講義ノート

形の数理

― 物性論と幾何学 ―

筑波大学物理工学系　　小　川　　　泰

最近の物性物理学では，非周期的な秩序である準結晶やサッカーボール形炭素分子であるバックミンスターフラーレン（C_{60}など）のように幾何学的な話題が多い．これらは，大変楽しく感動的な話題なのだが，現在の教育体系の中では，幾何学教育が軽視されているために，取っつきにくいという思いの人が多い．実は，ちょっとしたきっかけで楽しむことができ，奥行きの深い世界なのである．また，既に知っている筈のことを旨く組み合わせるだけで，この世界を理解できるようになり，物理学が自由な学問であることを実感できるようになれるのである．こうしたきっかけとなることを目指して，講義したい．

私は，1980年12月に，京大基研の短期研究会「形の物理学」を組織して以来，「かたち」をキー・ワードとする学際研究を活動の中心としている．一言でいえば，定量化しにくい事柄を科学したいということである．1984年に形の科学会が結成され，翌年に国際シンポジウムSCIENCE ON FORMが開催された．英文誌FORMAを刊行し，年３回の国内シンポジウムを開催している．また，1992年には，形の文化会，高次元科学会が相次いで関連する活動を始めた．1994年11月には，国際シンポジウム「かたちの知・知のかたち」 KATACHI ∪ SYMMETRYを開催する予定である．狭い意味での物理学にはこだわらず，若い諸君の視野を広げるべく，刺激を与えたい．物理学は自由な学問でなければならない．

最近興味をもっている「棒の結晶学・準結晶学」についてもお話したい．

物理学という言葉に常識的にこだわるならば，もっと形態形成の問題や，物質の法則を話題にすべきであろう．それについての私の見解は，もっと空間の性質を知らなければ，何が本質であるかを判断できないというものである．舞台機構としての空間が役者である物質の行動に与える制約についてのわれわれの知識が充分ではないために，物質の法則を分離することが困難であるということである．元素の周期律表に現れる一種の魔法数の起源は，結局球対称性に起因する縮重とパウリの禁制則である．数自体は幾何学的に決まると捉えることもできよう．弦の振動に関連して整数固有値が現れるように，球面にできうる節のありように関連して2L+1重の縮重が現れるわけである．sp混成軌道の話などにも関連するが，球面調和関数を形の問題との関わりで理解しておくと便利である．これについても触れたい．

臨界現象の物理学では，空間の次元数は，単に積分の多重度のパラメータにすぎない．それはそれで結構であり，重要な成果であることに異論はない．しかし，空間の次元数というものが，すべてこのような捉え方に解消してしまうと思ったら誤りであろう．低次元から高次元に向かってすすむにつれて，次第に新しい性質が現れて来る．それを味わいながら学問を楽しみたい．物理学は，扱う対象によって定義されているものだとは思わない．ある種の態度・手法によって見えて来るものは，すべて対象と考えてよかろう．自分で垣

根をこしらえてしまう理由はまったく無い．

§１．　たった５種類の正多面体

正p角形は任意のpに対してあるのに，正N面体は、N=4, 6, 8, 12, 20の5種類しかない．そのことを覚え込むのではなく，ちょっとした作業を通じて，これらに限られていることを納得して欲しい．さて，正多面体の定義は，各面とも正多角形で，各面・各稜・各頂点ともそれぞれ同等な多面体である．ところで，ご存じのように、p角形の内角和は一般に2(p-2)直角=180(p-2)°である．外角和が360°なのだといってもよい． 正p角形の内角は、θ_p=180(1-2/p)°である． さて，合同な正p角形を辺を共有するように平面に張れるのは，q=[360/θ_p]個までである（[･･･]は切捨て整数化のガウス記号）．すなわちq<2p/(p-2)である．これは(p-2)(q-2)<4と書き換えられる．これを充す(p, q)の整数値の組は，(3, 3), (3, 4), (3, 5), (4, 3), (5, 3)の５組だけである．

さて，正多面体に限らず，任意の多面体に対して一般に， Eulerの関係式V-E+F=2がなりたつ．ただし，V, E, Fはそれぞれ一つの多面体の頂点数，稜数，面数である．
この関係式の証明は立体角の説明の後に行う．2, 3, 4, 5回軸の本数N_2, N_3, N_4, N_5と共に表示する．

p	q	V	E	F	N_2	N_3	N_4	N_5
3	3	4	6	4	3	4	0	0
4	3	8	12	6	6	4	3	0
3	4	6	12	8	6	4	3	0
5	3	20	30	12	15	10	0	6
3	5	12	30	20	15	10	0	6

