

「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」
平成20年度採択研究代表者

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

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

新たに専任研究員4名(数学系2名、実験系2名)を加え、前年度着任の1名(数学系)と合わせて合計5名の若手研究者による研究体制が整った。実験グループと数学グループの相互理解のため定期的な打合せとセミナーを開始し、若手研究者を中心に成果が得られ始めた。さらに、CREST 国際研究集会を主催した(1月)。(1) 運営会議により全体企画の調整などを行った。(2) 新たに4名の若手研究員が着任した。(3) 雇用した若手研究員を中心に、実験系研究グループと数学グループの連携強化を図った。(4) 倒立型顕微鏡を設置し、液晶空間変調器と高感度カメラを組み合わせて顕微鏡下で微細パターンを作るための光学系の実験整備を行った。(5) 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 CREST セミナーを開始した。集中講義として CREST レクチャーを開催した。(6) 東北大学の研究者ネットワークである「応用数学連携フォーラム」と、ワークショップを共同開催した。(7) 国際研究集会「The 1st CREST-SBM symposium "Random Media"」を主催した。(8) 研究会の開催案内や

成果の広報など本研究に関連する情報のウェブ発信を拡充した。

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・大学院理学研究科、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・金属材料研究所、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

§ 3. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(4-1)に対応する)

今年度は、新たに専従研究員 3 名を加え、実験グループと数学グループの相互理解のため定

期的な打ち合わせやセミナーを開始し、成果が得られ始めた。さらに、CREST 国際研究集会を主催した(1月)。

(1) 運営会議 各グループから数名の代表者からなる運営会議を初年度に発足させている。研究の全体企画や調整などチームの意思決定を行った。

(2) 研究員等の任用 数学の専従研究員を公募し、2名が10月に着任した。21年2月に着任している1名と合わせて、数学グループのコアとして実験グループとの共同研究を推進することが期待される。実験系では2名の専従研究員が着任した。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) 実験系研究グループと数学グループの連携強化 雇用したPDがそれぞれの研究テーマを絞り、研究体制を整えた。田上は阿尻グループとの研究打ち合わせを定期的にもち、数学グループとのパイプ役として機能し始めた。杉峰は、ランダムシミュレーティング作用素・パーコレーションのチュートリアルをCRESTセミナーで行った。黒田は、ナノチューブに関して論文探索を行い、数理的に拡張する結果を出した。赤間は小谷グループの実験グループである福村グループと定期的に意見交換を行った。

(4) 実験設備の拡充 倒立型顕微鏡を設置し、液晶空間変調器と高感度カメラを組み合わせて顕微鏡下で微細パターンを作るための光学系の整備を行った。

(5) 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CRESTセミナーと称して開始した。専従研究員が企画調整にあっている。化学グラフ・流体力学極限・拡散方程式・離散数学などをテーマに合わせて10回開催した。また、特定の課題について理解を深め、知識を共有するために、CRESTレクチャーを開催した。テーマは(i)相転移現象の数理、(ii)フラクタルによる空間タイリング、を取り上げた。

(6) 応用数学連携フォーラムとワークショップの共催 東北大学において応用数学関連の研究者ネットワークである「応用数学連携フォーラム」との連携を深めるため、外部講師を招いて、ワークショップを共同開催した。テーマは結晶格子の視覚化と非線形シミュレーティング方程式を取り上げた。

(7) 国際研究集会の開催 「The 1st CREST-SBM International Conference "Random Media"」と題する国際研究集会を1月25-29日の日程で仙台国際センターで開催した。24件の招待講演、30件の口頭発表、7件のポスター発表があった。

(8) 広報 初年度より専用サーバー上にウェブページを開設している。研究会の開催案内や成果の広報など本研究に関連する情報の発信を拡充した。ウェブ上においてニュースレターを6回発行した。ニュースレターでは、研究メンバー間の相互理解の推進をねらって、田上による研究メンバーのインタビュー記事を掲載している。間もなく英語版も公開予定である。数学者をコアとした異分野協同の実を世に問うための書籍出版について検討を始めた。

