

結晶基が2個までの分子の振動を表す離散的な等価回路

永井 信夫

目次

- I. はじめに
- II. 集中定数回路と映像パラメータ理論
 - 2.1 回路の相反性, 無損失および対称性
 - 2.2 無損失対称回路の固有値と固有ベクトル
- III. 定Kフィルタの映像パラメータ
 - 3.1 基本区間
 - 3.2 固有値と固有ベクトル
 - 3.3 通過帯域の性質
 - 3.4 遮断周波数帯域の性質
- IV. N個の分子の等価回路
- V. 結晶基が2個の原子を含む1次元格子
- VI. むすび

I. はじめに

文献 [1] において, 分子の運動はバネと同じであると知られていることを基に, 分子の運動方程式を満たす変位を回路素子の一つであるコンデンサの電荷に対応させることができ, 分子の運動方程式を満たす等価回路を求めることができた。また, 分子が連続体と考えられるときの運動方程式に回路理論を応用したところ, その運動方程式を満足する関数は変位だけではなく, 対となる2つの関数を定義することができ, その2つの関数はマクスウェル方程式を満足することを示した。すなわち, 連続体と仮定する分子の振動は(分布定数)回路そのものとなり, エネルギー

の伝送などに用いることができることが明らかとなった。

ところで, 連続体にはならないで大きさを持っていて, 離散的あるいは不連続な物質と考えたほうが適切な場合には, 変位に関する差分方程式になっていて, 分子の運動方程式の解析は固有振動で行われる。そのため, 波動回路の場合でも固有値問題は定常状態を表していて, エネルギーが閉じ込められていて, 振動がゼロに固定されている点がある。また, 固有振動以外の周波数の波はどうなるのかの疑問も残る。また, 差分方程式で表される集中定数回路の固有値問題では, 波動回路よりなお一層無効電力の影響が強くなると考えられるので, エネルギーや信号の移動については考察を続ける必要を感じる。すなわち, 1次元結晶のN個の分子を利用してフィルタの働きを得たいと考える場合には, 固有振動以外の周波数のエネルギーや信号の移動ができることをハッキリと示しておかなければならない。

本文では, 集中定数回路に映像パラメータ理論を用いて, 周期構造系に関するエネルギーの移動や, 集中定数回路のような離散的な回路と波動回路のような連続的な回路との違いを考える。

そこで本文では, 結晶基が1個の分子のエネルギーの伝わり方の解決法を示し, 結晶基が2個の原子を含む1次元格子振動には古典回路理論の映像パラメータ理論を述べた文献

キーワード: 分子の振動を表す離散的な等価回路, 差分方程式に対する集中定数等価回路, 映像パラメータ理論, 対称回路が縦続接続した周期構造系, 結晶基が2個までの分子の等価回路

[2] を引用して、エネルギーや信号の移動が古典回路理論で説明できることを示す。

II. 集中定数回路と映像パラメータ理論

文献 [1] において1次元結晶の分子の運動方程式を考えたところ、微分方程式と差分方程式との混在する方程式であった。また、その結晶の振動は集中定数回路素子の L, C で等価回路表示できた。したがって、差分方程式のような離散的な表現は集中定数回路で表される可能性があることになる。そこで、差分方程式を表現することに重点において集中定数回路について考察しておこう。

2.1 回路の相反性、無損失性および対称性

回路理論の基本性質の一つにエネルギーの移動があるが、それは古典回路理論の反復および映像パラメータ理論で考えられていて、その再考が文献 [2] などに述べたので、ここでは映像パラメータ理論で必要となる事項を簡単に述べておく。

回路には電圧と電流という二つの関数(成分)が定義されていて、2ポート(端子対)回路は縦続行列で次のように表わされる。

$$\begin{bmatrix} V_1 \\ I_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_2 \\ I_2 \end{bmatrix} \quad (1)$$

ただし、ここでは I_2 の電流方向も左から右を正の方向としている。

回路理論は伝送線路でエネルギーを遠方に伝えるという研究からはじまったと考えられるが、R, L, C という集中定数回路素子を用いる理論に移っていったので、微分方程式の解と結びついた。R, L, C を用いた集中定数回路は微分方程式を満たし、電圧、電流を用いる縦続行列は式(1)のように表され、しかも次式を満たす「相反性」が示された。

$$AD - BC = 1 \quad (2)$$

ところで、行列式の本には平行四辺形の面

積を変えない条件として、式(2)を満足する行列を $SL(2, C)$ と表している。回路理論においても電圧と電流との積が電力を表すから、式(2)が無損失回路に関係すると考えられる。しかし、回路理論では式(2)の条件は相反回路を表し、直接には無損失の条件ではないことにまず注意しておく。

分子の振動は集中定数回路素子の L, C で等価回路表示できたが、L, C は無損失素子である。そこで、無損失な回路を考える。ところで、無損失回路の条件が文献 [3] に述べられているので、その条件を再記する。

[無損失なるための縦続行列の条件] 二端子対回路が無損失なるための縦続行列の条件は次のように与えられる。

$$\begin{bmatrix} A^* & C^* \\ B^* & D^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3a)$$

上の条件は縦続行列が「J-ユニタリ行列」と呼ばれる [4]。なお、無損失の集中定数回路の条件は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} A \text{ および } D & \text{ は実数であり,} \\ B \text{ および } C & \text{ は純虚数} \end{aligned} \quad (3b)$$

どうして回路理論では無損失の条件は式(2)ではなく、式(3)なのであろうか。これは電気現象の特長で、エネルギーは電力に関係するが、電気現象では電圧と電流という二つの関数が定義されているので、電力には有効電力と無効電力という2種類の電力があり、エネルギーに関係するのは有効電力のみという性質から説明される。

文献 [5] および [6] に、ヘヴィサイドについて述べたが、ヘヴィサイドの最も大きな発明は「無ひずみ線路の数学的な解」を求めたことと言われているが、実はその条件は「定常状態で負荷に最大のエネルギーを送り込む」条件であることを示した。ヘヴィサイドがこの条件を見つける基になったのは装荷コイルの伝送線路への挿入であり、高速道路にコブをつくるようなものとして大反対を受

