格子振動

by T. Koyama

１．３次元の基準振動

平衡位置 $\mathbf{r}$ における質量 M の原子の振動に関する運動方程式は、

$$M\frac{\partial^2\mathbf{u}(\mathbf{r})}{\partial t^2} = -\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{D}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{u}(\mathbf{r}') \tag{1}$$

にて与えられる。原子の変位場を次式にて定義する。

$$\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \mathbf{e}U(q)\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)] \tag{2}$$

$\mathbf{e}$ は実空間における原子の振動方向を表す単位ベクトルで、基準振動の偏りベクトルと呼ばれる。物理的には波の振幅が増減する実空間方向を意味する。$\mathbf{q}$ は波の波数で、波の伝播方向を表している。さて、式(2)を(1)へ代入し整理しよう。

$$\begin{aligned}
&M\frac{\partial^2\mathbf{u}(\mathbf{r})}{\partial t^2} = -\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{D}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{u}(\mathbf{r}') \\
&-M\mathbf{e}\omega^2U(q)\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)] = -\mathbf{e}U(q)\mathbf{D}(\mathbf{q})\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)] \\
&M\omega^2\mathbf{e} = \mathbf{D}(\mathbf{q})\mathbf{e}
\end{aligned} \tag{3}$$

ここで、

$$\frac{\partial^2\mathbf{u}(\mathbf{r})}{\partial t^2} = -\mathbf{e}\omega^2U(q)\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]$$

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{D}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{u}(\mathbf{r}') \\
&= \mathbf{e}U(q)\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{D}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'-\omega t)] \\
&= \mathbf{e}U(q)\exp(-i\omega t)\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{D}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\exp[-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \\
&= \mathbf{e}U(q)\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{D}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\exp[-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \\
&= \mathbf{e}U(q)\mathbf{D}(\mathbf{q})\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]
\end{aligned}$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}) \equiv \sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{D}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\exp[-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \tag{4}$$

を用いた。式(4)はダイナミカルマトリックスとして知られている。式(3)を成分に書き下してみよう。

$$M\omega^2\mathbf{e} = \mathbf{D}(\mathbf{q})\mathbf{e}$$

$$M\omega^2\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M\omega^2 & 0 & 0 \\ 0 & M\omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & M\omega^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{11}(\mathbf{q}) & D_{12}(\mathbf{q}) & D_{13}(\mathbf{q}) \\ D_{21}(\mathbf{q}) & D_{22}(\mathbf{q}) & D_{23}(\mathbf{q}) \\ D_{31}(\mathbf{q}) & D_{32}(\mathbf{q}) & D_{33}(\mathbf{q}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$\begin{pmatrix} D_{11}(\mathbf{q}) - M\omega^2 & D_{12}(\mathbf{q}) & D_{13}(\mathbf{q}) \\ D_{21}(\mathbf{q}) & D_{22}(\mathbf{q}) - M\omega^2 & D_{23}(\mathbf{q}) \\ D_{31}(\mathbf{q}) & D_{32}(\mathbf{q}) & D_{33}(\mathbf{q}) - M\omega^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = 0$$

これより、

$$\begin{vmatrix} D_{11}(\mathbf{q}) - M\omega^2 & D_{12}(\mathbf{q}) & D_{13}(\mathbf{q}) \\ D_{21}(\mathbf{q}) & D_{22}(\mathbf{q}) - M\omega^2 & D_{23}(\mathbf{q}) \\ D_{31}(\mathbf{q}) & D_{32}(\mathbf{q}) & D_{33}(\mathbf{q}) - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \tag{6}$$

を解くことによって、３つの基準振動の角振動数ωが $\mathbf{q}$ の関数として得られる。これがフォノンの分散関係である。数学的にもう少し解析すると、式(4)のダイナミカルマトリックスの固有値を$(\lambda_1(\mathbf{q}),\lambda_2(\mathbf{q}),\lambda_3(\mathbf{q}))$、および固有ベクトルを$(e_1^0(\mathbf{q}),e_2^0(\mathbf{q}),e_3^0(\mathbf{q}))$としよう。マトリックス表記すると、

$$\begin{pmatrix} D_{11}(\mathbf{q}) & D_{12}(\mathbf{q}) & D_{13}(\mathbf{q}) \\ D_{21}(\mathbf{q}) & D_{22}(\mathbf{q}) & D_{23}(\mathbf{q}) \\ D_{31}(\mathbf{q}) & D_{32}(\mathbf{q}) & D_{33}(\mathbf{q}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e_1^0(\mathbf{q}) \\ e_2^0(\mathbf{q}) \\ e_3^0(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1(\mathbf{q}) & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2(\mathbf{q}) & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3(\mathbf{q}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e_1^0(\mathbf{q}) \\ e_2^0(\mathbf{q}) \\ e_3^0(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \tag{7}$$

