数理科学実践研究レター　2021–16 September 24, 2021

非 **Euclid** 空間における結晶系および **Bravais** 格子について

by

沖 泰裕

UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

非 Euclid 空間における結晶系および Bravais 格子について

沖　泰裕[1]（東京大学大学院数理科学研究科）
Yasuhiro Oki (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概 要

結晶物理学において, 結晶系および Bravais 格子は重要な概念である. 本研究では, 非 Euclid 空間における格子に対する結晶系および Bravais 格子の代数的な定義を与え, その性質について考察する.

1　はじめに

n 次元 Euclid 空間内の格子とは, 階数 n の $\mathbb{Z}$-部分加群で, $\mathbb{R}$ 上のベクトル空間として $\mathbb{R}^n$ を生成するもののことである. 結晶物理学では, 格子の分類が基本的かつ重要であり, そのために結晶系および Bravais 格子という概念が用いられる. 結晶系および Bravais 格子は, はじめは格子の "変形" の概念を用いて定められていたが, 後に Michel–Mozrzymas によってそれらの群論的な定義が発見された ([1]).

本論文では, [1] に倣い, 非 Euclid 空間, すなわち $\mathbb{R}$ 上の不定符号二次空間の中の格子に対し, 結晶系および Bravais 格子を定義する. また, 2 次元の場合に結晶系および Bravais 格子全体の集合の濃度を決定する.

2　群論の基本事項

本節では, 結晶系および Bravais 格子を定義するために必要な群論的な用語を導入する.

G を群とし, X を左 G-作用付きの集合とする. $x \in X$ に対し,

$$\mathrm{Stab}_G(x) := \{g \in G \mid gx = x\}$$

とおく.

いま, $x, y \in X$ に対し, $\mathrm{Stab}_G(x)$ と $\mathrm{Stab}_G(y)$ が互いに共役であるとき $x \sim_G y$ と書く. 定義より, $\sim_G$ は同値関係である. この同値関係による X の商を $G\backslash\backslash X$ で表す.

次の命題は基本的である:

補題 1 標準写像 $X \to G\backslash\backslash X$ は

$$G\backslash X \to G\backslash\backslash X$$

を誘導する.

X が右 G-作用付き集合のときも, 同様にして同値関係 $\sim_G$ およびそれによる X の商集合 $X//G$ を定義する. また, 補題 1 と同様の結果が成り立つことも分かる.

3　格子, 結晶系および Bravais 格子

$\mathbb{R}^n$ を標準的な n 次元実ベクトル空間とする. $r, s \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, $r + s = n$ に対し,

$$(\ ,\ )_{r,s} \colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}; ((x_1, \ldots, x_n), (y_1, \ldots, y_n)) \mapsto \left(\sum_{i=1}^{r} x_i y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{s} x_{i+r} y_{i+r}\right)$$

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

とおく. $(\ ,\ )_{r,s}$ は $\mathbb{R}^n$ 上の内積である. 一方, Sylvester の慣性法則より, $\mathbb{R}^n$ の内積は $(\ ,\ )_{r,s}$ で与えられることが知られている. 以下,

$$\mathrm{O}_{r,s}(\mathbb{R}) := \{A \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{R}) \mid \text{任意の } x, y \in \mathbb{R}^n \text{ に対し } (g(x), g(y))_{r,s} = (x, y)_{r,s}\}$$

とおく.

定義 2 $r, s \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対し,

$$\mathrm{Lat}(r, s) := \mathrm{O}_{r,s}(\mathbb{R})\backslash \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})/\mathrm{GL}_n(\mathbb{Z})$$

の元を符号 (r, s) の格子と呼ぶ. また,

$$\mathrm{CS}(r, s) := \mathrm{O}_{r,s}(\mathbb{R})\backslash\backslash \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})/\mathrm{GL}_n(\mathbb{Z}),$$

の元を符号 (r, s) の結晶系,

$$\mathrm{BL}(r, s) := \mathrm{O}_{r,s}(\mathbb{R})\backslash \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})//\mathrm{GL}_n(\mathbb{Z})$$

の元を符号 (r, s) の *Bravais* 格子と呼ぶ.

$(r, s) = (n, 0)$ のとき, $\mathrm{Lat}(n, 0)$, $\mathrm{CS}(n, 0)$ および $\mathrm{BL}(n, 0)$ はいずれも通常の意味の格子, 結晶系および Bravais 格子である.
一方で, 次の概念も重要となる.

定義 3 $L \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ に対し,

$$H_{\mathrm{a}}(L) := \mathrm{Stab}_{\mathrm{GL}_n(\mathbb{Z})}(\mathrm{O}_{r,s}(\mathbb{R}) \cdot L)$$

を数論的ホロヘドリー,

$$H_{\mathrm{g}}(L) := \mathrm{Stab}_{\mathrm{O}_{r,s}(\mathbb{R})}(L \cdot \mathrm{GL}_n(\mathbb{Z}))$$

を幾何的ホロヘドリーと呼ぶ.

補題 1 より, $H_{\mathrm{a}}(L)$ および $H_{\mathrm{g}}(L)$ は L より定まる格子にのみ依存する. また, $H_{\mathrm{g}}(L)$ は $H_{\mathrm{a}}(L)$ と $\mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ 内で共役であり, 従って離散的である.

