一軸変形を受けた bcc, fcc 単純金属のすべり面 における電子圧力の変化†

小 竹 茂 夫* 鈴 木 泰 之* 妹 尾 允 史*

Electron Pressure of bcc, fcc Simple Metals at Slip Plane under Uniaxial Deformation

by

Shigeo KOTAKE*, Yasuyuki SUZUKI* and Masafumi SENOO*

The probability density of stress on valence electron, called electron stress σ , is studied at slip planes of simple metals, K and Al, under uniaxial deformation. σ is calculated from the perturbed wave function by using pseudo-potential method. Distributional change on σ indicates the properties of plastic deformation like the critical shear stress in bcc and fcc metals. The direction between the local minimum density of σ and an atom is agreeable with the slip direction of bcc and fcc metals. We also examine the force between ion and electron from virial force by concerning the electron screening effects on ions. Although the present calculations are the analysis on the perfect crystal, distributional change of σ can imply the phenomena on plastic deformation in simple metals.

Key words: Slip plane, Slip direction, fcc-bcc crystal structure, Pseudo-potential, Electron stress, Dislocation, Piers potential

1 緒 言

金属には結晶構造に依存したすべり面、すべり方向が存在し (fcc: $\{111\}\langle 110\rangle$, bcc: $\{110\}$ or $\{112\}\langle 111\rangle$), 材料の加工特性は、これらの組合せにより理解することができる。転位は、合金化、析出、加工、温度などの履歴に依存し、基本的には、様々な面や方向を取りうるにも関わらず、決められたすべり面、すべり方向にのみ存在する。従って、この塑性現象は、結晶構造に依存した材料の本質的な性質によるものと考えられる。¹⁾

従来の転位論は、面間隔が最大であるためにパイエルスポテンシャルが最小となると予測される面をすべり面と考え、一方、弾性変形によるエネルギーが最小となるバーガースベクトルの向きから、すべり方向や fcc における拡張転位を説明してきた。²⁾ 転位エネルギーの大部分が、周囲の連続体に弾性的に保存されるとするこの取扱いは、ここ 30 年の塑性現象の理解に大きく役立った。^{3), 4)} しかしながら一方で、転位運動の基礎である周期的なパイエルスポテンシャルは、依然として計測不可能な仮定の式の域を出ることができず、現在その関数形には、多くの疑問が投げかけられている。^{5), 6)}

近年、これらの連続体的な議論の欠点を補うことを目的として、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) や分子静力学 (Molecular Statistics: MS) によるシミュレーションが盛んに行われており、^{7)~9)} 従来の実験結果を説明するすべり面、すべり方向の存在が確認されている。しかしながら、これらの計算結果は、仮定する原子間ポテンシャルに大きく依存し、また、計算機実験的な結果

からは、すべり面やすべり方向を決定する本質的な理解を得にくい。一方、擬ポテンシャル法などの電子論によるエネルギー計算から、転位の性質を説明する試みも見られる。¹⁰⁾ しかし、転位の弾性的な効果は、 $1/r$ (r : 転位芯からの距離) の関数となり、物質内部の広い範囲に影響する。そのため、十分に大きな単位胞を使用する必要があり、現在においても容易に計算することは難しい。また転位に代表される不規則な欠陥は、実空間的な変化であり、 k 空間における格子の周期性を議論する電子論とは、単純には相容れない。

一方、強加工下のセル壁においても、得られる転位の最大密度は、高々、 10^{16}m^{-2} 程度にすぎず、¹¹⁾ 転位芯の体積は 10^{-4} 程度であることから、 k 空間における転位の影響は、完全結晶とは大きく異なる。また、すべり面やすべり方向は、結晶構造により一定で、加工条件などによらないことから、これらを支配する因子は、本質的に完全結晶においても成立すると考えられる。他方、原子配列の不規則性による電子の局在性を考慮しても、波動関数は、転位芯を越えてガボール関数的に局所的な波として空間に大きく広がっており、周囲の規則的なポテンシャルの影響を受ける。転位芯回りの格子は大きな弾性変形を受けており、また塑性過程において結晶全体も弾性変形を受ける。妹尾らは、擬ポテンシャルによる転位芯近傍の弾性変形における理論解析の可能性¹²⁾ について言及している。特に転位近傍の領域は、大きく一軸ひずみを受けた完全結晶に等しく、これのすべり面やすべり方向における電子状態の変化について議論することは

