HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	パーコレーション・ネットワークにおけるフラクトン動力学
Author(s)	矢久保, 考介
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	乙第4066号
Issue Date	1992-03-25
DOI	https://doi.org/10.11501/3060731
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/49803
Type	doctoral thesis
File Information	000000249696.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

パーコレーション・ネットワークにおける
フラクトン動力学

矢久保　考介

学位論文

パーコレーション・ネットワークにおけるフラクトン動力学

矢久保 考介

北海道大学工学部応用物理学科

応用数理物理学講座

目次

第1章　序論　1

第2章　浸透網の構造とそのフラクタル性　7
2–1　浸透網と浸透問題　7
2–2　スケーリング理論と臨界指数　11
2–3　自己相似性とフラクタル次元　18
2–4　Nodes-Links-Blobs モデル　26

第3章　浸透網上の異常拡散　34
3–1　迷宮の中の蟻　34
3–2　異常拡散のスケーリング理論　36

第4章　フラクトン励起のスケーリング理論　40
4–1　異常拡散とフラクトン励起　40
4–2　Alexander-Orbach の予想　45
4–3　フラクトン励起の諸性質　48
4–3–1　局在性　49
4–3–2　フォノン-フラクトン・クロスオーバー　50
4–4　ベクトル・フラクトン　52

第5章　数値計算法　65
5–1　状態密度　66
5–1–1　数値計算法　66
5–1–2　厳密解との比較　71
5–2　モード・パターン　74
5–2–1　単一モードの抽出　74
5–2–2　モードの単色性　76
5–2–3　数値計算の最適化　79
5–3　1次元不規則格子への応用　89
5–4　ベクトル化へのチューニング　95
5–4–1　一般論　95
5–4–2　具体的チューニング　100

第6章　スーパーコンピュータによるフラクトン力学　103
6–1　フラクトン状態密度　103
6–2　フラクトンのモード・パターン　108
6–3　ベクトル・フラクトン　113

第 7 章　フォノン-フラクトン・クロスオーバー　122
7–1　クロスオーバーのスケーリング理論　122
7–2　数値計算による結果　124
7–3　失われたモードのゆくえ　126

第 8 章　フラクトン波動関数の超局在性　133
8–1　フラクトン励起の超局在波動関数　133
8–2　指数 d_ϕ に関する理論　137
8–3　指数 d_ϕ に関する数値計算　142

第 9 章　浸透網の動的構造因子　149
9–1　実験によるフラクトンの検証　149
9–1–1　光および中性子散乱実験　149
9–1–2　その他の実験　155
9–2　フラクトンによる動的構造因子の理論的取り扱い　158
9–2–1　有効媒質近似　159
9–2–2　平均波動関数による動的構造因子　160
9–3　計算機シミュレーションによる動的構造因子　163

第 10 章　結言　172

謝辞

参考文献

第1章　序論

物質の構造とその物理的性質が深い関わりを持っていることはよく知られている。自然界に存在する多種多様な構造のなかで、その構造的特徴と物理的性質の間の関係が十分理解されているものは、並進対称性を有する系に関してのみである。単結晶物質などは、このような並進対称性を持つ物質の代表であるが、それ以外のガラス，プラスティック，ゴム，液体など、多くの物質は周期構造からかけ離れたランダムな構造をとっている。これらのいわゆるランダム系は、工学的に非常に多くの場面において利用されており、その重要性は近年増加する一方である。このような状況において、ランダム系の物性解明は早急かつ重要な課題であり、現在非常に多くの研究者によってその努力がなされている。

従来、ランダム構造を持つ物質の性質を理論的に記述することは不可能であると考えられていたが、これらの多くが自己相似性という特殊な対称性を有することが明らかになるにつれ、状況は大きく変わってきた。自己相似性とは、図1–1のKoch曲線のように、その構造の一部分が構造全体と相似であるという性質をいう。この例のように、相似性が数学的に厳密であるような系（決定論的自己相似）は現実の物理系には存在しないが、統計的な意味で自己相似である系（統計的自己相似）は自然界に非常に多く見い出すことができる。自己相似性という概念そのものの歴史は古く、Leonard da Vinciの「大洪水」の絵や葛飾北斎の浮世絵の中でも乱流の様子が自己相似的に描かれている。しかし、自己相似性が科学的に扱われるようになったのは、1950年代以降である*。このころから海岸線や川，山の稜線，雲など身近なランダム構造が自己相似性を持っていることが次々に示されていった。自己相似構造に対するこのような断片的知識はMandelbrot[3,4]によって系統化され、自己相似構造や自己相似性を表す統合的概念は“フラクタル”と名付けられた**。Mandelbrot以後、フラクタルに関する研究は爆発的に増加した。固体表面，高分子架橋体，神経細胞，静脈・動脈，脳のしわ，銀河団分布など、現在までおよそ1000種類以上のフラクタル構造を持つ系が発見されている。最近では、自然界の中でおよそラ

＊ Perrin[1,2]は今世紀初頭に石鹸溶液に塩を加えてできる白いフレークやランダム・ウォークの軌跡が自己相似的であることを指摘していた。

＊＊ フラクタルとはラテン語の形容詞fractusから作られたものであるが、fractusに対する動詞frangereは「壊れる」、すなわち不規則な断片ができるという意味がある。この命名にも自己相似性とランダムネスとの関連性が込められている。ちなみに、algebra（代数）という言葉は、アラビア後で一つにまとめるという意味のjabaraから派生してきているので、フラクタルとアルジェブラは語源的に反意語となっている。

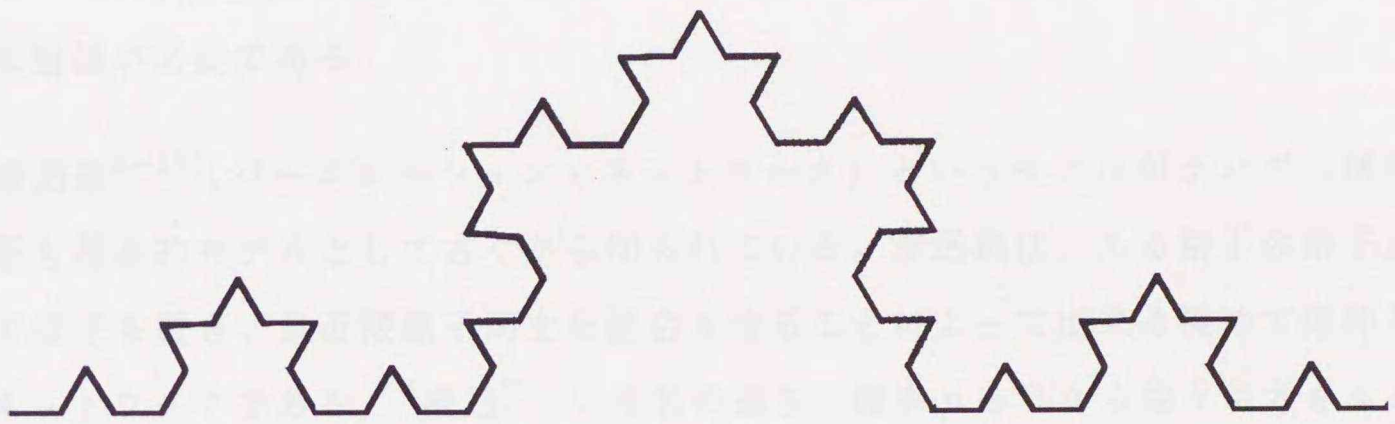


図 **1–1.**　Koch 曲線。構造の一部分が構造全体と相似である。

ンダムと思える構造を持つ物質の中で、フラクタルと無関係なものは存在しないであろうとさえ言われている[5]。このような発展の重要な鍵となっているのはMandelbrotによるフラクタル次元の導入である。フラクタル次元は自己相似構造の相似比の程度を特徴づける非整数次元であり、フラクタル構造にとって最も基本的な量となる。様々なフラクタル系は、そのフラクタル次元によって分類することができる。同じフラクタル次元を持つ2つの系は、同程度の複雑さを持っており、フラクタル次元が高ければ高いほど系は複雑な構造をしていると考えてよい。フラクタル次元の導入によって、これまで単にランダムと称されていた多くの系を、スケール変換に対する対称性という新しい観点から分類することが出来るようになった。しかし、フラクタル次元だけではフラクタル構造を持つ物質の物性を完全に記述することができないことが明らかになるにつれ、博物学的なフラクタル次元の研究は次第に減少してきた。フラクタルを特徴づけるには、少なくともう一つ新たな指標が必要である。

浸透網[6-13](パーコレーション・ネットワーク)というモデルがランダム構造を記述する最も基本的モデルとして古くから知られている。浸透網は、ある格子の格子点上に確率pで原子を置き、最近接原子同士を結合させることによって出来る極めて単純なランダム・ネットワークである。“浸透”という名の通り、確率pを0から徐々に大きくしていくと、ボンドで結ばれたクラスターの平均サイズは次第に大きくなり、ある特別な濃度p_cのところで発散(浸透)する。この濃度p_cは、熱力学的相転移における臨界濃度と同様の意味を持つことから、臨界濃度と呼ばれている。臨界濃度近傍における浸透網の幾何学的振舞いは、少数の独立な臨界指数によって記述できることが知られている。このように臨界的性質を持っていることから、浸透網は単にランダム構造を持つ物質に対するモデルだけではなく、相転移のモデルとしても広く研究されている。浸透網は元々フラクタルとはなんの関係もなく生まれてきたモデルであったが、1979年Stauffer[10]をはじめとする多くの研究者[14-16]によって浸透網のフラクタル性が示された。このことにより、臨界現象におけるスケール不変性は、$p = p_c$における浸透網のフラクタル性と密接に関係していることが明らかになった。また、これまで浸透網模型で記述されていた多くのランダム系、例えばアモルファス半導体，高分子ゲル，金属シンター，多孔質ガラスなどがこれを契機にフラクタルの観点から見直されるようになった。

しかし、先にも述べたようにフラクタル次元だけではランダム系の物性を特徴付けることができないため、この時点ではフラクタルという考え方がランダム系の物理を大きく進展させるまでには至らなかった。1982年のAlexanderとOrbach[17]および1983年のRammalとToulouse[18]の仕事はこの状況を一変させた。彼等は、フラクタル系の物理的性質を理解するためのもう一つの重要な指標が、フラクタル系の動力学を特徴付ける次元であることを示し、この次元を“フラクトン次元”と名付けた。浸透網のフラクタル次元およびフラクトン次元を求めることにより、非常に多くのランダム系の物理的性質が統一的に理解されるようになってきた。特に、浸透網上の振動励起に関する研究によって、フラクトンと呼ばれるフラクタル系固有の局在振動励起が存在することがスケーリング理論[17,18]によって予想された。もし、フラクトンが実際に存在すれば、ガラスやゲルなどのランダム系の熱的性質（比熱や熱伝導度）や格子振動を介した緩和（スピン-格子緩和）や電気伝導（ホッピング伝導）など、多くの物理量にフラクトンの影響が現れてくるであろう。フラクトン力学の解明は、新しい観点にたったランダム系の物理学の基礎を与える上で極めて重要な課題である。

本研究の目的は、浸透網上にフラクトンが存在することを数値的に直接確認し、その状態密度，分散関係，波動関数，散乱強度などの基本的性質を明らかにすることである。この研究により、フラクタル性を有するランダム構造物質の物性を定量的に理解することが可能となった。具体的な数値計算を行うために、本研究では新しい数値計算法が開発された。浸透網上のフラクトン励起を見つけるには巨大な浸透網を扱わなければならない。しかし、従来行われていたようなダイナミカル・マトリックスの対角化という数値計算法では、系の自由度の2乗に比例した計算機記憶容量が必要であったため、この種の大規模数値計算を行うことはできなかった。本研究で開発された新しいアルゴリズムは、系の自由度に比例した計算機記憶容量しか必要としないため、大規模計算ができるようになり、これによってフラクトンの数値的研究が初めて可能となった。また、開発されたアルゴリズムはベクトル処理計算に適しており、並列処理型スーパー・コンピュータを有効に利用することで超高速計算が実現できた。この新しい数値計算法は、フラクトン・ダイナミクスのみならず、大規模数値計算を必要とする様々な分野で利用されうる。特に、ランダム系の電子状態，スピン状態，光導波路のモード解析などに適用することにより、未解決の多くの問題を解きあかすことが可能になる。このように多くの物理系の大規模数値計算に適

用可能な優れたアルゴリズムを開発したことも本研究の成果の一つである。

本論文は次のように構成されている。第2章では本論文で扱われる浸透網の構造的特徴、特にスケール不変性と臨界指数、およびそのフラクタル性について言及される。また、複雑な浸透網構造を単純化した模型であるNodes-Links-Blobsモデルについてもここで述べられる。この模型は、後の章でフラクトン励起を議論する際再三利用される。第2章が浸透網の静的性質の説明であったのに対し、第3章では浸透網上の動力学の基礎である拡散現象について述べられる。そこではまず、浸透網上の拡散現象と他の動力学の間の密接な関係について述べられ、次に浸透網上の拡散現象に対するスケーリング理論が展開される。このスケーリング理論は、フラクトン励起に対するスケーリング理論の基礎を与えることとなり、そこでの結果は本論文で多数引用される。第4章はフラクトン励起に対するスケーリング理論の説明に当てられる。フラクトン励起の存在を予言する3つの独立な理論を紹介し、フラクトンの状態密度，分散関係などの基本的性質に関するスケーリング理論の予想を示す。第5章では本研究の計算結果を導くために開発された数値計算法について述べる。この方法がフラクトン以外の系にも適用しうることを具体的に示すため、浸透網模型と直接関係のない系も例として扱われる。第6章以降が本研究の結果である。まず第6章では、第4章で予想されたフラクトン励起の存在を数値計算により確認し、スケーリング理論で示された状態密度の振動数依存性と数値計算によるものとを比較する。また、フラクトンの単一モードを抜き出すことによって、その局在性やモード・パターンの特徴に関しても議論される。さらに、変位をベクトルとし、ボンド変角力も考慮した場合の局在振動励起（ベクトル・フラクトン）の振動状態密度の計算結果、およびそのフラクトン次元について述べられる。第7章ではフォノン-フラクトンのクロスオーバーにおける状態密度の振舞いについての従来の理論を紹介し、本研究の計算結果がこの予想とは異なる振舞い方を示している理由について議論する。ここでは、状態密度に関する新しいスケーリング理論が展開され、数値実験の結果がこの新しい理論とよく一致することが示される。フラクトン波動関数に関する詳細な議論は、第8章で述べられる。まず、フラクトンの平均波動関数の考え方を説明し、その平均波動関数に関する幾つかの理論を紹介する。これらの理論と本研究で計算されたフラクトンの平均波動関数とを比較し、両者が一致しないこと、およびその理由について述る。第9章では、フラクトンによる動的構造因子の理論と数値計算の結果が述べられる。動的構造因子は非弾性散乱実験で直接得られる

量として重要であるばかりでなく、フラクトンと他の素励起との相互作用を記述する方法の基礎を提供するものとして注目される。数値計算で得られた動的構造因子は、平均波動関数を用いた方法ではうまく説明できないことがこの章で示される。第 10 章は結言である。フラクトン励起に関して本研究で得られた知見、開発された数値計算法がまとめられ、今後の課題について述べられる。

第2章　浸透網の構造とそのフラクタル性

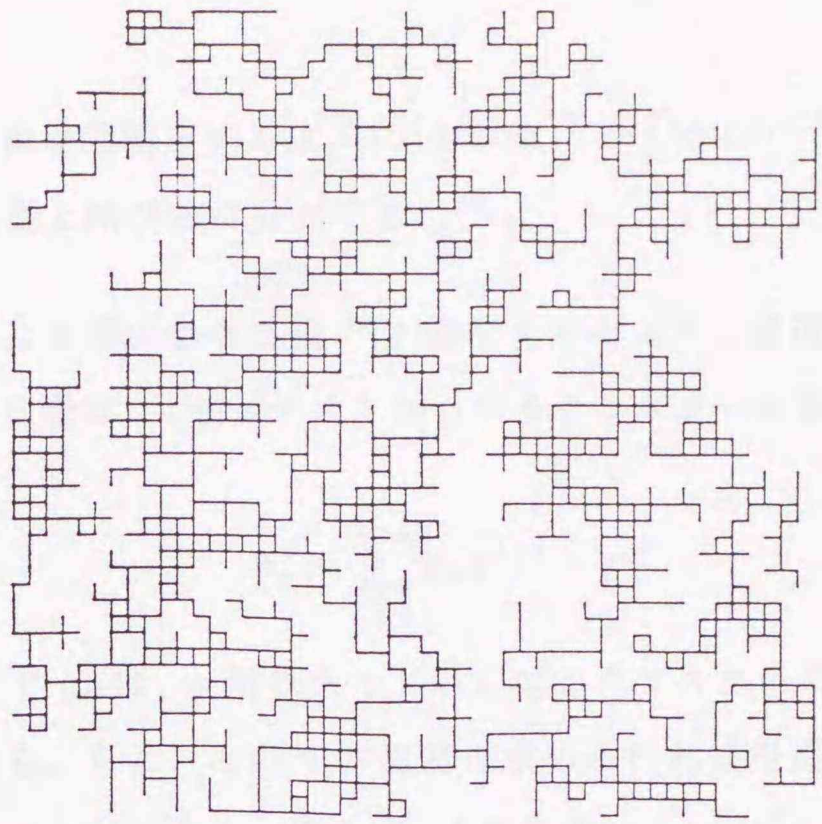
統計的自己相似性を持つランダム構造の最も基本的なモデルに浸透網がある。このモデルの臨界的性質および自己相似構造に関する諸性質を本章と次章で述べる。本章ではおもにその静的性質を、次章ではフラクトン励起と密接に関係する浸透網上の拡散現象について述べる。

2–1. 浸透網と浸透問題

無限に大きな格子の各格子点に確率 p で点を配置し、もしある点の最近接に点が存在すれば、その2点を線（ボンド）で結ぶという極めて単純な規則にしたがって形成されるネットワークをサイト型浸透網（site percolation network）という（図2–1(a)）。これに対し、規則格子の全ての点に予め点をおき、それらを確率 p で結ぶことによってできるネットワークをボンド型浸透網（bond percolation network）という（図2–1(b)）。確率 p を0から徐々に大きくしていくと、ボンドで結ばれたクラスターのうち最も大きなもののサイズは次第に大きくなり、ある特別な値 p_c のところで発散する。この濃度 p_c は、熱力学的相転移における臨界温度と同様の意味を持つことから臨界濃度と呼ばれている。臨界濃度近傍における浸透網の幾何学的振舞いは臨界指数によって特徴付けられる。臨界指数に関するスケーリング理論などは次節で述べることにして、本節では浸透網を特徴付けるのに必要な様々な量について考える。

浸透網モデルは1954年Broadbent[19]によって初めて導入された[20]。当時 *British Coal Utilization Research Association* で炭坑用ガス・マスクの設計をしていたBroadbentは、ガス・マスク内に詰められた多孔炭素微粒子の中をガスが通り、吸着する過程を浸透モデルを用いて考えた。すなわち炭素微粒子内の複雑な細孔ネットワークを規則細管ネットワーク上のボンド型浸透網と見なした。Broadbentはこのような浸透網に外部からガスを進入させたとき、全細管のうちどれだけの割合のものがガスによって満たされるかを考え、その割合 $P(p)$ の p 依存性を調べた。そして、$P(p)$ を求めるにはコンピュータによるモンテカルロ計算が有効であることを主張した。当時 *United Kingdom Atomic Energy Research Establishment* でコンサルタントとして核反応のモンテカルロ計算を行っていた数学者Hammersley[21]はこの問題に興味を持ち、浸透網の数学

A



B

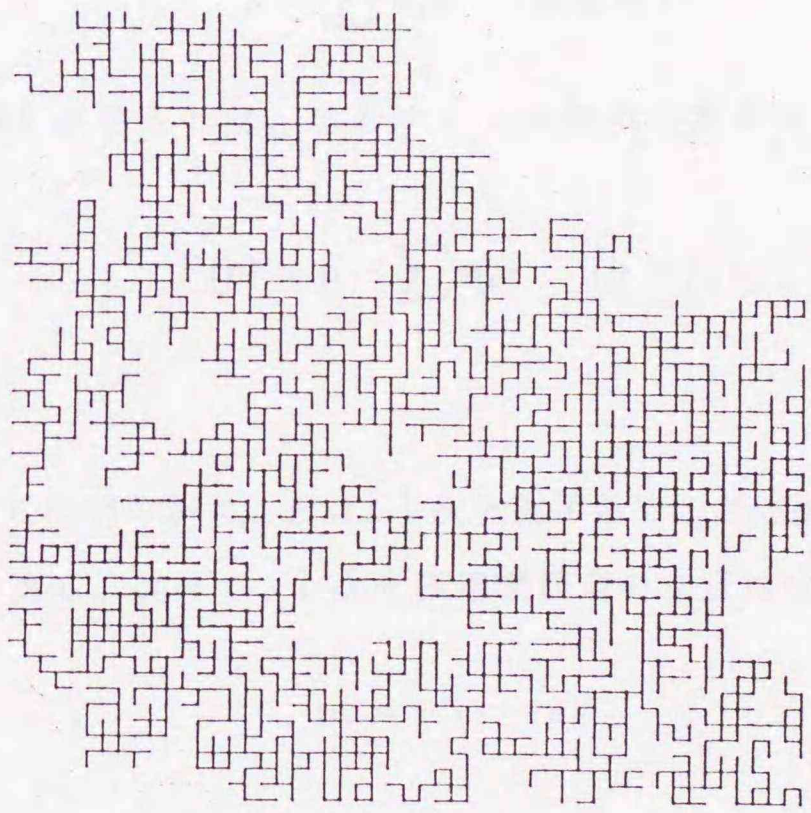


図 2–1.　臨界濃度におけるサイト型浸透網 (A) とボンド型浸透網 (B)。

的基礎を築いた。以後浸透網モデルはAnderson[22]やDomb[23]をはじめ、多くの研究者により物理学の諸問題と結び付けられてきた[24]。

Broadbentにより導入された量$P(p)$を考えてみよう。浸透網構造の統計的性質を理解する上で最も重要な量は、s個のサイトからなるクラスターの格子点当りの数n_sである。一般にn_sは、

$$n_s = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t \tag{2-1}$$

で与えられる。ここでg_{st}は、s個のサイトからなるクラスターのうち周縁のサイト数がtであるものの数である。もし、このn_sが厳密に求められれば浸透網構造に関する統計的諸量は正しく計算することができる。例えば、1次のモーメント$\sum_s n_s s$は任意の格子点がいづれかの有限サイズクラスターに属する確率を表し、それは$p < p_c$の場合浸透濃度pそのものである。

$$p = \sum_s n_s s \qquad (p < p_c) \tag{2-2}$$

従って、Broadbentが導入した、あるサイトが無限に大きなクラスターに属する確率$P(p)$は、

$$P(p) = p - \sum_s n_s s \qquad (p > p_c) \tag{2-3}$$

と書くことができる。

(2–1)式より直ちに明らかなことは、1次元格子系での浸透網において、$t = 2$, $g_{st} = 1$であるということである。従って、1次元浸透網構造の性質は分布関数

$$n_s = p^s (1-p)^2 \tag{2-4}$$

によって完全に理解される。1次元浸透網は$p_c = 1$のつまらないものであるが、次に述べるベーテ格子の場合とともに浸透網のスケーリング理論を構築する上で重要な役割を果たす。

クラスター数の分布が完全に明らかになっているもう一つの例はベーテ格子上の浸透網である。ベーテ格子は図2–2に示されるような格子で、中心の点からz本のボンドが出ており、各ボンドの他の端には格子点があり、この格子点からもz本のボンドが出ている。

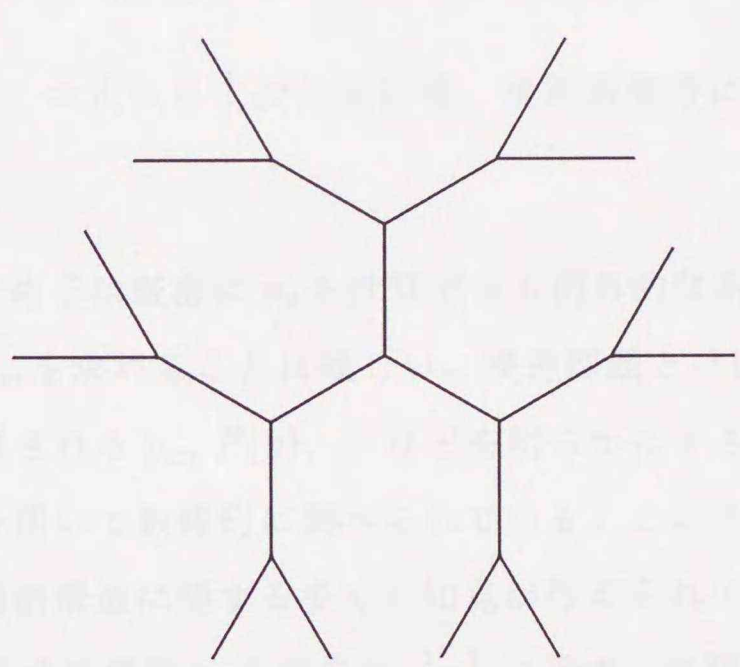


図 2–2.　$z=3$ のベーテ格子。

このような分岐を無限に繰り返すことによって得られる格子がベーテ格子である。この格子はある意味で無限次元の系と考えることができる*。ベーテ格子上の浸透網クラスターに関して $t=(z-2)s+2$ という関係式が成立するため**、n_s は

$$n_s = g_s p^s (1-p)^{2+(z-2)s} \tag{2–5}$$

となる。図 2–2 のように $z=3$ で s が十分大きく p が p_c に近い場合、(2–5)式は、

$$n_s \propto s^{-5/2} \exp\left[-(p-p_c)^2 s\right] \tag{2–6}$$

と書くことができる[6]。この式から 1 次元系同様、浸透網構造に関する諸量を計算することができる。

1 次元格子、ベーテ格子は厳密に n_s を計算できる例外的な系であり、他の多くの格子においては(2–1)式の g_{st} を求めることは難しい。浸透問題とは様々な系における g_{st}, n_s あるいはそれらから計算される p_c, $P(p)$, ···などを明らかにすることであり、その多くは大型のコンピューターを用いて数値的に調べられている。このような研究は現在でも精力的に行われており、浸透網構造に関する多くの知見が与えられている。現在まで明らかになっている格子上の臨界浸透濃度 p_c の値を表 2–1 に示す。次節で示すように浸透濃度の関数である量、例えば $P(p)$ などは、多くの場合 $p=p_c$ の回りで臨界的に振舞う。従って、これらの量の $p=p_c$ 近くでの様子は臨界指数によって特徴付けられる。臨界指数は格子の次元が同じであれば、格子の型や、サイト型かボンド型かに依らず一定の値をとる（ユニバーサリティ）。次節では浸透網のクラスター分布に対するスケーリング仮説、およびそれを基にして得られる臨界指数どうしの間の関係について述べる。

2–2. スケーリング理論と臨界指数

前節で 1 次元格子、ベーテ格子の浸透網に対する n_s が厳密に得られることを述べた。1 次元系の場合、(2–4)式より $p \sim p_c(=1)$ のとき、

$$n_s = p^s (1-p)^2 \simeq (p_c-p)^2 \exp\left[-(p_c-p)s\right] \tag{2–7}$$

＊ 一般の次元 d の物体においては、表面積$\propto$(体積)$^{1-1/d}$であるが、ベーテ格子では $r \longrightarrow \infty$ において 表面積$\propto$体積となり $1/d=0$ となる。

＊＊ 一つの孤立した点は、z個の近接した空格子に囲まれている。大きさ 2 のクラスターは $2z-2$ 個の空格子に囲まれる。その後、クラスターの大きさが 1 増えるたびに空格子は $z-2$ 個増える。従って、$t=(z-2)s+2$ となる。

次元	格子	サイト	ボンド
2	蜂の巣	0.6962^{A}	$1-2\sin(\pi/18)\ (=0.65271)^{\dagger B}$
	カゴメ	$0.652704^{\dagger C}$	$0.524430^{\dagger C}$
	正方	0.592745^{A}	$1/2^{\dagger B}$
	三角	$1/2^{\dagger B}$	$2\sin(\pi/18)\ (=0.34729)^{\dagger B}$
	ダイス	0.5851 ± 0.0004^{C}	$0.475570^{\dagger C}$
	ペンローズ	0.5837 ± 0.0003^{C}	0.4770 ± 0.0002^{C}
3	単純立方	0.3117^{A}	0.24865 ± 0.00013^{D}
			0.2488 ± 0.0001^{A}
	体心立方	0.245^{A}	0.18025 ± 0.00015^{E}
			0.1795 ± 0.0003^{F}
	面心立方	0.198^{A}	0.119^{A}
	ダイアモンド	0.428^{A}	0.388^{A}
4	単純立方	0.197^{G}	0.161 ± 0.0015^{H}
			0.16013 ± 0.00012^{D}
			0.16005 ± 0.00015^{E}
5		0.141^{G}	0.118 ± 0.01^{H}
			0.1182 ± 0.0002^{I}
			0.11819 ± 0.00004^{E}
6		0.108^{I}	0.094075 ± 0.0001^{I}
			0.09420 ± 0.0001^{E}
7		0.085^{I}	0.078^{H}
			0.078685 ± 0.00003^{E}
$d\to\infty$		$1/(2d-1)$	
	ベーテ（配位数 z）	$1/(z-1)$	

表 2–1. 各格子における浸透網の臨界濃度。†は厳密な値。参考文献および導出方法は次ページ参照。

前ページの文献と臨界濃度の導出方法

A) D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory*, (Taylor and Francis, London, 1985).

モンテ・カルロ　シミュレーション

B) J. W. Essam, D. S. Gaunt, and A. J. Guttmann, J. Phys. A**11**, 1983 (1978).

厳密解

C) S. Sakamoto, F. Yonezawa, and M. Hori, J. Phys. A**22**, L699 (1989).

モンテ・カルロ　シミュレーション

D) P. Grassberger, J. Phys. A**19**, 1681 (1986).

級数展開

E) J. Adler, Y. Meir, A. Aharony, and A. B. Haris, Phys. Rev. B**41**, 9183 (1990).

級数展開

F) D. S. Gaunt and M. F. Sykes, J. Phys. A**16**, 783 (1983).

級数展開

G) D. S. Gaunt and H. Ruskin, J. Phys. A**11**, 1369 (1978).

級数展開

H) J. Adler, A. Aharony, Y. Meir, and A. B. Harris, Phys. Rev. B**34**, 3469 (1986).

級数展開

I) H. Nakanishi and H. E. Stanley, Phys. Rev. BBf 22, 2466 (1980).

モンテ・カルロ　シミュレーション

また、ベーテ格子の場合(2–6)式より

$$n_s \propto s^{-5/2} \exp\left[-(p_c - p)^2 s\right] \tag{2–8}$$

である。そこでこれら2つのn_sの形の一般形として、

$$n_s = s^{-\tau} f\left[(p - p_c)s^{\sigma}\right] \tag{2–9}$$

が一般に成立すると仮定する。ここで$f(z)$は未知の関数、τ, σ は未知の量である。これが浸透網のn_sに対するスケーリング仮説である。(2–7)式が(2–9)式に含まれることは、(2–7)式で$z = (p_c - p)s$ とおくと$n_s = s^{-2} z^2 e^{-z} = s^{-2} f(z)$であることから分かる。スケーリング仮説(2–9)式が正しいことの証明はないが、これまでのところ浸透網に関するシミュレーションなどによって得られた結果のうちこのスケーリング仮説と相容れないものは見つかっていない。スケーリング関数$f(z)$の陽な形は、格子の種類，次元，サイト型・ボンド型の別によって異なる。しかし、浸透網のクラスター分布に関する極めて有用な情報は関数fの形を完全に決めなくても得られる。すなわち臨界指数どうしの間に成立する関係式が(2–9)式から求められる。以下にそれを示す。

p_cが臨界濃度と呼ばれるのは、これが2次相転移における臨界温度に対応しているからである。すなわち、p_c近くで浸透網の構造は臨界的に振舞い、幾つかの臨界指数を定義することができる。以下はその代表的なものである。

i) クラスターの総数　　：α

浸透網内に存在する有限の大きさのクラスター数Fは

$$F = \sum_s n_s \tag{2–10}$$

で与えられる。Fは$p = p_c$で有限にとどまる滑らかな項F_0と$(p - p_c)^{2-\alpha}$に比例する非解析的な項F^*の和で与えられる。臨界指数αは、

$$F^* \propto |p - p_c|^{2-\alpha} \tag{2–11}$$

で定義される。熱相転移においてFは系の自由エネルギーに対応しており、αは自由エネルギーを温度で2回微分したもの、すなわち比熱の臨界指数に対応している。

ii) 浸透強度（オーダー・パラメータ）　　：β

浸透強度Pは、Broadbentが導入したPすなわちあるサイトが無限に大きなクラスターに属する確率を意味し、(2–3)式で定義される。$p \sim p_c$のときは特に、

$$P(p) = \sum_s [n_s(p_c) - n_s(p)]\, s \tag{2–12}$$

と書くことができる。臨界指数βは$p \to p_c$で成立する式

$$P(p) \propto (p - p_c)^{\beta} \tag{2–13}$$

で定義される。熱相転移では、$P(p)$はオーダー・パラメータを意味するため、浸透網理論でもPをしばしばオーダー・パラメータと呼ぶ。

iii) 有限クラスターの平均サイズ　　：γ

浸透網内に存在する有限サイズのクラスターの平均サイズSは

$$S = \frac{\sum_s n_s s^2}{\sum_s n_s s} \tag{2–14}$$

で与えられる。$n_s s$が、格子点を任意に選んだときそれがサイズsのクラスターに属する確率であることを考えると、(2–14)式の意味は理解できる。$\sum_s n_s s = p$であり、$p \to p_c$で(2–14)式の分母は有限にとどまることを考えると、

$$S \propto \sum_s n_s s^2 \tag{2–15}$$

と書けることが分かる。臨界指数γは$p \to p_c$でのSに対して、

$$S \propto |p - p_c|^{-\gamma} \tag{2–16}$$

と定義される。熱相転移では、γは感受率の臨界指数に対応し、気液相転移では等温圧縮率、磁気相転移では等温磁化率の臨界指数に相当する。

iv) 伝導度　　：μ

静的臨界指数ではないが直流伝導度σ_Eもp_c近くで臨界的に振舞う。伝導度とは、例え

ば浸透網が金属のネットワークでできていた場合の電気伝導度を意味し、その臨界指数をμとすると、

$$\sigma_E \propto (p - p_c)^{\mu} \tag{2–17}$$

となる。$p < p_c$では系全体に拡がるクラスターは存在しないから$\sigma_E = 0$であり、$p = p_c$で初めて電流が流れる。従ってμは全ての次元で正の値をとる*。そのほか(2–9)式で導入されたσとτも浸透網の臨界指数であるが熱相転移に対応する指数は存在しない。

スケーリング仮説(2–9)式を用いてこれらの臨界指数の間を関係付けよう。まずオーダー・パラメータ Pは、(2–12)式より

$$P = \sum_s [n_s(p_c) - n_s(p)]\, s$$

$$= \int s^{1-\tau} [f(0) - f(z)]\, ds$$

ここで$z = (p - p_c)s^{\sigma}$である。積分変数をsからzに変換すると

$$P = (p - p_c)^{(\tau-2)/\sigma} \int z^{-1+(2-\tau)/\sigma} [f(0) - f(z)]\, dz/\sigma$$

となるが、積分は単に定数を与えるだけであるから、

$$P \propto (p - p_c)^{(\tau-2)/\sigma} \tag{2–18}$$

となる。この式と(2–13)式を比較することにより、

$$\sigma\beta = \tau - 2 \tag{2–19}$$

という関係が得られる。平均クラスター・サイズ S, クラスター総数 F^* に対しても同様に計算することによって、

$$S \propto |p - p_c|^{(\tau-3)/\sigma}$$

---

* 初めμはβと同じ値をとると考えられていた[J. M. Ziman, J. Phys. C**1**, 1532(1968)]。しかし、この考えが正しくないことは伝導性コロイドを塗ったグラフ用紙に小穴をあけたもの[B. P. Last and D. J. Thouless, Phys. Rev. **B9**, 4893(1974)]とか、つなぎ目をはさみで切ってある導線のメッシュ[B. P. Watson and P. L. Leath, Phys. Rev. **B9**, 4893(1974)]などについて直接行われた測定結果や、2 次元, 3 次元の浸透網に対するシミュレーション計算[S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **27**, 1722(1971)]によって示された。

$$F^* \propto |p - p_c|^{(\tau-1)/\sigma}$$

となるから、(2–16)式，(2–11)式より

$$\sigma\gamma = 3 - \tau \tag{2–20}$$

$$\sigma(2 - \alpha) = \tau - 1 \tag{2–21}$$

となる。(2–19)-(2–21)式より例えば

$$2 - \alpha = 2\beta + \gamma \tag{2–22}$$

$$\sigma = 1/(\beta + \gamma) \tag{2–23}$$

$$\tau = 2 + \beta/(\beta + \gamma) \tag{2–24}$$

などの関係式が得られる。これらの関係式は、クラスター数に関する臨界指数は2つの独立な指数によって計算できることを示している。F^*, P, Sは各々n_sの0次，1次，2次のモーメントであるが、一般にk次のモーメントに対する臨界指数δ_kもσとτ或はαとβなどの2つの臨界指数によって表すことができる。このような関係式をスケーリング関係式という。上で表した全てのスケーリング関係式は任意の次元で成立するものであり、スケーリング仮説(2–9)式が正しいならば厳密に成り立つ関係式である。それ故、数値計算などで求められた臨界指数の値が正しいかどうかを判断する場合にもこれらの関係式が用いられる。μのような動的臨界指数に関するスケーリング関係式については次章で述べる。

スケーリング仮説によって臨界指数同士の間に成立する関係式を見つけることができたが、臨界指数そのものの値は、この仮説から得ることができない。臨界指数を求めるための方法は非常に多く存在し、それらをここで説明することはしないが、代表的なものに

- 繰り込み群による方法[25–29)]
- クラスター展開法[30–38)]
- モンテ・カルロ法[39–42)]

・有限サイズ・スケーリングによる方法[43–45)]

などがあるが、これらのほとんど全てが計算機を用いた方法である。表2–2に現在までに知られている臨界指数の値を載せる。浸透網の臨界指数は格子の種類に対するユニバーサリティがあると考えられているので、各指数の次元ごとの値を示している。2次元系の指数の値が分数で表されているのは厳密な値に対する予想値である。また$d \geq 6$次元での値はベーテ格子上の浸透に対する厳密な値である。

このように浸透網のクラスター数やサイズは$p \to p_c$で臨界的に振舞い、その臨界性はスケーリング仮説で記述されることが分かった。しかし、そのクラスターがどのような構造をしているかについては(2–9)式の仮説は何も語っていない。次節では浸透網内のクラスター構造に着目したスケーリング仮説を導入し、浸透網クラスターの構造的特徴について議論する。

2–3. 自己相似性とフラクタル次元

浸透網には相関長ξ_pという唯一の特徴的長さが定義できる。これはある有限クラスターに属する2つの占有サイト間の平均距離として定義される。この長さξ_pの濃度依存性を見るために、サイズsのクラスター内の2つの占有サイト間の距離の二乗平均R_s^2を導入する。サイズsの1つのクラスター上に2点を選ぶ組合せはs^2通り有り、sクラスターの数はn_sだけあるから、$s^2 n_s$はサイズsの同一クラスター上に2点を選ぶ組合せの数となる。従って、確率$s^2 n_s / \sum_s s^2 n_s$でR_s^2の期待値をとった量がξ_p^2となるから、

$$\xi_p^2 = \frac{2\sum_s R_s^2 s^2 n_s}{\sum_s s^2 n_s} \tag{2–25}$$

と書くことができる。熱相転移での揺らぎの相関長が臨界点で指数νの発散を示すことから、浸透網に対しても

$$\xi_p \propto |p - p_c|^{-\nu} \tag{2–26}$$

によって臨界指数νを定義することができる。νと他の臨界指数とを関係付けるには(2–25)式におけるR_sのsやpに対する振舞いを知らねばならない。新しい臨界指数ρを導入して(2–9)式と同様なR_sに対するスケーリング仮説

$$R_s = s^\rho h\left[(p - p_c)s^\sigma\right] \tag{2–27}$$

指数	2次元	3次元	4次元	5次元	$d(\geq 6)$次元
β	$5/36^{A}$	0.42 ± 0.006^{B} 0.463^{D} 0.454 ± 0.008^{F} 0.474 ± 0.014^{E} $0.40\ \pm0.035^{F}$ 0.435 ± 0.035^{d} 0.44 ± 0.1^{E} 0.43 ± 0.04^{I} 0.34 ± 0.04^{K} 0.34^{M} 0.412 ± 0.010^{N} 0.405 ± 0.025^{L}	0.62^{C} 0.665 ± 0.15^{E} 0.64^{G} 0.56^{H} 0.65 ± 0.04^{I} 0.5^{J} 0.64 ± 0.02^{K} 0.639 ± 0.020^{L}	0.84^{C} 0.83 ± 0.1^{E} 0.84^{G} 0.67^{H} 0.7^{J} 0.835 ± 0.005^{K} 0.835 ± 0.005^{L}	1
γ	$45/18^{A}$	1.78 ± 0.05^{O} 1.73 ± 0.03^{F} 1.79^{E} 1.71 ± 0.06^{Q} 1.82 ± 0.04^{K} 1.75^{M} 1.74 ± 0.015^{M} 1.795 ± 0.005^{N} 1.805 ± 0.02^{L}	1.41 ± 0.25^{P} 1.44 ± 0.05^{E} 1.6 ± 0.1^{J} 1.44^{K} 1.435 ± 0.015^{L}	1.25 ± 0.15^{P} 1.20 ± 0.03^{E} 1.3 ± 0.1^{J} 1.18^{K} 1.185 ± 0.005^{L}	1
ν	$4/3^{A}$	0.88^{C} 0.88 ± 0.02^{F} 0.89 ± 0.01^{R} 0.88 ± 0.05^{I} 0.90 ± 0.02^{Q} 0.71^{S} 0.83 ± 0.01^{K} 0.81^{M} 0.875 ± 0.008^{N} 0.872 ± 0.007^{L}	0.66^{C} 0.64^{H} 0.68 ± 0.03^{I} 0.58^{S} 0.68^{K} 0.678 ± 0.050^{L}	0.57^{C} 0.51^{H} 0.53^{S} 0.57^{K} 0.571 ± 0.003^{L}	1/2
μ	$1.297^{+0.007\,T}_{-0.004}$ $1.303^{+0.004\,V}_{-0.014}$ 1.31 ± 0.03^{X}	2.02^{U} 3.6 ± 0.3^{W}	2.39^{U}	2.73^{U}	3
D_f	$91/48^{A}$	2.48 ± 0.09^{F}	3.3^{Y}	3.8^{Y}	4
d_s	0.3489 ± 0.01^{Z}	0.27^{a}	0.21^{b}	0.19^{b}	1/6

表 2–2. 浸透網の臨界指数。参考文献は次ページ参照。

前ページの文献と臨界指数の導出方法

A) B. Nienhuis, J. Phys. A**15**, 199 (1982); M. P. den Nijs, J. Phys. A**12**, 1857 (1979); B. Nienhuis, E. K. Riedel, and M. Schick, J. Phys. A**13**, 189 (1980); R. B. Pearson, Phys. Rev. B**22**, 2579 (1980).
厳密解
B) M. F. Sykes, D. S. Gaunt, and M. Glen, J. Phys. A**9**, 1705 (1976).
級数展開
C) M. Sahimi, J. Phys. A**17**, 3073 (1984).
級数展開
D) D. S. Gaunt, S. G. Whittington, and M. F. Sykes, J. Phys. A**14**, L247 (1981).
級数展開
E) J. Adler, A. Aharony, Y. Meir, and A. B. Harris, J. Phys. A**19**, 3631 (1986); Phys. Rev. B**30**, 2832 (1984).
級数展開
F) D. S. Gaunt and M. F. Sykes, J. Phys. A**16**, 783 (1983).
級数展開
G) J. Adler, A. Aharony, Y. Meir, and A. B. Harris, Phys. Rev. B**34**, 3469 (1986).
級数展開
H) N. Jan, D. C. Hong, and H. E. Stanley, J. Phys. A**18**, L935 (1985).
モンテ・カルロ繰り込み群
I) J. Adler, Z. Phys. B**55**, 227 (1984).
級数展開
J) S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **36**, 69 (1976).
モンテ・カルロ　シミュレーション
K) O. F. de Alcantara Bonfim, J. E. Kirkham, and A. J. McKane, J. Phys. A**13**, L247 (1980); **14**, 2391 (1981).
ε展開
L) J. Adler, Y. Meir, A. Aharony, and A. B. Harris, Phys. Rev. B**41**, 9183 (1990).
級数展開
M) J. S. Reeve, J. Phys. A**15**, L521 (1982); J. S. Reeve, A. J. Guttmann, and B. Keck, Phys. Rev. B**26**, 3923 (1982).
vertex 展開
N) R. M. Ziff and G. Stell,
モンテ・カルロ　シミュレーション
O) H. Nakanishi and H. E. Stanley, Phys. Rev. B**22**, 2466 (1980).
モンテ・カルロ　シミュレーション
P) D. S. Gaunt, M. F. Sykes, and H. Ruskin, J. Phys. A**9**, L43 (1976).
モンテ・カルロ　シミュレーション
Q) H. Saleur and B. Derrida, J. Phys. (Paris) **46**, 1043 (1985).
t-行列法
R) A. Margolina, H. J. Herrmann, and D. Stauffer, Phys. Lett. **93A**, 73 (1982); D. W. Heermann and D. Stauffer, Z. Phys. B**44**, 339 (1981).
モンテ・カルロ　シミュレーション
S) K. Newman, E. K. Riedel, and S. Muto, J. Phys. A**29**, 302 (1984).
Scaling Field 法
T) C. J. Lobb and D. J. Frank, Phys. Rev. B**30**, 4090 (1984).
モンテ・カルロ　シミュレーション
U) J. Adler, 1984 preprint.
級数展開
V) D. J. Frank and C. J. Lobb, Phys. Rev. B**37**, 302 (1988).
モンテ・カルロ　シミュレーション
W) N. Wagner and I. Balberg, J. Stat. Phys. **49**, 369 (1987).
モンテ・カルロ　シミュレーション
X) J. M. Gordon, A. M. Goldman, and B. Whitehead, Phys. Rev. B**38**, 12019 (1988).
モンテ・カルロ　シミュレーション
Y) D. Stauffer, Phys. Rep. **54**, 1 (1979).
モンテ・カルロ　シミュレーション
Z) D. C. Hong, S. Havlin, H. J. Herrmann, and H. E. Stanley, Phys. Rev. B**30**, 4083 (1984).
モンテ・カルロ　シミュレーション
a) R. B. Pandey, D. Stauffer, and J. G. Zabolitzky, J. Stat. Phys. **49**, 849 (1987).
モンテ・カルロ　シミュレーション
b) S. Alexander and R. Orbach, J. Phys. (Paris) Lett. L625 (1982).

を考え、(2–9)式とともに(2–25)式に代入すると

$$\xi_p \propto \frac{|p-p_c|^{-(3+\rho-\tau)/\sigma}}{|p-p_c|^{-(3-\tau)/\sigma}} \propto |p-p_c|^{-\rho/\sigma} \tag{2–28}$$

が得られる。従って(2–26)式より

$$\rho = \sigma\nu \tag{2–29}$$

というスケーリング関係式が求められる。

(2–27)式より $p = p_c$ では $R_s \propto s^{\rho}$、すなわち

$$s \propto R_s^{1/\rho} \tag{2–30}$$

であることを示している。R_sがサイズ s のクラスターの平均の差渡し距離であることを考えると、(2–30)式は $1/\rho$がクラスターの有効次元であることを表している。$1/\rho$は浸透網において一般に非整数値をとる。このような非整数次元は、その系のフラクタル次元と呼ばれている。フラクタルとは自己相似性を意味しており、図 2–3 に示される Sierpinski Gasket はフラクタル性を持つ図形の代表として知られている。この図のようにその一部を拡大すると元の図形と同一になる構造を自己相似構造と呼ぶ。

Sirpinski Gasket の測度を M として Mが一辺の長さ L によってどの様に表されるかを考えてみる。図 2–3 の一番大きな三角形の一辺を L、この図形全体の測度を Mとし、$M \propto L^{D_f}$ と書けるとする。ここで D_f は未知の定数であり、Sierpinski Gasket の有効次元となる指数である。一辺 $L/2$ の一回り小さな三角形の測度は図 2–3 より明らかなように $M/3$ である。従って、

$$\left(\frac{M}{3}\right) \propto \left(\frac{L}{2}\right)^{D_f} \tag{2–31}$$

となり、

$$D_f = \frac{\log 3}{\log 2} \simeq 1.585 \tag{2–32}$$

が得られる。この D_fが Sierpinski Gasket のフラクタル次元であり、やはり非整数値をとっている。このように系に自己相似性がある場合、系の有効次元は非整数になり、この非整数次元すなわちフラクタル次元によって系の構造は特徴付けられる。

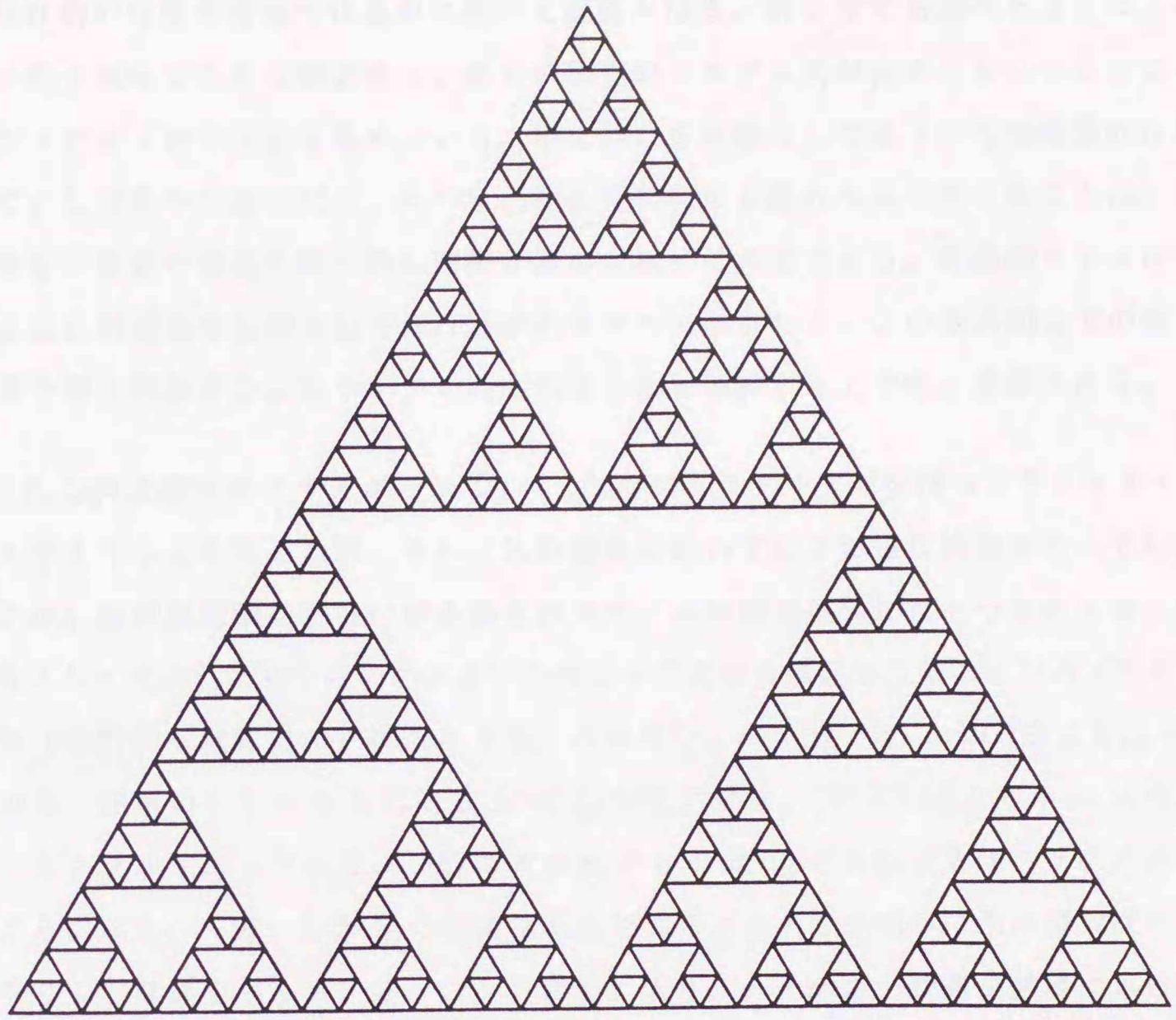


図 2–3.　Sierpinski ガスケット。

$p = p_c$の浸透網は、図2–3のように完全な自己相似性を持っているわけではない。しかし、占有サイトの分布の仕方は統計的に自己相似であり、そのフラクタル次元は浸透網の静的及び動的性質を特徴付けるのに極めて重要となる。第1章でも述べたようにこのような統計的な意味での自己相似性は、多くの現実のランダム系が有するものであることが最近分かってきており注目を集めている。単に乱れを摂動として扱うか有効媒質的な見方で扱っていた従来の方法に対し、系の自己相似性に着目し乱れた系を考えることは、ランダム系特有の性質や現象を統一的に理解するのに極めて有効である。浸透網モデルはランダム性と自己相似性を自然な形で含む基本的モデルであるため、この浸透網上での様々な物理現象を解き明かすことはランダム系の物理全体を理解する上で特に重要である。

$p = p_c$の浸透網内のクラスターは$D_f = 1/\rho$のフラクタル次元を持つフラクタル・ネットワークであることを示したが、それ以外の濃度においてはどの様な構造をとっているのであろうか。浸透網構造を特徴付ける長さのスケールは相関長ξ_pただ一つであるから、考えているスケールがξ_pより小さいか大きいかによって異なる構造をとることはあっても、それ以外の（統計的な意味での）構造をとることはない。$p = p_c$では(2–26)式より$\xi_p \to \infty$となるので、任意のスケールLに対し$L \ll \xi_p$が成立する。(2–30)式より$p = p_c$の場合は系はフラクタルであったから、一般に$p \neq p_c$でも$L \ll \xi_p$であれば系はフラクタル構造をとることになる。一方、$L \gg \xi_p$の極端な場合である$p = 1$では明かに系は整数次元を持つユークリッド構造をとっている。以上の議論により、$p \neq p_c$の一般的な濃度における浸透網内のクラスターの構造は$L \ll \xi_p$ではフラクタル、$L \gg \xi_p$ではユークリッド的になることが分かる（表2–3）。$L \sim \xi_p$ではフラクタル構造とユークリッド構造とがクロスオーバーすることになる。後に示すように、浸透網の動力学的性質にもこのクロスオーバーは興味深い役割を示す。

次に、浸透網のフラクタル次元D_fが他の臨界指数とどのように関係付けられているかを示す。浸透網内の無限大クラスターに属するサイトのうち一辺Lの超立方体の内部に含まれるものは、$L \ll \xi_p$であればL^{D_f}に比例し、$L \gg \xi_p$ならばPL^dとなる。ここでPは(2–13)式で与えられる浸透網のオーダー・パラメータである。$L \sim \xi_p$では両者が同程度となるので、

$$\xi_p^{D_f} \propto P\xi_p^d \quad . \tag{2–33}$$

スケール	構造	有効次元
$L \ll \xi_p$	フラクタル構造	フラクタル次元 D_f (非整数)
$L \gg \xi_p$	ユークリッド構造	ユークリッド次元 d (整数)

表 **2–3.**　浸透網構造とスケールの関係。

この関係式と(2–13)式、(2–26)式から

$$D_f = \frac{1}{\rho} = d - \frac{\beta}{\nu} \tag{2–34}$$

が得られる。(2–20)-(2–24)式のスケーリング関係式を用いると、例えば

$$\nu = \frac{1}{d}(\gamma + 2\beta) \tag{2–35}$$

が得られる。(2–34)式、(2–35)式のスケーリング関係式は次元数 d を含んでいる。このような関係式はハイパー・スケーリング則と呼ばれており、2 次元，3 次元のような低次元では成立するが、上部臨界次元 d_cに近付くと成立しなくなる特別な関係式である。浸透網では $d_c = 6$ であり、6 次元以上の高次元では平均場近似すなわち $d \to \infty$ に相当するベーテ格子上の浸透網に対する厳密解が成立するようになる。しかし、この次元では明かに(2–34)式や(2–35)式は成立していないことが表 2–2 より分かる。

この節を終える前に浸透網の有限サイズ・スケーリング理論について述べておく。浸透網が無限に大きければ $p \to p_c$で Pやξ_pなどの量が臨界的に振舞うことは分かった。それでは、十分大きいが有限の大きさの格子上の浸透網を考えた場合、$p \sim p_c$で興味ある様々な量はどのように振舞うのであろうか。この振舞いを明らかにすることは、単に有限サイズ浸透網でのシミュレーションを行う際有用であるばかりでなく、浸透網上の動力学的性質を考える場合に重要となる。有限サイズ浸透網に対する一般的なスケーリング則を示す前に、まずオーダー・パラメータ Pを例にとって考える。一辺 L の d 次元格子に作られた臨界濃度近傍の浸透網のオーダー・パラメータは、L が十分大きいとき(2–27)式との類推から

$$P = L^{-a} F\left[(p - p_c)L^b\right] \tag{2–36}$$

となると考えられる。Fはスケーリング関数、a, b は適当な臨界指数である。関数 $F(z)$ ($z \equiv (p - p_c)L^b$)の性質から指数 a および b を既知の臨界指数を用いて表そう。$z \to +\infty$ すなわち $p > p_c$で $L \to \infty$ における関数 $F(z)$の漸近形は Pが L に依存しないことから、$F(z) \propto z^{a/b}$ $(z \to +\infty)$でなければならない。従ってこのとき $P \propto (p - p_c)^{a/b}$となり

$$\beta = \frac{a}{b} \tag{2–37}$$

が成立する。一方、$z=0$ すなわち $p=p_c$ では $P=L^{-a}F(0)\propto L^{-a}$ である。$p=p_c$ の最大クラスターに含まれる格子点の数は L^{D_f} に比例するから $P\propto L^{D_f}/L^d$ となり、$P\propto L^{-a}$ と比較すると

$$a=d-D_f \tag{2–38}$$

が得られる。$D_f=d-\beta/\nu$ と(2–37), (2–38)式から $a=\beta/\nu$, $b=1/\nu$ が得られ、結局オーダー・パラメータ P に関して

$$P=L^{-\beta/\nu}F\left[(p-p_c)L^{1/\nu}\right] \tag{2–39}$$

のようなスケーリング則が導かれる。オーダー・パラメータに関する上記の理論を一般化すると、ある量 M が臨界濃度に近い無限系浸透網上で $M\propto(p-p_c)^m$ のように振舞うならば、有限サイズにおいては、

$$M=L^{-m/\nu}G\left[(p-p_c)L^{1/\nu}\right] \tag{2–40}$$

の様に振舞う。この式が有限サイズ・スケーリング則であり、有限サイズ格子上の浸透網における物理量のサイズ依存性を示している。スケーリング則(2–40)式は $L\ll\xi_p$ であれば M にとって ξ_p はもはや特徴的長さではなくなり、システム・サイズ L がその系の相関長と同じ役割を果たすことを意味している。

