

戦略的創造研究推進事業 CREST  
研究領域「数学と諸分野の協働による  
ブレークスルーの探索」  
研究課題「離散幾何学から提案する  
新物質創成と物性発現の解明」

## 研究終了報告書

研究期間 平成20年10月～平成26年3月

研究代表者：小谷 元子  
(東北大学大学院理学研究科、教授)

## § 1 研究実施の概要

### (1) 実施概要

すぐれた物性機能をもつ新物質創成は安心・安全で豊かな社会を支える基盤であり、科学技術立国を標榜する我が国にあって分野横断的に取り組むべき最重要課題である。厳しい国際競争のなか際立つ研究成果を有する本学の材料科学研究グループと、離散幾何解析学・計算機科学・アルゴリズム論・確率解析に特徴的な成果を有する数学グループがチームを組み、メソスケールの物性研究に統一的な離散幾何学的研究手法を確立し、新しい数理モデルに基づいて物性構造を解明し、更に新物質創成を提案することを目的とした。以下の具体的研究項目に対して、小谷グループ(数学)が数理モデルを提案し、川添グループ(計算材料科学)がシミュレーションにより数理モデルの妥当性を検証し物性を予測、それを受けて阿尻グループ(化学工学)は①と④を、福村グループ(物理化学)は②と③について実験および材料合成・装置開発に取り組んだ。

- ① ダイヤモンド・ツインである K4 格子の物性計算と合成
- ② 準結晶を用いた構造化照明法の開発
- ③ 相分離の極短時間挙動の解析
- ④ 耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成とアルゴリズム開発

その結果、以下のような成果を得た。

- A) 新たな炭素構造の探索と数学的指標の提案
  - ・ K4 炭素結晶合成過程における独自の高温・高圧合成技術の確立、および K4 構造ネットワークを持つ金属酸化物の新合成法の開発に成功した。
  - ・ フラーレン様のコア・シェル構造をデザイン理論により定式化し、これまでの知見を統一理解する枠組みを与えると同時に、更に新構造を発見し論文として発表。
  - ・ 離散極小曲面論を用いた周期的炭素結晶構造の記述指標を与え論文発表
- B) 単一のナノ秒パルス光により高い解像度の周期構造を観測できる構造化照明法を開発し、これによって観測された相分離構造の成長に対して、数理モデルを提案しシミュレーションとの比較を行った。開発した装置は細胞内の微小構造体のダイナミクスを調べる有効な技術に発展する可能性があり、企業との共同研究へとつながった。
- C) アモルファス構造のトポロジカル解析: 周期性・準周期性を持つ材料の構造記述と物性予測は、群論やフーリエ解析など材料科学・固体物理において数学がもっとも有効に活用された例である。周期性を持たない物質の中距離・長距離構造の記述および物性予測は、現状では全く手がかりがない。本研究では、局所構造から大域構造を解析する最初の試みとして計算トポロジーを提案し、論文として発表した。
- D) ハイブリッド材料における最適配置として、グラフ理論を用いた改良構造の提案および、方程式の固有値最適化問題としての定式化と数値解析を行い、材料形成への新しい指針を与え、また論文として発表した。

数学が「新しい材料デザイン」への方向を主導し、従来の材料科学にはない視点による材料生成の試みにつながったこと、その結果を材料科学者と共同で著名雑誌に発表したこと、また、数理モデルの提案から新材料の創生、そして実験現場からのフィードバックによるモデルの改良といったサイクル全体に数学グループが係わり多くの分野横断で議論を積み重ねた結果「数理材料科学」の基盤を築いたことが、本チームの大きな成果である。若手人材が自発的に研究提案を行い、成果を出し始めたことは予想以上の進展である。CREST 研究員は順調に研究職へキャリアアップした。また、本研究は、WPI プログラムにおいて数学-材料科学連携拠点へと発展した。

## (2) 顕著な成果

### < 優れた基礎研究としての成果 >

1. M. Tagami, Y. Y. Liang, Y. Kawazoe, M. Kotani: New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8-12 Atoms Found by Euclidean Designs, *Materials Transactions* 53 3 (2012).

概要: 純粋数学理論であるデザイン理論を、研究員自らの発想で材料科学分野の問題に応用した。これまでアドホックな手法で発見されたコア・シェル構造を含む一連の構造列を数学的に特徴付け、意味合いを明らかにするとともに、無限の可能性を示唆した。本チームの目標である数学的視点による材料科学の新機軸と人材育成の成功例である。

2. A. Hirata, L.J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A.R. Yavari and M.W. Chen: Geometric frustration of icosahedron in metallic glasses, *Science* (2013)

概要: 金属ガラスの 20 面体局所構造を直接観察する事に初めて成功し、その形が非常に歪んだ 20 面体になっている事を明らかにした。さらにガラス構造の解析としては初めてホモロジーを適用、特に 0 次パーシステントホモロジーにより、全ての 20 面体が類似した歪み方をしており、それが全体に広がる事でガラス構造に特徴的な不規則で密な構造を採っている可能性を示した。

3. J. Lu, S. Asahina, S. Takami, T. Adschiri: Synthesis of gyroid CeO<sub>2</sub> structure using MCM-48 as a hard template, in preparation

ナノメートルオーダーの多孔体であり、空隙のトポロジーが K4 構造と同じ MCM-48 を テンプレートとして用い、酸化セリウムの前駆体水溶液を充填後焼成することで、K4 構造に類する酸化セリウムのナノ構造を形成することに成功した。生成物は MCM-48 と同様の高い比表面積を持ち、高分解能の電子顕微鏡像からも MCM-48 と 同様の構造が存在していることが確認できた。

### < 科学技術イノベーションに大きく寄与する成果 >

1. ナノ秒構造化照明法の開発: ナノ秒レーザー (Quantel 社製 Brilliant, 6 ns, 532 nm) と位相変調器 (浜松ホトニクス社製 LCOS-SLM X10468-01), 倒立顕微鏡 (ニコン社製 ECLIPSE Ti-U) を組み合わせることにより, ナノ秒構造化照明法を開発し, 相分離過程の極初期に現れる溶液内微小構造を観測することに成功した。この結果はパルス光を用いた構造化照明が可能である事を示すもので, 細胞内の微小構造体のダイナミクスを調べる上で極めて重要な技術に発展する可能性がある。

## § 2. 研究構想

### (1) 当初の研究構想

#### 研究の目標・ねらい

すぐれた物性機能をもつ新物質創成は安心・安全で豊かな社会を支える基盤であり、科学技術立国を標榜する我が国にあつて分野横断的に取り組むべき最重要課題である。新物質創成研究において、ナノスケールの系を観測し、デザインすることが可能となってきた今日、従来の経験則を超えて物性の予測をする新理論、計算モデル、シミュレーション技術が強く求められている。新物質創成の鍵はメゾスケールにおける物性の解明にあるが、本研究では、厳しい国際競争のなか際立つ研究成果を有する本学の材料科学研究グループと、離散幾何解析学・計算機科学・アルゴリズム論・確率解析に特徴的な成果を有する数学グループがチームを組みメゾスケールの物性研究に統一的な離散幾何学的研究手法を確立し、新しい数理モデルに基づいて物性構造を解明し、更に新物質創成を提案することを狙う。将来的には、本研究チームは、数理科学・情報科学・物理化学・材料科学を高度に融合した「数理物質科学」研究のコアとして発展させる。

本研究の核心は、離散幾何解析学的アプローチにある。すなわち、原子核や電子の配置を離散ネットワークとしてモデル化することで幾何学的対象とし、ミクロスコピック構造がメゾスコピックな現象を、メゾスコピック構造がマクロスコピックな現象を統制する仕組みを離散幾何的構造の反映として統一的に理解したい。4 つの研究項目(下記)を設定し、それを数学者・計算科学者・実験科学者と共同で解決する。その過程で、計算物理学や統計力学による従来研究に新しい観点と方法を提示し、マイクロメゾマクロの階層のより深い理解を目指すと同時に、従来の方法論にとらわれない新しい数理モデルの構築、その数理解析およびシミュレーションによる物性予測、化学工学における新物質創成までを貫く新しい指導原理を確立したい。

#### 研究項目とその概略

##### (1) K4 格子の物性計算と合成

数学的な抽象化によってネットワークを分類し、それを 3 次元空間の中に高い対称性をもつように自然な形で実現(標準的实现)することで、ダイヤモンド・ツインである K4 格子が数学者砂田利一によって発見された。K4 格子の物性を数理モデルと第一原理シミュレーション計算によって予想し、化学工学の手法を駆使して K4 炭素結晶として合成する。さらに、数理モデルとシミュレーションによる解析を繰り返し、金属イオン導入による構造安定化を探り、新材料創成を目指す。

##### (2) 準結晶を用いた構造化照明法の開発

準結晶フィルターを通して構造化した照明光を用いて、溶液内のナノ構造体を実時間で可視化することは革新的な観測手法となる。様々のモデル形態を対象とし、これらをナノメートルの分解能で捕らえるための、最適な構造化照明パターンを2次元準結晶の数理モデルをもとに検討し、液体相分離構造・合成高分子鎖・生体分子などが可視化できるかどうかを実験的に確認する。これによって、準結晶フィルターによる溶液内ナノ構造の可視化の数理モデルの構築を目指す。

##### (3) 相分離の極短時間挙動の解析

2 種類の混合液体に起こる相分離の時間発展において、極初期のダイナミクスを実験的に観測

することが可能になってきたが、分子間結合の情報が本質的な極初期段階の時間発展を十分に説明する理論はまだない。分子間結合の離散幾何解析学を発展させ、マイクロ・マクロ・メゾの現象の関わりをとらえる流体力学極限の知見を取り込みながら、数理モデルを構成し、計算手法もあわせて開発する。

#### (4) 耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成

パワーエレクトロニクス分野では、高熱伝導性と絶縁性を両立するハイブリッド素材の開発が緊急の課題となっている。熱伝導率の低い領域に、熱伝導率の高い部分領域を配置して合成熱伝導を最大にする最適配置を数理モデルによって解明する。さらに、このような配置を実現するために、異種高分子の相分離構造を利用した熱伝導性ナノ粒子の配向技術を開発し、高熱伝導性、絶縁性と加工性の同時発現を図る。化学工学的手法を駆使した構造評価、熱伝導解析結果と数理モデルによる数値シミュレーションとを比較を行ない、相分離構造・粒子配列構造と熱伝導性との相関関係を明らかにする。

(2) 新たに追加・修正など変更した研究構想

##### ① 中間評価で受けた指摘や助言、それを踏まえて対応した結果について

中間評価で受けた指摘事項

・研究体制: 全く背景、手法が異なる複数の材料科学者を統合する可能性がある学問分野としては数学が本来その筆頭であるべきであるが、それを実現できる土俵を作れる数学者は極めて少ない。本研究代表者はその困難を乗り越えて、数学、大規模計算、材料合成とその物性を扱う3つの研究グループをよくコーディネートし、異分野融合の核としての機能を果たしている。

・構造化照明法の開発においては最適照明パターンの数理的・実験的探索に関する研究が、相分離の極短時間挙動の解析に関しては数理モデルの予備的検討等の研究が進んでいるが、数学の貢献がどのようになされていくかが今後の課題としてあるだろう。

・また、新規材料についての提案もなされており、今後は成果の特許化についても是非検討していただきたい。

・数学はその自由な発想と思いつかぬ視点をさらっと提供できる力がある。その自由さがさらに発揮され、材料科学者との協働が加速的に進むことが望まれる。確立した手法と方法論をもつ異分野研究者間の壁は高いのだが、最初の突破口は開かれたと思われる。CREST に参加する若手のみならず、あらゆる分野の数学で学んでいる若手研究者に対し、ひとつのロールモデルを提供する稀な機会であると考えます。

研究項目1「ダイヤモンド・ツインである K4 格子の物性計算と合成」に以下を追加した。

・K4 格子と同様のメゾ構造を持つ材料の開発: K4 構造の合成について、原子レベルでの K4 構造に加え、K4 が周期的極小曲面と関連あることから、相分離構造において K4 と同様のグラフ構造を形成できる可能性が数学研究者から指摘され、これに基づいてネットワーク構造が K4 に類似した構造の合成にも着手した。

・新たな炭素構造の探索と数学的指標の提案: sp<sup>2</sup> 混成軌道からなる 3 次元炭素構造は重要であることが材料科学者から指摘され、K4 格子に限定せず新しい炭素構造の探索を行った。デザイン理論を用いたフラーレン様のコア・シェル構造や、標準的実現を用いた離散的周期極小曲面を提案し、また、それらの構造を記述する数学的指標を提案した。

研究項目3「相分離の極短時間挙動の解析」に以下を追加した。

- ・相分離過程にある溶液中における光還元反応を用いた特異な結晶構造成長:当初、研究項目2で開発した観測技術を用いて相分離の極短時間挙動を観測し、その数理モデルを構築する予定であったが、研究項目2の装置開発が予定より遅れた。当初の計画を着実に遂行するとともに、新たに相分離初期過程にある溶液を反応場として金イオンの光還元反応を利用して、特異な形態の結晶を作成し、その構造やサイズの制御を行った。理想状態における結晶成長の機構は数学的には理解されているが、現実の物質における制御における種々の課題を検討する。

- ・アモルファス構造のトポロジカル解析:周期性・準周期性を持つ材料の構造記述と物性予測は、群論やフーリエ解析など材料科学・固体物理において数学がもっとも有効に活用された例である。周期性を持たない物質の中距離・長距離構造の記述および物性予測は、現状では全く手がかりがない。本研究では、局所構造から大域構造を解析する最初の試みとして計算トポロジーを提案する。

## ② 上記①以外で生まれた新たな展開について

若手の分野融合の場として、CRESTseminar (CREST 研究員が企画運営)、Math-Mate(rials) seminar(原子分子材料科学高等研究機構)、smart seminar(大学の支援による「数学をコアとするスマートイノベーション」プログラム)、応用数学連携フォーラム(国際高等研究機構に設置された学内の数学・諸分野連携組織)を定期的に開催した。CREST 若手研究員、原子分子材料科学高等研究機構の若手材料科学者、理学研究科・情報科学研究科数学研究者・学生、その他学内外の諸分野の研究者が参画し、分野を超えた活発な議論がおこなわれるようになった。また、数学内の分野を超えた共同研究も生まれた。

### § 3 研究実施体制

#### (1) 研究チームの体制について

##### ① 「小谷」グループ

##### 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
小谷 元子	東北大学・大学院理学研究科	教授	H20.10～
福村 裕史	東北大学・大学院理学研究科	教授	H20.10～
赤間 陽二	東北大学・大学院理学研究科	准教授	H20.10～
梶本 真司	東北大学・大学院理学研究科	助教	H20.10～
堀本 訓子	東北大学・大学院理学研究科	助教	H20.10～
田上 真	九州工業大学・情報工学部	准教授	H21.2～
松江 要	東北大学・大学院理学研究科	助教	H23.10～H25.8
杉峰 伸明	東北大学・大学院理学研究科	助教	H21.10～ H23.11
黒田 紘敏	大阪府立大学高等教育推進機構	教育拠点形成教員	H21.10～
長瀬 優子	東北大学・大学院理学研究科	助教	H24.5～H24.7
戸田 昌利	東北大学・大学院理学研究科	産学官連携研究員	H25.1～
近藤 剛史	東北大学・大学院理学研究科	助教	H24.4～
大森 俊明	東北大学・大学院理学研究科	助教	H25.4～
能川 知昭	東邦大学医学部	講師	H25.4～
工藤 正明	東北大学・大学院理学研究科	D3 JST-RA	H21.4～H24.3
小野寺 玉江	東北大学・大学院理学研究科	研究補助員	H20.11～
松島 進一	東北大学・大学院理学研究科	研究補助員	H21.4～H23.3
井上 和俊	東北大学・大学院理学研究科	産学官連携研究員	H25.10～
研究員 A	東北大学・大学院理学研究科	産学官連携研究員	H25.11～
Hanis Binti Mohd Yusoff	東北大学・大学院理学研究科	D3	H20.10～H25.3
森 綾香	東北大学・大学院理学研究科	M2	H21.4～H23.3

豊内秀一	東北大学・大学院理学研究科	D3	H21.4～
白澤 大輔	東北大学・大学院理学研究科	D3	H22.4～
五月女 光	東北大学・大学院理学研究科	D2	H22.4～
藤田 康彦	東北大学・大学院理学研究科	D3	H23.4～
北畠 健太	東北大学・大学院理学研究科	M2	H23.4～H25.3
柴田 穰	東北大学・大学院理学研究科	准教授	H24.3～
千葉 裕介	東北大学・大学院理学研究科	M2	H24.3～H25.3
富澤 繁	東北大学・大学院理学研究科	M2	H24.3～
尾畑 伸明	東北大学・大学院情報科学研究科	教授	H20.10～
徳山 豪	東北大学・大学院情報科学研究科	教授	H20.10～
宗政 昭弘	東北大学・大学院情報科学研究科	教授	H20.10～
全 眞嬉	東北大学・大学院情報科学研究科	准教授	H20.10～
森山 園子	東北大学・大学院情報科学研究科	准教授	H23.4～
田中太初	東北大学・大学院情報科学研究科	准教授	H20.10～
Kaothangtong Natusda	東北大学・大学院情報科学研究科	D3	H23.4～
Matias Korman	東北大学・大学院情報科学研究科	D3	H20.10～H22.9
宇治田康浩	東北大学・大学院情報科学研究科	D3	H20.10～H23.3
田村宏樹	東北大学・大学院情報科学研究科	D3	H20.10～H23.3
須田庄	東北大学・大学院情報科学研究科	D3	H20.10～H23.3
鈴木香奈子	茨城大学理学部数学・情報数理領域	准教授	H20.10～
小谷 眞一	関西学院大学・理工学部	教授	H20.10～
吉田 伸生	名古屋大学大学院多元数理科学研究科	教授	H20.10～
砂田 利一	明治大学理工学部	教授	H23.4～
内藤 久資	名古屋大学大学院多元数理科学研究科	准教授	H23.4～

田中 守	東北大学・WPI-AIMR 原子分子材料科学高等 研究機構	助教	H24.4～
小滝 雄太	東北大学・大学院理学研 究科	M2	H24.3～
岡本 隆志	東北大学・大学院理学研 究科	M1	H24.3～
田村 京一	東北大学・大学院理学研 究科	M1	H24.3～
中澤 聡	東北大学・大学院理学研 究科	M1	H24.3～

#### 研究項目

小谷グループは、小谷をリーダーとする「理論グループ」と福村をリーダーとする「実験グループ」から成り立っている。

#### 理論グループの研究項目

- ・4つの研究課題を通して理論的・計算科学的な研究

#### 実験グループの研究項目

- ・構造化照明法の開発
- ・相分離の極短時間挙動の解析

#### ② 「川添」グループ

##### 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
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	H20.10～
水関博志	東北大学・金属材料研究 所	准教授	H20.10～H25.6
佐原亮二	東北大学・金属材料研究 所	助教	H20.10～H25.2
Liang Yunye	東北大学未来科学技術 共同研究センター	機関研究員	H21.7～
カーロウ 綿村 ウルスラ	東北大学未来科学技術 共同研究センター	技術補佐員	H24.10～H25.3
八島 真友子	東北大学未来科学技術 共同研究センター	事務補佐員	H24.5～H24.9

#### 研究項目

第一原理シミュレーション計算と物性予想

#### ③ 「阿尻」グループ

##### 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
阿尻雅文	東北大学・WPI-AIMR 原 子分子材料科学高等研究 機構	教授	H20.10～

高見誠一	東北大学・多元物質科学研究 研究所	准教授	H20.10～
有田稔彦	東北大学・多元物質科学研究 研究所	助教	H20.10～
南公隆	東北大学・WPI-AIMR 原 子分子材料科学高等研究 機構	助教	H20.10～H24.2
北條大介	東北大学・WPI-AIMR 原 子分子材料科学高等研究 機構	助教	H20.10～
伊藤正寛	東北大学・多元物質科学研究 研究所	機関研究員	H20.10～H21.6
Wen Bin (温斌)	東北大学・WPI-AIMR 原 子分子材料科学高等研究 機構	産学官連携研究 員	H21.4～H22.3
Lu Jinfeng (盧 金鳳)	東北大学・WPI-AIMR 原 子分子材料科学高等研究 機構	産学官連携研究 員	H22.4～
真鍋法義	東北大学・未来科学技術共 同研究センター	産学官連携研究 員	H22.8～H23.3
青木宣明	東北大学・WPI-AIMR 原 子分子材料科学高等研究 機構	助教	H23.4～

#### 研究項目

数理モデルの実験的検証と新物質の化学合成

#### (2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

本研究をきっかけとして、2012年より研究代表者小谷元子が東北大学原子分子材料科学高等研究機構(WPI研究拠点)の拠点長となり、数学—材料科学連携研究が組織的に進められることになった。同機構内に数学ユニット(8名)とインターフェースユニット(理論、7名)が設置され、WPIプログラム参加の第一級材料科学者と若手の数学・理論研究者が緊密な議論を行い、数学—材料科学連携の基盤を築きつつある。

## § 4 研究実施内容及び成果

本チームは、4つの課題を設定し、数学グループがモデル提案、計算グループがその検証・物性予測、実験グループがそれに基づいた材料合成・装置開発を行ってきた。緊密な協働体制を取って研究に取り組んで来たため、グループごとの実施内容を分離して記述することは困難であるため、§ 2に記載した4つのテーマに分けて記載する。小谷グループ(数学)、川添グループ(計算科学)はすべての課題に参画し、阿尻グループ(化学工学)と福村グループ(物理化学)は、それぞれ研究項目1・4、研究項目2・3に参画した。

### 研究項目 I: K4 格子の物性計算と合成

(あ) ダイヤモンドなどの3次元構造の中で炭素は4本手  $sp^3$  混成軌道をとる。3本手の  $sp^2$  混成軌道は3本手自身が1つの平面に乗ることもあり、実験家はグラファイトのような平面構造を構成すると考えていた。ところが、砂田の K4 格子は3本手の立体構造をもつ

ため、材料科学業界の思い込みを打破し大きなインパクトを与えた。数学的な抽象化によってネットワークを分類し、それを 3 次元空間の中に対称性が高くかつ自然な形で実現すること(標準的实现)による大きな功績である。そこで本研究では、数学から予言された K4 結晶を炭素系で合成することを目指した。

まず、K4 格子の合成可能性、および予測される物性を予測するため、スーパーコンピュータによる第一原理シミュレーション計算を行い、K4 格子が電導性に関して金属の性質をもつことを予測した。この成果に基づき、本研究では、電荷密度分布・電子局在関数・体積弾性率・電子状態・フォノンのバンド構造などのより詳しい物性を調べた。

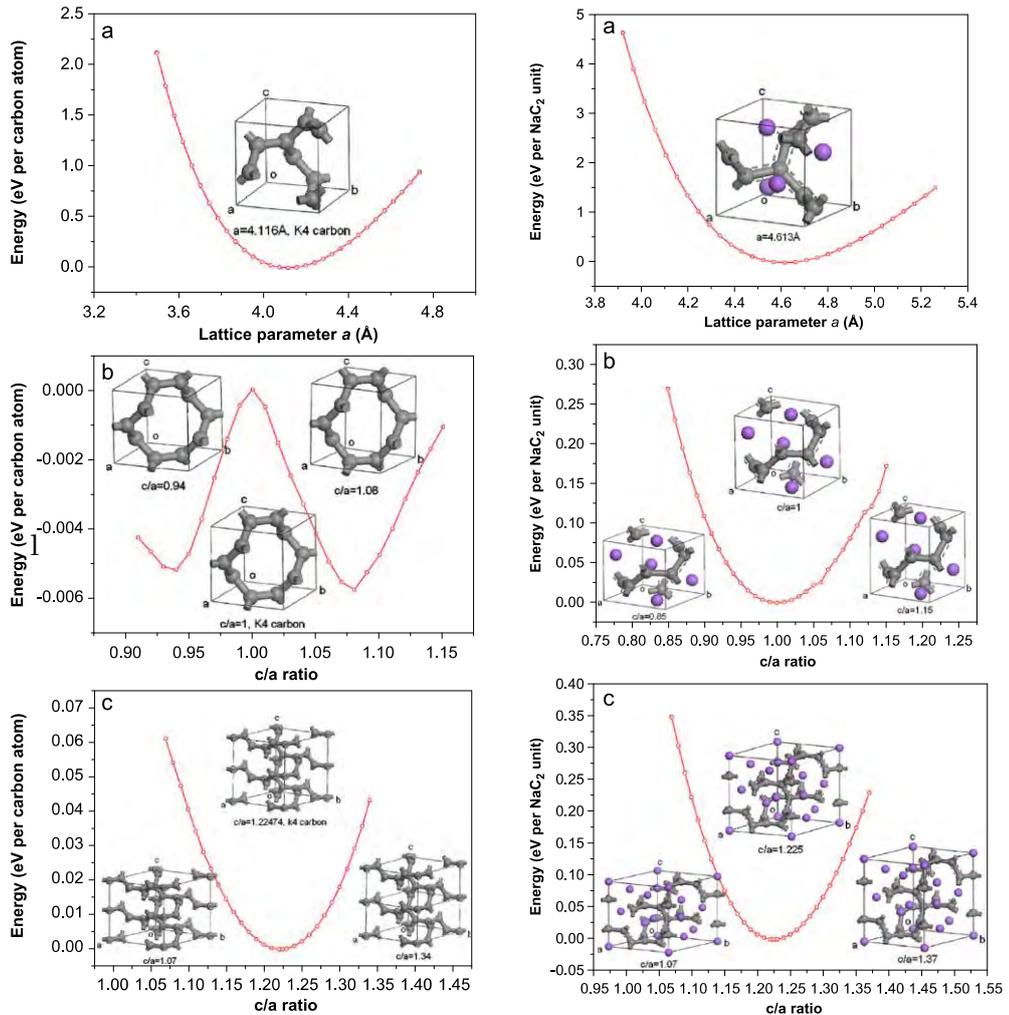


図1 ドーピングを行っていない炭素の K4 結晶構造を(a) isotropic, (b) tetragonal, (c) trigonal の各方式で変形させた時の全エネルギー変化

