BCC 金属のパイエルス機構

鈴木 敬愛* 竹内 伸**

1. 緒 言

金属以外のほとんどの結晶の強度は、転位のイントリンシックな性質，すなわちパイエルス・ポテンシャルによって支配されているにもかかわらず，パイエルス機構について統一的に論じられる機会は稀である．我々は，パイエルス機構によって支配される結晶の強度を統一的に理解する試みを行ってきたが，近年かなりの成果を収めてきた．昨年，筆者が，格子欠陥と結晶塑性に関する新しいシリーズの review book を発刊する企画に執筆を依頼されたのを機に“Deformation of Crystals Controlled by the Peierls Mechanism of the Smooth Kink Regime”という題名でかなり大部の review をまとめた．本総説はその内の bcc 金属に関する記述を基にまとめたものである．bcc 金属の変形機構については1970年代に盛んに議論されたやや古い問題であるが，特に bcc 金属を取り上げる理由は，塑性の実験データが最も豊富で系統的な解析が可能である一方，その低温塑性に関して誤った解釈が流布していることを憂慮するからである．本総説によって多くの研究者に我々の統一的解釈を理解していただきたいと考える．紙数の関係から，説明が行き届かない所もあると思われるが，原論文を参考にして頂ければ幸いである．

2. bcc 金属の塑性

鉄をはじめ Nb や Mo 等の bcc 遷移金属の降伏応力が低温

で急激に大きくなり，延性-脆性遷移を引き起こすことは古くから知られていた．また，応力-歪曲線には降伏点降下が現れるのが常であった．このような bcc 金属に共通の塑性変形挙動がイントリンシックな性質に由来するのか，侵入型不純物による固溶硬化に起因するのか論争が行われた．1960年代末から1970年代に，侵入型不純物濃度が数 ppm 以下の超高純度結晶の作成に成功し変形実験が行われると，降伏点降下は消失し，代わって stage zero と呼ばれる初期硬化の領域が出現した⁽¹⁾⁻⁽⁴⁾．超高純度 bcc 結晶の弾性限は低純度結晶よりは低い，それでも低温では不純物による硬化では説明し得ない高さなので，イントリンシックな機構によることが確実となった．電子顕微鏡によるその場観察の結果，塑性変形はらせん転位の viscous なすべり運動によって起こることが明らかになった(例えば，文献(5))．このことは低温で bcc 金属の変形応力がらせん転位の易動度によって決まることを意味する．1970年代末から1980年代初頭に九州大学のグループが高純度 bcc 金属単結晶の塑性に関する系統的な研究を行った⁽⁶⁾⁻⁽⁸⁾．彼らは，直径 0.5 mm 以下の細い単結晶では stage zero が現れないことを示した．このことは，超高純度 bcc 金属の低い弾性限が grown-in の刃状転位の運動による降伏であることを意味する．らせん転位が動ける応力ではないので，転位の増殖は起こらず，したがって急速な歪硬化を起こす．それが stage zero である．Stage zero の後に，らせん転位の易動度が変形応力を決める stage one が始まる．Grown-in 刃状転位の密度を ρ_e ，結晶の直径を D とすると，stage zero の長さ(歪量) ϵ_0 は $\rho_e b D / 2$

* 東京大学教授；生産技術研究所(〒106-8558 東京都港区六本木7-22-1)

** 東京理科大学教授；基礎工学部

Peierls Mechanism in BCC Metals; Takayoshi Suzuki*, Shin Takeuchi**(*Institute of Industrial Science, University of Tokyo, Tokyo.

**Department of Materials Science and Technology, Science University of Tokyo, Chiba)

Keywords: Peierls mechanism, body-centered cubic (bcc) metals, screw dislocations, yielding, plastic anisotropy, plastic homology, core structure, kink pair formation

2000年9月4日受理

の程度となる． $\rho_e=10^6\text{ cm}^{-2}$ とすると， ε_0 は $D=1\text{ cm}$ のとき1.5%， $D=0.5\text{ mm}$ ならば0.08%に過ぎない．一方，純度の悪い結晶では grown-in の刃状転位は全て偏析した不純物で固着されていて，僅かな数の増殖源が高い応力下で活動するだけなので Johnston-Gilman 型の降伏降下現象⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾が現れる．以下，本稿では高純度結晶のらせん転位による降伏に的を絞る．

(1) 降伏応力の温度依存性

遷移金属の内の7つの元素(V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ta, W)がbcc構造をとる．アルカリ金属(Li, Na, K, Rb, Cs)とアルカリ土類金属(Ba)もbcc構造をとるが，LiとNaは低温でfcc構造に相変態する．RbとCs以外のほとんど全ての結晶の塑性のデータが文献にある．

