数理科学実践研究レター　2021–13 September　17,　2021

数え上げ擬結晶と非結晶性指数

by

亀岡 健太郎

UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

数え上げ擬結晶と非結晶性指数

亀岡健太郎[1]（東京大学大学院数理科学研究科）
Kentaro Kameoka (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概 要

本研究では厳密な結晶ではない原子配置を記述する数学的概念を考察する．数え上げ擬結晶や非結晶性指数という概念を導入し，それらに関する問題をいくつか提起する．確率論的モデルによるアプローチやフーリエ準結晶との関係についても考察する．

1 はじめに

固体の原子配置には厳密な離散的並進対称性を持つ結晶から規則性のないアモルファスまで多様なものがある．結晶ではないがきれいな構造を持つ準結晶の存在も知られておりデローン集合，モデル集合などいろいろな定義がある．また結晶からなるはずの固体でも現実には転位，ずれなどが発生する可能性がある．本研究では厳密な結晶ではない原子配置を記述する概念を数学的観点から提案することを目指す．

具体的には数え上げ擬結晶，非結晶性指数，曲率が消えない擬結晶という概念を導入する．これは結晶の場合の点の数え上げと曲率の関係についての結果に着想を得たものである．非結晶性指数はアモルファスや準結晶の結晶との違いの目安になるとともに結晶のずれ，転位，ひずみなどの程度をはかる指標としても期待される．擬結晶や非結晶性指数についての問題をいくつか提起し，確率論的モデルによるアプローチを提示する．またフーリエ解析に基づく準結晶の定式化であるフーリエ準結晶について説明し，フーリエ準結晶と関係する非結晶性指数の問題も提起する．

2 数え上げ擬結晶と非結晶性指数

2.1 背景：格子の場合

$0 \in X \subset \mathbb{R}^d$ を有界狭義凸の滑らかな領域で境界 ∂X のガウス曲率が消えないものとすると $t \to \infty$ で次が成り立つ．

$$\#(\mathbb{Z}^d \cap tX) - t^d \mathrm{Vol}(X) = \mathcal{O}(t^{d-\frac{2d}{d+1}}).$$

証明はポワソンの和公式と停留位相法による（例えば Hörmander [1, Theorem 7.7.16]).

X が格子面に平行な平行四面体ならば $\mathcal{O}(t^{d-1})$ であることに注意する．X が歪んでいるために tX の境界上に格子点が集中できないことが上記評価が成り立つ理由である．

逆に X が平行四面体のときに上記評価が成り立つという性質により結晶からの歪みをはかることを考える．

2.2 擬結晶，曲率，非結晶性指数

定義 1 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ を局所有限集合とする．

(1). ある定数 $c > 0$ が存在して任意の $\mathbb{R}^d$ の基底 $v_1, \dots, v_d$ と任意の $v_0 \in \mathbb{R}^d$ に対して $X = \{\sum_{j=1}^d a_j v_j ||a_j| < 1\}$ として

$$\#(\Lambda \cap (v_0 + tX)) - ct^d \mathrm{Vol}(X) = \mathcal{O}(t^{d-1})$$

が成り立つとき Λ を（数え上げ）擬結晶という．ただし $\mathcal{O}$ は v_0 について一様とする．

(2). *(1)* において $\mathcal{O}(t^{d-1})$ を $\mathcal{O}(t^{d-\frac{2d}{d+1}})$ とできるとき Λ を曲率が消えない擬結晶という．

(3). 擬結晶 Λ に対して *(1)* において $\mathcal{O}(t^{d-1})$ を $\mathcal{O}(t^{d-1-\alpha})$ とできるような $0 \le \alpha \le d-1$ の上限を Λ の（数え上げ）非結晶性指数とよび $\mathrm{NCr}(\Lambda)$ とかく．

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

2.3 定義についての注意

命題 2 *(1).* 結晶は非結晶性指数 0 の擬結晶である．
(2). 任意の $(m_1, \dots m_d) \in \mathbb{Z}^d$ に対して $\#(\Lambda \cap \Pi_{j=1}^d (m_j, m_j + 1]) = 1$ ならば Λ は擬結晶である．

