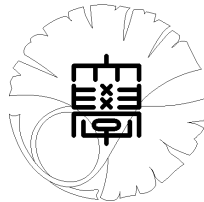


数理科学実践研究レター 2023-19 October 17, 2023

いくつかの例における結晶グラフの配位数列

by

北村 侃



UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

いくつかの例における結晶グラフの配位数列

北村侃¹ (東京大学大学院数理科学研究科)

Kan Kitamura (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概要

いくつかの具体例を通じて、分子構造や格子から来るグラフの配位数列を調べた。

1 はじめに

本レターは、社会数理実践研究における議論で筆者が得られたことをまとめたものである。分子結晶に対して、原子を頂点、分子結合を辺とすることで \mathbb{R}^3 に埋め込まれたグラフ (V, E) を構成できる。このグラフの $v \in V$ を始点とする配位数列 $(s_n)_{n=1}^\infty$ を $s_n := \#\{w \in V \mid v \text{ と } w \text{ はグラフ距離 } n\}$ と定める。なお $s_0 := 1$ としておく。このとき、もとの結晶の物性との関連を動機の一つとして $(s_n)_n$ のもつ性質が調べられて来た。ここで実数列 $(a_n)_{n=1}^\infty$ が準多項式とは、ある $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ と実係数多項式 p_1, \dots, p_m があって $a_{km+l} = p_l(k)$ が任意の $k \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ と $l \in \{1, \dots, m\}$ で成り立つこととする。さらに $m = 1$ ととれるとき、 $(a_n)_n$ は多項式という。また $(a_n)_n$ が準多項式型とは、有限個の例外となる n を除いてある準多項式の数列と一致することとする。同様に、有限個の例外を除き多項式となるときは多項式型と呼ぶ。[6] では無向グラフ (V, E) が \mathbb{Z}^d の作用をもち、その商が有限グラフとなるならばその配位数列は常に準多項式型になることが証明された。一方、この準多項式型の配位数列がいつ準多項式となるかはよくわかっていない。本レターでは、この間に関連したいくつかの例を観察する。

2 酸化銅 (II)

多くの場合において、結晶からくるグラフの配位数列は準多項式となることが確かめられている。これに対し、本節では CuO の分子構造から来るグラフの配位数列の計算結果を与え、準多項式ではないことをみる。 $V_O := \mathbb{Z}^3 \subset \mathbb{R}^3$,

$$V_{Cu} := (\frac{1}{2} + 2\mathbb{Z}) \times (\frac{1}{2} + \mathbb{Z}) \times \mathbb{Z} \cup (\frac{3}{2} + 2\mathbb{Z}) \times \mathbb{Z} \times (\frac{1}{2} + \mathbb{Z}) \subset \mathbb{R}^3,$$

$V := V_O \cup V_{Cu}$ とし、 $E := \{(v, w) \in V \times V \mid \|v - w\| = \frac{1}{\sqrt{2}}\}$ とする。この無向グラフ (V, E) は CuO の分子構造から来るグラフで、 V_O が酸素原子、 V_{Cu} が銅原子の配置に対応する [1]。

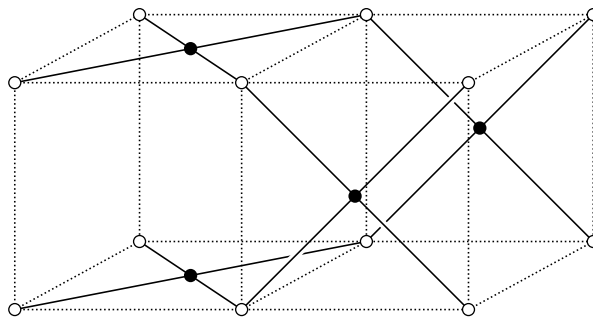


図 1: CuO の模式図。白い丸が酸素原子、黒い丸が銅原子で、実線が結合を表す。

定理 1 CuO の分子構造から来るグラフの配位数列は V_O の点から始めた際

$$\begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n \geq 1 \text{ が奇数のとき}) \\ \frac{5}{2}n^2 & (n \geq 1 \text{ が } 4 \text{ で割った余りが } 2 \text{ のとき}) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 & (n \geq 1 \text{ が } 4 \text{ の倍数のとき}) \end{cases}$$

