

平成 30 年 5 月 22 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2012～2016

課題番号：24244004

研究課題名(和文)量子スピン系の離散幾何解析学

研究課題名(英文)Discrete Geometric Analysis for Quantum Spin System

研究代表者

小谷 元子(Kotani, Motoko)

東北大学・理学研究科・教授

研究者番号：50230024

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 35,300,000円

研究成果の概要(和文)：物性物理における基本的な研究題材である電気伝導性、特に電子のもつスピンに注目し波動関数のなすバンド構造のトポロジカルな性質であるトポロジカル絶縁体とその表面流について、無秩序系を含む定式化を非可換幾何学の枠組みで構成した。量子ウォークや、カーボンナノチューブにおける物性研究を行うために、離散曲面論を構築し、離散データから連続体の幾何学を抽出する方法を考察した。これによりミクロ構造とマクロ物性の関係を解明する方向性を見出した。

研究成果の概要(英文)：We study mathematical framework for Quantum spin system. Physics on topological Insulator and topologically protected surface/edge state is formulated in K-theory. By using the non-commutative geometry, we generalized it to disordered systems. We also develop discrete surface theory to study the relation of microscopic structural data and macroscopic properties and apply it to carbon networks.

研究分野：幾何学、離散幾何解析学

キーワード：幾何学 離散幾何学 スペクトル解析 スピン系

1. 研究開始当初の背景

物性物理における基本的な性質は様々な環境設定における電気伝導性であり、対応するハミルトニアンの特異値構造によって決定される。近年の中心的な課題は、電子のスピントロニクス(スピン+エレクトロニクス)であり、特に、波動関数のなすバンド構造のトポロジカルな性質が伝導性・絶縁性を決定するトポロジカル絶縁体は、環境変化に対して安定的かつエネルギー変換効率が非常に高い新物質として注目を集めている。これらの物性物理研究において真の意味で物質の幾何構造を取り込むための数学的枠組みが強く求められている。

2. 研究の目的

量子スピン系の離散幾何解析学の理論構築と展開を行う。より具体的には、トポロジーで保護された表面状態とバルクの幾何構造をより一般的な枠組みで関係づけるための幾何学理論を構築する。時に秩序系から無秩序系への展開や、離散的なネットワーク構造の幾何を取り込んだトポロジカル相の研究や、そのための離散幾何学の構築を目指す。

3. 研究の方法

研究代表者 小谷を中心に、分担者 熊谷隆、塩谷隆、連携研究者 尾畑伸明、楯辰哉、宮岡礼子と緊密に連絡をとりつつ研究を進めた。海外動向調査を含め情報収集と発信に努めた。すべての研究を小谷の指揮のもとに遂行したが、分担者は責任テーマのとりまとめを行った。離散距離空間の幾何学、スペクトル幾何学、非可換幾何学、トポロジーの知識を適用することで、量子スピン系の離散幾何解析学を展開した。

4. 研究成果

物性物理における基本的な研究題材である電気伝導性、特に電子のもつスピンに注目し波動関数のなすバンド構造のトポロジカルな性質であるトポロジカル絶縁体とその表面流について、無秩序系を含む定式化を非可換幾何学の枠組みで構成した。量子ウォークや、カーボンナノチューブにおける物性研究を行うために、離散曲面論を構築し、離散データから連続体の幾何学を抽出する方法を考察した。これによりミクロ構造とマクロ物性の関係を解明する方向性を見出した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 62 件)

Xin Luo and Tatsuya Tate, Up and down Grover walks on simplicial complexes, *Linear Algebra and its Applications*, 545, 2018, 174-206, 査読あり, <https://doi.org/10.1016/j.laa.2018.01.036>

Motoko Kotani, Hisashi Naito, Toshiki Omori, A discrete surface theory, *Computer Aided Geometric Design*, 査読あり, 58, 24-54, 2017, <https://doi.org/10.1016/j.cagd.2017.09.002>

D.A. Croydon, B.M. Hambly and T. Kumagai, Time-changes of stochastic processes associated with resistance forms, *Electron. J. Probab.*, 査読あり, 22, no.82, 2017, 1-41, 10.1214/17-EJP99

M.T. Barlow, D.A. Croydon and T. Kumagai, Subsequential scaling limits of simple random walk on the two-dimensional uniform spanning tree, *Ann. Probab.*, 45, no.1, 2017, 4-55, 査読あり, 10.1214/15-AOP1030

R. Huang and T. Kumagai, Stability and instability of Gaussian heat kernel estimates for random walks among time-dependent conductances, *Electron. Commun. Probab.*, Vol. 21, 2016, paper no. 5, 1-11, 査読あり, 10.1214/15-ECP4347

Nobuaki Obata, Quantum probability aspects to lexicographic and strong products of graphs, *Interdiscip. Inform.Sci*, 22(1), 査読あり, 2016, 143-146, 10.4036/iis.2016.S.1

