

準結晶にからむ二三の数理

小川 泰 (筑波大学物理工学系)

準結晶[1]の研究から出発した形についての研究の中から,他の分野の方にも興味を持って頂けそうな三つの話題を選んだ.これらは互いに独立な話題と考えていただいてよい.準結晶の問題としての細部にはあまりこだわらないことにする.

- I. 準結晶の「いわゆる射影法模型」
— 高次元結晶格子の射影,「占い師の水晶玉」,設計図
- II. 正多角形が一般にもつ自己相似性
— 対角線,拡張黄金比,拡張Fibonacci数列
- III. 閉曲面の形を表現する基底としての点群調和関数
— 直交多項式,行列表現,確率過程

I. 準結晶の「いわゆる射影法模型」[2] — 高次元結晶格子の射影,「占い師の水晶玉」,設計図 —

文字の変換則 $L \rightarrow LS, S \rightarrow L$ によって作られる, 2種類の文字L, Sによる準周期文字列を考える.

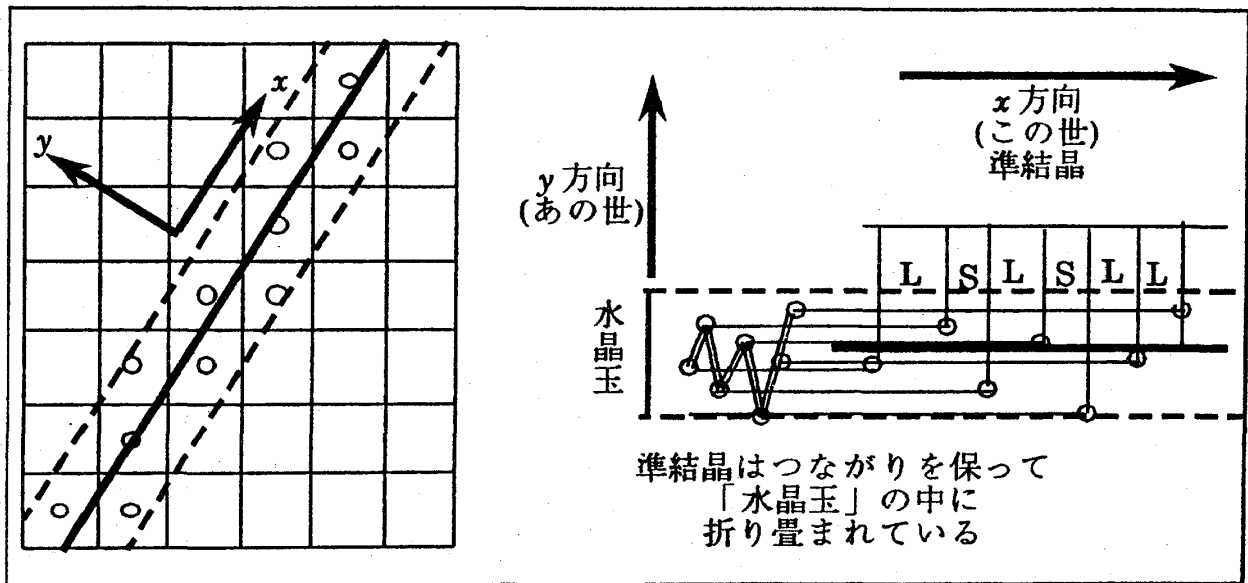
$S \rightarrow L \rightarrow LS \rightarrow LSL \rightarrow LSLLS \rightarrow LSLLSLSL \rightarrow LSLLSLSLLSLSL \rightarrow LSLLSLSLLSLSLLSLSL \rightarrow LSLLSLSLLSLSLLSLSLLSLSL \rightarrow \dots$

という意味である.文字列の最初の部分は固定してゆき,第N世代+第(N-1)世代=第(N+1)世代 となっている.この変換則で作った文字列は自己相似性をもっている.文字の変換則を間隔の変換則として読み換えると,文字列は2種類の間隔L, Sをもった準周期な1次元点列,あるいは,間隔列に対応する.その間隔比が $L/S = \tau = (\sqrt{5}+1)/2 = 1.618$ (黄金比) のとき 自己相似性のある点配置となっている.

L	S	L	L	S	L	S	L	L	S	L	L	S	
L	S	L	L	S	L	S	L	S	L	L	S	L	
L		S	L			L		L		S		L	
L				S				L				L	
L						S						L	S

第1図 変換法による1次元Fibonacci格子のもつ自己相似性.

