

氏名	中 澤 宏 なか ざわ ひろし
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	論 理 博 第 332 号
学位授与の日付	昭 和 45 年 11 月 24 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 2 項 該 当
学位論文題目	On Lattice Thermal Conduction (格子熱伝導について)
論文調査委員	(主 査) 教 授 巽 友 正 教 授 松 原 武 生 教 授 松 田 博 嗣

論 文 内 容 の 要 旨

主論文は規則格子における熱伝導を取扱っている。格子の両端を異った温度の熱槽と接触させた場合、格子を通して熱流が生ずるが、その際、格子の中に温度勾配が発生するかどうかが問題である。もし有限の温度勾配があるならば、熱伝導に関する Fourier の法則が成立することになるが、一方において、このような非可逆的な法則が何らの散逸機構をも、もたない規則格子において成立するということは理解しにくいことである。申請者はこの問題を調和格子と非調和格子の場合に分けて、前者を解析的に後者を数値的に取扱っている。

この種の計算で注意すべきことは、格子の両端と熱槽との接触部における境界条件のとり方である。申請者は境界条件が一般に、両端の格子点に働らく偶然力と粘性抵抗の二つを与えることによって指定できることを示した。

調和格子の場合に、申請者は一般の 3 次元格子を取扱い、それが 1 次元格子の場合に帰着できることを示した。そして 1 次元格子における熱伝導の解析の結果、調和格子では熱流はあっても温度勾配は現れない、すなわち Fourier の法則は成立しないことを示した。この場合、熱抵抗は両端での熱槽との接触抵抗の形でのみ現われることになる。

一方、非調和格子については、申請者は 1 次元格子における熱伝導を数値実験によって取扱い、非調和性が十分大きい場合には、格子内部で有限の温度勾配が現われるという結果を得た。非調和格子においては、格子振動間の相互作用のために熱抵抗が発生するという事は Peierls によって予想され、彼自身の理論によってある程度裏づけられていたが、彼の計算では 1 次元系については熱抵抗を導き出すことに成功しなかった。この点、申請者の結果は 1 次元系において有限の熱抵抗の存在をはじめて実証したもので、非常に興味ある結果である。

参考論文 1 は、無限の 1 次元格子の中に 1 個だけ軽い不純物がある場合、格子振動が不純物のまわりの局在振動に移行することを示したものである。参考論文 2 は、やはり無限 1 次元格子の中に 1 個だけ極端

に重い不純物が存在する場合、他の分子がこの不純物に及ぼす影響は、偶然力と粘性抵抗の和で表わされることを示したものである。参考論文3は、調和格子における熱伝導について、1次元格子の特別な場合における解を求めたもので、主論文への準備段階をなすものといえることができる。

論文審査の結果の要旨

固体は多くの場合、無数の結晶の集まりから成り、その理想化として完全結晶を考えることができる。完全結晶においては分子は格子状の規則正しい配列を形造っており、各分子は各格子点を中心に振動している。このように、格子は固体の一つの微視的なモデルを与える力学系であり、これを支配する方程式を解くことによって、固体のいろいろな性質を理論的に導き出すことができる。申請者は申請論文を通じて一貫して格子の振動を研究し、とくに主論文においては格子における熱伝導を取扱っている。

固体における熱伝導や拡散などのいわゆる輸送現象を支配する巨視的法則として、たとえば熱伝導の場合には、「熱流は温度勾配に比例する」という Fourier の法則が広く成立することが知られている。ところがこのような法則は、熱流に対する抵抗の存在を前提とする非可逆的な法則であり、規則格子のように何らの散逸機構をもたない力学系においては、成立しうるかどうか問題がある。

格子は大別すると、各分子間に働く力が平衡点からの変位に比例する復元力である“調和格子”と、非線型の復元力をもつ“非調和格子”とに分類される。調和格子においては、熱流は互いに独立な基準振動として伝達されるために、熱流に対する抵抗は存在せず、したがって、Fourier の法則は成立しないことが示される。一方、非調和格子の場合には事情はやや異り、各基準振動の間に相互作用が働くために、その結果として熱流が妨げられ熱抵抗が生ずる可能性がある。Peierls はこのような推論に従って、非調和格子の場合に熱抵抗を導き出す理論を作り上げたが、その計算の過程でいくつかの近似を採用したために、結果はあまり説得力あるものとは言えなかった。

申請者は主論文において、このようにいくつかの問題点を含む格子熱伝導の現象を、近似を含まないやり方で解析的および数値的に取扱った。用いた方法は、格子の両端を異った一定温度に保った場合の定常状態での熱伝導を調べるやり方である。この場合注意すべきことは、格子の両端での境界条件をどのように与えるかということであるが、申請者は、境界条件が両端の格子点に働く偶然力と粘性抵抗との二つを与えることによって一般的に規定できることを示した。

調和格子に関しては申請者は、一般の3次元格子における熱伝導を取扱い、それが1次元格子の場合に帰着できることを示した。その結果、調和格子の場合には、両端の温度差のために熱流は存在するが、温度勾配は格子内部では完全に0であり、熱抵抗は両端での接触抵抗として現われるにすぎないことを解析的に厳密に証明した。

一方、非調和格子の熱伝導については、申請者は数値実験によって定常状態での温度勾配の有無を調べた。その結果、分子間力の非調和部分を増していくと格子内で温度勾配が現われ、接触抵抗以外に正味の熱抵抗が生ずることが示された。これは、Peierls が予想しながら具体的には示しえなかった「非調和性から熱抵抗が導かれる」という仮説を、数値計算によって実証したものである。Peierls の理論では非調和項について1次の摂動までしか考慮していないために、1次元系では熱抵抗を導き出すことに成功

しなかった。申請者の計算ではこのような近似を行っていないために、非調和性が大きいときには1次元系においても有限の熱抵抗が現われることをはじめて示したもので、非常に興味ある結果であると言える。

もっとも、この計算には両端における境界条件の形で非可逆性が含まれているために、上の結果を直ちに「非調和性だけから非可逆的な熱抵抗が導かれる」と解釈することには問題がある。しかし少なくとも、非調和性が境界条件における非可逆を拡大し内部に伝達する役割を果たすことは実証されたわけであり、その意味でこの結果は、非可逆現象における非調和性の役割について重要な一知見を加えたものと言えることができる。

参考論文3編はいずれも1次元の格子振動を取扱っており、1個だけ質量が異なる不純物分子への他の分子の影響、そのまわりでの局在振動などを論じている。

よって、本論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認められる。