

平成21年 5月31日現在

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2006～2008

課題番号：18740057

研究課題名（和文） 結晶成長モデルおよび関連する界面運動の数理解析

研究課題名（英文） Mathematical analysis of a model of crystal growth and related dynamics of interfaces

研究代表者

中村 俊子（荻原俊子）(NAKAMURA TOSHIKO (OGIWARA TOSHIKO))

城西大学・理学部・准教授

研究者番号：70316678

研究成果の概要：結晶が成長していく際、結晶の表面には、結晶分子レベルの高さの一定速度・一定波形で進むフロント波（転位）が観察されることがある。こうした結晶成長を記述する空間1次元反応拡散方程式を用いた数理モデルに対し、解の時間的ふるまいを調べ、時間無限大での解の漸近形を決定した。また、転位の時間発展の本質を記述する運動方程式を導出し、転位同士の間には互いに反発力が働いていることを示すと同時に、反発力の大きさと転位間の距離の関係を求めた。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,000,000	0	1,000,000
2007年度	700,000	0	700,000
2008年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	2,300,000	180,000	2,480,000

研究分野：応用解析学

科研費の分科・細目：数学・数学一般（含確率論・統計数学）

キーワード：結晶成長モデル、界面運動、反応拡散方程式

1. 研究開始当初の背景

炭化ケイ素やカルシウムなどの鉱物の結晶が成長していく際、結晶の表面には、結晶分子レベルの高さの、一定の波形・一定の速度で進むフロント波や回転するスパイラル波が観察されることがある。これは、初めは一様であった結晶の表面に圧力や電荷等の影響により段差ができ（転位がおこり）、溶液中の結晶分子はこの段差部分で結晶と結合し、段差が前進あるいは渦巻きながら結晶

が成長していくためである。

こうした結晶成長を記述する数理モデルとして、周期関数を反応項に持つ多安定型の反応拡散方程式が、Falo らのグループ（1991年）、Aranson らのグループ（1998年）、小林亮氏（1999年）により提案されている。しかしながら、周期関数を反応項に持つ反応拡散方程式モデルに対する数学的研究は、本研究代表者らによって、フロント波やスパイラル波の存在が示されている程度で、それまでほとんどなされていなかった。

また、反応拡散方程式における波の伝播に関する研究も、生物種の侵入や神経パルスの伝播、化学反応波の伝播現象を記述する数理モデルなどの、単安定型、あるいは双安定型とよばれる反応項を持つ方程式に対するものばかりであり、本研究の対象とする多安定型の方程式を扱ったものは、これまでほとんど無かった。とりわけ、反応拡散方程式を直接解析するのが困難である場合や転位の時間発展を調べる場合には、方程式に含まれる物理パラメータを0に近づけた特異極限として得られる、転位のダイナミクスの本質を記述する方程式(界面の運動方程式)を取り出すという手法が有効であるが、多安定型反応拡散方程式に対する界面ダイナミクスについての研究はこれまでなされていなかった。

2. 研究の目的

結晶成長を記述する反応拡散方程式モデル、あるいはその特異極限として得られる転位の時間発展を記述する界面の運動方程式の解析を通して、結晶表面の波の伝播メカニズムおよび転位ダイナミクスを明らかにし、結晶の成長現象を数学的に説明することが本研究の目的である。具体的には、以下について研究を推進する：

(1) 反応拡散方程式モデルにおける

- ① 解の時間的挙動と漸近挙動(時間無限大での解の挙動)の解析；
- ② 転位の相互作用について、2つ転位の間の距離と転位間に働く相互作用の向き・大きさの関係の解明。

(2) 界面方程式における

- ① (広義の意味での)強比較定理が成り立つ弱解のクラスの構成；
- ② 進行波やスパイラル波の存在と漸近安定性の証明、ならびにフロントの進行速度(成長速度)の評価。

3. 研究の方法

(1) 反応拡散方程式モデルの解の挙動

本研究で扱う反応拡散方程式モデルにおいては、比較定理が成り立つ(すなわち、反応拡散方程式の優解とよばれる関数と劣解とよばれる関数について、初期時刻において劣解 \leq 優解という順序関係(大小関係)が成り立っていれば、時間が経ってもこの順序関係は

保たれたままであるという性質が成り立つ)。反応拡散方程式に対し、優解と劣解を構成して比較定理を用いる手法に、力学系の手法を取り入れ、解の定性的性質や解の時間的挙動および、時間無限大での漸近形を求める。

(2) 転位ダイナミクス

反応拡散方程式に含まれる物理パラメータ(微小パラメータ)について漸近展開することにより、界面の運動方程式の導出を試みる。また、元の反応拡散方程式に対し優解と劣解を構成し比較定理を適用して、導出した界面方程式の数学的正当化(転位ダイナミクスの本質的部分を記述していることの数学的証明)を行うとともに、界面方程式の解析を通して、結晶の成長速度や転位の相互作用について調べる。

(3) 数値シミュレーション

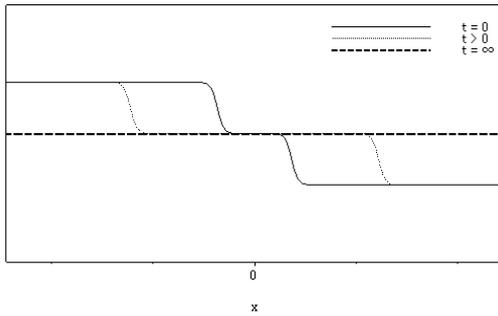
理論的な研究と並行して補助的な数値計算を行い、反応拡散方程式モデルの解の時間発展を数値的に求め、解の挙動・時間無限大での漸近挙動、結晶の成長速度の評価や転位の相互作用など、理論的結果の予測に役立つ。

