

5. 乱れたセル構造のパターン動力学

九大・理 川崎 恭 治

自然界には色々な種類のセル構造がみられる。生体の未分化の細胞の集合、玄武岩の柱の集合体の切り口*)等は身近にみられる。これらのセル構造は皆大体同じように見えるが果たしてそうなのか？また、もしそうだとすれば何故そうなるのか？更に、これ等パターンの統計的振舞には一般的法則があるのだろうか？これらはこの様なセル構造を見た者が誰しもいただく素朴な疑問である。この様な問いに真剣に答えようとする研究が以前から細々とながら続けられている¹⁾ これらを物理の問題としてきちんと理解しようと思うなら上にのべた例よりもその素生や生因がはっきりしているものがよい。この様な研究の対象になっているものとして2枚のガラス板の間に作られた石鹼泡と多結晶の粒界構造がある。これらは時間と共に或るきまったダイナミカルな法則によってスケールの大きいセル構造へと進化して行く。一方、理論的な研究は余り進んでいない。最近 Rivier²⁾ はエントロピー極大原理を応用する試みを発表しているが採用された束縛条件に必然性があるのか疑問が残る。この様な状況の下で計算機シミュレーションがいくつか試みられている。その代表的な例は2次元格子上的 Potts モデルについてモンテ・カルロ法による Exxonグループの研究である³⁾ 一方この問題ではっきりした事と云うにはできるだけセルの数を多くして統計誤差を減らす必要がある。この点で格子模型によるシミュレーションは厳しい限界がある。最近の成長則の指数を巡る混乱はこの事を物語っている⁴⁾

最近我々(長井, 川崎, 榎本, 中村)は充分多くのセルを効率よく取り扱うことができるシミュレーション用の模型を開発したのでそれについて報告した。基本的考え方はドメインの種類の数が非常に大きい時にはドメインの界面が殆ど平面になっている事実からすべての界面を平面でおきかえる事にある。こうすれば2次元系では界面は直線になり, 3本の直線の交点(バーテックス)の位置を指定する事によってセル構造をきめることができる。一方バーテックスの運動方程式を求めるにはパターン動力学の変分定式化⁵⁾ によるのが便利である。こうして出て来た運動方程式は一般に(以下2次元で考える)

$$\sum_j \eta_{ij} \frac{d}{dt} \mathbf{r}_i = -\sigma \sum_j \frac{^{(i)} \mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \quad (1)$$

の形をしている。ここで η_{ij} はバーテックスの配置 $\{\mathbf{r}_i\}$ に依存した摩擦係数, σ は界面エネ

*)福岡市西郊の「芥屋の大門」にその見事な実例がある。

ルギ, 右辺の和はバーテックス i と界面 (ボンド) で結ばれたバーテックスについてとる。この式は大変複雑であるので更に簡単化を行なう。その程度に応じて Model I, Model II, Model III が得られる。最も簡単な Model III では(1)の左辺が

$$\frac{1}{2L} \overline{r(t)} \frac{d}{dt} r_i \quad (2)$$

となる。ここで $\overline{r(t)}$ は平均のボンドの長さ, L はある係数である。Model II では(2)の代りに

$$\frac{1}{6L} \sum_j^{(i)} |r_i - r_j| \frac{d}{dt} r_i \quad (3)$$

が来る。これら簡単化されたモデルは元の系からみれば乱暴な近似が含まれる。しかし我々の興味は成長パターンの統計法則で期待されるユニバーサルな性質にあるならば, この性質をこわさない範囲で可能な限り単純化する方がむしろ望ましい。しかしどこまでユニバーサルな性質が保たれているのか理論がない以上先験的にはわからない。これには色々なモデルで得られる結果を詳細に比較検討するしかない。ここでユニバーサルな性質と云ったのは(1)ドメインの時間的な成長則: $\overline{r(t)} \propto t^\nu$ とした時の ν の大きさ(2)乱れたセル構造の random topology である。これまでに Model III についてはシミュレーションがかなり行われて予想される結果がえられている。特に $\nu = 1/2$ の値やセルの角形分布やその相関についての Aboav-Weaire 則と云われているものが確かめられている。これらの結果の一部は発表されて居り^{5,6)} 他も発表予定⁷⁾ であるのでここでは詳しくはのべない。また, 上記のモデルは多結晶を念頭においており石鹸泡については別に考えなければならぬが一つの予想として上記(2)の性質はこれらのちがいを越えてユニバーサルではないかと思っている。何れにしても我々のモデルを用いればこれまで手が届かなかった大きな系についてのシミュレーションが可能になり乱れたセル構造の統計についての新しい知見が得られるものと期待している。

文 献

- 1) D. Weaire and N. Rivier, Contemporary Physics 25 (1984) 59.
- 2) N. Rivier, Phil. Mag. B 52 (1985) 795.
- 3) P. S. Sahni, D. J. Srolovitz, G. S. Grest, M. P. Anderson and S. A. Safran, Phys. Rev. B 28 (1983) 2705.
- 4) G. S. Grest, M. P. Anderson and D. J. Srolovitz, Proc. NATO Conf. on Time-dependent effects

in disordered materials, Geilo, Norway (1987).

- 5) K. Kawasaki, 19th Yamada Conference on Ordering and Organization in Ionic Solutions (Nov. 1987, Kyoto).
- 6) T. Nagai, K. Kawasaki and K. Nakamura, in Dynamics of Ordering Processes in Condensed Matter, eds S. Komura and H. Furukawa, Plenum. Press.
- 7) 長井達三, 川崎恭治, 中村勝弘, 日本物理学会誌解説

6. 自己アフィン・フラクタルとクラスター統計

中大・理工 松下 貢

§1. はじめに

d 次元空間内で d_s 次元の下地 (Substrate; $d_s < d$) からパターンが成長するような状況を考える。例えば, 2次元平面上に線状に並んだ種粒子 ($d_s = 1$) に対する拡散律速型の凝集 (diffusion-limited deposition-DLD) や, 下地平板 ($d_s = 2$) への通常の蒸着などがその例である。このような場合には単にパターンの全体的構造だけでなく, それを構成する個々のクラスターの構造やその統計が議論の対象となり得る。しかも, パターン形成の経緯から考えてこれら3者は密接な関係があるはずである。事実, 全体のパターンとそれを構成する個々のクラスターとが同じフラクタル次元を持つ自己相似フラクタルの場合についてはこの関係は既に議論されている¹⁻³⁾

ここでは個々のクラスターが自己アフィン・フラクタルである場合に議論を拡張する。単純な拡張だが, これまでなされた数多くのシミュレーションを驚く程すっきりと統一的にまとめることができ, かつ多くの今後の課題が見えて来る。

§2. 自己アフィン・クラスター

s 個の粒子からなる個々のクラスターの下地から測ったrms高さ h_s , 及びそれに垂直なrms幅 w_s が

$$h_s \sim s^{\nu_{\parallel}} \quad (1a)$$

$$w_s \sim s^{\nu_{\perp}} \quad (1b)$$

とスケールされるものと仮定する。 $\nu_{\parallel} = \nu_{\perp} = \nu (= D^{-1})$ の時にはクラスターは自己相似(そ