メゾ力学のための非局所化弾性定数の検討*
(第 2 報, 点対称な均質構造と不均質構造に対する非局所性)渋谷 陽 二*¹Nonlocal Elastic Constants for Mesomechanics
(2nd Report, Nonlocal Properties for Centrosymmetric Homogeneous
Structures and Inhomogeneous Ones)Yoji SHIBUTANI*¹

Nonlocal elastic constants have been related to atomistic properties elucidated by atomic simulation through a macro-micro linking approach proposed in a previous paper (Trans. of JSME, Vol. 62, No. 601, 1996, 2054-2059). These nonlocal properties are evaluated either for the initial relaxed (meta-stable) structures of condensed matter or for structures under infinitesimal deformation. Therefore they could be called intrinsic (elastic) nonlocal properties. They appear tiny for the conventional cubic lattice structure like a face-centered cubic lattice (fcc), as predicted in the 1960s. In this second report, nonlocal material constants such as characteristic length are estimated for both homogeneous centrosymmetric bulk lattice structures and inhomogeneous relaxed surfaces and grain boundaries. Some surfaces with a low-to-high index and consistent tilt grain boundaries are constructed using molecular statics or molecular dynamics simulations employing the many-body potential. The nonlocal properties extracted from these atomic configurations are found to be sensitive to inhomogeneity, while the characteristic length itself is less than one-fifth of the lattice parameter.

Key Words: Micromechanics, Nonlocal Elastic Constant, Characteristic Length, Centrosymmetric Bulk, Inhomogeneous Structure, Molecular Statics, Molecular Dynamics

1. 結 言

前報⁽¹⁾において, コッセラ弾性理論における運動方程式と, 連続変位近似を導入した格子力学における運動方程式

の比較から, 次式に示すような一連の非局所化弾性定数を定義した. 任意な原子 α の位置する点を連続体力学における物体点とみなし, その点において,

$$\xi c_{ijkl} = \frac{1}{2v^\alpha} \sum_{\beta} \Phi_{ik}(\alpha; \beta) \bar{x}_j(\alpha\beta) \bar{x}_l(\alpha\beta) = C_{ijkl} \quad \dots\dots\dots(1)$$

$$2\xi b_{[ij,kl]m} = -\frac{1}{6v^\alpha} \sum_{\beta} \Phi_{ik}(\alpha; \beta) \bar{x}_j(\alpha\beta) \bar{x}_l(\alpha\beta) \bar{x}_m(\alpha\beta) = B_{ijklm} \quad \dots\dots\dots(2)$$

$$\xi l^2 a_{ijklmn} = -\frac{1}{24v^\alpha} \sum_{\beta} \Phi_{il}(\alpha; \beta) \bar{x}_j(\alpha\beta) \bar{x}_k(\alpha\beta) \bar{x}_m(\alpha\beta) \bar{x}_n(\alpha\beta) = A_{ijklmn} \quad \dots\dots\dots(3)$$

ここで, Φ_{ij} は仮定する原子間ポテンシャルの変位に関する 2 階微分(いわゆる力定数), $\bar{x}_i(\alpha\beta)$ は 2 原子(α, β)間の距離ベクトル, そして v^α は原子 α の原子体積を表す. 式(1)は通常の 4 階の弾性定数 c , 式(2), (3)は勾配項に対する 5 階および 6 階の非局所化弾性定数 b, a である. さらに, 式(1)および(3)より, 非局所性を表す特性長さ l を次

式のように定義する.

$$l^2 = \frac{1}{\xi} |\mathbf{A}| = \frac{1}{\xi} \sqrt{A_{ijklmn} A_{ijklmn}} \quad \dots\dots\dots(4)$$

ここで,

$$\xi = |\mathbf{C}| = \sqrt{C_{ijkl} C_{ijkl}}$$

すなわち, 6 階の非局所化弾性定数の大きさと, 4 階の弾性定数の大きさの比から特性長さを定義している.

* 原稿受付 1996 年 10 月 11 日.

*¹ 正員, 神戸大学大学院自然科学研究科 (〒657 神戸市灘区六甲台町).

