準結晶の数学的モデル：準周期タイリング

秋山 茂樹

1　準結晶の発見

1984 年に発表された論文 [14] で D. Shechtman 等はマンガンとアルミの合金を急速に冷却した合金のX線回折像が 10 回対称性を示すことを示した。よく知られているように回折分析では、高エネルギーの粒子線を物質に当てその反射波の干渉を捕らえることにより物質の内部状態を調べる。反射波が干渉してエネルギー集中の輝点（Bragg Peak) が現れるのは物質内部に同じようなパターンの繰り返し構造があり反射波が共鳴するからである。当時このような輝点の存在は結晶構造の証明であり、内部構造の周期性（併進対称性）を表すものと考えられていた。しかしここで発見された 10 回回転対称性は三次元結晶群にはありえない[1]。結晶学の基礎を揺るがす発見で、この物質の新しい内部状態は後に **準結晶** と命名されこの発見により D. Shechtman は 2011 年度のノーベル化学賞を受賞した。

一般に科学論文は投稿されたあと、その分野の専門家により査読されその内容の正しさ、価値、独創性などが検討される。Shechtman が実際にこの発見をしたのは 1982 年であったが、紆余曲折があって２年半も論文が発表されるまで時間がかかった。この論文を否定する立場の最大の論客はノーベル賞受賞者の L. Pauling であった。長い歴史を経て検証されてきた結晶学の基礎が覆されることへの拒否感は特別なものがあったろう。現在ではこの反論は完全に退けられているが、その論争の歴史は科学史の一幕としても興味深い ([11])。常識を覆す発見が最初から認められないことは科学ではよくある出来事なので２年ほどで論文が発表できたのは幸運なほうかもしれない。もちろん逆は必ずしも真ならずで自分の研究が周囲に認められないからといって素晴らしいということには全くならない。残念である。

数学の立場からすると不思議に思えるのは Shechtman の論文は４名の共著論文であるのにノーベル賞は Shechtman のみに与えられたことである。数学という分野では複数の著者名はアルファベット順に並べるのが基本で、筆頭著者であることは特別の意味を持つことはないが、化学では筆頭が主要と扱われるらしい。いずれにせよ準結晶の発見は Shechtman 個人の長期にわたる努力の成果であることが良く知られているので一人のみの受賞を問題視する考え方は存在しない。

2　準周期秩序

準結晶の発見は結晶とは何かに関する深刻な議論を引き起こした。議論の末、国際結晶学会は 1991 年に結晶の暫定的な再定義を行った。結晶とは回折像が本質的に輝点のみからなる物質であるとし、準結晶も晴れて結晶の仲間となったのである ([12])。

準結晶の発見は新しい数学の分野を作り出した。その分野は準周期秩序の数学 (Mathematics of Aperiodic Order) と命名されている。その目的は、周期を持たないが多数のパターンの繰り返しを持つような数学的構造、および回折像が輝点を持つような集合の数学的モデルを与え公理化し深く理解しようという試みである。

最初の抽象化として、原子配置の代わりにユークリッド空間（たとえば直線、平面や空間) の点集合 X を考える。実際の物質は有限の範囲をしめるが、数学的モデルをかんがえる場合無限な広がりを持つ

[1] 三次元結晶群の一点の固定部分群（点群）は位数 5 の元を含まない。

空間の点集合を考えるのが自然である。二つの原子はあまり近くに配置することができないので、一定値があって二点間距離はそれ以上離れているとする。これを満たす集合を**一様離散**という。さらに回折分析をする以上一定の圧力下にある物質を扱うのであり、その点集合に大きな穴が開いていないという条件も必要だ。つまりある定数 R があって、半径 R の球をどこに配置しても、その内部には X の点があるという条件も課したくなる。この条件を満たす集合を**相対稠密**という。**Delone 集合**とは与えられた空間の中で一様離散かつ相対稠密なものをいう。もちろんこれでは一般的すぎてパターンの繰り返しについて何も言えない。パターンの繰り返しは差集合 $X - X$ によって記述される。これが離散閉集合ならば局所的な点配置（すなわち一定の大きさの地図）は平行移動を除いて有限個しかないことになる。さらに強い制限であるが有限集合 F があって $X - X$ が X の有限個の平行移動の合併 $X + F$ に含まれてしまう Delone 集合を **Meyer 集合** という。Meyer 集合は準結晶の基礎的な数理モデルとしてよく知られている。さて数学的にはそのような点集合の回折像をどのように定義したらよいだろうか。以下は準結晶の参考文献に良くなされている説明である[2]。まずは X の点に対しディラックのデルタ関数 $\delta(x)$ の和を考える。その自己相関

