

剛体円柱の集合がとり得る構造の研究 — 周期6軸構造を中心として —*

筑波大学大学院工学研究科物理工学専攻

手嶋 吉法†

概要

合同な無限長剛体円柱を多数寄せ集めたとき、幾何学的に許される構造を、円柱の方向を[110]型の6方向だけに限った場合について、詳しく調べた。

我々は力学的に安定な構造だけを考えるために、自己保持状態という概念を導入した。[110]型の構造を考える上では、自己保持状態は2種類に限定される。そのうちの1種類の構造を調べることにより、そのような構造でトポロジカルに異なる構造が、ちょうど7種類あることを結論できた。これには、既に知られていた土方-福多の構造が含まれ、他の6種類は我々が新たに見出した構造である。

さらに我々は、7種の構造1つ1つに対して正8面体群がもつ24個の回転操作を施し、どの構造がどれだけの対称要素をもつかを調べ、また空間充填率を求めるなどして、構造の特徴づけを行った。

目次

1 はじめに

- 1.1 問題意識
- 1.2 歴史的背景
- 1.3 考えられるいくつかの応用について
- 1.4 本論の構成

2 周期6軸構造の基礎づけ

- 2.1 用語の解説および定義
- 2.2 [110]型6軸構造を取り扱う理由

3 構造が満たす条件の設定

- 3.1 自己保持状態とは
- 3.2 [110]型6軸構造における自己保持状態
- 3.3 構造が満たすべき4条件

4 構造の種類を尽くす

- 4.1 空間直線の式
- 4.2 構造の決定方法の概観

4.3 具体的に構造を求める

4.4 7種の構造の表示と単位立方格子

4.5 構造の特徴づけ — 空間充填率と回転群

4.5.1 空間充填率

4.5.2 回転操作による特徴づけ

5 まとめと今後の課題

5.1 まとめ

5.2 今後の課題

謝辞

Appendix

A 2直線の距離に関する式

B [100]型3軸構造

C [111]型4軸構造

D [110]型準周期6軸構造

E [110]型周期6軸構造の別のタイプの例

参考文献

*この論文は1995年2月に筑波大学大学院理工学研究科修士論文として書かれたものである。

†e-mail: teshima@kafka.bk.tsukuba.ac.jp (Yoshinori Teshima)

〒305 つくば市天王台 1-1-1 筑波大学物理工学系小川泰研究室

1 はじめに

1.1 問題意識

私達人間は、日常生活において、ある広さの土地に建物を建て、あるいは紙の上にもものを描き、またある容積をもつ容器にミカンやリングを詰めるなどということをしばしば行う。これらは、理想化してみれば「二次元平面上における円盤の配置の問題」や「三次元空間内における球の充填（パッキング）の問題」となる。このような問題は人間だけでなく動物界でも、なわばりの問題やミツバチの巣の構造の問題などと密接に関わっており、さらに言えば無生物の世界でも、例えば岩石、土壌、地層などの構造を調べる上で直面する問題なのである。

科学においても、配置された状態、充填された状態、あるいは被覆された状態を対象とする場合がほとんどであり、この幾何学的考察はあらゆる科学（たとえば生物学、医学、固体物理や物性物理学、土木工学、都市設計学、粉粒体の科学等々）において、その背景としていつも暗に考慮されているものである。一つを例にとってみると、「そもそも物性物理学は、構造の同定に始まる。」といわれている通りに、ある物質の物性を云々するには、その物質中の原子や分子の配置が分かっているなければならない。このことは、固体物理を支える結晶学という壮大な体系にあらわれており、近年ではアモルファス研究において、まさに構造の把握が最大の課題だったことからわかる。このような事情は、ほかのあらゆる科学においても同様である。

ここで筆者は、以下の例をふまえて一つの問題意識を喚起したい。3次元の球の最密充填率が、面心立方構造（fcc）や六方最密構造（hcp）あるいは三角格子層のランダムスタッキング構造から与えられることはよく知られていることだが、驚くべきことにこれらに対してさえ、最密であることの数学的証明は未だ与えられていないのである [1]。このことは何を意味するのであろうか。それは、我々人類が3次元空間についてまだあまりよく知らない、ということの表れではないか。球に限らず、いろいろな基本的立体を3次元空間内で寄せ集めたときに、現れ得る構造に対する知識を収集し、総合的にまとめていくことがまだまだ不足している。本研究はこのような問題意識を根底に持つ。

さて、本研究で対象とするのは、合同な円柱だけを寄せ集めたときに許される構造である。円柱の長さを無限長としたときを理想的に考えている。このとき合同な球だけの集合を考えると同時に、半径という1つのパラメータさえ定めれば、構成単位である1本の円柱についての形状は決定されたことになる。これは当然のようではあるが、例えば楕円では1つのパラメータだけでは表すことができず、長軸と短軸（あるいはそのどちらかの軸と離心率）のように2つのパラメータが必要となる。円柱の配置や充填の問題は、この意味で基本的対象の1つと位置づけることができる。

1.2 歴史的背景

我々が基本的考察対象と考える、この「合同円柱の集合がとる構造」であるが、意外にも過去にそれ程多くの研究はなされていない。

先駆的研究として、1977年の O'Keeffe と Anderson による論文 [2] を挙げることができる。(また、付録 B,C を参照のこと。) ここでは、ロッド系の周期的 4 軸構造が、ガーネット等の構造を説明するモデルとして用いられた。また、彼らによる仕事ではないが、1 軸構造、2 軸構造、3 軸構造も、対応する実際の結晶と共にそこに提示されている。

また近年、複合強化材料を設計する分野において、このロッド系の構造物が注目を浴びた。これは、言ってみれば 3 次元の編み物である。通常の布のような 2 次元の編み物は、その繊維方向の引っ張り力には強いが、布面の法線方向の力には弱い。そこで繊維を 3 次元で出来るだけ等方的に組むことで、どの方向からの力に対しても強い素材をつくるわけである。これらは、実際にロケット等の強化部品として使用されている。この分野の中で、土方と福多の論文 [3] に注目したい。このなかには、O'Keeffe-Anderson では見られなかった、周期的 6 軸構造についての記述がある。そもそも本研究は、この土方-福多の構造を理解したいという欲求、そしてそれ以外にこの周期的 6 軸構造が考えられないかという疑問に端を発する。

また、参考までに述べると、立体パズルの本のなかに、ロッドの 4 軸構造等に相当するものが見受けられる (たとえば、Alan Holden[4])。

1.3 考えられるいくつかの応用について

本研究はロッド系の多軸構造の応用についての研究ではなく、構造そのものに対する研究であるが、本研究で扱うような構造が、どのように役立ちうるかということを考えてみるのは、無意味ではないし、読者にも限らない興味を喚起する可能性がある。そこで以下に 2、3 の例を掲げる。これを見て、読者が本研究に対し少しでも関心を持っていただければ、幸いである。

まず、既に述べたように、ロッド系の構造は、実際の結晶構造のモデルとして用いられる。それは、結晶の回転対称軸同志が交わらずに、ネジレの関係にあるような、直観ではとらえきれない複雑な結晶に対して、大変理解しやすい構造モデルを与える。たとえば、A15 構造やザクロ石構造はその典型例である。(これらに関しては、付録 B,C と参考文献 [2] を参照のこと。)

また、やはり既に触れたが、複合強化材料としての応用がある。炭素繊維をロッドとして用い、多軸構造を組み上げた後、焼き固めるという。その分野での研究報告 [5] によると、強度等の諸性質は、軸数を 7 以上にしても 6 軸構造と比べてさほど改良されることはないとされている。

さらに、最近生物物理の分野等で蛋白質の構造の研究が進んでいるが、棒状である生体高分子の構造モデルを理解する上でロッド系の構造の知識が役立つ可能性がある。棒状高分子の結晶化においては、それらがちょうど円柱のパッキングと同じ様に、出来るだけ密な配置をとろうとする場合があるからである [6]。

1.4 本論の構成

以上、序論として様々なことを述べてきたが、ここで、以下の本論で述べられる内容について簡単にふれておく。

2章では、本研究で新たに用いられる言葉の定義を行うと共に、考察対象を明らかにする。

3章では、自己保持状態という概念を導入し、構造の満たすべき4つの条件を明記する。

4章では、3章で設定された条件を満足する構造を、全て網羅するための系統的方法を示す。その結果、4条件をクリアするものが、わずか7種類に限られるということが結論される。また、それら7種に対して個々の特徴づけを行う。

5章をまとめとし、今後の課題についても述べる。

2 周期6軸構造の基礎づけ

2.1 用語の解説および定義

本論文において、特別な意味で用いられる言葉や新たな造語について、解説あるいは定義を以下に与える。

- ロッド（あるいはロッド系） — 剛体円柱、または多数の合同な剛体円柱の集合を指す。長さは、理想的に無限長とする。
- 排除体積効果 — 剛体円柱を考えているから、2本の円柱の中心線間距離は最も接近した場合でも円柱の直径の距離までである。その強い斥力のこと。
- n 軸構造 — n を自然数として、ロッドの方向数を n 個に限った構造。この n 方向それぞれに対して平行にロッドを配置する、いわば3次元の編み物を考察対象とする。我々が詳しく論じるのは、次に説明する[110]型の周期6軸構造である。
- [110]方向 — 次の6方向を意味する： $(1, \pm 1, 0)$, $(0, 1, \pm 1)$, $(\pm 1, 0, 1)$ 。これらの方向を、具体的な立体と対応づけて表現すれば、正4面体がもつ6稜の方向、立方体の各面（正方形）上での対角線の方向、あるいは菱形12面体の各面に対する法線方向6つとも言い表すことが出来る（図1）。なお、同じく6方向だがより等方的である $[1\tau 0]$ 型の6方向については、付録Dを参考されたい。

2.2 [110]型6軸構造を取り扱う理由

一般の n 軸構造のなかで、とくにこの[110]型6軸構造を扱う理由を述べる必要がある。つまり「5軸や7軸や8軸ではどうしていけないか」というような素朴な疑問に筆者は答えようと思う。率直な答えとしては、「5軸でも7軸でも8軸でも研究価値はある」といえる。これらは個別に面白い問題を含んでいるからである。ただし、我々は空間で n 方向を選ぶとき、出来るだけ等方的な方向を選んでいる。

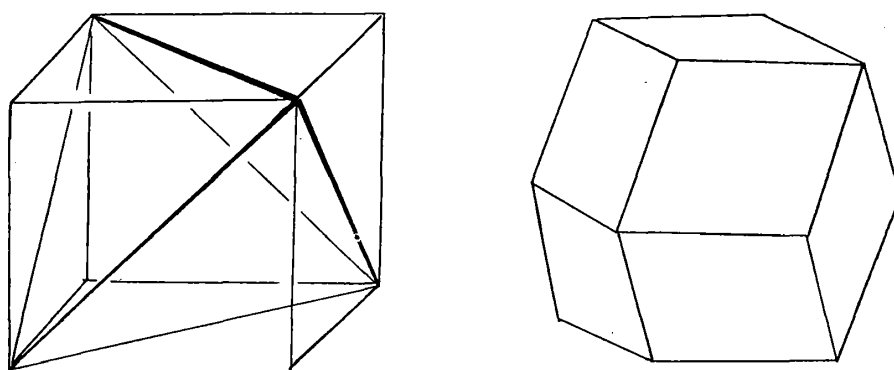


図 1: $[110]$ 型 6 方向を特徴づける立体。(左) 立方体とそれに合体した正 4 面体、(右) 菱形 12 面体。

平面内で 1 点から等方的な n 方向をつくる場合は、円周角 360° を n 等分した角度をなすように、1 点から線分を次々に引いていけばよい。しかし、空間内においては話は全く異なる。この事情は、平面内で正多角形はいくらでもつくれるが、空間内で正多面体が 5 種類しか存在しないということを反映している。軸数の少ない方から順に考えていくと、1 軸は考えるまでもなくどの方向を探ってもよい。2 軸では、互いに垂直な 2 方向を選び、当然その 2 方向は同等である。3 軸では、デカルト座標の直交座標軸の方向 ($[100]$ 方向) を選べば、やはりどの軸も同等である。4 軸では、 $[111]$ 方向つまり立方体の体心対角線の 4 方向を選べば、どの軸も同等 (1 つの軸が他の 3 軸となす角 θ は $\theta = \arccos(1/3)$ となり全て同じ) である。5 軸に対しては、そのような同等な 5 方向が空間内でとれないことがわかっている。それは、正 10 面体 (5 方向の 2 倍としての 10) なるものが存在しないことと対応している。3 軸に対しては正 6 面体 ($6 = 3 \times 2$) が、4 軸に対しては正 8 面体 ($8 = 4 \times 2$) が存在するから、同等な 3 方向、4 方向がとれるのである。

