

# スパイラル成長の等高線法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

## 1. イントロダクション

結晶のスパイラル成長とは、らせん転位の助けを借りた結晶成長のことである。気相など分子の濃度の薄い環境下における結晶成長のメカニズムとして、1949年に F. C. Frank により提唱された。結晶はその分子による格子の最密面で囲まれた多面体をなすが、その表面上にはステップと呼ばれる分子数十個から数百個分の高さの段差が存在し、このステップにおいて分子を結晶相に取り込むと考えられている。らせん転位の助けとは、このステップの供給が分子格子の部分的なずれによることを指している。このときずれの起こった面と起こっていない面の境界線に線状の格子欠陥ができる。これをらせん転位と呼ぶ。らせん転位により供給されたステップは、分子を取り込むことでらせん転位の周囲を巻き込んでいくように前進する。このスパイラルステップがらせん転位の周囲を一周すると、ステップはらせん階段を上るように一階層上の層に現れることになる。その結果スパイラルステップは消滅することなく前進し続け、その結晶表面が成長する。1951年に W. K. Burton, N. Cabrera, F. C. Frank らがステップの移動速度などを理論的に導き出し、その速度とらせん転位の構造から結晶表面の成長速度を理論的に計算した ([BCF])。その理論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

$$V = v_{\infty}(1 - \rho_c \kappa) \quad (1.1)$$

で与えられる。ここで  $V$ ,  $\kappa$  はステップを曲線と見立てたときの連続単位法ベクトル場  $\vec{n}$  方向への移動速度および  $-\vec{n}$  方向に曲がる向きを正とする曲率、 $v_{\infty}$  は直線状のステップの移動速度、 $\rho_c$  は臨界曲率半径と呼ばれる定数である。結晶表面に単独のスパイラルステップが存在する場合、その成長速度はスパイラルステップが最終的に形を維持したまま回転するよう見えるところから、スパイラルステップの角速度  $\omega$ 、ステップの単位高さ  $h_0$  に対し表面の成長速度  $R$  は

$$R = \frac{h_0 \omega}{2\pi} \quad (1.2)$$

で与えられる。

本講演ではこのスパイラルステップの運動を表す微分方程式を導出するとともに、表面の高さを表す関数を求め、最終的に表面の成長速度を数値的に求めることを目標とする。物理背景から

(A1) ステップは (1.1) に従って動く

(A2) らせん転位は表面上に  $N(N \geq 1)$  個以上存在する

(A3) らせん転位ごとにステップの向き、単位高さのステップの本数は異なっていて良い

を仮定する。これまでに提案されている微分方程式として、Allen–Cahn 型方程式を用いたフェーズフィールド法による方程式が Karma–Plapp([KP])、R. Kobayashi([K]) により、また等高線法による方程式を Smereka([Sm]) が提案している。しかしフェーズフィールド法ではスパイラルステップによる曲線を厚みを持つ遷移層で表すなどステップの動きを近似的に表現するものなので、(1.1) により動く曲線を直接的に表現したいと考える。他方 Smereka のモデルはステップの曲線を直接的に表すものの、補助関数を二つ用いた連立方程式で数学解析が困難であると同時に、(A3)、とくにらせん転位から現れるステップの本数がらせん転位ごとに異なる状況を表し得ない。そこで、本講演では [O] による、渦巻曲線に対する等高線法とその数値・数学解析について紹介する。私は等高線法と Karma–Plapp、R. Kobayashi らのアイデアを組み合わせることから、一つの補助関数と結晶のらせん転位がもたらす格子構造を表したシートストラクチャ関数の組み合わせによりこのスパイラルステップの運動を表す等高線方程式を導出した。さらに、曲線の位置から結晶表面を数値的に構成し、これを用いて結晶表面の成長速度を表す量を定義、計算することを行った。これについて、まず §2 で [O] の等高線法と表面の成長速度の計算法、§3 では向きの異なるらせん転位が二つのみある状況下で、結晶表面が成長しない inactive pair の存在を数学的な立場から証明する。

## 2. 渦巻曲線の等高線法

まずは渦巻曲線の運動の様子を、等高線法を用いて表現する。渦巻曲線に対する等高線法の導入でもっとも困難な点は、ステップを挟んで存在する高地側と低地側を、ステップを跨がずに行き来出来る点である。これにより、通常の等高線法である補助関数  $u$  のゼロ点集合という定め方は有効にならない。実際そのように定めると曲線上で  $|\nabla u| = 0$  となり、法ベクトルを  $u$  のみで定めることができない。この問題に対し、Smereka[Sm] は補助関数を二つ用いることで決したが、そのモデルではらせん転位ごとにステップの本数が異なる場合を含まない。

そこで、ここでは Karma–Plapp[KP]、小林亮 [K] がフェーズフィールドモデルで導入したシートストラクチャ関数を等高線法と組み合わせ、渦巻曲線を表現する。シートストラクチャ関数は初期の結晶表面を表した関数で、同時に結晶の層構造を表す関数とみなすことができる。結晶は分子の組み込みによって高さ方向に成長するため、ある点に注目すると離散的にしか成長しない。したがって結晶そのものをシートストラクチャ関数で表現されたらせん面とみなし、らせん面を内部と外部に分ける境界線をステップの位置と考える。以上のアイデアを数学的に定め、渦巻曲線に対する新たな等高線法を導入する。

以下、特別に断らない限り  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  は滑らかな境界をもつ有界領域、 $a, a_1, \dots, a_N$  は  $\Omega$  の点、 $B_a, B_j \subset \Omega$  はそれぞれ  $a$  もしくは  $a_j$  の閉近傍で、 $\partial B, \partial B_j$  は滑らかとする。 $B_j$  には

$$B_i \cap B_j = \emptyset, \quad (2.1)$$

を仮定する。§2.3以降では常にらせん転位が  $N$  個 ( $\geq 1$ ) の場合を考える。拙著論文 [O] では  $B_j$  として閉円板  $B_{\rho_j}(a_j) := \{x; |x - a_j| \leq \rho_j\}$  を取っている。[O] の結果は、たとえば  $W = \Omega \setminus (\bigcup_{j=1}^N B_j)$  の境界が  $C^2$  であれば成り立つので、本講演の条件で成立する。

## 2.1. 渦巻の種類

まずステップの初期状態を与えるために、渦巻曲線を定義する必要がある。本質的には渦巻の中心が一つになる曲線と二つになる曲線が存在し、あとはこの二つの組み合わせで渦巻模様が形成されていると考えられる。これらを数学的に定義しよう。

**定義 2.1** (i) らせん転位が一つの場合、すなわち  $W = \Omega \setminus B_a$  を考える。このとき、 $\Gamma = \{P(s) \in \overline{W}; s \in [0, \ell]\}$  が  $a$  の基本型渦巻曲線であるとは  $\Gamma$  が次をみたすときをいう。

( $\Gamma 1$ )  $\Gamma$  は  $C^1$  単純曲線である。すなわち  $P$  が  $C^1$  級の単射である。

( $\Gamma 2$ )  $P(0) \in \partial B$ ,  $P(\ell) \in \partial \Omega$ ,  $P(s) \notin \partial W$  ( $s \in (0, \ell)$ ) である。

( $\Gamma 3$ ) 次をみたす  $\delta > 0$  が存在する。任意の  $\text{dist}(x, \Gamma) < \delta$  をみたす  $x \in \overline{W}$  に対し、 $y \in \Gamma$  で  $\text{dist}(x, \Gamma) = |x - y|$  をみたすものがただ一つ存在する。ただし集合  $A$  に対し  $\text{dist}(x, A) = \inf_{y \in A} |x - y|$  と定義する。

(ii) らせん転位が二つの場合、すなわち  $W = \Omega \setminus (B_1 \cup B_2)$  を考える。このとき、 $\Gamma = \{P(s) \in \overline{W}; s \in [0, \ell]\}$  が  $a_1, a_2$  の接続型渦巻曲線であるとは、 $\Gamma$  が (i) の ( $\Gamma 1$ ), ( $\Gamma 3$ ) に加え次をみたすときをいう。

( $\Gamma 2'$ )  $P(0) \in \partial B_1$ ,  $P(\ell) \in \partial B_2$ ,  $P(s) \notin \partial W$  ( $s \in (0, \ell)$ ) である。

