

令和 4 年 6 月 3 日現在

機関番号：34419

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K03777

研究課題名(和文) ソフトマター準結晶と準周期タイリング理論の革新的展開

研究課題名(英文) Advanced study of softmatter quasicrystals and quasiperiodic tiling theory

研究代表者

堂寺 知成 (Dotera, Tomonari)

近畿大学・理工学部・教授

研究者番号：30217616

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：黄金比に基づく10回対称ペンローズタイリング、白銀比に基づく8回対称タイリングが1970年代から1980年代にかけて発見され、1980年代に実験的に発見された金属準結晶の数学的基礎を与えた。それから40年余り新しい金属比の準結晶タイルは発見されなかったが、本研究では、代表者が創成した学術分野「ソフトマター準結晶」に着想を得て、青銅比準結晶に加えて、偶数および3の倍数の金属比をもつ準結晶タイリングを含む準結晶タイリングを無限に構成した。40年ぶりにブレイクスルーを果たし、研究題目にある「準周期タイリング理論の革新的展開」という世界で独自の研究成果を生み出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

40年余り新しい金属比の準結晶タイリングは発見されなかったが、本研究によって青銅比を皮切りに無限個の金属比の準結晶タイリングが構成できることが分かったことに、本成果の学術的意義がある。そのほとんどが4回及び6回対称性を持ち、「準結晶タイリングの特徴が、従来の結晶学で許されない回転対称性を持つ」という人口に膾炙した表現が正しくないことをわかりやすく例示している。準結晶を含む結晶学の書き換えが必要で、基礎学理の革新である。このブレイクスルーには、ハードマター(金属)準結晶研究の枠を超え、ソフトマター準結晶研究を遂行したことが不可欠であって、分野横断的な研究の有効性を示した点にも社会的意義がある。

研究成果の概要(英文)：Until recently, it has been believed that the most characteristic feature of quasicrystals is their once-forbidden rotational symmetry, the established examples being the 10-fold Penrose and the 8-fold Ammann-Beenker tilings. Contrary to this belief, we recently have found the 6-fold bronze-mean tiling.

In this project, by generalizing the Ammann-Beenker tiling and the bronze-mean tiling, we show an infinite number of 4-fold and 6-fold aperiodic tilings with various inflation factors including even metallic means and the metallic-mean of multiples of three. Implying that we cover two-thirds of metallic means ($k=3, 4, 6, 8, 9, 10, 12, \dots$) as the inflation factors of new quasicrystals by using conventional square and hexagonal rotational symmetries. In the limit of these tilings, they become the square lattice or the hexagonal lattice; they are thus considered as quasiperiodic approximants to periodic crystals, and fill the gap between quasicrystals and incommensurate structures.

研究分野：物性物理学

キーワード：準結晶 ソフトマター 結晶学 分子シミュレーション タイリング

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

古典結晶学で許されない回転対称性を持つ「準結晶」の発見は 20 世紀後半の物質科学上の大発見の 1 つに数えられ、2011 年にノーベル賞が授与された。準結晶がノーベル賞で注目を浴びて以来、金属系以外の準結晶研究が爆発的に展開し、物質の種類、階層に関わらず普遍的に準結晶構造があることがわかってきた。研究代表者はアルキメデスタイリング構造、高分子準結晶 (PRL2007) モザイク準結晶 (10 回、12 回、18 回対称, Nature2014) 青銅比準結晶 (Nature Materials 2017) など、実験研究者、理論研究者と共同しつつ計算機物理学的手法で 21 世紀の結晶物理学の新たな潮流「ソフトマター準結晶」の研究分野を開拓してきた。

図 1 に示すように、黄金比(1.618)に基づく 10 回対称ペンローズタイリング、白銀比(2.414)に基づく 8 回対称アンマン・ピーンカータイリングが 1970 年代から 1980 年代にかけて発見されたが、これらは 1980 年代から実験的に発見されたきた金属準結晶の数学的基礎を与えている。研究代表者はこれらのタイリングの系列で 3 番目の金属比である青銅比(3.303)に基づく 6 回対称準結晶タイリングを発見、2017 年 Nature Materials 誌に発表している。

