

1. 転位と塑性変形

1.1 転位

身の周りに存在する金属 (metals) 及び合金 (alloys) は結晶である。結晶の塑性変形 (Plastic deformation) を微視的観点から理解すると、ある特定の結晶学的な面に沿って特定の方向に原子が移動することである。この面をすべり面 (slip plane)、方向をすべり方向 (slip direction) という。通常、金属の結晶内部には原子の並びが線上に乱れた領域が存在し、この線欠陥 (line defect) を転位 (dislocation) と呼ぶ。結晶の塑性変形は、転位がある特定のすべり面上において特定のすべり方向へ移動するせん断変形 (shear deformation) と理解できる。ここでは、転位の構造とその移動 (すべり) について理解する。

図 1.1 は、単純立方晶に存在する刃状転位の原子の並びを 3 次元的に示したものである。原子の並んでいる面を上下方向に見ると上側の結晶は 6 枚の面が存在し、下側では 5 枚の面が存在する。それらの中央に、上側の原子面 (余剰半面 : extra half plane) しか存在しない領域が見られる。この余剰半面の下端部は結晶の並びが紙面奥行き方向に沿って乱れた構造となっている。この線上の格子欠陥を刃状転位 (edge dislocation) と呼び、余剰反面下の線上 (紙面奥行き方向) に原子配列の乱れた領域を転位線 (dislocation line) と呼ぶ。この刃状転位はしばしば「 \perp 」の記号で示され、縦の棒は余剰半面を示し、横の棒はすべり面を表す。刃状転位が導入されることによって、上側の余剰反面分の原子の並びにずれが生じているのがわかる。この原子位置のずれの量と方向を表すのが、バーガースベクトル (Burgers vector) である。刃状転位の場合、バーガースベクトルと転位線 (紙面奥行き方向) は垂直になる。

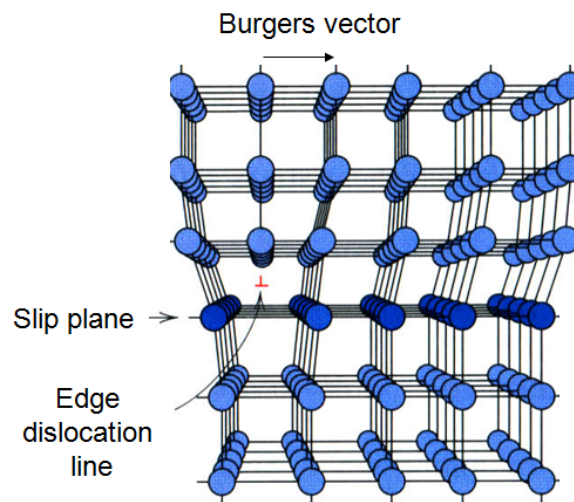


図 1.1 単純立方格子に存在する刃状転位の原子の並び [1]

転位線には余分な原子 (余剰半面) が一層挿入されているとみなすことができる。そのため、転位の中心部 (転位芯 : dislocation core) は非常に大きな格子ひずみ (lattice strain) 及びそれに伴う応力を受けることになる。図 1.2 に、転位周りの応力場及び符号 (sign) が同一及び異なる場合の 2 つの転位間の相互作用を模式的に示す。余剰反面を含む上部の結晶の転位芯周りは圧縮の力 (compression) が負荷

され、下部の結晶の周りは引張の力 (tension) が付与される。この転位周りの応力状態は弾性論を基に定量化される [2,3]。このような特徴のため、同一な符号 (⊥と⊥) を持つ2つの転位はその圧縮応力 (下部の結晶では引張応力) 同士の相互作用により反発する。一方、異なる符号 (⊥と⊥) を持つ2つの転位はその圧縮応力と引張応力との相互作用によって引き寄せあう。なお、同一すべり面上の異なる符号の転位が重なると、お互いの余剰反面の原子を共有するため転位は消滅する (完全結晶となる)。転位周りの詳細な応力状態は弾性論を基に定量化される。

