

## 材料のマルチスケールモデリング



技術解説

尾方 成信\*

Development and Application of Multiscale Materials Modeling

Key Words : Structural Materials, Multiscale Modeling, Spatial- and Temporal-Scales

### はじめに

複数の時間・空間スケールが互いに影響しながら発現するマルチスケール現象をモデル化し、それに基づくシミュレーションや実験によって現象の理解とその応用を目指すマルチスケールモデリングは、1980年代頃から盛んになり、その後計算機やシミュレーション技法の発達、実験・観察技法の発達とともに大きく発展してきた。原子・分子から地球・宇宙規模の現象に至るまで、興味深く予測が難しい非線形現象は、大抵スケール間の相関が現象の鍵を握っており、マルチスケールモデリングはほとんどすべての工学・理学分野で取り組まれてきたと言っても過言ではない。私自身が専門としない分野の成果の中にも、個人的に興味深いと思うものが多くあり、本当はそれらすべてを紹介したいという衝動に駆られるが、紙面の都合もあり、本稿では、私が取り組んできた材料のマルチスケールモデリング (Multiscale Materials Modeling)、中でも構造材料のマルチスケールモデリングについて、その現状を紹介したいと思う。

### 材料のマルチスケールモデリングの最近の動向

材料のマルチスケールモデリングの最近の動向を端的に示すためにまず、近年行われた国際会議と関連のハンドブックを紹介したい。

昨年2018年10月28日から11月2日まで、大阪中之島の大阪国際会議場において第9回材料のマルチスケールモデリングに関する国際会議 (MMM2018) [1] を、大阪大学工学研究科 濫谷陽二教授、金沢大学理工研究域 下川智嗣教授と私の3名が議長・事務長を務めて開催した。本会議は2002年にイギリスロンドンで第1回が開催され、その後2年ごとに米国、欧州、アジアで開催されている会議である。今回我々の会議提案が採択され、日本で初開催となった。欧米から地理的に遠い日本での開催ということもあり、参加者数の減少を危惧する声もあったが、ふたをあげてみると、参加者は630名を数え、過去最大規模となった。加えて、参加者のうち500名近くが海外からの参加者であり、米国、ドイツ、フランス、中国をはじめとする40に及ぶ国と地域から多数の参加者を集めた。世界的に材料のマルチスケールモデリングに興味を持ち、これに携わる研究者人口が拡大していることがうかがえる。本会議は15のシンポジウムで構成された。これらは一般から提案を募り、そのうちから厳選したものであり、各シンポジウムの話題がそのまま現在の研究者の興味の対象や最先端トピックを反映したものになっている。具体的な各シンポジウムのタイトルを以下に示す。

- A) Advances in Materials Theory for Multiscale Modeling
- B) Challenges in the Multiscale Modeling of Radiation Effects in Nuclear Materials
- C) Crystal Plasticity: From Electrons to Dislocation Microstructure
- D) Data-Driven and Physics-Informed Materials Discovery and Design
- E) Deformation and Fracture Mechanism of Materials



\* Shigenobu OGATA

1969年1月生まれ  
大阪大学大学院 工学研究科 機械工学  
専攻博士後期課程 (1995年中退)  
現在、大阪大学大学院 基礎工学研究科  
機能創成専攻 教授 博士(工学)  
E-mail : ogata@me.es.osaka-u.ac.jp



図1 第9回材料のマルチスケールモデリングに関する国際会議 [1]。

- F) From Microstructure to Properties: Mechanisms, Microstructure, Manufacturing
- G) Modeling Mechanical Behavior of Materials under Harsh Environments
- H) Multiscale Mechanics of Polymers, Soft Matter and Network Materials
- I) Multiscale Modeling of Grain Boundary Dynamics, Grain Growth and Polycrystal Plasticity
- J) Multiscale Modeling of Heterogeneous Layered Media
- K) Multiscale Simulations of Catastrophic Phenomena: Toward Bridging between Materials Fracture and Earthquake
- L) Structure, Statistics and Mechanics in Crystal Dislocation Plasticity
- M) Time- and History-Dependent Material Properties
- N) Towards Experimentally Relevant Time Scales: Methods for Extending Atomistic Simulation Times and Their Applications in Material Science
- O) Tribology and Interface: Multi-Scale, Multi-Physics, and Multi-Chemistry Phenomena in Friction, Lubrication, Wear, and Adhesion