† 原稿受理 平成 11 年 6 月 9 日 Received June 9, 1999

* 正 会 員 三重大学工学部機械工学科 〒514-8507 津市上浜町, Dept. of Mech. Eng., Mie Univ., Kamihama-cho, Tsu, 514-8507

重要であろう。

従来、量子力学に基づく電子論の計算は、エネルギーを中心に、系全体の物理量の期待値を求める手段として応用されてきた。¹²⁾ 定常状態での系全体の応力の期待値¹³⁾は、一般に0となり、意味を持たない。一方、量子力学的演算子から導かれる各物理量の確率密度は、波動関数で表される位置の関数となる。演算子のエルミート性から、その実部は局所的な領域の期待値を与え、その和は系全体の期待値と等しくなる。本研究で議論する確率密度は、ポテンシャルを与えるイオンと波動関数である電子との間の相互作用によって生じる応力の分布を意味し、原子—電子間の結合状態を表すパラメーターとなりうる。一般に連続体中で議論される応力は、原子構造を考慮しないマクロな視点での実在する物理量であり、単位胞全体の期待値に等しい。今回議論する電子応力は、原子よりも小さな領域の確率密度分布を議論するもので、両者は取り扱う領域の大きさから異なる概念である。

これまで筆者等は、単純金属内部の価電子がもつ応力の確率密度(電子応力)の計算を行ない、一軸ひずみ下における分布の急激な変化から、相変態¹⁴⁾や、破壊現象¹⁵⁾について研究をおこなってきた。今回、同じ状態下での単純金属の完全結晶におけるすべり面上の電子応力の変化について計算を行ない、イオン—電子間の応力の変化について考察した。これにより、従来からのパイエルスポテンシャルや連続体の弾性エネルギーによる解析とは異なる電子論的視点から、単純金属のすべり面やすべり方向、拡張転位などの塑性現象について議論をおこなった。また、固体内部の一原子の変位に伴う、電子応力の変化とパイエルス応力との関連について議論を行った。電子応力は、イオン間の力の釣合いを含まない分、系全体の応力の変化を表すことはできない。しかし、クーロン力によるイオン間の相互作用には、変形に際して急激な変化が期待されないのに対し、電子応力は、フェルミ面近傍のブリルアン・ゾーンの影響から、変形による物質内部の結合力の急激な変化の主たる要因となりうる。

2 研究の目的

本論文は、完全結晶を電子論的に解析するといった従来の転位を含んだ系とは異なった観点から塑性について議論をおこなう。そのため今回の計算は、転位芯の易動性を議論するものではない。マクロな塑性を説明する転位の性質を電子論によりミクロに説明するといった階層的な視点ではなく、ミクロな現象の変化から直接マクロな現象との関連について考察をおこなう。

電子論的観点から転位の影響を考えた場合、固体の結合をになう電子状態の変化は、転位近傍での大きな弾性変形によるブリルアン・ゾーンの変化として代表される。電子の局所的な広がりを考慮した場合、この影響は、完全結晶におけるブリルアン・ゾーンによる変化と大きくは違わない。従来の転位による議論は、連続体中にパーガスベクトルを取り入れることにより、結晶構造の影響を弾性エネルギーとして評価してきた。今回、これと同様な影響が、弾性変形下でのひずみによる完全結晶の