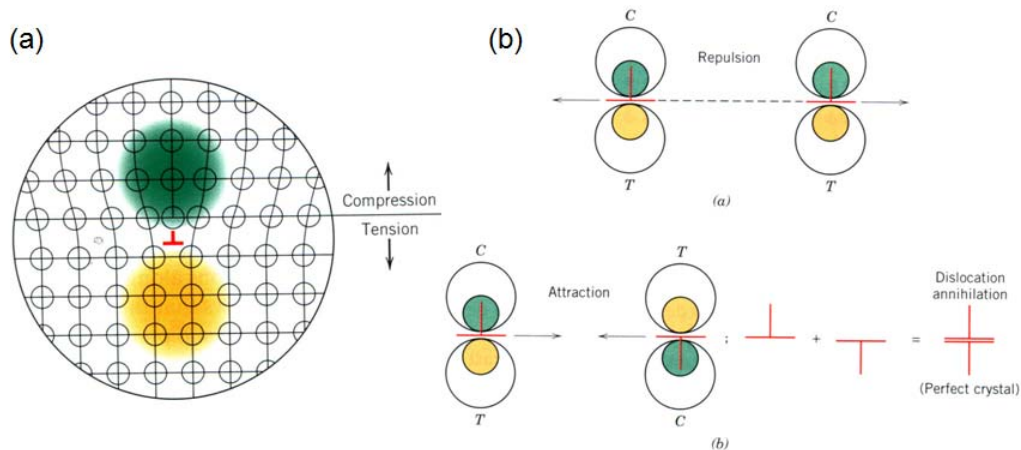


図 1.2 (a) 転位周りの応力場 及び (b) 2つの転位間の相互作用 [1]

図 1.3 は、単純立方晶の結晶格子中に存在するらせん転位 (screw dislocation) の原子配列を示す。図中の赤い線が転位線に対応する。図の結晶格子の左全面において、転位線より右側の上部の結晶は下部の結晶に対して1格子分ずれていることがわかる。転位線周りを一周すると (図 1.3(a))、1格子分の段差ができる。このずれは、刃状転位同様、らせん転位のバーガースベクトルに相当する。したがって、らせん転位の転位線とバーガースベクトルは平行である。

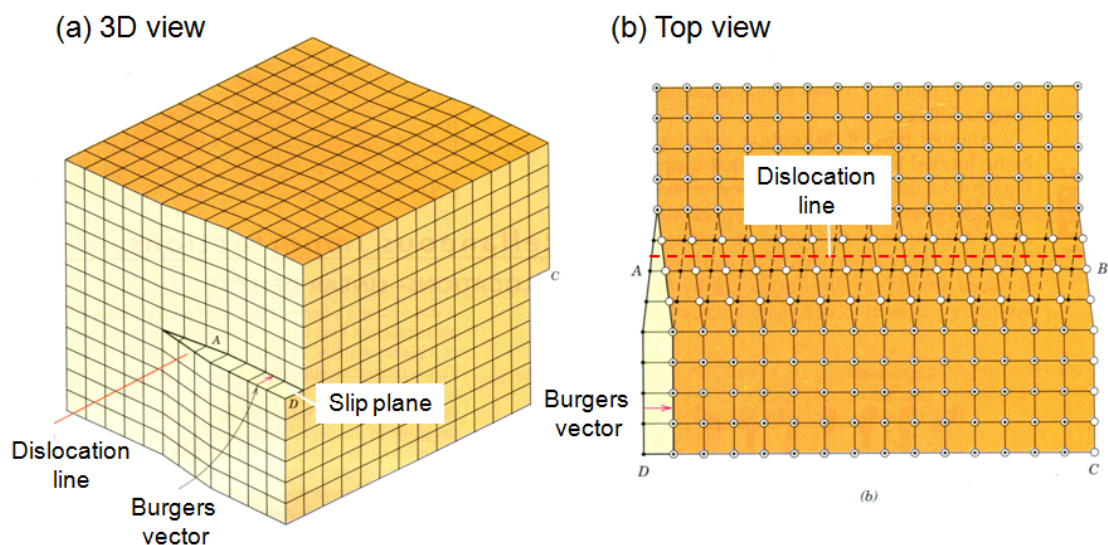


図 1.3 単純立方晶の結晶格子中に存在するらせん転位の原子配列 [1]

