科学研究費助成事業 研究成果報告書



平成 26 年 6 月 24 日現在

機関番号: 22401

研究種目: 挑戦的萌芽研究 研究期間: 2011 ~ 2013

課題番号: 23654135

研究課題名(和文)無機化合物準結晶の可能な立体構造

研究課題名(英文) A potential three-dimensional structure of an inorganic quasicrystal

研究代表者

石原 正三 (Ishihara, Shozo)

埼玉県立大学・保健医療福祉学部・教授

研究者番号:10290727

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 2,200,000円、(間接経費) 660,000円

研究成果の概要(和文):ペンローズパターンの折り紙モデル(PPOモデル)に用いた正八面体の骨格構造(スケルトン)が、三次元ペンローズタイリングの三次元準周期構造を構成する二種類の菱形六面体のうちのアキュート六面体に含まり、面体に対応していることが示唆され、黄金八面体のスケルトンを折り紙で制作して、PPOモデルの黄金八面体に特定の配向があることを明らかにした。

面体に特定の配向があることを明らかにした。 国際会議や学会等で研究成果の発表を積極的に行い、大量の八面体のスケルトンを作ってポータブルなPPOモデルを新たに組み立て、三次元準周期構造が八面体のみで表現できること、および、面と角を共有して接続された黄金八面体の配向を立体モデルによって具体的に説明した。

研究成果の概要(英文): It has been suggested that regular octahedral skeletons constructing an Origami-mo del of Penrose Pattern, abbr. PPO-model, would correspond to golden octahedra appearing in an acute parall elepiped, which is one of the two parallelepipeds, obtuse and acute ones, occurring in a three-dimensional Penrose Tiling. By making use of golden octahedral skeletons made of Origami, it has been revealed that golden octahedra in PPO-model exhibit a typical orientation.

A new portable PPO-model has been constructed by using a lot of octahedral skeletons, and the PPO-model has been used for presenting that a quasi-periodic structure can be exhibited by the PPO-model made of only octahedra, and orientations of face- and vertex-sharing golden octahedra has been pointed out concretely.

研究分野: 数物系科学

科研費の分科・細目: 物理学・数理物理・物性基礎

キーワード: 準結晶 折り紙モデル 無機化合物 準周期構造 ペンローズパターン 八面体のスケルトン アキュ

ート六面体 黄金八面体

1.研究開始当初の背景

(1) 2011 年度のノーベル化学賞を受賞したダン・シェヒトマン教授らが 1984 年に公表した準結晶(じゅんけっしょう; Quasicrystal)発見の報告は、それまで無限に広がる繰り返し構造(周期構造: Periodicity)を最大の特徴としていた"結晶(Crystal)"の概念を拡張し、結晶の定義が変更される契機とすった。その後、72°回転すると元の構造と重なる5回対称性に代表される非周期的な構造(準周期構造; Quasiperiodic structure)を持つ準結晶が続々と発見されるとともに、準周期構造が安定な構造相であることが確認され、準結晶研究が推進されてきた。

本研究の開始当初、研究対象はほぼ合金系 準結晶のみであり、金属の等方的結合を前提 とした空間充填構造をモデルとして、実験結 果の理論的検討が行われていた。

- (2) 1974 年にロジャー・ペンローズ教授により考案されていた二次元ペンローズタタイリング (2D Penrose Tiling) が二次元の準周期構造の具体的な構造モデルとして注目され、三次元ペンローズタイリングが数学目的、三次元によって、準周期構造を高次元に議論の周期構造の射影として取り扱う手法構造の周期構造し、正二十面体などを基本構とする、合金系準結晶の実験結果から、種々の三次元準周期構造モデルが提案されていた。
- (3) 2010 年にペンローズパターンの折り紙モデル (PPO モデル) が考案され、八面体の骨格構造 (スケルトン) のみで形成された板状準周期構造が二次元ペンローズタイリンでのパターン (ペンローズパターン) に対応でいることが確認された。PPO モデルは空間充準 構造を基本とする、従来の合金系準結晶の重構造モデルとは異なり、無機化合物準結晶を表本構造としており、無機化合物準結晶の可能な準周期構造を示唆しる、新たな準周期構造の立体モデルとして注目されていた。

2.研究の目的

- (1) PPO モデルから示唆される可能な無機化合物準結晶の3次元準周期構造のより詳細な立体モデルを制作する。
- (2) 面と角を共有する配位八面体が形成する結晶構造に関する先行研究から、結晶化学的視点に基づき、無機化合物準結晶として合成可能な化合物組成を検討する。
- (3) PPO モデルの板状構造が高次元空間において形成する周期構造を理論的に明らかにして、板状構造を積み重ねることによって得られる三次元の準結晶構造を考察する。