電子構造の変化として理解される可能性がある。

本研究では、こうした観点から、完全結晶のひずみを与えるブリルアン・ゾーンの変化を固体内部の結合の一部を表現する電子応力の分布により評価をおこない、塑性の基本的現象であるすべり面やすべり方向との関係について議論をおこなった。今回取り上げたKやAlは単純金属であり、一般的な構造材料であるFeなどのd電子による共有結合性の強い遷移金属を代表するものではない。そのため本研究は、金属結合が主となる単純金属に限った議論であり、格子のひずみに対する準自由電子近似による理解を示すものである。

3 計算方法

3.1 一軸ひずみによる σ の変化

計算は、周期的境界条件をおいたK, Alの単位胞を、[001]のz軸方向に5%ずつ、一軸ひずみ($\epsilon = 0.80 \sim 1.20$)を与えることによっておこなった。この際、x, y軸は固定した。 ϵ は変形後と無変形とのz軸の長さの比である。価電子の擬波動関数(ϕ)は、フェルミ球内部の約200個の k 点について表現した。 ϕ は、Heine-Abarenkov型の擬ポテンシャル(W)を用い、一次の摂動により $3k_f$ (k_f : フェルミ波数)内部の q 点について十分に収束するよう平面波展開することにより求めた(式(1), (2))。

$$\phi = |k\rangle + \sum' a_q |k+q\rangle \quad (1)$$

$$a_q = 2m \langle k+q | W | k \rangle / \left\{ \hbar^2 (k^2 - |k+q|^2) \right\} \quad (2)$$

$|k\rangle$ は、 k 点での平面波、 $\hbar$ はプランク定数、 m は電子の質量である。また Σ' は、 $q=0$ を除く q 点での和を表す。

本研究におけるブリルアン・ゾーンの影響は、 a_q の分母に取り込まれており、結晶のひずみは、 ϕ の変化となって表れる。擬ポテンシャルのパラメーターは、妹尾らにより大きな体積変化を伴う系について成り立つよう求められた値¹²⁾を使用した。計算によって求められた弾性定数(C_{11} , C_{12})が実験値とよい一致を示すことから、¹⁵⁾今回のパラメーターおよび近似は、マクロな物性値を議論するには十分であると考えられる。

電子応力(σ または σ_{ij})は、式(3)により、また σ の静水圧成分である電子圧力(p)は、式(4)により定義される。¹⁴⁾

$$\sigma_{ij} = \hbar^2 / 4m (\phi^* \nabla_i \nabla_j \phi + \phi \nabla_i \nabla_j \phi^* - \nabla_i \phi^* \nabla_j \phi - \nabla_i \phi \nabla_j \phi^*) \quad (3)$$

$$p = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) / 3 \quad (4)$$

4.1節で考慮するように、定常状態の価電子の波動関数から計算される σ は、電子—イオン間の相互作用を表現し、本研究では一軸ひずみによるこの相互作用の変化に着目して議論をおこなう。

今回、bcc構造を持つKのすべり面{110}およびfcc構造を持つAlのすべり面{111}について σ および p の計算を行った。これらのすべり面は、bccについては、低溫変形の際に、またfccについては、ほぼ全条件において、転位の移動が観察される領域である。¹⁾ 計算方法および使

用したパラメーターの詳細は、相転移についての報告に等しい。¹⁴⁾ σ の各成分についての考察は、複雑となるため、今回は p による考察を主として行った。

3・2 一原子の変位による生じる力の変化

パイエルス力 (τ_p) は、転位線が、すべり面を進む際に周期的に作用する力であり、大きな領域での計算が必要なことから、現在においても、これを電子論的に導出することは容易ではない。¹²⁾ 今回、単位胞における周期的境界条件下で、一原子を移動させた際に生じる原子回りの σ の変化から、価電子が原子の変位に与える力 (F_σ) について考察を行った。 F_σ は、一定の半径で原子を取り囲む閉空間 Ω 内部の価電子全体の virial 力の和 ($F_v = \Sigma \text{div} \sigma$) の体積積分によって定義され、¹³⁾ Gauss の定理により、 σ の表面積分 A により算出した (式 (5))。

$$\begin{aligned} F_\sigma &= \int_{\Omega} F_v dv = \int_{\Omega} \Sigma \text{div} \sigma dv \\ &= \Sigma \int_A \sigma ds \end{aligned} \quad (5)$$

