結晶構造体に対する計算力学モデルの検討*

([II], 面外せん断荷重下のき裂先端の微視的変形場の 分子動力学シミュレーション)

北川 浩^{*1}, 中谷 彰 宏^{*2}

Study on Computational Modelling for Materials with Crystalline Structure ([II] Molecular Dynamic Simulation of Microscopic Crack Tip Field under Anti-plane Shear Loading)

Hiroshi KITAGAWA and Akihiro NAKATANI

The atomic-scale changes of a structure around the crack tip in a *fcc* crystal under anti-plane shear loading are analyzed by molecular dynamics (MD) simulation. The interatomic force interaction is assumed to be derived from the many-body potential proposed by Finnis and Sinclair. The crack surface and its front are assigned to (1) [110] (001), (2) [110] (111), and (3) [110] ($\bar{1}10$). The fixed boundary condition is adopted, that is, the displacement of the atoms located at the boundary is given, so that the atomic block is embedded in the elastic singular field with the prescribed stress intensity factor K_{III} . Ductile deformation with the emissions of screw dislocations from the crack tip is observed in every case. The dislocation moves in the {111} slip plane and dissociates into two Shockley partial dislocations. Repulsion between dislocations prevents their movement, and so-called cross slip appears; that is, some dislocations change their slip plane. Good correspondence is shown between the MD simulation and the results obtained from a continuum model of the crystalline material given by Rice et al.

Key Words: Computational Mechanics, Molecular Dynamics, *Fcc* Crystal, Ductile Fracture, Dislocation Emission, Screw Dislocation, Cross Slip, Anti-plane Loading

1. 緒 言

結晶体の内部構造に起因する力学特性に対する知見を得るためには、巨視的な力学場と内部構造の相互干渉を扱える現象のスケールに応じた階層的モデル化が必要である。第一報⁽¹⁾では、結晶塑性理論を組み込んだ連続体モデル⁽²⁾が、結晶すべりとといった内部構造の変化情報を取出しうる状態で巨視的な変形解析をすすめることができ、そのシミュレーション結果は、現象論的構成式を用いた結果と良く対応することを示した。しかしながら、結晶塑性理論もまた、結晶のすべりに対して、現象論的仮説に基づいている。著者らは、モードI型のき裂先端近傍の微視的変形場の挙動に対して、原子モデルにもとづく分子動力学 (Molecular Dynamics; MD) 法と結晶塑性理論を考慮した連続体モデルを用いる有限要素法によるシミュレーションを行ない、変形の原子レベルの微視的素過程である刃状転位の挙動と、連続体モデルの巨視的結晶すべりととのスケールを越えた対応をづけを行うことにより、これらの結晶構造体の

階層的なモデル化の可能性について検討を加えてきた^{(3)~(6)}。その結果、き裂先端が転位源となって起こる微視的現象が巨視的な現象に結びつく場合には、両モデルはよい対応を示すことがわかってきた。

この様な対応づけをさらに進めるために、本報では、面外せん断荷重下のき裂先端の微視的変形場の MD シミュレーションを行い、モードIIIき裂の変形において、先端から発生するらせん転位の挙動を調べる。モードIII型き裂における主要な変形機構であるらせん転位は、刃状転位のように限定されたすべり面上を運動するのではなく交差すべりをおこすなど比較的自由な運動が可能であり、き裂先端が転位源となって巨視的な塑性変形に結びつく様々な変形機構についての知見を引き出すことができると考えられる。ここでは、MD計算の結果を、結晶塑性論に基づくRiceとNikolic⁽⁷⁾(RNと略す)の解と比較し、原子モデルと連続体力学モデルとの接点を求めてゆく。また、付録において、き裂先端近傍の応力場の線形弾性解との比較を行なう。

2. 解析法

2.1 分子動力学法 古典力学にしたがって運動す

* 原稿受付 平成4年6月1日。

^{*1} 正員, 大阪大学工学部 (〒565 吹田市山田丘2-1)。^{*2} 正員, 大阪大学大学院。

る N 原子からなる系を考える。原子のニュートンの運動方程式は、

$$m \frac{d^2 \mathbf{q}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{q}_i} \quad (1)$$

