24．２次元セルパターン成長の平均場理論

九州共立大　九大理^A　長井達三　川崎恭治^A　奥園　透^A

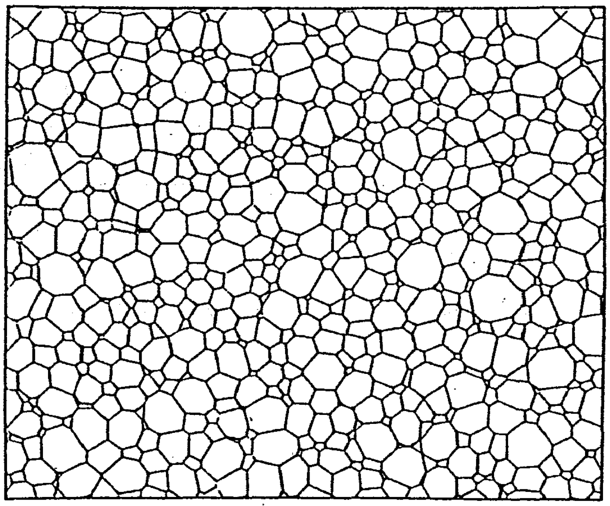
§１　序論

２次元セルパターン成長の性格は、多くの実験（石鹸泡系、結晶粒系）および計算機シミュレーションによって、最近、次第に明らかになってきた（第1図参照）。　その特徴は次の三つに纏められる：

（i）ベキ則成長　平均セルサイズ$R(t)$の長時間（t）漸近形は$R(t)=At^{\nu}$、ここでAとνは正定数である；

（ii）自己相似性　ベキ則成長の時間域で、セルパターンは自己相似的成長をする（スケール性）；

（iii）角数相関　n角形に隣接するセルの平均角数は$m(n)=K_1+K_2/n$、ここで K_1とK_2は正定数である（Aboav-Weaire則）。



第1図　2次元セルパターン　Vertexモデルによるシミュレーションのスケール域におけるスナップ・ショット。

成長則指数νは各セルの辺の運動方程式の次元解析で決まり、より詳細な系の性質に依らない。　自己相似性を記述するセル角数およびセルサイズ分布のスケール関数はνより詳細な個々の系の性質を反映する。　定数A、K_1およびK_2は更に詳しく個々の系の違いを反映する。　このような普遍性クラスの分類は今後の重要な課題である。

最近、いくつかの２次元モデルに対して、大きいセル系の計算機シミュレーションが実行されるようになり、この系のスケール域での統計的性質が明らかになってきた。[1,2] 我々の目的は、それらを統一的に説明し、前述の普遍性クラスの階層性を明らかにすることである。

§２　平均場理論

次の仮定をする。　２次元平面を埋めるセル系の状態は、各セルの角数n_iと面積A_iの組$(n_1, n_2, \cdot\cdot\cdot, A_1, A_2, \cdot\cdot\cdot)$で記述され、$A_i$の時間変化は次式に従う：

$$\dot{A}_i=\alpha(n_i) \qquad (i=1,2,\cdot\cdot\cdot Nc) \tag{2.1}$$

ここで、$\alpha(n_i)$はn_iのみの関数である。　更に、単位時間当りの遷移（$n_i \to n_i \pm 1$）の割合（遷移率と呼ぶ）を$W_{\pm}(n_i, A_i; t)$とする。　セルの角数は$n_i \geq 3$とする。

そうすると、分布関数h(n,A;t)に対するマスター方程式を書くことが出来る。[3]

考えているセルパターン系が,どの様な初期状態から出発しても、充分時間が経過した後には自己相似的成長をするものと仮定する。 そうすると、系の特徴的な長さは平均セルサイズR(t)だけであり、更にそれが系の時間発展を記述するから、分布関数h(n,A;t)と遷移率$W_{\pm}(n,A;t)$は次の様にスケールされる：

$$h(n,A;t)=\frac{1}{\bar{A}}h^{*}(n,x) \tag{2.2}$$

$$W_{\pm}(n,A;t)=\frac{\dot{\bar{A}}}{\bar{A}}W^{*}_{\pm}(n,x) \tag{2.3}$$

ただし、$\bar{A}$は平均セル面積で$\bar{A}\equiv R(t)^2$と定義する。 また、$x\equiv A/\bar{A}$ で、$h^{*}(n,x)$と$W^{*}_{\pm}(n,x)$は対応する量のスケール関数である。 $h^{*}(n,x)$に対するスケール方程式から成長則は次のように決まる。[3]

$$\bar{A}(t)=\alpha t \tag{2.4}$$

ここで、係数αは$h^{*}(n,x)$を使って次のように表現される：

$$\alpha=2\sum_{n=3}^{\infty}\alpha(n)\frac{\langle x\rangle_n}{\langle x^2\rangle} \tag{2.5}$$