実は、上記のような意味、つまり 1 つの軸が残りの軸となす角度が 1 種類でありどの軸についてもそれがいえる、という意味での対称性をもつ方向は、最大 6 方向までである。その 6 方向は $[1\tau0]$ 方向 (ただし $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$) として表され、正 12 面体や正 20 面体をもつ 5 回軸 6 本の方向と対応している。この場合も、1 つの方向に対する残りの 5 方向の角度はみな等しい (付録 D 参照)。

7 軸以上に対しては、このような意味での対称性をもつ方向はない。よって、「空間で等方的な n 方向を選んだとき、その内から任意に 1 つの方向をとり、その方向と残りの $(n-1)$ 個の方向との角度がみな等しいとする。このような n は、 $n=1, 2, 3, 4, 6$ に限られる。」
 と言うことが出来る。

$[1\tau0]$ 型 6 軸構造を調べることは、上記の意味で基本的であると同時に、この方向が 5 回対称をもつ準周期構造を生み出す、という点においても重要である。

ところが、今回我々が調べるのは、 $[110]$ 型の 6 方向からなる構造である。この 6 方向は上記の意味での対称性をもっていない。どの 6 方向も同等な立場ではあるが、任意の 1 方向に対する残りの 5 方向が、 90° のものが 1 つと 60° のものが 4 つという具合に、1 方向

と他方向のなす角が2種類ある。また、この方向から生み出されるのは周期構造である。

[1 1 0] 方向を取り上げる理由は、ひとつには6軸という同じ土俵の上で周期と準周期の比較を行いたいという考えからである。準周期的6方向と比べ、上で述べた意味で対称性が低下した周期的6方向から、どのような構造のバリエーションが発生するのかを調べたい。

もうひとつの理由は、周期構造としての利点である。例えば複合強化材料の生産過程上、周期的なものでないと大量生産にむすびつかないし、結晶や生体高分子の構造として6軸構造が見い出されることが今後あるとしても、それが周期6軸である可能性の方が準周期6軸である可能性よりも高いと思われる。

以上が、[1 1 0] 型の6軸構造を本研究のテーマとした理由である。[1 τ 0] 型の6軸構造についての系統的な検討はまだなされておらず、それは我々のグループがかかえる大きな問題である。

3 構造が満たす条件の設定

3.1 自己保持状態とは

説明をわかりやすくするために、まず「2次元における合同な剛体円盤の集合による自己保持構造」を説明する。

円盤の充填においては、隣り合う2円の中心は互いにその直径までの距離しか近づけない。また、「1つの円盤を固定するにはその円盤の円周上で、最低ほかの3個の円盤と接し、かつその3接点を結んで出来る3角形が鋭角3角形でなければならない」といえる(図2、L. Fejes Tóth [7] 参考)。

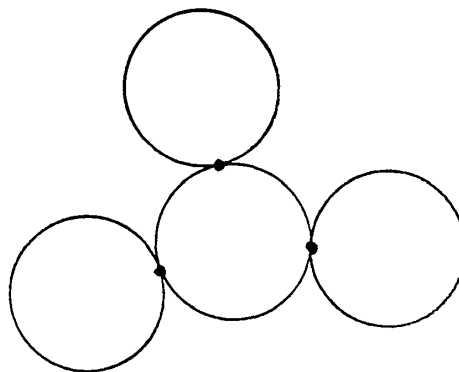


図 2: 2次元での円盤の固定

我々は、たくさんの円盤の集合を考えたときに、どの1つの円盤を見てもそれが上記の意味で固定されているときに、その円盤の集合全体を「自己保持構造」と呼ぶ。

2次元円盤における、最大円盤隣接数は6 (L. Fejes Tóth [7] 参考) であるから、結局隣接数が6、5、4、3の場合に自己保持構造を得る可能性があるわけである。図3に示すのは、その代表的なもので、隣接数が6のみ、4のみ、3のみからなる規則的な充填の例である。図3の左(隣接数6)は2次元における最密充填な構造である。

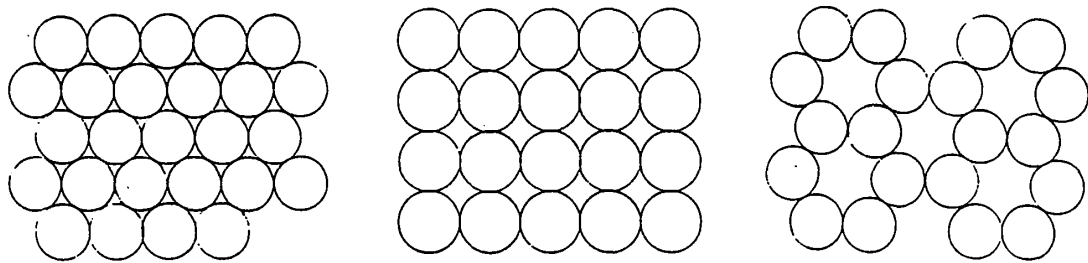


図 3: 2次元円盤系における自己保持構造の例。

3次元に話を移す。まず空間で1個の球を固定することを考える。このとき少なくとも4個の球が必要である (L. Fejes Tóth [7] 参考)。

では3次元ロッド系では、どうであろうか。まず注意すべきこととして、空間中での2ロッドの中心線の相対関係は、「平行」か「ネジレ」のいずれかしかないということである。空間中での任意の2直線の相対関係は、「交わる」、「平行」、「ネジレ」のいずれかになるが、ロッドの場合は排除体積をもつので「交わる」ことはない。従って、空間中で1本のロッドが固定されるのは、「平行」なロッドと接するか、「ネジレ」のロッドと接するかのどちらかによってである。「平行」なロッド同士が接する場合は、「2次元円盤充填」と同様の考察で済む。3次元でのロッド系多軸構造を考える場合の特有な面白さは、「ネジレ」のロッドと接して固定されるところにある。よって以下では専ら「ネジレ」のロッドと接し合う構造に対象を制限する。「ネジレ」のロッドと「平行」なロッドによる固定の両方を含むような構造については、O'Keeffe が4軸構造に限り考察している (O'Keeffe [8] 参照)。

一つ方向と他の「ネジレ」のロッドとの距離の関係をみるときは、投影図を考えるのが便利である。ここで、「2次元円盤」の例にならって「1本のロッドの固定」を考えてみると次の様になる (図4参考)。

「周期構造において、1本のロッドに垂直な面への射影図をとったとき、そのロッドが他のロッドと3点以上で接し、かつその3点を結んでできる3角形が鋭角3角形であれば、そのロッドは固定されている (そのロッドは自己保持状態にある、という)」

同じ3次元内での固定であるのに、球の場合別の球が少なくとも4個必要であるのに、ロッドでは最小「3本」で済むのは、無限長のロッドを考えているということで軸方向への移動 (すべり) によっては構造は不変とみなしているからである。

よって、ロッド系における自己保持構造を次のように定義する。

「ロッドの集合を考えたときに、それらのどのロッドをみても固定されているとき、その集合全体を自己保持構造と呼ぶ」

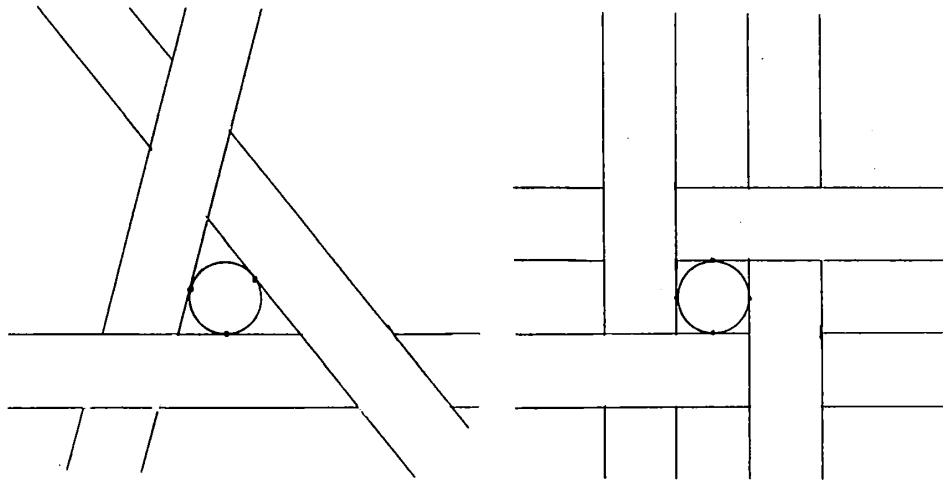


図 4: 3次元ロッド系における固定の例。(左右ともに中心のロッドの方向に垂直な面への投影図)

3.2 [110] 型 6 軸構造における自己保持状態

[1 1 0] 型 6 方向については既に説明を与えたように、1つの方向からみた角度にもとづき、他の 5 方向は 2 種類に分類される。例えば $(1, 1, 0)$ 方向を基準に考えると他の 5 方向は、 90° をなす $(1, -1, 0)$ と、 60° をなす 4 方向 $(0, 1, \pm 1), (\pm 1, 0, 1)$ の 2 種に分類される。この関係は、どの方向を基準にとっても成り立つ。

よって、どれか 1 つの方向に属するロッド（ここでは $(1, 1, 0)$ 方向のロッド）に垂直な、一般的な投影図は図 5 のようになる。

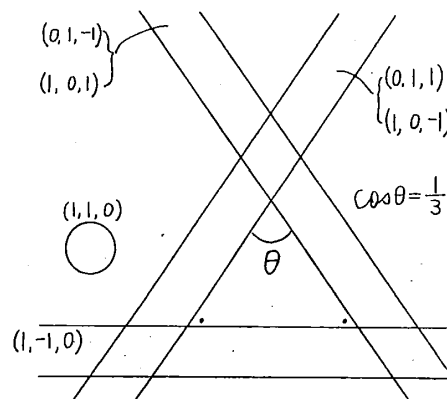


図 5: [110] 型 6 方向をとるロッドを $(1, 1, 0)$ を法線ベクトルとする平面に投影した図。(他の 5 方向との関係に注意)

図 5 と 3.1 の「固定」の条件から次のことがいえる。

「[1 1 0] 型 6 軸構造における自己保持状態は、Fig.6 の 2 種類に限られる」

我々の目的は、[110] 型 6 軸構造において全ての自己保持構造を明らかにすることである。それは、上述の 2 種の自己保持状態をふまえたものでなくてはならない。しかし、残念ながら以下本研究では、case-1 の自己保持状態しか系統的に扱わない。現時点では、case-2 を含むような自己保持構造に関する系統的な研究は未解決の問題として残っている。

case-2 を含め得なかったことは、不本意なことではあるが、我々は case-1 の自己保持状態だけからなる構造が数種であることを決定し得たのである。これは今までに知られてい

