

News letter

離散幾何と材料

その共通項を探究する



Discrete Geometric
Analysis for
Materials Design

次世代物質探索のための離散幾何学

科学研究費助成事業「新学術領域研究（研究領域提案型）」
平成 29 年～ 33 年度

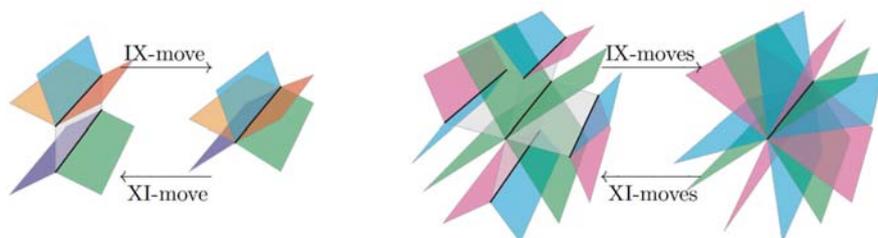
News letter
Vol. 02

A02 班代表挨拶

A02 班では、「ネットワーク解析による高分子材料」の研究を行います。特に、有機系材料や高分子材料の構造をネットワークとしてとらえ、3次元トポロジー、階層的シミュレーションを用いて解析します。

A02 班で用いる数学的手法は、3次元トポロジーや結び目理論など、トポロジーが中心です。これまでも結び目理論は紐状の物質の絡みを記述する方法として用いられてきました。DNAは2重螺旋構造が有名ですが、もう少し大域的な視点では結び目や絡み目の構造が現れます。そのような構造がDNAの組換え酵素の研究や、染色体の配置の研究に使われてきました。また近年では、複雑な構造を持つ環状高分子が合成されています。環状高分子は環の部分に結び目の構造を含むことが出来、その構造は物性を変化させることが知られています。

今回の研究では、結び目理論と関連の強い3次元トポロジーを用いて、物質のネットワーク構造を解析します。例えばブロックコポリマーのマイクロ相分離構造からネットワークの構造を取り出し、その特徴付けや、その動的な変化の様子を記述します。これらの問題に取り組むためには、新しい数学の理論と新しいシミュレーション方法の構築が必要になることが明らかになりました。これらの理論的な側面の発展と、それを応用することによる新奇材料の開発の両方を連携して進めて行くことを目指しています。



埼玉大学大学院
理工学研究科 教授

下川 航也

SHIMOKAWA Koya

研究分野:トポロジー

研究テーマ:3次元トポロジー

研究概要:トポロジーの一分野である、結び目理論、3次元多様体論と、それらの応用。特に、結び目理論のDNA、高分子化学研究への応用、3次元多様体論の材料科学への応用を進めています。具体的には、DNAの部位特異的組み換え酵素のタンゲル解析、高分子トポロジー、3次元ネットワークと材料の数理モデルの研究を行っています。

論文・書籍紹介

A02 班が扱う幾何学と物質・材料科学の連携については下記のような文献が参考になります。

- [1] Koya Shimokawa, Kai Ishihara and Yasuyuki Tezuka, Topology of polymers. SpringerBriefs in the Mathematics of Materials, to appear.
- [2] Neighborhood equivalence for multibranched surfaces in 3-manifolds, Kai Ishihara, Yuya Koda, Makoto Ozawa, and Koya Shimokawa, arXiv:1806.08919.

A02 班研究の概要

A02 班には 2 つの研究計画があります。

■ **A02-1 「3次元トポロジーに基づく静的・動的ネットワークの提案」**（研究代表：下川航也）

■ **A02-2 「高分子高次構造の階層的シミュレーション」**（研究代表：青柳岳司）

A02-1 では数学の 3 次元トポロジーを用いた研究を行い、A02-2 ではソフトマテリアルの粗視化シミュレーションを用いた研究を行います。数学的な側面では、共連続構造を分岐曲面を用いて表し、その変形の研究を行っています。

