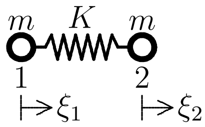
（格子振動系の基準振動分解について）

１．**例１**　ばね定数 K のばねで結合した質量 m の２質点系



図のように座標をとると

$$
\begin{aligned}
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_1 &= -K(\xi_1-\xi_2) \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_2 &= -K(-\xi_1+\xi_2)
\end{aligned}
$$

ここで，座標変換

$$
q_0=\frac{1}{2}(\xi_1+\xi_2)\ ,\quad q_1=\frac{1}{2}(\xi_2-\xi_1) \tag{1}
$$

$$
\xi_1=q_0-q_1\ ,\quad \xi_2=q_0+q_1 \tag{2}
$$

により

$$
\begin{aligned}
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,q_0 &= 0 \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,q_1 &= -2Kq_1
\end{aligned} \tag{3}
$$

となり，ハミルトニアン（エネルギー関数）は，$\dot{q}_0=0$（重心固定），$p_1=2m\dot{q}_1$ として

$$
\mathcal{H}=\frac{m}{2}(\dot{\xi}_1^2+\dot{\xi}_2^2)+\frac{K}{2}(\xi_2-\xi_1)^2=\frac{1}{4m}{p_1}^2+2K{q_1}^2 \tag{4}
$$

と，調和振動子の形になる。

２．一般の格子振動系

簡単のため原子の質量はすべて m とし，各原子の変位の (x,y,z)-成分に通し番号を付け，$\{\xi_1,\xi_2,...\}$ とする。弾性エネルギーは隣り合う２原子の変位の差の関数として与えられるから，変位についての展開の最低次で，ハミルトニアンと運動方程式は一般に

$$
\mathcal{H}=\sum_i\frac{m}{2}\,\dot{\xi}_i^2+\frac{1}{2}\sum_i\sum_j K_{ij}\xi_i\xi_j \tag{5}
$$

$$
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_i \;=\; -\sum_j K_{ij}\xi_j \quad (K_{ij}=K_{ji}\text{：正値・実対称行列}) \tag{6}
$$

の形に書くことができる。ここで，この連立線形微分方程式の特解として

$$\xi_i(t) = \eta_i \cos(\omega t + \alpha) \quad (\alpha\text{は任意の位相差}) \tag{7}$$

の形を仮定すれば

$$-m\omega^2 \eta_i \cos(\omega t + \alpha) = -\sum_j K_{ij}\eta_j \cos(\omega t + \alpha) \qquad \therefore \sum_j [K_{ij} - m\omega^2 \delta_{ij}]\ \eta_j = 0 \tag{8}$$

となり，これが自明でない解をもつ条件として

$$\det\ [K_{ij} - m\omega^2 \delta_{ij}] = 0 \quad (\textbf{固有値方程式}) \tag{9}$$

が得られる。したがって問題は実対称行列 $\{K_{ij}\}$ の対角化問題に帰着する。

そこで，直交行列 $\boldsymbol{U}$ ($\boldsymbol{U}^{-1} = \tilde{\boldsymbol{U}}$: 転置行列) があって，直交変換（座標の回転）

$$\xi_i = \sum_j U_{ij} q_j \tag{10}$$

により，行列 $\boldsymbol{U}$ が

$$(\tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{U})_{ij} = \kappa_i \delta_{ij} \tag{11}$$

と対角化できたとする。このとき運動方程式は

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\ \xi_i = m\sum_j U_{ij}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\ q_j = -\sum_j\sum_k K_{ij}U_{jk}q_k \tag{12}$$

これに左から $\tilde{\boldsymbol{U}}$ をかけることにより

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\ q_k = -\kappa_k q_k \tag{13}$$

