歪んだダイヤモンドはどれぐらい面心格子か？～高次元の空間を使って対称性を調べる

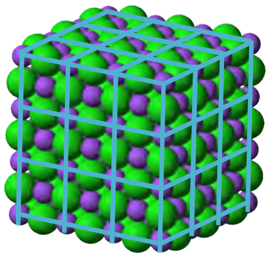
富安亮子（JSTさきがけ、東北大学）
JSTさきがけキャラバン
11月23日@岡山大学

今日お話しすること

- 数学と「結晶学」の関わり
  数学以外の分野で役に立っている例をお伝えしたい。

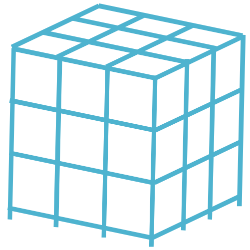
- 結晶を選んだ理由は、数学・理論以外の理系分野に進学しても、出会う数学の一例として。

● 具体的には、以下のような問題（の2次元版）を解くことを考える。



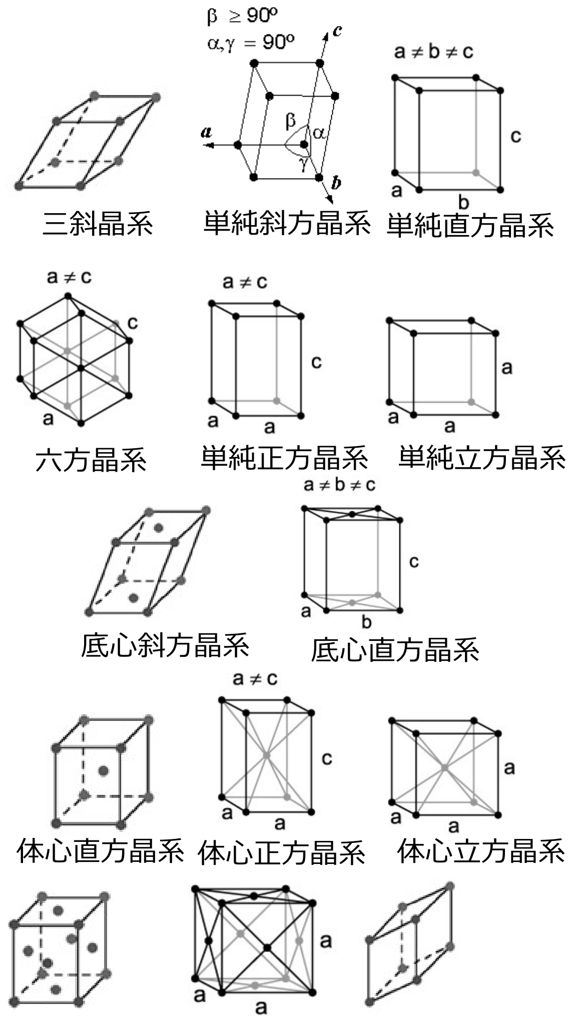
結晶と呼ばれる固体物質

実験データから抽出



結晶格子
（それぞれのセルには同じ分子構造が入る）

14種類の対称性で分類（計算機）

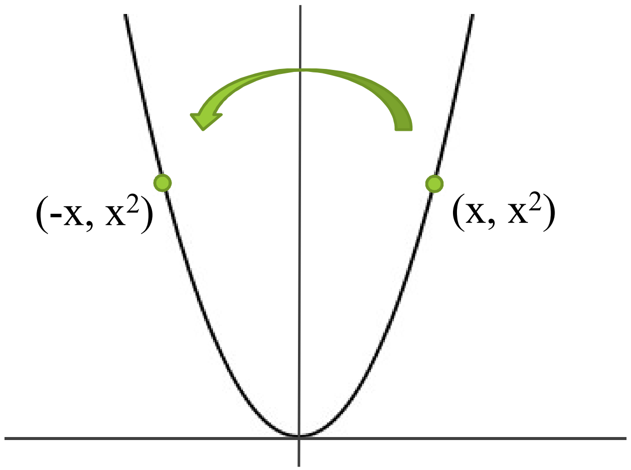


✓ 結晶格子は観測誤差のため歪んで見えているとする。

✓ この話は、数学の「代数」と呼ばれる分野と関係が深い。

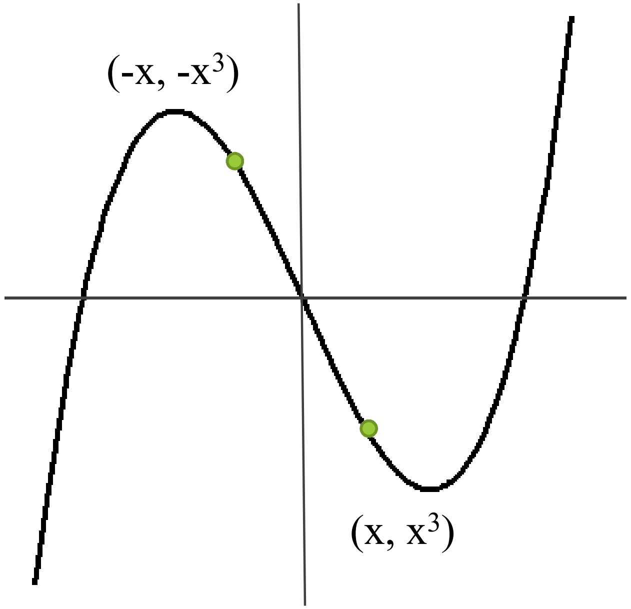
小中学校で学ぶ対称性

- 線対称と点対称



線対称な例：$y = x^2$

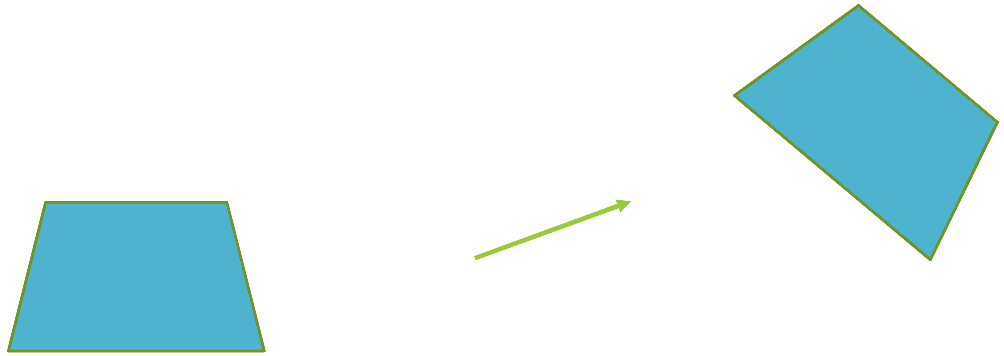
座標変換$(x, y) \mapsto (-x, y)$を行っても同じグラフ。



点対称な例：$y = x^3$

座標変換$(x, y) \mapsto (-x, -y)$を行っても同じ。

- 一般に、ある集合Vの任意の2点x, yに対して距離が定義されているとき、以下の性質を満たすものをVの合同変換φと呼ぶ。
  1. φがVからVへの写像で、
  2. どのようなx, yを取ってきても、x, y間の距離とφ(x), φ(y)の距離が等しい。
- 「図形A, Bが合同」というのは、つまり「A, Bはある合同変換で写り合う」ということ。



