

3. 単結晶の塑性変形 (2)

前回の講義で単結晶の塑性変形のしやすさは、応力軸方向とすべり面及びすべり方向の関係（シュミット因子：Schmid factor）に依存することを述べた。今回は、単結晶の塑性変形の理解を深めるために、結晶方位を表現するステレオ投影（stereographic projection）の読み方を学習し、それを基に単結晶の塑性変形の方位依存性を考える。

2.1 ステレオ投影図

ステレオ投影図は結晶内における特定の方向や面を3次元（立体）から2次元（平面）に変換して表す図面である。その作成方法の原理は以下の通りとなる。

1. 結晶の中心を球の中心に置き、原点 O とする3次元座標 (x, y, z) を定める。
2. 原点から結晶の各面の法線を描き、その法線が球面と交わる点（図 3.1 (a)の点 P ）を求める。
3. 球と法線の交点を xy 平面に投影する（図 3.1 (a)の点 P' ）。

図 3.1 に、結晶と実空間（しばしば結晶座標系と材料座標系として定義される）の関係を示す。ステレオ投影された結晶の方位を定性的に理解するためには、透明な半球の中心に結晶が居る（図 3.1 (a)）ことを想像し、自分はその球を真上（図 3.1(a)の N 方向）から眺めていると解釈すればよい。中心に立っている結晶がある方向 $[h k l]$ を指し、その方向と球面が交わる点に印（図 3.1 (a)の点 P ）をつける。その球を真上から眺めている自分は赤道を含む面上（球中心の xy 平面上）に投影し、印（図 3.1 (a)の点 P' ）をつける。この印を極（pole）と呼び、その球中心の xy 平面上に描いた円がステレオ投影図である。ステレオ投影図上の中心と極との距離は、 N と極との角度 (ϕ) と球の半径 R を用いて、 $R \tan(\phi/2)$ で表される（図 3.1）。

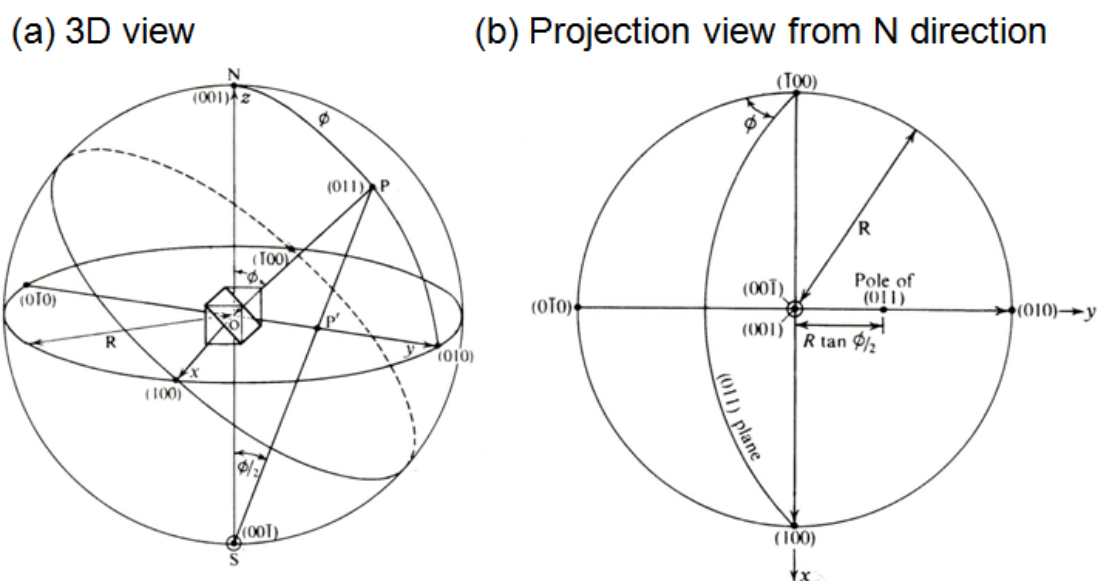


図 3.1 ステレオ投影による結晶面の投影：(a) 3次元図，(b) xy 平面に投影した2次元図[2]

なお, 図 3.2 に示すように, ステレオ投影による方位は, O 点から結晶面の法線と球面とが交わる点 P と S 極を結んだ線上に投影されるもの (図 3.2 の P'_s) である. しばしば, O 点から結晶面の法線と球面とが交わる点をそのまま xy 平面に投影する方法 (図 3.2 の P'_o , P'_G) と混同されがちであるため, 注意が必要である.

