

# 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

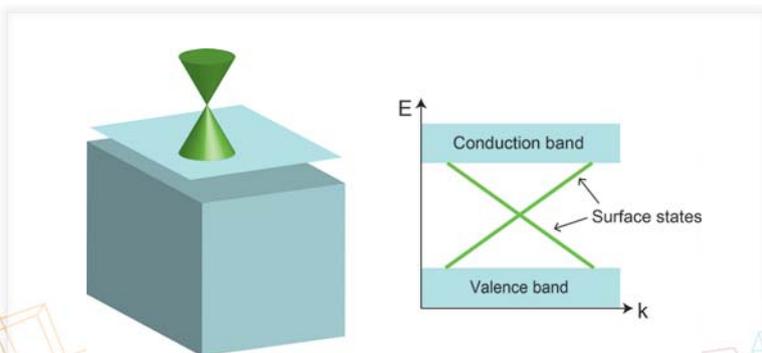
次世代物質探索のための離散幾何学  
科学研究費助成事業「新学術領域研究（研究領域提案型）」  
平成 29 年～ 33 年度

News letter **04**  
Vol.

# A01 班代表挨拶

A01 班では、幾何学を基礎として新しい「トポロジカル物質」の探索、設計に貢献できるような学理を構築することを目指しています。既に知られているトポロジカル物質の代表例は、固体内部は絶縁体であるが表面のみ電気伝導性を示すトポロジカル絶縁体ですが、これは、従来の固体物理学の体系では説明できない、トポロジーという数学の概念を導入することで初めて理解できる伝導メカニズムをもつ物質です。このような新物質の存在が、数学を基礎として理論物理学者によって予言され、実際に実験で見出された、という歴史的事実は、数学者、理論物理学者、実験材料科学者の強固な連携によって、これからも新しいトポロジカル物質の発見が可能であることを予感させます。

A01 班は、主に数学者からなる計画研究 A01-1 と、主に理論物理学者からなる計画研究 A01-2 の 2 つのグループによって構成され、更に、実験研究者を含む 7 つの公募研究が加わり、数学者、理論物理学者、実験材料科学者の連携ネットワークを構築しています。このネットワークを有機的に機能させることで、最初は空想の域を出ないアイデアであっても、議論を重ねることで徐々に具現化され、実際の物質誕生へと導く一連の材料設計・創製の道筋を確立できるのではないかと、当班の代表として大いに期待をしているところです。このニューズレター Vo.4 では、このような目標をもって研究を進める私たち A01 班の概要をご紹介します。



東京大学大学院  
数理科学研究科 数理構造論大講座  
教授

古田 幹雄

FURUTA Mikio

研究分野: 幾何学

研究テーマ: ゲージ理論・4次元トポロジー

研究概要: 多様体上の線形および非線形の偏微分方程式系の解空間を利用してその多様体の性質を研究しています。線形方程式では指数の局所化、非線形方程式では4次元空間上のゲージ理論由来の Yang-Mills 方程式、Seiberg-Witten 方程式を主な対象とし、方程式系の無限次元幾何学として展開を目指しています。

## 論文・書籍紹介

A01 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] Koji Hashimoto, Taro Kimura, Xi Wu, Boundary conditions of Weyl semimetals, Prog. Theor. Exp. Phys. 2017, 053101 (2017).
- [2] Koji Hashimoto, Xi Wu, and Taro Kimura, Edge states at an intersection of edges of a topological material, Phys. Rev. B 95, 165443 (2017)
- [3] Shin Hayashi, Topological Invariants and Corner States for Hamiltonians on a Three-Dimensional Lattice, Commun. Math. Phys. 364, 343 (2018)

# A01 班研究の概要

「トポロジカル物質」を主テーマとする A01 班には以下の 2 つの研究計画があります。

- **A01-1 指数定理の展開とトポロジカル表面状態** (研究代表: 古田 幹雄)
- **A01-2 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** (研究代表: 橋本 幸士)

