塑性変形に必要な力 — パイエルス力

鈴木 秀 次*

パイエルス力とは

結晶のすべり変形は転位の運動によって起こる。したがって転位を動かすのにどれだけの外力が必要であるかということは大変重要な問題である。転位は他の転位と切り合ったり、弾性的な相互作用を及ぼし合ったりして抵抗を受ける。固溶原子や析出物も転位の運動を妨げ、結晶境界は転位がそのまま通過し得ない障害となる。もしこのような障害物が全くないとき、転位はどれだけの外力を加えれば運動するだろうか。1940年 Peierls⁽¹⁾が初めて転位を動かすのに必要な力を計算した。そのとき、結晶中にはただ1本の転位があるだけであり、その他の格子欠陥はもちろん、熱振動も存在しないと仮定した。この条件のもとで転位を動かすのに必要なせん断応力をパイエルス力と呼んでいる。Peierls の論文には途中の計算がほとんど書かれていなかったために、Nabarro⁽²⁾が再計算して誤りを正して発表したのでパイエルス—ナバロ力と呼ばれることがある。

面心立方金属の降伏点は液体ヘリウム温度(4.2 K)でも室温と大差ないが、体心立方金属は低温で急速に硬化するのは、面心立方金属のパイエルス力は無視できるほど低い、体心立方金属中のらせん転位のパイエルス力が高いためであると考えられている。また体心立方合金の固溶硬化が面心立方合金の場合と著しく異なる理由も、同様に説明される。さらにダイヤモンドを始めとして、ダイヤモンド構造をもつ Ge, Si などが硬い理由はパイエルス力が高いためであると考えられている。

パイエルス力の計算そのものは大変難しく、定量的に信頼できる計算はほとんどない。しかし、パイエルス力が何らかの方法で分かっているならば、その結晶の機械的性質、たとえば降伏点の温度変化を計算する方法などは確立されている。またそのような性質の測定値を用いて、パイエルス力を実験的にきめることもできる。このかいせつでは、パイエルス力が結晶によって異なる理由を定性的に説明し、つぎにパイエルス力の異なる結晶の変形応力の温度変化について述べる。

パイエルス力の大きさ

図1に示すような刃状転位を考える。この場合、図の黒丸の位置に紙面に垂直に原子列が並んでいると考える。上半分の結晶が下半分の結晶に対して b だけずれるには、刃状転位が1本すべり面を掃けばよい。すべり面のすぐ上のA原子面内の原子列が下半分の結晶から受ける力は、大体図2の位置エネルギーを用いてあらわされる。とこ

図1 刃状転位。

* 東京大学教授；理学部
Peierls Stress; Hideji Suzuki (Department of Physics, Faculty of Science, University of Tokyo, Tokyo)
1978年4月17日受理

図 2 (a) 転位のないときの各原子列のエネルギー変化。
(b) 転位の移動に伴う各原子列のエネルギー変化。

るで、転位の中心附近では図 2 (b) のようにすべり面のすぐ上の原子列は位置エネルギーの極小の位置に入りきらずに、持ち上っている。転位が右に移動すると、原子列は矢印のように移動し、転位の右半分の原子列は位置エネルギーを増大し、左半分の原子列は位置エネルギーを減少する。各原子列は上半分の結晶としてつながっているの、左半分の原子列が得た位置エネルギーは右半分の原子列を持上げるのに使われる。したがって転位を動かすには左右で相殺せずに残るエネルギー差を外力によって乗り越えればよい。転位を含まない結晶では図 2 (a) のように全部の原子列を同時に谷底から持ち上げなければすべりは起き得ないのであるから、転位があるとその運動によって、完全結晶よりずっと小さな応力のもとですべりが起こることになる。

次に転位を動かすのに必要な力、すなわちパイエルス力の大体の大きさを評価してみよう。すべり面のすぐ上の原子列が下半分の結晶から受けている力を加え合わせたものが転位の運動に対する抵抗力である。この力は転位の位置によって変化し、1 原子距離動くと全く同じ大きさになる。したがって 1 原子距離動く間の最大値がパイエルス力である。各原子列が下半分の結晶から受ける力は原子列がどれだけ変位しているかによって異なるが、大体図 3 のようになる。この図では転位の位置を原点にとってあり、各原子列が下半分の結晶から受ける力は白丸で示されている。したがって、転位に働いている力は白丸で示された力の総和を求めればよい。図 3 の力は、図 2 (b) の各原子列の位置エネルギーの勾配である。そのため、各原子列の位置が転位の位置に関して対称になっていると、中心の原子列を除いて必ず正負対になっているので、力の総和は零である。

