

結晶を
不定方程式
で解く

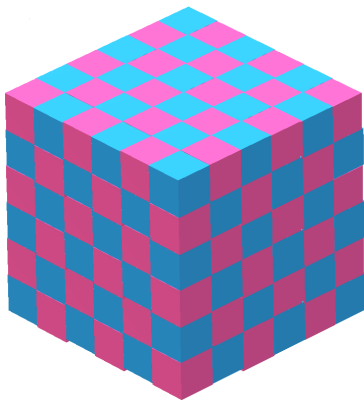
Tomohiro Yamada

Aug 4, 2018 / Aug 10, 2018 revised

結晶とは

結晶 = 同じパターンを繰り返したる構造

Figure: 岩塩構造（立方体からなる結晶）



2次元の場合

2次元の結晶＝平面上への敷詰め

Figure: 正3角形敷き詰め

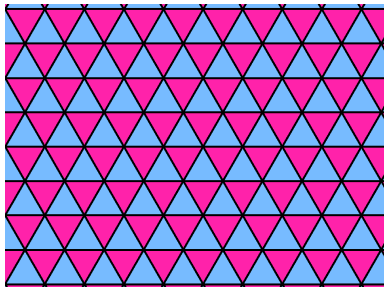
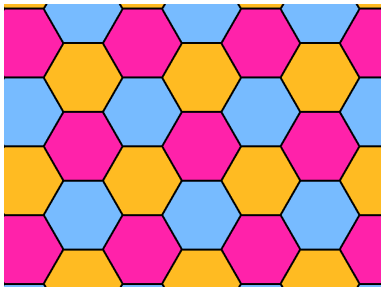


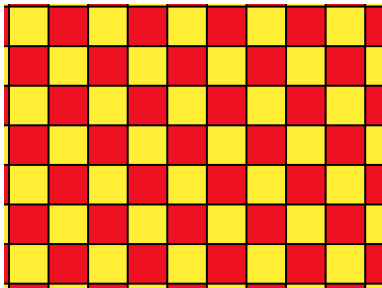
Figure: 正6角形敷き詰め



正 3 角形・正 6 角形敷き詰めの場合

- $\pi/3$ の回転
- $(1, 0), (1/2, \sqrt{3}/2)$ の平行移動
- 6 つの対称軸に関する鏡像

Figure: 正方形敷き詰め



正方形敷き詰めの場合

- $\pi/2$ の回転
- $(1, 0), (0, 1)$ の平行移動
- 4つの対称軸に関する鏡像

平面上の結晶構造

Figure: 正3角形敷詰めの基本構造

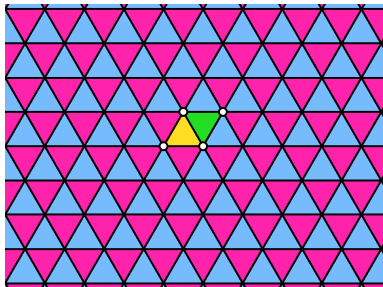
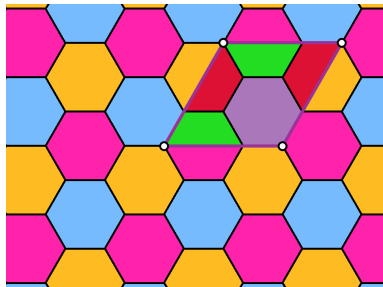


Figure: 正6角形敷詰めの基本構造



- 2つのベクトル \mathbf{u}, \mathbf{v} の平行移動で不変
- $0, \mathbf{u}, \mathbf{u} + \mathbf{v}, \mathbf{v}$ を頂点とする平行四辺形（基本構造）の繰り返し

3次元の結晶の場合は？

立方体敷き詰めの場合

- $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$ の平行移動
- どのような回転・鏡像で不変かは自明ではない！

3次元上の結晶構造

- 3つのベクトル $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ の平行移動で不変
- $0, \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ で定まる平行六面体（基本構造）の繰り返し

変換させても元の結晶と完全に重なるような変換全体は群となる
点群…結晶群の中で、回転と鏡像のみからなる変換からなる部分群

結晶群の決定

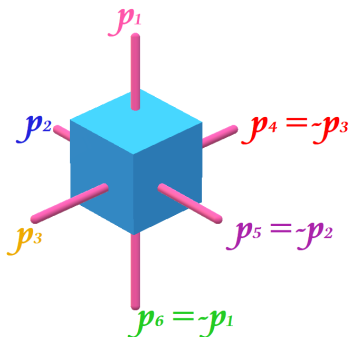
- 2次元の結晶群は壁紙群・文様群と呼ばれ、全部で 17 種類
- 17 種類の壁紙群すべてに対応するパターンが日本の伝統文様で使用されている
- 3次元結晶群は 230 種類
- 3次元点群は 32 種類
- 3次元点群の同型類は 18 種類で、鏡像を含まない（回転のみからなる）ものは 11 種類