材料にターゲットを絞った会議ではあるが、それでも内容が多岐にわたっていることがわかると思う。残念ながら内容の詳細までをすべて紹介することはできないが、シンポジウムのタイトルを眺めるだけでも、マルチスケールモデリングの理論、極限環境下での材料挙動、材料劣化、マイクロ材料組織と力学

特性、時間マルチスケールモデリング、履歴依存材料特性、ソフトマターなどの複雑材料、塑性と破壊、摩擦と地震、データ駆動型の材料開発とマルチスケールモデリングとの融合、などいくつかの興味深いキーワードが浮かび上がってくる。この中で、特に近年になって活発になっているものに、1) 時間粗視化によって長時間の現象を捉えようとする時間スケールのマルチスケールモデリング、2) 摩擦や地震のみならず材料の塑性変形や破壊でも観察されることがわかってきたスケール不変性を示すべき乗則、3) マルチスケールモデリングの次のステップとして、データサイエンスを援用したデータ駆動型の材料開発、がある。1) については後ほど述べるが、2)、3) の詳細については是非ホームページ [1] をご覧いただき、各講演のタイトルやそのアブストラクトを参照いただきたい。

一方、材料モデリングのハンドブック (Handbook of Materials Science) が2006年に出版されている [2]。全体で3000ページになんなんとする大著であり、当時の最先端の情報を集めたものである。前半はマルチスケールモデリングの手法に関する記述、後半は材料中に発生する現象や事象のモデル化についての記述がなされている。これには筆者もささやかながら寄稿させていただいている。手法に関しては、電子論のスケール、原子論のスケール、メゾ・連続体スケールとスケール別に書かれたものに加え、一般的なマルチスケールモデリングの数理についても書かれている。モデル化に関しては、速度論が支配する事象、欠陥、微細構造、流体、ソフトマターのそれぞれのモデル化について書かれている。実はこのハンドブックが大幅に改訂され、まもなく発刊される予定となっている [3]。十数年の間において出版される最新版には冒頭、

“Since its first publication in 2006 it has set a standard toward defining the broad community and stimulating its growth. The second edition reflects the significant developments that have occurred in all aspects of computational materials research, ranging from fundamental concepts to increasingly more realistic models and more powerful multiscale simulation methods in the intervening 10 years.

• *Broaden* the scope of HMM to include challenges and opportunities in emerging areas of

interdisciplinary interest.

・ *Focus on applications to demonstrate and expand on the capabilities of current models and simulation methods. [3]*”とのメッセージが書かれており、この10年で、モデルについてはより現実的に、手法もより強力になったとしている。またこの最新版では、マルチスケールモデリングの応用についての記述をより強調したとしており、マルチスケールモデリングは発展段階を終えて、応用段階に移行しつつあることを示唆している。

以上の国際会議とハンドブックの内容からもわかるように、材料のマルチスケールモデリングは特にここ10年の間に急速に発展し、今では材料研究の実用的な手段の一つとしての地位を確立したと言っても過言ではない。

なお過去の発展の経緯から、材料のマルチスケールモデリングといえば、計算機シミュレーションを意味すると思われがちであるが、モデリングとシミュレーションは異なる概念である。シミュレーションはモデルに基づいて実施するひとつの解析手段である。様々なスケールでの実験や観察による解析も、シミュレーションと同様に、或いはそれ以上に、マルチスケールモデリング研究を進めるにあたり重要な解析手段である。

### 構造材料のマルチスケール性と求められる特性

先に材料マルチスケールモデリングがより実用的な対象へと拡大していることを紹介した。実用的な材料の中でも最も困難なモデリング対象のひとつが構造材料ではないかと思う。構造材料は構造物を支え保つことをその機能とする材料である。具体的には、強度、延性、靱性、耐熱性、耐疲労性、耐食性などが求められる特性となる。構造材料は一般的に結晶粒、析出物、転位組織など内部に様々な特徴長さを有する組織や欠陥を有している。さらには、極めて短時間で生じるき裂進展などの現象から非常長時間にわたる腐食や疲労といった現象にいたるまで、様々な時定数の現象を内発しうる。したがって、そのモデル化には広範囲の時空間スケールを同時に考慮する必要がある。ほとんどの場合、材料特性の起源は、材料内部の原子配置、原子結合、原子運動など原子・電子レベルの時空間事象にある。しかし構造材料のようにマルチスケール性が強い場合、原子

