数理科学実践研究レター　2021–18 November 25, 2021

Bravais 格子の諸定義の等価性について

by

山本 祐輝

UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

Bravais 格子の諸定義の等価性について

山本祐輝[1]（東京大学大学院数理科学研究科）
Yuki Yamamoto (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概 要

Bravais 格子とは結晶の対称性を記述する際に用いる概念である．その定義には物理的な「連続変形」を用いるものや，群の剰余類・共役類の概念を用いたものがある．本論文では,「連続変形」を数学的に適切に定義した場合，それらの定義の間にどのような関連があるのかを調べる．

1 はじめに

結晶を考察するにあたっては，類似した対称性を持つユークリッド空間内の格子を考察することが重要となる．結晶および格子の対称性を記述する際に用いられる概念として，Bravais 格子というものがある．3 次元の格子は 14 種類の Bravais 格子に分けられることが知られており，応用上はその 14 種類を知っていれば十分であることも多い．反面，その 14 種類がどのように得られたのか，Bravais 格子の定義に立ち返る機会はあまり多くない．
数理結晶学において，Bravais 格子の定義として主流なものとして，群の剰余類・共役類の概念を用いたものがある．これは数学的に厳密である一方で，あまり直観的でないために数理結晶学以外では採用されないことも多い．
一方，[1] における Bravais 自身の定義は上に述べたものではなく，格子の連続変形を用いるものである．すなわち,「対称性を保つ連続変形」によってうつりあう格子達を同じ Bravais 格子に属すると定義したのである．この定義に基づいて実際に 14 種類の Bravais 格子が得られたとされている．しかし，この「対称性を保つ連続変形」が何を指しているのか判然としていないという批判が [2] にて行なわれている．[2] では,「対称性を保つ連続変形」の定義を 1 つ固定して同値関係を定めたとき，同値類が 11 種類になることも示されている．
しかしながら,「対称性を保つ」の数学的解釈は [2] に挙げられたもの以外にもいくつか存在する．そこで本稿は「対称性を保つ連続変形」の定義の候補をいくつか考案し，それらから定まる同値関係と数理結晶学的な Bravais 格子の定義との関連性を考察する．とくに応用上重要と考えられる，3 次元までの空間において考えられる格子に関する次の定理を証明する．

定理 1 (定理 2，定理 5 (2)) 「対称性を保つ格子の連続変形」を適当な意味で定めると，$N = 2, 3$ において，群の剰余類・共役類の概念を用いた *Bravais* 格子の定義と，連続変形による *Bravais* 格子の定義は一致する．

なお以下では，より一般の状況における N について証明を行う．

2 格子論からの準備

本節では，[2, §2,3] に沿って数理結晶学に関する種々の概念を復習する．

2.1 格子および関連する群

N を正の整数とする．Λ が N 次元格子であるとは，Λ が $\mathbb{R}^N$ のある $\mathbb{R}$ 上の基底から $\mathbb{Z}$ 上生成される加群であることをいうのであった．本稿では N を固定し，$\mathbb{R}^N$ 内の N 次元格子のことを単に格子とよぶことにする．格子全体の集合を $\mathscr{L}$ と書くことにする．
$G := \mathrm{GL}_N(\mathbb{R})$ とおき，$g = \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_N \end{pmatrix} \in G$ とする．ただし $v_1, \ldots, v_N$ は N 次列ベクトルである．このとき，$v_1, \ldots, v_N$ は $\mathbb{R}^N$ の $\mathbb{R}$ 上の基底をなすことから，$\bigoplus_{i=1}^N \mathbb{Z}v_i$ は格子となる．このよ

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

うにしてできる格子を $\tilde{L}(g) \in \mathscr{L}$ とおく．このとき，写像 $\tilde{L} : G \to \mathscr{L}$ は全射である．$g, g' \in G$ について $\tilde{L}(g) = \tilde{L}(g')$ が成り立つのは互いに他方の列ベクトル達を自身の列ベクトル達の $\mathbb{Z}$ 係数線形結合で表せるときであり，これはある $\Gamma := \mathrm{GL}_N(\mathbb{Z})$ の元 γ であって，$g' = g\gamma$ となるものが存在することと同値となる．したがって $\tilde{L}$ は全単射 $G/\Gamma \to \mathscr{L}$ を誘導する．G/Γ には G から定まる商位相が入り，この全単射により $\mathscr{L}$ にも位相空間の構造が入る．
なお，$L \in \mathscr{L}$ に対して $\tilde{L}(g) = L$ となる $g \in G$ をとることは L の $\mathbb{Z}$ 上の基底，すなわち格子基底を 1 つ固定することに対応している．
$\mathscr{L}$ には $g \in G, L \in \mathscr{L}$ に対し $g \cdot L := g(L)$(すなわち，g による L の像) と定めることで左 G 作用が入る．これは全単射 $G/\Gamma \cong \mathscr{L}$ において，G/Γ に自然に入る左 G 作用と合致している：すなわち，$g, g' \in G$ に対して $g\tilde{L}(g') = \tilde{L}(gg')$ が成り立つことが分かる．特に今回は格子の対称性を考察するため，K を直交群 $\mathrm{O}_N(\mathbb{R})$ とし，$\mathscr{L}$ の K 作用について考える．

