

講 義

鉄鋼の強度の転位論*

鈴木 秀 次**

Dislocation Theory of Strength of Iron and Steel

Hideji SUZUKI

1. ま え が き

鉄鋼の強度を転位論の立場から解説するのがこの小文の目的であるが、とくに鉄鋼の示す次の特徴を説明することに重点をおく。

- (1) 微量の炭素および窒素によつて著しく降伏強度を増す。
- (2) 室温以下で温度の低下とともに降伏強度が急に上昇する。
- (3) 降伏強度は変形速度に強く依存する。

しかし、これらの問題を論ずる前に塑性変形および強度の転位論についての一般的な解説を述べる。なお、この解説の前半とくに3節は前に本誌に掲載した「降伏点に関する最近の研究」¹⁾とかなり重複しているが、後半の記述に必要なので削除しなかつた。

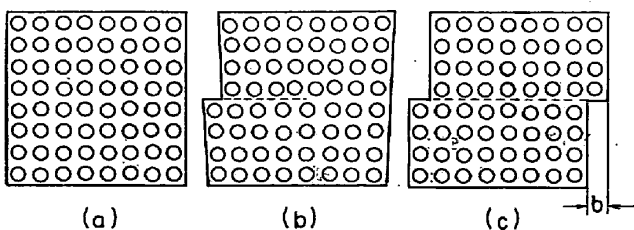
2. 転位の運動、増殖と塑性変形

1本の転位が結晶のすべり面にそつて全断面を通過すれば、パーガース・ベクトル b だけ上半分の結晶が下半分の結晶に対してすべる (第1図参照)。いま長さ l の転位が短い距離 d だけ移動したとき、全断面を A とすると bd だけすべつたとみなすことができる。単位体積中にある同じすべり系の転位の全長が L cm であつて、どの部分も同じ距離 d だけ移動したとすると、すべり変形量 S は

$$S = Lbd \dots \dots \dots (1)$$

で与えられる。

転位が一定の速度 v で動いているならば、短い時間 Δt の間には転位は僅かだけ長さをかえ $L + \Delta L$ となる。また転位の移動距離は $v\Delta t$ である。 Δt が小さいとき L に対して ΔL は無視できるから、



第1図 転位の移動によるすべり

$$\dot{S} = \frac{dS}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta S}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(L + \Delta L)bv\Delta t}{\Delta t} = Lvb \dots \dots \dots (2)$$

とかくことができる。

次にもともと結晶中にあつた転位は釘づけされており、外力で釘づけからはずれると一定量のすべりを起こして動けなくなる場合を考える。すなわち、釘づけから外れた転位はフランク・リード源となつて一定数の転位を増殖して活動を停止する。増殖された転位もある距離移動した後、他の転位と相互作用を起こして動けなくなる場合を考える。1本の転位が釘づけ位置からはずれて増殖された転位の掃く総面積を A_i とし、転位が釘づけされた位置から外れて転位源となる頻度を \dot{N} とすると

$$\dot{S} = \dot{N}A_i b \dots \dots \dots (3)$$

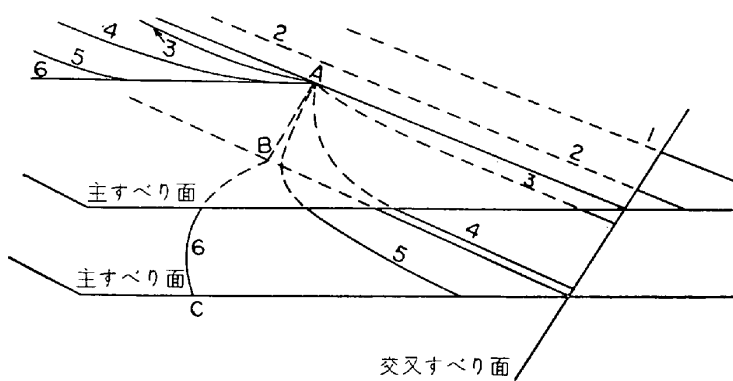
という関係が成り立つ。結晶の塑性変形速度が(2)と(3)のどちらの式であらわされるかは転位源の性質や転位の運動に対する抵抗力の性質によつて異なる。(2)が成り立つのはもともと結晶中に含まれている転位が転位源として働らくのではなく、増殖された転位が新しい転位源として働き続ける場合に限られる。

運動する転位が新しい転位源になるのは二重交叉すべりを起こす場合である。すなわち、第2図のように、らせん転位の部分が別のすべり面に移り、少し運動した後、もとのすべり面に平行な離れたすべり面上を動き始めたとする。図の6番目の曲線のABCの部分を見ると、BCの部分だけが主すべり面上にあり、フランク・リード源になつている。ただこの場合、もとのすべり面上にもADであらわされる転位がついている。この平行な2枚のすべり面上の転位はたがいに逆符号で力をおよぼしあつている。この2枚のすべり面の間隔が十分に離れているか、または外力が大きければ第3図(c)のように互いに無関係に運動することができ新しい転位源となる。(b)のように双極子を作つている転位が刃状転位であるとき、上下の転位を互いに無関係に動かすのに必要な外

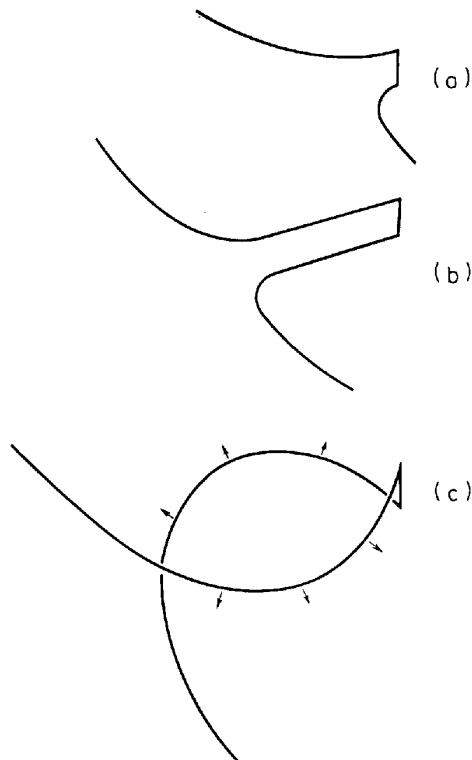
* 昭和41年9月 日本鉄鋼協会第5回技術講座において講演

昭和42年8月3日受付

** 東京大学理学部 理博



第2図 二重交又すべりによる大きなジョグの形成



第3図 二重交又すべりによる転位の増殖

- (a) 交又すべりによつて大きなjogを作る
- (b) 転位双極子を作る
- (c) 転位双極子が転位源となる

力は

$$\tau_a = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)h} \dots\dots\dots (4)$$

で与えられる。ここに μ は剛性率、 b はバーガース・ベクトルの大きさ、 ν はポアソン比、 h は2本の転位ののつているすべり面の間隔である。らせん転位の場合には

$$\tau_a = \frac{\mu b}{4\pi h} \dots\dots\dots (5)$$

で与えられる。らせん転位の方が幾分大きな力を必要とするが、二重交又すべりを起こすときには刃状転位の双極子を作ると考えられるから(5)は用いないことにする。

鋼の場合 $\mu = 8 \times 10^{11}$ dyne/cm²、 $b = 2.5 \times 10^{-8}$ cm を代入すると、 $\tau_a = 10$ kg/mm² に対して $h \approx 120 \text{ \AA}$

となる。すなわち、せん断応力が 10 kg/mm² であれば、交又すべりで 120 Å 以上離れた平行なすべり面に移つたらせん転位の部分は、新しい転位源となつて増殖することができるのである。

交又すべりが起こるならば、運動している転位は新しい転位源となつて転位を増殖するから、もともと結晶中にあつた転位が最初の転位源になつたとしても、結晶のすべり速度は(2)式に示されるように転位の移動速度に比例する。しかしもし転位が与えられた応力の下では交又すべりを起こさないならば、転位はもとのすべり面にのつていなければならないが、何かの障害物に出会うととめられて、その後で増殖された転位は第4図のようにたまつてしまう。同じ転位源から作られた転位がたまると、外力と逆向きの内部応力を発生する。このため外力が打ち消されて転位源の活動は停止する。したがつて、もともと結晶中にあつた転位を動かす始めるのに必要な力が、自由に動いている転位の摩擦力よりずつと大きければ、結晶の変形速度は(3)式で与えられる。

体心立方結晶中の転位は非常に交又すべりを起こしやすい。したがつて変形速度は(2)式にしたがう。このほか、NaCl 型のイオン結晶も交又すべりを起こしやすいので変形速度は(2)式であらわされる。また Ge, Si 中の転位は交又すべりをほとんど起こさないと考えられるが、転位の摩擦力が非常に大きいので、やはり(2)式に従う。これに対して面心立方格子をもつ合金は(3)式に従う。この合金では交又すべりは起き難く、また転位の摩擦力にくらべて固着力が非常に大きいからである。面心立方格子をもつ金属と体心立方格子をもつ金属の機械的性質の差異はこのような変形様式の相異によつている部分が多い。

特殊鋼の一部を除けば、鉄鋼の結晶構造は体心立方または正方構造であり、したがつて、この解説では変形速度が(2)式で与えられる場合についてだけ述べる。オーステナイト系特殊鋼についてはここに述べる話を適用できないことに注意していただきたい。

3. 転位の運動と降伏強度

結晶の塑性変形は多数の転位が運動することによつて起こるのであるから、1本1本の転位の運動の仕方と巨視的な降伏現象の関係を述べよう。この問題を徹底して実験事実だけに基づいて論じたのは GILMAN と JOHNSTON²⁾³⁾ であつた。彼らの理論はそのまま鉄に適用できるので、やや詳しく彼らの理論を紹介しよう。

GILMAN と JOHNSTON²⁾⁴⁾ は LiF というイオン結晶を用いて、結晶表面に顔を出している転位の位置に美しい腐食孔を作ることに成功し、その技術を用いて、1本の転位を定まつた条件の下で移動させ速度を測定した。転位が存在する位置の腐食孔はとがつているが、転位の動いた後で再び腐食すると、もとの腐食孔は深さを増さない



第4図 転位の Pile up

で広がるだけであるから、底が平らになる。もちろん、新しい転位の位置には底ののがつた腐食孔が新しく作られるので、もとの転位の位置と新しい転位の位置を知ることができるのである。JOHNSTON と GILMAN は応力のパルスを加えることによつて転位を動かし、応力を加えた時間で移動距離を割つて速度を求めた。しかし転位の移動は必ずしも一様ではなく、1ないし数ミクロンごとに跳躍運動をしていることが知られる。これは転位が障害物にひつかかりひつかかり動いていることを示している。1回の跳躍よりも長い距離に対する移動速度を求めると、短時間のパルスを多数回かけた場合でも、長時間のパルスを1回かけた場合でも同じ値が得られる。

第5図は以上のようにして測定された転位の速度と加えた応力の関係を示す。図から知られるように、非常に高速度の場合を除くと、刃状転位は、らせん転位の10倍以上も速い。

JOHNSTON らはこのほか、次のような事実を腐食孔の実験から見いだしている。

(1) 結晶を成長させたときから結晶中にあつた転位は変形が進行しても動かない。動くのは結晶を劈開するときになされた転位対 (劈開面に顔を出している転位の半輪) などのように固着されていないと考えられる転位である。

(2) 自由な (固着されていない) 転位が動くときと転位が増殖される。

第5図によると刃状転位と、らせん転位の速度は異なるので、刃状転位とらせん転位の2種類しかないとすれば(2)式は

$$\dot{S} = b(n_s v_s + n_e v_e) \dots\dots\dots (6)$$

とかかれる。ここに n_s, n_e はらせん転位および刃状転位の密度、 v_s, v_e はそれぞれの速度である。前には単位体積中の転位の全長を用いたが、腐食孔で転位を観察するので、表面に顔を出している転位の数 (単位面積あたりであらわすのが便利である。 $L \approx n \approx n_s + n_e$ が成り立つと考えられる。転位が増殖される時、刃状転位、らせん転位を含む輪として作られるから、

$$\frac{n_s}{n_e} = \frac{v_e}{v_s} \dots\dots\dots (7)$$

したがつて

$$\dot{S} = 2bn_s v_s = 2bn_e v_e \dots\dots\dots (8)$$

転位の全密度は

$$n = n_s + n_e = n_s (1 + v_s/v_e) \dots\dots\dots (9)$$

$v_s \ll v_e$ であるから

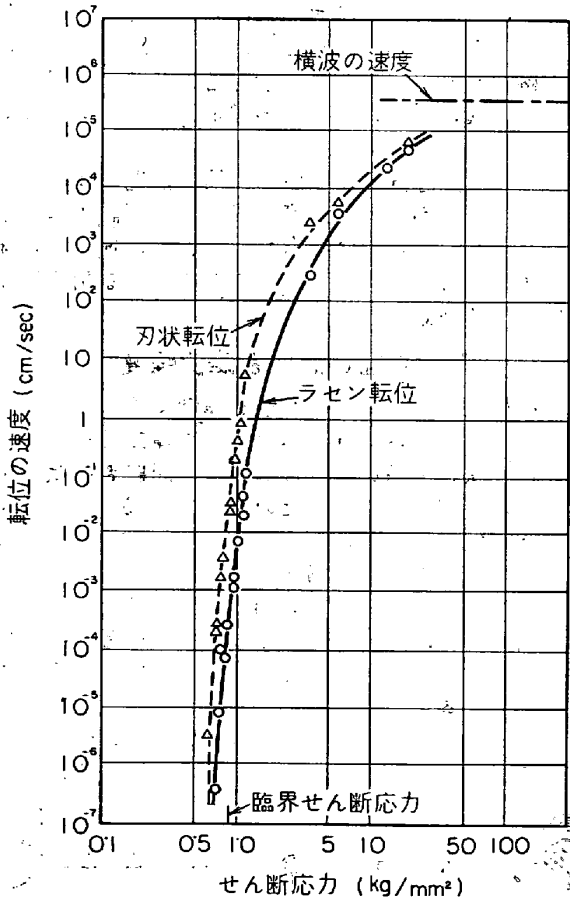
$$\dot{S} \approx 2bnv_s \dots\dots\dots (10)$$

