

DBMに対するカイネティック項の効果

東京工業大学 理学部 横田 修

1. はじめに

1986年にE.Ben-JacobらによるHele-Shaw cellの実験で、Dense Branching Morphology(DBM)と呼ばれるパターンが現れることが報告された。¹

Hele-Shaw cellの界面のパターンは、ラプラス場により記述されるが、この他にも基本的にラプラス場で記述される系として、

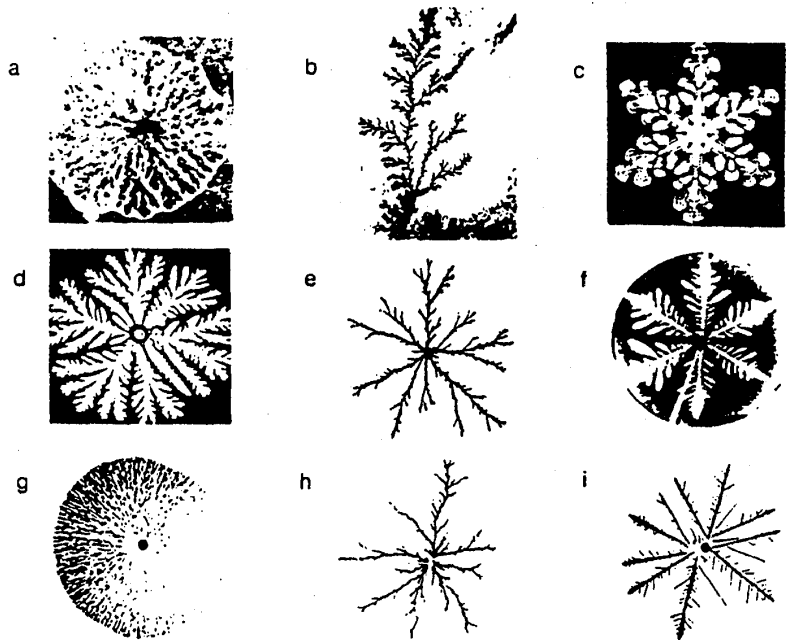
- 1) 電析 (Electrodeposition)
- 2) バクテリア・コロニー
- 3) 過冷却、過飽和状態からの結晶成長 (雪の結晶等)

等も挙げられるが、電析やバクテリア・コロニーでも、あるパラメーター領域においてDBMが現れるのが確認されている。^{2,3}

ラプラス場により記述される系の成長によって形成されるパターンとして既にDLA(Diffusion Limited Aggregation)や、樹枝状成長(Dendrite)、針状(Needle-like)成長等が報告されているが、DBMをこれらと区別する特徴として、

- 1) 連続的な先端分岐をする。則ち先端は不安定。
- 2) フラクタル次元は2である。
- 3) きれいにそろった外周を持つ。

等が考えられる。^{4,5} (Fig.1)



(Fig.1) フラクタル成長現象 (タマス・ヴィチェック著) より転載
図の a), d), g) が DBM にあたる。

2. カイネティック項

DBM が如何なるメカニズムで現出するのかについてのコンセンサスは未だ得られていないが、DBM を説明する試みの一つに、界面での局所的熱平衡を仮定する式 (Gibbs-Thomson の条件式) に非平衡の効果を第一近似として取り入れ、カイネティック項を付け加えることが提案されている。

上記の系を記述するのは以下の 3 つの式である。場を u としたとき、

$$\nabla^2 u = 0 \quad (1)$$

$$v = -D(\nabla u \cdot n) |_{interface} \quad (2)$$

$$u_{interface} = \Delta - d_0 k \quad (3)$$

ここで D は拡散係数、 Δ は平面解に対する界面での場のギャップを、 k は界面の曲率を意味し、 k の係数 d_0 は capillary-length と呼ばれる。

(1) 式が系の場を記述するラプラス方程式、(2) 式が界面の成長を与える式、(3) 式が今述べた Gibbs-Thomson の条件式であり場の境界条件を与える。