A01 班は、無機材料、とくにトポロジカル物質を対象とするグループです。計画班は、幾何学が専門の数学者を中心とする A01-1 班、高エネルギー物理学の理論研究者を中心とする A01-2 班からなります。トポロジカル物質のバルクエッジ対応の数学的な背景をなす指数の理論は、1950 年代に展開されました。材料科学に現れるまでにほぼ半世紀を要しています。高エネルギー物理学のアノマリー概念は 1970 ~ 80 年代に注目されましたが、材料科学におけるバルクエッジ対応に現れたのは近年のことです。A01 班では、このようなタイムスパンを視野にいれ、材料科学の過去と現在と未来の根底を支える基礎科学の展開を目標としています。

A01-1 班では物性科学の視点が数学に新しい課題を提示する側面にも注目しています。指数定理は 20 世紀の数学の重要な理論でしたが、それを取り巻く分野への新しい貢献として、計画班と後述の公募班との共同研究により、4 次元空間の考察に 5 次元空間を用いる理論や、格子上の指数定理への新しいアプローチを開発しています。A01-2 班では、高エネルギー物理学における連続系の知見が、物質科学に対して有効に働く可能性に着目し、例えば、従来物質科学にはなかったブラックホールなどの視点を導入した研究がなされています。

A01-1 班と A01-2 班はいずれも理論的研究を追求しますが、方法は相補的です。例えば、トポロジカル物質の角に対する高次指数は近年研究が盛んですが、A01-1 班では非可換代数を用いた包括的枠組みの立場から研究され、A01-2 班の研究では場の量子論に現れる典型的モデルを用いた詳細な考察の提示がなされています。

A01 班には公募班が 7 グループ属しています。計画班が理論的側面に従事するのに対して、公募班は、理論とともに、実験により具体的な物質を扱うグループが含まれます。計画班と公募班の構成研究者が有機的に連携し、トポロジカルな物性が発現する普遍的原理を解明することで、新たなトポロジカル物質を創製のための指針、学理を構築し、またその指針によって得られた新トポロジカル物質を用いたデバイスの開発へと展開することを目指しています。

HARMONICS  
Column for math-mate collaboration

## 第 4 話 準結晶と高温超伝導体

前号の本コラム (第 3 話) で、東北大学教授の蔡安邦 (TSAI An-Pang) 先生の業績に触れました。ダニエル・シェヒトマン博士が電子顕微鏡 (電子線回折像) 観察中に発見した準結晶の存在を世界が認めるために、蔡先生による安定な準結晶の発見が大きく貢献したと記しました。しかしながら、そのコラムを書いた後、本年 5 月 25 日、蔡先生が逝去されたという訃報がもたらされました。ご自身の出身地でもある台湾にご出張中、心不全で倒られたと報じられています。私自身は、蔡先生から直接研究のご指導をいただけるほど近い立場にはありませんでしたが、シェヒトマン博士の高校生・一般向け講演会を一緒に企画させていただいたり、書籍執筆の折に準結晶の顕微鏡写真をご提供いただくなど、お世話になりました。蔡先生の業績に敬意を表し、心よりご冥福をお祈りいたします。

蔡先生による安定な準結晶の発見は、シェヒトマン博士のノーベル化学賞受賞に決定的な役割を果たしたと言われ、勤務地である東北大学では、蔡先生のノーベル賞受賞待望の声がありました。毎年 10 月上旬に行われるノーベル賞受賞者の発表には世界中が注目し、受賞者や受賞が期待されていた研究者の周囲では様々なドラマが展開されます。今年もまたその時期が近づいてきました。研究者はノーベル賞だけを目指して研究しているわけではないのですが、やはり毎年この時期はソワソワします。

