ド解析への応用を行った.

半径1の球面を，球帽（球面上の円）でランダムに充塡するときの充塡率（球帽の数の最密充塡数に対する比）を，数値シミュレーションによって求めた．最密充塡数が2から32までについて結果を求めたが，最密充塡数が10を越えると，平面の場合の充塡率である0.603に近づくことがわかった．次に，球面上に初期に与えた乱雑な点配置から，適切に設定した調節モデルを用いて，最終的な点配置をもとめた．その結果，各点のボロノイ多角形は，平均として6角形であり，5角形や7角形が少し混ざるようなパターンが得られた．点の数が11～50の範囲で，調節モデルの結果として，最適点配置を求めた．それによれば，12個の場合は正12面体に，32個の場合は炭素の化合物C_{60}に類似のパターンに収束することが示された．その他の場合は，多少の不規則性が残った．

水中に中立浮遊させた半径約1.5 cmの球形油滴に，細い棒を接触させて振動する外力を与え，共鳴して生じた基準振動を観察した．1箇所で刺激した場合，振動モードは単一の球面調和関数で表わすことができ，基準振動数の値は流体力学的に求めた理論値とよく一致した．2箇所で刺激した場合，正多面体の構造を持つ基準振動が現れる傾向がみられた．正多面体の形が，球面調和関数の重ね合わせで表現できることを示した．共鳴振動数の実験値は，理論値とだいたい一致した．正多面体の構造が出やすいということは，上に述べた数値シミュレーションで，12個の点の最適配置がどんな初期条件から出発しても，正12面体に落ちつくことに対応していると思われる．

3-共研-38　結晶の対称性のランダム生成モデル

統計数理研究所　伊藤栄明

(1)　結晶の空間群の出現頻度について統計的研究を行うには種の定義が重要である．データベースICSDを用いてこれを行い，計算機により自動的に頻度が得られるようにした．2種類の結晶の間に距離を定義し，相互の距離がある値d以上はなれていれば別の種であるとする．ICSD内での順番にしたがい，種を逐次定義してゆく．すなわちn個の種がすでに定義されたとすれば，すでに定義されたn個の種よりd以上はなれているものがあらわれたときに$n+1$個目の種であると定義する．得られた種について対称性の統計的分布を点群，空間群について整理し，ランダムに群を生成するシミュレーションの結果をこれと比較した．

たとえばC_{2h}という点群で記述される構造を，最密充塡構造がある方向にゆがんだものであるととらえるとした場合，もとの最密充塡構造を推定するという問題にとりくんだ．これは結晶の対称性の統計的分布を説明する統計モデルをより具体的なものとするために必要である．

(2)　楕円体の最密パッキングの問題について解決した．$p31m$充塡系について数式処理ソフトウェアREDUCEを用いて最密充塡密度をもとめることができた．もう一つの最密充塡系$p3$について最密充塡密度をもとめた．これらについて楕円の最密充塡密度を与えるのは長軸と短軸が等しい場合すなわち円の場合のみであることを示した．これらの問題は数式の計算が複雑であり数十年前に進展がとまっていたが，この方法により解ける問題がおおきくひろがった．