名古屋工業大学大学院 「結晶構造解析特論」

担当：井田隆（名工大セラ研）

2012年11月13日(火) 更新

付録　7.A　確率 P_m^0 , P_m^+ , P_m^- の導出

7.A.1　P_m^0 についての漸化式の導出

変形型積層不整が出現する確率を α としたときの， P_m^0 の値を求めます。第ゼロ層は A 層だとします。第 m 層が A 層になるのは以下の４通りの場合しかありません。

$$
\begin{array}{cccccc}
0 & & m-2 & m-1 & m \\
A & \cdots & A & B & A \\
A & \cdots & A & C & A \\
A & \cdots & B & C & A \\
A & \cdots & C & B & A
\end{array}
$$

「A のつぎに B」,「B のつぎに C」,「C のつぎに A」が来る確率はいずれも $(1-\alpha)$ で，「A のつぎに C」,「B のつぎに A」,「C のつぎに B」が来る確率はいずれも α です。したがって，第 $(m-2)$ 層と第 m 層の関係から

$$
\begin{aligned}
P_m^0 &= P_{m-2}^0(1-\alpha)\alpha + P_{m-2}^0\alpha(1-\alpha) + P_{m-2}^+(1-\alpha)^2 + P_{m-2}^-\alpha^2 \\
&= 2P_{m-2}^0\alpha(1-\alpha) + P_{m-2}^+(1-\alpha)^2 + P_{m-2}^-\alpha^2
\end{aligned}
\tag{7.A.1}
$$

となります。また，第 $(m-2)$ 層と第 $(m-1)$ 層の関係から

$$P_{m-1}^0 = P_{m-2}^+\alpha + P_{m-2}^-(1-\alpha) \tag{7.A.2}$$

となること，さらに確率の和が１になるという関係

$$P_{m-2}^0 + P_{m-2}^+ + P_{m-2}^- = 1 \tag{7.A.3}$$

とを使えば，式 (7.A.1) から P_{m-2}^+ と P_{m-2}^- とを消去して， P_m^0 , P_{m-1}^0 , P_{m-2}^0 の間の関係を表す式を導くことができるはずです。

はじめに，式 (7.A.3) を P_{m-2}^+ について解いて，

$$P_{m-2}^+ = 1 - P_{m-2}^0 - P_{m-2}^- \tag{7.A.4}$$

これを式 (7.A.2) に代入して，

$$P_{m-1}^0 = \left(1 - P_{m-2}^0 - P_{m-2}^-\right)\alpha + P_{m-2}^-(1-\alpha) = \alpha - P_{m-2}^0\alpha + P_{m-2}^-(1-2\alpha) \tag{7.A.5}$$

これを P_{m-2}^- について解いて

$$P_{m-2}^- = \frac{-\alpha + P_{m-1}^0 + P_{m-2}^0\alpha}{1-2\alpha} \tag{7.A.6}$$

これを式 (7.A.4) に代入すれば

$$P_{m-2}^{+} = 1 - P_{m-2}^{0} - \frac{-\alpha + P_{m-1}^{0} + P_{m-2}^{0}\alpha}{1-2\alpha} = \frac{1-2\alpha - P_{m-2}^{0}\left(1-2\alpha\right) + \alpha - P_{m-1}^{0} - P_{m-2}^{0}\alpha}{1-2\alpha}$$

$$= \frac{1-\alpha - P_{m-1}^{0} - P_{m-2}^{0}\left(1-\alpha\right)}{1-2\alpha} \tag{7.A.7}$$

となります。式 (7.A.6) と (7.A.7) を (7.A.1) に代入すれば

$$P_{m}^{0} = 2P_{m-2}^{0}\alpha(1-\alpha) + \frac{1-\alpha - P_{m-1}^{0} - P_{m-2}^{0}\left(1-\alpha\right)}{1-2\alpha}(1-\alpha)^2 + \frac{-\alpha + P_{m-1}^{0} + P_{m-2}^{0}\alpha}{1-2\alpha}\alpha^2$$

$$= 2P_{m-2}^{0}\alpha(1-\alpha) + \frac{(1-\alpha)^3 - P_{m-1}^{0}(1-\alpha)^2 - P_{m-2}^{0}(1-\alpha)^3 - \alpha^3 + P_{m-1}^{0}\alpha^2 + P_{m-2}^{0}\alpha^3}{1-2\alpha}$$

