

面心立方格子，体心立方格子中の転位とその特徴

Dislocations in face-centered cubic and body-centered cubic crystals

田中 将己*

Masaki TANAKA

Synopsis: In this article, the author reviews the basics of the plastic deformation of crystalline materials. First, three mechanisms behind the plastic deformation were shown in case of non-large scale plastic deformation at lower than a half of a melting point, such as slip deformation, twinning deformation, and phase transformation. Slip deformation was focused to explain in detail. Slip systems, Burgers vectors, theoretical strength, and Peierls stress were mentioned. The definition of Burgers vectors with a FS/RH convention was explained. Natures of dislocations in fcc and bcc crystals were explained. For fcc crystals, dislocations were dissociated into Shockley partial dislocations. The relationship between work hardening and stacking fault energy was mentioned. For bcc crystals, the strong temperature dependence of yield stress was focused. The reason why screw dislocations in bcc crystals have high Peierls potential was explained basing on a Suzuki model. The decreased in the yield stress was explained basing on the thermally activated process of dislocation glide.

Key words: dislocation; bcc; fcc; slip; yield; low temperature; dislocation velocity; strain hardening

1. はじめに

結晶に応力が負荷されると、その応力量にしたがって結晶は変形を起こす。応力を除荷すると形状が元に戻る変形を弾性変形、除荷しても結晶の形状が元に戻らない永久変形を塑性変形と呼ぶ。塑性変形を司る機構は $T_m/2$ 以下(T_m : 融点)の温度においては大きく分けて三つに大別でき、辻り変形、双晶変形、相変態がある(大変形を除く)。図1(a)に太線で示すような変形前には正方形を成す結晶の上面・下面に矢印で示す剪断応力を負荷する状況を考える。この時、塑性変形によってマクロな結晶の形が正方形から平行四辺形になったとすると、塑性変形のメカニズムによって、変形後のマクロな形状変化は同じであっても、結晶格子の形状変化に相違が見られる。なお、図1中の四角形の内部には結晶格子に対応した格子を細線で描いている。

辻り変形の場合には、図1(b)が示す様に变形前後で結晶格子の形状に変化は生じず、辻り面を境に辻り方向(模式図では左右方向)に沿って格子の相対的なズレが生じる。その結果、試料の端には段差が生じ、これが辻り帯になる。双晶変形では、図1(c)で示す様に塑性変形前後で結晶格子の形状に変化が生じる。この時、結晶格子は双晶面を境に鏡面対象となる様に变化するが、結晶構造そのものは変化しない。なお、双晶面はbcc結晶では $\{112\}$ 面、fcc結晶

では $\{111\}$ 面となる¹⁾。マルテンサイト変態では、図1(d)で示すように、結晶格子の形状(結晶構造)が变形前後で全く異なることになる。なお、マルテンサイト変態にもなって双晶変形や辻り変形が起こることも知られているが、ここではそのような補足変形に伴う塑性変形では無く、変態そのものによって生じた塑性変形の事を意味している。

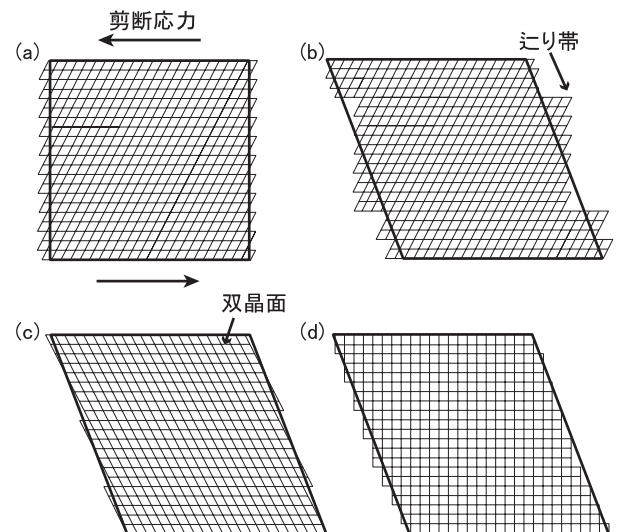


Fig.1 Change in a macroscopic shape with plastic deformation. (a)before deformation, (b)slip deformation,(c)twinning deformation, (d)martensitic transformation

原稿受付日：2019年4月22日

* 九州大学工学研究院材料工学部門 教授

我々はこれまで，試料表面に電子線リソグラフィを用いて微細な格子状マーカを描画し，塑性変形前後での格子状マーカ形状変化を追跡することで，塑性変形によって生じた局所歪分布などを測定してきた^{2,3)}。その一例として図2 (a) にじり変形によって生じた格子のズレを示す。試料中央に右上から左下に入るじり帯が見られ，そのじり帯にそって僅かではあるが格子が切断されている様子が分かる。次に変形双晶によって生じた微細マーカ形状変化を図2 (b) に示す。白の四角で囲った二つの領域が双晶関係にあり，格子の傾きがおおよそ対称になっていることが分かる。なお，格子の形が完全に対応していないのは，双晶面が試料表面に垂直でない事に起因する。このような格子の変化から歪分布を得ることで，マクロな塑性変形挙動の様相が明らかにできる事になる。本稿では，上記塑性変形のメカニズムの中で最も重要なじり変形に着目してその機構について述べる。

