

研究領域名	次世代物質探索のための離散幾何学
領域代表者	小谷 元子（東北大学・理学研究科・教授）
研究期間	平成29年度～平成33年度
研究領域の概要	<p>数学と物質・材料科学の連携により、新学術領域の創成を目指す。物質・材料研究における最重要課題は、構造・機能・プロセスの相関原理の解明である。原子・分子を直接に観察・制御し、メゾ構造を精密に形成するナノテクノロジーが発達した今日、物質のマイクロ・メゾ構造とマクロな物性・機能との関係を解析（順問題）すること、更に、その知見を活かし、求められる物性・機能をもつマイクロ・メゾ構造の予見（逆問題）、構造を生成する動的構造形成の制御（最適化・制御）が求められている。離散（マイクロ・メゾ）と連続（マクロ）の関係を明らかにすることを目的とする21世紀の数学「離散幾何解析学」により、物質・材料探索を革新する。それとともに材料科学の課題から刺激を受け、離散幾何解析学を深化・展開する。複数領域が双方向に刺激を受け新機軸に挑戦することで新領域を創成する。</p>
科学研究費補助金審査部会における所見	<p>本研究領域は、数学分野で発展しつつある離散幾何解析を新物質探索に応用することで、これまでの体系化された固体物性論に頼るのとは異なり、数学+物質・材料科学+計算科学の分野にまたがる新たな切り口で材料探索を革新するという新学術領域としての発展が充分期待できる挑戦的な研究提案がなされている。特にビッグデータや人工知能を物質設計に応用しようとする機運が世界的に高まるなか、「幾何学」という観点からの取組は本研究領域独自のものであり、高く評価できる。しかしながら、実際に構造と機能を結び付けることは容易ではないと考えられ、本研究領域が掲げる提案の有効性を実証するためにも、新材料開発や数学的モデルから逆問題を解いた具体的例などを早期に示すことが求められる。</p> <p>経験豊富な領域代表者のもと、手法ではなく、数学が牽引すると期待できるターゲットに応じた3つの研究項目を設定し、それぞれ数学系、実験科学系、数理・計算科学系の研究者が連携した組織が提案されている。また、公募研究についても、新領域開発や研究項目間のインターフェイスとなる人材育成が重視されていることは評価される。</p> <p>一方で、提案された研究計画の一部には領域の構成として不適切と判断せざるを得ないものも含まれていた。この評価を受けて、領域代表者および総括班でただちに本研究領域の目的の達成のために必要な研究計画について検討を行い、適切なスタートを切れるよう配慮すべきである。</p>