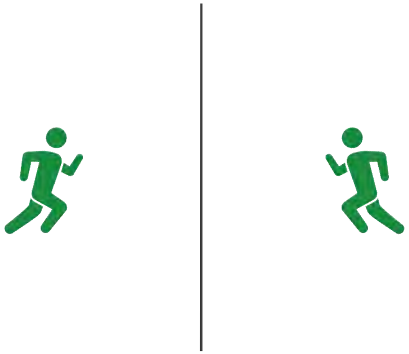
- 図形Aが線対称（または、点対称、並進対称）のとき、ある合同変換によって、AはA自身に写る。

２次元平面、３次元空間の様々な合同変換

□ 鏡映・・・線対称の概念の一般化

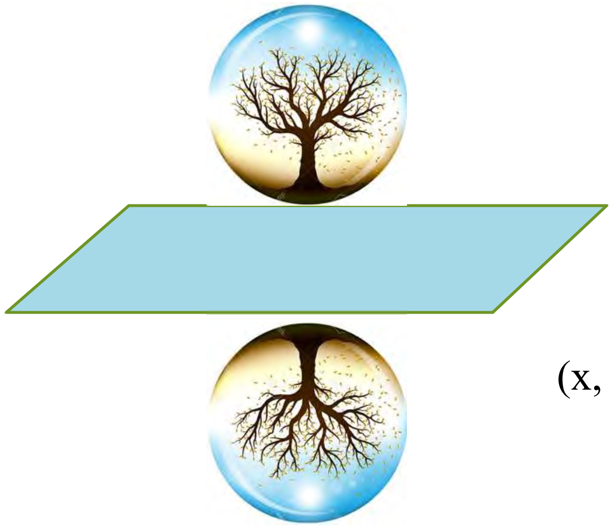
- 2次元平面の場合：　鏡映とは、ある直線上の点を全て固定する（動かさない）合同変換のこと
- 3次元空間：　鏡映とは、ある平面上の点を全て固定する合同変換のこと

✓ 直線 (x = 0) に関する鏡映



$(x, y) \mapsto (-x, y)$

✓ 平面(xy 平面) に関する鏡映



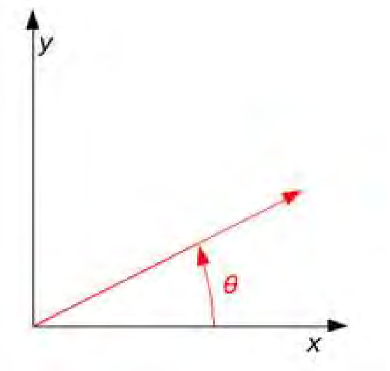
$(x, y, z) \mapsto (x, y, -z)$

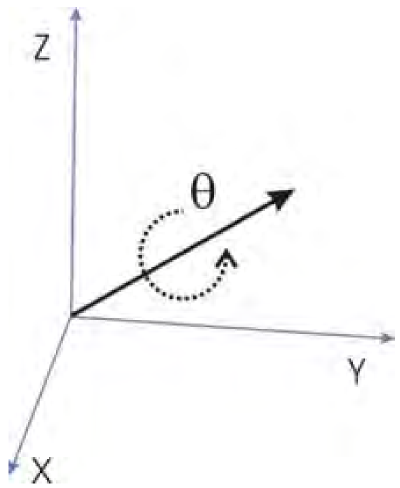
□ 反転・・・点対称の概念の一般化

- 2次元平面の場合: $(x, y) \mapsto (-x, -y)$
- 3次元空間の場合: $(x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$

□ 回転（次元が2, 3の場合）

- ある点を固定する合同変換で、鏡映でも反転でもないもの。



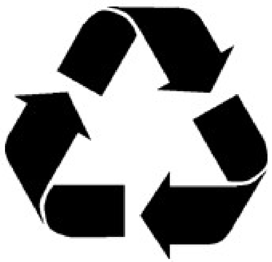


3次元の場合、回転は必ずある直線を固定する（オイラーの定理)

