早稲田大学審査学位論文(博士)の要旨

3123

内 20-10

早稲田大学大学院理工学研究科

博 士 論 文 概 要

論 文 題 目

多結晶上の力学系

(Dynamical Systems on Polycrystal)

申 請 者

小西 徹治

Tetsuji Konishi

資源及材料工学 数理材料設計学

2000 年 10 月

伝統的な結晶学の分野は単結晶の格子定数の決定や空間群の決定を目的とする結晶構造解析を中心に展開されており，その数学的方法としては群論やFourier 解析が用いられた．しかしながら，現実の固体物質の多くは単結晶としてではなくて多結晶として存在している．ところが，実際にはこれまで多結晶についての数学的に厳密な議論はほとんどなされてこなかった．これまでにも構造決定はなされてきたが，これらも多結晶の明確な定義の上でなされたものではなく，多結晶を扱うための厳密な数学的方法は未だに整備されているとは言い難い．多結晶が数学的に明確に定義され，多結晶を構成する単結晶の集まり方や多結晶のもつ物性の厳密な議論が可能となれば，新しい材料を開発するという観点から材料設計学の裾野を大きく拡げることになると考えられる．例えば，多結晶を位相空間（topological space）として扱うことによって，単結晶に対する物性値を多結晶を定義域とする写像として扱うことが可能となり，扱いたい多結晶をある力学系の解として捉えることによってその構造や物性を議論することも可能である．さらに将来的には，多結晶体である複合材料のもつ物性の予測，またそれとは逆に好ましい物性をもつためにはどの様な多結晶を作成すればよいか等の議論も可能であろう．また，最近になって，準結晶や，星形回位をもつ多結晶等の複雑な構造をもった物質が数多く観察されているが，この様な複雑な構造の予測や取り扱いに際しても，このような数学的方法が有効であると考えられる．そこで本研究では，多結晶を数学的に取り扱う一つの方法論を提案し，多結晶上の力学系について離散力学系と連続力学系の両面から議論する．

本論文は第１章「緒言」，第２章「多結晶上の離散力学系」，第３章「発展方程式の古典解の性質」，第４章「多結晶上の連続力学系」，第５章「総括」の全５章により構成される．

第１章においては，結晶学の歴史的流れについて触れた上で，伝統的な結晶学がほとんど扱ってこなかった，多結晶を取り扱うときの数学的方法を，今回新たに提案することの意義について述べる．また本論文の概要についても述べる．

第２章においては，多結晶そのものの幾何学的構造等を扱う数学的議論の場としての距離空間 "多結晶" を提案する． "単結晶" は基本格子ベクトルの設定やその順序など，人為的特徴によって区別されるものではなく，格子点の配列が同じならば全て同じ "単結晶" と考える．すなわち単結晶はその実体のみによって定義されるものとする．そこでまずk 次元 affine 空間において格子 s^α を定義する．格子すべての集合 P に，格子点の配列が同じならば同値とみなす同値関係 $\sim$ を導入して，その同値類 $C(s^\alpha)$ を単結晶と定義する．この単結晶全ての集合 $P/\sim$ に距離位相を導入したものとして多結晶を定義したい．そこでこの多結晶 $P/\sim$ の商位相 τ が距離化可能，特に完備距離化可能であることを示す．そのためにまず P の位相空間 $(P;\tau_{|\cdot|}\cap P)$ としての性質を考察し，それが第２可算な局所コンパクト空間となることを示す．さらに P から $P/\sim$ への 標準射影 $g: P \to P/\sim$ が開写像となることを示し，このことを用いて位相空間 $(P/\sim, \tau)$ が第２可算な局所コンパクト Hausdorff 空間，すなわち完備距離化可能空間となることを示す．この完備距離空間" 多結晶" 上の離散力学系を用いて弱い自己相似性を持つ領域の存在を示す．具体的には，完備距離空間 (X, d) で定義される弱い縮小写像系

$$f_j: (X,d) \to (X,d) \quad d(f_j(x), f_j(y)) \leq \alpha_j(t) d(x,y)\ ,\ d(x,y) < t$$

$$0 \leq \alpha_j(t) < 1\ ,\ t > 0,\ j \in \bar{m} = \{1, 2, \cdots, m\},\ 2 \leq m < \infty$$

に基づく集合力学系

$$T: (C(X), d_H) \to (C(X), d_H)\ ,\quad A \mapsto \bigcup_{j \in \bar{m}} f_j(A)$$

の不動点として，弱い自己相似集合が存在することの証明を通して，多結晶 $(P/\sim, \tau)$ 内に弱い自己相似領域が存在することを示す．弱い自己相似性を特徴付ける弱い縮小写像の変数係数 $\alpha_j(t)$ に対して$\tilde{\alpha}_j(t) = \inf_{t<p} \alpha_j(p) > 0$ としたとき，方程式$\sum_{j \in \bar{m}} \tilde{\alpha}_j(t)^x = 1$の一意解 $x = x(t)$ と，弱い自己相似領域Sの Hausdorff 次元$\dim_H S$との間に

$$\dim_H S \leq \inf_{0<t} x(t)$$

という関係が成り立つことを示す．さらに $\alpha_j(t)$ の連続性を仮定すると，$\inf_{0<t} \alpha_j(t) = \xi_j > 0$として，$\sum_{j \in \bar{m}} \xi_j^x = 1$の解$x = x_0$について，$\inf_{0<t} x(t) = x_0$. が成り立つ．すなわち，$\dim_H S \leq x_0$ となり，与えられた弱い縮小写像に基づく弱い自己相似領域 S の Hausdorff 次元を定量的に評価出来ることになる．この不等式から, この弱い自己相似集合 S に特徴的なものとして以下の性質をあげることが出来る．すなわち，$\sum_{j \in \bar{m}} \alpha_j(t_0) < 1$ となる 1 点 t_0 が存在するならば，その時，任意の $\varepsilon > 0$ に対して，その和が S になるところの，各直径が ε 未満の互いに重ならず空でない有限個のコンパクト集合 $S_1, \cdots, S_n$ が存在する．

さらに多結晶の濃度や多結晶の１点コンパクト化についても言及する．

第3章においては，第4章以降で議論することになる非線形偏微分方程式 $u_t = F(t, x, u, (u_{x_i}), (u_{x_i x_j}))$ の古典解の性質を一般的な立場から考察する．

第4章においては，多結晶でおこる現象の性質を連続力学系の観点から考察する方法論を提案する．多結晶でおこる現象を連続力学系として扱い，最大値原理などの諸定理を適用することによってその現象の本質を抽出し，その現象が起こるための数学的条件を提案する．特に本研究では，多結晶でおこる現象の一例として，固体表面がそれ自身の蒸気と平衡している状況での，気体の蒸発・凝着のみによる粒界の時間発展を記述する方程式

$$u_t = F(u_{x_1}, u_{x_2}, u_{x_1x_1}, u_{x_1x_2}, u_{x_2x_2}),\ t > 0,\ (x_1, x_2) \in R^2,$$

$$\begin{aligned} &F(p_1, p_2, q_1, s, q_2) \\ &= -C_1 \left(1 + \sum_{i=1}^{2} p_i^2\right)^{\frac{1}{2}} \left\{\exp\left(-C_2 \frac{(1 + {p_2}^2)q_1 + (1 + {p_1}^2)q_2 - 2p_1p_2s}{(1 + \sum_{i=1}^{2} p_i^2)^{\frac{3}{2}}}\right) - 1\right\}, \end{aligned}$$

$$F(p_1, p_2, q_1, s, q_2) \in C^1(R^5),$$

$$C_1 = \frac{\upsilon p_0}{(2\pi MkT)^{1/2}}, \quad C_2 = \frac{\upsilon\gamma}{kT}$$

を導出して，これが down-hill diffusion 方程式であることを，第3章において考察した非線形偏微分方程式 $u_t = F(t, x, u, (u_{x_i}), (u_{x_i x_j}))$ の古典解の性質を用いて示す．さらに，具体的にどのような拡散挙動を示すのかを最大値原理を用いて詳しく考察する．

第5章においては，本論文で取り上げた，多結晶上の離散力学系と連続力学系に関する議論のまとめを行う．