共鳴振動を利用した金属材料の非線形弾性定数評価への取り組み

垂 水 竜 一*

1. は じ め に

単結晶金属材料の持つ共鳴周波数から三次弾性定数(非線形弾性定数)を評価することを目的として，著者等は非線形弾性体に対する二つの共鳴振動理論(非線形共鳴振動理論[1][2]と準線形共鳴振動理論[3])を構築した．本稿ではその成果について紹介したい．理論の基本的な設計方針はRayleigh[4]とRitz[5][6]による線形共鳴振動理論の一般化であり，数学的な基盤としては変分法と群論を用いている．紙面の都合で研究の全てを取り上げることはできないが，一方で，これから金属材料の共鳴振動問題を取り扱う本稿が，通常の金属材料研究紹介とは趣が異なることはよく承知している．そのため，研究の詳細についてはひとまず第3節以降へ先送りとし，次節ではまず著者が本研究に着手した動機について詳しく説明する．なお，本稿で使用する数学的表現の中には必ずしも一般的でないものが含まれている．これは煩雑・冗長な説明を避けるための処置であり，必要に応じて原論文[1]-[3]をご参照頂けば無用な混乱は起こらないと考えるが，この点については予めご了承頂けると幸いである．

2. 研究背景と目的

(1) 弾性理論

1678年のRobert Hookeによるフックの法則の発見以降，弾性理論はBernoulli, Euler, Navier, Cauchyといった巨人達の手でその骨格が建設された．こうした取り組みの一つの到達点は応力の平衡方程式であろう．これは弾性体Ω内では応力テンソルの発散がゼロとする局所化された偏微分方程式で[7]-[10]，ひずみエネルギー密度Wを導入して構成式を確定すると，変位u_iに対する2階の線形偏微分方程式として次のように表される．

$$\frac{\partial^2 W}{\partial u_{i,j}\partial u_{k,l}}\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}=0 \tag{1}$$

この楕円型微分方程式は，$\partial\Omega$上の境界条件を適切に設定することでwell-posedされる．変分法の立場から見ると，式(1)は弾性体の全エネルギー汎関数に対するEuler-Lagrange方程式であり，弾性体に生じる変位はこの汎関数を最小化する関数として特徴付けられる[7]-[10]．前近代に築かれたこうした線形弾性理論(古典弾性理論)の基本的な枠組みが，今日における固体材料の力学特性研究の基盤となっていることは周知の通りである．

20世紀に入ると，Cosserat, Truesdell, Ericksen, Eshelby, Eringen, Ball等によって非古典的な弾性理論の構築が進められる．その流れの中で重視される概念の一つが客観性公理である．いま三次元ユークリッド空間内で立方体領域を占有する弾性体を$\Omega=\{x_i\,|\,0<x_i<1,\ i=1,2,3\}$とする．この弾性体を$x_3$軸を中心に角度$\theta$反時計回りに回転させ，回転後の弾性体を$\Omega^\varphi$，内部座標を$x_i^\varphi$，その勾配を$F_{ij}=\partial x_i^\varphi/\partial x_i$とする．このとき，剛体回転行列$R_{ij}$を用いた一次変換によって$x_i^\varphi=R_{ij}x_j$が成立する．一方，定義より変位は$u_i=x_i^\varphi-x_i$である．したがって，この弾性体に生じるCauchyのひずみテンソルϵ_{ij}は次のように表される．

$$\epsilon_{ij}=\frac{1}{2}(u_{i,j}+u_{j,i})=\begin{pmatrix}\cos\theta-1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta-1 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \tag{2}$$

いまΩは等方体と仮定して構成式を$\sigma_{ij}=\lambda\delta_{ij}\epsilon_{kk}+2\mu\epsilon_{ij}$と表せば，式(2)から導かれる応力テンソル$\sigma_{ij}$はその垂直成分が$\sigma_{11}=\sigma_{22}=2(\lambda+\mu)(\cos\theta-1)$, $\sigma_{33}=2\lambda(\cos\theta-1)$となり，一般にはゼロとならない．すなわち，剛体回転させた弾性体

* 大阪大学准教授；大学院工学研究科(〒565-0871 吹田市山田丘2-1)
Theoretical Foundations of Nonlinear Resonant Ultrasound Spectroscopy; Ryuichi Tarumi(Department of Mechanical Engineering, Osaka University, Suita)
Keywords: *elastic constants, resonant ultrasound spectroscopy, nonlinear elasticity, calculus of variations, Ritz method, quasiharmonic approximation*
2015年5月1日受理[doi:10.2320/materia.54.454]

Ω^{φ}の内部には，本来存在するはずのない応力が発生する．一体何が起きたのだろうか？通常，物理量はそれを観測する座標系によらず不変であることが要請されている(客観性公理)．この例では，座標系ではなく観測対象を相対回転させて問題を簡単化したが，操作の本質は変わらない．この問題は，線形弾性理論の構成式が客観性を欠くことに起因する．線形弾性理論で用いられる無限小変形近似はその処方箋として働くが，本来は構成式の客観性回復を考えるべきであろう．

客観性公理を満足した等方弾性体の構成式の一般形は，Rivlin–Ericksen の表現定理としてまとめられている(7)．しかしながら，金属材料は一般に結晶構造に応じた異方性を有するため，等方体の構成式が本質的な意味で有用なケースは限定的である．異方性を有する金属材料を取り扱う際に都合が良いのは次のひずみエネルギー密度 W である(11)．

$$W=\frac{1}{2}C_{ijkl}E_{ij}E_{kl}+\frac{1}{6}C_{ijklmn}E_{ij}E_{kl}E_{mn}+\mathrm{O}(E_{ij}^{4}) \qquad (3)$$

ここで E_{ij} は次式で表される Green–Lagrange ひずみテンソルである．

$$E_{ij}=\frac{1}{2}(u_{i,j}+u_{j,i}+u_{k,i}u_{k,j}) \qquad (4)$$

式(3)において，C_{ijkl} は二次弾性定数(線形弾性定数)，C_{ijklmn} は三次弾性定数(非線形弾性定数)と呼ばれている．ここで式(3)の右辺第二項は力学的非線形項と呼ばれており，物理的には原子間相互作用の非調和性を表している．一方，式(4)のひずみテンソル E_{ij} は Cauchy のひずみテンソル ϵ_{ij} が幾何学的非線形項 $u_{k,i}u_{k,j}/2$ によって修正されており，これが客観性の回復をもたらしている．式(3)に関連して強調しておきたいのは次の二点である．第一は，このひずみエネルギー密度 W には二つの非線形性(力学的非線形性と幾何学的非線形性)が含まれている点であり，第二は，これらの非線形性は無限小変形近似下では高次微小量として消失し，その結果，従来の線形弾性理論のひずみエネルギー密度 $W^{\mathrm{Lin}}=(1/2)C_{ijkl}\epsilon_{ij}\epsilon_{kl}$ が導かれる点である．この意味で，式(3)は線形弾性理論から非線形弾性理論への自然な拡張と考えられる．

