

氏 名	鶴 井 明 つる い あきら
学 位 の 種 類	工 学 博 士
学 位 記 番 号	工 博 第 332 号
学位授与の日付	昭 和 48 年 5 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 1 項 該 当
研 究 科 ・ 専 攻	工 学 研 究 科 数 理 工 学 専 攻
学 位 論 文 題 目	ON MODULATED WAVES IN ANHARMONIC LATTICES

(非調和格子における変調波について)

論文調査委員	(主 査) 教 授 伊 原 干 秋	教 授 上 田 顕	教 授 池 田 峰 夫
--------	----------------------	-----------	-------------

論 文 内 容 の 要 旨

この論文は固体の熱膨脹，結晶格子中の熱パルスの非線型伝播などに関連して，1次元の非調和格子を伝わる変調波の性質について研究したもので，5章からなっている。

第1章では，非調和格子に関連した研究の重要性について述べるとともに，この分野での他の研究と比較しながら，この論文の概要を述べ，あわせてこの研究で用いられる摂動の方法についての簡単な説明を行っている。

第2章では，1次元の単原子非調和格子を取り上げ，その中での変調波の性質を調べている。すなわち，まず Taniuti, Yajima によって提案された漸近摂動の方法を，格子力学の運動方程式に適用し，連続体近似を行わずに，漸近展開の最低次で，変調波のゆっくり変化する振幅の時間的发展を記述する方程式を導き出し，それが最終的には非線型の Schrödinger 方程式になることを示している。しかもその場合，この変調波のほかに，それに付随してもう一つ別の形でゆっくり変化する同じ程度の大きさの波が現われ，ある条件のもとでは，これが格子を膨脹させ，平面波を安定させる作用をもつことを見出した。そしてこのことからポテンシャルの非線型性と格子を伝わる波の周波数との相互関係によって，平面波が安定になる領域と不安定になる領域とが存在することを導き出した。つぎに格子の熱膨脹について議論するため，Grüneisen 比を計算し，平面波が不安定になる領域ではそれが負になること，すなわちある種のポテンシャルをもつ格子では，十分高温で熱膨脹係数が負になる可能性があることを示した。

第3章では，2種の原子からなる1次元の非調和格子を取り上げているが，この場合にも軽い原子，重い原子に対応して現われる二つの波 (envelope wave) がともに非線型 Schrödinger 方程式にしたがうことを見出している。そのうえ2原子格子の場合には，音響モードと光学モードが存在するので，ポテンシャルが非対称形のときには，光学モードにも，前章でえられたような膨脹波が随伴し，平面波の安定性に決定的な影響を与えることが示されている。

第4章では，不規則な非調和格子を伝わる変調波の性質を調べている。これは最近観測された熱パルス

の self-steepening 効果に対する格子中の不純物の影響を調べる目的で取り上げたものであり、そのためこの効果の説明に重要であると思われる対称非調和ポテンシャルが用いられている。まず不純物の影響が小さい場合に限り、前の各章と同じ摂動の方法を使って、変調波のゆっくり変化する振幅の振舞いを記述する方程式を導き、それが前に述べた非線型 Schrödinger 方程式に付加項がついた形に帰着することを示し、さらにまたここでは前の例でえられた膨脹波のほかに、不純物の不規則分布のために、種々の波数をもつ小振幅の波が励起されることをも示している。このため入射熱パルスは格子を伝わる間に、このような小さい波を引き起こしながら、漸次エネルギーを失ない、その振幅が減衰するのであるが、その減衰率をも求めている。

第5章では、以上の各章での主な結果のまとめと、いくつかの注意を述べている。

論文審査の結果の要旨

結晶格子のもついくつかの性質を格子振動の立場から説明しようという試みは古くから行なわれ、調和ポテンシャルを使った近似で、ある程度の解明がなされているが、非調和ポテンシャルを使わなければ、説明できない部分も多いのである。しかし非調和ポテンシャルをもつ格子の取扱いは非常にむづかしく、その基礎的研究もあまり行なわれていないのが現状であって、今後大いに開拓されなければならない領域である。

本論文はそのうち特に格子の熱膨脹、熱パルスの伝播など、結晶格子の熱的性質を解明するため、1次元の非調和格子中を伝わる変調波の性質を、連続体近似を使わずに調べて、以下のような結果をえている。

1. 1次元の非調和格子においては、振幅が非線型 Schrödinger 方程式にしたがう変調波のほかに、必ずもう一つ別の形の波が現われ、これがある条件のもとでは格子を膨脹させ、平面波を安定にすることを示した。このような変調波に関する研究は、これまでも二、三あって、特に Lowell は、1次元非調和格子中の平面波は常に不安定であるとの結論を出している。しかし著者は、これは平面波を安定化する上述の膨脹波を考慮しなかったためであることを指摘するとともに、もしこの波を考慮しなければ、2原子格子の場合に、光学モードの平面波が長波長側で不安定になるという不自然な結果が導かれることを明らかにした。

2. 単原子格子中の変調波と格子の熱膨脹との関連を見るために、Grüneisen 比を求め、その結果、一般に熱膨脹係数が正になることを示したが、ある種のポテンシャルをもつ格子では、十分高温でそれが負になりうることをも見出した。このような現象は確かに存在し、簡単なモデルにも拘らず、物理的に自然な結果がえられたわけで、他の研究と違って、1次元格子がこのような問題に対する結晶モデルとして、十分有効であることを示した。

3. 不純物の混入が熱パルスの伝播に及ぼす影響を見るため、不規則1次元格子中の変調波の性質を調べているが、この場合不純物の不規則な分布のために、入射波は種々の波数の小さい波を励起しながら伝播し、次第にそのエネルギーを失うという考えを導入して、変調波の振幅の時間変化を記述する新しい方程式を導き出すことに成功している。これは非線型 Schrödinger 方程式に付加項がついた比較的簡単な形のものであって、これを使うと、熱パルスの振幅の減衰率を求めることができるが、この種の解析を行

ったのは、著者がはじめてである。

以上を要するに、この論文は1次元の非調和格子中の変調波の性質を解析して、注目すべき基礎的結果を導き出し、未開拓のこの分野に一步踏み込んだものであって、理論上、応用上寄与するところが少ない。

よって、本論文は工学博士の学位論文として価値あるものと認める。