ただし、

$$\langle x\rangle_n\equiv\int_0^{\infty}dx\,x\,h^{*}(n,x),\quad \langle x^2\rangle\equiv\sum_{n=3}^{\infty}\int_0^{\infty}dx\,x^2h^{*}(n,x) \tag{2.6}$$

(2.4)式から成長則指数は$\nu=1/2$となり、これは運動方程式(2.1)の次元解析から期待されるものと一致する。 これらの成長則に関する結果(2.4)-(2.6)式は遷移率の詳細な形に陽に依らず、(2.3)式で表されるスケール性を持てば良い。

マスター方程式から、角数分布f(n,t)の方程式は次の形に導かれる：

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\dot{N}c}{Nc}\right\}f(n,t)=j(n-1,n;t)-j(n,n+1;t) \qquad (n\geqq 3) \tag{2.7}$$

ここで、$j(n,n+1;t)$は遷移（$n\rightarrow n+1$）を起こすセルの流束で、

$$j(n,n+1;t)=\int dA\ \{W_+(n,A;t)h(n,A;t)-W_-(n+1,A;t)h(n+1,A;t)\} \qquad (2.8)$$

(2.7)式の左辺第2項はセル数$Nc(t)$の減少に起因する、相対的な涌き出しを表わす。
更に、$f(n,t)$には規格化条件と幾何学的制約が付く：

$$\sum_{n=3}^{\infty} f(n,t)=1 \qquad (2.9)$$

$$\sum_{n=3}^{\infty} nf(n,t)=6 \qquad (2.10)$$

遷移率は、角数が大きければ、角数に比例すると考えられるので次の様に書く。

$$W_{\pm}(n,A;t)=C_{\pm}(t)n+W'_{\pm}(n,A;t) \qquad (2.11)$$

この式で、$C_{\pm}(t)$は大角数セルの各辺の遷移率であり、$W'_{\pm}(n,A;t)$は小さい角数に対する補正で、$n\rightarrow\infty$で0に近付くものとする。Fradkovは我々のマスター方程式と（全く同等ではないが）類似の方程式を導いたが、$W'_{\pm}(n,A;t)$を完全に落とした。[4] 以下で示すように、我々の理論ではそれは重要な役割をする。即ち、$W'_{\pm}(n,A;t)$を全て0にすると角数分布の分散が発散する。これは今までに為された実験およびシミュレーションの結果に合わない。

§3　角数分布の母関数

(2.7)式を解くために、次のような母関数を考える。

$$\Psi(z,t)=\sum_{n=3}^{\infty} f(n,t)z^n \qquad (3.1)$$

$\Psi(z,t)$の従う方程式は、(2.7)式に(2.11)式を代入して、

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\dot{N}c}{Nc}-(z-1)(C_+z-C_-)\frac{\partial}{\partial z}\right\}\Psi(z,t)=\frac{\dot{N}c}{Nc}z^2+$$
$$+(z-1)\sum_{n=2}^{\infty} j'(n,n+1;t)z^n \qquad (3.2)$$

(3.2)式右辺の最後の項は遷移率の補正項からきた項で、$j'(n,n+1;t)$は(2.8)式の

WをW'で置き換えたものである。

規格化条件(2.9)式と幾何学的制約(2.10)式は次の様になる：

$$\Psi(1,t)=1 \tag{3.3}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial z}(1,t)=6 \tag{3.4}$$

スケール域で角数分布の母関数は時間に依存せず、

$$\Psi^*(z)=\sum_{n=3}^{\infty} f^*(n)z^n \tag{3.5}$$

と書ける。 (3.2)式から

$$\left\{\kappa(z-1)(z-\gamma)\frac{d}{dz}+1\right\}\Psi^*(z)=z^2+(1-z)\sum_{m=2}^{\infty}\varepsilon_{mm+1}z^m \tag{3.6}$$

ただし、

$$\kappa\equiv C_+^*,\quad \gamma\equiv\frac{C_-^*}{C_+^*},\quad C_\pm(t)=C_\pm^*\frac{\dot{\bar{A}}}{\bar{A}} \tag{3.7}$$

$$\varepsilon_{mm+1}\equiv\int_0^\infty dx\,\{W'^*_+(m,x)h^*(m,x)-W'^*_-(m+1,x)h^*(m+1,x)\} \tag{3.8}$$

