

領域略称名：材料離散幾何解析
領域番号：2902

令和元年度科学研究費助成事業
「新学術領域研究（研究領域提案型）」
に係る中間評価報告書

「次世代物質探索のための離散幾何学」

（領域設定期間）

平成29年度～令和3年度

令和元年6月

領域代表者 （東北大学・材料科学高等研究所・教授・小谷 元子）

目 次

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	6
2. 研究の進展状況	8
3. 審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況	11
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	13
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公开发表等）	16
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	21
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	23
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	24
9. 総括班評価者による評価	25
10. 今後の研究領域の推進方策	27

研究組織 (総：総括班, 計：総括班以外の計画研究, 公：公募研究)

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00 総	17H06460 次世代材料探索のための 離散幾何解析推進	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	小谷 元子	東北大学・材料科学高等研究所・教授	9
A01 計	17H06461 指数定理の展開とトポロ ジカル表面状態	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	古田 幹雄	東京大学・大学院数理科学研究科・教 授	3
A01 計	17H06462 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	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	橋本 幸士	大阪大学・理学研究科・教授	5
A02 計	17H06463 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	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	下川 航也	埼玉大学・理工学研究科・教授	4
A02 計	17H06464 高分子高次構造の階層的 シミュレーション	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	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	1
A03 計	17H06465 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	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	小谷 元子	東北大学・材料科学高等研究所・教授	2
A03 計	17H06466 ナノ極小曲面論による相 分離過程の大域解析	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	内藤 久資	名古屋大学・多元数理科学研究科・准 教授	2
A03 計	17H06467 界面活性剤を用いた多連 続多孔質構造の形成	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	高見 誠一	名古屋大学・工学研究科・教授	2
B01 計	17H06468 複雑ネットワーク解析に 基づく物質・材料探索	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	大西 立顕	東京大学・大学院情報理工学系研究 科・准教授	2
B01 計	17H06469 材料観察画像からの機能 推定	平成 29 年度 ～ 令和 3 年度	一木 輝久	名古屋大学・未来社会創造機構・特任 准教授	1
総括・計画研究 計 10 件					

A01 公	18H04471 トポロジカル物質の特異な電子・スピン状態と熱電物性との相関の解明	平成 30 年度 ～ 令和元年度	松下 ステファ ン悠	東北大学・理学研究科・助教	1
A01 公	18H04472 電子状態解析に基づくトポロジカル物質相の探索	平成 30 年度 ～ 令和元年度	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	1
A01 公	18H04473 光学的な計測法を用いたトポロジカル物質のベリー曲率の観測	平成 30 年度 ～ 令和元年度	Chen Yong	東北大学・材料科学高等研究所・教授	1
A01 公	18H04478 乱れや相互作用のある系のトポロジカル相とその不変量	平成 30 年度 ～ 令和元年度	桂 法称	東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授	1
A01 公	18H04481 ナノスケールのスピン構造が誘起するトポロジカル熱電変換物質デザイン	平成 30 年度 ～ 令和元年度	石井 史之	金沢大学・数物科学系・准教授	1
A01 公	18H04482 炭素同素体トポロジーと分子自由度の結合による新規物性の開拓	平成 30 年度 ～ 令和元年度	阿波賀 邦夫	名古屋大学・理学研究科・教授	1
A01 公	18H04484 ドメインウォールフェルミオンで探る格子ゲージ理論のトポロジー	平成 30 年度 ～ 令和元年度	深谷 英則	大阪大学・理学研究科・助教	1
A02 公	18H04469 高速ナノセンシングによる液晶の位相欠陥ネットワーク組換えダイナミクスとレオロジー	平成 30 年度 ～ 令和元年度	藤井 修治	北海道大学・工学研究院・准教授	1
A02 公	18H04470 数学的アプローチによる新奇超分子系材料創成と解析	平成 30 年度 ～ 令和元年度	山本 拓矢	北海道大学・工学研究院・准教授	1
A02 公	18H04476 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	平成 30 年度 ～ 令和元年度	森 龍也	筑波大学・数理物質系・助教	1

A02 公	18H04479 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	平成 30 年度 ～ 令和元年度	本多 智	東京大学・大学院総合文化研究科・助教	1
A02 公	18H04483 高分子からみあいの階層的記述	平成 30 年度 ～ 令和元年度	増淵 雄一	名古屋大学・工学研究科・教授	1
A02 公	18H04486 ネットワーク状構造物のトポロジーと強靱化	平成 30 年度 ～ 令和元年度	山口 哲生	九州大学・工学研究院・准教授	1
A02 公	18H04490 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	平成 30 年度 ～ 令和元年度	斎木 敏治	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・教授	1
A03 公	18H04475 液体中に分散したカーボンナノチューブの同期現象	平成 30 年度 ～ 令和元年度	佐野 正人	山形大学・大学院有機材料システム研究科・教授	1
A03 公	18H04477 カーボンネットワークの離散曲面論を用いた特性解釈と予測に基づく合成	平成 30 年度 ～ 令和元年度	伊藤 良一	筑波大学・数理物質系・准教授	1
A03 公	18H04487 離散幾何学と滑らかな幾何学をつなぐ幾何解析の創造・展開と物質・材料科学との連携	平成 30 年度 ～ 令和元年度	小磯 深幸	九州大学・マス フォア インダストリ研究所・教授	1
A03 公	18H04489 多角的なアプローチを用いた次数 3 の空間グラフの離散平均曲率一定曲面の研究	平成 30 年度 ～ 令和元年度	安本 真士	大阪市立大学・大学院理学研究科・特任准教授	1
A03 公	18H04491 幾何学構造に基づいた多孔性炭素材料の開発	平成 30 年度 ～ 令和元年度	吉川 浩史	関西学院大学・理工学部・准教授	1
B01 公	18H04474 物質構造のスパース推定における信頼性評価法の開発	平成 30 年度 ～ 令和元年度	中島 千尋	東北大学・情報科学研究科・研究員	1

B01 公	18H04480 機械学習を用いた高効率 走査トンネル分光測定に よる物質探索	平成 30 年度 ～ 令和元年度	吉田 靖雄	東京大学・物性研究所・助教	1
B01 公	18H04488 粒子群最適化および進化 論的アルゴリズムを利用 した結晶構造予測による 物質探索	平成 30 年度 ～ 令和元年度	辻 雄太	九州大学・先導物質化学研究所・助教	1
B01 公	18H04492 巨視的物性を支配する微 視的不均一状態の解明	平成 30 年度 ～ 令和元年度	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	1
B01 公	18H04494 ゴム中ナノ粒子のネット ワーク構造の離散幾何解 析と構造機能相関解明	平成 30 年度 ～ 令和元年度	萩田 克美	防衛大学校・応用科学群・講師	1
公募研究 計 24 件					

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ以内）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募研究領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

① 研究の学術的背景

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。従来の物質開発は主に研究者の経験と勘に基づく試行錯誤によるものであり、新物質の創成には 20~30 年の長時間がかかると言われている。これを効率化すべく、情報科学的手法を用いるデータ駆動型物質探索が世界中で始まっている。物質・材料創成の鍵である「構造・機能・プロセスの相関原理」には多重スケール・多重物理が関わっており、物質の階層的理解が本質である。特にデータ駆動社会における材料開発において、情報科学的手法を最高に活用するためには、物質の階層的理解を数理的な概念で行うことが重要となる。

一方、数学も国際社会の主要グループであり、日本が優位性を持つ領域である。数学は科学技術の共通言語としてその発展に貢献してきたが、20 世紀までの数学は単純すぎ、物質・材料科学のような複雑現象の記述には不十分であった。しかしながら 21 世紀に入り、数学の成熟は、複雑現象を記述する新概念、新手法を開発してきた。

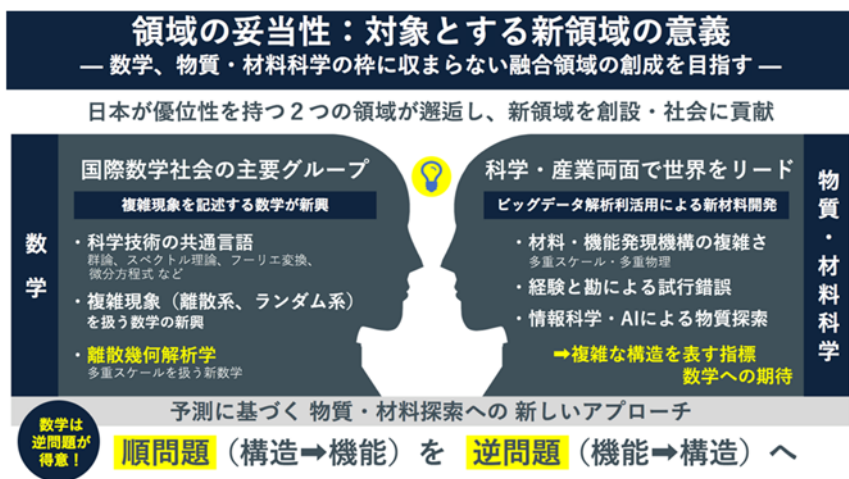
領域代表者の開発してきた「離散幾何解析学」とは、離散と連続の関係を幾何学的に理解する 21 世紀に生まれた学問である。物質のミクロ・メゾ構造を幾何学の言葉で記述しそれらがマクロな物性・機能にどうかかわるかを解析（順問題）、更に求められる物性・機能をもつミクロ・メゾ構造の特定（逆問題）、そしてその構造を生成するための初期条件・境界条件設定と動的構造形成の制御（最適化・制御）に対して離散幾何解析学は様々な概念や道具を提供することができる。

領域代表者は材料科学者・計算科学者との連携により、JST CREST（2008 年~2013 年）において研究課題「離散幾何学による新物質創成・物性発現の解明」を実施し、事後評価においては最高の A+ 評価を得た。更に 2012 年から 2016 年は、文部科学省の世界トップレベル研究拠点形成（WPI）プログラムの支援を受けて東北大学に設置された WPI-Advanced Institute for Materials Research において、数学—材料科学連携による予見に基づく材料科学のための基盤を築くことに従事してきた。本領域は、このような実績の下に、国内外の研究者が参画し、これまでに数学—材料科学連携の方針が明確となっている研究を深めるとともに、更に多様なアイデアと手法を取り入れることで新領域「次世代物質・材料科学のための離散幾何解析学」の確立を目指すものである。

これまで、出会う機会の少なかったが日本の優位性を持つ 2 つの領域が協働し、これにより数学、物質・材料科学の枠に収まらない融合領域を創成し、また人材を育成することは、まさに学問の成熟と時代の要請に適ったものであり、我が国の学術水準の向上・強化につながる。

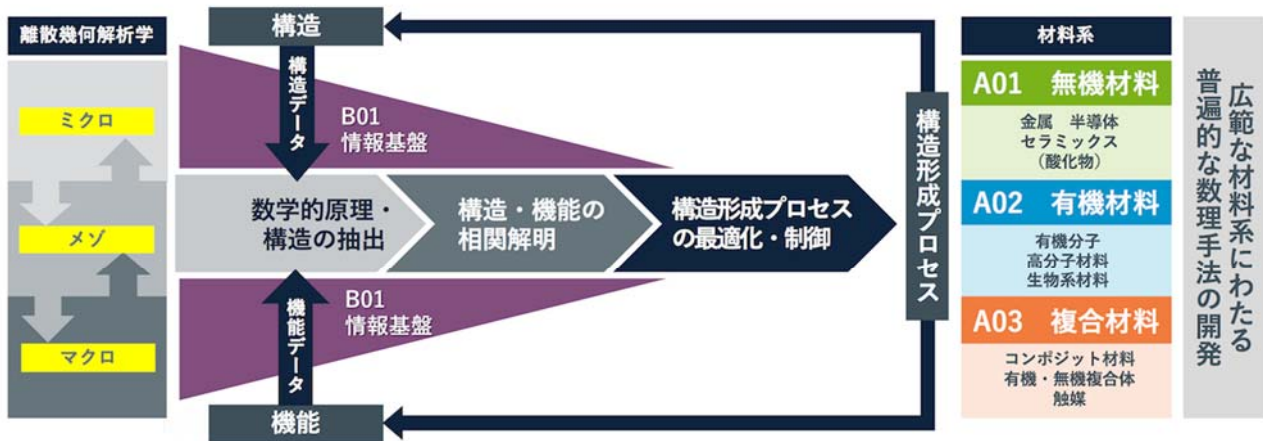
② 概要

学術面では、構造・機能・プロセスの相関原理を深め、情報科学やデータサイエンスの力を用いた新たなフェーズの物質・材料科学を進展する。また、数学においては複雑で多重スケールな構造を階層的に理解し、離散と連続の相関を調べる離散幾何解析学や離散力学系を大きく進展させる。そのために以下の研究項目を設定し、A01（無機材料）、A02（有機材料）、A03（複合材料）には、それぞれ「計画研究」において数学、理論・計算、実験・観測のチームを置いた。それぞれの項目ごとに垂直連携により固有の課題に挑戦するとともに、項目を超えた水平展開により、広範な材料系にわたる普遍的な数理手法を開発する。また、情報科学基盤 B01 との有機的連携を図り、データ駆動社会に求められる材料探索の手法を開発する。