(iii) らせん転位が  $N (\geq 1)$  個の場合、すなわち  $W = \Omega \setminus (\bigcup_{i=1}^N B_i)$  を考える。このとき、 $\Gamma$  が  $\overline{W}$  上の渦巻模様であるとは  $\Gamma$  が  $\Gamma_i \cap \Gamma_j = \emptyset$  ( $i \neq j$ ) をみたす基本型または接続型の渦巻曲線  $\Gamma_i$  ( $i = 1, \dots, K$ ) によって  $\Gamma = \bigcup_{i=1}^K \Gamma_i$  と表されるときをいう。

らせん転位が一つの場合と二つの場合では状況が本質的に異なる。一つの場合では、渦巻曲線は基本型しか存在しえない。他方らせん転位が二つの場合、状況としてらせん転位がそれぞれ独立して基本型の曲線を持つ場合と、接続型で結ばれている場合が存在する。さらにそれぞれが基本型を持つ場合であっても、曲線の向きによっては接続型と同じ場合と、異なる場合が存在する。これは巻きの向きによって区別することが出来る。巻きの向きは次節で定義する。

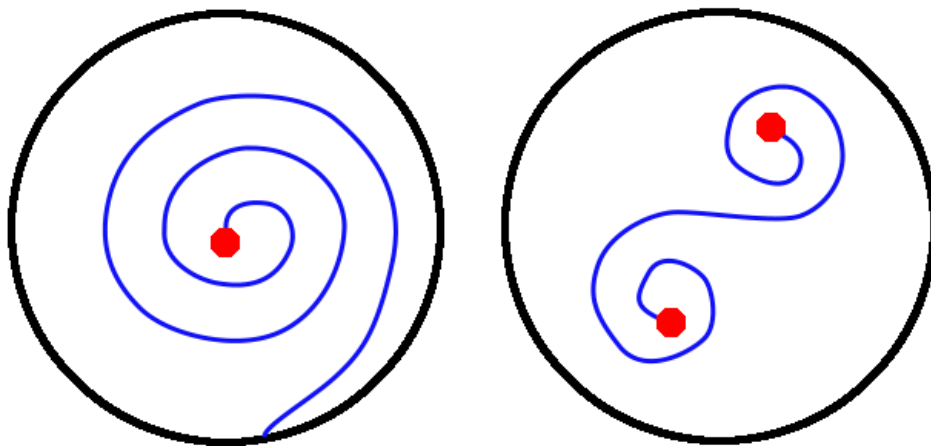


図 2.1: 基本的な渦巻曲線の例。左が基本型で、右が接続型。

## 2.2. 曲線の向きと渦巻の向き

曲線の運動には向きがある。儀我 [G] より、曲線  $\Gamma$  上定義された連続単位法ベクトル場  $\vec{n}$  を運動の向きという。スパイラルステップの運動ではステップの向き、すなわちテラスの高地側から低地側へ向く単位法ベクトル場に対応する。なお、(1.1) における曲率  $\kappa$  は、曲率円の中心が  $-\vec{n}$  方向にあるときに正とする向きで定義している。しかしスパイラルステップではこの曲線の向きとは別に、らせん転位の周りをどちらに一回転するとステップの高地側に出るか、というらせん面の向きが存在する。これは等高線法で渦巻模様を描くために必要であるので、らせん面の向きを定義する。

定義 2.2 らせん転位が一つの場合、すなわち  $W = \Omega \setminus B_a$  を考える。  $\Gamma = \{P(s) \in \overline{W}; s \in [0, \ell]\}$   $a$  の基本型渦巻曲線であるとし、  $\vec{n}$  を  $\Gamma$  の向きとする。このとき  $\Gamma$  が右巻きの向きであるとは、

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{P_s(s)}{|P_s(s)|} = \vec{n}(P(s)) \quad (2.2)$$

が成り立つときをいう。  $\Gamma$  が左巻きの向きとは

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{P_s(s)}{|P_s(s)|} = -\vec{n}(P(s)) \quad (2.3)$$

が成り立つときを言う。

上の定義では基本型渦巻曲線に対してのみ巻きの向きを定義しているが、接続型渦巻曲線に対しては各閉近傍  $B_j$  の周りで局所化すれば基本型渦巻曲線と見なせる。これを用いて巻きの向きを定義する。したがって、接続型渦巻曲線が見られるときは二つのらせん転位に対し右巻きと左巻きの曲線がそれぞれ与えられる。ところで、

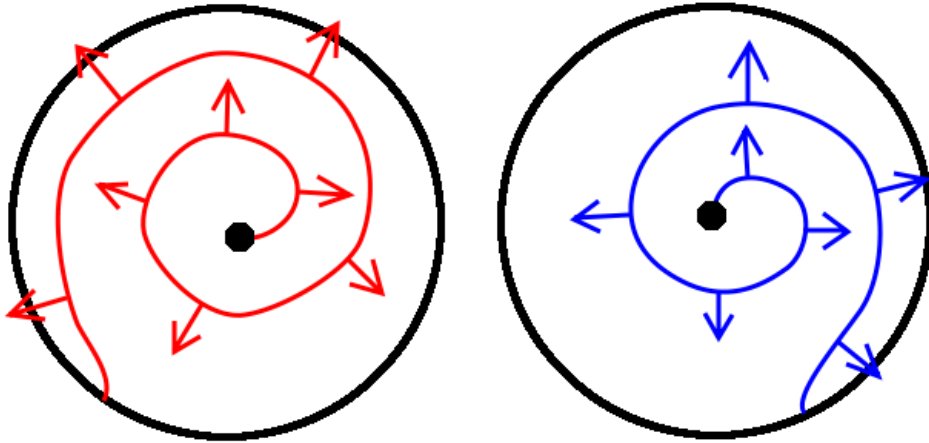


図 2.2: 巻きの向き例。左が左巻きで、右が右巻き。

定義 2.2 における (2.2) および (2.3) の等式は  $\Gamma$  のパラメータの向きに依存することに注意しなければならない。すなわち、 $\Gamma$  のパラメータの向きを  $(\Gamma 2)$  と逆の向きで定める場合、(2.2) および (2.3) は正負逆の等式になることに注意する。なお、接続型渦巻曲線の場合  $\Gamma$  のパラメータの向きによらず巻きの向きは一意に定まる。実際、始点  $a_1$  側で右巻き、終点  $a_2$  側で左巻きとすると、 $Q(s) = P(\ell - s)$  は

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{Q_s(s)}{|Q_s(s)|} = - \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{P_s(\ell - s)}{|P_s(\ell - s)|} = -\vec{n}(P(\ell - s)) = -\vec{n}(Q(s))$$

より  $Q(s)$  の始点  $a_2$  側で左巻き、終点  $a_1$  側で右巻きとなる。

しかし、二つのらせん転位の巻きの向きが逆であるからといって、曲線が常に接続型であるとは限らない。実際、 $\Omega = B_2(0)$ ,  $a_1 = (-1, 0)$ ,  $a_2 = (1, 0)$  に対し、 $\Gamma = \{(x, 0); |x| \geq 1\}$ ,  $\mathbf{n}(x) = (0, 1)(x \in \Gamma)$  とすると、 $\mathbf{n}$  は  $\Gamma$  の運動の向きであり、 $\Gamma$  は  $a_1$  に対し左巻き、 $a_2$  に対し右巻きとなる。

### 2.3. シートストラクチャ関数

曲線の巻きの向きが定義されると、分子の層構造に基づいたシートストラクチャ関数が定義できる。このアイデアは Karma-Plapp [KP]、小林亮 [K] により導入された。

定義 2.3 らせん転位が  $N$  個の場合の渦巻模様、すなわち  $W = \Omega \setminus (\bigcup_{j=1}^N B_j)$  と  $\bar{W}$  上の渦巻模様  $\Gamma$  を考える。 $m_j^+$ ,  $m_j^-$  をそれぞれ  $a_j$  に対する左巻き、右巻きの渦巻曲線の本数とし、 $m_j = m_j^+ - m_j^-$  とおく。このとき

$$\theta(x) := \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j) \quad (2.4)$$

を  $\bar{W}$  上の  $\Gamma$  に対するシートストラクチャ関数と呼ぶ。

偏角  $\arg(x - a_j)$  を主値、すなわち  $\arg(x - a_j) \in (0, 2\pi)$  とするとステップが  $a_j + (r, 0) (r > 0)$  にある場合の結晶表面の様子を表している。実際、転位論と線形弾性論かららせん転位による格子の変位が高さ方向のみで十分小さいとすれば、表面の高さを表す関数  $h(x)$  はステップの曲線以外で

$$\Delta h = 0 \quad (2.5)$$

をみたく。他方、直接計算から  $\arg(x - a_j)$  は不連続点以外で (2.5) をみたく。よって単位ステップの高さを  $h_0$  とおくと、

$$\frac{h_0}{2\pi} \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j) = \frac{h_0}{2\pi} \theta(x)$$

