

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 將己*

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 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Tm/2以下(Tm: 融点)の温度においては大きく分けて三つに大別でき、 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.

 亡り変形の場合には、図1(b)が示す様に変形前後で結 晶格子の形状に変化は生じず、 亡り面を境に辷り方向(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、 これが辷り帯になる. 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変化するが、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)が変形前後で 全く異なることになる. なお,マルテンサイト変態にとも なって双晶変形や辷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.





原稿受付日	: 2019	9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ーを描画し、塑性変形前後での格子 状マーカーの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) に辷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辷り帯が見られ、その辷り 帯にそって僅かではあるが格子が剪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ーの形状変 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辷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. 辷りによる塑性変形

にり変形は結晶がある原子面を境にずれる()」。 よって生じる. そのズレが生じる原子面を辷り面, ずれる 方向を辷り方向と呼び、その組み合わせを辷り系と呼ぶ. **辷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辷り系は表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 e_a , b, cとし, その長さの関係 e_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 の局部変形が抑えられることで室温でも辷り変形を起こし 得る事が示されている.

Table 1 Crystal	structures	and slip	o systems.
-----------------	------------	----------	------------

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

に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, に り面より上にある原子群を下の原子群に対して辷り面上で 水平に1原子だけ辷り方向へずらすのに必要な剪断応力を $\tau_{\rm th}$ とすると,その値は次式で与えられる.

$$au_{th} = rac{\mu}{2\pi}$$
 (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、辷り面上に存在する原子群が 一斉に辷り方向へ動くと仮定したためで、CRSSが過大評 価されている.つまり、実際の辷り変形では、辷り面上の

^{*} 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.実際の辷り変形では,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 転位の運動による辷り変形である.

Table 2 Theoretical strength and measured CRSS.

	$\tau_{th}(=\mu/30)$	CRSS の実測値	理想強度と
材料	[GPa]	[MPa]	実測値との比
Ag	1.0	0.37	0.00037
AI	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辷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 転位を辷り変形が起こった領域と起こっていない領域との 境界であると考える. 辷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 したものをバーガースベクトルと呼びbと表す. つまり転 位が通り過ぎた場所では、
こり面を境に結晶が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.

バーガー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有るため[®],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 たバーガースベクトルの決定方法について説明する[®].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 ξ の 場合を純刃状転位、b $//\xi$ 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) で示す様なバーガー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は辷り面の上側にある. 一方バー ガー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は辷り面の下側にある. 即ち、extra-half planeは、いーガースベ 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「右巻きらせん転位」、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<110>, bccではa/2<111>となる. なお, 辷り面 は辷り転位が動くことができる面と言い換えることがで き, 辷り面の法線ベクトルをnとするとξ×b/±nとなる 時に辷り転位として活動可能である.このことから,刃状 転位の辷り面はただ1つに限定される一方,らせん転位の 辷り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、転位が辷り面を変える交叉辷りが可能にな 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 ガースペクトルの向きは、応力下における転位運動を考え るときに重要になる.なぜなら、もしバーガースペクトル 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-ナバロー応力として知ら 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、v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で整理出来ることが知られてい 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/b10).

一般に辷り帯は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、交叉辷りが頻繁に生じ た結果であり、この波打つ辷り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.辷り変形による塑性変形が起き ると、試料表面と辷り面との交線に辷り帯が見られる.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 る辷り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辷り線は、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 defromation.

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カー 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結晶の辷り面である{111}面上での 原子配置を表す. {111}面は最密原子面であり、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<110>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<110>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<110>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<110>方向に移動する際,図8で示すように 一度にa/2<110>方向に進むのでは無く,一端a/6<112> 方向へずれた後に再度a/6<112>の方向にずれた方がエネ ルギーが低くなる.このa/6<112>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<110>となる.分 解前の転位のバーガースペクトルを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.

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

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^{*a*}[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 $\frac{a}{6}$ [121]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 ・・・ ACABCABC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 晶内に辷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 staking fault induced by Shockley partial dislocations.

積層欠陥エネルギーの単位はJ/m²であるので. N/mとも 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 よってショ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.ショ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ysr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 I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辷 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、交叉辷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、 そのままでは交叉辷りを起こすことができないため、交叉 辷りに先立って、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 によって交叉辷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∂σ /∂ε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

スベクトルは紙面と垂直方向な[111]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[111]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[111]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[11]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bの位置に原子が来る. [11]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くなる事がbcc金属でらせん転 位のパイエルスポンテ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 kinkpair 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、キンク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る.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ンク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、このキンク対 は刃状成分を持つ.次にこのキンク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、キンク対を作る過程 とそのキンク対が運動する過程の二つとなる.ここでキン ク対を作るのに必要なエネルギーをE_k、キンク対が移動す 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.

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

ここで v_o 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 >> E_m の場合,転位速度は

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

となり、転位の運動速度はキンク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て おり、歪速度と転位速度との間には次の関係がある.

$$\dot{\varepsilon} = \rho b v$$
 (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,

$$\dot{\varepsilon} = \rho b v_0 exp \left(-\frac{E_k}{kT}\right)$$
 (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う.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,キン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.

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

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碍を乗り越える際に掃く面 積にバーガー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.

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

(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

- N. Narita and J. Takamura: Dislocation in Solids, 9, F.R.N. Nabarro (Ed.), North-Holland Publishing Company, Amseterdam, New York, Oxford, (1992), 178.
- H. Minami, K. Nakayama, T. Morikawa, K. HIgashida, Y. Toji and K. Hasegawa: Tetsu-to-Hagané 97 (2011), 493.
- M. Tanaka, Y. Yoshimi, K. Higashida, T. Shimokawa and T. Ohashi: Mater. Sci. Eng. A 590 (2014), 37.
- A. Inoue, T. Ogura and T. Masumoto: Bull. Jpn. Inst. Met. 13 (1974), 653.
- M. Umemoto, Y. Todaka, T. Takahashi, P. Li, R. Tokumiya and K. Tsuchiya: Mater. Sci. Eng. A 375-377 (2004), 894.
- 6) S. Tagashira, K. Sakai, T. Furuhara and T. Maki: ISIJ International 40 (2000), 1149.
- 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 Yourk, USA, (1986), 19-25.
- 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.
- F.F. Csikor, C. Motz, D. Weygand, M. Zaiser and S. Zapperi: Science 318 (2007), 251.
- B. Henderson: The structures and Properties of Solids I, Defects in Crsytalline solids, Crane, Russak, (1972),
- 17) H. Suzuki: Dislocations and Mechanical Properties of Crsytals, J.C. Fisher, W.G. Johnston, R. Thomson and J. T. Vreeland (Eds.), Wiley & Sons, (1957), 361.

- 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.