bcc 金属の降伏応力(臨界せん断応力) τ_c の温度依存性は，様々な純度，方位，温度範囲，歪速度で測定されている．図1に最も純度の良い結晶(Kを除いてRRR>3000)のデータを示す⁽³⁾⁽⁷⁾⁽⁸⁾⁽¹¹⁾⁻⁽²⁰⁾．歪速度が 10^{-4} cm^{-1} 前後の測定で，異常すべりを起こさない場合を選んだ．それぞれの実験条件は表1にまとめている．Brunnerら⁽¹²⁾⁽¹³⁾の α -FeのデータはKuramotoら⁽¹¹⁾，Aonoら⁽⁷⁾⁽⁸⁾のデータとよく一致する．Taの77 K以上の点はLachenmannら⁽³⁾の応力-歪曲線から読み取った臨界せん断応力である．Basinskiら⁽²⁰⁾はKのデータを τ_c の値ではなく比 $\tau_c(T)/\tau_c(4.2\text{ K})$ で与えているが，30 K以下の温度依存の顕著な部分はKirchner⁽¹⁹⁾のデータと平行である．Baのデータ⁽¹⁹⁾は，解析に必要な弾性定数が測られていないので，図1には含めていない．LiとNaはfcc構造への相変態のために複雑な挙動を示す⁽²¹⁾ので，やはり除外した．

bcc 金属に共通の特徴として，降伏応力は温度と共に減少し，高温では10 MPa程度の小さな値となる．しかし，絶対0度以外挿した降伏応力の値 τ_0 も温度依存性が消える臨界温度 T_0 も結晶によって大きく異なる．Kの τ_c は遷移金属に比べて2桁も小さいが，それはKの弾性定数が小さいことと関係している．FeとMoの τ_c - T 曲線にはハンプが見られる．Wでも600 K付近にハンプがあるとBrunnerら⁽¹⁸⁾は主張している．

(2) 降伏応力の方位依存

1960年代に，bcc 金属単結晶の降伏応力はSchmid 則に従わないことが明らかになった⁽²²⁾⁻⁽²⁵⁾．典型的なSchmid 則の破れは{112}せん断に対するすべりの非対称性に見ることが出来る．すなわち，{112}面に沿う<111>せん断の向きが変わるとすべりの挙動が異なる．bcc 金属のすべりの方位依存は τ_y - χ 曲線， ϕ - χ 曲線で表わされる．ここで， τ_y は<111>すべり方向に属する晶帯の最大せん断応力面上に分解したせん断降伏応力， χ は最大せん断応力面とそれに最も近い{110}面の間の角度， ϕ はその{110}面と観察されるすべり面との間の角度である． χ と ϕ の符号は普通，双晶を起こす{112}せん断の方向が -30° ，双晶を起こさせない{112}

図1 高純度 bcc 金属の降伏応力の温度依存性． τ_c は{110}面に分解した臨界せん断応力．実験条件および文献等は表1参照．Kのデータ1はKirchner⁽¹⁹⁾，2はBasinskiら⁽²⁰⁾による．

表1 高純度 bcc 金属の降伏応力の測定とパイエルス応力．

	α -Fe		Nb	Mo		Ta		W		K
測定 (文献番号)	(7),(8),(11)	(12),(13)	(14)	(15),(16)	(17)	(3)	(18)	(19)	(20)	
格子間型不純物濃度 (at ppm)	—	<1	~10	—	—	<3.5	—	1	—	
残留抵抗比 (RRR)	3500-4400	>1500	4000	5500-7200	≥ 10000	7000-8000	45000	—	~200	
方位角 χ (degree)	0	0-8	25	30	10	0	40	15	—	
温度範囲 (K)	4-400	4-400	2-450	4-500	0.7-40	77-500	50-800	4-36	1.5-25	
歪速度 $\dot{\varepsilon}$ (s ⁻¹)	1.7×10^{-4}	4×10^{-4}	8×10^{-5}	1.7×10^{-4}	1×10^{-4}	1.2×10^{-4}	4×10^{-4}	2×10^{-4}	3.4×10^{-4}	
$A=\Delta H(\tau)/k_B T$	27	30 ± 1	28 ± 3	—	24 ± 2	—	24	—	—	
非熱的応力 τ_a (MPa)	3	3	13	15	—	3.5	10	0.9	0.4	
パイエルス応力 τ_F (MPa)	390	390	415	730	340	—	960	2.7	2.4-3.6	
$\tau_P/G(10^{-3})$	5.2	5.2	8.2	5.4	5.2	—	5.9	2.0	2-3	

せん断の方向が $+30^\circ$ となるように決める。

図2に3つの温度で測ったFe単結晶の τ_y - χ 曲線を示す⁽⁶⁾⁽⁷⁾。bcc金属に共通の一般的特徴は以下の通りである。

(1) τ_y - χ 曲線は $\chi=0^\circ$ に関して非対称で、 $\tau_y(\chi>0^\circ)>\tau_y(\chi<0^\circ)$ 。(2)非対称性は低温側でとくに顕著で、高温では τ_y は χ に依存しなくなる。(3) ϕ - χ 曲線は温度の上昇と共に $\phi=\chi$ の線(45° の線)に近づく。(4)温度が下がると ϕ - χ 曲線は $\phi=0^\circ$ の線($\{110\}$ すべり)に近づくか、または、物質によっては $\phi=\pm 30^\circ$ の線($\{112\}$ すべり)に近づく。すなわち、bcc金属には $\{110\}$ すべり形と $\{112\}$ すべり形の2つのグループがあり、ヘリウム温度での τ_y - χ 曲線、 ϕ - χ 曲線はそれぞれ図3に模式的に描いたようになる(例えば、文献(26))。