が表面の高さとなる。以上の理解は等高線法による曲線から表面を再構成する際に再び用いられる。詳しくは §2.6 を参照せよ。

## 2.4. 等高線法

定義 2.4 時刻  $t = 0$  における結晶表面の様子からシートストラクチャ関数  $\theta$  が (2.4) で与えられたとせよ。このとき、時刻  $t$  における渦巻模様  $\Gamma_t$  の等高線表示を

$$\Gamma_t := \{x \in \overline{W}; u(t, x) - \theta(x) \equiv 0 \pmod{2\pi\mathbb{Z}}\} \quad (2.6)$$

と定める。ただし  $\theta$  は多価関数とし、 $\arg(x - a_j)$  の不連続点は考えないものとする。

曲線の周囲に局所化して考えれば (2.6) は滑らかな関数  $u - \theta$  による通常の等高線表示と同様とみなすことができる。したがって  $\Gamma_t$  の向き  $\vec{n}$  は

$$\vec{n} = -\frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|} \quad (2.7)$$

と定める。 $\theta$  は多価でも  $\nabla\theta$  は分枝によらず一意に定まるため (2.7) は well-defined である。この定義 (2.6) で表される渦巻模様の具体例として、アルキメデスのらせん

$$\Gamma := \{x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}; -|x| - \arg x \equiv 0 \pmod{2\pi\mathbb{Z}}\}$$

が挙げられる。この例で言うと  $-|x|$  が  $u(t, x)$  の部分に相当する。

定義式 (2.6) の感覚的な意味については、被覆空間を導入して考えるとわかりやすい。著者 [O] や後藤-中川-大塚 [GNO] では

$$\mathcal{X} := \{(x, \xi) \in \overline{W} \times \mathbb{R}^N; \xi = (\xi_1, \dots, \xi_N), \frac{x - a_j}{|x - a_j|} = (\cos \xi_j, \sin \xi_j)\}$$

を導入して数学的な議論を行う。しかしここでは分かりやすさを考慮して、上の代わりに

$$\mathcal{X} := \{(x, z) \in \overline{W} \times \mathbb{R}; z \equiv \theta(x) \pmod{2\pi\mathbb{Z}}\}$$

を導入する。  $N = 1$  かつ  $a_1 = 0$  のとき、 $\mathcal{X}$  はリーマン面となることに注意する。

いま、 $\theta_{\Gamma_t}$  を  $\overline{W} \setminus \Gamma_t$  上で定義された  $\theta(x)$  の連続な分枝とする (これが存在するか否かは補題 2.6、または [GNO] を参照せよ)。§2.3 で指摘したように、 $\theta_{\Gamma_t}(x)$  は表面の形を表す関数である。そこで

$$h(t, x) = \begin{cases} \theta_{\Gamma_t}(x) - \pi & (x \in \overline{W} \setminus \Gamma_t \text{ のとき}), \\ \liminf_{y \rightarrow x} \theta_{\Gamma_t}(y) & (x \in \Gamma_t \text{ のとき}) \end{cases}$$

とすると、 $h(t, x)$  は  $\Gamma_t$  でのみ  $h(t, x) - \theta(x) \equiv 0 \pmod{2\pi\mathbb{Z}}$  をみたす。表面を表す関数が  $h$  だと思つと、結晶は表面の下、すなわち  $z < h(t, x)$  をみたす集合とみなすことができる。

ここで結晶は分子をステップで取り込み成長することを考えると、表面の位置  $x$  における高さは離散的にしか上下しないので  $\mathcal{X}$  を結晶が存在する空間とみなすことができる。したがって上の考察と合わせると

$$\begin{aligned} \tilde{I}_t &:= \{(x, z) \in \mathcal{X}; z < h(t, x)\}, \\ \tilde{\Gamma}_t &:= \{(x, z) \in \mathcal{X}; z = h(t, x)\} \end{aligned}$$

で表される  $\tilde{I}_t, \tilde{\Gamma}_t$  がそれぞれ結晶の内部および界面とみなすことができる。以上から  $(x, z) \in \mathcal{X}$  のとき  $z \equiv \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j)$  に注意すれば

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

を得る。これは (2.6) の特別な形である。

ところで与えられた渦巻模様  $\Gamma$  に対し (2.6) の式をみたす連続関数  $u \in C(\overline{W})$  の存在は自明でない。後藤-中川-大塚 [GNO] がその存在を証明している。

**定理 2.5** ([GNO])  $\Gamma$  を渦巻模様とし、 $\vec{n}$  を  $\Gamma$  の運動の向きとせよ。このとき、ある  $m_j \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$  と  $u \in C(\overline{W})$  が存在して、

$$\Gamma = \{x \in \overline{W}; u(x) - \theta(x) \equiv 0 \pmod{2\pi\mathbb{Z}}\} \quad (2.8)$$

をみたす。なお、 $m_j$  は定義 2.3 の定め方による。

証明については、次の補題を用いる。

**補題 2.6**  $\Gamma$  を渦巻模様とする。このとき、定義 2.3 により定められた  $m_j \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$  と  $\theta \in C(\overline{W} \setminus \Gamma)$  で

$$\theta(x) \equiv \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j) \pmod{2\pi\mathbb{Z}}$$

をみたすものが存在する。

すなわち、 $\Gamma$  上のみ不連続な  $\theta(x) = \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j)$  が存在する。定理 2.5 の連続関数  $u$  は  $\theta$  を、(2.8) をみたす連続関数になるように変形することで構成する。

## 2.5. 数学的結果

導入した等高線法で渦巻模様の運動を表す。

まず初期の渦巻模様  $\Gamma_0$  を与える。すると定理 2.5 から

$$\Gamma_0 = \{x \in \overline{W}; u_0(x) - \theta(x) \equiv 0 \pmod{2\pi\mathbb{Z}}\} \quad (2.9)$$

をみたく  $u_0 \in C(\overline{W})$  が存在する。ここまで渦巻模様を有界領域上の曲線として定義してきたので、境界条件として Neumann 境界条件を課す。すなわち

$$\Gamma_t \perp \partial W \quad (2.10)$$

とする。すると  $\Gamma_0$  を初期状態とし、法速度 (1.1)、境界条件 (2.10) による渦巻模様の運動は次の等高線方程式による初期値境界値問題

$$u_t - v_\infty |\nabla(u - \theta)| \left\{ 1 + \rho_c \operatorname{div} \frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|} \right\} = 0 \quad \text{in } (0, T) \times W, \quad (2.11)$$

$$\langle \vec{\nu}, \nabla(u - \theta) \rangle = 0 \quad \text{on } (0, T) \times \partial W, \quad (2.12)$$

$$u|_{t=0} = u_0 \quad \text{on } \overline{W} \quad (2.13)$$

の解の等高線表示 (2.6) として表される。ここで  $\vec{\nu}$  は  $\partial W$  の外向き単位法ベクトル場、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$  は  $\mathbb{R}^2$  の内積を表す。したがって、あとは次の二つの問題を解決すればよい。

1. (2.11)–(2.13) の解の一意存在
2. (1.1), (2.10) かつ  $\Gamma_t|_{t=0} = \Gamma_0$  をみたく  $\Gamma_t$  の一意存在

2. は等高線法特有の問題である。というのも、等高線法において  $\Gamma_0$  に対する (2.9) をみたく  $u_0 \in C(\overline{W})$  は一意ではない。他方、1. の結論では  $u_0$  に対する (2.11)–(2.13) の解の一意存在のみを保証する。したがって、1. の結果のみでは無数の初期値にそれぞれただ一つの解が存在することを述べるに過ぎず、結局  $\Gamma_t$  は無数に得られることになる。2. は、一つの  $\Gamma_0$  に対し得られる無数の初期値  $u_0$ 、および無数の解から (2.6) によって表現される集合  $\Gamma_t$  の一意性、すなわち曲線を表さない部分で初期値や解の値がいかに異なろうとも曲線は一意に定まるか否か、を考える問題である。