図2 Na 原子をドーピングした炭素の K4 結晶構造を(a) isotropic, (b) tetragonal, (c) trigonal の各方式で変形させた時の全エネルギー変化

炭素原子から構成される K4 結晶格子の構造安定性を評価した所、isotropic、trigonal deformation に対しては安定であるが、tetragonal deformation に対しては不安定であり、常圧下では構造が不安定であることが明らかになった(図1)。そこで、周期律表の広い範囲にわたる金属原子のドーピングによる構造安定化のシミュレーション計算を実行し、格子振動解析の結果、いくつかの金属原子が K4 構造を安定化させることを確認した。具体的には、Na をドーピングした NaC<sub>2</sub> 結晶は deformation に対しても安定であることが明らかとなり、ドーピングにより安定構造を合成可能であることを示すことができた(図2)((1)-国際-[67])。また、K4 に類似した構造を持つ結晶に SrSi<sub>2</sub>, LaIrSi がある。そこで、こ

これらの結晶系に類似する炭素系構造を提案し、さまざまな原子をドーブした結晶の構造安定性評価を行った。その結果、SrSi<sub>2</sub>系ではMgB<sub>2</sub>が、LaIrSiではNaBNとMgBNが安定に存在しうることが明らかとなった。さらに、窒素原子を構成要素とするK4構造は不安定であるが、炭素をドーピングすることで安定化すること、さらに高いエネルギー密度を有していることが明らかとなった((1)-国際-[68])。さらに、炭素結晶の構造と生成エンタルピーとの関係を密度汎関数法により調べた所、2700 GPa以上の超高压条件では単純格子結晶が安定であることが判明した((1)-国際-[69])。

続いて本研究では、ボールミリング、ダイヤモンドアンビルセルを用いた高压合成法、ステンレスチューブを用いた高温合成法など、K4結晶の合成に必須であると考えられる高温、高压条件を実現できる合成法を提案し、合成を試みた((3)-②-国内-[74])。h-BNとMg、また、SrSi<sub>2</sub>とMgをボールミリングにより処理を行ったが、原料以外の結晶相は確認できなかった。また、K4に類似した構造を持つSrSi<sub>2</sub>とMgとをアニーリングし高温での合成を試みた所、原料とは異なる結晶相が出現したが、K4結晶構造ではないことが確認された。

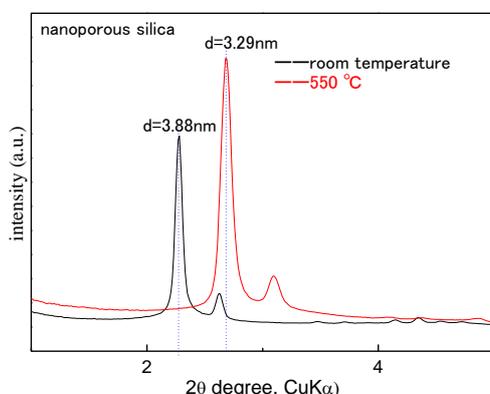


図3 合成したMCM-48構造のX回折パターン

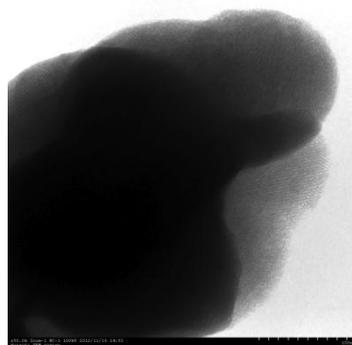


図4 合成したCMK-1構造の電子顕微鏡像

これらの結果をふまえて、K4結晶構造と同じネットワーク構造を持つ材料の合成に取り組んだ。まず、gyroid構造を持つメソポーラスシリカであるMCM-48を合成し、これをテンプレートとしてgyroid構造に対する鋳型構造(CMK-1)を形成した(図3、4)。

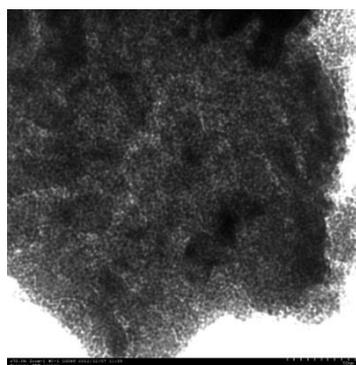


図5 CMK-1を鋳型として合成したFe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

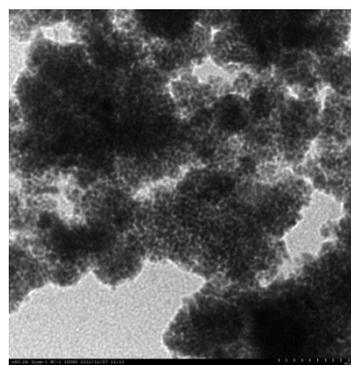


図6 CMK-1を鋳型として合成したCeO<sub>2</sub>

さらに、このgyroid構造に対する鋳型を用いて、gyroid構造を有する材料の合成を試みた。その結果、これまでにCMK-1を鋳型としてCeO<sub>2</sub>やFe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の合成を行うことに成功した(図5、6)((3)-②-国内-[20])。

(い)本課題では K4構造の合成を目指しているが、フラレンの拡張としてその2重3重構造である Core-Shell の安定構造発見が材料分野で重要であることを材料科学者から示唆され、数理的な視点で「良い」構造をもつ新たな構造を田上研究員が発想した。フラレン C<sub>60</sub>が球デザインであることから、球デザインを拡張したユークリッドデザイン理論を用いて、第一にユークリッドデザインとエネルギー安定性の関連性を調べ((1)-国際-[66])、さらに、その結果を応用して安定性の高い Core-Shell 構造の無限列を具体的に特定した。これは、これまで材料分野でアドホックに発見された構造をすべて含むものであり、かつこれまで見逃されていた構造を含むものである。また、それらの構造の意味付けを数学的に与えた((1)-国際-[65]、(1)-国際-[79])。さらに有限長カーボンナノチューブの「長さ」を測る尺度 (length index) を定義し、具体的なカーボンナノチューブに対して、それらを計算するウェブアプリケーションの開発を行なった((1)国際-[76])。また、負曲率炭素結晶について数学的な考察で新構造を提案した((1)国際-[77])。

## 研究項目 II: 準結晶を用いた構造化照明法の開発

福村研と小谷グループ赤間研が隔週程度の頻度で打ち合わせを重ねながら、福村研で構造化照明顕微鏡装置を開発し、様々な構造を持った照明光を用いることによるその高速化、観測手法の改善を行った。赤間研で数値シミュレーションを行いながら装置の改善を進めることで効率化を図った。

最適照明パターンの数理的探索: 構造化照明により得られた画像データから、従来法にしたがって解像度の高い原画像を得るプログラムをMatlabにより作成した。実験グループは、顕微鏡下においてサブマイクロメートルオーダーの縞模様の照明パターンを作る事に成功し、これを用いてジャイロイド様の周期構造を有する相分離ポリマーの微細構造の撮像を行った。実験的に得られた画像を数学グループ提供のプログラムにより解析することにより、従来法の構造化照明法が再現できることを確認した。さらに、数値シミュレーションによって従来の構造化照明顕微鏡における誤差の与える影響について考察した。この結果から、解析時に重み付き平均を取りながら画像構築を行うことにより、従来よりもノイズが少ない超解像画像が得られることが分かった。「構造化照明蛍光顕微鏡の画像再構成アルゴリズムについて」、赤間陽二、上條隆宣、「応用数理」掲載((1)国際-[78]) (2013)、モデル集合上のランダム場に有限な相互作用がある場合の解析測度について計算手法を開発した((1)-国際-[71])。

構造化照明装置の作製: 倒立顕微鏡とレーザー、位相変調器、CCDカメラ、さらに種々のレンズ系を組み合わせることで、構造化照明顕微鏡装置を作製し、顕微鏡下においてサブマイクロメートルオーダーの縞模様の照明パターンを作ることに成功した。さらに、従来法に従って解像度の高い超解像画像を得るプログラムをMatlabによって作成した。これらを用いて、1 $\mu$ m程度のジャイロイド様の周期構造を有する相分離ポリマーの微細構造の撮像を行い、解析することにより従来法の構造化照明法が再現できることを確認した。さらに、解析時に重み付き平均を取りながら画像構築を行うことにより、従来よりもノイズが少ない超解像画像が得られることが分かった。また、非周期構造を含めた種々の構造を持った照明光パターンを作製するために、位相変調器と光の干渉によるパターンの作製だけでなく、フォトマスクを用いて照明光に構造を持たせ、顕微鏡を用いて試料上に投影した。これによって、様々な構造を用いて構造化照明法が可能になった。

最適照明パターンの実験的探索: 相分離過程において観測される様な周期的な構造が試料に存在する時には、その構造と照明パターンとの干渉に由来する周期構造がフーリエ変換像に現れ、1枚の画像から試料の構造周期を推測できることを確認した。従来の構造化照明法では、1枚の超解像画像を得るために照明パターンの位相や方向を変えながら複数枚の画像を撮像する必要がある。そのため、一般に構造化照明法では光源のパルス幅によらず高い時間分解能を得ることができない。しかし、この結果は試料の周期構造と照明パターンの干渉を用いることにより、高い時間分解能で超解像画像が得られることを示している。実際に、光源をナノ秒パルスレーザーに変え、照明光をパルス化することによってナノ秒程度の時間分解能で構造周期を得ることに成功した。この装置を用いて液体試料に対しても動的構造の観察が可能であることを確認した。これらの結果については、国際会議において発表した((3)-③-国際会議-[9])。

また、非周期構造を用いた構造化照明顕微鏡として、フォトマスクを組み合わせ、**pinwheel tiling** 構造や相分離構造を照明光パターンとして用いた構造化照明顕微鏡を試みたが、限られた観測領域に投影できるパターンのサイズが限られるため、多くの周期を足し合わせることが出来ず、異方性も残ってしまう。当初計画していた非周期構造を用いた構造化照明顕微鏡は大規模な装置でなければ実現できないことが判明した。今後、開発を継続する手段を見つきたい。

関連してナノ物質の基礎的光学特性を理解するため、金属ナノファイバーに沿った光の伝播についても研究し一定の成果を得た((1)-国際-[9])。

溶液内の動的構造の観測: ナノ秒パルスレーザーを光源として、相分離過程にある溶液を対象として構造化照明を行った。照明光のパターンに一方方向にマイクロメートル程度の周期構造を持った縞状構造を用いることによって、得られた画像のフーリエ像に照明光の構造の周期と試料の周期の干渉に起因する周期が観測された。相分離過程に現れる構造は等方的で相の大きさを表す特徴的な波数を持っているため、その画像をフーリエ変換するとリング状の構造が得られる。構造化照明法を用いて画像を撮影すると、元々のリングだけでなく、縞状構造の周期に対応する点を中心としたリングが得られた。これは2つの異なる周期の干渉によって縞状の構造周期分だけ相分離構造の周期に対応するリングパターンがシフトしていることを示している。このリングパターンから試料中に存在する周期を求めた。

また、この手法では深さ方向の空間分解能は向上しないためより小さい相の観測には試料の厚さ自身が十分に薄い必要があった。厚い試料を用いた際のナノ秒構造化照明顕微鏡の評価には最密充填構造を取っている 1 マイクロメートルの蛍光ビーズを用いた。その結果を受けて、2 枚のカバーガラスを用いて液体試料を準備することによって、レーザー誘起相分離過程の早い時間に現れるより小さい相の観測が可能になった。

本研究項目で開発したナノ秒構造化照明装置: ナノ秒レーザー (Quantel 社製 Brilliant, 6 ns, 532 nm) と位相変調器 (浜松ホトニクス社製 LCOS-SLM X10468-01), 倒立顕微鏡 (ニコン社製 ECLIPSE Ti-U) を組み合わせることにより、ナノ秒構造化照明法を開発し、相分離過程の極初期に現れる溶液内微小構造を観測することに成功した。この結果はパルス光を用いた構造化照明が可能である事を示すもので、細胞内の微小構造体のダイナ

ミクスを調べる上で極めて重要な技術に発展する可能性がある。

### 研究項目 III: 相分離の極短時間挙動の解析

研究項目 II で作製した構造化照明顕微鏡の光源をナノ秒パルスレーザーにすることで、ナノ秒程度の時間分解能で相分離過程の初期過程に現れる微小構造の撮影を行った。試料となる微小相の周期的な構造と照明光の周期構造の干渉を利用することで複数枚の画像を撮影することなく、試料内に存在する周期情報の取得に成功した。また、蛍光画像として得られる構造化照明顕微鏡像だけでなく、シャドウグラフ法によって得られる透過像や光散乱の強度分布を取得し比較することによって、それぞれの方法による見え方の違いについて考察した。さらに、これらの方法を用いて、初期過程を観測することによって、レーザー誘起相分離過程に置いては溶液内に存在すると考えられる数 100 nm 程度の相関長を持った揺らぎが重要であることが示唆された。

数理モデルの予備的検討: 早い時間領域の現象に取り組むため、光照射により相分離を引き起こす系について幾つか検討を行った。また、相分離が開始する前の均一相においても、動的微細構造が存在している可能性を蛍光相関分光法により確認できた。相分離が起こる2液混合液体内部の分子間相互作用についても理論的な考察を行った。さらに、相分離過程にある溶液中で光還元反応を誘起することにより、特異な結晶構造を有するサイズ選択的なナノ粒子を生成することを示す事ができた。相分離構造の理解につながる数学的準備をすすめた。特に、流体力学極限について吉田研究室、杉峰研究員、JST-RA 工藤研究員を中心に研究を進めた((1)-国際-[32][33][34])。結晶格子の場合の流体力学極限について本チームメンバーではないが、京都大学田中亮吉氏により研究成果があった (Hydrodynamic limit for weakly asymmetric simple exclusion processes in crystal lattices, Communications in Mathematical Physics November 2012, Volume 315, Issue 3, pp 603-641)

早い時間領域の実験データ取得: ピコ秒程度の極めて短い時間内に起こる相分離過程を調べるために、溶質分子の光異性化反応を利用し、短パルスレーザー光で相分離を誘起できる系を開拓した。具体的には、下部臨界点を持つブトキシエタノール-水混合溶液に溶質分子としてスピロピラン分子を溶解させ、溶液中で光異性化反応を誘起することで相分離温度が変化することを発見した((1)-国際-[26])。この現象を利用し、パルスレーザー光照射によって光異性化を誘起することで、温度変化なしに光によって溶液の相分離、相融合といった相挙動を制御できることを見いだした。

また、相分離初期に現れると予想される数 10 nm 程度の相の観測に向けて、パルスレーザーを光源とする構造化照明顕微鏡を作製した。構造化照明法による観察を可能にするために従来の透過画像測定法ではなく、蛍光画像によって相分離過程が観測可能であることを確認した。同じ試料、実験条件で得られた、透過画像と蛍光画像、さらに光散乱強度分布を比較すると、試料溶液の厚さが相の大きさに比べて薄い場合には同様の結果が得られたが、試料の厚さが厚い場合には透過像測定の方が相が小さく観測された。これは、顕微鏡の深さ方向の分解能が十分でないことに起因すると考えられる。透過像観測では、試料全体を通して散乱を繰り返した光を結像することによって像を得ている。相が対物レンズの焦点深度に比べて十分に大きい場合には試料全体からの散乱の影響は小さいが、焦点深度と比べて相が小さい場合には多くの相が重なった状態の像が得られるために実

際の相よりも小さく観測されたと考えられる。この試料の中での散乱の影響をできるだけ小さくするために、薄い試料を使う必要があることが分かった。試料厚さが十分に薄い場合には、蛍光画像、透過画像も散乱強度分布も同様の結果を示した。このことから実際の相分離過程の観測では 2 枚のカバーガラスに挟まれた 10 マイクロメートル以下の溶液試料を対象として実験を行った。

分子動力学計算:相分離が開始する前の均一相においても、動的微細構造が存在している可能性を蛍光相関分光法により確認した。特に、水への溶解度が異なる 2 つの蛍光色素分子を用いて実験を行ったところ、臨界温度からは十分に離れているにもかかわらず、臨界濃度付近で水への親和性が小さい蛍光分子の拡散時間が遅くなることが分かった。一方、水にも有機溶媒にも高い親和性を示す蛍光分子を用いた場合には臨界濃度でもこのような異常性は見られなかった((3)-③-国内会議-[11])。この結果は選択的溶媒和等によって色素分子の溶媒和の状態が臨界濃度付近で大きく変化していることを示唆しており、臨界濃度を持った溶液の中に動的な微細構造が存在しており、溶質分子の拡散が制限されている可能性を示している。また、相分離が起こる2液混合液体内部の分子間相互作用についても理論的な考察を行った。

さらに、液体内部の相互作用エネルギーだけでなく、相分離におけるエントロピーの寄与も考察するために分子の幾何形状とそれに起因する配向エンタルピーに注目し、異方的な相互作用を組み込んだ粒子を用いた分子動力学計算を、戸田研究員を中心に行った。この結果「LCST 型相分離現象における分子の幾何形状の効果(戸田昌利、梶本真司、川勝年洋、赤間陽二、小谷元子、福村裕史)」を日本物理学会 H25 年会において発表した。

微小相構造観測装置の開発:相分離の極短時間挙動の観測については、(2-2)、(2-3)で示したナノ秒レーザー構造化照明顕微鏡、及び散乱光測定を用いて実験的に行った。また、同試料、同実験条件において散乱測定、蛍光画像測定、構造化照明顕微鏡画像を取得できる様に、顕微鏡と 2 台の CCD カメラを組み合わせ、蛍光画像測定に用いたものと同じパルス光を用いて散乱像測定も行った。構造化照明に関しては、マイクロメートル程度の周期を持った縞状構造を用い、相分離初期過程の溶液内に存在する構造の周期を求めた。

ナノスケール相分離の観測:ナノ秒レーザーを光源としたシングルショット構造化照明顕微鏡を用いて、レーザー誘起相分離過程の観測を行った。十分に薄い試料にナノ秒近赤外光パルス照射し、溶液内の水分子を直接振動励起することによって急激な温度上昇とそれに伴う相分離過程を誘起した。相分離過程に過渡的に現れる微小相をナノ秒構造化照明を用いて画像化した。照明光のパターンとしては位相変調器を用いてパルスレーザー光を 2 つに分け、試料上で干渉させることによって得られる縞状構造を用いた。得られた画像をフーリエ変換し、照明光の構造と溶液内の周期構造の干渉によって現れるリングパターンを求め、そこから相分離初期過程における周期を算出した。さらに、同様の実験条件で散乱高強度分布の遅延時間依存性を測定し、この結果からも溶液内構造の周期の時間発展を調べた。

これらの結果から試料の初期温度を 295 K と臨界温度である 322 K よりも十分に低く保ち、30 K 程度の温度上昇が起こる様に近赤外光パルスの強度を調整した場合には、数

100 nm 程度の周期が 5 マイクロ秒以降 20 マイクロ秒程度まで観測され、その間ほとんど成長しないことが分かった((3)-②-国際会議-[65])。その後、20 マイクロ秒以降は 0.67 程度の指数を持ったべき条則に従って単調に成長し続けた。この結果は、臨界濃度の混合溶液内に予め存在していると考えられる数 100 nm 程度の相関長を持った揺らぎが相分離の初期過程の決定に大きく寄与していることを示している。また、ラマン分光法の結果を基に従来考えられていた、温度上昇後 1 マイクロ秒程度が濃度の変化や分子間結合の切断等を含む相分離の early stage であり、その後は単純なべき条則に従って相サイズの成長が起こるという考えと合致しない結果といえる。これはラマン分光法はそれぞれの分子とその環境の平均しか見ていないのに対して、相の形成には分子の集団としての動きが重要であるということに起因すると考えられる。

#### 当初の予定になかったが追加したサブテーマ：

・相分離過程にある溶液中における光還元反応を用いた特異な結晶構造成長：相分離初期過程に現れる微小相を反応場として金イオンの光還元反応を誘起すると、金のナノ結晶が得られることが分かった。実験には相分離誘起に用いる赤外光パルスと還元反応を誘起する紫外光パルスを用いた。この2つのパルスの遅延時間を変え、反応場となる微小相の大きさを変化させることによって、得られるナノ結晶の構造やサイズを制御することに成功した。特に、遅延時間を 5 マイクロ秒とすると一辺 200 nm 程度、厚さ 30 nm 程度の四角いプレート状の金の単結晶が選択的に得られることが分かった。この結果については論文(1)-国際-[72][73]に発表した。金結晶の成長メカニズムと微小相の反応場としての働きを解明することによって、相分離初期過程にある溶液の性質について考察し、さらに多くの反応に応用していくことを計画している。

・アモルファス構造のトポロジカル解析：周期性・準周期性を持つ材料の構造記述と物性予測は、群論やフーリエ解析など材料科学・固体物理において数学がもっとも有効に活用された例である。周期性を持たない物質の中距離・長距離構造の記述および物性予測は、現状では全く手がかりがない。本研究では、局所構造から大域構造を解析する最初の試みとして、計算トポロジーを導入した。非平衡材料である金属ガラスの 20 面体局所構造を直接観察する事に初めて成功し、その形が非常に歪んだ 20 面体になっている事を明らかにした。さらにガラス構造の解析としては初めてホモロジーを適用、特に 0 次パーシステントホモロジーにより、全ての 20 面体が類似した歪み方をしており、それが全体に広がる事でガラス構造に特徴的な不規則で密な構造を採っている可能性を示した。この結果は((1)-国際-[70])に発表した。

#### 研究項目 IV：耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成

パワーエレクトロニクス分野では、さまざまな部品の使用温度の高温化にともない耐熱性や絶縁性の向上が求められると同時に、樹脂素材を混ぜ込んだ低コストで加工しやすい新たな素材が必要とされている。高熱伝導性と絶縁性という相反する性質をもつ材料として、絶縁素材の中に電導性の良い材料を配向させたハイブリッド素材の開発が緊急の課題となっている。そこで本研究では、異種高分子の相分離構造を利用して熱伝導性ナノ粒子を配向させることで、高熱伝導性、絶縁性と加工性の同時発現を図る超臨界法有機無機複合化技術の確立を目指した((3)-②-国内-[20][45])。

まず、金属酸化物の超臨界水熱合成場において、生成される金属酸化物ナノ粒子の表

面と結合することが可能な有機分子を共存させることで、有機分子が表面に結合したナノ粒子を合成するという手法を世界で初めて提案するとともに、実際に合成を行い、この手法が可能であることを証明した。続いて、有機修飾ナノ粒子の占める体積が圧力、温度に対してどのように依存するかを評価することで熱力学的特性を評価し、高分子との親和性評価、高分子中への分散挙動の予測を行う手法の開発に成功した。さらに、ナノ粒子表面に結合する有機分子の選択により、高分子との親和性を制御できることを確認した((3)-①-国内-[50])。