図2 α -Feの τ_y - χ 関係(Kitajimaら⁽⁶⁾、Aonoら⁽⁷⁾による)。実線は2次元パイエルス・ポテンシャル図6(b)による理論曲線(Edagawaら⁽³⁶⁾による)。

図3 τ_y - χ 関係(左)と ϕ - χ 関係(右)に見るbcc金属の2つのタイプ： $\{110\}$ すべりタイプと $\{112\}$ すべりタイプ。

3. bcc金属のらせん転位とパイエルス・ポテンシャル

(1) らせん転位の構造

bcc構造とらせん転位のエネルギーの間の幾何学的関係を最初に指摘したのは、Suzuki⁽²⁷⁾であった。図4は $\langle 111 \rangle$ 方向から見たbcc結晶の原子構造である。円は原子が $a/2 \langle 111 \rangle = b$ (Burgers vectorの長さ)の周期で並ぶ原子列を表わし、円内の数字は原子列方向の原子の位置の相対的高さを表わす(単位は b)。三角形を形づくる3本の隣接原子列はらせん構造をなし、右回りらせんと左回りらせんが交互に並んでいる。ここにらせん転位を導入すると次のような構造変化が起きる。いま、本来右回りらせん構造の三角形の中心Bに右回りらせん転位を導入すると、その三角形は左回りらせんの構造に変化する。同じ転位を隣の左回りらせん構造の三角形の中心Cを導入すると、らせん構造は消滅して3本の原子列は同じ高さに揃う。その結果、最近接原子間距離は15%短くなる。B位置にいる転位の芯3本の原子列は完全結晶と同じらせん構造(向きは逆)であるから、転位の導入によるエネルギーの増加は外側の歪による分だけである。一方、C位置の転位は最近接原子の接近によって大きなエネルギーを持つ。このような幾何学的考察の結果は原子モデルによるエネルギー計算によっても裏付けられる⁽²⁸⁾⁽²⁹⁾。したがって、らせん転位のエネルギーはbcc格子の結晶幾何学的性質に基づく2次元の周期的ポテンシャルによって表わされる(次節参照)。

他方、Hirsch⁽³⁰⁾は転位芯が $\{112\}$ 面に沿って3つの方向に拡張することがbcc金属のらせん転位の低い易動度の原因であるとする説を唱えた。このモデルによれば、拡張して動き難い(sessile)構造から動き易い(glissile)構造への熱的遷移が変形速度を支配すると考える。しかし、bcc金属中の

図4 $\langle 111 \rangle$ 方向から見たbcc格子の原子列構造。円は原子列、その中の数字は $\langle 111 \rangle$ 方向の原子の相対位置(単位 b)。B、Cはらせん転位にとってのエネルギー極小、または極大位置(H. Suzuki⁽²⁷⁾による)。

{112}積層欠陥が安定である証拠は全くないので、Hirschのモデルは現実味に乏しい。

1970年代以降、モデルbcc金属のらせん転位の芯構造とその応力下での挙動に関する計算機シミュレーションが盛んに行われた(Reviewとして、文献(28)(31)(32))。多くの計算が、安定な芯構造は図5(a)のような構造であることを示す。点は<111>原子列の位置を示す。点と点の間の矢印は二本の原子列上の原子の相対的変位を表す。ただし、完全結晶における値を差し引いた値、すなわち転位によって生じた変位の大きさである。転位の歪場は等方的に広がっているのではなく、3重回転対称の異方性をもっている。図5(b)は、(a)とエネルギー的に等価なもう一つの構造である。この二つはしばしば「縮退した構造」と呼ばれる。また、弾性論の解と比べると中心の3本の原子列が上方、または下方に変位しているので、「分極した構造」とも呼ばれる。これに対して、Takeuchi⁽²⁹⁾は図5(c)のような縮退も分極もしていない芯構造も安定な構造となることを示し、原子間相互作用と芯構造の関係を分析した。さらに、芯構造がその転位のすべり面を決定する基本要因であることを示した。

分極構造(図5(a), (b))は、あたかも3つの{112}面の上に拡張しているように見えるので、Hirsch⁽³⁰⁾のモデルにおける sessile な構造を連想させる。そのため、多くの研究者はこの芯構造(分極構造)がらせん転位の低い易動度の原因であると信じてきた。しかし、モデル計算によれば分極構造をとるらせん転位のパイエルス応力が非分極構造(図5(c))に比べて必ずしも高いとは限らない⁽²⁹⁾。

転位芯がある方向に「拡がって見える」とことと「拡張している」とことは別のことである。ここにbcc金属の塑性をめぐる誤解と混乱の原因がある。転位が拡張(部分転位に分解)していると言うことに意味があるのは、拡張幅(形も)の異なる幾つかの構造(非拡張構造を含むかもしれない)が安定に存在し、それぞれの間にエネルギー障壁が存在する場合である。Hirsch⁽³⁰⁾のモデルが意味をもつならば、図5(a), (b)のような構造の他に収縮した(glissile)構造も準安定構造として存在し、転位の運動が拡張構造→収縮→隣の位置への移動→再び拡張の過程に従って起こるのではなければならない。

