

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 $N \times N \times N$ 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。

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

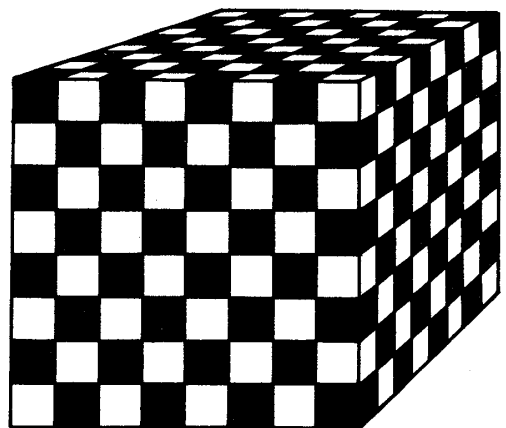


図-1 完全規則材料のモデル

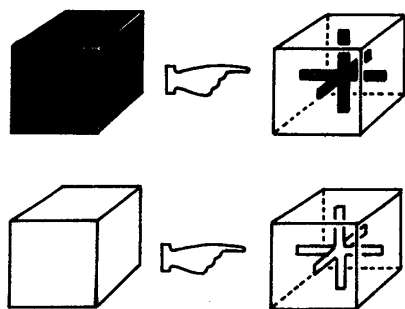


図-2 単位抵抗体

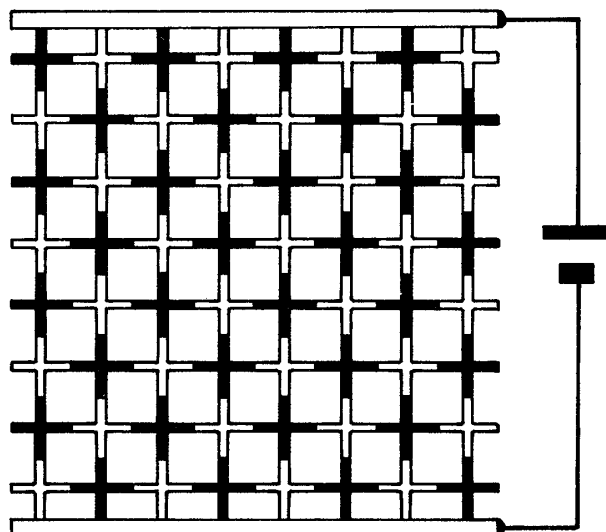


図-3 完全規則抵抗網の断面図

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		Theory	
	$N = 8$	$N = 30$	$K_{N=8}$	$K_{N=30}$
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,

$$K = f(K_1, K_2, N) \quad \dots\dots (1)$$

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, $N \rightarrow \infty$ 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,

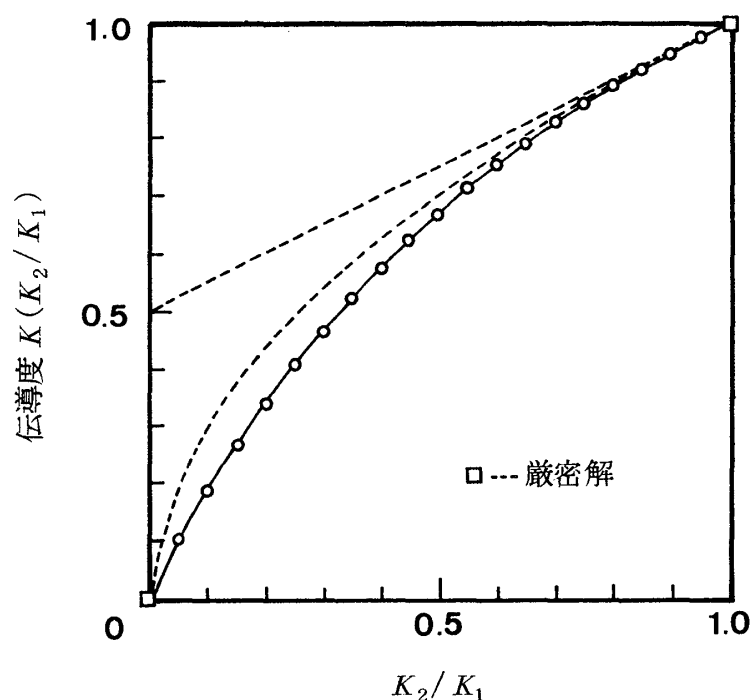


図-4 第一相と第二相のコンダクタンスの比 K_2/K_1 と二相規則抵抗網の伝導度 $K(K_2/K_1)$ 。実線は理論値。

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

$$= 2K_1 K_2 / (K_1 + K_2), \quad \dots\dots (2)$$

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、 $K_3 = 2K_1 K_2 / (K_1 + K_2)$ 。

ここで、single bond EMT によって系全体の伝導度 K_m は、

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

$$= 2K_1 K_2 / (K_1 + K_2), \quad \dots\dots (3)$$

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、

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

を得る。ところでA層の伝導度は、

$$K_A = (K_1 + K_2)N \quad \dots\dots (5)$$

C層の伝導度 K_C はA層と同じである：

$$K_C = K_A. \quad \dots\dots (6)$$

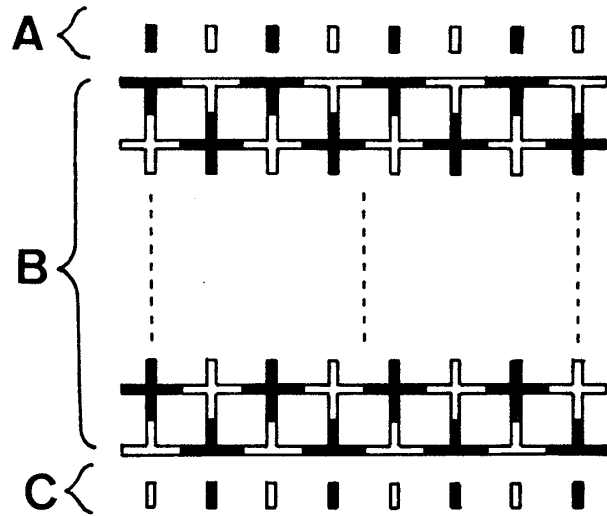


図-5 A, B, C層に分割された規則抵抗網

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、

$$K_B = \frac{2NK_1K_2}{(K_1 + K_2)(N - 1)}. \quad \dots\dots (7)$$

(4), (5), (6), (7)式から、有限系における伝導度は、

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

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、

$$K = \sqrt{K_1K_2}. \quad \dots\dots (9)$$

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、

$$K = \frac{K_1 + K_2}{2} . \quad \dots\dots (10)$$

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).