となる。

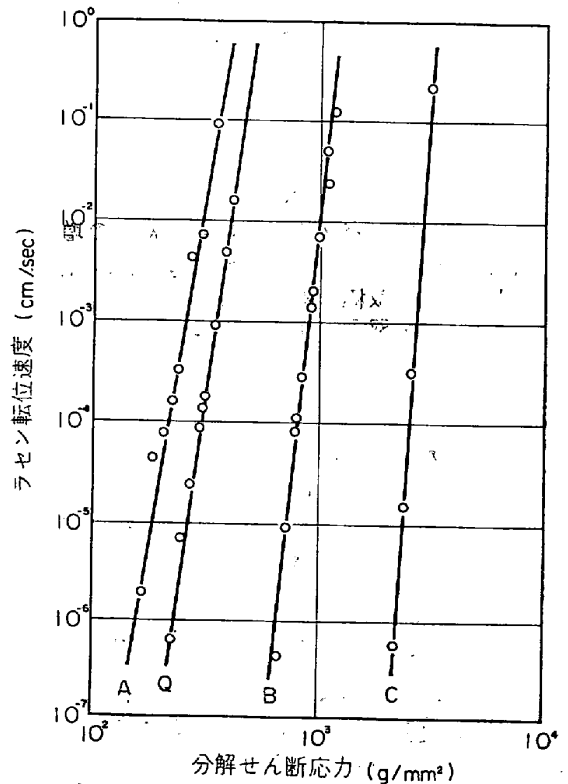
第5図の転位の速度は非常に速いものまで含めてあり、臨界せん断応力よりも、はるかに高い応力範囲におよんでいるが、低い速度範囲だけに限れば大体直線的になる。いろいろな結晶を用いて、1 cm/sec 以下の速度範囲で測定した結果を拡大して描くと、第6図のようになっている。すなわち、

$$v_s = (\tau/D)^m \dots\dots\dots (11)$$

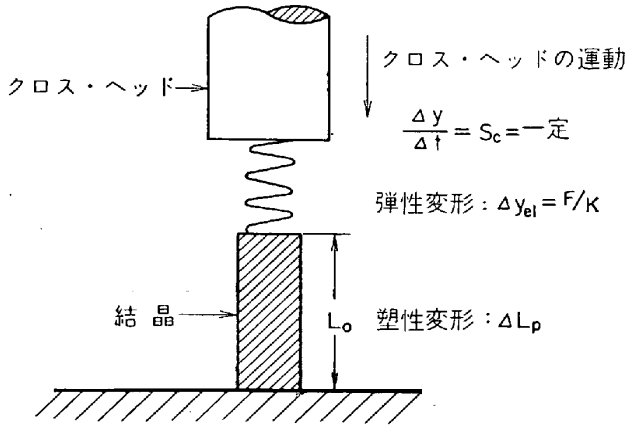
とあらわされる。ここに τ は分解せん断応力、 D および m は定数で結晶によつて異なるが、図のQという結晶に対しては $D = 540 \text{ g/mm}^2, m = 16.5$ であつた。LiF 結晶



第5図 LiF 結晶中の転位の速度とせん断応力との関係 (JOHNSTON と GILMAN²⁾ による)



第6図 LiF における転位速度とせん断応力との関係 (JOHNSTON³⁾による)



第7図 圧縮試験の概念図

では転位密度 n は変形量 ϵ に比例して増加した。ところ
すべりは $\{110\}$ 面でおき、圧縮方向は $\langle 001 \rangle$ 方向で
あるから、

$$n = \alpha S \dots\dots\dots (12)$$

実験の結果によると $\alpha = 10^9 / \text{cm}^2$ であつた。

(11)式と(12)式を(10)式に代入すると、

$$\dot{S} = 2b\alpha S (\tau/D)^m \dots\dots\dots (13)$$

となる。次に実験的に応力-歪曲線を測定する方法を考
えてみよう。降伏点の研究に使われるのは、ふつう、
Instron 型のように応力の測定のためにわずかしが変位
しない、いわゆる、「硬い」引張圧縮試験機である。この
場合の測定方式を図式的に示すと第7図のようになる。
すなわち、クロス・ヘッドは一定の速度 S_c で動いて固
定された台の上の試料を圧縮する。クロス・ヘッドの変
位の一部は試料自身やロードセルその他の試験機の部分
を弾性的に歪ませるのに使われ、残りが試料の塑性変形
を起こす。弾性的な変形をすべてまとめて第7図のスプリ
ングの変形で表わしてある。弾性変形は $\Delta y_{el} = F/K$ と
書くことができる。ここに F は荷重、 K は有効バネ定数
である。

ΔL_p で塑性変形の量をあらわすと、クロス・ヘッドの
変位は

$$\Delta y = S_c t = \Delta y_{el} + \Delta L_p \dots\dots\dots (14)$$

ここに t はクロス・ヘッドを動かし始めてからの時間
である。LiF を $\langle 001 \rangle$ 方向に圧縮するとき、すべり面は
 $\{110\}$ 、すべり方向は $\langle \bar{1}10 \rangle$ であるから、試料の最初
の長さを L_0 とすると

$$\epsilon = \frac{S}{\sqrt{2}} = (\Delta L_p / L_0) = (S_c t - F/K) / L_0 \dots\dots (15)$$

また $\tau = F/2A$ ここに A は試料の断面積である。したが
つて塑性変形速度は

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{S} = \left(S_c - \frac{1}{K} \frac{dF}{dt} \right) / L_0 \dots\dots\dots (16)$$

Instron 型の試験機では荷重 F を時間 t の関数として
記録する。これはすべり面にそつたすべり方向のせん断
応力 τ をクロス・ヘッドの変位 y の関数として記録して
いることになる。(15)、(16)式を(13)式に代入し、 $\tau =$
 $F/2A$ 、 $\frac{dy}{dt} = S_c$ の関係を用いると

$$d\tau/dy = C - B(\tau/D)^m (C_y - \tau) \dots\dots\dots (17)$$

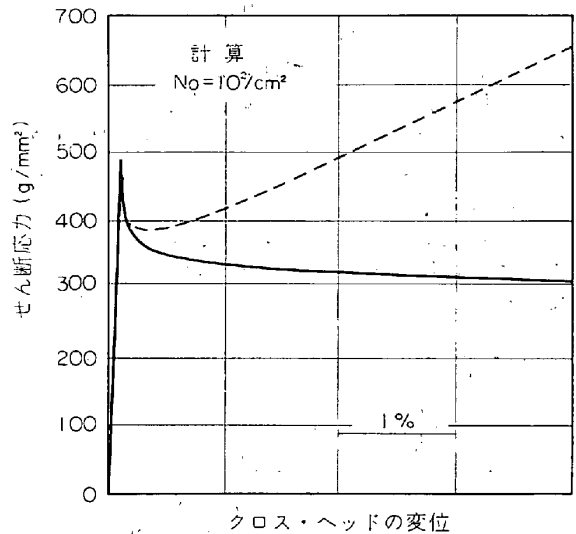
ここに

$$C = K/2A$$

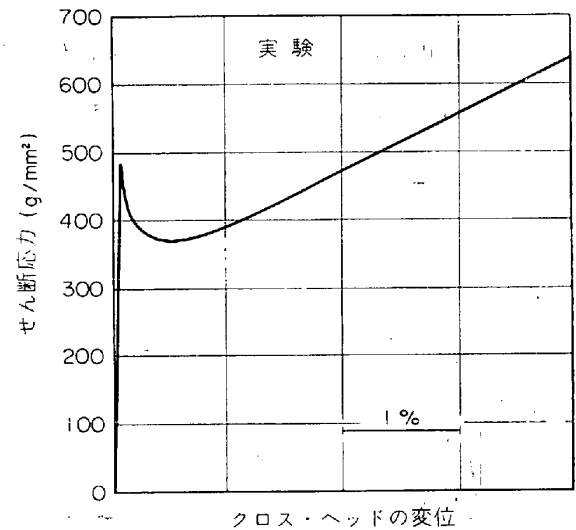
$$B = b\alpha/S_c$$

(17)式は応力と歪の関係を与える微分方程式である
が、解析的に解くことはできないので、電子計算機で数
値的に解かれた。その場合最初に τ と y の初期値の組
 τ_0 と y_0 を与えなければならないが、(12)と(14)式から
知られるように、 τ_0 と n の初期値 n_0 の値を与えるこ
とと同じである。

次に結晶 Q についての応力-歪曲線を計算してみよう。
この結晶では $D = 540 \text{ g/mm}^2$ 、 $m = 16.5$ であつた。いま
 $n_0 = 10^2 / \text{cm}^2$ とし、実験の条件に合わせて $S_c = 0.005 \text{ in/}$
 min 、 $A = 12.5 \text{ mm}^2$ 、 $K = 4.15 \times 10^4 \text{ lb/in}$ とする。(17)
式から計算される応力-歪曲線は第8図の実線で示す
とおりである。するどい降伏点を示して応力はどんどん低
下している。これに対して、実測の応力-歪曲線は第9



第8図 最初 $10^2 / \text{cm}^2$ の自由な転位があると仮定
して計算された LiF の応力-歪曲線。実線
は加工硬化のない場合、破線は $90 \text{ g/mm}^2 /$
 1% の加工硬化のある場合 (JOHNSTON³⁾に
よる)



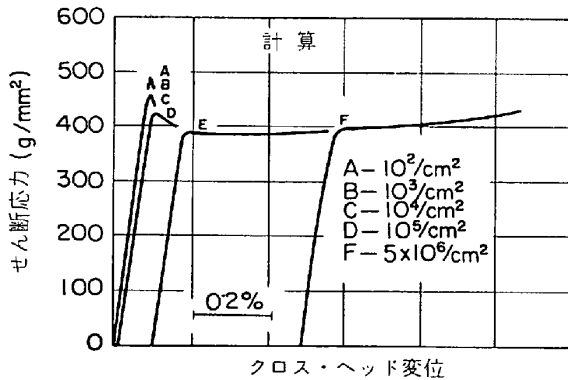
第9図 あらかじめ歪を与えた後 115°C で時効さ
せた LiF 結晶の応力-歪曲線 (JOHNSTON³⁾
による)

図のとおりである。降伏点附近の形は似ているが、変形が進むと相異が大きくなる。

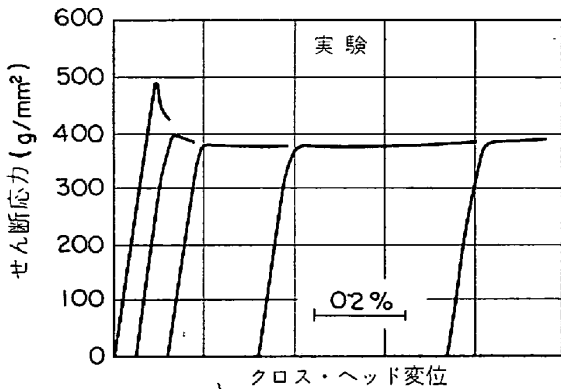
(17)式を導き出すさいには、すべての動き得る転位が v_s の速度で動くことと仮定した。しかし、実際の結晶中では転位はある距離動くことと他の転位と出会う力をおよぼし合い動けなくなる。このために加工硬化の現象が起こるのである。加工硬化の機構については現在でも議論がわかれているので、1本1本の転位の挙動に立ち入って理論を組み立てるのは適当でない。LiF 結晶の場合、加工硬化は変形量に比例しているの、それだけを補正した応力-歪曲線を第8図の破線で示してある。

