



JP0150888

JAERI-Research

2001-045



# 黒鉛の格子振動の温度依存性と比熱の解析

(協力研究)

2001年11月

仁平 猛・岩田 忠夫・岩瀬 彰宏

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。  
入手の問合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費領布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2001

編集兼発行 日本原子力研究所

## 黒鉛の格子振動の温度依存性と比熱の解析 (協力研究)

日本原子力研究所東海研究所物質科学研究部  
仁平 猛<sup>※1</sup>・岩田 忠夫<sup>※2</sup>・岩瀬 彰宏

(2001年8月30日受理)

Komatsu と Nagamiya によって提案された黒鉛の格子振動の半連續体モデルは、格子振動の分散関係を解析的に表すことに成功した唯一のもので、分散関係の表式には層面間距離  $c$ 、弾性定数  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$ 、 $C_{44}$  および  $\kappa$  がパラメータとして含まれている。ここで、 $c\rho\kappa^2$  は層面の曲げの弾性定数、 $\rho$  は密度である。われわれは、これらのパラメータを温度の関数として取り扱うことにより、この半連續体モデルを改良する。 $\kappa$  以外のパラメータには既知の実験データおよびそれから導いた関係を用いる。 $\kappa$  は、改良した半連續体モデルによる比熱の計算値を実験値に一致させることにより、温度の関数として求める。改良した半連續体モデルは、360K 以下の広い温度範囲にわたって比熱の実験値をよく説明し、その温度範囲で熱伝導などの解析に用いることができる。 $\kappa$  は温度上昇とともに著しく減少するが、これは out-of-plane モード振動の softening が起こることを示す。比熱の実験曲線の温度による 2 階微分は格子振動の振動数分布についての情報を与える。低温比熱の解析から、 $C_{44}$  の室温の値は  $0.415 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  であると確定される。

---

本研究は茨城大学との協力研究のもと実施された。

東海研究所：〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4

※1 平成 13 年 3 月まで茨城大学工学部に在職

※2 平成 13 年 3 月まで研究嘱託

Temperature Dependence of Lattice Vibrations and Analysis of  
Specific Heat in Graphite  
(Cooperative Research)

Takeshi NIHIRA<sup>\*1</sup>, Tadao IWATA<sup>\*2</sup> and Akihiro IWASE

Department of Materials Science  
Tokai Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 30, 2001)

The semi-continuum model of lattice vibrations of graphite proposed by Komatsu and Nagamiya is the only one that has succeeded in expressing analytically the dispersion relation of lattice vibrations. The expressions of the dispersion relation contain the interlayer spacing,  $c$ , and the elastic constants,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{44}$  and  $\kappa$ , as parameters, where  $c\rho\kappa^2$  is the bending elastic constants of a graphite layer and  $\rho$  is the density. We improve the semi-continuum model by taking these parameters as a function of temperature. For the parameters except  $\kappa$ , we use the experimental data already known and the relations derived from them.  $\kappa$  is derived as a function of temperature by fitting the calculated specific heat to the experimental one. The improved semi-continuum model can explain the specific heat well in the temperature range below 360 K and be reliably used there for the analysis of thermal conductivity, etc..  $\kappa$  decreases largely with temperature increasing, which means that there occurs the softening of the out-of-plane vibration. The second derivative of the experimental specific heat curve with respect to temperature gives information on the frequency distribution of lattice vibrations. From the analysis of the low-temperature specific heat, the value of  $C_{44}$  at room temperature is determined to be  $0.415 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ .

Keywords : Graphite, Lattice Vibrations, Specific Heat, Elastic Constants, Thermal Expansion, Temperature Dependence, Phonon Frequency Distribution

---

This research was performed by cooperative research with Ibaraki University.

<sup>\*1</sup> Faculty of Engineering, Ibaraki University (~ March, 2001)

<sup>\*2</sup> Research Consultant (~ March, 2001)

## 目 次

1. はじめに . . . . .	1
2. Komatsu-Nagamiya の Semi-Continuum Model . . . . .	2
3. 弹性定数とその温度依存性 . . . . .	4
4. 热膨張 . . . . .	5
5. Debye 振動数 . . . . .	6
6. 比熱の計算 . . . . .	8
7. 比熱の実験値の評価 . . . . .	9
8. 比熱の計算値と実験値の比較及び $C_{44}$ と $\kappa$ の決定 . . . . .	10
9. 格子振動の温度依存性 . . . . .	12
10. 比熱の実験曲線の 2 階微分と格子振動の振動数分布 . . . . .	13
11. おわりに . . . . .	14
謝 辞 . . . . .	15
参考文献 . . . . .	15

## Contents

1. Introduction . . . . .	1
2. The Semi-Continuum Model Proposed by Komatsu and Nagamiya . . . . .	2
3. Elastic Constants and Their Temperature Dependence . . . . .	4
4. Thermal Expansion . . . . .	5
5. Debye Frequencies . . . . .	6
6. Calculation of Specific Heat . . . . .	8
7. Evaluation of Experimental Specific Heat Data . . . . .	9
8. Comparison between the Calculated and the Experimental Values of Specific Heat and Determination of $C_{44}$ and $\kappa$ . . . . .	10
9. Temperature Dependence of Lattice Vibrations . . . . .	12
10. Second Derivative of Experimental Specific Heat Curve and Frequency Distribution of Lattice Vibrations . . . . .	13
11. Conclusions . . . . .	14
Acknowledgments . . . . .	15
References . . . . .	15

This is a blank page.

## 1 はじめに

黒鉛は異方性の著しい興味ある物質である。その格子振動については、既に多くの理論的および実験的研究が行われている [1-21]。そのうち、Komatsu と Nagamiya によって提案された semi-continuum model [1,3] は、格子振動の分散関係を解析的に表すのに成功した唯一のモデルであつて、比熱 [1,3,22-24]、熱伝導 [25-34]、熱膨張 [35]、熱振動振幅 [36,37]、弾性定数 [38]、電気抵抗 [39-41]、熱電能 [42] などの計算に使われている。この semi-continuum model では、格子振動が in-plane longitudinal mode、in-plane transverse mode および out-of-plane mode の三つのモードに分離され、それらの分散関係の表式には層面間距離  $c$ 、弾性定数  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$ 、 $C_{44}$  および  $\kappa$  がパラメータとして含まれている。ここで、 $c \rho \kappa^2$  は a graphite layer の曲げの弾性定数、 $\rho$  は密度である。

本研究では、この semi-continuum model について、弾性定数の温度変化および格子定数の熱膨張を取り入れて、モデルの改良を試みる。因みに、等方性固体の格子振動の Debye 理論においては、格子振動の温度依存性は Debye 温度（あるいは Debye 振動数）が温度の関数として変化することによって記述されている [43-45]。

格子振動モデルの妥当性を評価する直接的な方法の一つは、モデルによる比熱の計算値を比熱の実験値と比較することである。Komatsu は  $C_{44}$  と  $\kappa$  を主な adjustable parameters として semi-continuum model により比熱を計算し、結晶性の異なるいろいろな黒鉛試料について、20 K 以下の比熱の実験値に一致するように  $C_{44}$  と  $\kappa$  を決めた [22,23]。そのようにして決めた  $C_{44}$  は試料の結晶性に依存した。また、 $\kappa$  は ref. 1 で得られたものとは大きく異なるものであった。そして、20 K 以上では、比熱の計算値は実験値から徐々にずれていった。そこでは、弾性定数の温度変化は考慮されていなかった。即ち、弾性定数の一組が適当に選ばれ、固定されるとき、これまでの semi-continuum model は 20 K 以下の低温領域でのみ妥当なものである。われわれは、妥当な温度範囲をさらに高温領域まで拡張するためには、このモデルのパラメータに温度依存性を取り入れる必要があると考える。

モデル・パラメータの温度依存性は以下のように取り入れる。 $\kappa$  以外のパラメータには既知の実験データ及びそれらから導いた関係を用いる：室温における  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$  および  $C_{33}$  には、Blakslee らが ultrasonic 法などの力学的試験法によって測定した値 [46] を用いる。後に述べるように、室温の  $C_{44}$  については、力学的試験法から得られた値と比熱や中性子散乱の解析から得られた値が一致せず、未確定である。そこで、われわれは改良したモデルによる低温比熱の計算から新たに一義的に決めた値、 $C_{44} = 0.415 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ 、を用いる。これらの全  $C_{ij}$  の相対的な温度変化は、Hwang [47] によって測定された  $C_{33}$  のそれと同じであると仮定する。層面間距離の温度変化は、室温以上のデータに、Bailey and Yates [48] が 20-270 K で測定した熱膨張のデータを組み合わせて求める。一方、 $\kappa$  は adjustable parameter として、改良した semi-continuum model

により比熱を計算し、それを実験値に一致させることにより  $\kappa$  の温度依存性を決める。

ここで採用する実験値は、現時点で報告されている比熱の全実験データをわれわれが新たに評価した比熱データである。また、評価した比熱の実験曲線の温度による 2 階微分は、格子振動の振動数分布についての情報を与えることを示す。

本解析においては、0.4 – 360 K の温度範囲で、比熱の計算値が実験値とよく一致し、 $\kappa$  の温度依存性を決めることができた。即ち、温度依存性を取り入れた semi-continuum model は 360 K 以下の温度範囲で妥当なものに改良された。この改良モデルは、妥当な温度範囲が広がったことにより、異方的な熱伝導の温度依存性の定量的な解析などに適用できる。 $\kappa$  は温度上昇とともに著しく減少し、その温度変化の割合は  $C_{ij}$  のそれよりも大きい。これは out-of-plane モード振動の softening が起こることを示している。

## 2 Komatsu-Nagamiya の Semi-Continuum Model

Komatsu と Nagamiya によって提案された黒鉛の格子振動の semi-continuum model [1,3] の概要について述べる。格子振動は in-plane longitudinal mode, in-plane transverse mode, out-of-plane mode の三つのモードに分離され、それぞれの分散関係は、 $\omega$  を角振動数、 $q$  を波数ベクトルとすると

$$\begin{aligned}\omega_l^2 &= v_l^2(q_x^2 + q_y^2) + \frac{4\zeta}{c^2} \sin^2 \frac{cq_z}{2} \\ \omega_t^2 &= v_t^2(q_x^2 + q_y^2) + \frac{4\zeta}{c^2} \sin^2 \frac{cq_z}{2} \\ \omega_c^2 &= \kappa^2(q_x^2 + q_y^2)^2 + 4\mu^2 \sin^2 \frac{cq_z}{2} + \zeta(q_x^2 + q_y^2)\end{aligned}\quad (1)$$

である。ここで添え字  $l$ ,  $t$ ,  $c$  はそれぞれ in-plane longitudinal mode, in-plane transverse mode および out-of-plane mode を表す。また、 $v$  は速度を表し、それは弾性定数を用いると

$$v_l = \sqrt{\frac{1}{\rho} \left( C_{11} - \frac{C_{13}^2}{C_{33}} \right)} \quad v_t = \sqrt{\frac{1}{2\rho} (C_{11} - C_{12})} \quad (2)$$

である。 $\zeta$  および  $\mu$  のそれぞれは、

$$\rho\zeta = C_{44} \quad (3)$$

および

$$c^2\rho\mu^2 = C_{33} \quad (4)$$

によって弾性定数  $C_{ij}$  と関係づけられる。ここで  $\rho$  は黒鉛の体積密度、 $c$  は  $c$  軸方向の層面間距離を表す。また、 $c\rho\kappa^2$  は a graphite layer の曲げの弾性定数である。

in-plane longitudinal mode および in-plane transverse mode の振動数分布関数は、(1) の分散関係から次式で与えられる。

$$\omega \leq \omega_z : \quad D(\omega) = \frac{V}{\pi^2 c v_i^2} \omega \sin^{-1} \frac{\omega}{\omega_z} \quad (5)$$

$$\omega \geq \omega_z : \quad D(\omega) = \frac{V}{\pi^2 c v_i^2} \omega \frac{\pi}{2} \quad (6)$$

ここで

$$\omega_z = 2 \frac{\sqrt{\zeta}}{c} = 2 \sqrt{\frac{C_{44}}{c^2 \rho}} \quad (7)$$

である。 $V$  はモル体積を表し、添え字  $i$  は  $l$ 、 $t$  を指す。

また、out-of-plane mode の振動数分布関数は、(1) の分散関係から次式で与えられる。

$\omega \leq \omega'_z :$

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 \kappa c} \left( \frac{\omega}{\omega'_z} \right) \int_0^{\sin^{-1}(1/\sqrt{1+\zeta^2/\omega^2})} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \left( \frac{\omega}{\omega'_z} \right)^2 \left( 1 + \frac{\zeta^2}{4\kappa^2 \omega^2} \right) \sin^2 \phi}} \quad (8)$$

$\omega \geq \omega'_z :$

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 \kappa c} \left( 1 + \frac{\zeta^2}{4\kappa^2 \omega^2} \right)^{-1/2} \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \left( \frac{\omega'_z}{\omega} \right)^2 \left( 1 + \frac{\zeta^2}{4\kappa^2 \omega^2} \right)^{-1} \sin^2 \phi}} \quad (9)$$

ここで

$$\omega'_z = 2\mu = 2 \sqrt{\frac{C_{33}}{c^2 \rho}} \quad (10)$$

である。

また、3つのモードの Debye 振動数  $\omega_D$  は、それぞれのモードの振動数分布関数を  $D(\omega)$  とする

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = N_0 \quad (11)$$

から求まる。ここで、 $N_0$  は Avogadro 定数で  $6.0225 \times 10^{23} / \text{mol}$  である。

この semi-continuum model に温度の効果を取り入れるため、3 節で弾性定数の温度依存性について、4 節で熱膨張について述べる。

### 3 弾性定数とその温度依存性

semi-continuum model では、格子振動の分散関係の表式に互いに独立な弾性定数  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$ 、 $C_{44}$  および  $\kappa$  がパラメータとして含まれている。Blakslee らは、高配向性熱分解黒鉛 (Highly Oriented Pyrolytic Graphite, HOPG) について室温における弾性定数を ultrasonic 法、sonic resonance 法および static test 法により測定した [46]。その結果、 $C_{44}$  以外の  $C_{ij}$  については、得られた値は黒鉛単結晶の  $C_{ij}$  を示すものとして確定し、広く受け入れられている。

