

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 2 日現在

機関番号：34419

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25400431

研究課題名(和文) ソフトマター3重周期極小曲面の構造と物性の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical Studies on the Structures and the Physical Properties of Triply Periodic Minimal Surfaces

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) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：平面にビリヤード球を並べると、1つの球のまわりに6つの球が並ぶ。この構造は電子、原子から始まり、コロイド球、界面活性剤や高分子が作る構造に至るまで普遍的な規則構造として知られている。球状ウィルスのように、正曲率曲面である球面上の規則構造もよく知られている。しかし、ポテトチップのような馬の鞍型(負曲率)曲面上の物理的規則構造の研究はなされていなかった。本研究ではシュワルツのダイヤモンド及びプリミティブ3重周期極小曲面上で球のシミュレーションを行い、エントロピーを駆動力としたアルダー相転移を観察することによって、負曲率曲面上の規則構造を多数発見し、それらを結晶学、数学的観点から解析した。

研究成果の概要(英文)：On a flat surface the hexagonal arrangement is a ubiquitous regular arrangement arising from dense packing, space division, or interactions between particles. What is regular arrangement when a surface is curved? On a sphere, this question was firstly raised by J. J. Thomson for electrons constituting atoms, Goldberg elucidated regular polyhedra, and for biological icosahedral viruses Caspar and Klug found a construction principle of regular arrangements on a sphere. In contrast, regular arrangements of particles on saddle-shaped periodic surfaces with negative curvatures have not been pursued. In this project, we have shown numerous regular arrangements of spheres on the Schwarz P- and D-surfaces obtained through the Alder transition, where magic numbers have been obtained in analogy with icosahedral viruses. These unprecedented arrangements are analyzed in terms of space groups, and polygonal & hyperbolic tilings.

研究分野：ソフトマター物理学

キーワード：ソフトマター 3重周期極小曲面 ジャイロイド タイリング アルダー転移 空間群

1. 研究開始当初の背景

ジャイロイド(G)、ダイヤモンド(D)、プリミティブ(P)とよばれる3重周期極小曲面に関連した共連続構造がはじめて発見されたのは1960年代であるが、1990年代以降、ブロック共重合体、液晶などの有機分子、界面活性剤を利用して合成される多孔質シリカ、有機・無機ハイブリッド分子、さらに生体内でもミトコンドリア、網膜色素細胞、葉緑体、蝶の羽の鱗粉などで共連続構造がつつぎに発見されている。すなわち共連続構造は生物・無生物を問わず普遍的に発見されてきた構造で、近年、数学者、物理学者、化学者、生物学者から材料科学者に至るまで多く研究者に分野横断的に興味を持たれている。

研究代表者は、ブロック共重合体系のGDPリオトロピック転移を発見(PRL表紙)するなど、共連続相に興味をもってきたが、名大の松下らと階層的ジャイロイドという共連続構造を発見したが構造がわからなかった。そこで、問題を一般化し、負曲率曲面上の規則配置は何か?という問題を考えた。その結果、ジャイロイド曲面上の剛体球のアルダー転移を発見し、連携協力の数学者松澤と共同して、数学的解析を行った。

2. 研究の目的

研究題目「ソフトマター3重周期極小曲面の構造と物性の理論的研究」の研究目的は、広範なソフトマター系で発見される共連続立方相の構造的特徴付けを新たな視点から理論的に研究し、その構造のもたらす特異的な物性を明らかにすることである。

(1)空間群の作用を保つ双曲空間(ポアンカレ円盤)との等角写像、3重周期極小曲面上のアルダー転移を利用して、ジャイロイドだけではなく、ダイヤモンド、プリミティブ曲面にも研究を広げ、3重周期極小曲面上の規則構造について統一的な描像を得ること、(2)研究代表者らが発見したブロック共重合体系の階層的ジャイロイド構造の構造を明らかにすること、(3)蝶の鱗粉などに見られる共連続構造の固有値問題(フォトニクス、フォノニクス)を研究すること、の3点に焦点を当てる。

3. 研究の方法

25年度は、(1)P曲面とD曲面のアルダー転移を探索する計算研究を行う;(2)双曲面と3重周期極小曲面との写像関係を表示するコードを作成する;(3)ABC格子高分子モデルの階層的ジャイロイド構造の計算研究を行う。方法はモンテカルロ法を中心として、過去に開発し成果を挙げた計算コードを用いる。また、(2)では数学者と共同研究する。(3)では松下研究室(名古屋大学)と連携し、すでに得られている複雑構造の実験データの解析を行う。

26年度以降、(4)(1)~(3)の結果をまとめ、統一描像を得る;(5)光物性の

研究についてFDTD法(時間領域差分法)を共連続相に応用し、メタマテリアルという視点で研究を行う。(6)3重周期極小曲面の固有値問題の基本的理解を得るために、離散的3重周期極小曲面を作成し、その上での量子力学(タイトバインディングモデル)あるいはバネの固有値問題を考える。