である。式(5)と(7)を比較することによって、式(5)を満足する角振動数は、

$$\begin{aligned} &M\omega_s^2(\mathbf{q}) = \lambda_s(\mathbf{q}) \\ &\omega_s(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\lambda_1(\mathbf{q})}{M}} \quad ,(s=1,2,3) \end{aligned} \tag{8}$$

および、偏りベクトルは、$e_s^0(\mathbf{q}) \quad ,(s=1,2,3)$ にて与えられることがわかる。

１次元の場合は、q と $\omega(\mathbf{q})$ の関係、いわゆる分散関係が重油であるが、３次元の場合は、これに加えて、偏りベクトル$e_s^0(\mathbf{q})$と波の伝播方向 q の関係も重要となる。等方体における波は、波数 $\mathbf{q}$ に対して縦波$(\mathbf{e}//\mathbf{q})$の分枝１本と、横波$(\mathbf{e}\perp\mathbf{q})$の分枝２本に分解できる。異方体では通常、必ずしもこのように単純に分解することは出来ない。しかし異方体であっても、立方晶などの対称性の高い異方体では、対称性の高い軸に沿った $\mathbf{q}$ の波を縦波１本と横波２本(振動数は縮退する)に分解することができる。また $\mathbf{q}$ が一般の方向を取った場合、厳密には縦波と横波に分解することはできない。しかし、そのずれはそれほど大きくはなく、かつ $\mathbf{q}$ の方向に対して連続的に変化するので、縦波および横波の分枝という呼び方を続けて用いることができる。

さて、結晶を考える場合、格子点は離散的であるので、$\mathbf{q}$ についてもこれに基づく制約が加味される。結晶格子の３つの基本ベクトルを$\mathbf{a}_i,(i=1,2,3)$および、整数を$N_i,(i=1,2,3)$とすると、結晶の並進性から、

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}+N_i\mathbf{a}_i)=\mathbf{u}(\mathbf{r}) \tag{9}$$

である。式(9)に式(2)を代入してみよう。

$$\begin{aligned}
&\mathbf{u}(\mathbf{r}+N_i\mathbf{a}_i)=\mathbf{u}(\mathbf{r})\\
&\mathbf{e}U(q)\exp[i\{\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}+N_i\mathbf{a}_i)-\omega t\}]=\mathbf{e}U(q)\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]\\
&\exp[i\{\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}+N_i\mathbf{a}_i)\}]=\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})\\
&\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})\exp(i\mathbf{q}\cdot N_i\mathbf{a}_i)=\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})\\
&\exp(iN_i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_i)=1
\end{aligned} \tag{10}$$

したがって、これより波数 $\mathbf{q}$ は、

$$\mathbf{q}=\frac{n_1}{N_1}\mathbf{b}_1+\frac{n_2}{N_2}\mathbf{b}_2+\frac{n_3}{N_3}\mathbf{b}_3 \tag{11}$$

でなくてはならない。ここで $\mathbf{b}_i$ は逆格子ベクトルで、

$$\mathbf{a}_i\cdot\mathbf{b}_j=2\pi\delta_{ij} \tag{12}$$

にて定義される。n_i は整数である。ちなみに、$n_i=1$～N_i であるので、$\mathbf{q}$ の取りうる状態数は $N=N_1N_2N_3$ となり、１周期内の全原子数に等しい。

２．ダイナミカルマトリックスと弾性定数マトリックスとの関係

ダイナミカルマトリックスと弾性定数マトリックスとの関係について導こう。まず、連続体の体積要素に働くニュートンの運動方程式は次式にて与えられる。

$$\rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}=\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j} \tag{13}$$