室温における  $C_{44}$  については、測定した試料あるいは測定法によって著しく異なる値が報告されている。上述の Blakslee らの値は  $(0.018 \sim 0.035) \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  である [46]。Soule and Nezbeda は単結晶について static shear stress-strain 測定および ultrasonic 法の測定を行い、 $(0.013 \sim 0.166) \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  を得た [49]。これらの力学的測定より得られた値は、basal-plane dislocations の存在の影響によって、intrinsic の値より小さくなっていると考えられている。Boron doping [49] によって、あるいは中性子照射による欠陥の導入 [50,51] によって dislocation pinning を行うと、 $C_{44}$  の値は大きくなる。一方、低温比熱の解析から natural graphite の  $C_{44}$  が求められており、Bowman and Krumhansl [52] は  $0.23 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  を、Komatsu [22,23] は  $0.405 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  および  $0.452 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  を得ている。また、中性子散乱測定の解析から求めた  $C_{44}$  として、Dolling and Brockhouse [9] は  $(0.42 \pm 0.2) \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  を、Nicklow ら [11] は  $(0.46 \pm 0.02) \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  を与えている。このように、室温の  $C_{44}$  の値はこれまで確定していない。後に述べるように、本研究においてわれわれは、低温における比熱の解析から、室温の  $C_{44}$  は  $0.415 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  であると確定する。

Gauster and Fritz は、HOPG について 5 個の弾性定数  $C_{ij}$  を 4~300 K の温度範囲で ultrasonic 法により測定し、全ての  $C_{ij}$  の相対的温度変化がほとんど同じであることを示した [53]。後に Hwang は、HOPG の  $C_{33}$  について 4~325K の温度範囲で ultrasonic 法による高精度の測定を行った [47]。 $C_{33}$  の温度変化については、190~2200 K の高温領域で中性子散乱法による測定が行われているが、その結果は低温領域の ultrasonic 法によるものにはほぼ繋がっている [54-56]。

このような従来の研究に基づいて、われわれは先ず、Hwang の実験結果を採用する [47]。彼が

$C_{33}$ について得た結果は次の式で表される。

$$\frac{C_{33}(T)}{C_{33}(0)} = f(T) = \begin{cases} 1.0 - 0.92 \times 10^{-6} T^2 & : T \leq 136 \text{ K} \\ 1.017 - 2.5 \times 10^{-4} T & : T \geq 136 \text{ K} \end{cases} \quad (12)$$

さらに、 $C_{33}$ 以外の弾性定数  $C_{ij}$  の相対的温度依存性は  $C_{33}$  のそれと同じであると仮定する。即ち、 $C_{ij}(T)/C_{ij}(0) = C_{33}(T)/C_{33}(0)$  とする。このとき、 $C_{ij}(293)/C_{ij}(0) = C_{33}(293)/C_{33}(0) = 0.944$  であるから、温度  $T$  における弾性定数  $C_{ij}(T)$  は

$$C_{ij}(T) = \frac{C_{ij}(T)}{C_{ij}(0)} \times \frac{C_{ij}(293)}{0.944} = f(T) \times \frac{C_{ij}(293)}{0.944} \quad (13)$$

となる。

$\kappa$ の値は、通常の力学的測定からは求められず、比熱あるいは中性子散乱の解析から得られるものである。Komatsu and Nagamiya は ref. 1において  $C_{44}=0$  と仮定して、250 K 以上の比熱の解析から  $\kappa$ として  $0.381 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$ を得た。また、Komatsu は refs. 3, 22, 23 では  $C_{44} \neq 0$ として、15 ~ 60 K および 20 K 以下の比熱の解析から  $\kappa$ は  $0.611 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$ であるとしている。二つの異なる  $\kappa$ を採用したことについて、Komatsu は何の説明もしていない。われわれは、これは  $\kappa$ が温度によって異なることを示していると考える。 $\kappa$ の相対的温度変化が  $C_{ij}$  のそれと同じかどうかはわからない。われわれは  $\kappa$ を未知のパラメータとして、それを比熱の計算値と実験値が一致するように決めるにすることにする。

Table Iに、改良された semi-continuum model で用いる弾性定数および関連の量の室温における値を示す。本研究で得られた  $\kappa$  の温度変化については、後に 8 節で述べる。

4 热膨胀

Bailey and Yates は、HOPG の  $c$  軸に平行な方向および垂直な方向について、20~270K の温度範囲で熱膨張係数を測定した [48]。ここでは、 $c$  軸に平行な方向の熱膨張のみを考える。 $c$  軸に垂直な方向、即ち面内の熱膨張係数は、 $c$  軸に平行な方向のその約 1/20 であるので、その影響は無視できるとする。

Bailey and Yates が得た  $c$  軸方向の熱膨張係数は次式で表される（単位は  $1/K$ ）。

$0 \leq T \leq 80$  K

$$\alpha_s = 5.350 \times 10^{-9} T^2 - 3.755 \times 10^{-11} T^3 \quad (14)$$

$$80 \leq T \leq 273 \text{ K}$$

$$\alpha_c = 2.4352 \times 10^{-7}T - 7.690 \times 10^{-10}T^2 + 8.875 \times 10^{-13}T^3 \quad (15)$$

この式は、彼等のデータに 1 % の精度で一致する。

$c$  軸方向の層面間距離 (interlayer spacing) は、この熱膨張係数を積分して、4.2 K [57] および室温 [58] における層面間距離の値を入れることにより、次のように与えられる (単位はÅ)。

$$0 \leq T \leq 80 \text{ K}$$

$$c(T) = 3.3360 + 5.95 \times 10^{-9}T^3 - 3.13 \times 10^{-11}T^4 \quad (16)$$

$$80 \leq T \leq 273 \text{ K}$$

$$\begin{aligned} c(T) &= 3.3355 \\ &+ 4.061 \times 10^{-7}T^2 - 8.55 \times 10^{-10}T^3 + 7.65 \times 10^{-13}T^4 \end{aligned} \quad (17)$$

273 K 以上の熱膨張係数および層面間距離は、Nelson and Riley [59]、Steward and Cook [60,61] および Morgan [62] のデータを上記の 273 K 以下の式 (15)(17) につなげることにより、次のように与えられる。

$$273 \leq T \leq 1000 \text{ K}$$

$$\alpha_c = 2.723 \times 10^{-5} + 3.32 \times 10^{-9}(T - 273) - 1.15 \times 10^{-12}(T - 273)^2 \quad (18)$$

$$\begin{aligned} c(T) &= 3.3526 + 9.128 \times 10^{-5}(T - 273) \\ &+ 6.81 \times 10^{-9}(T - 273)^2 - 1.12 \times 10^{-12}(T - 273)^3 \end{aligned} \quad (19)$$

## 5 Debye 振動数

### 5.1 in-plane mode

in-plane mode の Debye 振動数  $\omega_{D,i}$  ( $i = l, t$ ) は (5)(6)(11) より、あるいは波数ベクトル空間において  $q_z = \pi/c$ ,  $q_z = -\pi/c$  および  $\omega_{D,i}$  面が囲む領域中の状態数より

$$\frac{V}{4\pi c v_i^2} \left[ \omega_{D,i}^2 - \frac{1}{2}\omega_z^2 \right] = N_0 \quad (20)$$

で与えられる。ここで  $V/c$  は温度によらず、 $1.580 \times 10^8 \text{ (cm}^2/\text{mol)}$  であり、 $v_i$ 、 $\omega_z$  の温度変化は

$$v_i^2 = [v_i(293)]^2 \times \frac{f(T)}{0.944} \cdot \frac{c(T)}{c(293)} \quad (21)$$

$$\omega_z = \omega_z(293) \times \sqrt{\frac{f(T)}{0.944} \cdot \frac{c(293)}{c(T)}} \quad (22)$$

である。

## 5.2 out-of-plane mode

out-of-plane mode の Debye 振動数  $\omega_{D,c}$  は (8)(9)(11) より、あるいは波数ベクトル空間において  $q_z = \pi/c$ ,  $q_z = -\pi/c$  および  $\omega_{D,c}$  面が囲む領域中の状態数より

$$\frac{V}{4\pi\kappa c} \left\{ \frac{2}{\pi} E(m) \left( \omega_{D,c}^2 + \frac{\zeta^2}{4\kappa^2} \right)^{1/2} - \frac{\zeta}{2\kappa} \right\} = N_0 \quad (23)$$

で与えられる。ここで

$$m = (\omega'_z)^2 / \left( \omega_{D,c}^2 + \frac{\zeta^2}{4\kappa^2} \right) \quad (< 1) \quad (24)$$

$$\begin{aligned} E(m) &= \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - m \sin^2\phi} d\phi \\ &= \frac{\pi}{2} \times \left\{ 1 - \frac{1}{4}m - \frac{3}{64}m^2 - \frac{5}{256}m^3 - \dots \right\} \end{aligned} \quad (25)$$

である [63]。

また、 $\omega'_z$  および  $\zeta$  の温度変化は、それぞれ

$$\omega'_z = \omega'_z(293) \times \sqrt{\frac{f(T)}{0.944} \cdot \frac{c(293)}{c(T)}} \quad (26)$$

$$\zeta = \zeta(293) \times \frac{f(T)}{0.944} \times \frac{c(T)}{c(293)} \quad (27)$$

である。

(23) には  $\omega_{D,c}$  のほかに  $\kappa$  が未知数として含まれている。したがって  $\omega_{D,c}$  と  $\kappa$  を決めるためには、(23) のほかにもう一つの条件が必要である。その条件として、比熱の計算値が実験値と一致することを選ぶ。 $\omega_{D,c}$  と  $\kappa$  を決める手順は以下のようである。

まず、 $\omega_{D,c}$  と  $\kappa$  のおおよその値を推定する。 $\omega_{D,c} > \omega'_z > \zeta/2\kappa$  であるので、(23) は近似的に

$$\frac{V}{4\pi\kappa c} \cdot \omega_{D,c} \cong N_0 \quad (28)$$

となる。低温領域では、比熱の計算値はほとんど  $\omega_{D,c}$  によらないので計算値と実験値の比較から  $\kappa$  の近似値が求まり、さらに (28) から  $\omega_{D,c}$  の近似値が求まる。高温領域では、 $\kappa$  と  $\omega_{D,c}$  の近似値を低温領域の結果と (28) から予測する。次に、この  $\kappa$  と  $\omega_{D,c}$  の近似値から出発して、(23) の成立および比熱の計算値と実験値の一致の 2 条件を満たすように、 $\kappa$  と  $\omega_{D,c}$  の近似度を高める。これを繰り返して self-consistent な  $\kappa$  と  $\omega_{D,c}$  を決定する。

## 6 比熱の計算

### 6.1 定積格子比熱

2、5 節において各モードの振動数分布関数  $D(\omega)$  および Debye 振動数  $\omega_D$  が得られたので、in-plane mode および out-of-plane mode の定積格子比熱は

$$C_v = k \int_0^{\omega_D} \left( \frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)^2} D(\omega) d\omega \quad (29)$$

で与えられる。ここで  $k$  は Boltzmann 定数、 $\hbar$  は Planck 定数を  $2\pi$  で割ったものである。

### 6.2 $C_p - C_v$ 補正

実験から得られる比熱は定圧比熱である。ここで必要となる定圧格子比熱と定積格子比熱の差は

$$C_p - C_v = \frac{\alpha_v^2 V}{K} \times T \quad (30)$$

で与えられる [64]。 $\alpha_v$  は体膨張係数で、 $\alpha_c$  および  $\alpha_a$  をそれぞれ  $c$  軸および  $a$  軸方向の熱膨張係数とすると  $\alpha_v = \alpha_c + 2\alpha_a \cong \alpha_c$  とおくことができる。また、 $K$  は圧縮率で、 $S_{ij}$  を弾性コンプレイアンス定数とすると

$$K = 2(S_{11} + S_{12}) + S_{33} + 4S_{13} = \frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}}{(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2} \quad (31)$$

$$K = K(293) \times \frac{0.944}{f(T)} \quad (32)$$

で与えられる。また、

$$V = V(293) \times \frac{c(T)}{c(293)} \quad (33)$$

である。

### 6.3 電子比熱

van der Hoeven and Keesom は、natural graphite (単結晶) の 1.2 K 以下の比熱測定から、次の電子比熱を得た [65]。

$$Ce = 13.8 T \quad (\mu\text{J/mol.K}) \quad (34)$$

電子比熱の温度依存性は、実験的に求めることが難しいので、電子エネルギーバンドの Fermi レベル近傍の状態密度から計算する。Komatsu and Nagamiya [1] は、Wallace の 3 次元バンドモデルが与える状態密度 [66]に基づいて、電子比熱の温度依存性を計算し、1 mol 当たりの電子比熱として次の結果を得た。

$$Ce = \frac{2N_0}{\sqrt{3}\pi^2} \left( \frac{\gamma_1}{\gamma_0^2} \right) \left\{ \frac{\pi^2}{3} \cdot k^2 T + 5.41 \left( \frac{\pi}{\gamma_1} \right) k^3 T^2 + \frac{7\pi^4}{30} \left( \frac{3}{4\gamma_1^2} \right) k^4 T^3 + \dots \right\} \quad (35)$$

ここで、 $k$  は Boltzmann 定数である。 $\gamma_0$  と  $\gamma_1$  は、バンドモデルのパラメータで、 $\gamma_0$  は面内最隣接原子間の共鳴積分、 $\gamma_1$  は面間最隣接原子間の共鳴積分である。 $\gamma_0 = 3.11$  eV,  $\gamma_1 = 0.385$  eV [67] を使うと、(35) は

$$Ce = 11.0 T [ 1 + 1.16 \times 10^{-3} T + 2.6 \times 10^{-7} T^2 + \dots ] \quad (\mu\text{J/mol.K}) \quad (36)$$

