

複数のスパイラルステップ に対して 等高線の方法

大塚岳(群馬大学大学院工学研究科)

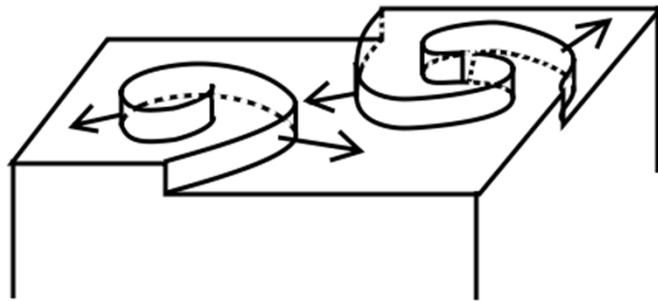
表面・界面ダイナミクスの数理Ⅲ

2012年5月17日

スパイラル成長

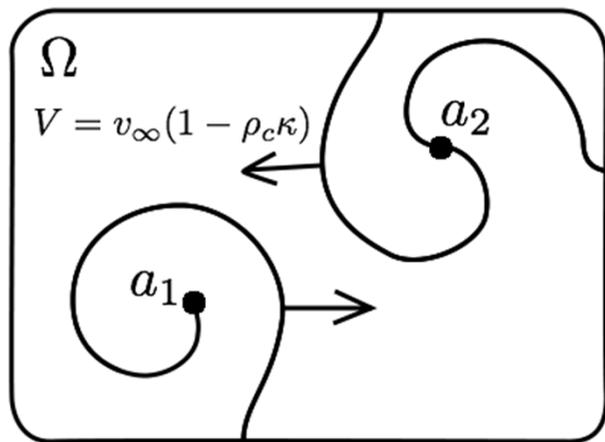
(‘51 Burton-Cabrera-Frank)

らせん転位による結晶成長 → スパイラルステップの進行による結晶表面の成長



目標: スパイラル成長の数理モデル化

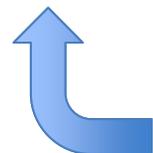
- 表面を上から見た図: Ω
- らせん転位の中心
 $a_1, a_2, \dots, a_N \in \Omega$ ($N \geq 1$)
(中心は**複数**存在する)
- 各 a_i は m_i (**0でない整数**)本のスパイラルステップを持つ
($m_i > 0$:反時計回り, $m_i < 0$:時計回り)
- ステップの速度
 $V = v_\infty(1 - \rho_c \kappa)$



スパイラルの数理モデル化

- Diffuse interface model(Allen-Cahn方程式)
 - '98 Karma-Plapp, Kobayashi

$$u_t^\varepsilon - \Delta u^\varepsilon + \frac{f_\varepsilon(u - \arg x)}{\varepsilon^2} = 0$$


$$E_\varepsilon(u^\varepsilon) = \int \left[\frac{|\nabla(u^\varepsilon - \arg x)|^2}{2} + \frac{F_\varepsilon(u^\varepsilon - \arg x)}{\varepsilon^2} \right] dx$$

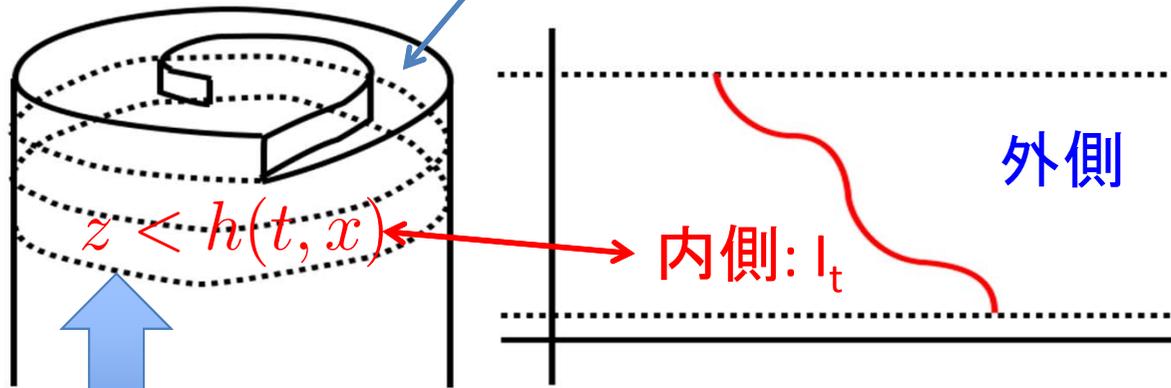
の勾配流

- 曲率流方程式の動きを**近似**
- Sharp interface model(曲線の運動方程式+等高線法)
 - '00 Smereka(補助関数二つのシステム)
 - '03 O(等高線法+**Sheet structure function**)

スパイラルの定式化

中心が一つの場合

$z = h(t, x)$: 表面の高さ
極座標



中心が複数のとき: らせん面をそのまま使う

$$\mathfrak{X} = \left\{ (x, z) \mid z = \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j) \right\}$$

$$\tilde{\Gamma}_t = \{(x, z) \in \mathfrak{X}; z = u(t, x)\}, \quad \tilde{I}_t = \{(x, z) \in \mathfrak{X}; z < u(t, x)\}$$