一般に、任意の位置の ϕ は、複数の原子からなるポテンシャルの影響を受けるため、 F_σ も、一つの原子と電子との間の力 (F_a) とは等しくならない。一方、各原子のもつポテンシャルは、電子ガスの遮へいを受けることから、閉空間の半径を適切に設定した場合、 F_a にほぼ等しい値が得られる可能性がある。そのため閉空間の半径を様々に変化させた F_σ と、Lennard-Jones (L-J) ポテンシャルから静力学的に求められた F_{aMS} との比較を行った。

4 計算結果

4・1 K{110} 面の電子応力の変化

z 軸方向に、 $\varepsilon = -20, -10, -5\%$ の圧縮ひずみを受けた場合の p を Fig. 1 (a) ~ (c) に、ひずみのない状態 ($\varepsilon = 0\%$) の p を Fig. 1 (d) に、 $\varepsilon = 5, 10, 20\%$ の引張りひずみの状態での p を Fig. 1 (e) ~ (g) に示す。 p の分布図において、明るい領域は、引張り方向に高い圧力を示す。 bcc 金属である K の単位胞の {110} 面には、面の中央部および角に原子が位置する (Fig. 1 (h))。 今回の計算の全てに共通して、原子位置における p は系全体の最小値を示すが、これは内核電子によるパウリの排除律の影響を含んだ擬ポテンシャルによるものであり、今回のイオン間の結合に関連する p の分布とは関係しない。 以下、各空間の位置を単位胞の対称性を代表させた座標位置 ($\langle xyz \rangle$) で表す。

ひずみのない状態では、 p の極大点 (明るい領域) は、 $\langle xyz \rangle = a/4 \langle 111 \rangle$ の位置にあるのに対し、 $\varepsilon = 5\%$ において位置の変化を始め、 $\varepsilon = 10\%$ 以上では、 $a/2 \langle 100 \rangle$ へと移動した。 一方、 $\varepsilon = 5\%$ 以上では、 $a/4 \langle 111 \rangle$ 近傍で、 p は鞍点を示した。 これらの p の変化は、さらなる弾性変形においては観察されなかった。 一方、圧縮においては、ピーク位置は広がる形で変化を示し、 $\varepsilon = -30\%$ を越えるまで分布の移動は観察されなかった。 全ての状態において、原子間には、高い電子応力の障壁が存在し、前述のように多少の極大値の位置の変化は認められるものの、ひずみに依らずこの傾向は変わらなかった。

Fig. 1. Electron pressure (p) in potassium under (a) $\varepsilon = -20\%$, (b) -10% , (c) -5% , (d) 0% , (e) 5% , (f) 10% , (g) 20% and (h) schematic figure of bcc unit cell.

4・2 Al {111} 面の電子応力の変化

fcc 金属である Al の {111} 面には、面周囲の角、中心および各辺の中点に原子が位置する (Fig. 2 (f))。 z 軸方向の一軸変形が、 $\varepsilon = -20\%, -10\%$ の圧縮状態の p を Fig. 2 (a), (b) に、ひずみのない状態 ($\varepsilon = 0\%$) の p を Fig. 2 (c) に、 $\varepsilon = 10\%, 20\%$ の引張り状態の p を Fig. 2 (d), (e) に示す。 各辺の [111] と $[-1-1]$ のベクトルは、約 109 度の角をなすが、ここでは都合上、直角として表す。 ひずみ量に依らず p の極小値 (暗い領域) の位置は、 $\langle xyz \rangle = a/6 \langle 211 \rangle$ に存在した。 一方、 p の極大値 (明るい領域) は、ひずみの無い状態では、 $a/4 \langle 110 \rangle$ と $a/4 \langle 111 \rangle$ の両方に存在したが、引張り下では $a/4 \langle 110 \rangle$ に、圧縮下では $a/4 \langle 111 \rangle$ へと移動した。

