

スパイラル成長の数理モデルと結晶表面の成長について

大塚 岳

明治大学先端数理科学インスティテュート 研究推進員

tohtsuka@math.meiji.ac.jp

本講演では結晶のスパイラル成長を表す数理モデルから、結晶表面上で見られる渦巻状のステップの運動を表す等高線法の数理モデルと、これを用いた結晶表面の成長速度を計算法を紹介する。これらを用いて行った結晶表面の成長速度の解析に関する最近の研究について紹介する。

スパイラル成長とは、らせん転位と呼ばれる結晶の格子欠陥の助けを借りて成長する結晶成長の物理モデルのことである。らせん転位とは結晶格子が部分的にずれることにより出来る線状の格子欠陥のことで、これが結晶表面に現れるとステップが結晶表面上に供給される。このステップに分子が吸着することで、ステップがらせん面を駆け上がるように前進し、結晶が成長する。結晶成長理論 ([BCF]) によるとステップの前進速度は駆動力付き曲率流方程式

$$V = v_\infty(1 - \rho_c \kappa) \quad (1)$$

で与えられることが知られている。ここで V はステップの描く曲線の法線方向への移動速度、 κ は V と反対向きの法ベクトルに対する曲率、 v_∞ は直線状のステップの移動速度、 ρ_c は臨界曲率半径と呼ばれる定数である。この運動によりステップは渦巻模様を描き、時間が経つとこの渦巻模様は一定の形を取りながらそのまま回転するように見える。

この渦巻模様の運動について、らせん転位が複数ある場合はステップ同士が衝突するので、等高線法のアイデアを用いて表現する。等高線法を用いる上での最大の難点は渦巻曲線が領域を内部と外部の二つの部分に分割しない曲線であることである。これまでに渦巻模様の等高線法として Smereka([S]) が、補助関数を二つ使って表す方法を提案している。これに対し本講演では、Karma-Plapp([KP]), Kobayashi([K]) がアレン・カーン方程式によるモデルを構成したときに導入した、シートストラクチャ関数のアイデアを用いる。すなわち、らせん転位の中心を $a_i (j = 1, \dots, N)$ とするとき

$$\theta(x) = \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j)$$

とおく。ここで $m_j \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ である。これを用いて時刻 t における渦巻模様 Γ_t を

$$\Gamma_t = \{x \in \overline{W}; u(t, x) - \theta(x) \equiv 0 \pmod{2\pi m\mathbb{Z}}\} \quad (2)$$

と定める。ここで $W = \Omega \setminus (\bigcup_{j=1}^N \overline{U}_j)$ 、 Ω は結晶表面を表す \mathbb{R}^2 の有界領域、 U_j は a_j の開近傍、 m は $|m_j|$ の公約数である。整数 m_j について、 $|m_j|$ はらせん転位 a_j から発生する渦巻模様の曲線の本数を表し、 $\text{sgn}(m_j)$ は a_j に対するステップの向きを表す。等高線集合 (2) で注意すべき点は、 $\theta(x)$ が多価関数である点である。これは、 $\theta(x)$ を一価関数とすると偏角関数の不連続性による等高線が現れてしまう点と、らせん転位の周りを何重にも巻く渦巻を表現するためである。これにより、渦巻模様を表すことができる。

曲線を表す等高線集合の式 (2) をもとに、(1) から等高線方程式を導出する。関数 θ が多価であることや、渦巻曲線が領域を二分しない点は通常の等高線法とは異なるが、局所的に見れば従来の等高線法と同様と見なすことが出来る (従来の等高線法については [G] を参照せよ)。したがって

$$V = \frac{u_t}{|\nabla(u - \theta)|}, \quad \kappa = -\text{div} \frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|}$$

となり、(1) は

$$u_t - v_\infty |\nabla(u - \theta)| \left\{ \rho_c \operatorname{div} \frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|} + 1 \right\} = 0 \quad \text{in } (0, T) \times W \quad (3)$$

と表される。これに、数学的問題として Neumann 境界条件 $\partial W \perp \Gamma_t$ 、すなわち

$$\langle \nabla(u - \theta), \vec{\nu} \rangle = 0 \quad \text{on } (0, T) \times \partial W \quad (4)$$

を合わせた初期値-境界値問題を考える。この問題の一意可解性、運動の一意性が [O]、[GNO] により示されている。

曲線 Γ_t が与えられると、これから表面の高さ関数を構成することが出来る。らせん転位による分子位置の転位について、平面方向の移動はなく、高さ方向の移動が十分小さいと仮定すると、表面の高さ関数 $h(t, x)$ は

$$\Delta h = -h_0 \operatorname{div} \delta_{\Gamma_t} \vec{n} \quad (5)$$

をみたすことがわかる。ここで δ はディラックのデルタ関数、 \vec{n} は Γ_t の向きを表す単位法ベクトル、 h_0 はステップの単位高さである。Smereka([S]) はこれに Neumann 境界条件を合わせた境界値問題を解いているが、本講演では Γ_t 上のみ不連続性を持つ $\theta(x)$ の分枝を h とする。これは (5) をみたすことがわかる。

