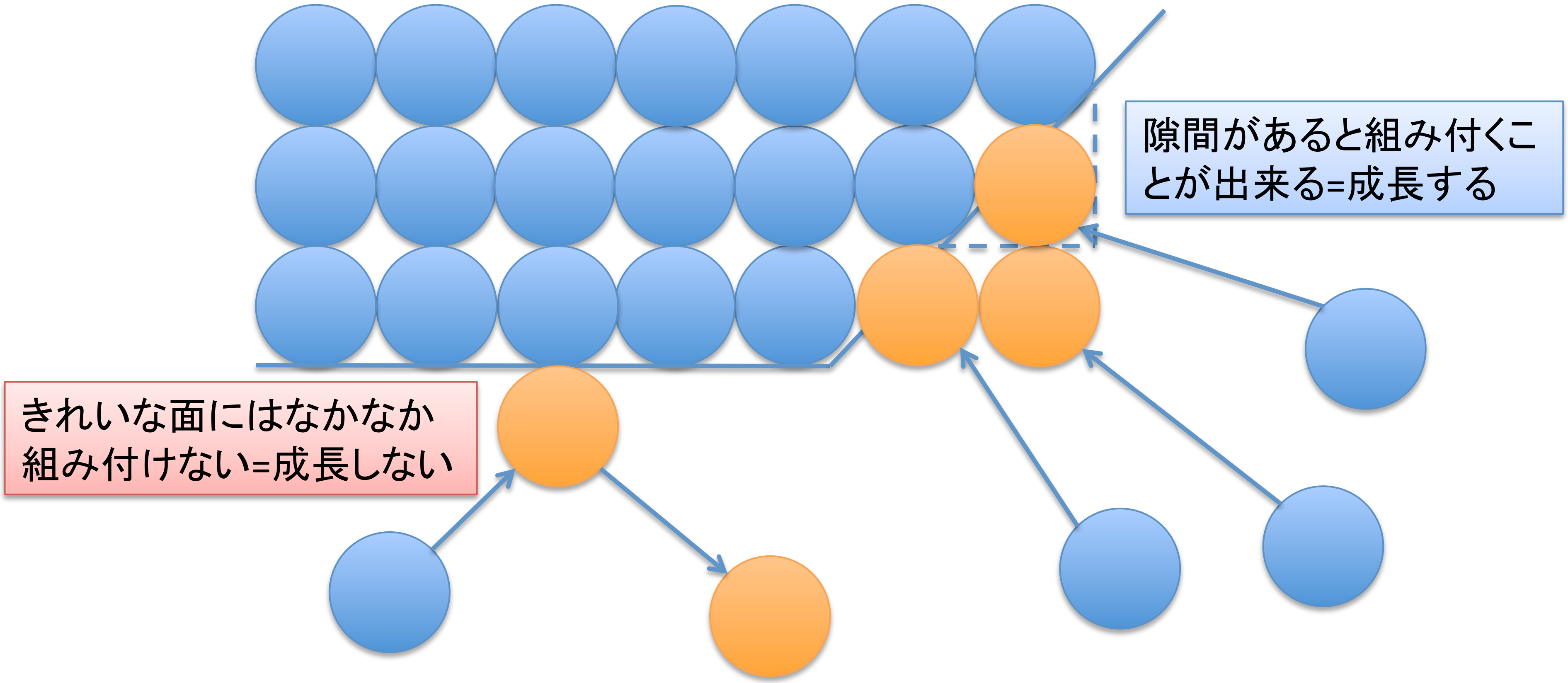
結晶表面上の渦巻模様の運動

大 塚　岳
群馬大学大学院工学研究科
渦の特徴付け
2012年8月6日 北海道大学

結晶の成長

結晶=分子の規則正しい配列(格子構造)

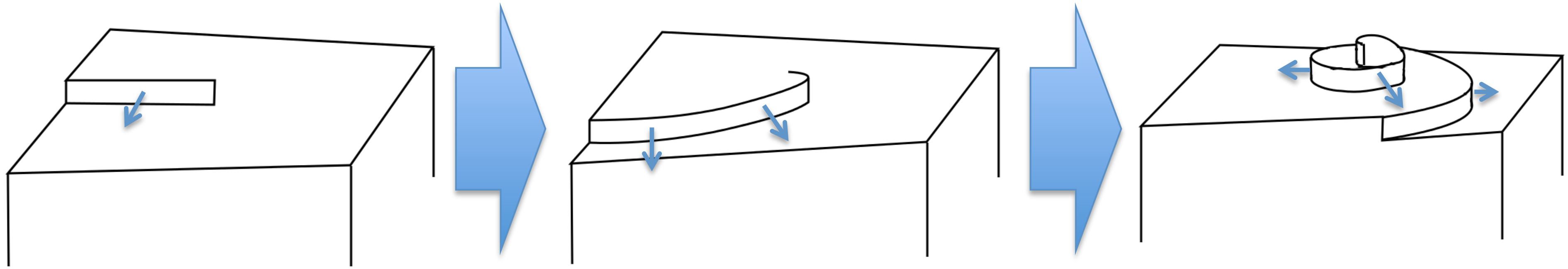


結晶のきれいな形は、成長しづらい面が形作っている!
→成長しづらい面だけになったとき、結晶はどう成長するか?