非局所性には、材料の初期安定構造が潜在的に具備している材料特性値、いわば弾性非局所性と、変形に依存した非局所性が考えられる。本研究では、初期安定配置か、あるいは微小変形を適用範囲としているので、前者に相当する非局所性を対象とする。後者に関しては、最近 Fleck ら⁽³⁾ により提案された非局所性塑性論などが該当する。Mindlin ら⁽³⁾ や Krumhansl⁽⁴⁾ は、点対称性を持つ立方晶に対する非局所性が非常に小さいことを 1960 年代に示唆している。ここでは、多体効果を取り入れたより現実的な原子間ポテンシャルを用いて、まず分子静力学法(以降 MS 法と称する)や分子動力学法(以降 MD 法と称する)により、面心立方格子(fcc)の銅(Cu)を対象にした均質安定構造(バルク構造)と、不均質な表面や結晶粒界の安定構造を得る。そして、その原子構造に対する非局所性材料特性値を、特に特性長さに着目して求める。

2. 力定数

式(1)から(3)中にある Φ_{ij} は力定数と呼ばれ、原子間ポテンシャルの変位に関する 2 階微分で次式のように定義される。

$$\Phi_{ij}(\alpha; \beta) = \frac{\partial^2 E_{tot}}{\partial u_i^\alpha \partial u_j^\beta} \quad \dots\dots\dots(5)$$

ここで、ギリシャ文字(上付添字)は原子を、ローマ文字(下付添字)は座標成分を表す。本解析に用いる原子間ポテンシャルは、Finnis & Sinclair により提案された多体ポ

テンシャル(以降 FS ポテンシャルと称する)⁽⁵⁾⁽⁶⁾ である。FS ポテンシャルは、Daw & Baskes により提案された原子埋め込み法⁽⁷⁾ (EAM)と同様な全エネルギーの記述を行い、パラメタライズされた強結合近似法(Tight-binding 法)に基づいている。FS ポテンシャルによる全エネルギーは次式で表され、

$$\begin{aligned} E_{tot} &= E_{pair} + E_{many} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} V(r^{\alpha\beta}) - A \sum_{\alpha} F(\rho^{\alpha}) \quad \dots\dots\dots(6) \end{aligned}$$

ここで、 $F(\rho^{\alpha})$ は電子密度 ρ^{α} を持つ位置にある原子 α の埋め込みエネルギーを表わし、次式で定義される。

$$F = \sqrt{\rho^{\alpha}} \quad \dots\dots\dots(7)$$

この電子密度 ρ^{α} は、その原子 α に隣接する原子群 β の電子密度の線形結合として近似される。

$$\rho^{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \phi^{\beta}(r^{\alpha\beta}) \quad \dots\dots\dots(8)$$

ここで、 $\phi^{\beta}(r^{\alpha\beta})$ は電子密度が 2 原子間の距離 $r^{\alpha\beta}$ にのみ依存するという仮定の下で、原子 β からの電子密度の寄与を表わす。また、 $V(r^{\alpha\beta})$ は原子間の中心斥力を表わす。

式(5)の力定数の評価のために、式(6)の 1 階微分、および 2 階微分を以下に示す⁽⁵⁾。式(6)の右辺第 1 項は従来の 2 体間ポテンシャルと同じなので省略し、右辺第 2 項の多体項についてのみ示す。まず、1 階微分は、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{A} \frac{\partial E_{many}}{\partial r_i^{\alpha}} &= -F'_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} \phi'(r^{\alpha\beta}) \frac{r_i^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} + \sum_{\beta \neq \alpha} F'_{\beta} \phi'(r^{\beta\alpha}) \frac{r_i^{\beta\alpha}}{r^{\beta\alpha}} \\ &= -\sum_{\beta \neq \alpha} (F'_{\alpha} + F'_{\beta}) \phi'(r^{\alpha\beta}) \frac{r_i^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \quad \dots\dots\dots(9) \end{aligned}$$

となり、2 階微分は、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{A} \frac{\partial^2 E_{many}}{\partial r_i^{\alpha} \partial r_j^{\beta}} &= -(F'_{\alpha} + F'_{\beta}) H(\phi) \\ &+ \sum_{\gamma} F''_{\gamma} \phi'(r^{\gamma\alpha}) \phi'(r^{\gamma\beta}) \frac{r_i^{\gamma\alpha} r_j^{\gamma\beta}}{r^{\gamma\alpha} r^{\gamma\beta}} - F''_{\alpha} \phi'(r^{\alpha\beta}) \frac{r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \sum_{\gamma} \phi'(r^{\alpha\gamma}) \frac{r_i^{\alpha\gamma}}{r^{\alpha\gamma}} \\ &- F''_{\beta} \phi'(r^{\beta\alpha}) \frac{r_i^{\beta\alpha}}{r^{\beta\alpha}} \sum_{\gamma} \phi'(r^{\beta\gamma}) \frac{r_j^{\beta\gamma}}{r^{\beta\gamma}} \quad \dots\dots\dots(10) \end{aligned}$$