さて、問題 1. から考察する。まず、方程式 (2.11) は退化放物型、非発散型の方程式であり、かつ多価関数  $\theta$  を含むため解の定義が問題となる。しかし方程式に含まれるのは  $\theta$  の微分のみであり、これは一価に定めることができる。したがって普通の平均曲率流方程式の等高線方程式と同じく、(2.11)–(2.12) について通常の定義どおりに粘性解が定義できる。粘性解を定義するにあたり、(2.11) をより一般の形で表した

$$u_t + F(\nabla(u - \theta), \nabla^2(u - \theta)) = 0 \quad \text{in } (0, T) \times W$$

の形を導入する。方程式 (2.11) は

$$F(p, X) = -v_\infty \left[ |p| + \rho_c \operatorname{trace} \left\{ \left( I - \frac{p \otimes p}{|p|^2} \right) X \right\} \right] \quad (2.14)$$



で表される。以下の定義において、領域  $D \subset \mathbb{R}^k$  上定義された関数  $f$  に対する上半連続包  $f^*: \bar{D} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  および下半連続包  $f_*: \bar{D} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$  を

$$f^*(x) := \limsup_{r \rightarrow 0} \{f(y); |x - y| < r\}, \quad f_*(x) := \liminf_{r \rightarrow 0} \{f(y); |x - y| < r\}$$

で定義する。

**定義 2.7** (i) 関数  $u: (0, T) \times W \rightarrow \mathbb{R}$  が (2.11)–(2.12) の粘性劣解であるとは、 $u^*(t, x) < \infty$  が任意の  $(t, x) \in [0, T] \times \bar{W}$  で成り立ち、かつ任意の  $(\hat{t}, \hat{x}) \in (0, T) \times \bar{W}$  と

$$(t, x) \in (0, T) \times \bar{W} \quad \text{ならば} \quad (u^* - \varphi)(t, x) \leq (u^* - \varphi)(\hat{t}, \hat{x}) \quad (2.15)$$

をみたす任意の  $\varphi \in C^2((0, T) \times \bar{W})$  に対し、

(a)  $\hat{x} \in W$  ならば

$$[\varphi_t + F_*(\nabla(\varphi - \theta), \nabla^2(\varphi - \theta))](\hat{t}, \hat{x}) \leq 0 \quad (2.16)$$

(b)  $\hat{x} \in \partial W$  ならば (2.16) か

$$[\langle \bar{\nu}, \nabla(\varphi - \theta) \rangle](\hat{t}, \hat{x}) \leq 0 \quad (2.17)$$

のいずれか一方

が成り立つときをいう。

(ii) 関数  $u: (0, T) \times W \rightarrow \mathbb{R}$  が (2.11)–(2.12) の粘性優解であるとは、 $u_*(t, x) > -\infty$  が任意の  $(t, x) \in [0, T] \times \bar{W}$  で成り立ち、かつ任意の  $(\hat{t}, \hat{x}) \in (0, T) \times \bar{W}$  と

$$(t, x) \in (0, T) \times \bar{W} \quad \text{ならば} \quad (u_* - \varphi)(t, x) \geq (u_* - \varphi)(\hat{t}, \hat{x}) \quad (2.18)$$

をみたす任意の  $\varphi \in C^2((0, T) \times \bar{W})$  に対し、

(a)  $\hat{x} \in W$  ならば

$$[\varphi_t + F^*(\nabla(\varphi - \theta), \nabla^2(\varphi - \theta))](\hat{t}, \hat{x}) \geq 0 \quad (2.19)$$

(b)  $\hat{x} \in \partial W$  ならば (2.19) か

$$[\langle \bar{\nu}, \nabla(\varphi - \theta) \rangle](\hat{t}, \hat{x}) \geq 0 \quad (2.20)$$

のいずれか一方

が成り立つときをいう。

(iii) 関数  $u: (0, T) \times W \rightarrow \mathbb{R}$  が (2.11)–(2.12) の粘性解であるとは  $u$  が粘性劣解かつ粘性優解であるときをいう。

注意として、 $C^2$  級の粘性解が古典解となるのは  $F$  が退化放物型をみたすとき、すなわち  $N \times N$  実対称行列  $X, Y$  が  $X \leq Y$  をみたすならば

$$F(\cdot, X) \geq F(\cdot, Y)$$

をみたすときであることを注意しておく。(2.14) は退化楕円型である。より一般の退化楕円型方程式に対する粘性解の定義と理論については Crandall–Ishii–Lions[CIL] を参照せよ。また平均曲率流方程式に対する一般論は Chen–Giga–Goto[CGG], Evans–Spruck[ES] を参照せよ。

著者が (2.11)–(2.13) に対する粘性解の比較定理と大域解の存在を証明している。

**定理 2.8 (比較定理 ([O]))**  $\partial W$  は  $C^2$  級を仮定する。 $u, v: (0, T) \times W \rightarrow \mathbb{R}$  を (2.11)–(2.12) の粘性劣解および優解とする。このとき

$$\text{任意の } x \in \overline{W} \text{ について } u^*(0, x) \leq v_*(0, x)$$

が成り立つならば、

$$\text{任意の } (t, x) \in (0, T) \times \overline{W} \text{ について } u^*(t, x) \leq v_*(t, x)$$

が成り立つ。

連続関数の初期値に対する粘性解の一意性は比較定理からただちに得られる。次の定理は大域解の存在定理である。

**定理 2.9 (大域解の存在 ([O]))** 任意の  $u_0 \in C(\overline{W})$  に対し、(2.11)–(2.13) の粘性解  $u \in [0, \infty) \times \overline{W}$  がただ一つ存在する。

この大域解の存在定理では、大域解が存在することの他に、初期値に連続関数を取ると解も連続関数になることを主張している。証明は、非凸領域における通常の平均曲率流方程式の比較定理および大域解の存在を証明した Giga–Sato[GS] および Sato[Sa] の方法を渦巻模様の問題に適用させて用いる。問題は  $\theta$  の多価性であるが、これは粘性解の理論でしばしば見られる最大点の性質を調べる議論で被覆空間を用いることにより問題を回避する。詳しくは [O] を見よ。

また等高線集合の一意について、存在は定理 2.9 と定理 2.5 からただちに得られる。一意性については後藤–中川–大塚が以下に述べる被覆空間上における内部集合の比較定理を示しており、これから得られる。

**定理 2.10 (正值集合の比較定理 ([GNO]))**  $u, v: (0, T) \times W \rightarrow \mathbb{R}$  は (2.11)–(2.12) の粘性劣解および粘性優解で、

$$\{(x, \xi) \in \mathfrak{X}; u(0, x) - \sum_{j=1}^N m_j \xi_j > 0\} \subset \{(x, \xi) \in \mathfrak{X}; v(0, x) - \sum_{j=1}^N m_j \xi_j > 0\}$$

を仮定する。このとき

$$\begin{aligned} & \{(t, x, \xi) \in (0, T) \times \mathfrak{X}; u(t, x) - \sum_{j=1}^N m_j \xi_j > 0\} \\ & \subset \{(t, x, \xi) \in (0, T) \times \mathfrak{X}; v(t, x) - \sum_{j=1}^N m_j \xi_j > 0\} \end{aligned}$$

が成り立つ。

定理は [GNO] の記述に合わせて書いた。なお、[GNO] では初期値に連続性を仮定しているが、同様の証明で本講究録の仮定まで条件を緩めることができる。被覆空間として  $\mathfrak{X}$  を用いているが、これを  $\mathcal{X}$  でみるには  $\sum_{j=1}^N m_j \xi_j$  を  $z$  とみなせばよい。すなわち定理 2.10 は初期時刻において内部を表す集合で包含関係があるときに、その関係が保持されることを意味している。比較定理 (定理 2.8) と異なる点は  $u$  と  $v$  の初期値の間に大小関係が仮定されていない点で、そのため正值集合の比較定理は普通の比較定理からただちに導かれるものではない。

証明には従属変数の変換不変性の性質を用いる。具体的には、以下のような定理を言う。

従属変数の変換不変性  $G: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  を単調非減少な上半連続関数とし、ある  $s_0 \in \mathbb{R}$  について

$$s > s_0 \text{ ならば } G(s + 2\pi|m_j|) = G(s) + 2\pi|m_j| \quad (j = 1, \dots, N) \quad (2.21)$$

が成り立つとする。このとき、 $v$  が (2.11)–(2.12) の粘性優解であるならば、 $G(v-\theta)+\theta$  も (2.11)–(2.12) の粘性優解である。

