

1999/02/17~1999/02/19

研究題目 固溶体の結晶成長理論 Theory on crystal growth of solid solutions

氏名 松本尚子 Matsumoto Naoko

所属 京都大学大学院理学研究科

Department of Geology and Mineralogy, Graduate School of Science,
Kyoto University

受け入れ教官 基礎宇宙化学部門：中村栄三

固溶体結晶と母相との間の元素や同位体の分配は、地球科学ではこれまで多くの場合、平衡論で扱われてきたが、カインेटクスを考慮した扱いが必要な現象も知られている。本研究では、まず、界面のカインेटクスの効果について微視的な動的過程をモデル化して考察した。

界面でのカインेटクスが固一液分配係数に与える効果に関しては、従来、成長表面上のいずれかの場所（キンクやステップ）で平衡を仮定したモデルが広く用いられてきた。しかし、固体内拡散の遅い成長条件での固溶体の成長をも扱える一般性のある理論の構築には、キンクでのカインेटクスそのものを扱う必要がある。

現時点で、成長単元間の結合エネルギーを既知とするとき、与えられた成長条件（温度・母相の濃度など）に対して、結晶の化学組成を予測するモデルが1次元結晶について完成したため、PMLのセミナーで発表した。内容は以下のとおり。

希薄環境から成長する理想2元固溶体が、A,B2種類の成長単元からなる1次元結晶を考える。成長過程のうち結晶端（キンクに相当）での付着・脱離の効果のみに着目する。付着速度は母相中の成長単元の濃度に比例する。一方、脱離の場合には、結晶の組成に自由度があることから、結晶端周囲のA,Bの配列にさまざまな状況がありうる。相互作用エネルギーを $\Phi_{AA} > \Phi_{BB}$ ($2\Phi_{AB} = \Phi_{AA} + \Phi_{BB}$)とすると、Bに関する結合を切って脱離するほうがAに関する脱離より起こりやすい。これを反映させて、脱離速度を結晶端の成長単元の種類に依存する形で定義する。これらの付着速度・脱離速度を用いて、定常状態での分配係数を定式化した。

典型的な数値例によると、解は

- (1)母相中に、結晶に入りにくい成分が少ないほど
- (2)2成分間の相互作用エネルギー差が大きいほど、
流束の増加に対する分配係数の増加率が大きい

という特徴をもつ。この点について、PMLの構成員と議論を行った。

本理論では、非平衡度を過飽和度で表しているが、過冷却度であらわした場合どうなるのか、などの質問があった。