

# 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

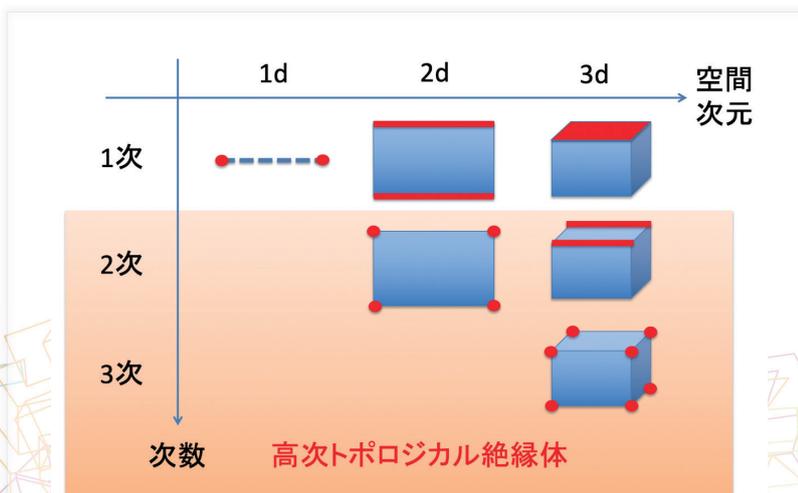
科学研究費助成事業「新学術領域研究（研究領域提案型）」  
平成 29 年度～令和 3 年度

News letter  
Vol. 06

# A01 班代表挨拶

A01 班の研究対象は、トポロジカル物質です。近年の物性物理学の大きな潮流であるトポロジカル物質とは、トポロジーという数学の概念に基づいた物質の分類において非自明な物質のことです。通常、物質の相を決めるには、磁化や比熱、抵抗といった物理量の測定により、それらの温度依存性や圧力依存性、電荷密度依存性などがあまり変わらない領域、という方法で決めます。しかしトポロジカル物質は、物質を切断した時の表面にのみ特殊な性質が現れるものであり、従来の方法では特徴付けできないのです。これが、トポロジーという数学で分類されました。

A01 班の特色は、A01-1 班と A01-2 班の二つに分かれ、それぞれが数学者と物理学者の集合として組織されていることです。さらに実験物理学者を含む 7 名の公募研究グループが参加し、数学者・物理学者・実験材料科学者が一堂に会する稀有な場所となっています。数学者と物理学者は、通例、目指すことや手法、そして概念の捉え方まで非常に異なるものです。しかし、我々はトポロジカル物質というテーマを中心に集まり議論をすることで、新しいトポロジカル物質の捉え方、そしてその材料への可能性に至るまで、数学と物理の融合により新しい知の開拓を目指しています。このニュースレターでは、A01 班の研究概要と研究成果をご紹介します。



大阪大学大学院  
理学研究科 物理学専攻  
教授

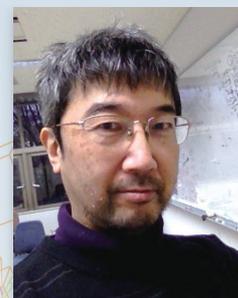
橋本 幸士

HASHIMOTO Kōji

研究分野: 理論物理学

研究テーマ: 超弦理論・量子重力理論

研究概要: 重力と素粒子を統一する超弦理論・量子重力理論について研究しています。特に、量子重力理論で基本的な役割を果たす AdS/CFT 対応やブレーンなどの概念を、トポロジカル物質や量子色力学、深層学習といった関連する様々な概念に数理上で関係づけ橋を創ることで、数理的な統合による新しい理論物理学を目指しています。