4・3 Al 内部の原子の変位に伴う電子応力の変化

Al 内部の一原子を、 $\langle 100 \rangle$ 方向に移動させた際に生じる原子回りの空間積分により、 F_σ を求めた。 Fig. 3 に、

Fig. 2. Electron pressure (p) in aluminum under (a) $\varepsilon = -20\%$, (b) -10% , (c) 0% , (d) 10% , (e) 20% and (f) schematic figure of bcc unit cell.

積分範囲の半径 ($r_0 : \Omega = 4/3\pi r_0^3$) をパラメーターとして, F_σ の変位量 ($\Delta\xi$) による変化を求めた. また同じ条件下で, 分子静力学によって得られる変位原子に掛かる力 (F_{OMS}) についても示した. F_σ と F_{OMS} は, 両者とも $\Delta\xi$ と共に増加するが, F_{OMS} が発散傾向を示すのに対し, F_σ は一定以上の変位に際して飽和傾向を示す. また F_σ は, 積分領域の半径に従って増加した. 両者とも, 原子間隔で周期関数になるが, 変位量に対する力の増加傾向は大きく異なった.

5 考 察

5.1 電子応力の変化と固体内部の力の釣り合い

電子の確率密度流れ (J_i) の時間変化は, F_b と Feynman 力 (F_f) の釣り合いによって表現される.¹⁶⁾

$$\partial J_i / \partial t = -\nabla_j \cdot \sigma_{ij} - \rho \nabla_i V = F_b - F_f \quad (6)$$

この式は, 一電子の局所的な力の釣り合いを示し, 系が定常状態にあった場合に ($\partial J_i / \partial t = 0$), F_b と F_f は等しくなり, F_f は F_b と同様に電子-イオン間の力の釣り合いを表す. 電子応力は, 平衡方程式 ($F_b = \text{div} \sigma$) によって表されることから, p は電子がその位置でイオンに与える局所的な圧力を表わし, 電子による原子間の結合を表現する.^{14), 15)} 高い p ほど, 引張り方向に正の圧力を持ち, イオンは電子に押されるため, この方向に原子を変位させることができない. よって塑性変形下において, 原子は,

Fig. 3. Force between one atom and electron (F_σ) with atomic displacement ($\Delta\xi$) and the radius of integrated area (r_0).

p の低い方向に移動するものと考えられる. もっとも, 今回の計算は, 完全結晶についての応力計算であり, 格子欠陥である転位や原子位置の変化によっても, p の分布は変化するものと考えられる. 詳しい議論は, 5.7 節にて述べる.

5.2 すべり面の p の変化とすべり方向の関係

bcc 金属では, 引張りひずみによって, p の位置が変化し, $\varepsilon \geq 5\%$ で p の障壁がつくる極小値の方向が原子のすべり方向 ($\langle 111 \rangle$) と一致する. これは, 原子がこの方向に変位し易いことを意味し, 転位論と同じ結果を与える. 原子間における p の障壁は, bcc 金属に特有な臨界せん断応力の存在を示唆する. 転位芯の近傍では, 格子に引張りと圧縮の大きな弾性変形によるひずみが存在するが, 今回の計算結果から, 引張り側の格子に大きな p の分布の変化が期待され, この半結晶の電子状態が, 塑性変形と密接に関係しているものと考えられる.

一方, fcc 金属におけるすべり面上の転位のバグズベクトルは, $a/2 [10-1] \rightarrow a/6 [2-1-1] + a/6 [11-2]$ へと部分転位に分解することが知られている.¹⁾ つまり, fcc 金属における転位芯は, 直接 $\langle 110 \rangle$ 方向に動くことはなく, $\langle 2-1-1 \rangle$ や $\langle 11-2 \rangle$ 方向に分解して動く. 今回の計算で示された p の分布から, ひずみ量に関係なく, 各原子は $a/6 \langle 211 \rangle$ 方向に原子が動き易いことが示される. これは上述した拡張転位の方位を満足し, bcc 金属同様, p の分布は転位論と同じ結論を与える.