書き下せば、

$$\begin{aligned}
\rho\frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}&=\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2}+\frac{\partial\sigma_{13}}{\partial x_3}\\
\rho\frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}&=\frac{\partial\sigma_{21}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{22}}{\partial x_2}+\frac{\partial\sigma_{23}}{\partial x_3}\\
\rho\frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2}&=\frac{\partial\sigma_{31}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{32}}{\partial x_2}+\frac{\partial\sigma_{33}}{\partial x_3}
\end{aligned}$$

である。ρ は密度であり、u_i は i : x=1,y=2,z=3 方向の変位である。式(13)右辺は、体積要素内における力の収支式であり、体積要素に作用している正味の力を与える。この力が、ニュートンの法則によって格子変位(格子振動)の慣性力と釣合うとしたのが式(13)の物理的意味である。ところで、応力 σ_{ij} はフックの法則に基づき次式にて与えられる。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \tag{14}$$

式(14)を式(13)に代入する。

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) = \frac{1}{2} C_{ijkl} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_j \partial x_k} \right) \tag{15}$$

ところで、ダイナミカルマトリックスの計算式から、原子の変位場に関する運動方程式(2)を成分で書けば次式となる。

$$M \frac{\partial^2 u_i(\mathbf{r})}{\partial t^2} = -\sum_{\mathbf{r}'} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_j(\mathbf{r}') \tag{16}$$

ここで、全ての原子間力の釣り合い条件から、

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{r}'} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}'}{}^{*} \; D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0 \\ &D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = -\sum_{\mathbf{r}'}{}^{*} \; D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{aligned} \tag{17}$$

が成立する。これより、式(16)の右辺は、

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{r}'} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_j(\mathbf{r}') \\ &= D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}'}{}^{*} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_j(\mathbf{r}') \\ &= -\sum_{\mathbf{r}'}{}^{*} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_j(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}'}{}^{*} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_j(\mathbf{r}') \\ &= \sum_{\mathbf{r}'}{}^{*} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \{ u_j(\mathbf{r}') - u_j(\mathbf{r}) \} \end{aligned} \tag{18}$$

と変形できるので、最終的に式(16)は次式にて与えられる。

$$M \frac{\partial^2 u_i(\mathbf{r})}{\partial t^2} = -\sum_{\mathbf{r}'}{}^{*} D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \{ u_j(\mathbf{r}') - u_j(\mathbf{r}) \} \tag{19}$$

ここで、式(15)と(19)を比較してみると、式(19)は式(15)の差分表記になっていることがわかる。実は、原子間力を基礎に記述された式(19)を連続体近似した場合が式(15)に相当するのである。したがって、式(19)を連続体近似に基づき書き換えることによって、原子間の力定数と弾性定数の関係を導くことが出来る。式(19)を連続体近似するということは、格子振動論における長波長近似($\mathbf{q} \to 0$)に相当する。

さて、式(19)右辺の $u_j(\mathbf{r}') - u_j(\mathbf{r})$ を $\mathbf{r}'$のまわりでテイラー展開しよう。

$$
\begin{aligned}
&u_j(\mathbf{r}') - u_j(\mathbf{r}) \\
&= u_j(\mathbf{r}) + \left(\frac{\partial u_j(\mathbf{r}')}{\partial r_k'}\right)_{r_k'=r_k} (r_k - r_k') + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u_j(\mathbf{r}')}{\partial r_l' \partial r_k'}\right)_{\substack{r_k'=r_k \\ r_l'=r_l}} (r_k - r_k')(r_l - r_l') + \cdots - u_j(\mathbf{r}) \\
&\cong \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u_j(\mathbf{r}')}{\partial r_l' \partial r_k'}\right)_{\substack{r_k'=r_k \\ r_l'=r_l}} (r_k - r_k')(r_l - r_l')
\end{aligned}
\tag{20}
$$