となる。ここで、 $\mathbf{q}_i, \mathbf{F}_i (i=1, 2, 3, \dots, N)$ は、それぞれ、 i 番目の原子の位置ベクトルと作用する力、 m は原子の質量、 Φ は、系の全ポテンシャルエネルギーを表わす。ここでは、モデル材料として fcc 銅を対象とすることにして、次に示す Ackland ら⁽⁸⁾による Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いる。このポテンシャルは、

$$\Phi = \Phi_P + \Phi_N \quad (2)$$

$$\Phi_P = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(r^{ij}) \quad (3)$$

$$\Phi_N = - \sum_{i=1}^N f(\rho_i) \quad (4)$$

の様に、2 体項 Φ_P と、 N 体項 Φ_N の和で表わされる。

$$f(\rho_i) = \sqrt{\rho_i}, \quad \rho_i = \sum_{j \neq i}^N \phi(r^{ij})$$

$$V(r) = \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r)^3 H(r_k - r)$$

$$\phi(r) = \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r)^3 H(R_k - r).$$

r^{ij} は、 ij 原子間の距離であり、 $H()$ は、ヘビサイドのステップ関数である。また、パラメータ $a_1, \dots, a_6, A_1, A_2$ は、格子定数、弾性定数などが、材料の物性値に合うように決定されている。

表 1 解析対象

case	Crack Model	N	$\bar{K}_{III}$ MPa $\sqrt{m}/ps$	T_0 K
I1H	[110](001)	I 2268	0.05	180
I2H	[110](111)	I 2316	0.05	180
I3H	110	I 2280	0.05	180
I1L	[110](001)	I 2308	0.005	40
I2L	[110](111)	I 2316	0.005	40
I3L	110	I 2308	0.005	40
V1L	[110](001)	V 2246	0.005	40
V2L	[110](111)	V 2231	0.005	40
V3L	110	V 2266	0.005	40

図 1 面外せん断荷重下のき裂

図 2 原子配置図と境界条件 (I1H)

運動方程式 (1) の時間積分には、ここでは、5 次精度の Gear の方法⁽⁹⁾を用いる。系全体のエネルギー保存量をモニタしながら解析を進める。

2.2 き裂先端場の解析

fcc 銅単結晶中に、図 1 のように、 x, y, z 軸をそれぞれ、き裂進展方向、き裂面法線方向、き裂前縁方向とするモード III 形の荷重を受けるき裂を考える。解析領域は、 $x-y$ 面内で、 $40b \times 40b (b = \sqrt{2}/2a_0)$ は、バーガースベクトルの大きさ、 $a_0 = 3.615 \times 10^{-10} (m)$ は、格子定数) にとり、 z 方向は周期境界条件を適用する。初期条件として、初期設定温度 T_0 でのマックスウェル分布にしたがうランダムな初速度を各原子に与え、荷重負荷の境界条件として、モード III の応力拡大係数 K_{III} に対応する結晶方位に依存した異方性を考慮した線形弾性解より得られる z 方向変位 (付録、式 A1 参照) に基づいて、その時間変化率 $\dot{K}_{III}$ に対応する速度を境界の原子に与える。

表 1 に示すように、結晶方位、初期き裂のモデル化、温度、変形速度の異なる 9 種類のケースについて解析を行なう。各ケースの条件を表わす略号は、順に、き裂のモデル化の方法・結晶配向・初期温度および変形速度を表わす。初期き裂のモデル化の方法として、初期のき裂面を越えてはたらく原子間の相互作用は考えないことによりモデル化する方法 (略号 I)、き裂面を原子空孔のシートとしてモデル化する方法 (略号 V) の二種を考える。結晶の配向については、き裂前縁を $[110]$ 、すなわち、fcc 結晶におけるすべり方向 (らせん転位のバーガースベクトルの方向) にとり、 $x-y$ 面内で格子を回転させた、表中に示

図 3 き裂先端拡大図

した $[110](001)$, $[110](\bar{1}11)$, $[110](\bar{1}10)$ の三種類の配向を考え、それぞれ、略号 1, 2, 3 で表わす。最初の $[\]$ はき裂前縁の方向、続く $(\)$ はき裂面を表す。また、初期温度・変形速度について、 $T_0 = 180\text{K}$, $\dot{K}_{III} = 0.05\text{MPa}\sqrt{\text{m}}/\text{ps}$ (略号 H) と、 $T_0 = 40\text{K}$, $\dot{K}_{III} = 0.005\text{MPa}\sqrt{\text{m}}/\text{ps}$ (略号 L) の二種を考える。

