

Title	結晶成長理論に現れる非線形発展方程式に関する数理的な研究
Author(s)	藤村, 英明
Citation	大阪大学, 2009, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/49572
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	藤村英明
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 22925 号
学位授与年月日	平成21年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科精密科学・応用物理学専攻
学位論文名	結晶成長理論に現れる非線形発展方程式に関する数値的研究
論文審査委員	(主査) 教授 八木 厚志 (副査) 教授 笠井 秀明 准教授 須藤 孝一 神戸大学工学部准教授 白川 健

論文内容の要旨

本研究は、1994年にJohnson-Orme-Hunt-Graff-Sudijono-Sauder-Orrによって提案されたモデル方程式について、数学解析ならびに数値シミュレーションを行った結果をまとめたものである。

本論文は、以下の全九章で構成されている。

第一章では、本研究の背景および目的、さらに位置付けについて記した。

第二章では、結晶成長の科学に現れる幾つかの数理モデルを紹介した。さらに、本論文で扱うモデル方程式について、モデル化の仮定、拠り所となる物理法則、モデル方程式の導出過程等について解説した。

第三章では、非線形偏微分方程式を解析的に研究する上で必要となる関数解析の基礎事項についてまとめた。

第四章では、数値シミュレーションを行うに当たり、本研究の対象としたモデル方程式の離散化スキームを構成した。

第五章では、モデル方程式から定まる力学系の構成を行った。まず、モデル方程式を半線形抽象放物型発展方程式として定式化し、一般論で知られている結果を適用して、各初期値に対する一意的な時間局所解を構成した。さらに、初期値についての局所解の連続性を示した。次いで、局所解についてのア・プリオリ評価式を示し、局所解が時間大域解に延長できる事を結論付けた。以上より、本モデルから $L^2(\Omega)$ を全体空間とする力学系が構成される事を示した。

第六章では、前章で構成した力学系の構造を解析した。始めに非線形半群が絞込み性を有する事を示した。この事から力学系の一般論より指数アトラクタが存在する事を結論付けた。次いで、本力学系についてLyapunov関数が構成できる事を示した。この事から、各軌道について ω -極限集合は力学系の平衡点から成る事を示した。

第七章では、前章の結果を受けて、モデル方程式に対する定数定常解の安定性・不安定性を調べた。まず、零解の周りにおける線形化方程式を求め、次に半群 $S(t)$ は零解の近傍においてFréchet微分可能である事を証明した。微分 $S'(t)(0)$ のスペクトル集合に関する分離条件を示し、安定多様体と不安定多様体が構成される事を示した。

凝集効果の係数が小さいとき、零解は安定であるが、同係数がある閾値を越えると不安定化する事を証明した。

第八章では、モデル方程式についての数値計算を行い、結晶表面形状の時間発展を追跡し、その方程式の大きな定常解の構造や定性的特徴について調べた。

第九章では、本論文の締め括りとして、本研究のまとめを記述した。そして、今後の課題についても触れた。

論文審査の結果の要旨

結晶成長過程における表面形状の制御方法の開発は、次世代ナノテクノロジーにおける重要課題の一つとなっている。一般に結晶表面では、吸着分子の表面拡散と凝集の相反する二つの効果の相互作用により複雑な表面形状が自律的に形成されると考えられている。本研究では、1994年にJohnson-Orme-Hunt-Graff-Sudijono-Sauder-Orrによって提案された、MBE(Molecular Beam Epitaxy)成長下での表面形状の時間発展を記述するモデル方程式に着目し、それについて数理的に研究することにより同モデルのもつ数学的な構造を調べている。その成果は以下の4点に集約できる。

1. モデル方程式に抽象放物型発展方程式の理論とア・プリオリ評価式を適用して解析的に解を構成するとともに、無限次元力学系の理論を用いて、表面形状の状態を記述する関数全体を相空間とする一つの力学系の構成を行っている。これにより、本モデルは、数学解析の理論によりその構造を追究することができ得るという意味において解析的に適切なモデルであることを明らかにしている。
 2. 構成した力学系について、表面形状のポテンシャルとも考えるべきリャプノフ関数が存在することを見出し、力学系のすべての軌道に沿ってこのリャプノフ関数の値が単調に減少することを示している。さらに、本結果を活用して各軌道の ω 極限集合が定常解のみから成ることを明らかにしている。このことから、表面のどのような状態を初期値としても、表面形状はリャプノフ関数が単調に減少するように推移して行き、やがてはある定常状態に近づいて行くということを結論付けている。
 3. 力学系を定義する非線形半群についてその絞込み性を示すことにより、本力学系には有限次元をもち、すべての軌道を指数的に急速に引き寄せる、力学系の専門用語で指数アトラクタと呼ばれる極限集合が存在することを示している。これにより、結晶表面が表面拡散と凝集の二つの効果の相互作用により自律的に変化する場合、時間が十分経過したときに最終的に取り得る形状状態のタイプは、非常に限られたものになっているであろうということを示唆している。
 4. 凝集効果の強度が表面拡散係数よりも小さい場合には、空間的に均一で表面形状が平坦な定常状態は力学系の意味で安定であるものの、反対に、凝集効果の強度の方が強くなるとこの均一・平坦な定常解はもはや安定性を失い不安定となるという結果を得ている。さらに、凝集強度について均一・平坦定常解が安定性を失うための閾値についての解析的な条件を見出している。均一・平坦定常解が不安定となった場合について、解析解の数値計算を行うことにより実際に出現する表面形状の具体例をいくつか求めている。
- 以上のように、本論文は結晶成長における表面形状の動的過程を数理的に研究したもので精密科学・応用物理学、特に結晶成長科学に寄与するところが大きい。
- よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。