統計数理 第34巻 第1号（1986）

幾何学的対称性の統計的分布

── 結晶における群とその頻度 ──

統計数理研究所　伊　藤　栄　明

（1986年4月　受付）

§1.　幾何学的対称性の統計的分布

幾何学的な対称性を群論をもちいて記述する方法はよく知られている．3次元空間における周期的な構造について対称性を記述する230個の群があり，それらは空間群と呼ばれている．結晶における原子の配列を解析する際に空間群はもちいられる．結晶の対称性は230の空間群のいずれかによりあらわされる．（仁田勇監修X線結晶学（1959））．

対称性の統計的分布について，球の充塡あるいは楕円球の充塡等にもとづいたモデルが考えられる．たとえば等大球の面心立方最密充塡と六方最密充塡のいずれになるかということについてある仮定のもとでの確率を議論することは興味ある幾何確率の問題と思われる．幾何学的対称性の統計的分布についてこのような観点からの議論も基本的である．ここではこのような幾何学的構造を直接考えずに群とその表現にもとづいたモデルについて議論する．個々の結晶の対称性が何になるかという問題は物理的，化学的な議論にもとづいて行われるべきものであるが，多数の結晶について対称性についての分布をしらべるには統計的モデルを考えうる．群を値としてとる確率分布という見方が可能である（伊藤（1985, 1986））．群を値としてとる確率分布あるいは確率過程という見方でとらえることのできる現象は多くあると思われる．有向グラフを値としてとる確率過程について以前に議論した(Itoh (1979))．群を値としてとる確率過程も興味ある今後の課題と思われるがこれについては別の機会に議論したい．幾何学的対称性を平行移動の操作を考慮に入れずに記述する点群といわれている32個の群がある．それらは定点Oを通る軸による回転及び定点Oについての反転からなる有限群である．点群は結晶の形態を記述する際にもちいられる．点群における対称操作に平行移動の操作を組み合わせたものが空間群であり，各空間群は32個の点群のいずれかにもとづいて構成されている．ここでは各空間群に対応する点群についての統計的分布を考える．結晶の対称性についてのデータを物理的，化学的な性質を考慮し，同一のモデルで議論しうるように分類する必要がある．Nowacki, Matsumoto, 及び, Edenharter（1967）は構造の知られている8795の結晶について分類し，比較的多く存在する空間群についてのみ議論し，それぞれに属する結晶の個数を示した．

ここでは彼等の分類における酸化物と水酸化物の結晶からなる分類IIIについて各点群についての頻度分布（表1）を議論する．多く存在している群は，群として生成されやすいということと考え，生成されやすさということについてのモデル化をこころみる．計算機シミュレーションを行いデータと比較する．

表1.　対称性の頻度分布

O_h	139
T_h	21
D_{6h}	23
C_{6h}	9
D_{3d}	58
D_{4h}	50
D_{2h}	21
C_{2h}	21

§2. 点　群

図形がある軸のまわりのある角の回転により不変であることを回転の操作によって図形が不変であるという．空間にある図形があって，それがある軸のまわりの $2\pi/n$（n は正の整数）の角またはその任意の整数倍だけ回転しても不変にとどまるとき，その図形はその軸のまわりに n 次の回転対称性をもつといい，その軸を n 次の回転対称軸または単に回転軸または対称軸という．空間の任意の点 $p(x, y, z)$ を原点0に対して逆の位置 $p'(-x, -y, -z)$ に移すことを反転の操作という．回転対称軸を符号的に表すのに，その次数の数字によって，それぞれ

$$1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\cdots\cdots \text{等}$$

と書く．

回反操作は回転と反転の合成である．点0を通る軸による次数 n の回転の後に点0に対して反転を行う操作によって不変であることを n 次の回反軸があるといい，$\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{5}$……等と書く．このような変換を行列により表現した場合，回転は行列式が1であり，回反は行列式が-1である．結晶における原子の配列を記述するには回転と回反だけでなく並進をともなった回転，並進をともなった回反等の平行移動と回転，平行移動と回反を組み合わせた操作を考える必要があり230の空間群は，それらのすべての可能な組み合わせである．結晶の形態をしらべる場合，平行移動を考慮せずにある点Oを通る軸による回転及び回反からなる群による記述だけで十分である．結晶においてあらわれるのは1, 2, 3, 4, 6及び $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ に限定されており，これらがどのようなとじた組み合わせをつくりうるかをしらべればよい．これより32個の群が得られ，これらを点群と言う．これらは結晶の形態を分類する32の晶族に対応している．