レベルの時空間事象だけをつぶさに調べたとしても、解析対象となる強度や延性などのマクロ特性を的確に予測することは難しい（ある程度ならば予測することは可能であるが）。これは、スケール間の非線形性の強い相互作用が、スケールごとに特徴のある挙動を生み出し、それが積み重なってマクロ特性を決定していることが原因となっている。つまり、スケール不変性が成立しないことが、単純な線形予測を困難にしている。現在までに開発された優れた構造材料の多くは理論的に設計されたものではなく、主として開発者の経験やひらめきによって創製されたものである。しかし、今後さらに優れた構造材料が効率良く開発・設計されていくためには、その指針の構築が不可欠である。それを実現する手段の一つとしてマルチスケールモデリングに期待が集まっている。

ここでひとつ重要なことは、簡単に特性が予測できないということは、構造材料の開発・設計にとって確かに良いことではないが、同時にまだ我々がすべてを見渡すことができていない可能性があるということであり、未知の優れた構造材料の存在を期待させるものである。

強度、延性、靱性、耐熱性、耐疲労性、耐食性などのすべてに優れた構造材料を創製することが理想である。しかし残念ながら、そのいくつかは互いにトレードオフの関係にある。たとえば、強度の高い材料は大抵腐食環境下で脆い。耐熱性の高い材料も延性の乏しいことが多い。強度と延性も幅広い材料系にわたってトレードオフの関係がみられる。ダイヤモンドやセラミックス材料は強度が高いが延性に乏しい、ポリマー材料の多くは延性に優れているが強度が出ない。一般的な金属（合金）はその中間に位置するが、合金化していない純金属は延性に優れるが極めて強度が低い。合金化することで比較的容易に強度を上げることができるが、それにより一般的には延性が低下する。強度と延性・靱性の両立というのは端的に言えば、強くてかつなかなか壊れないということであり、工業的に極めて重要な因子である。では強度と延性を高次元で両立する材料をつくることはできないのかというと、決してそうではなく、近年、強度と延性を両立する材料が提案されている。たとえば、異なる結晶サイズを同時に含んだナノ結晶材料 [4] や、4-5種の元素が同じ割合で

含まれるハイエントロピー合金 [5] などがある。前者はナノ組織を積極的に制御することによって生まれた材料であり、大きな結晶粒の間に小さな結晶を配置することで強度と延性を両立することに成功している。後者は原子配置のランダム性によって、面欠陥のエネルギーを低減させ、それによって変形途中に面欠陥やナノ組織がダイナミックに生成され変化していくことで、変形のしやすさを適切に制御して強度と延性を両立している（注：他のメカニズムも提案されている）。これらに共通するのは材料の塑性変形を担う転位や双晶の生成や運動を、その上位スケールのマイクロ組織によって絶妙に制御することに成功している点である。つまり材料のマルチスケール性を最大限に利用した設計になっている。この変形メカニズムは材料が創製された後にマルチスケールモデリングとそれに基づくシミュレーションや実験観察によって解明されたものであり、材料を創製する段階で具体的なメカニズムはわかっていなかった。しかし、やはり材料を開発・設計するものとしては、このような材料を実験以前に理論的に予測して創製することが理想である。そのためにはまず、的確なマルチスケールモデリングによってこれらの特性が発現するメカニズムを根源的に理解し、それに基づいて材料設計指針を構築することが必要である。

### 構造材料のマルチスケールモデリングの例

ここでは筆者がかかわった研究を中心に、構造材料のマルチスケールモデリングの例を紹介する。

まず空間マルチスケールモデリングを紹介する。空間マルチスケールモデリングはその歴史も古く、大きく分類して2つの戦略がある。1つは重要なイベントが発生する場所を高精度なモデルで解析し、それ以外を粗視化したモデルで解析する方法、もう一つは高精度なモデルによる解析で材料の構成関係をあらかじめ導いておいて、それに基づく粗視化モデルで目的の材料の挙動を解析する方法である。これらはモデル化する解析対象によって使い分ければ良いが、前者は例えばき裂進展の問題などに適用されてきた。具体的には、き裂先端を原子モデルで解析し、き裂先端から比較的になれた部分を線形弾性連続体モデルで粗視化した解析がなされている [6]。これに対して筆者らは、後者の手法を使