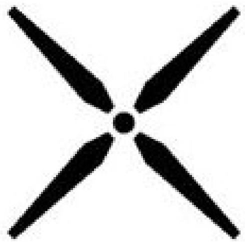
回転対称性

- ✓ 点対称・・・180度回転すると元に戻る。
- ✓ n回対称・・・360/n 度回転すると元に戻る。

2回対称



3回対称



4回対称

5回対称

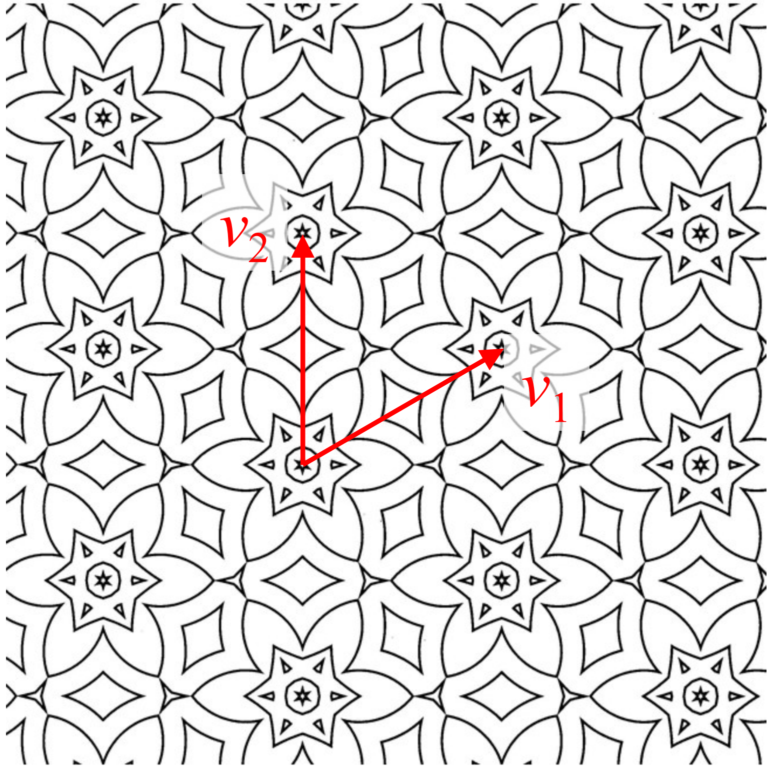
平行移動による対称性（並進対称性）

- 右のようなパターンが2次元平面全体に広がっているとする。

- パターン全体をv_1（またはv_2）だけ平行移動したとき元のパターンと同じものが得られる。

  座標変換で表すと、$(x, y) \mapsto (x, y) + v_i$

- さらにどの整数m_1, m_2に対しても、全体を$m_1 v_1 + m_2 v_2$だけ平行移動したとき、元のパターンと同じになる。



結晶

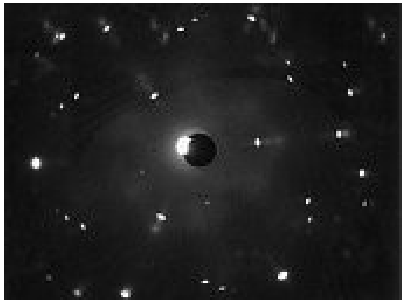
そういったものは現実にも存在する。例えば、結晶と呼ばれるもの。

ダイヤモンドも結晶の一つ。

拡大
(10^7倍ぐらい)

ダイヤモンド

回折実験



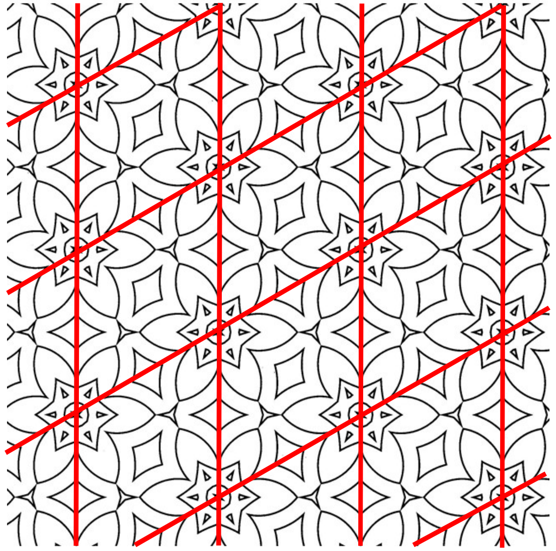
並進対称性がある物質では
回折像に輝点が生じる。

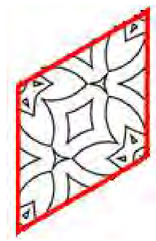
宝石の大きさは有限なので、完全に厳密な意味で並進対称性が成立しているわけではないが、

