分子動力学法によるナノ多結晶体の力学特性と
引張荷重下における非弾性変形機構の検討*中谷 彰宏^{*1}, 北川 浩^{*1}, 下川 智嗣^{*2}Molecular Dynamics Study of Mechanical Properties
and Inelastic Deformation Mechanism of Nanocrystalline Materials
under Tensile LoadingAkihiro NAKATANI^{*3}, Hiroshi KITAGAWA and Tomotsugu SHIMOKAWA^{*3} Osaka University, Dept. of Adaptive Machine Systems,
Yamada-oka 2-1, Suita, Osaka, 565-0871 Japan

Nano-polycrystalline material that consists of many minute (nanometer order) grains shows some interesting mechanical properties; e.g. opposite Hall-Petch relationship, superplasticity, and elastic modulus softening. To clarify the origin of these properties, we study the behavior of 3-dimensional nano-polycrystalline model under uniaxial tensile loading. The model consists of 48 aluminum grains and the dynamics of total 551011 atoms are simulated by using a large scale parallel molecular dynamics (MD). First, it is shown that the elastic moduli is located on intermediate value between the overall properties estimated by Voigt and Reuss models. Then, it is shown that crystalline slips caused by dislocations emitted from grain boundaries are one of main mechanisms of its deformation. Finally, the technique of the stereographic projection which is used to investigate the rotation of each grains in usual polycrystalline material, is applied to this atomistic simulation to elucidate a mechanism of slip. As the result, it is concluded that the crystal slip and grain rotation which are often observed in usual polycrystalline material appear during the atomistic deformation and they play an important role of the mechanism of inelastic deformation in nano-polycrystalline material.

Key Words: Computational Mechanics, Molecular Dynamics, Nanocrystalline Materials, Inelasticity, Plasticity, Dislocation, Crystal Slip, Grain Rotation, Stereographic Projection, Grain Boundary Migration

1. はじめに

近年, 多結晶体の粒径を数ナノメートルまで微細化したナノ多結晶体に多くの関心が集まっている. ナノ多結晶体は, 従来の多結晶とは異なった特有の性質を示すことが報告されており⁽¹⁾, 特に, その機械的性質では, Hall 粒径の $-1/2$ 乗に比例して降伏応力が増加する Hall-Petch の関係に従わないこと, 比較的低い温度域で超塑性を示すこと, 弾性率が低下することなどが知られている.

このような機械的性質の発現のメカニズム解明に向けて, 精力的に研究がなされている⁽²⁾⁻⁽⁶⁾. ナノ多結晶体の粒径は, 100nm 以下と極めて小さいために, 従来の粒径の大きい多結晶体に比べ, 粒界や粒界の会合部の体積分率が非常に大きいことや粒内に存在する欠陥が少ないことが特有の性質を生む原因となると考えられているが, まだ十分に明かにされているわけではない.

一方, コンピュータシミュレーションによる解析では, 適切なモデル化を通じて実験では実現が困難な条件を作り出したり, 特定のパラメーターの影響を調べたりすることを通じて現象の本質に肉薄できる利点があるため, 様々なアプローチが試みられている. 連続体モデルに基づくモデルによる研究⁽⁷⁾⁽⁸⁾⁽⁹⁾においても機械的性質の粒径・粒界の体積分率の依存性についても検討されているが, ナノ多結晶体の特性には原子レベルの構造変化が直接関わってくることは明かであり, 原子レベルの検討が有意義であると考えられる. 近年のコンピューターのパフォーマンス向上を背景に, 分子動力学法⁽¹⁰⁾によりその結晶粒サイズの原子集合を取り扱うことは可能になってきており, 原子/分子レベルでのアプローチにも期待が寄せられている⁽¹¹⁾⁻⁽¹⁵⁾.

例えば, Heinisch らは2つの粒(クラスター)の距離を変化させた時に見られる相互作用(粒の回転や拡散)について論じている⁽¹⁶⁾. Tajima らは2次元系のシミュレーションにより, 変形の素過程が結晶粒の相対的運動や回転であることを示している⁽¹⁷⁾. 岩崎らは高延性の原因が原子の再配列にあることを示している⁽¹⁸⁾. 井上らはき裂が粒界部分から発生することを確認し, 温

* 原稿受付 1999 年 3 月 19 日.