¹kankita@ms.u-tokyo.ac.jp

となり、 V_{Cu} の点から始めた際

$$\begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n \geq 1 \text{ が奇数のとき}) \\ 10 & (n = 2 \text{ のとき}) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 & (n \geq 4 \text{ が偶数のとき}) \end{cases}$$

となる。

一般に、実数列 $(a_n)_{n=1}^{\infty}$ が準多項式で周期が N の約数であることと、ある $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ と次数 mN 以下の多項式 $f \in \mathbb{R}[X]$ について $\sum_{n=1}^{\infty} a_n X^n = \frac{f(X)}{(1-X^N)^m}$ と書けることは同値なので (例えば [7] の Section 4.4 を参照のこと)、 V_{Cu} の点から始めた配位数列は準多項式でないことが従う。定理 1 の証明の鍵となるのは次の補題である。

補題 2 CuO の分子構造のグラフ (V, E) と $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ について、 $(0, 0, 0) \in V_{\text{O}}$ からグラフ距離 $4n$ 以下の V_{O} の点の配置は

$$\begin{aligned} & [-2n, 2n] \times [-n, n] \times [-n, n] \\ & \cup \bigcup_{k=0}^{n-1} \left([-2k, 2k+1] \times \{\pm(2n-k)\} \times [-k, k] \right. \\ & \quad \left. \cup [-2k-1, 2k] \times [-k, k] \times \{\pm(2n-k)\} \right) \end{aligned}$$

と \mathbb{Z}^3 の共通部分で、グラフ距離 $4n+2$ 以下の V_{O} の点の配置は

$$\begin{aligned} & [-2n-1, 2n+1] \times [-n, n] \times [-n, n] \\ & \cup \bigcup_{k=0}^n \left([-2k, 2k+1] \times \{\pm(2n-k+1)\} \times [-k, k] \right. \\ & \quad \left. \cup [-2k-1, 2k] \times [-k, k] \times \{\pm(2n-k+1)\} \right) \end{aligned}$$

と \mathbb{Z}^3 の共通部分である。また、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \in V_{\text{Cu}}$ からグラフ距離 $4n+1$ 以下の V_{O} の点の配置は

$$\begin{aligned} & [-2n, 2n+1] \times [-n, n+1] \times [-n, n] \\ & \cup \bigcup_{k=0}^{n-1} \left([-2k, 2k+1] \times \{-(2n-k), 2n-k+1\} \times [-k, k] \right. \\ & \quad \left. \cup [-2k-1, 2k+2] \times [-k, k+1] \times \{\pm(2n-k)\} \right) \end{aligned}$$

と \mathbb{Z}^3 の共通部分で、グラフ距離 $4n+3$ 以下の V_{O} の点の配置は

$$\begin{aligned} & [-2n-1, 2n+2] \times [-n, n+1] \times [-n, n] \\ & \cup \bigcup_{k=0}^n \left([-2k, 2k+1] \times \{-(2n-k+1), 2n-k+2\} \times [-k, k] \right. \\ & \quad \left. \cup [-2k-1, 2k+2] \times [-k, k+1] \times \{\pm(2n-k+1)\} \right) \end{aligned}$$

と \mathbb{Z}^3 の共通部分である。

この補題は n について帰納的に確かめることができる。さらに隣接する頂点を考えることで V_{Cu} の点の配置も決定できる。例えば、 $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ について $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \in V_{\text{Cu}}$ からグラフ距離 $2n$ 以下の V_{Cu} の

点の配置は

$$\begin{aligned} & [-n + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}] \times [-\frac{n+1}{2}, \frac{n+1}{2}] \times [-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}] \\ & \cup \bigcup_{k=0}^{n-1} [-k + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}] \times \{\pm(n - \frac{k}{2}) + \frac{1}{2}\} \times [-\frac{k}{2}, \frac{k}{2}] \\ & \cup \bigcup_{k=1}^{n-1} [-k + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}] \times [-\frac{k+1}{2}, \frac{k+1}{2}] \times \{\pm(n - \frac{k}{2})\} \end{aligned}$$