1983 年、チューリッヒの IBM 研究所において、ヨハネス・ゲオルク・ペドノルツ博士とカール・アレクサンダー・ミュラー博士は遷移金属酸

4 ページへ続く

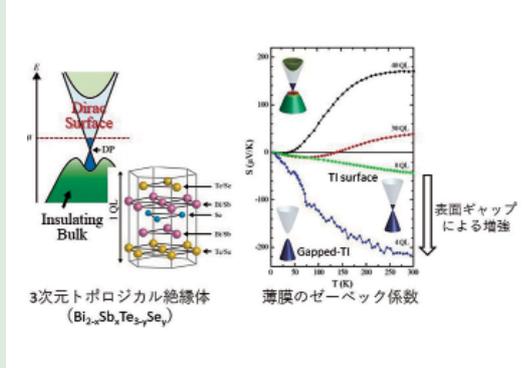
# A01班 公募研究紹介

## 研究内容

研究題目 ▶ トポロジカル物質の特異な電子・スピン状態と熱電物性と  
の相関の解明

研究計画 ▶

高品質な3次元トポロジカル絶縁体(3D-TI)薄膜の熱電輸送特性を測定し、高効率熱電材料の実現を目指します。また、トポロジカル物質の特異な電子・スピン状態と熱電性能との相関を解明し、現行の熱電理論の拡張も試みます。



## 研究代表者

東北大学大学院  
理学研究科 助教

松下 ステファン 悠

MATSUSHITA Stephan Yu



研究分野：物性物理

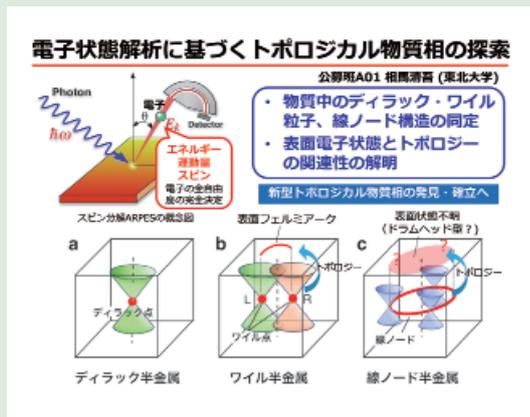
研究テーマ：熱電変換材料、トポロジカル絶縁体、有機半導体  
研究概要：トポロジカル絶縁体の持つ特異な電子・スピン状態に着目し、その熱電輸送の基礎原理の解明や熱電材料としての応用を行っています。高品質なTI薄膜作製技術と、熱電物性(抵抗率、ゼーベック係数、熱伝導率)をはじめとした様々な輸送特性を測定する自作デバイスを駆使して、実験的な側面から研究を進めています。本研究計画では、特に表面電子バンドにギャップが生じる超薄膜の熱電物性についての研究を行っています。

## 研究内容

研究題目 ▶ 電子状態解析に基づくトポロジカル物質相の探索

研究計画 ▶

角度分解光電子分光(ARPES)を使って表面(エッジ)に現れるトポロジカルな電子状態を観測して、3次元トポロジカル半金属(ワイル、ディラック半金属)を新たに実現する物質を実験的に発見・確立します。



## 研究代表者

東北大学  
スピントロニクス学術連携  
研究教育センター 准教授

相馬 清吾

SOMA Seigo



研究分野：物性実験

研究テーマ：光電子固体物性

研究概要：物質の性質は、その中で運動する電子によって決定されます。私たちは、スピン分解光電子分光という手法を用いて、物質の中の電子の全自由度(エネルギー・運動量・スピン)を一挙に測定することで、超伝導や磁性、トポロジカル量子物性などの物性の発現機構を解明します。さらに、物質内部と表面(エッジ)の電子状態も曖昧さなく同定することで、電子状態に潜むトポロジカルな性質を実験的に見出すことができます。

