。

1.3 回位 (wedge 欠陥)

回位 (disclination) のモデル図を図 3 に示す。原子は点で描かれている。このような欠陥は液晶などに見られる。

¹ishiba@ms.u-tokyo.ac.jp

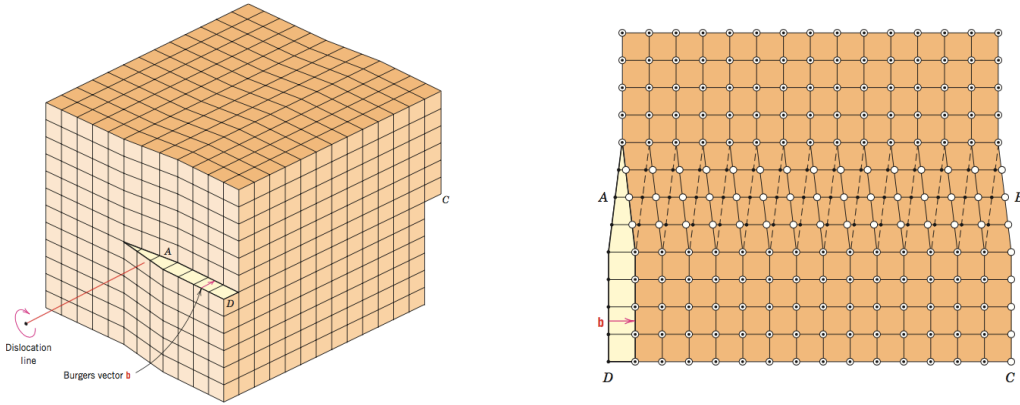


図 2: 螺旋転位. W. D. Callister, Jr., Materials science and engineering : an introduction, John Wiley & Sons, Inc., 1940, p. 90 (左), W. T. Read, Jr., Dislocations in Crystals, McGraw-Hill Book Company, New York, 1953 (右) より引用.

先行研究. Riemann 幾何の弾性体への応用については歴史が古く, 成書が多く存在する. 例えば [Au09] を見よ. 上述の格子欠陥は弾性体の理論の範疇外ではあるが, Riemann 幾何を用いた定式化については多くの先行研究が試みられている. 例えば [KMS15, Ka05, KL08] などを見よ. また, [HMNSU18] ではファイバー束のモノドロミーを用いた螺旋転位のトポロジカルな定式化が行われている. 本稿の目的のひとつは後者のトポロジカルな定式化の刃状転位, 回位など他の格子欠陥についての拡張である.

2 特異アフィン多様体

この節では格子欠陥の記述に用いる数学の準備を行う.

定義 1 (アフィン変換群) 半直積群 $\text{Aff}(\mathbb{R}^n) := \text{GL}_n(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^n$ をアフィン変換群とよぶ. ここで積構造は $(A, x), (B, y) \in \text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$(A, x)(B, y) := (AB, Ay + x)$$

で与えるものとする. アフィン変換群はユークリッド空間 \mathbb{R}^n に $(A, x) \cdot v := Av + x$ ($v \in \mathbb{R}^n$) により作用する. 本稿で用いるのは $n = 2, 3$ の場合である.

定義 2 (アフィン多様体) Hausdorff 位相空間 M 上の n 次元アフィンアトラスとは族 $\{(U_i, \phi_i)\}_{i \in I}$ であって次をみたすものである.

1. $\{U_i\}_{i \in I}$ は M の開被覆, $\phi_i : U_i \rightarrow \phi(U_i) \subset \mathbb{R}^n$ は同相写像.
2. $U_i \cap U_j \neq \emptyset$ のとき, 座標変換 $\phi_i \circ \phi_j^{-1} : \phi_j(U_i \cap U_j) \rightarrow \phi_i(U_i \cap U_j)$ は各連結成分上で $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ のある元の制限で与えられる.

極大な n 次元アフィンアトラスを M 上の n 次元アフィン構造とよぶ. n 次元アフィン構造付きの位相空間を n 次元アフィン多様体という.

