

〈논 문〉

비정형 3상 소재의 유효전도율

김 인 찬*

(1995년 7월 24일 접수)

Effective Conductivity of Disordered Three-Phase Media

In Chan Kim

Key Words : Effective Conductivity (유효전도율), Disordered Three-Phase Composite Media (비정형 3상 복합소재), Connectivity (연결도), Impenetrability Parameter (비중복성계수), First-Order Cluster Bound (제1계 클러스터 하한치), PS-PCS Model (Permeable Sphere-Penetrable Concentric Shell 모델)

Abstract

A problem of determining the effective conductivity of a useful model of sphere-matrix type, disordered three-phase composite media is considered. Specifically, a three-phase media in which two-phase composite spheres, consisting of spheres of conductivity k_2 (phase 2) and concentric shells of conductivity k_3 (phase 3), are randomly distributed in a matrix of conductivity k_1 (phase 1) is considered. As for the structure models configuring three-phase composite media, three different structure models of PCS, PS-1 and PS-2 models are defined, which are analogous to well-established PCS, PS structure models of two-phase composite media. Furthermore, a generalized PS-PCS structure model is proposed to incorporate these three different models in one. Effective conductivity k^* of multiphase composite media is greatly influenced by the phase connectivity of each dispersed phase material, as well as phase conductivities and phase volume fractions. Phase connectivity of three-phase PCS, PS-1, PS-2 composite media is quantified by the impenetrability parameter λ . Mathematically rigorous first-order cluster bounds on k^* are derived for these models of three-phase composite media, and as computation examples, first-order cluster bounds on k^* for three-phase composites consisting of largely different phase conductivities are computed and compared as functions of connectivity parameter λ . Results and discussions are given.

1. 서 론

서로 다른 물성을 갖는 물질들이 불규칙적으로 혼합되어 소재의 구성구조가 비정형인 혼합재의 유효물성을 결정하기 위한 노력은 오랜 역사를 가지

고 있다.^(1,2) 특히 비정형 다상 혼합재의 유효이동 특성 (effective transport property)은 구성물질들의 상대적 체적비와 이동특성치뿐 아니라 혼합재의 구성구조에 크게 영향을 받는다. 이것은 구성구조에 따라 각 상끼리의 연결도(connectivity)가 달라지기 때문이다. 예로서 은 입자(silver particles)와 베이클라이트(bakelite) 분말의 혼합물의 전기전도율은 은의 체적비가 약 30%일 때를 전후하여 큰

*회원, 군산대학교 생산기계공학과

차이를 나타내는데⁽³⁾ 이것은 은의 체적비 30% 근처에서 은 입자끼리 연결되지 않은 상태에서 연결된 상태로 바뀌기 때문이며 이렇게 연결되지 않은 상태에서 연결된 상태로 바뀌는 것을 percolation이라 한다.⁽⁴⁾ 다상 혼합재의 구성구조는 각 상을 구성하는 물질의 구체적인 형상에 따라 달라지는 만큼 수없이 많은 종류의 구성구조가 존재할 수 있으나 많은 경우 사암(sandstone), 소결물질(sintered material), 세라믹 물질 등에서 그 예를 찾을 수 있듯이⁽⁵⁾ 기재(matrix material) 내에 다른 소재가 국부적으로 위치하는 구조를 갖는다. 국부적으로 위치하는 소재는 그 자체가 다상소재일 수 있으며 이 국부적 소재끼리 서로 연결될 수도 있고 연결되지 않을 수도 있다. 현실적으로 응용성이 높아 실제 많은 종류의 복합재구조를 모델링할 수 있으면서도 수학적 접근이 용이하여 많은 연구성과가 얻어진 구조모델 중의 하나가 기재 내에 구형(spherical shape)의 이물질이 무작위적으로 분포되어 있는 구조이다. 구형의 소재끼리는 서로 중첩이 허용될 수도 있고 허용되지 않을 수도 있으나 구끼리의 연결성을 갖기 위해서는 중첩이 허용되어야 한다. 중첩이 허용되지 않는 구들이 기재내에 무작위적으로 분포되어 열역학적 평형을 이루는 구조를 강구(hard sphere) 구조모델이라 하며, 이와는 반대로 아무런 제한없이 중첩이 허용되는 구조를 중첩구(overlapping sphere) 혹은 완전연구(perfectly penetrable sphere) 구조모델이라 한다.

이하에서는 강구 구조모델을 HS 모델, 완전연구 구조모델을 OS 모델로 약칭하기로 한다. 복합소재에 따라서는 강구와 중첩구만으로는 기술이 불완전하여 부분적으로 중첩이 허용되는 구조모델을 도입할 필요가 있으며, 이때 중첩구(permeable sphere) 모델과 중첩가능외피(penetrable concentric shell) 모델이 사용된다. PS 모델로 약칭하는 중첩구 모델에서는 구형의 소재끼리 중첩될(또는 중첩되지 않을) 확률이 0과 1 사이의 값으로 주어지며, 이 때 중첩되지 않을 확률을 비중복성계수(impenetrability parameter) λ 로 정의한다. 중첩가능외피 모델은 PCS 모델로 약칭하며 PCS 모델에서는 반경 R 의 구가 반경 λR 인 강구핵(hard core)과 두께 $(1-\lambda)R$ 인 동심의 완전 중첩가능외피 구조로 이루어진 것으로 생각한다. PCS 모델에서도 λ 를 비중복성계수라 하며 λ 는 $0 \leq \lambda \leq 1$ 의 범위를 취한다. PS 모델과 PCS 모델에서 $\lambda=0$ 일

때는 OS 모델과, $\lambda=1$ 일 때는 HS 모델과 같아지게 된다. 구형의 소재는 PS 모델에서의 구이건, PCS 모델에서의 구이건 그 자체가 다상소재일 수 있다. 순물질의 구형소재가 기재내에 분포되었다 할지라도 소재간의 접촉이 불완전하여 접촉저항이 존재할 수 있으며 이런 경우 구형의 소재를 전도율이 매우 작은 제3의 소재가 얇은 두께로 감싸고 있는 동심복합구(concentric composite sphere) 구조로 모델링할 수 있다. 또 소재간 접촉저항을 무시할 수 있는 경우에도 복합소재의 강도나 전도율을 높이기 위해 구형의 소재를 표면처리하거나 제3의 소재로 도포할 경우에도 동심복합구 구조로 모델링할 수 있다. 동심복합구 구조에서는 반경이 a 이며 전도율이 k_2 인 소재 2(또는 상 2)의 내층구(inner sphere)를 두께 $b-a$ 이며 전도율이 k_3 인 소재 3(또는 상 3)의 외피가 동심으로 감싼 형태의 복합구들이 전도율이 k_1 인 기재(또는 상 1) 내에 무작위적으로 위치하여 열역학적 평형을 이룬다. Fig. 1은 상 2와 상 3으로 이루어진 복합구들이 서로 중첩되지 않는 조건하에서 무작위적으로 분포되어 열역학적 평형을 이룬 HS 구조모델의 한 예이다. 동심복합구의 내외층 반경비 b/a 가 1보다 약간 클

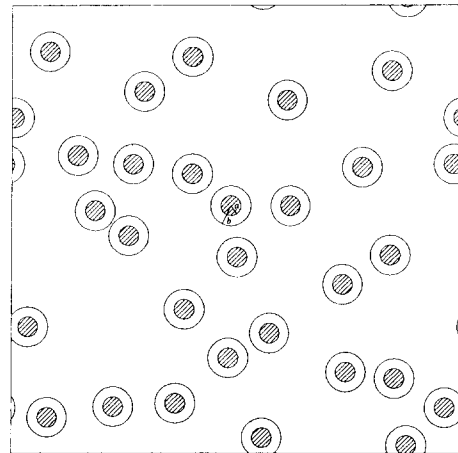


Fig. 1 A realization of sphere-matrix type three-phase disordered media. Each sphere consists of inner sphere of conductivity k_2 and radius a (shaded region), surrounded by concentric shell of conductivity k_3 and thickness $b-a$ (dotted region). Matrix is of conductivity k_1 (white region). Here spheres are impenetrable to each other, thus $\lambda=1$ (hard-spheres structure)

때는 ($b/a=1+\epsilon$, $\epsilon \ll 1$), 접촉저항이 있거나 ($k_3/k_2 < 1$), 전도율이 큰 소재로 표면도포를 한 경우를 ($k_3/k_2 > 1$) 모델링할 수 있다. 반대로 내외측 반경 비 b/a 의 값이 매우 클 경우에는 ($b/a \gg 1$) 구형의 소재내에 전도율이 높거나 ($k_3/k_2 > 1$) 낮은 ($k_3/k_2 < 1$) 불순물이 포함된 경우를 모델링할 수 있다.

본 연구에서는 동심복합구가 기재내에 무작위적으로 위치하는 구조의 3상 복합소재에서 복합소재의 유효전도율 k^* 가 상별 체적비 ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 와 상별 전도율 k_1, k_2, k_3 , 그리고 복합구간의 연결도를 나타내는 변수인 비중복성계수 λ 에 따라 어떻게 달라지는가를 밝히고자 한다. 여러 가지 구조모델에서 구조변수 λ 의 k^* 에 대한 영향은 k^* 에 대해 수학적으로 엄격한 상하한치 (upper and lower bounds)를 유도함으로써 평가될 것이다. 이것은 현실적으로 k^* 를 정확하게 예측해 줄 수학적 이론이 존재하지 않기 때문이며, k^* 의 상하한치 자체도, 첫째, 이 후에 제시될 다른 이론 및 수치실험 결과에 대한 오류의 판별 근거가 될 수 있다는 점과, 둘째, 상하한치와 하한치의 값이 크게 다를 경우에도 복합소재의 구성구조에 따라 상하한치중 하나가 k^* 의 실제 값에 훌륭한 근사값을 제공한다는 점에서⁽⁶⁾ 유용하다.

이하 제2절에서는 임의의 구조를 갖는 3상 복합소재에 대해서 수학적으로 엄격한 k^* 의 상하한치를 유도한다. 제3절에서는 동심복합구의 구조를 갖는 3상 복합소재에 적용하기 위해 필요한 몇 가지 구조함수를 정의하고 제4절에서는 PCS 모델과 두 가지 다른 PS 모델에서의 k^* 에 대한 상하한치를 구체적으로 계산한다. 제5절에서는 계산결과를 도시하며 제6절에서 결론을 제시한다.

2. 변분법적 한계

전도율이 k_1 인 기재(소재 1 또는 상 1) 내에 k_2 과 다른 값의 전도율을 가진 구형(spherical shape)의 이물질 N 개가 무작위적으로 분포되어 소재간 열역학적 평형을 이루는 복합소재를 생각해 보자. 구형의 이물질들은 각각 그 자체가 복합소재로서 전도율이 k_2 이며 반경이 a 인 구형의 소재(소재 2 또는 상 2)를 전도율이 k_3 이며 두께가 $b-a$ 인 다른 소재(소재 3 또는 상 3)가 동심외피(concentric shell) 형상으로 감싸고 있는 동심복합구(concentric composite sphere)이다. Fig. 1에 예

시된 대표적 구조에서 볼 수 있듯이 결과적으로 세 가지 다른 소재가 결합된 3상 복합소재에서 소재 1, 소재 2, 소재 3의 상별 체적비를 각각 ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 라 한다. ($\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 = 1$) 복합구끼리는 상호중복이 허용될 수 있으며 중복허용의 정도는 비중복성계수(impenetrability parameter) λ 로서 나타낸다. ($0 \leq \lambda \leq 1$) $\lambda=0$ 일 때는 복합구끼리 아무런 제한없이 중복이 허용되며 $\lambda=1$ 일 때는 복합구 상호간 중복이 불가능하다. $0 < \lambda < 1$ 인 범위의 λ 는 중복구(permeable sphere) 모델이나 중복가능외피(penetrable concentric shell) 모델 등의 예에서 찾아볼 수 있다. 임의의 비중복성계수 λ 를 가지는 3상 복합소재의 유효전도율의 상하한치는 수학적 변분원리(variational principle)를 열역학적 최소에너지 정리에 적용하여 유도할 수 있다. 이하에서는 전도율문제를 정전기학(electrostatics)적 응용의 의미에서 다루기로 한다. 정전기학적 응용에서 전도율은 전기전도율(electric conductivity)을 의미하게 된다. 그러나 전기전도(electric conduction)의 문제와 열전도(thermal conduction)의 문제는 수학적으로 동일하기 때문에 전기전도율에 대하여 얻어지는 모든 결과는 열전도율에 대해서도 적용가능하다. 2상 복합소재의 경우에는 Torquato가 제1계 클러스터 상하한치(first order cluster bound)를 유도한 바 있으며,⁽⁷⁾ 이 결과를 3상 복합소재의 경우까지 확장 적용할 수 있다. 이하의 식 (2.3), (2.4)으로 표시되는 Torquato의 상하한치는 복합소재 내 복합구들의 2계 혹은 그 이상의 다체(many body)의 상호작용을 배제한 결과라는 의미에서 제1계 클러스터 상하한치라 불린다. 이것은 복합소재 내 위치 \mathbf{r} 에서의 전기장 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 과 전류 $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ 을 클러스터 확장식

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle + \mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r}) + \dots \quad (2.1)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{J}(\mathbf{r}) \rangle + \mathbf{J}^{(1)}(\mathbf{r}) + \mathbf{J}^{(2)}(\mathbf{r}) + \dots \quad (2.2)$$

으로 쓸 때 $\mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r}), \mathbf{E}^{(3)}(\mathbf{r}), \dots$ 과 $\mathbf{J}^{(2)}(\mathbf{r}), \mathbf{J}^{(3)}(\mathbf{r}), \dots$ 을 배제한다는 의미이다. 여기서, 기호 $\langle \rangle$ 는 앙상블 평균(ensemble mean)을 의미하며 $\mathbf{E}^k(\mathbf{r}), \mathbf{J}^k(\mathbf{r})$ 은 k 개의 복합구간 상호작용에 의한 전기장과 전류에 대한 기여량이다.