5.3 bcc, fcc 金属における p とパイエルス力の関係

一般に, bcc 金属の降伏応力は大きく, 温度依存性が見られるのに対し, fcc 金属では, これは非常に小さい. そのため, 純度の良い fcc 単結晶では, 極低温においても明確な降伏応力が観察されない. 従来の転位論では, fcc 金属の降伏応力が小さい理由を, 拡張転位による弾性エネルギーの低下から τ_p が小さくなるためと説明されてきたが,¹⁾ τ_p の大幅な値の違いや, その温度依存性を統一的に論じることはできなかった. p の大きさは, τ_p と密接に関係するものと考えられ, 温度による原子の熱揺らぎは, このポテンシャルを越える力となる. 今回の計算から, bcc 金属では, 変形に関わらず原子位置の中間に p による極大領域が存在するのに対し, fcc 金属では, ひずみの量に関係なく原子位置の中間に p の極小値が存

在する。以上の考察から、bcc 金属の高い降伏応力は、原子間の p の障壁が原因で生まれると考えられ、一方、fcc 金属の低い降伏応力は、 p の障壁が十分に高くないことによると考えられる。

5・4 相変態および破壊現象との関係

以前、筆者等は、 p の計算から、fcc/bcc 相変態の機構¹⁴⁾や金属・半導体の破壊現象¹⁵⁾について議論をおこなってきた。その結果、大きなひずみ ($\varepsilon > 30\%$) を伴う理想的な一軸変形状態において、カタストロフィックな p の分布の移動が確認され、破壊現象との関係が示唆された。一方、今回のすべり面における p の変化は、 $\varepsilon = 5\%$ 付近と、小さなひずみ量において観察され、一般に、塑性変形が、破壊に先行する現象であることと一致する。すべり面上で観察された p は、破壊や相変態における発散的な変化とは異なるものの、ひずみに伴う結合位置の移動が、ひずみ面においては、微小ひずみ下で観察されたものと考えられる。 p の分布の変化の原因について、相変態同様、波動関数に影響を及ぼすブリルアン・ゾーンとフェルミ面との位置関係について、より詳細な考察が必要となろう。

5・5 F_0 と電子遮へいの関係

一般に、自由電子によって電子遮へいされたクーロン・ポテンシャル ($U(r)$) は、式 (7) によって説明される。ここで $d_{TF} = 1/k_s$ は、トーマス・フェルミ遮へい距離と呼ばれ、電子密度 (n_e) とフェルミエネルギー (E_f) から、式 (8) のように表現される。¹⁷⁾

$$U(r) = q/r \exp(-k_s r) \quad (7)$$

$$(1/d_{TF})^2 = k_s^2 = 3n_e e^2 / (2\varepsilon_0 E_f) \quad (8)$$

ここで、 e は電子の電荷、 ε_0 は真空の誘電率である。すなわち、 $1/r$ の関数形を持ち、広い範囲に広がるイオンの $U(r)$ は、原子間に広がる自由電子の遮へいを受けて、一定の範囲にその影響が留まる。個々のイオンのポテンシャルが独立と見なせる場合 (Fig. 4)、遮へい領域内部の F_0 は、一つのイオンに掛かる力にほぼ等しくなる。

一方、二体間ポテンシャルにより求めた F_{0MS} は、十分に小さい $\Delta\xi$ に対して精度の良い値を示すと考えられる。Fig. 3 における F_0 と F_{0MS} との比較から、 $r_0 = 1.2d_{TF}$ (Al: $d_{TF} = 0.154\text{nm}$) の領域において、微小ひずみにおける F_0 と F_{0MS} の傾きが等しくなる。よって、 d_{TF} 程度に積分領域を限れば、一原子当たりの力を見積もることができると考えられ、これは前述の遮へい理論とも良く合う。一般に、一原子に掛かる力は、Feynman 力によって求められるが、電子密度の高い金属の場合、 σ から同様な計算が得られることが分かる。

