



Title	パーコレーション・クラスターにおける振動スペクトル : Alexander-Orbachの予測
Author(s)	矢久保, 考介; Yakubo, Kousuke; 高杉, 恒一 他
Citation	北海道大學工學部研究報告, 137, 83-92
Issue Date	1987-10-31
Doc URL	<a href="https://hdl.handle.net/2115/42053">https://hdl.handle.net/2115/42053</a>
Type	departmental bulletin paper
File Information	137_83-92.pdf



パーコレーション・クラスターにおける振動スペクトル  
—Alexander-Orbach の予測—

矢久保考介 高杉 恒一 田中 哲\*)  
中山 恒義

(昭和 62 年 6 月 30 日受理)

**Vibrational Spectra of Percolation Clusters**  
—Alexander-Orbach Conjecture—

Kousuke YAKUBO, Kouichi TAKASUGI, Satoshi TANAKA  
and Tsuneyoshi NAKAYAMA

(Received June 30, 1987)

**Abstract**

We study numerically the dynamical properties of percolation clusters with fractal dimensions as the simplest model for amorphous solids or porous media. It is found, using a novel numerical technique suitable for the present problem, that the fracton density of states  $g(\omega)$  is proportional to  $\omega^{1/3}$  as conjectured by Alexander and Orbach. The mode patterns of fractons are obtained for the first time, and it is shown that fracton excitations are localized in some "peninsulas" in the percolation cluster.

**1. 序 論**

近年、ランダム系の物理現象を統一的に理解するために、フラクタルという概念が注目されている。これは、自己相似性を有する空間的構造や時間発展的現象などに適用される総称的概念である<sup>1)</sup>。フラクタル構造をもつ対象の一つであるパーコレーション・クラスターは、アモルファス材料や絡みあった高分子鎖あるいはセラミックのような多孔媒質等の、トポロジカルに乱れた構造に対する最も基本的なモデルである<sup>2,3)</sup>。このような系の物性研究は、理学、工学の両面から高い関心を集めている。なかでも、振動スペクトル (状態密度 Density of States) の研究は、系の動的性質等を決定する上で、極めて重要である。例えばアモルファス材料の熱伝導度  $\kappa$  が素材によらず、10 K 近くで温度に対しプラトーを示すことが昔から知られている。このプラトーの物理的要因とトポロジカルな乱れとの関連が最近指摘されるようになってきた。振動スペクトルに関する知見はまた、系がトポロジカルに乱れたときの超伝導転移温度  $T_c$  の変化、というような実用上重要な問題に対しても基本的な役割を果たす。

パーコレーション・クラスターの振動スペクトルをフラクタルという考え方をを用いて初めて論じたのは、Alexander と Orbach<sup>4)</sup> である。彼等は、パーコレーション・クラスターの状態密度が、ある振動数領域でそのユークリッド次元  $d$  によらず、角振動数  $\omega$  の  $1/3$  乗に比例すると予測した。

このパーコレーション・クラスターに特有な振動モードは、「フラクトン」と呼ばれている。またこの系は、フラクトンが励起されるよりもはるかに低い振動数領域において、通常のフォノンに対するデバイ型の状態密度に従う。すなわち  $\omega^{d-1}$  に比例する。これは、“乱れ”を特徴付ける長さに比べてはるかに大きなスケールでは、パーコレーション・クラスターが均質な系とみなされうることに起因している。

これまで、フォノンとフラクトンのクロスオーバー領域において、状態密度が振動数に対して急激に変化することが、有効媒質近似を用いた理論<sup>5,6)</sup>や、Grest と Webman<sup>7)</sup>による数値計算より、示唆されていた。しかし、有効媒質近似は系の乱れをぬりつぶし、全体に一樣であるとして扱うため、波の干渉効果が極めて重要になるようなこの振動数領域では、干渉に起因する興味深い特徴的性質まで近似とともに葬り去ることになってしまう。また、固有値方程式を解く従来の数値計算の方法<sup>7)</sup>では、計算機上の大きな記憶領域を使用するため、対象としている系を小さくしかとれない。従って、系の有限サイズ効果や、低振動数の固有値に対する誤差が大きいために致命的となり、定量的な議論ができなかった。このように、フォノンとフラクトンのクロスオーバー領域における状態密度のふるまいは、未解決の問題のままであった。