2.2 holohedry

この小節では，群の剰余類・共役類の概念に基づく Bravais 格子の定義を述べる．そのためにまず，格子の対称性を記述する holohedry という概念を導入する．
L を格子とするとき，$P(L) := \{\sigma \in K \mid \sigma L = L\}$ とおく．すなわち，$P(L)$ は L を不変にする直交変換全体のなす群である．この $P(L)$ を L の幾何学的 holohedry という．$P(L)$ は有限群になる．
L を K の元 σ でうつした格子 $L' = \sigma L$ は L と対称性が同じものと考えたい．$P(L') = \sigma P(L) \sigma^{-1}$ は $P(L)$ の $\sigma \in K$ による共役である．そこで，2 つの格子 L, L' が同じ結晶系に属するということを，$P(L)$ と $P(L')$ が K 共役で移りあうことと定義する．
$g \in G$ に対し，$L = \tilde{L}(g)$ と書ける場合に $P(L)$ がどのように記述できるか考える．$\sigma \in K$ について，$\sigma \in P(L)$ は $\sigma\tilde{L}(g) = \tilde{L}(g)$ と同値である．このうち左辺は $\tilde{L}(\sigma g)$ であるから，これは $\sigma g = g\gamma$ を満たす $\gamma \in \Gamma$ が存在することと同値である．これは次のようにも言える：$\gamma_{g,\sigma} := g^{-1}\sigma g$ とおいたとき，$\gamma_{g,\sigma} \in \Gamma$．
この対称性をより精密に考察するため，数論的 holohedry という概念を定義する．定義より $P(L) = K \cap \mathrm{Aut}_{\mathbb{Z}}(L)$ であることが分かる．L の $\mathbb{Z}$ 上の基底を 1 つ固定すると，群の同型 $\mathrm{Aut}_{\mathbb{Z}}(L) \cong \mathrm{GL}_N(\mathbb{Z}) = \Gamma$ が得られる．L の基底を固定することは，$\tilde{L}(g) = L$ となる $g \in G$ を 1 つ固定することと同義であった．そこで，上のように Γ に埋め込まれた $P(L)$ を $A(g)$ と書き，g から定まる L の数論的 holohedry とよぶことにする．
この同型 $P(L) \cong A(g)$ は $\sigma \mapsto \gamma_{g,\sigma}$ で得られることが分かる．したがって $A(g)$ は，$\sigma g = g\gamma$ を満たす $\sigma \in K$ が存在するような Γ の元 γ 全体となる．これはこのようにも言い換えられる：$g\gamma g^{-1} \in K$．
ここで，$\tilde{L}(g') = L$ となる別の元 $g' \in G$ を考えると，$g' = g\gamma$ となる $\gamma \in \Gamma$ が存在するのであった．このとき $A(g') = \gamma^{-1}A(g)\gamma$ となり，$A(g')$ は $A(g)$ と Γ 共役となる．ゆえに L の数論的 holohedry の Γ 共役類は g の取り方によらず一定となる．そこで，2 つの格子 L, L' が同じ Bravais 格子に属するということを，数論的 holohedry の Γ 共役類が一致することと定義し，これを $L \sim_m L'$ と書くことにする．2 つの格子が同じ Bravais 格子に属するとき，それらは同じ結晶系に属する．

2.3 格子の連続変形

前小節において，群の剰余類・共役類の概念を用いた Bravais 格子の定義を説明した．本小節では，Bravais 自身の方針である格子の連続変形という概念に基づいて $\mathscr{L}$ の同値関係の定義を行う．そのために，必要な概念の数学的に正確な定式化を行う．
まず格子の連続変形とは連続写像 $\Lambda : [0,1] \to \mathscr{L}$ のこととする．$L = \Lambda(0), L' = \Lambda(1)$ とおくとき，Λ を L から L' への連続変形とよぶことにする．
「対称性を保つ連続変形で移りあう」という関係をうまく定めれば，それにより $\mathscr{L}$ に同値関係を入れることができる．そのためには「対称性を保つ」ことの定義を考える必要があるが，本稿ではその

定義の候補として以下のものを考える.