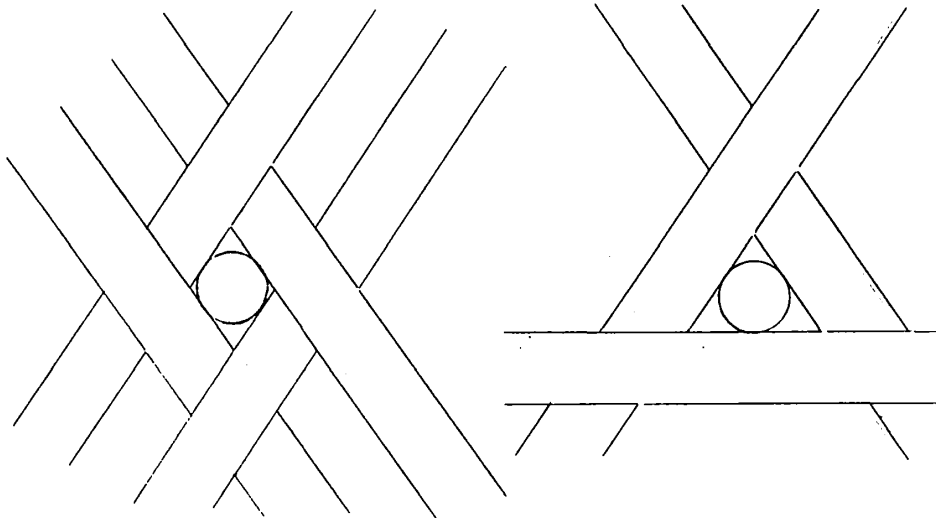


図 6: [110] 型 6 軸構造において固定が実現する 2 つの場合。(左) 中央のロッドがそれと 60° をなす 4 本のロッドから固定される (case-1)。(右) 中央のロッドがそれと 60° をなす 2 本のロッドと 90° をなす 1 本のロッドから固定される (case-2)。

ない重要な結果である。

3.3 構造が満たすべき 4 条件

本研究では、以下の 4 条件を満たす構造を全て網羅する。

1. 合同な剛体円柱（ロッド）のみの集合を考える。
2. ロッドのとり得る方向は、 $[1\ 1\ 0]$ 型 6 方向に限る。
3. 全てのロッドは、それと 60° をなす 4 方向のロッドにより固定される。[case-1]
4. 構造の立方体単位格子が 1 方向あたり $\sqrt{2}a$ の長さのロッドを含むような構造を考える。(a は格子定数)

条件 1、2、3 は既に述べたことをまとめたに過ぎない。条件 4 の意味するところは、図 7 をみるとわかりやすい。つまり、各 6 方向のロッドは、単位格子中にこの図の長さ分だけ含まれるということである。

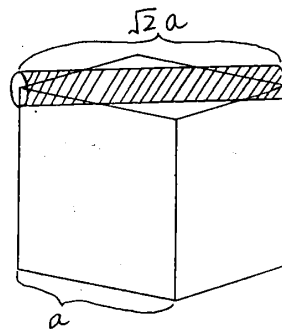


図 7: 単位立方体中に含まれるロッドの長さは、1 方向あたり $\sqrt{2}a$ とする。

4 構造の種類を尽くす

本節では、3.3 で設定した 4 条件を満足する構造を実際に求める。

4.1 空間直線の式

任意のロッドは、その中心線の直線の式 $\vec{P}$ とその太さ d (直径) で指定される。直線の式は、方向ベクトル $\vec{A}$ と空間中の 1 定点 $\vec{B}$ を用いて、

$$\vec{P} = t\vec{A} + \vec{B} \quad (1)$$

(ただし、 t はパラメータ) と表される。

[1 1 0] 型 6 軸構造を考える上では、方向ベクトル $\vec{A}$ は、

$$\begin{aligned} \vec{A}_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{A}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \vec{A}_4 &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{A}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \vec{A}_6 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2)$$

となる。

また、定点を表すベクトル $\vec{B}$ は、方向ベクトル $\vec{A}$ に対していつでも

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = 0 \quad (3)$$

の形に選ぶことができる (図 8)。

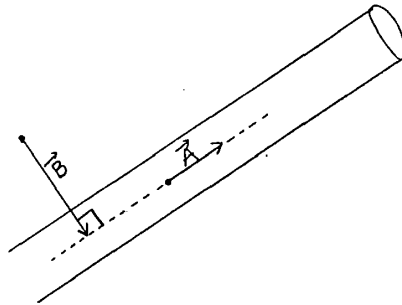


図 8: 定点のベクトル $\vec{B}$ は、方向ベクトル $\vec{A}$ に対して直交するように選ぶ。(未知パラメータの減少)

そしてそのとき、各 6 方向のロッドの中心線を表す式は、

$$\vec{P}_1 = t\vec{A}_1 + \vec{B}_1 = t \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_1 \\ -c_1 \\ d_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t + c_1 \\ t - c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$\vec{P}_2 = t\vec{A}_2 + \vec{B}_2 = t \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_2 \\ c_2 \\ -c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_2 \\ t + c_2 \\ t - c_2 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\vec{P}_3 = t\vec{A}_3 + \vec{B}_3 = t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -c_3 \\ d_3 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t - c_3 \\ d_3 \\ t + c_3 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$\vec{P}_4 = t\vec{A}_4 + \vec{B}_4 = t \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_4 \\ c_4 \\ d_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t + c_4 \\ -t + c_4 \\ d_4 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$\vec{P}_5 = t\vec{A}_5 + \vec{B}_5 = t \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_5 \\ c_5 \\ c_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_5 \\ t + c_5 \\ -t + c_5 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\vec{P}_6 = t\vec{A}_6 + \vec{B}_6 = t \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_6 \\ d_6 \\ c_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -t + c_6 \\ d_6 \\ t + c_6 \end{pmatrix} \quad (9)$$

というふうに、シンプルな形で書ける。(たとえば、 $\vec{P}_1$ をみると

$$\vec{A}_1 \cdot \vec{B}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ -c_1 \\ d_1 \end{pmatrix} = 0 \quad (10)$$

となり、確かに内積が0となるように $\vec{B}_1$ はとられている。)

我々は周期構造を取り扱うので、単位格子を考えることが出来る。この単位格子を立方体にとり、その1辺の長さを a とする。座標軸は単位格子に対して、図9のようにとる。

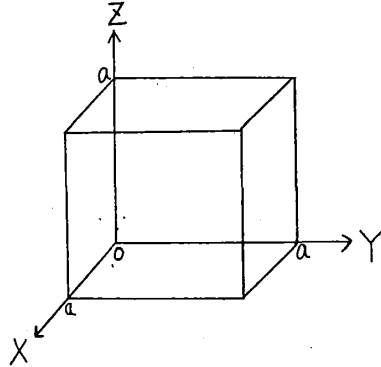


図9: 座標系中への単位立方格子の据え方。(ただし、4.4で平行移動により原点をずらす)

我々がなすべきことは、単位格子内において次の12個の定数

$$c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6,$$

$$d_1, d_2, d_3, d_4, d_5, d_6$$

を条件1、3、4を満たすように決定することである。(条件2は方向ベクトルを(2)と採った段階で既に満たされている。)

4.2 構造の決定方法の概観

この節では、条件1～4を満たす構造を求める際の基本的な考え方を、正四面体（図10）を思考の助けとしながら説明していく。（正四面体の6稜は $[1\ 1\ 0]$ 方向と対応づく。ロッド $\vec{P}_1$ から $\vec{P}_6$ はそれらと平行に配置される。）

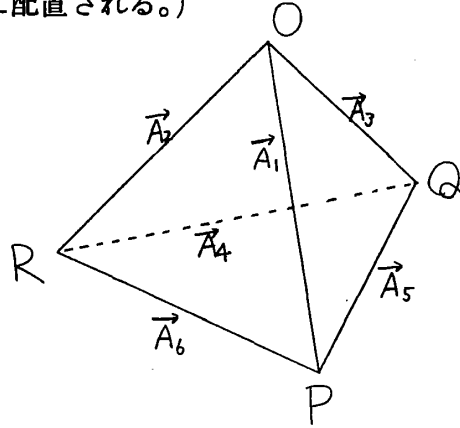


図10: 正四面体が有する6稜は、 $[110]$ 型6方向と対応づく。

説明のポイントをはっきりさせるため、ロッド $\vec{P}_1$ に注目して話を進めることにする。

条件3を満たすということは、ロッド $\vec{P}_1$ が、ロッド $\vec{P}_2, \vec{P}_3, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ の4方向のロッドから固定されているということであるが、これを

$$\begin{cases} \vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_6 \\ \vec{P}_1, \vec{P}_3, \vec{P}_5 \end{cases}$$

の2組に分けて考える。つまり $\triangle OPR$ と $\triangle OPQ$ 上にある3稜づつ（に平行なロッド）に分けて考える。

ロッド $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_6$ は、方向ベクトルが互いに 60° をなす3ロッドであり、 $\vec{P}_1$ は $\vec{P}_2$ と $\vec{P}_6$ と接して固定されている。 $\vec{P}_2, \vec{P}_6$ もまた $\vec{P}_1$ と同様にそれ自身と 60° をなすロッドから固定されなくてはならないので、結局 $\vec{P}_2$ は $\vec{P}_1$ と $\vec{P}_6$ に固定され、 $\vec{P}_6$ は $\vec{P}_1$ と $\vec{P}_2$ に固定されなければならない。これをまとめると、

「 $\triangle OPR$ の3稜と平行なロッド $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_6$ は $\triangle OPR$ の法線方向である $(1, -1, 1)$ 方向に沿って、

$$\dots \vec{P}_1 \vec{P}_2 \vec{P}_6 \vec{P}_1 \vec{P}_2 \vec{P}_6 \vec{P}_1 \dots$$

という具合に、3者が互いに接するように配置されなければならない。」

（ここで、ロッド $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_6$ は、 $\triangle OPR$ を含む平面と平行であり、その平面と交点をもたないということは認識しておくべきことである。）

さらに条件1を付加すれば、上記の内容は次の様になる。「 $\triangle OPR$ の3稜と平行なロッド $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_6$ は、 $(1, -1, 1)$ 方向に沿って、 $\dots \vec{P}_1 \vec{P}_2 \vec{P}_6 \vec{P}_1 \vec{P}_2 \vec{P}_6 \vec{P}_1 \dots$ という具合に配置され、隣り合うロッドの中心間の距離は、等間隔（ロッドの直径分の距離）である。」同様のことが、

- $(1, 1, 1)$ 方向に沿っての $\vec{P}_4, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ ($\triangle PQR$ の稜に平行なロッド)
- $(-1, 1, 1)$ 方向に沿っての $\vec{P}_1, \vec{P}_3, \vec{P}_5$ ($\triangle OPQ$ の稜に平行なロッド)
- $(1, 1, -1)$ 方向に沿っての $\vec{P}_2, \vec{P}_3, \vec{P}_4$ ($\triangle OQR$ の稜に平行なロッド)

に関して同様に成り立つ必要がある。以上の観点が、本研究の要諦をなす部分である。

さて、この段階で全てのロッドが、自身と 60° をなすロッドから固定されたことになるが、ここで次のことを吟味しなければならない。それは、「自身と 90° の方向をなすロッドとの距離」である。

これまで、自身と 60° の方向をなすロッドとの距離だけを考えてきたから、そこから得られた構造の中には、 90° をなすロッドとの中心線間の距離が、直径よりも小さいものが含まれている危険性がある。よって、そのようなものは最終的には自己保持構造の観点から削除されるべき構造である。

こうして残ったものが、条件1～4を満たす構造として適切なものである。

4.3 具体的に構造を求める

この4.3では4.2の考え方をういて、 c_i, d_i の12定数を決定する方法を具体的に示す。

まず、各方向のロッド

$$\vec{P}_i = t\vec{A}_i + \vec{B}_i \quad (11)$$

の方向ベクトル6種の間の関係をまとめておく。表1は、方向ベクトル $\vec{A}_i (i = 1, 2, 3, 4, 5, 6)$ を規格化し、他の方向との内積の絶対値をまとめたものである。

