

点集合置換法による十回対称準周期
タイリングの作成

東北大多元研 藤田伸尚

骨子

1. 準周期タイリングの基礎
2. タイリングの一般的作成法
～点集合置換法～
3. 三元十回対称タイリング
～RPHタイリング～
4. フェイゾンと乱雑タイリング
5. まとめ

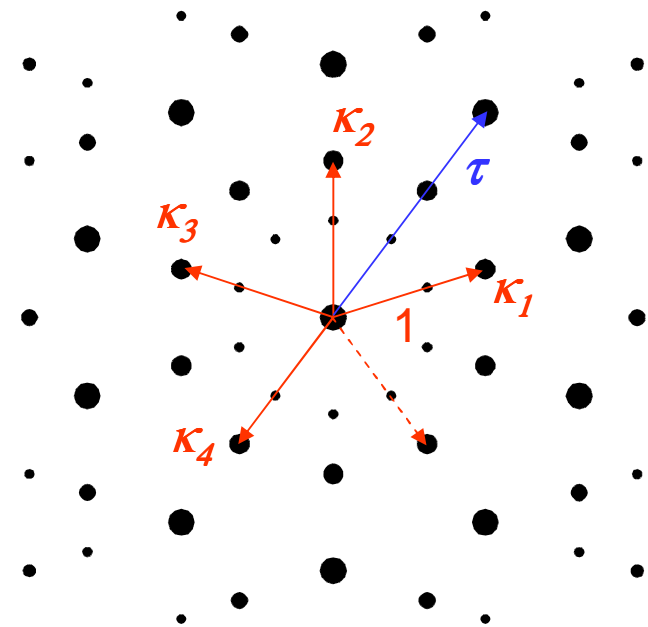
1. 準周期タイリングの基礎

準周期性

定義: ある構造が「準周期的である」とは、

1. フーリエ変換 (構造因子)
が純点スペクトルを持つ
(ディラックピークのみ)
⇨ 長距離秩序
2. ディラックピークの指数付けを行う為に必要な波数ベクトル基底の数 (\mathbf{N}) が空間次元数 (\mathbf{D}) より大きい

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= m_1 \mathbf{K}_1 + m_2 \mathbf{K}_2 + m_3 \mathbf{K}_3 + m_4 \mathbf{K}_4 \\ &= [m_1 m_2 m_3 m_4] \end{aligned}$$

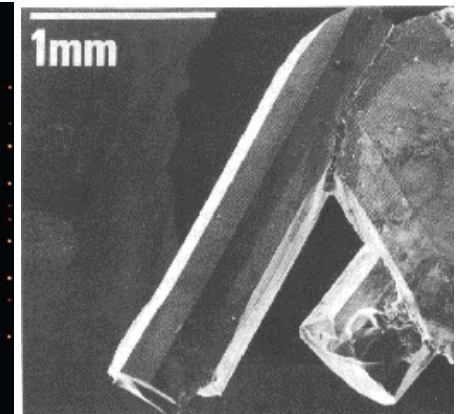
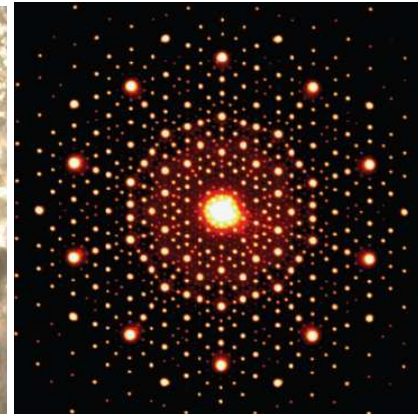
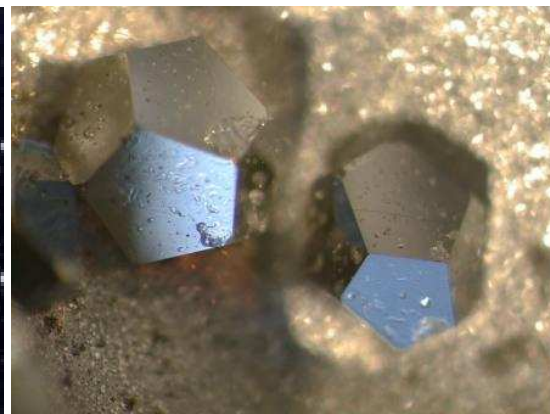


$$\tau = 2 \cos \frac{\pi}{5} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \cong 1.618$$

準結晶

定義: ある構造が次の二つの条件を満たすとき、これを「準結晶」と呼ぶ。

1. 準周期的な長距離秩序を有する
2. 結晶学的に許されない点対称性を有する
例) **5, 7, 8, 9, 10, 11, 12**回対称性



タイリングとは

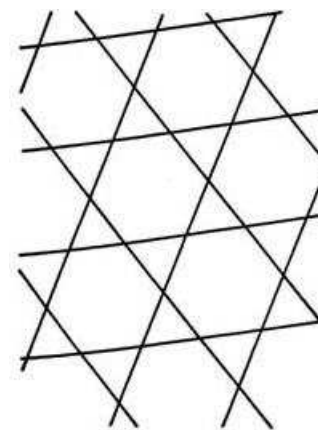
本セミナーでの定義:

(2D)有限種類の多角形による平面充填

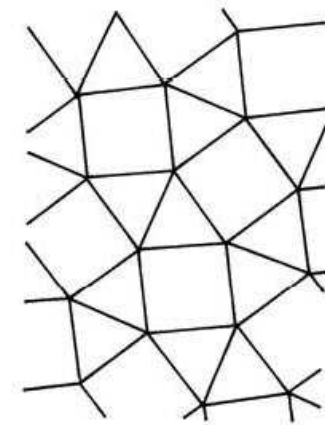
(3D)有限種類の多面体による空間充填

特に、隣接タイル同士が辺または面を共有する場合に話を限定する場合が多い—edge-to-edge, face-to-face

アルキメデスタイリング
(周期的)



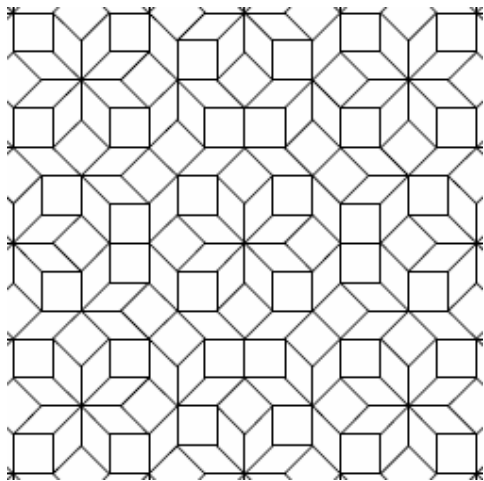
(3.6.3.6)



(3².4.3.4)

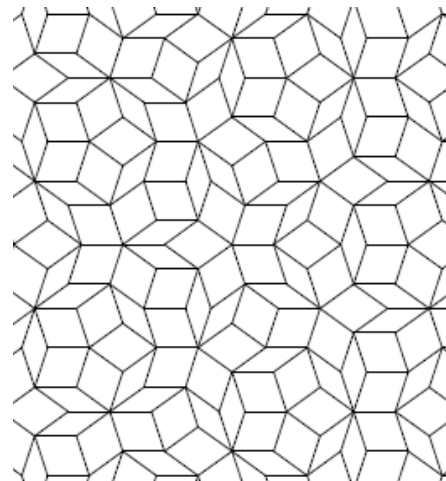
代表的な準周期タイリング

八回対称



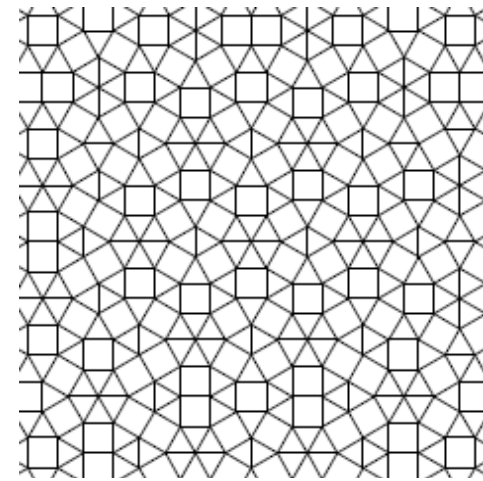
Ammann-Beenker
タイリング

十回対称



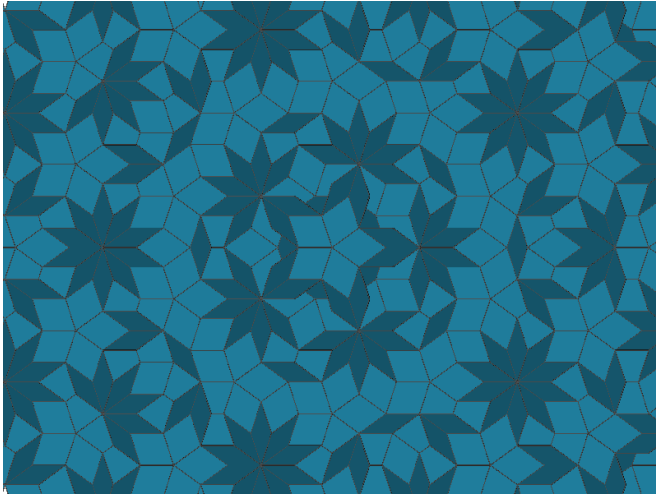
菱形Penrose
タイリング

十二回対称

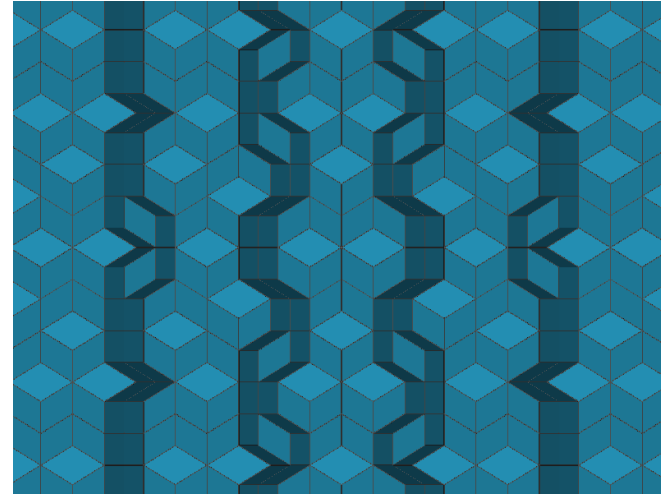


Stampfli
タイリング

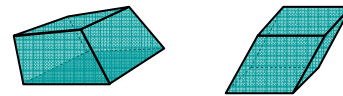
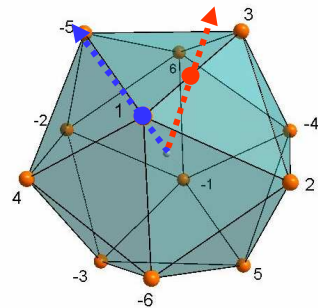
菱面体タイリング (三次元Penroseタイリング)



5回対称軸方向から見た図

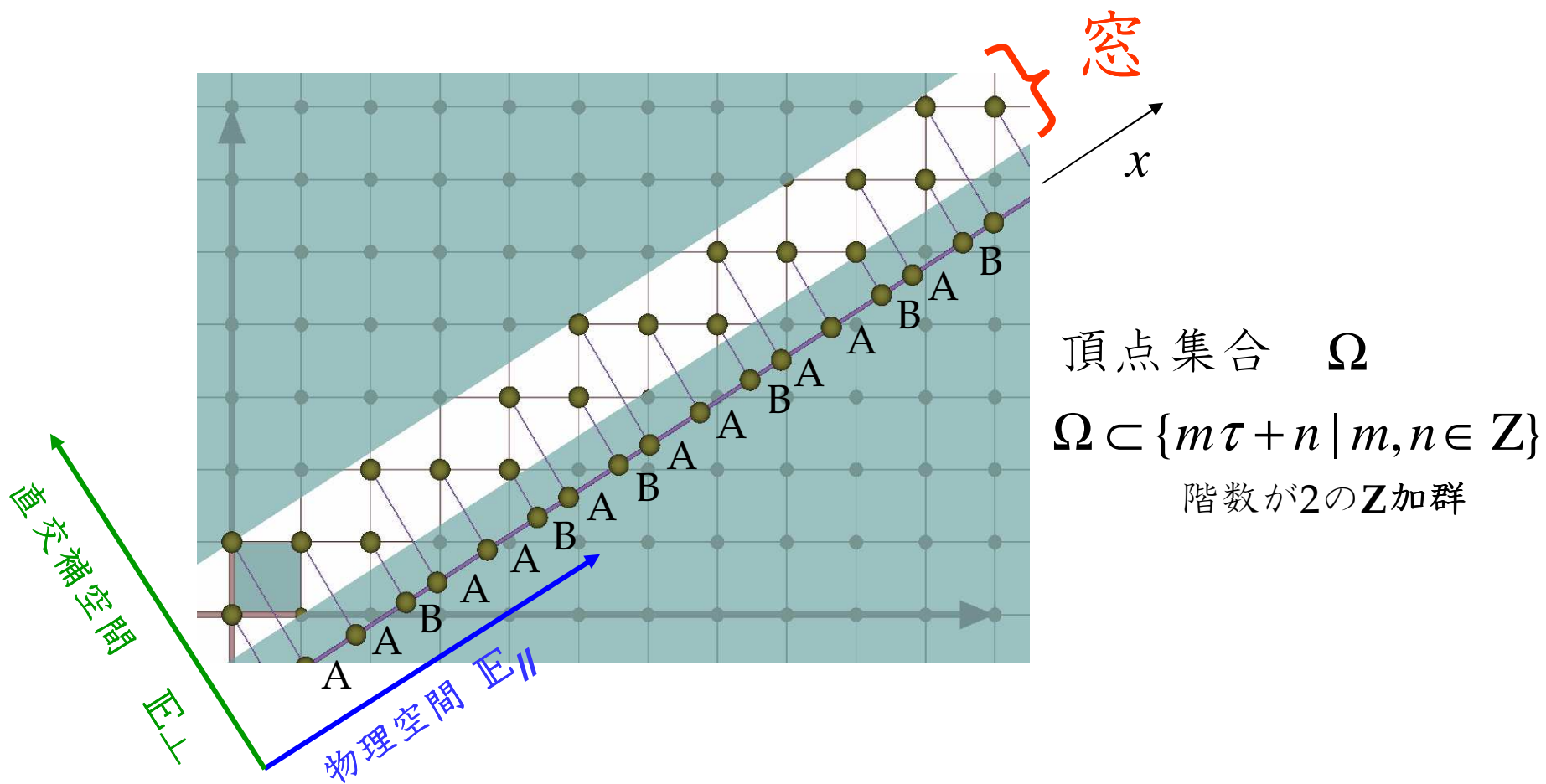


2回対称軸方向から見た図

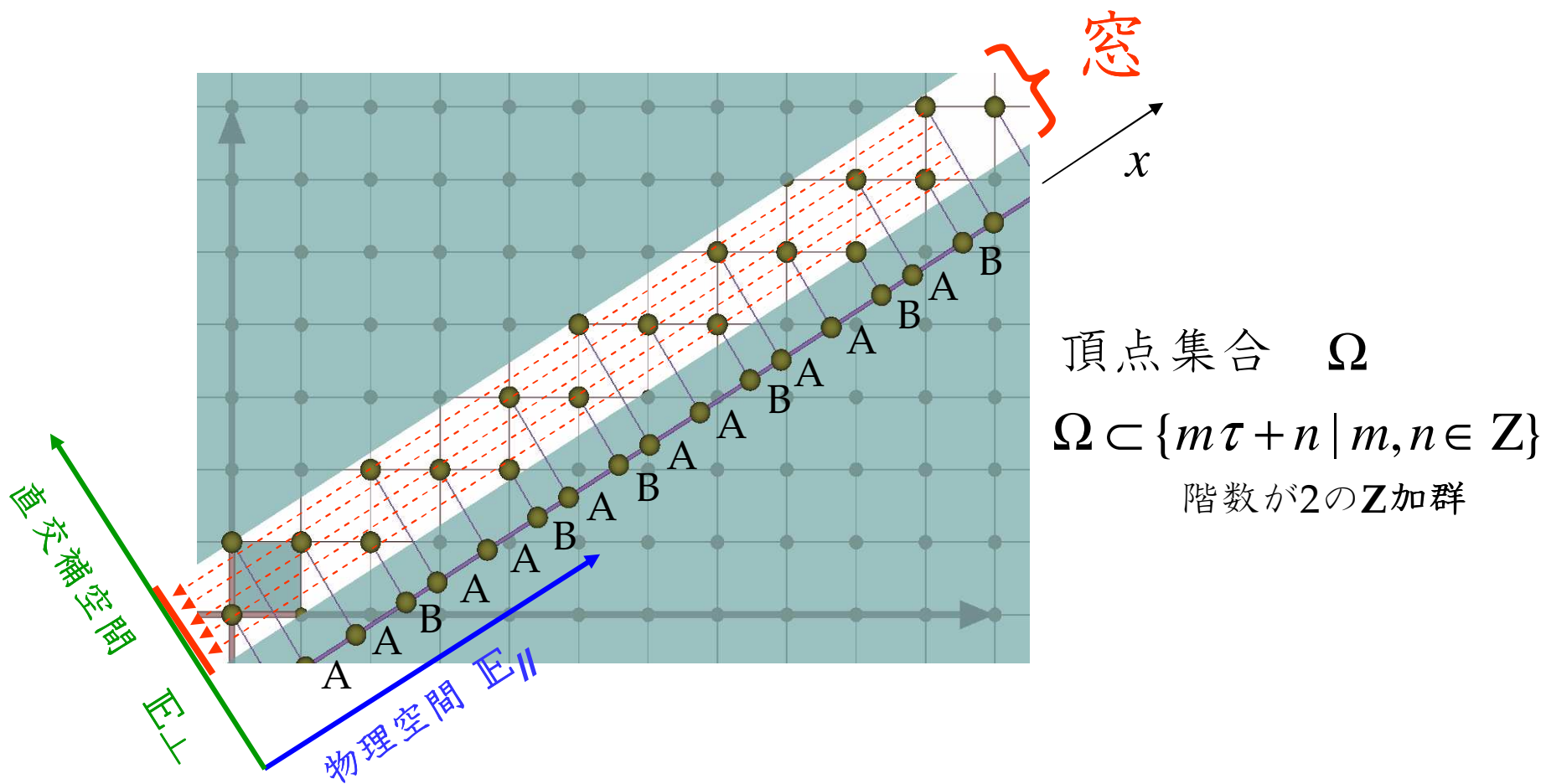


Prototiles T_1, T_2
(Ammann rhombohedra)

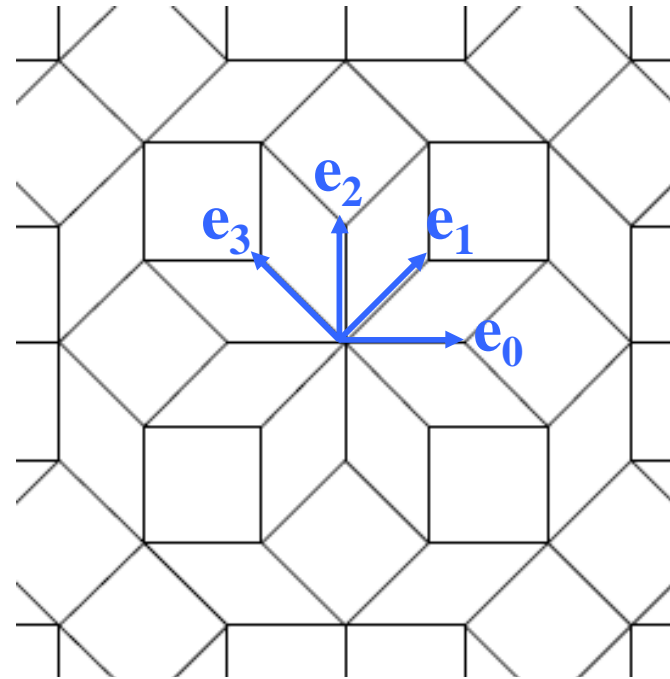
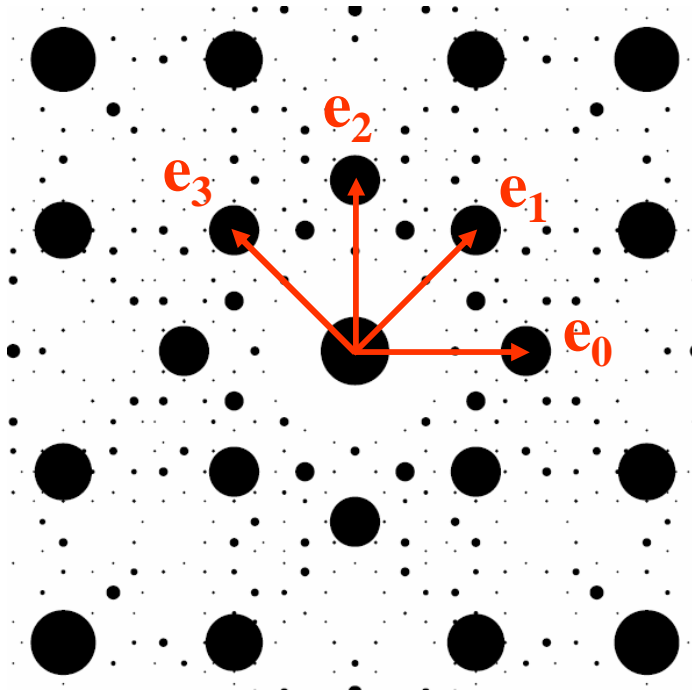
切断射影法（射影法）



切断射影法 (射影法)