(2) 線形共鳴振動理論

20世紀に差しかかる頃，本稿に関連したもう一つの理論が構築されている．それが Rayleigh と Ritz による線形共鳴振動理論である．Rayleigh は共鳴振動によって弾性体に生じる変位の関数形を仮定し，これを基に計算したひずみエネルギーと運動エネルギーの比(Rayleigh 商)から共鳴周波数を推定した(4)．これに対して，Ritz は未知の変位を既知の完備系関数列で展開し，最小作用の原理(ハミルトンの原理)に基づいてその展開係数を決定する，いわゆる Ritz 法を考案してこの理論を完成させた(5)(6)(Ritz 法を Rayleigh–Ritz 法と呼ぶ文献も存在するが，この方法に Rayleigh の名を冠するのは恐らく適切ではない(12))．

Rayleigh と Ritz が構築した線形共鳴振動理論を用いれば，単結晶金属材料の形状 L_i，密度 ρ，および二次弾性定数 C_{ijkl} を与えることで，その材料の共鳴周波数 ω_i を計算することができる．1970年代に入ると，Demarest がこの理論を応用した新しい二次弾性定数計測法を考案した(13)．これは材料の形状 L_i，密度 ρ，および共鳴周波数 ω_i を実験計測し，得られた ω_i を再現できるよう計算に用いる C_{ijkl} を最適化することで，その材料の持つ全ての独立な C_{ijkl} を決定する方法である．線形共鳴振動理論を逆解析的に応用する Demarest のアイデアは，その後，Ohno, Migliori, Ogi 等の手によって理論・計測法の両面から整備され，今日の超音波共鳴法として確立されている(14)–(18)．超音波共鳴法を用いれば，1つの単結晶材料に対する1度のスペクトル計測から，その材料の持つ全ての独立な C_{ijkl} を高精度に決定することができる．著者の知る限り，超音波共鳴法は現行の C_{ijkl} 計測法の中でも最も優れた方法と考えられる．

(3) 研究目的

著者は，学位取得後は超音波共鳴法を用いた金属・セラミックス材料の C_{ijkl} 計測を進めてきたが，次第に線形共鳴振動理論の抱える原理的な問題が顕在化し，それを無視できなくなった．それは，上記の二つの非線形性に関連した次の問題である．

[1] 線形共鳴振動理論では，構成式に線形弾性理論を用いている．したがって，この理論が描く共鳴振動現象は客観性公理を満たしていない．客観性公理の成否は物理学の原理・原則に関わる本質的な問題である．それでは，構成式に幾何学的非線形項を取り入れて客観性公理を回復させた本来の共鳴振動現象には，従来の線形理論では見落とされてきた本質的な相違点が現れるだろうか？

[2] 本来，固体材料の共鳴振動には僅かながらも非線形効果が含まれている．そのため，共鳴周波数を高精度に計測・逆解析すれば，原理的には三次弾性定数 C_{ijklmn} の計測も可能である．それにも関わらず，現行の超音波共鳴法の計測対象が二次弾性定数 C_{ijkl} に限られているのは，構成式に力学的非線形項が含まれないことによる．それでは，共鳴周波数から C_{ijklmn} を評価するためには，従来の理論をどのように修正すれば良いのだろうか？

従来の線形共鳴振動理論の構成式に二つの非線形性を取り入れ，これを非線形弾性体の共鳴振動理論として一般化することは，上記の二つの問題に答える唯一の方法と思われた．これが，著者が本研究に着手した動機である．結果的に二つの理論(非線形共鳴振動理論(1)(2)と準線形共鳴振動理論(3))を構築したが，前者が問題[1]に対する，そして後者が問題[2]に対する著者なりの回答である．

3. 非線形共鳴振動理論

(1) 基礎理論

簡単のため，本節では参照状態において長方形形状を持った一様な二次元 St. Venant–Kirchhoff 型弾性体 $\Omega=\{x_i|-L_i<x_i<L_i, i=1,2\}$を考える．この弾性体の構成式は，式(3)のひずみエネルギー密度 W から力学的非線形項を消去し，また二次弾性定数を線形等方弾性体と同じくラメ定数を用い

て $C_{ijkl}=\lambda\delta_{ij}\delta_{kl}+\mu\delta_{ik}\delta_{jl}+\mu\delta_{il}\delta_{jk}$ と表すことで得られる．

いま，共鳴振動によって Ω 内に生じる変位を $u_i=u_i(x_i, t)$ とおけば，運動エネルギー密度 T は次のように書くことができる．

$$T=\frac{1}{2}\rho(u_{1,t}^2+u_{2,t}^2) \tag{5}$$

これにより Ω のラグランジアン密度 $L=T-W$ が確定する．次に，ω を任意の実数として長さ不定の時間領域 $t\in(0, 2\pi/\omega)$ を設定し，L を領域 $\Omega\times(0, 2\pi/\omega)$ 上で積分すれば，この弾性体の作用積分は変位 u_i の汎関数 $I[u_i]$ として次のように表すことができる．

$$I[u_i]=\int_0^{2\pi/\omega}\int_\Omega L\,dV\,dt \tag{6}$$

ここで解析対象の弾性体は最小作用の原理を満たすため，まず作用汎関数 $I[u_i]$ の第一変分から Euler–Lagrange 方程式と自然な境界条件を導出し，解(変位 u_i)の持つ基本的な性質を明らかにする．このためには式(6)の第一変分が必要となるが，この計算の際には時間領域が不定であることに注意が必要である．すなわち，この問題は可変領域上で定義された変分問題であり，第一変分の計算には従属変数 u_i と独立変数 t を同時に微小変換する必要がある．すなわち，

$$t\to t+\alpha\varphi+o(\alpha), \tag{7}$$

$$u_i\to u_i+\alpha\,\psi_i(x_i, t, u_i, u_{i,j})+o(\alpha) \tag{8}$$

ここで φ は任意の定数，$\psi_i=\psi_i(x_i, t, u_i, u_{i,j})$ は任意の関数であり，α は微小な任意定数である．この変換により得られる $I[u_i]$ の第一変分 δI は次のようにまとめられる[19]．

$$\delta I=-\int_0^{2\pi/\omega}\int_\Omega\left[\left(\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial u_{i,t}}+\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial L}{\partial u_{i,j}}\right)\bar{\psi}_i-\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}}\left(\frac{\partial L}{\partial u_{i,t}}\bar{\psi}_i+L\varphi\right)\right.$$
$$\left.-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial L}{\partial u_{i,t}}\bar{\psi}_i\right)\right]dV\,dt \tag{9}$$