図 2 に示すような初期原子配置を考える。図中で、丸の大小は、 z 方向に異なる層の原子を表わし、境界条件は、境界拘束原子に対して z 方向変位速度拘束量に比例した半径の円 ($\odot, \otimes$ はそれぞれ、 z 方向の拘束が正、負であることを示す) で模式的に示している。境界拘束原子は、 x, y 方向変位は零に固定され、 z 方向変位のみ規定される。また、各ケースのき裂先端の拡大図を図 3 に示す。初期き裂を実線で示す。また、I1L, I3L の場合に、き裂面と原子の位置が一致しないように、すべての原子を y の負の方向に微小量移動させる。原子の質量は、 $m = 1.05522 \times 10^{-25}(\text{kg})$ であり、時間ステップは、 $\Delta t = 5 \times 10^{-15}(\text{s})$ で行なう。

3. 解析結果と考察

3.1 原子配置の変化 各ケースの典型的な変形状態を図 4~6 に示す。ここでは、Vitek らの原子の z 方向

相対変位による表記⁽¹⁰⁾ と、各原子 x, y 位置での z 方向の変位を示す鳥瞰図とを用いて図示する。前者は、隣接する原子間の z 方向の相対変位を矢印で表したもので矢印の長さは完全結晶からのずれを示すと考えてよい。一方、後者は変形の履歴の集積を表している。

I1H では、き裂先端かららせん転位が発生し、 $(\bar{1}11)$ 面および、 $(1\bar{1}1)$ 面ですべりが生じ、転位はそれぞれ、 $[\bar{1}12]$, $[112]$ 方向に動く。I2H では、先端からき裂面 $(\bar{1}11)$ に発生したらせん転位は $[\bar{1}12]$ 方向に運動し、少し進んだ後、領域境界手前で $[\bar{1}12]$ 方向に向きを変え、交差すべりを生じる。変形が進むと、 $(1\bar{1}1)$ 面 $[112]$ 方向、 $(\bar{1}11)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向にも転位の運動が見られる。I3H では、き裂先端より発生した転位が $(1\bar{1}1)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向と $(\bar{1}11)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向に運動する。

I1L~I3L, V1L~V3L においても、定性的にはほぼ同様な変形を示す。V1L では、 $[\bar{1}12]$ 方向に進む転位は、き裂先端から完全に抜けず、き裂先端に部分転位を残したまま、隣接した原子層から別の転位が同様に発達する。この変形は、き裂先端の丸みが大きく、 $x-y$ 面内の変形の拘束が小さいために生じる $x-y$ 面内の原子の運動に関連していると考えられる。また、V3L においては、 $(1\bar{1}1)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向へ転位が発生し、境界付近まで進ん

図 4 解析結果 (I1H~I3H)

図 5 解析結果 (I1L~I3L)

だ後、新たな転位が先の転位と同じ方向に進展するが、途中で、 $(\bar{1}11)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向に交差すべりが起こる。これは、先の転位との相互作用により転位間に反発力が生じることによると考えられる。

図7は、転位の運動の典型的な例として、I1Lの、 $0.21 \sim 0.30 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ における $0.03 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ごとの相対変位図で、 $(\bar{1}11)$ 面を運動する転位が、境界にぶつかるまでを示している。各ケースにおいてこれとほぼ同様な結果が得られている。すなわち、らせん転位は最稠密面 $\{111\}$ を運動する。また、転位は、 $\langle 110 \rangle$ 方向に長さ $4a_0$ に広がり2つの Shockley の半転位にわかれ、拡張転位となる。これらの結果は、Pestman ら⁽¹¹⁾の結果と一致している。さらに、境界付近で交差すべりを生じる際に転位は収縮するなどの現象がみられる。初期き裂の位置、初期条件によって、I1Lの場合のように、一方だけ転位が入るなどの非対称な変形が生じてしまうことが起こるが、き裂のモデル化(IとVの違い)、および、初期き裂の位置によるこれらの変形に本質的な差はない。

3.2 応力値の評価 図8は、I1H の、 $K_{III} = 0.5 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ における相対変位図および、相当応力分布を示したものである。相当応力分布は、原子 i の応力テン

ソルを付録の式(A4)で計算し、その大きさに比例する半径で模式的に示したものである。この様にある瞬間の原子配置から計算される応力は、原子の振動により大きく変動するため、巨視的な応力にそのまま結び付けることはできないが、相対変位図と比較すると、変位差の大きい転位芯付近や、き裂先端付近での応力値が有限ではあるが大きくなっていることがわかる。