上の計算では $n_0=10^2/cm^2$ に選んだが、実際の結晶ではいろいろな値を取り得るであろう。第10図は n_0 をかえてみたときの計算結果である。 n については(12)式を仮定してあるから、 n_0 をかえることは前もつて少量の歪を与えたことと同じである。第10図の計算に対応する応力-歪曲線を測定すると第11図のように、よく似た曲線が得られる。この曲線で明らかなように n_0 の小さいほど鋭い降伏点を得られ、上の降伏点が上昇する。 n_0 がある数以上になると、降伏点における応力低下があらわれなくなる。その様子は第12図にもつと、わかりやすく示されている。

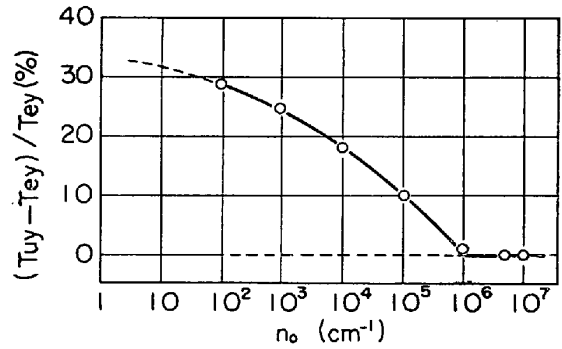
次に変形速度が変わった場合の応力-歪曲線の変化を計算してみよう。第13図は $n_0=10^3/cm^2$ として計算した結果であつて、曲線の形は変形速度によつてほとんど変



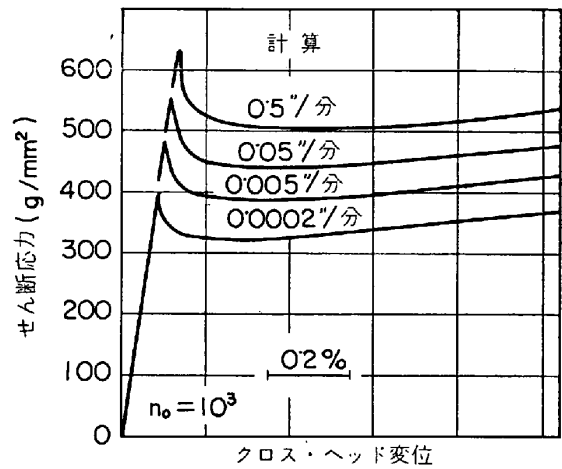
第10図 自由な転位の最初の密度、 n_0 の降伏点におよぼす影響。 n_0 以外の定数は第8図の計算に用いたものと同じ (JOHNSTON³⁾ による)



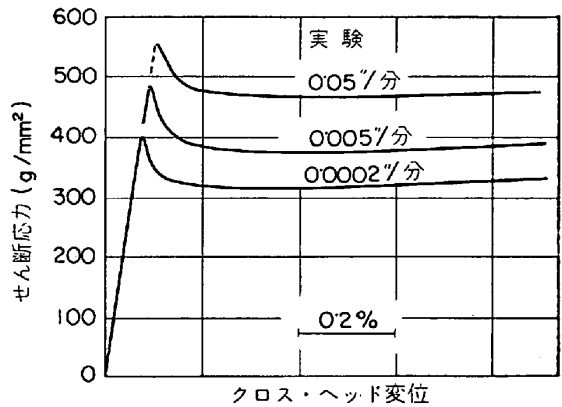
第11図 第10図に対する実測の応力-歪曲線 (JOHNSTON³⁾ による



第12図 異なる n_0 に対して計算された応力-歪曲線の降伏点における応力低下 (JOHNSTON³⁾ による)



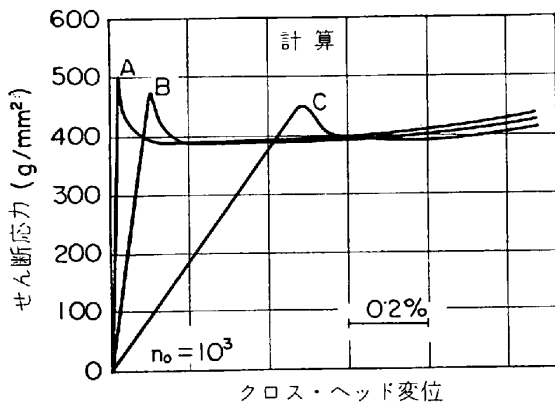
第13図 クロス・ヘッド速度の応力-歪曲線におよぼす影響 (JOHNSTON³⁾ による)



第14図 第11図に対応する実測の応力-歪曲線 (JOHNSTON³⁾ による)

化しないが、曲線全体が変形速度の大きいほど上昇している。すなわち、変形速度の大きいほど降伏点は上昇し、変形速度が2,500倍になると、降伏点は50%以上も上昇するが、降伏点の鋭さや、降伏点における応力低下はほとんど変わらない。他方この計算に対応する測定曲線は第14図で、以上の特徴をよくあらわしている。

降伏点のあらわれ方は試験機の特性によつてかなり異なる。Instron 型の試験機は最も硬く上の計算に示したようなパネ定数をもつが、振り型試験機のように柔らかいとパネ定数は極端に小さくなり、降伏点を記録できな



第 15 図 試験機の「硬さ」による応力-歪曲線の变化 (JONSTON³⁾による)

くなる。第 15 図バネ定数をかえた場合の降伏点附近の応力-歪曲線を計算したもので、上に述べた傾向を示している。

4. JONSTON-GILMAN 理論の鉄への応用

LiF についての実験結果を基にして組み立てられた前節の議論は、そのまま鉄鋼の場合にあてはめることができる。ただ鉄の場合に 1 本の転位の速度の測定が LiF ほど徹底して行なわれていないので、多少異なった実験結果を利用しなければならない。以下 HAHN⁵⁾ が試みた理論を簡単に紹介しよう。

前節の議論で LiF の実験値を用いているのは (11) 式と (12) 式だけである。あとは一般的に成り立つ式であるから (11) と (12) の代りに鉄の測定値を代入すればよい。

STEIN と LOW⁶⁾ は Fe-3.25%Si 結晶中の転位の速度を測定し (11) と同じ形の実験式を得た。すなわち

$$v = (\tau/D)^m \dots\dots\dots (11)'$$

ここに D および m は結晶によつて異なる定数である。STEIN と LOW の測定したのは刃状転位の速度ということになっている。

転位密度と変形量の関係については (12) 式を次のように修正した。

$$n = \beta \epsilon^i \dots\dots\dots (18)$$

ここに β , i は定数である。また実際の転位密度の測定値と比較するときには

$$n = n_0 + \beta \epsilon^i \dots\dots\dots (19)$$

とおいて β , i の値をきめた。第 1 表はこのようにしてきめた β , i の値である。 i は 1 の近くに散らばっているように思われる。

第 1 表 転位の増殖をあらわすパラメーターの値

(HAHN⁵⁾ による)

測定者	材 料	結晶粒の直径 (mm)	転 位 密 度	
			β (cm ⁻²)	i
KEH および WEISSMANN ⁷⁾ (透過電子顕微鏡)	鉄 {脱炭処理を行なったもの}	0.015	2.4×10^9	0.9
		0.020	2.0×10^9	0.7
		0.100	1.6×10^9	0.8
HAHN ⁵⁾ (腐食孔)	1020 鋼	0.09	4.7×10^7	1.5

HAHN は (14) 式の Δy_{el} の項を無視することによつて式を簡単化した。また加工硬化を取り入れるために (11)' を

$$v = (\tau - q\epsilon)^m D^{-m} \dots\dots\dots (20)$$

と書き直した。さらに結晶中の転位の一部分 fn だけが一定の速度 v で運動し、ほかはとまっていると仮定した。そうすると

$$\dot{\epsilon} = 0.5nub \dots\dots\dots (21)$$

この係数 0.5 は、すべりを引張または圧縮歪に換算する幾何学的因子である。(19), (20) を (21) に代入して

$$\dot{\epsilon} = 0.5bf(n_0 + \beta \epsilon^i)(\tau - q\epsilon)^m D^{-m} \dots\dots\dots (22)$$

(22) はまた次の形に書き直すことができる。

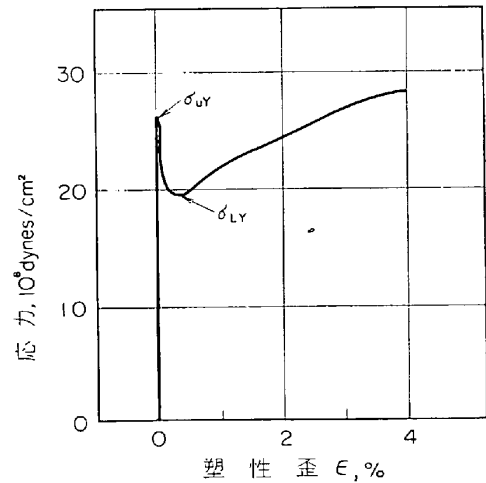
$$\tau = q\epsilon + D \left[\frac{\dot{\epsilon}}{0.5bf(n_0 + \beta \epsilon^i)} \right]^{1/m} \dots\dots\dots (23)$$

(23) を用いて応力-歪曲線をかくことができる。第 16 図にその一例を示す。これは鋼の応力-歪曲線の特徴をよく示している。

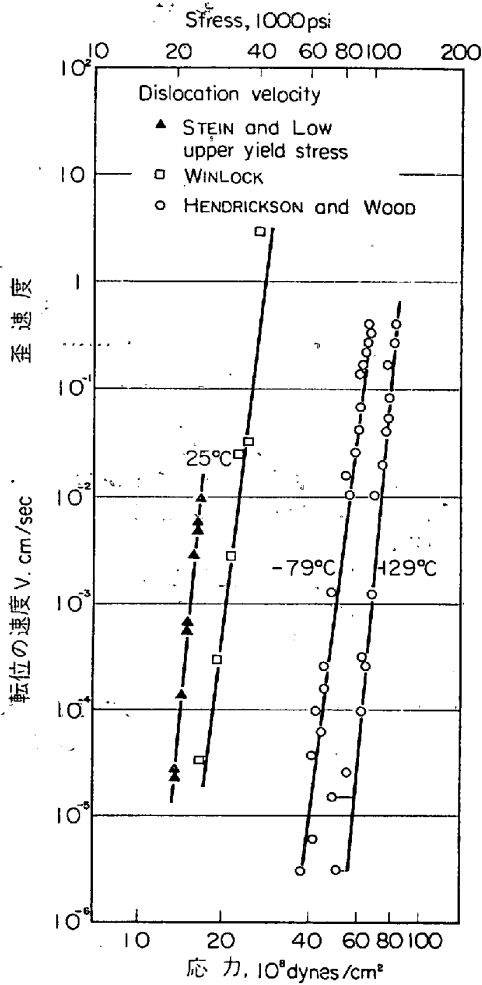
(23) 式はまた変形速度を変えたとき変形応力がどのように変わるかを示している。すなわち、

$$\log \tau \approx \log \beta + \frac{1}{m} \log \dot{\epsilon} \dots\dots\dots (24)$$

(24) を用いて、 m の値を実験的に求めることができる。第 17 図に (24) 式に相当する測定結果を示してある。この傾斜が m に比例する。この図には STEIN-LOW⁶⁾ の転



第 16 図 (23) 式で計算した応力-歪曲線、一様変形を仮定。 $\dot{\epsilon} = 0.02/\text{min}$, $m = 35$, $\tau_0 = 16.6 \times 10^8 \text{ dyne/cm}^2$, $q = 37.1 \times 10^9 \text{ dyne/cm}^2$, $b = 2.48 \times 10^{-8} \text{ cm}$, $f = 10^{-1}$ (HAHN⁵⁾ による)



第 17 図 軟鋼の上の降伏点と歪速度の関係 (WINLOCK および HENDRICKSON と WOOD による) Fe-3.25%Si 結晶中の転位速度の応力による変化 (STEIN と Low による)

位速度の測定値も示してあり、 m の値が両者であまり異なることを示している。第2表はこのような方法で定められた m の値を示してある。 m の値は変形量が小さいと小さいようである。

5. 多結晶材料の降伏強度¹²⁾¹³⁾

鉄鋼材料として用いられるものは多結晶体である。転位は結晶境界を自由に通過することはできない。ふつうの結晶境界では転位が運動を阻止され、隣の結晶内で新

しく転位が形成されたり増殖されたりしてすべりが伝播する。このため結晶境界は材料の強度に大きな影響を与える。この節では多結晶材料の強度が、結晶内を転位が運動するときの抵抗力と、結晶境界の影響に分離できることを述べる。