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。

# A01 班研究の概要

A01 班の研究テーマは「トポロジカル物質」であり、その計画班として、以下の二つの研究計画を掲げています。

## ■ 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)

本新学術領域研究が開始されて4年目を迎えておりますが、それまでの研究成果として、それぞれの班での多くの研究のうちいくつかを紹介しましょう。

トポロジカル物質には「バルクエッジ対応」と呼ばれる対応原理が知られており、これは特に、バルクすなわち物質内部での物質の波動関数を持つトポロジーが、エッジすなわち物質表面での特殊な伝導状態の存在を示す定理のことであります。この数学的背景には、指数理論があります。A01-1 計画班は幾何学を専門とする数学者が集まり、バルクエッジ対応の背後にある数学の定式化と物理学への橋渡しを行っています。その成果の一つとして、Atiyah-Patodi-Singer の指数定理と呼ばれるものを拡張し、物理学で普段用いられる境界の場合にも定理が成立することを証明したものがあります。この証明には理論物理学者も参加し、物理学者にもフレンドリーな照明の直観的理解の方法なども得られました。この成果は広く研究コミュニティに受け入れられつつあります。

また、A01-2 班の重要な成果の一つに、「コーナー状態の存在を予言した」ことが挙げられます。バルクエッジ対応においては、表面の伝導状態(エッジ状態)が予言されますが、これを拡張して、ある種のトポロジカル物質には、境界の境界すなわちコーナーに状態が局在化することを我々は予言しました。この予言には、理論物理学の数理的な手法である超弦理論の数学が用いられました。興味深いことに、このような予言をしたグループが世界に同時期に複数現れ、実際のその物質まで発見されています。今日、コーナー状態を持つ物質は「高次トポロジカル物質」と呼ばれ、物性物理学の世界的潮流となっています。

このような成果は、新学術研究領域の後期として公募され新たに採択された7つのA01 公募研究と相互作用しながら検討され、統合的な描像の模索や、幾何学と理論物理学の間の橋造りへとつながっています。

## 論文・書籍紹介

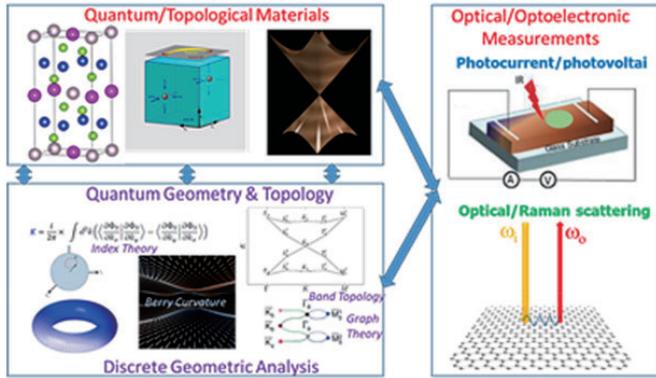
A01 班のこれまでの成果については下記の文献が参考になります。

- [1] K. Sato, R. Tanaka, "Solitons in one-dimensional mechanical linkage", *Physical Review E* 98 (1) (2018).
- [2] T. Kimura, V. Pestun, "Quiver W-algebras", *Letters in Mathematical Physics* 108 (6) (2018) 1351-1381.
- [3] Y. Hidaka, S. Pu, D.L. Yang, "Nonlinear responses of chiral fluids from kinetic theory", *Physical Review D* 97 (1) (2018).
- [4] K. Hashimoto, K. Murata, N. Tanahashi, "Chaos of Wilson loop from string motion near black hole horizon", *Physical Review D* 98 (8) (2018).
- [5] K. Hashimoto, S. Sugishita, A. Tanaka, A. Tomiya, "Deep learning and the AdS/CFT correspondence", *Physical Review D* 98 (4) (2018).
- [6] S. Hayashi, "Toeplitz operators on concave corners and topologically protected corner states", *Letters in Mathematical Physics* (2019) 1-32.
- [7] M. Elyasi, K. Sato, G.E.W. Bauer, "Topologically nontrivial magnonic solitons", *Physical Review B* 99 (13) (2019).
- [8] K. Gomi, C. Tauber, "Eigenvalue crossings in Floquet topological systems", *Letters in Mathematical Physics* (2019).
- [9] R. Okugawa, S. Hayashi, T. Nakanishi, "Second-order topological phases protected by chiral symmetry", *Physical Review B* 100 (23) (2019).
- [10] D. Baraglia, H. Konno, "A gluing formula for families Seiberg-Witten invariants", *Geom. Topol.* 24 (3) (2020) 1381-1456.
- [11] Hidenori Fukaya, Mikio Furuta, Shinichiroh Matsuo, Tetsuya Onogi, Satoshi Yamaguchi & Mayuko Yamashita, "The Atiyah-Patodi-Singer Index and Domain-Wall Fermion Dirac Operators", *Commun. Math. Phys.* (2020)
- [12] H. Konno, M. Taniguchi, "Positive scalar curvature and 10/8-type inequalities on 4-manifolds with periodic ends", *Invent. Math.* 222 (3) (2020) 833-880

