HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	結晶成長におけるパターン形成
Author(s)	小林, 亮
Citation	電子科学研究, 3, 101-103
Issue Date	1996-01
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/24361
Type	bulletin (article)
File Information	3_P101-103.pdf

Instructions for use

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

結晶成長におけるパターン形成

情報数理研究分野　小　林　　亮

デンドライト状結晶は，自然界における自発的なパターン形成の典型的な例である。このような現象を理解するためのアプローチとしてフェーズフィールドモデルと呼ばれる数理モデルについて述べる。このモデルを用いた断熱条件下での過冷却凝固の3次元シミュレーションを紹介する。特に，結晶の形態が界面運動の異方性の強さに非常に鋭敏に依存している事を示す。

1．はじめに

結晶成長には気相成長・溶液成長・融液成長等さまざまな様式があるが，本稿では融液成長において見られるパターン形成について述べたい。

融液成長の例としては，水や熔融金属の凝固が代表的であろう。これらの現象において，デンドライトと呼ばれる樹枝状の構造がしばしば観察される。結晶をとりまく環境相が何も複雑な構造を持たないにもかかわらず，このような複雑なパターンが形成されるのは何故なのか，という疑問は誰もが持つであろう。ここでは，できるかぎりシンプルなモデルを用いて，典型的なデンドライトを再現することにより，このような複雑なパターンを生み出すメカニズムを理解しようとするアプローチを紹介する。

2．モデル

ここでは凝固過程を記述するモデルとしてフェーズフィールドモデルと呼ばれるモデルを紹介する。このモデルの最も特徴的な点は，固液界面をシャープな（すなわち厚さゼロの）界面として表現するのではなく，非常に薄いが有限な厚みをもつものとして表現しようというところにある。具体的には，次のような秩序変数の場 $p(r,t)$ を考える（r は空間変数，t は時間変数）。すなわち $p=0$ は液相を表し，$p=1$ は固相を表すとし，固液界面は $p=0$ と $p=1$ を結ぶ非常に狭い内部遷移層によって表現するのである。さらに温度場 $T(r,t)$ を考え $p(r,t)$ とカップルすることにより構成した方程式系が次である。

$$\tau\frac{\partial p}{\partial t}=\epsilon^2\nabla^2 p+p(1-p)\left(p-\frac{1}{2}+m(T,-\nabla p)\right) \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\nabla^2 T+\frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.2}$$

ただし，$m(T,v)=-\frac{\alpha}{\pi}Tan^{-1}(\gamma\sigma(v)T)$，$\sigma(v)=1-\delta(1-\frac{|v|_4^4}{|v|_2^4})$ であり，ϵ，τ は微小な正のパラメータである。(2.1) は $p(r,t)$ の時間発展，すなわち結晶の形状変化を表す方程式であり，(2.2) は界面における潜熱発生を考慮した熱伝導方程式である。ここで，微小パラメータ ϵ はフェーズフィールドにおける界面（内部遷移層）の幅に対応するパラメータであり，δ は異方性強度を表すパラメータである。

3．シミュレーション

上記のモデル方程式系を用いた空間3次元のシミュレーションを紹介する。ここでは，一様に過冷された融液で満たされた系の一点で核生成が起こった状態を初期状態としてとり，以降の成長過程を計算している。結晶の形に影響を及ぼすパラメータにはいろいろなものがあるが，異方性強度以外のパラメータはすべて固定し，異方性強度のみを変化させて結晶形態の変化を見ることにしよう。ただし，ここでの異方性は立方状の異方性で(1,0,0)，(0,1,0)，(0,0,1)方向に結晶が成長しやすいように与えられており，図1から図5にかけて異方性が強くなっている。特に図1は異方性の存