表面の高さ関数から、表面の成長速度が計算できる。Burton–Cabrera–Frank では回転する渦巻模様の角速度 ω と (1) から、成長速度

$$R = \frac{h_0 \omega}{2\pi}$$

を計算している。これに対応する数値解からの成長速度として、表面の平均成長高度 $R_h(t)$ 、平均成長速度 $R_a(t; t_0)$ および数値的な成長速度 $R_n(t)$ を

$$R_h(t) := \frac{1}{|W|} \int_W [h(t, x) - h(0, x)] dx, \quad R_a(t; t_0) := \frac{R_h(t) - R_h(t_0)}{t - t_0}, \quad R_n(t) = R'_h(t)$$

で与える。講演ではこれを用いた表面の成長速度の数値計算結果を紹介する予定である。

References

- [BCF] W. K. Burton, N. Cabrera and F. C. Frank, The growth of crystals and the equilibrium structure of their surfaces, *Philos. Trans. Roy. Soc. London. Ser. A.* **243**(1951), 299–358.
- [G] Y. Giga, *Surface evolution equation – A level set approach*, Birkhäuser, 2006.
- [GNO] S. Goto, M. Nakagawa and T. Ohtsuka, Uniqueness and existence of the generalized motion for spiral crystal growth, *Indiana University Mathematics Journal* **57**(2008), 2571–2599.
- [KP] A. Karma and M. Plapp, Spiral surface growth without desorption, *Physical Review Letters* **81**(1998), 4444–4447.
- [K] R. Kobayashi, private communication.
- [O] T. Ohtsuka, A level set method for spiral crystal growth, *Adv. Math. Sci. Appl.* **13**(2003), 225–248.
- [S] P. Smereka, Spiral crystal growth, *Physica D*, **138**(2000), 282–301.

「Asymptotic behavior of solution of drift-diffusion system of degenerate type」

小川 卓克 (東北大学)

Drift-diffusion system は半導体モデルや走化性モデルあるいは星雲モデルの極限モデルとして現れ、こうしたモデルに特徴的な解の挙動を示すことが知られている。ここでは、こうした drift-diffusion モデルを流体力学モデルから形式的に導出し、そこに現れる指数の臨界性について論じる。特に藤田型臨界指数と, Sobolev 型臨界指数による挙動の変化や, 時間大域挙動について論じ、解の漸近安定性について述べたい。

渦巻く化学反応：Belousov-Zhabotinsky (BZ) 反応の数理

産総研・山口智彦

あまたの生命過程で時間・空間的な秩序構造が自己組織化的に発生するさまを目の当たりにしても、私たちはそれが自然科学の法則に反しているとは思わない。けれども 20 世紀中葉に至るまで、生命現象は従前の科学法則にはなじまない vital なものとして扱われていた。生命観のパラダイムシフトに少なからぬ貢献をしたものが、1950-60 年代にロシアで「発明」された Belousov-Zhabotinsky (BZ) 反応である。

BZ 反応は、自律的なリズムの形成や動的パターンの形成など、様々な生命現象に現れる時空間構造を実験室で観測できる化学モデルと位置づけることができる。その反応過程は、A:インヒビターの消費→B:アクティベーターの自触媒的增加→C:インヒビターの生成→A…という 3 つの反応プロセスが一方向のみに循環する反応機構で説明される (FKN メカニズム)。FKN メカニズムの理解には BZ 反応液に添加剤を加える摂動実験が有効である。例えば界面活性剤を加えると、パターンが発生するまでの誘導時間、パターンの伝播速度、振動周期が変化する。これらの変化は FKN メカニズムのプロセス A、B、C の変化をそれぞれ反映したものとして理解することができる。

FKN メカニズムから反応速度式 (連立常微分方程式 (ODEs)) を書き下し、さらに 2 変数にまで縮約したものをオレゴネータと呼ぶ。時間的な周期性のみならずラセン波 (図 1) などの空間パターンも、オレゴネータをもとに議論できる。ラセン波は波面断点 (チップ) 周辺におけるアクティベーターの拡散 (散逸) によって自律的に形成される。ラセン波の中心部にはインヒビターが堆積し、コアと呼ばれる不活性領域が自己組織的に形成される。ラセン波の回転周期は、チップがコアの縁を一周する時間できまる。それゆえ、ラセン波には幾つかの自己組織化の連鎖を認めることができる (表 1)。