そこで、これらの手法を用いて高分子と高熱伝導性粒子を複合化し、高熱伝導性材料の実現を目指した。可能な限り少ない量の粒子を入れることで高熱伝導性を実現できれば、可塑性など高分子の特徴を損なうことがないため、決まった量の高熱伝導性粒子をどのように高分子中に配置すれば高い熱伝導性を実現できるかを求めるという問題を設定し、検討を行った。田上研究員が、グラフの固有値問題として定式化し、材料科学者の常識とは異なる配置により、熱伝導性を大きく向上させる可能性を示唆した。その後、高熱伝導性粒子の表面を化学修飾することにより高分子との親和性の制御を試み、これに成功した。この結果、高熱伝導性粒子を高分子中に高密度充填することができ、BN 粒子を充填したポリマー材料が極めて高い熱伝導性を示すことを明らかにした。ここで、BN など、結晶構造に由来する熱伝導性の異方性を持つ粒子を用いることで、高熱伝導性を実現したい方向に粒子の熱伝導性の高い方向を揃えることで、熱伝導の異方性質の高い熱伝導性材料を実現できることを明らかにした((2)-[18])。また、様々な2次元形状材料における2種類の材料の最適配置を数学的に記述するため、二値の熱伝導率を持つ領域の第一固有値に対する最適配置として定式化し、シミュレーションを行った。最適配置領域の形状に関する数学的考察をまとめ論文として発表した((1)国際-[75])。

## § 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0 件、国際(欧文)誌 79 件)

国内 0 件

国際 79 件

- [1] Shinichi Kotani: KdV flow on Generalized reflectionless potentials, *Journal of Mathematical Physics Analysis, Geometry* 4 (2008), 490-528. [2008 winter 発行] DOI なし
- [2] Nobuo Yoshida: Phase transitions for the growth rate of linear stochastic evolutions, *J. Stat. Phys.* 133 (2008), 1033-1058. DOI: 10.1007/s10955-008-9646-4 [2008.12 発行]
- [3] Jonathan Hobley, Tomoya Oori, Sergey Gorelik, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura and Dirk Hönl: Time-resolved Brewster angle microscopy for photochemical and photothermal studies on thin-films and monolayers, *J. Nanoscience and Nanotechnology* 9 (2009), 59-68. DOI: 10.1166/jnn.2009.J017 [2009.1 発行]
- [4] Masahiro Itoh, Motoko Kotani, Hisashi Naito, Toshikazu Sunada, Yoshiyuki Kawazoe, and Tadafumi Adschiri: New metallic carbon crystal, *Phys. Rev. Lett.*

102 (2009), 055703. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.055703 [2009.2.4 発行]

- [5] Shinji Iizuka, Yohji Akama and Yutaka Akazawa: Asymmetries of cut-and-project sets and related tilings, *Interdisciplinary Information Sciences* 15 (2009), 99-113. DOI:10.4036/iis.2009.99 [2009.3 発行]
- [6] Un Cig Ji and Nobuaki Obata: Annihilation-derivative, creation-derivative and representation of quantum martingales, *Commun. Math. Phys.* 286 (2009), 751-775. DOI: 10.1007/s00220-008-0702-3 [2009.3 発行]
- [7] Y. Nagahata and N. Yoshida: Central limit theorem for a class of linear systems, *Electron. J. Probab.* 14 (2009), no. 34, 960–977. DOI なし
- [8] Nobuo Yoshida and Y. Hu: Localization for branching random walks in random environment, *Stoch. Processes Appl.* 119 (2009) 1632-1651. DOI:10.1016/j.spa.2008.08.005
- [9] James A. Hutchison, Silvia P. Centeno, Hideho Odaka, Hiroshi Fukumura, Johan Hofkens, and Hiroshi Uji-i: Subdiffraction Limited, Remote Excitation of Surface Enhanced Raman Scattering, *Nano Lett.*, 9 (2009), 995-1001 DOI: 10.1021/nl8030696
- [10] Yohji Akama: Commutative Regular Shuffle Closed Languages, Noetherian Property, and Learning Theory, *Lecture Notes in Computer Science* 5457 (2009), 93-104. DOI: 10.1007/978-3-642-00982-2\_8
- [11] Masaaki Harada and Akihiro Munemasa: There exists no self-dual  $[24,12,10]$  code over  $F_5$ , *Designs, Codes Cryptogr.* 52 (2009), 125-127. DOI 10.1007/s10623-009-9271-5
- [12] Masaaki Harada and Akihiro Munemasa: A complete classification of ternary self-dual codes of length 24, *J. Combin. Theory, Ser. A* 116 (2009), 1063-1072. DOI:10.1016/j.jcta.2008.11.011
- [13] Masaaki Harada, Akihiro Munemasa and Boris Venkov: Classification of ternary extremal self-dual codes of length 28, *Math. Comp.* 78 (2009), 1787-1796. DOI:10.1090/S0025-5718-08-02194-7
- [14] Masaaki Harada and Akihiro Munemasa: On the classification of self-dual  $Z_k$ -codes, the Twelfth IMA International Conference on Cryptography and Coding, *Springer Lecture Notes in Comp. Sci.* 5921, 78-90. DOI:10.1007/978-3-642-10868-6\_6
- [15] Koichi Betsumiya, Rowena A.L. Betty and Akihiro Munemasa: Mass formula for even codes over  $Z_8$ , the Twelfth IMA International Conference on Cryptography and Coding, *Springer Lecture Notes in Comp. Sci.* 5921, 65-77. DOI:10.1007/978-3-642-10868-6\_5
- [16] Kanat Abdukhalikov, Eiichi Bannai and Sho Suda: Association schemes related to universally optimal configurations, Kerdock codes and extremal Euclidean line-sets, *J. Combin. Theory Ser. A* 116 (2009), 434-448. DOI:10.1016/j.jcta.2008.07.002

- [17] G. Yin, Y. Y. Liang, F. Jiang, H. Chen, P. Wang, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe: Polarization-induced switching effect in graphene nanoribbon edge-defect junction, *J. Chem. Phys.*, 131 (2009) 2347061-2347067. DOI: 10.1063/1.3273312
- [18] Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, and Yoshiyuki Kawazoe: Low-temperature phase transformation from graphite to  $sp^3$  orthorhombic carbon, *Phys. Rev. Lett.*, 106 (2009) 075501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.075501
- [19] U. C. Ji and N. Obata: Quantum stochastic integral representations of Fock space operators, *Stochastics* 81 (2009), 367-384. DOI:10.1080/17442500902919645
- [20] U. C. Ji and N. Obata: Quantum stochastic gradient, *Interdisciplinary Information Sciences* 15 (2009), 345-359. DOI 10.4036/iis.2009.345
- [21] Hideho Odaka, Toshifumi Miura, Koji Hatanaka, Sabine Wiebel, Hiroshi Fukumura: A picosecond hard X-ray study of the fluorescence Dynamics of anthracene derivatives and 8-hydroquinone complex microcrystals, *J. Phys. Chem. C*, 113 (2009), 11969-11974. DOI:10.1021/jp9031332
- [22] M. Tagami: Gorenstein polytopes obtained from bipartite graphs, *Electron. J. Combin.* 17 (2010), no. 1, Research Paper 8, 12 pp. DOI なし
- [23] M. Itoh, S. Takami, Y. Kawazoe, T. Adschiri: Properties of atomic intercalated carbon K4 crystals, arXiv:1004.3494v1. [2010. 4.20 発行] DOI: 10.1016/j.cplett.2011.02.042
- [24] Wang Jing, Liang Yun-Ye, Chen Hao, Wang Peng, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe: Self-consistent study of conjugated aromatic molecular transistors, *Chin. Phys. Lett.*, 27 (2010), 0673031-0673034. DOI: 10.1088/0256-307X/27/6/067303
- [25] Sho Suda: Coherent configurations and triply regular association schemes obtained from spherical designs. *J. Comb. Th. Ser. A* 117(2010), 1178-1194. DOI:10.1016/j.jcta.2010.03.016 [2010年11月]
- [26] Shinji Kajimoto, Ayaka Mori, Hiroshi Fukumura: Photo-controlled phase separation and mixing of a mixture of water and 2-butoxyethanol caused by photochromic isomerisation of spiropyran, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 9 (2010), 208-212 DOI: 10.1039/b9pp00137a
- [27] Yohji Akama, Kei Irie, Akitoshi Kawamura, and Yasutaka Uwano: VC Dimensions of Principal Component Analysis, to appear in *Discrete and Computational Geometry* 44 (2010), 589-598. DOI: 10.1007/s00454-009-9236-5
- [28] Nurbosyn U. Zhanpeisov, Sakurako Takanashi, Shinji Kajimoto and Hiroshi Fukumura: On the origin of the Raman band shifts for H-bonded complexes of normal alcohols and 2-butoxyethanol with water: A theoretical DFT and MP2 study, *Chemical Physics Letters* 491, 151-155 (2010) DOI: 10.1016/j.cplett.2010.04.015
- [29] A. Jurisic, A. Munemasa and Y. Tagami: On graphs with complete multipartite

- mu-graphs, *Discrete Math.* 310 (2010), 1812-1819 DOI:10.1016/j.disc.2009.12.009
- [30] T. Ikuta and A. Munemasa: Pseudocyclic association schemes and strongly regular graphs, *European J. Combin.* 31 (2010), 1513-1519 DOI:10.1016/j.ejc.2009.08.003
- [31] M. Harada, C. Lam, A. Munemasa and V. D. Tonchev: Classification of generalized Hadamard matrices  $H(6,3)$  and quaternary Hermitian self-dual codes of length 18, *Electronic J. Combin.* 17 (2010), #R171 (electronic) DOI なし
- [32] Y. Nagahata and N. Yoshida: A note on the diffusive scaling limit for a class of linear systems, *Electron. Commun. Probab.* 15 (2010), 68-78. DOI なし
- [33] Y. Nagahata and N. Yoshida: Localization for a class of linear systems, *Electron. J. Probab.* 15, (2010), 636-653. DOI なし
- [34] N. Yoshida: Localization for linear stochastic evolutions, *J. Stat. Phys.* 138 (2010), 598-618. DOI: 10.1007/s10955-009-9876-0
- [35] Y. Ide, N. Konno and N. Obata: Spectral properties of the threshold network model, *Internet Math.* 6 (2010), 173-187. DOI なし
- [36] U. C. Ji and N. Obata: Implementation problem for the canonical commutation relation in terms of quantum white noise derivatives, *J. Math. Phys.* 51 (2010), 123507, 15pp. DOI:10.1063/1.3516477
- [37] Jonathan Hobley, Sergey Gorelik, Tomoya Oori, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, Jun Matsui, Tokuji Miyashita: Cooperative photoinduced two-dimensional condensation in Langmuir films observed using nanosecond pump-probe Brewster angle microscopy, *Biointerphases* 5 (2010), FA105-109. DOI:10.1116/1.3507241 [2010年12月発行]
- [38] S. Kotani and Pham Van Quoc: On asymptotics of eigenvalues for a certain 1-dimensional random Schrodinger operator, *Osaka J. Math.* 48 (2011) 69-89. [2011.3発行] DOI なし
- [39] Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe, Tadafumi Adschiri: Carbon-doped K4 nitrogen: A novel high energy density materials, *Chem. Phys. Lett.* 506 (2011), 175-178. DOI: 10.1016/j.cplett.2011.02.042 [2011年4月発行]
- [40] Tadafumi Adschiri, Lee Youn-Woo, Motonobu Goto, Seiichi Takami: Green materials synthesis with supercritical water, *Green Chem.* 13 (2011), 1380-1390. DOI: 10.1039/C1GC15158D [2011.5.27発行]
- [41] N. Obata: Markov product of positive definite kernels and applications to  $Q$ -matrices of graph products, *Colloq. Math.* 122 (2011), 177-184. DOI なし
- [42] Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe, Tadafumi Adschiri: Pressure-dependent mechanical stability of simple cubic carbon, *Physica B: Physics of Condensed Matter* 406 (2011), 2654-2657. DOI: 10.1016/j.physb.2011.04.009 [2011.7.1発行]
- [43] Arseniy Akopyan and Makoto Tagami: On the number of points in a lattice

polytope, *Electronic Journal of Combinatorial Number Theory (Integers)* 11 (2011) A22, 3 page. DOI: 10.1515/INTEG.2011.046

- [44] A. Chan and A. Munemasa: Hamming graphs in Nomura Algebras, *Linear Algebra Appl.* 435 (2011), 330--341. DOI:10.1016/j.laa.2011.01.020
- [45] S.Kotani; On limit behavior of eigenvalues spacing for 1-D random Schrödinger operators, *RIMS Kôkyûroku Bessatsu B27* (2011), 67–78. DOI なし
- [46] Eiichi Bannai and Makoto Tagami: A note on anticoherent spin states, *J. Phys. A: Math. Theor.* 44 (2011) 342002, 8 page DOI: 10.1088/1751-8113/44/34/342002 [2011年8月]
- [47] Francis Comets and Nobuo Yoshida: Branching random walks in space-time random environment: Survival probability, global and local growth rates, *J. Theoretical Prob.* 24 (2011), 657-687. DOI: 10.1007/s10959-009-0267-x
- [48] Kanako Suzuki and Izumi Takagi: On the role of basic production terms in an activator-inhibitor system modeling biological pattern formation, *Funkcialaj Ekvacioj* 54 (2011), 237-274. DOI なし
- [49] Grzegorz Karch and Kanako Suzuki: Blow-up versus global existence of solutions to aggregation equation with diffusion, *Applicationes Mathematicae* 38 (2011), 243-258. DOI:10.4064/am38-3-1
- [50] Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe: Mechanism for Direct Conversion of Graphite to Diamond, *Phys. Rev. B* 84 (2011), 012102. DOI:10.1103/PhysRevB.84.012102 [2011年7月]
- [51] Gang Chen, Qi Peng, Yoshiyuki Kawazoe: Structural and electronic properties of neutral and charged Ca<sub>8</sub>C<sub>12</sub> metal carbides, *Chemical Physics Letters* 507 (2011), 260–264. DOI: 10.1016/j.cplett.2011.04.011
- [52] Mina Jung, Atsushi Okada, Takanobu Saito, Takashi Suemasu, Chan-Yeup Chung, Yoshiyuki Kawazoe, and Noritaka Usami: In situ observation of polycrystalline silicon thin films grown using aluminum-doped zinc oxide on glass substrate by the aluminum-induced crystallization, *Japanese J. Applied Phys.* 50 (2011) 04DP02 DOI: 10.1143/JJAP.50.04DP02
- [53] Y. Y. Liang, H. Chen, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe: Gate-controlled current and inelastic electron tunneling spectrum of benzene: A self-consistent study, *J. Chem. Phys.* 134 (2011), 144113. DOI: 10.1063/1.3571475
- [54] B. Cai, O. Sugihara, H. I. Elim, T. Adschiri, T. Kaino: A Novel Preparation of High-Refractive-Index and Highly Transparent Polymer Nanohybrid Composites, *Applied Physics Express* 4 (2011) ,092601 3pp. DOI:10.1143/APEX.4.092601 [2011.9.7 発行]
- [55] J. Hobley, S. Gorelik, Y. Kuge, S. Kajimoto, M. Kasuya, K. Hatanaka, H. Fukumura: Dynamics of volume expansion of de-mixing liquids after pulse IR heating, *Aust. J. Chem.* 64(9), 1272–1279 (2011). DOI: 10.1071/CH11171

- [56] M. Harada and A. Munemasa: Classification of quaternary hermitian self-dual codes of length 20, *IEEE Trans. Inform. Theory* 57 (2011), 3758-3762 DOI: 10.1109/TIT.2011.2134330
- [57] N. Obata and H. Ouerdiane: A note on convolution operators in white noise calculus *Infin. Dimen. Anal. Quantum Probab. Rel. Top.* 14 (2011), 661-674. DOI: 10.1142/S0219025711004535
- [58] N. Obata: One-mode interacting Fock spaces and random walks on graphs, *Stochastics*, Available online:24 May 2011, DOI:10.1080/17442508.2010.550919
- [59] S. Torii, Y. Goto, T. Ishikawa, H. Hoshi, K. Goryo, K. Yasumoto, H. Fukumura. K. Sogawa: Pro-apoptotic activity of inhibitory PAS domain protein (IPAS), a negative regulator of HIF-1, through binding to pro-survival Bcl-2 family proteins, *Cell Death Differ.* 18(11), 1711-1725 (2011) DOI:10.1038/cdd.2011.47 [2011.5.6 発行]
- [60] M. Taguchi, S. Takami, T. Adschiri, T. Nakane, K. Sato, T. Naka: Simple and rapid synthesis of ZrO<sub>2</sub> nanoparticles from Zr(OEt)<sub>4</sub> and Zr(OH)<sub>4</sub> using a hydrothermal method, *CrystEngComm* 14 (2012), 2117-2123. DOI: 10.1039/C2CE06408A
- [61] M. Taguchi, S. Takami, T. Adschiri, T. Nakane, K. Sato, T. Naka: Synthesis of surface-modified monoclinic ZrO<sub>2</sub> nanoparticles using supercritical water, *CrystEngComm*. 14 (2012), 2132-2138. DOI: 10.1039/C2CE06409J.
- [62] A. Munemasa and H. Tamura: The codes and the lattices of Hadamard matrices, *Europ. J. Combin.* 33 (2012), 519-533. DOI: 10.1016/j.ejc.2011.11.007
- [63] M. Harada and A. Munemasa: On the classification of weighing matrices and self-orthogonal codes, *J. Combin. Des.* 20 (2012), 40-57 DOI: 10.1002/jcd.20295
- [64] A. Munemasa and M. Sawa: Steiner quadruple systems with point-regular automorphism groups, accepted for publication in *J. Stat. Theory Practice* 2012. DOI: 10.1080/15598608.2012.647536
- [65] M. Tagami, Y. Y. Liang, Y. Kawazoe, M. Kotani: New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8-12 Atoms Found by Euclidean Designs, *Materials Transactions* 53 no.3 (2012), 459-462. DOI: 10.2320/matertrans.N-M2011859
- [66] T. Miezaki, M. Tagami: On Euclidean designs and the potential energy, *Electrotic J. Combin.* Volume 19 (1)(2012). DOI なし
- [67] B. Wen, S. Takami, Y. Kawazoe, T. Adschiri, “Mechanical stabilities of K<sub>4</sub> carbon and K<sub>4</sub>-like NaC<sub>2</sub>”, *J. Chem. Phys.*, 73, 1264–1267, 2012. DOI: 10.1016/j.jpcc.2012.07.013
- [68] B. Wen, S. Takami, Y. Kawazoe, T. Adschiri, “Carbon-doped K<sub>4</sub> nitrogen: A novel high energy density material”, *Chem. Phys. Lett.*, 506, 175–178, 2011. DOI: 10.1016/j.cplett.2011.02.042
- [69] B. Wen, S. Takami, Y. Kawazoe, T. Adschiri, “Pressure-dependent mechanical stability of simple cubic carbon”, *Phys. B*, 406, 2654–2657, 2011. DOI:

10.1016/j.physb.2011.04.009

- [70] A. Hirata, L.J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A.R. Yavari and M.W. Chen, "Geometric frustration of icosahedron in metallic glasses", *Science* (2013) (DOI: 10.1126/science.1232450)
- [71] Yohji Akama and Shinji Iizuka: Random Fields on Model Sets with Localized Dependency and Their Diffraction, *Journal of Statistical Physics*, Volume 149, Issue 3, 2012, Page 478-495 DOI: [10.1007/s10955-012-0588-5](https://doi.org/10.1007/s10955-012-0588-5)
- [72] Kajimoto, S.; Shirasawa, D.; Horimoto, N. N.; Fukumura, H., Additive-Free Size-Controlled Synthesis of Gold Square Nanoplates Using Photochemical Reaction in Dynamic Phase-Separating Media, *Langmuir*, **29**, 5889–5895(2013)
- [73] Fujita, Y.; Horimoto, N. N.; Kajimoto, S.; Fukumura, H., Bias voltage- dependent STM-tip-enhanced Raman spectroscopy of benzenethiol-modified gold nanoplates, *Chem. Phys. Lett.*, (in press) DOI:10.1016/j.cplett.2013.07.028
- [74] J. Lu, S. Asahina, S. Takami, T. Adschiri: Synthesis of gyroid CeO<sub>2</sub> structure using MCM-48 as a hard template, in preparation
- [75] 松江要, 内藤久資, “二値の熱伝導率を持つ領域の第一固有値に対する最適配置”, *応用数理*, Vol. 23, no. 4, 10-15, (2013).  
DOI: 無し
- [76] Taisuke Matsuno, Hisashi Naito, Shunpei Hitotsugi, Sota Sato, Motoko Kotani, Hiroyuki Isobe, “Geometric measures of finite carbon nanotube molecules: A proposal for length index and filling indexes”, *Pure and Applied Chemistry* に掲載予定  
DOI: doi:10.1515/pac-2014-5006
- [77] Mackay like crystals with 8-fold symmetry - a joint building block of a CNT jungle gym, M.Tagami, Y.Liang, H.Naito, Y.Kawazoe, M.Kotani, preprint
- [78] 赤間 陽二, 上條隆宣, 構造化照明蛍光顕微鏡の画像再構成アルゴリズムについて, *応用数理* Vol.23 No.4, 16-21 (2013)
- [79] 田上真, 球デザインの材料科学への応用, *応用数理* Vol.23 No.4, 22-26 (2013)

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

- [1] 小谷元子: 幾何と対称性: ダイヤモンドツイン? 特集「対称性をもつ世界」, *数学セミナー* 2009年7月号, 日本評論社, pp. 23-28
- [2] 小谷真一: 確率微分方程式(誕生とその後の発展), *数学セミナー* 2009年11月号 pp. 68-73
- [3] 徳山豪: 高密度部分グラフの抽出ーその計算限界と打破. *電子情報通信学会誌* 92 (2009)
- [4] 徳山豪: 現代数理科学事典, 計算の数理の部, 編集担当及び執筆, 丸善書店, 2009年

12 月

- [5] M. Kotani, H. Naito and T. Tate (Editors): Spectral Analysis in Geometry and Number Theory, Contemporary Mathematics 484, 2009
- [6] M. Kotani, Y. Moeda and N. Tose (Editors), Noncommutativity and Singularities, Adv.Stud.Pure Math.55, 2009
- [7] H. Fukumura, M. Irie, Y. Iwasawa, H. Masuhara, and K. Uosaki (編集): Molecular Nano Dynamics, Volume 1: Spectroscopic Methods and Nanostructures, Volume 2: Active Surfaces, Single Crystals and Single Biocells, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2009
- [8] 阿尻雅文・市川和義: 超臨界水熱プロセスによるナノ粒子の合成とハイブリッド化, 化学と工業 4月号 2010年
- [9] 堀本訓子・福村裕史: 光学的ナノスコープ, 現代界面コロイド科学の事典, 日本化学会編, 丸善株式会社, 2010年, 3章 新しい解析技術 108 - 109 頁
- [10] 福村裕史: 溶液内における光化学反応の新展開, 化学, 化学同人, Vol. 65, No. 9, pp.70-71 (2010)
- [11] 人生200年、ようやく往路の半分、「数学の道しるべ」、数理科学 48 巻 3 号、2010 年 3 月
- [12] 宮田建治・阿尻 雅文: BN 縦配向コンポジットシート, CM 出版 書籍「高熱伝導性コンポジット材料」(仮)2011 発刊予定
- [13] 「以後の風景」のなかで、混沌の裏には単純があると学ぶ、この数学者に出会えてよかった、数学書房編集部 編、2011 年 5 月
- [14] J. Hobley, D. Paramelle, P. Free, D. G. Fenig, S. Kajimoto, S.Gorelik, “Photothermal Laser Material Interactions – From the Sledgehammer to Nano-GPS” in “Advances in Bio-Imageing: From Physics to Signal Understanding Issues”, Edited by Nicolas Lomenie, Daniel Racoceanu, Alexandre Gouaillard, Springer, 2012.
- [15] 福村裕史: レーザーの手作りから始まった化学 -時間のゆとりと良い研究者仲間恵まれて, 化学と工業, 65(3), 231-233 (2012)
- [16] 吉田伸生, “確率の基礎から統計へ”, 遊星社, 2012, ISBN 978-4-434-16546-7)
- [17] Toshikazu Sunada, “Topological crystallography ---With a View Towards Discrete Geometric Analysis---”, Surveys and Tutorials in the Applied Mathematical Sciences, Vol. 6, Springer, 2012.
- [18] 阿尻 雅文, 新井 智宏, 石川 佳澄, 上野 真孝, 上田 正孝, 岡田 拓也, 大島 英紀, 中川 孝行, 福島 敬二, 前田 重之, 宮田 建治, 森下 丈弘, 山縣 利貴, 高見 誠一, 青木 宣明, 有田 稔彦, 北條 大介, 南 公隆, 富樫 貴成, 朝比奈 俊輔, 田口 実, 梅津 光央, 大原 智, 名嘉 節, “超臨界水熱プロセスによるナノ粒子の合成とハイブリッド化—粒子表面改質による相反機能材料開発—”, 高圧力の科学と技術, Vol. 22, pp.89–96, 2012.