となる。

本論文のわれわれの計算では、低温の実験結果 (34) と計算結果 (36) の括弧内の温度依存性とを組み合わせた、次式で電子比熱が与えられると仮定する。

$$Ce = 13.8 T [ 1 + 1.16 \times 10^{-3} T + 2.6 \times 10^{-7} T^2 + \dots ] \quad (\mu\text{J/mol.K}) \quad (37)$$

比熱の実験値に対応する計算値は、(29)(30)(37) の和で与えられる。

## 7 比熱の実験値の評価

室温以下の比熱についてはこれまでに多くの測定が行われている [24,65,68-74]。しかし、それらの測定値は、試料の結晶性、また試料に含まれる格子欠陥や不純物の量に依存して、互いに著しく異なる。一般に、結晶性の低いものほど、また格子欠陥や不純物を多く含むものほど、比熱の測定値が大きくなっている。

われわれは従来の測定データを評価して、黒鉛の intrinsic な比熱値、即ち高結晶性・高純度の単結晶黒鉛の比熱値を推定する。われわれは、従来の測定データの中から、intrinsic な比熱値を与えるものとして、それぞれの温度範囲に対して以下の測定を選んだ。

- 1) 0.4~2.0 K: van der Hoeven and Keesom による Madagascar natural graphite についての測定 [65]
- 2) 1.3~20 K: DeSorbo and Nichols による Canadian natural graphite についての測定 [73]
- 3) 9.7~17 K: DeSorbo and Nichols による Artificial polycrystalline graphite (pile graphite) についての測定 [73]
- 4) 20~120 K: DeSorbo による Ceylon natural graphite についての測定 [70]
- 5) 40~300 K: DeSorbo and Tyler による Artificial polycrystalline graphite (Acheson graphite)

についての測定 [68]

6) 300~1800 K: JANAF Thermochemical Tables [75] および Artificial polycrystalline graphite についての諸測定 [76-79]

0.4 K から 300 K の温度範囲では、それをさらに 6 個の温度範囲に分け、実験値の生データの間を通る滑らかな曲線を引いて、intrinsic な比熱値を表す多項式を求めた。そのとき、細分された温度範囲の互いの間で、多項式の絶対値のみならず、温度による 1 階微分と 2 階微分も連続であるという条件を課した。

300 K 以上については、各論文には生データではなく、100 °C 毎に評価された比熱値が掲載されている [75-79]。それらの比熱値は一つの多項式でよく表せるものであり、その多項式の値は 300 K 以下のものに連続している。しかし、多項式の 1 階微分および 2 階微分の値は、300 K 以下のものと大きく異なり、連続していない。

われわれは、300 K から 1800 K の温度範囲を 5 個の温度範囲に分け、300 K 以下および各温度範囲の間で 1 階微分と 2 階微分が連続であるという条件のもとに、ref. 75 の比熱値を 0.6 % 以下の精度で再現するようにして、intrinsic な比熱値を表す多項式を求めた。

以上のようにして評価した、単結晶黒鉛の比熱の表式を Table II に示す。10 節で述べるように、この比熱式の温度による 2 階微分には振動数分布の特徴がよくあらわれている。

## 8 比熱の計算値と実験値の比較及び $C_{44}$ と $\kappa$ の決定

比熱の計算は、室温における  $C_{44}$  の値、 $C_{44}(293)$ 、および温度に依存する  $\kappa$  を adjustable parameters として、6 節で述べた手続きに従って行う。そして、この計算値が Table II の実験値と一致するようにパラメータを決める。

Figure 1 は、 $C_{44}(293)$  として仮定したいろいろな値に対して、計算値と実験値の一致から得た  $\kappa$  の温度依存性である。温度が約 50 K 以上では、 $\kappa$  は仮定した  $C_{44}(293)$  の値によらず、ほとんど同一の温度依存性を示す。即ち、 $C_{44}$  の影響はそれより低温においてしか現れないことを意味している。それ以下の低温では、 $C_{44}(293)$  が  $0.415 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  より小さければ、温度が 0 K に近づくとき、 $\kappa$  が急激に上昇する。逆に、 $C_{44}(293)$  がそれより大きければ、 $\kappa$  は急激に降下する。温度が 0 K に近づくときの、 $\kappa$  のこのような急激な変化は物理的に受け入れがたい [80]。このことより、われわれは  $C_{44}(293) = 0.415 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  であると決定する。

このように、低温の比熱の解析から  $C_{44}(293)$  は一義的に決まるので、未知のパラメータは実質的には  $\kappa$  だけであり、本研究では、 $\kappa$  の温度依存性を比熱の解析から決めることになる。

得られた  $\kappa$  の数値を Table III に示す。その温度依存性は、40 K 以下ではほぼ一定で、40 K 以上では急速に減少する (Fig. 1)。 $\kappa$  が温度とともに減少する割合は 3 節で述べた  $C_{ij}$  のそれよりも

著しく大きい。Table IIIの $\kappa$ の温度依存性は次式で表される(単位はcm<sup>2</sup>/s)。

$$0 \leq T \leq 45 \text{ K}$$

$$\kappa = 5.13 \times 10^{-3} - 9.10 \times 10^{-10} T^3 \quad (38)$$

$$45 \leq T \leq 119 \text{ K}$$

$$\kappa = 5.01 \times 10^{-3} + 1.007 \times 10^{-5} T - 2.25 \times 10^{-7} T^2 + 7.60 \times 10^{-10} T^3 \quad (39)$$

$$T \geq 119 \text{ K}$$

$$\kappa = 1.067 \times 10^{-2} - 1.328 \times 10^{-3} \log T \quad (40)$$

Table IIIに0.4～500 K間の比熱の計算結果を示す。比熱の計算値を実験値に一致させることができたのは、360 K以下においてであって、そこでは両者は1%以下の精度でよく一致した。360 K以上になると、計算値は実験値より小さく、それに達しない。

このsemi-continuum modelは、波数ベクトルが小さい領域では格子振動のよい近似を与えるが、波数ベクトルが大きくなるとよい近似ではなくなると考えられる。360 K以上の高温で比熱の計算値が実験値からずれることは、波数ベクトルの大きい領域でこのモデルの近似がよくないことを示している。

格子振動のより正しい計算は、Born-von Kármán force-constant modelによるものであり、これまでに数多く行われている[4-8, 10-21]。そのうち、Al-Jishi and Dresselhaus[18]によって行われた最近の計算では、層面内、層面間とも第4隣接原子までの相互作用を取り入れ、そのforce constantsを中性子散乱、ラマン散乱、赤外吸収、弾性定数の実験データより決めて、格子振動の分散関係および振動数分布を求めている。しかし、振動数分布の低振動数領域の計算値が少ないので、それから求めた比熱の計算値は、50 K以下では精度がよくない。50 K以上1800 Kまでの温度範囲では、彼らの振動数分布による比熱の計算値は、Table IIの実験値とほぼ2%の精度で一致していて、高温におけるsemi-continuum modelの欠点は改善されている。Born-von Kármán modelによる振動数分布の計算に関しては、比熱の実験値とのより精度のよい一致、振動数分布の温度依存性などを検討する必要があると思われる。

デバイ温度 $\Theta$ は $k\Theta = \hbar\omega_D$ によって定義される。Figure 2に、5節に述べた方法で求めたデバイ温度の温度依存性を示す。Out-of-plane modeのデバイ温度の温度変化が大きいのは、 $\kappa$ の温度変化が大きいことによる。

## 9 格子振動の温度依存性

われわれは、黒鉛の格子振動の semi-continuum model に温度の効果を取り入れるため、分散関係の表式に含まれるパラメータについて、弾性定数  $C_{ij}$  と格子定数は実験データに従って温度変化させ、 $\kappa$  の温度依存性は比熱の解析から求めた。ここで、 $\kappa$  は a graphite layer の曲げの弾性定数の平方根に比例する。

既に述べたように、semi-continuum model による比熱の解析から得られた  $\kappa$  の温度変化は著しく大きい。これは、温度が上昇するときに、二つの in-plane modes の寄与が小さいので、out-of-plane mode の寄与を大きくするためである。Semi-continuum model において in-plane modes の寄与を大きくするためには、弾性定数  $C_{11}$  を小さくしなければならない。実験的には考えにくいくことであるが、仮に室温における  $C_{11}$  の値が Table I の値より 10 % も小さいと仮定して、 $\kappa$  の温度変化がどうなるかを調べてみる。即ち、 $C_{11} = 95 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ ,  $C_{12} = 16 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ , ( $C_{12}/C_{11}=0.17$ ) とし、 $C_{13}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{44}$  は Table I の値をとると仮定して、比熱の計算値を実験値に fit させることにより  $\kappa$  を求めると、50 K, 100 K, 200 K, 300 K の  $\kappa$  の値はそれぞれ 0.00517, 0.00463, 0.00383, 0.00345  $\text{cm}^2/\text{s}$  となる。これらに対応する Table III の値はそれぞれ 0.00507, 0.00451, 0.00364, 0.00310  $\text{cm}^2/\text{s}$  である。このように、弾性定数の値を大幅に変えたとしても、 $\kappa$  の温度変化は  $C_{ij}$  の温度変化よりかなり大きいままである。従って、semi-continuum model の枠内では、 $\kappa$  の大きな温度変化は当然の結果として受け入れざるを得ない。

Figure 3 から Fig. 7 に、各振動モードについて、本研究の結果から予測される分散関係の温度依存性の例を示す。out-of-plane mode の場合、温度の効果が大きいが、それは  $\kappa$  の温度変化が大きいことに起因する。即ち、温度上昇とともに  $\kappa$  は著しく減少し、out-of-plane mode の softening が起こることを示している。

Figure 8 に、各振動モードについて、(5) から (10) で与えられる振動数分布の温度依存性を示す。out-of-plane mode の場合、温度の効果が大きい。Figure 9 は Fig. 8 に示される  $3 \times 10^{13} / \text{s}$  以下の振動数に対する out-of-plane mode の曲線を拡大したものである。

温度上昇とともに out-of-plane mode の softening が起こるという予測が正しいかどうかは、中性子散乱や赤外吸収の実験によって確かめることができる。中性子散乱では、この予測が正しければ、Fig. 6 や Fig. 7 のような温度依存性が観測される筈である。赤外吸収では、室温で観測される  $868 \text{ cm}^{-1}$  の吸収が  $A_{2u}$  out-of-plane mode 振動に起因するとされている [81]。もしこの予測が正しければ、77 K に冷却するときこの赤外吸収は約 50 % も高振動数側にシフトする筈である。

表面格子振動の分散関係が電子エネルギー損失分光法 (EELS) によって測定されている [82,83]。測定された表面格子振動の分散曲線は bond charge model によって計算されたバルク格子振動の分散曲線とよく一致している [21]。従って、電子エネルギー損失分光測定においても Fig. 6 や Fig. 7 のような温度依存性を期待できるであろう。

## 10 比熱の実験曲線の 2 階微分と格子振動の振動数分布

かつて、式(29)により比熱曲線から振動数分布関数  $D(\omega)$  を求める“inversion”の問題が研究されたことがある[43]。しかし、比熱曲線は  $D(\omega)$  のかたちにあまり sensitive ではないので、この inversion はうまくゆかなかった。

現在、格子振動の分散関係は中性子非弾性散乱測定によって求められている。しかし、利用できる中性子束強度の制約から、実際の測定範囲は  $\omega < 100 \text{ THz}$  に限られていて、黒鉛の場合にはそれは最高振動数の  $1/3$  以下の領域である。一方、ラマン散乱や赤外吸収では、さらに高振動数領域を調べることができるが、それは波数ベクトル空間の光学的に active な領域に限られる。これらに対して、比熱は波数ベクトル空間全体を integrate した情報を与える点で重要である。

われわれはここで、比熱曲線の温度による 2 階微分が振動数分布関数についての情報を与えてくれることを示したい。

定積格子比熱の温度による 2 階微分は、(29) より次のように与えられる。

$$\frac{d^2 C_v}{dT^2} = k \int_0^{\omega_D} \left( \frac{\partial^2 E(T, \omega)}{\partial T^2} D(T, \omega) + 2 \frac{\partial E(T, \omega)}{\partial T} \frac{\partial D(T, \omega)}{\partial T} + E(T, \omega) \frac{\partial^2 D(T, \omega)}{\partial T^2} \right) d\omega \quad (41)$$

ここで

$$E(T, \omega) = \frac{z^2 e^z}{(e^z - 1)^2}, \quad z = \frac{\hbar\omega}{kT}$$

$$\frac{\partial E(T, \omega)}{\partial T} = \frac{1}{T} \frac{z^2 e^z}{(e^z - 1)^3} \{z + 2 + (z - 2)e^z\}$$

$$\frac{\partial^2 E(T, \omega)}{\partial T^2} = \frac{1}{T^2} \frac{z^2 e^z}{(e^z - 1)^4} \{z^2 + 6z + 6 + (4z^2 - 12)e^z + (z^2 - 6z + 6)e^{2z}\}$$

である。

Figure 10 に、比熱曲線の温度による 2 階微分についての実験結果と計算結果を比較する。実験結果は、Table II の式を 2 階微分したものである。計算結果は二つあり、それぞれ、改良した semi-continuum model の  $D(\omega)$  および Al-Jishi and Dresselhaus[18] が Born-von Kármán model により求めた  $D(\omega)$  を (41) に代入したものである。計算では、 $C_p - C_v$  補正と電子比熱の 2 階微分は小さいので無視した。計算結果には、それぞれの  $D(\omega)$  の特徴が反映されている。改良した semi-continuum model の  $D(\omega)$  に対する結果は、70 K 以下では実験結果とよく合っているが、それ以上の高温側ではそれからずれてくる。Al-Jishi and Dresselhaus の  $D(\omega)$  の場合には、 $D(\omega)$  が

