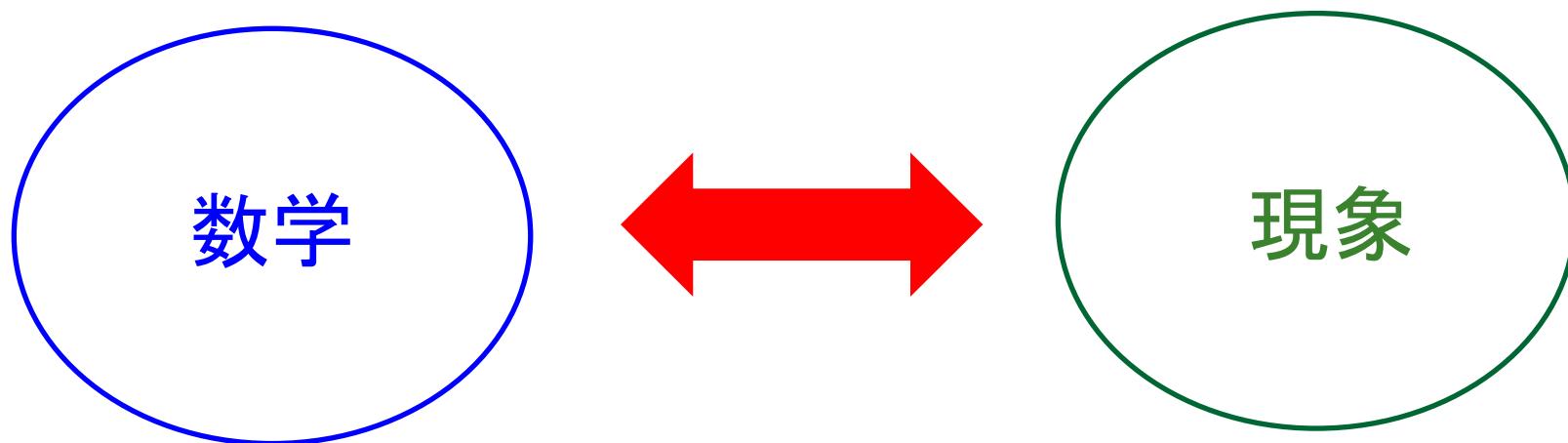

界面発展に関するある基本的な性質

2012年5月17日

早稲田大学理工学術院
小笠原義仁

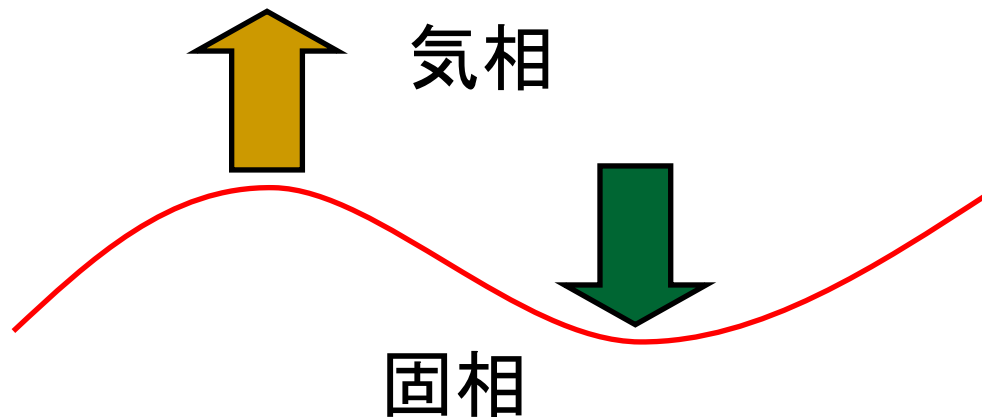
応用数学とは何か



- 新たなパラダイムの提案へ
 - 新たな自然認識の構築へ
-
- 「応用数学」の研究か「数学」を応用する研究か

Mullins モデル

- Mullins: J. Appl. Phys. 28 (1957) 333.
- 蒸発-凝縮機構による固気界面の発展



■ 凝縮に寄与する原子の流速 θ_A

$$\theta_A = \frac{P_A}{(2\pi M k T)^{1/2}}$$

P_A : 雰囲気蒸気圧

■ 蒸発に寄与する原子の流速 θ_K

$$\theta_K = \frac{P_K}{(2\pi M k T)^{1/2}}$$

P_K : 曲率 K の界面の蒸気圧

■ Gibbs-Thomson式

$$\ln\left(\frac{P_K}{P_0}\right) = K \frac{v\gamma}{kT}$$

P_0 : 曲率 0 の界面の蒸気圧

M : 原子量, k : ボルツマン定数, T : 絶対温度,
 v : 原子体積, γ : 単位面積あたりの界面エネルギー

$$\blacksquare \quad y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} v(\theta_A - \theta_K)$$

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II} \exp(A_{III} K(y_x, y_{xx})),$$

$$A_I = \frac{vP_0}{(2\pi MkT)^{1/2}}, \quad A_{II} = \frac{vP_A}{(2\pi MkT)^{1/2}}, \quad A_{III} = \frac{v\gamma}{kT},$$

$$K(y_x, y_{xx}) = -\frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}}, \quad (x, t) \in \Omega.$$

$y(x, t)$: 表面形状関数, P_0 : 曲率 0 の界面の蒸気圧,
 v : 原子体積, M : 原子量, k : ボルツマン定数, T : 絶対温度,
 γ : 単位面積あたりの界面エネルギー, Ω : 連結開集合

Mullins方程式

■ $P_A = P_0$

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I \left[1 - \exp \left\{ -A_{III} \frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}} \right\} \right],$$

$$A_I = A_{II} = \frac{vP_0}{(2\pi MkT)^{1/2}}, \quad A_{III} = \frac{v\gamma}{kT}$$