この「変換法」で求めたのと全く同じ点列を 2次元正方格子からの射影によっても求めることができる。

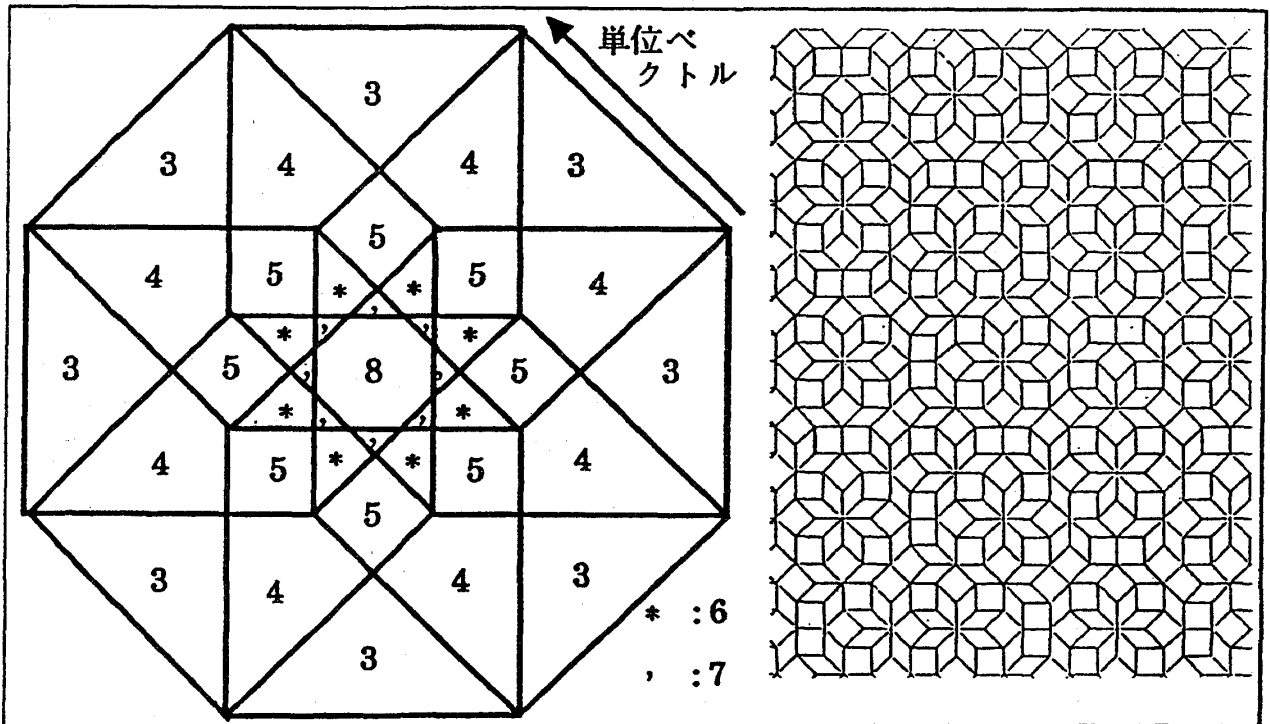


第2図 「いわゆる射影法」と「水晶玉」の説明

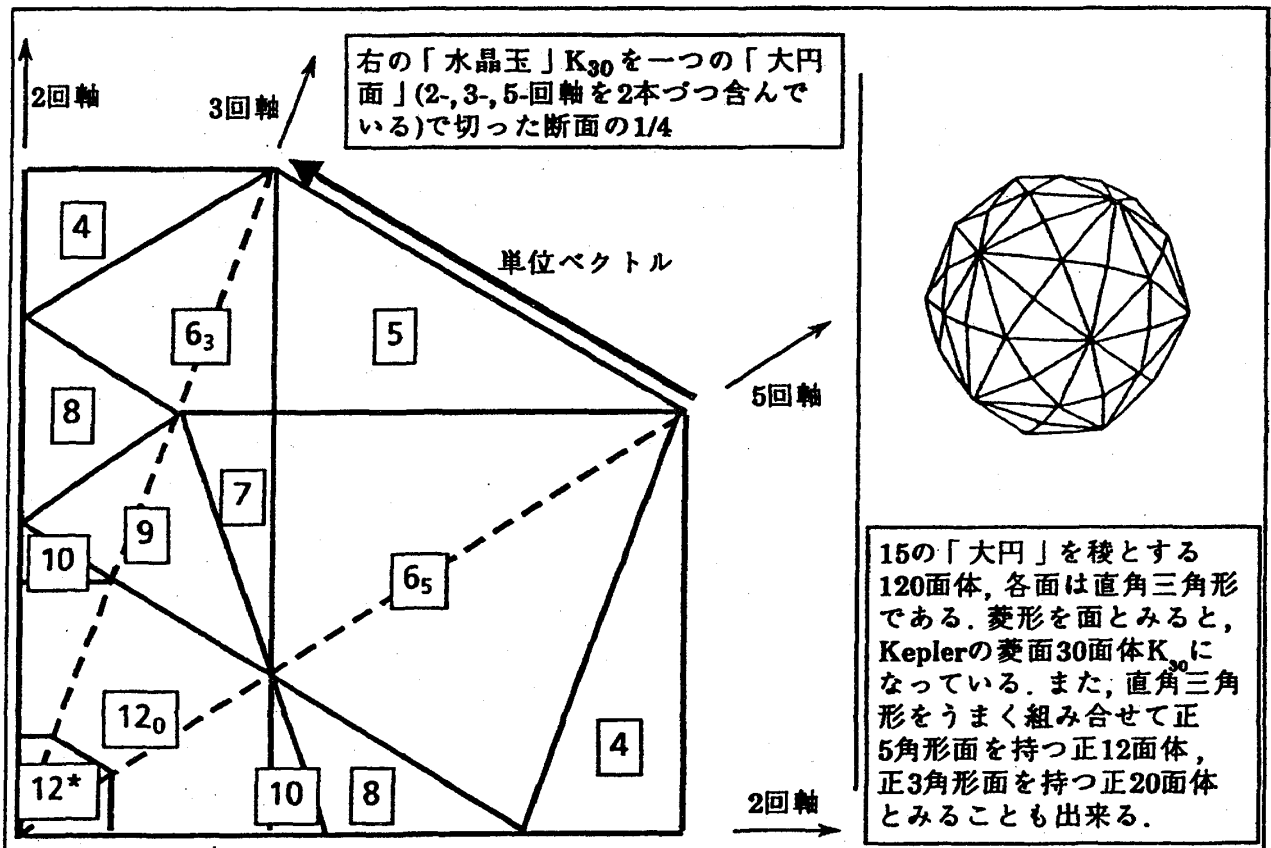
2次元(一般には D 次元超)立方格子を用意し, Voronoi分割する. 適当な直線を引き(d 次元超平面を作り), それを通るVoronoi領域を選別する. それらの中心である格子点から直線(超平面)への射影が一般格子である. 直線の勾配が有理数のときは周期的な通常の結晶格子, 無理数のときが準結晶格子である.

以上はずっと以前から知られていることであるが, この方法で求めた「いわゆる射影模型」の性質を読み取るには, 次の「水晶玉」の方法が便利である.

D 次元から d 次元(「この世」)へ射影したときに捨てた($D-d$ 次元空間「あの世」)を考えると, 選別された点からこの空間への射影は, ある領域に落ちている. また逆に, この領域に射影をもつ点のすべてを拾っている. この領域の形は, 一般には, D 次元格子のVoronoi領域が「あの世」に写す影である. この領域を「占い師」の「水晶玉」と名付けよう. 「この世」の準格子は, すべてのつながりを保ちながら折り畳まれ, この「水晶玉」の中に押し込められている. これを上手に覗きこんでやれば, 準結晶の構造の特徴が読み取れるはずである. 「この世」と「あの世」という見方に移ったとたんに, D 次元のことは忘れ, 「この世」と「あの世」の間の変換とみなしてよいことになる. $D=4, d=D-d=2$ に相当する2次元8回対称準格子を第3図に, $D=6, d=D-d=3$ に相当する3次元準格子の場合の「水晶玉」を第4図に掲げておく. ある種の自己相似性があること, その他いろいろな性質を読み取ることができる. 1次元Fibonacci格子や, 2次元Penrose tiling, 第3図の2次元8方準格子などの場合はいずれも「変換法」による模型と「いわゆる射影法」模型が一致しているが, すべての場合にそうであるというわけではなく, 肝心の3次元の場合には一致していない. もっと厳密にいうと, 同じ向きの同種単位胞が決して隣接しないという意味で一様な「いわゆる射影法」模型は, 理想模型の一つには違いない. また, 自由度をもつ変換法模型の特



