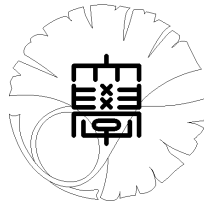


数理科学実践研究レター 2023–17 October 11, 2023

結晶の配位数と非可換射影空間のヒルベルト多項式

by

金城 翼



UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

結晶の配位数と非可換射影空間のヒルベルト多項式

金城翼¹ (東京大学大学院数理科学研究科)

Tasuki Kinjo (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概要

一種類の原子からなる結晶格子の配位数列は、ある射影代数多様体のヒルベルト多項式で与えられることが知られている。本論文では、一般の n 種類の原子からなる結晶格子に対して、原子の配位数列がある非可換空間のヒルベルト多項式で与えられることを示す。その過程において、一般の非負整数からなる $n \times n$ 行列 A が与えられたとき、非可換射影空間 \mathbb{P}^A とそのヒルベルト多項式を導入する。このヒルベルト多項式が実際に準多項式になるという形で射影空間のコホモロジーの消滅定理が非可換化されることを予想し、 $n = 2$ の場合を含む特別な場合でこれを証明する。この手法は今後 [NSMN21] による結晶の配位数列が準多項式型であるという事実の別証明及び一般化を与えると期待される。

1 導入

本レポートは社会数理実践研究における議論で得られた結果のサーベイである。研究の目的は現実世界における結晶の対称性について、非可換幾何学などの観点から理解を進めること、および結晶学を背景に持つような幾何学的な対象を純粋数学における研究対象として導入することである。

本論文では結晶格子を以下で定義する：

定義 1. 結晶格子 C は以下のデータ (N, S, n, f, T) によって定まる：

- 結晶の埋め込まれている空間の次元 $N \in \mathbb{Z}_{>0}$.
- 原子の集合 $S \subset \mathbb{R}^N$. 集合 S は離散的であり、原点 0 を含むと仮定する.
- 原子の種類の数 $n \in \mathbb{Z}_{>0}$.
- 原子の種類を与える写像 $f: S \rightarrow \{1, \dots, n\}$.
- 原子の結合に対応する集合 $T \subset S \times S$.

これらのデータは次を満たすものとする：

- (局所有限性) 任意の $x \in S$ に対し、 $\{y \in S \mid (x, y) \in T\}$ は有限集合である.
- (平行移動対称性) 原子の組 $(x, y) \in T$ と、原子 $x' \in S$ で $f(x) = f(x')$ を満たすものに対し、 $x' + y - x \in S$ であり、 $(x', x' + y - x) \in T$ である.

補足 2. 結晶格子の配位数列に関する基本文献である [NSMN21] における結晶格子の定義は、上述の結晶格子の定義に T の対称律を加えたものと本質的に一致する。現実に現れる結晶においては T が対称律を満たしているが、§3 で議論されるような非可換代数幾何学的な観点からは対称律を課さない方が自然である。

結晶格子 $C = (N, S, n, f, T)$ に対し、対 (S, T) は有向グラフを定めることがわかる。次に結晶格子の配位数列を定義する：

定義 3. $C = (N, S, f, n, T)$ を結晶格子とする。非負整数 m に対し、

$$a_C(m) := \{x \in S \mid \text{原子 } x \text{ の原点 } 0 \text{ からのグラフ距離がちょうど } m \text{ である.}\}$$

とおく。結晶格子 C の配位数列を $\{a_C(m)\}_{m=0,1,\dots}$ によって定める。 C の総配位数 $S_C(m)$ を

$$S_C(m) := \sum_{l=0}^m a_C(l)$$

¹kingjmath@gmail.com

によって定める.

論文 [NSMN21] では (T が対称律を満たす場合に) 配位数列 $a_C(m)$ が準多項式型であることが示されている. 別の言い方をすると, ある正の整数 d が存在し, 全ての $k \in \{0, \dots, d-1\}$ に対して, $a_C(dm+k)$ は十分大きい m について多項式になっている. 原子の種類が 1 種類である場合には $d=1$ と選ぶことができ, この事実は本質的に, 射影代数多様体のヒルベルト多項式の多項式性からの帰結である. 従って次のような疑問が自然である:

疑問 4. 一般の結晶格子の配位数列が準多項式型であるという事実を, 射影代数多様体を一般化する何らかの幾何学的対象の「ヒルベルト準多項式」の準多項式性から導くことはできるか?