空間群及び点群は合同変換からなる不連続群である．(Hilbert und Cohn-Vossen (1932))．

群は次のように定義される．（浅野，永尾 (1965))．

演算の定義された集合 S において任意の元 a, b, c に対して

$$(a\circ b)\circ c = a\circ(b\circ c)$$

がなりたつとき S は $\circ$ に関して半群をつくるという．

集合 G が演算 $\circ$ に関して半群をつくり，さらに G が単位元をもち，G の各元が逆元をもつとき，G は $\circ$ に関して群をつくるという．

集合 L から集合 M への写像というのは L の元 $a, b, c, \cdots$ のおのおのに対して，それぞれ M の元 a', b', c' が一意的にきまる対応のことである．集合 M から M の中への写像を M の自己写像という．M の自己写像のうちで，M から M の上への一対一写像を M の置換という．3次元ユークリッド空間の点全部の集合を E^3 とする．E^3 上の置換において2点 x, y の距離と，対応する2点 x', y' の距離とがつねに等しいとき，このような置換を E^3 の合同変換という．合同変換の全体は群をつくる．この群を E^3 の合同変換群という．回転移動(定直線を軸として空間の各点を一定角だけまわす回転)，平行移動，定点に関する対称移動は合同変換の特殊の場合で，一般の合同変換はこれら3種の変換を合成してえられる．特定の正多角体または正多角形を，それと合同な位置にもたらすような合同変換の全体は一つの有限群をつくる．正六面体からえられるこのような有限群で位数が最大であるものを考える．それは結晶学において O_h と呼ばれている群である．正六角形の高さが一様な柱から得られる有限群で位数が最大であるものは結晶学において D_{6h} といわれているものである．32個の点群は O_h, D_{6h} 及びそれらの部分群のいずれかである．

§3. 点群の表現

O_h 及び D_{6h} を3次元の行列により表現する．まず O_h の表現を考える．頂点の各座標が $+1$ あるいは -1 であるような正六面体を考える．それと合同な位置にもたらすような合同変換のすべてを行列により表現したものを表2において示す．それらのうち回転軸が (1, 1, 1) と $(-1,\ -1,\ -1)$ を通る $\bar{3}$ を含む D_{3d} を考え，それを含む D_{6h} の表現も表1に示してある．O_h と D_{6h} の双方に含まれる位数が最大の部分群は D_{3d} であり，表2に示した O_h 及び D_{6h} の表現は D_{3d} の表現をひとつ共有している．