項目	課題	対象材料	材料系
A01	トポロジカル物質	スピントロニクス	無機材料
A02	ネットワーク解析による高分子材料	高分子材料	有機材料
A03	極小曲面とナノ構造の動的構造形成	多孔質材料	複合材料
B01	物質・材料科学のための情報科学基盤	ネットワーク解析、画像処理、機械学習	

領域で得た知識・手法を産業界へチュートリアル・コンサル・共同研究へと展開し社会に貢献する。知財支援を行う。人材育成も総括班の大きなミッションである。この研究に従事する数学の専門性をもつ若手研究者、もしくは物質・材料科学のトレーニングを受けた若手研究者は、他分野との共同研究を推進するなかで、コミュニケーション能力を育み、従来の研究者とは異なる人材として育成される。これはビッグデータ社会において必要とされている数理能力と専門領域を併せ持つ人材である。



ミクロ・メゾ・マクロの階層に注目し、階層ネットワークとして解析することで、物質のプロセス・構造・機能の相関原理を説明（順問題から逆問題へ）

③ 領域内での研究の有機的な結合により目指す新たな研究の創造

3つの研究項目 A01, A02, A03 はそれぞれにターゲットとする物質系を扱いながら、「物質を階層的ネットワークとして理解する」という大目標を共有する。また B01 は情報科学・データ科学の基盤手法を開発する。項目を超えて（研究項目間の連携の必要性）、また公募研究を有効に活用しながら（公募班の必要性）、情報を共有し有機的連携を行うことで、多様な分野の多様な手法を組み合わせ、普遍的に有効な離散幾何解析学の手法と広範な応用課題を開発する。特に、数学者と物質・材料科学者が協働し（数学と実験の連携の必要性）、従来の物質開発のありかたを根本から変革する。

④ 当該分野におけるこの研究(計画)の学術的な特色・独創的な点及び予想される結果と意義

数学者と物質・材料の実験科学者が直接的に連携する領域開拓は世界に先駆けたものである。特に、領域代表者が開発してきた新しい数学「離散幾何解析」により物質・材料の階層ネットワーク構造を記述することで、機能・構造・プロセスの相関原理を解析し数理モデル化するという研究は独創的である。これが成功すれば、従来の物質・材料開発を一段と深いレベルから見直し手法を根本から変えることが期待できる。更に情報科学的手法を用いた材料探索・分類を実効的に効率化し、物質・材料科学者に飛躍的な発想の源を提供することにより、革新的な材料を開発する可能性を高める。

2. 研究の進展状況〔設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する〕（3 ページ以内）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らして、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

本領域では、数学者と物質・材料科学者が協働して「数学的原理・構造の抽出」「構造と物性・機能の相関解明」「構造形成の制御・最適化」の流れを作り、従来の物質探索のありかたを変革することを目指している。材料系によらない普遍的な理解と広汎な数理学的手法の開発を行うため、A01「トポロジカル物質」、A02「ネットワーク解析による高分子材料」、A03「極小曲面とナノ構造の動的構造形成」の各研究項目に数理チーム（A01-1、A02-1、A03-1）、理論・計算チーム（A01-2、A02-2、A03-2）を置き、また A03 には実験チーム（A03-3）を置くほか、公募班から実験系の研究提案を多数採択した（A01、A02 の実験チームは採択にいたらなかった）。また、B01「物質・材料科学のための情報科学基盤」にはネットワーク解析や画像処理・機械学習に強いチーム（B01-1、B01-2）を置いた。以下に研究項目ごとの設定目的と発展状況を説明し、さらに領域を形成したことで項目を越えて誘起された研究例を紹介する。

研究項目 A01「トポロジカル物質」

（設定目的）

トポロジ相に依存するロバストな状態が物質の表面に観測されており、その原理は指数定理で記述される。対称性の破れにより異なる状態が発現する普遍的原理を解明し、秩序系で構築された理論を非コンパクト、非線形系、無秩序系へと展開する。

- ・ 相互作用系のトポロジカル表面状態の探求から創発される指数定理の展開・深化
- ・ 偏極ヒルベルト多様体に対する K 理論を構築し、低次元トポロジの近年の顕著な発達と物性物理とのリンクを開拓
- ・ 位相幾何学とソリトンに離散対称性の量子異常を適用した普遍的局在状態の解明
- ・ 数学で予測された新しいトポロジ相の物質によりスピントロニクスの新機能を開拓 ← 計画研究としては不採択、公募研究により強化

（進展状況）

A01-1「相互作用系のトポロジカル表面状態の探求から創発される指数定理の展開・深化」に関して、非線形化と非コンパクト化のゲージ理論（フレアー的理論）の構築は予定どおり進んでいる。前倒しの進捗としては、対称性によって保護されたトポロジカル相（SPT 相）について 1 次元スピン系の場合にはほぼ最終的な成果を、バルクエッジ対応の有限次元モデルについてモジュライ空間と比較可能な具体例を得た。予想外かつ重要な展開として、非コンパクト空間の上の指数定理、APS 指数定理とドメインウォールの関係、格子指数定理とドメインウォールの組み合わせの潜在的意義の発見があり、これは A01 公募班・深谷との連携によるところが大きい。これにより、従来相互交流がなかった「物理における格子ゲージ理論の分野」と「数学における指数定理の分野」との間に「有限次元近似」を鍵とした大きなインパクトを持ちうる領野の開拓が期待される。

A01-2「位相幾何学とソリトンに離散対称性の量子異常を適用した普遍的局在状態の解明」に関しては、素粒子論と物性論におけるトポロジカルソリトン上に現れるギャップレス状態の理解が順調に進み、与えられた物性のモデルに対応して新超弦理論の曲がった時空を決めるという逆問題を解くためにニューラルネットワークと離散幾何学に関する研究を取り入れた方法を考案した。この A03 との連携により、超弦理論の物質研究を離散幾何学的に取り扱うことができるようになった。また、当初予定した「境界の境界」についての研究に困難の存在は判明したが、同様の概念である「高次トポロジカル物質」における離散的対称性と連続理論の対応関係を見る方向で軌道修正した。ここでも格子ゲージ理論の専門家である A01 公募班・深谷との連携によるトポロジカル物質のバルクエッジ対応の数理的な理解／場の量子論での理解の進展が期待される。

このように、A01-3 実験班が欠けた分を公募班との連携と発想の転換で乗り越える取り組みが功を奏して、「バルクエッジ対応における角の考察」が極めて重要な共通の接点として新たに認識され、さらに複数の公募班を巻き込んだ新たな学術領域生成への流れができつつある。

研究項目 A02「ネットワーク解析による高分子材料」

（設定目的）

均質ネットワークポリマーを 3 次元空間内の静的ネットワークとして記述し、結び目理論などの位相不変量と物性との相関を解明する。さらに密度揺らぎを最適化・制御する動的ネットワーク構造を予見し、多機能性

をもつ高分子材料を合成する。

- ・ 3次元ネットワーク構造（静的・動的）の記述および機能との相関原理の解明
- ・ 高分子高次構造の階層的シミュレーションの開発
- ・ 数学の予見に基づく高機能高分子の合成 ← 計画研究としては不採択

（進展状況）

A02-1「3次元ネットワーク構造（静的・動的）の記述および機能との相関原理の解明」に関して、3つの絡み合うネットワークと共連続構造の分岐曲面の関連についての基礎的研究を完成した。予想しなかった重要な研究展開としてネットワークのトポロジーの分類と多面体の構造の関連が明らかになり、藤田誠氏（領域外：東京大学）[有機合成]との共同研究により見た目が異なる複雑な分子系の本質的な相違の有無を見極められるようにした。A02-2「高分子高次構造の階層的シミュレーションの開発」に関しては、機械学習を用いた相分離構造予測と分子構造設計のために、SCF 計算で得られたブロックコポリマーの準安定相分離構造から安定相の構造を予測することができるようになった。

研究項目 A02-1 と A02-2 はそれぞれの研究を進めるとともに議論を進め、数学の知見を物質デザインに持ち込むための連携計画は着実に進められている。A02-1・下川グループでは、現在、絡み合う3つのネットワークから分岐曲面を作り出す研究を進めている。3次元トーラスの種数5のハンドル体3つによる分解などのstabilizedな分解例にもとづいて本質的な種数の小さい例の構成とトポロジーの観点からの分類を行い、得られた具体的なモデルの安定性を統計物理学的に評価してA02-2・青柳グループに提供するとともにA02公募班の山本（高分子化学）らと実際の材料設計を行うことが予定されている。3次元トーラスのstabilizedではないハンドル体分解についても、高分子材料としての機能をトポロジーの言葉で表して有力な候補モデルを選定し、同様の連携に持ち込む。また、A02-2・青柳グループの計算機シミュレーションによる物性評価としてダブルジャイロイド（DG）構造のマイクロ相分離ネットワーク構造の力学物性（S-S挙動）の解析などが進んでいるが、安定相であるDG相と比べて準安定として得られる対称性の低いネットワーク構造における分岐数、分岐点間距離、分岐角の特徴付けは自明でなく、その定量的評価をB01班と連携展開している。

ネットワーク理論との本質的な相性の良さを生かしてB01-1の大西らと多様な連携を図る取り組みが、絡み合いを考慮した実材料の高精度・高効率粗視化シミュレーションを得意とする増淵や光刺激によりネットワーク構造を組み替える高分子材料の合成を得意とする本多をはじめとする他のA02公募班や、手弁当で側面支援をしている小椎尾（総括班）らとの共同研究につながり成果をあげ始めている。

研究項目 A03「極小曲面とナノ構造の動的構造形成」

（設定目的）

複雑なチャンネルのネットワーク構造を形成し、優れた触媒の実現のために適切な物質輸送と物質分離の仕組みを制御する。多連続多孔質構造を離散曲面論により分類・最適化し、それを相分離により実現するために、大域解析学を用いて狙った構造形成を実現する指針を見出す。これを踏まえ、高度な界面制御技術により狙った構造を形成する。

- ・ 離散極小曲面論による多孔質構造の分類と最適構造の予見
- ・ 狙った極小曲面構造の形成過程の最適化、安定性、特異点の制御
- ・ 多連続多孔質構造の形成と構造観察

（進展状況）

A03-1では、研究の基盤となる理論を完成した。離散曲面論は位相的な曲面を近似する理論として発展してきたが、与えられた離散データの背後にある連続曲面を見出す手法を逆の観点から構築し、収束と特異点分類を定式化した。「座標」や「連続構造」がない離散曲面の収束で生じる特異点の定式化は大きな課題であり当初は特異点の排除を目指したが、具体例の考察を通して特異点の分類や制御へと発想を転換することで多くの実りを得た。Pinkall-Lamの最近の成果を我々の理論と組み合わせることで、物質材料開発につながる具体的なアイデアを多く構築できる見通しが立った。

A03-2では、A03-1と共同で3次元グラフエンに代表される負曲率炭素構造を想定した三分岐離散曲面の細分を考察し、抽象グラフと局所エネルギー最小化を用いてハウス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。また、与えられた境界条件（枠）に対するトポロジータイプを特定するプログラムを開発するため、A03公募班の小磯らとマルチフェーズフィールド法を与える偏微分方程式の安定な解法を考察し、解の構成が容易な2次元系の数値挙動を確かめた。

計画班において唯一の実験グループであるA03-3では、「離散極小曲面論」から提案された数理的な具体例を物質系で実現するため、極小曲面を形成する土台となる枠をミクロスケールで形成する手法、デバイス材料とし

てミクروسケールの極小曲面を用いる手法、ミクروسケールの極小曲面の形状を動的に制御する手法の開発に取り組み、実証が順調に進んだ。また、A03-2 や A02-1 の進展を受けて、その知見に基づく反応器や冷却器などの化学装置の形状設計の議論が始まった。