本研究で我々は、スーパー・コンピューターを用いた計算機シミュレーションにより巨大なパーコレーション・クラスターにおける振動の状態密度を求めた。さらに、振動のモード・パターンを求めることによって、フォノンとフラクトンの振動状態の相違を初めて視覚的に示し、フラクトンが局在モードであることを明らかにした。ここで用いられたシミュレーションの方法は、高次行列の固有値方程式を解くという一般的方法とは異なる、全く新しいタイプのものである。実際の計算においては、スーパー・コンピューターのベクトル演算を効率的に使用することにより、従来の方法では不可能であった極めて大きな系を取り扱うことができた。また、これまで計算されていなかった低振動数領域を高精度で計算することが可能となった。ここで用いたアルゴリズムは、本研究の対象以外にも高次行列の固有値と固有モードが重要となる工学および物理学の諸問題に対して極めて有効である。以下では、2章でパーコレーション・クラスターとフラクタルについて概説し、3章でシミュレーション法を要約する。計算結果は、4章で報告される。最終章はまとめである。

## 2. フラクタルとパーコレーション・クラスター

フラクタルの特徴を一言でいえば、“自己相似な構造”という事である。フラクタル構造をもつ図形は、単位となる長さを任意に変えて観測しても、構造的特徴は変化しない。つまり、系に特徴的な長さはない。フラクタル構造は、自然界にも多数存在している。たとえば、樹木の枝分れ構造や、小惑星集団の大きさの分布などがその代表的な例である<sup>1)</sup>。フラクタル構造を特徴づける量として、“フラクタル次元”を定義することができる。これは通常の図形におけるユークリッド次元に対応するもので、一般に非整数値をとる。このフラクタル次元  $D$  によって、様々なフラクタル構造、ひいてはランダム構造を分類することができる。しかし、フラクタルが物理において最近特に注目されているのは、フラクタル次元  $D$  が単に構造の分類だけでなく、物理量そのものに直接関与しているためである。このことは、ランダム構造の代表であるパーコレーション・クラスターについても言える。

格子点上に確率  $P$  でランダムに点を打つことを考えよう。隣接する2点は結合しているものとする。格子には不規則なクラスターが出来上がる。こうしてできたクラスターはサイト・パーコレーション・クラスターと呼ばれる。濃度  $P$  を0から徐々に大きくし、臨界濃度と呼ばれる

ある特別な濃度  $P_c$  に達すると、無限に大きなクラスターが形成される。このクラスターが、我々の研究対象であるパーコレート（浸透）したクラスターである。パーコレーション・クラスターには、特徴的長さとして格子定数  $a$  と、次式で定義される相関長  $\xi_p$  がある<sup>9)</sup>。

$$\xi_p \propto |P_c - P|^{-\nu} \quad (2-1)$$

ここで  $\nu$  は正の定数、 $P_c$  は臨界濃度である。一般にパーコレーション・クラスターは、 $\xi_p \gg L \gg a$  のスケールでフラクタル構造を持っている。2次元正方格子上のパーコレーション・クラスターの場合、そのフラクタル次元は  $D=1.89$ 、3次元単純立方格子の場合  $D=2.56$  であることが知られている<sup>10)</sup>。

さて、このようなパーコレーション・クラスターが、質点と線形バネで構成されているような場合を考えよう。パーコレーション・クラスターに代表されるようなランダム・ネットワーク上でのダイナミクスは、全てその構造上での拡散の問題に帰着される<sup>11)</sup>。さらに、そのような拡散問題に対するスケーリング理論<sup>12)</sup>によると、サイズ  $N$  のランダム・ネットワーク上での拡散長  $r$  は、時間  $t$  に対して

$$\langle r^2(t) \rangle_N \propto t^{2/(2+\theta)} \quad (2-2)$$

となる。ここで  $\theta$  は拡散定数の  $r$  依存性を定める正の指数である。また  $\langle \dots \rangle_N$  は、 $N$  個の点から構成されるクラスターの集合平均を表す。均質媒質中での通常の拡散が

$$\langle r^2(t) \rangle \propto t \quad (2-3)$$

であるから、それよりもゆっくりと拡散していくことがわかり、直観的な描像と一致する。一方、拡散を記述するマスター方程式の解の一つである自己相関関数のラプラス変換は、その系における振動の運動方程式の Green 関数と一致している<sup>13)</sup>。従って、振動系の状態密度  $g(\omega)$  は、

$$g(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} \text{Im} \langle \tilde{P}_0(-\omega^2 + i\epsilon) \rangle \quad (2-4)$$