- [19] 高見 誠一, 阿尻 雅文, “表面修飾無機ナノ粒子と有機材料のハイブリッド材料の開発”, OHM, Vol. 99, pp.8–9, 2012.
- [20] 東北大学数学連携の取り組み、応用数理 22(2), 151-153, (2012年6月)
- [21] Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe, Oleg S. Subbotin, Ravil K. Zhdanov, and Vladimir R. Belosludov, “Computational Materials Science and Computer-aided Materials Design and Processing”, Handbook of Sustainable Engineering (2013)
- [22] 青木 宣明, 富樫 貴成, 北條 大介, 高見 誠一, 梅津 光央, 名嘉 節, 阿尻 雅文, 「超臨界法による有機修飾ナノ粒子合成と有機無機ハイブリッド材料創成」, 日本接着学会誌, 49, 191-196, 2013.
- [23] T. Adschiri, S. Takami, T. Arita, D. Hojo, K. Minami, N. Aoki, T. Togashi, “Supercritical Hydrothermal Synthesis”, pp. 949-978, Handbook of Advanced Ceramics (2013)
- [24] 数学・数理科学の新たな潮流・諸科学との連携を求めて—表面科学 Vol. 34 (2013) No. 1 p. 2
- [25] 材料科学と離散幾何解析学の連携による挑戦—表面科学 Vol. 34 (2013) No. 1 p. 3-8
- [26] 「離散幾何から提案する新物質創成・物性発現の解明」への挑戦 AMF/CREST/SMART/WPI-AIMRを推進して、数学 65 巻 3 号(2013年7月)299–302
- [27] 小谷元子, 離散幾何学から提案する新物質創成・物性発現の解明, 応用数理 Vol.23 No.4, 6-9 (2013)
- [28] Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe, Oleg S. Subbotin, Ravil K. Zhdanov and Vladimir R. Belosludov, “Computational Materials Science and Computer-aided Materials Design and Processing”, Handbook of Sustainable Engineering, pp.1215-1247, 2013
- [29] Toshikazu Sunada, “Topological crystallography”, With a view towards discrete geometric analysis. Surveys and Tutorials in the Applied Mathematical Sciences, 6. Springer, Tokyo, 2013. xii+229 pp. ISBN: 978-4-431-54176-9; 978-4-431-54177-6.
- [30] Yhoji, Akama, Review of “Li, Xingjie Helen, Luskin, Mitchell and Ortner, Christoph, Positive definiteness of the blended force-based quasicontinuum method, Multiscale Model. Simul. 10 (2012), no. 3, 1023-1045” (MR3022030), Mathematical Review, American Mathematical Society, 2013

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 65 件、国際会議 94 件)

国内会議 65 件

- [1] 小谷元子(東北大学): Geometric aspect of random walk on a crystal lattice, Perspectives in mathematical sciences, Tokyo University, 2008.10.7-9

- [2] 徳山 豪 (東北大学): Geometric problems on ad-hoc network design, RIMS Workshop on Discrete Mathematics and Computational Geometry, Kyoto, 2008.10.19
- [3] 小谷 真一 (関西学院大学): On limit distribution of zeros of polynomials approximating the exponential function and related topics, Workshop on "Random matrices, special functions and related topics" 京都大学数理解析研究所, 2008.11.15
- [4] 小谷 真一 (関西学院大学): Spectral theory of reflectionless potentials and related topics, ランダム作用素のスペクトルと関連する話題, 京都大学人間環境学研究所, 2008.11.26
- [5] 吉田 伸生 (京都大学): ランダム行列で記述される粒子系の相転移, 「離散幾何学から提案する新物質創成と物性発現の解明」キックオフシンポジウム, 東北大学, 2008.12.26
- [6] 吉田 伸生 (京都大学): Phase transitions for linear stochastic evolutions, Random Systems and Processes, Kyoto University, 2009.2.18
- [7] 阿尻 雅文 (東北大学): 超臨界水中での有機・無機ハイブリッドナノ粒子合成, 超ハイブリッド材料創製に向けて, 第 208 回新規事業研究会, 東京工業大学, 2009 年 4 月 11 日
- [8] Yohji Akama (東北大学) and Shinji Iizuka: Randomized Model Sets and Diffraction, The fifth Asian International Workshop on Quasicrystals, Tokyo 2009 年 6 月 3 日
- [9] Shinji Kajimoto (東北大学): Laser-induced phase separation of binary liquid mixtures: Ultrafast dynamics and its application for nano-chemistry, Symposium on Dynamics of Molecules and Clusters, Sendai, 2009 年 6 月 3 日
- [10] 須田 庄 (東北大学): ある  $\mathbb{Q}$ -多項式スキームの正則性の特徴付け, 第 26 回代数的組合せ論シンポジウム, 遊学館 (山形県生涯学習センター), 2009 年 6 月 26 日
- [11] 全真 嬉 (東北大学): デジタル線分とその応用, ワークショップ「離散アルゴリズムの最先端」, 東京工業大学, 2009 年 7 月 14 日
- [12] Akihiro Munemasa (東北大学): リーチ格子のフレームとその応用, 第 54 回代数学シンポジウム, 明治大学, 2009 年 8 月 6 日
- [13] 阿尻 雅文 (東北大学): 超臨界法による有機・無機ハイブリッドナノ粒子合成と超ハイブリッド材料創製, 化学工学会米沢大会, 山形大学, 2009 年 8 月 10 日
- [14] Nobuo Yoshida (京都大学): Continuous-time linear systems, 統計力学の数学的理論, 大阪電機大学, 2009 年 8 月 25 日
- [15] Akihiro Munemasa (東北大学): The twisted Grassmann graph is the block graph of a design, Japan-Korea Workshop on Algebra and Combinatorics, 九州大学, 2009 年 8 月 27 日
- [16] Nobuo Yoshida (京都大学): Branching Random Walks in Random Environment:

Survival Probability and Growth Rates, Topics in Random Media, 京都大学, 2009年9月15日

- [17] Nobuo Yoshida (京都大学): Power Law Fluids with Random Forcing, 大規模相互作用系の確率解析, 東京大学, 2009年10月9日
- [18] 赤間陽二(東北大学), 飯塚新司: 切断射影集合と回折, 高知タイル貼り小研究集会 2009, 高知大学, 2009年10月24-26日
- [19] Nobuo Yoshida (京都大学): Stochastic power law fluids: Construction of a weak solution, Stochastic Problems and Nonlinear PDEs, 京都大学, 2009年11月30日
- [20] S.Kotani (関西学院大学): Limit distribution of eigenvalues spacing for Schrodinger operators with random decaying potentials, Spectra of Random Operators and Related Topics, 京都大学, 2009年12月2-4日
- [21] 赤間陽二(東北大学): A mathematical model of (localized) correlation and diffraction's absolutely continuous component, 第14回準結晶研究会, ラフォーレ蔵王, 2009年12月17-19日
- [22] Nobuo Yoshida (京都大学): Stochastic power law fluids: the existence and the uniqueness of the weak solution, International Workshop on Mathematical Fluid Dynamics, Waseda University, Tokyo, Japan, 2010.3.13
- [23] Tadafumi Adschiri: Supercritical Route for Organic-Inorganic Hybrid Nanoparticles, 第3回グローバル COE サマースクールシンポジウム東北大学理学部大講義室 2010年8月20日
- [24] Shinji Kajimoto (東北大学): Dynamics of laser-induced phase separation of binary liquid mixtures and its application to nanostructure fabrications, G-COE International Symposium on Physical Chemistry –Structures, Reactions, and Other Chemical Properties of Molecular Systems, Tohoku University, Sendai, September 2-3, 2010
- [25] Tadafumi Adschiri (東北大学): NEDO Project "Super Hybrid Materials" Challenge for Incompatible Multi-Functions, ISAOP&ISSM 国際シンポジウム, 東京工業大学, 2010.9.28-30
- [26] Takeshi Tokuyama (東北大学): Combinatorial Geometry, Mathematics for Geometric Information Processing, 京都賞ワークショップ, Mathematical Development of Algorithm Science. Kyoto, 2010.11.12
- [27] Tadafumi Adschiri (東北大学): Supercritical Hydrothermal Synthesis of Organic-Inorganic Hybrid Nanoparticles - Toward super hybrid Materials - Neptis-19 Sendai, 2010年12月7日
- [28] Nobuo Yoshida (京都大学): Stochastic Power Law Fluids, PDE 実解析研究会, 東京大学, 2011.4.20
- [29] Nobuo Yoshida: Stochastic Power Law Fluids, PDE 実解析研究会, 東京大学, 2011.4.20

- [30] Shinji Kajimoto: Effect of plasmon excitation on fluorescence lifetime of dye molecules nearby gold nanoparticles; two-color experiment, International workshop on characterizations for OPV materials and devices, Miyazaki, 2011.9.5
- [31] 高見誠一:表面修飾金属酸化物ナノ結晶の水熱合成, 集積と機能化, 日本セラミックス協会 第 24 回秋季シンポジウム, 日本, 札幌, 2011.9.8.
- [32] 阿尻 雅文, 高見 誠一, 新井 智宏, 石川 佳澄, 上田 正孝, 上野 真孝, 大島 英紀, 中川 孝行, 福島 敬二, 前田 重之, 宮田 建治, 森下 丈弘, 山縣 利貴: 超ハイブリッド材料技術開発, INCHEM TOKYO 2011, 日本, 東京, 2011.11.15.
- [33] S. Takami: Experimental challenge to realize K4 crystals, The 9th International Workshop on Water Dynamics, Sendai, Japan. 2012.3.8.
- [34] 福村裕史:溶液光化学の新局面:超高速時間分解 X 線散乱と相分離溶媒中の化学反応, 日本化学会第 92 春季年会 (2012), 横浜, 2012.3.25-28.
- [35] Hiroshi Fukumura: Light-induced isomerization of molecules in liquids, Discussion Meeting on FEL experiments and Electron/molecular Dynamics, Kyoto, 2012.3.28-29.
- [36] 近藤剛史, “一様凸空間に対する群作用の固定点定理”, 東北大学幾何学セミナー, 2012 年 5 月 8 日
- [37] Takefumi Kondo, “Fixed point property for uniformly convex spaces”, Geometric group theory and K-theory, RIMS International Camp on Discrete Geometry, Toba Seaside Hotel, 2012.6.14
- [38] Toshikazu Sunada, “Coincidence Symmetry Groups”, 京都大学数理解析研究所プロジェクト「離散幾何解析学」, 京都大学数理解析研究所, 2012.8.27
- [39] Takefumi Kondo, “Nonlinear spectral gap and fixed point property”, Discrete Geometric Analysis, 京都大学数理解析研究所, 2012.8.28
- [40] Nobuo Yoshida, “Brownian Directed Polymers in Random Environment: Complete Localization and Phase Diagram”, Random media II, WPI-AIMR, Tohoku University, Sendai, 2012.9.5
- [41] Mamoru Tanaka, “Expander graphs and higher eigenvalues of the Laplacians on graphs”, Random Media II, 東北大学, 2012.9.7
- [42] Takefumi Kondo, “Poincare inequality and distortion of finite graphs”, 確率論と幾何学, 山形大学, 2012.10.19
- [43] Mamoru Tanaka, “Multi-way expansion constants and expander graphs”, 確率論と幾何学, 山形大学, 2012.10.19-21
- [44] Toshikazu Sunada, “Design of Crystal Structures”, GCOE 国際会議, 明治大学 MIMS, 2012.11.6

- [45] 梶本真司, “レーザー誘起相分離初期過程における気泡の発生と発光現象”, 東京工業大学応用セラミックス研究所ワークショップ「局所高密度励起の化学と応用」, 東京, 2012 年 12 月 6-7 日
- [46] 砂田利一, “Design of Crystal Structures”, 中央大学数学科談話会, 中央大学, 2012 年 12 月 20 日
- [47] Mamoru Tanaka, “Coarse nonembeddability of a graph containing a sequence of expanders as induced subgraphs”, Rigidity School, 東京大学, 2013.1.7-10
- [48] 阿尻雅文, “超臨界水熱合成プロセスによるナノ粒子連続合成 –有機・無機融合ナノマテリアル創成に向けて–”, 新学術領域研究【融合マテリアル】公開シンポジウム, 仙台, 2013 年 1 月 28 日
- [49] 阿尻雅文, “超臨界技術と超ハイブリッド材料技術開発”, 第 11 回高分子ナノテクノロジー研究会講座, 東京, 2013 年 2 月 1 日
- [50] 阿尻雅文, “超臨界場でのナノ界面制御”, ナノ学会ワークショップ「現代幾何学と表面・ナノ物質科学との新融合領域」, 東京工業大学, 東京, 2013 年 3 月 22 日
- [51] 田上真, “調和指数の spherical design”, 第 39 回 CREST セミナー, 東北大学, 2013.5.9
- [52] 田中守, “Multi-way expansion constants and expander graphs”, 第 60 回幾何学シンポジウム, 東京工業大学, 2013.8.24
- [53] 近藤剛史, “Gromov の Wirtinger space と非線形スペクトルギャップ”, 九大幾何学セミナー, 九州大学伊都キャンパス伊都図書館3階 中セミナー室2, 2013.5.24
- [54] 近藤剛史, “Gromov の Wirtinger space と非線形スペクトルギャップ”, 名古屋大学 Rigidity seminar, 名古屋大学理学部 A 館 428, 2013.7.5
- [55] 近藤剛史, “Gromov の Wirtinger space と非線形スペクトルギャップ”, 第60回幾何学シンポジウム, 東京工業大学大岡山キャンパス西五号館, 2013.8.26
- [56] 近藤 剛史, “双曲群とは”, SMART 研究会「応用現代幾何学」, 東北大学大学院情報科学研究科 2F 大講義室, 2013 年 9 月 5 日.
- [57] 阿尻 雅文, “ナノマテリアルプロセッシングのための超臨界流体の利用”, 化学工学会第 45 回秋季大会, 岡山 (2013.9.16-2013.9.18)
- [58] 豊田 哲, 近藤 剛史, “非線形スペクトルギャップに関するグラフの最適実現”, 日本数学会 2013 年度秋季総合分科会, 愛媛大学 城北キャンパス, 2013 年 9 月 26 日.
- [59] 近藤 剛史, 豊田 哲, “ $Cycl_k(0)$  空間と Wirtinger 空間”, 日本数学会 2013 年度秋季総合分科会, 愛媛大学 城北キャンパス, 2013 年 9 月 26 日.
- [60] 梶本真司, “相分離過程に現れる溶液内ナノ構造を反応場とした金属ナノ粒子作製”, 第 3 回 CSJ 化学フェスタ 2013, タワーホール船堀, 2013.10.22
- [61] 近藤 剛史, “固定点定理と非線形スペクトルギャップ”, 早稲田双曲幾何幾何学的群論セミ

ナー, 早稲田大学教育学部数学科 14 号館, 2013 年 10 月 25 日.

- [62] 近藤 剛史, “Gromov の Wirtinger space と非線形スペクトルギャップ”, 金沢大学数理学談話会, 金沢大学自然科学 5 号館 コロキウム室 3, 2013 年 10 月 30 日.
- [63] Toshiaki Omori, “What do we know about three-periodic nets? ”, Joint Workshop on Pure and Applied Mathematics, Kawai Hall, Sendai, 2013.11.1
- [64] 吉田伸生, ”Random walk in disastrous environment”, CREST 報告会, 東北大学, 2013 年, 11月27日
- [65] 小谷眞一, “A remark on Schroedinger operators with random potentials of Cauchy distribution”, 研究集会「ランダム作用素のスペクトルと関連する話題」, 京都大学 人間・環境学研究科, 12月6日

国際会議 94 件

- [1] 小谷元子(東北大学): Geometric aspect of random walk on a crystal lattice, Algebras, Operators and Noncommutative Geometry, Australian National University, Australia, 2008.12.1-5
- [2] 福村裕史(東北大学): Table-top laser-induced x ray and its application to analytical chemistry and physical chemistry , Seminar at University of Melbourne , University of Melbourne, Melbourne, Australia, 2008.12.2
- [3] 福村裕史(東北大学): Instrumental progresses for time and space-resolved fluorescence and Raman spectroscopy: applications including biological systems, A\*STAR Cross-Council Workshop: Optical and Emission Imaging Microscopy for Cell Biology and Biochemistry, Creation Theatre, Matrix, Biopolis, Singapore, 2008.12.5
- [4] 尾畑伸明(東北大学): Spectral analysis of random complex networks, The 3rd Cheongju Workshop on Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, Research Institute of Mathematical Finance and Research Institute of Basic Sciences, Chungbuk National University, Cheongju, Korea, 2009.1.12-14
- [5] Keiko Imai, Akitoshi Kawamura, Jiri Matousek, Yu Muramatsu and Takeshi Tokuyama(東北大学): Distance k-Sectors and Zone Diagrams. Proc. EuroCG 2009 (2009), ブリュッセル, ベルギー, 2009 年 3 月 18 日
- [6] 小谷元子(東北大学): A mathematical challenge to material sciences, Collocium Talk, Technische Universität Graz, Austria, 2009.3.23
- [7] Matias Korman, Takeshi Tokuyama(東北大学): An Improved Algorithm for Insegrint a Highway in a City Metric based on Quasiconvex Optimization Techniques, Proc. 2nd Asian Association for Algorithms and Computation, 杭州, 中国, 2009 年 4 月 11 日
- [8] Takeshi Tokuyama(東北大学): Geometric Routing on Ad Hoc Networks. Proc. 6th Japanese-Hungarian Conference on Discrete Mathematics and Its Applications (2009) 381-387, ブダペスト, ハンガリー, 2009 年 5 月 17 日

- [9] Takeshi Tokuyama (東北大学): Geometric Optimization in Grid Topology and Related Topics. Algorithmic and Combinatorial Geometry 20 (2009) ブダペスト, ハンガリー, 2009年6月18日
- [10] Nobuo Yoshida (京都大学): Linear stochastic evolutions: Diffusive behavior and localization, Workshop on Interacting Particle Systems in honor of Professor T. Liggett's 65th Birthday, 北京大学, 2009年6月19日
- [11] Jinhee Chun (東北大学), Ryosei Kasai, Matias Korman and Takeshi Tokuyama: Algorithms for optimal segmentation of regions decomposable into basic shape, 11th Japan-Korea Joint Workshop on Algorithms and Computation (WAAC09), 2009年7月4日、ソウル、韓国
- [12] Sho Suda: On spherical dual width, 2009 Combinatorics Workshop, Korea Advanced Institute Science and Technology, Korea, 2009年8月21日
- [13] T. Adschiri (東北大学): Supercritical hydrothermal synthesis of organic inorganic hybrid nanoparticles – super-hybrid nanomaterials, The 4th International Conference of Green and Sustainable Chemistry, Beijing, China, 2009年8月21日
- [14] M. Kotani (東北大学): A Mathematical Challenge to a New Phase of Material Sciences, International Conference on Women Scientists, Kaohsiung, Taiwan, 2009.9.4-2009 9.6
- [15] T. Adschiri (東北大学): Supercritical route for superhybrid nanomaterials, The 3rd Symposium on Green Chemical Process Technologies – Innovative Technologies on Intensified and Multi-Functional Chemical Processes, Taiwan, 2009年11月28日
- [16] Akihiro Munemasa (東北大学): On the classification of self-dual  $Z_k$ -codes, the Twelfth IMA International Conference on Cryptography and Coding, Royal Agricultural College, United Kingdom, 2009年12月15日
- [17] Jinhee Chun (東北大学), Ryosei Kasai, Matias Korman, Takeshi Tokuyama: Algorithms for Computing the Maximum Weight Region Decomposable into Elementary Shapes, the 20th Annual International Symposium on Algorithms and Computation (ISAAC09), ホノルル、米国、2009年12月18日
- [18] M. Kotani (東北大学): A Mathematical Challenge to a new phase of Material Sciences, in Geometry and Analysis, Paris 2009.12.21-2009 12.24
- [19] Tadafumi Adschiri (東北大学): Supercritical route for organic-inorganic hybrid nanoparticles, 1st WCUIAMS (POSTECH) – WPIAIMR (Tohoku Univ.) Joint Workshop, Pohang, Korea, 2010.6.18-19
- [20] Takeshi Tokuyama (東北大学): Zone Diagram and Geometric Equilibrium, Conference on Theory and Applications of Models of Computation, Prague, 2010.7.9
- [21] N. Obata (東北大学): Quantum probabilistic aspect to random walks on graphs,

13th Workshop on Noncommutative Harmonic Analysis, Bedlewo, Poland, 2010.07.11

- [22] 宗政昭弘(東北大学): Triply even binary codes, lattices and framed vertex operator algebras, Algebraic and Geometric Combinatorics, 慶州(韓国), 2010年7月12日
- [23] Tadafumi Adschiri: Super Hybrid Nanomaterials, ISHA2010 & CISPT2010, Beijing, China, 2010.7. 27-29
- [24] N. Obata(東北大学): Deformed vacuum states and Q-matrices of graphs, Symposium on Analysis and Probability 2010, Institute of Mathematics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan, 2010.8.10
- [25] Hiroshi Fukumura(東北大学): Laser-induced pulsed x-ray and its application to time-resolved spectroscopy for materials science, ICI-ECP Workshop J: Molecular systems for energy transfer and conversion, Universität Heidelberg, August 30, 2010
- [26] Shin-ichi Matsushima(東北大学), Hikaru Sotome, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura: Laser-induced x-ray sources for time-resolved diffraction of transient states of solids and solutions, 6th Asian Photochemistry Conference, Rutherford House, Wellington, New Zealand, 2010.11.16
- [27] Tadafumi Adschiri(東北大学): Super Hybrid Nanomaterials, AMN-5 Fifth international conference on Advanced Materials and Nanotechnology, The Michael Fowler Centre, Wellington, New Zealand, 2011.2.7-11
- [28] Akihiro Munemasa(東北大学): Binary codes related to the moonshine vertex operator algebra, Mathematical Society of the Philippines Annual Convention, University of Santo Tomas, Manila, the Philippines, 2011年5月21日
- [29] S. Kotani(関西学院大学): Grassmann manifold and spectral theory of 1-D Schrödinger operators, Mini-Course and Workshop: Hilbert spaces of entire functions and spectral theory of self-adjoint differential operators, Centre de Recerca Matemàtica, Barcelona, 2011.5.30-6.4
- [30] Tadafumi Adschiri(東北大学): Supercritical Route for Super Hybrid Nanomaterials, ICMAT 2011, Suntec, Singapore, 2011.6.27
- [31] Akihiro Munemasa: Binary codes related to the moonshine vertex operator algebra, Mathematical Society of the Philippines Annual Convention, University of Santo Tomas, Manila, the Philippines, 2011.5.21.
- [32] S. Kotani: Grassmann manifold and spectral theory of 1-D Schrödinger operators, Mini-Course and Workshop: Hilbert spaces of entire functions and spectral theory of self-adjoint differential operators, Centre de Recerca Matemàtica, Barcelona, 2011.5.30-6.4
- [33] Tadafumi Adschiri: Supercritical Route for Super Hybrid Nanomaterials, ICMAT 2011, Suntec, Singapore, 2011.6.27
- [34] Seiichi Takami: Synthesis of surface-modified metal oxide nanocrystals and their

assembly to realize various materials, Zing Conference - Nanomaterials Conference, Mexico, Cancun, 2011.11.29.