## 3 ページの続き

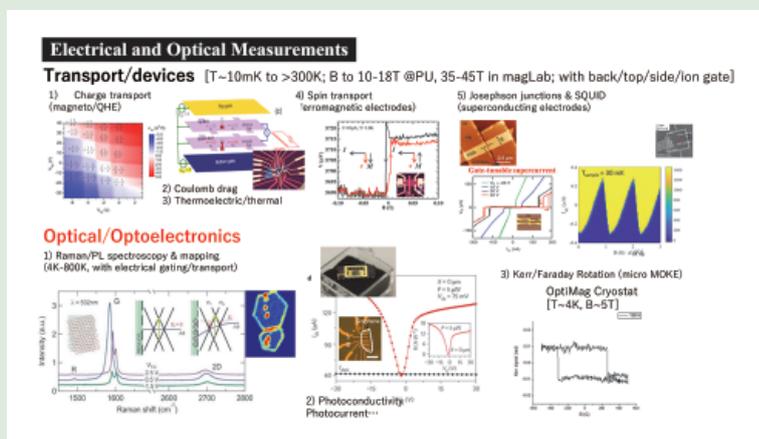
化物からなるセラミックスの電子的性質に関する研究に取り組み、バリウム・ランタン・銅の酸化物が35ケルビン以下の温度で超伝導的な振る舞いをする  
ことを見出しました。しかし、超伝導であることの決定的な証拠を示すことができず、また学会発表をしても信じてもらえず、1986年に「Possible high Tc  
superconductivity in the Ba-La-Cu-O system」という、「Possible」が付いたタイトルで論文を発表します。当時、再現性のない超伝導体の発見報告が多く、  
USO (Un-identified Superconducting Object の略。後述の北澤先生による UFO を意識した造語。「うそ」とも読めるのが面白い)と呼ぶこともあったようですが、  
両博士の結果に関しても、慎重に見ようと考えた研究者が少なからずいたようです。

ところが、ベドノルツ博士とミュラー博士は論文発表の翌年、1987年にノーベル物理学賞を受賞しています。論文発表からわずか1年でのスピード受賞です。  
当初結果を信じてもらえなかった状況が、数か月程度の短期間で一転・急展開し、世界中が信じ、喝采を浴びるようになったということになります。一体何が  
起こったのでしょうか？

ベドノルツ博士らによる発見は、通常は絶縁体であるセラミックスがいきなり電気伝導の王様である超伝導体になるという画期的なものでした。画期的すぎ  
てには信じられない研究者が多数派となる中で、可能性を感じ取った研究者も存在しました。東京大学の田中昭二教授グループでは、ベドノルツ博士ら  
による結果を知ると、内田慎一先生(当時講師)と高木英典先生(当時助手)を中心とするメンバーが追試を開始、ベドノルツ博士らが作製した物質(複数の  
相の集合体であつたらしい)の中に本物の超伝導体( $\text{CuO}_2$ のシートの中にBaやLaなどの陽イオンが入った層状構造をもつ酸化物)が一部含まれていること  
を見出し、その超伝導体を単一相として合成することにも成功しました。この結果に世界が驚き、多くの研究者が参入し、次々に新しい高温超伝導体(“高温  
超伝導体”という呼称の由来は他文献を参照ください)が合成され、いわゆる「超伝導フィーバー」が幕を開けました。

### 研究内容

研究題目 ▶ 光学的な計測法を用いたトポジカル物質のペリー曲率の観測



### 研究代表者

東北大学  
材料科学高等研究所 (AIMR) 教授

Yong P. CHEN

Yong P. CHEN



研究分野：Condensed matter physics

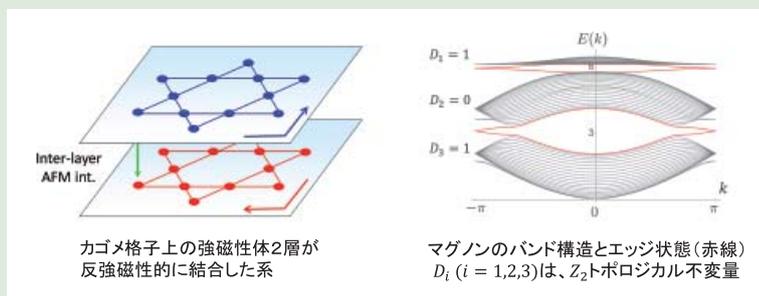
研究テーマ：Spintronics

Quantum materials and quantum devices  
Quantum transport and quantum photonics  
Topological materials and topological physics  
Two-dimensional materials