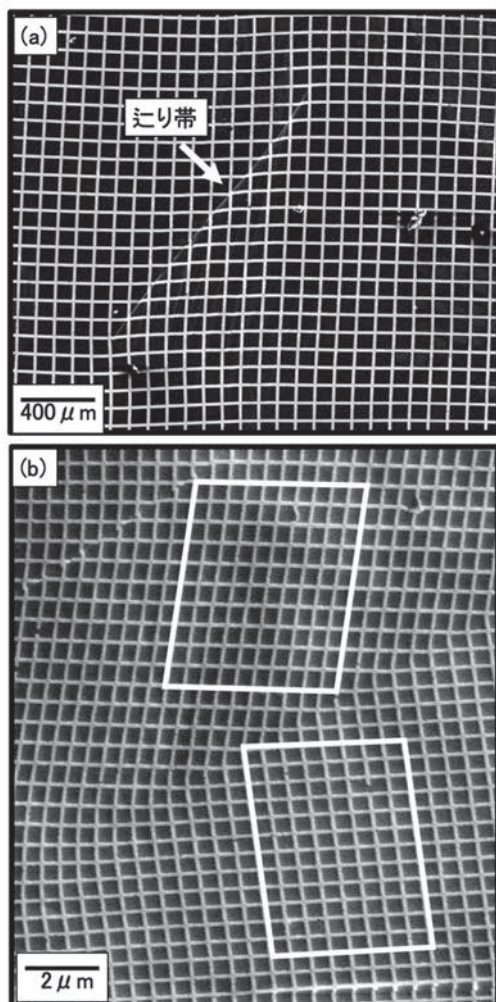


Fig.2 Precision-markers on specimen surfaces after tensile deformation.(a)Area with slip deformation. (b)Area with twins. Markers in white squares are twinning relations.

2. じりによる塑性変形

じり変形は結晶がある原子面を境にずれる（じり）事によって生じる。そのズレが生じる原子面をじり面，ずれる方向をじり方向と呼び，その組み合わせをじり系と呼ぶ。じり系は結晶構造によって決まっており，鉄鋼材料で見られる三つの相におけるじり系は表1で示す通りとなる。なお，セメンタイトの結晶構造は直方晶（斜方晶）であり，単位格子の3辺の長さはそれぞれ異なる。ここでは格子定数を a , b , c とし，その長さの関係を $a < b < c$ とした場合のミラー指数を示している⁴⁾。一般にセメンタイトは塑性変形能が低いため単体では室温では塑性変形せずに脆性的に破壊する⁵⁾。しかし，パーライト中のセメンタイトはある程度の塑性変形能を持ち外形の変形に伴って塑性変形する^{3,6)}。結晶塑性有限要素法による解析によれば⁷⁾，パーライトのように軟質相であるフェライトと硬質相であるセメンタイトが層状に積層している材料で積層方向に対して垂直に引張変形を行うと，フェライトの塑性変形によってセメンタイトが均一に塑性変形を起こし，セメンタイトでの局所変形が抑えられることで室温でもじり変形を起こし得る事が示されている。

Table 1 Crystal structures and slip systems.

相(結晶構造)	じり面	じり系
オーステナイト(fcc)	{111}	$\langle 110 \rangle$
フェライト(bcc)	{110}, {112}, {123}	$\langle 111 \rangle$
セメンタイト ⁴⁾ (orthorhombic)	(100)	$b[010]$
	(010)	$c[001]$
	(001)	$b[010]$
	{110}	—

じり変形が塑性変形を司る場合，格子のズレを生じさせる応力が塑性変形開始応力となり，臨界分解剪断応力 (critical resolved shear stress: CRSS) となる*。今，じり面より上にある原子群を下の原子群に対してじり面上で水平に1原子だけじり方向へずらすのに必要な剪断応力を τ_{th} とすると，その値は次式で与えられる。

$$\tau_{th} = \frac{\mu}{2\pi} \quad (1)$$

なお， μ は剛性率である。ここで， τ_{th} を理想剪断強度と呼び，更に詳しい計算では $\tau_{th} = \mu/30$ となる。表2に種々の純金属における理想剪断強度と実際のCRSSとの比較を示す。何れの結晶においても実測されるCRSSは理想強度と比較して文字通り桁違いに小さい。これは理想強度の計算では塑性変形に際し，じり面上に存在する原子群が一斉にじり方向へ動く仮定したためで，CRSSが過大評価されている。つまり，実際のじり変形では，じり面上の

* 本稿では，対象としている結晶の転位密度は十分小さく，一本の転位（後述）を動かす応力がCRSSになると考えている。そのため，CRSSは材料物性値になると考えられる。一方，結晶塑性では，純粋に塑性変形が開始する剪断応力をCRSSと呼ぶ。そのため，同じ材料でも変形と供に加工硬化の分だけCRSSは増加することになる。

原子が一斉に動くよりもより低い応力で原子が動く機構が存在していることを示している。実際のじり変形では、塑性変形の開始点から原子列が1原子ずつ伝播する。これが転位の運動によるじり変形である。

Table 2 Theoretical strength and measured CRSS.

材料	$\tau_{th}(=\mu/30)$ [GPa]	CRSSの実測値 [MPa]	理想強度と 実測値との比
Ag	1.0	0.37	0.00037
Al	0.9	0.78	0.00087
Cu	1.5	0.49	0.00032
Ni	2.6	3.2	0.0070
α -Fe	2.8	27.5	0.001

この転位と言う概念を導入することによって、先に述べた理想剪断強度より十分低い応力でじり変形が起きることが説明できる。転位は線欠陥の一つであるが、その概念は大変分かり難い。転位には色々な側面があるが、ここでは転位をじり変形が起こった領域と起こっていない領域との境界であると考え、じり面が同じでもマクロな結晶のずれる方向には、図3中の太い矢印で示す様に剪断応力のかけ方によって、2つの自由度がある。この図では結晶は左から右に向かってそのズレが伝播し、中央で結晶がずれた領域とずれていない領域の境目があるとすると、この境界線が転位となり、その方向を ξ とする（向きは任意。ここでは手前から奥向きを正としている）。また、転位が通り過ぎた後に結晶に生じる変位量とその方向をベクトル標記したものをバーガスベクトルと呼び**b**と表す。つまり転位が通り過ぎた場所では、じり面を境に結晶が**b**の方向に|**b**|だけ相対的にずれることになる。

