高次応力理論に基づく転位－結晶塑性モデルを用いた Mg基LPSO相のキンク帯形成に関するFEM解析

FE simulation on kink band formation of magnesium-based LPSO phase using
dislocation-crystal plasticity model based on higher-order stress theory

志澤 一之

Kazuyuki SHIZAWA

1. はじめに

近年、地球温暖化対策に関わる取り組みが数多く行われているが、軽量かつ高強度な構造材料からなる輸送機器（乗用車、航空機など）を開発し、燃費を飛躍的に改善することに期待が寄せられている。かかる状況下において、長周期積層構造（LPSO：Long Period Stacking Ordered Structure）を有するマグネシウム合金（Mg/LPSO 合金）がわが国で創生され^{1),2)}、従来のマグネシウム合金と比較して類を見ない高い強度を有することから次世代構造材料として注目を集めている。同合金は六方最密（HCP）構造を有する α -Mg相とLPSO相の複相組織から構成され、その材料強化には α -Mg相の動的再結晶による結晶粒微細化とLPSO相のキンク変形が関与していると考えられている。キンク変形はHess-Barrett³⁾らによって局所化した底面系の転位運動としてモデル化されているが、このような転位の挙動をその場観察するには困難を伴う。そこで、数値シミュレーションを用いたキンク帯形成の再現とその詳細なメカニズムの解明が重要となる。

著者ら^{4),5)}はこれまでに、転位－結晶塑性モデルを用いた有限要素法（FEM）によってMg基LPSO相単結晶のキンク変形を数値解析的に再現した。しかしながら、従来の転位－結晶塑性FEM解析においてはキンク帯形成過程でメッシュ依存性がみられるという問題がある。これに対して高次応力理論^{6),7)}に基づく従来のFEM解析では、ひずみの局所化領域におけるメッシュ依存性を軽減できることが報告されている⁸⁾。

そこで本稿では、高次応力理論に基づく転位－結晶塑性モデルの定式化およびキンク帯形成のFEM解析⁹⁾について紹介し、本モデルによるメッシュ依存性の軽減および試験片サイズの違いに起因する寸法効果の発現について解説する。加えて、結晶塑性モデルに導入された不適合度（すべりの二次こう配）¹⁰⁾を用いて、キンク帯の四隅に形成される回位四重極¹¹⁾を簡易的に表現する方法についても言及する。なお、回位とは回転性の結晶欠陥のことであり、有限の刃状転位列は回位双極子で置き換えられることを付記しておく。

2. 運動学

2.1 塑性速度こう配

有限変形問題において4配置構成¹²⁾を考えると、変形こう配は次式のように乗算分解される。

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^p \quad (1)$$

ここで $\mathbf{F}^p$ は塑性変形こう配、 $\hat{\mathbf{U}}^e$ は弾性ストレッチ、 $\mathbf{R}^*$ は弾・剛体回転を表す直交テンソルである。式（1）に従って、初期配置における量 $(\cdot)_{(1)}$ は第1中間配置の量 $(\cdot)_{(M)}$ 、第2中間配置の量 $(\cdot)_{(m)}$ 、そして現配置の量 $(\cdot)$ へ次々と写像されるが、本稿では第2中間配置を構成式の参照配置とする。このとき、第1中間配置における塑性速度こう配 $\mathbf{L}_{(M)}^p$ は、結晶塑性論では、

$$\mathbf{L}_{(M)}^p \equiv \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left(\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} \quad (2)$$

のように表される。ここで、 (α) はすべり系番号であり、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ はすべり速度、 $\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}$ はすべり方向の単位ベクトル、 $\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ はすべり面法線方向の単位ベクトルである。また、 $\mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ であり、その対称部分 $\mathbf{P}_{(M)S}^{(\alpha)}$ はSchmidテンソルである。

2.2 転位密度

第1中間配置において、正味のBurgersベクトル $\tilde{\mathbf{b}}_{(M)}$ はBurgers回路に沿った微小線素 $d\mathbf{x}_{(M)}$ の周回積分によって次式のように表される。

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = \sum_{\alpha} \tilde{\mathbf{b}}_{(M)}^{(\alpha)} = -\oint_{\mathcal{C}_{(M)}} d\mathbf{x}_{(M)} \quad (3)$$

ここで、 $\mathcal{C}_{(M)}$ は第1中間配置における領域 $\mathcal{S}_{(M)}$ を囲む閉曲線を表す。式（3）右辺を初期配置に戻した後、Stokesの定理を適用し、さらにNansonの公式を用いて第1中間配置に戻せば次式を得る。

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = -\oint_{\mathcal{C}_{(M)}} J^{p-1} \left(\text{Curl} \mathbf{F}^p \right) \mathbf{F}^{pT} \mathbf{n}_{(M)} da_{(M)} \quad (4)$$

ここで、 $\text{Curl}(\bullet)$ は初期配置における回転を表し、 J^p は $J^p \equiv \det \mathbf{F}^p$ である。また、一般に正味のBurgersベクトルはKrönerの転位密度テンソル $\boldsymbol{\alpha}_{(M)}$ によって次のように表され