研究の成果と今後の見通し

(1) K4 格子の物性計算と合成

第一原理計算を用いた K4 結晶格子および類似結晶の構造決定、安定性評価、物性予測を行った。まず K4 結晶格子の構造安定性の評価を行い、**isotropic, trigonal deformation** に対しては安定であるが、**tetragonal deformation** に対しては不安定であり、常圧下では構造が不安定であることが明らかになった[16]。構造安定化についていくつかの有効な手法についてシミュレーション計算を実行した。安定性評価の結果、有望な方針を見出した。

フラーレンなどのより一般の結晶構造の探究のために、化学グラフ理論と空間パッキングを主に組合せ数学の手法によって扱った。特に、ある種の配置の存在と分類が重要である。この方向で、二部グラフを用いてゴーレンシュタイン凸多面体の無限系列が構成された[13]。また、球デザインに代表される空間における最適配置の探究のために、様々な自己双対コードの分類を行った[5,6,7,8,9]。さらに、アソシエーションスキームの一般化によって球面パッキングを論じた[10,15]。22年度は、より詳細なシミュレーション計算を実行し、これらの安定性の確認を行うと同時に分子動力学計算による有限温度での振る舞いを確認し、さらに K4 炭素結晶の持つべき広範な新機能性を検討する。より一般の結晶構造の探究のため、組合せ論的手法をさらに発展させ、研究課題(2)とも関連させてゆく。

(2) 準結晶を用いた構造化照明法の開発

実験グループでは装置の整備が順調に進み、数学グループとの共同作業に着手した。フェムト秒レーザーにより発生した白色パルス光を用い倒立型顕微鏡下で位相変調により、任意の照明パターンを作成を試みた。その結果、任意のパターンをフーリエ変換した画像を位相変調器に入力することで、数マイクロメートルの分解能でパターン作成が可能である事を確認した。これを受けて、数学グループはさまざまな照明パターンを得るために画像データを提供するとともに、得られた画像データから点像関数を用いて解像度を上げるためのプログラム開発にも着手した。目標としている数 10~数 100 ナノメートル領域の画像観察を実現するためには、CCD カメラとの結合レンズの問題、位相変調における光源のスペクトル幅の問題など、解決すべき課題が明らかになった。今後、実験装置の改良を重ねるとともに、実験グループと数学グループとの連携をさらに強化し、数 100 ナノメートルの解像度の実現をめざす。これと関連してナノ物質の基礎的光学特性を理解するため、金属ナノファイバーに沿った光の伝播についても研究し一定の成果を得た[3]。また、数理モデルの研究が進展した[4,19]。

(3) 相分離の極短時間挙動の解析

ピコ秒程度の極めて短い時間内に起こる相分離過程を調べるためには、超短パルス光により相分離を誘起する必要がある。これを可能とするため光で相分離を誘起できる系の開拓を行い、これに成功した[18]。今後この系を用いて溶液内微細構造生成のダイナミクスを調べていく。また、有機結晶内部で生成した電子・ホールペアの極めて早い電場下拡散過程についても、パルスX線

を用いた励起法により実験的に調べることができる点を示すことができた[17]。極短時間における物性解析のための実験手法は整いつつある。数学グループは、相分離の標準的理論の再検討と流体力学極限・パーコレーションなど確率論的手法によるアプローチを進展させている。

(4) 耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成

高分子と高熱伝導性粒子を複合化することで、高熱伝導性材料の実現を目指した。可能な限り少ない量の粒子を入れることで高熱伝導性を実現できれば、可塑性など高分子の特徴を損なうことがないため、決まった量の高熱伝導性粒子をどのように高分子中に配置すれば高い熱伝導性を実現できるかを求めるという問題を設定し、検討を行った。高熱伝導性粒子の表面を化学修飾することにより高分子との親和性の制御を試み、これに成功した。この結果、高熱伝導性粒子を高分子中に高密度充填することに成功した。これを受けて、熱拡散と付随するノイズの評価のための数学的理論へ向けて、ランダムシュレーディンガー作用素のスペクトル[14]と量子確率解析における新しい微分作用素の詳細を論じた[11,12]。今後は、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理論を構築するとともに、研究課題(1)でも扱っている空間における最適配置との関連を調べてゆく。