位相空間 M とその閉部分集合 D について, $M \setminus D$ がアフィン多様体となっている場合には組 (M, D) (又は単に M) を特異アフィン多様体とよぶ.

特異アフィン多様体の欠陥体 (body with defect) への応用は既に [KMS15] で述べられている. [KMS15] ではアフィン構造から誘導される Riemann 計量を用いて計算を行っているが, 本稿ではそのモノドロミー表現に着目する.

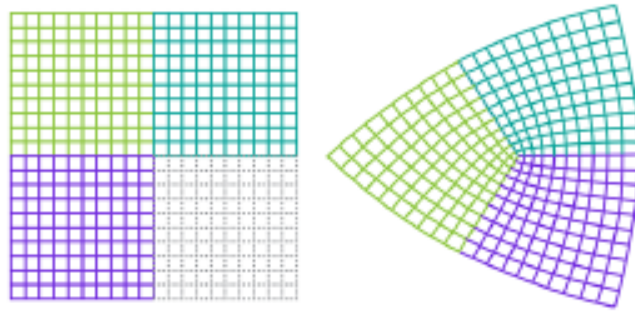


Figure 1: A disclination defect in a 2D crystal. The defect can be formed by cutting away one quadrant from a square lattice (left) and stretching the remaining crystal to fill the space (right). Pretko and Radzihovsky showed that this defect has the same immobility constraint as a fracton [1]. (APS/Alan Stonebraker)

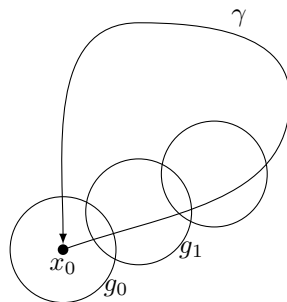
図 3: 回位. K. Slagle, Crystal Defects Mimic Elusive Fractons, Physics 2018 (<https://physics.aps.org/articles/pdf/10.1103/Physics.11.43>) より引用.

M を特異アフィン多様体とし, 基点 $x_0 \in M$, そのまわりでのアフィン座標 (U_0, ϕ_0) を固定する. このとき準同型 $\rho : \pi_1(M, x_0) \rightarrow \text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ が次のように定まる. $\gamma \in \pi_1(M, x_0)$ を代表する閉曲線は有限個のアフィン座標近傍 $(U_0, \phi_0), (U_1, \phi_1), \dots, (U_N, \phi_N)$ で覆うことができる. ここで $U_0 \cap U_1, \dots, U_{N-1} \cap U_N, U_N \cap U_0$ は非空連結, その他の交わりは空集合であるとしてよい. このとき各座標変換 $\phi_{i+1} \circ \phi_i^{-1}$ ($i \in \mathbb{Z}/(N+1)\mathbb{Z}$) は $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ の元 g_i で表される. 以上のもとで

$$\rho(\gamma) := g_N \dots g_0$$

と定めると, これは γ の代表元およびアフィン座標 $(U_1, \phi_1), \dots, (U_N, \phi_N)$ の取り方によらず準同型 $\rho : \pi_1(M, x_0) \rightarrow \text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ を定める. また, 共役類 $[\rho] \in \text{Hom}(\pi_1 M, \text{Aff}(\mathbb{R}^n))/\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ は基点およびアフィン座標 (U_0, ϕ_0) の取り方によらず, M 上のアフィン構造のみで定まる. 詳しい議論については [Th97] を見よ.

定義 3 ρ またはその共役類 $[\rho]$ を M のモノドロミー表現とよぶ. 特異アフィン多様体 (M, D) に対しては, アフィン多様体 $M \setminus D$ のモノドロミー表現を (M, D) のモノドロミー表現と呼ぶ.



