



ナノスケールのラビリンス（迷路空間）の自己構築

近畿大学工学部（大阪府東大阪市）理学科物理学コース・堂寺知成 教授、田中秀明 氏（近畿大学大学院総合理工学研究科 2018 年卒）、オーストラリア・シドニー大学&オーストラリア国立大・スティーブン・ハイド（Stephen Hyde）教授の研究グループは、ナノテクノロジーを利用してナノ多角形が、通路や部屋のある無限多面体の建築に自ら組み上がることを計算機実験で明らかにしました。

本件に関する論文が、令和 5 年 8 月 1 日、アメリカ化学会の（化学、生物学、材料科学、物理学、工学を包含した）ナノ科学およびナノテクノロジーの総合誌 ACS NANO（IF: 17.1）にオンライン掲載されました。

(<https://doi.org/10.1021/acsnano.2c11929>)

本件に関する YouTube が近畿大学情報学部 i-CORE で収録されました。

<https://www.youtube.com/watch?v=dKEV8u3SV0I>

<https://www.youtube.com/watch?v=-aSdfpjeTn4>

【本件のポイント】

- ナノテクノロジーによって、6 角形と 3 角形のナノ多角形が「自己組織化」し、迷路空間をなす共連続多面体が構築されることが、モンテカルロシミュレーションで示された。
- 共連続多面体は、ペトリーとコクセターの無限多面体 {6, 4|4} と、ハートの「ジャイラングル」である。
- 右巻きと左巻きのジャイラングルが存在し、キラル 3 角形ナノプレートからも、非キラル 3 角形ナノプレートからも構築されることが示された。
- 高分子、液晶、両親媒性分子などの合成化学および蝶の鱗粉や細胞生物学において広く見られる複雑な共連続ナノ構造の研究に新たな可能性を提示した。

【本件の内容】

自己組織化 (Self-assembly) とは、さまざまな形状や相互作用がデザインされた、個々の構成要素が秩序立った構造に自己配列するプロセスです。過去 20 年にわたってナノ科学と DNA ナノテクノロジーの世界では、多角形や多面体コロイド粒子による結晶や準結晶への自己組織化や、レゴブロックのように様々な形状を DNA を使って作る研究が進展してきました。これら自己組織化により、ナノスケールからマクロなスケール^{*1}まで、私たちは手を加えることなく、構成要素をほっておくと、さまざまな幾何学的形状の構築物の自己作成が可能になってきました。しかし、2 次元の多角形ナノプレートが壁^{*2}になって、小部屋と回廊を持つ 3 次元構造に自己組織化する可能性の検討はなされていませんでした。

本論文では、モンテカルロシミュレーション^{*3}を用いて、DNA の相補的な相互作用によって六角形と三角形のナノプレートが自己組織化し、プレートが壁となった「共連続多面体 (または無限多面体)」が形成されることを示しました。これらの多面体の壁は、3 次元空間を互いに貫入する 2 つのラビリンス (迷路空間) に分割します。2 つのラビリンスは互いに入り組みながら無限の彼方へと小部屋と回廊を結びます。

本論文では、ペトリーとコクセターの無限多面体 {6, 4|4} と、ハートの「ジャイラングル^{*4}」 (= ジャイロイド+トライアングル) とよばれる 2 つの共連続多面体が自己組織化することが示されました。前者は 2 つの相補的な六角形ナノプレートから構成されます。後者は、鏡に映した右手と左手のようにキラルの性質があって、右巻きと左巻きのジャイラングルが存在します。このジャイラングルは、キラル 3 角形ナノプレートからも、非キラル 3 角形ナノプレートからも構築されることが示されました。

これらの共連続多面体は、数学的にはシュワルツ (Schwarz) のプリミティブ (primitive) 三重周期極小曲面と、ショーン (Schoen) のジャイロイド (gyroid) 三重周期極小曲面という

最も単純な三重周期極小曲面の多面体へのメタモルフォーゼ（変身）とみなせます。したがって、本研究は、高分子、液晶、両親媒性分子などの合成化学、蝶の鱗粉や細胞生物学において広く見られる、複雑な共連続ナノ構造への新たなアプローチを提供しています。

今回の国際共同研究は、長年にわたる国際研究集会、国際会議での交流と、堂寺知成教授のオーストラリア国立大学での短期滞在研究、スティーブン・ハイド教授の日本訪問、田中秀明氏のオーストラリア派遣などコロナ前に始まった研究をまとめたものです。研究の発案は田中秀明氏と堂寺知成教授が担当し、スティーブン・ハイド教授は、三重周期極小曲面の物理研究の第一人者で理論研究を担当、堂寺知成教授とジャイラングルを再発見しました。今回用いた計算コードは田中秀明氏が作成、同氏と堂寺知成教授が計算を実行し、堂寺知成教授が全体を統括いたしました。

【論文掲載】

雑誌名: ACS NANO

発刊元: American Chemical Society

論文名: Programmable Self-Assembly of Nanoplates into Bicontinuous Nanostructures

著者: 田中秀明 1、堂寺知成 1*)、スティーブン・ハイド 2)

所属: 1 近畿大学、2 シドニー大学&オーストラリア国立大学 (*責任著者)

<https://doi.org/10.1021/acsnano.2c11929>

【研究支援】

本研究は、科学研究費補助金 基盤研究 (B) (課題番号 16H04037) の支援のもとに行われました。

【解説】

- *1 宇宙に正 5 角形の壁を打ち上げ、正 12 面体の部屋を自己組織化するという研究も考案されている。(本論文 文献 2)
- *2 DNA で構成された 3 角形ナノプレートが正 20 面体に自己組織化し、コロナウィルスを閉じ込めるといった実験研究も進展している。(本論文 文献 34)
- *3 モンテカルロシミュレーションは、分子シミュレーション (計算機実験) の手法の一つで、乱数を用いるのでモンテカルロの名前がついている。
- *4 ジャイラングルはあまり知られていないが正 3 角形による無限正多面体である。ショーンのジャイロイドと同じトポロジーのラビリンス (迷路空間) を持つのが特徴で、ジョージ・ハート氏が 1980 年代に発見した。(本論文 文献 51, 52)