ここで $\bar{\psi}_i=\psi_i-u_{i,t}\varphi$ である．次に最小作用の原理に従って停留条件 $\delta I=0$ を課すと，その必要条件から次の Euler–Lagrange 方程式が導かれる．

$$\rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}-\frac{\partial^2 W}{\partial u_{i,j}\partial u_{k,l}}\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_l\partial x_j}=0 \tag{10}$$

いま共鳴振動による変位 u_i は十分小さいと仮定すると，係数テンソル $\partial^2 W/\partial u_{i,j}\partial u_{k,l}$ は強楕円条件[7]–[10]を満足し，したがって式(10)は非線形の波動方程式を与える．一方，時間軸上の自然な境界条件として次の結果が導かれる．

$$u_{1,t}|_{t=0}=u_{2,t}|_{t=2\pi/\omega}=0 \tag{11}$$

$$L|_{t=0}=L|_{t=2\pi/\omega}=0 \tag{12}$$

式(11)は Ω 内の変位速度が時間領域の両端で消失することを意味している．これと波動方程式の持つ基本的な性質から，解は $t=0$ を中心とした時間反転対称性を持つと考えられる．一方，式(12)からは解の時間周期性が要請される．さらに，空間方向に対する自然な境界条件から，弾性体の表面 $\partial\Omega$ 上では Piola–Kirchhoff の応力ベクトルが消失する．これが共鳴振動変位 u_i が満たすべき条件である．

(2) Ritz 法による数値計算

式(10)で表された非線形波動方程式の解を求めるためには，上記の自然な境界条件に加えて変位の初期条件も必要となるが，これは不明で事前に与えることはできない．そこで本研究では，Ritz 法に基づく直接解法によってこの変分問題を数値的に解く．まず自然な境界条件より，Ω 内に生じる変位は時刻 $t=0$ に対する時間反転対称性と，$\Delta t=2\pi/\omega$ なる時間周期性を備えた定在波と考えられるため，本研究では変位 u_i を次の形式で展開する．

$$u_1=\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N}a_{1,m,n}\phi_1(x_1, x_2, m)\cos(n\omega t) \tag{13}$$

$$u_2=\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N}a_{2,m,n}\phi_2(x_1, x_2, m)\cos(n\omega t) \tag{14}$$

ここで ϕ_1 と ϕ_2 は離散的なフーリエ級数によって構成されており，$a_{i,m,n}$ はその未知係数である[1][2]．時間依存項には ω とその整数倍の角振動数を持った余弦関数(同位相)を用いる．このように近似した変位関数を式(6)へ代入して積分を解析的に実行後，停留条件より $\partial I/\partial a_{i,m,n}=0$ を課せば，未知係数 $a_{i,m,n}$ の数と同じ次元の非線形代数方程式が導かれる．更に変位関数の L^2 ノルムを導入して $\|u_i\|_{L^2}=\mathrm{const.}$ と束縛すれば，方程式系が閉じる．

こうして導かれた非線形代数方程式を解析的に解くことは困難である．そこで，まずひずみエネルギー密度 W を線形化して問題を従来の線形共鳴振動理論に一致させ，解くべき代数方程式を線形固有値問題に帰着させる．その結果，固有値(L^2 ノルムに対する未定定数)から共鳴周波数が，対応する固有ベクトルから変位関数の未知係数が求められる．こうして得られた線形解を初期推定値とし，Newton 法による収束計算を用いてこの問題(非線形代数方程式)の解を求めた．なお具体的な数値計算条件は次の通りである：$\rho=1$, $\lambda=1$, $\mu=0.33$, $L_1=1.1$, $L_2=0.9$, $\|u_i\|_{L^2}=0.05$，基底関数の全自由度 $\chi=1{,}568$.

(3) 解析方法：点群と既約表現

線形弾性体の共鳴振動は，群論(点群と既約表現)を用いた対称性解析によってユニークに分類することができる[20]．この背景には，物質の示す巨視的な物性が点群によって記述されることを要請するノイマンの原理(結晶物理学の基本原理)が存在する[21][22]．点群を用いた共鳴振動対称性の解析は本稿において中心的な役割を果たすため，ここではその基本的な考え方について説明したい．

いま解析対象とする弾性体 Ω は長方形形状を持つことから，これを不変に保つ対称操作は，E(恒等操作)，C_2(π 回転操作)，および，σ_x と σ_y(x 面と y 面に対する鏡映操作)の 4 種類であり，その集合は点群 $\mathbb{C}_{2v}=\{E, C_2, \sigma_x, \sigma_y\}$ を構成する[23]．この点群は**表 1** に示すキャラクターテーブルを有しており，ここから A_1, A_2, B_1, B_2 と表される 4 つの既約表現が導かれる．これらの既約表現はそれぞれ異なる射影演算子 P を有しており($P^{A_1}=(E+C_2+\sigma_y+\sigma_x)/4$, $P^{A_2}=(E+C_2-\sigma_y-\sigma_x)/4$ など)，これを式(13)，(14)の変位関数に作用させると，各既約表現の対称性を満たす関数のみが project-out され，その集合が表現の基底を作る．これを線形代数の立場から見ると，基底の一次変換に伴う表現行列の同値変換が，

表 1　点群 $\mathbb{C}_{2v}$ のキャラクターテーブル．

	E	C_2	σ_y	σ_x
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	−1
B_2	1	−1	−1	1

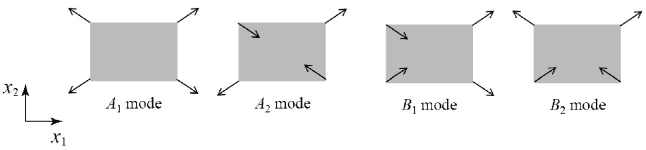


図 1　4 つの既約表現が表す共鳴振動対称性．

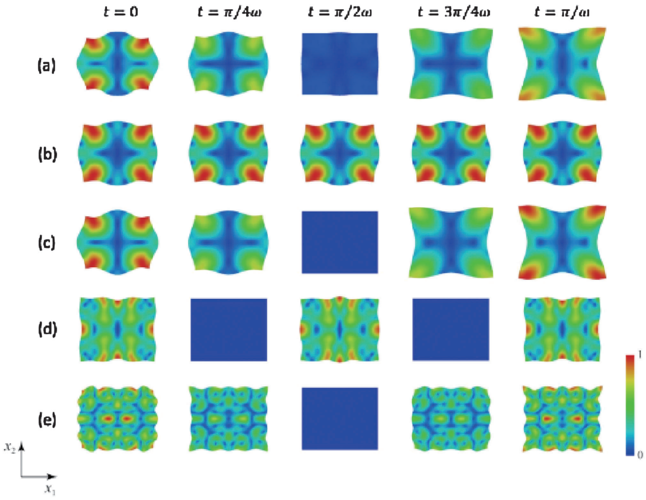


図 2　(a)$A_1'-3$ モードの非線形共鳴振動．(b)～(e)は(a)に含まれる変位成分を表しており，それぞれ角振動数 ω の係数が(b)$n=0$，(c)$n=1$，(d)$n=2$，(e)$n=3$ に対応している．右端のカラースケールは規格化された変位の L^2 ノルム値を表す．