これらの研究計画に加え、様々な研究分野に渡り、様々な物質・材料を扱う 7 件の公募研究が採択されました。

計画研究、公募研究が共同し、これまでに無い形での数学、シミュレーション、材料科学の連携を模索し、新しい高分子材料の研究と開発を目指します。

科研費 新学術領域「次世代物質探索のための離散幾何学」（領域代表 小谷）では、公募研究を募集し、本新学術領域全体で 24 件の、また A02 班では 7 件の研究提案が採択されました。ポリマーをはじめとする、材料科学に現れる様々な数学に関する研究など、興味深い研究が集まりました。

次ページ以降で、A02 班で採択された全公募研究の紹介をします。

HARMONICS
Column for math-mate collaboration

第2話 逆問題を解く

数学者の方から、"Can one hear the shape of a drum?" という問題があることを教えていただきました。太鼓の「音を聴く」のではなく、太鼓の「形を聴く」というちょっと奇妙なフレーズです。太鼓の膜の形を変えると発生する音が変わりますが、では、音を聴いて太鼓の膜の形を言い当てることのできるか？形を聴き取ることができるか？という問いのようです。

入力・原因（膜の形）から出力・結果（音）を求める問題を「順問題」と呼びます。古来、人間は自然の法則に従って事象が起こったり変化したりする道筋を順方向とらえてきましたので、入力→出力が順問題となります。それに対して、出力・結果（音）から入力・原因（膜の形）が何であるかを推測する、出力→入力を解く問題を「逆問題」と呼びます。現象を記述する適切な数学モデルが存在し、その数式を逆に解くための適切な解法があれば、出力から入力を推測することができると考えられ、逆問題は数学における重要な研究課題、研究分野の一つになっています。数学モデルが複雑になればなるほど、逆問題を解くのは難しいであろうことは何となく想像できます。

さて、数学者ではない筆者は、この逆方向の論理展開には不慣れであり、文章を書きながらも既に頭が混乱し始めていますが、逆問題こそが未来の材料科学を大きく変える可能性があると考えられることから、本コラムシリーズ HARMONICS の第2話として取り上げてみることにしました。

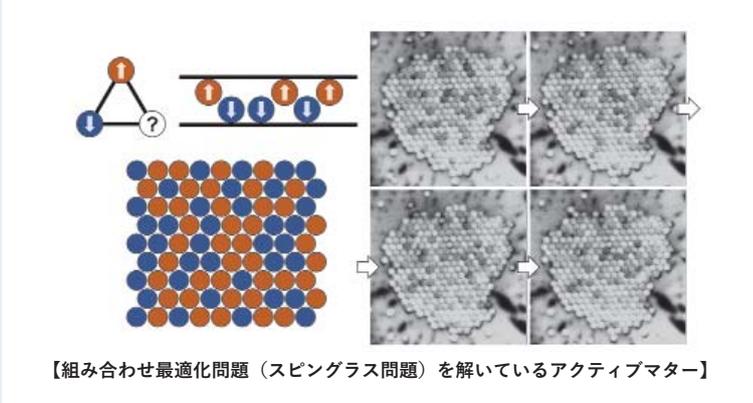
自然科学の基本である「実験」という研究手法は順問題の典型例であり、ある初期状態を準備し、それが時間とともにどのように変化していくかを、自然の力に委ねて観測します。自然が出した結果は宇宙の基本法則に従っているはずですので、実験結果に真理が含まれていることを前提に考察を行います。

