

題名	新しいパラダイムを求めて
Title	Science during Paradigm Creation
著者名	ジョン・ワーナー・カーン
Author(s)	John Werner Cahn
言語 Language	日本語・英語 Japanese, English
書名	稲盛財団：京都賞と助成金
Book title	Inamori Foundation: Kyoto Prize & Inamori Grants
受賞回	27
受賞年度	2011
出版者	公益財団法人 稲盛財団
Publisher	Inamori Foundation
発行日 Issue Date	4/20/2013
開始ページ Start page	110
終了ページ End page	153
ISBN	978-4-900663-27-1

## 新しいパラダイムを求めて

ジョン・ワーナー・カーン

材料科学者としての私の仕事を評価していただき、京都賞を受賞できますことは、大変光栄であり、心からの喜びとするところであります。これまでの受賞者の列に加えていただけることに恐縮しています。冶金学、その後にセラミックス、そして材料科学に関わってまいりましたが、その重要かつ興味深い問題で、長い研究生活は楽しく、達成感を感じさせるものになりました。なぜそのようなになったのか。どのようにしてこのような分野を見つけたのか。今日までどのような出来事があったのか。人生を振り返ってみますと、小さな出来事、大きな出来事、そして不幸な出来事さえも、時には思いがけない幸運な結果をもたらす予想外の生き方と転職の契機となりました。

### パラダイム構築途上の学問分野

私が研究の道に入った60年前、科学と呼べる冶金学とセラミックス学は、トーマス・クーンが言うところのパラダイム構築途上の段階にありました。パラダイムとは、ある一定の分野の人たちで共有されている原理、法則、方法論、学問知識、そしてその他の教示概念のことです（クーン著『科学革命の構造』第2版 P.viii [P.v] ... 一般に認められた科学的業績で、一時期の間、専門家に対して問い方や答え方のモデルを与えるもの。P.10 [P.12-13] 彼らの業績が、他の対立競争する科学研究活動を棄てて、それを支持しようとする特に熱心なグループを集めるほど、前例のないユニークさを持っていたからであり、いま一つにはその業績を中心として再構成された研究グループに解決すべきあらゆる種類の問題を提示してくれているからである。〔訳文引用 □ 内ページは日本語訳版のページ：中山茂訳・みすず書房・1971〕）。何千年もの間、職人たちは金属と陶磁器の知識と技術を磨き、徒弟の指導に役立つ技能伝承を生み出してきました。無学でありながらも天分豊かな職人が成し遂げた結果に驚かされることがあります。一方、中世の学者たちは、めったに観察することをせず、互いに、あるいは職人たちとは全く異なった基本的考えを持っていました。職人も学者も正しくは理解していませんでしたが、ともに進歩はしました。例えば、西洋の職人は、何千年にもわたり、鉄を何日も炭火で熱して少量の鋼<sup>はがね</sup>を作ってきましたが、火が鉄を精錬し、何か貴重なもの、つまり鋼に変えると信じていました。1781年になって、スウェーデンの錬金術師のトルビョルン・ベリマンは、金属に対する酸の影響を研究し、鉄が溶解した場合には何も残らないのに対して、鋼が溶解すると炭素の残留物があることを発見しました。こうして、鋼が鉄と炭素の合金であることが知られた

## Science during Paradigm Creation

John Werner Cahn

It is a great honor and a real pleasure to receive the Kyoto prize for my work as a materials scientist. To be in the footsteps of all the previous prizewinners is a humbling experience. Metallurgy, later ceramics, and then materials science provided me with important and interesting problems that kept me happy and gave me a feeling of accomplishment during a long research career. How did this happen? How did I find these fields? What are the events that led to this day? In looking over my life, I am amazed how small and large events, some calamitous, caused unplanned lifestyle and career changes often with serendipitous consequences.

### Paradigm building fields

At the beginning of my career 60 years ago, scientific metallurgy and ceramics were, in what Thomas Kuhn calls, the paradigm building stage. Paradigms are the laws, rules, methods, lore, and other teaching concepts that are universally shared by those working in a field. (Kuhn 2<sup>nd</sup> Ed. P. viii. ...universally recognized scientific achievements that for a time provide model problems and solutions to a community of practitioners. P.10. Their achievement was sufficiently unprecedented to attract an enduring group of adherents away from competing modes of activity, and simultaneously was sufficiently open-ended to leave all sorts of problems for the redefined group of practitioners to resolve.) For thousands of years craftsmen had honed their knowledge and skills about metals and ceramics, and created craft lore that helped them teach their apprentices. One marvels at what was achieved by gifted craftsmen who usually were illiterate. Medieval scholars rarely made observations and had quite different concepts from each other and from craftsmen. Both craftsmen and scholars had misconception, but both made advances. For example, for millennia, Western craftsmen always made steel in small amounts by heating iron for days in a charcoal fire. They believed that the fire purified the iron and turned it into something noble, that is, steel. In 1781, a Swedish alchemist, Tobern Bergman, studying the effect of acids on metals, found that nothing remained when iron was dissolved, but when steel was dissolved there was a residue composed of carbon. Once it was known that steel is an alloy of iron and carbon, large-scale production of steel with controlled carbon content became possible.

Being ignorant of the extensive craft knowledge, the academic community had strange ideas about the inertness of solids. It was obvious to them that "solid" meant that atoms or molecules could not move or react in a solid, even though it

## 職人技術が遠くへ伝播 Craft Skills Spread Far



### 鉛を使って銀から銅を分離する (南蛮吹)

精錬された粗銅と鉛を炉の中に入れ、液状化するまで加熱する。次に鉄製の道具を用いる。銅は上層部に残り、液状の鉛は流れ出る。残った銅は、「絞り銅」と呼ばれる。この過程で銅に含有されていた銀は、鉛に溶融して流れ出る。この過程を「絞り吹」という。この精錬方法は外国から導入されたことから、「南蛮吹」と呼ばれる。

### Using Lead to Separate Copper from Silver (*nanban-buki*)

Smelted copper and lead is put into a furnace and heated till part liquefied; then it is worked with an iron tool, the copper will remain at the top while the liquid lead will run off. The copper that remains is called "squeezed-out copper" (*shiborido*). By this process the silver contained in the copper will be drawn out dissolved in the lead. The process is called "shibori-fuki". Since this way of smelting was introduced from abroad, it is called the "southern barbarian smelting method" [*nanban-buki*].

ことにより、炭素含有量を管理して鋼の大量生産が可能になりました。

学者たちは、十分な技能知識がないために、固体の不活性について、おかしな考え方をしていました。すなわち、「固体」ということは、その中で、原子や分子は移動したり反応したりできないというものです。一方、職人はそうではないということを知っていました。1900年になって、ようやく固体の拡散についての研究がなされて、固体の拡散は、速度が非常に遅いだけで、液体や気体の拡散と同じ数学的法則に従うことが分かったのです。そして、例えば原子が欠けている場所である「空格子点」のような欠陥がイオン結晶中の運動を調整することを科学者が見つけたのは、それから20年も経ってからでした。そして、金属についても同様であることが分かるまで、さらに30年を要したのです。職人は、火によって鉄を弱くする何かは抜け出ることによってできる「細孔」があると長く考えてきました。つまり、その変化は加熱時間とともに内側で起こり、固体の中での移動を暗示していました。現在、私たちは



### 鉛から銀を分離

取り出された鉛は灰の入った炉に入れ、炭火でゆっくりと溶かすと、鉛は灰の中に沈む。その結果、銀だけが中央に残る。これを「灰吹銀」と呼ぶ。

### Separating Silver from Lead

When the extracted lead is put into a furnace lined with ashes and slowly melted in a charcoal fire, the lead will sink into the ashes; and only the silver will remain in the center. This is called cupellation (*haifukigin*, literally "Ash-smelted silver").

was known to craftsmen. It was not until 1900 that diffusion in the solid-state was studied, and found to obey the same mathematical laws as diffusion in liquids and gases, only much slower. It took 20 more years for scientists to discover that defects, such as "vacancies," sites for atoms that are unoccupied, mediated the motion in ionic crystals, and another 30 years for them to realize that the same was true for metals. Craftsmen had long postulated "pores" to account for the drawing out by the fire of whatever made iron weak; the changes moved inward with heating time and implied movement in solids; now we call the pores, vacancies. As late as 1950 I was taught that the chemical species of solids cannot react to form different chemical species until they were dissolved or vaporized, and that solids could only change their concentrations, their ratios of chemical constituents, by dissolving and crystallizing. There was a strong belief in the "law of definite proportion." It took a long while for the "indefinite proportions" of solid solutions, so well-known and common in alloys, to be accepted.

There is great power in a mature science. There are laws and paradigms for everything and they can be trusted. You know what to measure, how to measure it, and why you need it. With good data, your predictions work and you are almost

その細孔のことを空格子点と呼んでいるのです。1950年にやっと、私は、固体の化学種は溶解されるか気化されるまでは別の化学種を生成する反応を起こさず、固体は溶解、晶出によってのみ、その濃度、化学組成比を変化させると習いました。「定比例の法則」への強い信仰があったのです。合金ではよく知られていて常識である、固溶体は「定比例しない」ということが受け入れられるまでには長い時間を要しました。

成熟した科学には大いなるパワーがあります。すべてのことに法則とパラダイムがあり、それらは信用するに足るものです。何を測定するのか、どのように測定するのか、なぜそれが必要なかが分かっています。正しいデータが得られれば、予測ができ、間違えることはまずありません。このことは、冶金学やセラミックス学のようなパラダイム構築途上の科学では、非常に難しいことです。何が重要かを決定し、測定の仕方やそれをどのように利用するかを見つけないければならないからです。通常、科学者間の強い協力関係があります。観察から規則性が分かることを期待し、法則やパラダイムを定式化しようとしています。そこには間違いという大きなリスクがあります。しかし、時にはうまくいって、さらなる発展の大きな機会を創出します。

1950年代、科学的冶金学に関わる科学者は、全世界でおよそ300人にすぎませんでした。冶金はセラミックスより単純ですから、多くの新しい科学的パラダイムが冶金学から起こり、セラミックスや、後にはポリマーの進歩を生み出しました。新しいパラダイムの発表がいくつもの新しい発見の引き金になることもありました。心躍る時代でした。初期のパラダイムは定性的なものがほとんどでした。数学はまだ冶金学のツールになっていませんでしたし、高等数学は冶金学者や物理化学者の教育科目ではありませんでした。私は、数学の勉強もしていましたが、それが私の研究の一部になるとは思ってもいなかったのです。

## 子ども時代

ここで私が科学者になった経緯をお話しします。私は1928年にドイツでユダヤ系の家に生まれました。父は弁護士でした。祖父は、若い時に小額の借り入れをしてワインの会社を設立し、ドイツ最大のワイン会社になりました。孫の中でただ一人の男の子だった私は、ドイツのワイン商人になる運命にありました。

ところが、1933年、新たに誕生したナチス政権に拘束される危機が迫っていると

never wrong. It is very different in the paradigm building sciences, like metallurgy and ceramics. You have to decide what is important, find ways of measuring it, and how to use it. There is usually great collegiality among scientists. You are all hoping to understand the regularities that are observed and trying to formulate laws or paradigms. You are at great risk of being wrong. But every once in a while things fall into place, creating great opportunities for further advances.

