

ソフトパーコレーションにおける ユニバーサリティーの破れ

九州大学理学部 和智 勇治¹, 小田垣 孝

1. ソフトパーコレーション

パーコレーションは、構造不規則系における多くの現象を理解する上で極めて重要な概念である。構造不規則な系におけるパーコレーション過程は、空間に乱雑に分布した点を対象とし、二点間の距離がある臨界値以下であるとき、それらの点の間につながりが生じると考える。そして、点の密度 n の変化に応じてつながりがパーコレートするかどうか問われる。[1] ソフトパーコレーション過程は、二点間のつながりの強度が距離に依存するという新しい概念のパーコレーション過程であり、つぎのような動的過程を用いて定式化される。[2]

空間内にランダムに分布された点の上をランダムウォークする粒子を考え、その粒子が時刻 t で点 $\mathbf{s}$ にいる確率 $P(\mathbf{s}, t | \mathbf{s}_0, 0) \equiv P(\mathbf{s}, t)$ (ただし、 $t = 0$ での初期位置を $\mathbf{s}_0$ とする) に対して次のマスター方程式に従うダイナミックスを考える：

$$\dot{P}(\mathbf{s}, t) = \sum_{\mathbf{s}'} w_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}', t) - \sum_{\mathbf{s}'} w_{\mathbf{s}'\mathbf{s}} P(\mathbf{s}, t). \quad (1)$$

ただし、和はジャンプの可能な点についてとる。二点 $\mathbf{s}, \mathbf{s}'$ 間のジャンプ率 $w_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}$ が二点間のつながりの強度を表し、

$$w_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} = \begin{cases} w_0(1 - |\mathbf{s} - \mathbf{s}'|/R)^\alpha & |\mathbf{s} - \mathbf{s}'| < R \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

という距離依存性をもつと仮定する。 $\alpha = 0$ が通常のパーコレーションに対応し、 $\alpha > 0$ の場合がソフトパーコレーション過程である。[2]

2. 拡散係数の厳密な表式

(1) 式に従って運動する粒子のダイナミックスを計算機実験で追って拡散係数を求めるには、長時間の膨大な計算が必要であり、しかも $t \rightarrow \infty$ の極限をとることは原理的に不可能である。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。そこで、周期境界条件を積極的に用いて、粒子の位置の時間発展を追

¹現在 三菱電機 ULSI 開発研究所

うことなく拡散係数を厳密に求める方法を提案する。周期境界条件を用いて粒子の位置をセルの番号 $\mathbf{n}$ とセル内の位置 $\mathbf{s}$ で表すと、マスター方程式は

$$\frac{dP^{\mathbf{n}}(\mathbf{s}, t)}{dt} - \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{s}'} H_{\mathbf{ss}'}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}} P^{\mathbf{m}}(\mathbf{s}', t) = 0 \quad (3)$$

$$H_{\mathbf{ss}'}^{\mathbf{m}} = w_{\mathbf{ss}'}^{\mathbf{m}} - \delta_{\mathbf{m}0} \delta_{\mathbf{ss}'} \sum_{\mathbf{m}', \mathbf{s}''} w_{\mathbf{s}''\mathbf{s}}^{\mathbf{m}'} \quad (4)$$

と書くことができる。 $w_{\mathbf{ss}'}^{\mathbf{m}}$ の意味は自明である。

$$H_{\mathbf{k}} = \left[\sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{m} + \mathbf{s} - \mathbf{s}')} H_{\mathbf{ss}'}^{\mathbf{m}} \right] \quad (5)$$

という $N \times N$ 行列 (N はセル内の点の数) を考えると、 H_0 の固有値、固有ベクトル $\epsilon_\lambda, |\phi_\lambda\rangle$ 用いて、振動数 ω に依存する拡散係数 D_ω は

$$\begin{aligned} D_\omega = & \left\langle \frac{1}{2d} [\langle \phi_0 | V_0 | \phi_0 \rangle - 2 \sum_{\alpha=1}^d \sum_{\lambda \neq 0} \frac{|\langle \phi_0 | V_\alpha | \phi_\lambda \rangle|^2}{i\omega - \epsilon_\lambda}] + \frac{1}{2dN} \sum_{\mathbf{s}_0} \sum_{\lambda \neq 0} \frac{i\omega}{i\omega - \epsilon_\lambda} [\langle \phi_0 | V_0 | \phi_\lambda \rangle \right. \\ & \left. - 2 \sum_{\alpha=1}^d \sum_{\lambda' \neq 0, \lambda} \frac{\langle \phi_0 | V_\alpha | \phi_{\lambda'} \rangle \langle \phi_{\lambda'} | V_\alpha | \phi_\lambda \rangle}{(i\omega - \epsilon_{\lambda'})}] \langle \phi_\lambda | \mathbf{s}_0 \rangle \right\rangle \quad (6) \end{aligned}$$