この疑問に部分的な解答を与えることがこの論文の目的の一つである. まず, 最も基本的な射影代数多様体は d 次元射影空間 \mathbb{P}^d であるが, この空間のヒルベルト多項式は, d 次元空間の非負部分で格子状に広がる 1 種類の原子からなる結晶格子 C_d^{univ} の総配位数列と一致することがわかる. この結晶格子の一般化として, 非負整数係数の $n \times n$ 行列 A に依存して決定される n 種類の原子からなる結晶格子 C_A^{univ} を導入する. これは n 種類の原子からなる結晶格子で結合行列が A であるもののうち, 最も普遍的なものである. この結晶格子に対応する幾何学的対象は射影空間の非可換化と解釈するべきものであり, \mathbb{P}^A と書くことにする. \mathbb{P}^A は次数つき代数, もしくは三角圏として定義される. 本論文では C_A^{univ} の総配位数列を \mathbb{P}^A のヒルベルト準多項式と解釈することで, 複数種類の原子からなる結晶格子の配位数列の研究においても代数幾何学的な考え方が有効であることを示す.

表 1: 結晶理論と代数幾何学の比較

結晶理論	代数幾何学
1 種類の原子からなる結晶格子	代数多様体
複数種類の原子からなる結晶格子	非可換代数多様体
配位数列	(非可換) ヒルベルト多項式
結晶 C_d^{univ}	射影空間 \mathbb{P}^d
結晶 C_A^{univ}	非可換射影空間 \mathbb{P}^A

2 普遍結晶格子

いま $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ を非負整数からなる $n \times n$ 行列とし, $|A| := \sum_{1 \leq i, j \leq n} a_{ij}$ とおく. この節では, 行列 A を隣接行列に持つような **普遍結晶格子** $C_A^{\text{univ}} = (|A|, S_A, n, f_A, T_A)$ を導入する. ベクトル空間 $\mathbb{R}^{|A|}$ の基底 $\{e_{ij,k}\}_{1 \leq i, j \leq n, 1 \leq k \leq a_{ij}}$ を固定する. このとき, 集合 $S_A \subset \mathbb{R}^{|A|}$, $f_A: S_A \rightarrow \{1, \dots, n\}$, および $T_A \subset S_A \times S_A$ を以下のように帰納的に構成する:

- 原点 $0 \in \mathbb{R}^{|A|}$ を S_A に含め, $f_A(0) = 1$ とする.
- $f_A(v) = i$ をみたすような $v \in S_A$ に対し, $v + e_{ij,k}$ ($1 \leq j \leq n, 1 \leq k \leq a_{ij}$) を S_A の元を含め, $f_A(v + e_{ij,k}) = j$ と定める. また, $(v, v + e_{ij,k})$ を T_A の元を含める.

この操作を繰り返すことで $\mathbb{R}^{|A|}$ の部分集合 S_A , $f_A: S_A \rightarrow \{1, \dots, n\}$, および $T_A \subset S_A \times S_A$ を構成する.

補題 5. 上の構成は well-defined であり, 従って $C_A^{\text{univ}} = (|A|, S_A, n, f_A, T_A)$ は結晶格子を定める.

証明. 元 $v \in S_A$ に対し $f_A(v)$ の値が唯一に定まることを示せば良い. 元 v は $v = e_{1j_0, k_0} + e_{i_1 j_1, k_1} + \dots + e_{i_l j_l, k_l}$ と (順序を除いて) 一意に書くことができる. このとき, 重複つき集合 $\{i_1, \dots, i_l, j_0, \dots, j_l\}$ に奇数回現れる整数が唯一存在し, $f_A(v)$ の値はその整数に一致することがわかる.

