

---

次世代物質探索のための離散幾何学

---

領域番号: 2902

平成29年度～令和3年度

科学研究費助成事業(科学研究費補助金)  
(新学術領域研究(研究領域提案型))  
研究成果報告書

令和5年6月

領域代表者 小谷 元子

東北大学・材料科学高等研究所・教授

## はしがき

優れた機能をもつ物質・材料を創製することは我々の生活を便利にするだけでなく、時には生活のスタイルや価値観を変える力を持っている。日本は物質・材料科学領域では科学・産業両面で世界をリードしてきたが、近年、米国を皮切りにドイツ、中国などが情報科学を適用したデータ駆動型物質探索の大型プロジェクト (Materials Genome Initiative など) を足がかりとして激しく追いついてきている。これは「求める物性や機能を持つような物質・材料を設計する」という長年の夢を実現する可能性を秘めた動きであり、従来の『順問題』的アプローチから次世代の『逆問題』的アプローチへと、材料開発のありかたが大きく変わろうとしている。そこではこれまでに蓄積された経験や知見、特に個人の内に蓄えられた感覚や勘と行った抽象的なものを、いかにして科学の言葉にしていくかが成功の鍵となる。ここに、科学の共通言語を提供してきた数学、特に複雑さや階層性を記述することを得意とし21世紀に入って急速に進展している離散幾何解析学を適用することで、物質・材料の構造・機能・プロセス関係を深く理解できるのではないかと考えた。

そのための枠組みとして、本領域では、数学と物質科学の連携により「物質を階層的ネットワークとして理解すること」を共通の大目標とする3つの研究項目 A01,A02,A03 を置いた。A01 では、トポロジーという数学の概念を導入することで初めて理解できる、従来の固体物理学の体系では説明できない伝導メカニズムをもつ「トポロジカル物質」を対象に、無限次元の系を有限次元の系で近似したモデルを経由して本質的な情報を抽出する「指数」という概念を用いて、物理学の格子ゲージ理論の理解と拡張を行った。また、物質を重力で取り扱う超弦理論のホログラフィー原理を用いて、相互作用の入ったトポロジカル物質系の理解を目指した。A02 では、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次元空間内の結び目理論などの位相不変量を調べる手法と高度な階層的シミュレーションを組み合わせて、構造と物性の相関の解明を目指した。A03 では、石けん膜が作る構造として知られる極小曲面の概念を原子分子が作るナノ構造の世界に持ち込むことで、材料物質の構造形成の研究を行った。特に、複雑につながった構造を分類・最適化する「離散曲面論」を構築して、目的の機能物性を持つ界面構造の作成を目指した。さらに、A01,A02,A03 の研究項目の推進や連携を後押しするために、情報科学的手法の開発や導入を担当する研究項目 B01 を置いた。

研究の推進にあたっては、日本が優位性を持つ数学と材料科学が協働して、従来の枠に収まらない融合領域の創成を目指した。また、学問の成熟と時代の要請に適った人材を育成して我が国の学術水準の向上・強化につなげることを重視した。これらに留意しつつ、離散と連続の関係を幾何学的に理解する「離散幾何解析学」を材料科学の諸課題と連携させて、物質のマイクロ・メゾ構造を幾何学の言葉で記述し、マクロな物性・機能にどう関わるかの解析 (順問題) や、求められる機能物性を実現するマイクロ・メゾ構造の特定 (逆問題) を可能とする融合分野の開拓に取り組んだ。

## 研究組織 (令和4年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

### 計画研究

領域代表者 小谷 元子 (東北大学・材料科学高等研究所・教授)

#### (総括班)

研究代表者 小谷 元子 (東北大学・材料科学高等研究所・教授)

研究分担者 大西 立顕 (立教大学・人工知能科学研究科・教授)

研究分担者 内藤 久資 (名古屋大学・多元数理科学研究科・准教授)

研究分担者 高見 誠一 (名古屋大学・工学研究科・教授)

研究分担者 一木 輝久 (名古屋大学・未来社会創造機構・特任准教授)

研究分担者 古田 幹雄 (東京大学・大学院数理科学研究科・教授)

研究分担者 青柳 岳司 (国立研究開発法人産業技術総合研究所・材料・化学領域・総括研究主幹)

研究分担者 下川 航也 (埼玉大学・理工学研究科・教授)

研究分担者 橋本 幸士 (京都大学・理学研究科・教授)

(A01-1 班) 指数定理の展開とトポロジカル表面状態  
研究代表者 古田 幹雄 (東京大学・大学院数理科学研究科・教授)  
研究分担者 五味 清紀 (東京工業大学・理学院・教授)  
研究分担者 加藤 毅 (京都大学・理学研究科・教授)

(A01-2 班) ブレーンとソリトンの量子異常が導くトポロジカル物質  
研究代表者 橋本 幸士 (京都大学・理学研究科・教授)  
研究分担者 日高 義将 (大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・教授)  
研究分担者 押川 正毅 (東京大学・物性研究所・教授)  
研究分担者 衛藤 稔 (山形大学・理学部・教授)

(A02-1 班) 次元トポロジーに基づく静的・動的ネットワークの提案  
研究代表者 下川 航也 (埼玉大学・理工学研究科・教授)  
研究分担者 石原 海 (山口大学・教育学部・准教授)  
研究分担者 伊藤 克司 (東京工業大学・理学院・教授)  
研究分担者 出口 哲生 (お茶の水女子大学・基幹研究院・教授)

(A02-2 班) 高分子高次構造の階層的シミュレーション  
研究代表者 青柳 岳司 (国立研究開発法人産業技術総合研究所・材料・化学領域・総括研究主幹)

(A03-1 班) 物質分離・輸送を最適化する多層・多孔質材料の離散曲面論  
研究代表者 小谷 元子 (東北大学・材料科学高等研究所・教授)  
研究分担者 楯 辰哉 (東北大学・理学研究科・教授)

(A03-2 班) ナノ極小曲面論による相分離過程の大域解析  
研究代表者 内藤 久資 (名古屋大学・多元数理科学研究科・准教授)  
研究分担者 納谷 信 (名古屋大学・多元数理科学研究科・教授)

(A03-3 班) 界面活性剤を用いた多連続多孔質構造の形成  
研究代表者 高見 誠一 (名古屋大学・工学研究科・教授)  
研究分担者 遠藤 明 (国立研究開発法人産業技術総合研究所, 材料・化学領域, 研究部門長)

(B01-1 班) 複雑ネットワーク解析に基づく物質・材料探索  
研究代表者 大西 立顕 (立教大学・人工知能科学研究科・教授)  
研究分担者 高橋 数冴 (東京大学・医科学研究所・助教)

(B01-2 班) 材料観察画像からの機能推定  
研究代表者 一木 輝久 (名古屋大学・未来社会創造機構・特任准教授)  
研究分担者 大関 真之 (東北大学・情報科学研究科・教授)

## 公募研究

平成 30 年度～ 令和元年度

(A01)

研究代表者 松下 ステファン悠 (東北大学・理学研究科・助教)  
研究代表者 相馬 清吾 (東北大学・スピントロニクス学術連携研究教育センター・准教授)

研究代表者 Chen Yong (東北大学・材料科学高等研究所・教授)  
研究代表者 桂 法称 (東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授)  
研究代表者 石井 史之 (金沢大学・ナノマテリアル研究所・准教授)  
研究代表者 阿波賀 邦夫 (名古屋大学・理学研究科・教授)  
研究代表者 深谷 英則 (大阪大学・理学研究科・助教)

(A02)

研究代表者 藤井 修治 (北海道大学・工学研究院・准教授)  
研究代表者 山本 拓矢 (北海道大学・工学研究院・准教授)  
研究代表者 森 龍也 (筑波大学・数理物質系・助教)  
研究代表者 本多 智 (東京大学・大学院総合文化研究科・助教)  
研究代表者 増渕 雄一 (名古屋大学・工学研究科・教授)  
研究代表者 山口 哲生 (九州大学・工学研究院・准教授)  
研究代表者 斎木 敏治 (慶應義塾大学・理工学部(矢上)・教授)

(A03)

研究代表者 佐野 正人 (山形大学・大学院有機材料システム研究科・教授)  
研究代表者 伊藤 良一 (筑波大学・数理物質系・准教授)  
研究代表者 小磯 深幸 (九州大学・マス フォア インダストリ研究所・教授)  
研究代表者 安本 真士 (日本学術振興会特別研究員 (PD) 受入研究機関: 大阪市立大学)  
研究代表者 吉川 浩史 (関西学院大学・理工学部・准教授)

(B01)

研究代表者 中島 千尋 (東北大学・情報科学研究科・特任助教)  
研究代表者 吉田 靖雄 (金沢大学・数物科学系・准教授)  
研究代表者 辻 雄太 (九州大学・先導物質化学研究所・助教)  
研究代表者 森 道康 (国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 先端基礎研究センター・研究主幹)  
研究代表者 萩田 克美 (防衛大学校・応用科学群・講師)