# A01班 公募研究紹介

## 研究内容

研究題目 ▶ ファンデルワールス物質におけるトポロジーの光学的計測法による観測



## 研究代表者

東北大学  
材料科学高等研究所(AIMR) 教授

Yong P. CHEN



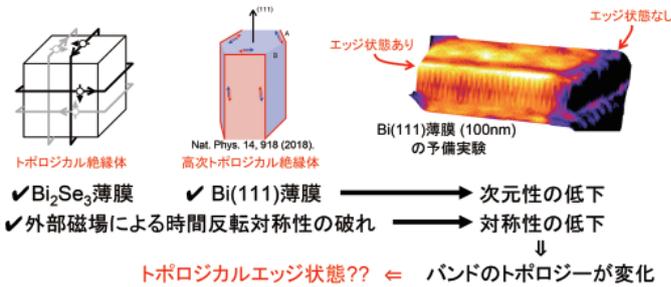
研究分野：物性実験

研究テーマ：量子材料・デバイス、量子輸送・フォトンクス、スピントロニクス、トポジカル材料物性、二次元材料

研究概要：トポジカル半金属における光学的応答の微視的機構は結晶構造の対称性や非自明なベリー曲率など幾何学的な概念と密接に関係することは知られているが、現状としてトポジカルバンド構造による光学的応答の明確な証拠は得られていない。本研究では新規材料の設計を目指した数理解析の応用可能な実験計測法を提案する。具体的には、電子輸送特性の計測と光学特性計測を組み合わせた新奇計測法の開発を行い、電子物性トポロジーの光学的観測を実現する。

## 研究内容

研究題目 ▶ 局所トンネル分光によるトポジカルエッジ状態の検出



走査トンネル顕微鏡 (STM) の局所トンネル分光により  
トポジカルエッジ状態の検出

## 研究代表者

東北大学  
材料科学高等研究所(AIMR) 助教

岡 博文



OKA Hirofumi

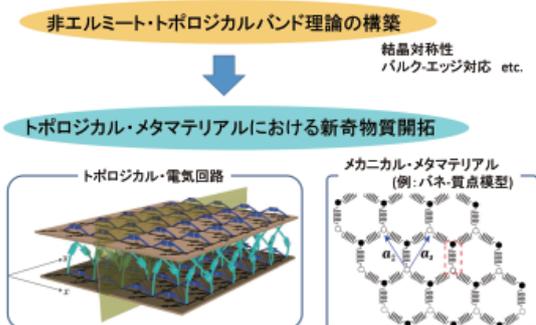
研究分野：薄膜・表面界面物性、ナノ材料科学

研究テーマ：表面電子物性、表面・ナノ磁性、プローブ顕微鏡

研究概要：薄膜やナノ構造では、量子効果や表面・界面の効果が強く現れ、バルクとは異なる新奇な物性が発現します。そこで、電子線蒸着やパルスレーザー堆積法を用いて金属や酸化物薄膜・ナノ構造を作製し、走査トンネル顕微鏡 (STM) による原子レベルの電子状態計測を行うことにより、そのような新奇物性の発現機構を解明し、新たな電子材料や電子デバイスへの応用につなげることを目指しています。

## 研究内容

研究題目 ▶ 非エルミートバンド構造が織りなす新奇トポジカル物質  
研究計画 ▶ 非エルミートバンド理論に基づき、電気回路、メカニカル・メタマテリアルをターゲットに非エルミート・トポジカル物質の開拓を行う