第3図 2次元8回対称準格子の場合の「水晶玉」の形 【左】「水晶玉」の形は辺長が1(=格子定数)の正八角形である。各領域に記入されている整数は、「あの世」への射影がその領域に落ちる点が、「この世」でもつ配位数を示す。【右】実空間のタイル貼り。



第4図 【左】3次元の「いわゆる射影法模型」に対応する「水晶玉」Kepler 30面体 K_{30}

【右】その断面(その第1象限に対応する4分の1)

2本の破線にそってそれぞれ折り曲げ、三角錐状に閉じ合わせたものは、底面が黄金菱形の4分の1に相当する直角三角形となり、「水晶玉」全体の120分の1に相当している。

例に当たる。しかし、変換法模型では、自己相似的な階層性をもつ対称性という趣向も可能なのに、「いわゆる射影法」模型の局所対称性はあまりよくない。「いわゆる射影法」模型以外の模型では、いわば「水晶玉」の外に飛び出る点も、「この世」で許されている。

この見方によって、6次元という高次元空間や、そこから3次元への射影といった3次元落とす射影について想像を逞しくせずとも、「あの世」の3次元と「この世」の3次元との間の変換とみなすことが可能になっている。さらに、もはや「あの世」といわずとも、この3次元空間に「水晶玉」をおき、そのなかの設計図を読み取りながら、準結晶を組み立てることができる。また、「あの世」「この世」「水晶玉」などというオカルト的な表現はやめて、メルヘン風に、次のようにも表現できる。6次元の竜宮から貰ってきた玉手箱には、準結晶がつながりを保ったまま(三浦折りで)畳み込まれており、煙が漏れるといけないから開けて取り出すのではなく、注意深く覗きこんでやれば、準結晶の設計図としてだけでなく、性質を見抜くのに充分に役立つ。

II. 正多角形が一般にもつ自己相似性

— 対角線, 拡張黄金比, 拡張Fibonacci数列 —

準結晶秩序の難型である Penrose tiling の持つ不思議さは、周期性と相容れない5回対称性が長距離秩序を持ち、自己相似性がそれを可能にしているということであろう。黄金比も重要な役割を演じ、それらはいずれも正五角形の中に潜んでいる。それでは、他の正多角形はそのような魔力を秘めていないであろうか?

II-1. 黄金比の復習

黄金比 τ

$$\tau = \frac{\sqrt{5}+1}{2} = 2\cos 36^\circ \approx 1.6180339, \quad (1)$$

は2次方程式,

$$\tau = 1 + \frac{1}{\tau}, \quad \text{すなわち, } \tau^2 - \tau - 1 = 0, \quad (2)$$

の解であり

辺長1の正五角形の対角線の長さである。正五角形に、5本の対角線のすべてを記入すると、各対角線は3部分に分割される。その分割は、

$$\tau = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau^2} + \frac{1}{\tau}. \quad (3)$$

と表現できる。これは、そのときできる三角形の形が、2種類の2等辺三角形のみであり、相似な三角形の合成として関係づけられていることと関係している。

半無限数列である Fibonacci 数列

$$f_0=0, f_1=1, f_{n+1}=f_n+f_{n-1}, \quad (4)$$

$$\{f_n; n \geq 1\} = \{1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, \dots\}, \quad (5)$$

との密接な関係が知られている。前進行列

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad F_n = \begin{bmatrix} f_n \\ f_{n+1} \end{bmatrix}, \quad F_0 = \begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad F_{n+1} = TF_n. \quad (6)$$

を定義すると便利である。その固有値、固有ベクトルは

$$T \begin{bmatrix} 1 \\ \tau \end{bmatrix} = \tau \begin{bmatrix} 1 \\ \tau \end{bmatrix}, \quad T \begin{bmatrix} -\tau \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} -\tau \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

である。後退行列はその逆行列

$$T^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad F_{n-1} = T^{-1}F_n. \quad (8)$$

である。これを使うと初項からさらにさかのぼって数列を定義することができ、Fibonacci数列を無限数列に拡張できる。

$$\{f_{-1}, f_{-2}, f_{-3}, f_{-4}, \dots\} = \{1, -1, 2, -3, 5, -8, 13, -21, \dots\}. \quad (9)$$

$$T^n = \begin{bmatrix} f_{n-1} & f_n \\ f_n & f_{n+1} \end{bmatrix}, \quad \frac{\tau T^n}{f_n} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & \tau \\ \tau & \tau^2 \end{bmatrix} \quad (10)$$

より、この数列の極限は、

$$\begin{aligned} f_{n+1}/f_n &\rightarrow \tau \quad (n \rightarrow \infty), \\ f_{n-1}/f_n &\rightarrow -\frac{1}{\tau}, \quad (n \rightarrow -\infty). \end{aligned} \quad (11)$$

である。 τ^n を f_n で、 f_n を τ^n で表すと、

$$\tau^n = f_n \tau + f_{n-1}, \quad f_n = \frac{\tau^n - (-\tau)^{-n}}{\tau - \tau^{-1}} \quad (12)$$

となる。

最後に、(2)式の反復代入でわかるように、黄金比が最も簡単な連分数

$$\tau = k + \frac{1}{k + \frac{1}{k + \frac{1}{k + \dots}}} \quad (k=1) \quad (13)$$

であることを指摘しておく。Iで述べたような2種類の文字による自己相似的な文字列や、2種類の間隔による1次元点列はもう少し拡張できることが知られているが、いずれもここで k の値を別の自然数にとったものと同様関係していることも知られている。

II-2. 正7角形の場合 (以下、式の番号はII-1と対応させてある)

正7角形の対角線は2種類あるが、辺長1に対して、 $\alpha < \beta$ とする。その内角の5分の1を θ として、

$$a = 2\cos\theta \approx 1.801937736.$$

$$\beta = a\cos\theta + \cos 2\theta = 2\cos 2\theta + 1 \approx 2.246979604. \quad (1')$$

である。すべての対角線を記入してわかるように、3種類の相似な三角形群[3辺の比で表示して(1, 1, a), (1, a, \beta), (1, \beta, \beta)]が多数現れる。これらの合成も相似なので、これらの長さ1, a, \betaの間に次のような関係があることがわかる。

$$a^2 = 1 + \beta, \quad a\beta = a + \beta, \quad \beta^2 = 1 + a + \beta,$$

$$a^{-1} = 1 + a - \beta, \quad \beta^{-1} = \beta - a, \quad \beta/a = \beta - 1, \quad a/\beta = a - 1, \quad a^{-1} + \beta^{-1} = 1.$$