温度に依存しないので、(41) の右辺の寄与は第一項のみである。また、低温側の計算結果がないのは、彼らの  $D(\omega)$  に低振動数領域のデータが欠けているからである。ここでは  $D(\omega)$  の詳細についての議論を行わない。ただ、比熱曲線の温度による 2 階微分が  $D(\omega)$  の妥当性を検討するときに有用であることを強調したい。

Table II に与えられる比熱の実験曲線の 2 階微分は、300 ~ 760 K の温度範囲で大きく振動していて、二つの計算結果と大きく異なる。温度の高いところでは (41) の積分は  $D(\omega)$  のかたちにだんだん sensitive でなくなってくるので、この実験結果の方が不自然であると考えられる。7 節で述べたように、300 K 以上の実験式を決めるに当たって、われわれは 1 階微分と 2 階微分が連続であるという条件を課したが、この大きな振動はその結果である。一方、以前の論文においては [75-79]、実験データの評価に当たって、300 K 以上のデータの絶対値が一つの実験式で表せるという条件を優先していて、300 K 以下のデータとの間で 1 階微分と 2 階微分が連続であるという条件を考慮していない。これらのことから、300 K 以上の比熱の生データを、絶対値ばかりではなく、1 階微分と 2 階微分までが連続であるという条件を課して、再評価する必要があると思われる。

以上の結果は、広い温度範囲にわたって比熱の精度よい測定が行われるならば、比熱の 2 階微分から格子振動の振動数分布についての情報を抽出できることを示している。

## 11 おわりに

われわれは、Komatsu and Nagamiya によって提案された黒鉛の格子振動の semi-continuum model に温度の効果を取り入れる改良を行い、モデルが適用できる温度範囲を低温から 360 K までの範囲に拡張した。温度効果を取り入れるために、分散関係式中に含まれる弾性定数  $C_{ij}$  の温度変化と格子定数の熱膨張には実験データを用いた。また、a graphite layer の曲げの弾性定数の平方根に比例する  $\kappa$  は、未知のパラメータとして扱い、モデルによる比熱の計算値を実験値に一致させることによって、その温度依存性を求めた。

改良した semi-continuum model による比熱の計算値は、0.4~360 K 間の実験値を 1 %以下の精度で再現することができた。このモデルは、分散関係が解析的に与えられているので、この温度範囲における異方的な熱伝導などの解析にかなりの信頼性を持って用いることができる。

比熱の解析から得られた  $\kappa$  は、温度上昇とともに著しく減少した。これは温度上昇により out-of-plane mode の softening が起こることを意味している。

比熱の実験曲線の温度による 2 階微分が格子振動の振動数分布についての情報を与えることを示した。

また、低温の比熱の解析から、室温における  $C_{44}$  の値を  $0.415 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$  であると確定した。

## 謝 辞

著者の一人（仁平）は、原研施設利用共同研究により、長年にわたって物質科学部の岩瀬彰宏主任研究員と「セラミックスの照射損傷」に関する協力研究を行っている。その協力研究の中で黒鉛の熱伝導の中性子照射効果について実験と解析を行ったが、本研究は、その過程で照射効果以前の格子振動そのものを解明する必要が生じたため、行われたものである。岩瀬主任研究員及びそのグループの皆様に、日頃の有益な議論および研究上の便宜の提供に対して感謝申し上げる。

## 参考文献

1. K. Komatsu and T. Nagamiya: J. Phys. Soc. Jpn. **6**, 438 (1951)
2. T. Nagamiya and K. Komatsu : J. Chem. Phys. **22**, 1457 (1954)
3. K. Komatsu: J. Phys. Soc. Jpn. **10**, 346 (1955)
4. J. Krumhansl and H. Brooks: J. Chem. Phys. **21**, 1663 (1953)
5. H. B. Rosenstock: J. Chem. Phys. **21**, 2064 (1953)
6. A. Yoshimori and Y. Kitano: J. Phys. Soc. Jpn. **11**, 352 (1956)
7. G. R. Baldock: Phil. Mag. **1**, 789 (1956)
8. J. A. Young and J. U. Koppel: J. Chem. Phys. **42**, 357 (1965)
9. G. Dolling and B. N. Brockhouse: Phys. Rev. **128**, 1120 (1962)
10. H. Takahashi: Nucl. Sci. Eng. **37**, 198 (1969)
11. R. Nicklow, N. Wakabayashi and H. G. Smith: Phys. Rev. **B 5**, 4951 (1972)
12. A. A. Ahmadieh and H. A. Rafizadeh: Phys. Rev. **B 7**, 4527 (1973)
13. H. A. Rafizadeh: Physica **74**, 135 (1974)
14. K. K. Mani and R. Ramani: phys. stat. sol. (b) **61**, 659 (1974)
15. A. P. P. Nicholson and D. J. Bacon: J. Phys. C: Solid State Phys. **10**, 2295 (1977)
16. R. J. Nemanich and S. A. Solin: Phys. Rev. **B 20**, 392 (1979)
17. M. Maeda, Y. Kuramoto and C. Horie: J. Phys. Soc. Jpn. **47**, 337 (1979)
18. R. Al-Jishi and G. Dresselhaus: Phys. Rev. **B 26**, 4514 (1982)
19. G. P. Alldredge, E. de Rouffignac, B. Firey and F. W. de Wette: Phys. Rev. **B 29**, 3712 (1984)
20. H. C. Gupta, J. Malhotra, N, Rani and B. B. Tripathi: Phys. Rev. **B 33**, 7285 (1986)
21. G. Benedek and G. Onida: Phys. Rev. **B 47**, 16471 (1993)
22. K. Komatsu: J. Phys. Chem. Solids **6**, 380 (1958)
23. K. Komatsu: J. Phys. Chem. Solids **25**, 707 (1964)

24. G. H. Wostenholm and B. Yates: *Phil. Mag.* **27**, 185 (1973)
25. C. N. Hooker, A. R. Ubbelohde, F.R.S. and D. A. Young: *Proc. Roy. Soc. A* **284**, 17 (1965)
26. B. Dreyfus and R. Maynard: *J. Phys. (France)* **28**, 955 (1967)
27. B. T. Kelly: *Carbon* **5**, 247 (1967)
28. B. T. Kelly: *Phil. Mag.* **15**, 1005 (1967)
29. B. T. Kelly: *Carbon* **6**, 71 (1968)
30. B. T. Kelly: *Carbon* **6**, 485 (1968)
31. R. Taylor, B. T. Kelly and K. E. Gilchrist: *J. Phys. Chem. Solids* **30**, 2251 (1969)
32. T. Nihira and T. Iwata: *J. Phys. Soc. Jpn.* **49**, 1916 (1980)
33. T. Nihira and T. Iwata: *Point Defects and Defect Interactions*, ed. J. Takamura, M. Doyama and M. Kiritani (Univ. of Tokyo Press, 1982) 236
34. B. Nysten, J. -P. Issi, R. Barton, Jr., D. R. Boyington and J. G. Lavin: *Phys. Rev. B* **44**, 2142 (1991)
35. B. T. Kelly and P. L. Walker, Jr.: *Carbon* **8**, 211 (1970)
36. B. T. Kelly: *J. Nucl. Mater.* **24**, 210 (1967)
37. B. T. Kelly: *J. Nucl. Mater.* **34**, 189 (1970)
38. B. T. Kelly: *Carbon* **12**, 535 (1974)
39. K. Sugihara and H. Sato: *J. Phys. Soc. Jpn.* **18**, 332 (1963)
40. S. Ono and K. Sugihara: *J. Phys. Soc. Jpn.* **21**, 861 (1966)
41. K. Sugihara: *Phys. Rev. B* **37**, 7063 (1988)
42. K. Sugihara, Y. Hishiyama and A. Ono: *Phys. Rev. B* **34**, 4298 (1986)
43. M. Blackman: in *Handbuch der Physik*, ed. S. Flugge, Vol. VII, Part 1 (Springer-Verlag, Berlin, 1955) pp. 325-382
44. J. de Launay: in *Solid State Physics*, ed. F. Seitz and D. Turnbull, Vol. 2 (Academic Press, New York, 1956) pp. 219 - 303
45. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin: *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, 1976) Chap. 23
46. O. L. Blakslee, D. G. Proctor, E. J. Seldin, G. B. Spence and T. Weng: *J. Appl. Phys.* **41**, 3373 (1970)
47. D. M. Hwang: *Solid State Comm.* **46**, 177 (1983)
48. A. C. Bailey and B. Yates: *J. Appl. Phys.* **41**, 5088 (1970)
49. D. E. Soule and C. W. Nezbeda: *J. Appl. Phys.* **39**, 5122 (1968)
50. C. Baker and A. Kelly: *Phil. Mag.* **9**, 927 (1964)

51. E. J. Seldin and C. W. Nezbeda: *J. Appl. Phys.* **41**, 3389 (1970)
52. J. C. Bowman and J. A. Krumhansl: *J. Phys. Chem. Solids* **6**, 367 (1958)
53. W. B. Gauster and I. J. Fritz: *J. Appl. Phys.* **45**, 3309 (1974)
54. A. P. Roy: *Can. J. Phys.* **49**, 277 (1971)
55. B. N. Brockhouse and G. Shirane: *Bull. Amer. Phys. Soc.* **17**, 123 (1972)
56. D. K. Ross: *J. Phys. C: Solid State Phys.* **6**, 3525 (1973)
57. Y. Baskin and L. Meyer: *Phys. Rev.* **100**, 544 (1955)
58. B. T. Kelly: *Physics of Graphite* (Applied Science Pub., London, 1981) Chaps. 1 and 4
59. J. B. Nelson and D. P. Riley: *Proc. Phys. Soc. (London)* **57**, 477 (1945)
60. E. G. Steward and B. P. Cook: *Nature* **185**, 78 (1960)
61. E. G. Steward, B. P. Cook and E. A. Kellett: *Nature* **187**, 1015 (1960)
62. W. C. Morgan: *Carbon* **10**, 73 (1972)
63. in *Handbook of Mathematical Functions*, ed. M. Abramowitz and I. A. Stegun (Dover Publications, Inc., New York, 1965) Chap. 17
64. C. Kittel: *Thermal Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1969) Chap. 19
65. B. J. C. van der Hoeven, Jr. and P. H. Keesom: *Phys. Rev.* **130**, 1318 (1963)
66. P. R. Wallace: *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947)
67. M. P. Sharma, L. G. Johnson and J. W. McClure: *Phys. Rev. B* **9**, 2467 (1974)
68. W. DeSorbo and W. W. Tyler: *J. Chem. Phys.* **21**, 1660 (1953)
69. U. Bergenlid, R. W. Hill, F. J. Webb and J. Wilks: *Phil. Mag.* **45**, 851 (1954)
70. W. DeSorbo: *J. Amer. Chem. Soc.* **77**, 4713 (1955)
71. P. H. Keesom and N. Pearlman: *Phys. Rev.* **99**, 1119 (1955)
72. W. DeSorbo and W. W. Tyler: *J. Chem. Phys.* **26**, 244 (1957)
73. W. DeSorbo and G. E. Nichols: *J. Phys. Chem. Solids* **6**, 352 (1958)
74. B. J. C. van der Hoeven, Jr., P. H. Keesom, J. W. McClure and G. Wagoner: *Phys. Rev.* **152**, 796 (1966)
75. D. R. Stull and H. Prophet: *JANAF Thermochemical Tables* (Second Edition), NSRDS-NBS 37 (1971); *Nat. Stand. Ref. Data Ser., Nat. Bur. Stand. (U.S.)* **37**, 1141 (1971)
76. H. M. Spencer: *Ind. Eng. Chem.* **40**, 2152 (1948)
77. R. E. Nightingale, H. H. Yoshikawa and H. H. W. Losty: in *Nuclear Graphite*, ed. R. E. Nightingale (Academic Press, New York, 1962) Chap. 6
78. R. A. McDonald: *J. Chem. Eng. Data* **10**, 243 (1965)
79. E. D. West and S. Ishihara: *Advances in Thermophysical Properties at Extreme Temperatures and Pressures*, ed. S. Gratch (Amer. Soc. Mech. Eng., New York, 1965) pp. 146-151;

- Third ASME Symp. on Thermophysical Properties, Purdue Univ., Indiana (1965)
- 80. J. A. Garber and A. V. Granato: Phys. Rev. **B 11**, 3990 (1975)
  - 81. R. J. Nemanich, G. Lucovsky and S. A. Solin: Mater. Sci. Eng. **31**, 157 (1977)
  - 82. J. L. Wilkes, R. E. Palmer and R. F. Willis: J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **44**, 355 (1987)
  - 83. C. Oshima, T. Aizawa, R. Souda, Y. Ishizawa and Y. Sumiyoshi: Solid State Comm. **65**, 1601 (1988)

Table I. Physical constants of graphite at room temperature.

(a) Elastic constants				
$C_{11}$	106	$\times 10^{11}$	dyn/cm <sup>2</sup>	ref.(46)
$C_{12}$	18	$\times 10^{11}$	dyn/cm <sup>2</sup>	ref.(46)
$C_{13}$	1.5	$\times 10^{11}$	dyn/cm <sup>2</sup>	ref.(46)
$C_{33}$	3.65	$\times 10^{11}$	dyn/cm <sup>2</sup>	ref.(46)
$C_{44}$	0.415	$\times 10^{11}$	dyn/cm <sup>2</sup>	present analysis
$\kappa$	3.12	$\times 10^{-3}$	cm <sup>2</sup> /s	present analysis
(b) Other parameters				
$c$	3.3544	$\times 10^{-8}$	cm	
$\rho$	2.26		g/cm <sup>3</sup>	
$V$	5.30		cm <sup>3</sup> /mol	
$v_l$	2.16	$\times 10^6$	cm/s	eq.(2)
$v_t$	1.40	$\times 10^6$	cm/s	eq.(2)
$\zeta$	1.836	$\times 10^{10}$	cm <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	eq.(3)
$\mu$	1.20	$\times 10^{13}$	/s	eq.(4)
$\omega_z$	8.08	$\times 10^{12}$	/s	eq.(7)
$\omega'_z$	2.40	$\times 10^{13}$	/s	eq.(10)
$K$	2.80	$\times 10^{-12}$	cm <sup>2</sup> /dyn	eq.(31)

Table II. Formulation of the experimental specific heat values of graphite.