令和2年度～令和3年度

(A01)

研究代表者 Chen Yong (東北大学・材料科学高等研究所・教授)  
研究代表者 岡 博文 (東北大学・材料科学高等研究所・助教)  
研究代表者 吉田 恒也 (筑波大学・数理物質系・助教)  
研究代表者 桂 法称 (東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授)  
研究代表者 塩見 雄毅 (東京大学・大学院総合文化研究科・准教授)  
研究代表者 村上 修一 (東京工業大学・理学院・教授)  
研究代表者 山影 相 (名古屋大学・理学研究科・助教)

(A02)

研究代表者 藪 浩 (東北大学・多元物質科学研究所・准教授)  
研究代表者 浦山 健治 (京都工芸繊維大学・材料化学系・教授)  
研究代表者 畝山 多加志 (名古屋大学・工学研究科・准教授)  
研究代表者 小椎尾 謙 (九州大学・先導物質化学研究所・准教授)  
研究代表者 斎木 敏治 (慶應義塾大学・理工学部(矢上)・教授)  
研究代表者 鯉渕 弘資 (仙台高等専門学校・その他・名誉教授)

(A03)

研究代表者 景山 義之 (北海道大学・理学研究院・助教)  
研究代表者 伊藤 良一 (筑波大学・数理物質系・准教授)  
研究代表者 齋藤 一弥 (筑波大学・数理物質系・教授)

研究代表者 岡 俊彦 (静岡大学・電子工学研究所・准教授)  
研究代表者 大戸 達彦 (大阪大学・基礎工学研究科・助教)  
研究代表者 小磯 深幸 (九州大学, マス・フォア・インダストリ研究所, 教授)  
研究代表者 吉川 浩史 (関西学院大学・工学部・教授)  
(B01)  
研究代表者 辻 雄太 (九州大学・先導物質化学研究所・助教)  
研究代表者 天本 義史 (九州大学・先導物質化学研究所・助教)  
研究代表者 本武 陽一 (統計数理研究所・統計的機械学習研究センター・特任助教)  
研究代表者 萩田 克美 (防衛大学校・応用科学群・講師)

**交付決定額**

年度	合計	直接経費	間接経費
平成 29 年度	143,130,000 円	110,100,000 円	33,030,000 円
平成 30 年度	292,370,000 円	224,900,000 円	67,470,000 円
令和元年度	288,990,000 円	222,300,000 円	66,690,000 円
令和 2 年度	299,780,000 円	230,600,000 円	69,180,000 円
令和 3 年度	291,070,000 円	223,900,000 円	67,170,000 円
合計	1,315,340,000 円	1,011,800,000 円	303,540,000 円

## 研究発表

### ○ 主な雑誌論文

#### 研究項目 A01 トポロジカル物質

(計画研究 A01-1) 指数定理の展開とトポロジカル表面状態 計 50 件

1. K. Gomi, Homological bulk-edge correspondence for Weyl semimetals. *Progress of Theoretical and Experimental Physics* 2022, 04A106 (2022).
2. H. Fukaya, M. Furuta, Y. Matsuki, S. Matsuo, T. Onogi, S. Yamaguchi, M. Yamashita, Mod-two APS index and domain-wall fermion. *Letters in Mathematical Physics* 112, 32 (2022).
3. T. Kato, H. Konno, N. Nakamura, Rigidity of the mod 2 families Seiberg-Witten invariants and topology of families of spin 4-manifolds. *Compos. Math.* 157, 770-808 (2021).
4. K. Gomi, Y. Kubota, G. C. Thiang, Twisted crystallographic T-duality via the Baum-Connes isomorphism. *Int. J. Math.* 32, 65 (2021).
5. H. Fukaya, M. Furuta, S. Matsuo, T. Onogi, S. Yamaguchi, M. Yamashita, The Atiyah-Patodi-Singer Index and Domain-Wall Fermion Dirac Operators. *Communications in Mathematical Physics* 380, 1295-1311 (2020).
6. R. Okugawa, T. Yokoyama, Topological exceptional surfaces in non-Hermitian systems with parity-time and parity-particle-hole symmetries. *Physical Review B* 99, 6 (2019).
7. R. Okugawa, S. Hayashi, T. Nakanishi, Second-order topological phases protected by chiral symmetry. *Physical Review B* 100, 9 (2019).
8. S. Hayashi, Topological Invariants and Corner States for Hamiltonians on a Three-Dimensional Lattice. *Communications in Mathematical Physics* 364, 343-356 (2018).

(計画研究 A01-2) ブレーンとソリトンの量子異常が導くトポロジカル物質 計 21 件

9. K. Hashimoto, Y. Matsuo, Escape from black hole analogs in materials: Type-II Weyl semimetals and generic edge states. *Physical Review B* 102, 9 (2020).
10. K. Hashimoto, Y. Matsuo, Universal higher-order topology from a five-dimensional Weyl semimetal: Edge topology, edge Hamiltonian, and a nested Wilson loop. *Physical Review B* 101, 10 (2020).
11. K. Hashimoto, S. Kinoshita, K. Murata, Einstein Rings in Holography. *Phys. Rev. Lett.* 123, 5 (2019).
12. S. Kinoshita, K. Murata, T. Oka, Holographic Floquet states II: Floquet condensation of vector mesons in nonequilibrium phase diagram. *Journal of High Energy Physics* 2018 (2018).
13. Y. Yao, C. T. Hsieh, M. Oshikawa, Anomaly Matching and Symmetry-Protected Critical Phases in SU(N) Spin Systems in 1+1 Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* 123, 6 (2019).
14. K. Hashimoto, S. Sugishita, A. Tanaka, A. Tomiya, Deep learning and the AdS/CFT correspondence. *Physical Review D* 98 (2018).
15. K. Hashimoto, X. Wu, T. Kimura, Edge states at an intersection of edges of a topological material. *Physical Review B* 95, 10 (2017).

A01 公募研究 計 115 件

16. H. Yang, L.H. Li, K. Okunishi, H. Katsura, Duality, criticality, anomaly, and topology in quantum spin-1 chains, *Physical Review B* 107(12) (2023) 14.
17. Y. Ominato, A. Yamakage, M. Matsuo, Anisotropic superconducting spin transport at magnetic interfaces. *Physical Review B* 106, 6 (2022).
18. S. Tsubota, H. Yang, Y. Akagi, H. Katsura, Symmetry-protected quantization of complex Berry phases in non-Hermitian many-body systems. *Physical Review B* 105, 6 (2022).
19. H. Wakao, T. Yoshida, Y. Hatsugai, Discriminant indicator with generalized rotational symmetry. *Physical Review B* 105, 10 (2022).
20. T. Yoshida, T. Mizoguchi, Y. Hatsugai, Non-Hermitian topology in rock-paper-scissors games. *Scientific Reports* 12, 7 (2022).
21. T. Yoshida, Real-space dynamical mean field theory study of non-Hermitian skin effect for correlated systems: Analysis based on pseudospectrum. *Physical Review B* 103, 9 (2021).
22. H. Yoshida, H. Katsura, Rigorous Results on the Ground State of the Attractive SU(N) Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* 126, 100201 (2021).
23. T. Yokouchi, Y. Shiomi, Enhancement of Current-Induced Out-of-Plane Spin Polarization by Heavy-Metal-Impurity Doping in Fe Thin Films. *Phys. Rev. Appl.* 16, 6 (2021).
24. N. Shibata, N. Yoshioka, H. Katsura, Onsager's Scars in Disordered Spin Chains. *Phys. Rev. Lett.* 124, 6 (2020).
25. H. Fukaya, N. Kawai, Y. Matsuki, M. Mori, K. Nakayama, T. Onogi, S. Yamaguchi, The Atiyah-Patodi-Singer index on a lattice. *Progress of Theoretical and Experimental Physics* 2020, 11 (2020).

26. M. Hirayama, R. Takahashi, S. Matsuishi, H. Hosono, S. Murakami, Higher-order topological crystalline insulating phase and quantized hinge charge in topological electrified apatite. *Phys. Rev. Res.* 2, 14 (2020).
27. H. Sawahata, N. Yamaguchi, F. Ishii, Electric-field-induced Z(2) topological phase transition in strained single bilayer Bi (111). *Appl. Phys. Express* 12, 3 (2019).
28. A. Mizuno, Y. Shuku, K. Awaga, Recent Developments in Research of Molecular Spin Gyroids. *Bulletin of the Chemical Society of Japan* in press (2019).
29. S. Y. Matsushita, K. K. Huynh, K. Tanigaki, Ultrathin film of 3D topological insulators by vapor-phase epitaxy: Surface dominant transport in wide temperature revealed by Seebeck measurement. *Physical Review B* 99 (2019).
30. H. Idzuchi, A. E. L. Allcca, X. C. Pan, K. Tanigaki, Y. P. Chen, Increased Curie temperature and enhanced perpendicular magneto anisotropy of Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub>/NiO heterostructures. *Applied Physics Letters* 115, 5 (2019).
31. K. Yamada, S. Souma, K. Yamauchi, N. Shimamura, K. Sugawara, C. X. Trang, T. Oguchi, K. Ueno, T. Takahashi, T. Sato, Ultrathin Bismuth Film on 1T-TaS<sub>2</sub> : Structural Transition and Charge-Density-Wave Proximity Effect. *Nano Letters* 18, 3235-3240 (2018).