けた考えであった。

へヴィサイドの考えが受け入れられなかったのは、偏微分方程式における過渡状態と定常状態との区別をハッキリとしていないことであると私は考えていて、現在でもそれが続いていると感じている。すなわち、「無ひずみ線路の数学的な解」の条件は波形の問題で、時間と深い関係のある過渡応答の条件であると考えられるが、偏微分方程式の普通の解は定常状態を表していて、時間との関係の薄い「定常状態で負荷に最大のエネルギーを送り込む」条件と解釈すべきものと私は考えている。また、装荷コイルを伝送線路へ挿入することは、インピーダンスを実数（すなわち、抵抗）の値にし、電圧と電流との位相差をゼロにすることである。電圧と電流との位相差をゼロにする最も簡単な方法は2ポート回路を対称回路にすることであり、影像パラメータ理論の出番となる。

無損失伝送線路では、一定の特性抵抗上エネルギーが伝わるが、それを回路表示するとどこから見ても対称回路となっている。それに対して、集中定数回路では対称回路を得るには注意が必要となる。

対称回路の条件は、次のように与えられる。

[対称回路の条件]

$$A = D \quad (4)$$

影像パラメータ理論はこの対称回路の条件を使って集中定数回路上をエネルギーが伝わることを示した理論ともいえることに注意しておこう。

2.2 無損失対称回路の固有値と固有ベクトル

影像パラメータ理論は集中定数回路を分布定数回路の伝送線路のように見なして、電圧および電流が伝送されることを扱った理論である。ただし、従来の教科書による説明よりは文献[2]に述べた固有値と固有ベクトルとの説明の方が適切であると確信しているので、それを再び述べる。

ここで、式(1)の縦続行列の固有値と固有ベクトルを求めておこう。固有値は次の行列式から導かれる Λ の2次方程式の根である。

$$\begin{vmatrix} A-\Lambda & B \\ C & D-\Lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (5a)$$

$$\therefore \Lambda^2 - (A+D)\Lambda + AD - BC = 0 \quad (5b)$$

式(5b)に式(3)の相反性と式(4)の対称性とを代入すると次式が得られる。

$$\Lambda^2 - 2A\Lambda + 1 = 0 \quad (6a)$$

したがって

$$\Lambda = A \pm \sqrt{A^2 - 1} \quad (6b)$$

二つの固有値に対する固有ベクトルを求めよう。

固有値 $\Lambda_1 = (A + \sqrt{A^2 - 1})$ に対する固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} Z_I \\ 1 \end{bmatrix} \quad (6c)$$

固有値 $\Lambda_2 = (A - \sqrt{A^2 - 1})$ に対する固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} Z_I \\ -1 \end{bmatrix} \quad (6d)$$

ここに

$$Z_I = \frac{\sqrt{A^2 - 1}}{C} \quad (6e)$$

と表される。

無損失対称回路では、式(6)の A は実数であるから

$$-1 < A < 1 \quad (7a)$$

のときは、 Λ は複素数になるが、式(6a)の与えられ方から、次のように表すことができる。

$$\Lambda_1 = \exp(j\beta_s) \text{ および } \Lambda_2 = \exp(-j\beta_s) \quad (7b)$$

また

$$A \leq -1 \text{ または } 1 \leq A \quad (7c)$$

のときは、 Λ は実数になるが、式(6a)の与えられ方から

$$\gamma_s = \alpha_s + j\beta_s \quad (7d)$$

と表しておけば、

$$\Lambda_1 = \exp(\gamma_s) \text{ および } \Lambda_2 = \exp(-\gamma_s) \quad (7e)$$

ただし

$$\beta_s = n\pi \cdots (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (7f)$$

と表すことができる。

このように、式(7b)のときは、回転ベクトルに似た性質をもつベクトルを表しているので、単位素子で説明したように(ただし定常状態で)波が伝送されることが示されている。そこで、集中定数回路で得られるこのベクトルを「擬似回転ベクトル」と呼ぶことにする。それに対して、 Λ が実数になるときは、ベクトルを表す複素数ではないので、波が伝送されることを表しているわけではない。このような性質を持つ回路を回路理論ではどのように用いているかを、文献[2]で述べたものをそのまま記述して、次章で具体的な回路を使って考察しよう。

Ⅲ. 定 K フィルタの映像パラメータ

前章では相反で無損失対称な回路の縦続行列の固有値を求めたところ、それが擬似回転ベクトルになる場合もあるが、ならないこともあることが示された。実は映像パラメータ理論は無損失対称回路における定常状態での波の伝わり方の考察から導かれたとも考えられるもので、集中定数回路に対しても伝送に關係するベクトルを求めたことと、固有値がベクトルではないものも導出したことが、フィルタの設計のみならず回路理論に対して重要であると考えられる。

なお、分子の運動方程式から得られる等価回路も以下に述べる定 K フィルタと深い関係がある。そこで、映像パラメータ理論で最も重要な回路である定 K フィルタについて考察しよう。

3.1 基本区間

集中定数回路で波を伝えることを考えれば、図1に示す無損失伝送線路の微小区間を集中定数素子に置き換えたものが重要と考えられ

る。

図1に示す回路は回路素子 L および C が周期的に並んでいて、周期構造の基になっている基本区間で、しかも対称回路となっているのは、図2に示す2種類の回路である。

図2に示す2種類の基本区間は、映像パラメータ理論の定 K フィルタの基本区間として知られていて、その映像パラメータは Z_{K1} および Z_{K2} と表されていて[7]、映像パラメータ理論の基礎を与えている。