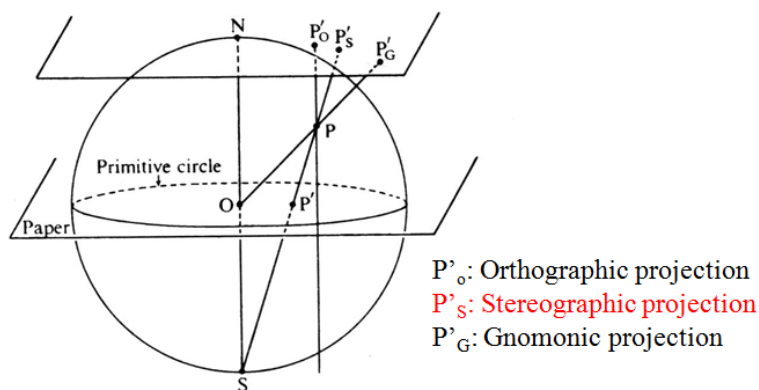


図 3.2 ステレオ投影による結晶方位の投影方法[2]

ステレオ投影された点と点の角度を簡便に測定するため, ある角度毎にステレオ投影した点を結んだ軌跡を表示したもの (図 3.3 (a)) を使用する. これをウルフネット (Wulff net) と呼ぶ (図 3.3(b)). このウルフネットとトレーシングペーパー (透かし紙) を重ねることによって, ステレオ投影された 2 点間の角度を簡便に測ることができる.

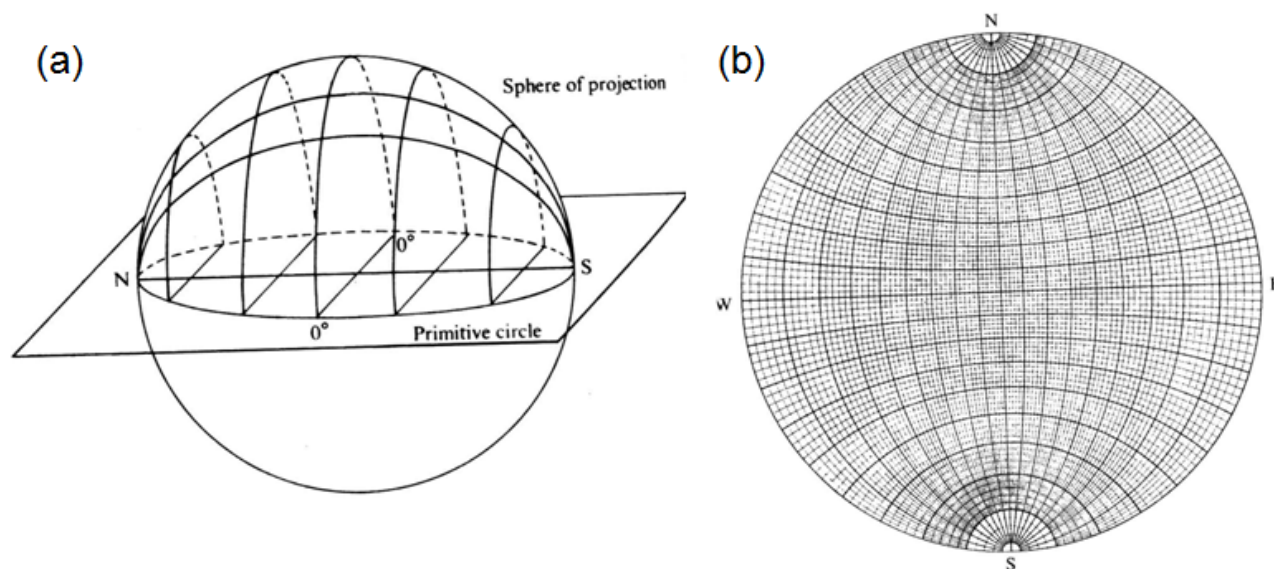


図 3.3 (a) ある角度毎にステレオ投影した点を結んだ線の模式図[2] と (b) ウルフネット

3.2 すべりと結晶方位の関係

図 3.4 (a)に, 立方晶 (単位胞 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) における低指数面 (面法線方向) のステレオ投影図を示す. このような結晶の重要な面をステレオ投影したものを**標準ステレオ投影 (standard stereographic projection)**とも呼ばれる. これに対応する結晶内の{001}面と{011}面の配置を示した模式図を図 3.4 (b, c)に併せて示す. これより, ステレオ投影によって示された結晶面法線方向と実際の結晶の面方位との対応を理解できる.