In the 1950s only about 300 scientists worldwide were contributing to scientific metallurgy. Because metallurgy was simpler than ceramics, many new scientific paradigms emerged from it and created advances in metallurgy, ceramics and later in polymers. Often the announcement of a new paradigm triggered a cascade of new discoveries. It was an exciting time. Most of the early paradigms were qualitative. Mathematics was not yet a tool of metallurgical science, and advanced mathematics was not part of the training of metallurgists and physical chemists. Although I had additional training in mathematics, I did not expect that it would be part of my research.

## Early years

Let me talk now about my own path to becoming a scientist. I was born Jewish in Germany in 1928. My father was a lawyer. As a young man my grandfather had founded a wine company with a small loan that became the largest wine company in Germany. As the only male Cahn grandchild, I was destined to become a German wine merchant.

In 1933 my father was warned of an impending arrest by the new Nazi regime, and fled to Belgium with his family. At the age of 5, I became a refugee. We spent most of 1933 in Le Coq, Belgium with other refugees, including Albert Einstein.

For the next six years my family lived mostly in Amsterdam, Holland, where I had an excellent education at a Dalton School. For part of 1935-6, until the Hitler-Mussolini pact, we lived in Italy. It was a happy and interesting childhood. I was aware of the dangers to my extended family, but they seemed like Grimm Fairy Tales. I was good in chess and geometrical thinking. I enjoyed taking mechanical gadgets apart, to see how they worked and how to put them together again.

If war had not come in September 1, 1939, I would have grown to be a

警告された父は、家族とともにベルギーに逃れ、私は5歳で難民になったのです。私たちはベルギーのルコックで1933年のほとんどを過ごしました。他の難民も一緒にいましたが、その中に、あのアルバート・アインシュタインもいました。

その後の6年間のほとんどを、私たち家族はオランダのアムステルダムで暮らしました。そこで、私はドルトン・スクールに通い、素晴らしい教育を受けました。1935～6年の一時期、ヒトラーとムッソリーニが同盟を結ぶまでの間、私たちはイタリアにも住みました。幸せで、楽しい子ども時代でした。親族・親戚の危険な状況は承知していましたが、なにかグリム童話のように思えたのでした。私はチェスが得意で、幾何学的思考に優れていました。小さな機械仕掛けの器具を分解し、どのように動くのか、どのように組み立てるのかを調べるのが好きでした。

1939年9月1日に戦争（第二次世界大戦）が始まらなければ、私はオランダ国民として成人していたかもしれません。1939年9月16日、私たち家族はホーランドアメリカラインの船に乗って、中立を宣言したオランダを離れ、ニューヨークに移住しました。私は、英語が全く分かりませんでしたが、すぐに公立の学校に入りました。1年飛び級をしましたが、授業内容のほとんどはすでに知っていることでした。しかし、それは問題ではありませんでした。英語を習う必要があったからです。

### ブルックリン工業高校

退屈な小学校生活であったことから次の予期せぬことが起こりました。全くの偶然でしたが、難度の高い公立高校、ブルックリン工業高校のことを知りました。数学と科学を得意とする男子校です。志願書に工学のどの分野に興味があるのかという問いがありました。皆目見当がつかず、他の志願者に尋ね、「土木」工学と記入しました。私は入学を許可され、驚くほど意欲を駆り立てられる高校教育を受けたのです。こうして、私は科学者になりました。

当時は、ほとんどの家庭にとって経済的に苦しい時代でした。私は、13歳の時、放課後に食品雑貨の配達のアルバイトを始めました。その後、住んでいた大きなアパートで便利屋をし、そして数学と科学の家庭教師をしました。2度の夏休みには、リゾートホテルでウェイターもしました。私の家族は1945年にそろってアメリカ国籍を取得しました。こうして、本日、私は、政治的な出来事があったがために、アメリカ国籍を持つ引退した科学者として皆様の前に立っています。これも幸運な偶然でしょうか。



1933年ルコックにて。  
ドイツに帰れる日を待つ難民として。  
LeCoq 1933.  
Refugees waiting for sanity to return to Germany

Dutch citizen. Instead we left neutral Holland on September 16, 1939 on the Holland America line, sailed past England at war, and settled in New York. I was immediately enrolled in public school without knowing a word of English. Even though I was skipped a grade, I already knew most of the subject matter. That was okay because I needed to learn English.

### Brooklyn Technical High School

The next serendipitous event occurred because I was bored in elementary school. Quite by accident, I learned about a challenging public school, Brooklyn Technical High School, for boys who were good in math and science. On the application form I was asked what kind of engineering I was interested in. I had no clue. After asking another applicant, I put down "civil" engineering. I was admitted, and had an amazing and challenging high school education. That is how I became a scientist.

These were hard financial times for most families. I began working after school at age thirteen, delivering groceries. Later I became the handyman at the large apartment house in which we lived, and tutored in mathematics and science. During two summers I worked as a waiter in resort hotels. My family became American citizens in 1945. I stand before you today as a retired US scientist because of political events. Serendipity?

## ミシガン大学とカリフォルニア大学バークレー校

高校の化学の先生のおかげで、私は化学に興味を持つようになりました。私の家は、全員が自営業でしたので、化学者になることは、他人に仕えるという意味で価値がないという雰囲気がありました。しかし、私は、自己決定を大切にするようにと育てられましたから、ミシガン大学を志願し、1945年6月に、アナーバー（ミシガン州）にやってきました。

ミシガン大学では、目一杯の講座を受講する一方で、化学品貯蔵庫で週20時間の研究をしました。しかし、すぐに学部レベルの化学は好きでなくなり、物理と数学を専攻しようと思いました。これらの学問を学んだことが後に私にとって重要になりました。ただ、当時の私には、これらの分野の経歴がどのように役立っていくのか全く分かりませんでした。大学で出される問題はすべて数時間で解がでるものばかりでした。科学では、経歴を重ねても、同じように退屈な問題で、単に長い時間を要する問題を解くことになるのだろうか。私は科学への興味を失いつつありました。しかし、その時には、成熟しきった分野の科学をやりたいだけであることに気付いていませんでした。

大学4年生の時、物理化学の講座で、私は未解決の問題に出会いました。このことで、私は、米国で最高の物理化学学部を擁するカリフォルニア大学バークレー校に行く決心をしました。ミシガン大学では化学の講座をあまり多く取っていませんでしたので、学んでいなかった講座を登録したいと思いました。ところが、そのいくつかの講座を担当して教えるように依頼されてしまいました。教えることで、私は物質について、より早く、より完璧に学ぶことができ、後の研究人生の良き準備となりました。だからといって私の教えた学生たちが不利益を被ったとは思っていません。大学院生活は楽しいものでした。また、幸運にもアン・ヘッシングと出会い、その年のうちに結婚しました。

バークレー校の（博士号取得のための）認定試験は、私の論文テーマとは異なる3つのテーマについての研究計画の提案説明と審査を受けることでした。偶然に見つけたものですが、私は自分のテーマの一つとして臨界点付近の現象（後でもう一度話題にします）を選択しました。相反する理論がたくさんあり、そのほとんどが非論理的なものでした。実験結果の多くは予想外のもので、再現性のないこともよくありました。そのため、審査官の間での活発な議論を呼び起こしてしまい、私はほとんど質問

## Universities of Michigan and California at Berkeley

A high school chemistry teacher got me interested in chemistry. Everyone in my family had been self-employed, and there was a feeling that there was no dignity in being a chemist because they worked for others. I grew up valuing self-determination. I applied to the University of Michigan, and in June of 1945 came to Ann Arbor.

For my entire time at Michigan I worked 20 hours per week in the chemistry stockroom, while taking a full load of courses. I quickly found that I did not like undergraduate chemistry, and tried majoring in physics and mathematics, which would prove to be important for me later. I had no understanding of what a career in any of these fields would be like. All the problems in the courses had solutions which could be gotten in a few hours. Would a career in science be solving longer versions of the same kinds of boring problems? I was losing interest in science, but did not realize that I did not want to be in a mature science.

In my senior year a course in physical chemistry exposed me to problems that had not been solved. That convinced me to apply to the top physical chemistry department in the US, which was at the University of California in Berkeley. Since I had not had many chemistry courses at Michigan, I wanted to register for those I had not taken. Instead I was asked to teach some of them. By teaching, I learned the material faster and more thoroughly, and it was good preparation for my later career. I don't think the students I taught suffered. Graduate school was a happy time. As luck would have it I met Anne Hessing and we were married within the year.

The qualifying examination at Berkeley consisted of proposing and defending research plans for three topics different from my thesis topic. Serendipitously, I chose phenomena near critical points (to be revisited later in this talk) as one of my topics. There were many conflicting theories and most were illogical. Many experimental results were strange and often not reproducible. I was asked few questions because I had stimulated intense discussion among my examiners. Critical phenomena have since been important topics in physics, and important for testing some of my basic ideas in materials science.

The State of California imposed a loyalty oath on University of California professors, which drove many top theoretical physicists away. However the physics department managed to attract a great young theoretical physicist, Charles Kittel,



二酸化炭素を封入したカプセルに、臨界密度点とその上下に各1個、計3個のフロートを入れ、4つの異なる温度で長時間平衡させる。(左から右)

- ・臨界温度以上では、均一な流体である。
- ・臨界温度（スピノーダル）では、圧縮率がゼロ近くになり大きな密度揺らぎによって単一の流体は乳白色になる。比重の影響が大きい。
- ・臨界温度より少し低いときは、2個のフロートが気体と液体の境界面にある。しかし、液体は密度が不十分で最も重いフロートを浮かせることができない。液体も気体も乳白色である。
- ・臨界温度を相当下回るときは、液体と気体は透明で、十分な密度さによって3個のフロートは境界面に集まる。

Carbon dioxide encapsulated with three floats, one above, one below and one at the critical density, and equilibrated for a long time at four temperatures, from left to right:

- ・ Above the critical temperature there is a single uniform fluid
- ・ At the critical temperature (and at the spinodal) the single fluid is milky (opalescent) due to the large density fluctuations as a result of the near zero compressibility. There is a large effect of gravity.
- ・ Slightly below the critical temperature two floats are at the surface between gas and liquid, but the liquid is not dense enough to float the heaviest float. Both liquid and gas are milky.
- ・ Well below the critical temperature liquid and gas are clear and there is enough density difference to confine all three floats to the surface.