であたえられる。 $\tilde{P}_0(\omega)$  は、自己相関関数  $P_0(t)$  のラプラス変換である。Alexander と Orbach<sup>4)</sup> は、 $\tilde{P}_0(\omega)$  を以下のようにして求めた。まず、フラクタル次元  $D$  で特徴付けられるネットワーク上を拡散運動している点を考える。この点が時間  $t$  内に訪れることのできるサイト数  $V(t)$  は、フラクタル次元の定義から、

$$V(t) \propto \langle r^2(t) \rangle^{D/2} \quad (2-5)$$

となり、さらに、拡散のスケーリング理論の結果(2-2)式を用いれば、

$$V(t) \propto t^{D/(2+\theta)} \quad (2-6)$$

と書ける。一方、自己相関関数  $P_0(t)$  は、 $t=0$  で原点にいた点が  $t=t$  においても原点にとどまっている確率を与えているから、これは、 $[V(t)]^{-1}$  に比例する。従って、

$$P_0(t) \propto t^{-D/(2+\theta)} \quad (2-7)$$

となる。これをラプラス変換して(2-4)に従い状態密度  $g(\omega)$  を求めてやると、

$$g(\omega) \propto \omega^{\frac{D}{d}-1} \quad (2-8)$$

を得る。 $\bar{d}$  は、フラクトン次元、あるいはスペクトル次元と呼ばれる次元で、

$$\bar{d} = \frac{2D}{2+\theta} \quad (2-9)$$

で定義されている。パーコレーション・クラスターについての  $D$  及び  $\theta$  をモンテ・カルロ計算により求め、 $\bar{d}$  の値を調べてやることができる。これにより、全てのユークリッド次元について  $\bar{d} = \frac{2}{3}$  であることが推測されている (Alexander-Orbach conjecture)。ここで重要なことは、次元によらず  $g(\omega) \propto \omega^{1/3}$  となることであり、長い間常識となっていたデバイ理論 ( $g(\omega) \propto \omega^{d-1}$ ) への“挑戦”とも考えられる点である。もちろん、このようなモード (フラクトン・モード) が見られるのは、クラスターがフラクタルであると考えられる波長領域 ( $\lambda < \xi_p$ ) に関してだけであり、相関長  $\xi_p$  より長い波長をもつ振動については、系は均一と見られるので、状態密度はデバイ理論に従うことが予想される (フォノン・モード)。このことから、 $\xi_p$  程度の波長に対応する振動数  $\omega_c$  で両者のクロスオーバーが起こると考えられる。このクロスオーバー振動数  $\omega_c$  近くの状態密度は、系の自由度が一定であることに起因した「コブ」または「急勾配」を示す可能性がある。 $\omega_c$  におけるこの「急勾配」は、状態密度に関する有効媒質近似<sup>5)</sup> によっても得られている。ただし、この近似では、系を effective に均一な媒質とみなしてしまうため、 $\lambda$  (波長)  $\gg \xi_p$  に対しては正しい物理的描像を与えるものの、 $\lambda < \xi_p$  におけるフラクタルの特徴は失われ、 $g(\omega) \propto \omega^0$  という Alexander-Orbach conjecture とは異なる結果を与えてしまう。したがって、有効媒質近似で得られたクロスオーバーでの「急勾配」も果たして正しいものかどうか疑問が残る。

クロスオーバー付近での状態密度の振舞を数値計算によって調べるには、以下のような点に注意しなければならない。まず、パーコレーション系にフォノンとフラクトンのクロスオーバーが存在するためには、相関長  $\xi_p$  が有限値でなければならない。相関長  $\xi_p$  は、濃度が臨界値  $P_c$  からずれると急激に減少し、対応する振動数  $\omega_c$  も高振動数側に移動する。しかし、この場合  $\xi_p \sim a$  では、パーコレーション系のもう一つの特徴的長さである格子定数  $a$  の影響で、フラクトンは存在しなくなる。一方、濃度が臨界値に極めて近い場合、 $\xi_p$  は考えている有限系のサイズ  $L$  より大きくなる。このとき低振動数領域では、フラクトンからフォノンへ移るまえに系のサイズ効果により振動モードそのものが存在しなくなる。また、系を  $\xi_p$  に対して十分に大きくしたとしても、クロスオーバー振動数  $\omega_c$  は極端に低振動数であるため、従来のダイナミカル・マトリックスの固有値を直接求める方法では、誤差が大きく計算精度が悪い。Grest と Webman<sup>7)</sup> は、従来の方法で、パーコレーション・クラスターの状態密度を計算した。彼等の計算は、3次元単純立方格子上的クラスター・サイズ  $10^3 \sim 10^4$  を持つサイト・パーコレーション・クラスターに対して行なわれた。彼等は、これらの結果より、クロスオーバー領域では、状態密度が振動数の増加にともなって、デバイ近似よりも急激に大きくなることを主張し、有効媒質近似の結果を支持した。しかし、彼等の計算は、対象とした系が小さいことによる有限サイズ効果や、クロスオーバー振動数が低振動数であることによる不可避的な計算誤差のため信頼性に欠く。

