

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 27 年 5 月 26 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2011～2014

課題番号：23654020

研究課題名(和文)物性物理に発する非可換幾何学モデルの提案

研究課題名(英文)Mathematical approach to materials science by using non-commutative geometry

## 研究代表者

小谷 元子 (Kotani, Motoko)

東北大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：50230024

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：物質のもつ性質を、そのミクロな構造と物性の関係をあきらかにすることにより研究することは、物性物理におけるもっとも基本的な課題である。周期的な結晶構造をもつ物質に関しては、局所的なデータから大域的な構造が記述できるため、原理的には詳細な物性を計算することができる。しかし様々な物理的な理由により、周期性が壊れた場合に物性がどのように変化するかは難しい課題である。これに非可換幾何学の手法で挑戦し、準周期構造や、磁場のある場合、境界のある場合などに対して、数学的な手法を確立した。

研究成果の概要(英文)：One of the fundamental questions of solid state physics is to understand relations between microscopic structures and macroscopic properties of matter. One can compute properties in principle if the matter assumes periodic structure. It however often happens that periodic structures are broken under various physical environment such as with impurities, magnetic fields, boundaries. In this project we challenge to establish a new mathematical approach to those problems by using non-commutative geometry.

研究分野：幾何学、離散幾何解析学

キーワード：非可換幾何学 準結晶 格子欠陥 量子ホール効果

## 1. 研究開始当初の背景

申請者は「幾何学と確率論」の関わりに興味を持ち、平成16年～19年基盤研究B「離散群の作用する無限グラフのスペクトル解析とグロモフ・ハウスドルフ収束」、平成17年度～19年度萌芽研究「超準解析による極限定理の幾何学的解釈」、平成20年度～の「ランダム性を通して見る離散空間の幾何学」などを遂行することで、**離散幾何解析学**の研究を進めてきた。

全体を通じての申請者の問題意識は、離散空間に的確な**連続モデル**を与えることである。離散空間の幾何構造を反映する連続モデルを用いることで、離散空間の隠れた構造を見出し、離散的な力学系の長時間挙動や、空間の大域的な性質を幾何的視点から研究してきた。

更に、平成20年度～CREST研究においては、離散ネットワークを物質のミクロ構造と考え、そのスケール変換極限が記述するマクロ現象に対して、ミクロな幾何構造がどのような影響を与えるかを考察することで、数学による材料開発への挑戦を行っている。

一方、これらの研究を通じて、物性物理の問題に触れる機会を持ち、それに触発された幾何学の問題意識が新たに芽生えた。このような経緯から本申請にいたった。

## 2. 研究の目的

申請者はこれまで、離散ネットワークを物質のミクロ構造と考え、特に周期性を持つ場合に、ミクロな幾何構造がマクロ現象に対して、どのような影響を与えるかを離散幾何解析学を用いて研究してきた。準周期構造や格子欠陥や不純物が混じるような場合に拡張する、もしくは磁場やスピンの影響を考慮するなどの場合には、これまでの研究の鍵であった可換性を仮定することができない。本研究の目的は、このような物性物理に端を発した諸問題を、非可換幾何学の枠組みで理解し、適切な数理モデルを提案することである。また、そのことにより、ともしれば抽象的になりがちな非可換幾何学を具体化し、深化することを旨とする。

## 3. 研究の方法

結晶のミクロ構造の単純化した数理モデルとして、周期性をもつ無限グラフを考え、これを結晶格子という。結晶格子およびその上のランダム・ウォークに関する申請者のこれまでの研究では、周期構造と作用素の可換性が重要であった。これを物性物理に発する非可換な設定に、非可換幾何学の手法を用いて以下の課題に拡張する。

- ・分数量子ホール効果と非可換統計
- ・準結晶と結晶の統一的取り扱いと代数幾何学
- ・格子欠陥と曲率・トーシヨンの取り扱い

ワーキングセミナー、海外の研究者との情報交換を密に行、最終年には国際研究集会を開催する。

## 4. 研究成果

物性物理に発する非可換幾何学モデルについて、研究協力者として赤間陽二、小田忠雄とともに研究を実施した。成果は以下のとおりである。

本課題では、結晶のミクロ構造の数理モデルとして、周期性をもつ無限グラフ「結晶格子」を考え、物性物理における現象から生じる非可換性（例えば、磁性、欠陥、不純物など）を、非可換幾何学の枠組みで理解することを目的とした。

