第 2 回　金属転位論

材料工学専攻
准教授　安田公一

１．はじめに

今回は，材料の擬弾性・塑性変形・高温クリープなどの現象の実体的要因である結晶欠陥について解説する．結晶欠陥には，点欠陥・線欠陥・面欠陥があるが，点欠陥については，これまでにも欠陥の動力学でショットキー欠陥（$\phi \Leftrightarrow V_M'' + V_O^{\cdot\cdot}$）やフレンケル欠陥（$M_M \Leftrightarrow V_M'' + M_i^{\cdot\cdot}$）を，固体物理学で電子やホールなどの電子欠陥の話を聞いてきていると思うので，その繰り返しはやめて，ここでは，線欠陥である転位と面欠陥である粒界について講義する．また，最後に，実際の金属材料についても概説する．

２．転位とは

実際の結晶では，一定量の原子空孔（あるいは格子間原子）が存在することにより，エントロピー項の利得を得て，熱力学的に平衡状態になっている．また，実際のハンドリングでは，不純物の混入もある．したがって，現実には，完全結晶というものは存在しないが，ここでは，完全結晶がある原子面ですべることを考えて，理論的なせん断強度を求めることにする．

計算の詳細は，破壊力学の講義で説明する理論強度（理論引張り強度）と同様なので，そこで説明することにして，ここでは，結果のみを用いることにする．図１のような 1 対の原子面間ですべる場合，上の原子面は，下の原子面が作る周期的ポテンシャルを乗り越えて，すべることになる．なぜならば，外部からせん断応力が掛かっていない場合は，ポテンシャルの低い一番安定な位置に上の原子面が来て，平衡状態になるからである．この時の，周期的ポテンシャルから計算される内部せん断応力場は，次式で表される．

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi a} sin \frac{2\pi x}{b} \qquad (1)$$

ここで，G は剛性率，b は外部せん断応力の方向の格子定数，a は原子面間の間隔，x は平衡位置からの変位である．この場合の臨界せん断応力（理論せん断強度）は，次式となる．

$$\tau_{th} = \frac{Gb}{2\pi a} \qquad (2)$$

通常，b と a とは，comparable order であり，２π で割ると，おおよそ１桁オーダーが下がることから，(2)式は，次のように近似できる．

$$\tau_{th} = \frac{G}{10} \qquad (3)$$

これに対し，実際の金属結晶のせん断強度を測ると，10^{-4}G から 10^{-6}G であることがわかっている．このことから，原子面同士が，一挙に，すべってせん断変形している

のではないことがわかる．この理論と実験との著しい差を説明するために，転位という概念が提案された．

転位には，刃状転位とらせん転位という 2 つの種類がある．刃状転位は，図 2 に示すように，完全結晶の一端から ABCD のところまで切れ込みを入れ，この切れ込みの前縁を転位線と呼ぶ．そして，切れ込み上部の半結晶を転位線に垂直方向に，切れ込み面に沿って 1 格子間隔だけ押し込み，切れ込み面の上下の原子間結合を元通りに戻す．このような操作により，上部の半結晶には，余分な半原子面が転位線 AD の位置に挿入された形になり，このような線欠陥を刃状転位という．

これに対し，切れ込み上部の半結晶を転位線に垂直に，切れ込み面に沿って 1 格子間隔だけ押し込み，切れ込み面の上下の原子間結合を元通りに戻すと，図 3 に示すらせん転位となる．

さらに，図４に示すように，完全結晶の角の部分に 1/4 円形の切れ込みを入れ，奥行き方向に押し込むと，点 A ではらせん転位が，点 C では刃状転位になり，その両者の間の転位線の部分（1/4 円の弧の部分）は，刃状転位成分とらせん転位成分が混ざった混合転位となる．