1) 幾何学的 holohedry の K 共役類が不変である，すなわち任意の $t \in [0,1]$ に対して，適当な $k \in K$ であって $P(\Lambda(t)) = kP(\Lambda(0))k^{-1}$ となるものがある.

2) 幾何学的 holohedry の各元も連続的に変化する，すなわち任意の $\sigma \in P(\Lambda(0))$ に対して，$\tilde{\sigma}(0) = \sigma$ を満たす連続写像 $\tilde{\sigma} : [0,1] \to K$ であって次を満たすものが存在する：任意の $t \in [0,1]$ に対して $\tilde{\sigma} \in P(\Lambda(t))$.

以上のもとで，L および L' が「対称性を保つ連続変形で移りあう」ことを，L から L' への連続変形および L' から L への連続変形であって (上のいずれかの意味で) 対称性を保つものが存在することとして定めると，これは格子全体の集合における同値関係となることが分かる.「対称性を保つ」ことの定義を上のようにしたとき定まる同値関係を順に $\sim_1, \sim_2$ とおく.
以降では，前小節で定義した $\sim_m$，および今定義した $\sim_1, \sim_2$ の間の関連性を調べる．本小節の最後に，その証明に用いる事実を一つ述べる．Λ を格子の連続変形とすると，Λ はある意味で「持ち上げる」ことができる：Γ が G の離散部分群であることから，標準的な写像 $\pi : G \to G/\Gamma$ は局所同相である．ゆえに，連続写像 $q : [0,1] \to G/\Gamma$ について，$\pi(g) = q(0)$ となる $g \in G$ を 1 つとると，連続写像 $\tilde{q} : [0,1] \to G$ であって，$\tilde{q}(0) = g$ および $q = \pi \circ \tilde{q}$ を満たすものが一意的に存在する．今 $\tilde{L}$ から $\lambda : G/\Gamma \cong \mathscr{L}$ が誘導されていたから，$q = \lambda^{-1} \circ \Lambda$ と $g \in G$ に対して上の議論をすることで，連続写像 $p : [0,1] \to G$ で $p(0) = g$ および $\Lambda = \tilde{L} \circ p$ を満たすものが一意的に存在することが分かる．この p を，g から定まる Λ の持ち上げとよぶことにする.

2.4 Gram 行列

本小節では，数論的 holohedry を考察する際に有用な概念として Gram 行列を説明する．またそれに付随して，後の証明に用いる群をいくつか導入し，その性質を見る.
$g \in G$ に対して，$s(g) := {}^T gg$ は正定値対称行列となる．ただし ${}^T g$ は g の転置行列である．この $s(g)$ を g の Gram 行列とよぶことにする.
S を N 次の正定値対称行列全体のなす多様体とすると，s は連続写像 $s : G \to S$ を定める．このとき s は全射であり，さらに $g, g' \in G$ が $s(g) = s(g')$ を満たすときは適当な $k \in K$ によって $g' = kg$ となる．これは B を正則な N 次上三角行列全体からなる G の閉部分群とおいたときに Gram–Schmidt の正規直交化法から $G = KB$ となること，および $K \cap B$ が対角成分 ± 1 の対角行列全体からなる群になることを用いて証明できる．ゆえに s は微分同相 $K \backslash G \cong S$ を誘導する.
S の性質をいくつか見ておく．まず，S は凸集合である：すなわち，$a, a' \in S$ および $t \in [0,1]$ に対し，$(1-t)a + ta' \in S$ である．また，$a \in S, g \in G$ に対し $a^g := {}^T gag$ とすることで S には右 G 作用が入る．以下では特に，この作用を Γ に制限して考える.
$g \in G$ に対し，$\gamma \in A(g) \Leftrightarrow s(g)^\gamma = s(g)$ が成り立つ．実際，$\gamma \in A(g)$ のときは $\sigma g = g\gamma$ となる $\sigma \in K$ が存在するが，このとき $s(g)^\gamma = s(g\gamma) = s(\sigma g) = s(g)$ となる．逆に $s(g)^\gamma = s(g)$ となるとき，やはり $s(g)^\gamma = s(g\gamma)$ から $g\gamma = \sigma g$ となる $\sigma \in K$ が存在することが分かり，$\gamma \in A(g)$ が分かる.
このように，g の Gram 行列は g から定まる数論的 holohedry の情報を持っている．特に，$g, g' \in G$ が $s(g) = s(g')$ を満たすとき，$A(g) = A(g')$ が成り立つ.
最後に，$L \sim_m L'$ である 2 つの格子 L, L' の間の連続変形を構成するために用いる群をいくつか定義する．G_+ を G の連結成分とする．K_+ および B_+ についても同様である．このとき G_+ は行列式が正となる G の元全体，$K_+ = \mathrm{SO}_N(\mathbb{R})$，$B_+$ は対角成分が全て正である上三角行列全体となる.
K の K_+ 剰余類分解および B の B_+ 剰余類分解を $G = KB$ に適用することで $G_+ = K_+B_+$ が分かる．また $(K \cap B)B_+ = B$ および $K \cap B_+ = \{\mathrm{I}\}$(ただし I は単位行列) となることから，埋め込み $B_+ \hookrightarrow B$ は微分同相 $B_+ \cong (K \cap B) \backslash B$ を誘導する．一方 $G = KB$ より $(K \cap B) \backslash B \cong K \backslash G \cong S$(最後は s から誘導されている) であったから，$s_B := s|_{B_+}$ は微分同相 $s_B : B_+ \cong S$ を誘導する.