を受けませんでした。臨界現象は、以来、物理学における重要なテーマになっていますし、材料科学におけるいくつかの私の基本的な考えを試す重要なものになりました。

カリフォルニア州は、カリフォルニア大学の教授陣に忠誠宣誓（公職に就く者に要求される反体制活動をしなという宣誓）を強要したために、多くの優秀な理論物理学者が大学を去りました。しかし、物理学部は、偉大な若手物理学者であったチャールズ・キッテル先生を引き入れることに成功しました。彼の専門は固体物理でした。私は、先生の大学講義を聴講し、固体化学の分野を切り拓いていくことに興味を抱く



シリル・スタンレー・スミス先生 1950年  
Cyril Stanley Smith, ca. 1950

who specialized in the solid-state. I audited his undergraduate course and became intrigued with the idea of making a career in creating the field of solid-state chemistry. Chemists had little interest in solids. My career plan was 40 years premature.

Knowing almost nothing about metals, I took a chance and applied successfully to join the faculty of the Institute for the Study of Metals at the University of Chicago, headed by Cyril Stanley Smith. It was the first interdisciplinary materials research group. My initial appointment was for two years, and it proved impossible for me to learn enough about metals, to initiate research and have results in that time. None of my early ideas for quick results worked. In desperation I chose to measure diffusion in a solid alloy.

Diffusion is the process whereby atoms or molecules in liquids, gases, or solids intermingle as a result of their spontaneous movement caused by thermal agitation. Normally in solutions, the dissolved substances move from a region of higher to one of lower concentration, causing the concentrations to become more uniform. To measure the rate of diffusion in a solid metal, one can deposit a thin layer of a metal on a metallic single crystal, heat the crystal for a few weeks, and then slice it to measure how far the deposited metal has penetrated. It was tedious boring hard work that might have provided useful data and insight. But I did not have the necessary skills. My data were not accurate enough and all that tedious work was worthless. Chicago was a good lesson. I had been unprepared to begin work

ようになりました。当時の化学者は固体にはほとんど関心がありませんでした。私のキャリアプランは、40年早かったのです。

金属についての知識はほとんどありませんでしたが、一か八かでシリル・スタンレー・スミス先生率いるシカゴ大学金属材料研究所の教員に応募し、見事に採用されました。それは、学際的な材料研究を行う最初のグループでした。私の最初の契約は2年間でしたが、金属について十分に学び、その期間内に研究を始めて結果を出すことは不可能でした。すぐに結果を出すための私の最初の考えは、どれもうまくいきませんでした。苦し紛れに、私は、固体合金の拡散速度を計測することにしました。

拡散とは、液体、気体、あるいは固体の原子や分子が熱運動の結果として混ざり合うことです。一般に、溶液中では、溶質は密度の高い場所から低い場所に移動して、濃度をより均一にしようとします。固体金属の拡散速度を測定するためには、金属単結晶に金属の薄い層をデポジットし、その結晶を数週間熱した後、スライスして溶着した金属がどの程度浸透したかを測定します。単調で退屈で骨が折れるのですが、有益なデータや知見が得られるかもしれない作業です。しかし、私は必要な技能を持ち合わせていませんでした。私のデータは精度が十分でなく、退屈な作業も無駄になりました。このシカゴ大学での経験はよい教訓になりました。つまり、新しい分野で研究をするのに準備もせずに始め、努力が報われない長い退屈な研究をしてしまったのです。

シリル・スミス先生は、もう一つのことを教えてくださいました。先生は多くの研究者がいる分野を避けておられました。生涯、誰も研究をしていない問題を求めては、その問題を科学が扱えるということを最初に示してこられました。先生は知識を広げることを大事にされ、問題が解決されるのであれば誰がそれをやったとしても気にしておられませんでした。他の科学者が後に続くと分かった途端にその研究から離れられることで有名でした。スミス先生は、冶金学が興味深い問題が溢れている分野で、それを研究する人もほとんどいないということを教えてくださいました。シカゴ大学の契約は更新されませんでしたが、私たちはMIT（マサチューセッツ工科大学）で再び結び付けられ、生涯の友とならせていただきました。

## GE

シカゴ大学での2年間で、私の研究人生は終わってしまいそうでしたが、拡散の研

in a new field, and had undertaken a long tedious study that was not worth the effort.

Cyril Smith taught me another lesson. He hated crowded fields, and had spent a lifetime successfully searching for subjects that were not being studied by any scientist and then being the first to show that science could be done on that subject. He cared about expanding knowledge, and did not care who did it as long as it was done. He is known to have left one subject as soon as he learned that an excellent scientist was following his footsteps. Smith showed me that metallurgy was a field filled with interesting subjects, and that there were far too few people working on them. Even though my contract at Chicago was not renewed we became lifelong friends later at MIT.

## GE

The two years at Chicago could have been the end of my career, but the choice to do diffusion and having to leave was more serendipity. The best work in scientific metallurgy in the world was being done at the Metallurgy and Ceramics Department of the General Electric (GE) Research Laboratory in Schenectady, New York. It included a group under David Turnbull making pioneering studies about how diffusion occurs in solids. Having shown a willingness to engage in such boring work, I was hired into that group.

An unexpected road block provided me with another amazing serendipitous career change. To expand its laboratory, GE had been building a new wing to be finished in the summer of 1954. When I showed up in September 1954, the new wing was not finished. There was not enough space! For nine months I had no laboratory available to start my diffusion work. My shared desk space was in a blocked off windowless hallway. My bosses were terribly apologetic about my inability to begin my experimental work. I was under no pressure to do anything! What a wonderful opportunity to learn! I had nine months to become acquainted with the research of my new colleagues, and discovered that I could be helpful to them. I had a knack for formulating and solving their problems. When my laboratory was completed, I had published three small pieces of useful theoretical model making. Simple mathematical theories that could become paradigms were useful and needed, but there were few who could create them. I began doing modeling in addition to experimental work. I had generous help from GE's mathematicians, and gradually

究を選択したことで大学を去らねばならなかったことが、さらに思いがけない幸運をもたらしました。科学としての冶金学の世界最高の研究は、ニューヨーク州スケネクタディにあるゼネラル・エレクトリック（GE）研究所の冶金・セラミックス部門で行われていました。そこにはデーヴィッド・ターンブル博士率いる研究グループがあり、固体でどのようにして拡散が起こるのかということについて先駆的な研究を行っていました。私は、その退屈そうな研究への意欲を示したことで、そのグループに雇ってもらいました。

突然の行く手を阻む出来事が再び私の人生に思わぬ大きな変更をもたらしました。GEは、研究所を拡張するために、1954年夏の完成を目指して新棟を建設していました。ところが、9月に着任した時には、その研究棟はまだ完成していませんでした。私の居場所がなかったのです！9ヶ月間、拡散の研究を始めるための私の研究室がありませんでした。その間、私の研究机は、窓のない廊下を仕切ったところに置かれました。上司の皆さんは、私が研究を開始できないことに大変恐縮しておられました。何をするにもプレッシャーがなかったのです！勉強するにはなんとすばらしい機会でしょう！私は9ヶ月かけて新しい同僚たちの研究内容を知ることができ、彼らの役に立てることが分かりました。私には、彼らの問題を定式化し、解決する力があつたのです。私の研究室が完成した時、私は有用な理論モデルをつくる3つの論文を発表していました。パラダイムとなりうるシンプルな数学理論は有用で必要とされるものでしたが、これを編み出すことのできる人はほとんどいませんでした。私は、実験研究に加えて、モデリングの仕事を始めました。私はGEの数学者たちからの惜しみない助けを得て、徐々にスキルを高めていきました。次々と結果が出たことで、私は、行き詰ったプロジェクトを中止し、新しい着想を得た時にプロジェクトを立ち上げることができました。雇用される理由となった退屈な拡散の研究に戻ることは決してありませんでした。私は、7年後に、一般的な拡散の重要な方程式であるカーン・ヒリアード方程式を生み出したのですが、その道のりは多くの幸運な偶然によって遠回りしたものでした。京都賞の業績はこの途上で生まれました。

### スピノーダル分解とカーン・ヒリアード方程式への道

ターンブル・グループの主要研究テーマの一つは、元々の組成や構造とは異なる物質の粒子がどのようにしてできるのかというものでした。そのような粒子は、すべて

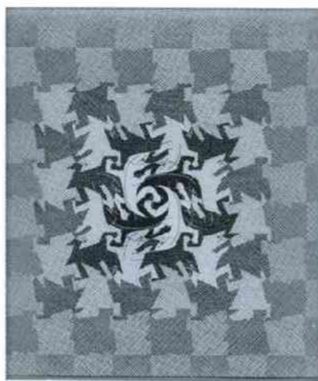


GEのターンブル・グループ、1957年。後列左から1人目がカーン、5人目がヒリアード、6人目がターンブル博士。10年以内にほとんどの研究者が一流の教授になった。  
Turnbull's group at GE in 1957. Cahn, Hilliard and Turnbull are, respectively, first, fifth and sixth from left in back row. Within a decade most of the scientists became leading professors.

acquired greater skills. With a steady stream of results, I could drop projects which were stalled and initiate projects when there was a new idea. I never returned to the boring diffusion work for which I had been hired. Seven years later I would devise the Cahn-Hilliard equation, which is an important equation for a common kind of diffusion, but the path to that was a circuitous one with much serendipity. The Kyoto Prize work occurred en route.

### The path to spinodal decomposition and the Cahn-Hilliard equation

One of the main research topics of Turnbull's group was how particles of matter arise that are different in composition and structure from what had been there before. It was tacitly assumed that all such particles must start small and then grow. "Nucleation" is an apt name for this; it describes the "birth" of a new "phase," a physically distinct and mechanically separable portion of matter, like for example, a new bubble of gas, a new droplet, a new crystal, even a new crack in a crystal, the "birth" of something physical, arising from an existing "matrix" phase. During solidification, solid metals nucleate and then grow from melts. Many alloys, ceramics, and plastics are hardened or given their properties by the precipitation within the solid of some of their chemical elements. Nucleation needed to be understood and controlled. David Turnbull was one of the world's leaders. We all believed that nucleation was the universal birth mechanism for starting any new phase.



関係のないタイル（合金化元素）を集めて小さなかたまりにすることは、チェス盤（物質）の性質に大きな影響を与える。（M.C. エッシャー）

The gathering together of the alien tiles (alloying elements) into small clusters greatly affects the properties of the chess board (a material). (M. C. Escher).