^{*1} 正員, 大阪大学大学院工学研究科(〒565-0871 吹田市山田丘2-1).^{*2} 学生員, 大阪大学大学院.

E-mail: nakatani@ams.eng.osaka-u.ac.jp

度の影響について考察している⁽¹⁹⁾。Ogawa は高温におけるジルコニウム多結晶の格子拡散、粒界拡散について考察している⁽²⁰⁾。Schiotz らは層状に結晶粒を配置し、変形に伴う粒界移動、分断について考察している⁽²¹⁾。また粒径を変化させ、粒を微細化することにより軟化することを発見している⁽²²⁾。

これらのシミュレーションの多くは、理想的な問題に限定して取り扱いを簡便にするとともに現象の素過程に対する有益な知見を得ることを意図して実施されているが、同時に、いくつかの素過程の複合により起こる現象を理解することも必要であると考えられる。そこで、本研究では、現実のナノ結晶において現れる機械的性質、特に変形のメカニズムに対する知見を得るために、55 万原子からなるナノ結晶モデルを作成し、引張変形シミュレーションを行い、ナノ多結晶体の非弾性域での変形メカニズムを解明するための一歩として、粒界の移動、相当ひずみによる粒内の転位の移動、ステレオ投影法の考えに基づいた粒の回転などを報告する。これらの変形メカニズムの解明は、粒界すべりとそれを補助する粒内、粒界での付随調査機構と深く関わって発現する高速超塑性のメカニズム⁽²³⁾に対し、定性的ではあるが有意義な知見を与える可能性がある。

2. 解析モデルと解析方法

2.1 解析モデルの作成と緩和計算 解析対象として、Al 原子からなるナノ結晶体を考える。原子間の相互作用は、有効媒質理論 (Effective-Medium Theory, EMT)⁽²⁴⁾により記述することとする。

一辺 $52a_0$ の立方体を単位セルとし、周期境界条件を仮定する。内部にランダムに配置した 48 個の代表点に対してボロノイ多面体分割を行ない、得られる 48 の多面体を結晶粒と考える。ここで、 $a_0 = 4.027 \times 10^{-10} \text{ m}$ はアルミニウムの格子定数である。ナノ結晶体の各粒内には転位はほとんど存在していないことが報告されているので、個々の結晶粒は、面心立方完全結晶により構成されるものとし、得られた多面体ごとにランダムな配向を与えて原子を満たす。その結果、個々の結晶粒に含まれる原子は、約 6000 から約 20000 個程度、平均粒径は約 5nm、総原子数は、551011 個となっている。

計算は領域分割法により MPI(Message passing interface)⁽²⁵⁾ライブラリを用いた並列化分子動力学プログラムにより行なう。まず、安定配置を得るために表 1 に示す緩和条件で速度スケール法により初期温度 (300K) を保った状態で緩和計算を行なう。

2.2 引張変形解析 単軸引張解析を行うためにセルに z 軸方向均一にステップ状にひずみ 0.004 与え、320 fs の間緩和するという手順を繰り返すことにより、表 2 に示す条件で単軸引張変形の解析を行なう。 x , y 軸方向の伸縮は、Parrinello-Rahman のアルゴリズムを

用いた圧力一定の方法で実現する。

Table 1 Condition of analysis on relaxation

Number of Atom	551011
$L_x \times L_y \times L_z$	$52a_0 \times 52a_0 \times 52a_0$
Analysis method	constant pressure MD Parrinello-Rahman algorithm
Initial temperature	300 K
Boundary condition	Periodic boundary condition applied in x,y,z direction
Relaxation time	38000 fs
Time step	2.0 fs
Number of CPU	32

Table 2 Condition of analysis on tensile testing

Initial temperature	300 K
Strain rate	$1.25 \times 10^{10} \text{ 1/s}$
Final simulation time	40000 fs
Final strain	0.500