スパイラル成長

Point! 結晶表面上の段差が常に残る成長メカニズム

(Burton-Cabrera-Frank, 1951)



1. 格子が部分的にずれてらせん面構造を形成
2. ずれた分が表面に現れるとステップを供給
3. 分子はステップで結晶に組み込まれる
4. ステップが前進するとらせん面を登って結晶が成長

特徴

- 結晶表面上に渦巻模様が現れる
- 中心、ステップの数は複数
  - →ステップ同士でぶつかる、ちぎれるなど複雑な挙動を示す

研究課題

- 渦巻模様の形成過程
- 運動の定性的性質
- 何が渦を巻くか?

（物理的視点）

- ‘方程式’は解けるか?
- ‘現象の本質’を捉えているか?

（数学的視点）

数学的な捉え方

- 適切な概念を定義して定式化する(⇔現象を捉えているか?)
    - 現象を表現している
    - 第3者が検証、利用できる
    - ‘似てる’現象も表現できる
- 解ける・解けないをきちんと分類できる
    - その現象はある？ない？
    - 再現できる？できない？
    - コントロールできる？できない？

これらの間に意味のある答えが出せる定式化をする

現象をどう捉えるか

対象は?	スケールは？	現象の原理は？
• 分子 • ステップ • ‘内’と‘外’	• ミクロ • メゾ • マクロ	• 粒子の運動 • 分子の流入量 • 変分構造

意味のある答えを出すには？
- 適切なスケールと原理の選択
- 対象を適切に表現する

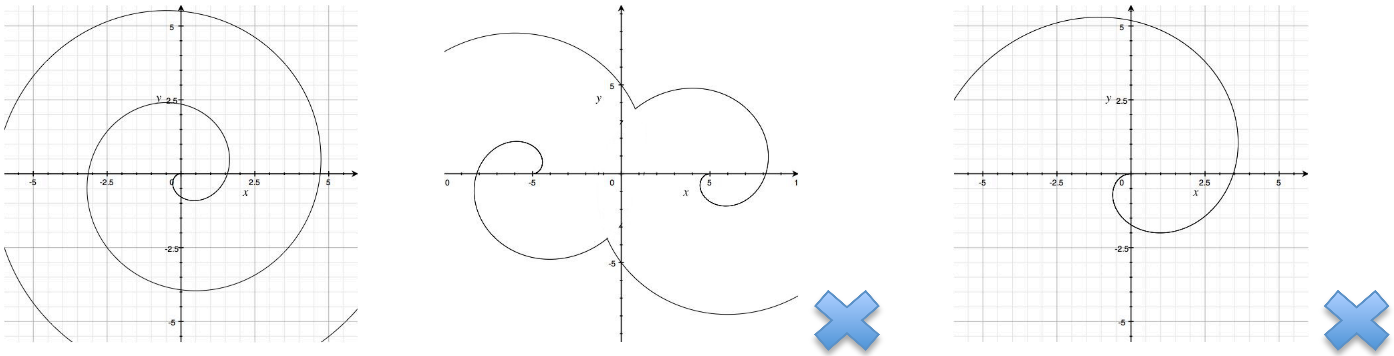
スパイラル成長の場合…
- 分子+オートマトン（粒子の運動）→モンテカルロ法
- ステップ+分子の流入量→等高線法(Smereka ’00, O ’03)
- 内と外+変分構造→Allen-Cahn方程式(Karma-Plapp ’98, Kobayashi)

（もちろん自由に組み合わせてもよい）

渦とは何か?

渦巻模様の場合…対象を捉えるのが難しい

1. 端点のある曲線
2. ~~同じ方向に曲がり続ける~~
3. ~~せめて中心のまわりを1回転以上~~

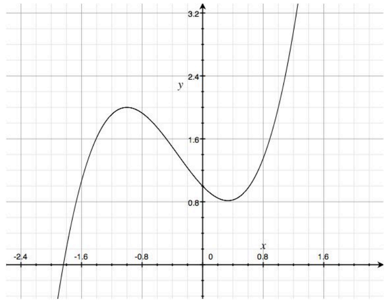


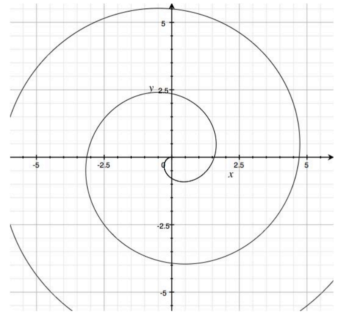
- 否定して消えるものは現象固有の状態
  - 否定して消えないものを問題の定式化(本質を捉えるための言葉)に使う
  - 現象固有の状態は適切に定義して、数式化された問題から導き出す!(目標)

渦の難しさ

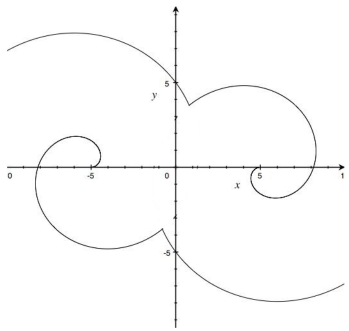
渦=端点のある曲線を数式で表現することは難しい!