また、3次元グラフェンの合成とドーピングによる触媒活性の付与は A03 公募班の伊藤が得意とするところであり、ここに A03-1 の幾何学的な特徴付けと分類の知見を取り入れる取り組みを進めている。

研究項目 B01 「物質・材料科学のための情報科学基盤」と他研究項目との連携

(設定目的)

項目 A01, A02, A03 に共通な情報科学的手法として、巨大・複雑ネットワークの解析と統計手法を用いた画像解析を開発し、構造データ・機能データを数理モデルに結びつける。

(進展状況)

項目 B01 は、得意とする手法の使い方を具体例で示しつつ領域内の連携研究を支援する難しい役割を担っている。B01-1 はシミュレーションデータから高分子のネットワーク構造と力学物性との相関を抽出して構造と機能を結びつけて見せ、B01-2 は有限要素法によるシミュレーション結果をニューラルネットワークにより学習させて局所変形の情報から大域変形を高速に予測して見せるなど、まず自らの情報科学基盤を活かした具体例の提示に取り組んだ。

同時に、B01-1 は「高分子3次元ネットワークの分類と物性相関」「複雑ネットワーク指標を用いたネットワークポリマーの力学物性解析」「相分離におけるネットワーク構造の解析」「マイクロビーズ系を用いた擬似高分子ネットワークモデルの実装」「複雑ネットワーク解析に基づく高分子構造-物性の記述」といった主に研究項目 A02 (高分子材料) との連携に取り組み、具体的成果につながる領域発展の芽を生み出している。また、B01-2 は A03-2 の内藤らとの議論から着想を得て画像処理の新しいアルゴリズム開発にもつながるラプラス作用素による非自明な空間分割法を編み出したり、トポロジカル超伝導体の分散関係を示すと思われるデータから測定対象が実際にトポロジカル超伝導体であるかを判定する手法の開発を A01 公募班の相馬と共同で行ったりして、分野横断的な取り組みを狙った成果を挙げている。このように献身的な働きにより、具体例を伴った連携研究が多数進展している。

研究項目を超えた進展

物質科学の視点を出発点として A01-2 班と A03-2 班が議論を深めた結果、当初の研究計画では想定していなかった「2次元ポアンカレディスクの有界領域に対する適切なメッシュの構成」という課題に気づいた。これは素粒子物理学において非常に重要なテーマであり、従来ほとんど行われてこなかった双曲空間での数値解析に道を開くものであることが認識され、研究項目を超えた進展の例となった。

また、公募班が主導する連携も活発である。例えば、小磯 (A03 公募) [数学]、斎木 (A02 公募) [実験]、安本 (A03 公募) [数学]、赤嶺 (A03-2 計画) [数学] らは、外場制御可能なアクティブマターを実験素材として動的ネットワークの数理構造を調べ、界面についての新しい動的自由境界問題や曲面の特異点、離散曲面の構造などを解析するための新しい方法や概念を得つつある。

3. 審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況（2ページ以内）

審査結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

（審査結果の所見）

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、⁽¹⁾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。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。一方で、⁽²⁾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。

対応状況

- (1) 数学、計算科学、物質・材料科学との連携により新たな物質創成の基盤を構築する高度に異分野融合で挑戦的な研究を評価いただいた。これまで、出会いの機会がまれであり、言葉や価値観、研究手法などが異なる研究者間でのコミュニケーションは簡単ではない。また、物質・材料は大変に複雑な系であり、その機能発現の機構の理解は、ご指摘いただいたとおり、容易ではない。この困難を打破するために、本領域では総括班がリードし、分野間を超えるための様々な仕組みを設けている。
- ① 各研究項目が企画し領域全体に提供するチュートリアル、勉強会、および定期開催の「物質と情報セミナー」「物質と幾何学セミナー」を開催し、研究者特に若手研究者に参画を奨励している
 - ② インターフェース研究者は領域内での分野融合を進めるための駆動力となるとともに、本人が異分野の言葉を理解し、共同研究の種を積極的に探す機会を持つことで、将来この領域を率いるリーダーとなる研究者として成長する。
 - ③ 領域内での連携を進めるためのシーズファンドとなる連携奨励グラントを設けた。

このような努力により、「2. 研究の進展状況」に示したようにいくつか連携の成功例がある。これらはまだまだ萌芽的であり「物質を創生する」ことには至っていないが、数学と物質・材料科学の連携がなければできなかった新たな視点、手法がみいだされ、研究期間内および将来に発展することを期待できる。また連携によりインスパイアされた新たな研究シーズが予想以上に生まれている。

- (2) 本領域では、申請時構想では物質系による研究項目 A01（無機）、A02（有機）、A03（複合）のそれぞれに数学、理論・計算、実験のチームを置く3×3構造と、その情報基盤となる B01 に2チームという11の計画研究を置くこととしていた。しかしながら A01、A02の実験チームは採択に至らないという判断が下され、研究計画の変更の必要が生じた。これに対応するために、まず不採択となった計画研究代表を総括班メンバーに加え、研究活動に参画することを可能にした。領域会議、班会議等を通じて情報交換を行っている。一方で、数学、理論・計算科学が実際の物質・材料科学と乖離しないためには、実験系研究者との議論、共同研究の機会が重要であり、それこそが、本領域が目指すものである。計画研究で欠けた要素を公募研究で補うことを意識して積極的に実験系を採択するようにし、第1期分として合計24件採択した（約300万円/2年：2件、約500–600万円/2年：18件、約1,800万円/2年：4件）。以下がその内訳である。

A01	実験 4	計算 1	理論 2	数学 0	情報 0
A02	実験 5	計算 1	理論 1	数学 0	情報 0
A03	実験 3	計算 0	理論 0	数学 2	情報 0
B01	実験 2	計算 0.5	理論 1.5	数学 0	情報 1
合計	実験 14	計算 2.5	理論 4.5	数学 2	情報 1

計画研究においては申請時にすでに必要な情報交換や共同研究方針がシェアされていたが、公募研究に関しては2年目からの開始であることに加え、これまでに面識のない研究者同士ということはあったが、領域班会議や勉強会、ワークショップを通じてお互いの研究を知りあう機会を設け、また打ち合わせの旅費や成果発表を援助する連携奨励グラントを用意することで、予想より多くの共同研究や連携の方向性が見出された。

このような取り組みの成果として当初の計画を超えて以下のような連携が進んでいる。①②は申請時の研究項目内での連携計画が公募班の参加により強化されたもの、③は領域発足後に異なる項目間の計画班連携として始まったもの、④—⑩はB01計画班〔情報〕の積極的な連携推進によるもの、⑪—⑭は総括班の連携奨励グラントの補助を受けたものである。また、⑮は本領域での研究が、領域外の優れた実験家との連携によって予想外に発展的な成果につながった例である。スタート時点の逆境を克服して余りある展開が見て取れる。

- ① 「トポロジカル物質における数学と理論の接点」
古田 (A01-1) [数学]、橋本 (A01-2) [理論]、深谷 (A01 公募) [理論]
- ② 「離散曲面の数学理論と物質系としての実現」
小谷 (A03-1) [数学]、内藤 (A03-2) [理論]、高見 (A03-3) [実験]、阿波賀 (A01 公募) [実験]
- ③ 「3次元ネットワークに付随する相分離に関わる三重周期極小曲面とネットワークとの対応」
下川 (A02-1) [数学]、小谷 (A03-1) [数学]、内藤 (A03-2) [理論]
- ④ 「ラプラス作用素による最適空間分割」
内藤 (A03-2) [理論]、一木 (B01-2) [情報]
- ⑤ 「トポロジカル超電導の統計的推定」
相馬 (A01 公募) [実験]、一木 (B01-2) [情報]
- ⑥ 「高分子3次元ネットワークの分類と物性相関」
下川 (A02-1) [数学]、青柳 (A02-2) [計算]、大西 (B01-1) [情報]
- ⑦ 「複雑ネットワーク指標を用いたネットワークポリマーの力学物性の解析」
増淵 (A02 公募) [理論 計算]、出口 (A02-1) [理論 数学]、天本 (B01-1) [計算]、大西 (同) [情報]
- ⑧ 「相分離におけるネットワーク構造の解析」
青柳 (A02-2) [計算]、大西 (B01-1) [情報]
- ⑨ 「マイクロビーズ系を用いた擬似高分子ネットワークモデルの実装」
齋木 (公募班 A02) [実験]、大西 (B01-1) [情報]
- ⑩ 「分子系ハミルトニアンとグラフ理論」
辻 (B01 公募) [理論]、大西 (B01-1) [情報]
- ⑪ 「複雑ネットワーク解析に基づく高分子構造-物性の記述」 *連携奨励グラント*
小椎尾 (総括班) [実験]、天本 (B01-1) [計算]、大西 (同) [情報]
- ⑫ 「相変化材料工学と微分及び離散幾何学の連携による動的ネットワーク解析並びにナノ及び離散極小曲面論における新しい方法の発見と展開」 *連携奨励グラント*
小磯 (A03 公募) [数学]、齋木 (A02 公募) [実験]、安本 (A03 公募) [数学]、赤嶺 (A03-2) [数学]
- ⑬ 「ポリマーネットワーク構造に起因する THz 帯普遍的ダイナミクスの実験・理論研究」 *連携奨励グラント*
森 (A02 公募) [実験]、萩田 (B01 公募) [実験 計算]
- ⑭ 「数学モデル化によるグラフェン特性の予測と材料合成」 *連携奨励グラント*
伊藤 (A03 公募) [実験]、Dechant (総括班インターフェース) [理論]、小谷 (A03-1) [数学]
- ⑮ 「多面体絡み目の形状をもつ化合物の特徴付け」
下川 (A02-1) [数学]、藤田誠氏 (領域外：東京大学) [有機合成] との共同研究

4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

(3 ページ以内)

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。記述に当たっては、**本研究課題により得られたものに厳に限る**こととします。

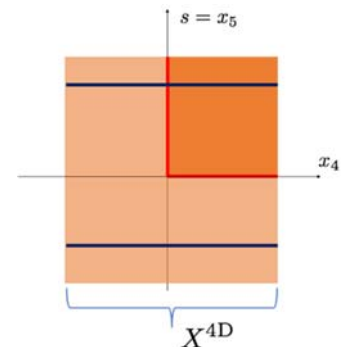
研究項目 A01 トポロジカル物質

A01-1 (計画・古田)

・角のあるドメインウォールと APS 指数定理の関係（APS 指数定理における物理と数学）：A01 公募・深谷と連携

深谷らは、4 次元多様体 X 上の APS 指数に対してエータ不変量を用いる記述を物理学的な考察から見出した。通常の APS 指数定理は X 内の 3 次元多様体のエータ不変量を用いるが、それとは異なる新しいものである。しかし、① 4 次元の中の 3 次元空間をドメインウォールとするこの記述は従来物理で提唱されていた 5 次元の中の 4 次元空間と次元がずれていること、② その議論は APS 指数の新奇な表示を与えるものであったが APS 指数定理が成立する根拠そのものは与えていないことが課題であった。

深谷らとの共同研究により、①②を同時に解決し、さらに APS 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は、さらに 1 次元高い演算子の指数の異なる表現という形で等価であると証明できた。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。Fukaya, Furuta, Matsuo, Onogi, Yamaguchi and Yamashita, “The Atiyah-Patodi-Singer Index Theorem and Domain-Wall Fermion Dirac Operators”, *in preparation*.



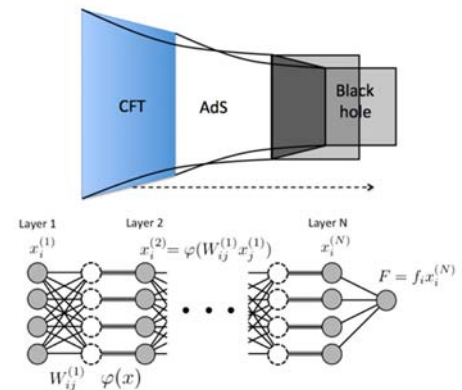
図：APS 指数とドメインウォールによる指数の等価性を示す 5 次元時空の例。ドメインウォールは 4 次元であり、角は 3 次元となる。

A01-2 (計画・橋本)

・深層学習と AdS/CFT 対応

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が、そこでの離散幾何の利用は行われてこなかった。そこで、ホログラフィー原理の創発時空を離散幾何として捉え、ニューラルネットワークと考えることで、深層学習により創発時空を決定するという形の研究展開を行った（右図）。これにより、物質の外場応答などのデータが与えられれば、そこから機械学習により時空を創発し、超弦理論的な描像を得ることに成功した。

K. Hashimoto, S. Sugishita, A. Tanaka, A. Tomiya, “Deep learning and the AdS/CFT correspondence”, *Phys. Rev. D* 98 (2018) 46019.