4. 研究成果

研究代表者は高橋、田中と共同し、P、D曲面上の剛体球のシミュレーションを行い、ソフトマター系で重要なエントロピーを駆動力としたアルダー相転移を観察することによって、これまで知られていなかった負曲率曲面上の規則構造を多数発見した。それらはまず曲面のもつ空間群の部分群として立方晶になるもの、三方晶になるもの、部分群ではなく2倍の超構造を作るものの3種に分類された。また双曲空間(ポアンカレ円盤)、3次元タイリングとしても解析された。さらにCasparとKlugの20面体ウィルスの配列を説明するT数とよく似たH数を定義して規則構造のマジックナンバーを明らかにした。これらの結果は、ソフトマター物理学、結晶学、数学という異なる研究分野を横断する学際的成果となった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計3件)

1. 「Mosaic two-lengthscale quasicrystals」T. Dotera, T. Oshiro & P. Ziherl Nature、査読有、506、208-211 (2014)。
2. 解説「ジャイロイドの迷宮」、堂寺知成 現代化学、査読無、第523号 p. 32 (2014)。
3. 解説「ソフトマター準結晶」、堂寺知成 固体物理、査読有、48第7号、331-340 (2013)。

〔学会発表〕(計30件)

1. 「青銅比準結晶相の発見」口頭発表、堂寺知成、別宮進一、P. Ziherl、ソフトマター研究会(2015/12/19、東北大学(仙台))。
2. 「ペンローズ格子の剛体菱形による無秩序・秩序転移」ポスター発表、堤一真、堂寺知成、ソフトマター研究会(2015/12/18、東北大学(仙台))。
3. 「3重周期極小曲面上の剛体球 - ダイヤモンド曲面 - 」ポスター発表、田中秀明、堂寺知成、ソフトマター研究会(2015/12/18、東北大学(仙台))。
4. 「3重周期極小曲面上の剛体球 - プリミティブ曲面 - 」ポスター発表、高橋佑輔、堂寺知成、ソフトマター研究会(2015/12/18、東北大学(仙台))。

5. 「ハードコア矩形ショルダー粒子系が
つくる新規タイリング構造」ポスター発
表、別宮進一、堂寺知成、ソフトマター
研究会 (2015/12/18、東北大学 (仙台))。
6. 「青銅比タイリングの発見」口頭発表、
T. Dotera, S. Bekku, and P. Ziherl、
準結晶研究会 (2015/12/17、東京理科大
学 (葛飾、東京))。
7. 招待講演「Bronze mean quasicrystals」
T. Dotera, S. Bekku, and P. Ziherl、
Toyota RIKEN International Workshop
2015、Strongly Correlated Electron
Systems: Open Space between Heavy
Fermions and Quasicrystals
(2015/11/19、Nagoya University
(Nagoya))。
8. 招待講演「Hard-core/square-shoulder
quasicrystals」P. Ziherl and T. Dotera、
Geometry and Dynamics of
Quasiperiodic Structures (2015/11/
30-12/1、Institut Henri Poincaré、
(Paris, France))。
9. 「青銅比タイリング」口頭発表、堂寺知
成、強非周期タイル集合とその周辺
(2015/10/19、京大数理解析研究所 (京
都))。
10. 「プリミティブ曲面上の剛体球の配置」
ポスター発表高橋佑輔、堂寺知成、日本
物理学会秋季大会 (2015/9/17、関西大
学 (大阪))。
11. 「ダイヤモンド曲面上の剛体球の配置」
ポスター発表、田中秀明、堂寺知成、日
本物理学会秋季大会 (2015/9/17、関西
大学 (大阪))。
12. 「ハードコア-ソフトショルダー粒子系
が作る新規タイリング構造」口頭発表
別宮進一、堂寺知成、日本物理学会秋
季大会 (2015/9/16、関西大学 (大阪))。
13. 「Regular tessellations of hard
spheres on the P-surface」ポスター発
表、Tomonari Dotera、Gordon Research
Conference、Soft Condensed Matter
Physics (2015/8/9-14、Colby-Sawyer
College、New London、NH、USA)。
14. 「Hard Spheres on the Primitive
Surface」口頭発表、Yusuke Takahashi
and Tomonari Dotera、Workshop on
minimal surfaces (2015/4/5、Nara
Women's University (Nara))。
15. 「Hard Spheres on the Diamond
Surface」口頭発表、Hideaki Tanaka and
Tomonari Dotera Workshop on minimal
surfaces (2015/4/5、Nara Women's
University (Nara))。
16. 依頼講演「Hard Spheres on the
Primitive Surface」Tomonari Dotera
and Yusuke Takahashi、APS March
Meeting 2015、Focus Session: Beyond
the Gyroid: Complex Network Phases in
Self-Assembled Soft Materials
(2015/3/2、San Antonio、Texas、USA)、
A50.00002。
17. 招待講演「ソフトマター準結晶」、堂寺
知成、第一回研究発表交流会ランチョ
ンセミナー (2014/12/24、近畿大学 (大
阪))。
18. 「ハードコア-ソフトショルダー粒子系
のつくる新規タイリング構造」口頭発表、
別宮進一、堂寺知成、準結晶研究会
(2014/12/22、ラフォーレ蔵王 (宮城))。
19. 「ハードコア-ソフトシェル粒子系準結
晶のモンテカルロシミュレーション」ポ
スター発表、別宮進一、堂寺知成、高分
子計算機科学研究会・高分子ナノテク
ロジー研究会討論会 (2014/12/19、東工
大 (大岡山、東京))。
20. 招待講演「ソフトマター準結晶」、堂寺
知成、JST さきがけ[超空間]領域会議ナ
イトセッション講演 (2014/11/21、クロ
スウエーブ幕張 (幕張、千葉))。
21. 招待講演「Mosaic quasicrystals:
Isosceles triangular tilings」、
Tomonari Dotera、準結晶の数学的モデ
ルとその周辺 (2014/10/27、京大数理解
析研究所 (京都))。
22. 「2つの長さスケールを持つモザイク
準結晶のシミュレーション」口頭発表、
堂寺知成、大城辰也、P. Ziherl、高分
子討論会 (2014/9/24、長崎大学 (長
崎))。
23. 「コアシェル粒子系の18回対称準結
晶」ポスター発表、別宮進一、堂寺知成、
高分子討論会 (2014/9/24、長崎大学
(長崎))。
24. 招待講演「[Introduction to Aperiodic
Crystals](#)、Soft Matter Quasicrystals」、
Tomonari Dotera、IUCr2014 Workshop
(2014/8/5、Montreal、Canada)。
25. 招待講演「The Expanding Universe of
Quasicrystals」堂寺知成、2011年ノー
ベル化学賞ダン・シェヒトマン特別教授
名古屋大学大学院特別講演会
(2014/5/12、解説講演、名古屋大学 (名
古屋))。
26. 「ハードコア-ソフトショルダー粒子系
の2次元準結晶-頂点統計」ポスター
発表、別宮進一、堂寺知成、日本物理学
会年会 (2014/3/30、東海大学湘南 (神
奈川))。
27. 招待講演「まとめ」、堂寺知成、日本物
理学会年会 領域6、7シンポジウム「複
雑秩序-準結晶と多様な物質分野の学
融合-」 (2014/3/29、東海大学湘南 (神
奈川))。
28. 「ハードコア-ソフトショルダー粒子系
の2次元準結晶-頂点統計」口頭発表
別宮進一、堂寺知成、準結晶研究会
(2013/12/17、東京理科大学 (葛飾、東
京))。
29. 「Random quasicrystals formed by