- 関数y=f(x)を使う
  - xとyの相関にならない

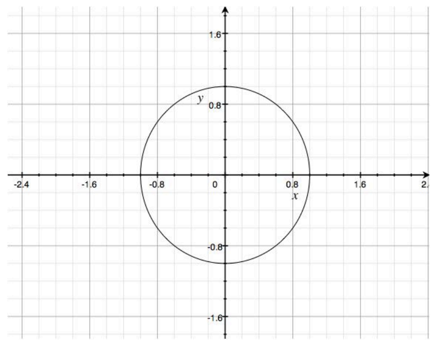




- ヒモを平面に貼り付ける
  - 渦の数だけヒモがいる

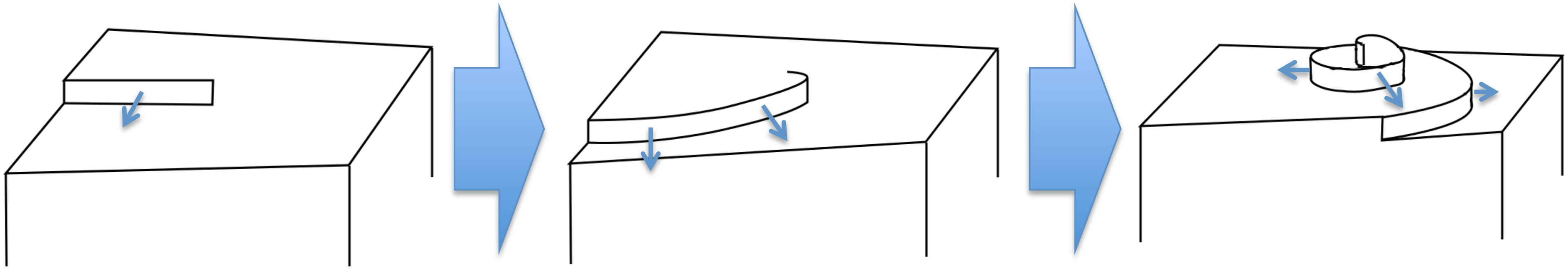


- ‘円: $x^2+y^2=1$’みたいな表現もダメ!
  - 「端点のある曲線」にならない



渦の表現

適切な表現のため...現象に戻る



1. 格子が部分的にずれてらせん面構造を形成
2. ずれた分が表面に現れるとステップを供給
3. 分子はステップで結晶に組み込まれる
4. ステップが前進するとらせん面を登って結晶が成長

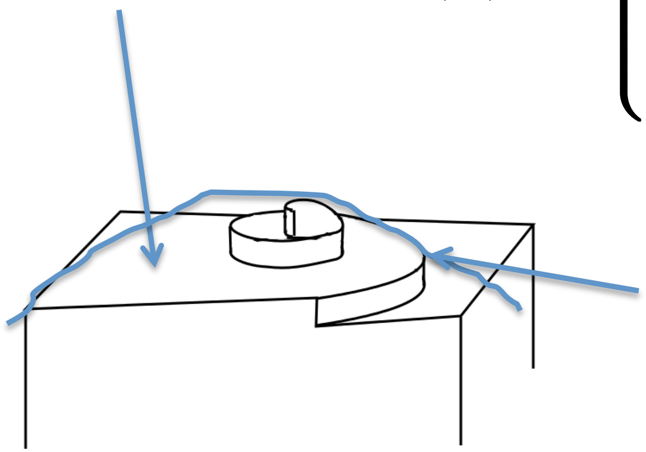
らせん面がスパイラル成長の本質!

渦=らせん面と表面の交差‘線’

らせん面上の等高線法

らせん面: $z = \theta(x) = \begin{cases} \arg(x) & \text{(中心が原点一つの場合)} \\ \displaystyle\sum_{j=1}^{N} m_j \arg(x - a_j) & \end{cases}$

(中心がN個あって、それぞれ複数のスパイラルを持つ場合)



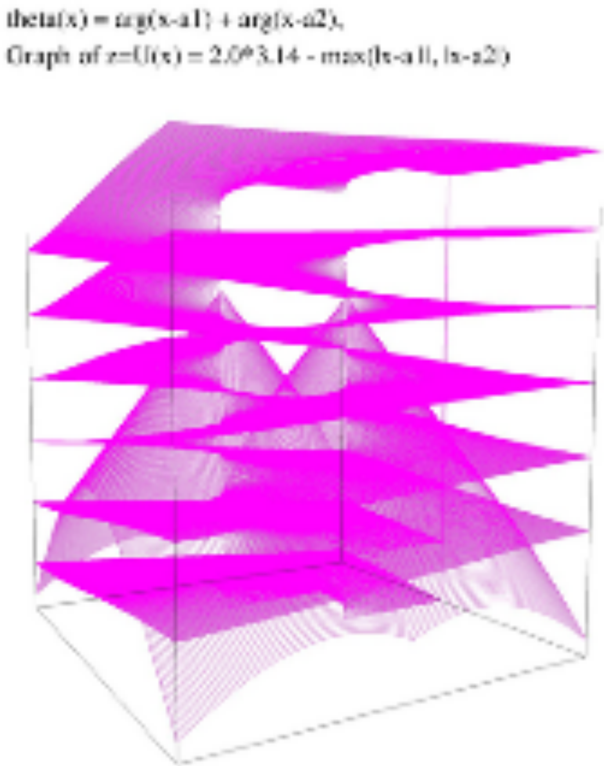
表面: z=u(t,x)