もし、転位が一つの安定構造(拡張しているように見える)から隣の同じ安定構造へ単一の過程で移るならば、その途中で芯構造がどんな風に変化しようとも、見た目以上の意味はない。その過程の抵抗が大きいとすれば、それは単にパイエルス・ポテンシャルが高いというに過ぎない。多くのモデル計算は、図5(a), (b)のような拡張して見える分極構造以外に収縮して見える安定構造の存在を示していない。また、分極構造の転位の芯構造はパイエルス応力に近い高応力下でも無応力時の構造を保っていて、収縮構造は出現しない⁽³³⁾。さらに、後述のように、低温の塑性変形挙動はらせん転位の安定位置の間の単一過程としてのキンク対形成によってよく説明でき、転位芯の収縮過程を特別に考慮しなければならない実験的徴候は何もない。

(2) 2次元パイエルス・ポテンシャル

Takeuchiら⁽³⁴⁾は有限温度の塑性異方性をらせん転位の熱活性化キンク対形成機構によって説明することを試みた。らせん転位は外力の下で一つの平衡位置(例えば、図4のB)から近接する平衡位置の何れかへキンク対を作って熱的に遷移することができる。Takeuchiら⁽³⁴⁾は、それぞれの経路に対して1次元のパイエルス・ポテンシャルを仮定してキンク対形成確率を計算し、三つの方向への遷移確率を重ね合わせることによって有限温度での転位速度とすべり面を求めた。計算では、それぞれのキンク対形成経路は予め一定の形に仮定されている。しかし、実際には経路そのものが活性化エネルギーを最小にするように選ばれるべきである。すなわち、らせん転位の運動は経路を予め指定することなく、転位線の方角 z に垂直な (x, y) 平面上のエネルギー曲面 $V_p(\mathbf{r})$ によって記述されるべきである($\mathbf{r}=[x, y]$)。これを「2次元パイエルス・ポテンシャル」と呼ぶことにする。 $V_p(\mathbf{r})$ は前節3.(1)で記したようにbcc結晶のらせん転位の幾何学的対称性を満たす関数でなければならない。二つの例を図6に示す。これらは点群 $3m$ の対称性をもつ周期関数の1次と2次のフーリエ成分で構成されていて、そのパラメータを変えたものである。何れもBで極小、Cで極大であるが、(a)のポテンシャルは原子列の位置Aが一種の鞍点なのに対して、(b)

図5 らせん転位の芯構造：(a), (b)は分極構造，(c)は非分極構造(Takeuchi⁽²⁹⁾による)。

図6 bcc 格子のらせん転位の2次元パイエルス・ポテンシャル $V_P(x, y)$, (Edagawa ら⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾による). A は原子列の位置, B_i は極小, C は極大. (a) と (b) は A の周りの形が異なる. (a) の破線は孤立したキンクの形を示すが, (b) ではほぼ直線になる. χ は最大せん断応力面と $(\bar{1}01)$ 面の間の角度.

では A が第二の極大である. 一つの平衡位置 B_0 から隣接する平衡位置 B_1, B_2, B_3 への遷移はそれぞれベクトル $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ で表わされる. Edagawa ら⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾ はこれらのポテンシャルを用いて詳細な計算を行い, 塑性異方性の本質を示すことに成功した.

4. パイエルス機構による変形

(i) キンク対形成エネルギー

2次元パイエルス・ポテンシャルの中のキンク対形成は, 1次元ポテンシャルの場合のように一つの平面上で起こるのではなく, 図7のような3次元曲線を描いて起こる. Edagawa ら⁽³⁵⁾ は転位の弦模型(line-tension model)を使って2次元パイエルス・ポテンシャルの中のキンク対の鞍点形状(saddle point configuration)とそのエネルギーを求める巧妙な方法を見出した. いま, 張力 κ の転位線が最初の直線平衡位置 $\mathbf{r}_0 = [x_0, y_0]$ から彎曲して張り出した形状を $\mathbf{r}(z) = [x(z), y(z)]$ とする. 張り出しによる転位線全体のエネルギー増は

$$\Delta H(\mathbf{r}(z)) = \Delta H(x(z), y(z)) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2} \kappa \left\{ \left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 \right\} + \Phi(x, y) - \Phi(x_0, y_0) \right] dz \quad (1)$$

ただし, 最大せん断応力が xz -面から角度 χ 回転した面に沿って働いているとき,

$$\Phi(x, y) = V_P(\mathbf{r}) - \tau b(\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = (\cos \chi, \sin \chi) \quad (2)$$

第一式の右辺第二項は外力のなす仕事(work done)である. キンク対の鞍点形状は汎関数(1)の Euler-Lagrange 方程式

$$\kappa \frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial x}, \quad \kappa \frac{d^2 y}{dz^2} = \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial y}. \quad (3)$$

図7 2次元ポテンシャル中で初期平衡位置 I から隣接平衡位置 II へのキンク対形成. xy -面への射影が曲線 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(x, y)$. $\mathbf{r}_0$ は初期位置, $\mathbf{r}_m$ は先頭位置.