4 ページへ続く

A02班 公募研究紹介

研究内容

研究計画 ▶ 外場制御可能な人工原子からなる動的ネットワークの数理構造と機能



研究代表者

慶應義塾大学
理工学部電子工学科 教授

齋木 敏治

SAIKI Toshiharu



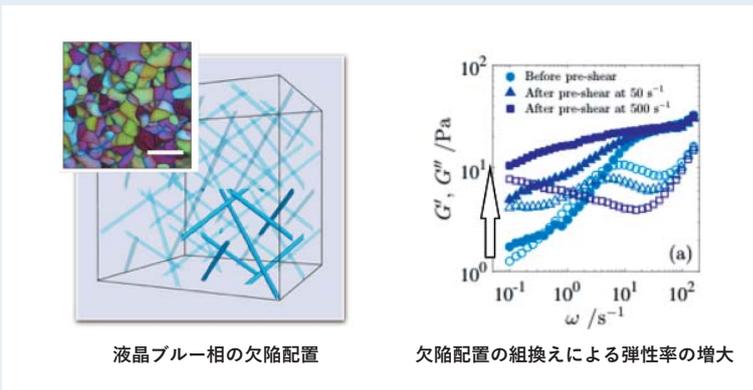
研究分野：相変化材料工学 ナノフォトニクス

研究テーマ：コロイド粒子アクティブマター

研究概要：記憶・演算機能を兼ね備えた相変化材料と「巨大原子」として振る舞うコロイド粒子を利用したアクティブマターの研究を進めています。外場によって人工原子の物性を変調し、相互作用と揺らぎに関わるパラメータを大きな自由度で調整しながら、新たな知能材料のモデルを提案し、事例を横断して共通する数理構造の発見を目指します。

研究内容

研究計画 ▶ 液晶の三次元位相欠陥ネットワーク組換えダイナミクス



研究代表者

北海道大学大学院
工学研究院 准教授

藤井 修治

FUJII Shuji



研究分野：ソフトマターのレオロジー

研究テーマ：液晶ブルー相の欠陥ネットワーク組換えダイナミクス
研究概要：位相欠陥ネットワークにより構造が規定される液晶ブルー相のレオロジーを、欠陥ダイナミクスの観点から調べています。

本研究では、液晶ブルー相の三次元位相欠陥ネットワークを可視化し、せん断変形下における欠陥ネットワークの組換えダイナミクスの直接計測を試み、レオロジー特性との因果関係を明らかにします。

3 ページの続き

材料研究も基本は順問題です。原料（工業的には天然原料、研究では化学試薬）を様々な割合で調合し、ある温度、圧力条件で加熱、加圧すると化学反応が進み、原料とは異なる化合物が形成され、何らかの新たな物質ができていきます。そして、何ができたのか、どのような性質を持つのかを分析機器により調べます。その新物質の性質が何か世の中の役に立つようなものであるならば（すなわち、機能を有しているならば）、それは、人類にとって有用な新材料と言えます。しかし、役に立つものはそう簡単には見つからず、研究者は、少しずつ、原料の調合割合を変えたり、処理温度、圧力を変えたりして、新しい機能を持った材料が見つかるまで実験を繰り返します。日本の材料科学の基礎を築いた本多光太郎博士も無類の実験好きであったと言いつづけていますが、日本の材料科学者はこういった実験を細かく丁寧に繰り返し、人類の生活を豊かにする優れた材料を発見してきました。

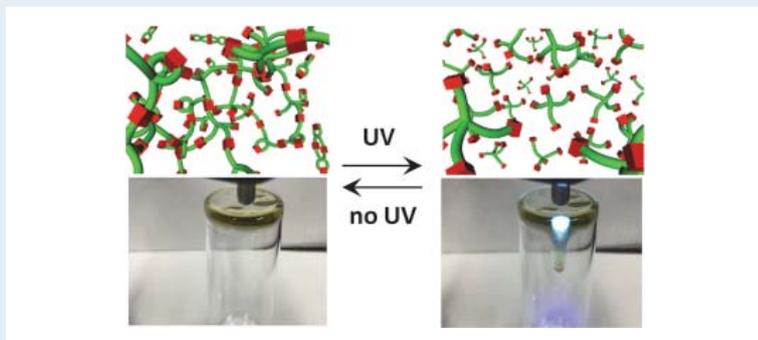
このような「順問題」的な研究を繰り返すことによって、何らかの法則性が見いだされ、その知見を集大成することで新たな学問領域が形成されます。この段階になってきますと、「では、〇〇〇の機能を持った材料を創製するためには、〇〇と〇〇を調合し、〇〇℃、〇〇気圧で処理すればよいのではないか？」という予測に基づいた実験も可能となります。この予測は「逆問題」に相当します。人は「当たり」をつける時に、過去の様々な経験に基づき脳内で逆問題を解こうとしています。もしも、〇〇〇の機能を持った材料を作製したい、と思った時に、コンピュータが逆問題を解いて、〇〇と〇〇を〇：〇の割合で混ぜ、〇〇℃、〇〇気圧で処理しなさい、と指示を出し、その指示通りに合成して本当にその機能を持った材料ができたとなれば、材料科学は完成の域に達したと言ってもよいでしょう（材料科学者は皆職を失ってしまうかもしれませんが・・・）。

