

学 位 論 文 題 名

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

学位論文内容の要旨

ランダム系に特有な諸現象を統一的に理解する上でフラクタルという概念は極めて重要である。フラクタルとは、自己相似性を有する空間的構造や時間発展現象等に適用される総称的概念である。フラクタル構造をとる浸透網（パーコレーション・ネットワーク）は、アモルファス材料や絡み合った高分子鎖あるいは多孔媒質など、トポロジカルに乱れた構造に対するもっとも基本的なモデルである。このような系の物性研究は、理学・工学の両面から高い関心を集めている。中では浸透網上の励起状態の研究は、ランダム系の動的性質を理解する上で極めて重要である。

本論文は、浸透網の動力学的性質を数値的に研究したものである。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諸特性を並列処理型スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションにより明らかにした。本論文は全10章で構成され、各章の概要は以下の通りである。

第1章は緒論であり、本論文の主題であるフラクトン励起に関する研究の背景と問題点を概説する。

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を議論する。複雑な浸透網構造を単純化したモデルである Nodes-Links-Blobs モデルについてもここで言及する。

第3章は、ランダム系の動力学の基礎となる浸透網上の拡散現象およびその理論的取り扱いについて述べている。浸透網における拡散現象と他の動力学の間の密接な関係を示した上で、浸透網上の拡散現象に対するスケーリング理論を展開している。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になる。

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ている。フラクトン励起の存在を予測する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、本研究で開発された数値計算アルゴリズムを詳解している。強制振動法と呼ばれ

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 $N \sim 10^5$ 以上の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、などである。また、この強制振動法は、電子系やスピン系あるいは半導体光導波路内のモード解析など、様々な物理系に適用できることも本章で明らかとなる。

第6章では、第4章で予想されたフラクトン励起の存在が大規模シミュレーションにより直接確認され、フラクトン状態密度の振動数存在性が数値的に明らかになる。まず、2次元、3次元、いずれの次元の場合にもスカラー変位のフラクトンの状態密度 $D(\omega)$ は、 $D(\omega) \sim \omega^{1/3}$ となり、フラクタル上の動的性質を特徴付けるフラクトン次元 $\tilde{d}$ が空間次元によらず $\tilde{d} = 4/3$ となることを実証している。また、 $p > p_c$ の浸透網に対するシミュレーションから、 $\omega < \omega_c$ では通常のフォノンが、 $\omega > \omega_c$ ではフラクトンが励起されることを明らかにしている。さらに、従来のスケーリング理論で予測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存在しないことを発見している。本章では、変位をベクトルとしたフラクトンの状態密度の数値計算も行っている。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。この計算により、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明らかになった。一つはフラクトン次元 $\tilde{d}_v = 0.79$ のフラクトン（ベクトル・フラクトン）であり、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）である。本章の後半は、数値計算によって求められたフラクトンのモード・パターンの記述に当てられている。特に、臨界濃度における大規模な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、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を直接的に検証している。この計算結果から、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ことを見いだしている。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つ領域が存在する、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いる、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・エッジ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。

第7章ではフォノン-フラク톤のクロスオーバーにおける状態密度の振舞いが、本研究の計算結果と従来の理論予想とで食い違っている理由について議論する。まず、振動状態密度の絶対値の浸透濃度依存性が数値計算により詳しく調べられ、次にこの濃度依存性を説明する新しいスケーリング理論が展開される。

第8章では、平均化されたフラク톤波動関数の性質が数値的に調べられる。具体的には、 10^2 個程度の同一振動数を持つフラク톤が浸透網上に作られ、これを数値的に平均することによりその関数形を求めている。平均波動関数 $\langle \phi_{fr} \rangle$ は $\langle \phi_{fr} \rangle \sim \exp [-(r/\Lambda)^{d_\phi}]$ の形で減衰し、局在の強さを示す指数 d_ϕ の値は $d_\phi = 2.3$ となることが示される。この値は既存のあらゆる理論の予想値よりも大きく、フラク톤が極めて強く局在していることを物語っている。この章では、局在指数がこのように大きな値を取る理由についても議論している。

第9章では、フラク톤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ている。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톤と他の素励起との散乱理論の基礎を与えるものとして注目される。従来まではフラク톤の散乱現象はフラク톤の平均波動関数を用いて記述されていたが、第6章で得られたフラク톤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ないと考えられる。本章では2次元浸透網上のスカラー変位のフラク톤による動的構造因子 $S(q, \omega)$ の q -依存性を数値的に解明している。特に、 $S(q, \omega)$ は $q = q_{max}$ にピークを持つ関数であり、 q_{max} の振動数依存性は、スケーリング理論による分散関数 $q_{max} \sim \omega^{0.705}$ とよく一致していることを示している。また、 q_{max} でリスケールされた $S(q, \omega)$ は ω によらず一本のユニバーサルな曲線に乗ること、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 に対しべき的に変化しており、 $q \ll q_{max}$ では $S(q, \omega) \sim q^{2.7}$ 、 $q \gg q_{max}$ では $S(q, \omega) \sim q^{-2.7}$ のような q -依存性を示すことも明らかとなる。最後に、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ないことを指摘している。