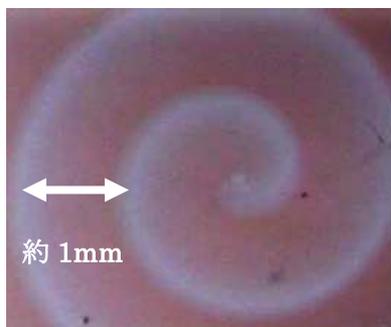


図 1 : BZ 反応の動的ラセン波
(時計回りに回転)

表 : BZ ラセンの階層的自己組織化

構造	時間	空間
振動反応(0D)	大 T_b	小 $\phi \sim (DT_b)^{1/2}$
波列(1D)	$T < T_b$	$\lambda \sim (Dk_5)^{1/2} T$
ラセン波(2D)	$T < T_b$	コアの自己組織化
	周期の自己組織化	コア径による分岐
領域(境界)	小 $(T_1 - T_2)/(T_1 + T_2)$	大 生存競争

多安定型反応拡散方程式におけるフロントの相互作用

荻原俊子 (城西大学)

(共同研究者: 中村健一 (電気通信大学))

本講演では, 次の反応拡散方程式

$$u_t = u_{xx} + \frac{1}{\varepsilon^2} f(u), \quad x \in \mathbb{R}, t > 0 \quad (1)$$

を考える. ここで, $\varepsilon > 0$ は微小パラメータ, $W(u) := -\int_0^u f(s)ds$ は $u = k$ ($k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) に同じ深さの底を持つ多重井戸型ポテンシャルである. このような $f(u)$ の例として, 結晶成長モデルに用いられる sine-Gordon 型非線形項 $f(u) = -\sin(2\pi u)$ が上げられる.

ポテンシャル $W(u)$ が $u = 0, 1$ に同じ深さの底を持つ 2 重井戸型の場合, (1) は Allen-Cahn 方程式と呼ばれ, 2 成分系の相分離を記述するモデルとしてよく知られている. このとき, 方程式の解に値が 0 から 1 に, あるいは 1 から 0 に急激に変化する界面 (もしくは内部遷移層) と呼ばれる部分が現れる. 複数の界面が存在する場合にそれらがどのように運動するかについて, Carr-Pego [1989], Fusco-Hale [1989] らの研究により, 準安定なパターンが非常にゆっくりと動くこと, および, 隣り合う界面の相互作用は引力的 (attractive) であることが示されている (図 1 を参照). また, Chen [2004] は界面が形成され準安定なパターンができるまでのダイナミクスや隣り合う界面の衝突・消滅の様子を厳密に調べている.

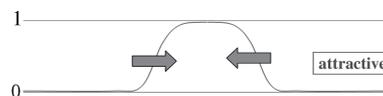


図 1: 双安定系の界面ダイナミクス

一方, 非線形項 $f(u)$ が本講演で取り上げる多安定型である場合には, 図 2 のような階段パターンも現れる. 講演では, (1) の解の振る舞いについて得られた数学的結果を紹介するとともに, 階段パターンにおける隣接フロント間の相互作用は斥力的 (repulsive) であることを述べる (図 3).

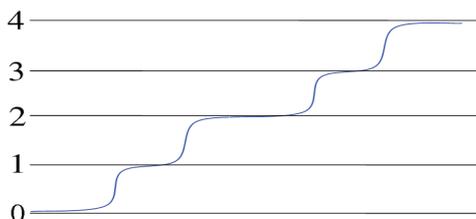


図 2: 多安定系の界面

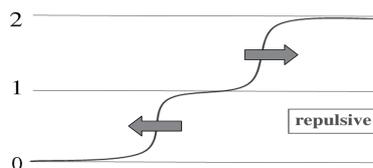


図 3: 多安定系の界面ダイナミクス

「熱伝導圧縮性粘性流体の半空間上の定常解について」

西畑 伸也（東京工業大）

本講演では、半空間上での圧縮性ナビエストークス方程式の時間大域的可解性と、解の漸近挙動について論じる。ここでは、流出境界条件または流入境界条件を課す。具体的な結果として、定常解が一意に存在する為の条件を求め、それが漸近安定である事を示す。また、流出境界条件に対しては、初期値の空間無限方向での衰退のオーダーに応じて、定常解への収束の速さが同じオーダーである事を示す。

なお、本結果は、川島秀一氏、中村徹氏、Peicheng Zhu 氏との共同研究に基づきます。

Cahn-Hilliard 方程式の定常解の大域的分岐構造 と関連する話題

四ツ谷 晶二 (龍谷大学理工学部)

微分方程式の解の大域的構造を完全に調べることは最も基本的ながら難しい問題である。なぜならば、これが分かるということは、考えている微分方程式に含まれるパラメータをいかように与えても、そのパラメータ値においての、微分方程式の解の存在・非存在・一意性・多重度に関して即座に完全に解答できることを意味するからである。