これまで順問題的な研究によって優れた材料を創製できたのだから、今後もそれでよいではないか、という考え方もあります。しかし、急速な社会の発展により、新材料に求められる要求も高度化し、また、開発に許されるタイムスケールも短くなり、数百、数千の実験をする余裕もなくなってきました。材料科学は「科学」であり、全てが社会貢献に直結する必要はありませんが、社会が要求する機能を持った材料を最短経路で創製する学問的基盤を作ることが、昨今、材料科学に求められるようになってきたのも事実です。我々は今後、逆問題的な発想へと徐々に舵を切り、究極的には逆問題を解くことで新材料を開発していくことを、真剣に考えねばならなくなってくるでしょう。

研究内容

研究題目 ▶ 光刺激により分子鎖切断・再生を制御可能な均質スターポリマーネットワークの創製

研究計画 ▶ 光刺激によってトポロジーを組換え、時空間局所的に粘弾性を制御可能な高分子物質を作り出します。



研究代表者

東京大学大学院
総合文化研究科 助教

本多 智

HONDA Satoshi



研究分野：高分子化学、超分子化学
研究テーマ：有機合成・高分子合成・自己組織化
研究概要：生体分子の構造・トポロジーに倣った有機・高分子ソフトマテリアルの合成と機能性分子集合体の構築に取り組んでいます。本研究計画ではネットワークの切断と再生を光刺激で自在に操り、ネットワークのトポロジーの変化が物性に及ぼす効果を理解するための研究を行っています。

研究内容

研究題目 ▶ 高分子からみあいの階層的記述



名古屋大学大学院
工学研究科 教授

増淵 雄一

MASUBUCHI Yuichi



研究分野：レオロジー
研究概要：マクロなからみあい現象のミクロな本質を明らかにすることを目指す。応募者独自の数理モデル群を用いて、粘弾性実験により実材料との整合性を担保しつつ、ミクロな分子間の幾何的構造/相互作用とマクロな高分子のからみあい現象との間を階層的に接続する。

長く材料科学の「順問題」的な研究をしていると、「やはり、逆問題で新材料を開発するのは難しいのではないか」と思ったりもします。前号第1話で書いたセンダストのように、ある非常に限られた化学組成をとったときのみ、デルタ関数的に機能を発現するような材料の場合、その物質系の大域的な挙動をモデル化しても、その特異な1点を見出すことはできないでしょう。また、物質・材料は原子から成り立っていますが、オングストローム (0.1 ナノメートル) の世界 (原子のレベル)、ナノメートルの世界 (分子、ナノ粒子のレベル)、マイクロメートルの世界 (結晶粒子のレベル)、ミリメートル~センチメートルの世界 (実際の材料) でそれぞれ支配する方程式が違う可能性があり、また、それら各階層間を接続する際にどのような数学モデルを使うのが適切であるのかも不明瞭であり、ミクロ~マクロの全体構造はそう簡単にはつながらない可能性もあります。仮につなぐたととしても、複雑なモデルになって、今度はその逆解法で苦労しそうです。うーむ。。。逆問題で材料を設計する、あるいは、逆問題を材料設計の一助とするには、一体どのような方法をとればよいのでしょうか？

