

On the Dirichlet fundamental domains for 3-dimensional lattices

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2022-02-07 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 坪井, 俊 メールアドレス: 所属:
URL	https://mu.repo.nii.ac.jp/records/1669

3次元格子のディリクレ基本領域について

On the Dirichlet fundamental domains for 3-dimensional lattices

坪井 俊¹

Takashi Tsuboi

1 はじめに

数理工学科のオムニバス講義（数理工学概論 I）の中で 2021 年 1 月 27 日に「空間充填図形のとらえ方」という話をした。そこで 2 次元、3 次元の格子のディリクレ領域（ポロノイ領域）の形状について説明した。格子の変形空間は、抽象的には $SL(2; \mathbf{Z}) \backslash SL(2; \mathbf{R}) / SO(2)$, $SL(3; \mathbf{Z}) \backslash SL(3; \mathbf{R}) / SO(3)$ のように表される。2 次元格子のときには、変形空間は複素楕円曲線のモジュライ空間と同一視でき、多くの関数論の教科書でも扱われ、2 次元オービフォールドとしてよく理解されている。3 次元格子については、5 次元の特異点をもつ空間であるが、あまりよく理解できていないようである。2 次元格子のディリクレ領域は、記述しやすい形状をもっていて、それによりオービフォールドの形も説明できる。同様のことを、3 次元格子のディリクレ領域を用いて行うことが本稿の目標である。ミンコフスキー (Hermann Minkowski 1864–1909) の *parallelohedron* の研究、フェイエシュ・トート (László Fejes Tóth 1915–2005) の多面体に関する研究などがあり、本稿のかなりの部分は古くから既知のものと思われる。本稿では、予備知識を仮定することなく、3 次元格子がこのように分類される理由を幾何的に簡明に説明することを試みた。

2 格子群のモジュライ空間

2.1 結晶群

空間充填図形は非常に多様である。結晶群の基本領域を考えても、3 次元結晶群は分類されており、230 種類、鏡像のものを同じと考えると 219 種類である ([6])。これらは、1891 年、1892 年にフェドロフ (Evgraf Fedorov 1853–1919) とシェーンフリス (Arthur Moritz Schoenflies 1853–1928) により独立に、後に共同で分類された。結晶群は、3 次元ユークリッド空間の運動群（等長変換群） $\mathbf{R}^3 \times O(3)$ の離散部分群でコンパクトな基本領域をもつものである。ビーベルバッハ (Ludwig Bieberbach, 1886–1982) の 1911 年、1912 年の結果によれば、すべての次元 n において結晶群は、次元と同じ階数の格子群 $G \cong \mathbf{Z}^n$ を唯一の極大可換正

¹ 武蔵野大学数理工学センター員 / 武蔵野大学工学部数理工学科特任教授

規部分群として含む。結晶群は \mathbf{Z}^n の有限群による拡大の形に理解される。そこで結晶群は、格子の対称性、すなわち商のトーラス $\mathbf{R}^n/G \cong \mathbf{R}^n/\mathbf{Z}^n$ の対称性を通じて理解できる ([2])。

2.2 ブラベ格子

3次元ユークリッド空間の1次独立な3つのベクトルが生成する格子の相似類の決定はブラベ (Auguste Bravais 1811–1863) により 1848 年の論文 [1] でなされている。この仕事により 3次元ユークリッド空間の平行移動のなす \mathbf{Z}^3 と同型な群はブラベ格子と呼ばれる。格子の対称性に従ってブラベ格子は 14 通りに分類される。

この 14 通りは、結晶の通常呼び方に対応している。三斜格子、単純単斜格子、底心単斜格子、単純直方格子、底心直方格子、体心直方格子、面心直方格子、単純正方格子、体心正方格子、六方格子、三方格子、単純立方格子、体心立方格子、面心立方格子である ([6], [7] Bravais lattice)。1次独立な3つのベクトルで生成される格子であるから、平行六面体の基本領域を持つのであるが、この分類の仕方では、1つの格子を分割したという形で格子が記述されている。実際に格子を Mathematica 等でグラフィックスとして表示し、いろいろな方向から観察するとこの格子を与えられてどのように分類するのかという点をもう少し考える必要があるように思われた。

2.3 モジュライ空間とディリクレ領域

一般に n 次元ユークリッド空間の n 個の1次独立なベクトル \vec{v}_i ($i = 1, \dots, n$) が生成する自由アーベル群 $L = \left\{ \sum_{i=1}^m a_i \vec{v}_i \mid a_i \in \mathbf{Z} \right\}$ を n 次元格子群と呼ぶ。格子群の生成元 \vec{v}_i を並べたものは、 $GL(n; \mathbf{R})$ の元を定める。格子群の生成元を $GL(n; \mathbf{Z})$ の元で写したのも全く同じ格子群を生成する (向きを考えることにするときは $SL(n; \mathbf{Z})$ を用いる)。格子の相似類を考えることは、 $\mathbf{R}_{>0} \times O(n)$ (向きを考えるときは $\mathbf{R}_{>0} \times SO(n)$) で写りあうものは同じと考える。この考察から向きを考えた格子群の相似類は、 $SL(n; \mathbf{Z}) \backslash SL(n; \mathbf{R}) / SO(n)$ の元と対応することがわかる。この空間 \mathcal{M}_n を格子群のモジュライ空間と呼ぶ。 $SL(n; \mathbf{R}) / SO(n)$ は等質空間で $n^2 - 1 - \frac{n(n-1)}{2} = \frac{(n-1)(n+2)}{2}$ 次元の多様体である。これは極分解により $SL(n; \mathbf{R}) = SP(n) \cdot SO(n)$ ($SP(n)$ は行列式が1の正定値対称行列の集合) のように分解されることからわかる ($\dim SP(n) = \frac{n(n+1)}{2} - 1$)。離散群 $SL(n; \mathbf{Z})$ の $SL(n; \mathbf{R}) / SO(n)$ への作用は自由ではなく、モジュライ空間 \mathcal{M}_n は、格子の対称性を記述するアイソトロピー群に従うストラティフィケーションを持つ層化空間となる。

n 次元格子群 $L \cong \mathbf{Z}^n$ の n 次元ユークリッド \mathbf{R}^n への作用のディリクレ領域 K は、

$$K = \{ \vec{x} \in \mathbf{R}^n \mid \forall \vec{v} \in L, \|\vec{x}\| \leq \|\vec{x} - \vec{v}\| \}$$