方向	$\vec{A}_1$	$\vec{A}_2$	$\vec{A}_3$	$\vec{A}_4$	$\vec{A}_5$	$\vec{A}_6$
$\vec{A}_1$	1	1/2	1/2	0	1/2	1/2
$\vec{A}_2$	1/2	1	1/2	1/2	0	1/2
$\vec{A}_3$	1/2	1/2	1	1/2	1/2	0
$\vec{A}_4$	0	1/2	1/2	1	1/2	1/2
$\vec{A}_5$	1/2	0	1/2	1/2	1	1/2
$\vec{A}_6$	1/2	1/2	0	1/2	1/2	1

表1: 規格化した方向ベクトル間の内積の絶対値。

たとえば、方向ベクトル $\vec{A}_1$ と 60° の関係にある方向は、この表で内積 $1/2$ の値であるから、 $\vec{A}_2, \vec{A}_3, \vec{A}_5, \vec{A}_6$ である。よって条件3により、ロッド $\vec{P}_1$ は、4ロッド $\vec{P}_2, \vec{P}_3, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ から固定されなければならないということになる。同様のことが各6方向についていえるので、それらをまとめると

- ロッド $\vec{P}_1$ は、 $\vec{P}_2, \vec{P}_3, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ に固定される。

- ロッド $\vec{P}_2$ は、 $\vec{P}_1, \vec{P}_3, \vec{P}_4, \vec{P}_6$ に固定される。
- ロッド $\vec{P}_3$ は、 $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_4, \vec{P}_5$ に固定される。
- ロッド $\vec{P}_4$ は、 $\vec{P}_2, \vec{P}_3, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ に固定される。
- ロッド $\vec{P}_5$ は、 $\vec{P}_1, \vec{P}_3, \vec{P}_4, \vec{P}_6$ に固定される。
- ロッド $\vec{P}_6$ は、 $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_4, \vec{P}_5$ に固定される。

ということが、表1 からいえる。

次に、方向ベクトル $\vec{A}_i (i = 1, 2, 3, 4, 5, 6)$ と $[1\ 1\ 1]$ 型4方向との角度の関係をまとめておく。やはり、それぞれを規格化し内積の絶対値を表にしたものである。

方向	$\vec{A}_1$	$\vec{A}_2$	$\vec{A}_3$	$\vec{A}_4$	$\vec{A}_5$	$\vec{A}_6$
(1, 1, 1)	$2/\sqrt{6}$	$2/\sqrt{6}$	$2/\sqrt{6}$	0	0	0
(-1, 1, 1)	0	$2/\sqrt{6}$	0	$2/\sqrt{6}$	0	$2/\sqrt{6}$
(1, -1, 1)	0	0	$2/\sqrt{6}$	$2/\sqrt{6}$	$2/\sqrt{6}$	0
(1, 1, -1)	$2/\sqrt{6}$	0	0	0	$2/\sqrt{6}$	$2/\sqrt{6}$

表2: $[110]$ 方向と $[111]$ 方向の方向ベクトルをそれぞれ規格化し内積の絶対値をとったもの。

表2中、内積が0のところは角度が 90° ということを意味し、内積が $2/\sqrt{6}$ のところは、角度が約 35.2° だということを意味する。例えば、(1,1,1) 方向に対する各方向ベクトルの角度をみると、 35.2° をなすのが $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ で、 90° をなすのが $\vec{A}_4, \vec{A}_5, \vec{A}_6$ である。4.2で述べたように、(1,1,1) 方向との内積が0となる方向ベクトル $\vec{A}_4, \vec{A}_5, \vec{A}_6$ を持つロッド $\vec{P}_4, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ が、(1,1,1) 方向に沿って互いに接するように配置されなければならないわけである。

この様な3ロッド $\vec{P}_4, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ は、原点を通り (1,1,1) 方向を法線とする平面と交わらないから、その平面と $\vec{P}_4, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ の間の距離を考えることができる。我々はこの距離のことを、「原点からの高さ」と呼ぶことにする。

(1,1,1) 方向を I 方向と名付け、この方向に沿った $\vec{P}_4, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ の「原点からの高さ」を $h_{I,4}, h_{I,5}, h_{I,6}$ と名付ける。いま、表2の1段目であるI方向について説明したが、2段目や3段目や4段目についても内積が0を示す方向ベクトルに注意して、同様な「原点からの高さ」を考えることができる。

(-1,1,1) 方向を II 方向、(1,-1,1) 方向を III 方向、(1,1,-1) 方向を IV 方向と名付け、表2をもとにそれらをまとめてかくと、

- I方向：(1,1,1) 方向に沿っての、
 $\vec{P}_4, \vec{P}_5, \vec{P}_6$ の「原点からの高さ」： $h_{I,4}, h_{I,5}, h_{I,6}$

- II 方向： $(-1, 1, 1)$ 方向に沿っての、
 $\vec{P}_1, \vec{P}_3, \vec{P}_5$ の「原点からの高さ」： $h_{II,1}, h_{II,3}, h_{II,5}$
- III 方向： $(1, -1, 1)$ 方向に沿っての、
 $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_6$ の「原点からの高さ」： $h_{III,1}, h_{III,2}, h_{III,6}$
- IV 方向： $(1, 1, -1)$ 方向に沿っての、
 $\vec{P}_2, \vec{P}_3, \vec{P}_4$ の「原点からの高さ」： $h_{IV,2}, h_{IV,3}, h_{IV,4}$

の12個の「原点からの高さ」を考えることになる。これらを表としてまとめると表2と対応して、表3のようになる。

	$\vec{P}_1$	$\vec{P}_2$	$\vec{P}_3$	$\vec{P}_4$	$\vec{P}_5$	$\vec{P}_6$
I 方向	*	*	*	$h_{I,4}$	$h_{I,5}$	$h_{I,6}$
II 方向	$h_{II,1}$	*	$h_{II,3}$	*	$h_{II,5}$	*
III 方向	$h_{III,1}$	$h_{III,2}$	*	*	*	$h_{III,6}$
IV 方向	*	$h_{IV,2}$	$h_{IV,3}$	$h_{IV,4}$	*	*

表3: 各I~IV方向に対する、ロッドの「原点からの高さ」： h

さて、これら「原点からの高さ」の具体的表式は、規格化した $[1\ 1\ 1]$ 方向のベクトル

$$\vec{e}_I \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{e}_{II} \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{e}_{III} \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{e}_{IV} \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (12)$$

と、定点を表すベクトル $\vec{B}_i$, ($i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) との内積をとることによって与えられる。よって、12個の「原点からの高さ」の具体的表式は以下のように与えられる。

$$h_{I,4} = \vec{e}_I \cdot \vec{B}_4 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_4 + 2c_4) \quad (13)$$

$$h_{I,5} = \vec{e}_I \cdot \vec{B}_5 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_5 + 2c_5) \quad (14)$$

$$h_{I,6} = \vec{e}_I \cdot \vec{B}_6 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_6 + 2c_6) \quad (15)$$

$$h_{II,1} = \vec{e}_{II} \cdot \vec{B}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_1 - 2c_1) \quad (16)$$

$$h_{II,3} = \vec{e}_{II} \cdot \vec{B}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_3 + 2c_3) \quad (17)$$

$$h_{II,5} = \vec{e}_{II} \cdot \vec{B}_5 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-d_5 + 2c_5) \quad (18)$$

$$h_{III,1} = \vec{e}_{III} \cdot \vec{B}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_1 + 2c_1) \quad (19)$$

$$h_{III,2} = e_{\vec{III}} \cdot \vec{B}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_2 - 2c_2) \quad (20)$$

$$h_{III,6} = e_{\vec{III}} \cdot \vec{B}_6 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-d_6 + 2c_6) \quad (21)$$

$$h_{IV,2} = e_{\vec{IV}} \cdot \vec{B}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_2 + 2c_2) \quad (22)$$

$$h_{IV,3} = e_{\vec{IV}} \cdot \vec{B}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_3 - 2c_3) \quad (23)$$

$$h_{IV,4} = e_{\vec{IV}} \cdot \vec{B}_4 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-d_4 + 2c_4) \quad (24)$$

次に我々がなすべきことは、12個の「原点からの高さ」を同時に与えてやることである。すると上記の12個の方程式を解くことにより、求めるべき12個の未知数 $c_i, d_i (i = 1, 2, 3, 4, 5, 6)$ が定まり、1つの構造を得たことになる。具体的には、 $\vec{B}_1 = (c_1, -c_1, d_1)$ は

$$\begin{cases} h_{II,1} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_1 - 2c_1) \\ h_{III,1} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_1 + 2c_1) \end{cases}$$

$\vec{B}_2 = (d_2, c_2, -c_2)$ は

$$\begin{cases} h_{III,2} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_2 - 2c_2) \\ h_{IV,2} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_2 + 2c_2) \end{cases}$$

$\vec{B}_3 = (-c_3, d_3, c_3)$ は

$$\begin{cases} h_{II,3} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_3 + 2c_3) \\ h_{IV,3} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_3 - 2c_3) \end{cases}$$

$\vec{B}_4 = (c_4, c_4, d_4)$ は

$$\begin{cases} h_{I,4} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_4 + 2c_4) \\ h_{IV,4} = \frac{1}{\sqrt{3}}(-d_4 + 2c_4) \end{cases}$$

$\vec{B}_5 = (d_5, c_5, c_5)$ は

$$\begin{cases} h_{I,5} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_5 + 2c_5) \\ h_{II,5} = \frac{1}{\sqrt{3}}(-d_5 + 2c_5) \end{cases}$$

$\vec{B}_6 = (c_6, d_6, c_6)$ は

$$\begin{cases} h_{I,6} = \frac{1}{\sqrt{3}}(d_6 + 2c_6) \\ h_{III,6} = \frac{1}{\sqrt{3}}(-d_6 + 2c_6) \end{cases}$$

の連立方程式から得られる。

ここで1組の連立方程式から2つの未知数を決定しているが、このことの幾何学的な意味は、「2平面の交線として、1直線が与えられる」ということに他ならない。つまり、ここでは[111]型の4方向の内2方向を法線に持つ2平面を考えており、あとは2個の「原点からの高さ」を与えてやれば、2平面が確定し、その交線としてロッドの中心線が決まるのである。

具体的に12個の「原点からの高さ」の組を与えることを考える。

明らかに、1本目のロッド（これを $\vec{P}_1$ にとる）はどこに固定しても良いので、 $\vec{B}_1 = (0, 0, 0)$ とする。すると、

$$h_{II,1} = 0, \quad h_{III,1} = 0$$

となるから、II 方向と III 方向の高さの基準が具体的に決まる。今、周期構造の単位立方格子を考えているのであるから、 $\vec{B}_1$ であると同時に、立方体の残りの7頂点全てにロッド $\vec{P}_1$ が配置されることになる。（図 11 の通り、立方体の周りに6本ロッドが置かれ、これらは単位格子中で同等なロッドである。）

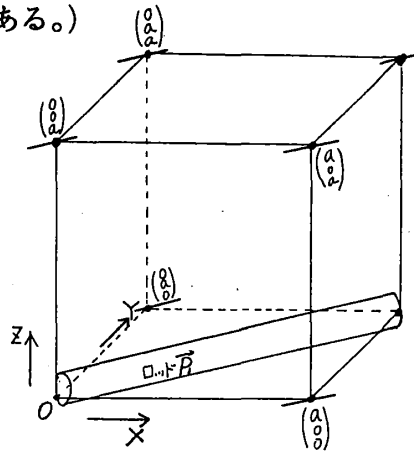


図 11: ロッド $\vec{P}_1$ が原点を通るように配置する。

そして、条件4を考慮すると、これ以上にロッド $\vec{P}_1$ がこの単位格子内に配置されることはないとわかる。 $\vec{P}_1$ に垂直な面上に単位立方体を射影すると図 12 の様になる。