式(20)を式(19)に代入する。

$$
\begin{aligned}
M\frac{\partial^2 u_i(\mathbf{r})}{\partial t^2} &= -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r}'} {}^* D_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\left(\frac{\partial^2 u_j(\mathbf{r}')}{\partial r_l' \partial r_k'}\right)_{\substack{r_k'=r_k \\ r_l'=r_l}} (r_k - r_k')(r_l - r_l') \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r}'} {}^* D_{il}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\left(\frac{\partial^2 u_l(\mathbf{r}')}{\partial r_j' \partial r_k'}\right)_{\substack{r_k'=r_k \\ r_j'=r_j}} (r_k - r_k')(r_j - r_j')
\end{aligned}
\tag{21}
$$

式(15)と比較することにより、最終的に次式を得る。

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{2M}\sum_{\mathbf{r}'} {}^* D_{il}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\left(\frac{\partial^2 u_l(\mathbf{r}')}{\partial r_j' \partial r_k'}\right)_{\substack{r_k'=r_k \\ r_j'=r_j}} (r_k - r_k')(r_j - r_j') = \frac{1}{2\rho} C_{ijkl}\left(\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k}\right) \\
&-\sum_{\mathbf{r}'} {}^* D_{il}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\left(\frac{\partial^2 u_l(\mathbf{r}')}{\partial r_j' \partial r_k'}\right)_{\substack{r_k'=r_k \\ r_j'=r_j}} (r_k - r_k')(r_j - r_j') = \frac{M}{\rho} C_{ijkl}\left(\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k}\right) \\
&-\sum_{\mathbf{r}'} {}^* D_{il}(\mathbf{r},\mathbf{r}')(r_k - r_k')(r_j - r_j') = \frac{2M}{\rho} C_{ijkl}
\end{aligned}
\tag{22}
$$

式(22)において $r_i - r_i'$ は原子間距離である。したがって式(22)を利用することにより、弾性定数から力定数を導くことが出来る。ただしここで注意点が存在する。式(22)左辺は、k と j の交換に対して対象であるが、右辺は $C_{ijkl} \neq C_{ikjl}$ であるので対象ではない。この点を補正するために、しばしば式(22)は、

$$
-\sum_{\mathbf{r}'} {}^* s(ilkj) D_{il}(\mathbf{r},\mathbf{r}')(r_k - r_k')(r_j - r_j') = \frac{2M}{\rho} C_{ijkl}
\tag{23}
$$

と表記される。ここで $s(ilkj)$ は

$$
s(ilkj) = \frac{2c_{ikjl}}{c_{ikjl} + c_{ijkl}}
\tag{24}
$$

にて定義され、式(24)に関して、右辺は $ijkl$ について和は取らない。なお式(23)は、弾性波を長波長近似しているので、原子間距離程度の格子歪にまで式(22)を適用することは当然ながらできない。

３．立方晶の弾性波

ここで、立方晶の弾性波について導出しておこう。まず、歪成分は、

$$e_{ij} \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{25}$$

にて定義される。立方晶の弾性定数は、

$$C_{ijkl} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \tag{26}$$

となり、フックの法則 $\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl}$ を書き下して、

$$\begin{aligned}
\sigma_{11} &= C_{11}e_{11} + C_{12}(e_{22} + e_{33}) = C_{11}\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + C_{12}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}\right) \\
\sigma_{22} &= C_{11}e_{22} + C_{12}(e_{11} + e_{33}) = C_{11}\frac{\partial u_2}{\partial x_2} + C_{12}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}\right) \\
\sigma_{33} &= C_{11}e_{33} + C_{12}(e_{11} + e_{22}) = C_{11}\frac{\partial u_3}{\partial x_3} + C_{12}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2}\right) \\
\sigma_{23} &= 2C_{44}e_{23} = C_{44}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right) \\
\sigma_{31} &= 2C_{44}e_{31} = C_{44}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1}\right) \\
\sigma_{12} &= 2C_{44}e_{12} = C_{44}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\right)
\end{aligned} \tag{27}$$

