

第3章 結晶のすべり変形

金属材料は無機材料とは異なり、一般に塑性変形（plastic deformation）が起こりやすい。すなわち、力を加えると形を変えることができる。しかし、形は変わるが、材料の全体積は一定に保たれる。したがって、単軸引張応力を加えて塑性変形をさせる場合、材料は巨視的には引張軸方向へ伸び、それに垂直な方向へは縮む。しかし、単結晶、多結晶を問わず、個々の結晶粒の内部では、塑性変形はすべり変形（slip deformation）の組み合わせによって起こっていることが知られている。すべり変形とは、ちょうど積み上げられたトランプカードをずらすような変形で、与えられた結晶によって決まる特別な結晶面をすべり面とし、すべり面上の特別な結晶方向をすべり方向とするせん断変形のことである。実際、表面をよく磨いた金属を塑性変形させると、表面に微細な多数の平行な線（すべり線，slip line）による段差が出現することが光学顕微鏡で観察される。

表 3.1 と図 3.1 に金属材料の代表的な 3 つの結晶で最もよく見られるすべり面とすべり方向を示した。すべり面とすべり方向とを組にしてすべり系（slip system）という。条件や結晶によってはこれ

結晶構造	すべり面	すべり方向
面心立方晶(fcc)	{111}	$\langle 110 \rangle$
体心立方晶(bcc)	{110}	$\langle 111 \rangle$
最密六方晶(hcp)	(0001)	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$

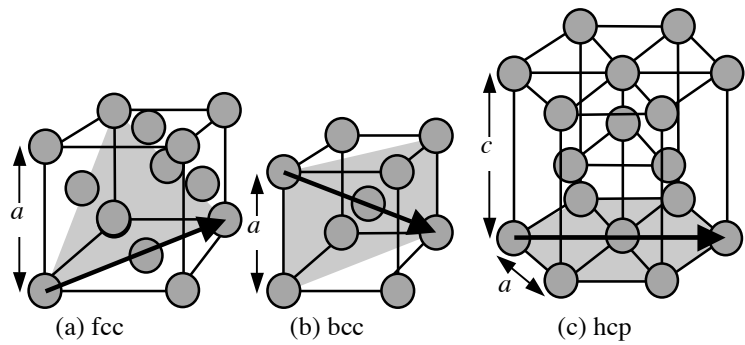


図 3.1 3 種の結晶でのすべり面とすべり方向

以外のすべり系も働くが、表 3.1 の代表的なすべり面は結晶の最密原子面（原子が一番密に詰まっている面で、この面の面間隔が最も広い）であり、すべり方向は最近接原子を結ぶ方向であると憶えておくとう便利である。面と方向を示す括弧は、等価なものをまとめて示すときには、それぞれ $\{ \}$ 、 $\langle \rangle$ を用い、個別のものを示すときには $()$ と $[]$ を用いる。

たとえば fcc では、結晶学的に等価な $\{111\}$ 型の面は 4 個あり、各 $\{111\}$ 面上に $\langle 110 \rangle$ 方向は 3 つ（方向の正負は問わないことにする）あるので、表 3.1 の $\{111\} \langle 110 \rangle$ すべり系の数は 12 個あることになる。しかし、図 3.1 で示した hcp の底面すべり（basal slip）では、すべり系の数は 3 個しかない。

第 1 回練習問題

問題 1.1 銅での原子空孔の形成エネルギーを $E_V = 1.0 \text{ eV}$ ($\approx 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$) として、(2.1) 式から室温 (300 K) と融点 (1356 K) での空孔の熱平衡濃度を計算せよ。

問題 1.2 何も手がかりがないときに使える便利な式として、金属の自己拡散の活性化エネルギー Q_D とその金属の絶対温度で測った融点 T_m との間に、 $Q_D / T_m \approx 150 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ が成り立つという経験式がある。

(a) この経験式を信じて、銅 ($T_m = 1356 \text{ K}$) の自己拡散の活性化エネルギーを求めよ。単位は $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ とせよ。

(b) 自己拡散係数 D の振動数項を $D_0 = 5 \times 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ と置いたとき、(2.4) 式を使って拡散係数(縦軸、

log スケール) の温度 (横軸, 線形スケール) 依存性を表すグラフを描け.

