

雪のような形をした結晶をコンピュータの中で育てよう！

神戸大学海事科学部 高木知弘

1. はじめに

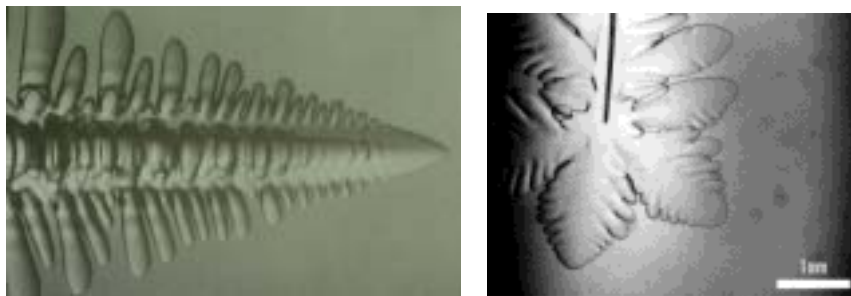
私たちの身の回りには、綺麗な形をした結晶、複雑な形をした結晶を数多く見ることができます。その中でも図 1 に示す雪の結晶は、最も親しみのある魅力的な結晶ではないでしょうか。雪は水蒸気が昇華してできた結晶で、上空の湿度や気温によってその形が異なります⁽¹⁾。逆に、降ってきた雪の結晶を見れば上空の状態が分かるということから、雪の研究で有名な中谷先生は「雪は天から送られた手紙である」という言葉を残されています⁽²⁾。

雪に比べるとあまりなじみが無いかもしれませんが、水から氷ができるように液体が凝固して結晶ができる際にも、図 2 に示すような複雑で綺麗な結晶ができる場合があります。しかしながら、冷凍庫の中で、普通に氷を作る場合はこのような形にはなりません。どのような条件でこのような結晶ができるのでしょうか？

ここでは、図 2 のように液体が凝固する現象を対象とし、結晶の成長をコンピュータを用いて再現する、つまり「コンピュータの中で結晶を育てる」方法およびその結果を紹介します。「育てる」といっても、コンピュータゲームのように人が前もって記憶させておいたデータを条件に応じてモニタに出力するものとは違います。また、ノートや本の端っこに書いて遊んだらばら漫画とも違います。その現象をきちんと再現することのできる数学的なモデルを作り、それをコンピュータに計算してもらおうのです。



図 1 雪の結晶 (文献[3]より転載)



(a) サクシノニトリル

(b) 水

図 2 過冷却液相中での樹枝状結晶成長 (文献[4][5]より転載)

2. 樹枝状結晶の成長のメカニズム⁽⁶⁾

図 1 の一番左側の結晶や図 2 の結晶は、木の枝の様な形をしています。このような形をした結晶を**樹枝状結晶**、英語で**デンドライト** (dendrite) と呼びます。コンピュータシミュレーションの説明に入る前に、純粋な液相の中で結晶が成長する過程 (**融液成長** と呼びます) において、図 2 に示すような複雑な形状をした結晶がどのようにして成長するのか、どうして形状に 4 方向や 6 方向の対称性があるのか、そのメカニズムを見てみましょう。

2.1 なぜ複雑な形をした結晶ができるのか？

融液成長の最も身近な例として、冷凍庫の製氷器の中で水が凍って氷になる現象があります。液相が固相に変化する凝固 (結晶化) 過程においては、液相と固相の境 (**界面**) で熱を放出します。これを凝固**潜熱** と呼びます。注射を打つ前に、消毒のためアルコールを塗るとス〜ッとしますが、これは気化潜熱により肌の表面から熱が奪われるためです。このように、気相・液相・固相間の相の変化では潜熱の放出・吸収が生じます。融液成長では、この放出された潜熱を取り除く過程が最も重要になります。

融液成長は、界面で発生した潜熱が固相側に流れるか液相側に流れるかによって、2 つの成長方法に分けることができます。図 3 は水の凝固を例に、2 つの成長方法における潜熱の流れる方向 (赤い矢印) と結晶の成長する方向 (黒い矢印) を示しています。

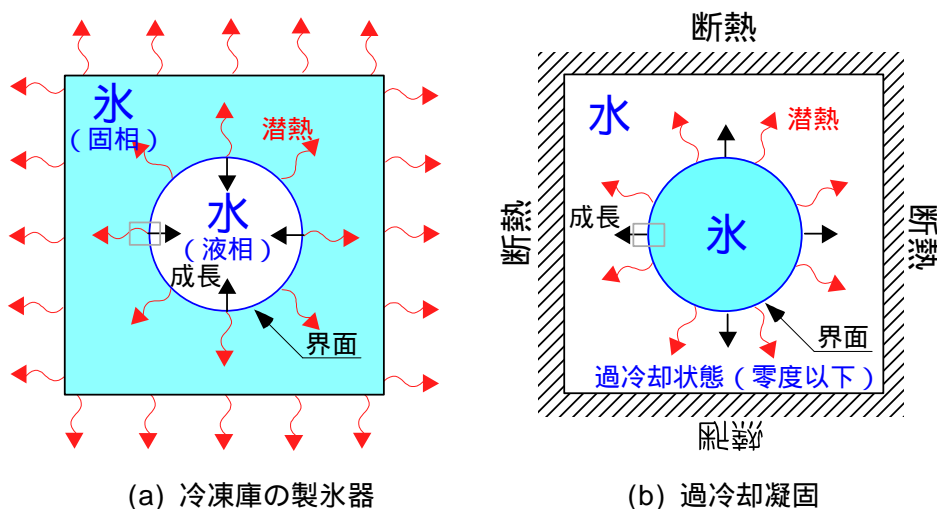


図 3 融液成長における 2 つの成長方法

まず図 3(a)を見てください。冷凍庫の製氷器の中で氷を作る場合、氷と水の界面で発生した潜熱は氷を通して外部に放出されます。この場合、通常氷は製氷器の壁から発生し中央に向かって成長します。そして、氷と水の界面は、製氷器が四角形をしていてもだんだんと球状になっていきます。水が完全に凍る前に氷を取り出したとき、真中に丸い穴が空いているのを経験した人もいると思います。