る¹³⁾。

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = \oint_{\mathcal{S}_{(M)}} \boldsymbol{\alpha}_{(M)} \mathbf{n}_{(M)} d\mathbf{a}_{(M)} \quad (5)$$

塑性変形による体積変化は無視できるものとし、式 (4) および式 (5) を比較すれば転位密度テンソルが次式のように書ける。

$$\boldsymbol{\alpha}_{(M)} = -(\text{Curl} \mathbf{F}^P) \mathbf{F}^{PT} \quad (6)$$

次に、式 (6) で定義した転位密度をすべり系ごとの量に分解することを考える。式 (6) の物質時間微分を取って整理すると次のようになる。

$$\dot{\hat{\boldsymbol{\alpha}}}_{(M)} = \dot{\hat{\boldsymbol{\alpha}}}_{(M)} - \mathbf{L}_{(M)}^P \boldsymbol{\alpha}_{(M)} - \boldsymbol{\alpha}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^P = -\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^P \equiv \mathbf{Z}_{(M)} \quad (7)$$

ここで、 $\text{curl}_{(M)}(\bullet)$ は第1中間配置における回転、 $\dot{\hat{\boldsymbol{\alpha}}}_{(M)}$ は Oldroyd 速度、また $\mathbf{Z}_{(M)}$ は転位ドリフト速度¹²⁾である。塑性変形によって結晶格子は変化しないため、初期配置および第1中間配置において結晶基底は一定と考えれば、式 (7) は式 (2) を用いて次のように書ける。

$$-\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^P = \sum_{\alpha} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes (\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \times \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \quad (8)$$

ここで、 $\nabla_{(M)}$ は第1中間配置における微分演算子ナブラである。式 (8) を $\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}$ および単位縦法線ベクトル $\mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \times \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ を用いて書き換えれば

$$-\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^P = \mathbf{Z}_{(M)} = \sum_{\alpha} \left[(\nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)}) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} - (\nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right] \quad (9)$$

となり、 $\mathbf{Z}_{(M)}$ に対してすべり系ごとの値で記述した結晶塑性論的表現が得られる。また、式 (9) より GN (Geometrically Necessary) らせん転位密度速度および GN 刃状転位密度速度はすべり速度のこう配を用いて次のように定義される。

$$\dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \equiv \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} \quad (10)$$

$$\dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \equiv -\frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \quad (11)$$

式 (9) を時間積分した転位密度 $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}$ は、式 (10) および式 (11) を用いて

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} \equiv \int \mathbf{Z}_{(M)} dt = \sum_{\alpha} \left(\tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \quad (12)$$

と表されるため、GN 転位密度のノルムを式 (12) から

$$\rho_G^{(\alpha)} \equiv \|\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}\| / \tilde{b}^{(\alpha)} = \sqrt{(\rho_{G(s)}^{(\alpha)})^2 + (\rho_{G(e)}^{(\alpha)})^2} \quad (13)$$

のように定義する。

一方、転位対の密度を表現する SS (Statistically Stored) 転位密度は次式のように表現される¹⁴⁾。

$$\dot{\rho}_S^{(\alpha)} = \frac{c^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)} L^{(\alpha)}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (14)$$

ここで、 $c^{(\alpha)}$ は1のオーダーの数値パラメータ、 $L^{(\alpha)}$ は転位の平均飛行距離であり、ここではその表現に転位密度依存モデル^{14), 15)}：

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^{*(\alpha)}}{\sqrt{\sum_{\beta} \omega^{(\alpha\beta)} (\rho_G^{(\beta)} + \rho_S^{(\beta)})}} \quad (15)$$

を採用する。ここで、 $c^{*(\alpha)}$ は転位が不動化するまでに横切る林立転位の数を表す転位易動度であり、 $\omega^{(\alpha\beta)}$ は自己硬化を除く転位の相互作用行列の成分である。式 (14) を時間積分すれば、現時刻の SS 転位密度が $\rho_0^{(\alpha)}$ を初期転位密度として次のように得られる。

$$\rho_S^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \int_t \dot{\rho}_S^{(\alpha)} dt \quad (16)$$

2.3 回位密度の表現

結晶塑性論の場合、不適合度は次のように表現できる¹⁰⁾。

$$\boldsymbol{\eta} = \text{curl} \left[\text{curl} \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right) \right]_S^T \quad (17)$$

式 (17) を式 (10) および式 (11) を用いて変形すれば

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{\eta} = \sum_{\alpha} \left[-\tilde{b}^{(\alpha)} (\nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)}) (\mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)})_S \right. \\ \left. + \tilde{b}^{(\alpha)} (\nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)})_S \right. \\ \left. - \tilde{b}^{(\alpha)} (\nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)}) (\mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)})_S \right. \\ \left. + \tilde{b}^{(\alpha)} (\nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) (\mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)})_S \right] \quad (18) \end{aligned}$$

のようになる。式 (18) 右辺第3項は刃状転位密度のすべり面法線方向こう配であり、くさび形回位密度に相当する。ここでは、回位密度を新たに定義することなく、簡易的にこの量を回位密度の代わりとして採用する。

