

フラクタル凝集と樹枝状結晶成長

慶大理工

齋藤幸夫

東北大金研

上羽牧夫

1. 序

樹枝状結晶は近似的にはフラクタルと見なせるような開いた構造を持っていることが多い。拡散律速凝集 (DLA) 類似のシミュレーションではこのフラクタル構造は、拡散場の近似としてのラプラス場が特徴的な長さを持たないことによっている。現実の拡散場中の成長では開いた構造は拡散長の程度までしか広がらないだろう。実験でも、過飽和度を高くして特性長を縮める事によって樹枝状結晶は開いた構造から“コンパクト”に変わる¹⁾。ここでは格子気体模型で有限濃度からの成長を調べることで、成長速度とDLAのフラクタル次元の間の簡単な関係を導く。更にモデルに異方性を導入して現実の樹枝状結晶成長に近いものにする。

2. 格子気体模型

モデルは昨年²⁾と同じで、2次元正方格子上の気体原子が酔歩によって拡散し、“固体”に接触すると固化して動かなくなる。格子間隔、拡散係数ともに1にとり、線状の種から一方向へ成長させる。次の事がわかった。

平均の固体密度と気体密度が等しい定常状態が実現する。固体はある特性長さ以下ではDLA的フラクタルだがより大きなスケールでは一様と見なせる (図1a)。 ξ は空間次元 d の中のフラクタル次元 D_f のDLAの平均密度が遠方の気体密度と等しくなる長さで

$$n_0 \sim \xi^{D_f - d} \quad (1)$$

で決まる。固体の成長速度 V ($= \Delta N_s / n_0 L \Delta t$, N_s : 固体原子数, L : 体系の幅) は ξ と同程度の拡散長で決まるから

$$V \sim 1 / \xi \sim n_0^{1/(d - D_f)} \quad (2)$$

となる²⁾。本来ダイナミックスのないDLAのフラクタル次元が定常成長速度を支配する点がおもしろい。図2の黒丸がシミュレーションの結果だが、これから(2)によって D_f を求めると $D_f = 1.71 (\pm 0.01)$ となってDLAの値として知られているものとよく一致する。