となり，調和振動の運動方程式が得られる。これを**基準振動**という。このときハミルトニアンは，運動量を $p_i = m\dot{q}_i$ として

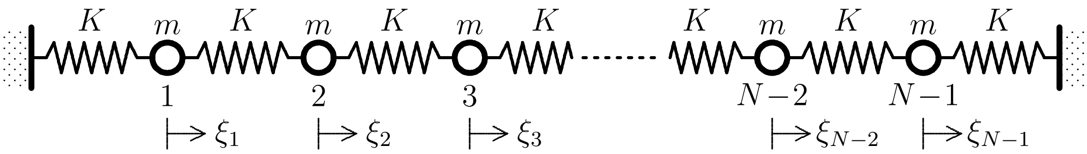
$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{m}{2}\sum_i \dot{\xi}_i^2 + \frac{1}{2}\sum_i\sum_j K_{ij}\xi_i\xi_j \\ &= \sum_i \left(\frac{1}{2m}{p_i}^2 + \frac{m{\omega_i}^2}{2}{q_i}^2\right) \qquad (\text{ただし } {\omega_i}^2 = \frac{\kappa_i}{m}\ )\end{aligned} \tag{14}$$

と，各基準振動子のエネルギーの単純和の形に分解される[1]。

このように，位相空間の座標回転により，等エネルギー面（エルゴード面）は（超）楕円面であることがわかる。しかしながらこのハミルトニアンでは各基準振動子は独立であって，各振動子ごとにエネルギーが保存される。したがって，軌道はこの楕円面上の限られた部分空間を形成するため，**結合調和振動子系ではエルゴード性は成り立たない。**

[1] 各質点の質量が均一である場合，運動エネルギーの2次式の係数は**単位行列**であり，直交変換では形は変わらず対角化されたままである。質量が異なる場合には，もう一工夫必要である。各質点の質量を m_i，平均的な質量を m，$\xi_i' = (m_i/m)^{1/2}\ \xi_i$ として，$K_{ij}' = (m^2/m_i m_j)^{1/2}\ K_{ij}$ を対角化すればよい。

３．**例２**　１次元振動子系（両端固定）



$N-1$ 個の質量 m の原子が，ばね定数 K のばねでつながれ，両端も同じばね定数のばねで固定されているとする。$\{\xi_i\}$ を鎖に沿った方向の変位として運動方程式は

$$\begin{aligned}
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_1 &= -K(2\xi_1-\xi_2) \\
&\cdots \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_r &= -K(-\xi_{r-1}+2\xi_r-\xi_{r+1}) \\
&\cdots \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_{N-1} &= -K(-\xi_{N-2}+2\xi_{N-1})
\end{aligned} \tag{15}$$

である。特解として

$$\xi_r = \sin r\theta\cos(\omega t+\alpha) \quad （\alpha は任意の位相差） \tag{16}$$

を仮定すると，$1<r<N-1$ に対して

$$\begin{aligned}
-m\omega^2\sin r\theta &= -K(2\sin r\theta-\sin(r-1)\theta-\sin(r+1)\theta) \\
&= -2K(1-\cos\theta)\sin r\theta
\end{aligned} \tag{17}$$

となり，固有値の候補として

$$\omega^2 = \frac{2K}{m}(1-\cos\theta) = \frac{4K}{m}\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{18}$$

が予想される。この解は，$r=1$ については

$$-m\omega^2\sin\theta = -K(2\sin\theta-\sin 2\theta) = -2K(1-\cos\theta)\sin\theta \tag{19}$$

で成立している。これに対して，$r=N-1$ については，恒等式

$$\sin(N-2)\theta+\sin N\theta = 2\sin(N-1)\theta\cos\theta \tag{20}$$

を用いれば

$$\begin{aligned}
-m\omega^2\sin(N-1)\theta &= -K[-\sin(N-2)\theta+2\sin(N-1)\theta] \\
&= -2K(1-\cos\theta)\sin(N-1)\theta-K\sin N\theta
\end{aligned} \tag{21}$$

となるから，θ が条件

$$\sin N\theta = 0 \tag{22}$$

を満たすとき成り立つ。したがって，θ は

$$\theta_p = \frac{p\pi}{N} \quad (p = 1, 2, ..., N-1) \tag{23}$$

を満たさなければならない。（$p = 0$ と $p = N$ は，いずれも「すべての $\xi_r = 0$」となり，特解にはならない。）以上より，特解は

$$\xi_r = \sin\left(\frac{rp\pi}{N}\right)\ \cos(\omega_p t + \alpha_p) \ \ , \ \ {\omega_p}^2 = \frac{4K}{m}\sin^2\frac{p\pi}{2N} \ \ , \ \ (p = 1, 2, ..., N-1) \tag{24}$$