4 つの小行列へのブロック対角化となることを意味している．

図 1 に 4 つの既約表現が表す共鳴振動対称性を模式的に示す．ここで A_1 は共鳴振動によって対称性が低下しない全対称モードと呼ばれており，共鳴振動によって対称性が低下する他の 3 つのモードとは性質が異なっている．A_2 はせん断変形型の振動モードであり，B_1 と B_2 は曲げ変形型の振動モードである．これら 4 つの共鳴振動モードは対応する既約表現が 1 次元であるために縮退がなく，また従来の線形共鳴振動理論ではそれぞれ異なる不変部分空間を張ることから，互いに直交して相互作用はない．

(4)　数値計算結果

図 2 に数値計算によって得られた非線形共鳴振動の一例を示す．ここで図 2(a)は $A_1'-3$ モードを表している．この計算結果は次の過程で求めている．まず従来の線形共鳴振動理論を用いて A_1-3 モード(A_1 対称性の中で共鳴周波数が下から 3 番目のモード)の共鳴周波数と共鳴振動変位を求め，次にこれを初期推定値として非線形連立代数方程式へ代入し，最後にその近傍で Newton 法による収束計算によって求解した．この図では，基準時刻 $t=0$ から半周期後までの振動パターンを示しているが，残る半周期は $t=0$ に対する時間反転より直ちに導かれる．図中の(a)は非線形共鳴振動を表しているが，式(13)，(14)より明らかなように，この変位には角振動数の異なる 4 種類の変位成分($n=0$～3)が含まれている．そこで，これらの成分を n 値に応じて書き出したものが同図の(b)～(e)である．換言すると，(b)～(e)の総和が(a)である(変位の表示倍率は n 値毎に適宜調整している)．図において，(c)は(a)に含まれる $n=1$ の調和振動成分を表すが，この振動形状と(a)の非線形振動の形状が類似していることから，この非線形共鳴振動では調和振動成分が支配的である．(b)$n=0$ の静止成分と(d)$n=2$ の二次高調和成分，および(e)$n=3$ の三次高調和成分は何れも弾性体の非線形性によって生じており，従来の線形共鳴振動理論では現れない本質的な相違点である．次に共鳴振動対称性について考える．図より明らかなように，(b)～(e)の各成分は全ての時刻で A_1 対称性を有しており，したがってその重ね合わせの(a)もまた全時刻で A_1 対称性を持っている．この結果は，従来の点群と既約表現に基づく対称性の予測結果と完全に一致しており，また解析を行った他の全ての A_1' 系モードについても成立している．

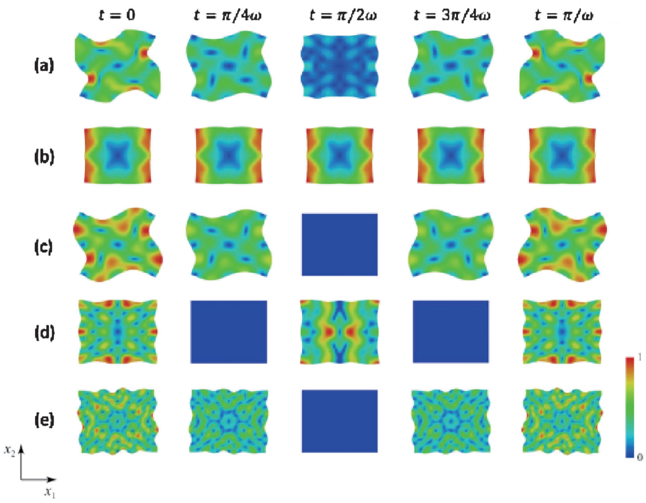


図 3　(a)$A_2'-3$ モードの非線形共鳴振動．(b)～(e)は(a)に含まれる変位成分を表しており，それぞれ角振動数 ω の係数が(b)$n=0$，(c)$n=1$，(d)$n=2$，(e)$n=3$ に対応している．右端のカラースケールは規格化された変位の L^2 ノルム値を表す．

同様の解析を $A_2'-3$ モードに対して行った結果を**図 3** に示す．ここで図(a)～(e)は図 2 と同様の意味を有している．図を見ると，(a)に示された非線形共鳴振動は(c)に示された $n=1$ の調和振動成分に類似しており，したがってこのモードでも調和振動成分が支配的である．次に振動対称性について考えると，n が奇数となる(c)$n=1$ と(e)$n=3$ につい

ては，ほぼ全ての時刻において A_2 対称性を持つことが確認できるが，時刻 $t=\pi/2\omega$ では何れも共鳴振動変位が消失し，例外的に A_1 対称性が現れている．一方で，驚くべきことに，n が偶数となる(b)$n=0$ と(d)$n=2$ の変位成分を見ると，その対称性は全時刻で A_1 であり，A_2 対称性は現れない．すなわち，$A_2'-3$ モードの非線形共鳴振動には，A_2 対称性と A_1 対称性という二つの異なる対称性(既約表現)が含まれており，その選択は n 値のパリティ(偶奇性)に依存している．無論，これらの結果は，解析を行った全ての A_2' 系モードについて成立している．また，同様の解析を B_1' 系モードおよび B_2' 系モードに対して行った結果，A_2' 系モードと本質的に同様の傾向が確認された．すなわち，n が奇数のときには線形共鳴振動と同一の振動対称性が現れ(B_1' 系では B_1 対称性，B_2' 系では B_2 対称性)，逆に n 値が偶数のときには何れも A_1 対称性が現れる(1)(2)．