3. 力学的釣合い法則および高次境界条件

3.1 力学的釣合い方程式

仮想仕事率の原理は、内力のなす仮想仕事率 $\bar{P}$ と表面力のなす仮想仕事率 $\bar{P}_S$ および物体力のなす仮想仕事率 $\bar{P}_b$ の釣合いによって次のように表される。

$$\int_{\mathcal{V}} \bar{P} dv = \oint_{\mathcal{S}} \bar{P}_S da + \int_{\mathcal{V}} \bar{P}_b dv \quad (19)$$

ここで、 $(\bar{\bullet})$ は仮想量を表す。次に、内力を表現するため、構成式の参照配置である第2中間配置における全自由エネルギー Ψ の引数を、等温過程であることを仮定して次のように与える。

$$\Psi = \Psi(\mathbf{E}_{(m)}^e, \mathbf{E}_{(m)}^p, \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}) \quad (20)$$

ここで $\mathbf{E}_{(m)}^e$ は弾性ひずみ、 $\mathbf{E}_{(m)}^p$ は塑性ひずみである。全自由エネルギーの物質時間微分をとると

$$\dot{\Psi} = \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{Z}}_{(m)} \quad (21)$$

となる。ここで $(\tilde{\bullet}) \equiv J(\bullet)$ であり、 $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$ は Kirchhoff 応力、 $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$ は背応力 $\mathbf{T}_b$ を用いて $\tilde{\mathbf{T}} \equiv \mathbf{T} - \mathbf{T}_b$ と定義される有効応力、 $\tilde{\mathbf{N}}_{(m)}$ は GN 転位の駆動力に相当する高次応力である。内力のなす仮想仕事率 $\bar{P}$ は式 (21) の引数を仮想量に置き換え、現配置の量で表せば次式のようになる。

11

$$\tilde{P} = T \cdot \tilde{D}^e + \hat{T} \cdot \tilde{D}^p + N \cdot \tilde{Z} \quad (22)$$

第2中間配置において $\tilde{P}$ は式 (2) および式 (9) を考慮すれば

$$\tilde{P} = T_{(m)} \cdot \tilde{D}_{(m)}^e + \hat{T}_{(m)} \cdot \tilde{D}_{(m)}^p + \sum_{\alpha} \xi_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} \quad (23)$$

となる。ここで $\xi_{(m)}^{(\alpha)}$ は

$$\xi_{(m)}^{(\alpha)} \equiv \left[N_{(m)} \cdot \left(s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes s_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] t_{(m)}^{(\alpha)} - \left[N_{(m)} \cdot \left(s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes t_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] s_{(m)}^{(\alpha)} \quad (24)$$

のように定義される高次応力 $N_{(m)}$ のすべり系 α への射影であり、すべり系ごとのGN転位の駆動力と見なせる⁷⁾。式 (23) の表現を現配置へ進め、 $D^e = D - D^p$ を用いれば

$$\tilde{P} = T \cdot \tilde{D} - \sum_{\alpha} \tau_b^{(\alpha)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \tilde{\gamma}^{(\alpha)} \quad (25)$$

となる。ここで、 $\tau_b^{(\alpha)}$ は

$$\tau_b^{(\alpha)} \equiv \tau^{(\alpha)} - \hat{\tau}^{(\alpha)} = (T - \hat{T}) \cdot P_S^{(\alpha)} \quad (26)$$

と定義される分解背応力であり、 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ は $\tau^{(\alpha)} \equiv \tau^{(\alpha)} - \tau_b^{(\alpha)}$ で与えられる有効分解せん断応力である。

一方、外力のなす仮想仕事率を著者ら¹²⁾は次式の形でそれぞれ与えている。

$$\tilde{P}_S = t^{(n)} \cdot \tilde{v} + N^{(n)} \cdot \tilde{L}^p \quad (27)$$

$$\tilde{P}_b = \rho(f - \dot{v}) \cdot \tilde{v} \quad (28)$$

ここで、 $t^{(n)}$ は通常の表面力、 $\tilde{v}$ は運動学的に可容な仮想速度、 $N^{(n)}$ は N と関連づけられる高次表面力、 f は物体力、 $\dot{v}$ は加速度である。式 (27) 右辺第2項の高次表面力項は、式 (2) を用いて次のように表現できる。

$$N^{(n)} \cdot \tilde{L}^p = \sum_{\alpha} N^{(n)} \cdot \left(P^{(\alpha)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} \right) = \sum_{\alpha} \zeta^{(n)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} \quad (29)$$

ここで $\zeta^{(n)} \equiv N^{(n)} \cdot P^{(\alpha)}$ は高次表面力 $N^{(n)}$ のすべり系 α への射影である。

式 (25), (27), (28) および式 (29) を式 (19) に代入し、発散定理を適用して整理した後、仮想量の任意性を考慮すれば、局所形の力学的釣合い方程式および力学的境界条件がそれぞれ次のように得られる。

$$\text{in } \mathcal{V} : \text{div} T + \rho(f - \dot{v}) = 0, \quad T = T^T, \quad \tau_b^{(\alpha)} = -\text{div} \xi^{(\alpha)} \quad (30)$$

$$\text{on } \mathcal{S} : t^{(n)} = Tn, \quad \zeta^{(n)} = \xi^{(\alpha)} \cdot n \quad (31)$$