図 3 転位の中心から x の距離にある原子列に働く力。

図 2 の転位が右に動くと、図 3 の白丸は矢印のように右に移動し、転位が 1 原子距離移動すると、隣の白丸が最初にあった位置に重なる。この途中で左右の配列が対称でないときには力の総和は零にならない、それを計算する方法は数学的すぎるので省略するが、最大値は

$$\frac{\mu b^2}{(1-\nu)a} \exp\left[-\frac{\pi h}{(1-\nu)a}\right]$$

で与えられる⁽³⁾。ここで μ は剛性率、 ν はポアソン比、 b はバーガースベクトルの大きさ、 a は原子列の間隔、 h はすべり面に平行な原子面の間隔である。パイエルス力を τ_P とすると、転位に働く力は $\tau_P b$ であるから

$$\tau_P = \frac{\mu b}{(1-\nu)a} \exp\left[-\frac{\pi h}{(1-\nu)a}\right] \quad (1)$$

である。図 1 の場合には $a=b$ であるから、 $h=b$ 、 $\nu \approx 1/3$ と仮定すると、 $\tau_P \sim 0.01 \mu$ の程度になる。しかし、これは金属に対する値としては大き過ぎる。

金属の刃状転位

金属の場合には、図 1 のようにすべり面上下の原子は向い合って存在せず、図 4 のようにずれている。そして、A 原子面の 1 本の原子列の受ける力は B 原子面上の 2 本の原子列とのずれでさまる。図 4 で、すべり面に斜めに交わっている原子列対のずれは、両原子列の平均位置のずれで近似的に表わすことができる。したがって、力の総和は図 3 の白丸の値でなく、白丸の間隔の 1/2 の間隔で中間の値に対してとられなければならない。すな

わち、式(1)の a の代りに $a/2$ とおけばよく、

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

となる。前と同様に $a=b=h$, $\nu=1/3$ とおくと $\tau_p \approx 2.4 \times 10^{-4} \mu$ となる。

図4 金属中の刃状転位.

実際の *fcc*, *bcc*, *hcp* 結晶では図4と多少異なった原子配列をもっているし、とくに転位の拡張を無視しているので、極めて粗い近似にすぎない。しかし、金属、イオン結晶では、すべり面上の1本の原子列が、下の複数の原子列と強い相互作用をしているために、これらの結晶のパイエルス力が小さいのであることは理解できるであろう。

ダイヤモンド構造

図5にダイヤモンド構造の結晶を $[1\bar{1}0]$ 方向から見た原子配列とボンドを示してある。この中の転位はA, A' 面間のように広い場所に存在する場合と、A', B 面間のように狭い場所に存在する場合が考えられる。A, A' 面間に存在するときには、A, A' 面内の原子が向かい合っているので、 τ_p は

図5 ダイヤモンド格子の(111)原子面の積重なり $[110]$ 方向からみる。

式(1)で与えられる。この場合、 $a=\sqrt{3}b/2$, $h=(4/5)\sqrt{2/3}b$ であるから、 $\tau_p \approx 0.05 \mu$ であって、ダイヤモンド構造の結晶が硬いことと定性的には一致している。

A/B 面にあるときには式(2)を用いなければならないが、 h が非常に小さくなるために、 τ は 0.1μ 以上になる。

bcc 金属のらせん転位

金属ではパイエルス力が低いといわれていたが、*bcc* 構造をもつ α 鉄などの降伏点が低温で急上昇するのはパイエルス力がかなり高いためであると考えられるようになった。現在では *bcc* 構造に特有な幾何学的性質のためにらせん転位のパイエルス力が高いのであると理解されており、刃状転位は *fcc* 金属と大差ないと考えられている。*bcc* 金属のらせん転位のパイエルス力が高くなる理由は定性的には次のように説明される⁽⁴⁾。

bcc 結晶中のらせん転位を考えるには、結晶をバーガースベクトル $(a/2)[111]$ に平行な原子列の集合体と考えるのが便利である。すなわち、これらの原子列はらせん転位の運動のさいに、原子列の間隔をほとんど変えずに原子列の方向にだけ変位する。完全な *bcc* 結晶はこの原子列の方向から見ると図6の丸のように並んでいる。この図で丸の中の数字は原子列中の原子の位置が異なることを示す。原子の位置を原子列に垂直な方向から見ると、図7のように $b/3$ ずつ異なる3種類の位置がある。ここに b は $[111]$ 原子列上の原子間距離である。

図6で3本の原子列に囲まれた3角形にはH, Lの2種類があって、Hのまわりでは時計の針の

図6 *bcc* 結晶を $\langle 111 \rangle$ 方向から見た原子配列。

図7 体心立方結晶を $[111]$ に垂直な $[\bar{1}10]$ 方向に見たときの原子配列。白丸と黒丸は異なった高さにある。

まわる向きに3本の原子列をまわると、原子の位置は $b/3, 2b/3, b$ と増大している。またLのまわりでは同じ向きに原子列をまわると、原子の位置は $b, 2b/3, b/3$ と減少している。もし、らせん転位のまわりを時計の針と同じ向きにまわるとき、変位が減少するならば、Hのまわりの3本の原子列の原子の位置は

$$\frac{b}{3} + b = \frac{4}{3}b, \quad \frac{2}{3}b + \frac{2}{3}b = \frac{4}{3}b,$$