기재와 다른 전도율을 가진 소재들이 국부적으로 기재내에 무작위적으로 분포된 복합소재에 대하여 Torquato는 수학적 변분원리를 이용하여 유효전도율의 상하한치를 전기장과 전류와 관계된 앙상블

평균들을 포함하는 대수식으로 표시하였으며, 그 표현식은 복합소재가 기재와 국부적 소재로 이루어진 다상 소재이지만 하면 국부적 소재의 균질성(homogeneity) 여부에 관계없이 적용될 수 있다. 이에 의하면 본 문제의 3상 복합소재의 유효전도율을 k^* 라 할 때 k^* 의 제1계 클러스터 상한치는

$$k^* \leq \left[\langle k \rangle - \frac{\langle k \mathbf{E}^{(1)} \rangle \cdot \langle k \mathbf{E}^{(1)} \rangle}{\langle k \mathbf{E}^{(1)}, \mathbf{E}^{(1)} \rangle} \right] \quad (2.3)$$

그리고 제1계 클러스터 하한치는

$$k^* \geq \left[\left\langle \frac{1}{k} \right\rangle - \frac{\langle \mathbf{J}^{(1)}/k \rangle \cdot \langle \mathbf{J}^{(1)}/k \rangle}{\langle \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(1)}/k \rangle} \right]^{-1} \quad (2.4)$$

으로 주어진다. 복합소재내 임의의 위치 \mathbf{r} 에서의 국부전도율(local conductivity) $k(\mathbf{r})$ 은 각 상별 특성함수 $I(\mathbf{r})$ 을 이용하여

$$\begin{aligned} k(\mathbf{r}) &= k_1 I^{(1)}(\mathbf{r}) + k_2 I^{(2)}(\mathbf{r}) + k_3 I^{(3)}(\mathbf{r}) \\ &= k_1 + (k_2 - k_1) I^{(2)}(\mathbf{r}) + (k_3 - k_1) I^{(3)}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

으로 표시할 수 있다. 여기서, $I^{(i)}(\mathbf{r})$ 은

$$\bar{K} = \begin{cases} -(1+K_1) \mathbf{U}, & r < a \\ -(1+K_2) \mathbf{U} + \frac{K_3 a^3}{r^3} [3 \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{U}], & a < r < b \\ \frac{K_4 a^3}{r^3} [3 \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{U}], & r > b \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\bar{M} = \begin{cases} -(k_1 + k_2 K_1) \mathbf{U}, & r < a \\ -(k_1 + k_3 K_2) \mathbf{U} + \frac{k_3 K_3 a^3}{r^3} [3 \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{U}], & a < r < b \\ \frac{k_1 K_4 a^3}{r^3} [3 \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{U}], & r > b \end{cases} \quad (2.10)$$

으로 주어진다. 식 (2.9), (2.10)의 K_1, K_2, K_3, K_4 는 각각

$$K_1 = \frac{9b^3 k_1 k_3}{L} \quad (2.11)$$

$$K_4 = -\frac{b^3 [(a^3 - b^3) k_1 k_2 + (a^3 + 2b^3) k_1 k_3 - (2a^3 + b^3) k_2 k_3 + 2(a^3 - b^3) k_3^2]}{a^3 L} \quad (2.14)$$

$$L = 2(a^3 - b^3) k_1 k_2 - 2(a^3 + 2b^3) k_1 k_3 - (2a^3 + b^3) k_2 k_3 + 2(a^3 - b^3) k_3^2 \quad (2.15)$$

이며, 여기서 $\mathbf{x}_i = \mathbf{r} - \mathbf{r}_i$, $r = |\mathbf{r}|$, $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$, 그리고 \mathbf{U} 는 단위텐서이다. 식 (2.7), (2.8)에서의 ρ 는 복합구의 수밀도(number density)이다. ($\rho \equiv N/V$, $V = V_1 + V_2 + V_3$) 식 (2.3), (2.4)에서 전도율의 상하한치에 나타나는 여러 가지 앙상블 평균들

$$I^{(i)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in V_i (i=1, 2, 3) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.6)$$

으로 정의되는 상별 특성함수(phase characteristic function)로서 $I^{(1)}(\mathbf{r}) + I^{(2)}(\mathbf{r}) + I^{(3)}(\mathbf{r}) = 1$ 이며 V_1, V_2, V_3 는 각각 상 1, 2, 3의 영역을 나타낸다. 식 (2.3), (2.4)에서 나타나는 $\mathbf{E}^{(1)}$ 과 $\mathbf{J}^{(1)}$ 은 각각 복합소재내 전기장과 전류에 대한 복합구들 각각의 날개로서의 기여항이며, 이것은 정전기학적 경계조건 문제(electrostatic boundary value problem)의 해로서 주어진다. 그 중심이 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ 에 위치한 N 개의 복합구와 기재로 이루어진 본 문제의 복합소재에서는 $\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r})$ 과 $\mathbf{J}^{(1)}(\mathbf{r})$ 이 각각

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}^N) &= \sum_{i=1}^N \bar{K}(\mathbf{x}_i) \cdot \langle \mathbf{E} \rangle \\ &\quad - \int d\mathbf{r}_1 \rho \bar{K}(\mathbf{x}_1) \cdot \langle \mathbf{E} \rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}^N) &= \sum_{i=1}^N \bar{M}(\mathbf{x}_i) \cdot \langle \mathbf{E} \rangle \\ &\quad - \int d\mathbf{r}_1 \rho \bar{M}(\mathbf{x}_1) \cdot \langle \mathbf{E} \rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

으로 표시되며, 여기서 텐서량 \bar{K} 와 \bar{M} 은 각각

$$\begin{aligned} &r < a \\ &a < r < b \\ &r > b \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} &r < a \\ &a < r < b \\ &r > b \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$K_2 = \frac{3b^3 k_1 (k_2 + 2k_3)}{L} \quad (2.12)$$

$$K_3 = -\frac{3b^3 k_1 (k_2 - k_3)}{L} \quad (2.13)$$

은 약간의 수학적 조작을 거쳐 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\langle k \rangle = k_1 + \phi_2 (k_2 - k_1) + \phi_3 (k_3 - k_1) \quad (2.16)$$

$$\left\langle \frac{1}{k} \right\rangle = \frac{1}{k_1} + \phi_2 \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) + \phi_3 \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \langle k\mathbf{E}^{(1)} \rangle &= -4\pi \langle \mathbf{E} \rangle \left\{ (1+K_1) \times \int_0^a dx x^2 [(k_2-k_1)H_1^{(1)}(x) + (k_3-k_1)H_1^{(3)}(x)] + (1+K_2) \right. \\ &\quad \left. \times \int_a^b dx x^2 [(k_2-k_1)H_1^{(2)}(x) + (k_3-k_1)H_1^{(3)}(x)] \right\} \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}^{(1)}/k \rangle &= -4\pi \langle \mathbf{E} \rangle \left\{ (k_1+k_2K_1) \times \int_0^a dx x^2 \left[\left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) H_1^{(1)}(x) + \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) H_1^{(3)}(x) \right] + (k_1+k_3K_2) \right. \\ &\quad \left. \times \int_a^b dx x^2 \left[\left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) H_1^{(2)}(x) + \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) H_1^{(3)}(x) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$\frac{\langle k\mathbf{E}^{(1)} \cdot \mathbf{E}^{(1)} \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle} = k_1 A + (k_2 - k_1) B + (k_3 - k_1) C \quad (2.20)$$

$$\frac{\langle \mathbf{J}^{(1)} \cdot \mathbf{J}^{(1)}/k \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle} = \frac{D}{k_1} + \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) E + \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) F \quad (2.21)$$

식 (2.18), (2.19)의 $H_1^{(1)}$, $H_1^{(2)}$, $H_1^{(3)}$ 는 이하 식 (2.80), (2.81)으로 정의된다. 여기서, 계산의 편의를 위해 A , B , C , D , E , F 를 각각

$$A = A_1 + A_2 + A_3 + \cdots + A_7 \quad (2.22)$$

$$B = B_1 + B_2 + B_3 + \cdots + B_9 \quad (2.23)$$

$$C = C_1 + C_2 + C_3 + \cdots + C_9 \quad (2.24)$$

$$D = D_1 + D_2 + D_3 + \cdots + D_7 \quad (2.25)$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \cdots + E_9 \quad (2.26)$$

$$F = F_1 + F_2 + F_3 + \cdots + F_9 \quad (2.27)$$

으로 표시하고 A_1 , A_2 , ..., F_9 은 각각

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{4}{3} \pi a^3 \rho (1+K_1)^2 \\ &\quad + \frac{4}{3} \pi (b^3 - a^3) \rho (1+K_2)^2 \\ &\quad + \frac{8}{3} \pi \left(a^3 - \frac{a^6}{b^3} \right) \rho K_3^2 + \frac{8\pi a^6}{3b^3} \rho K_4^2 \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} A_2 &= 8\pi^2 \rho^2 (1+K_1)^2 \int_0^a dz z^2 \int_0^a dy y^2 \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du h(x) \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} A_3 &= 16\pi^2 \rho^2 (1+K_1) \\ &\quad \times (1+K_2) \int_0^a dz z^2 \int_a^b dy y^2 \int_{-1}^1 du h(x) \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$A_4 = 8\pi^2 \rho^2 (1+K_2)^2 \int_a^b dz z^2 \int_a^b dy y^2 \int_{-1}^1 du h(x) \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} A_5 &= 16\pi^2 a^6 \rho^2 K_3^2 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_a^b \frac{dy}{y} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du P_2(u) h(x) \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} A_6 &= 32\pi^2 a^6 \rho^2 K_3 K_4 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du P_2(u) h(x) \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} A_7 &= 16\pi^2 a^6 \rho^2 K_4^2 \int_b^\infty \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du P_2(u) h(x) \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$B_1 = 4\pi (1+K_1)^2 \int_0^a dz z^2 G_1^{(2)}(z) \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} B_2 &= 4\pi (1+K_2)^2 \int_a^b dz z^2 G_1^{(2)}(z) \\ &\quad + 8\pi a^6 K_3^2 \int_a^b dz \frac{G_1^{(2)}(z)}{z^4} \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$B_3 = 8\pi a^6 K_4^2 \int_b^\infty dz \frac{G_1^{(2)}(z)}{z^4} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} B_4 &= 4\pi^2 (1+K_1)^2 \int_0^a dz z^2 \int_0^a dy y^2 \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du Q^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} B_5 &= 16\pi^2 (1+K_1) (1+K_2) \int_0^a dz z^2 \int_a^b dy y^2 \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du Q^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} B_6 &= 8\pi^2 (1+K_2)^2 \int_a^b dz z^2 \int_a^b dy y^2 \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du Q^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} B_7 &= 16\pi^2 a^6 K_3^2 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_a^b \frac{dy}{y} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du P_2(u) Q^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} B_8 &= 32\pi^2 a^6 K_3 K_4 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du P_2(u) Q^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} B_9 &= 16\pi^2 a^6 K_4^2 \int_b^\infty \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 du P_2(u) Q^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$C_1 = 4\pi (1+K_1)^2 \int_0^a dz z^2 G_1^{(3)}(z) \quad (2.44)$$

$$C_2 = 4\pi (1+K_2)^2 \int_a^b dz z^2 G_1^{(3)}(z)$$

$$+ 8\pi a^6 K_3^2 \int_a^b dz \frac{G_1^{(3)}(z)}{z^4} \quad (2.45)$$

$$C_3 = 8\pi a^6 K_4^2 \int_b^\infty dz \frac{G_1^{(3)}(z)}{z^4} \quad (2.46)$$

$$C_4 = 8\pi^2 (1+K_1)^2 \int_0^a dz z^2 \int_0^a dy y^2 \\ \times \int_{-1}^1 du Q^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.47)$$

$$C_5 = 16\pi^2 (1+K_1)(1+K_2) \int_0^a dz z^2 \int_a^b dy y^2 \\ \int_{-1}^1 du Q^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.48)$$

$$C_6 = 8\pi^2 (1+K_2)^2 \int_a^b dz z^2 \int_a^b dy y^2 \\ \times \int_{-1}^1 du Q^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.49)$$

$$C_7 = 16\pi^2 a^6 K_3^2 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_a^b \frac{dy}{y} \\ \times \int_{-1}^1 du P_2(u) Q^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.50)$$

$$C_8 = 32\pi^2 a^6 K_3 K_4 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \\ \times \int_{-1}^1 du P_2(u) Q^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.51)$$

$$C_9 = 16\pi^2 a^6 K_4^2 \int_b^\infty \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \\ \times \int_{-1}^1 du P_2(u) Q^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.52)$$

$$D_1 = \frac{4}{3} \pi a^3 \rho (k_1 + k_2 K_1)^2 \\ + \frac{4}{3} \pi (b^3 - a^3) \rho (k_1 + k_3 K_2)^2 \\ + \frac{8}{3} \pi \left(a^3 - \frac{a^6}{b^3} \right) \rho k_3^2 K_3^2 \\ + \frac{8\pi a^6}{3b^3} \rho k_4^2 K_4^2 \quad (2.53)$$

$$D_2 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)^2}{(1+K_1)^2} A_2 \quad (2.54)$$

$$D_3 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)(k_1 + k_3 K_2)}{(1+K_1)(1+K_2)} A_3 \quad (2.55)$$

$$D_4 = \frac{(k_1 + k_3 K_2)^2}{(1+K_2)^2} A_4 \quad (2.56)$$

$$D_5 = k_3^2 A_5 \quad (2.57)$$

$$D_6 = k_1 k_3 A_6 \quad (2.58)$$

$$D_7 = k_4^2 A_7 \quad (2.59)$$

$$E_1 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)^2}{(1+K_1)^2} B_1 \quad (2.60)$$

$$E_2 = 4\pi (k_1 + k_3 K_2)^2 \int_a^b dz z^2 G_1^{(2)}(z) \\ + 8\pi a^6 k_3^2 K_3^2 \int_a^b dz \frac{G_1^{(2)}(z)}{z^4} \quad (2.61)$$

$$E_3 = k_1^2 B_3 \quad (2.62)$$

$$E_4 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)^2}{(1+K_1)^2} B_4 \quad (2.63)$$

$$E_5 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)(k_1 + k_3 K_2)}{(1+K_1)(1+K_2)} B_5 \quad (2.64)$$

$$E_6 = \frac{(k_1 + k_3 K_2)^2}{(1+K_2)^2} B_6 \quad (2.65)$$

$$E_7 = k_3^2 B_7 \quad (2.66)$$

$$E_8 = k_1 k_3 B_8 \quad (2.67)$$

$$E_9 = k_4^2 B_9 \quad (2.68)$$

$$F_1 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)^2}{(1+K_1)^2} C_1 \quad (2.69)$$

$$F_2 = 4\pi (k_1 + k_3 K_2)^2 \int_a^b dz z^2 G_1^{(3)}(z) \\ + 8\pi a^6 k_3^2 K_3^2 \int_a^b dz \frac{G_1^{(3)}(z)}{z^4} \quad (2.70)$$