(5) 考察：磁性点群とカラー対称性

従来の線形共鳴振動理論では $n=1$ の調和振動のみが発現し，その対称性は点群 $\mathbb{C}_{2v}$ が持つ4つの既約表現によって分類されてきた(この解析法では，時刻 $t=\pi/2\omega$ で瞬間的に A_1 対称性が現れる点については説明できない)．これに対して，本研究で得られた非線形弾性体の共鳴振動変位には，$n=0$ の静止成分と，$n=2, 3$ の高調和成分が含まれている．さらに，A_2' 系，B_1' 系および B_2' 系モードでは，非調和成分の対称性が n 値に応じて交代出現している．これらの結果は，点群と既約表現に基づく従来の解析法では説明することができない．この，まるでパズルのような共鳴振動対称性は，どのように理解すれば良いのだろうか？著者はこの問題を次の過程で考察した．まず非線形共鳴振動モードの計算結果とノイマン原理との整合性について考える．先述の通り，この原理は共鳴振動対称性が点群の枠組み内で記述されることを要請するが，本研究の計算結果は次の理由でこの原理には違反していない．上記のように，A_1 対称性は全対称とも呼ばれており，それ自体は弾性体の持つ点群対称性を変化(低下)させない．そのため，例えば図3では A_2 対称性と A_1 対称性が同時に現れるが，両者を重ね合わせた非線形共鳴振動は A_2 対称性を有しており，これは従来の既約表現に従っている．B_1' 系および B_2' 系モードについても同様の状況が成り立っており，図2については全ての変位成分が A_1 対称性を有している．

この考察は，従来の解析方法は最も根本的な意味では誤っておらず，むしろ何らかの意味で不完全であることを示唆している．次にこの不完全性の起源について考えると，それはほぼ自明で，問題は時間軸上での対称操作の不足にある．先述の通り，n 値のパリティは変位の時間依存性に関する性質である．一方，点群 $\mathbb{C}_{2v}$ の元は空間軸に対する対称操作のみから構成され，時間軸上の対称操作は含まない．位置 x_i と時間 t が変位 u_i に対して互いに独立な変数である以上，点群 $\mathbb{C}_{2v}$ から解の時間依存性に関する情報を直接引き出すことはできない．最後に，この現象を数値計算結果から考えると，現象の説明に必要な群は，A_1' 系モードと他の3系統のモードを本質的に区別する必要があり，さらに後者については，n 値に応じて変化する二種類の射影演算子を持つことが必要となる．

これらを手掛かりとして既存の群を調べた結果，たどり着いたのが磁性点群である(24)．磁性点群は，従来の点群に時間反転演算子 $\hat{T}$ を導入して一般化した群の概念である．いま弾性体が属する点群 $\mathbb{C}_{2v}$ を位数2で剰余類分解し，次に時間反転演算子 $\hat{T}$ を E を含まない部分群にかけて両者の和を取ると，次に示す3種類の群が導かれる．

$$\mathbb{C}_{2v}(\mathbb{C}_2)=\{E, C_2\}+\hat{T}\{\sigma_x, \sigma_y\}, \tag{15}$$

$$\mathbb{C}_{2v}(\mathbb{C}_x)=\{E, \sigma_x\}+\hat{T}\{C_2, \sigma_y\}, \tag{16}$$

$$\mathbb{C}_{2v}(\mathbb{C}_y)=\{E, \sigma_y\}+\hat{T}\{C_2, \sigma_x\}, \tag{17}$$

これらはいずれも二色(白色と黒色)の磁性点群と呼ばれており，$\hat{T}\{\cdot, \cdot\}$によって表された対称操作はカラー対称性と呼ばれている．これに対して，従来の点群 $\mathbb{C}_{2v}$ は磁性点群の表記法を用いると

$$\mathbb{C}_{2v}(\mathbb{C}_{2v})=\{E, C_2, \sigma_x, \sigma_y\} \tag{18}$$

と表される．これは単色(白色か黒色)の磁性点群と呼ばれており，式(15)～(17)に示された二色の磁性点群とは明示的に区別されている．

次に時間反転演算子 $\hat{T}$ の役割を定める．図4に本解析で用いた共鳴振動変位の時間依存性を示す．作用汎関数に対する自然な境界条件から，$n=1$～3で表される3つの余弦関数は全て同位相である．そのため，共鳴振動変位は時刻 $t=0$ に対する時間反転対称性を有しており，したがって $\hat{T}$ の時間反転軸を $t=0$ としても有意な結果は得られない．そこで改めて図4を眺めると，従来の解析法で不備のあった時刻 $t=\pi/2\omega$ (図中の $t=0.25$)が興味深い特徴を持つことに気付く．この時刻では n が奇数の余弦関数は値が消失するため，ここを中心に時間を反転させると振幅もまた反転する．これに対して，n が偶数の余弦関数はこの時刻で最大振幅を取っており，ここを中心に時間を反転させても振幅は不変である．そこで，演算子 $\hat{T}$ の時間反転軸を $t=\pi/2\omega$ と設定すれば，その役割は n 値に応じて次のように変化する．

$$\hat{T}=\begin{cases} 1 & : n=\text{偶数}(n=0, 2) \\ -1 & : n=\text{奇数}(n=1, 3) \end{cases}, \tag{19}$$

このように定義した時間反転演算子 $\hat{T}$ を用いて磁性点群 $\mathbb{C}_{2v}$

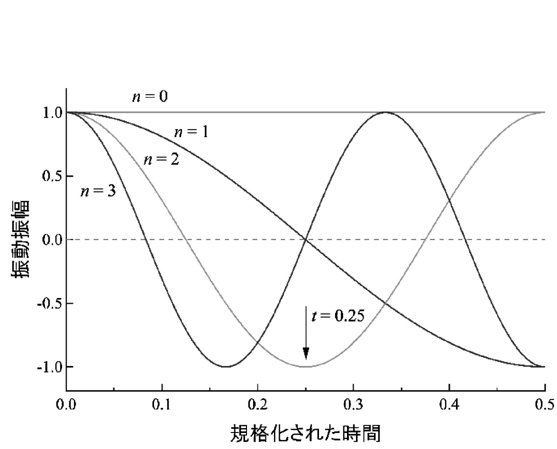


図4　共鳴振動変位に用いられる4つの余弦関数の時間変化．

$(\mathbb{C}_2)$の射影演算子を考えると，n が奇数の変位関数に対しては $P^{\mathrm{Odd}}=(E+C_2-\sigma_x-\sigma_y)/4$ となって既約表現 A_2 の射影演算子が得られるのに対して，n が偶数の変位関数に対しては $P^{\mathrm{Even}}=(E+C_2+\sigma_x+\sigma_y)/4$ となって既約表現 A_1 の射影演算子が導かれる．この結果は，非線形共鳴振動の対称性が n 値のパリティに応じて二つの既約表現(A_2 と A_1)を持つことを意味している．換言すると，カラー対称性を備えた二色の磁性点群 $\mathbb{C}_{2\mathrm{v}}(\mathbb{C}_2)$は，$\mathrm{A}_2'$ 系モード(図3)に対する数値計算結果を説明することができる．