で与えられる。ただし、 $U_0 = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} (-\nabla_{\mathbf{k}}^2 H_{\mathbf{k}})$, $\mathbf{V} = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} (-\nabla_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}})$, d は空間次元数である。 [3, 4] また、 ϵ_λ の最大値は $\epsilon_0 = 0$ である。静的拡散係数は、(6) 式において $\omega \rightarrow 0$ の極限を取り、

$$D_0 = \frac{1}{2d} \left\langle \langle \phi_0 | U_0 | \phi_0 \rangle + 2 \sum_{\alpha=1}^d \sum_{\lambda \neq 0} \frac{|\langle \phi_0 | V_\alpha | \phi_\lambda \rangle|^2}{\epsilon_\lambda} \right\rangle \quad (7)$$

で与えられる。

3. 拡散係数の臨界指数

拡散係数 D_0 をしきい値 B_c 付近で

$$D_0 \sim (B - B_c)^\mu \quad (8)$$

のように表し、拡散係数の臨界指数 μ を定義する。ただし、 B は無次元化された密度であり 2 次元では $B = n\pi R^2$ である。図 1 は、 $15R \times 15R$ のセル中に最大 450 点を配置した系の拡散係数を、様々な α について B の関数として示したものである。図から、 B_c は α に依らず、 $B_c \sim 4.5$ であることがわかる。

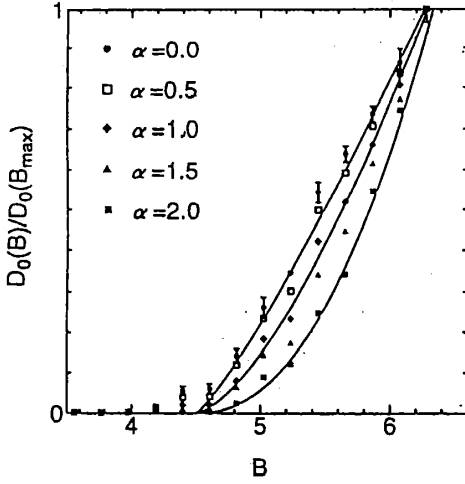


図 1. 静的拡散係数 D_0 の密度依存性. 三本の曲線は, $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$ について, $B_c = 4.5$, $D_0 \propto (B - B_c)^\mu$ とした最小自乗法フィットである. D_0 は, $B_{\max} = 2\pi$ における値で規格化して示してある. 典型的な誤差を $\alpha = 0.0$ の場合に示す.

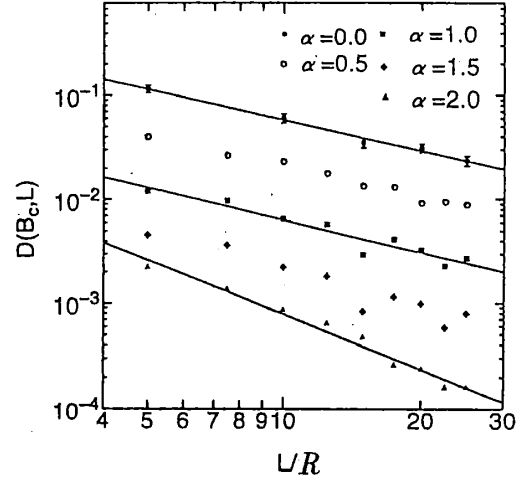


図 2. 拡散係数 $D(B_c, L)$ ($B_c = 4.5$) の L 依存性を $\alpha = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ について示したものの. 有限サイズスケリング理論によると, この図における直線の傾きが μ/ν を与える. 典型的な誤差を $\alpha = 0.0$ の場合に示す.