3. 解析結果と検討

3.1 緩和後の構造とサイトポテンシャルエネルギー

図 1 は、今回作成したナノ多結晶体のサイトポテンシャルエネルギー (各原子のポテンシャルエネルギー) 分布を、完全結晶体のそれと比較したものである。この結果は、粒界・欠陥近傍に位置する原子は結晶領域に位置する原子よりも高いエネルギーを持つことことを裏付けている。

また、図から、 $-5.12 \times 10^{-19} \text{ J}$ 以上のポテンシャルエネルギーを持つ原子は完全結晶体のモデルでは存在しないことから、ここでは、それ以上のエネルギーを持つものを粒界・欠陥近傍の領域に属している原子としそれぞれを識別することにする。緩和後の原子配置を図 2 に示す。図では、このサイトポテンシャルエネルギーの違いを評価して、粒界・欠陥近傍の領域に属している原子を黒色、完全結晶の部分に属している原子を灰色で示している。

図 2 で識別された粒界・欠陥部分は、モデル作成時に想定した結晶粒界および、初期配属粒 (初期状態で同じ結晶方位をもつ原子からなる結晶粒) の境界部分とよく一致しており、ここでの緩和シミュレーションの間に顕著な結晶粒成長や、消滅などは起こっていない。また図より、無負荷の状態で結晶粒内に転位などの欠陥の存在は認められない。

(a) Perfect crystal (b) Nano-polycrystal
Fig.1 Distribution of site potential energy

Fig.2 Relaxed configuration

3.2 応力ひずみ関係と粒界割合の変化 変形のシミュレーションにおける応力-ひずみ曲線を図3に示し、全体の原子数に対する粒界部分に属する原子の割合 (Boundary component proportion; BCP)⁽²⁶⁾の変化を図4に示す。

ひずみ $\varepsilon_z \approx 0.070$ の範囲では、応力ひずみ関係はほぼ線形で、弾性的に変形が進行していると考えられる。また弾性ひずみエネルギーの寄与により見かけ上BCPは2次関数的に増加していく。一方、最高荷重点を経て $\varepsilon_z \approx 0.100$ の範囲内では、BCPの増加の仕方に変化が生じ、徐々に増加し、その後、ひずみの増加に対してほぼ一定となる。これは、結晶内部での不均一な変形による欠陥の領域の割合がほぼ平衡状態に達したためである。さらに変形が大きくなると、変形応力もほぼ一定値となっていることがわかる。

Fig.3 Stress-strain curve

Fig.4 Relationship between BCP and strain

3.3 巨視的弾性定数 立方晶の弾性定数は、 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{44} の3つの独立な成分で表現され、単結晶では異方性を示す。単結晶のランダムな配向によって実現される多結晶は巨視的には等方性を有していると考えられる。ここでは、表3の EMTを用いた Al 単結晶の弾性定数⁽²⁷⁾を用いて、Al 多結晶体を、巨視的均一性を有していると仮定して巨視的弾性定数を Voigt の方法、および Reuss の方法で評価する⁽²⁸⁾。概念的に言えば、Voigt の方法は、ひずみテンソルが多結晶体内で一定、Reuss の方法は、応力が一定であると仮定したものに对应し、ここでは、添字 V, R をつけて示すことにする。体積弾性係数 K^V 、 K^R 、せん断弾性係数 G^V 、 G^R は、

$$K^V = K^R = K^C \dots\dots\dots (1)$$

$$G^V = \frac{1}{5}(2G_1 + 3G_2), \quad G^R = \frac{5G_1G_2}{3G_1 + 2G_2} \dots\dots (2)$$

で与えられる⁽²⁸⁾。ここで、 G_1 、 G_2 は、

$$G_1 = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \quad G_2 = C_{44} \dots\dots\dots (3)$$

である。さらに、縦弾性係数 E 、ポアソン比 ν が次式で評価できる。

$$E = \frac{9KG}{3K + G}, \quad \nu = \frac{E}{2G} - 1 \dots\dots\dots (4)$$

Table 3 Elastic constants of fcc Al single crystal

C_{11} GPa	C_{12} GPa	C_{44} GPa
104.4	80.1	42.4

このようにして得られた巨視的弾性定数を表4に示す。これらの値を用いて得られる応力ひずみ関係と今回のシミュレーションで得られた結果と比較したものを図5に、セル全体に与えるひずみ ε_z とシミュレーションで得られたセルの横方向ひずみ ε_x 、 ε_y の関係について図6に示し、今回のモデルと Voigt, Reuss の2つのポアソン比から求まるセルの横ひずみを比較し図7、図8に示す。