により定義される。以下の節で、 $n = 2, 3$ のときに、格子群のモジュライ空間の様子を格子群のディリクレ領域の形を理解することで記述していく。

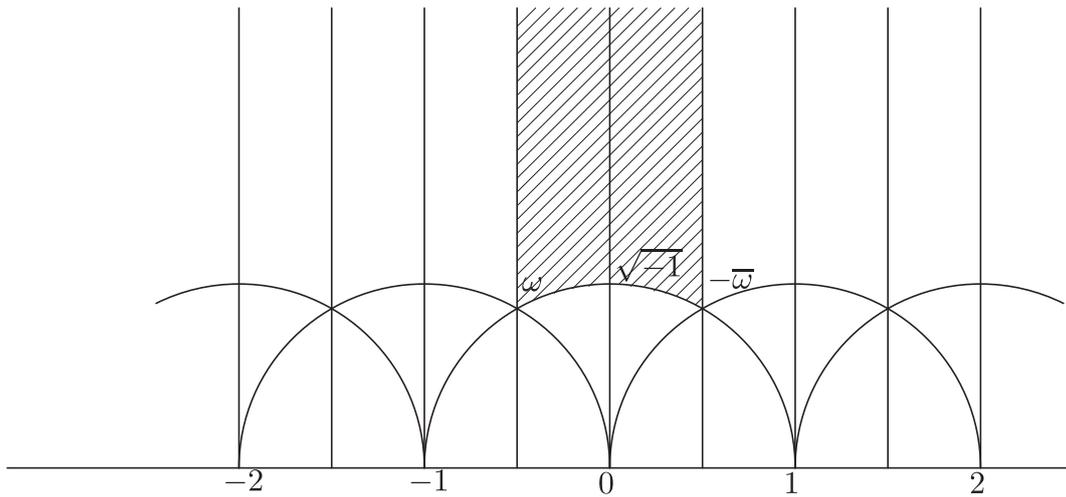


図1 $PSL(2; \mathbf{Z})$ の作用の基本領域。

3 2次元格子群の基本領域

3.1 2次元格子群のモジュライ空間

2次元の格子群の相似類の分類は、楕円曲線の分類と同じものとなり、モジュライ空間 \mathcal{M}_2 は、関数論の教科書で扱われることの多い2次元オービフォールド $CP^1(2, 3, \infty)$ である。この空間は、図1の複素数上半平面内の基本領域を、平行移動 $z \mapsto z + 1$, $\sqrt{-1}$ における $\frac{1}{2}$ 回転 $z \mapsto -\frac{1}{z}$, $\omega = \frac{-1 + \sqrt{-3}}{2}$ における $\frac{1}{3}$ 回転 $z \mapsto \frac{-z - 1}{z}$ により、同一視して得られる。モジュライ空間は $\frac{1}{2}$ 回転による商の特異点 $\sqrt{-1}$, $\frac{1}{3}$ 回転による商の特異点 ω , カスプ特異点 ∞ の3つの特異点を持つ複素射影直線という意味で、 $CP^1(2, 3, \infty)$ と書かれる。

平面格子群の平行四辺形の基本領域は、 $\sqrt{-1}$ では正方形、 ω では正三角形を2つ合わせたものである。純虚数のときは、長方形の基本領域を持ち、単位円周上では菱形の基本領域を持つ。 ω , $-\bar{\omega}$ を含む、実数部分が半奇数の点も菱形の基本領域を持つ。この平行四辺形の基本領域は、一意的に定まるものではなく、格子をみただけでは格子の対称性を判定できない。そこでディリクレ領域を用いることを考える ([5])。

3.2 ディリクレの六角形定理

次の命題は1850年にディリクレ (Peter Gustav Dirichlet, 1805–1859) が発表したもので、ディリクレの六角形定理と呼ばれる ([4], [7]Fundamental polygon)。

命題 3.1 平面格子群のディリクレ領域は、円に内接する中心対称な六角形、または長方形である。

この命題は、以下の平面格子のディリクレ基本領域をとる手順から従う。

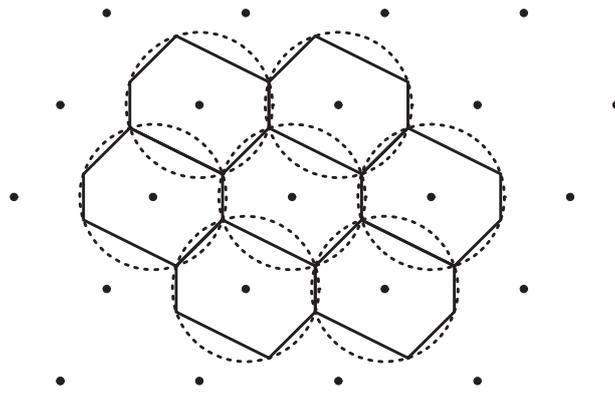


図3 ディリクレ領域によるタイリング

辺への平行移動により、平面のタイリングを構成できる。 K の中心の平行移動による像全体は、平面格子を成している。

このような円に内接する対辺が平行で中心対称な六角形の変形は、頂点を円周上で移動させることにより実現される。中心対称であるから、回転を除いて、3組の中心対称点のうちの2組を移動させる自由度があるので、モジュライ空間の次元は2である。特に3組の中心対称点のうちの2組が一致する場合が長方形のディリクレ基本領域を持つ場合である。

円に内接する対辺が平行で中心対称な六角形の一般の等長変換の群は、中心対称の群 $\cong \mathbf{Z}/2\mathbf{Z}$ である。ディリクレ基本領域が長方形のときは、等長変換の群は“正六角形の等長変換群” $D_4 \cong \mathbf{Z}/2\mathbf{Z} \times \mathbf{Z}/2\mathbf{Z}$ である。このような六角形の隣り合う辺の長さが等しいときも、等長変換の群は D_4 である（平行四辺形の基本領域としては菱形となる）。より特別な場合が2つあり、1つは正方形の場合で等長変換の群は D_8 であり、もう1つは正六角形の場合で等長変換の群は D_{12} である。 D_{2k} は正 k 角形の合同変換群で、 $2k$ は群の位数である。この等長変換群は、対応する格子の原点を固定する等長変換群となっている。