この式でε_{mm+1}が補正項で、mが大きくなると共に充分急激に小さくなるものとする。 (3.6)式の解は次式で与えられる：

$$\Psi^*(z)=C_0\left|\frac{z-1}{z-\gamma}\right|^\beta+\sum_{m=0}^{\infty}a_m z^m \tag{3.9}$$

ここで、C_0は積分定数で指数βは

$$\beta\equiv 1/[\kappa(\gamma-1)]=1/(C_-^*-C_+^*) \tag{3.10}$$

(3.9)式の第2項の係数a_mは次の漸化式で与えられる。

$$\kappa(m-1)a_{m-1}+[1-\kappa(\gamma+1)m]\,a_m+\kappa\gamma(m+1)a_{m+1}=b_m \qquad (3.11)$$

ただし、

$$b_m = \begin{cases} 0 & , \quad m=0,1 \\ =3C_-^* f^*(3) & , \quad m=2 \\ =\varepsilon_{mm+1}-\varepsilon_{m-1m} & , \quad m\geqq 3 \end{cases} \qquad (3.12)$$

幾何学的制約(3.4)式から

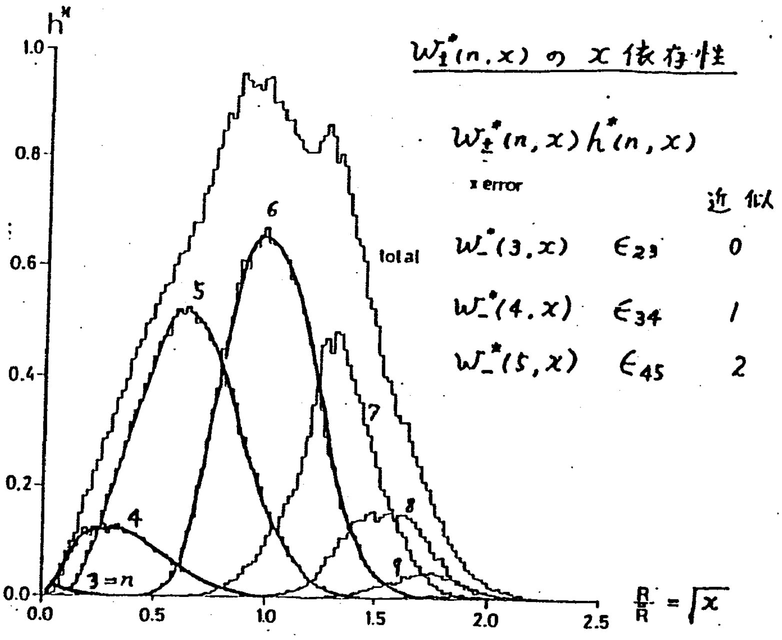
$$\beta=\frac{6}{4+\sum_{m=2}^{\infty}\varepsilon_{mm+1}} \geqq 1 \qquad (3.13)$$

スケール域における角数分布は(3.9)式から次式により求められる。

$$f^*(n)=\frac{1}{n!}\,\frac{d^n\Psi^*}{dx^n}(0) \quad , \quad n\geqq 3 \qquad (3.14)$$

§4　補正項の役割

遷移率(2.11)式で第1項はx依存性を持たない。　以下にみるように、これは小角数セルについては良くなく、補正項を考慮しなければならない。　流速j(n,n+1;t)の式(2.8)から分かるように、遷移率$W_\pm^*(n,x)$は同じ角数の分布$h^*(n,x)$と積の形で現れる。故に、分布が0でないxの領域で、遷移率の変化が緩やかならば、遷移率のx依存性を無視できる。　第2図にVertex モデルのシミュレーションから得られた角数別サイズ分布$h^*(n,x)$を示す。[5] n=3を見ると、$\sqrt{x}$～0.01-0.25の範囲で分布が0でない。3角形の消滅は$\sqrt{x}$～0.01で起こる。従って、$W_-^*(3,x)$のx依存性は強い。　一方、3角形が4角形へ変わる遷移は、3角形セルの1つの