ここで,

$$F'_\alpha = \frac{\partial F}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho^\alpha}, F''_\alpha = \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho=\rho^\alpha}$$

$$H(\phi) = \frac{\delta_{ij}}{r^{\alpha\beta}} \phi'(r^{\alpha\beta}) + \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{(r^{\alpha\beta})^2} (\phi''(r^{\alpha\beta}) - \frac{\phi'(r^{\alpha\beta})}{r^{\alpha\beta}})$$

FS ポテンシャルの具体的な係数は文献(5), (6)を参照するとよい.

3. 不均質構造の非局所性

3・1 表面構造 (100), (120), (123)の3種類のミラー指数の表面を含む原子スラブを作成し, MS 法によりその安定構造を求めた. MS 法では温度の考慮ができなため, 環境温度は 0[K]となる. また, 面内2方向は周期条件を持つ. FS ポテンシャルのもとで, 最適化手法に基づく MS 法により表面の安定構造を得た後, 式(1)を用いて原子レベルの4階の不均質弾性定数を求めた一例が図1である. 縦軸は, 均質領域の3個の独立した成分 C^* (C_{11} , C_{12} および C_{44}) で無次元化し, 横軸は表面を 0 とし, その法線内部方向を格子定数 a_0 で無次元化している. 表面近傍の原子レベル弾性定数は, 対称性の喪失および緩和過程による構造変化が生じ, 均質領域(バルク領域)よりも増大していることがわかる. しかしながら, その変化は表面ごく近傍に限られており, 2 格子定数ほど内部にはいると独立な弾性定数3個で表される均質構造になっている. さらに, 式(4)から定義される特性長さ l を示したのが図2である. 縦軸は特性長さ l を格子定数 a_0 で無次元化し, 横軸は表面からの深さを格子定数 a_0 で除したものである. 表面近傍になるほど, そしてミラー指数が大きくなって対称

Fig. 1 Atomic level distribution of fourth-order elastic constants from copper (100) surface to inward

性を失う面ほど, 非局所性の増大していることがわかる.

3・2 結晶粒界構造 対称傾角軸 [001]とする $\Sigma 5$ および $\Sigma 13$ の結晶粒界を含む原子構造を作成し, MD 法を用いて安定構造を得た. 環境温度を 5 [K]とし, 3 軸とも周期条件を持つ解析セルを作成し, 圧力一定の MD 法により十分に緩和をさせた. その結果, 金属学的に安定な結晶粒界が得られ, その構造の一例を図3に示す. 黒丸は白丸より[001]方向に $a_0/2$ だけ上方に位置する原子面を示す. 同様に, 粒界面から法線方向の原子位置における特性長さ l の変化を求めたのが図4である. 縦軸は特性長さ

Fig. 3 An example of atomic image of relaxed $\Sigma 5$ grain boundary by MD method

Fig. 2 Distribution of characteristic lengths normalized by lattice parameter from surfaces (100), (120) and (123) to inward

l を格子定数 a_0 で無次元化し、横軸は結晶粒界面から垂直方向の距離 x_3 を格子定数 a_0 で除したものである。表面の場合と同様に、粒界近傍での非局所性の増大がみられる。図2との比較により、粒界構造の乱れは表面よりもより深く影響を及ぼしていること、また非局所性もやや大きくなっていることがわかる。

Fig. 4 Distribution of characteristic lengths normalized by lattice parameter from grain boundaries $\Sigma 5$ and $\Sigma 13$ to inward

4. 考 察

点対称性を持つ均質なバルク体を対象とすると、式(2)の5階の非局所化弾性定数は常にゼロになる。式(1)と(3)の通常の4階の弾性定数および6階の非局所化弾性定数について、等方テンソルを仮定し式(1)および(3)の定義式から得られる対称条件を用いた場合の独立な個数を調べる。そして、3.で得られた均質構造体(バルク)の原子構造に対して、式(1)および(3)を用いた非局所化弾性定数の全成分を求め両者を比べる。

4・1 式(1)の c_{ijkl} まず、式(1)の4階のテンソル c_{ijkl} について $\mathbf{x}^2$ -座標系へのテンソル変換は、次式で表わされる。

$$c'_{ijkl} = \beta_{im} \beta_{jn} \beta_{ko} \beta_{lp} c_{mnop} \quad \dots\dots\dots(11)$$

