

数理科学実践研究レター 2020-12 September 28, 2020

モデル集合の全体空間の次元について

by

前多 啓一



UNIVERSITY OF TOKYO
GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES
KOMABA, TOKYO, JAPAN

モデル集合の全体空間の次元について

前多啓一¹ (東京大学大学院数理科学研究科)

Keiichi Maeta (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概要

自然界の物質には結晶構造を持たないが、ある種の対称性をもつ準結晶と呼ばれる物質がある。それらの数学的なモデルの一つとして、モデル集合がある。モデル集合はより高い次元をもつ全体空間の結晶の射影として実現される。本稿では、射影が特殊な場合に、モデル集合から全体空間の次元を求める方法について考察する。

1 はじめに

自然界の物質には、塩化ナトリウムやダイヤモンドなど、結晶と呼ばれる物質が数多く存在する。結晶とは、原子や分子が空間的に繰り返しパターンを持って配列しているような物質のことであるが、正確には空間並進対称性をもつように原子が並んだ物質のことを言う。数学的には、結晶は \mathbb{R}^3 の中の格子 Γ および有限部分集合 F に対し、 $\Gamma + F$ と表される集合と定義される。数学において格子はその対称性によって分類されている。ここで言う対称性とは、その格子に作用する変換群で定義され、この群は結晶群と呼ばれる。3次元の場合、結晶群は230種類、また、格子は対称性から14種類に分類される (Bravais 格子と呼ばれる)。

一方、自然界にはその原子の並びに並進対称性がないが、回転対称性があると考えられるような物質もあることが知られており、準結晶と呼ばれる。準結晶を初めて発見したのは、ダニエル・シュヒトマンであり、その発見により、2011年にノーベル化学賞を受賞している。準結晶の数学的定義は明確に定められていないが、その一つのモデルとしてモデル集合がある。モデル集合は、より高い次元の結晶の一部の射影として実現されるような離散集合である。本稿では、モデル集合からその全体空間の次元を決定する方法について考察する。

2 格子、結晶およびモデル集合の数学的定式化

本節では、[1], [2]などを参考に、数学的定式化を復習する。

定義 1 (一様離散, 相対的稠密, Delone 集合). X を距離空間, Y をその部分空間とする。

- 1) Y が一様離散 (uniformly discrete) であるとは、ある実数 $r > 0$ が存在して、任意の $y \in Y$ に対し、 $B_r(y) \cap Y = \{y\}$ を満たすことを言う。
- 2) Y が相対的稠密 (relatively dense) であるとは、ある実数 $R > 0$ が存在して、任意の $x \in X$ に対し、 $B_R(x) \cap Y \neq \emptyset$ であることを言う。

一様離散かつ相対的稠密である距離空間の部分集合 Y を Delone 集合という。

Delone 集合は「満遍なく、ある程度離れて点が存在している」ことだけを課した部分集合である。以下では、 X を Euclid 距離空間 \mathbb{R}^n として、もう少し性質のいいクラスである Mayer 集合を定義する。

定義 2 (Mayer 集合). Delone 集合 $\Lambda \subset X$ が Mayer 集合であるとは、ある有限部分集合 $F \subset X$ が存在して、 $\Lambda - \Lambda \subset \Lambda + F$ が成り立つことを言う。

Mayer 集合の特別な場合として、格子、結晶、準結晶 (モデル集合) を定義する。

定義 3 (格子, 結晶). X の余コンパクト離散部分群 Γ を格子と呼ぶ。有限部分集合 $F \subset X$ と格子 Γ に対し、 $\Gamma + F$ とかける集合を結晶という。

¹maeta@ms.u-tokyo.ac.jp

定義 4 (Cut and projection method, モデル集合). $X = \mathbb{R}^k \oplus \mathbb{R}^{n-k}$ に対し, それぞれへの正射影を $\text{pr}_{\mathbb{R}^k}, \text{pr}_{\mathbb{R}^{n-k}}$ と書く. 結晶 $\Lambda \subset X$ と \mathbb{R}^{n-k} の開集合を含む有界集合 $W \subset \mathbb{R}^{n-k}$ に対し, 次の集合 M をモデル集合と呼ぶ.

$$M := \{ \text{pr}_{\mathbb{R}^k}(x) \in \mathbb{R}^k \mid x \in \Lambda, \text{pr}_{\mathbb{R}^{n-k}}(x) \in W \}$$

X をモデル集合の全体空間, W を窓と呼ぶ. 射影を結晶全体に制限したときに単射である場合, その射影を無理数的射影と呼び, $\text{pr}_{\mathbb{R}^{n-k}}$ および $\text{pr}_{\mathbb{R}^k}$ が無理数的であるとき, 無理数的モデル集合と呼ぶことにする.

事実 5 ([2]). モデル集合は Mayer 集合である.

例 6. $n = 2, k = 1$ のモデル集合の例を作る. \mathbb{Z}^2 を 30° だけ原点周りに回した格子を Γ とし, $W = \left(0, \frac{1}{2}\right)$ とすると, $M = \left\{ -\frac{1}{2}n - \frac{\sqrt{3}}{2}[\sqrt{3}n] \mid n \in \mathbb{N} \right\}$ はモデル集合となる.

