

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 離散・位相幾何学的手法による界面構造予測と粒界指標の確立

2. 個人研究者名

井上 和俊（東北大学材料科学高等研究所 講師／科学技術振興機構 さきがけ専任研究者）

3. 事後評価結果

界面は、構造材料、電子材料、磁石材料など、様々な材料で普遍的に見られ、ごくわずかであっても巨視的な材料特性を支配することもある重要な要素であるが、三次元周期性を破るために最先端の計測技術や計算機シミュレーションでも取り扱いが容易ではなく、例えばもっとも基本的な情報である結晶粒界の3次元原子配列ですら解明が難しい。井上研究者は数学者としての知見をもとに、走査型透過電子顕微鏡と第一原理計算を併用して、3次元結晶粒界の原子配列の解明に取り組み、粒界近傍を充填する基本的な多面体とその傾角依存性に粒界周期を反映した階層性が存在することを見出し、多面体配列が数学の整数論に登場するファレイ数列によって記述できることを発見した。

本研究において、井上研究者は数学（整数論）を道具として、結晶粒界構造という歴史が古く困難な材料の問題に取り組み、重要な学理的発展をもたらすことに成功したと言える。領域アドバイザーからは、歴史に残る成果であるとの意見もあった。この成果は、界面エネルギーや各種物性値の予測や理解にもつながる可能性があるが、そのためには関連分野の研究者にわかりやすい言葉で伝え、理解して利用していただくことが肝要であろう。