無限に同じパターンが続いていると仮定しても、結晶構造のモデルとしては殆ど問題ない。

並進対称性を持つパターン（模様）の記述

- あるパターンが並進対称性を持つ場合、繰り返しの元となるパターンの一部（基本領域）を取ることで、全体を描かなくても、記述できる。





基本領域

左の模様は、右の基本領域を平行移動することで得られる複数のピースからなる。

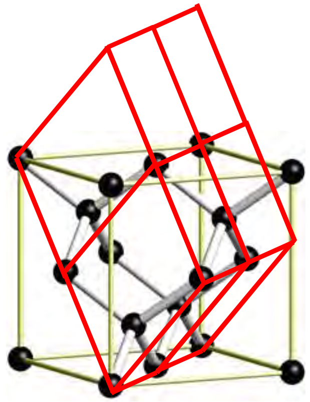
- 結晶構造もこの方法で表現される。

● ダイヤモンドの場合

Diamond

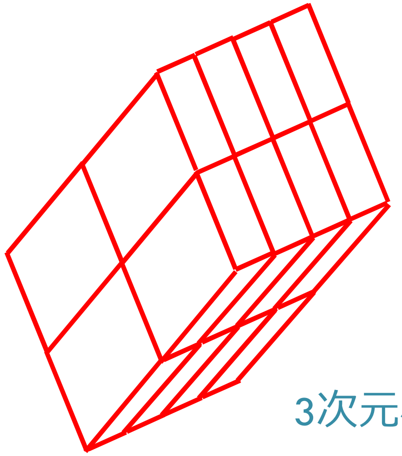
拡大

拡大

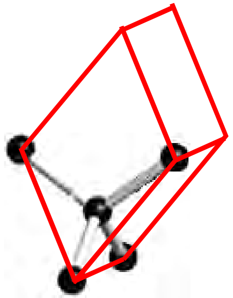


赤い辺・・・全部同じ長さ

したがって、以下の二つの情報があればダイヤモンドの構造は再構成できる。

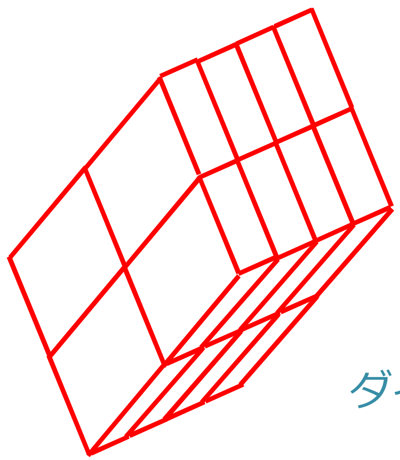


3次元格子



基本領域内の
各原子の位置

以下の格子を直接、計算機に渡せるわけではないので、もう少し言葉の意味を正確にする必要がある。



ダイヤモンドの結晶格子

- 対称性を決めたい格子は、どのように入力されるのか？
- その前に、格子とは何か？

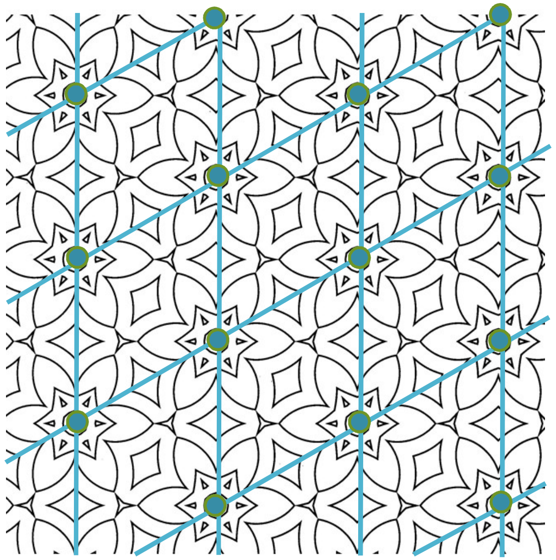
以下では主に2次元の場合を扱うが、高次元でも殆ど変わらない。

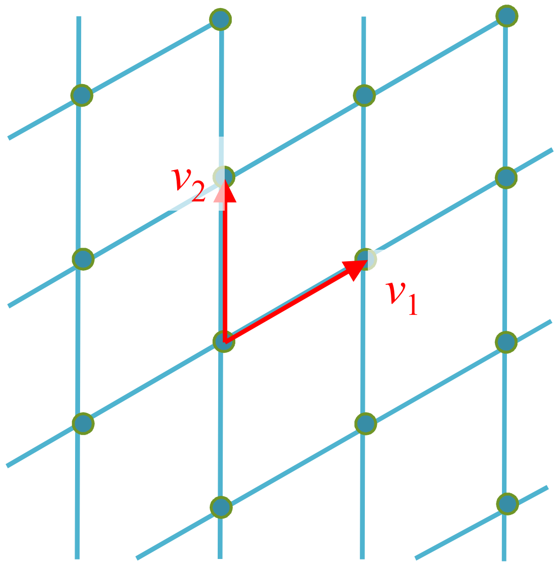
●格子とは何か？

✓ 2次元格子とは、1次独立なベクトルv_1, v_2の和 $m_1v_1+m_2v_2$ (m_iは整数)で書ける座標点からなる集合。

２次元格子Lを固定したとき、上記の性質を持つLのベクトルv_1, v_2を、Lの「基底」と呼ぶ。

並進対称性を持つパターンがあったとき、並進対称性を与える平行移動を全て取り出せば、格子になる。





2次元格子

●格子を数値化する(1/2)

以下は、2次元格子を数値化する代表的な方法（高次元の場合も同様）。

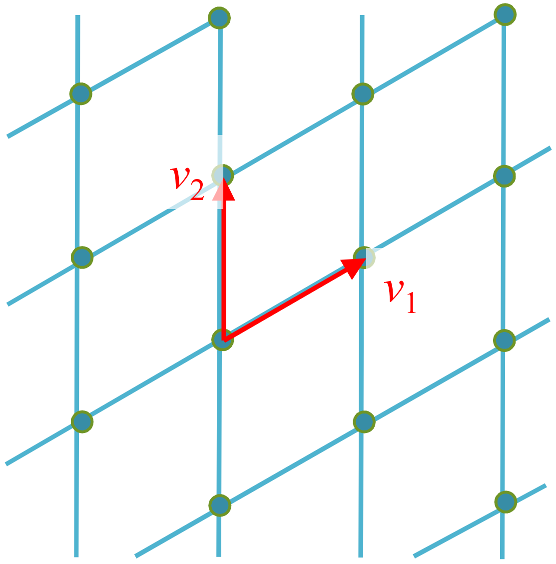
方法その1: v_1, v_2の長さ $|v_1|$, $|v_2|$と、 v_1, v_2の交わる角度γを用いて、$\begin{pmatrix}|v_1| & |v_2| & \gamma\end{pmatrix}$と表す。

方法その2: 内積を用いる: $\begin{pmatrix}v_1 \cdot v_1 & v_1 \cdot v_2 & v_2 \cdot v_2\end{pmatrix}$

注) 通常、右のように2×2の対称行列で書く $\begin{pmatrix}v_1 \cdot v_1 & v_1 \cdot v_2 \\ v_1 \cdot v_2 & v_2 \cdot v_2\end{pmatrix}$

以下の関係式を用いれば、その1↔その2間の変換は簡単に行える。

$$\begin{cases} v_1 \cdot v_2 = |v_1||v_2|\cos\gamma \\ v_i \cdot v_i = |v_i|^2 \end{cases}$$



2次元格子

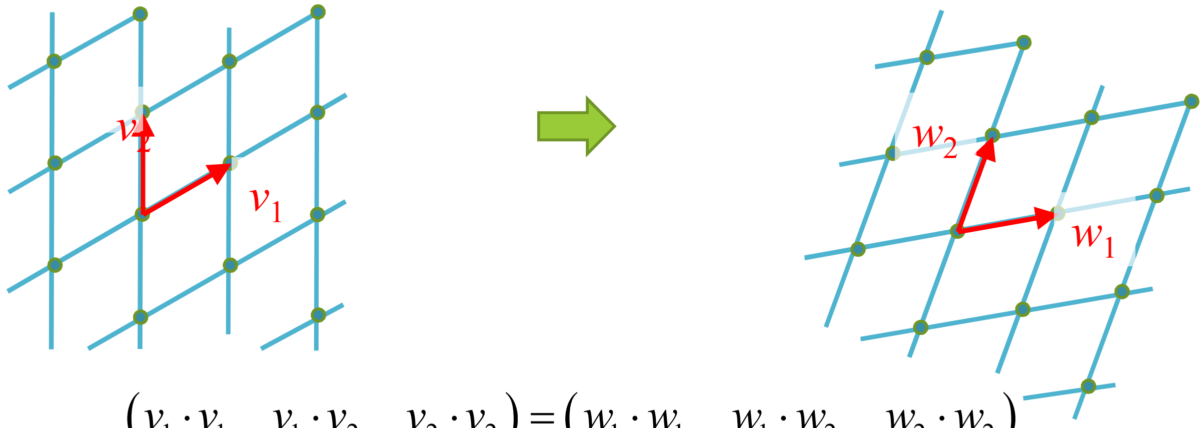
格子を数値化する(2/2)

$\begin{pmatrix} v_1\cdot v_1 & v_1\cdot v_2 & v_2\cdot v_2 \end{pmatrix}$の代わりに、以下のように2次式の係数として書いて表すこともよくある。

$$\left|xv_1+yv_2\right|^2=\left(v_1\cdot v_1\right)x^2+2\left(v_1\cdot v_2\right)xy+\left(v_2\cdot v_2\right)y^2$$ 2次形式

方法その1でもその2でも、格子とv_1, v_2を2次元平面の中で回転させた前後で、

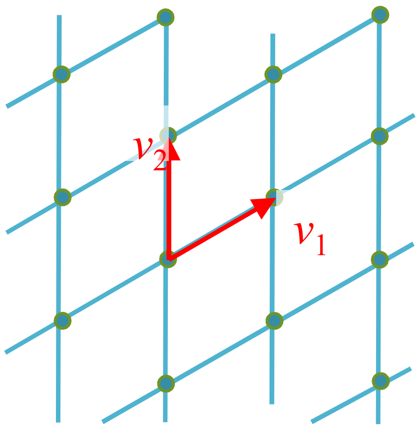
数値が変わらない、という「良い」性質を持つ。

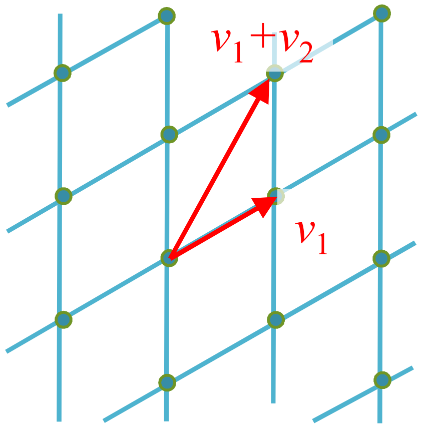


$$\begin{pmatrix} v_1\cdot v_1 & v_1\cdot v_2 & v_2\cdot v_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} w_1\cdot w_1 & w_1\cdot w_2 & w_2\cdot w_2 \end{pmatrix}$$