ここで、 β_{ij} は座標変換マトリクスである。いま、 $\mathbf{x}$ -座標系から $\mathbf{x}^2$ -座標系へ微小な回転により変換されるとすると、 ω_{ij} を回転テンソルとして β_{ij} は次式のように表わされる。

$$\beta_{ij} = \delta_{ij} - \omega_{ij} \quad \dots\dots\dots(12)$$

ω_{ij} は反対称テンソルで、回転軸ベクトル $\boldsymbol{\omega}$ と相対の関係があり、交代テンソル ε_{ijk} を用いて次式のようにも表わさ

れる。

$$\beta_{ij} = \delta_{ij} - \varepsilon_{ijk} \omega_k \quad \dots\dots\dots(13)$$

式(13)を式(11)に代入し、 c_{ijkl} が等方であること、および ω_i に関して2次以上の項は省略すると仮定すると、任意な ω_i に対して次式が成立する。

$$\varepsilon_{ims} c_{mjkl} + \varepsilon_{jns} c_{sinkl} + \varepsilon_{kos} c_{ijol} + \varepsilon_{lps} c_{ijkp} = 0 \quad (14)$$

式(14)の両辺に ε_{ijs} を掛けて整理すると、

$$2c_{ijkl} + c_{jtkl} + c_{kjt l} + c_{ljkt} = A_1 \delta_{kl} \delta_{ij} + A_2 \delta_{ji} \delta_{kt} + A_3 \delta_{jk} \delta_{il} \quad (15)$$

ここで、

$$A_1 = \frac{1}{3} c_{nnaa}, A_2 = \frac{1}{3} c_{obob}, A_3 = \frac{1}{3} c_{pcpp} \quad \dots\dots\dots(16)$$

式(1)から(3)で定義される弾性定数は、原子離散系モデルから求められる。したがって、通常の弾性理論に基づく弾性定数の対称条件のかわりに、式(1)から(3)より得られる対称性を用いる。式(5)の定義式から、点対称格子構造に対して力定数 Φ_{ij} は示数交換の対称性を持ち、そして2原子間の距離ベクトル $\mathbf{x}$ の交換から、

$$c_{ijkl} = c_{kjil} = c_{ilkj} (= c_{klji}) \quad \dots\dots\dots(17)$$

のような対称性を持つ。この条件を用いて式(15)を整理すると、次式のようになる。

$$3c_{kjil} + c_{kljt} + c_{kltj} = (A_1 + A_3) \delta_{kl} \delta_{ij} + A_2 \delta_{ji} \delta_{kt} \quad (18)$$

下付添字 (j, t, l) に関して順置換した式を2個求め、3式を加えあわせると、

$$c_{kjil} + c_{kljt} + c_{kltj} = \frac{1}{5} (A_1 + A_2 + A_3) (\delta_{kl} \delta_{ij} + \delta_{ji} \delta_{kt} + \delta_{kj} \delta_{il}) \quad (19)$$

式(18)から式(19)を引くと、

$$c_{ijkl} = T_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + T_2 \delta_{ii} \delta_{jk} + T_3 \delta_{ik} \delta_{jl} \quad \dots\dots\dots(20)$$

ここで、

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{1}{10} (-A_1 - A_2 + 4A_3), \\ T_2 &= \frac{1}{10} (-A_1 + 4A_2 - A_3), \\ T_3 &= \frac{1}{10} (4A_1 - A_2 - A_3) \end{aligned} \quad \dots\dots\dots(21)$$

となり、3個の独立した定数により表わされることがわかる。Cu の [100], [010] および [001] を座標系 (x, y, z) にとり、MS 法により得られた安定配置の構造から式(1)の4階の弾

性定数を求めると、同様に以下の3個の独立な成分が得られた。これは、ポテンシャルを決定する際に用いられた実験値の c_{11} 、 c_{12} および c_{44} と同一になる。

$$\begin{aligned} c_{11} &= 1.050 \quad [\text{eV}/\text{\AA}^3] = 168 \quad [\text{GPa}] \\ c_{12} &= 0.757 \quad [\text{eV}/\text{\AA}^3] = 121 \quad [\text{GPa}] \\ c_{44} &= 0.470 \quad [\text{eV}/\text{\AA}^3] = 75.3 \quad [\text{GPa}] \end{aligned}$$