前節および本節の議論より、浸透網内のクラスター数やクラスター構造が浸透濃度やスケールに対してどのように振舞うかについて、スケーリング理論の枠内で理解することができた。しかし、スケーリング理論はあくまで系の漸近的振舞いを記述しているに過ぎない。臨界指数やフラクタル次元などを定量的にしかも解析的に議論するには浸透網は余りに複雑すぎる。そこで浸透網構造の構造的特徴を抽出し単純化した決定論的構造モデルを考えることは非常に意義深い。次節ではこのような構造モデルの一つであり、本研究と密接に関連している Nodes-Links-Blobs モデルについて述べる。

2–4. Nodes-Links-Blobs モデル

図 2–1 を見て分かるとおり、無限大の浸透網クラスターは大ざっぱに言って様々な大きさのループ（ブロッブ），それらを結ぶボンド（リンク），リンクとリンクの結節点（ノー

ド)、およびこれらから枝葉のように出ているデッドエンドと呼ばれる部分から成り立っている。デッドエンドとは浸透網内で袋小路になっている部分であり、言い換えれば両端に電位差をかけられた金属浸透網の中で電流が流れない部分である。$p \sim p_c$であれば無限大浸透網クラスターの大部分はデッドエンドであり、それ以外の骨格部分(バックボーン)はわずかである。Skal-Shklovskii-de Gennes (SSG)[46,47]はξ_pより大きなスケールでは浸透網がユークリッド的構造をとっていることを考慮し、浸透網の無限大クラスターの構造を図2–4のようなノードとリンクとブロッブおよびデッドエンドから構成されるネットワークとして単純化した(SSGモデル)。リンクやブロッブやデッドエンドの数が実際の浸透網内でどの様に分布しているかはPikeとStanley[48]によって数値的に調べられており、その分布にしたがって浸透網構造に近いSSGモデルを組み立てることができる。

浸透網の多くの動的性質、例えば電気伝導などを支配するのは無限大クラスターのバックボーン部分である。SSGモデルにおいてデッドエンドを除き、さらにξ_p以下のスケールでのフラクタル性を考慮したモデルにNodes-Links-Blobsモデル[49,50]がある。このモデルを説明する前に$p = p_c$での無限大クラスター$(\xi_p \to \infty)$のバックボーン構造を単純化したモデルである階層格子モデル[51–54]を説明する。この場合$\xi_p \to \infty$であるから、あらゆるスケールにおいて浸透網は自己相似的である。数値計算などの研究により、$p = p_c$ではバックボーンも全スケールで自己相似構造をとっていることが知られている[55]。もちろんバックボーンのフラクタル次元D_f^{BB}は浸透網全体のフラクタル次元D_fとは異なる値をとっている。$p = p_c$でのバックボーンにはノードがないため、リンクとブロッブのみで自己相似構造を作っていることになる。階層格子モデルは、そのようなフラクタル格子の一つで、図2–5に示されるような繰り返し操作によって作られる。この図は2次元浸透網のバックボーンに対するモデルである。図中のループはブロッブを表し、それ以外の一重結合部分がリンクとなる。図の一番上から第0, 1, 2階層と呼ぶと第N階層の階層格子モデル中のボンド数N_B, リンク数L_1は各々$N_B = 4^N$, $L_1 = 2^N$である。またボンド1本の長さを1としたとき、系の全長Lは$L = 3^N$であるから、N_B, L_1をLで表すと

$$N_B = L^{\frac{\log 4}{\log 3}} \tag{2–41}$$

$$L_1 = L^{\frac{\log 2}{\log 3}} \tag{2–42}$$

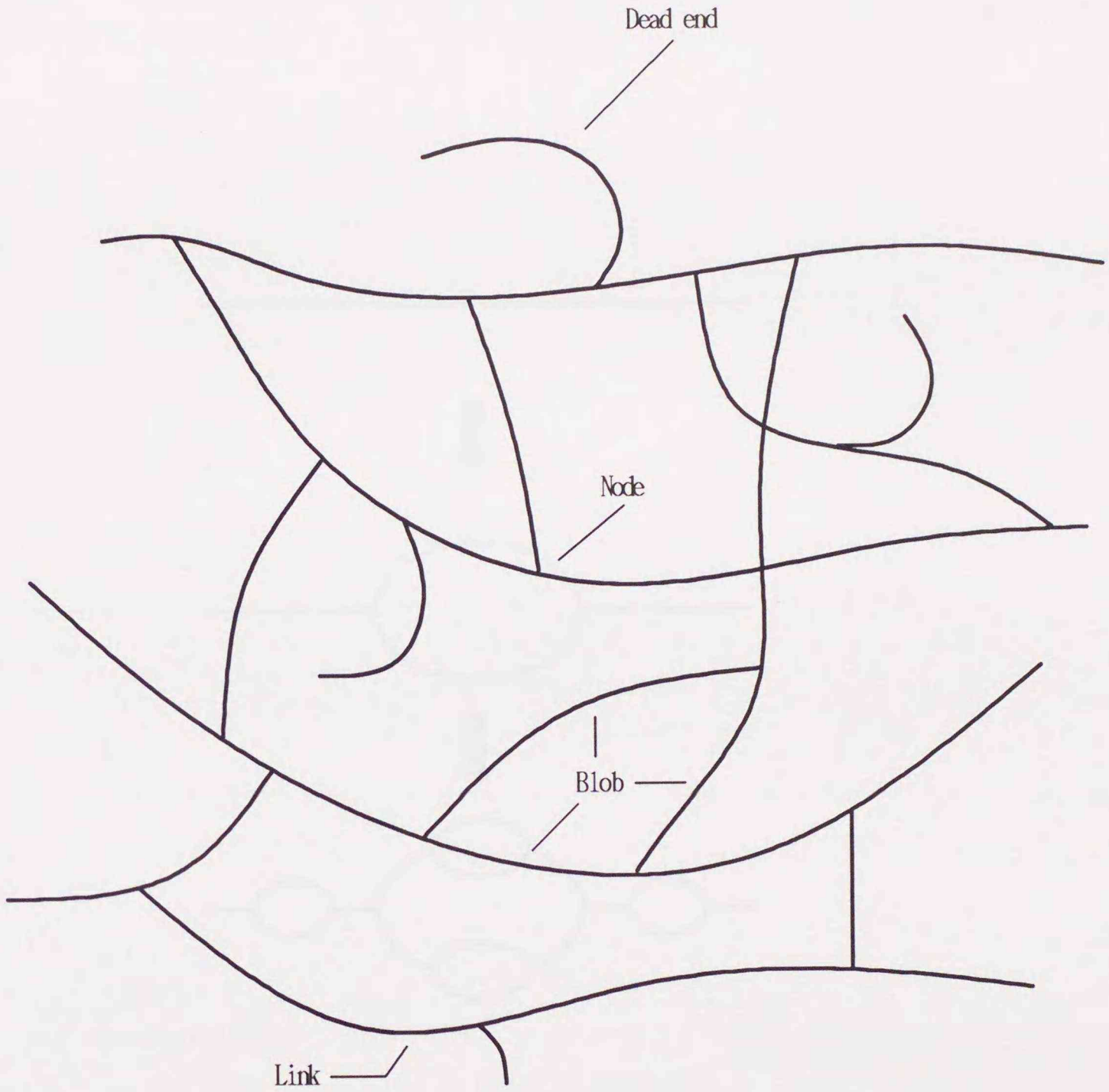


図 2–4.　SSG モデル。ノード、リンク、ブロッブおよびデッド・エンドより構成されている。

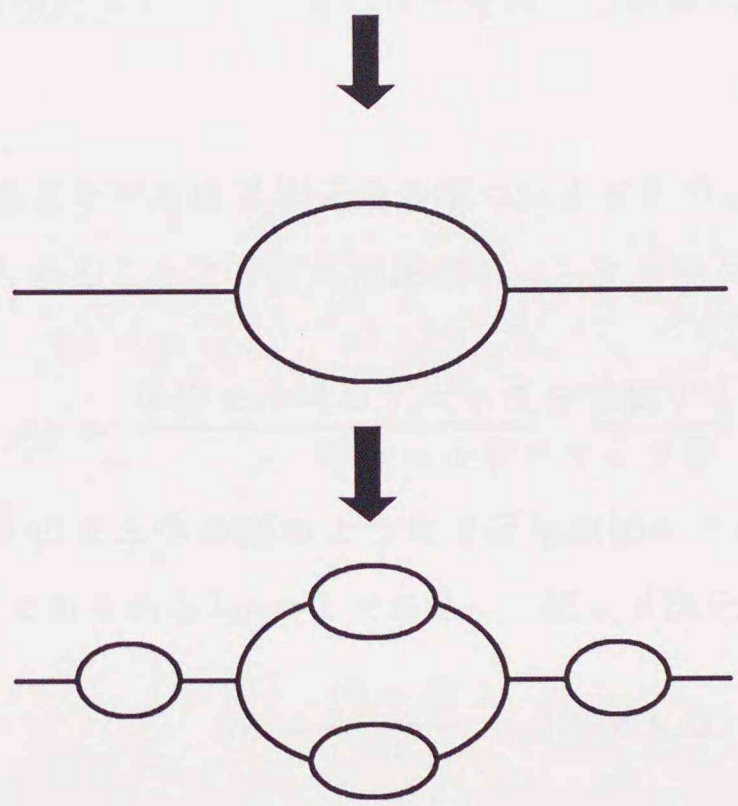


図 **2–5.** 臨界濃度の浸透網のバックボーンに対する階層格子モデル。$\lambda_H = 1$ の場合の図であり、2 次元浸透網に対応する。

となる。(2–41)式は、$\log 4/\log 3$ が階層格子モデルのフラクタル次元 D_f^{HL} であることを意味している。実際の 2 次元浸透網におけるバックボーンのフラクタル次元 D_f^{BB} が 1.594[29,56–59] であるから $D_f^{HL} = \log 4/\log 3 \simeq 1.262$ はやや小さいもののおおよその特徴をつかんでいる。(2–42)式はリンク数に対する Coniglio の関係式[49]

$$L_1 \propto L^{1/\nu} \tag{2–43}$$

に対応するものであり、階層格子モデルでは$\nu = \log 3/\log 2 \simeq 1.585$ となる。表 2–2 より 2 次元では$\nu = 4/3$ であるから、この値も多少本物の浸透網からはずれている。それにも関わらず階層格子モデルがよく利用されるのは、浸透網の動的性質をこのモデルで解析的に調べたものと、数値計算によって得られた実際の浸透網のものとがよく一致しているからである[54]。

図 2–5 の階層格子モデルは 2 次元浸透網に対するものであったが、次式で定義されるパラメータλ_Hを導入することで d 次元浸透網のバックボーンに対するモデルへ拡張することができる。

$$\lambda_H = \frac{\text{単位セル内のブロックを構成するボンド数}}{\text{単位セル中のリンク数}}$$

単位セルとは図 2–5 のまん中の図のような自己相似図形の基本構造を言う。図 2–5 の場合、分母分子とも 2 であるから$\lambda_H = 1$ である。一般に d 次元浸透網のバックボーンの場合、

$$\lambda_H = \frac{(6-d)}{4} \quad , 2 \leq d \leq 6 \tag{2-44}$$

と選ぶことにより、本物の d 次元浸透網のバックボーンをうまくモデル化できると考えられている。しかし、このモデル化はバックボーン上の動力学に対しては威力を発揮するが、νや D_f^{BB} のような静的臨界指数は高次元になるほど実際のものとはずれてくる。実際の浸透網のバックボーンのフラクタル次元 D_f^{BB} と階層格子モデルのフラクタル次元 D_f^{HL} およびνを各次元で比較したものを表 2–4 に示す。

階層格子モデルでは $p = p_c$の浸透網のバックボーンに対するモデルであった。このモデルとデッドエンドを取り去った SSG モデルを組み合わせることによって $p \neq p_c$での浸透網バックボーンをモデル化することができる。これが Nodes-Links-Blobs モデル[49,50]である（図 2–6 ）。このモデルは $L < \xi_p$のスケールでは決定論的自己相似構造をと

d	D_f^{HL}	D_f^{BB}	ν	ν^{HL}
2	1.262	1.594[A]	4/3	1.585
3	1.185	1.83[B]	0.88	1.325
4	1.113	1.89[B]	0.66	1.161
5	1.048	1.93[B]	0.57	1.057
≥ 6	1	2	1/2	1

表 **2–4.** Nodes-Links-Blobs モデルによる D_f と ν と浸透網バックボーンにおける D_f と ν との比較。

A) M. Sahimi, J. Phys. A**17**, 3073 (1984).

B) D. C. Hong and H. E. Stanley, J. Phts. A**17**, 3073 (1984).

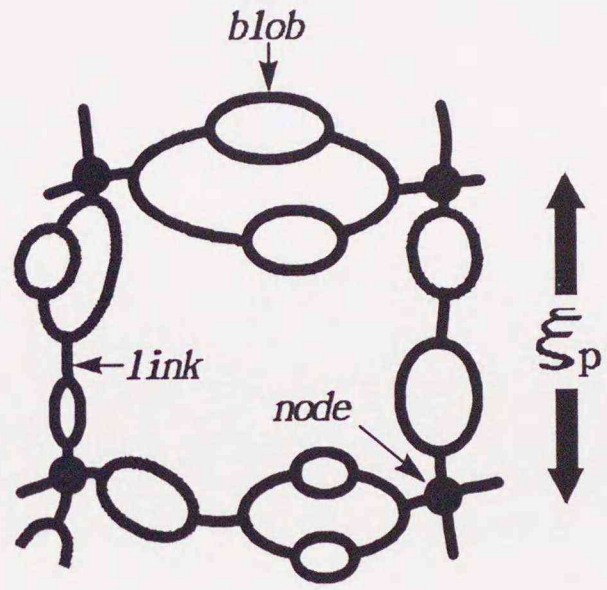


図 2–6.　Nodes-Links-Blobs モデル。

り、$L > \xi_p$ではξ_pを単位とした規則格子構造をとっている。浸透網の構造的特徴を決定論的構造にうまく焼きなおしたこのモデルは、浸透網の動力学的側面を研究する上で特に有用である。

第3章　浸透網上の異常拡散

Broadbent と Hammersley が浸透網モデルを提唱したのはガスマスク内の細孔ネットワーク中をガスがどの様に拡散するかを考えるためであった[19,21]。それ以後、多孔媒質中の色素拡散[60–64]，アモルファス半導体の電気伝導[12,65,66]，高分子化合物のゲル化[67,68]，アモルファス固体中の水素拡散[69] など、浸透網に関する理論は特に拡散現象と関連して発展してきた。浸透網上の拡散原子は動ける経路が制約されているため、通常の格子上の拡散に比べて遅くなることが期待される。しかし、どの程度遅くなるのか、拡散係数は浸透濃度 p に対しどの様に依存するのかは自明ではない。この問題は 1976 年 de Gennes[70] により“迷宮の中の蟻”の問題として提起された。de Gennes は、この問題を解明することは、単に上述したランダム系の拡散現象そのものを明らかにするだけではなく、乱れた系の一般的ダイナミクスを理解するために基礎を与えることになると主張した。その具体例は次章で取り上げるが、ここでは浸透網上の拡散について現在まで得られている知見について述べる。

3–1.　迷宮の中の蟻

“迷宮の中の蟻”において迷宮は浸透網、蟻はランダム・ウォーカーを表していることは言うまでもないが、蟻の種類によって拡散の仕方が異なってくることに注意しなければならない。図 3–1 は、3 種類の蟻がサイト数 5 の 1 次元クラスター上を動くときの動き方を示している。いづれの場合も初期状態 $(t=0)$ で蟻は中央のサイトにいるものとする。●の下の数字は、各時間ステップにおいて蟻がそのサイトに存在する確率を表す。(A) は時間の各段階で次ぎに進むべき点を全ての最近接点（占有・非占有を問わず）から等確率で選び、もし選ばれた点が非占有格子であれば、元の点から動かないような拡散のしかたを表している。このような種類の蟻は“盲目の蟻 (blind ant)[71]”と呼ばれている。図 3–1 のような 5 サイトからなるクラスターの場合、$t \to \infty$ で明らかに各サイトに存在する確率は 1/5 に収束する。(B) は“近視の蟻 (myopic ant)[71]”と呼ばれている蟻の拡散の様子である。この蟻は現在自分がおかれている地点から進むことのできるサイト（占有された最近接サイト）がどれであるかを判断し、それらの中から次に進むべき点を等確率で選択する。この場合 $t=1$ と $t=3$ は同じパターンであり、存在確率は振動するため $t \to \infty$ でも一定値に収束しない。(C) は自己回避型ランダム・ウォーク (self-avoiding random

	(A) bliant ant					(B) myopic ant					(C) 自己回避型				
	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●
$t=0$	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0
$t=1$	0	1/2	0	1/2	0	0	1/2	0	1/2	0	0	1/2	0	1/2	0
$t=2$	1/4	0	1/2	0	1/4	1/4	0	1/2	0	1/4	1/2	0	0	0	1/2
$t=3$	1/8	3/8	0	3/8	1/8	0	1/2	0	1/2	0	1/2	0	0	0	1/2
$t=4$	1/4	1/16	3/8	1/16	1/4	1/4	0	1/2	0	1/4	1/2	0	0	0	1/2

図 **3–1.** 5サイトから成るクラスター上の蟻のランダム・ウォーク。●はサイト、その下の数字は各時間ステップにおいてそのサイトに蟻が存在する確率を表す。(A)は blind ant 、(B)は myopic ant 、(C)は自己回避型ランダム・ウォークを表している。

walk)を表しており、一度通った道は二度と通ることはできないという制約付きの拡散である。図3–1のような1次元系の場合、単に一方向（右または左）への弾道的運動を示すに過ぎないが、2次元，3次元における自己回避型ランダム・ウォークは高分子のランダム構造のモデルとしてよく用いられる[68,71]。

数値的な研究[72]の結果 blind ant の問題と myopic ant の問題は同じユニバーサリティ・クラスに属していることが分かっているが、浸透網上の拡散に関する多くの研究では blind ant による拡散を前提として議論されている。これは blind ant が長時間の極限ではクラスター内の全ての占有サイトを同等に訪れるため、理論的及び数値的取扱が容易であるからである。次節で述べる拡散のスケーリング理論においても blind ant による拡散を想定している。自己回避型ランダム・ウォークは blind ant や myopic ant と異なるユニバーサリティ・クラスに属しており、それ自身は興味深い性質を持っているが、本研究では直接関係無いので詳細は文献[71]に譲り本論分では取り上げない。

浸透網の拡散問題を解明するということは、二乗平均拡散距離 $\langle R^2 \rangle$ の時間依存性を明らかにすることであり、その振舞いが浸透濃度 p によってどの様に変化するかを示すことである。これまでにこの問題に対する数多くの仕事がなされており、様々な知見が得られている。その多くは計算機による数値計算であるが、結果については拡散現象のスケーリング理論と共に次節でふれる。

3–2. 異常拡散のスケーリング理論

de Gennes により“迷宮の中の蟻”の問題が提起されてから7年後、Gefen, Aharony および Alexander[73] によって浸透網上の拡散現象に対するスケーリング理論が与えられた。彼等の理論によって浸透網のみならずフラクタル系のダイナミクスに関する議論全体が飛躍的に進展した。特に本研究で扱うフラクトン力学においては、彼等のスケーリング理論が全ての出発点となっているので、以下にこの理論を説明する。これより以降の全ての議論において浸透網といった場合、特にことわらない限り $p \geq p_c$ では無限大クラスターを指し、$p < p_c$ ではある有限の大きさのクラスターを指すことにする。

$p > p_c$ の浸透網上の拡散で十分時間が経過し、二乗平均拡散距離 $\langle R^2 \rangle$ が相関長の二乗

ξ_p^2よりも十分大きくなったときを考える。前章で述べたように、このスケールでは浸透網は一様構造と見なすことができるので通常の拡散

$$\langle R^2 \rangle \propto D_\infty t \tag{3–1}$$

が成立していると考えられる。D_∞は拡散係数であり、Einsteinの関係より、伝導度σ_Eとキャリア濃度nを用いて

$$D_\infty \propto \sigma_E / n \tag{3–2}$$

と表すことができる。σ_Eは(2–17)式より臨界点近傍で$\sigma_E \propto (p - p_c)^\mu$のように振舞い、$n$は全空間に対する無限大クラスターの割合、すなわちオーダー・パラメータPに比例する。従って、(2–13)式より$p > p_c$, $t \to \infty$での拡散係数D_∞の浸透濃度依存性は、

$$D_\infty \propto (p - p_c)^{\mu - \beta} \tag{3–3}$$

のようになる。$\mu - \beta$の値は表2–2より全ての次元で正である。これは無限大の大きさを持った全浸透網（βで記述される）の中で実質的に電流が流れるのは前章で述べたバックボーン部分のみであることを表している。また、$\mu - \beta > 0$ということは濃度pを上からp_cに近付けるにつれて、拡散は遅くなるという直感的な事実をも物語っている。但し、このとき$\langle R^2 \rangle$がtに比例するという時間依存性そのものは変化していないことに注意する。

浸透網上の拡散が特に興味深いのは$p = p_c$或はξ_pよりも短いスケールでの拡散である。このスケールでの拡散は通常拡散と質的に異なるものである。この振舞いを見るために、まず$p < p_c$を考える。このとき浸透網は全て有限の長さを持ち、その大きさはξ_p程度となる。従って十分時間が経過した後には$\langle R^2 \rangle$はtに依存せず

$$\langle R^2 \rangle \propto \xi_p^2 \propto |p - p_c|^{-2\nu} \tag{3–4}$$

となるであろう。(3–1)式と(3–4)式により、$p > p_c$および$p < p_c$での$t \to \infty$における拡散が各々記述されたので、次式のようなスケーリング関数を導入して$p = p_c$における$t \to \infty$での振舞いを調べてみよう。

$$\langle R^2 \rangle^{1/2} = t^x F\left[(p - p_c) t^y\right] \tag{3–5}$$

$p > p_c$で(3–1)式が成立するためには $F(z)_{z\to\infty} \propto z^{(\beta+\mu)/2}$ とならなければならない。従って、(3–1)式と(3–5)式より

$$\frac{y(\mu-\beta)}{2} + x = \frac{1}{2} \tag{3–6}$$

また、$p < p_c$では $\langle R^2 \rangle$ は時間に依存しなくなるので $F(z)_{z\to-\infty} \propto z^{-x/y}$ となる。このとき(3–4)式，(3–5)式から

$$\frac{x}{y} = \nu \tag{3–7}$$

となる。(3–6)式，(3–7)式から

$$x = \frac{\nu}{2\nu+\mu-\beta} \tag{3–8}$$

$$y = \frac{1}{2\nu+\mu-\beta} \tag{3–9}$$

が得られ、これを(3–5)式に代入することにより $p = p_c$では

$$\langle R^2 \rangle^{1/2} \propto t^{d_s} \tag{3–10}$$

但し、

$$d_s = \frac{\nu}{2\nu+\mu-\beta} \tag{3–11}$$

となることが導かれる。指数 d_sの値は表 2–2 にまとめられているが、いずれの次元においても通常拡散の指数 1/2 より小さいことが分かる。浸透網上のこのような遅い拡散をGefen 等[73]は“異常拡散”と名付けた。

(3–5)式より拡散の様子が異常拡散から通常拡散へクロスオーバーする時間τの浸透濃度依存性を見積ることができる。τは$(p-p_c)\tau^y \sim 1$ であるから(3–9)式より

$$\tau \sim (p-p_c)^{2\nu+\mu-\beta} \tag{3–12}$$

となる。すなわち $p > p_c$の場合、$t \ll \tau$であるなら(3–10)式で記述される異常拡散が、$t \gg \tau$になれば通常拡散が起こることを(3–5)式は示している。長さのスケールでいうと、$L \ll \xi_p$のスケールでの拡散と $L \gg \xi_p$での拡散が各々、異常拡散・通常拡散に対応している。

d_sの値は、数値計算により直接 $\langle R^2 \rangle$ の時間依存性を調べるか[74–76]、t 時間のランダム・ウォークの間に新たに訪れたサイト数 S_t $\left(S_t \propto t^{d_s D_f}\right)$を計算することによって[77,78]

求めることができる。しかし、このような計算をするとき注意しなくてはならないのは、(3–10)式が単一の無限大クラスターの $t \ll \tau$ における拡散を表しているということである。もし、浸透網内の全クラスター上にランダム・ウォーカーを置いて、それら全ての拡散の平均的な振舞いを見ようとすると、全クラスターに対して平均をとらなければならない。s 個のサイトから成るあるクラスターの二乗平均拡散距離 $\langle R^2 \rangle_s$（(3–10)式のように振舞う）を

$$\langle R^2 \rangle \propto \int_1^{\xi_p^{D_f}} s n_s \langle R^2 \rangle_s ds \tag{3–13}$$

の形で平均する。n_s は前章で導入された s サイトからなるクラスターの数であり、(2–9)式のように仮定される。(3–10)式，(3–13)式より、クラスター平均された二乗平均拡散距離 $\langle R^2 \rangle$ の $t \ll \tau$ での振舞いは

$$\langle R^2 \rangle \propto t^{d'_s} \tag{3–14}$$

但し、

$$d'_s = \frac{2\nu - \beta}{2\nu + \mu - \beta} \tag{3–15}$$

となる[73]。従って、単一クラスターではなく、浸透網全体でランダム・ウォークのシミュレーションを行った場合[77]、二乗平均拡散距離の時間依存性は(3–10)式ではなく(3–14)式に従うことに成り、これから直接求められる指数は d'_s ということになる。(3–14)式の有限サイズ・クラスター内での異常拡散は、交流伝導度などの物理量と密接に関係する[73]。先にも述べたように、本研究は単一クラスターの動力学的性質を調べるものであるため、(3–14)式のようなクラスター平均された拡散を考えることは以後の議論ではない。

本章では浸透網のダイナミクスの基本となる拡散現象とそのスケーリング理論について述べてきた。Gefen 等のスケーリング理論によって浸透網やフラクタル・ネットの動的側面に関する研究は飛躍的に進展した。特に本研究の中心テーマであるフラクトンと呼ばれる局在励起の存在がこのスケーリング理論を基礎に示されて以来、ランダム系に固有な現象や性質がフラクトン励起を考えることによって統一的に理解されるようになってきた。次章では、フラクトンに関するスケーリング理論を紹介し、フラクトンの持つ様々な性質について述べる。

第4章　フラクトン励起のスケーリング理論

フラクトンと呼ばれるフラクタル系固有の局在励起状態の発見は前章で述べた拡散のスケーリング理論から生まれた最大の成果の一つである。フラクトンとはAlexanderとOrbach[17]によって命名された励起で、均質系における励起とは全く異なる状態密度を持ち、空間的に強く局在している。この励起は、格子系，電子系，スピン系など構造が自己相似的であれば同じように存在する普遍的励起であると考えられているが、以下ではスケーリング関係式などを具体的に示すために格子振動問題に限って議論することにする。

4–1.　異常拡散とフラクトン励起

フラクトン励起の存在を示すスケーリング理論には3つある[17,18,79]。AlexanderとOrbach[17]によるものとRammalとToulouse[18]によるものはほぼ同時に発表されており、どちらも拡散を支配する方程式と振動の方程式の類似性を利用したやり方である。これに対し、Feng[79]の示した方法はNodes-Links-Blobsモデルを用いたスケーリング理論であり、前者2つとはやや異なった理論である。これら3つの理論は同一の結論を導く。本節ではAlexanderとOrbach[17]の理論とRammalとToulouse[18]の理論を紹介し、Feng[79]による理論は本章最終節で述べることにする。

I. AlexanderとOrbachのスケーリング理論[17]

以下で述べる理論はフラクトン励起の存在を初めて示し、その励起に“フラクトン”という名を冠するに至ったものである。

格子系の拡散を記述するマスター方程式は、1次元を例にとると

$$\frac{dP_l}{dt} = W_{l,l-1}(P_{l-1} - P_l) + W_{l,l+1}(P_{l+1} - P_l) \tag{4–1}$$

である。ここでP_lはサイトlに拡散粒子が存在する確率であり、$W_{l,l'}$はサイトlからサイトl'へ粒子が飛び移る確率である。これに対し、スカラー変位を持つ1次元格子振動の運動方程式は、

$$M_l \frac{d^2 u_l}{dt^2} = K_{l,l-1}(u_{l-1} - u_l) + K_{l,l+1}(u_{l+1} - u_l) \tag{4–2}$$

である。M_l, u_lはサイトlにおける粒子の質量と変位、$K_{l,l'}$はl, l'サイトを結ぶバネの強

さである。(4–1)式，(4–2)式を比較すると、時間微分の階数が違うだけで同じ様な方程式になっている[80]。両方程式を

$$\tilde{P}_l(\omega) = \int_0^\infty e^{-\omega t} P_l(t) dt$$
$$\tilde{u}_l(\omega) = \int_0^\infty e^{-\omega t} u_l(t) dt \qquad (4\text{–}3)$$

のようにラプラス変換すると、時間微分の階数の違いは方程式の中にω(マスター方程式)が現れるか、ω^2(振動の方程式) が現れるかだけとなる。従って、ラプラス変換されたマスター方程式の自己相関関数$\tilde{P}_0(\omega^2)$と振動系のグリーン関数$G(\omega)$とは等しくなり、振動励起の状態密度$\mathcal{D}$は、

$$\mathcal{D}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathrm{Im} \left\langle \tilde{P}_0(-\omega^2 + i\varepsilon) \right\rangle \qquad (4\text{–}4)$$

と表せる。ここで$\langle \cdots \rangle$はアンサンブル平均を意味する。$\tilde{P}_0(\omega^2)$は自己相関関数$P_0(t)$のラプラス変換であるから、まず$P_0(t)$のt依存性を考える。フラクタル格子系を拡散運動しているランダム・ウォーカーが時間t内に訪れることのできるサイト数$V(t)$は

$$V(t) \propto \langle R^2 \rangle^{D_f/2} \qquad (4\text{–}5)$$

となる。$\langle R^2 \rangle$は二乗平均拡散距離であり、$p = p_c$の浸透網においては(3–10)式より

$$V(t) \propto t^{D_f d_s} \qquad (4\text{–}6)$$

と書ける。一方、自己相関関数$P_0(t)$は、$t = 0$で原点にいたランダム・ウォーカーが$t = t$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、

$$P_0(t) \propto t^{\nu D_f/(2\nu+\mu-\beta)} \qquad (4\text{–}7)$$

のようなt依存性を示す。ここでd_sの定義式(3–11)式を用いた。これをω^2の変数にラプラス変換してやると

$$\tilde{P}_0(\omega^2) = \int_0^\infty t^{-\nu D_f/(2\nu+\mu-\beta)} e^{-\omega^2 t} dt$$
$$\propto \omega^{2\nu D_f/(2\nu+\mu-\beta)-1} \qquad (4\text{–}8)$$

となる。$\mathrm{Im}\tilde{P}_0(\omega^2+i\varepsilon)$は、副素数 z の a（実数）乗の虚数部が $|z|^a \sin(a\mathrm{Arg}z)$ であることを用いて計算でき、結局(4–4)式から、

$$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{\tilde{d}-1} \tag{4–9}$$

が得られる。ここで$\tilde{d}$はフラクトン次元、またはスペクトル次元と呼ばれる指数であり、

$$\tilde{d} = 2d_s D_f = \frac{2\nu D_f}{2\nu+\mu-\beta} = \frac{2(\nu d-\beta)}{2\nu+\mu-\beta} \tag{4–10}$$

である*。(4–10)式の最初の等号は、浸透網に限らない一般的なフラクタル格子において成立するものである。第2，第3の等号は、特に浸透網の場合、その臨界指数でフラクトン次元を表したものである。(4–10)式のフラクトン次元は、スカラー変位の振動系に対するものであることに注意する。$\tilde{d}$は一般にユークリッド次元 d とは異なる値を持つため、(4–9)式で与えられる状態密度はデバイ理論による振動モードとは異なる状態密度を記述している。(4–9)式のような状態密度を持つ励起を Alexander と Orbach[17]は“フラクトン”と名付けた。

フラクトンは後に示すように空間的に強く局在した励起である。この局在を特徴付ける長さ、すなわち局在長の振動数依存性は、いわば規則格子系での分散関係に当たる重要な関係式である。これは、異常拡散の式(3–10)式を $t \to 1/\omega^2$ のように変数を読み替えることにより得られる。その結果、振動系での特徴的長さΛは

$$\Lambda \propto \omega^{-2d_s} \tag{4–11}$$

或は、(4–10)式より、

$$\Lambda \propto \omega^{-\tilde{d}/D_f} \tag{4–12}$$

となる。

以上の議論は、系全体が自己相似構造をとっている場合、浸透網でいえば $p = p_c$ におけるものであった。$p > p_c$での励起状態はどのようになっているか、$\tilde{d}$の値はどうなるか、何故フラクトンは局在するのかなどについては次節以後で述べる。

＊ この指数そのものは、1976 年 Shender[E. F. Shender, J. Phys. C**9**, L309(1976)]によってすでに導入されていた。

II. Rammal と Toulouse のスケーリング理論[18)]

1983年 Rammal と Toulouse[18)]によって与えられた理論は、フラクタル構造体上に励起されたモードの状態密度がスケール変換によってどのように変わるかを議論することによって、フラクトンの存在を明らかにしたものである。

いま、N個の質点からなるフラクタル構造体 Sを考える。Sのフラクタル次元を D_fとすると、フラクタル次元の定義より、長さ L に含まれる質点の数 $N(L)$は

$$N(L) = b^{-D_f} N(bL) \tag{4–13}$$

となる。S上に何等かの励起状態が存在しているとし、その状態密度を $\mathcal{D}$とする。構造の自己相似性のため、サイズ L での状態密度 $\mathcal{D}_L(\omega)$と $D_{bL}(\omega)$は(4–13)式から任意の振動数に対して、

$$\mathcal{D}_L(\omega) = b^{-D_f} \mathcal{D}_{bL}(\omega) \tag{4–14}$$

となる*。一方、励起された bL の大きさを持つモードの振動数$\omega(bL)$と L の大きさを持つモードの振動数$\omega(L)$の間に、

$$\omega(L) = b^a \omega(bL) \tag{4–15}$$

の関係が成立しているとする。この関係式は励起の分散が

$$\omega \propto L^{-a} \tag{4–16}$$

のようにスケールすることを意味している。サイズ L の系に大きさ L のモードが励起されている場合、そのモードの状態密度 $\mathcal{D}_L(\omega(L))$は、$\omega(L)$がこの系の最低振動数であることから

$$\mathcal{D}_L(\omega(L)) = \frac{1}{\Delta\omega(L)} \sim \frac{1}{\omega(L)}$$

である。同様に $\mathcal{D}_{bL}(\omega(bl)) \sim 1/\omega(bL)$であるから(4–15)式より

$$\mathcal{D}_L(\omega(L)) = b^{-a} \mathcal{D}_{bL}(\omega(L) b^{-a}) \tag{4–17}$$

---

* 規格化された状態密度 $n(\omega)$は $n(\omega) = \mathcal{D}_L(\omega)/N(L) = \mathcal{D}_{bL}(\omega)/N(bL)$であり、$L$ に依存しないということから(4–14)式が得られる。

となる。(4–14)式において$\omega \to \omega(L)b^{-a}$とした式を用いると、

$$\mathcal{D}_L(\omega(L)) = b^{D_f - a}\mathcal{D}_L(\omega(L)b^{-a}) \tag{4–18}$$

と書け、$b = \omega(L)^{1/a}$とすることによって、

$$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{D_f/a - 1} \tag{4–19}$$

が成立する*。ここで、フラクトン次元$\tilde{d}$を

$$\tilde{d} = \frac{D_f}{a} \tag{4–20}$$

とすると状態密度は、

$$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{\tilde{d}-1} \tag{4–21}$$

のようになる。前節と同様に、上式で状態密度が与えられるような励起$(\tilde{d} \neq d)$がフラクトンである。ここまでの議論は励起の種類を特定しない一般的なものであった。仮定されたのは、素励起の分散が自己相似構造の影響を受けて(4–16)式のようになるということだけである。従って、フラクトンは異なる物理系においても存在する普遍的な励起であると考えることができる。

励起をスカラー変位を持つ振動励起に特定することによって$\tilde{d}$の具体的な表式が得られる。このときの分散関係はAlexanderとOrbachによる議論と全く同じように考えることによって得られる。すなわち拡散を支配する方程式とスカラー振動の方程式の類似性から、異常拡散の式(3–10)式を$t \to 1/\omega^2$, $\langle R^2 \rangle \to L^2$と読み替えることにより$L \sim \omega^{-2d_s}$（(4–11)式と同じ）となる。これを(4–16)式と比較することにより

$$a = \frac{2\nu + \mu - \beta}{2\nu} \tag{4–22}$$

従って、

$$\tilde{d} = \frac{D_f}{a} = \frac{2\nu D_f}{2\nu + \mu - \beta} \tag{4–23}$$

が得られる。この表式は(4–10)式と全く同じである。

---

* (4–18)式は任意のLに対して成立するから、Lを表式から消した。

以上2つの理論は、フラクタル格子上の振動励起に対して全く同じ結論を導いた。それによるとフラクトンとはユークリッド次元 d とは異なる値を持つ新たな次元$\tilde{d}$で特徴付けられ、

i) 状態密度　：$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{\tilde{d}-1}$

ii) 分散関係　：$\Lambda \propto \omega^{-\tilde{d}/D_f}$

となる励起である。フラクタル次元 D_fが自己相似構造の静的性質を記述しているのに対し、フラクトン次元$\tilde{d}$はフラクタル系の動的性質を特徴付ける重要な指数である。例えば、自己相似性を有する物質の低温での熱伝導度，比熱，スピン-格子緩和，電気伝導度，超伝導特性などは全て$\tilde{d}$に依存している。次節ではこの$\tilde{d}$の値について述べる。

4–2.　Alexander-Orbach の予想

フラクタル系の動力学を特徴付けるフラクトン次元$\tilde{d}$は、他の臨界指数と(4–10)式のような関係があることが分かった。2～6 次元の浸透網においてβ, ν, μの知られている値（表 2–2 ）を代入することにより、各次元での浸透網のフラクトン次元$\tilde{d}$の値を推定することができる。表 4–1 はその結果であるが、これを見ると$\tilde{d}$は空間次元 d によらずほぼ一定値 4/3 をとることが分かる。このことより Alexander と Orbach[17]は、浸透網のフラクトン次元はユークリッド次元によらず厳密に

$$\tilde{d} = \frac{4}{3} \tag{4–24}$$

となることを予想した（ Alexander-Orbach conjecture ）。(4–24)式はデバイ理論がフラクタル系において破綻することを示すだけでなく、動的臨界指数μが静的臨界指数であるνおよびβによって、

$$\mu = \frac{1}{2}\left[(3d-4)\nu - \beta\right] \tag{4–25}$$

のように書き表せることを意味している。動的臨界指数μを静的臨界指数で表そうとする試みは数多くなされていて、例えば$\mu = 1+\beta'$[81]（β'はバックボーンに対するオーダー・パラメータの指数），$\mu = (d-1)\nu$[81,82], $\mu = 1+(d-2)\nu$[83,84], $\mu = (d-2)\nu + (48-d)/42$[85], $\mu = 1+2\beta$[86,87]などがあるが、どの表式も $2 \leq d \leq 6$ の全ての次元で数値解と一致するも

	2 次元	3 次元	4 次元	5 次元	6 次元
$\tilde{d}$	1.32	1.32	1.31	1.33	4/3

表 4–1. 各ユークリッド次元の浸透網におけるフラクトン次元$\tilde{d}$の値。

のはなかった。これに対し、(4–25)式は数値的には全ての次元でよく一致しているように見える。

$\tilde{d} = 4/3$ という予想を確かめるために多くの仕事がなされている[88–100]。$\tilde{d}$ の値を直接求めるには幾つかの方法がある。最も直接的なのはフラクトンの状態密度を求め、その振動数依存性から$\tilde{d}$を得るものである。これは本研究によって初めて行われたものであり、結果は Alexander-Orbach の予想と一致している。これに関しては第 6 章で詳しく述べるが、この方法ではあまり正確に$\tilde{d}$の値を求めることはできない。より正確な$\tilde{d}$を求める一つの方法は、浸透網上の拡散のシミュレーションにより求めるものである[88–93]。Nステップのランダム・ウォークの間に新たに訪れたサイト数 S_N は(3–10)式より、

$$S_N \propto \langle R^2 \rangle^{D_f/2} \propto N^{d_s D_f} \quad . \tag{4–26}$$

従って、(4–10)式から、

$$S_N \propto N^{\tilde{d}/2} \tag{4–27}$$

となる。これより、シミュレーションによって S_N を計算することで直接フラクトン次元$\tilde{d}$を求めることができる。Havlin と Avraham[90] は 2 次元 3 角格子，正方格子の浸透網上の拡散のシミュレーション（最大ステップ数 $N_{max} = 3000$ ）により $d = 2$ で$\tilde{d} = 1.33 \pm 0.03$ 、$d = 3$ で$\tilde{d} = 1.34 \pm 0.03$ の値を得ており、Alexander-Orbach の予想を強く支持している。また Argyrakis 等[91,92] は 2 次元・3 次元立方格子の浸透網に対し、$N_{max} = 2 \times 10^5$ ステップのシミュレーションを行い、いずれの場合にも$\tilde{d} = 1.30 \pm 0.03$ の値を得ている。この値は Alexander-Orbach 予想とも一致するが、むしろ Aharony-Stauffer[82] の予想$\tilde{d} = 2D_f/(D_f + 1)$($d = 2$ で$\tilde{d} = 1.31$ ）に近い。さらに Rammal 等[93] は 10^7 サイトの $2 \leq d \leq 6$ および $d = \infty$（ベーテ格子）における浸透網に対し $N_{max} \sim 10^6$ ステップの拡散シミュレーションを行った結果、$S_N = aN^{\tilde{d}/2}(1 + bN^{-\omega})$ の形をとることを示した。このとき全ての次元で指数ωは$\omega \simeq 1/6$ であり、$\tilde{d}$は $1.322 \leq \tilde{d} \leq 1.332$ であった。彼等はこの結果から$\tilde{d}$は 4/3 よりわずかに小さいものと結論づけた。

$\tilde{d}$を求めるために浸透回路網の伝導度をキルヒホッフの式によって計算する方法もある。(4–25)式と 2 次元浸透網での値$\nu = 4/3$ と$\beta = 5/36$ を用いれば

$$\frac{\mu}{\nu} = \frac{91}{96} \simeq 0.9479 \tag{4–28}$$

であるが、Lobb 等[94]は有限サイズ・スケーリングを用いて$\mu/\nu = 0.973^{+0.005}_{-0.003}$を得ており、Alexander-Orbach 予想から得られる値(4–28)式と 2.6%ずれていることを示した。また、Zabolitzky[95]や Hong 等[96]もそれぞれ$\mu/\nu = 0.973 \pm 0.005,\ 0.970 \pm 0.009$ という値を得ており、フラクトン次元は 4/3 とはわずかに異なるとみている。Gordon[97] のようにμ/νの値を実験的に求めた仕事も報告されている。彼らは酸化したシリコンの基盤上に 50nm の厚さのアルミニウムの薄膜をのせ、電子ビーム露光による方法で 800 × 800 の正方格子上の浸透網を作り、その電気伝導度を調べた。その結果$\mu/\nu = 0.98 \pm 0.03$ ($\nu = 4/3$ とした）という値を得ている。この値は Lobb 等のシミュレーション値とは一致するが、Alexander-Orbach 予想とは異なっていると彼らは主張している。

Essam と Bhatti[98]は、2 次元浸透回路網の抵抗感受率を 10 次までの級数展開と Padé 近似により計算し、フラクトン次元$\tilde{d}$を求めた。その結果$\tilde{d} = 1.334 \pm 0.007$ であり Alexander-Orbach 予想と一致している。Rammal[100]は、浸透網のフラクトン次元に対しε展開$(\varepsilon = 6 - d)$の議論を用い、

$$\tilde{d} = \frac{4}{3} + \frac{761}{83349}\varepsilon^2 \tag{4–29}$$

という結果を与えた。Alexander-Orbach 予想については、より高次のε展開が必要であり、(4–29)式ではその正否は判断できないとしている。

以上のように$\tilde{d} = 4/3$ という予想は、その予想のもつ意味が重大なため、様々な方法でチェックされてきたが、$\tilde{d} = 4/3$ が厳密かどうかは現在に至るまで明らかになっていない。しかし、ここで紹介した幾つかの研究結果から分かるように、$\tilde{d} = 4/3$ は非常によい近似であるが、厳密ではないと考えるのが現在のほぼ共通した見解である。特に(4–29)式でも示される通り、そのずれは低次元において特に大きいと考えられている。フラクトン励起の立場からすれば、$\tilde{d}$が 4/3 から少しだけずれるということは、フラクトン状態密度や分散関係の振動数依存性がほんのわずかだけ変化することを意味しており、フラクトン励起の諸性質を明らかにする際これは本質的な問題とはならない。以後の議論は、$\tilde{d}$の正確な値よりもフラクトン励起の物理的性質を中心に展開されていく。次節ではフラクトンの局在性、フォノン-フラクトン・クロスオーバーなどについて述べられる。

4–3. フラクトン励起の諸性質

臨界濃度における浸透網に励起された振動モードはフラクトンと呼ばれ、その状態密度や分散関係がフラクトン次元$\tilde{d}$によって記述されることがこれまでの議論によって分かった。本節では、フラクトン励起が何故局在励起であるのか、また臨界濃度以上の浸透網にはどの様な振動励起が存在するのかについて述べる。

4–3–1. 局在性

フラクトン励起に関してスケーリング理論で予言することのできる重要な性質の一つにフラクトンの局在性がある。サイズ L の浸透網のコンダクタンス $g(L)$ と伝導度σ_Eとの間には、よく知られているように

$$g(L) \propto \sigma_E L^{d-2} \tag{4–30}$$

の関係がある。σ_Eは濃度 p に対して(2–17)式、すなわち$\sigma_E \propto (p-p_c)^{\mu}$のように振舞う。従って、$p=p_c$では有限サイズ・スケーリングの式(2–40)式より、

$$\sigma_E \propto L^{-\mu/\nu} \tag{4–31}$$

のようなサイズ依存性を示す。(4–30), (4–31)式から、

$$g(L) \propto L^{d-2-\mu/\nu} \propto L^{D_f(\tilde{d}-2)/\tilde{d}} \tag{4–32}$$

となる。ここで、(2–34)式, (4–10)式を用いた。励起の局在・非局在を示すβ関数は、

$$\beta(g) \equiv \frac{d\ln g(L)}{d\ln L} = D_f(\tilde{d}-2)/\tilde{d} \tag{4–33}$$

となり、$\tilde{d}<2$ であれば$\beta(g)<0$ となり、励起は局在することが分かる*。全てのユークリッド次元において浸透網上のフラクトンは$\tilde{d}=4/3$ であるから、常に$\beta(g)<0$ となり局在する。ランダム・ポテンシャル中の電子や乱れた質量を持つ格子系の振動励起が 3 次元以上で局在・非局在転移を示すのに対し、臨界濃度における浸透網上のフラクトンは必ず局在し、易動度端は存在しない。

---

* 規則格子や Sierpinski カーペットのような特別な場合を除いて、大半のフラクタル格子（フラクタル格子上のランダム・ウォークが粗視化可能であるような系）のフラクトン次元は$\tilde{d}<2$ であることが証明されている[K. Hattori, T. Hattori, and H. Watanabe, Phys. Lett. A**115**, 207(1986)]。

上記のような簡単な議論からフラクトンは局在励起であることが分かったが、それがどのような波動関数を持ち局在しているかは難しい問題である。フラクトン波動関数のプロファイルについては第8章で改めて議論することにする。但し、一つだけいえることは(4–12)式で与えられた特徴的長さが、局在したフラクトンの局在長に他ならないということである。なぜなら、$p = p_c$の浸透網上の拡散における唯一の特徴的長さが二乗平均拡散距離であることに対応して、フラクトン励起における特徴的長さは唯一(4–12)式で与えられるΛのみであるからである。

4–3–2. フォノン-フラクトン・クロスオーバー

$p = p_c$の浸透網における振動励起は全てフラクトンであったが、$p > p_c$の系では全ての振動数においてフラクトンが励起されるわけではない。$p > p_c$の浸透網には相関長ξ_pという有限の大きさの特徴的長さが存在する。局在長のような振動を特徴付ける長さがこれよりも長ければ、振動励起にとって系は一様なユークリッド媒質であり、その励起は通常のフォノンとして振舞う。しかし、この長さが系の相関長よりも短ければ、振動は系がフラクタルであることを感じ、励起はフラクトンとなり局在するであろう。これら2つの長さがほぼ等しくなったところでフォノンとフラクトンのクロスオーバーが起こるはずである。

フォノン-フラクトン・クロスオーバーが起こる振動数と浸透濃度の関係を調べるために、$p > p_c$の浸透網上にフラクトンが励起されていると考えよう。フラクトン振動の特徴的長さは(4–12)式で与えられるΛである。このΛと相関長ξ_pが等しくなる振動数ω_cでクロスオーバーは起こるから、

$$\Lambda(\omega_c) \sim \xi_p \tag{4–34}$$

となり、(2–26), (4–12)式より、

$$\omega_c^{-\tilde{d}/D_f} \sim |p - p_c|^{-\nu} \quad .$$

故に、

$$\omega_c \propto (p - p_c)^{\nu D_f/\tilde{d}} \tag{4–35}$$

となる。上式で与えられるクロスオーバー振動数ω_cよりも低振動数側$(\omega \ll \omega_c)$ではフォノンが、高振動数側$(\omega \gg \omega_c)$では局在したフラクトンが励起されることになる（図4–1）。

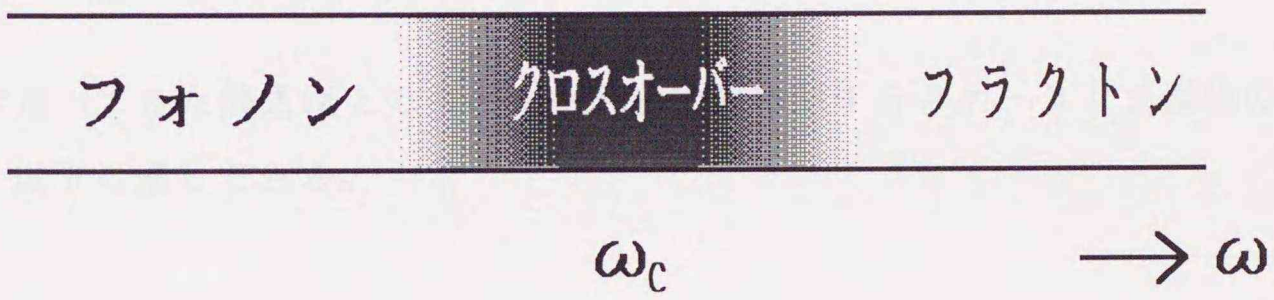


図 4–1.　振動数と励起されるスカラー変位モードとの関係。

クロスオーバー振動数ω_cの濃度依存性から、浸透網上のフォノンの音速のp依存性を求めることができる。フォノンの波数をk，音速を$c(p)$とすると、分散関係は$\omega = c(p)k$となるが、$\omega \to \omega_c$でもこれが成立しているとすると、$k \sim 1/\xi_p$として

$$\omega_c \sim c(p)/\xi_p \quad . \tag{4–36}$$

故に、(4–35)式より $c(p) \propto (p-p_c)^{\nu D_f/\tilde{d}-\nu}$となり、スケーリング関係式(4–10)式を用いれば、

$$c(p) \propto (p-p_c)^{(\mu-\beta)/2} \tag{4–37}$$

が得られる。浸透網では常に$\mu > \beta$であるから$p \to p_c$にすると$c(p) \to 0$となるが、これは浸透網を有効媒質的に捕らえたとき、臨界濃度に近付けるにつれて系が柔らかくなっていくという事実に対応している。

これまで述べてきた浸透網上のスカラー振動励起に関するスケーリング理論の結果をまとめると、以下の通りである。

$$\text{状態密度} \quad : \quad \mathcal{D}(\omega) \quad \sim \quad \begin{cases} \omega^{d-1}/\left[c(p)\right]^d & \omega \ll \omega_c \\ \omega^{\tilde{d}-1} & \omega \gg \omega_c \end{cases}$$

$$\text{分散関係} \quad : \quad \omega \quad \sim \quad \begin{cases} c(p)k & \omega \ll \omega_c \\ \Lambda^{D_f/\tilde{d}} & \omega \gg \omega_c \end{cases}$$

但し、

$$\begin{aligned} \omega_c \propto \quad & (p-p_c)^{\nu D_f/\tilde{d}} && \text{クロスオーバー振動数} \\ c(p) \propto \quad & (p-p_c)^{(\mu-\beta)/2} && \text{フォノンの音速} \\ \tilde{d} = \quad & 4/3 \quad \text{for any } d && \text{予想} \end{aligned}$$

4–4. ベクトル・フラクトン

これまでの議論はすべて変位をスカラーとして考えたものであった。スカラー振動の運動方程式がマスター方程式と類似の形を持つことから、振動と拡散の間に関係をつけスケーリング理論を展開した。しかし、現実のランダム系において、スカラー変位の振動

は有り得ない。本節では変位をベクトルとして扱った場合、これまでのフラクトンに関する結果がどの様に変更されるのかについて述べる。変位をベクトルとした場合、振動の運動方程式とマスター方程式の間の類似性を見つけることは難しい。そこで、ここではNodes-Links-Blobsモデルを用いたFeng[79]の理論を紹介する。

系の振動を記述するハミルトニアンが

$$H = \frac{1}{2}\alpha \sum_{\langle ll' \rangle} g_{ll'} \left[(\vec{u}_l - \vec{u}_{l'}) \cdot \vec{r}_{ll'} \right]^2 + \frac{1}{2}\beta \sum_{\langle ll'l'' \rangle} g_{ll'} g_{ll''} (\delta\theta_{l'll''})^2 \tag{4–38}$$

であるような浸透網を考える。第1項はボンドの伸縮(stretching)力を記述する項であり、αがその強さを表している。$g_{ll'}$はサイトlとl'の両方が占有されているときには1、それ以外のときには0をとるものとする。また、$\vec{u}_l$はサイトlにある原子の平衡位置からの変位であり、$\vec{r}_{ll'}$はサイトlからl'へ向かう単位ベクトルを表す。第2項はボンド間の変角(bending)力を表しており、βはその力定数である。$\delta\theta_{l'll''}$はボンド$\langle ll' \rangle$とボンド$\langle ll'' \rangle$の間の角の平衡からのずれを表している。和は最近接格子点全てについてとられる。

ここで、浸透網を2–4節で述べたNodes-Links-Blobsモデルに置き換えて考える。Nodes-Links-Blobsモデルでは、ブロッブは多重連結しており、リンク部分に比べて弾性的に硬いクラスターを形成している。そこで、ブロッブは剛体と見なしてしまい、系の弾性はリンクのみで担われると考える。リンクによる有効バネ定数をKとすると、Nodes-Links-Blobsモデルはさらに簡単に図4–2のようなバネ定数Kのバネで張られた規則格子として考えることができる。KantorとWebman[101], Feng[79], WebmannとGrest[102]によれば、長さξ_pの一つの辺のバネ定数Kは、

$$K^{-1} \sim \left(\frac{\alpha}{\mathrm{L}_1} \right)^{-1} + \left(\frac{\beta}{\mathrm{L}_1 \xi_p^2} \right)^{-1} \tag{4–39}$$

と表せる。ここでL_1は、長さξ_pの一辺に含まれるリンクの数であり、(2–43)式で与えられる。(2–43)式と有限サイズ・スケーリングの式(2–40)式から任意の次元で

$$L_1 \propto (p - p_c)^{-1} \tag{4–40}$$

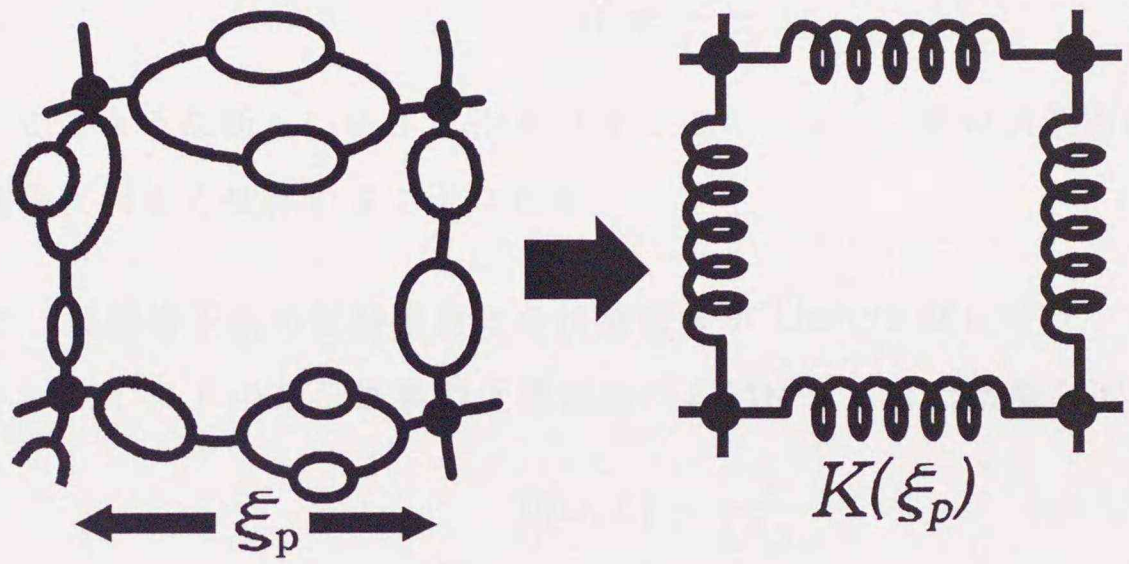


図 4–2. 弾性的に単純化された Nodes-Links-Blobs モデル。Nodes-Links-Blobs モデル（左）を有効バネ定数 K で張られた規則格子（右）と考える。