● 格子を数値化したことで生じる問題点

基底の取り方を変えると、1, 2いずれの方法でも全然違う値になってしまうこと。
同じものを表す異なるパラメータが無数に出来てしまう。





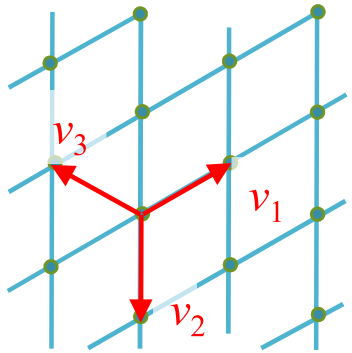
$$\begin{pmatrix} v_1\cdot v_1 & v_1\cdot v_2 & v_2\cdot v_2 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} v_1\cdot v_1 & v_1\cdot(v_1+v_2) & (v_1+v_2)\cdot(v_1+v_2) \end{pmatrix}$$

この現象は結晶学でも問題になっていたが、数学者のSellingが作った「簡約」と呼ばれる方法で解決された。

Selling簡約

Sellingは、どのような2次元格子に対しても、(*)が成立するような基底v_1, v_2を取れることを示した。

(*) $v_3 = -v_1 - v_2$ としたとき、$v_1 \cdot v_2 \leqq 0,\ v_1 \cdot v_3 \leqq 0,\ v_2 \cdot v_3 \leqq 0$



左のようにv_1, v_2を取り直せば、どの$v_i \cdot v_j$も交わる角度が鈍角なので(*)を満たす。

さらに、v_1, v_2, v_3のうち1番長さが短いものがv_1、次に短いものがv_2となるよう、添え字を交換すれば$(v_1 \cdot v_1 \quad v_1 \cdot v_2 \quad v_2 \cdot v_2)$ は、最初に取った2次元格子に対して一意に定まることが示される。つまり、

$$2\text{次元格子}L \ \underset{1\text{対}1\text{対応}}{\mapsto}\ (v_1 \cdot v_1 \quad v_1 \cdot v_2 \quad v_2 \cdot v_2)$$

v_1, v_2: LのSelling簡約な基底

Selling簡約な基底を使えば、2次元格子を数値で一通りに表現することができる。

2次元格子のパラメータの次元

以上のことから、2次元格子は、3次元ベクトルによって一意に数値化できる。

$$(v_1 \cdot v_1 \quad v_1 \cdot v_2 \quad v_2 \cdot v_2)$$

v_1, v_2: LのSelling簡約な基底

上のベクトルがSelling簡約なv_1 , v_2に対応する必要十分な条件は、

$$\begin{cases} v_1 \cdot v_2 \leq 0 \\ -v_1 \cdot v_1 - v_1 \cdot v_2 = v_1 \cdot v_3 \leq 0 \\ -v_1 \cdot v_2 - v_2 \cdot v_2 = v_2 \cdot v_3 \leq 0 \end{cases}$$

同様に、3次元格子は、6次元ベクトルを用いて一意に数値化できる。

$$\left(v_1 \cdot v_1 \quad v_1 \cdot v_2 \quad v_2 \cdot v_2 \quad v_1 \cdot v_3 \quad v_2 \cdot v_3 \quad v_3 \cdot v_3\right) \quad \text{または} \quad \begin{pmatrix} v_1 \cdot v_1 & v_1 \cdot v_2 & v_1 \cdot v_3 \\ v_1 \cdot v_2 & v_2 \cdot v_2 & v_2 \cdot v_3 \\ v_1 \cdot v_3 & v_2 \cdot v_3 & v_3 \cdot v_3 \end{pmatrix}$$

3次対称行列

高次元のSelling簡約については、例えば以下の本に書いてある:

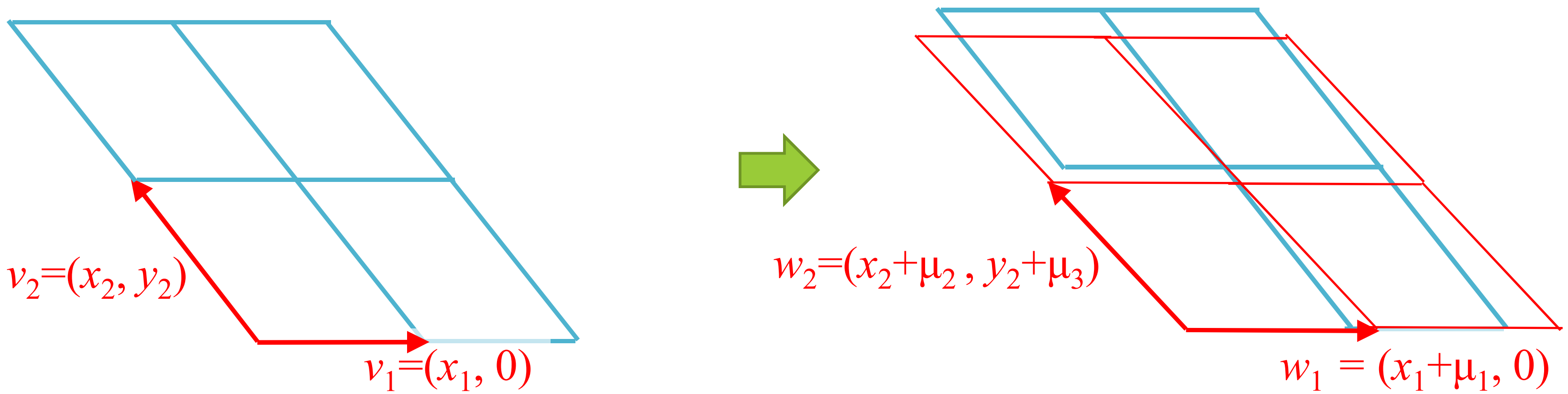
「素数が香り、形がきこえる-目でみる2次形式」, J.H.コンウェイ (著)
(シュプリンガー数学リーディングス)

● 元の格子の次元より高次元の空間を使う意味

以下の2次元格子を表すパラメータに実験誤差が含まれているケースを考える:

$$\begin{pmatrix} v_1\cdot v_1 & v_1\cdot v_2 & v_2\cdot v_2 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} v_1\cdot v_1+\varepsilon_1 & v_1\cdot v_2+\varepsilon_2 & v_2\cdot v_2+\varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