次に、図 3(b)を見てもらう前に、**過冷却**という状態が起こりうることを覚えておいてください。過冷却状態とは、温度が融点 (水であれば零度) 以下になっても液相が凝固しない状態のことをいいます。学校で、「水は零度で凍ります。」と習った皆さんにとっては、

かなり受け入れがたい事実かもしれませんが、もしかしたら、大学受験が終わるまでは知らない方が良かったのかもしれませんが、しかしながら、この過冷却こそが樹枝状結晶など複雑な形状をした結晶の成長にかかせないものなのです。この点をふまえて、図 3 (b) を見て下さい。これは、零度以下の水が断熱（熱が入りもしないし出てもしない）された容器の中にいれられ、その中央に氷ができた状態を示しています。氷は潜熱の発生により水より温度が高くなりますので、潜熱は温度の低い水の方に向かって流れます。

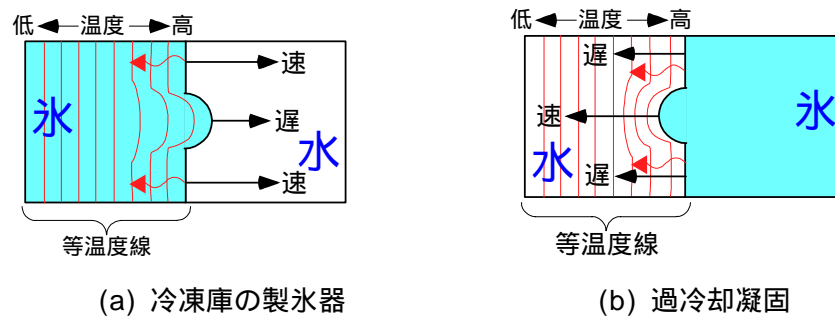


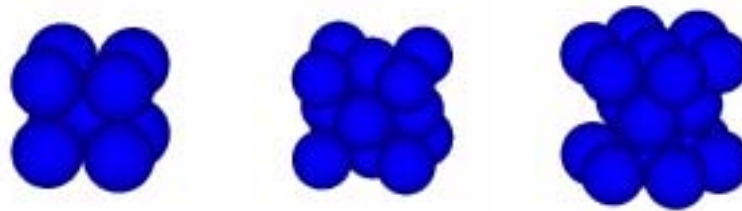
図 4 等温度線と結晶の成長速度

結論から言いますと、図 3(a)に示す成長方法では界面は平らになり複雑な結晶はできません。一方、図 3(b)に示す過冷却状態においては界面が乱れ、最終的には図 2 に示すような樹枝状結晶が成長します。では、なぜ潜熱の流れる方向によって結晶の形が変わるのでしょうか？このことを図 4 を用いて説明します。

図 4 の(a)と(b)は、それぞれ図 3(a)と(b)中のグレーで囲った小さな領域を拡大したものです。ここで、ちょっとした乱れにより図 4 のように界面の一部に小さな氷の突起ができたとします。図 4 (a)の水と図 4 (b)の水の温度を零度一定とすると、潜熱の流れによる温度の分布は図 4 (a)の水と図 4 (b)の水の中でのみ生じます。ここで、等しい温度を結んだ等温度線を図 4 に赤い細線で示しています。図 4(a)では、突起先端部分の等温度線の間隔が他の部分よりも広がっており、図 4(b)では反対に狭くなっていることが分かります。天気図を思い出して下さい。等圧線の間隔が狭いとこほど、風速が速いですよね。風と同じように、結晶も等温度線の間隔が狭い場所ほど成長が速くなり、図の中に“速”“遅”で示しているように、場所によって結晶の成長する速度が変化します。このため、図 4(a)の突起の成長速度は周りより遅く、最終的にその突起はなくなってしまいます。一方、図 4(b)の突起の成長速度は周りより速いため、突起はより前に突き出し、最終的に図 2 に示すような樹枝状結晶が誕生するのです。

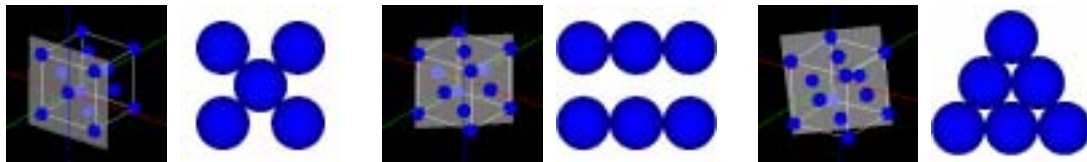
2.2 なぜ結晶は 4 方向や 6 方向に対称な形になるのか？

日本で降る雪の多くは図 1 に示すように六角形をしています。また、図 2 に示す樹枝状結晶の枝は、図 2(a)では 90 度毎の 4 方向に、図 2(b)では 6 方向に対称に成長していることが分かります。どうしてこのように対称な形状を示すのでしょうか？結晶は原子や分子が周期性を持って規則正しく配列してできた固体ですが、この原子や分子の構造が結晶の形を決定します。



