

# 共同利用

## ホモロジー解析を用いた非結晶性固体に関する構造の特徴付けと物性の記述

種別	短期共同研究
研究計画題目	ホモロジー解析を用いた非結晶性固体に関する構造の特徴付けと物性の記述
研究代表者	中村壮伸（東北大学原子分子材料科学高等研究機構・助教）
研究実施期間	平成26年1月20日（月）～平成26年1月23日（木）
研究分野のキーワード	アモルファス、バルクメタリックガラス、シリカガラス、分子動力学シミュレーション、パーシステントホモロジー
目的と期待される成果	<p>非晶質(アモルファス)構造をもつ物質は工学的な目的から実験、理論ともに数多くの研究がなされているが、理論的な定式化は結晶固体や液体と比べると現在においてもなお発展途上の段階である。結晶では原子配置の構造と巨視的物性の対応、散乱実験のデータ解析などはすべて動径分布関数や散乱因子という量で定式化できることが知られているが、非晶質では上記の量だけでは十分良く記述することができないということが主な原因である。そのため新たな数学的手法が待望されている。本研究会ではパーシステントホモロジーという、ごく最近誕生した数学的手法を用いて、非晶質構造の新しい定式化について議論を行う。とくにシリカガラスと金属ガラスを題材とする。前者は共有結合性ボンド複雑なネットワーク構造に潜む中距離秩序が、後者は局所的な最密充填構造を維持したまま生じる乱れが、それぞれ物性を支配するという性質が知られている。これらの構造は従来の数学的手法では記述が困難な典型的な例である。この共同研究では原子配置の幾何学的な特徴付けに加え、不均一な弾性応答のホモロジー解析の可能性について議論を行い材料の新たな記述方法を模索する。本研究会は微視的スケールで複雑な幾何学的形状を持つ材料の、定式化(数学)、物性の記述(物理)、材料設計への提案(実験)の三つを達成目標とし、数学の専門家、計算物理学の専門家、およびアモルファス材料の高精度計測を専門とする実験家の間で議論を行う。本共同研究は単に最先端の数学を材料科学に持ち込むにとどまらず、材料科学での問題から新たな数学の問題設定を産む場となることを目指す。</p>
組織委員(研究集会) 参加者(短期共同利用)	中村壮伸（東北大学原子分子材料科学高等研究機構・助教） 西浦廉政（東北大学原子分子材料科学高等研究機構・教授） 高田章（旭硝子株式会社中央研究所・特任研究員） 平岡裕章（九州大学マス・フォア・インダストリー研究所・准教授） Emerson Escolar（九州大学 数理学研究院・後期博士課程1年） 平田秋彦（東北大学原子分子材料科学高等研究機構・准教授） 松江要（統計数理研究所・助教） 辰巳創一（東京工業大学・助教）