

はじめに

著者の経験では、材料科学（特に狭義の材料工学）の関連する学界や産業界で、数学的/解析的な研究テーマは主流から遠いところにあるし、また、アカデミアのカリキュラムの中にも体系化されていないように思う。日本だけではなく、世界的に見ても Materials Science は数学とは遠いところに位置している。これは、材料科学は実験科学であるところに本質があり、材料工学はモノづくりに直結すべきであるというこの分野に携わる人たちの伝統的な考え方の上に起因するのではなく、材料科学で取り扱う事象が複雑で、既存の数学に乗りきらないところに大きな理由があると思う。もちろん、各事象・現象の背後には物理的に明快な素過程があり、それぞれの素過程は物理学の法則に則り、それを記述する数学も明確である。しかし、素過程が集まり事象や現象を発現するときには、素過程の中で支配的なものが選択され、また、往々にして、各素過程の足し算以上のプラス α が現れる。この選択則やプラス α の正体を明らかにし、数学の下で系統化することが「材料数理学」の固有の命題であるというのが著者の考えである。特にマルチスケールにわたる情報伝播の中で、スケールを交差するときに何が選択されるのか、そして、非一様で不均質な内部組織や微細組織の時間発展の過程で、背後にどのような原理が支配しているのか、この問いに答えることが材料数理学の目的であると考えている。本書の内容は、未だこのような高邁な目的からは遠いが、執筆することで蒙昧とした描像を具体化し、読者に問うことでよりよい体系を築いていくことができれば著者の大きな喜びである。

第1章と第2章は原子配列に関する話題である。これよりもスケールの小さな領域にあるのが電子状態の議論であるが、それ自体で優に一冊の書を越える分量になるであろうし、何よりも著者の専門ではない。したがって、本書で扱う最小のスケールは原子と結晶である。各章の概略・趣旨を以下に述べる。

第1章で議論するのはクラスター展開法 (Cluster Expansion Method; CEM) である。Connolly と Williams の論文以来、すでに 40 年以上の時を経て今や計算材料科学のほぼ汎用の具になったといってもよい。現在、実用的に重要なのは大規模化であり、また、原子配列のみならず磁気モーメントへの拡張も新たな方向性である。し

ii はじめに

かし、本書のスコープは数理的な側面を論じることにより、基本となる熱力学空間の直交性、完備性の問題に焦点を置いた。

第2章はクラスター変分法 (Cluster Variation Method; CVM) である。相平衡の計算においてこれに代わる手法は数多ある。昨今の計算の大規模化は、分子動力学法やモンテカルロ法への流れを加速している。あるいは AI の利用は方法論そのものを変えつつある。そのような中で、著者が今日に至るまで CVM に固執してきた理由はただ一つ、美しいからである。本章では、単純な Bethe 近似を例にとりて具体的な定式化を論じ、CVM の階層構造を紹介する。

第3章で最終の目的としたのは配列の揺らぎに対する系の安定性の理論である。材料科学に携わる人でスピノーダル分解を知らない人はほとんどいない。しかし、スピノーダルオーダーリングは名前さえほとんど知られていない。スピノーダルオーダーリングに必須の k -空間での安定性の議論は、フォノン計算の虚数モード、すなわち、ソフトモードといわれる一群の変位型相転移と双対をなしている。また、スピノーダルオーダーリングの理論を含めて、我々が扱う自由エネルギー（熱力学関数）は多変数関数である。本章では、熱力学関数の有用な変換の仕方にも言及した。

第4章は時間発展の議論である。材料科学における時間発展の典型的な例は拡散である。拡散に関してはこれまで多くの優れた書で扱われてきたが、その主な内容は、Fick の法則から始まり、拡散係数の導出、多元系拡散、拡散方程式の種々の解法、ポテンシャル下での拡散、拡散の原子機構などであろう。実験結果の解釈において、これらが有用であることは言をまたない。ただ、著者が、かねがねから抱いている素朴な疑問は、多くの時間発展過程を扱う理論の中で、Fick の法則を始めとする拡散の議論がどのような位置づけにあるのか、熱力学・統計力学の基本原則からどのように導かれるのかということである。本章はこのような視点で書いた。

第5章では、離散格子上の固溶体の議論が、連続媒体の内部組織の議論とどのように連動するかに焦点を置いた。trans-scale, cross-scale 等、いろいろな言葉で語られるマルチスケール現象の定式化は、材料科学の一つの大きな命題である。過飽和固溶体からの整合析出は実験的には頻繁に観察される現象であり、それぞれを扱う理論手法もほぼ確立しているように思われる。しかし、この二つのプロセスをシームレスにつなぐ理論を著者は知らない。離散格子から連続体へ、それぞれの領域を支配している物理量がどのように粗視化されていくのかという問いである。Khachaturyan の理論と我々の第一原理相平衡計算、第一原理フェーズフィールド計算に基づいて議