特に、分数量子ホール効果、準結晶、格子欠陥について考察し、新しい数学の手法を開発することとした。

平成23年度は赤間氏を京都大学に派遣、近藤氏、能川氏、米国・ジョージア工科大学のBellissard氏、フランス・パリ大学のDe Nittis氏、イスラエル・ワイズマン研究所Smilansky氏を東北大に招へいし、研究討論を行った。

また、ドイツ・ビレフェルト大学のBaake氏、イギリス・ケンブリッジ大学の時枝氏を訪問し研究情報交換を行った。

準結晶に関して、小田忠雄が結晶格子との統一的な取扱いが可能なモデルを代数幾何学の手法で確立し、論文として発表した。

平成24年度は分数量子ホール効果に対する理解を深めるため、東北大学平山氏、川勝氏との定期的な勉強会を実施した。また、米国・ジョージア工科大学のBellissard氏、Parada氏、米国・テキサス大学のRadin氏を招へいし、disorder系の非可換幾何学による統一的なモデルに関する国際研究集会を開催した、特に金属ガラスのような一見ランダムに見える構造から短距離・中距離の秩序を取り出す数学的アプローチについて、有益な示唆を得た。

平成25年度は、物性物理の中心的話題の量子スピンホール効果について研究をおこなった。量子ホール効果を非可換幾何学を用いて定式化したBellissard氏の有名な結果をスピンの拡張する方針を立て、Schulz-Baldes氏、Prodan氏、古田氏、森吉氏、村上氏を招へいし国際研究集会を開催した。ランダムポテンシャルを持つ場合のバルクーエッジ対応を非可換幾何学の枠組みで確立し論文として発表した。

平成26年度は、更にこれらの研究を進め、

窪田氏、佐藤氏、林氏、古田氏、松尾氏とともに定期的な勉強会を開催し、バルクエッジ対応が成立する背景にあるギャップ指数という概念を提示し、非常に一般的な枠組みで説明する理論をK理論をもちいて確立する事に成功した。

また、内藤氏、田上氏とともに、カーボンネットワークの曲率を定義し、3重周期をもつ離散的極小曲面安定構造の分類およびその伝導性を調べ、論文として発表した。赤間氏は準結晶の配置をタイリングの測度論的力学系を用いて考察し発表した。

研究期間を通じて、物性物理の研究者と情報交換を行い、彼らの中心的課題について数学の理論を提案し理解を深めたこと、更にそれらを論文として発表できたこと、第一人者を世界各国から招へいし国際研究集会を開催し有益な情報交換をできたことなど、挑戦的萌芽に相応しい実績をあげることができた。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 17 件)

Taisuke Matsuno, Hisashi Naito, Shunpei Hitosugi, Sota Sato, Motoko Kotani, Hiroyuki Isobe, Geometric measures of finite carbon nanotube molecules: A proposal for length index and filling indexes, Pure and Applied Chemistry, 査読有、86 (4) 巻、2014 年、489-495  
DOI:10.1515/pac-2014-5006

T Makoto Tagami, Yunye Liang, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe, Motoko Kotani akashi Shioya, Negatively curved cubic carbon crystals with octahedral symmetry, Carbon, 査読有、76 巻、2014 年、266-274  
DOI: 10.1016/j.carbon.2014.04.077

Shuichi Toyouchi, Shinji Kajimoto, Masatoshi Toda, Toshihiro Kawakatsu, Yohji Akama, Motoko Kotani, Hiroshi Fukumura, Mesoscopic Dynamics of Laser-Induced Phase Separation in Water and 2-Butoxyethanol Mixtures Revealed by Nanosecond Time-Resolved Light Scattering, Chemistry Letters, 査読有、43 (12) 巻、2014 年、1838-1840  
DOI: 10.1246/cl.140698

Motoko Kotani, Hermann Schultz-Baldes, Quantization of interface currents, Journal of Mathematical Physics, 査読