(3) 式に速度依存性を入れ、

$$\begin{aligned} u_{interface} &= \Delta - f(k, v) \\ &= \Delta - d_0 k - \beta v \end{aligned} \quad (4)$$

と、 k, v について一次まで展開したときの $-\beta v$ をカイネティック項と呼ぶ。⁵ また、 β をカイネティック係数と呼ぶ。

E. Ben-Jacob は、DBM を報告した論文¹ で、カイネティック項を入れた線形安定性の議論をしている。その他の論文でも線形安定性を議論したものは幾つかあるが、これだけでは定性的にも、定量的にも十分検討されているとは言い難い。

そこで今回、この項に関して、

- 1) カイネティック項のパターンに与える影響
- 2) カイネティック項で DBM を説明できるか否か

を調べるため、2 次元正方格子上で直線的な界面から出発し、ラプラス方程式を数値的に (緩和法) 解くかたちで以下のシミュレーションを行った。

3. アルゴリズム

系のサイズは 200×200 とし、 $D = 1.0, \Delta = 10.0$ とした。更に、今回はカイネティック項のみを評価するため、曲率に関する項は省いた。

- 1) 直線状に種を蒔く。

更に、ランダムネスの効果を入れるため、ランダムに 500 個種を蒔く。

- 2) 各点で勾配を評価。

(4) 式を通じて界面での場の大きさを決定。

- 3) 緩和法を用いて場を緩和。

- 4) 次の条件をを満足するサイトを一齐に成長。

$$\frac{(\text{界面に隣接するサイトでの勾配})}{(\text{最大勾配})} \geq (\text{一様乱数})$$

- 5) 1)~4) を繰り返す。

4. 結果

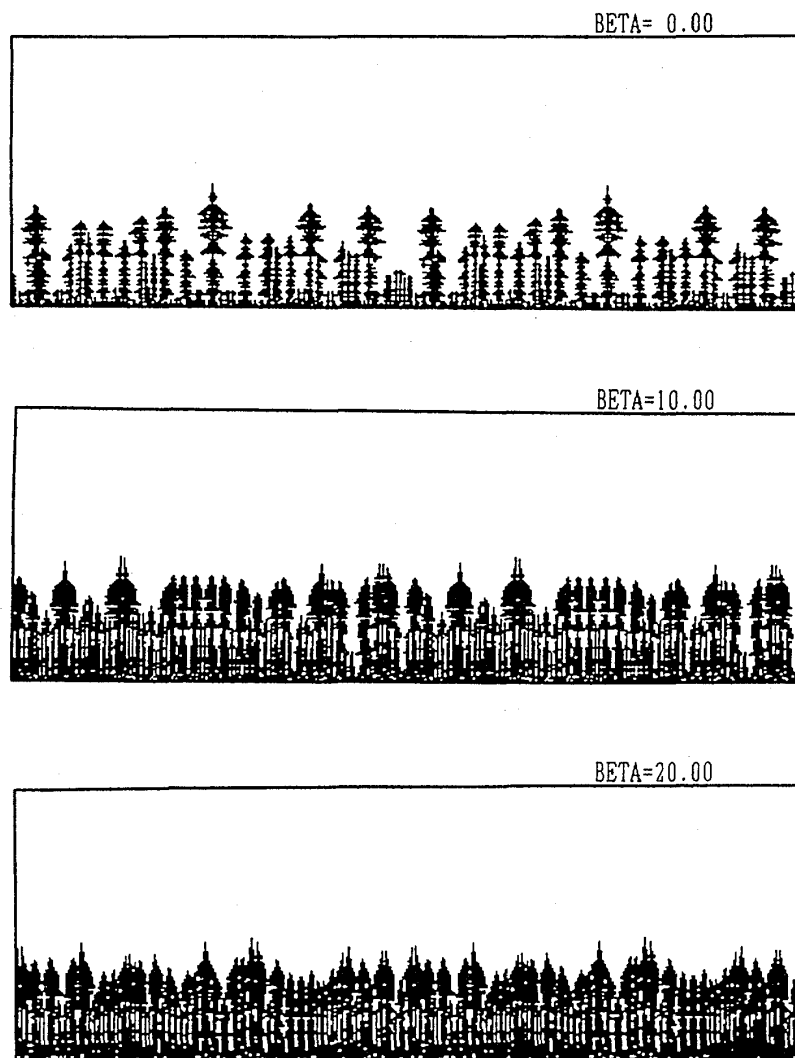
β を0.0,10.0,20.0と変化させた時、パターンに以下の様な変化が見られた。(Fig.2)