であり，一般解はこの１次結合である。この場合の座標変換の直交行列 $\boldsymbol{U}$ は成分

$$U_{rp} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sin\left(\frac{rp\pi}{N}\right) \tag{25}$$

で与えられる。

（連続化）　原子間の間隔（格子定数）を a として，$L = Na,\ x = ra$ とおけば

$$\xi(x) = \sin kx \cos(\omega t + \alpha)\ , \quad k = \frac{p\pi}{L} \tag{26}$$

となり，縦波の**分散関係**

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{m}}\ \sin\frac{ka}{2} \tag{27}$$

が得られる。長波長領域では

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{K}{m}}\ ka \tag{28}$$

と近似され，波の位相速度と波長は

$$c = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{K}{m}}\ a\ , \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{p} > 2a \tag{29}$$

となる。$2a$ より短い波長のものは存在しない。

（横波）　鎖が全体として引き延ばされて両端を固定されている場合は，張力の働いている弦と同じで，横波を考えることができる。ばねの自然長を l とし，原子の鎖に対して横（垂直）方向の変位を $\{\eta_i\}$ とすると，ばねのエネルギーは

$$\frac{K}{2}(\sqrt{a^2 + (\eta_{i+1} - \eta_i)^2} - l)^2 - \frac{K}{2}(a - l)^2 \simeq \frac{K}{2}\left(1 - \frac{l}{a}\right)(\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \tag{30}$$

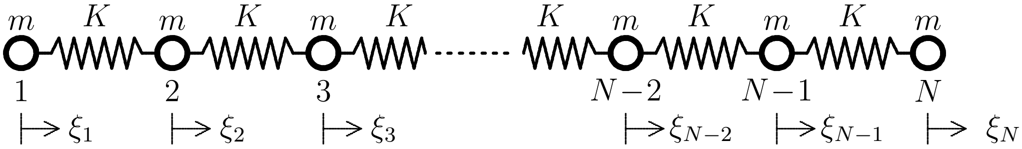
となるから，上の結果でばね定数 K を

$$K' = K\left(1 - \frac{l}{a}\right) \tag{31}$$

で置き換えればよい。弦の場合，張力を $T = K(a - l)$，密度（単位長さあたりの質量）を $\rho = m/a$ とすると，弦を伝わる横波の速さは，(28)，(29) より以下となる。

$$c = \sqrt{\frac{T}{\rho}} \tag{32}$$

４．**例３**　自由端の場合：N 個の原子が結合されており端は自由とする。



$$\begin{aligned}
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_1 &= -K(\xi_1 - \xi_2) \\
&\cdots \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_r &= -K(-\xi_{r-1} + 2\xi_r - \xi_{r+1}) \\
&\cdots \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\xi_N &= -K(-\xi_{N-1} + \xi_N)
\end{aligned} \tag{33}$$

上式をすべて足し合わせれば

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\sum_{i=1}^{N}\xi_i = 0 \tag{34}$$

であり，固有値の一つは明らかに０であることがわかる（**並進自由度**）。

ここで新たな座標として

$$\hat{\xi}_r = \xi_r - \xi_{r+1} \quad (r = 1, 2, ..., N-1) \tag{35}$$

とおくと

$$\begin{aligned}
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\hat{\xi}_1 &= -K(2\hat{\xi}_1 - \hat{\xi}_2) \\
&\cdots \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\hat{\xi}_r &= -K(-\hat{\xi}_{r-1} + 2\hat{\xi}_r - \hat{\xi}_{r+1}) \\
&\cdots \\
m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\,\hat{\xi}_{N-1} &= -K(-\hat{\xi}_{N-2} + 2\hat{\xi}_{N-1})
\end{aligned} \tag{36}$$

となり，固定端問題に帰着する。したがって，固有値は上の０を含めて

$$\omega_p = 2\sqrt{\frac{K}{m}}\sin\left(\frac{p\pi}{2N}\right) \quad , \quad (p = 0, 1, 2, ..., N-1) \tag{37}$$

