完全規則系材料のモデルと抵抗網

東京農工大学農学部　　弓　削　善　夫

Ⅰ. はじめに

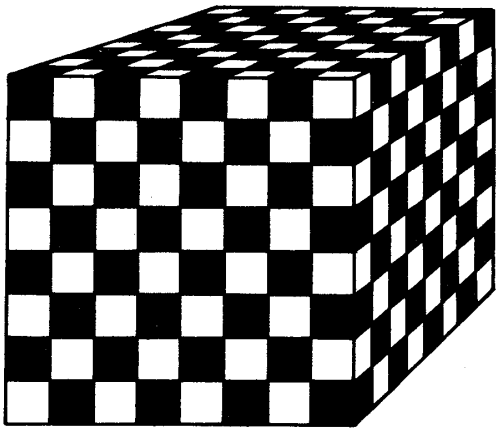
最近不均一系材料に対する関心が高まり，各方面の研究者がその物理的性質を統計的に予測しようとする試みがなされてきた[1)]。一方，完全規則系材料も，自然界にはほとんど存在しないが，不均一系との比較のため，あるいは結晶などの性質を知るうえにも必要であろう。

近年，電子計算機の高速化に伴い，材料の物性を抵抗網[2,3,4)]やFEM（有限要素法）[5)]などにより予測する試みがなされ，有効な近似理論式が得られている。また，二次元のくり返し模様の電気伝導度も美しい理論によって厳密に解析されている[6)]。これらの理論や考え方は薄膜抵抗や集積回路の技術，あるいは複合材料の物性にも広く利用可能と考えられる。

著者は規則系材料を抵抗網のモデルに置き換えることにより，全く古典的な規則抵抗網の伝導度の計算問題として研究した。その計算結果とそれを予測する理論式を報告する。

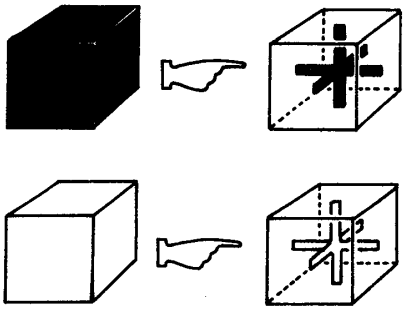
Ⅱ. 二相規則系材料のモデル

二相規則材料の三次元モデルを図－1に示す。これは第一相を代表する黒の単位立方体と第二相を表わす白の単位立方体を，交互にN×N×Nに積み重ねたものである。注意すべきことは黒および白の立方体の個数は相等しいことである。

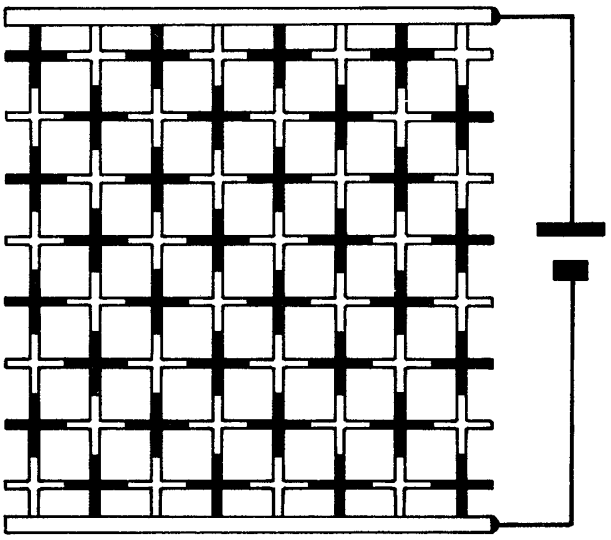


図－1　完全規則材料のモデル

このモデルの黒，白の立方体をそれぞれの相に対応する，異なるコンダクタンスを持つ単位抵抗体（図－2）で置き換えると，図－3



図－2　単位抵抗体



図－3　完全規則抵抗網の断面図

の三次元の規則抵抗網が得られる。この抵抗網の上下に完全導体からなる電極板をつけ，電圧勾配に適合する初期値を抵抗網の各格子点に与える。このときの各層の電流値をKirchhoff の法則にもとづくSuccessive over-relaxation 法によって，定常状態になるまで計算すると系全体の伝導度が求められる[2,3,4]。