我々が用いた新しい方法は、系に周期的な外力を加え、その応答によって状態密度を調べるものである。この方法による状態密度の計算誤差は、主に周期的外力に共鳴するモードの数と各サイトの外力の振幅を与える乱数の精度に依存し、基本的には振動数に依らない<sup>8)</sup>。また、この方法は、スーパー・コンピューターによるベクトル処理に適していることが明らかになった。その結果、従来考えられなかった巨大システムに適用でき、全振動数領域で状態密度を高精度で計算することを可能にしている。

### 3. 数値シミュレーション法

本方法は、質点と線形バネから構成される系に、周期的外力を加えることにより誘起される共鳴現象を利用する。

#### 3.1 状態密度

単位質量 ( $M=1$ ) の質点と単位バネ定数のバネから構成されたパーコレーション・クラスターに関する運動方程式を考える。以下の議論では、質点の位置を表す添字は  $n$  とし変位はスカラーとする。この系に周期的外力項  $F_n \cos(\Omega t)$  を加えたとき、変位  $u_n$  について運動方程式は、

$$\ddot{u}_n(t) + \sum_{n'} \Phi_{nn'} u_{n'}(t) = F_n \cos(\Omega t) \quad (3-1)$$

と表せる。 $\Phi_{nn'}$  は最近接格子点  $n, n'$  の両方に質点がある場合は 1、それ以外は 0 をとるものとする。ここで、外力の振幅  $F_n$  を

$$F_n = F_0 \cos(\phi_n) \quad (3-2)$$

とする。 $F_0$  は定数であり、 $\phi_n$  は  $n$  に対してランダムな位相である。系が十分大きいとき、 $\phi_n$  について平均操作を行うことができ、系のエネルギーは

$$\langle E \rangle = \frac{F_0^2}{4} \sum_{\lambda} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{\lambda} - \Omega}{2} t\right)}{(\omega_{\lambda} - \Omega)^2} \quad (3-3)$$

となる。上式は共鳴を表す式で、 $\omega_{\lambda}$  は系の固有振動数である。(3-3)式の共鳴因子が十分鋭く、 $\Omega$  の近傍に多数のモードが励起されているとき、強制振動による系のエネルギーと状態密度の関係は次のようになる。

$$g(\Omega) = \frac{8\langle E \rangle}{\pi t F_0^2 N} \quad (3-4)$$

ここで、 $t$  は強制振動を加える時間、 $N$  は系の自由度である。従って、系のエネルギーを計算することができれば、状態密度  $g(\Omega)$  が求められる。

実際のコンピューターでの数値計算は、運動方程式(3-1)を時間  $t$  に対して差分化し、その時間発展を追うことにより行なわれる。このとき差分方程式は、差分化の刻み  $\tau$  が系の最大振動数の周期にたいして十分に小さいとき、もとの微分方程式と等価になる。また、差分方程式によって記述される系の振動数  $\Omega$  と実際の運動方程式によって記述される系の振動数  $\omega$  とは、

$$\omega = \frac{2}{\tau} \sin\left(\frac{\Omega \tau}{2}\right) \quad (3-5)$$

の関係があることに注意を要する。

#### 3.2 モード・パターン

運動方程式(3-1)を解いて質点  $n$  の変位を求めると、次の式が得られる。

$$u_n = \sum_{\lambda} F_{\lambda} h(\Omega, \omega_{\lambda}, t) e_n(\lambda) \quad (3-6)$$

$$F_{\lambda} = \sum_n F_n e_n(\lambda) \quad (3-7)$$

$$h(\Omega, \omega_\lambda, t) = \frac{2 \sin\left[\frac{1}{2}(\Omega - \omega_\lambda)t\right] \sin\left[\frac{1}{2}(\Omega + \omega_\lambda)t\right]}{\Omega^2 - \omega_\lambda^2} \quad (3-8)$$

(3-8)式は、共鳴因子であり、 $e_n(\lambda)$ は、偏極ベクトルである。状態密度の計算では、多数のモードの励起を前提としていたが、モード・パターンを求めるには、単一のモードが必要となる。ここでは、モードの選択性を高めるために、以下の手法が用いられた。