(c) 固体材料の変形を考えると, 高温変形と低温変形は, 原子の拡散の寄与が重要であるか否かで区別される. 拡散係数の値が $D \geq 10^{-22} \sim 10^{-20} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 程度にならないと, 変形における拡散の寄与は小さいという. このことと (b) で得られたグラフより, 融点の何倍程度の温度以上での変形が高温変形の範疇に入るかを考察せよ.

問題 1.3 fcc や bcc などの立方晶の結晶では, (hkl) 面と $[hkl]$ 方向は互いに垂直である. したがって, (hkl) 面と $[uvw]$ 方向が垂直かどうかを知るには, $[hkl]$ 方向と $[uvw]$ 方向のベクトル内積 $(hu + kv + lw)$ がゼロになるかどうかを調べれば良い. これを知って, fcc 結晶の $\{111\}\langle 110 \rangle$ すべり系 12 個のすべてを書け.

第 4 章 すべり変形と転位

4.1 シュミット因子とシュミット則

結晶の塑性変形はすべり変形 (の組み合わせ) で起こることを学んだが, ここで円筒形の単結晶試料の単軸引張試験を考える. 図 4.1 のように引張力 $\mathbf{F}$ の方向とすべり面法線 $\mathbf{n}$ とのなす角を θ , 引張方向とすべり方向 $\mathbf{d}$ のなす角を ϕ とする. 当然ながら $\mathbf{n}$ と $\mathbf{d}$ のなす角は 90° である. しかし, $\mathbf{F}$, $\mathbf{n}$, $\mathbf{d}$ の三方向は必ずしも同一平面上にはないので, 一般には $\theta + \phi$ は 90° にはならない. 試料の断面積を A , 引張力の大きさを F とすると, 引張応力 σ は $\sigma = F/A$ である. 一方, 引張力のすべり方向 $\mathbf{d}$ への分力は $F \cos \phi$ であり, すべり面の面積は $A_s = A / \cos \theta$ であるから, このすべり系に分解したせん断応力 (分解せん断応力, resolved shear stress) τ は

$$\tau = (F \cos \phi) / A_s = (F \cos \phi) / (A / \cos \theta) = \sigma \cos \theta \cos \phi \quad (4.1)$$

となる (せん断応力についての定義は後の章で詳述する). この式は, 引張応力 σ が与えられたとき, あるすべり系への分解せん断応力 τ は方位因子

$$S_F = \cos \theta \cos \phi \quad (4.2)$$

の値 (の絶対値) が大きいほど大きいことを意味している. この S_F のことをシュミット因子 (Schmid factor) という.

たとえば fcc 結晶での 12 個のすべり系の各々についてのシュミット因子が知れば, そのうちの絶対値が最も大きなシュミット因子を持つすべり系がまず最初に活動すると考えて良い. このすべり系のことを主すべり系 (primary slip system) という. 簡単な幾何学的考察でわかるように, シュミット因子の可能な最大値は $\theta = \phi = 45^\circ$ のときの 0.5 である.

単結晶試料で主すべり系のみが活動して降伏が起るとき, 降伏応力 σ_Y は同じ単結晶でも引張方向によって異なるが, σ_Y を (4.1) の σ に代入して得られる主すべり系に分解した臨界分解せん断応力 (critical resolved shear stress, 略して CRSS) τ_c は, 引張方向に依存しないことが予想される. これをシュミット則 (Schmid's law) とよび, fcc や hcp では良く成り立つことが知られている. 一方, bcc では, 表 3.1 に示した $\{110\}$ 面以外の結晶面 (たとえば $\{112\}$ や $\{123\}$) もすべり面として働くので, シュミット則は成り立たない.

