

Title	14.格子DLAにおける異方的パターンへのcross over(拡散に支配された凝集(DLA)およびその周辺の問題,研究会報告)
Author(s)	大槻, 弘幸
Citation	物性研究 (1988), 50(1): 43-46
Issue Date	1988-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/93038
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

「拡散に支配された凝集 (DLA) およびその周辺の問題」
ければならない。これは高安等³⁾⁴⁾のシュミレーションでは仮定されており、彼等の解析を考
える際には問題はないが、現実の系ではそぐわない場合がありうる。次に (3b) (12) と云った関
係式は凝集確率がクラスターのサイズに依存しない場合に成立するが、一般には成り立たない
であろう。また式(2)の表式は臨界現象では特異な次元解析が正しい結果を与えることになっ
ている。これは不可逆凝集固有の特性であり、可逆の場合は次元解析では何も言えない。最後に
乱流のカスケード過程との類似を指摘して筆を置きたい。何れにせよ、詳細は筆者の論文⁶⁾を
参照のこと。

参 考 文 献

- 1) T. Vicsek, P. Meakin and F. Family, Phys. Rev. A 32 (1985) 1122.
- 2) Z. Rácz, Phys. Rev. A 32 (1985) 1129.
- 3) H. Takayasu and I. Nishikawa, *Proc. 1st. Int. Symp. on Science on Form* (KTK Sci. Publ. 1986).
- 4) H. Takayasu, I. Nishikawa and H. Takayasu, submitted to Phys. Rev. A.
- 5) M. Doi, J. Phys. A 9 (1976) 1465.
応用例については、最も最近では
T. Ohtsuki and T. Keyes, Phys. Rev. A 36 (1987) 4434.
- 6) H. Hayakawa, submitted to J. Phys. A.

14. 格子DLAにおける異方的パターンへの cross over

中央大・理工 大槻弘幸

I. 格子DLA及び格子一般化DLAにおける cross over

2次元のDLAについて計算機シュミレーションが行われ始めた頃、得られたDLA
パターンはそれが横たわる格子の形には依存せずにはほぼ等方的になると考えられて
いた。しかしその後、粒子数が 4×10^6 にも及ぶシュミレーション¹⁾が正方格子上で
行われると、できたパターンは十字形をしており明かに格子の形に依存しているこ
とがわかった。また、もっと小さなパターン (粒子数 10^4 程度) でも、いくつかのパ
ターンを重ね合わせることによって、基本的な形は異方性を持っていることがわか
った。¹⁾

I.1 スケール理論からの予想

研究会報告

この cross over について出されたスケール理論²⁾及びそれを修正し一般化DLA (η -モデル)に拡張した理論³⁾によると、cross overの起こる粒子数を N_c 、格子の異方性を示す方向の数を m としたとき

$$N_c \sim m^\beta$$
$$\beta = \begin{cases} \frac{4+\eta}{\eta} & (\eta < 2) \\ \frac{4+\eta}{2} & (\eta > 2) \end{cases}$$

と表され、正方格子 ($m = 4$) の場合 $N_c \sim 10^3$ ($\eta = 1$)、 10^2 ($\eta = 2$) と予想される。

I.2 シミュレーション及び結果

上述のスケール理論の妥当性を確かめるために計算機シミュレーションを行った。パターンは異なる乱数の種によって、 $\eta = 1$ の場合32個、 $\eta = 2$ の場合16個を重ね合わせ、さらにoctantに分けそれを重ねたものを再び全面に広げるという方法を用いた。

$\eta = 1$ の場合、粒子数 $N = 3 \times 10^3$ まで調べたが、その外形はすでに等方的ではなくダイヤモンド形に近い。 $\eta = 2$ では $N = 6 \times 10^2$ まで調べた(図1)。強い異方性が現れているのがわかる。

以上のようにシミュレーションは理論と一致し、理論の妥当性が確認された。

I.3 これからの課題

論文³⁾でも述べられているように、 $\eta > 2$ の場合でも成り立つかどうか確かめなければならない。また、正方格子以外の格子についても確かめなければならない。

II. 表面拡散を考慮したモデル

実際の結晶成長においては、それを構成する粒子が最初に到達した結晶表面にすぐに定着するよりも、表面上を拡散しポテンシャルの低い場所に定着しやすい。ということ考慮にいたしたモデルで計算機シミュレーションを行った。ここでは Sticking probability を変えるモデル⁴⁾からヒントを得て、表面上を拡散して行くモデルについて行った。

II.1 アルゴリズム及びシミュレーション

基本的な部分はDLAと同様でsticking probabilityも1、即ち、Random-walker (RW)がクラスターのnearest-neighbor siteに到達したとき、そのRWは必ずクラスターに取り込まれる。但しそれがある位置に定着する確率 p は粒子がいる位置のnearest-neighborである場所のうちいくつがクラスターによって占められているか(いわゆるボンドの数 B) に依存して