固体と気体の界面は疎な入り組んだ構造なので境界ははっきりしないが、成長点を界面と考

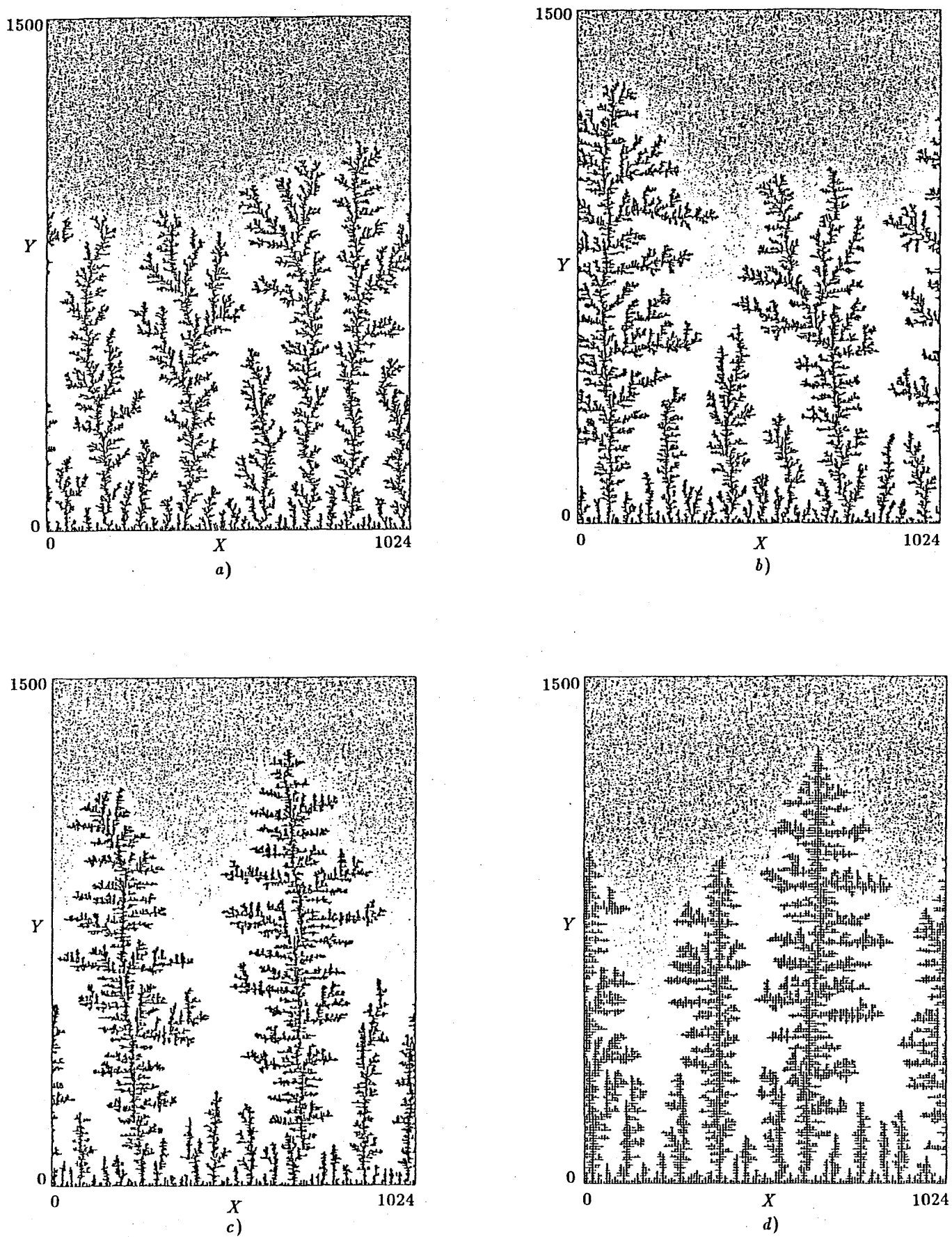


図1 いろいろな格子間隔 m での固体と周辺の気体の様子。 a) $m=1, n_0=0.1$; b) $m=$