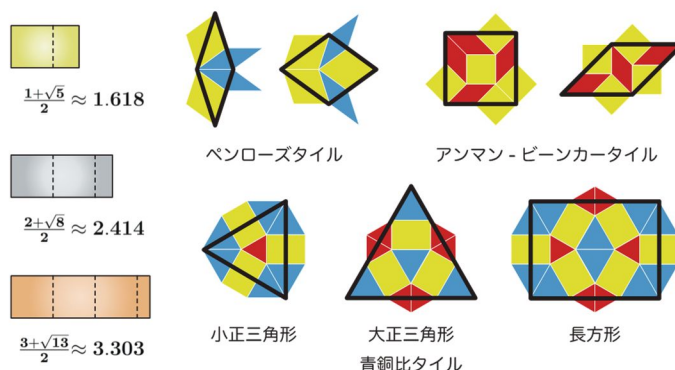


図 1. 黄金比、白銀比、青銅比タイリング

2. 研究の目的

- ・ ソフトマター準結晶の計算研究から得られた新しい準周期タイリング「青銅比タイリング」をさらに拡張し、革新的な準周期タイリングの理論を構築すること。
- ・ ソフトマテリアルの分子デザインの無限の可能性を利用して、数学、物理学、化学、結晶学、ナノテクノロジーの分野横断的発想で、従来の固体物理学の枠に収まらない予想外の秩序構造をさらに探究し「ソフトマター準結晶の物理学」を発展させること。

3. 研究の方法

- 準結晶のための高次元結晶学および物性物理学の理論的方法
- ハードコア-ソフトショルダー粒子系の分子シミュレーション (モンテカルロ法)
- 密度汎関数法

4. 研究成果

- 1) 中蔵-堂寺-Ziherl は、ソフトマター準結晶研究に端を発し、6 回対称および 4 回対称の金属比準結晶タイリングを無数に生成する方法を発見し、従来の準結晶理論を包含する枠組みである革新的準結晶理論の発見に至った。

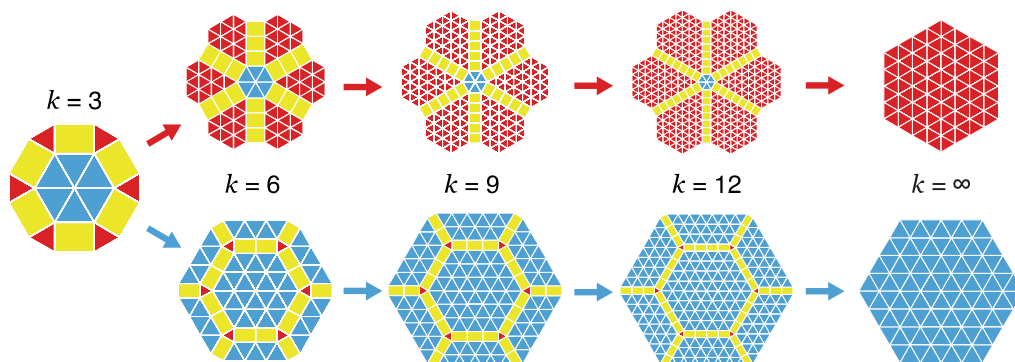


図 2. 3 倍数 (6,9,12,...) の金属比をもつ自己相似タイリング列

- ・ 図 2 に示すように、2 種類の 3 倍数 (6, 9, 12, ...) の金属比をもつ自己相似タイリング列を発見した。同時に金属比以外にも無限種類の自己相似タイリングの構成法も発見した。これまで数種しかなかった自己相似タイリングを無限に広げることになった。
- ・ 準周期結晶の近似列の先に周期的結晶がある「近似準結晶」という概念を提唱した。この

「近似準結晶」の考え方は、これまで知られていた「近似結晶」と相補的概念となっており、準結晶は物珍しいのではなくて、沢山あって、そのなれの果てが結晶であると考えます。