■ 曲率が蒸発に及ぼす影響は小さい

$$y_t = A_I A_{II} \frac{y_{xx}}{1 + y_x^2}$$

■ 界面の水平面からの角度は小さい

$$y_t = A_I A_{II} y_{xx}$$

平坦化特性

線形化

$$y_t = A_I A_{II} \frac{y_{xx}}{1 + y_x^2}$$

- A. Kitada, J. Math. Phys. (1986).
- H. Gage and R. Hamilton, J. Diff. Geom. (1986).
- A. Kitada, J. Math. Phys. (1987).
- A. Kitada and H. Umehara, J. Math. Phys. (1987).
- M. Grayson, J. Diff. Geom. (1987).
- P. Broadbridge, J. Math. Phys. (1989).
- A. Kitada and H. Umehara, J. Math. Phys. (1991).
- C. Z. Qu, IMA J. Appl. Math. (1999).
- K. S. Chou and X. P. Zhu, Duke Math. J. (1999).

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I \left[1 - \exp \left\{ - A_{III} \frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}} \right\} \right]$$

- A. Kitada and S. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. (1998).
- A. Kitada, S. Nakamura and K. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. (1998).

界面現象について

- Ti系合金の熱力学測定
 - 電子ビーム溶解装置を使ったLangmuir蒸発法
 - 水冷銅ルツボの使用
 - ⇒ 温度分布の発生
 - 雰囲気蒸気圧の制御

温度勾配, 雰囲気蒸気圧

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I(y) - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II}(y) \exp(A_{III}(y) K(y_x, y_{xx})),$$

$$A_I = \frac{v P_0(T(y))}{(2\pi M k T(y))^{1/2}}, \quad A_{II} = \frac{v P_A}{(2\pi M k T(y))^{1/2}}, \quad A_{III} = \frac{v \gamma}{k T(y)},$$

$$K(y_x, y_{xx}) = -\frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}}, \quad (x, t) \in \Omega.$$