と V_{Cu} の共通部分であることが確かめられる。

ここで、頂点集合の分割 $V = V_O \cup V_{Cu}$ は次の補題の条件を満たすので、始点とそこからのグラフ距離の偶奇によって V_O か V_{Cu} のどちらか一方に属する頂点しか配位数列の勘定に入らないことに注意する。対応する種類の頂点の増分を数えることで定理 1 が得られる。

補題 3 連結グラフ (V, E) の頂点集合の交わりのない 2 つの部分集合への分割 $V = V_0 \cup V_1$ であって $E \subset V_0 \times V_1 \cup V_1 \times V_0$ となるものを考える。 $E_0 := \{(v, w) \in V_0 \times V_0 \mid v \text{ と } w \text{ のグラフ距離は } 2\}$ とおく。このとき、 $v \in V_0$ の点から始めた (V, E) の配位数列 $(s_n)_n$ に対し、 v から始めた (V_0, E_0) の配位数列は $(s_{2n})_n$ となる。

頂点集合の分割 $V = V_O \cup V_{Cu}$ からこの補題の要領で作られるグラフ (V_{Cu}, E_{Cu}) について、 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) + V_{Cu} \subset \mathbb{R}^3$ は格子となる。ここで本レターでは、格子とはユークリッド空間の離散部分群を意味することにする。さらに第 1 成分を $\frac{1}{\sqrt{2}}$ 倍することで、 E_{Cu} の辺の長さを全てユークリッド距離 1 にできる。 CuO の例は、このような状況でもなおグラフの配位数列が (準) 多項式になるとは限らないことを意味する。そこで次節では、さらに平行移動についての基本領域内に頂点が 1 つしかないような場合に配位数列の準多項式性を考えることにする。

3 格子から来る例

ユークリッド空間内の格子 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ について、特に断らなければ以下の記号を用いることにする。 $V_1 := \{v \in \Lambda \mid \|v\| = \min_{0 \neq w \in \Lambda} \|w\|\}$ とおく。グラフ (V, E) を、 $V := \Lambda$ 、 $E := \{(v+w, w) \mid v \in V_1, w \in \Lambda\}$ で定め、その配位数列を $(s_n)_n$ とおく。必要なら Λ を V_1 で生成される部分群に置き換えることで、 V_1 が Λ を (群として) 生成するものとしてよい。この条件は (V, E) が連結グラフであることと同値である。このようなグラフ (V, E) の配位数列を具体的な場合に調べる。[6] より $(s_n)_n$ は多項式型であることがわかっている。この s_n の候補として V_1 の凸包の Ehrhart 多項式の差分が挙げられる。

定義 4 凸多面体とは、ユークリッド空間のコンパクト部分集合 $Q \subset \mathbb{R}^d$ であって有限個の半空間の共通部分として表せるものとする。このとき、 Q の定義における半空間の境界と Q の共通部分として表せるコンパクト集合で、 Q の境界の相対位相について空でない開集合を含むものを Q の面ということにする。また、凸多面体 $Q \subset \mathbb{R}^d$ と非負実数 $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ について、 $tQ := \{tx \in \mathbb{R}^d \mid x \in Q\}$ とする。このとき、頂点が格子 Λ に含まれる凸多面体 $Q \subset \mathbb{R}^d$ の **Ehrhart 多項式** とは、 $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ についての関数 $\#(\Lambda \cap nQ)$ である。これは $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ の多項式となることが知られている [4]。

以下では、格子 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ に対し、 V_1 の凸包を P とおき、 P の Ehrhart 多項式を p_n とおく。なお記法として、特に断らなければ Λ に装飾記号をつけて表される格子に対し、 $V_1, (V, E), s_n, P, p_n$ と同様の構成で得られるものは Λ と同じ装飾をつけることで表すものとする。以下、数列 $(a_n)_{n=0}^\infty$ について、 $\Delta a_n := a_n - a_{n-1}$ とおく。便宜上 $a_{-1} := 0$ とする。

例 5 体心立方格子 $\Lambda := \mathbb{Z}^3 + (\frac{1}{2} + \mathbb{Z})^3 \subset \mathbb{R}^3$ について、 $s_n = \Delta p_n$ であることが確かめられる。