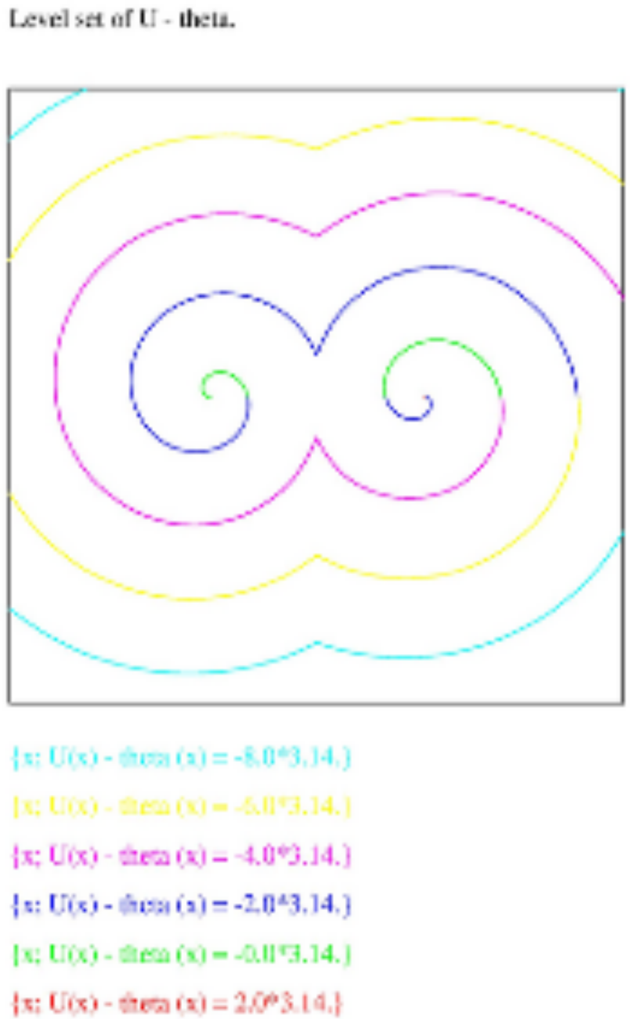
らせん面と表面の交差
→ u(t,x) = θ(x)

$$\Gamma_t = \{x;\ u(t,x) - \theta(x) = 2\pi k\ \ (k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)\}$$

2中心の場合(1)

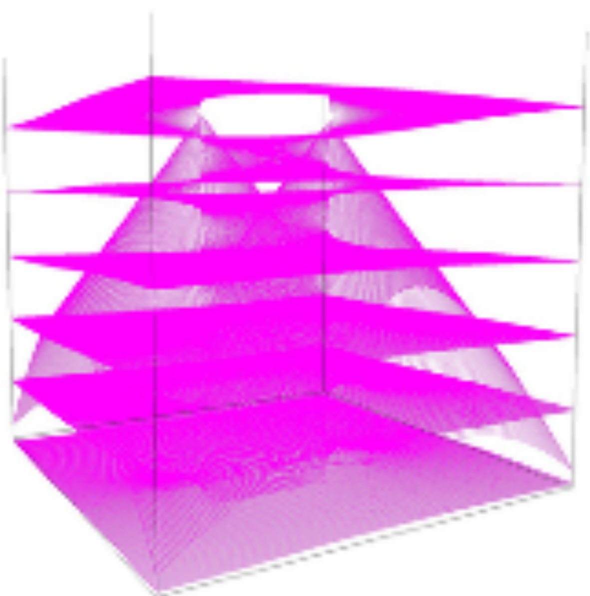
$$\theta(x) = \arg(x - a_1) + \arg(x - a_2)$$

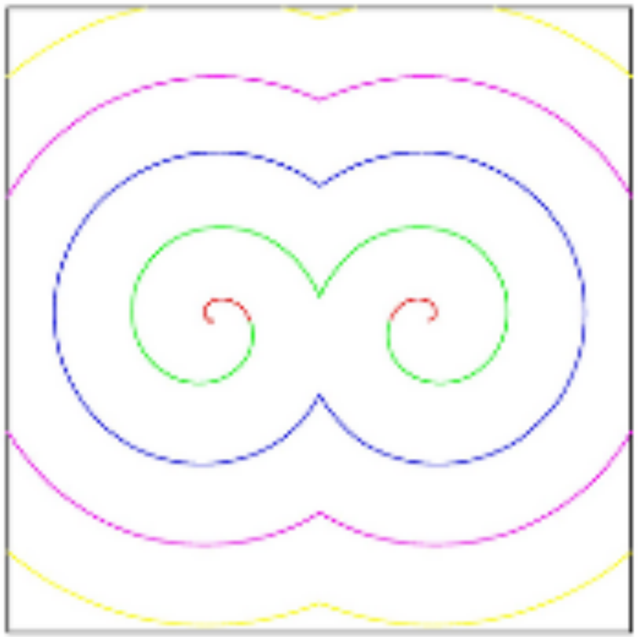




2中心の場合(2)

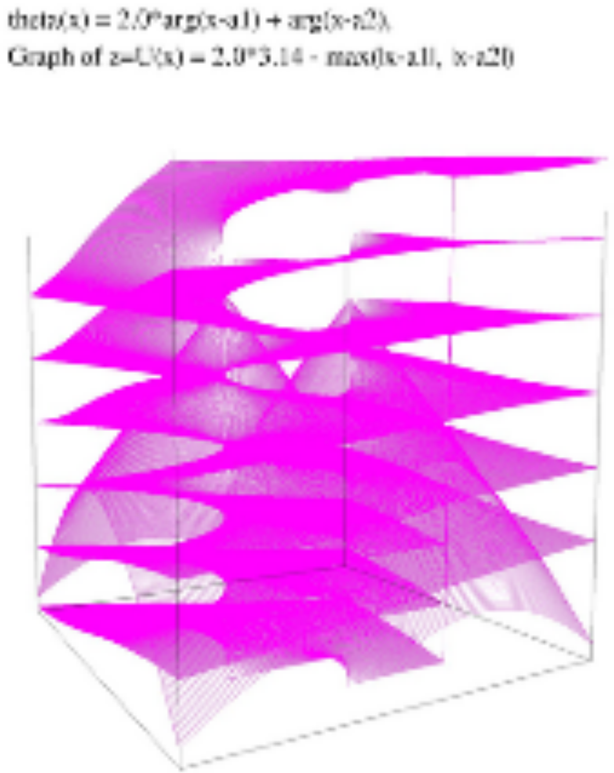
$$\theta(x) = \arg(x - a_1) - \arg(x - a_2)$$