(a) 体心立方格子(bcc) (b) 面心立方格子(fcc) (c) 六方稠密格子(hcp)

図 5 よく見られる結晶構造



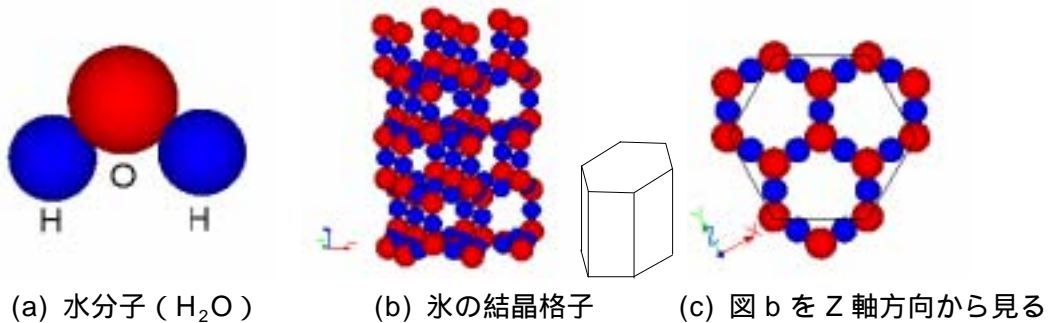
(a) 面 1 (100)

(b) 面 2 (110)

(c) 面 3 (111)

図 6 面心立方格子における結晶表面の原子配列の異方性

図 5 は、金属によく見られる結晶の配列の仕方（結晶構造）を示しています。ここでは結晶の形を考えるため、結晶の表面（界面）の構造を見てみましょう。図 6 は、図 5(b)に示す面心立方格子を 3 種類の平面、“面 1”“面 2”“面 3”で切った場合の切り口、つまり表面構造を示しています。図 6(a)(b)(c)より、面の方向によって結晶の配置の仕方および詰まり具合が異なることが分かります。これを異方性と呼びます。このように表面構造に異方性が存在するので、面の方向によって成長速度が異なり、結果として結晶の形が方向によって変わります。一般に、成長の早い面は、図 6(c)のように原子が最も密に詰まった面になります。



(a) 水分子 (H_2O)

(b) 氷の結晶格子

(c) 図 b を Z 軸方向から見る

図 7 氷の結晶構造

次に、雪や氷の結晶はなぜ六角形なのか見てみましょう。水の分子 (H_2O) は、図 7(a)に示すように 2 つの水素原子 (H) と 1 つの酸素原子 (O) が結合したものです。この水分子が多数集まって氷の結晶を作ると図 7(b)のようになります。ちょっと見にくいですが、六角柱の形をしています。図 7(b)を Z 軸方向から見ると、図 7(c)のような形をしており、一番上側に位置する酸素原子を結ぶと 6 方向の対称性を持っていることが分かります。氷の結晶の場合、分子の密度が高い面は、図 7(b)に示す上下の六角形の面と、六面体の 6 つの側面となります。このため、通常見られる雪や氷の結晶は六角形をしています。

3. 結晶成長のコンピュータシミュレーション

前置きが長くなってしまいましたが、本題に入っていきたいと思います。さて、どのような過程をたどれば、図 2 のような結晶をコンピュータの中で成長させることができるのでしょうか？この問題には昔から多くの研究者が取り組んできました。そして、10 年ほど前に画期的なフェーズフィールド法というシミュレーション手法が開発されました。ここでは、このフェーズフィールド法を簡単に紹介したいと思います⁽⁷⁾。

3.1 フェーズフィールド法って？

融液成長では、界面で生じる潜熱の除去過程が重要であることは前で述べました。このため、結晶の成長をシミュレーションにより再現するためには、界面を液相と固相が突然変わる境界線とし、その境界から潜熱が発生すると考えるのが一般的な気がします。しかしながら、この方法では結晶の成長とともに動く界面の位置を明確に知っておく必要があります。また、コンピュータシミュレーションは、何かが“突然変わる”ような現象を取り扱うことを苦手とします。ここで紹介するフェーズフィールド法は、界面を境界として取り扱うことをやめ、界面の場所を特定する難しさやコンピュータが苦手とすることを避けた方法です。

“フェーズフィールド(phase field)”を日本語に訳すと“相場”になります。これはニュースで良く出てくる為替や株式の“相場”とは違います。“相”は液相や固相の“相”、“場”は場所の“場”で分布しているという意味です。例えば、温度分布を温度場、濃度分布を濃度場ということがありますが、これらと同様の使い方です。ただ、言い回しがいいので英語をそのまま使っています。

図 8 を見てください。これは、液相と固相の界面に近いところの原子構造のイメージ図です。固相では原子が規則正しく配列しています。一方、液相では原子がばらばらになっています。原子配列の規則性の高い固相を 1、全く規則性の無い液相を 0 とし、界面における中間的なところを 0 から 1 まで滑らかに結んだものがフェーズフィールドです。原子の配列の規則性を示しているので、秩序変数とも呼ばれます。このフェーズフィールドの導入により、界面を明確に決定する必要がなくなります。