一般の円に内接する対辺が平行で中心対称な向きが与えられた六角形については、辺の長さが同じでも、最も長い辺と最も短い辺の並び方によって、互いに鏡映となる2通りの六角形があることがわかる。これがモジュライ空間 \mathcal{M}_2 上の対合を定義している。通常の上半平面の基本領域では、 $\Delta(\infty, \sqrt{-1}, \omega)$, $\Delta(\infty, \sqrt{-1}, -\bar{\omega})$ という三角形の内部を虚軸についての鏡映で移すことに対応する。基本領域が長方形のものは虚軸に対応し、隣り合う辺の長さが等しい場合が、単位円および実部が $\pm \frac{1}{2}$ の場合に対応しており、正方形は $\sqrt{-1}$, 正六角形は、 $\omega, -\bar{\omega}$ に対応している。

注意 3.2 このように格子を格子に移す回転の角度は $\pi, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}$ に限られる。2次元の結晶群を分類するときには、格子群による商空間がさらに対称性を持つかを考え、結晶群による商空間を考えるとよいが、商空間の錘点における角度は、この3通りになることがわかり、有限通りの商空間が得られる。これを用いて、2次元の結晶群が17通りに分類される。

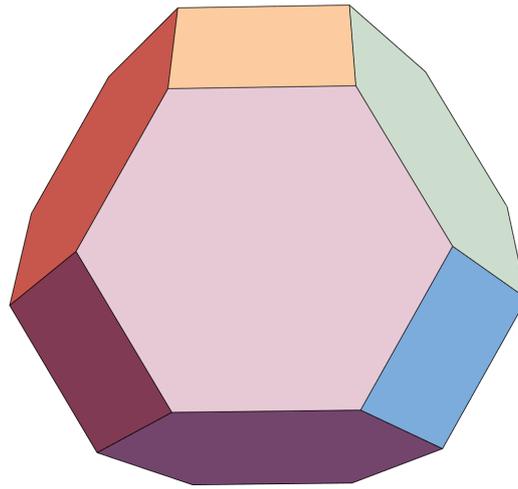


図4 切頂八面体

4 3次元格子群の基本領域

3次元格子群の相似類のなすモジュライ空間 \mathcal{M}_3 は、 $SL(3; \mathbf{Z}) \backslash SL(3; \mathbf{R}) / SO(3)$ という5次元の空間である。格子の持つ対称性に対応するストラティフィケーションをもつ。そのストラタの数が14である。5次元空間で容易には記述できないが、ストラティフィケーションの様子もうまく記述できることが望ましい。

論理的には必要ではないが以後何を考えて進めているかをチェックできるようにディリクレ領域の典型例をいくつか挙げる。

4.1 切頂八面体 (truncated octahedron)

図4参照。

最も対称性の高い切頂八面体の面は、8個の正六角形、6個の正方形からなり、体心立方格子のディリクレ領域である。この切頂八面体の向きを保つ等長変換群 ($\subset SO(3)$) は、立方体あるいは正八面体の向きを保つ等長変換群と同じであり、三角群 $T(2, 3, 4) \cong \langle a, b, c, \mid a^2 = b^3 = c^4 = abc = \text{id} \rangle \cong S_4$ (4次対称群) である。 $T(2, 3, 4)$ の位数は24である。 a は2つの隣り合う正六角形の共通辺の中点の周りの $\frac{1}{2}$ 回転、 b は正六角形の中心の周りの $\frac{1}{3}$ 回転、 c は正方形の中心の周りの $\frac{1}{4}$ 回転という形で作用する。

3次元格子群のディリクレ領域としては、8個の中心対称六角形、6個の平行四辺形をもつ14面体の形で変形し、 \mathcal{M}_3 の5次元のストラタムを与える。

ディリクレ領域 K の中心対称六角形の1つが正六角形である変形の場合は、 D_{12} の対称性を持つ。平行四辺形の1つが正方形である変形の場合は、 D_8 の対称性を持つ。平行四辺形の

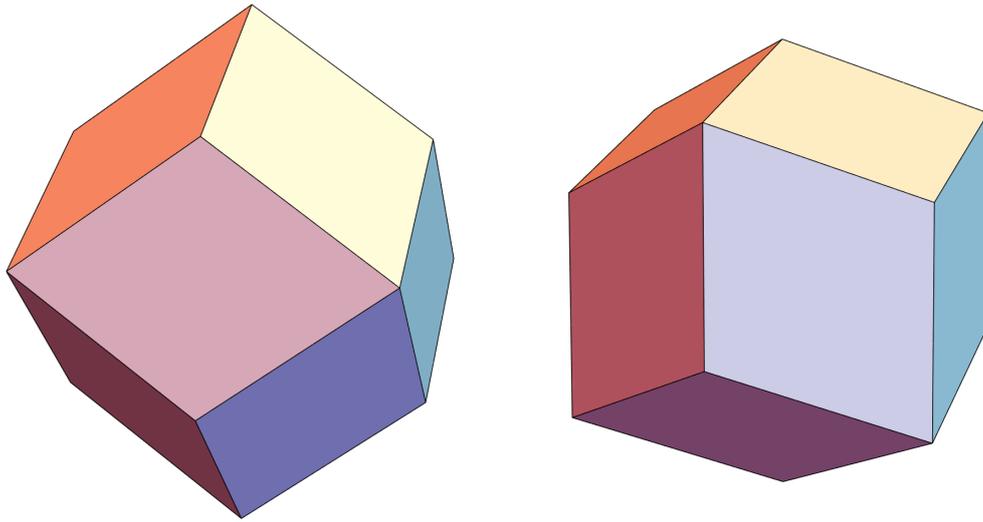


図5 菱形十二面体

1つが長方形である変形の場合は、 D_4 の対称性を持つ。

4.2 菱形十二面体 (rhombic dodecahedron)