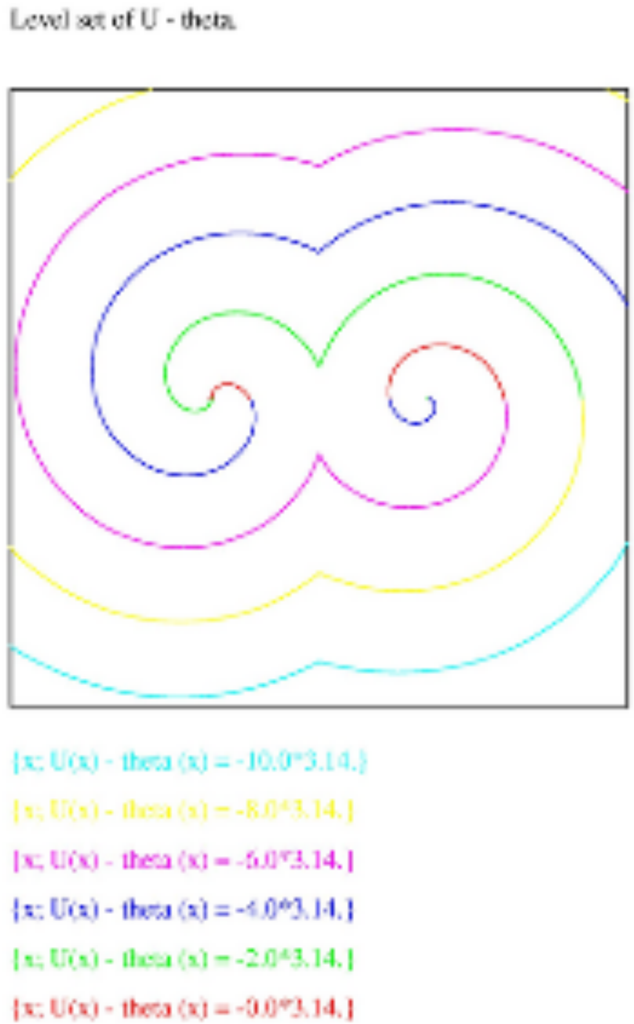




2中心の場合(3)

$$\theta(x) = 2\arg(x - a_1) + \arg(x - a_2)$$





運動方程式

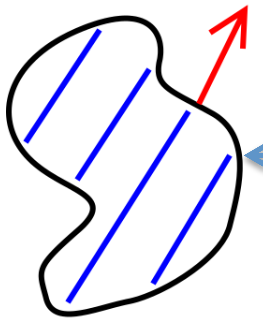
Gibbs-Thomson効果:
内に向かって曲がれば曲がるほど分子は流出しやすく、外に向かって曲がれば曲がるほど流入しやすい

$$V_N = v_\infty(1 - \rho_c \kappa)$$

V_N: ステップの移動速度、κ: 曲率
v_∞: 直線ステップの移動速度、ρ_c: 臨界曲率半径

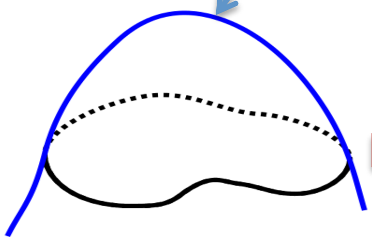
等高線法

(1988 Osher-Sethian,
cf. 2006 Y. Giga, Surface evolution equation: a level set approach, Birkhäuser, 2006)



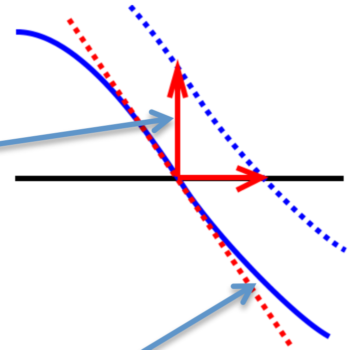
$$\Gamma_t = \{x | u(t,x) = 0\}$$

$$z = u(t,x)$$



V_N

$$\vec{N} = -\frac{\nabla u}{|\nabla u|}, \quad V = \frac{u_t}{|\nabla u|}$$



接線の傾き: $-|\nabla u|$

曲率=法ベクトル(向き)の変化量

$$\sum_{j=1}^{n} \kappa_j = \mathrm{div}_{\Gamma_t} \vec{N} = -\mathrm{div} \frac{\nabla u}{|\nabla u|}$$

(uをすべてu-θに換える)