$y(x, t)$: 表面形状関数, P_0 : 曲率 0 の界面の蒸気圧,
 v : 原子体積, M : 原子量, k : ボルツマン定数, T : 絶対温度,
 γ : 単位面積あたりの界面エネルギー, Ω : 連結開集合

命題

2階常微分方程式

$$y'' = f(y, y'), \quad x > 0, \quad f(y, p) \in C^1(\mathbb{R}^2), \quad ' = \frac{d}{dx}$$

において

$$\exists \lambda \in \mathbb{R} \text{ s.t. } f(\lambda, 0) = 0, \quad f_y(\lambda, 0) > 0$$

を満たすならば

$$0 < A < \left| \frac{f_p(\lambda, 0) - \sqrt{f_p(\lambda, 0)^2 + 4f_u(\lambda, 0)}}{2} \right|$$

を満たす任意の A に対して, 非自明大域解 $y(x)$ が存在し

$$\exp(Ax) | y(x) - \lambda | < \infty$$

を満たす。ただし, $y(0) < \lambda$ である。

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I(y) - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II}(y) \exp \left\{ - A_{III}(y) \frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}} \right\}$$

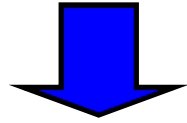
において $y_t=0$ とすると

$$y'' = f(y, y')$$

$$= -(1 + y'^2)^{3/2} \frac{kT(y)}{v\gamma} \ln \left\{ \frac{P_A}{P_0(T(y))} \right\}$$

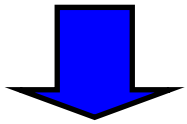
$$= -\frac{(1 + y'^2)^{3/2}}{A_{III}(y)} \ln \left\{ \frac{A_I(y)}{A_{II}(y)} \right\}$$

■ $\exists \lambda \in R$ s.t. $f(\lambda, 0) = 0, f_y(\lambda, 0) > 0$

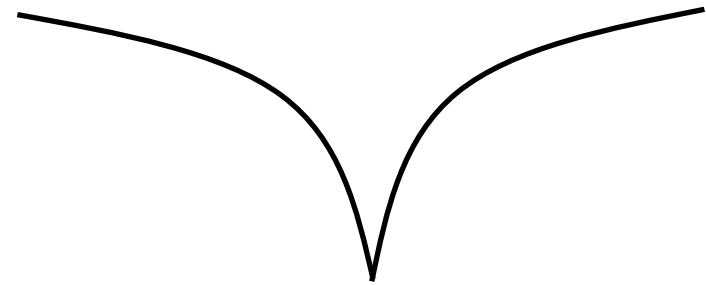


$\exists \lambda \in R$ s.t. $P_0(T(\lambda)) = P_A, \left. \frac{d}{dy} P_0(T(y)) \right|_{y=\lambda} > 0$

■ $0 < A < \left| \frac{f_p(\lambda, 0) - \sqrt{f_p(\lambda, 0)^2 + 4f_u(\lambda, 0)}}{2} \right|$



$0 < A < \sqrt{\frac{kT(\lambda)}{v\gamma P_A} \left. \frac{d}{dy} P_0(T(y)) \right|_{y=\lambda}}$



$y''=f(y,y')$ を式変形すると

$$\ln \frac{P_A}{P_0(T(y))} = \frac{v\gamma}{kT(y)} K(y', y'')$$

$$P_0(T(\lambda)) = P_A, \left. \frac{d}{dy} P_0(T(y)) \right|_{y=\lambda} > 0$$

$y = \lambda$

$P_0 > P_A$

$P_0 < P_A$

$$0 < A < \sqrt{\left. \frac{kT(\lambda)}{v\gamma P_A} \frac{d}{dy} P_0(T(\lambda)) \right|_{y=\lambda}}$$