$$= 2P_{m-2}^{0}\alpha(1-\alpha) + \frac{\left(1-P_{m-2}^{0}\right)(1-2\alpha)\left[(1-\alpha)^2 + (1-\alpha)\alpha + \alpha^2\right] - P_{m-1}^{0}(1-2\alpha)}{1-2\alpha}$$

$$= 2P_{m-2}^{0}\alpha(1-\alpha) + \left(1-P_{m-2}^{0}\right)\left(1-\alpha+\alpha^2\right) - P_{m-1}^{0}$$

$$= 1-\alpha+\alpha^2 + P_{m-2}^{0}\left(2\alpha - 2\alpha^2 - 1 + \alpha - \alpha^2\right) - P_{m-1}^{0}$$

$$= 1-\alpha(1-\alpha) - P_{m-1}^{0} - P_{m-2}^{0}\left[1-3\alpha(1-\alpha)\right] \tag{7.A.8}$$

この式を変形して，P_{m}^{0}，P_{m-1}^{0}，P_{m-2}^{0} の間の関係式

$$P_{m}^{0} + P_{m-1}^{0} + \left[1-3\alpha(1-\alpha)\right]P_{m-2}^{0} - 1 + \alpha(1-\alpha) = 0 \tag{7.A.9}$$

が導かれます。この式は，数列 $\left\{P_{m}^{0}\right\}$ $\left(m = 0,1,2,\cdots\right)$ の漸化式とみなすことができます。この漸化式を解くことはできるでしょうか？

7.A.2　漸化式の一般的な解法

一般的に

$$a_m + Aa_{m-1} + Ba_{m-2} + C = 0 \tag{7.A.10}$$

の形の漸化式で表される数列 $\left\{a_m\right\}$ は，初期値 a_0 と a_1 が決まれば必ず解くことができて，解は

$$a_m = s_0 + s_+ r_+^m + s_- r_-^m \tag{7.A.11}$$

$$s_0 = -\frac{C}{1+A+B} \tag{7.A.12}$$

$$r_\pm = \frac{-A \pm \sqrt{A^2 - 4B}}{2} \tag{7.A.13}$$

$$s_\pm = \frac{a_1 - a_0 r_\mp - s_0(1-r_\mp)}{r_\pm - r_\mp} \tag{7.A.14}$$

という形になります。以下，このことを導きます。

式 (7.A.10) の

$$a_m + Aa_{m-1} + Ba_{m-2} + C = 0$$

の形を，

$$a_m - r_- a_{m-1} + z - r_+ \left(a_{m-1} - r_- a_{m-2} + z\right) = 0 \tag{7.A.15}$$

と書き直します。ここで，式 (7.A.10) と (7.A.15) を比較すれば

$$r_+ + r_- = -A \tag{7.A.16}$$

$$r_+ r_- = B \tag{7.A.17}$$

$$\left(1 - r_+\right) z = C \tag{7.A.18}$$

という関係が成り立っていれば良いことがわかります。式 (7.A.16) と式 (7.A.17) から， r_+ と r_- は２次方程式 $x^2 + Ax + B = 0$ の解なので，解の公式から式 (7.A.13) が得られます。式 (7.A.18) からは，

$$z = \frac{C}{1 - r_+} \tag{7.A.19}$$

という関係が導かれます。

さて，式 (7.A.15) の形から，数列 $\left\{a_m - r_- a_{m-1} + z\right\}$ は公比 r_+ の等比数列ですから， $m = 1$ のときの値を sr_+ とすれば，初期値について

$$a_1 - r_- a_0 + z = sr_+ \tag{7.A.20}$$

一般的に

$$a_m - r_- a_{m-1} + z = sr_+^m \tag{7.A.21}$$

と書けます。この形は，さらに

$$a_m - s_0 - r_- \left(a_{m-1} - s_0\right) = sr_+^m \tag{7.A.22}$$

という形に変形できます。式 (7.A.22) と (7.A.21) を比較すれば

$$-\left(1 - r_-\right) s_0 = z \tag{7.A.23}$$

となっていれば良いことがわかります。式 (7.A.23) と (7.A.19), (7.A.16), (7.A.17) とから

$$s_0 = -\frac{z}{1 - r_-} = -\frac{C}{(1 - r_-)(1 - r_+)} = -\frac{C}{1 + A + B}$$