正方格子のとき

$$p = \begin{cases} 1 & B = 3 \\ \beta_s & B = 2 \\ \beta_s^2 & B = 1 \end{cases}$$

三角格子のとき

$$p = \begin{cases} 1 & B = 5 \\ \beta_t & B = 4 \\ \beta_t^2 & B = 3 \\ \beta_t^3 & B = 2 \\ \beta_t^4 & B = 1 \end{cases}$$

とした。もしこれが満たされないとき RW はクラスターの表面上を移動する。 β_s 、 β_t としては、1.0, 0.1, 0.01 を基本として行った。もちろん $\beta_s(\beta_t) = 1$ では ordinary DLA に一致する。

正方格子の場合表面を移動するのに nearest-neighbor site へと、next-nearest-neighbor site への移動が考えられる。それに対して次の3通りの方法で行った。

- 1) nearest-neighbor site にのみ移動できる。
- 2) nearest-neighbor site に移動できないときのみ next-nearest-neighbor site へ移動できる。
- 3) 常に両方へ移動できる。

II. 2 結果

図2に正方格子での結果を示す。dendriteやhopperといわれるような形に似たものやBerg effectのようなものも見る事ができる。「ポテンシャルの低いところに定着しやすい。」ということを考えてただけでこのような形を得ることができた。さらに細かい成長過程や β 依存性を調べることは興味深いことのように思われる。

三角格子についてはもともと異方性が出にくいこともあり良い結果が得られなかった。雪の結晶のような形を得るためには他のパラメータも考慮しなければならない。今後の課題として単純ではあるが物理的意味のはっきりしたモデルを考え、シミュレーションを行いたいと思う。

参考文献)

- 1) P. Meakin, R. C. Ball, P. Ramanlal and L. M. Sander : Phys. Rev. A 35 (1987) 5233.
- 2) F. Family and H. G. E. Hentschel : to appear in J. Chem. Soc. Faraday Trans. 83 (March 1987), and paper presented at StatPhys-16, August 1986, Boston.
- 3) M. Matsushita, F. Family and K. Honda : Phys. Rev. A 36 (1987) 3518.
- 4) J. R. Banavar, M. Kohmoto and J. Roberts : Phys. Rev. A 33 (1986) 2065.

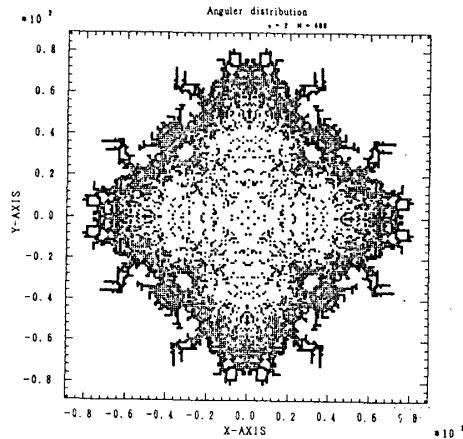


図 1 : $\eta = 2$ 、 $N = 6 \times 10^2$ のパターンを 16 個重ね、各 octant を 1 カ所に重ねて再び展開したもの。異なる記号は、異なる密度等高線を示す。

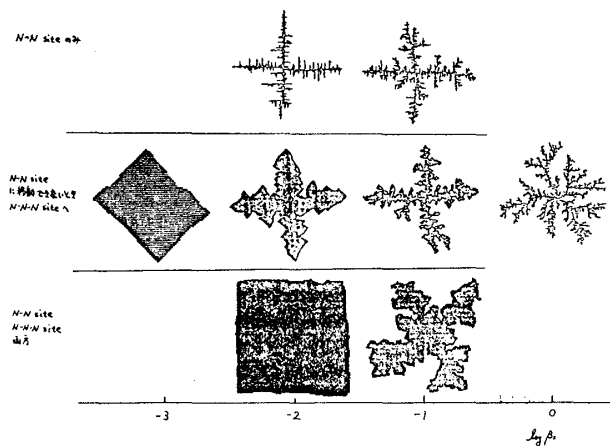


図 2 : 正方格子上で表面拡散を考慮した場合。上からそれぞれ 1) N-N site のみ 2) N-N site に移動できないとき N-N-N site へ 3) N-N site, N-N-N site 両方、の移動の仕方に対応している。横軸は $\log \beta_s$ 。 $\beta_s = 1$ のときは ordinary-DLA に一致する。

15. DLA と結晶成長

九大・教養 太田 正之輔

ブラウン粒子の吸着現象が作る凝集体の計算機シミュレーションから始った DLA 研究は、金属葉、沿面放電、ヴィスコス・フィンガー、結晶成長等の実験的検証を得て、非線形非平衡系におけるパターン形成の新分野として急速に発展してきている。DLA は等方的で自己相似性を有するフラクタルなパターンを作り、フラクタルパターン研究の物理的基礎をなしてきた。Witten と Sander によって提起された DLA の計算機モデルは、ブラウン粒子を用いたラプラス