証明は難しくない．命題 2 より擬結晶は結晶からアモルファスまで広い範囲の原子配置を含んだ概念であることが分かる．

空間次元 $d = 1$ ならば必ず $\mathrm{NCr}(\Lambda) = 0$ であるので数え上げ非結晶性指数は多次元において意味のある概念である．そもそも $\mathrm{NCr}(\Lambda) > 0$ となる擬結晶が存在するか非自明であることに注意する．Λ が $d-1$ 次元と 1 次元の擬結晶の直積として書ける場合は $\mathrm{NCr}(\Lambda) = 0$ であるので本質的に多次元的な構成が必要になると思われる．

2.4 非結晶性指数の物理的意味

非結晶性指数 $\mathrm{NCr}(\Lambda)$ が大きいことは平行四面体 tX の境界にたくさんの Λ の原子が集中できないことを意味し，これは結晶面が存在しないことを表すと解釈できる．従って結晶の結晶面に沿って切断されやすい（へき開しやすい）という性質が失われると期待される．

アモルファスや準結晶の結晶との違いをはかる目安になるとともに結晶のずれ，転位，ひずみなどをはかる指標としても使えると期待される．

2.5 問題

非結晶性指数について以下のような問題が考えられる．

- $\mathrm{NCr}(\Lambda) > 0$ となる擬結晶は存在するか．また曲率が消えない擬結晶は存在するか（$d \geq 2$）．
- $\mathrm{NCr}(\Lambda)$ のとりうる値を決定せよ．
- ペンローズタイリングの頂点集合の非結晶性指数を決定せよ．

3 確率論的モデルによるアプローチ

3.1 定式化

$\mathrm{NCr}(\Lambda)$ が大きい Λ の候補として以下のランダムな原子配置 $\Lambda = \Lambda_\omega$ (ω は適切な確率空間の点）を考えることができる．
(1). $\{x_m\}_{m \in \mathbb{Z}^d}$ を $(0,1]^d$ の一様分布に従う独立な確率変数列とし，$\Lambda = \left\{ m + x_m \,\middle|\, m \in \mathbb{Z}^d \right\}$ としたとき．
(2). Λ がポワソン点配置（互いに交わらない体積有限の $E_1, \dots E_N \subset \mathbb{R}^d$ に対して $\#(\Lambda \cap E_k)$ が独立でパラメータ $\mathrm{Vol}(E_k)$ のポワソン分布に従う）のとき．

確率論的モデル (1) では命題 2.(2) より Λ は必ず擬結晶になることに注意する．

3.2 確率論的モデルについての問題

確率論的モデルついて以下のような問題が考えられる．

- 確率論的モデル (2) において確率 1 で Λ は擬結晶になるか．
- 確率論的モデル (1),(2) において確率正で非結晶性指数が正となることを示すことにより非結晶性指数正の擬結晶の存在が言えるか．より強く確率 1 で（または確率正で）$\mathrm{NCr}(\Lambda) \geq \beta_d$ となる $\beta_d > 0$ は存在するか．また $\mathrm{NCr}(\Lambda) = \beta_d$ としたらどうか．

4　フーリエ準結晶

本節ではフーリエ準結晶を定義し，非結晶性指数と関連する問題を紹介する．

4.1　フーリエ準結晶の定義

電子線などの回折（散乱）実験においてポテンシャルのフーリエ変換（の絶対値の二乗）が観測される（散乱振幅のボルン近似）と考えられている．これを踏まえフーリエ解析に基づいて離散的な回折像をつくる集合として準結晶を定義する．

局所有限集合 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ に対し，$T_\Lambda(x) = \sum_{a\in\Lambda} \delta(x-a)$ と定める．$T_\Lambda \in \mathscr{S}'(\mathbb{R}^d)$（緩増加超関数）と仮定する．

定義 3 T_Λ のフーリエ変換 $\hat{T}_\Lambda$ がある局所有限集合 $\Lambda' \subset \mathbb{R}^d$ を用いて $\hat{T}_\Lambda(k) = \sum_{b\in\Lambda'} c_b \delta(k-b)$, $c_b \in \mathbb{C}$, とかけるとき Λ をフーリエ準結晶とよぶ．

全ポテンシャル $V_{\mathrm{tot}}(x) = T_\Lambda * V = \sum_{a\in\Lambda} V(x-a)$ のフーリエ変換は

$$\hat{V}_{\mathrm{tot}}(k) = (2\pi)^{d/2}\hat{V}(k)\hat{T}_\Lambda(k) = (2\pi)^{d/2}\sum_{b\in\Lambda'}\hat{V}(b)c_b\delta(k-b)$$