式 (30)₁ および式 (30)₂ はそれぞれ従来の運動方程式および応力の対称性 (角運動量方程式) であり、式 (31)₁ はCauchyの基本定理である。式 (30)₃ および式 (31)₂ はそれぞれ高次応力の釣合い方程式および高次応力の境界条件であり、通常のモデルには表れない式である。

3.2 速度形仮想仕事の原理

有限変形問題に対応できるよう、前節で述べた仮想仕事率の原理を速度形に拡張する。まず、式 (25), (27) および式 (28) を式 (19) に代入し、慣性力および物体力を無視する。次に、それを初期配置の量で記述し、仮想量の任意性を考慮

して $\dot{v} = 0$ および $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$ の下で物質時間微分を施せば、速度形仮想仕事の原理が次のように得られる。

$$\int_{\mathcal{V}_0} \dot{P} \cdot (\tilde{v} \otimes \tilde{v}) dv_{(0)} - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_0} \dot{\tau}_b^{(\alpha)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} dv_{(0)} + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_0} \dot{\xi}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(0)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} dv_{(0)} \\ = \oint_{\mathcal{S}_0} \dot{i}^{(0)} \cdot \tilde{v} da_{(0)} + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}_0} \dot{\zeta}^{(0)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} da_{(0)} \quad (32)$$

ここで、各内力の定義は以下のとおりである。

$$\Pi \equiv JTF^{-T}, \quad \tilde{\tau}_b^{(\alpha)} \equiv J\tau_b^{(\alpha)}, \quad \tilde{\xi}^{(\alpha)} \equiv J\xi^{(\alpha)}F^{-T} \quad (33)$$

さらに、各応力速度は式 (33) の物質時間微分をとることに より、それぞれ次のように書ける。

$$\left. \begin{aligned} \dot{\Pi} &\equiv J \left[\overset{\circ}{T} - (DT + TD) + LT \right] F^{-T} \\ \dot{\tilde{\tau}}_b^{(\alpha)} &\equiv J \dot{\tau}_b^{(\alpha)} \\ \dot{\tilde{\xi}}^{(\alpha)} &\equiv J \left[\overset{\nabla}{\xi}^{(\alpha)} - D\xi^{(\alpha)} - \sum_{\beta} P_{\Lambda}^{(\beta)} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \right] F^{-T} \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

ここで、 $\overset{\circ}{T} \equiv \dot{T} - WT + TW$ はCauchy 応力のJaumann速度、 $\overset{\nabla}{\xi}^{(\alpha)} \equiv \dot{\xi}^{(\alpha)} - W^* \xi^{(\alpha)}$ は高次応力のMandel-Kratovich速度および $W^* \equiv W - W^p$ は下部構造スピンである。また、通常と同様に $\dot{J} = J \text{tr} L = 0$ を用いている。式 (34) を式 (32) に代入し、参照配置を現配置に選べばupdated Lagrange形式の速度形仮想仕事の原理が次式的ように得られる。

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\overset{\circ}{T} - (DT + TD) + LT \right] \cdot \tilde{L} dv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \dot{\tau}_b^{(\alpha)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} dv \\ + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left[\overset{\nabla}{\xi}^{(\alpha)} - D\xi^{(\alpha)} - \sum_{\beta} P_{\Lambda}^{(\beta)} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \right] \cdot \nabla \tilde{\gamma}^{(\alpha)} dv \\ = \oint_{\mathcal{S}} \dot{i}^{(n)} \cdot \tilde{v} da + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \dot{\zeta}^{(n)} \tilde{\gamma}^{(\alpha)} da \quad (35)$$

なお、境界で既定されている量を $(\bullet)$ と表せば、幾何学的境界条件および対応する力学的境界条件は

$$\text{on } \mathcal{S} : v = \underline{v} \quad \text{or} \quad \dot{i}^{(n)} = \underline{\dot{i}}^{(n)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \underline{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \quad \text{or} \quad \dot{\zeta}^{(n)} = \underline{\dot{\zeta}}^{(n)} \quad (36)$$

のように表される。このように、高次応力理論ではすべり速度の境界条件を設定できるため、治具による試験片の拘束状態あるいは結晶粒界におけるすべりなし (転位の停止) といった境界条件を表現可能である。

3.3 高次量に対する境界条件

境界値問題を解くにあたり、高次量に対する境界条件を次式のように設定することが多い^{16), 17)}。

$$\text{on } \mathcal{S} : \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{or} \quad \dot{\zeta}^{(n)} = 0 \quad (37)$$

式 (37)₁ はすべり拘束条件と呼ばれ、物体表面が剛体に接触しているため表面においてすべり変形が妨げられることを意味している。一方、式 (37)₂ のように高次表面力を零とする場合はすべり自由条件と呼ばれ、物体表面は高次表面力が作用しない自由表面となり、すべり変形 (転位の通過) が生じることを表す。

