

令和 4 年 6 月 20 日現在

機関番号：12401

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06463

研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）Design of static and dynamic networks based on 3-dimensional topology

研究代表者

下川 航也（Shimokawa, Koya）

埼玉大学・理工学研究科・教授

研究者番号：60312633

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 40,100,000円

研究成果の概要（和文）：この研究では数学の幾何学分野である結び目理論と3次元トポロジーの研究を行い、その成果を高分子をはじめとする材料の設計へと応用した。グラフ理論、結び目理論の多環状高分子の研究への応用、3次元トポロジーのブロック共重合体材料の設計への応用、結び目理論を用いた絡み合う超分子構造の設計に関する成果を得ている。また、トポロジーと高分子、材料科学の研究者との交流を図るため、国際会議を開催した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、トポロジーの応用として、結び目理論を用いた多環状高分子のトポロジーの研究、相分離構造の形を数学的に解析することによるブロック共重合体材料の設計、超分子の絡み方を結び目理論を用いた分析を行った。これらの成果は、分子が作る形が、その物性・機能に繋がることを示しており、トポロジーが今後化学においても重要な道具となることを示唆している。

研究成果の概要（英文）：In this research, we studied knot theory and three-dimensional topology, a field of geometry in mathematics, and applied the results to the design of polymers and other materials. We have obtained results on the application of graph theory and knot theory to the study of multicyclic polymers, the application of three-dimensional topology to the design of block copolymer materials, and the design of entangled supramolecular structures using knot theory. In addition, an international conference was held to promote interaction between researchers in topology and polymers and materials science.

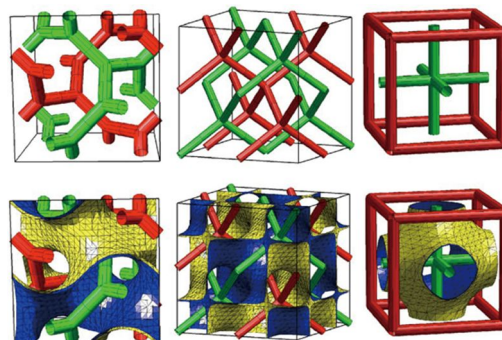
研究分野：トポロジーとその応用

キーワード：3次元トポロジー ブロック共重合体 共連続構造 ネットワーク 超分子

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

代表者はこれまで、多環状高分子のトポロジーの研究を、結び目理論やグラフ理論を用いて、高分子化学者の手塚氏、統計物理学者の出口氏とともにやってきた(H26-H30 科研費 B 特設分野研究等)。今回の研究では、その研究を発展させ、それが繋がりが合い構成する3次元ネットワークの構造をもつ高分子の研究を行う。また、これまで共連続構造(bicontinuous 構造。図参照)については、材料科学の側面から数多くの研究が行われていた。さらに、3相共連続構造(tricontinuous 構造)についても、多くの例が知られていて、さらに化学的にも合成されている。このような背景に基づき、この研究では、3次元ネットワークと、その双対である多相共連続構造(polycontinuous 構造)の特徴付けと分類の研究を、3次元トポロジーを応用し行う。その結果を、A02-2,3 グループにブロック共重合体等を用いた高分子材料の設計として提案する。



2. 研究の目的

本研究では、結び目理論と3次元トポロジー的手法を駆使し、環状高分子のトポロジーの研究、ブロックコポリマーの相分離構造の特徴付けとトポロジーを用いた設計、その他の結び目・絡み目の構造を持つ材料の研究を行う。

3次元トーラスの複数のハンドル体分解の特徴付けの研究を行い、3次元空間内のネットワークの分類を行う。その応用として、ポリマーのネットワークの特徴付け、また、ネットワークの双対として現れる多連続構造の分類に応用することが目的である。特に、3つのネットワークの絡み、そして、3相共連続構造の場合の分類中心に行く。その分類で得られた結果をもとに、新奇高分子化合物、多孔質構造、ブロック共重合体を用いた材料の設計提案、および、その物性の予測を行う。