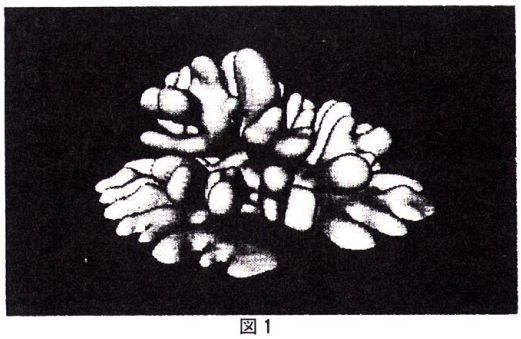

図 1

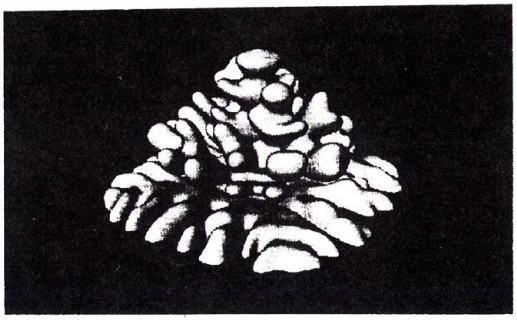

図 2

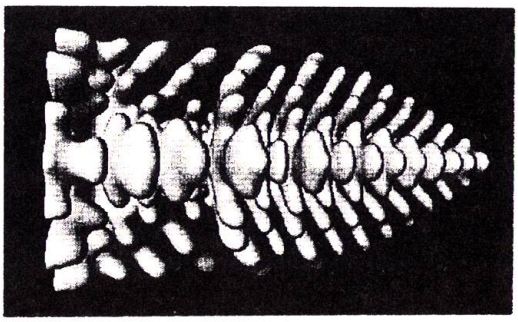

図 3

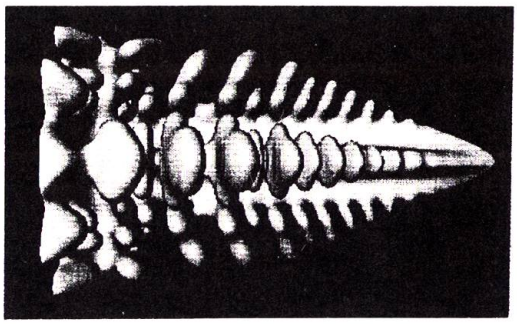

図 4

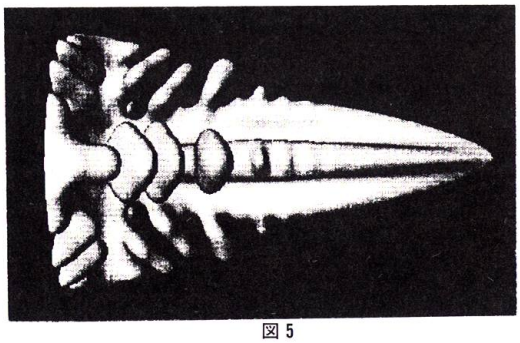

図 5

在しない場合のシミュレーションであり，この場合と異方性の弱い図 2 では主枝は形成されず，サンゴのような形状の結晶がみられる。これらの形はある程度成長した枝が tip splitting を起こすことによって形成される。図 3 は，振動成長型のデンドライトである。主枝先端の成長速度が強く振動しているため，主枝先端近傍においてすでに側枝が十分成長している。図 4 はサクシノニトリルの凝固でみられるような典型的なデンドライトで，この場合には図 3 と違って主枝成長速度は振動していず，側枝は主枝先端付近の側面の形状不安定化により生じてくる。それゆえ，側枝が十分成長するのは図 3 と比べて主枝先端から離れた場所においてである。図 5 では側枝の成長はほとんどみえないが，実はこのあたりの異方性強度では側枝の構造はノイズに敏感に依存することが確かめられている。

4. まとめ

ここでは，界面の運動方程式に含まれる異方性の強度をコントロールすることにより，さまざまな結晶形態を得た。異方性強度のようなパラメータは実際の実験ではコントロールしがたいものであるが，数理モデルを用いた実験では容易である。このような実験を通して，パターンの形成に関する理解がより深められると確信している。

【参考文献】

[1] S.-C. Huang and M. E. Glicksman, Acta. Metal. **29**, 719 (1981)

[2] R. Kobayashi, Physica**D**, Vol.63, No.3, 410 (1993)

[3] R. Kobayashi, Experimental Mathematics, Vol.3, No.1, 59-81 (1994)