§２．　立体角とEuler関係式

単位球面上の球面三角形の面積を，球の中心からその球面三角形をのぞむ三角錐の立体角という．球面三角形の各辺は大円である．球面三角形の内角をα，β，γとしたとき，その立体角Ωは$\Omega=\alpha+\beta+\gamma-\pi$である．ある大円で分かたれた二つの領域の(+)および(-)とする．三辺に相当する三つの大円によって単位球面は(+++) (++-)など８領域に分かたれる．

(0)　　$(+++)+(++-)+(+-+)+(-++)+(+--)+(-+-)+(--+)+(---)=4\pi$

ここで，(+++) がΩに相当すると考える．二つの大円は球の直径の両端で交わり，このと

きできる二つの合同な「球面二角形」のうちの一つの立体角と4πとの比が，その一内角と2πとの比に等しいことから，次の関係が得られる．

(1) $(+++)+(-++)=2\alpha$
(2) $(+++)+(+-+)=2\beta$
(3) $(+++)+(++-)=2\gamma$

2は$4\pi/2\pi$である．また，立体角について$(+++)=(---)$，$(++-)=(--+)$などの関係があるので，(0)は

(0') $(+++)+(++-)+(+-+)+(-++)=2\pi$

と書ける．(1) (2) (3)を加えて(0')を使うと目的のΩの表現が得られる．立体角あるいは（2次元）球面3角形の面積は，このように内角和のみの情報で書き表すことができた．しかし，次元を1次元だけ高めたときには，このようにはいかない．

単位球面上の球面3角形の面積は$\Omega=\alpha+\beta+\gamma-\pi$．　単位球面上の球面p角形の面積は，（$p-2$）個の球面3角形に分割できるから，$\Omega=\Sigma\alpha-(p-2)\pi$と表せる．$\Sigma\alpha$は内角和である．単位球の表面をV個の頂点とE個の大円弧によって，F個の球面多角形領域に分割したとする．このとき，

(5) $4\pi=\Sigma\Omega=\Sigma\,[\Sigma\alpha-(p-2)\pi]$

と表せるが，

(6) $\Sigma\Sigma\alpha=2\pi V$,　　$\Sigma p=2E$,　　$\Sigma 2=2F$

であるから，これらを使って，右辺は

(7) $2\pi V-2(E-F)\pi=2\pi(V-E+F)$．

これで，Eulerの関係式が導けた．p角形面の数をF_p，稜あるいは面がq個集まる頂点の数をV_qとすれば，

(8) $\Sigma F_p=F$,　　$\Sigma V_q=V$,
(9) $\Sigma pF_p=\Sigma qV_q=2E$

これらをEulerの関係式に代入すれば，

(10) $\Sigma(1-q/2)V_q+\Sigma(1-p/2)F_p=2$

すべての$q=3$　（単純多面体という）のとき，$3V=2E=\Sigma pF_p$となって，

(11)　$V-E+F=\Sigma(p/3-p/2+1)F_p=2$

つまり，

(12)　$\Sigma(6-p)F_p=12.$

この式によれば，すべて$p=6$ならば$F\to\infty$となってしまう．（単純）多面体には$p<6$の面が必ず存在する．より正確には各面の（$6-p$）の和がちょうど１２である．$p<6$の面が正の曲率をもたらし，$p>6$の面が負の曲率を担う．$p=3$を使えば$F=4$ですむが，$p=5$のみなら最低$F=12$は必要である．

次に，球面の分割ではなく，多面体の内角について考える．各頂点での内角和$\Sigma\alpha$が2πからどれだけ減少しているかを考え，全ての頂点についてその量の和を求める．

(13)　$\Sigma(2\pi-\Sigma\alpha)=2\pi V-\pi\Sigma(p-2)F_p=2\pi(V-E+F)=4\pi$

すなわち，各頂点での内角和の2πからの欠損（展開図で切り取る部分の角度）は，合計丁度4π（すなわち球面ぐるりの立体角）に達する．多角形の外角和が2πという関係と統一的に捉えることができる．

§３．　回転の表現

単位ベクトル**A**を軸とする角度θの回転によって，ベクトル**P**が**Q**に移ったとする．このとき，

(14)　$\mathbf{Q}=(\mathbf{A}\mathbf{P})(1-\cos\theta)\mathbf{A}+\mathbf{P}\cos\theta+[\mathbf{A}\times\mathbf{P}]\sin\theta$

