拡散律速凝集モデル

拡散律速凝集モデル Diffusion Limited Aggregation

- 結晶成長を考える
  - 金平糖
  - 金属樹
- 溶媒中の粒子の浮遊・拡散：酔歩
- 結晶化した部分に吸着
- 実際の系では、結晶からの融解もある
  - この部分を無視する

モデル

- システム中央に種となる結晶がある
- 遠方から結晶粒子がブラウン運動 (Brownian Motion) しながら近づく
- 既に結晶となっている部分に粒子が接触すると、その場所に吸着する
- 一度に一つの粒子がブラウン運動する

拡散過程

- *d* 次元正方格子上の酔歩
  - 格子ベクトル $\vec{x}$
  - 隣接格子へのベクトル $\Delta \vec{x}_i \quad (i=0,1,\ldots,2d-1)$
- 粒子が時刻*t* に*x* に居る確率 $u(\vec{x},t)$
  - その時間変化

$$u(\vec{x},t+\Delta t)-u(\vec{x},t)=\frac{1}{2d}\sum_{i=0}^{2d-1}\left[u(\vec{x}+\Delta\vec{x}_i,t)-u(\vec{x},t)\right]$$

$$=\frac{1}{2d}\sum_{i=0}^{d-1}\left[u(\vec{x}+\Delta\vec{x}_i,t)-2u(\vec{x},t)+u(\vec{x}-\Delta\vec{x}_i,t)\right]$$

- 微小変位 $u(\vec{x}, t+\Delta t) - u(\vec{x}, t) = \frac{\partial u}{\partial t} \Delta t$

$$\frac{1}{2d} \sum_{i=0}^{d-1} \left[u(\vec{x} + \Delta \vec{x}_i, t) - 2u(\vec{x}, t) + u(\vec{x} - \Delta \vec{x}_i, t) \right]$$

$$= \frac{1}{2d} \sum_{i=0}^{d-1} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} (\Delta x_i)^2$$

- 拡散方程式を得る

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \eta \nabla^2 u$$

酔歩の広がり

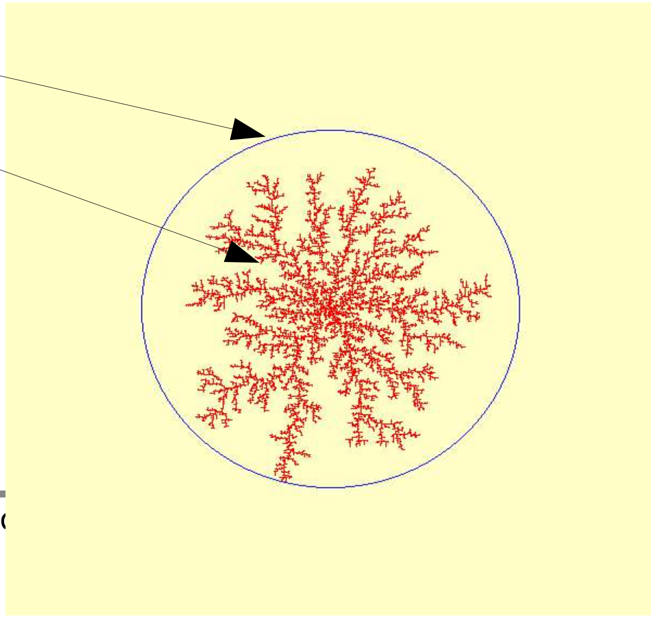
- 初期条件　$u(\vec{x}, t_0) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$
- 境界条件　$u(\vec{x}, t) = 0 \quad \text{if} \, |\vec{x} - \vec{x}_0| \to \infty$

$$u(\vec{x}, t) = \left[4\pi\eta(t - t_0)\right]^{-d/2} \exp\left(-\frac{|\vec{x} - \vec{x}_0|^2}{4\eta(t - t_0)}\right)$$

- 等方的拡散

静的解

- 同様の実験を多数回繰り返し、その頻度で確率u を解釈する
- 平均としては中心から対称なクラスタが出来る
- 半径　$R_{\max}$
- 質量(粒子数)　M



$$M \propto R_{\max}^{D}$$

外側での拡散

- $R_{\max}$ の球面の外側での拡散
  - 境界条件 $u\left(R_{\max}\right)=0$
- 拡散方程式の解

$$u(r)=u_0\left[1-\left(\frac{R_{\max}}{r}\right)^{d-2}\right] \quad \text{for } d>2$$

$$=u_0 \ln\left(\frac{r}{R_{\max}}\right) \quad \text{for } d=2$$

- 球面でのカレント(粒子の流れ込み)密度

$$j_r = -\eta \frac{\partial u}{\partial r} \propto R_{\max}^{d-2} / r^{d-1}$$

- 球面でのカレントの総量
- J は質量増加に比例する
  - v をクラスタの成長速度とする

$$J \propto R_{\max}^{d-2}$$

$$R_{\max}^{d-2} \propto J = \frac{\mathrm{d}\,M}{\mathrm{d}\,t} = \frac{\mathrm{d}\,M}{\mathrm{d}\,R_{\max}} \frac{\mathrm{d}\,R_{\max}}{\mathrm{d}\,t} \propto R_{\max}^{D-1} v$$

- v は成長とともに遅くなるはず

$$d-1-D\leq 0$$

- DLA クラスタはフラクタル

$$d-1\leq D\leq d$$

クラクタル次元

- 次元(dimension)と単位の関係
  - 面積：長さ^2：面は2次元
  - 体積：長さ^3：立体は3次元
- 長さの単位を変更したときに、「質量」がどのように変化するか
- 整数でない次元
  - 1.5次元：面と線の中間
    - 太った線・すかすかの面

フラクタルの例