ソフトパーコレーション系のダイナミックス

九大理　和智勇治、小田垣孝

§1 周期境界条件における random walk と拡散係数

格子上などの random walk において、拡散係数などの物理量を計算機実験で求めるには、粒子の位置の時間発展を追う必要があり、膨大な計算を要する。通常、計算機実験は周期境界条件を用いて行われ、多くのセルにわたった粒子の変位から拡散係数が決定される。

ここでは、空間的に乱雑に分布した点上の randon walk について、実際の粒子のダイナミックスを追うことなく、拡散係数を求める方法を提案する。random walk の拡散係数はジャンプ率から作られる行列の固有値、固有ベクトルから決定できる [1]。ここで周期境界条件をおくと、マスター方程式は

$$\frac{dP_s^n(t)}{dt} - \sum_{m,s} H_{s,s'}^{n-m} P_{s'}^m(t) = 0 \tag{1}$$

$$H_{s,s'}^m = F_{s,s'}^m - \delta_{m,0}\delta_{s,s'} \sum_{m,s'} F_{s',s}^m \tag{2}$$

と書ける。ただし $P_s^n(t)$ は、時刻 $t=0$ に原点にある粒子が、時刻 t に $\mathbf{n}$ 番目のセルの $\mathbf{s}$ に存在する確率である。また、$F_{s,s'}^m$ は $\mathbf{0}$ 番目のセルの $\mathbf{s}'$ から $\mathbf{m}$ 番目のセルの $\mathbf{s}$ にジャンプするジャンプ率である。

次に (1) を、

$$\psi_s^n(\varepsilon) = \int_0^\infty e^{-\varepsilon t} P_s^n(t) dt \tag{3}$$

$$\psi_s^k = \sum_n e^{-\mathbf{ik}\cdot(\mathbf{n}+\mathbf{s})} \psi_s^n(\varepsilon) \tag{4}$$

という空間について $Fourier$ 変換、時間について $Laplace$ 変換を行った量を用いて書くと、

$$\varepsilon\psi_s^k - \sum_{s'} H_{s,s'}^k \psi_{s'}^k = P_s^n(0) \tag{5}$$

$$H_{s,s'}^k \equiv \sum_m e^{-\mathbf{ik}\cdot(\mathbf{m}+\mathbf{s}-\mathbf{s}')} H_{s,s'}^m \tag{6}$$

となる。

さて、この ψ_s^k を用いて拡散係数 D は、

$$2dD = -\lim_{k\to 0}\lim_{\varepsilon\to 0} \langle\phi_0|\varepsilon^2 \nabla_k^2 G^k(\varepsilon)|\Psi_0\rangle \tag{7}$$

という形で書くことができる。ここで d は空間次元数を表す。$|\phi_0\rangle$、$|\Psi_0\rangle$ は ϕ_s^0、$P_s^n(0)$ を縦ベクトルに書いたもので、それぞれ、$\phi_0^s = \sqrt{\lim_{t\to\infty} \sum_n P_s^n(t)}$ 、$P_s^n(0) = \delta_{n,0}\delta_{s,0}$ である。また $G^k(\varepsilon)$ は $G^k(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{H_k}}$ なるグリーン関数、ただし H_k は $H_{s,s'}^k$ から作られる実対称行列である。

ここで、$\nabla_k^2 G^k$ が

$$\nabla_k^2 G^k = G^k[\nabla_k^2 H^k + 2(\nabla_k H^k)\cdot G^k \cdot (\nabla_k H^k)]G^k \tag{8}$$

と書けることと、$\lim_{k\to 0} G^k(\varepsilon) = g(\varepsilon)$ が、$H_0 = lim_{k\to 0} H_k$ なる行列の固有値、固有ベクトル ε_λ, $|\phi_\lambda\rangle$ 用いて

$$g(\varepsilon) = \frac{|\phi_0\rangle\langle\phi_0|}{\varepsilon} + \sum_{\lambda\neq 0} \frac{|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda|}{\varepsilon_\lambda} \tag{9}$$

と書けることに注意すると、(7) 式の拡散係数 Dは、

$$2dD = \langle\phi_0|V_0|\phi_0\rangle + 2\sum_{\lambda\neq 0}\sum_{\alpha=1,\ldots,d}\frac{|\langle\phi_0|V_\alpha|\phi_\lambda\rangle|^2}{\varepsilon_\lambda} \tag{10}$$