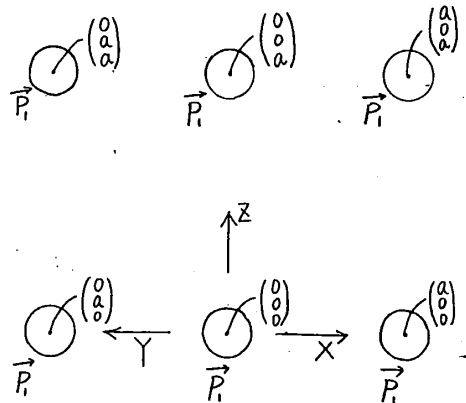


図 12: 前図の単位格子を $\vec{P}_1$ に垂直な面に投影した図。（この6本は皆 $\vec{P}_1$ である）

図 12 に III 方向 $(1, -1, 1)$ とそれに沿った $\vec{p}_1$ の「原点からの高さ」を書き込むと図 13 のようになる。

隣り合う $\vec{P}_1$ の高さの差を $a/\sqrt{3}$ で書き込んだ理由は、単位立方体の体心対角線の長さが $\sqrt{3}a$ だからである。 $h_{III,1} = 0$ と $h_{III,1} = a/\sqrt{3}$ との間に2本のロッド $\vec{P}_3$ と $\vec{P}_5$ が配置されるので、結局 $a/\sqrt{3}$ という値は直径3本分の大きさである。よって

$$\frac{a}{\sqrt{3}} = 3d \quad (25)$$

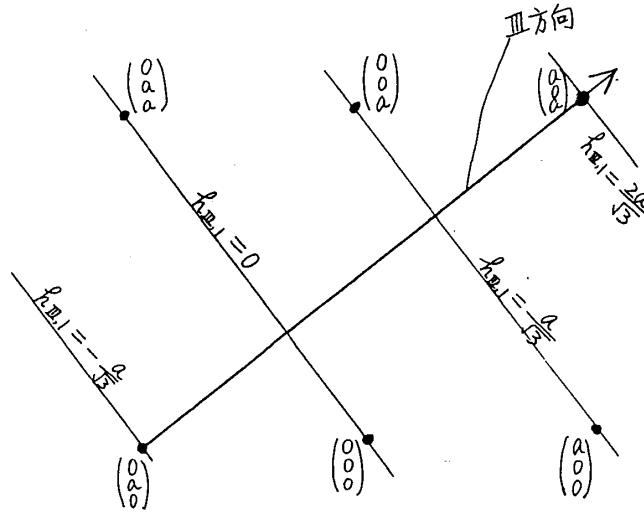


図 13: 前図と同じ投影図でロッドを黒丸で表している。III 方向とそれに沿った $\vec{P}_1$ の高さを書き込んだ。

$$\text{ゆえに } d = \frac{a}{3\sqrt{3}} \quad (26)$$

という関係式を得る。(この結果は後で充填率の計算を行うときに用いる。)

また、2 本目のロッド $\vec{P}_2$ を $\vec{P}_1$ と接する様に置く。 $\vec{B}_2 = (a/3, 0, 0)$ とすれば $\vec{P}_1$ との中心線間の距離が上で求めた直径 d と一致する。これで 2 個の「原点からの高さ」

$$h_{III,2} = h_{IV,2} = \frac{a}{3\sqrt{3}} = d$$

が決まる。

この段階で、まだ定まっていない「原点からの高さ」は 8 個である。

I 方向について $h_{I,4}, h_{I,5}, h_{I,6}$ の 3 個、II 方向について $h_{II,3}, h_{II,5}$ の 2 個、III 方向について $h_{III,6}$ の 1 個 IV 方向について $h_{IV,3}, h_{IV,4}$ の 2 個である。 $\vec{P}_2$ を $\vec{P}_1$ に接するように置いたとき、なぜ $(a/3, 0, 0)$ なのかということについて、もう少し補足を与える。 $\vec{P}_1$ と $\vec{P}_2$ が接するのは、III 方向の「原点からの高さ」の差を直径分にする事だから、 $h_{III,1} = 0$ に対しては、 $h_{III,2} = d$ であればよく、そのためには $\vec{B}_2 = (d_2, c_2, -c_2)$ は必ずしも $(a/3, 0, 0)$ でなくともよく、無限のとりかたがある。なぜなら、ただ

$$\frac{d_2 - 2c_2}{\sqrt{3}} = \frac{d}{3\sqrt{3}}$$

を満たしてさえいれば良いからである。しかし、そのような考察はロッドが 2 本だけの場合では全く無意味である。なぜなら、その 2 本の相対関係（中心線間距離、なす角）は、そのような $\vec{B}_2$ に対しても同じだからである。よって、 $\vec{B}_2$ に対してもっともシンプルな表式をとったわけであるそして、このように $\vec{P}_1, \vec{P}_2$ の 2 本を決定した時点で、II 方向に対しては、 $h_{II,1} = 0$ が決まっているので $h_{II,3}, h_{II,5}$ ともに d の整数倍の値をとることがいえる。III 方向に到っては、既に

$$h_{III,1} = 0, \quad h_{III,2} = d$$

と 2 つの高さが決まっており、ここも残りの $h_{III,6}$ に対しては d の整数倍だけを考えれば良い。IV 方向に対しても同様で、未知の $h_{IV,3}$ も $h_{IV,4}$ も d の整数倍である。そして $h_{IV,4}$,

$h_{II,5}$, $h_{III,6}$ と $h_{I,4}$, $h_{I,5}$, $h_{I,6}$ の関わりによって、一見全く基準の高さが定まっていないうにみえる I 方向の「原点からの高さ」も d の整数倍をとるのである。よって、添え数字を略して「原点からの高さ」を h とすれば、全 $[1\ 1\ 1]$ 型 4 方向について、

$$h = md, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$$

といえる。しかもこの整数 m は、広い範囲で考える必要がなく、6 段階だけで考えれば良い。

結局我々は、この有限個の組み合わせを確かめるわけである。この範疇から、3.3 節の 4 条件を満たす解が漏れることはありえないのである。

以上の全ての組み合わせをからえられる構造が、全て解になるわけではなく、自己保持構造の観点から互いに垂直なものの距離が直径より近づいているものは不適とする。さらに、4.5.2 節で説明する回転操作によりトポロジカルに同じ構造を見分け、整理する。また、実際の座標表示 c_i, d_i には、

$$c_i + k\frac{a}{2} \text{ は } c_i, \quad d_i + ka \text{ は } d_i$$

(k は整数) に変換できるので、計算で得られた座標を単位格子内の値として記述できる。

以上の考察の結果、3.3 節の 4 条件を満たす解でトポロジカルに異なるものが、7 種類であるという結論に達した。その詳細については、以下に述べる。

4.4 7 種の構造の表示と単位立方格子

前節の考察の結果、最終的に残った解 (c_i, d_i の 1 2 定数の組) は、次の 7 種である (3.3 節の 4 条件を満足する 7 つの解)。

$$\begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 & c_4 & c_5 & c_6 \\ d_1 & d_2 & d_3 & d_4 & d_5 & d_6 \end{pmatrix}$$

の並びで、

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & a/6 & a/6 & a/6 & 0 \\ 0 & a/3 & 0 & a/3 & 2a/3 & a/3 \end{pmatrix} \quad (27)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 5a/12 & a/6 & a/6 & a/4 \\ 0 & a/3 & a/2 & a/3 & 2a/3 & 5a/6 \end{pmatrix} \quad (28)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & a/12 & a/12 & a/6 & a/4 \\ 0 & a/3 & a/6 & a/2 & 2a/3 & 5a/6 \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & a/6 & a/4 & a/3 & 0 \\ 0 & a/3 & 0 & a/2 & 0 & a/3 \end{pmatrix} \quad (30)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & a/4 & a/4 & 0 & a/4 \\ 0 & a/3 & a/6 & a/2 & 2a/3 & 5a/6 \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & a/6 & a/4 & a/4 & a/12 \\ 0 & a/3 & 0 & a/2 & 5a/6 & a/2 \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 5a/12 & a/4 & a/4 & a/3 \\ 0 & a/3 & a/2 & a/2 & 5a/6 & 0 \end{pmatrix} \quad (33)$$

となる。4.3 節の考察で、6 方向の内、互いに垂直なもの同志の距離が、ロッドの直径の大きさよりも小さいものは削除したが、残った 7 種の解について垂直なものの距離を眺めてみよう。 $\vec{P}_1$ と $\vec{P}_2$ の中心線間距離を r_{12} 、 $\vec{P}_3$ と $\vec{P}_4$ の中心線間距離を r_{34} 、 $\vec{P}_5$ と $\vec{P}_6$ の中心線間距離を r_{56} で表すことにすると

解 (27) は

$$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\} = \left\{\frac{a}{3}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\right\}$$

解 (28) は

$$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\} = \left\{\frac{a}{3}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\right\}$$

解 (29) は

$$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\} = \left\{\frac{a}{2}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\right\}$$

解 (30) は

$$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\} = \left\{\frac{a}{2}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\right\}$$

解 (31) は

$$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\} = \left\{\frac{a}{2}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\right\}$$

解 (32) は

$$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\} = \left\{\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right\}$$

解 (33) は

$$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\} = \left\{\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right\}$$

となり、結果的に垂直なロッドの距離としては、 $a/3$ と $a/2$ しかでてこないことがわかる。上記の結果を表としてまとめると、表 4 の様になる。

$\{r_{12}, r_{34}, r_{56}\}$	個数
$\{a/3, a/3, a/3\}$	2
$\{a/2, a/3, a/3\}$	3
$\{a/2, a/2, a/2\}$	2
計	7

表 4: $[110]$ 方向には、互いに垂直な方向が3組ある。得られた7種の構造を、垂直なもの同志の距離で分類した。

最後に (27) ~ (33) の表式を、原点の位置を平行移動することで見やすい形式に書き換える。具体的には、各タイプに対し、原点と各ロッドとの関係が下図のようになるよう平行移動する。

$\{a/3, a/3, a/3\}$ タイプは図 14 (左)、 $\{a/2, a/3, a/3\}$ タイプは図 14 (中央)、 $\{a/2, a/2, a/2\}$ タイプに対しては図 14 (右) へと位置が移るように単位格子を平行移動した。これ

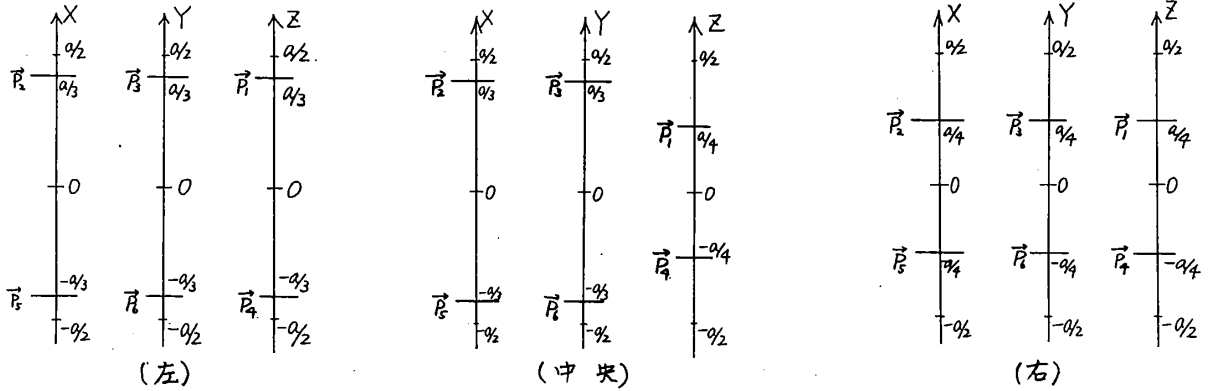


図 14: 単位格子の原点を対称性の良い位置へとずらす。

により (27) ~ (33) は、以下の様書きかわる。

$$\begin{pmatrix} 0 & -a/6 & -a/6 & 0 & a/6 & -a/6 \\ a/3 & a/3 & a/3 & -a/3 & -a/3 & -a/3 \end{pmatrix} \quad (34)$$

$$\begin{pmatrix} a/4 & a/12 & a/12 & a/4 & -a/12 & a/12 \\ a/3 & a/3 & a/3 & -a/3 & -a/3 & -a/3 \end{pmatrix} \quad (35)$$

$$\begin{pmatrix} a/4 & a/8 & 5a/24 & -a/6 & a/24 & -a/8 \\ a/4 & a/3 & -a/3 & -a/4 & -a/3 & a/3 \end{pmatrix} \quad (36)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & a/24 & a/8 & a/12 & a/8 & -5a/24 \\ a/4 & -a/3 & a/3 & -a/4 & a/3 & -a/3 \end{pmatrix} \quad (37)$$

$$\begin{pmatrix} a/4 & -a/8 & a/8 & 0 & a/8 & a/8 \\ -a/4 & a/3 & -a/3 & a/4 & -a/3 & a/3 \end{pmatrix} \quad (38)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -a/6 & -a/6 & 0 & a/6 & -a/6 \\ a/4 & a/4 & a/4 & -a/4 & -a/4 & -a/4 \end{pmatrix} \quad (39)$$

$$\begin{pmatrix} a/4 & a/12 & a/12 & a/4 & -a/12 & a/12 \\ a/4 & a/4 & a/4 & -a/4 & -a/4 & -a/4 \end{pmatrix} \quad (40)$$