$\beta = 0.0$ の場合はサイトの大きさ以上のスケールで、自己相似的な構造が見て取れる。これは DLA の場合に対応している。(先端分岐が見られないのは、アルゴリズムがそれを許していないためである。)

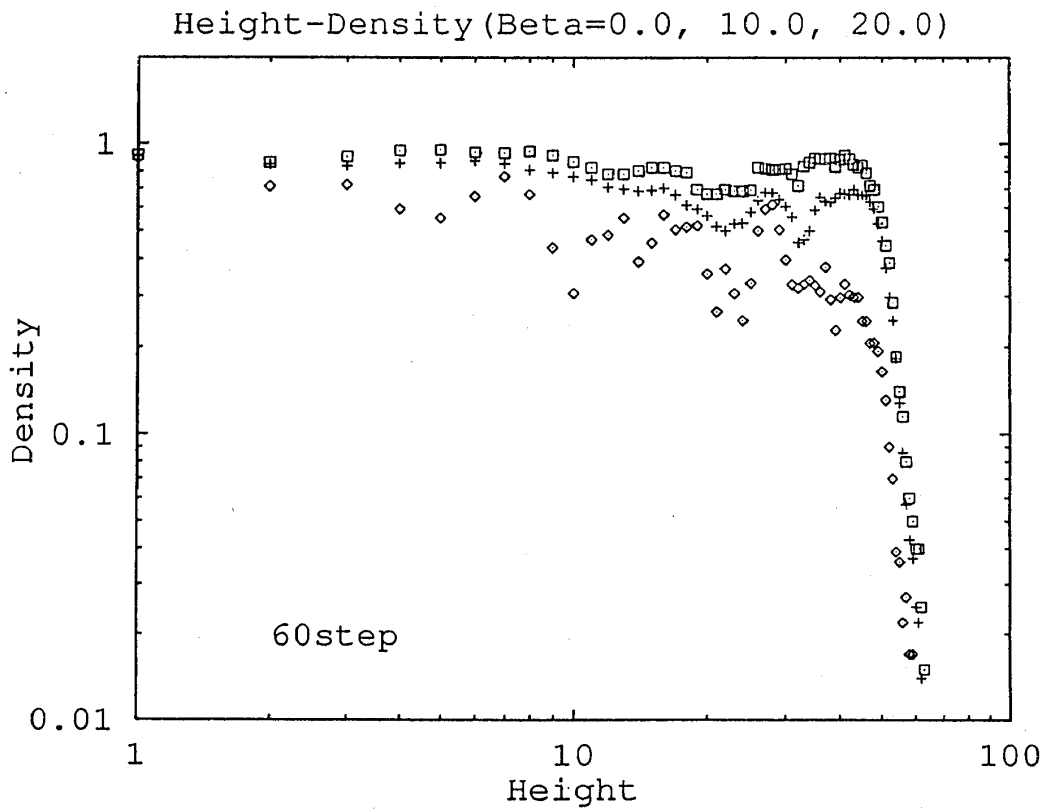
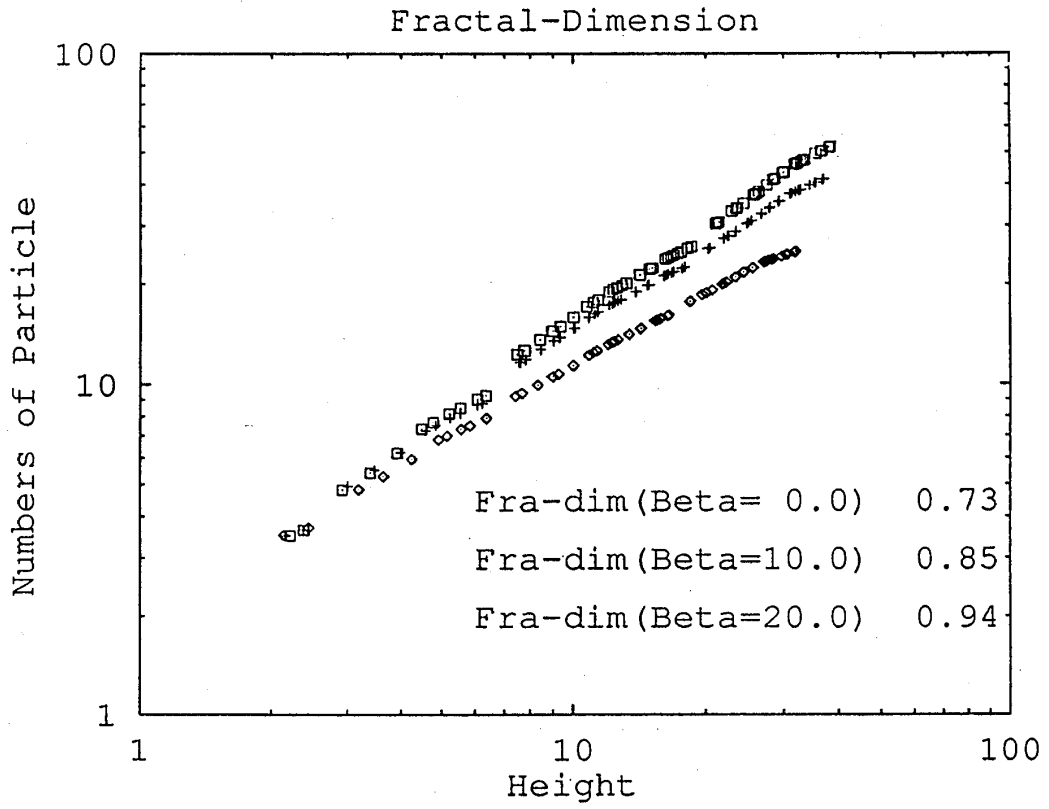
$\beta = 10.0, 20.0$ と変化するに従い、パターンが dense になり、界面も揃っていく様子が確認できる。