□

本研究では C_A^{univ} の配位数を求めることを主な目的とする。 C_A^{univ} を定義する上で、 $f_A(0) = i$ において上と同様な帰納的構成を行ったものを $C_A^{\text{univ},i}$ とおく。 すなわち $C_A^{\text{univ},1} = C_A^{\text{univ}}$ である。 非負整数 m に対し、 $C_A^{\text{univ},i}$ の原点からのグラフ距離がちょうど m であるような S_A の元 x で $f(x) = j$ をみたすものの数を $\text{sym}^m(A)_{ij}$ とおく。 (i, j) 成分が $\text{sym}^m(A)_{ij}$ であるような $n \times n$ 行列を $\text{sym}^m(A)$ とおく。

補足 6. ここで C_A^{univ} の配位数列の記号として sym^m を用いる理由を説明する。 $n = 1$ の場合には、 $\text{sym}^m(a)$ は a 元からなる集合から重複を許し m 元を選び出す場合の数と一致する。 従って

$$\text{Sym}^m(\mathbb{C}^a) \cong \mathbb{C}^{\text{sym}^m(a)}$$

が成立し、 sym^m は対称積作用素 $V \mapsto \text{Sym}^m(V)$ がベクトル空間の圏の K 群 $K(\text{Vect}) \cong \mathbb{Z}$ に誘導する射であるとわかる。 このことから、 C_A^{univ} の配位数は対称積作用素の行列環類似と考えられるため、ここでは対称積の記号を小文字にしたもの sym^m を用いた。 $n > 1$ の場合にも C_A^{univ} の配位数に圏化が存在するかは興味深い問題であり、今後の課題である。

ここで、 m が小さい場合に $\text{sym}^m(A)$ の計算を行う。 まず、 $m = 0, 1$ のとき、明らかに次の二式が成立する：

$$\text{sym}^0(A) = I_n, \text{sym}^1(A) = A.$$

また、 $m = 2$ の場合も容易な計算で次の等式が得られる：

$$\text{sym}^2(A) = \begin{pmatrix} \text{sym}^2(a_{11}) + \sum_{1 < i < j \leq n} a_{1i}a_{1j} & \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{1i}a_{1j} & \cdots & \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{1i}a_{1j} \\ \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{2i}a_{2j} & \text{sym}^2(a_{22}) + \sum_{1 \leq i < j \leq n, i \neq 2} a_{2i}a_{2j} & \cdots & \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{2i}a_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{ni}a_{nj} & \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{ni}a_{nj} & \cdots & \text{sym}^2(a_{nn}) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{ni}a_{nj} \end{pmatrix}.$$

一般に $\text{sym}^m(A)$ の表示は、 A^m を成分について展開した際に現れる冪乗作用素を、対称積作用素に取り替えたものとして記述される。

補足 7. 行列の多項式の指数の計算では、基底変換が有効であった。一方で、 $\text{sym}^m(A)$ は基底変換で不変でないため、計算を実行するのは一般に難しい。

結晶格子 C_A^{univ} の配位数の多項式性について、以下が予想される：

予想 8. 1. $m \mapsto \text{sym}^m(A)_{11}$ は $m > 0$ で準多項式になる。すなわち、ある整数 d が存在し、任意の整数 $l > 0$ に対して $m \mapsto \text{sym}^{dm+l}(A)_{11}$ は m について多項式になる。

2. A を隣接行列に持つ有向グラフが強連結、すなわち任意の二頂点が相互に有向パスで結ばれると仮定する。このとき、 $m \mapsto \text{sym}^m(A)_{ij}$ は $m > 0$ で準多項式になる。

補足 9. 一つ目の主張は二つ目の主張の特別な場合である。実際、 A を隣接行列に持つ有向グラフの部分グラフであって、頂点 1 を含む強連結なものうち最大であるものを取り、行列 A をこの部分グラフの隣接行列に取り替えることで、強連結な場合に帰着される。

補足 10. 上の予想は射影空間のコホモロジーの消滅と密接に関わっている。実際、 $A = (a)$ が 1×1 行列のとき、 $\text{sym}^m(A)$ は \mathbb{P}^a 上の直線束 $\mathcal{O}_{\mathbb{P}^a}(m)$ の 0 次コホモロジーの次元と一致することが容易にわかる。さらに、代数多様体のコホモロジーの一般論により、次の数列

$$m \mapsto \sum_i (-1)^i \dim H^i(\mathbb{P}^a, \mathcal{O}_{\mathbb{P}^a}(m))$$

は多項式であることが知られている。このことを用いると、上の予想における準多項式性は消滅定理

$$H^i(\mathbb{P}^a, \mathcal{O}_{\mathbb{P}^a}(m)) = 0 \quad (i > 0, m \geq 0)$$

の系であることがわかる。このことより、上の予想は射影空間のコホモロジーの消滅の一般化であると解釈される。この予想の非可換幾何的な解釈は次の節で詳しく議論する。

いま, $n = 2$ の場合にこの予想が成立していることを証明する:

命題 11. $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ とおく. このとき,

1. $\sum_{m \geq 0} \text{sym}^m(A)_{11} t^m = \left(\frac{bct^2}{(1-bct^2)(1-t)^d} + 1 \right) \cdot \frac{1}{(1-t)^a}$.
2. $\sum_{m \geq 0} \text{sym}^m(A)_{12} t^m = \frac{bt}{(1-bct^2)(1-t)^{a+d}}$.
3. $\sum_{m \geq 0} \text{sym}^m(A)_{21} t^m = \frac{ct}{(1-bct^2)(1-t)^{a+d}}$.
4. $\sum_{m \geq 0} \text{sym}^m(A)_{22} t^m = \left(\frac{bct^2}{(1-bct^2)(1-t)^a} + 1 \right) \cdot \frac{1}{(1-t)^d}$.

特に, $m \mapsto \text{sym}^m(A)_{11}, \text{sym}^m(A)_{22}$ は一般に準多項式であり, $m \mapsto \text{sym}^m(A)_{12}, \text{sym}^m(A)_{21}$ は $bc \neq 0$ ならば準多項式である.

証明. ここでは等式 1 の証明のみ与える. 等式 2-4 は同様に示される. いま, 原子 1 の頂点のみからなる部分グラフの配位数列の母関数は $1/(1-t)^a$ であるので, 原子 1 と原子 2 の両方を通るようなパスの母関数 $G_A(t)$ を計算すれば良い. A の (1,1)-成分もしくは (2,2)-成分が 1 だけ増えた行列を A' とおく. このとき等式

$$G_{A'}(t) = G_A(t) \cdot \frac{1}{1-t}$$

が成立することがわかる. 従って, $a = d = 0$ の場合に等式を証明すれば良いが, これは明らかである. □

次に予想 8 が $n = 3$ の場合に条件付きで成立することを示す:

命題 12. $A = \begin{pmatrix} a_{11} & 1 & 1 \\ 1 & a_{22} & 1 \\ 1 & 1 & a_{33} \end{pmatrix}$ を非負整数成分からなる 3×3 行列とする. このとき, 予想 8 が成立する.

証明. 証明は予想 8-1, 予想 8-2 どちらも同様なので, 前者についてのみ証明を与える. $\overline{\text{sym}}^m(A)_{11}$ を結晶格子 C_A^{univ} 内で原点からのグラフ距離がちょうど m であるもののうち, 原点から全ての種類の原子を通るようなパスが存在するものの数とする. 包除原理により, $m \mapsto \overline{\text{sym}}^m(A)_{11}$ が準多項式であることを示せば良い. いま, A の対角成分を全て 0 に置き換えたような行列を A' とおくと, 等式

$$\sum_{m \geq 0} \overline{\text{sym}}^m(A)_{11} t^m = \left(\sum_{m \geq 0} \overline{\text{sym}}^m(A')_{11} t^m \right) \cdot \frac{1}{(1-t)^{a_{11}+a_{22}+a_{33}}}$$

が成立する. 従って A の対角成分が全て 0 であると仮定して良い. このとき, 原子の隣接グラフ (つまり三頂点からなる有向完全グラフ) での回転数による場合分けを用いることで, 容易に次の等式を導くことができる:

$$\sum_{m \geq 0} \overline{\text{sym}}^m(A)_{11} t^m = \frac{2}{(1-t^3)(1-t^2)^3} - \frac{1}{(1-t^2)^3} - \frac{1}{1-t^2}.$$

特に配位数列が準多項式になることがわかる. □

補足 13. 上の証明を一般化することで, 対角成分が非対角成分と比較して十分に大きいような $n \times n$ 行列に対して予想が成立していることが示される.