研究項目 A02 ネットワーク解析による高分子材料

A02-1 (計画・下川)

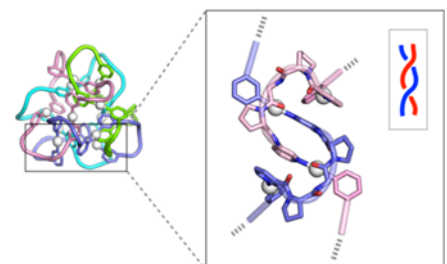
・3 次元トポロジーに基づく静的・動的ネットワークの提案

3 つの絡み合うネットワークと共連続構造の分岐曲面の関連についての基礎的研究を完成し、3 相共連続構造の分類が可能であることを明らかにした。

K. Ishihara, Y. Koda, M. Ozawa and K. Shimokawa, “Neighborhood equivalence for multibranch surfaces in 3-manifolds”, *Topology Appl.* 257 (2019) 11-21.

また、予想しなかった重要な研究展開としてネットワークのトポロジーの分類と多面体の構造の関連が明らかになった。その応用として多面体絡み目の形状をもつ化合物の特徴付けを行い、見た目が異なる場合でも本質的な相違の有無を見極められるようにした（右図）。

T.Sawada, A.Saito, K.Tamiya, K.Shimokawa, Y.Hisada and M. Fujita, “Metal-peptide rings form highly entangled topologically inequivalent frameworks with the same ring- and crossing-numbers”, *Nature Commun.* 10, (2019) 921.

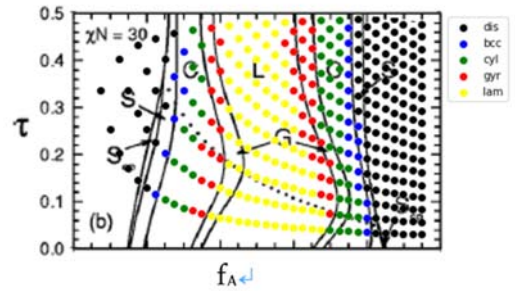


A02-2 (計画・青柳)

・深層学習によるマイクロ相分離構造の分類

機械学習を用いた相分離構造予測と分子構造設計のために、SCF 計算で得られたブロックコポリマーの準安定相分離構造から安定相の構造を予測する事を試みた。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、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できた。

T. Aoyagi, S. Yamanaka, "Prediction of the Stable Morphology of Block Copolymer by using SCF Calculation and Deep Learning" APS March meeting 2019 (Boston, USA).



A02 公募研究には、光刺激による分子鎖切断・再生の制御 (本多: S. Honda et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019)、高分子からみあいの階層的記述 (増淵: Y. Masubuchi, *Macromolecules*, 2018)、外場制御可能な人工原子からなる動的ネットワーク (齋木: K. Esashika, ..., T. Saiki, *Opt. Mater. Expr.*, 2018) など、連携強化につながる成果も多い。

研究項目 A03 極小曲面とナノ構造の動的構造形成

A03-1 (計画・小谷)

・「離散曲面論」「離散極小曲面論」の完成: A03-2 の内藤と連携

与えられたネットワークを離散曲面とみなして、「幾何学的に計算するアルゴリズムの開発」「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の特定」「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。 M.Kotani, H.Naito, T.Ohmori, "Discrete Surface Theory", *CAGD* 58 (2017). 他

・離散曲面上のランダムウォークと連続曲面上の確率過程: (協力者 鈴木)

「調和的な埋め込みによってユークリッド空間上に離散曲面を実現し、細分をとって(連続)曲面へ収束させるときに、離散曲面上のランダムウォークが連続曲面上の確率過程に収束するかどうか」という問題に取り組んだ。これにより、安定性や拡散速度を表す数値モデルの構築と解析、化学工学的な最適構造の提案が可能になった。

K. Suzuki, "Convergence of non-symmetric diffusion processes on RCD spaces", *Calc. Var. Partial. Dif.* 57:120(5), (2018).

・正則グラフの GC 細分とグラフ・ラプラシアン固有値問題: (分担者 楯)

巨大な分子構造の数学的な記述方法として注目されている数学概念である Goldberg-Coxeter(GC)細分について、元々のグラフの固有値により GC 細分の固有値を上から具体的に評価できること、GC 細分列の固有値は任意の実数を近似すること、GC 細分列全てにおいて巨大な重複度を持つ固有値が必ず存在することなどを証明した。また、基礎理論を拡張して量子計算への応用を可能とし、研究項目 A01 との連携に繋がりがつある。

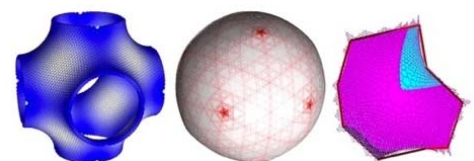
X. Luo, T. Tate, "Up and down Grover walks on simplicial complexes", *Linear Algebra and Its Applications* 545 (2018) 174-206. 他

A03-2 (計画・内藤)

・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 の小谷と連携

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ス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次元グラフェンに代表される負曲率炭素構造を考える際に有意義である。

M.Kotani, H.Naito, C.Tao, "Convergence Theory for subdivided discrete networks", arXiv:1806.03531.



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)

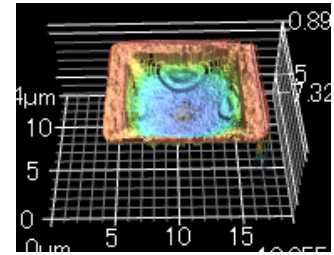
・3次元ネットワークを境界とした極小曲面(プラトー問題)の数値的構成と特異摂動を含む偏微分方程式との対応: A03 公募・小磯と連携

通常はフェーズフィールド法を用いて極小曲面を数値的にとらえることが多い。しかしながら、プラトー問題の場合には境界条件(枠)を与えただけではそのトポロジタイプをアприオリに知ることができない。そこで、A03 公募班の小磯とマルチフェーズフィールド法を与える偏微分方程式の安定な解法を考察し、3次元ディレクレ境界条件下での解析の準備として解の構成が容易な2次元周期境界条件下で数値計算から着手した。

A03-3 (計画・高見)

・マイクロメートルスケールの極小曲面の形成

太さ $1\mu\text{m}$ 、1辺 $10\mu\text{m}$ の立方体状の枠を形成してオレイン酸カリウム水溶液を滴下し、直後に凍結して電子顕微鏡で観察した所、マクロスケールの膜と似た構造が形成されることを確認した。レーザー顕微鏡を用いてこの形状を詳細に調べ(図)、数学的に予測される極小曲面の構造と同様であることを明らかにした。これより、枠の形状を数学で予測して μm で形成できさえすれば、この上に目的とする形状を持つ極小曲面を実現できることを初めて明らかにした。これは、数学と実験との連携により全く新しい材料合成の手がかりとなる。



・界面活性溶液へのナノ粒子の分散

目的とする極小曲面を持つ金属やセラミックス材料を μm スケールで実現するために、界面活性溶液に金属やセラミックスのナノ粒子を分散させることを着想した。そのためには水に良分散するナノ粒子の合成と界面活性水溶液への分散が必要である。酸化ジルコニウムナノ粒子を合成して水溶性ポリマーを含む界面活性水溶液に分散した所、マクロスケールの枠上で酸化ジルコニウムを含むポリマー膜が形成できることを確認した。

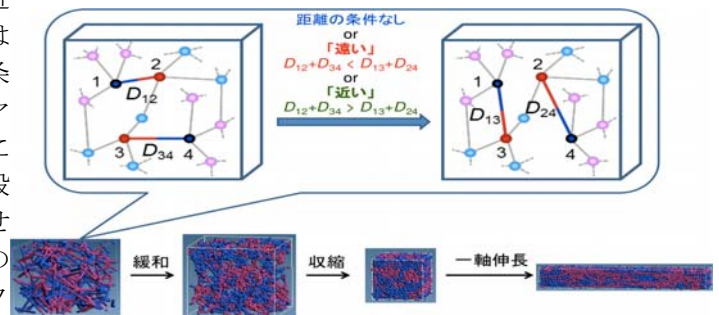
穴あきグラフェンのエッジに異元素ドーピングして触媒活性を上げる (Adv.Sci. 2019) など炭素系材料の創製を得意とする A03 公募班の伊藤は、A03-1, A03-2 の数学的・理論的知見を導入したデザイン法に取り組んでいる。

研究項目 B01 物質・材料科学のための情報科学基盤

B01-1 (計画・大西)

・複雑ネットワーク指標を用いたネットワークポリマーの力学物性の解析

架橋高分子のエントロピー弾性における力学物性は架橋点間の距離にも依存していると考えられるが、ネットワーク指標は基本的にネットワーク構造のみから算出されるため、実空間上の位置や距離の情報を考慮できていない。そこで、架橋点間距離とネットワーク指標の両方がネットワークポリマーの力学物性にどのような影響を与えているかを解析した。現実的なネットワークポリマーに加えて、距離の条件を入れてリンクの張り替えを行い人工的な方法で架橋させたネットワークポリマーも解析した。生成したネットワークポリマーを一軸伸長させて応力-歪曲線と架橋点間距離を観測した結果、「近い」という条件で生成したネットワークポリマーは系全体の伸長に追従できない一方、「遠い」という条件と距離の条件なしで生成したネットワークポリマーは、架橋点間距離が広がることで系全体の伸長に追従して高い応力を示すことを明らかにした。一般のネットワークポリマーにおいても、一軸伸長させた際の架橋点間の広がりや架橋点間距離と中心性の二つに依存することが示され、複雑ネットワーク指標の有用性が示された。

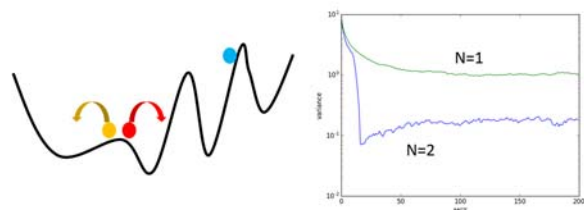


C. Mizokami, T. Ohnishi, "Three State Model for Temporal Network Change Detection", NetSci-X 2018: International School and Conference on Network Science (Paris, France).

B01-2 (計画・一木)

・ラプラス作用素による最適空間分割: A03-2・内藤らと連携

Fleming-Viot 過程と呼ばれる確率過程の定常状態と Dirichlet zero 境界条件を満たすラプラス作用素の基底状態との一致から得られる知見を深化し、非自明な空間分割への応用やその意味について理解を深めた。この成果は画像処理における単なるデータ処理に留まらず、深い数理構造に立脚した普遍性とそこからくる汎用性を持つアルゴリズムの開発につながると期待できる。また、微細エレクトロニクスデバイスのデザインにも応用でき、数理的原理に基づくデバイス設計法として物質の詳細に依らない設計原理を与える方針を開拓しつつある。複数のエージェント粒子を用いて探索することで、最適化を従来手法に比べて格段に高速化することができる点も重要である。一木、坂口、福泉、「基底状態のエネルギーを最小化する空間分割」日本物理学会第 74 回年次大会(2019)。



5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開發表等）（5 ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

- 論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付してください。
- 別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。
- 補助条件に定められたとおり、本研究課題に係り交付を受けて行った研究の成果であることを表示したもの（論文等の場合は謝辞に課題番号を含め記載したもの）について記載したものについては、冒頭に▲を付してください（前項と重複する場合は、「◎▲・・・」と記載してください）。
- 一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

<発表論文>

研究項目 A01 トポロジカル物質

A01-1（計画・古田） 計 15 件（査読有 15 件）

- ▲*Shin Hayashi, “Topological Invariants and Corner States for Hamiltonians on a Three Dimensional Lattice”, *Comm. Math. Phys.*, 364, (2018), 343-356. 査読有

A01-2（計画・橋本） 計 13 件（査読有 13 件）

- ▲*K. Hashimoto, S. Sugishita, A. Tanaka, A. Tomiya, “Deep learning and the AdS/CFT correspondence,” *Phys. Rev. D* 98, (2018) 46019. 査読有
- Shunichiro Kinoshita, *Keiju Murata, Takashi Oka, “Holographic Floquet states II: Floquet condensation of vector mesons in nonequilibrium phase diagram”, *JHEP* 06, (2018) 096. 査読有.