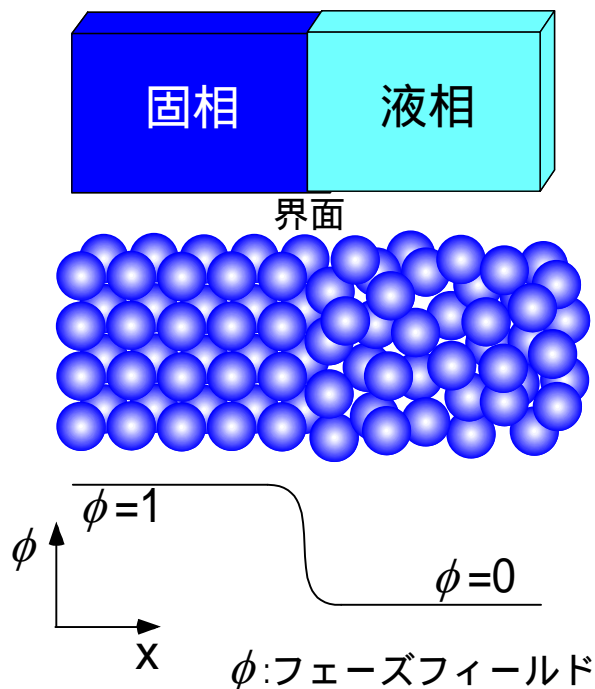


図 8 界面近傍の原子構造とフェーズフィールド

3.2 どのようにして式を導く？

何らかの現象をきちんと再現するためには、その現象を支配する式を作る必要があります。結晶が成長する現象を再現するためには、どのような考え方をしてどのような式を作ればいいのでしょうか？

ここでは、エネルギーを考えます。エネルギーと聞くと、太陽など非常に高い温度のものを想像するかもしれませんが、水や氷などのような低い温度のものもエネルギーをもちています。図 3(b)のように、外側と熱のやりとりが全くない容器の中では、エネルギーが増加することはありません。その容器の中で自然に生じる結晶の成長は、容器の中のエネルギーを減少させるように生じます。

図 3(b)のような容器の中で液相と固相が共存する場合のエネルギーを次のように考えてみましょう。

$$\text{(容器の中のエネルギー)} = \text{(液相と固相のエネルギー)} + \text{(界面のエネルギー)} \quad (\text{式 1})$$

界面が存在するとエネルギーは増加します。葉っぱやガラスについた水滴を考えてください。丸い球形をしていますよね。これは、水滴の表面（水滴と空気の界面）の面積を最も小さくし（球の表面積が最も小さい）、界面のエネルギーをできる限り小さくするようにしているためです。このため、式 1 の右辺に（界面のエネルギー）の項を加えています。仮に容器の中が全て液相または固相の場合、この項は零になります。次に、式 1 の具体的な形をみてみましょう。

式 1 の右辺第 1 項（液相と固相のエネルギー）は例えば次のようにフェーズフィールド ϕ の式で表すことができます（ ϕ はギリシャ文字でファイと読みます）。

$$f(\phi) = \text{(液相と固相のエネルギー)} = a\phi^3(10-15\phi+6\phi^2) + b\phi^2(1-\phi)^2 \quad (\text{式 2})$$

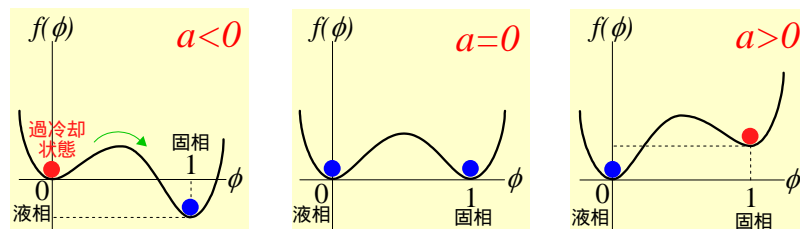


図 9 液相と固相のエネルギー $f(\phi)$

この式は、図 9 のような形をしており、変数 a の正負によって固相($\phi = 1$)のエネルギーの値が変化しています（ a と b が変化すると、どのようなグラフになるのか一度皆さんで考えてみてください）。 b は正の定数です。変数 a の値は温度によって変化し、温度が融点より低い場合は $a < 0$ 、融点より高い場合は $a > 0$ 、そして温度が融点の場合は $a = 0$ となります。式 1 の右辺第 2 項（界面のエネルギー）は界面の無い液相($\phi = 0$)と固相($\phi = 1$)では零となり、 $0 < \phi < 1$ の界面領域でのみ正の値を取ります。このため、式 1 左辺（容器の中のエネルギー）は図 9 に示すグラフと同じ形となります。

さて、自然に生ずる現象はエネルギーの低い方向に進みますので、図 9 の中で示した点が最も安定な状態となります。図 9 のような形をした坂道があって、適当な場所にボールを置けば、のところにボールが止まりやすいと考えればいいと思います。つまり、温

