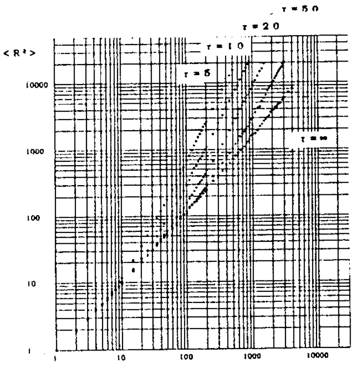

図2　End-to-end distance Rの平均$<R^2>$を時間tに対しプロットしている。この傾きからフラクタル次元が求められる。

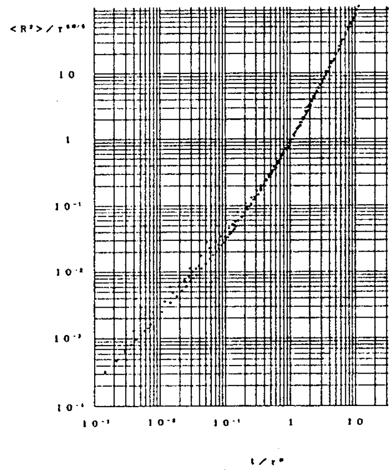

図3　スケーリング則のチェック　$\phi=1.84$　のときが最適であった。

3.　離散空間の一様性，等方性

筑波大学物理工学系　　小　川　　泰

広く、形の物理学、形の科学一般に興味を持つ者として、DLAは重要な模型と考えているが、自分では全くいじっていない門外漢である。この研究会の名を頼りに、「...その周辺」の話題として、DLAに現れると言う異方性の問題[1)]に関連して、微分方程式の差分化や、連続空間の問題を格子のような離散空間で扱う場合の一般的な問題点について論じたい。

この研究会でも幾つかの発表があるように、DLA の long-run-simulation では、格子のもつ異方性が反映してくると言うことである。格子上の酔歩と拡散の関係は、まず1次元では、二項分布からGauss分布への移行と言う中央極限定理の問題であり、Stirling の公式を使う近似と、原点(出発点)に近いところに着目する近似に基づいている。2次元正方格子では、指数関数の肩が二次式であるGauss分布近似の枠内では等方的であるが、4次まで考慮したときには異方性を免れない。また、原点付近の分布は、何度も行き来した結果である。しかるに、DLAでは、凝集体表面に初めて到着したときに付着するので、この考えの範囲内では、異方性が現れて当たり前である。1度の到着だけでは、単純には付着しないと修正した模型では、当方性が回復するように見受けられるが、格子を導入している以上、ある程度の異方性は避けられない。

正方格子は、4回対称性を持つので、この対称性を持つ最低次の調和関数は4次式

$$Q_4=(x^4+y^4)+ax^2y^2 \tag{1}$$

である。(1,0)方向と(1,1)方向が同等ではないことを反映して、$a\neq 2$である。6回対称性をもつ三角格子では、$a=2$となって4次部分は円くなり、

$$Q_4=(x^2+y^2)^2 \tag{2}$$

最低次は6次式になる。8回対称なら8次と言うところだが、それは後で述べる準結晶では可能だが、結晶格子にはならない。よく知られているように、Bravais格子で許される回転対称性は2-, 3-, 4-, 6-回対称性に限られる。したがって、すべての格子点を完全に平等にとる限り、最低次は6次以上の高次にはならない。

さてここで、準結晶[2)]について若干の説明をしよう。図1が、いわゆる2次元Penrose格子であるが、局所的な5回対称中心は無数にある。5回対称性と並進対称性あるいは結晶格子の矛盾はよく知られているが、禁止されている内容をもう少し厳密に言えば次のようになる。「平面全体に対する回転対称性を問題にする限り、2-, 3-, 4-, 6-回対称性以外の対称中心はせいぜいいずれかの一つに限られる。」複数存在するとしたとたんに最短距離なしに複製され、平面全体を稠密に覆ってしまうことになる。Penrose格子における5回対称性は、あくまでも有限域を支配する5回対称であって、無限域を支配する中心は、あっても全体の中心であるただ1個に限られる。