3 主定理

本節では，前節で定義した同値関係 $\sim_1, \sim_2, \sim_m$ の間の関係性を調べる．
まず $\sim_2$ および $\sim_m$ について，次の定理が成り立つ．

定理 2 $L, L' \in \mathscr{L}$ が $L \sim_2 L'$ を満たすとすると，$L \sim_m L'$ となる．

証明 Λ を 2 の意味で対称性を保つ，L から L' への連続変形とする．このとき各 $\sigma \in P(L)$ に対して，$\tilde{\sigma}(0) = \sigma$ を満たす連続写像 $\tilde{\sigma} : [0,1] \to K$ であって，$t \in [0,1]$ に対して $\tilde{\sigma}(t) \in P(\Lambda(t))$ となるものが存在するのであった．ここで $\tilde{L}(g) = L$ となる $g \in G$ を 1 つ取り，g から定まる Λ の持ち上げを $p : [0,1] \to G$ とおく．このとき

$$\tilde{L}(\tilde{\sigma}(t)p(t)) = \tilde{\sigma}(t)\tilde{L}(p(t)) = \tilde{\sigma}(t)\Lambda(t) = \Lambda(t) = \tilde{L}(p(t))$$

となることから，$\tilde{\sigma}(t)p(t)\Gamma = p(t)\Gamma$，すなわち $\gamma_\sigma(t) := p(t)^{-1}\tilde{\sigma}(t)p(t) \in \Gamma$ が従う．このとき p および $\tilde{\sigma}$ の連続性から，写像 $\gamma_\sigma : [0,1] \to \Gamma$ は連続である．ところが Γ は離散的であったから，γ_σ は定値写像である．
ここで $A(g) \subset A(p(1))$ を示すため $\gamma \in A(g)$ とする．このとき $g\gamma = \sigma g$ を満たす $\sigma \in P(L)$ が取れるが，$\gamma = g^{-1}\sigma g = p(0)^{-1}\tilde{\sigma}(0)p(0) = \gamma_\sigma(0)$ となることから $\gamma_\sigma \equiv \gamma$ が分かる．とくに $\gamma = \gamma_\sigma(1)$ より $p(1)\gamma = \tilde{\sigma}(1)p(1)$ が分かり，$\gamma \in A(p(1))$ が従う．
さて，$A(g) \cong P(L)$ である．また $\tilde{L}(p(1)) = \Lambda(1) = L'$ であったことに注意すると，$A(p(1)) \cong P(L')$ となる．よって $A(g) \subset A(p(1))$ から，$P(L)$ の位数は $P(L')$ の位数以下であることが分かる．この議論は L と L' を入れ替えても成立するため，$P(L')$ の位数が $P(L)$ の位数以下であることも分かる．ゆえに $P(L)$ と $P(L')$ の位数は一致し，各々の群と同型であった $A(g)$ と $A(p(1))$ の位数も一致する．ここで $A(p(1))$ は有限群であったから，包含 $A(g) \subset A(p(1))$ により相等 $A(g) = A(p(1))$ が従う．したがって，$L \sim_m L'$ となる．
次に，$\sim_1$ と $\sim_2$ の関連性について，次の定理が成り立つ．

定理 3 $L, L' \in \mathscr{L}$ が $L \sim_1 L'$ を満たすとき，$L \sim_2 L'$ となる．とくに，定理 *2* から $L \sim_m L'$ も従う．