3 格子欠陥のモノドロミー表現

3.1 格子欠陥のアフィン構造の構成

格子欠陥のアフィン多様体としての定式化をやや詳細に述べる。まず結晶群について復習しておく。以下では $n = 2, 3$ とする。

定義 4 Euclid 空間 \mathbb{R}^n の等長変換群 $O(n) \times \mathbb{R}^n$ の離散部分群 Γ であって、平行移動からなる部分群 $T_\Gamma := \Gamma \cap \mathbb{R}^n$ が \mathbb{Z}^n に同型となっているものを結晶群 (*crystallographic group*) とよぶ。

T_Γ を (原点への作用の軌道との同一視により) \mathbb{R}^n の部分集合と同一視し、適切に辺で結んで得られるグラフを Bravais 格子とよび、 L_Γ と表す。詳しくは [河野 15] を見よ。 L_Γ の各頂点 v を中心とする十分小さい開球 U_v および各辺 e の十分小さい管状近傍 U_e の和集合 $M(L_\Gamma) \subset \mathbb{R}^n$ を L_Γ の定めるファットグラフとよぶことにする。これは \mathbb{R}^n の開部分多様体である。ここで辺の管状近傍は $U_e \cong e \times D^{n-1}$ とパラメトライズされているとする。 \mathbb{R}^n の開集合

$$U_v := \bigcup_e U_e(v)$$

を v の標準近傍とよぶことにする。ここで e は v を端点にもつ L_Γ の辺全体を走り、 v が 0 に対応するような測地パラメータ $e \cong [0, a]$ に対して $U_e(v) := [0, \frac{3}{4}a] \times D^{n-1} \subset U_e$ とおいた。 L_Γ の頂点集合の $\text{Aut}(L_\Gamma)$ -作用に関する代表木 V を固定する。例えば正方格子の場合には $V = \{\vec{0}\}$ 、菱形格子の場合には V は 2 頂点からなる木である。

以上の準備のもと、格子欠陥のグラフ $G \subset \mathbb{R}^n$ が与えられているとする。ここである結晶群に関する Bravais 格子 L_Γ が存在して、有限個の例外を除き G の各頂点 v の (グラフの意味での) 近傍 $N_G(v)$ は L_Γ のある頂点 $v' \in V$ の近傍 $N_{L_\Gamma}(v')$ と同型になっていると仮定する。 L_Γ を G のモデル格子とよぶ。 G のファットグラフ $M = M(G)$ を上と同様に定義する。 M 上のアフィンアトラスを次のように構成する。

- 各頂点 $v \in G$ に対し同型 $f_v : N_G(v) \xrightarrow{\sim} N_{L_\Gamma}(v')$ を固定し、対応するファットグラフへの拡張を同じ記号で表す。 $\phi_v := i_{v'} \circ f_v : f_v^{-1}(U_{v'}) \rightarrow \mathbb{R}^n$ と定める。ここで $i_{v'} : U_{v'} \rightarrow \mathbb{R}^n$ は自然な埋め込み。
- v' の固定部分群 $\text{Fix}_\Gamma(v')$ の元 γ に対し、 $\phi_v^\gamma := \gamma \circ \phi_v : f_v^{-1}(U_{v'}) \rightarrow \mathbb{R}^n$ と定める。このとき $\{(U_v, \phi_v)\}_{v \in G} \cup \{(U_v, \phi_v^\gamma)\}_{v \in G, \gamma \in \text{Fix}_\Gamma(v')}$ は M 上のアフィンアトラスを定める。これは各頂点での同型 f_v の取り方によらない。

構成から、 M のモノドロミー表現は (必要なら $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ -共役のもと) 結晶群 Γ に値をもつ。ここで、同じモデル格子 L_Γ を与える結晶群 Γ は一般に複数ありうるということに注意しておく。必要な (最小の) 結晶群 Γ は欠陥の種類に応じて決まると考えられる (以下の例を参照)。

3.2 刃状転位, 螺旋転位

刃状転位については図 4 のようになる。モデル格子は正方格子で、図のアフィン座標は全て第 1 座標が右向きになるよう取ってあるものとする。 ”転位線” を含む 5 角形を囲む閉曲線 γ に対してモノドロミーを計算すれば $g_1 = g_2 = (0, 1)$, $g_3 = (-1, 0), \dots$ より $\rho(\gamma) = (1, 0) \in \mathbb{Z} \subset \text{Aff}(\mathbb{R}^2)$ を得る。一方 ”転位線” を囲まない閉曲線に関するモノドロミーは自明であるから、これにより転位の存在を検出することができる。さらにモノドロミー $(1, 0)$ は刃状転位の特徴量である Burgers ベクトルに一致する。全く同様にして螺旋転位のモノドロミー表現も計算することができる (ここでは割愛する)。これらの転位の場合にはモノドロミー表現は $\Gamma = \mathbb{Z}^3 \subset \text{Aff}(\mathbb{R}^3)$ に値をもつ。