第2図　角数別サイズ分布

頂点から出る3辺の中で、その3角形に属さない1つの微小辺の組替え（T1過程）によって起こる。 従って、この過程はxに強く依存しない。 更に、第2図から分かるように、n=4の分布はn=3の分布を完全に含んでいるので、どのxに対しても$3\rightarrow4$の遷移は可能である。 故に、$W_+^*(3,x)$ のx依存性は弱い。 同様にして、$W_-^*(4,x)$はx依存性が強い。 第2図を見ると、nが大きくなるに従って隣合う分布の重なる割合が増大しているので、遷移率のx依存性は弱くなると考えてよい。従って、補正項ε_{mm+1}はmと共に近似の段階を表わす。 以下、補正項をmまで考慮するとき第(m-2)近似と呼ぶ。全ての補正項を0にすると、(3.13)式から$\beta=3/2$となり(3.9)式から角数の2次モーメントが発散することが分かる。 しかし、これを支持するような実験またはシミュレーションの報告はない。 従って、補正項を考慮することが重要である。

（１）第0近似

この近似ではε_{23}だけを残す。 角数の2次モーメントが有限であることを要請すると、$\beta=1$が唯一の解で、全てのパラメタは決まる。 このとき、角数分布は次のようになる。

$$f^*(n)=(\gamma-1)\gamma^{2-n} \quad , n\geqq 3 \tag{4.1}$$

ただし、$\gamma=4/3$。 これはnの単調減少関数であるから、実験及びシミュレーションの結果を説明しない。

（２）第1近似

この近似ではε_{23}とε_{34}を残す。 角数の3次モーメントまで有限であることを要請すると、$\beta=1$または$\beta=2$が解である。 パラメタは1個未定で、それをγに選ぶと角数分布は次のようになる。

(2a) $\beta=1$の場合

$$f^*(3)=\frac{1}{\gamma}(3-2\gamma)\ ,\quad f^*(n)=3(\gamma-1)^2\gamma^{2-n}\quad (n\geqq 4) \tag{4.2}$$

ただし、$(9+\sqrt{21})/10<\gamma<3/2$。 このとき、$f^*(4)$が最大値になるが、今までに為された実験及びシミュレーションでこれを支持するものはない。

(2b) $\beta=2$の場合

$$f^*(3)=\frac{2}{\gamma}(2-\gamma)\ ,\quad f^*(n)=(\gamma-1)^2\left(n-\frac{\gamma+1}{\gamma-1}\right)\gamma^{2-n}\quad (n\geqq 4) \tag{4.3}$$

ただし、$(6+\sqrt{11})/5<\gamma<2$。　このとき、$f^*(5)$が最大値になり、実験及びシミュレーションでこれを支持するものがある。(4.3)式はRivierの結果と同形であるが$f^*(3)$が異なる。[6]

（３）第2近似

この近似ではε_{23}, ε_{34}およびε_{45}を残す。　角数の6次モーメントまで有限であることを要請すると$\beta=1,2,3,4,5$が解である。　このとき、充分大きなnに対して、

$$f^*(n) \sim n^{\beta-1}\gamma^{-n} \quad , \quad n \gg \beta \tag{4.4}$$

この近似ではパラメタを適当に選ぶと、$f^*(5)$または$f^*(6)$を最大値にすることが出来る。　今までに得られた実験およびシミュレーションの結果はこの両方がある。　従って、近似を上げるのは第2近似までで、充分であろう。

§５　結論

2次元セルパターン成長の統計力学的定式化を試みた。　その結果は次の通りである。

（１）平均セルサイズは時間の平方根に比例し、比例係数は角数・サイズ分布関数のスケール関数で表わすことが出来る。

（２）小角数セル（n=3,4,5）の遷移率のセルサイズ依存性は強い。　特に、角数が減る向きの遷移に付いて強い。

（３）角数分布のスケール関数を解析的に求めた。大きい角数nに対する漸近形は

$$f^*(n) \sim n^a \exp(-bn) \quad , \quad n \gg a \tag{5.1}$$

ここで、aは自然数でbは正定数である。

文献

1) C.W.J.Beenakker, Phys.Rev.A37(1988)1697.
2) K.Nakashima,T.Nagai and K.Kawasaki, J.Stat.Phys.57(1989)759.
3) 長井達三　中島勝也　川崎恭治，基研研究会〈パターン形成，運動およびその統計〉1989.
4) V.E.Fradkov, Phil.Mag.Lett.58(1988)271.
5) T.Nagai,S.Ohta,K.Kawasaki and T.Okuzono, Phase Transitions (1990) (in press).
6) N.Rivier, Phil.Mag.B52(1985)795.