証明 Λ を 1 の意味で対称性を保つ，L から L' への連続変形とする．定理の主張を示すには，Λ が 2 の意味で対称性を保つことを示せば十分である．
$\tilde{L}(g) = L$ となる $g \in G$ を 1 つ取り，g から定まる Λ の持ち上げを p とおく．$\sigma \in P(L)$ とすると，$\sigma g = g\gamma_\sigma$ を満たす $\gamma_\sigma \in \Gamma$ が存在する．そこで，$t \in [0,1]$ に対し $\tilde{\sigma}(t) = p(t)\gamma_\sigma p(t)^{-1}$ とおく．p の連続性から写像 $\tilde{\sigma} : [0,1] \to G$ は連続である．また，$\tilde{\sigma}(0) = p(0)\gamma_\sigma p(0)^{-1} = g\gamma_\sigma g^{-1} = \sigma$ である．
以降，$\tilde{\sigma}([0,1]) \subset K$ を示す．これが示されると，各 $\sigma \in P(L)$ に対して

$$\tilde{\sigma}(t)\Lambda(t) = \tilde{\sigma}(t)\tilde{L}(p(t)) = \tilde{L}(\tilde{\sigma}(t)p(t)) = \tilde{L}(p(t)\gamma_\sigma) = \tilde{L}(p(t)) = \Lambda(t)$$

となることから，Λ が 2 の意味で対称性を保つことが分かる．
そのためにまず，各 $\sigma \in P(L)$ に対して $I_\sigma := \{t \in [0,1] \mid 0 \le t' \le t \Rightarrow \tilde{\sigma}(t') \in K\}$ とおく．$\tilde{\sigma}(0) = \sigma \in K$ から $0 \in I_\sigma \neq \emptyset$ であり，I_σ は上に有界な非空集合である．そこで $t_\sigma = \sup I_\sigma$ とおくと，$t_\sigma \in I_\sigma$，すなわち $t_\sigma = \max I_\sigma$ であることが以下のようにして分かる：$0 \le t' \le t_\sigma$ とする．このとき $\tilde{\sigma}(t') \in K$ であることを示せばよい．
<u>$0 \le t' < t_\sigma$ のとき</u>　$t_\sigma = \sup I_\sigma$ より，$t' \le t''$ を満たす $t'' \in I_\sigma$ が存在する．$t'' \in I_\sigma$ および $0 \le t' \le t''$ より $\tilde{\sigma}(t') \in K$ が従う．
<u>$t' = t_\sigma$ のとき</u>　$t \in I_\sigma$ に対して，特に $0 \le t \le t$ から $\tilde{\sigma}(t) \in K$ が従うため，$I_\sigma \subset \tilde{\sigma}^{-1}(K)$ である．ゆえに I_σ の $[0,1]$ 内での閉包の元である $t_\sigma = \sup I_\sigma$ は $\tilde{\sigma}^{-1}(K)$ の閉包の元でもある．しかし $\tilde{\sigma}$ は連続であり，K は G の閉部分群であったから，$\tilde{\sigma}^{-1}(K)$ は自身の閉包と一致する．したがって $t_\sigma \in \tilde{\sigma}^{-1}(K)$，すなわち $\tilde{\sigma}(t_\sigma) \in K$ である．

任意の $\sigma \in P(L)$ に対して $t_\sigma = 1$ を示すことができれば，$\tilde{\sigma}([0,1]) \subset K$ が従う．そこで，ある $\sigma \in P(L)$ に対して $t_\sigma < 1$ となると仮定する (背理法)．$t_0 = \min_{\sigma \in P(L)} t_\sigma$ とおくと，仮定から $t_0 < 1$ となる．

ここで次の主張 (*) を考える : (*) t_0 の近傍 I であって，I の任意の元 t に対して $\{\tilde{\sigma}(t) \mid \sigma \in P(L)\} = P(\Lambda(t)) \subset K$ となるものが存在する．(*) が示されると，$t_0 < 1$ から $[t_0, t_1) \subset I$ となる $t_1 \in (t_0, 1]$ が取れる．特に $t_2 = (t_0 + t_1)/2$ とおくと $t_0 < t_2$ であり，さらに $[t_0, t_2] \subset I$ である．一方，任意の $t \in [t_0, t_2]$ および $\sigma \in P(L)$ に対して $\tilde{\sigma}(t) \in P(\Lambda(t)) \subset K$ となるため $t_\sigma \geq t_2 > t_0 = \min_\sigma t_\sigma$ となって矛盾が生じ，証明が完結する．よって，以降では (*) を示す．

連続写像 $f : [0,1] \times K \to G$ を $f(t,k) = p(t)^{-1} k p(t)$ により定め，その像を $F := f([0,1] \times K)$ とおく．$[0,1] \times K$ がコンパクトであり，f が連続であることから F もコンパクトである．ゆえに $F \cap \Gamma$ はコンパクトかつ離散的であり，有限集合となることが分かる．また，$\gamma \in (F \cap \Gamma) \setminus A(g)$ に対して，$\tau_\gamma(t) = p(t)\gamma p(t)^{-1}$ とおくと，写像 $\tau_\gamma : [0,1] \to G$ は連続である．よって $J_\gamma := \tau_\gamma^{-1}(K) \subset [0,1]$ は閉集合である．そこで $J := \bigcup_{\gamma \in (F \cap \Gamma) \setminus A(g)} J_\gamma$ とおくと，$(F \cap \Gamma) \setminus A(g)$ が有限集合であることから，J もまた $[0,1]$ の閉集合である．そこで開集合 I を $I = [0,1] \setminus J$ とおく．I が (*) の条件を満たすことを示せばよい．