Fig.5 Stress-strain curve (elastic region)

Fig.6 Relationship between strain ε_z and transverse strain ε_x , ε_y Fig.7 Relationship between strain ε_z and transverse strain ε_x Fig.8 Relationship between strain ε_z and transverse strain ε_y

図5よりひずみ 0.008 まではこの範囲に入っていることが確認でき、応力一定と考える Reuss モデルに近いことが確認できる。またこれは、ナノ結晶の弾性定数が減少する傾向にあるという実験事実⁽²⁹⁾に合致する。

変形が大きくなると、線形関係から逸脱するようになる。このことは第一にポテンシャルの非線形性によると考えられる。また粒界領域では粒内に比べて原子構造がエネルギー的に不安定であり、粒界原子の準安定状態間の推移が見かけ上の応力を低減すると考えられる。

Table 4 Macroscopic elastic moduli

	K GPa	G GPa	E GPa	ν
Voigt	88.2	30.3	81.56	0.346
Reuss	88.2	21.2	58.90	0.389

図7, 8より, 変形初期においては, x 方向, y 方向のひずみ ε_x , ε_y は Voigt および Reuss の方法により評価した直線の2つの間に入っており, 等方性を有しているとみなせることがわかる. しかしながら, 図6からもわかるように変形が大きくなると両者の差は大きくなり, ナノ多結晶体が均一変形ではないことを示している.

3.4 結晶粒および粒界の移動 図9に初期配属粒に応じて色分けをした変形初期の図(a)と変形後($\varepsilon_z = 0.5$)の図(b)を示す. また, 変形前の各初期配属粒の重心の無次元化座標と変形後の値の差のノルムを評価し図10に示す. 図10からいくつかの結晶粒で単位セル一辺の4%以上の値となり, 比較的大きな移動が見られるけれども, 図9からわかるように多くの結晶粒において初期配属粒自体が解析中大きく移動していないことがわかる.

Fig.9 Atomic arrangement of all (colored by original grain)

Fig.10 Distance of X_G from Initial X_G Fig.11 Analysed nanocrystal ($\varepsilon_z = 0.5$)

図11にサイトポテンシャルエネルギーにより識別した変形後の原子配置を示す. 図11と図9(b)を比べると, 必ずしも初期配属粒の境界が粒界に対応しているわけではないことが確認できる.

この様子をさらに詳しく見るためにある断面での変

形前(ひずみ $\varepsilon_z = 0.0$)と, 変形後(ひずみ $\varepsilon_z = 0.5$)の原子配置に対して, 初期配属粒による色分けしたものとサイトポテンシャルにより識別した結果を図12, 13に比較して示す.

Fig.12 Atomic arrangement of one plane (colored by original grain)

Fig.13 Atomic arrangement of one plane (colored by using site potential energy)

図12(a)と図13(a)を比較すると初期配属粒の境界とサイトポテンシャルエネルギーにより粒界または欠陥と判別された領域がほぼ一致していることがわかる. しかしながら, 図12(b)と図13(b)を比べると初期配属粒による境界と欠陥領域とは対応せず, 粒界が移動していることが確認できる.

このことは, ここで図13に示す矢印をつけた原子(同じ原子)のサイトエネルギーの変化を示した図14によってより明かである. 図からひずみ0.2から0.35の区間でこの原子のサイトポテンシャルエネルギーがしきい値 $-5.12 \times 10^{-19} \text{ J}$ を越えており, 粒界が通過していることがわかる.