$$F_3 = k_1^2 C_3 \quad (2.71)$$

$$F_4 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)^2}{(1+K_1)^2} C_4 \quad (2.72)$$

$$F_5 = \frac{(k_1 + k_2 K_1)(k_1 + k_3 K_2)}{(1+K_1)(1+K_2)} C_5 \quad (2.73)$$

$$F_6 = \frac{(k_1 + k_3 K_2)^2}{(1+K_2)^2} C_6 \quad (2.74)$$

$$F_7 = k_3^2 C_7 \quad (2.75)$$

$$F_8 = k_1 k_3 C_8 \quad (2.76)$$

$$F_9 = k_4^2 C_9 \quad (2.77)$$

으로 정의하였다. 식 (2.38) ~ (2.43)에서의 $Q^{(2)}$ 와 식 (2.47) ~ (2.52)에서의 $Q^{(3)}$, 그리고 식 (2.18), (2.19)에서의 $H_1^{(1)}$, $H_1^{(2)}$, $H_1^{(3)}$ 는 각각

$$Q^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \equiv G_2^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) - \rho G_1^{(2)}(\mathbf{y}) \\ - \rho G_1^{(2)}(\mathbf{z}) + \rho^2 \phi_2 \quad (2.78)$$

$$Q^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \equiv G_2^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) - \rho G_1^{(3)}(\mathbf{y}) \\ - \rho G_1^{(3)}(\mathbf{z}) + \rho^2 \phi_3 \quad (2.79)$$

$$H_1^{(1)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \equiv G_1^{(1)}(x) - \rho \phi_1 \quad (2.80)$$

$$H_1^{(2)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \equiv G_1^{(2)}(x) - \rho \phi_2 \quad (2.81)$$

$$H_1^{(3)}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \equiv G_1^{(3)}(x) - \rho \phi_3 \quad (2.82)$$

$$x = |\mathbf{y} - \mathbf{z}| \quad (2.83)$$

$$u \equiv \frac{y^2 + z^2 - x^2}{2yz} \quad (2.84)$$

으로 정의되는 함수들이며, 여기서, $G_n^{(i)}$ 는 점/ n -입자 분포 함수(point/ n -particle distribution function)라 불리는 함수로서

$$G_n^{(i)} \equiv \frac{N!}{(N-n)!} \int \cdots \int dr_{n+1} \\ \cdots dr_N I^{(i)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}^N) P_N(\mathbf{r}^N) \quad (2.85)$$

으로 정의된다. 여기서, $P_N(\mathbf{r}^N) d\mathbf{r}^N$ 은 복합구 1이

위치 \mathbf{r}_1 주위의 체적요소 $d\mathbf{r}_1$ 에 있고, 복합구 2가 위치 \mathbf{r}_2 주위의 체적요소 $d\mathbf{r}_2$ 에 있고, ..., 복합구 N 이 위치 \mathbf{r}_N 주위의 체적요소 $d\mathbf{r}_N$ 에 있을 확률을 나타내며 이것은 통계역학에서 가장 기본적인 통계량 가운데 하나이다. 수학적으로 $G_n^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{n+1})d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_{n+1}$ 은 3상 복합체로 이루어진 앙상블 시스템에서 위치 \mathbf{r}_1 이 상 1에 속하고, 임의의 복합구 1개의 중심이 \mathbf{r}_2 주위의 체적요소 $d\mathbf{r}_2$ 에 위치하고, 다른 복합구 1개의 중심이 \mathbf{r}_3 주위의 체적요소 $d\mathbf{r}_3$ 에 위치하고, ..., 또 다른 복합구 1개의 중심이 \mathbf{r}_{n+1} 주위의 체적요소 $d\mathbf{r}_{n+1}$ 에 위치할 확률을 나타낸다. $G_n^{(i)}$ 는 Weissberg와 Prager에 의해 연구된, 본 연구의 주제인 복합소재의 유효전도율의 문제와도 밀접한 관계가 있는, 현탁액(suspension)에서의 유효점성계수(effective viscosity)를 결정하는 문제에서 처음 도입되었으며⁽⁶⁾ 이 $G_n^{(i)}$ 의 여러 가지 특성들이 Torquato에 의해 연구된 바 있다.⁽⁷⁾ 본 연구의 대상인 3상 복합시스템에서처럼 통계적 등방성(statistical isotropy)을 가지는 경우에는 $G_1^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = G_1^{(i)}(r_{12})$, $G_2^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = G_2^{(i)}(r_{12}, r_{13}) = G_2^{(i)}(r_{12}, r_{13}, \bar{\mathbf{r}}_{12} \cdot \bar{\mathbf{r}}_{13})$ 가 된다. (여기서, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$, $\bar{\mathbf{r}}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$ 이다.) $h(x)$ 는 전상관함수(total correlation function)로서, 아래의 식 (2.87)으로 정의되는 반경분포함수(radial distribution function) $g(x)$ 와는

$$h(x) = g(x) - 1 \quad (2.86)$$

의 관계에 있으며, $x \rightarrow \infty$ 이면 $h(x) \rightarrow \infty$ 이다. 통계적 등방성을 가지는 복합소재의 경우 반경분포함수 $g(x)$ 는

$$\begin{aligned} g(r_{12}) &\equiv g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &\equiv \frac{N!}{\rho^2(N-2)!} \int \cdots \int d\mathbf{r}_3 \cdots d\mathbf{r}_N P_N(\mathbf{r}^N) \end{aligned} \quad (2.87)$$

으로 정의되며 $P_N(\mathbf{r}^N)$ 과 함께 통계역학적 응용에서 가장 흔히 나타나는 기본적인 통계량 가운데 하나이다. 또 식 (2.32) ~ (2.34) 등에서 나타나는 $P_2(x)$ 는 제2계 Legendre 다항식(second order Legendre polynomial)으로서 식 (2.85), (2.87)의 $P_N(\mathbf{r}^N)$ 과는 구분된다. 식 (2.3) ~ (2.77)까지의 결과는 Fig. 1과 같은 3상 복합소재에 적용되며 이하에서 논할 PCS 모델 혹은 PS 모델 등의 구체적인 미시구조 내용과 관계없이 일반적으로 성립된다.

전상관함수 $h(x)$ 를 비중복성계수 λ 를 변수로 하

여 수밀도 ρ 에 대한 다항식으로 전개하면

$$h(x; \lambda) = h_o(x; \lambda) + O(\rho) \quad (2.88)$$

으로 쓸 수 있으며 $h_o(x; \lambda)$ 는 시스템내 복합구의 분포에 따라 다른 함수의 형태를 취한다. 전술한 HS 모델, 그리고 이하에서 논할 PCS 모델, PS 모델 등은 $h_o(x; \lambda)$ 의 함수형태의 차이로도 구분될 수 있다. 식 (2.22) ~ (2.27)을 각 모델별로 구체적으로 계산하기 위해 이하 제3절에서는 먼저 몇 가지 특성함수들을 정의하고 $G_n^{(i)}$, $Q^{(i)}$, $H_1^{(i)}$ 등을 새로이 정의된 특성함수들로 표시한다.

3. 관계되는 함수들

식 (2.3), (2.4)으로 주어지는 유효전도율 k^* 의 상하한치를 구체적으로 3상 복합소재의 각 모델별로 계산하기 위해 먼저 다음과 같이 특성함수 $m_a(x)$, $m_b(x)$ 와 $e_a(x)$, $e_b(x)$ 를 정의한다.

$$m_a(x) = \begin{cases} 1, & x < a \\ 0, & x > a \end{cases} \quad (3.1)$$

$$m_b(x) = \begin{cases} 1, & x < b \\ 0, & x > b \end{cases} \quad (3.2)$$

$$e_a(x) = 1 - m_a(x) = \begin{cases} 1, & x < a \\ 0, & x > a \end{cases} \quad (3.3)$$

$$e_b(x) = 1 - m_b(x) = \begin{cases} 1, & x < b \\ 0, & x > b \end{cases} \quad (3.4)$$

Torquato에 의해 제시된 것처럼 식 (2.85)의 $G_n^{(i)}$ 를 복합구의 수밀도(number density) ρ 의 다항식으로 전개하면 m_a , m_b , e_a , e_b 를 이용하여

$$\begin{aligned} G_1^{(i)}(r_{12}) &= \rho e_b(r_{12}) - \rho^2 e_b(r_{12}) \left[\frac{4}{3} \pi b^3 \right. \\ &\quad \left. + \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_b(r_{13}) \right] + O(\rho^3) \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} G_1^{(2)}(r_{12}) &= \rho m_a(r_{12}) + \rho^2 e_a(r_{12}) \left[\frac{4}{3} \pi a^3 \right. \\ &\quad \left. + \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_a(r_{13}) \right] + O(\rho^3) \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} G_1^{(3)}(r_{12}) &= \rho [e_a(r_{12}) - e_b(r_{12})] \\ &\quad + \rho^2 \left[\frac{4}{3} \pi b^3 e_b(r_{12}) - \frac{4}{3} \pi a^3 e_a(r_{12}) \right. \\ &\quad \left. + e_b(r_{12}) \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_b(r_{13}) \right. \\ &\quad \left. - e_a(r_{12}) \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_a(r_{13}) \right] \end{aligned}$$

$$+ O(\rho^3) \quad (3.7)$$

$$G_2^{(1)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}) = \rho^2 [h_o(r_{23}) + 1] \times e_b(r_{12}) e_b(r_{13}) + O(\rho^3) \quad (3.8)$$

$$G_2^{(2)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}) = \rho^2 [h_o(r_{23}) + 1] \times [1 - e_a(r_{12}) e_a(r_{13})] + O(\rho^3) \quad (3.9)$$

$$G_2^{(3)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}) = \rho^2 [h_o(r_{23}) + 1] \times [e_a(r_{12}) e_a(r_{13}) - e_b(r_{12}) e_b(r_{13})] + O(\rho^3) \quad (3.10)$$

의 관계를 유도할 수 있다. 따라서 식 (2.78), (2.79), (2.81), (2.82)의 $Q^{(2)}$, $Q^{(3)}$, $H_1^{(2)}$, $H_1^{(3)}$ 를 수 밀도 ρ 의 다항식으로 전개하여 $O(\rho^2)$ 까지만 쓰면 각각

$$Q^{(2)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}) = G_2^{(2)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}) - \rho G_1^{(2)}(r_{12}) - \rho G_1^{(2)}(r_{13}) + \rho^2 \phi_2 = \begin{cases} \phi_2 \rho^2, & r_{12} > a, r_{13} > a \\ [h_o(r_{23}) + \phi_2] \rho^2, & r_{12} < a, r_{13} > a \\ [h_o(r_{23}) + \phi_2] \rho^2, & r_{12} > a, r_{13} < a \\ [h_o(r_{23}) - 1 + \phi_2] \rho^2, & r_{12} < a, r_{13} < a \end{cases} \quad (3.11)$$

$$Q^{(3)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}) = G_2^{(3)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}) - \rho G_1^{(3)}(r_{12}) - \rho G_1^{(3)}(r_{13}) + \rho^2 \phi_3 = \begin{cases} \phi_3 \rho^2, & r_{12} > b, r_{13} > b \\ [h_o(r_{23}) + \phi_3] \rho^2, & a < r_{12} < b, r_{13} > b \\ \phi_3 \rho^2, & r_{12} < a, r_{13} > b \\ [h_o(r_{23}) + \phi_3] \rho^2, & r_{12} > b, a < r_{13} < b \\ [h_o(r_{23}) - 1 + \phi_3] \rho^2, & a < r_{12} < b, a < r_{13} < b \\ [-1 + \phi_3] \rho^2, & r_{12} < a, a < r_{13} < b \\ \phi_3 \rho^2, & r_{12} < b, r_{13} < a \\ [-1 + \phi_3] \rho^2, & a < r_{12} < b, r_{13} < a \\ \phi_3 \rho^2, & r_{12} < a, r_{13} < a \end{cases} \quad (3.12)$$

$$H_1^{(2)}(r_{12}) = G_1^{(2)}(r_{12}) - \rho \phi_2 = \begin{cases} \rho(1 - \phi_2), & r_{12} < a \\ -\rho \phi_2 + \rho^2 \left[\frac{4}{3} \pi a^3 + \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_a(r_{13}) \right] + O(\rho^3), & r_{12} > a \end{cases} \quad (3.13)$$

$$H_1^{(3)}(r_{12}) = G_1^{(3)}(r_{12}) - \rho \phi_3 = \begin{cases} -\rho \phi_3, & r_{12} < a \\ \rho(1 - \phi_3) - \rho^2 \left[\frac{4}{3} \pi a^3 + \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_a(r_{13}) \right] + O(\rho^3), & a < r_{12} < b \\ -\rho \phi_3 + \rho^2 \left[\frac{4}{3} \pi (b^3 - a^3) + \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_b(r_{13}) - \int d\mathbf{r}_3 h_o(r_{23}) m_a(r_{13}) \right] + O(\rho^3), & r_{12} > b \end{cases} \quad (3.14)$$

으로 된다.