スパイラルの運動方程式

(LV)等高線方程式

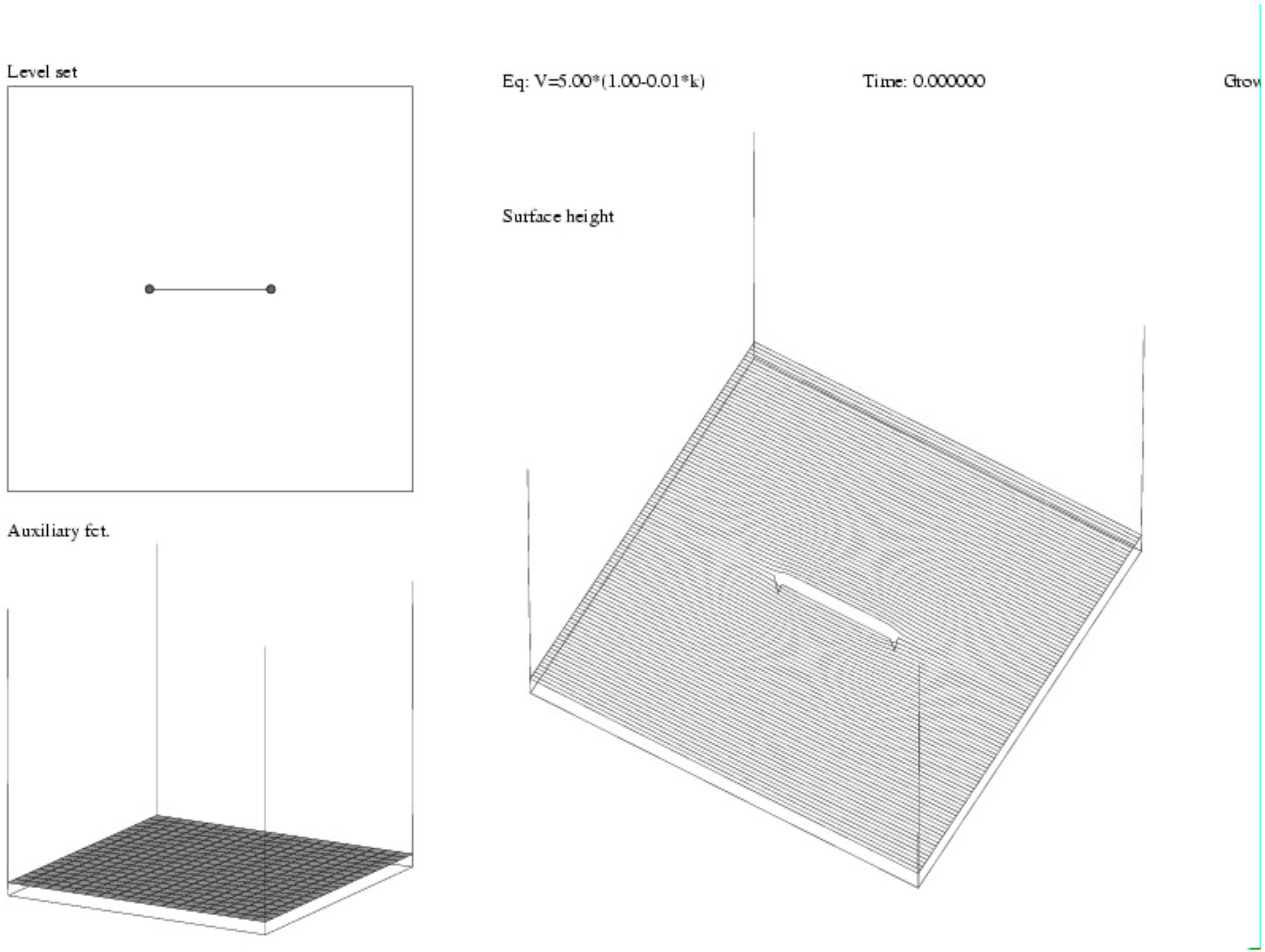
$$u_t - v_\infty |\nabla(u-\theta)| \left\{ \rho_c \mathrm{div} \frac{\nabla(u-\theta)}{|\nabla(u-\theta)|} + 1 \right\} = 0,$$

+境界条件(境界とスパイラルが直交)