また、様々な構造を持つ多環状高分子、その他の結び目・絡み目の構造を持つ材料についても、トポロジーの側面から研究を行う。

3. 研究の方法

研究代表者：下川航也(埼玉大学・3次元トポロジー・実施および総括)

研究分担者：石原海(山口大学・3次元トポロジーの応用)、出口哲生(お茶の水女子大学・統計物理学的高分子トポロジーの研究)、手塚育志(東京工業大学・高分子トポロジー化学の研究)

連携研究者：小沢誠(駒澤大学・3次元トポロジーの応用)、古宇田悠哉(広島大学・3次元トポロジーの応用)、博士研究員1名(埼玉大学・3次元トポロジーの応用)

3重対称性を持つ2つの連結成分をもつ3次元ネットワークと、その双対である3重対称性を持つ共連続構造は、3次元トーラスのHeegaard分解に対応する。3次元トーラスのHeegaard分解の特徴付けは1990年に分類されているので、その結果を応用することにより、3次元ネットワークと共連続構造の数学的分類を与える。統計物理学者、高分子化学者とともに、その物理的性質、化学的性質を予測し、構造と機能との相関関係を解明する。

同様に、多相共連続構造には、3次元トーラスの3つ以上のハンドル体による分解に対応する。3次元多様体の3つ以上のハンドル体による分解の総合的な数学的研究はまだ存在せず、今回の研究でその新理論の構築を行う。特に、安定化定理、分解の一意性を中心に考察する。主な対象として、今回の中心課題である3つの連結成分が絡み合う3次元ネットワークと、その双対の3相共連続構造に対応する3次元トーラスの3つのハンドル体による分解を考察する。3次元多様体のハンドル体による分解と多相共連続構造との対応には、さらに、3分岐(および多分岐)曲面、グラフの位置の議論などが必要となる。それらのものも既存の研究では不十分であるため、新理論を構築し今回の研究へと応用する。また、高分子のトポロジーに着目し、特徴的なトポロジーを持つ多環状高分子等の物性・機能を明らかにする。

これらの数学的モデルをA02-2,3のグループに、高分子材料のモデルとして提案する。さらに、A02-2,3グループにより作られた材料のトポロジーを用いた解析を行い、数学的モデルの改良を行う。

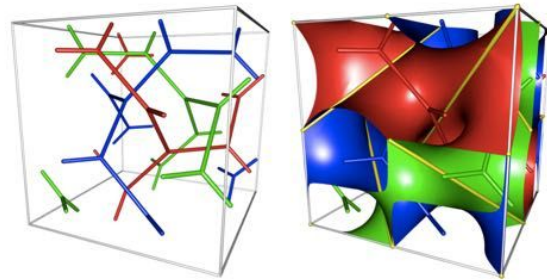
4. 研究成果

(1) 多環状高分子のトポロジーの研究

多環状高分子のトポロジーの研究では、数学的側面では、グラフ理論を用いて、多環状高分子の命名法を与えた。また、それらのトポロジーを持つ高分子の生成方法に関する議論を行った。高分子化学的側面では、これまで推進してきた独自の高分子合成手法(ESA-CF法)に基づく、様々な新奇多環状トポロジー高分子の設計法を進展させ、トポロジー幾何学の視点から特に重要な「かたち」に焦点を絞り合成を行うとともに、高分子のトポロジー効果によるブレークスルー機能の創出を図った。統計力学的側面では、複雑な構造をもつ高分子に対して、慣性半径や拡散係数など様々な物理量を具体的に数値的に計算した。分子動力学シミュレーションを実行し、排除体積模型に対するトポロジー高分子の慣性半径や拡散係数を求めた。環状高分子における結び目確率などトポロジーの効果の詳細に調べた。これらの成果は、例えば、著書“Topology of Polymers”として、Springer Briefs in the Mathematics of Materialsの第4巻として2019年に出版している。