3.3 系のエネルギーの変化 図9に、系のポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、仕事、の変化を示す。ポテンシャルエネルギーは初期値との差を示す。温度 T は、運動エネルギー E_{kinetic} により、 $T = 2E_{\text{kinetic}}/(3Nk)$ として

図7 らせん転位の運動 (I1L)

図6 解析結果 (V1L~V3L)

図8 相当応力の分布図と相対変位図 (I1H, at $0.5 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$)

求めている。ここで、 k は、ボルツマン定数である。

各原子に与えた初速度が平衡状態をあらわしていないため、系の平衡状態への緩和が起こり、運動エネルギーが変化し、系の温度は180Kから約100K、40Kから約20Kのように変化し、初期の設定値より低くなる。

高温で変形速度が大きい、I1H~I3Hについては、変形が過渡的で動的な効果が大きいので、ポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、仕事の変化と転位の発生などの現象との対応をつけることはできない。

一方、低温で変形速度が小さい、I1L~I3Lと、V1L~V3Lについては、変形が小さいとき、系に加えた仕事は二次関数の形で増加し、そのまま、ポテンシャルエネルギー(ひずみエネルギーに対応する)の増加に結び付くが、系の運動エネルギーの増加にはほとんど寄与しない。これは、準静的な弾性体の挙動を示していると考えられる。き裂先端から転位が発生すると、ポテンシ

アルエネルギーが解放され、その散逸により、系は不可逆的な挙動を示し、階段関数状に急激な温度上昇がみられる。その後、温度はほぼ一定になる。また、ポテンシャルエネルギーの変化には、転位発生のためのエネルギー障壁が認められる。転位の発生点において、仕事の変化を示す曲線の傾きが変化するが、ここでは K_{III} を変位で変化させていて、この傾きは、一般化した力に関連するから、降伏と弾塑性挙動の最も微視的な素過程の応答を示すと考えられる。

低温の場合、転位の発生する臨界応力拡大係数の値についてみると、V1Lは、I1Lに対し大きく、逆に、V2Lでは、I2Lに比べて小さくなっている。これは、V1Lでは、先端の丸みが大きいため、先端応力値がI1Lに比べて小さくなっているため、また、V2Lでは、I2Lに比べて、き裂先端表面に可能なすべり面が多くあり、 $x-y$ 面内の変形拘束が小さい効果が勝ったためと考えられる。

図9 ポテンシャルエネルギー・運動エネルギー・仕事の変化

3.4 結晶理論による解との比較 Rice と Nikolic⁽⁷⁾

は、単結晶の降伏条件として、すべり系の臨界せん断応力 τ_0 がそのすべり系の降伏を限界付け、すべり系の分解せん断応力とせん断ひずみとの関係が、弾・完全塑性によって特徴付けられるとするモデルで、モード III き裂先端変形を論じている。そこでは、 τ_0 と、横弾性係数 μ が、材料特性値として既知で、 K_{III} の負荷が規定されるとき、き裂先端の漸近場では、 x 軸から反時計回りにとった θ のところで、先端から放射状に線状の塑性域が伸び、この塑性域で不連続な、周方向には一定の応力状態の扇形状の変形場が現われることを示し、その塑性域の長さ R とき裂先端の z 方向の不連続変位 Δw_z を求めている。最近、Mohanら⁽¹²⁾は、同様の問題に対して、結晶の回転を考慮した有限変形解析を行ない、RN 解では線状に現われる塑性域が拡散し、応力状態が一定の領域の境界が不明瞭になるといった違いを指摘しているが、ここでは、変形は微小であるとみなしているため、配向 1、配向 2 に対して、MD 計算の結果と fcc 結晶で 12 の $\{111\}$ 面 $\langle 110 \rangle$ 方向のすべり系を考慮した RN 解との比較を行なう。なお、比較する MD 計算結果としては、I1H, I2H の結果を用いる。高温で変形速度が大きい I1H, I2H の場合は、先の考察から、厳密な定量的な評価はできないが、変形が過渡的である分、解析領域の境界の影響を受けにくく、発生した転位が先端の変形場に及ぼす効果が小さいと考えられる。