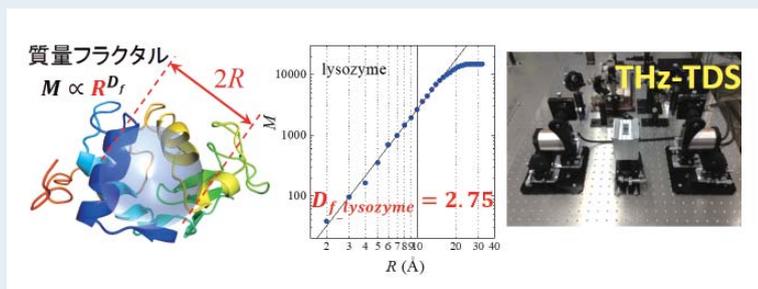
実際のところは、もっと楽観的に考えています。数学と材料科学の連携は難しいチャレンジと言われながらも、筆者が所属する東北大学 AIMR では、数学者と材料科学者の数年間にわたる議論から、数学に馴染まないと思われていた材料の諸問題に、うまく数学を取り入れ、新しい視点で材料の構造、作製プロセスや物性に関して語れるようになってきました。何よりも議論を重ねることが重要です。科学ですので、未知の世界に踏み込まねば面白くありません。失敗は恐れずに、実験研究者、理論研究者、数学者が様々なコラボをしてくれることを期待しています。解決の糸口は、思わぬところに突如出現するかもしれません。

池田 進

1990年東北大学理学部地学科卒業。セメント会社勤務後、2000年に東京大学大学院理学系研究科で学位取得。同大学院新領域創成科学研究科の助教等を経て、2008年より東北大学 AIMR 助教、2010年より同准教授。2011年より副事務部門長 (研究担当) を、また2018年より研究支援部門長を併任。岩石・鉱物、セメント、表面、薄膜成長、有機半導体デバイス等の幅広い物質・材料分野の研究経歴を踏まえ、現在、数学と材料科学の連携を推進中。

研究内容

- 研究題目** ▶ タンパク質や高分子のフラクタル性に起因する普遍的ダイナミクスのテラヘルツ分光研究
- 研究計画** ▶ 高分子ガラスのフラクタルダイナミクスのテラヘルツ時間領域分光による検出を実証し、高分子のフラクタル構造との相関を明らかにします。
また、その幾何構造情報を用いて、パーシステントホモロジー理論によるフラクタル構造の解釈も試みます。



研究代表者

筑波大学
数理物質系・物質工学域 助教

森 龍也

MORI Tatsuya



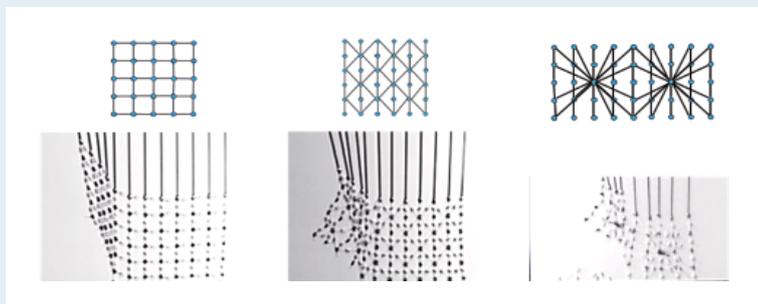
研究分野：物性物理

研究テーマ：ガラスのテラヘルツ帯普遍的ダイナミクス、テラヘルツ分光

研究概要：テラヘルツ帯の分光手法を用いて、ガラスの普遍的ダイナミクスであるボゾンピーク、及びポリマーガラスに普遍的に現れると考えられるフラクタルダイナミクスの研究を行っています。ボゾンピークについては、THz分光によって光と振動状態密度の相互作用を定量的に調べ、最近の分子動力学計算の解釈の助けを得ながらその性質を明らかにしていきます。ポリマーガラスの「ガラス部分」に着目したTHz分光研究は未開拓な分野ですが、相補的なラマン散乱手法を組み合わせながら普遍的な性質を調べます。