4. 각 모델별 계산

식 (2.3), (2.4)의 클러스터 상하한치를 실용적으로 나타내는데는 3절에서처럼 복합구의 수밀도 ρ 의 전개식으로 표시하는 것보다는 복합구의 체적비 $\phi_2 + \phi_3$, 또는 상 2의 체적비 ϕ_2 의 전개식으로 표시하는 것이 바람직하다. 복합구의 반경비 b/a

가 주어지면 ϕ_3 는 ϕ_2 에 의존하므로 결국 관계되는 통계량들을 ϕ_2 의 전개식으로 표시하면 된다. 이를 위해 먼저 반경 a 인 상 2의 구의 환원밀도 (reduced density) η_a 를

$$\eta_a \equiv \frac{4}{3} \pi a^3 \rho \quad (4.1)$$

반경 b 인 상 2와 상 3으로 이루어진 복합구의 환원밀도 η_b 를

$$\eta_b \equiv \frac{4}{3} \pi b^3 \rho = \frac{b^3}{a^3} \eta_a \quad (4.2)$$

으로 정의하면 2절과 3절에서 수밀도 ρ 의 전개식으로 표시한 모든 관계식들을 η_a 와 η_b 의 전개식으로 표시할 수 있다. η 와 ϕ 의 관계는 복합구끼리의 중복성 여부, 즉 구체적인 미시구조에 따라 달라지게 된다. 복합구끼리의 중복이 전혀 허용되지 않는 강구(hard sphere) 모델에서 비중복성계수가 $\lambda=1$ 의 경우에는 $\phi_2 = \eta_a$, $\phi_2 + \phi_3 = \eta_b$ 의 관계를 가지며, 반대로 복합구끼리의 중복에 아무 제한이 없는 $\lambda=0$ 의 경우에는 $\phi_2 = 1 - \exp(-\eta_a)$, $\phi_2 + \phi_3 = 1 - \exp(-\eta_b)$ 의 관계가 성립한다. 비중복성계수의 값이 $0 < \lambda < 1$ 의 경우에는 미시구조 모델에 따라 η 와 ϕ 의 관계가 달라지게 된다. 복합구가 상 2로만 이루어진 2상 복합소재의 경우 ($\eta_a = \eta_b = \eta$, $\phi_3 = 0$) Torquato는 ϕ_2 와 η 의 관계를 유도한 바 있다.⁽⁹⁾

$$\phi_2 = \eta - G\eta^2 + O(\eta^3) \quad (4.3)$$

여기서, 계수 G 는

$$G = \frac{1}{2 \left(\frac{4}{3} \pi a^3 \right)^2} \times \iint dr_1 dr_2 [1 + h_o(r_{12})] V_2^{INT}(r_{12}) \quad (4.4)$$

으로 주어지는 적분치이며 $V_2^{INT}(x)$ 는 반경 a 인 구 두 개가 서로 거리 x 만큼 떨어져 있을 때 두 구가 서로 겹치는 부분의 체적이다. 식 (4.3), (4.4)는 본 연구의 3상 복합소재의 경우에도 약간의 손질만 하면 적용가능하며 그 함수형태는 구체적인 구조모델 즉 $h_o(x)$ 에 따라 달라지게 된다.

본 연구에서는 3상 복합소재의 구조모델로서 중복가능외피(penetrable concentric shell, PCS) 모델과 두 가지 다른 종류의 중복구(permeable sphere, PS) 모델을 고려한다. 또 몇 가지 서로 다른 3상 구조모델을 일반화시킨 것으로 PS-PCS 모델을 제안한다. 이하에서 보듯이 PCS 모델이나 두 가지 PS 모델 모두 PS-PCS 모델의 한 형태로 취급될 수 있다. 중복가능외피(PCS) 모델에서는 복합구가 반경 λa 인 중복이 불가능한 강구핵(hard core)주위를 두께 $b - \lambda a$ 의 동심외피(concentric shell)가 둘러싼 형태로 이루어진 것으로 외피끼리, 혹은 외피와 강구핵 사이에는 아무런 제한없이 중복이 허용된다. 중복가능 여부에 따른 반경 λa 에서의 경계는 상전도율 k_2 와 k_3 의 경계면이 반경 a 에 위치하는 것과는 구별되어야 한다. Fig. 2는

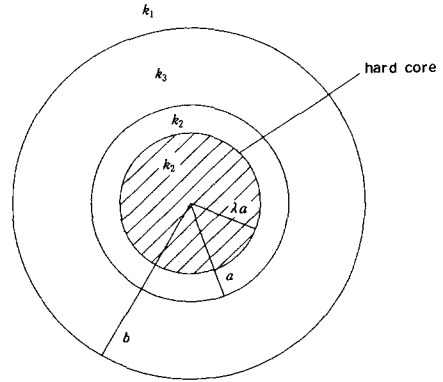


Fig. 2 A composite sphere in PCS (penetrable-concentric-shell) model. In the figure, shaded, dotted and white regions denote hard core of radius λa (shaded), sphere of conductivity k_2 and radius a (dotted), and concentric shell of conductivity k_3 and thickness $b-a$ (white), respectively. Region outside the hard core is perfectly penetrable

비중복성 계수의 값이 $0 < \lambda < b/a$ 인 범위의 PCS 모델에서 복합구의 구조를 개략적으로 나타낸다. 중복구(PS) 모델에서는 복합구끼리 중복이 허용되며 비중복성 계수 λ 는 두 개의 복합구끼리 중복이 허용되지 않을 확률을 의미한다. 반경 a 인 상 2의 구형물질을 두께 $b-a$ 인 상 3의 물질이 둘러싼 형태의 복합구의 경우 상 3의 비중복성 여부에 따라 두 가지로 구분할 수 있다. 첫번째 모델은 상 2는 부분적으로 중복이 제한되나 상 3은 아무 제한없이

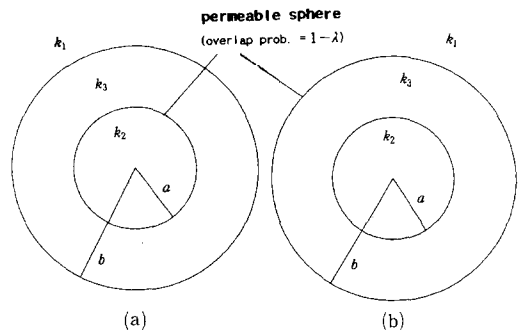


Fig. 3 Two composite spheres in different PS (permeable sphere) models: (a) PS-1 model, (b) PS-2 model. In the figure, dotted regions denote (partially penetrable) permeable spheres where the probability of overlapping is given by $1-\lambda$. Region outside the permeable spheres is perfectly penetrable

중복이 허용되는 것으로 PS-1 모델이라 칭하기로 한다. 두 번째 모델은 상 2와 상 3이 모두 부분적으로 중복이 제한되는 것으로 PS-1 모델이라 칭하기로 한다. Fig. 3은 PS-1 모델과 PS-2 모델에서의 복합구 구조의 차이를 비교하여 나타낸다. PCS, PS 모델 등은 또한 전상관함수 $h(x)$ 로도 구분할 수 있다.

식 (2.88)의 $h(x)$ 의 수밀도 전개식

$$h(x) = h_o(x) + O(\rho) \quad (4.5)$$

에서 $h_o(x; \lambda)$ 가 PCS 모델에서는

$$h_o(x; \lambda) = \begin{cases} -1, & x < 2\lambda a \\ 0, & x > 2\lambda a \end{cases} \quad (4.6)$$

으로 주어진다. 또 $h_o(x; \lambda)$ 가 PS-1 모델에서는

$$h_o(x; \lambda) = \begin{cases} -\lambda, & x < 2a \\ 0, & x > 2a \end{cases} \quad (4.7)$$

그리고 PS-2 모델에서는

$$h_o(x; \lambda) = \begin{cases} -\lambda, & x < 2b \\ 0, & x > 2b \end{cases} \quad (4.8)$$

으로 된다. 본 연구에서는 복합구로 이루어진 3상 시스템의 구조를 포괄적으로 모델링하기 위해 PS-PCS 모델을 제안한다. PS-PCS 모델은 기존의 PCS 모델과 PS 모델을 일반화시킨 것으로 PCS 모델에서는 아무 제한없이 중복이 허용되는 외피 내부에 중복이 불가능한 강구핵이 위치하던 것에 비해 강구핵을 중복이 부분적으로 가능한 중복구로 대체한 것이다. Fig. 4는 PS-PCS 모델에서의 복합구의 구조를 개략적으로 나타낸다. PS-PCS 모델에서는 비중복성계수로 λ_1, λ_2 의 두 가지가 필요하며 반경 R 인 PS-PCS 구의 경우 식 (4.5)의 h_o

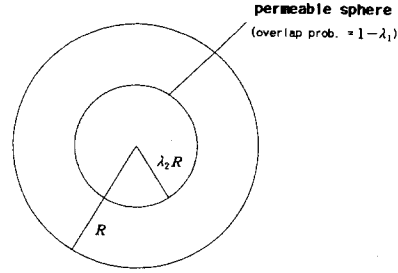


Fig. 4 A sphere of radius R in PS-PCS model. In the figure, the dotted region denotes (partially penetrable) permeable sphere of radius $\lambda_2 R$ where the probability of overlapping is given by $1 - \lambda_1$. Region outside the permeable spheres is perfectly penetrable

(x)가

$$h_o(x; \lambda_1, \lambda_2; R) = \begin{cases} -\lambda_1 & x < 2\lambda_2 R \\ 0, & x > 2\lambda_2 R \end{cases} \quad (4.9)$$

으로 된다. 이렇게 하면 PCS 모델에서는

$$h_o(x; \lambda)_{PCS} = h_o(x; 1, \lambda; a)_{PS-PCS} \quad (4.10)$$

PS-1 모델에서는

$$h_o(x; \lambda)_{PS-1} = h_o(x; \lambda, 1; a)_{PS-PCS} \quad (4.11)$$

PS-2 모델에서는

$$h_o(x; \lambda)_{PS-2} = h_o(x; \lambda, 1; b)_{PS-PCS} \quad (4.12)$$

으로 되어 각 모델 공히 PS-PCS 모델로 일반화됨을 알 수 있다.

본 연구의 복합구를 반경이 $R=b$ 인 PS-PCS 구로 생각하면 η 와 ϕ 의 관계식은 식 (4.3)에 의해

$$\phi_2 + \phi_3 = \eta_b - G\eta_b^2 + O(\eta_b^3) \quad (4.13)$$

이 된다. 여기서, 계수 G 는

$$G = G(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{1}{2\left(\frac{4}{3}\pi b^3\right)^2} \iint dr_1 dr_2 [1 + h_o(r_{12})] V_2^{INT}(r_{12}) = \begin{cases} 4(1 - \lambda_1 \lambda_2^3) - \frac{9}{2}(1 - \lambda_1 \lambda_2^2) + (1 - \lambda_1 \lambda_2^6) & \lambda_2 < 1 \\ 0 & \lambda_2 > 1 \end{cases} \quad (4.14)$$

로서 $V_2^{INT}(x)$ 는 반경 b 인 구 두 개가 서로 거리 x 만큼 떨어져 있을 때 두 구가 서로 겹치는 부분

의 체적이다. 이렇게 하면 PCS 모델에서는 G 가

$$G = G(1, \lambda) = \begin{cases} 4(1 - \lambda^3) - \frac{9}{2}(1 - \lambda^2) + (1 - \lambda^6) & \lambda < 1 \\ 0 & \lambda > 1 \end{cases} \quad (4.15)$$

으로 되며 PS 모델에서는

$$G = G(\lambda, 1) = \frac{1}{2}(1 - \lambda) \quad (4.16)$$

으로 된다. PS 모델에서는 PCS 모델에서와는 달리 비중복성 계수 λ 가 중복되지 않을 확률을 의미하므로 λ 의 범위가 $0 \leq \lambda \leq 1$ 로 제한된다.

구체적으로, PCS 모델에서는 식 (4.3)에 의하여 η 와 ϕ 사이에

$$\phi_2 = \eta_a - G(1, \lambda) \eta_a^2 + O(\eta_a^3) \quad (4.17)$$

이 성립한다. 여기서, 거꾸로 η_a 를 ϕ_2 의 다항식으로 전개하면

$$\eta_a = \phi_2 + G(1, \lambda) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.18)$$

이 되고, 따라서 η_b 는

$$\eta_b = \frac{b^3}{a^3} \eta_a = \frac{b^3}{a^3} [\phi_2 + G(1, \lambda) \phi_2^2] + O(\phi_2^3) \quad (4.19)$$

으로 된다. 또 상 3의 체적비 ϕ_3 역시 ϕ_2 의 전개식으로

$$\phi_3 = \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \phi_2 + \left[\frac{b^3}{a^3} G(1, \lambda) - \frac{b^6}{a^6} G\left(1, \frac{a}{b}\lambda\right) \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.20)$$

으로 되고 따라서

$$\begin{aligned} \phi_1 &= 1 - (\phi_2 + \phi_3) \\ &= 1 - \frac{b^3}{a^3} \phi_2 \left[\frac{b^3}{a^3} G(1, \lambda) - \frac{b^6}{a^6} G\left(1, \frac{a}{b}\lambda\right) \right] \\ &\quad + \phi_2^2 O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.21)$$

의 관계를 쉽게 유도할 수 있다. 마찬가지로 PS-1 모델에서는

$$\eta_a = \phi_2 + G(\lambda, 1) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.22)$$

$$\eta_b = \frac{b^3}{a^3} [\phi_2 + G(\lambda, 1) \phi_2^2] + O(\phi_2^3) \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \phi_3 &= \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \phi_2 + \left[\frac{b^3}{a^3} G(\lambda, 1) - \frac{b^6}{a^6} G\left(\lambda, \frac{a}{b}\right) \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &\quad (4.24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi_1 &= 1 - \frac{b^3}{a^3} \phi_2 - \left[\frac{b^3}{a^3} G(\lambda, 1) - \frac{b^6}{a^6} G\left(\lambda, \frac{a}{b}\right) \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &\quad (4.25) \end{aligned}$$

의 관계가 얻어지며 PS-2 모델에서는

$$\eta_a = \phi_2 + G(\lambda, 1) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.26)$$

$$\eta_b = \frac{b^3}{a^3} [\phi_2 + G(\lambda, 1) \phi_2^2] + O(\phi_2^3) \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \phi_3 &= \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \phi_2 + \left[\frac{b^3}{a^3} G(\lambda, 1) - \frac{b^6}{a^6} G(\lambda, 1) \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &\quad (4.28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi_1 &= 1 - \frac{b^3}{a^3} \phi_2 - \left[\frac{b^3}{a^3} G(\lambda, 1) - \frac{b^6}{a^6} G(\lambda, 1) \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &\quad (4.29) \end{aligned}$$

의 관계를 얻을 수 있다.