1) PETCH の関係

まず、1つの結晶内で転位源が働いて転位を増殖した場合を考えよう。転位は第18図のようにすべり面上に分布する。実際の結晶では転位はループを作っているが、ここでは近似的に紙面に垂直な直線状になっているとする。紙面に垂直に z 軸をとり、転位の移動方向を x 軸にとる。 $x=\xi$ の位置には $x=\eta$ にある転位によつて

$$\tau_1(\xi) = \frac{A}{\xi - \eta} \dots \dots \dots (25)$$

のせん断応力をうける。 A は転位線とパーガース・ベクトルのなす角に依存し、刃状転位では

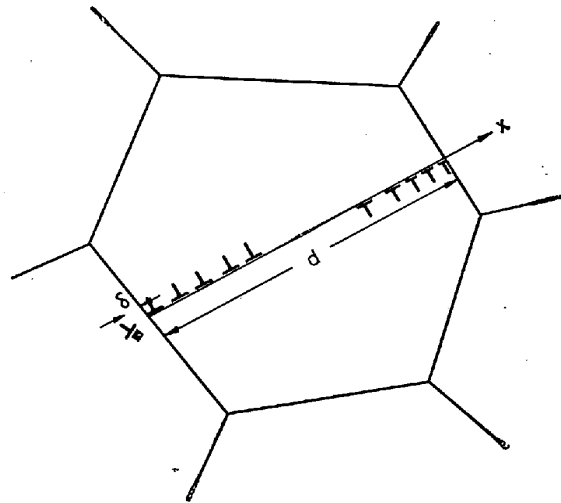
$$A = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$$

らせん転位では

$$A = \frac{\mu b}{2\pi}$$

である。すべり面上の転位の分布を近似的に連続関数 $D(x)$ であらわすと、この転位群によつて $x=\xi$ の位置に働く力は

$$\tau(\xi) = A \int \frac{D(x) dx}{\xi - x} \dots \dots \dots (26)$$



第 18 図 結晶境界に堆積した転位群

第 2 表 実験的に求められた m の値

測定方法および測定者	材 料	いろいろな温度での m の値				
		298	198	194	144	78°K
転位速度 (STEIN & LOW ⁶⁾)	Fe-3.25% Si	35	38			44
歪速度依存 (WINLOCK ⁹⁾)	軟 鋼	22				
〃 (HENDRICKSON & WOOD ⁹⁾)	〃			22	32	
〃 (TAKEUCHI & IKEDA ¹⁰⁾)	純 鉄	10				
〃 (MICHALAK ^{10a)})	〃	7	15		25	50

で与えられる。いま外力 τ_a が加わり、また転位の運動に対する摩擦力が τ_f であるとする、転位は次の条件で停止する。

$$\tau(\xi) + \tau_a = \tau_f \dots\dots\dots (27)$$

第 18 図の結晶内のすべりに対しては(26)と(27)から

$$\int_{-d/2}^{d/2} \frac{D(x)dx}{x-\xi} = \frac{-\tau_a + \tau_f}{A} \dots\dots\dots (28)$$

$$\text{ただし } -\frac{d}{2} \leq \xi \leq \frac{d}{2}$$

この積分方程式は航空力学の翼理論に現われる FUCHS-HOPH-SEEWALD の方程式の 1 つの形である。この解¹¹⁾は

$$D(x) = -\frac{(\tau_a - \tau_f)}{\pi A} \frac{x}{\left\{ \left(\frac{d}{2} \right)^2 - x^2 \right\}^{1/2}} \dots\dots\dots (29)$$

このときに作られる正の転位の数 n_+ は

$$n_+ = \int_{-d/2}^0 D(x)dx = \frac{(\tau_a - \tau_f)d}{2\pi A} \dots\dots\dots (30)$$

で与えられる。いま $\tau_a - \tau_f = 10 \text{ kg/mm}^2$, $d \approx 0.01 \text{ mm}$ とすれば、らせん転位に対して $n_+ \approx 50$ の程度である。

これだけの転位の運動による変形量は試片の直径を 5 mm, 長さを 50 mm とすると,

$$\epsilon \approx 7 \times 10^{-13}$$

にすぎない。この変形量は測定にかからない。このようなすべりが 10^6 起きたとしても変形量は 10^{-6} 以下で實際上塑性変形が起きたとはいえない。しかし、もし 1 つの結晶粒ですべりが起こると隣の結晶粒にもすべりが誘起され、次々とすべりが伝播するならば、急に塑性変形の起き始めたことを認め得るだろう。第 18 図のように結晶境界で移動をとめられた転位群は隣の結晶に大きな局部的応力集中を起こし、このために隣の結晶にすべりが誘起される。応力集中によつて、もとの結晶のすべり面にそつてすべり方向のせん断応力は

$$f(\delta) = A \int_{-d/2}^{d/2} \frac{D(x)}{\left(\frac{d}{2} + \delta \right) - x} dx + \tau_a \dots\dots\dots (31)$$

で与えられる。いま $x/(d/2) = \cos \theta$ とおくと

$$dx = -\frac{d}{2} \sin \theta d\theta$$

また

$$\left[\left(\frac{d}{2} \right)^2 - x^2 \right]^{1/2} = \frac{d}{2} \sin \theta$$

故に

$$f(\delta) = -\frac{\tau_a - \tau_f}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cos \theta d\theta}{\left(1 + 2\frac{\delta}{d} \right) - \cos \theta} + \tau_a$$

$$= (\tau_a - \tau_f) \left[-1 + \frac{\delta + d/2}{\sqrt{\delta d + \delta^2}} \right] + \tau_a \dots\dots\dots (32)$$

$\epsilon \ll (d/2)$ ならば

$$f(\delta) = (\tau_a - \tau_f) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d}{\delta}} + \tau_f \dots\dots\dots (33)$$

いま隣の結晶粒内の δ_c の位置に σ_o というせん断応力が加わったら、すべりが伝わるとすると、降伏の条件は

$$\sigma_o = (\tau_a - \tau_f) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d}{\delta_c}} + \tau_f \dots\dots\dots (34)$$

となる。書き直して

$$\tau_a = \tau_f + 2\sqrt{\delta_c} (\sigma_o - \tau_f) d^{-1/2} \dots\dots\dots (35)$$

となる。引張応力を加えたとき、すべり系が最も大きな分解せん断応力をもっている結晶では $\tau_y = 2\tau_a$ であるから、

$$\tau_y = 2\tau_f + 4\sqrt{\delta_c} (\sigma_o - \tau_f) d^{-1/2} \dots\dots\dots (36)$$

鉄鋼で隣の結晶粒にすべりが伝わるときには、結晶境界附近に新しく転位を作るか、粒界から転位を発生させなければならぬので、 σ_o は τ_f に比べてはるかに大きい。したがつて $4\sqrt{\delta_c} (\sigma_o - \tau_f) \approx k_y = \text{const.}$ とおくことができる。すなわち

$$\tau_y = 2\tau_f + k_y d^{-1/2} \dots\dots\dots (37)$$

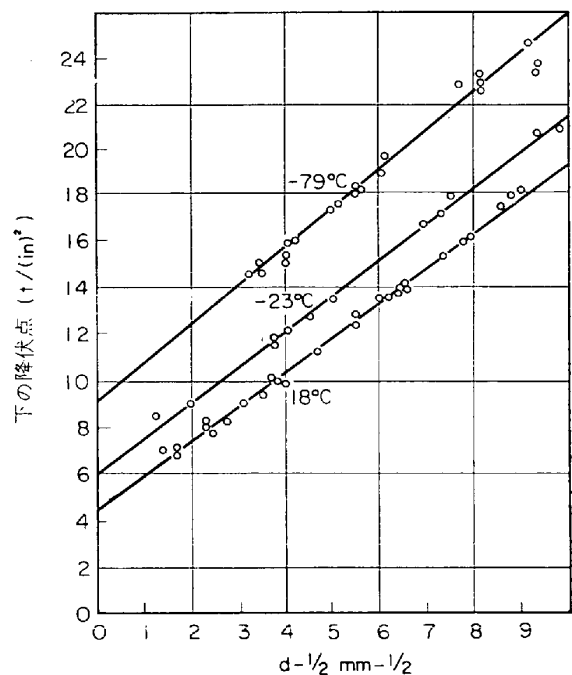
この関係は PETCH¹⁴⁾ によつて実験的に詳細に検討され確立されたので PETCH の関係と呼んでいる。この式の第 1 項は転位の摩擦力によるものであり、第 2 項は結晶境界によるもので、実験条件がかなり変化しても結晶粒の大きさだけに依存する。第 1 項は単結晶中の問題と共通であり、多結晶であるという影響は第 2 項だけにあらわれる。

鉄鋼の場合に面倒なことは多結晶の変形のさいに Lüders 帯が伝わるということである。すなわち試片の一端または数カ所から変形が始まり、変形した領域が広がるという形で初期の変形が進行する。この問題にはあとで触れることにして、まず下降伏点についての実験結果について述べよう。

2) k_y

第 19 図は軟鋼の下降伏点と結晶粒の大きさの関係を示す。(37)式に示されるように降伏応力は $d^{-1/2}$ に比例して増大している。また温度が変化しても傾斜が変わらず k_y が一定であることを示している。このことは多少問題となる点を含んでいるので多少詳しく述べよう。

隣の結晶粒にすべりが誘起される条件として(34)式で



第 19 図 下の降伏点の結晶粒の大きさによる変化 (PETCH¹⁵⁾による)

は転位を作る応力というものを考えた。しかし隣の結晶中にも転位があるから、その転位を動かし始める可能性も考えられる。転位が釘づけになつていて、動かし始めるのに σ_l の力が必要であり、また結晶境界からの距離が δ_l であるならば(36)式は

$$\tau_y = 2\tau_f + 4\sqrt{\delta_l} (\sigma_l - \tau_f) d^{-1/2} \dots\dots\dots (38)$$

と書きかえられる。 σ_l は温度によつて変化すると考えられるのに k_y が温度に依存しないということは、このような機構が存在しないことを意味することになる。なぜ隣の結晶粒中の転位が動き得ないのであるかという理由は、次のような観察から明らかになつた¹³⁾。すなわち、鉄の薄片試料の透過電子顕微鏡観察を行なうと、ふつうに熱処理された鉄中の転位には炭素が析出して炭化物が作られており、COTTRELL の雰囲気として考えられていたものよりはつと強固に転位を釘づけにしているのである。それならば炭素が COTTRELL の雰囲気を作る程度のときはどうであろうか。FISHER¹⁶⁾は C+N が 0.001% の高純度鉄を用い、再結晶によつて結晶粒の大きさが 0.0002 cm から 0.6 cm の間のいろいろな試料を用いて k_y の測定を行なつた。

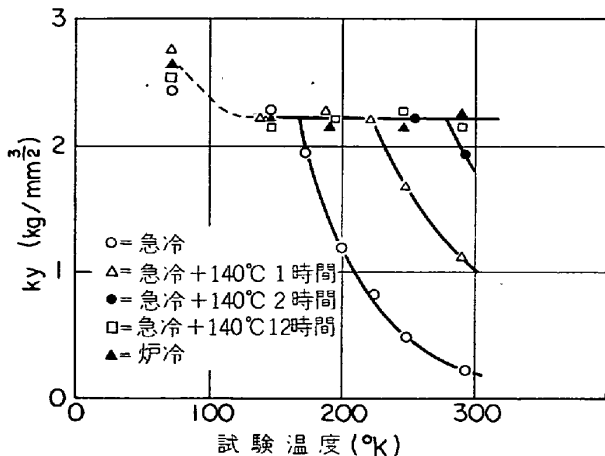
第 20 図に示すように炉冷した試料では、液体窒素温度を除くと一定の値をとる。急冷した試料では Cottrell 雰囲気に釘づけになつている転位の σ_l に期待されるとおりの温度依存を示している。短時間の時効によつて k_y は上昇している。

FISHER の実験で炉冷した試料の k_y の一定の値を k_y^0 とすると $k_y^0 \approx 2.2 \text{ kg/mm}^2$ である。この場合 τ_f は大体無視できるから

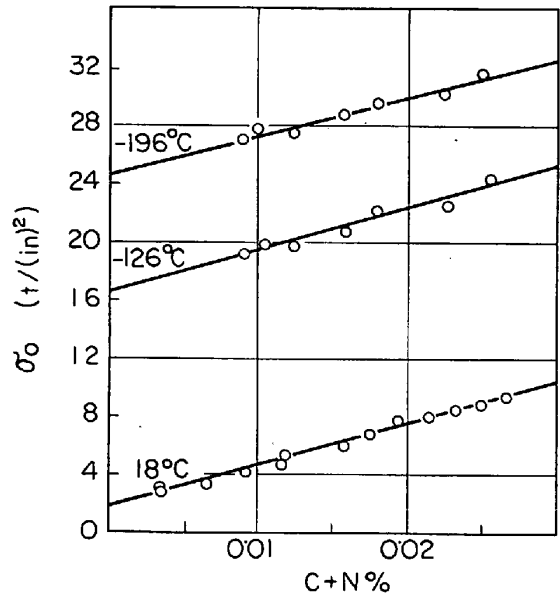
$$4\sqrt{\delta_c} \sigma_0 = 2.2 \text{ kg/mm}^2$$