✓ 元の2次元平面で考えた場合: 右側のパラメータに対応する2次元格子基底をw_1, w_2とする。



上の図では左の格子（水色）と右の格子（赤）のずれを表すのに、パラメータμ_1, μ_2, μ_3が使われている。

⇒ 結局、3次元の空間を使って考えることが必要。

● 数値化された格子の対称性の決定

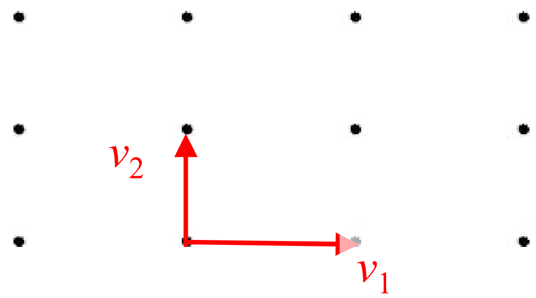
以下の3次元ベクトルの値が実験データとして得られているとする。

$$\left(v_1 \cdot v_1 + \varepsilon_1 \quad v_1 \cdot v_2 + \varepsilon_2 \quad v_2 \cdot v_2 + \varepsilon_3\right)$$

ただし、$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$は、 $|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|, |\varepsilon_3|$ が $v_1 \cdot v_1$, $v_2 \cdot v_2$ と比較すると小さい（例えば1/20以下）ということを除き正確な値が分かってないとする。　　　つまり、 $v_1 \cdot v_1$, $v_2 \cdot v_2$, $v_1 \cdot v_2$ の正確な値も分からない。

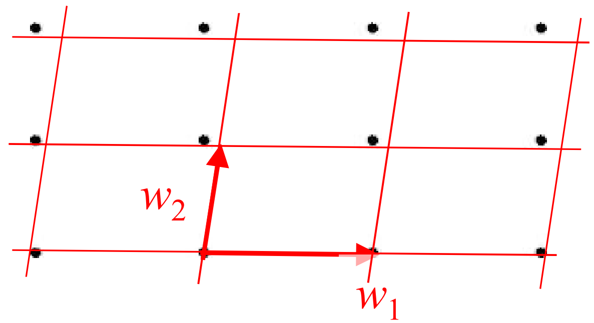
このときに、以下の左の格子がどのような対称性を持つか、右の格子から推定する、という問題を考える。

$$\left(v_1 \cdot v_1 \quad v_1 \cdot v_2 \quad v_2 \cdot v_2\right)$$



長さ、角度など正確な数字が分からない

$$\left(v_1 \cdot v_1 + \varepsilon_1 \quad v_1 \cdot v_2 + \varepsilon_2 \quad v_2 \cdot v_2 + \varepsilon_3\right)$$

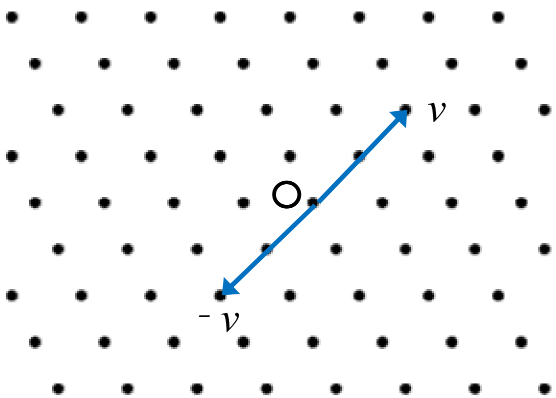


観測値なので分かっている

●格子の対称性の一般論について

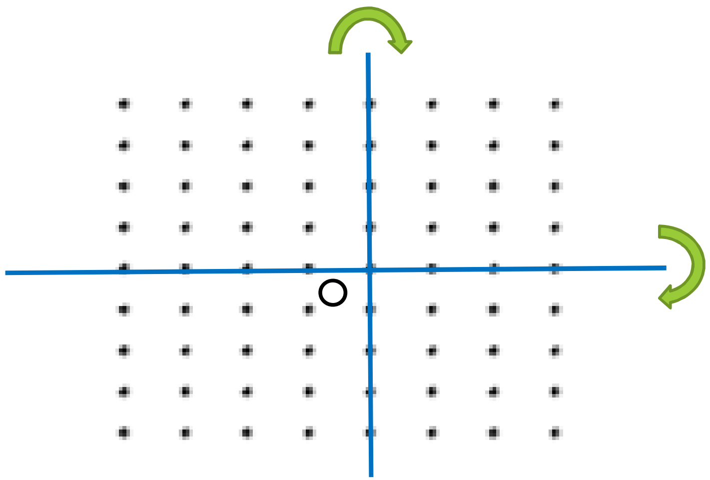
まず、どのような2次元格子も反転対称性（図左）は必ず持っている。

他方で、鏡映対称性（図右）を持つには、ある格子ベクトルと格子ベクトルが90度で交わる必要がある。



(x, y) ↦ (-x, -y)

(x, y) ↦ (-x, y)

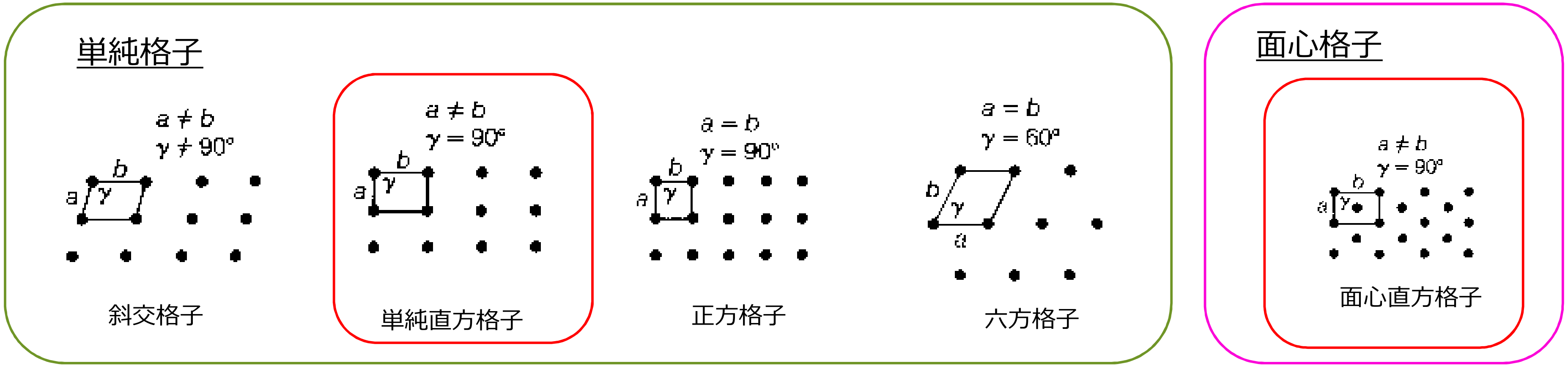


(x, y) ↦ (x, -y)