および, 境界条件 $x(\infty) = x(-\infty) = x_0, y(\infty) = y(-\infty) = y_0$ を満たさねばならない. z を時間と見なせば, 式(4)はポテンシャル面 $\Phi(x, y)$ の中で運動する質量 κ の粒子の運動方程式と見ることができる. この相似性を利用すればキンク対の鞍点形状を求めることができる. 詳しい計算方法については原論文(35)を参照していただきたい.

活性化エネルギーは,

$$\Delta H = 2\sqrt{2}\kappa \int_{r_0}^{r_m} \sqrt{\Phi(x, y) - \Phi(x_0, y_0)} dl, \quad dl = \sqrt{dx^2 + dy^2} \quad (4)$$

で与えられる. dl は鞍点形状を (x, y) 面上へ射影した曲線の線素, $\mathbf{r}_m$ はその先頭位置, すなわち $\Phi(x, y) = \Phi(x_0, y_0)$ の解である. ただし, $\mathbf{r}_m \neq \mathbf{r}_0$.

張力 κ は弾性異方性も考慮して

$$\kappa = \zeta K_T b^2, \quad \zeta = \frac{1}{4\pi} \ln \left(\frac{\phi_1}{\phi_0} \right). \quad (5)$$

ここで、 K_T はいわゆる張力因子(line-tension factor)で、格子定数と弾性定数から Barnett ら⁽³⁷⁾の方法によって計算される。 ϕ_0, ϕ_1 は内、外のカット・オフである。

(2) 変形速度

古典論的 Arrhenius 則に従う範囲で、 B_0 から B_i へのキンク対形成頻度は

$$v_i = v_0 \exp \left(\frac{-\Delta H_i}{k_B T} \right) \quad (6)$$

で与えられる。ここで、 v_0 は頻度因子、 k_B は Boltzman 定数、 T は温度、 $\Delta H_i(\tau)$ は経路 i の活性化エンタルピーで、図 6 のポテンシャルに対して前節の方法で計算される。

転位速度 v がキンク対形成過程によって支配されるとすれば、 v は式(6)の3つの確率過程の重ね合わせ

$$v = \sum_{i=1}^3 v_i R_i \quad (7)$$

となる。 v と x 軸の間の角度

$$\phi = \sin^{-1} \frac{v_y}{|v|} \quad (8)$$

が観察されるすべり面と $(\bar{1}01)$ 面のなす角度である。可動転位密度を n とすると、 ϕ 方向のせん断歪速度は

$$\dot{\gamma} = nb|v|. \quad (9)$$

$-30^\circ \leq \phi \leq +30^\circ$ の範囲では $(\bar{1}01)$ 面に分解したせん断歪速度は $0.85\dot{\gamma}$ より小さくはならない。 n と v_0 が i や実験条件に依らず一定とすると、歪速度一定の実験では $|v|$ = 一定。この条件を満たす τ を τ_y とする。式(6)、(7)を解けば $\tau_y(\chi, T)$ が得られる。その結果、速度ベクトル v の方向が決まり、式(8)によりすべり面の方向 $\phi(\chi, T)$ が決まる。なお、 τ_y は角度 χ で指定された面に沿う臨界せん断応力で、 $(\bar{1}01)$ 面に分解した臨界せん断応力は $\tau_c = \tau_y \cos \chi$ である。

5. 実験結果の解釈

(1) 降伏応力の温度依存性

K を含む6つの bcc 金属の $\tau_c - T$ 関係を図1に示した。 τ_c はある温度 T_0 より高温ではほとんど温度に依存しない応力値 τ_a になる。高純度結晶では τ_a は 10 MPa 程度に過ぎず、エクストリンシックな機構によると考えられる。有効応力 $\tau_c^* = \tau_c - \tau_a$ がパイエルス機構に寄与すると仮定して以下の解析を行う。 τ_a の値は表1に載せてある。

以下のように、 τ_c^* を $T=0$ K に外挿するとパイエルス応力 τ_P はかなり正確に決定できる。 $\tau \approx \tau_P$ では3つのキンク対形成経路のうち $i=1$ 、すなわち $B_0 \rightarrow B_1$ だけが起これるので、式(6)-(9)では $i=1$ だけを考慮すればよい。したがって、歪速度は

$$\dot{\gamma} = nbv_0 \exp \left[-\frac{\Delta H_1(\tau)}{k_B T} \right]. \quad (10)$$

ここで、 $d = |R_i|$ である。 $\tau \approx \tau_P$ ではキンク対の高さは低い

ので、ほぼ平面上にあると見なすことができ、漸近形⁽³⁸⁾

$$\Delta H_1(\tau) = B_h \left(1 - \frac{\tau}{\tau_P} \right)^{5/4} \quad (11)$$