多結晶の場合は, さまざまな方位を持つ結晶粒が多数存在しているために, 単結晶のように簡単には CRSS を知ることができない. その場合は, さまざまな方位の結晶のシュミット因子 (の逆数) を平

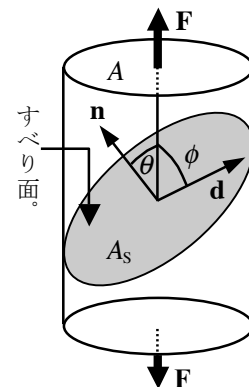


図 4.1 分解せん断応力の求め方

均化したようなテイラー因子 (Taylor factor) M を使って CRSS を見積もることをよく行う。

$$\tau_c = \sigma_Y / M \quad (4.3)$$

M の値を考察することは、それだけで1つの学問分野となるほどの大変なことであるが、すべり系の数が多いほど小さくなることは容易に予想できる。したがって、多くの面がすべり面となり得る bcc が最も小さく、次いで fcc, hcp の順に大きくなるであろう。実際、それぞれ、2.0, 3.1, 6.5 などの値が提唱されている。

4.2 完全結晶の理想せん断強度

ここで、すべり変形を起こさせるためには、どの程度の応力が必要かを完全結晶 (perfect crystal) を例にとって考える。完全結晶とは、格子欠陥を全く含まない理想的、空想的な結晶のことである。図 4.2 において、(a) と (c) は結晶の安定原子配列、(b) は不安定 (鞍点) 配列である。すなわち、結晶の自由エネルギーは (a) と (c) で最小、(b) で最大である。

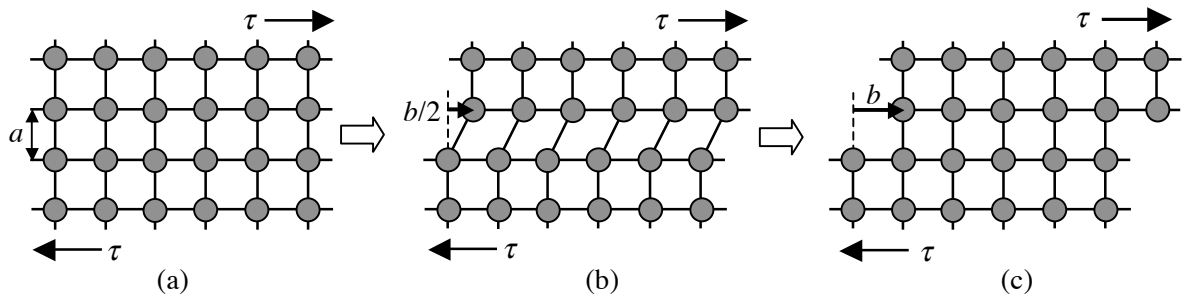


図 4.2 完全結晶の単位 b のすべり変形

(a) の変形前の状態の結晶変位を $x=0$ とし、(a) → (b) → (c) のように結晶のせん断変位 x を進めさせるときに必要なせん断応力を $\tau(x)$ とする。そして、この $\tau(x)$ は、図 4.3 のように、振幅 τ_m 、周期 b を持ち、簡単のために

$$\tau(x) = \tau_m \sin(2\pi x / b) \quad (4.4)$$

と正弦関数で書けるものとする。この τ_m を完全結晶の理想せん断強度 (ideal strength) とよぶ。 $x \ll b$ のとき、(4.4) は

$$\tau(x) \approx 2\pi x \tau_m / b \quad (4.5)$$

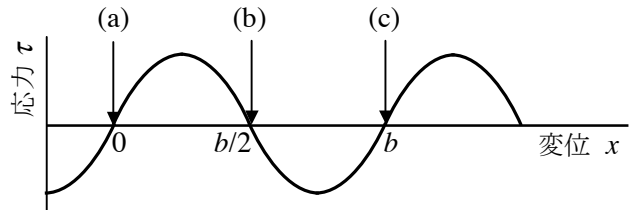


図 4.3 完全結晶のすべり変形を進行させるための応力

となる。一方、 $x \ll b$ のときは弾性変形で、フックの法則が成り立つと考える。変位が x のときの弾性せん断ひずみは x/a なので、フックの法則は次式で表せる。

$$\tau(x) = \mu(x/a) \quad (4.6)$$

ここで、 μ は剛性率 (せん断の弾性定数) である。(4.5) と (4.6) を等しいと置くと、

$$\tau_m = \frac{\mu b}{2\pi a} \approx \frac{\mu}{2\pi} \quad (4.7)$$

を得る。ここで最後の表式では $a \approx b$ と考えた。以上のような簡単な考察からでも理解できるが、より詳細な考察によると、完全結晶の理想せん断強度は、およそ

$$\tau_m \approx \frac{\mu}{30} \sim \frac{\mu}{10} \quad (4.8)$$

程度になるという．一般に，金属材料においては $\mu = 10^{10} \sim 10^{11} \text{ Pa}$ なので，理想せん断強度は， $\tau_m = 10^9 \sim 10^{10} \text{ Pa}$ 程度の大きさになる．