이상의 결과를 이용하여 식 (2.3), (2.4)의 k^* 의 클러스터 상하한치를 각 모델별로 상 2의 체적비 ϕ_2 의 전개식으로 표시하는 것이 가능하다. 이에서는 식 (2.18) ~ (2.21)까지의 앙상블 평균들을 ϕ_2 의 전개식으로 유도한다. 먼저 식 (2.18)의 $\langle kE^{(1)} \rangle$ 에 대해서는

$$\frac{\langle kE^{(1)} \rangle \cdot \langle kE^{(1)} \rangle}{\langle E \rangle \cdot \langle E \rangle} = Y_1 \phi_2^2 + 2Y_2 \phi_2^3 + O(\phi_2^4) \quad (4.30)$$

으로 전개하면 계수 Y_1, Y_2 는 각각

$$\begin{aligned} Y_1 &= \left[(1 + K_1) (k_2 - k_1) + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \right. \\ &\quad \left. \times (1 + K_2) (k_3 - k_1) \right]^2 \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} Y_2 &= G(1 + K_1)^2 (k_2 - k_1)^2 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (1 + K_2) \\ &\quad \times \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(G - \frac{b^3}{a^3} \right) (1 + K_2) - \frac{b^3}{a^3} (1 + K_1) \right] (k_3 - k_1)^2 + (1 + K_1) \\ &\quad \times \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(2G - \frac{b^3}{a^3} \right) (1 + K_2) - \frac{b^3}{a^3} (1 + K_1) \right] (k_2 - k_1) (k_3 - k_1) \\ &\quad + (1 + K_1) [1 + K_1 + I_6(1 + K_2)] \\ &\quad \times (k_2 - k_1) (k_3 - k_2) + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (1 + K_2) \\ &\quad \times [1 + K_1 + I_6(1 + K_2)] (k_3 - k_1) (k_3 - k_2) \end{aligned} \quad (4.32)$$

으로 주어진다. 또 식 (2.19)의 $\langle J^{(1)}/k \rangle$ 에 대해서는

$$\frac{\langle J^{(1)}/k \rangle \cdot \langle J^{(1)}/k \rangle}{\langle E \rangle \cdot \langle E \rangle} = Z_1 \phi_2^2 + 2Z_2 \phi_2^3 + O(\phi_2^4) \quad (4.33)$$

으로 전개하면 계수 Z_1, Z_2 는 각각

$$Z_1 = \left[(k_1 + k_2 K_1) \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& \times (k_1 + k_3 K_2) \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right)^2 \quad (4.34) \\
Z_2 = & G(k_1 + k_2 K_1)^2 \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right)^2 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \\
& \times (k_1 + k_3 K_2) \times \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(G - \frac{b^3}{a^3} \right) \right. \\
& \times (k_1 + k_3 K_2) - \left. \frac{b^3}{a^3} (k_1 + k_2 K_1) \right] \\
& \times \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right)^2 + (k_1 + k_2 K_1) \\
& \times \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(2G - \frac{b^3}{a^3} \right) \right. \\
& \times (k_1 + k_3 K_2) - \left. \frac{b^3}{a^3} (k_1 + k_2 K_1) \right] \\
& \times \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \\
& \times (k_1 + k_3 K_2) [k_1 + k_2 K_1 + I_6 (k_1 + k_3 K_2)] \\
& \times \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_2} \right) \quad (4.35)
\end{aligned}$$

으로 주어진다. 여기서, G 는 식 (4.14)의 $G(\lambda_1, \lambda_2)$ 로서 PCS 모델에서는 식 (4.25), PS-1, PS-2 모델에서는 식 (4.16)으로 각각 주어진다. I_6 는 아래의 식 (4.100)으로 정의되는 적분치이다. 그리고 식 (2.20), (2.21)은 각각 다음과같이 계산된다.

$$\frac{\langle k\mathbf{E}^{(1)} \cdot \mathbf{E}^{(1)} \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle} = k_1 A + (k_2 - k_1) B + (k_3 - k_1) C \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\langle \mathbf{J}^{(1)} \cdot \mathbf{J}^{(1)} / k \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle} = & \frac{D}{k_1} + \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) E \\
& + \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) F \quad (4.37)
\end{aligned}$$

$$A = A_1 + A_2 + A_3 + \dots + A_7 \quad (4.38)$$

$$B = B_1 + B_2 + B_3 + \dots + B_9 \quad (4.39)$$

$$C = C_1 + C_2 + C_3 + \dots + C_9 \quad (4.40)$$

$$D = D_1 + D_2 + D_3 + \dots + D_7 \quad (4.41)$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots + E_9 \quad (4.42)$$

$$F = F_1 + F_2 + F_3 + \dots + F_9 \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned}
A_1 = & A_{1,1} \phi_2 + A_{1,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & \left[(1 + K_1)^2 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (1 + K_2)^2 + 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) K_3^2 \right. \\
& + \left. \frac{2a^3}{b^3} K_4^2 \right] \phi_2 + G \left[(1 + K_1)^2 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \right. \\
& \times (1 + K_2)^2 + 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) K_3^2 + \left. \frac{2a^3}{b^3} K_4^2 \right] \phi_2^2 \\
& + O(\phi_2^3) \quad (4.44)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_2 = & A_{2,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & I_o (1 + K_1)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.45)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_3 = & A_{3,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & 2I_1 (1 + K_1) (1 + K_2) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_4 = & A_{4,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & I_2 (1 + K_2)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.47)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_5 = & A_{5,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & I_3 K_3^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_6 = & A_{6,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & 2I_4 K_3 K_4 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.49)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_7 = & A_{7,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & I_5 K_4^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.50)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_1 = & B_{1,1} \phi_2 + B_{1,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & (1 + K_1)^2 \phi_2 + G (1 + K_1)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_2 = & B_{2,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 - I_6 \right) (1 + K_2)^2 \right. \\
& + \left. 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} - I_7 \right) K_3^2 \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.52)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_3 = & B_{3,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & 2 \left(\frac{a^3}{b^3} - I_8 \right) K_4^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.53)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_4 = & B_{4,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & (I_o + 1) (1 + K_1)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.54)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_5 = & B_{5,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & 2I_1 (1 + K_1) (1 + K_2) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.55)
\end{aligned}$$

$$B_6 = O(\phi_2^3) \quad (4.56)$$

$$B_7 = 0 \quad (4.57)$$

$$B_8 = 0 \quad (4.58)$$

$$B_9 = 0 \quad (4.59)$$

$$C_1 = 0 \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned}
C_2 = & C_{2,1} \phi_2 + C_{2,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (1 + K_2)^2 + 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) K_3^2 \right] \phi_2 \\
& + \left\{ \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (G - 1) + I_6 \right] (1 + K_2)^2 \right. \\
& + \left. 2 \left[\left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) (G - 1) + I_7 \right] K_3^2 \right\} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.61)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_3 = & C_{3,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} + I_8 - I_9 \right) K_4^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.62)
\end{aligned}$$

$$C_4 = O(\phi_2^3) \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned}
C_5 = & C_{5,2} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\
= & -2 \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (1 + K_1) (1 + K_2) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.64)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_6 &= C_{6,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= \left[I_2 - \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \right] (1 + K_2)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} C_7 &= C_{7,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= I_3 K_3^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} C_8 &= C_{8,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= 2I_4 K_3 K_4 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.67)$$

$$C_9 = 0 \quad (4.68)$$

$$\begin{aligned} D_1 &= D_{1,1}\phi_2 + D_{1,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= \left[(k_1 + k_2 K_1)^2 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (k_1 + k_3 K_2)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) k_3^2 K_3^2 + \frac{2a^3}{b^3} k_1^2 K_4^2 \right] \phi_2 \\ &\quad + G \left[(k_1 + k_2 K_1)^2 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (k_1 + k_3 K_2)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) k_3^2 K_3^2 + \frac{2a^3}{b^3} k_1^2 K_4^2 \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.69)$$

$$\begin{aligned} D_2 &= D_{2,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= I_0 (k_1 + k_2 K_1)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.70)$$

$$\begin{aligned} D_3 &= D_{3,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= 2I_1 (k_1 + k_2 K_1) (k_1 + k_3 K_2) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.71)$$

$$\begin{aligned} D_4 &= D_{4,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= I_2 (k_1 + k_3 K_2)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.72)$$

$$\begin{aligned} D_5 &= D_{5,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= I_3 k_3^2 K_3^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.73)$$

$$\begin{aligned} D_6 &= D_{6,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= 2I_4 k_1 k_3 K_3 K_4 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.74)$$

$$\begin{aligned} D_7 &= D_{7,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= I_5 k_1^2 K_4^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.75)$$

$$\begin{aligned} E_1 &= E_{1,1}\phi + E_{1,2}\phi^2 + O(\phi^3) \\ &= (k_1 + k_2 K_1)^2 \phi + G (k_1 + k_2 K_1)^2 \phi^2 + O(\phi^3) \end{aligned} \quad (4.76)$$

$$\begin{aligned} E_2 &= E_{2,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 - I_6 \right) (k_1 + k_3 K_2)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} - I_7 \right) k_3^2 K_3^2 \right] \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} E_3 &= E_{3,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= 2 \left(\frac{a^3}{b^3} - I_8 \right) k_1^2 K_4^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.78)$$

$$\begin{aligned} E_4 &= E_{4,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= (I_0 + 1) (k_1 + k_2 K_1)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.79)$$

$$E_5 = E_{5,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3)$$

$$= 2I_1 (k_1 + k_2 K_1) (k_1 + k_3 K_2) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.80)$$

$$E_6 = O(\phi_2^3) \quad (4.81)$$

$$E_7 = 0 \quad (4.82)$$

$$E_8 = 0 \quad (4.83)$$

$$E_9 = 0 \quad (4.84)$$

$$F_1 = 0 \quad (4.85)$$

$$\begin{aligned} F_2 &= F_{2,1}\phi_2 + F_{2,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (k_1 + k_3 K_2)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) k_3^2 K_3^2 \right] \phi_2 \\ &\quad + \left\{ \left[\left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (G - 1) + I_6 \right] (k_1 + k_3 K_2)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2 \left[\left(1 - \frac{a^3}{b^3} \right) (G - 1) + I_7 \right] k_3^2 K_3^2 \right\} \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.86)$$

$$\begin{aligned} F_3 &= F_{3,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= 2 \left(1 - \frac{a^3}{b^3} + I_8 - I_9 \right) k_1^2 K_4^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.87)$$

$$F_4 = O(\phi_2^3) \quad (4.88)$$

$$\begin{aligned} F_5 &= F_{5,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= -2 \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) (k_1 + k_2 K_1) \\ &\quad \times (k_1 + k_3 K_2) \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.89)$$

$$\begin{aligned} F_6 &= F_{6,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= \left[I_2 - \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \right] (k_1 + k_3 K_2)^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.90)$$

$$\begin{aligned} F_7 &= F_{7,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= I_3 k_3^2 K_3^2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.91)$$

$$\begin{aligned} F_8 &= F_{8,2}\phi_2^2 + O(\phi_2^3) \\ &= 2I_4 k_1 k_3 K_3 K_4 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \end{aligned} \quad (4.92)$$

$$F_9 = 0 \quad (4.93)$$

여기서, I_0, \dots, I_9 은 아래와 같이 정의되는 적분치들이다.

$$I_0 \equiv \frac{9}{2a^6} \int_0^a dz z^2 \int_0^a dy y^2 \int_{-1}^1 du h(x) \quad (4.94)$$

$$I_1 \equiv \frac{9}{2a^6} \int_0^a dz z^2 \int_a^b dy y^2 \int_{-1}^1 du h(x) \quad (4.95)$$

$$I_2 \equiv \frac{9}{2a^6} \int_a^b dz z^2 \int_a^b dy y^2 \int_{-1}^1 du h(x) \quad (4.96)$$

$$I_3 \equiv 9 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_a^b \frac{dy}{y} \int_{-1}^1 du P_2(u) h(x) \quad (4.97)$$

$$I_4 \equiv 9 \int_a^b \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \int_{-1}^1 du P_2(u) h(x) \quad (4.98)$$

$$I_5 \equiv 9 \int_b^\infty \frac{dz}{z} \int_b^\infty \frac{dy}{y} \int_{-1}^1 du P_2(u) h(x) \quad (4.99)$$

$$I_9 \equiv \frac{9}{4\pi} \int_b^\infty \frac{dz}{z^4} V_2^{INT}(z; b, 2\lambda a) \quad (4.103)$$

$$I_6 \equiv \frac{9}{4\pi a^6} \int_a^b dz z^2 V_2^{INT}(z; a, 2\lambda a) \quad (4.100)$$

식 (4.100) ~ (4.103)의 $V_2^{INT}(x; R_1, R_2)$ 는 반경이 각각 R_1, R_2 인 두 구의 중심이 서로 거리 x 만큼 떨어져 있을 때 두 구가 서로 겹치는 부분의 체적이며 $R_1 < R_2$ 라 할 때 다음과 같이 주어진다.

$$I_7 \equiv \frac{9}{4\pi} \int_a^b \frac{dz}{z^4} V_2^{INT}(z; a, 2\lambda a) \quad (4.101)$$

$$I_8 \equiv \frac{9}{4\pi} \int_b^\infty \frac{dz}{z^4} V_2^{INT}(z; a, 2\lambda a) \quad (4.102)$$

$$V_2^{INT}(x; R_1; R_2) = \begin{cases} \frac{4\pi R^3}{3}, & 0 \leq x \leq R_2 - R_1 \\ \frac{4\pi}{3} \left[-\frac{3(R_2 - R_1)^2}{16x} + \frac{R_2^3 + R_1^3}{2} - \frac{3x}{8}(R_2^2 + R_1^2) + \frac{x^3}{16} \right], & R_2 - R_1 \leq x \leq R_2 + R_1 \\ 0, & x \geq R_2 + R_1 \end{cases} \quad (4.104)$$

이렇게 하여 식 (2.20), (2.21)은 다음과 같이 ϕ_2 의 전개식으로 쓸 수 있다.

$$\frac{\langle k \mathbf{E}^{(1)} \cdot \mathbf{E}^{(1)} \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle} = L_1 \phi_2 + L_2 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.105)$$

$$\frac{\langle \mathbf{J}^{(1)} \cdot \mathbf{J}^{(1)} / k \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle} = L_3 \phi_2 + L_4 \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.106)$$

여기서, 계수 L_1, L_2, L_3, L_4 는 각각

$$L_1 = k_1 A_{1,1} + (k_2 - k_1) B_{1,1} + (k_3 - k_1) C_{2,1} \quad (4.107)$$

$$L_2 = k_1 (A_{1,2} + A_{2,2} + A_{3,2} + A_{4,2} + A_{5,2} + A_{6,2} + A_{7,2}) + (k_2 - k_1) (B_{1,2} + B_{2,2} + B_{3,2} + B_{4,2} + B_{5,2}) \\ + (k_3 - k_1) (C_{2,2} + C_{3,2} + C_{5,2} + C_{6,2} + C_{7,2} + C_{8,2}) \quad (4.108)$$

$$L_3 = \frac{D_{1,1}}{k_1} + \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) E_{1,1} + \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) F_{2,1} \quad (4.109)$$

$$L_4 = \frac{1}{k_1} (D_{1,2} + D_{2,2} + D_{3,2} + D_{4,2} + D_{5,2} + D_{6,2} + D_{7,2}) + \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) \\ \times (E_{1,2} + E_{2,2} + E_{3,2} + E_{4,2} + E_{5,2}) + \left(\frac{1}{k_3} - \frac{1}{k_1} \right) (F_{2,2} + F_{3,2} + F_{5,2} + F_{6,2} + F_{7,2} + F_{8,2}) \quad (4.110)$$

이며 $A_{1,1}, \dots, F_{8,2}$ 는 식 (4.44) ~ (4.92)에서 정의된 계수들이다.