定常的な結晶粒界溝の存在

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I(y) - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II}(y) \exp(A_{III}(y) K(y_x, y_{xx})),$$
$$A_I = \frac{v P_0(T(y))}{(2\pi M k T(y))^{1/2}}, \quad A_{II} = \frac{v P_A}{(2\pi M k T(y))^{1/2}}, \quad A_{III} = \frac{v \gamma}{k T(y)},$$
$$K(y_x, y_{xx}) = -\frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}}, \quad (x, t) \in \Omega.$$

界面エネルギー測定のための原理の提案

発展方程式の定性的な性質

- 一般的な発展方程式

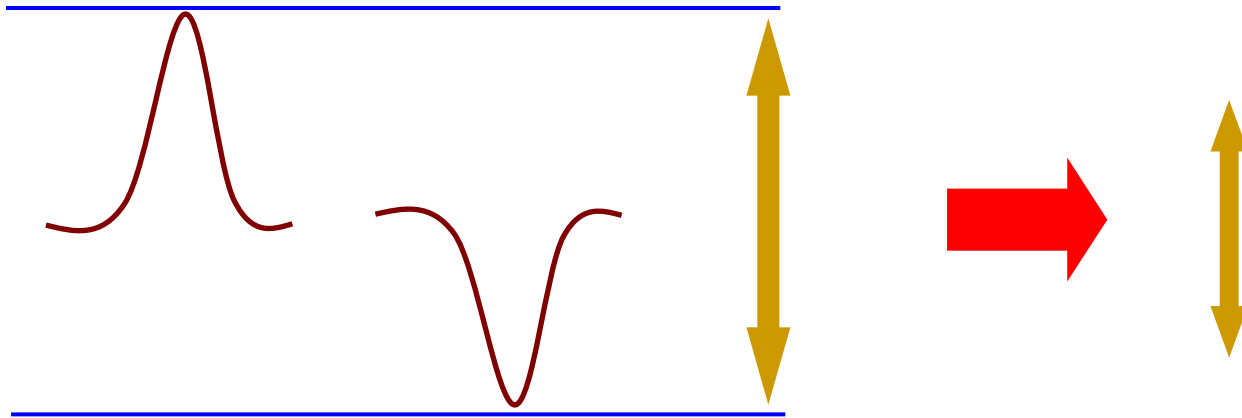
$$y_t = F(t, x, y, y_x, y_{xx}), \quad F \in C^1$$