となる。(4–39)式から重要な結論が引き出せる。すなわち、変角力を含む浸透網には、新たに

$$d_c \propto \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{1/2} \tag{4–41}$$

で定義される特徴的長さが生まれることになる[103]。相関長ξ_pが$\xi_p \ll d_c$であれば、(4–39)式より

$$K \propto \frac{\alpha}{L_1} \tag{4–42}$$

となり、変位による弾性エネルギーはボンドの伸縮が担うことになり、$\xi_p \gg d_c$ならば逆にボンドの変角の効果が主になり、

$$K \propto \frac{\beta}{L_1 \xi_p^2} \tag{4–43}$$

となる。このような新しい長さd_cが存在することにより、系の状態密度はξ_p, d_c, λ(波長)の大小関係に大きく依存することになる。

さて、規則格子系の低振動数での状態密度がDebye則に従うことを次のように示してみよう。サイズLの最低振動数近傍における規格化された状態密度は、

$$\mathcal{D}(\omega, L) = \frac{1}{L^d \Delta\omega} \tag{4–44}$$

で与えられる。$\Delta\omega$は、最低固有値における固有値間隔、すなわち最低固有値ω_Lそのものである。サイズLの系の場合、音速をcとして$\Delta\omega = \omega_L = \pi c/L$であるから、$L = \pi c/\omega_L$となる。これより(4–44)式は、

$$\mathcal{D}(\omega) = \frac{1}{\pi^d c^d} \omega_L^{d-1} \tag{4–45}$$

となる。Lを波長と読み換えることにより、(4–45)式は

$$\mathcal{D}(\omega) = \frac{1}{(\pi c)^d} \omega^{d-1} \tag{4–46}$$

となり、Debye則を得る。

同様の考え方を$p = p_c$の浸透網に対するNodes-Links-Blobsモデルに対して行うことができる。この場合(4–44)式に対応する式は、

$$\mathcal{D}(\omega, L) = \frac{1}{L^{D_f} \Delta\omega} \tag{4–47}$$

である。$\Delta\omega$をサイズLのフラクタル系の最低振動数ω_Lに置き換えると、

$$\Delta\omega \sim \omega_L \sim \left(\frac{K(L)}{M(L)}\right)^{1/2} \tag{4–48}$$

となる。$M(L)$は、系の質量である。また、$K(L)$は系の有効バネ定数であり、今の場合$\xi_p \to \infty$であるから、(4–39)式でξ_pをLで置き換えたものとして与えられる。系のサイズLが$L \ll d_c$であれば(2–43)式より

$$K(L) \sim \alpha/L_1 \sim L^{-1/\nu} \tag{4–49}$$

であり、$M(L) \sim L^{D_f}$であるから

$$\omega_L \sim L^{-(D_f+1/\nu)/2} \tag{4–50}$$

となる。従って、(4–47)式の状態密度は

$$\mathcal{D}(\omega) \sim (\omega_L)^{2D_f/(D_f+1/\nu)-1} \tag{4–51}$$

となる。一方、弾性率Yの臨界指数f $\left(Y \propto (p-p_c)^f\right)$は、Nodes-Links-Blobs モデルにおいて次のように表せる。Yとバネ定数Kの間には$Y \sim KL^{2-d}$の関係があるから、$L \ll d_c$のときは(4–49)式より

$$Y \sim L^{2-d-1/\nu} \tag{4–52}$$

となり、有限サイズ・スケーリングより$Y \sim (p-p_c)^{\nu(d-2)+1}$。故に、

$$f = \nu(d-2)+1 \quad . \tag{4–53}$$

となる。$L \ll d_c$のときは、ハミルトニアン(4–38)式のうち stretching の項のみが効くため、系のユニバーサリティ・クラスは古典電気伝導のものと等しくなる。従って、弾性率Yの指数fと伝導度の指数μは同じである。すなわち、Nodes-Links-Blobs モデルでは、

$$\mu = \nu(d-2)+1 \tag{4–54}$$

が成立する*。この式を(4–51)式に代入し、(4–45)式から(4–46)式への移行と同じことを行うと、

$$\mathcal{D}(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}_s-1} \quad , \tag{4–55}$$

---

* 実際、伝導度を Nodes-Links-Blobs モデルで計算した Stephen[83] や Dasgupt 等[84]の結果（p.45 参照）と一致する。

但し、

$$\tilde{d}_s = \frac{2D_f}{2+(\mu-\beta)/\nu} \tag{4–56}$$

を得る。ここで注意しなくてはならないのは、(4–51)式や(4–52)式が成立するのは$L \ll d_c$の場合であり、そのため(4–55), (4–56)式が成立するのは、分散関係(4–50)式、すなわち

$$\Lambda \propto \omega^{-2/(D_f+1/\nu)} \propto \omega^{-\tilde{d}_s/D_f} \tag{4–57}$$

で与えられるΛが$\Lambda \ll d_c$の場合である。(4–55)-(4–57)式は(4–9), (4–10), (4–12)式と全く同じである。言い替えるとハミルトニアン(4–38)式で記述されるようなベクトル変位を持つ浸透網の$\Lambda \ll d_c$であるような振動励起は、スカラー変位のフラクトンと同じユニバーサリティ・クラスに属するということである。このような、スカラー変位のフラクトンと同じユニバーサリティ・クラスに属するフラクトンを以後“スカラー・フラクトン”と呼ぶ。

$\Lambda \gg d_c$の場合を考えよう。このとき、有効バネ定数Kは(4–43)式で与えられるので、(4–49)式に対応する式は、

$$K(L) \sim L^{-1/\nu-2} \tag{4–58}$$

となる。これより(4–48)式の$\Delta\omega$は、

$$\Delta\omega \sim L^{-(D_f+1/\nu+2)/2} \tag{4–59}$$

となり、状態密度は

$$\mathcal{D}(\omega) \sim \omega^{2D_f(D_f+1/\nu+2)-1} \tag{4–60}$$

と書ける。一方、弾性率Yは$L \gg d_c$のとき(4–58)式より

$$Y \sim L^{-d-1/\nu} \tag{4–61}$$

となるから、

$$f = \nu d + 1 \tag{4–62}$$

という関係式が成立する。これを(4–60)式に代入すると、

$$\mathcal{D}(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}_v-1} \quad , \tag{4–63}$$

但し、

$$\tilde{d}_v = \frac{2D_f}{2+(f-\beta)/\nu} \tag{4–64}$$

と計算される。この励起の分散関係は、(4–59)式より

$$\Lambda \sim \omega^{-2/(D_f+1/\nu+2)} \sim \omega^{-\tilde{d}_v/D_f} \tag{4–65}$$

となる。(4–54)式と(4–62)式を比べると、

$$f = \mu + 2\nu \tag{4–66}$$

であり、$\nu > 0$ であることから一般に $f > \mu$が成立する。このため$\tilde{d}_v \neq \tilde{d}_s(=\tilde{d})$であり、$\Lambda \ll d_c$での励起とは異なるユニバーサリティ・クラスに属する振動モードが$\Lambda \gg d_c$で励起される。ボンド変角力に起因するベクトル変位特有のこのモードを以下では“ベクトル・フラクトン”と呼ぶことにする。

(4–54)式や(4–62)式は、動的な臨界指数と静的な臨界指数を結び付けるハイパー・スケーリング則であるが、このような単純な関係が成立するのはこれらを導く理論が Nodes-Links-Blobs モデルに立脚しているためであることに注意しなければならない。これらの式がどの程度実際に成立するかを調べるために、表 2–1 であげた静的臨界指数の値を元に計算された値とシミュレーションで得られている値とを比較してみよう（表 4–2 ）。この表より、Nodes-Links-Blobs モデルに基づいたスケーリング関係式(4–54), (4–62), (4–66)式は、いずれも高次元で非常によく成立する近似的関係式であることが分かる。従って、ベクトル・フラクトンのフラクトン次元$\tilde{d}_v$を与える式(4–64)も極めてよい近似として成立していると考えられる。

前章では$\tilde{d}(=\tilde{d}_s)$が空間次元 d によらず 4/3 の値をとるという Alexander-Orbach の予想について前章で述べた。これに対して$\tilde{d}_v$は d 次元浸透網に対してどの様な値をとるであろうか。(4–64)式の D_f, ν, βに対して表 2–1 の各値を、fに対して表 4–2 のシミュレーション値を代入すると、表 4–3 の$\tilde{d}_v$の値を得る。スカラー・フラクトンの場合とは異なり、$\tilde{d}_v$は弱くではあるが空間次元 d に依存している。特に重要なことは、ベクトル・フラクトンの状態密度の振動数依存性の指数$\tilde{d}_v - 1$ は常に$\tilde{d}_v - 1 < 0$ であるため、$\omega \to 0$ で状態密度が発散するということである。このような$\omega = 0$ での anomaly はスカラー・フ

μの比較

	μのシミュレーション値(表2–2)	$\nu(d-2)+1$
2次元	1.297	1
3次元	2.02	1.88
4次元	2.39	2.32
5次元	2.73	2.71
6次元以上	3	3

fの比較

	fのシミュレーション値	$\nu d+1$
2次元	3.5 ± 0.2^{A}	3.67
3次元	3.8 ± 0.2^{B}	3.64
4次元	3.71^{C}	3.64
5次元	3.87^{C}	3.85
6次元以上	4	4

(4–66)式のチェック

	$f-\mu-2\nu$
2次元	-0.45 ± 0.2
3次元	-0.02 ± 0.2
4次元	0.0
5次元	0.0
6次元以上	0

表4–2. Nodes-Links-Blobsモデルにより求められた臨界指数μ, fの値とシミュレーション値との比較。

A) D. J. Bergman, Phys. Rev. B**31**, 1696 (1985).

B) D. Deptuck, J. P. Harrison, and P. Zawadzki, Phys. Rev. Lett. **54**, 913 (1985).

C) M. Sahimi, J. Phys. C**19**, L79 (1986).

ラクトンやフォノンの状態密度では見られなかったことであり、ベクトルフラクトンの大きな特徴となっている。

以上の議論より、(4–38)式で記述される弾性浸透網上には、$\Lambda \ll d_c$ でスカラー・フラクトン，$\Lambda \gg d_c$でベクトル・フラクトンが各々励起されることが分かった。両者のクロスオーバーは$\Lambda \sim d_c$で起こると考えられるが、これを振動数で表すと(4–57)式より

$$d_c \sim \omega_{vs}^{-\tilde{d}_s/D_f}$$

となるので、(4–41)式より

$$\omega_{vs} \sim \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{-D_f/2\tilde{d}_s} \tag{4–67}$$

であることが分かる。これより$\omega \ll \omega_{vs}$ではベクトル・フラクトン，$\omega \gg \omega_{vs}$ではスカラー・フラクトンが励起されることになる。

これまでの議論は$p = p_c$の浸透網に対するものであったが、$p > p_c$の場合はξ_pが有限となり、$\Lambda \gg \xi_p$において当然フォノンが励起される。このクロスオーバー振動数ω_{pf}はフォノンからベクトル・フラクトンへクロスオーバーするか、フォノンからスカラー・フラクトンへクロスオーバーするかによって異なってくる。言い替えれば、ξ_pとd_cとの大小関係によってクロスオーバーの様子は違ってくる。(4–67)式の導出と同様に考えることにより、フォノン-スカラー・フラクトンおよびフォノン-ベクトル・フラクトン・クロスオーバー振動数は各々、

$$\omega_{pf} \sim \begin{cases} \xi_p^{-D_f/\tilde{d}_s} & :\text{フォノン-スカラー・フラクトン・クロスオーバー} \\ \xi_p^{-D_f/\tilde{d}_v} & :\text{フォノン-ベクトル・フラクトン・クロスオーバー} \end{cases} \tag{4–68}$$

となることが分かる。また、状態密度はおおよそ図4–3のようになるであろう。図4–4に長さのスケールと振動数および励起される振動モードの関係を図示した。

Nodes-Links-Blobsモデルに基づいたスケーリング理論により、ボンド変角力を持つ弾性浸透網上に励起されたベクトル変位の振動モードの状態密度と分散関係について、幾つかのことが予想された。特に重要なことは、ボンド変角が主となるフラクトンのフラクトン次元$\tilde{d}_v$は、スカラー・フラクトンのフラクトン次元$\tilde{d}_s = 4/3$とは異なる値をとると

	2次元	3次元	4次元	5次元	6次元
$\tilde{d}_v$	0.78	0.87	0.92	0.96	1

表 **4–3.** 各ユークリッド次元の浸透網におけるベクトル・フラクトンのフラクトン次元$\tilde{d}_v$の値。

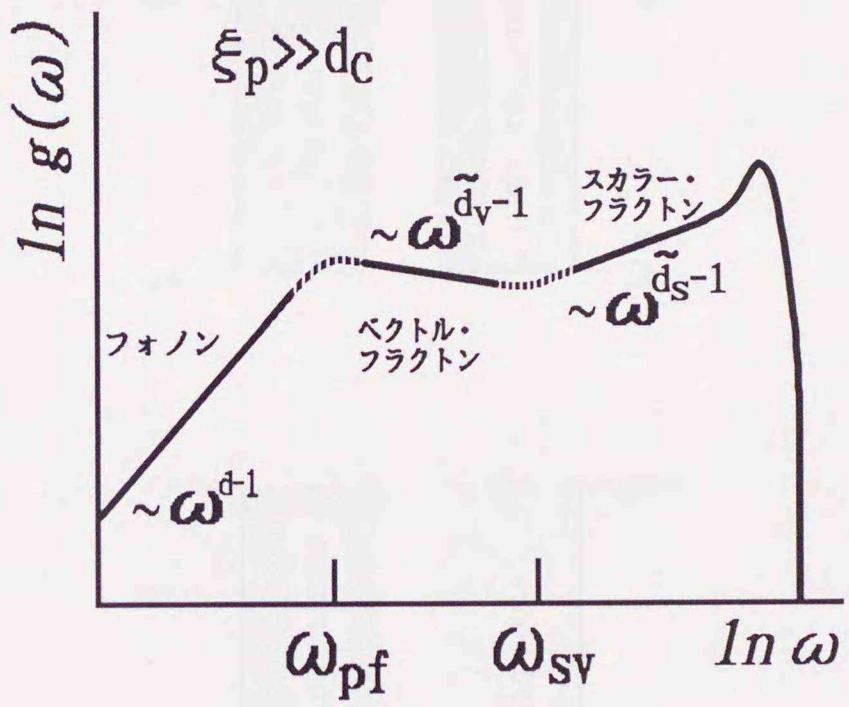
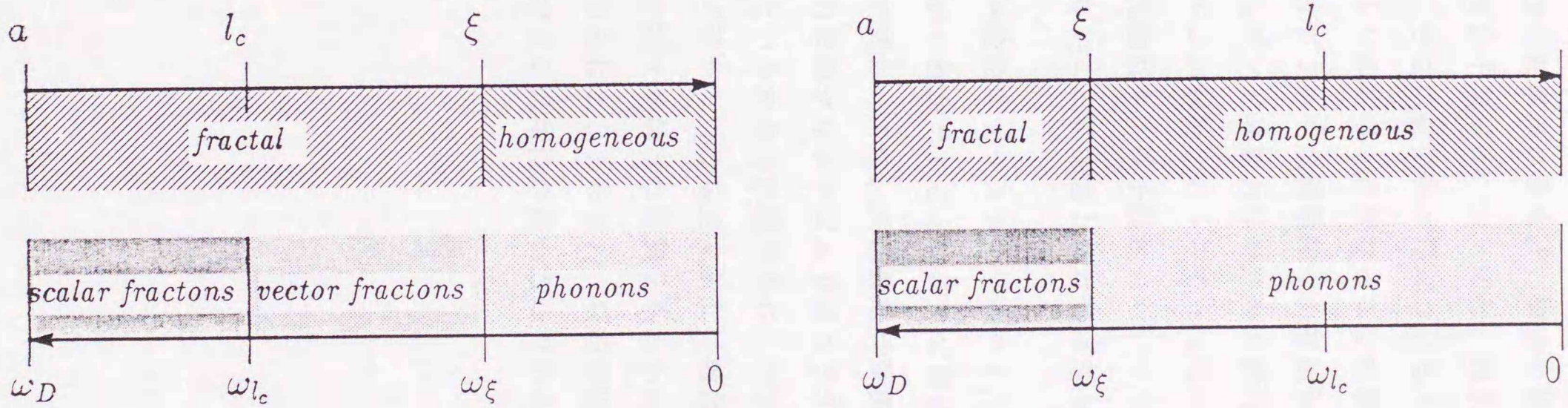


図 4–3.　$p > p_c$における浸透網のベクトル変位振動状態密度の概念図。



(a) $\xi > l_c$ (b) $\xi < l_c$

図 4–4. 振動数と励起されるベクトル変位モードとの関係。

いうことである。例えば浸透網構造に最も近い構造を持つと考えられているシリカ・エアロゲルやエポキシなどの高分子架橋体においては、原子同士の共有結合からくるボンド変角力の寄与が重要となり、そこに低振動で励起されるフラクトンのユニバーサリティ・クラスはスカラー・フラクトンのものとは異なることが期待される。これに対してホウ化銀ガラスのような超イオン性ガラスや金属微粒子の焼結体などにみられる原子結合はイオン結合であり、変角力よりもボンド伸縮力の寄与の方が大きい。そのため比較的低振動においてもスカラー・フラクトンが観測されうることになる。このように、浸透網構造を持つサンプルに対し、非弾性光散乱や中性子散乱を行いフラクトン次元を決めたとしても、その値が常に 4/3 とは限らないことに注意しなければならない。

このように、スカラー変位のフラクトンやベクトル変位のフラクトンに関するスケーリング理論の予想を実験的に確かめることは決して簡単ではない*。これらの理論を確かめるためのより直接的なアプローチは、大規模な計算機シミュレーションである。しかしながら、従来通りの格子力学のアルゴリズムではフラクトンが励起されるような大規模な系を扱うことができないという大きな問題があり、フラクトンの数値的研究の進行を阻んでいた。本研究では次章で述べるような全く新しい数値計算法を用いることでこの問題を解決し、フラクトン励起に関する様々な性質を明らかにすることに初めて成功した。この数値計算法はフラクトンのみにとどまらず、一般的な格子振動問題、電子問題、スピン問題などに適用することができる汎用性の高い方法である。

＊ 実験に関しては第 9 章で詳しく述べる。

第5章　数値計算法

1972年のDean[104]の論文以来ランダム系の固有振動モードの解析において数値的研究の重要性は広く知られるところとなった。さらに、最近の並列処理型スーパーコンピュータの出現は、この種の研究を大きく前進させることとなった。格子振動解析の基本は、ダイナミカル・マトリクスと呼ばれる行列を対角化することにより、その固有値，固有ベクトルから固有振動数，固有モードを求めることである。ダイナミカル・マトリクスを数値的に対角化するには大きく分けて2つの方法がある。1つは、行列を一旦3重対角行列に変換し、その3重対角行列を対角化する方法で、もう1つは与えられた行列を一気に対角化してしまうものである。前者において任意の行列を3重対角行列に変換するためのよく知られた方法としてLanczos法[105]やHouseholder法[106]があり、3重対角行列から固有値を求める代表的方法にBisection法[107]がある。また、後者の方法としてはJaccobi法[107]がよく用いられている。さらに計算された固有値から固有ベクトルを求めるには逆反復法が代表的方法として知られている[108]。しかし、これらいずれの方法も自由度Nの系に対するダイナミカル・マトリクスの要素数N^2に比例した記憶容量を必要とする。例えば、32Mbyteのメモリーを持つコンピューターでは$N \sim 10^3$の系しか扱えない。このような小さな系では、乱れた系に特有な動的性質を明かにすることはできない。浸透網上のフラクトンを見つけるにしても10^3サイトでは自己相似性を反映した振動励起を実現することは極めて困難である。この問題を解決するために、Equation of Motion Method[109]，Negative Eigenvalue Method[104,110]，Recursion Method[111]など幾つかの数値計算法が開発されている。これらの方法はいずれも系の自由度Nに比例したメモリーしか必要としないことから原理的には非常に大きな系を扱うことができる。しかし、実際には計算のために非常に長いCPU時間が必要であり、現実的にはそれ程大きな系を扱えない。また、これらのどの方法も固有値のみしか計算することができない、計算された結果の精度を定量的に評価することができない、などの欠点を持っている。このようなことから、ランダム系の振動励起を調べるための数値計算法は次のような特徴を持っていなければならないことになる。

1) 必要なメモリー容量は系の自由度Nに比例する。

2) 固有値、固有値密度（状態密度）が求められる。

3) 固有ベクトル（固有モード）が求められる。

4) CPU 時間が短い。

5) 計算結果の精度を定量的に評価できる。

我々は、これら全ての条件を満足する全く新しい数値計算法−強制振動法− を開発した。この方法は系に振動数Ωの周期的外力を加えたとき、Ωに近い固有振動数を持つモードだけが共鳴し、大きな振幅とエネルギーを持つという格子振動系の性質を利用している。このアルゴリズムでは自由度 Nに比例したメモリーしか使わないので 32Mbyte のメモリーを持つコンピューターでも 10^5サイト以上，64Mbyte のメモリーであれば 10^6ものサイト数を有する巨大な系の振動解析を行うことができる。さらに、このアルゴリズムに基づいたプログラムはベクトル化し易く、並列処理型スーパーコンピューターの利用により、スカラー計算に比べておよそ 250 倍も速い高速計算を行うことができる。次節以下では、この新しい数値計算法について詳しく説明される。まず、5–1 節では状態密度について、5–2 節では固有モードについて述べられる。5–2–1 項では固有モードの計算法について述べ、求められた固有モードの精度（単色性）について、および固有振動数については 5–2–2 項で述べられる。5–2–3 項では固有モード計算のアルゴリズムで用いられる 2 つのパラメータ（強制振動時間 t と繰り返し回数 p）の最も効果的な設定法について説明する。5–3 節ではフラクトン問題以外の系に対する適用の一例を紹介し、5–4 節でベクトル化へ向けてのチューニングについて述べる。

5–1. 状態密度

5–1–1. 数値計算法[112−115)]

まず初めに、線型バネで互いに結合された N原子から成る格子を考えよう。各原子の変位に関する運動方程式は、

$$M_l \ddot{u}_l(t) = -\sum_{l'} \phi_{ll'} u_{l'}(t) \tag{5–1}$$

である。ここで、M_lはサイト lにおける原子の質量，$u_l(t)$は時刻 t におけるサイト lの原子の平衡位置からのずれを表す。以下では簡単のため u_lはスカラーとして扱われるが、ベク

トル変位への拡張は容易に行われる。$\phi_{ll'}$はl番目の原子とl'番目の原子を結ぶバネのバネ定数に相当し、対角成分ϕ_{ll}は$\sum_{l'}\phi_{ll'}=0$となるように決められる。条件$\sum_{l'}\phi_{ll'}=0$は系が無限小推進変換に対して不変であることを保証している。

変位は次のように基準モードに分解される。

$$u_l(t)=\sum_{\lambda}Q_\lambda(t)\frac{e_l(\lambda)}{\sqrt{M_l}} \quad . \tag{5–2}$$

ここで$Q_\lambda(t)$および$e_l(\lambda)$は、モードλの振幅と分極ベクトルである。$Q_\lambda(t)$が$e^{i\omega_\lambda t}$で時間依存しているとすると、運動方程式(5–1)は

$$\sum_{l'}D_{ll'}e_{l'}(\lambda)=\omega_\lambda^2 e_l(\lambda) \tag{5–3}$$

となる。ここで$D_{ll'}$はダイナミカル・マトリクスと呼ばれる行列で

$$D_{ll'}\equiv\frac{\phi_{ll'}}{\sqrt{M_lM_{l'}}} \tag{5–4}$$

で定義される。

状態密度を求めるために、(5–1)式で記述される系の各原子に$F_l\cos(\Omega t)$の大きさの外力を加えることを考える。このとき、系の運動方程式は、

$$M\ddot{u}_l(t)=-\sum_{l'}\phi_{ll'}u_{l'}(t)+F_l\cos(\Omega t) \tag{5–5}$$

となる。この式に(5–2)式を代入し(5–3)式を用いて整理すると

$$\sum_{\lambda}\left\{\ddot{Q}_\lambda(t)e_l(\lambda)+\omega_\lambda^2Q_\lambda(t)e_l(\lambda)\right\}=\frac{F_l}{\sqrt{M_l}}\cos(\Omega t) \tag{5–6}$$

と書ける。この両辺に$e_l(\lambda')$を掛け、lについて和をとると

$$\ddot{Q}_\lambda(t)+\omega_\lambda^2(t)Q_\lambda(t)=\sum_{l}\frac{F_l}{\sqrt{M_l}}\cos(\Omega t)e_l(\lambda) \tag{5–7}$$

となる。ここで$e_l(\lambda)$の規格直交条件

$$\sum_{l}e_l(\lambda)e_l(\lambda')=\delta_{\lambda\lambda'} \tag{5–8}$$

を用いた。

外力を受けた系の運動方程式(5–7)から、固有振動数ω_λ に属するモードのエネルギーを計算することができる。新しい変数、

$$\xi_\lambda(t) = \dot{Q}_\lambda(t) + i\omega_\lambda Q_\lambda(t) \tag{5–9}$$

を導入し、(5–7)式に代入すると

$$\dot{\xi}_\lambda - i\omega_\lambda \xi_\lambda = \sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} \cos(\Omega t) e_l(\lambda) \tag{5–10}$$

という微分方程式が得られる。この方程式の解を$\xi_\lambda = A_\lambda(t)e^{i\omega_\lambda t}$と仮定すると、

$$\dot{A}_\lambda(t) = \sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} \cos(\Omega t) e_l(\lambda) e^{i\omega_\lambda t} \tag{5–11}$$

が得られる。これをtに関して積分することにより

$$A_\lambda(t) = \frac{i}{2} \sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} e_l(\lambda) \left[\frac{e^{-i(\Omega+\omega_\lambda)t}}{\Omega+\omega_\lambda} - \frac{e^{i(\Omega-\omega_\lambda)t}}{\Omega-\omega_\lambda} \right]_0^t \tag{5–12}$$

を得る。上式より、系のもつ固有振動数のうち外力の振動数Ωに近いモードのみが大きなA_λを与えることが分かる。このようなモードに対しては(5–12)式第1項の寄与は第2項に比べて無視することができる。従って、ξ_λは、

$$\xi_\lambda = \frac{i}{2} e^{i\omega_\lambda t} \sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} e_l(\lambda) \frac{1 - e^{i(\Omega-\omega_\lambda)t}}{\Omega - \omega_\lambda} \tag{5–13}$$

となる。モードλの振動のエネルギーE_λは、

$$E_\lambda = \frac{1}{2} \left\{ \dot{Q}_\lambda^2 + \omega_\lambda^2 Q_\lambda^2 \right\} \tag{5–14}$$

と書けるので結局、

$$E_\lambda = \frac{1}{2} \mid \xi_\lambda \mid^2 = \frac{1}{2} \left[\sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} e_l(\lambda) \right]^2 \frac{\sin^2[(\omega_\lambda - \Omega)t/2]}{(\omega_\lambda - \Omega)^2} \tag{5–15}$$

となる。これより、周期的外力による系全体のエネルギー Eは

$$E = \frac{1}{2}\sum_{\lambda}\left[\sum_{l}\frac{F_l e_l(\lambda)}{\sqrt{M_l}}\right]^2 \frac{\sin^2\left[(\omega_\lambda - \Omega)t/2\right]}{(\omega_\lambda - \Omega)^2} \tag{5–16}$$

となることが分かる。

各原子に加える外力の振幅 F_lを

$$F_l = F_0\sqrt{M_l}\cos\left(\varphi_l\right) \tag{5–17}$$

ととることにしよう。ここでφ_lはlに対して0から2πまでの一様ランダムな量である。(5–17)式を(5–16)式に代入すると、(5–16)式の[　]^{2}の部分は、

$$\left[\sum_{l}\frac{F_l e_l(\lambda)}{\sqrt{M_l}}\right]^2 = F_0^2\sum_{l}\left[e_l^2(\lambda)\cos^2\left(\varphi_l\right) + \sum_{l'(\neq l)} e_l(\lambda)e_{l'}(\lambda)\cos\left(\varphi_l\right)\cos\left(\varphi_{l'}\right)\right] \tag{5–18}$$

となる。この式において、φ_lに関する平均をとることを考える。このためφ_lに関して$[0, 2\pi]$まで積分すると、(5–18)式の第2項は0となり

$$\begin{aligned}\left\langle\left[\sum_{l}\frac{F_l e_l(\lambda)}{\sqrt{M_l}}\right]^2\right\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left[\sum_{l}\frac{F_l e_l(\lambda)}{\sqrt{M_l}}\right]^2 d\varphi_l \\ &= \frac{1}{2}F_0^2\end{aligned} \tag{5–19}$$

と書ける。従ってφ_lについて平均をとった系の全エネルギーは、

$$\langle E\rangle = \frac{F_0^2}{4}\sum_{\lambda}\frac{\sin^2\left[(\omega_\lambda - \Omega)t/2\right]}{(\omega_\lambda - \Omega)^2} \tag{5–20}$$

で表されることになる。(5–20)式において、外力を加える時間 t を十分長くする，すなわち、

$$\Omega t \gg 1 \tag{5–21}$$

とすると、(5–20)式の共鳴項は、

$$\frac{\sin^2\left[(\omega_\lambda - \Omega)t/2\right]}{(\omega_\lambda - \Omega)^2} \longrightarrow \frac{\pi t}{2}\delta(\omega_\lambda - \Omega) \tag{5–22}$$

となる。何故なら$t \to \infty$において、$\omega_\lambda \neq \Omega$では0となり、$\Omega$についての積分は$\pi t/2$を与えるからである*。故に、(5–21)式の条件のもとでは、(5–20)式は、

$$\langle E \rangle = \frac{\pi F_0^2 t}{8} \sum_\lambda \delta(\omega_\lambda - \Omega) \tag{5–23}$$

となる。状態密度$\mathcal{D}$の定義式

$$\mathcal{D}(\Omega) = \frac{1}{N} \sum_\lambda \delta(\omega_\lambda - \Omega) \tag{5–24}$$

と(5–23)式を比較することにより、

$$\mathcal{D}(\Omega) = \frac{8\langle E \rangle}{\pi t F_0^2 N} \tag{5–25}$$

が得られる。

ここで注意しなくてはならないのは、周期的外力を加えている時間tは(5–21)式を満足していれば、どんなに長くとってもよいというわけではないということである。あまり長い時間外力を加え続けると(5–20)式の共鳴項の共鳴幅が狭くなりすぎ、共鳴幅の中にモードが存在しなくなってしまうからである。従って、時間tは条件式(5–21)式に加えて、

$$\frac{4\pi N}{\omega_D t} \gg 1 \tag{5–26}$$

も満足するように選ばなくてはならない。ここでω_Dは系のカットオフ振動数である。(5–26)式で(N/ω_D)は系の平均状態密度、$4\pi/t$は共鳴項の第1暗輪間の幅であるから、条件(5–26)式は、この幅に多数のモードが存在することを意味している。

以上の議論から、(5–17)式のような振幅を持った振動数Ωの周期的外力をt時間系に加え続け、系の平均エネルギーを数値的に求めれば、(5–25) 式を用いて系の状態密度を計算できることがわっかた。Nを大きくとった場合、外力の振幅$\{F_l\}$に関する系の平均エ

---

*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2[(\omega_\lambda - \Omega)t/2]}{(\omega_\lambda - \Omega)^2} d\Omega = \frac{t}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \frac{\pi t}{2}$$

ネルギーは、単一の $\{F_l\}$ の組で自己平均がとられるので、幾つもの $\{F_l\}$ のパターンで平均操作を行う必要はない。すなわち N が大きいとき、$E = \langle E \rangle$ である。系のエネルギーは、外力を受けた系の時間発展を追うだけで求めることができ、そのためこの計算法では系の自由度 N に比例した計算機記憶容量しか必要としない。従って、先にも述べた通り、極めて大きな格子系を扱うことができる。また、任意の Ω に対する状態密度だけを計算できることもこの方法の特徴である。但し、系のサイズ N があまり小さすぎると(5–21), (5-26)式の両条件を満足する t が存在しなくなるばかりでなく、結果の精度も悪くなるので注意が必要である。

5–1–2. 厳密解との比較

強制振動による共鳴を利用した上記の方法の精度をチェックするため2次元正方格子および3次元立方格子の振動状態密度を強制振動法により求めた。無限に大きな2および3次元立方格子の状態密度の厳密な形はMontrolとPotts[116]により求められている。原子の質量を1、バネ定数を1とすると、2次元規則格子では、

$$\mathcal{D}(\omega) = \frac{\omega}{\pi^2} K\left[\frac{\omega^2(8-\omega^2)}{16}\right] \quad , \tag{5–27}$$

3次元では、

$$\mathcal{D}(\omega) = \frac{\omega}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_0^3(2v) e^{iv(6-\omega^2)} dv \tag{5–28}$$

となる。ここで、K は第1種完全楕円積分を、J_0 は0次のベッセル関数を表す。2次元規則格子での数値計算は 100×100 のシステム・サイズの系について行われた。結果は図5–1に示す通りである。実線は(5–27)式で表される厳密解，黒丸は強制振動法を用いた数値計算の結果である。図5–2は3次元格子に対する結果で、同じく実線が(5–28)式で与えられる厳密解，黒丸が $30 \times 30 \times 30$ の立方格子に対する計算結果を表している。実際の計算は、北大の大型計算機センターにあるスーパーコンピュータ HITAC S-810/10 を使用して行われた。S-810/10 の最高処理速度は315MFLOPSであるが、図5–1の計算を行うのに約7分，図5–2の計算を行うのに約20分のCPU時間を要している。どちらの結果も厳密解と非常によく一致している。従来の対角化の方法では低振動数領域における固有値の精度が高振動数側に比べて悪くなるという問題があったが、図5–1，図5–2

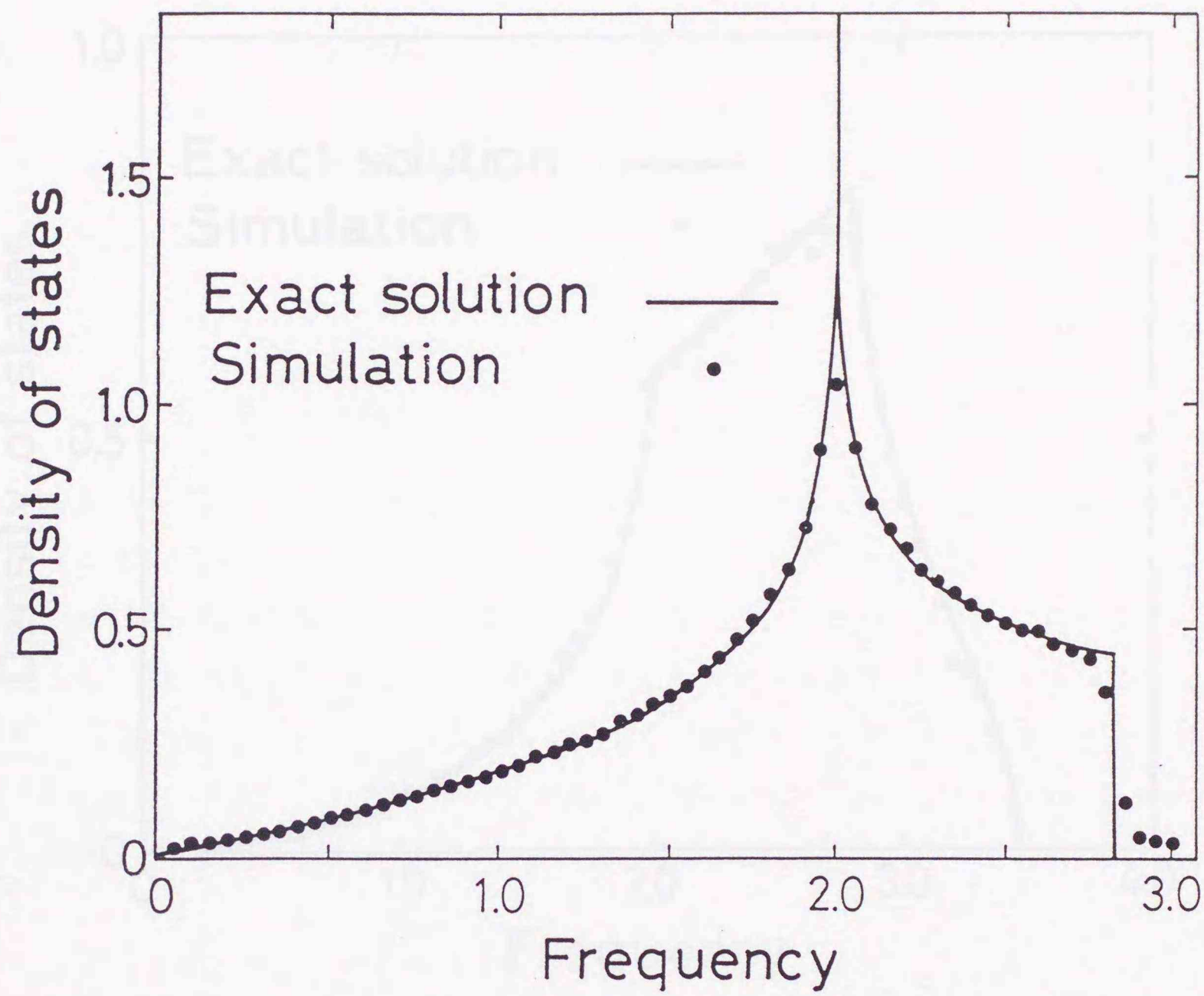


図5−1. 2次元正方格子の振動状態密度の厳密解と、100×100の正方格子に対するシミュレーション結果との比較。

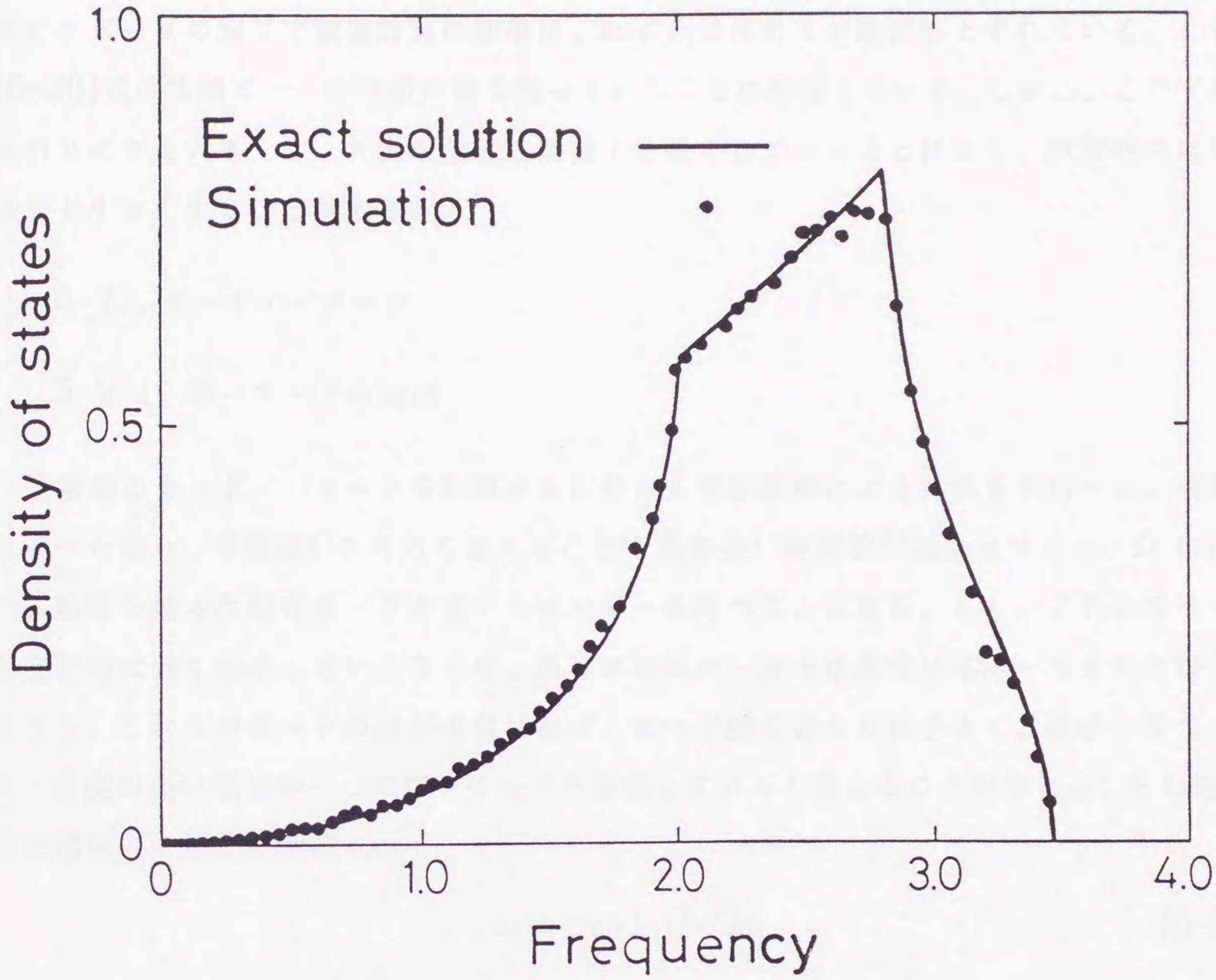


図5–2. 3次元立方格子の振動状態密度の厳密解と、30 × 30 × 30 の立方格子に対するシミュレーション結果との比較。

を見てわかるとおり、本方法により求められた状態密度は低振動数領域においても極めて高い精度を持ち続けている。但し、図5–1におけるω_D近傍および図5–2における$\omega \sim 3$近くのピークの回りで数値計算の結果は、わずかではあるが厳密解とずれている。これは(5–20)式の共鳴ピークが有限の幅を持っていることに起因している。しかし、このずれは系のサイズを大きくし、外力を加える時間tを長くしてやることにより、原理的にはいくらでも小さくすることができる。

5–2. モード・パターン

5–2–1. 単一モードの抽出

振動のモード・パターンを計算するためにも強制振動による共鳴を利用する。前節でも述べた通り、振動数Ωの外力を加えることで系を長い時間強制振動させると、Ωの近くの振動数を持った固有モードが高いエネルギーを持つことになる。もし、これらのモードが空間的に強く局在しているならば、系のエネルギー分布は非常に不均一なものとなるであろう。これらのモードの数が少なければ、モード間の重なりは小さく、格子上のエネルギー密度の高い領域が一つの単一モードを形成していると考えることができる。その結果、局在領域内の原子の変位u_lは、

$$u_l = Ce_l(\lambda_0)/\sqrt{M_l} \tag{5–29}$$

となる。ここでCはサイトlに無関係な係数である。こうして、変位u_lからモード・パターン$e_l(\lambda_0)$を見つけることができる。しかし、モードが拡がっていたり弱く局在している場合、このような議論は成立しなくなる。従って、モードが拡がっていたり弱く局在している場合にも使えるような数値計算法を考えなければならない。

まず始めに、t時間の間周期的外力$F_l\cos(\Omega t)$を加え続けた場合、各原子の変位$u_l^{(1)}$がどのようになるかを見てみよう。そにためには、運動方程式(5–7)を解かなければならない。この方程式の特殊解を

$$Q_\lambda(t) = \tilde{Q}_\lambda \cos(\Omega t) \tag{5–30}$$

とすると、$\tilde{Q}_\lambda$は

$$\tilde{Q}_\lambda = \sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} \frac{e_l(\lambda)}{\omega_\lambda^2 - \Omega^2} \tag{5–31}$$

と求まる。一般解は、この特殊解に(5–7)式の斉次方程式の解を加えることにより得られ、

$$Q_\lambda(t) = a\cos(\omega_\lambda t + \alpha) + \sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} \frac{e_l(\lambda)}{\omega_\lambda^2 - \Omega^2} \cos(\Omega t) \qquad (5\text{–}32)$$

となる。ここで a，α は定数である。(5–32)式は $\Omega = \omega_\lambda$ で適用できない。そこで、上式を

$$Q_\lambda(t) = a'\cos(\omega_\lambda t + \alpha) + \sum_l \frac{F_l}{\sqrt{M_l}} \frac{e_l(\lambda)}{\omega_\lambda^2 - \Omega^2} \{\cos(\Omega t) - \cos(\omega_\lambda t)\} \qquad (5\text{–}33)$$

と変形する。初期条件として、$t = 0$ で $Q_\lambda(t) = 0$ とすると、$a' = 0$ となり、三角関数の公式を用いることにより

$$Q_\lambda(t) = 2\sum_l \frac{F_l e_l(\lambda)}{\sqrt{M_l}} \frac{\sin[(\Omega + \omega_\lambda)t/2] \sin[(\Omega - \omega_\lambda)t/2]}{\Omega^2 - \omega_\lambda^2} \qquad (5\text{–}34)$$

を得る。従って、(5–2)より変位 $u_l^{(1)}$ は

$$u_l^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{M_l}} \sum_\lambda F_\lambda h(\Omega, \omega_\lambda, t) e_l(\lambda) \quad . \qquad (5\text{–}35)$$

但し、

$$F_\lambda = \sum_l \frac{F_l e_l(\lambda)}{\sqrt{M_l}} \qquad (5\text{–}36)$$

$$h(\Omega, \omega_\lambda, t) = \frac{2\sin[(\Omega + \omega_\lambda)t/2] \sin[(\Omega - \omega_\lambda)t/2]}{\Omega^2 - \omega_\lambda^2} \qquad (5\text{–}37)$$

となる。

次にサイト l に加える外力の振幅を新たに

$$F_l^{(1)} = M_l u_l^{(1)} \qquad (5\text{–}38)$$

とし、外力 $F_l^{(1)}\cos(\Omega t)$ を変位 0，初速度 0 とした系に t 時間加える。t 時間後の変位 $u_l^{(2)}$ は

$$u_l^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{M_l}} \sum_\lambda F_\lambda h^2(\Omega, \omega_\lambda, t) e_l(\lambda) \qquad (5\text{–}39)$$

となる。さらにこの変位を用いて外力の振幅を

$$F_l^{(2)} = M_l u_l^{(2)} \qquad (5\text{–}40)$$

と再定義し同じ手続きを続ける。このような操作を p 回繰り返した後のサイト l の原子の変位は、

$$u_l^{(p)} = \frac{1}{\sqrt{M_l}} \sum_{\lambda} F_\lambda h^p(\Omega, \omega_\lambda, t) e_l(\lambda) \tag{5–41}$$

で表される。繰り返し操作を十分多く行うと(5–41)式の形より、ある一つのモード（λ_1 とする）の振幅が他のモードの振幅に比べ著しく大きくなることが分かる。このモードは(5–37)式で定義される h–関数の絶対値を最も大きくするω_λに属するモードである。従って十分大きな p に対して

$$u_l^{(p)} \approx C e_l(\lambda_1)/\sqrt{M_l} \tag{5–42}$$

となる。Cは lに依らない定数である。このようにしてある特定のモードの空間的なパターンを求めることができる。

この方法も状態密度に対する方法と同様に運動方程式の時間発展を追うだけなので系のサイズ Nに比例するメモリーしか必要としない。こうして計算されたモード・パターンの精度は $|h_1|$ と $|h_2|$ の比に依存する。h_1, h_2はモードλ_1, λ_2に対する h–関数の値であり、λ_1は $|h|$ を最大とするモード, λ_2は 2 番目に大きな $|h|$ を与えるモードである。p 回の繰り返し操作の後には、モード・パターンの誤差は$(|h_2|/|h_1|)^p$に比例している。より具体的な誤差の評価、すなわち繰り返し回数 p とモードの単色性の間の関係については次項で説明する。

5–2–2. モードの単色性[113)]

前項で述べられた方法により計算された振動パターンの単色性を評価するために、次式で定義される量δ_lを導入する。

$$\delta_l \equiv \frac{1}{\sqrt{M_l}}(a_l - \tilde{\omega}^2 b_l) \quad . \tag{5–43}$$

ここで a_l, b_lは

$$a_l = \sum_{l'} \phi_{ll'} u_{l'} \tag{5–44}$$

$$b_l = M_l u_l \tag{5–45}$$

である。(5–43)式の$\tilde{\omega}$はこの段階では未知のパラメータであり、(5–49)式において後にその意味が明かとなる量である。もし変位パターンu_lが単一モードλ_1だけから構成されているとすると、λ_1モードに対する運動方程式から$\tilde{\omega} = \omega_1$のとき$\delta_l = 0$となる。また、$u_l$が$\Omega$に近い少数のモードから構成されているとすると、$\delta_l$は$\tilde{\omega} \approx \Omega$で小さな値をとる。このようなことから、$\delta_l$はモードの混在の程度を示す一つの指標となりうることがわかる。しかし、δ_lはサイトlに依存する次元を持った量であるので、系全体について定義される無次元量δ;

$$\delta^2 \equiv \frac{\sum_l \delta_l^2}{\sum_l (a_l^2/M_l)} \tag{5–46}$$

を用いた方がより便利であろう。(5–46)式に(4–44)式を代入することにより

$$\delta^2 = (\Gamma_4 - 2\Gamma_2\tilde{\omega}^2 + \Gamma_0\tilde{\omega}^4)/\Gamma_4 \tag{5–47}$$

となる。ここで

$$\Gamma_0 = \sum_l \frac{b_l^2}{M_l} \tag{5–48a}$$

$$\Gamma_2 = \sum_l \frac{a_l b_l}{M_l} \tag{5–48b}$$

$$\Gamma_4 = \sum_l \frac{a_l^2}{M_l} \tag{5–48c}$$

である。(5–47)式の$\tilde{\omega}^2$に関する微分から、δ^2は

$$\tilde{\omega}^2 = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_0} \tag{5–49}$$

において最小値

$$\delta^2 = (\Gamma_0\Gamma_4 - \Gamma_2^2)/\Gamma_0\Gamma_4 \tag{5–50}$$

をとる。Γ_n $(n = 0, 2, 4)$は(5–44), (5–45), (5–48)式を用いると変位パターンu_lから直接計算することができるので、p回の繰り返し操作後のシミュレーション結果$u_l^{(p)}$からδや$\tilde{\omega}$を求めることができる。以下でδ, $\tilde{\omega}$と書いたならば、δ^2を最小とする値、すなわち(5–49)式や(5–50)式で与えられる量を指すこととする。

δや$\tilde{\omega}$の持つ意味を考えよう。(5–3), (5–41), (5–44), (5–45), (5–48)式および$\{e_l(\lambda)\}$の規格直行条件(5–8)式を用いると、

$$\Gamma_n = \sum_{\lambda} A_\lambda^2 \omega_\lambda^n \quad , \qquad (n = 0, 2, 4) \tag{5–51}$$

と表される。A_λはモードλの振幅であり、

$$A_\lambda = F_\lambda h^p(\Omega, \omega_\lambda, t) \tag{5–52}$$

で与えられる。さて、p回の繰り返し操作の末、励起された変位パターンには2つのモード($\lambda = 1, 2$)しか含まれていないものと仮定しよう。このとき(5–49)式, (5–51)式より、

$$\tilde{\omega}^2 = \frac{A_1^2\omega_1^2 + A_2^2\omega_2^2}{A_1^2 + A_2^2} \tag{5–53a}$$

$$\delta^2 = \frac{A_1^2 A_2^2 (\omega_1^2 - \omega_2^2)^2}{(A_1^2 + A_2^2)(A_1^2\omega_1^4 + A_2^2\omega_2^4)} \tag{5–53b}$$

となる。A_1, A_2およびω_1, ω_2はモードλ_1, λ_2の振幅および固有振動である。系が十分大きい、従って固有振動数間隔が十分小さい（$|\omega_1 - \omega_2| \ll \omega_1$）場合、もし$A_1 \gg A_2$ならば(5–53b)式は

$$\delta \simeq \frac{2\Delta\omega}{\tilde{\omega}} \left| \frac{A_2}{A_1} \right| \tag{5–54}$$

と書ける。$\Delta\omega (\equiv |\omega_1 - \omega_2|)$はおよそ$[N\mathcal{D}(\omega)]^{-1}$の程度である。こうして$\delta$の値を知ることでモードの混在比$A_2/A_1$を見積ることができる。同様に$A_1 \gg A_2$のとき(5–53a)式は

$$\tilde{\omega} \simeq \omega_1 + \Delta\omega \left(\frac{A_2}{A_1} \right)^2 \tag{5–55}$$

となる。従って、$A_1 \gg A_2$の時には、(5–49)式で与えられる$\tilde{\omega}$は真の固有振動数ω_1に対する極めて良い近似となる。そのずれは微小な量2つの積の程度である。

(5–54)式や(5–55)式の結果はいづれも$A_1 \gg A_2$の条件が満たされているときに成立するものである。従って、これらの式を用いてモード混在比や固有振動数を求める際$A_2/A_1 \ll 1$となっているかどうかを判断しなくてはならない。そのために(5–52)式を(5–54)式に代入することで得られる式

$$\log \delta \simeq p \log \left| \frac{h(\Omega, \omega_2, t)}{h(\Omega, \omega_1, t)} \right| + \log \left| \frac{2\Delta\omega F_2}{\omega F_1} \right| \tag{5–56}$$

を考える。この方程式は励起された変位パターンに対する主な寄与はたかだか2つのモードのみであり、かつ $A_1 \gg A_2$ であれば $\log\delta$ が p に比例することを示している。逆に言えば、$\log\delta$ が p に対して線型に変化しているかどうかを見ることにより、これら2つの条件が成立しているかどうかを判断することができる。

以上のような議論の有効性を確かめるために、200原子からなる1次元規則チェーンの振動を調べた。原子の質量 M は全て等しく $M=1$ であり、最近接原子間をつなぐボンドのバネ定数も1とした。チェーンの両端は周期境界条件が課せられている。前項で述べた数値計算法によりモード・パターンを計算した。外力の振動数は $\Omega=0.3$，1回の繰り返しの中で外力を加える時間 t は $t=300$ とした。また、外力の振幅の初期パターンは、状態密度を求めるときと同じ、すなわち

$$F_l = F_0 \cos(\varphi_l) \tag{5–57}$$

とする。ここで F_0 は定数，φ_l は0から 2π までの l に対する乱数である。モード・パターンから計算された δ の値と繰り返し回数 p との関係は図5–3に示されている。この図より $p \geq 3$ に対して $\log\delta$ と p が線型関係にあることがわかる。図5–4は $p=2$ と $p=8$ で得られたモード・パターンである。$p=2$ でのモード・パターンはうなりをともなっている。これは明かに複数のモードからの寄与が無視できないためである。$p=2$ および $p=8$ に対する変位パターンの δ の値は各々0.204，6.31×10^{-5} である。1次元チェーンに対する状態密度 $\mathcal{D}(\omega)$ の式(5–27)式から $\Delta\omega=[N\mathcal{D}(\omega)]^{-1}$ を計算すると $\omega=0.3$ では $\Delta\omega=0.0155$ である。この値を使って(5–54)式から $p=8$ の変位パターンに対するモード混在比 A_2/A_1 を求めると 6×10^{-4} となる。この系の $\omega=0.3$ に最も近い固有振動数を持つモードは、波長20サイトのモードであり、$\omega=s\sin(\pi/20)=0.3128689301$ であるが、$p=8$ に対する $\tilde{\omega}$ は0.3128689であり、極めてよく一致している。

5–2–3. 数値計算の最適化

これまでの議論においては外力を加える時間 t と繰り返し回数 p について特に条件は無かった。$\log\delta$ が p に比例するようになるための p の値は、明かに t に依存する。ここでは、t と p をどのように選べば最も効率の良い計算ができるかについて考察する。2つの

