

# News letter

離散幾何と材料

その共通項を探究する



Discrete Geometric  
Analysis for  
Materials Design

次世代物質探索のための離散幾何学

科学研究費助成事業「新学術領域研究（研究領域提案型）」  
平成 29 年～33 年度

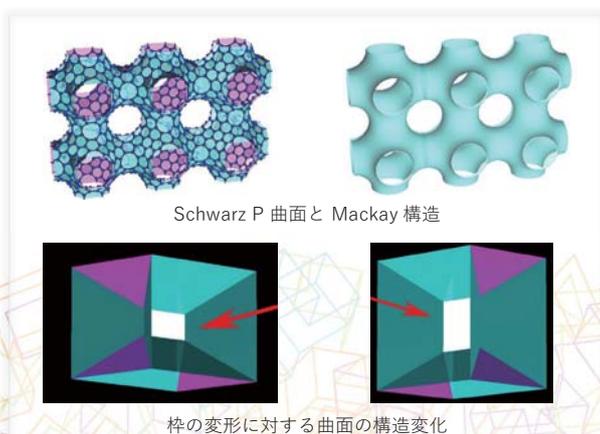
News letter  
Vol. 03

# A03 班代表挨拶

A03 班では「極小曲面とナノ構造の動的構造形成」の研究を行います。特に、多連続多孔質構造を離散曲面論により分類・最適化し、それを相分離により実現するために、大域解析を用いて狙った動的構造形成を実現する指針を見出し、高度な界面制御技術により狙った構造の形成を目指します。

A03 班で用いられる数学は、主として位相的結晶理論を中心とする離散幾何解析となります。位相的結晶理論は、抽象的なネットワーク構造の実空間への最適配置を与える理論であり、これを用いて、エネルギー的に安定な構造を見出し、新奇物質設計へのヒントを与えることができます。一方、針金の枠に張る石鹸膜の形は、数学では極小曲面と呼ばれます。特に空間内の周期的な極小曲面は、位相的結晶理論から得られる3次元ネットワークと密接に関連しています。また、周期的極小曲面は、空間を複数の領域に分割することが知られています。そのような構造は多連続構造と呼ばれ、材料科学で幅広く利用されている多孔質構造はその代表例となります。

今回の研究では、一例として、3次元ネットワークの連続変形と対応する極小曲面の変形を考え、極小曲面の構造が変化する状況を追跡し、実際にナノレベルで動的に構造が変化する多連続構造を構築することを目標としています。また、相分離過程を追跡することで、多連続構造の変化の状況を調べ、目的に応じた多連続構造を実際に構築するための指針を構築することを目指しています。このような解析を行うためには、離散幾何解析や相分離過程の数値シミュレーションのみならず、材料科学・物質科学からの視点が極めて重要であると考えています。



名古屋大学大学院  
多元数理科学研究科 准教授

内藤 久資

NAITO Hisashi

研究分野: 大域解析・数値解析

研究テーマ: 幾何学的変分問題、非線形微分方程式、離散幾何解析

研究概要: 幾何学的変分問題に由来する非線型微分方程式や離散幾何解析などを中心的なテーマにして研究を行なっています。非線形偏微分方程式で記述された幾何学的対象を、その幾何学的性質を利用して解析的に研究しています。一方、物質科学で現れる結晶格子を高い対称性を持ったグラフと考え、さらには変分問題の解として理解することもできます。この立場から、対象の幾何学的性質を利用して、その性質を調べる研究を行なっています

## 論文・書籍紹介

A03 班が目指す幾何学と物質・材料科学の連携については下記の文献が参考になります。

- [1] Makoto Tagami, Yunye Liang, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe, and Motoko Kotani, Negatively curved cubic carbon crystals with octahedral symmetry, Carbon, vol. 76, 266-274, (2014).
- [2] Motoko Kotani, Hisashi Naito, and Toshiaki Omori, A discrete surface theory, Computer Aided Geometric Design, vol. 58, 24-54, (2017).
- [3] 内藤久資, 化学と幾何学～離散幾何学と炭素構造, 数理科学, vol. 624, 42-47, (2015).