#### 研究項目 A02 ネットワーク解析による高分子材料

(計画研究 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 計 23 件

32. N. Sakata, R. Mishina, M. Ogawa, K. Ishihara, Y. Koda, M. Ozawa, K. Shimokawa, Handlebody decompositions of 3-manifolds and polycontinuous patterns. *Proc. Royal Soc. A* 478, Issue 2260 (2022).
33. K. Hagita, T. Murashima, M. Ogino, M. Omiya, K. Ono, T. Deguchi, H. Jinnai, T. Kawakatsu, Efficient compressed database of equilibrated configurations of ring-linear polymer blends for MD simulations. *Sci. Data* 9, 9 (2022).
34. T. Sawada, A. Saito, K. Tamiya, K. Shimokawa, Y. Hisada, M. Fujita, Metal-peptide rings form highly entangled topologically inequivalent frameworks with the same ring- and crossing-numbers. *Nature Communications* 10, 921 (2019).
35. T. Sawada, Y. Inomata, K. Shimokawa, M. Fujita, A metal-peptide capsule by multiple ring threading. *Nature Communications* 10 (2019).
36. K. Kyoda, T. Yamamoto, Y. Tezuka, Programmed Polymer Folding with Periodically Positioned Tetrafunctional Telechelic Precursors by Cyclic Ammonium Salt Units as Nodal Points. *Journal of the American Chemical Society* 141, 7526-7536 (2019).
37. K. Ishihara, Y. Koda, M. Ozawa, K. Shimokawa, Neighborhood equivalence for multibranching surfaces in 3-manifolds. *Topology and its Applications* 257, 11-21 (2019).
38. E. Uehara, T. Deguchi, Mean-square radius of gyration and the hydrodynamic radius for topological polymers expressed with graphs evaluated by the method of quaternions revisited. *Reactive & Functional Polymers* 133, 93-102 (2018).

(計画研究 A02-2) 高分子高次構造の階層的シミュレーション 計 15 件

39. T. Aoyagi, Coarse-grained molecular dynamics study of elasticity of block copolymers with cubic symmetrical morphology. *Polymer* 243, 8 (2022).
40. T. Aoyagi, Optimization of the elastic properties of block copolymers using coarse-grained simulation and an artificial neural network. *Computational Materials Science* 207, 9 (2022).
41. H. Kawaguchi, M. I. Ito, S. Yamanaka, T. Aoyagi, Largest Connected Component and Free Energy of Microphase Separated Structures. *J. Comput. Chem.-Jpn.* 19, 136-138 (2021).
42. H. Kawaguchi, M. I. Ito, T. Aoyagi, T. Ohnishi, Prediction of Stress-Strain Curve of Block Copolymers Using Transfer Learning of 3D Convolutional Neural Network. *J. Comput. Chem.-Jpn.* 20, 100-102 (2021).
43. K. Hagita, T. Aoyagi, Y. Abe, S. Genda, T. Honda, Deep learning-based estimation of Flory-Huggins parameter of A-B block copolymers from cross-sectional images of phase-separated structures. *Scientific Reports* 11, 16 (2021).

A02 公募研究 計 65 件

44. B. H. Chen, T. Wada, H. Yabu, Amphiphilic Perforated Honeycomb Films for Gravimetric Liquid Separation. *Adv. Mater. Interfaces* 9, 7 (2022).
45. T. Aoyama, K. Kato, K. Urayama, Marked Sensitivity of Ultimate Elongation to Loading Axiality in Polyrotaxane Gels with Largely Slidable Cross Links. *ACS Macro Letters* 11, 362-367 (2022).
46. T. Yamaguchi, Y. Onoue, Y. Sawae, Topology and Toughening of Sparse Elastic Networks. *Phys. Rev. Lett.* 124, 5 (2020).
47. R. Soma, B. Nakayama, M. Kuwahara, E. Yamamoto, T. Saiki, Phase-change Janus particles with switchable dual properties. *Applied Physics Letters* 117, 7 (2020).
48. T. Mori, Y. Jiang, Y. Fujii, S. Kitani, H. Mizuno, A. Koreeda, L. Motoji, H. Tokoro, K. Shiraki, Y. Yamamoto, S. Kojima, Detection of boson peak and fractal dynamics of disordered systems using terahertz spectroscopy.



Physical Review E 102, 12 (2020).

49. Y. Masubuchi, T. Uneyama, Retardation of the reaction kinetics of polymers due to entanglement in the post-gel stage in multi-chain slip-spring simulations. *Soft Matter* 15, 5109-5115 (2019).
50. S. Honda, M. Oka, H. Takagi, T. Toyota, Topology-Reset Execution: Repeatable Postcyclization Recyclization of Cyclic Polymers. *Angewandte Chemie-International Edition* 58, 144-148 (2019).
51. K. Esashika, R. Ishii, S. Tokihiro, T. Saiki, Simple and rapid method for homogeneous dimer formation of gold nanoparticles in a bulk suspension based on van der Waals interactions between alkyl chains. *Optical Materials Express* 9 (2019).

#### 研究項目 A03 物質分離・輸送を最適化する多層・多孔質材料の離散曲面論

(計画研究 A03-1) 物質分離・輸送を最適化する多層・多孔質材料の離散曲面論 計 23 件

52. K. Inoue, K. Kawahara, M. Saito, M. Kotani, Y. Ikuhara, 3D arrangement of atomic polyhedra in tilt grain boundaries. *Acta Mater.* 202, 266-276 (2021).
53. A. Dechant, T. Ohto, Y. Ito, M. V. Makarova, Y. Kawabe, T. Agari, H. Kumai, Y. Takahashi, H. Naito, M. Kotani, Geometric model of 3D curved graphene with chemical dopants. *Carbon* 182, 223-232 (2021).
54. R. Ozawa, Y. Sakurai, T. Yamada, Geometric and spectral properties of directed graphs under a lower Ricci curvature bound. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations* 59, 39 (2020).
55. A. Dechant, S. Sasa, Fluctuation-response inequality out of equilibrium. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 117, 6430-6436 (2020).
56. H. Morita, A. Miyamoto, M. Kotani, Recoverably and destructively deformed domain structures in elongation process of thermoplastic elastomer analyzed by graph theory. *Polymer* 188, 8 (2020).
57. T. Tate, Eigenvalues, absolute continuity and localizations for periodic unitary transition operators. *Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* 22, 21 (2019).
58. K. Suzuki, Convergence of non-symmetric diffusion processes on RCD spaces. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations* 57 (2018).
59. M. Kotani, H. Naito, T. Omori, A discrete surface theory. *Computer Aided Geometric Design* 58, 24-54 (2017).

(計画研究 A03-2) ナノ極小曲面論による相分離過程の大域解析 計 18 件

60. M. Kotani, H. Naito, C. Tao, Construction of continuum from a discrete surface by its iterated subdivisions. *Tohoku Mathematical Journal* 74 (2022).
61. S. Akamine, M. Umehara, K. Yamada, Improvement of the Bernstein-type theorem for space-like zero mean curvature graphs in Lorentz-Minkowski space using fluid mechanical duality. *Proceedings of the American Mathematical Society, Series B* 7, 17-27 (2020).
62. T. Omori, H. Naito, T. Tate, Eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for 3-and 4-valent graphs. *Electron. J. Comb.* 26, 31 (2019).
63. S. Nayatani, T. Shoda, Metrics on a closed surface of genus two which maximize the first eigenvalue of the Laplacian. *C. R. Math.* 357, 84-98 (2019).

(計画研究 A03-3) 界面活性剤を用いた多連続多孔質構造の形成 計 4 件

64. K. Takezawa, J. F. Lu, C. Numako, S. Takami, One-step solvothermal synthesis and growth mechanism of well-crystallized beta-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles in isopropanol. *Crystengcomm* 23, 6567-6573 (2021).
65. T. Taira, T. Yanagimoto, K. Sakai, H. Sakai, T. Imura, Au(i)-, Ag(i)-, and Pd(ii)-coordination-driven diverse self-assembly of an N-heterocyclic carbene-based amphiphile. *RSC Adv.* 11, 17865-17870 (2021).
66. A. A. Litwinowicz, S. Takami, S. Asahina, X. D. Hao, A. Yoko, G. Seong, T. Tomai, T. Adschiri, Formation dynamics of mesocrystals composed of organically modified CeO<sub>2</sub> nanoparticles: analogy to a particle formation model. *Crystengcomm* 21, 3836-3843 (2019).