立方体の繰り返しの場合

回転軸のパターンは 3 種類

一般に、回転軸と基本構造の平行六面体は 2 つの交点で交わり、その 2 つの交点はその回転によって動かない（回転極と呼ぶ）

Type 1. 回転軸 $(-1, 0, 0) - (1, 0, 0)$ 型



- 回転軸 3 本
- 回転極 6 個 (面に対応)
- 回転角 $\frac{\pi}{2}$ (よって各回転軸ごとの回転の個数は 4 個)

Figure: $s_{(1)}^f$: $\pm p_1$ 軸による回転

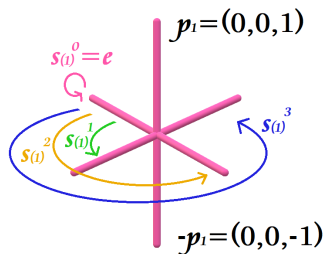
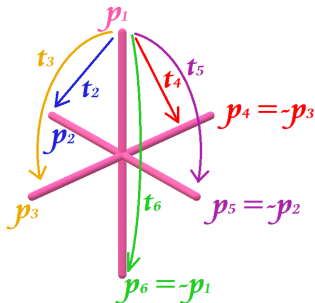


Figure: t_j : p_1 を p_j に移す



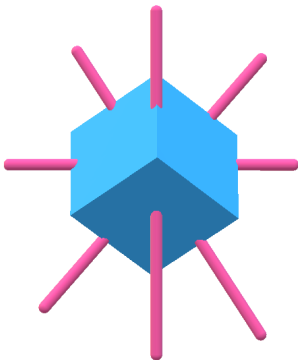
回転極を p_1, p_2, \dots, p_6 とおく

任意の回転は p_1 を p_j ($j = 1, 2, \dots, 6$) に (つまり、 p_1 に対応する面を p_j に対応する面に) 移し、その後 $p_j, -p_j$ を通る回転軸によって回転させるという形であらわされる

よって回転の総数は $6 \times 4 = 24$ 個

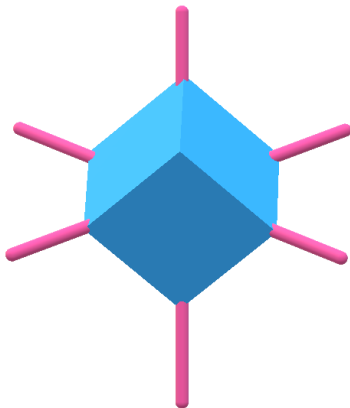
一方、各回転軸において、自明なもの以外の回転は 3 つずつあるからこの型の回転の総数は $3 \times 3 = 9$ 個

Type 2. 回転軸 $(-1, -1, 0) - (1, 1, 0)$ 型



- 回転軸 6 本、回転極 12 個 (辺に対応)
- 回転角 π 、回転軸ごとの回転の個数 2 個
- (自明でない) 回転の総数 $6 \times 1 = 6$

Type 3. 回転軸 $(-1, -1, -1) - (1, 1, 1)$ 型



- 回転軸 4 本、回転極 8 個（頂点に対応）
- 回転角 $\frac{2\pi}{3}$ 、回転軸ごとの回転の個数 3 個
- （自明でない）回転の総数 $4 \times 2 = 8$

いずれの場合も、回転極の個数 × 回転軸ごとの回転の個数は 24 で一定
さらに、それぞれの型の回転の個数と、恒等変換をあわせると、

$$9 + 6 + 8 + 1 = 24$$

となって、回転の総数に一致する！

なお結晶の（最小の正の）回転角は $\pi, 2\pi/3, \pi/2, \pi/3$ （対応する回転の個数は 2, 3, 4, 6）しかない。

実際、基本ベクトルの一つを $\mathbf{v}_1 = (1, 0)$ とすると $\mathbf{v}_2 = (\cos \theta, \sin \theta)$ 一方 $-\mathbf{v}_1 = (-1, 0)$ を θ 逆回転させた $\mathbf{v}_3 = (-\cos \theta, \sin \theta)$ も含まれる。よって $\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_3 = (2 \cos \theta, 0)$ も含まれる。しかし $(1, 0)$ が基本ベクトルの一つだから $2 \cos \theta$ は整数。よって $\cos \theta$ は $1/2$ の整数倍でないといけない。

上の議論を一般化すると、3次元結晶の回転のなす群を決定可能
回転の型を $C_i (i = 0, 1, 2, \dots, m)$ であらわし (C_0 は恒等変換の型とする)、
それぞれの型における回転の極を p_1, p_2, \dots, p_{r_i} 、回転角を $2\pi/n_i$ とおく