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{2N}\right)^d \sum_{x,y\in X\cap[-N,N]^d} \delta(x-y)$$

に対して、

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{2N}\right)^d \left|\sum_{x\in X\cap[-N,N]^d} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x,t\rangle)\right|^2$$

はそのフーリエ変換の一点 t での値であり、この点における回折強度と考えることができる。ここで d は空間の次元、$\langle x,y\rangle$ は x, y の標準内積とする。自己相関のフーリエ変換がこの回折強度のデルタ関数の和によって表され、任意の位置の単位球で一様に有界な測度を与える集合を**純点回折集合**という。[2] のサーベイは読みやすい。

[2] A. Hof [8, 9] により数学的基礎が与えられた。以下の議論は自己相関測度の一意性を仮定しなくてはならないが、以下にでてくる Delone 集合はその仮定を満たす。

3 射影切断集合と自己相似タイル張り

純点回折集合の具体例を作り出すにはどうしたらよいだろうか。Shechtman の発見した準結晶が 10 回対称性を持っていたことで R. Penrose のよるタイル張りが脚光を浴びた。これは図 1 のように凧と手裏剣の形の二枚の四角形タイルからなるタイル張りで、タイル表面の二種の円弧の文様が連続的に繋がるように並べるものである。平面をタイル張りすることは可能だが、驚くべきことに出来上がったものは一切の平行移動に関する周期性を持たない。このようなタイルの集合を**強非周期的タイル集合**と呼ぶ。Grünbaum-Shephard [7] の 10-11 章に詳しい解説がある。このようなタイルは言語理論の立場からも大変興味深いものである。

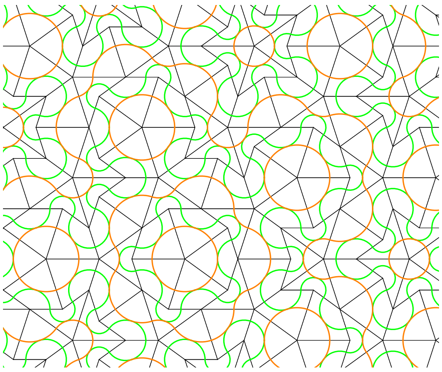

図 1: Penrose タイル張り

Penrose タイル張りの同じ向きのタイルを一種類選んでどこかに一点印をつけると、印全体の集合は平面内の Delone 集合となる。de Bruin [4] はこうしてできる Delone 集合を五次元の格子のうち無理方向の帯に入るものの投影像で説明した。一般にこの方法で得られる集合を**切断射影集合**という。五次元は理解が難しいので、二次元の格子から一次元の切

断射影集合を作る方法を図 2 で示した。二次元の格

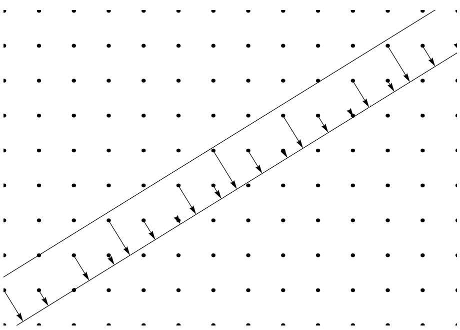

図 2: 切断射影集合

子点のうち無理方向に延びる帯の間に入る点だけを考え、これを帯の方向の直線に投影する。このようにして得られる点集合は周期的でないが Meyer 集合であることをみるのは易しい。一般に切断射影集合は純点回折集合になる。Penrose タイルから作られる Delone 集合は Meyer 集合で純点回折集合にもなる。回折像を近似計算してみると図 3 のようになった。確かに五次元格子が垣間見えるように感じられ

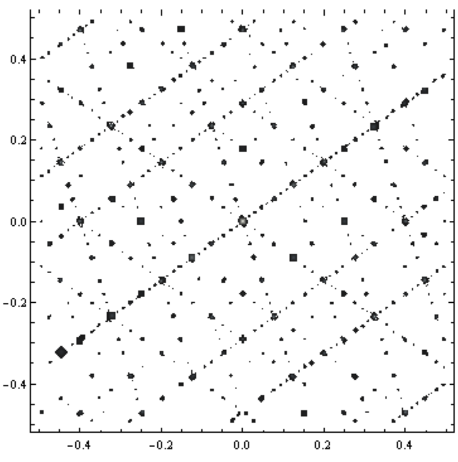

図 3: Penrose タイル張りの回折像

る[3]。

我々の生きている世界は（少なくとも結晶構造のスケールでは）三次元である。高次元の射影とは実体として何を意味するのだろうか。幾人かの準結晶の研究者の方々に伺ったのだが皆「説明のための方便だ」という考え方をされていた。実験結果がうまく説明がつけばよいのかもしれないが個人的には十分に納得できていない。