次に統計的な量を通してパターンの性質の違いを見るため、フラクタル次元と、高さ-密度の関係を調べた(対数目盛り)。(Fig.3)

これらからも β に依存してパターンが dense になっていくのが確認できる。(出発する種が点状の場合のフラクタル次元 D_0 と、直線状の場合のフラクタル次元 D_1 の間には $D_0 = D_1 + 1$ の関係がある。例えば $\beta = 0.0$ の時 $D_0 = 1.71$ に相当する。)



(Fig2)



(Fig.3)

5. 結論、問題点

シミュレーション結果では、カイネティック項に依存してパターンがDLA的なものからdenseなものに移行して行くのが見て取れた。

これにより、カイネティック項でDBMを説明することができると考えているが、上の結果だけでは未だ未だ不十分であり、以下に今後取り組むべき問題点を挙げる。

- 1) パターン界面の性質を統計的に調べる。
(ランダム・ウォーク的であるか否か等)
- 2) 結果がアルゴリズム依存でないことを調べる。
- 3) 曲率に関係した項も取り入れる。

6. 参考文献

- 1) E.Ben-Jacob, G.Deutscher, P.Graik, Nigel D.Goldenfeld, and Y.Lareah :
Phys.Rev.Lett.57(1986)1903
- 2) David G.Grier, David A.Kessler, and L.M.Sander :Phys.Rev.Lett.59(1987)2315
- 3) 藤川 浩, 松下 貢 : 統計数理 38(1990)61
- 4) Niegl Goldenfeld : J.Cryst.Growth 84(1987)601
- 5) E.Ben-Jacob, P.Garik, T.Mueller, and D.Grier : Phys.Rev A 38(1988)1370