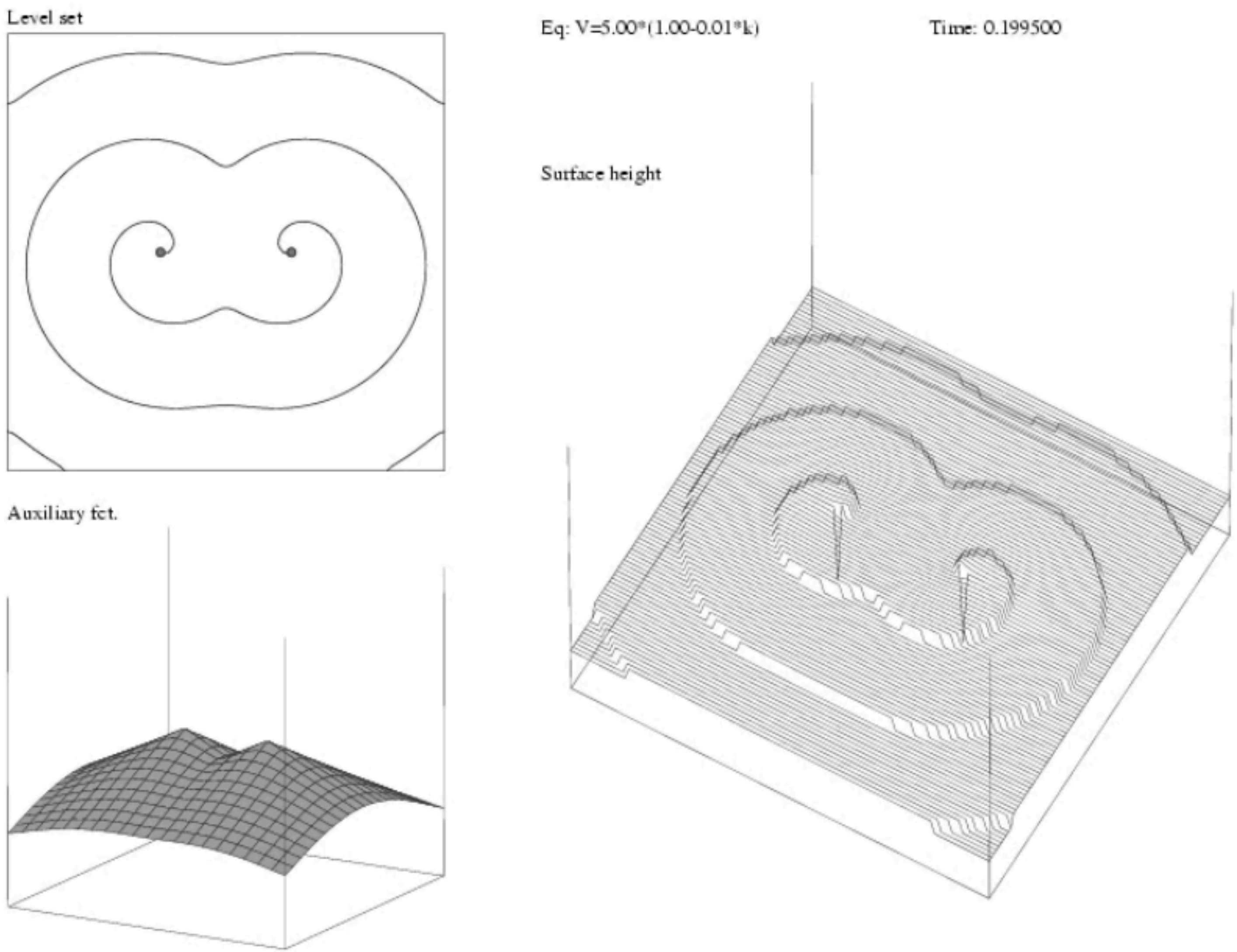
数学的結果

2003 O
解の比較定理: 二つの連続な解u, vに対し u(0,x) ≦ v(0,x) ならば、すべてのtで u(t,x) ≦ v(t,x).
解の一意存在: 与えられた連続関数の初期値に対し、(LV)の粘性解で与えられた初期条件をみたすものがただ一つ存在する。
2008 Goto-Nakagawa-O
曲線の運動の一意性: 等高線から得られる曲線の運動は、与えられた初期時刻の曲線に対し一意に定まる。
初期値の存在: 与えられた`適切’なスパイラル曲線の場合、それを等高線法で描くことが出来る連続な関数が存在する。