スパイラルの等高線法('03 0)

$$\Gamma_t := \bigcup_{k \in \mathbb{Z}} \{x \in \bar{W} \mid u(t, x) - \theta(x) = 2\pi k\}, \quad \vec{n} = -\frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|}$$

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

m_j : Strength of s.d. (0, ± 1 , ± 2 , ...)

 a_j : Center of s.d.

$$\Rightarrow V = \frac{u_t}{|\nabla(u - \theta)|}, \quad \kappa = \operatorname{div} \left(-\frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|} \right)$$

(LV) Level set equation:

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

+Neumann Boundary condition

数学的結果(1)

('03 O)

- **比較定理**: u, v が(LV)の連続な粘性解であるとする。このとき、 $u(0, x) \leq v(0, x) \ (\forall x) \Rightarrow u(t, x) \leq v(t, x) \ (\forall (t, x))$
- **解の存在**: 連続な初期値 u_0 に対し、時間大域的かつ連続な粘性解 u で、 $u(0, x) = u_0(x)$ をみたすものが存在する。

('08 Goto-Nakagawa-O)

- 初期の曲線 Γ_0 が適切なspiralであれば、以下をみたす整数 m_j と連続関数 u_0 が存在する。

$$\Gamma_0 = \left\{ x; u_0(x) - \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j) \equiv 0 \pmod{2\pi\mathbb{Z}} \right\}$$

数学的結果(2)

('08 Goto-Nakagawa-O)

- 内部集合の比較定理: u, v は (LV) の連続な粘性解とする。このとき、

$$\{(x, z) \in \mathfrak{X}; u(0, x) - z > 0\} \subset \{(x, z) \in \mathfrak{X}; v(0, x) - z > 0\}$$

ならば

$$\{(x, z) \in \mathfrak{X}; u(t, x) - z > 0\} \subset \{(x, z) \in \mathfrak{X}; v(t, x) - z > 0\} \quad (\forall t)$$

が成り立つ。→二つのspiralで追い越しが発生しない。

(Tsai-Giga-O, in preparation, スパイラルの挙動の解析)

- インアクティブ・ペアの存在: $N=2$ とする。
screw dislocationのペア a_1, a_2 が逆向きで $|a_1 - a_2| < 2\rho_c$ をみたすならば、このときの結晶表面は成長しない。
- 束の安定性
- Kobayashiモデルの漸近展開から(LV)が導出される。

インアクティブペア

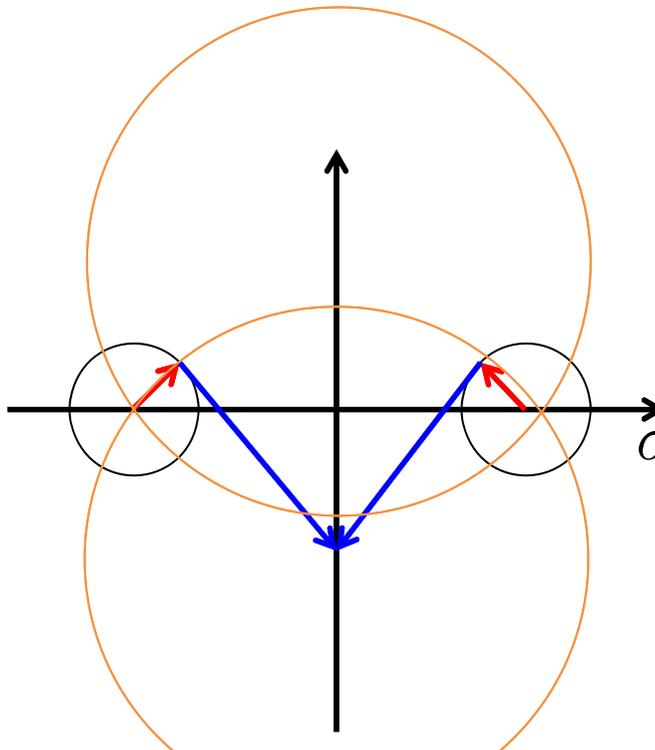
記号

$$a_1 = (-a, 0), \quad a_2 = (a, 0), \quad \theta(x) = \arg(x - a_1) - \arg(x - a_2)$$