Sarkar, Parantap; Sun, Zhe; Tokuhira, Toshiki; Kotani, Motoko; Sato, Sota; Isobe, Hiroyuki, Stereoisomerism in nanohoops with heterogeneous biaryl linkages of E/Z- and R/S-geometries, *ACS Cent. Sci.*, 査読あり, 2 (10), 740-747, 2016, 10.1021/acs

centsci.6b00240

Motoko Kotani and Susumu Ikeda, Materials inspired by mathematics, Science and Technology of Advanced Materials (STAM), 査読あり, 17(1), 253-259, 2016, <https://doi.org/10.1080/14686996.2016.1180233>

Zhe Sun, Takuya Suenaga, Parantap Sarkar, Sota Sato, Motoko Kotani, Hiroyuki Isobe, Stereoisomerism, crystal structures, and dynamics of belt-shaped cyclonaphthylenes, Proc Natl Acad Sci U S A., 査読あり, 113(29), 8109-8114, 2016, <https://doi.org/10.1073/pnas.1606530113>

Shioya, Takashi, Concentration, convergence, and dissipation of spaces, Geometry and topology of manifolds, Springer Proc. Math. Stat., 査読あり, 154, 2016, 299-314, 10.1007/978-4-431-56021-0_16

Takeshi Fujita, Koji Ohara, Keiji Miura, Akihiko Hirata, Motoko Kotani, Yasumasa Nishiura, Mingwei Chen, Visualization of topological landscape in shear-flow dynamics of amorphous solids, EPL (Europhysics Letters), 査読あり, 110, 2015, 38002-38002, 10.1209/0295-5075/110/38002

Ikeda, Susumu, Kotani, Motoko, A new direction in mathematics for materials science, Springer Briefs in the Mathematics of Materials, 査読あり, Vol.1, 2015, 1-86, 10.1007/978-4-431-55864-4

Z.-Q. Chen, D.A. Croydon and T. Kumagai, Quenched invariance principles for random walks and elliptic diffusions in random media with boundary, Ann. Probab., 査読あり, 2015, 43巻 no.4, 1594-1642

Taisuke Matsuno, Hisashi Naito, Sunpei Hitotsugi, Sota Sato, Motoko Kotani and Hiroyuki Isobe, Geometric measures of finite carbon nanotube molecules: A proposal for length index and filling indexes, Pure and Applied Chemistry, 査読あり, 86巻, 489-495 2014, 10.1515/pac-2014-5006

Motoko Kotani, Hermann Schultz-Baldes, Carlos Villegas-Blas, Quantization of interface currents, Journal of Mathematical Physics, 査読あり, 55(12), 1219011-9, 2014, 10.1063/1.4902377

Makoto Tagami, Yunye Liang, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe, Motoko Kotani, Negatively curved cubic carbon crystals with octahedral symmetry, Carbon, 査読あり, 76巻, 266-274, 2014, 10.1016/j.carbon.2014.04.077

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

Tatsuya Tate, An algebraic structure for one-dimensional quantum walks and a new proof of the weak limit theorem, Infinite Dimensional Analysis, Quantum Probability and Related Topics, 査読あり, 16巻 (no.2), 1-12, 2013, 10.1142/S0219025713500185

Tatsuya Tate, The Hamiltonians Generating One-Dimensional Discrete-Time Quantum Walks, Interdisciplinary Information Sciences, 査読あり, 19巻, 2号, 1499-156, 2013, 10.4036/iis.2013.149

Makoto Tagami, Yunye Liang, Yoshiyu

ki Kawazoe and Motoko Kotani, New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8-12 Atoms Found by the Method of Euclidean Designs, Materials Transactions, 査読あり, 53 巻, 459-462, 2012, 10.2320/matertrans. N-M2011859

[学会発表](計 157 件)

小谷 元子, Mathematical Challenge to a New Phase of Materials Science, Workshop on nonlinear partial differential equations and related topics, 2016 年

Motoko Kotani, Mathematical challenge for materials research at AIMR, International Conference on Mathematics and Mathematics Education (ICME) 2016, 2016

小谷 元子, 数学と材料科学の連携の
もたらす未来 東北大学原子分子材料
科学高等研究機構 (AIMR) における実験
, 俯瞰ワークショップ ナノテクノ
ロジー・材料分野領域別分科会 全体会
議「研究開発力強化に向けた施策間連
携」, 2016

Motoko Kotani, Topology in Materials, IGA/AMSI Workshop Topological Matter, Strings, K-theory and related areas, 2016

Motoko Kotani, A mathematical challenge to material, GEMS 2016: Geometry and Materials Science, 2016

Motoko Kotani, Structure understanding of materials by discrete geometric analysis, Stochastic Analysis and Large Scale Interacting Systems, 2017

Motoko Kotani, Structure understanding of materials by discrete geometric analysis, Novel Optical Materia

ls, 2017

小谷 元子, 数学による構造・機能相関の解明, 17-1 ポリマーフロンティア 21, 2017

Kotani, Motoko, Structure understanding of materials by discrete geometric analysis, International Workshop on Industrial Mathematics, 2017

Motoko Kotani, Mathematical Challenge to Understanding of Material, International Conference on Research and Education in Mathematics 2017 (ICREM8), 2017