5・6 F_0 とパイエルスポテンシャル

L-J 等の二体間ポテンシャルにおける F_a の発散は、原子間の斥力の急激な増加に起因する。一方、電子-イオン間の力の釣合いは、原子の変位により電子密度が必要以上に大きくならないことから、飽和を示すものと考えられる。近年、パイエルスポテンシャルの形は、sin 型ではなく、台形型に近いという報告がなされており、^{5), 6)} 今

Fig. 4. Schematic figure of (a) Coulomb potential and (b) screened potential of ions within a metal.

回の計算結果は、パイエルスポテンシャルそのものではないが、このモデルを支持するものと考えられる。しかし、イオン間の力を考慮していない点や、周期境界条件下での結果であることなどから、定性的な議論に留まる。

5・7 完全結晶と転位

今回の計算結果から、完全結晶においても、 p の極小値と原子間を結ぶ方位は、すべり方向に等しいことが示された。これは、すべりの方位を、転位の及ぼす弾性エネルギーの影響から説明されてきた従来の理論と比較すると、大変不思議な結果と言える。しかし、格子が電子に及ぼすポテンシャルの影響は、逆格子空間的であり、転位密度が 10^{-4} を越えて大きくならないことから、¹⁾ 転位が存在するすべり面の静的な電子状態は、完全結晶の電子状態とは大きくは異なるものと考えられる。(動的な電子の散乱などは、むしろ大きく影響を受けるだろう。) よって、今回の p の分布は、欠陥の入った結晶においても、その傾向は変化しないものと考えられる。

また、転位周りの圧縮と引張りによるミクロな応力の変化は、今回のひずみの異なる p の分布の差となって表れるものと考えられ、マクロには連続体中の転位の作る応力場と同じ結果を与えるものと考えられる。この他、転位まわりに力を及ぼす因子として、イオン間のクーロン相互作用が考えられるが、これがわずかなひずみで変化することはなく、 p の変化が主たる要因となると考えられる。

今回のミクロな p の分布の変化が、マクロに見たせん断応力による転位の易動性と、どのような関係にあるのかは、必ずしも明らかではない。しかし、 p の変化が、従来の転位の易動性と同じ結果を与えることから、ひずみを受けた転位周りの結晶場そのものに塑性に関わる機構の存在を示唆する。従来の転位論が、弾性場のエネルギーによって理解されてきたのと同様に、転位の作るひずみ場による電子状態の変化が、塑性現象の理解を深めるかもしれない。

5・8 本モデルの適用限界

今回おこなった経験的局所擬ポテンシャル下での摂動論による解析方法は、現在盛んに研究が進められている第一原理計算と比較して粗い近似であり、マクロな物性値の予測には十分であるものの、今回のような内部の物理量の分布について議論をする場合は、十分に定量的な値を得ることができない。

一方, 経験的局所擬ポテンシャルにおいても定量的な評価が可能な単純金属に限って議論をおこなうことにより, 固体内部の金属結合の変化について, 定性的にだが信頼のおける予測ができる. よって, 今回の結果は, 格子ひずみによる完全結晶の金属結合の変化が, マクロな塑性現象と同様な結果を与えることを意味する. 塑性現象を電子論的に理解する試みは, 近年始まったばかりであり, これが金属に特有な現象であることから, 今回, 電子構造のブリルアン・ゾーンによる影響について得られた結果は, こうした解析のさらなる可能性を示唆する.

今後, 共有結合性を持つ Fe などの遷移金属について議論をおこなう場合, 第一原理計算など, より予測性の高い計算法による解析が期待される. また, 実際の転位によるひずみの分布が, 不均一であることから, 転位自身を取り入れた, より大規模な計算が必要であろう. 本研究では, イオン間の力や, 温度の影響が考慮されなかったが, 今後, これらの量も含めて考察することにより, 実験から得られている τ_p 等との定量的な比較が望まれる.