A03 公募研究 計 77 件

67. T. Oka, Y. Yamamura, S. Kutsumizu, K. Saito, Aggregation structure of chiral cubic liquid crystals revealed by X-ray diffraction utilizing a new algorithm. *Soft Matter* 19, 1194-1201 (2023).
68. T. Oka, A phase retrieval algorithm for triply periodic minimal surface like structures. *Acta Crystallogr. Sect. A* 79, 51-58 (2023).
69. A. A. H. Tajuddin, M. Wakisaka, T. Ohto, Y. Yu, H. Fukushima, H. Tanimoto, X. Li, Y. Misu, S. Jeong, J.I. Fujita, H. Tada, T. Fujita, M. Takeguchi, K. Takano, K. Matsuoka, Y. Sato, Y. Ito, Corrosion-Resistant and High-Entropic Non-Noble-Metal Electrodes for Oxygen Evolution in Acidic Media. *Adv Mater* 35, e2207466 (2023).
70. E. Shinkawa, M. Koiso, Geometry of anisotropic double crystals. *JSIAM Lett.* 15, 13-16 (2023).
71. D. Marchiani, A. Tonelli, C. Mariani, R. Frisenda, J. Avila, P. Dudin, S. Jeong, Y. Ito, F.S. Magnani, R. Biagi, V. De Renzi, M.G. Betti, Tuning the Electronic Response of Metallic Graphene by Potassium Doping. *Nano Lett* 23, 170-176 (2023).
72. M. Koiso, K. Okuda, Stability of surfaces with constant mean curvature bounded by two coaxial circles.

- JSIAM Lett. 15, 25-28 (2023).
73. M. Koiso, U. Miyamoto, Stability of hypersurfaces of constant mean curvature with free boundary in two parallel hyperplanes. JSIAM Lett. 15, 9-12 (2023).
  74. M. Koiso, Stable anisotropic capillary hypersurfaces in a wedge, Math. Eng. 5, 1-22 (2023).
  75. R. Costantini, D. Marchiani, M.G. Betti, C. Mariani, S. Jeong, Y. Ito, A. Morgante, M. Dell'Angela, Pump-Probe X-ray Photoemission Spectroscopy of Free-Standing Graphane. Condensed Matter 8, (2023).
  76. K. Saito, Y. Yamamura, Small Spin Clusters Mimicking a Temperature-Induced Phase Transition: Spins on Vertices of Regular Octahedron and Icositetrachoron. Journal of the Physical Society of Japan 91, (2022).
  77. T. Oka, Crystallographic phase retrieval method for liquid crystal bicontinuous phases: indicator-based method. Acta Crystallogr. Sect. A 78, 430-436 (2022).
  78. Y. Tanabe, Y. Ito, K. Sugawara, S. Jeong, T. Ohto, T. Nishiuchi, N. Kawada, S. Kimura, C.F. Aleman, T. Takahashi, M. Kotani, M. Chen, Coexistence of Urbach-Tail-Like Localized States and Metallic Conduction Channels in Nitrogen-Doped 3D Curved Graphene. Adv. Mater., 34, 51 (2022)..
  79. K. Obara, Y. Kageyama, S. Takeda, Self-Propulsion of a Light-Powered Microscopic Crystalline Flapper in Water. Small 18, 10 (2022).
  80. K. Saito, M. Hishida, Y. Yamamura, Two-Dimensional Spin Model Possibly Undergoing a Phase Transition: Heisenberg Model of Headless Spins Preferring Twist on Triangular Lattice. Journal of the Physical Society of Japan 90, 11 (2021).
  81. K. Okada, Y. Tanaka, T. Inose, H. Ujii, H. Yoshikawa, D. Tanaka, Electrolytic synthesis of porphyrinic Zr-metal-organic frameworks with selective crystal topologies. Dalton Transactions 50, 5411-5415 (2021).
  82. Y. Ito, S. Kukunuri, S. Jeong, G. Elumalai, A. A. H. Tajuddin, Z. Y. Xi, K. L. Hu, T. Ohto, Phase-Dependent Electrochemical CO<sub>2</sub> Reduction Ability of NiSn Alloys for Formate Generation. ACS Appl. Energ. Mater. 4, 7122-7128 (2021).
  83. K. L. Hu, T. Ohto, Y. Nagata, M. Wakisaka, Y. Aoki, J. Fujita, Y. Ito, Catalytic activity of graphene-covered non-noble metals governed by proton penetration in electrochemical hydrogen evolution reaction. Nature Communications 12, 9 (2021).
  84. Y. Hatakeyama, M. Koiso, Stability of helicoidal surfaces with constant mean curvature. Int. J. Math. Study 12, 23 (2020).
  85. A. Kumatani, C. Miura, H. Kuramochi, T. Ohto, M. Wakisaka, Y. Nagata, H. Ida, Y. Takahashi, K. L. Hu, S. Jeong, J. Fujita, T. Matsue, Y. Ito, Chemical Dopants on Edge of Holey Graphene Accelerate Electrochemical Hydrogen Evolution Reaction. Advanced Science 6, 8 (2019).

#### 研究項目 B01 物質・材料科学のための情報科学基盤

(計画研究 B01-1) 複雑ネットワーク解析に基づく物質・材料探索 計 4 件

86. K. K. Takahashi, Y. Amamoto, H. Kikutake, M. I. Ito, A. Takahara, T. Ohnishi, Random Forest Analysis of X-ray Diffraction and Scattering Data on Crystalline Polymer. J. Comput. Chem.-Jpn. 20, 103-105 (2021).
87. H. Kawaguchi, M. I. Ito, T. Aoyagi, T. Ohnishi, Prediction of Stress-Strain Curve of Block Copolymers Using Transfer Learning of 3D Convolutional Neural Network. J. Comput. Chem.-Jpn. 20, 100-102 (2021).
88. M. I. Ito, Y. Amamoto, T. Ohnishi, Change of Weighted Network Structure of Elastomer during Uniaxial Elongation. J. Comput. Chem.-Jpn. 20, 89-91 (2021).
89. Y. Amamoto, K. Kojio, A. Takahara, Y. Masubuchi, T. Ohnishi, Complex Network Representation of the Structure-Mechanical Property Relationships in Elastomers with Heterogeneous Connectivity. Patterns 1, 9 (2020).

(計画研究 B01-2) 材料観察画像からの機能推定 計 7 件

90. S. Tokuda, S. Souma, K. Segawa, T. Takahashi, Y. Ando, T. Nakanishi, T. Sato, Unveiling quasiparticle dynamics of topological insulators through Bayesian modelling. Communications Physics 4, 8 (2021).
91. R. Okugawa, H. Oshiyama, M. Ohzeki, Mirror-symmetry-protected dynamical quantum phase transitions in topological crystalline insulators. Phys. Rev. Res. 3, 9 (2021).
92. A. Ichiki, K. Okumura, Diversity of dynamical behaviors due to initial conditions: Extension of the Ott-Antonsen ansatz for identical Kuramoto-Sakaguchi phase oscillators. Physical Review E 101, 8 (2020).
93. U. Yamamoto, H. Imai, K. Sano, M. Ohzeki, T. Matsuda, T. Tanaka, Improving Time Resolution in the Imaging of Metabolic Dynamics using Compressed Sensing from 3D Heteronuclear Multiple Quantum Coherence. Proceedings of The International Society for Magnetic Resonance in Medicine 26, 1289 (2019).

**B01 公募研究** 計 79 件

94. K. Hagita, T. Murashima, Practical compatibility between self-consistent field theory and dissipative particle dynamics. Polymer 269, 10 (2023).
95. K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, K. Shimokawa, T. Deguchi, E. Uehara, S. Fujiwara, Molecular Dynamics of Topological Barriers on the Crystallization Behavior of Ring Polyethylene Melts with Trefoil Knots.