これらの関係を行列で表示すれば、

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

と整理できる。第1要素から順に、1, a, \betaに対応する。この式を(6)式の一般化として眺めていただきたい。まだここでは見にくいだが、III-3で述べるように、1次元の波の伝搬を表す行列とみることも出来る。対角線の分割は、

$$a = \frac{1}{a} + \frac{\beta}{a^2} + \frac{1}{a}, \quad a = \frac{1}{a} + \frac{1}{a\beta} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{a\beta} + \frac{1}{a}, \quad (3')$$

$$\beta = \frac{a}{\beta} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{a\beta} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{a}{\beta}, \quad \beta = \frac{1}{\beta} + \frac{a}{\beta^2} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{a\beta} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{a}{\beta^2} + \frac{1}{\beta}.$$

である。行列A, Bの固有値方程式はそれぞれ、

$$\lambda^3 - \lambda^2 - 2\lambda + 1 = 0, \quad \lambda^3 - 2\lambda^2 - \lambda + 1 = 0. \quad (2')$$

行列A, Bは共通の固有ベクトルを持っている。

$$\begin{aligned} Av_1 &= av_1, & Av_2 &= -(\beta - 1)v_2, & Av_3 &= (\beta - a)v_3 \\ Bv_1 &= \beta v_1, & Bv_2 &= (1 + a - \beta)v_2, & Bv_3 &= -(a - 1)v_3, \end{aligned} \quad (7')$$

ただし、

$$v_1 \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ a \\ \beta \end{pmatrix}, \quad v_2 \equiv \begin{pmatrix} a \\ -\beta \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_3 \equiv \begin{pmatrix} \beta \\ 1 \\ -a \end{pmatrix}$$

と定義した。A^n, B^nは次のようになっている。

$$A^n = \begin{pmatrix} a_{n-1} & a_n & a_{n+1} - a_{n-1} \\ a_n & a_{n+1} & a_{n+2} - a_n \\ a_{n+1} - a_{n-1} & a_{n+2} - a_n & a_{n+1} + a_n \end{pmatrix}, \quad B^n = \begin{pmatrix} b_{n-1} & b_n - b_{n-2} & b_n \\ b_n - b_{n-2} & b_n + b_{n-1} & b_{n+1} - b_{n-1} \\ b_n & b_{n+1} - b_{n-1} & b_{n+1} \end{pmatrix} \quad (9')$$

(10)式を参考に、A, Bを(6)式の前進行列として、まずFibonacci数列のような二つの半無限数列を定義できる、

$$\begin{aligned} \{a_n; n \geq 1\} &= \{1, 0, 2, 1, 5, 5, 14, 19, 42, 89, \dots\}, \\ \{b_n; n \geq 1\} &= \{1, 1, 3, 6, 14, 31, 70, 157, \dots\}. \end{aligned} \quad (5')$$

その漸化式は、

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= a_n + 2a_{n-1} - a_{n-2}, \\ b_{n+1} &= 2b_n + b_{n-1} - b_{n-2}. \end{aligned} \quad (4')$$

また、極限は、

$$\begin{aligned} \frac{A^n a}{a_n} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & a & \beta \\ a & a^2 & a\beta \\ \beta & a\beta & \beta^2 \end{pmatrix} \quad (n \rightarrow \infty), & \frac{B^n \beta}{b_n} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & a & \beta \\ a & a^2 & a\beta \\ \beta & a\beta & \beta^2 \end{pmatrix} \quad (n \rightarrow \infty) \\ a_{n+1}/a_n &\rightarrow a \quad (n \rightarrow \infty), & b_{n+1}/b_n &\rightarrow \beta \quad (n \rightarrow \infty). \end{aligned} \quad (11')$$

続いてその逆行列である後退行列

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8')$$

を使って無限行列に拡張できる。

$$A^{-n} = \begin{pmatrix} a_{-n-1} & a_{-n} & a_{-n+1} - a_{-n-1} \\ a_{-n} & a_{-n+1} & a_{-n+2} - a_{-n} \\ a_{-n+1} - a_{-n-1} & a_{-n+2} - a_{-n} & a_{-n+1} + a_{-n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{n+1} & b_n & -b_{n+1} + b_{n-1} \\ b_n & b_{n-1} & -b_n + b_{n-2} \\ -b_{n+1} + b_{n-1} & -b_n + b_{n-2} & b_n + b_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$B^{-n} = \begin{pmatrix} b_{-n-1} & b_{-n} - b_{-n-2} & b_{-n} \\ b_{-n} - b_{-n-2} & b_{-n} + b_{-n-1} & b_{-n+1} - b_{-n-1} \\ b_{-n} & b_{-n+1} - b_{-n-1} & b_{-n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{n+1} & -a_{n+2} + a_n & a_n \\ -a_{n+2} + a_n & a_{n+1} + a_n & -a_{n+1} + a_{n-1} \\ a_n & -a_{n+1} + a_{n-1} & a_{n-1} \end{pmatrix}.$$

なので、

$$a_n = b_{-n}, \quad a_0 = b_0 = 0 \quad (9')$$

となり、無限数列としては一つになってしまう。 a^n, β^n を a_n, b_n で表せば、

$$a^n = a_{n-1} + a_n a + (a_{n+1} - a_{n-1}) \beta. \quad (12')$$

$$\beta^n = b_{n-1} + (b_{n+1} - b_{n-1}) a + b_n \beta.$$

その逆は、

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{\alpha\beta-1}{7} \left[\frac{1}{\beta} a^n + \frac{1}{a} \left(\frac{1}{\beta} \right)^n - \left(-\frac{\beta}{a} \right)^n \right], \\ b_n &= \frac{\alpha\beta-1}{7} \left[\frac{1}{a} \beta^n + \frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{a} \right)^n - \left(-\frac{a}{\beta} \right)^n \right]. \end{aligned} \quad (12'')$$

である。

このように、正五角形についてと同様な、美しい自己相似の世界が正七角形についても広がっている。Penrose tiling同様の趣向は、どの正多角形についても可能であろう。II-1の最後に、連分数について述べたが、連分数は2数の比に対するも

のであるが、3数以上に対する連比についても同様の入れ子構造的な比を想定できる。既に誰かがやっても不思議はない。1:α:βは最も簡単な(おそらくパラメータを1にとった)「三数連比連分数」に相当していると考えられる。

