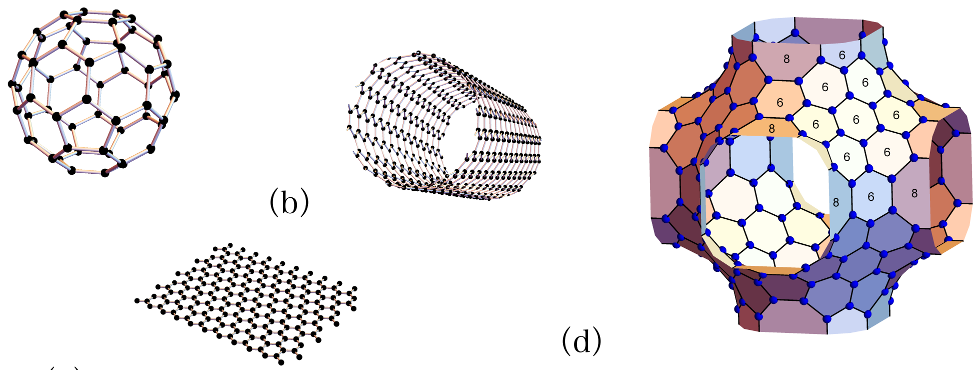
A discrete surface theory for carbon networks

大森 俊明 *

本稿の内容は，小谷元子氏（東北大学）と内藤久資氏（名古屋大学）との共同研究に基づく．

§1　研究の動機

近年，炭素同素体の研究は非常に盛んであり，次々と新たなタイプのナノカーボン材料が合成されている．(a）フラーレン（図は C_{60}），(b）カーボンナノチューブ（図は単層）や（c）グラフェンは代表的な例である．いずれの例も，一つの炭素原子は他の三つの炭素原子と sp^2 軌道により共有結合しており，数学的な構造は次数が 3 のグラフと考えることができる．図から分かるように，フラーレンは球面（正曲率）の形に見え，カーボンナノチューブ，グラフェンは，それぞれ円柱面，平面（曲率 0）に見える．



(a)　(b)　(c)　(d)

負曲率の曲面を張るカーボン材料の存在は自然な問いであろう．Mackay-Terrone [3] は，3 重周期型の極小曲面である Schwarz P-曲面を張る，計算上は構造安定なカーボンネットワーク（b）を提唱した．その後も，P-曲面上のカーボンネットワークがいくつか提唱され，最近では，Tagami-et al. [4] によって，頂点数が少ない場合の構造安定なカーボンネットワークの分類がなされているが，実際の合成は成功を収めていないようである．我々は，新たな構造安定カーボンネットワークの発見を視野に入れ，離散幾何解析の視点から，次数が 3 のグラフの「曲面」としての幾何構造を調べたい．

*東京理科大学理工学部数学科（omori_toshiaki@ma.noda.tus.ac.jp）

§2　グラフに対する離散曲面論

講演者が知る限り，既存の離散曲面論は「面」の存在を前提とした理論のみであって，一方で，我々が対象とする曲面には「自然な面」が存在しない．我々は，「法ベクトル」の定義から始め，その変化によって曲面の幾何を記述する．

定義 1 $\boldsymbol{\Phi}\colon X \to \mathbb{R}^3$ が**離散曲面**であるとは，次の三条件が満たされるときをいう．

(i) $\boldsymbol{\Phi}$ は，次数 3 のグラフ $X=(V,E)$ の $\mathbb{R}^3$ への区分的線型実現である．

(ii) 各頂点 $x \in V$ に対して，$\boldsymbol{\Phi}(x)$ を始点とする三つのベクトル $\{\boldsymbol{\Phi}(e) \mid e \in E_x\}$ は 2 次元以上の部分空間を生成する．

