様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ３０ 年　 ６ 月　 １ 日現在

機関番号：１４４０１
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2016～2017
課題番号：１６Ｋ１４１１７

研究課題名（和文）固体の振動現象を支配する群構造の特定

研究課題名（英文）Group theoretical analysis for nonlinear normal mode of solids

研究代表者
垂水　竜一（Tarumi, Ryuichi）

大阪大学・工学研究科　・准教授

研究者番号：３０３６２６４３

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,600,000円

研究成果の概要（和文）：固体の振動現象を司る群構造の同定を目的として，本研究では二次元分子の示す非線形振動の対称性解析を行った．数値解析の結果，非線形効果によって基準振動モードの整数倍の角振動数を持つ高調和振動の励起が確認され，その振動対称性は角振動数の係数のパリティに依存し，二つの異なる既約表現が交互に出現することを明らかとした．また，この対称性の選択則は，カラー対称性を備えた磁性点群による予測結果と完全に一致している．このことから，磁性点群を用いた固体の振動対称性の分類が，従来の弾性体に留まらず，そのミクロ極限である分子振動までマルチスケールに適用可能と考えられる．

研究成果の概要（英文）：This study investigates the symmetry of nonlinear normal mode vibrations of a two-dimensional molecule. Present numerical analysis revealed that nonlinearity of the system excites higher order harmonics in the normal mode vibration. Fourier spectrum analysis revealed that vibration symmetry of the higher harmonics can be classified on the basis of magnetic point group rather than the conventional irreducible representation of point group. This result indicates that magnetic point group is the appropriate framework for classification of normal mode vibration of solids.

研究分野：固体力学

キーワード：非線形分子振動　磁性点群　カラー対称性

１．研究開始当初の背景

前世紀の初頭，レイリー卿と数学者リッツによって，線形弾性体の共鳴振動理論（レイリー・リッツ理論）が構築された．その後，この理論によって得られた共鳴振動モード（基準振動モード）の解析に群論が適用され，これによって点群（既約表現）に基づく共鳴振動モードの分類が実現された．レイリー・リッツ理論は，これまで広範な分野で顕著な成功を収めてきたが，その一方で，この理論に用いられる「線形近似」の弊害については議論が進んでおらず，理論構築から 1 世紀以上経過した現在においてもなお看過されてきた．弾性体の構成則に対する線形近似の導入は，弾性理論の基盤である客観性公理の破綻を意味している．そのため，公理に違反した構成則から導かれる線形弾性体の共鳴振動解が，固体の本来の共鳴振動特性を再現しているとは限らない．

この問題に対して，研究代表者はこれまで客観性公理を満たした非線形弾性体に対する共鳴振動解析を進めてきた．その結果，(i)非線形弾性体では基準振動数の整数倍の角振動数を持つ高調和振動が励起されること，(ii)高調和振動の対称性は角振動数の係数のパリティ（偶奇性）に依存した二つの振動対称性が交互に現れること，(iii)この共鳴振動対称性は従来の点群に「時間反転操作」を加えてこれを一般化した磁性点群により説明できること，(iv)磁性点群の予測する共鳴振動対称性は量子力学の摂動論解析結果に一致すること，を明らかとしている．ここで，角振動数の係数のパリティに依存して現れる二つの振動対称性は，磁性点群の慣習に従うと，「カラー対称性」と呼ぶことができる．磁性点群が予測するカラー対称性は，これまで見落とされてきた弾性体の新しい振動対称性であり，その影響はこれまでレイリー・リッツ理論が応用されてきた全ての振動解析分野に及ぶと考えられる．このことは同時に，磁性点群を用いた共鳴振動モードの解析が，従来の解析対象であった弾性体（連続体）に留まらず，より広範な振動現象の中にも含まれていることを示唆している．

こうした振動現象として最も魅力的な解析対象は分子振動である．弾性体の共鳴振動モードは，分子の基準振動モードの連続体極限として捉えることができる．したがって，弾性体が持つ新しい共鳴振動対称性は，そのミクロ極限である分子の基準振動モード内にも含まれると推測される．非線形弾性体の振動が非線形波動方程式に従うが，分子の非線形振動はニュートンの運動方程式に従っている．そのため，二つの振動現象は異なる支配方程式を有しているが，その解の中に磁性点群という共通の代数的構造が含まれているかを調べることは，振動現象に関連した学術分野において極めて重要な意味を持っている．