表2．各元の行列による表現（O_h の欄にある○はその行列が本文において述べた O_h の元の表現であることを示す。D_{6h} についても同様である。）

操作	行列	位数	固有和	行列式	O_h	D_{6h}
1	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	1	3	1	○	○
$\bar{1}$	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	2	-3	-1	○	○
2	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	
2	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	
2	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	
2	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	
2	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	○
2	$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	
2	$\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	○
2	$\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	
2	$\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	2	-1	1	○	○
2	$\begin{pmatrix}-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}\\-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}\\\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}\end{pmatrix}$	2	-1	1		○
2	$\begin{pmatrix}\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}\\-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}\\-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}\end{pmatrix}$	2	-1	1		○
2	$\begin{pmatrix}-\frac{1}{3}&\frac{2}{3}&\frac{2}{3}\\\frac{2}{3}&-\frac{1}{3}&\frac{2}{3}\\\frac{2}{3}&\frac{2}{3}&-\frac{1}{3}\end{pmatrix}$	2	-1	1		○
2	$\begin{pmatrix}-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}\\\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}\\-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}\end{pmatrix}$	2	-1	1		○
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	○
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	○
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	2	1	-1	○	○
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}\frac{2}{3}&\frac{2}{3}&-\frac{1}{3}\\\frac{2}{3}&-\frac{1}{3}&\frac{2}{3}\\-\frac{1}{3}&\frac{2}{3}&\frac{2}{3}\end{pmatrix}$	2	1	-1		○
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}-\frac{1}{3}&\frac{2}{3}&\frac{2}{3}\\\frac{2}{3}&\frac{2}{3}&-\frac{1}{3}\\\frac{2}{3}&-\frac{1}{3}&\frac{2}{3}\end{pmatrix}$	2	1	-1		○
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix}\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}\\-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}&-\frac{2}{3}\\-\frac{2}{3}&-\frac{2}{3}&\frac{1}{3}\end{pmatrix}$	2	1	-1		○

操作	行　列	位数	固有和	行列式	O_h	D_{6h}
$\bar{2}$	$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}$	2	1	−1		○
3	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	○
3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	○
3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	
3	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	
3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	
3	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	
3	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	
3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	3	0	1	○	
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	○
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	○
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	
$\bar{3}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	6	0	−1	○	
4	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	4	1	1	○	

操作	行　列	位数	固有和	行列式	O_h	D_{6h}
4	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	4	1	1	○	
4	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	4	1	1	○	
4	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	4	1	1	○	
4	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	4	1	1	○	
4	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	4	1	1	○	
$\bar{4}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	4	−1	−1	○	
$\bar{4}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	4	−1	−1	○	
$\bar{4}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	4	−1	−1	○	
$\bar{4}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	4	−1	−1	○	
$\bar{4}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	4	−1	−1	○	
$\bar{4}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	4	−1	−1	○	
6	$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$	6	2	1		○
6	$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$	6	2	1		○
$\bar{6}$	$\begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$	6	−2	−1		○
$\bar{6}$	$\begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$	6	−2	−1		○

§4. 群の存在頻度と群の生成されやすさ

表1にあげたNowacki, Matsumoto and Edenharter (1967) の分類III（酸化物及び水酸化物）の結晶の点群はすべて C_{2h} を部分群としてもつ．C_{2h} は2章で述べた対称操作 1, $\bar{1}$, 2, $\bar{2}$ よりなる群である．C_{2h} に対称操作が加わって得られるのがこれらの結晶の点群であると考え

表 3.

	位数					固有和							行列式	
	1	2	3	4	6	−3	−2	−1	0	1	2	3	+1	−1
O_h	1	19	8	12	8	1	0	15	16	15	0	1	24	24
O	1	9	8	6	0	0	0	9	8	6	0	1	24	0
T_d	1	9	8	6	0	0	0	9	8	6	0	1	12	12
T_h	1	7	8	0	8	1	0	3	16	3	0	1	12	12
D_{6h}	1	15	2	0	6	1	2	7	4	7	2	1	12	12
D_{4h}	1	11	0	4	0	1	0	7	0	7	0	1	8	8
T	1	3	8	0	0	0	0	3	8	0	0	1	12	0
D_6	1	7	2	0	2	0	0	7	2	0	2	1	12	0
D_{3h}	1	7	2	0	2	0	2	3	2	4	0	1	6	6
C_{6v}	1	7	2	0	2	0	0	1	2	6	2	1	6	6
C_{6h}	1	3	2	0	6	1	2	1	4	1	2	1	6	6
D_{3d}	1	7	2	0	2	1	0	3	4	3	0	1	6	6
D_4	1	5	0	2	0	0	0	5	0	2	0	1	8	0
D_{2d}	1	5	0	2	0	0	0	5	0	2	0	1	4	4
C_{4v}	1	5	0	2	0	0	0	1	0	6	0	1	4	4
C_{4h}	1	3	0	4	0	1	0	3	0	3	0	1	4	4
D_{2h}	1	7	0	0	0	1	0	3	0	3	0	1	4	4
C_6	1	1	2	0	2	0	0	1	2	0	2	1	6	0
C_{3h}	1	1	2	0	2	0	2	0	2	1	0	1	3	3
D_3	1	3	2	0	0	0	0	3	2	0	0	1	6	0
C_{3v}	1	3	2	0	0	0	0	0	2	3	0	1	3	3
C_{3i}	1	1	2	0	2	1	0	0	4	0	0	1	3	3
C_4	1	1	0	2	0	0	0	1	0	2	0	1	4	0
S_4	1	1	0	2	0	0	0	3	0	0	0	1	2	2
D_2	1	3	0	0	0	0	0	3	0	0	0	1	4	0
C_{2v}	1	3	0	0	0	0	0	1	0	2	0	1	2	2
C_{2h}	1	3	0	0	0	1	0	1	0	1	0	1	2	2
C_3	1	0	2	0	0	0	0	0	2	0	0	1	3	0
C_2	1	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	2	0
C_s	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	1	1
C_i	1	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	1	1
C_1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0