論する。

第 6 章はこれまでの章とはかなり趣が異なる。合金の強度という具体的な問題を対象にした。合金の材料強度は、第 1 章から第 5 章まで論じてきた材料科学のマルチスケール性と非一様性、そしてその時間発展過程が集積した現象である。断片的なスケール、局所的な現象については多くの結果が報告されているが、上述のような立場からの議論はあまりなされていないように思われる。この章では、かつて著者のグループで行ったいくつかの計算を論じ、著者の合金強度、転位論に対する問題意識、視点を述べた。

本書を執筆するにあたりお世話になった方々に謝辞を述べたいと思う。

まず、Professor Sanchez (Univ. Texas, Austin) なくしてはこの本の半分も執筆が進まなかった。大学院時代に彼の Diffusion in Solids の講義を聴いた折の彼の手書きの講義ノートが第 4 章の下地である。「通常の材料科学」と統計力学の橋渡しをしてくれたのが彼の講義であり、今まで受講した中で、最高の講義であった。第 1 章のクラスター展開法も Professor Sanchez が切り拓いてきた分野といって過言ではない。Professor Sanchez とは同じグループに所属した経緯もあり、長年の交流の中で数限りなく多くのことを学んだ。第 1 章と第 4 章の執筆にあたって、彼と何度もやり取りをしながら、再び多くのことを学ぶ機会を得た。彼のコメントと励ましに深く感謝するものである。

第 2 章のクラスター変分法は故菊池良一先生の開発された手法である。菊池先生は常に静謐な姿勢、独自のペースで学問に取り組まれた孤高の科学者であった。先生が最後に挑戦されたクラスター変分法の連続体への拡張、すなわち、連続変位クラスター変分法 (Continuous Displacement CVM; CDCVM) が、私にとってもライフワークになりそうな気がする。先生への謝辞は先生が目指された CDCVM を完結させることであろう。謝辞も第 2 章も未完である。

第 5 章と第 6 章ではかつての私のグループの院生であった庄司哲也博士 (現 トヨタ自動車株式会社) と大野宗一教授 (現 北海道大学大学院工学研究院) の博士論文の仕事を参考にした。私に拡散反応方程式の問題意識と知識を与えてくれたのが庄司博士であり、同様に、フェーズフィールド法の世界を拓いてくれたのが大野教授である。私は、最初に彼らに簡単なテーマを与えただけであるが、今回、彼らの博士論文を読み直しながら、今の私よりも彼らははるかに遠いところを歩いていたことを思った。

第 6 章の一部は私の Ph.D thesis のテーマである。指導教官の Professor Morris (Univ. California, Berkeley) には、自由に考える時間を与えてもらった。あの時代に苦闘し吸収した転位論の知識も問題意識も今なお自分の中で新鮮である。いろいろな方向に興味も思考も発散する私を最後まで見守ってもらった Morris 先生に心から感謝する。

第 4 章の拡散の記述に関して、茨城大学の池田輝之教授の教えを乞うたことも記しておきたい。数学の座標変換の問題の中で混沌とした考えを抜け出せない私に、現実の拡散の話を通して、親切に根気よく私の愚問に答えていただいた。

マルチスケール塑性場に関して、神戸大学の長谷部忠司先生との議論に大変啓発された。本書の概要を執筆した後のことであり、この議論を第 6 章に反映できなかったのは心残りである。彼の深い洞察が第 6 章の参考文献に展開されていることを記し、謝意を表する。

本書の執筆に関して直接の教示を受けたわけではないが、改めて、第 5 章の一部の内容は、Professor Khachaturyan (Rutgers University) の名著「Theory of Structural Transformations in Solids」に基づいていることを述べておく。極めて難解な書物であるが、何度も苦労して読み返しながら、本書の執筆の大きな動機を得た。

上に、特に本書の執筆に関してお世話になった方々への謝意を記した。ただし、本書での記載事項に誤りや誤解があったとしてもそれは上述の方々の責任ではなく、私の無理解によるものであることを明記しておく。

本書の執筆に直接関係しなくとも多くの方々にお世話になった。お一人お一人の名前を書き始めるといくら枚数があっても足りない。長年の共同研究者であり、本書に引用した論文の一番最近の共著者である東北大学 陳迎名誉教授、北海道科学大学 堀内寿晃教授のお二人の名前を代表して記し、皆様への謝意を表したい。

最後に執筆の機会を与えていただいた(株)内田老鶴圃 内田 学氏に心から謝意を表したい。氏の長年にわたる忍耐と励ましなくしてはこの本は世に出なかった。

2026 年 8 月

毛利 哲夫