立方晶 (単位胞 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) において, 面法線方向の角度は直交座標系のベクトル間の角度, すなわち指数の内積を用いて求められる. すなわち, 方位 $\mathbf{A} (h k l)$ と方位 $\mathbf{B} (u v w)$ の面法線方向の角度 θ (すなわち面同士の角度) は次式によって求められる.

$$\theta = \cos \left(\frac{hu + kv + lw}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}} \right)^{-1} \quad (3.1)$$

上式より, 垂直の関係を持つ方位は指数の内積が 0 となるのは自明である. ただし, この条件は単位ベクトルが 1 かつ直交座標系で表される立方晶系 (すなわち, 単位胞 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) でのみ適用可能であることに注意が必要である. これを用いて[100]極を例にとると, その極に垂直な方向を結んだ軌跡 (Fig. 3.4 (a)の左から[0-10] \rightarrow [0-21] \rightarrow [0-11] \rightarrow [0-12] \rightarrow [001] \rightarrow [012] \rightarrow [011] \rightarrow [021] \rightarrow [010]を結んだ線) を結ぶ. これらの指数との内積は必ず 0 である. 一般に回転軸に対応する指数 (この場合[100]) を用いて, [100]の**晶帯軸 (zone axis)**と呼ぶ.

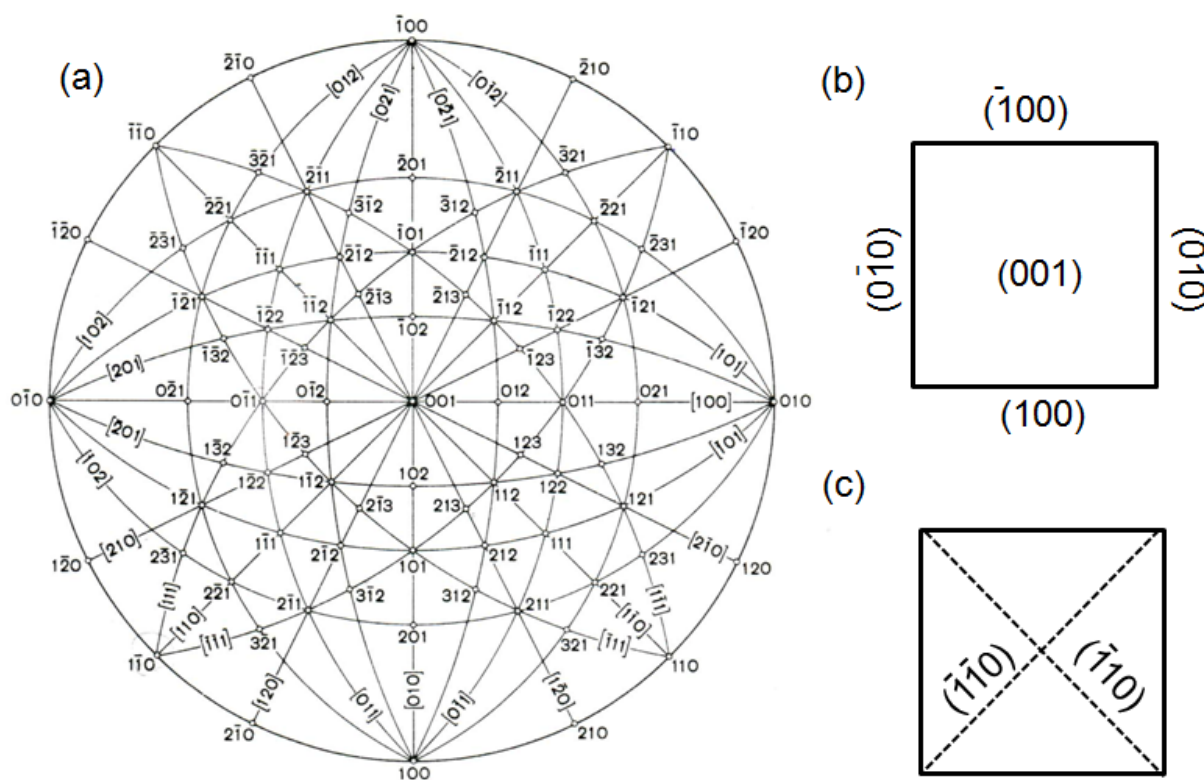


図 3.4 (a) 立方晶における低指数面 (面法線方向) のステレオ投影図[2]と(b) 結晶内の{001}面と{011}面の配置

図 3.4 (a)のステレオ投影図上に (001)-(011)-(111)を結んだ三角形 (標準ステレオ三角形) を描くことができる. この三角形を異なる符号の組み合わせで分類すると, ステレオ投影図上に 24 個の三角形が存在することが分かる. これを分かりやすく示したものが図 3.5(a)である (図 3.4 (a)と図 3.5 (a)は上下逆になっていることに注意). このことは, 立方晶系における方位 $\langle hkl \rangle$, $\{uvw\}$ には等価な 24 種の方位 $[hkl]$, (uvw) が存在することを意味する.