ここで得られた構造を多数のロッドで組み、わかりやすい形（菱形12面体）に切り出

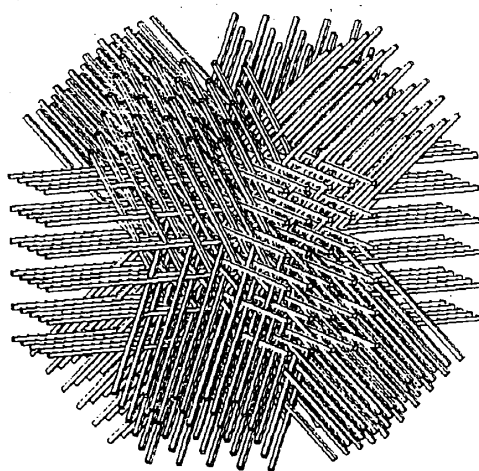


図 15: 周期6軸構造の概観（この図は、渡辺慶規氏に提供していただいた。）

すとその概観はどれも図 15 のようになる。

4.5 構造の特徴づけ — 空間充填率と回転群

4.5.1 空間充填率

前節 4.4 で示した7種の構造について、各構造のロッドの部分の体積が、空間中どれだけの比率を占めているか、つまり空間充填率の計算を行う。ただしこれは、3.3節の条件4から、7種の構造全部について同じ充填率であることがわかる。4.3節で与えたように、単位立方格子の1辺 a とロッドの直径 d の間に

$$d = \frac{a}{3\sqrt{3}}$$

なる関係があるから、

$$\rho = \frac{(6 \text{ 本}) \times (\text{立方体に含まれる1方向あたりのロッドの体積})}{(\text{単位立方体の体積})} \quad (41)$$

$$= \frac{6 \times \left\{ \pi \left(\frac{d}{2} \right)^2 \times \sqrt{2}a \right\}}{a^3} \quad (42)$$

$$= \frac{\pi}{9\sqrt{2}} \quad (43)$$

$$= 0.2468 \dots \quad (44)$$

となり、約 24.7 % の充填率である。

4.5.2 回転操作による特徴づけ

「原点からの高さ」のあらゆる組み合わせを考慮し、見かけ上多くの構造を得るが、それらを回転操作で重ね合わせることでできる構造は同一のものとして整理した、と 4.3 節で述べた。このことと、互いに垂直なロッドの中心線間距離がロッドの直径 d より小さいものを除外した結果、見かけ上は多かった構造が実は 7 種しかないということになったのである。ただし、そこで用いた回転操作についての説明は、4.3 節では与えていなかった。ここでは、まずその「回転操作」に対する説明を行う。さらにその後、それを用いて現在得ている 7 種の構造がいかに特徴づけられるかを説明する。

さて、 $[1\ 1\ 0]$ 型 6 軸構造を検査する上で我々はどのような回転を考えるべきであろうか。回転だからといって、あらゆる種類の回転を考える必要は全くない（またその様な無限個の回転を考えることは不可能でもあるが。）。例えば、 x 軸のまわりで 1° 回転させるような操作を考える必要はない。その様な操作では、明らかに再び $[1\ 1\ 0]$ 型 6 軸構造とはなり得ないからである。結局、我々が考えるべき回転操作は、その操作を施した構造のロッドがやはり $[1\ 1\ 0]$ 型の 6 方向だけに平行配置されている様な回転操作である。（ただし、ここで用いている回転という言葉は、空間中でのある 1 点のまわりでの回転である。）。

実は、 $[1\ 1\ 0]$ 型 6 方向を $[1\ 1\ 0]$ 型 6 方向に移す回転操作の全体は、正 8 面体群をつくるのである。それは、正 8 面体の中心から、正 8 面体の 12 稜の各中点に向けた 12 個の方向ベクトルが、 $[1\ 1\ 0]$ 型の 6 方向（逆方向も考えれば 12 方向）と対応しているからである。我々は、群の定義から始めて、正 8 面体群の変換群の具体的な表式を求めていくことにする。

次の 3 つの事柄が全て成り立つような、演算の定められている数の集まり、ベクトルの集まり、置換の集まり、回転の集まり等に群という名前をつける。（群の定義）

- A 演算の成立とその一意性（演算の結果が一通りであること。）
- B 結合方向則
- C 単位元の存在
- D 逆演算の可能

特に、空間中のある一点のまわりの回転操作の有限個の集まりが上で定義した群になっているとき、これを有限回転群という。正 8 面体群は、正多面体群の 1 つなのであるが、後

述するように正多面体群は全て有限回転群である。それは、正多面体を自分自身に重ねるすべての回転の個数が、有限個であることからいえるのである。

今問題になっている、正8面体を自分自身に重ねる全ての回転の個数が有限個であることを示し、どのような回転がいくつあるかを調べることにする。

まず、正8面体の対称軸（回転の軸）は、次の3種類しかない。

- [1] 向かい合った2つの頂点を結ぶ軸
- [2] 向かい合った2つの面の中心を結ぶ軸
- [3] 向かい合った2稜の中点を結ぶ軸

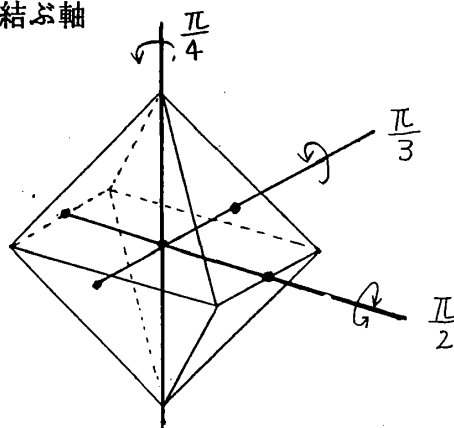


図 16: 正8面体の対称軸

対称軸の総数を n として、そのうち [1], [2], [3] の種類の対称軸の個数をそれぞれ n_1, n_2, n_3 とすれば、表5のようになる。

n_1	n_2	n_3	総 n
3	4	6	13

表 5: 正8面体の対称軸の本数

さて、[1] の種類の1つの対称軸を軸とする回転の個数は、その軸上の1つの頂点を通る稜の数 p_1 に等しい。また、[2] の種類の1つの対称軸を軸とする回転の個数は1つの面の頂点の数 p_2 に等しい。また [3] の種類の1つの対称軸を軸とする回転の個数は必ず2である。（ここで、正8面体については、 $p_1 = 4, p_2 = 3$ である。）従って、[1], [2], [3] の種類の1つの対称軸を軸とする全ての回転の内、静止を除けばその個数は、それぞれ $p_1 - 1, p_2 - 1, 1$ となる。ゆえに回転の総数 M は、静止も含めて

$$M = n_1(p_1 - 1) + n_2(p_2 - 1) + n_3 + 1 \quad (45)$$

$$= 3(4 - 1) + 4(3 - 1) + 6 + 1 \quad (46)$$

$$= 9 + 8 + 6 + 1 \quad (47)$$

$$= 24 \quad (48)$$

となり、正8面体を自分自身に重ねる回転の総数が、有限個の24個であることがわかった。また、回転操作の内訳が、

- 4回対称軸まわりでの回転操作が9個
- 3回対称軸まわりでの回転操作が8個
- 2回対称軸まわりでの回転操作が6個
- 恒等操作が1個

であることもわかった。

次に、このような回転の集まり（これを G と名づける。）が、回転の演算に関して群であることを証明しておく。

[証明] G に属する2つの回転 p と q の積 pq は、やはり、正8面体をそれ自身に重ねる1つの回転であるから、 G に属して、 A が成り立つ。また B, C が成り立つのは明らかである。次に G に属する回転 p の逆回転を p^{-1} とするならば、 $pp^{-1} = p^{-1}p = e$ は静止である。ところが、 p の軸と軸上にない頂点を通る平面に関して、正8面体は対称であるから、 p^{-1} はやはり正8面体をそれ自身に重ねる。すなわち p^{-1} は G に属する。ゆえに、 p と q が G に属するとき、 $p^{-1}q$ も qp^{-1} も G に属するから、 D が満たされる。ゆえに G は群である。[終]（他の正多面体についても、それ自身に移す回転操作が群となることが、上と全く同様に証明できる。）

以上を根拠として、 $[110]$ 型6方向を $[110]$ 型6方向に移す回転操作の全体が正8面体群をつくっている、と最初に述べた訳である。しかし、ここで次のような疑問が湧くかもしれない。それは、「 $[110]$ 型6方向は、正4面体の6稜とも対応しているのに、なぜ正4面体群ではないのか。」という疑問である。確かに $[110]$ 型6方向は、正4面体の6稜と対応づくが、正4面体には、正8面体の対称軸の説明のところで述べた(3)の対称軸：「向かい合った2稜の中点を結ぶ対称軸」についての90°回転という操作が存在しない。ところが、正4面体をそのような対称軸のまわりで90°回転させたときに得られる正4面体（これはもとの正4面体とは重ならない。）の6稜もやはり $[110]$ 方向と対応しているのであるから、そのような対称軸を除外するわけにはいかない。それゆえ、今の場合正4面体の回転群を考えるだけでは不十分なのである。

さて、それでは24個の回転操作の具体的表式を求めることを考える。

$[110]$ 型の6つの方向ベクトル

$$\begin{aligned}\vec{A}_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{A}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \vec{A}_4 &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{A}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \vec{A}_6 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

において、 $\vec{A}_1$ と $\vec{A}_2$ （これらは、60°をなす。）を他の全ての60°をなす方向ベクトルの組に重ね合わせる回転操作に伴って、他の4方向がやはり $[110]$ 型6方向のどれかに移るので、

この操作は正 8 面体群が持つ 24 個の回転操作に対応している。これは、4.3 節の表 1 で互いに 60° をなす組が 24 組であることから確認できる。

例えば、 $\vec{A}_1$ を $\vec{A}_3$ に移し、かつ $\vec{A}_2$ を $\vec{A}_4$ に移す回転操作を

$$(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_4)$$

などと書き表すことにすれば、24 個の回転操作は、

$$\begin{array}{ll}
 (1) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \\
 (2) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_3) \\
 (3) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_5) \\
 (4) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_6) \\
 (5) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_1) \\
 (6) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_3) \\
 (7) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_4) \\
 (8) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_6) \\
 (9) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_1) \\
 (10) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_2) \\
 (11) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_4) \\
 (12) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_5) \\
 (13) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_2) \\
 (14) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_3) \\
 (15) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_5) \\
 (16) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_6) \\
 (17) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_1) \\
 (18) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_3) \\
 (19) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_4) \\
 (20) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_6) \\
 (21) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_1) \\
 (22) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_2) \\
 (23) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_4) \\
 (24) & (\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_5)
 \end{array}$$

である。

任意の座標 (x, y, z) を (X, Y, Z) に移すような変換を (X, Y, Z) と書き表すことにすると、例えば

$$(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_4)$$

について変換の具体的表式をもとめてみよう。まず

$$\vec{A}_1 \Rightarrow \vec{A}_3: (1, 1, 0) \Rightarrow (1, 0, 1) \text{ または } (-1, 0, -1)$$