第10章は結言である。フラク톤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をまとめるとともに、今後の課題について述べている。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 中 山 恒 義

副 査 教 授 堤 耀 広

副 査 教 授 佐久間 哲 郎

ランダム系に特有な諸現象を統一的に理解する上でフラクタルという概念は極めて重要である。フラクタル構造をとる浸透網（パーコレーション・ネットワーク）はアモルファス材料や絡み合った高分子鎖あるいは多孔媒質など、トポロジカルに乱れた構造に対するもっとも基本的なモデルである。このような系の物性研究は、理学・工学の両面から高い関心を集めている。中でも浸透網上の励起状態の研究は、ランダム系の動的性質を理解する上で極めて重要である。

本論文は、浸透網の動力学的性質を数値的に研究したものである。特に、フラクタル系固有の局在振動励起であるフラクトンの諸特性を並列処理型スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションにより明らかにしたもので、全体は10章で構成されている。

第1章は緒論であり、本論文の主題であるフラクトン励起に関する研究の背景と問題点の概説、および論文の構成について述べている。

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を議論する。複雑な浸透網構造を単純化したモデルである Nodes—Links—Blobs モデルにつて述べている。

第3章は、ランダム系の動力学の基礎となる浸透網上の拡散現象およびその理論的取り扱いについて述べている。浸透網における拡散現象と他の動力学の間の密接な関係を示した上で、浸透網上の拡散現象に対するスケーリング理論を展開している。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になる。

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ている。フラクトン励起の存在を予測する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、本研究で開発された数値計算アルゴリズムを詳解している。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)のため $N \sim 10^5$ 以上の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, などである。また, この強制振動法は, 電子系やスピン系あるいは半導体光導波路内のモード解析など, 様々な物理系に適用できることも本章で明らかとなる。

第6章では, 第4章で予想されたフラクトン励起の存在が大規模シミュレーションにより直接確認され, フラクトン状態密度の振動数依存性が数値的に明らかになる。まず, 2次元, 3次元, いずれの次元の場合にもスカラー変位のフラクトンの状態密度 $D(\omega)$ は, $D(\omega) \sim \omega^{1/3}$ となり, フラクタル上の動的性質を特徴付けるフラクトン次元 $\tilde{d}$ が空間次元によらず $\tilde{d} = 4/3$ となることを実証している。本章では, 変位をベクトルとしたフラクトンの状態密度の数値計算も行っている。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。この計算により, 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明らかになった。

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が, 本研究の計算結果と従来の理論とで食い違っていることを指摘し, 理論的予想の間違いの理由について議論する。まず, 振動状態密度の絶対値の浸透濃度依存性が数値計算により詳しく調べられ, 次にこの濃度依存性を説明する新しいスケーリング理論が展開される。

第8章では, 平均化されたフラクトン波動関数の性質が数値的に調べられる。具体的には, 10^2 個程度の同一振動数を持つフラクトンが浸透網上に作られ, これを数値的に平均することによりその関数形を求めている。平均波動関数 $\langle \phi_{fr} \rangle$ は, $\langle \phi_{fr} \rangle \sim \exp[-(r/\Lambda)^{d_\phi}]$ の形で減衰し, 局在の強さを示す指数 d_ϕ の値は $d_\phi = 2.3$ となることが示される。この値は既存のあらゆる理論の予想値よりも大きく, フラクトンが極めて強く局在していることを物語っている。この章では, 局在指数がこのような大きな値を取る理由についても議論している。

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ている。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散乱理論の基礎を与えるものとして注目される。本章では2次元浸透网上的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 -依存性を数値的に解明している。特に, $S(q, \omega)$ は $q = q_{max}$ にピークを持つ関数であり, q_{max} の振動数依存性は, スケーリング理論による分散関係 $q_{max} \sim \omega^{0.705}$ とよく一致していることを示している。また, q_{max} でリスケールされた $S(q, \omega)$ は ω によらず一つのユニバーサルな曲線に乗ること, 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 に対しべき的に変化しており、 $q \ll q_{max}$ では $S(q, \omega) \sim q^{2.7}$ 、 $q \gg q_{max}$ では $S(q, \omega) \sim q^{-2.7}$ のような q -依存性を示すことも明らかとなる。最後に、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ないことを指摘している。

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をまとめるとともに、今後の課題について述べている。

以上、本論文は、並列処理型スーパーコンピュータを駆使した大規模シミュレーションにより、トポロジカルに乱れた構造に対する基本的モデルであるパーコレーション・ネットワークの動的性質の諸特性を、系統的かつ詳細に研究し、重要な多くの新知見を得、応用物理学に貢献するところ大なるものがある。よって著者は博士（工学）の学位を授与される資格あるものと認める。