## 研究代表者

筑波大学  
数理物質系 助教

吉田 恒也

YOSHIDA Tsuneya



研究分野：物性理論

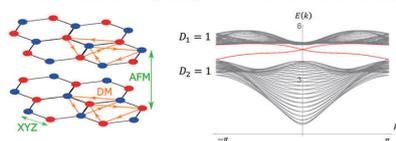
研究テーマ：トポジカル絶縁体・超伝導体、古典系でのトポジカル物性、強相関系

研究概要：トポジカルに非自明な系でのバンド分散の理論は量子力学で記述されるミクロな系のみならずマクロな系でも成り立つ事が明らかとなってきた。この研究の発展の一方で近年、非エルミートハミルトニアンで記述される系において、新奇な現象が多数報告されている。本研究では、非エルミート性が制御可能なマクロな系を中心に、非エルミートトポジカル系の物質開拓を行う。

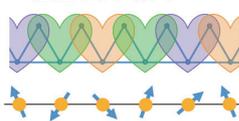
研究内容

研究題目 ▶ 磁性体・冷却原子系におけるトポジカル相の探求

ハニカム格子2層系とマグノンのエッジ状態



スピン自由度をもつ  
遍歴ボソン系のSPT



トポジカル不変量による特徴付け

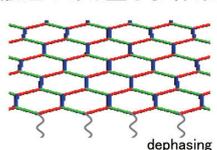
■  $Z_2$  不変量

$$\nu = \dim \ker (P_F - D_a P_F D_a - 1) \pmod 2$$

■  $Z_2$  Berry 位相

$$e^{i\gamma} = \langle \psi(0), P\psi(0) | \psi(\pi), P\psi(\pi) \rangle$$

散逸のある量子多体系



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



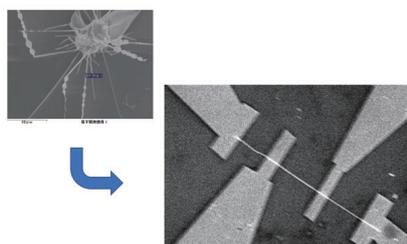
研究分野：物性理論、統計力学

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：磁性体や冷却原子系は、量子多体系の物理を探索する格好の舞台ですが、これらの系におけるトポジカルに非自明な相の理論的研究を進めています。特に、磁性体中の素励起であるマグノンが示すトポジカル相の開拓、非エルミート性や散逸のある量子多体系のトポジカル不変量を用いた特徴付け、スピン自由度をもつ遍歴ボソン系での対称性に保護されたトポジカル (SPT) 相に関する研究などを行っています。

研究内容

研究題目 ▶ トポジカルナノワイヤにおけるスピンメカニクス機能開拓



トポジカル物質のナノワイヤ試料の合成とデバイス作製の例

ナノワイヤの  
特徴的な形状や柔軟性

トポジカル・スピン  
メカニクス機能

研究代表者

東京大学大学院  
総合文化研究科 准教授

塩見 雄毅

SHIOMI Yuki



研究分野：物性物理学、スピントロニクス

研究テーマ：物性物理材料におけるスピントロニクス機能の開拓

研究概要：トポジカル物質などの物性物理材料におけるスピントロニクス機能を開拓することを目指して実験研究を行っている。本研究課題ではトポジカル物質のナノワイヤ試料を合成し、特徴的な形状や柔軟性を利用した新しいスピン-力学相関効果を探る。力学特性などの曲がった空間のトポジカル物性を研究することで、トポジカル・スピンメカニクスを開拓する。

HARMONICS  
Column for math-mate collaboration

第6話 情報量と単純さのはざまに

第5話を執筆してから1年が過ぎました。COVID-19と命名された新型コロナウイルス感染症の世界的大流行（パンデミック）により、1年前には想像もできなかった日々となりました。ここで「想像もできなかった」と表現しましたが、人類に限らず動物、そして植物も、感染症との闘い、パンデミックを幾度となく経験し、大きなダメージを受けながらもそれを乗り越えてきた歴史があり、しっかりと過去に学んでいれば想像はできたのであろうと思います。