切断射影集合は純点回折集合を作り出すが、高次元の格子を考えるので簡単に把握できない。もっと手軽に Meyer 集合や純点回折集合をつくれないだろうか。実は自己相似性をもつタイル張りを考えれば手軽に Meyer 集合を作り出すことができる。Penrose タイル張りの強非周期性は自己相似性と密接に繋がっている。

ではタイル張りが自己相似性をもつとはどういうことか説明してみよう。ここでは説明の易しい R. Ammann による図 4 の強非周期タイル集合を考える[4]。これは二つの相似な凹んだ六角形 A, B からなり、

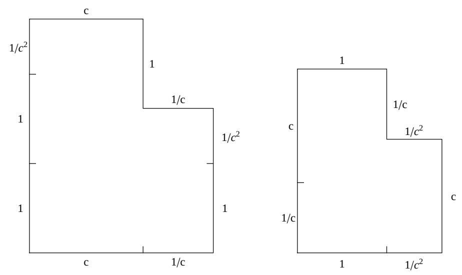

図 4: Ammann tile

$c = 1.272\ldots$ は黄金比 $(1+\sqrt{5})/2$ の平方根である。各辺についているマークは、辺がそこで切れていることを示す。したがって A の凹んだ六角形タイルは十角形、B は八角形と考える。A, B を合同変換（回転、裏返し、平行移動）してタイル張りするのだが、辺と辺がぴったり合うようにしなければならない。辺が切れているのでたとえば図 5 のように長さの合わない形に置いてはいけない。

さて A と B を図 6 の左端のように組み合わせる

[3] Bielefeld 大の M. Baake 氏に回折像の作成に関して詳しく教えて頂いた。

[4] 以下のものは Ammann のオリジナルな張り合わせ規則よりも容易である。その詳細は拙稿 ‘ A note of aperiodic Ammann tiles’ に書いたので参照ください。

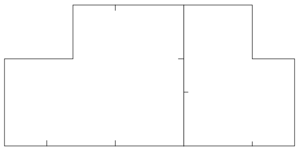

図 5: 辺が合致していない例

とその合併もまた A と相似になる。これを A を c 倍したら A と B を生みだす規則と考えよう。一方で B は c 倍したら A になる。この c 倍操作を繰り返すと一点を中心に図 6 のようにタイル張りは次々成長していくが、辺の切れ方も矛盾が生じないことが確認できる。これにより図 7 のような平面のタイル張りができる。

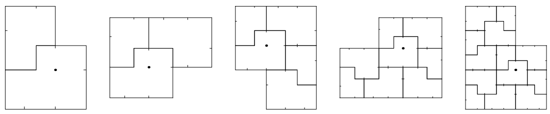

図 6: タイルの成長規則

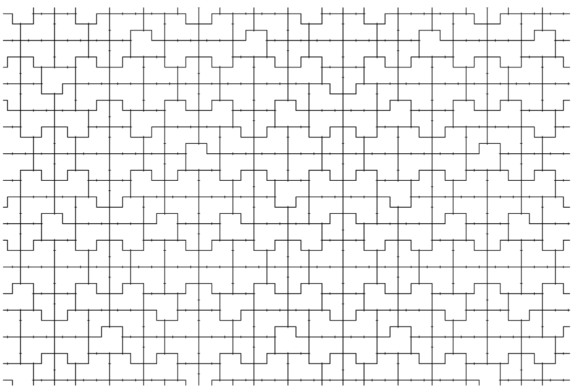

図 7: Ammann タイル張り

強非周期性の証明は厳密には面倒だが大まかに説明しよう。もし A, B によるタイル張りが存在すれば B の凹んだ部分には図 6 の左端のように A が入るしかないことはすぐに確認できる。そこで B と A がこのように合併したタイルを A' と考え、そのような組にならない A を B' と考える。すると A, B によるタイル張りは A', B' によるタイル張りとも考えられ、さらに A', B' のタイル張りと見る方法はただ一つである。実はこの操作は何回でも繰り返す事が出来て A, B のタイル張りは、それぞれをマークも含めて c^n 倍した二枚の相似タイルによるタイル張りと考えることができる。このようなタイル張りが周期 k をもつことはあり得ない。なぜなら n を大きくとれば c^n 倍したタイルは、それを k だけ平行移動したタイルと重なってしまうからである。