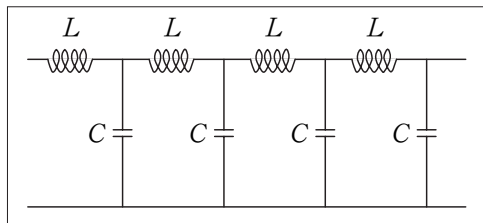


図1 集中定数素子による伝送線路
Fig.1 Transmission line composed of lumped-constant elements

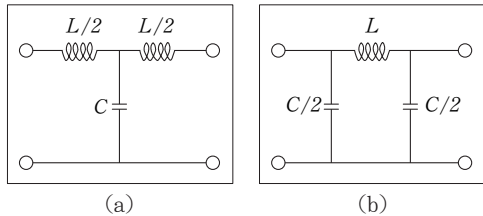


図2 2種類の対称回路の基本区間
Fig.2 Two basic symmetric sections

3.2 固有値と固有ベクトル

ここでは、二つの基本区間の縦続行列を求め、それぞれの縦続行列に対する固有値と固有ベクトルとを求めよう。

図2(a)の回路の縦続行列は、次のように求まる。

$$\begin{bmatrix} 1 + s^2 \frac{LC}{2} & sL + s^3 \frac{L^2 C}{4} \\ sC & 1 + s^2 \frac{LC}{2} \end{bmatrix} \quad (8)$$

この行列に対する固有値および映像インピーダンスは次のように求まる。ただし、二つの

固有値は2種類の基本区間に共通なので、次のように Λ_1 および Λ_2 と表しておく。

$$\Lambda_1 = \left(1 + s^2 \frac{LC}{2}\right) + s\sqrt{LC} \sqrt{\left(1 + s^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (9a)$$

$$\Lambda_2 = \left(1 + s^2 \frac{LC}{2}\right) - s\sqrt{LC} \sqrt{\left(1 + s^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (9b)$$

元に戻って、式(8)を満足する基本区間から考えよう。この区間の固有値は式(9)を満足し、その映像インピーダンスは次のように与えられる。

$$Z_{K1} = \sqrt{\frac{L}{C}} \sqrt{\left(1 + s^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (10)$$

次に図2(b)の回路についても同様に求めよう。縦続行列は次式となる。

$$\begin{bmatrix} 1 + s^2 \frac{LC}{2} & sL \\ sC + s^3 \frac{C^2 L}{4} & 1 + s^2 \frac{LC}{2} \end{bmatrix} \quad (11a)$$

この行列に対する固有値は式(9)と同一となり、映像インピーダンスは次のように求まる。

$$Z_{K2} = \sqrt{\frac{L}{C}} \frac{1}{\sqrt{\left(1 + s^2 \frac{LC}{4}\right)}} \quad (11b)$$

式(9)に求めた固有値は、(a)絶対値が1のベクトルで、伝送に関する単位長の擬似回転ベクトルになり、信号が伝送される通過帯域となる場合と、(b)固有値が実数となり、ベクトルが現れないので遮断帯域となる場合とがあることが示されている。そこで、通過帯域と遮断帯域とを分けて考察しよう。

3.3 通過帯域の性質

図1に示す回路で信号が伝送されるのは、縦続行列の固有値 Λ がベクトルとなるところである。ところで、式(9)の s に $s = j\omega$ を

代入して、 Λ_1 および Λ_2 がベクトルを表す複素数になるのは

$$-1 < 1 - \omega^2 \frac{LC}{2} \leq 1 \quad (12a)$$

を満足する ω であり、 ω を正の角周波数とすれば、次のように表される。

$$0 \leq \omega < \frac{2}{\sqrt{LC}} \quad (12b)$$

図1に示す回路は低域通過フィルタを表しているが、その通過帯域内を映像パラメータで表そう。 ω が上の範囲内であれば

$$\Lambda_1 = \exp(j\beta_a), \quad \Lambda_2 = \exp(-j\beta_a) \quad (13a)$$

ここに

$$\cos \beta_a = 1 - \omega^2 \frac{LC}{2} \quad (13b)$$

$$\sin \beta_a = \omega \sqrt{LC} \sqrt{\left(1 - \omega^2 \frac{LC}{4}\right)} \quad (13c)$$

となり、確かに固有値 Λ はベクトルで表される。そのときの映像インピーダンス Z_{K1} および Z_{K2} は式(10)および式(11b)から、どちらも実数となる。ここで、映像インピーダンスが実数となるとき、映像抵抗と呼ぶことにし、 R_{K1} および R_{K2} と表しておこう。

この R_{K1} および R_{K2} は次の実数である。

$$0 < R_{K1} \leq R \quad (14a)$$

$$R \leq R_{K2} < \infty \quad (14b)$$

映像パラメータ理論においては、公称インピーダンスを定義するが、それは抵抗値なのでここでは公称抵抗 R と呼び、次のように定義する。

$$R = \sqrt{\frac{L}{C}} \quad (15)$$

この公称抵抗を用いると、映像抵抗は次の関係を満足する。

$$R_{K1} R_{K2} = \frac{L}{C} = R^2 \quad (16)$$

式(16)の関係をを用いて、 R_{K1} と R_{K2} との関係を分かりやすく表そう。そのために、公称コンダクタンスと呼ばれる G を次のように

定義する。

$$G = \sqrt{\frac{C}{L}} = \frac{1}{R} \quad (17a)$$

次に R_{K2} の逆数を G_{K2} と表す。

$$G_{K2} = R_{K2}^{-1} \quad (17b)$$

そうすれば、式(28.16)は次のように表される。

$$\frac{R_{K1}}{R} = \frac{G_{K2}}{G} \quad (17c)$$

ここで、式(12)を満たす ω の通過帯域における、式(13)で表される映像位相 β_a および式(17c)で表される映像抵抗などを図3に示す。

映像パラメータの通過帯域の物理的意味を考えてみよう。この通過帯域においては、 L および C が無限に接続されているなら、同一の実数の映像抵抗を背中合わせに接続するから、無反射条件を満足する。

ここで、この基本区間を有限個用いた回路の特性を考えるために、改めて基本区間の縦続行列を映像量を用いて求めよう。

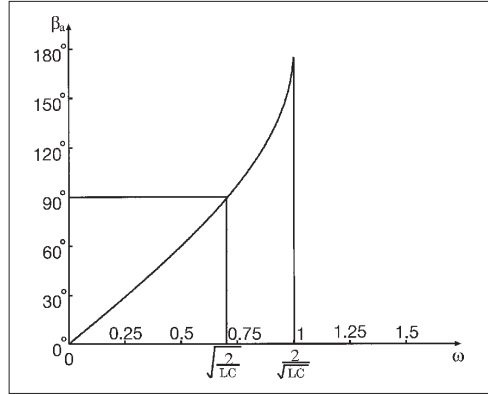
図2(a)の回路の縦続行列は次のように求まる。

$$\begin{bmatrix} R_{K1} & R_{K1} \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \exp(j\beta_a) & 0 \\ 0 & \exp(-j\beta_a) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} R_{K1} & R_{K1} \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \cos \beta_a & jR_{K1} \sin \beta_a \\ \frac{j}{R_{K1}} \sin \beta_a & \cos \beta_a \end{bmatrix} \quad (18a)$$