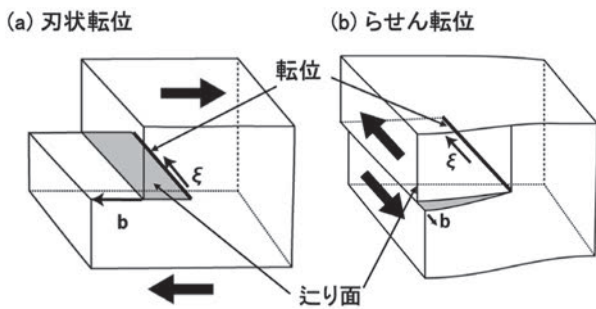


Fig.3 Schematic drawings of dislocations. (a) edge dislocation, (b) screw dislocation.

バーガスベクトルの定義にはFS/RHコンベンションとSF/RHコンベンションの二種類があるため⁹⁾、厳格に転位の性格付けをする場合には、どちらの定義を用いるのかを明記する必要がある。ここでは、高分解能電子顕微鏡法で得られた結果を基に、FS/RHコンベンションに従って行ったバーガスベクトルの決定方法について説明する⁹⁾。図4 (a) は中央に刃状成分を持つ転位を含む領域の高分解能電子顕微鏡像で、転位は紙面に対して立って入っており、

ξ は紙面手前から奥行き方向に定義する。まず、 ξ の方向を向いて転位線周りに右巻き (right-handed: RH) の閉じた回路C1を描く。次に同じ回路(格子点の数)を転位を含まない完全結晶内(図4 (b))で描くと、この回路C2は閉じない。最後に回路C2を閉じるため、C2の終点(F: Finish)から出発点(S: Start)に向かうベクトルFSを引き、これを**b**とする。

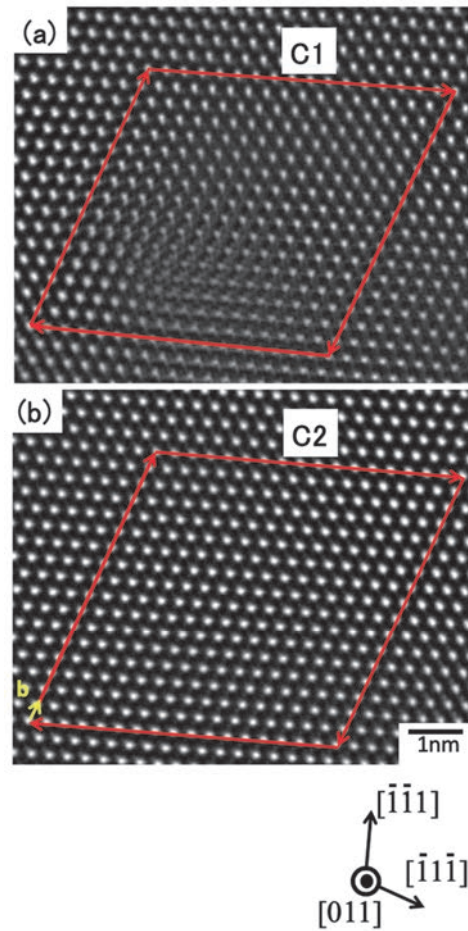


Fig.4 Burgers circuits to determine a Burgers vector under the FS/RH convention. (a) Imperfect region including a dislocation. (b) Perfect region without dislocations.

転位は**b**と ξ との関係によって性格付けられ、 $b \perp \xi$ の場合を純刃状転位、 $b \parallel \xi$ の場合を純らせん転位、 b と ξ とが平行でも垂直でもない場合を混合転位と呼ぶ。更に刃状転位とらせん転位はそれぞれ二種類に分類することができ、図3 (a) で示す様なバーガスベクトルが転位線方向を向いて左向きになる刃状転位を「正の刃状転位」と呼び、この時extra-half planeはじり面の上側にある。一方バーガスベクトルが右向きになる刃状転位を「負の刃状転位」と呼び、この時extra-half planeはじり面の下側にある。即ち、extra-half planeは、じり面に対して $\xi \times b$ の方向に存在する事になる。らせん転位の場合には、バーガスベクトルと転位線方向ベクトル同じ向き ($\xi \cdot b > 0$) の場合を「右巻らせん転位」、逆向き ($\xi \cdot b < 0$) の場合を

「左巻きらせん転位」と呼ぶ。右巻きらせん転位では、転位線に向かって時計回りで転位の周りを一周すると原子が奥行き方向に1原子ずれる。一方、左巻きらせん転位では転位線にむかって反時計回りに一周すると原子が奥行き方向に1原子ずれる。

一般には ξ と b は垂直、または平行ではない。そのような場合には、バーガースベクトルを転位線方向を基準として刃状成分とらせん成分とに分け、それらの線形和で表す。ここで、バーガースベクトルの刃状成分をベクトル表記で b_e (ξ に垂直)、らせん成分を同様にベクトル表記で b_s (ξ に平行)とすると、それらは独立 ($b_e \cdot b_s = 0$) であるので、混合転位のバーガースベクトルは $b = b_s + b_e$ と表す事が出来る。バーガースベクトルの方向は、一般に最隣接原子の方向となる事が多く、格子定数を a とすると、fccでは $a/2\langle 110 \rangle$ 、bccでは $a/2\langle 111 \rangle$ となる。なお、 ξ に平行な面は刃状転位が動くことができる面と言い換えることができ、 ξ に垂直な面の法線ベクトルを n とすると $\xi \times b \parallel \pm n$ となる時に刃状転位として活動可能である。このことから、刃状転位の刃面はただ1つに限定される一方、らせん転位の刃面は結晶学的な制限を考えなければ無限にある事になる。