### 研究内容

研究題目 ▶ 乱れや相互作用のある系のトポジカル相とその不変量

研究計画 ▶ ・磁性体中の素励起（マグノン）のトポジカル不変量による特徴付け  
・強く相互作用する量子多体系のトポジカル不変量による特徴付け



### 研究代表者

東京大学大学院  
理学系研究科 准教授

桂 法称

KATSURA Hoshio



研究分野：物性理論 統計力学

研究テーマ：トポジカル物性、強相関量子多体系、可解模型

研究概要：乱れや相互作用のある系における様々な相の、トポジカル不変量を用いた特徴づけに興味をもって研究を進めています。本研究では特に、(1) 磁性体中のボソンの素励起であるマグノンのトポジカル相とその表面状態、(2) 反転対称性などの離散的な対称性をもつ強相関量子多体系のトポジカル不変量を用いた特徴づけ、に関する研究に取り組みます。

このあたりの息をのむ展開は、当時田中グループの助教で、研究成果を世界に情報発信する際の先頭に立った北澤宏一先生が執筆された回想記事などで読むことができます。

蔡先生による安定な準結晶の発見と田中グループメンバーによる銅酸化物の超伝導発見の証明は、当該分野にノーベル賞をもたらす決定的な役割を果たしました。ノーベル賞受賞こそありませんでしたが、世界に大きなインパクトを与えました。科学の歴史において、類似のエピソードはほかにもいろいろ存在すると思いますが、著者が読んだり、聞いたりしてきた中で、最も印象に残る2例です。準結晶や高温超伝導体の研究はその後も発展を続け、例えば超伝導研究では、秋光純教授グループ（当時 青山学院大学）による  $MgB_2$  の超伝導発見の発見、細野秀雄教授グループ（東京工業大学）による鉄系超伝導物質の発見、ミハイル・エレメツ博士ら（マックス・プランク研究所）が報じた硫化水素の200ケルビンを超える温度での超伝導発見など、話題は尽きません。

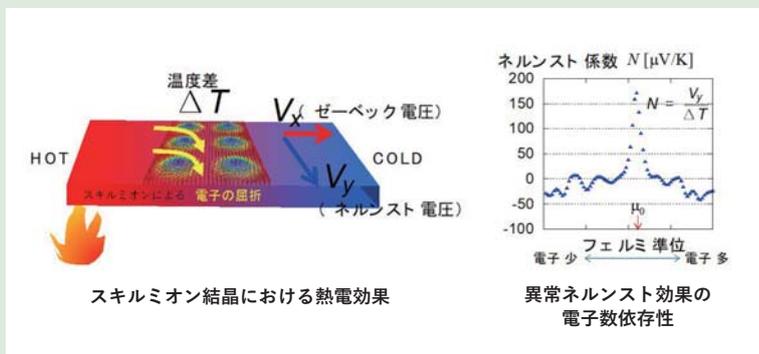
今回は数学には触れませんが、数学もまた、第1話に書いたように、物質・材料科学の発展に決定的な役割を果たしてきました。本新学術領域研究においても、数学と物質・材料科学の接点を種をまき、新たな発芽を見逃すことなく新学術へと育て上げていきたいと考えています。

### 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等を経て、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。

研究内容

研究題目 ▶ ナノスケールのスピンの構造が誘起するトポロジカル熱電変換物質デザイン



研究代表者

金沢大学  
ナノマテリアル研究所 准教授

石井 史之

ISHII Fumiyuki



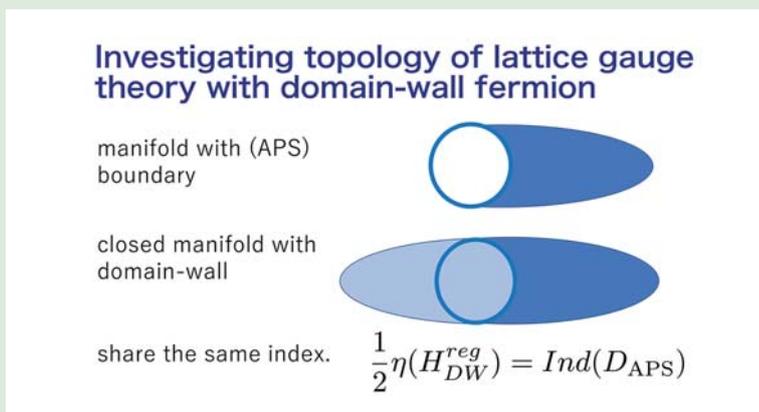
研究分野：計算物性物理学

研究テーマ：トポロジカル磁性体の熱電特性

研究概要：本研究の目的は密度汎関数法に基づく第一原理計算手法によって非自明なスピン構造が誘起する異常な量子輸送現象（異常ホール効果、異常ネルンスト効果）を活かして、効率の高い熱電変換物質をデザインすることです。数学者と共同でスキルミオン等のナノスケールのスピン構造を有する物質の波動関数のトポロジーを解析し、新たなアイデアで高い熱電変換効率を持つ物質をデザインすることを目的としています。