小さいところから始まり、そして成長するものと、それとなく考えられていました。「核生成」という名前がそれに相応しいものでした。すなわち、現存する「マトリックス」相から、例えば、新しいガス気泡、新しい液滴、新しい結晶、さらには結晶中の新しい亀裂のような、物理的性質が異なり機械的に分離可能な物質的なものの「誕生」、新しい「相」の「誕生」メカニズムを表現しているからです。凝固の過程で、固体金属が核となって溶融物から成長します。合金、セラミックス、合成樹脂の多くは、化学成分のいくつかが固体として析出することによって、硬さが増したり、特性を得たりします。従って、核生成についての理解と制御が必要でした。デーヴィッド・ターンブル博士は、その第一人者の一人でした。私たちは、全員、核生成は新しい相が生成される普遍的な誕生メカニズムであると信じていました。

核生成の速度論はいくつかの部分に分かれます。新しい相の物質が成長しようとする時、圧力を及ぼすことができなければなりません。それは熱力学的データで決定できます。この圧力は核生成する粒子を取り囲む表面を広げるために必要です。風船を膨らませる時、ある大きさに達すると息を吹き込むことが楽になりますが、核生成にはそれと似たところがあります。新しい粒子を取り囲む表面の引っ張り力は、表面張力と言いますが、成長を妨げます。表面張力は表面を作る働きで、核生成理論では量

The theory of nucleation kinetics has several parts. If the material of the new phase is to grow, it has to be able to exert a pressure, which can be determined from thermodynamic data. This pressure is needed to expand the surface surrounding the nucleating particle. Nucleation has some similarities to blowing up a balloon; the huffing and puffing become easier after a certain size is reached. The tension of the surface, called surface tension, surrounding the new particle resists the growth of the particle. Surface tension is the work of creating the surface, and is the hardest to measure quantity in nucleation theory. An error of a few percent can result in a hundred fold change in the prediction of the nucleation rate. It is almost impossible to measure for solid surfaces, although my colleagues tried many ways. Where estimates exist, predictions from nucleation theory most of the time find that nucleation is much too difficult for the nucleation rates that are observed. For a long time, scientists rationalized such observations by postulating that small particles and other unobservable small defects were the midwives of nucleation. Such a postulate is unscientific because it cannot be falsified.

Not everyone believed in nucleation theory. I arrived at GE at the end of a scientific polemic between David Turnbull and Prof G. Borelius of Sweden about how precipitation occurs in solid alloys of tin dissolved in solid lead when cooled to temperatures where the tin is supersaturated, that is, where more tin is dissolved in the lead than it could hold. Borelius believed that nucleation was so difficult that another process, made possible by a postulated condition, termed the spinodal, had to be involved. Beyond a spinodal a material is unstable and able somehow to change continuously into the precipitate. Borelius calculated the temperature where this continuous process should occur in solid alloys of lead and tin, and lead to the precipitation of tin. From indirect measurements of electrical resistance, he claimed that changes indeed began at that temperature. Turnbull found by observation under a microscopic that tin crystals nucleated and grew, depleting the lead crystals of tin. Since every part of the alloy remained unchanged until the growth front reached it, the material was clearly not unstable everywhere, even down to minus 40°C, well below the calculated spinodal. Borelius accepted these findings, and joined everyone who claimed that the spinodal was nonsense.

Turnbull's experiment created an unexpected important paradigm for low temperature processing. These temperatures were too low to explain the draining of tin from the solid lead. Grain boundaries, internal surfaces in the solid specimens,

的測定が困難を極めます。数パーセントのエラーが核生成速度予測に100倍もの変化になって現れます。私の同僚たちは、固体表面を測定する様々な方法を試みましたが、ほとんど測定不能です。推定値がある場合でも、核生成速度の理論的予測は、たいていの場合、実測した核生成速度を説明することができませんでした。長い間、科学者たちは、小さな粒子と他の観測できない小さな欠陥が、核生成を補助するものであると仮定することによって、矛盾を合理化していました。このような仮定は科学的ではありません。それは反証できないからです。

誰もが核生成理論を信じていたわけではありませんでした。私がGEに着任したのは、デーヴィッド・ターンブル博士とスウェーデンのG・ボレリウス教授の間の科学的な論争の終盤の頃でした。その議論とは、スズ鉛系において、合金が過飽和状態、つまり鉛が含むことができる以上にスズが溶け込んでいる状態の温度まで冷やしていった時に、鉛の固溶体に溶けたスズの固体合金の析出が如何にして起こるかについてでした。ボレリウス教授は、核生成が困難なので、スピノーダルという必要条件によって可能となる他のプロセスを伴わなければならないと考えていました。スピノーダルを越えると、物質は不安定になり、なぜか連続的に析出物へ変化します。ボレリウス教授は、この連続的なプロセスがスズ鉛固体合金で起こる温度を計算し、そしてスズを析出させました。電気抵抗の間接測定により、彼は、実際にその温度で変化が始まることを主張しました。ターンブル博士は、鉛の結晶からスズが激減し、スズの結晶が核を作って成長する様子を電子顕微鏡で観察しました。計算されたスピノーダル点よりも十分に低い $-40^{\circ}\text{C}$ に下げたところであっても、残された合金のどの部分も成長先端がそれに到達するまで変化しませんでした。つまり、その物質は、明らかにすべての部分が不安定ではありませんでした。ボレリウス教授はこれらの観察結果を受け入れ、スピノーダルはナンセンスであると主張する人々に加わりました。

ターンブル博士の実験は、非常に低い温度における固体拡散で、予想もしない重要なパラダイムを構築しました。その温度はあまりに低くて、固体の鉛からスズが分離する拡散を説明することができませんでした。固体の内部表面である粒界は、個体(の表面)をなめるように、効率の高い「短回路」拡散のように振舞っていると言えます。内部表面が動く原因を理解するのに、さらに40年かかりました。



J・ウィラード・ギブズ  
J. Willard Gibbs

acted as highly effective diffusion “short circuits” because they swept throughout the solid. It took another 40 years to understand what caused the internal surfaces to move.

### Nickel-Gold

Nothing in my background had taught me about either the spinodal or nucleation. In those early months at GE I had a chance to look a bit deeper. I concluded on quite fundamental grounds that Borelius' claim was fundamentally wrong and should not have been taken seriously. There could not be a spinodal in alloys of lead and tin. For thirty years there had been conflicts between believers in the spinodal and nucleation mechanisms, but that should not have happened. The name spinodal was coined by van der Waals in 1873 and generalized by J. Willard Gibbs in 1875 based on limits where necessary conditions for stability of a material failed. If they failed, the material would change continuously. In the same paper Gibbs developed a nucleation theory, including a theory for various types of midwives. He implied that nucleation would come into play only if there was no spinodal. Because most scientists thought that nucleation was catalyzed by dirt, it was not a subject for science. For fifty years the spinodal became the only topic studied, and the link to Gibbs was forgotten. The condition for the spinodal was easy to

## ニッケル金

私は、スピノーダルについても、核生成についても、全く知識はありませんでした。GE入社後間もない頃、私は、少し学ぶ機会があり、ボレリウス教授の主張は根本的に間違っており、重要視しなくてよいという非常に基本的な知識に基づいて結論付けを行いました。鉛スズ合金ではスピノーダルはあり得ません。30年の間、スピノーダルと核生成のメカニズムのそれぞれの信奉者の間では論争が続きましたが、起こるはずがありませんでした。スピノーダルは、1873年にファンデルワールスが命名し、1875年にJ・ウイラード・ギブズによって、物質が安定する必要条件が満たされない限界に基づいて一般化されました。条件が満たされない時、物質は連続して変化します。同じ論文で、ギブズは、何種類かの補助となるものの理論を含めて核生成の理論も発表しました。彼は、スピノーダルが起こらない場合に限って、核生成が関わってくると示唆しました。核生成は不純物が触媒として働くと考えた科学者がほとんどであったため、それは科学の対象とはなりません。その後50年間、スピノーダルのみが研究テーマとなり、ギブズとの関わりは忘れ去られました。スピノーダルの条件は、核生成が始まる点を誤って予測するのと似たようなもので、教えることは難しくありませんでした。予測が間違っていれば、その原因は不純物にあったかもしれないのです。1925年にヴォルマーとウェーバーが核生成速度に関する基本理論を提示した時、ギブズの核生成理論の再発見にも触れましたが、彼のより深い業績について知るようになった人はほとんどいませんでした。私は、スピノーダルを起こす合金を探していました。ニッケル (Ni) と金 (Au) は同じ結晶構造をしています。低温では、2つの状態があります。わずかなニッケルを溶解できる純金とわずかな金を溶解できる固体ニッケルです。単相にさらに注入しようとすると、第二相として過剰なものが析出します。温度を上げると相互の溶解度は増加します。840℃では、純金相と固体ニッケル相は同一となり、融合します。この温度と40%ニッケルの極限組成が臨界点を決定します。840℃以上では、ニッケルと金はどのような比率であっても互いに溶融します。すなわち完全な混和性を示します。スピノーダルが定義された通りに存在するなら、それは臨界組成点であり、840℃という臨界温度以下でなければなりません。

日常の研究が終わった後、私は、臨界濃度の金ニッケル合金を準備し、単一の固溶体を作るために840℃以上に加熱し、その後冷却し、合金がどのようにしてニッケル

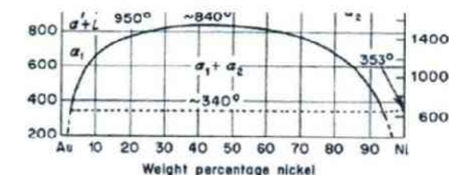
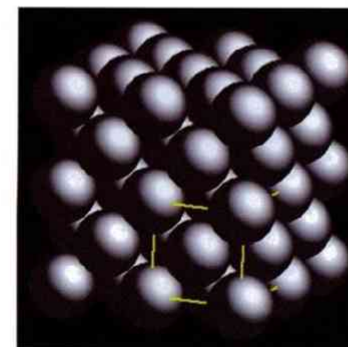


Fig. 14.7 Gold-nickel phase diagram. (From Carapella, Louis A., *ASM Metals Handbook*, 1948 ed.).

曲線の左右部分は、それぞれ純金へのニッケルの溶解度、固体ニッケルへの金の溶解度を示す。840℃と約40%ニッケルの臨界点で融合する。840℃以上ではニッケルと金は完全に混和性を示す。平衡している時、曲線より下の合金は金粒子とニッケル粒子に分解する。

The left and right hand parts of the curve show the solubilities of nickel in solid gold and gold in solid nickel, respectively. They merge at the critical point at 840°C and about 40% nickel. Above 840°C nickel and gold are completely miscible. At equilibrium alloy below the curve will decompose into a mixture of gold and nickel rich particles.

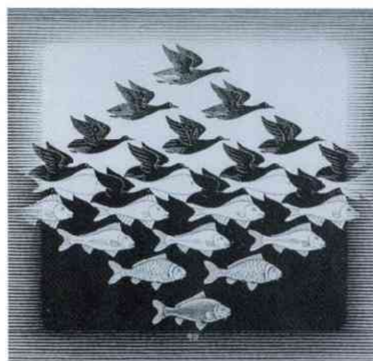


金とニッケルの結晶構造は同じである。但し、ニッケルの方が15%ほど小さい。合金は非常に大きな格子歪みを有する。これも幸運な偶然です！  
The crystal structures of Gold and Nickel are the same, but Nickel is about 15% smaller. Alloys have tremendous lattice distortions. More serendipity!



黒い部分は私が当初顕微鏡で観察したニッケル合金の結晶粒界で核生成された析出物。黒い部分の間に補助となるものの欠陥が後ろ側の曲線として現れている。白い斑点は変容しない準安定部分である。スピノーダルを示す形跡はない。

Precipitation in my Nickel-Gold alloy, shown in my early attempt at microscopy, as the black areas, nucleated at grain boundaries, the midwife defects peeking out as the back curved lines between black areas. The speckled white is untransformed and metastable. There is no evidence of the spinodal.