また σ_0 は μ を剛性率とすると $\mu/20 \sim \mu/10$ の程度であり $\sigma_0 \approx 400 \sim 800 \text{ kg/mm}^2$ となるから $\delta_c \approx 5 \sim 20 \text{ \AA} \approx 2 \sim 8$ 原子距離となる。これは幾分、小さ過ぎるかも知れない。これについては文献 1) に述べたように Lüders 帯を考えると妥当な値に近づく。

ふつうの鉄鋼の降伏強度の結晶粒度に依存する項はこのように結晶境界附近に転位を作る条件から導き出されるので変形速度や変形温度によつて変わらない。第 20 図で液体窒素温度の値だけが異なつているのは双晶変形のためである。すべりが伝わるときには交叉すべりが起



第 20 図 種々の熱処理をした鉄における k_y の温度による変化 (FISHER¹³⁾による)



第 21 図 摩擦力と固溶炭素および窒素量との関係 (HESLOP と PETCH^{16a)}による)

きて隣接する結晶のすべり面が結晶境界で一直線上で出会うようにすることができる。しかし変形双晶は {112} 面に限られるので、結晶境界でうまくつながらぬ。このために(34)式が多少の修正をうけるのである。

3) 摩擦力

摩擦力 τ_f は第 21 図のような測定値から(37)式を用いて求められる。 τ_f と固溶している C+N 量との関係は第 21 図のとおりである。すなわち、実験の範囲においては τ_f は C+N の量に対して直線的に変化する。また τ_f そのものが温度によつていちじるしく変化するのであるが、 τ_f の C+N に対する傾斜は温度によつて変つていない。温度によつて変化するのは τ_f の C+N 濃度に依存しない部分である。

最近の研究では τ_f が第 21 図の結果とかなり異なつていものもある。とくに相異なる点は τ_f と C または N 量との関係で、直線的ではなく、ある濃度で極小を示したりしている。これらの相異点の解決は今後にまたなければならぬ。しかし、多結晶材料の降伏強度、不純物量、変形速度による変化は τ_f の変化にほかならないといえる。もちろん、組成、熱処理などの影響は(37)式の第 2 項にもあらわれるが、それはたんに結晶粒の直径 d を変化させることによつて間接的に影響するの過ぎない。

6. 摩擦力の解析

6.1 一般的な関係

前節で鉄鋼の降伏強度にとつては、転位の運動に対する摩擦力 τ_f が非常に重要であることを述べた。この節で τ_f をもつと詳しく検討する。

摩擦力が温度に強く依存することから、転位は障害物を熱的に活性化されて乗り越えながら移動するのであると考えられる。障害物を乗り越えときに必要な活性化自由エネルギーを $G(\tau, T)$ であらわすと、

$$v = av^* \exp[-G(\tau, T)/kT] \dots\dots\dots (39)$$

で与えられるだろう。 a は1つ山を乗り越えるときに転位の移動できる距離と転位の単位長当りにそのような活性化の起こる場所の数の積である。 ν^* は転位の振動数、 τ^* は有効せん断応力で、外部から加えているせん断応力から温度に依存しない抵抗力を除いたものである。すなわち、 $\tau^* = \tau_f - \tau_\mu$ で与えられる。 τ_μ は転位間の相互作用による抵抗力である。また T は絶対温度、 k はボルツマン定数である。

(39)を(2)に代入して、

$$\dot{S} = Lbav^* \exp[-G(\tau^*, T)/kT] \dots\dots\dots(40)$$

ところで、 $G = H - TS$ とかかれ、 H は活性化エネルギーと呼ばれている。 S は活性化エントロピーである。 CONRAD と WIEDERSICH¹⁷⁾ は(40)を巧妙に変換して、活性化エネルギーを次の項であらわす式を得た。

$$H = -k \left(\frac{\partial \ln \dot{S}/\nu}{\partial 1/T} \right)_{\tau^*} \dots\dots\dots(41)$$

$$= -kT^2 \left(\frac{\partial \ln \dot{S}/\nu}{\partial \tau^*} \right)_T \left(\frac{\partial \tau^*}{\partial T} \right)_\dot{S} \dots\dots\dots(41a)$$

また(40)をかきかえて微分すれば直ちに

$$-\frac{dH}{d\tau^*} = kT \left(\frac{\partial \ln \dot{S}/\nu}{\partial \tau} \right)_T \dots\dots\dots(42)$$

$$= \frac{k \ln(\dot{S}/\nu)}{\left(\frac{\partial \tau^*}{\partial T} \right)_\dot{S}} \dots\dots\dots(42a)$$

ここに $\nu = Lab\nu^*$ であり、 $-dH/d\tau^*$ は活性化体積 v^* である。 ν の値は

$$H = kT \ln(\nu/\dot{S}) \dots\dots\dots(43)$$

または

$$-T \left(\frac{\partial \ln \dot{S}}{\partial \tau^*} \right)_T \left(\frac{\partial \tau^*}{\partial T} \right)_\dot{S} = \ln(\nu/\dot{S}) \dots\dots\dots(43a)$$

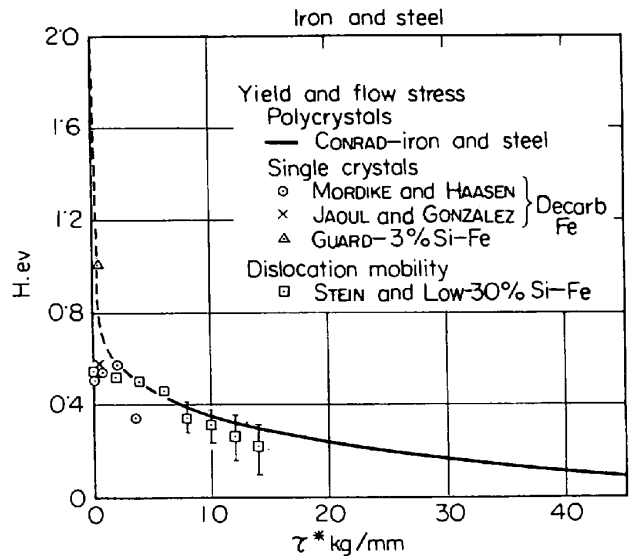
から求められる。

以上の関係式を用いると転位の運動を支配している障壁の性質を示す量が定まり、転位の摩擦力がどのような原因から生じているかを推測することができる。(41)~(43)式の量をきめるのに必要な測定は、変形速度または変形温度をかえたときの変形応力の変化、降伏応力の温度変化である。単結晶については分解せん断応力とすべり量を用いて変形応力および変形量をあらわす。多結晶試料では引張応力の1/2がせん断応力であり、伸びの1.4倍がすべり量であるとしてよい。

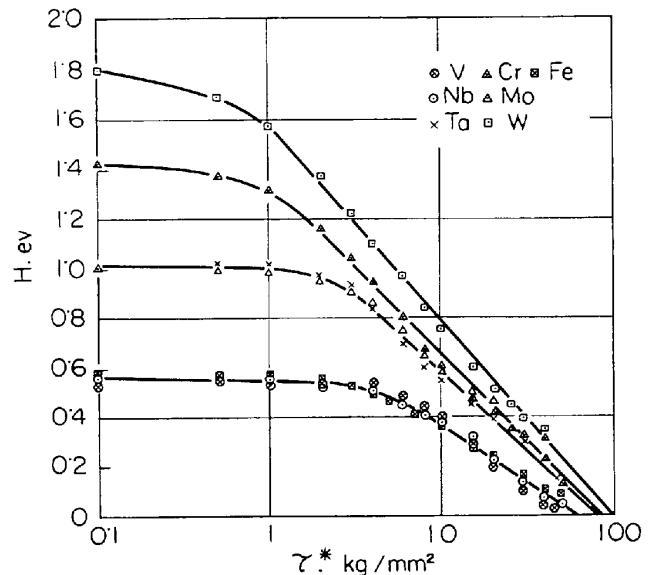
6.2 活性化エネルギー H

CONRAD は上の関係を用いて体心立方金属中の転位の摩擦力を系統的に調べている。その中から鋼の H と τ^* の関係を求めたものを第22図に示す。点はかなり散っているが、他の金属のデータも比較してみると、 H と τ^* の関係はいろいろな測定方法で同一の曲線を与えているとみなされる。 τ^* が零に近づくと H は一定値に近づく。いま $\tau^* = 1 \text{ kg/mm}^2$ に対する H の値を H_0 とすると、体心立方遷移金属では H_0 は大体 $0.1 \mu b^3$ の程度であつた。

応力が增大すると活性化エネルギーは応力の対数に対して直線的に減少する。第23図にいろいろの体心立方金属の多結晶試片を用いて得られた H と $\log \tau^*$ の関係



第22図 鉄および鋼の変形に必要な活性化エネルギーと有効せん断応力の関係(CONRAD¹⁸⁾による)



第23図 B.C.C. 遷移金属の変形に必要な活性化エネルギーと有効せん断応力の関係(CONRAD¹⁸⁾による)

を示す。図は大体2本の直線的な部分からなっている。

6.3 活性化体積

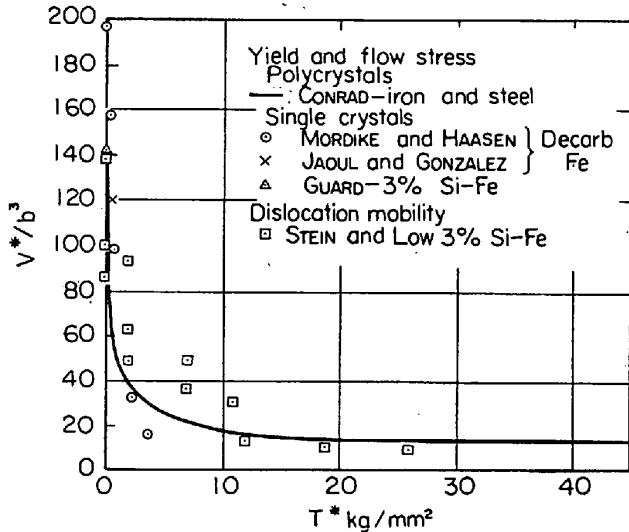
Feの活性化体積 v^* と τ^* の関係を第24図に示す。図には体心立方金属の同じ関係をまとめて示してある。いろいろな金属で得られた関係が同一の曲線を与えているように見える。第25図から、 $\tau^* = 2 \text{ kg/mm}^2$ で v^* は大体 $50b^3$ であり、応力の低下とともに増大し、低い応力では $100b^3$ を越える。また応力を増すと減少して $2 \sim 5b^3$ の値に達することもある。

6.4 頻度因子 ν

頻度因子 ν は試料の純度によつて異なるようなので、第3表に 0.005 wt\% 以下の不純物の場合と 0.02 wt\% 以上の場合において ν の値を示してある。

6.5 摩擦力の原因

以上の結果は鉄中の転位の運動に対する摩擦力 τ_f が



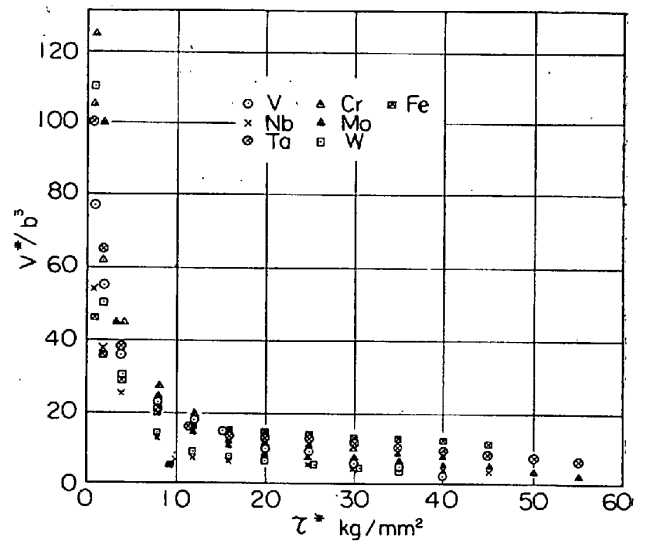
第 24 図 鉄および鋼の変形のさいの活性化体積におよぼす応力の影響 (CONRAD¹⁸)による

他の体心立方金属と同様な特性をもっていることが知られる。したがって体心立方格子をもつ金属中では同じ原因から生じた摩擦力が働いていると考えられる。摩擦力の原因としてこれまでに提案されているものを年代順にならべると次のとおりである。