で与えられる [2]。ただし、$V_0 = \lim_{k\to 0}(-\nabla_k^2 H_k), \mathbf{V} = \lim_{k\to 0}(-\nabla_k H_k)$ である。つまりこの方法は粒子の時間発展を直接追わなくても、拡散係数が計算できることを意味し、stochastic な系のダイナミックな量を求めるのに有効な方法である。

§2 ソフトパーコレーション

パーコレーションモデルは、つながりが重要な働きをする現象を説明するうえで成功をおさめてきた。従来パーコレーションは主に格子上の過程として議論されてきたが、連続系においてもつながりが重要な現象は数多く存在する。

連続系におけるつながりを構成する場合、格子系のように隣接するという概念がない。そこでつながりを次のように定義する。まず空間上にランダムに点を配置する。次にある点を中心にして半径 r_0の円（３次元では球）を描き、この円内にある点はつながっていると定義する。図１はこのような判定法により分類されたクラスターの様子である。ここでは $10r_0 \times 10r_0$のセル中に 150 点配置されている。半径 $r_0 = 1$ とした。同一のシンボルの点は同じクラスターに属していることを意味し、いくつかのまとまったクラスターが形成されている様子がわかる。

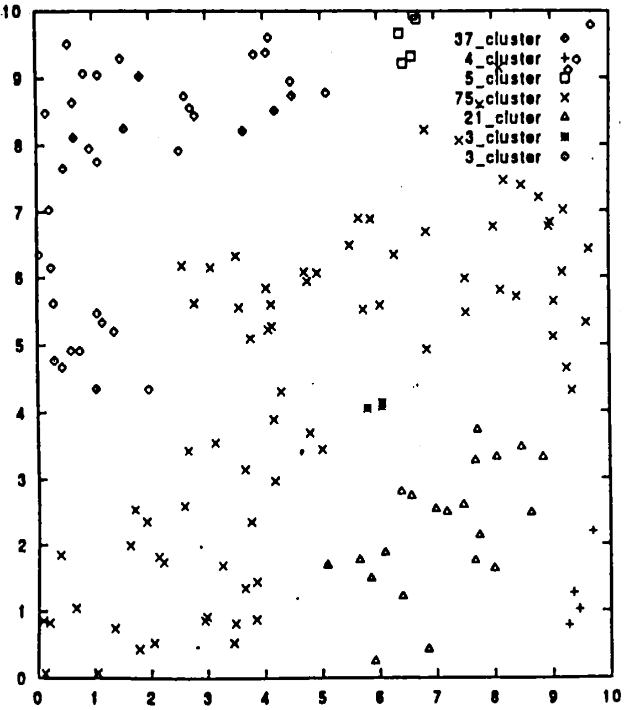

図１：クラスターの様子

このような連続空間内のパーコレーション過程を定義するのにダイナミックな量を用いる方法がある。このような点の間を random walk する粒子の運動を master 方程式で表す。点 s から s′へのジャンプ率 $\omega_{s,s'}$をある距離 r_0 以下では一定、それを超えると 0 とすると、上に述べたつながりの判定に対応した動的パーコレーション過程となる。点の密度を大きくしたとき、拡散係数が丁度 0 でなくなるときが percolation threshold であり、それより高い密度で、無限のかなたに粒子が到達できる確率が有限となることを意味している。

ジャンプ率の距離依存性は、上のように距離に依らずに一定とするより、むしろ距離に依存す

ると考えた方が自然であろう。そこで、次のようなジャンプ率 $\omega_{s,s'}$の距離依存性を仮定する。

$$\omega_{s,s'}(r) = \begin{cases} \omega_0(1-\frac{r}{r_0})^\alpha & r < r_0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{11}$$

$\alpha = 0$ が通常のパーコレーションに対応する。ただし $r = |\mathbf{s} - \mathbf{s}'|$ である。ジャンプ率$\omega_{s,s'}(r)$ はいわばつながりの強度を表す量であり、αの値により cut off 半径 r_0付近の特異性が異る。このようなパーコレーション過程はソフトパーコレーションと呼ばれている。

§3 拡散係数の臨界指数の non universal な振舞

パーコレーション過程の拡散係数 Dを, しきい値付近で次のように表し、

$$D \sim (B - B_c)^\mu \tag{12}$$

拡散係数の臨界指数μを定義する。Bは無次元化された密度であり、点密度をρとすると、2 次元では $B = \rho\pi r_0^2$ また B_cはしきい値を表す。