# A03 班研究の概要

A03-1 班では、離散幾何解析を用いて、3次元ネットワークから得られる多連続構造の分類をおこないます。A03-2 班では、多連続構造の分類に基づき、相分離過程から得られる極小曲面の連続変形に関する数値シミュレーションを中心に研究を行います。A03-3 班では、ナノスケールの極小曲面を実際に作成し、新奇構造を安定的に構成する研究を行います。

これらの計画研究に加え、様々な研究分野から5件の公募研究が採択されました。内訳は、数学を中心とする研究が2件、材料科学を中心とする研究が3件となっています。これらの計画研究・公募研究は、一見すると数学と材料科学の間に共通点が無いように見えますが、離散幾何解析・極小曲面・ナノスケール材料というキーワードで結びついています。これらの研究が相互に連携し、新奇物質の研究のみならず、新しい視点による数学の研究を行います。

次ページ以後で、A03 班で採択された5件の公募研究の紹介を行います。

HARMONICS  
Column for math-mate collaboration

## 第3話 結晶と幾何学

筆者は様々な物質・材料の研究を経験してきましたが、大学で最初に勉強したのが岩石・鉱物学であったことから、人工の物質・材料を扱う際においても、天然の岩石や鉱物の知識と照らし合わせながら考えることがよくあります。人類が最初に手にした材料は石器や装飾品に用いる岩石や鉱物などであったでしょうから、天然の岩石や鉱物の知識を基に考えるというのは、人類と材料の関係の原点に立ち返るという意義もあるかもしれません。さて、この新学術領域研究では、物質・材料の研究に幾何学を役立てていくことを目的としています。筆者が習った鉱物学の歴史に基づけば、18世紀の終盤、結晶(注釈参照)が同じ形、同じ大きさの微小ブロックの積み重ねでできているということをフランスの鉱物学者が提唱しました。結晶、すなわち材料の基本要素とも言うべきものが、神秘的な(人智を超えた)物体から、科学の対象となっていくのです。この視点に立てば、物質・材料科学の原点は「形」、すなわち幾何学だった訳で、物質・材料科学に幾何学を役立てるといえるのは、ごく自然なことと言えるでしょう。

(注釈) ここで「鉱物」と「結晶」という言葉が出てきましたが、鉱物と結晶は同じものではないかと思っただけかもしれませんが、天然に産する物質で一定の化学組成を持つものが「鉱物」と定義されるのに対し、「結晶」は天然に存在するかどうかとは関係なく、原子が規則正しく配列している物質を指します。鉱物の大部分は結晶ですが、一部、オパールなど非晶質であっても鉱物と定義されているものがあります。人工の化合物も多くものは結晶になりますが、天然に存在しなければ鉱物とは認定されません。

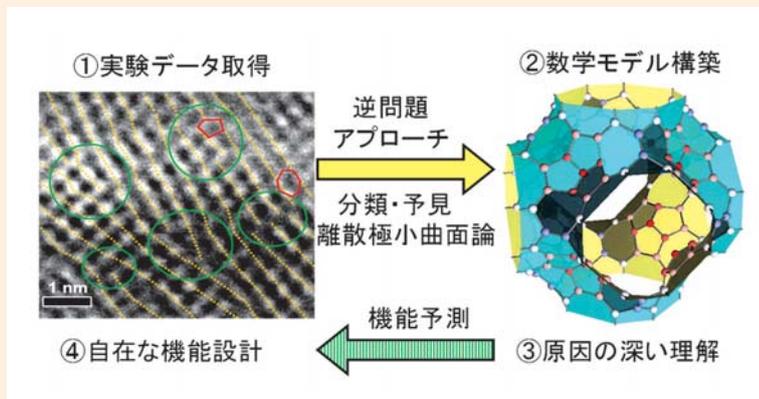
ちょっとこじつけになるかもしれませんが、物質の成り立ちを幾何学で理解しようとする人類の試みの原点は、更に歴史をさかのぼり、古代ギリシアの時代には既にあったと見ることもできます。紀元前5〜4世紀頃、一部の哲学者、レウキッポス、デモクリトス、エピクロスなどは、物質はそれ以上分割できない最小の単位(原子)から成り立っていると考え、Atomism(原子論)を提唱し、それを提唱した彼らはAtomistsと呼ばれます。そして、彼らの次の世代として、プラトンが現れます。プラトン自身はAtomistとは認識されていませんが、万物が5つの多面体(プラトン立体、プラトンの正多面体などと呼ばれる)から構成されているという考え方をもっていました。以上のようなAtomistsと呼ばれる哲学者たちやプラトンの考え方の背景には、物質がある基本的な形の組み合わせで成り立っているという幾何学的な発想があったものと推測することができます。