1. パイエルス力
2. ジョグ
3. 微細析出物
4. 交叉すべり
5. 固溶している格子間不純物

CONRAD¹⁸)はこれらの提案と、摩擦力を特性づける H , v^* , ν などの測定値と比較して、パイエルス力が最も重要であると結論した。

析出物や固溶格子間不純物の影響はもちろんあるが、つねに大きなパイエルス力があつて、それと一緒にそれら



第 25 図 B.C.C. 遷移金属の変形に対する活性化体積におよぼす応力の影響 (CONRAD¹⁸)による)

の影響があるのであると考えなければならぬことを示した。鈴木²⁴)はあとで述べるように、パイエルス力はらせん転位の場合にだけ大きく、刃状転位では小さいと考えた。以下そのような考えで鉄およびほかの体心立方金属の摩擦力 τ_f の性質が説明されることを示そう。

6.6 パイエルス力による摩擦力

パイエルス力というのは1本の転位を含んでいるほかは完全な結晶中で、その転位を動かすのに必要な力である。この場合もちろん熱振動もない—すなわち絶対零度で転位を動かす力である。このような力は転位の位置が1原子距離進むと同じ値をとる周期的なポテンシャルによつて生ずる。転位が1原子距離動けば転位芯を始めまわりの原子の配列は全く同じになるから、転位のポテン

第 3 表 体心立方結晶で測られた頻度因子 ν

金属	著 者	Pure	Impure
Fe	CONRAD ¹⁸)	10^{11}	10^8
	BASINSKI and CHRISTIAN ¹⁹)	10^8
	CONRAD ²⁰)	$10^8 \sim 10^9$
	LEAN, PLATEAU and CRUSSARD ²¹)	$10^8 \sim 10^{10}$
V	CONRAD ¹⁸)	10^6
	CHRISTIAN and MASTERS ²²)	10^{10}
Nb	CONRAD ¹⁸)	10^6	10^8
	CHRISTIAN and MASTERS ²²)	10^8
Ta	CONRAD ¹⁸)	10^8	10^8
	CHAMBERS ²²)	10^7
	CHRISTIAN and MASTERS ²²)	10^{11}
	MORDIKE ²³)	10^9
Cr	CONRAD ¹⁸)	10^9
Mo	"	10^{11}	10^6
W	"	10^{11}	10^7

シャルエネルギーは等しい値をとる。転位のポテンシャルエネルギーを $U(x)$ とすると

$$U(x) = H_p \cos\left(2\pi \frac{x}{a}\right) \dots\dots\dots (44)$$

で与えられる。 x はすべり面上で転位線に垂直な方向にとり、また転位線の方を z 軸にとる。 $2H_p$ はパイエルスエネルギー、 a は最密原子列間の距離である。

すべり面上で $U(x)$ が極大をとる位置 ($x = na, n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$) を実線で、極小の位置 ($x = (n + \frac{1}{2})a$) を破線で示す。転位はエネルギーが極小である位置にまっすぐ伸びているだろう。しかしこれが隣の谷に移るときにはまっすぐなままで移動するには非常に大きな力—ちようどパイエルス力に等しい力—を必要とする。実際には熱振動があるので、一部分が熱的活性化によつて山を越えて隣の谷に達し、第 26 図 c の形をとるだろう。このように転位が彎曲して隣の谷に移つている遷移部分を kink という。c の状態になれば、kink の対は互いに離れる方向に伝わり、転位の全長を隣の谷に移すことができる。したがつて、この場合には a から c に移る途中で b の形状に対応する活性化エネルギー H だけ熱的に活性化されれば、転位が動き得ることになる。

活性化エネルギーをきめる b の形状は次のようにしてきめられる。転位の突出部の移動距離に対して転位のエネルギーをみると、 b の位置はエネルギーが極大になっているが、いろいろな径路のうち一番低い極大である。すなわち、ポテンシャルの山を越えるときの転位の形はいろいろあり得るが、その中で最もエネルギーの低い形をとる。すなわち b の形から少しだけ形がずれるとどちらにずれてもエネルギーが高くなるのであり、また転位の突出部がどちらにずれてもエネルギーが低くなるのであるから、転位線は力学的につり合つた状態になければならない。転位が曲つていると曲率の中心の方へ動こうとする力 E_0/R が働く。 E_0 は転位の張力で単位長当たりのエネルギーを用いればよい。転位の曲りかたが小さければ転位線の位置を $x(z)$ とすると $1/R \approx \partial^2 x / \partial z^2$ とかくことができる。

パイエルス・ポテンシャルによる力は $-dU/dx$ 、外力 τ_a が転位におよぼす力は $\tau_a b$ であるから、転位線は

$$-E_0 \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} = \frac{2\pi H_p}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} + \tau_a b \dots\dots\dots (45)$$

の方程式を満足する。(45)を解いて転位の形状をきめれば、それに対応するエネルギーの増加が H である。しかし(45)を正確に解くことは難しいので SEEGER^{18a)}は近似的な解を求めて次の式を得た。

kink 対を作つてパイエルスポテンシャルの山を乗り越すのに必要なエネルギーは、外力が余り大きくなければ

$$H = H_k \left[1 + \frac{1}{4} \ln \left(\frac{16}{\pi} \frac{\tau_p^0}{\tau^*} \right) \right] \dots\dots\dots (46)$$

で与えられる。ここに H_k は 1 個のキंकを作るのに必要なエネルギーで

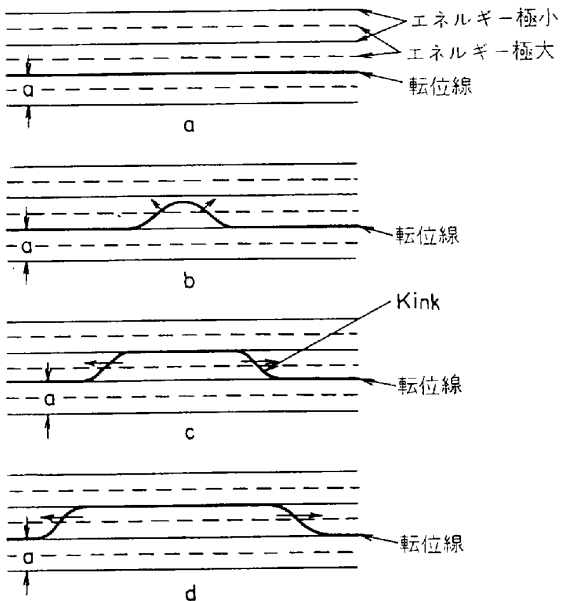
$$H_k = \frac{2a}{\pi} \left(\frac{2E_0 a b \tau_p^0}{\pi} \right)^{1/2} \dots\dots\dots (47)$$

τ_p^0 はパイエルス力である。また

$$H_p = \frac{\tau_p^0 a b}{2\pi} \dots\dots\dots (48)$$

$$= \frac{H_k^2 \pi^2}{16a^2 E_0} \dots\dots\dots (48a)$$

ここに $2H_p$ は単位長当たりのパイエルス・エネルギー、 a は最密原子列間の間隔、 b はバーガース・ベクトルの大きさ、 E_0 は転位線の単位長あたりのエネルギーである。 τ_p^0 の代りに絶対零度に外挿した有効せん断応力 τ_a^*



第 26 図 熱運動によつてパイエルス・エネルギーを乗り越える過程

第 4 表 実験値から求めた H_0, H_k および H_p の値

(CONRAD¹⁹⁾ による)

金属	b Å	μb^3 ergs $\times 10^{-12}$	$H_0(\tau^* = 1 \text{ kg/mm}^2) / \mu b^3$		$H_k / \mu b^3$			$H_p / \mu b^2$ (48)式 $\times 10^{-3}$
			(46) & (47)式より $\times 10^{-2}$	第23図より $\times 10^{-2}$	(46)より $\times 10^{-2}$	(47)より $\times 10^{-2}$	(49)より $\times 10^{-2}$	
Fe	2.48	11.2	7.8	8.3	3.4	3.2	2.7	1.3
V	2.63	9.4	9.5	9.3	3.8	3.9	4.2	1.9
Nb	2.86	9.5	10.7	9.3	3.8	4.4	4.5	2.4
Ta	2.86	16.6	8.9	9.3	3.8	3.6	5.5	1.6
Cr	2.50	17.6	7.8	8.5	3.3	3.1	3.7	1.2
Mo	2.73	25.5	7.6	8.3	3.3	3.0	4.1	1.1
W	2.73	31.5	8.4	8.2	3.2	3.2	4.1	1.3

を用い、 $E_0 = \frac{1}{2} \mu b^2$ とおくと、 $H_0(\tau^* = 1 \text{ kg/mm}^2) \approx 0.1 \mu b^3$ となる。これは表4に示すように測定された H_0 とよく一致する。また(46)を微分すると

$$-\frac{dH}{d\tau^*} = v^* = \frac{1}{4} \frac{H_k}{\tau^*} \dots\dots\dots (49)$$

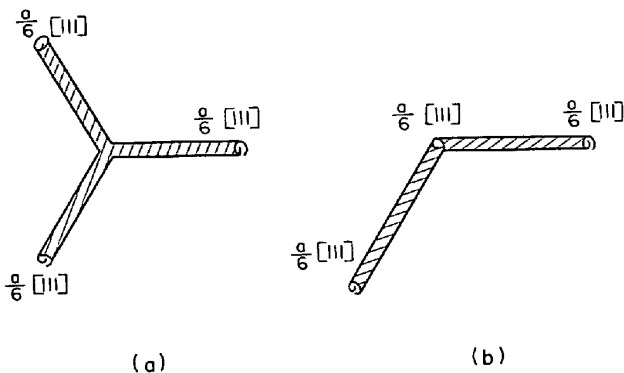
(46), (47), (49)式から求めた H_k が互によく一致し、大体 $3 \sim 4 \times 10^{-2} \mu b^3$ の値をもっている。

頻度因子、活性化体積についてもパイエルス・ポテンシャルを乗り越す模型から計算したものは、 H_p の値を表4のように仮定すれば測定値とよく一致する。すなわち、以上の解析はパイエルス力を仮定しさえすれば、降伏応力の温度変化、変形速度依存性などの測定値を十分に説明できることを示している。それならば体心立方金属では何故パイエルス力が大きいのであるか。次節にこの問題を論じよう。

7. 体心立方金属のパイエルカス

体心立方金属のパイエルス力が大きいと仮定すると、前節まで述べてきたように、低温で降伏点が急に上昇すること、変形応力が非常に大きく変ることを説明できる。それならば体心立方金属のパイエルス力は何故大きいのであるか。その理由についてこれまで十分な解答は与えられていなかったが、次のような可能性が指摘されていた。体心立方構造をもつ金属、とくに第4表にあげたような大きなパイエルス力をもつ金属は、 d 帯が完全にはつまつていない遷移金属である。したがって d 電子が直接イオン間の結合に寄与すると考えることができる。 d 電子による結合は d 軌道と s 軌道の混成軌道関数であらわされるような方向性をもつた結合をするのではないか。このために最密充填ではない体心立方格子を作るであろう。方向性のある結合はダイヤモンド、シリコン、ゲルマニウム²⁵⁾のような共有結合結晶で知られているように、著しくパイエルス力を増大させると考えなければならない。しかし、この考えに従って信頼できる程度の計算を遂行することは、現在の固体電子論にとつては不可能に近い。

第2の可能性は体心立方結晶中のらせん転位の幾何学に基づいている。すなわち、SLEESWYK²⁶⁾は体心立方結晶中のらせん転位 $\frac{a}{2} [111]$ は3本の $\frac{a}{6} [111]$ に分解し、3



第27図 体心立方結晶中のらせん転位の分解、斜線の部分は $\{112\}$ 面の積層欠陥を示す。(b)の方が安定である。

枚の $\{112\}$ 面上に積層欠陥を作つて第27図(a)のように分解することを指摘した。しかし、(a)よりは(b)の形になる方がより安定であることも明らかにされた。

HIRSCHら²⁷⁾はこのように拡張した転位が移動するためには1度収縮しなければならないことを指摘し、それがパイエルス力の原因となり得ると述べている。著者が前に示したように、積層欠陥エネルギーが適当な範囲の値をもつならば、計算されるパイエルス力は測定値の程度となる²⁸⁾。

しかし、著者²⁹⁾が最近指摘したように、体心立方結晶中の積層欠陥エネルギーは非常に高く、転位は拡張しそわない。積層欠陥エネルギーのように測定されたことのない値を都合のよいように仮定することなく、もつと無理のない模型から出発して、体心立方結晶のパイエルス力を計算しようという試みは、最近になつてようやく成功した²⁴⁾²⁰⁾。次に模型、計算方法をやや詳しく述べよう。

8. 体心立方結晶の原子列模型

2個の原子 i, j の間の相互作用ポテンシャル ϕ_{ij} が原子間の距離 r_{ij} だけに依存する場合には結晶のポテンシャルエネルギーは

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi(r_{ij}) \dots\dots\dots (50)$$