Fig.14 Site potential of marked atom in Fig.13

3.5 原子配置の変化とミクロな変形メカニズムの検討
 モデルから切り出したある領域の原子に対して、その後の運動を、式(5)に示すようなある基準点まわりの重み付け平均した変位のこう配⁽¹⁰⁾から評価されるひずみによりミクロな変形メカニズムの検討を行う。ここで x_i^P は基準点 (今回は変形後の原子の位置) の座標で、 $x_i^{(\alpha)}$ は基準点と変形後の原子との相対位置、 $u_i^{(\alpha)}$ は基準点周りの各原子の変位である。また、重み関数として正規分布を用いるが σ はその標準偏差でありここでは、 $\sigma = 2 \times 10^{-10} \text{m}$ としている。なお、以下では、相当ひずみ $\bar{\epsilon}^{(30)}$ を求めることにより、ひずみ量をスカラー化してその値に対応する濃淡によって原子に色づけして示す。

$$\epsilon_{ij}(x^P) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \left[u_i^{(\alpha)} x_j^{(\alpha)} + u_j^{(\alpha)} x_i^{(\alpha)} \right] \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^3 \times \frac{1}{\sigma^5} \exp \left(-\frac{x_k^{(\alpha)} x_k^{(\alpha)}}{2\sigma^2} \right), \quad \bar{\epsilon} = \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\epsilon_{ij} \epsilon_{ij}} \quad (5)$$

図15(a),(b)に緩和後の構造に対し、粒界を含む領域について変形による構造変化を確認しやすくするため $\{111\}, \{100\}$ 面などの面で切り出し、サイトポテンシャルエネルギーにより識別した粒界部と結晶部を示し ((b)は(a)の紙面の裏側にあたる)、図16(a)~(c)に全体のセルに与えたひずみ0.008間での相当ひずみを示し、(d)~(f)に緩和後からセルに与えたひずみ間での相当ひずみを示す。濃い色ほど基準点周りの原子の変位から評価されるひずみが大きいことを表す。ここで、図16(a)と(d)に示しているB点は同じ場所を示しており、(a)~(c)と(d)~(f)はそれぞれ対応関係にある。

A点では、粒界から生じた転位が粒内を運動していき、反対の粒界に達する様子がわかる。また、B点に生じたらせん転位は、粒内を運動し、粒界に突き当たるが、図16(a)~(c)では粒界を横切ること無く粒界に沿って交差すべりを起こす。また、図16(d)~(f)は粒界を介して隣の結晶に転位を発生させる。C点に生じているらせん転位は粒界に達し同じ結晶内の違うすべり面で交差すべりを繰り返し、違う粒界に達し、粒界に沿ってすべる。このように、ナノ結晶の最高荷重点後の非弾性変形機構には粒界が大きく関与していると言える。また、相当ひずみを用いることで、実験的にナノスケールの粒では確認が難しい転位の動きを確認できた。

粒径の大きい通常の多結晶体では粒内の転位の増殖や運動、粒界へのパイルアップによって硬化するが、粒径の小さいナノ多結晶体はここで確認できるように、粒内転位は粒界に抜ける。また図4でBCPが一定となっていることから粒内に蓄積される転位はほとんど

見られないと考えられる。このことがナノ多結晶体がHall-Petchの関係を示さない原因の一つであると考えられる。

Fig.15 Atomic arrangement near grain boundary

Fig.16 Deformation near grain boundary

3.6 結晶粒の不均一変形 巨視的なひずみに対して、個々の結晶粒がどのように応答しているかを調べるために、図 17(a) に示すようにある粒界をはさんだ 2 つの結晶粒から切り出した完全結晶体に対して得られる変形後の原子配置を図 17(b) に示す。また、図で矢印をつけた原子の引張方向 (z 方向) の変位から計算されるひずみ (微視的ひずみとする) と巨視的ひずみ ε_z の関係を図 18 に示す。図より巨視的な応力ひずみ関係が最高荷重点までの弾性領域では巨視的ひずみと結晶粒のひずみはほぼ一致しているとみなせるが、最高荷重点以降、微視的ひずみと巨視的ひずみの差が顕著になり、内部変形が不均一になることがわかる。

図 19 は、変形前と変形後の原子配置に対して、初期配属粒ごとに z 座標の最大値と最小値の差をとって、その変化によって算出したひずみを示している。この図からもセル内部で不均一な変形が生じていることも確認できる。