Temperature	$a_0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$
0.4 – 1 K	0.00000E + 00	1.39138E – 05	– 1.05094E – 06	3.07802E – 05	– 2.95885E – 06	0.00000E + 00
1 – 3.5 K	1.05720E – 06	1.09795E – 05	3.16565E – 06	2.74995E – 05	– 2.02294E – 06	1.93940E – 08
3.5 – 14 K	2.48399E – 05	– 8.31698E – 05	6.95256E – 05	9.88026E – 06	– 3.28353E – 07	4.92921E – 09
14 – 35 K	– 6.87254E – 03	1.39682E – 03	– 1.83061E – 05	8.97996E – 06	– 1.09079E – 07	9.79999E – 11
35 – 175 K	– 2.94690E – 03	– 3.53410E – 03	3.94434E – 04	– 3.01935E – 06	1.35233E – 08	– 2.35909E – 11
175 – 300 K	1.566285E + 00	– 2.950883E – 02	4.058787E – 04	– 1.054325E – 06	9.659433E – 10	0.00000E + 00
300 – 510 K	– 3.526120E + 01	4.752160E – 01	– 2.282650E – 03	5.822490E – 06	– 7.302880E – 09	3.572450E – 12
510 – 620 K	– 1.446127E + 02	1.158705E + 00	– 3.439530E – 03	5.104493E – 06	– 3.671931E – 09	1.001007E – 12
620 – 760 K	2.699737E + 02	– 1.881706E + 00	5.364635E – 03	– 7.434892E – 06	5.067046E – 09	– 1.364005E – 12
760 – 1000 K	– 5.828411E + 01	3.611088E – 01	– 7.127680E – 04	7.347003E – 07	– 3.836109E – 10	8.038670E – 14
1000 – 1800 K	5.75291E + 00	2.65547E – 02	– 1.29297E – 05	2.15489E – 09	0.00000E + 00	0.00000E + 00

Table III. Results of the numerical calculation of the specific heat of graphite.

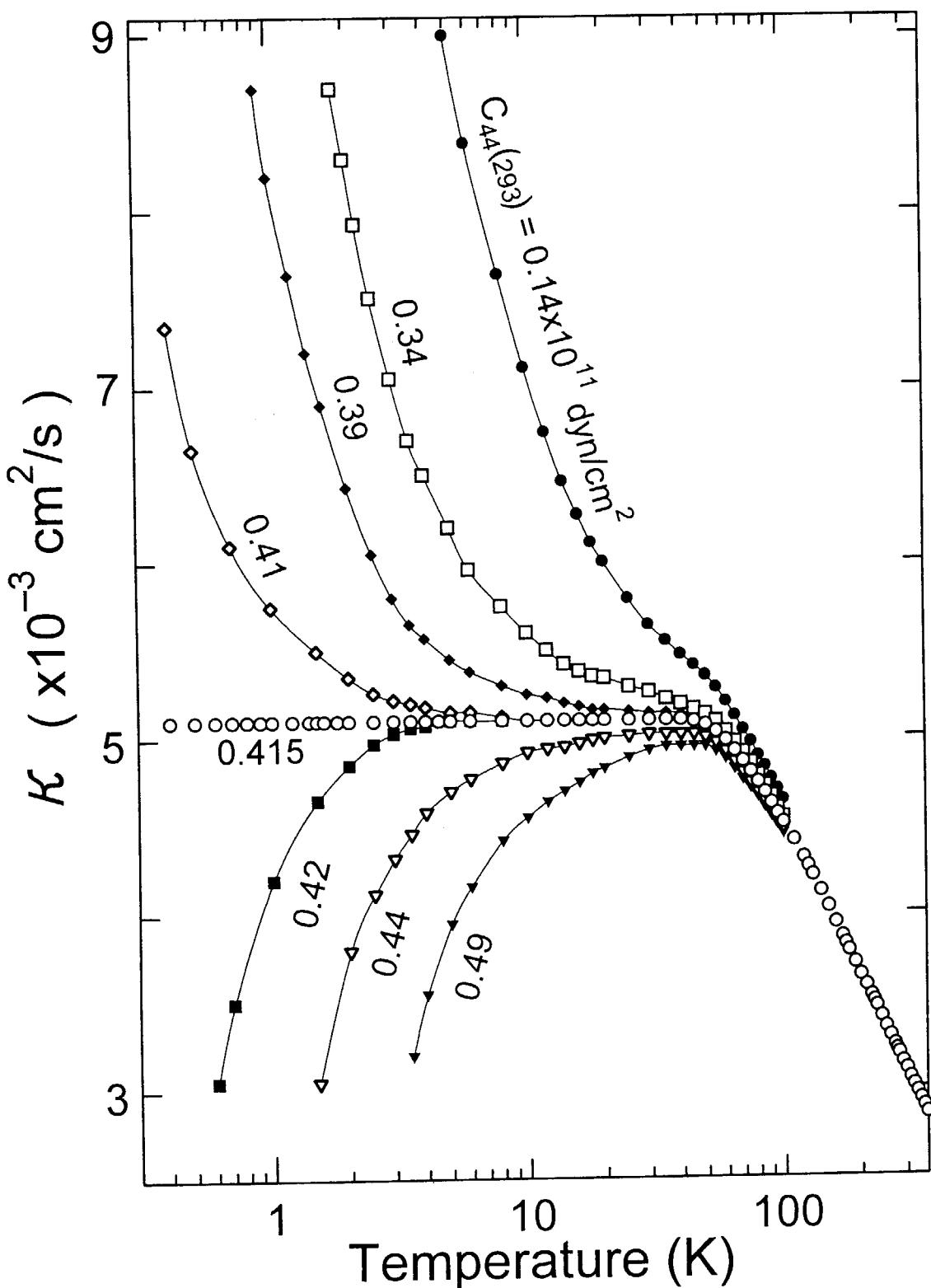
$T$ (K)	$C_t$ (mJ/mol/K)	$C_t$ (mJ/mol/K)	$C_c$ (mJ/mol/K)	$\Delta$ (mJ/mol/K)	$C_e$ (mJ/mol/K)	$C_p$ (mJ/mol/K)	$\kappa$ (cm <sup>2</sup> /s)
						calculated	observed
0.4	0.000020	0.000048	0.001709		0.005522	0.00730	0.00510
0.5	0.000039	0.000094	0.003325		0.006903	0.01036	0.00510
0.6	0.000068	0.000162	0.005719		0.008285	0.01423	0.00510
0.7	0.000108	0.000257	0.009035		0.009666	0.01907	0.00510
0.8	0.00016	0.00038	0.01341		0.01105	0.0250	0.00510
0.9	0.00023	0.00055	0.01897		0.01243	0.0322	0.00510
1.0	0.00031	0.00075	0.02584		0.01381	0.0407	0.00510
1.2	0.00054	0.00130	0.04397		0.01658	0.0624	0.00510
1.4	0.00086	0.00206	0.06866		0.01935	0.0909	0.00510
1.5	0.00106	0.00253	0.08370		0.0207	0.1080	0.00510
1.6	0.0013	0.0031	0.1007		0.0221	0.1271	0.00510
1.8	0.0018	0.0044	0.1407		0.0249	0.1718	0.00510
2.0	0.0025	0.0060	0.1892		0.0277	0.225	0.00510
2.5	0.0049	0.0118	0.3514		0.0346	0.403	0.00510
3.0	0.0086	0.0204	0.5768		0.0415	0.647	0.00510
3.5	0.0137	0.0326	0.8702		0.0485	0.965	0.00510
4.0	0.021	0.049	1.235		0.055	1.360	0.00510
4.5	0.029	0.070	1.675		0.062	1.837	0.00510
5.	0.041	0.097	2.192		0.069	2.40	0.00510
6.	0.072	0.171	3.462		0.083	3.79	0.00510
7.	0.117	0.277	5.057		0.097	5.55	0.00510
7.5	0.145	0.345	5.980		0.104	6.57	0.00510
8.	0.178	0.424	6.987		0.111	7.70	0.00510
9.	0.258	0.615	9.259		0.125	10.26	0.00510
10.	0.36	0.85	11.88		0.14	13.24	0.00510

Table III. (continued)

$T$ (K)	$C_t$ (J/mol/K)	$C_t$ (J/mol/K)	$C_c$ (J/mol/K)	$C_e$ (J/mol/K)	$\Delta$ (J/mol/K)	$C_e$ (J/mol/K)	$C_p$ (J/mol/K)	$C_p$ (J/mol/K)	calculated	observed
10.	0.00036	0.00085	0.01188		0.00014	0.01324	0.01324		0.00510	
12.	0.00063	0.00149	0.01821		0.00017	0.0205	0.0205		0.00510	
14.	0.00098	0.00234	0.02604		0.00020	0.0296	0.0296		0.00510	
15.	0.00119	0.00284	0.03056		0.00021	0.0348	0.0348		0.00510	
16.	0.00143	0.00340	0.03549		0.00022	0.0405	0.0405		0.00510	
18.	0.00196	0.00466	0.04665	0.00001	0.00025	0.0535	0.0534		0.00510	
20.	0.00257	0.00611	0.05963	0.00001	0.00028	0.0686	0.0684		0.00510	
25.	0.0044	0.0106	0.1003	0.00004	0.0004	0.1157	0.1153		0.00510	
30.	0.0068	0.0162	0.1523	0.0001	0.0004	0.1757	0.1750		0.00510	
35.	0.0096	0.0228	0.2137	0.0002	0.0005	0.247	0.246		0.00510	
40.	0.0129	0.0306	0.2822	0.0003	0.0006	0.327	0.326		0.00510	
45.	0.0166	0.0394	0.3564	0.0005	0.0007	0.414	0.413		0.00509	
50.	0.0207	0.0493	0.4351	0.0007	0.0007	0.507	0.506		0.00507	
55.	0.0253	0.0602	0.5183	0.0011	0.0008	0.606	0.605		0.00503	
60.	0.0303	0.0722	0.6052	0.0015	0.0009	0.710	0.710		0.00498	
65.	0.0358	0.0853	0.6957	0.0020	0.0010	0.820	0.819		0.00492	
70.	0.0418	0.0994	0.7888	0.0025	0.0010	0.933	0.932		0.00486	
75.	0.048	0.1115	0.884	0.003	0.001	1.051	1.049		0.00480	
80.	0.055	0.130	0.981	0.004	0.001	1.172	1.169		0.00474	
85.	0.062	0.148	1.081	0.004	0.001	1.296	1.293		0.00468	
90.	0.070	0.167	1.183	0.005	0.001	1.425	1.421		0.00462	
95.	0.078	0.186	1.287	0.005	0.001	1.558	1.551		0.00456	
100.	0.087	0.207	1.390	0.006	0.002	1.692	1.685		0.00451	
110.	0.106	0.251	1.603	0.008	0.002	1.969	1.962		0.00441	
120.	0.126	0.300	1.824	0.009	0.002	2.26	2.25		0.00431	
125.	0.137	0.326	1.938	0.010	0.002	2.41	2.40		0.00426	
130.	0.148	0.353	2.054	0.011	0.002	2.57	2.56		0.00421	

Table III. (continued)

$T$ (K)	$C_l$ (J/mol/K)	$C_t$ (J/mol/K)	$C_c$ (J/mol/K)	$\Delta$ (J/mol/K)	$C_e$ (J/mol/K)	$C_p$ (J/mol/K)	$C_p$ (J/mol/K)	$\kappa$ (cm <sup>2</sup> /s)
140.	0.173	0.411	2.288	0.013	0.002	2.89	2.87	0.00412
150.	0.199	0.474	2.529	0.014	0.002	3.22	3.21	0.00403
160.	0.227	0.541	2.778	0.016	0.003	3.57	3.55	0.00394
170.	0.257	0.612	3.027	0.018	0.003	3.92	3.91	0.00386
175.	0.273	0.649	3.153	0.019	0.003	4.10	4.09	0.00382
180.	0.289	0.688	3.279	0.020	0.003	4.28	4.27	0.00378
190.	0.323	0.768	3.527	0.022	0.003	4.64	4.64	0.00371
200.	0.359	0.852	3.774	0.024	0.003	5.01	5.01	0.00364
210.	0.397	0.941	4.012	0.026	0.004	5.38	5.38	0.00358
220.	0.437	1.034	4.246	0.028	0.004	5.75	5.76	0.00352
225.	0.457	1.082	4.361	0.029	0.004	5.93	5.94	0.00349
230.	0.478	1.131	4.475	0.030	0.004	6.12	6.13	0.00346
240.	0.522	1.231	4.700	0.032	0.004	6.49	6.49	0.00340
250.	0.568	1.334	4.917	0.034	0.005	6.86	6.86	0.00334
260.	0.616	1.441	5.117	0.036	0.005	7.21	7.21	0.00329
270.	0.666	1.550	5.308	0.038	0.005	7.57	7.57	0.00324
275.	0.691	1.606	5.408	0.039	0.005	7.75	7.74	0.00321
280.	0.717	1.662	5.492	0.039	0.005	7.92	7.92	0.00319
290.	0.771	1.776	5.667	0.041	0.005	8.26	8.26	0.00314
300.	0.827	1.892	5.824	0.042	0.006	8.59	8.60	0.00310
320.	0.944	2.127	6.124	0.045	0.006	9.25	9.27	0.00301
340.	1.068	2.366	6.382	0.048	0.007	9.87	9.93	0.00293
360.	1.200	2.605	6.612	0.051	0.007	10.47	10.58	0.00285
380.	1.338	2.842	6.807	0.054	0.008	11.05	11.23	0.00278
400.	1.481	3.077	6.980	0.056	0.008	11.60	11.87	0.00271
500.	2.258	4.157	7.557	0.070	0.011	14.05	14.70	0.00242

Fig. 1 Temperature dependence of  $\kappa$ . Parameters are  $C_{44}$  at room temperature.