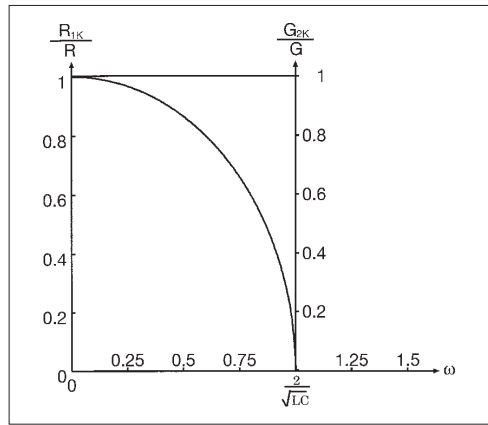
同様に図2(b)の回路の縦続行列は次のように求まる。

$$\begin{bmatrix} \cos \beta_a & jR_{K2} \sin \beta_a \\ jG_{K2} \sin \beta_a & \cos \beta_a \end{bmatrix} \quad (18b)$$

図2の(a)および(b)の二つの対称回路となる基本区間は集中定数素子で構成されているにもかかわらず、式(18)に示すように縦続行列は位相定数 β_a で表される擬似回転ベクトルを持っている。しかも、角周波数の関数となっているが映像抵抗が分布定数線路の特性抵抗の役目を果たしている。したがって、この基本区間を単位素子のように用いて、信



(a)



(b)

図3 通過帯域における(a)映像位相量、(b)映像抵抗および映像コンダクタンス

Fig.3 (a) Image phase and (b) image resistance and conductance in a pass band for the circuit depicted in Fig. 1

号の伝送やフィルタなどを構成できることが明らかであろう。

3.4 遮断角周波数帯域の性質

この節では式(12)以外の ω 、すなわち

$$\frac{2}{\sqrt{LC}} \leq \omega \quad (19)$$

なる ω の特性を考えよう。

このとき、式(9)で与えられる Λ_1 および Λ_2 は実数となり、ベクトルとはならない。

ここで、 γ_a を

$$\gamma_a = \alpha_a + j\beta_a \quad (20a)$$

なる複素数として

$$\cosh \gamma_a = 1 - \omega^2 \frac{LC}{2} \quad (20b)$$

$$\sinh \gamma_a = \sqrt{\left(-\omega^2 LC + \omega^4 \frac{L^2 C^2}{4}\right)} \quad (20c)$$

と表せば、固有値 Λ_1 および Λ_2 は

$$\Lambda_1 = \exp(\gamma_a), \Lambda_2 = \exp(-\gamma_a) \quad (21a)$$

ただし

$$\beta_a = \pi \quad (21b)$$

と表すことができる。

このとき、二つの回路に対する影像インピーダンスは、式(10)および式(11b)から、次のように表せる純虚数である。

$$Z_{K1} = jR \sqrt{\left(\omega^2 \frac{LC}{4} - 1\right)} = jX_1 \quad (22a)$$

$$Z_{K2} = \frac{R}{j \sqrt{\left(\omega^2 \frac{LC}{4} - 1\right)}} = \frac{R^2}{jX_1} \quad (22b)$$

このように、遮断帯域では、同じ虚数のインピーダンスを背中合わせに接続しているから、瞬時的には無反射であるかもしれないが、定常状態での共役整合とはならないから反射のある回路となり、遮断回路となることが理解されよう。

ここで図4に示すように、図2(a)の回路の1区間を選び、電圧源 E の内部抵抗は公称抵抗 R とし、遮断角周波数の振る舞いを調べよう。

図4に示す回路の負荷インピーダンス Z_R を影像インピーダンス jX_1 とし、入力インピーダンスを求めると、次式のようになる。

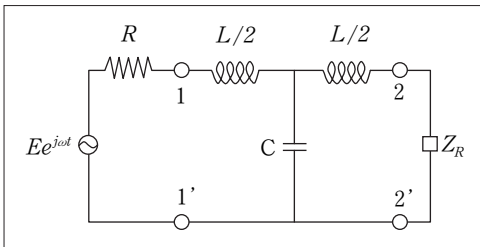


図4 遮断回路
Fig.4 Cutoff circuit

$$\begin{aligned} \frac{V_1}{I_1} &= Z_{in} \\ &= \frac{jX_1 \cosh \gamma_a + jX_1 \sinh \gamma_a}{-jX_1^{-1} jX_1 \sinh \gamma_a + \cosh \gamma_a} \\ &= jX_1 \end{aligned} \quad (23)$$

したがって

$$E = I_1(R + jX_1) \quad (24a)$$

$$V_1 = jX_1 I_1 \quad (24b)$$

であり、次のように求まる。

$$I_1 = \frac{E}{R + jX_1} \quad (25a)$$

$$V_1 = \frac{jX_1 E}{R + jX_1} \quad (25b)$$

文献[8]に述べた入射、反射、透過波のことを用いて、反射電圧 V_r 、反射電流 I_r は次のように求められる。

$$I_r = \frac{E}{2R} - \frac{E}{R + jX_1} = \frac{E(jX_1 - R)}{2R(jX_1 + R)} \quad (26a)$$

$$V_r = \frac{E}{R + jX_1} - \frac{E}{2} = \frac{E(jX_1 - R)}{2(jX_1 + R)} \quad (26b)$$

したがって、反射係数 r は

$$r = \frac{(jX_1 - R)}{(jX_1 + R)} \quad (27)$$

と求められ、反射係数の絶対値 $|r|$ は1となり、そのときの透過係数は0となる。

この回路では、透過係数が0であるからといって、負荷インピーダンスにおける電圧や電流が0になることを意味しない。すなわち、基本区間の左端の電圧および電流は式(25)に与えられて0ではないし、負荷インピーダンスにおける値は式(25)の値を式(21)に与えられる固有値 Λ_1 で割った値となる。それでは何が0になるのかというと、負荷インピーダンス jX_1 に伝送される有効電力が0になることを示している。