3.研究の方法

- (1) 詳細な折り紙モデルを得るため、折り紙で多数の正四面体の骨格構造(スケルトン)の折り紙を作るとともに、独自に開発した"科学折り紙"の手法を応用して、黄金八面体と黄金四面体のスケルトンを折り紙で作り、数種類の新たな PPO モデルを制作する。
- (2) 結晶構造のシミュレーションシステムを利用して、面と角を共有する結晶構造のデータベース検索を行い、PPO モデルの部分的な構造を持つ無機化合物結晶を探索して、その化合物組成から PPO モデルが示す無機化合物準結晶の化合物組成の候補を抽出する。
- (3) 面を共有する八面体構造で正十二面体 構造を組み立て、PPO モデルの板状構造間に 挿入して得られる準結晶構造の特徴を検討 する。

4. 研究成果

(1) 615 個の正八面体のスケルトンを用いて、約850mm×約950mm×約50mmの大きさのPP0モデル(図1参照)を新たに制作し、2013年9月にギリシャ・クレタ島で開催された、「対称性と迷路」を主題する、第9回対称の学際的研究国際学会(ISIS-Symmetry)においてPP0モデルに関する研究発表を行った。この国際会議において、

八面体のスケルトンのみで構成された PPO モデルの板状構造によって、二次元ペンローズパターンに対応する準周期構造を表現できる、

PPO モデルの板状構造は4種類のクラスター(図2参照)で構成されている、

角を共有して4種類のクラスターを接続 すると、板状構造には凸凹が生じている、

面を共有する八面体のスケルトンで構成された正十二面体構造(図3参照)でPP0モデルの板状構造接続することにより、板状構造をその板面に垂直な方向に積み重ねて、多様な準結晶構造を組み立てることが可能である

ことを新たに制作した PPO モデルによって具体的に示した。



図 1 新たに制作した、手軽に持ち運びできる 大きさのペンローズパターンの折り紙モデ ル:約850mm×約950mm×約50mm

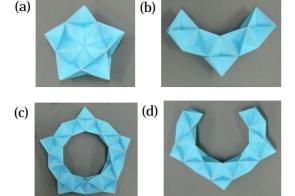


図 2 PPO モデルの板状構造を構成する、面を 共有する八面体の 4 種類のクラスター: (a) 星形、(b) 部分 、(c) リング、(d) 部分

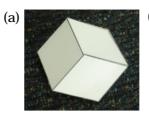


図3 面を共有する八面体のスケルトンで組み立てられた正十二面体構造

(2) 数学的理論により、三次元ペンローズタイリングは、オブチューズとアキュートの二種類の菱形六面体(図4(a)と(b)参照)の空間充填構造であることが示されている。このうち科学折り紙の手法を活用して、アア・麦形六面体(図5参照)、および、ア・カート六面体に含まれる黄金八面体と関)を元し、PPO モデル中の八面体構造が3次元やの黄金八面体に対応していることが示唆されることを示した。

また、黄金八面体のスケルトンで PPO モデルを構成する 2 種類のクラスター (図 2 (a)と(b)参照)を制作する際、黄金八面体をやや長い稜:/(図 6 参照)が作る正三角形の面で接続するとつながらないことが分かった。今後、三次元ペンローズタイリングと PPO モデルの対応関係を確認するために、多数の黄金八面体のスケルトンを折り紙で制作するには時間がかかることから、3 D プリンタを用いて大量の黄金八面体と黄金八面体を制作することを計画している。

本研究において発見した黄金八面体の配向に関する規則性を探求するとともに、PPO モデルの空間部分をどのようにして黄金四面体とオブチューズ六面体で埋め尽くせるかを考察し、三次元のタイリングに関する数学的研究も共同研究により進めることを考えている。



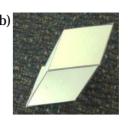
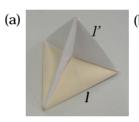


図4 三次元ペンローズタイリングを構成する二種類の菱形六面体: (a)オブチューズ菱形六面体と(b)アキュート菱形六面体



図5 アキュート菱形六面体のスケルトン: 1つのアキュート菱形六面体は2つの黄金四面体と1つの黄金八面体で構成される



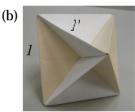


図 6 (a) 黄金四面体と(b) 黄金八面体のスケルトン:白い稜線 / 'は色のついた稜線 / に対し、/ '= $(1+^2)^{1/2}/2=0.95 \times /$ だけ短くなっている。ただし、 =(5+1)/2であり、は黄金比と呼ばれている。