補足 14. 本研究では一般の行列に対して予想 8 を証明することができなかった。また、一般の行列に対して予想を証明するアプローチを筆者は持ち合わせていない。予想を示す上で以下のケースを考えることが重要であると考えます：

- 一般の 3×3 行列。
- $n \times n$ 行列で対角成分以外が全て 1 であるもの。

前者については、上の命題の証明で用いた回転数の手法を用いることで配位数列の一般式が具体的に書き下せると考える。後者については n 次元単体の組み合わせ論的構造を理解することが重要になり、組み合わせ論的にも興味深い問題である。

3 非可換射影空間

この節では上で与えた結晶格子 C_A^{univ} に対応する幾何学的対象について説明する。この幾何学的対象は射影空間の行列値一般化と解釈するべきものである。

いま、 $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ を非負整数からなる $n \times n$ 行列とする。このとき、非可換環 R_A を次のように定義する：

- 環 R_A は \mathbb{C} 上で元 $e_i x_{ij, k} \bar{e}_j$ ($1 \leq i, j \leq n, 1 \leq k \leq a_{ij}$)、および t によって生成される。
- 積は関係式 $\bar{e}_i \cdot e_j = \delta_{ij}$, $x_{ij, k} \cdot x_{i'j', k'} = x_{i'j', k'} \cdot x_{ij, k}$ 、および t と他のすべての元の可換性によって生成される。

この環は t によって次数付けを入れることができる。この次数付けによって R_A は次数付き非可換環になる。 A が 1×1 行列のとき、 R_A は射影空間の斉次座標環である。従って、 R_A は仮想的な空間 \mathbb{P}^A に対応する斉次座標環と見做すべきものである。

次の主張は定義より明らかである：

補題 15. 非負整数 m に対し、 $f_{ij}(R_A, m)$ で環 R_A における次数が m の元であって $e_i y \bar{e}_j$ の形をしているもの全体のなす空間の次元とする。このとき、等式

$$f_{ij}(R_A, m) = \sum_{l=0}^m \text{sym}^l(A)_{ij} = \text{sym}^m(A + E_{ii})_{ij}$$

が成立する。ここで E_{ii} は (i, i) -成分のみ 1 でそれ以外の成分が 0 であるような n 次正方行列を表す。

この等式により、結晶格子 C_A^{univ} の総配位数列は非可換環のヒルベルト多項式として解釈されることがわかった。

補足 16. ここではヒルベルト多項式という言葉を用いているが、有限生成次数付き非可換環 R が与えられた時、 $n \mapsto \dim R_n$ は一般に多項式ではない。実際、非可換多項式環のとき、上の対応は指数関数の増大度を持つ。我々が扱っている環 R_A では“ヒルベルト多項式”が多項式増大度を持つことがわかる。これは環 R_A が比較的可換環に近いということの意味している。

いま、隣接行列が A であるような、 n 種類の原子からなる結晶格子 C が与えられたとする。このとき、次の主張は上の補題と同様に導かれる：

補題 17. R_A の両側斉次イデアル I_C が存在し、等式

$$f_{ij}(R_A/I_C, m) = \sum_{l=0}^m a_C(l)_{ij}$$

が成立する。ここで $a_C(l)_{ij}$ は、ある原子 i からのグラフ距離がちょうど l であるような結晶格子 C の原子 j の数を表す。

この命題は、一般の結晶格子の総配位数列が \mathbb{P}^A 上の“接続層”のヒルベルト多項式として解釈できることを意味している。すなわち、結晶格子の配位数列の研究は射影代数多様体のヒルベルト多項式の研究の非可換化として解釈される。

非可換代数幾何学の一つの定式化では、空間として三角圏（より現代的には安定 ∞ -圏）を用いる。このことに倣い、非可換射影空間 \mathbb{P}^A を三角圏（もしくは安定 ∞ -圏）として定義する方法を述べる。まず $D^b(R_A)$ を、 R_A 上の次数付き有限生成右 R_A -加群のなす有界導来圏とする。また、 $D^b(R_A)$ の部分三角圏 \mathcal{N} を次で定義する：

$$M \in \mathcal{N} \iff H^i(M)_N = 0 (\forall i \in \mathbb{Z}, N \gg 0).$$

非可換射影空間 \mathbb{P}^A の導来圏をヴェルディエ商で定義する：

$$D^b(\mathbb{P}^A) := D^b(R_A)/\mathcal{N}.$$

補足 18. A が 1×1 -行列 (d) のとき、圏同値

$$D^b(\mathbb{P}^A) \simeq D^b(\mathbb{P}^d)$$

が成立する。このことにより、 $D^b(\mathbb{P}^A)$ という記法が正当化され、非可換射影空間が三角圏（もしくは安定 ∞ -圏）として定義されたことになる。