5 ページへ続く



研究内容

研究題目 ▶ カーボンネットワークの離散曲面論を用いた特性解釈と予測に基づく合成



研究代表者



筑波大学  
数理工学系 准教授  
伊藤 良一

ITO Yoshikazu

研究分野：材料科学、触媒、環境エネルギー  
研究テーマ：曲面を持つグラフェン

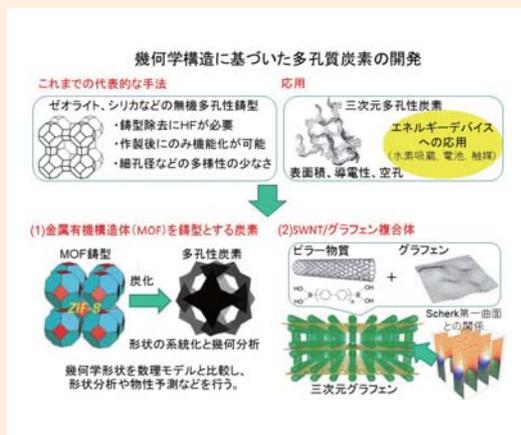
研究概要：数学者との議論を通じて離散曲面で定義可能な極小曲面を持つグラフェンをモデル化することに取り組んでいます。また、その数学モデルから導き出された物性解釈や特性予測を検証・実証するために、実際に極小曲面を持つグラフェンを合成することで数学モデルとの対応を調べながらグラフェンの自在な機能化を目指しています。

研究内容

研究題目 ▶ 幾何学構造に基づいた多孔性炭素材料の開発

研究計画 ▶

本研究では、ナノ構造の極小曲面や動的構造形成の概念といった幾何学構造に基づいて、例えば、金属有機構造体を鋳型とする多孔質炭素材料の新しい作製法を開発し、構造と電極特性などの物性を完全に制御することを目的とした研究を進めていきます。



研究代表者



関西学院大学  
理工学部 准教授  
吉川 浩史

YOSHIKAWA Hirofumi

研究分野：電気化学、有機無機複合材料  
研究テーマ：高性能な電池特性を示す材料の開発

研究概要：遷移金属酸化物に取って代わる新しい高性能な二次電池用正極材料の開発を進めています。多電子の酸化還元反応を示す有機分子や有機無機複合材料を対象に、新規創製と電池特性の検討、放射光施設を利用した電池反応機構の解明を通して、革新的な正極材料の実現を目指しています。また、正極材料だけではなく、様々な多孔性ナノ炭素材料の開発と負極への応用研究も進めています。

3 ページの続き

再び時代は近代に戻ります。オランダの地質学者、解剖学者ニコラウス・ステノが、1669年、同一種の鉱物の結晶は形こそ個々に異なるが、特定の面と面がなす角度を測ると常に一定であるという「面角一定の法則」を発見します。そしてこのステノによる発見が、およそ100年後のアユイによる更なる発見へとつながっていきます。1784年、フランスの鉱物学者ルネ＝ジュスト・アユイは、全ての結晶面を整数の組み合わせ（現在皆が使っている  $h, k, l$ ）で表現できる「有理指数の法則」を発見し、結晶が、原子によって形作られる同じ形状をもった小さなユニットの3次元的繰り返しによってできているという説を提案しました（実際に、この仮説は正しかった！原子、分子を見ることができなかった18世紀に！アユイの豊かな発想に心から敬意を表します！）。原子の存在や、結晶が小さなユニット、すなわち単位胞の繰り返しでできていることの証明は、20世紀のX線回折による構造解析や、電子顕微鏡、走査トンネル顕微鏡等による原子の直接観察を待つ必要がありますが、18世紀に、人類は、結晶のミクロな構造に関する正しいイメージを得ることに成功したのです。そして、19世紀末、3名の科学者（うち2名は数学者のE.S. フォードロフとA.M. シェーンフリース、1名は結晶学者のW. バーロウ）が、それぞれ独立して、結晶構造の対称性を記述するのに用いられる群、すなわち空間群の数が230であることを証明し、結晶の基本的理解が更に前進しました。ここまでくれば、物質・材料科学において幾何学が重要であることを疑う方はもういらっしゃらないでしょう。

結晶についてほぼ完璧に理解したと思われた20世紀の終盤、当時、誰一人として予想しなかった新しい構造をもつ物質の発見がなされました。準結晶です。従来の結晶の定義であった並進対称性を持たないが、しかしながら、原子の配列に秩序があるという、頭の中で想像するのはちょっと難しい物質です。対称性には1回、2回、3回、4回、6回回転（対称）軸はあっても、5回回転軸はありません。正三角形、正四角形、正六角形のタイルは隙間なく平面を埋め尽くすことができますが、五角形のタイルはどんなに頑張っても平面を埋め尽くすことはできず、隙間が空いてしまいます。で