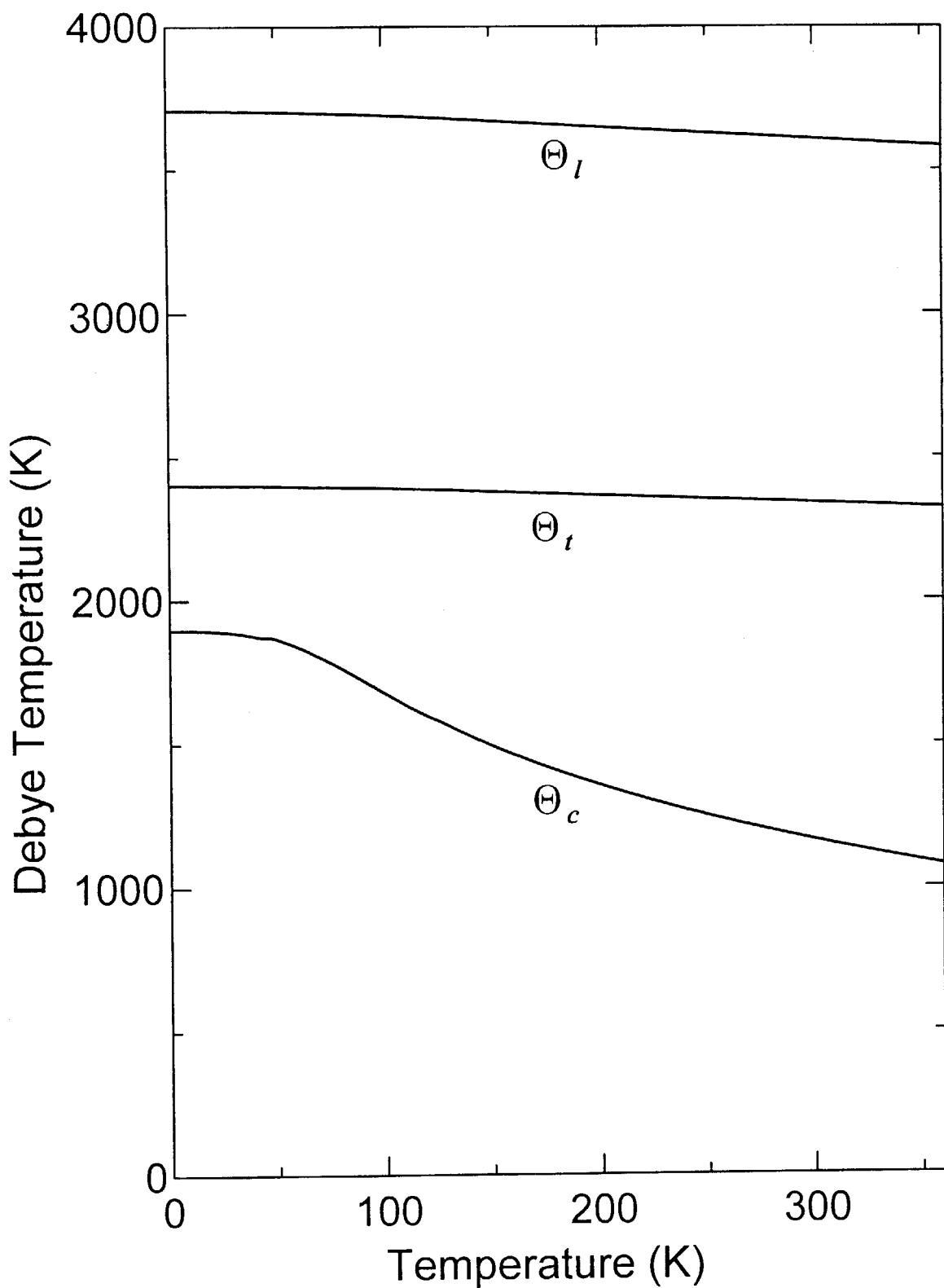


Fig. 2 Temperature dependence of Debye temperatures,  $\Theta_l$ ,  $\Theta_t$  and  $\Theta_c$ , for in-plane longitudinal mode, in-plane transverse mode and out-of-plane mode, respectively.

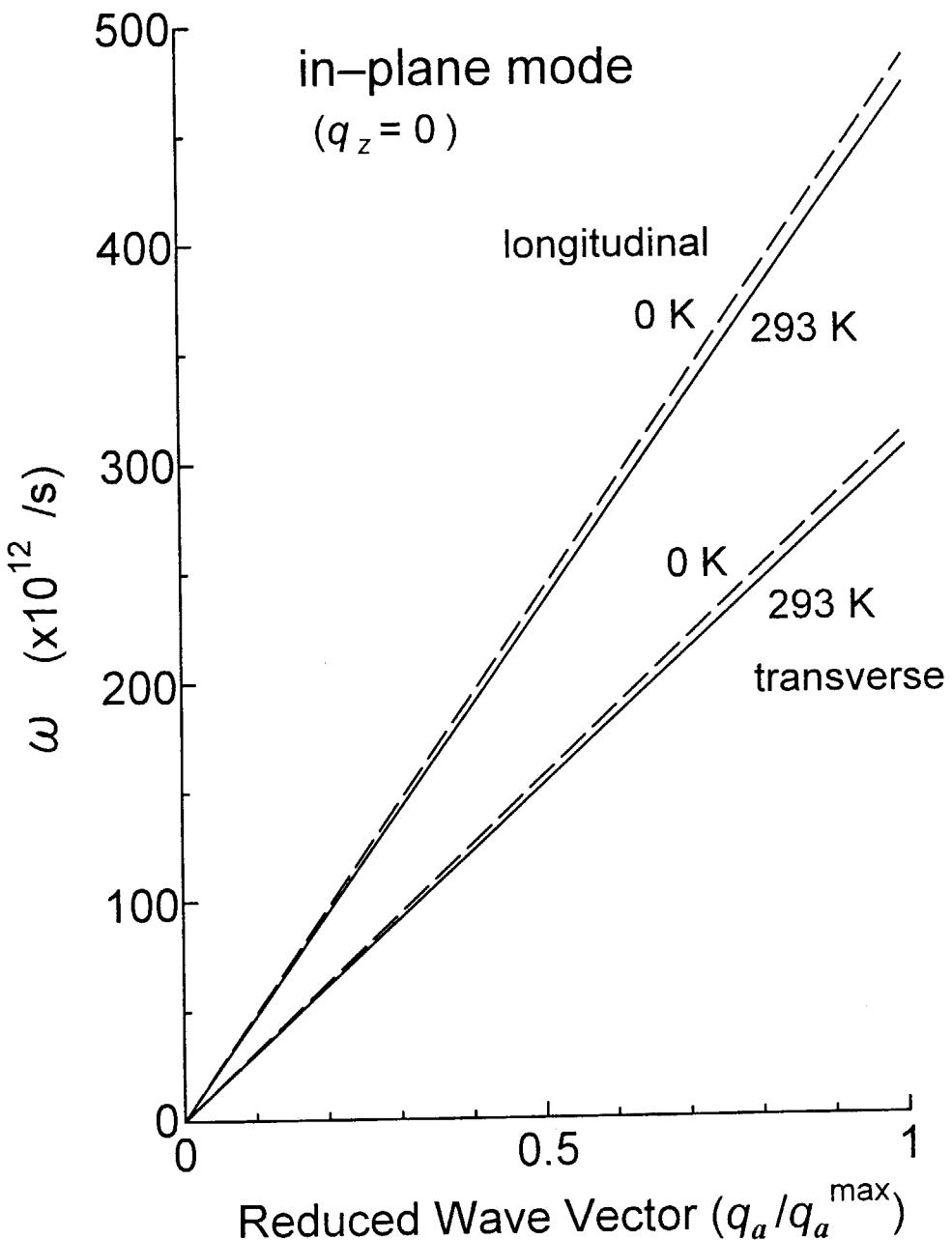


Fig. 3 Dispersion curves of the two in-plane modes along the  $q_a$  direction for  $q_z = 0$  at 0 K and 293 K.  $q_a^{\max} = 4(\pi/3\sqrt{3})^{1/2}/a$  and  $a$  is the nearest neighbour atomic spacing. Effect of  $q_z$  on the curves is negligibly small except for near  $q_a = 0$ .

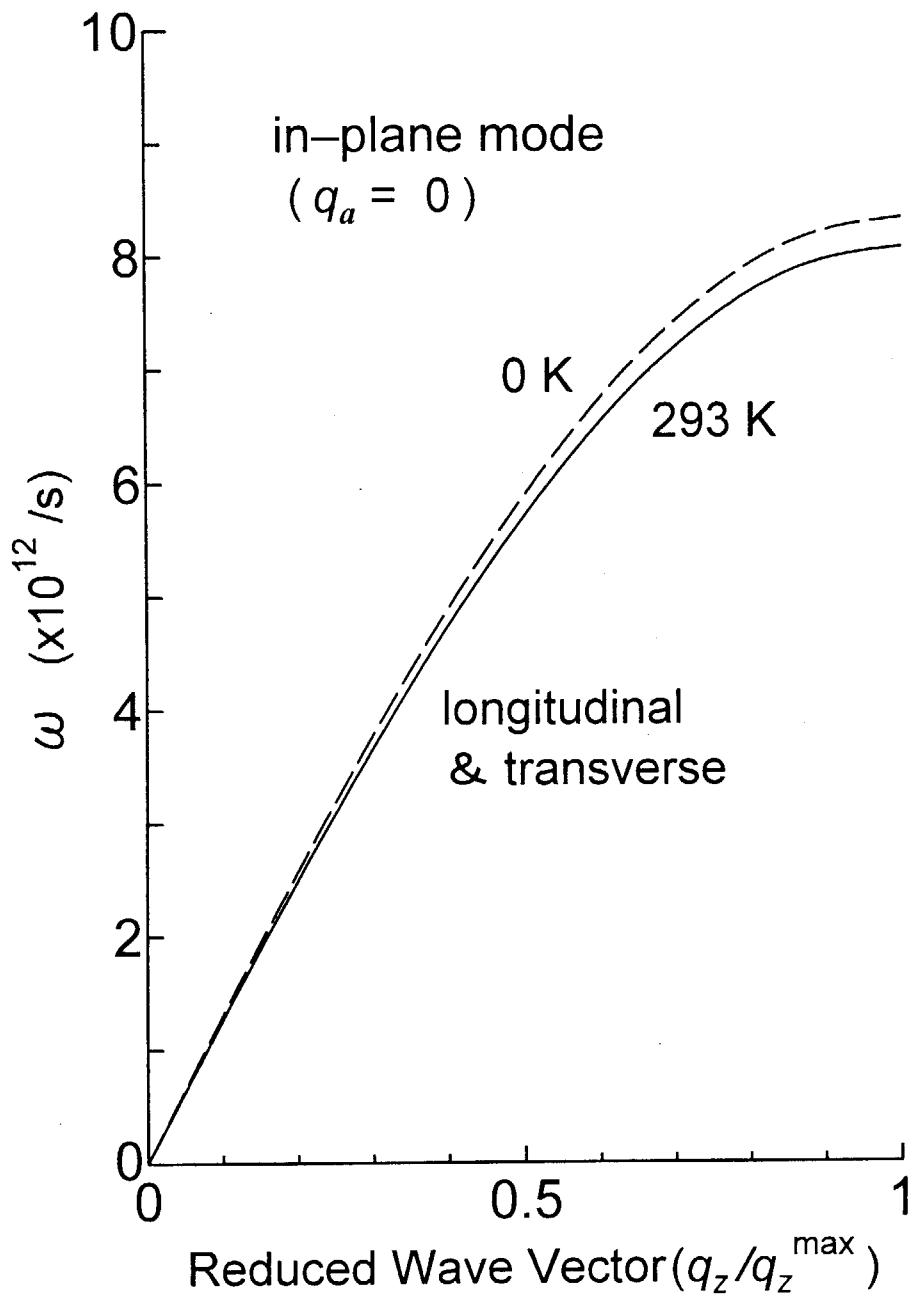


Fig. 4 Dispersion curves of the two in-plane modes along the  $q_z$  direction for  $q_a = 0$  at 0 K and 293 K.  $q_z^{\max} = \pi/c$  and  $c$  is the interlayer spacing.

