

1. 6 海外研究開発動向調査報告

結晶成長におけるコンピュータ・シミュレーション技術の調査研究

出張期間：平成9年12月6日～平成10年2月6日

受け入れ先：アメリカ合衆国カーネギ・メロン大学物理学科

所 属：工学部 横山 悦郎

はじめに

カーネギ・メロン大学（CMU）物理学科を客員教授として2ヶ月間訪問し、結晶成長の理論に関する調査活動を行ってきました。CMUはアメリカ合衆国ペンシルバニア州ピッツバーグ市にある私立大学です。ピッツバーグは古くは製鉄・鉄鋼の町として有名であり、大気汚染がひどい過去からよみがえり、現在はハイテク産業の町として生まれ変わっています。かつての鉄工所跡地のモノゲヘラ川沿いには、ベンチャービジネス企業のためにCMUなどが出資した大きな建物が、つい最近できたばかりです。

実はCMUに滞在するのは、短期訪問を除けば、2回目です。1990年から約2年間、ロバート・F・セカーカ教授のもとでポストドク研究員をしていました。セカーカ教授は、マリNZ・セカーカの形態安定性理論としてこの分野で世界的に有名であり、結晶成長に関する理論研究の指導者の1人として活躍しています。また現在、結晶成長国際会議の副会長をしておられます。このCMUには、形態安定性理論の共著者であるマリNZ教授が冶金物質工学科、界面の運動の数理的研究として有名なガーティン教授が数学科にと、討論するには非常に恵まれた環境にあります。また歩いて20分程度の距離のピッツバーグ大学物理学科とCMUはほぼ毎週共同のセミナーを開催し、世界中から訪れる第一線の研究者の話を受ける大変有意義な2ヶ月間でした。

セカーカ教授との研究

今回の滞在は、2ヶ月という短い期間ですので、その間にできると思われるテーマを選びました。それは、過冷却水からできる円盤氷の成長様式を説明することです。このテーマは、1997年7月にセカー

カ教授が日本学術振興会の招きで日本に滞在中に、私と話し合っていて決めていました。最近、北海道大学低温科学研究所の古川義純助教授らが、過冷却水からできる円盤氷の実験的研究を行い、初めて円盤の半径と円盤の厚みを同時に測定しました。その結果、同一の実験条件（過冷却度）にも関わらず、種結晶から成長する円盤氷の厚みと半径の関係には2つのタイプがあることがわかりました。すなわち、円盤結晶の半径が小さくとも円盤の厚み方向に成長できるタイプと、ある程度、円盤の半径が大きくなると、厚み方向の成長が起きない2つのタイプです。厚み方向と半径方向の極端な成長速度の違いが、円盤状の結晶ができる要因です。では、なぜ2つのタイプに分かれるのか、ということが問題になります。ちょっと専門的になりますが、厚み方向は、氷結晶のc軸に垂直な面（底面）の成長であり、界面カイネティックス（水分子が結晶相に組み込まれる微視的過程）が成長を支配していると考えられます。また半径方向は、c軸に垂直な面の成長であり、結晶化の際に発生する潜熱の輸送過程が成長を支配していると考えられます。従って、厚み方向に関しては、2つの界面カイネティックスが存在するのでは、と想像されます。

ところでこの円盤氷の研究は、かつて、人工雪で有名な中谷宇吉郎門下の荒川らが1952年に行っています。また、セカーカ教授も、1974年に形態安定性理論の検証の興味から、当時、大学院生であったフジオカ博士と理論・実験の両面から円盤氷の研究を行っています。フジオカの博士論文では、厚みと半径の成長を記述するそれぞれの式をすでに定式化していました。しかしながら、20年以上も前では半径と厚みの3次元の同時測定はできず、それ以上の

研究の進展はありませんでした。今回のセカーカ教授の発案は、フジオカが定式化している式を数値解析的に解いて、古川らの実験結果を説明できないかというものです。厚み方向、すなわち氷のC軸に垂直な面の成長速度を毛管ガラスを使って精密に測定した文献には、ある温度で劇的に成長速度の温度依存性が変化すると記されています。これが、2つの界面カイネティクスに対応するものでは？と考えられます。早速、私は、2つの界面カイネティック係数を、円盤氷結晶の厚みと半径の時間変化の式に当てはめ、数値計算を行ってみました。すると、一つは、古川らの実験結果に非常によく合うのですが、もう一つはそれほど一致しません。これは、水と氷の熱伝導度の違いを考慮し、成長する円盤面(底面)上の温度を正しく補正することによって説明できるはずと、予想しています。この温度補正を見積もる計算は、滞在中にはできなく、帰国後の宿題となっています。

セカーカ教授の研究室

セカーカ教授との研究の進め方は、一週間に1回予約を取って、約2時間ぐらい議論を行い、研究を進めていくものです。私の滞在期間、ちょうどルーマニアからソホーニア博士が客員教授としてセカーカ教授と4ヶ月間共同研究を行っていました。またセカーカ教授には、現在3人の大学院生がいます。従って、セカーカ教授を中心に、ソホーニア博士とわたしを含めた5人のそれぞれの仕事が、同時に進展していくことになります。1週間で自分の仕事を進めておくことは、特に大学院生にとっては、非常に重要です。働きのわるい者は、首になるからです。私も、ポストドク時代、次回予約までに、研究内容に進展がなければ、首になるというプレッシャーは大変だったという思い出があります。

この個人的な議論とは別に、1週間に一度、研究室の全員が集まって、教職員食堂で昼食をとることになっていました。食事代は、セカーカ教授のおごりです。セカーカ教授を交えて、ソホーニア博士や大学院生らと、おしゃべりや仕事の議論を行いました。また、ソホーニア博士とは同室ですので、昼食の

あと部屋に戻って、黒板を使って彼の行っている格子ボルツマン・モデルの計算の進め方をいろいろと教わることができました。その際、時には、政治の話にも及び、ルーマニアの変革から現在の様子まで興味深い話を聞くことができたのも良い思い出です。

おわりに

1990年に渡米し、CMUにおける計算機ネットワーク・システム：アンドリューに初めて初めてふれたときは大変なカルチャー・ショックを受けました。スーパー・コンピューターを含め、自分のワークステーションから、UNIXのネットワークを自由につかって仕事ができる環境に感激したものです。今回の滞在中では、最新の並列計算機や、スーパー・コンピューター等、研究専用機を使う機会はありませんでした。しかし、アンドリューのメッセージ・システムにかわるCMU独自の計算機サービスであるサイロスというというプロジェクトが進行しているなど、相変わらず計算機環境の整備が進んでいるという印象でした。

最後に、今回の海外研究動向調査という大変貴重な機会を与えて頂いたことに対して、関係各位に心から感謝いたします。

連絡先

TEL : 0836-35-9944 FAX : 0836-35-9044

E-mail : yokoyama@sip.eee.yamaguchi-u.ac.jp