が成立つ。 B_h と τ_P は χ 依存を含んでいるが、 χ = 一定で $\dot{\gamma}$ = 一定の実験では $\tau_P - \tau$ が $T^{4/5}$ に比例することを式(10)、(11)は意味する。実際に、 τ_c^* のデータを $T^{4/5}$ に対してプロットするとこの関係がよく成り立っている⁽³⁹⁾⁽⁴⁰⁾。それぞれに $T=0$ K に外装して得られる τ_P の値を表1に示した。

全温度範囲に亘る α -Fe の実験データ⁽⁷⁾⁽⁸⁾⁽¹¹⁾と図6(b)のポテンシャルを用いた理論曲線を図8に示す⁽³⁶⁾。理論曲線は、 $\tau_c \approx 0.2\tau_P$ に見られる小さなハンプを除いて、実験をよく再現している。

(2) 塑性ホモロジー

α -Fe 以外の結晶についても $\tau_c - T$ 関係をそれぞれに再現することは可能であるが、より意味のあることは、bcc 結晶に共通のホモロジカルな関係を描くことができるか否かである。孤立したキンクのエネルギー U_k は χ に依存することなく、 $2U_k = \Delta H_i(\tau=0)$ である。1次元ポテンシャル上の平面的キンクの場合⁽⁴¹⁾⁻⁽⁴³⁾

$$2U_k = Bd(bd\tau_P\kappa)^{1/2}, \quad B \approx 1.0 \quad (12)$$

である。張力 κ として式(5)を代入すれば

$$2U_k = B\zeta^{1/2}(bd)^{3/2}(\tau_P K_T)^{1/2} \quad (13)$$

図6(a)に破線で描かれているような形のキンクに対しても式(13)は近似的に成り立つであろう。ただし、 τ_P は χ に依存するので、 $\chi=0^\circ$ に対する値を取ることに決めるとすれば、 B の値は図6(a)のポテンシャルの場合1.06、(b)の場合0.89である。

パイエルス機構が支配する最高温度 T_0 は $Ak_B T_0 = 2U_k$ で与えられ、通常の実験条件では $A \approx 30$ である。したがって、 $0 \leq T \leq T_0$ における $\tau_c - T$ 曲線は一般に

図8 α -Fe の $\tau_y - T$ 関係 ($\chi=0^\circ$) (Kuramoto ら⁽¹¹⁾, Aono ら⁽⁷⁾⁽⁸⁾による)。実線は2次元パイエルス・ポテンシャル図6(b)による理論曲線 (Edagawa ら⁽³⁶⁾による)。

$$f\left(\frac{\tau}{\tau_P}\right) = \frac{T}{T_0} = \frac{Ak_B T}{2U_k} = \frac{Ak_B T}{B\zeta^{1/2}(bd)^{3/2}(\tau_P K_T)^{1/2}} \quad (14)$$

の形に表わされるはずである。関数 $f(\tau/\tau_P)$ は τ/τ_P の減少関数で $f(0)=1, f(1)=0$ 。 $f(\tau/\tau_P)$ の具体的な形はパイエルス・ポテンシャルの形に依存する。

Suzuki ら⁽⁴⁴⁾は図1に含まれる5つの結晶の降伏応力を τ_c^*/τ_P と $k_B T/b^3(\tau_P K_T)^{1/2}$ の関係にプロットし直した。それにWのデータを加えたのが図9である。 K_T は低温の弾性定数⁽⁴⁵⁾を使って計算した。アルカリ金属Kも含めて全てのデータがほぼ一つの曲線(universal curve)に乗ることは、式(14)に含まれる定数 A, B, ζ および関数 f の形が結晶の種類にほとんど依らないことを意味する。 $A \approx 30, B \approx 1.0$ とすれば $\zeta \approx 1.0$, 式(5)より $\phi_1/\phi_0 \approx 10^{-4-5}$ となる。これは妥当な大きさである。

ここで注意すべきことは、式(12)から式(13), (14)を導く際に張力 κ として弾性異方性を考慮した式(5)を用いねばならない点である。もし、等方弾性体近似 $\kappa \approx 2\zeta G b^2$ (G は平均的剛性率)を用いて式(14)の K_T を $2G$ で置き換えると図9のような一致は得られない。なぜなら、bcc 金属は結晶によって異方性が大きく異なるからである。

bcc 金属の τ_c-T 曲線が図9のようにスケールされるということは、個々の結晶の降伏応力を決定する因子として格子定数、2次の弾性定数(K_T を与える)の他にもう一つ、パイエルス応力 τ_P だけを考慮すればほぼ十分であることを意味する。転位芯構造のような詳細はあまり重要ではない。図9に含まれる結晶の τ_P は $(2-8) \times 10^{-3} G$ の範囲に分布する(表1)。それぞれの結晶の τ_P の大きさが何によって決まっているのかが今後の課題である。

図9 τ_c^*/τ_P と $k_B T/b^3(\tau_P K_T)^{1/2}$ の関係(Suzuki ら⁽⁴⁴⁾の図に最近のWのデータ⁽¹⁸⁾を加えた)。