関数  $G(v-\theta)+\theta$  は多価関数を含むため、定義に注意が必要である。仮に今  $\theta$  が一価だとしても、 $\arg(x-a_j)$  には不連続点が存在する。この不連続点は  $v$  とは無関係に存在するものなので、 $G(v-\theta)+\theta$  が  $\theta$  の不連続点や文枝の選び方によらず定義されるものでなければならない。これを解決する条件が (2.21) である。 $G(v-\theta)+\theta$  の厳密な定義は [GNO] を参照せよ。定理 2.10 の証明ではこの形の変形で、初期値に大小関係が成立するようにする。すなわち  $G$  は従属変数の変換不変性に必要な仮定とともに

$$u^*(0, x) \leq G(v_*(0, x) - \theta(x)) + \theta(x)$$

をみたすものを選ぶ。具体的な  $G$  の定義は [CGG] や [ES] と同様、

$$G(s) := \sup\{(\tilde{u}_0(y, \eta))_+; (y, \eta) \in \mathfrak{X}, \tilde{v}_0(y, \eta) \leq s\}$$

とする。ここで

$$\tilde{u}_0(x, \xi) = u^*(0, x) - \sum_{j=1}^N m_j \xi_j, \quad \tilde{v}_0(x, \xi) = v_*(0, x) - \sum_{j=1}^N m_x \xi_j$$

である。この、定義に  $\sum_{j=1}^N m_j \xi_j$  の部分が含まれていることが、定理 2.10 の証明に対する象徴的な工夫である。この  $G$  が、

(G1)  $G$  は単調非減少

(G2)  $s \leq 0$  ならば  $G(s) = 0$

(G3)  $\tilde{u}_0(x, \xi) \leq G(\tilde{v}_0(x, \xi))$

(G4) 任意の  $j = 1, \dots, N$  について、 $s \in G^{-1}((0, \infty))$  のとき  $G(s + 2\pi|m_j|) = G(s) + 2\pi|m_j|$

(G5)  $G$  は  $\mathbb{R}$  で上半連続であり、かつ  $s = 0$  で連続

をみtasことを示す。[GNO] では  $G$  が well-defined であることや (G1)–(G5) を示すのに  $u(0, x)$ ,  $v(0, x)$  に連続性を仮定していたが、本質的には  $u^*$  や  $v_*$  の半連続性のみですべて示すことができる。証明の詳細については [GNO] を参照せよ。

## 2.6. 表面の成長速度

らせん転位による格子の変動は表面に対し垂直方向にのみ発生すると仮定すると、線形弾性論から表面の高さを表す関数  $h = h(t, x)$  は

$$\Delta h = -h_0 \operatorname{div}(\delta_{\Gamma_t} \vec{n}) \quad (2.22)$$

をみtas。ここで  $h_0$  はステップの単位高さ、 $\delta_{\Gamma_t}$  は  $\Gamma_t$  上でのみ無限大の値を取るディラックのデルタ測度、 $\vec{n}$  は  $\Gamma_t$  の向きを表す  $\Gamma_t$  の連続な単位法ベクトルとする。この方程式の解として、例えば  $\Gamma_t := \{(x, 0); x > 0\}$  であるとき

$$\frac{h_0}{2\pi} \arg(x)$$

がしばしば例として挙げられる ([HL])。実は §2.3 で指摘したように、一般の  $\Gamma_t$  に対しても  $\Gamma_t$  上のみ不連続となる  $\theta(x) = \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j)$  が (2.22) の解となること が直接計算から確認できる。

そこで、ここでは一般化された渦巻模様として (2.6) の式が与えられた際に、 $\Gamma_t$  上でのみ不連続となる  $\theta$  の定義方法を示し、これを表面の高さ関数とする。それにはまず、被覆空間上での曲線の位置を見つける必要がある。 $\Theta_j(x) \in [0, 2\pi)$  を  $\arg(x - a_j)$  の主値とし、 $\Theta(x) = \sum_{j=1}^N m_j \Theta_j(x)$  とする。すると各  $(t, x) \in (0, T) \times \overline{W}$  に対しある  $k(t, x) \in \mathbb{Z}$  が存在し、

$$-\pi \leq u(t, x) - (\Theta(x) + 2\pi k(t, x)) < \pi$$

をみtas。ここでヘビサイド関数  $H(s)$ 、すなわち

$$H(s) = \begin{cases} -1 & (s < 0 \text{ のとき}), \\ 0 & (s = 0 \text{ のとき}), \\ +1 & (s > 0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

を導入し、

$$\zeta(t, x) := \Theta(x) + 2\pi k(t, x) + \pi H(u(t, x) - [\Theta(x) + 2\pi k(t, x)])$$

と定義する。すると  $\zeta$  は  $\Gamma_t$  上のみ不連続であり、かつ

$$\zeta(t, x) \equiv \theta(x) + \pi \pmod{2\pi\mathbb{Z}}$$

をみたす。実際  $\Gamma_t$  上の不連続性は定義から明らかである。他方各  $\Theta_j(x)$  の不連続点の集まりである直線  $L_j := \{a_j + (r, 0); r \geq 0\}$  上については、 $k(t, x)$  の定義から  $x_0 \in L_j$  のとき、

$$\Theta(x_0) + \pi(2k(t, x_0) - 1) \leq u(t, x_0) \leq \Theta(x_0) + 2\pi k(t, x_0)$$

である。実際  $x_0 \notin \Gamma_t$  のとき  $x \mapsto k(t, x)$  は  $x_0$  のある近傍上連続になるので、もし  $u(t, x_0) > \Theta(x_0) + 2\pi k(t, x_0)$  とすると、

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow -0} u(t, x_0 + (0, r)) &\geq \lim_{r \rightarrow -0} [\Theta(x_0 + (0, r)) + 2\pi k(t, x_0 + (0, r))] \\ &= \Theta(x_0) + \pi(2k(t, x_0) + 1) \end{aligned}$$

となる。したがって

$$u(t, x_0) - (\Theta(x_0) - 2\pi k(t, x_0)) \geq \pi$$

となり、これは  $k(t, x)$  の決め方に矛盾する。

したがって

$$h(t, x) := \frac{h_0}{2\pi} \zeta(t, x) \tag{2.23}$$

とおくと、これが求める表面の高さ関数となる。表面の高さが得られればこれをもとに表面の成長速度が計算できる。まず、表面全体の平均成長高度  $R_h(t; t_0)$  を

$$R_h(t; t_0) = \frac{1}{|W|} \int_W [h(t, x) - h(t_0, x)] dx \tag{2.24}$$

で定義する。ただし  $|W|$  は  $W$  の測度を表す。 $R_h(t; t_0)$  が微分可能ならば、これを時間微分したものが表面の平均成長速度である。すなわち

$$R(t) := R'_h(t; t_0) = \frac{1}{|W|} \int_W h_t(t, x) dx$$

と定義する。実際の数値計算実験では時間の間隔パラメータ  $\Delta t$  に対し、 $R_h(t, t - \Delta t) / \Delta t$  を成長速度としている。

この定義は [BCF] にある、回転する基本型渦巻曲線

$$\Gamma_t := \{r(\cos(\theta(r) + \omega t), \sin(\theta(r) + \omega t)); r \geq 0\}$$

をもとに定義している。[BCF] では (1.1) をもとに  $\theta(r)$  を求め、その角速度  $\omega$  を

$$\omega = \frac{v_\infty \sqrt{3}}{2\rho_c(1 + \sqrt{3})} \approx 0.63 \times \frac{v_\infty}{2\rho_c}$$

と近似している。ここで  $v_\infty/(2\rho_c)$  は  $\Gamma_t$  をアルキメデスのらせんとしたときの角速度である。さらに [BCF] では、この角速度から成長速度  $R$  を

$$R = \frac{h_0\omega}{2\pi} \approx \frac{h_0v_\infty\sqrt{3}}{4\rho_c(1+\sqrt{3})} \quad (2.25)$$

としている。この第一式が、回転により単位時間に積まれる分子層の枚数に相当する。そこで、(2.23) は  $[t_0, t]$  の間に積まれる分子層の枚数を計算するよう定義した。したがってその微分 (2.24) は (2.25) に相当する。以下に、らせん転位が一つの場合の数値計算結果を示す。