$$W = \Omega \setminus (\overline{B_\rho(a_1)} \cup \overline{B_\rho(a_2)}).$$

仮定: $a \leq \rho_c \quad (\Leftrightarrow |a_1 - a_2| \leq 2\rho_c).$

このとき、2本の定常曲線が描ける



$$p_i(\sigma) = a_i(\sigma) + \rho(\cos \sigma, \sin \sigma),$$

$$q_i(\sigma) = p_i(\sigma) + \rho_c(-\sin \sigma, \cos \sigma).$$

$\Rightarrow q_i$ は2点 $(0, \pm b)$ ($b > 0$)で交わる

$$C_i : r_i(\sigma) = b_i + \rho_c(\cos \sigma, \sin \sigma),$$

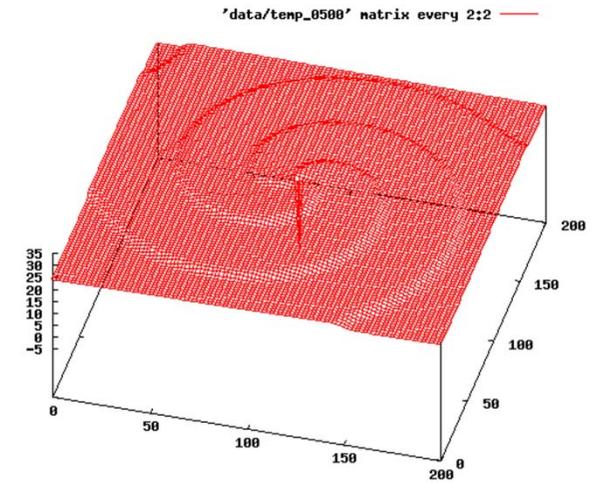
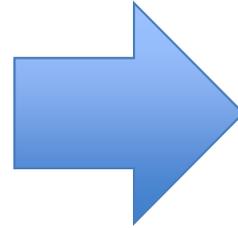
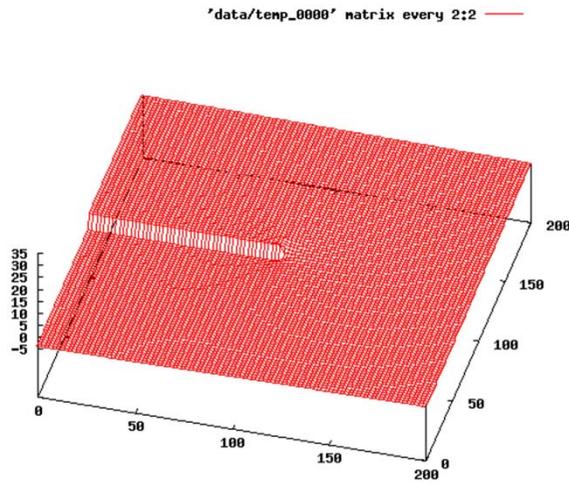
$\sigma \in (\pi/2 - \sigma^*, \pi/2 + \sigma^*)$ for some $\sigma^* > 0$.

$\Rightarrow C_i \perp \partial B_\rho(a_i), C_i \subset \{x; |x - b_i| = \rho_c\}.$

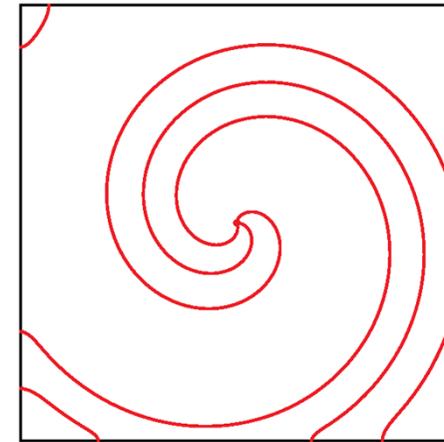
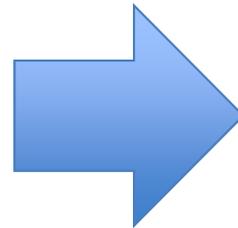
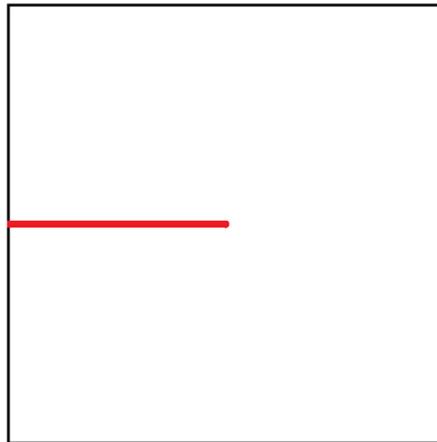
束の安定性

Allen-Cahn型方程式

どちらも広がってしまう?



等高線法



実は等高線方程式では、束は剥がれない(数値計算上は剥がれる)

不純物沈降モデル

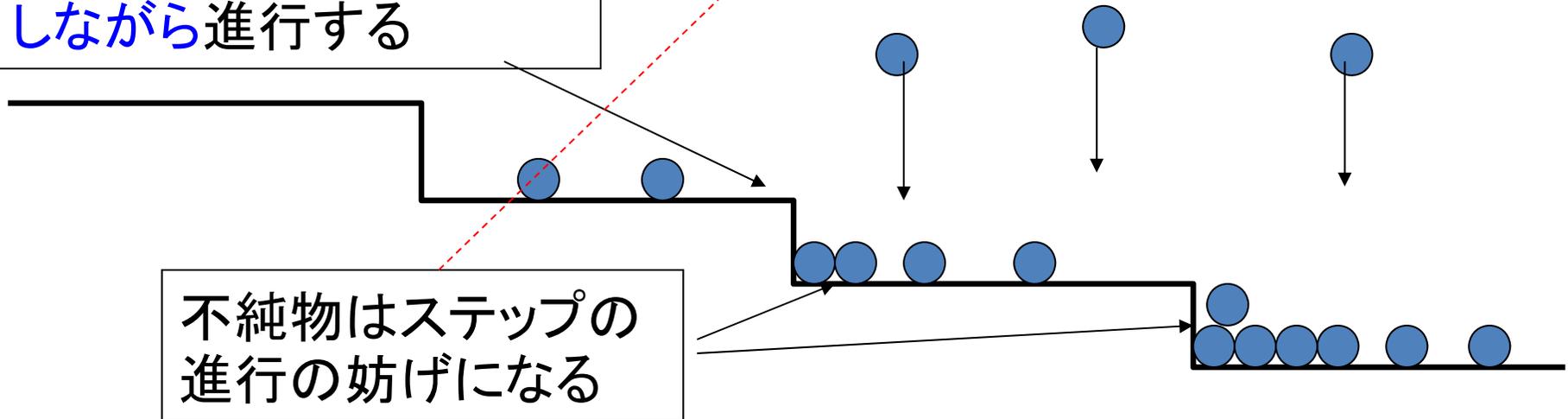
$$\begin{cases} u_t - |\nabla(u - \theta)| \left\{ C(w) - \operatorname{div} \frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|} \right\} = 0, \\ C(w) = c_{min} + \frac{(c_{max} - c_{min}) \exp(-\gamma w)}{1 + \exp(-\gamma w)}, \\ w_t = \mu - w \delta_{\Gamma_t}(x) \end{cases} \quad \text{in } (0, T) \times W$$

