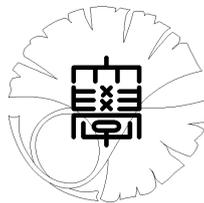


数理科学実践研究レター 2020-13 September 28, 2020

準結晶の不変量について

by

加藤 佑矢



UNIVERSITY OF TOKYO
GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES
KOMABA, TOKYO, JAPAN

準結晶の不変量について

加藤佑矢¹ (東京大学大学院数理科学研究科)

Yuya Kato (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概要

準結晶に対して、関数に値をとる新しい不変量を導入し、いくつかの結晶および準結晶に対して計算する。

1 はじめに

準結晶とは 1984 年にダニエル・シェヒトマンによって発見された、結晶ともアモルファスとも異なる固体の状態である。結晶のような並進対称性をもたないが、アモルファスなどよりも高い秩序を有している。一方 [1] では、ガラスの持つ秩序性がパーシステントホモロジーを用いることによって明らかにされている。ガラスのようなアモルファスは一見無秩序だが、そのパーシステントダイアグラムと呼ばれるものを計算すると、特徴的なパターンが観測される。本稿では準結晶に対して、パーシステントホモロジーにインスパイアされた不変量を導入し、1次元あるいは2次元の結晶および準結晶に対して計算している。パーシステントホモロジーがガラスの秩序性を明らかにしたのと同じように、この不変量が準結晶の構造の研究に有効であることを期待している。

2 不変量の定義

定義 1 (Delone 集合) \mathbb{R}^n の離散部分集合 Λ に対して、ふたつの正の実数 R, r が存在して次の条件を満たすとき、 Λ を Delone 集合であるという。

- (1) 任意の点 $x \in \Lambda$ に対して $y \in \Lambda$ が存在して $\|x - y\| \leq R$ が成り立つ。
- (2) 任意の 2 点 $x, y \in \Lambda$ に対して $\|x - y\| \geq r$ が成り立つ。

定義 2 (準結晶) \mathbb{R}^n の Delone 集合 Λ に対して、ある \mathbb{R}^n の有限部分集合 F が存在して次の条件を満たすとき、 Λ を準結晶であるという。

$$\Lambda - \Lambda \subset \Lambda + F$$

定義 3 (モデル集合) $\mathbb{R}^{n+k} = \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k$ の第 1 成分、第 2 成分への射影をそれぞれ π_1, π_2 とする。 Γ を \mathbb{R}^{n+k} の格子、 B を \mathbb{R}^k の有界開集合とする。このとき

$$\Lambda := \{\pi_1(x) \in \mathbb{R}^n \mid x \in \Gamma, \pi_2(x) \in B\}$$

をモデル集合と呼ぶ。

定義 4 (関数 p_k) Λ を \mathbb{R}^N のモデル集合、 r を正の実数、 k を 0 以上の整数とする。 \mathbb{R}^N の増大する凸領域の列 $U_1 \subset U_2 \subset \dots$ で $\bigcup_{n=1}^{\infty} U_n = \mathbb{R}^N$ を満たすものをとる。このとき

$$p_k(r) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_k(\bigcup_{x \in U_n \cap \Lambda} B(x; r))}{\#(U_n \cap \Lambda)}$$

と定義する。ただし b_k は k 次ベッチ数である。

¹omoti67@gmail.com

3 計算例

3.1 1次元結晶

まず1次元結晶に対して計算する. 結晶の格子間隔を a とする.



格子を中心とする球の半径が $\frac{a}{2}$ に達するとすべての球が接触するので p_0 は以下のようなになる.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{a}{2}) \\ 0 & (\frac{a}{2} \leq r) \end{cases}$$

3.2 1次元結晶 + 有限集合

長さの違うタイル a, b, c を周期的に並べてえられる下図のような構造を考える. その頂点の全体の集合は1次元結晶 L と有限集合 F を用いて $L + F$ と書ける. この集合に対して p_0 を計算する.