が得られる。さて弾性波を求めよう。式(25)～(27)を波動方程式に代入することによって、

$$\begin{aligned}
\rho\frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_3} \\
&= C_{11}\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + C_{12}\left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3}\right) + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_1}\right) + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_1}\right) \\
&= C_{11}\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2}\right) + (C_{12} + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3}\right)
\end{aligned} \tag{28}$$

$$\rho\frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}=\frac{\partial\sigma_{21}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{22}}{\partial x_2}+\frac{\partial\sigma_{23}}{\partial x_3}$$
$$=C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1\partial x_2}\right)+C_{11}\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2}+C_{12}\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2\partial x_1}+\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2\partial x_3}\right)+C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2}+\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3\partial x_2}\right)\quad(29)$$
$$=C_{11}\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2}+C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2}\right)+(C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1\partial x_2}+\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2\partial x_3}\right)$$

$$\rho\frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2}=\frac{\partial\sigma_{31}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{32}}{\partial x_2}+\frac{\partial\sigma_{33}}{\partial x_3}$$
$$=C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1\partial x_3}\right)+C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2\partial x_3}\right)+C_{11}\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2}+C_{12}\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3\partial x_1}+\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3\partial x_2}\right)\quad(30)$$
$$=C_{11}\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2}+C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2^2}\right)+(C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1\partial x_3}+\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2\partial x_3}\right)$$

を得る。

弾性波の進行方向の方向余弦をl,m,nとすると、これらは波数ベクトル$\mathbf{q}=(q_1,q_2,q_3)$を用いて、

$$(l,m,n)=\frac{(q_1,q_2,q_3)}{|\mathbf{q}|}=\frac{(q_1,q_2,q_3)}{\sqrt{q_1^2+q_2^2+q_3^2}}=\frac{(q_1,q_2,q_3)}{q}=\left(\frac{q_1}{q},\frac{q_2}{q},\frac{q_3}{q}\right)\quad(31)$$
$$(q_1,q_2,q_3)=(ql,qm,qn)$$

にて与えられる。また弾性波の振動方向の方向余弦をe_1,e_2,e_3とし、振幅は波数に依存しない定数U_0とすると、弾性波$\mathbf{u}=(u_1,u_2,u_3)$は、

$$u_1(x_1,x_2,x_3,t)=e_1U_0\exp[i(q_1x_1+q_2x_2+q_3x_3-\omega t)]$$
$$=e_1U_0\exp[iq(lx_1+mx_2+nx_3)-i\omega t)]$$
$$u_2(x_1,x_2,x_3,t)=e_2U_0\exp[iq(lx_1+mx_2+nx_3)-i\omega t)]\quad(32)$$
$$u_3(x_1,x_2,x_3,t)=e_3U_0\exp[iq(lx_1+mx_2+nx_3)-i\omega t)$$

にて表現される。式(32)を式(28)～式(30)に代入し整理する。

$$\rho\frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}=C_{11}\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2}+C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2}\right)+(C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1\partial x_2}+\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1\partial x_3}\right)$$
$$-\rho\omega^2u_1=-C_{11}q^2l^2u_1-C_{44}\left(q^2m^2u_1+q^2n^2u_1\right)-(C_{12}+C_{44})\left(q^2lmu_2+q^2lnu_3\right)$$
$$\rho\omega^2u_1=q^2\{C_{11}l^2+C_{44}(m^2+n^2)\}u_1+q^2(C_{12}+C_{44})lmu_2+q^2(C_{12}+C_{44})lnu_3$$
$$\left\{C_{11}l^2+C_{44}(m^2+n^2)-\rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_1+\left[(C_{12}+C_{44})lm\right]u_2+\left[(C_{12}+C_{44})ln\right]u_3=0$$

$$\rho\frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = C_{11}\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2}\right) + (C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2 \partial x_3}\right)$$
$$-\rho\omega^2 u_2 = -C_{11}q^2 m^2 u_2 - C_{44}\left(q^2 l^2 u_2 + q^2 n^2 u_2\right) - (C_{12}+C_{44})\left(q^2 lmu_1 + q^2 mnu_3\right)$$
$$\rho\omega^2 u_2 = q^2\{C_{11}m^2 + C_{44}(l^2+n^2)\}u_2 + q^2(C_{12}+C_{44})lmu_1 + q^2(C_{12}+C_{44})mnu_3$$
$$\left\{(C_{12}+C_{44})lm\right\}u_1 + \left\{C_{11}m^2 + C_{44}(l^2+n^2) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_2 + \left\{(C_{12}+C_{44})mn\right\}u_3 = 0$$