初期状態には、系の各質点は変位  $u_n = 0$  で、外力も加わっていないものとする。つぎに、 $\tilde{t}$ 時間だけ外力  $F_n \cos(\Omega t)$ を加える。このとき、各質点の変位  $u_n$  は、

$$u_n^{(1)} = \sum_\lambda F_\lambda h(\Omega, \omega_\lambda, \tilde{t}) e_n(\lambda) \quad (3-9)$$

となる。つぎに外力の振幅を

$$F_n^{(1)} = u_n^{(1)} \quad (3-10)$$

と変換し、系を初期状態にもどしてから同じ手順を繰り返す。この操作を  $P$  回繰り返すと、変位  $u_n$  は、

$$u_n^{(P)} = \sum_\lambda F_\lambda h^P(\Omega, \omega_\lambda, \tilde{t}) e_n(\lambda) \quad (3-11)$$

となる。従って、共鳴因子が  $P$  乗され共鳴幅  $\Delta\Omega$  は小さくなり、モードの選択性が向上する。このようにして  $\tilde{t}$  と  $P$  を適当に設定することにより単一モードが得られる。外力の振動数  $\Omega$  に最も近い固有値  $\omega_\lambda$  とつぎに近い固有値に対する共鳴因子をそれぞれ  $h_1, h_2$  とすると、 $(h_2/h_1)^P \ll 1$  のとき、変位  $u_n$  は単一モード  $\omega_\lambda$  の振幅と考えられる。

### 3.3 スーパー・コンピューターとベクトル化率

本研究には、北海道大学大型計算機センターのスーパー・コンピューター HITACHI S-810 モデル10を使用した。スーパー・コンピューターは、一般にアレイ・プロセッサ (Array Processor) を持ち、並列処理により、高速演算を可能としている。アレイ・プロセッサは、繰り返し演算の部分 (例えば、DO ループ) だけを高速化する。従って、その能力を十分に発揮するために、繰り返し演算部のベクトル化が重要である。

本研究で用いた数値シミュレーション法では、プログラム中に複雑な判断や I.O. がなく主要な DO ループはベクトル化されている。また、我々は、ベクトル処理速度がループ長の増大とともに向上することに着目し、プログラム内の多重ループの一重化とループ長の増加をはかり、効率的なベクトル演算を実現した。この結果、小さなクラスター (クラスター・サイズ246) に対する計算においても、ベクトル化率 99.076 % を達成することができた。また、巨大クラスターに対しては、ループ長を  $10^5$  程度とすることにより、ベクトル処理速度をほぼ限界値に置き、そのうえでベクトル化率を 99.9 % 以上に上げることができた！

## 4. 計算結果

2次元正方格子および3次元立方格子のサイト・パーコレーション・クラスターについて、振動の状態密度とモード・パターンを計算した。格子は、単位質量の質点と単位バネ定数を持つ線形バネから構成されている。また境界条件はすべて自由端とした。

3章で述べたシミュレーション法を実際の計算機上で実行させるにあたって、まず問題となる

のは、計算精度である。我々は、状態密度に関する精度が十分であることを3次元規則格子に対するシミュレーションと厳密解を比較することにより、確かめた(図1)。実線は、最近接相互作用を考えた単純立方格子の状態密度の厳密解であり、次式で与えられる<sup>14)</sup>。

$$g(\omega) = \frac{\omega}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega^2 x + i6x} J_0^3(2x) dx \tag{4-1}$$

ここで  $J_0(x)$  は零次のベッセル関数である。格子サイズ  $30 \times 30 \times 30$  に対してシミュレートした結果は、 $\bullet$  で表されている。この図より、本研究で用いられた数値計算法が十分な精度を持っていることが分る。

#### 4.1 状態密度

図2は、2次元パーコレーション・クラスターの臨界濃度  $P_c = 0.593$  における状態密度である。図中の  $\bullet$  は、格子サイズ  $100 \times 100$  で、クラスターのサイズが3714から4854の7つのクラスターについて求めた状態密度の平均値である。状態密度は、計算した最低振動数まで  $g(\omega) \propto \omega^{1/3}$  となっている。これは、系をフラクタル構造とみなせる最大スケール  $\xi_p$  が、臨界濃度において発散していることに対応している。この結果から、2次元パーコレーション・クラスターに関して、Alexander-Orbach conjecture が正しいことが分る。 $\omega > 1$  に対する  $g(\omega)$  は、 $\omega^{1/3}$  に比例しなくなるが、これは波長  $\lambda$  が格子間隔程度となり、この格子間隔が特徴的長さとなってしまうためである。すなわち、この振動数領域では系の構造をフラクタルと見なせなくなり、状態密度は Alexander-Orbach conjecture に従わなくなる。濃度を0.67にすると、状態密度は、図3のように変わる。ここでの格子のサイズは  $700 \times 700$  で、クラスター・サイズは317672である。この結果は、デバイ理論  $g(\omega) \propto \omega$  が成り立つ領域(フォノン領域)と  $g(\omega) \propto \omega^{1/3}$  が成り立つ領域(フラクトン領域)が存在することを示している。図4は、濃度  $P = 0.40$  ( $P_c = 0.312$ ) での3次元パーコレーション・クラスターの状態密度である。格子のサイズは  $70 \times 70 \times 70$  で、クラスターのサイズは122448である。こ