度が融点より低い場合 ($a < 0$) は固相($\phi=1$)，高い場合 ($a > 0$) は液相($\phi=0$)，温度が融点の場合 ($a = 0$) は液相と固相がそれぞれ最も安定な状態です．温度が融点の場合，液相と固相が共存できるということです．さて，図 9 の中に ϕ がありますが，ボールはここにも止まることができそうです．実は，止まることができません．図 9 の $a < 0$ の ϕ が過冷却状態に対応します． $a < 0$ の場合，温度は融点より低いので固相($\phi=1$)の方がエネルギーの低い状態にあるのですが，過冷却状態となって液相としても存在することができるのです．しかしながら，まんなかの山を越えるようなエネルギーを与えてやると，すぐに凝固が起こり $\phi=1$ のところに行ってしまいます．このため， $\phi=1$ の部分は準安定な状態であるといえます．

タイトルにもありますように，結晶をコンピュータの中で育てたいので，容器の中のエネルギーがどのような道をたどって最小な値に落ち着くのか追っていかねばなりません．ここでは，凝固現象はエネルギーが最も早く減少する方向に進むと考えて，式 1 を変形すると次のように形になります．(注：説明の都合上完全には対応していません．)

$$\left(\text{フェーズフィールド } \phi \text{ の時間変化} \right) = \phi(1-\phi)(\phi-0.5-a) + \left(\text{界面のエネルギーに関する項} \right) \quad (\text{式 3})$$

式 3 の右辺 $\phi(1-\phi)(\phi-0.5-a)$ の項がどのような形をしているのか見てみましょう．この項は，式 2 から導かれています．図 10 は図 9 と同じように，変数 a の符号によって $\phi(1-\phi)(\phi-0.5-a)$ のグラフがどのように変化するか示しています．温度が融点である $a = 0$ (黒線) の場合，

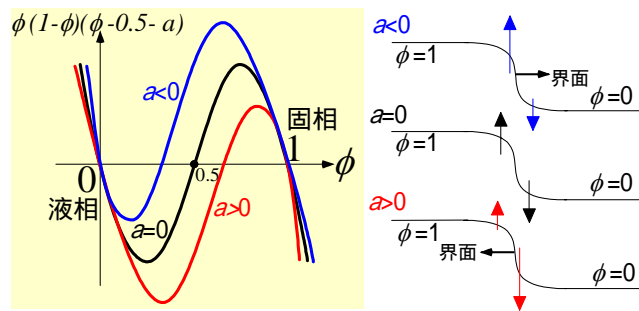


図 10 $\phi(1-\phi)(\phi-0.5-a)$ の変化

$0.0 < \phi < 0.5$ の範囲では負， $0.5 < \phi < 1.0$ の範囲では正となっています．この正負は，式 3 の左辺 (フェーズフィールドの時間変化) に関係しますので，負の値を示す $0.0 < \phi < 0.5$ の範囲では ϕ を減少させる方向に，正の値を示す $0.5 < \phi < 1.0$ の範囲では ϕ を増加させる方向に作用します (図 10 中の右側の図)．また，それぞれの範囲で曲線と ϕ 軸で囲まれる面積が等しく， ϕ を増加させる力と減少させる力が釣りあっており，界面は動かないこととなります．温度が融点より低い $a < 0$ (青線) の場合，曲線と ϕ 軸で囲まれる面積は正の部分の方が大きくなっており， ϕ の値を増加させる力の方が強く作用します．このため，界面は $\phi=1$ の固相を広げる方向に動きます．これは凝固を表します．温度が融点より高い $a > 0$ (赤線) の場合は反対に ϕ の値を低下させる力の方が強くなり，融解を表すこととなります．

融液成長では，界面で発生した潜熱の除去過程が重要でした．そのため，式 3 で示したフェーズフィールドの式と同時に熱がどのように伝わるのか，熱伝導の式も解く必要があります．次に示すシミュレーションの例では，フェーズフィールドの式と熱伝導の式をある時間間隔で交互に解いています．しかしながら，これらの式を人の手で解くのは大変ですので，シミュレーションのテクニックを使って，コンピュータに計算してもらいます．

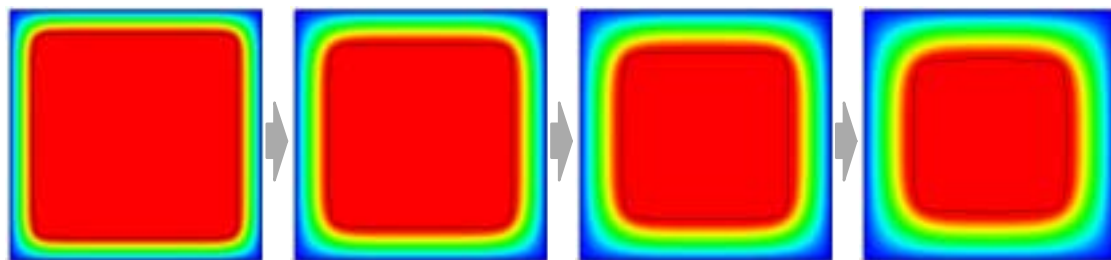
3.3 シミュレーション結果

コンピュータシミュレーションで得られた、結晶成長例をいくつか見てみましょう。ここでは、純粋なニッケル（融点 $1728\text{K}=1455^\circ\text{C}$ ）の凝固過程を示します。このような金属も水などと同様に過冷却現象や樹枝状結晶の成長がみられます。水と比べるとかなり融点が高くなっており、ちょっとピンとこないかもしれませんが、温度分布を見るときはその温度が融点より高いか低いかを見ればわかりやすいかと思えます。