研究内容

研究題目 ▶ ドメインウォールフェルミオンで探る格子ゲージ理論のトポロジー



研究代表者

大阪大学大学院  
理学研究科 助教

深谷 英則

FUKAYA Hidenori



研究分野：素粒子論

研究テーマ：カイラル対称性とそのアノマリーの非摂動的理解

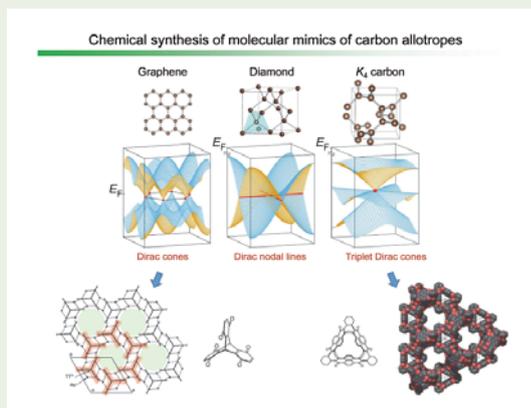
研究概要：最近の私たち（深谷、大野木、山口）の研究で、Atiyah-Patodi-Singerの指数定理をドメインウォールフェルミオンのDirac演算子を用いて再定式化することに成功しました。本研究では、数学者の古田、松尾、山下を共同研究に迎え、その数学的な基礎づけ、さらに格子ゲージ理論への応用を目指しています。この研究は、素粒子論、物性理論のバルク・エッジ対応をアノマリーマッチングで理解するための数学的基礎として重要であると考えています。

研究内容

研究題目 ▶ 炭素同素体トポロジーと分子自由度の結合による新規物性の開拓

研究計画 ▶

炭素同素体の構造を分子性物質で実現し、分子性炭素同素体とも呼ぶべき物質群を構築し、トポロジー対称性と分子自由度が複合化された、トポロジー物性を実現する。

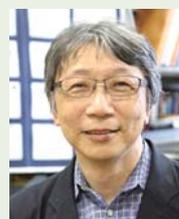


研究代表者

名古屋大学  
教授

阿波賀 邦夫

AWAGA Kunio



研究分野：物性化学

研究テーマ：機能性物質の開拓

研究概要：物質合成、基礎物性探索、デバイス展開研究を縦断的に行い、特徴的な分子性物質を用いた新しい有機エレクトロニクスを追求している。その一方、電界効果トランジスタや電気化学セルなどのデバイス構造を作りこむことによってバレンス制御を行い、新奇な分子物性の発現を探索している。物性科学と固体電気化学の融合から、基礎と応用においてwin-winの成果を目指す。

## 物質と幾何セミナー（第6回）

日時：2019年5月14日（火） 会場：名古屋大学多元数理科学棟 452-453 室

本新学術領域 A03 班のメンバーを中心に、物質と幾何セミナー（第6回）が開かれました。本セミナーは、新学術領域の間で連携を深めるための情報交換を目的に、前年度から続けられています。

今回のセミナーは、本領域 A02 公募班の研究代表者でもある増淵雄一氏（名古屋大学）によって「高分子のからみあい」をテーマに行われました。からみあいとは高分子の運動の遅延を表すものであり、応用を考えるうえでも重要な現象の一つです。講演においては、その分子運動のからみあいを説明する様々な理論モデルが紹介されました。からみあいを記述するモデルを構築することは単純ではなく、どのように実験との整合性を説明するかということは非常に難しい課題です。本セミナーでは、数学的側面からどうこのからみあいに対してアプローチを図ればよいかという問題提起も含めて様々な議論が行われました。その結果、高分子物理学と数学との間で新たな接点が生まれるようなセミナーとなりました。