と表すことができる．

３回対称軸の配置としては(1, 1, 1) (1, -1, -1) (-1, 1, -1) (-1, -1, 1)の４本組と，それに$(\tau, 0, \tau^{-1})$ $(\tau, 0, -\tau^{-1})$ $(0, \tau^{-1}, \tau)$ $(0, -\tau^{-1}, \tau)$ $(\tau^{-1}, \tau, 0)$ $(-\tau^{-1}, \tau, 0)$ の６本を加えた10本組が，可能である．ただし，$\tau=(1+\sqrt{5})/2=1.618\cdots$は黄金比で，$\tau^2=\tau+1$，$\tau^{-1}=\tau-1$ を充す．最初に２本の関係を仮定し，上記の式を使ってそれらを複製して行ってみれば，これらで閉じていることが容易に確かめられる．

§４．正12面体－正20面体

３次元空間で，普通のデカルト座標をとったとき，一組の相異なる０でない３数a, b, cのみで表しうる点は，それらの順序からの$3!=6$ と符号の可能性$2^3=8$ を乗じた48点までである．それより多い点は３次元デカルト座標では互いに同等には見えない．それが，正12面体－正20面体的な対称性では，120点（正12面体の各5角形面に10点ずつ）が同等なのである．６本の５回軸が (p, q, 0) (p, -q, 0) (q, 0, p) (-q, 0, p) (0, p, q) (0, p, -q)で表せること（$p=\sqrt{(1+t)/2}$，$q=\sqrt{(1-t)/2}$，$t=1/\sqrt{5}$である），15本の２回軸が$(\tau, 1, \tau^{-1})$などの24本と(1, 0, 0)などの６本で表せることを知っていると便利である．一般に，$p^2+q^2=1$, p^2-q^2

=sとしておき，sを連続的に変化させたとき，s=0（立方体的）とs=t（正12面体-正20面体的）が特別に対称性高くなることを確かめてみるとよい．この描像は，これらを連続的につなぐものである．

(p, q, 0)型の12点のみを考えると，s=0では立方体の稜の中心で，原点を含めると面心立方的な配置である．12点あるいは13点について強結合模型での電子構造などを sをパラメータとして計算してみるのも興味深い．空間的な対称性が高ければ高度な縮重が起こり，s=tのときには5重縮重も現れる．それだけ球対称に近いということである．よく知られているように，球対称の場合には，整数固有値L の角運動量に対して2L+1重の縮重が可能である．

§5.　球の充填

元素の周期律は，角運動量による縮重で理解できる．一方等大剛体球による面心立方型規則的空間充填では，各閉殻の収容数は1, 12, 42, 92, 162, ･･ となり，第n(>0)殻に$10n^2+2$個である．第n殻までの累積は，$(10n^3+15n^2+11n+3)/3$=1, 13, 55, 147, ･･である．超微粒子では，nが小さいうちはほとんどの原子が表面上にあり，表面原子の数が総数の半数を切るのはn=5のときで561中252，10%を切るのはn=29で85609 中8412である．ちなみに1%はn=300で総数9×10^7 である．

さて，面心立方型規則的空間充填は結晶的で，表面からの距離こそ違え，どの球も同じ構造環境にある．しかし，この構造が，正４面体のみによる充填ではなく，と正８面体も混えた充填であることを記憶にとどめておきたい．

それに対して，s=tの方は，中心に関する対称性ははるかに高い．n=1の球間距離はほぼ1.05で，いわば，第１殻内にも隙間があることになる．従って，正４面体ではないが，中心部分は単一４面体のみの充填になっている．その結果，少なくとも局所的な充填効率が面心立方型よりもよい．しかし，n>1の正確な配置がnに依存するので，かなり複雑であるが，中心部付近で局所的に充填効率がよいだけで，等大球充填では nの増加と共に無理が募って来る．だから，長距離秩序は組めそうもない．そのことが，非晶質構造と関係していると考えられてきた．この観点からいえば，非晶質は，局所利益を優先した不均質構造．結晶は，全員が最善を諦めて譲歩した均質構造とである．

§6.　準結晶と一般結晶学・一般構造学

さて，準結晶は，このような構造が非周期的な長距離秩序を組めることを示した物であるということができる．ただし，その典型的なモデルと考えられるPenrose tilingには，異常に接近した「格子点」もあるので，等大球の充填とは考えにくい．また，幾何学的な秩序形成の可能性と物理過程とは無関係ではないが，一応別物である．とはいえ，準結晶の幾何学は美しくまた興味深く，さまざまな示唆に富んでいる．カオスのような予測不能問題とも関係があり，その面からも物理の基本問題とつながっている．固体電子論の基礎である Broch定理を前提にできず．結晶学も，準結晶を含めた一般結晶学・一般構造学にまとめあげる必要がある．