各回転軸 z_j に対して2つの回転極 $p_j, -p_j$ が対応

回転軸の個数は $r_i/2$

便宜上 $p_{r_i+1-j} = -p_j$ とすると、 $z_1, z_2, \dots, z_{r_i/2}$ がすべての回転軸をあらわす

回転軸 z_j をもつ回転は（自明なものも含めて）

$e = s_{(j)}^0, s_{(j)}^1, s_{(j)}^2, \dots, s_{(j)}^{n_i-1}$ の n_i 個

回転極 p_1 を p_j に移す変換を一つ取り、それを t_j とおく

すべての回転は $s_{(j)}^f t_j (1 \leq j \leq r_i, 0 \leq f \leq n_i - 1)$ の形であらわされ、
よって回転の総数は

$$N = r_i n_i$$

で与えられ、これは回転軸の型によらずに一定

一方、固有の回転は各回転軸ごとに $s_{(j)}, s_{(j)}^2, \dots, s_{(j)}^{n_i-1}$ の $n_i - 1$ 個
よって、 C_i に属する回転の総数は $s_{(j)}^f$ ($1 \leq f \leq n_i - 1, 1 \leq j \leq r_i/2$) の
 $r_i(n_i - 1)/2$ 個

これらを全部合わせると回転の総数になるので

$$N = 1 + \sum_{i=1}^m \frac{r_i(n_i - 1)}{2}$$

が成り立つ。

$N = r_i n_i$ なので $r_i(n_i - 1)/2 = N(1 - 1/n_i)/2$ が成り立つから

$$N - 1 = \sum_i \frac{r_i(n_i - 1)}{2} = \frac{N}{2} \sum_i \left(1 - \frac{1}{n_i}\right),$$

両辺を $N/2$ で割って

$$2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) = \sum_{i=1}^m \left(1 - \frac{1}{n_i}\right)$$

が得られる。

こうして 3次元結晶の回転のなす群の分類は、不定方程式を解くことに帰着される！

$m = 2$ のとき

$$\frac{2}{N} = \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}$$

より $n_1 = n_2 = N \in \{2, 3, 4, 6\}$.

$m = 3$ のとき

$$1 + \frac{2}{N} = \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3}.$$

$n_1 \leq n_2 \leq n_3$ とすると $\frac{3}{n_1} > 1$ より $n_1 = 2$ でなければならない。

$$\frac{2}{n_2} \geq \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} = \frac{1}{2} + \frac{2}{N} > \frac{1}{2}$$

より $n_2 = 2, 3$ のどちらか。

$n_2 = 2$ のとき

$$\frac{2}{N} = \frac{1}{n_3}$$

より $N = 2n_3$ かつ $n_3 \in \{2, 3, 4, 6\}$ がわかる。

$n_2 = 3$ のとき

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{n_3} > 1$$

より $n_3 < 6$ なので $n_3 = 3, 4$ のどちらか。

結論

これらから、結晶の回轉變換のなす群は（回轉變換をもたない場合を除いて） $(2, 2)$, $(3, 3)$, $(4, 4)$, $(6, 6)$, $(2, 2, 2)$, $(2, 2, 3)$, $(2, 2, 4)$, $(2, 2, 6)$, $(2, 3, 3)$, $(2, 3, 4)$ のいずれかのパターンに分類される。

点群の決定

- 反転写像 $-1 : (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$ を含む点群は (回転のみからなる) 11 種類の群のいずれかと、 (± 1) の直積
- 反転を含まず、鏡像を含む点群は、群としては (回転のみからなる) 11 種類の群と $\psi(s) = (\det s)s$ により同型

ここから、18 種類の同型類と、32 種類の点群が決定される

3次元結晶群

230個あり、219種類の同型類からなる（2つの結晶群を含む同型類が11個ある）

- 結晶群の分類から、結晶に対する変換は分類可能だが、結晶構造そのものが分類できたわけではない
- 2次元、凸多角形による周期構造の分類は2017年によく解決 (Rao, 2017, preprint)
- 周期的でない（平行移動によって不変ではない）構造については未解決！

T. Janssen, *Crystallographic groups*, North-Holland, 1973.

W. Opechowski, *Crystallographic and metacrystallographic groups*, North-Holland, 1986.

(以下、講演後追記)

Teruhisa Sugimoto, Convex Polygons for Aperiodic Tiling, *Res. Comm. Math. Math. Sci.*, **8** (2017), 69–79.

M. Rao, Exhaustive search of convex pentagons which tile the plane, <https://arxiv.org/abs/1708.00274>.

MANY THANKS
FOR YOUR ATTENTION



To be continued...?

Tomohiro Yamada
Center for Japanese language and culture
Osaka University
562-8558
8-1-1, Aomatanihigashi, Minoo, Osaka
Japan
e-mail: tyamada1093@gmail.com