空と水の間の境界面を広げて、魚でも鳥でもないゾーンを作る。

(M.C. エッシャー)

Broadened the surface between sky and water by creating a zone that is neither fish nor fowl.

(M. C. Escher)

粒子と金粒子に分離していくかを観察しました。顕微鏡で観察する限り、それは鉛とスズの場合と全く変わりませんでした。あらゆる観察結果は（準）安定を示していました。核生成と成長が唯一のメカニズムでした。私も、他の研究者と同様、スピノーダルはナンセンスだと信じた。私たちは、できるはずであったスピノーダルの特徴である「界面」が確認されなかったことから間違いであると説明付けたのです。

私は他の研究に転換し、生産的であり続けようとしてしました。私は転位に関する講座を取りました。そして核生成のエネルギー障壁が消滅する条件を見つけ出し、転位に関する核成長理論の論文を書きました。この時、習っていた変分計算法を初めて使いました。当時、これは高等数学の一つで研究仲間の誰も習ったことがありませんでしたが、以来、それは材料理論で頻繁に使われる重要なツールの一つになりました。

### ジョン・ヒリアードと共同研究した拡散界面と核生成

1956年、GEは首尾よくすばらしい実験冶金学者を雇い入れました。ジョン・ヒリアードです。彼はリバプール大学で博士号を取得した後、MITで5年間研究をしていました。その間、彼は、固体の内部表面の表面張力に関する精密測定など、毎年、

teach as an approximate way for erroneously predicting where nucleation would begin. If a prediction failed, dirt could be blamed. In 1925, when Volmer and Weber proposed a primitive theory for nucleation kinetics, they mention rediscovering Gibbs' nucleation work, but few became familiar with his more profound accomplishments.

I looked for an alloy where a spinodal could occur. Nickel (Ni) and gold (Au) have the same crystal structure. At low temperatures there are two phases; solid gold which can dissolve a little bit of nickel and solid nickel which can dissolve a little bit of gold. If we try to accommodate more into a single phase, the excess will eventually appear as a second phase. As the temperature rises, the mutual solubilities increase. At a temperature of 840°C gold-rich and nickel rich phases become identical and merge. This temperature and the limiting compositions of about 40% nickel define the critical point. At and above 840°C nickel and gold can dissolve in each other in any proportion; they are completely miscible. If the spinodal existed as then defined, it had to be at the critical composition and below the critical temperature of 840°C.

When my lab was finished, I prepared alloys of gold and nickel with the critical concentration, heated them above 840°C to make a single solid solution and then cooled them and observed how the alloys transformed into separate nickel rich and gold rich particles. Under the microscope it was no different from lead and tin. All the evidence supported (meta) stability. Nucleation and growth were the only mechanisms. I joined everyone else and believed the spinodal was nonsense. We rationalized that it was wrong, because the spinodal criterion did not account "surfaces" that would have to be created.

I turned to other research and continued to be productive. I took a course on dislocation, and published a theory of nucleation on dislocations in which I found conditions for which the energy barrier to nucleation disappeared. It was my first use of variational calculus, which I had learned. This was then an advanced mathematics that none of my colleagues had learned. It has since become an important tool frequently used in materials theory.

### Diffuse interfaces and nucleation with John Hilliard

In 1956 GE managed to hire a great experimental metallurgist, John Hilliard. He had spent five years at MIT after his PhD from Liverpool. Every year during that

実験研究の独創的な方向性を生み出していました。ヒリアードと私は、関心を同じくするところがたくさんありました。彼の実験冶金学の知識と私が急速に確信を深めつつあった理論研究とが互いに補完し合いました。ほどなく私たちは共同研究を始めました。

表面張力を推算する理論は数多くありました。それに寄与する一つの要素は、急峻な表面が作られる時に変化する結合の数を数えて得られるエネルギーの単純な化学結合モデルに基づくもので、結合エネルギーと想定されるものでした。その寄与は表面の組成差の自乗に比例すると予測されました。この予測は簡単にできるもので、自乗差には普遍的妥当性があります。それはトーマス・ヤングが1805年に発見したのですが、現在もなお繰り返し再発見されています。私たちは1938年のリチャード・ベッカーの発見を知っただけでしたので、それを利用してGEでは予測していました。混ざり合わない物質、例えば水と油が接している時には、組成差は大きく変化することができないので、実験することは難しいことでした。物質の変化は結合エネルギーを変化させるのです。例外は臨界点近くで起こります。そこでは濃度比が急速に変化し、界面が消失する臨界温度でゼロになる傾向があります。実際の表面張力は組成比の自乗で予測したものよりもずっと速くゼロになることが1980年代から知られています。

ヒリアードと議論を進める初期段階で、私たちは表面張力を組成比の自乗に比例させることには基本的な欠点があることに気づいていました。界面を、組成の半分、つまりエネルギーの四分の一になるように2つの界面に分割すると、2つの界面の合計張力は半分になります。界面が広がるほどに合計した表面張力は低下します。界面のそれぞれの側の材料組成の間にある中間組成の物質は、より高いエネルギーを持ち、わずかに出現するはずです。しかし、2つの溶液が均一になる臨界点近くでは、この中間物質の余分なエネルギーは小さくなり、界面は非常に広くなるはずです。私たちは、臨界点でどのように混ざるのかを2つの溶液のエネルギーの単純なモデルを使い、それらの界面の特性を計算しました。それまでも同様の考えに基づく論文がいくつか出ていましたが、私たちの1958年の論文は今でも多く引用されています。

臨界点近くの表面張力と相のエネルギーについての適切なモデルによって、私たちは、核生成理論のためのすべての要素を手に入れました。2つの溶液が平衡となる条件下での単一の溶液を検討し、変分法を使って第二溶液のどのような液滴が臨界核になるかを計算しました。スピノーダルからかけ離れたところで、私たちは古典理論に合

period he had produced new imaginative directions for experimental work, including some fine measurements on the surface tension of internal surfaces of solids. Hilliard and I shared many interests. His knowledge of experimental metallurgy and my burgeoning confidence in theoretical work complemented each other. We soon began collaborating.

There were many theories for estimating surface tension. One factor contributing to it was based on a simple chemical bond model for the energy, obtained by counting the number of bonds that would be changed when an abrupt surface was created, and assuming a bond energy. This contribution was predicted to be proportional to the square of the composition difference across the surface. This estimate is easy to devise and the square of the difference has a universal plausibility. It is still rediscovered regularly, although Thomas Young discovered it in 1805. We knew only of its discovery by Richard Becker in 1938, and used it at GE for crude estimates because there was nothing else. It was hard to test because when two immiscible materials are in contact, say oil and water, the composition difference cannot be changed much. Changing the materials changes the bond energy. The exceptions are near critical points where concentration differences change rapidly and tend to zero at the critical temperature where surfaces disappear. It has been known since the 1890s that the measured surface tensions go to zero much faster than predicted by the square of the composition differences.

Early in my discussions with Hilliard we realized that letting the surface tension be proportional to the square of the composition difference has a basic flaw. If we split the surface into two surfaces, each with half the composition jump and thus a quarter of the energy, the combined tensions of the two surfaces would be halved. The further the surface is spread, the lower the combined surface tension would be. We developed a theory for what keeps it from spreading. Material with compositions intermediate between the compositions of material on each side of the surface would have a higher energy and should appear sparingly. However near a critical point where two solutions become identical this extra energy of intermediate material becomes small and surfaces should become very broad. We used a simple model for the energies of the two solutions, how they merged at the critical point, and computed the properties of the surface between them. Although there had been several earlier papers with this idea, our 1958 paper is still highly cited.

With a reasonable model for surface tension near a critical point and the energy

致する核を計算しました。それは、成長を続けると予測されたサイズをもつ第二溶液相の液滴、すなわち2つの溶液相の間の界面と整合する液滴の界面でした。しかし、元の溶液の条件がスピノーダルの条件に近づくにつれて、核生成へのエネルギー障壁はゼロに近づき、そして、核は徐々に大きく広がる雲となって、その中では第二溶液成分の濃縮度が減少していきます。私たちはなぜそのようなようになるのかが分からず、この結果を核生成理論と一致させようとしていました。スピノーダルを越えて、元の溶液は明らかに不安定で連続して変化しました。核生成にはエネルギー障壁はありませんでした。もし、それが第二溶液の液滴の誕生である核生成がどこでも起こるものであることを意味するならば、それはどのようなものなのでしょう。

より重要なことは、ニッケル金の実験結果と私たちの計算結果を一致させることでした。私の出した結論は、固溶体について私たちの溶液モデルにない何かがあるというものでした。ニッケル原子の半径は金より15%ほど小さいのです。従って、これらの原子が同じ結晶に適應するのは容易なことではなく、動き回ることが結晶中にストレスを発生させることは間違いありません。このような効果は溶液にはなく、私たちの採用したモデルを構成するものではありませんでした。それ以外に考えられませんでした。核生成の論文題名に「液体」という言葉を入れることは、但し書きとして無難なことでした。スピノーダルは、もはやナンセンスではなくなりましたが、次に何を為すべきかという手がかりはありませんでした。それは幸運な偶然を必要とする謎でした。

#### ケンブリッジ大学でのグッゲンハイム特別研究員として

GEは、学界から特に優秀な科学者数名を彼らの夏休みに私たちの研究所に招聘していました。私たちは何人かの研究者と終生の友情を結ぶことができました。例えば、私は、ブリストル大学のF・C・フランク、オックスフォード大学のJ・W・クリスチャン、そしてネヴィル・モットやジャック・ナッティングと共著論文を書きました。また、ケンブリッジ大学のアラン・コットレル、そしてM・H・コーエンとは、シカゴ大学時代からの知り合いです。キャヴェンディッシュ研究所のモットは、並みの研究者がこれほどの良い研究をしているのを見たことがないと言ったそうです。それは、GEの研究環境に対する賛辞でした。

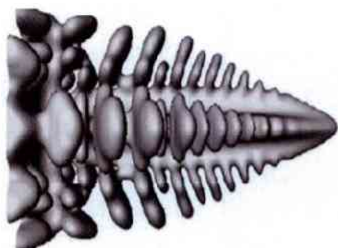
私は、一目置かれる冶金学者になりましたが、自分の知識と実験能力とのギャップ

of the phases, we had all the ingredients for a theory of nucleation. We consider a single solution under conditions where two solutions should be present at equilibrium, and used variational calculus to calculate what kind of droplet of the second solution would be a critical nucleus. Far away from the spinodal, we calculated nuclei that agreed with classical theory. They were droplets of the second solution phase, the surface of the droplets matched the surface between the two solution phases, had the predicted size to continue growing. However, as the conditions in the original solution approached those of the spinodal, the energy barriers to nucleation approached zero, and the nucleus became a cloud spread over an increasingly larger volume in which there was an ever smaller enrichment in the components of the second solution. We did not know what to make of this, and tried to reconcile this result with nucleation theory. Beyond the spinodal, the original solution was clearly unstable to continuous changes. There was no energy barrier to nucleation. If it meant that nucleation, the birth of droplets of the second solution, would take place everywhere, what would that look like?