이상의 결과를 요약하면 식 (2.3)과 (2.4)의 제1계 클러스터 상하한치는

$$\frac{k^*}{k_1} \leq 1 + M_1 \phi_2 + M_2^U \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.111)$$

$$\frac{k^*}{k_1} \geq 1 + M_1 \phi_2 + M_2^L \phi_2^2 + O(\phi_2^3) \quad (4.112)$$

으로 상 2의 체적비 ϕ_2 에 관한 전개식으로 쓸 수 있다. 여기서, 제1차 항의 계수 M_1 은

$$M_1 = \left(\frac{k_2}{k_1} - 1 \right) + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(\frac{k_3}{k_1} - 1 \right) - \frac{Y_1}{k_1 L_1} \quad (4.113)$$

이다. 클러스터 상한치 (4.111)의 제2차 항의 계수 M_2^U 는 PCS 모델의 경우

$$M_2^U = \left[\frac{b^3}{a^3} G(1, \lambda) - \frac{b^6}{a^6} G\left(1, \frac{a}{b} \lambda\right) \right] \left(\frac{k_3}{k_1} - 1 \right) - \frac{2Y_2}{k_1 L_1} + \frac{Y_1 L_2}{k_1 L_1^2} \quad (4.114)$$

이며 PS-1 모델에서는

$$M_2^U = \left[\frac{b^3}{a^3} G(\lambda, 1) - \frac{b^6}{a^6} G\left(\lambda, \frac{a}{b}\right) \right] \left(\frac{k_3}{k_1} - 1 \right) - \frac{2Y_2}{k_1 L_1} + \frac{Y_1 L_2}{k_1 L_1^2} \quad (4.115)$$

그리고 PS-2 모델에서는

$$M_2^U = \left[\frac{b^3}{a^3} G(1, \lambda) - \frac{b^6}{a^6} G(\lambda, 1) \right] \left(\frac{k_3}{k_1} - 1 \right) - \frac{2Y_2}{k_1 L_1} + \frac{Y_1 L_2}{k_1 L_1^2} \quad (4.116)$$

으로 된다. 클러스터 하한치 (4.112)의 제2차 항의 계수 M_2^L 은 PCS 모델의 경우

$$\begin{aligned} M_2^L = & \left[\frac{b^3}{a^3} G(1, \lambda) - \frac{b^6}{a^6} G\left(1, \frac{a}{b\lambda}\right) \right] \left(1 - \frac{k_1}{k_3} \right) + \frac{2k_1 Z_2}{L_3} - \frac{k_1 Z_1 L_4}{L_3^2} \\ & + \left[\frac{k_1}{k_2} - 1 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(\frac{k_1}{k_3} - 1 \right) - \frac{k_1 Z_1}{L_3} \right]^2 \end{aligned} \quad (4.117)$$

이며 PS-1 모델에서는

$$\begin{aligned} M_2^L = & \left[\frac{b^3}{a^3} G(\lambda, 1) - \frac{b^6}{a^6} G\left(\lambda, \frac{a}{b}\right) \right] \left(1 - \frac{k_1}{k_3} \right) + \frac{2k_1 Z_2}{L_3} - \frac{k_1 Z_1 L_4}{L_3^2} \\ & + \left[\frac{k_1}{k_2} - 1 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(\frac{k_1}{k_3} - 1 \right) - \frac{k_1 Z_1}{L_3} \right]^2 \end{aligned} \quad (4.118)$$

그리고 PS-2 모델에서는

$$\begin{aligned} M_2^L = & \left[\frac{b^3}{a^3} G(\lambda, 1) - \frac{b^6}{a^6} G(\lambda, 1) \right] \left(1 - \frac{k_1}{k_3} \right) + \frac{2k_1 Z_2}{L_3} - \frac{k_1 Z_1 L_4}{L_3^2} \\ & + \left[\frac{k_1}{k_2} - 1 + \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \left(\frac{k_1}{k_3} - 1 \right) - \frac{k_1 Z_1}{L_3} \right]^2 \end{aligned} \quad (4.119)$$

으로 된다.

식 (4.94)~(4.103)의 적분들은 구조모델에 따라 그 값이 달라지며 각 모델에 따른 적분치들은 다음과 같다.

4.1 PCS 모델

4.1.1 $\frac{b}{a} < 3$ 일 경우

$$I_0(\lambda) = \begin{cases} -2\lambda^6 + \lambda^4 - 8\lambda^3, & \lambda < 1 \\ -1, & \lambda > 1 \end{cases} \quad (4.120)$$

$$I_1(\lambda) = \begin{cases} 2\lambda^6 - 9\lambda^4, & \lambda < \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a} - 1 \right) \\ \frac{9}{2} \left(\frac{b^2}{a^2} - 1 \right) \lambda^4 - 4 \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \lambda^3 + \frac{9}{8} \left(\frac{b^2}{a^2} - 1 \right)^2 \lambda^2 - \frac{1}{32} \left(\frac{b}{a} - 1 \right)^4 \left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1 \right), & \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a} - 1 \right) < \lambda < 1 \\ -2\lambda^6 + \frac{9}{2} \left(\frac{b^2}{a^2} + 1 \right) \lambda^4 - 4 \left(\frac{b^3}{a^3} + 1 \right) \lambda^3 + \frac{9}{8} \left(\frac{b^2}{a^2} - 1 \right)^2 \lambda^2 - \frac{1}{32} \left(\frac{b}{a} - 1 \right) \left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1 \right) + 1, & 1 < \lambda < \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a} + 1 \right) \\ -\frac{b^3}{a^3} + 1, & \lambda > \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a} + 1 \right) \end{cases} \quad (4.121)$$

$$\begin{cases} -4\lambda^6 + 9 \left(\frac{b^2}{a^2} + 1 \right) \lambda^4 - 8 \left(\frac{b^3}{a^3} - 1 \right) \lambda^3, & \lambda < \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a} - 1 \right) \\ -\frac{9}{4} \left(\frac{b^2}{a^2} - 1 \right)^2 \lambda^4 + \frac{1}{16} \left(\frac{b}{a} - 1 \right)^4 \left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1 \right), & \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a} - 1 \right) < \lambda < 1 \end{cases}$$

$$I_2(\lambda) = \begin{cases} 2\lambda^6 - 9\lambda^4 + 8\lambda^3 - \frac{9}{4}\left(\frac{b^2}{a^2} - 1\right)^2\lambda^2 + \frac{1}{16}\left(\frac{b}{a} - 1\right)\left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1\right) - 1, & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ -2\lambda^6 + \frac{9b^2}{a^2}\lambda^4 - \frac{8b^3}{a^3}\lambda^3 + \frac{2b^3}{a^3} - 1, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) < \lambda < \frac{b}{a} \\ -\left(\frac{b^3}{a^3} - 1\right)^2, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.122)$$

$$I_3(\lambda) = \begin{cases} -4\left(1 + \frac{a^6}{b^6}\right)\lambda^6 + 18\left(1 + \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^4 - 16\left(1 - \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^3, & \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ -4\left(1 - \frac{2a^3}{b^3} + \frac{a^6}{b^6}\right)\lambda^6 + 18\left(1 - \frac{a}{b} - \frac{a^3}{b^3} + \frac{a^4}{a^4}\right)^2\lambda^4 - \frac{9}{2}\left(\frac{b}{a} - \frac{2a}{b} + \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^2 \\ \quad + 2 + \frac{1}{8}\left(\frac{b^3}{a^3} + \frac{a^3}{b^3}\right) - \frac{9}{8}\left(\frac{b}{a} + \frac{a}{b}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) < \lambda < 1 \\ 4\left(\frac{2a^3}{b^3} - \frac{a^6}{b^6}\right)\lambda^6 - 18\left(\frac{a}{b} + \frac{a^3}{b^3} - \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^4 + 16\lambda^3 - \frac{9}{2}\left(\frac{b}{a} - \frac{2a}{b} + \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^2 \\ \quad + \frac{1}{8}\left(\frac{b^3}{a^3} + \frac{a^3}{b^6}\right) - \frac{9}{8}\left(\frac{b}{a} + \frac{a}{b}\right), & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ -\frac{4a^6}{b^6}\lambda^6 + \frac{18a^4}{b^4}\lambda^4 - \frac{16a^3}{b^3}\lambda^3 + 2, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) < \lambda < \frac{b}{a} \\ 0, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.123)$$

$$I_4(\lambda) = \begin{cases} \frac{4a^6}{b^6}\lambda^6 - \frac{18a^4}{b^4}\lambda^4, & \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ -4\left(\frac{a^3}{b^3} - \frac{a^6}{b^6}\right)\lambda^6 + 18\left(\frac{a}{b} + \frac{a^3}{b^3} - \frac{2a^4}{b^4}\right)\lambda^4 - 8\left(1 - \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^3 + \frac{9}{4}\left(\frac{b}{a} - \frac{2a}{b} + \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^2 - 1 \\ \quad - \frac{1}{16}\left(\frac{b^3}{a^3} + \frac{a^3}{b^3}\right) + \frac{9}{16}\left(\frac{b}{a} + \frac{a}{b}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ \frac{4a^6}{b^6}\lambda^6 - \frac{18a^4}{b^4}\lambda^4 + \frac{16a^3}{b^3}\lambda^3 - 2, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) < \lambda < \frac{b}{a} \\ 0, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.124)$$

$$I_5(\lambda) = \begin{cases} -2\left(\frac{2a^6}{b^6}\lambda^6 - \frac{9a^4}{b^4}\lambda^4 + \frac{8a^3}{b^3}\lambda^3\right), & 0 < \lambda < \frac{b}{a} \\ -2, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.125)$$

$$I_6(\lambda) = \begin{cases} -2\lambda^6 + 9\lambda^4, & \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ -\frac{9}{2}\left(\frac{b^2}{a^2} - 1\right)\lambda^4 + 4\left(\frac{b^3}{a^3} - 1\right)\lambda^3 - \frac{9}{8}\left(\frac{b^2}{a^2} - 1\right)^2\lambda^2 + \frac{1}{32}\left(\frac{b}{a} - 1\right)\left(\frac{b^2}{a^2} + 4\frac{b}{a} + 1\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) < \lambda < 1 \\ 2\lambda^6 - \frac{9}{2}\left(\frac{b^2}{a^2} + 1\right)\lambda^4 + 4\left(\frac{b^3}{a^3} + 1\right)\lambda^3 - \frac{9}{8}\left(\frac{b^2}{a^2} - 1\right)^2\lambda^2 + \frac{1}{32}\left(\frac{b}{a} - 1\right)\left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1\right) - 1, & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ \frac{b^3}{a^3} - 1, & \lambda > \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \end{cases} \quad (4.126)$$

$$I_7(\lambda) = \begin{cases} -\frac{9}{4}\lambda^4 + 4\lambda^3 - \frac{9}{8}\lambda^2 - \frac{3}{16(2\lambda+1)} + \frac{3}{16(2\lambda+1)^2} + \frac{3}{16}\ln(2\lambda+1), & \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) \\ -\frac{9}{4}\left(1-\frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^4 + 4\left(1-\frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^3 - \frac{9}{8}\left(1-\frac{a^2}{b^2}\right)\lambda^2 - \frac{1}{64}\left(13-\frac{36a^2}{b^2} + \frac{32a^3}{b^3} - \frac{9a^4}{b^4}\right) \\ \quad + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{b}{a}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) < \lambda < 1 \\ \frac{9a^4}{4b^4}\lambda^4 - \frac{4a^3}{b^3}\lambda^3 + \frac{9}{8}\left(\frac{2a^2}{b^2} - \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^2 + \frac{1}{64}\left(51 + \frac{36a^2}{b^2} - \frac{32a^3}{b^3} + \frac{9a^4}{b^4}\right) \\ \quad - \frac{3}{16(2\lambda-1)} - \frac{3}{16(2\lambda-1)^2} + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{b}{a(2\lambda+1)}\right), & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \\ 1 - \frac{a^3}{b^3}, & \lambda > \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \end{cases} \quad (4.127)$$

$$I_8(\lambda) = \begin{cases} 0, & \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) \\ -\frac{9a^4}{4b^4}\lambda^4 + \frac{4a^3}{b^3}\lambda^3 - \frac{9}{8}\left(\frac{2a^2}{b^2} - \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^2 + \frac{1}{64}\left(13 - \frac{36a^2}{b^2} + \frac{32a^3}{b^3} - \frac{9a^4}{b^4}\right) \\ \quad - \frac{3}{16(2\lambda+1)} + \frac{3}{16(2\lambda+1)^2} + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{a(2\lambda+1)}{b}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \\ \frac{a^3}{b^3} - \frac{3}{16(2\lambda+1)} - \frac{3}{16(2\lambda-1)} + \frac{3}{16(2\lambda+1)^2} - \frac{3}{16(2\lambda-1)^2} \\ \quad + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2\lambda+1}{2\lambda-1}\right), & \lambda > \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \end{cases} \quad (4.128)$$

$$I_9(\lambda) = \begin{cases} -\frac{9a^4}{4b^4}\lambda^4 + \frac{4a^3}{b^3}\lambda^3 - \frac{9a^2}{8b^2}\lambda^2 - \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)} + \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)^2} \\ \quad + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2a\lambda}{b}+1\right), & 0 < \lambda < \frac{b}{a} \\ 1 - \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)} - \frac{3}{16(2a\lambda/b-1)} + \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)^2} - \frac{3}{16(2a\lambda/b-1)^2} \\ \quad + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2a\lambda/b+1}{2a\lambda/b-1}\right), & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.129)$$