となり，式 (7.A.12) の関係が確認できます。式 (7.A.20) と (7.A.23) から

$$s = \frac{a_1 - r_- a_0 + z}{r_+} = \frac{a_1 - r_- a_0 - s_0(1 - r_-)}{r_+} \tag{7.A.24}$$

です。

式 (7.A.22) の両辺を r_+^m で割れば，

$$\frac{a_m - s_0}{r_+^m} - \left(\frac{r_-}{r_+}\right) \frac{a_{m-1} - s_0}{r_+^{m-1}} = s \tag{7.A.25}$$

と書けますが，さらに書き直して

$$\frac{a_m - s_0}{r_+^m} - s_+ - \left(\frac{r_-}{r_+}\right)\left[\frac{a_{m-1} - s_0}{r_+^{m-1}} - s_+\right] = 0 \tag{7.A.26}$$

という形にすることができます。式 (7.A.26) と (7.A.25) を比較すれば

$$\left(1 - \frac{r_-}{r_+}\right)s_+ = s \tag{7.A.27}$$

という関係が成り立っていれば良いことがわかります。式 (7.A.27) と式 (7.A.24) から

$$s_+ = \frac{s}{1 - r_- / r_+} = \frac{a_1 - r_- a_0 - s_0(1 - r_-)}{r_+ - r_-}$$

となって，式 (7.A.14) の s_+ についての形式を確認できます。

式 (7.A.25) から，数列 $\left\{\frac{a_m - s_0}{r_+^m} - s_+\right\}$ は公比 $\left(\frac{r_-}{r_+}\right)$ の等比数列なので， $m = 0$ のときの値を s_- とすれば，初期値について

$$a_0 - s_0 - s_+ = s_- \tag{7.A.28}$$

一般に

$$\frac{a_m - s_0}{r_+^m} - s_+ = s_-\left(\frac{r_-}{r_+}\right)^m \tag{7.A.29}$$

という形になります。式 (7.A.28) と式 (7.A.14) の s_+ についての形式から

$$s_- = a_0 - s_0 - s_+ = a_0 - s_0 - \frac{a_1 - r_- a_0 - s_0(1 - r_-)}{r_+ - r_-}$$

$$= -\frac{a_1 - r_+ a_0 - s_0(1 - r_+)}{r_+ - r_-}$$

となり，式 (7.A.14) の s_- についての形式を確認できます。

式 (7.A.29) に r_+^m をかければ，

$$a_m - s_0 - s_+ r_+^m = s_- r_-^m$$

さらに書き直して式 (7.A.11) の

$$a_m = s_0 + s_+ r_+^m + s_- r_-^m$$

という形式が得られるわけです。

7.A.3　確率 P_m^0 の解

式 (7.A.9) の漸化式

$$P_m^0 + P_{m-1}^0 + \left[1 - 3\alpha(1 - \alpha)\right]P_{m-2}^0 - 1 + \alpha(1 - \alpha) = 0$$

に対して，

$$A=1$$
$$B=1-3\alpha(1-\alpha)$$
$$C=-1+\alpha(1-\alpha)$$

とすれば，前節の結果をそのまま使えます。

式 (7.A.12) から

$$s_0=-\frac{C}{1+A+B}=-\frac{-1+\alpha(1-\alpha)}{1+1+1-3\alpha(1-\alpha)}=\frac{1}{3} \tag{7.A.30}$$

式 (7.A.13) から

$$r_\pm=-\frac{A\pm\sqrt{A^2-4B}}{2}=\frac{-1\pm\sqrt{1-4+12\alpha(1-\alpha)}}{2}=\frac{-1\pm\sqrt{-3(1-4\alpha+4\alpha^2)}}{2}$$
$$=\frac{-1\pm\sqrt{3}(1-2\alpha)i}{2} \tag{7.A.31}$$

式 (7.A.14) と $P_0^0=1$，$P_1^0=0$ の関係を用いれば

$$s_\pm=\frac{P_1^0-P_0^0 r_\mp-s_0(1-r_\mp)}{r_\pm-r_\mp}=\frac{-r_\mp-s_0(1-r_\mp)}{r_\pm-r_\mp}=\frac{-s_0+(-1+s_0)r_\mp}{r_\pm-r_\mp}$$
$$=\frac{-\frac{1}{3}-\frac{-1\mp\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{3}}{\pm\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}=\frac{1}{3} \tag{7.A.32}$$

