



不純物が結晶成長に及ぼす作用の理論的解明

物性物理学およびその関連分野

研究者所属・職名 : 理学研究科・准教授

ふりがな みうら ひとし

氏名 : 三浦 均

主な採択課題 :

- [基盤研究\(C\)「微小重力環境下での結晶成長過程における不純物効果の理論的解明」\(2020-2024\)](#)

分野 : 結晶成長学、惑星科学

キーワード : 結晶成長、鉱物、理論、数値計算、フェーズフィールド法

課題

●なぜこの研究をおこなったのか？(研究の背景・目的)

結晶は、ごく微量の不純物によって成長速度や形、性質が大きく変化する。しかし、その具体的な仕組みは十分に解明されていない。特に、国際宇宙ステーションなどの微小重力環境では、地上と異なり対流が抑制されるため、不純物の影響がより明瞭に現れることがある。本研究では、微小重力下で観察された氷結晶の成長挙動や鉱物結晶の成長挙動を理論と数値計算により再現し、不純物が結晶成長過程に及ぼす作用のメカニズムを明らかにすることを目的とした。

●研究するにあたっての苦労や工夫(研究の手法)

結晶表面のステップ運動や不純物吸着を記述する従来モデルを拡張し、微小重力環境を想定した数値シミュレーションを構築した。フェーズフィールド法やモンテカルロ法といった異なる計算手法を組み合わせることで、実験で観測された振動成長や成長阻害といった特徴的な挙動の再現に取り組んだ。モデル化には多くのパラメータ調整や複雑な境界条件設定が必要であり、計算付加の大きさと不純物効果の複雑さが研究上の大きな課題となった。

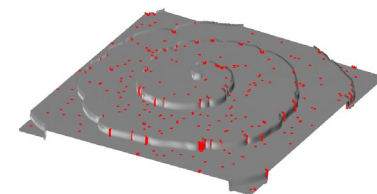


図1 不純物吸着の影響を受けながら成長する結晶表面の数値計算例

不純物が結晶成長に及ぼす作用の理論的解明

物性物理学およびその関連分野

研究成果

● **どんな成果がでたか？どんな発見があったか？**

本研究では、微小重力環境における結晶成長と不純物効果の理解に向けて、以下の重要な成果を得た。

① **不凍糖タンパク質 (AFGP) による氷結晶の自発的振動成長の理論的解明**

過冷却水中でAFGPを含む条件では、温度が一定にもかかわらず氷の成長速度が周期的に変動する現象が観測されていた。本研究では、AFGPの界面吸着とステップ運動の相互作用を組み込んだ新しい平均場モデルを構築し、「成長ヒステリシス」を介して振動が自然に発生する条件を理論的に示した。さらに、フェーズフィールド法とモンテカルロ法を組み合わせた数値シミュレーションにより、計算機上でこの振動成長の再現に世界で初めて成功し、微小重力実験との比較を可能にする理論枠組みを確立した。

② **鉱物に見られる波動累帯構造の新しい形成モデルの提案**

斜長石などの鉱物に観察される周期的な化学組成帯（波動累帯構造）について、不純物吸着がステップの進行を妨げることで自然発生するという新しい理論モデルを提示した。これにより、鉱物成長過程の理解に新たな視点を提供した。

③ **結晶への不純物取り込み効率を予測する理論モデルの構築**

結晶成長界面への不純物取り込み効率（分配係数）を定式化し、表面プロセスから分配係数を予測する新たなモデルを開発した。この枠組みは、氷・鉱物・半導体など幅広い結晶系に適用可能で、結晶成長理論の発展に大きく寄与した。

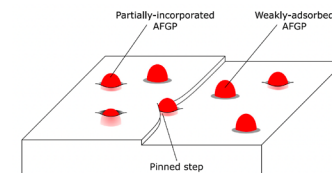


図2 氷結晶表面に吸着した不凍糖タンパク質の作用モデル

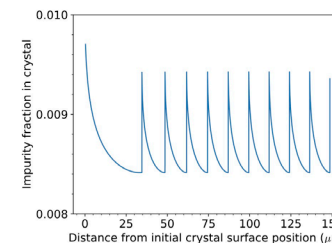


図3 結晶内不純物分布の周期構造の再現

今後の展望

● **今後の展望・期待される効果**

今後は、理論モデルをより精緻化し、微小重力実験データや天然鉱物の分析結果との比較を進めることで、不純物効果の定量的理解を一層深める予定である。また、本研究で構築したモデルは、氷だけでなく鉱物、半導体、生体高分子など多様な結晶系への応用が期待される。これにより、添加物濃度の制御や結晶の高品質化技術に貢献するとともに、宇宙環境下での物質形成過程の理解にもつながり、学際的な研究の発展に寄与すると考えられる。

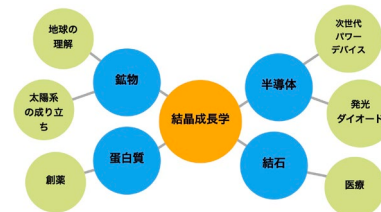


図4 研究の広がりイメージ