

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)(研究代表者)

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)(主たる共同研究者)

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)(主たる共同研究者)

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

## § 2. 研究実施内容

### 研究項目 1. K4 格子の物性計算と合成

#### ① 研究のねらい

ダイヤモンドなどの 3 次元構造の中で炭素は 4 本手  $sp^3$  混成軌道をとる。3 本手の  $sp^2$  混成軌道は 3 本手自身が 1 つの平面に乗ることもあり、実験家はグラファイトのような平面構造を構成すると考えていた。ところが、砂田の K4 格子は 3 本手の立体構造をもつため、材料科学業界の思い込みを打破し大きなインパクトを与えた[4]。数学から予言された K4 結晶を炭素系で合成することをめざす。

#### ② 研究成果の概要・進捗状況

平成23年度までの理論探索より、炭素、BN、MgB<sub>2</sub> などの材料系が K4 結晶を形成しうることを明らかにした。そこで平成24年度には、ボールミリングを用いて、これまでに予測を行った炭素系、BN 系における K4 結晶合成を試みた[14]。理論計算から予測されるアルカリ金属をドーピングし、炭素、BN とともにボールミリングにより、高圧、高温を印加することで K4 結晶合成を試みた[16]。ダイヤモンドアンビルセルを用い高圧下で K4 結晶合成を試み、構造を SPring-8 の放射光を用いて評価した。

一方、理論探索においては、K4 結晶を構成する炭素、窒素など以外の構成要素の探索を行い、実験に情報提供した。また、K4 以外の新しい結晶構造やフラーレン構造について、化学グラフの知見をもって探究し、その安定性の解析を行った[9][12]。田上研究員はデザイン理論を用いて川添研とともにコアシェル構造の研究を行い、材料系雑誌に共同研究論文が受理された[10][11]。更に、この方向で研究を発展させた。内藤氏、小谷とともに、マッカイ結晶など、極小曲面上のネットワークによる構造を、組み合わせ論を用いて分類し、川添研とともに安定性の評価に取り組んでいる。

黒田研究員は、ナノチューブの DOS と曲率の関係を明らかにするため、回転面上の周期ポテンシャルを持つシュレーディンガー作用素のスペクトルギャップ端での漸近挙動と回転面の曲率の関係を調べており、離散的効果の有無を明らかにする予定である。

砂田氏の量子ウォークの研究と尾畑氏のこれまでの研究とに関連性が予測される。砂田氏が参画したので、今後はこの原理解明を試みる(参考[3][5][6][7])。

### 研究項目 2. 準結晶を用いた構造化照明法の開発

#### ① 研究のねらい

現在の実験現場では、経験に頼った観測技法に頼っており、観測技法の理論においても解明すべき課題が多い。最適化構造化照明パターンを用いて、溶液内ナノ構造の可視化の数理モデルの構築を目指す。

## ② 研究成果の概要・進捗状況

数学グループと実験グループが協同して研究を進めている。実験グループではナノ秒レーザーを光源とした構造化照明顕微鏡を用いて液体中の相分離構造を観測した。特に、相分離開始後 100ns 程度の比較的遅い時間領域では得られた画像のフーリエ変換像に照明光の構造に起因するリングパターンのシフトが観測され、ナノ秒の時間分解能を持った単一画像での構造化照明顕微鏡の構築に成功したと言える。しかし、より早い時間では元々のリングとシフトしたリングの重なりによって観測が困難となった。これらの結果から、試料の持つ周期や構造によって最適な周期／構造を用いて観測する必要があることが分かった。この問題を解決するために、数学グループによって提案された Charles Radin の pinwheel tiling 等の構造[8]を持った照明を可能とする透過像型の構造化照明顕微鏡装置を作製した。今後は、周期を変えながら、あるいは異なる構造を用いて構造化照明を行う。