- Macromolecules 56, 15-27 (2023).
96. T. Murashima, T. Kawakatsu, K. Hagita, Lamellar Domain Spacing of Symmetric Linear, Ring, and Four-Arm- Star Block Copolymer Blends. *Macromolecules* 55, 8021-8031 (2022).
  97. T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, Topological Transition in Multicyclic Chains with Structural Symmetry Inducing Stress-Overshoot Phenomena in Multicyclic/Linear Blends under Biaxial Elongational Flow. *Macromolecules*, 15 (2022).
  98. K. Hagita, T. Murashima, T. Ohkuma, H. Jinnai, Ring-Filling Effect on Stress-Strain Curves of Randomly End-Linked Tetra-Arm Prepolymers. *Macromolecules* 55, 6547-6561 (2022).
  99. Y. Sumiya, Y. Tsuji, K. Yoshizawa, Shear adhesive strength between epoxy resin and copper surfaces: a density functional theory study. *Physical Chemistry Chemical Physics* 24, 27289-27301 (2022).
  100. K. Okazawa, Y. Tsuji, K. Kurino, M. Yoshida, Y. Amamoto, K. Yoshizawa, Exploring the Optimal Alloy for Nitrogen Activation by Combining Bayesian Optimization with Density Functional Theory Calculations. *Acs Omega* 7, 45403-45408 (2022).
  101. M. Yoshida, Y. Tsuji, S. Iguchi, H. Nishiguchi, I. Yamanaka, H. Abe, T. Kamachi, K. Yoshizawa, Toward Computational Screening of Bimetallic Alloys for Methane Activation: A Case Study of MgPt Alloy. *Acs Catalysis* 12, 9458-9472 (2022).
  102. Y. Tsuji, K. Yoshizawa, Adsorption Site Preference Determined by Triangular Topology: Application of the Method of Moments to Transition Metal Surfaces. *J. Phys. Chem. C* 126, 13505-13519 (2022).
  103. Y. Tsuji, M. Yoshida, T. Kamachi, K. Yoshizawa, Oxidative Addition of Methane and Reductive Elimination of Ethane and Hydrogen on Surfaces: From Pure Metals to Single Atom Alloys. *Journal of the American Chemical Society*, 22 (2022).
  104. Y. Sumiya, Y. Tsuji, K. Yoshizawa, Peel Adhesion Strength between Epoxy Resin and Hydrated Silica Surfaces: A Density Functional Theory Study. *Acs Omega* 7, 17393-17400 (2022).
  105. S. Nakamura, S. Yamamoto, Y. Tsuji, K. Tanaka, K. Yoshizawa, Theoretical Study on the Contribution of Interfacial Functional Groups to the Adhesive Interaction between Epoxy Resins and Aluminum Surfaces. *Langmuir*, 12 (2022).
  106. K. Okazawa, Y. Tsuji, K. Yoshizawa, Graph-theoretical exploration of the relation between conductivity and connectivity in heteroatom-containing single-molecule junctions. *Journal of Chemical Physics* 156, 8 (2022).
  107. Y. Mototake, Interpretable conservation law estimation by deriving the symmetries of dynamics from trained deep neural networks. *Physical Review E* 103 (2021).
  108. K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, Mathematical Classification and Rheological Properties of Ring Catenane Structures. *Macromolecules* 10.1021/acs.macromol.1c01705, 12 (2021).
  109. Y. Tsuji, Y. Kitamura, M. Someya, T. Takano, M. Yaginuma, K. Nakanishi, K. Yoshizawa, Adhesion of Epoxy Resin with Hexagonal Boron Nitride and Graphite. *Acs Omega* 4, 4491-4504 (2019).
  110. K. Hagita, Y. Shudo, M. Shibayama, Two-dimensional scattering patterns and stress-strain relation of elongated clay nano composite gels: Molecular dynamics simulation analysis. *Polymer* 154, 62-79 (2018).

○ 学会発表（招待講演）

1. (A01-1) M. Furuta, "The Atiyah-Patodi-Singer index theorem and domain walls" MATERIALS RESEARCH MEETING 2019 (Yokohama) 2019.
2. (A01-2) K. Hashimoto, "Holography, matter and deep learning", Microsoft workshop "Physics Meets ML"(Seattle) 2019.
3. (A02-1) K. Shimokawa, "3-dimensional topology and poly-continuous pattern", Special Session on Applied Knot Theory, AMS Sectional Meeting AMS Special Session (Tennessee) 2020.
4. (A02-2) T. Aoyagi, "High-throughput prediction and optimization of stress-strain curve of thermoplastic elastomer", International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design (online) 2021.
5. (A03-1) M. Kotani, "Discrete geometric analysis for materials research" International Congress of Chinese Mathematicians (Beijing) 2019.
6. (A03-2) 内藤久資、「3分岐離散曲面と炭素構造」日本数学会 2021年度年会（オンライン）2021.
7. (A03-3) S. Takami, "Fabrication of micrometer-size complicated nanocomposite film structures designed by mathematics" Polymers and networks via topology and entanglement (Tokyo) 2019.
8. (B01-1) 大西立顕、「複雑ネットワークとデータサイエンスを活用した高分子計算機科学の可能性」高分子計算機科学研究会（東京）2019.
9. (B01-2) A. Ichiki, "Laplacian eigenvalue problem: macroscopic and microscopic energetics for soft matter" Polymers and networks via topology and entanglement (Tokyo) 2019.

他、計画研究・公募研究を問わず多数（全体の論文数 501 件）

## ○ 書籍・総説

1. 小谷 元子、物質科学における数理的アプローチの新展開、表面と真空、66 巻 3 号 p. 133(2023)
2. 伊藤良一、グラフェンで被膜した卑金属による PEM 水電解槽用電極の開発、触媒 Vol.65、 pp. 35-40(2023)
3. 田邊洋一、伊藤良一、窒素ドーピング 3D グラフェン—触媒活性な局在電子と電荷輸送を担う、化学、Vol.78、 pp. 40-44 (2023)
4. 萩田克美(分担執筆)、ディープラーニングを用いたゴム中ファイラー凝集構造解析、CSJ カレントレビュー46「持続可能な社会を支えるゴム・エラストマー」、 pp. 135-140、化学同人(2023)
5. 辻雄太「最低被占分子軌道のグラフ理論的解釈に基づく金属クラスターの解析」、特集「物質の構造を捉える数理的アプローチ」、表面と真空、Vol. 66、 No. 3、 pp. 158-163(2023)
6. 高垣敦、辻雄太、吉澤一成「第 1 章 第 1 節 第 7 項 酸化白金によるメタンからメタノールへの低温選択酸化」、『メタンと二酸化炭素 ～ その触媒的・化学変換技術の現状と展望 ～』pp.118-125、シーエムシー・リサーチ(2023)
7. 塩田淑仁、辻雄太、吉澤一成「第 5 章第 1 節 メタン選択酸化の計算科学最前線」、『メタンと二酸化炭素 ～ その触媒的・化学変換技術の現状と展望 ～』pp.305-315、シーエムシー・リサーチ(2023)
8. 辻雄太「情報科学的手法を活用した触媒材料探索」特集 2 マテリアルズインフォマティクスによる新材料の創出、MATERIAL STAGE (2022 年 12 月号)、 Vol. 22、 No. 9、 pp. 51-57、(株)技術情報協会(2022)
9. 福嶋 健二、桂 法称、『Python で実践—基礎からの物理学とディープラーニング入門』、全 306 頁、科学情報出版(2022)
10. 鄭サムエル、大戸達彦、伊藤良一、第 5 章第 7 節 pp. 438-446「二酸化炭素をギ酸などの化成品に変える化学的固定化技術」、「CO<sub>2</sub> の分離・回収・貯留技術の開発とプロセス設計」技術情報協会編(2022)
11. 伊藤良一、辻口 拓也、河邊 佑典、大戸 達彦、高橋 康史、第 2 章第 1 節「スズとグラフェンの界面を活用したギ酸の合成プロセス」、「二酸化炭素有効利用 ～DAC から物質合成、産業利用まで～」株式会社エヌ・ティー・エス(2022)
12. A.Tanaka、 A.Tomiya、 K.Hashimoto "Deep Learning and Physics" 全 207 頁、 Springer Nature (2021)
13. 田中 章詞、富谷 昭夫、橋本 幸士『ディープラーニングと物理学 原理がわかる、応用ができる』全 300 頁、講談社 (2019)
14. K.Shimokawa、 K. Ishihara、 Y. Tezuka "Topology of Polymers" 全 89 頁、 Springer、 SpringerBriefs in the Mathematics of Materials (2019)
15. H. Naito "Trivalent Discrete Surfaces and Carbon Structures" 全 103 頁、 Springer、 SpringerBriefs in the Mathematics of Materials [掲載決定]
16. 手塚 育士(監修)「環状高分子の合成と機能発現」全 336 頁、シーエムシー出版 (2018)

他、部分執筆した書籍や学術誌における総説記事 多数

## ○ ホームページ

[本領域のホームページ](https://www.math-materials.jp) (<https://www.math-materials.jp>)

この事後評価報告書に記載しきれない情報を参照いただけます

## ○ 主催シンポジウム等

1. 日本応用数学会 2022 年度年会 オープンセッション「次世代物質探索のための離散幾何解析学」2022.9.9-10 (Online)
2. Workshop "Discrete Geometric Analysis and its Applications" 2022.1.7-9 (Online)
3. "International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design" 2021.9.26-29 (Online)
4. "GTF2021 The Geometry & Topology Behind Fabrics at Multiple Scales" 2021.5.20-21 (Online)
5. 日本物理学会第 76 回年次大会 共催シンポジウム「次世代 物質探索のための離散幾何学」2021.3.12 (オンライン)
6. 化学工学会第 51 回秋季大会 [材料・界面部会シンポジウム] 次世代物質・材料探索のための新たなアプローチ 2020.9.24 (オンライン)
7. Workshop "Topological phenomena in non-Hermitian and non-equilibrium systems" 2020.2.24-28 (Sendai)
8. MRM2019, Symposium B-3, "Mathematical Materials Science -Mathematical Approaches for Materials Designs in the Data Driven Society-" 2019.12.10-14 (Yokohama).
9. "Deep Learning and Physics 2019" 2019.10.31-11.2 (Kyoto)