4. 構成式および硬化則

4.1 応力および高次応力の速度形構成式

塑性変形速度 $\mathbf{D}^p$ を $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ で表せば、従来と同様の形式で弾・粘塑性構成式が次のように書ける。

$$\mathbf{T} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \mathbf{C}^e : \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left(\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right)_{\mathbf{s}} \quad (38)$$

一方、高次応力の構成式は、転位の作る線形弾性応力場との比較を容易にするため、GN 転位密度 $\bar{\mathbf{a}}_{(m)}$ に対して線形であると仮定すれば、

$$\tilde{\mathbf{N}}_{(m)} = \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathbf{a}}_{(m)}} = \lambda \bar{\mathbf{a}}_{(m)} \quad (39)$$

となる。ここで、 λ は未定係数である。式 (24) を用いて $\tilde{\mathbf{N}}_{(m)}$ を各すべり系に射影し、式 (12) を代入すると次式のようになる。

$$\begin{aligned} \xi_{(m)}^{(\alpha)} = J^{-1} \lambda \sum_{\beta} \tilde{b}^{(\beta)} B_{ss}^{(\beta\alpha)} \left[\left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} B_{ss}^{(\beta\alpha)} + \rho_{G(e)}^{(\alpha)} B_{ts}^{(\beta\alpha)} \right) \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right. \\ \left. - \left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} B_{st}^{(\beta\alpha)} + \rho_{G(e)}^{(\alpha)} B_{tt}^{(\beta\alpha)} \right) \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right] \end{aligned} \quad (40)$$

ここで

$$\begin{aligned} B_{ss}^{(\beta\alpha)} &\equiv \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(m)}^{(\beta)}, \quad B_{ts}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(m)}^{(\beta)} \\ B_{st}^{(\beta\alpha)} &\equiv \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(m)}^{(\beta)}, \quad B_{tt}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(m)}^{(\beta)} \end{aligned} \quad (41)$$

は高次応力の幾何学的なすべり系間相互作用を表す係数である。本稿では簡単化のために $\xi_{(m)}^{(\alpha)}$ のすべり系間相互作用は小さいとして無視し、式 (41) において $\alpha = \beta$ の場合のみを考慮すると構成式は次式のように簡単化される。

$$\xi_{(m)}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \quad (42)$$

ここで微小弾性変形の仮定 ($J^{-1} = 1$) を用いている。式 (42) の物質時間微分をとり、現配置に進めれば高次応力の速度形構成式が次式のように得られる。

$$\dot{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) = \hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (43)$$

ここで $\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)}$ は式 (10) および式 (11) より、 $\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)} \equiv \lambda \left(\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \right)$ と表される。式 (44) にはすべり速度の空間こう配が現れており、物質点近傍の非局所性が導入されているといえる。式 (42) を現配置の量で表せば次式のようになる。

$$\xi^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \quad (44)$$

式 (44) を式 (30)₃ に代入し、結晶基底のこう配は十分小さいと仮定すれば本理論体系における背応力は次式のように表せる。

$$\begin{aligned} \tau_b^{(\alpha)} = -\text{div} \xi^{(\alpha)} &\approx -\lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} - \nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \\ &= -\lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\nabla_{(1)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} - \nabla_{(1)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \end{aligned} \quad (45)$$

ここで任意のスカラー量 $(\bullet)$ について $\nabla(\bullet) = \nabla_{(1)}(\bullet) \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{-1} \mathbf{R}^{*T}$ が成り立つこと、および次式で表される結晶基底の配置変換則を用いている。

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{t}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \quad (46)$$

一方、転位論において背応力モデルが次のように提案されている¹⁸⁾。

$$\tau_b^{(\alpha)} = -\frac{\mu r^2 \tilde{b}^{(\alpha)}}{4} \left[\nabla_{(1)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} - \frac{1}{2(1-\nu)} \nabla_{(1)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right] \quad (47)$$

ここで、 r は特性長であり、一つの物質点に長範囲応力場をもたらす転位群からの距離を表す。また、 μ は等方弾性体における横弾性係数、 ν はポアソン比である。いま、非圧縮性を仮定し、 $\nu \approx 1/2$ として式 (45) および式 (47) を比較すれば、 λ は次式のように書ける。

$$\lambda \approx \frac{\mu r^2}{4} \quad (48)$$

したがって、高次応力の速度形構成式は次式のようになる。

$$\dot{\xi}^{(\alpha)} = \frac{\mu r^2}{4} \left(\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (49)$$

なお、特性長 r を零とすれば、背応力が零となるため有効分解せん断応力は通常の分解せん断応力に帰着する。

4.2 硬化則

本稿では、すべり速度硬化則に Kuroda-Tvergaard⁸⁾ によって提案された次式を採用する。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \text{sgn}(\dot{\tau}^{(\alpha)}) \left| \frac{\dot{\tau}^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \quad (50)$$

ここで、 $g^{(\alpha)}$ はすべり変形の抵抗を表す流れ応力であり、 $\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}$ は参照すべり速度である。流れ応力は従来と同じく、多重すべりに拡張された Bailey-Hirsch の式¹⁴⁾：

$$g^{(\alpha)} = \tau_f^{(\alpha)} + a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} \sqrt{\rho_s^{(\beta)}} \quad (51)$$