について

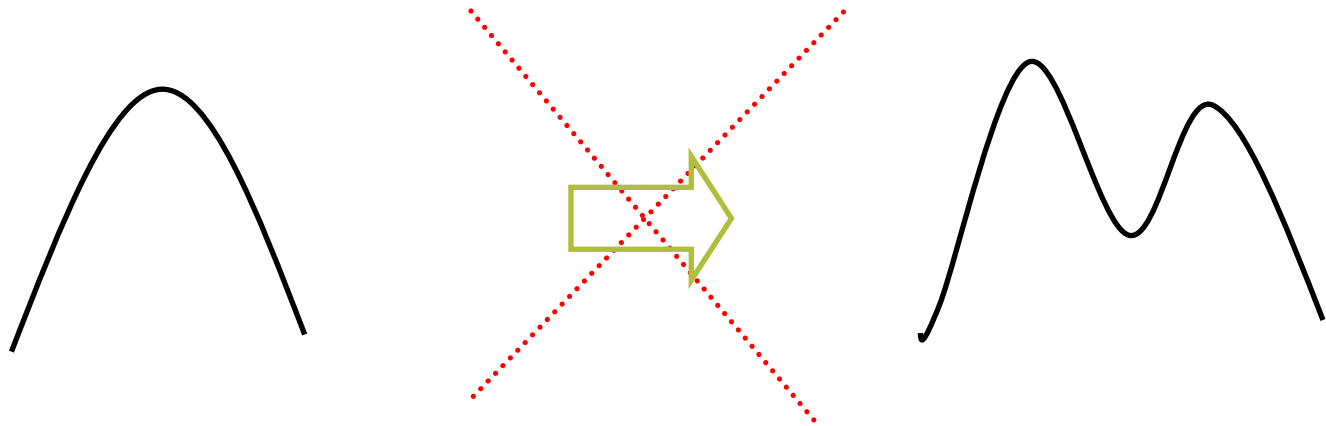
$$F_q(t, x, y, p, q) > 0$$

を満たしている時を考える。

- $F(t, x, y, 0, 0) = \text{定数}$



- $F(t, x, y, y_x, y_{xx}) = G(t, y, y_x, y_{xx})$



命題

常微分方程式

$$\frac{dy}{dt} = f(y), \quad t > 0, \quad f(y) \in C^1(\mathbb{R}^1)$$

において

$$\exists \lambda \in \mathbb{R} \text{ s.t. } f(\lambda) = 0, \quad f'(\lambda) < 0$$

を満たすならば

$$0 < A < f'(\lambda)$$

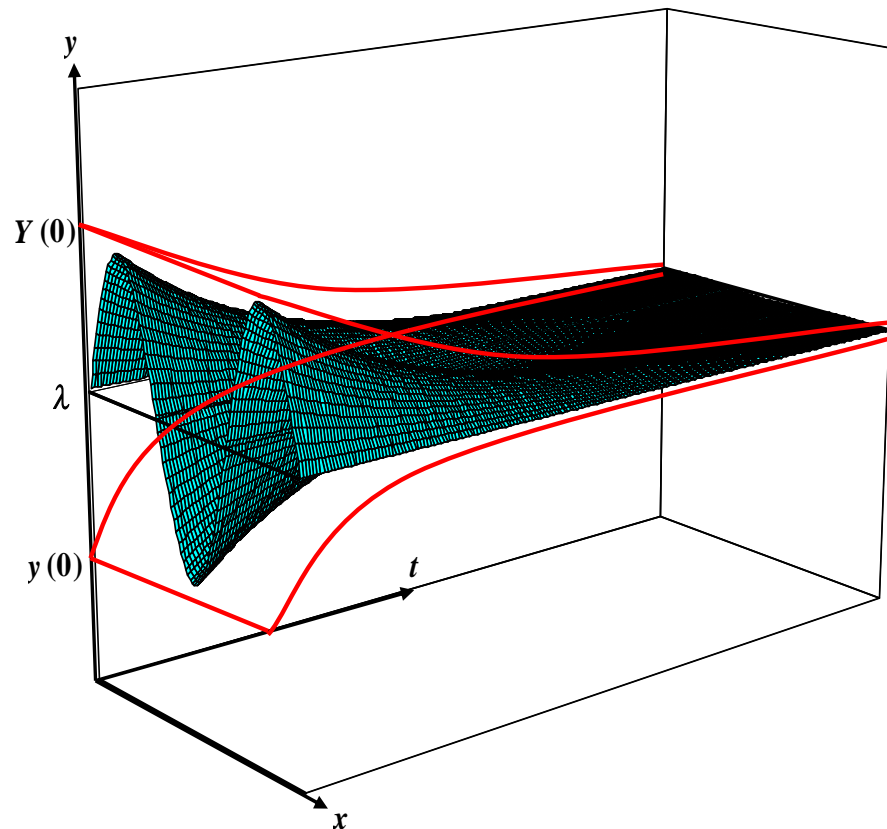
を満たす任意の A に対して, 非自明大域解 $y(t), Y(t)$ が存在し

$$\exp(At) | y(t) - \lambda | < \infty, \quad \exp(At) | Y(t) - \lambda | < \infty$$

を満たす。ただし, $y(0) < \lambda, Y(0) > \lambda$ である。

■ $F(t, x, y, y_x, y_{xx}) = G(y, y_x, y_{xx}),$

$$\exists \lambda \in \mathbb{R} \text{ s.t. } G(\lambda, 0, 0) = 0, \left. \frac{d}{dy} G(y, 0, 0) \right|_{y=\lambda} < 0$$