数値シミュレーション

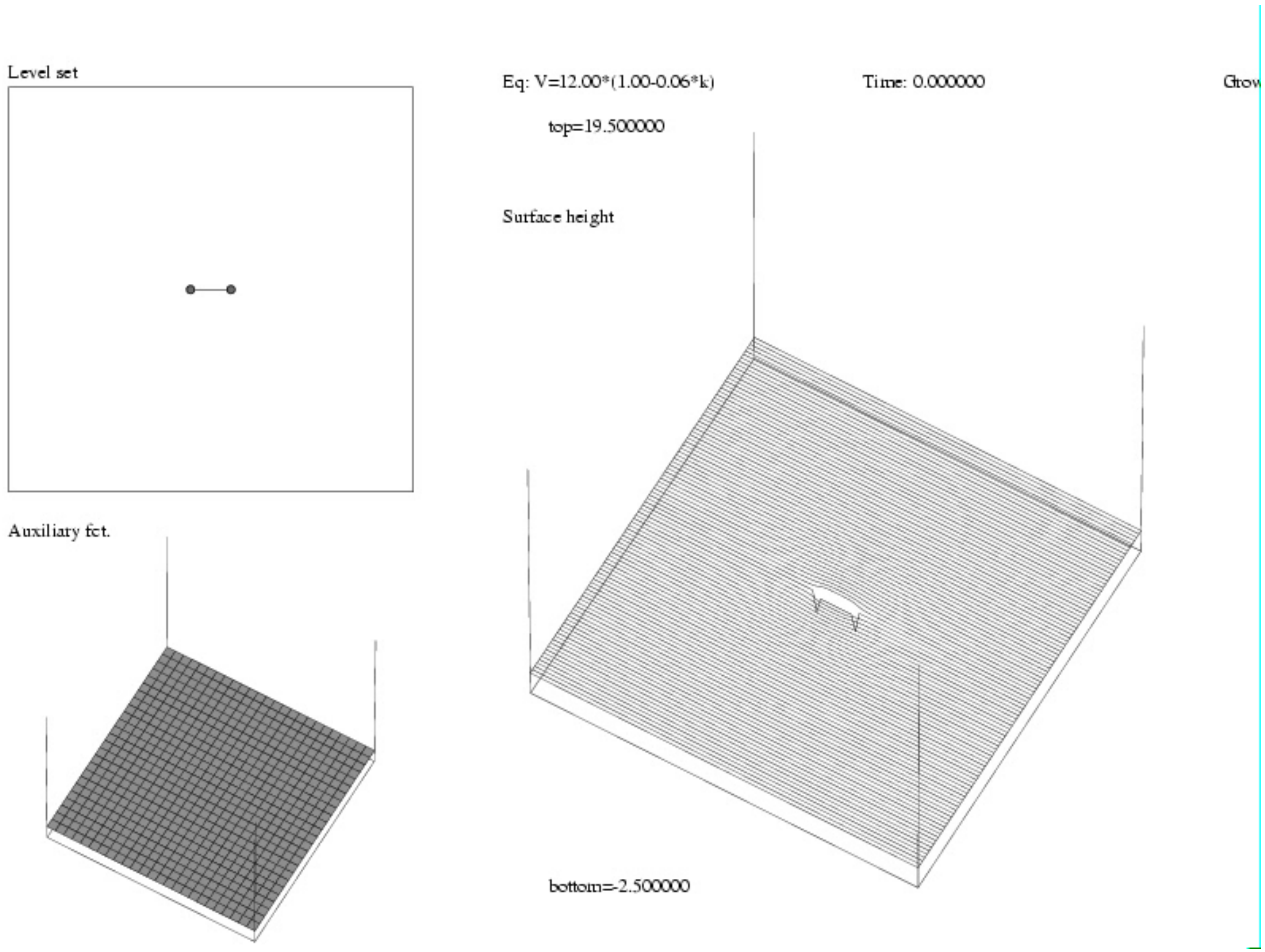

Level set
Auxiliary fct.
Eq: V=5.00*(1.00-0.01*k)
Time: 0.000000
Surface height

シミュレーション結果


Level set
Auxiliary fct.
Eq: V=5.00*(1.00-0.01*k)
Time: 0.199500
Surface height

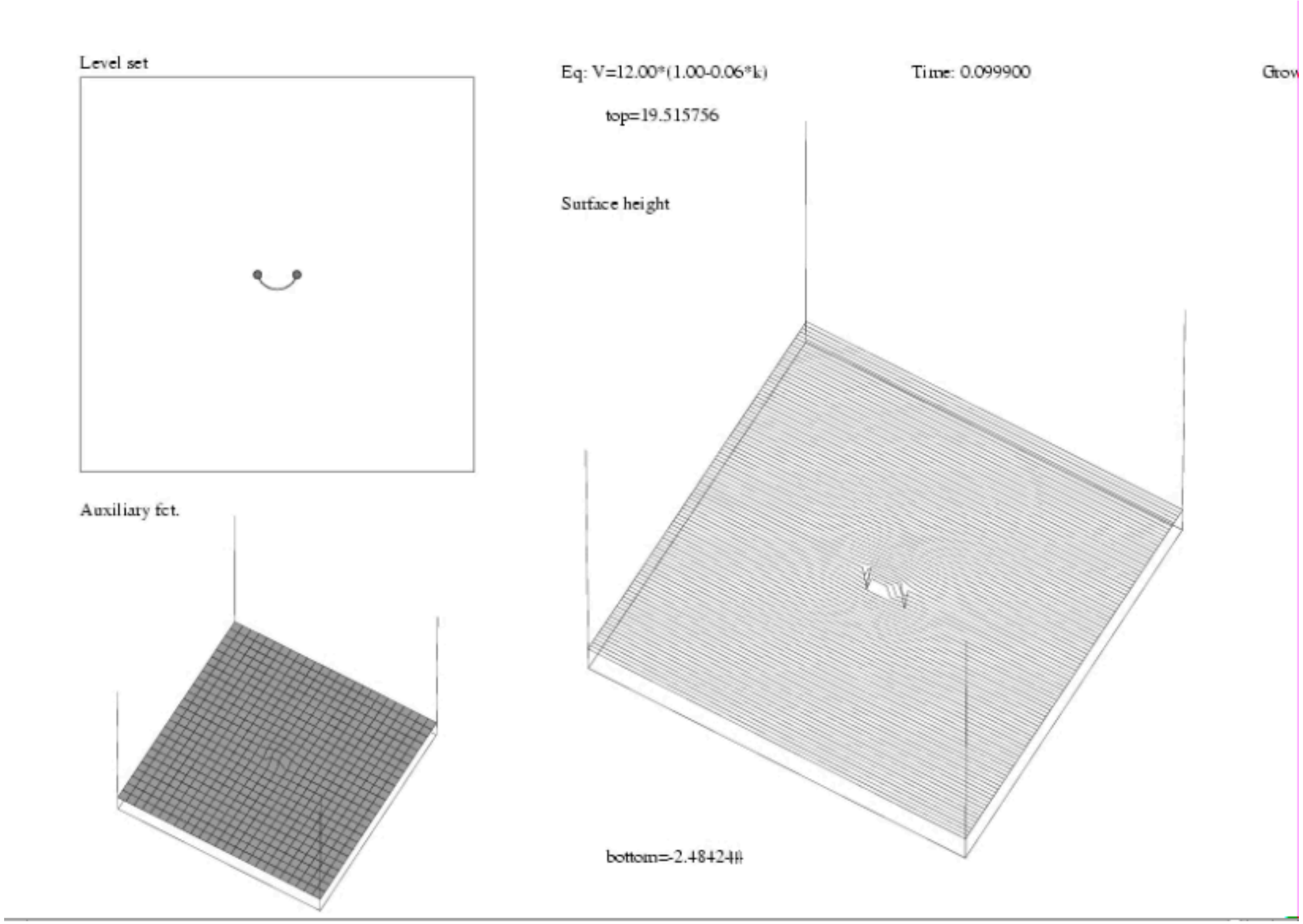
インアクティブペア

個別現象の発見: 逆向きに回転するスパイラルのペアが十分近い位置にある場合、その表面は成長しない



インアクティブペア

個別現象の発見: 逆向きに回転するスパイラルのペアが十分近い位置にある場合、
その表面は成長しない



まとめ

- 渦＝らせん面と表面の交差線
  - このアイデアのもとで渦を数式化すると、'段差が渦巻をなす現象'を表現することができる
    - 解の存在（現象の存在）
    - 一意性（パラメータを一致させれば再現できる）
    - 初期値に対する連続性（正確に表現しきれないパラメータの近似による表現）
    - 曲線どうしの衝突、ちぎれを表現することができる
    - インアクティブペアと呼ばれる、個別の現象をきちんと表現し、その存在を示すことも出来る

今後の課題

- モデル間の相互関係
- より重要な現象に対応しうる定式化の導入
- 現象の制御