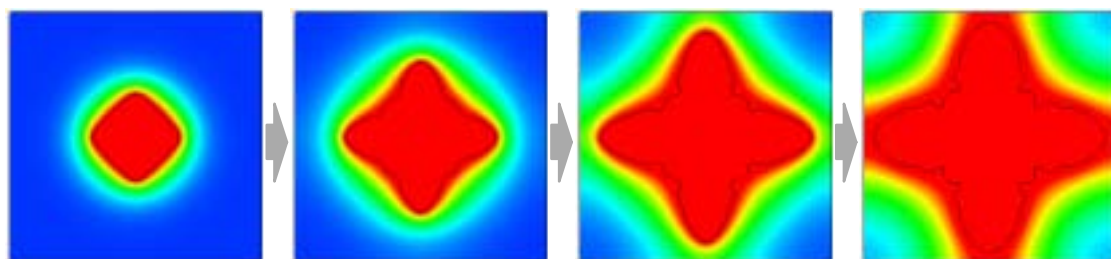
3.3.1 融液成長の2つの成長方法の比較 図11は、図3と図4を用いて説明した融液成長の2つの成長方法を比較したシミュレーション結果です。右の図に行くほど結晶が成長しています。フェーズフィールド ϕ は図8のように分布していますが、その中間の値 $\phi=0.5$ を界面とみなし、黒色の実線で示しています。温度分布はカラーで示しています。また、図11(a)と(b)いずれも4方向に対称な異方性を考慮しています。

図11(a)は、融点温度の液相で満たした容器を冷凍庫のようなところに入れて冷却するシミュレーションの結果です。結晶は壁側から中央に向かって成長しています。また、4点の角が結晶の成長とともに丸くなっており、界面は乱れていないことが分かります。

図11(b)は、過冷却状態である 1511K の液相の真中に結晶の種を入れ、その種から結晶が成長する過程を示しています。過冷却度は、融点 $1728\text{K}-1511\text{K}=217\text{K}$ と非常に高いように感じますが、ニッケルでは融点より 300K 以上温度の低い過冷却状態を達成することができます⁽⁸⁾。図11(b)より、図11(a)の場合とは異なり、4方向の異方性の影響が見られ、上下左右方向により早く成長していることが分かります。また、界面で放出された潜熱の影響で液相よりも固相の方が温度が高くなっています。



(a) 4面の壁から熱を取り除く場合（壁側の温度が低い部分が固相）



(b) 過冷却融液からの凝固（中央の温度が高い部分が固相）

1500 1563 1625 1688 1750 : 温度[K]

図11 融液成長の2つの成長方法の比較

3.3.2 樹枝状結晶の成長シミュレーション 図 12 は、過冷却状態 (1511K) にある液相からの樹枝状結晶の成長シミュレーション結果を示しています。結晶の種は、解析領域の下側の真中に置かれ、ここから結晶が成長します。図 12(a) はフェーズフィールド ϕ が 0.5 以上の固相部を青色で表し、結晶成長の様子を示しています。図 12(b) はフェーズフィールド $\phi=0.5$ の界面と温度分布の変化を示しています。

図 12(a) より、4 方向の異方性を考慮しているため、上と左右方向に結晶が優先的に成長しています。ある程度成長すると、平らだった界面が乱れ、小さな突起部の成長速度が速くなり枝状の結晶が成長する様子がよくわかります。図 12(b) の温度分布を見てみると、成長の早い結晶先端の等温度線の間隔が他の部分よりも狭くなっていることがわかります。また、成長の遅いところは温度が高くなっています。