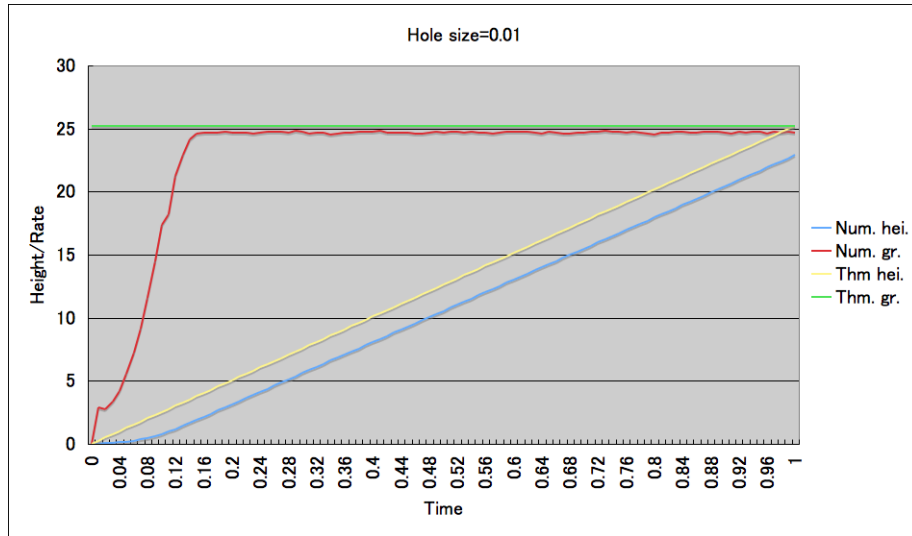


図 2.3: らせん転位が一つの場合の平均成長高度および成長速度。緑、黄が [BCF] による  $R$  および  $R_h = Rt$  を表す。赤、青が数値計算による  $R$  および  $R_h$  を表す。

数値計算は通常の有限差分近似を行った。  $\Omega = (-0.5, 0.5)^2$ ，中心は原点であり格子点が原点を含むため、  $B_\rho(0)$  を除く代わりに原点の格子点 1 点のみを取り除いている。空間格子間隔のパラメータ  $\Delta x = 0.01$  に対し  $\Delta t = 0.25 \times \Delta x^2$  を取る。(1.1) のパラメータとして  $v_\infty = 5.0$ ，  $\rho_c = 0.01$  とする。計算に当たって方程式 (2.11) の特異点を取り除くため、

$$u_t - v_\infty |\nabla(u - \theta)| \left\{ 1 + \rho_c \operatorname{div} \frac{\nabla(u - \theta)}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\nabla(u - \theta)|^2}} \right\} = 0 \quad \text{in } (0, T) \times W$$

として計算を行っている。  $\varepsilon = 0.001$  と取る。曲線の初期状態として  $\{(r, 0); r > 0\}$  をとり、  $u_0 \equiv 0$  とする。

数値計算の結果において、初期時刻からしばらくの間  $R_h$  が [BCF] の値よりも小さいのは、曲線が空間に対し一様な渦巻模様を形成していないことによる。すなわち (2.24) の感覚的な理解として、数値計算上では渦巻模様が通過した格子点の数の和であるため、初期状態が  $\{(r, 0); r > 0\}$  の場合では一様な渦巻模様が形成されるまでは成長速度が上昇しない。

### 3. Inactive pair

ステップが (1.1) で動くとき、逆向きのらせん転位の組  $a_1, a_2$  で  $|a_1 - a_2| < 2\rho_c$  をみたすものを inactive pair という。Burton-Cabrera-Frank は、inactive pair は結晶表面の成長に何ら寄与しないと指摘している。このことは、実際に  $\Omega$  上に inactive pair のみ存在する状況下では成長高度に上限が存在する、という結果をもって示すことができる。

いま  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  は有界領域で、この後 (3.1) で定義する曲線  $R_1$  が内部に含まれるとする。  $a_1 = (-a, 0), a_2 = (a, 0)$  は  $a_1, a_2 \in \Omega, |a_1 - a_2| = 2a < 2\rho_c$  とする。  $\rho \in (0, \rho_c)$  は十分小さくとり、  $B_i = B_\rho(a_i) (i = 1, 2)$  とする。ただし  $B_\rho(a)$  は中心  $a$ 、半径  $\rho$  の閉円板とする。  $W = \Omega \setminus (B_1 \cup B_2)$  の境界は滑らかとする。

$$\theta(x) = \arg(x - a_1) - \arg(x - a_2)$$

とする。

以上の仮定のもとで、次が成り立つ。

**定理 3.1 (Inactive pair)**  $u_0 \in C(\overline{W})$  を任意に固定し、  $u$  を (2.11)–(2.13) の解とする。このときある定数  $M > 0$  が存在し、  $u(t, x) < M$  が任意の  $t > 0$  について成り立つ。

§2.4 での説明から、

$$\widehat{I}_t := \{(x, z) \in \mathfrak{X}; u(t, x) - z > 0\}$$

は結晶内部を表す。したがって定理 3.1 の結論は

$$(x, z) \in \widehat{I}_t \quad \text{ならば} \quad z < M$$

が任意の  $t > 0$  について成り立つ、すなわち各点の結晶表面の高さに一様な上界が存在することを示している。

定理 3.1 の証明は、接続型渦巻曲線で 1.1, (2.10) の定常解の存在することを示すことで行う。まず  $\partial B_i (i = 1, 2)$  を表す曲線

$$\begin{aligned} p_1(\sigma) &= (-a, 0) + \rho(\cos \sigma, \sin \sigma), \\ p_2(\sigma) &= (a, 0) + \rho(\cos \sigma, \sin \sigma) \end{aligned}$$

を考える。この円の各点から、  $\partial B_\rho(a_1), \partial B_\rho(a_2)$  について法ベクトルをそれぞれ  $-\pi/2, \pi/2$  回転させた接ベクトルを導入する。その方向に  $\rho_c$  移動した点の軌跡

$$\begin{aligned} q_1(\sigma) &= p_1(\sigma) + \rho_c(\sin \sigma, -\cos \sigma) = (-a, 0) + \sqrt{\rho^2 + \rho_c^2}(\cos(\sigma - \alpha), \sin(\sigma - \alpha)), \\ q_2(\sigma) &= p_2(\sigma) + \rho_c(-\sin \sigma, \cos \sigma) = (a, 0) + \sqrt{\rho^2 + \rho_c^2}(\cos(\sigma + \alpha), \sin(\sigma + \alpha)) \end{aligned}$$

を考える。ここで  $\alpha \in (0, \pi/2)$  は

$$\cos \alpha = \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + \rho_c^2}}, \quad \sin \alpha = \frac{\rho_c}{\sqrt{\rho^2 + \rho_c^2}}$$

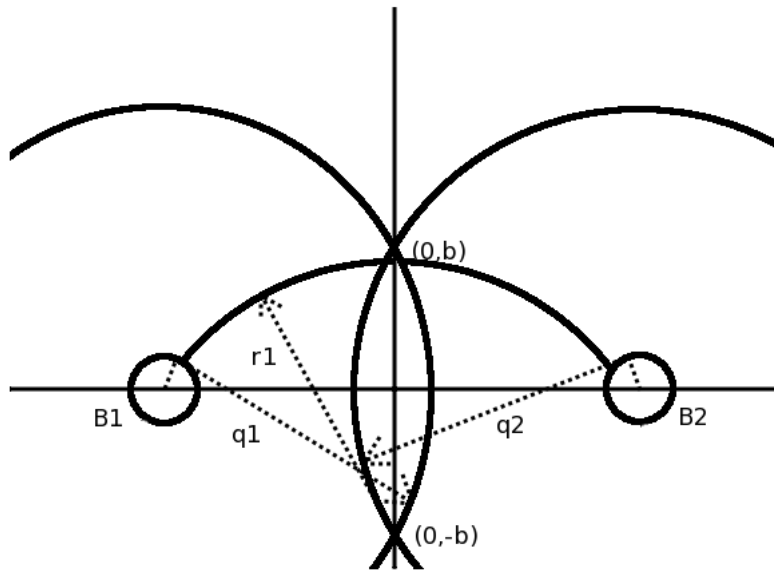
をみたす数とする。するとこの二つの円  $q_1(\sigma)$ ,  $q_2(\sigma)$  は交点を 2 つ、 $(0, \pm b)$  ( $b > 0$ ) でもつ。そこで中心  $(0, -b)$ 、半径  $\rho_c$  の円を考えると、ある  $\gamma > 0$  が存在して

$$R_1 := \{r_1(\sigma) = (0, -b) + \rho_c(\cos \sigma, \sin \sigma); \sigma \in [\pi/2 - \gamma, \pi/2 + \gamma]\} \quad (3.1)$$