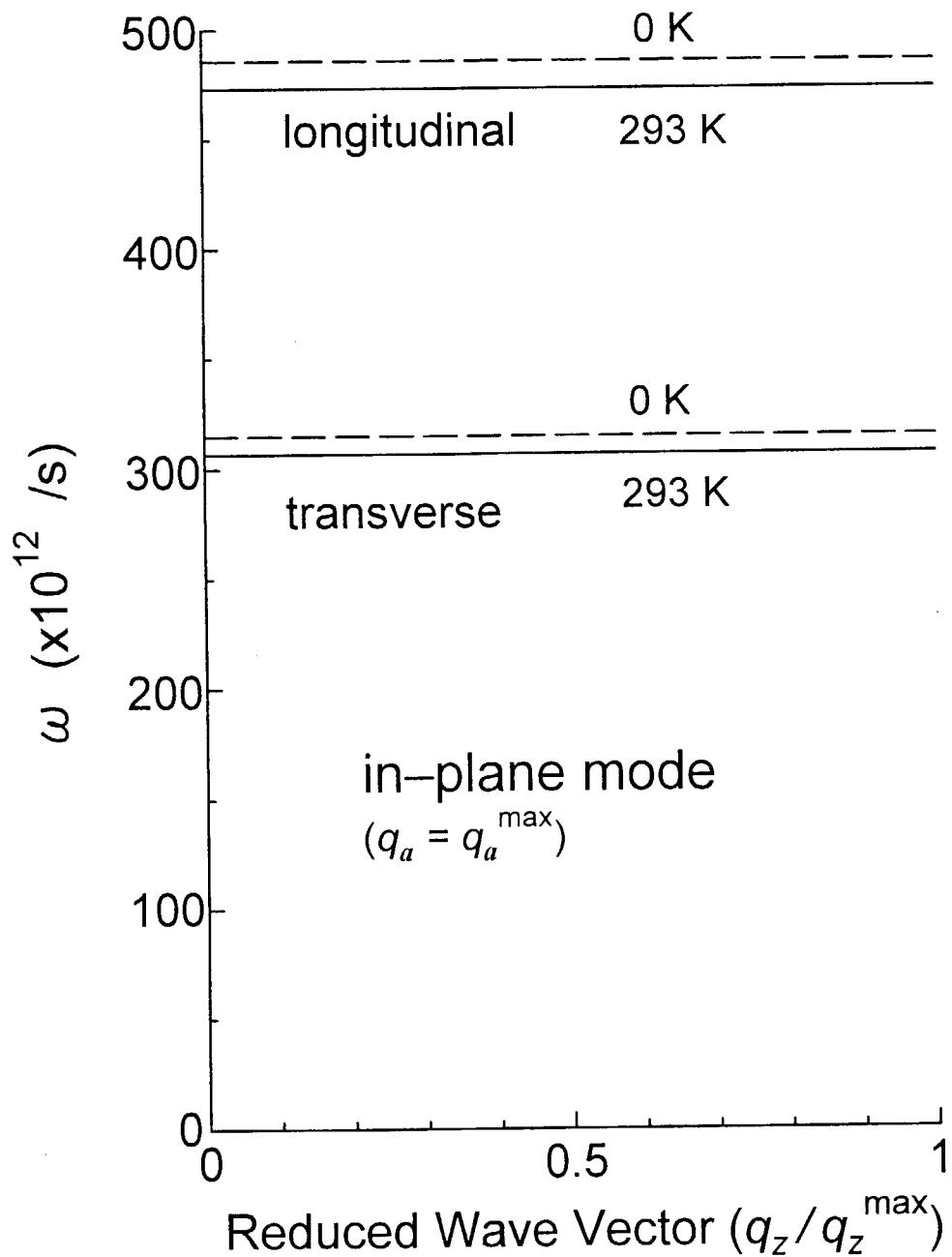


Fig. 5 Dispersion curves of the two in-plane modes along the  $q_z$  direction for  $q_a = q_a^{\max}$  at 0 K and 293 K.  $q_a^{\max} = 4(\pi/3\sqrt{3})^{1/2}/a$ ,  $q_z^{\max} = \pi/c$ ,  $a$  is the nearest neighbour atomic spacing and  $c$  is the interlayer spacing.

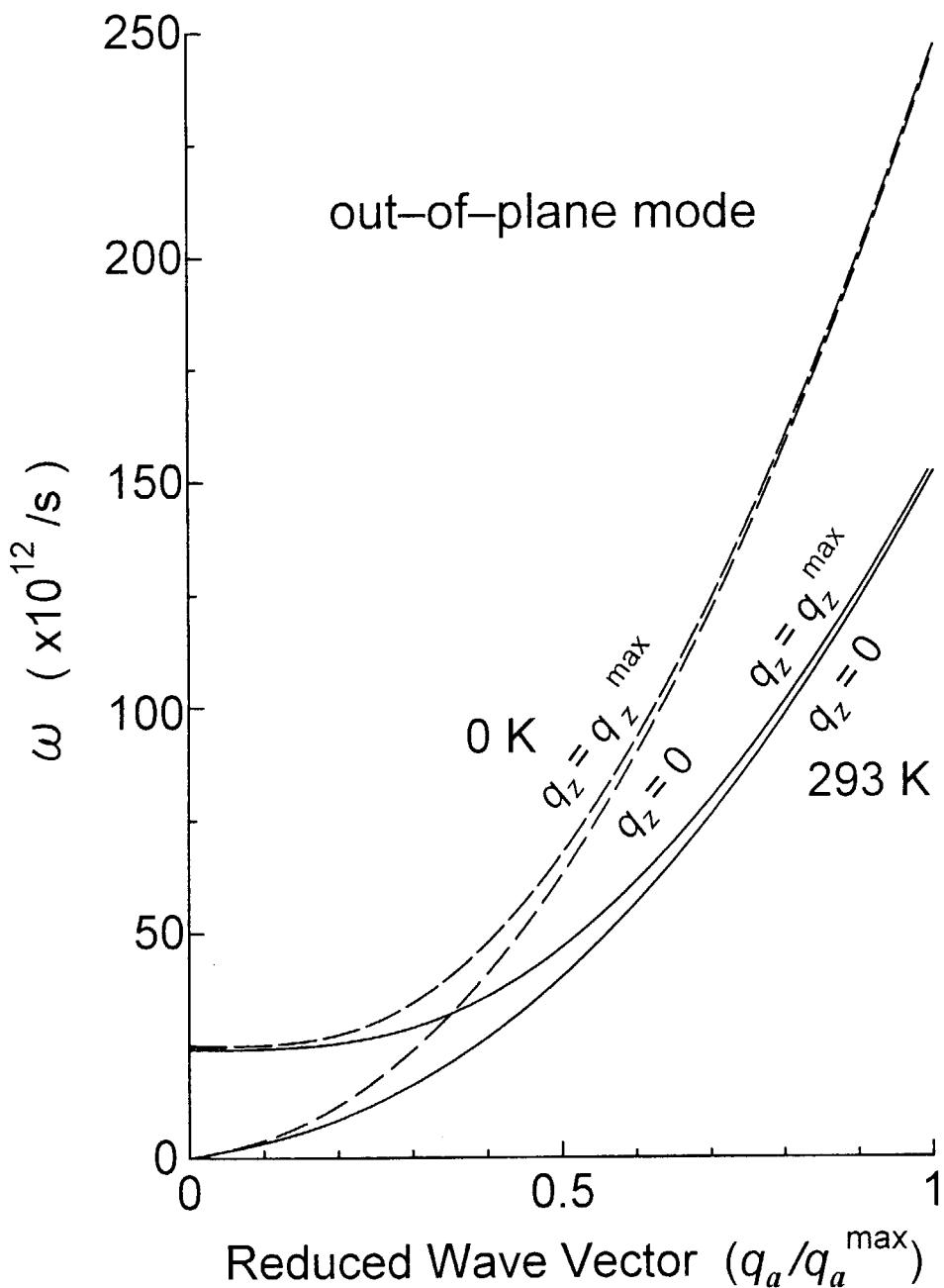


Fig. 6 Dispersion curves of the out-of-plane mode along the  $q_a$  direction for  $q_z = 0$  and  $q_z = q_z^{\max}$  at 0 K and 293 K.  $q_a^{\max} = 4(\pi/3\sqrt{3})^{1/2}/a$ ,  $q_z^{\max} = \pi/c$ ,  $a$  is the nearest neighbour atomic spacing and  $c$  is the interlayer spacing.

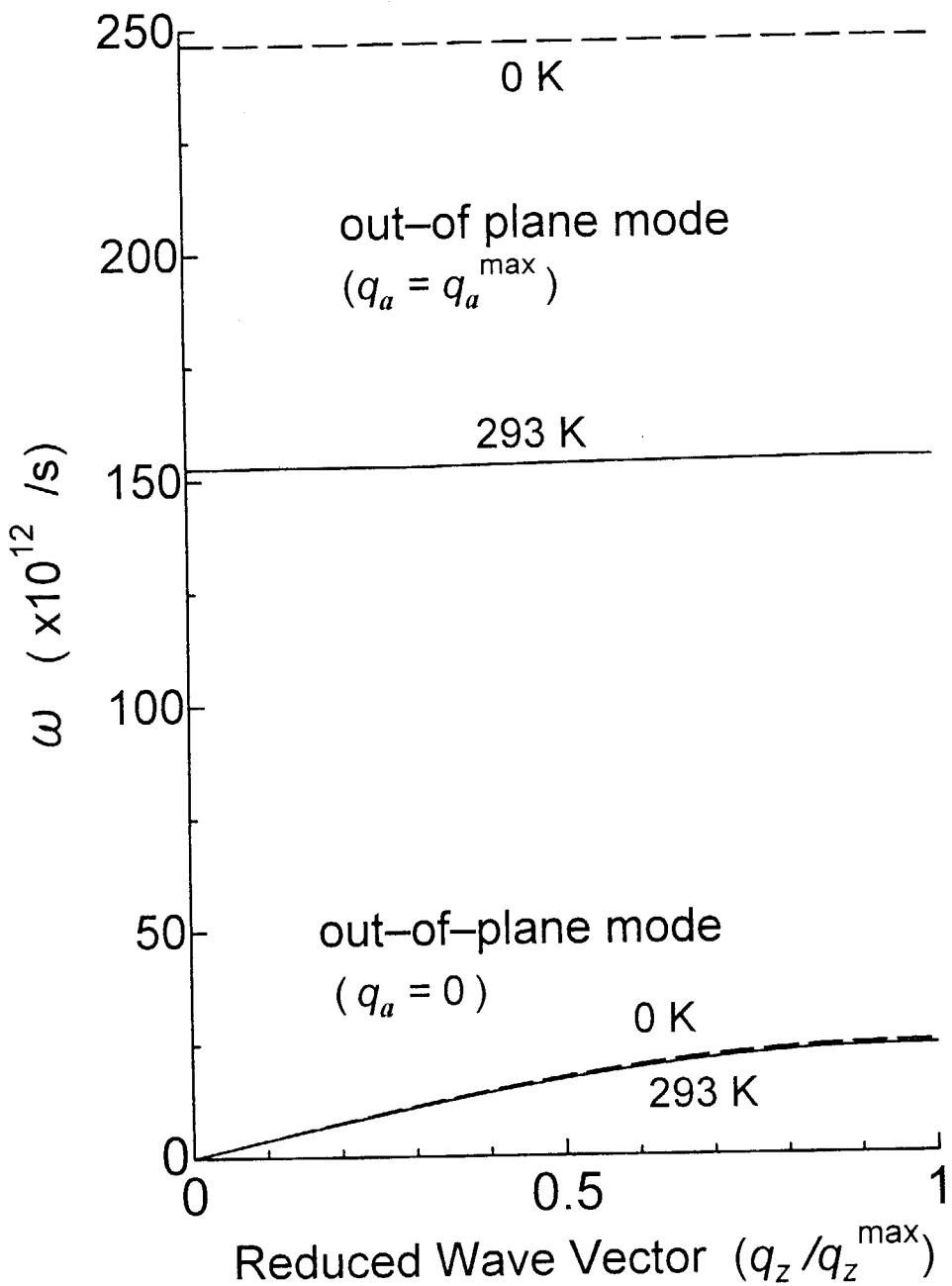


Fig. 7 Dispersion curves of the out-of-plane mode along the  $q_z$  direction for  $q_a = 0$  and  $q_a = q_a^{\max}$  at 0 K and 293 K.  $q_a^{\max} = 4(\pi/3\sqrt{3})^{1/2}/a$ ,  $q_z^{\max} = \pi/c$ ,  $a$  is the nearest neighbour atomic spacing and  $c$  is the interlayer spacing.

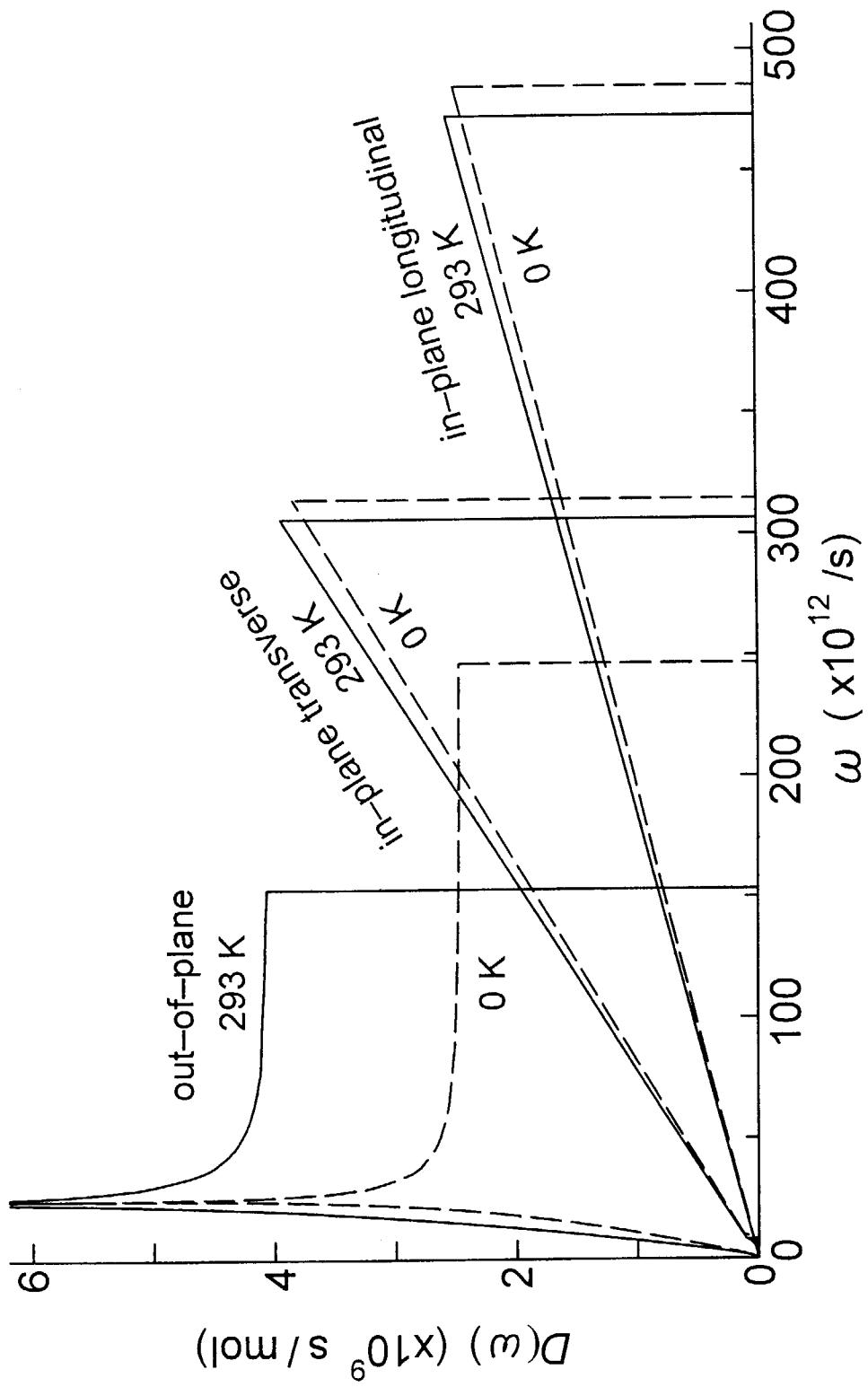


Fig. 8 Frequency distribution functions of in-plane longitudinal, in-plane transverse and out-of-plane vibrations at 0 K and 293 K.