２．研究の目的

このような研究背景の下で，本研究では非線形分子振動現象の数値解析を行い，これによって非線形効果によって励起される高調和振動の対称性を明らかにすることを研究目的とした．弾性体に限らず，そのミクロ極限である分子振動内にもカラー対称性が見出されれば，振動現象全般を記述する群構造として磁性点群の有用性が明瞭となる．

３．研究の方法

本研究では，二次元分子モデルを解析対象とした．図 1 に 8 個の質点からなる分子モデルを模式的に示す．ここで質点の質量は何れも$m = 1$と規格化し，各質点は$k = 1$なる線形ばねで接続されている．このばねの自然長は，図の質点間距離と一致している．この分子モデルは，点群$\mathrm{C_{2v}}$によって表される対称性を有している．点群$\mathrm{C_{2v}}$は 4 つの既約表現（$\mathrm{A_1}, \mathrm{A_2}$, $\mathrm{B_1}$，$\mathrm{B_2}$）を持つことから，この分子モデルの基準振動モードもまた 4 つの既約表現を用いて分類することができる．

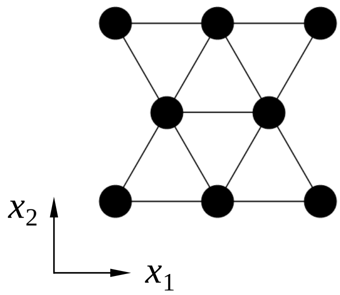

図 1　本研究で数値解析に用いた二次元非線形分子モデル．平衡状態における質点間距離aはばねの自然長と一致している．

本研究では，系のポテンシャルエネルギーはばねに蓄えられるひずみエネルギーとする．このポテンシャルエネルギーは，各質点の平衡位置からの変位の関数として記述されているが，有限変位を考える場合，すなわち変位に無限小近似が成り立たない場合，ポテンシャルエネルギーには幾何学的な非線形項が含まれる．本研究では，まず変位の無限小近似を導入してポテンシャルエネルギーを平衡点まわりでテイラー展開し，その主要線形項のみを取り出した．このとき，調和振動形式の解を仮定すると，各質点の運動方程式は線形固有値問題へと帰着し，特性行列の固有値から基準振動モードの角振動数が，また固有ベクトルから各振動モードに対する振動変位が導かれる．

このようにして得られた共鳴振動変位を初期値とし，非無限小近似化での非線形分子振動の数値解析を行った．この解析では，線形振動の近傍における弱非線形領域での分子振動解析を目的としており，初期値として用いた変位のノルムは各モード毎に適宜調整した．基準時刻$t = 0$における質点の初速はゼロとして質点の運動方程式を数値的に積分した．

数値積分には Adams-Bashforth 法を採用し，積分の時間刻み幅は$\delta t = 10^{-2}$，積分の総時間は$t = 10^4$とした．

数値計算によって得られた各質点の振動変位から離散フーリエ変換によって振幅スペクトルを求め，ここへバンドパスフィルターをかけて逆フーリエ変換することで，非線形振動の中に含まれる高調和振動成分を抽出し，対称性解析を行った．

４．研究成果

図 2 に一次の非線形振動モードから得られた振動変位のx_1軸方向に対する振幅スペクトルを示す．この結果を見ると，角振動数$\omega \approx 0.49$に大きなピークが現れていることが確認できる．これは運動方程式を線形近似した際に得られる一次の基準振動モードの角振動数とほぼ一致している．これに加えて，この角振動数ωの 0 倍，2 倍および 3 倍の角振動数にもピークが現れている様子が確認できる．これらの角振動数はωに対して正確に整数倍となっていることから，非線形効果によって励振された高調和振動を表していると考えられる．図中に現れた他のピークは，線形系において得られる他の基準振動モードの角振動数とほぼ一致しており，そのため非線形効果が一次モードとその高調和振動のみではなく，次数の異なる振動モードをも励起することが確認された．