臨界指数 μ の α 依存性を詳しく調べるために, 有限サイズスケリングの方法を用いる. セルの大きさが L のときの静的拡散係数を $D(B, L)$ と書く. $L \gg 1$, $(B - B_c) \sim 0$ の極限では, $D(B, L)$ は

$$D(B, L) = L^{-\mu/\nu} F[(B - B_c)L^{1/\nu}] \quad (9)$$

と書ける. ここで, $F(x)$ はスケール関数である. $F(0)$ は定数だから $D(B_c, L)$ は L のみの関数となり,

$$D(B_c, L) \propto L^{-\mu/\nu} \quad (10)$$

と表される. 図 2 は, $B_c = 4.5$ として $D(B_c, L)$ の L 依存性を $\alpha = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ について示したものである. 最小自乗法で求めた傾きから μ/ν が求められ, $\nu = 4/3$ を援用して, 拡散係数の臨界指数 μ が決定される.

図 3 は, この様にして決定された指数 μ を α の関数として図示したものである. $0.0 \leq \alpha \leq 1.0$ に対して μ は, $1.30 (-0.03, +0.07)$ であり, また $1.0 < \alpha < 2.5$ では μ は α とともに直線的に増加する. これらの振舞をまとめると,

$$\mu(\alpha) = \begin{cases} \mu_{un} & (0 \leq \alpha \leq 1.15) \\ 1.0(\alpha - 1) + 1.15 & (\alpha \geq 1.15) \end{cases} \quad (11)$$

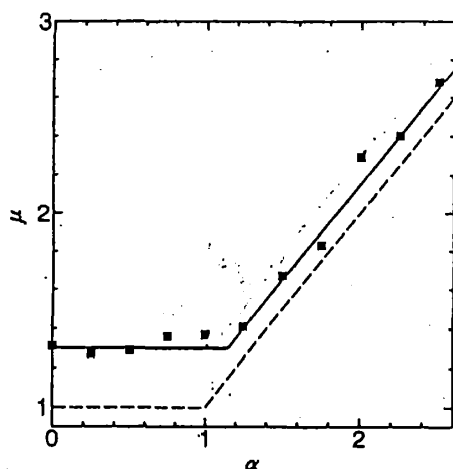


図 3. ソフトパーコレーションモデルの臨界指数 μ の α 依存性. ■ は, シミュレーションの結果. 実線は (11) 式, 破線は平均場近似の結果.

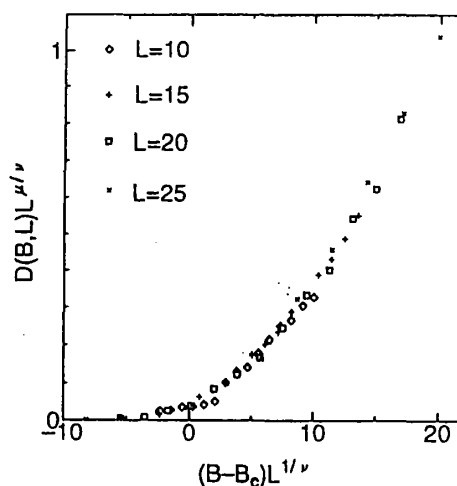


図 4. $\alpha = 2.0$ に対する静的拡散係数のスケール関数. (11) 式で予想される $\mu = 2.15$ および $\nu = 4/3$ を用いた.

のように書くことができる. 図 3 の実線はこの関係を示したものである.

(11) 式を検証するために, (9) 式を用いて求めた静的拡散係数のスケール関数を図 4 に示す. これは, $\alpha = 2.0$ について $D(B, L)L^{\mu/\nu}$ を $(B - B_c)L^{1/\nu}$ に対して図示したものである. ただし, $\nu = 4/3$. 様々な L におけるデータは, ほぼ同一のスケール関数にのっており, ここで得た $\mu(\alpha)$ の推定が正しいことを示している.

以上の結果は, α とともに μ が変化することを示しており, ユニバーサリティーの破れが起こるということを示している. 一方, しきい値 B_c は α の値によらず一定であり, Odagaki[1] によって予想されたコントラユニバーサリティーが成り立つことを示している. なお, $\alpha \sim 1$ におけるクロスオーバーは, 今後の研究課題である.

この研究は, 文部省科学研究費重点領域研究「計算物理学」の援助を得て行われた.

References

- [1] T. Odagaki and M. Lax, Phys. Rev. **B36**, 3851 (1987).
- [2] T. Odagaki, J. Phys: Condens. Matter **1**, 1013 (1989).
- [3] Y. Wachi and T. Odagaki, preprint.
- [4] B.D. Bookout and P.E. Parris, Phys. Rev. Lett. **71**, 17 (1993).