$$\rho\frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = C_{11}\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2^2}\right) + (C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_3}\right)$$
$$-\rho\omega^2 u_3 = -C_{11}q^2 n^2 u_3 - C_{44}\left(q^2 l^2 u_3 + q^2 m^2 u_3\right) - (C_{12}+C_{44})\left(q^2 lnu_1 + q^2 mnu_2\right)$$
$$\rho\omega^2 u_3 = q^2\{C_{11}n^2 + C_{44}(l^2+m^2)\}u_3 + q^2(C_{12}+C_{44})lnu_1 + q^2(C_{12}+C_{44})mnu_2$$
$$\left\{(C_{12}+C_{44})ln\right\}u_1 + \left\{(C_{12}+C_{44})mn\right\}u_2 + \left\{C_{11}n^2 + C_{44}(l^2+m^2) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_3 = 0$$

したがって、

$$\left\{C_{11}l^2 + C_{44}(m^2+n^2) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_1 + \left\{(C_{12}+C_{44})lm\right\}u_2 + \left\{(C_{12}+C_{44})ln\right\}u_3 = 0$$
$$\left\{(C_{12}+C_{44})lm\right\}u_1 + \left\{C_{11}m^2 + C_{44}(l^2+n^2) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_2 + \left\{(C_{12}+C_{44})mn\right\}u_3 = 0 \qquad (33)$$
$$\left\{(C_{12}+C_{44})ln\right\}u_1 + \left\{(C_{12}+C_{44})mn\right\}u_2 + \left\{C_{11}n^2 + C_{44}(l^2+m^2) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_3 = 0$$

を得る。これより、[100], [110], [111]方向の弾性波は、以下の様に導かれる。

・[100]方向の弾性波
方向余弦は、$l=1, m=0, n=0$ であるので、式(33)は、

$$\left\{C_{11} - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_1 = 0 \quad ,\therefore \left\{C_{11} - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}e_1 = 0$$
$$\left\{C_{44} - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_2 = 0 \quad ,\therefore \left\{C_{44} - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}e_2 = 0$$
$$\left\{C_{44} - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_3 = 0 \quad ,\therefore \left\{C_{44} - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}e_3 = 0$$

となる。これより、弾性波の速度の二乗は、

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{\rho}C_{11} \quad (e_1=1, e_2=0, e_3=0)$$ ：縦波
$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{\rho}C_{44} \quad (e_1=0, e_2^2+e_3^2=1)$$ ：横波

計算されるが、工学的に２番目の式を２つに分けて、通常

$$
\begin{aligned}
v^2 &= \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{\rho}C_{11} \quad (e_1 = 1, e_2 = 0, e_3 = 0) &&\text{：縦波}\\
v^2 &= \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{\rho}C_{44} \quad (e_1 = 0, e_2 = 1, e_3 = 0) &&\text{：横波}\\
v^2 &= \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{\rho}C_{44} \quad (e_1 = 0, e_2 = 0, e_3 = 1) &&\text{：横波}
\end{aligned}
\tag{34}
$$

とする。

・[110]方向の弾性波

方向余弦は、$l = 1/\sqrt{2}, m = 1/\sqrt{2}, n = 0$であるので、式(33)は、

$$
\begin{aligned}
&\left\{\frac{1}{2}(C_{11} + C_{44}) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_1 + \left\{\frac{1}{2}(C_{12} + C_{44})\right\}u_2 = 0\\
&\left\{\frac{1}{2}(C_{12} + C_{44})\right\}u_1 + \left\{\frac{1}{2}(C_{11} + C_{44}) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_2 = 0\\
&\left\{C_{44} - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_3 = 0
\end{aligned}
$$

となる。最後の式から、

$$
v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{\rho}C_{44} \quad (e_1 = 0, e_2 = 0, e_3 = 1) \text{：横波} \tag{35a}
$$

を得る。また始めの２式から、行列式が

$$
\begin{aligned}
&(a - \rho v^2)^2 - c^2 = 0\\
&(a - \rho v^2 + c)(a - \rho v^2 - c) = 0\\
&\rho v^2 = a + c\ ,\ a - c
\end{aligned}
$$

の形式になるので、

$$
\begin{aligned}
\rho\frac{\omega^2}{q^2} &= \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44}) + \frac{1}{2}(C_{12} + C_{44}) = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})\\
\rho\frac{\omega^2}{q^2} &= \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44}) - \frac{1}{2}(C_{12} + C_{44}) = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12})
\end{aligned}
$$