である。特解は

$$\xi_r = \xi_1 - \sum_{k=1}^{r-1} \hat{\xi}_k \tag{38}$$

に対して

$$\sum_{k=1}^{r-1} \sin k\theta = \frac{1}{\sin\dfrac{\theta}{2}} \sin\frac{r\theta}{2} \sin\frac{(r-1)\theta}{2} = \frac{1}{2\sin\dfrac{\theta}{2}}\left[\cos\frac{\theta}{2} - \cos\left(r - \frac{1}{2}\right)\theta\right] \tag{39}$$

を用い，全原子がそろって振動する一様振動を除くため

$$\xi_1 = \frac{1}{2}\cot\frac{\theta}{2} \tag{40}$$

とおくと

$$\xi_r = \frac{1}{2\sin\dfrac{\theta}{2}}\cos\left(r - \frac{1}{2}\right)\theta \tag{41}$$

となる。これは，最初から特解を

$$\xi_r = \cos\left(r - \frac{1}{2}\right)\theta \ \ \cos(\omega t + \alpha) \quad （\alpha\text{は任意の位相差}） \tag{42}$$

と仮定することにより，固定端の場合と同様にして求めることができる。$1 < r < N$ の運動方程式からは，前と同様に

$$\omega^2 = \frac{4K}{m}\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{43}$$

が得られる。これは $r = 1$ については，公式

$$\cos\frac{3\theta}{2} = \cos\frac{\theta}{2}\ (2\cos\theta - 1) \tag{44}$$

を用いれば

$$\cos\frac{\theta}{2} - \cos\frac{3\theta}{2} = 2(1 - \cos\theta)\cos\frac{\theta}{2} \tag{45}$$

となり，満たされていることがわかる。$r = N$ については，公式

$$\cos\left(N - \frac{3}{2}\right)\theta = \cos\left(N - \frac{1}{2}\right)\theta\cos\theta + \sin\left(N - \frac{1}{2}\right)\theta\sin\theta \tag{46}$$

$$\begin{aligned}
&\sin\left(N-\frac{1}{2}\right)\sin\theta+\cos\left(N-\frac{1}{2}\right)\theta(1-\cos\theta) \\
=\;& 2\sin\left(N-\frac{1}{2}\right)\theta\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}+2\cos\left(N-\frac{1}{2}\right)\theta\sin^2\frac{\theta}{2} \\
=\;& 2\sin N\theta\ \sin\frac{\theta}{2} \qquad (47)
\end{aligned}$$

より

$$\cos\left(N-\frac{1}{2}\right)\theta-\cos\left(N-\frac{3}{2}\right)\theta=2(1-\cos\theta)\cos\left(N-\frac{1}{2}\right)\theta+2\sin N\theta\sin\frac{\theta}{2} \qquad (48)$$

したがって

$$\sin N\theta=0 \qquad (49)$$

が条件となり，やはり

$$\theta_p=\frac{p\pi}{N}\quad,\quad (p=0,1,2,...,N-1) \qquad (50)$$

が得られる。($p=N$ は $\theta=\pi$ となり，すべての $\xi_r=0$)

なお，この場合

$$\cos\left(N-\frac{1}{2}\right)\theta_p=\cos\left(p\pi-\frac{\theta_p}{2}\right)=(-1)^p\cos\frac{\theta_p}{2}\qquad\therefore\quad \xi_N=(-1)^p\xi_1 \qquad (51)$$

が成り立っている。

5．$N=3$ の自由端の場合

(1) $p=1$

$$\theta_1 = \frac{\pi}{3}\quad\rightarrow\quad \omega_1=2\sqrt{\frac{K}{m}}\sin\frac{\pi}{6}=\sqrt{\frac{K}{m}} \qquad (52)$$

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= \cos\frac{\pi}{6}=\frac{\sqrt{3}}{2} \\
\xi_2 &= \cos\frac{3\pi}{6}=0 \qquad (53)\\
\xi_3 &= \cos\frac{5\pi}{6}=-\frac{\sqrt{3}}{2}
\end{aligned}$$