は次をみたす。

$$R_1 \perp \partial W, \quad R_1 \subset \overline{W}.$$

この  $R_1$  が (1.1), (2.10) をみたす定常円であり、これを表す (2.11)–(2.12) の定常解が存在することを示す。



注意 3.2 仮定として  $R_1$  を含むとは恣意的に感じるかもしれない。しかし他方で、(1.1) で動く渦巻曲線において  $V > 0$  とすると  $\kappa < 1/\rho_c$ 、すなわち曲率半径が  $\rho_c$  より大きくなる。すなわち  $R_1$  が内部に含まれない領域では  $\Gamma_t$  がらせん転位の周りを取り巻くような渦巻を作ることが出来ない。したがって、 $\Omega$  が  $R_1$  を含む仮定は不自然に大きな領域を取っているわけではない。

補題 3.3  $v(x)$  を  $R_1$  でのみ不連続な  $\theta(x) = \arg(x - a_1) - \arg(x - a_2)$  とする。このとき、 $v$  は (2.11)–(2.12) の粘性解である。

証明に入る前に次を注意しておく。

補題 3.4 ([BG]) (i) 関数  $v: (0, T) \times W \rightarrow \mathbb{R}$  が (2.11)–(2.12) の粘性優解であることの必要十分条件は、次をみたすときをいう。任意の  $(\hat{t}, \hat{x}) \in (0, T) \times \overline{W}$  と、(2.18) をみたす任意の  $\varphi \in C^2((0, T) \times \overline{W})$  に対し、



(a)  $\hat{x} \in W$  のとき  $|\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x})| \neq 0$  ならば、不等式 (2.19) をみだし、  
 $|\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x})| = 0$  ならば、 $\nabla^2(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}) = 0$  のもとで  $\varphi_t(\hat{t}, \hat{x}) \geq 0$  が  
 成り立つ。

(b)  $\hat{x} \in \partial W$  のとき、(a) の不等式か (2.20) が成り立つ。

(ii) 関数  $u: (0, T) \times W \rightarrow \mathbb{R}$  が粘性劣解であることの必要十分条件は、次をみたすときをいう。任意の  $(\hat{t}, \hat{x}) \in (0, T) \times \overline{W}$  と、(2.15) をみたす任意の  $\varphi \in C^2((0, T) \times \overline{W})$  に対し、

(a)  $\hat{x} \in W$  のとき  $|\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x})| \neq 0$  ならば、不等式 (2.16) をみだし、  
 $|\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x})| = 0$  ならば、 $\nabla^2(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}) = 0$  のもとで  $\varphi_t(\hat{t}, \hat{x}) \leq 0$  が  
 成り立つ。

(b)  $\hat{x} \in \partial W$  のとき、(a) の不等式か (2.17) が成り立つ。

補題 3.4 の条件はもともと Ishii–Souganidis による粘性解の定義であった。Barles–Georgelin は Ishii–Souganidis の定義と Chen–Giga–Goto, Evans–Spruck らの定義の同値性を証明した。

補題 3.4 の証明は [BG] と同様の証明で示せるので省略する。ただし  $|\nabla(\varphi - \theta)| = 0$  の場合の証明において

$$\Phi(t, x, y) := v(t, x) + \frac{|x - y|^4}{\varepsilon} - \varphi(t, y) - (\theta(x) - \theta(y))$$

の最大点の様子から [BG] の証明と同様の結論を導く必要がある。ここで  $\theta(x), \theta(y)$  は  $\hat{x}$  の近傍で定義された滑らかな分枝とする。□

補題 3.3 の証明: 劣解、優解であることは同様に証明できるので優解であることのみ示す。

$(\hat{t}, \hat{x}) \in (0, T) \times \overline{W}$  を任意に固定し、 $\varphi \in C^2((0, T) \times \overline{W})$  は

$$(t, x) \in (0, T) \times \overline{W} \text{ ならば } v_*(x) - \varphi(t, x) \geq v_*(\hat{x}) - \varphi(\hat{t}, \hat{x}) \quad (3.2)$$

をみたすとする。

いま  $\hat{x} \notin R_1$  とすると  $v(x) \equiv \theta(x)$  は  $\hat{x}$  の近傍で滑らかであるから  $\nabla v(\hat{x}) = \nabla \theta(\hat{x})$ 、 $\nabla^2 v(\hat{x}) = \nabla^2 \theta(\hat{x})$  が成り立つ。さらに  $v_t = 0$  が常に成り立つことから、(3.2) より

$$\varphi_t(\hat{t}, \hat{x}) = 0, \quad \nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}) = 0, \quad \nabla^2(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}) \leq 0$$

が成り立つ。よってこのとき、補題 3.4 から  $v$  が粘性優解であることが得られる。

したがってあとは  $\hat{x} \in R_1$  かつ  $|\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x})| \neq 0$  の場合のみ考えればよい。以下では  $\hat{x} \in W$  の場合と  $\hat{x} \in \partial W$  の場合に分けて議論を行う。

Case 1.  $\hat{x} \in W$  の場合。  $\vec{r}(x)$  を  $\vec{r}(r_1(\sigma)) = (-\sin \sigma, \cos \sigma)$  で与えられる  $R_1$  の接ベクトル場とする。  $\vec{n}(x)$  を  $R_1$  の向きを表す法ベクトル場とすると  $\vec{n}(r_1(\sigma)) =$

$(\cos \sigma, \sin \sigma)$  で与えられることに注意する。

$$\Phi(\mu) = v_*(\hat{x} + \mu\vec{\tau}(\hat{x})) - \varphi(\hat{t}, \hat{x} + \mu\vec{\tau}(\hat{x})), \quad (3.3)$$

$$\Psi(\mu) = v_*(\hat{x} + \mu\vec{\mathbf{n}}(\hat{x})) - \varphi(\hat{t}, \hat{x} + \mu\vec{\mathbf{n}}(\hat{x})), \quad (3.4)$$

$$\Xi(\sigma) = v_*(r_1(\sigma)) - \varphi(\hat{t}, r_1(\sigma)) \quad (3.5)$$

とおく。さらに  $\hat{x} = r_1(\hat{\sigma})$  と表されれるとする。

いま、ある  $\hat{x}$  の近傍  $U$  と  $U$  上滑らかな  $\theta$  の分枝 ( $\tilde{\theta}$  で表すが、微分など誤解を生じない場合は  $\theta$  と書く) に対し、次をみたす  $k \in \mathbb{Z}$  が存在する。すなわち  $|\mu|$  が十分小さいとき

$$v_*(\hat{x} + \mu\vec{\tau}(\hat{x})) = \tilde{\theta}(\hat{x} + \mu\vec{\tau}(\hat{x})) + 2\pi k, \quad (3.6)$$

$$v_*(\hat{x} + \mu\vec{\mathbf{n}}(\hat{x})) = \begin{cases} \tilde{\theta}(\hat{x} + \mu\vec{\tau}(\hat{x})) + 2\pi k & (\mu \geq 0), \\ \tilde{\theta}(\hat{x} + \mu\vec{\tau}(\hat{x})) + 2\pi(k+1) & (\mu < 0) \end{cases} \quad (3.7)$$

となる。また  $|\sigma - \hat{\sigma}|$  が十分小さいとき

$$v_*(r_1(\sigma)) = \tilde{\theta}(r_1(\sigma)) + 2\pi k \quad (3.8)$$

となる。

よって、まず  $\Phi$  は十分小さな  $\mu$  について滑らかで  $\Phi'(0) = 0$ 、すなわち

$$\langle \nabla(\theta - \varphi)(\hat{t}, \hat{x}), \vec{\tau}(\hat{x}) \rangle = 0$$

をみたす。したがって

$$\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}) = \nu_0 \vec{\mathbf{n}}(\hat{x})$$

なる  $\nu_0 \in \mathbb{R}$  が存在する。他方 (3.2) と (3.7) から  $\mu > 0$  に対し

$$0 \leq \Psi(\mu) - \Psi(0) = \mu \langle \nabla(\theta - \varphi)(\hat{t}, \hat{x}), \vec{\mathbf{n}} \rangle + O(\mu^2)$$

が成り立つ。よって辺々を  $\mu > 0$  で割って  $\mu \rightarrow 0$  とすれば

$$\langle \nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}), \vec{\mathbf{n}} \rangle \leq 0$$

を得る。以上より  $\nu_0 \leq 0$ 、とくに

$$\frac{\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x})}{|\nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x})|} = -\vec{\mathbf{n}}(\hat{x})$$