この例と同じことが面心立方格子に対しても確かめられる。これは次の例の A_3 型の場合に相当する。

例 6 (Conway–Sloane [2]) $V_1 \subset \mathbb{R}^d$ を階数 d の ADE 型の単純ルート系とし、それが張る格子を Λ とする。 V_1 には Weyl 群が推移的に作用することに注意する。このとき、 $s_n = \Delta p_n$ となる (特に s_n は $n \geq 1$ で多項式となる)。さらにもし V_1 が E_7 型でも E_8 型でもない場合は、 $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ について $\Lambda \cap [t]P = \Lambda \cap tP$ となる (ここで $[t]$ は t 以下の最大の整数とする)。

以上の例に対し、本節では格子から得られるグラフの配位数列と Ehrhart 多項式の差分は典型的には一致しないことをいくつかの具体例を通じて示す。なお、定義より $\sum_{k=0}^n s_k \leq p_n$ であるので、これが全ての n で等号になることと $(s_n)_n = (\Delta p_n)_n$ は同値であることに注意しておく。まず、 ADE 型に分解できる半単純ルート格子の場合を考える。

補題 7 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, $\Lambda' \subset \mathbb{R}^{d'}$ を格子であってそれぞれに対応するグラフ (V, E) , (V', E') が連結なものとする。また、各 $v \in V_1$, $v' \in V'_1$ に対し $\|v\| = \|v'\|$ とする。このとき $\tilde{\Lambda} := \Lambda \oplus \Lambda'$ に対応するグラフ (\tilde{V}, \tilde{E}) の配位数列 $(\tilde{s}_n)_n$ について、次が成り立つ。

- (1) もし $(s_n)_n$ と $(s'_n)_n$ が $n \geq 1$ で多項式ならば、 $(\tilde{s}_n)_n$ も $n \geq 1$ で多項式である。
- (2) $\tilde{V}_1 = V_1 \times \{0\} \cup \{0\} \times V'_1$ の凸包 \tilde{P} の Ehrhart 多項式を \tilde{p}_n とおく。もし $(\tilde{s}_n)_n = (\Delta \tilde{p}_n)_n$ ならば、 $(s_n)_n = (\Delta p_n)_n$ かつ $(s'_n)_n = (\Delta p'_n)_n$ である。
- (3) 任意の $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ について $\Lambda \cap [t]P = \Lambda \cap tP$ が成り立つ場合には、(2) の逆も成り立つ。

証明 定義より $\tilde{s}_n = \sum_{k=0}^n s_k s'_{n-k}$ である。一般に実数列 $(a_n)_{n=0}^\infty$ が $n \geq 1$ で多項式であることと、ある $m \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ と次数 m 以下の多項式 $f \in \mathbb{R}[X]$ について形式的冪級数として $\sum_{n=0}^\infty a_n X^n = \frac{f(X)}{(1-X)^m}$ となることは同値なので (1) が従う。次に (2) を考える。もし $(\tilde{s}_n)_n = (\Delta \tilde{p}_n)_n$ とすると、各 n について $(\Lambda \times \{0\}) \cap n\tilde{P}$ の元は高々 n 個の \tilde{V}_1 の元の和で表せるので、高々 n 個の $V_1 \times \{0\}$ の元の和でも表せる。よって $s_n = \Delta p_n$ が従い、同様に $s'_n = \Delta p'_n$ となる。一方、(3) の仮定の下では

$$\begin{aligned} n\tilde{P} \cap \tilde{\Lambda} &= \bigcup_{t \in [0, n]} (\Lambda \cap tP) \times (\Lambda' \cap (n-t)P') \\ &= \bigcup_{t \in [0, n]} (\Lambda \cap [t]P) \times (\Lambda' \cap (n-[t])P') \end{aligned}$$

なので、 $\Delta \tilde{p}_n = \sum_{k=0}^n \Delta p_k \Delta p'_{n-k}$ となる。これより (3) が従う。 ■