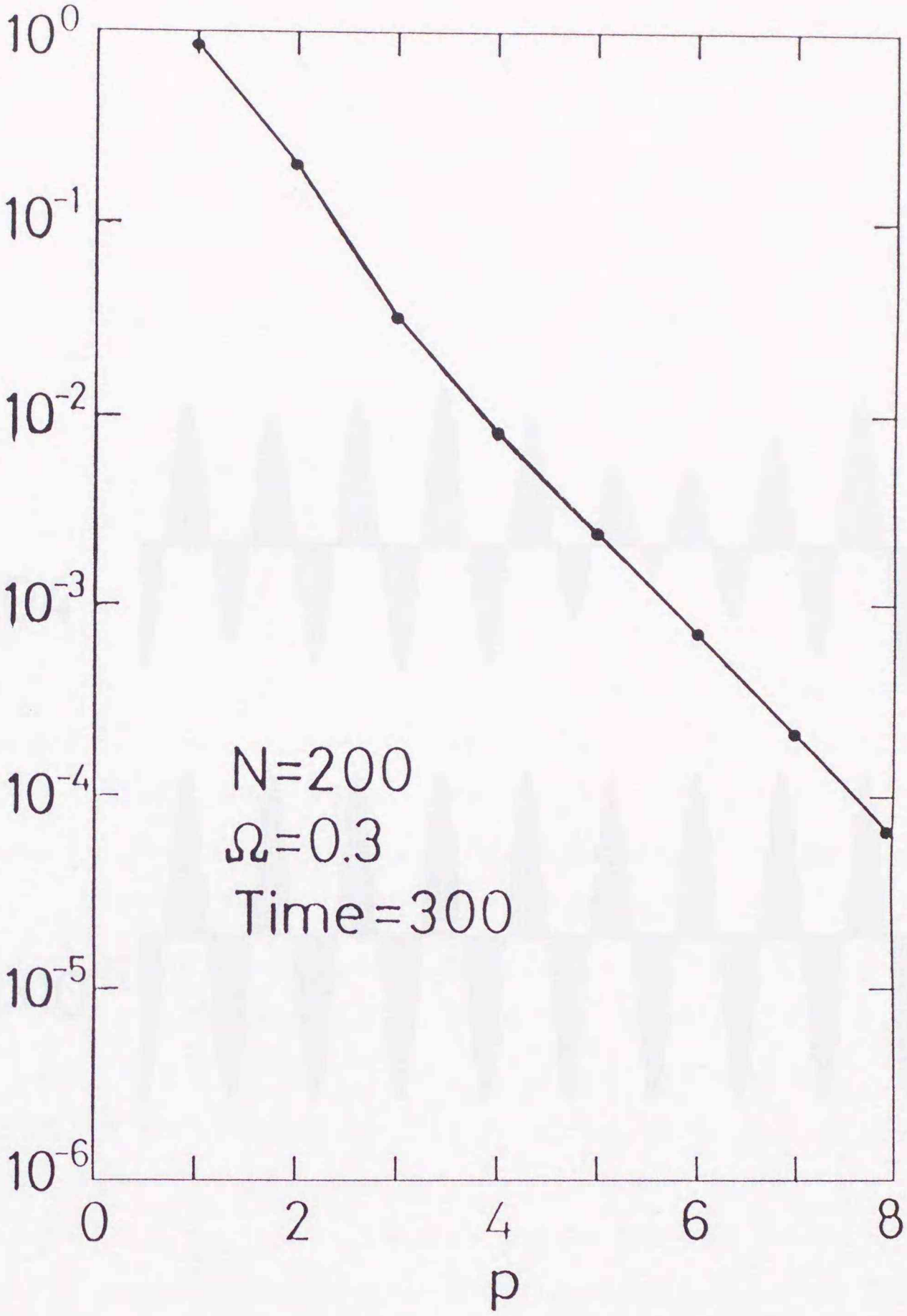


図 **5–3.** 200 原子からなる 1 次元規則格子上に励起された$\omega = 0.3128$ の固有振動数を持つ固有モードに対する $\log\delta$ と p の関係。外力の振動数Ωと強制振動時間 t は各々0.3, 300 である。

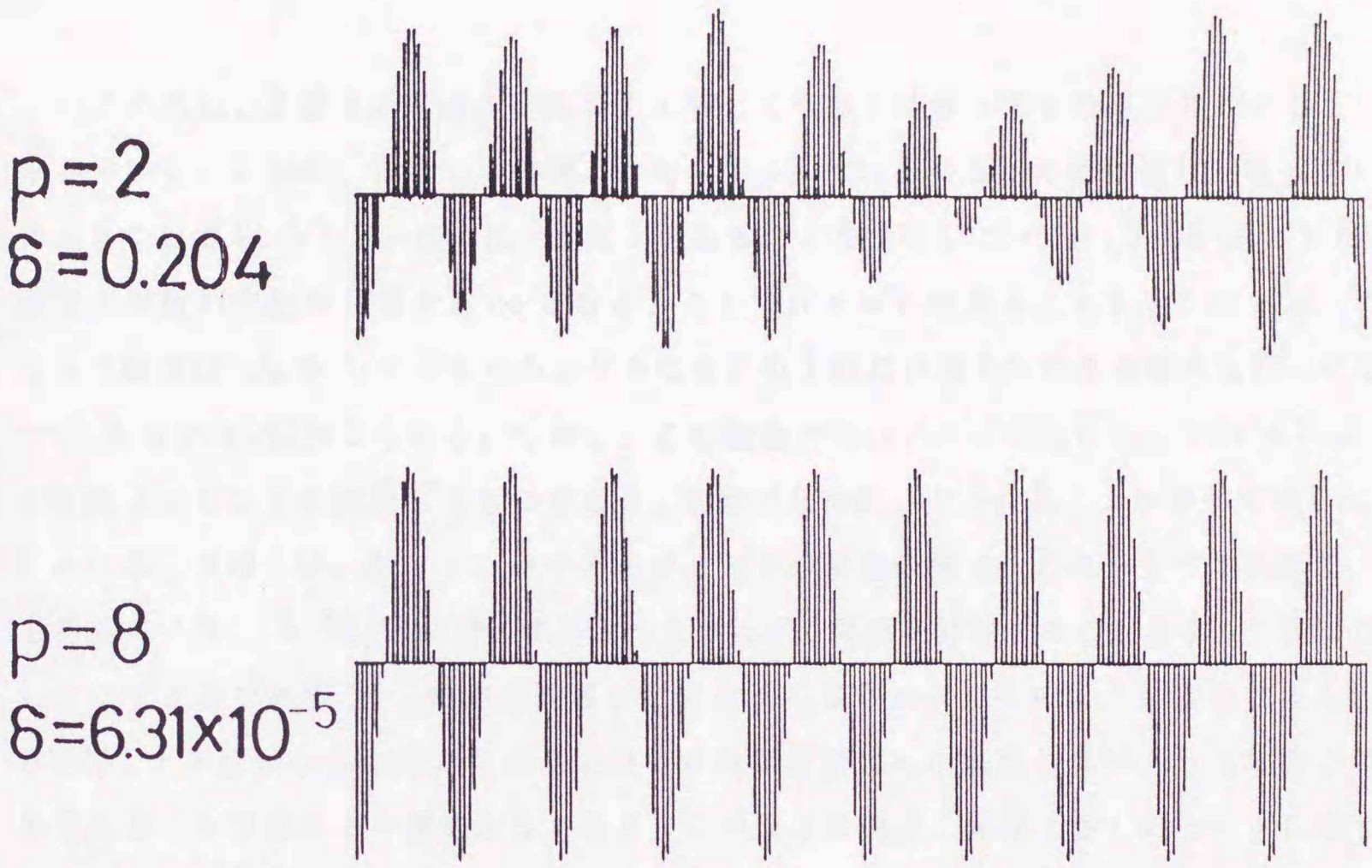


図 5–4. 強制振動法により得られた 200 原子からなる 1 次元規則格子（周期境界）の変位パターン。上と下の図は各々$p=2$と$p=8$のパラメータによって計算されたものである。計算は$\Omega=0.3$, $t=300$として行われた。

モードλ_1とλ_2しか励起されていない場合(5–37), (5–56)式よりある一定のδの値δ_0の値δ_0を与えるためのtとpは次の式で関係付けられている。

$$p \simeq \log \left| \frac{\delta_0 \omega F_1}{2\Delta\omega F_2} \right| / \left| \log \left| \frac{\sin\left[(\Omega-\omega_2)t/2\right] \sin\left[(\Omega+\omega_2)t/2\right](\Omega^2-\omega_1^2)}{\sin\left[(\Omega-\omega_1)t/2\right] \sin\left[(\Omega+\omega_1)t/2\right](\Omega^2-\omega_2^2)} \right| \right| \quad . \qquad (5\text{–}58)$$

この式は、2番目の対数の変数が1に等しくなるtにおいてpの値が発散することを示している。これは、これらの時間tに対して$h_1 = h_2$となるため繰り返し回数pをいかに大きくしてもA_1とA_2の比は一定にとどまることを意味している。(5–58)式はまた、2番目の対数の変数が0または∞となるところでは$p=0$であることも示している。このような場合は、h_1かh_2のどちらかが0となるため1回だけ外力を加える操作を行っただけでA_1あるいはA_2が0となる。しかし、この議論は外力によって他のモード($\lambda = 3, 4, \ldots$)が励起されることを無視したものである。実際には同時刻に$h_3, h_4, \ldots$がすべて完全に0となることはない。従って、パラメータpとtの最適の組は、これら全ての励起モードを考慮にいれ、(5–58)式に対応するようなpとtの関係を計算することによって見つけることができるであろう。tの連続関数としてのpの値はおよそ次のように変化すると考えられる。tの値が小さく外力により系がわずかな周期数しか振動しないような場合、共鳴を考えること自体あまり意味がなくなる。このような場合、非常に多くのモードに対するh–関数が同程度の値を持つため精度のよいモード・パターンを得るには大きな繰り返し回数が必要となるであろう。大きなtの値に対しては、pは一般に小さな値であっても単色性のよいモードが得られるであろうが、上で述べたように一定の値δを与えるために必要なpの値が発散してしまうようなtの値の列が存在することに注意しなければならない。これらの考察からδを一定とするようなpとtの関係は図5–5のようになると期待される。図5–5は、一定のδに対する$1/p$とtをプロットしたものである。実際にモード・パターンを得るために要するCPU時間が一定であるようなpとtの組は、t-$1/p$面の原点を通る直線上に存在する。従って、CPU時間を最小にする最適なpとtの値を決めるには、原点を通る直線のうちδ-一定の曲線と交わり、かつその傾きが最大であるようなものを見つければよい。その直線と曲線との交点が求めるべきtとpを与える。そのような直線が図5–5に破線で表されている。

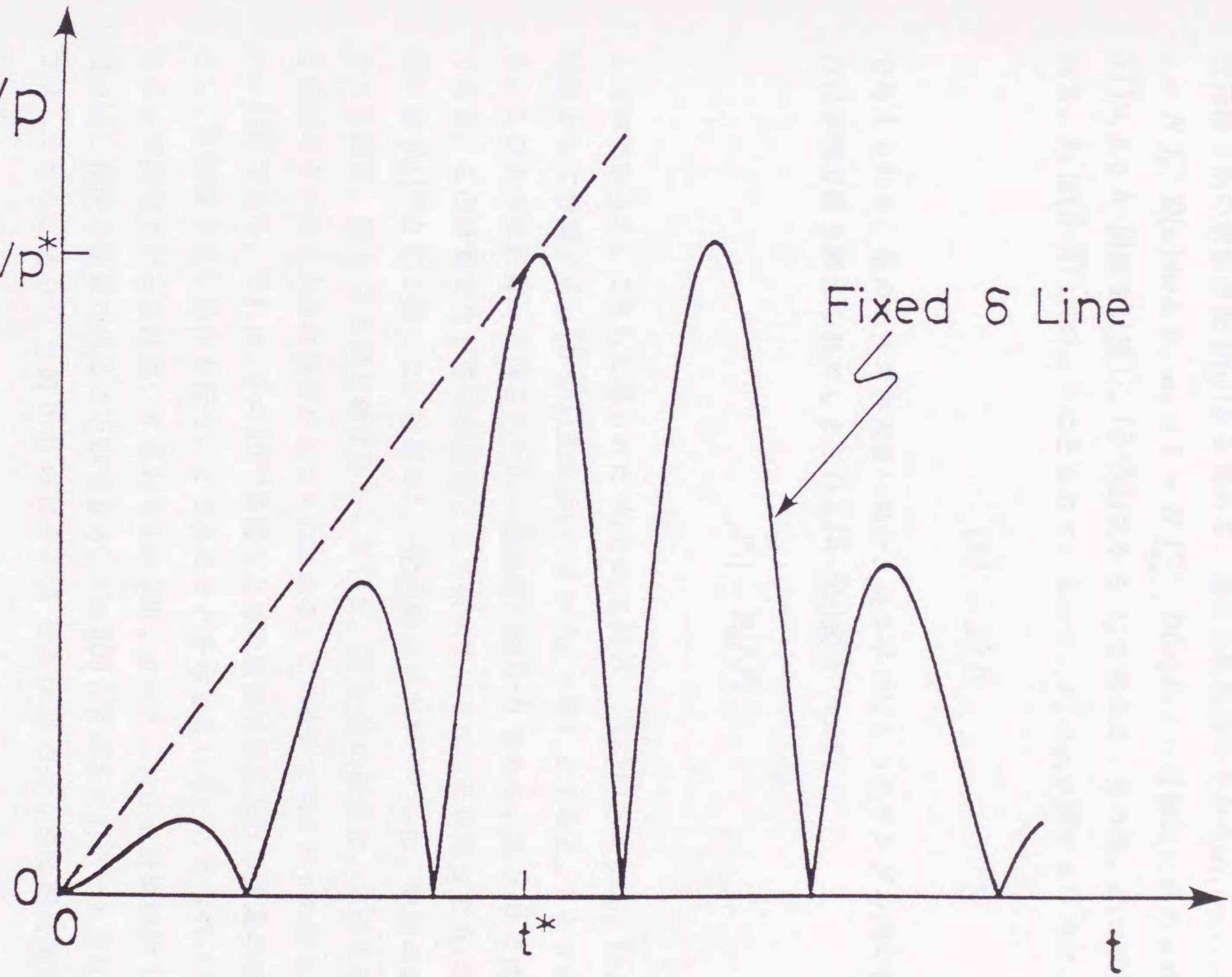


図 **5–5.** $\delta = const.$としたときの $1/p$ と t の関係の概念図。実線はδ一定のラインを表し、破線は実線と交差する（原点をとおる）直線の内最大の傾きを持ったものを表す。その交点が、パラメータ p と t の最適な値 p^* と t^* を与える。

最適な t と p の組を探すための上述のような方法の具体例を先に取り上げた 200 原子からなる 1 次元規則チェーンで説明する。まずこのモデルの 200 個の固有振動数を 1 次元格子系の状態密度 $\mathcal{D}(\omega)$から求める。固有振動数列を下から$\omega_1, \omega_2, \ldots$とすると、$\omega_1$は $1 = N\int_0^{\omega_1} \mathcal{D}(\omega)d\omega$より，$\omega_n$は $1 = N\int_{\omega_{n-1}}^{\omega_n} \mathcal{D}(\omega)d\omega$より近似的に求められる*。次に(5–37)式より h–関数を計算し、(5–52)式から A_λを求める。その際、F_λは次のように処理される。F_λは(5–57)式のようにとられているので、F_λ^2のφ_lに関する平均は、

$$\langle F_\lambda^2 \rangle = F_0^2/2 \tag{5–59}$$

で与えられる。系のサイズが大きい場合、φ_lの平均は 1 つのサンプル内の部分集合による自己平均で置き換えられてしまうから(5–59)式はこの時、

$$|F_\lambda| = F_0/\sqrt{2} \tag{5–60}$$

となるであろう。こうして得られた A_λとω_λを用いて(5–51)式よりΓ_0，Γ_2，Γ_4を t と p の関数として計算する。(5–50)式において$\delta = \delta_0$(一定）とすると、t と p の関係が得られる。このような計算から得られたδ-一定曲線が図 5–6 である。図 5–6 では$\delta_0 = 10^{-4}$としてある。この計算では p を連続関数として扱っているが、その際負の h_λの非整数乗（ $2p$ 乗）は $|h_\lambda|^{2p}$として扱った。結果のδ-一定曲線のプロファイルは、前節の議論により期待された概形、図 5–5 と同じ様な形をしている。図 5–6 の破線は、原点を通り曲線と交わる直線のうち最も大きな傾きをもつものである。この交点での t と p の値は各々$t = 119.2$，$p = 4.55$ である。これは、$\delta < 10^{-4}$を得るための数値計算における最適の条件は $t = 119.2$ とし、5 回繰り返し操作を行うことであることを示している。これらのパラメータを用いることで前項で行った計算、すなわち $t = 300$，$p = 8$ における計算の約 1/4 の CPU 時間で同じ精度の結果を得ることができる。$t = 300$，$p = 8$ に対応する点は図 5–6 の黒丸で示してある。図 5–7 は図 5–6 のピーク A および B の近くを時間に関して拡大した図である。

＊ このような規則格子の場合、厳密な固有振動数も求められるが、実際の多くの場合では正確な固有振動数を全て求めることは困難である。しかし、そのような場合でも、5–2 節で述べたような強制振動法を用いて状態密度を求めることはできる。そこで、あえてここでは状態密度を用いて近似的な擬似固有値列を求め、これを用いて、得られた t と p の最適値が真の最適値とほとんど変わらないことを示す。

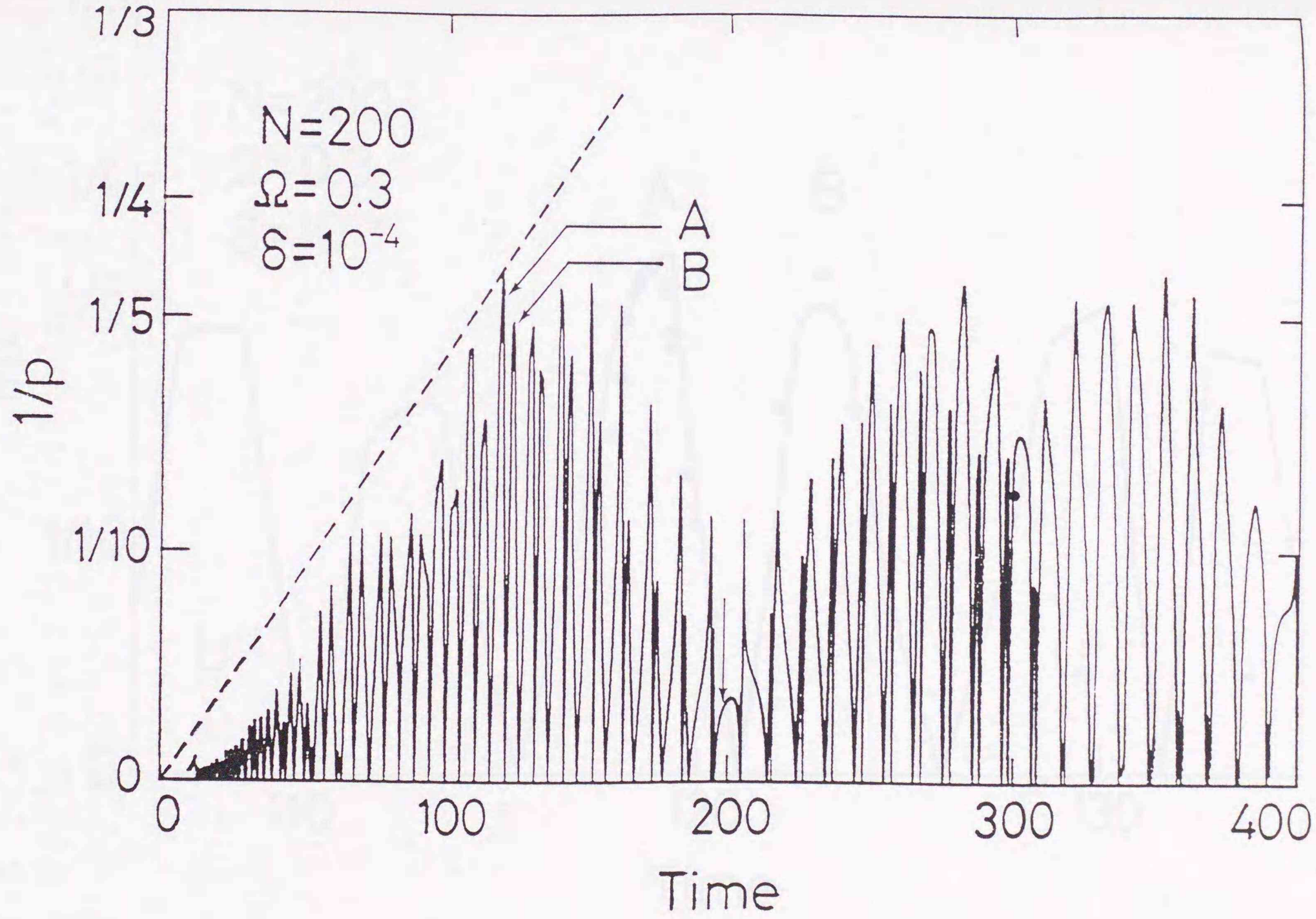


図 5–6. $\delta = 10^{-4}$, $\Omega = 0.3$ に対する $1/p$ と t の関係。系は 200 原子からなる 1 次元規則格子であり、時間の単位は $\sqrt{M/K}$ である。実線と破線の交点が最適な t と p の組を与える。黒丸は、$t = 300$, $p = 8$ に対応する点を表す。A および B とラベルが振られたピークの回りの領域が図 5–7 で拡大して表示されている。

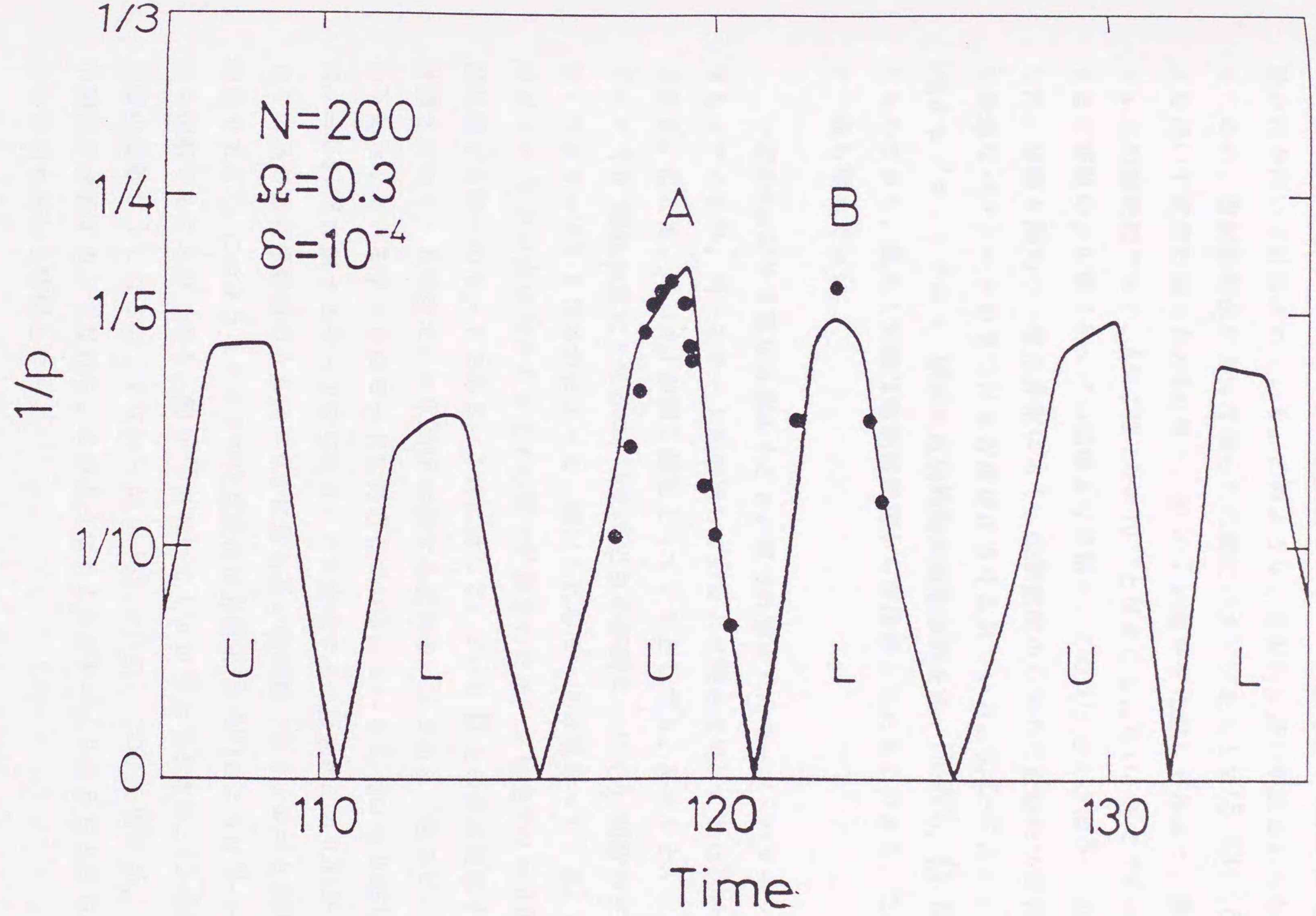


図 **5–7.** 図5–6のピークAおよびBの近傍の拡大図。黒丸は本文で述べられている方法によって計算されたものである。UとLのラベルは、この領域の時間を用いてシミュレーションを行うと各々$\omega = 0.3128$, $\omega = 0.2818$の固有振動数を持つ固有モードを引き抜くことになることを示している。

図 5–6 や図 5–7 は真の固有振動数ではなく、状態密度から求めた近似的な固有振動数の列を用いて計算されている。このような、近似的な扱いが許されるかどうかを判断するために、強制振動法によって得られた変位パターンをもとに(5–43)–(5–45), (5–48)式を用いて直接計算されたδの値と、図 5–7 の結果を比較してみよう。強制振動法における p は勿論整数であり、δが丁度 1.0×10^{-4} となることはない。そこで$\delta=1.0\times10^{-4}$に対する非整数の p の値を$\delta\propto e^{p}$の関係より見積り、この $1/p$ と t を図 5–7 の黒丸によって示した。曲線と黒丸の一致は非常によく、状態密度から求めた近似的な固有振動数列を使って最適なパラメータを見つける方法が正当化されている。図 5–8 は $t=198.4$ に対する $\log\delta$–p プロットであり、破線は近似的固有振動数列を用い(5–50), (5–51)式から計算したものであり、黒丸と実線は強制振動法から直接得られたものである。これら 2 つの曲線の一致も極めてよい。

一定のδに対する異なる値の t と p の組で計算されたモード・パターンは同一の単色度はもっているが、同一のモードを抽出しているとは限らない。これは次の理由によるものである。たとえ、$|A_2/A_1|$ が同じ値をとっているとしても、$\lambda=1$ と$\lambda=2$ のどちらが主モード（h–関数が最大となるモード）でどちらが副モード（h–関数が主モードの次に大きくなるモード）となるかによって、抽出されるモードは異なってくる。例えば、図 5–7 のピーク A 上の点に対する p と t の組で計算されたモードは全て$\omega=0.3128$ の固有振動数に属する同一のモードである。これに対して、ピーク B 上の点に対応する p と t の組で計算されたモードは全て$\omega=0.2818$ に属する固有モードである。他のピークは各々ピークの下に示しているラベルのモードに対応している。ラベル L は$\omega=0.2818$ に、ラベル U は$\omega=0.3128$ に属するモードを与えることを意味する。振動数$\omega=0.3128$ は先に述べた通りこの系の固有振動数のうち$\Omega=0.3$ に最も近い振動数であり、$\omega=0.2818$ は次に近い振動数である*。このようなモードの交互変化は方程式(5–58)のような 2-モード近似の議論から理解することができる。図 5–7 において $1/p$ が 0 となる点は、(5–58)式の 2 番目の対数の変数が 1 となる点（すなわち $h_1=h_2$）であり、この t を境に $|h_1|$ と $|h_2|$ の値の大小関係が逆転する。すなわち、このような t こそが$\lambda=1,2$ のうちどちらが主モードとなるかが切り替わる時間となる。

---

* 波長$=200/9=22.22$ に対するモードで$\omega=2\sin(9\pi/200)$。

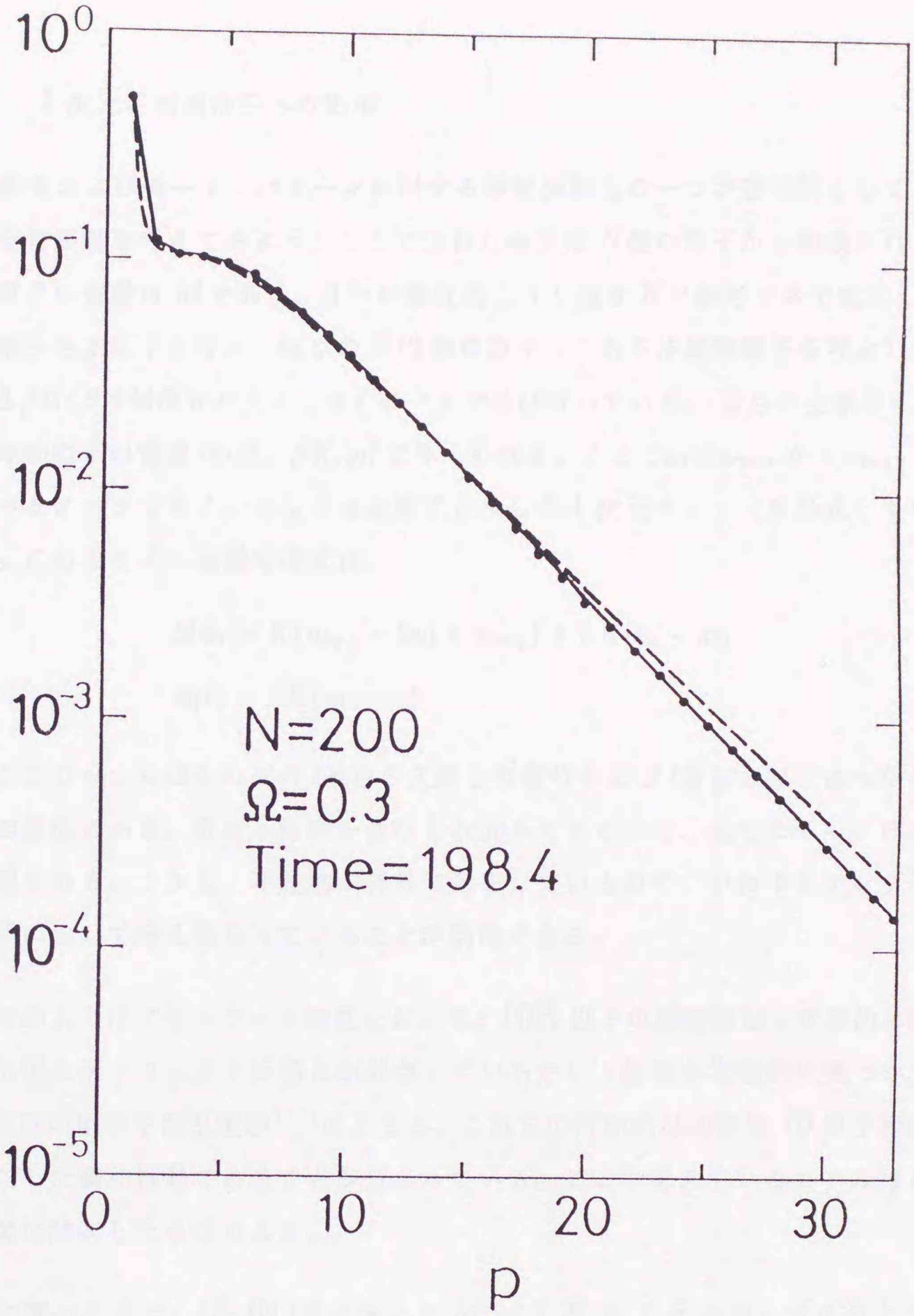


図5–8. 200原子からなる1次元規則格子上に励起された$\omega = 0.3128$の固有振動数を持つ固有モードに対する$\log\delta$とpの関係。外力の振動数Ωと強制振動時間tは各々0.3, 198.4であり、図5–6の矢印に対応している。実線は実際の数値計算により得られたものであり、破線は本文で述べられている近似法によって引かれたものである。

5–3. 1次元不規則格子への応用

状態密度およびモード・パターンに対する強制振動法の一つの適用例として不規則な格子系の固有振動を考えてみよう。ここで扱われる系はN個の原子から構成され、そのうち半分の原子の質量はMであり、互いに最近接どうし強さKの線形バネで結合している。これらの原子を主原子と呼ぶ。残りの$N/2$個の原子（これを不純物原子を呼ぶ）は各々主原子に強さβK(βは無次元パラメータ）のバネで結び付いている。l番目の主原子につながっている不純物原子の質量m_lは、$\beta K/\omega_l^2$で与えられる。ここでω_lはω_{min}からω_{max}の間のランダムなパラメータである。ここでは主原子どうしが1次元チェーンを形成している場合を考える。このとき系の運動方程式は、

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_l &= K(u_{l+1} - 2u_l + u_{l-1}) + \beta K(v_l - u_l) \\ m_l\ddot{v}_l &= \beta K(u_l - v_l) \end{aligned} \tag{5–61}$$

となる。ここでu_l, v_lはそれぞれl番目の主原子の変位およびl番目の原子につながれた不純物原子の変位であり。系は不純物を含む1次元系であるので、全てのモードは局在していると予想される。しかし、不純物が特殊な形をしているので、いわゆるアンダーソン局在とは細部において全く異なっていることが期待できる。

ガラスのようなアモルファス物質において、10K以下の温度領域で空間的に拡がったフォノン状態とディフェクト状態とが共存しているという証拠が実験的に幾つか見つかっている。最近の中性子散乱実験[117]によると、これらの付加的な状態は10原子程度の狭い領域に局在した調和振動であることが分かっている。ここで考えているモデルはこのような系と密接に関連したものである。

本節で調べる系は、(5–61)式において$M = 1, K = 1, \beta = 0.5$であるような系であり、系の両端は周期境界条件により結ばれている。ω_lの分布の上限と下限はそれぞれ、$\omega_{max} = w_0$, $\omega_{min} = \omega_0/2$とした。ここで$\omega_0$は不純物原子が存在しない主原子のみによる1次元鎖のカットオフ振動数であり、今の場合、$\omega_0 = 2$である。$N = 40,000$の系に対する状態密度を強制振動法により計算した。結果は図5–9に示す通りである。外力を加えた時間は、各振動数ωにおいておよそ$60\pi/\omega$の程度であり、図5–9を得るのにHITAC S-820/80（最大処理性能3GFLOPS）で3分程度のCPU時間を要している。主原子

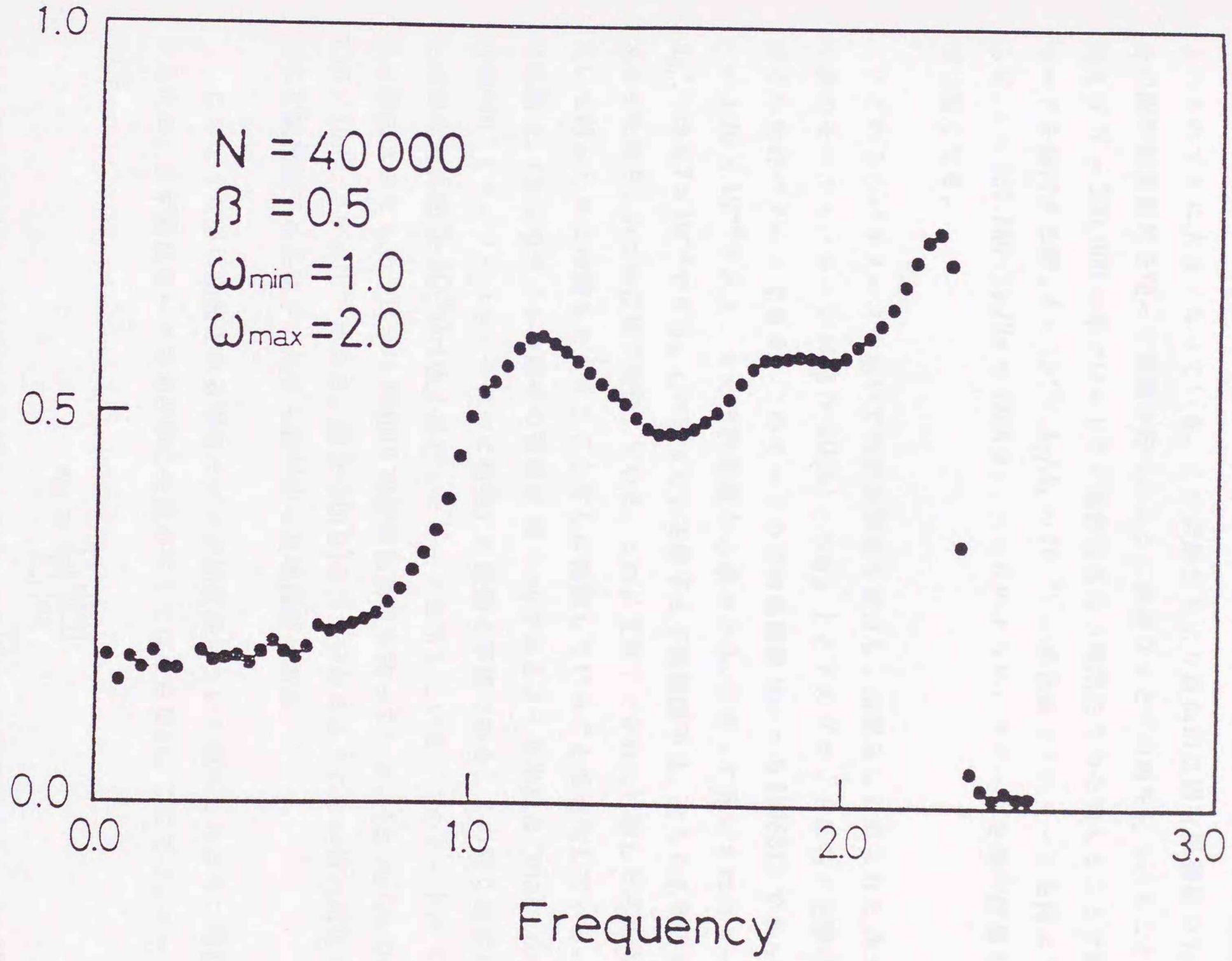


図 **5–9.** 不規則不純物を含む 1 次元格子の状態密度。系の原子数は 40,000 。パラメータ β, ω_{min} および ω_{max} は各々 0.5, 1.0, 2.0 である。

の配位数が完全1次元格子のものより増えているため、この系のカットオフ振動数ω_Dはω_0よりもわずかに大きくなっている。この状態密度より近似的な固有振動数の列を計算し、その固有振動数列を使って前節で行ったように最適なpとtの組を見つけることができる。例えば$N = 200,000$の系に$\Omega = 0.2$の振動数を持つ周期的外力を加えることで励起されるモードを抽出する際、$\delta \sim 10^{-6}$($A_2/A_1 \sim 10^{-3}$) の単色度でそのモードを得ようとするならば、$t = 137,230$ ($\Omega t/2\pi \simeq 4368.2$), $p = 8$のようにパラメータを選べば最もCPU時間は短くなる。

これらのパラメータを用いて強制振動法を実行し、結果として得られた$N = 200,000$の系のモード・パターンが図5–10(a)である。上と下のプロットは各々主原子と不純物原子の変位パターンである。このモードの固有振動数は$\omega = 0.1998215$であり、δの値は$\delta = 1.26 \times 10^{-6}$である。また状態密度から求めた$\Delta\omega$を使って評価されたモード分離度$A_2/A_1$は$4.7 \times 10^{-3}$である。この図より、主原子と不純物原子は、どちらも殆ど同じ変位の大きさを持ち、かつ同位相で振動している。これは主原子とそれに付随した不純物原子とが、互いを結ぶバネの伸縮をともなうことなしに振動していることを意味している。このような振動は、l番目のサイトの原子の質量が$M + m_l$であるような単純な“mass disordered system”（アンダーソン・モデルに相当）の振動と等価である。この弱く局在したモードとは対称的に図5–10(b)は強く局在したモードを示している。このモードは$N = 200$の系に励起されたもので$\Omega = 1.184019$の固有振動数を持っている。δとA_2/A_1の値は各々、7.16×10^{-6}, 3.9×10^{-4}である。図5–10(b)を見て分かるようにこの強い局在モードの起源は不純物原子の主原子に対する相対的な共鳴振動にある。

このような系に励起される固有モードの局在長について調べてみよう。局在長を決定するため、まず局在モードの局在中心を決めなくてはならない。ここでは、モードλの中心$r_{0\lambda}$を

$$r_{0\lambda} \equiv \frac{\sum_l r_l |u_l|}{\sum_l |u_l|} \tag{5–62}$$

によって定義した。r_0はl番目の主原子のチェーンの端からの距離であり、u_lはl番目の主原子の変位である。モードλの大きさの測度として次のようなモーメントを使うことにする。

$$\Lambda_\lambda \equiv \frac{\sum_l |(r_l - r_{0\lambda})u_l|}{\sum_l |u_l|}. \tag{5–63}$$

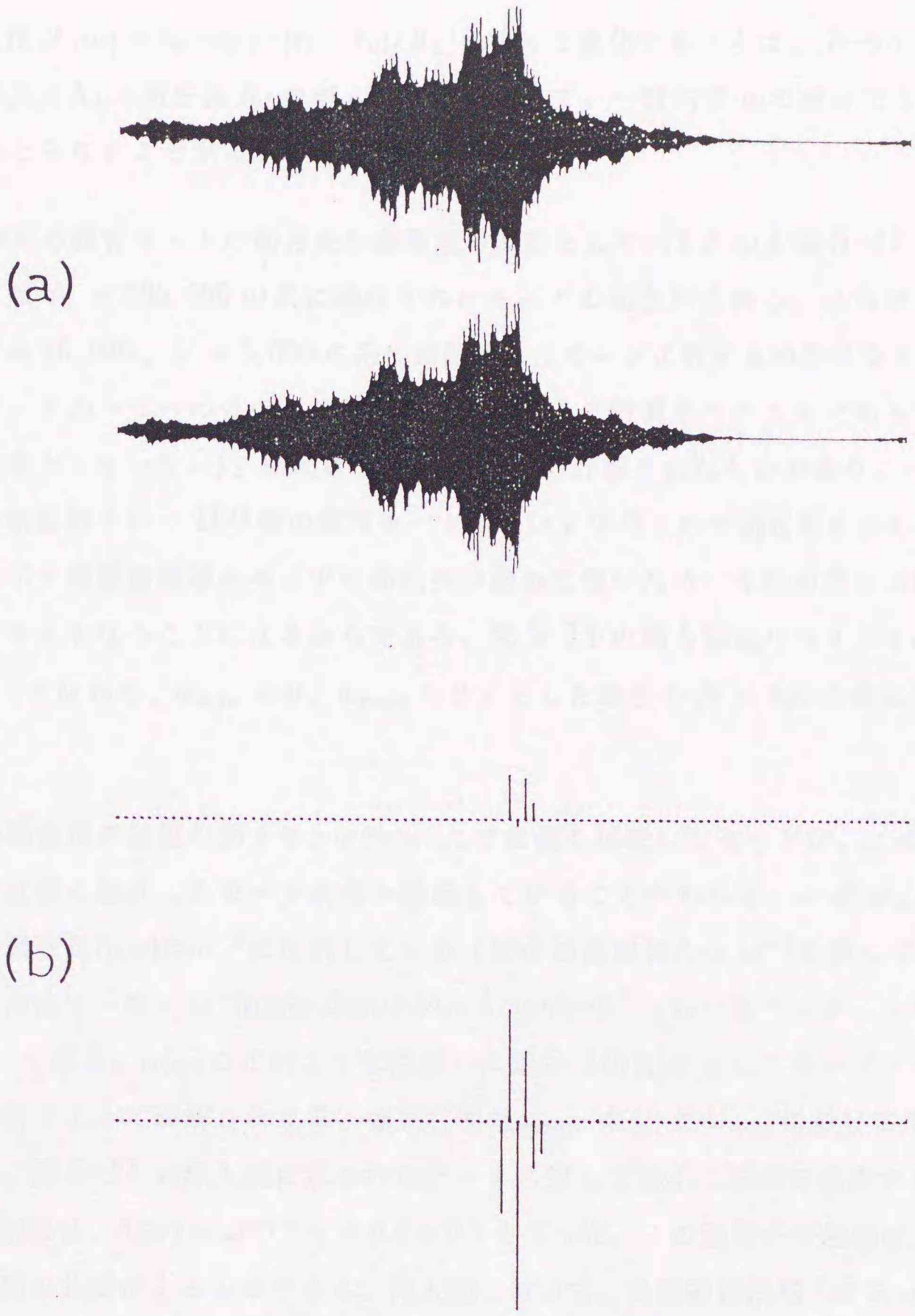


図5–10. 不規則不純物を含む1次元格子のモード・パターン。上のカラムと下のカラムは各々主原子の変位と不純物原子の変位を表している。(a)$N = 200,000$ の系に励起された $\omega = 0.1998$ に属する固有モード。モード混在比 A_2/A_1 は 4.7×10^{-3}。(b)$N = 200$ の系に励起された$\omega =$ 1.184 に属する固有モード。モード混在比 A_2/A_1 は 3.9×10^{-4}。

もし、変位が $|u_l| = u_0 \exp[-|r_l - r_0|/R_L]$ に従って変化するならば、(5–63)式で定義される特徴的長さ Λ_λ は局在長 R_L に等しくなる。従って、一般的な u_l の場合でも Λ_λ をモード λ の局在長とみなすことができるであろう。

この系の固有モードの局在長を振動数の関数として示したのが図 5–11 である。四角のマークは $N = 200,000$ の系に励起されたモードの局在長を表し、三角およびバツ印は各々、$N = 40,000$, $N = 5,000$ の系に励起されたモードに対する局在長を示している。これらのデータの一つ一つは一つの固有モードに対して計算されたものである（複数のモードで平均をとっていない)。黒丸は $N = 400$ の系で計算されたものであり、一つの黒丸は、対応する振動数を持つ 100 個の固有モードについて平均された局在長を表している。これは黒丸の示す振動数領域のモードの局在長が極めて短いため、その局在長は相対的に大きなゆらぎをともなうことになるからである。図 5–11 の挿入図はパラメータ ω_l の分布範囲を $[0, 2]$（すなわち、$\omega_{min} = 0$, $\omega_{max} = 2$ ）とした場合の $N = 400$ の系に対する結果である。

この局在長の結果の図より、$\omega \gg \omega_{min}$ では強く局在したモードが、$\omega \ll \omega_{min}$ の振動数領域では弱く局在したモードが各々励起していることがわかる。$\omega \ll \omega_{min}$ の領域に対しては、局在長 $\Lambda(\omega)$ は ω^{-2} に比例している（図中の直線は $\Lambda \propto \omega^{-2}$ を表している)。この振動数依存性は一次元の“mass disordered system”におけるアンダーソン局在のもの[118]と同一である。$\Lambda(\omega)$ のこのような振舞いは図 5–10(a) に示したモード・パターンおよびその解釈によって理解されうる。強局在領域 $\omega_{min} \ll \omega \ll \omega_{max}$ における $\Lambda(\omega)$ の振動数依存性は、図 5–11 の挿入図に示されたデータに対して最小二乗法を適用することで求められた。結果は、$\Lambda(\omega) \propto \omega^{-\gamma}$ で $\gamma = 0.6 \pm 0.1$ となった。この強局在の起源は主原子と不純物原子の間の共鳴によるものである。挿入図において、高振動数領域（$\omega > \omega_{max}$）に対する局在長の増大は、このような共鳴状態が存在しなくなるということで理解される。

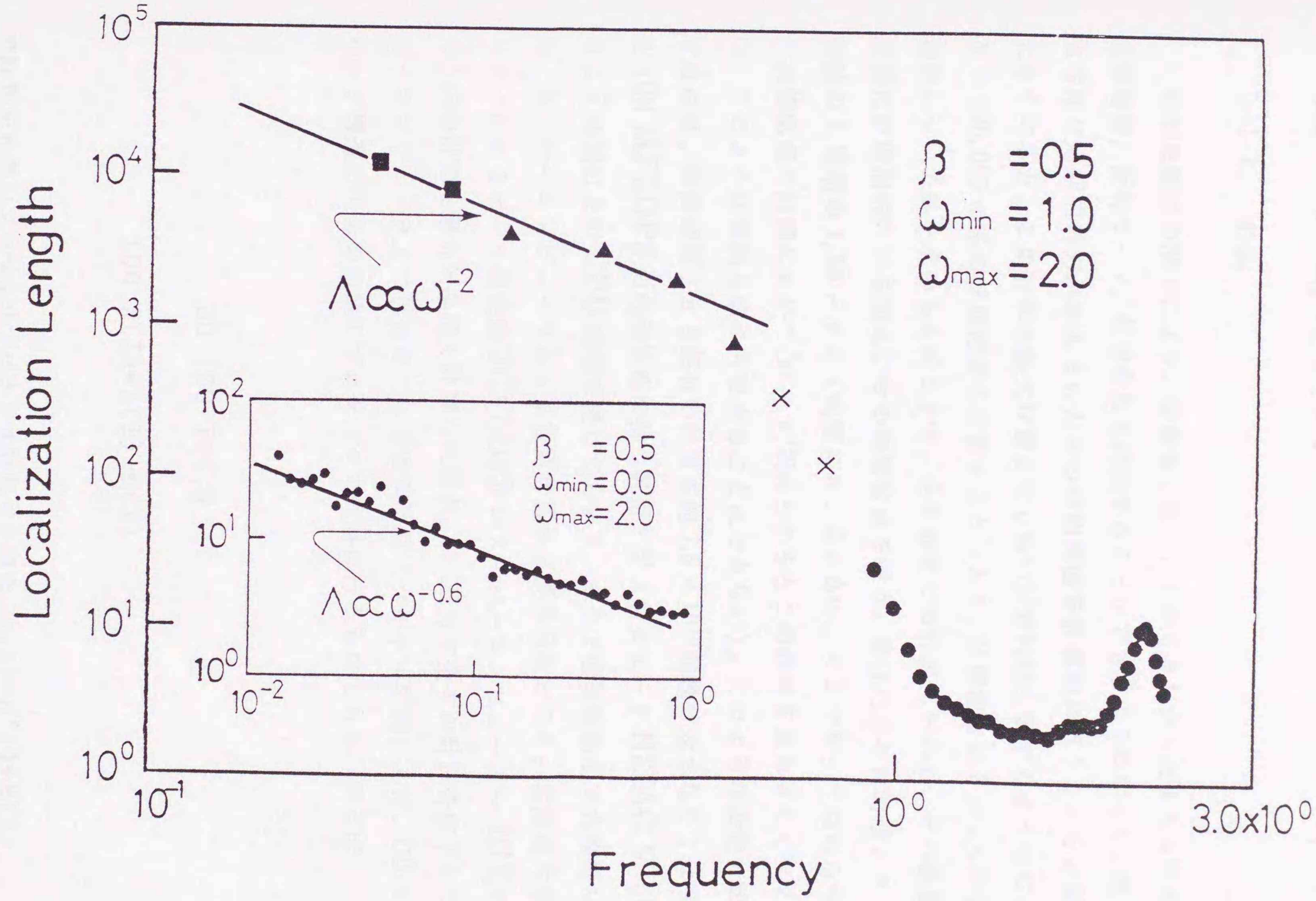


図 **5–11.** $\beta = 0.5$, $\omega_{min} = 1.0$, $\omega_{max} = 2.0$ の系に対する局在長と振動数の関係。■, ▲, ×および●は各々$N =$ 200,000, 40,000, 5,000 および 400 の系に対する結果を表す。挿入図は$\omega_{min} = 0$, $\omega_{max} = 2$ の系に対する局在長の振動数依存性を示している。

5–4. ベクトル化へのチューニング

5–4–1. 一般論

強制振動法の開発により、従来まで扱うことができなかったような巨大な格子系の固有振動数，固有モード，状態密度を計算することができるようになった。先に述べた通り、本方法は周期的外力が加えられた系の時間発展を数値的に追うことを必要とする。系が大きくなると、この計算は膨大な量となり長い計算時間を要するようになる。たとえば、$N = 500,000$ の系の状態密度を計算するとしよう。状態密度は $0 \sim \omega_D$ までの 50 点の振動数について各々求めるものとする。各振動数での計算において、その振動の 60 周期の時間だけ周期的外力を加え、その時間発展を追う。差分化された時間ステップ Δt をその振動の 1 周期の 1/50 とする（実際には、常に $\Delta t\omega_D < 2$ でなくてはならなく、低振動数の状態密度の計算において $\Delta t = \pi/25\omega$ とするとこの条件を満たさなくなることがあるので、このような単純な取り方をすることはできない）。このような設定で状態密度を計算するには、時間発展させる部分の計算を約 7.5×10^{10} 回繰り返さなくてはならない。これを 100 MFLOPS の処理性能を持つ汎用大型コンピュータ HITAC M-682H で計算すると 7 時間以上の CPU 時間を要してしまう。そこで強制振動法で大規模な計算を行うには、スーパーコンピュータによる並列計算が必要不可欠となる。北海道大学大型計算機センターにあるピーク時性能 3GFLOPS のスーパーコンピューター HITAC S-820/80 で上記の計算を最も効率良く計算した場合、約 10 分で全ての計算を終了してしまう。スーパーコンピュータ上で行われている並列計算（ベクトル計算）とは、DO ループのようなループ構造の中身を複数のプロセッサで同時に行うものである。例えば

```
      DO 100 I=1,N

100   A(I)=A(I)+B(I)
```

の計算を n 個のプロセッサでベクトル計算する場合、A(1)=A(1)+B(1),...,A(n)=A(n)+B(n)を同時に行い、次に A(n+1)=A(n+1)+B(n+1), ..., A(2n)= A(2n)+B(2n)

を同時に処理する。これを N/n 回繰り返すことで上記プログラムは実行される。このことから考えると、一般に n 個のプロセッサを持つスーパーコンピューターにおいては、単一のプロセッサを持つ通常のコンピュータに比べて $1/n$ の CPU 時間で処理を行うように考えられるが、実際はそうではない。状況によって、それより速くもなるし、遅くもなる。上述のプログラムのような場合、実際の処理速度は $1/n$ よりも速くなる。それは、並列でプロセッサを稼働させたとき、各プロセッサの待ち時間（次のタスクを待って何もしない時間）を最小にするように、逐次先行処理をするようになっている（パイプライン方式）ためである。このためプログラムによっては、スカラー処理に比べて数百倍の速さで実行させることもできる。一方、プログラムがベクトル処理向きでないような場合、$1/n$ の処理時間よりも遅くなることも考えられる。例えば

```
      DO 10 I=1,N
            J(I)=I
   10 A(J(I))=A(I)+B(I)
```

のようなプログラムの場合、2 行目を実行しない限り 3 行目を実行することはできない。従って、前述のプログラムのように n 個のプロセッサで n 個同時に 3 行目の処理を行うことができなくなってしまい、全体の処理時間は単一プロセッサでの処理時間の $1/n$ 以上になってしまう。このように、同じ事をしようとする場合でもベクトル処理が可能なプログラムと不可能なプログラムが書ける。並列処理型スーパーコンピュータを有効に利用するためには、ベクトル処理可能なようにプログラムをコーディングする必要がある。この作業がプログラムのベクトル化へのチューニングである。

実際に処理を複数のプロセッサに分散させパイプライン処理のスケジュールを決めるのはコンパイラの仕事である。従ってベクトル化へのチューニングとはコンパイラがベクトル化可能であると判断するようなプログラムにすることを意味する。どのような構文がベクトル化可能でどのようなものが不可能なのかの細かい部分は、コンパイラに依存して

いる。しかし、次のステートメントは殆どのコンパイラにおいてベクトル化されないということは共通している。

- DO ループ以外の部分
- 入出力文
- ブロック IF 文
- サブルーチン・コール従って、チューニングに対する一般的指針としては、DO ループ内に入出力文，ブロック IF 文，サブルーチン・コールを極力置かないようにすることである。

プログラムの全ステップ数におけるベクトル化されるステップ数の割合をベクトル化率βという*。このベクトル化率が高ければ高いほど、処理速度は向上する。パイプライン方式の並列計算機における高速計算で、もう一つ重要な要素は加速率である。次にこれを説明しよう。ベクトル・プロセッサの特徴の一つはベクトル処理を開始するための準備時間（オーバーヘッド）が零でないことである。このため、ベクトル処理の演算時間t_vは、ループの繰り返し回数（ループ長）をl，オーバーヘッド時間をt_0とすれば、

$$t_v = t_0 + a_v l \tag{5–64}$$

と表される。ここでa_vはベクトル・プロセッサの処理性能である。一方、同じプログラムをスカラー処理したときの演算時間t_sは、スカラー・プロセッサにオーバーヘッドが無いことから、

$$t_s = a_s l \tag{5–65}$$

と表される（$a_s > a_v$）。処理速度は (演算数)/(演算時間) で定義されるから、ループの中の演算数をmとするとベクトル処理速度V_vは

$$V_v = \frac{m}{t_0/l + a_v} \quad \text{(FLOPS)} \tag{5–66}$$

＊ 正確には、あるプログラムを全てスカラー命令で実行したときの総実行時間をt，そのうち、t'時間がベクトル命令で実行できるものとすると、ベクトル化率βは$\beta = t'/t$で定義される。

となる。lが小さいところでは$t_0 \neq 0$の影響でt_0/lの項が無視できず曲線的な立ち上がりを示す。lが十分大きくなると、ベクトル処理速度は一定値m/a_vに近づく。この時の処理速度を最大処理性能（或はピーク時処理速度）と呼ぶ**。これに対してスカラー処理速度V_sは

$$V_s = \frac{m}{a_s} \tag{5–67}$$

と一定値をとる。これより、ループ長が$l = t_0/(a_s - a_v)$よりも短ければ、スカラー処理の方がかえって速くなることになる。このようなループ長を交差ループ長と呼ぶ。加速率αとはスカラー処理速度に対するベクトル処理速度の比率を指す。従って、(5–66), (5–67)式より

$$\alpha = \frac{V_v}{V_s} = \frac{a_s}{t_0/l + a_v} \tag{5–68}$$

と表される。加速率はプログラム中のベクトル化された部分を並列処理するときの実効的な速さの指標である。

以上の議論より、あるプログラムを並列計算機で実行する場合、ベクトル化される部分を極力増やし（ベクトル化率βを上げる)、そのベクトル化された部分の処理速度を高めてやれば（加速率αを上げる）よいことがわかる。実際、あるプログラムをベクトル・プロセッサで処理した場合、全てをスカラー処理した場合の何倍速くなるかを表す相対性能p_rは、

$$p_r = \frac{\alpha}{\beta + \alpha(1-\beta)} \tag{5–69}$$

で与えられることが知られている（図5–12）。この式において、仮に加速率αを$\alpha = 100$とするならば、$\beta = 0.5$で約2倍，$\beta = 0.9$でも約9倍，$\beta = 0.99$でようやく50倍の相対性能を得ることができる。従って、並列処理型スーパーコンピュータで数値計算を行う場合、90% 以上にベクトル化率を高めなければそのコンピュータの能力を有効に使っていることにならない。