研究内容

- 研究題目** ▶ ネットワーク状構造物のトポロジーと強靭化
- 研究計画** ▶ 力学的脆弱性という致命的欠陥をもつネットワーク状弾性体を、トポロジーを考慮することによって強靭化します。トポロジカル物性、データ駆動科学などの知見を積極的に活用し、設計原理の発見と確立を目指します。



研究代表者

九州大学大学院
工学研究院機械工学部門 准教授

山口 哲生

YAMAGUCHI Tetsuo



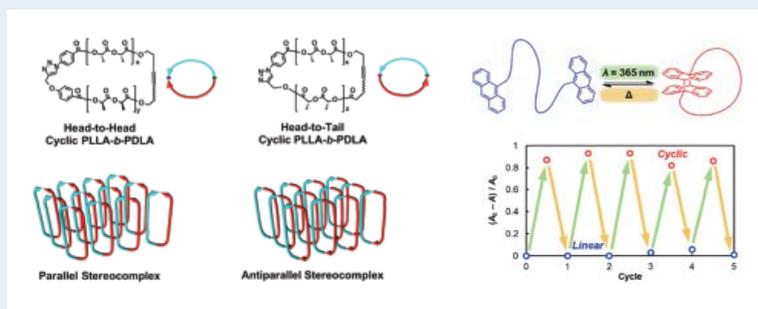
研究分野：ソフトマター物理学、実験地震学

研究テーマ：プレート境界型巨大地震のモデル実験、超音速すべり摩擦、破局的力学現象の発生予測など

研究概要：やわらかい弾性体の動力学に興味をもっています。巨大変形、遅い力学応答、内部自由度などを操って、モデル実験で状況証拠を掴み、計算機シミュレーションで大雑把に再現した後、単純な理論モデルを作って現象を理解したつもりになる、という自作自演型の芸風で研究をしています。

研究内容

- 研究計画** ▶ 数学的アプローチによる新奇超分子系材料創成と解析



研究代表者

北海道大学大学院
工学研究院 准教授

山本 拓矢

YAMAMOTO Takuya



研究分野：高分子化学

研究テーマ：環状高分子の合成・物性探索

研究概要：環状高分子の特異な性質に着目し、高分子合成および物性評価を行っています。例えば、環状両親媒性ブロック共重合体、環状ステレオブロックポリ乳酸、All Head-to-Tail型環状ポリ(3-ヘキシルチオフェン)の合成や光・熱反応を利用した直鎖・環の切り替えに基づく材料開発を目指しています。

物質と情報科学セミナー（第1回）

日時：2018年7月24日(火) 会場：東京大学本郷キャンパス工学部6号館368号室

本新学術領域における異分野間連携を目指すため、B01班によって物質と情報科学セミナーが開かれました。本セミナーでは、情報科学の物質・材料科学への応用を目指して、他の班を含む様々な分野の研究者が集まりました。講演は一木輝久氏（名古屋大学）と辻雄太氏（九州大学）の二名によって行われました。一木氏は多粒子種の運動の理論に関して、辻氏はエレクトライドの第一原理計算および分子内の電子の伝導理論に関して講演を行いました。両氏の講演からは数学を用いた物質科学への新しいアプローチも提案され、積極的に意見が交わされました。本講演においては、情報科学・物質科学・数学の分野を超えた活発な討論がなされ、研究のさらなる発展の可能性も感じられるものでした。両講演ともに非常に盛況であり、本新学術領域が進める材料科学と幾何学の新たな融合が期待されるものでした。



A02班会議

日時：2018年6月9日(日) 会場：お茶の水女子大学理学部1号館201室

A02班のメンバー、公募研究で採用された研究者の方々、さらに本新学術領域研究の他の班のメンバーの方も数人参加されたワークショップです。

下川航也氏、手塚育志氏、出口哲生氏、青柳岳司氏による研究計画の説明がまず、ありました。名前を挙げた順番に数学から材料科学へそれぞれの研究のグラデーションを感じることができ、今後の研究の相互発展が大いに期待できる内容でした。