(2) $p=2$

$$\theta_2 = \frac{2\pi}{3}\quad\rightarrow\quad \omega_2=2\sqrt{\frac{K}{m}}\sin\frac{2\pi}{6}=\sqrt{\frac{3K}{m}} \qquad (54)$$

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= \cos\frac{\pi}{3}=\frac{1}{2} \\
\xi_2 &= \cos\frac{3\pi}{3}=-1 \qquad (55)\\
\xi_3 &= \cos\frac{5\pi}{3}=\frac{1}{2}
\end{aligned}$$

６．連続体化

格子定数 a に比べて緩やかな変化に対して

$$\frac{1}{a^2}(\xi_{r-1}-2\xi_r+\xi_{r+1})=\frac{1}{a}\left(\frac{\xi_{r+1}-\xi_r}{a}-\frac{\xi_r-\xi_{r-1}}{a}\right)\simeq\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2} \tag{56}$$

とおけば，運動方程式は**波動方程式**

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\xi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}\ ,\quad c=\sqrt{\frac{K}{m}}a \tag{57}$$

と近似される。位相速度 c は (29) と一致している。３次元格子では

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\xi}{\partial t^2} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\xi \tag{58}$$

であるが，縦波と横波で位相速度 c が異なる。なお，講義ノートの**図 6.1** のような最近接間の結合だけではこの結果は得られず，次近接（斜め方向）の結合が必要である。

格子点 i，j における変位ベクトルを $\boldsymbol{\xi}_i$，$\boldsymbol{\xi}_j$，２点間のばね定数を $\{\kappa_{ij}\}$，２点の平衡位置を結ぶベクトルを $\boldsymbol{b}_{ij}$ とするとき，ばねの のびの長さ は

$$|\boldsymbol{b}_{ij}+(\boldsymbol{\xi}_j-\boldsymbol{\xi}_i)|-b_{ij}\simeq b_{ij}\left[1+\frac{\boldsymbol{b}_{ij}\cdot(\boldsymbol{\xi}_j-\boldsymbol{\xi}_i)}{{b_{ij}}^2}+\cdots\right]-b_{ij}=\frac{\boldsymbol{b}_{ij}\cdot(\boldsymbol{\xi}_j-\boldsymbol{\xi}_i)}{b_{ij}} \tag{59}$$

だから，$\boldsymbol{e}_{ij}=\boldsymbol{b}_{ij}/b_{ij}$ とおくとハミルトニアンおよび運動方程式は

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{1}{2}\sum_{i,j}\kappa_{ij}\ [\boldsymbol{e}_{ij}\cdot(\boldsymbol{\xi}_j-\boldsymbol{\xi}_i)]^2\\ &= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{r}}\sum_{b}\sum_{\alpha,\beta}\kappa(\boldsymbol{b})e_\alpha e_\beta\ [\xi_\alpha(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{b})-\xi_\alpha(\boldsymbol{r})][\xi_\beta(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{b})-\xi_\beta(\boldsymbol{r})]\end{aligned} \tag{60}$$

$$\begin{aligned}m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\xi_\alpha(\boldsymbol{r},t) &= \sum_b\sum_\beta\kappa(\boldsymbol{b})e_\alpha e_\beta\ [\xi_\beta(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{b})-\xi_\beta(\boldsymbol{r})]\\ &\simeq \frac{1}{2}\sum_b\sum_\beta\kappa(\boldsymbol{b})e_\alpha e_\beta\ (\boldsymbol{b}\cdot\nabla)^2\ \xi_\beta(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{61}$$

となる。ここで対称性 $\kappa(\boldsymbol{b})=\kappa(-\boldsymbol{b})$ を用いた。これから等方的な，すなわち座標回転で不変な波動方程式が導かれるためには，右辺は空間について２階の微分量から作られるベクトルの形になっていなければならない。この種のベクトルは２種類あり，一般形は

$$(A\nabla^2+B\nabla\nabla)\boldsymbol{\xi}=A\nabla^2\boldsymbol{\xi}+B\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{\xi}) \qquad \text{（注　}\nabla\nabla\text{ はテンソル積）} \tag{62}$$