このタイル張りの同じ向きのタイルを一種類選んで一点印を入れる。するとタイル張りした時の印の集合は Delone 集合になる。D. Frettlöh [5] はこの集合が切断射影集合となることを示した。したがってこの Delone 集合は純点回折集合となる。回折像を計算してみると図 8 のようになった。

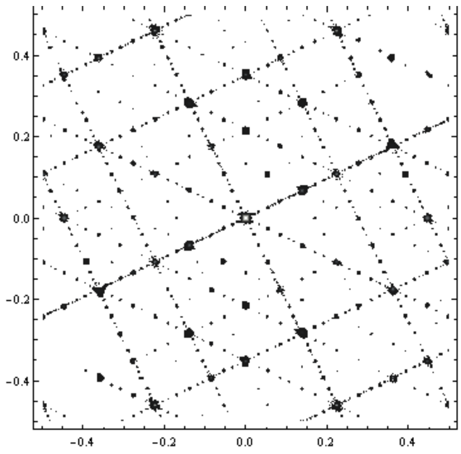

図 8: Ammann タイル張りの回折像

純点回折集合の例を作成する立場であれば論理的には強非周期性は不要である。しかし準結晶構造は局所的な相互作用で生成されると考えるのが自然だ。強非周期性をもつタイル集合は辺の局所的な組合わせ規則により必然的に純点回折集合を生み出すので特別に興味深いモデルと言ってもよい。ただ強非周期性を持つタイル集合の例は非常に数少ない。以下に述べる自己相似タイル張りから強非周期性を持つタイル集合を構成する一般的な方法を C. Goodman-

Strauss [6] が記述したが、難解な論文であり少なくとも私はまだ理解できていない。

ところで R. Ammann は Penrose タイルに触発されいくつも強非周期的タイル張り集合発見した天才アマチュア数学者である。Ammann tile に関する詳しい解説は [7, 1] にある。その人物像については [13] をお勧めする。世間一般の数学の天才像と重なる孤高の人で少し物悲しい。

Penrose タイルも Ammann タイルも 2 枚のタイルからなる。1 枚のタイルだけからなる強非周期的タイル集合が存在するかどうかは長い間未解決の問題であったが、最近 Socolar-Taylor [15] は六角形に張り合わせ規則を加えた強非周期的タイルを発見した。J. Taylor はタスマニア在住の女性でアマチュア数学者として 15 年間もこの問題に取り組んだそうである。

整数論には簡単に説明できるが難しい問題がたくさんあることが良く知られている。タイル張りもそのような面白い問題が多く、さらにアマチュア数学者の歴史的な貢献の占める割合は数論より多く感じる。

とりあえず強非周期性をもつか否かは度外視して上の構成方法を一般化しよう。$d \times d$ 正方行列 A の固有値の絶対値が全て 1 より大なとき拡大的という。m 個のタイル $T_1, T_2, \dots T_m$ があって、拡大的行列の作用でタイルを拡大すると幾つかの T_i の（境界を除いて）重ならない合併で書けるときこれを置換規則という。一般的に置換規則は

$$AT_j = \bigcup_{i=1}^{m} T_i + D_{ij}$$

とかける。ここで D_{ij} は平行移動を与える有限集合である。逆に A と D_{ij} が与えられたとき、この式を満たす空でないコンパクト集合 T_j は反復関数系アトラクターとして一意的に定まることが知られている。アトラクターの境界は一般にはフラクタル集合となる。Delone 集合を生成するにはタイルの形状が多角形であることは必要ではなく置換規則が明示されれば容易だ。

Penrose タイルの置換規則はより複雑である。拡大率は黄金比の平方 $(3+\sqrt{5})/2$ だが、拡大しても二つのもとのタイルの和で表されるのではなく、したがって上の置換規則では書けない。実は Penrose タイルをより自然に記述するためにはフラクタル境界を持つタイルが必要である。そのようなタイルは図 9 のようなもので C. Bandt-P. Gummelt [3] によって発見された。もとの Penrose タイルでは円孤を繋げる規則があったが、このタイルでは形により同等の規則が強制されるのでその必要がない。このタイル張りは上式の置換規則で記述される上に、もとの Penrose タイルの成長規則を正確に記述していることがしばらく図 9 を観察していれば分かる。フラクタルを許容すれば話はむしろ簡単になるのである。