(Idea is due to R. Kobayashi in Allen-Cahn equation model.)

ステップは不純物を掃除しながら進行する

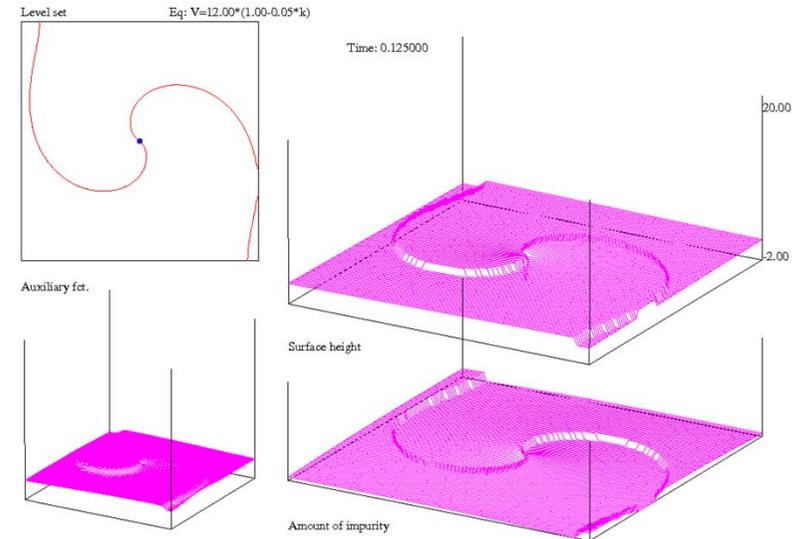
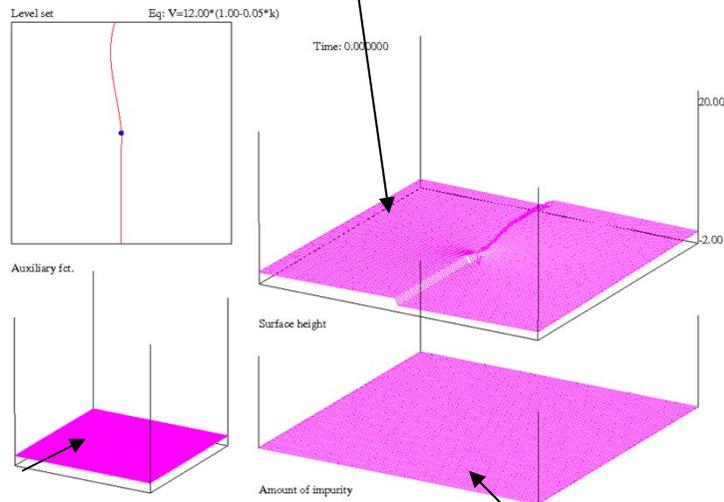
表面に不純物が一定の割合で降る

不純物はステップの進行の妨げになる



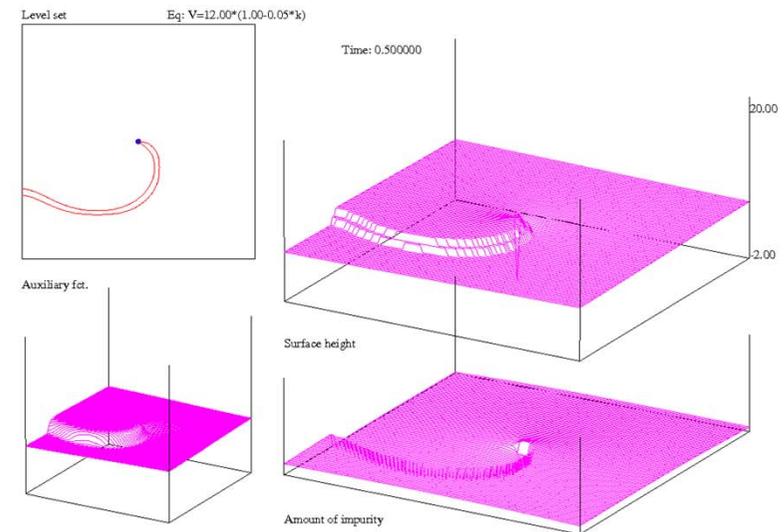
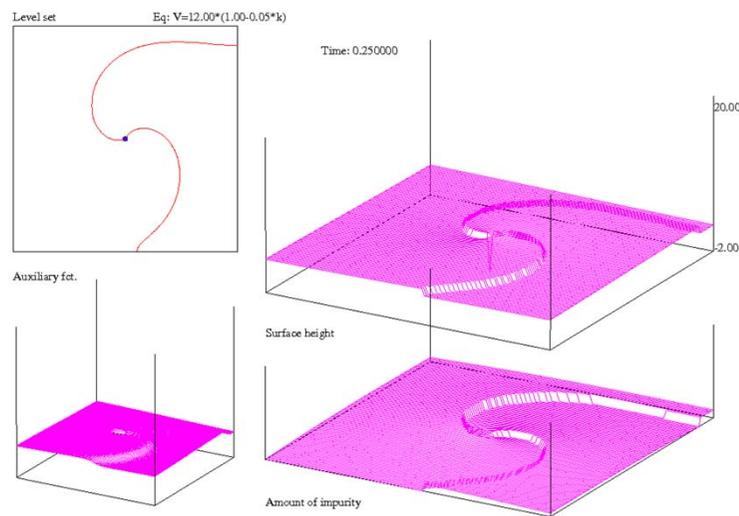
不純物沈降のシミュレーション