したがって、転位が刃面を変える交叉刃位が可能になるのは純らせん転位のみとなる。また、上述したようなバーガースベクトルの向きは、応力下における転位運動を考えるとときに重要になる。なぜなら、もしバーガースベクトルの方向が逆になる場合には、同じ応力下において転位にかかる力の向きが逆になるため、転位が運動する方向が正反対になるからである(例えば、フランク・リード源にある転位ループの形状が膨らむ際の転位運動が記述できる)。

次に転位を動かす応力について述べる。転位を動かす際に必要となる応力はパイエルス-ナバロ-応力として知られており次式で与えられる。

$$\tau_p = \frac{2\mu}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi}{1-\nu} \cdot \frac{h}{b}\right) \quad (2)$$

なお、 ν はポアソン比、 h は面間隔、 b はバーガースベクトルの大きさである。絶対零度で転位が乗り越える格子摩擦に起因するポテンシャルをパイエルスポテンシャルと呼び、パイエルス応力はこのパイエルスポテンシャルを乗り越える応力である。なお、パイエルス応力の精度についてはまだ議論の余地が残るが、転位を動かす応力が h/b に依存するという性質は大変重要である。実際、図5で示す様に異なる結晶系において剛性率で規格化したパイエルス応力の値は、大まかに h/b で整理出来る事が知られている¹⁰⁾。立方晶系では、fccはパイエルスポテンシャルが小さく、bcc結晶はパイエルスポテンシャルは大きい。このことがフェライト鋼の降伏応力で見られる強い温度依存性の要因となるが、詳細は後述する。

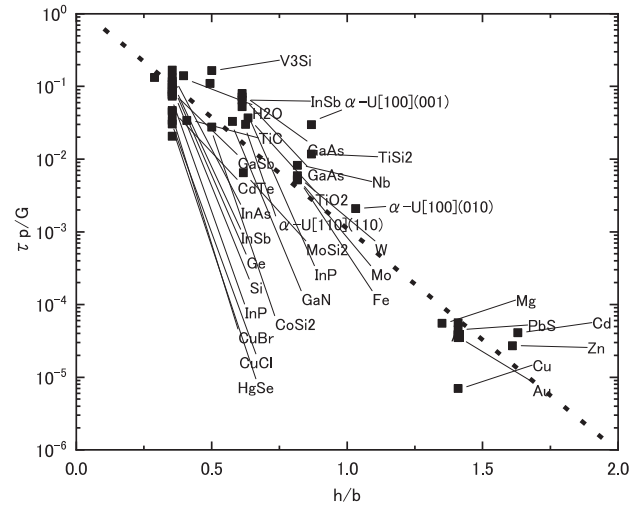


Fig.5 Relationship between Peierls stress and h/b ¹⁰⁾.

一般に刃位帯はfcc結晶では直線状になり、bcc結晶では波打つ様になる(図6)。これは、交叉刃位帯が頻繁に生じた結果であり、この波打つ刃位帯の形状が六角形鉛筆の背面を多数並べた時にできる模様と似ていることから、ペンシググライドとよばれる。刃位帯による塑性変形が起きると、試料表面と刃位帯との交線に刃位帯が見られる。これは転位が試料表面に抜けた時にできる表面段差である(図3(a)では左端面、図3(b)では手前端面に見られる段差に対応)。一本の転位が抜けた際に生じる段差の大きさはバーガースベクトルの大きさを試料高さ方向に投影した大きさに対応する。一般に光学顕微鏡レベルで観察される刃位帯は多数の転位が表面に抜けた後にできた段差であり、一本の転位が表面に抜けた際にみられる刃位線は、透過電子顕微鏡を用いて観察されることが多い。

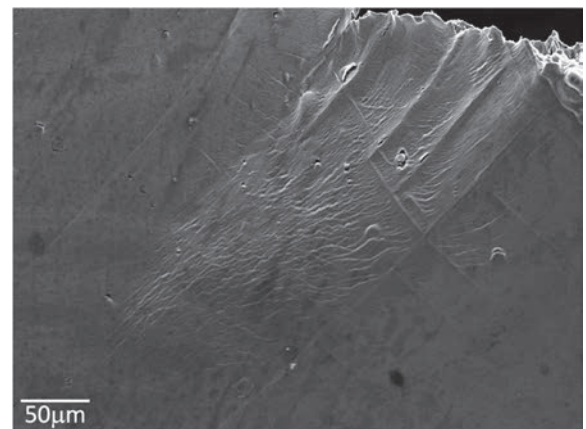


Fig.6 Pencil glides observed on the surface in ferrite after deformation.

ところで、転位論は金属における塑性変形を記述する概念として用いられているだけでは無く地震学にも応用されている¹¹⁻¹³⁾。地球規模のマクロスケールな変形と金属内

での原子スケールでの変形が, 一部とは言え同じ概念を基にして記述できる点は大変興味深い. また, 地震の規模を表すマグニチュードとその頻度の間にはグーテンベルク・リヒター則¹⁴⁾とよばれる直線関係が対数グラフ上であることがよく知られている. 動的歪時効が起こる際に応力-歪曲線上で見られるセレーションでの応力降下量とその頻度との間にも同じ関係が成り立ち¹⁵⁾, 大地の変形と金属の変形との関連性がここでも垣間見える.