10. "Polymers and networks via topology and entanglement" 2019.8.7-9 (Tokyo)
11. "Polymers meet Topology" 2019.1.30-2.1 (Tokyo)
12. "The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology" 2019.3.24-29 (Canada)
13. "AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics" 2019.1.7-8 (Sendai)
14. 新学術領域「次世代物質探索のための離散幾何学」キックオフワークショップ 2018.2.18 (仙台)
15. "Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers" 2017.8.8-10 (Tokyo)

他、各班主催の研究集会 多数

## ○ アウトリーチ活動

一般向け講演・セミナー：36件、記者プレスリリース：29件、  
メディア報道：国内55件 海外：22件、小・中・高向けの講演等：15件

### 【主だった活動】

#### パンフレットの作成

News letter「離散幾何と材料」vol.1 (2018.4.1) – vol.10 (2022.3.11) まで発行：紙媒体として関係先に送付するとともに、上記の領域ホームページにて公開

#### レクチャー

- 小谷元子：高校の数学の教員に対して数学の先端研究、特に AIMR における数学-材料科学連携を紹介（長野県須坂東高校、2018.11.10）
- 古田幹雄：女子中高生講座「数学の魅力 8」（東京大学駒場キャンパス大講義室、2019.3.10）
- 古田幹雄：Summer School 数理物理 2020（オンライン、2020.8.28）

他

#### 一般向けの情報発信

- 小谷元子：第8回 WPI サイエンスシンポジウム『数学の驚くべき力 数学が繋ぐ多様な世界』「数学でミクロとマクロをつなぐ」（東京 2020.1.12.）
- 橋本幸士：2018年度日本物理学会科学セミナー 公開講座「AI（人工知能）と物理学」（2018.8.1）
- 橋本幸士：オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学」2020.5 から 40 回以上開催 (<https://cometscome.github.io/DLAP2020/>)
- 下川航也：科学雑誌「Newton（ニュートン）」2018年6月号、「ニュートン別冊 数学の世界 図形編」に一般向け解説を掲載
- 正井秀俊：第154回サイエンスカフェ「数学小噺～日常に数学を～」(せんだいメディアテーク、2018.7.11.)
- 赤木和人：MathAM-OIL 第3回企業連携ワークショップ「ソフトマテリアルのトポロジカル解析: 顕微画像の分類とキャラクター化」（東京、2018.12.5）
- 赤木和人：「トポロジカルデータ解析コミュニティ」を主催し、2021.5 から主に材料系企業に向けてセミナーシリーズを開催 (<https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/TDA/>)

他

## 8 研究成果

本研究領域では、離散と連続の関係を幾何学的に理解する「離散幾何解析学」を材料科学の諸課題と連携させ、ミクロ・メゾ構造とマクロな機能物性を双方向に行き来できる新しい融合分野の開拓を目指した。「物質を階層的ネットワークとして理解すること」を共通の大目標として「トポロジカル材料」「高分子材料」「連続多孔質材料／曲面材料」をそれぞれ対象とする3つの研究項目に取り組み、物質材料の多様な課題に対して、数学を用いて高次元で複雑な構造に含まれた本質的な情報を取り出した。これらを踏まえ、ミクロとマクロの関係を階層横断的に理解して逆問題を解くための新しい概念や理論、手法や道筋を示せた。参画した若手研究者は様々に数理・データを用いた物質探索を体験してデジタル時代の物質科学に資する人材に育つなど、物質・材料科学の研究・開発のありかたを大きく変える新しい融合領域を創成した。

## 【数学とトポロジカル材料】

幾何学における微分方程式の局所化・有限次元近似・離散化の概念を融合し、トポロジカル相の研究において「指数」の概念の一般化に成功した。これにより物性物理側には「高次トポロジカル指標」に代表される先駆的な概念が、数学側には相互作用がある系に触発された指数定理の展開・深化がもたらされた。また、離散幾何解析からヒントを得て、素粒子論の手法で創発した時空を物質のspin配列から生まれた深層ニューラルネットワークと捉えて解く枠組みが生み出され、ディープラーニングと物理学が融合した革新的な学術領域の開拓が始まった。

## 【数学と高分子材料】

高分子のトポロジーや相分離構造を解析する数学的手法を確立したことで、分子やその集合体を作る「形」が階層を超えてどのようにマクロな物性・機能に繋がるかを調べられるようになり、テキストも出版された。一方、分子シミュレーションとネットワーク科学・機械学習を組み合わせたデータ科学的アプローチにも顕著な発展があった。これらは外挿領域に及ぶ高度な材料設計やプロセス設計につながる基盤として、学術・産業の両面で大きな波及効果をもたらしつつある。

## 【数学と連続多孔質材料／曲面材料】

多孔質構造の分類と形成のために3次元トポロジー的手法や極小曲面論などの微分幾何学的手法を構築して、原子・分子が作るミクロな構造とマクロな機能物性との関係の解析に取り組み、離散幾何解析と材料科学の融合を切り拓いた。炭素ナノ材料や有機金属構造体(MOF)のような実材料系で有用性を示せたことで産業界から関心が寄せられる一方、物質科学の課題から刺激を受けて離散幾何学自体も豊かに発展した。

以下に成果の具体例をいくつか挙げる。

### 研究項目 A01：トポロジカル物質

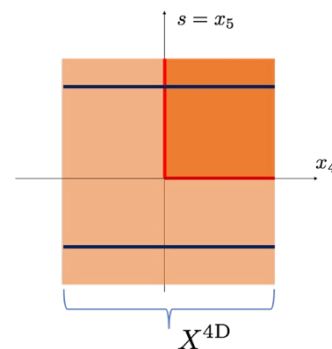
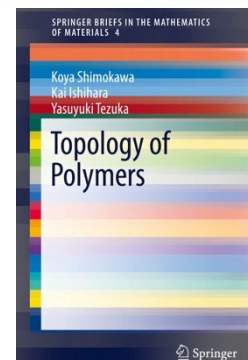
#### 「数学による格子ゲージ理論の理解と拡張」(A01-1, A01 公募：領域内連携)

「指数」とは無次元の系を有限次元の系で近似したモデルを経由してロバストな情報を抽出する概念である。数学者の古田・松尾(信)・山下は、物理学者の深谷らと共に、偶数次元の境界をもつ多様体に関する Atiyah-Patodi-Singer 指数とドメインウォールフェルミオンの Dirac 演算子のエータ不変量が、さらに1次元高い演算子の指数の異なる表現と等価であることを証明した。これは欲しいトポロジカル絶縁体の edge 状態に比べて2次元高い系になっており、高次トポロジカル相不変量の立場では「角における高次不変量がゼロである」こと、つまり「角の角度を連続的に変えても、角にゼロモードが出現しない」ことを示す。

また、深谷らと松尾(信)・山下は、任意の多様体を格子ゲージ理論によって扱う枠組みを提案した。基本的なアイデアは、多様体を高次元のトーラスに埋め込むことであり、連続理論においては埋め込まれた多様体の近傍への指数は局所化することを使う。さらに、Atiyah-Patodi-Singer 境界条件における mod2 指数のドメインウォールを用いた具体的な記述を与えた。これらは格子理論において対応する局所化を定式化するための重要な成果である。

*Commun. Math. Phys.* (2020), *Lett. Math. Phys.* (2022)

#### 「素粒子論を出発点として物質科学と機械学習を融合する」(A01-2)

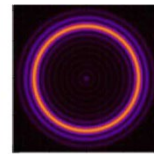


図：APS 指数とドメインウォールによる指数の等価性を示す 5次元時空の例。ドメインウォールは 4次元であり、角は 3次元となる。

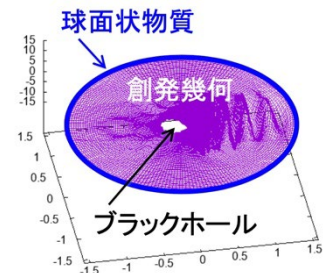
物質を重力で取り扱う超弦理論のホログラフィー原理を用いると、相互作用の入ったトポロジカル物質系も取り扱うことができる。そこで、ホログラフィー原理で発生する創発時空を、物質のสปิน配列から生まれた深層ニューラルネットワークと考える方法を探求し、QFTに双対な時空をニューラルネット上で創発させることに成功した。離散幾何学的時空と機械学習、物質科学を融合する研究を進め、QFTにおけるカイラル凝縮のデータから離散幾何としてのニューラルネットワークが決定されるアルゴリズムを提唱し、これを用いることで、物質科学と離散幾何学の架橋の基盤を構築した。特に、深層ボルツマンマシンと呼ばれるニューラルネットワークがホログラフィック原理の重力側の物質場の経路積分とみなせる形式を提案した。これらは英文の教科書としても出版した。 *Phys. Rev. D (2018)*, *Springer Nature (2021)*