●2次元格子の対称性

2次元格子の回転対称性は、2回、3回、4回、6回しかないことが知られている（証明は難しくない）。

このことから、2次元格子の対称性は以下の5種類であることが証明できる。

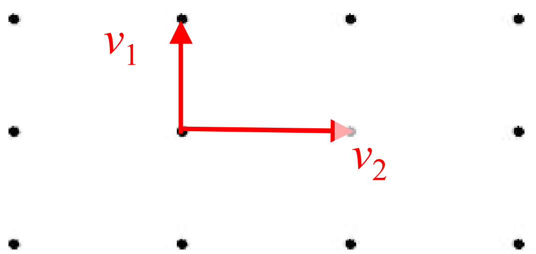


単純直方格子であるかどうかの推定

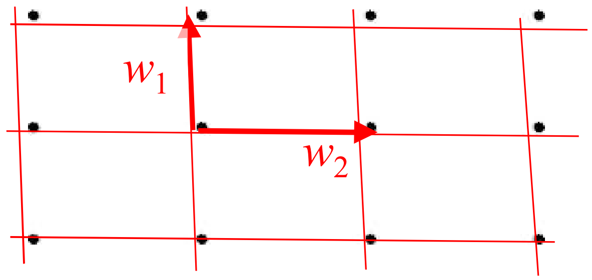
誤差のない場合、Selling簡約を与えるv_1, v_2は直角に交わるので図左のようになる。

このとき観測値の方のSelling簡約を与えるw_1, w_2は、図右のいずれかになると考えられる。

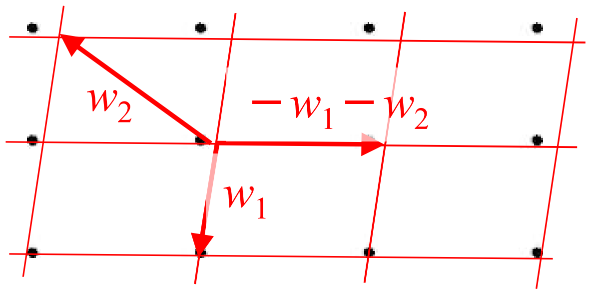
$$\left(v_1 \cdot v_1 \quad 0 \quad v_2 \cdot v_2 \right)$$



$$w_1 \cdot w_2 \approx 0$$



$$w_1 \cdot \left(w_1 + w_2 \right) \approx 0$$



すなわち、以下のいずれかが成立していれば

観測された元の格子も直方格子である可能性が高い。

$$w_1 \cdot w_2 \approx 0$$

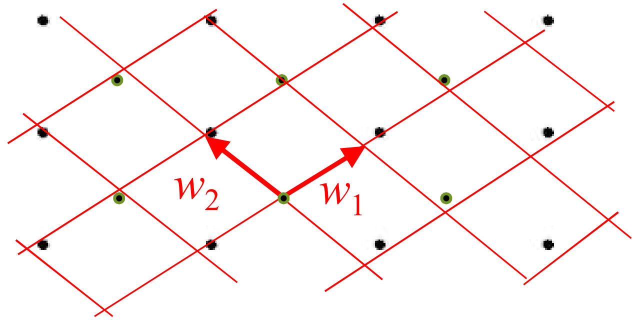
$$w_1 \cdot \left(w_1 + w_2 \right) \approx 0$$

面心直方格子であるかどうかの推定

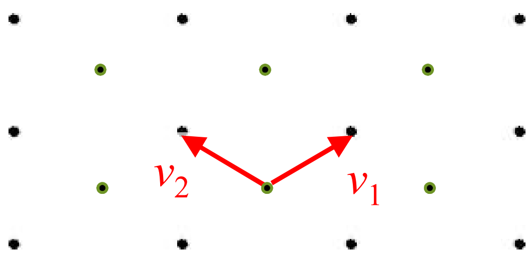
誤差のない場合、Selling簡約な v_1, v_2,を取ると、図左のようになり、v_1+v_2, v_1-v_2は直角に交わる。

このとき観測値の方のSelling簡約を与えるw_1, w_2 は、図右のいずれかになると考えられる。

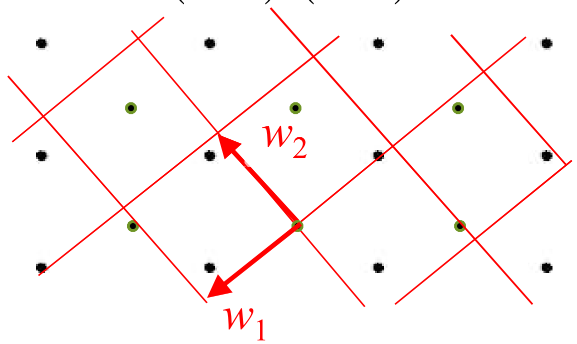
$$w_1 \cdot w_1 \approx w_2 \cdot w_2$$



$$v_1 \cdot v_1 = v_2 \cdot v_2$$



$$w_1 \cdot w_1 \approx (-w_2)\cdot(-w_2) = w_2 \cdot w_2$$



すなわち、以下が成立していれば観測された元の格子も面心直方格子である可能性が高いと考えられる。

$$w_1 \cdot w_1 \approx \ w_2 \cdot w_2$$

証明に使われる数学について（1/3)

２次元では、上半平面＝複素平面の上半分（虚数部が正の複素数 $x+\sqrt{-1}y$ に対応）が出てくる。

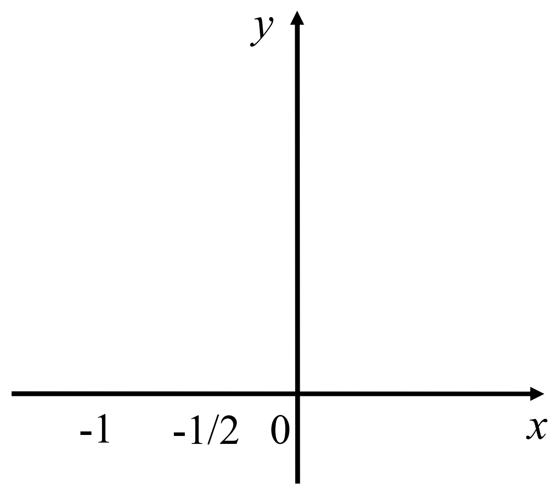
以下の写像により、2次元格子を表す3次元ベクトルを、さらに上半平面の一点に写すことができる。

$$\left(v_1\cdot v_1 \quad v_1\cdot v_2 \quad v_2\cdot v_2\right)\mapsto \frac{v_1\cdot v_2}{v_1\cdot v_1}+\sqrt{-1}\frac{\left(v_1\cdot v_1\right)\left(v_2\cdot v_2\right)-\left(v_1\cdot v_2\right)^2}{\left(v_1\cdot v_1\right)^2}$$

