## 研究課題別事後評価結果

- 1. 研究課題名: 離散幾何学から提案する新物質創成と物性発現の解明
- 2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点): 研究代表者

小谷 元子(東北大学大学院理学研究科 教授)

主たる共同研究者

川添 良幸(東北大学未来科学技術共同研究センター 教育研究支援者) 阿尻 雅文(東北大学原子分子材料科学高等研究機構 教授)

3. 事後評価結果

○評点

A+ 期待を超える十分な成果が得られている

## ○総合評価コメント

物質科学においてミクロな構造構築からマクロな物性を予見することは大きな夢である。本チームは数学、とくに離散幾何の観点と手法を用いて、ミクロな構造の可能性を開拓し、これまでの試行錯誤的手法を打ち破り、新たな物質創成を目指す数学と材料科学の融合連携研究である。5 年間という数学にとっては短い期間であったが、結果として「数理物質科学」の扉を開いたと言える画期的なものとなっている。当初数学的に予想された K4の原子レベルでの合成は安定性などの点から難しいことになったが、メソレベルのナノ構造体を酸化セリウムで実現したことは、数学的示唆の重要性を意味する。その経験を基に新たな炭素構造、とくにフラーレン様のコアシェル構造、離散的周期極小曲面など新たな数学的提案が具体的な物質創成につながってきた。これらを含め本チームの成果は数学的アイデアが駆動力となり材料科学者単独では決してできない材料創成デザイン原理を打ち出している。もの作りに関わる CREST であったので、惜しむらくは特許等の知財に関しては、より積極的な申請が欲しかった。国際的なネットワークも着実に広がりつつあり、代表者がWPI-AIMRの機構長であることも有効に働き、本チームのテーマを超えて極めて広い材料科学の分野に数理物質科学の思想が浸透しつつある。若手人材育成にも成功し、純粋数学背景のポスドクが材料科学の問題を自分の問題として設定し結果を残せた。結果としてほぼ全員が常勤職を得たことは特筆できる。上述の炭素構造を含む新たな材料創成と離散幾何学との相性は良く、またトポロジー的手法の材料科学における有効性も示せたことは今後の数理物質科学の発展を強く予感させるものである。