ってナノ構造体の強度試験との連携で材料の理想強度の研究を実施した。中国の実験グループとの共同研究で、欠陥を含まない材料の強度、すなわち理想強度がいくらになるのかを実測する目的で鉄のナノ粒子の圧壊試験を実施した [7]。表面や欠陥の影響を完全に排除した材料の理想強度を測定するのはひとつのチャレンジである。理想強度 [8] を測定するには内部欠陥の存在を排除する必要があるため、試験片をナノサイズにする必要があるが、ナノサイズにすると今度は表面の影響が顕れて、理想強度を測定することにならない。そこで我々は表面が酸化された様々なサイズの鉄ナノ粒子を用いた圧壊実験を実施した。粒子サイズを小さくしていくと、ある粒子サイズまでは圧壊に必要な力が増加するが、それ以下では一定になることがわかった。一定になるということは強度の上限に到達したと考えられ、その力が鉄の理想強度に対応しているのではないかと推測された。それを確かめるために、空間マルチスケールモデリングを実施して、ナノ粒子の中の応力分布を調べた。具体的なモデリング手法としては、第一原理電子状態計算を用いて鉄結晶の変形とそのエネルギー変化から鉄結晶の非線形弾性の応力-ひず

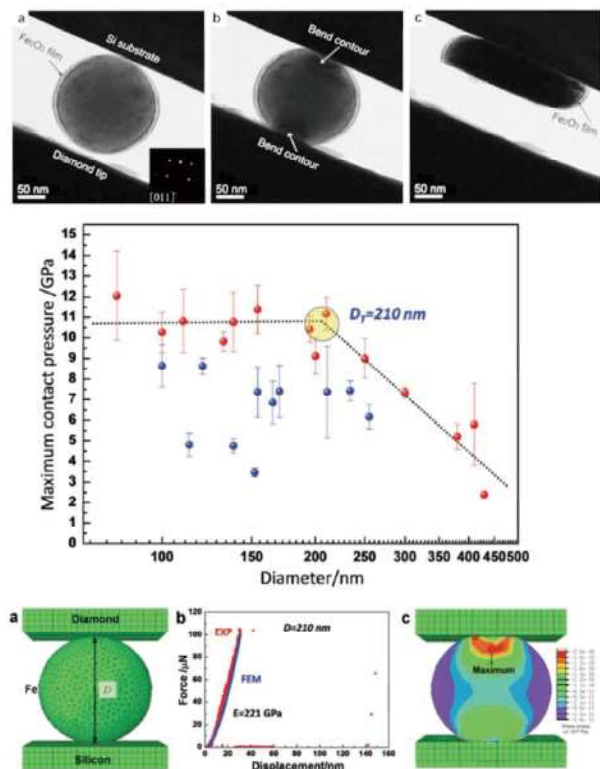


図2 鉄ナノ粒子圧壊試験とそれにより得られた強度。マルチスケール有限要素法による応力分布解析 [7]。



み関係をデータベース化し、それに基づく非線形弾性の有限要素法を実施した。荷重を受けて非線形弾性変形している鉄ナノ粒子中の応力分布を解析したところ、ナノ粒子内部で確かに最大せん断応力が発生し、その応力が鉄の理想強度と一致していることがわかった。すなわち、この試験で理想強度を測定していることが示され、材料の理想強度の測定手段の一つを提案できた。

次に時間マルチスケールモデリングの例について紹介する。こちらは空間マルチスケールモデリングよりも歴史が浅く、10年ほど前から盛んになってきた。基本的な戦略は解析の空間スケールをミクロスケールに維持しつつも時間スケールを拡張することで、長時間のミクロ現象解析を行うことである。たとえば欠陥の運動や生成など、材料で発生する多くの現象は原子スケールのミクロ現象であるが、それと同時に熱活性化過程でもあり、低温、低応力下では現象発生までに長い時間を要することが多い。原子スケールの解析は解析できる時間スケールが数ナノやマイクロ秒程度に限られるため、このような長時間のプロセスを解析することはできない。一般的なシミュレーション手法は空間と時間スケールが連動しており、時間スケールをアップすれば同時に空間的にも粗視化した解析になってしまう。