3. オーステナイト中に存在する転位の特徴

次に本節では, オーステナイトに代表されるfcc結晶中における転位の特徴について述べる. fcc結晶中に於いて転位は完全転位としては存在せず, 常に拡張して存在している. 図7 (a) にfcc結晶の切り面である{111}面上での原子配置を表す. {111}面是最密原子面であり, 原子は{111}面の高さ方向へ3周期で積層している. 図7 (a) に示す原子群の中心位置をAとすると, その上の{111}面にある原子群は図中のBで示す位置に, 更に上の原子群はCで示す位置に存在することになる. 図7 (b) に完全転位 $a/2\langle 110 \rangle$ の転位が通過した後の模式図を示しているが, 転位が通過するとBの位置にある原子群と, その上にあるCの位置にある原子群が $a/2\langle 110 \rangle$ 方向にある隣の原子位置へ皆ずれる. この時バーガースベクトル $a/2\langle 110 \rangle$ は図7 (b) に示している通りBから隣のBへ向かう方向と大きさとなる.

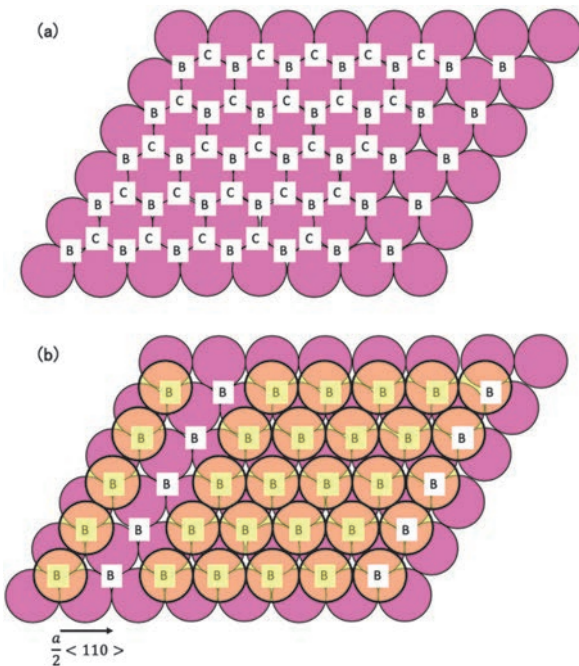


Fig.7 Schematic drawing of atomistic arrangement on {111} planes in fcc crystals. B and C are positions of atoms on upper layers.

原子が $a/2\langle 110 \rangle$ 方向に移動する際, 図8で示すように一度に $a/2\langle 110 \rangle$ 方向に進むのでは無く, 一端 $a/6\langle 112 \rangle$ 方向へずれた後に再度 $a/6\langle 112 \rangle$ の方向にずれた方がエネルギーが低くなる. この $a/6\langle 112 \rangle$ 方向へのズレを合成すると, 原子のずれる方向は最終的に $a/2\langle 110 \rangle$ となる. 分解前の転位のバーガースベクトルを $a/2[101]$ とすると, この時の転位の分解反応の一つは以下の式で表される.

$$\frac{a}{2}[101] \rightarrow \frac{a}{6}[112] + \frac{a}{6}[2\bar{1}1] \quad (3)$$

これら分解した転位はショックレーの拡張転位と呼ばれる. 転位は塑性変形が起こった領域と起こっていない領域の境界であるので, バーガースベクトルが $\frac{a}{6}[112]$ である拡張転位が通過するとBの位置にあった原子はCの位置に移動する. 次のバーガースベクトルが $\frac{a}{6}[1\bar{2}1]$ である拡張転位が通過すると, Cの位置にあった原子が隣のBの位置に移動する[†]. この時, これら二つの拡張転位で挟まれる領域, 即ち最初の拡張転位のみが通過した領域では, 図8で示す様に{111}面上における原子の積層が $\dot{A}C\dot{A}BCABC$ となりBの位置の積層が1面不足する事になる. この積層の異常は積層欠陥と呼ばれる. fcc結晶では拡張転位の通過によって生じた積層欠陥では局所的に結晶構造が稠密六方構造と等しくなる (ACACACの積層). 結晶内に切り変形に伴う積層欠陥が容易に導入されるか否かは結晶自身が持つ積層欠陥エネルギーに強く依存する. そこで次に積層欠陥エネルギーと積層欠陥の幅について述べる.

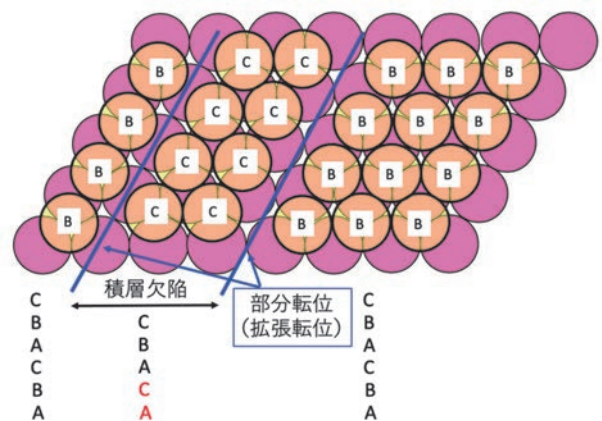


Fig.8 Schematic drawing of atomistic arrangements of a stacking fault induced by Shockley partial dislocations.

積層欠陥エネルギーの単位は J/m^2 であるので, N/m も表す事ができる. このことより積層欠陥エネルギーの大きさは転位の単位長さ当たりにかかる力 (引力型の線張力) と同じになる. 一方, 完全転位から分解したショックレー

† 最初に通過する転位をleading partial dislocation, 次に通過する転位をtrailing partial dislocationと呼ぶ.