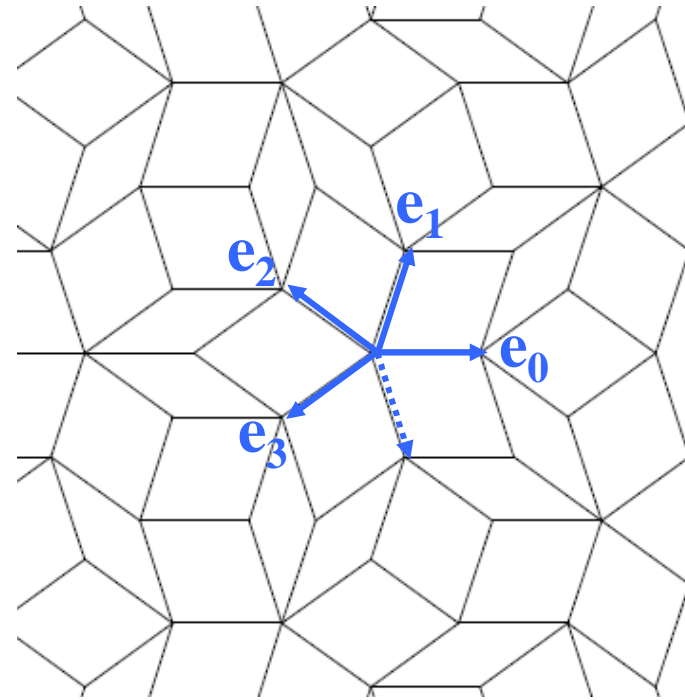
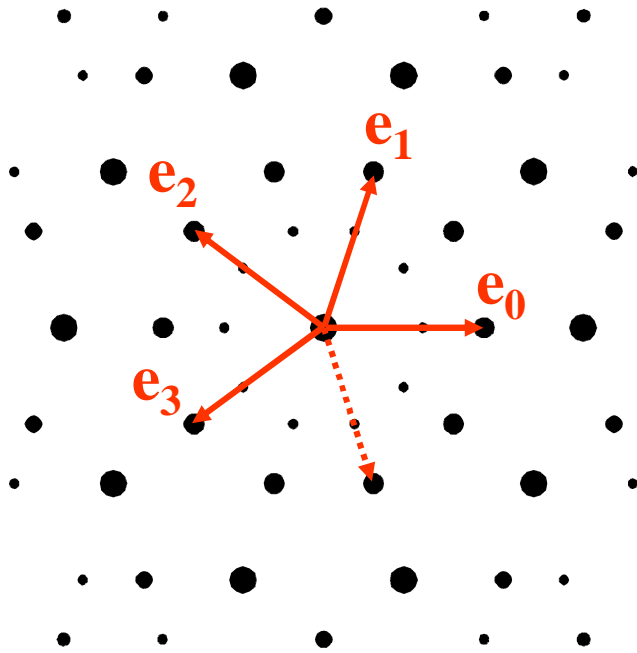
八回対称 \mathbf{Z} 加群 (\mathbf{Z} -module)



$$\mathbf{Z}_8 := \{n_0\mathbf{e}_0 + n_1\mathbf{e}_1 + n_2\mathbf{e}_2 + n_3\mathbf{e}_3 \mid n_j \in \mathbf{Z}\}$$

階数が4の \mathbf{Z} 加群

十回対称 \mathbf{Z} 加群 (\mathbf{Z} -module)



$$\mathbf{Z}_{10} := \{n_0\mathbf{e}_0 + n_1\mathbf{e}_1 + n_2\mathbf{e}_2 + n_3\mathbf{e}_3 \mid n_j \in \mathbf{Z}\}$$

階数が4の \mathbf{Z} 加群

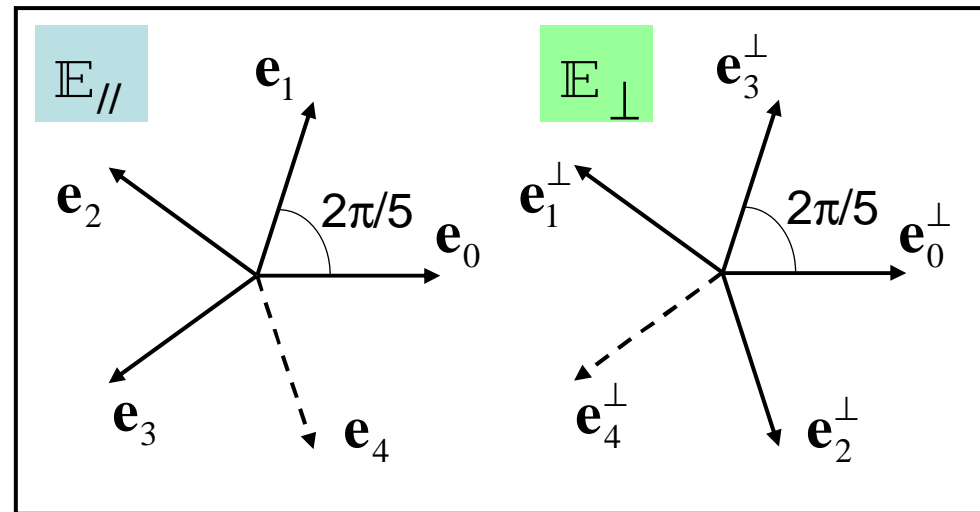
四次元の十方格子

基本格子ベクトル

$$\tilde{\mathbf{e}}_j = (\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_j^\perp)$$

$$\mathbf{e}_j = \left(\cos \frac{2\pi j}{5}, \sin \frac{2\pi j}{5} \right)$$

$$\mathbf{e}_j^\perp = \left(\cos \frac{4\pi j}{5}, \sin \frac{4\pi j}{5} \right)$$



十方格子

$$\tilde{\Lambda}_{10} := \{n_0 \tilde{\mathbf{e}}_0 + n_1 \tilde{\mathbf{e}}_1 + n_2 \tilde{\mathbf{e}}_2 + n_3 \tilde{\mathbf{e}}_3 \mid n_j \in \mathbf{Z}\}$$

十方 \mathbf{Z} 加群 ← 十方格子の二次元物理空間への投影

$$\mathbf{Z}_{10} := \{n_0 \mathbf{e}_0 + n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2 + n_3 \mathbf{e}_3 \mid n_j \in \mathbf{Z}\}$$

Z加群のスケール不変性

Z加群は、それを特徴付ける二次の無理数
(Pisot単位) のスケール変換に対して不変

...高次元代数学による帰結

$$\tau_{oc} \mathbf{Z}_8 \equiv \mathbf{Z}_8$$

$$\tau_{de} \mathbf{Z}_{10} \equiv \mathbf{Z}_{10}$$

$$\tau_{do} \mathbf{Z}_{12} \equiv \mathbf{Z}_{12}$$

Pisot unit

$$\tau_{oc} = 1 + \sqrt{2} \quad \tau_{de} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad \tau_{do} = 2 + \sqrt{3}$$



黄金比 τ

準周期タイリングを作成する為の 二種類のアプローチ

- 切断射影法

- 窓はあらかじめ与えられたものとする
- 窓の形状は通常、多角形を仮定する
- タイリングに対する拘束条件は自明ではない

- 置換法—スケール変換を伴う変換規則

(インフレーション則)

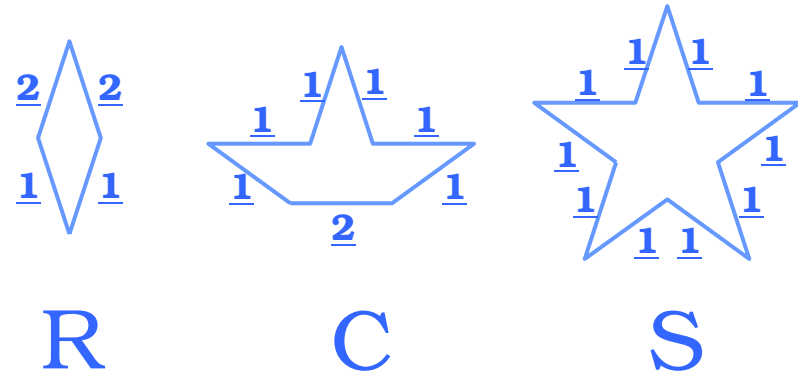
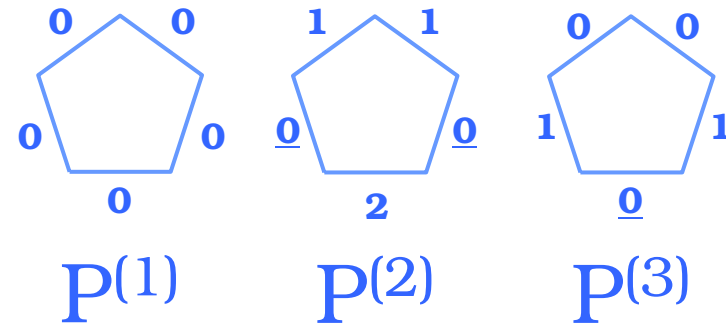
- 窓はあらかじめ与えられていない
- 窓の形状は、多角形である必要は無い
- 反復によりタイリングが自動的に生成
- 変換規則の構成には試行錯誤が必要

置換法によるタイリングの作成

インフレーション則（二段階）

(1): 拡大相似変換

(2): 拡大したタイルを元の
大きさのタイルで分割する
(タイルの種類は保持)



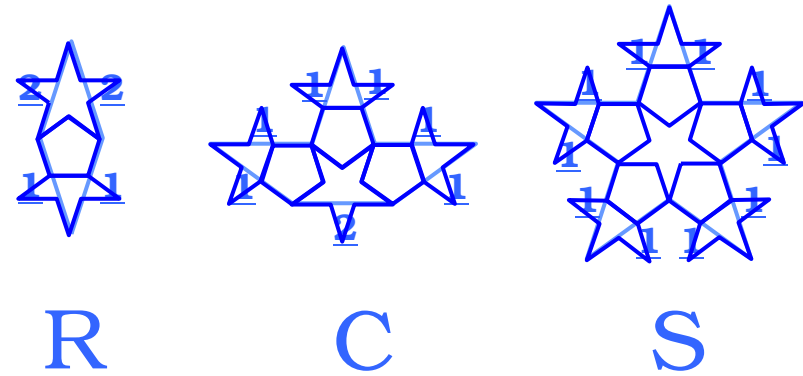
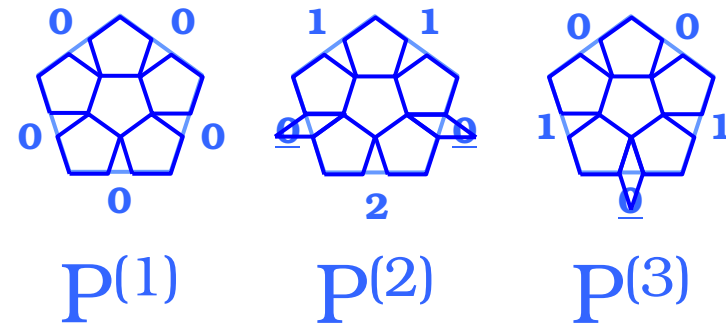
5 角形Penroseタイリング (P1)

Grünbaum and Shephard,
"Tilings and Patterns" (1987)

置換法によるタイリングの作成

インフレーション則（二段階）

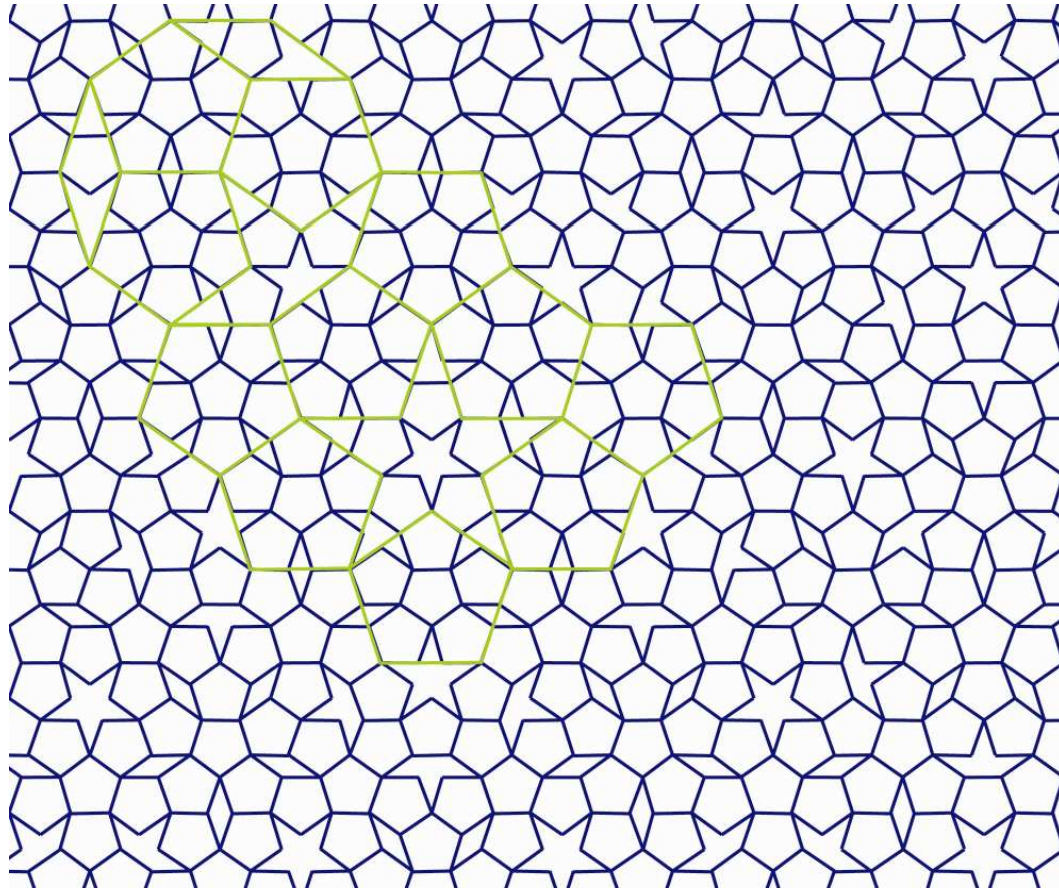
- (1): 拡大相似変換
- (2): 拡大したタイルを元の大きさのタイルで分割する
(タイルの種類は保持)



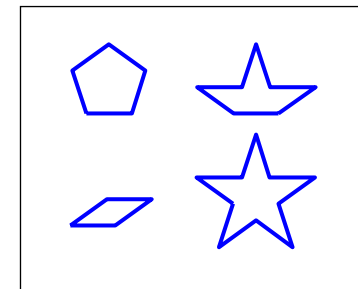
五角形Penroseタイリング (P1)

Grünbaum and Shephard,
"Tilings and Patterns" (1987)

五角形Penroseタイリング



プロトタイプ

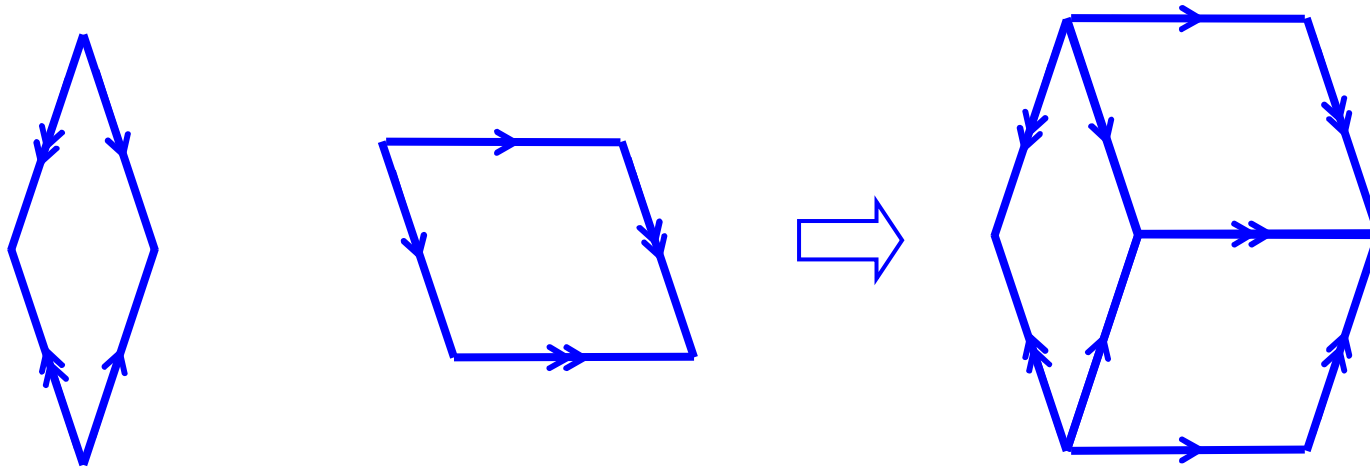


頂点集合 ~
**Cluster centers
of a QC**

R. Penrose, Bull. Inst. Math. Appl. 10 (1974) 266.

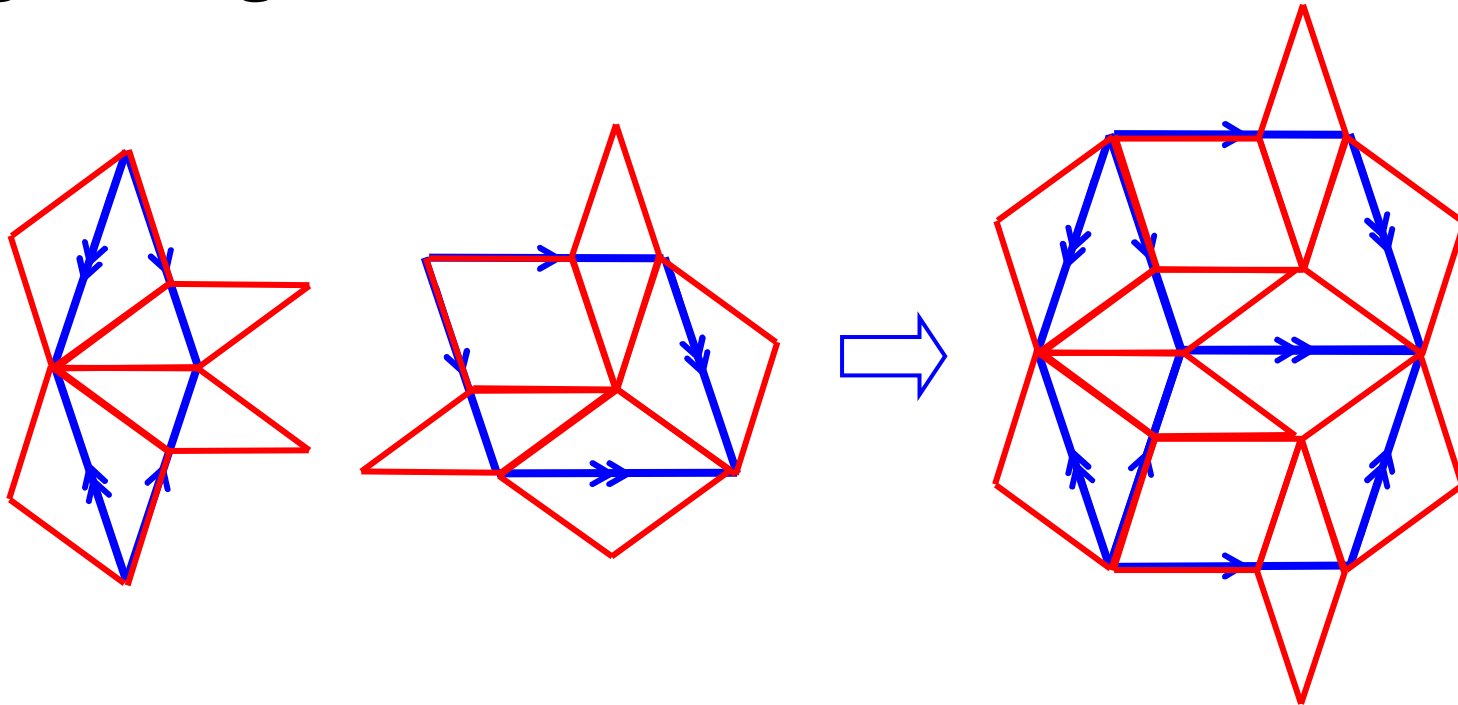
[Q] 準周期タイリングのインフレーション則を系統的に構成することは可能か？

- 適用可能なインフレーション則は構造全域に亘って矛盾を生じさせないものに限られる（特に、**edge-to-edge** の条件を満たすことを要請する）



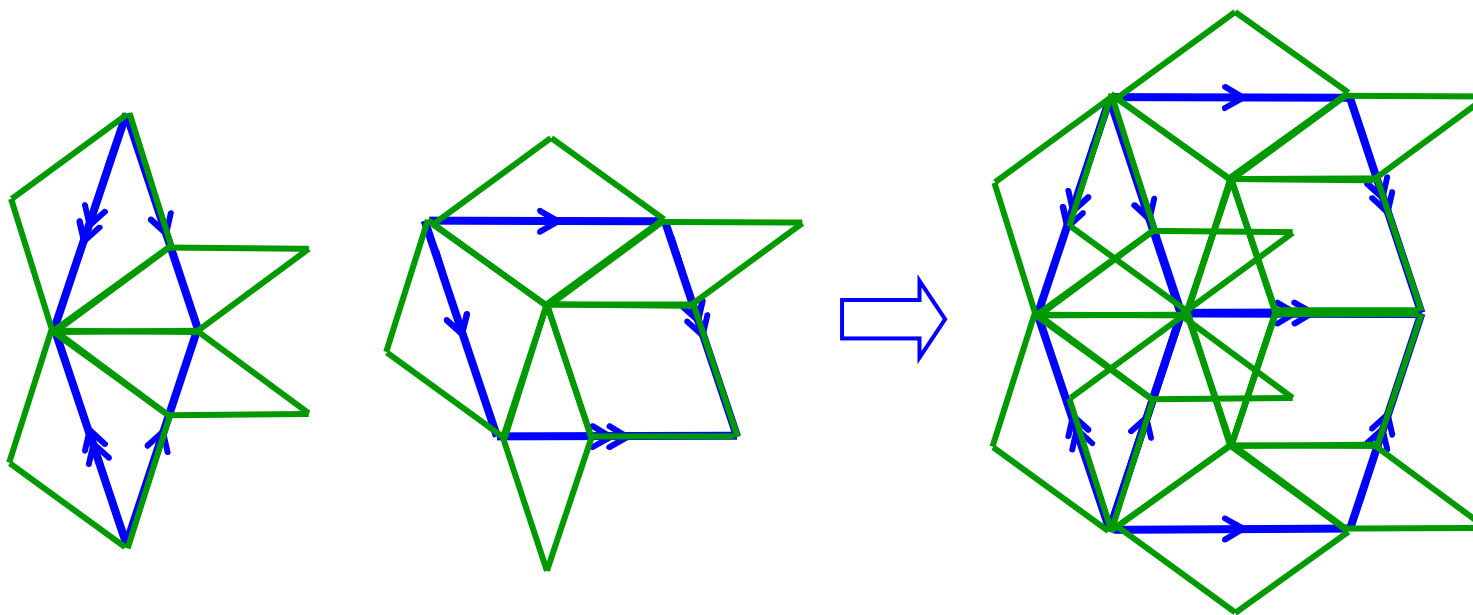
[Q] 準周期タイリングのインフレーション則を系統的に構成することは可能か？

- 適用可能なインフレーション則は構造全域に亘って矛盾を生じさせないものに限られる（特に、**edge-to-edge** の条件を満たすことを要請する）



[Q] 準周期タイリングのインフレーション則を系統的に構成することは可能か？

- 適用可能なインフレーション則は構造全域に亘って矛盾を生じさせないものに限られる（特に、**edge-to-edge** の条件を満たすことを要請する）



2. タイリングの一般的作成法 ～点集合置換法～

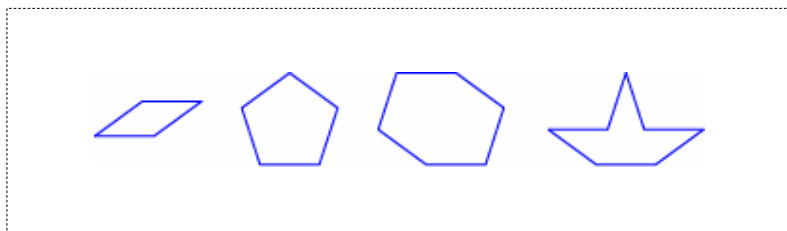
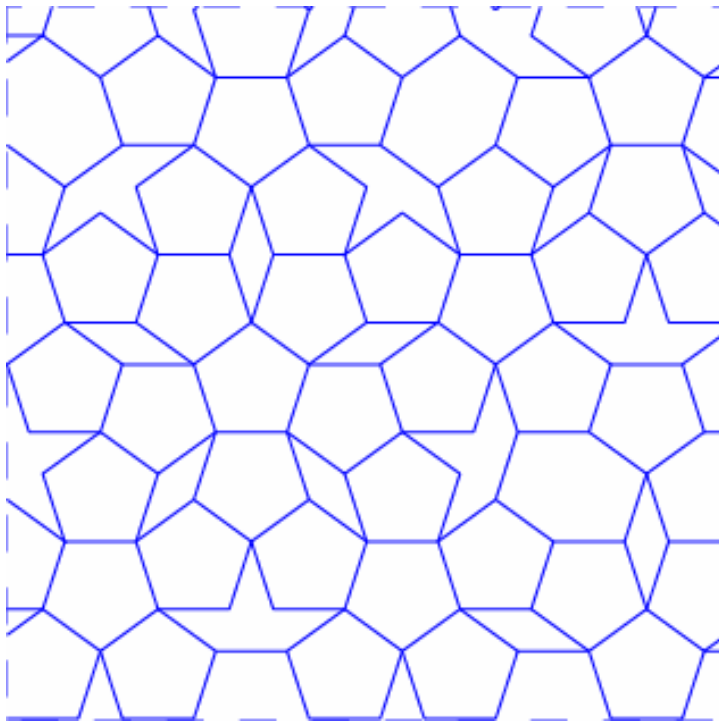
一般化点集合置換法