## Progress in the Mathematics of Topological States of Matter

日時：2019年7月29日（月）30日（火）31日（水）8月1日（木）2日（金）  
会場：東北大学材料科学高等研究所（AIMR）2F セミナー室・5F 交流スペース

本新学術領域 A01 班のテーマであるトポロジカル相のワークショップが5日間にわたって開かれました。本ワークショップでは、数学や物理学などの異なる側面からトポロジカル相の進展について議論されました。特に、近年発展が著しい非エルミート系・非平衡系やボゾン系など、様々なトポロジカル相に関する研究紹介が行われました。プレゼンテーションは20人によって1人当たり1時間程度行われ、非常に充実した形で会議が進みました。

プレゼンテーションにおいては、数学や理論物理学だけではなく実験物理学からのトポロジカル相のアプローチも紹介されました。これは、本新学術領域が目指すところである数学をもとにした材料の実現可能性などと深く関係するものです。結果として、トポロジカル相における数学と他分野の融合をますます感じられるようなワークショップとなりました。



## 新学術領域研究成果発表会・領域会議

日時：2019年8月2日（金）3日（土） 会場：名古屋大学多元数理科学棟 509 室・理学南館坂田平田ホール

新学術領域における研究成果発表会および領域会議がメンバー全体で開かれました。本会議では、二日間各班のメンバーによってこれまでの成果が発表されました。様々な分野にわたって、その簡単な歴史から最新の結果まで非常に興味深いプレゼンテーションが行われました。

本新学術領域は A01 班、A02 班、A03 班および B01 班と 4 つの研究班が次世代物質探索のため広範な研究をしています。その一方で、異なった班の間でも多くの共同研究が行われており、物質科学に新しい潮流を産み出す期待が持てるような会議となりました。これらの共同研究は違った分野でありながら、数学という共通言語を通じて進められたものも少なくありません。本新学術領域が今後も色々な分野の発展に対して、数学という強い力を通じて寄与できるとあらためて認識できる形で幕を閉じました。



# 活動記録

## 2019年

- 5月14日 物質と幾何セミナー第6回  
会場：名古屋大学多元数理科学棟 452-453 室
- 6月17日-8月9日 g-RIPS (Graduate-Level Research in Industrial Projects for Students) -Sendai  
会場：東北大学 AIMR
- 7月4日 物質と幾何セミナー第7回  
会場：名古屋大学多元数理科学棟 552 室
- 7月29日-8月2日 PROGRESS IN THE MATHEMATICS OF TOPOLOGICAL STATES OF MATTER  
会場：東北大学 AIMR 2F セミナー室・5F 交流スペース
- 8月2日-3日 新学術領域成果発表会・領域会議  
会場：名古屋大学多元数理科学棟 509 室 理学南館・坂田平田ホール
- 8月7日-9日 Polymers and networks via topology and entanglement  
会場：お茶の水女子大学共通講義棟 2号館 201 番教室
- 10月28日-29日 「物理学者のための K 理論」勉強会  
会場：大阪大学理学部 H 棟 701 号室
- 10月31日-11月2日 国際研究会「ディープラーニングと物理学 2019」  
会場：京都大学基礎物理学研究所
- 11月11日 CREST – さきがけ連携型公開ワークショップ：  
「高分子弾性のトポロジーと革新的理論の構築に向けて」  
会場：お茶の水女子大学理学 3号館 2階会議室（207、208、209 号室）
- 11月28日-29日 第13回物性科学領域横断研究会（領域合同研究会）  
会場：東京大学本郷キャンパス小柴ホール（理学部 1号館中央棟）

## 今後の行事予定

- 2019年12月7-8日 離散幾何解析とその周辺 2019  
会場：CIC 東京 5F
- 2019年12月10-14日 MATERIALS RESEARCH MEETING 2019  
会場：横浜シンポジア

## 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. 04 編集担当：奥川 亮、池田 進（東北大学 AIMR）