の拡張転位も転位であるため，お互いの持つ弾性歪場によってシヨックレーの拡張転位同士も相互作用力を受け，それは斥力型になる．これらの力が釣り合う様に積層欠陥の幅が決まる．シヨックレーの拡張転位の幅をwとすると，積層欠陥エネルギー γ_{SF} との間には次の関係がある．

$$W = \frac{\mu a^2}{16\pi} \left\{ \frac{2-3\nu}{3(1-\nu)} \right\} \frac{1}{\gamma_{SF}} \quad (4)$$

上式より材料が同じならば，積層欠陥の幅は積層欠陥エネルギーに反比例することが分かる．表3に種々の材料によって測定された積層欠陥エネルギーを示す¹⁶⁾．fcc合金における塑性変形挙動において積層欠陥エネルギーの大きさが影響を与える例として加工硬化が挙げられる．単結晶での典型的な応力-歪曲線は図9に示す様に3つのステージに分けることができる．それらは，降伏直後に現れ加工硬化率が最も小さいstage I，次に塑性変形中最も大きな加工硬化率を示すstage II，そして加工硬化率が減少するstage IIIである．なお，多結晶の変形ではstage IIは現れず，降伏直後にstage IIまたはstage IIIから始まる事になる．

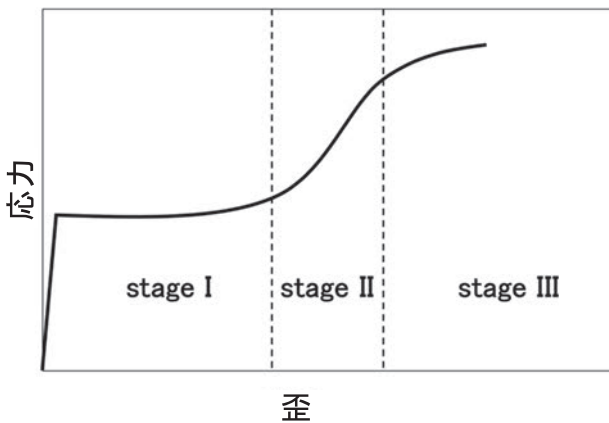


Fig.9 Typical stress-strain curve of single crystals.

ここで加工硬化率の高いstage IIIは転位の蓄積過程で，変形応力はいわゆるベイリー・ハースシュの式で表されるように転位密度のルートに比例する．stage IIIでみられる加工硬化率の減少は転位蓄積頻度の減少，即ち転位蓄積の緩和を意味している．この緩和過程の一つとして転位の交叉切りが挙げられる．ここで重要となるのは，先に述べたように，交叉切りが可能なのは純らせん転位（混合転位の場合は，らせん成分を持つ転位セグメント）のみである事である．純らせん成分を持つ完全転位が拡張している場合には，そのままでは交叉切りを起こすことができないため，交叉切りに先立って，拡張している転位は一端完全転位に収縮する必要がある．この時，積層欠陥エネルギーが小さく転位の拡張幅が大きくなるほど転位収縮が困難になる．これによって交叉切りが起こりにくくなり，転位蓄積の緩和が弱まることになる．その結果，積層欠陥エネルギーの小さ

な単結晶ではstage IIIの開始が遅れることになる．

Table 3 Stacking fault energy¹⁶⁾.

材料	積層欠陥エネルギー (mJ/m ²)	測定方法
ステンレス鋼	<10	節の解析
銀	25	節の解析
銀+25%亜鉛	3	節の解析
銅	70	節の解析
銅+25%亜鉛	7	節の解析
アルミニウム	135	ループの解析
マグネシウム	125	ループの解析
亜鉛	140	ループの解析
ニッケル	225	ステージIII加工硬化

多結晶では積層欠陥エネルギーの相違は加工硬化率 $\sigma / \partial \varepsilon$ の変化に影響する．一般に積層欠陥エネルギーが低いオーステナイト系ステンレス鋼では高い加工硬化率を示す．従って，オーステナイト鋼における加工硬化を議論する際には，含有する元素が積層欠陥エネルギーに与える影響を理解することが極めて重要となる．なお，フェライト鋼のようなbcc結晶では，積層欠陥エネルギーが極めて高いために転位の拡張は生じてないと考えられる．

4. フェライト中に存在する転位の特徴

次にフェライトに代表されるbcc構造を持つ結晶中での転位の特徴について述べる．フェライト鋼では降伏応力に強い温度依存性がみられ，低温ではほとんど塑性変形を伴わずに脆性破壊を起こす事もある．フェライト鋼で見られる「降伏応力の強い温度依存性」は換言すれば，「降伏応力は絶対零度では極めて高いが，温度上昇につれて急激に低下する」とも言える．この強い降伏応力の温度依存性は，図5で示した様に（1）bcc結晶ではパイエルスポテンシャルが高いこと，（2）転位がパイエルスポテンシャルを乗り越えて運動する過程が熱活性化過程であること，に由来している．

先に述べたように，bcc中はパイエルスポテンシャルが高い結晶であるが，鈴木¹⁷⁾はその理由として結晶構造そのものにあると指摘した．図10(a)にbccの単位格子，図10(b)に[111]方向から見た原子の投影図を示す．なお，図10(b)中の同じ色の原子は，将に同じ(111)面上に載っている．図10(b)中の緑色で示した原子が，一番手前にある(111)面上に載っているとすると，b/3だけ[111]方向にずれたところで赤色で示した原子が緑色で示した原子とは別の(111)面上に載っている．更にb/3（トータル2b/3）[111]方向に進んだ所で青色で示した原子が更に別の(111)面上に載ることになる．この時，らせん転位が取り得る配置として，三つの原子で囲まれた三角形AまたはBがある．らせん転位は転位線方向とバーガースベクトルが平行になるため，図中では転位線方向とバーガー