タイルの長さに $a < b < c$ の関係がある場合を考える. 各頂点を中心とした球の半径が $\frac{a}{2}$ に達するまで, すべての球は互いに共通部分をもたない. 半径が $\frac{a}{2}$ を超えるとタイル a の両端を中心とした球が接触する. 半径 $\frac{b}{2}$ を超えるとさらにタイル b の両端を中心とした球が接触する. 半径が $\frac{c}{2}$ を超えるとさらにタイル c の両端を中心とした球が接触する. したがって p_0 は以下のようなになる.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{a}{2}) \\ \frac{2}{3} & (\frac{a}{2} \leq r < \frac{b}{2}) \\ \frac{1}{3} & (\frac{b}{2} \leq r < \frac{c}{2}) \\ 0 & (\frac{c}{2} \leq r) \end{cases}$$

3.3 Fibonacci 準結晶

Fibonacci 準結晶に対して p_k を計算する. Fibonacci 準結晶とは長さの違うふたつのタイル a, b に次の代替規則を繰り返し適用して得られる1次元準結晶である.

$$a \rightarrow b, b \rightarrow ab$$

その結果以下の図が得られる. 下図の頂点全体の集合がモデル集合, 特に準結晶になっている.



タイル a から初めて, この代替規則を n 回繰り返したあとのタイリングにおけるタイル a とタイル b の枚数はそれぞれ Fibonacci 数列の第 $n-1$ 項 f_{n-1} と第 n 項 f_n になる. したがってその比は $n \rightarrow \infty$ において

$$a \text{ の枚数} : b \text{ の枚数} = 1 : \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$$

に近づく. したがってタイル a の長さよりタイル b の長さの方が長いとすると, p_0 は以下のようになる.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{a}{2}) \\ \frac{\sqrt{5}-1}{2} & (\frac{a}{2} \leq r < \frac{b}{2}) \\ 0 & (\frac{b}{2} \leq r) \end{cases}$$

3.4 2次元結晶

2次元結晶に対して計算する. 2次元結晶を \mathbb{R} 上独立なふたつの複素数 a, b によって $L = \mathbb{Z}a + \mathbb{Z}b \subset \mathbb{C}$ と思うと, 回転と拡大および鏡映によって移り合うものを同値な格子だとみなすと, よく知られているように L は $L(\tau) = \mathbb{Z} + \mathbb{Z}\tau$ と同値になる. ただし, τ は次の基本領域 D に属する複素数である.

$$D = \{z \in \mathbb{C} \mid 0 \leq \operatorname{Re}(z) \leq 1, |z| \geq 1\}$$

$L(\tau)$ の p_k の振る舞いは τ によって異なる. そこで, τ の値によって2次元結晶を6タイプに分類する. この分類は結晶学におけるブラベ格子の分類に対応している. すなわち, (1) が六方格子, (2) が正方格子, (3) および (4) が面心長方格子, (5) が長方格子, (6) が斜方格子に対応している. 面心長方格子に対応する格子のタイプが (3) および (4) と2つあるのは, 単位胞に狭角が $\frac{\pi}{3}$ よりそれぞれ小さいか大きいかでさらに細かく分類しているためである.

計算は容易だが煩雑なため省略する. 以下では原点と1と τ を頂点とする三角形の外心の半径を $r(\tau)$ とする.

(1) $\tau = \frac{1+\sqrt{3}i}{2}$ の場合.

六方格子の場合である. 格子のすべての頂点にそれを中心とした半径 r の球を置き, r を大きくしていくことを考える. r が $\frac{1}{2}$ に達する直前まではすべての球は互いに交差しないので, $p_0(r) = 1$ である. また, このとき $p_1(r) = 0$ である. r が $\frac{1}{2}$ を超えると, 隣り合うすべての球同士が接触するので, $p_0(r) = 0$ となることがわかる. また, r が $\frac{1}{2}$ を超えると, 単位胞当たりふたつの1次元サイクルが生成されるので, $p_1(r) = 2$ となる. r が $r(\frac{1+\sqrt{3}i}{2}) = \frac{1}{\sqrt{3}}$ を超えるとすべてのサイクルが消滅するので $p_1(r) = 0$ となる. 以上の考察をまとめると次のようになる.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \leq r) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 2 & (\frac{1}{2} \leq r < \frac{1}{\sqrt{3}}) \\ 0 & (\frac{1}{\sqrt{3}} \leq r) \end{cases}$$

他のタイプも同様の考察によって計算できるが, 煩雑になるので結果のみ示す.

