

小谷 元子

東北大学大学院理学研究科・教授

離散幾何学から提案する新物質創成と物性発現の解明

1. 研究実施の概要

研究概要

数学、計算材料科学、化学工学などの専門家がチームを組んで、従来の経験則を超えた物性予測の新理論、計算モデル、シミュレーション技術の構築を目指す。具体的には、次の 4 課題を設けて、数学理論、計算機シミュレーション、化学実験・合成の 3 つの立場からの融合的な研究を図っている。

- (1) K4 格子の物性計算と合成
- (2) 準結晶を用いた構造化照明法の開発
- (3) 相分離の極短時間挙動の解析
- (4) 耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成

進捗状況

今年度は 5 ヶ年にわたる研究のスタートアップの半年間という位置づけにあり、主として研究体制の整備を行った。(1) 研究の全体企画や調整、およびチームの意思決定のための運営会議を発足させた。(2) 数学の専従研究員および研究補助員を雇用した。(3) 超高感度 CCD カメラ、液晶空間変調器などの実験設備を整備した。(4) 研究チーム内の相互理解を深め、共同研究を推進するため、研究チーム内の専門家や外部講師を招いて、おもに数学者が問題を共有することを目的とした勉強会(MathMate チュートリアル、MathMate ミニワークショップおよび CREST セミナー)を断続的に開催した。テーマとして、準結晶の数理、化学グラフ、ランダムシュレディンガー作用素、相分離ダイナミクスなどを扱った。(5) 流体力学極限に関する合宿形式の勉強会を開催した。(6) 外部専門家や来賓を招き、本研究プロジェクトの広報もかねたキックオフ・シンポジウムを開催した。(7) 本研究の外国人アドバイザーである Sergio Albeverio 氏と Uzy Smilansky 氏を招聘し、講演会を開催するとともに、本研究計画遂行にあたり助言を受けた。(8) 専用サーバー上にウェブページを立ち上げて、研究会の開催案内や研究成果の広報など本研究に関連する情報の発信を始めた。

研究の成果と今後の見通し

研究実施内容に記載したとおり、それぞれの研究テーマに関して、いくつかの予備的な結果を得た。それらを受け、更に研究を進めるための体制が整い、今後着実に進展する見込みである。

2. 研究実施内容(文中にある参照番号は 4.(1)に対応する)

今年度は 5 ヶ年にわたる研究のスタートアップの半年間という位置づけにあり、主として研究体制の整備を行った。

- (1) 運営会議 チームの意思決定のため、各グループから数名の代表者からなる運営会議を発足させた。研究の全体企画や調整にあたる。
- (2) 研究員等の任用 数学の専従研究員を公募し、2 名を採用した。1 名は 2 月に着任し、もう 1 名は平成 21 年 10 月着任予定である。また、研究データの収集・整理のための研究補助員 1 名を雇用した。
- (3) 実験設備の拡充 超高感度 CCD カメラ、液晶空間変調器などを設置し、平成 21 年度からの本格実験に向けた調整・試験を行った。
- (4) セミナー等 研究チーム内の相互理解を深め、共同研究を推進するため、研究チーム内の専門家や外部講師を招いて、おもに数学者が問題を共有することを目的とした勉強会を断続的に開催した。非公開のものを MathMate チュートリアル、外部にも公開して開催するものを MathMate ミニワークショップ、CREST セミナーと称し、合わせて 6 回開催した。テーマとしては、準結晶の数理、化学グラフ、ランダムシュレディンガー作用素、相分離ダイナミクスなどを扱った。
- (5) 合宿勉強会 外部講師を招いて、流体力学極限に関する合宿形式の勉強会を開催した。
- (6) キックオフ・シンポジウム 外部専門家や来賓を招き、本研究プロジェクトの広報もかねたシンポジウムを開催し、内外に研究開始をアピールした。
- (7) アドバイザーの招聘 本研究のアドバイザーとして Sergio Albeverio 氏(ボン大学)と Uzy Smilansky 氏(ワイズマン研究所)が就任した。9 月(本プロジェクトの正式発足の直前)に Albeverio 氏、10 月に Smilansky 氏を招聘し講演会を開催するとともに、本研究計画遂行にあたり助言を受けた。
- (8) 広報 専用サーバー上にウェブページを立ち上げて、研究会の開催案内や研究成果の広報など本研究に関連する情報の発信を始めた。

研究の成果と今後の見通し

(1) K4 格子の物性計算と合成

砂田による数学研究で発見された K4 結晶を炭素系に適用し、第一原理計算により K4 炭素結晶が準安定構造として存在し、グラファイトの異方的な圧縮によりつくることができるという可能性を示した。また K4 炭素結晶が金属で有ることを示すことに成功した[4]。さらに、新機能性を発揮する、K4 炭素結晶をベースとした物質を設計するために、第一原理シミュレーション計算用プログラムを発展させ、より詳細な原子位置情報を実験家に提供することが期待できる。