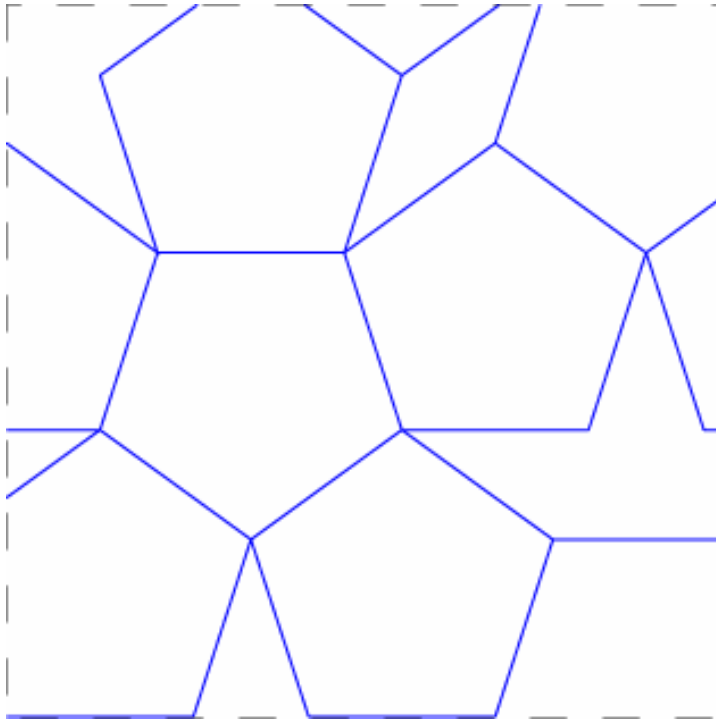
Generalized Point Substitution Processes

タイリングのインフレーション則を構成する手法

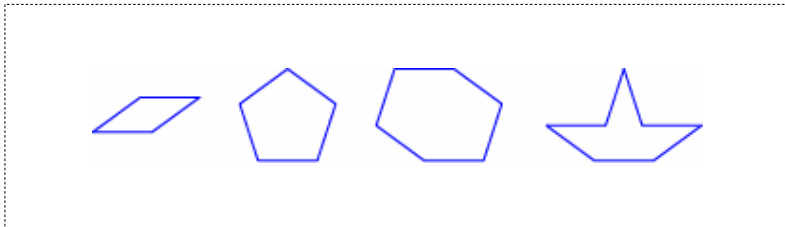
- (1) タイリングに拡大相似変換を適用する
但し、拡大比率は $\sigma = \tau^n$ (τ : **Pisot unit**)
- (2) 各頂点に基本点集合モチーフ S を配置する
- (3) 得られた点集合から、新しいタイリングの頂点を
与えるもののみを残し、それ以外は消去する
(局所的規則による)

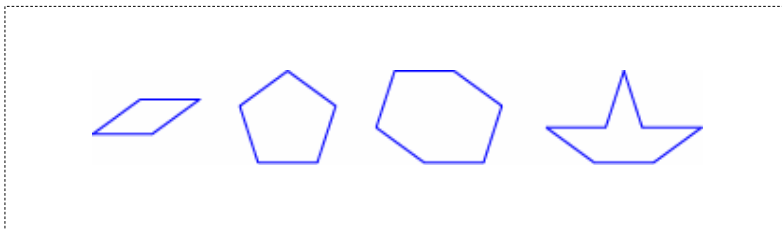
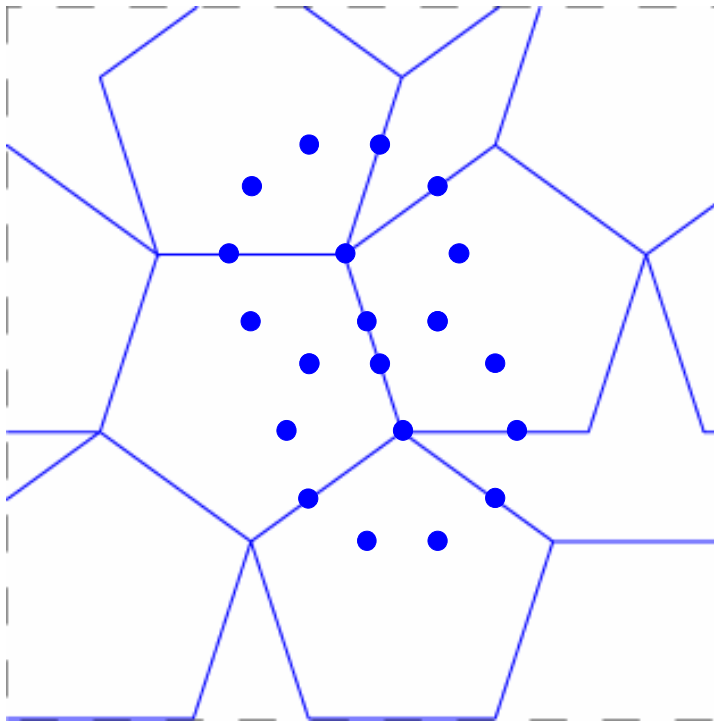
一般化点集合置換法の適用例





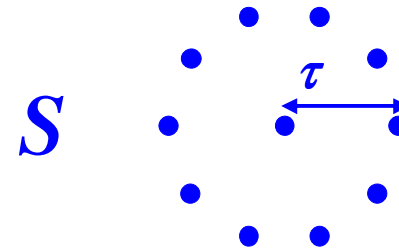
(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

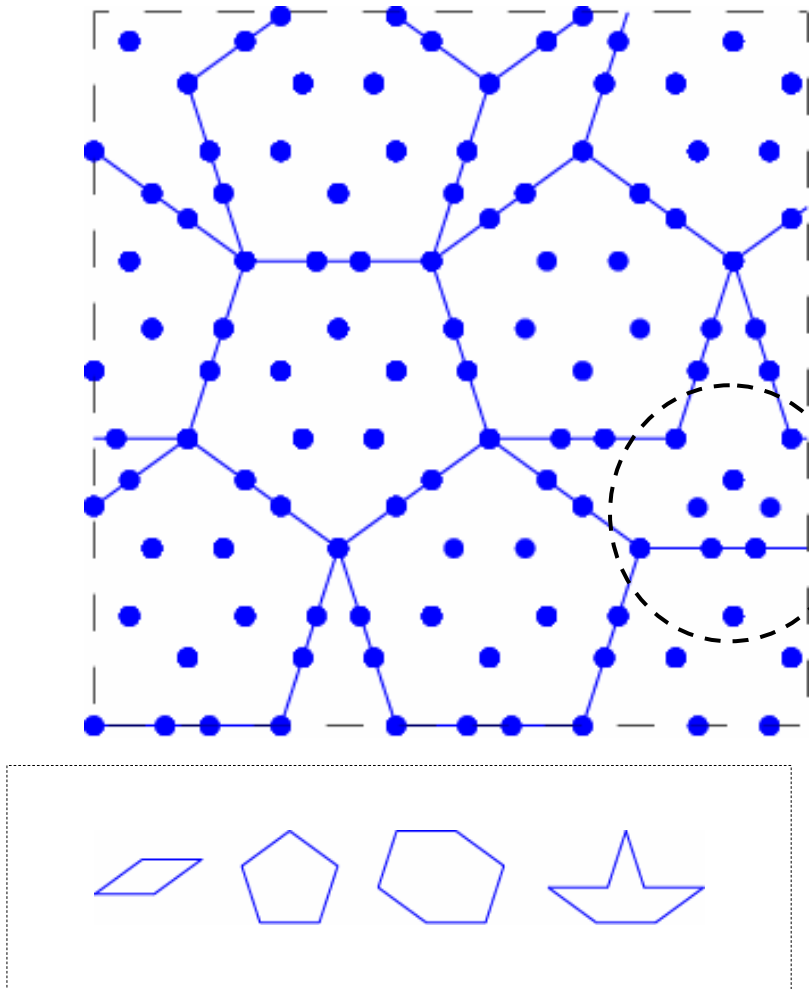




(S1) 拡大相似変換
 (比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

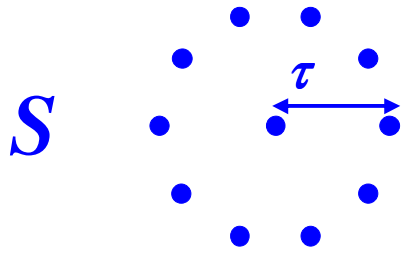
(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置

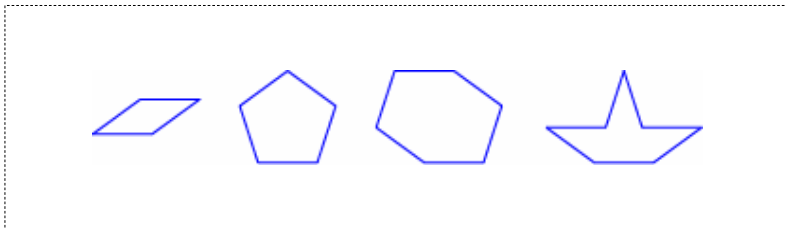
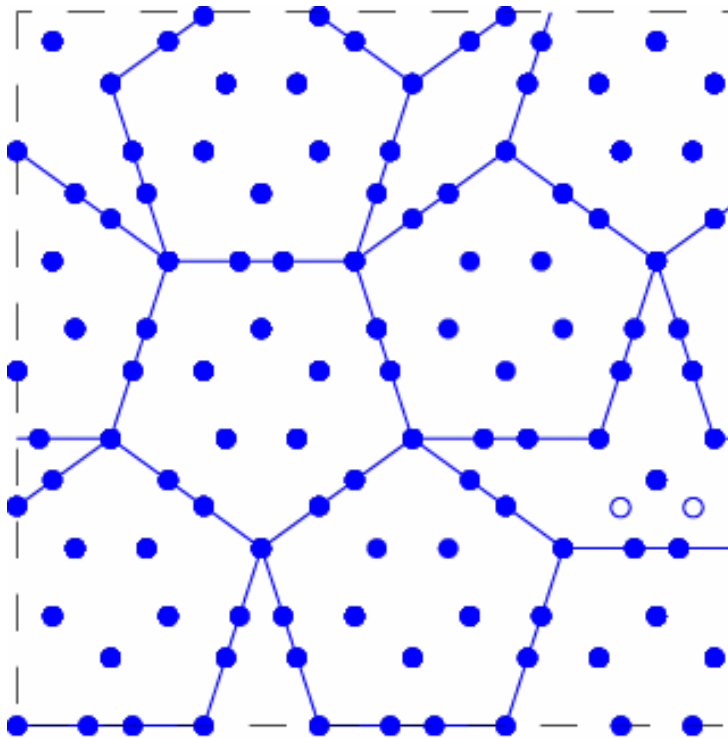




(S1) 拡大相似変換
 (比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

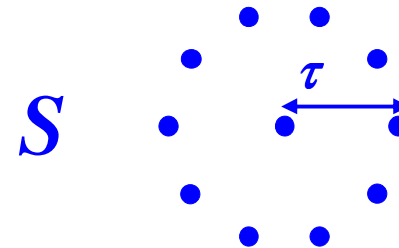
(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置



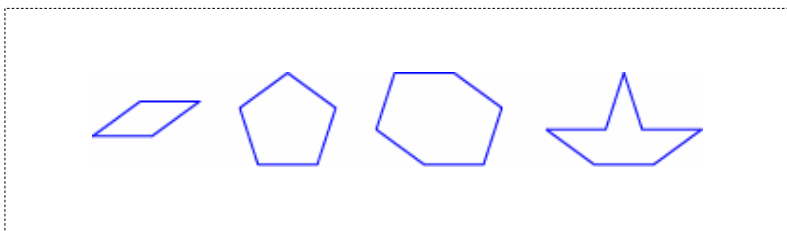
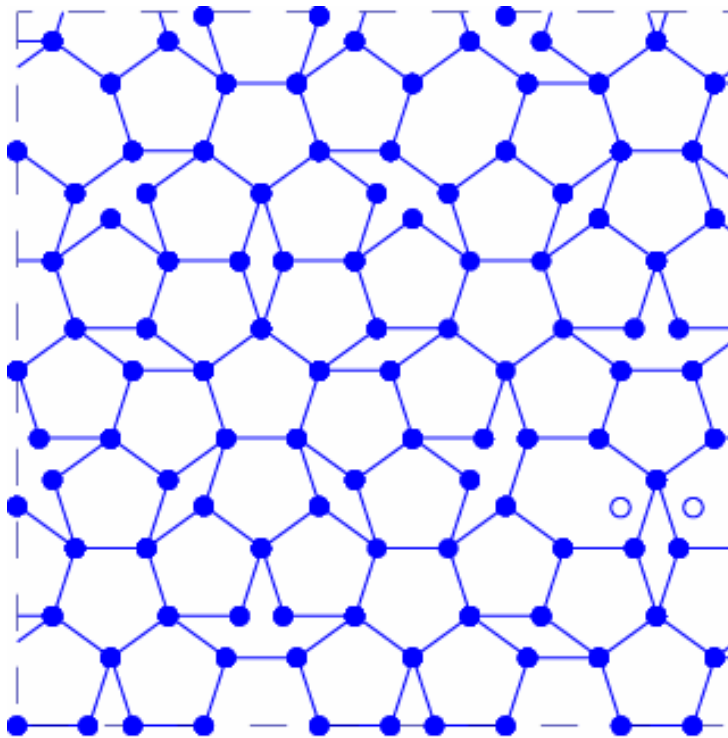


(S1) 拡大相似変換
 (比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置

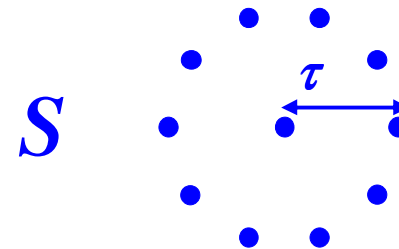


(S3) 過剰な点を削除

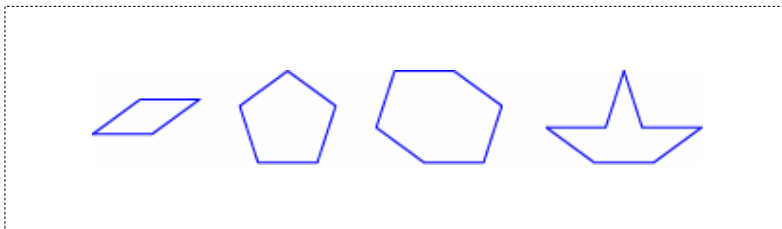
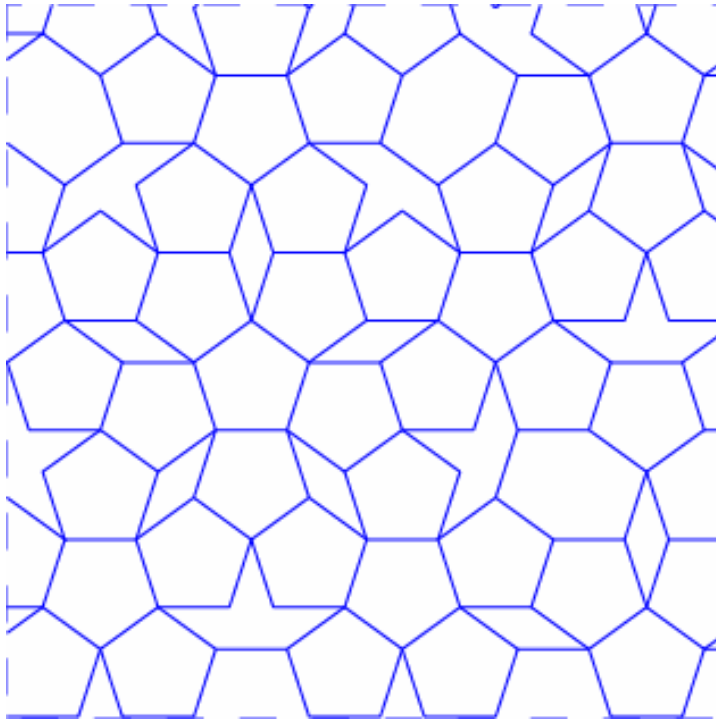


(S1) 拡大相似変換
 (比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置



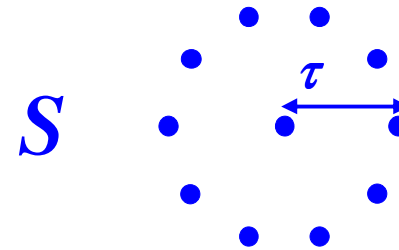
(S3) 過剰な点を削除



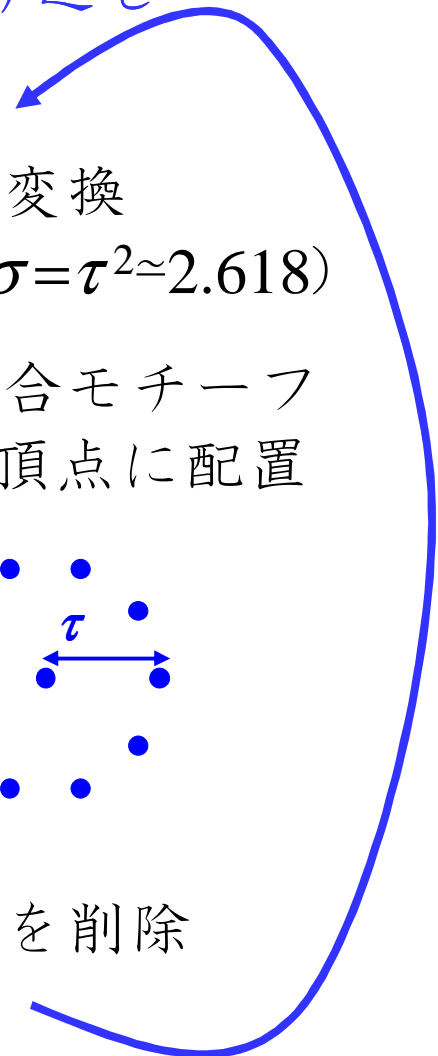
繰り返し

(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置

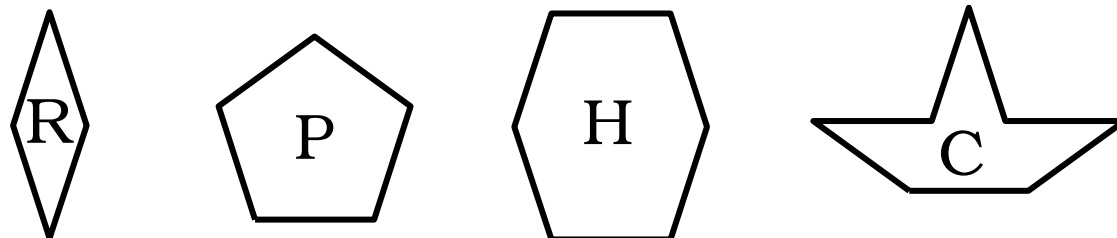


(S3) 過剰な点を削除

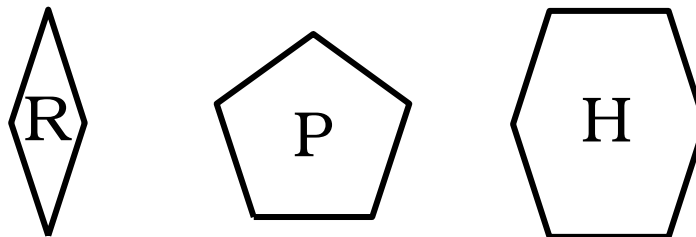


本研究で見つけた新しいタイリング

- RPHC family

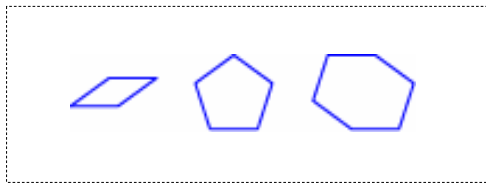
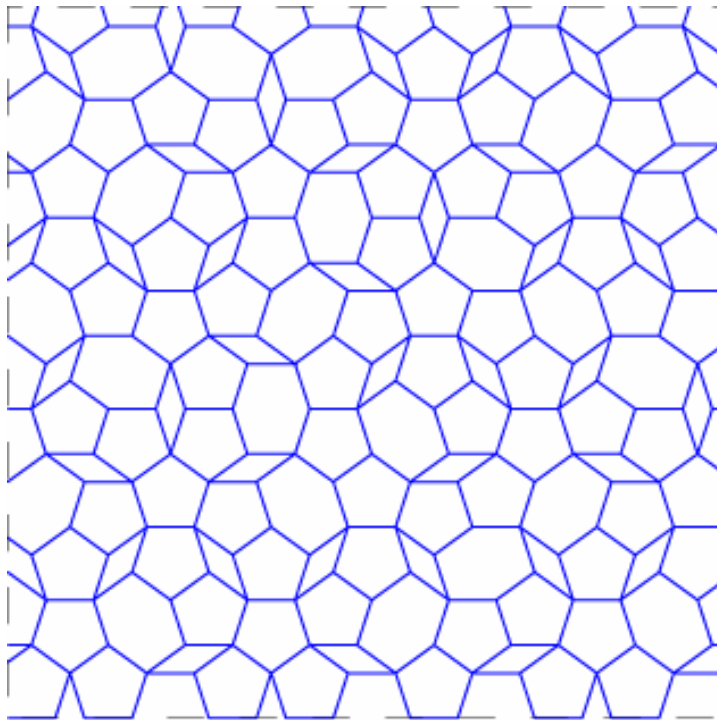