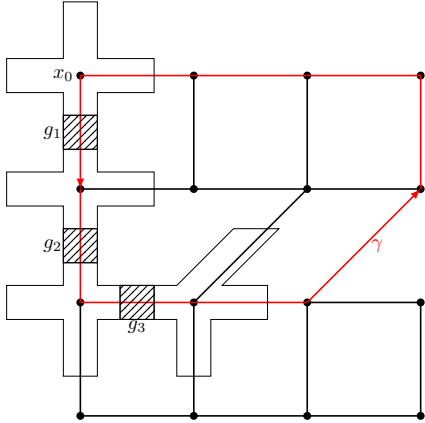


図 4: 刃状転位のモノドロミー表現

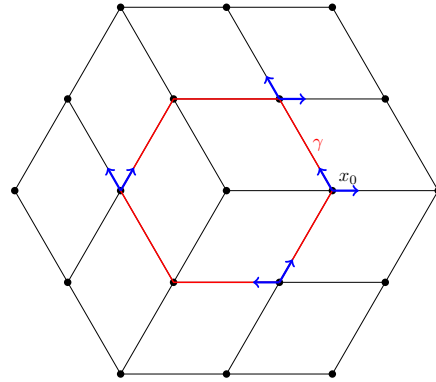


図 5: 回位のモノドロミー表現

3.3 回位

回位については図 5 のようになる。モデル格子は正方格子である。ここではアフィン座標の座標軸を青矢印で示している。閉曲線 γ に沿ったモノドロミーは

$$\rho(\gamma) = \left(R(\pi/2), \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \cdot \left(Id, \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} \right) = \left(R(\pi/2), \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix} \right)$$

と計算できる。この場合にはモノドロミー表現は $\Gamma = P_4 := \langle R(\pi/2) \rangle \times \mathbb{Z}^2 \cong \mathbb{Z}_4 \times \mathbb{Z}^2$ に値をもつ。 P_4 -共役に関する不変量 $\pi/2$ は回位の欠損角と呼ばれる特徴量である。

4 格子欠陥の変形理論

この節では格子欠陥の時間発展を記述する試みについて述べる。例えば 3 次元結晶内に転位線が複数存在し、時間発展によってこれらが衝突する現象は重要な研究対象となっている。このような問題には (特異) アフィン多様体の変形理論が必要と考えられる。本稿では 2 次元格子の場合に格子欠陥の連続体モデルを提案し、簡単な場合にその変形 (時間発展) を調べる。

4.1 Riemann 面上の有理型微分

R を Riemann 面とする。 K_R を R の標準束とする。

定義 5 R 上の有理型 k 次微分 ω とは標準束の k 階テンソル積 $K_R^{\otimes k}$ の有理型切断のことである。

つまり ω は局所的に有理型関数 $\omega(z)$ で表示され、座標変換 $w = w(z)$ に対して

$$\omega(z) = \omega(w) \left(\frac{dw}{dz} \right)^k$$

と振る舞うようなテンソル場である。記号として $\omega = \omega(z)dz^k$ と表す。 ω の零点、極は座標表示によらず定まる。これらを ω の特異点とよび、全体を $\text{Sing}(\omega)$ と表す。