結晶格子に含まれる多くの転位は、純粋な刃状やらせん転位成分を持つわけではない。両方の性質を持った**混合転位 (mixed dislocation)**であることが多い。図 1.4 に、単純立方晶の結晶格子中に存在する湾曲した転位線を持つ転位の原子配列を示す。湾曲した転位線は、バーガースベクトルと垂直な領域が刃状成分、バーガースベクトルと平行な領域がらせん成分、それ以外の領域が混合転位の成分となる。

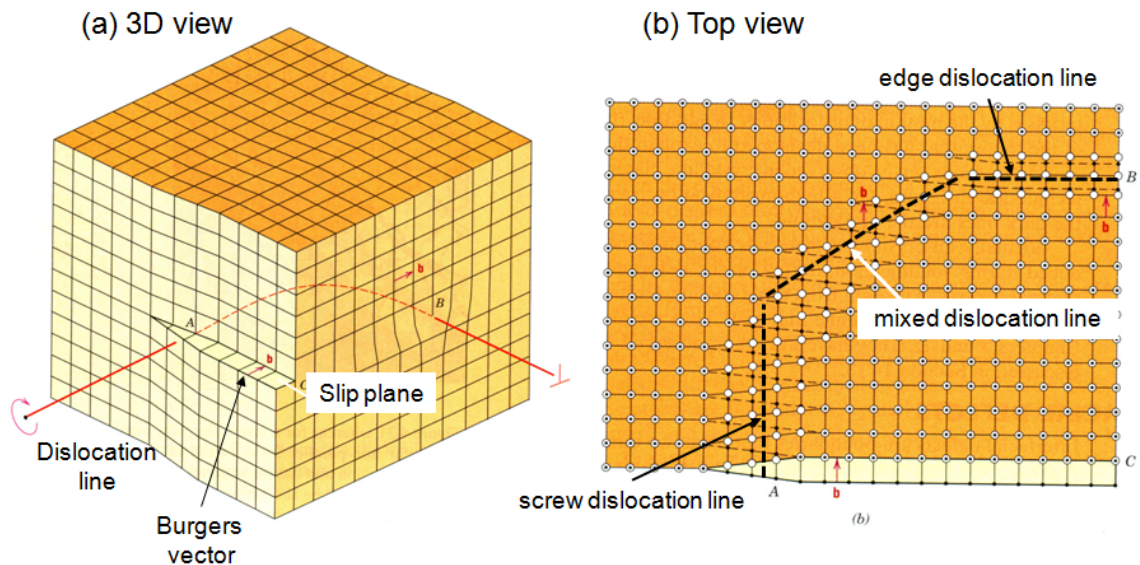


図 1.4 単純立方晶の結晶格子中に存在する湾曲した転位線を持つ転位の原子配列 [1]

1.2 すべりと塑性変形

結晶の塑性変形は転位のすべり (slip) によって生じる。図 1.5 に、単純立方晶中に存在する刃状転位が運動する様子とその原子配列の変化を示す。外部からせん断応力 (shear stress) が負荷されると、刃状転位の転位線 (上部結晶の余剰半面) が右に動いていく様子が分かる。上部結晶の余剰半面の原子は下部結晶の原子と結合しているが、転位の移動に伴って右隣の原子との結合に変化することがわかる

(図 1.5(a,b))。これより、転位の移動は転位近傍のわずかな原子の移動のみで発生することがわかる。移動した転位が結晶の表面まで到達すると、1 原子分の段差が生じる (図 1.5 (c))。この転位の移動による原子の動きは、芋虫の動きに例えると理解しやすい (図 1.6)。

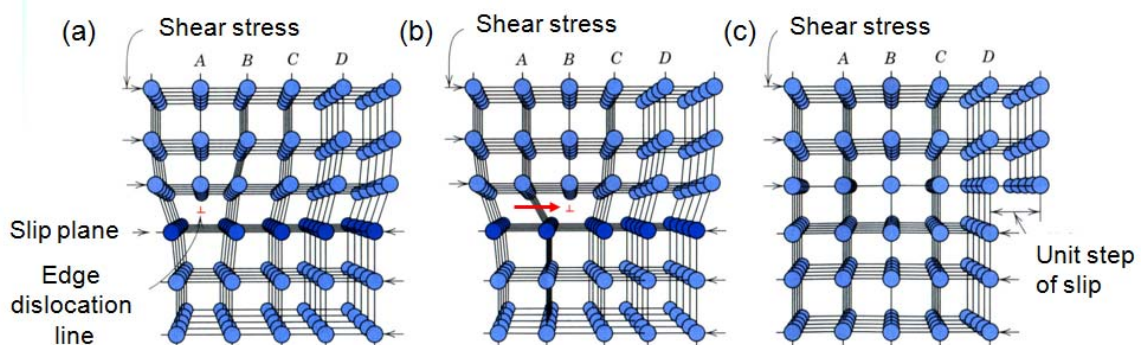


図 1.5 単純立方晶中に存在する刃状転位が運動する様子とその原子配列の変化 [1]