例 6 ([2]) と補題の (1) より Λ が ADE 型のルート格子の直和なら $(s_n)_n$ は多項式となる。さらに補題の (3) より、 E_7 型と E_8 型の成分が合計 1 つ以下の場合は $(s_n)_n = (\Delta p_n)_n$ となる。しかしそうでない場合はこの一致は期待できないことを次でみる。 E_8 , E_7 のルート格子の表示をそれぞれ $\Lambda_{E_8} := \{(x_k)_k \in \mathbb{Z}^8 \cup (\frac{1}{2} + \mathbb{Z})^8 \mid \sum_{k=1}^8 x_k \in 2\mathbb{Z}\} \subset \mathbb{R}^8$, $\Lambda_{E_7} := \{(x_k)_k \in \Lambda_{E_8} \mid x_1 = x_2\}$ としておく。

定理 8 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ が半単純ルート系で各ベクトルの長さが等しいものの格子のとき、 s_n は $n \geq 1$ で多項式である。さらに Λ が E_7 と E_8 の成分を合計で 1 つ以下しか含まないことと $s_n = \Delta p_n$ は同値である。

証明 上の議論と先の補題の (2) より、 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ が $\Lambda_{E_7}^{\oplus 2}$, $\Lambda_{E_7} \oplus \Lambda_{E_8}$, または $\Lambda_{E_8}^{\oplus 2}$ のとき、ある n で $s_n \neq \Delta p_n$ となることを示せばよい。 $V_{E_8,1}$ の元は $(\pm \frac{1}{2}, \dots, \pm \frac{1}{2})$ であって負の符号が偶数個であるものと $(\pm 1, \pm 1, 0, \dots, 0)$ の成分の並び替えである。

$$\begin{aligned} v &:= (2, 2, -1, 1, 1, 1, 1, 1) \\ &= \frac{1}{2}(1, 1, 0, \dots, 0) + \frac{1}{2}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}) + \sum_{k=4}^8 \frac{1}{2}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}) \\ &\in \Lambda_{E_7} \cap \frac{7}{2}P_{E_7} \end{aligned}$$

とおくと、 v と $V_{E8,1}$ の各元の内積は 4 以下だが v 自身との内積は 14 なので、 v を 3 つ以下の $V_{E8,1}$ の元の和で表すことはできない。よって $(v, v) \in \Lambda \cap 7P$ は 7 つ以下の V_1 の元の和では書き表せないので、 $\sum_{k=0}^7 s_k < p_7$ が従う。 ■

なお、CuO をはじめとするいくつかの分子構造からくるグラフや、以上で出てきた格子からくるグラフの多くは次の状況を満たしていることに注意する。

条件 ユークリッド空間 \mathbb{R}^d に埋め込まれたグラフ (V, E) の各 $v \in V$ に対し、 \mathbb{R}^d の等長アフィン変換で v を固定し (V, E) を保つものがなす群が $\{w \in V \mid (v, w) \in E\}$ に推移的に作用する。

格子 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ から来る連結グラフの場合は、 $\text{Aut}(\Lambda) := \{ \text{内積を保つ } \Lambda \text{ の自己同型} \}$ が V_1 に推移的に作用することと同値である。そのような他の例としては Leech 格子 $\Lambda_{24} \subset \mathbb{R}^{24}$ が挙げられる。これについても $(s_n)_n$ と $(\Delta p_n)_n$ は一致しないことが以下よりわかる。 Λ_{24} の基底の具体的な表示は [3] の Figure 4.12 を用いる。さらにこの表示の下で $\Lambda_{16} := \{(x_k)_k \in \Lambda_{24} \mid x_{17} = x_{18} = \dots = x_{24} = 0\}$ は Barnes–Wall 格子と呼ばれ、これも上の条件を満たすことが知られている [5]。Barnes–Wall 格子のこの表示については [3] の Figure 6.2 を参照されたい。

補題 9 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ を Leech 格子 Λ_{24} または Barnes–Wall 格子 Λ_{16} としたとき、 $(s_n)_n \neq (\Delta p_n)_n$ 。