II-3. 任意の正多角形の対角線

Gを任意の整数とする。正G角形はD=[G/2]-1種類の(通常の意味での)対角線を持っている。[]は、小さめの整数部分を取りだすGauss記号である。1内角の(G-2)分の1の角度をθとする。辺長1を第0対角線というように拡張する。外接円半径R, 第n対角線の長さd_nはそれぞれ

$$R = \frac{1}{2\sin\theta}, \quad d_n = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin\theta} \quad (n=0,1,2,\dots,D), \quad (14)$$

で与えられる。一般に,

$$d_{G-1}=0, \quad d_{G-n-2}=d_n \quad (15)$$

である。具体的には,

$$d_0=1 \quad \text{and} \quad d \equiv d_1 = \frac{\sin 2\theta}{\sin\theta} = 2\cos\theta. \quad (16)$$

一般式は,

$$d_n = \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k \frac{(n-k)!}{k!(n-2k)!} d^{n-2k} \quad (17)$$

とdの多項式で表せる。すなわち,

$$\begin{aligned} d_2 &= d^2 - 1, \\ d_3 &= d^3 - 2d, \\ d_4 &= d^4 - 3d^2 + 1, \\ d_5 &= d^5 - 4d^3 + 3d, \\ &\dots \end{aligned} \quad (18)$$

これらは母関数

$$\frac{1}{1-dz+z^2} = \sum_{n=0}^{\infty} d_n z^n. \quad (19)$$

で表すことができる。これは,

$$[1-2tz+z^2]^{-\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{\nu}(t) z^n, \quad (20)$$

を母関数とする Gegenbauer多項式

$$C_n^{\nu}(t) = \frac{(-1)^n}{2^n} \frac{\Gamma(\nu+\frac{1}{2})\Gamma(n+\nu)}{\Gamma(2\nu)\Gamma(n+\nu+\frac{1}{2})} \frac{(1-z^2)^{(1/2)-\nu}}{n!} \frac{d^n}{dz^n} [(1-z^2)^{n+\nu-(1/2)}] \quad (21)$$

のν=1, t=d/2の場合

$$d_n = C_n^1(d/2). \quad (22)$$

である。これらの間の関係は、 d_n を $n=0$ から順にならべた行列表現

$$(d_0, d_1, d_2, \dots, d_D) \tag{23}$$

をとれば、一般に(6), (6')に対応する D 個の $(D+1) \times (D+1)$ 行列

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \dots \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ 0 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{6''}$$

で表せる。これらの行列が波の性格を持つことは、(14)式の形からも理解できる。(23)等は、これらの行列群に共通の固有ベクトルである。以上は、まず星型多角形一般に拡張できる。ただし、よく使われているように、例えば一筆描き星形に相当する星形正五角形は2周して閉じるという意味で $G=5/2$ である。星形正七角形には $7/2$ と $7/3$ がある。星形正多角形では、対応する正多角形の対角線が辺になることを考えればわかるように、一般に星形正 G 角形には対角線の種類と同じ数だけの種類がある。(その外の場合にも拡張できるが、簡単のためここでは一応 G が素数の場合に限っておく)

II-2で、正七角形について述べたようなことは、これらに対してごく一般的に拡張できる。最後に(19)式的具体例を示す。

正3角形 ($d=1$)	$\frac{1}{1-z+z^2}$	$=1+z-z^3-z^4+\dots$	$=\frac{1+z}{1+z^3}$
正方形 ($d=\sqrt{2}$)	$\frac{1}{1-\sqrt{2}z+z^2}$	$=1+\sqrt{2}z+z^2-z^4-\sqrt{2}z^5-z^6+\dots$	$=\frac{1+\sqrt{2}z+z^2}{1+z^4}$
正5角形 ($d=\tau$)	$\frac{1}{1-\tau z+z^2}$	$=1+\tau z+\tau z^2+z^3-z^5-\tau z^6-\tau z^7-z^8+\dots$	$=\frac{1+\tau z+\tau z^2+z^3}{1+z^5}$
星型5角形 正(5/2)角形 ($d=1/\tau$)	$\frac{1}{1-\frac{1}{\tau}z+z^2}$	$=1+\frac{1}{\tau}z-\frac{1}{\tau}z^2-z^3+z^5+\frac{1}{\tau}z^6-\frac{1}{\tau}z^7-z^8+\dots$	$=\frac{1+\frac{1}{\tau}z-\frac{1}{\tau}z^2-z^3}{1+z^5}$
正6角形 ($d=\sqrt{3}$)	$\frac{1}{1-\sqrt{3}z+z^2}$	$=1+\sqrt{3}z+2z^2+\sqrt{3}z^3+z^4-z^6-\dots$	$=\frac{1+\sqrt{3}z+2z^2+\sqrt{3}z^3+z^4}{1+z^6}$

III. 閉曲面の形を表現する基底としての点群調和関数

— 直交多項式, 行列表現, 確率過程 —

この研究の本来の目的は、表題のように、いろいろな閉曲面的な形を表現したり、分類したり、体系化したりするために、球面調和解析することに関係している。況地球規模でのいろいろな観測網ができたり、また、環境問題の関連などからも、丸い地球を意識することがますます重要になってきている。さて、立方的な対称性の場合については、すでに結晶場理論などで立方調和関数が知られている[3]。準結晶の問題に関係して、正20面体的な対称性を持った調和関数を求めようと試みた。その過程で、回転群の行列表現であるスピ行列を利用する。任意の長さのスピンに対して任意の方向のスピンの固有ベクトルを一般的に求める方法を発見した。それが可能になったのは、ある種の確率過程とスピ行列の間にある一般的な関係が見抜けたためである。それが、スピ行列の演算が整数型でできるような表示の発見につながった。この節の内容は、本稿の中で一番の自信作部分であり、関連する問題も多い。しかし、話はかなり複雑であり、ここで具体的にご紹介できるのはそのほんの一部分に過ぎない。群論的な表現に筆者自身が疎いということもあるが、形の問題としての理解を念頭において、直感的な表現をむしろ意識的に多用している。群論の言葉の方が分かりやすい方々への配慮として、不完全ではあるが、()内に対応する群論記述をした。