(a) $\varepsilon_z = 0.000$ (b) $\varepsilon_z = 0.5$
Fig.17 Deformation of Grains

Fig.18 Macro, microstrain-macrostrain relationship

Fig.19 Each grain's strain

3.7 結晶粒の回転 前節で述べたように、非弾性変形領域では、微視的に見れば個々の結晶粒では不均一な変形が生じつつ巨視的な均一変形が実現されている。そのために粒界近傍の原子の再配列や結晶粒の相対すべりや回転などが、変形を持続させるための要因になっていると考えられる。ここでは、結晶粒の回転に注目し、ランダムに配置した結晶粒の方位がひずみの増加に伴ってどのように変化していくかを調べるために、ステレオ投影法⁽³¹⁾を原子配置に適用する。

各原子とその最隣接原子 (ここでは fcc 構造なので 12 個) の情報により決定した配向をその原子の配向と定義し、その配向を基準に引張軸の方向を決定し、図 20 に示す斜線部の標準三角形内の点と対応づける。

結晶塑性論によれば三角形内にあるときは単一すべりが支配的となり、辺上にあるときは重すべりが支配的となり、引張軸は変形に従い図 20 に示す方向に向かって回転していくことが知られている。

まず、サイトポテンシャルエネルギーによる識別によって結晶部分と判断された全原子についてステレオ投影を行う。図 22 にそれぞれの等高線により色分けした内部分布を示す。図 22 から分かるように最初ランダムに分布していた引張軸が変形量の増大とともに図 20 に示すように標準三角形の斜辺に向かって回転していることが確認できる。このことは異なった方位を持つ結晶粒をランダムに配置したにも関わらず、結晶粒の回転に規則性があることを意味している。

Fig.20 Rotation of sample axis in tensional deformation

Fig.21 Position of each grain : $\varepsilon_z = 0.0$

Fig.22 Contour of each strain : total atom

次に個々の粒の引張軸の回転を確認するため、図 21 に示す 4 つの適当な結晶粒に対してステレオ投影を行い、図 23 に示す。等高線が 0.003 以上の部分をひずみの増加に伴い示している。それぞれは連続して分布していることから、結晶粒単位の回転をしていることが確認でき、必ずしも図 20 に示すように回転していないが、特異な回転をしていることが確認できる。これは、

結晶粒の寸法が非常に小さいために、結晶内部に発生する転位が必ずしも完全転位にはならず、部分転位により形成する積層欠陥で十分安定な構造をもつためと考えられる。

Fig.23 Rotation of atomic axis in crystal grains

ここでは紙面の都合上割愛するが、その他の結晶粒においても、同様の傾向に従っていることを確認している。このように、今回のシミュレーションモデルでは、結晶すべりによる粒の回転とそれに伴う粒界すべりが変形メカニズムを大きく支配していると考えられる。

4. おわりに

本研究では、ナノ多結晶体の変形機構のメカニズムを解明するために、領域分割した並列分子動力学法を用いて約55万原子よりなるAlの単軸引張解析を行った。その結果、以下のような結論を得た。

(1)BCP-ひずみ曲線から、最高荷重点後ひずみの増加に対して、結晶粒内部の欠陥(転位等)の数は平衡となることを確認し、また、粒内に発生した転位は粒内に蓄積せず粒界に抜けることから、ナノ多結晶体がHall-Petchの関係を示さない原因の一つを確認した。