話が突然に飛ぶが，比例代表制選挙の議席配分や，人員・資源の配分問題のような，高次元整数化問題も一般結晶学のテーマといってよい．配分の根拠となる需要や得票率は，

有理比としても複雑な比でありうる．それに対して，より簡単な有理比，つまり最善の格子点を選びだそうという問題であるから，結晶と無縁ではない．

「棒の結晶学」も「棒の準結晶学」について冒頭で触れたが，若い建築家日詰明男との共同研究中のテーマである．概念としては，無限に長い合同な円柱を用いて，３以上有限種類の方向のみを許して互いに接触する配置を探す問題である．断面を円形以外に拡張することもできる．実際には，竹ヒゴや，竹串を用いて立体的に組み上げた織物といっても良い．周期的にも，非周期的にも組むことができる．もっとも簡単なのは，互いに直交する３方向の周期的配置で，いわゆるＡ15構造みたいなものである．m, nを整数，kを実数として，(x=k, y=m, z=n+0.5) (y=k, z=m, x=n+0.5) (z=k, x=m, y=n+0.5)として，直径1の円柱で組むことができる．これを３軸織という．これを押し広げてもう1軸足したように，(1, 1, 1) (1, -1, -1) (-1, 1, -1) (-1, -1, 1)方向の4軸織も可能である．４方向の３回軸が一中心から放射状に出ているものではないことは，組んだものを見れば一目瞭然である．(1, 1, 0) (1, -1, 0) (0, 1, 1) (0, 1, -1) (1, 0, 1) (-1, 0, 1)方向の６軸織も可能である．①これらの方向の相対位置を定めて，これらを実際に織ること，②これらの直線を数式で記述し，対称性を正しく見きわめること，③その対称性が見やすいような素直な単位胞を見いだすこと．これらを有機的に行うことはそうたやすいことではないが，興味深く，有意義なことである．

以上は，結晶的な多軸織であるが，正12面体的な６方向を使い，正５角形版の２次元ペンローズ・タイリングの５角形頂点に棒を平行配置することによって，３次元準結晶的な６軸織が可能である．実際に28cmのバベキュー串で１方向に90本，合計 540本を組んだものをご披露するつもりである．仮想的に無限長のものを使えば無限に大きい組みものを織れることが証明できた．３次元準結晶についての新しい模型あるいは理解方法がえられるという期待を持って研究中である．

この非周期的多軸織の原型は，正５角形的５本組平行配置６組からなる30本組である．ごくごく一般に，ものとものとの基本的な相互関係には，単一量の大小関係による階層構造の他に，ヘビ・ナメクジ・カエルあるいはグー・チョキ・パーなり三権分立といった三すくみ関係がある．この30本組の30本は，どれがどれを一方的に支えているという関係ではなく，まったく対等の立場で支えあっており，ありうる基本関係の一つといってもよさそうである．

§７．　球面調和関数とかたち

球面調和関数は単位ベクトル表示で理解すると便利である．変数を単位ベクトル**R**とする．**a**, **b**, **c**などを定単位ベクトルとして，内積（スカラー積）（**aR**）等の直交多項式で考える．普通の表示は，**a**, **b**, **c**などを互いに直交する単位ベクトル**x**, **y**, **z**に限定したものであるが，これらを任意にとってかまわない．球面調和関数は，内積を**R**についての全立体角積分で定義した直交多項式とみなすことができる．

(15)　$Y_0(\mathbf{R})=1,\ \ Y_1{}^{\mathbf{a}}(\mathbf{R})=(\mathbf{aR}),\ \ Y_2{}^{\mathbf{a},\mathbf{b}}(\mathbf{R})=[3(\mathbf{aR})(\mathbf{bR})-(\mathbf{ab})]/\sqrt{[3+(\mathbf{ab})^2]},$

$Y_3{}^{\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}}(\mathbf{R})=[5(\mathbf{aR})(\mathbf{bR})(\mathbf{cR})-(\mathbf{bc})(\mathbf{aR})-(\mathbf{ca})(\mathbf{bR})-(\mathbf{ab})(\mathbf{cR})]/[\text{規格化因子}],$

$[\text{規格化因子}]=\sqrt{[5+3\{(\mathbf{ab})^2+(\mathbf{bc})^2+(\mathbf{ca})^2\}-2(\mathbf{ab})(\mathbf{bc})(\mathbf{ca})]}$