有理型 k 次微分 ω は次のように R 上の特異アフィン構造を定める。点 $p \in R \setminus \text{Sing}(\omega)$ に対し、単連結な複素座標近傍 U_p およびその上での $\sqrt[k]{\omega(z)}$ の分枝をひとつ固定する。関数 $\phi_p : U_p \rightarrow \mathbb{C}$ を

$$\phi_p(q) := \int_p^q \sqrt[k]{\omega(z)} dz$$

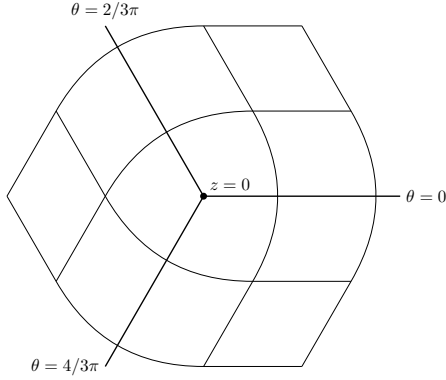


図 6: $\omega = z^{-1}dz^4$ のときの \mathcal{F}_ω

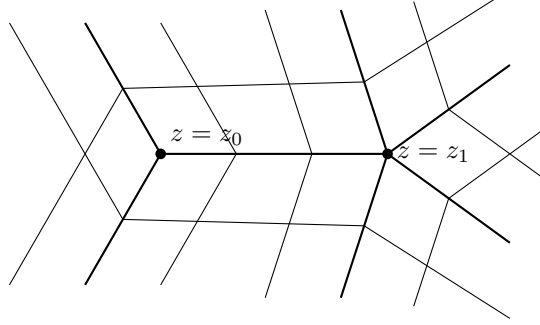


図 7: $\omega = \frac{z-z_1}{z-z_0}dz^4$ のときの \mathcal{F}_ω .

と定める. これらが実際に R 上の特異アフィン構造を定めることは座標変換が

$$z \mapsto \exp\left(\frac{2\pi il}{k}\right)z + c \quad (l = 0, \dots, k-1, c \in \mathbb{C})$$

となることから分かる. 第 1 項は分枝の取り換え, 第 2 項は基点 p の取り換えの寄与である. 特にモノドロミー表現は $P_k(\mathbb{R}) := (R(2\pi/k)) \times \mathbb{R}^2 \cong \mathbb{Z}_k \times \mathbb{R}^2 \subset \text{Aff}(\mathbb{R}^2)$ に値をもつ.

このような形で得られている特異アフィン構造に関しては, その変形理論を有理型 k -微分の変形によって考察することができる. $k = 2m$ が偶数の時には曲線 $\phi_p^{-1}(\Re z = \text{const.})$ および $\phi_p^{-1}(\Im z = \text{const.})$ の族 \mathcal{F}_ω は座標の取り方によらず well-defined であり, これらを用いて特異アフィン構造を可視化することができる. $k = 2$, すなわち有理型 2 次微分の場合には \mathcal{F}_ω は R 上の特異葉層をなし, その構造はよく調べられている (cf. [Str84]).

4.2 曲率 2 重極とその対消滅

$R := \mathbb{C}$ 上の有理型 4 次微分 $\omega := z^{-1}dz^4$ を考える. $\text{Sing}(\omega) = \{0\}$ である. \mathcal{F}_ω を調べるために原点を通る直線 $\gamma_\theta(t) := t \exp(i\theta)$ を考える. $p = \gamma_\theta(\epsilon)$ として

$$\phi_p(\gamma_\theta(a)) = \int_\epsilon^a \gamma_\theta^*(z^{-1/4}dz) = \int_\epsilon^a t^{-1/4} \exp\left(\frac{3}{4}i\theta\right) dt = \frac{4}{3}(a^{3/4} - \epsilon^{3/4}) \exp\left(\frac{3}{4}i\theta\right)$$

となるから, $\gamma_\theta \subset \phi_p^{-1}(\mathbb{R} \cup i\mathbb{R})$ となるのは $\theta = 0, \frac{2}{3}\pi, \frac{4}{3}\pi \pmod{2\pi}$ のとき. 従って \mathcal{F}_ω は図 6 のようになる.

これは回位の連続体モデルとみなせることに注意する. 図 3 と比較せよ. 実際, この特異アフィン構造のモノドロミー表現は 3.3 の計算結果を再現する.