最後に, Delone 集合, Mayer 集合, モデル集合の関係をまとめておく.

事実 7 ([2]). $\Lambda \subset X$ に対する以下の条件は同値である.

- 1) Λ は Mayer 集合である.
- 2) Λ はあるモデル集合の部分集合である.
- 3) $\Lambda - \Lambda$ は X の Delone 集合である.

3 全体空間の次元について

以下の問題について考える.

問題 8. モデル集合 M が与えられたとき, 全体空間 X の次元の最小値を求めよ.

本稿では, 無理数的モデル集合に限ってこの問題を解決したい. 以下では, M はモデル集合であるとし, $\Delta M = \{x - y \mid x, y \in M\}$ とする. 次元を記述するために, いくつかの概念を定義する.

定義 9 (S -連結). $S \subset \Delta M$ とする. このとき, M の部分集合 N が S -連結であるとは, すべての $n_0, n_1 \in N$ に対し, ある N の列 $\{a_n\}$ で, $a_0 = n_0, a_n = n_1, a_n - a_{n-1} \in \pm S$ であるようなものが存在することをいう.

定義 10 (web 集合). 部分集合 $N \subset M$ と $S \subset \Delta M$ に対し, (N, S) が web 集合であるとは, 以下を満たすことを言う.

- N は相対的稠密である.
- N が S -連結 である.

定義 11 (最小次元). 次の値 $d(M)$ を最小次元と言う.

$$d(M) := \min_{(N, S) \text{ は web 集合}} \#S$$

このとき, 次の定理が成り立つ.

定理 12. 無理数的モデル集合 M に対し, 最小次元 $d(M)$ は全体空間の次元 d と一致する.

注意 13. この定理は, モデル集合の定義を, 全体空間の結晶からの射影でなく, 全体空間の格子からの射影にしても成り立つ.

この定理は補題 14 と補題 16 から従う。

補題 14. 全体空間の次元が n の無理数的モデル集合 M に対し、 $d(M) \leq n$ が成り立つ。

証明 いかなる窓 W に対しても、 M は $\#S = n$ なる S に対する web 集合 (N, S) を含むことを示せば良い。また、 $\text{pr}_{\mathbb{R}^k}$ が無理数的なので、全体空間において、以下を満たす n 本のベクトル $\{v_i\}_{i=1, \dots, n}$ が存在することを示せば良い。すなわち、 $C = \text{pr}_{\mathbb{R}^k}^{-1}(W) \cap \Lambda$ に対し、

- $v_i \in \Delta C$
- C の任意の点 x に対し、 $x + v_i$ のいずれかは再び C に入る

今、射影が無理数的であるから、 $\text{pr}_{\mathbb{R}^k}(C)$ は W の稠密な部分集合である。 W は k 次元ベクトル空間の開集合を含むので、補題 14 は、以下の初等的な補題から従う。

補題 15. k 次元の球体 $D^k \subset \mathbb{R}^k$ とその稠密な部分集合 $D' \subset D^k$ に対し、 $k + 1$ 本のベクトル $\{v_i\}_{i=1, \dots, k+1}$ で、以下の 2 条件を満たすものが存在する。

- $v_i \in D'$
- D^k の任意の点 x に対し、 $x + v_i$ のいずれかは再び D^k に入る。

補題 16. 全体空間の次元が n の無理数的モデル集合 M に対し、 $d(M) \geq n$ が成り立つ。

証明 モデル集合 M に対し、 (N, S) を $\#S = d(M)$ を実現する web 集合であるとする。 $\text{pr}_{\mathbb{R}^k}$ が無理数的であるから、 $C = \text{pr}_{\mathbb{R}^k}^{-1}(W) \cap \Lambda$ は、 $\#S = d(M)$ なる $S \subset \Delta C$ が存在して、 S -連結である。もし仮に $d(M) < n$ とすれば、 $\text{pr}_{\mathbb{R}^{n-k}}$ が無理数的であるから、 $\mathbb{R}\text{-span}\{S\} \cap C$ は有界集合である。一方、 $N \subset \text{pr}_{\mathbb{R}^k}(\mathbb{R}\text{-span}\{S\} \cap C)$ であるから、 N が相対的稠密であることに矛盾する。

4 終わりに

モデル集合の全体次元は、幾何学的な情報の一つであり、全体次元をモデル集合から復元することは数学的な問いとしては自然である。本稿では、無理数的モデル集合の全体次元を考えたが、射影が無理数的であるというのはかなり強い条件であり、そうでない場合についてはまだ未解決である。ただし、例えば、2次元から1次元への射影を考えた場合、格子からは有理数的射影をしても結晶しかできないので、本質的には全体次元に与える影響が大きくないように思える。さらなる課題として、有理数的射影に関する全体次元の評価があげられる。さらに、元のモデル集合から、全体空間の結晶や格子などを（できれば最小次元で）構成できるような手法についても考えていきたい。

参考文献

- [1] Baake, M. (1999). A guide to mathematical quasicrystals. Retrieved from <http://arxiv.org/abs/math-ph/9901014>
- [2] Jiang, K., & Zhang, P. (2018). Numerical mathematics of quasicrystals. 3(21274005), 3575–3596.