6 ページへ続く

## A01班会議

日時：2018年10月26日(金) 会場：東北大学東京分室会議室 B

本新学術領域 A01 班のメンバーによって班会議が主催されました。本班会議では、公募班のメンバーを中心に講演が行われました。A01 班が扱うテーマの一つであるトポロジカル相と呼ばれる分野の進展は著しく、積極的に情報交換や討論がなされました。本班会議は幅広いバックグラウンドを持つ研究者が集まったことにより、一領域としての材料物理や物性物理を超えて、高エネルギー物理との融合や数学の新たな応用可能性も多岐にわたって議論されました。各講演とも盛んに意見が交わされ、新しく分野の発展が期待されるような内容となりました。さらに、本班会議によって様々な分野のメンバー間の連携が模索されたことで、非常に盛況な結果となりました。



## 領域会議

日時：2018年11月17日(土) 18日(日) 会場：宮城県仙台市太白区秋保町

本新学術領域の全班からメンバーが集合し、全体領域会議が開かれました。最初に、各計画班の代表から本領域が目指す数学と材料科学の融合について説明がありました。その後、公募班の研究代表者によって、トポロジカル物質や高分子材料および多孔質材料などに関する詳細なテーマが発表されました。本全体会議では、物質科学者に加えて数学や情報科学の研究者が一同に会していることにより、新しい視点からの意見も多く出されました。こうした本新学術領域の特色から、色々な分野を繋げる斬新なアイデアが数多く提案され、白熱した議論もなされました。本会議では研究者間の交流も進み、本領域が目指す異分野間の研究の相乗効果を肌で感じられました。こうした様々な分野間の連携が期待以上に促進され、本会議は成功裏に終わりました。



### 5 ページの続き

すので、5 回回転軸をもった結晶はないと考えられていました。しかし、ダニエル・シェヒトマン博士は 1982 年（論文出版は 1984 年）にアルミニウム - マンガン合金を透過電子顕微鏡で観察する過程で、5 回（または 10 回）対称性を示す電子線回折図形が現れる物質があることを見出しました。今となっては、ノーベル化学賞が授与されたこの発見、すなわち準結晶の存在は誰もが認めるところとなっていますが、シェヒトマン博士による発見当時、なかなか新しい物質、すなわち、それまで結晶とアモルファスの二つの状態しかない信じられていた固体物質に、第三の状態があるとは、素直には認めてもらえませんでした。双晶 (twin) を見ているのではないかと指摘されました。また、仮にそのような奇妙な対称性のものがあっても、安定して得られないのであれば、物質とは言えないという意見もあったようです。安定性の問題に関しては、東北大学の蔡安邦教授が多くの安定した準結晶を発見したことで、その存在が確実視されるようになりました。

2014 年にスティーヴン・ホーキング博士の半生を描いた映画が公開され注目を集めました。その映画の中でも大きな存在感を示していた英国の著名な数学者・物理学者のロジャー・ペンローズ博士は、シェヒトマン博士が準結晶を発見するよりも前に、準結晶と類似の構造をもつペンローズタイルを幾何学的な問題として見出していました。先に「当時、誰一人として予想しなかった」と書きましたが、ペンローズ博士は、そのような幾何学的構造があることは知っていました。もしも、ペンローズ博士が、ペンローズタイル構造をもつ物質が実在することを予想して、物質・材料科学者にアピールしていれば、準結晶はペンローズ博士が予言し、それにインスパイアされたシェヒトマン博士が実験で存在を証明した、という感じで、歴史は変わっていたかもしれません（もちろん、シェヒトマン博士が何もなかったところから新たに発見したのが事実です）。本新学術領域研究では、幾何学による研究成果、予見をどんどん物質・材料科学者に提供し、新物質の発見につなげる流れを構築していきたいと考えています。

池田 進

1990 年東北大学理学部地学科卒業。セメント会社勤務後、2000 年に東京大学大学院理学系研究科で学位取得。同大学院新領域創成科学研究科の助教を経て、2008 年より東北大学 AIMR 助教、2010 年より同准教授。2011 年より副事務部門長（研究担当）を、また 2018 年より研究支援部門長を併任。岩石・鉱物、セメント、表面、薄膜成長、有機半導体デバイス等の幅広い物質・材料分野の研究経歴を踏まえ、現在、数学と材料科学の連携を推進中。