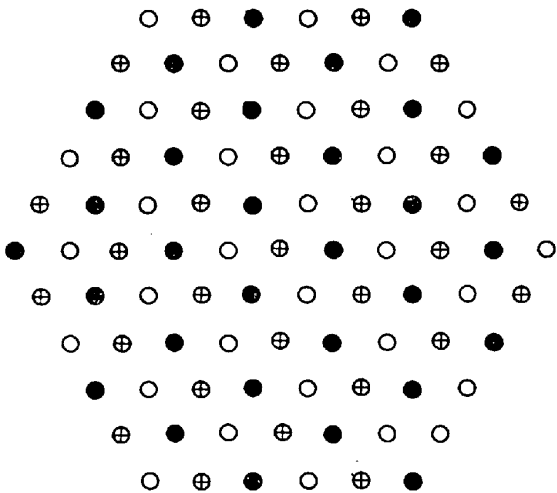
で与えられる。この場合、体心立方結晶が安定であるためには $\phi(r)$ の形はかなり強い制限をうける。原子間の相互作用を(50)の形であらわすこと自体問題があり、体心立方結晶が安定になるように選ばれた $\phi(r)$ の形には、かなり無理があるように思われる。

体心立方結晶が安定になるような最も簡単な相互作用は $[111]$ に平行な原子列を単位に考えた模型を用いるときにあらわれる。この原子列は原子間の間隔が変わらず、また原子列間の間隔も完全な結晶と同じになるよう固定されている。各原子列に許されている自由度は原子列方向への移動だけである。この模型は変位について強い制限をうけているようにみえるけれども、らせん転位の運動を調べたり、積層欠陥、双晶境界のエネルギーを考えるうえには最も適当な模型である。すなわち、これらの場合原子列間の間隔はほとんど変わらないとみなされ、原子列が原子列の方向にだけ変位する過程を考えればよいのである。

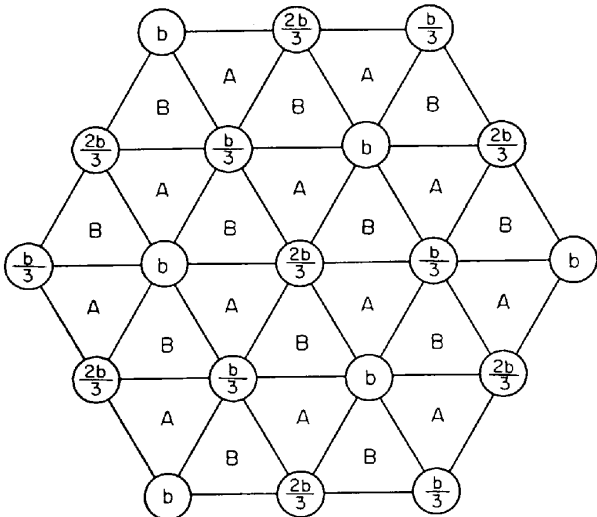
原子列は第28図に示すようにそれぞれ6本の最近接原子列に囲まれて等間隔にならぶ。原子間の相互作用を第2近接原子間にまで考慮する場合でも、原子列間では最近接の6本の原子列との相互作用の中に含まれている。いま $[111]$ 原子列に平行な z 軸をもつ直交座標系を考え、 i 番目の原子列上の1つの原子の z 方向の座標を z_i 、隣接する j 原子列上の原子の座標を z_j とすると、原子列 i, j 間の相互作用エネルギーは $z_i - z_j$ だけの関数で

$$\phi_{ij} = A \cos \left(2\pi \frac{z_i - z_j}{b} \right) \dots\dots\dots (51)$$

と書くことができると仮定する。ここに A は定数、 b は $[111]$ 原子列上の隣接原子間距離である。この式は原子が近づき過ぎると斥力が働き、離れ過ぎると引力になる



第28図 体心立方格子を [111] 方向からみたときの原子列の並び方, 異なつた記号は原子の位置が異なつてゐることを示す。



第29図 体心立方結晶の [111] 原子列の並び方

ことを最も簡単な式であらわしたものに他ならない。

(51)式は $z_i = z_i' + nb$ ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) とおいたとき, n が整数でありさえすれば ϕ_{ij} は同じ値を与える。これは原子列の上には b の間隔で原子がならんでゐるのであるから当然である。したがつて z_i を次の条件を満足するように制限してさしつかえない。

$$0 < z_i \leq b \dots \dots \dots (52)$$

z_i がこの範囲におさまらないときは, n を整数として, $z_i' = z_i - ab$ が (52) の条件を満足するようにすればよい。

完全な体心立方結晶は第 29 図に示すように, z_i が $\frac{b}{3}$, $\frac{2}{3}b$, b の 3 種類の値をとつて規則的にならんでゐる。この結晶を [111] 方向に一様なせん断変形を起こさせるときのエネルギー増加を弾性エネルギーと比較して剛性率がきめられる。剛性率はせん断変形の面がどの面であつても $2\sqrt{3}\pi^2 \frac{A}{b^2}$ で与えられる。他方, 立方結晶の [111] 方向への剛性率 μ は $\frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$ であるから

$$A = \frac{\mu b^2}{2\sqrt{3}\pi^2}, \quad \mu = \frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44}) \dots (53)$$

で与えられる。

9. らせん転位のパイエルスカの計算

原子列模型を用いると, らせん転位のパイエルスカの大きなことが容易に理解できる。らせん転位の中心は原子列から離れているほどエネルギーが低くなり得るので, 第 29 図の A, B という位置をとつて移動すると考えよう。ここで, 互いに最近接位置にある 3 本の原子列の中心の位置を A, B 2 種に分けたのは, A のまわりでは時計の針と逆向きに 3 本の原子列をまわると原子の位置は $\frac{b}{3}, \frac{2}{3}b, b$ と増大している。原子の位置を結びつける曲線は, らせん状につながつてゐる。これに対して B 位置では回転方向を逆にしなないと原子列と原子の位置の変化が同じにならない。すなわち, 原子の位置を結びつけて作られるらせんの向きが A と逆になつてゐる。もしらせん転位を取巻く径路を時計の針の進む方向と逆にとつたとき, 転位の変位が増大するならば, A 位置の芯の原子列は

$$\frac{b}{3} + \frac{b}{3} \rightarrow \frac{2}{3}b, \quad \frac{2}{3}b + \frac{2}{3}b \rightarrow \frac{1}{3}b, \quad b + b \rightarrow b$$

の相対位置をもつており, この 3 本の原子列の間の相互作用のエネルギーは完全結晶のものと一致する。この 3 本の原子列は転位の芯を構成し, もつとも歪エネルギーの高くなるはずの部分であるが, 体心立方結晶中の原子の並び方のために, この部分の歪エネルギーが零になってしまうのである。

これに対して B 位置に, らせん転位がきたときには, 同じ方向に径路をとつて, まわりの 3 本の原子列中の原子の位置は

$$\frac{b}{3} + \frac{b}{3} \rightarrow \frac{2}{3}b, \quad b + \frac{2}{3}b \rightarrow \frac{2}{3}b, \quad \frac{2}{3}b + b \rightarrow \frac{2}{3}b$$

となつて, (51)式から知られるように, この 3 本の原子列は最も高い相互作用エネルギーをもつていて, 完全結晶に比べて, $1.5A \times 3 = 4.5A \approx 0.13\mu b^2$ も高いエネルギーになる。この値は余りにも高すぎるが, その理由は 3 本の原子列も他の原子列と相互作用をもつことを無視しているからである。転位のエネルギーの位置による変化を求めようとすれば, もつと広い範囲の原子列間の相互作用を全部考慮に入れなければならない。

最も簡単なパイエルス・ポテンシャルの計算は z_i に弾性論の解を用いる方法である。すなわち, 完全結晶中の i 原子列上の位置を z_{i0} とし, 転位の中心を原点にとつた極座標を用いると,

$$z_i - z_{i0} = \frac{\theta}{2\pi} b \dots \dots \dots (54)$$

で与えられると仮定する。この解は PEIERLS や NABARRO が用いた計算方法を, らせん転位に適用したものと同一である。

エネルギーの計算には第 30 図に示すような $19 \times 20 = 380$ 本の原子列からなる結晶を考える。この結晶の全エネルギーは

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(i)} \phi_{ij} = \frac{A}{2} \sum_i \sum_{j(i)} \cos \left(2\pi \frac{z_i - z_j}{b} \right) \dots \dots \dots (55)$$

で与えられる。ここに $j(i)$ は i 原子列の最近接原子列の番号をあらわす。(55)の和は電子計算機を用いれば容易に求められる。第 31 図はそのようにして求めたポテンシャル・エネルギーの等高線である。黒丸は原子列の

位置である。3本の原子列の中央の位置は1つおきに極大と極小になっている。すなわち第 29 図のAは極小、Bは極大の位置なのである。この原子列の位置が最も高いエネルギーをもっている。転位の移動が起こる場合には低エネルギーの位置から、矢印の方向に移動し、途中馬の背型の位置を通過しなければならない。馬の背のエネルギーと最低エネルギーとの差は

$$\Delta E = 0.503A$$

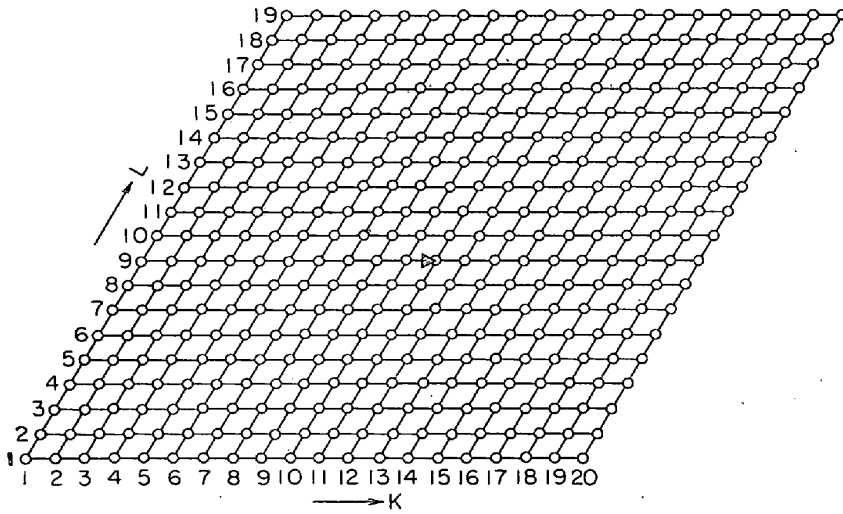
$$A = \frac{\mu b^2}{2\sqrt{3}\pi^2}$$

パイエルス力 τ_p は、したがって

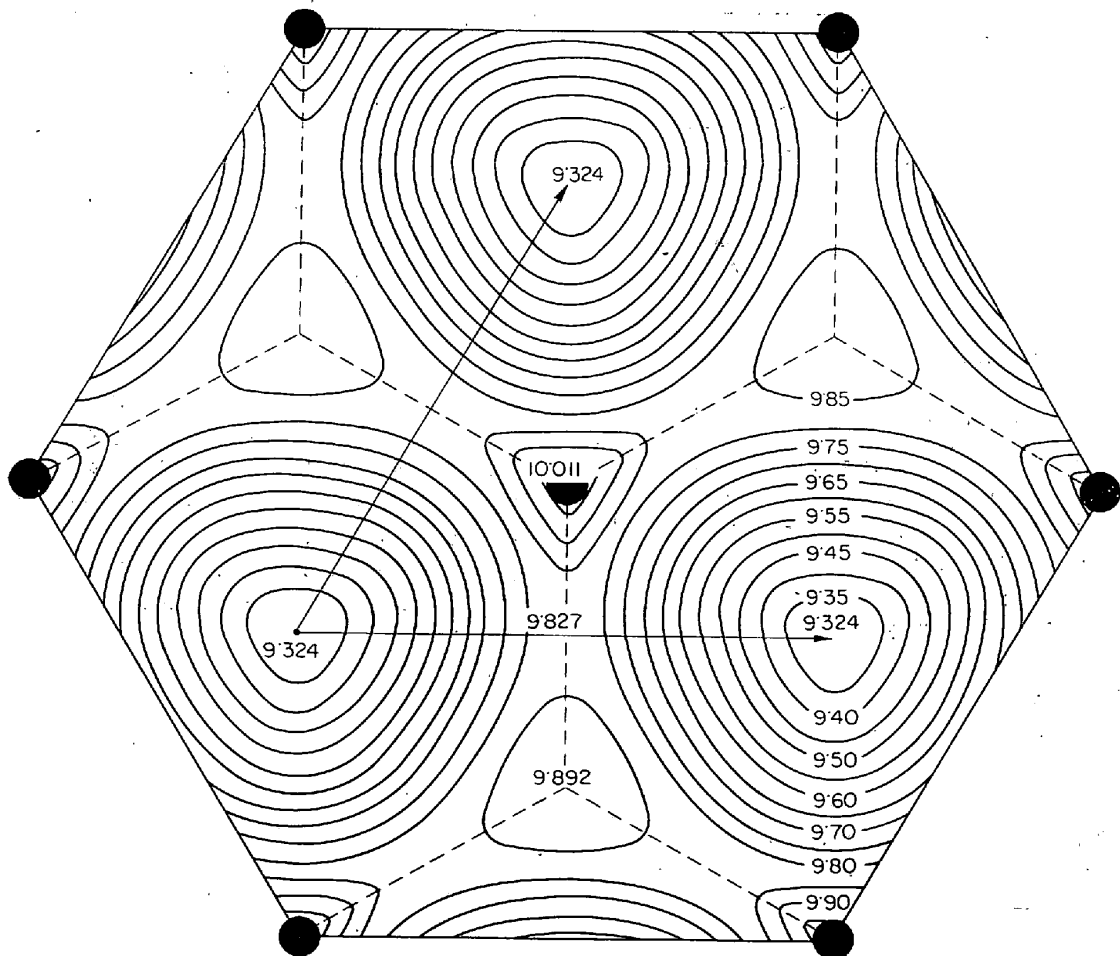
$$\tau_p = 0.049\mu$$

この値は第 4 表の値よりかなり大きく 6~10 倍である。

パイエルス力の計算値が大きくなり過ぎたのは、もちろん、ここで用いた近似の粗いことにも原因がある。原子列間のポテンシャルを簡単にし過ぎたこととらせん転位のまわりの原子列の変位に弾性論の解を用いたことなどである。これらはもつと多数の計算を行なつて検討する必要があるだろう。