図5 参照。

対角線の長さの比が $\sqrt{2} : 1$ の菱形 12 個の面を持つ菱形十二面体が、面心立方格子のディリクレ領域である。この菱形十二面体の向きを保つ等長変換群は、三角群 $T(2, 3, 4) \cong \langle a, b, c, \mid a^2 = b^3 = c^4 = abc = \text{id} \rangle$ で、 a は菱形の中心の周りの $\frac{1}{2}$ 回転、 b は 3 つの菱形が集まる頂点の周りの $\frac{1}{3}$ 回転、 c は 4 つの菱形が集まる頂点の周りの $\frac{1}{4}$ 回転という形で作用する。

菱形十二面体は、平行四辺形十二面体という形で変形し、 M_3 の 3 次元のストラタムを与える。このストラタム内に、 D_6 対称性を保つ変形、 D_4 対称性を保つ変形がある。

菱形十二面体の面が 4 個集まる頂点とその対蹠点が四角形に変形するとともにそれを頂点としない四角形がお互いに離れるように変化して切頂八面体に変形する。また 4 個の四角形が 4 個の六角形からなる帯に変わるように変化して長十二面体に変形する。

4.3 立方体 (cube)

図6 参照。

立方格子のディリクレ領域である。立方体の向きを保つ等長変換群は、三角群 $T(2, 3, 4) \cong \langle a, b, c, \mid a^2 = b^3 = c^4 = abc = \text{id} \rangle$ で、 a は辺の中点の周りの $\frac{1}{2}$ 回転、 b は頂点の周りの $\frac{1}{3}$ 回転、 c は正方形の中心の周りの $\frac{1}{4}$ 回転という形で作用する。

この形で直方体に変形し、 M_3 の 2 次元のストラタムを与える。

1 組の対面が 4 個の平行四辺形に分割され、残りが六角形になるように変化して、長十二面

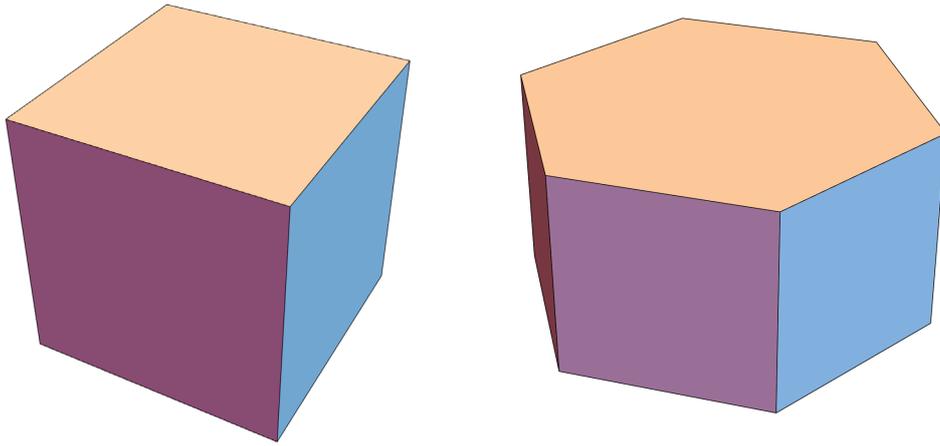


図6 立方体 六角柱

体に変形する。また、1組の対面が六角形になるように変化して六角柱に変形する。このとき同時に2つの六角形と2つの平行四辺形に分かれ、切頂八面体に変形する。このとき同時に六角形が4つの平行四辺形に分かれる場合は、菱形十二面体に変形する。

4.4 正六角柱 (regular-hexagonal prism)

図6参照。

正六角形をディリクレ領域とする平面格子と垂直なベクトルとによって生成される格子のディリクレ領域となる。向きを保つ等長変換の群は正六角形の二面体群 D_{12} となる。

円に内接する中心対称六角形として2次元のストラタムを与える。

六角形が2つの六角形と2つの平行四辺形に分かれるように変化して、切頂八面体に変形する。六角形が4つの六角形と2つの平行四辺形に分かれるように変化する場合、長十二面体に変形する。

4.5 長十二面体 (elongated dodecahedron)

図7参照。

長十二面体は、菱形十二面体の図5の左側のものの側面の菱形が六角形になった形状である。向きを保つ等長変換の群は正方形の二面体群 D_8 となる。正方形でない辺が長い体心正方格子のディリクレ領域となる。 D_8 対称性のある長十二面体のディリクレ領域は M_3 の1次元のストラタムを与える。

長十二面体の六角形の4個の面からなる帯の面の間の辺とその対蹠点の辺が四角形に変化し、その辺と接する四角形が六角形に変化して、切頂八面体に変形する。

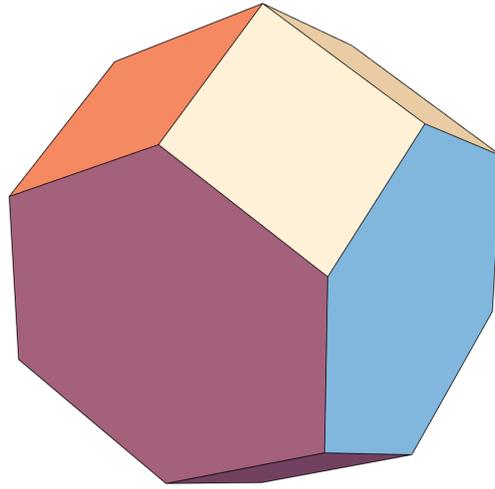


図7 長十二面体

4.6 平行多面体

上に挙げた5通りは、平行多面体 (parallelohedron) ([7]Parallelohedron) と呼ばれる多面体であり、図に示したものは平行多面体のなかで最も対称性の高いものになっている。

定義 4.1 平行多面体は、中心対称な凸多面体であり、各面も中心対称で、対面が合同であり、対面への平行移動が格子群を生成し、その格子群の基本領域となるもの、と定義される。