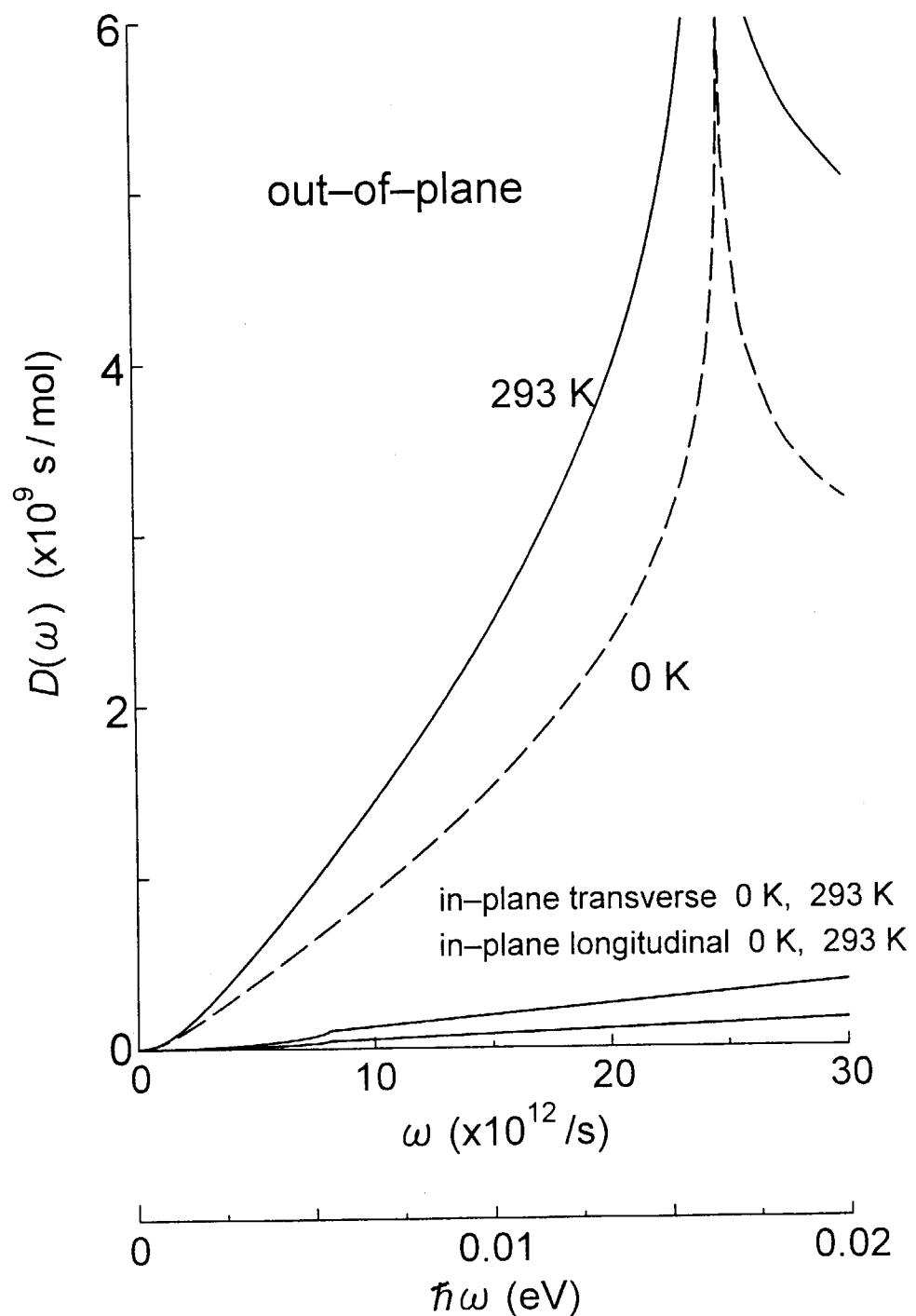


Fig. 9 Enlarged frequency distribution functions for the low frequency region.

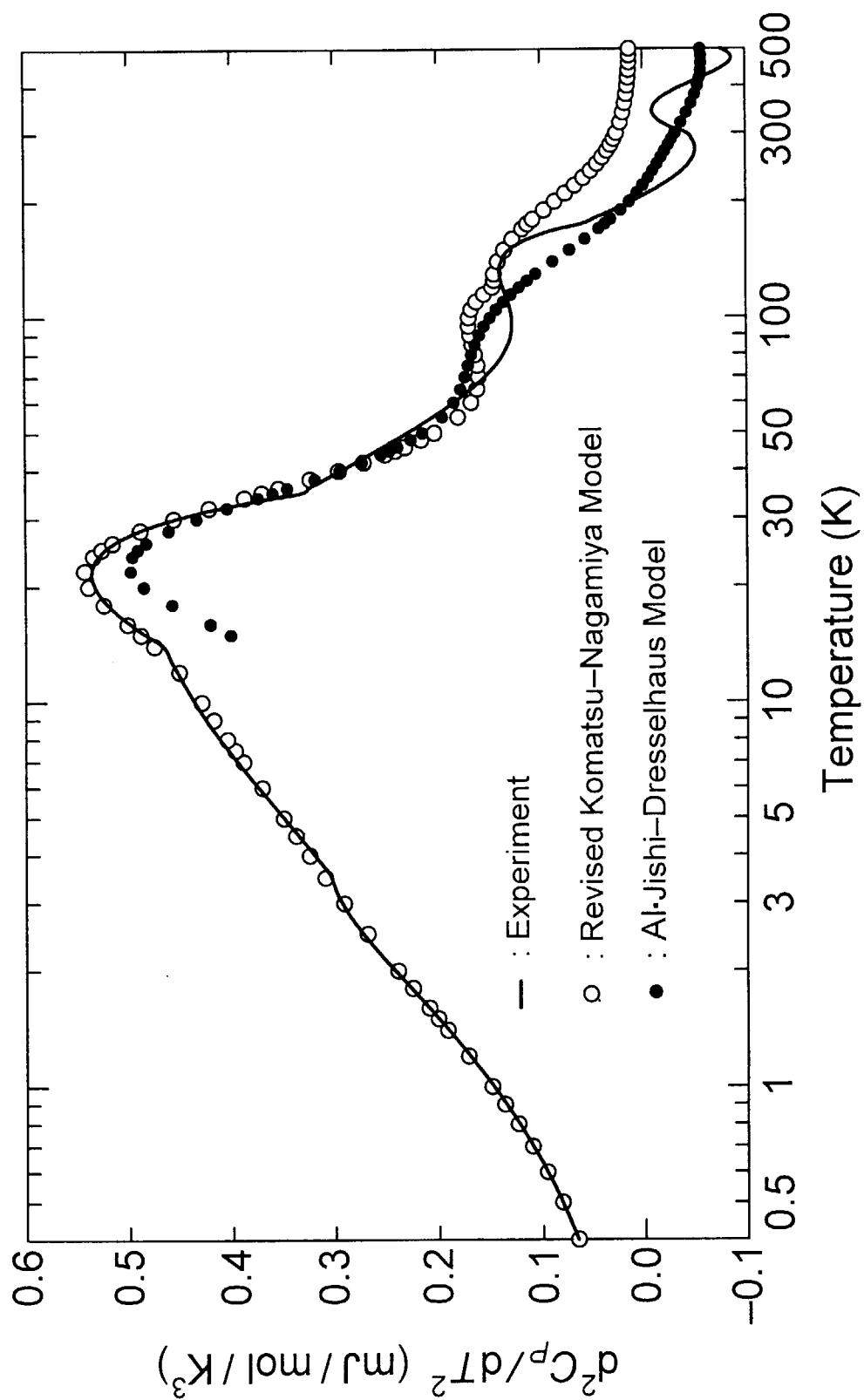


Fig. 10 Comparison of the experimental and the calculated second derivatives of the specific heat of graphite with respect to temperature. The solid line is derived from the experimental specific heat in Table II. The white and black circles are calculated from the frequency distribution functions of the revised Komatsu and Nagamiya model and the Al-Jishi and Dresselhaus model, respectively.

This is a blank page.

# 国際単位系(SI)と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s <sup>-1</sup>
力	ニュートン	N	m·kg/s <sup>2</sup>
圧力、応力	パスカル	Pa	N/m <sup>2</sup>
エネルギー、仕事、熱量	ジユール	J	N·m
功率、放射束	ワット	W	J/s
電気量、電荷	クーロン	C	A·s
電位、電圧、起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラード	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m <sup>2</sup>
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光束度	ルーメン	lm	cd·sr
照度	ルクス	lx	lm/m <sup>2</sup>
放射能	ベクレル	Bq	s <sup>-1</sup>
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量等量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名 称	記 号
分、時、日	min, h, d
度、分、秒	°, ′, ″
リットル	L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名 称	記 号
オングストローム	Å
バーゼル	b
バール	bar
ガル	Gal
キュリ	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

$$1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ b} = 100 \text{ fm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$$

$$1 \text{ bar} = 0.1 \text{ MPa} = 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm/s}^2 = 10^{-2} \text{ m/s}^2$$

$$1 \text{ Ci} = 3.7 \times 10^{10} \text{ Bq}$$

$$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{ C/kg}$$

$$1 \text{ rad} = 1 \text{ cGy} = 10^{-2} \text{ Gy}$$

$$1 \text{ rem} = 1 \text{ cSv} = 10^{-2} \text{ Sv}$$

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
$10^{18}$	エクサ	E
$10^{15}$	ペタ	P
$10^{12}$	テラ	T
$10^9$	ギガ	G
$10^6$	メガ	M
$10^3$	キロ	k
$10^2$	ヘクト	h
$10^1$	デカ	da
$10^{-1}$	デシ	d
$10^{-2}$	センチ	c
$10^{-3}$	ミリ	m
$10^{-6}$	マイクロ	μ
$10^{-9}$	ナノ	n
$10^{-12}$	ピコ	p
$10^{-15}$	フェムト	f
$10^{-18}$	アト	a

(注)

1. 表1~5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局1985年刊行による。ただし、1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。

2. 表4には海里、ノット、アール、ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。

3. barは、JISでは流体の圧力を表す場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。

4. EC機関理事会指令ではbar、barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

## 換 算 表

力	N(=10 <sup>5</sup> dyn)	kgf	lbf
1	0.101972	0.224809	
9.80665	1	2.20462	
4.44822	0.453592	1	

$$\text{粘度 } 1 \text{ Pa}\cdot\text{s}(N\cdot\text{s}/\text{m}^2) = 10 \text{ P(ボアズ)}(\text{g}/(\text{cm}\cdot\text{s}))$$

$$\text{動粘度 } 1 \text{ m}^2/\text{s} = 10^4 \text{ St(ストークス)}(\text{cm}^2/\text{s})$$

圧	MPa(=10bar)	kgf/cm <sup>2</sup>	atm	mmHg(Torr)	lbf/in <sup>2</sup> (psi)
力	1	10.1972	9.86923	$7.50062 \times 10^3$	145.038
	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	$1.33322 \times 10^{-1}$	$1.35951 \times 10^{-3}$	$1.31579 \times 10^{-3}$	1	$1.93368 \times 10^{-2}$
	$6.89476 \times 10^{-3}$	$7.03070 \times 10^{-2}$	$6.80460 \times 10^{-2}$	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 <sup>7</sup> erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft·lbf	eV	1 cal = 4.18605 J (計量法)	
								= 4.184 J (熱化学)	
1	0.101972	2.77778×10 <sup>-7</sup>	0.238889	9.47813×10 <sup>-4</sup>	0.737562	6.24150×10 <sup>18</sup>			
9.80665	1	2.72407×10 <sup>-6</sup>	2.34270	9.29487×10 <sup>-3</sup>	7.23301	6.12082×10 <sup>19</sup>			
$3.6 \times 10^6$	$3.67098 \times 10^5$	1	$8.59999 \times 10^5$	3412.13	$2.65522 \times 10^6$	$2.24694 \times 10^{25}$			
4.18605	0.426858	$1.16279 \times 10^{-6}$	1	$3.96759 \times 10^{-3}$	3.08747	$2.61272 \times 10^{19}$			
1055.06	107.586	$2.93072 \times 10^{-1}$	252.042	1	778.172	$6.58515 \times 10^{21}$			
1.35582	0.138255	$3.76616 \times 10^{-7}$	0.323890	$1.28506 \times 10^{-3}$	1	$8.46233 \times 10^{18}$			
$1.60218 \times 10^{19}$	$1.63377 \times 10^{20}$	$4.45050 \times 10^{-26}$	$3.82743 \times 10^{-20}$	$1.51857 \times 10^{-22}$	$1.18171 \times 10^{-19}$	1			

放射能	Bq	Ci	吸収線量	Gy	rad
	1	$2.70270 \times 10^{-10}$		1	100
	$3.7 \times 10^{10}$	1		0.01	1

照 射 線 量	C/kg	R
	1	3876
	$2.58 \times 10^{-4}$	1

線 量 等 量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

(86年12月26日現在)

黒鉛の格子振動の温度依存性と比熱の解析（協力研究）

R100  
古紙配合率100%  
白色度70%再生紙を使用しています