## AIMR workshop on Pure and applied Mathematics

日時：2019年1月7日(月)8日(火) 会場：東北大学材料科学高等研究所 (AIMR) セミナー室

本新学術領域 A03 班の活動の一環として、国際研究集会「AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics」が開催されました。純粋数学および応用数学における異分野間（離散幾何解析、変分学、材料科学など）での問題意識の共有、ならびに研究交流による新領域開拓の可能性の模索を目的として、国内外の若手研究者 10 名による講演が行われました。純粋数学的側面としては主に、離散空間上の幾何解析の最近の進展（幾何学的流理論やスペクトル理論など）が報告されました。応用数学については、材料科学に由来する変分問題や擬最適輸送理論の材料科学への応用が紹介されました。質疑応答では、純粋数学と応用数学の邂逅を意識した様々な意見が挙げられました。また各講演の合間の休憩時間が長めに設定されており、ゆったりとした雰囲気の中、会場の各所で参加者間での議論が交わされました。数学と材料科学、相互の発展への寄与が期待される内容となりました。



## A01-2 班研究会「ブレーンとソリトンの量子異常が導くトポロジカル物質」

日時：2019年1月28日(月)29日(火) 会場：大阪大学豊中キャンパス理学研究科 H 棟 7 階 H711 号室

A01-2 班によって研究会「ブレーンとソリトンの量子異常が導くトポロジカル物質」が開かれました。初日には、A01 班のメンバー 7 人から本新学術領域に関連した研究に関して紹介がありました。トポロジーにつながりを持つ様々な講演が行われ、新しい物理の創出を目的に印象深い議論が進みました。

2 日目には、渡辺悠樹氏（東京大学）による招待講演「「バンドトポロジーの対称性指標」の基礎から高次トポロジカル絶縁体への応用まで」がありました。バンドトポロジーと結晶対称性は密接に関連しており、高次トポロジカル絶縁体はそこから産まれる新奇なトポロジカル相です。高次トポロジカル絶縁体は非常にホットなトピックの一つであり、本新学術領域のメンバーも研究成果を出している分野でもあります。結果として、刺激的な議論がなされた一方で、メンバー間の相互作用も進むかたちとなりました。



## 国際ワークショップ「Polymers meet Topology」

日時：2019年1月30日(水)31日(木)2月1日(金) 会場：東京工業大学蔵前会館ロイヤルブルーホール

A02 班を中心に世界中からポリマー物理・化学およびトポロジーの専門家が一堂に会した国際シンポジウムが行われました。本シンポジウムには計 38 のプレゼンテーションがあり、主に三つのトピックからなりました。一つ目は、トポロジーのポリマー構造への応用で、リング状ポリマーに対するトポロジカル不変量を用いた特徴付け等が議論されました。二つ目は、非自明なトポロジーを持つポリマーの合成についてでした。三つ目は、ポリマーのトポロジーがどのようにその物理的・化学的性質に影響を与えるかということでした。例として、たんぱく質中のノットがその折り畳み安定性を向上させるかどうかテーマとなりました。数学・物理学・化学・データサイエンスの幅広い参加者によって、活発に知識やアイデアの交換がなされたシンポジウムとなりました。



# 活動記録

## 2018年

- 11月29日 物質と情報科学セミナー（第2回）  
会場：東京大学（本郷キャンパス）工学部6号館3階セミナー室B（368号室）



- 12月2日 研究会「高分子のからみあい」  
会場：東京工業大学（大岡山キャンパス）南8号館8階会議室

## 2019年

- 1月7-8日 国際ワークショップ “AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics”  
会場：東北大学片平キャンパス AIMR 本館2階セミナー室
- 1月15-16日 離散幾何解析とその周辺  
会場：CIC 東京 5F501
- 1月17日 物質と情報科学セミナー（第3回）  
会場：東京大学（本郷キャンパス）工学部6号館3階セミナー室B（368号室）
- 1月18日 物質と幾何セミナー（第5回）  
会場：名古屋大学 理学部 A 館 A207 室
- 1月28日-29日 A01-2 班研究会「ブレーションとソリトンの量子異常が導くトポロジカル物質」  
会場：大阪大学豊中キャンパス理学研究科 H 棟 7 階 H711 号室
- 1月30日-2月1日 国際ワークショップ 「Polymers meet Topology」  
会場：東京工業大学 蔵前会館 1 F ロイヤルブルーホール
- 3月1日 物質と情報科学セミナー（第4回）  
会場：日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 3 階 302 号室

## 今後の行事予定

- 2019年3月15日-16日 数学と諸分野の連携にむけた若手数学者交流会  
会場：科学技術振興機構（JST） 東京本部 B1F 大会議室

## 募集

博士研究員を募集しております。詳細は <https://math-materials.jp/recruit/> をご覧ください。



### 問い合わせ先

小谷 元子（領域代表）  
東北大学材料科学高等研究所（AIMR）  
E-mail : [contact@math-materials.jp](mailto:contact@math-materials.jp) 領域ウェブサイト : <https://math-materials.jp/>

News letter Vol. 03 編集担当：奥川 亮、池田 進（東北大学 AIMR）