全く同様の解析は，磁性点群 $\mathbb{C}_{2\mathrm{v}}(\mathbb{C}_\mathrm{x})$，および $\mathbb{C}_{2\mathrm{v}}(\mathbb{C}_\mathrm{y})$についても成立しており，これらの磁性点群から得られた射影演算子は，それぞれ B_1' 系および B_2' 系モードに対する数値計算結果を説明することができる．一方，式(18)で表された単色の磁性点群 $\mathbb{C}_{2\mathrm{v}}(\mathbb{C}_{2\mathrm{v}})$は時間反転演算子 $\hat{T}$ を含まないため，その射影演算子は n 値によらず常に $P=(E+C_2+\sigma_x+\sigma_y)/4$ である．この結果，共鳴振動は n値のパリティによらず常に A_1 対称性を持つことになる．このように A_1' 系モードの特殊性は，磁性点群 $\mathbb{C}_{2\mathrm{v}}(\mathbb{C}_{2\mathrm{v}})$の単色性と，他の三つの磁性点群の二色性の差として自然に説明できる．無論，上記の解析結果は変位成分を $n=1$ のみに限定した場合についても成立しており，この意味で磁性点群を用いた解析法は，点群・既約表現による従来の解析法を包含している．さらに付け加えると，時刻 $t=\pi/2\omega$ では時間反転演算子 $\hat{T}$ は常に恒等操作を表すため，この時刻では全ての磁性点群において n 値によらず常に $\hat{T}=1$ となる．その結果，この時刻における射影演算子は全ての振動モードで A_1 対称性となり，従来理論の不備(時刻 $t=\pi/2\omega$ で瞬間的に A_1 対称性が現れる)についても補完することができる．

(6) 検証：分子振動の **Acoustic Overtone** モデル

式(15)～(18)に示した4種類の磁性点群を用いれば，非線形共鳴振動の対称性を矛盾なく説明できるが，その妥当性については客観的な検証が必須である．本研究では，この検証に既存の分子振動理論を用いることにした．点群と既約表現を用いた解析は様々な分野で利用されているが，分子振動解析はその代表例の一つである．詳細は省略するが，この研究分野では量子力学的な摂動理論に基づいた非線形の分子振動解析モデル(Acoustic Overtone モデル)が構築されている[25]．本稿では，このモデルから導かれる非線形分子振動の対称性を，著者等の磁性点群による対称性の予測結果と比較したい．

いま点群 $\mathbb{C}_{2\mathrm{v}}$ に属する分子を考え，その内部では周波数 ω を持つ A_2 対称性のフォノンが励起されていると仮定する．このフォノンの振動振幅を増大させると，非線形分子振動モード(Overtone モード)が励起されるが，Acoustic Overtone モデルによると，その周波数は ω の和(2ω)で，対称性は既約表現の直積$(\Gamma_\omega\otimes\Gamma_\omega)$として表される．これを表1を用いて計算すると，$\Gamma_\omega\otimes\Gamma_\omega=1_E+1_{C_2}+1_{\sigma_x}+1_{\sigma_y}$ となって A_1 対称性が現れる．さらに解析を進めて三次の Overtone モードについて考えると，その周波数は 3ω，対称性は $\Gamma_\omega\otimes\Gamma_\omega\otimes\Gamma_\omega=1_E+1_{C_2}-1_{\sigma_x}-1_{\sigma_y}$ となってもとの A_2 対称性へ戻る．この操作は繰り返し続けることができるが，結果は二つの対称性の交代出現となる．すなわち，奇数次の Overtone モードでは ω の係数が奇数で対称性は A_2 となり，偶数時の Overtone モードでは ω の係数が偶数で対称性は A_1 となる．全く同様の解析は B_1 対称性と B_2 対称性を持つフォノンから出発しても成立する．一方，A_1 対称性から出発すると直積は $\Gamma_\omega\otimes\Gamma_\omega=(1_E+1_{C_2}+1_{\sigma_x}+1_{\sigma_y})$となり，Overtone モードの対称性は ω の係数に依らず常に A_1 である．これより明らかなように，Acoustic Overtone モデルを用いた非線形分子振動の対称性解析結果は，著者等の磁性点群に基づく解析結果と完全に一致する．この結果は，非線形共鳴振動理論と磁性点群によるその解析法の妥当性を裏付けるとともに，非線形分子振動現象の解析に磁性点群が有効であることを示唆している．

5. 準線形共鳴振動理論

(1) 基礎理論

上記の非線形共鳴振動理論では，金属材料の共鳴周波数が振動振幅依存性を持つことを予測しており[1]，これを計測・逆解析すれば，原理的には全ての三次の弾性定数を決定することができる．しかしながら，実験で得られる共鳴周波数の振動振幅依存性は極めて微小であり，またこの理論は数値計算コストが高いため解析対象は二次元・等方弾性体に限定されている．そこで研究戦略を変更し，新しく作り直したものが準線形共鳴振動理論である[3]．この理論では，弾性体には外部から一様な静水圧が負荷されることを想定し，これによって生じる共鳴周波数の圧力依存性を計測・逆解析することで，三次弾性定数を求めることを基本戦略としている(実際，高圧下での共鳴周波数計測は可能である[26][27])．

いま弾性体は $\Omega=\{x_i|-L_i<x_i<L_i,\ i=1,2,3\}$なる直方体形状を持ち，そのひずみエネルギー密度は式(3)で表されるとする．また，外部静水圧のポテンシャルエネルギーには Dead Load 条件を課し，全エネルギー汎関数を次のように修正する．

$$W[u_i]=\int_\Omega W\,dV-\int_{\partial\Omega}\langle g_i,u_i\rangle dA \tag{20}$$

ここで$\langle g_i,u_i\rangle$は外力ベクトル g_i と変位 u_i の内積を表しており，その表面 $\partial\Omega$ 上での積分が外力のポテンシャルエネルギー変化となる．この修正項を発散定理を用いて体積積分に変換すれば，この弾性体の作用汎関数(式(6))には外力の効果 $g\,\mathrm{div}\,u_i$ が null Lagrangian として追加される．

(2) **Ritz** 法に基づく数値解析

準線形共鳴振動理論では，その数値解析において様々な工夫を施しているが[3]，ここでは計算コストの大幅な削減につながった変位関数の展開方法についてのみ説明する．この理論では，弾性体に生じる変位は角振動数 ω の調和振動と，外部静水圧によって生じる静的で一様な変位のみに限定し，変位関数を次の形式で近似する．

$$u_i=\alpha x_i+\sum_{s=1}^{S} a_{i,s}\phi_s(x_1,x_2,x_3)\cos\omega t \tag{21}$$

