

格子熱伝導について

京大理 中 沢 宏

格子熱伝導に関しては最近 Kubo Formula の適用¹⁾ という立場からいくつかの進歩がなされた。²⁾ しかし特定の非調和力を持つ格子模型に対して熱伝導率を実際に計算できる状況にはまだ立ち到っていない。

最近 Payton et al.³⁾ はより直観的な、2つの温度を持ついくつかの heat bath の作用の下で有限長の一次元並に二次元格子が到達する定常状態について数値実験を試みた。彼等の扱った heat bath は Lebowitz 流の一次元完全気体であり、model としての格子は harmonic なものと anharmonic なもの、そしてそれぞれについて isotopic impurity の種々の濃度のものである。結果の主な点は次の通りである。

(1) impurity がある程度多くなると、熱抵抗は anharmonicity が存在する方がかえって小さくなる。

(2) 質量 m と m' の粒子を濃度比 c, c' ($c' = 1 - c$) で混ぜた格子の熱伝導率 $K(c, c')$ は c と c' について対称にならない：

$$K(c, c') \neq K(c', c)。$$

結果(1)はもちろん数値計算が最低次の摂動（その範囲では抵抗は加法的になるはずである）だけでは駄目な領域に亘っている事を示しているが、眼目は Payton 達が、impurity を含む格子の normal mode の localization の考え方をを用いて(1)を定性的に説明できた点にある。また(2)は Payton 達によれば重い host の間に軽い impurity が入る場合とその逆とでは normal mode の localization が異なる事によって説明される。

この数値実験にはいくつかの問題がある。それらの主なものは次の諸点である。

(a) 格子の両端の heat bath に近い部分では各粒子の温度が線型変化から大きくずれる。これは「温度勾配」の定義に多少困難をもたらす。

(b) 格子の両端の heat bath の温度の差は heat current を計算誤差

の中に埋もれさせないために有限の、かなり大きい値にとらなければならない。このためにフーリエの法則による熱伝導率の定義が正しいかどうかよくわからない。

(c) impurity があってもなくても、harmonic な場合には熱伝導率は温度によって変らないという結論⁴⁾と Payton 達のものとは異なる。これは heat bath のとり方によるものなのか、或は計算誤差の集積のためであるうか。

harmonic linear chain の場合の解析的に厳密な結果⁴⁾によると(a)の問題は粒子数 N を大きくすればそれで解決される問題で、多分 Payton 達の場合 ($N \sim 100$) で十分だろうと思われる。(b)の点は、しかし別の formulation をとらなければ解決できない。研究会ではこの formulation について報告した。これはすべての量から温度差に linear に依存する部分を⁴⁾抜き出そうというものである。また(c)についてはさらに別の formulation を用いて check すべきであると考ええる。

そもそも完全剛体球から作られる極端に非調和的な格子では温度勾配は存在し得ず、従って熱抵抗はない。これは完全な調和格子と同じである。一体どの様な非調和力がどの様に熱抵抗を惹き起すのであるか？ 上に述べた formulation による数値計算は未だに目論見の段階に過ぎないが、これによって Payton 達の結論を精密化するのみならず、さらに atomic な定数から組み立てられた anharmonic lattice の模型について熱伝導率 — 温度曲線の確実なところを出したいものだと思っている。

参 考 文 献

- 1) R. Kubo, Lectures in Theoretical Physical Physics (Boulder), vol. I (1958).
H. Mori et al., Studies in Statistical Mechanics, vol. I (1962), North-Holland Publishing Company, Amsterdam.
B. U. Felderhof and I. Oppenheim, Physica 31 (1965)

中沢 宏

1441.

- 2) P. Choquard, *Helv. Phys. Acta* 36(1963) 415.
R. J. Hardy, *Phys. Rev.* 132(1963) 168.
R. J. Hardy et al., *J. math. Phys.* 6(1965) 1741.
R. J. Hardy, *J. math. Phys.* 6(1965) 1749.
J. Ranninger, *Phys. Rev.* 140(1965) 2031.
- 3) D. N. Payton et al., *Phys. Rev.* 160(1967) 706.
- 4) Z. Rieder et al., *J. math. Phys.* 8(1967) 1073.
H. Nakazawa, *Prog. theor. Phys.* 39(1968) 236.