上の写像により $\left(v_1\cdot v_1 \quad v_1\cdot v_2 \quad v_2\cdot v_2\right)$ と $\left(w_1\cdot w_1 \quad w_1\cdot w_2 \quad w_2\cdot w_2\right)$ が同じ $x+\sqrt{-1}y$ に移されたとする。このとき、

$\frac{v_1\cdot v_2}{v_1\cdot v_1}=\frac{w_1\cdot w_2}{w_1\cdot w_1}, \frac{v_2\cdot v_2}{v_1\cdot v_1}=\frac{w_2\cdot w_2}{w_1\cdot w_1}$ なので、両者は、以下のように互いの定数倍であることが分かる。

$$\left(v_1\cdot v_1 \quad v_1\cdot v_2 \quad v_2\cdot v_2\right)=c\left(w_1\cdot w_1 \quad w_1\cdot w_2 \quad w_2\cdot w_2\right)$$



上半平面

以下では、この写像を用いて３次元→上半平面（2次元）と次元を落とし、議論を可視化する。

証明に使われる数学について（2/3)

写像 $\begin{pmatrix} v_1 \cdot v_1 & v_1 \cdot v_2 & v_2 \cdot v_2 \end{pmatrix} \mapsto \dfrac{v_1 \cdot v_2}{v_1 \cdot v_1} + \sqrt{-1}\dfrac{(v_1 \cdot v_1)(v_2 \cdot v_2) - (v_1 \cdot v_2)^2}{(v_1 \cdot v_1)^2}$ によって、

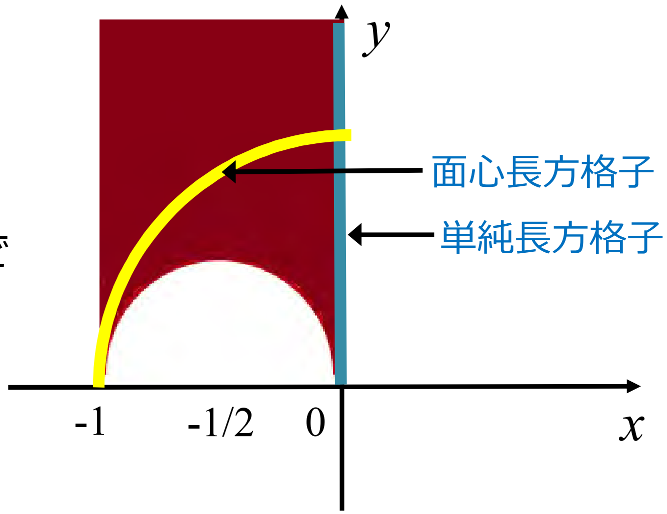
Selling簡約な3次元ベクトルに対応するものは、$-1 \le x \le 0,\ (x+1/2)^2 + y^2 \ge (1/2)^2$ で定まる領域（下図茶色）。

そのうち単純長方格子、面心長方格子に対応するものは、それぞれ、

$v_1 \cdot v_2 = 0$ より直線 $x = 0$ 上（右図青線）、

$v_1 \cdot v_1 = v_2 \cdot v_2$ より曲線 $x^2 + y^2 = 1$ 上（右図黄線）に写される。

簡単に述べると、面心長方格子の場合に、等式を1つ調べるだけで済んだのは、Selling簡約なパラメータ（黄線）が、茶色の領域の内部に位置し、境界から離れているからである。

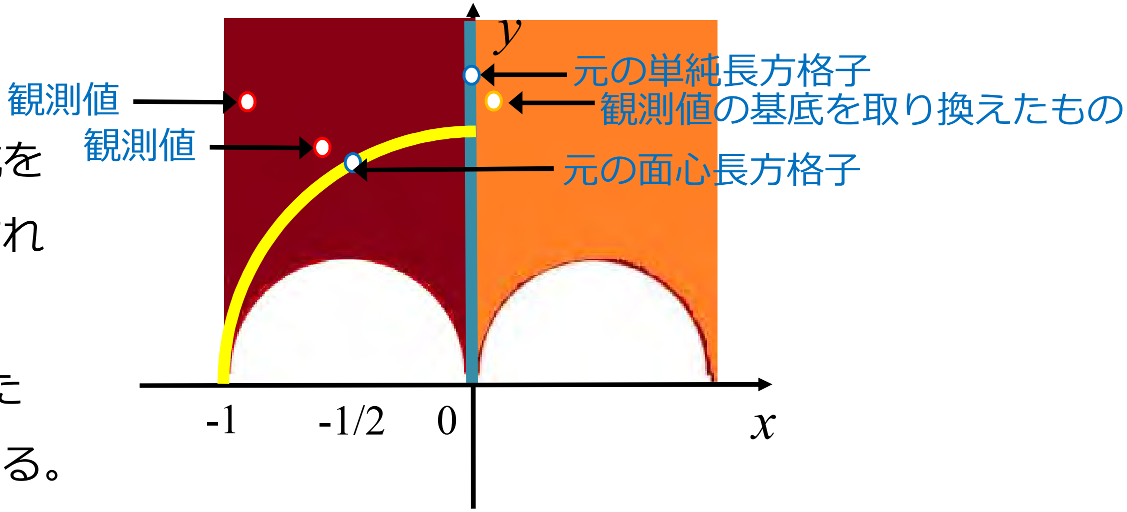


● 証明に使われる数学について（3/3)

面心長方格子を観測したとき、得られた３次元Selling簡約な基底に対応する3次元ベクトルは、
茶色の領域の中にあるので、結果として、元の面心長方格子のパラメータの近くにある。
なので、観測値が、面心長方格子に近いことが、すぐ分かる。

単純長方格子の場合は、茶色い領域の境界
にあたるので、そうならないことがある。

しかし、茶色い領域部分を平行移動した領域を
もう一つ準備して検討するエリアを２倍にすれ
ば青い線を境界から離すことができる。
単純長方格子の場合に等式が2つ必要となった
のは、領域２つを組み合わせたことに対応する。



逆にこの考え方で、対称性決定アルゴリズムの効率を向上させることができる（３次元以上では有効）。

まとめ

以下のことについて紹介を行った。

- ✓ ダイヤモンドを含む結晶と呼ばれる物質は、並進対称性を持っている。結晶格子の並進対称性を含む対称性を決定することには一定の需要があり、数学が使われる。

- ✓ 2次元格子は3次元、3次元格子は6次元のベクトルを用いて数値化される。一意的に数値化するための方法として、Selling簡約を紹介した。

- ✓ 2次元格子の場合、上記の3次元ベクトルを調べて、対称性の決定を行うことができる。誤差がある場合も、チェックする必要のある等式の数は増えるが、同様の決定を行うことができる。決定の効率を向上させる考え方の土台となる部分を紹介した。