コヒーレント媒質近似による解析によると、B_cはαの値によらず一定であるが、臨界指数μは、$\alpha < 1$ のときは通常のパーコレーションと等しい値をもつち、$\alpha > 1$ になるとαに比例して増加することが予想されている [3]。これは、$\alpha > 1$ では通常の *universality*が破れていることを意味していて大変興味深い。近年活発に研究されているレジスターネットワークにおいてもほぼ同様の結果が得られている [4]。

このことを数値的に検証するため、2 次元のソフトパーコレーション過程を§1 で述べた方法を用いて調べた。図 2 はいくつかのαにおける拡散係数 $D(B)$ の無次元化した密度 Bに対する依存性を示したもので、3 つの曲線はそれぞれ$\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$ の場合を表し、最小 2 乗法を用いて決定したものである。αの増加にともなってしきい値は変化しないが臨界値付近の立上がりが緩やかになっているのが分かる。なおここでは $15r_0 \times 15r_0$のセル中に最大 450 点を配置して計算した。ただし $D(B)$ は Bの最大の値が 1 になるように規格化してある。図 3 に臨界指数μのα依存性を示す。αとともにμが増加する傾向が見られる。これは$\alpha > 1$ で *universality*の破れが起こるという予想を支持している。

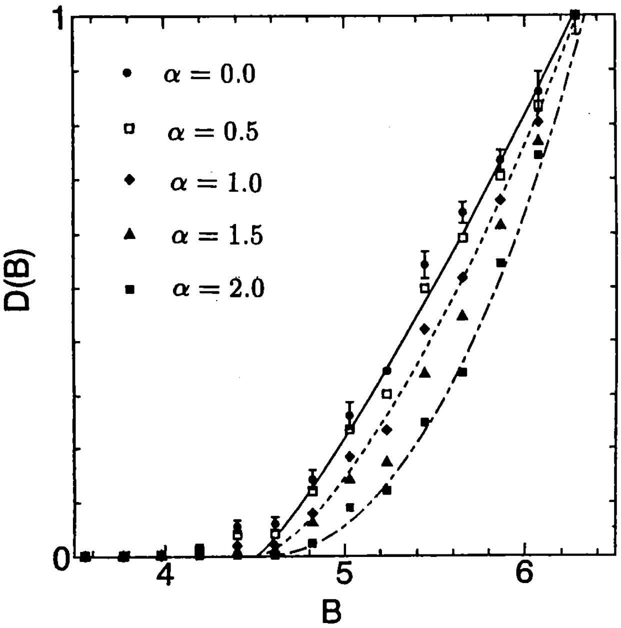

図 2　拡散係数 $D(B)$ の B依存性

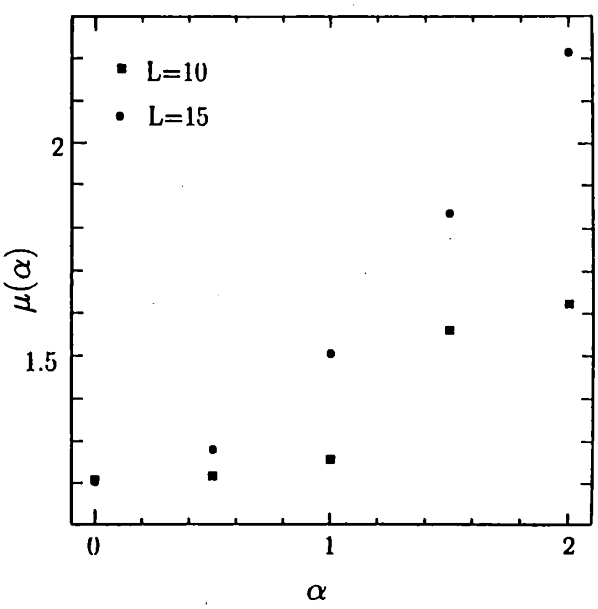

図 3　臨界指数μのα依存性

この研究は、文部省科学研究費重点領域研究「計算物性物理」の援助を得て行われたのである

参考文献

[1] T.Odagaki and M.Lax, Phys.Rev.B**26**,6480,(1982).
[2] B.D.Bookout and P.E.Parris, Phys.Rev.Lett.**71**,17,(1993).
[3] T.Odagaki, J.Phys:Condens Matter **1**,1013,(1989).
[4] P.M.Kogut and J.P.Straley, J.Phys.C:Solid State Phys.**12**, 2151,(1979); P.N.Sen,J.N.Roberts and B.I.Halperin, Phys.Rev.B**32**,3306,(1985).