えて成長領域の幅を考えるとよい。M個の成長点の高さyの揺らぎ

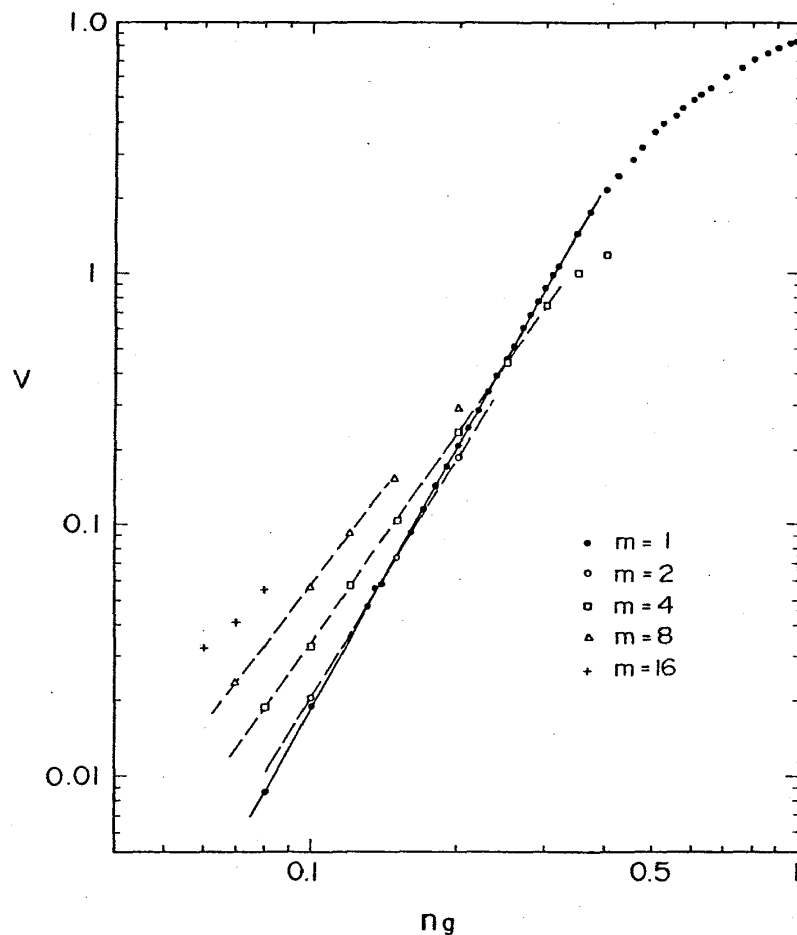
$$w^2(t) = M^{-1} \sum_{i=1}^M (y_{j+i} - M^{-1} \sum_{i=1}^M y_{j+i})^2 \quad (3)$$