1918年から1919年にかけ猛威を振ったスペインかぜ（流行源不明のインフルエンザ）は死者数千万人と言われ、また、1980年代以降世界に広がった後天性免疫不全症候群（AIDS）のように今なお人類が格闘している感染症もあり、パンデミックはフィクションではなく現実の脅威です。そして新たなパンデミックが人類に牙をむく可能性は常に目の前にあったはずなのですが、COVID-19の出現まで、少なくとも筆者は、パンデミックというのは映画の中に出てくる物語のように錯覚しておりました。

人々が国と国の間を行き交う現代においてひとたび感染が始まれば、これほど早く全世界へと広がるのだ、ということを今回私たちは学びました。教科書を読んで蓄える知識とは異なり、鮮烈に、私たちの記憶に突き刺さりました。現代に生きる私たちの多くにとっては初めての経験であり、どのような対応をとっても100%の正解はなく、効果があったりうまくいかなかったり繰り返しの繰り返し、トライアル・アンド・エラーになるのですが、私たちはこの学びを未来に生きる人々のために記録し、活かしていかなければならないのでしょうか。

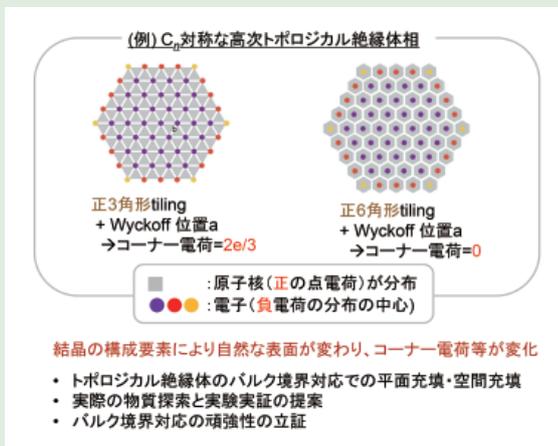
6ページへ続く

研究内容

研究題目 ▶ トポロジカル材料のバルク境界対応における平面・空間充填

研究計画 ▶

トポロジカル絶縁体のバルク境界対応での平面充填・空間充填の役割の探索、実際の物質探索と実験実証の提案、バルク境界対応の頑強性の立証



研究代表者

東京工業大学理学院  
教授

村上 修一

MURAKAMI Shuichi



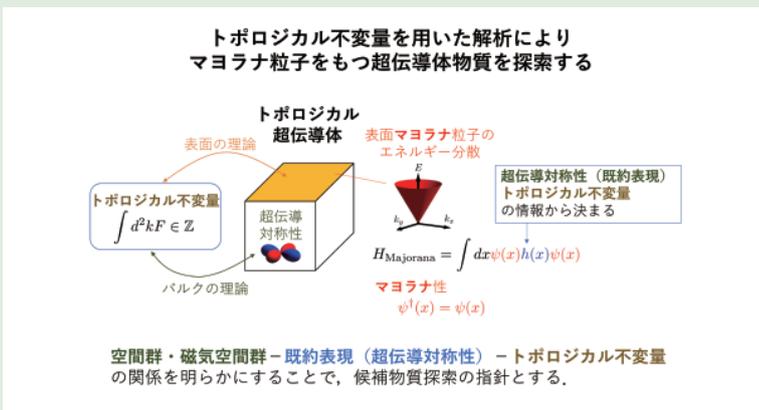
研究分野：物性理論

研究テーマ：トポロジカル相・スピントロニクス

研究概要：物質で実現するさまざまなトポロジカル相（トポロジカル絶縁体・半金属）における新規物性、また物質中のスピン輸送に関する新規現象を理論的に探索しています。手法としてはモデル計算と理論構築が中心であり、一方で第一原理計算研究者や実験研究者と積極的に共同研究を行って、一般性があり現実の物質にも広く応用可能な理論の構築を目指しています。