(iii) 局所的に向き付けられている，すなわち，X の各頂点から出る三つの辺には順序が割り当てられている．

$\boldsymbol{\Phi}\colon X \to \mathbb{R}^3$ を離散曲面とし，$E_x=\{e_1,e_2,e_3\}$ を，$x \in V$ を始点とする向き付けられた辺の集合とする．$\boldsymbol{x} := \boldsymbol{\Phi}(x) \in \mathbb{R}^3$ における $\boldsymbol{\Phi}$ の（向き付けられた）**単位法ベクトル**を

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}(x) &:= \frac{(\boldsymbol{e}_2-\boldsymbol{e}_1)\times(\boldsymbol{e}_3-\boldsymbol{e}_1)}{\|(\boldsymbol{e}_2-\boldsymbol{e}_1)\times(\boldsymbol{e}_3-\boldsymbol{e}_1)\|}\\ &= \frac{\boldsymbol{e}_1\times\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_2\times\boldsymbol{e}_3+\boldsymbol{e}_3\times\boldsymbol{e}_1}{\|\boldsymbol{e}_1\times\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_2\times\boldsymbol{e}_3+\boldsymbol{e}_3\times\boldsymbol{e}_1\|}\end{aligned}$$

（但し，$\boldsymbol{e}_i := \boldsymbol{\Phi}(e_i)$）により定義し，$\boldsymbol{n}(x)$ と直交する平面 $T_x \subseteq \mathbb{R}^3$ を $\boldsymbol{\Phi}$ の**接平面**と呼ぶ．$\boldsymbol{\Phi}$ や $\boldsymbol{n}$ の方向微分は，$\mathbb{R}^3$ における差分の T_x への直交射影によって定義する:

$$\begin{aligned}\nabla_e\boldsymbol{\Phi} &:= \operatorname{Proj}[\boldsymbol{\Phi}(e)] = \boldsymbol{e} - \langle \boldsymbol{e}, \boldsymbol{n}(o(e))\rangle \boldsymbol{n}(o(e)),\\ \nabla_e\boldsymbol{n} &:= \operatorname{Proj}[\boldsymbol{n}(t(e)) - \boldsymbol{n}(o(e))].\end{aligned}$$

但し，$e \in E$ に対して，$o(e)$，$t(e)$ はそれぞれ e の始点，終点である．点 $x \in V$ において，$E_x=\{e_1,e_2,e_3\}$ から二つ e_α, e_β を選ぶごとに，Weingarten 型の線型写像

$$S_{\alpha\beta}\colon T_x \to T_x,\quad S_{\alpha\beta}(\nabla_{e_\gamma}\boldsymbol{\Phi}) := -\nabla_{e_\gamma}\boldsymbol{n}\ \ (\gamma=\alpha,\beta)$$

が定義される．

$$H_{\alpha\beta}(x) := \frac{1}{2}\operatorname{tr} S_{\alpha\beta},\quad K_{\alpha\beta}(x) := \det S_{\alpha\beta}$$

と定め，

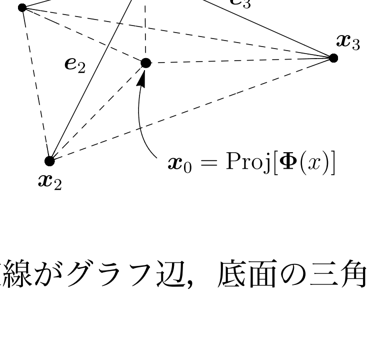


図 1: 実線がグラフ辺，底面の三角形が接平面

定義 2 $x \in V$ における $\boldsymbol{\Phi}$ の**平均曲率** $H(x)$，および，**Gauss 曲率** $K(x)$ を，次で定義する:

$$H(x) := \sum_{\alpha,\beta} \frac{A_{\alpha\beta}(x)}{A(x)} H_{\alpha\beta}(x),$$
$$K(x) := \sum_{\alpha,\beta} \frac{A_{\alpha\beta}(x)}{A(x)} K_{\alpha\beta}(x).$$

ここで，$A_{\alpha\beta}(x) := \|\nabla_{e_\alpha}\boldsymbol{\Phi} \times \nabla_{e_\beta}\boldsymbol{\Phi}\|$ であり，

