数理科学実践研究レター　2019–22 December　24，2019

結晶格子の **growth** の準多項式性

by

加藤 大輝

UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

結晶格子の growth の準多項式性

加藤大輝[1]（東京大学大学院数理科学研究科）
Hiroki Kato (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概 要

結晶格子をグラフとして捉えて, 結晶格子が満たすべき条件を数学的に定式化した. その条件の元で一種類の原子からなる結晶格子の growth が多項式的な振る舞いをすることを証明する.

1 はじめに

結晶格子に対して定まる不変量のひとつに配位数がある. 配位数は非常に荒い不変量であり元の結晶格子の情報をよく反映しているとは言えない. より精密な不変量として growth を考えることができる. growth は結晶格子に対して, 原子をひとつ指定する毎に定まる数列であり, n 番目の growth は指定した原子からちょうど n 本の化学結合で結ばれている原子の個数として定義される. growth は結晶の対称性などの性質を強く反映していると考えられているが知られていることは少ない. 本稿の目的は growth の振る舞いを系統的かつ数学的に記述することである. より正確に言うと, 我々は「結晶格子の growth は準多項式である」という計算による経験則に数学的な裏付けを与えることを目指している.
一般的に, 何かを数学的に証明するためには厳密な定義が必要である. ところが, 原子の結合の仕方まで含めた結晶格子とは何かの定義は確立されていないように思える.
Growth は原子がどうつながっているかによって決まる不変量であるので, まずはその部分を数学的に解釈する必要がある. つながり方まで含めて記述するために我々はグラフという枠組みを使うことにした. グラフは頂点と辺からなる対象である（定義 3）. 結晶格子が与えられるとそれに伴ってグラフが定まる. すなわち, 原子があるところに頂点があり, 結合があるところには辺があるという風に定める. すると, もとの結晶格子の growth はグラフの言葉で完全に記述できる（定義 5）. そこで, このグラフの性質として, growth の多項式的なふるまいを数学的に解釈したい.
ところが, グラフは非常に一般的な概念であり, とても結晶とは呼べないようなものもたくさん含んでいる. したがって, 「グラフが結晶らしい」とは何たるかを定式化する必要がある. 結晶であるために必要な条件として平行移動ができることを課すのは自然であると思う. そのようなグラフを結晶グラフと呼ぶことにした (定義 6). 結晶グラフの growth は十分良いふるまいをするでろうと考えている:

予想 1. *Γ を結晶グラフとする. Γ の頂点 x_0 に対し点付きグラフ (Γ, x_0) の growth $(g_n)_{n\geq 0}$ は準多項式型である.*

本稿の主結果は以下の定理である.

定理 2. *Γ を 1 種類の原子からなる結晶グラフとする. とのとき, 数列 $(g_n)_{n\geq 0}$ は多項式型である. 特に, 1 種類の原子からなる結晶グラフに対して, 予想 1 は正しい.*

2 用語の整理

定義 3. *1. グラフとは, 以下のような組 $\Gamma = (|\Gamma|, E)$ のこととする:*

- *集合 $|\Gamma|$,*
- *集合 $\{A \subset |\Gamma| : \#A = 2\}$ の部分集合 E.*

集合 $|\Gamma|$ の元を Γ の頂点, 集合 E の元を Γ の辺と呼ぶ.

[1] hiroki@ms.u-tokyo.ac.jp

2. $\Gamma = (|\Gamma|, E)$, $\Gamma' = (|\Gamma'|, E')$ をグラフとする．グラフの射 $\phi : \Gamma \to \Gamma'$ とは, 写像 $\phi : |\Gamma| \to |\Gamma'|$ であって任意の $A \in E$ に対し, $\phi(A) \in E'$ となるもののこととする．グラフの射で逆射が存在するものを同型という．Γ の自己同型 $\Gamma \to \Gamma$ 全体のなす群を $\mathrm{Aut}(\Gamma)$ で表す．

3. 群 G のグラフ Γ への作用とは群準同型 $G \to \mathrm{Aut}(\Gamma)$ のこととする．

4. グラフ $\Gamma = (|\Gamma|, E)$ が局所有限であるとは, 任意の頂点 x に対し, 集合 $\{y \in |\Gamma| : \{x, y\} \in E\}$ が有限集合であることとする．

5. グラフ Γ が連結であるとは, 任意のふたつの頂点 x, y に対して, 頂点の列 $x = x_0, x_1, \ldots, x_n = y$ であって $\{x_{i-1}, x_i\} \in E$ $(i = 1, \ldots, n)$ となるものが存在することとする．

補題 4. 連結なグラフ Γ に対して, 写像 $d_\Gamma : |\Gamma| \times |\Gamma| \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$ を $(x, y) \in |\Gamma|$ に対し頂点の列 $x = x_0, x_1, \ldots, x_n = y$ であって $\{x_{i-1}, x_i\} \in E$ $(i = 1, \ldots, n)$ となるものが存在するような最小の整数 n を $d_\Gamma(x, y)$ とおくことで定める．すると, d_Γ は距離である．