本研究で行われた数値計算において、どのようにしてベクトル化率を高め、加速率を上げたかを次に述べる。

** 本研究で用いられたHITAC S-810/10のピーク時処理速度は315 MFLOPS, HITAC S-820/80は3 GFLOPSである。

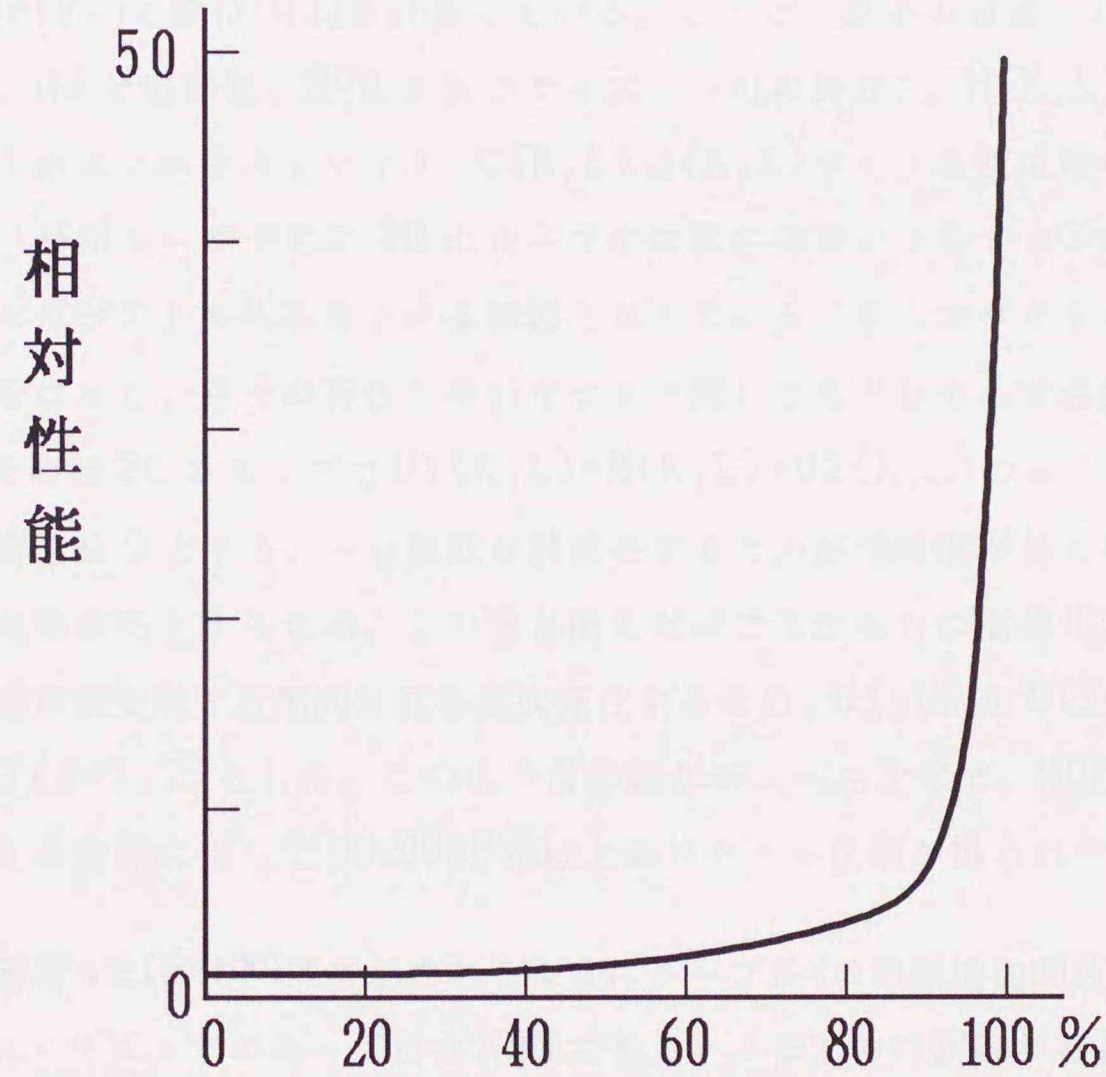


図 5–12.　相対性能 p_r とベクトル化率 β の関係。

5–4–2. 具体的チューニング

強制振動法によって状態密度を計算するときもモードパターンを計算するときも、最もその処理に時間を費やす部分は、周期的外力を受けたパーコレーション系の時間発展を追跡する部分である。従ってこの部分を如何にチューニングしたかを示す。図5–12は、何のチューニングも考えないときの、この部分に対するプログラム（2次元パーコレーション系）のソース・リストである。

10のループが時間のループであり、20のループで運動方程式を差分化してDT時間後の速度(V2)と変位(U2)を計算している。ここで、原子の質量，バネ定数は全て1としている。RWは振動数，NUMは系のサイズ（一辺の長さ），M(K,L)は(K,L)サイトに原子があるかないかを表すフラグ、C(K,L)は(K,L)サイトの配位数である。このプログラムでは、最深ループである20のループ中に非占有サイトをジャンプするためのIF文が入っておりベクトル化率を下げる原因となっている。そこでベクトル化率を高めるためこのIFをはずし、原子の存在しないサイトに関してもとりあえず速度と変位を計算してしまう。その後30のループでU1(K,L)=M(K,L)*U2(K,L)のようにして非占有サイトの速度と変位を0とする。一見無駄な計算をするため処理時間が長くなると思われるが、ベクトル化率が向上するため、この書き換えだけでもかなりの高速化が計れる。また、ループ内の演算で使用する配列変数を高次元化するため、U1,U2をU(I)(I=1,2)，V1,V2をV(I)(I=1,2)とした。このような単純なチューニングで、NUM= 700規模の計算でプログラム全体に対して99.9999%以上のベクトル化率が得られた。

加速率αは(5–68)式で示されるようにループ長lの単調増加関数である。図5–13のプログラム・リストでのループ長はNUMである。メモリーの制限からNUMは2次元で700，3次元で70程度が限界であるが、この程度のループ長では、αがその上限値a_s/a_vに十分近づいているとは考えられない。そこで、この2重ループ（3次元系では3重ループ）を1重ループ化し加速率αを大きくするようにした。このようにすることで、次元に依らずループ長を$\sim 10^5$とすることができ、加速率をその上限値と殆ど同じにすることができる。

このように、ベクトル化率と加速率を各々その上限値に極めて近い値にすることで、相対性能p_rを約250（小規模計算からの推定値）とすることができた。このことは、強制

```
      DO 10 I=1,TI
         COSR=COS(RW*FLOAT(I)*DT)
         DO 20 L=1,NUM
         DO 20 K=1,NUM
            IF(M(K,L).EQ.0) GOTO 20
            V2(K,2)=V1(K,L)+(  U1(K+1,L)+U1(K-1,L)
                             +   U1(K,L+1)+U1(K,L-1)
                             -   C(K,L)*U1(K,L)
                             +   F(K,L)*COSR          )*DT
            U2(K,L)=U1(K,L)+V2(K,L)*DT
20       CONTINUE
         DO 30 L=1,NUM
         DO 30 K=1,NUM
            U1(K,L)=U2(K,L)
            V1(K,L)=V2(K,L)
30       CONTINUE
10    CONTINUE
```

図5-13. チューニングしていないときの時間発展部分のソース・リスト。変数の意味は、以下の通り。

IT…時間ループの繰り返し回数
NUM…格子の一辺のサイズ
RW…外力の振動数
DT…分割された時間間隔
M(K,L)…サイト(K,L)の占有・非占有を表すフラグ
（M=1 for occupied, M=0 for unoccupied）
U1(K,L)…時刻 t におけるサイト(K,L)の変位
U2(K,L)…時刻 $t+\Delta t$ におけるサイト(K,L)の変位
V1(K,L)…時刻 t におけるサイト(K,L)の速度
V2(K,L)…時刻 $t+\Delta t$ におけるサイト(K,L)の速度
C(K,L)…サイト(K,L)の配位数
F(K,L)…サイト(K,L)にかかる外力

振動法で大規模計算を行うには並列処理型スーパーコンピューターでの実行が不可欠であることを意味する。次章以下で示される様々な結果は、強制振動法とスーパーコンピューターの有効利用により初めて得られるものである。

第6章　スーパーコンピュータによるフラクトン力学

第4章ではフラクトン励起に関するスケーリング理論を紹介した。スカラー振動のフラクトンに対するそこでの結論は、(i)フラクトン状態密度$\mathcal{D}(\omega)$は$\omega^{\tilde{d}-1}$に比例する，(ii)フラクトン次元$\tilde{d}$は次元によらず4/3であると予想されている（Alexander-Orbachの予想)，(iii)フラクトンは空間的に局在している，というものであった。さらに、ボンド伸縮力を考慮したベクトル変位のフラクトンの場合、(i)フラクトン状態密度$\mathcal{D}(\omega)$は$\omega^{\tilde{d}_v-1}$に比例する，(ii)$\tilde{d}_v$の値は2次元で0.78，3次元で0.87である，ということが示された。本章では、強制振動法を用いた大規模シミュレーションを浸透網に対し適用することで、スケーリング理論による様々な予測の直接的検証を行う。

6–1.　フラクトン状態密度[119−125)]

図6–1は臨界濃度における2次元サイト型浸透網に励起されたスカラー変位を持つ格子振動の状態密度の両対数プロットである。この浸透網は700×700の正方格子上に形成され116,991個の原子を有している。この状態密度は、強制振動法の式(5–25)におけるtを各振動数ωに対し$\omega t=10$、また運動方程式の差分化による時間分割Δtを$\omega>0.1$に対しては$\omega\cdot\Delta t=0.05$，$\omega<0.1$の低振動数領域に対しては$\Delta t=0.5$としてとして計算された。黒丸を通る実線は傾き1/3を持つ直線であり、最小二乗法で求められた直線ではない。この結果は、状態密度$\mathcal{D}(\omega)$が$\omega^{\tilde{d}-1}(\tilde{d}=4/3)$に比例するというAlexander–Orbach予想を支持している。もちろん、図6–1の結果から$\tilde{d}$に対する精度の良い値を得ることはできないので、$\tilde{d}=4/3$が厳密かどうかを判定することはできない。この図をみると極めて低振動の領域まで$\omega^{1/3}$-則が成立していることがわかる。これは、$p=p_c$で相関長ξ_pが発散しており、系のサイズに近いような長いスケールにおいてもネットワークがフラクタル構造をとっているためである。また、$\omega\gtrsim1$では$\omega^{1/3}$-則が破れているが、これは$\omega\gtrsim1$の振動の波長が格子間隔の程度になり、このスケールではもはやネットワークの自己相似性が失われてしまうことによっている。この振動数領域の固有状態については次章で詳しく述べる。

3次元浸透網上のフラクトン状態密度の計算結果は図6–2に示されている。この浸透網は$70\times70\times70$の立方格子上に臨界濃度($p_c=0.311$)で作られ、4,562個の原子を含んでいる。この図に示す通り、3次元系でも$\tilde{d}$の値はおよそ4/3であり、空間次元に依存

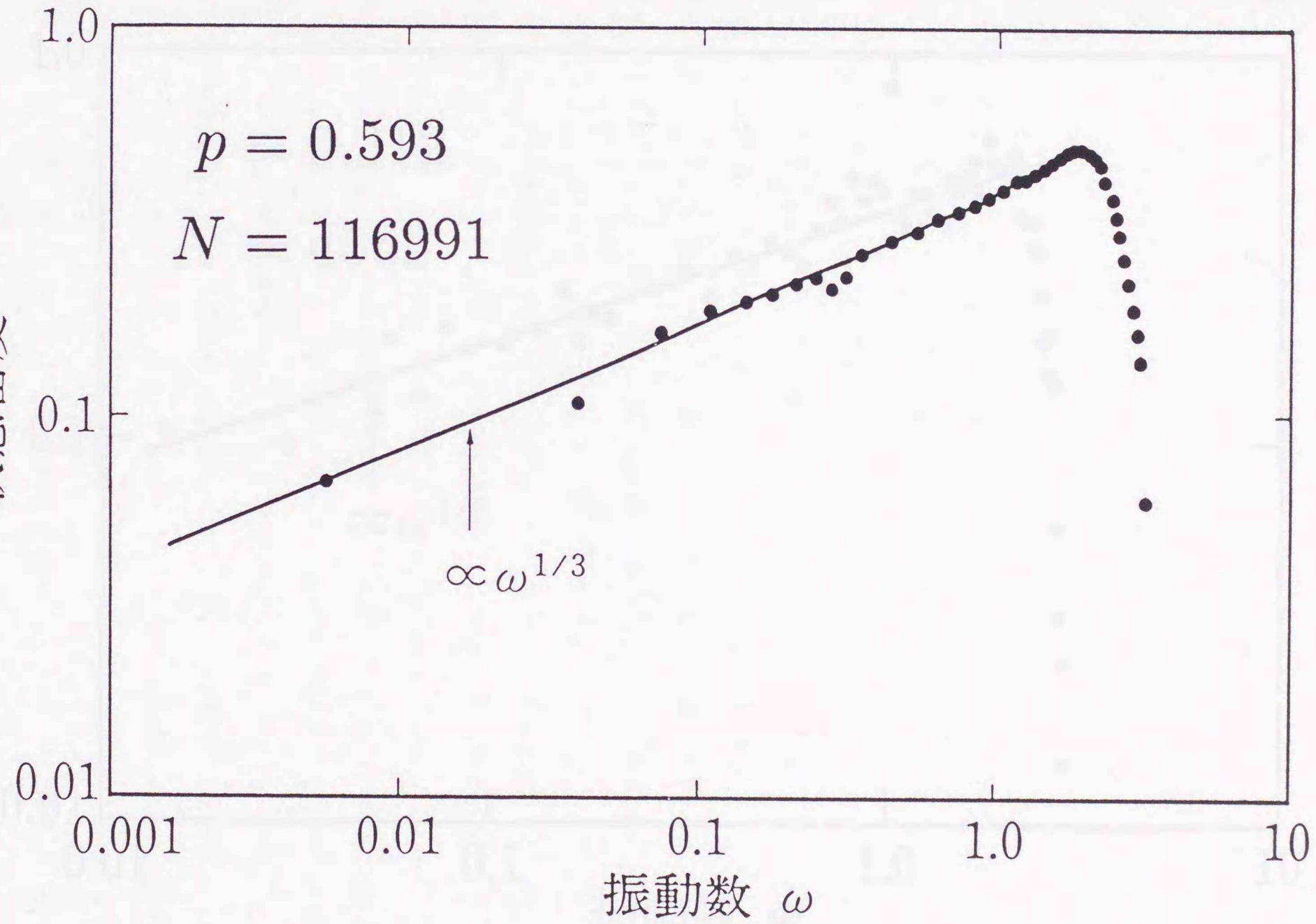


図 6–1. 臨界濃度の 2 次元浸透網における状態密度。浸透網は 700 × 700 の正方格子上に作られ 116,991 サイトを有する。

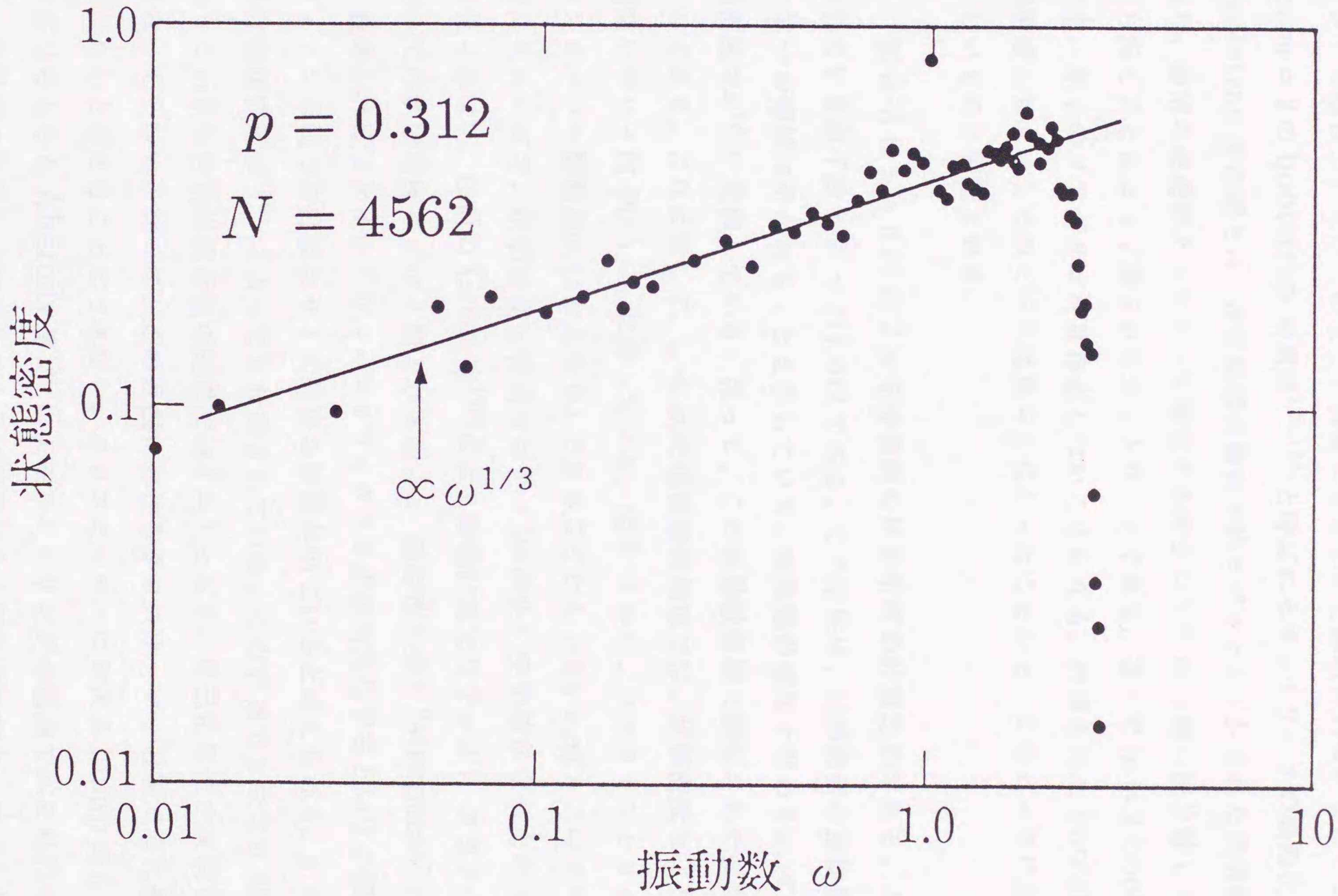


図 6–2. 臨界濃度の 3 次元浸透網における状態密度。浸透網は 70 × 70 × 70 の立方格子上に作られ 4,562 サイトを有する。

していないことがわかる。$\omega = 1$ におけるピークは、比較的大きく硬いブロックに一本のボンドで結びついた単一の原子の振動によるものと解釈される。このことを確かめるために、$m = 2$ の bootstrap 浸透網[127,128]と呼ばれるネットワークの振動状態密度を調べた。bootstrap 浸透網とは一次相転移の幾何学的モデルとして生まれた浸透網モデルの一種であり、通常の浸透網クラスターを構成する原子のうち m 未満の配位数しかもたない原子を取り除くことによって得られるネットワークである。従って $m = 2$ bootstrap 浸透網には単一原子のダングリングは存在しないことになる。計算された bootstrap 浸透網の状態密度には$\omega = 1$ でのピークは見られなかったことから、このピークに対する先の解釈が正しいものと判断される。

図 6–3 は $p = 0.67$ の 2 次元浸透網の状態密度の計算結果である。クラスター内に含まれている原子数は $N = 317,672$ である。この結果は、状態密度の振動数依存性が明らかに 2 つの領域に分かれることを示している。高振動数領域すなわち$\omega_c \ll \omega \ll 1$ では、状態密度は$\omega^{1/3}$に比例している。従って、この振動数領域で励起された振動モードはフラクトンである。これに対して、$\omega \ll \omega_c$の低振動数領域では、状態密度は 2 次元格子に対する通常のデバイ則 $\mathcal{D}(\omega) \sim \omega$に従っている。図 6–3 から、フラクトンとフォノンを分けるクロスオーバー振動数ω_cはおよそ 0.1 であることがわかる。ω_c近くでのクロスオーバーは非常にスムーズで、状態密度に特別なコブ（ hump ）や急峻な立ち上がり（ steepness ）は見られない。以前の Grest 等[129]による数値計算ではフォノン-フラクトン・クロスオーバーでの状態密度にデバイ則よりも強いω- 依存性を持つ“steepness”が見られた。しかし彼等の計算はダイナミカル・マトリックスを直接対角化するという小規模なものであり、フォノン領域での計算はサイズ効果の影響が出ていると考えられる。$p > p_c$での状態密度は有効媒質近似[130] によっても計算されている。この計算でもやはり steepness が見つかっているが有効媒質近似の結果では$\tilde{d} = 1$ となり、自己相似性を反映した正しい結果にはなっていない。従って、この近似におけるクロスオーバー領域での状態密度の振舞も正確なものと考えることはできない。クロスオーバーにおける hump または steepness の存在はそもそも Aharony 等[131]によるスケーリングの議論で示されたものである。しかし、本計算の結果からは、そのような異常は全く観測されなかった。スケーリングの議論と大規模シミュレーションのこのような相異については、次章で詳しく議論される。

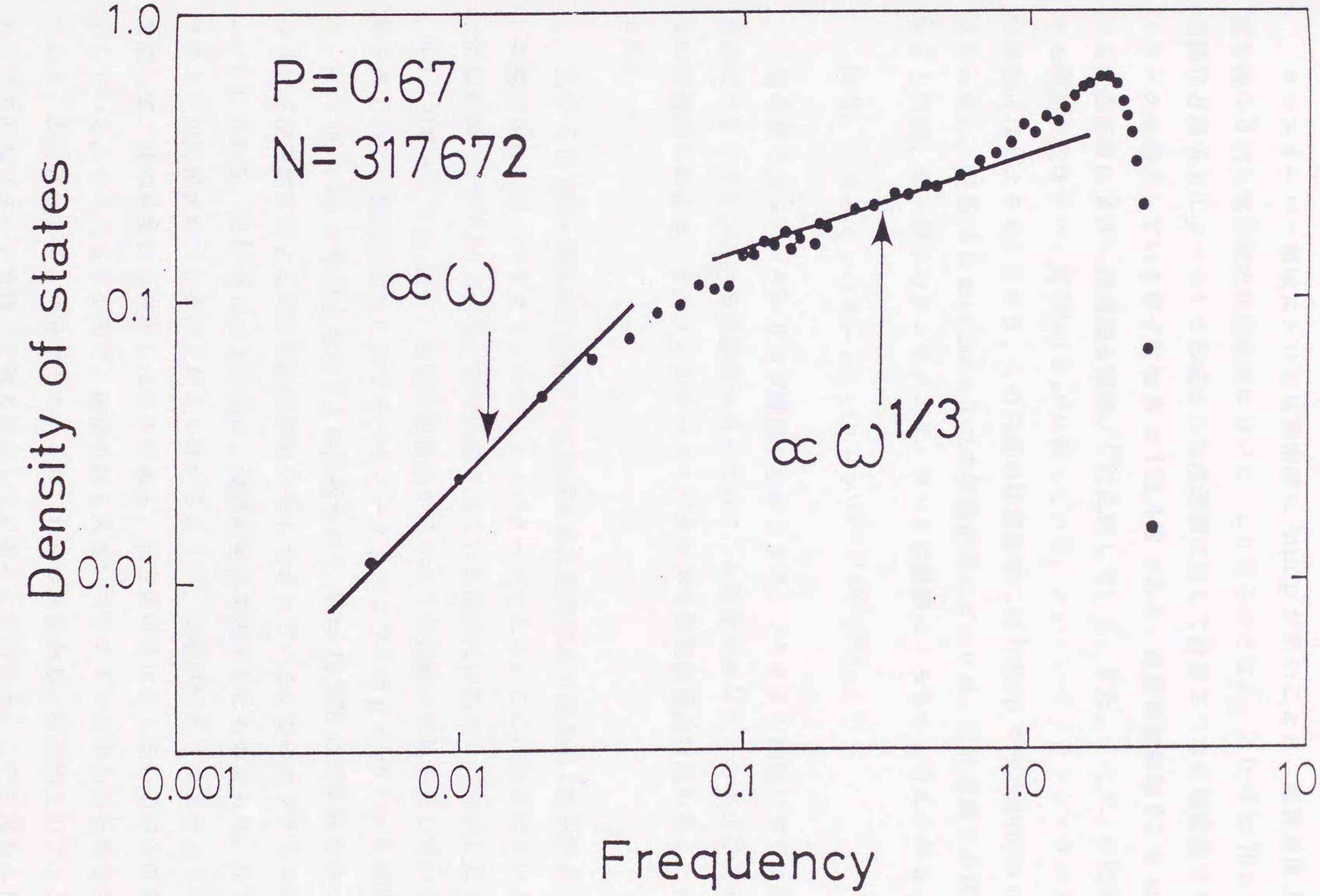


図 **6–3.** $p = 0.67$ の 2 次元浸透網における状態密度。浸透網は 700×700 の正方格子上に作られ 317,672 サイトを有する。

クロスオーバー領域における状態密度にhumpが無いことは、臨界濃度より高い濃度を持つ3次元浸透網の状態密度において、より明らかとなる。図6–4は$70\times70\times70$の単純立方格子上に$p=0.4$で形成された浸透網に対して計算された状態密度である。ネットワークを構成している原子数は$N=122,448$である。高振動数領域$0.1\ll\omega\ll1$における状態密度は2次元浸透網と同様$\omega^{1/3}$に比例している。また、$\omega\ll0.1$の低振動数領域での状態密度はデバイ則$\mathcal{D}(\omega)\propto\omega^2$に従っている。フォノン-フラクトン・クロスオーバー振動数ω_cはおよそ0.1であり、この付近の状態密度にはhumpやsteepnessはいっさい見られない。図6–4において$\omega=1$での状態密度のピークは、臨界濃度での状態密度 図6–2と同様、単一原子のダングリング・ボンドの振動によるものと考えられる。

6–2. フラクトンのモード・パターン[119–121,132–134)]

第4章で述べたスケーリング理論が示すように、フラクトン励起は本当に局在した状態なのであろうか。これを直接確かめるために、本研究では2次元および3次元の臨界濃度の浸透網におけるフラクトンのモード・パターンを強制振動法を用いることにより計算した。

図6–5は700×700の正方格子上に形成された臨界濃度の浸透網（原子数$N=169,576$）に励起された単一フラクトンのモード・パターンである。ここに示されているフラクトンの振動数は$\omega=0.01$であり、図は励起されている部分だけ拡大して表示したものである（200×400サイト）。色は、右側の色目盛が示すような振動の振幅を表している。この結果を得るのに、強制振動法におけるパラメータpおよびtは$p=16,t=8,000$と選ばれた。$90\times90\times90$の単位立方格子上に形成された$N=18,970$の原子数を持つ臨界濃度の3次元浸透網に対する同様な結果が図6–6に示されている。このフラクトンの振動数は$\omega=0.1$である。図6–6の左上の図は、浸透網全体を表示したものであり、左下の図はフラクトンが励起されている様子がよく分かるように、振幅が殆ど0であるような緑の部分を消して、別の角度から表示したものである。立方体の角にある赤い印がこの系の原点を示している。さらに右下の図は、振幅の最も大きいフラクトンの中心部をぬきだしたものである。2次元および3次元フラクトンのこれらの結果から、浸透網上のフラクトンは極めて異方的なパターンを持って強く局在していることが分かる。この状況をよりはっきりと見るために、図6–5で示された2次元フラクトンの断面図を図6–7に示す。上段の図

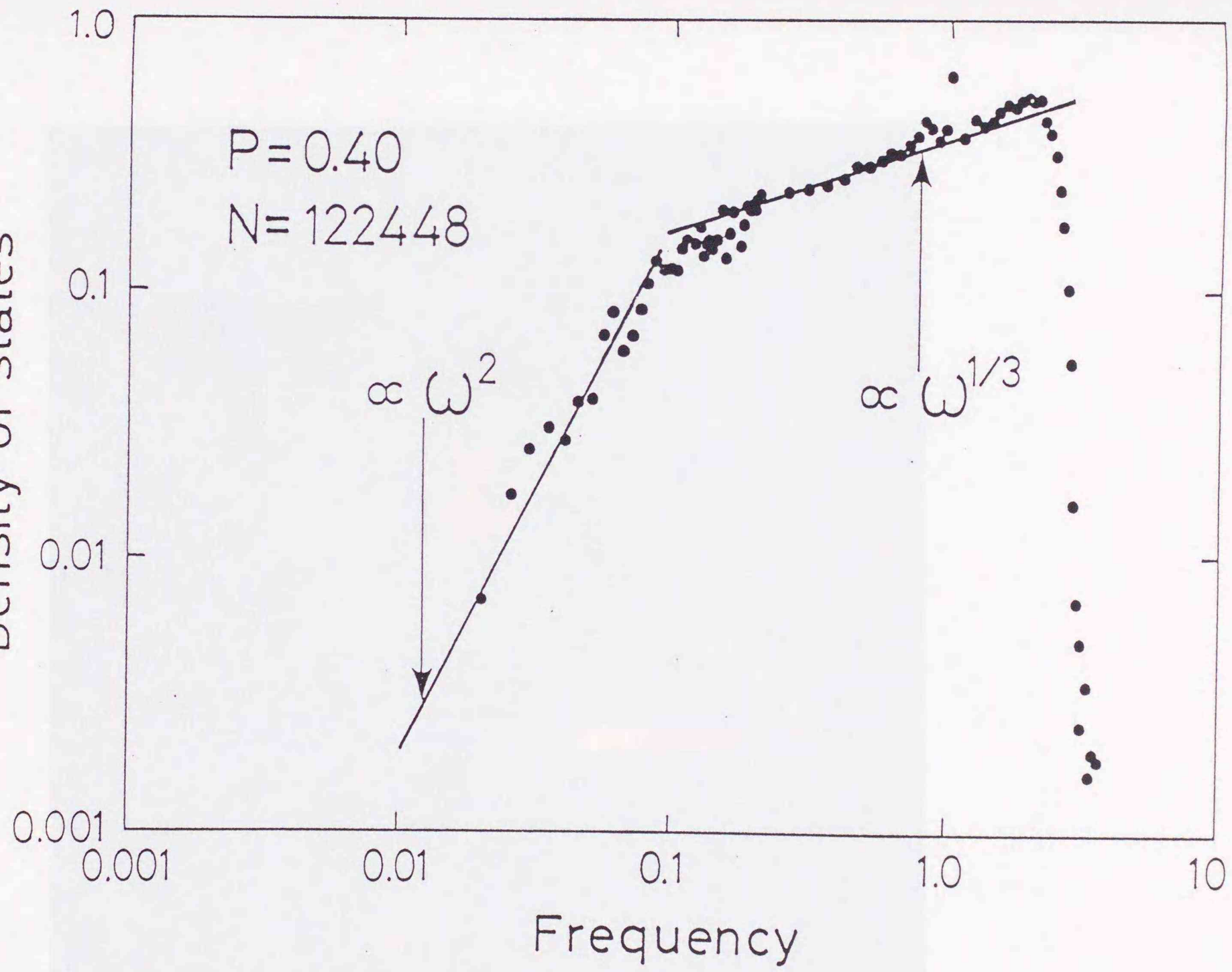


図 6–4. $p = 0.4$ の 3 次元浸透網における状態密度。浸透網は $70 \times 70 \times 70$ の立方格子上に作られ 122,448 サイトを有する。

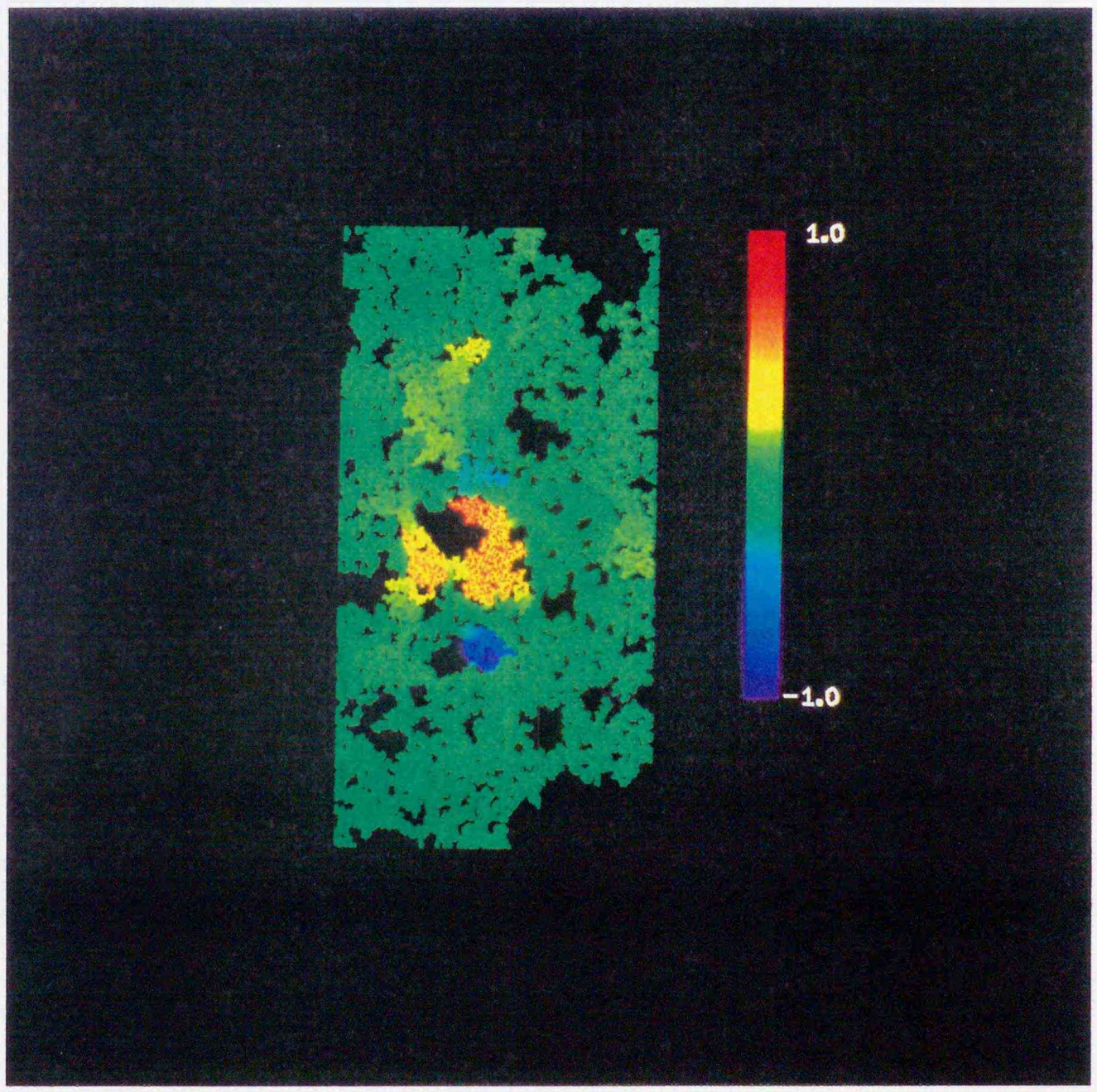


図6–5. 臨界濃度の2次元浸透網上に励起された固有振動数$\omega = 0.01$の単一フラクトン・モード・パターン。色は、最大振幅の絶対値を1と規格化したときの各サイトの振幅を表す。図は、700×700の正方格子上に作られた169,576サイトを有する浸透網に励起されたモードの拡大である。

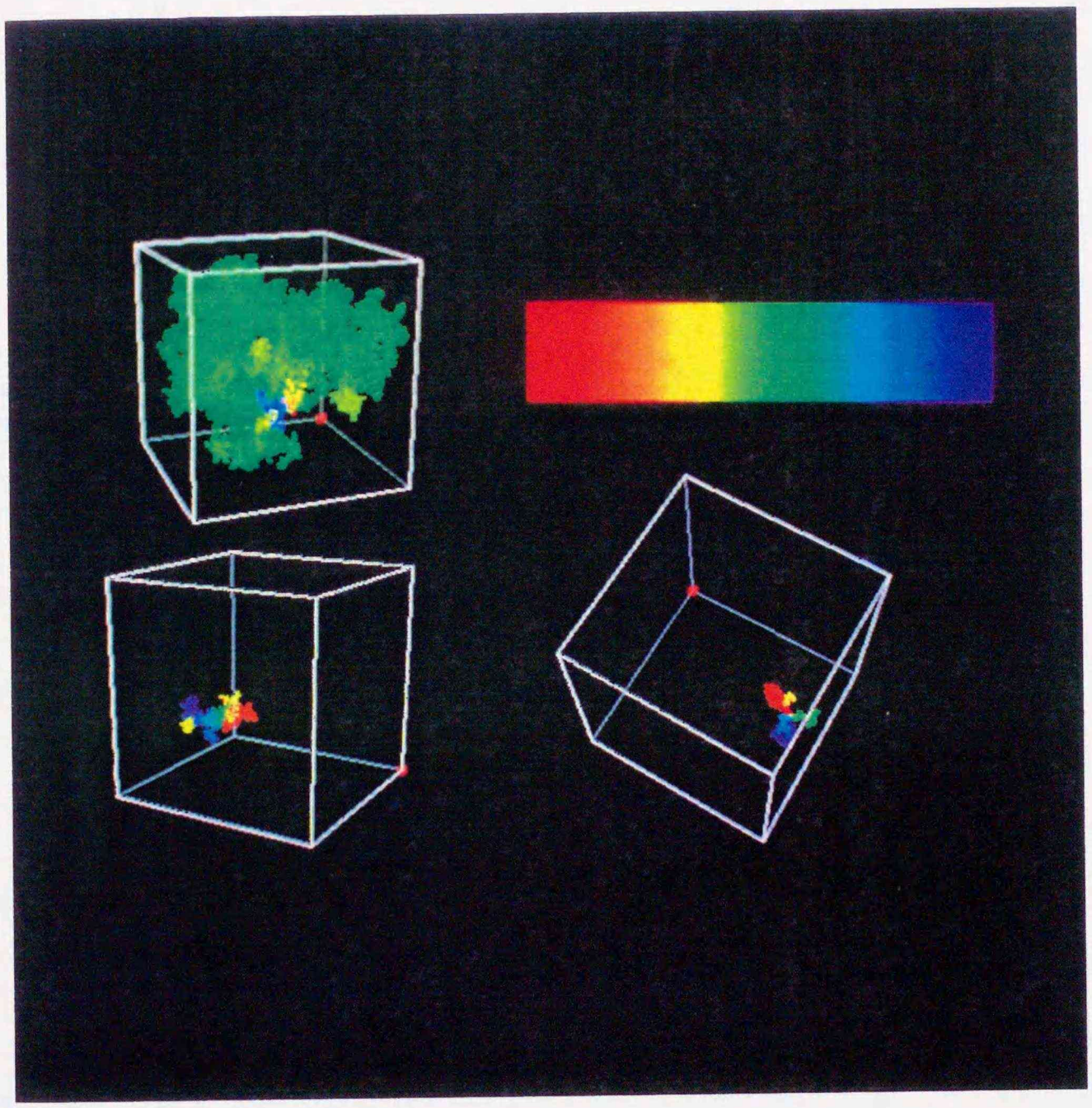


図6-6. 臨界濃度の3次元浸透網上に励起された固有振動数$\omega = 0.01$の単一フラクトン・モード・パターン。色は、最大振幅の絶対値を1と規格化したときの各サイトの振幅を表す。図は、$90 \times 90 \times 90$の立方格子上に作られた18,970サイトを有する浸透網に励起されたモードを表している。左上の図はフラクトンを含む全系を表示している。下の二つの図は励起されたフラクトンのみを抽出したものである。赤い小さな丸は系の原点を示す。

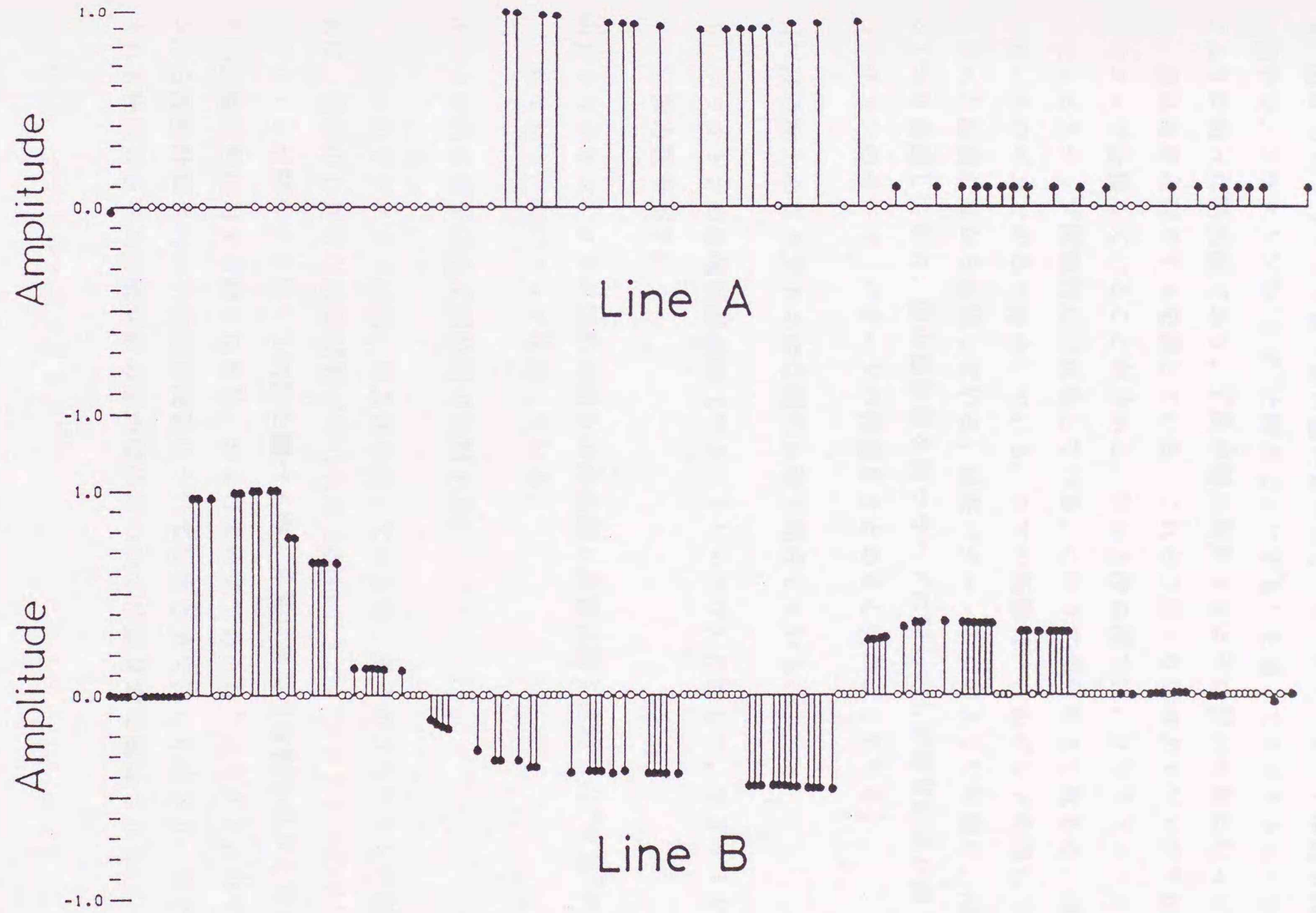


図 6–7. 図 6–5 のモード・パターンの断面図。上の図はフラクトン・コアを横断する直線による断面図であり、下の図は縦断する直線による断面図である。

は、図6–5のフラクトン最下部の濃い青の部分（モード・パターン中最も大きい振幅を持つ部分で、フラクトンの“コア”と呼ぶことにする）を通ってフラクトン・モードを横断するように切った断面図であり、下段の図は縦断するように引いた線に沿っての断面図である。白丸は非占有サイトを表している。これらの図よりフラクトン・コアは非常にシャープなエッヂを持っていることが分かる。特に上段の図では、フラクトン・コアのエッヂはほとんどステップ関数的な形状をしている。このコア部分をよく見ると、回りの浸透網とただ一本のボンドのみで結合している。コアの振動は、このボンドを通して上方の浸透網部分へと減衰しながら伝播している。局在パターンのこのような特徴は、浸透網上のフラクトンに共通しており、他の振動数を持つモードに関しても同様な結果が得られた。以上、フラクトンのモード・パターンの特徴をまとめると次のようになる。

i) 浸透網上のフラクトンは空間的に強く局在している。

ii) フラクトンの最強振動部分（フラクトン・コア）に対して、フラクトン・モードは強い異方性を示す。

iii) フラクトン・コアの振動は回りの浸透網と非常に弱く連結した“半島”内に閉じ込められており、鋭いエッヂを持っている。

iv) コア内の原子は全て同位相で振動する。

個々のフラクトンは強い異方性を持っているが、多くのフラクトンの集合平均を考えれば、当然中心対称な波動関数が得られると期待できる。フラクトンの平均波動関数は、フラクトンが関与する様々な物性を調べる際、非常に重要な役割を担うと考えられている。平均波動関数に対する様々な理論、および本研究で得られたフラクトンのモード・パターンから直接計算された平均波動関数については第8章で詳しく述べる。また、実際に観測される物理量と平均波動関数の間の関係については第9章で議論される。

6–3. ベクトル・フラクトン[135)]

これまでは全てスカラー変位のフラクトンに関するシミュレーション結果を紹介してきた。現実のランダム系では、スカラー変位の振動はあり得ず、変位をベクトルとした議

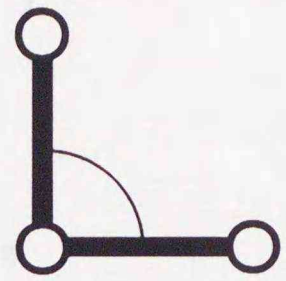
論をしなくはならない。ベクトル変位を持つ浸透網上のフラクトンに対するスケーリング理論[79]は4–4節で述べられたが、本節ではこのスケーリング理論による予測が正しいかどうかを大規模シミュレーションにより直接調べてみる。計算されたのは2次元浸透網の状態密度であり、系の運動を記述するハミルトニアンは4–4節と同じく

$$H = \frac{1}{2}\alpha \sum_{<ll'>} g_{ll'}[(\vec{u}_l - \vec{u}_l')\cdot\vec{r}_{ll'}]^2 + \frac{1}{2}\beta \sum_{<l'll''>} g_{ll'}g_{ll''}(\delta\theta_{ll'l''})^2 \qquad (6\text{–}1)$$

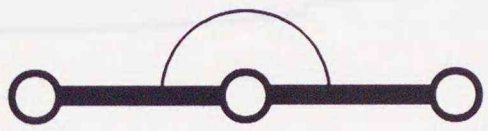
の形、すなわちボンド伸縮力（第一項）とボンド変角力（第二項）の2つの復元力が働く浸透網を考える。実際の計算では、第二項の和は図6–8(a)のような角$\theta_{ll'l''}$（サイトlとl''は第二近接サイト）だけでとられるのではなく、図6–8(b)のような角（サイトlとl''は第三近接サイト）についてもとられる。もし、図6–8(a)のような角だけに復元力が働き、(b)図のような角には復元力が働かないとすると、図6–8(c)のように結合した2つのブロックはlサイトを中心とする曲げにたいして不安定な力学的構造になってしまう。そのため、力学的に安定となるための最小の浸透濃度、すなわち弾性的臨界濃度p_c^*は、構造的臨界濃度p_cよりも大きくなってしまう。このような煩雑さを避けるため、本研究では図6–8(b)のような角に対しても復元力が働くものとして扱った[136,137]。

図6–9の黒丸は500×500の正方格子上に$p = p_c$で形成された浸透網のベクトル変位振動の状態密度を表している。浸透網に含まれる原子数は$N = 53,673$であり、(6–1)式の力定数$[\alpha,\beta]$は$[1/75, 10/75]$である。また、このネットワークのカットオフ周波数は$\omega_D = 2.0784$である。図6–9の高振動数領域（$\omega > \omega_0$）における状態密度のステップ関数的な減少は、ω_0以上の振動数においてボンド伸縮による振動モードが存在しなくなることと対応している。振動数ω_0は$\omega_0 = 2\sqrt{\alpha}$（原子の質量は全て1としている）で与えられ、$\alpha = 1/75$の場合$\omega_0 = 0.2309$となる。この値は図6–9で観測される値と一致している。

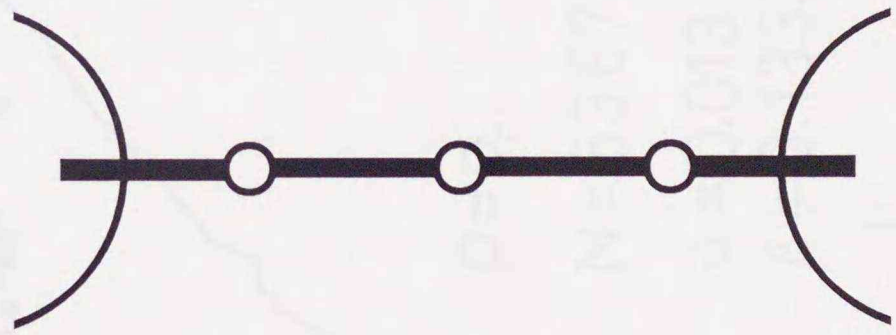
以後は$\omega < \omega_0$に対するフラクトン力学に焦点をあてて議論していこう。黒丸を通る直線は$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{1/3}$に対するガイド・ラインである。これより図6–9の結果は、$0.07 \lesssim \omega \lesssim 0.2$の振動数領域においてスカラー変位のフラクトンと同じユニバーサリティ・クラスに属するフラクトン、すなわちスカラー・フラクトンが励起されていることを示している。第4章のスケーリング理論によれば、スカラー・フラクトンが励起される振動数領域よりも低振動数において$\tilde{d}_v < 1$であるようなベクトル・フラクトンが励起されるはずである。（図



(a)



(b)



(c)

図6–8. ボンド変角力は(A)のような角だけでなく、(B)のような角についても働くものとする。(A)のような角だけに復元力が働くとすると、(C)のような結合部分は力学的に不安定になる。

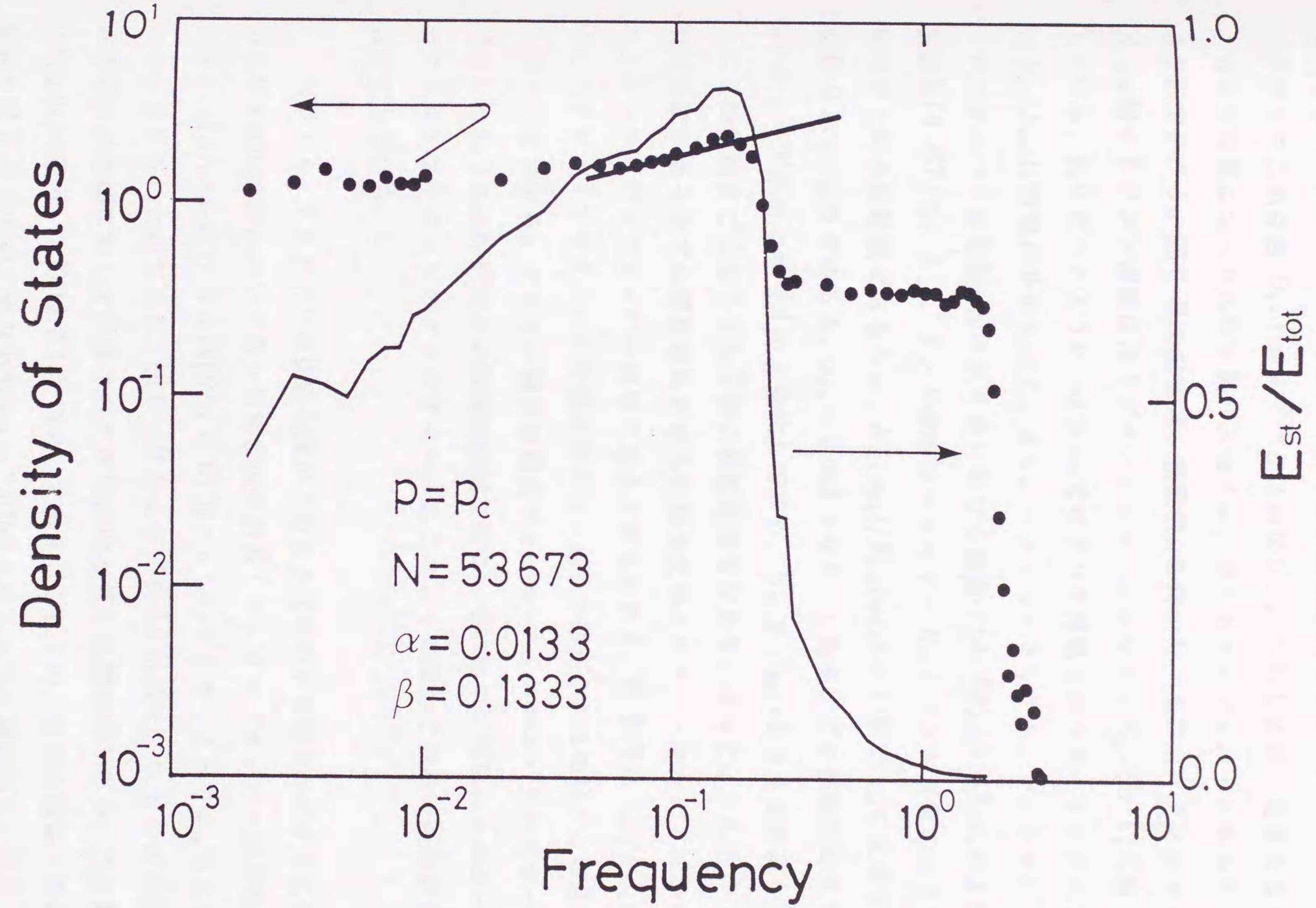


図 6–9. ベクトル変位を持つ振動の状態密度（黒丸）と全ポテンシャル・エネルギーに占めるボンド伸縮エネルギーの割合（実線）。系は、500 × 500 の正方格子上に臨界濃度で作られた $N = 53,673$ の浸透網である。力定数 α と β は各々0.0133, 0.133 である。黒丸をとおる直線は $\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{1/3}$ に対するガイド・ラインである。

4–3 参照)。しかし、この領域の状態密度の振動数依存性は、スケーリング理論[79]によって予想された依存性 $\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{-0.22}$ とは異なり、ω に対しほぼ一定値をとっている。何故このような事になったのかを調べるために、系のポテンシャル・エネルギーの振動数依存性を見てみよう。図 6–9 の曲線は、振動数ωを持つモードの全ポテンシャル・エネルギー E_{tot}に対するボンド伸縮に伴うポテンシャル・エネルギー E_{st}((6–1)式第一項) の比を表している。先に述べたように、$\omega > \omega_0$ではボンド伸縮を伴うモードが消失するため、この比 E_{st}/E_{tot}は急激に 0 に近づく。さて、ベクトル・フラクトンとスカラー・フラクトンのクロスオーバー振動数ω_{vs}は第 4 章における議論 ((4–42),(4–43)式およびその近くでの議論と(4–67)式) より、ボンド伸縮のエネルギー E_{st}とボンド変角のエネルギー E_{bend}が同程度となる振動数であるから、$E_{st}(\omega_{vs})/E_{tot}(\omega_{vs}) = 1/2$ でω_{vs}を見積ることができる。図 6–9 からω_{vs}を求めると、$\omega_{vs} \simeq 0.005$ となる。しかも、この振動数の近くで E_{st}/E_{tot}はωに対して対数的にゆっくりと変化しており、$E_{st} \gg E_{bend}$となる振動数から $E_{st} \ll E_{bend}$となる振動数まで少なくとも 2 桁の振動数変化がある。従って$\omega \sim 0.07$ から計算された最低振動数に至る全ての振動数における状態密度はスカラー・フラクトンからベクトル・フラクトンへのクロスオーバー領域であると考えられる。図 6–9 の E_{st}/E_{tot}曲線から推測するとベクトル・フラクトンの状態密度がはっきりと観測されるのは、この系の場合$\omega \lesssim 10^{-4}$ということになる。スカラー変位の場合フォノン-フラクトン・クロスオーバーは 6–1 節で示したように比較的せまい振動数領域で起こっていたのに対し、スカラー・フラクトン-ベクトル・フラクトンのクロスオーバーはこのように極めてひろい振動数領域でブロードに起こっている。

ベクトル・フラクトンの状態密度がどのようなものかを明らかにするため、$\beta/\alpha = 0.01$ および 1.0 の場合について各々状態密度を計算した。クロスオーバー振動数の式(4–67)式に従えば(β/α)を図 6–9 の時$(\beta/\alpha = 10.0)$よりも小さくすることでω_{vs}をより高振動数側にシフトさせることができる。図 6–10 および図 6-11 は各々図 6–9 の浸透網$(p = p_c)$ と同じ構造の浸透網に対して計算された状態密度と積分状態密度である。力定数の組$[\alpha, \beta]$は、$[1.0, 0.01]$ (黒丸) と$[0.12, 0.12]$(白丸) である。これらの力定数の組は、系のカットオフ振動数が図 6–9 のもの、すなわち$\omega_D = 2.0784$ となるように選ばれた。図 6–10 の結果が示すように、$\omega \to 0$ に対して状態密度は弱く発散している。発散傾向にある低振動数領域での励起をベクトル・フラクトンとみなし、ベクトル・フラクトン次元$\tilde{d}_v$を最小二乗法により