同様にして, $\omega = z dz^4$ という正則 4 次微分を考えると \mathcal{F}_ω は原点に 5 個の特異性を生じる. これらを組み合わせた有理型 4 次微分 $\omega = \frac{z-z_1}{z-z_0} dz^4$ に対応する \mathcal{F}_ω は図 7 のようになる. 得られる特異アフィン構造は曲率二重極 (curvature dipole) とよばれ, 刃状転位の連続体モデルとみなせることが知られている [KMS15]. 実際, z_0 および z_1 を両方囲む閉曲線に沿ったモノドロミー表現は $\Gamma = \mathbb{Z}^2$ に値をもつことが分かる. また, 有理型 4 次微分の変形

$$\omega(t) := \frac{z - \{(1-t)z_1 + tz_0\}}{z - z_0} dz^4, \quad t \in [0, 1]$$

を考えると $\omega(0) = \omega$, $\omega(1) = dz^4$ となり後者は欠陥のない 4 個の格子に対応する. この結果は物理的な観点からは欠陥の対消滅と解釈できる.

5 まとめと今後の展望

特異アフィン構造のモノドロミー表現を用いて、欠陥のある格子を幾何学的に定式化することができた。この方法は [HMNSU18] の一般化であり, [KMS15, Ka05] などによる計量を用いた定式化に比べると計算が容易になっている。また 2 次元の格子の場合にはその連続体モデルを Riemann 面上の有理型微分を用いて記述することができた。今後の課題として、例えば以下のものが考えられる:

- 一般の **Vortella process** のモノドロミー表現. 3 章で扱った刃状転位, 螺旋転位, 回位は Vortella process と呼ばれる構成で得られる格子欠陥モデルの特別な場合である。一般の Vortella process に対しモノドロミー表現を計算し, 欠陥の特徴量を抽出することは今後の課題である。
- 格子欠陥に対する位相的な制約. 4 章では Riemann 面が \mathbb{C} で与えられている場合を考察したが, 例えばトーラスの場合の考察は周期的な境界条件のもとでの格子欠陥を記述できると期待される。この場合には Poincaré-Hopf の定理から欠陥のタイプ (有理型微分の特異性の位数) に位相的な制約が得られる。
- **3 次元格子欠陥の変形理論**. 4 章では 2 次元の格子欠陥について有理型微分を用いた変形理論を考察した。3 次元の特異アフィン構造の変形理論を考察することは格子欠陥の研究 (例えば転位線の衝突現象の研究) において非常に重要な課題であると考えられる。

謝辞 本研究の課題を提供していただいたのみならず, 研究遂行の各段階で様々な助言をいただいた新日鐵住金の中川淳一氏に深く感謝致します。また, 内容に関して様々な意見を下さった, Austin Marsteller, 今野北斗, 間瀬崇史, 中村勇哉, Patrick van Meurs, 竹内知哉, 若林泰央, の各氏に感謝致します。

参考文献

- [Au09] D. Aubram, *Differential geometry applied to continuum mechanics*, Shaker Verlag, Germany, 2009.
- [Ka05] M. O. Katanaev, *Geometric theory of defects*, Phys. Usp. 48: 675-701, 2005; Usp.Fiz.Nauk 175: 705-733 (2005); available at arXiv: cond-mat/0407469.
- [河野 15] 河野俊丈, 結晶群, 共立出版, 2015.
- [KL08] M. Kleman, J. Friedel, *Disclinations, dislocations and continuous defects: a reappraisal*, Rev. Modern Phys. 80 (2008), no. 1, 61115.
- [KMS15] R. Kupferman, M. Moshe and J. P. Solomon, *Metric description of defects in amorphous materials*, Arch. Ration. Mech. Anal. 216 (2015), no. 3, 10091047.
- [HMNSU18] H. Hamada, S. Matsutani, J. Nakagawa, O. Saeki, and M. Uesaka, *An algebraic description of screw dislocations in SC and BCC crystal lattices*, Pac. J. Math. Ind. 10 (2018), Art. 3, 20 pp.
- [Th97] W. P. Thurston, *Three-dimensional geometry and topology. Vol. 1*, Princeton Mathematical Series, vol. 35, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1997. Edited by Silvio Levy.
- [Str84] K. Strebel, *Quadratic differentials*, Springer-Verlag, Berlin, 1984.