(1) $$A(x) := \|\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_2 \times \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{e}_1\|$$

(図 1 の底面の三角形の面積) は x における面責要素である．また, それぞれの和は $(\alpha,\beta) = (1,2),(2,3),(3,4)$ にわたって取る．

命題 3（面積変分）$\boldsymbol{x}$ の隣接三頂点 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3$ を，それぞれの法方向 $\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2, \boldsymbol{n}_3$ に動かすときの $\boldsymbol{x}_i(t) = \boldsymbol{x}_i + t\boldsymbol{n}_i$（$i = 1,2,3$）が作る三角形の面積 $A(x(t))$ の変分は，

$$\frac{1}{A(x)} \left.\frac{d}{dt}\right|_{t=0} A(x(t)) = -2H(x)$$

で与えられ，また，$\boldsymbol{x}_i$ が作る三角形と $\boldsymbol{x}_i(t)$ が作る三角形が平行という仮定の下で，

$$\frac{1}{A(x)} \left.\frac{d^2}{dt^2}\right|_{t=0} A(x(t)) = 2K(x)$$

が成り立つ．

命題 4（調和曲面）$\boldsymbol{\Phi}\colon X = (V, E, m) \to \mathbb{R}^3$ を重み付き調和曲面，すなわち，

$$m(e_1)\boldsymbol{\Phi}(e_1) + m(e_2)\boldsymbol{\Phi}(e_2) + m(e_3)\boldsymbol{\Phi}(e_3) = \mathbf{0}$$

（$m\colon E \to (0, +\infty)$，$m(e) = m(\bar{e})$）が各頂点で成り立つと仮定する．$\boldsymbol{\Phi}$ が極小である為には，各頂点において

$$\langle\boldsymbol{\Phi}(e_1), \boldsymbol{\Phi}(e_2)\rangle = \langle\boldsymbol{\Phi}(e_2), \boldsymbol{\Phi}(e_3)\rangle = \langle\boldsymbol{\Phi}(e_3), \boldsymbol{\Phi}(e_1)\rangle$$

が成り立つことが必要十分である．

命題 5 $\boldsymbol{\Phi}_0\colon X = (V, E) \to \mathbb{R}^3$ を離散曲面，$\boldsymbol{n}_0\colon V \to \mathbb{R}^3$ を $\boldsymbol{\Phi}_0$ の単位法ベクトルとし，各 $x \in V$ に対して，$\nabla_{e_2-e_1}\boldsymbol{n}_0 := \nabla_{e_2}\boldsymbol{n}_0 - \nabla_{e_1}\boldsymbol{n}_0$ は $\nabla_{e_3-e_1}\boldsymbol{n}_0$ と平行でないと仮定する（$E_x = \{e_1, e_2, e_3\}$）．任意の函数 $H\colon V \to \mathbb{R}$ に対して，

(2) $$2H(x)\boldsymbol{m}(x) = \nabla_{e_2-e_3}\boldsymbol{n}_0 \times \nabla_{e_1}\boldsymbol{\Phi} + \nabla_{e_3-e_1}\boldsymbol{n}_0 \times \nabla_{e_2}\boldsymbol{\Phi} + \nabla_{e_1-e_2}\boldsymbol{n}_0 \times \nabla_{e_3}\boldsymbol{\Phi}$$

を満たす離散曲面 $\boldsymbol{\Phi}\colon X \to \mathbb{R}^3$ は H を平均曲率に持つ．但し，

$$\boldsymbol{m}(x) := \boldsymbol{\Phi}(e_1) \times \boldsymbol{\Phi}(e_2) + \boldsymbol{\Phi}(e_2) \times \boldsymbol{\Phi}(e_3) + \boldsymbol{\Phi}(e_3) \times \boldsymbol{\Phi}(e_1)$$

である．特に，$H = 0$ のときは，(2) は線型方程式であり，常に可解である．

命題5を用いることにより, Kotani-Sunada [2] の標準実現Mackay結晶から極小Mackay結晶が得られる:

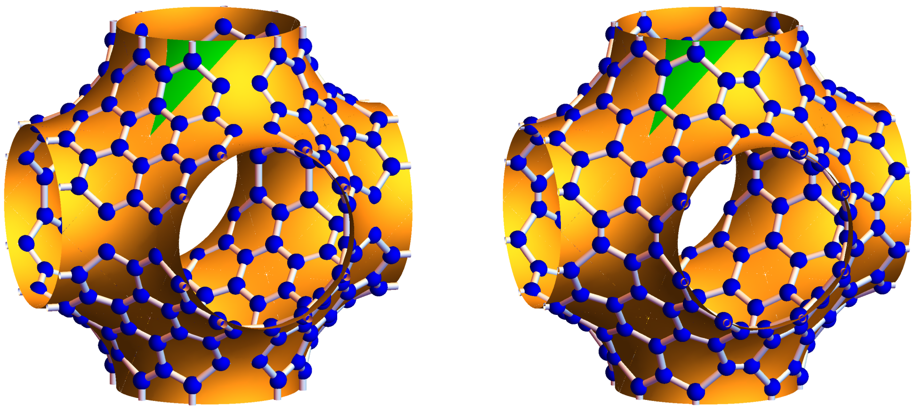


図 2: 標準実現 Mackay 結晶（左）と極小 Mackay 結晶（右）

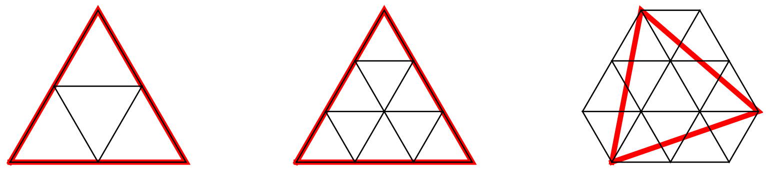
§3　離散から連続へ

定義 6（Goldberg-Coxeter 細分）$X = (V, E)$ を次数 3 の平面グラフとし，$k > 0$，$\ell \geq 0$ を整数とする．$\mathrm{GC}_{k,\ell}(X)$ とは，次のステップで構成される平面グラフである．

（1）X の双対グラフ X^* を取る（X^* は全ての面が三角形）．

（2）図 3 のように，X^* の各三角形を分割する．その際，境界の三角形でない面は隣の三角形でない面と適当に貼り合わされ，結果，X^* の三角形分割が得られる．

（3）（2）で得られたグラフの双対を $\mathrm{GC}_{k,\ell}(X)$ と定義する．



$(k, \ell) = (2, 0)$　　$(k, \ell) = (3, 0)$　　$(k, \ell) = (2, 1)$

図 3: 太線の三角形は X^* の面

例 1 正十二面体の $\mathrm{GC}_{1,1}$-細分は切頂二十面体（C_{60}），$\mathrm{GC}_{2,0}$-細分は Chamfered Dodecahedron（C_{80}）である．一般に，次数 3 の平面グラフの GC-細分は，六角形のみが増える．