(2) ブロック共重合体のミクロ相分離構造として現れる共連続構造の数学的モデル化

ブロック共重合体のミクロ相分離構造では、様々な複雑な構造が現れる。今回の研究では共連続構造に着目し、数学的にモデル化し、その分類と特徴付けを行った。そのために、3次元多様体のハンドル体分解の基礎理論を構築し、その分類研究をおこなった。その成果を共連続構造の研究に応用し、その分類の研究を行った。



3次元多様体の2つのハンドル体分解に対し、安定化定理を証明した。この結果を応用

し、 n 相共連続構造についても、安定化定理を与えた。これは2つの共連続構造が与えられた場合に、どのような変形を行うと一方を他方に変形できるかを明らかにしている。この成果により、無限に存在する共連続構造の分類を系統的に行えることとなった。この成果はTopology Appl. (2019)、Proc. R. Soc. A (2022)に発表した論文において公表している。

(3) 金属とペプチドからなる絡み目の研究

金属とペプチドから構成される環が絡み合う超分子構造の研究を行った。まず、トリペプチドと銀イオンから構成される、異なるトポロジーをもつ2つの4成分絡み目について、それらが実際に異なることを証明した。また、それらの絡み目は四面体から得られる多面体絡み目であることを示し、更なる超分子構造の設計方法を提案した。

その後、ペプチドをさらに長くすることにより6つ絡まることで作られるカプセル状の分子のトポロジーを考察した。この構造は交点数24を持つものであり、交点数が決定できる絡み目状の構造としては、これまでで世界で最も複雑なものとなっている。この絡み目も多面体から構成されるが、その構成方法を数学的に特徴付けた。

これらの研究は、2編の論文、Nature Communications 10: 921 (2019)、Nature Communications 10: 5687 (2019)として、発表した。

