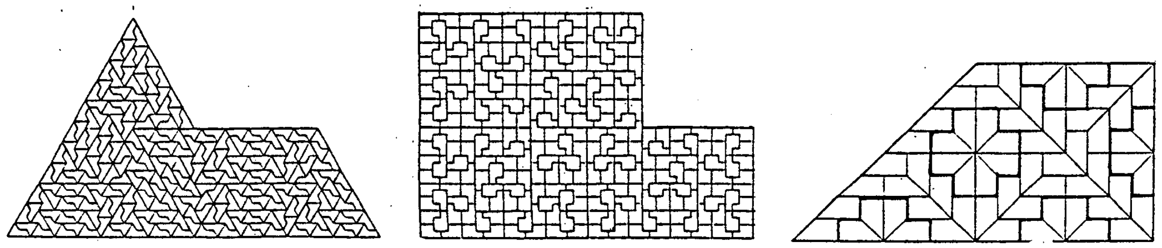
自己相似法による欠陥を持った格子構造

(理研) 渡辺泰成

一般に高次の回転対称を有する準結晶格子は高次元の超立方体の2次元または3次元空間への射影と解釈されている。一方Mackayは5回対称を持つペンローズタイルが自己相似則によって発生できることを示し、小川は3次元のペンローズ格子を発生させる自己相似則を発見した。準結晶格子とは異なる非周期パターンにおいても自己相似法の適用によって幾つかのパターンが作られている。本報告ではペントミノ片を用いた平面タイルの自己相似構造を紹介すると同時に、一般の非周期構造における2次元、3次元座標を自己相似則から導く方法を示す。

第1図. 格子点を用いた自己相似法による非周期パターン



結晶構造が単位胞内の非対称単位の原子座標を与えることによって記述されるように自己相似構造も自己相似の基底単位胞の粒子座標を与えることによって空間に長距離秩序を以て分布する全ての粒子を記述することができる。基底単位胞を第0世代、基底単位胞が集合して自己相似な単位パターンを形成するときこのパターンを第1世代と呼ぶ。

第0世代のn個の粒子座標の行ベクトル $\underline{X}^{(0)} = (r_1^{(0)}, r_2^{(0)}, \cdots, r_n^{(0)})$ $r_n^{(0)}(x_n^{(0)}, y_n^{(0)}, z_n^{(0)})$

m個の対称操作行列Rの列ベクトル $\mathbb{R}| = \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ \vdots \\ R_m \end{pmatrix}$

Rに付随した並進ベクトルのm×m行列 $\mathbb{T}^{(0)} = \begin{pmatrix} t_1, & t_1, & \cdots & t_1 \\ t_2, & t_2, & \cdots, & t_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_m, & t_m, & \cdots & t_m \end{pmatrix}$

第l世代の粒子座標の行列 $\mathbb{X}^{(l)}$, l-1世代からl世代へ拡大する相似比 k

$$\mathbb{X}^{(l)} = \mathbb{R}|\underline{X}^{(l-1)} + k\,\mathbb{T}^{(l-1)} \qquad (1)$$

$$\mathbb{T}^{(l-1)} = k\,\mathbb{T}^{(l-2)} = k^2\,\mathbb{T}^{(l-3)} = \cdots = k^{l-1}\,\mathbb{T}^{(0)} \qquad (2)$$

(1), (2) より
$$\mathbb{X}^{(\ell)} = \mathbb{R}\,|\,\underline{\mathbb{X}}^{(\ell-1)} + k^{(\ell-1)}\mathbb{T}^{(0)} \qquad (3)$$

ℓ世代の空間粒子分布は$\mathbb{X}^{(\ell)}$の行列要素として求めることができる。ペントミノの場合は基底単位胞が1種類であるがスフィンクス，ウエッジ，やペンローズパターンのように対掌体を含んだり，2種類の菱形の基底パターンを以て構成される単位パターンでは1番目の基底パターンを1世代の1番目の単位パターンに移すRの列ベクトル $\mathbb{R}_{11}$, Tの行列 $\mathbb{T}_{11}^{(0)}$ 2番目の基底パターンを 1番目の単位パターンに移すRの列ベクトル $\mathbb{R}_{21}$, Tの行列 $\mathbb{T}_{21}^{(0)}$ とすれば

$$\mathbb{X}_{11}^{(\ell)} = \mathbb{R}_{11}\,|\,\underline{\mathbb{X}_1}^{(\ell-1)} + k^{(\ell-1)}\mathbb{T}_{11}^{(0)} \qquad (4)$$

$$\mathbb{X}_{21}^{(\ell)} = \mathbb{R}_{21}\,|\,\underline{\mathbb{X}_2}^{(\ell-1)} + k^{(\ell-1)}\mathbb{T}_{21}^{(0)} \qquad (5)$$

$$\mathbb{X}_{1}^{(\ell)} = \mathbb{X}_{11}^{(\ell)} \cup \mathbb{X}_{21}^{(\ell)} \qquad (6)$$

$\mathbb{X}_2^{(\ell)}$ も同様に
$$\mathbb{X}_{2}^{(\ell)} = \mathbb{X}_{21}^{(\ell)} \cup \mathbb{X}_{22}^{(\ell)} \qquad (7)$$