- RPH family

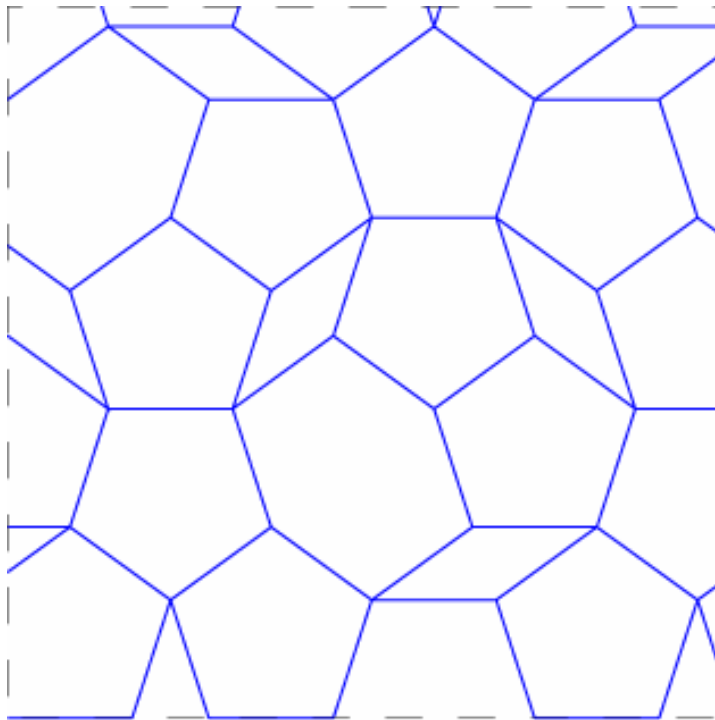


N. Fujita, Acta Cryst. A 65, 342 (2009)

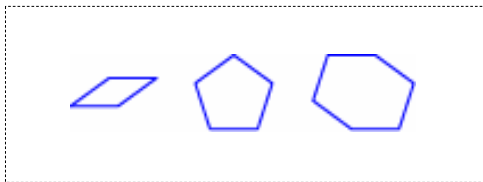
3. 三元十回対称タイリング ～RPHタイリング～



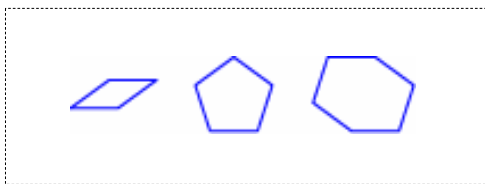
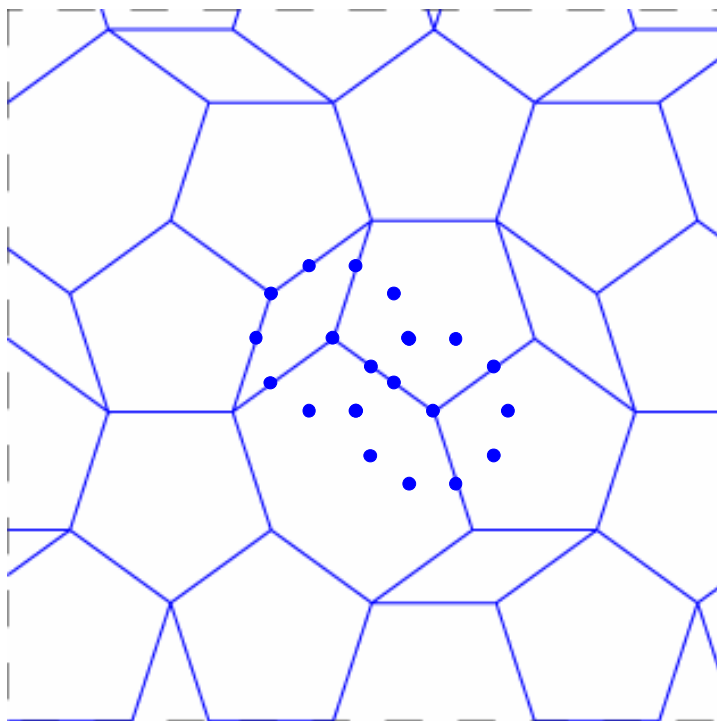
三元タイリング (RPH)



(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

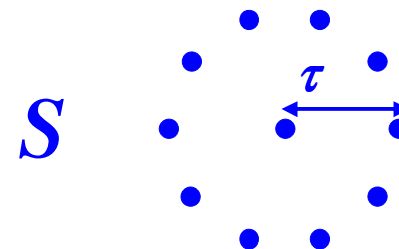


三元タイリング (RPH)

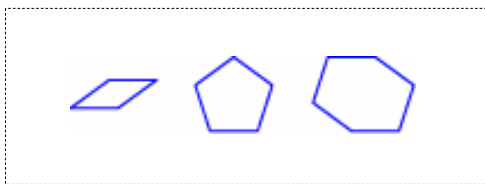
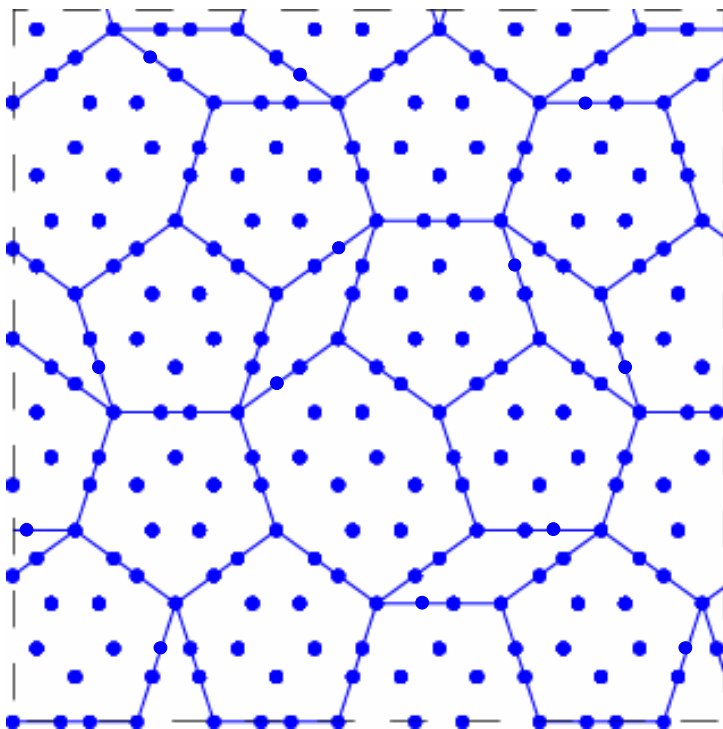


(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置

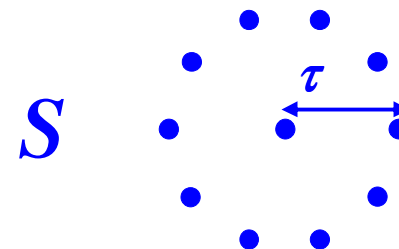


三元タイリング (RPH)

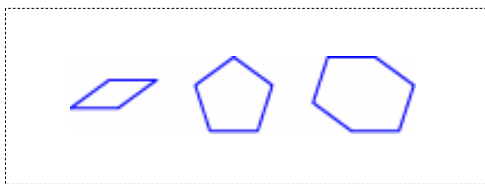
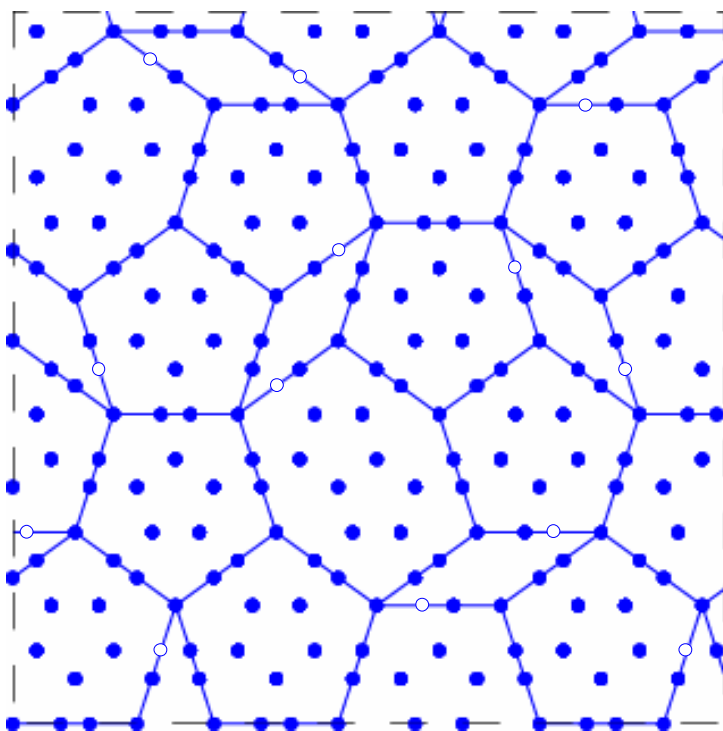


(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置

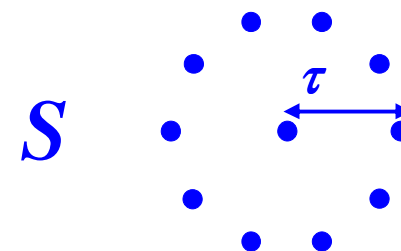


三元タイリング (RPH)



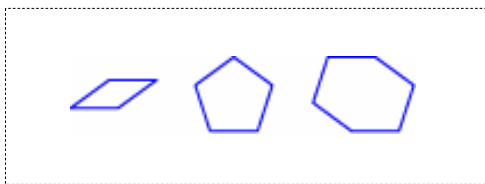
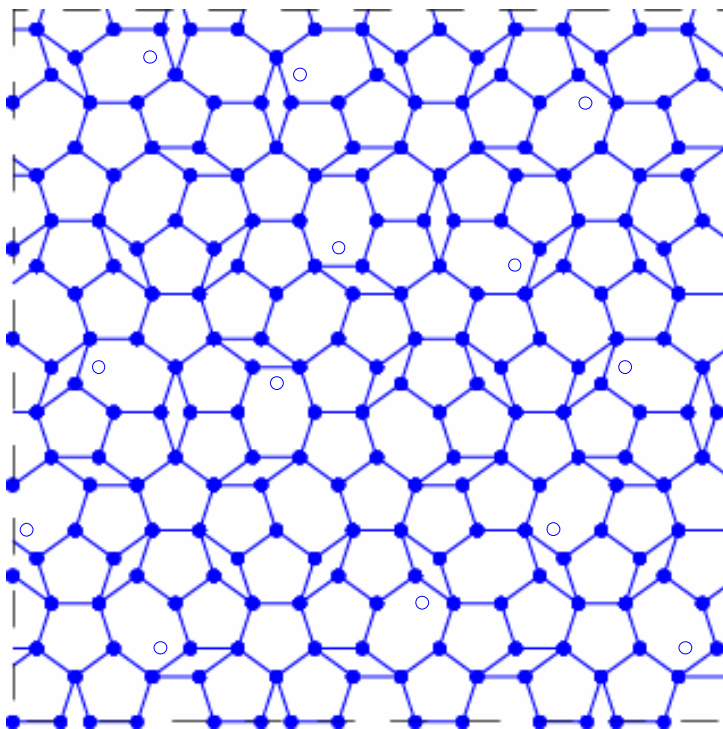
(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置



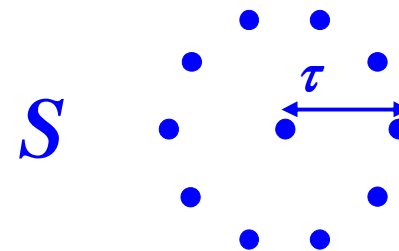
(S3) 過剰な点を削除

三元タイリング (RPH)



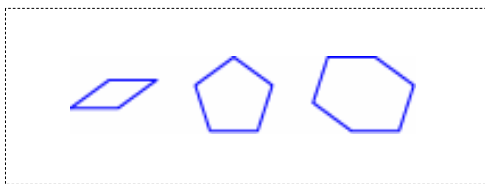
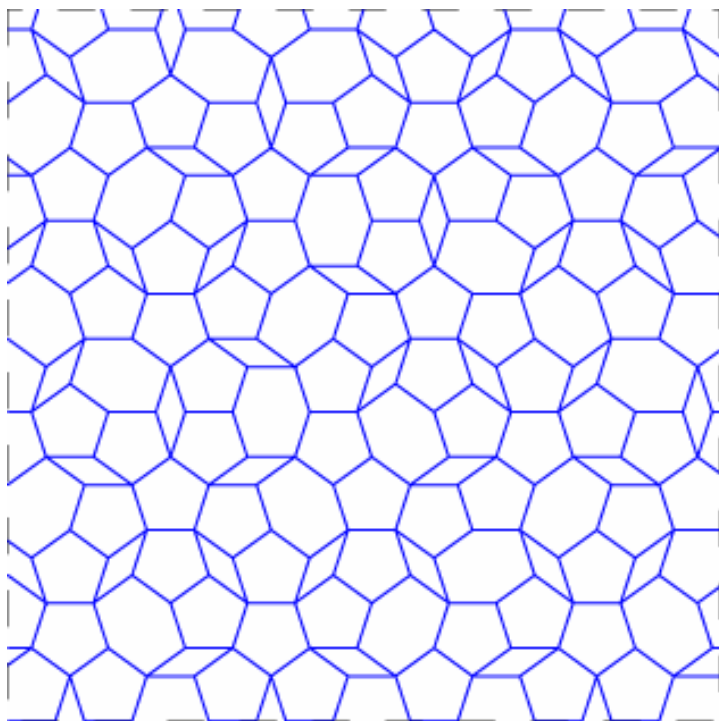
(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置



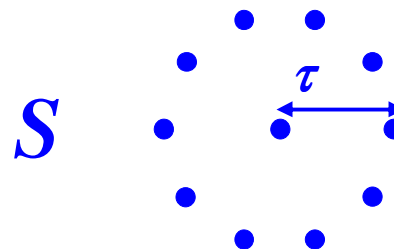
(S3) 過剰な点を削除

三元タイリング (RPH)

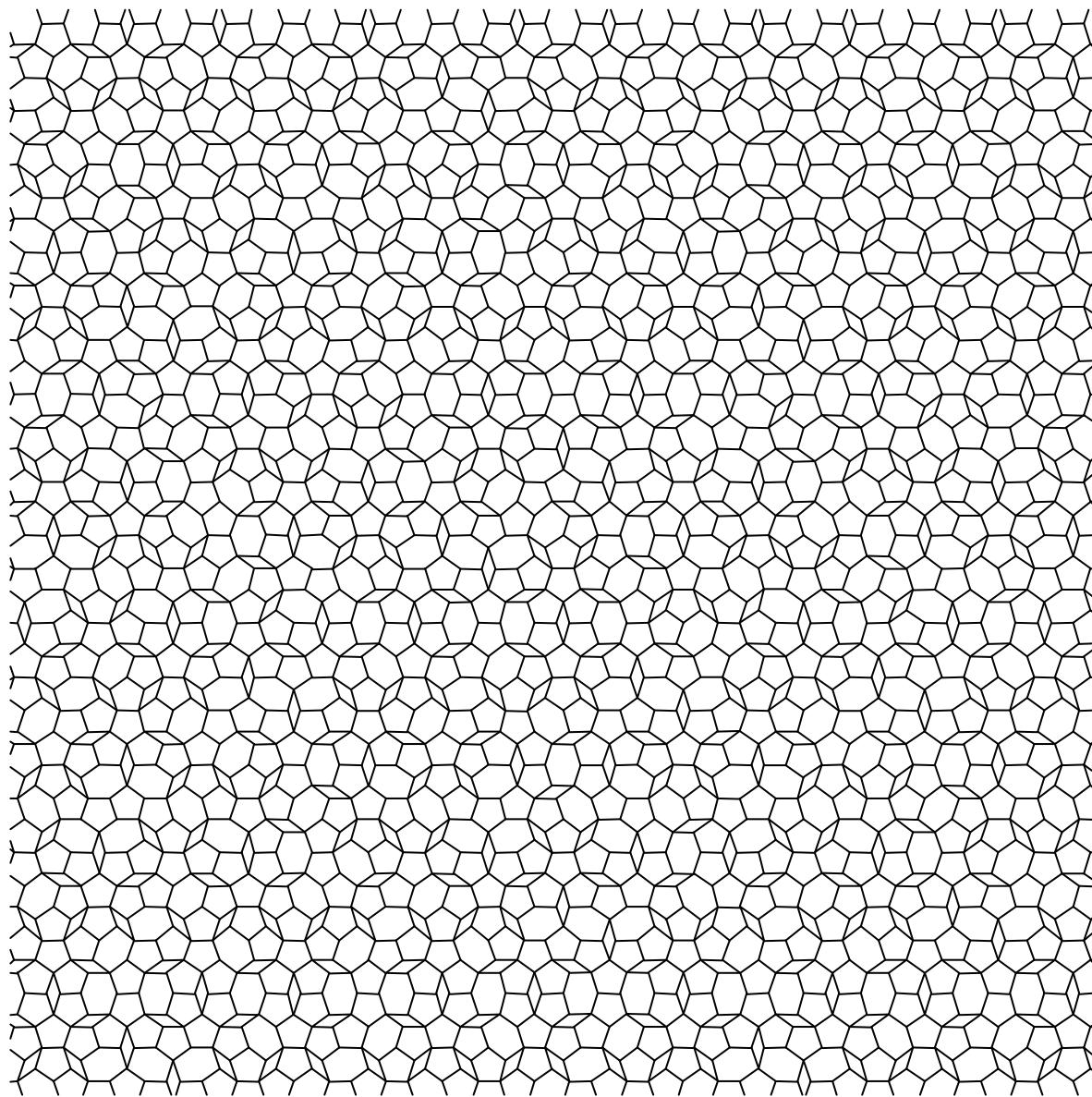


(S1) 拡大相似変換
(比率 $\sigma = \tau^2 \approx 2.618$)

(S2) 基本点集合モチーフ
 S を全頂点に配置



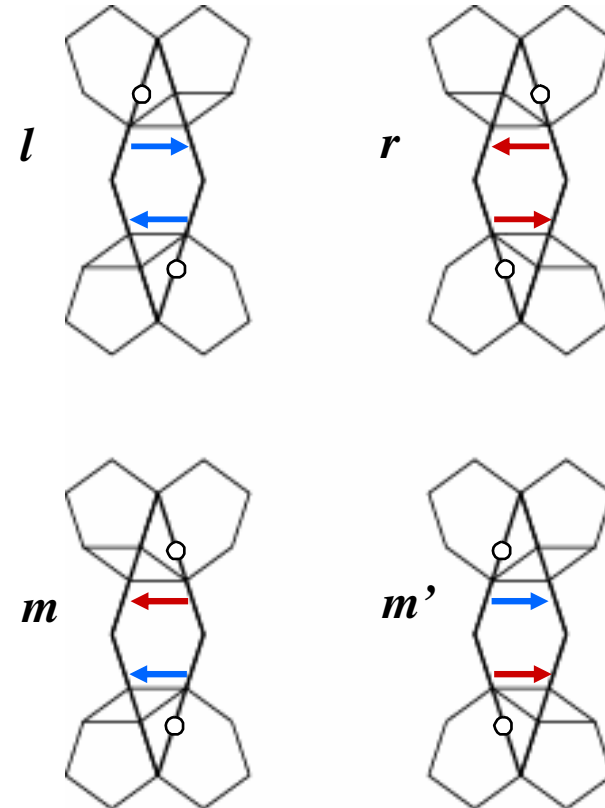
(S3) 過剰な点を削除



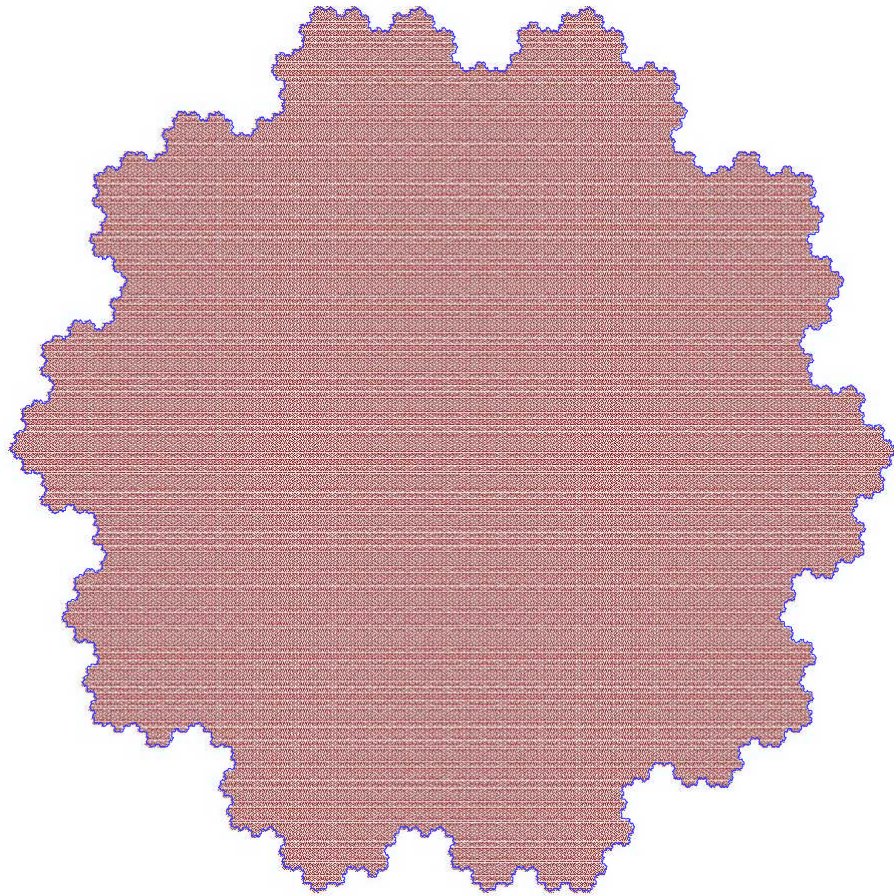
RPHタイリング
正方形パッチ

第三ステップ（消去）の自由度

拡大した菱形の各鋭角
に対して、点の消去の
仕方は二通り許される
(青と赤の矢印で区別)