hard-core/square-shoulder particles」Poster, T. Dotera, T. Oshiro and P. Ziherl、International Conference: Geometry and Physics of Spatial Random Systems (2013/9/10、Freudenstadt, Germany)。

30. 「Simulation study of two-lengthscale quasicrystals」口頭発表、T. Dotera, T. Oshiro and P. Ziherl。12th Int'l Conf. on Quasicrystals (2013/9/2、Kraków, Poland)。

〔図書〕(計1件)

4. 著書「高分子ナノテクノロジーハンドブック-最新ポリマ-ABC 技術を中心として-」西敏夫代表編集、堂寺知成、1031 ページ、NTS 出版 pp.788-794 分担執筆、(2014.2)。

〔その他〕

ホームページ等

<http://softmatter.phys.kindai.ac.jp>

1. 特記事項(メディアなど): プレスリリース 2/3、日刊工業新聞 2/3、読売新聞 2/17、朝日新聞 2/27、デロ新聞(スロベニア) 3/6、朝日新聞デジタル、[マイナビニュース](#)、Yahoo ニュースなどメディア、[ネイチャーフィジクス News & Views](#) に論文の解説記事 [*Nature Physics* 10、185-186 (2014)]、月刊「化学」[化学掲示板](#)、JST サイエンスチャンネル・サイエンスニュースで準結晶について解説(+同英語版)、Newton 別冊『近畿大学大解剖』p.148(2015)。
2. 特記事項(ワークショップ主催) Workshop Schoen Geometry: The Gyroid (Nara Women's University (Nara)、2015年4月4日-5日)、Tomonari Dotera and Junichi Matsuzawa。ただし、招待講演者アラン・シヨーン博士急病のためキャンセル。
3. 特記事項(シンポジウム主催)、T. Dotera 国際結晶学連合大会(結晶学100周年記念)ミクロシンポジウム主催および座長 (IUCr2014 MS-57、Montreal、Canada)。
4. 特記事項: 米国物理学会高分子分科のメール配信ニュースレターのヘッダーに高分子準結晶の図が採用される (2013.5-)。
5. 特記事項: ソフト準結晶の解説[ノーベル賞記念論文集 解説論文「Quasicrystals in Soft Matter」、T. Dotera、*Israel Journal of Chemistry*、51、1197-1205 (2011)]がノーベル賞記念論文集(掲載雑誌 *Isr. J. Chem.*)の2012年の最もダウンロードされた論文、および Wiley Hottest articles に選ばれる。

6. 研究組織

(1) 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: 3 0 2 1 7 6 1 6

(2) 研究分担者

()

研究者番号:

(3) 連携研究者

松澤 淳一 (MATSUZAWA Junichi)

奈良女子大学・自然科学系・教授

研究者番号: 0 0 2 1 2 2 1 7