結晶表面



等高線方程式の解

不純物の量



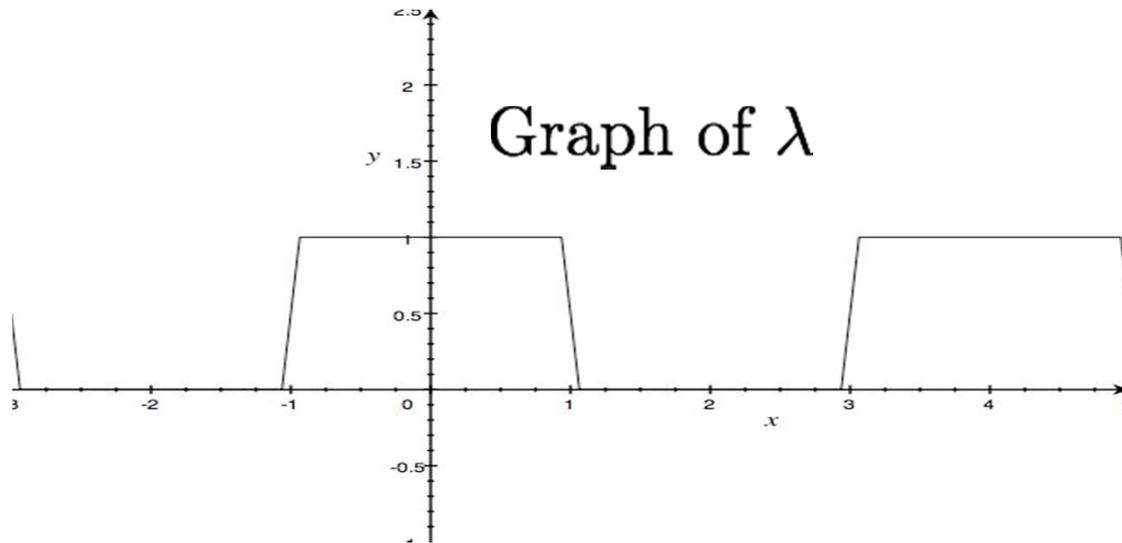
綾織り模様モデル

$$u_t + \lambda(u - \theta)F_1(\nabla(u - \theta), \nabla^2(u - \theta)) \\ + (1 - \lambda(u - \theta))F_2(\nabla(u - \theta), \nabla^2(u - \theta)) = 0$$

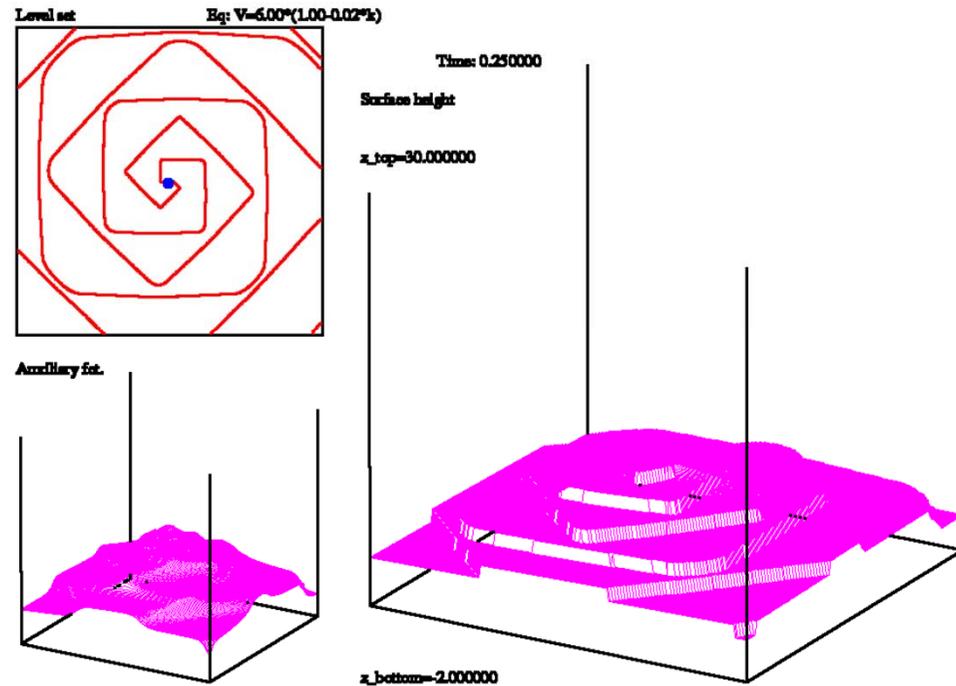
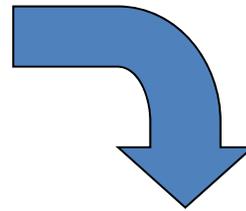
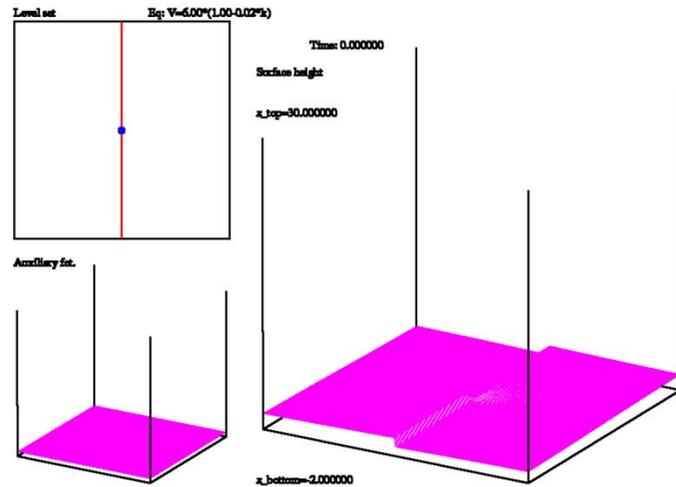
γ_i : 非等方的表面エネルギー密度 in $(0, T) \times W$

$$F_i(p, X) = -\gamma_i(p)(C_i + \text{tr}D^2\gamma_i(p)X)$$

$$\lambda(u) = \{\max(-1.0, \min(-1.0, M \cos(u/2))) + 1.0\}/2$$



綾織り模様のシミュレーション



注意! スパイラルのprofile
は λ に依存する。
⇒ 運動の一意性は成り立
たない

Wisker type growth

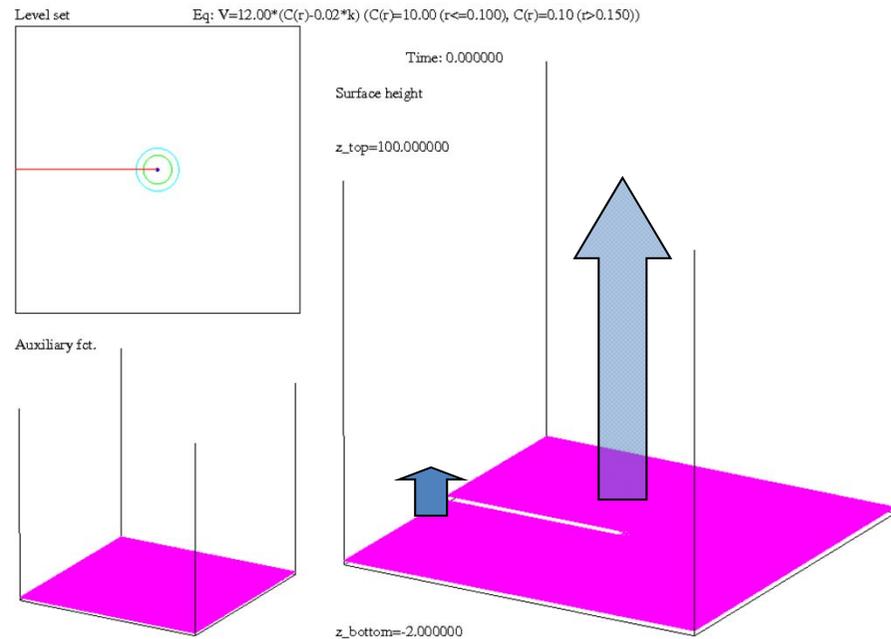
$$\begin{cases} V = C(r) - \kappa, \\ C(r) = \lambda(r)C_{int} + (1 - \lambda(r))C_{ext} \end{cases}$$

r : screw dislocationからの距離

$\lambda(r)$: cut-off function

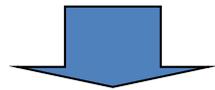
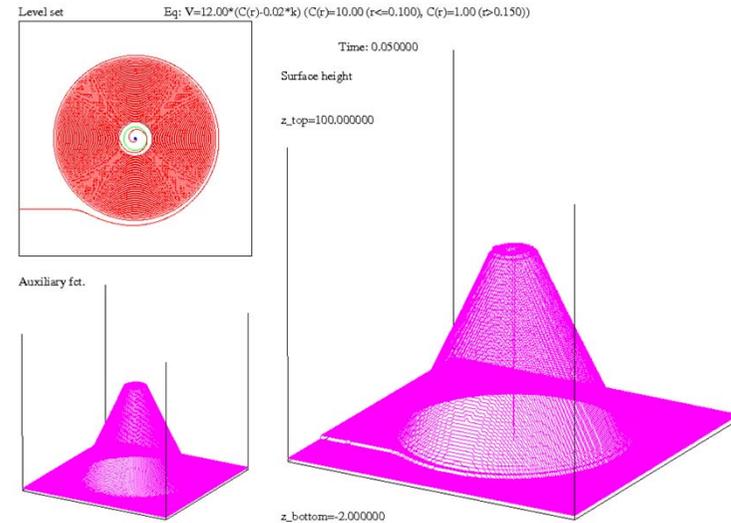
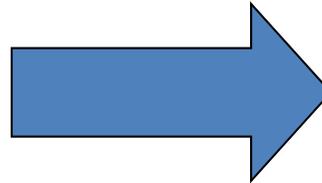
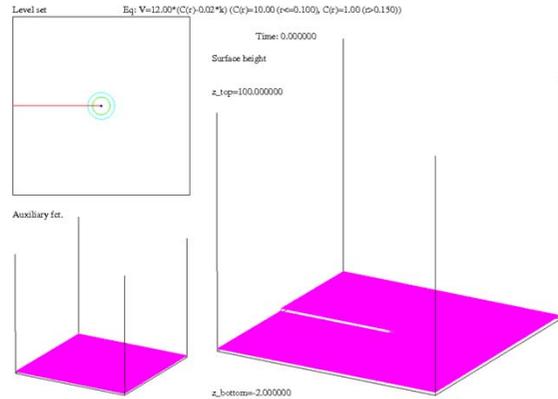
- $C_{int} > C_{ext} > 0$

→結晶はscrew dislocationの周りだけ速く成長する

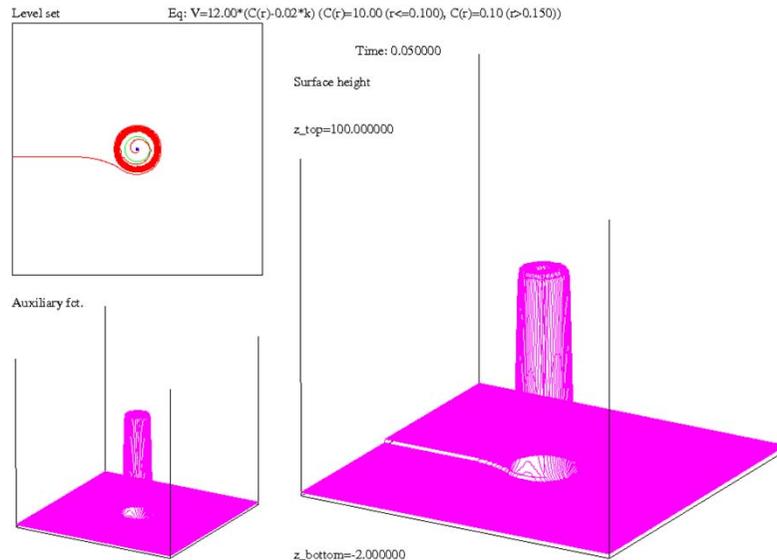


Wisker type growthのシミュレーション

$$C_{int}=10.0, C_{ext}=1.0$$



$$C_{int}=10.0, C_{ext}=0.1$$



もしwiskerがスパイラル成長によってできるのであれば、screw dislocationの周りでものすごく大きな駆動力が掛かるか、成長する周囲の外ではほとんど止まっている

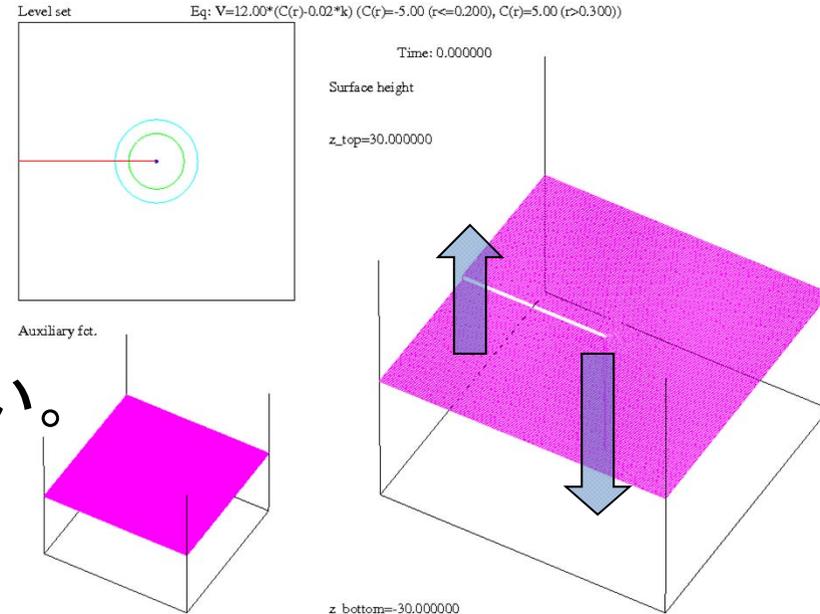
Hollow core type growth

$$\begin{cases} V = C(r) - \kappa, \\ C(r) = \lambda(r)C_{int} + (1 - \lambda(r))C_{ext} \end{cases}$$

r : screw dislocationからの距離,
 $\lambda(r)$: cut-off function

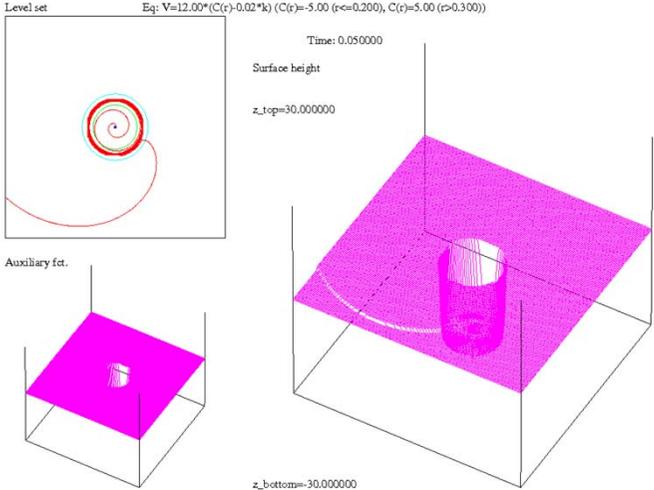
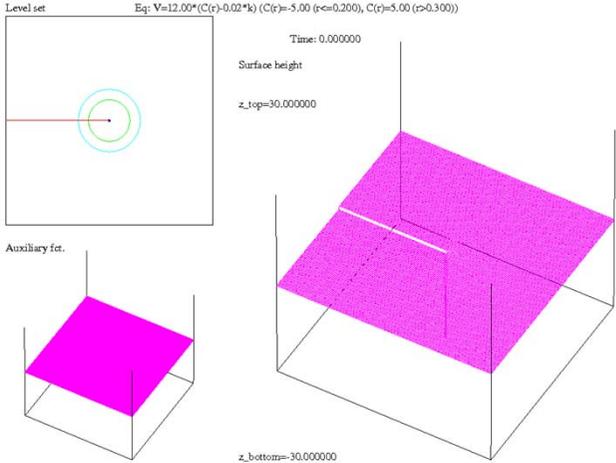
$$C_{int} < C_{ext}$$

結晶は成長するが、screw dislocationの周りでは駆動力がない。

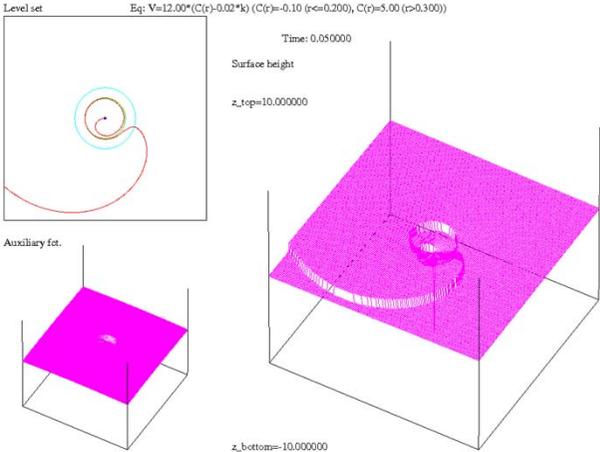


Hollow core type growthのシミュレーション

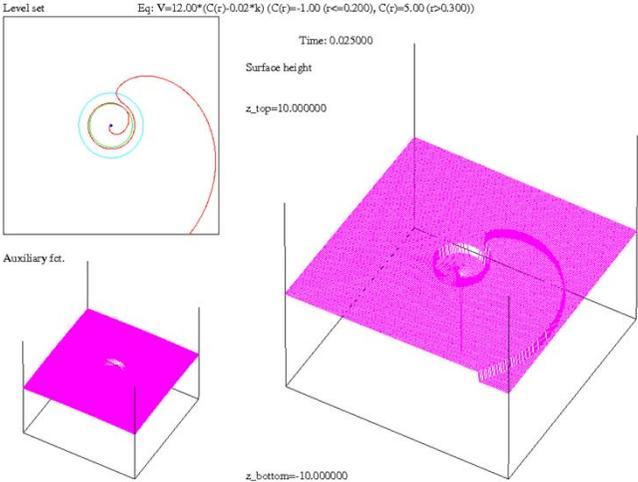
$C_{int} = -5.0, C_{ext} = 5.0$



$C_{int} = -0.1, C_{ext} = 5.0$



$C_{int} = -1.0, C_{ext} = 5.0$



very slow growth

melted

まとめ

- 結果
 - 単独の方程式によるスパイラル成長のsharp interface modelを提案した。(可解性などの十分な数学的結果を持つ)
 - 柔軟な拡張可能性を持つ(不純物沈降モデル、綾織り模様、wisker, hollow core)
- 課題:
 - 不純物沈降モデル、綾織り模様、wisker, hollow coreのトイモデルでステップのバンチングが見られる。
 - 不純物, 綾織り模様でのバンチングは**ショックウェーブ**に類似。
 - Wisker, hollow core: **特異"円"**を持つ。
→十分な可解性が得られるか?
 - [挙動]スパイラル成長によるwiskerの成長は、**周囲の駆動力がほぼゼロ**でないと起こらない?
 - [挙動]hollow coreは中心部におけるステップの**逆進**の他、**遅れ**でも発生する