Ⅲ. 計算結果

表－Ⅰに計算機実験で得られた結果を$K_2/K_1=1$のとき，$K(K_2/K_1)=1$ となるように正規化して示した。第一相と第二相のコンダクタンスの比K_2/K_1は0.05から0.95まで，0.05間隔で調べてある。系全体の伝導度はSOR 法によって反復計算した最後の各層の電流値の平均である。表－Ⅰに示した誤差は各層の電流値の最大と最小の差であり，$N=8$の場合は±0.0006，$N=30$の場合は±0.0008であった。

図－4には$N=30$のときの結果を示した。表－Ⅰの理論値と図－4の実線はⅣ章の理論式による予測で，破線は単位立方体が連続抵抗体であるときの上限値と下限値である。

なお，計算はモデルのパターンが同じであるため，$K_2/K_1=1$から除々に減少させる方法[2]を使用した。この方法によって反復計算はすみやかに行なわれ，収束も速く，計算時間は半減した。

表－1. 抵抗網の伝導度の計算結果と理論値

K_2/K_1	Numerical results $N=8$	Numerical results $N=30$	Theory $K_{N=8}$	Theory $K_{N=30}$
1.0	1.0*	1.0*	1.0*	1.0*
0.95	0.9744	0.9742	0.9744	0.9744
0.90	0.9476	0.9473	0.9477	0.9474
0.85	0.9195	0.9189	0.9197	0.9191
0.80	0.8900	0.8891	0.8903	0.8892
0.75	0.8588	0.8575	0.8593	0.8577
0.70	0.8260	0.8241	0.8267	0.8244
0.65	0.7914	0.7888	0.7923	0.7891
0.60	0.7546	0.7511	0.7559	0.7515
0.55	0.7156	0.7113	0.7172	0.7117
0.50	0.6741	0.6687	0.6761	0.6691
0.45	0.6296	0.6230	0.6321	0.6237
0.40	0.5820	0.5743	0.5849	0.5749
0.35	0.5307	0.5218	0.5340	0.5226
0.30	0.4752	0.4651	0.4789	0.4660
0.25	0.4148	0.4039	0.4188	0.4049
0.20	0.3487	0.3374	0.3529	0.3383
0.15	0.2758	0.2648	0.2800	0.2657
0.10	0.1948	0.1852	0.1984	0.1860
0.05	0.1035	0.0974	0.1061	0.0979
0.0	0.0*	0.0*	0.0*	0.0*
error	± 0.0006	± 0.0008		