温度分布の考慮

$$y_t = F(t, x, y, y_x, y_{xx}) \\ = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I(t, x, y) \\ - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II}(t, x, y) \exp(A_{III}(t, x, y) K(y_x, y_{xx})),$$

$$A_I(t, x, y) = \frac{vP_A}{(2\pi M k T(t, x, y))^{1/2}},$$

$$A_{II}(t, x, y) = \frac{vP_0(T(t, x, y))}{(2\pi M k T(t, x, y))^{1/2}},$$

$$A_{III}(t, x, y) = \frac{v\gamma}{kT(t, x, y)}$$

$$F_q(t, x, y, p, q) > 0$$

界面の発展方程式

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K(y_x, y_{xx})) \\ - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K(y_x, y_{xx})), \\ A_I(t, x, y) \geq 0, A_{II}(t, x, y) \geq 0, f_I(t, x, y, K) > 0, \\ f_{II}(t, x, y, K) > 0, f_I(t, x, y, 0) = f_{II}(t, x, y, 0) = 1,$$

$$K(y_x, y_{xx}) = -\frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}}$$

$$\frac{\partial}{\partial K} [A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K) - A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K)] < 0$$

発展方程式の定性的な性質

- 一般的な発展方程式

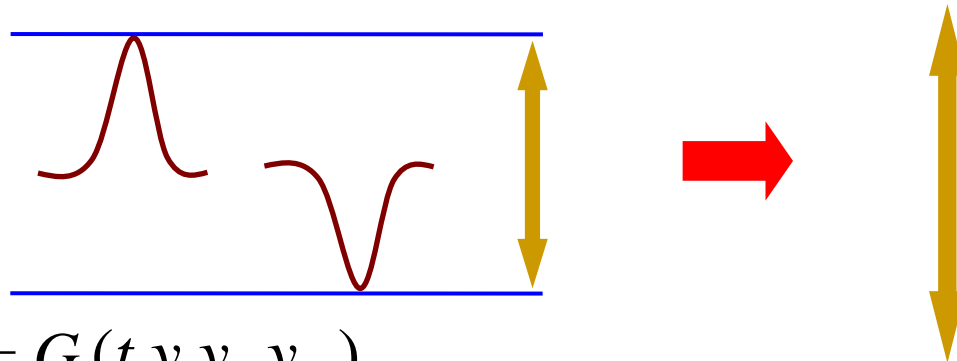
$$y_t = F(t, x, y, y_x, y_{xx}), \quad F \in C^1$$

について

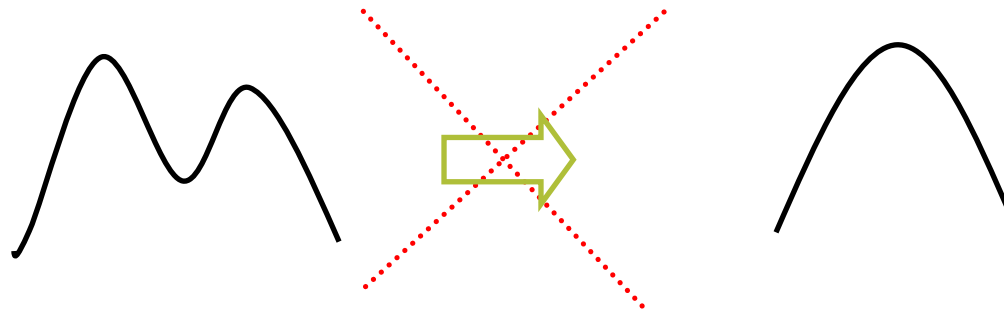
$$F_q(t, x, y, p, q) < 0$$

を満たしている時を考える。

■ $F(t, x, y, 0, 0) = \text{定数}$



■ $F(t, x, y, y_x, y_{xx}) = G(t, y, y_x, y_{xx})$



■ $F(t, x, y, y_x, y_{xx}) = G(y, y_x, y_{xx}),$

$$\exists \lambda \in R \text{ s.t. } G(\lambda, 0, 0) = 0, \left. \frac{d}{dy} G(y, 0, 0) \right|_{y=\lambda} \boxed{>} 0$$