証明. 距離の公理を満たすことがすぐに確認できる． □

定義 5. $\Gamma = (|\Gamma|, E)$ を連結で局所有限なグラフとし, Γ の頂点 x_0 を固定する．これに対し, 数列 $(g_n)_{n\geq 0}$ を以下で定める．

$$g_n = \#\{x \in |\Gamma| : d_\Gamma(x, x_0) = n\}.$$

この数列 $(g_n)_{n\geq 0}$ を点付きグラフ (Γ, x_0) の *growth* と呼ぶ．

定義 6. d を正の整数とする．d 次元の結晶グラフとは, $\mathbb{Z}^d$ の自由な作用付きの連結で局所有限なグラフ $\Gamma = (|\Gamma|, E)$ で, 商集合 $|\Gamma|/\mathbb{Z}^d$ が有限であるもののこととする．商集合 $|\Gamma|/\mathbb{Z}^d$ の位数が e であるとき, 結晶グラフ Γ は e 種類の原子からなるという．

定義 7. 1. 数列 $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ が準多項式であるとは, 整数 $h \in \mathbb{Z}_{\geq 1}$ と有理数係数の一変数多項式 $p_0, \ldots, p_{h-1}$ であって, $n \equiv i \pmod{h}$ ならば $a_n = p_i(n)$ となるものが存在することをいう．

2. 数列 $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ が多項式型 (*resp.* 準多項式型) であるとは, 有理数係数の一変数多項式 p (*resp.* 準多項式 $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}_{n\geq 0}}$) が存在して十分大きな n にたいして $a_n = p(n)$ (*resp.* $a_n = b_n$) となることをいう．

3 主結果の証明

証明には, 以下の事実を使う．

事実 8. $A = \coprod_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}} A_n$ を可換で有限生成な次数付きモノイドとし, A_0 は自明なモノイド 0 であるとする．また, A はモノイドとして A_1 で生成されると仮定する．このとき, A の *growth*

$$g_n(A) = \#A_n$$

は多項式型である．

定理 2 の証明. 数列 $(g_n)_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ が多項式型であることを示すには, 次で定まる数列 $(h_n)_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ が多項式型であることを示せばよい:

$$h_n = \#\{x \in |\Gamma| : d_\Gamma(x, x_0) \leq n\}.$$

この h_n を次数付きモノイドの growth として解釈して事実 8 を使う．

$$\Gamma^{\leq n} = \{x \in |\Gamma| : d_\Gamma(x, x_0) \leq n\}, \ \widetilde{\Gamma} = \coprod_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}} \Gamma^{\leq n}$$

とおく．$\widetilde{\Gamma}$ に以下のようにモノイドの構造を入れる: $\mathbb{Z}^d$ の $|\Gamma|$ への作用が自由かつ推移的なので, $x \in \Gamma^{\leq m}$ と $y \in \Gamma^{\leq n}$ に対し, $x = x_0 + a$, $y = x_0 + b$ となる $a \in \mathbb{Z}^d$ と $b \in \mathbb{Z}^d$ がただ一つ存在する．この a, b を用いて, $x \cdot y = x_0 + (a + b)$ と定める．この積により $\widetilde{\Gamma}$ は可換なモノイドとなる．

主張 9. $x \cdot y \in \Gamma^{\leq(m+n)}$ である. したがって, $\widetilde{\Gamma} = \coprod_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}} \Gamma^{\leq n}$ は次数付きモノイドである.

証明. 三角不等式より, $d_\Gamma(x\cdot y, x_0) \leq d_\Gamma(x\cdot y, x) + d_\Gamma(x, x_0)$ である. ここで, $x\cdot y = (x_0+a)+b = x+b$ であることに注意すると, $d_\Gamma(x\cdot y, x) = d_\Gamma(y, x_0)$ である. $x \in \Gamma^{\leq m}$, $y \in \Gamma^{\leq n}$ であったから, $d_\Gamma(x\cdot y, x_0) \leq m+n$ であることがわかる. □

主張 10. $\widetilde{\Gamma}$ はモノイドとして $\Gamma^{\leq 1}$ で生成される.

証明. $x \in \Gamma^{\leq n}$ とする. 距離 d_Γ の定義から, $|\Gamma|$ の元の列 $x_1, x_2, \ldots, x_n = x$ であって, $d_\Gamma(x_i, x_{i-1}) \leq 1$ を満たすものが存在する. $x_i = x_{i-1} + a_i$ となる $a_i \in \mathbb{Z}^d (i = 1, \ldots, n)$ をとり, $y_i = x_0 + a_i$ とおく. すると, $y_i \in \Gamma^{\leq 1}$, $x = y_1 \cdots y_n$ となる. □

以上で, 次数付きモノイド $\widetilde{\Gamma}$ は事実 8 の条件を満たすことがわかった. よって, 数列 $(h_n)_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ は多項式型である. □

4 終わりに

本稿では, 原子の種類がひとつの場合を扱った. この場合, growth をよいモノイドの growth を用いて解釈できたが, 原子の種類がひとつとは限らない一般の場合は少なくとも同じ方法では積がうまく定義できない. ここをどう修正するかが今後の課題のひとつである. また, growth が (準) 多項式型であるという主張の証明について述べたが, 実際, 結晶グラフであって growth が (準多項式型だが) 準多項式ではない例はたくさん存在する. 結晶格子の growth は準多項式であろうと考えられているので, 本稿で定義した「結晶グラフ」は一般的すぎる概念であると言える. 「結晶グラフ」にどのような制限をつけるべきかを考えること, そしてそのもとで growth が準多項式になることを証明することも課題である.