られる．ランダムに対称操作が加わったというモデルを考えてデータと比較してみる．まずモデルにもとづいてそれぞれの群が生成される確率を計算機シミュレーションにより推定する．表 2 の 60 個の行列を考える．60 個のうちの 4 つの行列 A_1, A_2, A_3, A_4 をえらびだす組みあわせは ${}_{60}C_4$ 通りあるが，そのうちで A_1, A_2, A_3, A_4 が C_{2h} になっているものを考える．

それらは 13 通りある．すなわちそれら 13 通りの 4 つの行列の組はいずれも 1, $\bar{1}$, 2, $\bar{2}$ を表す行列よりなる．13 通りのうち O_h の表現の一部になっているものが 9 通りあり D_{6h} の表現の一部になっているものが 7 通りある．9+7−13=3 であるから 3 通りは表 2 において示した O_h と D_{6h} の双方の表現の一部になっている．13 通りのうちからランダムに一つの組みをえらぶ．その組は行列 X_1, X_2, X_3, X_4 よりなるとする．さらに表 2 の 60 個の行列のうちから重複をゆるして N 個の行列 Y_1, Y_2, $\cdots$, Y_N をランダムにとりだすものとする．えらばれた X_1, X_2, X_3, X_4 と Y_1, Y_2, $\cdots$, Y_N の $4+N$ 個の行列から作られるすべての可能な積を考える．それがとじていたとすれば点群を表しているはずである．得られる点群が何であるかについて確率を計算機シミュレーションにより推定する．とじていない場合は結晶として存在しないものとみなしてとじている場合についてのみ考えることにする．N についての分布を仮定することによりデータを説明できるであろうか．ここでは $N-1$ が平均 1 の Poisson 分布に従うものとして計算機シミュレーションを行った．仮定する分布は試行錯誤により定めなくてはならない．計算機シミュレーションにより，適切な分布を定めるのは大変な時間がかかる．各点群の得られる