第30図 計算に用いられた結晶，中央部の斜線の部分にらせん転位の中心をおいた。



第31図 体心立方結晶中のらせん転位のポテンシャル・エネルギー。黒丸は原子列の位置を示す。

図中の数字はエネルギーの値を示し，単位は $A = \frac{\mu b^2}{2\sqrt{3}\pi^2}$

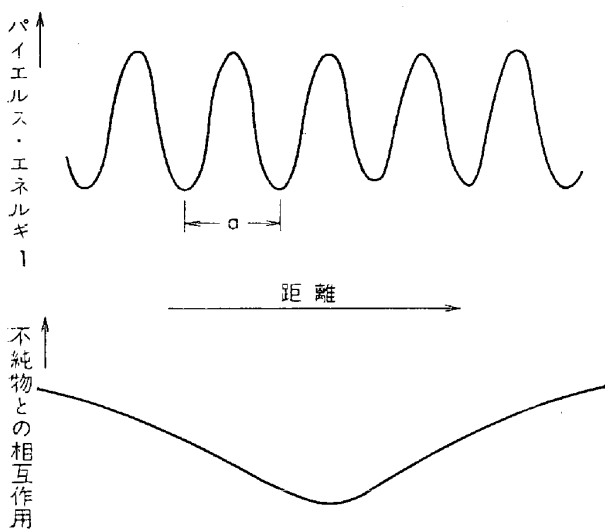
上の計算にはもう一つ重要な項が抜けている。それは零点エネルギーである。上の計算ではポテンシャル・エネルギーの計算をしたが、結晶の絶対零度におけるエネルギーはポテンシャル・エネルギーに零点振動のエネルギーを加えたものである。零点エネルギーは量子力学的な効果として存在するものである。振動数 ν の振動子は最低のエネルギー状態で $\frac{1}{2}h\nu$ の運動エネルギーをもっているがこれを零点エネルギーという。ここに h はプランクの定数である。転位を含む結晶の格子振動の振動数分布が転位の位置で異なれば、それだけ前に計算したポテンシャル・エネルギーに補正しなければならない。

体心立方結晶中のらせん転位に対して零点エネルギーの補正を近似的に計算した結果³⁰⁾によると、Liではポテンシャル・エネルギーの変化を打ち消してしまうことが判った。すなわち、パイエルス力が消失してしまつた。この他のアルカリ金属、遷移金属では零点エネルギーの補正の方が小さく、鉄ではパイエルス・ポテンシャルの13%程度である。

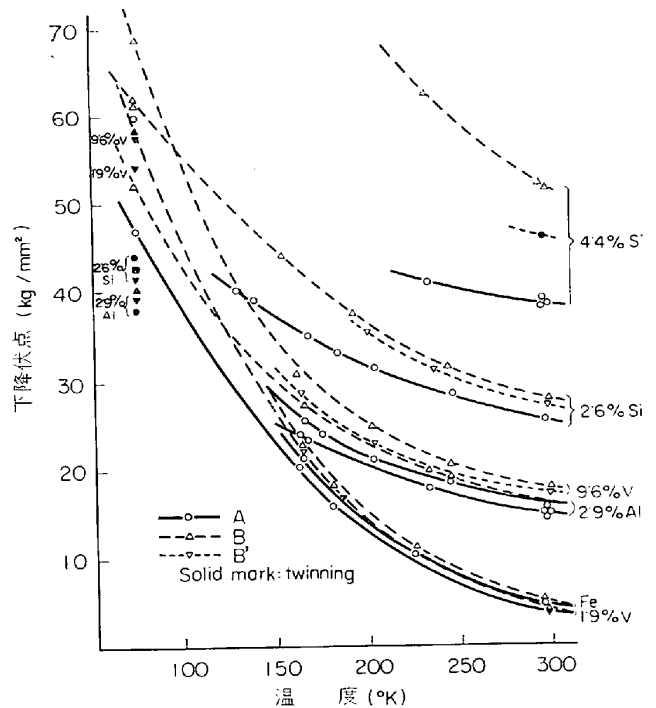
10. 不純物または溶質原子の影響

体心立方結晶中でらせん転位は大きなパイエルス力を与える。このような制限のもとで不純物または溶質原子は変形応力に対してかなり強い影響を与える。不純物または溶質原子の量が余り多くなければ、kink対はそれらの影響のない所で形成されることも可能であるが、kinkは伝播の途中で不純物原子と出会い、移動を妨げられるであろう。転位が進むためには転位の別な場所で独立にkink対を作らなければならない。ところが、らせん転位には定まつたすべり面がないから、kink対の作られ得る面は3つある。独立に作られたkink対が別な面につけるとjogを作ることになる。不純物があると独立に作られるkink対の数が増加するから、jogの数をまして転位の運動に対する抵抗力をます可能性がある。

不純物と転位の相互作用は数原子距離にわたるが、パイエルス・ポテンシャルの働く範囲は $\frac{1}{2}$ 原子距離なので両者のきき方がかなり異なる。すなわち、第32図に示



第32図 パイエルス・エネルギー (10原子長当たり) と不純物が相互作用エネルギーの比較



第33図 鉄合金単結晶の降伏点の測定温度による変化。A, B, B' は結晶方向がそれぞれ特定方向であることを示す (田岡, 竹内, 古林による)

すように、不純物との相互作用のエネルギーは大きい傾斜はゆるいから、力であらわすと小さい。パイエルス・ポテンシャルは割合小さいが、傾斜は大きく力は大きい。低温で熱振動のエネルギーが小さいから、kink対を作るさいに与えられるエネルギーは小さくなる。したがって大きな力を加えて、kink対を作るために必要な活性化エネルギーを減らさなければならない。それだけ大きな力を加えておくと、不純物がkinkの移動をさまたげる相互作用の力に打ち勝つて、kinkが移動できるようになるだろう。とくに置換型の溶質原子は相互作用の力がそれほど大きくないので、低温では溶質原子を加えたことによる硬化はほとんど起きないであろう。

これに対して比較的高温ではkink対を作るのに必要な力は非常に小さくなる。この場合、kinkは溶質原子との相互作用でつかまり、独立にkink対を作つてjogをまし、前に述べたように抵抗力をます。溶質原子の量が多くなると、独立にkink対を作るとみなすことができなくなるかも知れないが、そのときにはkinkが無理に溶質原子との相互作用に打ち勝つて移動すると思えなければならない。溶質原子との相互作用エネルギーが比較的大きいから、kinkを無理に動かすにはかなり大きな外力を加えなければならない。すなわち、比較的高温では溶質原子はかなりの硬化を起こすのである。

田岡ら³⁰⁾は多数の鉄合金単結晶を用いて、合金硬化の系統的な研究を行なつた。降伏点と測定温度の関係は第33図に示すとおりであつて、上に定性的に述べた傾向と一致している。

11. む す び

この解説は入門的な意味をかねるために、定量的な詳細な議論をほとんど入れることができなかつたが、鉄鋼

の強度の基本的な特徴を転位論によつて説明することが可能になつてきたことは理解できたと思われる。ここに述べなかつた詳細な研究は多数積み重ねられているにもかかわらず、現在においても鉄鋼の強度におよぼす不純物の影響を定量的に取り扱う理論はまだでき上つていないだけでなく、 C 、 N のように鋼で最も基本的な溶質原子が摩擦力 τ_f におよぼす影響についての実験結果は、研究者によつて必ずしも一致していないのである。これらの問題は今後の研究の発展に待たなければならない。

文 献

- 1) 鈴木秀次: 鉄と鋼, 50 (1964), p. 2351
- 2) W. G. JOHNSTON and J. J. GILMAN: J. Appl. Phys., 30 (1959), p. 129
- 3) W. G. JOHNSTON: J. Appl. Phys., 33 (1962), p. 2716
- 4) J. J. GILMAN and W. G. JOHNSTON: Dislocations and Mechanical Properties of Crystals, 1957, John Wiley and Sons, p. 116
- 5) G. T. HAHN: Acta Met., 10 (1958), p. 34
- 6) D. F. STEIN and J. R. LOW, JR.: J. Appl. Phys., 31 (1960), p. 362
- 7) A. S. KEH and S. WEISSMANN: Electron microscopy and Strength of Crystals, 1963, Interscience, p. 231
- 8) J. WINLOCK: Trans. AIME, 197 (1953), p. 797
- 9) J. A. HENDRICKSON and D. S. WOOD: Trans. AIME, 50 (1958), p. 498
- 10) T. TAKEUCHI and S. IKEDA: J. Phys. Soc. Japan, 18 (1963), p. 488, p. 1841
- 10a) J. T. MICHALAK: Acta Met., 13 (1965), p. 213
- 11) 例えば佐藤常三, 積分方程式論とグリーン函数, 1944, 柏葉書院, 299 頁以下
- 12) H. SUZUKI: Relation between Structure and Strength in Metals and Alloys, 1963, Her Majesty's Stationery Office, London, p. 519
- 13) A. H. COTTRELL: Relation between Structure and Strength in Metals and Alloys, 1963, Her Majesty's Stationery Office, London, p. 455
- 14) N. J. PETCH: J. Iron Steel Inst., 173 (1953), p. 25
- 15) N. J. PETCH: Phil. Mag., 3 (1958), p. 1089
- 16) R. M. FISHER: Deformation of Iron, 学位論文, Cambridge 大学 (1962); 文献 (13) をみよ
- 16a) J. HESLOP and N. J. PETCH: Phil. Mag., 1 (1956), p. 866
- 17) H. CONRAD and H. WIEDERSICH: Acta Met., 8 (1960), p. 128
- 18) H. CONRAD: Relation between Structure and Strength in Metals and Alloys, 1963, Her Majesty's Stationery Office, London, p. 475
- 18a) A. SEEGER: Phil. Mag., 1 (1956), p. 651
- 19) Z. S. BASINSKI and J. W. CHRISTIAN: Aust. J. Phys., 13 (1960), p. 299
- 20) H. CONRAD: J. Iron Steel Inst., 198 (1961), p. 364
- 21) J. B. LEAN, J. PLATEAU and C. CRUSSARD: Mem. Sci. Rev. Metall., 56 (1959), p. 427
- 22) See 18)
- 23) B. L. MORDIKE: Zeit. f. Metall., 53 (1962), p. 586
- 24) 鈴木秀次: 第 13 回応用物理学関係連合講演会第 21 回日本物理学会年回合同講演会予稿集, 1966 年 4 月, 第 5 分冊, p. 86
- 25) H. SUZUKI: J. Phys. Soc. Japan, 18, Suppl. 1 (1963), p. 182
- 26) A. W. SLEESWYK: Phil. Mag., 8 (1963), p. 1467
- 27) T. E. MITCHELL, R. A. FOXALL and P. B. HIRSCH: Phil. Mag., 8 (1963), p. 1895
- 28) 鈴木秀次: 「軟鋼の塑性」金属学会セミナー・テキスト, 1965 年, p. 51
- 29) 鈴木秀次: 「積層不整と回析現象」物性研短期研究会予稿, 1966 年 1 月, p. 139
- 30) 鈴木秀次: 「続・格子欠陥と金属の機械的性質」金属学会セミナー・テキスト, 1966 年, 第 6 章
- 31) 田岡忠美, 竹内 伸, 古林英一: 日本物理学会第 20 回年会予稿集, 3, 物性 I, 1965 年 10 月, p. 339