Penrose格子は、巨視的にみれば軸の逆方向も同等で、5回対称ではなく、10回対称である。したがって、前述の調和多項式の最低次は10次式である。配意数は3~7に分布し、結晶格子のような一様性には欠ける。しかし、東西や南北ではまったく遠回りしないのに、斜め方向では近道がないと言う京都のような正方の条里制に対して、Penrose格子ではどの方向でもまったくの直進は許さないことにより、高度の等方性を実現している。一様性も、結晶の場合のような点ごとのものではないが、巨視的には勿論一様である。そのことは、「任意の部分図形に対して、そのさしわたし程度の距離に合同な図形が必ず存在する。」というConwayの定理によって保証されている。

図2のように正方形と(45°-135°)の菱形を用いて、8回対称な準結晶も可能である。これは8次式的である。自己相似性と密接に関係した黄金比が、1辺1の正5角形の対角線の長さであるように、ごく一般に正多角形の対角線間には同様な美しい関係が存在する。そしてそれぞれにPenrose格子的な準結晶構造がありそうである。角度分割は細くなるので、ある意味では等方性がよくなるが、タイルの種類が増え、非常に細長い針状のもの迄動員しなくてはならなくなるので、一様性

は悪くなる。おそらく、離散空間における一様性と等方性の共存と言う観点からは、5回対称のPenrose格子が理想的と言えよう。この上でのDLAは興味なかろうか? 自己相似な離散空間で、自己相似なDLAパーンが現れても、感激が薄いと思われるかもしれない。しかし、Penrose格子のもたらす物理効果を知ることは、現実に存在する準結晶の性質を導くと言う観点からも有意義である。

任意のNについて正N角形が存在する2次元に対して、正多面体が5種類しか存在しない3次元では若干事情が異なる。前期の回転対称性の議論を球面上で展開すると、5回対称軸については、正12面体の面中心、同じことだが正20面体の12頂点に対応する6本の配置が可能になる。2次元では、5回対称性は7回対称性より若干簡単なだけであったが、3次元での5回対称性の地位は独特である。正12-20面体群は120個の対称操作をもち、この数は点群中の最大である。つまり、120個以上の点を単位球面上に配そうと思えば、必ず均衡を欠き、同等に配することが不可能なのである。網目を細かく、緻密にすればいくらでも連続空間に接近しうるというわれわれの素朴な期待は、このようにして無残にも打ち砕かれる。

球面上の点配置、あるいは単位ベクトルの集合$\{\mathbf{e}_i, i=1,...N\}$を特徴付ける方法として、Nelsonらによるbond-orientational-orderと言う考え方がある[3)]。球面調和解析といってもよいし、多重極展開でもある。Fourtier 分解による構造解析に球面的な境界条件を課したものと理解してもよい。適当に極座標の軸を導入すると、球面調和関数$Y_{lm}(\theta,\phi)$が定まる。各$\mathbf{e}_i$に対する$[\theta,\phi]$を、$[\theta_i,\phi_i]=[\theta(\mathbf{e}_i),\phi(\mathbf{e}_i)]$とする。

$$Y_{lm}(\mathbf{e}_i)=Y_{lm}(\theta_i,\phi_i) \tag{3}$$

として、この関数の値を、N個の単位ベクトルについて平均する。

$$Q_{lm}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}Y_{lm}(\mathbf{e}_i) \tag{4}$$