(3) 塑性異方性

降伏応力の温度依存性(τ_c-T 関係)に限れば、1次元のパイエルス・ポテンシャルを考慮するだけでかなり定量的かつ系統的に理解できることは5.(1), 5.(2)節に記述したとおりである。しかし、塑性異方性の理解には2次元パイエルス・ポテンシャルと4章に記した取り扱いが有効である。

図6(a)のポテンシャルを仮定して計算した $\tau_y-\chi-T$ 関係を図10に示す⁽³⁵⁾。計算は特定の物質を想定せず、代表的な定数値を使い、 $|v|=10^{-6} \text{ m/s}$ となるように式(6), (7)を解いた。図10はW, Taの実験結果の全体的傾向をよく再現している。例えば、Wの弾性限のデータ⁽⁴⁶⁾は図10の理論曲線に極めて良く似ている。しかし、図10は $\alpha\text{-Fe}$ とMoの低温かつ $\chi < 0^\circ$ の実験結果に合わない。一方、図6(b)のポテンシャルを仮定して計算した結果が図2の実線である⁽³⁶⁾。3つの温度における計算曲線は $\chi \approx \pm 30^\circ$ を除いて実験⁽⁶⁾⁽⁷⁾を良く再現する。 $\alpha\text{-Fe}$ の $\phi-\chi$ 関係は4.2 Kと77 Kで $\phi \approx 0^\circ$ となること⁽⁷⁾しか報告されていないが、これは理論でも示される⁽³⁶⁾。

このように、bcc 金属の塑性異方性はパイエルス・ポテンシャルを2次元化することによって良く理解できる。本質的なことはらせん転位のまわりの3重回転対称性であって、転位芯の具体的な構造や原子間ポテンシャルの詳細とは直接関係ない。3節で記したように、bcc 金属の塑性異方性をらせん転位の特殊な芯構造と関係づけて説明しようとする試みがHirsch⁽³⁰⁾以降、特に計算機シミュレーションの分野で繰り返されてきたが、それらは現象の理解には役立っていない。

6. 結 言

bcc 金属の塑性は固溶体においてもらせん転位の高いパイ

図10 2次元パイエルス・ポテンシャル図6(a)を用いていろいろな温度で計算した $\tau_y-\chi$ 関係(Edagawa ら⁽³⁵⁾による)。

エルス応力に強く影響されるが、本稿ではイントリンシックな硬化、すなわちパイエルス機構に限って最近の理解をまとめた。主な点を要約すれば、(1)降伏応力の温度依存性が系統的に整理され、パイエルス応力のみを塑性パラメータとして含む一つのユニバーサルな関係を得た。(2)らせん転位の結晶幾何学的対称性を考慮してパイエルス・ポテンシャルを2次元化することにより、塑性異方性の本質を理解することができた。その結果、bcc金属の塑性をめぐる長年の誤解は解消されたものと我々は考えている。

なお、 τ_c-T 曲線に現れるハンプの解釈については紙数の関係で省かざるを得なかったが、Seeger⁽⁴⁷⁾⁻⁽⁴⁹⁾の説は明確に否定されていることを付記したい(文献(40)(43)(50)参照)。極低温に現れる古典論的 Arrhenius 則からのずれ、または量子効果についても触れることができなかった。文献(14)(17)(51)を参照願いたい。