- ・ 技術的にも6次元理論を4次元の標準的理論に書き直し、簡便な高次元計算法を整備した。
- ・ 成果の第1報はNature Communications誌に発表した。
- ・ Nature Instagramに取り上げられた。
- ・ Nature ブログ「Behind the Paper」に記事を寄稿した。
- ・ スロベニアでの第14回準結晶国際会議を始め、複数の招待講演を行った。
- ・ 中蔵は、2019年度近畿大学大学院学長賞を受賞した。
- ・ 中蔵は、2020年日本物理学会学生優秀発表賞(2回目)を受賞した。
- ・ 8回対称 Ammann-Beenker タイリングの拡張として、偶数の金属比($k=4, 6, 8, \dots$)をもつ4回対称準周期タイリングに展開し、論文をまとめた(投稿準備中)。4番目の金属比タイリングは4回対称でありながらフィボナッチ列を構造の中に有するという際立った特徴がある。
- ・ ECIS2022でZiherl教授が発表予定である。

- 2) 英国からArcher教授、Rucklidge教授の2名が来日、研究代表者の所属大学に滞在、青銅比6回対称ソフトマター準結晶の密度汎関数理論についての共同研究を行った。
- ・ 密度汎関数理論の結果から、等対角長方形三角形(EquiDiagonal Rectangle-triangle; EDRT)タイリングという新しい6回対称準周期タイリング構造が現れた。
 - ・ 自己相似変換、高次元タイリング理論を整備した。
 - ・ 森本-堂寺が、拡張型ハードコア-ソフトショルダー粒子系の計算研究でEDRTタイリングの生成に成功し、日本物理学会で森本が発表した。
 - ・ 密度汎関数理論の結果から、青銅比タイリング構造が現れた。
 - ・ MRM21国際会議で招待講演を行った。Aperiodic2022でもRucklidge教授が発表予定である。

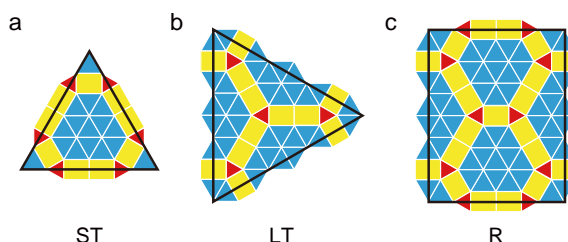
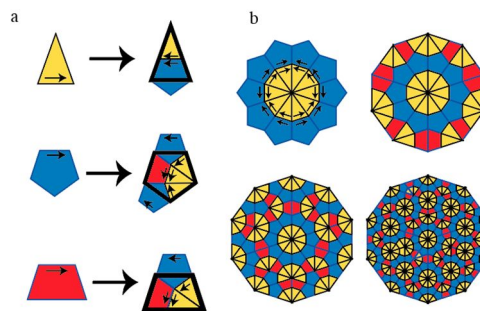


図3. 等対角長方形三角形タイリング

- 3) その他 チューピングタイリング
- ・ 新たなソフトマター準結晶の可能性として、高瀬-堂寺が、拡張型ハードコア-ソフトショルダー粒子系の計算研究で、10回対称チューピングタイリングの生成に成功、日本物理学会で高瀬が発表した。
 - ・ 10回対称チューピングタイリングについて、チューピング5角形タイリングの新しい自己相似変換を発見し、MRM21国際会議で高瀬が発表した。



以上、本計画「ソフトマター準結晶と準周期タイリング理論の革新的展開」によって、金属比について、 $k=1, 2, 3, 4, 6, 8, 9, 10, 12, \dots$ の準結晶が得られた。なお、そのほとんどの金属比準結晶が4回及び6回対称性を持ち、「準結晶タイリングの特徴が、従来の結晶学で許されない回転対称性を持つ」という人口に膾炙した表現は正しくないことがわかった。

これらの研究は、ソフトマテリアルの分子デザインの無限の可能性を利用して、数学、物理学、化学、結晶学の分野横断的発想で、従来の固体物理学とソフトマター科学の枠に収まらない予想外の革新的物質構造を発見するという当初の目的に沿った成果となっている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Nakakura Joichiro, Zihel Primoz, Matsuzawa Junichi, Dotera Tomonari	4. 巻 10
2. 論文標題 Metallic-mean quasicrystals as aperiodic approximants of periodic crystals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41467-019-12147-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計13件（うち招待講演 5件/うち国際学会 8件）