RN 解は、配向 1 に対して、

$$R = 0.292(K_{III}^2/\tau_0^2) \quad (\theta = \pm 54.74^\circ) \quad \dots\dots (5)$$

$$\Delta w_z = 0.346(K_{III}^2/\mu\tau_0) \quad \dots\dots (6)$$

配向 2 に対して、

$$\left. \begin{aligned} R_H &= 0.385(K_{III}^2/\tau_0^2) & (\theta = 0^\circ) \\ R_1 &= 0.202(K_{III}^2/\tau_0^2) & (\theta = 109.46^\circ) \\ R_2 &= 0.076(K_{III}^2/\tau_0^2) & (\theta = -70.54^\circ) \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots (7)$$

$$\Delta w_z = 0.584(K_{III}^2/\mu\tau_0) \quad \dots\dots (8)$$

で与えられる。

原子モデルにおいて、微視的構造の特性を反映したマクロ量 τ_0 の意味が、明確ではなく、材料定数として定義できない。ここでは、MD 解析結果より得られた、 Δw_z から、式(6)(8)を用いて τ_0 を計算し、さらに、式(5)(6)に代入することにより、塑性域の長さ R を求め、この長さを RN 解による値とする。ここで、横弾性係数 μ には、Voigt 平均を用いることとする。他方、らせん転位の運動の軌跡を R についての MD 解とする。 $K_{III} = 0.5 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ における、計算結果を表 2 に示し、得られた塑性域を原

表 2 諸量および RN 解の計算値

MD モデル	配向 1	配向 2
μ GPa	54.6	54.6
Δw_z m	6.5×10^{-10}	8.5×10^{-10}
τ_0 GPa	2.4	3.1
R m	$R = 1.3 \times 10^{-8}$	$R_H = 1.0 \times 10^{-8}$ $R_1 = 5.3 \times 10^{-9}$ $R_2 = 2.0 \times 10^{-9}$

図 10 MD 計算の結果と RN 解との比較 (at 0.5 MPa√m)

子配置図に重ねて黒く塗りつぶした領域で示し、らせん転位の軌跡と比較する(図 10)。

RN 解の線状の塑性域は最稠密面に広がるが、その方向は、らせん転位の運動の軌跡と一致している。塑性域の大きさとらせん転位の運動の距離は必ずしも対応しないが、これは転位同士の弾性相互作用が連続結晶理論では十分考慮されていないこと、解析領域の境界条件によって生じる鏡像力の影響があること、さらに、転位の発生が不連続に起こること、などの諸原因が考えられる。しかしながら、オーダー的には対応しており、面外せん断荷重下のき裂においてもモード I 型のき裂と同様、き裂先端が転位源となって生じる変形については、原子モデルは結晶モデルとよい一致を示すといえる。

4. 結 言

(1) き裂先端から発生するらせん転位は、境界や、他の転位の影響を受けて交差すべりを生じすべり面を変えるが、最稠密な $\{111\}$ 面を運動する。長さ約 $4a_0$ に広がり 2 つの Shockley の半転位に分かれる傾向にある。

(2) 転位の発生によって、急激にポテンシャルエネルギーが解放され、系の温度が上昇する。これは、低温で変

形速度が小さい場合に顕著である。

(3) 原子モデルから計算される応力分布は、き裂先端付近や転位芯で有限ではあるが、大きな値を示す。

(4) らせん転位の運動の軌跡は、Rice と Nikolic らの弾・完全塑性漸近解による線状の塑性域と対応づけられる。き裂先端が転位源となって生じる変形については、原子モデルによる結果は結晶塑性理論と対応づけられると考えられる。

付録 A. 線形弾性解と MD 計算の応力の評価

MD 計算の境界条件として、モード III の応力拡大係数 K_{III} に対する異方性線形弾性解⁽¹³⁾を用いている。変位の z 方向成分 $w_z(r, \theta)$ は、

$$w_z = 2K_{III} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \Re \left[\frac{\sqrt{\cos \theta + s \sin \theta}}{c_{45} + s c_{44}} \right] \quad \dots\dots (A1)$$

で与えられ、応力成分 τ_{zz}, τ_{yz} は、

$$\begin{Bmatrix} \tau_{zz} \\ \tau_{yz} \end{Bmatrix} = \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \Re \begin{Bmatrix} \frac{-s}{\sqrt{\cos \theta + s \sin \theta}} \\ \frac{1}{\sqrt{\cos \theta + s \sin \theta}} \end{Bmatrix} \quad \dots\dots (A2)$$