事象の地平面を望遠鏡で捉えたM87中心部のブラックホールの撮像図



2次元球面上の量子臨界物質で見るブラックホール



さらに、物質に双対な重力時空を再構築するため、離散幾何学の手法を応用した機械学習のニューラル常微分方程式を用い、創発時空を発見するプロトコルを開発した。また、物質側をQFT物質とした場合に、Wilson loop や計算複雑性などを用いることで創発時空を再構築する公式を提案した。これにより、特に創発時空上のブラックホールの内側までも再構築することが可能となった。 *Phys. Rev. Lett. (2019)*

**【A01 公募】**

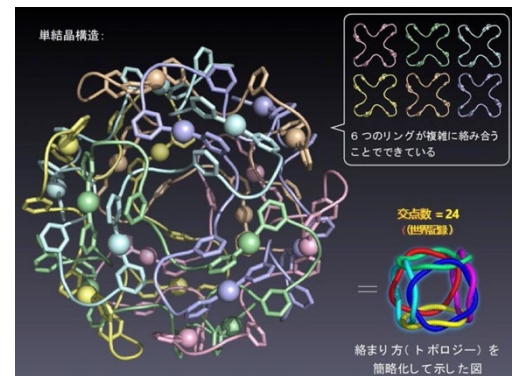
「熱平衡化しない量子多体系」のメカニズム解明に一石を投じる [桂, *Phys. Rev. Lett. (2020)* プレスリリース]、量子多体系の30年来の難問を解決: SU(N)ハバード模型の基本的な性質を解明 [桂, *Phys. Rev. Lett. (2021)* プレスリリース]、カゴメ格子状のじゃんけんゲームを解析することでトポロジカル現象の典型例であるカイラルエッジ状態の発現を解明 [吉田, *Scientific Report (2021)*]、さらに例外点の発現や非エルミート表皮効果の発現も指摘 [吉田, *Phys. Rev. B (2021)*]、トポロジカル物質のコーナー電荷などの量子化値を離散幾何学と関連付け [村上, *Phys. Rev. Res. (2020)*] ほか

**研究項目 A02 : ネットワーク解析による高分子材料**

**「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」 (A02-1 : プレスリリース)**

自己組織化の原理を利用して、ペプチド鎖24本と銀イオン24個の計48成分が精密に集合して複雑に編み込まれた球殻構造を世界で初めて合成することに成功した。分子構造解析と数学的な結び目理論に基づくトポロジー解析を実施することにより、この構造はペプチド鎖4本と銀イオン4個が交互に連なってできたリングが6つ、立方体状に絡まったトポロジーであることを示した。ナノ物質合成において、分子鎖を精密に編み込むことで中空の球殻構造(カプセル)を人工合成して幾何学的構造まで同定した例はなく、画期的な成果といえる。

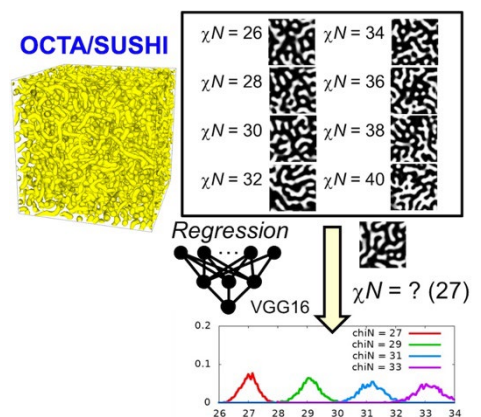
*Nature Communications 10 (2019)* に2報



**「相分離構造の電子顕微鏡画像情報から相互作用パラメータを推定」 (A02-2, B01 公募 : 領域内連携)**

3次元相分離構造を持つ高分子材料の2次元断面画像から、A-Bジブロックコポリマーの混合エンタルピーの評価に用いられる「Flory-Hugginsの $\chi$ パラメータ」を深層学習で推定する手法を開発した。実空間SCF計算によりブロックコポリマーの準安定相分離構造を発生させ、 $\chi$ パラメータを推定して安定相の構造を予測することで手法の振る舞いを検証した。対称性の低い準安定構造の空間分布の情報に本来取るべき安定相のラベルを与え、深層学習の一種である3D-Convolutional Neural Network(3D-CNN)を用いて約15,000サンプルを学習させたところ、学習に用いていないジブロックや非対称トリブロックコポリマーの準安定構造から安定相を予測することに成功した。

*Scientific Reports (2021)*



**【A02 公募】**

光で高分子形状をリセットする「T・レックス」により流動性が変わるシリコン材料を開発 [本多, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2019) プレスリリース]、破壊実験とシミュレーションによりネットワーク状構造物のトポロジーと強靱化の関連を解明 [山口, *Phys. Rev. Lett.* (2020)]、8の字架橋点を持つ高分子ゲルの極端に異方的な力学物性を解明 [浦山, *ACS Macro Lett.* (2022)] ほか

**研究項目 A03：物質分離・輸送を最適化する多層・多孔質材料の離散曲面論**

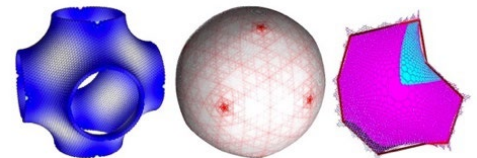
『離散曲面論』『離散極小曲面論』の完成 (A03-1, A03-2：領域内連携)

与えられたネットワークを「離散曲面」とみなし幾何学的に計算するアルゴリズムを開発して、ネットワークの細分とその収束列として背後に隠れた連続構造を特定し、「収束の極限に現れる特異点の分類」に対する道筋を与えた。これにより、要素分解と再構築を経て得られる 3 次元ネットワークのうち例えば拡散を最適化するものを分類し、多層・多孔質材料の最適構造を調べる道具立てを得た。これらの「離散極小曲面論」を踏まえて、ナノ構造の動的形成に関する数理モデルを微分幾何学的手法で具体的に構築する際の鍵となる方策を調査したところ、Pinkall-Lam らが発表した「サークル・パッキングを用いたネットワークの共形構造(Thurston)」を活用した離散極小曲面の Weierstrass 表現を我々の理論と組み合わせ、目的のネットワークを「指定された特異点を許容する周期的極小曲面」として構成すれば良いことが分かった。これにより、対応する三分岐極小曲面による三重連続構造の実現を研究する基盤が完成した。

*Comput. Aided. Geom. Des.*(2017), *Tohoku Math.J* (2022)

**カーボンネットワークをモデルとした離散曲面の細分の定義と細分列の収束 (A03-1, A03-2：領域内連携)**

カーボンネットワークは、数学の視点からは三分岐離散曲面と考えることができ、抽象グラフとしての細分を経由して細分列を定義可能である。さらに、局所エネルギー最小化によりハウドルフ距離に関する細分列の収束のアルゴリズムを開発した。これは単に数学的な興味だけではなく、3次元グラフエンに代表される負曲率炭素構造を考える際に有用な成果であり、モノグラフとしての出版も決まった。

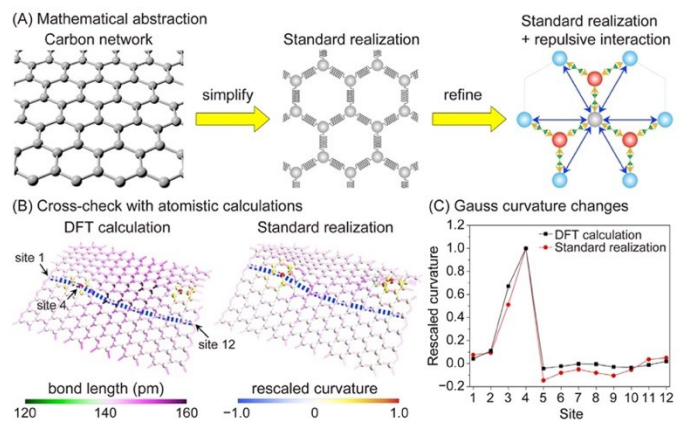


左：Mackay 結晶の細分 (ガウス曲率) (Kotani-Naito-Omori), 中：C60 の細分 (ガウス曲率) (Kotani-Naito-Tao), 右：K4 結晶の細分 (一つの leaf) (Kotani-Naito-Tao)

(*Springer Briefs in the Mathematics of Materials*, 2022 予定)