4.1.2 $\frac{b}{a} > 3$ 일 경우

$$I_0(\lambda) = \begin{cases} -2\lambda^6 + \lambda^4 - 8\lambda^3, & \lambda < 1 \\ -1, & \lambda > 1 \end{cases} \quad (4.130)$$

$$I_1(\lambda) = \begin{cases} 2\lambda^6 - 9\lambda^4, & \lambda < 1 \\ -8\lambda^3 + 1, & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) \\ -2\lambda^6 + \frac{9}{2}\left(\frac{b^2}{a^2}+1\right)\lambda^4 - 4\left(\frac{b^3}{a^3}+1\right)\lambda^3 + \frac{9}{8}\left(\frac{b^2}{a^2}-1\right)^2\lambda^2 - \frac{1}{32}\left(\frac{b}{a}-1\right) \\ \quad \times \left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1\right) + 1, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \\ -\frac{b^3}{a^3} + 1, & \lambda > \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \end{cases} \quad (4.131)$$

$$I_2(\lambda) = \begin{cases} -4\lambda^6 + 9\left(\frac{b^2}{a^2} + 1\right)\lambda^4 - 8\left(\frac{b^3}{a^3} - 1\right)\lambda^3, & \lambda < 1 \\ -2\lambda^6 - \frac{9b^2}{a^2}\lambda^4 - 8\left(\frac{b^3}{a^3} - 2\right)\lambda^3 - 1, & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ 2\lambda^6 - 9\lambda^4 + 8\lambda^3 - \frac{9}{4}\left(\frac{b^2}{a^2} - 1\right)^2\lambda^2 + \frac{1}{16}\left(\frac{b}{a} - 1\right)\left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1\right) - 1, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ -2\lambda^6 + \frac{9b^2}{a^2}\lambda^4 - \frac{8b^3}{a^3}\lambda^3 + \frac{2b^3}{a^3} - 1, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) < \lambda < \frac{b}{a} \\ -\left(\frac{b^3}{a^3} - 1\right)^2, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.132)$$

$$I_3(\lambda) = \begin{cases} -4\left(1 + \frac{a^6}{b^6}\right)\lambda^6 + 18\left(1 + \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^4 - 16\left(1 - \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^3, & \lambda < 1 \\ -\frac{4a^6}{b^6}\lambda^6 + \frac{18a^4}{b^4}\lambda^4 + \frac{16a^3}{b^3}\lambda^3 - 2, & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ 4\left(\frac{2a^3}{b^3} - \frac{a^6}{b^6}\right)\lambda^6 - 18\left(\frac{a}{b} + \frac{a^3}{b^3} - \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^4 + 16\lambda^3 - \frac{9}{2}\left(\frac{b}{a} - \frac{2a}{b} + \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^2 \\ + \frac{1}{8}\left(\frac{b^3}{a^3} + \frac{a^3}{b^6}\right) - \frac{9}{8}\left(\frac{b}{a} + \frac{a}{b}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ -\frac{4a^6}{b^6}\lambda^6 + \frac{18a^4}{b^4}\lambda^4 - \frac{16a^3}{b^3}\lambda^3 + 2, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) < \lambda < \frac{b}{a} \\ 0, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.133)$$

$$I_4(\lambda) = \begin{cases} \frac{4a^6}{b^6}\lambda^6 - \frac{18a^4}{b^4}\lambda^4, & \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ -4\left(\frac{a^3}{b^3} - \frac{a^6}{b^6}\right)\lambda^6 + 18\left(\frac{a}{b} + \frac{a^3}{b^3} - \frac{2a^4}{b^4}\right)\lambda^4 - 8\left(1 - \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^3 \\ + \frac{9}{4}\left(\frac{b}{a} - \frac{2a}{b} + \frac{a^3}{b^3}\right)\lambda^2 - 1 - \frac{1}{16}\left(\frac{b^3}{a^3} + \frac{a^3}{b^3}\right) + \frac{9}{16}\left(\frac{b}{a} + \frac{a}{b}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ \frac{4a^6}{b^6}\lambda^6 - \frac{18a^4}{b^4}\lambda^4 + \frac{16a^3}{b^3}\lambda^3 - 2, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) < \lambda < \frac{b}{a} \\ 0, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.134)$$

$$I_5(\lambda) = \begin{cases} -2\left(\frac{2a^6}{b^6}\lambda^6 - \frac{9a^4}{b^4}\lambda^4 + \frac{8a^3}{b^3}\lambda^3\right), & 0 < \lambda < \frac{b}{a} \\ -2, & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.135)$$

$$I_6(\lambda) = \begin{cases} -2\lambda^6 + 9\lambda^4, & \lambda < 1 \\ 8\lambda^3 - 1, & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ 2\lambda^6 - \frac{9}{2}\left(\frac{b^2}{a^2} + 1\right)\lambda^4 + 4\left(\frac{b^3}{a^3} + 1\right)\lambda^3 - \frac{9}{8}\left(\frac{b^2}{a^2} - 1\right)^2\lambda^2 + \frac{1}{32}\left(\frac{b}{a} - 1\right) \\ \times \left(\frac{b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 1\right) - 1, & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} - 1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \\ \frac{b^3}{a^3} - 1, & \lambda > \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a} + 1\right) \end{cases} \quad (4.136)$$

$$I_7(\lambda) = \begin{cases} -\frac{9}{4}\lambda^4 + 4\lambda^3 - \frac{9}{8}\lambda^2 - \frac{3}{16(2\lambda+1)} + \frac{3}{16(2\lambda+1)^2} + \frac{3}{16}\ln(2\lambda+1), & \lambda < 1 \\ 1 - \frac{3}{16(2\lambda+1)} - \frac{3}{16(2\lambda-1)} + \frac{3}{16(2\lambda+1)^2} - \frac{3}{16(2\lambda-1)^2} \\ \quad + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2\lambda+1}{2\lambda-1}\right), & 1 < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) \\ \frac{9a^4}{4b^4}\lambda^4 - \frac{4a^3}{b^3}\lambda^3 + \frac{9}{8}\left(\frac{2a^2}{b^2} - \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^2 + \frac{1}{64}\left(51 + \frac{36a^2}{b^2} - \frac{32a^3}{b^3} + \frac{9a^4}{b^4}\right) \\ \quad - \frac{3}{16(2\lambda-1)} - \frac{3}{16(2\lambda-1)^2} + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{b}{a(2\lambda+1)}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \\ 1 - \frac{a^3}{b^3}, & \lambda > \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \end{cases} \quad (4.137)$$

$$I_8(\lambda) = \begin{cases} 0, & \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) \\ -\frac{9a^4}{4b^4}\lambda^4 + \frac{4a^3}{b^3}\lambda^3 - \frac{9}{8}\left(\frac{2a^2}{b^2} - \frac{a^4}{b^4}\right)\lambda^2 + \frac{1}{64}\left(13 - \frac{36a^2}{b^2} + \frac{32a^3}{b^3} - \frac{9a^4}{b^4}\right) \\ \quad - \frac{3}{16(2\lambda+1)} + \frac{3}{16(2\lambda+1)^2} + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{a(2\lambda+1)}{b}\right), & \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}-1\right) < \lambda < \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \\ \frac{a^3}{b^3} - \frac{3}{16(2\lambda+1)} - \frac{3}{16(2\lambda-1)} + \frac{3}{16(2\lambda+1)^2} - \frac{3}{16(2\lambda-1)^2} + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2\lambda+1}{2\lambda-1}\right), & \lambda > \frac{1}{2}\left(\frac{b}{a}+1\right) \end{cases} \quad (4.138)$$

$$I_9(\lambda) = \begin{cases} -\frac{9a^4}{4b^4}\lambda^4 + \frac{4a^3}{b^3}\lambda^3 - \frac{9a^2}{8b^2}\lambda^2 - \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)} + \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)^2} \\ \quad + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2a\lambda}{b}+1\right), & 0 < \lambda < \frac{b}{a} \\ 1 - \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)} - \frac{3}{16(2a\lambda/b-1)} + \frac{3}{16(2a\lambda/b+1)^2} - \frac{3}{16(2a\lambda/b-1)^2} \\ \quad + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2a\lambda/b+1}{2a\lambda/b-1}\right), & \lambda > \frac{b}{a} \end{cases} \quad (4.139)$$

4.2 PS-I 모델

$$+ \frac{288a^4}{b^4} - \frac{64a^6}{b^6} \quad (4.144)$$

4.2.1 $\frac{b}{a} < 3$ 일 경우

$$I_0(\lambda) = -\lambda \quad (4.140)$$

$$I_1(\lambda) = -\frac{\lambda}{32}\left(\frac{b^6}{a^6} - \frac{45b^4}{a^4} + \frac{144b^3}{a^3} - \frac{81b^2}{a^2} - 19\right) \quad (4.141)$$

$$I_2(\lambda) = \frac{\lambda}{16}\left(\frac{b^6}{a^6} - \frac{45b^4}{a^4} + \frac{16b^3}{a^3} + \frac{63b^2}{a^2} - 35\right) \quad (4.142)$$

$$I_3(\lambda) = \frac{\lambda}{8}\left(\frac{b^3}{a^3} - \frac{45b}{a} + 128 - \frac{81a}{b} - \frac{115a^3}{b^3} + \frac{144a^4}{b^4} - \frac{32a^6}{b^6}\right) \quad (4.143)$$

$$I_4(\lambda) = -\frac{\lambda}{16}\left(\frac{b^3}{a^3} - \frac{45b}{a} + 144 - \frac{81a}{b} - \frac{243a^3}{b^3}\right)$$

$$I_5(\lambda) = -2\lambda\left(\frac{8a^3}{b^3} - \frac{9a^4}{b^4} + \frac{2a^6}{b^6}\right) \quad (4.145)$$

$$I_6(\lambda) = \frac{\lambda}{32}\left(\frac{b^6}{a^6} - \frac{45b^4}{a^4} + \frac{144b^3}{a^3} - \frac{81b^2}{a^2} - 19\right) \quad (4.146)$$

$$I_7(\lambda) = \frac{\lambda}{64}\left[27 + \frac{180a^2}{b^2} - \frac{288a^3}{b^3} + \frac{81a^4}{b^4} + 12\ln\left(\frac{b}{a}\right)\right] \quad (4.147)$$

$$I_8(\lambda) = \frac{\lambda}{192}\left[31 - \frac{540a^2}{b^2} + \frac{864a^3}{b^3} - \frac{243a^4}{b^4} - 36\ln\left(\frac{b}{3a}\right)\right] \quad (4.148)$$

$$I_9(\lambda) = \frac{\lambda}{16}\left[-\frac{18a^2}{b^2} + \frac{64a^3}{b^3} - \frac{36a^4}{b^4} - \frac{3b}{2a+b}\right]$$

$$+ \frac{3b^2}{(2a+b)^2} + 3\ln\left(\frac{2a+b}{b}\right)] \quad (4.149)$$

4.2.2 $\frac{b}{a} > 3$ 일 경우

$$I_0(\lambda) = -\lambda \quad (4.150)$$

$$I_1(\lambda) = -7\lambda \quad (4.151)$$

$$I_2(\lambda) = -\lambda\left(\frac{8b^3}{a^3} - \frac{9b^2}{a^2} - 13\right) \quad (4.152)$$

$$I_3(\lambda) = 2\lambda\left(-1 + \frac{8a^3}{b^3} + \frac{9a^4}{b^4} - \frac{2a^6}{b^6}\right) \quad (4.153)$$

$$I_4(\lambda) = -2\lambda\left(\frac{9a^4}{b^4} - \frac{2a^6}{b^6}\right) \quad (4.154)$$

$$I_5(\lambda) = -2\lambda\left(\frac{8a^3}{b^3} - \frac{9a^4}{b^4} + \frac{2a^6}{b^6}\right) \quad (4.155)$$

$$I_6(\lambda) = 7\lambda \quad (4.156)$$

$$I_7(\lambda) = \frac{\lambda}{48}(27 + 9\ln 3) \quad (4.157)$$

$$I_8(\lambda) = 0 \quad (4.158)$$

$$I_8(\lambda) = \lambda\left[\frac{3a^2}{16(2b+a)^2} - \frac{3a^2}{16(2b-a)^2} - \frac{3a}{16(2b+a)} - \frac{3a}{16(2b-a)} + \frac{a^3}{b^3} + \frac{3}{16}\ln\left(\frac{2b+a}{2b-a}\right)\right] \quad (4.168)$$

$$I_9(\lambda) = \frac{\lambda}{48}(28 + 9\ln 3) \quad (4.169)$$

5. 클러스터 한계의 계산에

식 (4.111)과 (4.112)에서 클러스터 상하한치의 밀도전개식의 제2차 계수의 상하한치 M_2^U 와 M_2^L 을 전술한 PCS, PS-1, PS-2 구조모델들에서 $b/a=2$ 와 $b/a=1.1$ 의 값과 극단적인 상전도율비의 값에 대하여 계산한 예를 Fig. 5~Fig. 8에 나타낸다. 흥미있는 경우는 전도율이 크게 상이한 소재들이 섞여 있는 복합재의 경우일 것이다. 따라서 Fig. 5에 $b/a=2$, $k_2/k_1=0.0001$, $k_3/k_1=10000$ 인 경우의 M_2^U 와 M_2^L 을 도시하였다. $b/a=2$, $k_2/k_1=0.0001$, $k_3/k_1=10000$ 의 변수는 비전도성 물질을 같은 두께의 초전도성 물질로 피복시켰을 경우를 모델링하기 위한 것이다. 그림에서 x 좌표축은 편의상 λ 대신 λ^* 의 값을 택하였다. λ^* 는 PS-1, PS-2 모델에서는 λ 를, PCS 모델에서는 $\lambda a/b$ 를 나타내며 λ 가 취할 수 있는 값의 범위가 PS-1, PS-2 모델에서는 $0 \leq \lambda \leq 1$ 이고 PCS 모델에서는 $0 \leq \lambda \leq b/a$ 인 것에 비해 λ^* 는 각 모델에서 모두 $0 \leq \lambda^* \leq 1$ 의 범위를 갖는다. $\lambda=0$ 일 때는 PCS, PS-1, PS-2 모델에서 모두 같은 M_2^U 와 M_2^L 의 값을 가지며 이것은 $\lambda=0$ 일 때 복합구가 완전 중첩가능구(fully penetrable

$$I_9(\lambda) = \frac{\lambda}{16}\left[-\frac{18a^2}{b^2} + \frac{64a^3}{b^3} - \frac{36a^4}{b^4} - \frac{3b}{2a+b} + \frac{3b^2}{(2a+b)^2} + 3\ln\left(\frac{2a+b}{b}\right)\right] \quad (4.159)$$