このように、遮断帯域であっても電圧および電流の一部が伝送されるのであるから、負荷の選び方によっては有効電力を伝送できる

と考えられる。そこで、負荷インピーダンスを公称抵抗 R として、入力インピーダンスを求めると、次式のようになる。

$$\frac{V_1}{I_1} = Z_{in} = \frac{R \cosh \gamma_a + jX_1 \sinh \gamma_a}{-jX_1^{-1}R \sinh \gamma_a + \cosh \gamma_a} \quad (26a)$$

よって

$$\operatorname{Re}(Z_{in}) = \frac{RX_1^2}{R^2 \sinh^2 \gamma_a + X_1^2 \cosh^2 \gamma_a} \quad (26b)$$

したがって、入力インピーダンス Z_{in} の実部が 0 でないので、確かに負荷の公称抵抗 R には有効電力が伝送される。

このように、遮断帯域であっても負荷の選び方によっては有効電力の一部が伝送されるのであり、それは縦続行列で求められるので、縦続行列を求めておこう。式(8)で与えられる図 2 (a)の基本区間の縦続行列を映像パラメータで表すと、次式のようになる。

$$\begin{bmatrix} \cosh \gamma_a & Z_{K1} \sinh \gamma_a \\ \frac{1}{Z_{K1}} \sinh \gamma_a & \cosh \gamma_a \end{bmatrix} \quad (27)$$

ただし

$$\gamma_a = \alpha + j\pi, Z_{K1} = jX_1$$

この式は、文献 [9] のトンネル効果を表す式(10.48)とまったく同一形である。したがって、トンネル効果は量子現象特有の現象といわれているが、実は映像パラメータ理論にすでに現れていた現象ということができる。

量子力学におけるトンネル効果の利用については、次のようなことが考えられる。回路理論では、遮断回路を通過帯域内に用いるようなことを考えなくても、要求に合う高級なフィルタを設計できた。それに対して量子力学では、要求に合う鋭い特性を計算上でも実現するためには、トンネル効果を用いなければ実現できないので、通過帯域内にトンネル効果を用いたということができる。

IV. N 個の分子の等価回路

文献 [10] には、N 個の分子の運動方程式が述べられていて、文献 [1] の式(16a)に表されているので、それを次に再記する。

$$M \frac{d^2}{dt^2} u_k = K(u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}) \quad (28)$$

ここに、 M は分子の質量、 K はバネ係数、 u_k は k 番目の分子の変位をそれぞれ表す。ここで、式(28)の右辺は差分方程式になっていることに注意しておこう。

文献 [1] において、式(28)を満たす周期構造系は図 1 に表されている LC 周期構造系に等価なことが示された。すなわち、図 1 に示されている回路にキルヒホフの電圧法則を適用すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned} L \frac{d}{dt} i_k(t) - \frac{1}{C} \int i_{k-1}(t) dt \\ + \frac{2}{C} \int i_k(t) dt - \frac{1}{C} \int i_{k+1}(t) dt = 0 \end{aligned} \quad (29a)$$

電流 $i_k(t)$ はコンデンサの電荷 $q_k(t)$ と次の関係を満たす。

$$q_k(t) = \int i_k(t) dt \quad (29b)$$

式(29a)に式(29b)の関係を代入して、次式を得る。

$$\begin{aligned} L \frac{d^2}{dt^2} q_k(t) - \frac{1}{C} q_{k-1}(t) + \frac{2}{C} q_k(t) \\ - \frac{1}{C} q_{k+1}(t) = 0 \end{aligned} \quad (29c)$$

式(29c)と式(20)とを対応させれば、電荷 $q_k(t)$ に変位 u_k を、 L に M 、 $1/C$ に K をそれぞれ対応させれば同じ式となることが確かめられる。したがって、離散的な N 個の分子からなる 1 次元結晶は、図 5 に示すような等価回路で表される。

図 5 に示す周期構造系に、映像パラメータ理論を前章と同様に導入しよう。すなわち、図 5 に示す周期構造系から導かれる 2 種類の対称回路は図 6 に示す回路となる。また、この 2 種類の対称回路ともにその映像位相量は

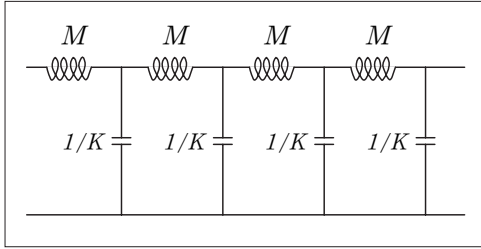


図5 N 個の分子からなる 1 次元結晶の等価回路
Fig.5 Equivalent circuit for periodic N molecules.

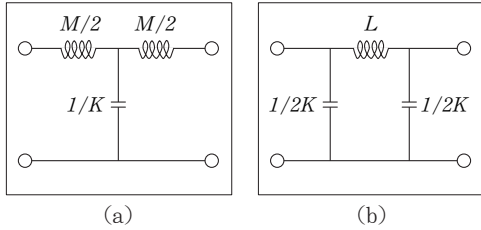


図6 1 次元結晶に対する 2 種類の対称回路
Fig.6 Two symmetric sections for periodic N molecules.

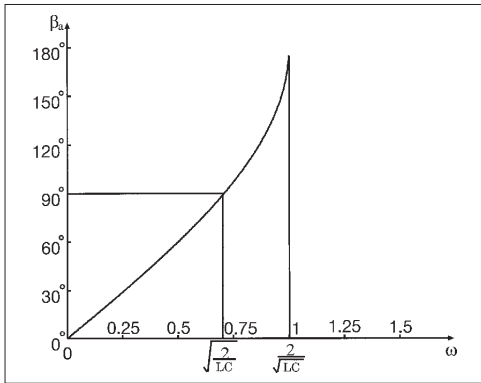


図7 1 次元結晶の対称基本区間の映像位相量
Fig.7 Image phase for symmetric section for N molecules.