4 主結果

定理 4 *1)* 標準写像 $\mathrm{Lat}(1, 1) \to \mathrm{CS}(1, 1)$ は全射 $\mathrm{BL}(1, 1) \to \mathrm{CS}(1, 1)$ を誘導する.

2) $\mathrm{CS}(1, 1)$, $\mathrm{BL}(1, 1)$ はともに加算無限集合である.

以下, 定理 4 の証明について説明する. これは, 幾何的ホロヘドリーの分類が重要となる. 定義より, 幾何的ホロヘドリーは $\mathrm{diag}(-1, -1)$ を含むことに注意する. 同型

$$\mathrm{O}_{1,1}(\mathbb{R}) \cong \left\{ \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a^{-1} \end{pmatrix} \mid a \in \mathbb{R}^\times \right\} \rtimes \left\langle \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle$$

より, $\mathrm{diag}(-1, -1)$ を含む $\mathrm{O}_{1,1}(\mathbb{R})$ の離散部分群は以下のいずれかに一致する:

- $\Gamma_a := \left\langle \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a^{-1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\rangle$ $(a \in \mathbb{R}_{\geq 1})$,
- $\Gamma'_{a,b} := \left\langle \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a^{-1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & b \\ b^{-1} & 0 \end{pmatrix} \right\rangle$ $(a \in \mathbb{R}_{\geq 1}, b \in \mathbb{R}_{>0})$.

まず, $\Gamma'_{a,b}$ と $\Gamma'_{a,1}$ は $\mathrm{O}_{1,1}(\mathbb{R})$ 内で共役である．一方, 上の形の部分群が $\mathrm{GL}_2(\mathbb{R})$ 内で共役ならば $\mathrm{O}_{1,1}(\mathbb{R})$ 内で共役であることが確かめられる．よって, 1) が成り立つ．また, Γ_a および $\Gamma'_{a,b}$ はともに有限生成であるから, BL$(1,1)$ は加算集合であることも従う．
次に, 2) の証明について説明する．1) より, BL$(1,1)$ に関する主張は CS$(1,1)$ に関する主張の証明に帰着される．次に, $\mathrm{O}_{1,1}(\mathbb{R})$ の部分群 Γ を Γ_a または $\Gamma'_{a,1}$ $(a \in \mathbb{R}_{\geq 1})$ とする．Γ が $\mathrm{GL}_2(\mathbb{R})$ 内で $\mathrm{GL}_2(\mathbb{Z})$ のある部分群と共役であると仮定すると, $a + a^{-1} \in \mathbb{Z}$ を得る．よって, a は加算無限集合

$$\{a_n := (n \pm \sqrt{n^2-4})/2 \in \mathbb{R}_{\geq 1} \mid n \in \mathbb{Z} \setminus \{0, \pm 1\}\}$$

の元であるから, CS$(1,1)$ の加算性が従う．一方, $n \in \mathbb{Z}_{\geq 2}$ に対し,

$$L_n := \begin{pmatrix} 1 & a_n \\ 1 & a_n^{-1} \end{pmatrix}$$

とおくと, $H_{\mathrm{g}}(L_n) = \Gamma'_{a_n,1}$ が成立する．また,

$$L'_2 := \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L'_3 := \begin{pmatrix} 1 & (a_3+13)/19 \\ 1 & (a_3^{-1}+13)/19 \end{pmatrix}$$

とおくと, $H_{\mathrm{g}}(L_n) = \Gamma_{a_n}$ $(n = 2, 3)$ となる．以上より, CS$(1,1)$ は無限集合である．

5　終わりに

本論文では 2 次元非 Euclid 空間における結晶系および Bravais 格子について考察し, Euclid 空間の場合とは異なり結晶系および Bravais 格子の有限性が成り立たないことを見た．しかし, 幾何的 (もしくは数論的) ホロヘドリーの抽象的な群としての同型類は有限通りしか存在しないことも判明した．幾何的ホロヘドリーの群同型による分類についての詳細な研究は, 今後の課題の 1 つである．
また, 幾何的ホロヘドリーの完全な決定も重要な問題である．L'_3 の幾何的ホロヘドリーの計算には, Pell 方程式 $x^2 - 5y^2 = 1$ の解を用いる．より一般に, この問題は実 2 次体 $\mathbb{Q}(a_n)$ $(n \geq 3)$ の数論と関係が深いと考えられる．
一方で, より高い次元の場合には $\mathrm{O}_{r,s}(\mathbb{R})$ の離散部分群の構造はより複雑になると想定される．ただし, $(r,s) = (2,1)$ の場合には同型 $\mathrm{SO}_{2,1}(\mathbb{R}) \cong \mathrm{PGL}_2(\mathbb{R})$ が存在することから, 古典的な Fuchs 群の理論を応用できる可能性がある．

謝辞　本研究に関して問題提起および助言をいただいた日本製鉄の中川淳一氏に深く感謝致します．また, 定期的な会合を開催し, 研究に関してご意見をいただいた東京大学大学院数理科学研究科の中村勇哉氏, 間瀬崇史氏および志甫淳氏に感謝致します．

参考文献

[1] L. Michel, J. Mozrzymas, *Les concepts fondamentaux de la cristallographie*, C. R. Acad. Sc. Paris, t. **307** (1988), Série I, pp. 905–910.