とする変換が

$$(x, \pm z, y), (y, \pm z, x), (-x, \pm z, -y), (-y, \pm z, -x) \quad (49)$$

であり、

$$\vec{A}_2 \Rightarrow \vec{A}_4: (0, 1, 1) \Rightarrow (1, -1, 0) \text{ または } (-1, 1, 0)$$

とする変換が

$$(y, -z, \pm x), (z, -y, \pm x), (-y, z, \pm x), (-z, y, \pm x) \quad (50)$$

であるから、(49) と (50) の共通操作として、

$$\pm(y, -z, x)$$

を得る。これ以外の回転操作の具体的表式も全く同様に定めることができ、以下の様になる。

- (1) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_2)$ の回転操作: $\pm(x, y, z)$
- (2) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_3)$ の回転操作: $\pm(y, x, z)$
- (3) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_5)$ の回転操作: $\pm(x, y, -z)$
- (4) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_1, \vec{A}_6)$ の回転操作: $\pm(y, x, -z)$
- (5) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_1)$ の回転操作: $\pm(z, y, x)$
- (6) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_3)$ の回転操作: $\pm(z, x, y)$
- (7) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_4)$ の回転操作: $\pm(-z, y, x)$
- (8) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_2, \vec{A}_6)$ の回転操作: $\pm(-z, x, y)$
- (9) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_1)$ の回転操作: $\pm(y, z, x)$
- (10) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_2)$ の回転操作: $\pm(x, z, y)$
- (11) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_4)$ の回転操作: $\pm(y, -z, x)$
- (12) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_5)$ の回転操作: $\pm(x, -z, y)$
- (13) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_2)$ の回転操作: $\pm(-x, y, z)$
- (14) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_3)$ の回転操作: $\pm(y, -x, z)$
- (15) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_5)$ の回転操作: $\pm(x, -y, z)$
- (16) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_4, \vec{A}_6)$ の回転操作: $\pm(-y, x, z)$
- (17) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_1)$ の回転操作: $\pm(z, y, -x)$
- (18) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_3)$ の回転操作: $\pm(z, -x, y)$
- (19) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_4)$ の回転操作: $\pm(z, -y, x)$
- (20) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_5, \vec{A}_6)$ の回転操作: $\pm(z, x, -y)$
- (21) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_1)$ の回転操作: $\pm(y, z, -x)$
- (22) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_2)$ の回転操作: $\pm(-x, z, y)$
- (23) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_4)$ の回転操作: $\pm(-y, z, x)$
- (24) $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_6, \vec{A}_5)$ の回転操作: $\pm(x, z, -y)$

これらの回転操作の意味と記号は以下の通りである。

- (1) 恒等操作... E
- (2) $(1, -1, 0)$ を対称軸とする 2 回回転操作... C_2
- (3) $(0, 0, 1)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^2
- (4) $(1, 1, 0)$ を対称軸とする 2 回回転操作... C_2
- (5) $(-1, 0, 1)$ を対称軸とする 2 回回転操作... C_2
- (6) $(1, 1, 1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^1
- (7) $(0, 1, 0)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^1
- (8) $(1, -1, 1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^2
- (9) $(1, 1, 1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^2
- (10) $(0, 1, -1)$ を対称軸とする 2 回回転操作... C_2
- (11) $(-1, 1, 1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^1
- (12) $(1, 0, 0)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^3
- (13) $(1, 0, 0)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^2
- (14) $(0, 0, 1)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^3
- (15) $(0, 1, 0)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^2
- (16) $(0, 0, 1)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^1
- (17) $(0, 1, 0)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^3
- (18) $(1, 1, -1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^2
- (19) $(1, 0, 1)$ を対称軸とする 2 回回転操作... C_2
- (20) $(-1, 1, 1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^2
- (21) $(1, -1, 1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^1
- (22) $(0, 1, 1)$ を対称軸とする 2 回回転操作... C_2
- (23) $(1, 1, -1)$ を対称軸とする 3 回回転操作... C_3^1
- (24) $(1, 0, 0)$ を対称軸とする 4 回回転操作... C_4^1

確かに、4 回対称軸まわりでの回転操作が 9 個、3 回対称軸まわりでの回転操作が 8 個、2 回対称軸まわりでの回転操作が 6 個、恒等操作が 1 個であることが再確認できる。

上記の回転操作は、 $(\vec{A}_1, \vec{A}_2) \Rightarrow (\vec{A}_3, \vec{A}_4)$ のような方向ベクトルの回転であるが、実は 4.3 節で構造の整理を行ったときは、これそのものではなく、定点 $\vec{P}_i (i = 1, 2, 3, 4, 5, 6)$ の変換も含めた $(\vec{P}_1, \vec{P}_2) \Rightarrow (\vec{P}_3, \vec{P}_4)$ などの 24 個の変換を用いている。その場合、変換操作の具体的表式に、上記の回転に加え平行移動が加わる。

本節においては、見やすい形に書き換えた 7 種の構造に対して、特徴付けを行うので、上記の表式で十分である。

1 つの構造にある回転操作 R を施した結果が、もとの構造と一致するとき、その構造は対称要素として回転操作 R を持つという言い方をする。7 種の構造全てに対して、24 個

の回転操作 (1)~(24) を行い、どの構造がどれだけの対称要素をもつかを確かめると以下のような結果を得た。

* $\{a/3, a/3, a/3\}$ タイプでは、解 (34) と解 (35) は、共に

- (1) 恒等操作 ... E
- (3) $(0,0,1)$ を対称軸とする 4 回回転操作 ... C_4^2
- (14) $(0,0,1)$ を対称軸とする 4 回回転操作 ... C_4^3
- (16) $(0,0,1)$ を対称軸とする 4 回回転操作 ... C_4^1

の 4 つの対称要素をもつ。

* $\{a/2, a/3, a/3\}$ タイプにでは、解 (36) と解 (37) は共に

- (1) 恒等操作 ... E

しかもたないが、解 (38) は

- (1) 恒等操作 ... E
- (13) $(1,0,0)$ を対称軸とする 4 回回転操作 ... C_4^2

と 2 つの対称要素をもつ。

* $\{a/2, a/2, a/2\}$ タイプの解 (39) と解 (40) は共に、 $\{a/3, a/3, a/3\}$ タイプの場合と同じく、

- (1) 恒等操作 ... E
- (3) $(0,0,1)$ を対称軸とする 4 回回転操作 ... C_4^2
- (14) $(0,0,1)$ を対称軸とする 4 回回転操作 ... C_4^3
- (16) $(0,0,1)$ を対称軸とする 4 回回転操作 ... C_4^1

の 4 つの対称操作を持つことがわかった。

5 まとめと今後の課題

5.1 まとめ

剛体円柱の集合がとり得る構造の、1 つの特別な場合として $[1\ 1\ 0]$ 型 6 軸構造を自己保持状態 case-1 (各ロッドがそれと 60° をなす 4 ロッドにより固定される場合。3.2 節参照) に限り詳しく調べた。その結果、トポロジカルに異なる構造が、ちょうど 7 種であることがわかった。7 種を、互いに垂直な方向を持つロッド同士の中心線間距離で区別すれば、

$\{\frac{a}{3}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\}$ タイプが2種類、 $\{\frac{a}{2}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\}$ タイプが3種類、 $\{\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\}$ タイプが2種類である（ただし、 a は格子定数である）。

この7種の各構造に対して、正8面体群がもつ24の回転操作を行い、どの構造がどれだけの対称要素をもつかを調べると $\{\frac{a}{3}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\}$ タイプと $\{\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\}$ タイプは全て主軸（Z軸）のまわりでの4回回転対称性 E, C_4^1, C_4^2, C_4^3 もち、これらが7種の中では、対称要素の数が多く従って対称性の高い構造であるといえる。 $\{\frac{a}{2}, \frac{a}{3}, \frac{a}{3}\}$ タイプの内1種類は、4回回転対称性 E, C_4^2 という2つの対称要素をもつが、ほかの2種の構造は恒等変換 E しかもたない、従って対称性の低い構造であるといえる。結果的に、正8面体群のもつ対称要素の内、4回回転対称性は現れたが、3回回転対称性や2回回転対称性は現れなかった。その理由については現段階でははっきりとしたことはいえないが、おそらく自己保持構造に限定したことが効いていると思われる。また4回回転対称性についても正8面体に3本存在する対称軸のうち、1本（上での主軸）についてのみしかあらわれない。このことの根拠はまだ明確になっていない。

また、空間充填率が全構造に対して、24.7%であることがわかった。

5.2 今後の課題

上記の様な結論を得たものの、[1 1 0] 型6軸構造について、調べるべきことはまだ多い。

まず、ここで得た7種の構造は周期構造なのだから、当然230の空間群のいずれかに属すると思われる。このことを明らかにしたい。

また、自己保持状態の case-2（各ロッドがそれと 60° をなす2ロッド、 90° をなす1ロッドの計3ロッドから固定される場合。3.2節参照）を含めた構造を考察をする問題も残されている。この場合は、case-1の構造を考える際に用いた、[1 1 1] 型の4方向に沿ってロッドの「原点からの高さ」を等間隔にするという考え方（4.2節参照）が使えないので、別の角度からのアプローチが必要になると思われる。しかし、我々はこれまでに発見的な構成法を用いて、case-2の自己保持構造と考えられる[1 1 0] 型周期6軸構造を見いだしている（付録E参照）。従って、これを元にして case-2の自己保持構造の系統的な記述が展開できる可能性がある。

また、本研究では力学的に安定な構造として、自己保持構造を取り扱ったが、対称性の観点だけからいうとかならずしも自己保持構造ということに固執することもない。

いずれにせよ、ようやく我々は周期6軸構造のおぼろげな姿をつかみかけてきたところである。ロッド系では、4軸以上の多軸構造で鏡映対称性が存在し得ないことなどいくつかの幾何学的制約があると予想される。そのような結晶学的観点からみても完全な記述として全く疑問点を残さぬよう、周期6軸構造の全容を明らかにし、一般の多軸構造を記述する体系すなわち「ロッド系の一般結晶学」の礎としたい。

謝辞

この修士論文は、小川泰教授の御指導のもとにまとめられたものである。同教授には、興味深い研究課題と適切な指針を与えていただき、またご多忙にもかかわらず暖かく

御指導いただきました。さらに、本研究以外の様々なことに関しても多くの知識、考え方を教えていただき、深く感謝いたします。また、本研究の共同研究者である渡辺慶規氏にも深く感謝いたします。同氏には、度ある毎に長時間にわたる議論におつきあいいただき、幾何学の話題はもとより雑多なことにわたるまで教えていただき、また模型を作る為の材料購入に一緒に行っていたり、多大なご協力をしていただきました。(尚、今回は修士論文という形式の為、筆者一人の名前で発表しましたが、本研究は小川教授ならびに渡辺氏との共同研究に基づいたものです。ただし、本論文の内容に関する責は全て筆者にあります。)

平田隆幸講師、中島善人博士、さらに吉野隆博士には、公私にわたりお世話になり、しばしば暖かい激励の御言葉もいただきました。こころより感謝いたします。

(株) 3Dコンポリサーチの福多健二博士には、貴重な資料を提供していただきありがとうございました。建築家の日詰明男氏には貴重な議論をしていただきありがとうございました。

また、小川-平田研究室ならびに物理工学理論研究室の皆様に様々な面でお世話になりました。皆様の暖かい支えなくして、この修士論文を書くことは決して出来なかっただろうと思います。特に、姫野学氏、清水大志氏、石塚徹氏には、お忙しい中多くのことを教えていただき、厚く感謝申し上げます。