ここで右辺第一項が一様変位，第二項が調和振動項である．αは弾性体に生じる圧縮率に相当する．α値は外部静水圧g_iと体積弾性率Bによって定まるが，αとg_iの同時指定は構成式への干渉となるため，αは調和振動の係数$a_{i,s}$と同様に未知数とする．ϕ_sは完備系関数列を表すが，本研究では共鳴周波数の計算精度が高い次のルジャンドル多項式を用いる．

$$\phi_s=\frac{1}{\sqrt{L_1L_2L_3}}\bar{P}_{k_s}\left(\frac{x_1}{L_1}\right)\bar{P}_{l_s}\left(\frac{x_2}{L_2}\right)\bar{P}_{m_s}\left(\frac{x_3}{L_3}\right), \tag{22}$$

$$\bar{P}_s(x)=\sqrt{\frac{2s+1}{2}}\frac{1}{2^s s!}\frac{d^s}{dx^s}(x^2-1)^s. \tag{23}$$

式(21)で表された変位では，一様な体積変化項と調和振動項が非線形相互作用を起こし，その結果，共鳴周波数ωがαに比例して(すなわち外部静水圧g_iに比例して)変化する．無論，$g_i=0$で得られる共鳴周波数ωは従来の線形共鳴振動理論のそれと結果と一致しており，この意味で本理論は，従来理論の高圧領域への自然な拡張となっている．

この解析法の持つ二つの特徴について説明しておきたい．第一は共鳴振動対称性である．外力g_iによる一様な体積変化αx_iは全対称であり，これを先の点群$\mathbb{C}_{2v}$を用いて表現すると既約表現はA_1，時間依存性は$n=0$(パリティは偶)である．一方，調和振動項$a_{i,s}\phi_s\cos\omega t$は$A_1$から$B_2$までの4つの既約表現を表現可能であり，その時間依存性は$n=1$(パリティは奇)である．磁性点群に従うと，これら二種類の変位は重ね合って一つの非線形振動モードを作ることができる．第二の特徴は，物性物理学における準調和近似との類似性である．この近似ではフォノンの振動数が体積に依存すると仮定し，その度合いをグリューナイゼン定数によって表現している．弾性体の共鳴振動はフォノンの長波長極限に他ならず，したがって式(21)の変位は準調和近似に相当する．

(3) 数値計算結果とその検証

準線形共鳴振動理論を用いると，直方体形状を有した金属材料のサイズと密度，および二次と三次の弾性定数を設定することで，共鳴周波数とその静水圧依存性を計算することができる．参考のため，Mgの全対称共鳴振動モード(A_g'モード)に対して行った1次～4次まで共鳴周波数の圧力依存性を**図5**(a)に示す(この数値計算条件は次の通りである：$L_1=9.0$, $L_2=10.0$, $L_3=11.0$(mm)，$\rho=1.738$(g/cm^3)，基底関数の自由度は$\chi=8{,}234$，弾性定数は文献(28)を参照)．この結果から明らかなように，共鳴周波数は圧力に対して線形に変化しており，その勾配は共鳴振動モードによって大きく異なる．残念ながら，共鳴周波数の圧力依存性が実験的に計測された材料は少なく，それを用いて本計算結果の定量的な検証を行うことはできない．そこで，グリューナイゼン定数を利用して計算結果の間接的な検証を行うことにした．

一般に，角振動数ω_iのフォノンのグリューナイゼン定数γ_iは次のように表すことができる．

$$\gamma_i=-\frac{\mathrm{d}\ln\omega_i}{\mathrm{d}\ln V}=-\frac{V}{\omega_i}\frac{\mathrm{d}\omega_i}{\mathrm{d}P}\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}V}=-\frac{\mathrm{d}\psi_i}{\mathrm{d}\omega_i}B \tag{24}$$

ここで$\psi_i=(\mathrm{d}\omega_i/\mathrm{d}P)\omega_i$は準線形共鳴振動理論を用いて計算可能な共鳴周波数の圧力依存性であり，Bは体積弾性率である．この関係式を用いれば，計算で得られたψ_iをグリューナイゼン定数γ_iへ変換することができる．そこで，Mgの1次から2400次までの共鳴振動モードについてγ_iを計算した結果を図5(b)に示す．図を見ると，低周波数側でγ_iは大きくばらつくものの，高周波数側では一定値へ収束する傾向が伺える．この収束値を決定するため，2400個のγ_iを次の関数で最小二乗近似した．

$$\gamma=\gamma^{\infty}+D_1\exp\left(-\frac{\omega-\omega_0}{\tau_1}\right)+D_2\exp\left(-\frac{\omega-\omega_0}{\tau_2}\right) \tag{25}$$

その結果，高周波数極限値として$\gamma^{\infty}=1.48$を得た．

準線形共鳴振動理論によって得られた極限値γ^{∞}は，熱力学的な意味でのグリューナイゼン定数γと解釈することができる[3]．そこで本研究では，Bruggerの方法[29]を用いて主要な金属元素のγを計算し，得られた結果をγ^{∞}と比較した(**図6**)．この図は縦軸に準線形共鳴振動理論により得られたγ^{∞}を，横軸にBruggerの理論により得られたγをプロットしている．図中の実線は切片をゼロで固定した最小二乗近似直線であり，その勾配は約0.97となった．このように，元素によってγとγ^{∞}の間に若干の相違が認められるものの，両者の計算結果は概ね一致すると考えて良い．この結果は，準

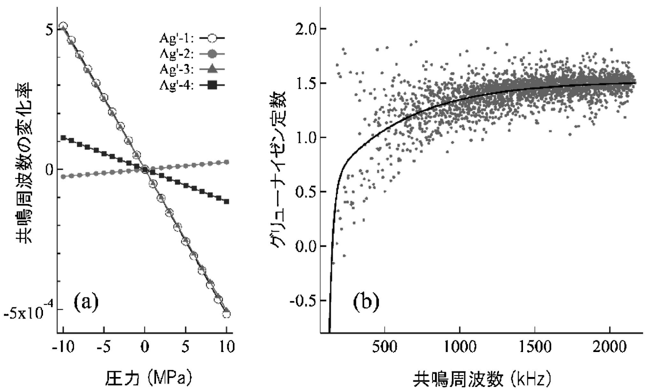


図5　Mg単結晶をモデルとした(a)共鳴周波数の圧力依存性，および(b)グリューナイゼン定数の共鳴周波数依存性．

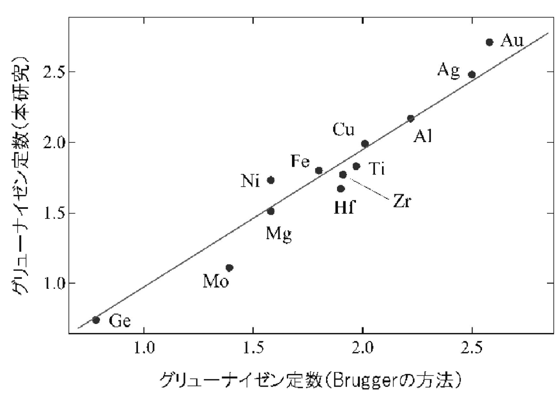


図6　本研究とBruggerの方法によって得られたグリューナイゼン定数の比較．

線形共鳴振動理論によって計算された共鳴周波数の圧力依存性が，定量的な意味で妥当であることを示唆している．

準線形共鳴振動理論では，金属材料の持つ二次と三次の弾性定数を仮定して共鳴周波数の圧力依存性を計算しているが，もしこの圧力依存性を実験で計測することができれば，理論値と実験値の差を最小化する最適化計算によって，原理的には全ての独立な二次弾性定数と，ほぼ全ての独立な三次の弾性定数を決定することが可能となった．今後は高圧領域における共鳴周波数計測実験が必要であるが，これは将来の研究課題である．