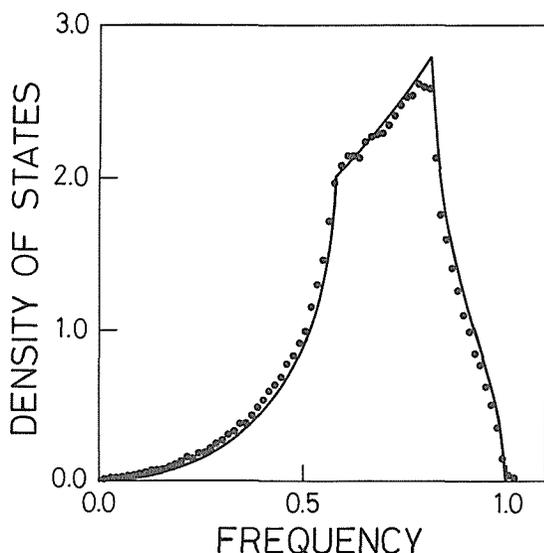


図1 3次元単純立方格子の状態密度<sup>14)</sup>。 $\bullet$  は、 $30 \times 30 \times 30$  の格子に対するシミュレーションの結果。

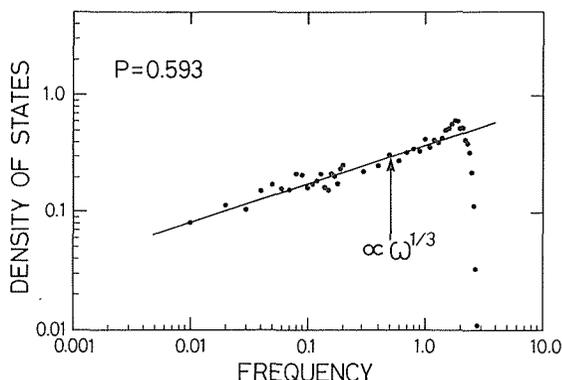


図2 2次元パーコレーション・クラスターの状態密度。 $100 \times 100$  の正方格子上に形成された  $P = 0.67$  のクラスター(クラスター・サイズ317672)に対するシミュレーションの結果。

の場合にも、フォノン領域( $g(\omega) \propto \omega^2$ )と、フラクトン領域( $g(\omega) \propto \omega^{1/3}$ )が存在している。図3および図4はいずれも濃度  $P$  が  $P_c$  より大きく、 $\xi_0$  が有限となっている。したがって、対応する波長が  $\xi_0$  より大きくなる低振動数での振動モードは、フラクタル構造を反映したモードではなく、状態密度はフォノンにおけるデバイ理論に一致する。このことにより、これら二つの図では、フォノンとフラクトンのクロスオーバーが存在することになる。しかしながらこの領域には、有効媒質近似<sup>5)</sup>や Grest<sup>7)</sup>の計算機実験によって示唆されているような、状態密度の急激な変化は認められない。ただし、3次元クラスターでの状態密度は、境界領域で比較的大きな揺らぎを持っており、今後さらに詳細な計算を必要とする。図2, 図3, 及び図4の全ての場合について、 $\bar{d} = 1/2$  が確認された。フラクトン・モードは次元によらず  $\omega^{1/3}$  に比例するという Alexander-Orbach conjecture が、これによって実際に確かめられたことになる。

#### 4.2 モード・パターン

図5, 図6は、濃度の異なる2次元パーコレーション・クラスターにおける

振動数  $\omega = 0.02$  でのモード・パターンである。図中の斜めの矢印が振動の様子を表している。図5は濃度  $P = 0.70$  で、状態密度の結果より、この振動数における振動モードは、フォノンとしてふるまう。この図より、不規則格子系においても、フォノン・モードは系全体に拡がったパターンを有していることが分る。図6は、臨界濃度におけるモード・パターンであり、振動モードはフラクトンとなる。フラクトンの振動モードは、パーコレーション・クラスターの「半島」状の部分に局在しており、フォノンの振動モードとは、全く異なった様相を呈している<sup>15)</sup>。フラクトンの局在したモードは、本研究により初めて視覚的に確かめられた。このような振動モードの局在があれば、系の熱伝導率は規則的な系に比べて著しく低下することが期待される。実際、アモルファス固体等における熱伝導率が10 K近くで温度  $T$  に関してプラトーを持つという実験事実が、以前から多数報告されていた<sup>16,17)</sup>。このプラトーを引き起こす物理的要因を明らかにすることは、理論的にも実験的にも重要な課題となっている。