A01（公募・松下） 計 1 件（査読有 1 件）

- ▲*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*, (2019) *in print*. 査読有

A01（公募・相馬） 計 6 件（査読有 6 件）

- ▲D. Takane, Z. Wang, S. Souma, K. Nakayama, T. Nakamura, H. Oinuma, Y. Nakata, H. Iwasawa, C. Cacho, T. Kim, K. Horiba, H. Kumigashira, T. Takahashi, Y. Ando, and *T. Sato, “Observation of Chiral Fermions with a Large Topological Charge and Associated Fermi-Arc Surface States in CoSi”, *Phys. Rev. Lett.* 122, (2019) 076402-1-6. 査読有
- ▲D. Takane, S. Souma, K. Nakayama, T. Nakamura, H. Oinuma, K. Hori, K. Horiba, H. Kumigashira, N. Kimura, T. Takahashi, and *T. Sato, “Observation of a Dirac nodal line in AlB₂”, *Phys. Rev. B* 98, (2018) 041105-1-5. 査読有

A01（公募・桂） 計 8 件（査読有 8 件）

- ▲*Hiroki Kondo, Yutaka Akagi, and Hosho Katsura, “ Z_2 topological invariant for magnon spin Hall systems”, *Phys. Rev. B*, 99, (2019) 041110(R)-1, 6. 査読有
- ▲*Jurriaan Wouters, Hosho Katsura, and Dirk Schuricht, “Exact ground states for interacting Kitaev chains”, *Phys. Rev. B*, 98, (2018). 155119-1, 15. 査読有

A01（公募・石井） 計 2 件（査読有 2 件）

- ▲T. B. Prayitno and *F. Ishii, “Implementation of Generalized Bloch Theorem Using Linear Combination of Pseudo-Atomic Orbitals”, *Journal of the Physical Society of Japan* 87, (2018) 114709-1-114709-9. 査読有
- ▲S. Minami, *F. Ishii, Y.P. Mizuta, and M. Saito, “First-principles study on thermoelectric properties of half-Heusler compounds CoMSb (M=Sc, Ti, V, Cr, and Mn)”, *Appl. Phys. Lett.* 113, (2018) 032403-1-032403-5 査読有

A01（公募・阿波賀） 計 7 件（査読有 6 件、査読無 1 件）

- ▲A. Mizuno, Y. Shuku, *K. Awaga, “Recent Developments in Research of Molecular Spin Gyroids”, *Bull. Chem. Soc. Japan*, *in press*. 査読有

研究項目 A02 ネットワーク解析による高分子材料

A02-1（計画・下川） 計 18 件（査読有 18 件）

- ◎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 (2019) 921. 査読有

2. ▲Kai Ishihara, Yuya Koda, Makoto Ozawa, and *Koya Shimokawa, "Neighborhood equivalence for multibranch surfaces in 3-manifolds", *Topology Appl* 257 (2019) 11-21. 査読有
3. ▲E. Uehara and *T. Deguchi, "Mean-square radius of gyration and the hydrodynamic radius for topological polymers, expressed with graphs evaluated by the method of quaternions revisited", *React. Funct. Polym.*, 133, (2018) 93-102. 査読有
4. ▲K. Kyoda, T. Yamamoto, *Y. Tezuka, "A Programmed Polymer Folding with Periodically-Positioned Tetrafunctional Telechelic Precursors by Cyclic Ammonium Salt Units as Nodal Points", *J. Am. Chem. Soc.*, 査読有

A02-2 (計画・青柳) 計 1 件 (査読有 1 件)

A02 (公募・藤井) 計 2 件 (査読有 2 件)

A02 (公募・山本) 計 2 件 (査読有 2 件)

1. ▲Kyoda, K.; Yamamoto, T.; *Tezuka, Y. A Programmed ESA-CF Polymer Folding with Periodically-Positioned Tetrafunctional Telechelic Precursors, *J. Am. Chem. Soc.* 141, (2019) in press. (peer reviewed) 査読有
2. ▲*Yamamoto, T.; Hosokawa, M.; Nakamura, M.; Sato, S.; Isono, T.; Tajima, K.; Satoh, T.; Sato, M.; Tezuka, Y.; Saeki, A.; Kikkawa, Y. "Synthesis, Isolation, and Properties of All Head-to-Tail Cyclic Poly(3-hexylthiophene): Fully Delocalized Exciton over the Defect-Free Ring Polymer", *Macromolecules*, 51, (2018) 9284–9293. (peer reviewed) 査読有

A02 (公募・森) 計 7 件 (査読有 7 件)

1. ▲*T. Mori, Y. Fujii, "Investigation of universal dynamics of amorphous materials by THz time-domain and low-frequency Raman spectroscopies", *Optical Materials X*, to be published 査読有

A02 (公募・本多) 計 2 件 (査読有 2 件)

1. ▲*Satoshi Honda, Minami Oka, Hideaki Takagi, Taro Toyota, "Topology-Reset Execution: Repeatable Postcyclization Recyclization of Cyclic Polymers", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 58, (2019) 144-148. 査読有

A02 (公募・増淵) 計 5 件 (査読有 5 件)

1. ▲*Yuichi Masubuchi, "Multi-chain slip-spring simulations for branch polymers", *Macromolecules*, 51, (2018) 10184-10193. 査読有
2. ▲*Yuichi Masubuchi and Takashi Uneyama, "Comparison among multi-chain models for entangled polymer dynamics", *Soft Matter*, 14, (2018) 5986-5994. 査読有

A02 (公募・山口) 計 1 件 (査読有 1 件)

A02 (公募・齋木) 計 2 件 (査読有 2 件)

1. ▲*K. Esashika, R. Ishii, S. Tokihiro, and 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", *Opt. Mater. Expr.* 9, (2018) 1667-1677. 査読有

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

A03-1 (計画・小谷) 計 5 件 (査読有 5 件)

1. *K. Suzuki, "Convergence of non-symmetric diffusion processes on RCD spaces", *Calculus of Variations and Partial Differential Equations* 57:120(5), (2018), DOI: <https://doi.org/10.1007/s00526-018-1398-7>

A03-1 (計画・小谷) A03-2 (計画・内藤) 計 1 件 (査読有 1 件)

1. ©▲*M. Kotani, *H. Naito, T. Omori, "A discrete surface theory", *Computer Aided Geometric Design* 58 (2017) 24-54, 査読有

A03 (公募・伊藤) 計 6 件 (査読有 6 件)

1. ▲*Akichika Kumatani, Chiho Miura, Hirota Kuramochi, *Tatsuhiko Ohto, Mitsuru Wakisaka, Yuki Nagata, Hiroki Ida, Yasufumi Takahashi, Kailong Hu, Samuel Jeong, Jun-ichi Fujita, Tomokazu Matsue, *Yoshikazu Ito, "Chemical dopants on edge of holey graphene accelerate electrochemical hydrogen evolution reaction", *Adv. Sci.*, (2019) 1900119. 査読有
2. ▲*Hua-Jun Qiu, Peng Du, Kailong Hu, Jiaojiao Gao, *Huanglong Li, Pan Liu, Toshiaki Ina, Koji Ohara, Yoshikazu Ito, *Mingwei Chen, "Metal and Nonmetal Codoped 3D Nanoporous Graphene for

Efficient Bifunctional Electrocatalysis and Rechargeable Zn-Air Batteries”, *Adv. Mater.*, (2019) *in press*. 査読有

- ▲Kailong Hu, Mingxing Wu, Satoshi Hinokuma, *Tatsuhiko Ohto, Mitsuru Wakisaka, Jun-ichi Fujita, *Yoshikazu Ito, “Boosting Electrochemical Water Splitting via Ternary NiMoCo Hybrid Nanowire Arrays”, *J. Mater. Chem. A*, 7, (2019) 2156-2164. 査読有
- ▲*Kemeng Ji, Jiuhui Han, Akihiko Hirata, Takeshi Fujita, Yuhao Shen, Shoucong Ning, Pan Liu, Hamzeh Kashani, Yuan Tian, *Yoshikazu Ito, Jun-ichi Fujita, *Yutaka Oyama, “Lithium intercalation into bilayer graphene”, *Nat. Comm.*, 10, (2019) 275. 査読有
- ▲Kailong Hu, *Tatsuhiko Ohto, Linghan Chen, Jiuhui Han, Mitsuru Wakisaka, Yuki Nagata, Jun-ichi Fujita, *Yoshikazu Ito, “Graphene Layer Encapsulation of Non-Noble Metal Nanoparticles as Acid-Stable Hydrogen Evolution Catalysts”, *ACS Energy Lett.*, 3, (2018) 1539-1544. 査読有

A03 (公募・小磯) 計2件 (査読有2件)

- ▲*Miyuki Koiso, “Uniqueness for closed embedded non-smooth hypersurfaces with constant anisotropic mean curvature”, *to appear in RIMS Kokyuroku* “偏微分方程式の解の形状解析” (Ed. by Shinya Okabe). 査読有

A03 (公募・安本) 計6件 (査読有3件、査読無3件)

- ▲*W. Rossman, 安本真土, 離散曲面の微分幾何, *preprint* (日本数学会発行『数学』用原稿). 査読無.

A03 (公募・吉川) 計4件 (査読有4件)

- Y. Kamakura, N. Hosono, A. Terashima, S. Kitagawa, H. Yoshikawa, *D. Tanaka, “Atomic Force Microscopy Study of the Influence of the Synthesis Conditions on the Single-Crystal Surface of Interdigitated Metal-Organic Frameworks”, *ChemPhysChem*, 19, (2018) 2134-2138, (Selected as Front Cover) 査読有

研究項目 B01 物質・材料科学のための情報科学基盤

B01-1 (計画・高見) 計1件 (査読有1件)

- ▲*A.A. Litwiniwicz, *S. Takami, S. Asahina, X. Hao, A. Yoko, G. Seong, T. Tomai, *T. Adschiri, “Formation dynamics of mesocrystals composed of organically modified CeO₂ nanoparticles: analogy to a particle formation model”, *CrystEngComm*, *in press*. 査読有

B01-2 (計画・一木) 計3件 (査読有2件、査読無1件)

- *Utako Yamamoto, Hirohiko Imai, Kei Sano, Masayuki Ohzeki, Tetsuya Matsuda, Toshiyuki 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, (2019). pp 1289-, 査読有

B01 (公募・吉田) 計1件 (査読有1件)

- ▲Masahiro Haze, Hung-Hsiang Yang, Kanta Asakawa, Nobuyuki Watanabe, Ryosuke Yamamoto, *Yasuo Yoshida, Yukio Hasegawa, “Bulk ferromagnetic tips for spin-polarized scanning tunneling microscopy”, *Review of Scientific Instruments*, 90, (2019), 013704, 査読有

B01 (公募・辻) 計6件 (査読有6件)

- ▲*Yuta Tsuji, Wataru Hashimoto, *Kazunari Yoshizawa, “Lithium-Richest Phase of Lithium Tetrelides Li₁₇Tt₄ (Tt = Si, Ge, Sn, and Pb) as an Electride”, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, *in press*, (2019) 査読有
- ▲Yuta Tsuji, *Kazunari Yoshizawa, “Effects of electron-phonon coupling on quantum interference in polyenes”, *The Journal of chemical physics*, 149, (2018) 134115, 査読有

B01 (公募・森) 計2件 (査読有2件)

B01 (公募・萩田) 計13件 (査読有13件)

- ▲*K. Hagita, “Two-dimensional scattering patterns of coarse-grained molecular dynamics model of filled polymer gels during uniaxial expansion. *Polymer*”, 166 (2019) 155-168. 査読有
- ▲*K. Hagita, T. Higuchi, H. Jinnai, “Super resolution for asymmetric resolution of FIB-SEM 3D imaging of silica nanoparticles in SBR”. *Scientific Reports*, 8 (2018) 5877. 査読有

総括班 (インターフェース) 計6件 (査読有6件)

- ▲*R. Okugawa, T. Yokoyama, “Topological exceptional surfaces in non-Hermitian systems with parity-time and parity-particle-hole symmetries”, *Physical Review B* 99 (2019). 査読有
- ▲*A. Dechant, “Multidimensional thermodynamic uncertainty relations”, *Journal of Physics a-*

<書籍>

1. 中島千尋 (B01-2 計画) “TEM イメージからの 3 次元ナノポーラス構造の再構成”, 第 22 回結晶工学セミナー『結晶工学×データサイエンス』最先端事例から学ぶクリスタルインフォマティクス 講演概要集, pp51-57, 公益社団法人応用物理学会刊 (ISBN 978-4-86348-650-8).
2. 大石進一 (著, 編集), 荻田武, 柏木雅英, 劉雪峰, 尾崎克久, 山中脩也, 高安亮紀, 関根晃太, 木村拓馬, 市原一裕, 正井秀俊, 森倉悠介, Siegfried M. Rump : (総括班・インターフェース)『精度保証付き数値計算の基礎』全 328 頁、コロナ社 (ISBN 978-4-339-02887-4).