平行六面体はその典型例である。平行多面体は、上に挙げた5通りの凸多面体をアフィン変換で変形したものになっている。

命題 4.2 3次元格子群のディリクレ領域は平行多面体である。平行多面体がディリクレ領域であるためには、平行移動が面に垂直であることが必要十分である。

証明 格子は原点について対称であるから格子群のディリクレ領域は中心対称である。ディリクレ領域は垂直二等分面の原点側の半空間の共通部分だから凸である。ディリクレ領域の面 F は、原点について対称移動した対面 $-F$ にベクトル \vec{v}_F の平行移動 $T_{\vec{v}_F}$ で移る。 F の辺 e に対し、 $T_{\vec{v}_F}(e)$ と $-e$ は、ともに $-F$ の辺であり、 $-F$ に含まれる平行四辺形の辺となる。 e と隣接する F の辺 e' に対しても同じことが成立し、平行四辺形 $\text{Conv}(T_{\vec{v}_F}(e), -e)$ の中心と平行四辺形 $\text{Conv}(T_{\vec{v}_F}(e'), -e')$ の中心は一致する。この中心は $-F$ の中心 c_{-F} となる。したがって $-F$ は中心対称であり、 F も中心対称である。なお、 F の中心 c_F に対し、 $T_{\vec{v}_F}(c_F) = c_{-F}$ であり、 \vec{v}_F は F , $-F$ に垂直である。□

注意 4.3 平行多面体は帯多面体 (zonohedron) ([7]Zonohedron) となる。すなわち、1つの

面 F_1 とその辺 e_1 に対し、 F_1 上の対辺 e_2 , e_2 で隣接する面 F_2 , e_2 の F_2 上の対辺 e_3, \dots, F_{k-1} に e_k で隣接する面 F_k , e_k の F_k 上の対辺は e_1 という形で、平行な辺 e_i をたどり、面 F_i からなる帯を得る。

注意 4.4 格子群 L のディリクレ領域の場合、面は格子点と原点の垂直二等分面の一部である。面の中心は、この格子点と原点の中点である。帯 $F_1 \cdots F_k$ に対し、この格子点は帯の隣接する面の共通辺 e_1, \dots, e_k に垂直で原点を通る平面 P 上にある。このことから帯の面を含む垂直二等分面と平面 P の交線は、平面 P 上の格子群 $P \cap L$ のディリクレ領域を与える。このディリクレ領域は、命題 3.1 により、円に内接する点対称な六角形または長方形である。したがって、帯は 4 枚または 6 枚の面からなる (注意 4.3 の k について、 $k = 4$ または 6)。

5 3次元格子群の基本領域の分類と3次元格子群のモジュライ

3次元格子 L が与えられたとき、その格子の形を理解する手順を述べる。

5.1 短ベクトル生成平面 P を定める

- 原点 $\vec{0}$ に最も近い L の非零ベクトルを \vec{a} とする。
- \vec{a} が生成する直線 $l_{\vec{a}}$ について、直線 $l_{\vec{a}}$ の上になく原点 $\vec{0}$ に最も近い L のベクトルを \vec{b} とする。
- \vec{a}, \vec{b} が生成する平面を P とし、 $\text{proj}_P : \mathbf{R}^3 \rightarrow P$ を P への正射影とする。
- $\mathbf{Z}\vec{a} \oplus \mathbf{Z}\vec{b} = L \cap P$ は平面 P に作用する格子群であり、平面格子 $L \cap P$ のディリクレ領域を K_P が定まる。命題 3.1 により、 K_P は円に内接する中心対称な六角形または長方形である。
- K_P によるタイリングの模様を T_P とする。 $T_P = \bigcup_{\vec{v} \in L \cap P} (\partial K_P + \vec{v})$.
- $W = \text{proj}_P^{-1}(\partial K_P)$ は、 L のディリクレ領域 K の面の帯を含む壁になっている。

5.2 平面 P の外の格子点

- 平面 P の上になく原点 $\vec{0}$ に最も近い L のベクトルを \vec{c} とする。
- $P \pm \vec{c}$ 上には、格子 $L \cap P \pm \vec{c}$ があり、タイリングの模様 $T_P \pm \vec{c}$ が描かれている。
- \vec{c} が P と垂直のときは、 K は K_P と $\|\vec{c}\|$ の長さの線分の直積となり、直方体または直六角柱になる。
- \vec{c} は、 $P + \vec{c}$ 上の格子 $L \cap P + \vec{c}$ の点で最も原点 $\vec{0}$ に近いので、 $\text{proj}_P(\vec{c}) \in K_P$ である。

次の補題により、 $\partial K_P \subset \partial K$ が示される。

補題 5.1 原点 $\vec{0} = (0, 0, 0)$ と点 $\vec{d} = (x, y, z)$ の垂直二等分面が xy 平面の単位円板の内部と交わらない必要十分条件は、点 $\vec{d} = (x, y, z)$ と単位円の距離が 1 以上であること： $z^2 + (\sqrt{x^2 + y^2} - 1)^2 \geq 1$ である。

証明 $\vec{p} = (X, Y, 0)$ が垂直二等分面上にある条件は $\vec{p} \cdot \vec{d} = \frac{1}{2} \vec{d} \cdot \vec{d}$ である。すなわち、 $xX + yY = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$ 。この XY 平面上の直線と原点の距離が 1 以上である条件は、 $\frac{1}{2} \frac{x^2 + y^2 + z^2}{\sqrt{x^2 + y^2}} \geq 1$ である。これは、 $x^2 + y^2 + z^2 - 2\sqrt{x^2 + y^2} \geq 0$, $(\sqrt{x^2 + y^2} - 1)^2 + z^2 - 1 \geq 0$ と変形される。□

補題 5.2 3次元格子群 L に対し、ベクトル $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ が上のようにとられているとする。平面格子群 $L \cap P = \mathbf{Z}\vec{a} \oplus \mathbf{Z}\vec{b}$ の平面ディリクレ領域 K_P は単位円に内接するとする。

$\vec{d} \in L \cap P + \vec{c}$ に対し、1つの場合を除いて、原点 $\vec{0}$ と点 \vec{d} の垂直二等分面 $\vec{d}^\perp + \frac{1}{2}\vec{d}$ と K_P は交わらない。 $\vec{d}^\perp + \frac{1}{2}\vec{d}$ と K_P が交われば、 K_P は正方形で、その1つの頂点で交わり、座標を $\vec{a} = (\sqrt{2}, 0, 0)$, $\vec{b} = (0, \sqrt{2}, 0)$, $\vec{c} = \vec{d} = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 1)$ となるようにとることができる。

注意 5.3 原点 $\vec{0}$ と点 \vec{d} の垂直二等分面と K_P が交わる時、 $K_P = [-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}] \times [-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}] \times \{0\}$ となり、ベクトル $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ は面心立方格子を生成する。 K は菱形十二面体となり、図5の左図の状況になる。