国際会議として、2017年8月8日～10日に“Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers”をお茶の水女子大学において開催し、プロシーディングはReactive and Functional Polymerから出版した。“The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology”をカナダのBanff International Research Station for Mathematical Innovation and Discoveryにおいて2019年3月24日～29日に開催し、“Polymers meet Topology”を東京工業大学において2019年1月30日～2月1日に開催した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計23件（うち査読付論文 21件 / うち国際共著 8件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Sakata N., Mishina R., Ogawa M., Ishihara K., Koda Y., Ozawa M., Shimokawa K.	4. 巻 478
2. 論文標題 Handlebody decompositions of three-manifolds and polycontinuous patterns	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences	6. 最初と最後の頁 20220073
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1098/rspa.2022.0073	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Ishihara Kai, Shimokawa Koya	4. 巻 -
2. 論文標題 Graph Theoretical and Knot Theoretical Analyses of Multi-cyclic Polymers	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 "Topological Polymer Chemistry: Concepts and Practices"	6. 最初と最後の頁 9~21
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-981-16-6807-4_2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Sawada Tomohisa, Inomata Yuuki, Shimokawa Koya, Fujita Makoto	4. 巻 10
2. 論文標題 A metal-peptide capsule by multiple ring threading	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5687
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-13594-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Sawada Tomohisa, Saito Ami, Tamiya Kenki, Shimokawa Koya, Hisada Yutaro, Fujita Makoto	4. 巻 10
2. 論文標題 Metal-peptide rings form highly entangled topologically inequivalent frameworks with the same ring- and crossing-numbers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 921
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-08879-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ishihara Kai, Koda Yuya, Ozawa Makoto, Shimokawa Koya	4. 巻 257
2. 論文標題 Neighborhood equivalence for multibranching surfaces in 3-manifolds	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Topology and its Applications	6. 最初と最後の頁 11 ~ 21
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.topol.2019.02.005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Beaton N. R., Eng J. W., Ishihara K., Shimokawa K., Soteros C. E.	4. 巻 14
2. 論文標題 Characterising knotting properties of polymers in nanochannels	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 5775 ~ 5785
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8sm00734a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Uehara Erica, Coronel Lucia, Micheletti Cristian, Deguchi Tetsuo	4. 巻 134
2. 論文標題 Bimodality in the knotting probability of semiflexible rings suggested by mapping with self-avoiding polygons	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Reactive and Functional Polymers	6. 最初と最後の頁 141 ~ 149
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.reactfunctpolym.2018.11.008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Ropelewski Sophia, Uehara Erica, Lehmann Caroline, Deguchi Tetsuo, Dietler Giovanni	4. 巻 133
2. 論文標題 Two-point correlation function of ring polymers: Experiments and numerical simulations for the case of circular DNA in 2 dimensions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Reactive and Functional Polymers	6. 最初と最後の頁 66 ~ 70
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.reactfunctpolym.2018.10.001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Uehara Erica, Deguchi Tetsuo	4. 巻 133
2. 論文標題 Mean-square radius of gyration and the hydrodynamic radius for topological polymers expressed with graphs evaluated by the method of quaternions revisited	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Reactive and Functional Polymers	6. 最初と最後の頁 93 ~ 102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.reactfunctpolym.2018.09.007	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Uehara Erica, Deguchi Tetsuo	4. 巻 51
2. 論文標題 Statistical properties of multi-theta polymer chains	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 134001 ~ 134001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/aaae2d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Lidster Benjamin John, Hirata Shuzo, Matsuda Shoki, Yamamoto Takuya, Komanduri Venukrishnan, Kumar Dharam Raj, Tezuka Yasuyuki, Vacha Martin, Turner Michael L.	4. 巻 9
2. 論文標題 Macrocyclic poly(p-phenylenevinylene)s by ring expansion metathesis polymerisation and their characterisation by single-molecule spectroscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 2934 ~ 2941
