

第 2 回 転位論

無機材料工学科
准教授 安田公一

1. はじめに

今回は、塑性の最も主要な起源である転位について説明してから、実際の金属材料について概説する。

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。

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の臨界値（理論せん断強度）は、次式で表される。

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

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 は原子面間の間隔である。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。

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

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平行に、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**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、絨毯が動かせるとい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。代表的な金属結晶の転位について整理したものを表 1 に示す。

表 1 金属結晶中の転位と双晶

結晶型	転位	
	すべり面	すべり方向
体心立方	$\{\bar{1}01\}, \{\bar{1}\bar{1}2\}, \{0\bar{1}1\}$	$\langle 111 \rangle$
面心立方	$\{11\bar{1}\}$	$\langle 101 \rangle, \langle 011 \rangle$
6 方最密	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$

表 2 に、セラミックスのすべり系を示す。セラミックスの場合、独立なすべり系の数が 5 個ない場合が多く、そのため、ある程度高温になって、2 次のすべり系も活動するようになって、ようやく、自由に塑性変形できるようになる。5 個のすべり系がないと自由に塑性変形できないというのは、前期の連続体力学で、任意の偏差応力テンソルを 5 つの純粋せん断応力で分解できることに起因する。

表 2 セラミックスのすべり系

物質	結晶構造	すべり系		独立したすべり系の数		すべり系の活動開始温度/°C	
		1 次	2 次	1 次	2 次	1 次	2 次
Al ₂ O ₃	六方	$\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	数個	2		1200	
MgO	立方	$\{110\}\langle 1\bar{1}0 \rangle$	$\{001\}\langle 1\bar{1}0 \rangle$	2	3	0	1700
β -SiC	立方	$\{111\}\langle 1\bar{1}0 \rangle$		5		>2000	
β -Si ₃ N ₄	六方	$\{10\bar{1}0\}\langle 0001 \rangle$		2		>1800	

6. 金属材料各論

ここでは、鉄鋼材料と非鉄金属材料について概説する。まず、軟鋼の応力／ひずみ曲線を図 2 3 に示す。実線は公称応力／公称ひずみ曲線、波線は真応力／公称ひずみ曲線である。図中の点 A が比例限度、点 B が弾性限度、点 C が上部降伏点、点 D が下部降伏点である。上部降伏点に達すると、引張り試験片にリュウダース帯というすべり帯が走り始め、下部降伏点に達するとリュウダース帯が試験片を貫通する。その後、点 E まで徐々にリュウダース帯が試験片全域に広がって、点 E で試験片全体がすべり変形を経験することになる。点 D から点 E までを降伏ひずみとか、降伏伸びと呼ぶことがある。

その後、点 E から加工硬化が始まり、この辺りから公称応力と真応力が徐々に乖離していく ($\sigma_{\text{true}} = \sigma_{\text{nominal}}(1 + \varepsilon_{\text{nominal}})$ より、 $\varepsilon_{\text{nominal}}$ が無視できなくなり始める)。そして、

最大荷重となる点 F で試験片にくびれが発生し、くびれた部分は断面積が減少するからますます真応力が高くなるので、くびれが助長されていくことになり、真応力は急激に増加することになる。しかし、くびれた部分の真応力が大きくなるが、断面積自体が減少するので、トータルの荷重はくびれが発生すると減少することになる。そのため、公称応力／公称ひずみ線図は、くびれが発生すると右下がりになる訳である。なお、くびれの発生は、塑性不安定という呼び方をされることがある。また、公称応力／ひずみ曲線上の最大応力（図 23 の点 F）を極限強さと呼び、引張り強度として使うことが多い。

図 2 5 には、各種金属材料の応力／ひずみ曲線を示した。参考のため、軟鋼のデータも載せてある。軟鋼以外は、明瞭な降伏点を示さないことがわかる。また、鉄鋼材料である鋳鉄は、脆性破壊に近い挙動をすることもわかる。

（1）鉄鋼材料

図 2 6 に鉄-炭素系状態図を示す。炭素約 0.02% 以下のものを工業用純鉄、約 0.02 から 2.14% のものを鋼、2.14% 以上のものを鋳鉄と呼ぶ。鋼の内、合金元素として炭素のみを含むものを炭素鋼、炭素以外の合金元素を含むものを合金鋼という。

α -Fe は、727°C で最大約 0.02% の炭素を固溶できる。この α -Fe に炭素その他の元素が固溶した状態をフェライトと呼ぶ。固溶限以上の炭素は、 Fe_3C という硬い化合物（セメンタイトと呼ぶ）として共存する。 γ -Fe は 2.11% まで炭素を固溶でき、 γ -Fe の固溶体をオーステナイトと呼ぶ。このオーステナイトは、727°C で、フェライトとセメンタイトに共析変態し、これを A_1 変態と呼ぶ。共析変態した後の組織は、フェライト層とセメンタイト層が層状に配列したパーライトという組織になる。

工具鋼のように高硬度が要求される場合は、焼き入れしたままで使われるが（実際には、200°C 以下で低温焼き戻しを行う）、一般の構造用鋼では、焼き入れしたままだと硬いけれども、脆くなるので、必ず、焼き戻し (tempering) を行う。おおよそ、500 ~ 700°C くらいの温度で熱処理を行い、硬さを減じて、靱性を上げるようにする。このように、焼き入れ・焼き戻しを行うことを調質処理という。焼き戻しには、内部応力を取り除いたり、変態しないで残った残留オーステナイトを安定化させるという副次的な効果がある。

鋼の熱処理には、この他、焼きならし (normalizing) と焼き鈍し (annealing) がある。焼きならしは、加工部品をオーステナイト状態にしてから、空气中で放冷して、微細な初晶フェライトあるいは初晶セメンタイトと、パーライトの混合組織にする熱処理法で、加工の影響を除去し、組織を微細均質化して機械的性質を改善するために行う。焼きならしにより強度・靱性が改善するが、焼き入れ・焼き戻しほどの効果はない。焼き鈍し（やきなましと読む、焼鈍とも言う）は、鋼を適当な温度に保持して

から、徐冷する熱処理で、その目的は、硬さの低下、内部応力の除去、炭化物を球状化して塑性加工や切削加工を容易にするなどが上げられる。

（２）非鉄金属材料

銅合金としては、黄銅（brass）がある。これは、Cu-Zn 系の合金で、Zn を添加することにより、高強度になり、また、加工性もよくなる。黄銅のことを、現場では、真中と書いて、真鍮と呼ぶこともある。また、青銅（bronze）は、Cu-Sn 系合金で、黄銅に比べて鋳物が作りやすいという特徴がある。青銅にリンを加えたものはりん青銅と呼ばれ、バネ材に用いられる。

アルミニウム合金としては、Al-Cu 系で JIS 規格の 2000 番台に型番を持つジュラルミンや超ジュラルミンがある。Al-Mg-Si 系は、6000 番台、Al-Zn-Mg 系は 7000 番となっている。7075 や 7178 番は、超超ジュラルミンと呼ばれ、Al 合金中最大の強度を示す。その基本組成は、Al-Zn-Mg-Cu となっている。

その他、Ni 基、Co 基、Fe 基耐熱合金がある。これらは、ガスタービンエンジンのタービンブレードなどに用いられていて、有名な材種にインコネルやハステロイ等が上げられる。