A more serious matter was reconciling our computed results with my experiments on nickel and gold. I came to the conclusion that there was something about solids solutions that was missing from the model of our solutions. The radius of a nickel atom is about 15% smaller than that of gold; these atoms would have a hard time fitting into the same crystal, and moving them about would surely create stresses in the crystal. Such effects would not apply in liquid solutions and were not part of the model we had assumed. We had no other idea. Putting "liquids" into the title of the nucleation paper was in a safe caveat. The spinodal was no longer nonsense, but I had no clue what to do next. It was a puzzle that would require serendipitous excursions.

#### The Guggenheim Fellowship at Cambridge

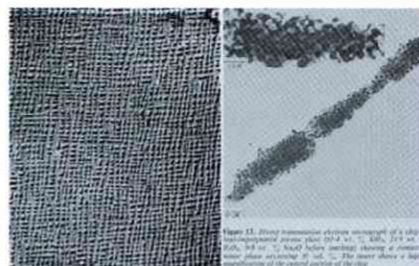
GE invited some of the best scientists from academia to spend their summers in our laboratory. We formed lifelong friendships with some of them, F. C. Frank from Bristol, J. W. Christian from Oxford, Neville Mott, Jack Nutting, with whom I wrote a paper, and Alan Cottrell from Cambridge, and M. H. Cohen, whom I had known in Chicago. Mott from the Cavendish Laboratory is reputed to have said of us that he has never seen so many mediocre scientists do such good work. It was a compliment to the research environment at GE.



強く過冷却された溶融中での純物質の樹枝状結晶成長の立体シミュレーション

©Elsevier 1994

3D simulation of dendritic growth of a pure substance in a highly undercooled melt, Reproduced with permission from [23], ©Elsevier 1994



スピノーダル分解の2つの事例。左側：立方晶のAlNiCo（アルニコ合金）の周期性は、3方向の弾性ソフトネスの効果を示している。右側：ガラス中では、全方向からの周期性は一つの相が取り除かれる錯綜した状態を作り出す。

Two cases of spinodal decomposition. On the left, the periodicity in cubic crystalline AlNiCo shows the effect of the three directions of elastic softness; in the glass on the right the periodicity from all directions create a labyrinth in which one phase can be leached.

を痛感していました。コーエンは、グッゲンハイム財団のフェローシップに応募してケンブリッジ大学に行くように勧めてくれました。そして、1959年の夏、産業界で働く科学者であったにも関わらず、私は運よく1960～1年のフェローシップを受賞することができました。

1960年9月、私はケンブリッジ大学の（ゴールドスミス研究所の古い建物内にあ）る冶金学部に着任しましたが、すぐに私の計画していたほとんどの研究ができないことを知りました。学部で、過去に大きな火災が2件起こっていたため、炉を一晩中動かすことは許可されませんでした。私の計画していた顕微鏡法による研究は、実験試料を何週間、何ヶ月と熱する必要があったのです。冶金学部の講義は定性的なもので、あまりに深みのないものでした。私はそのほかの可能性を捜し求めました。

ケンブリッジ大学の落ち着いた雰囲気の中で、未解決の問題や完了していない研究を再び上げる時間がありました。一学期には、学部外の講座で、偶然見つけた流体力学的不安定性と弾性の2科目を受講しました。GEで、私は「樹枝状結晶」を理解しようと努めていました。雪片のように針状の枝をもった針状の結晶で、通例、合金を铸造する時にできるものですが、铸造金属の特性に影響を与えます。流体力学的不安定性の講座では、枝状のものがどのようにして生じるのかということへの洞察が与えられるのではないかと期待していましたが、それどころか、物質がスピノーダル

In spite of becoming a respected metallurgist, I was keenly aware of the gaps in my knowledge and in my experimental skills. In the summer of 1959, Cohen suggested that I apply to the Guggenheim Foundation for a fellowship to go to Cambridge. I applied and in spite of being an industrial scientist, I was fortunate to be granted the Fellowship for 1960-1.

In September of 1960 I arrived at the Metallurgy Department (in the old building of the Goldsmith Laboratory) of Cambridge University and promptly found out that most of my research plans could not be carried out. There had been two major fires in the department. Consequently, no furnace was allowed to stay on overnight. My planned microscopy research involved heating specimens for weeks and months. The metallurgy courses were qualitative and much too superficial. I looked around for other opportunities.

In the calmer atmosphere of Cambridge, there was time to revisit unsolved problems and unfinished research. In my first term I serendipitously took two courses outside the department, Hydrodynamic Instability and Elasticity. At GE I had been trying to understand “dendrites,” needlelike crystals with needlelike branches, like snowflakes, which commonly occur during the casting of alloys and affect the properties of the cast metal. I had hoped that the course in hydrodynamic instability would give me insight into how the branches originated. Instead it showed me how to think about what happens when a material is inside the spinodal. The Cahn-Hilliard (CH) equation was then easily derived using variational calculus to be consistent with what we knew about diffusion and the energy contributions from gradients. Inside the spinodal the diffusion coefficient is negative; matter flow from regions of low concentration to ones with higher concentration. The picture predicted by this equation about what would happen inside the spinodal was very different from what I expected. The spinodal instability produces concentration waves that eventually give rise to particles periodically arrayed. Unlike the nucleation idea, these particles don’t starting out small and their surfaces sharpen late in the process.

In the elasticity course, I learned how to deal with the effects of the elastic stresses when spinodal decomposition occurs in a solid. There is no way for the energy from the elastic stresses to be diminished. Spinodal decomposition could occur in solids only when a reformulated stronger condition for the spinodal had been reached. Deeper cooling of the Nickel Gold alloys later revealed spinodal decomposition. Because elastic effects depend on direction in the crystal, spinodal

内にある時に何が起こるかということについての考え方を学びました。それによって、カーン・ヒリアード方程式は、拡散とエネルギー寄与について、私たちが持つ知識と一致する変分計算法を利用して、傾きから容易に導き出されました。スピノーダルの内では、拡散係数は負の値になります。つまり、低濃度域から高濃度域への物質流です。スピノーダル内部で起こっていることについてこの方程式で予測されたことは、私が予想していたこととは非常に違ったものでした。スピノーダル不安定性は濃度波を生み出し、最終的には周期的に配列された分子を生じさせます。核生成の考え方とは異なり、これらの分子は、小さなところから始まらず、過程の終わりにその界面が鮮明になります。

弾性の講座では、スピノーダル分解が固体で起こった場合の弾性応力をどのように扱うかについて学びました。エネルギーから弾性応力を減らせる方法はありません。スピノーダル分解が固体で起こるのは、スピノーダルのより強い条件が達成された時のみです。ニッケル金合金の深冷処理がのちにスピノーダル分解を示します。弾性効果は結晶方向に依存するため、スピノーダル分解は最も柔らかい結晶方向を選択します。組成変化と局所応力の相互作用はパラダイムとなり、それ自身が分野として形成されました。

スピノーダル分解された物質の微細構造がどのようになっているかを知ると、私たちは多くの事例を見つけ、特性を制御する理論を使うことができます。GEの研究仲間は、磁場でエージングを必要とする改良型永久磁石の特許を多数出願しました。スピノーダル分解はアロイやセラミックスの有用な構造を創り出す多くの応用法を見出したのです。

### 後方拡散の解決

正常拡散では、物質は濃度勾配に沿って濃度が高いところから低い方に向かって流れ落ちます。物質が正常拡散によってどのように広がっていくかは、補遺に示した拡散方程式として知られる方程式の解によって予測できます。しかし、究極的には、物質の初期分布は後にそれと同じ分布を示します。物質が後にどのような分布になるかを与えられても、方程式はどのようにしてそうなるのか、特に、どちらが先の分布であったかを説明できません。過去を解くことができない、つまり正常拡散は時間が経つと元に戻るために、後方拡散方程式は「不良設定」と呼ばれます。

decomposition chooses those directions in crystals known to be softest. The interaction between composition changes and local stresses has become a paradigm and a field of its own.

As soon as we knew what microstructure spinodally decomposed material would have, we could find many examples and use the theory to control the properties. GE colleagues wrote many patents for improved permanent magnets that required ageing in a magnetic field. Spinodal decomposition has found many applications in creating useful structures in alloys and ceramics.

### Solving backward diffusion

In normal diffusion, matter flows down the concentration gradient, that is, from where the concentration is higher to where it is lower. How matter will spread out by normal diffusion can be predicted by solutions to an equation known as the diffusion equation shown in the appendix. But infinitely many starting distributions of matter can give the same distribution at a later time. Given how matter is distributed at that later time, the equation cannot tell you how it got that way, specifically, which one was the earlier distribution? Because it cannot be solved for the past, that is, for normal diffusion going backward in time, the backward diffusion equation is called “ill posed.”

Because diffusion of heat and matter obey the same equation, the mathematics of this equation is highly developed. Whereas a fundamental law of thermodynamics, which even Einstein believed would never be overthrown, prohibits thermal diffusivity from being negative, the diffusion coefficient for matter can be negative. Heat cannot spontaneously flow from a cold temperature spot to a higher temperature spot, that is, “up the temperature gradient.” But matter is often attracted to the same kind of matter and then it can flow spontaneously from where its concentration is low to where it is high. The negative  $D$  found inside the spinodal, forward in time, is the same as backward diffusion. The problem for the equation going forward in time with a negative  $D$  is the same as for the equation with a normal positive  $D$  going backward in time. Both are ill posed. The Cahn-Hilliard equation has a solution for negativity  $D$  and is not ill posed. By accident, an equation of great interest to mathematicians and to researchers in many in other fields had been created. It was amazing serendipity.