6 結 言

bcc, fcc 構造をもつ単純金属の代表である K, Al について, 一軸変形下でのすべり面における電子圧力 (p) の分布について計算を行ない, その変化と塑性現象との関連について考察した. 以下, 得られた結果についてまとめる.

(1) bcc 単純金属のすべり面における原子回りの p の分布は, 変形のない状態において, すべり方向 $a/4 \langle 1, 1, 1 \rangle$ に極大値を示すが, $\varepsilon = 5\%$ 以上の引張り状態において, この位置は鞍点へと変化した. 一方, p 全体はひずみ量に関わらず原子間に障壁となって存在し, bcc 金属における転位が, すべり方向に, 温度やひずみに依存した臨界せん断応力を示す現象と一致する.

(2) fcc 単純金属のすべり面における原子回りの p の分布は, ひずみ量に依らず, $a/6 \langle 211 \rangle$ 方向に極小値を持つ. これは, fcc 金属が拡張転位をもち, かつ明確な臨界せん断応力を持たない性質と一致する.

(3) すべり面における p の変化は, 破壊や相変態における変化よりも微小ひずみで観察されることから, 塑性変形しやすい金属の性質と一致する.

(4) 一原子回りのイオン-電子間の力は, 電子遮へい

の影響から, トーマス・フェルミ遮へい距離程度の領域に留まる.

(5) p から計算されたイオン-電子間の力の増加は, 原子変位に従って飽和する傾向にあり, これは, パイエルス力について報告されている傾向と一致する.

(6) 完全結晶における p の分布が, 転位論におけるすべり方向と一致することから, ひずみによって変化する価電子の応力分布の変化が, 塑性変形にも大きく影響する可能性がある. これは, 従来の階層的な転位論による塑性現象の理解に, 新たな側面を与えるものと期待される.

参 考 文 献

- 1) 木村 宏, “材料強度の考え方”, 6 章 (1998) アグネ技術センター.
- 2) 橋口隆吉編, “金属物理”, p.240 (1970) 朝倉書店.
- 3) 北島貞吉, 日本金属学会会報, **26**, 628 (1987).
- 4) 藤田広志, 日本金属学会会報, **11**, 837 (1975).
- 5) T. Suzuki, H. Koizumi and H. O. K. Kirchner, Acta metall. mater., **43**, 2177 (1995).
- 6) H. Koizumi, H. O. K. Kirchner and T. Suzuki, Phil. Mag. A, **69**, 805 (1994).
- 7) H. Kitagawa, A. Nakatani and Y. Shibutani, Mater. Sci. Eng., **A176**, 263 (1994).
- 8) Y. Kogure and T. Kosugi, J. Phys. IV, Colloq., **6**, 195 (1996).
- 9) K. Ohsawa, E. Kuramoto and T. Suzuki, Mat.Sci. and Eng., **A234-236**, 302 (1997).
- 10) A. Moreno-Gobbi, G. Paolini and F. R. Zypman, Comput. Mater. Sci., **11**, 145 (1998).
- 11) 木村 宏, ibid., 第 8 章.
- 12) 妹尾允史, 藤城郁哉, 平野元久, 日本機械学会論文集, A-**50**, 744 (1984).
- 13) W. Pauli, “量子力学の一般原理”, p.41 (1975) 講談社.
- 14) 小竹茂夫, 木全央幸, 青木 敬, 鈴木泰之, 妹尾允史, 材料, **47**, 1006 (1998).
- 15) S. Kotake, H. Kimata, T. Aoki, Y. Suzuki and M. Senoo, “Mesoscopic Dynamics of Fracture”, p.195 (1997) Springer.
- 16) S. K. Ghosh, J. Chem. Phys., **87**, 3513 (1987).
- 17) C. Kittel, “固体物理学入門, 第 7 版”, p.313 (1998) 丸善.