表4. C_{2h}を部分群としてもつ群の表現

C_{2h}	ISUU= 4	KOSUU=13NO	1BAN ME				
1 0 0	0 1 0	0 −1 0	−1 0 0				
0 1 0	1 0 0	−1 0 0	0 −1 0				
0 0 1	0 0 1	0 0 −1	0 0 −1				
O_h	ISUU=48	KOSUU= 1NO	1BAN ME				
(表2参照)							
D_{6h}	ISUU=24	KOSUU= 1NO	1BAN ME				
(表2参照)							
D_{4h}	ISUU=16	KOSUU= 3NO	1BAN ME				
1 0 0	0 −1 0	−1 0 0	0 1 0	0 1 0	1 0 0	0 −1 0	−1 0 0
0 1 0	1 0 0	0 −1 0	−1 0 0	1 0 0	0 −1 0	−1 0 0	0 1 0
0 0 1	0 0 1	0 0 1	0 0 1	0 0 1	0 0 1	0 0 1	0 0 1
−1 0 0	0 1 0	1 0 0	0 −1 0	0 −1 0	−1 0 0	0 1 0	1 0 0
0 −1 0	−1 0 0	0 1 0	1 0 0	−1 0 0	0 1 0	1 0 0	0 −1 0
0 0 −1	0 0 −1	0 0 −1	0 0 −1	0 0 −1	0 0 −1	0 0 −1	0 0 −1
D_{3d}	ISUU=12	KOSUU= 5NO	1BAN ME				
1 0 0	0 0 1	0 1 0	0 1 0	1 0 0	0 0 1	−1 0 0	0 0 −1
0 1 0	1 0 0	0 0 1	1 0 0	0 0 1	0 1 0	0 −1 0	−1 0 0
0 0 1	0 1 0	1 0 0	0 0 1	0 1 0	1 0 0	0 0 −1	0 −1 0
0 −1 0	0 −1 0	−1 0 0	0 0 −1				
0 0 −1	−1 0 0	0 0 −1	0 −1 0				
−1 0 0	0 0 −1	0 −1 0	−1 0 0				
D_{3d}	ISUU=12	KOSUU= 5NO	3BAN ME				
1 0 0	0 0 −1	0 1 0	0 1 0	1 0 0	0 0 −1	−1 0 0	0 0 1
0 1 0	1 0 0	0 0 −1	1 0 0	0 0 −1	0 1 0	0 −1 0	−1 0 0
0 0 1	0 −1 0	−1 0 0	0 0 1	0 −1 0	−1 0 0	0 0 −1	0 1 0
0 −1 0	0 −1 0	−1 0 0	0 0 1				
0 0 1	−1 0 0	0 0 1	0 −1 0				
1 0 0	0 0 −1	0 1 0	1 0 0				
D_{2h}	ISUU= 8	KOSUU= 7NO	1BAN ME				
1 0 0	0 1 0	−1 0 0	0 −1 0	−1 0 0	0 −1 0	1 0 0	0 1 0
0 1 0	1 0 0	0 −1 0	−1 0 0	0 −1 0	−1 0 0	0 1 0	1 0 0
0 0 1	0 0 −1	0 0 1	0 0 −1	0 0 −1	0 0 1	0 0 −1	0 0 1
D_{2h}	ISUU= 8	KOSUU= 7NO	6BAN ME				
1 0 0	0 −1 0	−1/3 2/3 2/3	−2/3 1/3 −2/3	−1 0 0	0 1 0	1/3 −2/3 −2/3	2/3 −1/3 2/3
0 1 0	−1 0 0	2/3 −1/3 2/3	1/3 −2/3 −2/3	0 −1 0	1 0 0	−2/3 1/3 −2/3	−1/3 2/3 2/3
0 0 1	0 0 −1	2/3 2/3 −1/3	−2/3 −2/3 1/3	0 0 −1	0 0 1	−2/3 −2/3 1/3	2/3 2/3 −1/3

確率を，数値計算により求める方法を考える必要がある．これについては別の機会に議論する．

生成された群が何であるかを判定するには位数，固有和，行列式をもちいた．すなわち生成された群の各元の位数を求め，各位数をもつ元の数をかぞえ，位数がどのように構成されているかを比較する．例えば D_{6h} は位数1の元が1個，2の元が15個，3の元が2個，6の元が6個ある（表3）．表2における表現より固有和の構成も求めることができる．表3にあるように -3 の行列が1個，-2 が2個，-1 が7個，0が4個，1が7個，2が2個，3が1個という構成になっている．行列式は $+1$ か -1 であり $+1$ のものが12個ある．位数，固有和，行列式の構成をしらべることにより生成された群が何であるかを判定することができる．

モデルからあきらかなように得られる群はすべて C_{2h} を部分群として持つ（図1）．前述の C_{2h} の13通りの組のうちの一つについて，それを含む群は何かを考えた例を表4に示す．