スペクトルは紙面と垂直方向な $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向と平行となる。もしAの中心に右巻きらせん転位がある場合、転位線を時計回りに一周回ると原子が1原子だけ $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向にずれる。そこで、図中のAで示した領域を囲む緑色で示した原子を基準とすると、青色で示した原子は $b/3$ だけ $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向に移動し、元々の緑色で示した原子との相対変位である $2b/3$ と加えて b の位置に原子が来ることになる。また、赤色で示した原子は、 $2b/3$ だけ $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向にずれるため、原子の位置は先ほどの場合と同様に、元々の相対変位である $b/3$ と加えて b の位置に原子が来る。 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向に b だけ進んだ所には先ほどと同様に赤色の原子で示した原子がいるため、転位芯の周りではこれら三つの原子がひしめき合うことになる。転位がBの位置にある場合にはこのような事は起こらない。らせん転位が移動する場合には二回に一回の割合で、上記幾何学的によって生じる高いポテンシャルを乗り越えなければならない事がbcc金属でらせん転位のパイエルスポテンシャルが高くなる理由であると考えられる。

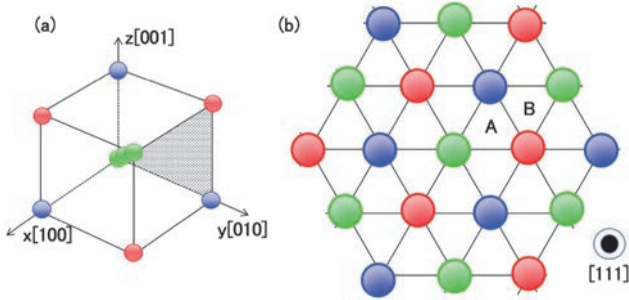


Fig.10 Schematic drawing of atoms in bcc crystals. (a)Unit cell, (b)(111) projection. Atoms with the same colours are on exactly the same (111) plane.

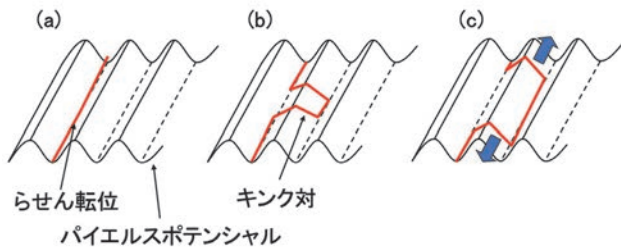


Fig.11 Schematic drawing of a screw dislocation and the Peierls potential. (a)A screw dislocation lies along the valley of the Peierls potential. (b)Nucleation of a kink-pair along the screw dislocation. (c)Motion of the kink-pair along the screw dislocation.

パイエルスポテンシャルが大きい結晶中のらせん転位は、キंक対を形成することでポテンシャルを乗り越える。ここで図11 (a) に示すように純らせん転位がパイエルスポテンシャルの底に横たわっているとす。なお、パイエ

ルスポテンシャルの周期は原子配列の周期に対応する。まず、らせん転位上の一部がキंक対を作りパイエルスポテンシャルを乗り越える (図11 (b))。なお、このキंक対は刃状成分を持つ。次にこのキंक対がらせん転位線の方向に沿ってお互いが遠ざかるように移動すると、結果としてらせん転位全体が次のパイエルスポテンシャルの谷に移動したことになる (図11 (c))。このように、パイエルスポテンシャルを乗り越える素過程は、キंक対を作る過程とそのキंक対が運動する過程の二つとなる。ここでキंक対を作るのに必要なエネルギーを E_k 、キंक対が移動するのに必要なエネルギーを E_m とすると、転位が隣の安定位置に移動する速度は次式で与えられる。

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{E_k + E_m}{kT}\right) \quad (5)$$

ここで v_0 は転位のセグメント長さ、振動因子などからなる定数、 k はボルツマン定数、 T は絶対温度である。 $E_k \gg E_m$ の場合、転位速度は

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right) \quad (6)$$

となり、転位の運動速度はキंक対形成頻度に律速されることになる。

bcc金属の低温での降伏応力は転位の運動速度が決められており、歪速度と転位速度との間には次の関係がある。

$$\dot{\epsilon} = \rho b v \quad (7)$$

ここで、 ρ は可動転位密度である。(7)式に(6)式を代入すると、

$$\dot{\epsilon} = \rho b v_0 \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right) \quad (8)$$

となる。一般に降伏応力の温度依存性は(初期)歪速度一定の条件下で測定される。そのような場合、転位運動の活性化エネルギーは図12¹⁸⁾で示すように温度に比例して上昇する。その理由は、実験条件が試験温度を変えても歪速度が一定となるような拘束条件下で行われるからである。もし拡散のように活性化エネルギーが温度に寄らず一定となるならば、温度上昇に伴って(8)式中の $\exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right)$ が大きくなり転位が早く動くようになる。その結果、歪速度が実験条件で与えた条件より大きくなってしまふ。従って、(8)式中の $\exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right)$ が一定となるように活性化エネルギー自身が大きくなる必要がある。なお、歪速度にもよるがパイエルス機構で転位が運動する場合、 $E_k = 26kT$ 程度になる事が知られている¹⁹⁾。なお、一定荷重下で行うクリープ試験では、歪速度一定の拘束条件が無いいため、試験温度上昇に伴って歪速度が増加する。