* Exact values

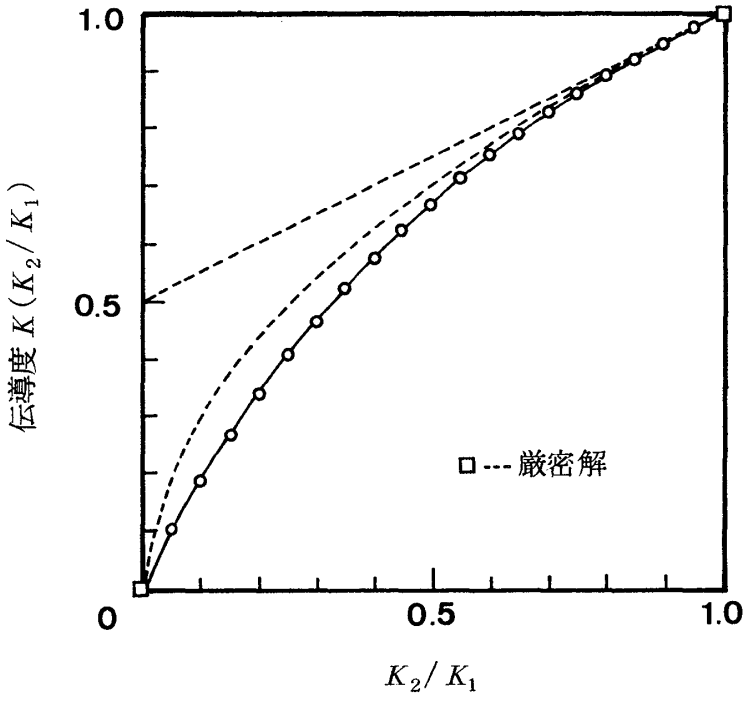
Ⅳ. 理　論

二相規則抵抗網の伝導度をKとすれば，

$$K=f(K_1,\ K_2,\ N) \qquad \cdots\cdots (1)$$

と定義される。ただし，K_1は第一相の，K_2は第二相のコンダクタンスを表わし，Nは系の大きさを表わす。

ところで，$N\to\infty$のとき格子点間のすべての bond が同じ抵抗値を持つことから，系全体の伝導度$K_{N=\infty}$は，



図－4　第一相と第二相のコンダクタンスの比 K_2/K_1 と
二相規則抵抗網の伝導度 $K(K_2/K_1)$。実線は理論値。

$$K_{N=\infty} = \lim_{N\to\infty} f(K_1,\ K_2,\ N)$$

$$= 2K_1K_2/(K_1+K_2), \qquad \cdots\cdots (2)$$

となる。

注目すべきことは，上記の式(2)がRef. (4)で修正されたEffective-medium theory (EMT) から導けることである。すなわち，図－3の K_1-siteおよび K_2-siteの最隣接bondの平均のコンダクタンスは，それぞれ，$K_{m1}=K_3$，$K_{m2}=K_3$，ただし，$K_3=2K_1K_2/(K_1+K_2)$。

ここで，single bond EMTによって系全体の伝導度 K_m は，

$$K_m = \left\{\frac{1}{2}K_{m1} + \frac{1}{2}K_{m2} + \left[\left(\frac{1}{2}K_{m1} + \frac{1}{2}K_{m2}\right)^2 + 8K_{m1}K_{m2}\right]^{\frac{1}{2}}\right\}/4,$$

$$= 2K_1K_2/(K_1+K_2), \qquad \cdots\cdots (3)$$

となる。このようにEMTが不規則系だけではなく，規則系にも適用できることは興味深く，きわめて応用範囲の広い理論であることを示している。

また，系が有限の場合（N：偶数）において，次のように抵抗網の伝導度を近似的に

求めることができる。

図－3に示した抵抗網を図－5のようにA，B，Cの三層に分割し，A層の伝導度をK_A，B層をK_B，C層をK_Cとすれば，系全体の伝導度K_Nは，

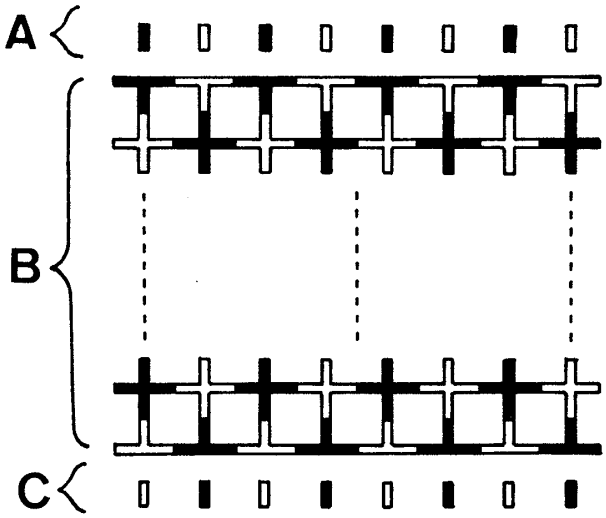
$$\frac{1}{K_N}=\frac{1}{K_A}+\frac{1}{K_B}+\frac{1}{K_C}, \qquad \cdots\cdots(4)$$