RPHタイリングの窓



赤い領域：

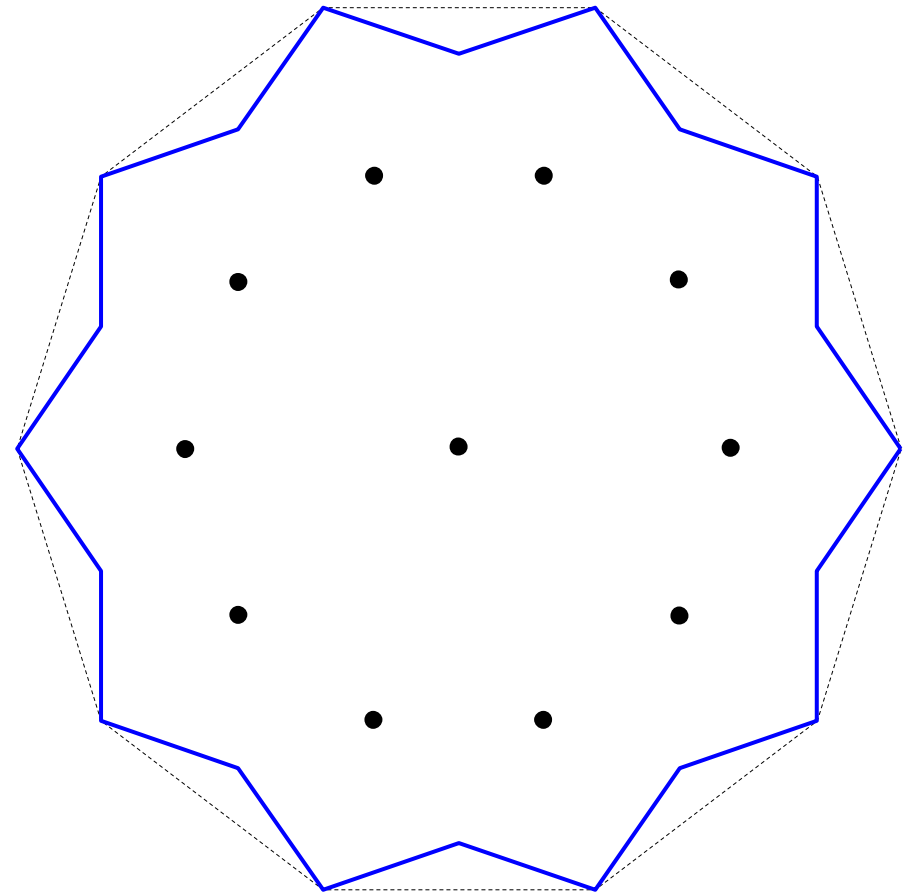
コンピュータで作成
したタイリングの頂
点集合（約**24**万点）
を、直交補空間に投
影したもの