4. 研究成果

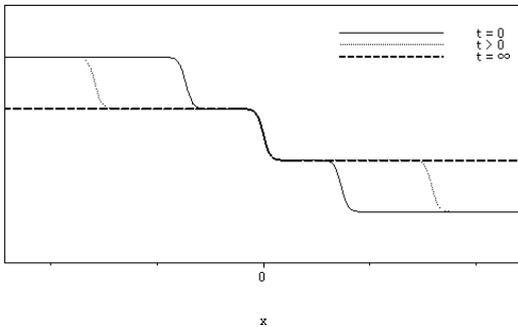
周期関数を反応項を持つ空間1次元反応拡散方程式モデル、ならびに、その特異極限である界面方程式に対し、ある対称性に関する仮定(物理的には、結晶が成長するという現象と溶解するという現象が同程度起こるという仮定)の下で、以下の結果を得た。

(1) 反応拡散方程式モデルの解の挙動

結晶表面の2つの転位(フロント)同士は互いに反発し合うこと、また、隣り合う2つの転位(フロント)の間の距離は時間経過とともに増加し、時間無限大で無限大に発散することを証明した。さらに、反応拡散方程式モデルの初期値問題について、時間無限大での解の漸近形を決定した。具体的には、2段や4段の階段など、段数が偶数である階段状の波形をした初期値から出発した解は、時間が経つにつれてある定数(詳しく述べると、初期値の平均値)に(広義一様に)収束することを示した。また、初期値が奇数個の段を持つ階段状の波形をしている場合には、Kanel'によって1960年、1961年に存在が示されている、双安定型反応拡散方程式の1フロント定常波に(広義一様に)収束することを示した。



[偶数個のフロントを持つ解の挙動]
(下図は2フロント解の挙動。実線で初期値のグラフを表す。)



[奇数個のフロントを持つ解の挙動]
(下図は3フロント解の挙動。実線は初期値のグラフを表す。)

(2) 転位ダイナミクス

形式的漸近展開により、反応拡散方程式から、界面方程式（転位（フロント）の運動方程式）を導出した。

また、下記の通り理論的証明を与えることにより、求めた界面方程式の数学的正当化を行った。

- ① 元の反応拡散方程式モデルの初期値問題の解において、時間が経つと界面（フロント）が形成されることを示した；
- ② 形成された界面（フロント）のダイナミクスを記述する運動方程式の主要項は、漸近解析的手法を用いて導出した界面方程式に一致することを示した。

さらに、界面方程式において、2つの転位（フロント）同士は反発し合うこと、とくに、転位間の距離の指数に反比例した速

度で互いに離れようとする力が働き、それらの反発力の和（相互作用）によって転位の運動の本質的部分が決定されることを明らかにした。

(3) 研究の位置付け・今後の展望

前述の通り、多安定型の反応項を持つ反応拡散方程式に対する理論的研究は、これまでほとんどなされていなかった。とくに、フロントのダイナミクスに関する研究も、単安定型方程式や双安定型方程式の、段差が1の凸凹した波形をした解に対する、1989年のCarr-Pego、同年のFusco-Haleの結果を初めとして結果が幾つか知られているものの、複数の段を持つ階段状の波形をした解に対するの結果は、本研究で得られた成果が初めてである。

今後、本研究期間中に得た、界面方程式におけるフロントダイナミクスについての結果を用いて、元の反応拡散方程式モデルの優解と劣解を構成し、結晶成長モデルの解の定性的性質や時間無限大での漸近形に至るまでの解の時間的ふるまいの詳細について調べたいと考えている。

また、本研究では、反応拡散方程式モデルに対し対称性に関する仮定を課したが、この条件をはずす、あるいは条件を緩め、より一般の結晶の成長・溶解現象について数学的に考察することも、今後の重要な課題の1つである。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 1件)

- ① 田中実鈴、荻原俊子、大出真理、周期関数を非線形項に持つ反応拡散方程式の解の漸近挙動、2006年度応用数学合同研究集会報告集、2006年12月、197-198、査読無。

[学会発表] (計 7件)

- ① Toshiko Ogiwara, Travelling waves for a reaction-diffusion equation with periodic nonlinearity, AIMS' 6th International Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, 2006年6月27日, Poitiers University (France)

- ② 荻原俊子, 結晶成長モデルに関連した反応拡散方程式の解の挙動について, 研究集会「NSC12 周年: 非線形数理の現状と発展」, 2006年10月14日, 北海道大学
- ③ 田中実鈴・荻原俊子・大出真理, 周期関数を非線形項に持つ反応拡散方程式の解の漸近挙動, 応用数学合同研究集会, 2006年12月21日, 龍谷大学
- ④ Toshiko Ogiwara, Behavior of solutions for a reaction-diffusion equation related to a model of crystal growth, International Council for Industrial and Applied Mathematics (ICIAM) 2007, 2007年7月19日, ETH Zurich and University of Zurich (Switzerland)
- ⑤ 荻原俊子, 多安定型反応拡散方程式におけるフロントの挙動, 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2008, 2008年3月6日, 北海道大学
- ⑤ Toshiko Ogiwara, Front dynamics in reaction-diffusion equation with multiple stable nonlinearity, Differential Equations and Applications to Mathematical Biology, 2008年6月29日, University of Le Harvre (France)
- ⑦ 荻原俊子, 多安定型反応拡散方程式におけるフロントの相互作用, 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2009, 2009年3月5日, 北海道大学

[その他]

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中村 俊子 (荻原俊子)
 (NAKAMURA TOSHIKO (OGIWARA TOSHIKO))
 城西大学・理学部・准教授
 研究者番号: 70316678

(2) 研究分担者

無

(3) 連携研究者

無

[図書] (計 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 件)

○取得状況 (計 件)