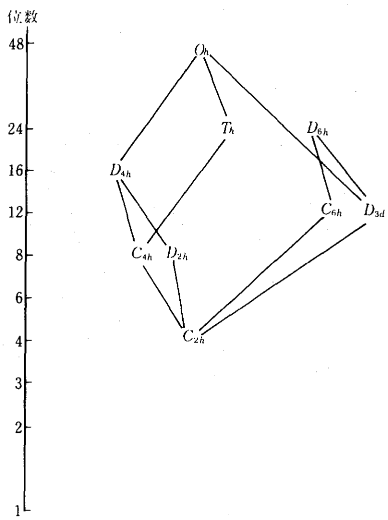

図1．C_{2h} を部分群としてもつ点群の対称の高低関係 ——で結ばれている場合下の群は上の群の部分群である。

以上のモデルにおいてPoisson分布の期待値を1として計算機シミュレーションを行った結果と実際のデータを比較したのが表6である．5000回実験を行った結果を表5に示す．いちばん下の段にある2202は可能な積が閉じなかった場合の回数である．これをのぞいた場合について1000分率を考えデータと比較した結果が表6である．対称操作がランダムに加ったというモデルで各点群の得られる確率はどうなるかということは興味ある問題であり本論文はそれについてのひとつのこころみである．

表5．群の生成されやすさ

O_h	1202
T_h	182
D_{6h}	254
D_{4h}	367
C_{6h}	22
D_{3d}	369
C_{4h}	32
D_{2h}	219
C_{2h}	151
閉じない場合	2202
計	5000

表6．1000分率による比較

	シミュレーション	データ
O_h	430	460
T_h	65	61
D_{6h}	91	67
D_{4h}	131	146
C_{6h}	8	26
D_{3d}	132	170
C_{4h}	11	0
D_{2h}	78	61
C_{2h}	54	61
計	1000	998

謝 辞

Nowacki, Matsumoto and Edenharter の研究をお教えいただいた東京大学理学部の武田弘教授に感謝する.

計算機プログラムの作成に御協力いただいた掛川由里さん，三好順子さんに感謝する.

本研究の一部は「幾何学的構造・空間パターンと統計」(統計数理研究所 60-共会-13)及び「幾何学的構造の確率模型」(統計数理研究所 60-共研-2) によるものである.

参 考 文 献

浅野啓三，永尾 汎 (1965). 群論，岩波書店，東京.

Hilbert, D. und Cohn-Vossen, S. (1932). Anshauliche Geometrie, Verlag von Julius Springer, Berlin. (芹沢正三訳 (1960) 直観幾何学，みすず書房，東京.)

Itoh, Y. (1979). Random collision models in oriented graphs, *J. Appl. Prob.* **16**, 36-44.

伊藤栄明 (1985). 群，グラフを値としてとる確率分布，統計数理，**33**, 68-70.

伊藤栄明 (1986). 幾何学的対称性の統計的分布，昭和60年度研究発表会要旨，統計数理研究所.

仁田 勇 (監修) (1959). X線結晶学，上，丸善，東京.

Nowacki, W., Matsumoto, T., and Edenharter, A. (1967). Classification of crystalline substances by crystal systems, crystal classes, Bravais lattices and space groups, *Acta Cryst.,* **22**, 935-940.

Statistical Distribution on Symmetry Groups

Yoshiaki Itoh
(The Institute of Statistical Mathematics)

Group theory is successfully applied to analysis of crystal structure. The symmetry of a crystalline substance is represented by one of the 32 point groups. In this note a stochastic model is introduced for the distribution of crystalline substances among the 32 point groups. Consider a point group X, and take possible symmetry operations, which can be added to the X, at random. Assume the number of operations is given by Poisson distribution. Add the operations to the X and we get a point group generated by the operations and the X. A simulation study is carried out by the model to compare the result with the data of the distribution of crystalline substances.