赤間氏は数理モデルをたててシミュレーションを事前に行い、このことで、実験の条件絞り込みに貢献している。これまでの数理的考察を論文にまとめている。

### 研究項目 3. 相分離の極短時間挙動の解析

#### ① 研究のねらい

2 種類の混合液体に起こる相分離のダイナミクスについて、福村研究室では独自の観測技術によって、従来の光散乱法や X 線回折による相の成長観測では得られなかった「分子間結合の情報」をつかまえることに成功し、相分離の時間発展に 3 つの領域があることを明らかにした。極初期段階の時間発展には、分子間結合の情報が本質的であると予想され、それを取り込んだ新しい数理モデルの提案をめざす。

#### ② 研究成果の概要・進捗状況

構造化照明法を用いた相分離極初期過程の観測を可能にするために、蛍光画像法によって相分離過程を観測し、これまで得られていた透過画像法による観測結果と比較した。この結果から透過画像法における界面の影響について考察した。また、相分離初期過程に観測される気泡の発生と成長、及びそれに付随する発光現象について詳細に観察し、発光現象に対する溶存気体の効果について考察した[2][18]。また、相分離の初期過程の計算機シミュレーションの実施に向けて必要となる理論物理系の戸田研究員が 1 月に着任し、実験と並行でモデルによるシミュレーションを行うことが可能になった。分子間相互作用の粗視化について実験グループと計算グループ間で議論を深め、必要なモデル構築の準備を進めた。

4月より参画した近藤研究員は、粒境界の相互作用の解明を離散幾何学的アプローチで開始した。確率論の様々な手法が必要であるので、平成25年度は、吉田、小谷(真)との協力体制を密にする(参考、[1][13][15])。

また、相分離の研究から展開した課題として、松江研究員が WPI-AIMR のチェン研と共同で金属ガラスの中距離構造を計算トポロジーの手法で解析し、論文として投稿した。

## 研究項目 4. 耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成

### ① 研究のねらい

パワーエレクトロニクス分野では、高熱伝導性と絶縁性という相反する性質をもつ材料として、絶縁素材の中に電導性の良い材料を配向させたハイブリッド素材の開発が緊急の課題となっている。それに向けて、異種高分子の相分離構造を利用して熱伝導性ナノ粒子を配向させることで、高熱伝導性、絶縁性と加工性の同時発現を図る超臨界法有機無機複合化技術を確立する。これまでの豊富な実験的蓄積に数理モデルを援用することで新材料の開発を目指す。

### ② 研究成果の概要・進捗状況

大きさの異なる粒子や形状の異なる粒子を充填した高分子が示す熱伝導率の理論的な考察を行った。充填量と熱伝導度との関係がどのように変化するか考察を行った。さらに、BN 粒子に代表される異方的な熱伝導率を持つ材料を用いる場合、充填構造の異方性と併せ、どのような熱伝導率の異方性を実現できるか、検討を行った。

松江研究員は、これまでの研究成果[17]を基に、名古屋大学の内藤久資氏とともにシミュレーションを行い、ナノ粒子の配置と熱伝導の関係について考察した。阿尻研の実験による成果から予想される構造は、非連続拡散係数ラプラスianの最小固有値の最大化を与える構造とは一致しないため、今後、より詳細な議論を必要とする。

## § 3. 成果発表等

### (3-1) 原著論文発表

#### ●論文詳細情報

- [1] R. Fukushima and N. Yoshida, “On the exponential growth for a certain class of linear systems”, *ALEA Lat. Am. J. of Prob. Math. Stat.*9, pp.323-336, 2012
- [2] Nobuo Yoshida, “Stochastic Shear Thickening Fluids: Strong Convergence of the Galerkin Approximation and the Energy Equality”, *Ann. Appl. Probab.*, Vol. 22, No.3, pp.1215-1242, 2012, (DOI: [10.1214/11-AAP794](https://doi.org/10.1214/11-AAP794))
- [3] Toshikazu Sunada and T. Tate, “Asymptotic behavior of quantum walks on the line”, *Journal of Functional Analysis*, Vol. 262, pp.2608-2645, 2012, (DOI:[10.1016/j.jfa.2011.12.016](https://doi.org/10.1016/j.jfa.2011.12.016))
- [4] Toshikazu Sunada, “Lecture on topological crystallography”, *Japan. J. Math.* Vol. 7, pp.1-39, 2012, (DOI: [10.1007/s11537-012-1144-4](https://doi.org/10.1007/s11537-012-1144-4))
- [5] Nobuaki Obata, “One-mode interacting Fock spaces and random walks on graphs”, *Stochastics*, Vol. 84, pp. 383-392, 2012 (DOI:10.1080/17442508.2010.550919)
- [6] Nobuaki Obata, “Manhattan products of digraphs: Characteristic polynomials and