したがって，式 (7.A.11) から

$$P_m^0=s_0+s_+r_+^m+s_-r_-^m$$
$$=\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\left[\frac{-1+\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2}\right]^m+\frac{1}{3}\left[\frac{-1-\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2}\right]^m \tag{7.A.33}$$

となります。

さらに，$\theta=\arctan\left[\sqrt{3}(1-2\alpha)\right]$ とすれば,

$$\left|\frac{-1\pm\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2}\right|=\frac{\sqrt{1+3(1-2\alpha)^2}}{2}=\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)} \tag{7.A.34}$$

$$\cos\theta=\frac{1}{2\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}} \tag{7.A.35}$$

$$\sin\theta=\frac{\sqrt{3}(1-2\alpha)}{2\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}} \tag{7.A.36}$$

などの関係があり,

$$\frac{-1\pm\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2}=-\frac{1\mp\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2}=-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\,\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\theta} \tag{7.A.37}$$

ですから,

$$P_m^0=\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\right]^m+\frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}\right]^m$$
$$=\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta}\right)$$
$$=\frac{1}{3}+\frac{2}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\cos\left(m\theta\right) \tag{7.A.38}$$
と書くこともできます。

7.A.4　確率 P_m^+ と P_m^- の導出

式 (7.A.7) から

$$P_m^+=\frac{1-\alpha-P_{m+1}^0-P_m^0\left(1-\alpha\right)}{1-2\alpha}$$
ですから，この式に式 (7.A.38) を代入すれば P_m^+ の値が求められるはずです。

$$P_m^+=\frac{1}{1-2\alpha}\left(1-\alpha-\left\{\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^{m+1}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\theta}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m+1)\theta}\right]\right\}\right.$$
$$\left.-\left(1-\alpha\right)\left\{\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta}\right)\right\}\right)$$
$$=\frac{1}{3(1-2\alpha)}\left\{3-3\alpha-1-\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^{m+1}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\theta}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m+1)\theta}\right]\right.$$
$$\left.-1+\alpha-(1-\alpha)\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta}\right)\right\}$$
$$=\frac{1}{3(1-2\alpha)}\left(1-2\alpha-\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\right.$$
$$\left.\times\left\{-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\theta}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m+1)\theta}\right]+(1-\alpha)\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta}\right)\right\}\right)$$
ここで式 (7.A.37) から $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}=\dfrac{1+\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}}$ の関係を使えば

$$=\frac{1}{3(1-2\alpha)}\left(1-2\alpha-\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\left\{\left[-\frac{1+\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2}+1-\alpha\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\left[-\frac{1-\sqrt{3}(1-2\alpha)\mathrm{i}}{2}+1-\alpha\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta}\right\}\right)$$
$$=\frac{1}{3}-\frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\left(\frac{1-\sqrt{3}\,\mathrm{i}}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}+\frac{1+\sqrt{3}\,\mathrm{i}}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta}\right)$$
$$=\frac{1}{3}-\frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)}\right]^m\left[\cos(m\theta)+\sqrt{3}\sin(m\theta)\right] \tag{7.A.39}$$

となります。

最後に式 (7.A.4) から P_m^- を求めると，

$$
\begin{aligned}
P_m^- &= 1 - P_m^0 - P_m^+ \\
&= 1 - \left\{ \frac{1}{3} + \frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)} \right]^m \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta} \right) \right\} \\
&\quad - \left\{ \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)} \right]^m \left(\frac{1-\sqrt{3}\,\mathrm{i}}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta} + \frac{1+\sqrt{3}\,\mathrm{i}}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta} \right) \right\} \\
&= \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)} \right]^m \left(\frac{1+\sqrt{3}\,\mathrm{i}}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta} + \frac{1-\sqrt{3}\,\mathrm{i}}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta} \right) \\
&= \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\left[-\sqrt{1-3\alpha(1-\alpha)} \right]^m \left[\cos(m\theta) - \sqrt{3}\sin(m\theta) \right]
\end{aligned}
\tag{7.A.40}
$$

となります。