$$b + \frac{b}{3} = \frac{4}{3}b$$

となって、同じ高さになってしまう。このときには完全結晶の最近接原子間距離よりも接近し、この3本の原子列は最も高い相互作用エネルギーをもっている。

これに対してL位置にらせん転位がくると、3本の原子列中の原子の位置は

$$b + b = 2b, \quad \frac{2}{3}b + \frac{2}{3}b = \frac{4}{3}b,$$

$$\frac{b}{3} + \frac{b}{3} = \frac{2}{3}b$$

となるが、各原子列上には b の間隔で原子が並んでいるので、それぞれ $b, b/3, (2/3)b$ になったのと同じであり、互いに $b/3$ ずつずれているから、3本の原子列間の相互作用エネルギーは完全結晶のものと同じである。この3本の原子列は転位の芯を構成し、最も歪エネルギーの高くなるはずの部分であるが、それが零になっているのである。すなわち、図6のH、Lはそれぞれ、らせん転位のエネルギーの高い位置と低い位置である。

転位はエネルギーの低いLの位置から、最も近いLの位置の1つに移ることによって運動するが、どうしてもその途中でエネルギーの高いHの位置を通過しなければならない。このためにパイエルス力が大きくなってしまっているのである。この力の計算は数値計算による外ない。その結果は用いるポテンシャルによって異なり、 $\tau_p = 0.002 \sim 0.03 \mu$ の程度である⁽⁶⁾。

熱運動の助けがある場合

パイエルス力は転位の位置エネルギーが図8に示すように、生基板状に変動するために生ずるのである。この位置エネルギーをパイエルスポテンシャルと呼んでいる。パイエルス力は転位がパイエルスポテンシャルの谷底にそって真直ぐなまま、山を乗り越えるのに必要な力である。しかし、実際には転位は湾曲できるので、パイエルス力よりも小さな応力の下でも、熱運動の助けを借りて図の曲線のように一部分が隣の谷に入り込み、折れ曲った部分が互いに離れる方向に運動すれば、山を乗り越えたことになる。

図8 転位が熱活性化によってパイエルスポテンシャルを乗り越える運動。

この過程では、転位が曲がるための長さの増加によるエネルギー増加と位置エネルギーの高い部分を転位が通るためのエネルギー増加の和から、転位が動くことによって外力のなした仕事を差引いた量、すなわち、エンタルピーの増加は熱運動によって与えられなければならない。転位の一部分が隣の谷に入り込む途中のエンタルピーの極大値 H は転位がどんな形に湾曲するかによって異なる。実際に起こる過程では、加えられた外力 τ の下で最も低いエンタルピーの極大を与えるよう

に、転位が湾曲する。このときのエンタルピーの極大値 $H(\tau)$ は活性化エンタルピーと呼ばれ、いろいろな条件のもとで計算されているが、その中最も役に立つ結果は

$$H(\tau) = \left(-\frac{1}{8} + \frac{3}{32}\pi \right) (2a^3 b^3 \tau_P \mu)^{1/2} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_P} \right)^2 \quad (3)$$

である⁽⁶⁾。この式は図8のパイエルスポテンシャルを簡単な関数で近似して求めたものであるが、たいいていの場合、この式で十分である。

結晶の変形速度 $\dot{\epsilon}$ は、転位の速度を v 、運動している転位密度を n とすると

$$\dot{\epsilon} = n v b \quad (4)$$

で与えられる。転位速度は式(3)の活性化エンタルピーを用いると、

$$v = v_0 \exp[-H(\tau)/kT] \quad (5)$$

と書ける。ここで v_0 は T および τ に余り依存しない定数である。また転位密度も余り変化しないと仮定すると

$$\tau = \tau_P \left[1 - \alpha \left(\frac{T^2}{\tau_P \mu} \right)^{1/4} \right] \quad (6)$$

と書くことができ、 α は物質にも余り依らない定数である。ところで多くの物質で融点 T_m と剛性率の比は大体一定である。したがって式(6)は

$$\frac{\tau}{\mu} = \frac{\tau_P}{\mu} \left[1 - \beta \left(\frac{\mu}{\tau_P} \right)^{1/4} \left(\frac{T}{T_m} \right)^{1/2} \right] \quad (7)$$

と書くことができる。ここで β は1より幾分小さい定数である。

図9に τ/μ と T/T_m の関係を示してある。 τ_P/μ

図9 異なったパイエルス力をもつ結晶の変形応力の温度変化の概算値。

は結晶構造によって図に記入したような値をもつものであり、これから焼鈍された純物質の変形応力は大体パイエルス力によってきまっていることが理解できるであろう。

文 献

- (1) R. Peierls: Proc. Phys. Soc., **52**(1940), 34.
- (2) F. R. N. Nabarro: Proc. Phys. Soc., **59**(1947), 256.
- (3) 例えば鈴木秀次: 金属の強さ, アグネ, (1972), 123.
- (4) H. Suzuki: *Dislocation Dynamics*, Ed. by A. R. Rosenfield et al., McGraw-Hill, New York, (1968), 679.
- (5) F. Minami, E. Kuramoto and S. Takeuchi: Phys. Status Solidi, (a) **22**(1974), 81.
- (6) た例えば鈴木秀次: 転位論入門, アグネ, (1967), 248.