(2)相当ひずみを用いることで、実験的には困難なナノスケールの結晶粒内での転位の運動・軌跡が確認できた。

(3)転位の発生・運動・消滅に対して粒界が密接に関係していることを確認した。

(4)各原子にステレオ投影法の考えを用いることで、ランダムな方位を持った結晶粒が、結晶塑性学的に規則的な結晶粒の回転を起こすことを確認した。

(5)今回のモデルでは、変形は結晶粒自体の移動はほとんど認められず、むしろ、結晶すべりによる結晶粒の回転とそれに伴う粒界すべりに変形を支配されていると確認した。

なお、本研究の一部は文部省科学研究費補助金の援助を受けて実施したことを記し、謝意を表する。

文 献

- (1) 荻野喜清, ナノ組織材料の構造と性質, 鉄と鋼, **80**-11 (1994), 807-811.
- (2) Mishra, R. S., & Mukherjee, A. K., *TMS Annual Meeting*, (1998), 109-116.
- (3) Wang, N., Wang, Z., Aust, K. T., & Erb, U., *Mater. Sci. Eng., A*, **237**-2(1997), 150-158.
- (4) Börner, I. & Eckert, J., *Mater. Sci. Eng., A*, **226-228**(1997), 541-545.
- (5) Mishra, R. S., Mukherjee, A. K., Mukhopadhyay, D. K., Suryanarayana, C., & Froes, F. H., *Scripta Mater.*, **34**-11(1996), 1765-1769.
- (6) Nieh, T. G., Luo, P., Nellis, W., Lesuer, D., & Benson, D., *Acta Mater.*, **44**-9(1996), 3781-3788.
- (7) Kim, H. S., Suryanarayana, C., Kim, S. J., & Chun, B. S., *Powder Met.*, **41**-3(1998), 217-220.
- (8) Hackney, S. A., Ke, M., Milligan, W. W., & Aifantis, E. S., *Proc. TMS Mater. Week'95 Symp.*, (1996), 421-426.
- (9) Lian, J., Baudelet, B., & Nazarov, A. A., *Mater. Sci. Eng., A*, **172**-1-2(1993), 23-29.
- (10) 北川 浩・北村隆行・渋谷陽二・中谷彰宏, 初心者のための分子動力学法, (1997), 養賢堂.
- (11) Hu, S., Ludwig, M., Farrissey, L., & Schmauder, S., *MRS Symp. Proc.*, **492**(1997), 395-400.
- (12) Sasajima, Y. & Okuda, S., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **457**(1997), 547-550.
- (13) Zhiying, D. & Zhiying, C., *J. Mat. Sci. Tech.*, **12**-6(1996), 476-478.
- (14) D'Agostino, G. & Van Swygenhoven, H., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **400**(1996), 293-298.
- (15) Wolf, D., Phillpot, S. R., & Keblinski, P., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **400**(1996), 115-117.
- (16) Heinisch, H. L., *TMS Annual Meeting*, (1996), 299-310.
- (17) Tajima, J., Nishioka, K., Inai, N., & Takai, T., *Mat. Sci. For.*, **207-209**-2(1996), 661-664.
- (18) 岩崎富生・佐々木直哉・千葉矩正・阿部康夫, 機論, A 編 **60**-578(1994), 2377-2382.
- (19) 井上秀行・赤星保浩・原田昭治・長原秀健, 機構論, No.940-39(1994), 63-68.
- (20) Ogawa, H., *Mesoscopic Dynamics of Fracture* (Kitagawa, H. et al.(Eds)), (1998), 155-164, Springer.
- (21) Schiøtz, J., Rasmussen, T., Jacobsen, K. W., & Nielsen, O. H., *Philos. Mag. Lett.*, **74**-5(1996), 339-344.
- (22) Schiøtz, J., Tolla, F., & Jacobsen, K. W., *Nature*, **391**-5(1998), 561-563.
- (23) Higashi, K., Mabuchi, M., & Langdon, T. G., *ISIJ Int.*, **36**-12(1996), 1423-1438.
- (24) Jacobsen, K. W., Nørskov, J. K., & Puska, M. J., *Phys. Rev. B*, **35**-14(1987), 7423-7442.
- (25) MPI フォーラム, "MPI メッセージ通信インターフェース標準(日本語訳ドラフト)", (1996).
- (26) Chen, D., *Mater. Sci. Eng., A*, **190**-1-2(1995), 193-198.
- (27) 斎藤賢一, 大阪大学学位論文, (1996).
- (28) 大南正瑛, マイクロメカニクス入門, (1980), オーム社.
- (29) Shen, T. D., Koch, C. C., Tsui, T. Y., & Pharr, G. M., *J. Mater. Res.*, **10**(1995), 2892-2896.
- (30) 山田嘉昭, 塑性力学, (1965), 日刊工業新聞社.
- (31) 日本金属学会編, 結晶の塑性, (1977), 丸善.