を平均時刻 $t = \sum_{i=1}^M t_{j+i} / M$ の界面の幅とする（正確には界面の定常的な移動 $V \Delta t$ を補正する）。wは大きく揺らぐが定常平均値を持つ。界面は特性長さ ξ の範囲では相関を持ち、それより遠方ではランダムに揺らぐと考えられるので、大きさ ξ の塊の L/ξ 歩の酔歩と見なせるだろうから

$$w \sim \xi \sqrt{L/\xi} \sim n_0^{-1/2(d-D_f)} L^{1/2} \quad (4)$$

が期待される。wの揺らぎが大きいので 100×10000 と 400×4000 の大きさの系でシミュレーションを行なった³⁾。図3に見られるようにwは $\sqrt{L}$ に相当する約2倍の差があり、高密度 $n_0 = 1$ ではEdenモデルで調べられているもの⁴⁾と一致する。低密度になると ξ が体系の幅Lに比べて無視できなくなるが $L=400$ のデータでは(4)から期待される n_0 依存性と矛盾しない。定量的な一致を見るまでの大きなシミュレーションを行なうことは困難である。

図2 いろいろなmに対する
気体密度と成長速
度の関係。



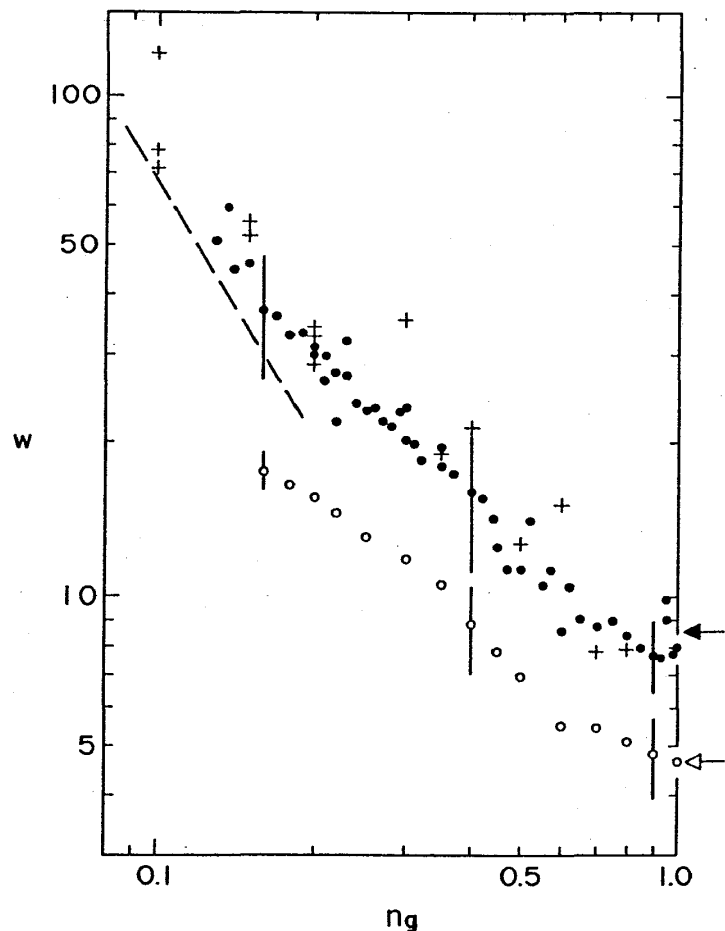
3. 異方性の効果

格子気体模型での格子の異方性は ε が極端に大きくならない限り無視できる⁵⁾。格子の異方性を強調するため、松下と近藤に習って m 番目毎の縦横の格子列上のみに固体の成長を制限した。その結果、図1のb~dにみられるように m の増大と共に枝は真っ直ぐになり樹枝状結晶の形態に似てきた。Nittmann と Stanley⁶⁾ はDLAでの異方性の導入によってフラクタル次元が1.5まで低下すると主張している。このことから V と n_0 の関係で(2)式の冪が、異方性の増大によって小さくなることが期待される。図2に示すようにシミュレーションの結果は

$$\begin{aligned} m=1 & \quad V \sim n_0^{3.50} \rightarrow D_f = 1.71 \\ m=2 & \quad V \sim n_0^{3.18} \rightarrow D_f = 1.69 \\ m=4 & \quad V \sim n_0^{2.76} \rightarrow D_f = 1.64 \\ m=8 & \quad V \sim n_0^{2.55} \rightarrow D_f = 1.61 \end{aligned}$$

である。固体の最大密度が $(2m-1)/m^2$ に制限されているので m が大きいとスケール則の成立する密度は小さくなる。系の大きさの制限のため、大きな m に対する(または小さな n_0 に対する)データを得るのはむずかしい。

図3 気体密度と平均の界面の幅の関係。系の大きさはおよそ、
+ : 1024×1500 , $\circ$: 400×4000 , $\bullet$: 100×10000 , 縦棒は w の揺らぎの程度を示す。
破線は低密度で期待される傾き $w \propto n_0^{-1/2(d-D_f)}$ 。矢印はEdenモデルの値。



固体内の密度相関の異方性を調べると、 m の増大と共に、 x 方向と y 方向の違いが大きくなり、 y 方向の相関関数の減少の幂が小さくなる。

4. 結論

有限密度の拡散場中でのランダムな成長は、気体の拡散長でもあり固体の構造変化のスケールでもある長さで特徴づけられる。低密度極限であるDLAのフラクタル次元が、成長速度や界面の幅の気体密度依存性を決定している。異方性の導入で、固体は樹枝状結晶に似た形となり、見かけ上の $V-n$ 関係から決まるフラクタル次元は小さくなる。

文 献

- 1) D. E. Ovsienko, G. A. Alfintsev and V. V. Maslov, *J. Cryst. Growth* **26** (1974) 233
重松公司, 東北大学博士論文 (1982) 未公刊
- 2) 上羽牧夫・齋藤幸夫, *物性研究* **50** (1988) 315 “パターン形成、運動および統計” 研究会報告
M. Uwaha and Y. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57** (1988) 3285
- 3) M. Uwaha and Y. Saito, 投稿中
- 4) D. E. Wolf, *J. Phys.* **A20** (1987) 1251
- 5) DLAの最近のレビューとして: 松下・早川・近藤・本田・豊木・本庄・太田, *物性研究* **48** (1987) 473; P. Meakin, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol.12 eds. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1988) p.335
- 6) J. Nittmann and H. E. Stanley, *Nature* **321** (1986) 663