いま、 R_A -加群 $\mathcal{O}_{\mathbb{P}^A, i}(m)$ を、 $\mathcal{O}_{\mathbb{P}^A, i}(m)_k := (e_i \cdot R_A)_{m+k}$ で定義する。つまり、 $\mathcal{O}_{\mathbb{P}^A, i}(m)$ は $e_i \cdot R_A$ の次数付けのみを変えたものである。次の命題は非可換射影空間の導来圏を用いた総配位数列の解釈を与える：

命題 19. C を n 種類の原子からなる結晶格子であって、隣接行列が A であるようなものとする。このとき、次の等式が成立する：

$$\dim \operatorname{Hom}_{D^b(\mathbb{P}^A)}(\mathcal{O}_{\mathbb{P}^A, i}(-m), e_j \cdot R_A/I_C) = \sum_{l=0}^m a_C(l)_{ij}.$$

証明. この命題が導来圏 $D^b(R_A)$ の中で成立することは構成より明らかである。従ってヴェルディエ商をとっても Hom が変化しないことを示せば良いが、 $e_j \cdot R_A$ の部分加群であって、十分高い次数で消えるようなものは零加群に限る。このことから主張を得る。 \square

予想 20 (非可換射影空間のコホモロジーの消滅). 行列 A に対応する隣接グラフが強連結であると仮定する。このとき、次の等式が成立する：

$$\dim \operatorname{Hom}_{D^b(\mathbb{P}^A)}(\mathcal{O}_{\mathbb{P}^A, i}(-m), R_A[k]) = 0 (\forall m \geq 0, k \neq 0).$$

予想 21 (ヒルベルト多項式の準多項式性). 任意の $M \in D^b(\mathbb{P}^A)$ に対し、

$$m \mapsto \sum_k (-1)^k \dim \operatorname{Hom}_{D^b(\mathbb{P}^A)}(\mathcal{O}_{\mathbb{P}^A, i}(-m), M[k])$$

は well-defined であり、準多項式になる。

予想 22 (セール型消滅予想). M を有限生成次数付き右 R_A -加群とする。このとき、十分大きい m に対し、消滅

$$\operatorname{Hom}_{D^b(\mathbb{P}^A)}(\mathcal{O}_{\mathbb{P}^A, i}(-m), M[k]) = 0 (\forall k > 0)$$

が成立する。

ここで、これらの予想の配位数列への帰結について述べる。まず、命題 19 より、予想 20 および予想 21 が正しければ予想 8 が従うことがわかる。また、予想 21 および予想 22 が正しければ、[NSMN21] の結果が復元されることがわかる。特に配位数の誤差項として「コホモロジカル配位数」の概念が定義され、この項を総配位数に付け加えることで常に準多項式性が成立することが従う。

4 結論

本研究では結晶の配位数の研究を非可換射影代数多様体のヒルベルト多項式として捉え直すことに成功した。また、代数幾何学における諸定理の非可換化に関する予想が成立するならば、結晶の配位数列が準多項式型になるという [NSMN21] の主定理の一般化が与えられることがわかった。さらに、組み合わせ論の手法を用いることで、 2×2 行列を含む様々な行列に対する非可換射影空間に対してヒルベルト多項式を計算することで、これらの予想の根拠を与えた。

コホモロジーの次元の交代和が多項式性を持つという現象は代数幾何において一般的であるが、準多項式として振る舞うような対象は筆者の知る限り見つかっていないため、結晶格子に対応する非可換空間は純粋数学の観点からも非常に興味深い対象であると考え。また、結晶への応用という観点では、「コホモロジカル配位数」により配位数の準多項式からのずれを定義することが可能になる。この誤差項を計算する手法を確立することが可能になれば、これまでより少ない計算で結晶の配位数列が計算できるようになると期待される。

5 謝辞

研究に非常に有益なコメントをくださった北村侃さん、中村勇哉先生、中川淳一先生、間瀬崇史先生に深く感謝申し上げます。

参考文献

- [NSMN21] Yusuke Nakamura, Ryotaro Sakamoto, Takafumi Mase, and Junichi Nakagawa, *Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type*, Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances **77** (2021), no. 2, 138–148.