有、55 (12) 巻、2014 年、121901 1-9  
DOI: 10.1063/1.4902377

小田 忠雄, 炭素の新しい結晶 K4 と代数学、数理科学、査読無、611 巻、2014 年、49-54、DOI:無

A.Hirata, L. J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A. R. Yavari, M. W. Chen, Geometric frustration of icosahedron in metallic glasses, Science, 査読有、341 巻 No.6144、2013 年、376-379  
DOI: 10.1126/science.1232450

小谷 元子, 離散幾何学から提案する新物質創成・物性発現の解明、応用数理、査読無、Vol.23 No.4、2013 年、6-9  
DOI: 無

Yohji Akama, Classification of spherical tilings by congruent quadrangles over pseudo-double wheels (I) -- a special tiling by congruent concave quadrangles., Hiroshima Math. J., 査読有、43 巻、2013 年、285-304  
DOI: 無

Tadao ODA, Algebro-geometry stability and crystals, Journal of Ramanujan Mathematical Society, 査読有、28A 巻、2013 年、353-408  
DOI: 無

Tadao ODA, Voronoi tilings hidden in crystals --- the case of maximal abelian coverings ---, Tohoku Math. J., 査読有、65 巻、2013 年、1-30  
DOI: 無

Tadao ODA, Convex polyhedral tilings hidden in crystals and quasicrystals, RACSAM, 査読有、107 巻、2013 年、123-143  
DOI:無

Makoto Tagami, Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe and Motoko Kotani, New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8-12Atoms Found by the Method of Euclidean Designs, Materials Transactions, 査読有、53 巻、2012 年、459-462、  
DOI: 10.2320/matertrans.N-M2011859

Motoko Kotani, ラボラトリーズ「東北大学数学連携の取り組み」、応用数理、査読有、22 巻、2012 年、73-75  
DOI:無

Motoko Kotani, 数学・数理科学の新たな潮流 諸科学との連携を求めて、表面科学、査読有、34 巻 No.1、2012 年、2-2  
DOI:無

Motoko Kotani, 材料科学と離散幾何解析学の連携による挑戦、表面科学、査読有、34 巻 No.1、2012 年、3-8

Yohji Akama and Shinji Iizuka, Random Fields on Model Sets with Localized Dependency and Their Diffraction, Journal of Statistical Physics、査読有、149 巻、2012 年、478-495  
DOI: 10.1007/s10955-012-0588-5

Yohji Akama, Set systems: order types, continuous nondeterministic deformations, and quasi-orders, Theoret. Comput. Sci., 査読有、412 巻、2011 年、6235-6251  
DOI: 10.1016/j.tcs.2011.08.010

[学会発表](計 28 件)

小谷 元子, Mathematical challenge to structural understanding of materials, 2015 East Asian Core Doctorial Forum on Mathematics, 2015 年 1 月 19 日、国立台湾大学(台北,台湾)

小谷 元子, Discrete geometric analysis applied to structural understanding of materials, Inverse Problems and Spectral Theory, 2014 年 10 月 17 日、Texas A&M University(カレッジステーション,アメリカ)

小谷 元子, 材料科学へのトポロジーの応用、幾何学とインターネットの数理 2014, 2014 年 7 月 20 日、東京大学玉原国際セミナーハウス(群馬県沼田市)

赤間 陽二, The rigidity, deformation and tile-transitivity of spherical tilings, Japan Conference on Graph Theory and Combinatorics, 2014 年 5 月 19 日、東京都世田谷区 日本大学

Yohji Akama, Solution to spherical Hilbert eighteenth problem and the deformation of spherical tilings, Canberra - Japan Meeting, "Pattern Formation: Mathematics and Materials" . 2014年4月29日、Australia National University, Canberra, Australia

Yohji Akama, SPHERICAL TILINGS BY CONGRUENT POLYGONS, Student-Faculty Colloquium, Department of Mathematics, Hong Kong University of Science and Technology, 2014 年 3 月 14 日、Hong Kong, 中国

Yohji Akama, 球面的ヒルベルトの第 18 問題の解決と球面タイリングの変形、直観幾何学、2014年2月11日、熊本大学(熊本市)

Motoko Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials , Tsinghua Sanya International Mathematics Forum , 2013 年 12 月 18 日-22 日、Mathematical Sciences Center, Sanya, China