を用いて表す。ここで $\tau_f^{(\alpha)}$ は格子摩擦応力、 $a^{(\alpha)}$ は転位の張り出しと関連した数値係数、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり系間相互作用行列の成分である。式 (51) の物質時間微分を取り、式 (14) を代入すれば流れ応力の発展式が次式のように得られる。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \frac{a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \Omega^{(\alpha\beta)} c^{(\beta)}}{2 \tilde{b}^{(\beta)} L^{(\beta)} \sqrt{\rho_s^{(\beta)}}} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (52)$$

ここで、 $h^{(\alpha\beta)}$ は転位密度依存の硬化係数である。これより、現時点における流れ応力は式 (52) を時間積分して次式のように得られる。

$$g^{(\alpha)} = g_0^{(\alpha)} + \int \dot{g}^{(\alpha)} dt \quad (53)$$

ここで、 $g_0^{(\alpha)}$ は流れ応力の初期値、すなわち臨界分解せん断応力 (CRSS: critical resolved shear stress) であり、式 (51) で $\rho_s^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)}$ とおいたものに相当する。

5. FEM 解析および検討

5.1 解析条件

解析モデルは図 1(a) に示す単結晶平板とし、平面ひずみ条件の下、試験片上端面に強制圧縮変位を加える。したがって公称圧縮率は試験片上端面における変位を U とすれば

$\varepsilon = U/L$ と書ける。高次応力理論に基づく解析では、物質点の自由度として物質速度 $\mathbf{v}$ に加えて各すべり系のすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ も付与される¹⁷⁾。本稿では $\mathbf{v}$ および $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ のそれぞれを、9節点四角形要素を用いて離散化する。また、数値解析に用いる材料定数および数値パラメータを表1に示す。なお、LPSO相は実際にはMg相に溶質原子(Zn, Yなど)相が交互に積層された長周期のHCP結晶構造をもっているが、ここでは簡単のため長周期性を具体的にはモデル化せず、一様なHCP結晶であると仮定する。そのうえで、式(51)から計算される各すべり系の臨界分解せん断応力が実験値と整合するように数値パラメータ $\tau_f^{(\alpha)}$ および $a^{(\alpha)}$ を決定する。硬化則で考慮する活動すべり系は $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 底面系(3個)、 $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 柱面系(3個)、そして $\{11\bar{2}2\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 二次錘面系(6個)である。Mg/LPSO合金におけるLPSO相では、変形双晶の活動は極めて限定的であるため、ここでは考えない。初期結晶方位は図1(b)のように負荷軸に対して底面が5°傾くように設定する(幾何学的初期不整)。この条件では底面系の活動が支配的となるため、以降では底面系に関する量の考察を行う。このような方位では結晶の対称性から面外のすべり変形は打ち消し合うため、平面ひずみ問題として解析できる。また、特性長 r の変形への影響を調べるために、 $\varepsilon_s \equiv r/L$ と定義される寸法効果パラメータを用いて解析結果を整理する。代表長さには試験片の長辺 L をとる。なお、ここで紹介する結晶塑性FEM解析に関連する詳細情報は文献4), 5), 9)を参照されたい。

5.2 キング帯形成のメッシュ依存性

まず、 5×30 , 10×60 , 15×90 の3通りのメッシュ分割を考え、異なる寸法効果パラメータに対して解析を行う。従来のモデルとの比較を行うために、高次量の境界条件は全ての表面ですべり自由条件とする。はじめに寸法効果パラメータが零の場合、すなわち $r = 0.0 \mu\text{m}$ とし、高次応力を考慮しない従来の解析結果を示す。図2(a)は公称応力ひずみ線図であり、いずれのメッシュサイズにおいてもキング変形の発生と同時に応力が急激に解放されていることが確認できる。形成するキング帯の幅が細いほど、応力の降下は激しくなっており、メッシュ依存性がみられる。メッシュ依存性が顕著でないのはひずみ速度感度指数 m に比較的大きな値を用いているためであると考えられる。図2(b)および(c)は1.0%圧縮後の