図7に示すものとなる。すなわち、差分と微分とからなる方程式は、集中定数回路で表現が可能となる場合があることに注目しておこう。

図7からこの1次元結晶をフィルタとして用いると、 ω が $2\sqrt{K/M}$ までの帯域が制限された低域通過フィルタとなることが分かる。文献[1]では、1次元結晶の極限とした連続体ではマクスウェル方程式と同様にすべての角周波数の波動が伝わるが、真空ではなく

誘電体などの物質内を伝わる波動では、本文のように角周波数の帯域が低域側に制限されることが示された。

1次元結晶を用いてフィルタを構成するにはどうしたらよいであろうか。集中定数回路であれば、コイルとしてインダクタンスがLのものも、L/2のものも容易に得られる。それに対して、分子の質量がMのものが得られても、M/2のものが得られるわけではない。そのため、映像パラメータ理論に用いた対称な基本区間をそのまま利用できるわけではない。どのようにするのであろうか。

ここで、質量Mの分子に振動を与える、すなわち、エネルギーを入力することを考えよう。そのためには、回路理論をまず用いることを考え、質量Mの分子に内部抵抗が R_G なる抵抗をMに接続すると考える。回路の左端を質量Mにするには、図6(a)の左側に質量M/2を付け加えれば質量Mが得られ、その左に R_G なる抵抗を接続すればよい。次に図6(a)の基本区間を(N-1)個接続し、基本区間をN区間用いる。この回路の右端に質量M/2を接続すれば、右端には質量Mがある。このMに負荷抵抗 R_G を接続する。この回路は質量Mの分子が(N+1)個あり、基本区間はN個用いていて、加えて左右に2個の質量M/2を付け加えていて、図8に得られた回路を示す。

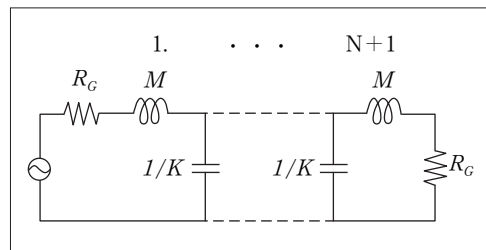


図8 分子を N+1 個用いたフィルタ
Fig.8 A molecule filter using N+1 molecules.

この回路の映像位相量を求めよう。図6(a)に示す基本区間の角周波数 ω が $\sqrt{K/M}$ で

の影像位相量は π である。また、1 個の質量 $M/2$ の分子の影像位相量は $\pi/4$ と求まるから、上に求めた回路の角周波数 ω が $2\sqrt{K/M}$ での影像位相量は、次のように求まる。

$$N\pi + \pi/2 \quad (30)$$

ところで、文献 [6] に述べたように、電源の内部抵抗と負荷抵抗とが等しく、回路の位相量が $k\pi$ (k は整数) のときには共鳴する。したがって、図 8 に示す回路においても、与えられた波動の位相量が $k\pi$ (k は整数) のとき共鳴して、電源の最大有能電力を負荷に伝送することができる。

共鳴する周波数を求めよう。この場合、直接角周波数 ω を求めるのではなく、図 7 における β_a を求めることを考える。分子の個数は $N+1$ のときの位相量は式(30)で与えられる。その位相量の中で共鳴する位相は $k\pi$ ($k = 1, 2, \dots, N$) であるから、図 7 における β_a は次のように表される。

$$\beta_a = \frac{180^\circ}{N+1/2} \cdot k, \quad (k = 1, 2, \dots, N) \quad (31)$$

この β_a に対応する角周波数を図 7 から読み取れば N 個の共鳴角周波数が読み取れる。

V. 結晶基が 2 個の原子を含む 1 次元格子

前章では文献 [10] に基づいた 1 種類の分子からなる 1 次元結晶をフィルタに利用することを考えた。本章では、文献 [11] に述べられている結晶基が 2 個の原子を含む 1 次元格子をフィルタに利用することを考えよう。

図 9 には文献 [11] に述べられている 2 種類の原子 (質量が M と m 、ただし $M > m$) で構成された結晶を示している。ここに、バネ定数は文献 [11] では b を用いているが、本文では前章で用いたのと同様に K を用いる。また、質量 M についての変位は、 u_{k-1} 、 u_k 、 u_{k+1} を、質量 m についての変位は v_{k-1} 、 v_k 、 v_{k+1} などを用いることにする。これら 2

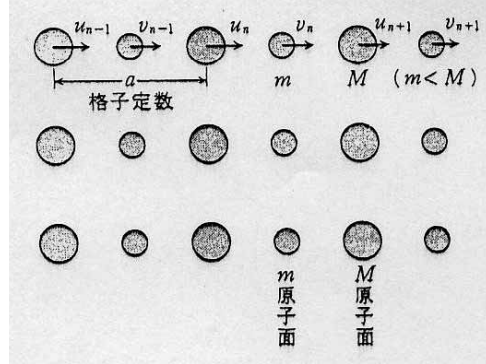


図9 質量 M と m の 2 原子結晶
Fig.9 Two atoms crystal of mass M and m .

個の原子の運動方程式は、式(28)にならって次のように表される。

$$M \frac{d^2}{dt^2} u_k = K(v_k + v_{k-1} - 2u_k) \quad (32a)$$

$$m \frac{d^2}{dt^2} v_k = K(u_{k+1} + u_k - 2v_k) \quad (32b)$$

式(32)を満たす差分を含む運動方程式の等価回路は、前章で考えた N 個の分子からなる 1 次元結晶の等価回路を参考にすれば、図 10 に示す回路として表現される。

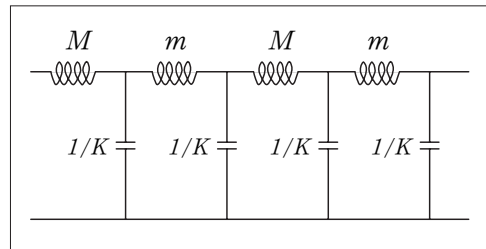


図10 質量 M と m の 2 原子結晶の等価回路
Fig.10 Equivalent circuit for two atoms crystal.