熱と物質の拡散は同じ方程式に従うため、この方程式の数学は大いに発展しました。アインシュタインでさえ覆ることはないと思っていた熱力学の基本法則では、熱拡散率が負になることはありませんが、物質の拡散係数は負になることがあります。熱は、自然には、冷温点からより高い温度点に、いわゆる「温度勾配を上る」ことはできません。しかし、多くの場合、物質は同種の物質に引かれることがあり、その時には濃度の低いところから高いところへ自然に動きます。時間が経過すると、スピノーダル内の $(-D)$ は、後方拡散と同じです。時間の経過とともに $(-D)$ が増加する方程式の問題は、正常な $(+D)$ が時間とともに減少する方程式と同じ問題です。両者とも「不良設定」です。カーン・ヒリアード方程式は $D$ の陰性に対する対策があり、不良設定にはなりません。偶然ですが、数学者や他の多くの分野の研究者に大きな興味を持たせる方程式になりました。それはすばらしい思わぬ発見でした。

## 学界

人工衛星スプートニクは、冶金学の学者需要を増やしました。私が1961年にGEに戻った時には、私たちのグループの優れた科学者たちが引き抜かれているところでした。1962年に、デーヴィッド・ターンブルがハーバード大学へ、ジョン・ヒリアードがノースウェスタン大学へと、それぞれがGEを去っていきました。

デーヴィッド・ターンブル博士は、核生成の知識を利用して結晶の核生成を避けることで金属ガラスを作りました。博士は1986年に日本国際賞を受賞しています。ターンブル博士の授業でスピノーダルについて学んだ一人の宇宙論者は初期宇宙のスピノーダル分解についての論文を書きました。臨界点以上での私の解のように、初期宇宙は、拡散が正常であった時は均質でした。その時、宇宙は非常に熱く、原子運動は重力にほとんど影響されませんでした。宇宙が冷えると、重力が調和する温度に到達し、その後、原子運動のランダム部分を圧倒しました。密度勾配にある原子は、引っ張られて密度のより高い場所に向かって移動します。これが後方拡散で、スピノーダル分解の条件を満たします。この論文により、スピノーダル分解は原子から宇宙の規模にまで拡がり、時間のスケールも研究室から宇宙論者のスケールまで拡大しました。これほどの広がりをカバーする理論はほとんどありません！

ジョン・ヒリアードは、ノースウェスタン大学で学生たちと、スピノーダル分解と人工的に成分的に調整された出発物質についてカーン・ヒリアード方程式の検証と拡

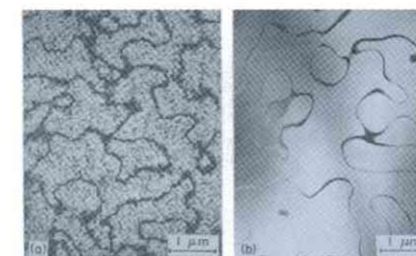


Fig. 4. Dark-field electron micrographs showing APB structures in Fe-25%Al and Fe-24%Al after identical ordering treatments at 904 K for 1200 s. The 25% alloy is within 4 K of its critical temperature and shows quenched-in critical fluctuations.

鉄アルミニウムの固体合金の薄い切片を観察し、臨界点への到達過程を見る。右側の24%合金は臨界点から約15X離れている。うねっている線は表面で（APB）と呼ばれる。APBは臨界点で消滅し、隣接領域が同一になり、溶け合う。

S・M・アレンの論文より

Looking through thin slices of solid iron-aluminum alloys to see an approach to a critical point. The 24% alloy on the right is about 15X further from the critical point. The wavy lines are surfaces, called (APB). The APB will disappear at the critical point, where the abutting regions become identical and merge. From the thesis of S. M. Allen.

## Academia

Sputnik increased the demand for academic metallurgists. When I returned to GE in 1961, the best scientists in our group were being lured away. In 1962 David Turnbull and John Hilliard left GE for Harvard University and Northwestern University, respectively.

David Turnbull used his knowledge of nucleation to make metallic glasses by avoiding nucleation of crystals. He won the Japan Prize in 1986. A cosmologist wrote a paper about the spinodal decomposition of the early universe after learning about the spinodal in Turnbull's class. Like my solutions above the critical point, the early universe was homogeneous when diffusion was normal; it was then so hot that atomic motion was hardly affected by gravity. As the universe cooled it reached temperatures where gravitational attraction matched and then overwhelmed the random part of atomic motion. Atoms in a density gradient would be attracted and move towards regions of higher density. This is backward diffusion, and satisfies the condition for spinodal decomposition. With that paper, spinodal decomposition has spanned the entire length scale from atomic to that of the universe and timescales from those of the laboratory to those of the cosmologist. Few theories can make

張に取り組む集中プログラムを始めました。その結果、彼は、ナノスケール材料のパイオニアになりました。同時に、材料科学のあらゆる理論的發展の先駆けとなるとともにすばらしい材料理論学者世代を養成しました。高等学校以降に正式な数学の教育を受けていない人間が、材料科学の数学理論を作り、教えることに高い力量と創造性を発揮したことは驚くべきことです。

ノースウェスタン大学数理科学部でヒリアードの研究仲間の一人であったスティーヴン・デーヴィスは、私がケンブリッジ大学時代に流体力学から学んだことから生み出された何かを流体力学に取り戻すために「対流カーン・ヒリアードモデル」の研究を10年前に始めました。

私はGEで非常に満足していましたが、親しい研究仲間のほとんどが大学に引き抜かれたため、1964年に、私もMITからの冶金・セラミックス学部（後の材料工学部）教授職就任の申し出を受けることにしました。ここでも、私は学生の頃学んだことのない大学院科目を教えていました。私は、他の大学からMITに来た学生から、他で教えられていたことを多く学びました。何が重要で、何が正しいかということについて一致しない部分もありました。教えるということは、科目全体を概観し、有益に学習できるように理解のずれを特定することでした。学期中は、ほとんど研究するための時間が取れませんでしたので、研究のできる短い夏を待ち望みました。私が十分に研究できる時間は、GE時代の12ヶ月からMITでは2ヶ月に縮まってしまったのです。私は、学生を通して研究を進めました。ジョン・モラルは、カーン・ヒリアード方程式の系を深く研究して多成分合金におけるスピノーダル分解の応用を大きく拡張しました。ジェームズ・ペーカーは、急冷凝固を研究し、溶質トラッピングを発見し、その後、凝固の熱力学を再検討しました。彼の業績のおかげで、私はNBSで急冷凝固法のプログラムを作ることができました。フランシス・ラルシェは、応力を受けた固体の熱力学を明確に説明しました。私たちは数十年間、共同研究をしました。ロン・ヘッディは、液相焼結と液-液臨界点付近の核生成について検討しました。サム・アレンは、より複雑な「三重臨界」点近くの鉄アルミニウム合金の原子配列の研究を行い、もう一つの重要な一般方程式、アレン・カーン方程式の定式化をしました。これは、菊池良一と1957年に始め、40年以上も続いた私の研究成果に基づいて、濃度の同じ領域と領域の間に形成される界面の生成と運動の時に起こる過程を扱ったものです。アレン・カーン方程式とカーン・ヒリアード方程式の系は、近年のフェーズ・フィールド研究のバックボーンになっています。私の学生たちの研究成果

that claim!

With his students at Northwestern, John Hilliard began an intensive program of testing and extending the Cahn-Hilliard equation both for spinodal decomposition and for normal diffusion in artificially compositionally modulated starting materials. As a result he became a pioneer in materials on the nanometer scale. But he also pioneered all kinds of theoretical advances in materials science and trained a generation of outstanding materials theorists. It is amazing that a man who had no formal training in mathematics past high school became highly skilled and innovative in creating and teaching mathematical theories for materials science.

Ten years ago Steven Davis, one of Hilliard colleagues in the Northwestern Mathematics Department started working on “Convective Cahn-Hilliard Models,” bringing back to hydrodynamics something created from what I learned from hydrodynamics at Cambridge.

I was very happy at GE, but with most of my close colleagues lured away by universities, in 1964 I succumbed to an offer of a full professorship at MIT in the Metallurgy and Ceramics Department, which later became Materials Science and Engineering. Again I was teaching graduate subjects I had never taken as a student. I learned a lot about what was taught elsewhere from students who had come to MIT from other institutions. There were disagreements about what was important and what was correct. Teaching meant surveying an entire subject and identifying the gaps in understanding that could be studied profitably. During term there was too little time for research, and I welcomed the short summer for doing research. I realized that my time for full-time research had shrunk from 12 months at GE to two months at MIT. I would do my research through my students. John Morall greatly expanded the applications of spinodal decomposition for multicomponent alloys by exploring a system of Cahn-Hilliard equations. James Baker studied rapid solidification and discovered solute trapping. He then re-examined the thermodynamics of solidification. Because of his work, I was able to create a program of rapid solidification processing at NBS. Francis Larché formulated a thermodynamics of stressed solids. We continued to collaborate for decades. Ron Heday examined liquid-phase sintering and also nucleation near a liquid-liquid critical point. Sam Allen studied ordering in iron-aluminum alloys near a more complex “tri-critical” point and formulated another important general equation, the Allen-Cahn equation. This dealt with processes that occurred during the creation and motion of surfaces that formed between regions that do not differ

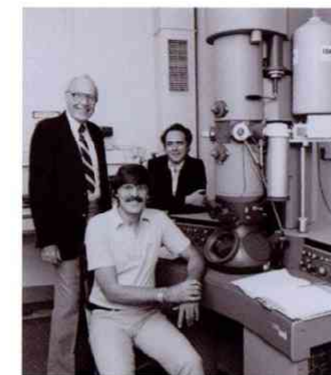
は胸躍るものでしたが、私は直接的な研究に関わる機会を逃してしまいました。

### 米国国立標準技術研究所 (NIST, 元のNBS)

1977年、私の妻はカーター大統領政権内での職を得ました。私は、彼女について行くことを決め、2年間の休暇を取ってNBSに着任しました。但し、月に一度はMITに戻って私の研究室の学生の監督指導をしました。NBSでは研究に専念できる大きな喜びがありました。最初の年、私は、臨界点近くでは常に完全なぬれがあることを理論的に示しました。それは臨界点を研究する者にとっての頭の痛い問題を説明しました。それ以来、臨界点付近の流体に関する多くの応用が見つかりました。アレンと私は、研究室で方程式についての予想を実験しました。2年が過ぎて、私はMITを退職し、NISTでさらに27年間勤めることになりました。

上級研究員として完全な自由を得た結果、NISTでの歳月は非常に実り多いものになりました。研究仲間とともに私はパラダイムの創造に携わっていました。特に、私は現在のパラダイムに相反すると思われる現象を専門的に扱うことができました。MITで7年目だった1971年に、私は1年間のサバティカル（研究休暇）を取り、イスラエルのハイファにあるイスラエル工科大学、通称テクニオンに客員教授として赴任しました。そこで、博士号取得のための研究最終年にあったダニエル・シェヒトマンに出会うという幸運に恵まれました。そして1980年にイスラエルに招聘教授として3ヶ月間滞在した時に、ダニエル・シェヒトマンに再会しました。その当時、彼はすでに教員職にあり、サバティカルを取得しようとしていました。NBSでは、急速凝固法の研究をしていて、どのような変わった物質ができるかを調べていました。私たちは電子顕微鏡の専門家を必要としましたので、ダニエル・シェヒトマンを招聘しました。NBSで研究をしている時に、ダニエル・シェヒトマンは、結晶学で受け入れられていたパラダイムではあり得ない結晶を発見しました。以降、国際結晶学連合は「結晶」の規則性定義に「準結晶」を含めるように変更しました。この発見により、ダニエル・シェヒトマンは、今年（2011年）のノーベル賞を受賞しました。

材料科学における数学の重要性はますます明白になっていました。そして、幸運なことに、私の研究は純粋数学および応用数学の両方の数学者に関心のある問題となっていました。アレン・カーン方程式とカーン・ヒリアード方程式は、数学者の多くの命題の対象になりました。この二つの方程式に基づく「フェーズ・フィールド」法



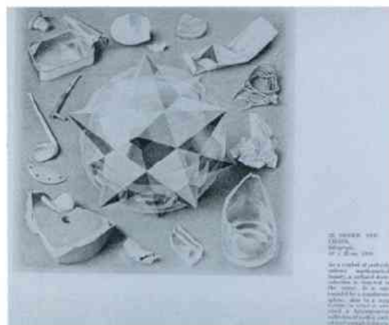
2011年ノーベル賞受賞者のダニエル・シェヒトマン。  
1984年、NISTの電子顕微鏡室にて。論文共著者の  
カーンとデニス・グラティアスと一緒に。  
2011 Nobel Laureate Dan Shechtman in 1984 in the  
electron microscope room at NIST with coauthors  
Cahn and Denis Gratias.

in concentration, based on my work with Ryoichi Kikuchi which began in 1957 and continued for more than forty years. Systems of the Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations are the backbone of modern phase field studies. The work of my students was exciting for me, but I missed being directly involved in research.