証明 $V_{24,1}$ の元は $\frac{1}{\sqrt{8}}(-3, 1, \dots, 1)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$ およびそれらの符号と成分の位置を適切に変えたものと、 $(\pm\sqrt{2}, \pm\sqrt{2}, 0, \dots, 0)$ の成分を並び替えたものである。 $n = 4$ において、 $4P$ の $x_9 = 4\sqrt{2}$ の面は $v := \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 8, 0, \dots, 0) \in \Lambda$ を含む。一方、4 つの元 $v_1, \dots, v_4 \in V_1$ について $\sum_{k=1}^4 v_k$ の第 9 成分が $4\sqrt{2}$ なら、各 v_k の第 9 成分は $\sqrt{2}$ でなければならず、特に v_k は $(\pm\sqrt{2}, \pm\sqrt{2}, 0, \dots, 0)$ の各成分を並び替えた形をしている。しかし、このような形の v_k については $\sum_{k=1}^4 v_k \neq v$ となるので、 $\sum_{k=0}^4 s_k < p_4$ が従う。 ■

最後に、条件を満たさない状況を考える。以下の例では、グラフ距離 n 以下の点の配置が $\Lambda \cap (nP$ の境界) を含むが、 $\Lambda \cap (nP$ の内部) を含まないという状況にあることに注意する。

定理 10 $\Lambda := \bigcup_{k=0}^2 ((\frac{k}{3}, \dots, \frac{k}{3}) + \mathbb{Z}^9) \subset \mathbb{R}^9$ とする。このとき、 s_n は Δp_n と異なる多項式となる。

ユークリッド空間の部分集合 $F \subset \mathbb{R}^d$ について、 $\tilde{F} := \{tx \mid x \in F, t \in \mathbb{R}_{\geq 0}\}$ とおく。

証明 $e_0 := (\frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{3}), e_k := (0, \dots, 0, \overset{k}{1}, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^9$ とおくと、 $V_1 = \{\pm e_k, \pm e_0\}$ である。 $\Gamma := \mathfrak{S}_9 \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \subset \Lambda$ を各成分の入れ替えと -1 のスカラー倍で生成される群とすると、 Γ の適切な元の作用で、 P の面は $\{e_1, \dots, e_6, -e_7, -e_8, -e_9, e_0\}$ の凸包 F_6 か $\{e_1, \dots, e_5, -e_6, -e_7, -e_8, -e_9\}$ の凸包 F_5 にできる (ここで、 F_6 や F_5 はそれぞれ P と $x_1 + \dots + x_6 - x_7 - x_8 - x_9 = 1$ 、および $x_1 + \dots + x_5 - x_6 - \dots - x_9 = 1$ で定まる平面との共通部分であることに注意する)。実際、任意の $(x_k)_k \in \mathbb{R}^9$ は Γ の作用で $x_1 \geq \dots \geq x_9$ かつ $x_5 \geq 0$ となるものに移せるが、もし $x_7 \leq 0$ となれば x_6 の正負によって $(x_k)_k \in \tilde{F}_5 \cup \tilde{F}_6$ となり、もし $x_7 \geq 0$ とすると、 $(x_k)_k = 3x_7 e_0 + \sum_{k=1}^6 (x_k - x_7) e_k - \sum_{k=8}^9 (x_7 - x_k) e_k \in \tilde{F}_6$ となる。各 $1 \leq k \leq 6$ に対し F'_k を $S_k := \{e_0, e_1, \dots, e_6, -e_7, -e_8, -e_9\} \setminus \{e_k\}$ の凸包とすると、 $F_6 = \bigcup_{k=1}^6 F'_k$ である。 S_k は Λ の基底をなすので、各 \tilde{F}'_k 内の点による s_n や Δp_n への寄与は一致する。次に \tilde{F}_5 について考える。 $(x_k)_k \in \Lambda$ であって $x_1, \dots, x_5 \geq 0 \geq x_6, \dots, x_9$ なものの原点からのグラフ距離 d は次のようになる。

- $(x_k)_k \in \mathbb{Z}^9$ なら $d = \sum_{k=1}^5 x_k - \sum_{k=6}^9 x_k$ である。
- $(x_k)_k \in e_0 + \mathbb{Z}^9$ なら、 $(x_k)_k - e_0, (x_k)_k + 2e_0 \in \tilde{F}_5$ であることに注意し、 $d = 1 + \sum_{k=1}^5 (x_k - \frac{1}{3}) - \sum_{k=6}^9 (x_k - \frac{1}{3}) = \frac{2}{3} + \sum_{k=1}^5 x_k - \sum_{k=6}^9 x_k$ である。