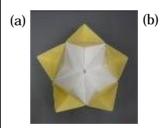




図7 黄金八面体の配向:正三角形ではなく 二等辺三角形の面で接続することが必要; (a)星形のクラスターの配向、(b) リングと 星形を接続した時の配向

(3) 結晶構造の先行研究に関する文献調査を行い、E. Parte 教授らによる配位四面体を基本構造とする無機化合物の結晶構造の系統的な分類と電荷分布に関する結晶化学的研究が行われていることが分かった。一方、配位八面体を含む無機化合物の結晶構造の研究は、ペロブスカイト構造などの角を共有する構造が中心で、面を共有する構造の研究はコランダム構造などの少数の結晶構造に限られていることが分かった。

また、シミュレーションソフト上のデータベースを検索したところ、面を共有する構造は 少なく、やはりコランダム構造が特徴的な構造として取り上げられていた。

今後、さらに無機化合物の結晶構造に関する 最新の研究成果の検索を継続し、面を共有し た配位八面体が作る結晶構造の系統的分類 を試みる必要性を強く感じている。

5 . 主な発表論文等

[雑誌論文](計 3件)

Effective Teaching Aid on Science、JPS Conference Proceedings、査読あり、Volume 1 (2014)、017024-1~017024-4、DOI:10.7566/JPSCP.1.017024

Ishihara, Shozo、An Origami-model of a Penrose Pattern, A Three-dimensional Quasi-periodic Structure of a Potential Inorganic Quasi-crystal、Arts and Science, The Journal of the International Society for the Inter-

disciplinary Study of Symmetry Science

Ishihara, Shozo, Science Origami, An

(ISIS-Symmetry) 2013/1-4、査読あり、pp.158-161

Ishihara, Shozo, The Architecture of Crystal represented by means of Origami. Japan's Traditional Handicraft of Paper-folding , Symmetry: Arts and Science. The Journal of the International Society for the Interdisciplinary Study of Symmetry Science (ISIS-Symmetry) 2012/1-2、査 読あり、pp.56-59

[学会発表](計 7件)

石原 正三、黄金八面体のスケルトンで構成された準周期構造の折り紙モデル、日本物理学会第69回年次大会(於:東海大学湘南キャンパス;2014年3月30日)30CB-6

石原 正三、準周期構造の折り紙モデルに基づく金属準結晶構造の検討、第76回形の科学シンポジウム(於:青山学院大学; 11月16日) 形の科学会誌,第28巻・第2号(2013) pp.168-169.

Ishihara, Shozo. An Origami-model of a Penrose Pattern, A three-dimensional quasi-periodic structure of a potential inorganic quasi-crystal, Symmetry: Art and Science, 2013, Symmetry and Labyrinth, 9th Interdisciplinary Symmetry Congress-Festival of ISIS-Symmetry, Crete, Greece, September 9-15, 2013.

<u>Ishihara, Shozo</u>, Science Origami, An Effective Teaching Aide on Science, The 12th Asia Pacific Physics Conference, Chiba, Japan, July 14-19, 2013

Ishihara, Shozo、 The Architecture of Crystal represented by means of Origami, Japan's Traditional Handi- craft of Paper-folding、 Symmetry: Art and Science, 2012, Folk Architecture-Vernacular Architecture with an outlook to Folk Music and Folk Dance Traditions and Rural Development, Congress-Festival of ISIS-Symmetry, Budapest-Veszprem-Szentendre, Hungary, June 8-10, 2012.

石原 正三、「ペンローズパターンの折り紙モデルに基づく金属準結晶構造の検討」,第72回形の科学シンポジウム(於:鹿児島大学;12月8日) 形の科学会誌,第26巻・第2号(2011) pp.213-214. 石原 正三、「八面体のスケルトンで作る正十二面体の折り紙モデル」,第71回形の科学シンポジウム(於:千葉大学;6月17日) 形の科学会誌,第26巻・第1号(2011) pp.56-57.

[図書](計 0件)

[産業財産権]

出願状況(計 0件)

取得状況(計 0件)

〔その他〕 特記事項なし

6.研究組織

(1)研究代表者

石原 正三(ISHIHARA, Shozo) 埼玉県立大学・保健医療福祉学部・教授 研究者番号: 10290727

(2)研究分担者

該当者なし() 研究者番号:

(3)連携研究者

該当者なし() 研究者番号: