

2014年度 修士論文要旨

吸着質誘導相転移モデルに対する理論的・数値的解析

関西学院大学大学院理工学研究科

数理科学専攻 大崎研究室 青木 崇明

1 はじめに

自然界の現象の中には、非常に小さな空間スケールで起こるものがある。それら現象の中で、本研究では白金を触媒とした一酸化炭素の酸化反応における吸着 CO 分子のパターン形成現象について扱った。この現象は 1990 年に Jakubith, Rotermund, Engel, Oertzen, Ertl [5] 等により明らかにされたものである。さらに、1999 年に Hildebrand, Kuperman, Wio, Mikhailov, Ertl [3] 等、また 2003 年に Hildebrand, Ipsen, Mikhailov, Ertl 等 [4] により、非常に小さな空間スケールでの空間パターンの形成を記述する数理モデルが導入された。

本研究では吸着質誘導相転移モデルとして以下の方程式を扱った：

$$\begin{cases} u_t = a\Delta u + du(u+v-1)(1-u) - \zeta(u - \frac{1}{2}) & (\mathbf{x} \in \Omega, t > 0), \\ v_t = b\Delta v + c\nabla \cdot \{v(1-v)\nabla\chi(u)\} - fe^{\alpha\chi(u)}v - gv + h(1-v) & (\mathbf{x} \in \Omega, t > 0). \end{cases} \quad (1)$$

ただし、 $\chi(u) = -u^2(3-2u)$ である。ここで、未知関数 $u(x, y, t)$ と $v(x, y, t)$ は時刻 t 、位置 $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ における白金表面構造のオーダパラメータと吸着 CO 分子の表面被覆率をそれぞれ表す。ここで、白金表面構造のオーダパラメータは、 1×2 構造および 1×1 構造に対し、それぞれ 0, 1 という値を割り当て、表面を粗視化することで得られる表面構造を表す連続量である。したがって、物理的な観点から u, v は $0 \leq u \leq 1, 0 \leq v \leq 1$ をみたすものとなる。各パラメータ $a, b, c, d, f, g, h, \alpha$ は正定数であり、 ζ は非負の定数である。ここで、物理的な条件から拡散係数 a, b は $a \ll b$ という関係を満たすとする。境界条件は斉次 Neumann 境界条件、初期関数は $u_0(x, y), v_0(x, y)$ と表す。このとき、 $0 \leq u_0, v_0 \leq 1$ をみたす。また、(1) の各項の作用は、まず第 1 式右辺について、第 2 項は表面構造の相転移現象を表す項である。第 3 項は熱力学的な視点から導入された項である [2]。次に第 2 式右辺について、第 2 項は $\nabla\chi(u)$ に依存する吸着 CO 分子の移動を表す項である。第 3 項は $\chi(u)$ に依存する吸着 CO 分子の熱脱離を表す項である。第 4 項と第 5 項はそれぞれ化学反応による吸着 CO 分子の減少率と増加率を表す項である。

久藤, 辻川 [1] により、(1) においてストライプ、四角形および六角形パターンを表す非自明定常解が存在することが示されている。実際、標準的な解析によってパラメータ c が

$$c = \frac{\{bl^2(m^2 + 3n^2) + B\}\{al^2(m^2 + 3n^2) + W\} - CV}{AVl^2(m^2 + 3n^2)} (=: c(m, n)), \quad m, n \in \mathbb{N}$$

のとき、解の分岐が起こりうることを示される。ここで、(1) の定数定常解を (\bar{u}, \bar{v}) とすると、 $A = -\bar{v}(1-\bar{v})\chi'(\bar{u})$, $B = fe^{\alpha\chi(\bar{u})} + \bar{g}$, $C = -f\alpha\chi'(\bar{u})e^{\alpha\chi(\bar{u})}\bar{v}$, $V = d\bar{u}(1-\bar{u})$, $W = \zeta - df_u(\bar{u}, \bar{v})$ である。ただし、考える空間領域 Ω は $(0, \pi/l) \times (0, \pi/\sqrt{3}l)$ である。

本研究ではストライプ、四角形および六角形パターンに対応する (m, n) としてそれぞれ $(3, 0), (2, 1), (2, 0)$ と設定した。また、(1) の各パラメータを、 $m^2 + 3n^2 = x$ とおいたとき、設定した (m, n) の値が $x > 0$ における $c(x)$ の極小値となるように決定することで、第 1 分岐点を調整した。

2 数値計算と対応する固有関数

図 1-3 は数値計算によって得られた v の定常状態であり，図 4-6 は対応する固有関数のグラフプロットである．これらを比較すると，久藤，辻川 [1] で示された分岐解の存在と今回新たに得られた数値計算の結果がよく一致していることを確認できる．ストライプ (図 1) と四角形 (図 2) パターンは，第 1 分岐点の値を調整することで容易に得られた．しかし，六角形 (図 3) パターンは，第 1 分岐点の他にパラメータや摂動の大きさを少しずつ変化させる必要があった．また，考える空間領域を広くして数値計算を行った場合に，六角形パターンが上手く得られないパラメータが存在しており，今後，六角形パターンについてはパラメータと数値計算の関連性を調べる必要があると考えられる．

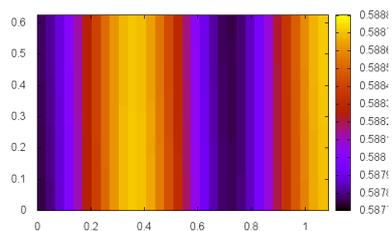


図 1 v のストライプ定常パターン (数値計算, $t = 500$).

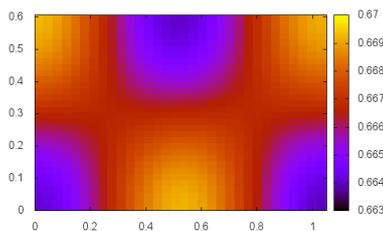


図 2 v の四角形定常パターン (数値計算, $t = 500$).

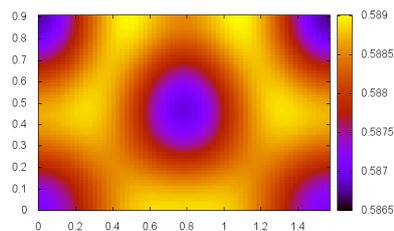


図 3 v の六角形定常パターン (数値計算, $t = 300$).

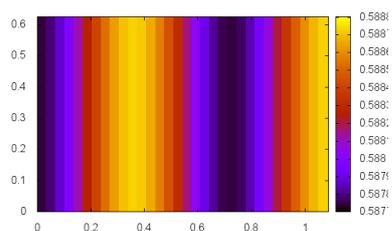


図 4 ストライプモード (3,0) に対応する固有関数.

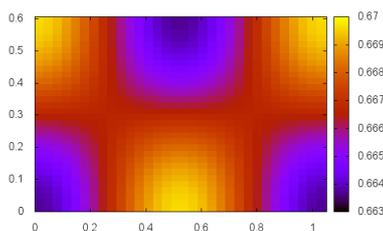


図 5 四角形モード (2,1) に対応する固有関数.

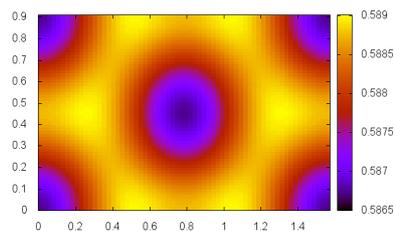


図 6 六角形複合モード (2,0), (1,1) に対応する固有関数.

参考文献

- [1] K. Kuto and T. Tsujikawa, *Pattern formation for adsorbate-induced phase transition model*, RIMS Kokyuroku Bessatsu B3 (2007), 43-58.
- [2] M. Hildebrand, *Selbstorganisierte Nanostrukturen in katalytischen Oberflächenreaktionen*, Dissertation, Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I, Humboldt-Universität zu Berlin (1999).
- [3] M. Hildebrand, M. Kuperman, H. Wio, A. S. Mikhailov and G. Ertl, *Self-Organized Chemical Nanoscale Microreactors*, Phys. Rev. Lett. **83** (1999), 1475-1478.
- [4] M. Hildebrand, M. Ipsen, A. S. Mikhailov and G. Ertl, *Localized nonequilibrium nanostructures in surface chemical reactions*, New J. Phys. **5** (2003), 61.1-61.28.
- [5] S. Jakubith, H. H. Rotermund, W. Engel, A. von Oertzen and G. Ertl, *Spatiotemporal Concentration Patterns in a Surface Reaction: Propagating and Standing Waves, Rotating Spirals, and Turbulence*, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 3013-3016.