<ホームページ・新聞等>

- ・本領域のホームページ (<https://www.math-materials.jp>)
- ・メディア報道：国内雑誌、新聞掲載等
小谷元子 (総括) : 「現代化学」6 件、週刊ダイヤモンド「数学と材料の紹介」16 件
下川航也 (A02-1 計画) : 科学雑誌「Newton (ニュートン)」2018 年 6 月号で研究を紹介、「ニュートン別冊」数学の世界 図形編に再録 (計 2 件)
辻雄太 (B01 公募) : 『【2019 年の化学】<注目の論文>究極の絶縁分子を創成する』化学 2019 年 (74 巻) 61-62、化学同人、2018 年 12 月 18 日出版

<主催シンポジウム等の状況>

1. 行事名：トポロジカル物質 ワークショップ (A01-1 計画班、A01-2 計画班合同)
実施日：2019 年 1 月 28 日～29 日、場所：大阪大学理学部 H 棟 H709、参加者：約 20 名
2. 行事名：Topological Insulators Workgroup (A01-1 計画班主催)
実施日：2018 年 8 月 13 日～17 日、場所：東北大学 AIMR
3. 行事名：AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics (A03-1 計画班主催)
Organizers: Motoko Kotani (Tohoku University), Andreas Dechant (Tohoku University), Kohei Suzuki (Tohoku University), Yohei Sakurai (Tohoku University)
実施日：2019 年 1 月 7 日～8 日、場所：東北大学 片平キャンパス AIMR 本館 2 階、参加者：約 20 名
URL: <https://sites.google.com/site/wpam2019/home>
4. 行事名：Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers (国際ワークショップ)
組織委員：出口哲生 (お茶の水女子大学)、手塚育志 (東京工業大学)、下川航也 (埼玉大学) (A02-1 計画)
実施日：2017 年 8 月 8 日 (火)～10 日 (木)、
場所：お茶の水女子大学 共通講義棟 2 号館 201 室、参加者：50 名程度
URL: <http://www.rimath.saitama-u.ac.jp/lab.jp/kshimoka/knotsandpolymers2017J.html>
プロシーディングを雑誌 “Reactive and Functional Polymers” から special issue として刊行。
<https://www.sciencedirect.com/journal/reactive-and-functional-polymers/special-issue/10GH5BCJ11V>
(論文 12 編、査読有) アブストラクト集を 100 部作成
5. 行事名：国際シンポジウム「Polymers meet Topology」
世話人：出口哲生 (お茶の水女子大学)、手塚育志 (東京工業大学)、下川航也 (埼玉大学) (A02-1 計画)
実施日：2019 年 1 月 30 日 (水)～2 月 1 日 (金)
場所：東京工業大学蔵前会館ロイヤルブルーホール、参加者：60 名程度
URL: <http://www.rimath.saitama-u.ac.jp/lab.jp/kshimoka/polymersmeettology2019.html>
アブストラクト集を 80 部作成
A02-2 班研究代表者青柳氏、ポスドク山中氏、A02 公募班の山本氏、本多氏が講演
6. 行事名：Mini-Workshop on Geometry and Mathematical Science,
組織委員：安本真土, Wayne Rossman (A03 公募・安本)
実施日：2018 年 7 月 28 日-30 日、場所：Osaka City University、参加者：22 名
7. 行事名：The 12th GEOSOCK Seminar "Geometry of Discrete Surfaces and Applications",
組織委員：太仁田義裕, 後藤竜司, 小磯深幸, Wayne Rossman, 安本真土 (A03 公募・安本)
実施日：2018 年 11 月 11 日、場所：Kyushu University、参加者：13 名
8. 行事名：The 2nd International Conference "Geometry of Submanifolds and Integrable Systems"
組織委員：太仁田義裕, 安本真土, Wayne Rossman, Martin Guest, Young Jin Suh (A03 公募・安本)

実施日：2019年3月22日-26日、場所：Osaka City University、参加者：51名

9. 行事名：The 12th GEOSOCK Seminar "Recent Progress on Willmore Surfaces"

組織委員：太仁田義裕，後藤竜司，小磯深幸，Wayne Rossman，安本真土（A03 公募・安本）

実施日：2019年3月28日、場所：Kobe University、参加者：10名

<アウトリーチ活動>

・記者プレスリリース：5件、メディア報道：37件（海外：8件）、小・中・高向けの講演等：10件

【主だったアウトリーチ活動】

・「出張授業」

小谷元子（総括）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年11月10日

古田幹雄（A01-1 計画）女子中高生講座「数学の魅力 8」、東京大学駒場キャンパス数理科学研究科棟大講義室、2019年3月10日、参加者：105名

・「講演会（サイエンスカフェ）」

正井秀俊（総括）第154回サイエンスカフェ「数学小断～日常に数学を～」、せんだいメディアテーク、2018年7月11日

・「一般向け講演会・セミナー」

赤木和人（総括）、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ゼーション、MathAM-OIL 第3回企業連携ワークショップでの招待講演、東京、2018年12月5日

橋本幸士（A01-2 計画）

・「2018年度日本物理学会科学セミナー」にて招待講演（公開講座「AI（人工知能）と物理学」、タイトル『深層学習と時空』）参加者約150名、2018年8月1日

・「大阪大学サイエンスナイト2018」にて講演『宇宙を支配する数式 素粒子と重力の統一理論を求めて』参加者約150名、2018年5月16日

・「日本物理学会2017年度公開シンポジウム」にて招待講演、量子力学90年『超ひも理論と量子力学の宿題』参加者約100名、2017年12月23日

・「パンフレット」

総括班：News letter「離散幾何と材料」Vol.1 発行、1000部、2018年4月1日

News letter「離散幾何と材料」Vol.2 発行、600部、2018年10月1日

News letter「離散幾何と材料」Vol.3 発行、600部、2019年3月28日

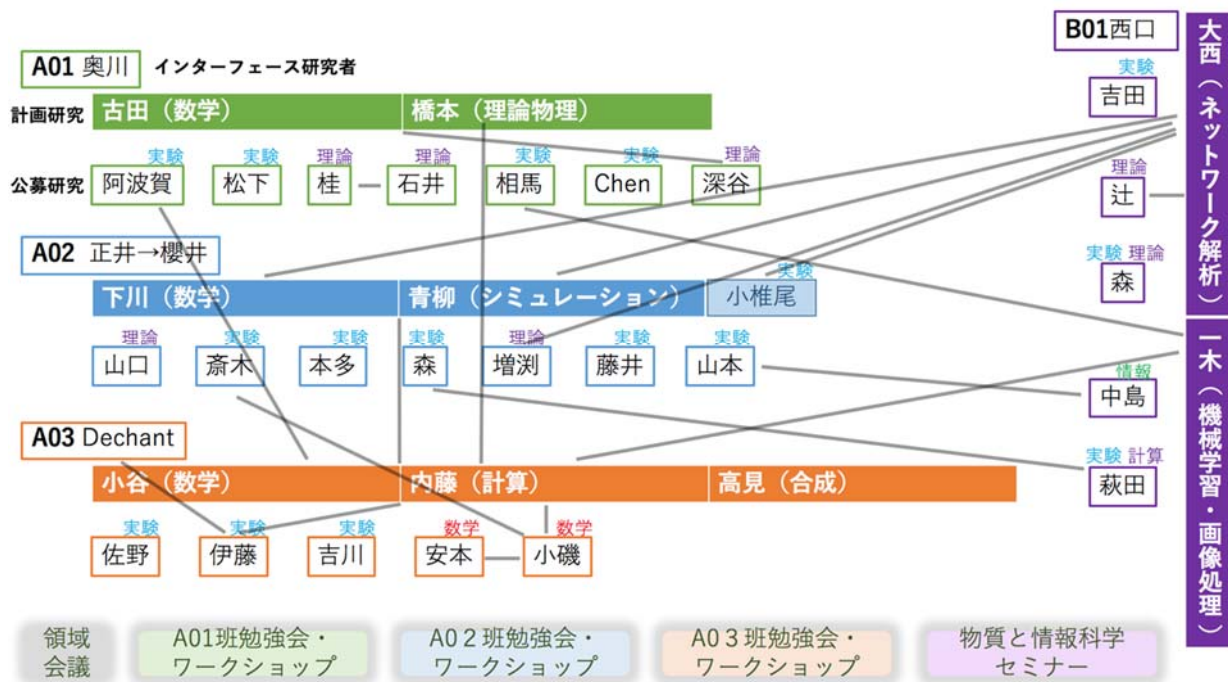
<受賞>

1. 手塚育志（A02-2）：2018年度高分子科学功績賞（高分子学会）
2. 太閔雅之（B01-2）：平成30年度船井学術賞、2019年4月
3. 山本詩子（B01-2）：平成29年度研究奨励賞・阿部賞、日本生体医工学会、2018年6月
4. 一木輝久（B01-2）：第33回（2017年度）電気通信普及財団賞（テレコムシステム技術賞）、2018年3月
5. 山本詩子（B01-2）：2017年度 ISMRM Travel Award（基礎・技師部門1位）日本磁気共鳴医学会、2018年3月
6. 森龍也（A02 公募）：日本セラミックス協会国際交流奨励賞 21世紀記念個人冠賞倉田元治賞
7. 森龍也（A02 公募）：第13回（2019年）日本物理学会若手奨励賞
8. 山口哲生（A02 公募）：日本機械学会計算力学講演会 優秀講演表彰、2019年3月
9. 伊藤良一（A03 公募）：第39回本多記念研究奨励賞
10. Yong P. Chen（A01 公募）：Villum Investigator Award, Apr 2019, The Velux Foundations (DK)
11. 安本真土（A03 公募）：2018年度大阪市立大学数学研究会 特別賞
「離散化された線形ワインガルテン曲面とその変形族の研究」
12. 吉田靖雄（B01 公募）：平成30年度日本表面真空学会 会誌賞（2018.11.20 受賞）
13. 森下和哉（B01 公募）：日本ゴム協会年次大会 ポスター優秀発表賞

6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2 ページ以内）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、研究組織間の連携状況について組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

本領域の研究組織（研究項目毎の分類／計画研究・公募研究）と連携状況の全体像を下図に示す。色分けされた各研究項目は計画研究・公募研究・インターフェース研究者からなり、公募研究については実験・理論・数学・情報の種別を付記した。連携の芽は枚挙にいとまがないため、既に成果が出つつあるものに限って実線で表記している。



全体集会である領域会議に加えて、インターフェース研究者が企画する勉強会やワークショップが研究項目毎に設定され、領域参加者の交流の場となっている。研究項目 B01 による勉強会は「物質と情報科学セミナー」として広く間口を開いた運営を心がけ、項目間連携の誘起を狙った。

実現した共同研究例のうち組織間連携を代表するものを以下に挙げる。

【当初の項目内連携が公募研究により強化されたもの】

「トポロジカル物質における数学と理論の接点」

古田 (A01-1) [数学]、橋本 (A01-2) [理論]、深谷 (A01 公募) [理論]

バルクエッジ対応における角の考察が極めて重要な共通の接点として認識され、他にも複数の公募班を巻き込んで新たな学術領域生成への流れができつつある

「離散曲面の数学理論と物質系としての実現」

小谷 (A03-1) [数学]、内藤 (A03-2) [理論]、高見 (A03-3) [実験]、阿波賀 (A01 公募) [実験]

「離散極小曲面論」の数学理論の構築、物質系としての負曲率構造を想定した離散曲面の細分の考察、数理的な具体例を様々な物質系で実現・検証

【異なる項目間の計画研究連携】

「3次元ネットワークに付随する相分離に関わる三重周期極小曲面とネットワークとの対応」

下川 (A02-1) [数学]、小谷 (A03-1) [数学]、内藤 (A03-2) [理論]

与えられた三重周期極小曲面とそのコアとしてのネットワークの数学的対応を明確にするため、離散幾何解析の手法を用いてコアネットワークの適切な配置を与えるエネルギーに関する研究を実施

「2次元ポアンカレディスクの有界領域に対する適切なメッシュの構成」

内藤 (A03-2) [理論]、橋本 (A01-2) [理論]