- [35] A. Munemasa: Graphs with complete multipartite mu-graphs, Incidence Geometry and Buildings, University of Ghent, 2012.2.6.
- [36] Nobuaki Obata, “Random walk, quantum walk, and quantum probability”, 6th KMS Probability Workshop, Seoul National University, 2012. 6.1
- [37] Tadafumi Adschiri, “Supercritical hydrothermal synthesis of organic modified nanoparticles -Toward super hybrid materials”, IPNF2012 / International Powder and Nanotechnology Fourm AICHEM 2012, Frankfurt, 2012.6.18-22
- [38] Tadafumi Adschiri, “Green chemistry route for organic modified nanoparticle synthesis by using SCW”, Gordon Research Conferences on Green Chemistry, Lucca (Barga), Italy, 2012.7.22-27
- [39] Nobuaki Obata, “An introduction to quantum white noise calculus”, 2012 NIMS Hot Topics Workshop: The 7th Jikji Workshop: Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, Chungbuk National University, Cheongju, Korea, 2012.7.23—27
- [40] Nobuaki Obata, “Localization of quantum walks on spidernets”, 15th Workshop on Non-Commutative Harmonic Analysis: Random Matrices, representation theory and free probability, with applications, Mathematical Research and Conference Center (MRCC), Institute of Mathematics, Polish Academy of Sciences, Bedlewo, Poland, 2012.9.24-29
- [41] Nobuaki Obata, “Distance k-graphs of direct product graphs and their asymptotic spectral distributions”, Quantum Probabilities and Related Fields, Centre International de Rencontres Mathematiques (CIRM), Luminy, France, 2012.10.1-5
- [42] Sonoko Moriyama, “Holt-Klee condition on SEB cubes, Mittagsseminar, Theory of Combinatorial Algorithms Group, Institute of Theoretical Computer Science”, ETH Zurich, 2012.10.23
- [43] Shuichi Toyouchi, Kenta Kitabatake, Daisuke Shirasawa, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, “Phase Separation Dynamics of Binary Liquid Mixtures: Application of Structured Illumination, Light Emission form Bubbles and Nanoparticles Synthesis in Dynamic Solvents”, IWAMSN 2012 / The 6th International Workshop on ADVANCED MATERIALS SCIENCE AND NANOTECHNOLOGY, Ho Long City, Vietnam, 2012.10.30-11.2
- [44] Nobuaki Obata, “Quantum probability and asymptotic spectral analysis of growing graphs” [Plenary Lecture], International Conference on Stochastic Modelling and Simulation (ICSMS2012) , Vel Tech Dr.RR & Dr.SR Technical University, Chennai, India, 2012.12.17-19
- [45] Nobuaki Obata, “Asymptotic spectral analysis of growing graphs: A quantum probabilistic approach”, International Conference on Frontiers of Statistics and its Applications, Pondicherry University, Puducherry, India, 2012.12.21-23

- [46] Nobuaki Obata, “Quantum probability and asymptotic spectral analysis of growing graphs”, International Conference on mathematical modeling and its applications 2012 (ICMMA 2012), Annamalai University, Annamalainagar, India, 2012.12.22-24
- [47] Nobuaki Obata, “Asymptotic spectral distributions of distance k-graphs of Cartesian product graphs”, International Conference in Honour of Sixtieth Birthday of Rajendra Bhatia: Matrices and Operators, Indian Institute of Science, Bangalore, India, 2012.12.27—30
- [48] Tadafumi Adschiri, “Supercritical Hydrothermal Synthesis of Organic Modified Nanoparticles for the Fabrication of Hybrid Polymers”, ISHA The3rd International Solvothermal and Hydrothermal Association Conference, Austin, U.S.A., 2013.1.15
- [49] Nobuo Yoshida, “Brownian Directed Polymers in Random Environment: Complete Localization and Phase Diagram”, EURANDOM, Eindhoven, 2013.1.18
- [50] Takefumi Kondo, “Spectral criterion for nonexistence of group actions”, Workshop on Mathematics and Glass Physics, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, 2013.1.18
- [51] Y. Kawazoe, “Overcome the Present Status of *ab initio* Simulation for Materials Design and ACCMS Activity” (Special Lecture) ACCMS-7, Suranaree, Thailand (2013/7/22-28)
- [52] H. Mizuseki, R. Sahara, and Y. Kawazoe, “Theoretical Study of Grain Boundaries in Multicrystalline Silicon by Tersoff Potential” (Invited Talk) ACCMS-7, Suranaree, Thailand (2013/7/22-28)
- [53] K. Ohno, R. Kuwahara, S. Ono, Y. Noguchi, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, “The Almighty First-principles Program, TOMBO” (Invited Talk) ACCMS-7, Suranaree, Thailand (2013/7/22-28)
- [54] V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, V. V. Larin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, “The Algorithm for Calculating Van der Waals Dispersion Coefficients with the All-electron Mixed-Basis Approach” (Invited Talk) ACCMS-7, Suranaree, Thailand (2013/7/22-28)
- [55] H. Mizuseki, KIST, Korea, “Computational Materials Science by using the New Supercomputer in IMR - 27 Years with Prof. Kawazoe” (Keynote) The 20<sup>th</sup> Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
- [56] R. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov, and Y. Kawazoe, Tohoku Univ., Sendai, Japan, “Description of properties of gas hydrates using interaction potentials evaluated from TOMBO program” (Invited) The 20<sup>th</sup> Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
- [57] J. T. Wang, C. F. Chen, and Y. Kawazoe, CAS, China, “Kinetic Origin of Phase Transformation Pathways in Carbon, Silicon and Germanium” (Invited) The 20<sup>th</sup> Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International

Conference

- [58] V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R.V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, SB-RAS, Russia, "Van der Waals interaction within density-functional theory in the all-electron mixed-basis TOMBO approach" (Invited) The 20<sup>th</sup> Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
- [59] R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe, NIMS, Japan, "Effect of a nickel cluster on the dissociation dynamics of a hydrogen molecule" (Invited) The 20<sup>th</sup> Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
- [60] S. Kotani; "Limit set of KdV flow", Mathematical Physics of Disordered Systems -A conference in Honor of Leonid Pastur at the FernUniversität in Hagen, Germany, 2013.5.15
- [61] S. Kotani; "On limit set of KdV flow: An extension of Remling's theorem" Mini-Workshop: Direct and Inverse Spectral Theory of Almost Periodic Operators, Oberwolfach, Germany, 2013.7.21-7.27
- [62] Kaname Matsue, "Several applications of homology to materials science", Dynamics and Applied Topology, Kyoto University, Kyoto, 2013. 6/14.
- [63] S. Kajimoto (Tohoku Univ.), "Photo-synthesis of metal nanoparticles in phase separating media and aqueous solution", Collaborative Conference on Materials Research, Jeju, Korea, June 24-28, 2013
- [64] H. Fukumura (Tohoku Univ.), "Tabletop laser-induced x-ray sources and its application", 14<sup>th</sup> Chitose International Forum on Photonics Science & Technology, "Laser – From Science to Applications", Chitose, Hokkaido, July 8-9<sup>th</sup>, 2013
- [65] D. Shirasawa, U. Y. Qazi, S. Toyouchi, S. Kajimoto, H. Fukumura (Tohoku Univ.), "Laser-induced soft nano-structures in binary liquid mixtures and photochemical reactions therein", International Photochemistry Conference 2013, Leuven, Belgium, July 21-26<sup>th</sup>, 2013
- [66] Hiroshi Fukumura (Tohoku Univ.), "Excited State Energy migration in Fluorescent Protein Layers Adsorbed on Chemically Modified Gold Surfaces", Peptides and Proteins: Beyond Structure, Function and Biotechnology, Le Mans, France, July 27-30<sup>th</sup>, 2013
- [67] T. Adschiri (Tohoku Univ), "Supercritical hydrothermal biomass conversion", Sustainable Manufacturing of Nanomaterials and their Organization for Hybrid Device Structures, Ile d'Oléron, 2013.6.10
- [68] T. Adschiri (Tohoku Univ.), "Supercritical Synthesis of Organic Modified Nanoparticles for Hybrid Polymer", ICMAT 2013 Symposium P, Singapore, 2013.7.4
- [69] T. Adschiri (Tohoku Univ.), "Supercritical Synthesis of Organic Modified Nanoparticles", ICMAT 2013 Symposium Q, Singapore, 2013.7.4

- [70] Jinil Kim, Peter Eades, Rudolf Fleischer, Seok-Hee Hong, Costas S. Iliopoulos, Kunsoo Park, Simon J. Puglisi and Takeshi Tokuyama, "Order Preserving Matching", The 16th Korea-Japan Joint Workshop on Algorithms and Computation (WAAC 2013), 2013年7月12日, Tokyo, Japan
- [71] Jinhee Chun, Natsuda Kaothanthong and Takeshi Tokuyama, "Correspondence Finder using Classified Distance Distribution for Efficient Shape Retrieval", The 16th Korea-Japan Joint Workshop on Algorithms and Computation (WAAC 2013), 2013年7月12日, Tokyo, Japan
- [72] Tomoaki Nogawa, "Fundamental classification of critical phenomena in hierarchical small-world networks", International Workshop on Phase Transition, Critical Phenomena and Related Topics in Complex Networks, Conference Hall, Hokkaido University, Sapporo, 2013.09.11.
- [73] Tran Phuong Nhung, Cam-Tu Nguyen, Jinhee Chun, Ha Vu Le and Takeshi Tokuyama, "A Multiple Instance Learning Approach to Image Annotation with Saliency Map", The 5th International Conference on Knowledge Discovery and Information Retrieval (KDIR 2013), 2013年9月21日, Vilamoura, Portugal
- [74] Hiroshi Fukumura, "Laser-induced physical and chemical changes in binary liquid mixtures: how long should we wait until the system entropy is maximized?", International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, Tohoku University, Sendai, 2013.9.28
- [75] Tadafumi Adschiri, "Supercritical route for super hybrid materials", International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, Sendai (2013.9.28-2013.9.30)
- [76] Tadafumi Adschiri, "Supercritical Route for Super Hybrid Materials", Super Green 2013, Taiwan, Kaohsiung (2013.10.11-2013.10.15)
- [77] Tadafumi Adschiri, "Supercritical route for super hybrid materials", The 11th Changwon International Symposium on Advanced Science and Technology 2013, KOREA, Changwon (2013.11.6-2013.11.8)
- [78] "Mackay like crystals with 8-fold symmetry - a joint building block of a CNT jangle gym -", The 8th ACCMS-VO General Meeting, 2013年11月09日, 東北大学. (M.Tagami, Y.Y.Liang, Y.Kawazoe, M.Kotani による共同発表)
- [79] Akihiro Munemasa "Twisted symplectic polar graphs", Workshop on Algebraic Combinatorics, 河北師範大学, 2013年11月20日.
- [80] Shinji Kajimoto, "Hydrogen-Bond Breaking during Phase Separation in Triethylamine -Water Mixture: A Molecular Dynamics Study", Satellite Meeting of ICMS2013, Tohoku University, Sendai, 2013.11.22
- [81] Takefumi Kondo, "Fixed point theorem for  $p$ -uniformly convex spaces", Metric geometry and analysis, Kyoto University, Department of Mathematics, Room 110, 2013.12.10.
- [82] Jinhee Chun, Ricardo Gonzalo and Takeshi Tokuyama, "Space-efficient and

data-sensitive polygon reconstruction algorithms from visibility angle information”, The 24th International Symposium on Algorithms and Computation (ISAAC2013), 2013年12月16日, Hongkong

- [83] Takefumi Kondo, “Fixed point theorems and nonlinear spectral gaps for p-uniformly convex spaces”, Growth 2, Osaka City University Advanced Mathematical Institute, Room 301, 2014.2.3.
- [84] Takefumi Kondo, “On a question of Gromov about Wirtinger spaces”, Rigidity Seminar, Nagoya University, Science Building A, Room 328, 2014.2.17.
- [85] Yoshiyuki Kawazoe, “Higher Level of Ab Initio Computer Simulation for Materials Design : How to Perform Theoretical Design of Materials”, International Symposium on Nanostructures and Their Applications in Renewable Energy (ISNARE-2013), Invited, p.5, 2013.10.25.
- [86] H. Mizuseki and Y. Kawazoe, “Modeling on Adsorption Properties in Novel Hydrogen Storage Materials”, International Symposium on Nanostructures and Their Applications in Renewable Energy (ISNARE-2013), Invited, pp.12-13, 2013.10.25.
- [87] Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Shota Ono, Hitoshi Adachi, Yoshifumi Noguchi, Marcel H. F. Sluiter, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe, “Development of the All-electron Mixed Basis Program, TOMBO”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Keynote, Key-2, 2013.11.08.
- [88] Yong Yang and Yoshiyuki Kawazoe, “Characterization of Zero-point Vibration in One-component Crystals”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Invited, Inv-2, 2013.11.07.
- [89] K. Iyakutti, R. Lavanya, V. Vasu, V.J. Surya and Y. Kawazoe, “Hydrogen Storage in Ni+MgH<sub>2</sub> and Ti+MgH<sub>2</sub> clusters - A First Principles Study”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Invited, Inv-3, 2013.11.07.
- [90] G. Chen and Y. Kawazoe, “Role of Transition Metal in Catalyzing H<sub>2</sub> Splitting”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Invited, Inv-4, 2013.11.07
- [91] V. R. Belosludov O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe, “Formalism for Calculation Van der Waals Dispersion Coefficients within the All-electron Mixed-basis Approach”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Invited, Inv-7, 2013.11.08
- [92] Summayya Kouser, Jaita Paul, Anil Kumar, Takeshi Nishimatsu, Y Kawazoe, Karin M Rabe and Umesh V Waghmare, “First-principles Theory of Structural Transitions and Domain Structure in Bulk and Nano-scale Ferroelectrics”, International Union of Materials Research Society International Conference in Asia 2013 IUMRS-ICA, Invited, 12-Inv-02, 2013.11.16.

- [93] Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Shota Ono, Hitoshi Adachi, Yoshifumi Noguchi, Marcel H. F. Sluiter, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe, "TOMBO, an All-electron Mixed Basis Program", International Union of Materials Research Society International Conference in Asia 2013 IUMRS-ICA, Invited, 24-Inv-03, 2013.12.17.
- [94] Y. Y. Liang, Makoto Tagami, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe and Motoko Kotani, "All Carbon Mackay-Like Crystals with 8-fold Symmetry", International Union of Materials Research Society International Conference in Asia 2013 IUMRS-ICA, Invited, 24-Inv-08, 2013.12.18.

② 口頭発表 (国内会議 123 件、国際会議 49 件)

国内会議 123 件

- [1] 鈴木香奈子(東北大学):ある反応拡散方程式系の解のダイナミクス, 偏微分方程式と現象, 宮崎大学工学部, 2008.11.14-15
- [2] 梶本真司(東北大学):(白澤大輔, 福村裕史と共同) 相分離初期過程に現れる溶液内微小構造を用いた金微粒子の作製, 第 27 回固体・表面光化学討論会, 徳島大学, 2008.11.22-23
- [3] 鈴木香奈子(東北大学):Collapse of patterns in some reaction-diffusion systems and how to prevent it, Singularities Arising in Nonlinear Problems 2008, 関西セミナーハウス, 2008.12.1-3
- [4] 吉田伸生(京都大学):ランダム行列で記述される粒子系の相転移, 確率論シンポジウム, 東京工業大学, 2008.12.16
- [5] 小谷眞一(関西学院大学):1 次元シュレディンガー作用素における無反射性に関連する話題, CREST セミナー, 東北大学, 2008.12.25
- [6] 小谷眞一(関西学院大学): アンダーソン局在の数学的側面, 「離散幾何学から提案する新物質創成と物性発現の解明」キックオフ・シンポジウム, 東北大学青葉記念会館 2008.12.26
- [7] 尾畑伸明(東北大学):量子確率解析からの展望, 「離散幾何学から提案する新物質創成と物性発現の解明」キックオフ・シンポジウム, 東北大学青葉記念会館, 2008.12.26
- [8] 伊藤正寛(東北大学): New metallic carbon crystal, 「離散幾何学から提案する新物質創成と物性発現の解明」キックオフ・シンポジウム, 東北大学青葉記念会館, 2008.12.26
- [9] 鈴木香奈子(東北大学):空間非一様な基礎生産項を含むある反応拡散系の定常解について, 若手のための偏微分方程式と数学解析, 九州大学西新プラザ大会議室, 2009.2.18-20
- [10] 鈴木香奈子(東北大学):ギーラー・マインハルト系の解と空間不均一なパラメータとの関係, 九州非線形数理集中・力学系合同セミナー, 九州大学西陣プラザ中会議室, 2009.2.20
- [11] Ryosei Kasai, Jinhee Chun, Matias Korman, Takeshi Tokuyama(東北大学):

Algorithms for optimal segmentation of regions decomposable into basic shapes,  
電子情報通信学会コンピュータシミュレーション研究会, 札幌, 2009年6月29日

- [12] 田上真(東北大学): Ehrhart 多項式に関するいくつかの結果, 日比セミナー, 大阪大学, 2009年7月8日
- [13] 田上真(東北大学): 球面上のコード、デザイン理論について, 松江セミナー, 島根大学, 2009年7月15日
- [14] 葛西亮生(東北大学), コルマン・マティアス, 全眞嬉, 徳山豪: 基本図形に分割可能な領域の最適切り出しアルゴリズム, LA シンポジウム 2009, 松島, 2009年7月22日
- [15] 全眞嬉(東北大学), 葛西亮生, コルマン・マティアス, 徳山豪, 単調領域の非交差和領域の最適イメージ切り出しアルゴリズム, 第8回 FIT 情報科学技術フォーラム 2009, 仙台, 2009年9月3日
- [16] Jinhee Chun(東北大学), Ryosei Kasai, Matias Korman and Takeshi Tokuyama: On simultaneous optimal segmentation of digital objects, 電子情報通信学会コンピュータシミュレーション研究会, 仙台, 2009年10月16日
- [17] Matias Korman(東北大学) et al (共著者9人): Colorful Strips, Proceedings of Int. Conf. on Computational Geometry and Graph Theory, 金沢, 2009年11月13日
- [18] 今井桂子(東北大学), 河村彰星, 徳山豪, イルジマトウシェク, ダニエルレエム: 距離等分の存在, COM 研究会, 通信学会技術報告 COMP2009-41, 福岡, 2010年1月25日
- [19] 河村彰星, 徳山豪(東北大学), イルジマトウシェク: ユークリッド空間及びノルム空間における地帯図, COM 研究会, 通信学会技術報告 COMP2009-42, 福岡, 2010年1月25日
- [20] Tadafumi Adschiri, "Mathematic and Chemical Engineering", The 1<sup>st</sup> CREST-SBM Symposium "Random Media", 仙台, 2010年1月25日-29日
- [21] 阿尻雅文(東北大学): 超臨界場を用いた有機無機ハイブリッドナノ粒子創製-超ハイブリッド材料にむけて, ソフトナノ材料研究ステーション(SNAMS)・高分子学会東北支部ジョイントシンポジウム-生体分子に学ぶソフトナノ機能材料の創製-&-ポリマーハイブリッドナノ材料開発の最前線, 多元物質科学研究所, 仙台, 2010年3月11日-12日
- [22] 浅野哲夫, ダニーチェン, 徳山豪(東北大学): 2次元線形計画法に対する決定的な定数ワークスペースアルゴリズム, COM 研究会, 通信学会技術報告 COMP2009-52, 東京, 2010年3月12日
- [23] 成田龍太, 徳山豪(東北大学): センサーネットワークの位相情報の検知に関する研究, COM 研究会, 通信学会技術報告 COMP2009-55, 東京, 2010年3月12日
- [24] 安斎進也, 全眞嬉, 葛西亮生, マチアス コルマン, 徳山豪(東北大学): 長方形やタブローの同時配置における隅位置情報の効果, COM 研究会, 通信学会技術報告 COMP2010-5, 大津, 2010.4.22
- [25] N. Yoshida(京都大学): Stochastic Shear Thickening Fluids: Strong Convergence of the Garelkin Approximation and the Energy Equality, Probability Seminar, Tokyo

Institutue of Technology, 2010.6.7

- [26] 田上真(東北大学): On the number of points in lattice polytopes, 第27回代数的組合せ論シンポジウム,高知大学, 2010年6月22日
- [27] 田上真(東北大学):球面上の有限点集合の配置とフラールン, 異分野融合シンポジウム(新エネルギー・材料創生に向けて), 松島, 2010年6月25日
- [28] 黒田紘敏(東北大学):ごく細い領域における演算子の振る舞いについて, 異分野融合シンポジウム--新エネルギー・材料創生に向けて--松島, 2010年6月25-26日
- [29] 森本雄太(東北大学),定兼邦彦,全眞嬉,徳山 豪: アルファベットサイズに依存しない高速近似文字列検索のための線形サイズ索引構造, LA シンポジウム, 2010年7月20日
- [30] 田上真(東北大学): Euclidean design と potential energy について, 九州大学組合せ数学セミナー, 九州大学, 2010年9月1日
- [31] 黒田紘敏(東北大学): 細い領域におけるラプラシアン振る舞いについて, 日本応用数理学会 2010年度年会, 明治大学, 2010年9月6-9日
- [32] 梶本真司(東北大学)・白澤大輔・中村堯祉・福村裕史:レーザー誘起相分離過程を利用した金ナノ結晶の構造制御, 光化学討論会 2010, 千葉大学, 2010年9月8-10日
- [33] 松島進一(東北大学)・五月女光・東遥介・梶本真司・福村裕史:フェムト秒レーザー誘起パルス X 線回折法による無機結晶の過渡的構造変化, 第4回分子科学討論会, 大阪大学, 2010年9月14-17日
- [34] 梶本真司(東北大学)・白澤大輔・豊内秀一・森綾香・中村堯祉・福村 裕史:パルスレーザー誘起相分離過程における微小相の成長とナノケミストリーへの応用, 第4回分子科学討論会, 大阪大学, 2010年9月14-17日
- [35] Takanari Togashi and Tadafumi Adschiri(東北大学): Supercritical Route for Organic-Inorganic Hybrid Nanoparticles, コロイドおよび界面化学国際会議 NSCC2010 International Conference Hall, Makuhari Messe, Chiba, Japan, 2010年9月19-22日
- [36] 黒田紘敏(東北大学):グラフに退化する領域上のラプラシアンの特異極限, 信州数理物理セミナー, 信州大学, 2010年9月27日
- [37] Tadafumi Adschiri(東北大学): NEDO Project "Super Hybrid Materials" Challenge for Incompatible Multi-Functions, ISAOP&ISSM 国際シンポジウム, 東京工業大学, 2010.9.28-30
- [38] 宗政昭弘(東北大学):最小固有値  $-2$  を持つグラフとルート系, 研究集会「Magma で広がる数学の世界」, 九州大学, 2010年10月9日
- [39] Cam-Tu Nguyen(東北大学), Natsuda Kaothanthong, Xuan-Hieu Phan and Takeshi Tokuyama: A Feature-Word-Topic Model for Image Annotation, CERIES GCOE The 3rd Student Organizing International Mini-Conference on Information

Electronics Systems, 仙台, 2010 年 10 月 20 日

- [40] Kanako Suzuki (東北大学): Patterns in a reaction-diffusion model of early carcinogenesis, Mini-Workshop on Modeling, Simulations and Analysis of Biological Pattern Formation, 仙台, 2010 年 10 月 30 日
- [41] 田上真(東北大学): On Euclidean designs and the potential energy, CREST 小谷チーム「離散幾何学から提案する新物質創成・物性発現の解明」中間報告会, 東北大学, 2010 年 11 月 5 日
- [42] 黒田紘敏(東北大学): On the limit behavior of solutions to parabolic equations on thin domains, CREST 小谷チーム中間報告会, 東北大学, 2010 年 11 月 5-6 日
- [43] Kanako Suzuki(東北大学): Patterns of the shadow system with nontrivial basic production terms, Concentration and Related Topics on Nonlinear Problems, 東北大学, 仙台, 2010 年 11 月 22 日
- [44] 鈴木 香奈子(東北大学): 一次元走化性モデルの解の時間大域的挙動, 仙台楕円型・放物型微分方程式研究集会, 東北大学理学部, 仙台, 2010 年 12 月 3 日
- [45] Tadafumi Adschiri (東北大学): Supercritical Hydrothermal Synthesis of Organic-Inorganic Hybrid Nanoparticles - Toward super hybrid Materials - Neptis-19 Sendai, 2010 年 12 月 5-8 日
- [46] 宗政昭弘(東北大学): An Infinite Family of Weighing Matrices, 研究集会「Hadamard 行列とそれに関する代数的組合せ論」, 神戸学院大学, 2010 年 12 月 12 日
- [47] 宗政昭弘(東北大学): Towards the classification of 4-frames in the Leech lattice, 研究集会「Research into Vertex Operator Algebras, Finite Groups and Combinatorics」, 京都大学, 2010 年 12 月 13 日
- [48] N. Obata(東北大学): Join of one-mode interacting Fock spaces and applications, 10th Sendai Workshop on Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, 東北大学大学院情報科学研究科, 仙台, 2010.12.17
- [49] N. Obata(東北大学): Non-commutative independence and structure of graphs, 研究集会「独立性と従属性の数理 --- 函数解析学の視点から」, 京都大学数理解析研究所, 京都, 2010.12.20
- [50] 鈴木香奈子(東北大学): 発癌メカニズムを記述するある反応拡散系が見せる空間パターン, 数学の展開・諸分野との連携を探る, 東北大学理学部, 2010 年 12 月 27 日
- [51] Akihiro Munemasa(東北大学): Accumulation points of the smallest eigenvalues of graphs, Analysis on Graphs in Sendai 2011, 東北大学, 2011 年 2 月 21 日
- [52] Nobuaki Obata (Tohoku University) Asymptotic Spectral Analysis of Large Graphs: A Quantum Probabilistic Approach, Analysis on Graphs in Sendai 2011, 東北大学, 2011 年 2 月 21 日

- [53] Tadafumi Adschiri (東北大学): Supercritical Fluid Technology for Green Materials Supercritical Route for Organic-Inorganic Hybrid Nanoparticles -, The 2011 WPI-AIMR Annual Workshop, Sendai International Center, 2011 年 2 月 24 日
- [54] 黒田紘敏 (東北大学): グラフに退化する領域上での放物型方程式の解の特異極限について, 北海道大学, 第 7 回数学総合若手研究集会, 2011 年 2 月 28 日 - 3 月 3 日
- [55] Akihiro Munemasa (東北大学): Computers and mathematics, a personal view, Sophia Mathematics, 上智大学, 2011 年 3 月 5 日
- [56] Nobuo Yoshida (京都大学): Stochastic Power Law Fluids, 関西確率論セミナー, 2011 年 5 月 20 日
- [57] T. Adschiri (東北大学), S. Takami, K. Minami, T. Yamagata, K. Miyata, T. Morishita, M. Ueda, K. Fukushima, M. Ueno, T. Okada, H. Oshima, Y. Mitani, S. Asahina, S. Unno: 超臨界水熱合成法による有機無機ハイブリッドナノ粒子合成-超ハイブリッド材料創製に向けて-, ナノ学会第 9 回大会, 北海道大学・学術交流会館 2011 年 6 月 2 日
- [58] 梶本真司 (東北大学), 白澤大輔, 中村堯祉, 福村裕史: レーザー誘起相分離過程にある溶液を反応場とした金属ナノ構造体の作製, 「液相中の固体とレーザー光との相互作用: ナノ材料作製のための基礎から応用」, 香川大学, 高松, 2011 年 6 月 11-12 日
- [59] 田上真 (東北大学): 球デザインとその応用について, 東北大学数学専攻談話会, 東北大学, 2011 年 7 月 25 日
- [60] K. Matsue: Rigorous verification of hyperbolic equilibria for evolutionary equations, Workshop on Applied Topology & Dynamical Systems, 九州大学医学部百年講堂, 2011. 9.9.
- [61] 石田千緒, 千葉裕介, 梶本真司, 堀本訓子, 福村裕史, ”金ナノ構造体の表面プラズモン励起に伴う近傍色素分子の蛍光寿命の変化”, 第 5 回分子科学討論会, 札幌, 2011.9.20-23.
- [62] A. Munemasa: Smallest eigenvalues of graphs and root systems of type A, D and E, Topics in the Theory of Weyl Groups and Root Systems, in honor of Professor Jiro Sekiguchi on his 60th birthday, 東京大学, 2011 年 9 月 22 日.
- [63] 黒田紘敏: グラフへ退化する細い領域上の Neumann Laplacian を定める quadratic form の Mosco 収束, 日本数学会 2011 年度秋季総合分科会実函数論分科会, 信州大学, 2011.9.28-10.1.
- [64] K. Matsue: Rigorous verification of hyperbolicity of equilibria in infinite dimensional dynamical systems, 日本数学会 2011 年度秋季総合分科会 (応用数学), 2011.9.28~10.1, 信州大学.
- [65] K. Matsue: Topological characterization of spatiotemporal patterns, 数学連携シーズ探索ミニワークショップ, 2011.10.21, 東北大学.
- [66] 黒田紘敏: 周期的なハミルトニアンの状態密度について, 数学連携シーズ探索ミニワークショップ, 東北大学, 2011 年 10 月 21 日.
- [67] A. Munemasa: Wilson's bijection and upper bounds on cyclotomic numbers, 研究

集会「離散数理構造とその応用」, 名古屋大学, 2011 年 11 月 19 日.