ここで、 c_{ij} はVoigt表記の弾性定数を表す。また、上記の値を基準にして、回転に関するテンソル変換を行った曲線と、式(1)より求められた弾性定数を比較したのが図5である。実線は z 軸([001])まわりの回転によるテンソル変換、黒丸は原子シミュレーションの結果であり、両者の一致から式(1)で定義された4階の弾性定数はテンソルであることが確認される。

また、通常の弾性論における次式の対称性を用いて式(15)を整理すると、

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij} \quad \dots\dots\dots(22)$$

独立な個数は、よく知られたLaméの定数2個に帰着される。

4・2 式(3)の a_{ijklmn} 6階のテンソル a_{ijklmn} のテンソル変換式は、式(11)を拡張して、

$$a'_{ijklmn} = \beta_{ip}\beta_{jq}\beta_{kr}\beta_{ls}\beta_{mt}\beta_{nu} a_{pqrstuv} \quad \dots\dots\dots(23)$$

$$2a_{cjklnm} + a_{jcklmn} + a_{kjclmn} + a_{ljkcmn} + a_{mjklcn} + a_{njklmc} = a_{qqklmn} \delta_{cj} + a_{rjrlmn} \delta_{ck} + a_{sjksmn} \delta_{cl} + a_{ijkln} \delta_{cm} + a_{ujklmu} \delta_{cn} \quad \dots\dots\dots(24)$$

ここで、式(24)の右辺は、総和規約により4階のテンソルに縮約される。低次の階数に関しても等方性が成立するので、式(20)で求められた4階の等方テンソルを代入する。また、式(3)の定義式から、4・1と同様に、本研究で求められる6階の非局所化弾性定数には以下の対称性を持つことがわかる。

$$\begin{aligned} 3a_{cjklnm} + a_{jcklmn} + a_{kjclmn} + a_{mjklcn} + a_{njklmc} = & \\ & A_1 (\delta_{kl} \delta_{mn} \delta_{cj} + \delta_{km} \delta_{ln} \delta_{cj} + \delta_{kn} \delta_{lm} \delta_{cj} + \delta_{jl} \delta_{mn} \delta_{ck} + \delta_{jm} \delta_{ln} \delta_{ck} + \delta_{jn} \delta_{lm} \delta_{ck} \\ & + \delta_{jk} \delta_{ln} \delta_{cm} + \delta_{jl} \delta_{kn} \delta_{cm} + \delta_{jn} \delta_{kl} \delta_{cm} + \delta_{jk} \delta_{lm} \delta_{cn} + \delta_{jl} \delta_{km} \delta_{cn} + \delta_{jm} \delta_{kl} \delta_{cn}) \\ & + A_2 (\delta_{jk} \delta_{mn} \delta_{cl} + \delta_{jm} \delta_{kn} \delta_{cl} + \delta_{jn} \delta_{km} \delta_{cl}) \quad \dots\dots\dots(26) \end{aligned}$$

ここで、

$$A_1 = \frac{1}{15} a_{ijjdd}, \quad A_2 = \frac{1}{15} a_{ijidd}$$

Fig. 5 Tensor transformation of atomic level fourth-order elastic constants

4・1と同様に、微小な回転に対する不変性の条件から、式(15)に対応する式が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} a_{ijklmn} &= a_{jiklmn} = a_{imkljn} = a_{ijnlkm} (= a_{lmnij}) \\ &= a_{ikjlmn} = a_{ijklmn} \quad \dots\dots\dots(25) \end{aligned}$$

したがって、以上のことから式(24)の右辺は次式のように整理され、2個の独立な定数のみで表わすことができる。

下付添字 (c, j, k, m, n) に関して順置換により4個の式を求め、式(26)を含めてすべて加える。そして、式(26)から、その加え合わせた式を差し引くことにより、式(25)の対称

性をもつ6階の非局所化弾性定数 a_{ijklmn} が次式のように表わされる.

$$\begin{aligned} a_{ijklmn} = & \frac{3A_1 - A_2}{14} (\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{mn} + \delta_{ij}\delta_{km}\delta_{ln} + \delta_{ij}\delta_{kn}\delta_{lm} + \delta_{ik}\delta_{jl}\delta_{mn} + \delta_{ik}\delta_{jm}\delta_{ln} + \delta_{ik}\delta_{jn}\delta_{lm} \\ & + \delta_{im}\delta_{jk}\delta_{ln} + \delta_{im}\delta_{jl}\delta_{kn} + \delta_{im}\delta_{jn}\delta_{kl} + \delta_{in}\delta_{jk}\delta_{lm} + \delta_{in}\delta_{jl}\delta_{km} + \delta_{in}\delta_{jm}\delta_{kl}) \\ & + \frac{3A_2 - 2A_1}{7} (\delta_{il}\delta_{jk}\delta_{mn} + \delta_{il}\delta_{jm}\delta_{kn} + \delta_{il}\delta_{jn}\delta_{km}) \dots\dots\dots (27) \end{aligned}$$