### National Institute of Standards and Technology (NIST, formerly NBS)

In 1977 my wife took a job in the administration of President Carter. I decided to follow her and to come to NBS for a two-year leave of absence, continuing the supervision of my students with monthly trips to MIT. I found I enjoyed doing research full-time immensely. In the first year I showed theoretically that there would always be perfect wetting near critical points. It explained a vexing problem for critical point researchers. Since then fluids near a critical point have found many applications. Allen and I tested predictions about the equation in the laboratory. After two years, I resigned from MIT and stayed at NIST for another 27 years.

As a Senior Fellow, I had complete freedom and the years at NIST were very productive. My colleagues and I were creating paradigms. In particular, I could specialize in phenomena that seemed to contradict existing paradigms. In my



「完全に順序化された数学的な美のシンボル」である  
エッシャーの十二面体の五回対称性は、結晶学者に  
カオスを生み出したかもしれない。  
The five-fold symmetry of Escher's dodecahedron, "a  
symbol of perfectly ordered mathematical beauty"  
would have created chaos among crystallographers.

は、移動界面問題の強力なツールになりました。最初のこのような研究成果の一つは、小林亮によるもので、アレン・カーン、カーン・ヒリアードの二つの方程式を使った計算が樹枝状結晶を分岐する結果をもたらしました。私がケンブリッジ大学で樹枝状結晶問題について諦めてから20年経って、私の研究成果がその研究のツールになったのです。これも幸運な偶然です。

私は、数学者との共同研究をずいぶん行いました。そして材料科学にとって数学者がどれほど価値ある人たちであるかに驚かされてきました。材料科学者の理論の多くは、物理的問題を単純化するもので、数学に似ています。実験とそのような理論との食い違いを調べる時、その問題が単純化された物理にあるのか、それとも数学的近似法にあるのかが分かりません。数学者と研究を進める時には、物理を単純化する必要はないのかもしれませんが。自然は複雑な状況から単純な結果を示すことがよくあります。このように、物理を単純化することで実際には数学をより難しくする問題があることに驚くことはありません。数学者の否定的な結論でさえ有益なのです。私が定式化した方程式に解がないと言われたとしたら、私は見逃されている物理を探さなければならぬのです。私たちは問題についての式を数学者に示すことができ、またさらなる近似を行わずに結果を得ることができます。もしそれらの結果が実際に観察されたことと異なるのであれば、私たちの式がこの問題に対して不適切であるということになるのです。

seventh year 1971 at MIT I had taken a sabbatical year as a visiting professor at the Israeli Institute of Technology, the Technion, in Haifa, Israel. There I was fortunate to meet Dan Shechtman, who was in his last year of study for his PhD. During a three-month visiting professorship to Israel in 1980 I became reacquainted with Dan Shechtman, who was now a faculty member and ready for a sabbatical. At NBS we were working on rapid solidification processing and exploring what unusual materials this process could make. We needed an electron microscopist and I invited Dan Shechtman to work with us. While working at NBS, Dan Shechtman discovered a crystal that was forbidden by the accepted paradigm of crystallography. The International Union of Crystallography has since changed the definition of "crystal" rules to include the "quasi (periodic) crystals". This year Dan Shechtman won the Nobel Prize for this discovery.

The importance of mathematics in materials science was becoming increasingly apparent, and I was fortunate that my research has led to problems of interest to both pure and applied mathematicians. Both the Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations have been the subject of dozens of theses in mathematics. The "phase-field" method, based on these two equations, has been a powerful tool for moving-boundary problems. One of the first such studies, by Ryo Kobayashi, showed that calculations with an AC-CH pair of equations resulted in branching dendrites. Twenty years after I had given up on the dendrite problem in Cambridge, my research provided the tools for studying it. Serendipity again.

I have done much collaboration with mathematicians, and I continue to be amazed how valuable they are to materials science. Many theories done by materials scientist simplify the physical problem and approximate the mathematics. When we see a discrepancy between an experiment and such a theory, we do not know whether the problem is in the simplified physics or in the mathematical approximations. When working with a mathematician, we may not need to simplify the physics. Nature often shows us simple results from complicated situations. Thus we should not be surprised that there are subjects where simplifying the physics actually makes the mathematics more difficult. Even negative results from mathematicians are useful. If I am told that the equation I have formulated has no solution, I have to look for the missing physics. We can give our formulation of a problem to a mathematician and obtain results without further approximation. If those results are different from what is observed, we know that our formulation is not appropriate for this problem.

プロセスや現象を精度よくシミュレーションする私たちの能力は驚くほどの速さで高まっています。私の研究仲間は「理論・計算材料科学センター」を設立し、20年以上にわたって、最高水準の計算論的アプローチを開発、利用し、産官学の研究に提供できるようにしてきました。そのホームページ <http://www.nist.gov/mml/ctcms/> は産業界に役立つ解決可能な問題の見事な、そして役に立つコレクションになっています。

私は自分の研究に大変満足しています。不可解な研究と思われていたものからどれほど多くの進歩があったか、また冶金学の問題からどれほど幅広い問題に発展していったかということに驚いています。パラダイムを構築する分野の研究に携わってこられたことは素晴らしいことでした。依然として、人類が明らかにしていない問題が誰かを待っています。世界中の素晴らしい研究で、分野は拡大していますが、それはまだまだ平等に与えられたものです。私たちはお互いに非常に協力的です。科学者は仲間を歓迎し、ブレークスルーに価値を見出します。

最後になりましたが、多くの国々の、そして複数の学問分野の100人を越える論文共著者の皆さんに感謝したいと思います。何年にもわたって助けていただき、貢献をしてくださいました。大変お世話になりました。この素晴らしい高尚な京都賞によって彼らの業績も認められ、多くの人たちが喜びを表してくださいました。

#### 補遺：方程式—興味のある方へ

Dが定数であれば、方程式は線形となり、解くことは容易です。

$$(\partial/\partial t) u = D \nabla^2 u,$$

uはある位置と時間における濃度、 $(\partial/\partial t) u$ はある位置における時間に対する濃度変化を示し、 $\nabla u$ はuの傾き、 $\nabla^2 u$ はuの傾きの発散を表します。両者ともその位置近傍でuがどの程度異なるかの値を示します。Dは拡散係数と呼ばれ、拡散の起こる速さを表します。Dは私がシカゴ時代に苦労して測定しようとしたものです。一般的なケースのようにDがuに依存するならば、

$$(\partial/\partial t) u = \nabla [D \nabla u],$$

Our ability to simulate processes and phenomena with accuracy grew at an amazing pace. My colleagues established the “Center for Theoretical and Computational Materials Science” which for more than twenty years has developed and used state of the art computational approaches and helped to make it available to industrial, government, and academic research. Their website, <http://www.nist.gov/mml/ctcms/>, is an amazing and helpful collection of solvable problems useful to industry.

I have found my research very gratifying. I am amazed how many advances came from what seemed arcane research, and how wide the range of topics that grew out of metallurgical problems has been. It has been wonderful working in a paradigm building field. There are still many unexplored topics waiting for someone. The field has become larger with excellent research all over the world, but it is still very collegial. We are very supportive of each other. Scientists welcome colleagues, and value breakthroughs.

Lastly I want to thank my more than 100 coauthors from more than a dozen countries and in several disciplines, who have helped me over the years and continue to contribute. I owe them much. Many have expressed their joy at the recognition of their work implied by this amazing and generous Kyoto Prize.

#### Appendix: The equations for those who want to see them

If D is a constant, the equation is linear and easy to solve

$$(\partial/\partial t) u = D \nabla^2 u,$$

where u is the concentration at a spot and time,  $(\partial/\partial t) u$  is how rapidly u at that spot changes with time,  $\nabla u$  is the gradient of u,  $\nabla^2 u$  is the divergence of the gradient of u. Both are measures of how different u is in the vicinity of the spot. D is called the diffusion coefficient which quantifies how rapidly diffusion occurs. D is what I tried to measure so laboriously in Chicago. If, as is usually the case, D depends on u,

$$(\partial/\partial t) u = \nabla [D \nabla u],$$

given any distribution of matter, solution to these equations will tell how it

となります。

物質分布が与えられれば、これらの方程式の解は、将来どのように分布するかを示してくれます。一般的に、より均一に分布するようになります。

しかし、究極的には、過去の分布の多くは現在の分布と同じものを与えられます。物質の現在の分布が与えられる時、方程式は、特に以前の分布からどうしてそのようになったのかを示すことができません。なぜなら過去について解が得られないからです。すなわち、正常分布が時間の経過と共に後方に進む時、後方拡散分布は「不良設定」と呼ばれます。

拡散方程式に4次の項を追加するとカーン・ヒリアード方程式になり、正と負のDについて解を与えます。

$$(\partial/\partial t) u = \nabla [D(u) \nabla u] - \varepsilon^2 \nabla^4 u,$$

$\varepsilon$  が短い距離であれば、それぞれの場合のその大きさは、実験からでも理論からでも得ることができます。

will be distributed in the future, usually becoming more uniformly distributed.

But infinitely many previous distributions can give the same current distribution. Given how matter is distributed now, the equation cannot tell you how it got that way, specifically from which earlier distribution. Because it cannot be solved for the past, that is, for normal diffusion going backward in time, the backward diffusion equation is called “ill posed.”

Adding a fourth-order term to the diffusion equation converts it into the Cahn-Hilliard equation, which has solutions forward in time for positive and negative D,

$$(\partial/\partial t) u = \nabla [D(u) \nabla u] - \varepsilon^2 \nabla^4 u,$$

where  $\varepsilon$  is a small distance, whose magnitude for each case can be obtained from experiment and/or theory.

稲盛財団 2011——第27回京都賞と助成金

発 行 2013年4月20日

制 作 公益財団法人 稲盛財団

〒600-8411 京都市下京区烏丸通四条下ル水銀屋町620番地

Phone: 075-353-7272 Fax: 075-353-7270

E-mail [admin@inamori-f.or.jp](mailto:admin@inamori-f.or.jp) URL <http://www.inamori-f.or.jp/>

**ISBN4-900663-27-1 C0000**