補題 5.2 の証明 まず、 $\|\vec{a}\| \leq \|\vec{b}\| \leq \|\vec{c}\|$ である。

K_P が内接する単位円において、中心 $\vec{0}$ と点 \vec{a} , 点 \vec{b} の垂直二等分線となる ∂K_P の辺の中心角を θ_a, θ_b とすると、 $\theta_a \geq \theta_b \geq \pi - \theta_a - \theta_b \geq 0$ である。したがって、 $\theta_b \leq \frac{\pi}{2}$ である。

$$\vec{c} \in \text{proj}_P^{-1}(K_P) \subset \text{proj}_P^{-1}(D^2) \quad (D^2 \text{ は単位円板})$$

$$\|\vec{c}\| \geq \|\vec{b}\| = 2 \cos \frac{\theta_b}{2} \geq 2 \cos \frac{\pi}{4} = \sqrt{2}$$

だから、点 \vec{c} と平面 P の距離は 1 以上である。

$L \cap P$ の作用で平面 P との距離は不変だから、 $L \cap P + \vec{c}$ の各点 \vec{d} と平面 P の距離は 1 以上である。したがって補題 5.1 により、原点 $\vec{0}$ と点 \vec{d} の垂直二等分面は単位円板の内部と交わらない。特に K_P の内部と交わらない。

原点 $\vec{0}$ と点 \vec{d} の垂直二等分面が K_P と交わる時、 $\theta_b = \frac{\pi}{2}$, $\theta_a = \frac{\pi}{2}$ でなければならない。このとき $\vec{a} = (\sqrt{2}, 0, 0)$, $\vec{b} = (0, \sqrt{2}, 0)$ となる座標をとることができる。さらに $\vec{0}$ と \vec{d} の垂直二等分面は、 $(\pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, 0)$ を通るが、 $\pm = +$ であるような \vec{d} をとると、 $\vec{d} = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 1)$ であるが、 $\vec{c} = \vec{d}$ ととられているとしてよい。□

以上から、 $\partial K_P \subset \partial K$ が示された。

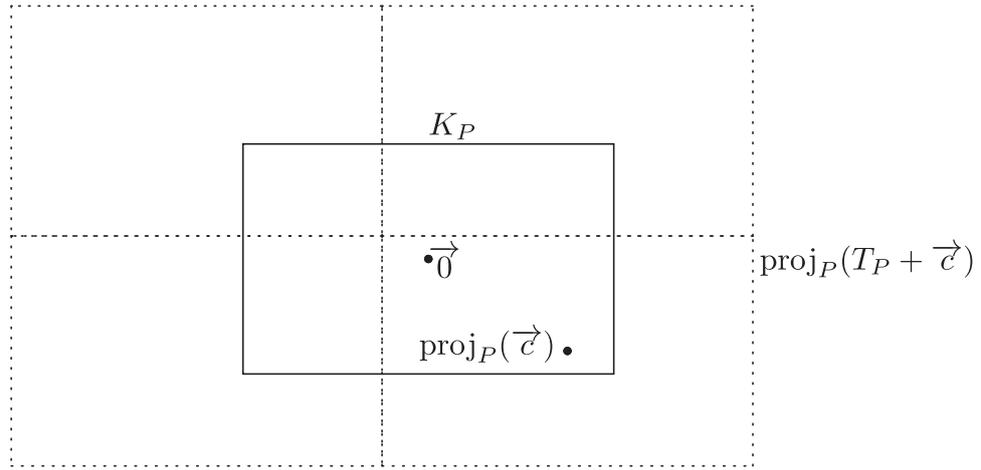


図8 K_P (実線) が長方形の場合

5.3 $\partial K_P \subset \partial K$ の帰結

$\partial K_P \subset \partial K$ により、ディリクレ領域 K の形状がよくわかる。

- $\partial K_P \subset \partial K$ であるが、面心立方格子の場合を除いて、壁 $W = \text{proj}_P^{-1}(\partial K_P)$ の ∂K_P の近傍は ∂K に含まれ、 ∂K_P と交わる ∂K の帯と一致する。
- これを平面格子群 $L \cap P$ の作用で動かして得られる平面タイリング T_P 上の壁 $\text{proj}_P^{-1}(T_P)$ の T_P の近傍は、 K による3次元タイリングの壁に含まれる。
- この状況を \vec{c} で平行移動すると、平面 $P + \vec{c}$ 上の壁 $\text{proj}_P^{-1}(T_P) + \vec{c}$ の $T_P + \vec{c}$ の近傍は、 K による3次元タイリングの壁に含まれる。
- ∂K の面のうちで壁 $W = \text{proj}_P^{-1}(\partial K_P)$ に含まれないもののうち、平面 P の \vec{c} の側のものは、原点 $\vec{0}$ と格子 $L \cap P + \vec{c}$ の点の垂直二等分面の一部である。これらの面は壁 W およびそれを \vec{c} 平行移動した壁 $\text{proj}_P^{-1}(T_P) + \vec{c}$ によって区切られる。
- この面の形は $K_P \cap \text{proj}_P(T_P + \vec{c}) = T_P + \text{proj}_P(\vec{c})$ をみればわかる。
- 平面 P の $-\vec{c}$ の側のものは、原点对称の面として理解される。
- こうして ∂K の面の形状がわかり、 K の形状がわかる。

5.4 K_P が長方形の場合

特殊な場合であるが、 K_P が長方形の場合を先に扱う。 K_P が (正方形でない) 長方形になるのは、2次元格子のモジュライ空間 \mathcal{M}_2 の1次元のストラタムである。

- \vec{c} の自由度は3次元あるので、一般的な \vec{c} をとった場合は3次元格子のモジュライ空間 \mathcal{M}_3 の $1+3=4$ 次元のストラタムの点を与える。このとき、 K の壁 W 上の面は点対称な六角形であり、 K は長十二面体となる。

$\text{proj}_P(\vec{c})$ が K_P の辺上で辺の中点以外にあるとき (M_3 の 3 次元のストラタムで)、 K は常に中心対称であるが、(今後 $SO(3)$ の部分群に限って述べると、) $\frac{1}{2}$ 回転対称性 (Z_2) をもつ。