- [68] 阿尻雅文: 超臨界法による有機修飾ナノ粒子合成と超ハイブリッド材料創製, 第 8 回 JEITA 電子材料セミナー～国内外再生可能エネルギーとグリーンイノベーションに貢献する最先端材料の最新動向～, 東京, 2011.11.21.
- [69] 白澤大輔, 梶本真司, 福村裕史: レーザー誘起相分離を反応場とした金ナノ結晶作製における繰り返し光照射の効果, 第 30 回 固体・表面光化学討論会, 長野, 2011.11.21～22.
- [70] 白澤大輔, 梶本真司, 福村裕史: レーザー誘起相分離を反応場とした金ナノ結晶作製における繰り返し光照射の効果, 第 30 回 固体・表面光化学討論会, 長野, 2011.11.21～22
- [71] A. Munemasa: Super Catalan numbers and Krawtchouk polynomials, 第 4 回九州大学組合せ数学セミナー, 九州大学, 2011 年 11 月 26 日.
- [72] 松江要: 無限次元力学系の双曲型不動点の数値検証に向けて, 応用数学合同研究集会 2011, 龍谷大学, 2011.12.15～12.17.
- [73] K. Matsue: Rigorous numerics による PDE のあるタイプの解と力学系の解析, 弘前非線型方程式研究会, コラボ弘前 (弘前大学創立 60 周年記念会館), 2011.12.22～12.23
- [74] S. Takami, “Experimental challenges to realize K4 crystal”, The 9<sup>th</sup> International Workshop on Water Dynamics, Sendai, Japan, 2012.3.8
- [75] 五月女光, 東遥介, 梶本真司, 福村裕史: パルス X 線で観る液体中の”分子の形”の変化, 東北大学理学部開講 100 周年記念公開シンポジウム, 仙台, 2012.3.15.
- [76] K. Matsue: Rigorous numerical verification of local dynamics around equilibria of dynamics in infinite dimensions, SMART Workshop : Exploring Collaborative Mathematics, 東北大学大学院情報科学研究科, 2012. 3.13-3.14.
- [77] H. Kuroda: The density of state of the Tomonaga-Luttinger liquid with geometric conditions, SMART Workshop: Exploring Collaborative Mathematics, 東北大学大学院情報科学研究科, 2012.3.13-14.
- [78] Yasuhiko Fujita, Shinji Kajimoto, Noriko Horimoto, Hiroshi Fukumura, “Tunneling electron and plasmon enhancement effect of photoexcited luminescence emitted from gaps between an STM gold tip and gold nanoplates”, IACIS2012 / International Association of Colloid and Interface Scientists, Conference, Sendai, 2012.5.13-18
- [79] Koichi Sato, Yasuhiko Fujita, Noriko Horimoto, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, “Gap-mode TERS of molecules adsorbed on an STM tip: visualization of purely plasmoninduced hot spots on substrate and its polarization dependence”, IACIS2012 / International Association of Colloid and Interface Scientists, Conference, Sendai, 2012.5.13-18
- [80] Makoto Tagami, “A research on spherical designs and anti-coherent spin states”, Asia Pacific Rim Meeting, The 2nd Institute of Mathematical Statistics, Tsukuba University, 2012.7.2-4

- [81] 田上真, “球面デザインとその応用”, 柏崎数学セミナー, 新潟工科大学, 2012年8月9日
- [82] 鈴木香奈子, “ある反応拡散方程式系における基礎生産項の役割について”, 光ファイバーとそれに関連する非線形偏微分方程式の研究, 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, 2012年8月20日
- [83] 松江要, “Saddle-saddle connection の精度保証付き数値計算”, 短期共同研究「光ファイバーとそれに関連する非線形偏微分方程式の研究」, 九州大学マスフォアインダストリ研究所, 2012年8月20-24日
- [84] 松江要, “Rigorous numerics とその応用” 短期共同研究「光ファイバーとそれに関連する非線形偏微分方程式の研究」, 九州大学マスフォアインダストリ研究所, 2012年8月20-24日
- [85] Kanako Suzuki, “Large time behavior of solutions of some reaction-diffusion equations with Turing instability”, Turing Symposium on Morphogenesis, 仙台国際センター, 2012.8.30
- [86] 松江要, “Saddle-saddle connection の精度保証付き数値検証” 日本応用数理学会 2012年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012年8月28日-9月1日
- [87] Nobuaki Obata, “Random walks, quantum walks and free Meixner laws”, Random Media II, Tohoku University, 2012.09.03-07
- [88] 田上真, “球面デザインとその応用”, RIMS 共同研究「トーリックイデアルに付随する統計モデルの探究」, 京都大学数理解析研究所, 2012年9月12-14日
- [89] 豊内秀一, 梶本真司, 福村裕史, “二液混合溶液の赤外レーザー誘起相分離過程における新しい発光の観測”, 2012年光化学討論会, 東京, 2012年9月12-14日
- [90] 佐藤宏一, 堀本訓子, 藤田康彦, 梶本真司, 福村裕史, “分子修飾 STM 金探針を用いたギャップモードプラズモン増強ラマン散乱測定: STM-ラマン同時マッピングによるホットスポット形成条件の評価”, 第6回分子科学討論会, 東京, 2012年9月18-21日
- [91] 松江要, “Saddle-saddle connection の精度保証付き数値検証” 日本数学会2012年度秋季総合分科会(応用数学), 九州大学, 2012年9月18-21日
- [92] 柴田 穰、西 俊輔、川上 恵典、沈 建仁、Thomas Renger、“Possible, non-photochemical quenching mechanism within photosystem II core complex”, 日本生物物理学会第50回年会, 名古屋, 2012年9月22-24日
- [93] Akihiro Munemasa, “Complex Hadamard matrices contained in a Bose-Mesner algebra”, The 2nd Japan-Taiwan Conference on Combinatorics and Its Applications, Nagoya University, 2012.11.10
- [94] 尾畑伸明, “Recent developments of quantum white noise calculus: Quantum stochastic derivatives and their applications”, RIMS 研究集会「量子場の数理とその周辺」, 京都大学数理解析研究所, 2012年11月14-16日
- [95] 小谷眞一, “A random Jacobi matrix arising from beta-ensemble”, ランダム作用素の

スペクトルと関連する話題, 京都大学, 2012 年 12 月 5-7 日

- [96] 松江要, “Saddle-saddle connection の精度保証付き数値検証について”, 応用数学合同研究集会 2012, 龍谷大学, 2012 年 12 月 20-22 日
- [97] 鈴木 香奈子, “パターン形成が記述する反応拡散系における拡散の役割を考える”, クロスボーダーセミナー, 北海道大学理学部, 2013 年 1 月 14 日
- [98] 松江要, “Saddle-saddle connection の精度保証付き数値検証について”, 東京大学数値解析セミナー, 2013 年 1 月 15 日
- [99] 宗政昭弘, “Complex Hadamard matrices contained in a Bose-Mesner algebra”, Combinatorics Seminar Hakata Workshop, 福岡, 2013 年 1 月 26 日
- [100] Kaname Matsue, “Homology and Glasses”, Structure and Dynamics of Metallic Glass, 東北大学 WPI-AIMR, 2013.2.
- [101] 松江要, “Saddle-saddle connection の精度保証付き数値検証に向けて”, 第 5 回福島応用数学研究集会, コラッセふくしま, 2013 年 3 月 1-2 日
- [102] 宗政昭弘, “On the image of certain rational mapping related to inverse orthogonal matrices”, Workshop on Algebraic Combinatorics, 神戸学院大学, 2013 年 3 月 7 日
- [103] 鈴木 香奈子, “細い領域における半線形楕円型方程式の解の集中点について”, 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2013, 北海道大学理学部, 2013 年 3 月 8 日
- [104] 松江要, “熱拡散ナノ粒子の最適配置” CREST-SMART 年次報告会, 東北大学大学院情報科学研究科, 2013 年 3 月 19 日
- [105] 柴田 穰、西 俊輔、川上 恵典、沈 建仁、“Thomas Renger、植物型光合成反応中心の光捕集過程:構造情報に基づく理解2”, 日本物理学会 2013 年年会, 広島大学, 2013 年 3 月 26-29 日
- [106] 松江 要, "精度保証付き数値計算と力学系 --Saddle-saddle connection を例に--", 応用数学連携フォーラム第 33 回ワークショップ, 東北大学学際科学国際高等研究センター, 仙台(宮城), 2013.4.2
- [107] 松江 要, "複雑さを捉えるための挑戦", 統計思考院セミナー, 統計数理研究所, 立川(東京), 2013. 5/21.
- [108] Akihiro Munemasa, “Complex Hadamard matrices and 3-class association schemes”, 第30回代数的組合せ論シンポジウム, 静岡大学, 2013.6.26.
- [109] 内藤久資「非等質媒質に対するラプラシアン の第一固有値に関する形状最適化」研究集会:スペクトル幾何学とその周辺,東北大学 AIMR,2013.4.13
- [110] 全眞嬉, Ricardo Garcia, 徳山豪, “視角情報による空間効率的な多角形再構築”, 電子情報通信学会コンピューテーション研究会, 神戸, 2013.4.24
- [111] 豊内秀一, 梶本真司, 福村裕史, “レーザー温度ジャンプによって誘起される水/有機溶媒の

混合溶液からの発光”, 2013 年光化学討論会, 愛媛大学, 松山, 2013.9.11

- [112] Akihiro Munemasa, “Complementary Ramsey numbers”, JCDCGG, 東京理科大学, 2013 年 9 月 17 日.
- [113] 田上真, “調和指数の Spherical design”, 九州大学組合せ数学セミナー, 小倉駅北口 KMM 会議ビル, 2013 年 9 月 21 日
- [114] 五月女光, 東遥介, 朝見翔, 梶本真司, 福村裕史, “サブピコ秒時間分解 X 線回折法と過渡吸収分光法による金島状膜の光励起電子-格子ダイナミクスの観測”, 第7回分子科学討論会, 京都テルサ, 京都, 2013.9.24
- [115] 戸田昌利, 梶本真司, 川勝年洋, 赤間陽二, 小谷元子, 福村裕史, “LCST 型相分離現象における分子の幾何形状の効果”, 日本物理学会平成 25 年度秋季大会, 徳島大学, 徳島, 2013.9.27
- [116] Toshiaki Omori, “What do we know about three-periodic nets? ”, CREST 小谷チーム報告会, Kawai Hall, Sendai, 2013.11.27
- [117] 内藤久資 “Negatively curved carbon crystals with 8-fold symmetry”, CREST 成果報告会, 2013 年 11 月 27 日, 東北大学
- [118] 赤間陽二, “球面的ヒルベルトの第 18 問題の解決と球面タイリングの変形”, 研究会「直観幾何学」, 熊本大学, 2 月 11 日
- [119] 能川知昭, “階層スモールワールドネットワーク上の相転移”, 統計物理の新展開 2014, 北海道大学術交流会館, 札幌市, 2014.03.05.
- [120] 田上真, “群作用による Mackay 結晶の分類について”, 代数的組合せ論ミニ集会, 神戸学院大学, 2014 年 3 月 7 日
- [121] 井上和俊, 斎藤光浩, 王中長, 小谷元子, 幾原雄一, “MgO  $\Sigma 5$  粒界近傍の O 格子理論による解析”, 日本金属学会 2014 年春期講演大会シンポジウム(S3-7), 東京工業大学, 2014.3.22
- [122] 能川知昭, 長谷川雄央, “ランダム階層スモールワールドネットワーク上のパーコレーションにおけるメタ転移”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 東海大学湘南キャンパス, 平塚市, 2014.3.29.
- [123] 宍戸統悦, 湯蓋邦夫, 森孝雄, 田中雅彦, 岡田繁, 野村明子, 菅原孝昌, 戸澤慎一郎, 小原和夫, 鎌本喜代美, 佐原亮二, 林好一, 古曳重美, 澤田豊, 手嶋勝弥, 大石修治, 川添良幸 and 吉川彰, “RCO<sub>2</sub>B<sub>2</sub>と R Co<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C(R=Gd,Y)の相関係と性質”, 第 8 回日本フラックス成長研究発表会, Vol.8, No.2, pp.125-126, 2013 年 12 月 6 日.

#### 国際会議 49 件

- [1] 鈴木香奈子(東北大学): Collapse of spatial patterns in an activator-inhibitor system, The 3rd Cheongju Workshop on Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, Research Institute of Mathematical Finance and Research

Institute of Basic Sciences, Chungbuk National University, Cheongju, Korea, 2009.1.12-14

- [2] 伊藤正寛(東北大学): New metallic carbon crystal, The 3rd International Symposium on Applications of Supercritical Fluids in Green Chemistry and Material Science (ISASF2009), Seoul, 2009.2.26
- [3] Hee-Kap Ahn, Sang Won Bae, Sang-Sub Kim, Matias Korman(東北大学), Iris Reinbacher, Wanbin Son: Square and Rectangle Covering with Outliers, 22nd EuroCG, ブリュッセル, 2009年3月17日
- [4] Akitoshi Kawamura, Jiri Matousek and Takeshi Tokuyama(東北大学): Zone diagrams in Euclidean spaces and in other normed spaces. ACM Symposium on Computational Geometry 2010, 米国ユタ州スノーバード, 2010年6月15日
- [5] Keiko Imai(東北大学), Akitoshi Kawamura, Jiri Matousek, Daniel Reem and Takeshi Tokuyama: Distance k-sectors exist, ACM Symposium on Computational Geometry 2010, 米国ユタ州スノーバード, 2010年6月15日
- [6] Tadafumi Adschiri(東北大学): Supercritical route for organic-inorganic hybrid nanoparticles, 1st WCUIAMS (POSTECH) – WPIAIMR (Tohoku Univ.) Joint Workshop, Pohang, Korea, 2010.6.18-19
- [7] Shinya Anzai(東北大学), Jinhee Chun, Ryosei Kasai, Matias Korman, Takeshi Tokuyama: Effect of Corner Information in Simultaneous Placement of K Rectangles and Tableaux. COCOON 2002, ベトナム国ニャチャン, 2010年6月19日
- [8] Kanako Suzuki(東北大学): Spikes and diffusion waves in one-dimensional model of chemotaxis, Nonlocal operators and partial differential equations, Mathematical Research and Conference Center, Bedlewo, Poland, 2010年6月29日
- [9] Tadafumi Adschiri(東北大学): Super Hybrid Nanomaterials, ISHA2010 & CISPT2010, Beijing, China, 2010.7. 27-29
- [10] Tadafumi Adschiri(東北大学): Supercritical Route for Super Hybrid Nanomaterials, CHISA2010 ECCE7, Prague, 2010年8月28日~9月1日
- [11] Tadafumi Adschiri(東北大学): Supercritical Route for Super Hybrid Materials, 9th Conference on Supercritical Fluids and Their Applications, Sorrento (Napoli), Italy, 2010.9. 5-8
- [12] Tadafumi Adschiri(東北大学): Supercritical Route for Super Hybrid Materials, 9th Conference on Solid State Chemistry, Prague, Czech Republic, 2010.9.10-15
- [13] Kanako Suzuki(東北大学): Steady-state patterns of the shadow system with nontrivial basic production terms, Partial Differential Equations in Mathematical Biology, Mathematical Research and Conference Center, Bedlewo, Poland, 2010年9月13日

- [14] Tadafumi Adschiri (東北大学): Green Supercritical Route for Super Hybrid Materials Green Solvento Conference 2010, Germany 2010年10月10-13日
- [15] 田上真(東北大学): On Euclidean designs and the potential energy, Workshop on Algebraic Combinatorics, 河北大学, 中国, 2010年11月27日
- [16] S.Takami(東北大学), K.Minami, D.Hojo, T.Arita, Tadafumi Adschiri: Supercritical Route for Organic-Inorganic Hybrid Nanoparticles, Pacificchem, Hawaii, USA, 2010年12.15-20
- [17] S.Takami(東北大学), K.Minami, D.Hojo, T.Arita, Tadafumi Adschiri: Supercritical Route for Organic-Inorganic Hybrid Nanoparticles, Pacificchem, Hawaii, USA, 2010.12.15-20
- [18] Kanako Suzuki(東北大学): Existence and behavior of solutions to aggregation equations, The 6th Jikji Workshop: Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, NIMS in South Korea, 2011年1月11日
- [19] Tadafumi Adschiri (東北大学): Super Hybrid Nanomateriaqls, AMN-5 Fifth international conference on Advanced Materials and Nanotechnology, Wellinton, NewZealand, 2011.2.7-11
- [20] Kanako Suzuki(東北大学): Asymptotic behaviour of solutions to one-dimensional nonlocal transport equation, International Winter School "Mathematical Analysis of Fluid Mechanics," Bialka Tatrzenska in Poland, 2011年2月8日
- [21] Nobuo Yoshida(京都大学): Stochastic Power Law Fluids, Seminaire de Probabilite, Uviversite Paris Diderot --Paris 7, 2011年3月21日
- [22] Akihiro Munemasa(東北大学): Hadamard graphs and their directed analogue, AGC seminar, POSTECH, 2011年4月1日
- [23] Shinji Kajimoto(東北大学), Daisuke Shirasawa, Takashi Nakamura, Hiroshi Fukumura: Photo-fabrication of gold nano-square crystals in dynamic phase separating media, E-MRS 2011 Spring Meeting, Congress Center, Nice, France, 2011年5月9-13日
- [24] Akihiro Munemasa(東北大学): The twisted Grassmans graph is a block graph of a design, Ateneo de Manila University, 2011年5月24日
- [25] Akihiro Munemasa(東北大学): The total number of reversals for generously transitive permutation groups, Algebra Seminar, University of the Philippines, 2011年5月25日
- [26] M. Tagami(東北大学): On Euclidean designs and the potential energy, 7th Shanghai Conference on Combinatorics, 上海交通大学, 中国, 2011年5月25日-28日
- [27] Kanako Suzuki(東北大学): Patterns in systems of a single reaction-diffusion equation coupled with ODE equations, INdAM Workshop, Geometry of solutions to Parabolic and Elliptic PDE's, Cortona in Italy, 2011年6月21日

- [28] Tadafumi Adschiri (東北大学): Solution Based Synthesis of Nanomaterials and their Organization for Hybrid Device Structures, Telluride Summer Research Center (TSRC) Workshop, Telluride, Colorado, USA, 2011年7月18日
- [29] Tadafumi Adschiri: Supercritical hydrothermal synthesis for super hybrid nanomaterials, International Conference on Materials and Technologies for Green Chemistry Jointly with workshop of cost action, Estonia, Tallinn. 2011.9.6.
- [30] A. Munemasa: Frames of the Leech lattice, Workshop on Algebraic Combinatorics, 上海交通大学, Shanghai, China, 2011.9.15.
- [31] Tadafumi Adschiri: Supercritical route for super hybrid nanomaterials, 8<sup>th</sup> European Congress of Chemical Engineering, 1st European Congress of Applied Biotechnology, 29<sup>th</sup> DECHEMA'S Biotechnology annual meeting, GERMANY, Berlin. 2011.9.29.
- [32] Kaname Matsue, "Rigorous numerical verification of local dynamics around equilibria of dynamics in infinite dimensions", DyToComp2012 (Dynamics, Topology and Computations), Bedlewo, Poland, 2012. 6.25-6.30
- [33] Kanako Suzuki, "Stability of patterns in some reaction-diffusion systems with the diffusion-driven instability", 9th AIMS international conference, Orlando, Florida, 2012.7.3
- [34] Akihiro Munemasa, "Graphs with Smallest Eigenvalue at least -3", The 5th International Workshop on Optimal Network Topologies, Institut Teknologi Bandung, Indonesia, 2012.7.27
- [35] Makoto Tagami, "Some applications of spherical designs, Mini-workshop on Spherical designs and related topics", Shanghai Jiao Tong University, China, 2012.11.19-21
- [36] Kanako Suzuki, "Behavior of solutions of some reaction-diffusion equations with autocatalysis property", Swiss-Japanese Seminar, University of Zurich, 2012.12.18
- [37] Jinil Kim, Peter Eades, Rudolf Fleischer, Seok-Hee Hong, Costas S. Iliopoulos, Kunsoo Park, Simon J. Puglisi and Takeshi Tokuyama, "Order Preserving Matching", The 6th Annual Meeting of the Asian Association for Algorithms and Computation, Matsushima, Japan, April 19, 2013
- [38] Jinhee Chun, Natsuda Kaothanthong and Takeshi Tokuyama, "Shape Description using Classified Distances", The 6th Annual Meeting of the Asian Association for Algorithms and Computation, Matsushima, Japan, April 20, 2013
- [39] Luis Barba, Jean Lou De Carufel, Rudolf Fleischer, Akitoshi Kawamura, Matias Korman, Yoshio Okamoto, Yuan Tang, Takeshi Tokuyama, Sander Verdonschot and Tianhao Wang, "Geometric Weight Balancing", The 6th Annual Meeting of the Asian Association for Algorithms and Computation, Matsushima, Japan, April 20, 2013

- [40] Ricardo Gonzaro and Takeshi Tokuyama, “Space-efficient polygon reconstruction from visibility angle information”, The 6th Annual Meeting of the Asian Association for Algorithms and Computation, Matsushima, Japan, April 21, 2013
- [41] Jinhee Chun, Natsuda Kaothanthong and Takeshi Tokuyama, “Classified-Distance Based Shape Descriptor for Application to Image Retrieval”, 15<sup>th</sup> International Conference on Computer Analysis of Image and Patterns (CAIP2013), York, United Kingdom, August 28, 2013
- [42] S. Kajimoto, D. Shirasawa, U. Y. Qazi, S. Kim, H. Fukumura (Tohoku Univ.), “Photochemical synthesis of metal nanoparticles in dynamic and static solution of water and butoxyethanol; the mechanism studied by transient absorption”, International Photochemistry Conference 2013, Leuven, Belgium, July 21-26th, 2013
- [43] 小谷眞一, “On limit set of KdV flow, Colloquium at The Institute of Mathematical Sciences”, Chennai, India, 9月14日
- [44] Makoto Tagami, “Spherical designs of harmonic index t”, Workshop on Algebraic Combinatorics, Hebei Normal University (China), 11月18日
- [45] Sonoko Moriyama, “Minimal non-orientable matroids of rank 3, Mittagsseminar”, Theory of Combinatorial Algorithms Group, Institute of Theoretical Computer Science, ETH Zurich, Switzerland, February 27th, 2014
- [46] Yoshiyuki Kawazoe, “Preface: The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Preface, 2013.11.07.
- [47] Yu. Yu. Bozhko, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, V. R. Belosludov and V.M. Fomin, “Modeling of Crystal Structures, Compositions and Structural Transitions in Neonwater System”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Oral, Oral-2, 2013.11.07.
- [48] Ravil Zhdanov, Oleg Subbotin, Vladimir Belosludov, Rodion Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe, “Theoretical Modeling of the Phase Diagram of Hydrogen Clathrate Hydrate in Wide Pressure Range”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Oral, Oral-3, 2013.11.07.
- [49] Y. Y. Liang, Makoto Tagami, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe and Motoko Kotani, “All Carbon Mackay-like Crystals with 8-fold Symmetry”, The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Oral, Oral-18, 2013.11.09.