4.3 PS-2 모델

$$I_0(\lambda) = -\lambda \quad (4.160)$$

$$I_1(\lambda) = -\lambda\left(\frac{b^3}{a^3} - 1\right) \quad (4.161)$$

$$I_2(\lambda) = -\lambda\left(\frac{b^3}{a^3} - 1\right)^2 \quad (4.162)$$

$$I_3(\lambda) = 0 \quad (4.163)$$

$$I_4(\lambda) = 0 \quad (4.164)$$

$$I_5(\lambda) = -2\lambda \quad (4.165)$$

$$I_6(\lambda) = \lambda\left(\frac{b^3}{a^3} - 1\right) \quad (4.166)$$

$$I_7(\lambda) = \lambda\left(1 - \frac{a^3}{b^3}\right) \quad (4.167)$$

sphere)가 되어 모델간에 차이가 없어지기 때문이다. PCS 모델과 PS-2 모델에서 $\lambda^*=1$ 일 때, 즉 PCS 모델에서는 $\lambda=b/a=2$ 이고, PS-2 모델에서는 $\lambda=1$ 일 때 M_2^U 와 M_2^L 의 값이 두 모델에서 일치하는 것은 반경 b 의 복합구가 중첩이 불가능한 강구(hard sphere)가 되어 PCS 모델과 PS-2 모델간의 차이가 없어지기 때문이다. $\lambda^*=0.5$ 일 때 PCS 모델($\lambda=0.5b/a=1$)과 $\lambda^*=1$ 일 때의 PS-1 모델($\lambda=1$)에서의 M_2^U 와 M_2^L 의 값이 서로 같아지는 것을 관찰할 수 있는 것도 마찬가지로 이유로 이 때 반경 a 의 내측구(inner sphere)가 완전 중첩가능한 두께 $b-a$ 의 외피내에 위치한 구조를 갖기 때문이다. 또 Fig. 5에는 $b/a=1$, $k_2/k_1=0.0001$ 인 2상 복합소재의 PCS, PS-1, PS-2 모델에서의 M_2^U 와 M_2^L 을 점선으로 도시하였다. ($b/a=1$ 인 2상 소재의 경우, k_3/k_1 의 값은 아무 의미가 없어진다.) 그림의 척도상 여섯 개의 곡선은 $y=0$ 근처에서 모두 겹쳐서 한 개의 직선처럼 보인다. Fig. 6은 $b/a=2$, $k_2/k_1=10000$, $k_3/k_1=0.0001$ 인 경우의 M_2^U 와 M_2^L 을 도시한 것으로서 Fig. 5에서와는 반대로 초전도성 물질을 같은 두께의 비전도성 물질로 피복시켰을 경우를 모델링한다. PCS, PS-1, PS-2 모델이 $\lambda=0$ 일 때 일치하며 $\lambda^*=1$ 일 때 PCS 모델($\lambda=b/a=2$)과 PS-2 모델($\lambda=1$)에서의 M_2^U 와 M_2^L 의 값이, λ^*

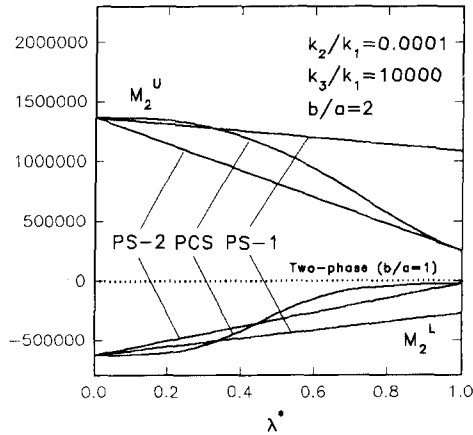


Fig. 5 Upper bounds M_2^U and lower bounds M_2^L in the equations (4.111), (4.112) as functions of the connectivity parameter λ^* for three different PCS, PS-1, PS-2 models of three-phase (solid lines) and two-phase (dotted lines) composites. Here $b/a=2$, $k_2/k_1=0.0001$, $k_3/k_1=10000$ for three-phase and $b/a=1$, $k_2/k_1=0.0001$ for two-phase composites, respectively. In the figure's scale, M_2^U and M_2^L of PCS, PS-1 and PS-2 models of two-phase composite appear to coalesce to a line around $y=0$

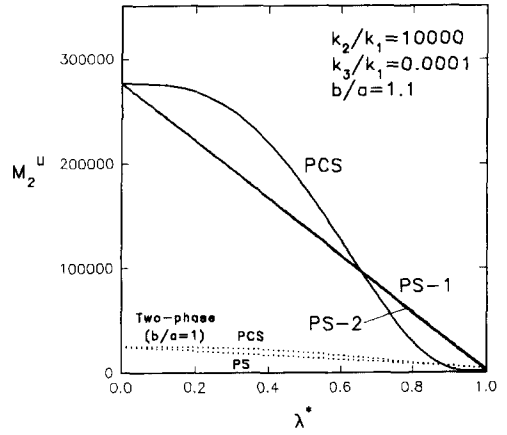


Fig. 7 Upper bounds M_2^U in the equation (4.111) as functions of the connectivity parameter λ^* for three different PCS, PS-1, PS-2 models of three-phase (solid lines) and two-phase (dotted lines) composites. Here $b/a=1.1$, $k_2/k_1=10000$, $k_3/k_1=0.0001$ for three-phase and $b/a=1$, $k_2/k_1=10000$, for two-phase composites, respectively. In the figure, M_2^U of PS-1, PS-2 models of two-phase composite coalesce to a curve

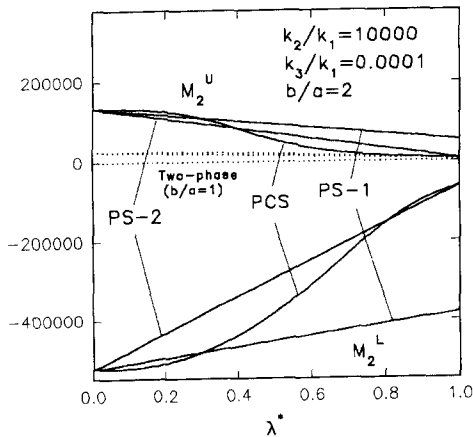


Fig. 6 Upper bounds M_2^U and lower bounds M_2^L in the equations (4.111), (4.112) as functions of the connectivity parameter λ^* for three different PCS, PS-1, PS-2 models of three-phase (solid lines) and two-phase (dotted lines) composites. Here $b/a=2$, $k_2/k_1=10000$, $k_3/k_1=0.0001$ for three-phase and $b/a=1$, $k_2/k_1=10000$ for two-phase composites, respectively. In the figure's scale, M_2^U and M_2^L of PCS, PS-1 and PS-2 models of two-phase composite appear to coalesce to two curves

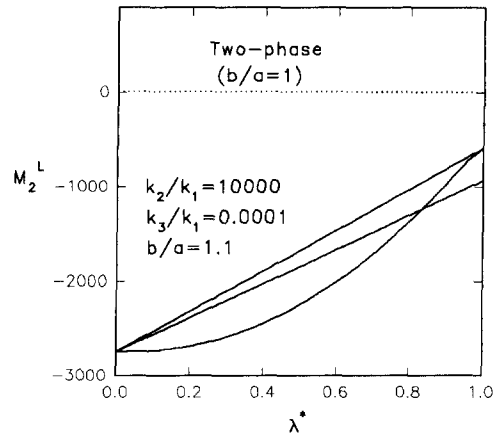


Fig. 8 Lower bounds M_2^L in the equation (4.112) as functions of the connectivity parameter λ^* for three different PCS, PS-1, PS-2 models of three-phase (solid lines) and two-phase (dotted lines) composites. Here $b/a=1.1$, $k_2/k_1=10000$, $k_3/k_1=0.0001$ for three-phase and $b/a=1$, $k_2/k_1=10000$ for two-phase composites, respectively. In the figure's scale, M_2^L of PCS, PS-1 and PS-2 models of two-phase composite appear to coalesce to a line around $y=0$

$=0.5$ 일 때 PCS 모델($\lambda=0.5b/a=1$)과 PS-1 모델($\lambda=1$)에서의 M_2^U 와 M_2^L 의 값이 일치하는 현상을 역시 확인할 수 있다. Fig. 6은 또 $b/a=1$, $k_2/k_1=10000$ 인 2상 복합소재의 PCS, PS-1, PS-2 모델에서의 M_2^U 와 M_2^L 를 점선으로 도시한다. 2상 복합소재의 경우, k_3/k_1 의 값은 아무 의미가 없으며, 그림의 척도상 PCS, PS-1, PS-2 모델에서의 차이가 거의 없어지며, 따라서 여섯 개의 곡선은 겹쳐져서 한 개의 상한치 곡선과 또 한 개의 하한치 곡선처럼 보인다. Fig. 5, Fig. 6 모두 λ 가 커짐에 따라 PCS 모델에서는 곡선적으로, PS-1, PS-2 모델에서는 선형적으로 변화하는 것을 확인할 수 있으며 이것은 Torquato의 2상 시스템에서도 확인된 현상이다.⁽⁷⁾ Fig. 7과 Fig. 8은 $b/a=1.1$, $k_2/k_1=10000$, $k_3/k_1=0.0001$ 인 3상 복합소재(실선)와 $b/a=1$, $k_2/k_1=10000$ 인 2상 복합소재(점선)의 M_2^U 와 M_2^L 의 계산결과로서 초전도성 구를 얇은 두께의 비전도성 물질로 피복시킨 경우를 모델링한 것이다. 복합재료의 유효전도율을 높이기 위해 전도율이 높은 물질을 투입시켰으나 소재간 접촉의 불완전성에 의해 유효전도율이 저하되는 경우에 해당된다 하겠다. Fig. 5, Fig. 6에서처럼 PS-1, PS-2 모델에서 상하한치의 λ 에 따른 선형적 변화와 $\lambda^*=0$ 에서 PS-1 모델, PS-2 모델, PCS 모델이 일치하는 현상, $\lambda^*=1$ 에서 PS-1 모델, PS-2 모델($\lambda=1$)과 PCS 모델($\lambda=b/a=1.1$)이 일치하는 현상, 그리고 $\lambda=1$ 에서 PS-1 모델($\lambda^*=1$)과 PCS 모델($\lambda^*=\lambda a/b=1/1.1$)이 일치하는 현상 등을 확인할 수 있다.

6. 결 론

복합재료의 유효물성과 소재의 미시구조와의 상관관계를 밝히는 문제는 이 문제를 해결하려는 연구개발의 오랜 역사가 응변하듯이 응용과학 분야의 오랜 숙원의 대상이다. 이 상관관계를 밝히기 위해 미시구조를 수학적으로 정량화하여 정량화된 변수에 따른 유효물성치의 변화를 구하는 것은 표준화된 방법론이다. 그러나 임의의 미시구조를 수학적으로 정확하게 정의하기 위해서는 무한한 갯수의 통계학적 상관함수들이 결정되어야 하며 이것은 몇 가지 특수한 미시구조의 예를 제외하면 원천적으로 불가능한 일이다. 따라서 구조에 대한 제한된 소량의 수학적 정보로부터 유효물성치를 결정하기 위해

서는 유효물성치의 상하한치를 예측하는 것이 적합하다.

본 연구에서는 기왕에 개발되어 연구개발성과가 많았던 기재와 구형소재로 이루어진 2상 복합소재 구조모델을 소재간 접촉의 불완전성이나 구형 소재의 표면처리 등의 효과를 포함할 수 있도록 현실적 응용성이 높게 확장시킨 3상 복합소재를 대상으로 복합소재의 구성에 따른 여러 변수와 구형 소재의 연결도를 나타내는 변수인 비중복성계수 λ 에 따른 복합소재의 유효전도율 k^* 의 수학적으로 엄격한 상하한치를 변분원리를 적용하여 유도하였고 여러 변수 중에서도 특히 λ 에 따른 k^* 의 변화를 중점적으로 살펴보았다.

각 모델 공히 비중복성계수 λ 의 값이 커짐에 따라 M_2^U 와 M_2^L 의 값 사이의 폭이 줄어드는 현상을 보였으며 이것은 λ 의 값이 커질수록 같은 상별 체적비에서 복합구의 위치를 결정하기 위한 제한조건이 늘어나므로 그만큼 복합구 내 구성구조의 자유도가 감소하기 때문에 유효전도율 k^* 의 값이 취할 수 있는 값의 범위가 그만큼 줄어들었기 때문으로 생각할 수 있다.

마찬가지로 PS-1 모델이 PS-2 모델에 비해 $\lambda > 0$ 의 범위에서 중복허용범위가 더 넓으며(Fig. 3 참조) 그 결과 M_2^U 와 M_2^L 사이의 폭이 PS-1 모델에서 항상 더 큰 것을 보아도 알 수 있다.

후 기

본 연구는 93년도 한국과학재단 핵심전문 연구비 지원(과제번호 931-1000-025-1)에 의한 결과이며, 관계자 여러분께 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Maxwell, J. C., 1873, *Electricity and Magnetism*, 1st ed., Clarendon Press, Oxford.
- (2) Lord Raleigh, 1892, "On the Influence of Obstacles Arranged in Rectangular Order Upon the Properties of a Medium," *Philosophical Magazine*, Vol. 34, pp. 481~502.
- (3) Gurland, J., 1966, "An Estimate of Contact and Continuity of Dispersion in Opaque Samples," *Trans. Metall. Soc. AIME*, Vol. 236, pp. 642~646.
- (4) Essam, J. W., 1972, *Phase Transitions and*

- Critical Phenomena*, Edited by Domb, C. and Green, M. S., Vol. 2, Academic Press, New York, pp. 197~270.
- (5) Carmen, P. C., 1956, *The Flow of Gases Through Porous Media*, Academic Press, New York.
- (6) Torquato, S., 1985, "Electrical Conductivity of Two-Phase Disordered Composite Media," *Journal of Applied Physics*, Vol. 58, pp. 3790~3797.
- (7) Torquato, S., 1986, "Bulk Properties of Two-Phase Disordered Media. III. New Bounds on the Effective Conductivity of Dispersions of Penetrable Spheres." *Journal of Chemical Physics*, Vol. 84, pp. 6345~6359.
- (8) Weissberg, H. L. and Prager, S., 1970, "Viscous Flow Through Porous Media. III. Upper Bounds on the Permeability for a Simple Random Geometry," *Physics of Fluids*, Vol. 13, pp. 2958~2965.
- (9) Torquato, S., 1984, "Bulk Properties of Two-Phase Disordered Media. I. Cluster Expansion for the Effective Dielectric Constant of Dispersions of Penetrable Spheres," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 81, pp. 5079~5088.