最後に、この浅学の息子の修士課程進学を許してくれた、私の父と母になにより感謝したいと思います。

A 2 直線の距離に関する式

$$\vec{p}_1 = t\vec{a}_1 + \vec{b}_1 \quad (51)$$

$$\vec{p}_2 = t\vec{a}_2 + \vec{b}_2 \quad (52)$$

という 2 直線があったとき、方向ベクトル $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ の双方に対して垂直な単位ベクトル $\vec{n}_{12}$ は

$$\begin{aligned} \vec{n}_{12} &= \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} \\ &= \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\sqrt{(a_1 a_2)^2 - (\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2)^2}} \end{aligned} \quad (53)$$

ただし、 a_1, a_2 は $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ の大きさである。 $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ を単位ベクトルにとっておけば、

$$\vec{n}_{12} = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\sqrt{1 - (\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2)^2}} \quad (54)$$

さらに、2 直線 $\vec{p}_1, \vec{p}_2$ の距離 d_{12} は

$$d_{12} = |\vec{n}_{12} \cdot (\vec{b}_1 - \vec{b}_2)| \quad (55)$$

で表される。

B [100] 型 3 軸構造

3 方向を $(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$ ととる。図 17 に、竹串で作成したモデルの写真を付す。[100] 型 3 軸構造は、A15 構造あるいは β -W 構造と呼ばれる。実際の結晶でこの構造をとるものは多い [2]。空間群は $Pm\bar{3}n$ [2]。この構造における最密充填率は

$$\rho_{max} = \frac{3\pi}{16} \cong 0.589 \quad (56)$$

である。ただし、図 17 の写真は最密構造からロッドの間引きを行って密度を半分にしたものである。

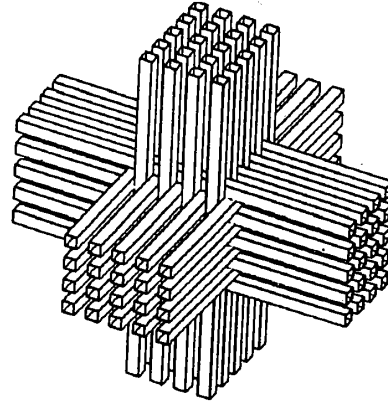
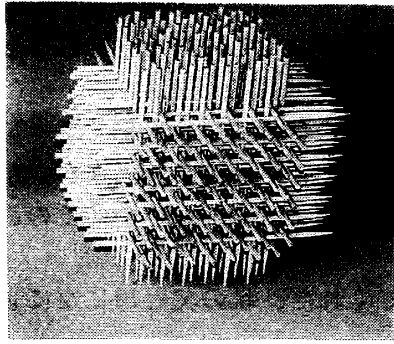


図 17: 周期的 3 軸構造 (右の図は渡辺氏に提供していただいた。)

C [111] 型 4 軸構造

4 方向を $(1, 1, 1), (-1, 1, 1), (1, -1, 1), (1, 1, -1)$ ととる。竹串で作成したモデルの写真を図 18 に付す。[111] 型 4 軸構造は、ザクロ石構造ともいわれ、ガーネット等の結晶は実際にこの構造をとる [2]。空間群は $Ia\bar{3}d$ [2]。この構造における最密充填率は

$$\rho_{max} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \cong 0.680 \quad (57)$$

である。ただし、図 18 の写真は最密構造からロッドの間引きを行って密度を $1/3$ にしたものである。

D $[1\tau 0]$ 型 準周期 6 軸構造

6 方向を $(1, \tau, 0), (1, -\tau, 0), (0, 1, \tau), (0, 1, -\tau), (\tau, 0, 1), (-\tau, 0, 1)$ ととる (ただし、 $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ で $1:\tau$ は黄金比といわれる)。竹串で作成したモデルの写真を図 19 に付す (ただし、この模型の作成は筆者によるものではなく、小川教授によるものである。) この構造は、5 回回転対称性を有する準周期構造である。(この構造についての、一般向けの解説が [13] にある。)

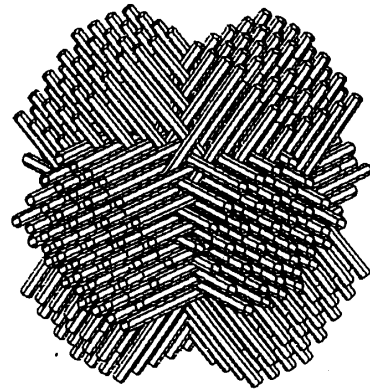
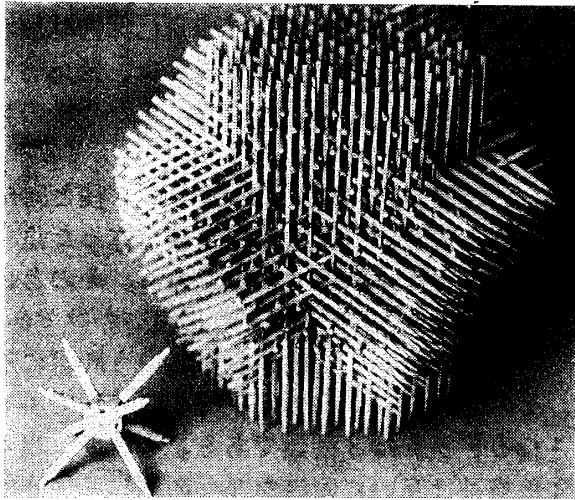


図 18: 周期的 4 軸構造 (右の図は渡辺氏に提供していただいた。)

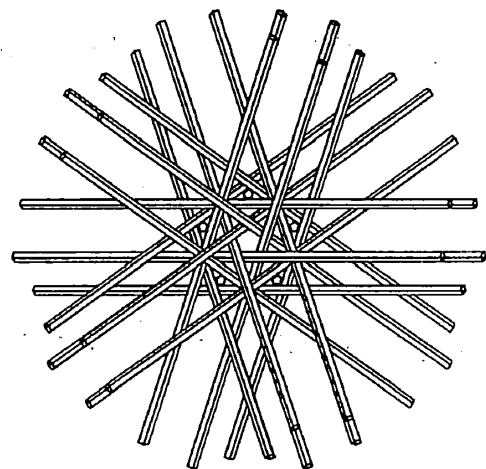
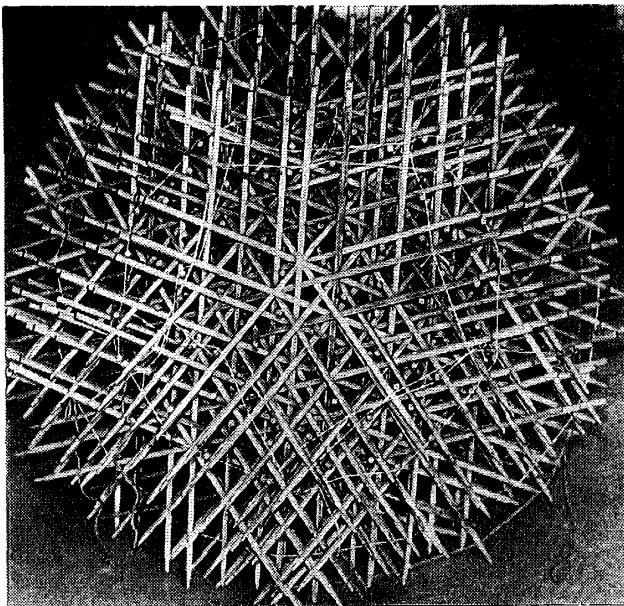


図 19: 準周期的 6 軸構造 (右の図は渡辺氏に提供していただいた。)

E [110] 型周期 6 軸構造の別のタイプの例 — 正 4 面体 + 3 角格子サブラティス法による構成

ここに紹介するのは、本論で詳しく調べた case-1 (3.2 節参照) だけの自己保持状態からなる構造ではなく、まだ系統的な考察がなされていないもので、次のような、発見的な配置法により得られたものである。筆者はこの方法を特に面白く思うので、また今後の発展の願いをこめる意味でも、付録としてここに収めることにする。

[正 4 面体 + 3 角格子サブラティス 法] [1 1 0] 型 6 方向は、正 4 面体の 6 稜と対応するから、正 4 面体の展開図を設計図として用いる。イメージとしては、紙で作った正 4 面体に竹串を刺し、そのときにロッドが稜と平行になるように刺すわけである。そのときのロッドと正 4 面体の各面との交点（ドット）を設計図上で指定してやれば良いわけである。よって、構造を探すという問題は設計図上でドットをいかに配置するかという問題に帰着する。正 4 面体の 1 つの面を貫くロッドは、その面上にない 3 稜に平行なロッドであることに注目する。よって、1 つの面上に配置されるドットは 3 種類である。そこで、我々は正 4 面体の各面上に 3 角格子を導入する。3 角格子は互いに同等な 3 つの副格子（サブラティス）に分けることが出来る。よって、この 3 つの副格子と 3 種類のドットを対応づけることにより、かなり高対称な構造が得られることが期待されるわけである。実際に我々は、この考え方を用いて 1 つの [1 1 0] 型周期 6 軸構造を構成出来た。この構造は、自己保持構造ではないが、対称性の高い構造のようである。

以下に付す写真は、上記の方法で実際に構成した構造を圧縮し自己保持構造（これが、自己保持構造であるという証明は現段階でなされていないが、少なくとも見かけ上は自己保持状態をとっている。）へと変化させた構造である。大変興味深いことに、この 1 つの構造の中に、case-1 と case-2 の両方の自己保持状態が含まれるのである。

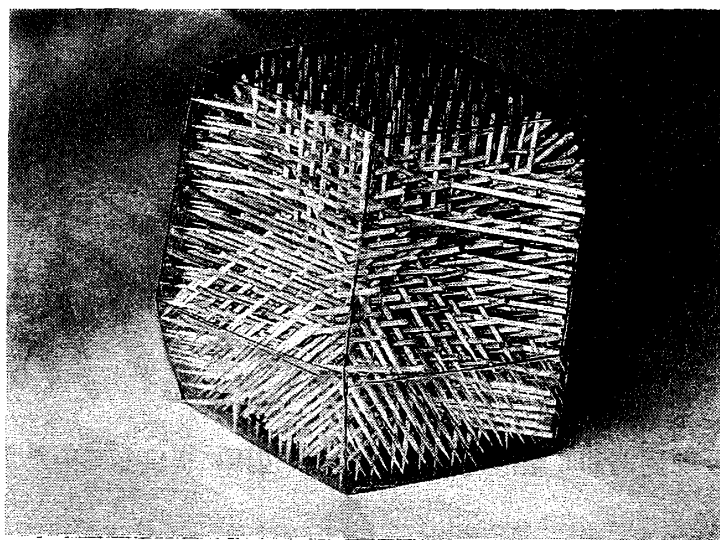


図 20: 本論では扱わなかった周期的 6 軸構造の例。

参考文献

- [1] N.J.A.Sloane, サイエンス 3月号 90頁 (1984)
- [2] M.O'Keeffe, Sten Anderson, *Acta Cryst.* **A33**,914(1977)
- [3] 土方明躬, 福多健二, 日本複合材料学会誌. **18.6** 231 (1992)
- [4] Alan Holden, SHAPES,SPACE,AND SYMMETRY.
Dover Publications. New York(1971)
- [5] 八田博志, 日本複合材料学会誌, **14.2** 73 (1988)
- [6] 私信
- [7] L.Fejes Tóth, (樋口伊佐夫, 種村正美 訳) 【配置の問題】. みすず書房 (1983)
- [8] M.O'Keeffe, *Acta Cryst.* **A48**,879(1992)
- [9] 稲葉栄次, 『群論入門』, 培風館 (1957)
- [10] 小川泰、手嶋吉法、渡辺慶規, 日本複合材料学会誌. (1995) 投稿中
- [11] 手嶋吉法、渡辺慶規、小川泰, 形の科学会報. **9.3** 32 (1994)
- [12] 渡辺慶規、手嶋吉法、小川泰, 形の科学会報. **10.1** 32 (1995)
- [13] 『アジアの形を読む』, 工作舎 (1993) (この中にある2論文を参照:日詰明男 (p.208-p.225), 小川泰 (p.226-p.235))