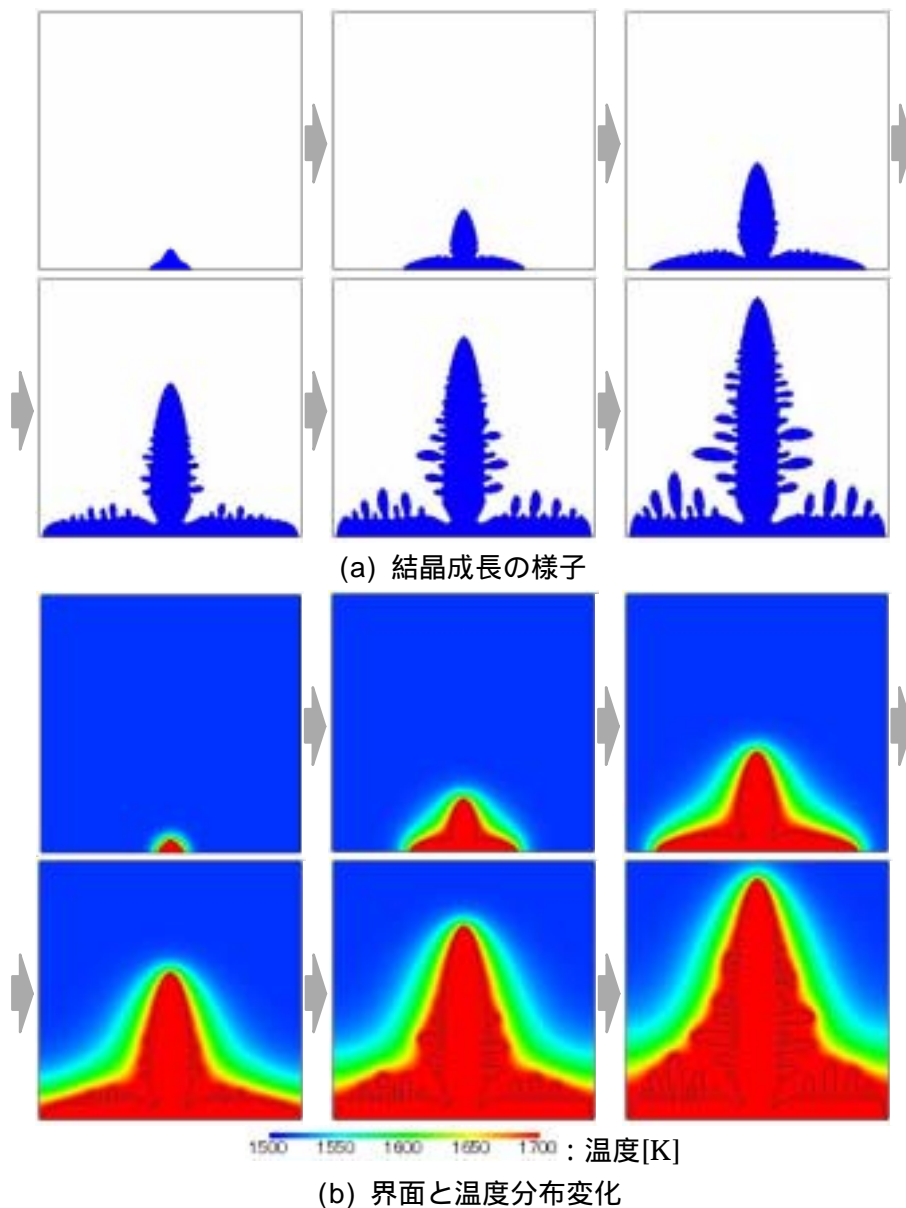


図 12 過冷却融液からの樹枝状結晶の成長シミュレーション結果

3.3.3 雪の形をした結晶のシミュレーション 図 13 は、雪の結晶と同じ 6 方向の対称性を考慮した過冷却凝固のシミュレーションの結果です。異方性の強さ、平らな界面の乱れやすさ、種結晶の大きさ、潜熱の大きさ等、いろいろな変数を変えた場合の結晶の形を示しています。結晶の形は様々な条件に強く影響を受けることがわかります。

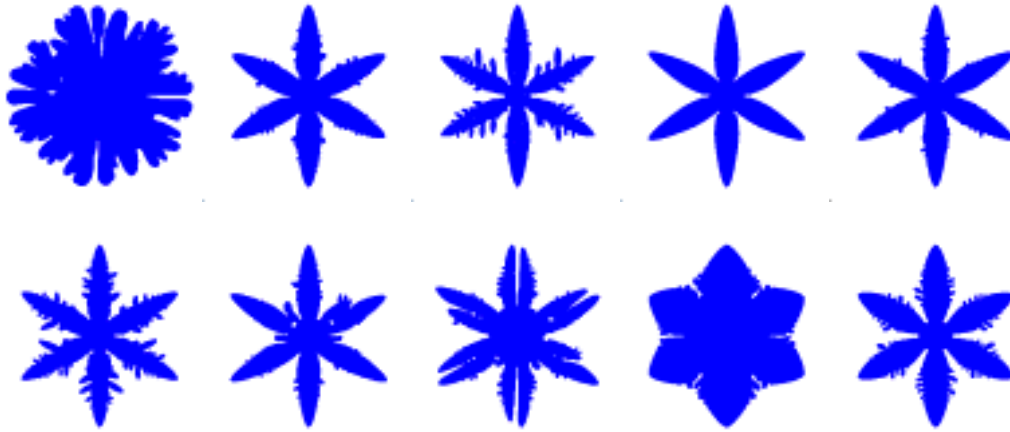


図 13 雪の形をした結晶

4. 溶液成長のコンピュータシミュレーション

これまでは純粋な液相の凝固過程つまり融液成長を見てきました。ここでは純粋でない液相つまり溶液の凝固シミュレーションの結果を紹介します。

水に食塩を少しずつ溶かしていくと、そのうち融けなくなります。この時の食塩水の濃度を飽和濃度と呼びます。この飽和濃度は、溶媒である水の温度によって変化します。ある温度で飽和濃度まで食塩を溶かし、その溶液の温度を低下させると過飽和状態を得ることができます。この中に結晶の種を入れると結晶成長が起こります（小学校の化学の実験で経験した人もいるのではないのでしょうか）。これを溶液成長と呼びます。溶液成長の場合、飽和濃度以上にどれだけ溶質が溶けているか、過飽和の程度が大きくなるほど結晶を成長させる力は強くなります。融液成長では潜熱の除去過程が重要でしたが、溶液成長では成長している結晶の表面まで物質を運ぶ輸送過程が重要になります。物質の輸送過程には流れや拡散があります。

ここでは、溶液の流れはないものとし、溶質の拡散だけを考えたシミュレーション結果を示します。シミュレーションでは、ニッケルに 40%の銅を混合したニッケル-銅合金を対象とします。シミュレーションの方法としては、前に紹介したフェーズフィールド法を用いますが、この場合、フェーズフィールドの式と濃度の式を交互に解くこととなります（詳細な説明は省略します）。

図 14 にシミュレーション結果を示しています。過飽和状態にある溶液の真中に種となる結晶を置いた状態からシミュレーションを開始しています。シミュレーションは、4 方向（図 14(a)）と 6 方向（図 14(b)）の対称性を考慮して行っています。黒い実線が固相と液相の界面、カラーは銅の濃度分布を示しています。シミュレーションがはじまると、異方性