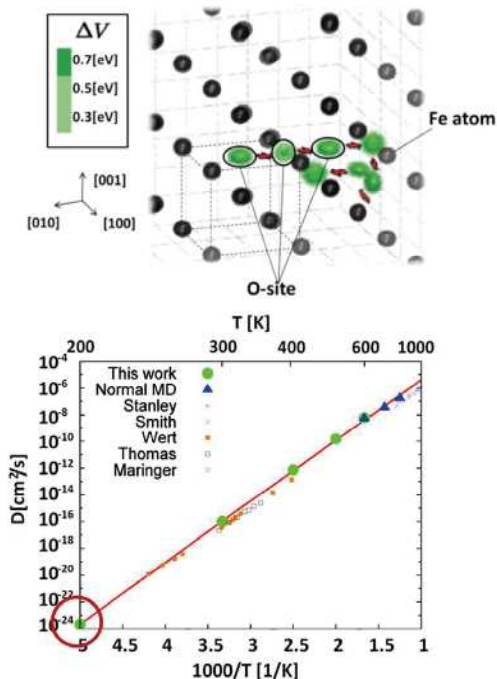


図3 鉄中炭素拡散の加速分子動力学解析と求められた拡散係数の温度依存性 [9]。

それでは原子レベルになにが起こるのかを見ることができない。このような事情から、原子スケールの解析で長時間事象を追うことができる加速分子動力学法が提案されている。様々な手法が提案されているが、筆者のグループでもアダプティブブースト加速分子動力学法と呼ぶ手法 [9] を提案して、それを用いた解析を行っている。本手法では自由エネルギー曲面を自動的に探索することでその形状を明らかにし、それを平坦にするように人工的なポテンシャルをオリジナルの自由エネルギー曲面に付与する。このようにして熱活性化プロセスを促進させ、最後に遷移状態理論を用いて正しい時間スケールを求める。

図3にはこの手法を用いて実施した鉄中の炭素の拡散解析と、それによって求められた拡散係数の温度依存性を示す。200Kの低温では拡散は極めて遅くなり長時間の解析を必要とするため、従来の分子動力学法では解析が不可能であるが、本手法ではそのような低速拡散も捉えることができる。

図4には銅の粒界から転位が核生成する熱活性化過程の解析結果を示す。粒界からの転位核生成は、ナノ結晶の降伏強度と関係しており、ナノ結晶の強

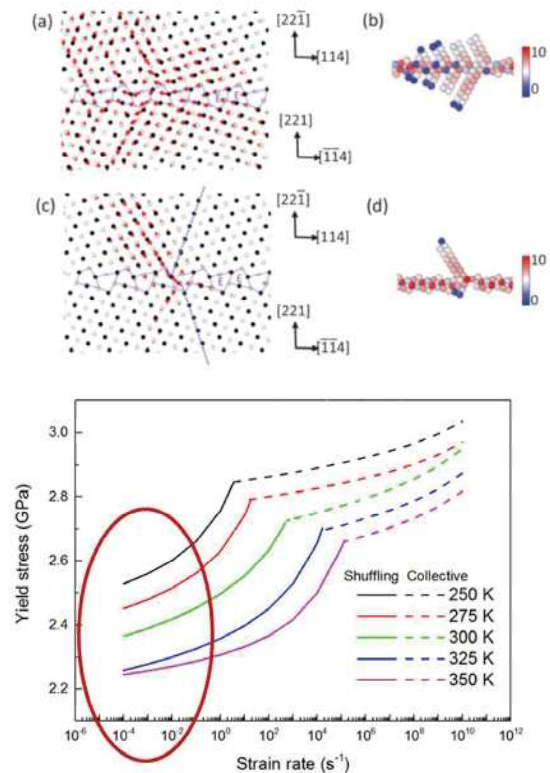


図4 銅中の粒界からの転位核生成の加速分子動力学解析と求められた強度の変形速度・温度依存性 [10]。

度予測に不可欠な情報である。この解析では、日常的な変形速度下でのナノ結晶の強度解析に成功している。従来の分子動力学法を用いた変形解析では、時間スケールの制限からどうしても現実的でない高速な変形速度を設定する必要があるが、超高速な変形速度下では変形の様相が日常的な変形速度下のものと全く異なることが多い。