と計算され、

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{2\rho}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44}), \quad (e_1 = 1/\sqrt{2},\ e_2 = 1/\sqrt{2},\ e_3 = 0) \qquad \text{：縦波} \tag{35b}$$

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{2\rho}(C_{11} + C_{12}) \quad , \quad (e_1 = 1/\sqrt{2},\ e_2 = -1/\sqrt{2},\ e_3 = 0) \qquad \text{：横波} \tag{35c}$$

となる。なお上記において、e_i の成分は互いに直交するように定義されている。

・[111]方向の弾性波

方向余弦は、$l = 1/\sqrt{3}, m = 1/\sqrt{3}, n = 1/\sqrt{3}$ であるので、式(33)は、

$$\left\{\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{44}) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_1 + \left\{\frac{1}{3}(C_{12} + C_{44})\right\}u_2 + \left\{\frac{1}{3}(C_{12} + C_{44})\right\}u_3 = 0$$

$$\left\{\frac{1}{3}(C_{12} + C_{44})\right\}u_1 + \left\{\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{44}) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_2 + \left\{\frac{1}{3}(C_{12} + C_{44})\right\}u_3 = 0$$

$$\left\{\frac{1}{3}(C_{12} + C_{44})\right\}u_1 + \left\{\frac{1}{3}(C_{12} + C_{44})\right\}u_2 + \left\{\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{44}) - \rho\frac{\omega^2}{q^2}\right\}u_3 = 0$$

となる。行列式は、

$$\begin{aligned}
\begin{vmatrix} a-\rho v^2 & c & c \\ c & a-\rho v^2 & c \\ c & c & a-\rho v^2 \end{vmatrix} &= (a-\rho v^2)^3 + 2c^3 - 3c^2(a-\rho v^2) \\
&= (a-\rho v^2)^3 - c^2(a-\rho v^2) + 2c^3 - 2c^2(a-\rho v^2) \\
&= (a-\rho v^2)\{(a-\rho v^2)^2 - c^2\} + 2c^2\{c - (a-\rho v^2)\} \\
&= (a-\rho v^2)(a-\rho v^2+c)(a-\rho v^2-c) - 2c^2(a-\rho v^2-c) \\
&= (a-\rho v^2-c)\{(a-\rho v^2)(a-\rho v^2+c) - 2c^2\} \\
&= (a-\rho v^2-c)\{(a-\rho v^2)^2 + (a-\rho v^2)c - 2c^2\} \\
&= (a-\rho v^2-c)(a-\rho v^2+2c)(a-\rho v^2-c) \\
&= (a-\rho v^2-c)^2(a-\rho v^2+2c) = 0
\end{aligned}$$

の形式になるので、

$$\rho\frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{44}) - \frac{1}{3}(C_{12} + C_{44}) = \frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$$

$$\rho\frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{44}) + \frac{2}{3}(C_{12} + C_{44}) = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$$

と計算され、

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{3\rho}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}), \quad (e_1 = 1/\sqrt{3},\ e_2 = 1/\sqrt{3},\ e_3 = 1/\sqrt{3})$$

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{3\rho}(C_{11} - C_{12} + C_{44}), \quad (e_1 + e_2 + e_3 = 0)$$

となる。しかし、工学的に２番目の式を２つに分けて、通常

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{3\rho}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}), \quad (e_1 = 1/\sqrt{3},\ e_2 = 1/\sqrt{3},\ e_3 = 1/\sqrt{3}) \quad \text{：縦波} \tag{36a}$$

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{3\rho}(C_{11} - C_{12} + C_{44}), \quad (e_1 = 1/\sqrt{2},\ e_2 = -1/\sqrt{2},\ e_3 = 0) \quad \text{：横波} \tag{36b}$$

$$v^2 = \frac{\omega^2}{q^2} = \frac{1}{3\rho}(C_{11} - C_{12} + C_{44}), \quad (e_1 = 1/\sqrt{6},\ e_2 = 1/\sqrt{6},\ e_3 = -2/\sqrt{6}) \quad \text{：横波} \tag{36c}$$

とする。この場合も e_i の成分は、互いに直交するように定義されている。