III-1. 調和解析

波の重ね合わせとして関数を表現するFourier解析は、形、構造の問題にいろいろ使われている。 $Y_{lm}(\theta, \phi) \equiv P_{lm}(\cos\theta)e^{im\phi}$ による球面調和解析は、球的な対称性を盛り込んだFourier解析といってよい。ただし、経度 ϕ については複素数表示になっており、進行波としてみているので、 m の波と $-m$ の波とをうまく重ね、実数表示とし、定常波としてみるほうが、節の配置構造などもみやすくなる。さらに、球面座標 θ, ϕ から単位球面($x^2+y^2+z^2=1$)上での直交座標 x, y, z に移ると、立方的な対称性も見やすくなる。(以下では、規格化因子を適宜省略してあるが)例えば、 $l=1$ の場合、 $m=0$ の $\cos\theta=z$ に見合うように $m=\pm 1$ の $\sin\theta e^{\pm i\phi}/\sqrt{2}$ から、 $x=\sin\theta\cos\phi$, $y=\sin\theta\sin\phi$ と組みなおした方が形の直感的な理解に便利である。 $l=1$ は1個の節で特徴付けられ、 z は赤道、 x, y は子午線が節になっている。また、別の直交座標に移っても、 $l=1$ の3状態の中で混ぜ合わせるだけで別の l の状態が混ざることはない。一般に、 l は節の数を表す。

このような考え方の延長として、正20面体的な対称性を持った調和関数を一般的に求めようとする、群論を利用したり、行列表現をとったりするのが便利である。そのための準備として、次節では別の角度から考える。その上、まったく別の確率過程のモデルから話が始まるが、めんくらわないでいただきたい。

III-2. Ehrenfest模型

ある意味での可逆モデルが示す不可逆性のデモンストレーションとして、1907年Ehrenfestはいわゆる壺の実験を行った。朝永振一郎先生は、名著「物理学

とは何だろうか」の執筆とも関係して、その追試を手作業で実行された。筑波大学の朝永記念室に保存されている遺品の解説に関係して、筆者は以前に数理科学誌上でこれを紹介し、自分の数理的な考察を加えた[4]。それが思いがけず今の問題とかがわってきたのである。

N 個の玉に1から N 迄の番号をつけ、二つの壺A,Bに入れる。乱数で当選玉を決め、それを今ある壺からもう一方の壺に移す。これがEhrenfestの壺の実験である。

任意の玉の数に対して一般的な議論ができるが、ここでは分かりやすいように、(i)玉4個の場合、(ii)玉5個の場合についての具体例と、(iii)一般の場合、を挙げる。以下では、一方の壺例えばAにある玉の個数にのみ注目する。玉が確実に1個移動する確率的なプロセスなので着目している数は、毎回1個の変化がある。1個増える確率はBの壺に、減る確率はAの壺にそのときにある玉の個数に比例している。つまりこの確率過程を表す遷移行列は $(N+1) \times (N+1)$ で

$$(i) W_4 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, (ii) W_5 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, (iii) [W_N]_{k'k} = \frac{1}{N} \left\{ (N-k)\delta_{k'k+1} + k\delta_{k'k-1} \right\} \quad (24)$$

と表せる。ただし、上から壺Aの玉数 $N, N-1, \dots, 0$ と玉数 k を第 $N-k+1$ 要素として表示してある。その $(N+1)$ 個の固有値は $(\pm 1, \pm(N-2)/N, \pm(N-4)/N, \dots)$ というように、1と-1を両端として等間隔に並ぶ、縦型固有ベクトルを固有値の大きいの方から順に左から右に向かって並べて行列を作ると。

$$(i) P_4 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 0 & -2 & -4 \\ 6 & 0 & -2 & 0 & 6 \\ 4 & -2 & 0 & 2 & -4 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, (ii) P_5 = \frac{1}{\sqrt{2^5}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 5 & 3 & 1 & -1 & -3 & -5 \\ 10 & 2 & -2 & -2 & 2 & 10 \\ 10 & -2 & -2 & 2 & 2 & -10 \\ 5 & -3 & 1 & -1 & 3 & -5 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (25)$$

となる。ただしいずれも $2^{-N/2}$ をくくりだしたときに、第1要素に1を、第2要素に固有値の N 倍を配置したものになっている。こうして作った行列は、自身が逆行列となっている、つまり自乗したものは単位行列である。

$$P^{-1} = P, \quad P^2 = E \quad (E: \text{単位行列}) \quad (26)$$

この行列は一般の N に対して母関数

$$\frac{1}{2^{N/2}} (f+1)^{(1+\lambda)N/2} (f-1)^{(1-\lambda)N/2} \quad (27)$$

で表せる。つまり、固有値 λ に対応する固有ベクトルのAの玉数 k に対応する成分は、この式を展開したときの f^k の係数で与えられる。固有値 $\lambda=1$ に対応する一番左の列は、当然のことながら定常分布に相当する二項分布に比例しており、Pascalの三角

形に相当する漸化関係がある。他の固有ベクトルについても、 N が1だけ異なるものとの間に同様の漸化関係が存在する。

さて、行列 W の固有値の分布は物理学を知っているものには、 $(\pm S, \pm(S-1), \pm(S-2), \dots)$ というように $(2S+1)$ 個の固有値が S と $-S$ を両端に等間隔に並ぶスピンを思い起こさせる。[スピンについてなじみの薄い方への、ここで必要なことはAppendix Aに記す]

実際、行列 W で対称要素間の幾何平均をとる対称化を行う。つまり、 (m, n) 要素とそれに対称な (n, m) 要素との幾何平均を (m, n) 要素および (n, m) 要素とする対称行列をつくり、 $S=N/2$ 倍すれば、スピンの大きさ S の場合の S_x 行列になっている。

$$(i) S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (ii) S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{5} & 0 & \sqrt{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{8} & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \sqrt{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{8} & 0 & \sqrt{5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

$$(iii) [S_x]_{mm'} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(S-m)(S+m+1)} \delta_{m m'-1} + \sqrt{(S+m)(S-m+1)} \delta_{m m'+1} \right] \quad (29)$$

ただし、 $m, m'=S, S-1, S-2, \dots, -S$ の順に配置してある。また、固有ベクトルから作った前述の行列に対しても同様の対称化操作を加えれば、(ただし、 S 倍はしない)その S_x 行列の固有ベクトルが並ぶ、

$$(i) U_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \sqrt{6} & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & -2 & -2 \\ \sqrt{6} & 0 & -2 & 0 & \sqrt{6} \\ 2 & -2 & 0 & 2 & -2 \\ 1 & -2 & \sqrt{6} & -2 & 1 \end{pmatrix} \quad (ii) U_{5/2} = \frac{1}{\sqrt{2^5}} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{5} & \sqrt{10} & \sqrt{10} & \sqrt{5} \\ \sqrt{5} & 3 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & -3 & -\sqrt{5} \\ \sqrt{10} & \sqrt{2} & -2 & -2 & \sqrt{2} & \sqrt{10} \\ \sqrt{10} & -\sqrt{2} & -2 & 2 & \sqrt{2} & -\sqrt{10} \\ \sqrt{5} & -3 & \sqrt{2} & \sqrt{2} & -3 & \sqrt{5} \\ 1 & -\sqrt{5} & \sqrt{10} & -\sqrt{10} & \sqrt{5} & -1 \end{pmatrix} \quad (30)$$