4.3 転位とすべり変形

前節のように完全結晶の理想せん断強度の大きさを理論的に求めることができた．(4.8)の結果は，結晶のすべり変形において，すべり面を挟んだ上下の結晶が一斉にせん断を起こすと仮定して得られたものである．一方，各種金属単結晶の CRSS を実験で求めると，(4.8)の τ_m の千分の一とか一万分の一とかという，はるかに小さな値になる．昔（と言っても 80 年ほど前まで）の人達は，この実験結果と理論予測との大きな相違の理由がわからずに苦しんだ．ところが，1930 年代に入って，格子欠陥の一種である「転位 (dislocation)」の概念が提唱され，この相違が理解できるようになった．

図 4.2 のようにすべり面の上下の結晶原子が一斉にずれるのではなく，図 4.4 のように各々の原子のわずかな位置移動によって局所的にすべりが進行すれば，理想強度よりはるかに小さな応力でのすべり変形が可能となる．図 4.4 で両端の結晶は完全結晶であるが，中央の 2 つの結晶には局所的に原子配列の乱れが生じている．この部分が転位である．原子配列が最も乱れている場所は，(b)，(c)の図で「 $\perp$ 」の記号で示された箇所，ここを転位の芯 (core) という．3 次元の結晶中では，「 $\perp$ 」の部分は線状に連なり，その真上の原子団はすべり面より上半分の結晶内に 1 枚の原子面（図では囲ってある 3 つの原子）を構成する．これを余分な原子半面 (extra half plane) という．

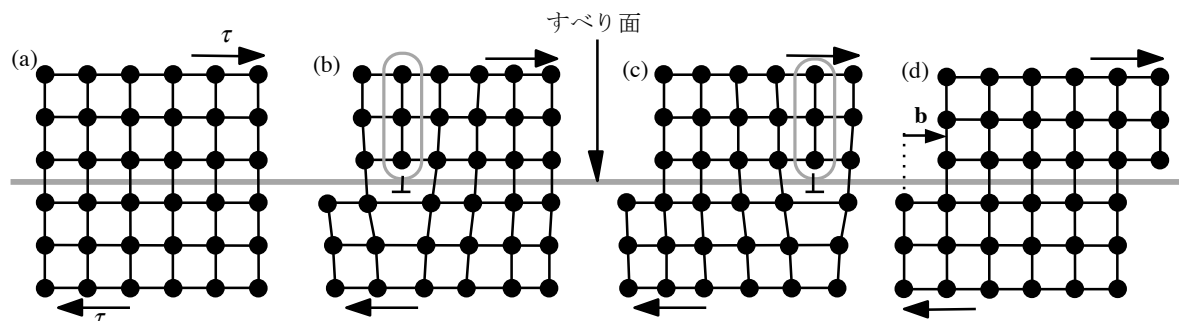


図 4.4 外部せん断応力 τ 下での結晶のすべり変形と転位の運動

以上より，転位とは，すべり面上ですでにすべった領域とまだすべっていない領域の境界線とも定義できる．図 4.4 の原子の集まりを結晶全体と考えれば，結晶の左側からすべりが始まって，転位が左表面から結晶内に導入される．転位が右に動くにつれてすべり変形が伝わり，最終的に結晶全体がすべると，転位は右側面で消滅する．この過程の間のどこにも原子の総数に変化はないので，転位は実在のある物体ではない．線状につながった原子配列の乱れの一種が転位であると理解すべきである．

たとえば図 4.4 の (b) や (c) の図が一つ与えられたのみでは，転位の運動方向はわからない．図では転位が右方向に動くようなせん断応力を加えてあるが，逆向きのせん断応力によっては左方向に動くことになる．したがって，「すでにすべった領域とまだすべっていない領域の境界線」という定義は，あくまで概念としての定義であり，実際に与えられた転位がどのようなすべり変形をもたらしたかは，加えた応力を知って初めてわかるものである．