転位を特徴付けるパラメーターとしては，バーガーズベクトル **b** がある．図 5 は刃状転位にバーガーズ回路を作って，バーガーズベクトルを示したものである．バーガーズ回路とは，結晶中の転位を取り囲むように，任意の原子から出発して，例えば，右に 4 歩．下に 2 歩，左に 4 歩，上に 2 歩と進むものである．もし，完全結晶ならば，この経路により，出発点に戻ってくるが，刃状転位がある場合は，出発点の位置に戻ってこない．そこで，バーガーズベクトルを到着点に足して，出発点に戻してやるように，バーガーズベクトルを決める訳である．図５では，右向きの 1 格子間隔の大きさを持つベクトル $\boldsymbol{b}$ がバーガーズベクトルである．すなわち，刃状転位では，バーガーズベクトルは転位線に垂直になっている．

一方，らせん転位でバーガーズ回路を作ってみると，図 6 のようになり，この場合，転位線に平行な 1 格子間隔の大きさを持つベクトルがバーガーズベクトルになる．なお，混合転位の場合は，図 4 を見ればわかるように，転位線のどの部分でもバーガーズベクトルは同じになる（バーガーズベクトルの保存則という）．また，この図 4 の 1/4 円を 4 つ合わせると，転位線が円を描くが，これを転位ループと言う．結晶中の転位は，転位ループになっているか，あるいは，表面や結晶粒界などでとぎれているかのどちらかになる．

金属やアルカリハライドの結晶を鏡面研磨し，適当な腐食液でエッチングすると，転位線の位置に，図 7 のようなエッチピットが現れ，これの面密度を数えることで，転位密度を測定することができる．転位密度は，本来，単位体積当たりの転位線の長さ $m/m^3=1/m^2$ で定義されるが，これは，表面における転位線の面密度と同じ意味を持っている．Gilman と Johnston は，応力をかけた単結晶を観察して，このエッチピットの移動速度から転位の移動度を測定する一連の研究を行っている．

３．転位の運動と塑性変形

ここでは，転位の運動がどのように塑性変形を引き起こすかについて説明する．刃状転位の場合，図8に示すように，余分な半平面の位置が次々に右側にずれて行って，最後に，結晶の表面に出ると，１原子面だけずれて塑性変形が残ることになる（転位のすべり運動，転位の保存運動という）．このようにすれば，上部の半結晶を丸ごと右にずらすよりも小さなせん断応力で，同じ塑性変形を残すことができる．これはあたかも，床に敷いてある大きな絨毯を，そのまま横にずらすには大きな力が必要であるが，小さなたるみを作って，そのたるみを絨毯の端から端まで動かせば，丁度，たるみの分だけ，絨毯が動かせると言うことに類似している．

らせん転位の場合も同様で，図 9 に示すように，転位線が AA'から BB'の方に移動して，反対側の表面に突き抜けると，上部の半結晶がバーガーズベクトルの分だけすべって塑性変形が残る．

なお，刃状転位は転位線とバーガーズベクトルが垂直なので，この両方向を含む平面の上だけしかすべり運動をすることができないが，らせん転位は，バーガーズベクトルと転位線が平行なので，如何なる方向にもすべり運動ができる．それは，図 10 に示すように，鉛筆の束を鉛筆の軸方向にずらせる場合，転位線が進む方向は必ずしも同じ平面になくても良いということを考えれば理解できる．このように，らせん転位が同じバーガーズベクトルを持ちながらすべり面を変えてすべることを，交差すべりという．この自由度のため，一般に，刃状転位よりはらせん転位の方が移動度が大きい．図 11 は，面心立方金属の交差すべりを示している．面心立方金属では，{111}面上をらせん転位が動くが，一つの{111}面上から別の{111}面上に乗り換えることができる．

このような転位のすべり運動の他に，転位には，上昇運動という運動（非保存運動）の仕方もある．この運動は，点欠陥の拡散を介在するので，高温にならないと起こらない．図 12(b)に示したように，十字線のところに転位線があるとする．そこに，原子空孔が拡散してくると，点 A の原子が原子空孔のサイトに入って，図 12(a）のように，余分な半平面が 1 原子層の分だけ上に上昇する．逆に，図 12(b)の点 A の原子から原子空孔が発生して，そこから拡散して遠くに行ってしまうと，図 12(c)のように，余分な半平面が 1 原子層の分だけ下に下がる．なお，実際には，原子空孔 1 個で，原子 1 個が吸収されるので，図 13 のように，余分な半平面にジョグと呼ばれる構造を作る．

（以下，省略）