

結晶グラフと現実世界の結晶の配位数列の関係に関するスタディ
Relationship between Crystal Graphs in Mathematics and Crystals in Real World

東京大学 大学院数理科学研究科

中川淳一

The University of Tokyo, Graduate School of Mathematical Science

Junichi Nakagawa

結晶の配位数列の準多項式性について研究している。結晶の配位数とは、各原子に隣接する原子の数を表す基本的な不変量である。配位数列とは、材料科学で使われている配位数を拡張した概念であり、 n 個の原子結合によりたどり着ける原子の数を s_n とおいたような数列である。結晶の配位数列に関する重要な問題として「結晶の配位数列は十分大きいところで準多項式になるかどうか？(この数学的性質は準多項式型と定義されている)」というGrosse-Kunstleve とBrunner, Sloane による予想([GKBS96])がある。本研究において、この予想を肯定的に解決することができた([NSMN21])。証明で重要なカギになるのは、有限生成モノイドの理論を使うことであった。一方、現実の結晶では、準多項式になることが多くの場合で観察される。そこで、どのような数学的条件を付与すれば準多項式型が準多項式になるかについて、代数系の理論と(グラフ理論による)数値計算の両面からスタディしたい。

The coordination sequences of periodic graphs are predicted to be of quasi-polynomial type by Grosse-Kunstleve et al. (1996). After that, various mathematical methods to calculate coordination sequences have been developed and they are actually calculated in many specific cases as in the work of Conway & Sloane (1997), Eon (2002, 2012), Goodman-Strauss & Sloane (2019), O’Keeffe (1995, 1998), Shutov & Maleev (2018, 2019, 2020). And, we were able to give the affirmative answer [NSMN21] to the question posed by Grosse-Kunstleve et al. [GKBS96] using monoid theory. On the other hand, Crystals in real world are observed to be quasi-polynomial in many cases. In SGW2022, we hope to study that what mathematical conditions on quasi-polynomial type make it quasi-polynomial, in the view points of mathematics and numerical calculation in graph theory.

[GKBS96] R. W Grosse-Kunstleve, G. O Brunner, and N. J. A Sloane, Algebraic description of coordination sequences and exact topological densities for zeolites, *Acta Cryst. A* 52 (1996), no. 6, 879–889.

[NSMN] Y. Nakamura, R. Sakamoto, T. Mase, J. Nakagawa, Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type, *Acta Cryst.* (2021). A77, 138-148

Key word:

結晶 (crystal) , 結晶グラフ (crystal graph) , 配位数列 (coordination sequence) , 準多項式 (quasi-polynomial), 準多項式型(quasi-polynomial type), 代数系(algebraic system), グラフ理論 (graph theory), 数値計算(numerical calculation)