(2) 準結晶を用いた構造化照明法の開発

準結晶における原子の配置などの準周期的構造は、平行移動不変性を持たないが特異な対称性を持つことが大きな特徴である。これに関連して、準周期構造の代表的な数学的モデルである切断射影集合の対称性を簡潔に特徴づける定理が得られた[5]。この成果に調和解析や概周期関数の手法を組み合わせることで、切断射影集合の応用研究が進展するものと期待される[1]。そのため、関連する数学分野について、外部講師によるセミナーや文献調査を継続的に行っている。実験グループでは、本格的な実験観測に先立ち、顕微鏡を用いないレベルで各種光学装置の光学特性の予備的検討を行った。これを受けて、倒立型蛍光顕微鏡などの設備を導入することで、移動しない微小物体の画像化の見通しが立った。今後は、数学グループと検討を重ねながら、さまざまな照明パターンによる観測結果から観測対象の像を再構成するアプローチを試す。

(3) 相分離の極短時間挙動の解析

相分離構造のダイナミクスについては、ピコ秒からナノ秒にかけてのより早い時間スケールにおける情報を得るため、フェムト秒レーザーにより相分離が誘起可能な系の実験的探索を行っている。液体表面の単一分子層をパルスレーザーで励起し、相変化の起こる様子をナノ秒の時間分解能でブルースター法によって観測に成功した[3]。観測手法に新規性があり、さらなる発展が期待される。特に、相分離構造の初期ダイナミクスの測定のためには実験設備を拡充し、溶液内のナノ相構造観測に適した蛍光プローブの検討を始める。一方で、新しい数理モデル構築のために、相分離の標準的理論の再検討と流体力学極限などの確率的手法の数学的理解を深める必要がある。関連論文[2],[7],[8]。

(4) 耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成

材料物性やコンビナトリアル化学などに現れる構造解析において、計算幾何学手法と離散構造解析の数学的理論を構築するため、外部講師による集中講義や文献調査によって基礎資料の収集を行った。これを受けて、熱伝導率の異なる2つの領域の空間配置に対して、熱拡散と付随するノイズの評価に必要となる確率論[6]やスペクトル解析の手法について、理論グループと実験グループとが協働して取り組む。

3. 研究実施体制

(1)「小谷」グループ

①研究分担グループ長:小谷 元子(東北大学大学院、教授)

②研究項目

小谷グループは、小谷をリーダーとする「理論グループ」と福村をリーダーとする「実験グループ」から成り立っている。

理論グループの研究項目

- ・ 4 つの研究課題を通して理論的・計算科学的な研究
実験グループの研究項目
- ・ 準結晶を用いた構造化照明法の開発
- ・ 相分離の極短時間挙動の解析

(2)「川添」グループ

- ①研究分担グループ長:川添 良幸(東北大学、教授)
- ②研究項目
 - ・ 第一原理シミュレーション計算と物性予想

(3)「阿尻」グループ

- ①研究分担グループ長:阿尻 雅文(東北大学・WPI-AIMR 原子分子材料科学高等研究機構、教授)
- ②研究項目
 - ・ 数理モデルの実験的検証と新物質の化学合成

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表 (原著論文)

1. Shinichi Kotani: KdV flow on Generalized reflectionless potentials, Journal of Mathematical Physics Analysis, Geometry 4 (2008), 490-528. [2008 winter 発行]
2. Nobuo Yoshida: Phase transitions for the growth rate of linear stochastic evolutions, J. Stat. Phys. 133 (2008), 1033-1058. [2008.12 発行]
3. Jonathan Hobley, Tomoya Oori, Sergey Gorelik, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura and Dirk Hönig: Time-resolved Brewster angle microscopy for photochemical and photothermal studies on thin-films and monolayers, J. Nanoscience and Nanotechnology 9 (2009), 59-68. [2009.1 発行]
4. Masahiro Itoh, Motoko Kotani, Hisashi Naito, Toshikazu Sunada, Yoshiyuki Kawazoe, and Tadafumi Adschiri: New metallic carbon crystal, Phys. Rev. Lett. 102 (2009), 055703. [2009.2.4 発行]
5. Shinji Iizuka, Yohji Akama and Yutaka Akazawa: Asymmetries of cut-and-project sets and related tilings, Interdisciplinary Information Sciences 15 (2009), 99-113. [2009.3 発行]
6. Un Cig Ji and Nobuaki Obata: Annihilation-derivative, creation-derivative and representation of quantum martingales, Commun. Math. Phys. 286 (2009), 751-775. [2009.3 発行]
7. Y. Nagahata and N. Yoshida: Central limit theorem for a class of linear systems, to appear in Electron. J. Probab.
8. Nobuo Yoshida and Y. Hu: Localization for branching random walks in random

environment, to appear in Stoch. Proc. Appl.

(2) 特許出願

平成 20 年度 国内特許出願件数 : 0 件 (CREST 研究期間累積件数 : 0 件)