図1 LPSO単結晶の解析モデル (a) 試験片, (b) 初期方位, (c) 活動底面系⁹⁾

表1 材料定数および数値パラメータ⁹⁾

Law	Values
Crystal defect	$\rho_0^{(\text{all})} = 0.1 \mu\text{m}^{-2}$, $c^{(\text{all})} = 2$, $\tilde{b}^{(\text{bas})} = 0.32 \text{ nm}$, $\tilde{b}^{(\text{pri})} = 0.32 \text{ nm}$, $\tilde{b}^{(\text{pyr})} = 0.61 \text{ nm}$, $c^{*(\text{bas})} = 100$, $c^{*(\text{pri})} = 50$, $c^{*(\text{pyr})} = 35$,
Constitutive law	$C_{11}^c = 67.7 \text{ GPa}$, $C_{33}^c = 72.9 \text{ GPa}$, $C_{44}^c = 21.5 \text{ GPa}$, $C_{12}^c = 28.3 \text{ GPa}$, $C_{13}^c = 19.5 \text{ GPa}$
$\dot{\gamma}$ power law	$\dot{\gamma}_r^{(\text{all})} = 0.001 \text{ s}^{-1}$, $m = 0.02$
Flow rule	$\tau_f^{(\text{bas})} = 3 \text{ MPa}$, $\tau_f^{(\text{pri})} = 155 \text{ MPa}$, $\tau_f^{(\text{pyr})} = 335 \text{ MPa}$, $a^{(\text{all})} = 0.3$, $\mu^{(\text{bas})} = 21.50 \text{ GPa}$, $\mu^{(\text{pri})} = 19.70 \text{ GPa}$, $\mu^{(\text{pyr})} = 24.61 \text{ GPa}$, $\Omega^{(\alpha\beta)} = 1$, $\omega^{(\alpha\beta)} = \begin{cases} 0 & (\alpha = \beta) \\ 1 & (\alpha \neq \beta) \end{cases}$
Prescribed nominal strain rate	$\dot{\varepsilon} = 0.001 \text{ s}^{-1}$

図2 (a) 公称応力ひずみ線図, (b) 底面GN転位密度の刃状成分分布および(c) 底面SS転位密度分布 ($\varepsilon_s = 0$, $U/L = 1.0\%$, (i) 5×30 , (ii) 10×60 , (iii) 15×90 要素)⁹⁾

GN転位密度の刃状成分とSS転位密度分布図である。メッシュサイズによってキンク帯の幅が異なることがわかる。また、Hess-Barrettのモデルに見られるような孤立転位をGN転位密度で、転位対をSS転位密度でそれぞれ表現できている。したがってこの解析によりキンク帯を表現できると考えられる。

キンク帯の形成は次のような過程を経ると考えられる。図3は 10×60 分割における底面系のすべり増分分布である。図3(i) および (ii) のように、材料が降伏すると試験片全体ですべりが生じ応力は徐々に緩和されていく。すべり領域は試験片中央に徐々に局所化していき、図3(iii) のように中央の1要素の局所化が完了すると、そこにキンク帯が形成される。キンク帯の幅にメッシュ依存性がみられるのは、変形の局所化が1要素まで進むためである。キンク帯が形成されると結晶格子が急激に回転するため、応力も急激に解放される。さらに圧縮を続けると図3(iv) のようにキンク帯の幅が拡大していく。

続いて特性長を与え、高次応力を考慮した結果について考察する。特性長を $r=0.5 \mu\text{m}$ とした時の応力ひずみ線図およびGN転位密度の刃状成分を図4に示す。メッシュサイズの違いによるキンク帯の幅の相違が小さくなり、メッシュ依存性が大幅に軽減されていることがわかる。しかしながら、応力ひずみ線図を見ると変形終了時の応力の値にわずかな差が見られる。さらに特性長を大きくして $r=1.0 \mu\text{m}$ とす

れば図5のようにメッシュ依存性はほぼ取り除かれる。また、キンク帯の幅やGN転位密度の大きさもメッシュサイズに依

図3 キンク帯の形成過程 ((i) $U/L=0.21\%$, (ii) 0.28% , (iii) 0.35% , (iv) 0.55% , 10×60 要素, $\varepsilon_s=0$)⁹⁾

図4 公称応力ひずみ線図および底面GN転位密度の刃状成分分布 ($r=0.5 \mu\text{m}$, $U/L=1.0\%$, (i) 5×30 , (ii) 10×60 , (iii) 15×90 要素)⁹⁾

図5 公称応力ひずみ線図および底面GN転位密度の刃状成分分布 ($r=1.0 \mu\text{m}$, $U/L=1.0\%$, (i) 5×30 , (ii) 10×60 , (iii) 15×90 要素)⁹⁾

らないことがわかる。したがって、寸法効果パラメータを $\varepsilon_s = 0.0056$ 程度にすればキンク変形のメッシュ依存性を除去できる。メッシュ依存性の除去という観点からは、高次応力の GN 転位に対する線形性の仮定は十分であると考えられる。特性長を与えない場合との違いは、すべり領域の局所化が 1 要素まで進まず、ある程度の幅をもって完了している点である。

5.3 キンク帯形成における寸法効果パラメータの影響

次に、寸法効果パラメータの変形に与える影響について調べる。前節の解析結果に基づいて、特性長は $r = 1.0 \mu\text{m}$ よりも大きい値とする。また、高次量の境界条件は変位制御面では治具や実験装置との接触を考慮してすべり拘束条件とし、自由表面では前節と同様にすべり自由条件とする。またメッシュは 10×60 分割の 600 要素で固定する。

寸法効果パラメータの影響を調べた結果を図 6 に示す。この結果から、寸法効果パラメータまたは特性長の増加に伴って激しい加工硬化が生じ、キンク帯の幅も拡大していることがわかる。寸法効果パラメータが大きい場合には、キンク帯の幅が広がり試験片全体ですべりが生じる。一方、この試験片の上下端面ではすべりを拘束しているため GN 転位が堆積する。このために加工硬化が生じると考えられる。これを確