- examples”, *Annals of Functional Analysis* 3, No. 2, pp. 135-143, 2012
- [7] Nobuaki Obata, “Asymptotic spectral distributions of distance  $k$ -graphs of large-dimensional hypercubes”, *Banach Center Publ.* 96, pp. 287-292, 2012 (DOI: 10.4064/bc96-0-20)
- [8] Yohji Akama and Shinji Iizuka, “Random fields on model sets with localized dependency and their diffraction,” *Journal of Statistical Physics* Vol. 149, No.3, pp.478-495, 2012 (DOI: 10.1007/s10955-012-0588-5)
- [9] Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe, “Orthorhombic Carbon Allotrope of Compressed Graphite: *Ab initio* Calculations”, *Phys. Rev. B*, Vol. 85, No. 3, pp.0334101-0334104, 2012, (DOI:[10.1103/PhysRevB.85.033410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.033410))
- [10] Makoto Tagami, Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe and Motoko Kotani, “New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8-12 Atoms Found by the Method of Euclidean Designs”, *Mater. Trans.*, Vol. 53, No. 3, pp.459-462, 2012, (DOI: [10.2320/matertrans.N-M2011859](https://doi.org/10.2320/matertrans.N-M2011859))
- [11] Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe, “New Cubic Carbon Phase via Graphitic Sheet Rumpling”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, Vol. 85, No. 21, pp.2141041-2141045, 2012, (DOI:[10.1103/PhysRevB.85.214104](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.214104))
- [12] Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe, “Phase Conversion from Graphite Toward a Simple Monoclinic  $sp^3$ -Carbon Allotrope”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 137, No. 2, pp.0245021-0245025, 2012, (DOI: [10.1063/1.4732538](https://doi.org/10.1063/1.4732538))
- [13] Tianjiao Shao, Bin Wen, Roderick Melnik, Shan Yao, Yoshiyuki Kawazoe and Yongjun Tian, “Temperature Dependent Elastic Constants and Ultimate Strength of Graphene and Graphyne”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 137, No. 19, pp.1949011-1949018, 2012, (DOI: [10.1063/1.4766203](https://doi.org/10.1063/1.4766203))
- [14] Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe and Tadafumi Adschiri, “Mechanical Stabilities of  $K_4$  Carbon and  $K_4$ -like  $NaC_2$ ”, *J. Phys. Chem. Solids*, Vol. 73, No. 11, pp.1264-1267, 2012, (DOI:[10.1016/j.jpcs.2012.07.013](https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2012.07.013))
- [15] Yunye Liang, Vei Wang, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe, “Band Gap Engineering of Silicene Zigzag Nanoribbons with Perpendicular Electric Fields: a Theoretical Study”, *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 24, No. 45, pp.4553021-4553028, 2012, (DOI: [10.1088/0953-8984/24/45/455302](https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/45/455302))
- [16] B. Wen, Sei-ichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe and Tadafumi Adschiri, “Mechanical stabilities of  $K_4$  carbon and  $K_4$ -like  $NaC_2$ ”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 73, No. 11, pp.1264–1267, 2012. (DOI: 10.1016/j.jpcs.2012.07.013)
- [17] Kaname Matsue, “Rigorous numerics for stationary solutions of dissipative PDEs - Existence and local dynamics”, to appear in *NOLTA*.

[18] Nobuo Yoshida, F. Comets: “Localization Transition for Polymers in Poissonian Medium”, *Commun. Math. Phys.*, to appear.

[19] 平石秀史, 今井浩, 森山園子, “三値マトロイドの生成と White の予想に関する実験”, *信学技報*, vol. 112, no. 21, COMP2012-3, pp.15-21, 2012