Q_{lm}のm依存性は、量子化の軸と言うか極座標の軸の選びかたに依存している。しかし、$|Q_{lm}|^2$を$(2l+1)$個のmについて加え、lで指定される部分空間の球面調和成分

$$\mathrm{Q}_l=\left[\sum_{m=-l}^{l}|Q_{lm}|^2\right]^{1/2} \tag{5}$$

をとれば、単位ベクトルの集合の座標軸の選び方によらない特徴を抜き出したことになる。

$l=0$は配置によらずに $\mathrm{Q}_0=1$である。. 球面上のすべての点を連続的に選んだ場合のみはすべての$l\neq 0$に対して $\mathrm{Q}_l=0$ である。2個の単位ベクトルからなる集合の場合、角の2等分線は単位球と2点で交わることに注意を要する。平面上の2点の中点が一義的に定まるのに対して、球面上では、その地球の裏側の点

も同等の資格であることを主張していることである。通常の場合、これら2点がまったくの同等ではないことは確かだとしても、北極と南極の2ベクトルからなる集合では、赤道上の諸点は、互いに同等の立場で、代表権を主張するであろう。正多面体頂点のように対称性の高い配置に対しては、ユークリッド空間と言うか、線形空間での常識は通用しない。

以上のことと関係して、まず、点対称な配置では、奇数のlに対して　$Q_l=0$ である。対称性のよい点配置に対して低次のQ_lは消える。例えば、正4面体対称をもって配置した点では$l=1,2$に対して、$Q_l=0$.　立方対称の場合は、$l=2$とすべての奇数次に対して　$Q_l=0$　である。正20面体対称をもって配置した点の場合には、さらにQ_4,Q_8も消える。球的な回転群と、離散的、正多面体的な点群との関係で言えば、$l=4$の部分空間は、4本の3回軸の存在と関連して、O群あるいはO_h群のA_g規約表現を持つこと、6本の5回軸、10本の3回軸、15本の2回軸をもつI_h群は、$l=6, 10, 15$ にA_g規約表現を持ち、$Q_l\neq 0$ となる。　このように、3次元では一層、5回対称性が重要な地位を閉めている。なお、以上に述べたように、球面調和解析による対称性の判断は、$Q_l\neq 0$の成分相互間の大小関係よりも、どのlに対して　$Q_l=0$　あるいはそれの近いかという方にあると言えよう。

参考文献

1) 例えば、
松下　貢、早川美穂、近藤　宏、本田勝也、豊木博泰、本庄春雄、太田正之輔:　物性研究 48, 473 (1987) §6.

2) 準結晶構造、Penrose tiling の数理については、例えば、
数セミ　1986年1~2月号.　日本金属学会会報　1986年2月号, サイエンス 1986年9月号,　「かたちの科学」(小川泰、宮崎興二編, 朝倉書店 1987)　等に筆者による解説がある。

3) D. R. Nelson and J. Toner: Phys. Rev. B24, 363 (1981).
R. J. Steinhardt, D. R. Nelson and M. Ronchetti: Phys. Rev. B28, 784 (1983).

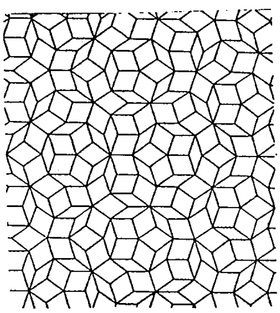

図1　ペンローズ・タイリング

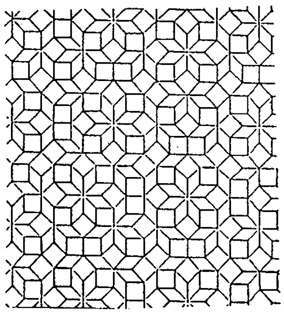

図2　8方準格子

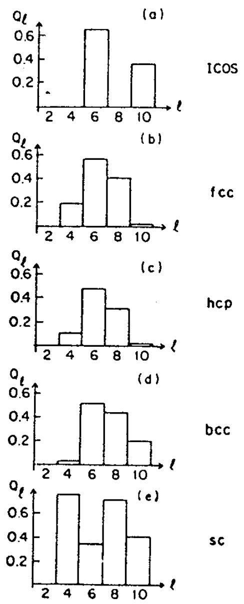

図3　いくつかの配置に対するQ_ℓ
一番上が正 20向体約 12方向