**「数学を取り入れて触媒を『設計』する」 (A03-1, A03-2, A03 公募：領域内連携, プレスリリース)**

安定な結晶格子の探索を数学的に行うために提案された「標準実現」の考え方を炭素のナノ構造の予測に応用すべく、斥力項を入れた SRRI モデルを構築した。これは  $\pi$  共役な離散曲面系において第一原理分子動力学計算を代替しうる精度で高速な構造予測を可能にし、ガウス曲率と窒素ドーピングエネルギーの相関を捉えることができた。さらにグラフェン様の炭素材料を実験的に作製し、その触媒能力を検証することで、数学を用いた材料設計の有用性を実証した。求める触媒機能を発現する異元素のドーピング箇所を決め、対応する離散曲面をデザインする「逆推論」の手法として期待される。



*Carbon*(2021), 科学新聞(2021年7月16日)

**「極小曲面の理論の構築と具体系としての実現」 (A03-2, A03-3, A03 公募：領域内連携)**

数学側からのアプローチとして、極小曲面や平均曲率一定曲面を相界面とする構造について、様々な理論構築に取り組んだ。内藤は、螺旋状の小さな針金が支える微小液滴の数理モデルを与えて螺旋運動で不変な CMC 曲面の安定性を調べ、一つの常螺旋と二つの短い曲線弧で張られる凸で安定な CMC 螺旋面のクラスを得た。小磯は、液滴の界面の数理モデルや可展面についての変分問題のエネルギー極小解を決定する研究を行った。

材料側からのアプローチとしては、ミクロな枠構造に無機材料の膜を張ることで目的の極小曲面を持つ触媒を作成する技術の開発に取り組んだ。高見は、セラミックスナノ粒子の分散液を調製し、マイクロメートルやミリメートルサイズの枠上で極小曲面を形成した





後に乾燥して、極小曲面の形状を有するセラミックス薄膜を形成するという手法を考案した。形成した薄膜は、イットリウム安定化ジルコニア(YSZ)ナノ粒子を用いた場合で 97.6 wt%という極めて高い濃度のセラミックスナノ粒子を含む。薄膜は極小曲面の形状をとっており、ヘリコイド構造や Enneper 曲面など様々な形状を実現可能である。YSZ ナノ粒子の他に  $\text{TiO}_2$  ナノ粒子を用いたセラミックス極小曲面の形成も可能とし、機能性を付与する前の段階まで進むことができた。

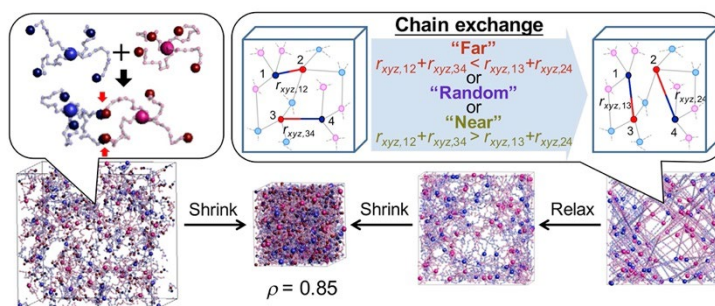
### 【A03 公募】

自発曲率の概念を導入して定常光照射下での結晶の巨視的変形の繰り返しを数理モデル化 [影山, *Small* (2022) プレスリリース]、電気化学反応により異なるトポロジーを持つ MOF を選択的に合成 [吉川, *Dalton Trans.* (2021)] ほか

### 研究項目 B01：物質・材料科学のための情報科学基盤

「複雑ネットワーク指標を用いたポリマーの力学物性の解析法」(B01-1, A02 公募, B01 公募: 領域内連携)

弾性を持った高分子であるエラストマーは、既存のモデルでは分岐数と架橋密度のみで応力が決まるとされており、ポリマー鎖の繋がりの影響を加味してゴム弾性を記述することはできていなかった。そこで、複雑ネットワーク科学の手法を応用して、架橋点の実空間上の位置とネットワーク上の位置の両方を考慮した新たな中心性指標を開発した。重み付きネットワーク表現を用いてエラストマーの力学物性を解析した結果、ネットワークの中心にいる架橋点、かつ、初期の架橋点間距離が大きい架橋点ほど応力に対して寄与すること、距離を考慮した新たな近接中心性の指標を導入したことで架橋点間距離と架橋点のゆらぎの両方を統一的に記述できることを明らかにした。これにより、伸びきり鎖による応力集中の記述も可能になった。



結果、ネットワークの中心にいる架橋点、かつ、初期の架橋点間距離が大きい架橋点ほど応力に対して寄与すること、距離を考慮した新たな近接中心性の指標を導入したことで架橋点間距離と架橋点のゆらぎの両方を統一的に記述できることを明らかにした。これにより、伸びきり鎖による応力集中の記述も可能になった。

*Patterns*(2020), *J. Comp. Chem. Jpn.*(2021)

### 「ブロック共重合体のマイクロ相分離構造の解析法の開発」(B01-1, A02-2：領域内連携)

ブロック共重合体は、モノマー間の相互作用の大きさや平均体積分率によって様々なマイクロ相分離構造をとる。また、ほぼ同じような条件で生成したとしても初期値のゆらぎに依存して異なる準安定構造をとる。これらの構造の違いが物性に影響を与えていると考えられるが、マイクロ相分離の複雑な構造を単純な方法で定量化するのは困難なため、どのような構造の特徴がどのように物性に寄与しているかについては分かっていなかった。そこで多様なマイクロ相分離の複雑な構造をマルチフラクタルで特徴づける方法を開発し、特異性指数や一般化次元などのマルチフラクタル指標が力学物性や自由エネルギーに関係していることを見出すことができた。

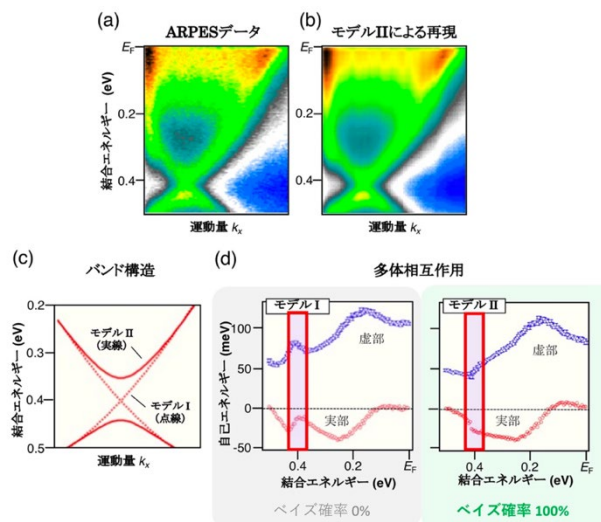
*J. Comp. Chem. Jpn.*(2020)

ベイズ推定を用いた新たな電子構造の解析法を開発：

「トポロジカル絶縁体などを巡る数々の論争の決着へ」(B01-2, A01 公募：領域内連携, プレスリリース)

角度分解光電子分光 (ARPES) によって得られたトポロジカル絶縁体  $\text{TlBi}(\text{S,Se})_2$  のバンド構造に対してベイズ推定を用いた電子状態の解析を行い、モデルが持つ 559 個のパラメータの値を全て決定することで、ARPES データを極めてよく再現する解析結果を得た。さらに、2 種類のバンド構造のモデルのどちらが妥当かを統計的に評価してディラック電子に質量があることを明確に示し、10 年越しの議論に決着をつけた。従来の解析方法では有限解像度のバンド構造データに対してパラメータ推定を行ってもモデル選択の自由度が残されていたが、本手法では選択されたモデルの良し悪しを統計力学的な手法で定量的評価することによって物理の異なる複数のモデルから妥当なモデルを選択することができた。このモデル選択の方法は従来、情報量基準として知られていたモデル選択の指針を統計力学の視点から自然に導入したものであり、ARPES イメージに限らず広範な実験データの解析に応用できる。

*Communications Physics* (2021)



### 【B01 公募】

4つまでの環状鎖で作るカテナンの MD 計算を行い絡み方とレオロジー特性の関係を解明した [萩田, *Macromolecules* (2021), A02-1 との連携]、X線散乱回折データを使って生分解性高分子のプロセス-構造-物性相関を調べる手法を提案した [天本, *Polym. J* (2021), A02 公募との連携]ほか

このように、日本が強い分野でありながら、これまでほとんど出会いのなかった数学と物質・材料科学という両分野間をブリッジし、互いに刺激を与え合うことで新しい概念や手法が開発された。世界に先駆けた試みを多数行なった結果、いくつかの成功例が生み出され、今後につながる多くの重要な課題も特定できた。物質材料の多様な課題に対して、数学を用いて高次元で複雑な構造に含まれた本質的な情報を取り出し、マイクロとマクロの関係を階層横断的に理解して逆問題を解くための道筋を示せたことは、国内外を見ても先進的な成果である。これらにより、物質・材料科学の研究・開発のありかたを大きく変える新興・融合領域の創成を達成した。得られた数々の手法や知見を素材開発へ展開することが期待されている点で、産業的・社会的にも大きなインパクトを与えている。本研究期間の終了はひとつの通過点であり、今後もその潮流は勢いを増すであろう。