従来ほとんど行われてこなかった双曲空間での数値解析に道を開くものであり、材料科学だけでなく純粋

に素粒子物理学においても非常に重要なテーマであることが判明

【B01 計画班の積極的な連携推進によるもの】

「ラプラス作用素による最適空間分割」

内藤 (A03-2) [理論]、一木 (B01-2) [情報]

空間分割問題に絡む数学分野を構築。従来の並列計算とは異なる新たな最適化問題へのアプローチを発見

「トポロジカル超電導の統計的推定」

相馬 (A01 公募) [実験]、一木 (B01-2) [情報]

角度分解光電子スペクトルからトポロジカル超電導であるか否かの判定を統計的推定により高精度で実現
「高分子 3 次元ネットワークの分類と物性相関」

下川 (A02-1) [数学]、青柳 (A02-2) [計算]、大西 (B01-1) [情報]

「複雑ネットワーク指標を用いたネットワークポリマーの力学物性の解析」

増淵 (A02 公募) [理論 計算]、出口 (A02-1) [理論 数学]、天本 (B01-1) [計算]、大西 (B01-1) [情報]

架橋点をノード、高分子鎖をリンクとし、クラスター係数やグラフ密度などのネットワーク指標で解析

「相分離におけるネットワーク構造の解析」

青柳 (A02-2) [計算]、大西 (B01-1) [情報]

粗視化分子動力学シミュレーションで生成される相分離によるネットワーク構造を解析

「分子系ハミルトニアンとグラフ理論」

辻 (B01 公募) [理論]、大西 (B01-1) [情報]

分子のネットワーク構造の隣接行列から電子系のハミルトニアンの固有値を求める手法の開発を支援

【総括班による連携奨励グラントをきっかけとするもの】

「複雑ネットワーク解析に基づく高分子構造-物性の記述」

小椎尾 (総括班) [実験]、天本 (B01-1) [計算]、大西 (B01-1) [情報]

近接中心性を用いる事で不均一なネットワーク構造に特有な弾性の発現機構を理解

「相変換材料工学と微分及び離散幾何学の連携による動的ネットワーク解析並びにナノ及び離散極小曲面論における新しい方法の発見と展開」

小磯 (A03 公募) [数学]、齋木 (A02 公募) [実験]、安本 (A03 公募) [数学]、赤嶺 (A03-2) [数学]

マイクロビーズ系の界面について、新しい動的自由境界問題や曲面の特異点、離散曲面の構造などを解析

「ポリマーネットワーク構造に起因する THz 帯普遍的ダイナミクスの実験・理論研究」

森 (A02 公募) [実験]、萩田 (B01 公募) [実験 計算]

ガラス形成物質の不規則な構造に現れる普遍的な協同ダイナミクスを位相的解析により理解

「数学モデル化によるグラフ特性の予測と材料合成」

伊藤 (A03 公募) [実験]、Dechant (総括班インターフェース) [理論]、小谷 (A03-1) [数学]

グラフエンエッジにおける幾何学的歪みの緩和と異元素ドーパの関係を理解・予測

7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1 ページ以内）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

本領域の構成メンバーに関しては、計画研究代表・公募研究代表を含め全体的に**若手研究者を意識的に多く採用した**。彼らが課題の発見と解決のために領域内で連携しやすい環境を用意することが、数学、理論・計算、実験、情報にまたがる異分野融合人材としての成長につながる。特に数学の専門性を持つ若手研究者、もしくは物質・材料科学のトレーニングを受けた若手研究者が、分野融合の共同研究を通じて、コミュニケーション能力をはぐくみ、従来の研究者とは異なるマインドセットを持つことは重要であるという認識のもとに、若手研究者の育成に注力している。デジタル化社会において、数理能力と専門領域の知識を兼ね備える人材への期待値は高く、そのような人材を輩出することは、本領域の目的の一つでもある。

このような視点から、以下のような取り組みを行っている。

若手育成プログラム。

- (1) 領域内チュートリアル型セミナー A01,A02,A03 企画勉強会・ワークショップ、B01 による「物質と情報科学セミナー」、「物質と幾何学セミナー」
- (2) 国際アドバイザーによる集中講義、若手発表会を通じてのアドバイス
- (3) スタディ・グループ (PBL) 2019年8月に予定

インターフェース研究者の配置

学位を取って日の浅い研究者を採用し、研究項目 A01, A02, A03, B01 にそれぞれアサインしている。彼らの役割は異なる分野のメンバー間の意思疎通を助け、自らも連携研究のプレーヤーになることである。具体的には、以下の活動に取り組んでいる。

- (1) 勉強会や班会議の企画を担当し、領域メンバー間の研究接点をコーディネートする。
- (2) ニュースレターの作成を通して、多くの領域メンバーと個人的な面識を得つつ異分野の研究を伝える
- (3) 海外のスクールに参加して内外の研究動向を調査報告する

総括班による共通機器、共通情報基盤の提供

若手研究者にとって貴重な予算・時間・機会を有効に利用するために、以下の環境を用意した。

- (1) 利便性の高い測定機材（レーザー顕微鏡）を東北大 AIMR に設置した。領域に所属する研究者は測定のために AIMR を訪れた際にインターフェース研究者と情報交換を行う機会ともした。
- (2) 利便性の高い計算サーバや機械学習用環境を導入して、煩雑な導入作業／メンテナンスや高価なソフトウェアの購入に悩まされず、リモートから気軽にアイデアを試せる環境を整備した。
- (3) 「数学的な具体系」の座標データや物質系のシミュレーションデータなどを手軽かつ安全に蓄積・共有できる環境を整備した。
- (4) オンラインソフトウェアや教科書的な電子書籍を共用できるように整備した。

これらの結果、当初の目的どおりに時代の要請にかなう高い専門性と異分野融合の経験をもつ人材が育成され、領域がスタートしてまだ2年ではあるが、すでにいくつものプロモーションが報告されている。

8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1 ページ以内）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

○ 共有インフラの整備

若手研究者が貴重な予算・時間・機会を有効利用できるように、また領域内での連携研究の母体となるバーチャルラボの形成が進むように、総括班として計算機システムと測定装置の導入・運用を行なっている。

(1) 計算機システム

近年は商用・フリーを問わず研究に役立つソフトウェアが数多く入手でき、ちょっとしたアイデアを試すためにシミュレーションや数理解析を行うことが容易になってきた。総括班として、ネット経由でアクセス可能な高性能サーバ6台からなる計算機クラスタを導入・管理し、有用なソフトウェアのインストール・更新を行うことで、領域全体の予算と研究者の時間を有効に利用できるようにした。高価な商用コンパイラを核とする開発環境、ポピュラーな分子動力学ソフト、電子状態計算ソフト、数式処理ソフト、画像処理ソフト、さらに東北大学 AIMR で開発した材料科学用パーシステント・ホモロジー計算ソフト「HomCloud」まで、ユーザの要望に応じて導入を進めた。機械学習を気軽に試せるライブラリ群や GPU 型アクセラレータも用意した。バッチ型ではなく対話型の環境を提供して利便性を高くしており、既に 11 名のアクティブユーザを抱えている。

また、この計算機システムは領域内でデータを蓄積・共有を促す目的でも運用している。数学の研究者が生成した具体例の座標データや高分子系の分子動力学シミュレーションのデータ、実験の顕微画像データなどを簡単にアップロード・分類できる仕組みと、それを計算サーバに移して別のシミュレーションや解析を行いやすくする仕組みを導入した。上記の計算環境とデータの共有による連携研究の促進を目指している。

(2) 測定装置

利便性の高いレーザー顕微鏡（キーエンス社製）を東北大学 AIMR に導入した。レーザー顕微鏡の空間分解能的は表面形状解析に一般的に用いられている原子間顕微鏡に次ぐレベルのものであるが、カンチレバーを用いる原子間力顕微鏡に比べて操作が各段に簡便であり、より広い領域を短時間で測定できる特徴を備えるため、本新学術領域における物質の 3 次元形状測定・解析に適している。例えば、オレイン酸カリウム水溶液を微細加工した立方体状の枠に滴下することでマイクロメートルスケールの極小曲面が形成される様子を直接観察し、数学的に予測されている極小曲面と同様の構造が得られることを確認できた。また、操作が容易であり熟練を必要としないことから、理論研究者が測定に参画することも可能で、実験研究者、数学・理論研究者、インターフェース研究者間で議論を深めることができる。今後、このレーザー顕微鏡を活かした研究者間の交流や共同研究がより加速する施策を推進する。

○ インターフェース研究者の導入

学位を取って日の浅い若手研究者 4 名を研究項目 A01, A02, A03, B01 にそれぞれに割り当て、次世代のリーダーとして育成している。彼らの役割は (1)研究項目内での会議や勉強会を企画&実施、(2)領域のニュースレターの編集&発行、(3)内外の集会での学際的研究の流れを情報収集、(4)プレーヤーとして自身の研究と連携研究を推進、することであり領域全体の活性化に大いに寄与している。

○ 国際活動支援

H29, H30 年度の活動は、国外の集会での情報収集や一部の戦略的連携機関での滞在研究、国内のワークショップへの招聘が主であった。H31 年度以降は、戦略的連携機関との幅広い連携強化や国際シンポジウム開催などの活性化策を用意している。

○ 連携推進奨励費の導入

複数の研究項目に跨る活動を対象に、打ち合わせ旅費や成果発表費用をサポートした（H30 年度は 30 万円×4 件）。前述のように、これによる連携研究の成果も出始めている。

○ 領域ホームページとメーリングリストの整備

本領域のサイト (<https://www.math-materials.jp>) を立ち上げて社会や内外の専門家に向けた情報の発信を行い、領域内の情報伝達とバーチャルラボ活動をサポートするメーリングリストを整備した。

9. 総括班評価者による評価（2 ページ以内）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

坪井 俊（武蔵野大学・工学部数理工学科・特任教授、東京大学名誉教授）

当該領域は 2017 年度後半に開始されているが、わずか1年半という短期間に研究期間終了までにさらに力強く新領域が開拓されることを予見させる研究成果と研究チーム形成がなされていることが納得できる。そう判断する理由は以下の点である。

- トポロジカル物質の発見は 20 世紀中盤のベクトル束の分類理論の対応物の物理理論・実験の側から再発見とみられ、位相的 K 理論、アティヤ・帕特ディ・シンガーの指数定理の 20 世紀後半から 21 世紀にかけての研究の進展が、材料科学において新たな応用を見出すことが期待されるものであった。A01-1 古田班では、コーナーのあるドメインウォールを設定してこれに関する指数定理を定式化し、このことは公募研究者の物理的考察を指示できることを示している。問題設定が物理的に示唆され、それを数学的に解明するというプロセスが実際に行われ、協力のもとで大きな成果が得られている。
- 今世紀初めの 3 次元トポロジーにおけるサーストンプログラムの解決以降、3 次元多様体の研究においてはより具体的な空間グラフ（ネットワーク）や分岐曲面の研究が重要になっている。空間グラフや分岐曲面の変形の問題は、表現論や他の数学分野との関係でも重要な研究課題となっている。このような中で、A02-1 下川班で数学的研究を進展させるとともに、A02-2 青柳班により機械学習も導入したシミュレーションを行いネットワーク構造の物性を明らかにしてきており、提案された物質が実験的に検証されることが期待できる状態になっている。
- 数学では離散的有限的な問題をより扱いやすい連続的無限的な問題に置き換えて解析することが重要な手段であるが、実際どのくらいの精度で解析が適用できるかということは今回の新学術領域研究における数学側の課題である。現実の物質は離散性と連続性を兼ね備えるものであろうから、この部分での研究の進展は材料科学にとどまらない重要性を持つと考えられる。A03-1 小谷班、A03-2 内藤班、A03-3 高見班の連携によるメッシュ構造の収束やこれにかかわる実験成果は、公募により参加している阿波賀氏、伊藤氏のような実験研究者との緊密な交流の下で着実な成果をあげている。

以上は、専門とする数学から見た本新学術領域研究のこれまでの成果に対する所見である。このような重要な成果とともにこの新学術領域が数学コミュニティに対する健全な影響を与えていることも付記したい。このような新学術領域の形成に日本を代表する数学者が参画していることは、今世紀になって世界的な規模で広まっている様々な分野への応用とともに発展していくという数学の姿が、日本でも動き出したことを数学・数理科学の研究者に納得させるものとなった。今後もここで創成される領域のように、数学・数理科学と諸学術分野の融合による新領域が立ち上がっていくことも期待させるものである。