である。したがって，この形を得るためにばね定数 $\{\kappa(\boldsymbol{b})\}$ の間に一定の制限がつく。

右辺がこの形に書けたとして，ここで任意のベクトル $\boldsymbol{\xi}$ に対して分解定理を用いて

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}_1 + \boldsymbol{\xi}_2 \ , \quad \nabla \cdot \boldsymbol{\xi}_1 = 0\,(\text{横波成分})\ , \quad \nabla \times \boldsymbol{\xi}_2 = 0\,(\text{縦波成分}) \tag{63}$$

と分解する（**注：**∇ が波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ に対応する。）と，運動方程式は

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,(\boldsymbol{\xi}_1 + \boldsymbol{\xi}_2) = A\nabla^2\boldsymbol{\xi}_1 + (A+B)\nabla^2\boldsymbol{\xi}_2 \tag{64}$$

となる。ここで公式 $\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{\xi}_2) - \nabla^2\boldsymbol{\xi}_2 = \nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{\xi}_2) = 0$ を用いた。(64) 式の両辺に ∇ をベクトル積としてかければ，$\nabla\times(\nabla^2\boldsymbol{\xi}_2) = \nabla^2(\nabla\times\boldsymbol{\xi}_2) = 0$ より

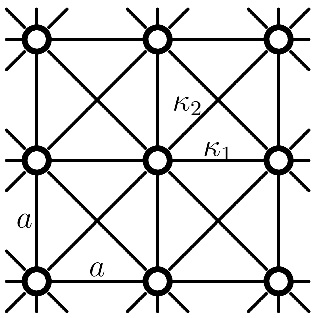
$$\nabla \times \left[m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\boldsymbol{\xi}_1 - A\nabla^2\boldsymbol{\xi}_1 \right] = 0 \tag{65}$$

であり，一方で $\nabla\cdot\boldsymbol{\xi}_1 = 0$ より $\nabla\cdot[...] = 0$ だから，$[...]$ はゼロベクトルである。同様に ∇ をスカラー積としてかければ，上とあわせて横波と縦波に対する波動方程式が得られる：

$$(\text{横波方程式})\qquad m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\boldsymbol{\xi}_1 = A\nabla^2\boldsymbol{\xi}_1\ , \quad {c_1}^2 = \frac{A}{m} \tag{66}$$

$$(\text{縦波方程式})\qquad m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\boldsymbol{\xi}_2 = (A+B)\nabla^2\boldsymbol{\xi}_2\ , \quad {c_2}^2 = \frac{A+B}{m} \tag{67}$$

例　２次元正方格子



最近接間および次近接間（対角線方向）のばね定数をそれぞれ κ_1，κ_2 とすると

$$\kappa_1:\ \boldsymbol{e}_1 = (\pm1, 0),\quad (0,\pm1),\quad \kappa_2:\ \boldsymbol{e}_2 = (\pm1/\sqrt{2}, \pm1/\sqrt{2}) \tag{68}$$

であるから，運動方程式は

$$\begin{aligned} m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\xi_x &= \kappa_1 a^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\xi_x + \frac{\kappa_2 a^2}{2}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\right)^2(\xi_x+\xi_y) + \left(\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial y}\right)^2(\xi_x-\xi_y)\right] \\ &= (\kappa_1+\kappa_2)a^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\xi_x + \kappa_2 a^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\,\xi_x + 2\kappa_2 a^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\,\xi_y \end{aligned} \tag{69}$$

となる。これは，$\kappa_1 = 2\kappa_2$ のときに等方性の条件を満たし，$\kappa_1 = \kappa$，$\kappa_2 = \kappa/2$ とおくと以下が得られる：

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\boldsymbol{\xi} = \frac{\kappa a^2}{2}\nabla^2\boldsymbol{\xi} + \kappa a^2\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{\xi}) \tag{70}$$

$$（横波方程式）\qquad m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\boldsymbol{\xi}_1 = \frac{\kappa a^2}{2}\nabla^2\boldsymbol{\xi}_1\ ,\quad c_1 = \sqrt{\frac{\kappa}{2m}}\ a \tag{71}$$

$$（縦波方程式）\qquad m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\boldsymbol{\xi}_2 = \frac{3\kappa a^2}{2}\nabla^2\boldsymbol{\xi}_2\ ,\quad c_2 = \sqrt{\frac{3\kappa}{2m}}\ a \tag{72}$$