Motoko Kotani, Discrete surface theory for trivalent graphs and its application to materials science, Geometry Workshop in Obergurgl 2017, 2017

小谷 元子, 数学から材料科学へのアプローチ, シンポジウム「高分子未来サミット」, 2017

Motoko Kotani, Mathematical challenge for materials science, 2017 Dasean Conference Mathematical Challenges and Industrial Problem Solving, 2017

Motoko Kotani, Mathematical challenges for materials design, Total Energy and Force Methods 2018 Workshop, 2018

Motoko Kotani, Figure Materials, 16th International Conference Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, 2016

Motoko Kotani, Mathematical Challenge to a New Phase of Materials Science, Japanese Swiss Energy Materials Workshop, 2016

小谷 元子, マルチスケール材料開発のための幾何学的手法, 先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会講演会「マルチスケール材料開発のための幾何学的手法」, 2016

Motoko Kotani, Mathematical challenge to structural understanding of materials, YHMA (Yau's High School Mathematical Award), 2015

Motoko Kotani, Mathematical challenge to structural understanding of materials, 2nd International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS), 2015

Motoko Kotani, Mathematical challenge to structural understanding of Materials, Geometric analysis in geometry and topology 2015, 2015

⑳ Motoko KOTANI, Mathematical challenge to structural understanding and structure of materials, 15th International Conference Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, 2015

㉑ Motoko Kotani, Mathematical Challenge to Structural Understanding of Materials, Mathematics of Novel Materials, 2015

㉒ Motoko Kotani, Mathematical Challenge to understanding of Materials, WE-Heraeus Seminar, 2015

㉓ Motoko Kotani, A test case at AIMR-Collaboration between mathematics and materials science, Mathematics of Fluid Dynamics and Material Science, 2014

㉔ Motoko KOTANI, Structural Understanding of Materials-Collaboration Between Mathematics and Materials Science, 150 years of beautiful structure

and defects, 2014

㉕ Motoko Kotani, Discrete geometric analysis applied to structural understanding of materials, Inverse Problems and Spectral Theory, 2014

㉖ Motoko Kotani, Mathematical challenge for structural understanding of materials, ICWM2014, 2014

㉗ M. Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials, Tsinghua Sanya International Mathematics Forum, 2013

㉘ M. Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials, Tohoku University Forum at UCL, 2013

㉙ M. Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials, CAMP opening symposium, 2013

㉚ M. Kotani, A mathematical challenge to a new phase of materials science, Connections 2013 Symposium: Crossing Boundaries with Informatics - from Basic Science to Social Infrastructure, 2013

㉛ M. Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials, Joint International Meeting of the AMS and the Romanian Mathematical Society, 2013

㉜ M. Kotani, Discrete Geometric Analysis applied to structural understanding of Materials, The 1st WPI workshop on materials science 10th France-Japan Workshop on Nanomaterials, 2013

㉝ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, TOHOKU-FUDANW

ORKSHOP ON THE OCCASION OF THE CENTENNIAL OF THE FACULTY OF SCIENCE, 2012

- ③⑤ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, Topology and Functional Analysis 2012, 2012
- ③⑥ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, 理研研究会「物質科学の数学的手法と数理物理」, 2012
- ③⑦ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, RIMS 研究集会「Discrete Geometric Analysis」, 2012
- ③⑧ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, 第18回複素幾何シンポジウム, 2012
- ③⑨ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, 2012 International Conference on Modeling, Analysis and Simulation「現象数理学の展開」(ICMAS), 2012
- ④⑩ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, Workshop on Stochastic Analysis and Related Topics, 2012
- ④⑪ 小谷 元子, A mathematical challenge to materials science, The Seventh General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science -Virtual Organization, 2012

〔図書〕(計 4 件)

Nobuaki Obata, Springer, Tokyo, Spectral Analysis of Growing Graphs--- A Quantum Probability Point of View, 2017, viii+138pp

Shioya, Takashi, EMS Publishing House, Gromov's theory of convergence and concentration of metrics and measures, 2016, 総ページ数 194

宮岡礼子, サイエンス社, 現代幾何学への招待, 2016, 総ページ数 144

T. Kumagai, Springer, New York, Random Walks on Disordered Media and their Scaling Limits, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 2101, Ecole d'Ete de Probabilites de Saint-Flour XL - 2010, 2014, 総ページ数 147

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小谷 元子 (Kotani Motoko)
東北大学・理学研究科・教授
研究者番号: 50230024

(2) 研究分担者

熊谷 隆 (Kumagai Takashi)
京都大学・数理解析研究所・教授
研究者番号: 90234509

塩谷 隆 (Shioya Takashi)
東北大学・理学研究科・教授
研究者番号: 90235507

(3) 連携研究者

尾畑 伸明 (Obata Nobuaki)
東北大学・情報科学研究科・教授
研究者番号: 10169360

楯 辰哉 (Tate Tatsuya)
東北大学・理学研究科・教授
研究者番号: 00317299

宮岡 礼子 (Miyaoka Reiko)
東北大学・高度教養教育, 学生支援機構・総長特命教授
研究者番号: 70108182