これは丁度 x 軸と z 軸が入れかわるような 180° 回転を意味するユニタリ変換の行列

$$U_S S_x U_S^{-1} = S_z, \quad U_S S_y U_S^{-1} = -S_y, \quad U_S S_z U_S^{-1} = S_x \quad (31)$$

になっている。(このことに誤りはないが、この行列の跡(trace)が回転軸の方向に依存しないための因子 $(-1)^S$ を乗じておくほうが、ここでは述べない後の議論にとって便利である。ここではそれによって何も変わらない。)一般の S に対する母関数表現は、平方根が沢山関係するため困難だが、ここまでの議論を整理すると、一般の S に対してとりうる方策が浮かび上がってくる。長さ S のスピンの x 成分を表す行列 S_x は、玉の数 $N=2S$ のEhrenfest過程と密接な関連があり、 W と S_x , P と U は行列 T

$$T_{kk'} = \frac{1}{\sqrt{N C_k}} \delta_{kk'}, \quad [T^{-1}]_{kk'} = \sqrt{N C_k} \delta_{kk'} \quad (k, k' = N, N-1, N-2, \dots, 0) \quad (32)$$

に対応する非ユニタリ変換 T で,

$$\begin{aligned} STWT^{-1} &= S_x, & TPT^{-1} &= U, \\ T^{-1}S_xT &= SW, & T^{-1}UT &= P \end{aligned} \quad (33)$$

のように相互に変換できる。従って、平方根を含まない「確率過程表示」を使って整数型の計算をし、最後に通常の変換に戻ればよい。数値計算をするにせよ、整数型の結果なら、平方根を含むものよりもはるかに法則性を見抜きやすい。[スピンと確率過程の関係についての若干の物理的議論をAppendix Bで行う。]

以上は、単なるスピン算法についてのちょっとした工夫にすぎず、スピンの無縁の者とは関係ないように思われるかもしれない。しかし、ここでは詳しくは述べ切れないが、冒頭に述べたように、閉曲面的な形の表現や、分類と密接に関係している。その議論の要点を箇条書にして記しておく。

- 1 x 方向のスピンに限らず、任意の方向のスピンについて、固有ベクトルを母関数で表すことができる。
- 2 それを使って任意の軸についての 180° 回転のユニタリ変換の行列を、任意の長さのスピンに対して求めることができる。
- 3 回転の合成によって、任意の軸についての任意の大きさの回転のユニタリ変換の行列を、任意の長さのスピンに対して求めることができる。
- 4 これによって、正20面体的な対称性を持つ直交多項式などを一般的に作る事が容易になった。

これらの議論に必要な予備知識の確認等を丹念にすれば、おそらく一冊の本になる分量であろう。詳しい結果はここで述べないが、回転群を正二十面体群 I_h の既約表現で展開したものを $l=15$ まで表に示す。その先は、 $l=29=30-1$ (30は2-, 3-,

偶数の l						奇数の l					
l	A_g	T_{1g}	T_{2g}	G_g	H_g	l	A_u	T_{1u}	T_{2u}	G_u	H_u
0	1	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0
2	0	0	0	0	1	3	0	0	1	1	0
4	0	0	0	1	1	5	0	1	1	0	1
6	1	1	0	1	1	7	0	1	1	1	1
8	0	0	1	1	2	9	0	1	1	2	1
10	1	1	1	1	2	11	0	2	1	1	2
12	1	1	1	2	2	13	0	1	2	2	2
14	0	1	1	2	3	15	1	2	2	2	2

5-回対称性の存在と関連してそれらの最小公倍数)を、までで「一巡」し、それより大きい l についてはある意味での繰り返しになっている。しかし、 $l=15$ から29ま

では、14から0までの値から次のように求まるので省略してある。示されている $l=14$ と $l=15$ の対応する欄にある数を加えると1, 3, 3, 4, 5(規約表現の次元数)となっているが、一般に、 $l=l_0$ の場合と、 $l=29-l_0$ の場合との間に同じ関係がある。なお、この表自体は、ここに至るまでのIIIの議論に頼るまでもなく、正二十面体群 I_h の規約表現の指標の表だけを使えば求まる。

この表の意味は次のとおりである。 A_g などの記号の足についている g, u は「 g (gerade) は原点について点対称な偶関数であること、 u (ungerade) は原点について反対称な奇関数であること」を示している。表の l に対応する各欄の整数を A, T_1, T_2, G, H で表すと、

$$2l+1 = A + 3T_1 + 3T_2 + 4G + 5H \tag{34}$$

というように $2l+1$ 個の l 次の3変数同次多項式をを対称性に基づいて分類している(群の規約表現)。 A はそれ自体で、この群のすべての対称性を持っている、その他の同次多項式は、この群の対称性の一部を備え、一部を欠いているが、(T なら3, G なら4といった)対応する数だけの「合同な」関数形を互いに直交(立体角積分で定義した内積のもとでの直交)させて作ることができるということを意味している。また、これら互いに「合同な」関数すべてからなる集合はこの群のすべての対称性(あるいは反対称性)を回復している(この群における部分空間を構成している)。

最後に、正20面体的な対称性を持つ直交多項式の低次のものを掲げておく。

$l=0$	A_g	1
$l=1$	T_{1u}	x, y, z
$l=2$	H_g	$\Psi_i(r) = \frac{(1+\sqrt{6})(3(e_0 r)^2 - \sqrt{6} r^2)}{10} + \frac{3}{2}(e_i r)^2 \quad (i=1,2,3,4,5)$
$l=3$	T_{2u}	$\frac{\sqrt{3}}{6} x \left[x^2 + \frac{3}{r} y^2 - 3uz^2 \right], \quad \frac{\sqrt{3}}{6} y \left[y^2 + \frac{3}{r} z^2 - 3ux^2 \right], \quad \frac{\sqrt{3}}{6} z \left[z^2 + \frac{3}{r} x^2 - 3vy^2 \right]$
	G_u	$\frac{1}{4} \left[(x^3 + y^3 + z^3) - r^2(xy^2 + yz^2 + zx^2) - \frac{1}{r^2}(xz^2 + yx^2 + zx^2) + 2\sqrt{15}xyz \right]$ $\frac{1}{4} \left[(x^3 - y^3 - z^3) - r^2(xy^2 - yz^2 - zx^2) - \frac{1}{r^2}(xz^2 - yx^2 - zx^2) + 2\sqrt{15}xyz \right]$ $\frac{1}{4} \left[(-x^3 + y^3 - z^3) - r^2(-xy^2 + yz^2 - zx^2) - \frac{1}{r^2}(-xz^2 + yx^2 - zx^2) + 2\sqrt{15}xyz \right]$ $\frac{1}{4} \left[(-x^3 - y^3 + z^3) - r^2(-xy^2 - yz^2 + zx^2) - \frac{1}{r^2}(-xz^2 - yx^2 + zx^2) + 2\sqrt{15}xyz \right]$