図 11(a) に示されている対称な基本区間 M_m の縦続行列は次のように表される。

$$\begin{bmatrix} A_m & B_m \\ C_m & A_m \end{bmatrix} \quad (33a)$$

$$A_m = 1 + s^2 \frac{m+M}{K} + s^4 \frac{mM}{2K^2} \quad (33b)$$

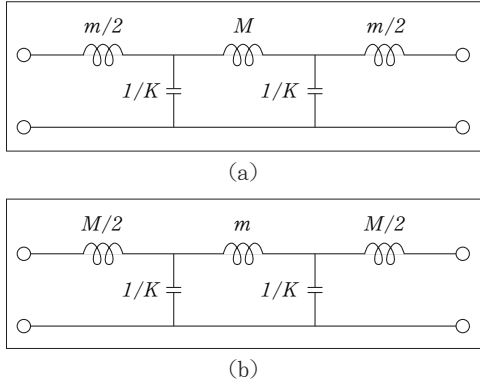


図11 2原子結晶に対する2種類の対称回路
Fig.11 Two symmetric circuits for two atoms crystal.

$$B_m = s(m+M) + s^3 \frac{m(m+2M)}{2K} + s^5 \frac{m^2 M}{4K^2} \quad (33c)$$

$$C_m = s \frac{2}{K} + s^3 \frac{M}{K^2} \quad (33d)$$

図11(b)に示されている対称な基本区間 N_M の縦続行列は次のように表される。

$$\begin{bmatrix} A_M & B_M \\ C_M & A_M \end{bmatrix} \quad (34a)$$

$$A_M = 1 + s^2 \frac{m+M}{K} + s^4 \frac{mM}{2K^2} \quad (34b)$$

$$B_M = s(m+M) + s^3 \frac{M(M+2m)}{2K} + s^5 \frac{M^2 m}{4K^2} \quad (34c)$$

$$C_M = s \frac{2}{K} + s^3 \frac{m}{K^2} \quad (34d)$$

この二つの対称回路の影像パラメータを求めよう。まず気が付くのが、式(33b)の A_m と式(34b)の A_M とが等しいことである。すなわち、図11に示す二つの回路の回路素子の配置は異なるが、同じ回路素子を用いているので、影像位相量は等しい。したがって、

$$-1 < A_m = A_M \leq 1 \quad (35a)$$

の場合には、影像位相を β_m とすれば、次のように表される。

$$\cos \beta_m = 1 - \omega^2 \frac{m+M}{K} + \omega^4 \frac{mM}{2K^2} \quad (35b)$$

図11に示す対称な基本区間の影像位相は図12に示す。

前章に示した1種類の分子のみの場合は角周波数 ω が $2\sqrt{K/M}$ までの低域に制限された低域通過特性を示した。原子が2種類の結晶では通過帯域が次の2つの帯域に分かれる。

$$0 \leq \omega < \sqrt{2K/M} \quad (36a)$$

$$\sqrt{\frac{2K}{m}} < \omega < \sqrt{2K\left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m}\right)} \quad (36b)$$

帯域が分かれることは文献 [11] にも述べられていて、式(36a)の帯域を第1ブリュアン領域といい、式(36b)の帯域を第2ブリュアン領域と呼んでいる。

図9に示す2原子結晶をフィルタとして利用することを考えよう。このフィルタは式(36a)および式(36b)で表される2帯域の通過フィルタであり、入力および負荷の抵抗が等しい構成が考えられる。どちらを選んでも図11に示す基本区間を N 区間を用い、その両端に同じ原子がある構成となる。したがって、基本区間を N 区間用いる回路の角周波数 ω が $\sqrt{2K(1/M+1/m)}$ における影像位相は、次のように求まる。

$$2N\pi + \pi/2 \quad (37)$$

前章と同様に共鳴する角周波数を求めよう。この場合、直接角周波数 ω を求めるのではなく、図12における β_m を求めることを考える。基本区間の個数が N のときの位相量は式(37)で与えられる。その位相量の中で共鳴する位相は $2k\pi$ ($k=1,2,\dots,N$) であるから、図7における β_m は次のように表される。

$$\beta_m = \frac{360^\circ}{2N+1/2} \cdot 2k, \quad (k=1,2,\dots,N) \quad (38)$$

この β_m に対応する周波数を図12から読み取れば N 個の共鳴周波数が読み取れる。

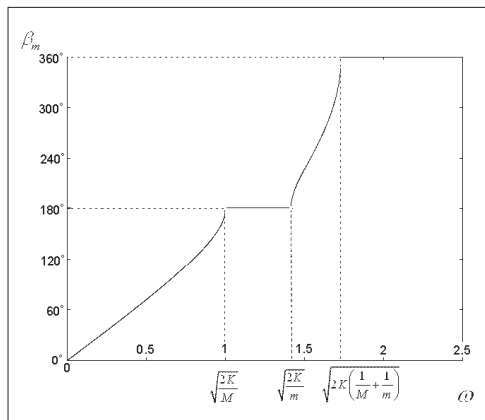
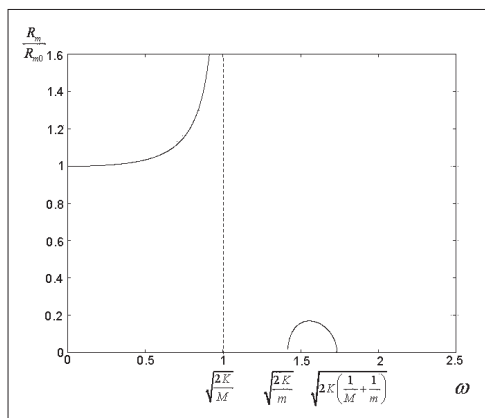
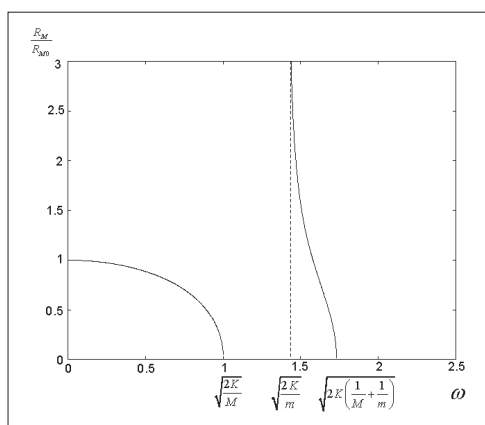


図12 2原子結晶の対称基本区間の映像位相量
Fig.12 Image phase for symmetric section of two atoms crystal.