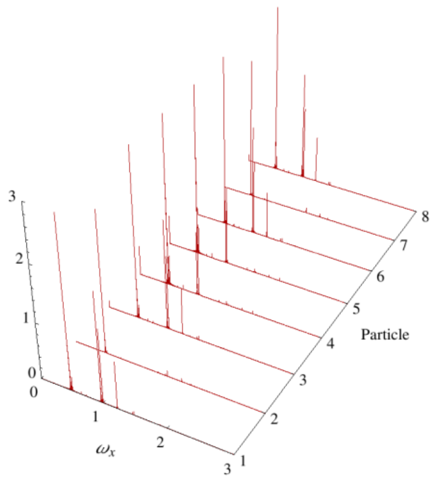

図 2 一次の非線形振動より得られた振動変位のx_1軸方向に対する振幅スペクトル．

本研究の主目的は，非線形効果によって励起された高調和振動の対称性解析にある．そこで，振幅スペクトルに現れた高調和振動ピークに対してバンドパスフィルターをかけ，これをフーリエ逆解析することで高調和振動に関する変位成分のみを取り出し，その対称性解析を行った．この解析方法によって得られたバンドパスフィルターを加えた後の振幅スペクトル，およびその逆フーリエ解析後の振動変位のスナップショットを図 3 に示す．この結果を見ると，角振動数はωの係数倍が奇数のとき，振動対称性は何れも横方向への曲げ振動を表すB_1対称性となっているが，ωの係数倍が偶数の時には何れも全対称のA_1対称性が現れていることが確認できる．すなわち，この非線形振動に含まれる高調和振動は，B_1対称性とA_1対称性という二つの異なる対称性を持つ高調和振動から構成されており，さらにその選択則は角振動数のパリティ（偶奇性）に依存して交互に出現している．この対称性の選択則は，磁性点群によって予測される解析結果と完全に一致している．

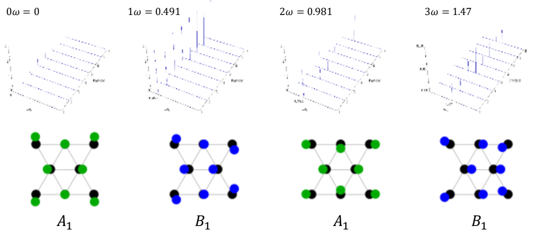

図 3 バンドパスフィルターをかけた後のフーリエスペクトル（上段）とその逆フーリエ変換結果のスナップショット（下段）．図は左より角振動数ωの 0 倍，1 倍，2 倍，3 倍の角振動数を持つ振動変位成分の解析結果．

同様の解析を全ての非線形振動モードに対して行った結果を図 4〜図 7 に示す．これらの解析結果から明らかなように，A_2系の振動モード（図 4），B_1系の振動モード（図 5），およびB_2系の振動モード（図 6）は何れも角振動数係数のパリティに依存した振動対称性が現れている．この結果から，磁性点群が予測する対称性の選択則が完全に満たされることが明らかとなった．

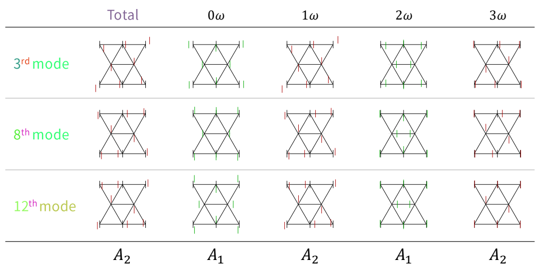

図 4 A_2系の振動モードに対する対称性の解析結果．

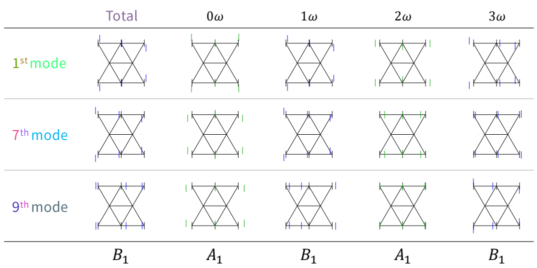

図 5 B_1系の振動モードに対する対称性の解析結果．

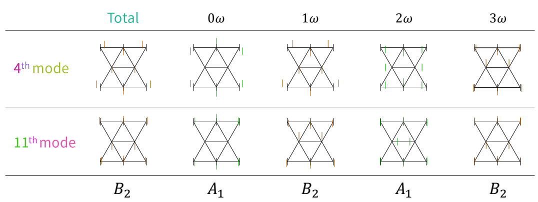

図 6 B_2系の振動モードに対する対称性の解析結果．

最後に，この解析をA_1対称性の非線形振動について行った結果を図 7 に示す．点群C_{2v}におけるA_1対称性は，他の 3 つの対称性と異なり，振動変位が生じても分子の対称性が低下しない全対称と呼ばれる特別な振動モードである．実際，図 4～図 6 において偶数係数の高調和振動が常にA_1対称性を持つことからも，A_1対称性の持つ特異性が確認できる．図 7 の解析結果を見ると，A_1系の非線形振動に含まれる高調和振動は，角振動数の係数のパリティに依存せず，常にA_1対称性を持つことが確認できる．この結果も，磁性点群が予測する対称性の選択則と完全に一致している．