<u>$t_0 \in I$ を示す.</u>まず，任意の $\sigma \in P(L)$ に対して $\tilde{\sigma}(t_0) \in K$ であったから，$\{\tilde{\sigma}(t_0) \mid \sigma \in P(L)\} \subset P(\Lambda(t_0))$ である．ここで $\sigma, \sigma' \in P(L)$ に対して $\tilde{\sigma}(t_0) = \tilde{\sigma}'(t_0)$ が成り立つとき，$p(t_0)^{-1}\gamma_\sigma p(t_0) = p(t_0)^{-1}\gamma_{\sigma'} p(t_0)$ から $\sigma = \sigma'$ が従う．よって $\{\tilde{\sigma}(t_0) \mid \sigma \in P(L)\}$ の濃度は $P(L)$ と一致する．さて，Λ は 1 の意味で対称性を保っているため，$P(L)$ の濃度は $P(\Lambda(t_0))$ と一致し，さらにこの濃度は有限であった．ゆえに，包含 $\{\tilde{\sigma}(t_0) \mid \sigma \in P(L)\} \subset P(\Lambda(t_0))$ から相等 $\{\tilde{\sigma}(t_0) \mid \sigma \in P(L)\} = P(\Lambda(t_0))$ が従う．

ここで $t_0 \in J_\gamma$ なる $\gamma \in (F \cap \Gamma) \setminus A(g)$ が存在すると仮定する (背理法)．このとき $p(t_0)\gamma p(t_0)^{-1} = \tau_\gamma(t_0) \in K$ であるから，$\tau_\gamma(t_0) \in P(\Lambda(t_0))$ となる．ゆえに，上の集合の相等から $\tau_\gamma(t_0) = \tilde{\sigma}(t_0)$ を満たす $\sigma \in P(L)$ が存在するが，このとき $\gamma = \gamma_\sigma \in A(g)$ となり矛盾する．以上により $t_0 \in [0,1] \setminus J = I$ となる．

<u>$t \in I$ ならば $P(\Lambda(t)) = \{\tilde{\sigma}(t) \mid \sigma \in P(L)\}$ となることを示す.</u>右辺の濃度が $P(L)$ および $P(\Lambda(t))$ と一致し，有限であることは $t = t_0$ のときと同様に示せる．よって，左辺が右辺に含まれることをいえば十分である．$\tau \in P(\Lambda(t))$ とすると，$\gamma := p(t)^{-1}\tau p(t) = f(t,\tau) \in F \cap \Gamma$ である．γ が $A(g)$ の元でないと仮定する (背理法)．このとき $\tau_\gamma(t) = p(t)\gamma p(t)^{-1} = \tau \in K$ となるため $t \in J_\gamma$ となるが，これは $t \in I \setminus J \subset I \setminus J_\gamma$ に矛盾する．ゆえに $\gamma \in A(g) = \{\gamma_\sigma \mid \sigma \in P(L)\}$ である．すなわち，$\gamma = \gamma_\sigma$ となる $\sigma \in P(L)$ が存在する．このとき $\tau = p(t)\gamma_\sigma p(t)^{-1} = \tilde{\sigma}(t)$ となるため，包含が従う．

以上により，定理の証明が完結した．

次に，$\sim_m$ による同値から $\sim_2$ による同値が得られるケースを考える．そのための補題として，$L \sim_2 L'$ が成り立つような L, L' の例をいくつか述べる．

補題 4 *1)* $L \in \mathscr{L}$，$k \in K_+$ とすると，$L' := k \cdot L \sim_1 L$ である．とくに，$L \sim_2 L'$ である．

2) $b, b' \in B_+$ が $A(b) = A(b')$ を満たすとき，$\tilde{L}(b) \sim_2 \tilde{L}(b')$ である．

証明

1) 後半の主張は前半と定理 3 の帰結である．前半を示そう．K_+ は弧状連結であるから，連続写像 $\tilde{k} : [0,1] \to K_+$ であって，$\tilde{k}(0) = \mathrm{I}$ および $\tilde{k}(1) = k$ を満たすものが存在する．$t \in [0,1]$ に対して $\Lambda(t) = \tilde{k}(t) \cdot L$ と定めると，G の $\mathscr{L}$ への作用が連続であることから Λ は連続変形であり，$\Lambda(0) = L$ および $\Lambda(1) = k \cdot L = L'$ を満たす．また $P(\Lambda(t)) = P(\tilde{k}(t)L) = \tilde{k}(t)P(L)\tilde{k}(t)^{-1}$ であるから，$L' \sim_1 L$ が従う．