§ 4. 成果発表等

(4-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

1. Y. Nagahata and N. Yoshida: Central limit theorem for a class of linear systems, *Electron. J. Probab.* Vol.14 pp.960-977 (2009)
2. Y. Hu and Nobuo Yoshida: Localization for branching random walks in random environment, *Stoch. Proc. Appl.* Vol.119 Issue 5 pp1632-1651 (2009) DOI:10.1016/j.spa.2008.08.005
3. James A. Hutchison, Silvia P. Centeno, Hideho Odaka, Hiroshi Fukumura, Johan Hofkens, and Hiroshi Uji-i: “Subdiffraction Limited, Remote Excitation of Surface Enhanced Raman Scattering”, *Nano Lett.*, 9 (2009), 995-1001 DOI:10.1021/nl8030696
4. Yohji Akama: Commutative Regular Shuffle Closed Languages, Noetherian Property, and Learning Theory, *Lecture Notes in Computer Science* 5457 (2009), 93-104. DOI: 10.1007/978-3-642-00982-2_8
5. Masaaki Harada and Akihiro Munemasa: There exists no self-dual $[24,12,10]$ code over F_5 , *Designs, Codes Cryptogr.* 52 (2009), 125-127. DOI:10.1007/s10623-009-9271-5
6. Masaaki Harada and Akihiro Munemasa: A complete classification of ternary self-dual codes of length 24, *J. Combin. Theory, Ser. A* 116 (2009), 1063-1072. DOI:10.1016/j.jcta.2008.11.011
7. Masaaki Harada, Akihiro Munemasa and Boris Venkov: Classification of ternary extremal self-dual codes of length 28, *Math. Comp.* 78 (2009), 1787-1796.

DOI:10.1090/S0025-5718-08-02194-7

8. Masaaki Harada and Akihiro Munemasa: On the classification of self-dual Z_k -codes, the Twelfth IMA International Conference on Cryptography and Coding, Springer Lecture Notes in Comp. Sci. 5921, 78-90. DOI:10.1007/978-3-642-10868-6_6
9. Koichi Betsumiya, Rowena A.L. Betty and Akihiro Munemasa: Mass formula for even codes over Z_8 , the Twelfth IMA International Conference on Cryptography and Coding, Springer Lecture Notes in Comp. Sci. 5921, 65-77. DOI:10.1007/978-3-642-10868-6_5
10. Kanat Abdukhalikov, Eiichi Bannai and Sho Suda: Association schemes related to universally optimal configurations, Kerdock codes and extremal Euclidean line-sets, J. Combin. Theory Ser. A 116 (2009), 434-448. DOI:10.1016/j.jcta.2008.07.002
11. U. C. Ji and N. Obata: Quantum stochastic integral representations of Fock space operators, Stochastics 81 (2009), 367-384. DOI:10.1080/17442500902919645
12. U. C. Ji and N. Obata: Quantum stochastic gradient, Interdisciplinary Information Sciences 15 (2009), 345-359. DOI:10.4036/iis.2009.345
13. M.Tagami: Gorenstein polytopes obtained from bipartite graphs, to appear in Electronic Journal of Combinatorics. 17 (2010).
14. S. Kotani and Pham Van Quoc: On asymptotics of eigenvalues for a certain 1-dimensional random Schrodinger operator, to appear in Osaka Journal of Mathematics
15. Sho Suda: Coherent configurations and triply regular association schemes obtained from spherical designs, to appear in J. Combin. Theory Ser. A.
16. M. Itoh, S. Takami, Y. Kawazoe, T. Adschiri: Properties of atomic intercalated carbon K4 crystals, to appear in Phys. Rev. B.
17. Hideho Odaka, Toshifumi Miura, Koji Hatanaka, Sabine Wiebel, Hiroshi Fukumura: A picosecond hard X-ray study of the fluorescence Dynamics of anthracene derivatives and 8-hydroquinone complex microcrystals, J. Phys. Chem. C, 113 (2009), 11969-11974 DOI:10.1021/jp9031332
18. Shinji Kajimoto, Ayaka Mori, Hiroshi Fukumura: Photo-controlled phase separation and mixing of a mixture of water and 2-butoxyethanol caused by photochromic isomerisation of spiropyran, Photochem. Photobiol. Sci., 9 (2010), 208-212 DOI:10.1039/b9pp00137a
19. Yohji Akama, Kei Irie, Akitoshi Kawamura, and Yasutaka Uwano: VC Dimensions of Principal Component Analysis, to appear in Discrete and Computational Geometry, 2010.