

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

専従研究員 5 名(数学系 3 名、実験系 2 名)の若手研究者による研究を推進している。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継続し、若手研究者を中心に成果が得られ始めた。CREST 小谷チーム中間報告会を開催した(11 月)。

- (1) 運営会議により全体企画の調整などを行った。
- (2) 若手研究員 5 名を中心に、実験系グループと数学グループが毎月1～2回の頻度で定期的にセミナーを行うなど連携強化を図り、構造化照明法、化学グラフ、ナノチューブのスペクトル構造解析に関して具体的な成果が上がってきた。
- (3) 構造化照明のための骨格となる実験環境・設備準備がほぼ完成した。
- (4) 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 セミナーを定期的に開催した。
- (5) CREST 小谷チーム中間報告会を開催した。

- (6) ビーレフェルト大学CRC(collaborative research center)と本学理学研究科が部局間学術交流協定を締結し、相互訪問による共同研究を開始した。
- (7) 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。紙媒体のニュースレターの発行を始めた。
- (8) 東北大学重点戦略支援プログラム「数学をコアとするスマート・イノベーション融合研究共通基盤の構築と展開」との研究連携を開始した。

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(東北大学大学院理学研究科)

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(東北大学金属材料研究所)

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(東北大学原子分子材料科学高等研究機構)

① 研究分担グループ長:阿尻雅文(東北大学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、専従研究員 5 名の若手研究者を中心として、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継続し、成果が得られ始めた。さらに、CREST 小谷チーム中間報告会を開催した(11 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) 実験系グループと数学グループの連携強化 若手研究員 5 名を中心に、実験系グループと数学グループが毎月1~2回の頻度で定期的にセミナーを行うなど連携強化を図った。田上は川添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(関連論文[3])。杉峰は、ランダムシュレーディンガー作用素・パーコレーションのチュートリアルを CREST セミナーで行い、吉田の最新の結果の照会にもつとめた[6、7、8]。黒田は、ナノチューブに関して論文探索を行い、スペクトル構造に関し数理的に拡張する結果を出した。ボン大の C.Cacciapuoti 氏とデバイス開発につながるレゾナンスの解析に関する共同研究を開始した。赤間は実験グループと定期的に意見交換を行い、構造化照明法の開発を強力に進めている。

(3) 実験設備の拡充 相分離の初期状態を構造化照明法により観測するための骨格となる実験設備の設置はほぼ完了した。精度改善のための光学消耗品およびソフトウェアを次年度に整えることで、ナノ秒での相分離状態の観測が可能になる見込みである(関連論文[1、2])。

(4) CREST セミナー等 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 セミナーを定期的に開催した。専従研究員が企画調整にあたっている。離散幾何学、化学グラフ、流体力学極限、フーリエ変換、準結晶、微分方程式などをテーマに合わせて 15 回開催した。2 月には、研究集会「Analysis on Graphs in Sendai 2011」を開催し、グラフ理論・離散幾何・確率論の横断的課題について議論を深めた。

(5) CREST 小谷チーム「離散幾何学から提案する新物質創成・物性発現の解明」中間報告会(11 月) Uzy Smilansky (海外アドバイザー)、砂田利一(明治大学)の招待講演 2 件とチームメンバーによる研究発表 7 件があり、関連する諸問題について討論した(関連論文[4、5、9、10、11、12])。

(6) ビーレフェルト大学との共同研究 ビーレフェルト大学CRCと本学理科学研究科は、部局間学術交流協定を締結した。小谷・尾畑が訪問(9 月)し、M. Baake 氏の研究グループと共同研究に関して意見交換。また、ZiF(境界領域研究所)の Ph. Blanchard 副所長と研究交流に関して意見交換。赤間が訪問し準結晶の数値モデルに関する共同研究打ち合わせを行った(3 月)。

(7) 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。研究メンバー間の相互理解を深めるために始めた研究メンバーのインタビュー取材(田上が担当)は一巡した。一部はすでにウェブ上

公開済みである。間もなく英語版も公開予定である。さらに、紙媒体のニュースレターの発行を始めた。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した。

(8) 学内における研究連携の強化 東北大学重点戦略支援プログラム「数学をコアとするスマート・イノベーション融合研究共通基盤の構築と展開」との研究連携を開始した。

§4. 成果発表等

(4-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

[1] Nurbosyn U. Zhanpeisov, Sakurako Takanashi, Shinji Kajimoto and Hiroshi Fukumura: On the origin of the Raman band shifts for H-bonded complexes of normal alcohols and 2-butoxyethanol with water: A theoretical DFT and MP2 study, Chemical Physics Letters 491, 151–155 (2010) DOI: 10.1016/j.cplett.2010.04.015

[2] Shinji Kajimoto, Ayaka Mori and Hiroshi Fukumura: Photo-controlled phase separation and mixing of a mixture of water and 2-butoxyethanol caused by photochromic isomerisation of spiropyran, Photochemical & Photobiological Sciences 9, 208–212 (2010) DOI: 10.1039/b9pp00137a

[3] A. Jurisic, A. Munemasa and Y. Tagami: On graphs with complete multipartite mu-graphs, Discrete Math. 310 (2010), 1812-1819 DOI:10.1016/j.disc.2009.12.009

[4] T. Ikuta and A. Munemasa: Pseudocyclic association schemes and strongly regular graphs, European J. Combin. 31 (2010), 1513-1519 DOI:10.1016/j.ejc.2009.08.003

[5] M. Harada, C. Lam, A. Munemasa and V. D. Tonchev: Classification of generalized Hadamard matrices $H(6,3)$ and quaternary Hermitian self-dual codes of length 18, Electronic J. Combin. 17 (2010), #R171 (electronic) DOI: なし

[6] Y. Nagahata and N. Yoshida: A note on the diffusive scaling limit for a class of linear systems, Electron. Commun. Probab. 15 (2010), 68-78.

[7] Y. Nagahata and N. Yoshida: Localization for a class of linear systems, Electron. J. Probab. 15, (2010), 636-653.

[8] N. Yoshida: Localization for linear stochastic evolutions, J. Stat. Phys. 138 (2010),

598-618.

[9] Y. Ide, N. Konno and N. Obata: Spectral properties of the threshold network model, Internet Math. 6 (2010), 173-187. DOI なし

[10] U. C. Ji and N. Obata: Implementation problem for the canonical commutation relation in terms of quantum white noise derivatives, J. Math. Phys. 51 (2010), 123507, 15pp. DOI:10.1063/1.3516477

[11] Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe, Tadafumi Adschiri: Carbon-doped K4 nitrogen: A novel high energy density materials, Chem. Phys. Lett., in press.

[12] Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe, Tadafumi Adschiri: Pressure-dependent mechanical stability of simple cubic carbon, Phys. B, in press.