2) $R : [0,1] \to S$ を $R(t) = (1-t)s(b) + ts(b')$ と定めると，$s(b)$ および $s(b')$ が Γ から誘導される $A(b)$ の作用に関して不変であるから，$R(t)$ もまた $A(b)$ の作用で不変である．そこで $c := s_B^{-1} \circ R : [0,1] \to B_+$ とおくと，$c(0) = s_B^{-1}(s(b)) = b, c(1) = b'$ である．$\Lambda(t) = \tilde{L}(c(t))$ とおくと，c の連続性から Λ は連続変形で，$\Lambda(0) = \tilde{L}(b), \Lambda(1) = \tilde{L}(b')$ となる．

Λ が 2 の意味で対称性を保つことを示す．$\sigma \in P(L)$ とすると，$\gamma_\sigma := b^{-1}\sigma b \in A(b)$ である．$\tilde{\sigma}(t) = c(t)\gamma_\sigma c(t)^{-1}$ とおくと，写像 $\tilde{\sigma} : [0,1] \to G$ は連続で，$\tilde{\sigma}(0) = b\gamma_\sigma b^{-1} = \sigma$ である．また，

$$\begin{aligned} {}^T\tilde{\sigma}(t)\tilde{\sigma}(t) &= {}^Tc(t)^{-1} \cdot {}^T\gamma_\sigma \cdot {}^Tc(t) \cdot c(t) \cdot \gamma_\sigma \cdot c(t)^{-1} = {}^Tc(t)^{-1} \cdot s(c(t))^{\gamma_\sigma} \cdot c(t)^{-1} \\ &= {}^Tc(t)^{-1} \cdot R(t)^{\gamma_\sigma} \cdot c(t)^{-1} \\ &= {}^Tc(t)^{-1} R(t) c(t)^{-1} \\ &= {}^Tc(t)^{-1} \cdot {}^Tc(t) \cdot c(t) \cdot c(t)^{-1} = \mathrm{I} \end{aligned}$$

である．ここで，2 行目から 3 行目の変形において $R(t)$ が $A(b)$ 不変であることを用いた．したがって $\tilde{\sigma}(t) \in K$ となる．さらに，

$$\tilde{\sigma}(t)\Lambda(t) = \tilde{\sigma}(t)\tilde{L}(c(t)) = \tilde{L}(\tilde{\sigma}(t)c(t)) = \tilde{L}(c(t)\gamma_\sigma) = \tilde{L}(c(t)) = \Lambda(t)$$

となるから，$\tilde{\sigma}(t) \in P(\Lambda(t))$ が従う．以上により，確かに Λ は 2 の意味で対称性を保つ連続変形である．$\tilde{L}(b')$ から $\tilde{L}(b)$ への連続変形も同様に構成できるため，結局 $\tilde{L}(b) \sim_2 \tilde{L}(b')$ である．

以上の準備をもとに，$\sim_m$ と $\sim_2$ の関連性について次の定理が成り立つことを示す．

定理 5 $L, L' \in \mathscr{L}$ が $L \sim_m L'$ を満たすとする．

1) L が次の仮定を満たすとする：

<u>仮定</u> $\tilde{L}(g_0) = L$ を満たす $g_0 \in G$ および $\det(\gamma) = -1$ を満たす $\gamma \in \Gamma$ であって，$\gamma A(g_0)\gamma^{-1} = A(g_0)$ となるものが存在する．

このとき，$L \sim_2 L'$ となる．

2) N が 2 または奇数のとき，*(1)* における仮定は任意の $L \in \mathscr{L}$ について成立する．したがって，$L \sim_2 L'$ となる．

証明

1) 補題 4 に帰着させるために，まず $\tilde{L}(g) = L, \tilde{L}(g') = L'$ を満たす $g, g' \in G$ であって「性質の良い」ものをとることを考える．具体的には，$g, g' \in G_+$ であって，$\tilde{L}(g) = L, \tilde{L}(g') = L', A(g) = A(g')$ となるものが取れることを示す．

g について，$\det(g_0) > 0$ のときは $g = g_0 \in G$ とおく．このとき $\gamma A(g)\gamma^{-1} = \gamma A(g_0)\gamma^{-1} = A(g_0) = A(g)$ となる．一方 $\det(g_0) < 0$ のときは $g = g_0\gamma \in G$ とおく．このとき $A(g) = A(g_0\gamma) = \gamma^{-1}A(g_0)\gamma = A(g_0)$ であるから，やはり $\gamma A(g)\gamma^{-1} = A(g)$ となる．いずれにおいても $\gamma A(g)\gamma^{-1} = A(g)$ が分かる．