であり離散的な回折像が観測される．

例 4 $\hat{T}_{\mathbb{Z}^d} = (2\pi)^{d/2} T_{2\pi\mathbb{Z}^d}$（ポワソンの和公式）より結晶はフーリエ準結晶である．

例 5 $\Lambda = \mathbb{Z}^d \cup \left(\sqrt{2}\mathbb{Z}^d + (0,\dots,0,\sqrt{3})\right)$ もフーリエ準結晶である．

ポワソンの和公式の平行移動，回転，拡大の有限個の重ね合わせで書けないものを非自明なフーリエ準結晶と呼ぶことにする．そのような例が存在するかが自然な問題となる．

4.2　フーリエ準結晶の先行研究

フーリエ準結晶の概念は筆者自身独自に到達したものであるが先行研究において類似の概念が既に調べられていたことが分かった．文献によって異なるが先行研究では離散的な台を持つ複素測度 μ でそのフーリエ変換 $\hat{\mu}$ も離散的な台を持つ複素測度になるもの（あるいはその台 $\operatorname{supp}\mu$) を結晶測度やフーリエ準結晶と呼んでいる．

Lev-Olevskii (2015, [4]) は $\operatorname{supp}\mu$ も $\operatorname{supp}\hat{\mu}$ も一様に離散的なら自明な例に限ることを示している（高次元なら $\mu \geq 0$ を仮定する）．

Lev-Olevskii (2016, [5]) はモデル集合の構成法の修正により, Kolountzakis (2016, [2]) はポワソンの和公式の無限個の重ね合わせにより $\operatorname{supp}\mu$ も $\operatorname{supp}\hat{\mu}$ も離散的になる非自明な例を構成している．

Kurasov-Sarnak (2020, [3]) は量子グラフ上のトレース公式，安定多項式，有限ディリクレ級数の零点といった発想により空間 1 次元のデローン集合 Λ で T_Λ のフーリエ変換が離散的な台を持つ測度になるものを構成している．

4.3　フーリエ準結晶の問題

フーリエ準結晶について以下のような問題が考えられる．

- 2 次元以上において [4] の $\mu \geq 0$ という仮定を外すと複素測度 μ で $\operatorname{supp}\mu$ も $\operatorname{supp}\hat{\mu}$ も一様に離散的になる非自明な例は存在するか.
- ペンローズタイリングの頂点集合はフーリエ準結晶か.

• T_Λ のフーリエ変換が離散的な台を持つ測度になる多次元におけるデローン集合 Λ で 1 次元の例の直積で書けないものをつくれ．

• フーリエ準結晶の新しい構成法，特に多次元特有の構成法を考えよ．

以上の問題から分かるようにフーリエ準結晶の観点からも本質的に多次元的な非結晶構造の探求が重要と思われる．これが数え上げ擬結晶や非結晶性指数を導入した動機の一つでもあった．
　フーリエ準結晶と非結晶性指数について以下のような問題が考えられる．

• 数え上げ擬結晶となる非自明なフーリエ準結晶で 1 次元の例の直積でかけないものを構成せよ．

• 数え上げ擬結晶となるフーリエ準結晶 Λ に対して非結晶性指数 $\mathrm{NCr}(\Lambda)$ のとりうる値を決定せよ．特に $\mathrm{NCr}(\Lambda) > 0$ となるフーリエ準結晶や曲率が消えないフーリエ準結晶は存在するか（$d \geq 2$）．

謝辞　1 年間にわたり本研究を見守り，また助言をして下さった中川淳一氏，中村勇哉氏，間瀬崇史氏，志甫淳氏に深く感謝する．

参考文献

[1] L. Hörmander, The analysis of linear partial differential operators I, second edition, Springer-Verlag, 1990.

[2] M. Kolountzakis, Fourier pairs of discrete support with little structure, J. Fourier Anal. Appl. 22 (2016), 1–5.

[3] P. Kurasov and P. Sarnak, Stable polynomials and crystalline measures, J. Math. Phys. 61. 083501 (2020).

[4] N. Lev and A. Olevskii, Quasicrystals and Poisson's summation formula, Invent. Math. 200 (2015), 585–606.

[5] N. Lev and A. Olevskii, Quasicrystals with discrete support and spectrum, Rev. Mat. Iberoam. 32 (2016), 1341–1352.