Motoko Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials , Tohoku University Forum at UCL , 2013 年 11 月 21 日-23 日、University College London, London, UK

Motoko Kotani , Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials, CAMP opening symposium, 2013 年 11 月 1 日、CAMP, NIMS, Daejeon, Korea

Motoko Kotani , A mathematical challenge to a new phase of materials science, Connections 2013 Symposium: Crossing Boundaries with Informatics - from Basic Science to Social Infrastructure, 2013 年 7 月 9 日、Cosmos Club, Washington DC, USA

Motoko Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials , Joint International Meeting of the AMS and the Romanian Mathematical Society , 2013年6月27日-30日、University of Alba Iulia, Rumania

Motoko Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials, The 1st WPI workshop on materials science 10th France-Japan Workshop on Nanomaterials, 2013 年 6 月 6 日、京都大学(京都府京都市)

Motoko Kotani, A mathematical challenge to materials scienc , The Seventh General Meeting of Asian

Consortium on Computational Materials Science-Virtual Organization、2012年11月25日、ホテル松島大観荘(松島)

Motoko Kotani、A mathematical challenge to materials scienc、Workshop on Stochastic Analysis and Related Topics、2012年11月7-9日、AMSS、Chinese Academy of Sciences(北京)中国

Motoko Kotani、A mathematical challenge to materials scienc、2012 International Conference on Modeling, Analysis and Simulation「現象数理学の展開」(ICMAS)、2012年11月06日、明治大学(東京)

Motoko Kotani、A mathematical challenge to materials scienc、第18回複素幾何シンポジウム、2012年10月25-26日、信州菅平高原プチホテルゾンタック(上田)

Motoko Kotani、A mathematical challenge to materials scienc、RIMS研究集会「Discrete Geometric Analysis」、2012年8月27-31日、京都大学(京都)

Motoko Kotani、A mathematical challenge to materials scienc、理研研究会「物質科学の数学的手法と数理物理」、2012年6月15-17日、理化学研究所(和光)

Motoko Kotani、A mathematical challenge to materials scienc、Topology and Functional Analysis 2012、2012年05月21日、復旦大学(上海)中国

- 21 Motoko Kotani、A mathematical challenge to materials scienc、TOHOKU-FUDAN WORKSHOP ON THE OCCASION OF THE CENTENNIAL OF THE FACULTY OF SCIENCE、2012年05月19日、ホテル松島大観荘(松島)

- 22 Motoko Kotani、A Mathematical Challenge to a new phase of materials science、MANA Symposium 2012、2012年2月29日、MANA(筑波)

- 23 小田 忠雄、(Semi)stability and (quasi)crystals、「Arithmetic and Algebraic Geometry 2012」、2012年2月16日、東京大学(東京)

- 24 Motoko Kotani、材料科学への数学の挑戦、The 6th Hokkaido Univ. Pure & Applied

Physics Salon、2012年1月30日、北海道大学(札幌)

- 25 小田 忠雄、(Semi)stability and (quasi)crystals、「CMI-IMSc International Mathematics Colloquium」、2012年1月27日、チェンナイ数学研究所(インド)

- 26 Motoko Kotani、離散幾何学から提案する新物質創成・物性発現の解明、CREST領域シンポジウム、2011年9月7日、東京

- 27 小田 忠雄、Algebro-geometric stability, (quasi)crystals and tropical geometry、「特異点論とそのひろがり」、2011年8月24日、京都大学理学部大会議室(京都)

- 28 Motoko Kotani、A Mathematical Challenge to a new phase of materials science、Korea Institute For advanced Study Seminar、2011年5月2日、KIAS(ソウル、韓国)

〔図書〕(計 0件)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

小谷 元子 (KOTANI MOTOKO)  
東北大学・大学院理学研究科・教授  
研究者番号：50230024

### (2) 連携研究者

赤間 陽二 (AKAMA YOHJI)  
東北大学・大学院理学研究科・准教授  
研究者番号：30272454

### (3) 連携研究者

小田 忠雄 (ODA TADAO)  
東北大学・大学院理学研究科・名誉教授  
研究者番号：60022555