本稿執筆にあたりご協力をいただいた枝川圭一氏(東大生研)と上村祥史氏(同)に感謝の意を表する。

文 献

- (1) R. L. Smialek and T. E. Mitchell: *Phil. Mag.*, **22**(1970), 1105.
- (2) K. Faber and H. Schultz: *Scripta Metall.*, **6**(1972), 1065.
- (3) R. Lachenmann and H. Schultz: *Z. Metallkunde*, **66**(1975), 443.
- (4) S. Takeuchi and K. Maeda: *Acta Metall.*, **25**(1977), 1485.
- (5) T. Imura: *High Voltage Electron Microscopy*, eds. P. R. Swan, C. J. Humphreys and M. J. Goringe, Academic Press, (1974), p. 179.
- (6) K. Kitajima, Y. Aono, Y. Abe and E. Kuramoto: *Strength of Metals and Alloys*, eds. P. Haasen, V. Gerold and G. Kostorz, Pergamon, (1979), p. 965.
- (7) Y. Aono, E. Kuramoto and K. Kitajima: *Rep. Res. Inst. Appl. Mechanics, Kyushu Univ.*, **29**(1981), 127.
- (8) Y. Aono, K. Kitajima and E. Kuramoto: *Scripta Metall.*, **15**(1981), 275.
- (9) W. J. Johnston and J. J. Gilman: *J. Appl. Phys.*, **30**(1959), 129.
- (10) W. J. Johnston: *J. Appl. Phys.*, **33**(1962), 2716.
- (11) E. Kuramoto, Y. Aono and K. Kitajima: *Scripta Metall.*, **13**(1979), 1039.
- (12) D. Brunner and J. Diehl: *Phys. Stat. Sol.(a)*, **104**(1987), 145.
- (13) D. Brunner and J. Diehl: *Z. Metallkunde.*, **83**(1992), 828.
- (14) S. Takeuchi, T. Hashimoto and K. Maeda: *Trans. JIM*, **23**(1982), 60.
- (15) Y. Aono, E. Kuramoto and K. Kitajima: *Strength of Metals and Alloys*, ed. R. C. Gifkins, Pergamon, (1982), p. 9.
- (16) Y. Aono, E. Kuramoto and K. Kitajima: unpublished data and private communication.
- (17) S. Takeuchi, K. Maeda and T. Suzuki: *Phys. Stat. Sol.(a)*, **43**(1977), 289.
- (18) D. Brunner, J. Diehl and V. Glebovsky: *UHPM-98*, (1998), p. 83.
- (19) H. O. K. Kirchner: *Acta Phys. Austriaca*, **48**(1978), 111.
- (20) Z. S. Basinski, M. S. Duesbery and G. S. Murty: *Acta Metall.*, **29**(1981), 801.
- (21) W. Pichl and M. Krystian: *Phys. Stat. Sol.(a)*, **169**(1997), 373.
- (22) T. Taoka, S. Takeuchi and E. Furubayashi: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **19**(1964), 701.
- (23) B. Šesták and N. Zarubova: *Phys. Stat. Sol.*, **10**(1965), 239.
- (24) S. Takeuchi, E. Furubayashi and T. Taoka: *Acta Metall.*, **15**(1967), 1179.
- (25) S. Takeuchi, T. Taoka and H. Yoshida: *Trans. ISIJ*, **9**(1969), 105.
- (26) T. Suzuki, S. Takeuchi and H. Yoshinaga: *Dislocation Dynamics and Plasticity*, Springer-Verlag, (1991), Chap. 6.
- (27) H. Suzuki: *Dislocation Dynamics*, eds. A. R. Rosenfield, G. T. Hahn, L. A. Bement and R. I. Jaffe, McGraw-Hill., (1968), p. 679.
- (28) V. Vitek: *Crystal Lattice Defects*, **5**(1975), 1.
- (29) S. Takeuchi: *Interatomic Potentials and Crystalline Defects*, ed. J. K. Lee, The Metall. Soc. AIME, (1981), p. 201.
- (30) P. B. Hirsch: *Fifth Intern. Congress on Crystallography*, Cambridge, (1960).
- (31) M. S. Duesbery: *Dislocations in Solids*, Vol. 8, eds. F. R. N. Nabarro and M. S. Duesbery, Elsevier, (1989), p. 67.
- (32) M. S. Duesbery and V. Vitek: *Acta Mater.*, **46**(1998), 1481.
- (33) S. Takeuchi, T. Hashimoto and K. Maeda: *The Structure and Properties of Crystalline Defects*, eds. V. Paidar and L. Lejcek, Elsevier, (1984), p. 169.
- (34) S. Takeuchi and E. Kuramoto: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **38**(1975), 480.
- (35) K. Edagawa, T. Suzuki and S. Takeuchi: *Phys. Rev.*, **B55**(1997), 8180.
- (36) K. Edagawa, T. Suzuki and S. Takeuchi: *Mater. Sci. & Eng.*, **A234-236**(1997), 1103.
- (37) D. M. Barnett, R. J. Asaro, S. D. Gavazza, D. J. Bacon and R. O. Scattergood: *J. Phys. F: Metal Phys.*, **2**(1972), 854.
- (38) T. Mori and M. Kato: *Phil. Mag.*, **43**(1981), 1315.
- (39) S. Takeuchi and T. Suzuki: *Strength of Metals and Alloys*, eds. P. O. Kettunen, T. K. Lepisto and M. E. Lehtonen, Pergamon Press, (1989), p. 161.
- (40) T. Suzuki, H. Koizumi and H. O. K. Kirchner: *Acta Metall. Mater.*, **43**(1995), 2177.
- (41) V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya and R. Thomson: *Phys. Rev.*, **131**(1963), 58.
- (42) J. E. Dorn and S. Rajnak: *Trans. Metall. Soc. AIME*, **230**(1964), 1052.
- (43) H. Koizumi, H. O. K. Kirchner and T. Suzuki: *Phil. Mag. A*, **69**(1994), 805.
- (44) T. Suzuki, Y. Kamimura and H. O. K. Kirchner: *Phil. Mag. A*, **79**(1999), 1629.
- (45) G. Simmons and H. Wang: *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties*, The MIT Press, (1971).
- (46) A. S. Argon and S. R. Maloof: *Acta Metal.*, **14**(1966), 1449.
- (47) A. Seeger: *Z. Metallkunde.*, **72**(1981), 369.
- (48) A. Seeger: *J. Physique*, **42**(1981), C5-201.
- (49) A. Seeger: *Dislocations 1984*, eds. P. Veyssire, L. Kubin and J. Castaing, CNRS, (1984), p. 141.
- (50) H. Koizumi, H. O. K. Kirchner and T. Suzuki: *Acta Metall. Mater.*, **41**(1993), 805.
- (51) S. Takeuchi, T. Suzuki and H. Koizumi: *J. Phys. Soc. Japan*, **69**(2000), 1727.