図5には、ヘリウムイオンを照射して内部にナノヘリウムバブルを高密度に生成させたナノ部材を創製し、それに対する引張り試験を行った結果と、その変形メカニズムを加速分子動力学法で明らかにした結果を示す。ヘリウムバブルを導入しない試験片よりも、導入した試験片の方が強度と延性がともに優れることがわかった。また、変形の素過程であるバブルや材料表面からの転位核生成現象を加速分子動力学法で解析することによって、バブルや表面からの転位核生成の頻度、材料中の転位の運動速度など、様々な素過程の時定数がうまくバランスして、優れた強度と延性が両立していることがわかった。欠陥を敢えて導入することで強度と延性が上昇する面白い例である。

このように長時間にわたる原子スケール現象の解析を実現することで、これまでに解析できなかった長時間事象に分子動力学法解析を適用することが可能となった。原子運動の時間スケールよりもはるかに長い時間使用される構造材料中で“実際に”起こる様々な事象を原子レベルで解明することができるようになったことは、マルチスケールモデリングによる構造材料設計に向けたひとつの大きなブレークスルーである。

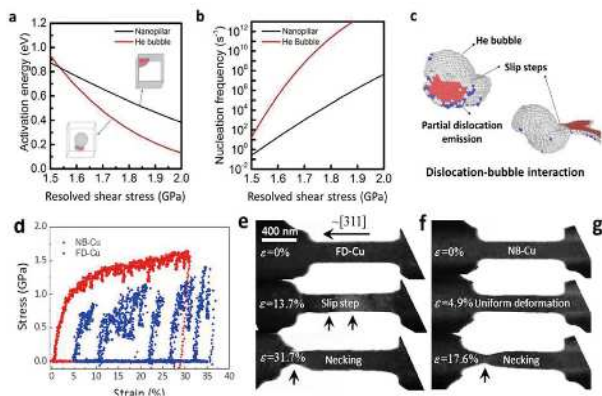


図5 ヘリウムナノバブルを有する銅が示す高い強度と延性の実験結果および加速分子動力学法によるメカニズムの検討 [11]。

## おわりに

理論的に材料を設計・開発をすることは材料研究者・技術者の長年の夢のひとつである。それが可能になれば、材料開発の省力化だけでなく、新奇材料の発見の加速にもつながっていく。その実現にはマルチスケールモデリングが有効である。本稿で示したいくつかの例からもわかる通り、マルチスケールモデリングには様々なスケールの計算機シミュレーションと実験観察との間の強い連携が不可欠である。この意味で、今後のマルチスケールモデリング理論の発展と、計算機シミュレーション技術や実験観察技術のさらなる発展が期待される。マルチスケールモデリングによって実験以前に材料の諸特性が高精度で予測できるようになれば、次の段階としては、それを使ってどのように優れた材料を探索し発見するかに注目が集まる。これには、たとえばデータ科学的な手法との融合が有効であり、力を発揮するよう思う。

## 参考文献

- 1) The 9<sup>th</sup> international conference on multiscale materials modeling (MMM2018) <http://mmm2018.jp/>
- 2) Handbook of Materials Modeling, S. Yip (Ed.), Springer (2005).
- 3) Handbook of Materials Modeling, W. Andreoni and S. Yip (Eds.), Springer (2019).
- 4) 例えば、Y. Wang *et al.*, Nature, 419, 912 - 915 (2002).
- 5) 例えば、Z. Zhang, *et al.*, Nature Communications, 14390 (2017).
- 6) 例えば、V.I. Yamakov, *et al.*, J. Mech. Phys. Solids, 65, 35 - 53 (2014).
- 7) W.-Z. Han *et al.*, Advanced Materials, 27, 3385 - 3390 (2015).
- 8) S. Ogata, J.Li, and S.Yip, Science, 298, 807 - 811 (2002).
- 9) A. Ishii *et al.*, Phys. Rev. B, 85, 064303 (2012).
- 10) J.-P. Du *et al.*, Phys. Rev. B, 94, 103110 (2016).
- 11) M.-S. Ding *et al.*, Nano Letters, 16, 4118 - 4124 (2016).