(3)の漸化式を解いてi世代j番目の粒子座標ベクトル$\mathbb{r}(i, j, n)$を求めると

$$\mathbb{r}(i,j,n) = R\left[\frac{j}{n}\right]\mathbb{r}\left(j-\left[\frac{j}{n}\right]\times n\right) + T\left[\frac{j}{n}\right] \qquad i=1 \qquad (8)$$

$$\mathbb{r}(i,j,n) = R\left[\frac{j-F_1}{n}\right]R\left[\frac{F_1}{n}\right]\mathbb{r}\left(j-\left[\frac{j}{n}\right]\times n\right) + R\left[\frac{j}{n\cdot m}\right] + R\left[\frac{j}{nm}\right] + T\left[\frac{F_1}{n}\right] + T\left[\frac{j}{nm}\right]k \qquad i=2 \qquad (9)$$

ここで $F_1 = j - \left[\frac{j}{nm}\right]\times nm$

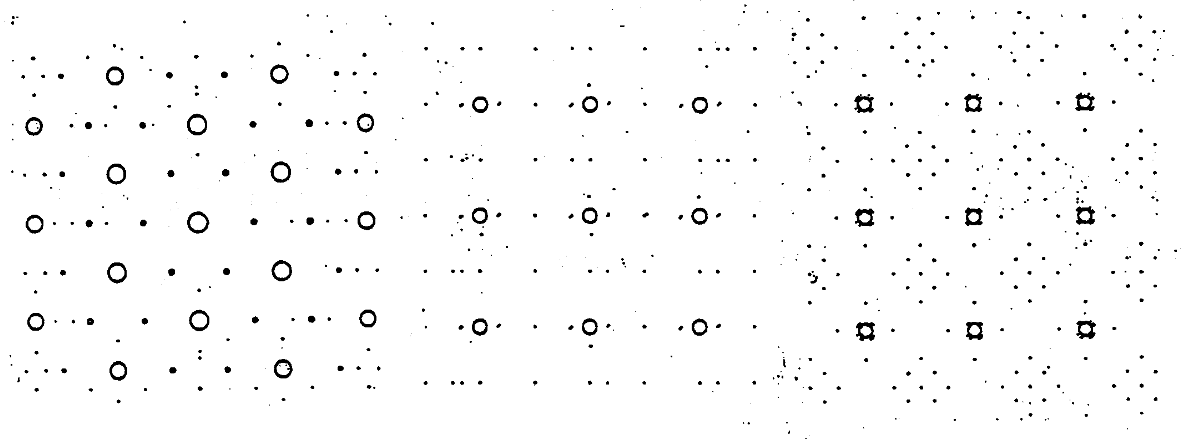
$$\begin{aligned}\mathbb{r}(i,j,n) =\ & R\left[\frac{j-F_{i-1}}{nm^{i-1}}\right]\prod_{\ell'=1}^{i-1}R\left[\frac{F_{i-\ell'}}{n\cdot m^{i-\ell'-1}}\right]\mathbb{r}\left(j-\left[\frac{j}{n}\right]\times n\right)\\ &+\sum_{\ell=3}^{i}R\left[\frac{j-F_{i-1}}{n\cdot m^{i-1}}\right]\prod_{\ell'=2}^{i-\ell+2}R\left[\frac{F_{i-\ell'+1}}{n\cdot m^{i-\ell'}}\right]T\left[\frac{F_{\ell-2}}{n\cdot m^{\ell-3}}\right]k^{\ell-3}\\ &+R\left[\frac{j}{n\cdot m^{i-1}}\right]T\left[\frac{F_{i-1}}{n\cdot m^{i-2}}\right]k^{i-2} + T\left[\frac{j}{nm^{i-1}}\right]k^{i-1} \qquad i\geqq 3 \qquad (10)\end{aligned}$$

ここで $F_{i-\ell} = j - \left[\frac{j}{nm^{i-\ell}}\right]\times nm^{i-\ell}$ $(\ell=1,\ i\geqq 2)$, $F_{i-\ell} = F_{i-\ell+1} - \left[\frac{F_{i-\ell+1}}{n\cdot m^{i-\ell}}\right]nm^{i-\ell}$
$(i>\ell\geqq 2,\ i\geqq 3)$

$[x]$は変換操作の番号 [ ]はガウス記号 $m\leqq x<m+1$ のとき $[x]=m$.

(8)(9)(10)よりスフィンクス，ペントミノ，ウェッジの格子点を求め，これらの回折像を計算した結果を下図に示す。回折像はいずれも結晶格子から選ばれた

第2図、第1図のフーリエ変換による回折像



スフィンクス　　　　ペントミノ　　　　ウェッジ

格子点の集合のフーリエ変換であるので結晶格子の対称(3回，4回)を有するが自己相似操作による非周期性のため結晶格子として眺めた場合、欠陥を持った格子構造と解釈することができる。特にウェッジでは規則的な消滅則が観測され一種の変調構造があると考えられる。これは格子点より長い周期を持った4回対称の模様単位が存在しこの模様の内部に欠陥格子点を含むことになると考えられる。これに対しスフィンクスやペントミノでは主反射に対する衛星反射が認められる点はウェッジと同じであるが、その消滅則はウェッジほど顕著でない。

参考文献

de Bruijn, N. G (1981) Nederl. Akad. Wetenshch. Proc. Ser. A43 39-66

Branko Grunbaum & G. C. Shephard. (1986) "Tilings and Patterns" W. H. Freeman and Company New York 512-523

Duneau, M. & Katz, A (1985), Phys. Rev. Lett, 54 2688-2691

Mackay, A. L. (1981), Sov. Phys. Crystallogr. 26 517-522

Mackay, A. L. (1982), Physica 114A 609-613

Ogawa, T (1985), J. Phys. Soc. Jpn. 54 3205-3208

Penrose, R. (1974), Bull. Inst. Maths. Appl. 10 266-271