かめるために、寸法効果パラメータを $\varepsilon_s = 0.022$ で固定し、試験片全体ですべり自由条件とした場合および試験片上下端面ですべり拘束条件にした場合について解析を行った結果を図 7 に示す。図 7(a) では、すべり拘束条件を与えると加工硬化が生じているのに対し、すべり自由条件では生じていない。図 7(b) の底面系のすべり分布図では試験片上下端面近傍でも底面すべりが活発に生じていることがわかる。また、図 7(c) においても GN 転位密度は値をほとんど有していない。この結果から、塑性変形が試験片で全体的に生じる場合に高次境界条件が大きな影響を及ぼすことがわかる。

5.4 回位四重極の表現

回位四重極構造に関する解析において、解析モデルは先ほどの単結晶解析と同じ 10×60 分割のメッシュを用い、自由表面ですべり自由条件、固定端ですべり拘束条件とする。特性長は $r = 1.0$ および $2.0 \mu\text{m}$ の 2 通りを考える。

図 8 は 1.0% 変形時のくさび形回位密度分布図である。キンク帯の四隅に回位が正負に分かれて集中していることがわかる。これは回位四重極構造に相当している。したがって、すべりの不適合度を用いることにより回位四重極構造を簡易的に表現できるといえる。ただし、回位密度を精密に定量化するには、物質点に回転の自由度を有する Cosserat モデルに基

図 6 公称応力ひずみ線図および底面 GN 転位密度の刃状成分分布 ($U/L = 1.0\%$, (i) $\varepsilon_s = 0.0056$, (ii) 0.011, (iii) 0.022, (iv) 0.056, (v) 0.17)⁹⁾

図 7 全表面においてすべり自由条件を用いたときの公称応力ひずみ線図および底面 GN 転位密度の刃状成分分布 ($U/L = 1.0\%$, $\varepsilon_s = 0.056$)⁹⁾

図8 不適合度のくさび型回位密度成分分布 ($U/L = 1.0\%$, (i) $r = 1.0 \mu\text{m}$, (ii) $2.0 \mu\text{m}$)⁹⁾

づく定式化が必要である。しかし、その検討は今後の研究に委ねることとする。

6. おわりに

LPSO型Mg合金の強化要因とされるLPSO相のキンク帯形成を計算力学的に表現することを目的とし、キンク帯形成のメッシュ依存性を軽減するために転位-結晶塑性モデルを高次応力理論に拡張した。続いて、得られたモデルに基づいてLPSO相単結晶に対するFEM解析を実施し、本モデルによるキンク帯形成のメッシュ依存性を寸法効果パラメータの観点から検討した。また、高次境界条件が変形に与える影響について調べた。さらに、キンク帯を特徴づける回位四重極構造を結晶塑性論に基づいて簡易的に表現する方法についても言及した。

謝 辞

本稿を作成するにあたり、数値解析の支援をいただいた慶應義塾大学大学院理工学研究科の木村祐一氏ならびに上田亮氏に対して深謝する。

参 考 文 献

- 1) Y. Kawamura, K. Hayashi, A. Inoue and T. Masumoto: Mater. Trans., **42** (2001), 1172-1176.
- 2) K. Hagihara, A. Kinoshita, Y. Sugino, M. Yamasaki, Y. Kawamura, H.Y. Yasuda and Y. Umakoshi: Acta Mater., **58** (2010), 6282-6293.
- 3) J. B. Hess and C. S. Barrett: Trans. Am. Inst. Min. Metall. Eng., **185** (1949), 599-606.
- 4) 上田 亮, 志澤一之: 材料, **64** (2015), 295-302.
- 5) 上田 亮, 志澤一之: 材料, **65** (2016), 220-227.
- 6) M. E. Gurtin: J. Mech. Phys. Solids, **48** (2000), 989-1036.
- 7) M. E. Gurtin: Int. J. Plasticity, **26** (2010), 1073-1096.
- 8) M. Kuroda and V. Tvergaard: J. Mech. Phys. Solids, **54** (2006), 1789-1810.
- 9) 木村祐一, 上田 亮, 志澤一之: 材料, **68** (2019), 825-832.
- 10) Y. Aoyagi and K. Shizawa: Int. J. Plasticity, **23** (2007), 1022-1040.
- 11) A. E. Romanov and V. I. Vladimirov: Phys. Status Solidi A, **78** (1983), 11-34.
- 12) K. Shizawa and H. M. Zbib: Int. J. Plasticity, **15** (1999), 899-938.
- 13) P. Steinmann: Int. J. Eng. Sci., **34** (1996), 1717-1735.
- 14) T. Ohashi: Philos. Mag. A, **70** (1994), 793-803.
- 15) T. Ohashi: Int. J. Plasticity, **21** (2005), 2071-2088.
- 16) M. E. Gurtin: J. Mech. Phys. Solids, **50** (2002), 5-32.
- 17) E. Bittencourt, A. Needleman, M. E. Gurtin and E. Van der Giessen: J. Mech. Phys. Solids, **51** (2003), 281-310.
- 18) L. P. Evers, W. A. M. Brekelmans and M. G. D. Geers: J. Mech. Phys. Solids, **52** (2004), 2379-2401.