研究内容

研究題目 ▶ 表面にマヨラナ粒子をもつ超伝導体物質探索のためのトポロジカル不変量の研究



研究代表者

名古屋大学理学研究科  
助教

山影 相

YAMAKAGE Ai



研究分野：物性理論

研究テーマ：トポロジカル絶縁体・半金属・超伝導体

研究概要：トポロジカル物質（絶縁体・半金属・超伝導体）についての基礎的な研究を行っています。例えば、線ノードと呼ばれるトポロジカルなバンド構造を特徴づけるトポロジカル不変量を導入し、また、実験研究者との共同研究により、候補物質の予測も行いました。さらに、トポロジカル超伝導体の表面に現れるマヨラナ粒子が生じる電磁気自由度を明らかにすることで、将来のマヨラナ物性研究のための基礎を確立していきます。

5 ページの続き

世界保健機関 WHO が COVID-19 の感染拡大を初めてパンデミックと認識表明した 3 月 11 日の前後、日本においては、感染拡大防止の政策決定に「数理モデル」に基づく予測結果が活用されました。科学・技術系の研究者であれば馴染みのある数理モデル。しかし、一般的には必ずしも認知度が高いとは言えなかった「数理モデル」という言葉が、毎日のようにマスメディアの報道に登場し、そしてまた実際にそれが、政策決定に直接影響したことは画期的でした。もちろん、計算結果はパラメータのとりかたでも大きく変わるため、全てが数理モデルの予測通りになるとは限りませんが、数理モデルがもつ可能性を社会全体に印象付けることができたのは明らかだと思います。

「数理モデル」という響きが、筆者の遠い昔の記憶、25～30 年前の記憶を蘇らせます。筆者はその頃、X 線回折やその他分光法によって得られた波形パターンの分解（ピーク分離）を行うプログラムを作っていました。プログラミングが得意だった訳ではないのですが、市販のソフトウェアではどうにも対応できない解析が必要となり、もう自分で書くしかない、非線形最小二乗プロファイルフィッティングのコードを書き始めました。完成したプログラムを様々なパターンの分解に応用しましたが、ガウス関数やローレンツ関数など（実際に使ったのはそれらの混合関数である擬似 Voigt 関数）のピーク形状を表現するパラメータの個数とフィッティング結果の関係が気になりました。また同じ頃、このプログラミングとはまた別の多変量解析を行っていたのですが、それでも似たような問題意識に遭遇しました。可変パラメータの数を多くすればするほどフィッティング結果は良くなる（残差二乗和が小さくなる）のですが、何か現象の本質を見抜いていないのではないかと感じるようになっていたのです。

自分なりの試行錯誤の結果、フィッティング精度は多少落ちてしまうのですが、幾つかのパラメータは動かさずに固定して少数の可変パラメータで勝負

## 研究会「トポロジカル表面状態、プレーンとソリトン、指数定理」(A01 班会議)

日時：2020年2月17日(月)18日(火) 会場：大阪大学理学部 南部陽一郎ホール

A01 班のメンバーによって、トポロジカル相に関する研究会が大阪大学で開かれました。2 日間にわたり、様々な分野から計 19 人の講演が行われました。

まず、初日は初貝安弘氏(筑波大学)の招待講演から始まりました。トポロジカル相の歴史から、近年のホットトピックである高次トポロジカル相まで広範なテーマが説明されました。さらに、A01 班のメンバーによって、物性物理学からの手法だけでなく高エネルギー物理や数学を用いたトポロジカル相へのアプローチが紹介されました。この分野横断的アプローチは新しいトポロジカル相を理解するための本新学術領域の目指すところであり、非常に盛況な議論がなされました。



## 2020年度 第1回 オンライン領域会議

日時：2020年6月13日(土)20日(土) 会場：zoom によるオンライン開催

2020年度第1回目の領域会議は、新型コロナウイルス感染症の状況を鑑みて、オンラインで開催されました。

2 日間にわたり、A01, A02, A03, B01 の計画班及び公募班の研究代表者を含む 38 名によって講演が行われました。

初日は小谷代表の挨拶から始まり、各計画班の研究代表者によって研究概要の紹介と進捗の報告がなされました。また、今年度から新しくメンバーに加わった方々を含め、自己紹介を交えながら公募班のメンバー及びインターフェースによる発表が行われました。