ただし、 $(e_i, i=0, 1, 2, 3, 4, 5)$ は正20面体の12頂点方向に対応する6本の単位ベクトルを表す。この内のどの2つをとってもそれらの内積は $\pm(1/\sqrt{5})$ のいずれかである。上の表で、 $l=2$ では合同性が見やすいように r の関数としてベクトル表示した。 x, y, z で表すと、親しみやすくはあるが合同であることが一目では見えない。これ

ら低次のものを求める限りでは、ここで行ったような議論は必要ない。しかし高次の場合にはそれが不可欠である。A_gがl=0の次に登場するのはl=6, A_uが初めて登場するのはl=15である。立方対称の場合なら群論を知らなくても対称性についてのある種のセンスを持っていれば、x, y, zの入れかえといったようなことで片づく。偶関数と奇関数との分離もはっきりとしている。一方、正20面体対称の場合のl=29(つまり29次式)に相当するのがl=11=12-1(つまり11次式, 12は2-, 3-, 4回対称性に対応する2と3と4の最小公倍数)であり、高次の多項式をいじらねばならない。また、3次元でありながらx, y, zと同等な(2回軸)方向が15もあり、偶関数と奇関数が互いに混ってしまう。[x^ly^mzⁿと書いたとき、(l+m+n)が奇数か偶数かという意味ではない。例えばそれを奇数としたときに、l, m, nのうちの一つが奇数で二つが偶数という場合と、三つとも奇数という場合がある。x, y, zの入れかえですむ立方対称の場合には分離しているそれらが、正20面体対称の場合は混ざるという意味である]

Appendix A スピンについて

物理的な説明は省き、ここで必要な数理的な性質のみを記す。まず、三つの演算子S_x, S_y, S_zを、交換関係

$$\{S_y, S_z\} = iS_x, \quad \{S_z, S_x\} = iS_y, \quad \{S_x, S_y\} = iS_z, \quad (A1)$$

ただし、{A, B} = AB - BA,

を満たすものとして定義する。演算子としてのスピン・ベクトルSは、(S_x, S_y, S_z)を成分とする3次元ベクトル演算子である。つまり、直交座標(x, y, z)から直交座標(ξ, η, ζ)への座標変換によって得られる(S_ξ, S_η, S_ζ)が、(ξ, η, ζ)を(x, y, z)で表されるのと全く同じ係数の一次結合で表される。この関係は、(30)式と

$$[S_y]_{mm'} = \frac{i}{2} \left\{ \sqrt{(S-m)(S+m+1)} \delta_{m m'-1} - \sqrt{(S+m)(S-m+1)} \delta_{m m'+1} \right\} \quad (A2)$$

$$[S_z]_{mm'} = m \delta_{m m'}$$

$$m = S, S-1, S-2, \dots, -S$$

によって、任意の整数Lに対してL×L行列で実現できる。ただし、L=2S+1, S=(L-1)/2である。偶数のLに対応する半整数のSの場合(Ehrenfest過程としては玉数N=L-1が奇数)と、奇数のLに対応する整数のSの場合(Ehrenfest過程としては玉数が偶数)とは物理的及び数理的にも若干意味が異なるが、ここで詳しくは述べない。後者(整数のS)は、球調和関数を基底として角運動量を表示したのもでもあり、形の問題と密接な関係がある。

Appendix B スピンと確率過程

玉数N個のEhrenfest過程の状態の総数は2^N個である。それらをN次元立方体の頂点にみたてて、稜にそっての酔歩というとならえかたも出来る。通常理論的な考察はN→∞の極限で行うが、それは丸い地球を平面的な世界地図にすることと似

ている。「形」の立場では丸さにこだわりたい。量子論に対する古典論と言う意味で、確率過程は(24)式の W の固有ベクトルに(相対)確率自体が並ぶ古典論である。一方、(28)式のスピン行列 S_x の固有ベクトルは、各要素の二乗が確率となる量子論的なものである。 $W^N(N \rightarrow \infty)$ で最大固有値1が効いて二つの壺の玉数がそろおうとするのは、組合せの数の多い状態への傾向、つまりエントロピー増大である。一方、スピンの場合にこれに相当する $m=0$ への傾向は、 x 方向に磁場をかけることによって得られる力学的なものである。これらが関連する式で結び付けられると言うことは、物理的な何かを示唆しているに違いない。

- [1] 準結晶の数理についての一般的な解説としては、
 小川 泰 数学セミナー 1986年1, 2月号
 小川 泰 サイエンス 1986年9月号
 小川 泰 「かたちの科学」 小川 泰・宮崎興二編 朝倉書店 (1987)
 石原慶一 月刊フィジックス 1987年8月号(シンポジウム 結晶成長)
- [2] "Symmetry of Three-dimensional Quasicrystals" in Proceedings of International Workshop on Quasicrystals, (Aug. 30~Sept. 5, in Beijing) Edited by K. H. Kuo (Trans Tech Publications).
- [3] 例えば、
 上村 洗, 菅野 暁, 田辺行人 「配位子場理論とその応用」 裳華房 (1969) p.145~147 7-2表 p.173~174 8-3表
- [4] 小川 泰 「朝永先生の手作業シミュレーション」 数理科学 1985年1月号

討論 (DISCUSSION)

準結晶にからむ二三の数理

小川 泰 (筑波大・物理工)

C. ペンローズパターン6次元立方体の、連結図形を2次元平面上へ「射影」した図、という考え方は歪みが大きすぎると思われる。むしろ6次元立方体の連結図形を2次元平面で切ったときの「断面」と見るべきではないだろうか。6次元立方体は5次元立方体を境界図形としている。この5次元立方体と2次元平面は6次元空間では1次元直線で交わる。
 このことは次元公式：

$$D = a + b - c \quad \text{により保証されている。}$$

D次元空間においてa次元図形とb次元図形は $(a+b)$ 、c次元図形を共有しながら交わる。
 宮崎 興二 (神戸大・教養・図学)