$\text{proj}_P(\vec{c})$ が K_P の頂点にあるとき (M_3 の 2 次元のストラタムで)、 $D_4 = Z_2 \times Z_2$ の対称性をもつ。

- $\text{proj}_P(\vec{c})$ が、長方形 K_P の対辺の中点を結ぶ線分上にあるとき (M_3 の 3 次元のストラタムで)、 K の平面 P の \vec{c} の側の面は長方形で、 K の壁 W 上の面は長方形と点対称な六角形であり、 K は直六角柱となる ($Z_2 \subset SO(3)$ の対称性をもつ)。

$\text{proj}_P(\vec{c})$ が、長方形 K_P の辺の中点であるとき (M_3 の 2 次元のストラタムで)、 K は D_4 の対称性をもつ。

特別な場合 (M_3 の 1 次元のストラタムで)、正六角柱になり、 D_{12} の対称性をもつ。

- $\text{proj}_P(\vec{c})$ が K_P の中心であるとき (M_3 の 2 次元のストラタムで)、 K は直方体となる。 $D_4 (\subset SO(3))$ の対称性をもつ。

特別な場合に側面の一組が正方形となり、 D_8 の対称性をもつ。

K_P が正方形のとき、平面格子は正方格子である。

- \vec{c} が一般の場合 (M_3 の 3 次元のストラタムで)、 K は長十二面体となる。

$\text{proj}_P(\vec{c})$ が K_P の辺上で辺の中点以外にあるとき (M_3 の 2 次元のストラタムで)、 K は $Z_2 (\subset SO(3))$ の対称性をもつ。

$\text{proj}_P(\vec{c})$ が K_P の対角線上にあるときも (M_3 の 2 次元のストラタムで)、 K は Z_2 の対称性をもつ。

$\text{proj}_P(\vec{c})$ が K_P の頂点にあるとき (M_3 の 1 次元のストラタムで)、 D_8 の対称性をもつ。

特別な場合、 K が菱形十二面体になり、八面体群 $T(2, 3, 4)$ の対称性を持つ (面心立方格子)。

- $\text{proj}_P(\vec{c})$ が、正方形 K_P の対辺の中点を結ぶ線分上にあるとき (M_3 の 2 次元のストラタムで)、長方形の場合と全く同様に K が記述される。

- $\text{proj}_P(\vec{c})$ が K_P の中心であるとき (M_3 の 1 次元のストラタムで)、 K は正方形の面を持つ直方体となる。 $D_8 (\subset SO(3))$ の対称性をもつ。

特別な場合に K は立方体となり、八面体群 $T(2, 3, 4)$ の対称性をもつ (立方格子)。

5.5 K_P が円に内接する中心対称な六角形の場合

K_P が円に内接する中心対称な六角形で隣り合う辺の長さが等しくないとき、 $L \cap P$ は 2 次元格子のモジュライ空間 M_2 の 2 次元のストラタムの元である。この場合の 3 次元立方格子群のモジュライ空間 M_3 のストラティフィケーションの構造は思わぬ対称性がある可能性があり完全な記述は難しい。

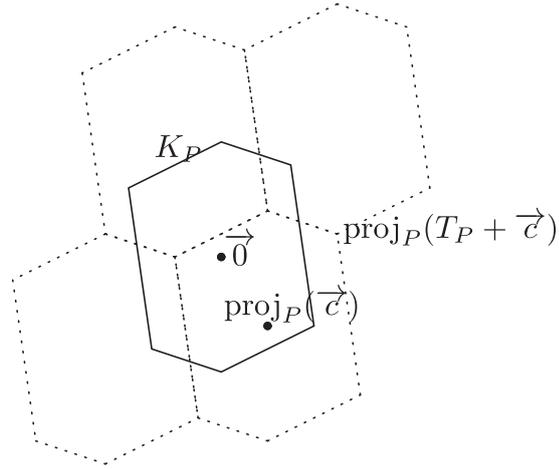


図9 K_P (実線) が円に内接する中心対称な六角形の場合: 切頂八面体

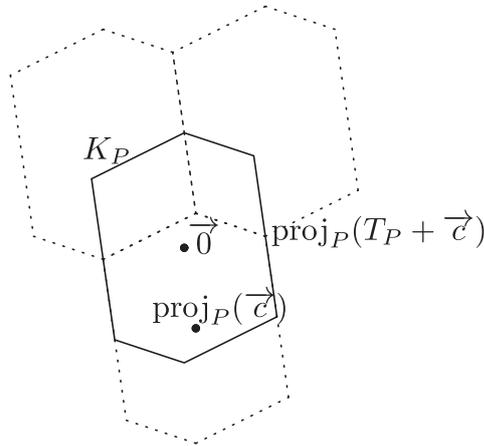


図10 K_P (実線) が円に内接する中心対称な六角形の場合: 長十二面体

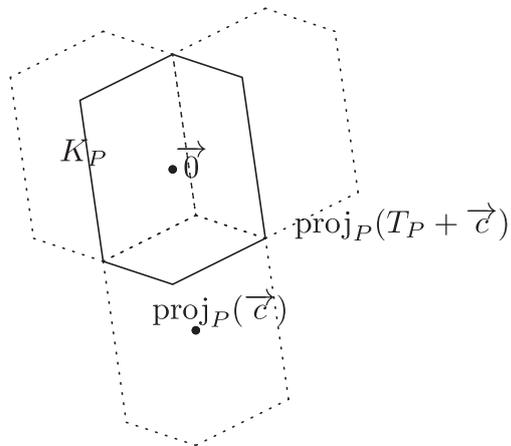


図11 K_P (実線) が円に内接する中心対称な六角形の場合: 菱形十二面体 (平行四辺形十二面体)

