

流れは Fourier law に従わないが、これを熱伝導率 ∞ の場合と考えるわけにはいかない。一次元と二次元以上とでは本質的に違いがある、熱膨張は quasi-harmonic 近似でも同様な式が得られるであろう。

戸谷は anharmonicity が現われる現象をマクロな性質（弾性率 $\partial^2 c_{ij} / \partial p^2$ 、熱膨張、熱伝導、比熱）とミクロな性質（中性子回折、X線回折）に分ける事を提案した。戸谷は first principle からアルカリ金属について anharmonicity のポテンシャルで3次の項まで含めた計算をし、Grüneisen定数が実験と一致した。中性子による anharmonicity の知識はマクロな性質から求めたのと大体一致している。波が anharmonicity のためにこわれるまでに振動する回数は Pd や Na I で 1.5 回、Na で 5 回、Ge で 10 回である。この程度で phonon がくずれるとすると phonon picture とはどういう事であろうか。Ge は一番 anharmonicity の少ない物質である。

Discussion : phonon に対する反省、比熱がよくあうのはなぜか

滝沢はシュレーンガー座標を使つて一次元のエネルギー流れを扱う計算で起るむつかしさを述べた。これに関連して柏村が一つの計算上の問題を提出し、これは discuss している内に大体片付いたと思う。こういう点に研究会の一つの良さがある。

(戸田)

基礎的な話

調和振動子系で力学解やスペクトルを得る方法を端正にすることとその数学的構成を明瞭にする事は表裏一体の面白い問題である。

大沢は可算個の不純物を含む一次元格子のスペクトルを得る場合に多端子回路の散乱行列理論を使用して Green 函数を構成した。この方法では全体の S 行列が個々の不純物の S 行列の可算個の直積の形で表わされるから、個々の不純物がスペクトルに及ぼす影響を調べる為には今迄の理論よりも見通しがよい。彼はこの方法で他の方法で得られた結果を再現しているが、より詳細な結果が

研究会報告

得られるかどうかは現在検討中である。

もつと一般的な問題として朝日が提起したのは無限格子系における固有函数展開可能な函数空間の性質である。即ち朝日は無限個の定差方程式の解を $L^2(0, \infty)$ (ただし積分の代りに和) という函数空間に制限すれば固有函数展開が可能である事を証明した。議論の筋道は微分方程式の場合と同一である。この結果として一般に localized mode を求める場合に行う Green 函数の解析延長の方向の一方性 (実軸より上方) は上記の L^2 条件を満足する為に必要である事を示してその妥当性を保証した。この L^2 条件は十分条件であつて厳しすぎる場合もありうるが、濃度有限の不純物を含む無限系のスペクトル等の問題に対しては問題設定 (答) の妥当性の一つの評価基準として極めて大切なものと思われる。

(柏村)

回顧と展望 I

第一日目の午後五時から六時半まで、昨年の研究会の反省のための symposium に時間をとつた。不可逆性を論ずるのに、harmonic lattice だけとりあげていてよいのだろうかということが、話題の中心である。

不可逆性、即ち time-dependent な問題は、energy flow (heat conductivity), equilibrium に近づく問題, あるいは、ergodic problem 等であるが、harmonic lattice では、キチンと問題を追求できるので、どこまでいけるかを見きわめる事は、意味あるのではないか。とくに initial condition, initial ensemble のとり方は問題になる。更に Langevin eq. の friction term とか random force の意味づけから、heat-bath という概念のもつあいまいさに至るまで、多くの philosophy が述べられたが、物理的にも数学的にもあいまいさを残さないで、厳密にやるとなると、大仕事である。

いづれにせよ、ほかでやつていない問題で、しかもやらなければならない事