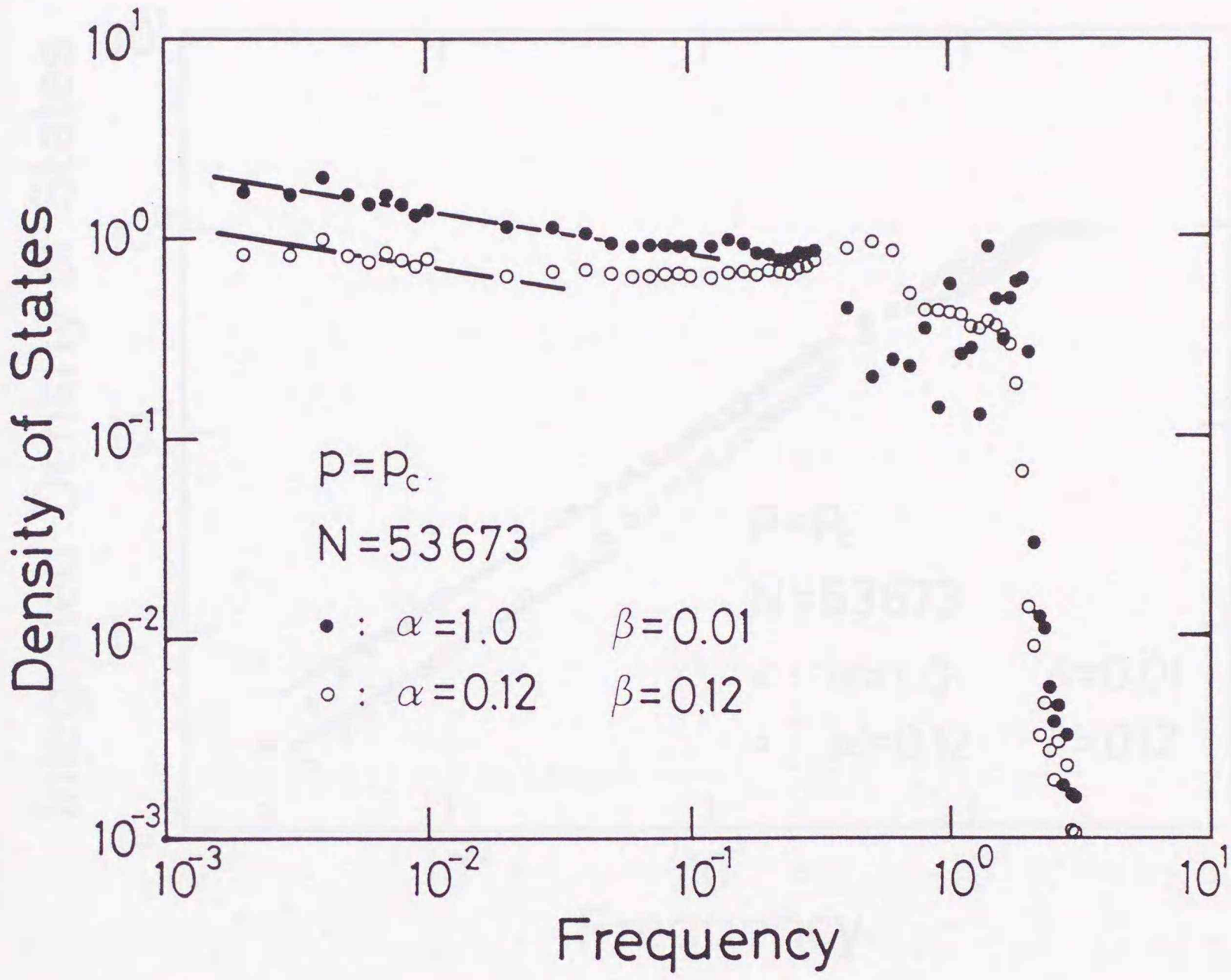


図6–10. ベクトル変位を持つ振動の状態密度。系は、500×500の正方格子上に臨界濃度で作られた $N = 53,673$ の浸透網である。力定数$[\alpha, \beta]$は$[1.0, 0.01]$（黒丸）および$[1.2, 1.2]$（白丸）である。左側の直線は $w^{\tilde{d}_v - 1}$ $\left(\tilde{d}_v = 0.79\right)$ に比例したラインを示すもので、最小二乗法によって求められた。右側の直線は $\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{1/3}$ に対するガイド・ラインである。

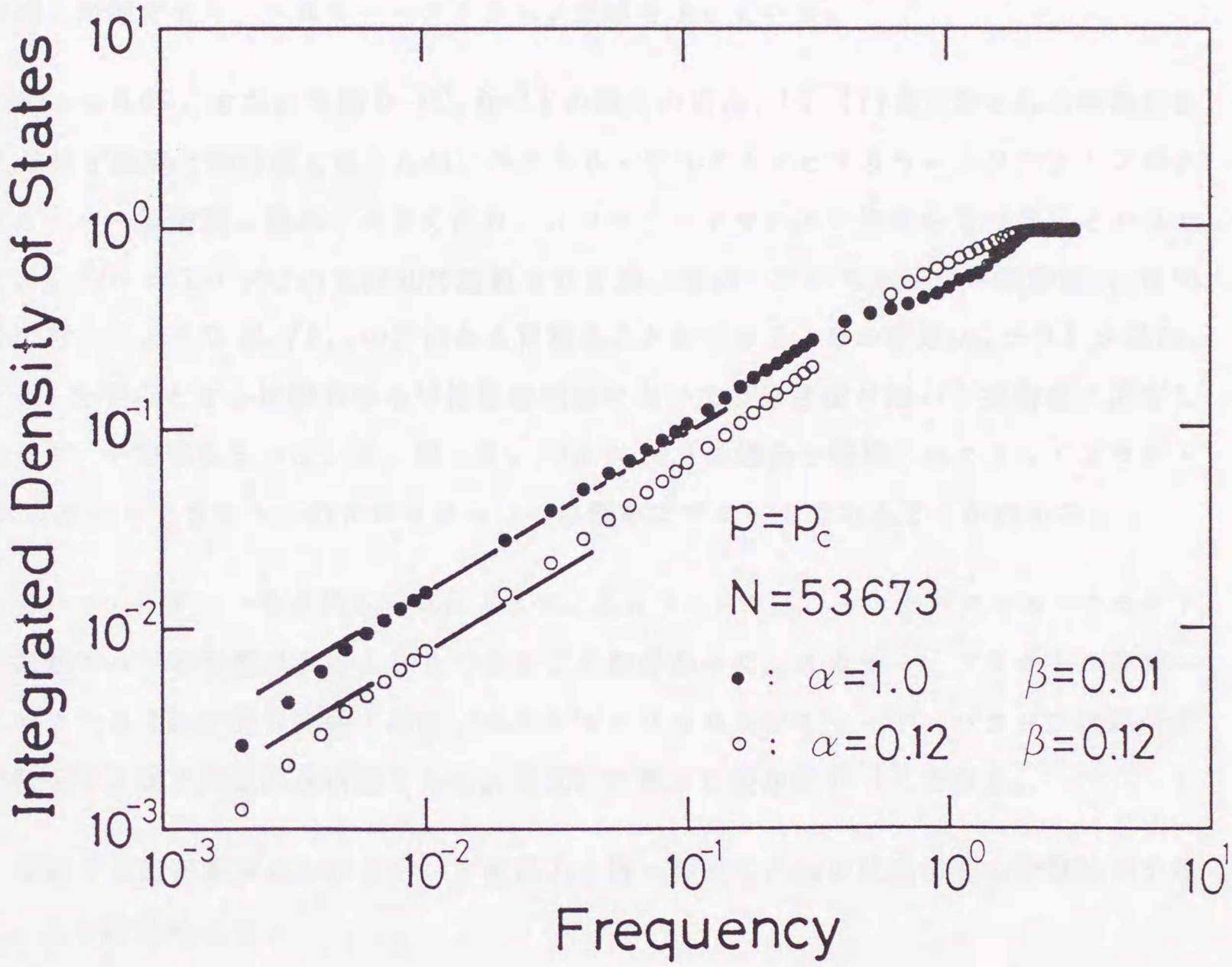


図6–11. ベクトル変位を持つ振動の積分状態密度。系は、500×500の正方格子上に臨界濃度で作られた $N=53,673$ の浸透網である。力定数$[\alpha, \beta]$は$[1.0, 0.01]$（黒丸）および$[1.2, 1.2]$（白丸）である。左側の直線は $w^{\tilde{d}_v}$ $\left(\tilde{d}_v=0.79\right)$ に比例したラインを示すもので、最小二乗法によって求められた。右側の直線は $I(\omega) \propto \omega^{4/3}$ に対するガイド・ライン である。

求めると$\tilde{d}_v = 0.79$となる。図6–10（図6–11）の低振動数領域の直線は$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{\tilde{d}_{vs}-1}$（$I(\omega) \propto \omega^{\tilde{d}_{vs}}$）を表している。フラクトン次元のこの値はスケーリング理論[79]によって予想された値$\tilde{d}_{vs} = 0.78$と非常によく一致している。また、高振動数側の直線は$\omega^{1/3}(\omega^{4/3})$に比例した線であり、スカラー・フラクトン領域を示している。

$\beta/\alpha = 0.01$、すなわち図6–10, 6–11の黒丸の場合、(4–41)式で表される特徴的長さd_cは格子間隔と同程度となるため、ベクトル・フラクトンとスカラー・フラクトンのクロスオーバー振動数は極めて大きくなり、スカラー・フラクトン領域を見つけることはできない。$\beta/\alpha = 1.0$すなわち白丸で表わされる系の場合、クロスオーバー振動数ω_{vs}は図6–9で行ったようなE_{st}/E_{tot}の評価から見積ることができる。その結果$\omega_{vs} \simeq 0.1$を得た。$\omega \simeq 0.1$を中心とする比較的ひろい振動数領域において状態密度は殆んど振動数に依存しておらず、一定値をとっている。従って、$\beta/\alpha = 10.0$の場合と同様、ベクトル・フラクトン-スカラー・フラクトンのクロスオーバーは極めてブロードであることがわかる。

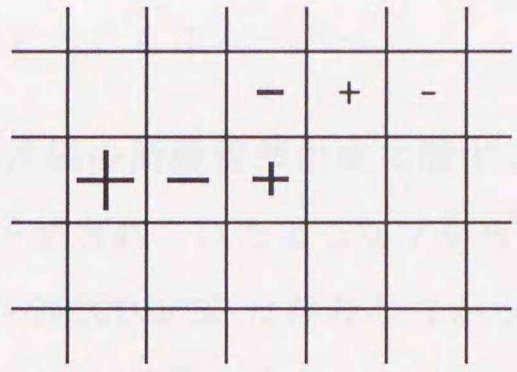
モード・パターンを求める計算によって、スカラー・フラクトンとベクトル・フラクトンの振動モードの特徴は次のとおりであることが分かった。スカラー・フラクトンのモード・パターンは局所的な膨張・収縮、ベクトル・フラクトンのモード・パターンは局所的な回転を伴う異方向強局在状態である。模式的に表したのが図6–12である。

本節では臨界濃度におけるボンド変角力を持つ弾性浸透網の状態密度の計算結果を述べた。この計算により、

i) ベクトル・フラクトン次元$\tilde{d}_v$は2次元で0.79であり、スケーリング理論による値とよく一致する。

ii) スカラー・フラクトンとベクトル・フラクトンのクロスオーバーはフォノン-フラクトン・クロスオーバーに比べて非常にブロードである。などが明らかとなった。Webmanと Grest[102] は以前に対角化を用いた小規模な計算によりベクトル・フラクトンの状態密度を計算していたが、ベクトル・フラクトンとスカラー・フラクトンのクロスオーバーをシミュレーションにより観測したのは本研究が初めてである。

フラクトンのモード・パターン



＋，－の記号の意味

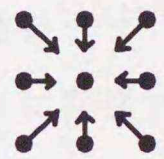
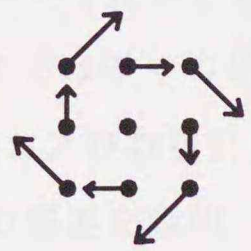
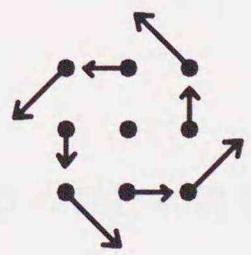
	記　号	変位パターン
スカラー・フラクトン	＋	
	－	
ベクトル・フラクトン	＋	
	－	

図6-12. スカラー・フラクトンとベクトル・フラクトンのモード・パターンの違いを表した模式図。両者共に上段の図のような空間的拡がりを持って局在している。但し、記号＋，－が表すパターンは、下の図のようにスカラー・フラクトンとベクトル。フラクトンで異なっている。また＋，－の記号の大きさは振幅の大きさを表す。

第7章　フォノン-フラクトン・クロスオーバー

前章では非常に大きな浸透網の振動状態密度に関する数値計算の結果が与えられた。その結果を見る限り、以前に予想されていたようなフォノン-フラクトン・クロスオーバーにおける状態密度の hump や steepness は存在しなかった。本章では、何故そのような hump が無いのか、クロスオーバーの際に失われたモードはどこに行ったのかについて議論する。

フォノン-フラクトン・クロスオーバーにおける状態密度の hump の存在は最初クロスオーバーに伴って一原子当たりの状態数が減少するという議論に基づいたスケーリング理論[131]によって示された。その後、有効媒質近似[130]，小規模な数値計算[129]，幾つかの実験[138−143]によってこの hump の存在は確認されたかのように思われた。しかし、最近のシリカ・エアロゲルを用いたより正確な実験[144−152]では、そのような hump は観測されず、フォノンからフラクトンへのクロスオーバーはスムーズに移行するという結果が示されている。さらに、前章で示したような大規模な数値計算の結果[119,120] でも hump は存在しなかったことから、クロスオーバーに伴う hump は本当に存在するのかどうか再度議論されるようになった。本研究では大規模シミュレーションで得た計算結果をもとにスケーリング理論を構築し、hump の有無，失われたモードのゆくえなどについて新しい見解を提示した[153]。この理論は数値的にも確かめられ、現在では多くの研究者がクロスオーバーには hump が存在しない事を認めている。この理論および数値計算を示す前に、Aharony 等[131] によって以前提示されたスケーリング理論の概要を説明し、その議論のどこが正しくなかったかを明らかにしよう。

7–1. クロスオーバーのスケーリング理論[131]

以下に Aharony 等[131]が行ったクロスオーバーの hump の存在に対するスケーリングの議論の概略を述べる。$p_1 = p_c$と $p_2 > p_c$の 2 つの浸透網における状態密度 $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2$を考える（図 7–1 ）。$\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2$はともに 1 原子当りの状態密度であり、$\omega$によるその積分は 1 に規格化されているものとする。このとき系の自己相似性から $\mathcal{D}_2$のクロスオーバー振動数ω_cよりも高振動数側では、この 2 つの状態密度は同じ値をとると考えられる。これは、状態

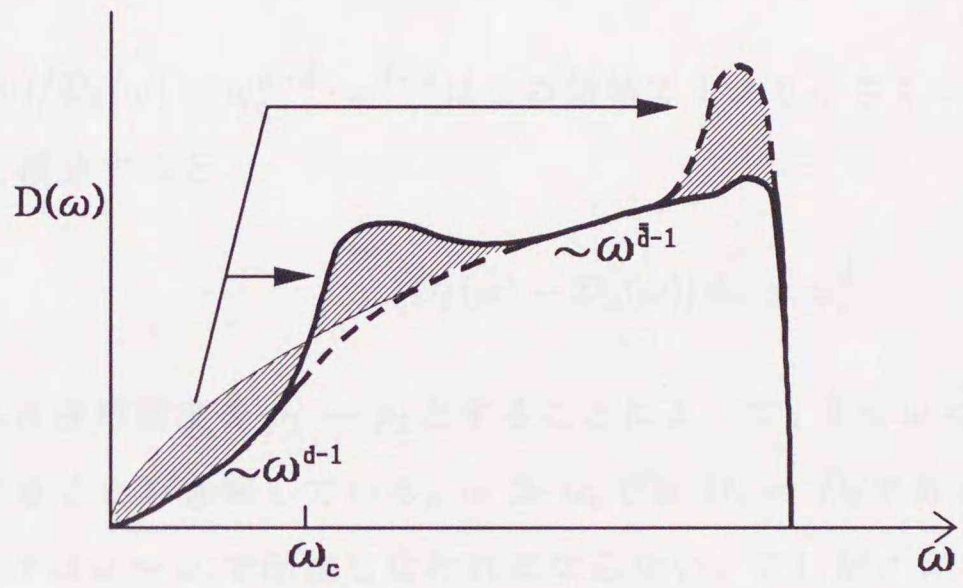


図7–1. Aharony 等によるフォノン-フラクトン・クロスオーバーでの状態密度の hump の根拠。説明は本文参照。

密度が一般に、

$$\mathcal{D}(\omega) = A\omega^{\tilde{d}-1} F\left(\omega/\omega_c\right) \tag{7–1}$$

のように、スケーリング関数 Fで書けると仮定したことと同じである。$F(x)$は $x \gg 1$ では $F(x) = 1$, $x \ll 1$ では $F(x) = x^{d-\tilde{d}}$と振舞う関数である。従って$\omega \gg \omega_c$では、

$$\mathcal{D}_1(\omega) = \mathcal{D}_2(\omega) = A\omega^{\tilde{d}-1} \qquad (\omega/\omega_c \gg 1) \tag{7–2}$$

となる。一方、フォノンの状態密度のωのベキはフラクトンのベキ $1/3$ よりも大きいため、$\omega \ll \omega_c$では $\mathcal{D}_1(\omega) > \mathcal{D}_2(\omega)$である。$(7–1)$式を使って言い換えると、$\omega \ll \omega_c$では、

$$\mathcal{D}_2(\omega) = A\omega_c^{\tilde{d}-d}\omega^{d-1} \qquad (\omega/\omega_c \ll 1) \tag{7–3}$$

であり、$\mathcal{D}_1(\omega)/\mathcal{D}_2(\omega) = \omega_c^{d-\tilde{d}} \cdot \omega^{\tilde{d}-d}$はこの領域で 1 より小さくなる。$\mathcal{D}_1 - \mathcal{D}_2$を$\omega = 0$ から$\omega = \omega_c$まで積分すると

$$\int_0^{\omega_c} \left[\mathcal{D}_1(\omega) - \mathcal{D}_2(\omega)\right] d\omega \propto \omega_c^{\tilde{d}} \tag{7–4}$$

となる。これは浸透濃度を $p_1 \to p_2$とすることによって、$0 < \omega < \omega_c$に存在していたモード数が減少することを意味している。$\omega \gg \omega_c$では $\mathcal{D}_1 = \mathcal{D}_2$であることを考えると、この失われたモードは$\omega \sim \omega_c$で回復しなければならない。これがクロスオーバーにおける状態密度の hump の原因である。

一見正しそうな議論であるが、前章で得た数値計算の結果と一致しない。この相異をより明確にするために、数値計算で得た状態密度の結果を、クロスオーバーでの振舞いを中心に再度見直してみよう。

7–2. 数値計算による結果

700×700 の 2 次元正方格子上の浸透網に対する状態密度の計算結果（図 6–1 と図 6–3 ）を $\mathcal{D}(\omega)/\omega^{1/3}$-$\omega$の両対数プロットとして再プロットすると図 7–2 のようになる。図中黒丸は $p = 0.593$, 白丸は $p = 0.67$ に対する結果である。白丸の$\omega \sim 0.1$ 近くでの折れ曲がりがフォノン-フラクトン・クロスオーバーであり、第 6 章においても述べたように hump らしきものは何も存在しない。この結果からまず最初に気が付くことは、2 つ

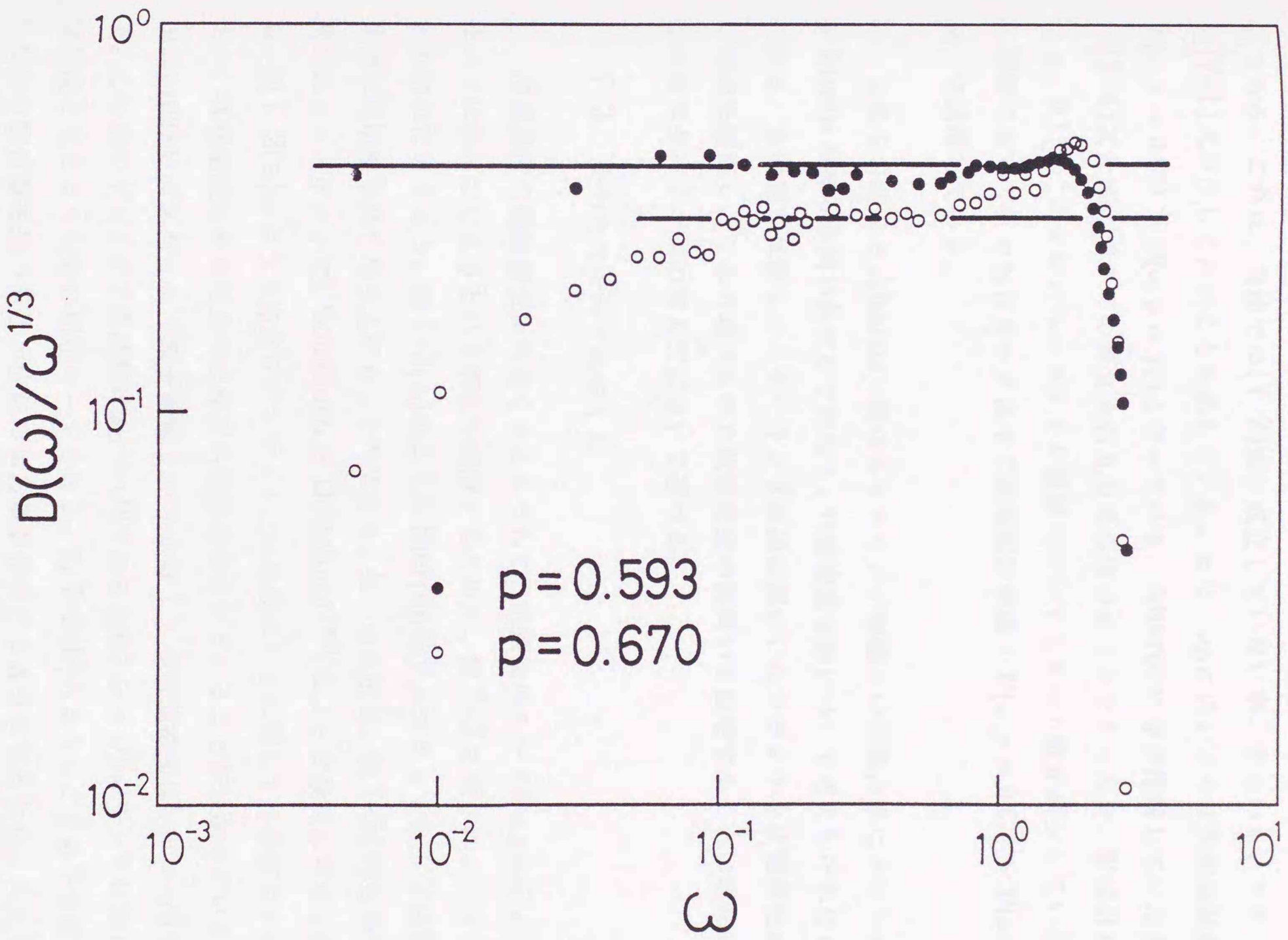


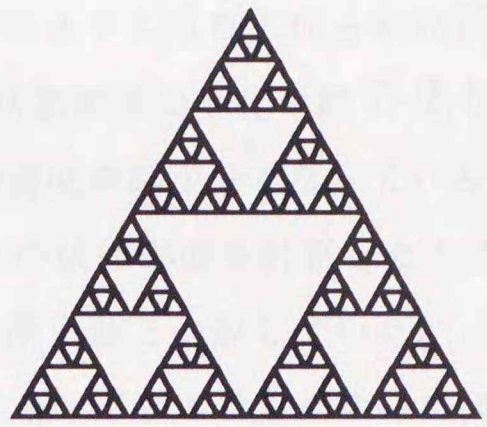
図 7–2. 図 6–1 および図 6–3 の状態密度を $\mathcal{D}(\omega)/\omega^{1/3}$ と ω とでプロットしなおしたもの。黒丸が図 6–1 に対応し、白丸が図 6–3 に対応する。水平の線分は単なるガイド・ライン。

のシミュレーションにおいてフラクトン領域の状態密度の大きさが異なっているということである。これは、前節での(7–2)式が成立していない事、すなわち、スケーリングの仮定(7–1)式が正しくないことを示している。また、ω_Dに近いような高振動数領域において$\mathcal{D}(\omega, p = 0.67) > \mathcal{D}(\omega, p = p_c)$となっている。Aharony 等が指摘していた失われたモード(7–4)式とは$\omega \lesssim 0.1$での黒丸と白丸の差の積分のことであったが、数値計算の結果によると、$0.1 \lesssim \omega \lesssim 1$すなわちフラクトン領域においてもモード数が減少している。この 2 つの領域において失われたモードは全て高振動数領域（$\mathcal{D}(\omega, p = 0.67) > \mathcal{D}(\omega, p = p_c)$の領域）で回復している。

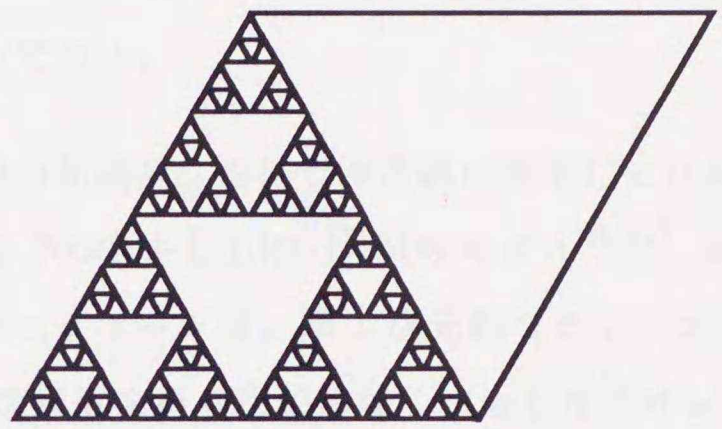
これらの結果と Aharony 等のスケーリング理論との相異は単にクロスオーバー領域に hump が有るか無いかだけではなく、状態密度全体について考えなければならないものである。本研究では新しいスケーリング仮説に基づいたフラクトン状態密度のスケーリング理論を構築し、ここで述べられた状態密度の振舞いを説明することに成功した。次節ではそのスケーリングの考え方について述べる。

7–3. 失われたモードのゆくえ

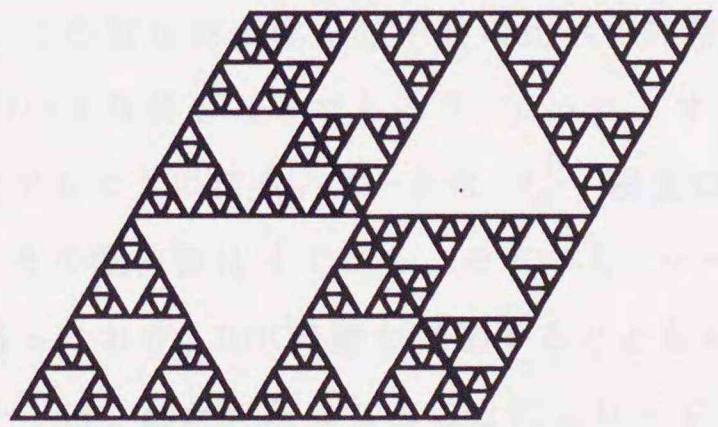
浸透濃度を臨界濃度より高くするにつれて、低振動のモードがω_Dに近いような高振動モードに移ってしまうという事実を理解するために、図 7–3 に示されるような簡単なモデルを初めに考えよう。図 7–3(a)のような Sierpinsky ガスケットから 2 種類の方法で大規模な周期格子系を作り上げることができる。第一の方法は、図 7–2(b)を単位格子とする規則的ネットワークで、Southern と Douchant[154] によって最初に考えられたものである。図 7–2(a)のような完全なガスケット上の振動モードに関しては非常によく調べられており、状態密度はそれ自身自己相似的な構造をとっていることが分かっている[155]。2 次元 Sierpinsky ガスケット（原子質量 1,バネ定数 1 ）の状態密度は、$\omega = \sqrt{5}$で最大値をとる。この系のカットオフ周波数は$\omega_D = \sqrt{6}$であるから、$\omega = \sqrt{5}$のモードは局在長が格子間隔程度となるような強い局在モードである。図 7–2(b)のようにして格子を組み立てると、6 配位の配位数を持つ原子が少数ではあるが存在するようになるため、カットオフ周波数は$\omega_D = 3$となる。従って、Sierpinsky ガスケットの“バンド”の上の領域$\sqrt{6} \leq \omega \leq 3$の状態密度が非零となる。高振動数領域$\sqrt{6} \leq \omega \leq 3$で状態密度が増加した分、低振動数領域、すなわちフラクトン領域の状態密度は減少しなければならない。このような状態密度



(a)



(b)



(c)

図7–3. Sierpinskiガスケットを基本とした格子モデル。(a)は第4階層のSierpinskiガスケット、(b)は(a)のようなガスケットと空の逆三角形を組み合わせたものからなる単位胞、(c)は2つのガスケットを組み合わせることによって作られる単位胞。

の変化は、図 7–2(c)のように組み上げられた規則格子においてより明確となる。この場合、$\sqrt{6} \leq \omega \leq 3$ での状態密度の変化は図 7–2(b)のものより大きく、そこでの増加分はフラクトン領域での状態密度の減少分となっている。実際、図 7–2(c)を単位格子として作られた規則ネットワークの状態密度を計算したところ、$\sqrt{6} \leq \omega \leq 3$ におけるモードの数は $z = 6$ の配位数を持つ原子数と一致していた。このことから、フラクタル構造をとるクラスターを規則的にタイリングすることによって得られる規則的ネットワークの一原子当りの状態密度はフラクトン領域においてもとのフラクタルなクラスターの状態密度よりも小さくなると考えられる。何故ならフラクタル・クラスター同士の結合部分の平均配位数が、フラクタル・クラスター内の平均配位数より大きくなるため、高配位原子に伴う高振動数モードが増加するからである。

以上の議論を有限の相関長ξ_pを持つ浸透網に適用してみよう。議論を簡単にするため、2 次元浸透網に対する Nodes-Links-Blobs モデル[46,47] を用いる。2–4 節で述べられたように、浸透網のバックボーンは、準 1 次元的なチェーン（リンク）とそれらの継ぎ目（ノード）およびループ構造を持ち比較的強く結合したブロック（ブロッブ）から構成される（図 2–6）。ノード間の平均的な距離はξ_pであり、ξ_p^2を単位胞とする規則的ネットワーク全体が浸透網のバックボーンであると見なす。$p = p_c(\xi_p \to \infty)$の浸透網において、$\omega \sim \omega_D$ での振動モードは、比較的重く、硬いブロックにより囲まれた 4 配位の原子の局所的な振動によるものであり、その数は系全体の原子数に比べて非常に少ない。従って、$\omega \sim \omega_D$ での状態密度は比較的小さな値をとるであろう。$p > p_c$、すなわちξ_pが有限の長さになると、系にノードが存在するようになる。ノードは、$\xi_p^{D_{fr}}$程度の重い質量を持ったブロッブによって囲まれており、その配位数は 4 である。それゆえ、ノードの局所的振動モードはω_Dに近い高い周波数を持っており、node 数が増加するとともに$\omega \sim \omega_D$の状態密度は大きくなる。この高振動モードは、ξ_pが有限になることによりフォノンモードが生じることと関係している。これより、図 7–2 においてフォノン領域で失われたモード（モード数 M_{pf}）は、ノードの高振動数モードへ移ったと考えられる。

より定量的には以下のようになる。まず、状態密度に対するスケーリング・フォームは、Aharony 等が考えたような(7–1)式ではなく、

$$\mathcal{D}(\omega, p) = A(p)\omega^{\tilde{d}-1} F(\omega/\omega_c) \tag{7–5}$$

の形をしていると仮定する。スケーリング関数 $F(x)$ は(7–1)式と同様、$x \gg 1$ で $F(x) = 1$, $x \ll 1$ で $F(x) = x^{d-\tilde{d}}$ となる関数である。(7–1)式との違いは状態密度の浸透濃度依存性が ω_c を通してだけでなく、係数 A を通しても入ってくるという点である。これは、図 7–1 で $\mathcal{D}_1(\omega) \neq \mathcal{D}_2(\omega)(\omega > \omega_c)$ であるという実験事実に基づいている。これより、フォノン状態密度 $\mathcal{D}_{ph}$ は $\mathcal{D}_{ph} = A(p)\omega^{d-1}/\omega_c^{d-\tilde{d}}$、フラクトン状態密度 $\mathcal{D}_{fr}$ は $\mathcal{D}_{fr} = A(p)\omega^{\tilde{d}-1}$ となる。さて、フォノン領域において失われたモード数 M_{ph}(1 原子当り) は、

$$\begin{aligned} M_{ph} &\simeq \int_0^{\omega_c} (\mathcal{D}_{fr} - \mathcal{D}_{ph}) d\omega \\ &= \left(\frac{1}{\tilde{d}} - \frac{1}{d}\right) A(p)\omega_c^{\tilde{d}} \\ &= \left(\frac{1}{\tilde{d}} - \frac{1}{d}\right) A(p)\Omega_0^{\tilde{d}}(p - p_c)^{\nu D_f} \end{aligned} \tag{7–6}$$

となる。この計算では $A(p) \simeq A(p_c)$ であるとした。ここで Ω_0 は(4–35) 式の比例定数であり、

$$\omega_c = \Omega_0(p - p_c)^{\nu D_f/\tilde{d}}$$

で定義される。一方 ξ_p^d の領域に含まれる原子の数は $\xi_p^d P$ である。P は第 2 章で述べた浸透網のオーダー・パラメータで、$P = P_0(p - p_c)^{\beta}$ で表される。従って、フォノン領域で失われたモードのうち、ξ_p^d の空間領域で失われた個数 M_{ph}^{ξ} は、

$$\begin{aligned} M_{ph}^{\xi} &\simeq \xi_p^d P M_{ph} \\ &= \left(\frac{1}{\tilde{d}} - \frac{1}{d}\right) P_0 \Xi^d \Omega_0^{\tilde{d}} A(p)(p - p_c)^{-\nu d + \beta + \nu D_f} \\ &= \left(\frac{1}{\tilde{d}} - \frac{1}{d}\right) P_0 \Xi^d \Omega_0^{\tilde{d}} A(p) \end{aligned} \tag{7–7}$$

となり p に依存しない。ここで Ξ_0 は $\xi_p = \Xi_0|p - p_c|^{-\nu}$ で定義される量である。また指数の計算には(2–34)式を用いた。$d = 2$ の場合実際に M_{ph}^{ξ} の値を求めてみよう。図 7–1 の結果において $p = 0.67$ で $\omega_c \sim 0.1$ とすると $\Omega_0 \simeq 13$ となる。また、$A(p)$ は同じ図より、$A(p) \simeq A(p_c) \simeq 0.4$ である。P_0 は Padé 近似による計算から $P_0 = 1.53$ であることが分かっている[30]。また Ξ_0 は ω_c におけるフラクトンの局在長から求められ、$\Xi_0 = 0.95$ となる。$d = 2, \tilde{d} = 4/3$ とともにこれらの値を(7–7)式に代入すると M_{ph}^{ξ} は 1 のオーダーを持つ量となる。この 1 つのモードは ξ_p^d の領域内に 1 個の割合で存在するノードに割り当てるこ

とができる。すなわち、フォノン領域で失われたモードは、各ノードの高振動数モードとなったとする先の考え方が定量的に裏付けられたことになる。

M_{ph}は実際には1より極めて小さい。失われたモードのうち数値的に大きな寄与を与えるのは、むしろフラクトン領域の状態密度の減少によるものである。カットオフ振動数近くのhumpを無視すると、この領域で失われたモードの数M_{fr}（1原子当り）は、

$$M_{fr} = \int_0^{\omega_D} [\mathcal{D}_{fr}(\omega, p_c) - \mathcal{D}_{fr}(\omega, p)]\, d\omega$$
$$= 1 - \frac{A(p)}{A(p_c)} \tag{7–8}$$

と書ける。ここで、状態密度のスケーリング・フォーム(7–5)式と、$\mathcal{D}_{fr}(\omega, p_c)$の全振動領域での積分が1であることを用いた。$M_{fr}$の浸透濃度依存性を考えよう。$p > p_c$の浸透網において、$\xi_p^d$の領域には臨界濃度の浸透網の平均配位数よりも高い配位数を持つ原子が数多く含まれることになる。この高配位数原子は図7–3(c)の周縁の6配位原子に対応しており、その数はノード（図7–3(c)ではコーナーの原子）の数よりはるかに大きい（ノードの密度は$1/(\xi_p^d P) \simeq M_{ph}$）。図7–3(c)のような場合には、このような高配位を持つ周縁原子はξ_p^{d-1}に比例するが、浸透網の場合その周縁は$D-1$次元のフラクタル構造をとっているため、高配位数原子の数は、ξ_p^{D-1}に比例する。従ってξ_pが有限の長さになるのに伴ってξ_p^{D-1}に比例した数の高配位数原子が生じ、これがフラクトン・モードを壊しω_D近くの高振動数モードを形成する。故に失われたフラクトン・モードの1原子当りの数は、

$$M_{fr} \propto \frac{\xi_p^{D-1}}{\xi_p^D} \propto (p - p_c)^{\nu} \tag{7–9}$$

となる。

2次元正方格子上の浸透網の場合、周縁は$4\xi_p^{D-1}$であり、$\nu = 4/3$であるから、$M_{fr} = 4(p-p_c)^{4/3}/\Xi \simeq 4.2(p-p_c)^{4/3}$となるあろう。この関係式が正しい事を確認するため、様々な濃度の（2次元正方格子上の）浸透網に対し状態密度を計算し、(7–8)式に従ってM_{ph}を求めた。図7–4がその結果である。直線は$M_{fr} = 4.1(p-p_c)^{4/3}$のラインである。係数4.1は、最小二乗法で求めたものである。このように数値計算の結果は指数，係数とも理論と非常によく一致する。

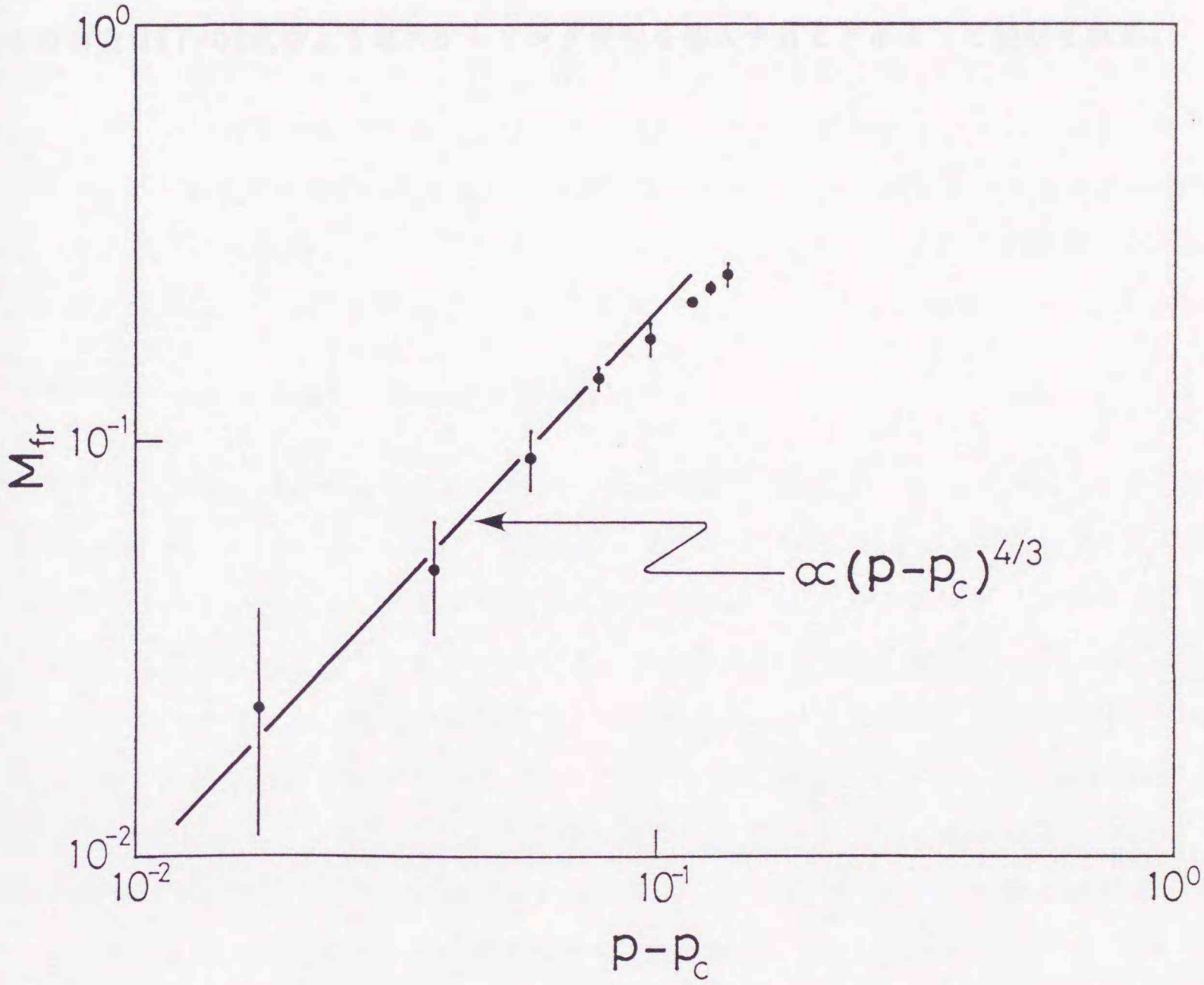


図7–4. フラクトン状態密度の減少による“失われたモード”の1サイト当りの数 M_{fr} と $p-p_c$ との関係。直線は理論的により得られる関係 $M_{fr} \propto (p-p_c)^{4/3}$ を表す。

本章で述べた研究の結果次のことが明かとなった。フォノン-フラクトン・クロスオーバーに伴う“失われたモード”は、クロスオーバー振動数領域で回復するのではなく、ω_Dに近いような高振動数領域で回復する。そのため、クロスオーバーにおける状態密度にはhumpは存在しなく、替わりに高振動数の状態密度が浸透濃度の増大とともに大きくなる。また、モードの消失はフォノン領域だけでなく、フラクトン領域の振動数でも起こる。これらの事実は(7–5)式のようなスケーリング仮説を導入することによって説明される。

第8章　フラクトン波動関数の超局在性

これまでは主にフラクトンの状態密度に関する議論を行ってきた。本章ではフラクトンの波動関数について詳しく議論する。第4章でのスケーリング理論によると、フラクトン次元$\tilde{d}$が$\tilde{d}<2$であれば、その励起は空間的に局在したモードとなる。この予想は本研究で行った大規模計算により直接的に確かめられた（図6–5および図6–6）。この大規模計算により、単一のフラクトン・モードの空間的な拡がりは極めて異方的であり、そのプロファイルを一つの関数で記述することは非常に難しいように思われる。そこで通常は多数のフラクトン・モードの集合平均としての波動関数を考え、その波動関数がどのような形をしているかについて議論する。以下では、そのようなフラクトンの平均波動関数の形についての様々な理論、および本研究で行った大規模シミュレーションの結果について述べる。

8–1. フラクトン励起の超局在波動関数

フラクトン励起の存在ははじめスケーリング理論で予想され、後に本研究で行われたような大規模シミュレーションによって数値的に確かめられた。しかし、現実のランダム系においてフラクトンが存在し、系の物性に何等かの影響を与えなければ、フラクトンに関する物理的な興味は失われてしまう。フラクトンの存在を実験的に観測することは、フラクトンと何か他の励起との散乱を観測することに他ならない。このような散乱の相互作用行列を計算し、散乱強度を求めるには、フラクトンの波動関数が必要となる。Alexander等[156–160]は、フラクトン放出による電子緩和およびスピン-格子緩和を調べるため、フラクトン波動関数について一つの仮定をした。彼等は、個々のフラクトンの形は複雑であるが、統計平均されたフラクトンの波動関数ψ_{fr}は等方的な

$$\psi_{fr}(r) \propto \exp\left[-\left(r/\Lambda(\omega)\right)^{d_\phi}\right] \tag{8–1}$$

という形を持っていると考えた。そして、フラクトンの関与する巨視的物理量は、この平均化されたはフラクトン波動関数によって計算されるものとした。ここで$\Lambda(\omega)$は、振動数ωのフラクトンの局在長であり、(4–12)式の振動数依存性を持っている。また、d_ϕはフラクトン局在の強さを示す指数である。この仮定が正しいかどうかは別として、フラクトンの関与する多くの物理量がこの平均波動関数を用いることによってとりあえず計算できるようになった。代表的なものを結果だけ挙げると次の通りである。

i) フラクトン放出による電子緩和[156,158,159)]

$$\langle W \rangle \sim \begin{cases} \omega_0^{2\tilde{d}d_\phi/D_f+\tilde{d}-2} & \beta\omega_0 \gg 1 \\ \omega_0^{2\tilde{d}d_\phi/D_f+\tilde{d}-3} k_B T & \beta\omega_0 \ll 1 \end{cases} \tag{8–2}$$

$\langle W \rangle$: 平均緩和確率
ω_0 : エネルギー変化

ii) 2フラクトン放出によるスピン-格子緩和[157,160−162)]

$$\langle 1/T_1 \rangle \sim \begin{cases} T^{2\tilde{d}[1+2(d_\phi/D_f)]-1} & \text{クラマース遷移} \\ T^{2\tilde{d}[1+2(d_\phi/D_f)]-3} & \text{非クラマース遷移} \end{cases} \tag{8–3}$$

T_1 : スピン-格子緩和時間
T : 温度

iii) フラクトンによるラマン（ブリルアン，中性子）散乱[163)]

$$\langle I \rangle \sim \omega^{(\tilde{d}/D_f)(2d_\phi+D_f)-2} [n(\omega)] \tag{8–4}$$

I : 散乱強度
$n(\omega)$: ボーズ分布

iv) フラクトンを媒介とするホッピング伝導[164−166)]

$$\sigma \sim \exp\left[-(T_0/T)^{d_\phi/(D_f+d_\phi)}\right] \tag{8–5}$$

$\langle \sigma \rangle$: 平均ホッピング伝導
T_0 : $k_B T_0$ = 局在電子の離散エネルギー間隔
T : 温度

v) フラクトン・ホッピングによる熱伝導度[167,168)]

$$\langle \kappa \rangle = \frac{\pi c_{eff}^2 \tilde{d}^2 d_\phi^4 I(\beta)}{6\rho^3 v_s^2 \xi_p^8 \omega_c^3} k_B^2 T \quad , \; T > \hbar\omega_c/k_B \tag{8–6}$$

$\langle \kappa \rangle$: 平均熱伝導度
c_{eff} : 浸透網の有効弾性定数
ρ : 質量密度
v_s : フォノンの音速
$I(\beta)$: $I(\beta) = \int_1^\infty x^{2\tilde{d}+(\tilde{d}/D_f)-4} \exp(-\beta\omega_c x) dx$
T : 温度

特に、最後の熱伝導度の結果はアモルファス物質に共通した性質である$T=10\mathrm{K}$近くでの熱伝導度のプラトー、およびそれより高温での$\kappa \propto T$をうまく説明するものとして注目されている。ガラスや高分子架橋体などの殆ど全てのアモルファス物質において、$T\sim 10\mathrm{K}$近くで熱伝導度κは温度によらない一定値（プラトー）をとり、$T \gtrsim 50\mathrm{K}$でκは温度に比例するという実験事実は、かなり昔から知られていた[169]。しかし、アモルファス物質に対して普遍的なこの現象を完全に説明する理論は現在でも存在せず[170,171]、ランダム系の物理学の大きな問題の一つとして残っている。(8–6)式を導く理論[167,168]の概要は次の通りである。$0<T\lesssim 10\mathrm{K}$まではフォノンが励起され、通常のデバイ的な熱伝導を示すが、$10\lesssim T\lesssim 50\mathrm{K}$になると新たにフォノンが励起されることはなく、局在振動モードであるフラクトンが励起されだす。局在性のためフラクトンは熱を運ばないので、熱伝導に寄与するのはすでに励起されているフォノンのみとなる。フォノンの数は$T\sim 10\mathrm{K}$で励起されているものと同じなので、結局この温度領域では、κは温度に対し一定値をとる。さらに$T\gtrsim 50\mathrm{K}$となると、フラクトンとフォノンの非線形相互作用が大きくなり、フォノンを媒介とするフラクトンのホッピング伝導が生じ、κはまた温度とともに上昇する。フラクトン波動関数を(8–1)式と仮定し、2次の摂動計算で熱伝導度を計算すると、温度Tに比例した(8–6)式のような熱伝導度を得る。

このように、フラクトンが関与する様々な物理量を計算するために、フラクトン平均波動関数ψ_{fr}が用いられてきた。Alexander等[156–160]がフラクトン平均波動関数を(8–1)式のような指数減衰型としたのは次の理由による。今、浸透網の一部が図8–1のような構造をしていたと考えよう。あるフラクトンの局在中心が図中のサイトAにあるとする。また、隣接サイト間でのホッピングによる振幅の減衰をe^{-a/l_0}（aは格子間隔、l_0は定数）とする。サイトAから直線距離でrだけ離れた所にある一つのサイト（サイトB）での振幅を考える。サイトAからサイトBにいたる浸透網上の最短経路の長さをl_mとすると、この経路を通ることによって減衰したサイトBでの振幅はe^{-l_m/l_0}に比例する。l_mは、点AとBのchemical lengthと呼ばれ

$$l_m \propto r^{\tilde{\zeta}_c} \tag{8–7}$$

であることが知られている（$\tilde{\zeta}_c$はchemical lengthの指数）[172]。この関係式によれば、$d_\phi=\tilde{\zeta}_c$ということになるが、実際は最短経路以外からの寄与もあり、サイトBでの振幅

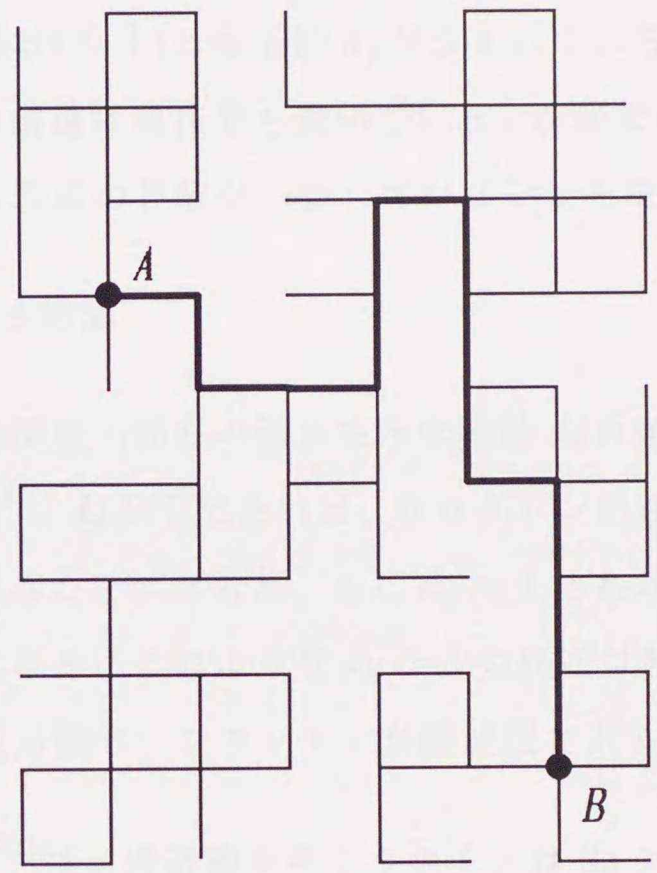


図 8–1.　フラクトン励起の超局在性。説明は本文参照。

は e^{-l_m/l_0} に比例しない。サイトAでの振動がサイトBに伝播する場合、サイトBでの振幅に対する様々な経路からの寄与をAB間の有効距離 l_{eff} で表せると考えると、サイトBでの振幅は e^{-l_{eff}/l_0} に比例することになる。さらにこの l_{eff} がchemical lengthと同じように

$$l_{eff} \propto r^{d_\phi} \tag{8–9}$$

と書けるならば、フラクトンの平均波動関数は(8–1)式の形で表されることになる。

フラクトン平均波動関数(8–1)には指数 d_ϕ が含まれているが、この指数の値がどのような値をとるかについての議論は現在でも続いている。次節では d_ϕ の値に関するいくつかの理論の結果を紹介し、各理論の見解が一致していないことを示す。

8–2. 指数 d_ϕ に関する理論

フラクトンの平均波動関数の局在の強さを示す指数 d_ϕ の値については様々な理論的研究がなされている[166,173,174]。d_ϕ が1であれば、フラクトン局在はアンダーソン局在と同じプロファイルで局在していることになるが、もし $d_\phi > 1$ であれば全く新しいタイプの局在の可能性を提示することになる。このような $d_\phi > 1$ の局在は特に“超局在”と呼ばれるが、これまでの理論の結果を見る限り、フラクトンが超局在であるかどうかは明確ではない。

Lévy と Souillard[173]は、浸透網上のフラクトンは $d_\phi > 1$ の超局在励起であると考えた。彼等は、浸透網内の占有サイト上に $V(x) = V_0 - Jn(x)$ というポテンシャルが存在する電子の強結合ハミルトニアンを調べた。$n(x)$ は x の位置の原子の配位数であり、J は最近接サイト間のホッピング・エネルギー、V_0 は定数である。この電子系の問題は、格子振動の問題と完全に対応付られる。Lévy 等は、この系の Schrödinger 方程式を虚時間の拡散問題に読み替えることによって、フラクトン波動関数が

$$|\psi_{fr}(r)| \approx \exp\left[t(E/J + 2d)\right]\left(1 + \exp\left[t|V_0|/J\right]P(r,t)\right) \tag{8–10}$$

となることを示した。ここで E は電子の固有エネルギーであり、$P(r,t)$ は時刻 $t = 0$ に $r = 0$ にいた粒子が浸透網上を拡散し、$t = t$ に $r = r$ の位置に到着する確率を表している。第3章の議論より $P(r,t)$ は

$$P(r,t) \sim f(r^{1/d_s}/t) \tag{8–11}$$

のようにスケールされるであろう。ここでd_sは第3章で定義された異常拡散を表す指数である（$\langle R^2\rangle^{1/2} \propto t^{d_s}$）。また、スケーリング関数$f(x)$は$x \gg 1$のとき

$$f(x) \propto \exp[-x^{\alpha_f}] \tag{8–12}$$

と考えるのが自然である。(8–10)式に(8–11), (8–12)式を代入し、tを消去するために$t \propto r^{\alpha_f/d_s(\alpha_f+1)}$と選んでやると、$\psi_{fr}$の$r$-依存性は$|\psi_{fr}(r)| \approx \exp[-Cr^{\alpha_f/d_s(\alpha_f+1)}]$となる（$C$は$r$に対して定数）。従って、指数$d_\phi$は

$$d_\phi = \frac{\alpha_f}{d_s(\alpha_f+1)} \tag{8–13}$$

となる。指数α_fの値については様々な議論があるが、Lévy等は$\langle R^2\rangle \gg \xi_p^2$では通常拡散となり$P(r,t) \propto \exp[-r^2/Dt]$すなわち$\alpha_f = 1$となることから、$\langle R^2\rangle \ll \xi_p^2$でも$\alpha_f = 1$であると考えた。$\alpha_f = 1$という結果はBanavarとWillemsen[175]やO'ShaughnessyとProcaccia[176]によっても支持されている値である。$\alpha_f = 1$を(8–13)式に代入することにより

$$d_\phi = \frac{1}{2d_s} \tag{8–14}$$

となる。表2–2より各次元でのd_ϕを求めると、表8–1のようになる。この表より、彼等の理論に従えば何れの次元においてもフラクトンは超局在励起となることが分かる。

HarrisとAharony[166]もLévy等と同様な議論を行うことにより指数d_ϕの値を評価した。Lévy等と異なるのは、(8–12)式におけるα_fの値である。Havlin等[177]やGuyer[178]は、決定論的フラクタル構造上の拡散現象に対し厳密な関係式

$$\alpha_f = \frac{d_s}{1-d_s} \tag{8–15}$$

を導いているが、Harris等はある一つの浸透網上の拡散の場合、(8–15)式はα_fの下限を与えていることを示した。彼等の議論によると、ある特定の浸透網構造上の拡散に対してα_fは

$$\frac{d_s}{1-d_s} \leq \alpha_f \leq \frac{d_s\tilde{\zeta}_c}{1-d_s\tilde{\zeta}_c} \tag{8–16}$$

の範囲で何れかの値をとる。$\tilde{\zeta}_c$は(8–7)式で定義されたchemical lengthの指数である。2次元浸透網の場合$\tilde{\zeta}_c = 1.15$[172]，$d_s = 0.349$であることが知られているので、α_f

Lévy & Souillard	2 次元	3 次元	4 次元	5 次元	6 次元
d_ϕ	1.43	1.92	2.38	2.63	3

表 **8–1.**　浸透網に対する指数 d_ϕ の値。Lévy と Souillard[173] による予想値。

は $0.53 \leq \alpha_f \leq 0.67$ の範囲のある値をとることになる。α_f のこの値は Lévy 等の予想よりも小さいが、Havlin 等[177] の数値計算（2 次元浸透網上の拡散に対し $\alpha_f = 0.57$ ）とは一致している。α_f の値がこの範囲にあるとすれば、(8–13)式で与えられる d_ϕ は

$$1 \leq d_\phi \leq \tilde{\zeta}_c \tag{8–17}$$

となる。2 次元浸透網の場合だと $1 \leq d_\phi \leq 1.15$ となる。(8–17)式はある特定の浸透網上のフラクトンに対する d_ϕ がこの範囲のある値をとることを意味しており、もし全ての浸透網構造に対し平均をとったとするならば、(8–17)式の上限は下限値 1 に一致する。すなわち、次元によらず

$$d_\phi = 1 \tag{8–18}$$

となり、フラクトンの平均波動関数 ψ_{fr} は通常の指数減衰を示すことになる。

一方、Aharony, Alexander, Entin-Wohlman および Orbach[174] は、フラクタル・ネットワーク上の振動の方程式が、同じ系の Kirchhoff 方程式と同じ形をしていることに注目し、距離 r だけはなれた 2 点間の抵抗 $R(r)$ の r-依存性から d_ϕ を求めた。$p = p_c$ の浸透網のバックボーンを第 2 章で述べた階層格子モデルで考えると、浸透網上の 2 つの点の間は準 1 次元的なチェーンと見なすことができる。この 2 点間の抵抗 $R(r)$ は、2 点間の有効距離に比例している。この有効距離が(8–9)式での有効距離と同じであるとすると、フラクトンの平均波動関数は $\psi_{fr} \propto \exp[-R(r)]$ となる。一方、(4–32)式より $R(r) \sim 1/g(r) \sim r^{d-2-\mu/\nu}$ であり、$d = 1$ とすると

$$R(r) \sim r^{1-\mu/\nu} \tag{8–19}$$

となる。従って、

$$d_\phi = 1 - \frac{\mu}{\nu} = \frac{D_f}{\tilde{d}}(2 - \tilde{d}) \tag{8–20}$$