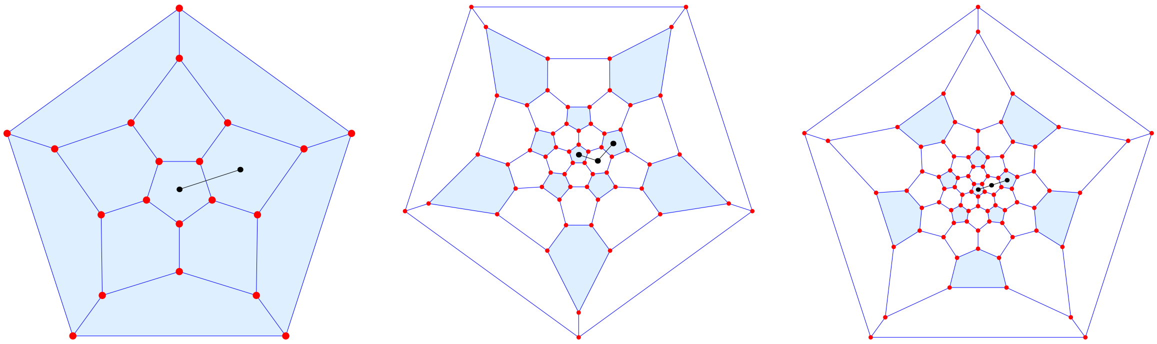
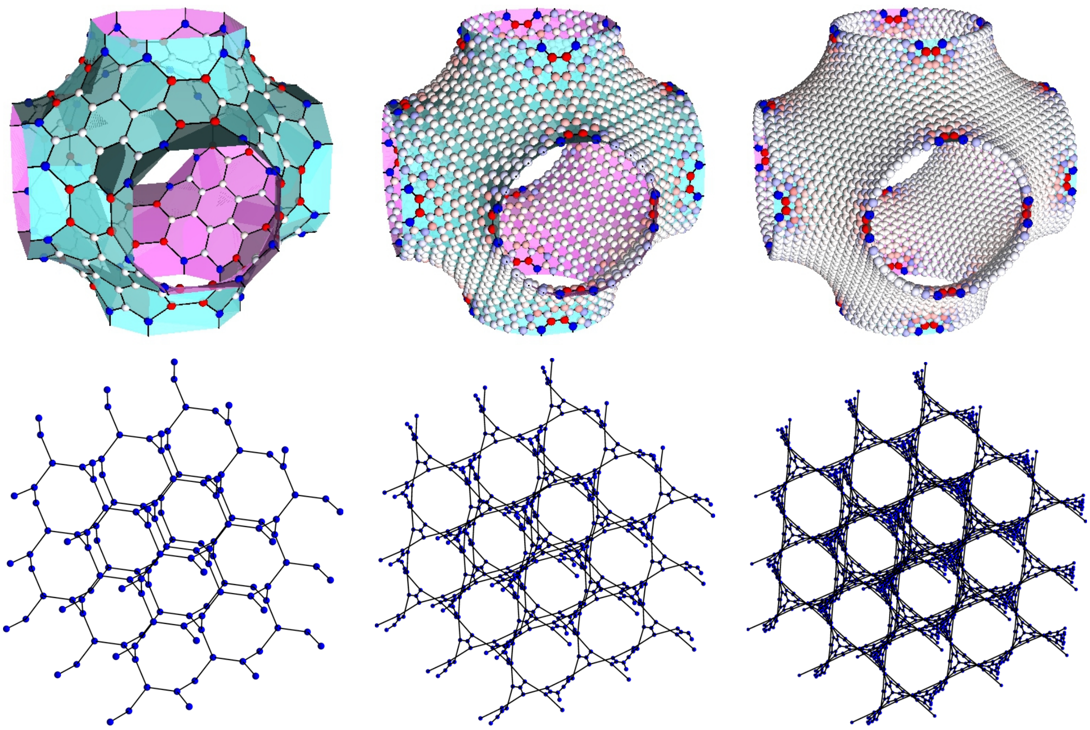


図 4: 正十二面体（左）とその $GC_{1,1}$-細分（中央）および $GC_{2,0}$-細分（右）

例 2 以下の図は，標準実現 Mackay 結晶（上段）と標準実現 K4 格子（下段）の GC-細分のいくつかのステップを表している．



参考文献

[1] M. Kotani, H. Naito, and T. Omori, A discrete surface theory. arXiv:1601.07272.

[2] M. Kotani and T. Sunada. Standard realizations of crystal lattices via harmonic maps. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **353**, 1–20, (2001).

[3] A. Mackay and H. Terrones. Diamond from graphite. *Nature*, **352**, 762, (1991).

[4] M. Tagami, Y. Liang, H. Naito, Y. Kawazoe, and M. Kotani. Negatively curved cubic carbon crystals with octahedral symmetry. *Carbon*, **76**, 266–274, (2014).