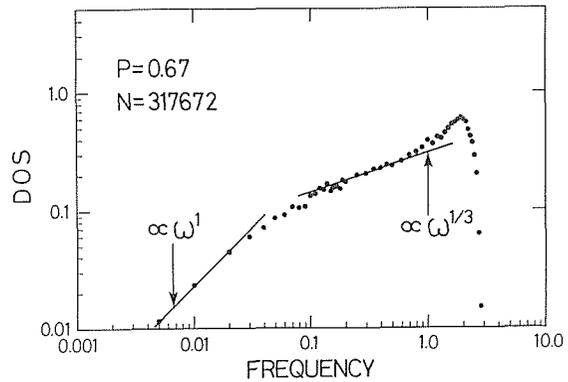


図3 2次元パーコレーション・クラスターの状態密度。700×700の正方格子上に形成された  $P = 0.67$  のクラスター(クラスター・サイズ 317672) に対するシミュレーションの結果。

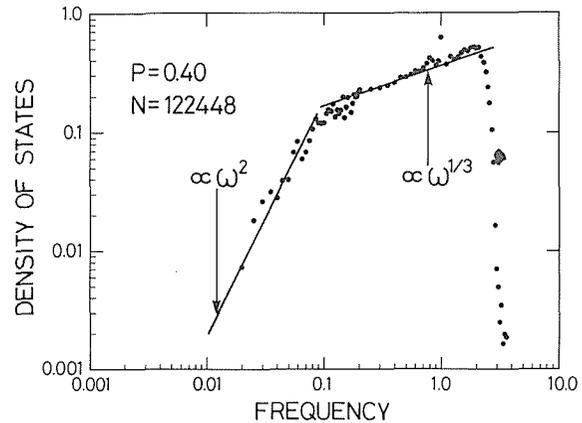


図4 3次元パーコレーション・クラスターの状態密度。70×70×70の単純立方格子上に形成された  $P = 0.40$  のクラスター(クラスター・サイズ 122448) に対するシミュレーションの結果。

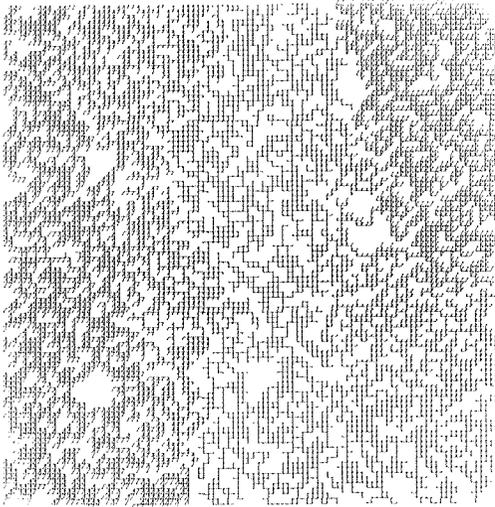


図5 フォノンのモード・パターン。100×100の正方格子上に形成された $P=0.70$ のクラスター（クラスター・サイズ6815）に対するシミュレーションの結果。振動数は $\omega=0.02$ 。斜めの矢印は質点の振動を表す。

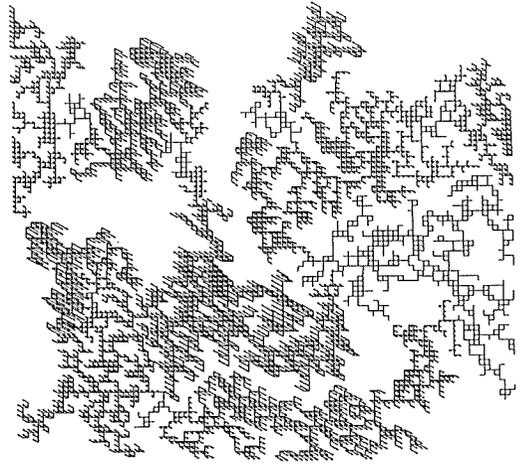


図6 フラクトンのモード・パターン。100×100の正方格子上に形成された $P=0.593$ （臨界濃度）のクラスター（クラスター・サイズ3714）に対するシミュレーションの結果。振動数は $\omega=0.02$ 。斜めの矢印は質点の振動を表す。