1. 発表者名 Alastair Rucklidge, Tomonari Dotera, Andrew Archer
2. 発表標題 Rectangle-triangle soft-matter quasicrystals with hexagonal symmetry
3. 学会等名 10th Interanational Conference on Aperiodic Crystals (Aperiodic 2022)(June, Sapporo) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomonari Dotera, Kota Morimoto, Andrew Archer, Alastair Rucklidge
2. 発表標題 Quasiperiodic tiling and density wave pictures in hexagonal quasicrystals
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM21) (PACIFICO YOKOHAMA) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Mikoto Takase, Tomonari Dotera
2. 発表標題 Tubingen triangle tilings formed by hard-core/square-shoulder particles
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM21) (PACIFICO YOKOHAMA) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森本康太、堂寺知成
2. 発表標題 拡張HCSSペアポテンシャルを用いた新規6方準結晶のモンテカルロシミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会（岡山大学・岡山理科大学オンライン）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高瀬みこと、堂寺知成
2. 発表標題 ハードコア-ソフトショルダー粒子系のチューピング三角形タイリングの構造形成
3. 学会等名 第25回準結晶研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高瀬みこと、堂寺知成
2. 発表標題 ハードコア-ソフトショルダー粒子系のチューピング三角形タイリングの構造形成
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Joichiro Nakakura, Tomonari Dotera
2. 発表標題 Aperiodic tilings derived from the Ammann-Beenker tiling
3. 学会等名 The 14th International Conference on Quasicrystals (ICQ14) (May, Slovenia) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomonari Dotera
2. 発表標題 Metallic-mean quasicrystals: Sequences of quasicrystals that approach crystals
3. 学会等名 The 14th International Conference on Quasicrystals (ICQ14) (May, Slovenia) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomonari Dotera
2. 発表標題 Metallic-mean quasicrystals: Sequences of quasicrystals that approach crystals
3. 学会等名 International Workshop on Soft Matter: Analysis, Computation, and Applications (June, Jilin University, China) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Joichiro Nakakura, Tomonari Dotera
2. 発表標題 Aperiodic tilings derived from the Ammann-Beenker tiling
3. 学会等名 Interdisciplinary Symposium for Quasicrystals and Strongly Correlated Electron Systems (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomonari Dotera
2. 発表標題 Metallic-mean quasicrystals: Sequences of quasicrystals that approach crystals
3. 学会等名 Interdisciplinary Symposium for Quasicrystals and Strongly Correlated Electron Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高瀬みこと, 堂寺知成
2. 発表標題 2つの長さスケールを持つ斥力粒子系の結晶成長シミュレーション
3. 学会等名 固液を区別するパラメタ 長距離秩序か配向秩序か (大阪電気通信大学)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堂寺知成
2. 発表標題 金属比準結晶と近似準結晶
3. 学会等名 離散幾何解析とその周辺 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究室URL http://softmatter.phys.kindai.ac.jp 研究室URL http://softmatter.phys.kindai.ac.jp Behind the paper, Nature Research Community https://devicematerialscommunity.nature.com/channels/1618-behind-the-paper/posts/53215-metallic-mean-quasicrystals-as-aperiodic-approximants-of-periodic-crystal Nature Instagram https://www.instagram.com/p/B3hA9E3BtRW/ 中蔵丈一郎君、大学院学長賞 https://softmatter.phys.kindai.ac.jp/assets/images/news/nakakura.jpg 中蔵丈一郎君、日本物理学会学生優秀発表賞、2回目の受賞 https://www.jps.or.jp/activities/awards/gakusei/2020a-student-presentation-award.php</p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	松澤 淳一 (Matsuzawa Junichi)	奈良女子大学・理学部・教授 (14602)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
スロベニア	University of Ljubljana	Josef Stefan Institute		
英国	University of Leeds	Loughborough University		