常行 真司（東京大学・理学系研究科・教授）

世界的な数学者である本領域代表は、東北大学 WPI-AIMR の拠点長として、数学と材料科学を結びつけることに強い意志とリーダーシップを持って取り組み、成果を上げてきた。ここまでは基本的に東北大学としての取り組みであったが、本領域では広く全国の数学者、数理物理学者、計算科学者、実験研究者を巻き込み、数学と材料科学をつなぐ新しい学問領域の確立という、まさに新学術領域にふさわしいテーマに取り組んでいる。トポロジカル系、動的ネットワーク構造、極小曲面といった、数学者も材料科学者も興味をもつキーワードを取り上げ、超弦理論の研究者のようなベクトルの異なる研究者も巻き込んで、うまく領域が設定されている。実際すでに、これまではない新しい研究が育ち始めており、領域の発展が大いに期待できる。

AIMR では、大学の同じキャンパス内に研究者が集うことで、物理的にもアンダーワンルーフの研究環境が整えられたが、新学術領域ではそのような境界条件が無いことは、数学と材料をつなぐという目的に照らして、運営上の困難をもたらすと予想される。またこれは領域側ではなく審査側の問題であるが、材料創製を担当するはずだった計画研究 2 件が採択されなかったことは、本新学術領域にとって大きな痛手であった。この 2 つは、本領域が乗り越えるべき基本的な組織上の困難である。

前者の問題については、機動的にメンバー間をつなぐ役割をになう若手の「インターフェース研究者」を置いたことが、一定の対策になっていると思われ、大変興味深い試みであると感じている。本領域終了時に、それが領域に与えた効果や、インターフェース研究者自身が研究者としてどのように成長したかに注目したい。それ以外には、領域メンバーが集う機会として、班内の企画勉強会・ワークショップ、セミナー、国際アドバイザーに

よる集中講義などが企画されている。ただ活動記録を見る限り、やや単発で範囲が狭く、班内やすでに交流のあるメンバーに閉じた印象がある。もともと参加する学会の異なる研究者が集まる領域であるので、多少無理をしてでも全員が顔を合わせる機会を増やすことが必要かもしれない。

後者の問題については、公募研究で実験系の研究者を多く採択することにより、ある程度リカバーを試みている点を評価したい。公募研究は2年間しかないため、その期間内にどこまで連携がすすみ、本新学術領域らしい新しい研究が育つかが問題であろう。そのためにも、やはり計画研究と公募研究の研究者が顔を合わせる機会を増やすことが重要である。また計画研究と公募研究の橋渡しの面でも、インターフェース研究者の活躍に期待したい。

最後に広報についてコメントしておきたい。新学術領域における広報活動の主な役割は、成果を外部に発信することであるが、本領域の場合は領域内も対象として、材料研究の内容を数学者に、数学研究の内容を材料研究者に伝えることも重要である。そのようなインタープリタとしての能力をもつ研究者が本領域の中で自然に育ち、本領域が作る学術領域の定着に寄与することを期待する。

塚田 捷（東京大学名誉教授）

本新学術領域は、離散幾何学と呼ばれる純粋数学の視点や方法論を、物質・材料科学の分野に導入し、また一方では、それらの分野に触発された数学における新しい方向と課題とを探索することを目標としている。従来、これらの異領域の研究者が協働できる問題を議論し合うことは稀有のことであったし、研究上のコンセプト、用いる方法論、学術用語も非常に異なるものであった。しかし、もしこれら異分野の研究者が出会い協働する機会が与えられたなら、多彩で実り豊かな学際的研究が開花する可能性は極めて高い。

A01-1 では、公募班との交流の結果、研究目標を当初のものから「トポロジカル物質を記述する枠組間の相互関連を解明する理論の構築」に変更したが、これは現実的で有効な判断と思われる。角のあるドメインウォールと APS 指数定理の関係について新しい知見を得るなど、すでに特筆すべき成果をあげている。様々な社会現象、自然現象と関係するマグニチュードホモロジーの理論展開も普遍的で意義のある研究と思われる。A01-2 ではニューラルネットワークに離散幾何学的な方法を取り入れて超弦理論における曲がった時空を決める問題が考究されたが、これは超弦理論の物質研究を取り扱う有効な方法論になると思われる。

A02-1 班は3次元トポロジーに基づく研究を行い、ネットワークと共連続構造の分岐曲面の関連について成果をあげた。領域外部の藤田グループと、多面体の絡目の特徴付けについて共同研究を開始したことに期待したい。A02-2 では、ダブルジャイロイド相分離構造の弾性挙動を解析し応力-ひずみ曲線を得たが、これは興味ある成功例である。また深層学習によるマイクロ相分離構造の分類も興味ある展開であり、今後の発展が期待できる。

A03-1, A03-2 グループのナノ構造における極小曲面を対象とした数学的研究は、立体グラフェンなど負曲率炭素構造を探る有効な手段となると思われる。合成実験の公募班との協働研究を行っていることは有意義であり成果を期待したい。マルチフェーズフィールド法偏微分方程式の安定解法を公募班と共同して研究し、成果を得ていることも評価できる。実験班 A03-3 でマクロスケールのもものと類似したマイクロ膜構造が形成されたことは、本領域の目的にそった進展である。

B01-1 は「ネットワーク」というキーワードによって、領域内の多様な研究を結びつける普遍原理を探るという重要な役割を担う。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など、領域内での協働研究が良好な成果を挙げつつあることを、高く評価したい。B01-2 班の役割は実験計測画像から機能を推定するための情報科学的方法論を開発することである。物質・材料科学者との協働はもちろん、手法の基礎となる理論の構築には数学との協働が有効であると思われる。多数の共同研究が活発に推進されており、特筆すべき成果も多い。

純粋数学と物質・材料科学とは、従来、かなり異質なものであり、両者が協力する機会は、特に我が国においては極めてまれなことであった。本領域ではトポロジー、高分子、極小曲面という3つの主項目を選択・集中することによって分野間協働研究の場を設定し、パイオニア的な研究者を結集することに成功し、活発な協働研究を開始して有意義な成果を上げ始めている。理論研究者ばかりでなく、多くの実験研究者が参加して実質的な共同研究が進められていることは、本領域の目的にかなうものであり評価できる。また、情報科学の研究グループは本領域の進展にとって極めて重要な寄与を果たしており、今後も活発な研究が行われることに期待したい。その意味でもトポロジー、高分子、極小曲面の分野を横断し、情報分野を加えた領域全体として自由な発想と活発な意見交換を目的とした全分野横断研究会・交流会の様なものを、できれば若手研究者のイニシアティブによって、より高い頻度で開催することを推奨したい。

10. 今後の研究領域の推進方策（2 ページ以内）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

領域全体の達成目標：数学、物質・材料科学、計算科学（情報科学）にまたがる新学術領域を創成する。これまで出会いの機会が少なかった数学と物質・材料科学が連携する場を提供することで、データ駆動社会に適う物質探索の共通基盤を形成するとともに、これらの課題から触発を受け、離散幾何解析学を革新する。総括班評価者からの評価意見を踏まえて、今後の推進方策を以下のように考えている。

【領域全体の推進方策】

この目標の実現のため、2年間で体制の整備を行った。また、「2. 研究の進展状況」で説明したとおり、計画研究においては、各研究項目において課題が明確で数学と物質・材料科学の連携の道筋が見えているものを設置し、数学・理論・実験の垂直展開を目指したが、当初の計画を順調に実現し、予想外の展開の種もいくつか産まれている。公募研究が加わることで多様なアイデアや手法が導入され、対象となる物質が広がった。総括班評価者から「従来、これらの異領域の研究者が協働できる問題を議論し合うことは稀有のことであったし、研究上のコンセプト、用いる方法論、学術用語も非常に異なるものであった。しかし、もしこれら異分野の研究者が出会い協働する機会が与えられたなら、多彩で実り豊かな学際的研究が開花する可能性は極めて高い。」「多少無理をしてでも全員が顔を合わせる機会を増やすことが必要」というコメントを頂いた。また、「インタープリタとしての能力をもつ研究者が本領域の中で自然に育ち、本領域が作る学術領域の定着に寄与することを期待する」これを踏まえて、今後はこれまで以上にそのような機会を増やしていく。

領域の一体化による新学術の創出を確実に行うために今後は、**a.項目ごとの成果の充実（垂直展開）、b.水平展開による領域の成熟と統合、c.情報発信強化、d.国際ネットワークの確立、e.若手リーダーの育成**にこれまで以上に重点を置く。

<a.項目ごとの成果の充実（垂直展開）、b.水平展開による領域の成熟と統合>

a と b の実現のために、総括班では、これまで以上に頻繁に、領域会議、総括班会議、各項目のワークショップ、勉強会を企画・開催するとともに、チーム間、項目間の連携研究を更に活発にするための、連携推進支援を行う。2年間の成果を評価し研究戦略を再設定する。これまでの成果を踏まえてこれを成熟させるとともに、項目を超える水平展開をさらに活発化し、広範な材料系にわたる連携を活性化することで、領域としての成熟と統合を図る。前半に実施し効果のあった「**連携推進奨励費**」を継続する。公募研究の成果継続発展できる **OB を含む領域交流会**を設置するとともに、計画研究・公募研究で生じた萌芽を育てるために必要性の見えてきた新たな手法やアイデアを後半2年の公募研究として採択する（900万円5件、300万円15件程度）。

<c.情報発信強化、d.国際ネットワークの確立>

c と d の実現のために、総括班は「研究戦略企画室」「領域研究推進室」「国際活動支援班」の機能を更に高める。特に、国際活動をより活発化し、戦略的連携機関（ケンブリッジ大学、オーストラリア国立大学、ベルリン自由大学、UCSB、清華大学）や国際アドバイザーとの協力のもと、ジョイント・ワークショップや国際研究集会開催により、領域からの成果発信とネットワーク形成、国際共同研究へと推し進める。また、数学から材料科学者へ、材料科学から数学者へのシーズ・ニーズを発信できるプラットフォームを構築する。企業や社会への情報発信を行う。

年次計画は以下のとおりである（総括班報告書より一部抜粋）

- ・令和元年 ①領域ワークショップ・勉強会における連携研究の深化と更なる連携の発掘、②E-MRS-IUMRS（ヨーロッパ材料研究学会と国際材料研究連合同の国際研究集会、領域代表者が **Conference Chair** の一人）や **Materials Research Meeting**（日本 MRS30 周年記念国際研究集会）やフォーラムにおける領域シンポジウム開催、物性系領域合同研究会の参画により、国際的に著名な研究者の招聘、領域参画研究者の成果発表の機会を積極的に設けて、領域の強化を目指す。前期公募研究の2年目であるので、公募研究発表会・交流会を行ってそのシーズを把握・評価し、継続的な研究推進を図る。
- ・令和2年、新たな発想や手法、応用を取り入れるとともに、前期公募研究実施者も交えた領域会議・交流会を行い、領域の成熟を図る。国際共同研究を推進するためのジョイント・ワークショップを開催する。また、国際アドバイザー・ボードを、領域ワークショップと連動で開催して研究進捗を評価いただき、研

究計画の見直しと絞り込みを行う。若手交流会を開催する。

・令和3年 最終年度であるので、これまでの成果をとりまとめ、国際研究集会を開催し成果を発表する。また領域活動で得られたデータを整理・保管し、発展研究や数学材料連携研究のシーズ・ニーズ情報提供のプラットフォームとして活用できるように整備する。

研究成果は速やかに国際研究集会発表、論文・総説の国際学術誌への発表などにより、研究コミュニティに発信する。領域のホームページを拡充し、専門家向けに成果を迅速に発信したりアーカイブしたりするだけでなく、一般向けの分かりやすい解説や SSH やサイエンスカフェを通じて、高校生や市民に情報発信していく。

領域代表者が編集責任者を務める Springer Briefs in the Mathematics of Materials からモノグラフ形式でのサーベイ論文を出版する。

企業を対象とするセミナーやチュートリアル、コンサルテーションなど情報共有の機会を設ける。UCLA の Institute for Pure and Applied Mathematics (IPAM) と共同で、企業がスポンサーとなり企業の問題を提供する PBL タイプのサマースクール G-RIPS を日米合同で開催する（トヨタ、NEC、富士通が参画）。

<e.若手リーダーの育成>

「7. 若手研究者の育成に係る取組状況」で述べたように本領域の重要な目標である。若手育成プログラムを充実するとともに、総括班による共通機器、共通情報基盤の提供により、若手研究者が挑戦的な研究を推進する環境を提供する。インターフェース研究員および領域にかかわる若手研究者を領域リーダーとして育成し、キャリア形成を支援する。