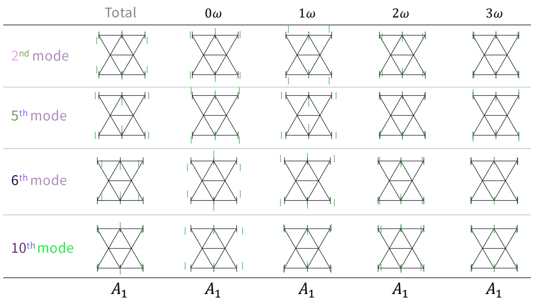

図 7 A_1系の振動モードに対する対称性の解析結果．

このように，二次元分子は非線形効果によって高調和振動を励起するが，こうした高調和振動の持つ対称性とその選択則は，今回解析を行った 12 個の振動モードの全てにおいて，磁性点群による予測結果と完全に一致し，例外は存在しなかった．分子振動によって対称性の低下を引き起こすA_2系，B_1系およびB_2系振動モードのように，一つの振動モード内に二つの異なる既約表現が現れるものを，磁性点群の分野では白黒二色の磁性点群と呼んでいる．これに対して，対称性の低下が生じないA_1系振動モードのように，単一の対称性のみから構成されたものを白または黒の単色の磁性点群と呼んでいる．この慣習を適用すると，ここで解析を行った非線形分子振動内には，カラー対称性と呼ぶべき新しい振動対称性が含まれることを意味している．さらにこの結果は，これまで研究代表者が非線形弾性体に対して行った解析結果と一致している．そのため，カラー対称性を備えた磁性点群による振動対称性の分類・解析は，物理的な時空間スケールや支配方程式の異なる分子振動と弾性体の振動の両極限において適用可能であり，固体の振動現象解析において極めて重要な役割を担うことが確認された．これは，本研究の当初目的が理想的な形で達成されたことを意味している．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 2 件）

(1) 垂水竜一,「固体の共鳴振動理論の深化と展開」，学術の動向，Vol. 22，No. 3，pp. 26-31（2017）．

(2) 垂水竜一,「古典弾性理論における二つの近似とその弊害 ～固体の共鳴振動解析を通して～」，計算数理工学レビュー，2017 年-1 号，pp. 1-9（2017）．

〔学会発表〕（計 8 件）

(1) 木村雄大，垂水竜一，渋谷陽二,「ひずみ勾配弾性理論を用いた共鳴振動現象のサイズ依存性解析」，日本機械学会関西支部第 93 期定時総会講演会，2018 年 3 月，大阪大学吹田キャンパス

(2) 木村雄大，垂水竜一，渋谷陽二,「二次元周期構造体の基準振動モードとサイズ効果」，日本物理学会秋季大会，2017 年 9 月，岩手大学

(3) 垂水竜一，渋谷陽二,「非線形分子振動に現れる高調和振動の対称性とその選択則」，日本物理学会秋季大会，2017 年 9 月，岩手大学

(4) 垂水竜一,「古典弾性理論における二つの近似とその弊害 ～固体の共鳴振動解析を通して～」，計算数理工学フォーラム（招待講演），2017 年 3 月，大阪大学吹田キャンパス．

(5) 木村雄大，垂水竜一，渋谷陽二,「ひずみ勾配弾性体のフォノン振動モードとサイズ効果」，日本物理学会春季大会，2017 年 3 月，大阪大学豊中キャンパス

(6) 小林舜典，垂水竜一，渋谷陽二,「ひずみ勾配弾性理論に現れる弾性定数テンソルの一般化線形群の下での既約分解」，日本物理学会春季大会，2017 年 3 月，大阪大学豊中キャンパス

(7) 垂水竜一，渋谷陽二,「非線形弾性体の共鳴振動とグリューナイゼン定数の推定」，日本物理学会春季大会，2017 年 3 月，大阪大学豊中キャンパス

(8) 中村準一，垂水竜一，渋谷陽二,「二次元分子モデルの非線形共鳴振動とその対称性解析」，日本機械学会関西支部第 92 期定時総会講演会，2017 年 3 月，大阪大学吹田キャンパス

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

○取得状況（計 0 件）

〔その他〕
ホームページ等

６．研究組織

(1)研究代表者
垂水 竜一（TARUMI Ryuichi）
大阪大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号：30362643

(2)研究分担者

(3)連携研究者

(4)研究協力者