を得る。ところでA層の伝導度は，

$$K_A=(K_1+K_2)N \qquad \cdots\cdots(5)$$

C層の伝導度K_CはA層と同じである：

$$K_C=K_A。 \qquad \cdots\cdots(6)$$



図－5　A，B，C層に分割された規則抵抗網

さらにB層の伝導度は無限系と同様にすべてのbondは同じ抵抗値であるから，

$$K_B=\frac{2NK_1K_2}{(K_1+K_2)(N-1)}。 \qquad \cdots\cdots(7)$$

(4)，(5)，(6)，(7)式から，有限系における伝導度は，

$$K_N=\frac{2NK_1K_2(K_1+K_2)}{(K_1+K_2)(N-1)+4K_1K_2} \qquad \cdots\cdots(8)$$

図－4には$K_{N=30}$を実線で示した。この近似式の精度は非常に良く，$N=8$の場合の誤差は2％，$N=30$では1％以下であった。

*　*　*　*　*　*　*

図－1に示した規則材料のモデルで，単位立方体が連続抵抗体のときは厳密に求められていないが，次のようにして上限値と下限値を与えることができる[7]。

図－1の規則モデルを分割し，N枚の並列抵抗体を考えると，変分原理によって，分割されたモデルの全抵抗は図－1よりも大きく，伝導度は小さくなる。この伝導度は完全に二次元な，全く等しいN枚の抵抗板の並列接続であるから正確に求められる。一枚の板は二次元市松模様で，その伝導度は$\sqrt{K_1K_2}/N$となる[6]。その並列接続で，

$$K=\sqrt{K_1K_2}。 \qquad \cdots\cdots(9)$$

これは図－1の伝導度の下限値となる。

上限値は水平に分割したN枚の抵抗板の直列接続から，

$$K=\frac{K_1+K_2}{2}\ 。 \qquad \cdots\cdots(10)$$

図－4にこの上限と下限を破線で示した。注意したいことは，抵抗網の伝導度が下限値よりさらに小さくなることである。これは連続体では電流は全く自由な方向に，流れ易い方へと流れていくが，抵抗網では制限され，特に1個の立方体を1個の節点を持った単位抵抗体で表わす場合は著しく，流れにくくなるために伝導度は小さくなると考えられる。

V. おわりに

規則抵抗網のモデルの伝導度を中心に計算機実験と理論解析を試みた。無限リニア・グラフで媒質中の粒子あるいは流体の運動を表わす浸透理論（percolation theory）が物質中の電子の挙動をも記述し得ることをZimanら[8,9]は示している。材料の構成要素を単位抵抗体で置換することは，浸透理論のsite problemに対応している。規則抵抗網の伝導度が本質的に近似理論であるEMTから厳密に導かれることは興味深い。

最後に，この研究に際し，遠い所からたいへん有益なご助言をいただいた茨城大学工学部の寺門龍一先生，終始暖いご指導をして下さった東京農工大学農学部の鬼塚宏太郎先生に心から感謝いたします。

References

1) 堀素夫，日本統計学会誌3，19（1972）.
2) S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 27, 1722 (1971).
Rev. Mod. Phys. 45, 573 (1973).
3) K. Onizuka, J. Phys. Soc. Japan 39, 527 (1975).
4) 弓削善夫，物性研究25，13（1975）. 物性研究26，35（1976）.
5) 小阪義夫，コンクリート工学13，1（1975）.
6) R. Terakado, Proc. IEEE 57, 734 (1969). 電気学会論文誌92－A，263（1972）.
数学セミナー12－11，10（1973）.

7) 寺門龍一, private communication.

8) J. M. Ziman, J. Phys. C: Proc. Phys. Soc., London 1, 1532 (1968).

9) T. P. Eggarter and M. H. Cohen, Phys. Rev. Lett. 25, 807 (1970).