(2) $\tau = i$ の場合.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \leq r) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 1 & (\frac{1}{2} \leq r < \frac{\sqrt{2}}{2}) \\ 0 & (\frac{\sqrt{2}}{2} \leq r) \end{cases}$$

(3) $|\tau| = 1$ かつ $\tau \neq \frac{1+\sqrt{3}i}{2}$, i の場合.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \leq r) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 1 & (\frac{1}{2} \leq r < \frac{\sqrt{|1-\tau|}}{2}) \\ 2 & (\frac{|1-\tau|}{2} \leq rr(\tau)) \\ 0 & (r(\tau) \leq r) \end{cases}$$

(4) $\operatorname{Re}(\tau) = 1$ かつ $\tau \neq \frac{1+\sqrt{3}i}{2}$ の場合.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \leq r) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{|\tau|}{2}) \\ 2 & (\frac{|\tau|}{2} \leq r < r(\tau)) \\ 0 & (r(\tau) \leq r) \end{cases}$$

(5) $\operatorname{Re}(\tau) = 0$ かつ $\tau \neq i$ の場合.

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \leq r) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{|\tau|}{2}) \\ 1 & (\frac{|\tau|}{2} \leq r < r(\tau)) \\ 0 & (r(\tau) \leq r) \end{cases}$$

(6) τ が D の内部に属する場合.

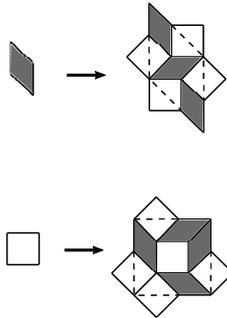
$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \leq r) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{|\tau|}{2}) \\ 1 & (\frac{|\tau|}{2} \leq r < \frac{|1-\tau|}{2}) \\ 2 & (\frac{|1-\tau|}{2} \leq r < r(\tau)) \\ 0 & (r(\tau) \leq r) \end{cases}$$

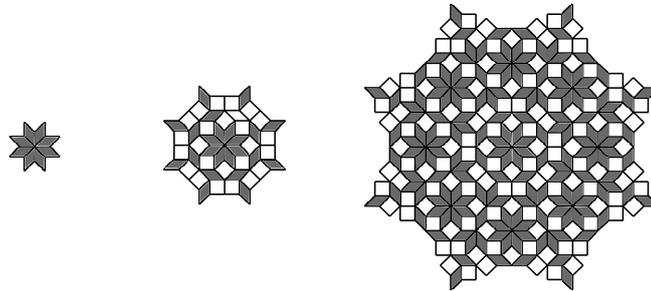
以上の計算結果から p_0, p_1 の挙動によって、結晶のタイプを特定することができる事が分かる。すなわち、 $p_1(r)$ が 2 を値に取らなければ、それは (2) または (5) である。さらに $p_0(r)$ が 0 になるのと $p_1(r)$ が 1 になるのが同時なら (2)、そうでなければ (5) である。 $p_1(r)$ が 2 を値に取り 1 をとらない場合は、(1) または (4) である。さらに $p_0(r)$ が 0 になるのと $p_1(r)$ が 1 になるのが同時なら (1)、そうでなければ (4) である。 $p_1(r)$ が 1 も 2 も値に取る場合は、(3) または (6) である。さらに $p_0(r)$ が 0 になるのと $p_1(r)$ が 1 になるのが同時なら (3)、そうでなければ (6) である。

3.5 Amman-Beenker 準結晶

Amman-Beenker 準結晶と呼ばれる準結晶に対して p_k を計算する。この準結晶は一辺の長さが 1 で狭い方の角度が $\pi/4$ の菱形のタイルと、一辺の長さが 1 の正方形のタイルに、次の代替規則を適用することによって作られる。



これによって作られる準結晶の最初の数ステップを示す。



STEP0

STEP1

STEP2

以下、 n ステップ目の図形に現れる頂点集合を Λ_n とし $K_{n,r} := \bigcup_{x \in \Lambda_n} B(x, r)$ とおく。代替規則から n ステップ目の菱形の枚数を a_n 正方形の枚数を b_n とすると

$$a_0 = 8, b_0 = 0$$

$$a_{n+1} = 3a_n + 4b_n$$

$$b_{n+1} = 2a_n + 3b_n$$

である. これを解くと

$$\begin{aligned} a_n &= 4\{(3 + 2\sqrt{2})^n + (3 - 2\sqrt{2})^n\} \\ b_n &= 2\sqrt{2}\{(3 + 2\sqrt{2})^n - (3 - 2\sqrt{2})^n\} \end{aligned}$$

である.

n 段階目の格子点の数を P_n とすると

$$P_n = a_n + b_n + e_n$$

である. ただし e_n は外枠上の格子点の数え方に由来する error term であり, $|e_n| \leq 3^n \cdot 16$ である. まず $p_1(r)$ を計算する.

