

格子・2次形式・数の幾何・応用調和解析

背景と動機 (problem)

失敗しない物質構造解析のための数理基盤

現状 (keep) 回折データから結晶格子（3次元格子）を推定する **ab-initio indexing** のためのCONOGRAPHの方法

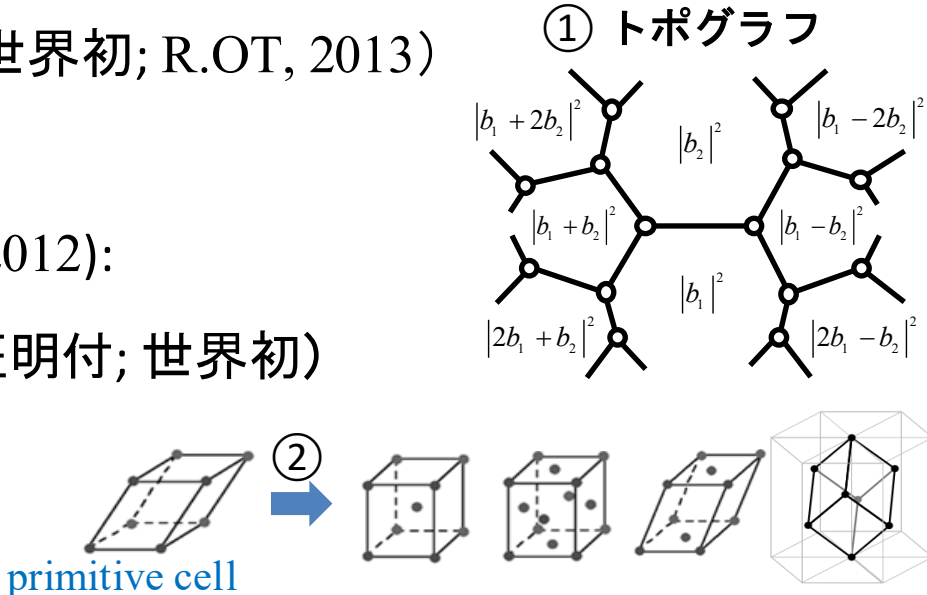
① 原子の特殊位置によるものを含む全ての空間群の消滅則に対応（世界初; R.OT, 2013）

物質構造解析への Conway トポグラフの初めての応用

② 観測誤差を含む結晶格子の対称性（ブラベー格子）決定法(R.OT, 2012):

- ✓ （原理上可能と言える）正定値条件を満たす範囲で失敗なし（証明付; 世界初）
- ✓ 高速（誤差0の場合もそうでない場合も同一手順になる）

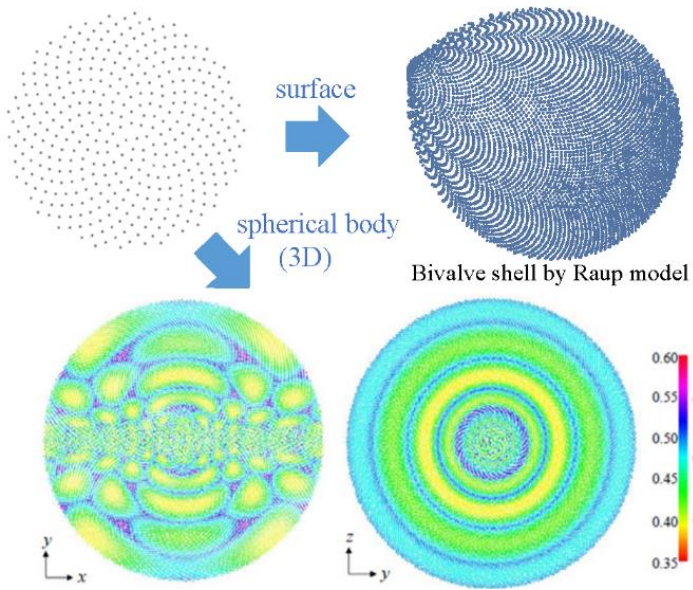
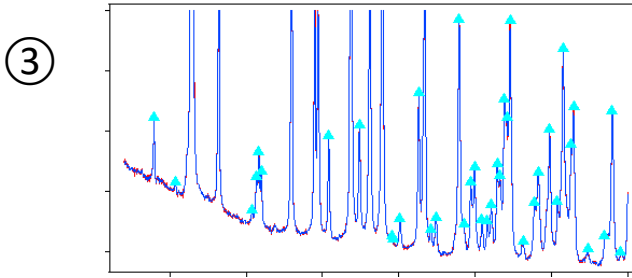
③ 偽ピーク（偽陽性）が生じにくいピークサーチの方法.



2013—15: 粉末回折用 ab-initio indexing ソフトウェア CONOGRAPHをJ-PARC
ユーザ向けに配布開始 (2022年以降の配布ページ: <https://z-code-software.com/>)

2017—19: 電子線後方散乱回折用 CONOGRAPHの開発（産学連携, R.OT et. al., 2020）

2022—24: In-zone 回折像への適用・未知構造解析 (C.-H. Chen, et. al., 2025)



2020: （柔らかい格子に関わる）葉序機構の一般化に成功
（左図; 博士学生Graiff Zuritaとの共同研究, 2024）

展開(try) 得られている一般化（左図）をもとに2つの数理をつなぐ:

- ✓ 物質構造解析に用いられる離散数学（数の幾何・数論を含む）
- ✓ 連続場を記述する数理（反応拡散方程式, Swift-Hohenberg方程式など）

⇒ 柔らかい物質の構造解析へ