界面の発展方程式

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K(y_x, y_{xx})) \\ - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K(y_x, y_{xx})), \\ A_I(t, x, y) \geq 0, A_{II}(t, x, y) \geq 0, f_I(t, x, y, K) > 0, \\ f_{II}(t, x, y, K) > 0, f_I(t, x, y, 0) = f_{II}(t, x, y, 0) = 1,$$

$$K(y_x, y_{xx}) = -\frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}}$$

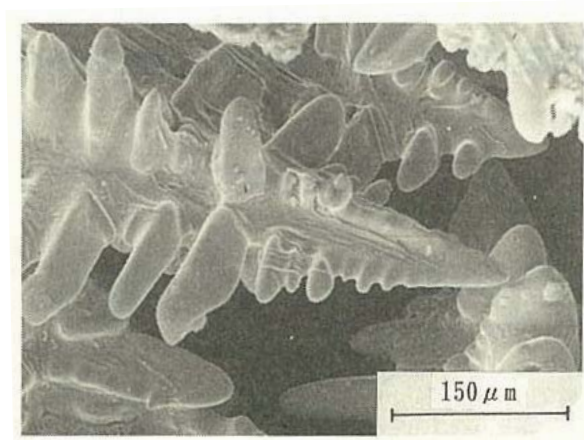
$$\frac{\partial}{\partial K} [A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K) - A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K)] \boxed{<} 0$$

$$\frac{\partial}{\partial K} [A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K) - A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K)] \boxed{>} 0$$

界面現象について

■ 固液界面の発展

□ 金属の凝固中に現れるデンドライト現象



中江秀雄, 結晶成長と凝固, アグネ承風社, p.78.

金属の凝固

- 純金属の凝固の際の界面形態
 - 固相の温度 < 液相の温度 の状況下での凝固界面は、平らな形状で時間発展する。
 - 固相の温度 > 液相の温度 (過冷却) の状況下での凝固界面は、デンドライトのような複雑な形状をとって時間発展する。

固液界面の発展方程式の導出

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} \frac{C_s G_s}{L} f_s(K(y_x, y_{xx})) - (1 + y_x^2)^{1/2} \frac{C_l G_l}{L} f_l(K(y_x, y_{xx})),$$
$$f_s(K) > 0, \quad f_l(K) > 0, \quad \frac{d}{dK} f_s(K) < 0, \quad \frac{d}{dK} f_l(K) > 0,$$
$$K(y_x, y_{xx}) = -\frac{y_{xx}}{1 + y_x^2}$$

C_s : 固相の熱伝導率, C_l : 液相の熱伝導率

G_s : 固相側の温度勾配, G_l : 液相側の温度勾配

界面の発展方程式

$$y_t = (1 + y_x^2)^{1/2} A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K(y_x, y_{xx})) \\ - (1 + y_x^2)^{1/2} A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K(y_x, y_{xx})), \\ A_I(t, x, y) \geq 0, A_{II}(t, x, y) \geq 0, f_I(t, x, y, K) > 0, \\ f_{II}(t, x, y, K) > 0, f_I(t, x, y, 0) = f_{II}(t, x, y, 0) = 1,$$

$$K(y_x, y_{xx}) = -\frac{y_{xx}}{(1 + y_x^2)^{3/2}}$$

$$\frac{\partial}{\partial K} [A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K) - A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K)] \boxed{<} 0$$

$$\frac{\partial}{\partial K} [A_I(t, x, y) f_I(t, x, y, K) - A_{II}(t, x, y) f_{II}(t, x, y, K)] \boxed{>} 0$$