上式より, a_{ijklmn} の729($=3^6$)個の成分のうち, 独立な成分は2個であることがわかる. **4・1**と同様に点対称格子構造に対して, 式(3)の6階の非局所化弾性定数を求める. そして, 独立な成分を調べると, 同様に以下の2個であることがわかり上記の予測と一致している.

$$\begin{aligned} \xi a_{111111} &= A_{111111} / l^2 = 0.163 [\text{eV}/\text{\AA}^3] = 26.1 [\text{GPa}] \\ \xi a_{111122} &= A_{111122} / l^2 = 0.324 [\text{eV}/\text{\AA}^3] = 51.8 [\text{GPa}] \end{aligned}$$

上式の換算に用いた特性長さ l の大きさは,

$$l/a_0 = 0.174 \quad (\text{格子定数 } a_0 = 3.615 [\text{\AA}])$$

と非常に小さく, 格子定数の1/5弱程度である.

通常のコッセラ弾性論において, 下記の示数交換の対称性のみを考慮すると,

$$a_{ijklmn} = a_{lmnij} \dots\dots\dots (28)$$

式(24)から同様な操作により, 11個の独立な係数を持つことになる. この結果は, Mindlin⁽⁸⁾や大南⁽⁹⁾によりすでに報告されている. すなわち, 前報⁽¹⁾で定義された6階の非局所化弾性定数は, 点対称な格子構造を持つ材料に対しては, 弾性論で定義されるものより対称性を多く持ち独立な成分が少なくなっていることがわかる.

5. 結 言

前報⁽¹⁾で定義した4階の弾性定数および6階の非局所化弾性定数の独立な成分について, 等方テンソルを仮定したテンソル解析による予測と一致することを確認し, 通常の弾性論の場合との違いについて検討を加えた. また, 分子静力学法や分子動力学法により, 面心立方格子(fcc)を持つ銅(Cu)を対象とした点対称な均質バルク構造, および表面や結晶粒界の不均質構造の安定構造を得た. そして, その安定構造に対して特性長さに代表される非局所性材料特性値の評価を行った結果, 以下のことがわかった.

1. 以前に予測されていたように, 立方晶のような点対称格子構造を持つ非局所性は非常に小さく, その特性長さは格子定数の1/5弱程度である.

2. 表面や結晶粒界といった面欠陥の不均質構造の存在は, 非局所性を増大させる.
3. 結晶粒界の構造変化は, 表面構造よりもより内部に影響を及ぼす.

結晶粒界に関する解析は, 神戸大学大学院石川恭弘氏(現ダイキン工業(株))により行われた. また, 本研究は, 文部省科学研究費補助金および倉田記念科学技術振興会奨励金の援助により行われたことを付記し, あわせてここに感謝する.

文 献

- (1) 渋谷陽二・V.Vitek・J.L.Bassani, 機論, **62**-601, A(1996), 2054-2059.
- (2) Fleck, N.A., Muller, G.M., Ashby, M.F. & Hutchinson, J.W., *Acta metall. mater.*, **42**-2, (1994), 475-487.
- (3) Mindlin, R.D. & Tiersten, H.F., *Arc. Rational Mech. Anal.*, **11**(1962), 415-448.
- (4) Krumhansl, J.A., *Lattice Dynamics (Proc. of Int. Conf. (Copenhagen))*, edited by Wallis, R.F., (1963), 627-634.
- (5) Finnis, N.W. & Sinclair, J.E., *Phil. Mag. A*, **50**-1 (1984), 45-55.
- (6) Ackland, G.J., Tichy, G., Vitek, V. & Finnis, M.W., *Phil. Mag. A*, **56**-6, (1987), 735-756.
- (7) Daw, M.S. & Baskes, M.I., *Phys. Rev. B*, **29**-12 (1984), 6443-6453.
- (8) Mindlin, R.D., *Mechanics of Generalized Continua, Proc. of IUTAM*, (1968), 312-320, Springer-Verlag.
- (9) 大南正瑛編, マイクロメカニクス入門, (1980), 39, オーム社.