

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]) がアレックス・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]などを参照せよ)。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.