6. ま と め

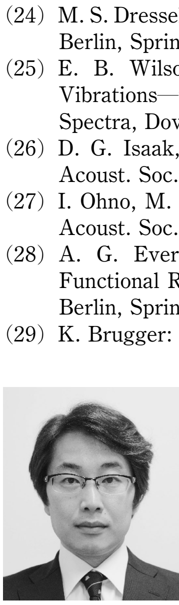
本稿では，近年著者等が構築した二つの共鳴振動理論[(1)–(3)]を主題として取り上げ，研究背景，動機と目的，理論の詳細，およびその検証結果について説明した．最初に取り組んだ非線形共鳴振動理論では，共鳴振動解析にカラー対称性と磁性点群という新しい概念を導入し，それがこの現象に対する著者等の理解を大きく前進させた．しかしながら，この理論は三次弾性定数の評価には不向きであり，そのためには研究戦略の大幅な見直しが求められた．仕切り直して取り組んだ準線形共鳴振動理論[(3)]では，先に導入した磁性点群と準調和近似の併用が効果的に計算コストを削減し，現実の金属材料が示す共鳴周波数の圧力依存性と，その材料が持つ三次弾性定数を関係付けるところまで辿り着いた．

本稿で紹介した理論には，既存の解析法や概念が多用されている．その使用にあたっては，多くの場合において数学的な定義のみを頼りとしたため，従来の使用例を十分フォローしていないものも少なくない．そのため，本研究では計算結果の検証を重視した．幸いなことに，これまでのところ特筆すべき矛盾や例外は生じていないが，著者の浅学ゆえの誤解や思いもよらぬ見落としがあるかもしれない．もし何かお気づきの点があれば，些細な点であろうとご指摘を頂ければ幸いである．

2008年から始めた本研究は，数多くの紆余曲折と失敗の繰り返しとともに進められた．この間，根気強く一緒に研究を進めてくれたのは，大阪大学大学院生・学生の松久朋久氏(現・トヨタ自動織機)，山田晋平氏(現・パナソニック)，山口悠太氏(現・住友電工)，および田窪智也氏(現・マツダ自動車)である．また，渋谷陽二教授(大阪大学)，平尾雅彦教授(大阪大学)，荻博次准教授(大阪大学)，高島和希教授(熊本大学)，および John Ball 教授(Oxford 大学)には，様々な形で著者の研究を支援して頂いた．これらの方々に心からのお礼を申し上げます．なお，本研究は科研費(23686024)の助成を受けて遂行した．

文 献

(1) R. Tarumi: Proc. R. Soc. A, **469**(2013), 20130275.
(2) R. Tarumi, S. Yamada and Y. Shibutani: Jpn. J. Appl. Phys., **53**(2014), 07KB09.
(3) R. Tarumi, Y. Yamaguchi and Y. Shibutani: Proc. R. Soc. A, **470**(2014), 20140448.
(4) L. Rayleigh, The theory of sound vol. 1 and 2, The Macmillan Company, Reprinted by Dover Publications, (1945).
(5) W. Ritz: Physik. J. Reine Angew. Math., **135**(1908), 1–61.
(6) W. Ritz: Annalen der Physik, **28**(1909), 737–786.
(7) P. G. Ciarlet, Mathematical Elasticity, Amsterdam, Elsevier, (2004).
(8) J. E. Marsden and T.J.R. Hughes: Mathematical Foundations of Elasticity, New York, Dover, (1994).
(9) M. Silhavy: The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media, Berlin, Springer, (2010).
(10) B. Dacorogna: Direct Methods in the Calculus of Variations, New York, Springer, (2008).
(11) D.C. Wallace: Thermodynamics of Crystals, New York, Dover, (1998).
(12) A.W. Leissa, J. Sound and Vib., **287**(2005), 961–978.
(13) H.H. Demarest Jr: J. Acoust. Soc. Am., **49**(1971), 768.
(14) I. Ohno: J. Phys. Earth, **24**(1976), 355–379.
(15) A. Migliori, J. Sarro, M.W. Visscher, T. Bell, M. Lei, Z. Fisk and R. Leisure: Physica B, **183**(1993), 1.
(16) J. Maynard: Phys. Today, **49**(1996), 26.
(17) A. Migliori and J. Sarro: Resonant ultrasound spectroscopy, New York, Wiley, (1997).
(18) H. Ogi, K. Sato, T. Asada and M. Hirao: J. Acoust. Soc. Am., **112**(2002), 2553.
(19) M. Gelfand and S. V. Fomin: Calculus of variations, New York, Dover Publications, (2000).
(20) E. Mochizuki: J. Phys. Earth, **35**(1987), 159–170.
(21) 今野豊彦：物質の対称性と群論，共立出版，(2004年).
(22) A. S. Nowick, Crystal Properties Via Group Theory, Cambridge, Cambridge University Press, (1995).
(23) 犬井鉄郎，田辺行人，小野寺嘉孝：応用群論，裳華房，(2008).
(24) M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus and A. Jorio: Group Theory, Berlin, Springer, (2008).
(25) E. B. Wilson, J. C. Decius and P. C. Cross: Molecular Vibrations—the Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra, Dover, New York, (1980).
(26) D. G. Isaak, J. D. Carnes, O. L. Anderson and H. Oda: J. Acoust. Soc. Am., **104**(1998), 2200–2206.
(27) I. Ohno, M. Kimura, Y. Hanayama, H. Oda and I. Suzuki: J. Acoust. Soc. Am., **110**(2001), 830–836.
(28) A. G. Every and A. K. McCurdy: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, vol. 29, Berlin, Springer, (1992).
(29) K. Brugger: Phys. Rev., **137**(1965), A1826–A1827.



垂水竜一

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
2003年　東京工業大学大学院総合理工学研究科博士後期課程修了
2003年–2008年　大阪大学大学院基礎工学研究科助手(助教)
2008年4月– 現職
専門分野：弾性理論，固体力学，超音波計測
◎弾性理論の金属工学分野への応用研究に従事．
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★