となる。

さらに (3.8) より  $\Xi$  は  $\hat{\sigma}$  に十分近い範囲で滑らかであり、(3.2) から  $\Xi''(\hat{\sigma}) \geq 0$  をみたす。  $r_1'(\cdot) = \rho_c \vec{\tau}$  であることと、  $r_1'' = -r_1 = -\rho_c \vec{\mathbf{n}}$  が成り立つことに注意して計算すると (以下の計算では煩雑さを避けるため  $\hat{t}, \hat{x}, \hat{\sigma}$  を省略する)

$$\begin{aligned} 0 \leq \Xi'' &= \langle \nabla(\theta - \varphi), r_1'' \rangle + \langle \nabla^2(\theta - \varphi) r_1', r_1' \rangle \\ &= -\langle (\varphi - \theta), -\rho_c \vec{\mathbf{n}} \rangle - \langle \rho_c \nabla^2(\varphi - \theta) \vec{\tau}, \rho_c \vec{\tau} \rangle \\ &= -\rho_c |\nabla(\varphi - \theta)| - \rho_c^2 (\Delta(\varphi - \theta) - \langle \nabla^2(\varphi - \theta) \vec{\mathbf{n}}, \vec{\mathbf{n}} \rangle) \\ &= -\rho_c |\nabla(\varphi - \theta)| - \rho_c^2 \left( \Delta(\varphi - \theta) - \frac{\langle \nabla^2(\varphi - \theta) \nabla(\varphi - \theta), \nabla(\varphi - \theta) \rangle}{|\nabla(\varphi - \theta)|^2} \right) \\ &= -\rho_c |\nabla(\varphi - \theta)| \left\{ 1 + \rho_c \operatorname{div} \frac{\nabla(\varphi - \theta)}{|\nabla(\varphi - \theta)|} \right\} \end{aligned}$$

を得る。したがって  $\rho_c > 0$  から  $(\hat{t}, \hat{x})$  にて

$$-v_\infty |\nabla(\varphi - \theta)| \left\{ 1 + \rho_c \operatorname{div} \frac{\nabla(\varphi - \theta)}{|\nabla(\varphi - \theta)|} \right\} \geq 0$$

が成り立つ。  $t \mapsto v(x) - \varphi(t, x)$  は滑らかであることを考えると  $(\hat{t}, \hat{x})$  で

$$-v_\infty |\nabla(\varphi - \theta)| \left\{ 1 + \rho_c \operatorname{div} \frac{\nabla(\varphi - \theta)}{|\nabla(\varphi - \theta)|} \right\} = \varphi_t + F(\nabla(\varphi - \theta), \nabla^2(\varphi - \theta))$$

であるので、補題 3.4(i)(a) の条件が示された。

**Case 2.**  $x \in \partial W$  の場合。  $\Phi(\mu) \geq \Phi(0)$  や (3.6) が  $\hat{x} \in \partial B_\rho(a_1)$ ,  $\hat{x} \in \partial B_\rho(a_2)$  のときそれぞれ  $\mu \leq 0$ ,  $\mu \geq 0$  の範囲でみたすことに注意する。さらに

$$\vec{\tau}(\hat{x}) = \begin{cases} \vec{\nu}(\hat{x}) & (\hat{x} \in \partial B_\rho(a_1) \text{ のとき}), \\ -\vec{\nu}(\hat{x}) & (\hat{x} \in \partial B_\rho(a_2) \text{ のとき}) \end{cases}$$

であることに注意すると、(3.2) より  $\hat{x} \in \partial B_\rho(a_1)$  のとき  $\mu < 0$  で

$$\begin{aligned} 0 \leq \Phi(\mu) - \Phi(0) &= \langle \nabla(\theta - \varphi)(\hat{t}, \hat{x}), \mu \vec{\tau}(\hat{x}) \rangle + O(\mu^2) \\ &= -\mu \langle \nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}), \vec{\nu} \rangle + O(\mu^2) \end{aligned}$$

が成り立つ。辺々を  $\mu < 0$  で割って  $\mu \rightarrow -0$  とすれば

$$\langle \nabla(\varphi - \theta)(\hat{t}, \hat{x}), \vec{\nu} \rangle \geq 0$$

を得る。したがって定理 3.4(i)(b) の条件をみたす。  $x \in \partial B_\rho(a_2)$  のときも符号に注意して計算すれば同様に証明できる。

以上より  $v(x)$  は (2.11)–(2.12) の粘性優解である。  $\square$

補題 3.3 と比較定理から定理 3.1 が容易に得られる。  $u_0 \in C(\overline{W})$  から  $k \in \mathbb{Z}$  を

$$u_0(x) \leq v_*(x) + 2\pi k \quad (x \in \overline{W})$$

が成り立つように十分大きく取ると、任意の  $T > 0$  と  $(t, x) \in (0, T) \times \overline{W}$  に対し

$$u(t, x) \leq v_*(x) + 2\pi k$$

が成り立つ。したがって  $M > 0$  を  $\sup_{\overline{W}} v^* < M$  となるように取ればよい。  $\square$

**注意 3.5** (i) *Inactive pair* の場合において定常円を定義する際に導入した円  $q_1$  と  $q_2$  の交点は一般に二つ存在する。したがって、定常円は本稿で定義したものの他に中心を  $(0, b)$  とするもう一つの定常解も存在する。これらの定常解の安定性や、定常解に挟まれた領域内の曲線がどのように動くかは興味深い問題である。数値計算実験の結果から推測すると定常解は *separatrix* であるか、本稿の定常解が安定で他方の定常解が不安定である可能性がある。

(ii) 成長速度の詳しい数学的な解析は今後の課題である。とくに逆向きのらせん転位の組の場合は *inactive pair* の他に、二つの距離を離していくとある程度の距離で成長速度が最大となり、その後単調減少することが数値的に得られている。予想として最大値を取る距離が約  $4\rho_c$ 、 $|a_1 - a_2| \rightarrow \infty$  としたときの成長速度の極限は単独の場合の成長速度に収束すると予想されるが、これの数学的な結果はまだ得られていない。

(iii) 今後の重要な課題として、バンチングと中空孔の問題がある。バンチングとはステップが束になって動く現象で、実際ステップの高さは分子数十個から数百個分の高さがある。ところがフェーズフィールドモデルでは  $m_j$  を大きくして一つのらせん転位に対するステップを複数出現させると、初期状態で複数のステップを束にしておいても、すぐに中心から離れていく様子が観測されている。他方、等高線方程式では数学的にはらせん転位が原点に一つのみ、同心円領域の場合は二本の渦巻曲線を十分近づけておくと離れないことが証明できる。この他、分子や不純物の濃度場などを導入した方程式でバンチングをシミュレーションしている例もある。

中空孔とは、一つのらせん転位から出現するスパイラルステップの高さが高すぎると、らせん転位付近に孔が開く現象のことである。これらの現象を正しく捉えるモデルの構築とその数学的研究は今後の課題である。

## 参考文献

- [BG] G. Barles and C. Georgelin, A simple proof of convergence for an approximation scheme for computing motions by mean curvature, *SIAM J. Numer. Anal.* **32**(1995), 484–500.
- [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.
- [CGG] Y.-G. Chen, Y. Giga and S. Goto, Uniqueness and existence of viscosity solutions of generalized mean curvature flow equation, *J. Differential Geom.* **33**(1991), 749–786.
- [CIL] M. Crandall, H. Ishii and P.-L. Lions, User’s guide to viscosity solutions of second order partial differential equations, *Bull. Amer. Math. Soc.* **27**(1992), 1–67.
- [ES] L. C. Evans and J. Spruck, Motion of level sets by mean curvature I, *J. Differential Geom.* **33**(1991), 635–681.
- [G] Y. Giga, *Surface evolution equation – A level set approach*, Birkhäuser, 2006.

- [GS] Y. Giga and M.-H. Sato, Neumann problem for singular degenerate parabolic equations, *Differential Integral Equations* **6**(1993), 1217–1230.
- [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.
- [HL] J. P. Hirth and J. Lothe, *Theory of dislocations*, McGraw-Hill, New York, 1968.
- [IS] H. Ishii and P. E. Souganidis, Generalized motion of noncompact hypersurfaces with velocity having arbitrary growth on the curvature tensor, *Tôhoku Math. J.* **47**(2005), 227–250.
- [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.
- [Sa] M.-H. Sato, Interface evolution with Neumann boundary condition, *Adv. Math. Sci. Appl.* **4**(1994), 249–264.
- [Sm] P. Smereka, Spiral crystal growth, *Physica D*, **138**(2000), 282–301.