が得られる。(8–20)式で与えられる d_ϕ の各次元における値は、表 8–2 に示すとおりである。この表から分かるとおり、2 次元浸透網の場合 $d_\phi < 1$ であり、通常の指数減衰よりもゆっくりと減衰することになる。

以上、d_ϕ の値に関する代表的な理論を 3 つ紹介したが、3 つとも指数 d_ϕ の予想値は異なっている。特に 2 次元浸透網の場合、Lévy 等は $d_\phi > 1$, Harris 等は $d_\phi = 1$,

Aharony *et al.*	2 次元	3 次元	4 次元	5 次元	6 次元
d_ϕ	0.948	1.24	1.65	1.9	2

表 **8–2.** 浸透網に対する指数 d_ϕ の値。 Aharony, Entin-Wohlman および Orbach[174] による予想値。

Aharony 等は $d_\phi < 1$ という結果を与えており、状況は非常に混迷した状態にある。フラクトンの局在に関するこの基本的な問題点を解決するには、大規模なシミュレーションを行うのが最もよい。次節では、強制振動法によるシミュレーションで平均波動関数を評価した結果について述べる。

8–3. 指数 d_ϕ に関する数値計算[120,124–126,133,179)]

フラクトンの平均波動関数の指数 d_ϕ の値を直接求めるために、第 5 章で述べた強制振動法を用い、図 6–5 のようなフラクトン・モードを多数励起させ、そのアンサンブル平均をとるという数値計算を行った。計算を実行するために、まず 9 パターンのサイト型浸透網を用意した。各々は 700×700 の 2 次元正方格子上に $p = p_c$ で作られたもので、最大のものは $N = 171,306$ 個の原子を、最小のものは $N = 76,665$ 個の原子を含んでいる。これらの上に $\Omega = 0.01$ の外力振動数による強制振動法でスカラー変位のフラクトンを励起させ、その中から 129 個のモードを選び出した。これらのフラクトンは全て $\omega = 0.01$ に近い振動数を持っており、いずれも正方格子の境界から十分離れたところにその局在中心を持っている。各フラクトン・モードの局在中心は次のような方法によって求められた。まず、変位パターン $\{u_l\}$ を l サイトの近傍で

$$u_l^{(1)} = \frac{1}{z+1}\left[u_l + \sum_{l' \ln N_l} u_{l'}\right] \tag{8–21}$$

のように平均する。ここで z はサイト l に位置する原子の配位数であり、N_l はサイト l の最近接原子の集合である。パターン $\{u_l^{(1)}\}$ は $\{u_l\}$ に比べて滑らかなプロファイルを持っている。$\{u_l^{(2)}\}$ は $\{u_l^{(1)}\}$ から同様の手続きで求められる。m 回このような手続きを繰り返すと、十分大きな m に対し、$\{u_l^{(m)}\}$ はただ一つの極大点を持った滑らかなパターンとなる。この極大点 R_0 を局在したフラクトン励起の中心と考えることにする。129 個のフラクトンの局在中心を全て一致させ、$\{u_l\}$ の相加平均をとり、さらに R_0 を中心とした角度方向の平均もとることによって平均化されたフラクトンのモード・パターンを得ることができる。

図 8–2 の白丸は ψ_{fr} の絶対値の平均を局在中心からの距離の関数としてプロットしたものである（距離の単位は格子間隔である）。この関数形が (8–1) 式のようになっているとすれば、$\log[\langle|\psi_{fr}|\rangle]$ と r の両対数プロットは直線になるはずである。黒丸はそのようなプロットの仕方をしたものであり、右の縦軸と上の横軸に従う。黒丸を通る直線は $r < 30$ の

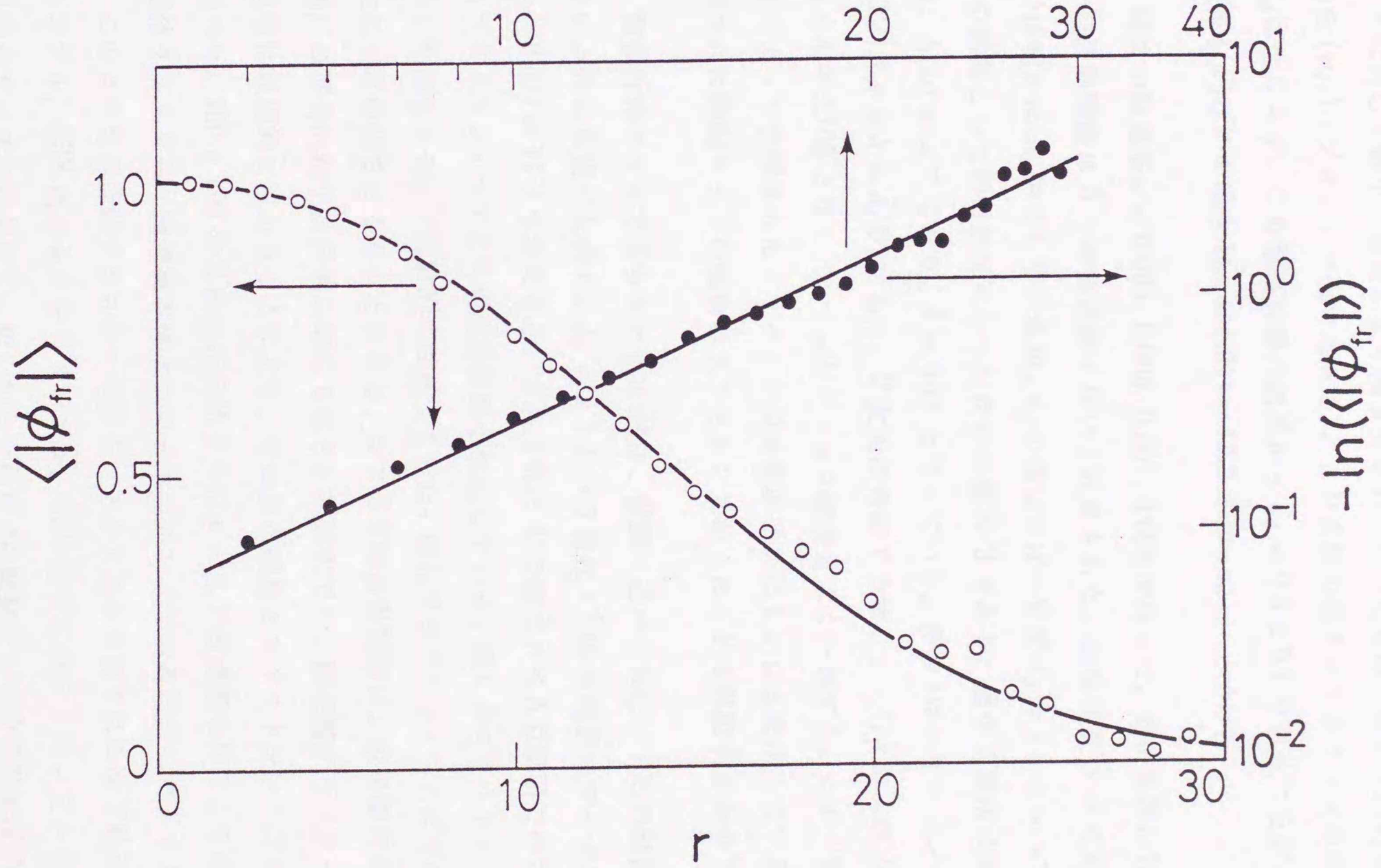


図 **8–2.** 平均されたフラクトン波動関数。黒丸は中心からの距離 r と平均振幅 $\langle|\psi_{fr}(r)|\rangle$ のプロットであり、白丸は r と $-\ln\langle|\psi_{fr}(r)|\rangle$ の log-log プロットである。

データに対して最小二乗法により傾きを求めて引いたものである（白丸を通る曲線は、同じ線を$\langle\psi_{fr}\rangle$-rプロットで引いたもの）。この直線の傾きはフラクトンの平均波動関数の指数d_ϕに他ならず、この数値計算の結果から$d_\phi = 2.3 \pm 0.1$であることが分かった。また、局在長$\Lambda(\omega)$はこの場合$\Lambda(\omega = 0.01) = 17.2$であった。

同様の計算を$\omega = 0.005, 0.006, 0.007, 0.008$で行った。各振動数に対するフラクトンの平均波動関数は5つの浸透網を用いて計算された。結果は表8–3に示される。局在長$\Lambda(\omega)$は明かにωに依存しているが、d_ϕの値はほぼ一定で$d_\phi \simeq 2.3$となっている。局在長Λをωの関数として両対数プロットしたのが図8–3である。最小二乗法によって引かれた直線は、$\Lambda(\omega) \propto \omega^{-\lambda}$であり、$\lambda = 0.71$となっている。指数$\lambda$はスケーリング理論によると、(4–12)式から$\lambda = \tilde{d}/D_f$であり、2次元浸透網での値、$\tilde{d} = 4/3$および$D_f = 1.89$を代入すると$\lambda = 0.705$となり、シミュレーション結果とよく一致する。この一致はスケーリング理論によって予想されたフラクトンの分散関係が正しいことを示していると同時に、集合平均された励起モードが確かにフラクトンであったことを保証するものでもある。

数値計算によって得られたd_ϕの値は、前節で述べられたいずれの理論的予想値よりも大きい。先にも述べた通り、$d_\phi = 2.3$という値は$r \lesssim 30$の範囲のデータから求められた。$\Lambda(\omega = 0.01) = 17.2$を考えると、求められた$d_\phi$の値は$r < \Lambda$の領域でのフラクトン、すなわちフラクトン・コアの平均波動関数を記述している。個々のフラクトン・コアは、図6–7に示した通りステップ関数的に振舞っていた。仮にフラクトン・コアにおける振動の振幅が完全に一定の値をとるものとすると、コアの平均波動関数は、浸透網内の“半島”（弱連結領域）の平均的粒子数分布に等しくなる。本研究では、弱連結クラスターの平均密度分布を実際に数値的に求めることにより、その分布関数とフラクトン・コアの波動関数の関係を調べた。100×100の2次元正方格子上に$p = p_c$で浸透網を作り、その中から1-ボンド弱連結クラスター（浸透網本体とただ一本のボンドでのみ結合したクラスター）を取り出す。このような弱連結クラスターのうち、クラスターに含まれる原子数が519個のものを5サンプル，538個のものを9サンプル，689個のものを3サンプルそれぞれ用意した。これらのサンプルにおいて、重心からの距離rの関数として粒子数密度$N(r)$を求めた。結果は、3種類のサイズのいずれの場合に対しても$N(r) \propto \exp[-Cr^\eta]$の形をとった。$\eta$の値

ω	Λ	d_ϕ
0.005	28.13	2.25
0.006	24.18	2.24
0.007	23.49	2.34
0.008	19.41	2.26
0.010	17.20	2.31

表 **8–3.**　d_ϕ と Λ の振動数依存性。

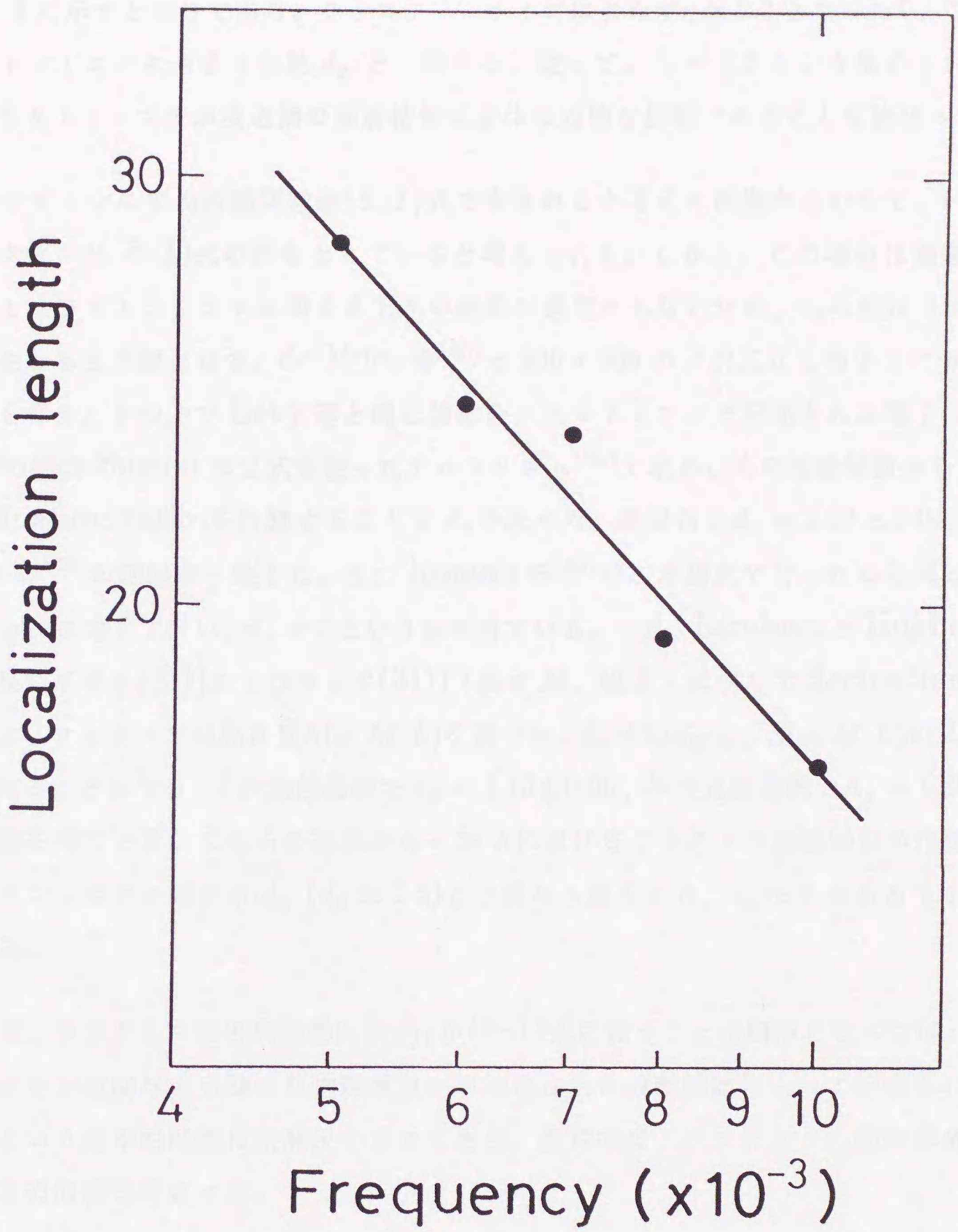


図 8–3. 局在長と振動数の log-log プロット。直線 $\left(\Lambda(\omega) \propto \omega^{-0.71}\right)$ は最小二乗法によって引かれたものである。

は表8–4に示すとおりであり、クラスター・サイズによらず$\eta \simeq 2.3$となった*。この値はフラクトン・コアに対する指数d_ϕと一致する。従って、$d_\phi = 2.3$という極めて大きな値は、フラクトン・コアが浸透網の弱連結領域全体の同相な振動であることを物語っている。

フラクトンの平均波動関数が(8–1)式で表されると考えた根拠からいって、$r \gg \Lambda$でもフラクトンは(8–1)式の形をとっていると考えられる。しかし、この場合は弱連結クラスターとフラクトン・コアに関する上述の議論が適用されないため、d_ϕの値は2.3とは異なる値をとると予想される。de Vries等[180]は200×200の2次元正方格子上に$p = p_c$の浸透網を作り、その上でLévy等と同じ強結合ハミルトニアンで記述される電子の波動関数をTrotter-Suzukiの公式を使ったアルゴリズム[181]で求め、その波動関数からinvers participation ratioを計算することでd_ϕを求めた。結果は、$d_\phi = 1.00 \pm 0.04$であり、Harris等[166]の理論と一致した。またRoman等[182]は、本研究で行ったのと同じ数値計算を$r \gg \Lambda$に対して行い、$d_\phi = 1$という値を得ている。一方、LambertとHughes[183]は非常に長いリボン(2D)およびロッド(3D)（長さM，幅L）に対してdecination法[184]を適用し、フラクトンの局在長$\Lambda(\omega; M, L)$を調べた。d_ϕは$\lim_{M\to\infty} \Lambda(\omega; M, L)$の$L$依存性から求めることができ、2次元浸透網で$d_\phi = 1.13 \pm 0.06$，3次元浸透網で$d_\phi = 1.39 \pm 0.07$という値を得ている。これらの結果から$r \gg \Lambda$におけるフラクトン波動関数の指数$d_\phi$は、フラクトン・コアに対する$d_\phi$ $(d_\phi \simeq 2.3)$とは異なる値をとり、$d_\phi \simeq 1$であろうことが予想される。

さて、フラクトンの平均波動関数ψ_{fr}が(8–1)式に従うことは明かとなったが、そもそもフラクトンの関与する様々な物理現象が平均化された波動関数によって記述されうるかどうかという基本的問題は未解決のままである。次章では、フラクトンの動的構造因子を通してこの問題を考察する。

---

* Harrmann[H. J. Herrmann, Z. Phys. B**32**, 335(1979)]の数値実験によれば、孤立した有限サイズの2次元浸透網の粒子数分布も$\exp[-C' r^{\bar{\eta}}]$に比例し、$\bar{\eta} \simeq 2.6$という値をとる。これより、孤立クラスターと弱連結クラスターは、ほぼ同じ構造をとっていることが分かる。

クラスター・サイズ	サンプル数	η
519	5	2.29
538	9	2.33
689	3	2.29

表 8–4.　弱連結クラスターの分布関数に対する指数ηの値。

第 9 章　浸透網の動的構造因子

浸透網上のフラクトンに関する様々な知見スケーリング理論や計算機シミュレーションによって得られてきた。このような興味深い励起が現実のランダム系において本当に存在するのかどうかを実験的に確認するのは非常に重要である。現在までそのような実験は数多く行われており、ランダム系の励動励起に関する多くの情報が得られている[138−152,162,163,185−211]。中でも光または中性子による非弾性散乱実験によってフラクトンの存在、その状態密度、分散関係などが次々と明らかにされている[142−152,163,185−200]。しかし、このような散乱実験から直接得られる量は散乱強度、すなわち動的構造因子であり、フラクトンのより詳細な性質を明らかにしようとすれば、動的構造因子とフラクトン波動関数の関係を明確にしなければならない。これまでは前章で述べたような平均波動関数を用いた解析により、実験的に得られた散乱強度の解釈がなされてきた。しかし、第 6 章で示した通り、個々のフラクトンは極めて異方的に局在しており、これらを平均化してしまった波動関数によって、フラクトンと他の素励起の相互が正しく記述されるかは疑問である。本章では、強制振動法を用いた大規模シミュレーションにより、励起されたフラクトン・モードから直接動的構造因子を求め、その結果を平均波動関数を用いた理論と比較する。

9–1.　実験によるフラクトンの検証[138−152,162,163,185−211]

9–1–1. 光および中性子散乱実験[142−152,163,185−200]

光または中性子の非弾性散乱実験によって直接得られる量は、次式で定義される動的構造因子 $S(\vec{q},\omega)$($\vec{q},\omega$ はそれぞれ波数シフトと振動数シフト）である。

$$S(\vec{q},\omega) = \int dt e^{-i\omega t} \int d\vec{r} d\vec{r}' e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} \langle\ \delta\rho(\vec{r},t)\cdot\delta\rho(\vec{r}',0)\ \rangle \qquad (9\text{–}1)$$

動的構造因子は質量密度の振動励起による変化分の相関関数のフーリエ変換であり、この関数の波数依存性または振動数依存性を調べることで励起状態の特性を知ることができる。最近エアロゲルの光散乱実験などが Courtens を中心に多くの研究者によって行われている。

フラクトンを実験的に検証するためには、フラクタル構造をとる物質が必要である。ガラス[189−196]やアモルファス物質[200]，エポキシ樹脂のような複雑に絡まり合った高分子

材料[197−199]，エアロゲル[142−152,163,185−188]，希釈磁性体[162,207,209]など多くの物質がその対象となるのではないかと考えられている。中でも、エアロゲルはパーコレーション・ネット構造を持つ物質としてよく知られている[212]。

シリカエアロゲルは縮重合を行ったアルコキシシラン(alcoxysilane)を水酸化してできるゲルを高温、高圧下において超臨界乾燥を行って作ることができる[213]。こうしてできるシリカエアロゲルは 90% 以上の気孔率を持つ非常に軽い固体である。エアロゲルの構造は小角中性子散乱(SANS)実験[144,149] などによって調べられている。SANS で得られる（静的）構造因子 $S(q)$を中性子の波数シフト q に対してプロットした図 9–1[144]からわかるように、3 種類の質量密度の異なるエアロゲルに対して（但し生成するときの pH などの条件は同じ)、ある q の範囲で $S(q)$は同じ傾きを持つ直線; にのっている。（以下 qは$\vec{q}$の絶対値を意味する。）

$$S(q) \propto q^{-2.4} \tag{9–2}$$

にのっている。（ qは$\vec{q}$の絶対値を意味する。）一般に構造因子 $S(q)$は密度相関関数 $g(r) \propto r^{D_f-d}$($d=3$) をフーリエ変換したものであるから、$S(q) \propto q^{-D_f}$ となる。従って、エアロゲルのフラクタル次元は $D_f = 2.4$ であることが分かる。この値は 3 次元パーコレーション・ネットのフラクタル次元に極めて近い。これらのエアロゲルは中性条件で生成されたものであるが、塩基性条件下で生成されたエアロゲルのフラクタル次元は $D_f = 1.8$ であり、この値は 3 次元 DLA に対する値とほぼ同じ値となる。このように、生成条件によってフラクタル次元が異なるものの、エアロゲルはフラクタル構造をよく実現している物質であることがわかる。図 9–1 からもわかるように質量密度ρと相関長ξ_pの間には

$$\rho \propto \xi_p^{D_f-d} \tag{9–3}$$

という関係式が成立している$(D_f - d = -0.60 \pm 0.02)$[145]。従って、小さな密度のエアロゲルほど長いスケールでもフラクタル的であることになる。$\rho \sim 100\mathrm{kg/m^3}$のエアロゲルでは、2 桁の長さのスケールでフラクタル性を持っている。このように（中性条件下で作られた）エアロゲルの構造は、パーコレーション・モデルによってよく表すことができる。

散乱実験によって直接得られる物理量は散乱強度 $I(\vec{q},\omega)$である。ここで$\vec{q},\omega$は、光の波

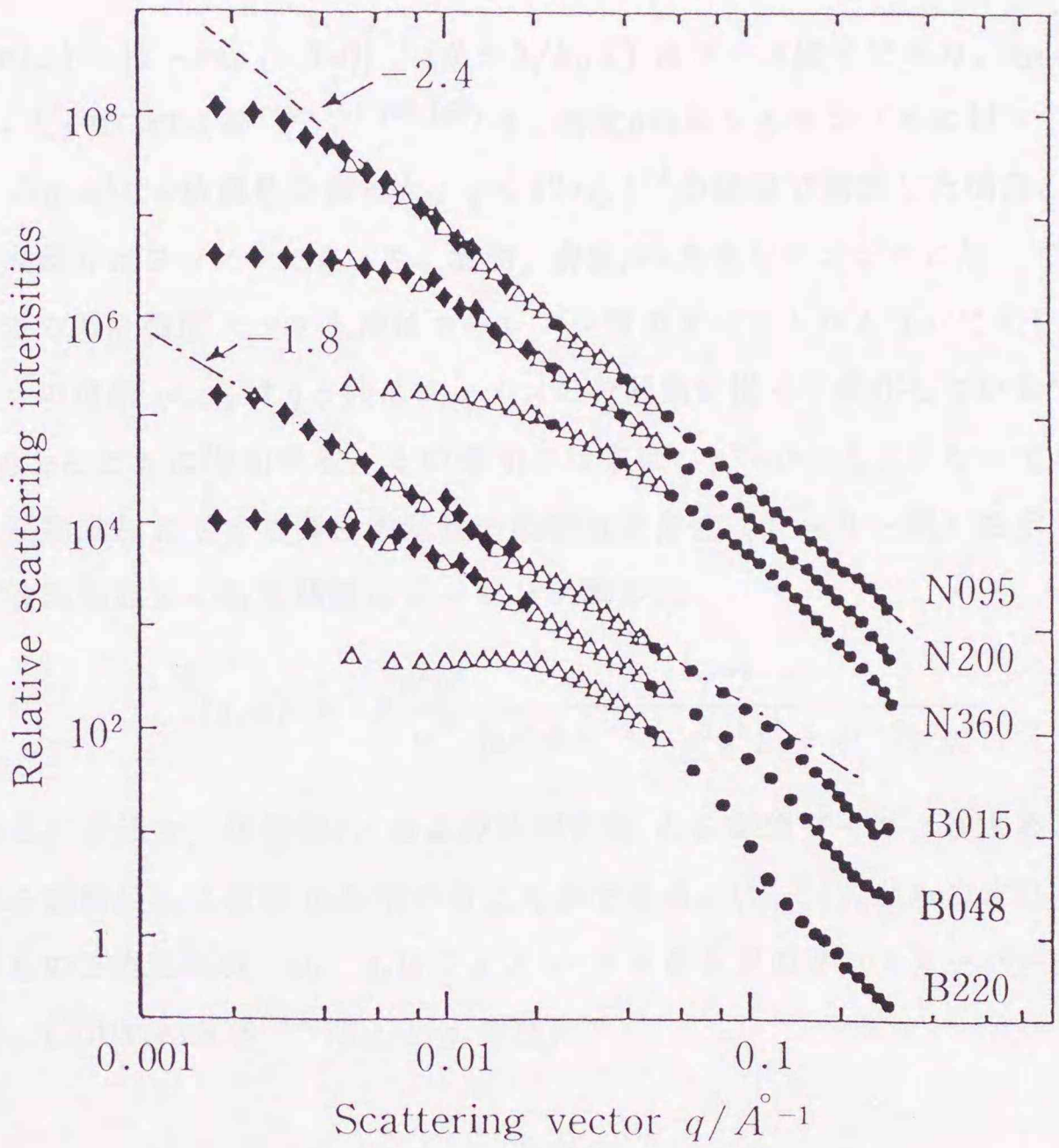


図 **9–1.** シリカ・エアロゲルの中性子による（静的な）散乱強度の波数依存性。図中、N は中性条件，B は塩基条件で作られたサンプルを表し、数字はサンプルの重さを表す。文献 114 より抜粋。

数シフトと振動数シフトを表す。動的構造因子と散乱強度との関係は次の式で与えられる。

$$S(\vec{q},\omega) = I(\vec{q},\omega)/n(\omega) \tag{9–4}$$

ここで、$n(\omega) = [1-\exp(-\beta\omega)]^{-1}$ $(\beta = 1/k_BT)$ はボーズ因子であり、k_Bはボルツマン定数である。Courtens 等[143–152,185,186]は、密度ρの異なるサンプルに対して、qを固定して散乱強度 $I(q,\omega)$のω依存性を調べた。$q < (2\pi\xi_p)^{-1}$の領域で測定した場合、$I(q,\omega)$ に対する寄与の大部分はフォノンであった。実際、密度ρの大きなサンプルに対して十分小さなqをとったときの散乱強度スペクトルはローレンツ型のスペクトルとなっており[143,144,146,152]、最大ピークの位置 ω_{max}は qと共にフォノンの分散則に従って変化している[144,146]。また半値幅τ^{-1}も qとともに増加する。その増加の仕方は、$\tau^{-1} \propto \omega_{max}^4$となっており、空間的に広がった振動励起に対する弾性散乱幅の振動数依存性（レーリー則）を示している。このような低波数領域での散乱強度はローレンツ型の式

$$I(q,\omega) = A\frac{c^2q^2}{\omega^2}\frac{\tau^{-1}}{\left(\omega^2+\tau^{-2}-c^2q^2\right)^2+4\tau^{-2}c^2q^2} \tag{9–5}$$

で表される。音速 c，半値幅τ，および比例定数 A を実験データより求め、この式が成立しなくなる振動数ω_cと波数 q_cを求めることができる。(9–5)式からのずれをフラクトン励起によるものと考えれば、ω_c，q_cはフォノン-フラクトンのクロスオーバー振動数および波数である。Courtens 等[149]はω_cと q_cの間に

$$\omega_c \propto {q_c}^{1.9} \tag{9–6}$$

の関係が存在することを見つけた。これはまさにフォノン-フラクトン・クロスオーバーにおけるフラクトンの分散則を表しており、その指数が $D_f/\tilde{d} \simeq 1.9$ であることを示唆している。また、音響的な相関長として$\xi_{ac} = 1/q_c$を定義すると、

$$\xi_{ac} \propto \xi_p \propto \rho^{1/(D_f-3)} \tag{9–7}$$

であるから、フラクタル次元として $D_f = 2.46 \pm 0.03$ を得る。(SANS からは $D_f = 2.40 \pm 0.03$)，フラクタル次元にこの値を用いると、$\tilde{d} = 1.3 \pm 0.1$ となり、Alexander-Orbach の予想とよく一致する。

以上の議論は、フォノンの動的構造因子が見えなくなるωとqの値から間接的にフラクトン励起の分散関係を得て、フラクトン次元$\tilde{d}$を求めるというものであった。これに対してTsujimi等[185]は、後方散乱でVH偏光によって観測されるラマン散乱強度にはフォノンからの寄与が含まれないことを利用して、直接フラクトンの動的構造因子を観測した。その結果図9–2のようなラマン感受率を得て、

$$S(q,\omega) \propto \omega^{-0.37\pm0.02} \tag{9–8}$$

の関係を見つけた。次節で述べるように平均波動関数(8–1)式を用いると$S(q,\omega) \propto \omega^{-2(1-\tilde{d}d_\phi/D_f)}$となり$d_\phi$が(8–20)式で与えられるとすれば

$$\begin{cases} d_\phi = 1.24 \\ \tilde{d} = 1.18 \end{cases} \tag{9–10}$$

となる。また、$\tilde{d}$が(9–7)式の下で述べたように$\tilde{d}=1.3$であるとすると、$D_f=2.46$として

$$\begin{cases} d_\phi = 1.6 \\ \tilde{d} = 1.3 \end{cases} \tag{9–11}$$

が得られる。同様の結果はCourtensを中心とするグループ[148,149,152]の光および中性子散乱実験により数多く得られている。また、これらの実験からは、フォノン-フラクトン・クロスオーバー領域で$S(q,\omega)$に何の異常も認められず、第7章で示したシミュレーションの結果と同じく、状態密度にはhumpは存在しないであろうことが結論されている。上で得られた$\tilde{d}$の値はスカラー・フラクトンのフラクトン次元に近いが、これはシリカ・エアロゲルが比較的重いブロックから成る基本粒子から構成されており、これらが極めて弱く結合しているためであると考えられる[149]。このため、フラクトンを励起する振動数領域の大部分がスカラー・フラクトン領域であり、ベクトル・フラクトンが励起される振動数領域が極めてせまくなる。また、第6章で結論されたように、ベクトル・フラクトンとスカラー・フラクトンのクロスオーバーは非常にブロードであるため、シリカ・エアロゲルでベクトル・フラクトンを観測することは非常に難しいと考えられる。Vacher等[151]は、中性子のスピン・エコーの測定と精密な中性子スペクトロメータによる分光などによって、$\rho = 210\mathrm{kg/m^3}$のシリカ・エアロゲル中にベクトル・フラクトンとスカラー・フラク

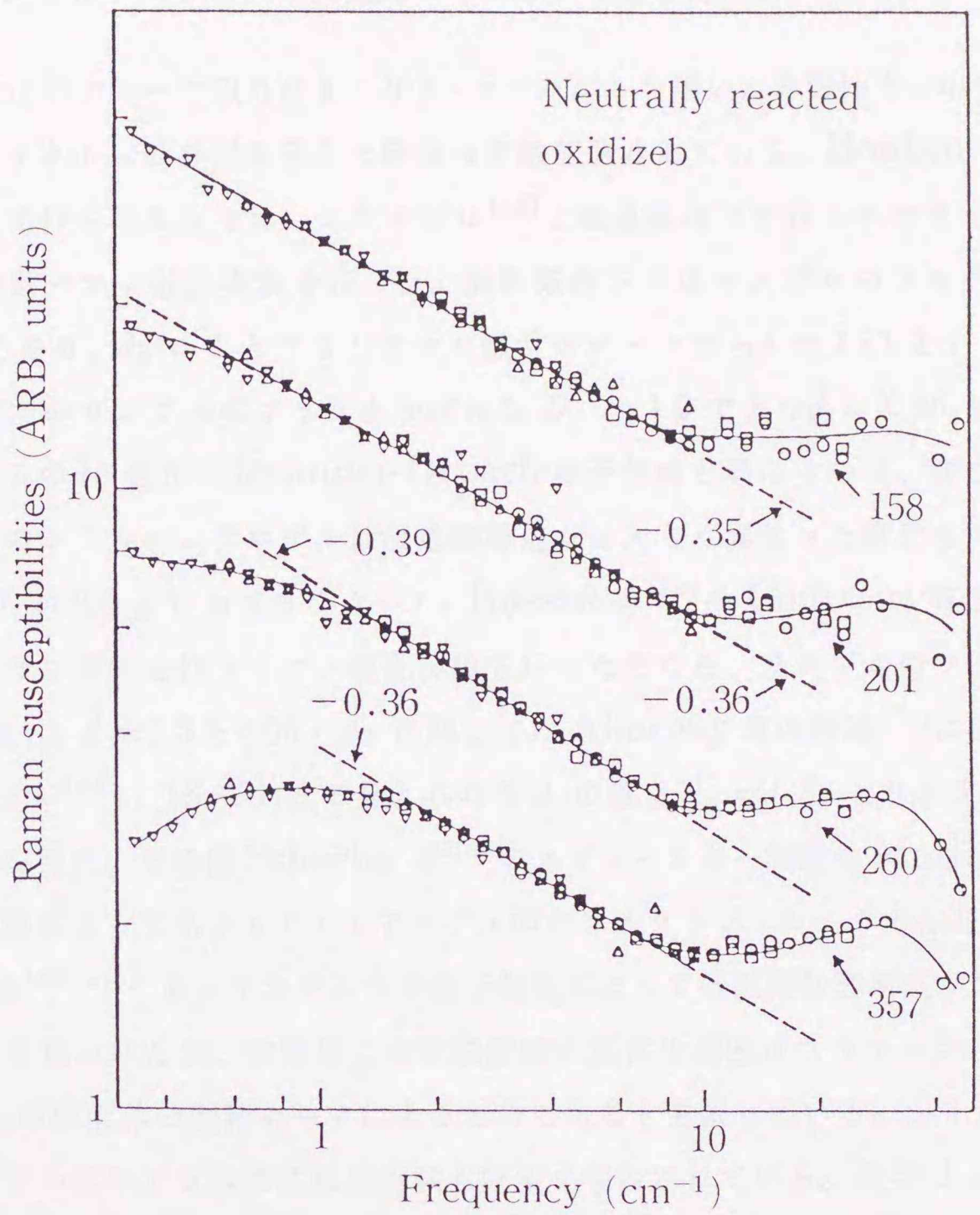


図 9–2.　シリカ・エアロゲルの動的構造因子の振動数依存性。文献 185 より抜粋。

トンが存在していることを初めて実験的に示した。その結果、スカラー・フラクトン次元 $\tilde{d}_s = 1.7$，ベクトル・フラクトン次元$\tilde{d}_v = 0.9$ という値を得た。

Courtens のグループ以外にもシリカ・エアロゲルを用いた非弾性光（中性子）散乱実験を行い、フラクトンの存在を示した研究は多数報告されている。Boukenter 等[163,187]は酸性条件下で作られたシリカ・エアロゲル[163]と塩基条件下で作られたサンプル[187]に対し、低振動数ラマン散乱実験を行った。酸性条件下ではサンプルのフラクタル次元は $D_f = 1.75$ であり、$d_\phi = 1$ とするとラマン散乱のデータから$\tilde{d} = 1.11$ という値を得た。塩基性条件下でのサンプルのフラクタル次元は $D_f = 1.9$ であり$\tilde{d} = 0.88$ という結果になった。これらの$\tilde{d}$の値が Alexander-Orbach の予想値と異なるのは、酸性あるいは塩基性条件下でのシリカ・エアロゲルは浸透網構造とは大きく異なった構造を持つためと考えられる（D_fが 2.5 よりかなり小さい）。Hassan 等[188]は Courtens 等と同じように中性条件下でサンプルを作りラマン散乱実験を行ったところ、サンプルのフラクタル次元 $D_f = 2.5$ に対し、$\tilde{d} = 1.5 \pm 0.05$（d_ϕ に関しては Aharony 等の理論[174]に従った、すなわち $S(\vec{q},\omega) \propto \omega^{3-\tilde{d}}$）、(8–20)式で与えられる d_ϕの値は $d_\phi = 0.83$ となり Courtens 等と同様な結果を得た。その他 Schaefer 等[208]のスピン・エコー測定や Mariotto 等[142]のラマン散乱実験によってもシリカ・エアロゲル中のフラクトン・モードの存在が示された。Buchenau 等[189–191]もシリカゲルの中性子散乱によって低振動状態密度がフォノン型とは異なることを見つけたが、彼等はこの状態密度の異常の原因はフラクトンによるものではなく、SiO_4の四面体の回転モードによるものであると主張している。シリカ・エアロゲル以外のサンプルに対する非弾性散乱実験も数多く報告されている。表 9–1 に代表的なものをあげる。

このように、同じ様な実験を行っても異なる結果が導かれるのは、フラクトン波動関数の扱いが統一的でないことにもよっている。ある解析では $d_\phi = 1$ とし、別な解析では $d_\phi = D_f(2-\tilde{d})/\tilde{d}$としている。また Courtens 等のように平均波動関数を使わないでフラクトン次元$\tilde{d}$を求めている実験もある。実験およびその解釈に関するこのような不明瞭さを取り除くには、フラクトン励起による動的構造因子の正しい振舞いを理論的・数値的に明らかにしなくてはならない。これに関する我々の研究結果は 9–3 節で述べる。

9–1–2. その他の実験[138–140,162,201–211]

サンプル	フラクタル次元	d_ϕ	$\tilde{d}$	実験方法
シリカの煙状微粒子の凝集体[192]	2.5±0.1		1.8±0.1 (T=136K)	中性子散乱
			2.1±0.05 (T=265K)	
シリカの煙状微粒子の凝集体[193]	2.6±0.1		2.3	中性子散乱
エポキシ樹脂[198]			1.9±0.1	中性子散乱
エポキシ樹脂[197]		(8–20)式	1.37	ラマン散乱
エポキシ樹脂[141]			1.5	中性子散乱
超イオン伝導性 AgBO ガラス[194,195]		(8–20)式	1.66	ラマン散乱
アモルファスひ素[200]	2.5(仮定)	1	1.25	ラマン散乱
PMMA(polymethylmetacrylate)[199]	2	1.5	1.8	ラマン散乱
		2.5		中性子散乱

表 9–1. 様々なランダム・フラクタル系に対する非弾性散乱実験。

本章の主題である動的構造因子とは直接関係ないが、フラクトンの実験的検証報告には非弾性光（中性子）散乱以外のものも多数存在する。ここでその代表的なものを簡単にまとめておこう。

状態密度が $\mathcal{D}_{fr} \propto \omega^{\tilde{d}-1}$ で表されると格子比熱 C_p は

$$C_p = \int_0^\infty \hbar\omega \mathcal{D}_{fr}(\omega) \frac{\partial n}{\partial T} \propto T^{\tilde{d}} \tag{9–12}$$

で表されるであろう。ここで n はボーズ分布関数である。従ってアモルファス物質の比熱を測定することによって、フラクトン次元 $\tilde{d}$ を測定できる。Sleator 等[203]は実際にシリカ・エアロゲルの低温比熱を測定して $\tilde{d}$ を求めたところ $\rho = 0.145\mathrm{g/cm^3}$ のサンプルに対し $\tilde{d} = 1.11$ となった。このサンプルのフラクタル次元は $D_f = 1.9$ である。また Tua 等[138]はエポキシ樹脂の比熱測定から $\tilde{d} = 1.3$ を得ている。しかし、このサンプルの D_f は明らかではない。$C_p \propto T^{\tilde{d}}$ となる温度領域は一般に極めてせまく、比熱測定から求められたフラクトン次元は大きな誤差を含んでいる。また、比熱の異常をフラクトンからの寄与だと考えるのは全くの仮定であり、比熱のデータだけからフラクトンの存在およびフラクトン次元を決めることは難しい。フラクトンの存在を主張するのに熱伝導度の測定も行われている。第 8 章で述べたようにフラクトン励起の存在する系での熱伝導度 κ は低温で $\kappa \propto T^2$, $T \simeq 10K$ でプラトー（$\kappa \simeq \kappa_p$）, $T \gtrsim 50K$ で $\kappa = \kappa_0 T + \kappa_p$ の振舞いをすることが理論的に予測されている[167,168]。Cahill と Pohl[201]は PMMA に対し、また Oliveria 等[202]はエポキシ樹脂に対して各々熱伝導度の測定を行ったところ、このような κ の温度依存性が見られたことから、これらの物質中でフラクトンが励起されていることを主張した。しかし、これらの実験から $\tilde{d}, d_\phi$ を得ることはできなかった。

前章の (8–3) 式で示したように、2 フラクトン放出によるスピン-格子緩和時間 T_1 の温度依存性は $\tilde{d}, d_\phi$ に依存している。従って種々のアモルファス物質中での T_1 を測定することによって、これらの指数を求めることができる。Stapleton 等[214]はフラクトンが理論的に予言される以前から、ヘモタンパクのクラマース遷移による $1/T_1$ が $T^{6.3}$ に比例することを実験的に示していた。Helman 等[211]はフラクトンの描像でこの実験結果を矛盾なく説明することに成功した。また、Srivastava[207] はメトミオグロビン・アジドの凍結溶液中の Fe^{3+} の T_1 を測定したところ $1/T_1 \propto T^{6.29}$ となり、d_ϕ を (8–20) 式で与えると、$\tilde{d} = 1.3$（$D_f = 1.7$ とした）となることを示した。さらに Stevens 等[209]は、シリカ・ガラスに微

量の Yb^{3+} を混入し、その T_1 を調べた。この場合も $1/T_1 \propto T^6$ となりフラクトンの存在を示唆している。また金属シンターの超音波吸収の実験[204]からフォノン-フラクトンのクロスオーバーを観測したという報告もある。

フラクトン励起の観測ではないがフラクトン次元 $\tilde{d}$ を求めるものとしては、エキシトンの消滅実験[205]やマイクロ・ファブリケーションによる精密実験[210]がある。Kopelman 等[205] は、多孔質ガラスの孔にナフタレンを入れ、ナフタレン中のエキシトンの消滅確率を測定した。エキシトンが拡散運動し互いに衝突することによって消滅する確率は $t^{-1+\tilde{d}/2}$（t:時間）に比例することから、消滅確率より $\tilde{d}$ を求めることができる。彼等の実験結果は、媒質のフラクタル次元によって $\tilde{d}$ は 1 ～ 1.7 と様々な値をとっているが、おおよそどの媒質においても $\tilde{d} \simeq D_f$ を示している。また Gordon 等[210] は電子ビームによるマイクロ・ファブリケーションで 4 階層の Sierpinski ガスケットをアルミニウムで作り、その超伝導転移温度 T_c と磁場 H の関係を測定した。その結果は、フラクタル・ネットの $T_c(H)$ に関する Rammal と Toulouse の理論[215]とよく一致し、$\tilde{d}$ の値として $\tilde{d} = 1.35 \pm 0.02$ を得た。

このように、フラクトン励起の存在を示す実験やフラクトン次元を求める実験は多岐に渡るが、いづれも間接的でフラクトン励起の直接観測にはなっていない。最も直接的なアプローチは 9–1–1 項で述べた非弾性散乱実験である。この種の実験からフラクトンに関するより多くの情報を引き出すためにも、フラクトン励起による動的構造因子の振舞を明らかにしなくてはならない。次節では、フラクトン励起による $S(\vec{q},\omega)$ の理論的取り扱いについて述べる。9–3 節で本研究で行ったシミュレーションの結果は 9–3 節で示される。

9–2. フラクトンによる動的構造因子の理論的取り扱い

フラクトン励起による動的構造因子 $S(\vec{q},\omega)$ を理論的に求める際に最も難しいのは、散乱行列の集合平均のとり方である。第 6 章で示した通り、個々のフラクトン波動関数は非常に不規則な形をしているため個々の散乱プロセスの振幅は様々な値をとることになるからである。平均操作を厳密に行うことをやめ、近似的にこれを行う方法として 2 つの方法が考えられている。一つはフラクトンの平均波動関数を用いる方法である。これは、個々の散乱行列の平均を、平均化された波動関数による散乱行列に置き換えるという考え方である。もう一つは、浸透網という不規則な媒質そのものを有効な均一媒質と見なしてしま

う、いわゆる有効媒質近似である。以下では、これら2つの近似のもとでフラクトンの動的構造因子がどのように表されるかを示す。

9–2–1. 有効媒質近似[216)]

本項では簡単のためボンド型浸透網を考える。サイト l, l' 間のボンドのバネ定数 $K_{ll'}$ は次の確率分布に従う。

$$P(K_{ll'}) = p\delta(K_{ll'} - K) + (1-p)\delta(K_{ll'}) \tag{9–13}$$

但し、p は浸透濃度である。浸透網上のサイト l における変位を $u_l(t)$ とすると、変位の遅延グリーン関数は次の式で与えられる。

$$g^R(l, l', t) = -\subset \theta(t)\langle [u_l(t), u_{l'}(0)] \rangle \tag{9–14}$$

一方、変位 u_l に関する運動方程式から $g^R(l, l', t)$ のフーリエ変換 $g^R(l, l', \omega)$ の満たすべき方程式は、

$$\left[\omega^2 - \sum_k\right] g^R(l, l', \omega) + \sum_{l''} K_{ll''} g^R(l'', l', \omega) = \delta_{ll'} \tag{9–15}$$

である。有効媒質近似では、1本のボンド（1-2ボンドと呼ぶ）を除いて、全てのボンドのバネ定数 $K_{ll'}$ を有効的なバネ定数 $W(\omega)$ で置き換える。このような置き換えを行うと、系のグリーン関数は

$$g^R(l, l', \omega) = G^R(l, l', \omega) - \sum_{m,n=1}^{2} G^R(l, m, \omega) T_{mn} G^R(n, l', \omega) \tag{9–16}$$

で与えられる。ここで、G^R は全てのボンドのバネ定数を W で置き換えたときの均質な格子の遅延グリーン関数である。また，2×2 の T 行列は

$$\begin{aligned} T &= \Delta_{12}(1 + G^R_{12}\Delta_{12})^{-1} \\ \Delta_{12} &= (W - K_{12}) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{9–17}$$

であり、G^R_{12} はサイト1と2の 2×2 均質グリーン関数である。

有効バネ定数 W は(9–16)式を確率分布(9–13)式で平均したときに T 行列が消えて、$g^R(l,l',\omega)$ が一様媒質のグリーン関数 $G^R(l,l',\omega)$ と等しくなるという条件から求められる。このとき W の満たす方程式は、

$$\frac{1}{d}(W-K)\left[1-\omega^2 G^R(0,0,\omega)\right]-W+pK=0 \tag{9–18}$$

となる。この式から、$\omega \to 0$ の極限をとると、有効媒質近似における臨界濃度として $p_c=1/d$ が得られる。W の振動数依存性を調べるには、(9–18)式にグリーン関数 G^R を代入すればよい。d 次元単純立方格子ではよく知られているように

$$G^R(q,\omega)=\left[\omega^2-2W(\omega)\sum_{n=1}^{d}(1-\cos q_n)\right]^{-1} \tag{9–19}$$

である。ここで、q_n は逆格子を単位とする波数ベクトルの成分であり、$G^R(l,l',\omega)$ とは

$$G^R(l,l',\omega)=\sum_q e^{\sqsubset q\cdot(l-l')}G^R(q,\omega) \tag{9–20}$$

の関係で結ばれている。従って、(9–19)式を(9–20)式に代入し、これを(9–18)式に代入することで W に関する積分方程式が得られる。しかし、実際には(9–20)式の q に関する積分を解析的に実行することは困難であるため、グリーン関数 $G^R(0,0,\omega)$ を p_c 近傍で展開したり、積分を近似して実行することが多い。こうして得られる W から、グリーン関数 $G^R(q,\omega)$ が求められ、状態密度 $\mathcal{D}(\omega)$ や動的構造因子 $S(q,\omega)$ を全ての振動数領域に対して得る事ができる。

$$\mathcal{D}(\omega)=-\frac{1}{2\pi}\ \mathrm{Im}\ G^R(0,0,\omega) \tag{9–21}$$

$$\begin{aligned} S(q,\omega) &= -2\ \mathrm{Im}\ G^R(q,\omega) \\ &= \frac{2q^2W_2}{\omega^4-2\omega^2q^2W_1+q^4\mid W\mid} \end{aligned} \tag{9-22}$$

最後の式は、$q_n \ll 1$ におけるグリーン関数 $G^R(q,\omega)=(\omega^2-Wq^2)^{-1}$ を用いることによって得られた近似式である[216]。W_1, W_2 は $W(\omega)$ の実部と虚部である。

しかし、有効媒質近似では p_c の値やフラクトン領域での状態密度の振舞いが正しく求められていない。これは、系を有効な均一媒質で塗りつぶすことによって、臨界領域の浸

透網で最も重要な構造の“相関”を無視したことによっている。従って、通常実験的に得られた$S(q,\omega)$を解析する際、有効媒質近似による結果(9–22)式は用いられず、次の平均波動関数を用いた方法が利用される。

9–2–2. 平均波動関数による動的構造因子

以下では、$S(q,\omega)$の振動数依存性のみを考える。振動数ω_αのフラクトンによる散乱強度I_αは、振動による局所歪みの2乗のアンサンブル平均と熱平均に比例しており、

$$I_\alpha \propto \langle\langle \delta\rho^2 \rangle\rangle_T \tag{9–23}$$

と書ける。$\langle\langle\cdots\rangle\rangle_T$はアンサンブル平均と熱平均を表わす。$\delta\rho^2$のアンサンブル平均をとるかわりに、平均波動関数で$\delta\rho$を計算することにしよう。(8–1)式から、フラクトンの平均波動関数を

$$\psi_{fr}(\omega_\alpha, r) \propto \Lambda(\omega_\alpha)^{-D_f/2} \exp\Big[-\big(r/\Lambda(\omega_\alpha)\big)^{d_\phi} \Big] \tag{9–24}$$

と書くことにする。因子$\Lambda(\omega_\alpha)^{-D_f/2}$は規格化因子である。$\delta\rho$は

$$\delta\rho \sim \frac{\partial \psi_{fr}}{\partial r} \tag{9–25}$$

であり、(4–12)式より

$$\Lambda(\omega_\alpha) \propto \omega_\alpha^{-\tilde{d}/D_f} \tag{9–26}$$

であるから、熱平均をとったI_αはストークス散乱に対して、

$$I_\alpha \propto \omega_\alpha^{2\tilde{d}d_\phi/D_f - 1} \Lambda(\omega_\alpha)^{-D_f} n(\omega) \exp\Big[-2\big(r/\Lambda(\omega_\alpha)\big)^{d_\phi} \Big] \tag{9–27}$$

となる。ここで$n(\omega)$はBose因子である。これをrに関して積分し、各モードからの寄与を状態密度$\mathcal{D}(\omega)$で表すと、

$$I(\omega) \propto \omega^{2\tilde{d}d_\phi/D_f - 1} \mathcal{D}(\omega) n(\omega) \tag{9–28}$$

となり、

$$S(q,\omega) = \frac{I(\omega)}{n(\omega)} \propto \omega^{(\tilde{d}/D_f)(2d_\phi + D_f) - 2} \tag{9–29}$$

が得られる。但しここで$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{\tilde{d}-1}$を用いた。もし、$d_\phi$がAharony等の理論[174]に従い(8–20)式で与えられるなら、

$$S(q,\omega) \propto \omega^{2-\tilde{d}} \tag{9–30}$$

と成る。$S(q,\omega)$の振動数依存性(9–29)および(9–30)式は、Boukenter等[163,187]によって初めて導かれた。

上式の導出において光散乱はサンプルの全領域で均等に起こると考えた。しかし、実際の散乱はフラクトン内に含まれる原子数に比例する。Tsujimi等[185]は、このことを考慮して、(9–23)式のかわりに

$$I_\alpha \propto \langle\langle \left[\Lambda^{D_f} \delta\rho\right]^2 \rangle\rangle_T \tag{9–31}$$

として同様の計算を行った。(9–31)式以外全て同じように計算すると、

$$S(q,\omega) \propto \omega^{-2\left(1-\tilde{d}d_\phi/D_f\right)} \tag{9–32}$$

となり、d_ϕが(8–20)式で表されると考えれば

$$S(q,\omega) \propto \omega^{-2(\tilde{d}-1)} \tag{9–33}$$

が得られる。

どちらの理論においても、$\langle\delta\rho^2\rangle$の熱平均をとるべきところを$[\partial\langle\psi_{fr}\rangle/\partial r]^2$の熱平均をとることで置き換えている。本研究で求めたフラクトンのモード・パターンから考えても、この置き換えが正しくない可能性は強い。最近、この種の置き換えをあらわに使わない解析法がAlexander[217]によって示された。彼の理論の概要は以下の通りである。フラクタル上の2点間で、歪の大きさはユークリッド的な距離に対して変化するのではなく、曲がりくねった経路に沿って変化している。これを考慮して、大きさLの領域で二乗平均歪$\langle e^2\rangle_L$の大きさを、

$$\langle e^2\rangle_L = \frac{\langle[u_l^\alpha - u_{l'}^\alpha]^2\rangle_L}{l_{mL}^2} \tag{9–34}$$

であると考える。ここで、αはモードを表す指標であり、$\langle\cdots\rangle_L$はLだけ離れた2点に関するアンサンブル平均を表す。また、l_{mL}はその2点間のフラクタル上の距離（chemical length）である。エネルギー等分配則を仮定すると、

$$T_L\langle[u_l^\alpha - u_{l'}^\alpha]^2\rangle_L \propto k_B T \tag{9–35}$$

とおける。ここでT_LはLだけ離れた2点間で定義されるバネ定数である。$l_{mL} \propto L^{\tilde{\zeta}_c}$であることと、$L$の領域の質量$m_L(m_L \propto L^{D_f})$を用いて$T_L$が$T_L \propto m_L\omega^2$と表されることを考えると、$L=\Lambda$(局在長)で

$$\langle e_\alpha^2 \rangle_\Lambda \propto \frac{k_B T}{\omega_\alpha^2} \Lambda(\omega_\alpha)^{-(D_f+2\tilde{\zeta}_c)} \tag{9–36}$$

となる。これから、振動数ω_αを持つフラクトンによる散乱強度$I(\omega_\alpha)$は、(9–31)式に従って、

$$\begin{aligned} I(\omega_\alpha) &\propto \left(\Lambda(\omega_\alpha)^{D_f}\right)^2 \langle e_\alpha^2 \rangle_\Lambda \\ &\propto \frac{k_B T}{\omega^2} \Lambda(\omega_\alpha)^{D_f - 2\tilde{\zeta}_c} \end{aligned} \tag{9–37}$$

となる。よって動的構造因子は、$n(\omega) \sim k_B T/\omega$と考えて

$$\begin{aligned} S(q,\omega) &\propto I(\omega)\mathcal{D}(\omega)/n(\omega) \\ &\propto \omega^{2\tilde{\zeta}_c \tilde{d}/D_f - 2} \end{aligned} \tag{9–38}$$

となる。(9–32)式と(9–38)式とはd_ϕの代わりに$\tilde{\zeta}_c$が入っているという点だけが異なっている。この解析方法では陽に平均波動関数を導入してはいない。しかし、(9–34)式の平均のとり方に注意しなくてはならない。(9–34)式では分子・分母を独立に平均しているが、分子と分母は互いに相関を持った量であるため、この操作は正しくない。この相関を無視するという近似が平均波動関数を導入するという近似に比べて優れているか否かは現在のところ明らかではない。

本項では、フラクトンによる動的構造因子の理論的取り扱いについて紹介した。取り扱いの差異により、

$$S(q,\omega) \propto \begin{cases} \omega^{2\tilde{d}d_\phi/D_f + \tilde{d} - 2} & \text{Boukenter } \textit{et al.} \\ \omega^{2\tilde{d}d_\phi/D_f - 2} & \text{Tsujimi } \textit{et al.} \\ \omega^{2\tilde{d}\tilde{\zeta}_c/D_f - 2} & \text{Alexander} \end{cases}$$

という異なる振舞いが予想されている。これらの理論のどれが正しいか、あるいは、このような近似的解析そのものが正しいのかどうかを確かめることは、フラクトンによる散乱現象を議論する上で極めて重要である。本研究では、計算機シミュレーションにより得られたフラクトン励起のモード・パターンから直接散乱行列要素を計算し、そのアンサンブル平均をとることで動的構造因子を計算した。次節ではシミュレーションの具体的な方法とその結果について述べる。

9–3. 計算機シミュレーションによる動的構造因子

フラクトンによる動的構造因子を数値計算によって求めるために、第5章で説明した強制振動法により多数のフラクトンのモード・パターンを作り、これらから(9–1)式を用い直接 $S(q,\omega)$を求めその波数依存性を調べた。