③ ポスター発表 (国内会議 44 件、国際会議 34 件)

国内会議 44 件

- [1] 赤間陽二(東北大学): (入江慶, 河村彰星, 上野康隆と共同) 主成分分析の VC 次元, 第 11 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2008), 仙台国際センター, 2008.10.29
- [2] 梶本真司(東北大学), 森綾香, 福村裕史:スピロピランの光異性化に誘起されるブトキシエタノール-水混合溶液の相分離ダイナミクス, 光化学討論会, 桐生, 2009 年 9 月 16-18 日
- [3] 白澤大輔(東北大学), 梶本真司, 福村裕史:レーザー誘起相分離過程を利用した金微粒子の生成過程における溶液内微小構造のサイズ効果, 光化学討論会, 桐生, 2009 年 9 月 16-18 日
- [4] 太田辰巳(東北大学), 堀本訓子, 福村裕史:走査型トンネル顕微鏡下におけるポリ p-フェニレンビニレン系高分子の探針増強蛍光およびラマン分光, 光化学討論会, 桐生, 2009 年 9 月 16-18 日
- [5] 五月女光(東北大学),小野林季,松島進一,小野博司,梶本真司,福村裕史,大西和樹,西川康明,内田欣吾:溶液内光異性化過程の観測に向けたレーザー誘起パルス X 線を用いた X 線散乱測定, 分子科学討論会, 名古屋, 2009 年 9 月 21-24 日
- [6] T. Adschiri(東北大学) et al: Superhybrid Nanomaterials, Supregreen 2009, 仙台, 2009 年 10 月 16 日
- [7] Y. Y. Liang(東北大学): Electron conductivity of the molecular devices: A new application for TOMBO, Asian Consortium on Computational Materials Science-Virtual Organization Meeting, 仙台, 2010 年 1 月 12-14 日
- [8] G. Yin(東北大学), Y.Y. Liang, F. Jiang, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe: Transport controlled by transverse electric field in graphene nanoribbon with edge-defect junction, The First CREST-SBM International Conference on Random Media, 仙台, 2010 年 1 月 25-29 日
- [9] 山縣利貴(東北大学), 宮田建治, 阿尻雅文: 高熱伝導性有機無機ハイブリッド材料の開発, 化学工学会宇都宮大会, 宇都宮, 2010 年 8 月 19 日-20 日
- [10] 五月女光(東北大学),小野林季,松島進一,梶本真司,福村裕史,大西和樹,西川康明,内田欣吾: X線散乱測定による溶液内 4,4'-ジヨードアゾベンゼンの光異性化反応の追跡, 光化学討論会 2010, 千葉大学, 2010 年 9 月 8-10 日
- [11] 豊内秀一(東北大学), 梶本真司, 福村裕史, Alexander Kiel・Dirk・Peter Herten: 蛍光相関分光法を用いた水/2-ブトキシエタノール混合溶液中での蛍光分子の拡散挙動の観測, 光化学討論会 2010, 千葉大学, 2010 年 9 月 8-10 日
- [12] 森綾香(東北大学), 梶本真司, 福村裕史:スピロピランの光異性化に誘起される水/2-ブトキシエタノール混合溶液の相分離初期過程における溶液構造の変化, 第 4 回分子科学討論会 2010, 大阪大学, 2010 年 9 月 14-17 日
- [13] Kenji Miyata(東北大学), Toshitaka Yamagata, and Tadafumi Adschiri: Extremely High Thermal Properties of Boron Nitride-Epoxy Composite with High Orientation and High Filling Ratio, ISAOP&ISSM 国際シンポジウム 東京工業大学 2010.9.28

- [14] Toshitaka Yamagata(東北大学), Kenji Miyata, and Tadafumi Adschiri: Influence of Thermal and Electrical Insulating Properties by Orientation of Hexagonal Boron Nitride Particles in Silicone Resin, ISAOP&ISSM 国際シンポジウム 東京工業大学 2010.9.28
- [15] Keiji Fukushima (東北大学) and Tadafumi Adschiri: Evaluation of Thermal Conductive Resistance at Organic-Inorganic Interface and Development of Thermal Conductive Hybrid Materials for Electronic Devices, ISAOP&ISSM 国際シンポジウム 東京工業大学 2010.9.28
- [16] 田上真(東北大学),小谷元子,川添良幸,Yunye Liang: ユークリッドデザインの Rhodium Nanocluster 構造解析への応用, 第2回領域シンポジウム「越境する数学」～CREST 研究報告会～, アキバプラザ, 2011年9月7日
- [17] 藤田康彦, 梶本真司, 堀本訓子, 福村裕史: STM 探針と金ナノ構造体間に生じるギャップモードプラズモン増強ラマン散乱及び発光の偏光フォトンマッピング, 宮崎, 2011.9.6-8.
- [18] 田上真, 小谷元子, 川添良幸, Yunye Liang: ユークリッドデザインの Rhodium Nanocluster 構造解析への応用, 第2回領域シンポジウム「越境する数学」～CREST 研究報告会～, アキバプラザ, 2011.9.7.
- [19] 中村堯祉, 白澤大輔, 梶本真司, 福村裕史: 相分離状態において過渡的に現れる微小相を用いた銀・銅ナノ構造体の作製, 平成 23 年度化学系学協会東北大会, 仙台, 2011.9.17-18.
- [20] 佐藤宏一, 藤田康彦, 梶本真司, 堀本訓子, 福村裕史: 分子修飾 STM 金探針を用いたプラズモン増強ラマン散乱測定: 基板形状の効果, 第 5 回分子科学討論会, 札幌, 2011.9.20-23.
- [21] 五月女光, 松島進一, 東遥介, 梶本真司, 福村裕史: フェムト秒レーザープラズマ誘起 X 線を光源として用いた液体試料の X 線散乱測定, 第 5 回分子科学討論会, 札幌, 2011.9.20-23.
- [22] 五月女光, 東遥介, 梶本真司, 福村裕史, “レーザープラズマ誘起X線を光源とした溶液資料の時間分解X線散乱測定: X線源の増強と測定精度の評価”, 第 6 回分子科学討論会, 東京, 2012年9月18-21日
- [23] 小滝雄太, 梶本真司, 福村裕史, “四塩化炭素中に分散した水滴のナノ秒温度ジャンプに伴うラマンスペクトルの変化”, 第 6 回分子科学討論会, 東京, 2012年9月18-21日
- [24] 千葉裕介, 石田千緒, 梶本真司, 堀本訓子, 福村裕史, “二色のレーザーを用い独立に色素及び表面プラズモンを励起した際の金ナノワイヤー近傍色素分子の蛍光寿命変化”, 第 6 回分子科学討論会, 東京, 2012年9月18-21日
- [25] 富澤 繁, 藤田 康彦, 佐藤 宏一, 堀本 訓子, 福村 裕史, “金(111)基板上に作製したベンジルメルカプタン-ベンゼンチオール 二成分自己組織化膜の SERS および STM による評価”, 第 6 回分子科学討論会, 東京, 2012年9月18-21日
- [26] 松江要, “熱拡散ナノ粒子の最適配置”, 計算材料科学と数学の協働によるスマート材料デザイン手法の探索 --階層構造を解析する--, 東北大学 WPI-AIMR, 2013年3月13-15

日

- [27] 田中守, “Connectivities of Networks and Subnetworks”, 計算材料科学と数学の協働によるスマート材料デザイン手法の探索—階層構造を解析する—, 東北大学原子分子材料科学高等研究機構, 2013年3月13-15日
- [28] 宍戸統悦(1), 湯蓋邦夫(1), 森 孝雄(2), 田中雅彦(3), 工藤邦男(4), 岡田 繁(5), 野村明子(1), 菅原孝昌(1), 鎌本喜代美(5), 佐原亮二(1), 林 好一(1), 古曳重美(6), 澤田豊(7), 手嶋勝弥(8), 大石修治(8), 川添良幸(1), 吉川 彰(1)  
(1) 東北大  
(2) 物材機構  
(3) 物材機構 Spring-8 分室  
(4) 神奈川大  
(5) 国土舘大理工  
(6) 九州工大院  
(7) 東京工芸大工  
(8) 信州大  
ThCr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> 型 YCo<sub>2</sub>B<sub>2</sub>, YCo<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C の合成および評価  
ナノ学会 第 11 回大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013.6.6-8
- [29] R. V. Belosludov(1), H. Mizuseki(1), O. S. Subbotin(2), V. R. Belosludov(2) and Y. Kawazoe(3)  
(1) Institute for Materials Research, Tohoku University  
(2) Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia  
(3) New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University  
Theoretical study of nanoporous materials with weak guest-host interactions  
ナノ学会 第 11 回大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013.6.6-8
- [30] O. Subbotin(1,4), R. Belosludov(2), H. Mizuseki(2), V. Belosludov(1,4) and Y. Kawazoe(3), T. Nakamura(4)  
(1) Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia  
(2) Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia  
(3) New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University  
Theoretical study of nanoporous materials with weak guest-host interactions  
ナノ学会 第 11 回大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013.6.6-8
- [31] Michael R Philpott(1) and Yoshiyuki Kawazoe(2)  
(1) Institute of Materials Research, Tohoku University  
(2) New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University  
Adsorption of Hydrogen on Graphene Materials  
ナノ学会 第 11 回大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013.6.6-8
- [32] Yunye Liang(1,2), Hiroshi Mizuseki(1) and Yoshiyuki Kawazoe(1,2)  
(1) Institute for Materials Research, Tohoku University  
(2) New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University  
Modulation of BN-C hetero-nanotubes by External Electric Fields :  
A First-Principles Study  
ナノ学会 第 11 回大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013.6.6-8
- [33] 佐原亮二(1), 土谷浩一(1), 水関博志(2), Marcel Sluiter(3), 大野かおる(4), 川添良幸(2)

(1) 物質・材料研究機構

(2) 東北大学・金属材料研究所

(3) デルフト工科大学

(4) 横浜国立大学

全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料設計

ナノ学会 第 11 回大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013.6.6-8

[34] 水関博志(1), N. S. Venkataramanan (1), 佐原亮二(1), 川添良幸(2)

(1) 東北大学・金属材料研究所

(2) 東北大学・未来科学技術共同研究センター

第一原理計算による新規有機水素貯蔵材料の評価

ナノ学会 第 11 回大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013.6.6-8

[35] U. Y. Qazi, S. Kim, 白澤 大輔, 梶本 真司, 福村 裕史 (東北大院理), "近紫外パルスレーザーを用いた銀イオン水溶液の光還元による微粒子作製:照射時間とサイズの関係", 第 5 回日本化学会新領域研究グループ「液相高密度エネルギーナノ反応場」研究会 "液相中へのレーザー光照射による粒子合成の新展開", 東京, 2013.8.8-9

[36] Umair Y. Qazi, 梶本真司, Sungjae Kim, 白澤大輔, 福村裕史, "Synthesis of nanoparticles via photoreduction of silver ions in aqueous solution: Comparison between CW and pulsed UV light irradiation", 光化学討論会, 愛媛大学, 松山, 2014.9.12

[37] 岡本隆志, 白澤大輔, 梶本真司, 福村裕史, "相分離溶液を反応場として作製した(100)面を持つ金ナノ四角プレートの光学特性の評価", 光化学討論会, 愛媛大学, 松山, 2014.9.12

[38] 豊内秀一, 梶本真司, 戸田昌利, 赤間陽二, 川勝年洋, 小谷元子, 福村裕史, "シングルショット構造化照明法を用いたレーザー誘起相分離過程に現れる周期構造の観測", 第 7 回分子科学討論会 2013, 京都テラサ, 京都, 2013.9.24

[39] 小滝雄太, 梶本真司, 福村裕史, "レーザー誘起温度ジャンプに伴う四塩化炭素中の水-AOT 逆ミセルの構造変化", 第 7 回 分子科学討論会 2013, 京都テラサ, 京都, 2013.9.26

[40] 能川知昭, "Wang-Landau 法による 2 成分剛体球の稠密クラスターの探索", 日本物理学会 2013 秋季大会, 徳島大学常三島キャンパス, 徳島市, 2013.09.28.

[41] 柴田 穰, 浪江 慶祐, 千葉 知史, 梶原 瑞, 加藤 渉, 福村 裕史, "開口数 0.9 の極低温光学顕微鏡の開発とその植物細胞内色素イメージングへの応用", 日本生物物理学会第 51 回年会, 京都国際会館, 京都, 2013.10.30

[42] 浪江 慶祐, 加藤 渉, 中西 華代, 野口 巧, 福村 裕史, 柴田 穰, "新しく開発した極低温顕微鏡による光化学系Iの1分子蛍光分光", 第 53 回日本植物生理学会年会, 富山大学, 富山, 2014.3.18

[43] Ahmed Ali, 柴田 穰, 長尾 遼, 野口 巧, 福村 裕史, "Dedicated comparison of light-harvesting dynamics between the cyanobacterial and the higher plant photosystem II", 第 53 回日本植物生理学会年会, 富山大学, 富山, 2014.3.18

- [44] 宍戸統悦, 湯蓋邦夫, 森孝雄, 田中雅彦, 岡田繁, 野村明子, 菅原孝昌, 佐原亮二, 林好一, 古曳重美, 澤田豊, 手嶋勝弥, 大石修治, 川添良幸 and 吉川彰, “GdCo<sub>2</sub>B<sub>2</sub>とGdCo<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cの相関係およびこれらの性質”, 公益社団法人日本セラミックス協会 第26回秋季シンポジウム, Poster, 1PQ03, 2013.09.04.

国際会議 34件

- [1] 梶本真司(東北大学):(Daisuke Shirasawa, Ayaka Mori, Nurbosyn U. Zhanpeisov, Hiroshi Fukumura と共同) Laser-induced phase separation of binary liquids: Ultrafast dynamics and photochemical reactions in dynamic nano/micro-structured phase, The 5th Asian Photochemistry Conference, Jiuhua Resort & Convention Center, Beijing, P. R. China, 2008.11.1-4
- [2] Daisuke Shirasawa (東北大学), Ayaka Mori, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, “Gold nano-particle formation by photo-reduction during laser-induced phase separation of binary solvents”, E-MRS 2009 Spring Meeting, Strasbourg, France, 2009年6月8-12日
- [3] Shinji Kajimoto(東北大学), Daisuke Shirasawa, Hiroshi Fukumura, Yasuhiko Fujita, Hiroshi Uji-i, Johan Hofkens, “Fabrication of gold nanoparticles in dynamic nano-structured phases during laser-induced phase separation”, International Conference on Photochemistry 2009, Toledo, Spain, 2009年7月19-24日
- [4] Ayaka Mori(東北大学), Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, Photo-controlled phase separation caused by photo-isomerization of spiropyran in water-butoxyethanol mixture, International Conference on Photochemistry 2009, Toledo, Spain, 2009年7月19-24日
- [5] Shinji Kajimoto(東北大学), Daisuke Shirasawa, Ayaka Mori, Yasuhiko Fujita, Hiroshi Fukumura, “Photochemical synthesis of gold nanoparticles in dynamic nano-phases during laser induced phase separation” 10th International Conference on Laser Ablation, Singapore, 2009年11月22-27日
- [6] Cam-Tu Nguyen(東北大学), Natsuda Kaothanthong, Xuan Hieu Phan and Takeshi Tokuyama: A feature-word-topic model for image annotation, ACM CIKM 2010, カナダ国トロント, 2010年10月27日
- [7] Daisuke Shirasawa(東北大学), Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura: Size control of gold nanocrystals synthesized during nanosecond laser-induced phase separation, 6th Asian Photochemistry Conference, Rutherford House, Wellington, New Zealand, November 14-18, 2010
- [8] Hanis Mohd Yusoff(東北大学), Hirotaka Hoshi, Kazuhiro Sogawa, Shinji Kajimoto, Noriko Horimoto, Hiroshi Fukumura: Fluorescence anisotropy decay of YFP adsorbed on gold nanoparticles, 6th Asian Photochemistry Conference, Rutherford House, Wellington, New Zealand, November 14-18, 2010
- [9] Shuichi Toyouchi(東北大学), Shinji Kajimoto, Kenta Kitabatake, Hiroshi Fukumura, Takanobu Kamijo, Yohji Akama, Motoko Kotani: Development of

nanosecond structured illumination microscopy for the observation of periodic nano-structures in solution, International Conference of Materials for Advanced Technologies, Suntec, Singapore, 2011年6月26日-7月1日

- [10] Shuichi Toyouchi, Shinji Kajimoto, Kenta Kitabatake, Hiroshi Fukumura, Takanobu Kamijo, Yohji Akama, Motoko Kotani: Development of nanosecond structured illumination microscopy for the observation of periodic nano-structures in solution, International Conference of Materials for Advanced Technologies, Suntec, Singapore, 2011.6.26-7.1.
- [11] Daisuke Shirasawa, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, “Effect of repetitive laser-irradiation on gold nanocrystal synthesis in dynamic nano-phases during laser-induced phase separation”, IACIS2012 / International Association of Colloid and Interface Scientists, Conference, Sendai, 2012.5.13-18
- [12] Shuichi Toyouchi, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, “Luminescence from bubbles formed by laser induced phase separation in water and 2-butoxyethanol mixtures”, IACIS2012 / International Association of Colloid and Interface Scientists, Conference, Sendai, 2012.5.13-18
- [13] Daisuke Shirasawa, Shinji Kajimoto, Umair Qazi, Hiroshi Fukumura, “Detergent-free synthesis of Au nano-square plates in dynamic nano-phases during laser-induced phase separation; Effect of repetitive laser-irradiation”, Angel 2012-2nd Conference on Laser Ablation and Nanoparticle Generation in Liquids, Hotel Lido Caparena, Taormina (Sicily), Italy, 2012.5.22-24
- [14] Shuichi Toyouchi, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, “Bubble formation and emission during phase separation of water and 2-butoxyethanol mixtures”, CAV2012(8th International Symposium on Cavitation), Novotel Clark Quay, Singapore, 2012.8.13-16
- [15] Daisuke Shirasawa, Shinji Kajimoto, Hiroshi Fukumura, “A transient absorption study on gold nano-particle formation via photo-reduction of gold ions in 2-butoxyethanol/water mixture”, 7th Asian Photochemistry Conference 2012, Osaka, 2012.11.12-15
- [16] Keisuke Namie, Wataru Kato, Hiroshi Fukumura, Yutaka Shibata, “Development of cryogenic microspectroscopy system with numerical aperture of 0.9 applicable to biological systems”, 7th Asian Photochemistry Conference 2012, Osaka, 2012.11.12-15
- [17] Makoto Tagami, “Some applications of spherical designs, The Seventh General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science”, Tohoku University, Sendai, 2012.11.23-25
- [18] Mamoru Tanaka , “Connectivities of Networks and Subnetworks”, AMIS2013, Sendai International Center, Sendai, 2013.2.19-21
- [19] ACCMS, K.V. Gets<sup>1,2</sup>, O. S. Subbotin<sup>1,2</sup>, V. R. Belosludov<sup>1,2</sup>, R.V. Belosludov<sup>3</sup>, H. Mizuseki<sup>3</sup>, Y. Kawazoe<sup>2,4</sup>
  1. Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk, Lavrentieva Av. 3, 630090, Russia

2. Institute of Thermophysics SB RAS, Novosibirsk, Lavrentieva Av. 1, 630090, Russia
3. Institute for Materials Research, Tohoku University, Katahira 2-1-1, Sendai, 980-8577, Japan
4. New Industry Hatchery Center, Tohoku University, Aramaki Aza Aoba 6-6, Sendai, 980-8579, Japan

Investigation of Structure Factor and Collective Vibration Properties  
Using the Lattice Dynamics Method  
ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28

- [20] Zhdanov<sup>1,2</sup>, Oleg Subbotin<sup>1,2</sup>, Vladimir Belosludov<sup>1,2</sup>, Rodion Belosludov<sup>3</sup>, Hiroshi Mizuseki<sup>3</sup>, Yoshiyuki Kawazoe<sup>2,4</sup>
1. Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia;
  2. Institute of Thermophysics SB RAS, Novosibirsk, Russia;
  3. Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai, Japan
  4. New Industry Hatchery Center, Tohoku University, Sendai, Japan
- Hydrogen Storage in Argon Doped Clathrate Hydrates  
ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28
- [21] Yu. Yu. Bozhko<sup>1\*</sup>, O.S. Subbotin<sup>1</sup>, R.V. Belosludov<sup>2</sup>, H. Mizuseki<sup>2</sup>, Y. Kawazoe<sup>3</sup>, V.R. Belosludov<sup>1</sup>, and V.M. Fomin<sup>4</sup>
1. Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, 630090, Russia
  2. Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai, Japan
  3. New Industry Hatchery Center, Tohoku University, Sendai, Japan
  4. Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, SB RAS, Novosibirsk, 630090, Russia
- Simulation of Structural Transitions and Composition for Neon Hydrates Based on Ice Ih and Ice II  
ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28
- [22] G. Chen<sup>1,2\*</sup>, H. Mizuseki<sup>2</sup>, and Y. Kawazoe<sup>2</sup>
1. School of Physics and Technology, University of Jinan, Jinan. 250022, China
  2. Institute for Materials Research, Tohoku University, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan
- Catalytic Properties of Near-surface Alloy of Transition Metal in Aluminum: A Density Functional Theory Study on Structural and Electronic Properties  
ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28
- [23] Yunye Liang<sup>1,2\*</sup>, Hiroshi Mizuseki<sup>1</sup>, and Yoshiyuki Kawazoe<sup>1,2</sup>
1. Institute for Materials Research, Tohoku University, Aobaku, Sendai 980-8577, Japan
  2. New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University, Aobaku, Sendai, 980-8579 Japan
- Modulation of BN-C Hetero-nanotubes by External Electric Fields : A Firstprinciples Study  
ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28
- [24] T.P. Adamova<sup>1\*</sup>, O.S. Subbotin<sup>1</sup>, V.R. Belosludov<sup>1</sup>, R.V. Belosludov<sup>2</sup>, H. Mizuseki<sup>2</sup>, and Y. Kawazoe<sup>3</sup>
1. Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Lavrentieva Av. 3, Novosibirsk, 630090, Russia

2. Institute for Materials Research, Tohoku University, Katahira, 2-1-1, Sendai, 980-8577, Japan
  3. New Industry Hatchery Center, Tohoku University, Aramaki, Aza Aoba 6-6, Sendai, 980-8579, Japan
- Computational Simulation of Structure and Composition of Mine Gas Hydrates ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28
- [25] V. J. Surya<sup>1\*</sup>, Y. Kawazoe<sup>1</sup>, H. Mizuseki<sup>2</sup>, T.Nakamura<sup>3</sup>, O. Subbotin<sup>4</sup>, R. Belosludov<sup>2</sup>, [1] and V. Belosludov<sup>4</sup>
1. New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University, 6-6-4 Aoba, Aramaki, Sendai – 980-8579, Japan
  2. Institute for Materials Research, Tohoku University, 2-1-1, Katahira, Aoba-ku, Sendai – 980-8577, Japan
  3. Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai – 980-8577, Japan
  4. Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia
- Exploration on Ionic Liquid-H<sub>2</sub>O Interaction using First Principles Study ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28
- [26] Thi Nguyen-Minh<sup>1</sup>, Hung Pham-Quang<sup>1</sup>, Nguyen-Nguyen Pham-Tran<sup>1\*</sup>, Yoshiyuki Kawazoe<sup>2</sup>, Hiroshi Mizuseki<sup>2</sup>, and Duc Nguyen-Manh<sup>3</sup>
1. Faculty of Chemistry, University of Science, Vietnam National University, 227 Nguyen Van Cu, District 5, Ho Chi Minh City, Vietnam
  2. Institute for Materials Research, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan
  3. Theory and Modeling Department, Culham Centre for Fusion Energy, United Kingdom Atomic Energy Authority, Abingdon, OX14 3DB, UK
- Theoretical Study of TiO<sub>2</sub> Nanoparticles Interaction with Anchoring Group of Organic Dyes in Dye-Sensitized Solar Cells ACCMS-7, Suranaree, Thailand, 2013.7.22-28
- [27] S. Kajimoto, Y. Chiba, C. Ishida, N. Horimoto, H. Fukumura (Tohoku Univ.), “Fluorescence lifetime changes of dyes nearby gold nanowires due to plasmon excitation revealed by two-colour laser experiment”, International Photochemistry Conference 2013, Leuven, Belgium, July 21-26th, 2013
- [28] H. Sotome, Y. Azuma, S. Asami, S. Kajimoto, H. Fukumura (Tohoku Univ.), “Picosecond time-resolved sub-picometer lattice changes in gold island films revealed by laser plasma-based X-ray diffraction”, International Photochemistry Conference 2013, Leuven, Belgium, July 21-26th, 2013
- [29] S. Toyouchi, S. Kajimoto, H. Fukumura, “Temperature jump-induced visible-light emission from binary mixtures of organic solvents and water”, International Photochemistry Conference 2013, Leuven, Belgium, July 21-26th, 2013
- [30] Hikaru SOTOME, Yosuke AZUMA, Sho ASAMI, Shinji KAJIMOTO, Hiroshi FUKUMURA, Ultrafast electron and lattice dynamics in gold island films probed by transient absorption spectroscopy and laser-plasma based X-ray diffraction, International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, Tohoku University, Sendai, 2013.9.30
- [31] Shuichi Toyouchi, Shinji Kajimoto, Fukumura Hiroshi, Temperature jump induced light emission from water and organic solvents mixtures, International

Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, Tohoku University, Sendai, 2013.9.30

- [32] V. J. Y. Surya, Y. Sivalingam, Y. Kawazoe, C. Di Natale and R. Paolesse, "DFT Study on Detection of Cysteine on Metalloporphyrins Coated ZnO Nanostructures", The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Poster, PS-16, 2013.11.07.
- [33] Yunye Liang and Yoshiyuki Kawazoe, "Half-Metallicity Modulation of Hybrid BN-C Nanotubes by External Electric Fields: A First-Principles Study", The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Poster, PS-23, 2013.11.07.
- [34] K. Shida and Y. Kawazoe, "Approximated MCMC of Heisenberg-model with Reduced usage of FFT", The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO), Poster, PS-29, 2013.11.07.