## 5. ま と め

パーコレーション・クラスターにおいて、状態密度が系のユークリッド次元  $d$  に依存せず  $\omega^{1/3}$  に比例するような、振動数領域があることを計算機シミュレーションにより直接確かめた。臨界濃度  $P_c$  よりも大きな濃度を持つパーコレーション・クラスターにおいては、このフラクトン・モードが励起される振動数領域より低振動数になると、デバイ理論 ( $g(\omega) \propto \omega^{d-1}$ ) に従う振動モード（フォノン・モード）が励起されることが分った。このとき、フォノンとフラクトンの境界領域での状態密度のふるまいには、有効媒質近似による計算<sup>5)</sup>や、Grest らの計算<sup>7)</sup>で主張された急激な変化は認められなかった。本研究で求めた状態密度は、図2以外、一つのクラスターについて計算したものである。臨界濃度よりわずかに大きな濃度を持つ有限サイズのパーコレーション・クラスターは、 $\xi_0$  程度のスケールで、そのクラスター固有の構造が生じてくるようになる。これは、有限クラスター中の最大の「半島」の空間分布がパーコレーション・クラスターを生成する乱数列に大きく依存するからである。3次元パーコレーション・クラスターに対する状態密度がフォノン-フラクトン・クロスオーバー振動数付近で大きな揺らぎを持っているのは、このためである。従って、クロスオーバーにおける状態密度をより正確に求めるためには、多数のクラスターについて状態密度を計算し、それを平均することが必要となる。これは、興味深い今後の課題である。また、 $\omega > 1$  における状態密度は、 $\omega^{1/3}$  に比例しなくなる。これは、この振動数領域での振動モードの波長が、格子間隔程度となり、系の構造をフラクタルであると見なせなくなるためである。

さらに本研究では、2次元パーコレーション・クラスター上に励起されたフォノン・モードとフラクトン・モードのモード・パターンを求めた。この計算により、フラクトン・モードは局在モードであることが、初めて視覚的に確かめられた。局在は、クラスター内の「半島」状の部分

で起こり、「半島」はそれ自身、自己相似的構造を持っている。このことが  $g(\omega) \propto \omega^{1/3}$  という普遍の関係式と密接に関連していると思われる。また、フォノン・モードは、連続媒質中でのフォノンと同様に広がったモード・パターンを持っていることも分った。

本研究においてスーパー・コンピューターの利用は、不可欠の条件であった。ここで用いた新しいシミュレーションの方法が極めてベクトル計算向きであったため、99.9%以上のベクトル化率を達成することができた。これにより、実際のCPU timeは、スカラー処理時の1/200程度に減少したと思われる。

#### 参考文献

- 1) B. Mandelbrot, *Fractals, Form, Chance, and Dimension* (Freeman, San Francisco, 1977)
- 2) M. B. Salamon, A. P. Murani, J. L. Tholence and J. L. Walter, *Phys. Rev.* **B33**, 7837 (1986)
- 3) K. De'Bell and T. Lookman, *Phys. Rev.* **B34**, 4812 (1986)
- 4) S. Alexander and R. Orbach, *J. Physique Lett.* **43**, L625 (1982)
- 5) B. Derrida, R. Orbach and Kin-Wah Yu, *Phys. Rev.* **B29**, 6645 (1984)
- 6) O. E. Wohlman, S. Alexander, R. Orbach and Kin-Wah Yu, *Phys. Rev.* **B29**, 4588 (1984)
- 7) G. S. Grest and I. Webman, *J. Physique Lett.* **45**, L1155 (1984)
- 8) M. L. Williams and H. J. Maris, *Phys. Rev.* **B31**, 4508 (1985)
- 9) S. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 574 (1973)
- 10) D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor and Francis, London, 1985)
- 11) P. G. de Gennes, *Recherche*, **7**, 919 (1976)
- 12) Y. Gefen, A. Aharony and S. Alexander, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 77 (1983)
- 13) S. Alexander, J. Bernasconi, W. R. Schneider and R. Orbach, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 175 (1981)
- 14) E. W. Montroll and R. B. Potts, *Phys. Rev.* **100**, 525 (1955)
- 15) R. Rammal and G. Toulouse, *J. Physique Lett.* **44**, L13 (1983)
- 16) M. P. Zeitlin and A. C. Anderson, *Phys. Rev.* **B12**, 4475 (1975)
- 17) S. Kelham and H. M. Rosenberg, *Solid State Phys.* **14**, 1737 (1981)