3次元立方格子の場合

$$\begin{aligned}
\kappa_1 &: \ \boldsymbol{e} = (\pm1,0,0),\ (0,\pm1,0),\ (0,0,\pm1) \\
\kappa_2 &: \ \boldsymbol{e} = (\pm1/\sqrt{2},\pm1/\sqrt{2},0),\ (\pm1/\sqrt{2},0,\pm1/\sqrt{2}),\ (0,\pm1/\sqrt{2},\pm1/\sqrt{2}) \\
\kappa_3 &: \ \boldsymbol{e} = (\pm1/\sqrt{3},\pm1/\sqrt{3},\pm1/\sqrt{3})
\end{aligned} \tag{73}$$

までとると，等方性条件は $\kappa_1 = \kappa_2 + (8/3)\,\kappa_3$ である。やはり κ_1 だけでは等方的な波動方程式は導かれず，少なくとも κ_2，κ_3 のいずれかがなければならない。

一般的には（ここは「ファインマン物理学 IV」18 章 参照：ただし間違いがある。）

$$C_{\alpha\beta\gamma\nu} = \sum_b b^2\kappa(\boldsymbol{b})e_\alpha e_\beta e_\gamma e_\nu\ ,\quad \boldsymbol{e} = \boldsymbol{b}/b \tag{74}$$

$$（歪み）u_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\xi_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial\xi_\beta}{\partial x_\alpha}\right)\ ,\quad（応力）\sigma_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\nu} C_{\alpha\beta\gamma\nu}u_{\gamma\nu} \tag{75}$$

とおくとき，x，y，z に関する対称性

$$C_{xxxx} = C_{yyyy} = C_{zzzz},\quad C_{xxyy} = C_{yyxx} = C_{xxzz} = \cdots,\quad C_{xxxy} = 0,\cdots\quad \text{etc} \tag{76}$$

を用いれば，ハミルトニアン (60) は

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\gamma,\nu}\sum_b b^2\kappa(\boldsymbol{b})e_\alpha e_\beta e_\gamma e_\nu u_{\alpha\gamma}u_{\beta\nu} \\
&= \frac{1}{2}\ [\ C_{xxxx}({u_{xx}}^2 + {u_{yy}}^2 + {u_{zz}}^2) + 2C_{xxyy}(u_{xx}u_{yy} + u_{yy}u_{zz} + u_{zz}u_{xx}) \\
&\qquad + 4C_{xyxy}({u_{xy}}^2 + {u_{yz}}^2 + {u_{zx}}^2)\ ]
\end{aligned} \tag{77}$$

となる。**等方性条件**は，波動方程式を導く場合と同じ考えで，歪みテンソル $\boldsymbol{u} = \{u_{\alpha\beta}\}$ の各成分の 2 次式で作られるハミルトニアン $\mathcal{H}$ のスカラー性（座標回転不変性）

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\ [\ \lambda\ (\mathrm{Tr}\ \boldsymbol{u})^2 + 2\mu\ \mathrm{Tr}\ \boldsymbol{u}^2\ ] = \frac{1}{2}\ [\ \lambda\ (\sum_\alpha u_{\alpha\alpha})^2 + 2\mu\sum_{\alpha,\beta}u_{\alpha\beta}^2\ ] \tag{78}$$

（または 1 次式で作られる応力 $\boldsymbol{\sigma}$ のテンソル性でも同様）より

$$C_{xxxx} = \lambda + 2\mu,\ C_{xxyy} = \lambda,\ C_{xyxy} = \mu \quad \therefore\ C_{xxxx} = C_{xxyy} + 2C_{xyxy} \tag{79}$$

となる。このとき等方的な波動方程式が導かれ，その係数は以下となる：

$$A = \mu\ ,\quad B = \lambda + \mu \tag{80}$$