一般化点集合置換法（直交補空間）

(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る

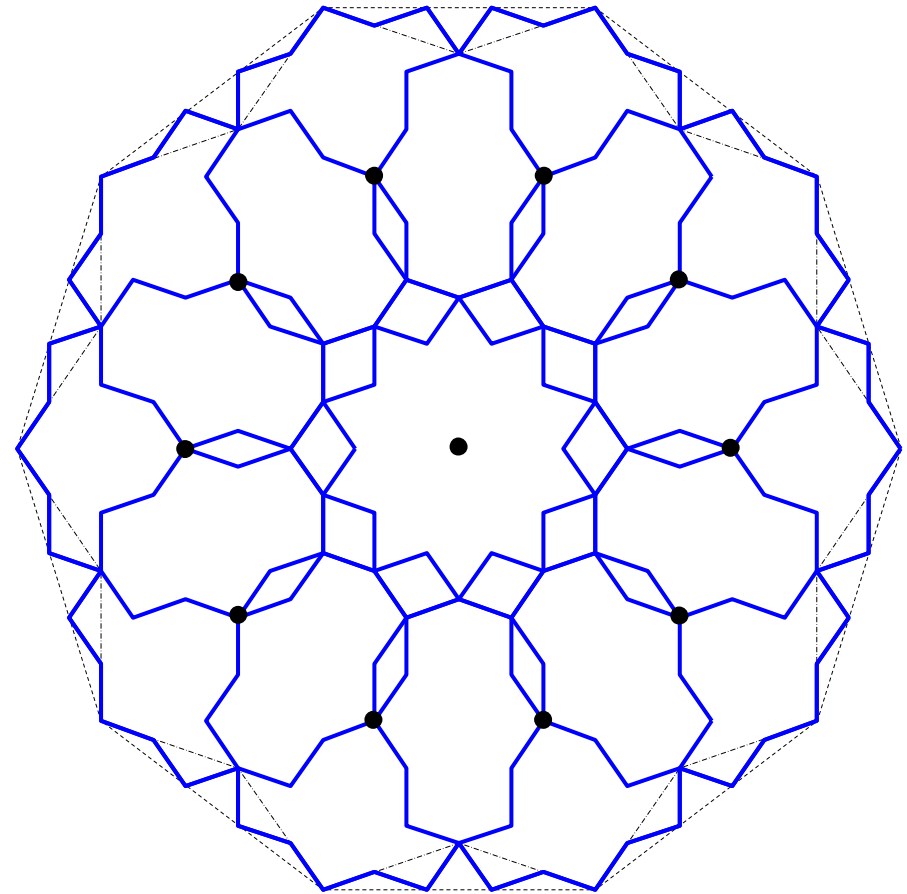


一般化点集合置換法（直交補空間）

(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る

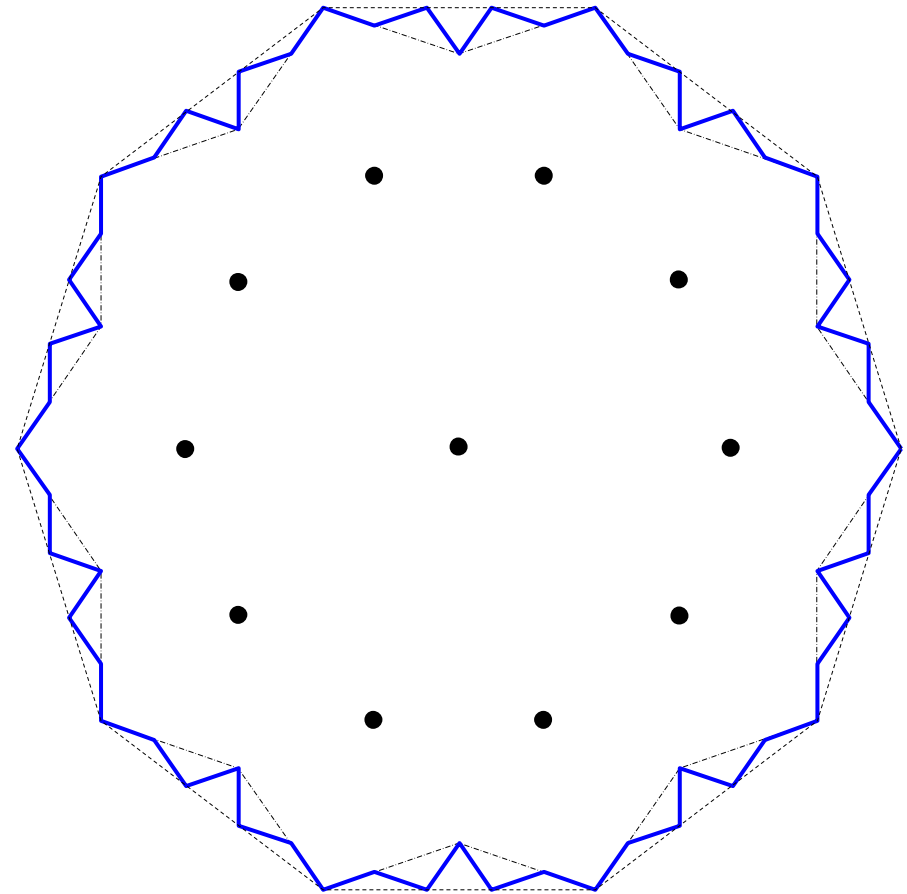


一般化点集合置換法（直交補空間）

(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る

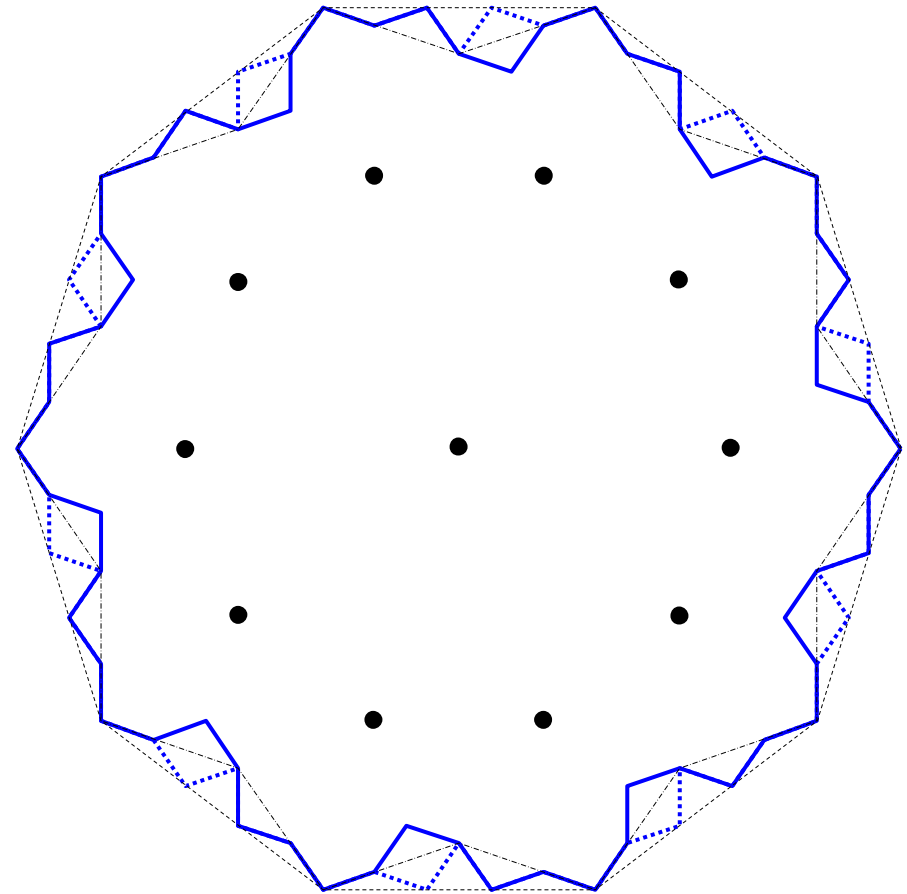


一般化点集合置換法（直交補空間）

(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る

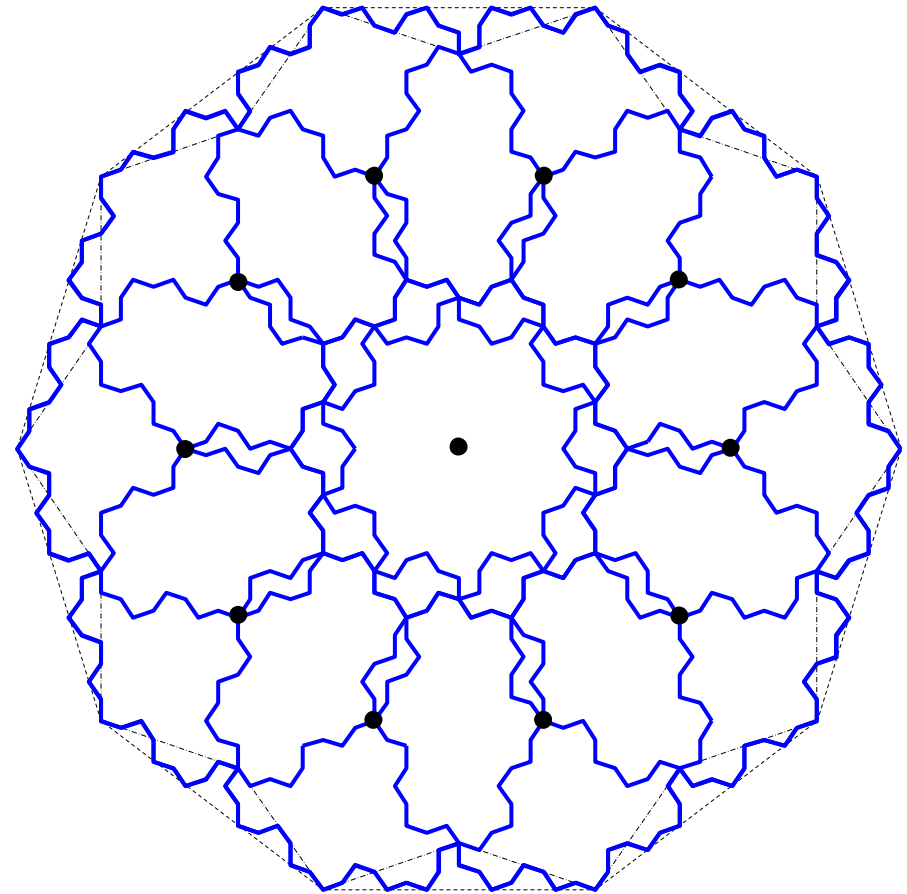


一般化点集合置換法（直交補空間）

(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る

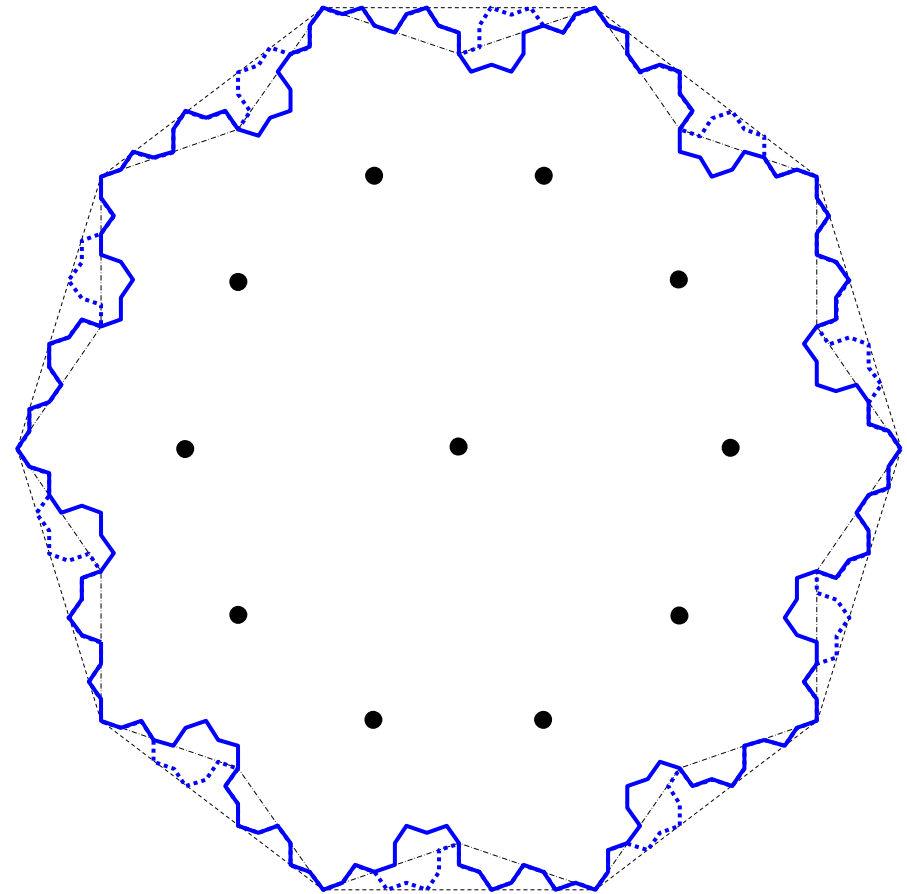


一般化点集合置換法（直交補空間）

(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る

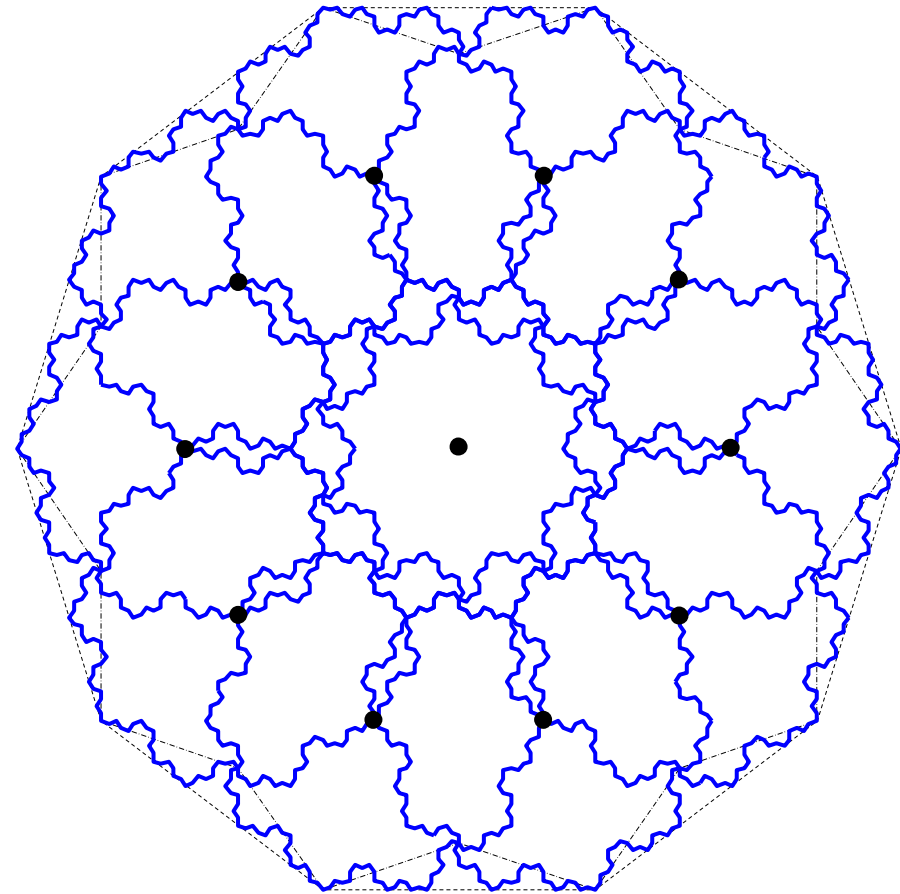


一般化点集合置換法（直交補空間）

(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る

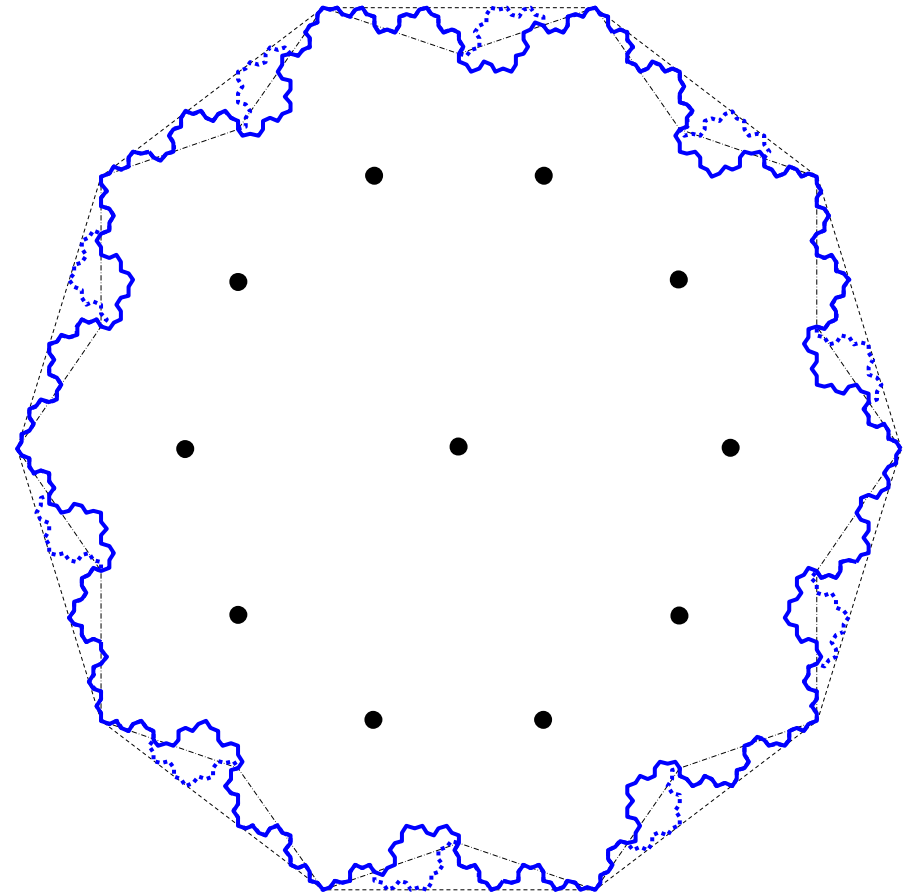


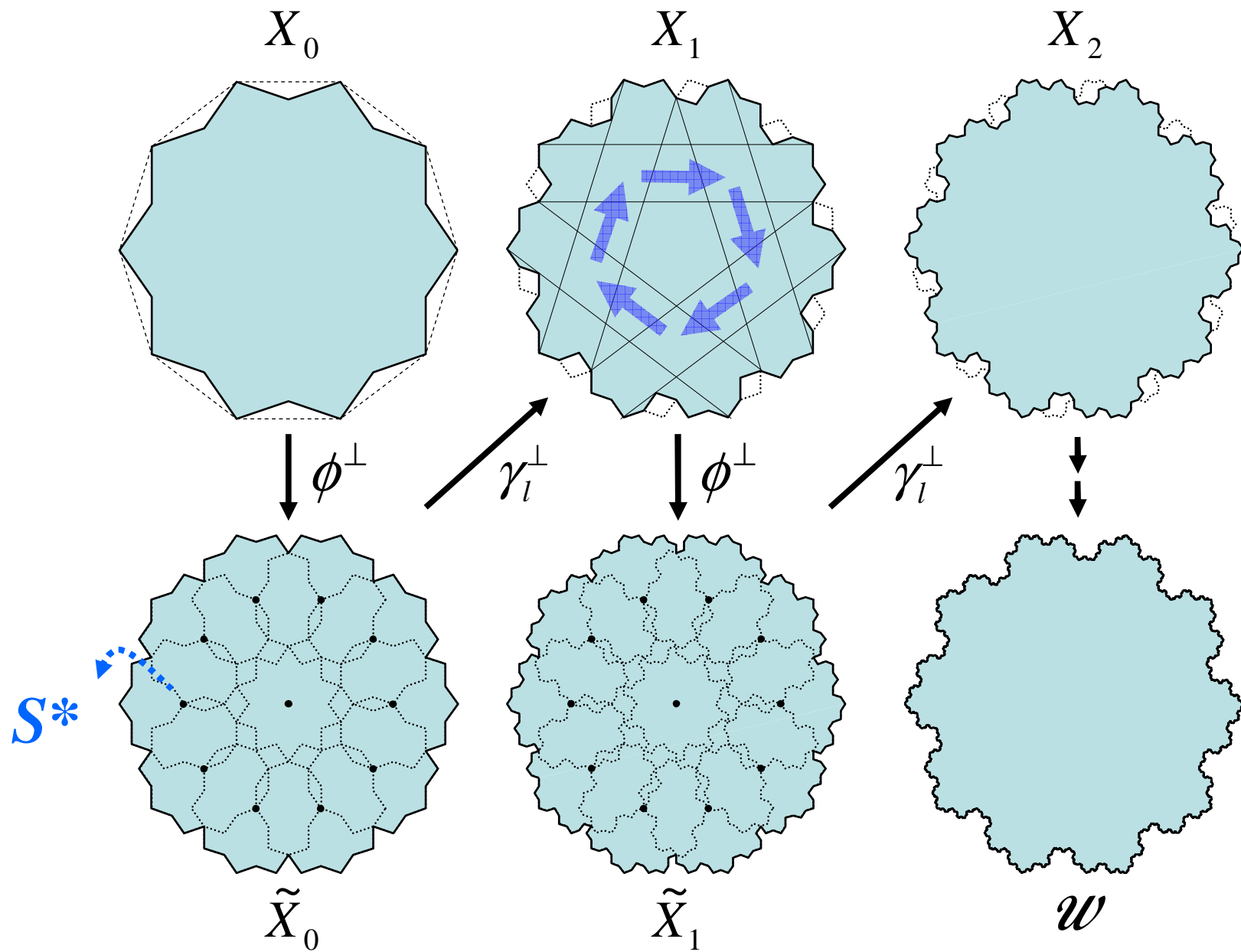
一般化点集合置換法（直交補空間）

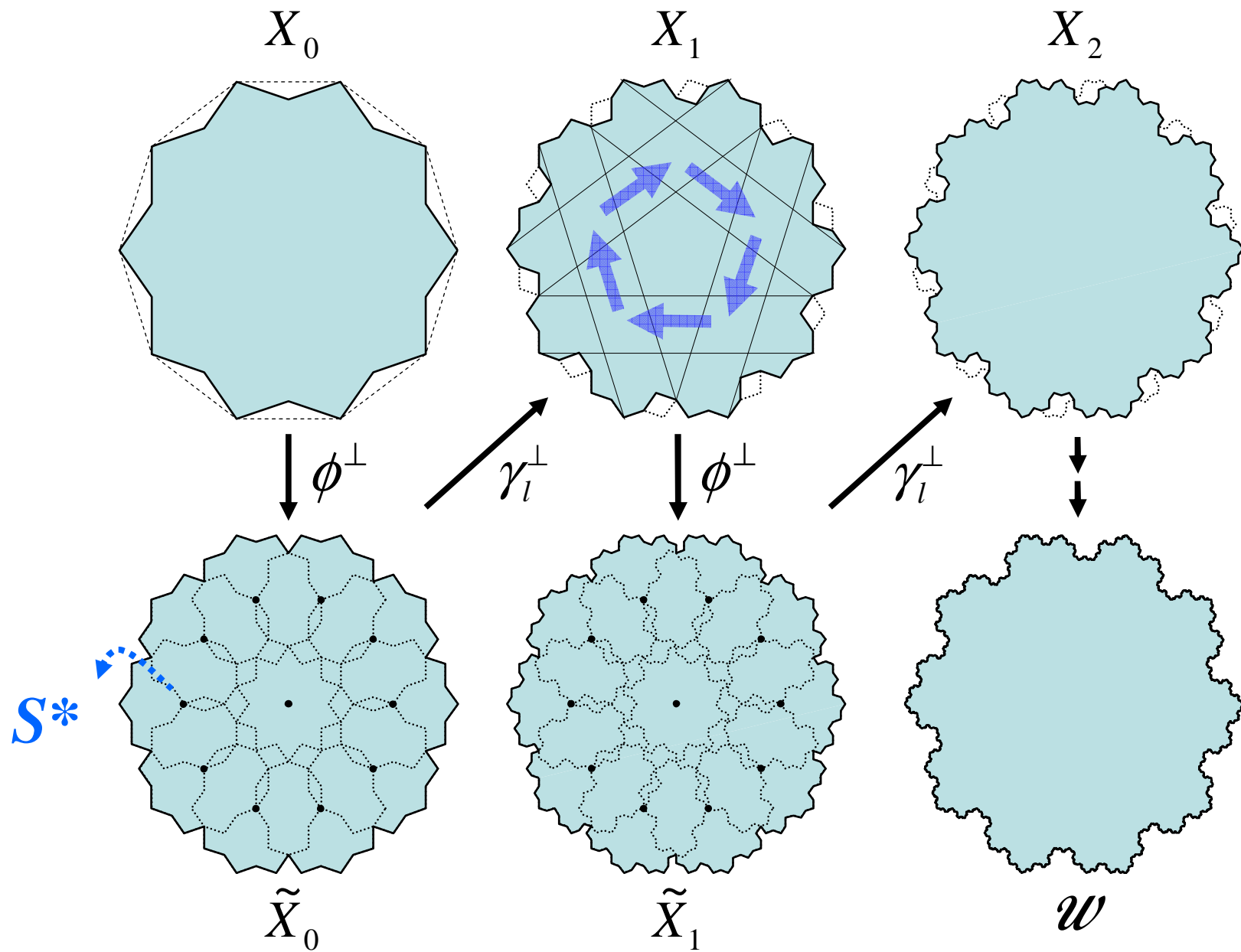
(1*) 初期図形に縮小相似
変換を適用する。
但し、拡大縮小比率は σ
 $=\tau^{-n}$ (τ : Pisot unit)

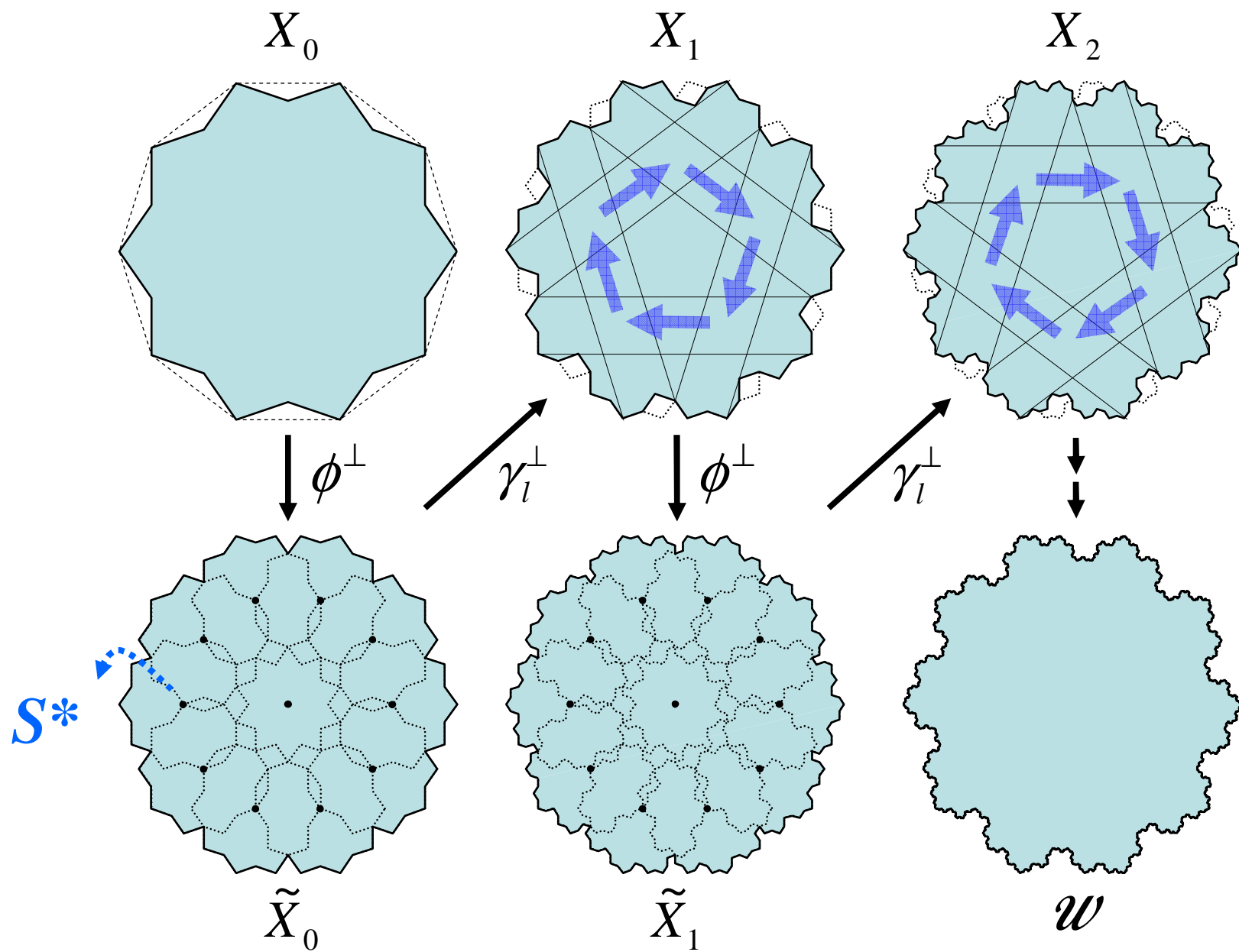
(2*) 縮小した図形を基本
点集合モチーフの像 S^*
の各点に配置する

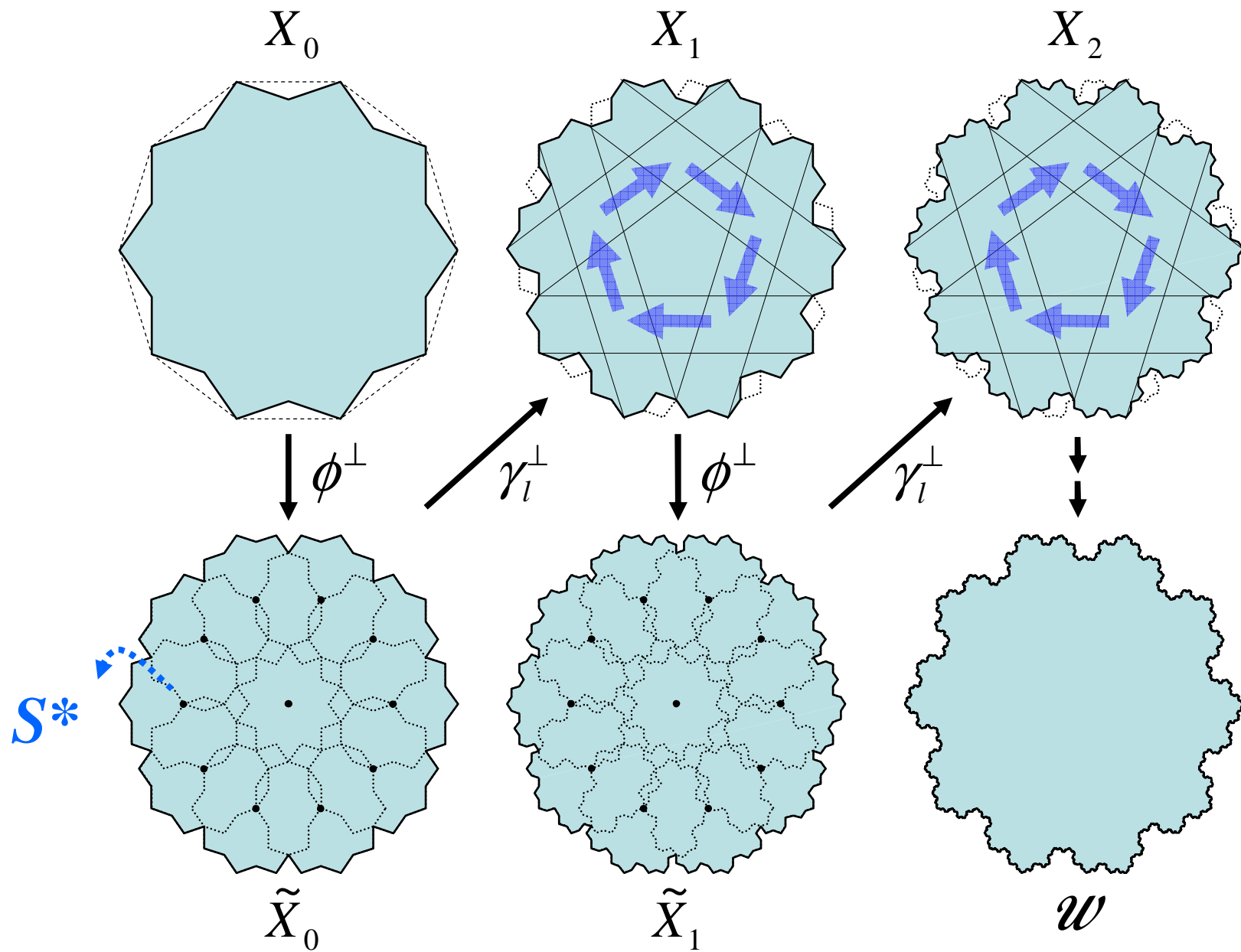
(3*) 消去則に対応する部分
を削り取る



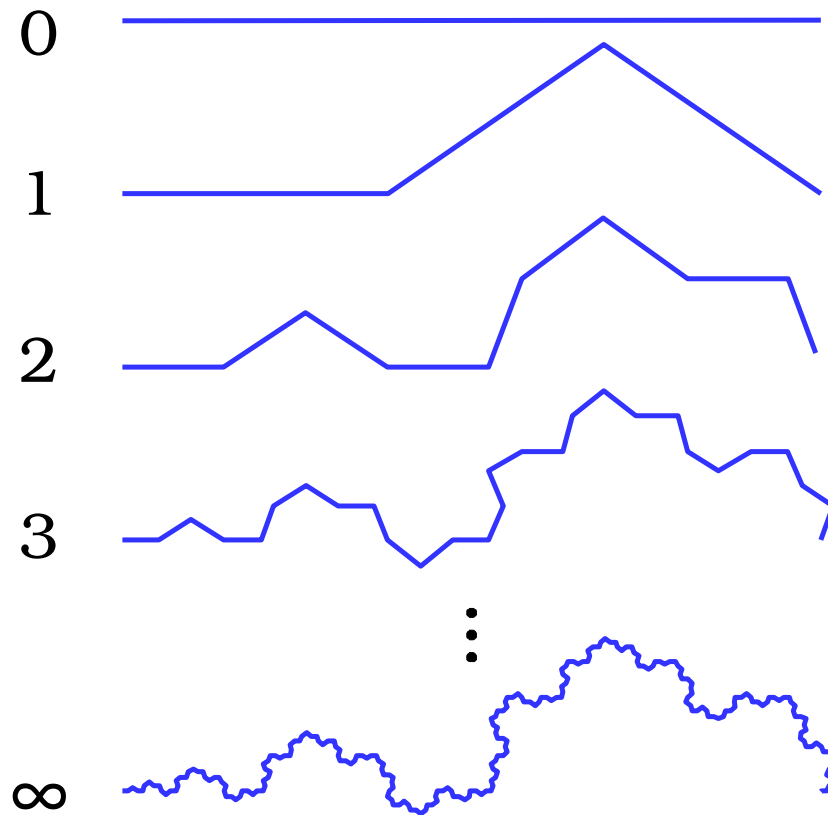








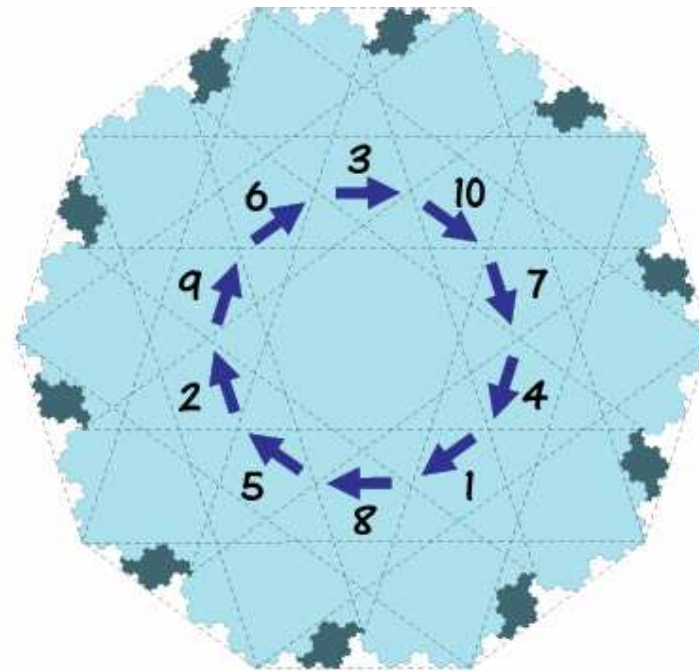
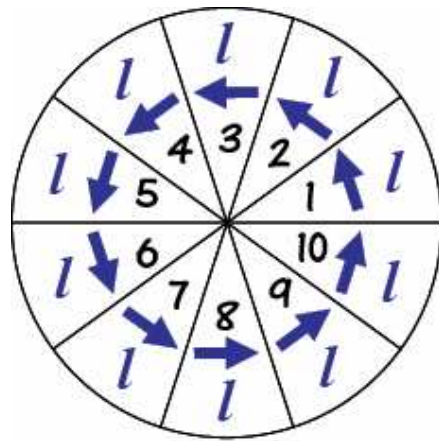
フラクタルな窓の境界



von Koch 曲線に類似
フラクタル次元 ↓

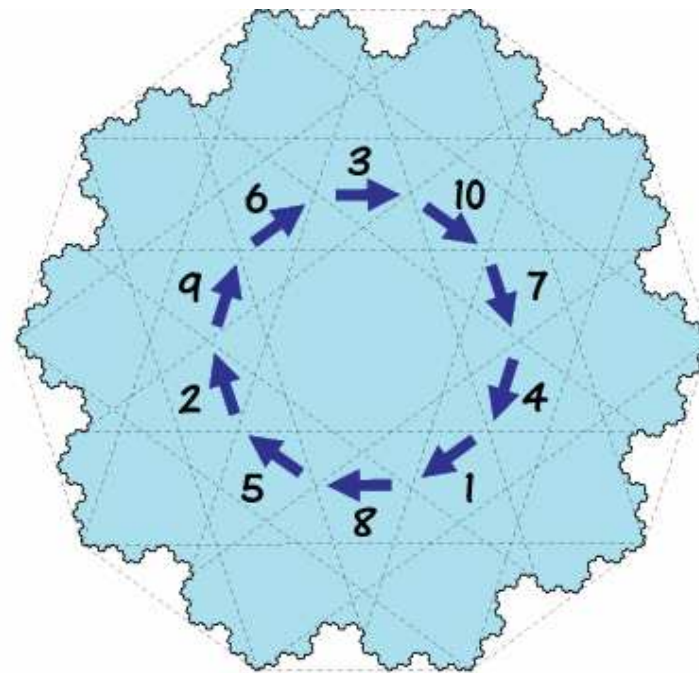
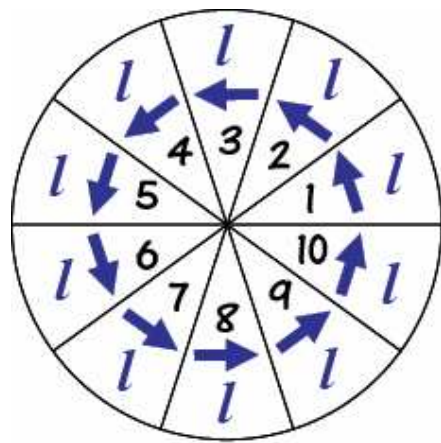
$$\begin{aligned} \dim(\partial W) &= \frac{\ln(3)}{\ln(\tau^2)} \\ &\cong 1.1415 \end{aligned}$$

全ての菱形の鋭角に対して、左向き
矢印の消去則を適用した場合



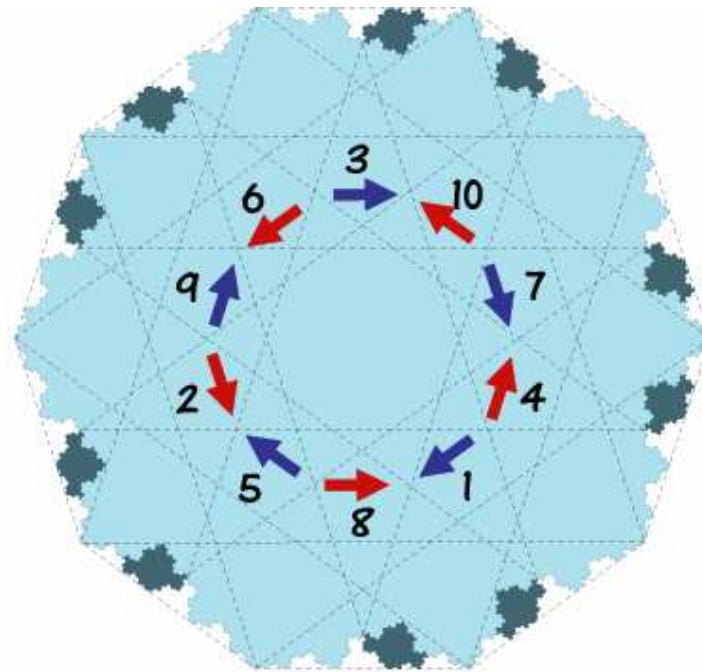
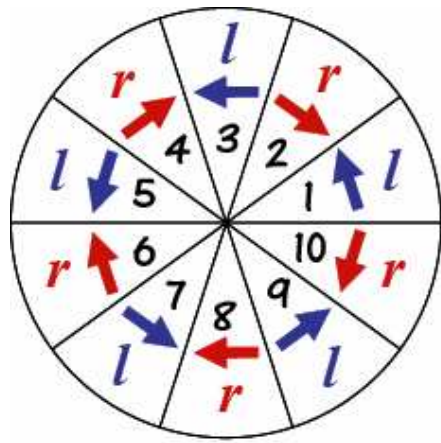
C_{10}

全ての菱形の鋭角に対して、左向き
矢印の消去則を適用した場合



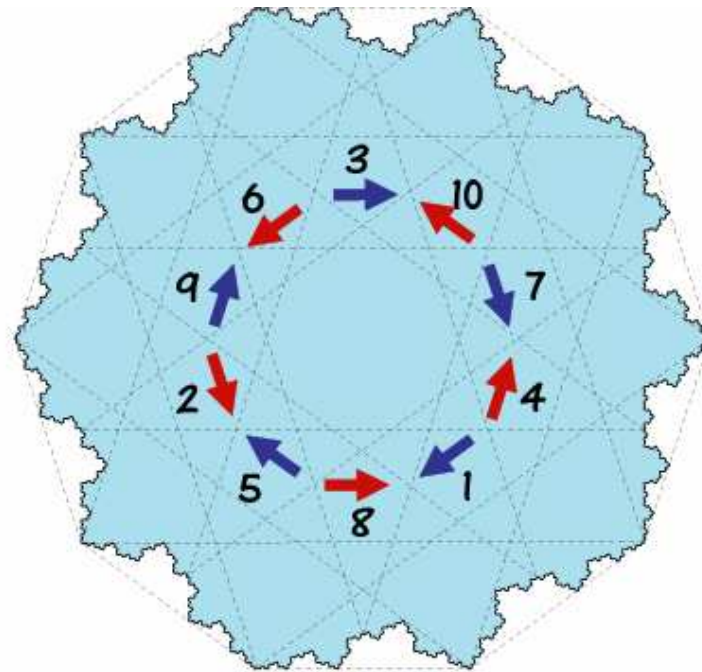
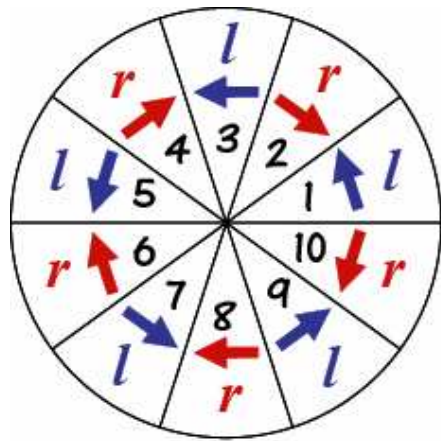
C_{10}