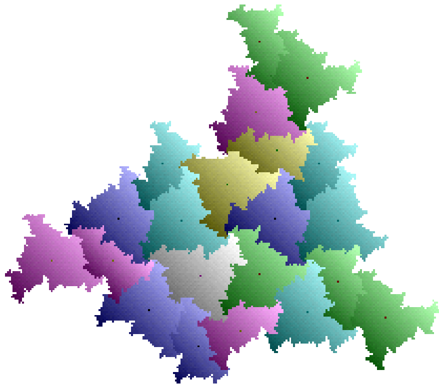

図 9: フラクタル Penrose タイル張り

置換規則があればタイル張りは手軽に作れ、自己相似タイル張りができればそのタイルに印をつけることで Delone 集合ができる。この構成は次のような問題を提起する。

1. どのような A と D_{ij} がタイル張りが与えるか。
2. 対応する点集合が Meyer 集合になるのはいつか。
3. 対応する点集合が純点回折集合となるのはいつか。

三つの問題はどれも難しく分かっていないことが多い。様々なアイデアが提案され発展している数

学の分野である。一番目の方向での最初の仕事は W. P. Thurston [17] によってなされ R. Kenyon 等にさらに研究がすすめられている。二番目の問題では、Q の固有値の代数的性質（Pisot 族と呼ばれている）とその置換規則に強い代数的制約が生ずることが B. Solomyak, J.-Y. Lee 等の仕事 [16, 10] により分かってきた。三番目の問の一次元の特別な場合は Pisot substitution 予想とも呼ばれており多くの研究者が現在も様々な角度から挑戦している。

参考文献

[1] R. Ammann, B. Grünbaum, and G. C. Shephard, *Aperiodic tiles*, Discrete Comput. Geom. **8** (1992), no. 1, 1–25.

[2] M. Baake and U. Grimm, *Mathematical diffraction theory of deterministic and stochastic structures: An informal summary*, RIMS proceedings **1725** (2011), 55–79.

[3] C. Bandt and P. Gummelt, *Fractal Penrose tilings. I. Construction and matching rules*, Aequationes Math. **53** (1997), no. 3, 295–307.

[4] N. G. de Bruijn, *Algebraic theory of Penrose's nonperiodic tilings of the plane. I, II*, Nederl. Akad. Wetensch. Indag. Math. **43** (1981), no. 1, 39–52, 53–66.

[5] D. Frettlöh, *Duality of model sets generated by substitutions*, Rev. Roumaine Math. Pures Appl. **50** (2005), no. 5-6, 619–639.

[6] C. Goodman-Strauss, *Matching rules and substitution tilings*, Ann. of Math. (2) **147** (1998), no. 1, 181–223.

[7] B. Grünbaum and G. C. Shephard, *Tilings and patterns*, W. H. Freeman and Company, New York, 1987.

[8] A. Hof, *On diffraction by aperiodic structures*, Comm. Math. Phys. **169** (1995), no. 1, 25–43.

[9] ———, *Diffraction by aperiodic structures*, The mathematics of long-range aperiodic order (Waterloo, ON, 1995), NATO Adv. Sci. Inst. Ser. C Math. Phys. Sci., vol. 489, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1997, pp. 239–268.

[10] J.-Y. Lee and B. Solomyak, *Pisot family substitution tilings, discrete spectrum and the Meyer property*, Discr. Conti. Dynam. Sys. **32** (2012), no. 3, 935–959.

[11] R. Lifshitz, *What is a crystal?*, Z. Kristallogr. **222** (2007), 313–317.

[12] International Union of Crystallography, *Report of the executive commitee for 1991*, Acta Cryst. **A48** (1992), 922–946.

[13] M. Senechal, *The mysterious Mr. Ammann*, Math. Intelligencer **26** (2004), no. 4, 10–21.

[14] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, *Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry*, Phys. Rev. Lett. **53** (1984), no. 20, 1951–1953.

[15] J. E. S. Socolar and J. M. Taylor, *An aperiodic hexagonal tile*, Journal of Combinatorial Theory **18** (2011), 2207–2231.

[16] B. Solomyak, *Dynamics of self-similar tilings*, Ergodic Theory Dynam. Systems **17** (1997), no. 3, 695–738.

[17] W.P. Thurston, *Groups, tilings and finite state automata*, AMS Colloquium Lecture Notes, 1989.