#### (4)知財出願

- ① 国内出願 ( 0件)
- ② 海外出願 ( 0件)
- ③その他の知的財産権

#### (5)受賞・報道等

##### ① 受賞

- [1] Masahiro Itoh: Best Presentation Award, ISASF2009, 平成 21 年 2 月
- [2] 徳山豪: 電子情報通信学会フェロー、2012 年 9 月 12 日
- [3] 阿尻雅文: 平成 22 年度産学官連携功労者表彰文部科学大臣賞「超ハイブリッド材料の開発」、2010 年 6 月 5 日
- [4] 阿尻雅文: 平成 22 年度文部科学大臣表彰科学技術賞(研究部門)「超臨界水反応による新材料創製の研究」、2010 年 4 月 5 日
- [5]第11回 GSC 賞 文部科学大臣賞「超臨界水中での低環境負荷有機修飾金属酸化物ナノ粒子の大量合成」阿尻 雅文、2012 年 6 月 11 日
- [6]化学工学会賞、阿尻雅文、2013 年 3 月 17 日
- [7]Hikaru Sotome, Poster award in the International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, 2013.9.30

##### ② マスコミ(新聞・TV等)報道

- [1] 共同通信/河北新報(2009.02.12): 第3の炭素結晶を証明 東北大、回路に応用も
- [2] 日経産業新聞(2009.02.12): 炭素新物質の存在予言 東北大合成に着手
- [3] 日刊工業新聞(2009.02.13): 東北大、「K4」金属結晶を確認ー生成法見通しも
- [4] 日経産業新聞(2009.03.12): 合成のヒント、数学の予言

- [5] 日刊工業新聞 (2009.10.19) : 「セラミック 高分子と均一に混合 東北大、高機能材料に道」
- [6] 仙台経済界 (2010.05.25) : 「川添良幸: 「本物」を追求し新材料を創造する」
- [7] 科学新聞(2012.9.28) : 「東北大 AIMR」
- [8] 河北新報社 科学欄 プリズム 連載 9月～11月(各週) 川添良幸
- [9] 日経産業新聞 (2014/01/28) 「東北大, 分子の形に指標」  
Taisuke Matsuno, Hisashi Naito, Shunpei Hitotsugi, Sota Sato,  
Motoko Kotani, Hiroyuki Isobe,  
Geometric measures of finite carbon nanotube molecules:  
A proposal for length index and filling indexes, に関する報道

③ その他

なし

(6)成果展開事例

① 実用化に向けての展開

② 社会還元的な展開活動

- 1) 本研究成果をインターネット(<http://www.mathmate.tohoku.ac.jp/>)で公開し、一般に情報提供している。
- 2) 東北大重点戦略支援プログラム「数学をコアとするスマートイノベーション融合研究共通基盤の構築と展開」の数理材料科学班、東北大原子分子材料科学国際研究機構(WPI-AIMR) 数学ユニットとの相補的な研究体制をリードしている。

§ 6 研究期間中の活動

6. 1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

平成 20 年度

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2008.9.19	アドバイザー講演会	東北大学理学研究科	20	Sergio Albeverio (ボン大学名誉教授) Asymptotics of infinite dimensional integrals and applications  本プロジェクト開始に先立って、チームアドバイザーを招聘したもの
2008.10.14-16	アドバイザー講演会	東北大学理学研究科	10	Uzy Smilansky(ワイズマン研究所名誉教授)Nodal Domains from Chladni to Quantum Chaos  本プロジェクト開始にあたって、チームアドバイザーを招聘したもの
2008.11.6	第1回 MathMate チュートリアル (非公開)	東北大学多元物質科学研究所素材棟	10	高見誠一(東北大学)耐熱性高分子中における高熱伝導性の達成
2008.11.18	第2回 MathMate	東北大学理	20	赤間陽二(東北大学)準周期的構造の大域的

	チュートリアル (非公開)	学部総合棟		性質
2008.11.21-24	流体力学極限の合宿研究会	KKR 稲取	25	千代延大造(関西学院大学)流体力学極限導出におけるエントロピー法、バラダン達の方法論の紹介 永幡幸生(大阪大学)勾配条件についてと拡散係数の決まり方 半田賢司(佐賀大学)T.Yau によるエントロピー法  吉田伸生(京都大学)Markov Chain から流体力学極限の入り口まで
2008.12.25	第1回 CREST セミナー	東北大学理学研究科数学棟	10	小谷真一(関西学院大学) 1次元シュレディンガー作用素における無反射性に関連する話題
2008.12.26	キックオフシンポジウム	東北大学青葉記念会館	50	小谷真一(関西学院大学)アンダーソン局在の数学的側面 吉田伸生(京都大学)無限次元ランダム行列で記述される粒子系の相転移 赤間陽二(東北大学)準周期構造と数値積分との関連について 尾畑伸明(東北大学)量子確率解析からの展望 伊藤正寛(東北大学) New Metallic Carbon Crystal 川添良幸(東北大学) ビリアル定理:3次元空間が決める物質構造の根源
2009.1.10-13	第2回 CREST セミナー	東北大学理学研究科数学棟	10	秋山茂樹(新潟大学)自己誘導構造と Pisot 数  大石亮子(KEK)粉末構造解析のアルゴリズムとその問題点について  ベノワ(新潟大学)CNS タイリング
2009.2.21-22	第1回 MathMate ミニワークショップ	東北大学大学院理学研究科化学大学院講義棟	30	福村裕史(東北大学)二成分混合液体の相分離ダイナミクス  川勝年洋(東北大学)高分子混合系の粗視化モデルの構築とシミュレーション  Qui Tran-Cong-Miyata(京都工芸繊維大学)反応性高分子混合系の相分離における Modes Selection の諸問題  杉峰伸明(京都大学)イジング模型における大偏差原理と相転移

				高見誠一(東北大学)有機無機ナノハイブリッド高熱伝導性材料
2009.3.10,13	第3回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟中講義室	10	Michel Deza (北陸先端大、Ecole Normale Supérieure) 1) Geometry of the Structure of Viruses 2) Space Fullerenes

平成 21 年度

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2009.5.7	第1回 CREST セミナー	東北大学理学部合同棟	10	田上真(東北大学)「Geometry of Chemical Graphs」の解説1
2009.6.4	第2回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	田上真(東北大学)「Geometry of Chemical Graphs」の解説2
2009.6.18	第3回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	田上真(東北大学)「Geometry of Chemical Graphs」の解説3
2009.7.2	第4回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	鈴木香奈子(東北大学) ある反応拡散系の解の存在とその挙動
2009.7.23	第5回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	杉峰伸明(京都大学) 完全グラフ上のランダム・クラスターモデルについての論文紹介
2009.9.2-4	CREST レクチャー	東北大学理学研究科数学棟	10	吉田伸生(京都大学) 線形確率成長模型: 拡散/局在相転移
2009.10.7	計算材料学研究部門セミナー	東北大学金属材料研究所セミナー室	30	Liang Yunye(東北大学) 全電子混合基底法第一原理シミュレーション計算プログラムへの2体グリーン関数法電子伝導計算を追加する方策について報告し、参加者との議論を行った。
2009.10.8	第6回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	黒田紘敏(東北大学) 非斉次項を持つ離散化された特異拡散方程式の解の挙動
2009.10.22	第7回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	田上真(東北大学)「Geometry of Chemical Graphs」の解説4
2009.11.5	第8回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	福永知則(北海道大学) 語のトポロジーとその結び目理論周辺への応用について
2009.11.19	第9回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	杉峰伸明(東北大学) 境界に駆動力を持つ排他過程の流体力学極限と大偏差原理の紹介 I
2009.12.3	第10回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	篠原雅史(鈴鹿工業高等専門学校) 距離集合的観点から見た正多面体の配置の美しさについて
2009.12.15	第10回応用数学連	東北大学学	20	応用数学連携フォーラムとCRESTセミナーの

	携フォーラムワーク ショップ	際科学国際 高等研究セ ンター大セ ミナー室		共催ワークショップ  内藤久資(名古屋大学) 結晶格子の視覚化と炭素結晶  菊池弘明(北海道大学) 単位球上における非線形シュレディンガー方 程式の定在波の安定性について
2010.1.12-1 4	Asian Consortium on Computational Materials Science-Virtual Organization Meeting	東北大学金 属材料研究 所講堂及び ホテル松島 大観荘会議 室	110	アジア地区の計算材料学研究集会。24件の 招待講演、22件の口頭発表、及び57件のポ スター発表があった。本チームからの報告も行 わる。
2010.1.25-2 9	国際研究集会 The 1st CREST -SBM symposium "Random Media"	仙台国際セ ンター	100	CREST 数学領域からの支援を受けて開催。 24件の招待講演、30件の口頭発表、7件の ポスター発表があった。
2010.2.24-2 5	CREST レクチャー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	Mathieu Dutour-Sikiric (Rudjer Boskovic Institute, Croatia) Space Fullerenes

平成 22 年度

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2010.4.2	第11回CRESTセ ミナー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	田上真(東北大学) 「Geometry of Chemical Graphs」の解説5
2010.4.9	第12回CRESTセ ミナー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	小田忠雄(東北大学) Finite graphs, crystal lattices and convex tilings
2010.4.16	第13回CRESTセ ミナー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	黒田紘敏(東北大学) 細い領域におけるラプラシアン振る舞いにつ いて
2010.5.7	第14回CRESTセ ミナー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	杉峰伸明(東北大学) 境界に駆動力を持つ排他過程の流体力学極 限と大偏差原理の紹介 II
2010.5.21	第15回CRESTセ ミナー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	赤間陽二(東北大学) Pinwheel tiling のパターンによる照明と蛍光 顕微鏡の解像度の向上
2010.6.4	第16回CRESTセ ミナー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	杉峰伸明(東北大学) 境界に駆動力を持つ排他過程の流体力学極 限と大偏差原理の紹介 III
2010.6.18	第17回CRESTセ ミナー	東北大学情 報科学研究 科棟	10	大島伸行(北海道大学) Level-set および Phase field アプローチに よる予混合火炎のモデル化

2010.7.2	第 18 回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	井ノ口順一(山形大学) 差分幾何について
2010.7.16	第 19 回 CREST セミナー	東北大学情報科学研究科棟	10	毛利哲夫(北海道大学) 材料組織形成のマルチスケール計算
2010.10.1	第 20 回 CREST セミナー	東北大学理学合同棟	10	澤野嘉宏(京都大学) カールソンのフーリエ変換の $L^2$ -収束定理に関して
2010.10.8	第 21 回 CREST セミナー	東北大学理学合同棟	10	田中亮吉(京都大学) Penner-Andersen による「Fatgraph Models of Proteins」の解説
2010.10.15	第 22 回 CREST セミナー	東北大学理学合同棟	10	大塚岳(群馬大学) Allen-Cahn type equation for multiple or spiral steps and its singular limit
2010.11.5-6	CREST 小谷チーム「離散幾何学から提案する新物質創成・物性発現の解明」中間報告会	東北大学大学院情報科学研究科大講義室	30	Uzy Smilansky (海外アドバイザー)、砂田利一(明治大学)の招待講演 2 件とチームメンバーによる研究発表 7 件
2010.11.19	第 23 回 CREST セミナー	東北大学理学合同棟	10	山下登茂紀(北里大学) 閉路が存在するための次数和条件
2010.12.3	第 24 回 CREST セミナー	東北大学理学合同棟	10	田上真(東北大学) universally optimal code の紹介
2011.1.21	第 25 回 CREST セミナー (応用数学連携フォーラム第 16 回ワークショップとの共催)	東北大学情報科学研究科棟	30	Jack Koolen (Department of Mathematics, POSTECH) Phylogenetic Combinatorics 樋口雄介(昭和大学) Spectral structure of the Laplacian on a covering graph
2011.2.4	第 26 回 CREST セミナー	東北大学理学合同棟	10	吉田伸生(京都大学) Stochastic Shear Thickening Fluids: Strong Convergence of the Galerkin Approximation and the Energy Equality.
2011.2.11	研究集会 Analysis on Graphs in Sendai 2011	東北大学理学合同棟	30	Tomoyuki Shirai (Kyushu University) Random analytic functions and their zeros Akihiro Munemasa (Tohoku University) Accumulation points of the smallest eigenvalues of graphs Nobuaki Obata (Tohoku University) Asymptotic Spectral Analysis of Large Graphs: A Quantum Probabilistic Approach Fumihiko Nakano (Gakushuin University) Domino tilings with impurities Pavel Exner (Czech Academy of Sciences) Vertex approximations in quantum

				graphs
--	--	--	--	--------

平成 23 年度

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2011.5.13	第 27 回 CREST セミナー	東北大学理学研究科合同棟	10	児玉大樹 (東京大学 数理科学研究科) Fatgraph モデルによるタンパク質モデリングの数理
2011.5.20	第 28 回 CREST セミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	砂田利一 (明治大学理工学部) How to define “non-pathological” topological crystals
2011.10.21	数学連携シーズ探索ミニワークショップ	東北大学理学研究科合同棟	15	黒田紘敏「周期的なハミルトニアンの状態密度について」 松江要「Topological characterization of spatiotemporal patterns」ほか若手による 10 件の研究報告
2011.11.10	第 29 回 CREST セミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	橋本幸士 (理化学研究所 仁科センター) 「超弦理論で微分方程式を解く」 「AdS/CFT 対応と素粒子論」
2011.11.17-20	流体力学極限勉強会	信州春日温泉かすが荘	6	佐々田槇子 (慶應大学) ノイズのある非調和振動子鎖に対する中心極限定理の分散  田中亮吉 (京都大学) 結晶格子上の格子気体の流体力学極限-勾配系  永幡幸生 (新潟大学) 2 つの保存量を持つ格子気体の流体力学極限
2012.2.18-19	Mathematical approach to emerging topics in material science 2012	東北大学 WPI-AIMR 本館2階セミナー室	70	Jean Bellissard 教授 (Georgia Institute of Technology) から 13 人の講師を国内外から招聘し、国際学会を行った

平成 24 年度

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2012.4.26	第 30 回 CREST セミナー	東北大学理学研究科合同棟	20	小磯深幸教授 (九州大学 IMI) を招聘し 「平均曲率一定曲面の分岐と安定性およびその一般化」について講演を行った概要
2012.5.28	第 31 回 CREST セミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	河備浩司教授 (岡山大学理学部) を招聘し 「三角格子上の非対称ランダムウォークの推移確率の長時間漸近挙動」について講演を行った
2012.5.31	第 32 回 CREST セミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	田中太初准教授 (東北大学情報科学研究科) が「組み合わせ最適化へのアソシエーションスキームの応用の発展」について講演を行った

2012.7.5	第33回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	10	寺本央助教(北海道大学電子科学研究所、大学院生命科学院)を招聘し「反変Lyapunovベクトルとそれを用いた法反発的不変面の構成」について講演を行った
2012.7.13	第34回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	夫紀恵氏(東京大学大学院情報理工学系研究科)を招聘し「平面的periodicグラフ上最短路計算について」について講演を行った
2012.7.26	第35回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	中野史彦教授(学習院大学)を招聘し「Kenyon-Wilson理論とダイマーモデルへの応用」について講演を行った
2012.9.3-7	Random Media II	東北大学WPI-AIMR 2F セミナー室	70	G. Grimmitt 教授ら25人の講師を国内外から招聘し、国際学会を行った
2012.10.25	第36回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	20	蔵本由紀名誉教授(京都大学)を招聘し「集団同期現象」について講演を行った
2012.12.13	第37回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	10	戸田昌利氏(東北大学)が「界面活性剤水溶液の内部構造とレオロジー」について講演を行った
2013.1.31	第38回CRESTセミナー	東北大学WPI-AIMR 2F セミナー室	15	松枝宏明准教授(仙台高等専門学校)を招聘し「物性論・情報理論の立場から見たゲージ・重力対応」について講演を行った
2013.1.29	組合せ論セミナー 「Some extremal results with given degree sequences」	東北大学情報科学研究科	10	上海交通大学 Xiao-Dong Zhang 教授を招聘し招待公演を行った。
2013.3.3	研究集会「ポテンシャル論に現れる逆問題と求積公式」	東北大学情報科学研究科	20	緒方准教授(電気通信大学)を招聘し招待公演を行った他、小野寺有紹が概要を解説し、平尾将剛が求積公式の解説を行った。

平成 25 年度

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2013.4.19-21	The 6th Annual Meeting of the Asian Association for Algorithms and Computation (AAAC2013)	松島	80	アルゴリズム・計算理論国際会議を主催した。
2013.4.27 2013.5.25 2013.6.22 2013.7.20	放送大学「勉強会」	放送大学大阪学習センター	20	放送大学学生を対象に「確率論の発展」というタイトルで講演
2013.5.9	第39回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	田上真准教授(九州工業大学情報工学部)を招聘し「調和指数のSpherical Design」について講演を行った。

2013.5.16	第40回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	20	寺田賢二郎氏(東北大学災害科学国際研究所)を招聘し「均質化法に基づくマルチスケール・マルチフィジックス解析」について講演を行った。
2013.5.27, 28, 30	CIMPA Research School of Graphs, Codes and Designs	Ramkhamhaeng University Bangkok, Thailand	60	講師の一人として大学院生向けの連続講義を行った。
2013.6.28	第41回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	20	佐々田槇子助教(慶應義塾大学理工学部)を招聘し「流体力学極限による非平衡統計力学へのアプローチ」について講演を行った。
2013.7.23-28	ACCMS7	スラナリ工科大学	250	アジア地区で開催される理論材料設計専門家の国際会議。
2013.7.25	第42回CRESTセミナー	東北大学理学研究科合同棟	15	千葉逸人助教(九州大学数理学研究院)を招聘し「一般化スペクトル理論とその結合振動子系への応用」について講演を行った。
2013.8.6	東北大学組合せ論セミナー	東北大学情報科学研究科	20	筑波大学の田崎博之氏による公開講演会を開催した。
2013.8.9	離散数学とその応用2013 研究集会	山形市保健センター	60	入門講義の講師の一人として、「組合せデザインから得られる線形符号」というタイトルの講義を行った。
2013.8.8-9	第20回 高校生のための「仙台数学セミナー」	東北大学理学部数理科学記念館(川井ホール)およびホテルふじや	15	意欲ある高校生に、大学で学ぶ現代数学の一片を講義・セミナー・演習形式で提供するのが目的。タイトルは「多面体から曲面へ」で、オイラー数を中心に議論を行った。
2013.8.19-23	Geometry and Topology of Liquid Crystals and Related Ordered Materials, Niels Bohr Institute International PhD School	The Niels Bohr Institute, Copenhagen, Denmark	26	液晶や金属有機構造体およびメソポーラス材料などの幾何学的構造に関する最先端研究の紹介および知識交換のためのスクール
2013.8.21-22	TOMBO20周年記念講演会	東北大学片平キャンパス	120	第一原理シミュレーション計算プログラムTOMBOに関する講演および研究会を開催した。
2013.10.18	ラジオ出演	東北大学情報科学研究科	4	放送大学のラジオ放送科目「コンピューティングー原理とその展開」における「8. 計算量」を担当(森山園子先生)
2013.11.7-9	アジア計算材料学コンソーシアム仮想組織国際会議	東北大学及びホテル松島大観荘	約100	川添の主催するアジア地区の計算材料学研究者集団が集まる年に1回の定期的集会。(川添研究室)
2013.11.27	CREST 小谷チーム「離散幾何学から提	東北大学大学院理学研	37	川添良幸(東北大学)「理論物理とは?・物理数学と数学物理」ほか10名の研究報告

	案する新物質創成・物性発現の解明」報告会	究科・川井ホール(数理学記念館)		
2013.11.30-2013.12.1	放送大学面接授業	大阪市	40	「行列とマルコフ連鎖」というタイトルで授業(小谷眞一先生)

## § 7 最後に

数学分野では初めてのチーム型・課題解決型の研究であり、研究推進・チーム運営にあたっては試行錯誤であった。5年半の研究実施のなかで、数学にあった協働体制が徐々に形成された。申請時の研究テーマに関しては、いずれも目標を達成し成果を論文・研究会などで発表した。数学が提案した指針にそって、材料合成・装置開発を行うことも構想し、実験グループとともに定期的な議論を繰り返し、材料合成・装置開発に挑み、種々の新たな手法が発見された。物性発現の解明に関しては様々な新たな知見が得られたが、研究期間中には新物質創成にはいたらなかった。挑戦的な課題であり、研究期間終了後も共同研究を継続して行く予定である。このように数学と実験科学ががっしりと協力体制を組み、本気の議論を繰り返しこれまでと全く異なる視点や手法が産まれたのは、「数学を中心にすえた」領域があつて初めて実現できた。本研究には、数学背景の若手研究者が数多く参加した。実験研究者との協働研究は、従来の数学科・数学専攻では得られない貴重な体験であつた。それを通じて新しいタイプの人材が育成されたことは、大げさに言えば、日本の科学技術研究を長期的に変えるものである。本チーム研究員の多くは研究職にキャリアアップしたが、これは数学背景を持ち諸分野との連携に積極的な人材が強く求められていることの証であろう。大変ではあつたが、楽しい5年半の研究であつた。