菱形の鋭角の方位によって異なる 消去則を適用した場合



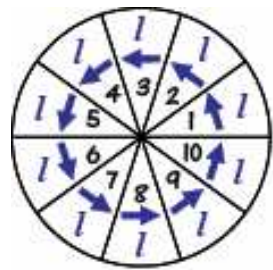
D_5

菱形の鋭角の方位によって異なる 消去則を適用した場合

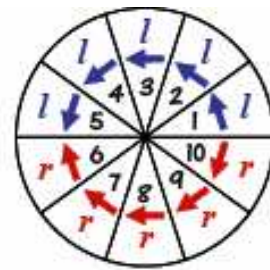
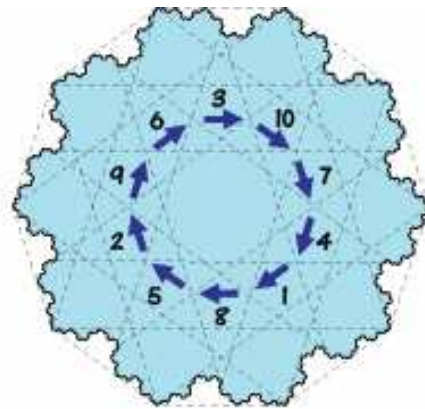


D_5

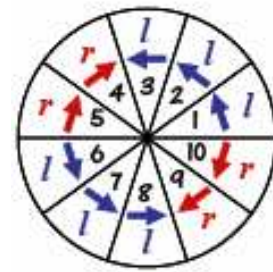
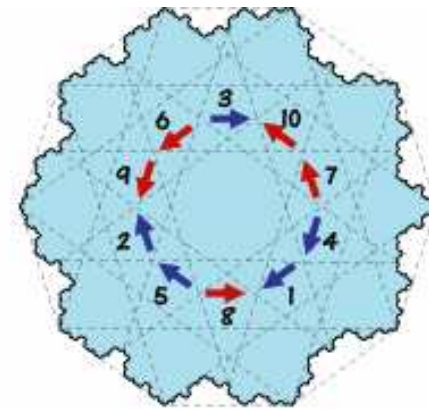
菱形の鋭角の方位によって異なる 消去則を適用した場合



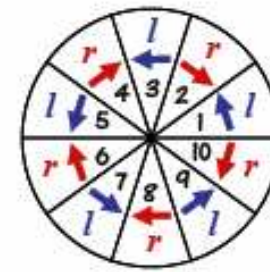
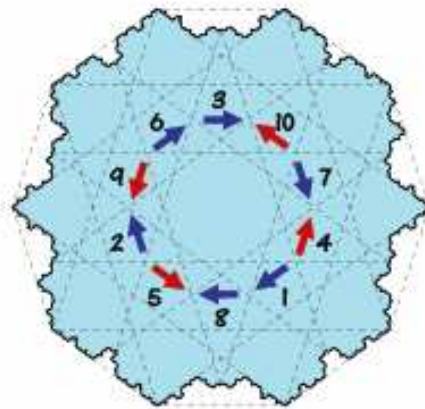
C_{10}



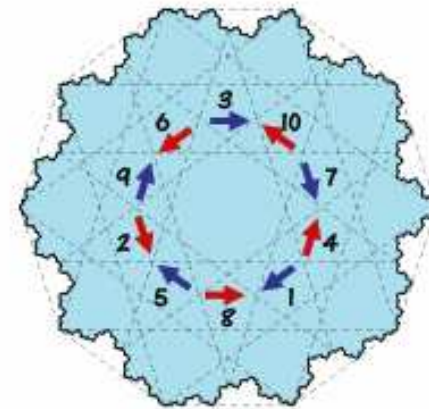
D_1



C_2

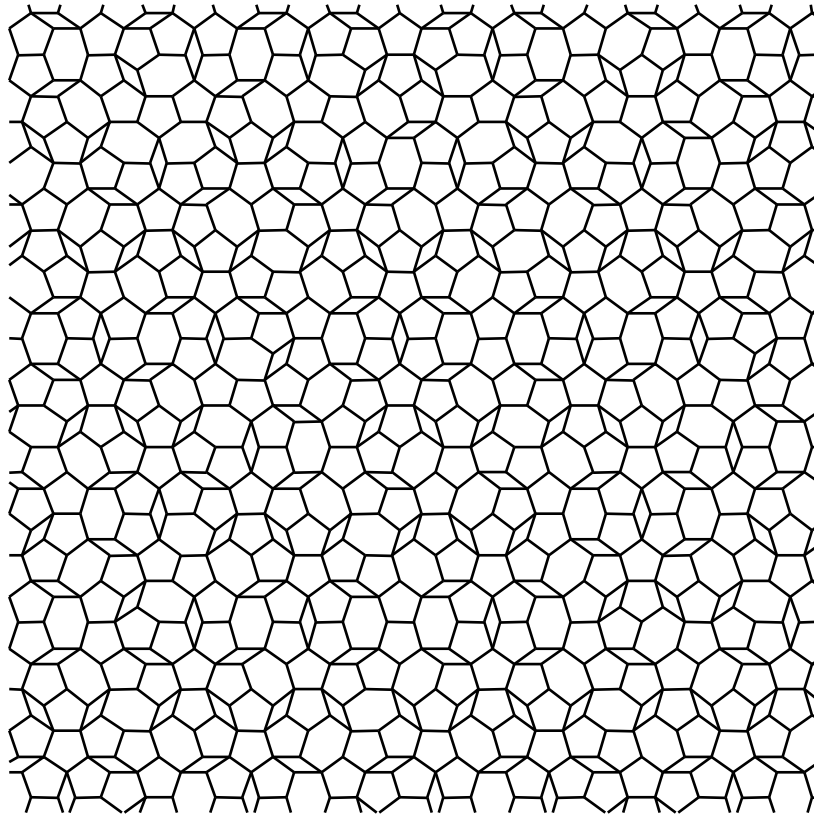


D_5

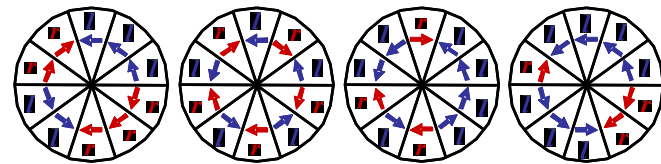


反復ステップ毎に異なる 消去則を適用した場合

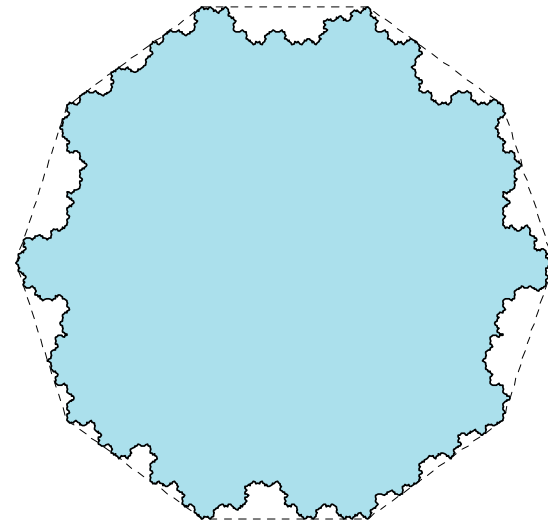
タイリングの正方形パッチ



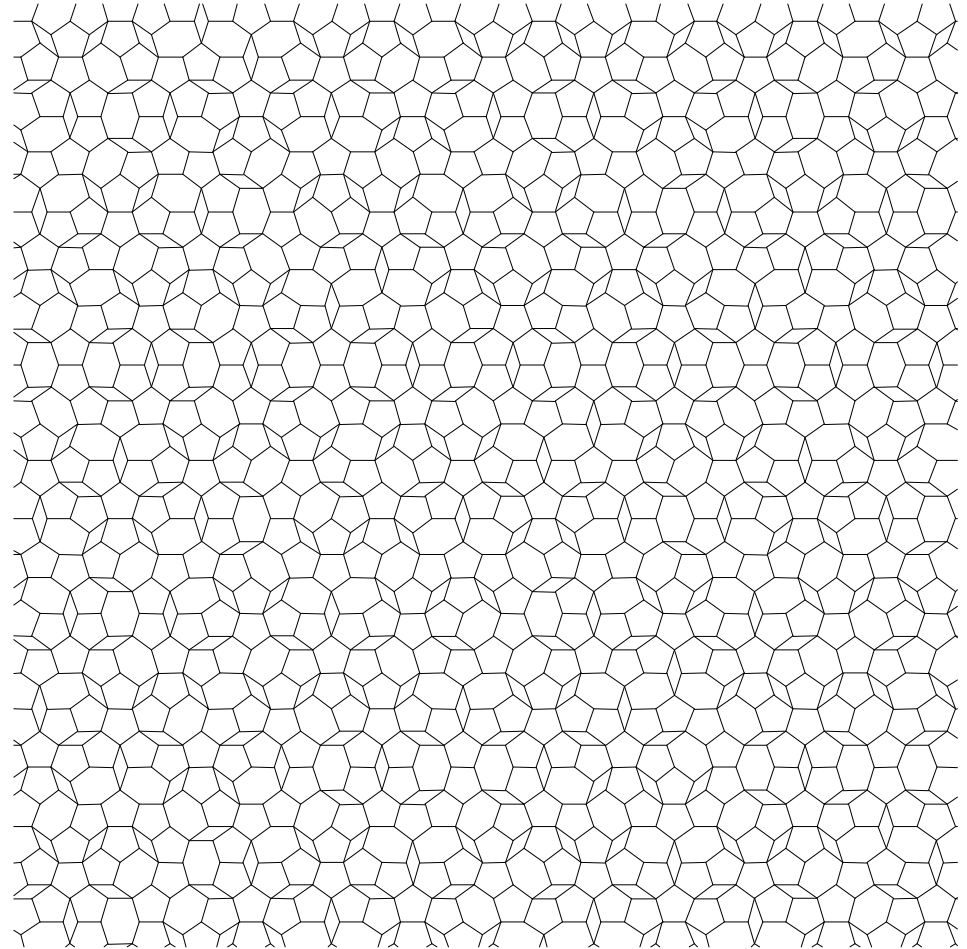
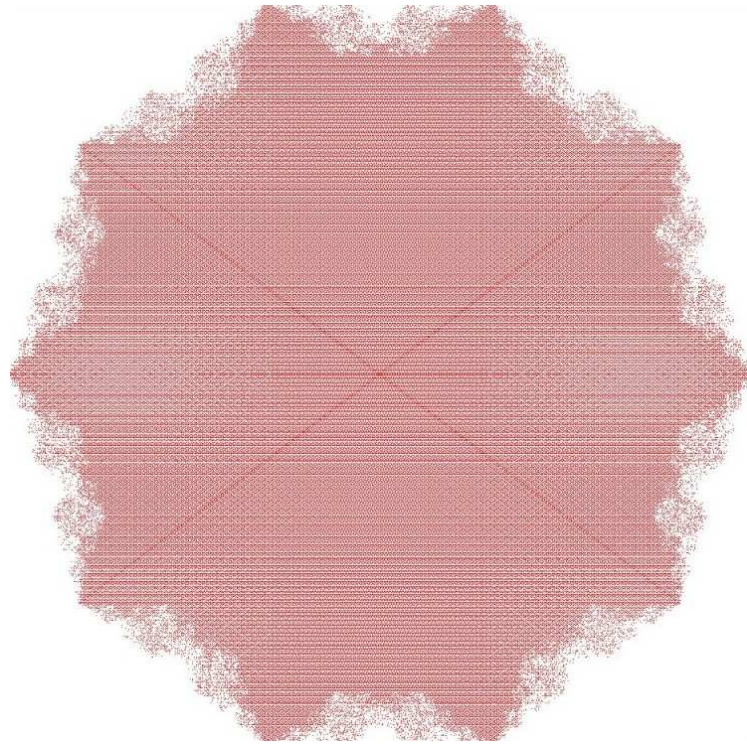
4周期のインフレーション則



窓の形状



4種類の消去則をランダムに 適用した場合



4. フェイゾンと乱雑タイリング

フェイゾンフリップ (Phason flip)

K. Edagawa, K. Suzuki & S. Takeuchi,
Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 1674.

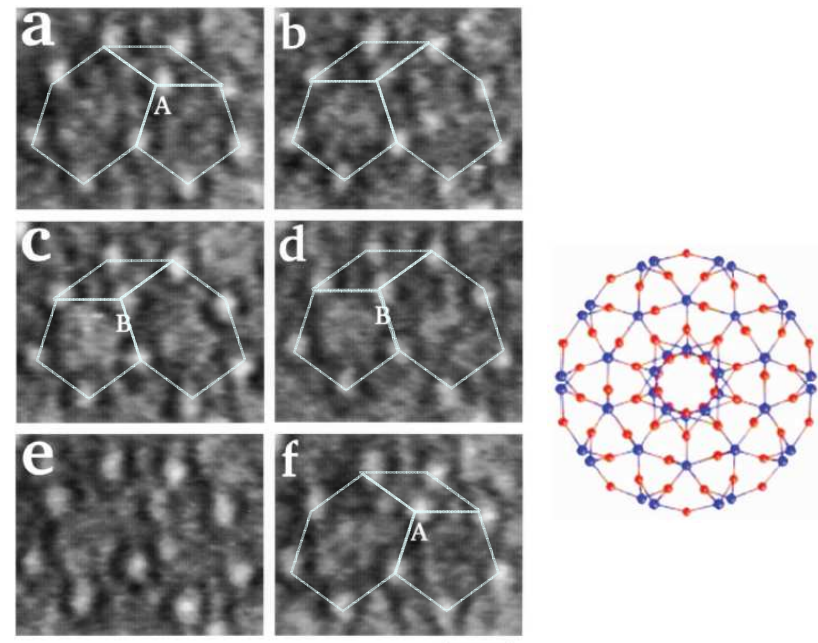
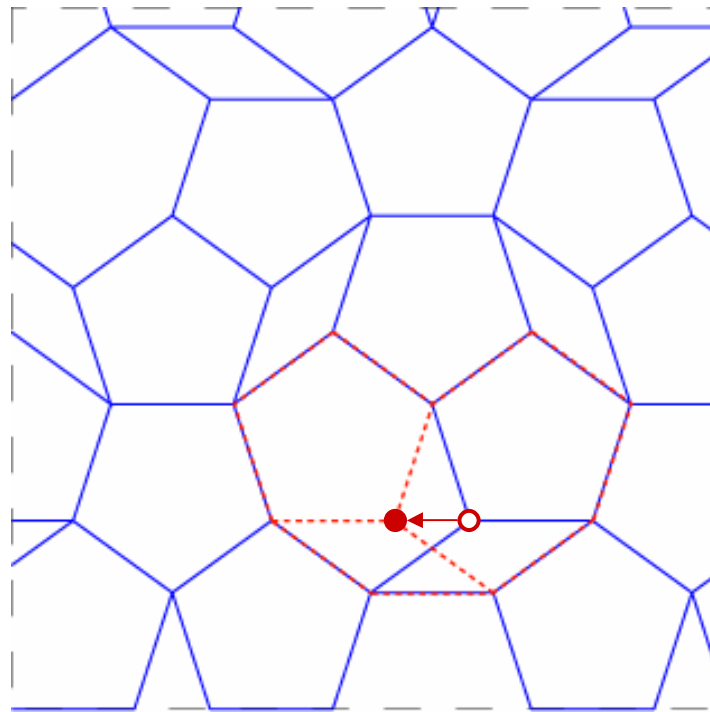


FIG. 2. An example of the change in the HRTEM image observed at 1123 K. Elapsed times for (a)–(f) are 0, 5, 8, 110, 113, and 115 s, respectively. The scale bar indicates 2.0 nm.

十回対称準結晶 $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Co}_{15}$
電子顕微鏡像 (1123K) ~ 時間変化を追ったもの

フェイゾンフリップ (Phason flip)

K. Edagawa, K. Suzuki & S. Takeuchi,
Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 1674.

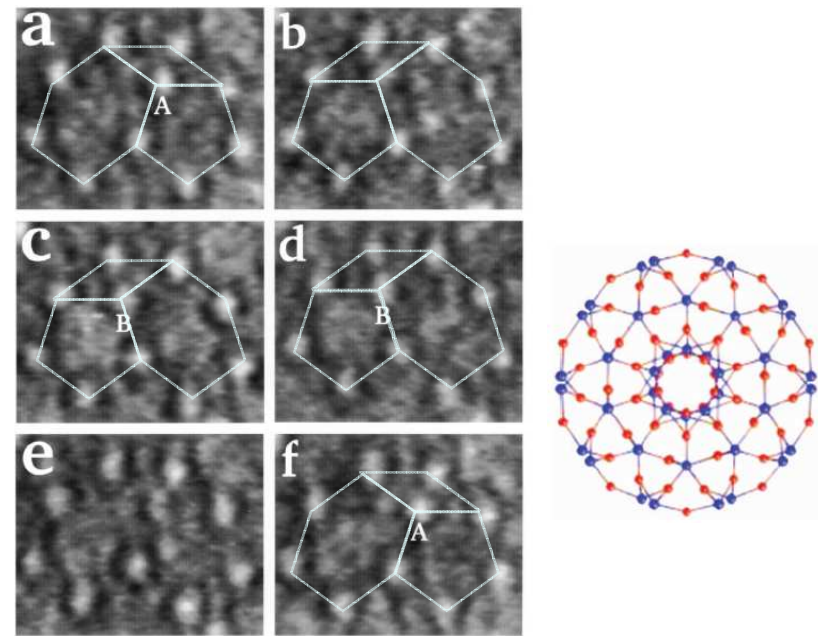
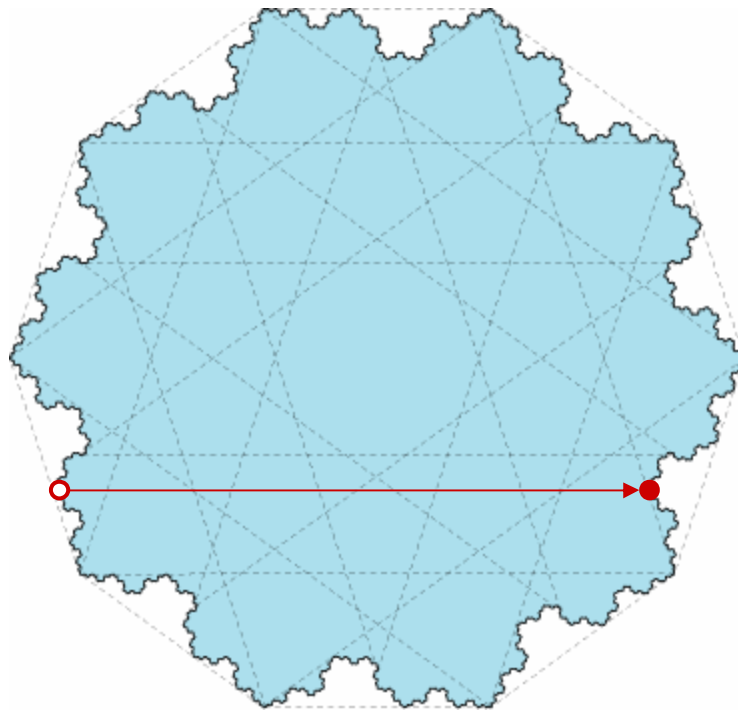


FIG. 2. An example of the change in the HRTEM image observed at 1123 K. Elapsed times for (a)–(f) are 0, 5, 8, 110, 113, and 115 s, respectively. The scale bar indicates 2.0 nm.