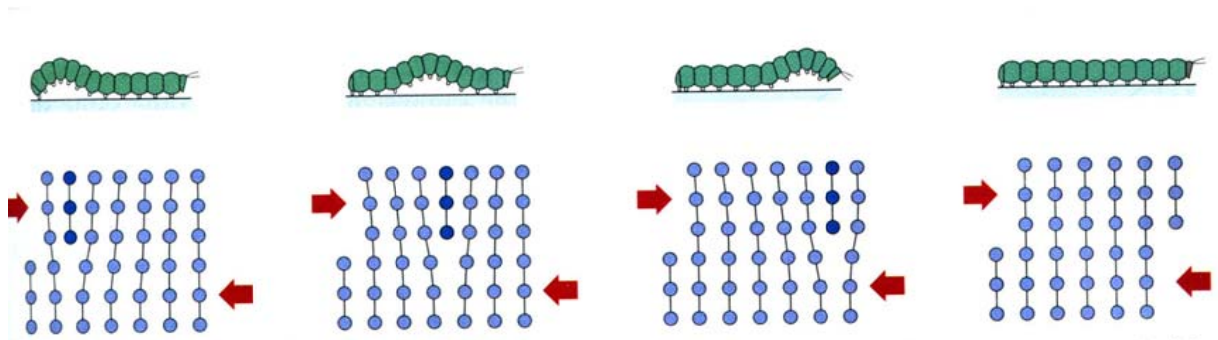


図 1.6 転位の移動と芋虫の移動 [1]

図 1.7 に、結晶のせん断変形の過程を模式的に示す。転位の移動を介したわずかな原子位置の変化がすべり面に沿って伝播すれば、結果的にすべり面を挟んだ上下の結晶がせん断変形を起こした場合に相当する。これは結晶が一斉にせん断変形を起こした場合に必要な応力よりも非常に小さな応力で起こり得る。また、転位の移動過程を考慮すると、転位はすべり面上ですでにすべった領域とすべっていない領域の境界とも理解できる。