(a)



(b)

図13 (a)図11aに対する, および(b)図11bに対
する 2原子結晶の対称基本区間の通過帯域の
映像抵抗

Fig.13 Image resistances in pass band for the cir-
cuit depicted (a) in Fig.11a and (b) in Fig.11b.

ここで, 2原子結晶をフィルタに利用する
場合, 図11に示すどちらの基本回路を選んだ
らよいかを考える。式(33)および式(34)から,
式(6e)を用いて次の映像インピーダンスが求
められる。

$$Z_m = \sqrt{\frac{K(m+M)}{2} \left(1 - \omega^2 \frac{mM}{2K(m+M)}\right)} \times \sqrt{\frac{(1 - \omega^2 m/2K)}{(1 - \omega^2 M/2K)}} \quad (39a)$$

$$Z_M = \sqrt{\frac{K(m+M)}{2} \left(1 - \omega^2 \frac{mM}{2K(m+M)}\right)} \times \sqrt{\frac{(1 - \omega^2 M/2K)}{(1 - \omega^2 m/2K)}} \quad (39b)$$

上式の映像インピーダンスは式(36)で表さ
れる2つの通過帯域では実数, すなわち映像
抵抗 R_m および R_M となるのでそのグラフを
図13(a)および(b)に示す。なお, 図では
 $\omega = 0$ における次の値で正規化している。

$$R_{m0} = R_{M0} = \sqrt{\frac{K(m+M)}{2}} \quad (40)$$

フィルタを構成する場合, $m/2$ あるいは
 $M/2$ を得ることができないので, m あるいは
 M とするため, インピーダンスは複素数
になるから, 映像位相量が $2k\pi$ から外れる
と反射量が現れる。その場合, 終端抵抗値と
映像抵抗値との違いが小さいほど反射量が少
なくなると考えられる。したがって, 内部抵
抗および負荷抵抗 R_G を式(40)より小さい値
に選ぶなら, 基本区間を図11(a)に選ぶなら
第2ブリュアン領域での $N/2$ 個の通過帯域
を広くでき, 基本区間を図11(b)に選ぶなら
第1ブリュアン領域での $N/2$ 個の通過帯
域を広く, また, 第2ブリュアン領域の高い
周波数域でおよそ $N/4$ 個の通過帯域を広く
することができると思われる。

VI. むすび

文献 [1] において、結晶基が1個の分子に対する振動の運動方程式には等価回路が求められ、その分子が連続体と仮定できる場合には、その等価回路に定義される電圧と電流とがマクスウェル方程式を満足することが示され、その結果、分子の振動を利用してエネルギーを伝えることを示した。

分子が連続体とみなすことができない場合は、その振動の解析は固有値問題となり、振動がゼロになる点があったり、固有振動以外の周波数の振動が存在しないのではないかなどの問題をかかえることになる。

そこで本文では、分子の結晶基が離散的と考えられるが、周期構造系となっている場合を考えた。その結果、結晶基が2個までの分子に対しては、その等価回路が対称回路を縦続接続した回路とすることができ、映像パラメータ理論で解析できることが示された。その結果、これらの分子を利用してエネルギーを伝えることができる角周波数帯域を表す低域通過フィルタを求めることができた。

[参考文献]

- [1] 永井信夫：分子の運動方程式を表現する等価回路，北星学園大学経済学部北星論集，45，2，pp.13-25，2006年3月
- [2] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理第12回 信号処理と映像パラメータ理論，Journal of Signal Processing (信号処理)，Vol.4，No.4，pp.293-304，July 2000
- [3] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理第6回 無損失2端子対回路と正規化散乱行列，Journal of Signal Processing (信号処理)，Vol.3，No.1，pp.15-24，Jan. 1999
- [4] A. V. Efimov, and V. P. Potapov, "J-expanding matrix functions and their role in the analytical theory of electrical circuits", Usp. Mat. Nauk, pp.65-130 (1973)
- [5] 永井信夫：回路理論の立場から見たマクスウェル方程式の特徴－オリヴァ・ヘヴィサイドの見つけたこと－，北星学園大学経済学部北星

論集，43，2，pp.1-17，2004年3月

- [6] 永井信夫：電磁波のヘヴィサイドー永井ー空間による解析－量子波動解析の基礎理論－，北星学園大学経済学部北星論集，44，2，pp.41-56，2005年3月
- [7] 渡部 和：伝送回路網の理論と設計，オーム社，1968
- [8] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理第5回 集中定数回路における反射・透過，Journal of Signal Processing (信号処理)，Vol.2，No.5，pp.337-346，Sept. 1998
- [9] 永井信夫：講義シリーズ量子力学と信号処理第10回 シュレディンガー方程式の複素等価回路，Journal of Signal Processing (信号処理)，Vol.3，No.5，pp.315-324，Sept. 1999
- [10] 生井澤寛：キーポイント連続体力学，岩波書店，1995
- [11] 坂田亮：物性科学，培風館，1989

[Abstract]

Discrete Equivalent Circuits Representing Molecule Oscillations of One and Two Crystal Basis

Nobuo NAGAI

When the motion equation for a molecule as represented by a partial differential equation for the arrangement of atoms is supposed to be continuous, a distributed-constant circuit is obtained as an equivalent circuit for the molecule. When the motion equation for molecules as represented by difference equations for the arrangement of atoms with one and two crystal basis is supposed, lumped-constant circuits of periodic systems are obtained as equivalent circuits for the equation of motion for molecules. As energy transmission can be analyzed by the image parameter theory for lumped-constant circuits, this paper shows the energy transmission for the oscillation and wave motion of molecules by using the circuit theory.

Key Words: Molecule Oscillations, Equivalent Lumped-Constant Circuits for Difference Equations, Image Parameter Theory, Periodic System, Equivalent Circuits for Molecules.