十回対称準結晶 $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Co}_{15}$
電子顕微鏡像 (1123K) ~ 時間変化を追ったもの

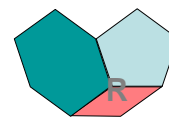
熱的フェイゾン揺らぎのシミュレーション

フェイゾンフリップによる構造の熱的揺らぎを調べる

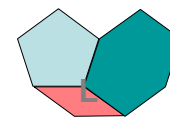
有効ハミルトニアン

$$E_{tot} = J_R N_R + J_L N_L + J_{LL} N_{LL} + J_{RR} N_{RR} + J_{RL} N_{RL} + J_P N_P + J_F N_F + J_C N_C + J_S N_S$$

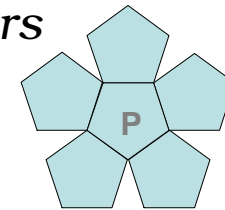
Energy parameters



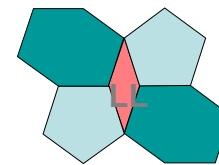
J_R



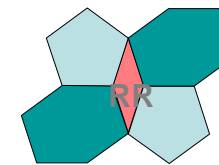
J_L



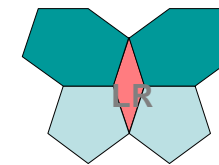
J_P



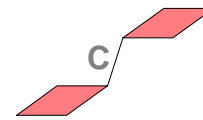
J_{LL}



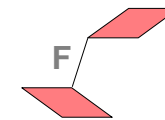
J_{RR}



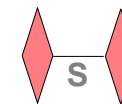
J_{LR}



J_C



J_F

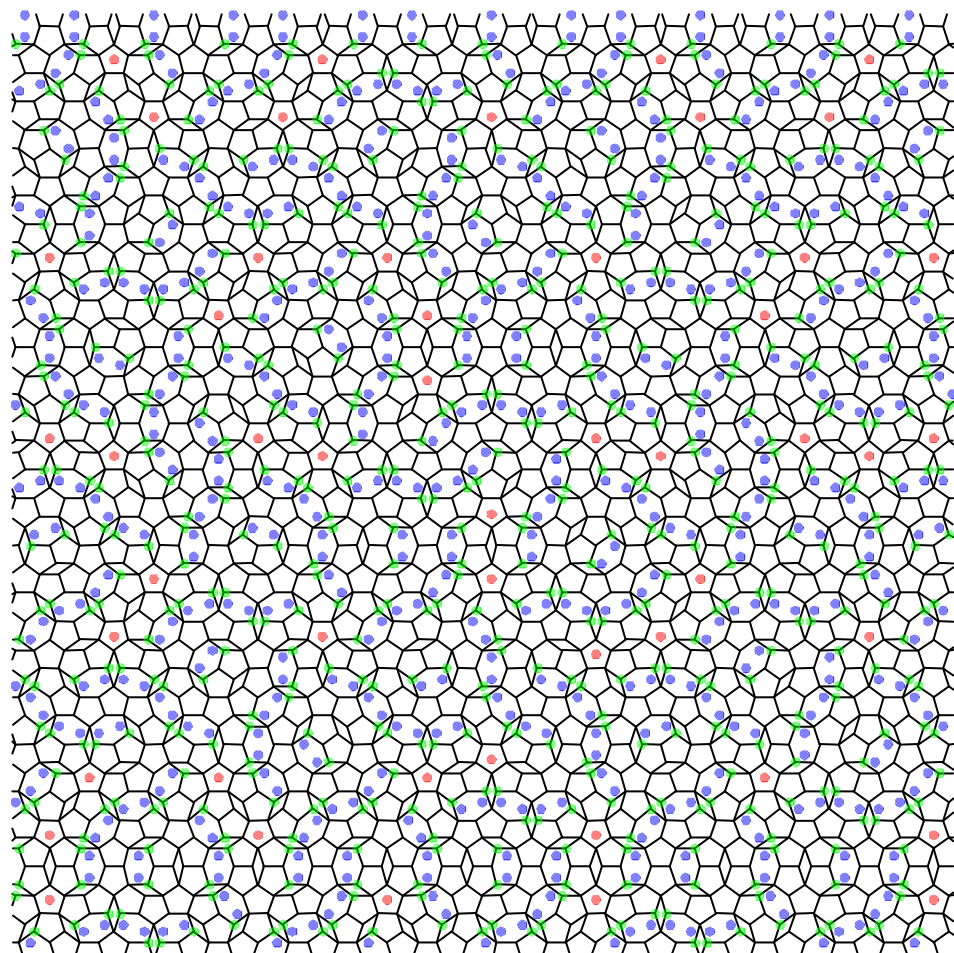
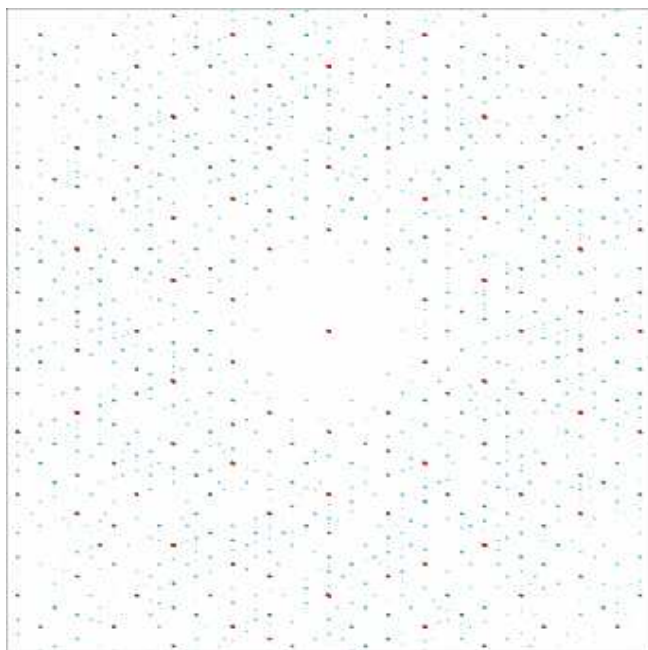
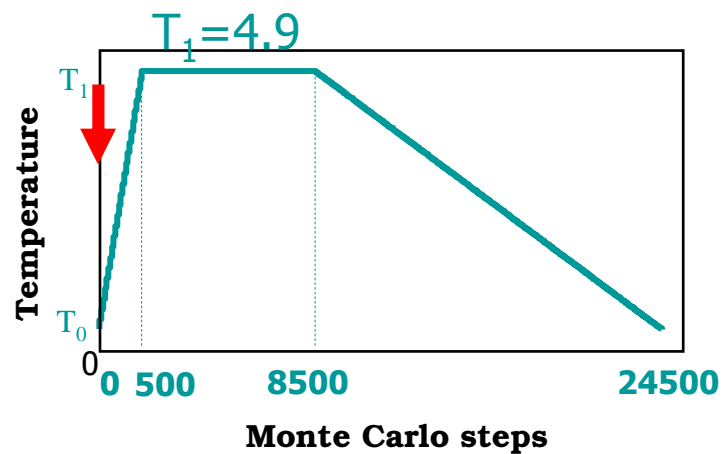


J_S

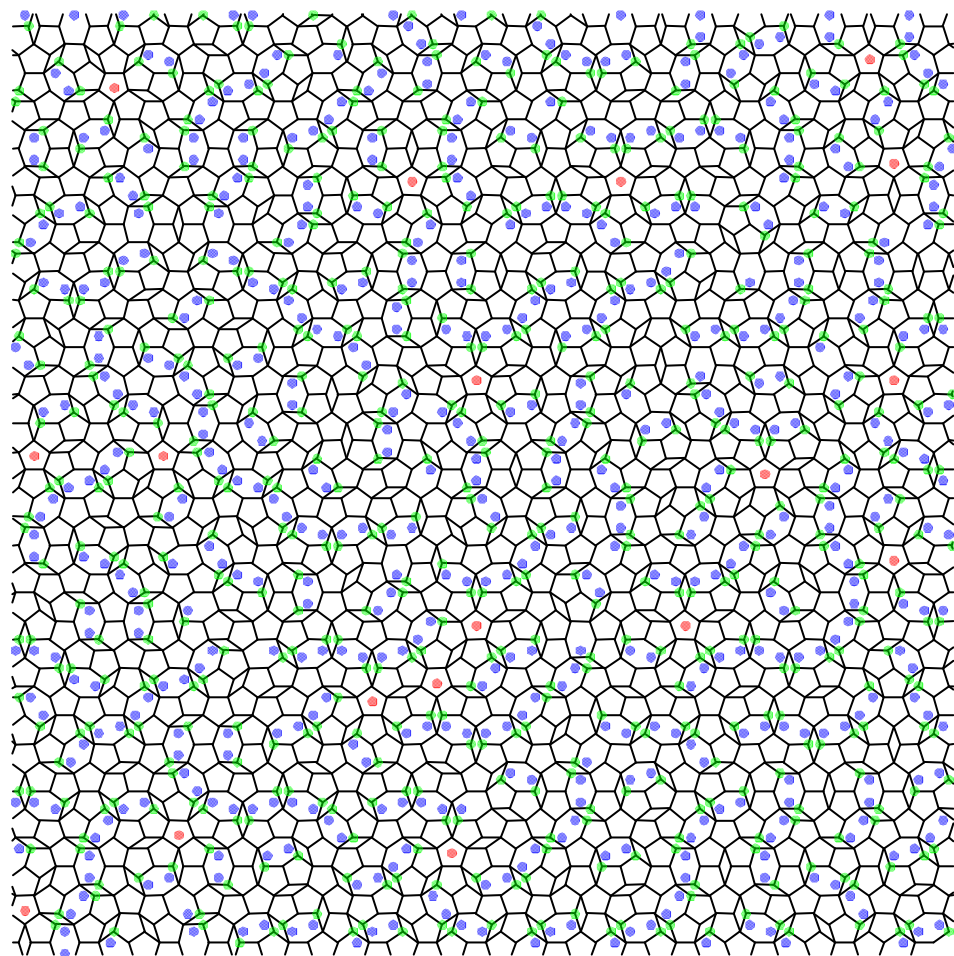
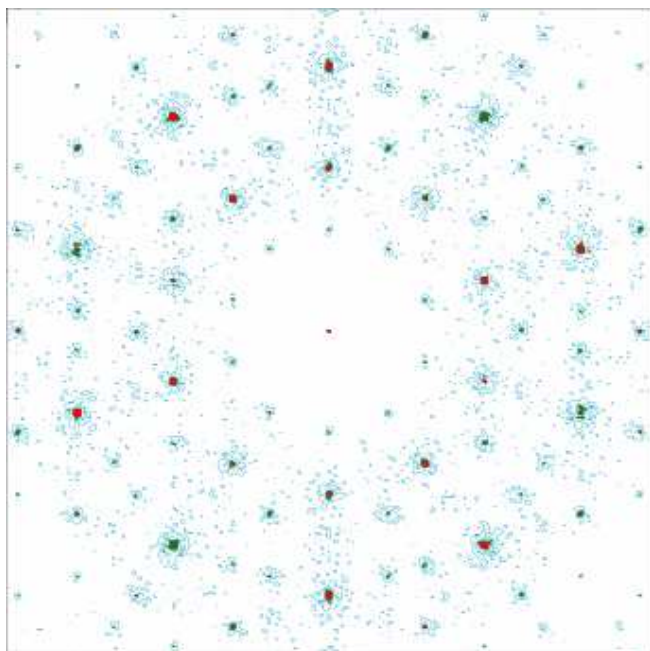
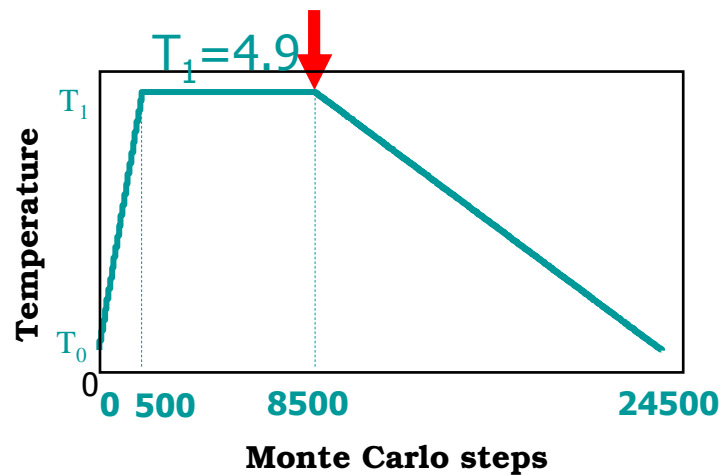
熱的フェイゾン揺らぎの
シミュレーション

$$\begin{aligned} J_R &= -2.0, J_L = -4.5, J_P = 0.3, \\ J_{LL} &= 3.0, J_{RR} = 3.0, J_{LR} = -0.7, \\ J_F &= 3.8, J_C = 3.0, J_S = 1.0 \end{aligned}$$

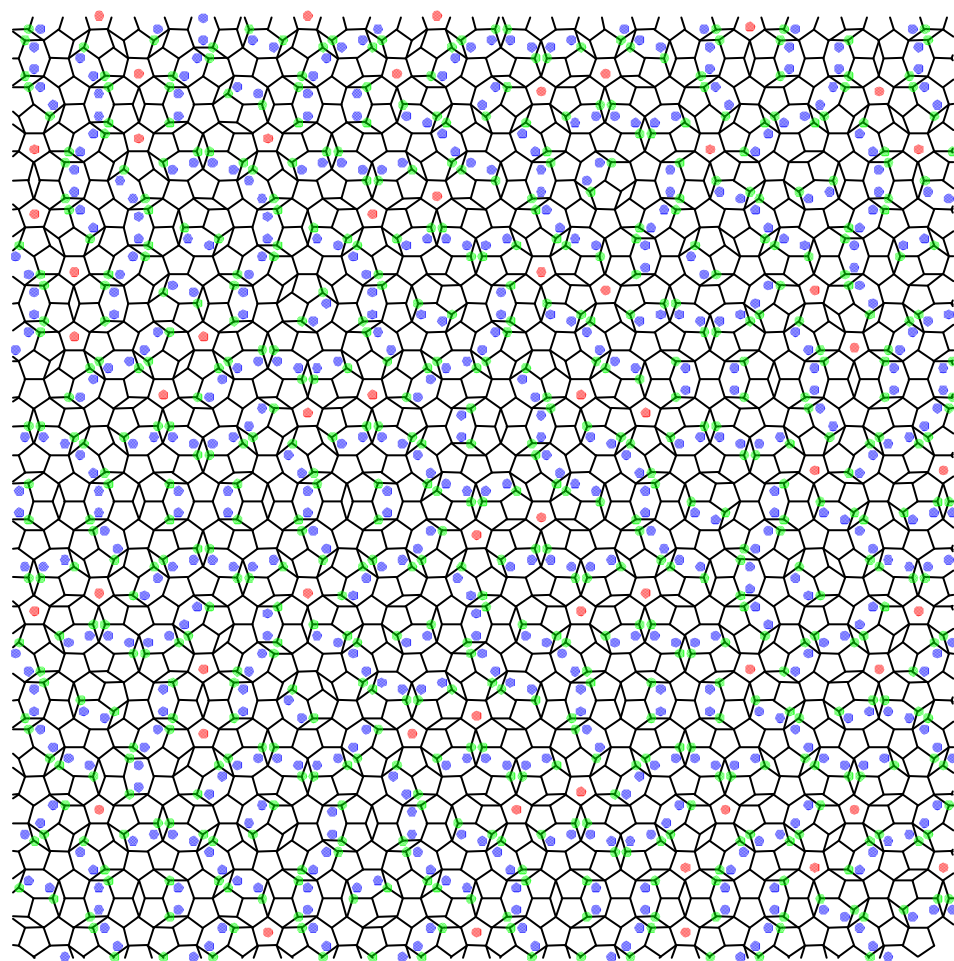
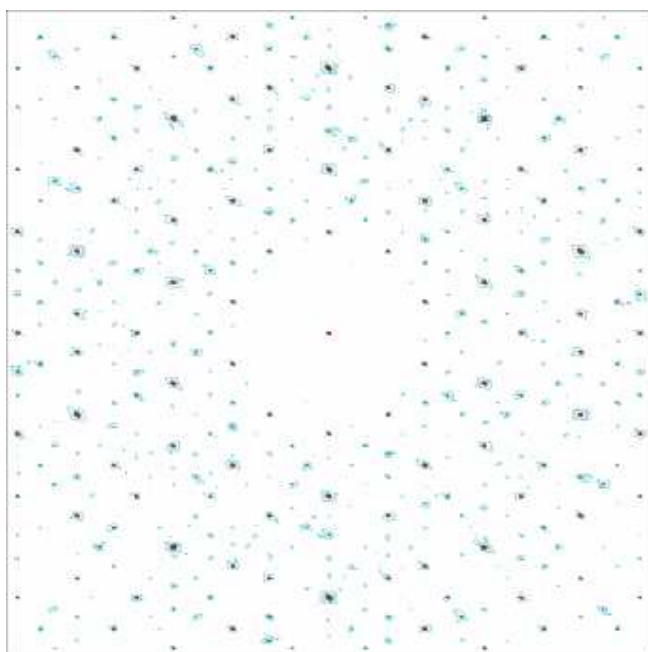
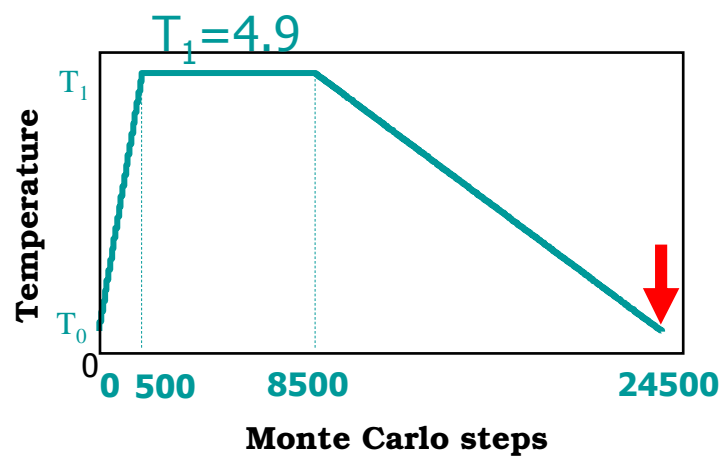
カノニカルモンテカルロ シミュレーション



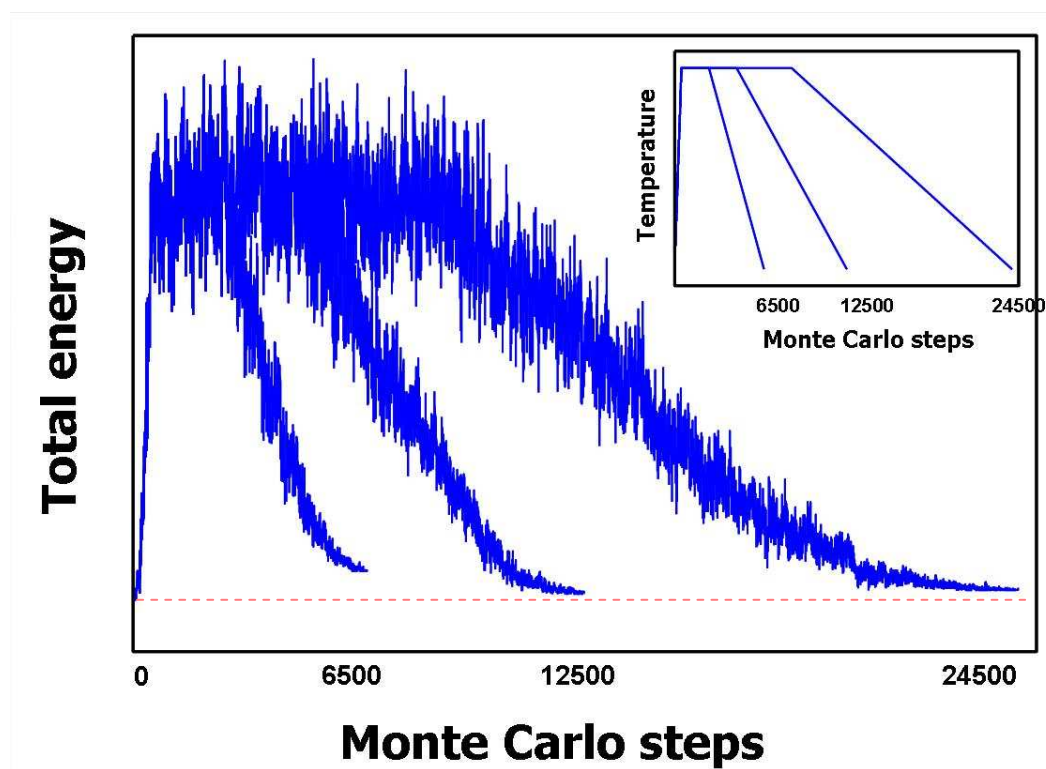
モンテカルロ シミュレーション



モンテカルロ シミュレーション

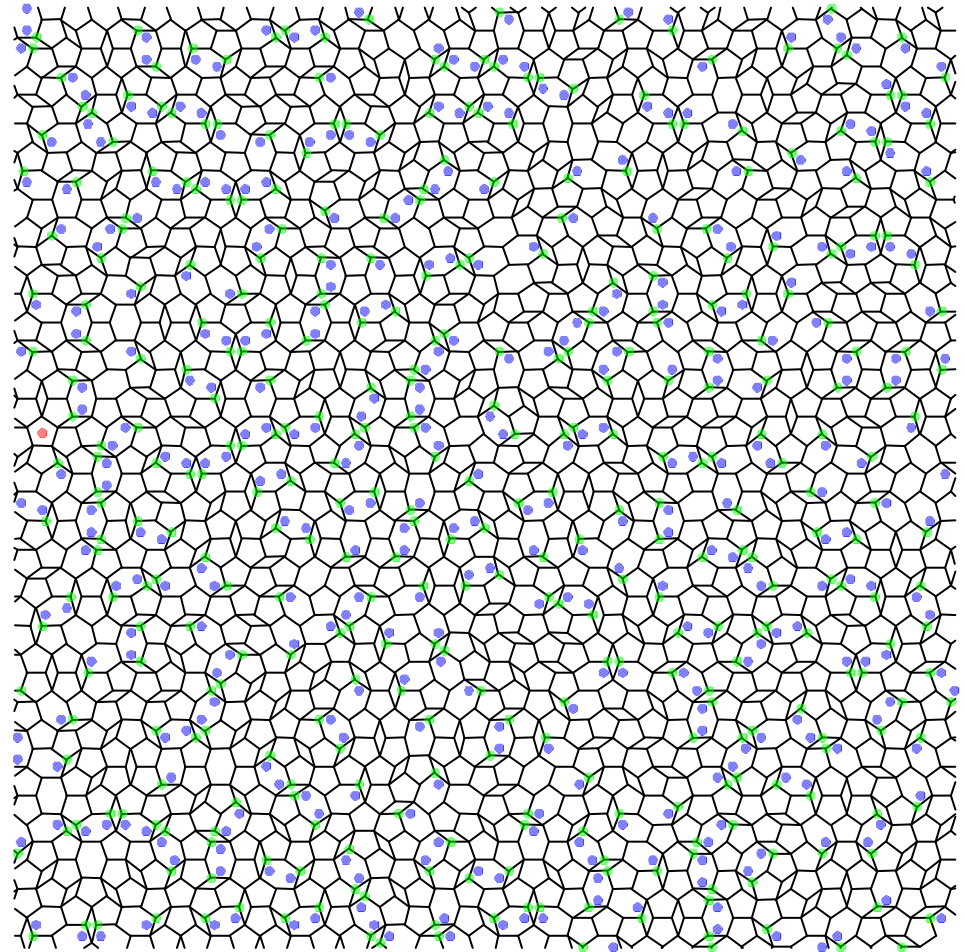
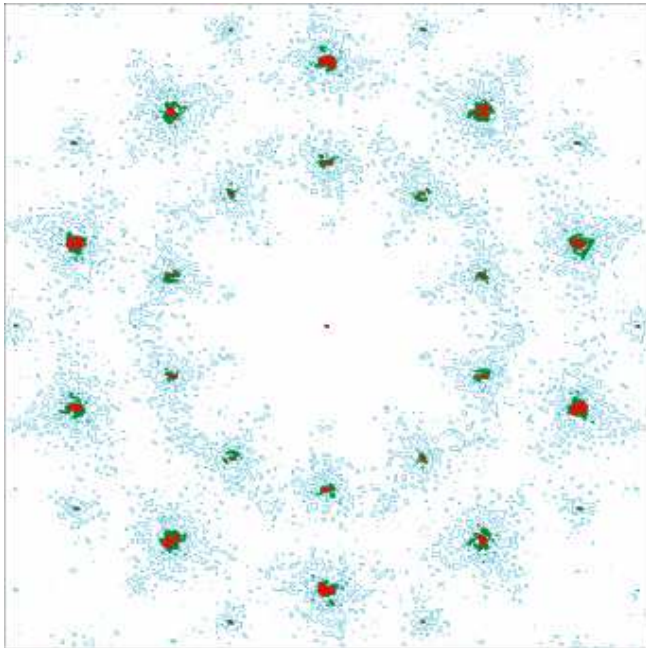


モンテカルロ シミュレーション



モンテカルロ シミュレーション

温度無限大の平衡状態
→完全に準周期性を喪
失した乱雑タイリング



5. まとめ

1. 一般化点集合置換法～
準周期タイリングの系統的作成法
2. 三元タイリングの族 (RPHタイリング) ～
点群 $C_{10}, D_5, C_2, D_1, C_1, C_5$
3. 確率的な操作の導入～
限定的にランダムなRPHタイリングの作成
4. カノニカルモンテカルロシミュレーション～
フェイズンによる熱的構造揺らぎの考察

課題：一般的な数学的定式化

(窓の形状を決定する一般則、等)