g' について，$L \sim_m L'$ より，$\tilde{L}(g') = L'$ かつ $A(g) = A(g')$ を満たすような $g' \in G$ が取れる．このように取った g' が G_+ の元であったときは，条件を満たす g, g' が得られたことになる．$g' \in G \setminus G_+$ のときは，$g'\gamma \in G_+$ であり，$A(g'\gamma) = \gamma^{-1}A(g')\gamma = \gamma^{-1}A(g)\gamma = A(g)$ となる．よって g' を $g'\gamma$ に入れ替えれば，結局条件を満たす g, g' が得られる．以上により，先に述べた条件を満たす g, g' を取ることができることが示された．

そのような $g, g' \in G_+$ を 1 つ取ると，$G_+ = K_+B_+$ より $g = kb, g' = k'b'$ を満たす $k, k' \in K_+, b, b' \in B_+$ が存在する．補題 4 (1) より $L = \tilde{L}(kb) \sim_2 \tilde{L}(b), L' \sim_2 \tilde{L}(b')$ が分かる．また，$s(g) = {}^Tb{}^Tkkb = {}^Tbb = s(b)$ より $A(g) = A(b)$ であり，同様に $A(g') = A(b')$ も分かる．$A(g) = A(g')$ であったから $A(b) = A(b')$ となり，補題 4 (2) より $\tilde{L}(b) \sim_2 \tilde{L}(b')$ となる．よって $L \sim_2 \tilde{L}(b) \sim_2 \tilde{L}(b') \sim_2 L'$ となり，$L \sim_2 L'$ が従う．

2) まず，$P(L)$ が $K \setminus K_+$ の元を持つとき (1) の仮定は成立することに注意する．これは，そのような $\sigma \in P(L) \setminus K_+$ および $\tilde{L}(g_0) = L$ を満たす $g_0 \in G$ を取ると，$(g_0, \gamma = g_0^{-1}\sigma g_0)$ が条件を満たす組となることから分かる．

以上を踏まえ，場合分けを行う．

<u>N が奇数のとき</u> $-\mathrm{I} \in P(L)$ であるが，N が奇数であることから $-\mathrm{I} \in K \setminus K_+$ となり，上の注意から分かる．

<u>N が 2 のとき</u> $P(L)$ の形が具体的に分かることを用いる．正の整数 l に対し，$D_l = \langle x, y \mid x^l = y^2 = 1, yxy^{-1} = x^{-1} \rangle$ とおく．さらに，埋め込み $D_l \hookrightarrow K$ を $x \mapsto \begin{pmatrix} \cos(2\pi/l) & -\sin(2\pi/l) \\ \sin(2\pi/l) & \cos(2\pi/l) \end{pmatrix}$, $y \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ により定める．このとき，$P(L)$ は $\{\pm\mathrm{I}\}, D_2, D_4, D_6$ のいずれかと K 共役である．このうち $P(L)$ が $\{\pm\mathrm{I}\}$ と共役である場合，$\tilde{L}(g_0) = L$ を満たす任意の $g_0 \in G$ に対して $A(g_0) = \{\pm\mathrm{I}\}$ が Γ の中心であることから仮定の条件は満たされることが分かる．それ以外と共役である場合は，$y \in P(L) \setminus K_+$ および先の注意から仮定の条件が満たされる．

4 終わりに

Bravais 自身の方針と同様にして対称性を保つ格子の連続変形による同値関係 $\sim_1, \sim_2$ を定義したところ，群の剰余類・共役類による Bravais 格子の定義 $\sim_m$ にある意味で近い同値関係を構成することができた．とくに標準的なケースである $N = 2, 3$ において，$\sim_m$ と一致する同値関係 $\sim_2$ を構成することができた．なお，N が 4 以上の偶数について $\sim_m$ が $\sim_2$ と一致するかは未解決である．ここは今後の課題としたい．

5 謝辞

本課題を提供してくださった日本製鉄・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様に深く感謝いたします．また，課題に関して様々な助言を下さった東京大学数理科学研究科の中村勇哉様，間瀬崇史様に感謝いたします．本研究は FMSP リーディング大学院の助成を受けております．

参考文献

[1] Bravais, A. (1850). *Mémoire sur les systèmes formés par les points distribués régulirement sur un plan ou dans l'espace.* J. l'Ec. Polytech. 19, 1-128.

[2] Pitteri, M., Zanzotto, G. (1996). *On the Definition and Classification of Bravais Lattices.* Acta Crystallographica Section A - ACTA CRYSTALLOGR A. 52. 830-838.