- $(x_k)_k \in 2e_0 + \mathbb{Z}^9$ なら、 $(x_k)_k - 2e_0, (x_k)_k + e_0 \in \tilde{F}_5$ であることに注意し、 $d = 1 + \sum_{k=1}^5 (x_k + \frac{1}{3}) - \sum_{k=6}^9 (x_k + \frac{1}{3}) = 2 + \sum_{k=1}^5 (x_k - \frac{2}{3}) - \sum_{k=6}^9 (x_k - \frac{2}{3}) = \frac{4}{3} + \sum_{k=1}^5 x_k - \sum_{k=6}^9 x_k$ である。なお、この形の点は \tilde{F}_5 の境界には含まれないことに注意。

以上から、 $\Delta p_n - s_n$ は $0 \leq n \leq 4$ では 0 で、 $n \geq 5$ では $\#\{\Gamma$ の対称性で F_5 に移る P の面 $\} \times \#\{(x_k)_k \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^9 \mid \sum_{k=1}^9 x_k = n - 5\} = \frac{2 \cdot 9!}{5! \cdot 4!} \cdot \frac{(n+3)(n+2) \cdots (n-4)}{8!}$ となるが、この多項式は $0 \leq n \leq 4$ で 0 になる。 ■

4 終わりに

本レターでは Leech 格子や Barnes–Wall 格子の配位数列が多項式か否かを決定することはできず、今後の課題として残されている。より低次元の場合として、12 次元の Coxeter–Todd 格子の配位数列も調べる余地がある。上に挙げた条件はグラフの配位の形状をよくすると考えられるが、配位数列にどのような寄与をするかも問題として考えられる。この条件を満たさない格子としては他に $\Lambda := \{(x_k)_k \in \bigcup_{l=0}^2 ((\frac{l}{3}, \dots, \frac{l}{3}) + \mathbb{Z}^{18}) \mid \sum_{k=1}^{18} x_k \in 2\mathbb{Z}\} \subset \mathbb{R}^{18}$ などが挙げられる。また、CuO の例においては配位数列の母関数は、例外項の s_2 を適切に修正すると若月氏 [8] により指摘されたよい対称性をもっている。この現象に対するよい説明を与えることも興味深い課題である。

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氏に深く感謝いたします。また、定期的な会合を通じて課題に関する様々な議論や助言を下された東京大学数理科学研究科の金城翼氏、中村勇哉氏、間瀬崇史氏、ならびにコメントを下された東京大学数理科学研究科の佐々田慎子氏、志甫淳氏に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] S. Åsbrink and L. J. Norrby, *A refinement of the crystal structure of copper(II) oxide with a discussion of some exceptional e.s.d.'s*. Acta Crystallographica Section B **26** (1970), no. 1, 8–15.
- [2] J. H. Conway and N. J. A. Sloane, *Low-dimensional lattices. VII. Coordination sequences*. Proc. R. Soc. London A **453** (1997), 2369–2389.
- [3] J. H. Conway and N. J. A. Sloane, *Sphere packings, lattices and groups*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften vol. 290, Springer New York, 2013.
- [4] E. Ehrhart, *Sur les polyèdres rationnels homothétiques à n dimensions*, C. R. Acad. Sci. Paris, **254** (1962), 616–618.
- [5] R. L. Griess Jr, *Pieces of 2^d : existence and uniqueness for Barnes–Wall and Ypsilanti lattices*. Adv. Math. **196** (2005), no. 1, 147–192.
- [6] Y. Nakamura, R. Sakamoto, T. Mase, and J. Nakagawa, *Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type*. Acta Crystallographica Section A **77** (2021), no. 2, 138–148.
- [7] R. P. Stanley, *Enumerative combinatorics, volume 1*. Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, 2011.
- [8] 若月駿, 結晶の *growth* について. 社会数理実践研究レター (2018).