(1) $\frac{1}{2} \leq r < \frac{1}{\sqrt{2+\sqrt{2}}}$ のとき.

菱形がふたつ, 正方形がひとつのサイクルを生成するので

$$b_1(K_{n,r}) = 2a_n + b_n$$

したがって

$$\begin{aligned} p_1(r) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_1(K_{n,r})}{P_n} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2a_n + b_n}{a_n + b_n + e_n} \\ &= 3 - \sqrt{2} \end{aligned}$$

(2) $\frac{1}{\sqrt{2+\sqrt{2}}} \leq r < \frac{1}{\sqrt{2}}$ のとき.

正方形がひとつのサイクルを生成するので

$$b_1(K_{n,r}) = b_n$$

したがって

$$\begin{aligned} p_1(r) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_1(K_{n,r})}{P_n} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n}{a_n + b_n + e_n} \\ &= \sqrt{2} - 1 \end{aligned}$$

(3) $\frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{2}$ のとき.

$$b_1(K_{n,r}) = n - 1 \text{ 段階目における index が } 8 \text{ の点} + e_n = P_{n-2} + e_n$$

したがって

$$\begin{aligned} p_1(r) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_1(K_{n,r})}{P_n} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n-2} + b_n + e_n}{a_n + b_n + e_n} \\ &= \frac{1}{(3 + 2\sqrt{2})^2} \\ &= 17 - 12\sqrt{2} \end{aligned}$$

(4) r が上記の範囲外の時は $p_1(r) = 0$ である.

次に $p_0(r)$ を計算する.

(1) $0 < r < \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}$ のとき $p_0(r) = 1$ である.

(2) $\frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{2}$ のとき.

Mayer-Bietoris 系列より

$$\begin{aligned} \dim H_0(K_{n,r}) &= P_n - a_n + \dim H_1(K_{n,r}) \\ &= P_n - a_n + P_{n-2} + e_n \end{aligned}$$

だから

$$p_0(r) = 19 - 13\sqrt{2}$$

(3) r が上記の範囲外のとき $p_0(r) = 0$ である.

以上をまとめると

$$p_0(r) = \begin{cases} 1 & (0 < r < \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}) \\ 16 - 11\sqrt{2} & (\frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{2}) \\ 0 & (\frac{1}{2} \leq r) \end{cases}$$

$$p_1(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}) \\ 17 - 12\sqrt{2} & (\frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{2}) \\ 3 - \sqrt{2} & (\frac{1}{2} \leq r < \frac{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}{2}) \\ \sqrt{2} - 1 & (\frac{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}{2} \leq r < \frac{1}{\sqrt{2}}) \\ 0 & (\frac{1}{\sqrt{2}} \leq r) \end{cases}$$

となる.

4 考察

結晶及び結晶 + 有限集合の計算結果と準結晶の計算結果の大きな違いは, 準結晶の場合は p_0 および p_1 が無理数値をとることである. 一般的に次が成り立つと予想される.

予想 1 すべての非負整数 k について, 結晶の p_k は無理数値をとらない.

この予想が証明できれば, 不変量 p_k が無理数値をとるかどうかによって準結晶かどうか判断できることがわかる.

2次元結晶に対して計算したように, p_0 および p_1 の挙動を見れば, 結晶のタイプを特定できる. 特にブラベ格子を特定することがわかった. 3次元においても結晶系やブラベ格子を特定できるのかどうかは興味深い問題である. 2次元の場合の結晶 + 有限集合, 高次元結晶および高次元準結晶に対する計算も今後の課題である.

5 謝辞

本研究のテーマ提供および様々な助言をいただいた日本製鉄・東京大学大学院数理科学研究科社会連携講座の中川淳一氏, および九州大学マス・フォア・インダストリ研究所の富安亮子氏に深く感謝致します. また, 内容に関して様々な意見を下さった東京大学数理科学研究科の間瀬崇史氏, 中村勇哉氏, 前多啓一氏に感謝致します.

参考文献

- [1] Hiraoka-Nakamura-Hirata-Escolar-Matsue-Nishiura PNAS June 28, 2016 113 (26) 7035-7040