過去に多くの研究があるよく知られた非線形微分方程式であっても、解の大域的構造が完全に解明されているものは、ごく少数である。下記文献 [WY2008] ~ [IKOY03] において、そこに現れる方程式に対しては、楕円関数や完全楕円積分を用いることにより、完全に解明できることを示した。すなわち、1次分岐のみならず2次以降の分岐を含めた分岐構造が完全にわかるのである。

得られた解の挙動はさらに大変興味深い。例えば、特異摂動問題の新たな解法と全く異なる視点を与える。すべての解が明示的に表示されていれば、特異摂動問題はの解表示に含まれる摂動パラメータを素直に零に近づけたときの極限を調べる問題に帰着されるからである。

すべての解の表示を求めるアイデアは極めて自然な考え方で、昔の人も考えたであろうが、計算が膨大で通常はすぐに捨て去る方法である。計算の膨大さとは、複雑ではあるが単調な、微分計算・代数式の計算が主であり、見通しのない手計算では一生を費やしても不思議でない量の計算である。

ところが、現在、充実した視覚化機能をもつ数式処理ソフト Maple, Mathematica 等で気楽に楕円関数や完全楕円積分に関係した微分・代数計算でき、いろんな視点から視覚化できる状況になっている。それを使わない手はないと思ひ、数式処理ソフトを実験装置と検算の両方に使い、研究を行っている。

下記文献にある研究においては、解の大域的構造を決定する問題は、完全楕円積分 $K(k), E(k), \Pi(*, k), k$ からなる連立超越方程式の解の非存在定理、一意性、解の多重度を正確に決定する問題に帰着される。問題点は、しばしば、 $\Pi(*, k)$ の * の所に、 $K(k), E(k)$ さえ入っている完全楕円積分の合成関数が現れることである。もともとの問題の難しさを同値な超越方程式に帰着した訳であるから、難しい超越方程式が出てくるのは当然ある。

この超越方程式の解析には、完全楕円積分の合成関数を微分するので、単純であるが複雑な計算が必要となる。計算結果は、微分すればするほどますます複雑になるので、いろいろと新たな工夫がある。しんどくもあり、楽しいところである。

数段階の消去の工夫を行うことにより，しばしば，最後の最後に問題は， $K(k), E(k)$ の斉次有理式の符号を調べる問題に帰着される．

しかしながら，この符号を求める問題は易しくはなく，複雑な背理法を用いたりして，問題ごとに苦し紛れの工夫で対処してきた．

講演では，「Cahn-Hilliard 方程式の定常解の大域的分岐構造」の決定の方法を例にとりその考え方を説明し，さらに，つい最近気がついた， $K(k), E(k)$ の斉次有理式の符号を調べる問題の一般的な解法について説明したい．

参考文献

[WY2008] T.Wakasa and S.Yotsutani, *Representation formulas for some 1-dimensional linearized eigenvalue problems*, Commun. Pure Appl. Anal. 7 (2008), 745-763.

[KMY2007] S. Kosugi, Y. Morita and S. Yotsutani, *Stationary solutions to the one-dimensional Cahn-Hilliard equation: proof by the complete elliptic integrals*, Discrete Contin. Dyn. Syst., 19 (2007), 609-629.

[Y2006] S. Yotsutani (with I. Takagi and H. Takaichi): *On a shadow system to Gierer-Meinhardt system with non-local term*. RIMS Kokyuroku 1475 (2006), 149-154.

[KMY2005g] S. Kosugi, Y. Morita and S. Yotsutani, *Global bifurcation structure of a one-dimensional Ginzburg-Landau model*, J. Math. Phys., 46 (2005), no. 9, 095111, 24.

[KMY2005] S. Kosugi, Y. Morita and S. Yotsutani, *A complete bifurcation diagram of the Ginzburg-Landau equation with periodic boundary conditions*, Commun. Pure Appl. Anal., 4 (2005), 665-682.

[MMY2005] W. Matsumoto, M. Murai and S. Yotsutani, *What have we learned on the problem: Can one hear the shape of a drum?*, Phase Space Analysis of Partial Differential Equations, II (2005), 345-361.

[LNY2004] Y. Lou, W.-M. Ni and S. Yotsutani, *On a limiting system in the Lotka-Volterra competition with cross-diffusion*. Partial differential equations and applications, Discrete Contin. Dyn. Syst., 10 (2004), 435-458.

[IKOY2003] H. Ikeda, K. Kondo, H. Okamoto and S. Yotsutani: *On the global branches of the solutions to a nonlocal boundary-value problem arising in Oseen's spiral flows*, Commun. Pure Appl. Anal., 3 (2003), 381-390.