その後、A02班で公募研究として採択された研究の概要発表がありました。材料科学の研究が多く採択されており、数学との関わりは始まったばかりですが、各研究とも数学の“匂い”を感じることができ、数学が材料科学の発展に役に立つことを期待させられる内容でした。今回の News Letter は本会議で得られた情報をもとに、本新学術領域の他の班の方々に紹介する内容となっています。



A03班会議

日時：2018年6月2日(土) 会場：日本橋ライフサイエンスビルディング

本領域 A03 グループの会議が行われました。各研究者が本領域で行う研究の計画やアイデアについて発表を行いました。最初に、小谷元子氏、内藤久資氏、高見誠一氏がそれぞれ、A03-1、A03-2、A03-3 班の研究の進展について講演を行いました。昼食を兼ねたディスカッションの時間の後、佐野正人氏、伊藤良一氏、小磯深幸氏、安本真土氏、吉川浩史氏らが各々の研究計画や、本領域研究で今後取り組む問題についての講演を行いました。問題の中には既存の数学を材料科学へ応用するものや、新しい数学分野を切り開く必要があるものがありました。例えば佐野正人氏はカーボンナノチューブの液体内での振動に対する実験についての発表を行い、その振る舞いを様々な統計モデルを用いて説明する方法について議論を行いました。また、伊藤良一氏は穴のあるグラフェンシートの諸性質を説明するために、フラストレーションのあるシステムの新しい幾何学的モデルの必要性を強調していました。既存の数学モデルでは説明できない性質があるとのこと。今までのところ材料科学へ数学が盛んに応用されている例はあまり多くありません。この研究集会では材料科学の研究者と数学の研究者が様々な情報交換を行い、様々な共同研究が今後期待できる議論が行われました。

活動記録

2018年

- 6月 2日 A03 班会議
会場：日本橋ライフサイエンスビルディング 会議室 302
- 6月 7日 B01 班会議
会場：東京大学本郷キャンパス工学部 2号館 33B2 号室
- 6月 9日 A02 班会議
会場：お茶の水女子大学理学部 1号館 201 室
- 6月 15日 物質と幾何セミナー第1回
会場：名古屋大学理学部 A館 A207 室
- 7月 20日 物質と幾何セミナー第2回
会場：名古屋大学理学部 A館 A207 室
- 7月 24日 物質と情報科学セミナー（第1回）
会場：東京大学本郷キャンパス工学部 6号館 368 号室
- 7月 28-30日 Mini-Workshop on Geometry and Mathematical Science
会場：大阪市立大学理学部 E棟 E408 講義室
- 8月 13-17日 PROGRESS IN THE MATHEMATICS OF TOPOLOGICAL STATES OF MATTER
会場：東北大学、AIMR
- 8月 29日 A02 班会議
会場：東京工業大学南 8号館 8階会議室
- 10月 22日 物質と幾何セミナー第3回
会場：名古屋大学理学部 A館 A428 室
- 10月 26日 A01 班会議
会場：東北大学東京分室会議室 B
- 11月 13日 物質と幾何セミナー第4回
会場：名古屋大学理学部 A館 A207 室
- 11月 17-18日 領域会議（仙台市内）

今後の行事予定

- 2019年 1月 7-8日 AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics（会場：東北大学 AIMR）
- 2019年 1月 15-16日 研究会集「離散幾何解析とその周辺 2018」（会場：CIC 東京）
- 2019年 1月 30日-2月 1日 国際ワークショップ「Polymers meet Topology」（会場：東京工業大学 蔵前会館）

募集

博士研究員を募集しております。詳細は <https://math-materials.jp/recruit/> をご覧ください。



問い合わせ先

小谷 元子（領域代表）
東北大学理学研究科・材料科学高等研究所 (AIMR)
E-mail : contact@math-materials.jp 領域ウェブサイト : <https://math-materials.jp/>

News letter Vol. 02 編集担当：正井秀俊（東京工業大学 理学院数学系）、池田進（東北大学 AIMR）