

非線型の問題 II

phonon conduction, anharmonicity, thermal expansion, 原子力
力間の anharmonicity は種々の現象に現われる。普通は phonon の散乱に
よつて熱抵抗が現われるとしていて、その原因を anharmonicity によるもの
としている。harmonic な場合でも不純物が多数ある場合のエネルギー流れの
問題はまだ解けていない。孤立系の平衡への近接に anharmonicity がどの
位本質的であるかは議論の多いところである。

小野は phonon conduction, thermal expansion についていくつかの
注意を与えた。(i) phonon に dispersion がなければ、エネルギーと運動
量との保存則は同じであるから phonon の分裂などが起つても熱抵抗とはなら
ず、dissipation は起らない。(ii) umklap があれば運動量の保存則が破ら
れるので dissipation が起り得る。

特に一次元 monatomic の場合は umklap はなく、phonon resistance
は起り得ない。しかし縦と横の振動 mode があれば umklep が起り得る事を
Peierls も注意している。一次元で diatomic chain の場合は 2 つの bran-
ch があるので umklap が起り得るかも知れない(この点は吟味の必要あり)
これらの注意をしてから小野は phonon number $N_s^{\vec{k}}$ ($\vec{k}$ は波数, s は polariza-
tion) の平衡からの偏差 $n_s^{\vec{k}}$ に対する Boltzmann 方程式

$$\left(\frac{\partial n_s^{\vec{k}}}{\partial t}\right)_c = \text{drift term}$$

を具体的に書いて議論を進めた。右辺は温度勾配 $\text{grad } T$ に比例する。これが
解を持つためには右辺を 0 とおいた斉次方程式の解が drift term と直交す
る事が必要である。もしも $\vec{k} + \vec{k}'' + \vec{k}''' = 0$ とすると $\text{grad } T = 0$ 以外に解
がない事が示される(一次元の場合に注意)。

一般に熱抵抗と Fourier law とは必ずしも同じでない事も注意しておく必
要がある。

小野は更に熱膨張に関する McDonald の統計力学的計算を紹介した。

Discussion : 不純物のある harmonic crystal (一次元) のエネルギー

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 $\partial^2 c_{ij} / \partial p$ 、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づかしさを述べた。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 関数を構成した。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