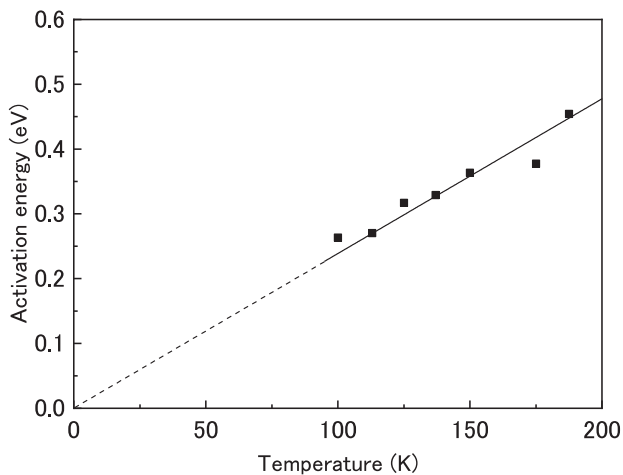


Fig.12 Activation energy obtained from the temperature dependence of yield stress in Ti-added ultra-low carbon steels¹⁸⁾.

ここで、キック対形成エネルギーは、転位にかかる有効応力 τ_e の関数で有り、活性化体積を V^* とすると次式で与えられる。

$$E_k = F - V^* \tau_e \quad (9)$$

なお、 F は応力が付与されていないときのエネルギーでヘルムホルツの自由エネルギーに対応する。活性化体積は、熱活性化過程に於いて転位が障害を乗り越える際に掃く面積にバーガスベクトルの大きさをかけたものである。従って (9) 式右辺の第二項は転位がパイエルスポテンシャルを乗り越える際に有効応力がする仕事になる。ここで (9) 式を (8) 式に代入して、次式が得られる。

$$\dot{\epsilon} = \rho b v_0 \exp\left(-\frac{F - V^* \tau_e}{kT}\right) \quad (10)$$

(10) 式中の F は一定であることと、一般に V^* も T の増加関数である事²⁰⁾ を考慮すると、(10) 式より歪速度が一定の場合、変数は τ_e だけとなる。従って温度上昇 (E_k の上昇) に伴って τ_e は低下する事になる。これが温度上昇に伴って降伏応力が低下するメカニズムである。パイエルスポテンシャルが大きい場合には温度上昇に伴う τ_e の変化が大きいため、bcc 結晶では降伏応力の温度依存性が大きくなる。

5. 終わりに

本項では、鉄鋼材料でメインとなるフェライトとオーステナイト中の転位に着目し、bcc 結晶およびfcc 結晶中での転位の特徴について述べた。本稿で述べた事項は純金属、単相中での転位の挙動であり、添加元素を含んでいる場合には、その影響を考慮する必要が出てくる。また、近年注目されている複相鋼の場合における加工硬化挙動にはマイ

クロメカニックス的な観点も必要となり、よりマクロスケールの観点からも変形機構に着目すべきとなる。

参考文献

- 1) N. Narita and J. Takamura: Dislocation in Solids, 9, F.R.N. Nabarro (Ed.), North-Holland Publishing Company, Amsterdam, New York, Oxford, (1992), 178.
- 2) H. Minami, K. Nakayama, T. Morikawa, K. Higashida, Y. Toji and K. Hasegawa: Tetsu-to-Hagané 97 (2011), 493.
- 3) M. Tanaka, Y. Yoshimi, K. Higashida, T. Shimokawa and T. Ohashi: Mater. Sci. Eng. A 590 (2014), 37.
- 4) A. Inoue, T. Ogura and T. Masumoto: Bull. Jpn. Inst. Met. 13 (1974), 653.
- 5) M. Umemoto, Y. Todaka, T. Takahashi, P. Li, R. Tokumiyama and K. Tsuchiya: Mater. Sci. Eng. A 375-377 (2004), 894.
- 6) S. Tagashira, K. Sakai, T. Furuhashi and T. Maki: ISIJ International 40 (2000), 1149.
- 7) T. Ohashi, L. Roslan, K. Takahashi, T. Shimokawa, M. Tanaka and K. Higashida: Mater. Sci. Eng. A 588 (2013), 214.
- 8) J.P. Hirth and J. Lothe: Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York, USA, (1986), 19-25.
- 9) D.R. Adhika, M. Tanaka, T. Yamamoto and K. Higashida: Trans. Mater. Res. Soc. Japan 40 (2015), 227.
- 10) Y. Kamimura, K. Edagawa and S. Takeuchi: Acta Materialia 61 (2013), 294.
- 11) Y. Okada: Bull. seism. Soc. Am. 75 (1985), 1135.
- 12) J.A. Steketee: Canadian Journal of Physics 36 (1958), 292.
- 13) 笠原慶一: 日本金属学会会報 14 (1975), 853.
- 14) B. Gutenberg and C.F. Richter: Bull. seism. Soc. Am. 32 (1942), 163.
- 15) F.F. Csikor, C. Motz, D. Weygand, M. Zaiser and S. Zapperi: Science 318 (2007), 251.
- 16) B. Henderson: The structures and Properties of Solids I, Defects in Crystalline solids, Crane, Russak, (1972),
- 17) H. Suzuki: Dislocations and Mechanical Properties of Crystals, J.C. Fisher, W.G. Johnston, R. Thomson and J. T. Vreeland (Eds.), Wiley & Sons, (1957), 361.

- 18) M. Tanaka and K. Higashida: Philos. Mag. 96 (2016), 1979.
- 19) 加藤雅治: 入門転位論, 裳華房, (1999), 106.
- 20) M. Tanaka, D. Izumi, N. Yoshimura, G. Shigesato, M. Hoshino, K. Ushioda and K. Higashida: Philos. Mag. 97 (2017), 2915.