5–2節で述べた強制振動時間 t と繰り返し回数 p を適当に選んで1つの浸透網上に振動数の近い多数のフラクトンが励起されるようにする。こうすることによって1つの浸透網から一度に多数のフラクトンによる平均歪みを求めることができる。このような浸透網を多数用意し密度変化$\delta\rho$を求め多数のフラクトンに対し平均する。このような平均操作を行うとフラクトンの持つ不均一性が平均化されてしまうため、その相関関数 $\langle\delta\rho(\vec{r})\delta\rho(\vec{r'})\rangle$ はベクトル$\vec{r}-\vec{r'}$の関数ではなく、方向に依存しない単なる $r(\equiv|\vec{r}-\vec{r'}|)$のみの関数となるであろう。相関関数が rのみの関数であるとすると、(9–1)式の角度方向の積分は実行でき、

$$S(q,\omega)\propto\int_0^\infty dr\quad r\cdot J_0(qr)g_\omega(r) \tag{9–39}$$

となる。ここで、 $g_\omega(r)$は密度変化の相関関数であり、$J_0(x)$は 0 次の第1種ベッセル関数である。(9–39)式を計算する際に、公式

$$\int_{-\pi}^{\pi}d\theta\quad e^{\mathrm{C}qr\cos\theta}=2\pi\ J_0(qr) \tag{9–40}$$

を用いた。

具体的計算方法について述べる。$g_\omega(r)$はモード・パターン u_lから直接数値的に計算した。$g_\omega(r)$は全格子点における密度変化$\delta\rho\propto\mathrm{div}\ u$ の2点相関を取って求められる。ここでサイト lにおける $\mathrm{div}\ u$ は占有されている最近接格子 l'との変位の差で与えられる量である。つまり、

$$(\mathrm{div}\ u)_l=\sum_{l'}(u_l-u_{l'}) \tag{9–41}$$

こうして得られた $g_\omega(r)$ を図9–3に示す。これを見るとフラクトン波動関数の急激な減衰が反映されていることが分かる。

このような計算方法により動的構造因子を求めた。調べた振動数シフト、すなわちフラクトンの振動数は、$\omega=0.01,\ 0.03,\ 0.05,\ 0.07$ の4種類である。フラクトンはいづれも

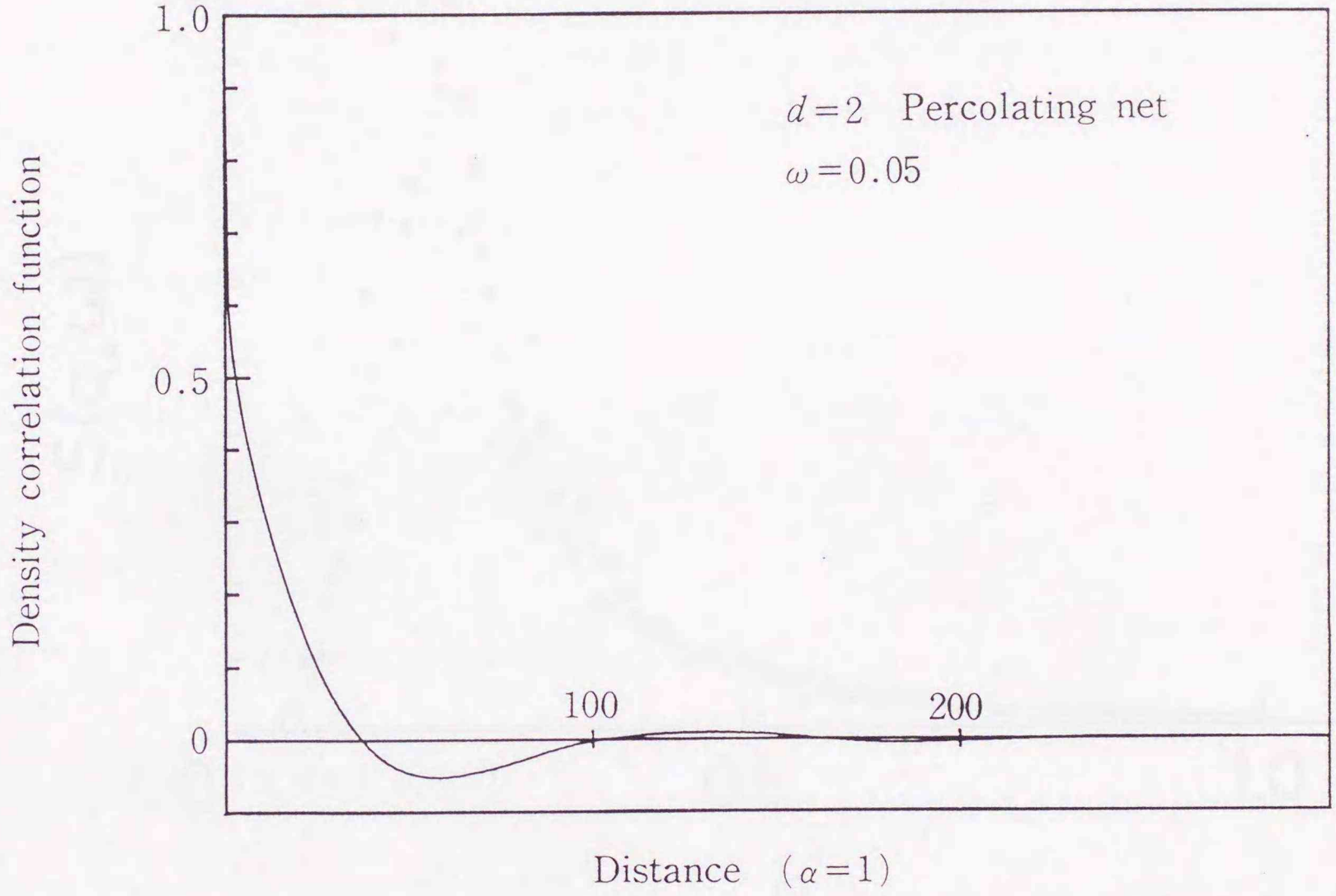


図 9–3. 密度変化の相関関数の計算結果。格子定数 a を単位としてプロットしてある。

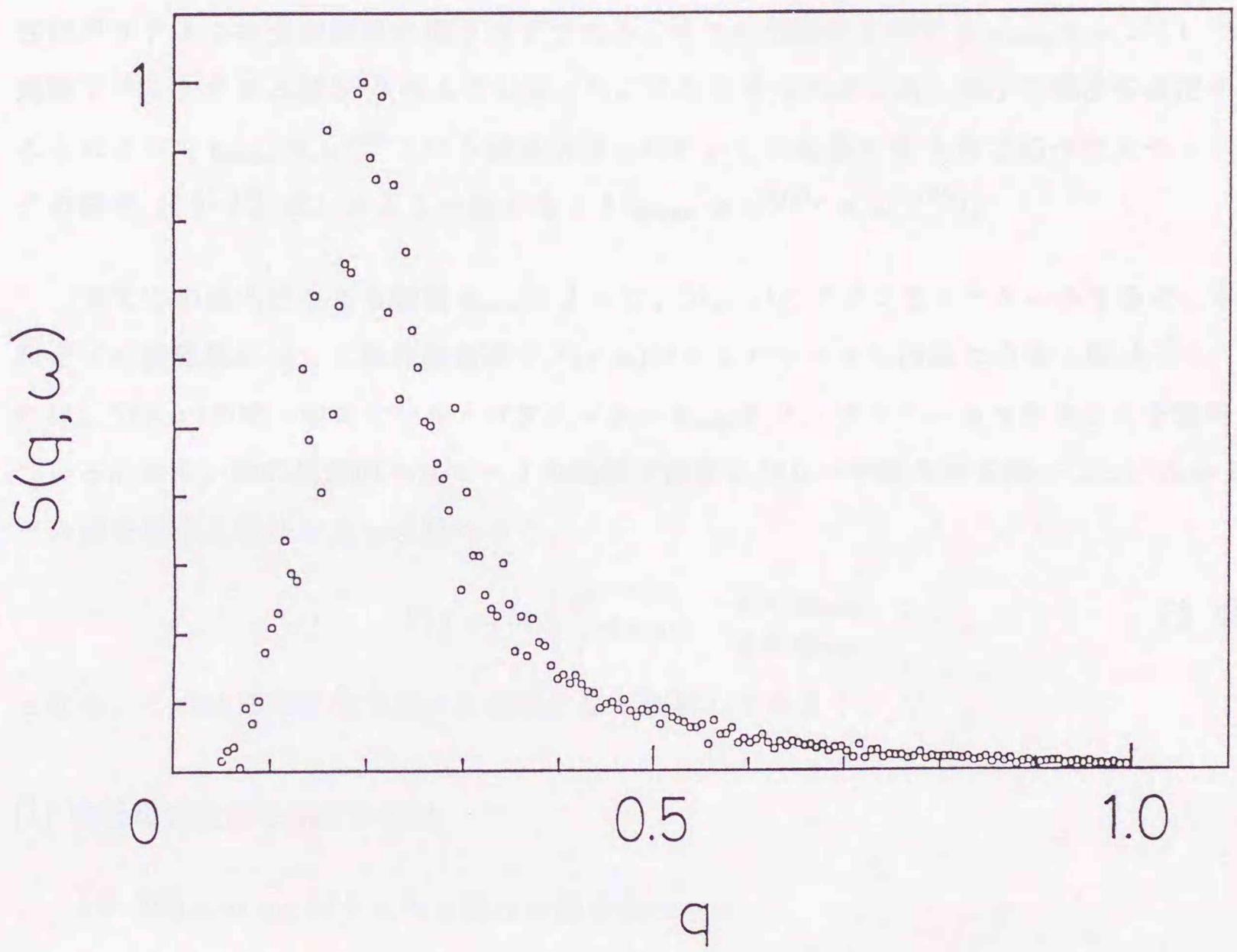


図 9–4. 2次元浸透網における動的構造因子の波数依存性の数値計算結果（振動数は$\omega = 0.07$であり、動的構造因子はその最大値でリスケールされている）。格子定数 a を単位としてプロットしてある。

700×700 の 2 次元正方格子上の浸透網($p = p_c$)で励起されたものである。図 9–4 に振動数シフトωを$\omega = 0.07$ と固定したときの動的構造因子の波数依存性を示した。この図より $S(q,\omega)$は $q \sim 0.2$ 付近にピークを持った関数であることが分かる。このピーク位置をより正確に決めるため、最大値をとる周辺の関数形を高次多項式で近似して、その近似式が最大となるところの値を読んだ。こうして得られたピーク値を与える波数 q_{max}の振動数依存性はフラクトンの分散関係に従うはずである。4 つの振動数に対する q_{max}をωに対して両対数プロットすると図 9–5 のようになった。これら 4 つの点に対し最小二乗法を適用することによって $q_{max} \propto \omega^{0.68}$という結果が得られた。この結果は第 4 章で述べたスケーリングの結果（$(4$–$12)$式）とよく一致する（$1/q_{max} \propto \omega^{\tilde{d}/D_f} \propto \omega^{0.705}$）。

さてこの最大値をとる波数 q_{max}によって、$S(q,\omega)$のグラフをリスケールすると、4 種類全ての振動数に対して動的構造因子 $S(q,\omega)$はユニバーサルな曲線にのる（図 9–6 ）。これは、$S(q,\omega)$が唯一のスケール・パラメーター q_{max}によってスケールされることを意味している。また、動的構造因子はピークの両側で波数に対しベキ依存性を持つことがわかる。その値を最小二乗法によって調べると、

$$S(q,\omega) \propto \begin{cases} q^{2.7\pm0.1} & q < q_{max} \\ q^{-2.6\pm0.1} & q > q_{max} \end{cases} \qquad (9\text{–}42)$$

となる。この結果を前章で述べた近似計算と比較してみよう。

(i) 有効媒質近似を用いた方法

$(9$–$20)$式の qに対する和を積分に置き換えると、

$$G^R(0,0,\omega) = -\int\int_{-1}^{1} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) \frac{1}{-\omega^2 + 2dW(1-\epsilon)} \qquad (9\text{–}43)$$

となる。ここで、

$$\mathcal{D}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int\int_0^{2\pi} dq_1 \; dq_2 \; \delta\left[\epsilon - \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}(\cos q_i)\right] \qquad (9\text{–}44)$$

である。2 次元系($d = 2$)では、上式の積分を $\mathcal{D}(\epsilon) \simeq 1/2$ と近似することができる。よってグリーン関数は

$$G^R(0,0,\omega) = -\frac{1}{8W} \ln\left[1 - \frac{8W}{\omega^2}\right] \qquad (9\text{–}45)$$

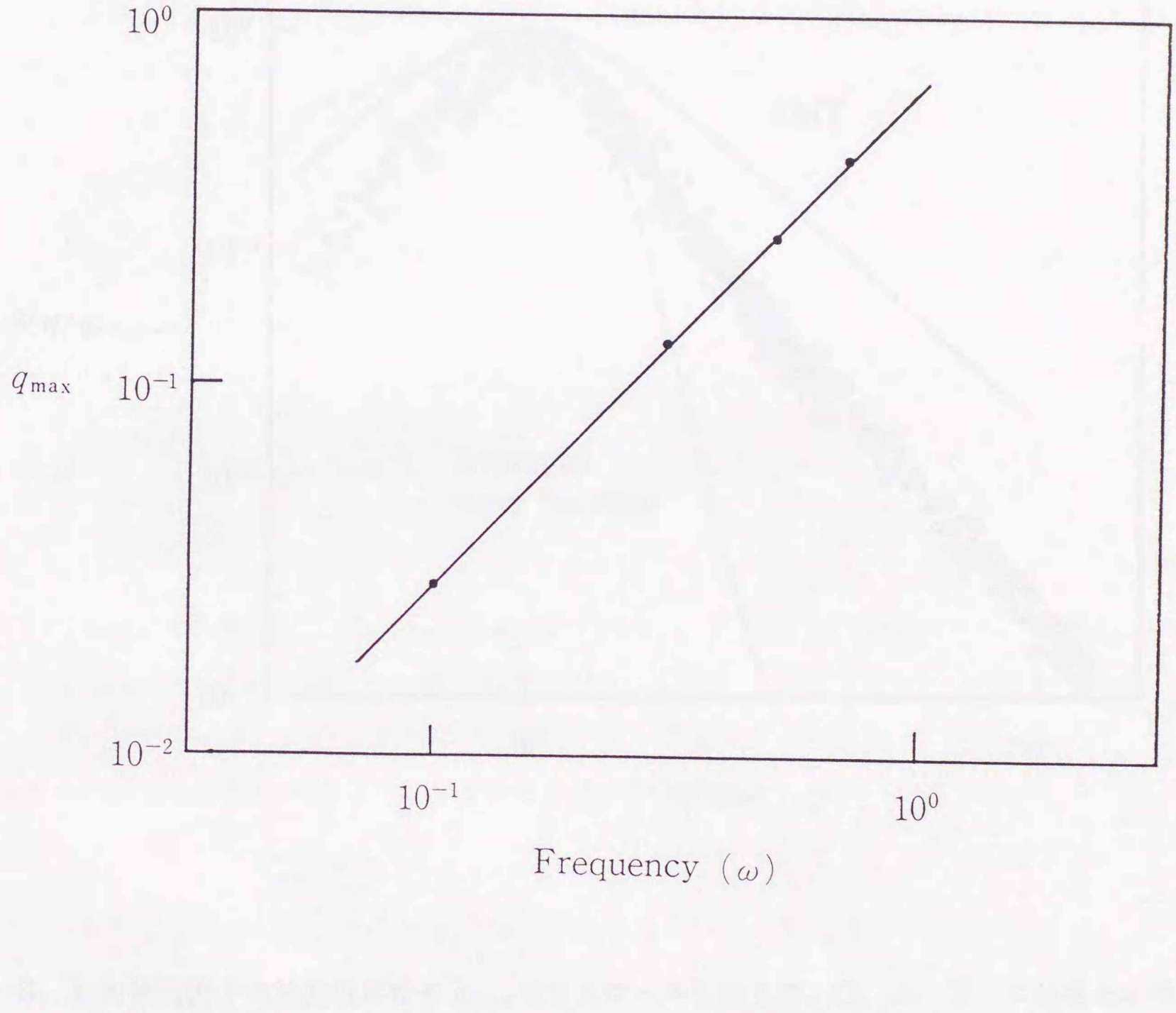


図 9–5.　動的構造因子の波数依存性の最大値を与える q_{max} と、フラクトンの振動数との関係。

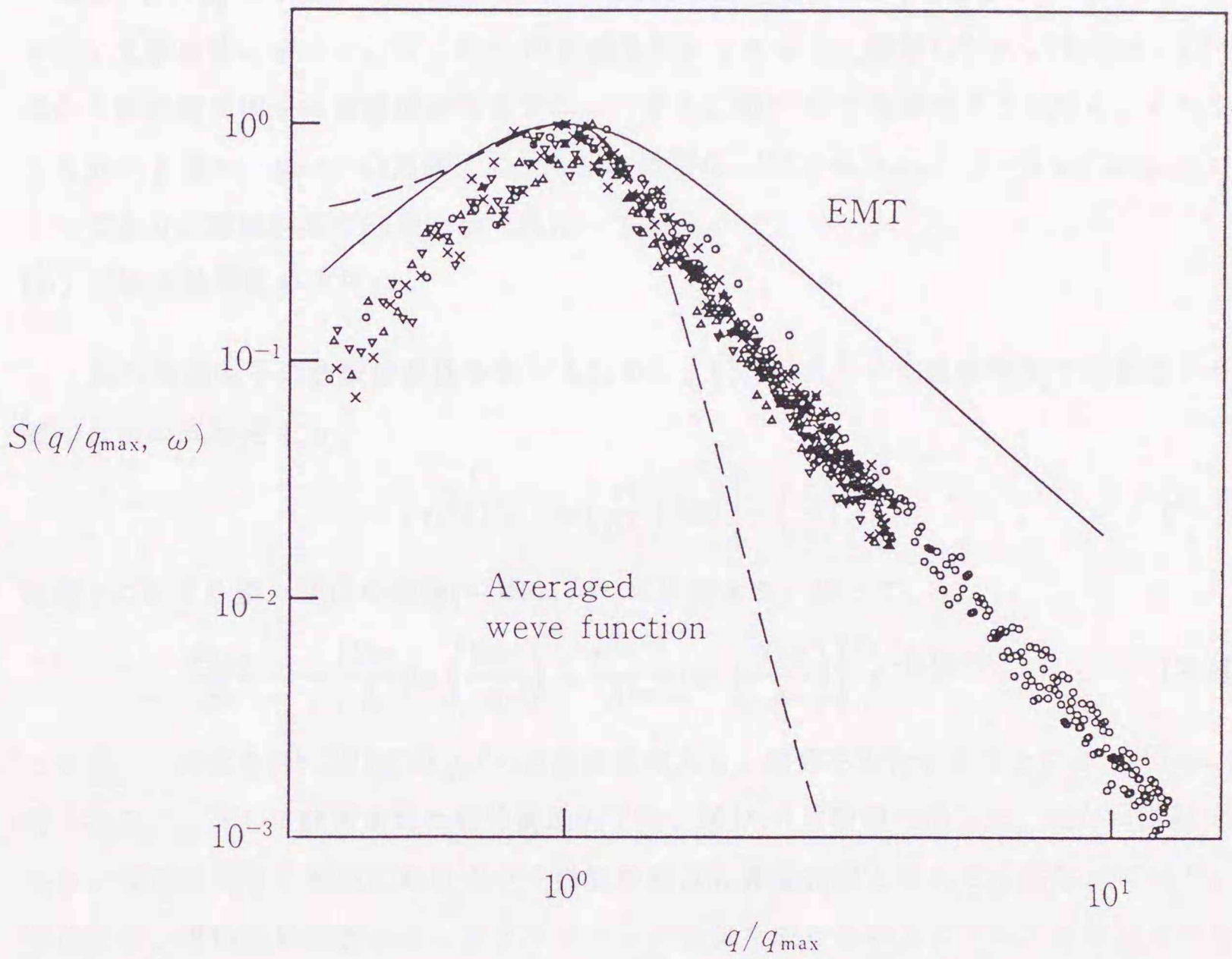


図 **9–6.** 動的構造因子の波数依存性を q_{max} でリスケールしたもの。○，△，▽，×は各々 $\omega =$ 0.01, 0.03, 0.05, 0.07 に対する結果である。また、実線は有効媒質近似による結果を示し、破線は平均波動関数を用いた計算結果を示している。

となる。これをセルフコンシステント方程式(9–18)式に代入すると、有効バネ定数 $W(\omega)$ の振動数依存性を求めるための式が得られる。ここで $K=1$ とすると、(9–18)式は

$$p_c(W-1)\left[1-\frac{\omega^2}{8W}\ln(1-\frac{8W}{\omega^2})\right]-W+p=0 \qquad (9\text{–}46)$$

となる。$p=p_c=1/d=1/2$ として、$\omega=0.01, 0.03, 0.05, 0.07$ のときの W を Müller 法を用いて数値的に求めた。得られた W の値を用いてグリーン関数 $G^R(q,\omega)$ を求め、(9–2)式から動的構造因子の波数依存性をプロットすると図 9–6 の実線のようになる。これを見ても分かる通り、ピークの両側でのベキ指数の値は、2（$q \ll q_{max}$）と−2（$q \gg q_{max}$）をとっており、数値計算の結果と全く異なっている。

(ii) 平均波動関数の方法

動的構造因子の波数依存性を調べるために、(8–1)式の平均波動関数に振動因子を考慮した次の式を考える。

$$\psi_{fr}(r)=\cos\left(\frac{\pi r}{2\Lambda}\right)\exp\left[-\left(\frac{r}{\Lambda}\right)^{d_\phi}\right] \qquad (9\text{–}47)$$

位置 r における歪は変位の発散($\sim d\psi_{fr}/dr$)に比例する。従って、

$$\frac{d\psi_{fr}}{dr}\sim-\left[\frac{2\pi}{\Lambda}\sin\left(\frac{2\pi r}{\Lambda}\right)+\frac{r^{d_\phi-1}}{\Lambda^{d_\phi}}\cos\left(\frac{2\pi r}{\Lambda}\right)\right]\ e^{-(r/\Lambda)^{d_\phi}} \qquad (9\text{–}48)$$

となる。この式を(9–39)式の $g_\omega(r)$ の部分に代入し、積分を実行することにより $S(q,\omega)$ が得られる。こうして計算された動的構造因子を、図 9–6 に破線で示した。明かに波数 q の小さい極限と大きい極限におけるベキ指数の値は計算機実験とは大きく異なっている。このことは、平均波動関数によってフラクトンの特質を取り入れることはできないことを示唆している。

動的構造因子 $S(q,\omega)$ を数値計算で調べることによって、次のことが分かった。

(i) $S(q,\omega)$ が最大値をとる波数 q_{max} と振動数ωとの間の関係（フラクトン分散関係）はスケーリング理論と非常によく一致する。

(ii) 分散関係は、図 8–3 のように平均フラクトン波動関数をシミュレーションによって求め、その局在長の振動数依存性を調べることでも求めることができるが、ここで行ったような方法で計算した方がはるかに良い精度で求められる。

(iii) q_{max} で $S(q,\omega)$ をリスケールすると、異なる振動数で得られた結果は全て同一曲線（ユニバーサル・ライン）上にのる。これは 、$S(q,\omega)$が唯一のスケール・パラメター q_{max} によってスケールされることを示している。

(iv) : ピークの両側で $S(q,\omega)$ は波数のベキ関数、

$$S(q,\omega) \propto \begin{cases} q^{2.7} & q < q_{max} \\ q^{-2.7} & q > q_{max} \end{cases}$$

となっている。この指数の値は、平均波動関数を用いた方法や有効媒質近似を用いた方法で得られる値とは全く異なる。この事実はこれまでの近似方法がフラクトン波動関数の持つ特徴を十分にとらえていないことを物語っている。特に、個々のフラクトンが極めて不均一な振動パターンを持つという特徴を従来の方法では十分考慮していなかった。

以上のようにフラクトン励起の関与する物理現象を議論する際には、フラクトン・モードの不均一性という特徴を正しく記述する新しい解析方法が必要であることが分かった。なってくる。特に、スーパーコンピューターを用いた大規模な数値計算によって直接的に得られた計算結果を、このような新しい理論と直接比較する事は極めて重要である。

第10章　結言

本論文の目的は、統計的フラクタル構造を持つモデルの代表である浸透網の動力学的性質を数値的に明らかにすることであった。特に、フラクタル系固有の局在振動モードであるフラクトンの様々な性質を調べ、フラクトンに関する多大な情報を得ることであった。これまでの章で示した様に、フラクトン・ダイナミクスはフラクタルなランダム系の拡散，電子状態，緩和，スピン波励起，熱伝導などと密接に関連しており、極めて重要な意味を持っている。構造的に乱れた物質内の動的性質は、工学的にも非常に重要である。浸透網は、このようなランダム構造に対するもっとも単純なモデルであり、浸透網上のフラクトン・ダイナミクスを理解することは乱れた系の動的現象全体に対する基礎を与えることになり、とりわけ重要である。

本研究で行った大規模な数値計算により、浸透網上のフラクトンに関する次のような知見が得られた。まず2次元および3次元の臨界濃度の浸透網に対し、スカラー変位のフラクトンの状態密度$\mathcal{D}(\omega)$を求めたところ、いずれの次元の場合にも$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{1/3}$となった。これは、フラクタル上の動的性質を特徴付けるフラクトン次元$\tilde{d}$が$\tilde{d} \cong 4/3$であることを意味し、Alexander-Orbachの予想が正しいことを実証した。また、$p > p_c$の浸透網の振動状態密度は、クロスオーバー振動数ω_cを境に$\omega \ll \omega_c$で$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{d-1}$、$\omega \gg \omega_c$で$\mathcal{D}(\omega) \propto \omega^{1/3}$となった。これより、$\omega \ll \omega_c$では通常のフォノンが、$\omega \gg \omega_c$ではフラクトンが励起されていると考えられる。但し、Aharony等によるスケーリング理論で示されたようなフォノン-フラクトン・クロスオーバーにおける状態密度のhumpは、2次元および3次元のいずれの浸透網においても観測されなかった。本研究ではクロスオーバーにおいてこのようなhumpが存在しない理由を考察するため、数値計算によって得られた状態密度をより精密に調べた。その結果、クロスオーバーにともなう“失われたモード”は、相関長ξ_p程度の大きさを持ったフラクタル・ブロックが規則的にタイリングされた際の継目の部分の高振動数モードに移行していくことが明かとなった。このことは、本論文で展開した新しいスケーリング仮説に基づいた理論によっても確かめられた。

本研究では現実の系におけるフラクトン励起を考慮して、変位をベクトルとしたフラクトンの状態密度も求めた。系に働く復元力はボンドの伸縮力だけでなく、ボンド間の結合角に対するものも含めた。その結果、臨界濃度の浸透網には2種類のフラクトン・モード

が励起されることが分かった。一つはフラクトン次元$\tilde{d}_v \simeq 0.79$のフラクトン（ベクトル・フラクトン）であり、$\omega \ll \omega_{vs}$（ω_{vs}はベクトル・フラクトン-スカラー・フラクトンのクロスオーバー振動数）の低振動数領域で励起される。もう一つはフラクトン次元がスカラー変位のものと同じ$\tilde{d}_s = 4/3$の値をとるフラクトン（スカラー・フラクトン）であり、$\omega \gg \omega_{vs}$で励起される。ベクトル変位のフラクトンのこのような振舞いは、Nodes-Links-Blobsモデルに基づいたスケーリング理論の予想と一致している。ベクトル・フラクトンからスカラー・フラクトンへのクロスオーバーは、フォノン-フラクトンのクロスオーバーに比べて非常にブロードであることも分かった。

フラクトンがどのようなモード・パターンを持って振動しているかについても、多くのことが明かとなった。フラクトンが空間的に強く閉じ込められた局在振動励起であることが、臨界濃度における大規模な2次元浸透網上に単一のフラクトンを励起させることによって、初めて直接的に示された。局在モードのモード・パターンは極めて異方的であり、そのパターンには次のような特徴がある; i)フラクトンの局在モードには、コアと呼ばれる全モード中最大の振幅をも領域が存在する、ii)コアは浸透網全体に対し弱く結合した半島状の部分からなってる、iii)コアの振動は弱連結部分を通してコア以外の部分へ減衰しながら異方的に伝播しており、その他の方向に対してはコア・エッヂの部分でステップ関数的に振幅ゼロとなる、iv)コア内の原子はすべて同位相で振動している。フラクトン・モードの同様な振舞いは3次元浸透網においても見られた。個々のフラクトン・モードはこのように強い異方性を示していたが、同じ振動数を持った多数のフラクトンの平均的なプロファイルは局在中心を中心とした球対称パターンを持つはずである。この平均化されたフラクトン波動関数の性質を調べるために、10^2個程度の同一振動数を持つフラクトンを作り、これを数値的に平均しその関数形を求めた。平均波動関数ψ_{fr}は$\psi_{fr} \sim \exp[-(r/\Lambda)^{d_\phi}]$の形で減衰し、局在の強さを示す指数$d_\phi$の値は$d_\phi \simeq 2.3$となった。この値は既存のあらゆる理論の予想値よりも大きい。但し、この値はフラクトンのコアに対するものであり、$r \gg \Lambda$の領域では異なるd_ϕの値によってψ_{fr}が記述されるものと期待される。また、平均波動関数の局在長Λの振動数依存性を調べたところ$\Lambda(\omega) \propto \omega^{-0.71}$となり、スケーリング理論によるフラクトンの分散関係$\Lambda(\omega) \propto \omega^{-0.705}$とよく一致していた。

従来まではフラクトンの散乱現象はフラクトンの平均波動関数を用いて記述されて

いたが、本研究により得られたフラクトンのモード・パターンが強い異方性を持っていることから、このような取扱は正確ではないと考えられる。そこで本研究では2次元浸透網上のスカラー変位のフラクトンによる動的構造因子$S(q,\omega)$のq-依存性を数値的に求めた。その結果、$S(q,\omega)$は$q=q_{max}$にピークを持つ関数であり、異なる4つの振動数に対し$q_{max} \propto \omega^{0.68}$という関係があることが分かった。これは先に述べたスケーリング理論による分散関係$q_{max} \propto \omega^{0.705}$とよく一致している。また、$q_{max}$でリスケールされた$S(q,\omega)$は$\omega$によらず一本のユニバーサルな曲線に乗ることが分かった。このユニバーサルな曲線は、$q \ll q_{max}$および$q \gg q_{max}$の領域でそれぞれqに対しベキ的に変化しており、$q \ll q_{max}$では$S(q,\omega) \propto q^{2.7}$, $q \gg q_{max}$では$S(q,\omega) \propto q^{-2.7}$のような$q$-依存性を示した。動的構造因子のこのような振舞いは、平均波動関数を用いた議論では説明されず、$S(q,\omega)$そのものに対するスケーリング理論のような、何か新しい考えが必要であることを示唆している。

フラクトン力学の研究における現時点での最大の焦点は、動的構造因子の問題である。平均波動関数による解析が有効でないことが本研究により示されたことで、$S(q,\omega)$の理論的研究は修正されることが余儀なくされる。$S(q,\omega)$の正しい扱いを示すことは、フラクトンと他の素励起との相互作用を記述する基礎を与えることになる。$S(q,\omega)$に対する新しい理論を構築するに当たって、まず正しい$S(q,\omega)$の振舞いをシミュレーションにより調べておくことが重要である。本研究により、波数シフト依存性は明らかになったが、その振動数シフト依存性は解明されていない。$S(q,\omega)$のω-依存性の数値的解明はフラクトン力学における現在最も重要な課題である。近い将来$S(q,\omega)$のω-依存性が明らかにされ、動的構造因子の振舞いが数値的に解明されたならば、その結果を基にスケーリング理論など$S(q,\omega)$に対する新しい理論が誕生し、フラクトンの関与する様々な相互作用を理解する鍵が与えられるであろう。

フラクトン励起に関する様々な性質を調べるのに大規模な数値実験が行われたが、このような大規模計算を可能にするための新しい数値計算法が本研究で開発され、利用された。強制振動法と呼ばれるこの方法は、従来の行列対角化による振動解析法とは異なり、強制振動を受けた系の時間発展を分子動力学的に追跡することにより、系の状態密度，固有値，固有ベクトルなどを求める方法である。この方法の利点は、i)必要な計算機メモリーが系の自由度Nに比例する（行列対角化ではN^2に比例）ため大規模な系を扱うことがで

きる，ii)必要な振動数近くの固有値，固有ベクトル，状態密度だけを求めることができる，iii)固有値、固有ベクトルの精度が定量的に評価できる，iv)並列処理型スーパー・コンピュータに適しており、その有効利用により高速な計算が可能である，などがあげられる。特に、i)のメリットによって、従来より2桁も大きなシステムである$N \sim 10^5$以上の原子数を含んだ系の振動解析を行うことができるようになった。本論文で述べられた強制振動法は、振動系のみならず様々な物理系に適用することができる。例えば、電子系を記述するSchrödinger方程式や、ハイゼンベルグ模型で記述されるスピン系の状態の研究、半導体光導波路内のモード解析などは、強制振動法を利用することで従来まで扱えなかった複雑かつ大規模な系の性質を議論することができ、数多くの新しい知見が得られるものと期待できる。

謝辞

本研究の遂行および本論分をまとめるにあたり、懇切なる御指導、御鞭撻を賜った北海道大学工学部 中山恒義教授に心から謝意を表します。また、本論文執筆時助教授であられた北海道大学工学部 田中啓司教授、丹田聡助手、石橋輝雄技官、木村久美子事務補佐員および北海道大学工学部応用物理学科応用数理物理学講座の学生の方々には、研究に関するものから日常的なことまで、多くの助言を頂きました。心より感謝致します。カリフォルニア大学ロサンゼルス校の R. Orbach 教授、IBM チューリッヒ研究所の E. Courtens 博士、およびブラウン大学の H. J. Maris 教授には本研究の発展に関して有益な討論をして頂き、ここに感謝いたします。最後に本研究を進めるにあたり、スーパーコンピュータの利用に関して便宜を計って頂いた北海道大学大型計算機センターに感謝の意を表します。

参考文献

1. J. Perrin, Revue de Mas. **1**, 323 (1906).
2. J. Perrin, Annales de Chimie et de Physique VIII, **18**, 5 (1909); *trans. by* T. F. Soddy, as *Brownian movement and Molecular Reality*, (Taylor & Francis, London, 1909).
3. B. B. Mandelbrot, *Fractals: Form, Chance, and Dimension*, (W. H. Freeman & Co., San Francisco, 1977).
4. B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, (W. H. Freeman & Co., San Francisco, 1983).
5. D. Stauffer and H. E. Stanley, *From Newton to Mandelbrot*, (Springer-Verlag, Berlin, 1990).
6. D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory*, (Taylor & Francis, London, 1985).
7. G. Deutscher, R. Zallen, and J. Adler, *Percolation Structures and Processes*, Annals of Israel Physical Society 5, (Adam Hilger, Bristol, 1983).
8. S. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **45**, 574 (1973).
9. J. W. Essam, Rep. Prog. Phys. **43**, 843 (1980).
10. D. Stauffer, Phys. Rep. **34**, 1 (1979).
11. A. L. Efros, *Physics and Geometry of Disorder : Percolation Theory*, (Mir, Moscow, 1986).
12. B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, (Springer-Verlag, Heidelberg, 1984).
13. D. J. Thouless, in *Ill-Condensed Matter*, Les Houches, Session XXXI, ed. by R. Balian *et al.*, (North-Holland, Amsterdam, 1979), p.1.
14. R. J. Harison, G. J. Bishop, and G. P. Quinn, J. Stat. Phys. **191**, 53 (1978).
15. S. Kirkpatrick, *Ill-Condensed Matter*, Les Houches, Session XXXI, ed. by R. Balian *et al.*, (North-Holland, Amsterdam, 1979), p.99.
16. J. W. Halley and T. Mai, Phys. Rev. Lett. **43**, 740 (1979).
17. S. Alexander and R. Orbach, J. Phys. (Paris) Lett. **43**, L625 (1982).
18. R. Rammal and G. Toulouse, J. Phys. (Paris) Lett. **44**, L13 (1983).
19. S. R. Broadbent, J. Roy. Stat. Soc. **B16**, 68 (1954).
20. J. M. Hammersley, in *Percolation Structures and Processes*, p.47, ed. by

G. Deutscher, R. Zallen, and J. Adler, Annals of Israel Physical Society 5, (Adam Hilger, Bristol, 1983).

21. J. M. Hammersley, Proc. Cambridge Phil. Soc. **53**, 642 (1957); S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, *ibit*, **53**, 629 (1957).
22. P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
23. C. Domb and M. F. Sykes, Phys. Rev. **122**, 77 (1961).
24. J. Ziman, *Models of Disorder*, (Cambridge University Press, 1979).
25. J. Bernasconi, Phys. Rev. B**18**, 2185 (1978).
26. F. Fucito and E. Marinari, J. Phys. A**14**, L85 (1981).
27. C. J. Lobb and K. R. Karasek, Phys. Rev. B**25**, 492 (1982).
28. B. Derrida and L. De Seze, J. Phys. (Paris) **43**, 475 (1982).
29. M. Sahimi, J. Phys. A**17**, 3073 (1984).
30. M. F. Sykes, D. S. Gaunt, and M. Glen, J. Phys. A**9**, 725 (1976).
31. M. F. Sykes, D. S. Gaunt, and M. Glen, J. Phys. A**9**, 1705 (1976).
32. D. S. Gaunt, J. Phys. A**10**, 807 (1977).
33. H. Nakanishi and H. E. Stanley, Phys. Rev. B**22**, 2466 (1980).
34. D. S. Gaunt, S. G. Whittington, and M. F. Sykes, J. Phys. A**14**, L247 (1981).
35. A. B. Harris and Y. Meir, Phys. Rev. A**36**, 1840 (1987).
36. J. Adler, Y. Meir, A. B. Harris, A. Aharony, and J. A. M. S. Duarté, Phys. Rev. B**38**, 4941 (1988).
37. M. Takayasu and H. Takayasu, Phys. Lett. A**128**, 45 (1988).
38. J. Adler, Y. Meir, A. Aharony, and A. B. Harris, Phys. Rev. B**41**, 9183 (1990).
39. A. Margolina, Z. Djordjevic, H. E. Stanley, and D. Stauffer, Phys. Rev. B**28**, 1652 (1983).
40. A. Margolina, H. Nakanishi, D. Stauffer, and H. E. Stanley, J. Phys. A**17**, 1683 (1984).
41. D. C. Rapaport, J. Phys. A**18**, L175 (1985).
42. D. Y. Kim, H. J. Herrmann, and D. P. Landau, Phys. Rev. B**35**, 3661 (1987).
43. J. T. Chayes, L. Chayes, D. S. Fisher, and T. Spencer, Phys. Rev. Lett. **57**, 2999 (1986).

44. S. Sakamoto, F. Yonezawa, and M. Hori, J. Phys. A**22**, L699 (1989).

45. S. Sakamoto, F. Yonezawa, K. Aoki, S. Nosé, and M. Hori, J. Phys. A**22**, L705 (1989).

46. A. S. Skal and B. I. Shklovskii, Fiz. Tekh. Poliprov. **8**, 1586 (1974), translation: Sov. Phys. -Semicond. **8**, 1029 (1975).

47. P. G. de Gennes, J. Phys. (Paris) Lett. **37**, L1 (1976).

48. R. B. Pike and H. E. Stanley, J. Phys. A**14**, L169 (1981).

49. A. Coniglio, Phys. Rev. Lett.**46**, 250 (1981).

50. H. E. Stanley, J. Phys. A**10**, L211 (1977).

51. A. N. Berker and S. Ostlund, J. Phys. C**12**, 6961 (1979).

52. A. Coniglio, J. Phys. A**15**, 3829 (1982).

53. A. Aharony, Y. Gefen, and A. Kapitulnik, J. Phys. A**17**, L197 (1984).

54. L. de Arcangelis, S. Render, and A. Coniglio, Phys. Rev. B**31**, 4725 (1985).

55. S. Kirkpatrick, AIP Conf. Proc. **40**, 99 (1978).

56. H. J. Herrmann, D. C. Hong, and H. E. Stanley, J. Phys. A**17**, L261 (1984).

57. G. Shlifer, W. Klein, P. J. Reynolds, and H. E. Stanley, J. Phys. A**12**, L169 (1979).

58. L. Puech and R. Rammal, J. Phys. C**16**, L1197 (1983).

59. D. C. Hong and H. E. Stanley, J. Phys. A**16**, L475 (1983).

60. W. D. Dozier, J. M. Drake, and J. Klafter, Phys. Rev. Lett. **56**, 197 (1986).

61. P. G. de Gennes, J. Fluid Mech. **136**, 189 (1983).

62. M. Sahimi and V. L. Jue, Phys. Rev. Lett. **62**, 629 (1989).

63. A. Ohi and T. Nakayama, Phys. Rev. B**41**, 7281 (1990).

64. A. Ohi and T. Nakayama, Phys. Rev. B**41**, 7322 (1990).

65. A. Gold, J. Phys. (Paris) **48**, 255 (1987).

66. F. G. Pikus and A. L. Efros, Sov. Phys. JETP, **69**, 558 (1989).

67. P. G. de Gennes, J. Phys. (Paris) Lett. **37**, L1 (1976).

68. P. G. de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics*, (Cornell University Press, Ithaca, 1979).

69. M. A. Shtremel and A. A. Knyazev, Fiz. Met. & Metalloved (USSR), **62**, 645 (1986).

70. P. G. de Gennes, La Recherche **7**, 919 (1976).

71. D. S. McKenzie, Phys. Rep. **27C**, 1 (1976).

72. E. Seifert and M. Suessenbach, J. Phys. A**17**, L703 (1984).

73. Y. Gefen, A. Aharony, and S. Alexander, Phys. Rev. Lett. **50**, 77 (1983).

74. D. Ben-Avraham and S. Havlin, J. Phys. A**15**, L691 (1982).

75. N. Wagner and I. Balberg, J. Stat. Phys. **49**, 369 (1987).

76. A. Bunde, Physica, A**168**, 536 (1990).

77. P. Argyrakis and R. Kopelman, Phys. Rev. B**29**, 511 (1984).

78. A. Bunde, S. Havlin, and H. E. Roman, Phys. Rev. A**42**, 6274 (1990).

79. S. Feng, Phys. Rev. B**32**, 5793 (1985).

80. S. Alexander, J. Bernasconi, W. R. Schneider, and R. Orbach, Rev. Mod. Phys. **53**, 175 (1981).

81. M. Sahimi, J. Phys. A**17**, L601 (1984).

82. A. Aharony and D. Stauffer, Phys. Rev. Lett. **52**, 2368 (1984).

83. M. J. Stephen, Phys. Rev. B**17**, 4444 (1978).

84. C. Dasgupta, A. B. Harris, and T. C. Lubensky, Phys. Rev. B**17**, 1375 (1978).

85. A. B. Harris, S. Kim, and T. C. Lubensky, Phys. Rev. Lett. **53**, 743 (1984).

86. J. A. Blackman, J. Phys. C**9**, 2049 (1976).

87. M. Sahimi, B. D. Hughes, L. E. Scriven, and H. T. Davis, J. Chem. Phys. **78**, 6849 (1983).

88. R. B. Pandey, D. Stauffer, and J. G. Zabolitzky, J. Stat. Phys. **49**, 849 (1987).

89. J. F. McCarthy, J. Phys. A**21**, 3379 (1988).

90. S. Havlin and D. Ben-Avraham, J. Phys. A**16**, L483 (1983).

91. P. Argyrakis, L. W. Anacker, and R. Kopelman, J. Stat. Phys. **36**, 579 (1984).

92. P. Argyrakis and R. Kopelman, Phys. Rev. B**29**, 511 (1984).

93. R. Rammal, J. C. Angles d'Auriac, and A. Benoit, Phys. Rev. B**30**, 4087 (1984).

94. C. J. Lobb and D. J. Frank, Phys. Rev. B**30**, 4090 (1984).

95. J. G. Zabolitzky, Phys. Rev. B**30**, 4077 (1984).

96. D. C. Hong, S. Havlin, H. J. Herrmann, and H. E. Stanley, Phys. Rev. B**30**, 4083 (1984).

97. J. M. Gordon and A. M. Goldman, Phys. Rev. B**38**, 12019 (1988).

98. J. W. Essam and F. M. Bhatti, J. Phys. A**18**, 3577 (1985).

99. A. B. Harris, Y. Meir, and A. Aharony, Phys. Rev. B**36**, 8752 (1987).

100. R. Rammal, J. Stat. Phys. **36**, 547 (1984).

101. Y. Kantor and I. Webman, Phys. Rev. Lett. **52**, 1891 (1984).

102. I. Webman and G. S. Grest, Phys. Rev. B**31**, 1689 (1985).

103. S. Feng, P. N. Sen, B. I. Halperin, and C. J. Lobb, Phys. Rev. B**30**, 5386 (1984).

104. P. Dean, Rev. Mod. Phys. **44**, 127 (1972).

105. C. Lanczos, *Applied Analysis*, (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1956).

106. A. S. Householder, *Principles of Numerical Analysis*, (McGraw-Hill, New York, 1953).

107. J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem*, (Oxford University Press, 1965).

108. J. H. Wilkinson and C. Reinsch, *Linear Algebra*, (Springer-Verlag, Berlin, 1971).

109. D. Beeman and R. Alben, Adv. Phys. **26**, 339 (1977).

110. R. J. Bell, Rep. Prog. Phys. **35**, 1315 (1972).

111. P. E. Meek, Phil. Mag. **33**, 897 (1976).

112. M. L. Williams and H. J. Maris, Phys. Rev. B**31**, 4508 (1985).

113. K. Yakubo, T. Nakayama, and H. J. Maris, submitted.

114. 中山恒義、矢久保考介、高杉恒一、田中哲, 北海道大学大型計算機センター・ニュース, Vol.**19**, p.15 (1987).

115. 矢久保考介、中山恒義, 北海道大学大型計算機センター・ニュース, Vol.**20**, p.96 (1988).

116. E. W. Montroll and R. B. Potts, Phys. Rev. **100**, 525 (1955).

117. U. Buchenau, H. M. Zhou, N. Nücker, K. S. Gilroy, and W. A. Phillips, Phys. Rev. Lett. **60**, 1368 (1988).

118. S. John, H. Sompolinsky, and M. J. Stephen, Phys. Rev. B**27**, 5592 (1983).

119. K. Yakubo and T. Nakayama, Phys. Rev. B**36**, 8933 (1987).

120. K. Yakubo and T. Nakayama, Phys. Rev. B**40**, 517 (1989).

121. K. Yakubo and T. Nakayama, Jpn. J. Appl. Phys. Suppl. **26-3**, 883 (1987).

122. 矢久保考介、高杉恒一、田中哲、中山恒義, 北海道大学工学部研究報告, Vol.**137**, p.83 (1987).

123. 中山恒義、矢久保考介, 物理教育研究, Vol.**15**, p.2 (1987).

124. 矢久保考介、中山恒義, 日本物理学会誌, Vol.**44**, p.833 (1989).

125. 矢久保考介、中山恒義, 統計数理, Vol.**37**, p.47 (1989).

126. 矢久保考介、中山恒義, 固体物理, Vol.**25**, p.141 (1990).

127. J. Chalupa, P. L. Leath, and G. R. Reich, J. Phys. C**12**, L31 (1979).

128. J. Adler and A. Aharony, J. Phys. A**21**, 1387 (1988).

129. G. S. Grest and I. Webman, J. Phys. (Paris) Lett. **45**, L1155 (1984).

130. B. Derrida, R. Orbach, and K. -W. Yu, Phys. Rev. B**29**, 6645 (1984).

131. A. Aharony, S. Alexander, O. Entin-Wohlman, and R. Orbach, Phys. Rev. B**31**, 2565 (1985).

132. K. Yakubo and T. Nakayama, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 1504 (1989).

133. T. Nakayama, K. Yakubo, and R. Orbach, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 1891 (1989).

134. K. Yakubo and T. Nakayama, in *Fractal Forms*, p.35, ed. by E. Guyon and H. E. Stanley, (Elsevier, North-Holland, 1991).

135. K. Yakubo, K. Takasugi, and T. Nakayama, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 1909 (1990).

136. S. Feng, Phys. Rev. B**31**, 1671 (1985).

137. M. Sahimi, J. Phys. C**19**, L79 (1986).

138. P. F. Tua, S. J. Putterman, and R. Orbach, Phys. Lett. **98A**, 357 (1983).

139. H. M. Rosenberg, Phys. Rev. Lett. **54**, 704 (1985).

140. A. Avogadro, S. Aldrovandi, and F. Borsa, Phys. Rev. B**33**, 5637 (1986); T. Sleator, A. Bernasconi, D. Posselt, J. K. Kjems, and H. R. Ott, Phys. Rev. Lett. **66**, 1070 (1991).

141. A. J. Dianoux, J. N. Page, and H. M. Rosenberg, Phys. Rev. Lett. **58**, 886 (1987).

142. G. Mariotto, M. Montagna, G. Viliani, R. Campostrini, and G. Carturan, J. Phys. C**21**, L797 (1988).

143. E. Courtens, J. Pelous, J. Phalippou, R. Vacher, and T. Woignier, Phys. Rev. Lett. **58**, 128 (1987).

144. E. Courtens, and R. Vacher, Z. Phys. B**68**, 355 (1987).

145. R. Vacher, T. Woignier, J. Pelous, and E. Courtens, Phys. Rev. B**37**, 6500 (1988).

146. E. Courtens, R. Vacher, J. Pelous, and T. Woignier, Europhys. Lett. **6**, 245 (1988).

147. R. Vacher, E. Courtens, G. Coddens, J. Pelous, and T. Woignier, Phys. Rev. B**39**,

7384 (1989).

148. R. Vacher and E. Courtens, Phys. Scripta T**29**, 239 (1989).

149. E. Courtens and R.Vacher, Proc. R. Soc. Lond. A**423**, 55 (1989).

150. H. Conrad, U. Buchenau, R. Schätzler, G. Reichenauer, and J. Fricke, Phys. Rev. B**41**, 2573 (1990).

151. R. Vacher, E. Courtens, G. Coddens, A. Heidemann, Y. Tsujimi, J. Pelous, and M. Foret, Phys. Rev. Lett. (1990).

152. E. Courtens and R. Vacher, in *Random Fluctuations and Pattern Growth*, p.20, ed. by

153. K. Yakubo, E. Courtens, and T. Nakayama, Phys. Rev. **42**, 1078 (1990).

154. B. W. Southern and A. R. Douchant, Phys. Rev. Lett. **55**, 966 (1985).

155. R. Rammal, J. Phys. (Paris) **45**, 191 (1984).

156. S. Alexander, O. Entin-Wohlman, and R. Orbach, J. Phys. (Paris) Lett. **46**, L549 (1985).

157. S. Alexander, O. Entin-Wohlman, and R. Orbach, J. Phys. (Paris) Lett. **46**, L555 (1985).

158. S. Alexander, O. Entin-Wohlman, and R. Orbach, Phys. Rev. B**32**, 6447 (1985).

159. O. Entin-Wohlman, S. Alexander, and R. Orbach, Phys. Rev. B**32**, 8007 (1985).

160. S. Alexander, O. Entin-Wohlman, and R. Orbach, Phys. Rev. B**33**, 3935 (1986).

161. K. N. Shrivastava, Phys. Stat. Solidi b**138**, 699 (1986).

162. S. B. Stevens and H. J. Stapleton, Phys. Rev. B**42**, 9794 (1990).

163. A. Boukenter, B. Champagnon, E. Duval, J. Dumas, J. F. Quinson, and J. Serughetti, Phys. Rev. Lett. **57**, 2391 (1986).

164. G. Deutscher, Y. Lévy, and B. Souillard, Europhys. Lett. **4**, 577 (1987).

165. G. Deutscher, Phil. Mag. B**56**, 725 (1987).

166. A. B. Harris and A. Aharony, Europhys. Lett. **4**, 1355 (1987).

167. S. Alexander, O. Entin-Wohlman, and R. Orbach, Phys. Rev. B**34**, 2726 (1986).

168. A. Jagannathan, R. Orbach, and O. Entin-Wohlman, in *Cooperative Dynamics in Complex Physical Systems*, p.183, ed. by H. Takayama (Springer-Verlag, Berlin, 1989).

169. W. A. Phillips, *Amorphous Solids: Low Temperature Properties*, (Springer-Verlag,

Berlin, 1981).

170. W. A. Phillips, J. Low Temp. Phys. **7**, 351 (1972).

171. P. W. Anderson, B. I. Halperin, and C. M. Varma, Phil. Mag. **25**, 1 (1972).

172. S. Havlin and R. Nossal, J. Phys. A**17**, L427 (1984).

173. Y. -E. Lévy and B. Souillard, Europhys. Lett. **4**, 233 (1987).

174. A. Aharony, S. Alexander, O. Entin-Wohlman, and R. Orbach, Phys. Rev. Lett. **58**, 132 (1987).

175. J. R. Banavar and J. Willemsen, Phys. Rev. B**30**, 6778 (1984).

176. B. O'Shaughnessy and I. Procaccia, Phys. Rev. A**32**, 3073 (1985).

177. S. Havlin, D. Movshovitz, B. L. Trus, and G. H. Weiss, J. Phys. A**18**, L719 (1985).

178. R. Guyer, Phys. Rev. A**32**, 2324 (1985).

179. K. Yakubo and T. Nakayama, in *Cooperative Dynamics in Complex Physical Systems*, p.217, ed. by H. Takayama (Springer-Verlag, Berlin, 1989).

180. P. de Vries, H. De Raedt, and A. Lagendijk, Phys. Rev. Lett. **62**, 2515 (1989).

181. H. De Raedt, Comp. Phys. Rep. **7**, 1 (1987).

182. H. E. Roman, S. Russ, and A. Bunde, Phys. Rev. Lett. **66**, 1613 (1991).

183. C. J. Lambert and G. D. Hughes, Phys. Rev. Lett. **66**, 1074 (1991).

184. D. Burton and C. J. Lambert, Europhys. Lett. **5**, 461 (1988).

185. Y. Tsujimi, E. Courtens, J. Pelous, and R. Vacher, Phys. Rev. Lett. **60**, 2757 (1988).

186. R. Vacher, E. Courtens, and J. Pelous, La Recherche, **21**, 426 (1990).

187. A. Boukenter, B. Champagnon, E. Duval, J. L. Rousset, J. Dumas, and J. Serughetti, J. Phys. C**21**, L1097 (1988).

188. H. A. Hassan, S. R. P. Smith, and J. H. Page, Solid Stat. Commun. **68**, 733 (1988).

189. U. Buchenau, N. Nücker, and A. J. Dianoux, Phys. Rev. Lett. **53**, 2316 (1984).

190. U. Buchenau, N. Nücker, A. J. Dianoux, N. Ahmad, and W. A. Phillips, Phys. Rev. B**34**, 5665 (1986).

191. A. J. Dianoux, U. Buchenau, M. Prager, and N. Nücker, Physica, **138B**, 264 (1986).

192. T. Freltoft, J. Kjems, and D. Richter, Phys. Rev. Lett. **59**, 1212 (1987).

193. J. H. Page, W. J. L. Buyers, G. Dolling, P. Gerlach, and J. P. Harrison, Phys. Rev.

B**39**, 6180 (1989).

194. A. Fontana, F. Rocca, and M. P. Fontana, Phys. Rev. Lett. **58**, 503 (1987).

195. A. Fontana, F. Rocca, and M. P. Fontana, Phil. Mag. B**56**, 251 (1987).

196. L. Börjesson, in *Dynamics of Disordered Materials*, p.316, ed. by D. Richter *et al.*, (Springer-Verlag, Berlin, 1989).

197. A. Boukenter, E. Duval, and H. M. Rosenberg, J. Phys. C**21**, 541 (1988).

198. M. Arai and J. E. Jørgensen, Phys. Lett. A**133**, 70 (1988).

199. M. G. Zemlyanov, V. K. Malinovskii, V. N. Novikov, P. P. Parshin, and A. P. Sokolov, Sov. Phys. JETP Lett. **51**, 358 (1990).

200. P. P. Lottici, Phys. Stat. Solidi, b**146**, K81 (1988).

201. D. G. Cahill and R. O. Pohl, Phys. Rev. B**35**, 4067 (1987).

202. J. E. de Oliveira, J. N. Page, and H. M. Rosenberg, Phys. Rev. Lett. **62**, 780 (1989).

203. T. Sleator, A. Bernasconi, E. Felder, D. Posselt, and H. R. Ott, Physica, B**165&166**, 907 (1990).

204. J. H. Page and R. D. McCulloch, Phys. Rev. Lett. **57**, 1324 (1986).

205. R. Kopelman, S. Parus, and J. Prasad, Phys. Rev. Lett. **56**, 1742 (1986).

206. G. S. Dixon, R. C. Powell, and X. Gang, Phys. Rev. B**33**, 2713 (1986).

207. K. N. Shrivastava, Solid Stat. Commun. **69**, 301 (1989).

208. D. W. Schaefer, C. J. Brinker, D. Richter, B. Farago, and B. Frick, Phys. Rev. Lett. **64**, 2316 (1990).

209. S. B. Stevens and H. J. Stapleton, Phys. Rev. B**42**, 9794 (1990).

210. J. M. Goldon, A. M. Goldman, J. Maps, D. Costello, R. Tiberio, and B. Whitehead, Phys. Rev. Lett. **56**, 2280 (1986).

211. J. S. Helman, A. Coniglio, and C. Tsallis, Phys. Rev. Lett. **53**, 1195 (1984).

212. J. Fricke, Scientific American, **258**, 68 (1988).

213. M. Prassas, J. Phalippou, and J. Zarzycki, J. Mater. Sci. **19**, 1656 (1984).

214. H. J. Stapleton, J. P. Allen, C. P. Flynn, D. G. Stinson, and S. R. Kurtz, Phys. Rev. Lett. **45**, 1456 (1980).

215. R. Rammal and G. Toulouse, Phys. Rev. Lett. **49**, 1194 (1982).

216. G. Polatseck and O. Entin-Wohlman, Phys. Rev. B**37**, 7726 (1988).

217. S. Alexander, Phys. Rev. **B40**, 7953 (1989).

218. 中山恒義、矢久保考介、大田啓之, 統計数理, Vol.**38**, p.73 (1990).

inches 1 2 3 4 5 6 7 8

cm 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19

Kodak Color Control Patches

© Kodak, 2007 TM: Kodak

Blue Cyan Green Yellow Red Magenta White 3/Color Black

Kodak Gray Scale

C Y M

© Kodak, 2007 TM: Kodak

A 1 2 3 4 5 6 **M** 8 9 10 11 12 13 14 15 **B** 17 18 19