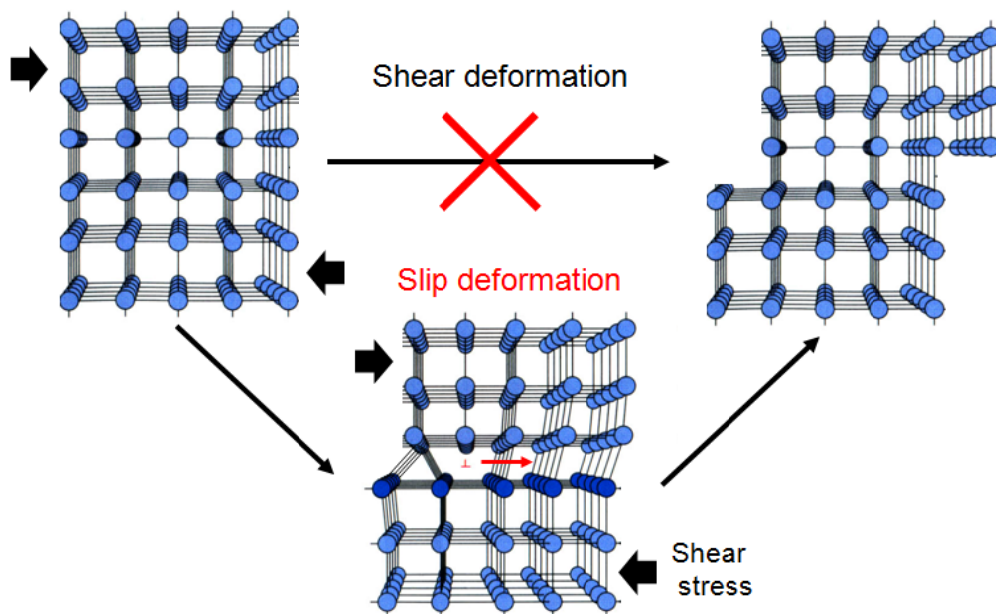


図 1.7 結晶のせん断変形の過程

結晶に外力を加えると、その結晶は塑性変形する。その塑性変形の過程は、結晶中のすべり（転位の移動）である。転位は刃状転位（edge dislocation）とらせん転位（screw dislocation）の二種類に大別できることは既に述べたが、両転位の移動によって最終的に変形した結晶の外形は同じである。図 1.8 に、せん断応力（shear stress）を負荷による結晶格子中の刃状転位とらせん転位の移動過程を示す。せん断

応力を負荷した場合，両転位ともすべり面（slip plane）上を転位線（dislocation line）と垂直な方向に移動する．したがって，刃状転位はせん断応力に対して平行な方向（紙面右側），らせん転位はせん断応力に対して垂直な方向（紙面上側）に移動する．一本の転位が移動すると，その転位のバーガースベクトル， b だけ変位する（結晶がずれる）ため，最終的に結晶はせん断応力方向に変位し，その方向はバーガースベクトルの方向となる．

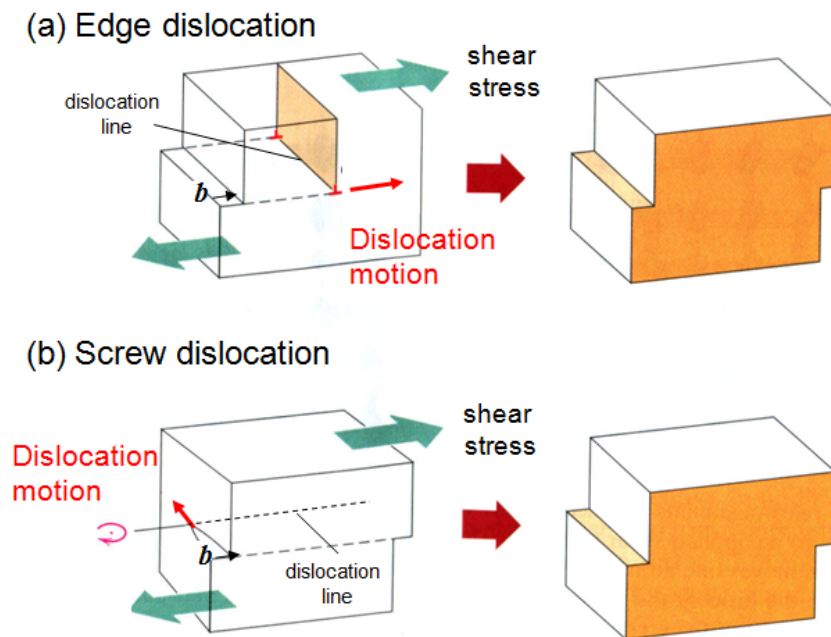


図 1.8 せん断応力負荷による結晶格子中の(a)刃状転位と(b)らせん転位の移動過程 [1]

図 1.5 より，転位の移動は原子の動きが必要となることがわかる．その原子移動を起こすためには，外部のせん断応力が必要となる．そのせん断応力は転位を移動させるために必要な応力に相当し，パイエルス（Peierls）力と呼ぶ．パイエルス力は一般に次式で表される [2,3].

$$\tau_c = \frac{2G}{1-\nu} \exp \left[-\frac{2\pi a}{(1-\nu)b} \right] \quad (1.1)$$

ここで， a はすべり面の間隔， b はすべり方向の原子間距離（バーガースベクトル）， ν はポアソン比， G は剛性率を示す．この式から，結晶におけるすべり面の間隔は大きく，バーガースベクトルが小さい方が，転位は低い応力で移動できる（変形しやすい）ことがわかる．

参考図書

- [1] Materials Science and Engineering 8th edition, William D. Callister and David G. Rethwisch, Wiley (2011).
- [2] 転位論入門，鈴木秀次，アグネ (1967).
- [3] 入門転位論，加藤雅治，裳華房 (1999).
- [4] 結晶転位論 鉄から窒化ガリウムまで，坂公恭，丸善出版 (2015).