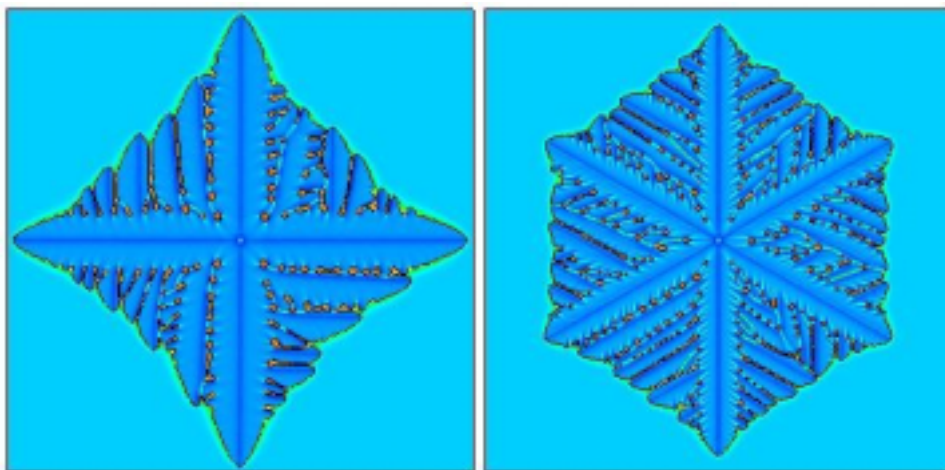
のため 4 方向および 6 方向に結晶が伸びています。しばらくすると平らな界面が乱れ，枝状の結晶が成長し，樹枝状結晶が形作られています。濃度分布をみると，結晶の成長過程で結晶の先端部を通ったところが青い色で表され濃度が低くなっていることがわかります。一方，枝と枝の間は色が赤くなっており，濃度が高いことがわかります。水道から出る水を冷凍庫で凍らせてできた氷は，外側が透明で真中の方はにごってますよね。水道の水は完全に純粋ではなく不純物が入っています。製氷器の中では壁側から氷ができますが，このとき水と氷の界面から不純物が吐き出されるためはじめに凍る水の純度は高く，最後の方で凍る真中の氷の純度は低くなるわけです。図 14 の合金のシミュレーションでも同じような現象を見ることができます。



(a) 4 方向対称結晶の成長過程



(b) 6 方向対称結晶の成長過程



(c) (a)と(b)の一番右側の図の拡大図

0.39 0.41 0.43 0.44 0.46 0.48 : 銅の濃度

図 14 過飽和溶液からの樹枝状結晶成長シミュレーション結果

5. おわりに

「コンピュータの中で結晶を育てる」最先端のシミュレーション方法を簡単に紹介しました。結晶の成長もそうですが、自然界で生じる現象をきちんと再現するためには、そのメカニズムを把握しておき、その現象を数学的にモデル化し、それをコンピュータが計算できるようにする能力が必要となります。今皆さんが学校で勉強している、数学や理科が重要になってくるというわけですね。ここで紹介した内容に皆さんが少しでも興味をもって、今やっている勉強にやる気を感じ、今後の進路に夢や希望を抱いてくれたらいいな、と思っています。

参考文献

- [1] 木下誠一, “雪と氷のはなし”, (1988), 技報堂出版。
雪はどのように降るのか? など簡潔に記されています。
- [2] 樋口敬二, “雪と氷の世界から”, (1985), 岩波新書。
雪や氷に関する研究に携わった経験が読みやすく書かれています。
- [3] <http://www.its.caltech.edu/~atomic/snowcrystals/>
雪の写真が沢山掲載されています。
- [4] D. T. J. Hurle, “Handbook of crystal growth 1b,” (1993), North Holland。
結晶成長のハンドブックです。英語で書かれていてかなり専門的。
- [5] Teraoka, Y., Saito, A., and Okawa, S., *Int. J. Refrigeration*, 25-2(2002), 218-225。
図 2(b)の図が掲載されている論文です。
- [6] 黒田登志雄, “結晶は生きている”, (1984), サイエンス社。
結晶成長に関する基礎的な事項が丁寧に書かれています。お勧めの一冊です。ただし、ちょっと専門知識が無いと厳しいかもしれません。
- [7] R. Kobayashi, *Phisica D*, 63 (1993), 410-423。
フェーズフィールド法を用いてデンドライトのシミュレーションをはじめて行った北海道大学小林先生の論文です。
- [8] 大野篤美, “金属凝固学”, (1977), 地人書館。
金属の凝固に関する教科書です。
- [9] <http://www.lowtem.hokudai.ac.jp/~frkw/>
北海道大学雪氷相転移ダイナミクス研究グループのHP。多くの雪の写真や、雪のメカニズムの説明があります。
- [10] http://force.energy.kyoto-u.ac.jp/~uehara/research/pf_j.html
京都大学上原先生のHP。2次元と3次元のシミュレーション結果を見ることができます。
- [11] <http://www.ctcms.nist.gov/~jwarren/solidification.html>
合金や多結晶金属の凝固シミュレーション結果を動画で見ることができます。
- [12] <http://quattro.me.uiuc.edu/~provatas/solid.html>
綺麗なシミュレーション結果を見ることができます。
- [13] <http://www-s.eng.kshosen.ac.jp/~takaki/phase/phase.html>
高木のHPです。本稿の図などを見ることができます。