領域外からも数学、材料科学などの分野を問わず多くの方に参加していただき、それぞれの講演に対して多数の質問が飛び交い、非常に活発な議論がなされました。

2 日間に渡った会議の最後には講評が行われ、分野と班の垣根を超えて積極的に交流がなされました。

をするようになり、その結果、重要と考えられる要因を絞り込み、腑に落ちる結果が得られるようになっていきました。動かすパラメータの数とフィッティング精度のバランスがとれたちょうどよいところがあるのだろう、と、自己満足的なものでしたが、確信した瞬間でした。後日、知人にそのような経験談を話したところ、赤池情報量規準(AIC)というものがあると教えていただきました。AIC 最小のモデル、すなわち、モデルの複雑さ(パラメータの数)と実測データとの適合性のバランスをとったモデルが最もよいモデルであるとするその理論は、筆者自身が漠然と考えていたことを数学的に明確に表現していて、感心といいますか、感嘆したことを覚えています。

ビッグデータの時代。膨大なデータから意味のある情報を抽出するために、数学者、数理科学者、情報科学者が、様々な手法を開発しています。筆者自身は、数理、情報科学の専門家ではないため、それぞれの研究の詳細についてはよくわかりませんが、とはいえ、かつて自らが経験した漠然とした感覚、情報の大きさや複雑さと単純さの「はざま」に物事の本質はあるのだろう・・・というとらえかたは、大正解ではないにしても、的外れというところまではいかないのかな、と2020年の大晦日、新たな一年の行方を思いつつ、ひとり妄想しています。

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手・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(2019年9月まで)。現在は客員研究員として東京大学にて勤務。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・材料分野の研究経験を踏まえ、異分野融合や組織間連携を推進する役割を担っている。

# 活動記録

## 2020年

- |               |  |
|---------------|--|
| 2月17日-18日     | 研究会「トポロジカル表面状態、ブレーンとソリトン、指数定理」<br>会場：大阪大学理学部 南部陽一郎ホール  |
| 2月24日-28日     | Workshop "Topological phenomena in non-Hermitian and non-equilibrium systems"<br>会場：東北大学片平キャンパス AIMR |
| 3月16日-18日     | ミニワークショップ「場の理論、代数トポロジー、量子化」<br>会場：ルノアール四谷店会議室  |
| 3月17日         | 総括班会議  |
| 5月14日 -       | (定期開催) オンラインセミナーシリーズ<br>「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」   |
| 5月30日、6月6日    | A03 班セミナー MOF とトポロジー   |
| 6月13日、20日     | 2020 年度第 1 回領域会議   |
| 7月28日         | オンライン MI サーベイレクチャー<br>第 2 回「マテリアルズ・インフォマティクスによる材料設計と技術動向」  |
| 9月19日         | 2020 年度 第 1 回 A02 班会議  |
| 9月24日         | 化学工学会第 51 回秋季大会（オンライン）内 SY-80 [材料・界面部会シンポジウム]<br>次世代物質・材料探索のための新たなアプローチ                              |
| 10月23日、11月20日 | オンラインセミナー「数学と材料科学」   |

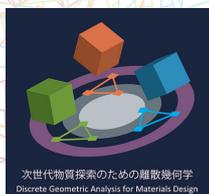
※会場の記載がない場合はオンライン開催です。

## 今後の行事予定

- 2021年1月27日 九大先導研・新学術「材料離散幾何解析」  
合同シンポジウムマテリアルズインフォマティクス講演会～材料科学と情報科学のクロスオーバー～

## 募集

人材募集する場合は領域ウェブサイトにて情報掲載いたします。



### 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. 06 編集担当：渡部 淳、福田 瑞季、池田 進（東北大学 AIMR）