で与えられる。ここで、 r は、き裂先端からの距離であり、 s とその共役量 $\bar{s}$ は、特性方程式

$$c_{44}s^2 + 2c_{45}s + c_{55} = 0 \quad \dots\dots (A3)$$

を満たす虚数または複素数で、記号 $\Re(z)$ は、 z の実部を表わす。また、 c_{ij} は、弾性マトリクスの ij 成分である。

一方、原子モデルでは、原子 i での応力テンソル $\tau_{\alpha\beta}^i$ を、

$$\tau_{\alpha\beta}^i = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\text{neighbours}} V'_{\text{eff}}(r^{ij}) \frac{r_{\alpha}^{ij} r_{\beta}^{ij}}{r^{ij}} \quad \dots\dots (A4)$$

で評価する。ここで、 Ω は、原子当たりの体積 ($= a_0^3/4$)、 V'_{eff} は、有効ポテンシャル、 r_{α}^{ij} は、原子間ベクトル r^{ij} の α 成分であり、ここで用いた、Finnis-Sinclair ポテンシャルでは、 $V_{\text{eff}}(r^{ij})$ は、次式で与えられる

$$V_{\text{eff}}(r^{ij}) = V(r^{ij}) - 2f'(\rho^i)\phi(r^{ij}). \quad \dots\dots (A5)$$

さて、分子動力学計算による結果と線形弾性解との対応を調べるために、I1H と同じ原子配置で、すべての原子に $K_{III}=0.1\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ に対応する変位を与えた後、境界原子を拘束し、MD 法により 10ps まで緩和計算を行なう。図 A1 に、 $\sigma_{zz} - \sigma_{yy}$ を 1~10ps まで平均をとってベクトル表示した応力ベクトル図を示す。先端付近の応力が非常に大きくなっていることがわかる。次に、 y 軸上での応力分布を図 A2, A3 に示す。実線は線形弾性解を表わしている。平均応力は線形弾性解に近い分布を示すことがわかる。き裂先端場の応力値は、MD 計算の結果、各瞬間で大きく変動するが、その時間平均をとると、線形弾性解の値とほぼ一致することがわかる。

文 献

- (1) 北川・小西・中谷, 機論, 57-541, A (1991), 1986.
- (2) Asaro, R.J., *Advances in Applied Mechanics*, Vol. 23, (1983), 117, Academic Press, Inc.
- (3) 北川・中谷, 機論, 第 68 期通常総会講演会, No. 910-17, Vol(A), (1991-3, 4), 474.
- (4) Kitagawa, H. and Nakatani, A., *Mechanical Behaviour of Materials - VI* Vol. 1, (ed. Jono, M. and Inoue, T.) *Proc. ICM-6*, (1991), 111.
- (5) Kitagawa, H. and Nakatani, A., *Constitutive Relations for Finite Deformation of Polycrystalline Metals* (ed. by Wang, R. and Drucker, D.C.) *Proc. IUTAM Symp.*, 1991, Beijing, (1992), 220, Springer Verlag.
- (6) 北川・中谷, 機論, 関西支部第 250 回講演会, No. 914-3, (1991-11), 75.
- (7) Rice, J.R. and Nikolic, R., *J. Mech. Phys. Solids*, **33-6** (1985), 595.
- (8) Ackland, G.J., Tichy, G., Vitek, V., and Finnis, M.W., *Philos. Mag. A*, **56-6** (1987), 735.
- (9) 橋渡, 固体物理, **24-8**, (1989), 242.
- (10) Vitek, V., Perrin, R.C., and Bowen, D.K., *Philos. Mag.*, **21** (1970), 1049.
- (11) Pestman, B.J., DeHosson, J.Th.M., and Vitek, V., *Philos. Mag. A*, **64-4** (1991), 951.
- (12) Mohan, R., Ortiz, M., and Shih, C.F., *J. Mech. Phys. Solids*, **40-2** (1992), 291.
- (13) Sih, G.C., Paris, P.C., and Irwin, G.R., *Int. J. Fract. Mech.*, **1** (1965), 189.

図 A1 応力ベクトル図
(2~5ps の平均)

図 A2 y 軸上での応力 σ_{zz} の分布
(from 1ps to 10ps step 0.04ps)

図 A3 y 軸上での応力 σ_{yy} の分布
(from 1ps to 10ps step 0.04ps)