- 一般の \vec{c} に対し (M_3 の $2+3=5$ 次元のストラタムで)、 $\text{proj}_P(T_P + \vec{c})$ は K_P を隣り合った2つの六角形と2つの平行四辺形に分ける。このとき、 ∂K_P を含む帯の6個の面のうち1組の対面は平行四辺形で、残り4個は中心対称な六角形である。 K の面は4個が平行四辺形、8個が中心対称な六角形となる。このとき、 K はアフィン切頂八面体である。
- \vec{c} は (M_3 の4次元のストラタムで)、 $\text{proj}_P(T_P + \vec{c})$ が K_P を1つの六角形と2つの平行四辺形に分けるようになる。このとき、 ∂K_P を含む帯の6個の面のうち1組の対面は中心対称な六角形で、残り4個は平行四辺形である。 K の面は8個が平行四辺形、4個が中心対称な六角形となる。このとき、 K はアフィン長十二面体である。
- \vec{c} は (M_3 の3次元のストラタムで)、 $\text{proj}_P(T_P + \vec{c})$ が K_P を3つの平行四辺形に分けるようになる。このとき、 K の面はすべて平行四辺形で、このとき、 K はアフィン菱形十二面体である (平行四辺形十二面体と呼ぶほうが良い)。

K_P が円に内接する中心対称な六角形で隣り合う辺の長さが等しく、正六角形ではないとき、 $L \cap P$ は2次元格子のモジュライ空間 M_2 の1次元のストラタムの元である。 \vec{c} の位置と、それに対応するディリクレ領域の形は、上に述べた3通りの場合分けでそれぞれ、 M_3 の4次元、3次元、2次元のストラタムにおけるものになる。 $\text{proj}_P(T_P + \vec{c})$ が K_P を1つの六角形と2つの平行四辺形に分ける場合の中に、 $\frac{1}{2}$ 回転の Z_2 対称性を持つものがあり、 $\text{proj}_P(T_P + \vec{c})$ が K_P を3つの平行四辺形に分ける場合は必ず $\frac{1}{2}$ 回転の Z_2 対称性を持つ。

K_P が正六角形のときは、 \vec{c} の位置と、それに対応するディリクレ領域の形は、上に述べた3通りの場合分けでそれぞれ、 M_3 の3次元、2次元、1次元のストラタムにおけるものになる。 K_P を1つの六角形と2つの平行四辺形に分ける場合の中には必ず $\frac{1}{2}$ 回転の Z_2 対称性を持ち、 $\text{proj}_P(T_P + \vec{c})$ が K_P を3つの平行四辺形に分ける場合は、必ず二面体群 D_6 の対称性を持つ。特別な場合、 K が面心立方格子に対応する菱形12面体となる。

6 おわりに

結晶群の研究がおこなわれるのは19世紀後半であるが、このころは物質が原子からできていることが確認されていたとは言い難い。アボガドロ数の提唱(1811)、ブラウン運動の発見(1827)、アインシュタインのブラウン運動の理論とアボガドロ数の決定(1905)に至って、物質が原子からできていることが確認された。さらにX線の発見(1895)ののち、結晶にX線ビームをあてて得られるラウエ斑点の発見(1912)、ブラッグ反射条件の発見(1913)により、結晶が原子分子の規則正しい周期的配列になっていることが、X線の波動性ととも示された。物質の結晶状態として現れない結晶群もあると思われるが、物質の結晶状態の分類は数学的裏付けを持って行われることになった。

このように現実と結びついている結晶群を理解するために、古典的なブラベ格子を原子の配列から直接理解し、その対称性をディリクレ領域の対称性とみて、3次元格子群のモジュライ

空間の様子を理解することを試みた。物性物理学でもこのような見方をすることも必要とされ、ここで述べたディリクレ領域は、ウィグナー・ザイツ胞 ([7]Wigner-Seitz cell)、ブリュアンゾーン ([7]Brillouin zone) と呼ばれている。

最後に古典的な分類とディリクレ領域の関係を述べておく。ブラベ格子の分類は格子に見いだされる直角に着目したものとみることができる。

三斜格子	↔	一般の切頂八面体、まれに長十二面体、ごくまれに菱形十二面体
単純単斜格子	↔	直六角柱
底心単斜格子	↔	切頂八面体、長十二面体、まれに菱形十二面体 (Z_2 不変)
単純直方格子	↔	直方体 (D_4 不変)
底心直方格子	↔	直六角柱 (D_4 不変)
体心直方格子	↔	切頂八面体、長十二面体、まれに菱形十二面体 (D_4 不変)
面心直方格子	↔	切頂八面体 (D_4 不変)
単純正方格子	↔	直方体 (正方形面、 D_8 不変)
体心正方格子	↔	切頂八面体、長十二面体 (D_8 不変)
六方格子	↔	直六角柱 (D_{12} 不変)
三方格子	↔	切頂八面体、菱形十二面体 (D_6 不変)
単純立方格子	↔	立方体 ($T(2, 3, 4)$ 不変)
体心立方格子	↔	切頂八面体 ($T(2, 3, 4)$ 不変)
面心立方格子	↔	菱形十二面体 ($T(2, 3, 4)$ 不変)

参考文献

- [1] A. Bravais: Mémoire sur les systèmes formés par des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace, Journal de l'École Polytechnique 19: 1-128.
- [2] John H. Conway, Olaf Delgado Friedrichs, Daniel H. Huson, William P. Thurston, On Three-Dimensional Space Groups, Contributions to Algebra and Geometry, Volume 42 (2001), No. 2, 475–507.
- [3] László Fejes Tóth, Regular Figures, Oxford: Pergamon Press (1964).
- [4] Ju L., Ringler T., Gunzburger M., Voronoi Tessellations and Their Application to Climate and Global Modeling. In: Lauritzen P., Jablonowski C., Taylor M., Nair R. (eds) Numerical Techniques for Global Atmospheric Models. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, vol 80. (2011) Springer, Berlin, Heidelberg.
- [5] 坪井 俊, 対称性と周期性, https://www.musashino-u.ac.jp/academics/faculty/engineering/mathematical_engineering/math_class/014.html
- [6] 数学辞典第4版, 日本数学会編, 岩波書店, 「125 結晶群」.
- [7] https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice
https://en.wikipedia.org/wiki/Wigner-Seitz_cell
https://en.wikipedia.org/wiki/Brillouin_zone

https://en.wikipedia.org/wiki/Fundamental_polygon

<https://en.wikipedia.org/wiki/Parallelohedron>

<https://en.wikipedia.org/wiki/Zonohedron>

(原稿提出: 2021 年 11 月 4 日; 修正稿提出: 2021 年 12 月 8 日)