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7SC03945J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zhang Shuangshuang, Tezuka Yasuyuki, Zhang Zhengbiao, Li Na, Zhang Wei, Zhu Xiulin	4. 巻 9
2. 論文標題 Recent advances in the construction of cyclic grafted polymers and their potential applications	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Polymer Chemistry	6. 最初と最後の頁 677 ~ 686
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7PY01544E	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yamamoto Takuya, Hosokawa Masaaki, Nakamura Minato, Sato Shin-ichiro, Isono Takuya, Tajima Kenji, Satoh Toshifumi, Sato Masamichi, Tezuka Yasuyuki, Saeki Akinori, Kikkawa Yoshihiro	4. 巻 51
2. 論文標題 Synthesis, Isolation, and Properties of All Head-to-Tail Cyclic Poly(3-hexylthiophene): Fully Delocalized Exciton over the Defect-Free Ring Polymer	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 9284 ~ 9293
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.8b01681	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kyoda Kohei, Yamamoto Takuya, Tezuka Yasuyuki	4. 巻 141
2. 論文標題 Programmed Polymer Folding with Periodically Positioned Tetrafunctional Telechelic Precursors by Cyclic Ammonium Salt Units as Nodal Points	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 7526 ~ 7536
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b02459	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishihara K.	4. 巻 132
2. 論文標題 Enzyme action for topological entanglement in DNA and knot theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Reactive and Functional Polymers	6. 最初と最後の頁 74 ~ 80
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.reactfunctpolym.2018.09.006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ishihara Kai, Pouokam Maxime, Suzuki Atsumi, Scharein Robert, Vazquez Mariel, Arsuaga Javier, Shimokawa Koya	4. 巻 50
2. 論文標題 Bounds for minimum step number of knots confined to tubes in the simple cubic lattice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 215601 ~ 215601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/aa6a4f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Stolz Robert, Yoshida Masaaki, Brasher Reuben, Flanner Michelle, Ishihara Kai, Sherratt David J., Shimokawa Koya, Vazquez Mariel	4. 巻 7
2. 論文標題 Pathways of DNA unlinking: A story of stepwise simplification	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 12420
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-017-12172-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Honda Satoshi, Adachi Kaoru, Yamamoto Takuya, Tezuka Yasuyuki	4. 巻 50
2. 論文標題 A Twisting Ring Polymer: Synthesis and Thermally Induced Chiroptical Responses of a Cyclic Poly(tetrahydrofuran) Having Axially Chiral Units	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 5323 ~ 5331
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.7b00839	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shundo Atsuomi, Hori Koichiro, Tezuka Yasuyuki, Yamamoto Takuya, Tanaka Keiji	4. 巻 33
2. 論文標題 Load-Induced Frictional Transition at a Well-Defined Alkane Loop Surface	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 2396 ~ 2401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.6b04042	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tezuka Yasuyuki	4. 巻 50
2. 論文標題 Topological Polymer Chemistry Designing Complex Macromolecular Graph Constructions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Accounts of Chemical Research	6. 最初と最後の頁 2661 ~ 2672
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.accounts.7b00338	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Uehara Erica, Deguchi Tetsuo	4. 巻 147
2. 論文標題 Knotting probability of self-avoiding polygons under a topological constraint	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 094901 ~ 094901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4996645	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Uehara Erica, Deguchi Tetsuo	4. 巻 147
2. 論文標題 Scaling behavior of knotted random polygons and self-avoiding polygons: Topological swelling with enhanced exponent	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 214901 ~ 214901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4999266	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Uehara Erica, Deguchi Tetsuo	4. 巻 51
2. 論文標題 Statistical properties of multi-theta polymer chains	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 134001 ~ 134001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/aaae2d	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計31件 (うち招待講演 31件 / うち国際学会 28件)