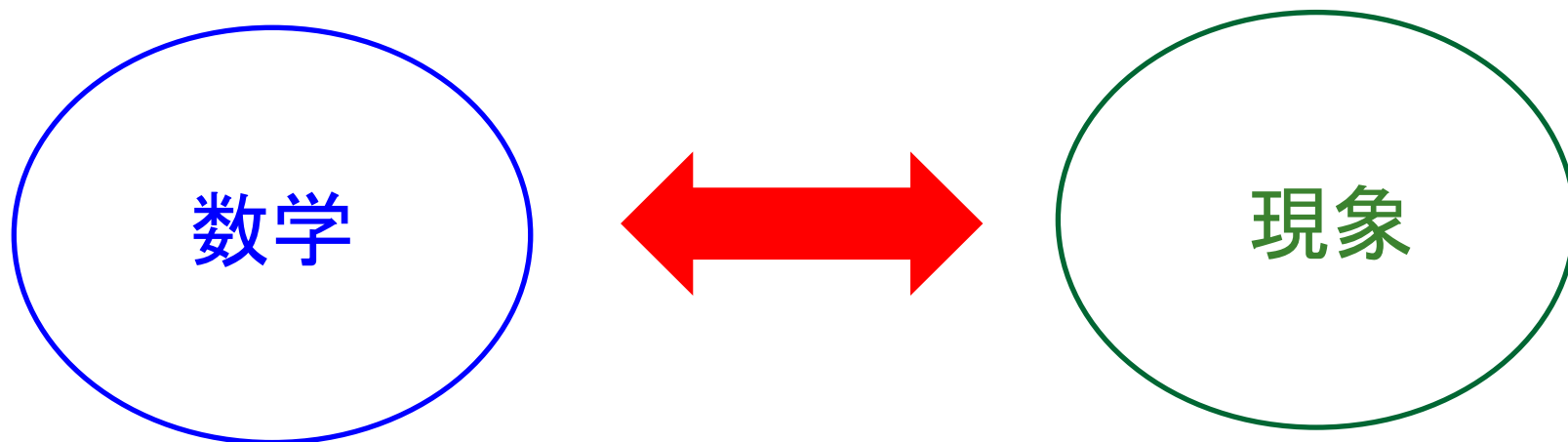
新たな自然認識へ向けて

- 方程式の構造の原初性, 一般性



- 既知とされている現象の再認識
- 未知の現象への理解
 - 近接場光による界面の平坦化現象*

応用数学とは何か



- 新たなパラダイムの提案へ
- 新たな自然認識の構築へ
- 自然認識そのものへの探求
 - トポロジー, カオス

参考文献

- 間宮崇幸, 小笠原義仁, 佐東信司, 鈴木俊夫, 吉成明, 日本金属学会誌, 61 (1997) 781
- Y. Ogasawara, T. S. Hadi and M. Maeda, ISIJ International, 38 (1998) 789
- S. H. Tabaian, M. Maeda, T. Ikeda and Y. Ogasawara, High Temperature Materials and Processes, 19 (1998) 257
- Y. Ogasawara, Journal of the Physical Society of Japan, 72 (2003) 1871
- Y. Ogasawara, Journal of the Physical Society of Japan, 73 (2004) 1703
- Y. Ogasawara, K. Eda and A. Kitada, Journal of the Physical Society of Japan, 74 (2005) 2439
- Y. Ogasawara and A. Kitada, Journal of the Physical Society of Japan, 75 (2006) 064003
- Y. Ogasawara and A. Kitada, Journal of the Physical Society of Japan, 78 (2009) 057001
- Y. Ogasawara, Applied Physics B, 97 (2009) 1
- Y. Ogasawara and S. Oishi, Journal of the Physical Society of Japan, 80 (2011) 113002