数理科学実践研究レター　2018–21 September 07, 2018

結晶の **growth** について

by

若月駿

UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

結晶の growth について

若月駿[1]（東京大学数理科学研究科）
Shun Wakatsuki (Graduate School of Mathematical Sciences, the University of Tokyo)

概 要

2013 年の StudyGroup において，結晶格子の配位数を一般化して growth 数という概念が定義された．その後落合啓之氏により， growth 数の母関数はある種の対称性を満たすことが指摘されている．本研究では，この対称性について考察する．

数列 $\{a_n\}_{n\geq 0}$ に対し，その母関数を $G(x)=\sum_{n\geq 0} a_n x^n$ と定める．

問題 1. 数列 $\{a_n\}_{n\geq 0}$ が結晶格子の growth 数であるとき，その母関数 $G(x)$ は対称性 $G(\frac{1}{x})=\pm G(x)$ を満たす．

例 2 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所教授 落合啓之氏)**.** 例えば β-BeO の結晶の場合は，

$$
\begin{aligned}
a_0 &= 1 \\
a_n &= \begin{cases} \frac{22}{9}n^2+2 & (n\equiv 0 \bmod 3) \\ \frac{22}{9}n^2+\frac{n}{9}+\frac{13}{9} & (n\equiv 1 \bmod 3) \\ \frac{22}{9}n^2-\frac{n}{9}+\frac{13}{9} & (n\equiv 2 \bmod 3) \end{cases} G_{\beta-\mathrm{BeO}}(x)=\frac{(1+x)(1+2x+5x^2+6x^3+5x^4+2x^5+x^6)}{(1-x)(1-x^3)^2} \\
& \qquad\qquad (n>0)
\end{aligned}
$$

となり，問題 1 の対称性を満たす．

この対称性について，本研究では以下のような考察を得た．

定義 3. $N>0,\ 0\leq n_0\leq N$ なる自然数 k,N,n_0 に対し，数列 $\{(a_k^{N,n_0})_n\}_{n\geq 0}$ を

$$
(a_k^{N,n_0})_n=\begin{cases} n^k & (n\equiv n_0 \bmod N) \\ 0 & (n\equiv n_0 \bmod N) \end{cases}
$$

で定める．ただし， 0^0 となる部分については $(a_0^{N,0})_0=1, (a_0^{N,N})_0=0$ とする．この数列により定まる母関数を $G_k^{N,n_0}(x)$ と書く．

まず，定義から次が容易に分かる．

命題 4. (1) $G_{k+1}^{N,n_0}(x)=(x\frac{d}{dx})G_k^{N,n_0}(x)$

(2) $G_k^{N,n_0}(x)=\frac{x^{n_0}}{(1-x^N)^{k+1}}\times(Nk$ 次多項式$)$

(3) $G_0^{N,0}(x)=G_0^{N,N}(x)+1,\ G_k^{N,0}(x)=G_k^{N,N}(x)$ for $k>0$

さらに，次の命題を得た．

命題 5. $G_k^{N,n_0}(\frac{1}{x})=(-1)^{k+1}G_k^{N,N-n_0}(x)$

この命題を用いると， 例 2 は次のように解釈できる．

例 6. 例 2 の a_n の表示式より，$G_{\beta-\mathrm{BeO}}$ は

$$
G_{\beta-\mathrm{BeO}}(x)=\frac{22}{9}G_2^{1,0}(x)+\frac{1}{9}G_1^{3,1}(x)-\frac{1}{9}G_1^{3,2}(x)+2G_0^{3,3}(x)+\frac{13}{9}G_0^{3,1}(x)+\frac{13}{9}G_0^{3,2}(x)+1
$$

と書ける．よって 命題 4(3) と 命題 5 より，

$$
\begin{aligned}
G_{\beta-\mathrm{BeO}}(\tfrac{1}{x}) &= \tfrac{22}{9}G_2^{1,0}(\tfrac{1}{x})+\tfrac{1}{9}G_1^{3,1}(\tfrac{1}{x})-\tfrac{1}{9}G_1^{3,2}(\tfrac{1}{x})+2G_0^{3,3}(\tfrac{1}{x})+\tfrac{13}{9}G_0^{3,1}(\tfrac{1}{x})+\tfrac{13}{9}G_0^{3,2}(\tfrac{1}{x})+1 \\
&= -\tfrac{22}{9}G_2^{1,1}(x)+\tfrac{1}{9}G_1^{3,2}(x)-\tfrac{1}{9}G_1^{3,1}(x)-2G_0^{3,0}(x)-\tfrac{13}{9}G_0^{3,2}(x)-\tfrac{13}{9}G_0^{3,1}(x)+1 \\
&= -\tfrac{22}{9}G_2^{1,0}(x)+\tfrac{1}{9}G_1^{3,2}(x)-\tfrac{1}{9}G_1^{3,1}(x)-2(G_0^{3,3}(x)+1)-\tfrac{13}{9}G_0^{3,2}(x)-\tfrac{13}{9}G_0^{3,1}(x)+1 \\
&= -G_{\beta-\mathrm{BeO}}(x)
\end{aligned}
$$

となり，問題 1 の対称性を満たすことが分かる．

[1] swaka@ms.u-tokyo.ac.jp

例 6 は，命題 5 を用いると数列 $\{a_n\}_{n\geq 0}$ の “対称性” から母関数 $G(x)$ の対称性が分かることを示している．

次に，対称性の少ない「結晶」を考え，結晶の対称性が growth の対称性に必要であることを見る．

例 7. 以下の図で与えられる結晶を考える．

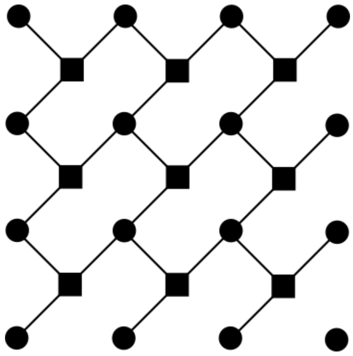

図 1:

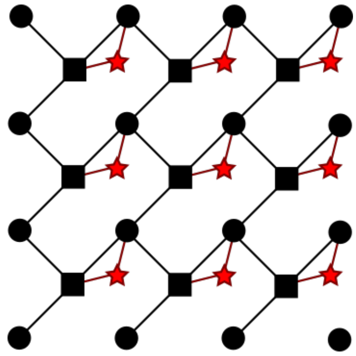

図 2:

それぞれの結晶に対して growth を計算すると，以下のようになる．

1. $G(x) = 1 + 3G_1^{1,0}(x) = \dfrac{1+x+x^2}{(1-x)^2}$

2. $G(x) = 1 - G_0^{2,2}(x) - \dfrac{1}{2}G_0^{2,1}(x) + \dfrac{9}{2}G_1^{1,0}(x) = \dfrac{1+3x+3x^2+2x^3}{(1-x)^2(1+x)}$

よって，図 1 の growth は対称的だが，図 2 の growth は対称的ではない．これは，図 2 の結晶の対称性が低いことを反映していると考えられる．

謝辞

本研究のテーマ提供，および様々なご助言をして頂きました新日鐵住金の中川淳一氏に感謝致します．