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and polycontinuous pattern
3. 学会等名 International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design, (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下川航也
2. 発表標題 共連続構造と3次元トポロジー
3. 学会等名 IMI研究会:材料科学おける幾何と代数II (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Handlebody decompositions of 3-torus and polycontinuous patterns
3. 学会等名 Novel Mathematical Methods in Material Science: Applications to Biomaterials (21w5232) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and polycontinuous pattern
3. 学会等名 The Geometry & Topology Behind Fabrics at Multiple Scales (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and poly-continuous pattern
3. 学会等名 Osaka City University International Academic Symposium Mathematical Science of Visualization, and Deepening of Symmetry and Moduli (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下川航也
2. 発表標題 共連続構造と3次元トポロジー
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会(2021年) 共催シンポジウム『次世代物質探索のための離散幾何』(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and poly-continuous pattern
3. 学会等名 Special Session on Applied Knot Theory, AMS Sectional Meeting AMS Special Session, Fall Southeastern Sectional Meeting (formerly at University of Tennessee at Chattanooga) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and polycontinuous pattern
3. 学会等名 International Symposium "Polymers and networks via topology and entanglement" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and poly-continuous pattern
3. 学会等名 MATERIALS RESEARCH MEETING 2019, Mathematical Materials Science -Mathematical Approaches for Materials Designs in the Data Driven Society- (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Handlebody decomposition of 3-manifolds and their application
3. 学会等名 可微分写像の特異点論とその応用 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and polycontinuous pattern
3. 学会等名 The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下川航也
2. 発表標題 トポロジーと高分子科学
3. 学会等名 日本数学会 2019年度年会企画特別講演 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Poly-continuous pattern, networks and 3-dimensional topology
3. 学会等名 International Symposium "Polymers meet Topology" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Knots, links and spatial graphs in the simple cubic lattice
3. 学会等名 2018 Fall AMS Sectional Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 Lattice knots and links in tube regions
3. 学会等名 33rd Summer Conference on Topology and its Applications (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tetsuo Deguchi
2. 発表標題 Rouse Dynamics of Topological Polymers through Gaussian Random Embeddings and Comparison with Experiments
3. 学会等名 The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tetsuo Deguchi
2. 発表標題 Rouse Dynamics of Topological Polymers through Gaussian Random Graph Embeddings
3. 学会等名 International Symposium "Polymers meet Topology" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Deguchi and E. Uehara
2. 発表標題 Knotting probability of self-avoiding polygons under a topological constraint: A sum rule derived from the factorization property
3. 学会等名 “Topology of Biopolymers”, Special Session at the Spring Eastern Sectional Meeting of AMS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Tezuka
2. 発表標題 Topological Polymer Chemistry with Programmed ESA-CF Polymer Folding Constructions
3. 学会等名 14th Japan-Belgium Symposium on Polymer Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Tezuka
2. 発表標題 Topological Chemistry Designing Novel Macromolecular Constructions
3. 学会等名 2018 Taiwan-Japan Bilateral Polymer Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Tezuka
2. 発表標題 Topological Polymer Chemistry Designing Macromolecular Graph Constructions, International
3. 学会等名 International Symposium "Polymers meet Topology" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Ishihara
2. 発表標題 Types of Multicyclic Graphs
3. 学会等名 International Symposium "Polymers meet Topology" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Ishihara
2. 発表標題 First steps of unlinking pathways
3. 学会等名 The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 On chirality of molecular graphs
3. 学会等名 Cyclic & Topologically Complex Polymers, Spring 2018 American Chemical Society Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Koya Shimokawa
2. 発表標題 3-dimensional topology and network analysis in soft materials
3. 学会等名 International kick-off workshop "Discrete Geometric Analysis for Materials Design" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasuyuki Tezuka
2. 発表標題 Topological Chemistry Designing Macromolecular Graph Constructions
3. 学会等名 Japan-Taiwan Bilateral Polymer Symposium (JTBS 2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yasuyuki Tezuka
2. 発表標題 Designing Cyclic and Topological Polymer Constructions by Innovative Synthetic Protocols
3. 学会等名 International Workshop "Ring Polymers" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tetsuo Deguchi
2. 発表標題 Statistical and Hydrodynamic Properties of Graph-Shaped Polymers and Quaternions
3. 学会等名 International workshop "Knots and polymers: aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 E. Uehara and T. Deguchi
2. 発表標題 Statistical Mechanics of Theta-shaped and Ring-shaped Polymer Chains
3. 学会等名 International workshop "Knots and polymers: aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Deguchi and E. Uehara
2. 発表標題 Additivity of Topological Balance Length and a Slow Growth in the Effective Scaling Exponent of Knotted Random Polygons
3. 学会等名 CMO-BIRS Workshop: "The Geometry and Topology of Knotting and Entanglement in Proteins" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Deguchi and E. Uehara
2. 発表標題 Statistical and hydrodynamic properties of graph-shaped polymers and quaternions
3. 学会等名 Cyclic & Topologically Complex Polymers, Spring 2018 American Chemical Society Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Shimokawa, Koya, Ishihara, Kai, Tezuka, Yasuyuki	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer, SpringerBriefs in the Mathematics of Materials	5. 総ページ数 89
3. 書名 Topology of Polymers	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>下川航也ホームページ https://www-p.sci.ocha.ac.jp/shimokawa-lab/ ペプチド鎖が精密に編み込まれたナノカプセルの合成に初成功 http://www.saitama-u.ac.jp/topics_archives/2019-1211-1337-18.html 新学術領域「次世代物質探索のための離散幾何学」 https://www.math-materials.jp</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	石原 海 (Ishihara Kai) (40634762)	山口大学・教育学部・准教授 (15501)	
研究分担者	伊藤 克司 (Ito Katsushi) (60221769)	東京工業大学・理学院・教授 (12608)	
研究分担者	出口 哲生 (Deguchi Tetsuo) (70227544)	お茶の水女子大学・基幹研究院・教授 (12611)	
研究分担者	手塚 育志 (Tezuka Yasuyuki) (80155457)	東京工業大学・物質理工学院・教授 (12608)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
連携研究者	小沢 誠 (Ozawa Makoto) (50308160)	駒澤大学・総合教育研究部・総合教育研究部 (32617)	
連携研究者	古宇田 悠哉 (Koda Yuya) (20525167)	広島大学・理学(系)研究科(研究院)・教授 (15401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計4件

国際研究集会 国際シンポジウム "Polymers and networks via topology and entanglement"	開催年 2019年～2019年
国際研究集会 国際シンポジウム「Polymers meet Topology」	開催年 2019年～2019年

国際研究集会 The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology	開催年 2019年～2019年
国際研究集会 Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers	開催年 2017年～2017年

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	University of California, Davis	University of Georgia		
カナダ	University of Saskatchewan	University of British Columbia		
メキシコ	UNAM			
オーストリア	University of Melbourne			