ステレオ投影図上に応力軸方向 (この場合, 引張方向) をプロットすると, 結晶のどのすべり系が働くか容易に理解することができる. ここで, すべり面 $\{111\}$ 及びすべり方向 $\langle 011 \rangle$ を持つ面心立方晶を考える. (001)-(011)-(111)を結んだ標準ステレオ三角形内に引張方向があると定義すると (図 3.5 (b)), 主すべり系, すなわちシュミット因子が最も大きなすべり系は(11-1)面及び[101]方向となる (すべり面法線方向と引張方向の成す角度 ϕ とすべり方向と引張方向の成す角度 λ が最も 45° に近くなる組み合わせのすべり系). 特に, 前回講義で述べたシュミット因子に関わる ϕ と λ (図 3.5 (c)) がステレオ投影図上で図 3.5 (b)のように表されることを理解して頂きたい.

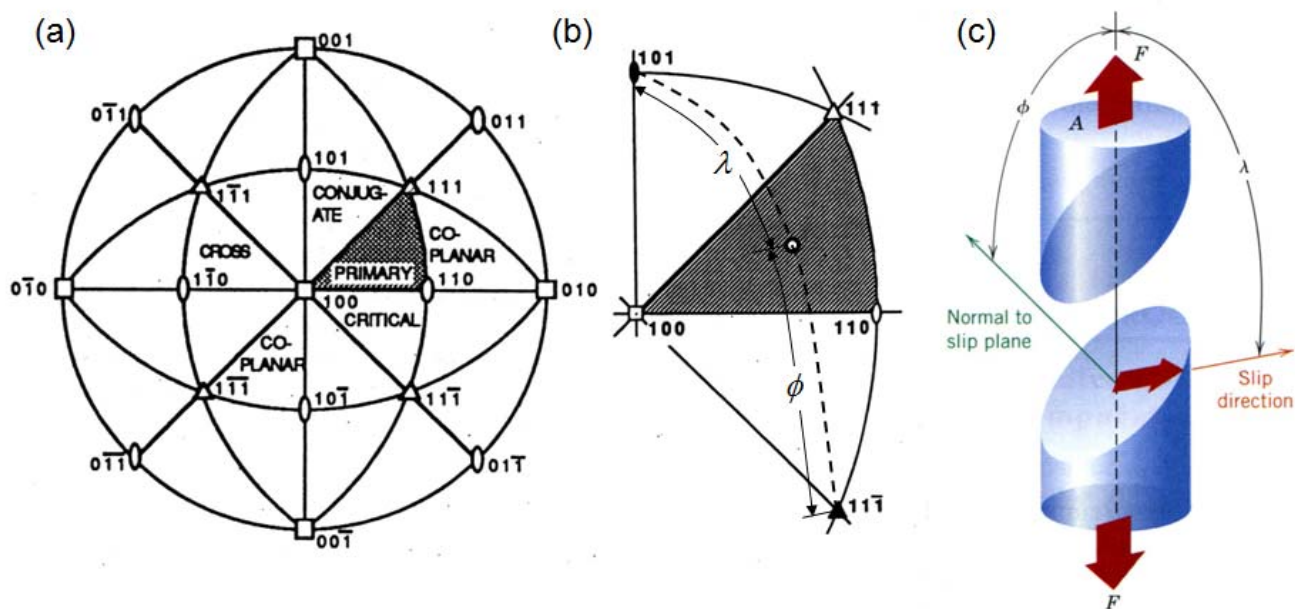


図 3.5 (a) 立方晶の標準ステレオ投影図[3]と

(b,c) すべり面法線方向と引張方向の成す角度 ϕ とすべり方向と引張方向の成す角度 λ [1,3]

したがって, 立方晶のすべりの容易さ (シュミット因子の大小) は引張方向によって変わることがわかる. この理解を基に, ϕ と λ の異なる引張方向を標準ステレオ三角形を含むステレオ投影図上に示す場合, シュミット因子の等高線を描くことができる. 図 3.6 に, 面心立方晶のシュミット因子の等高線を示す. 標準ステレオ三角形内の高指数の方位が, シュミット因子最大の 0.5 を示すことがわかる.

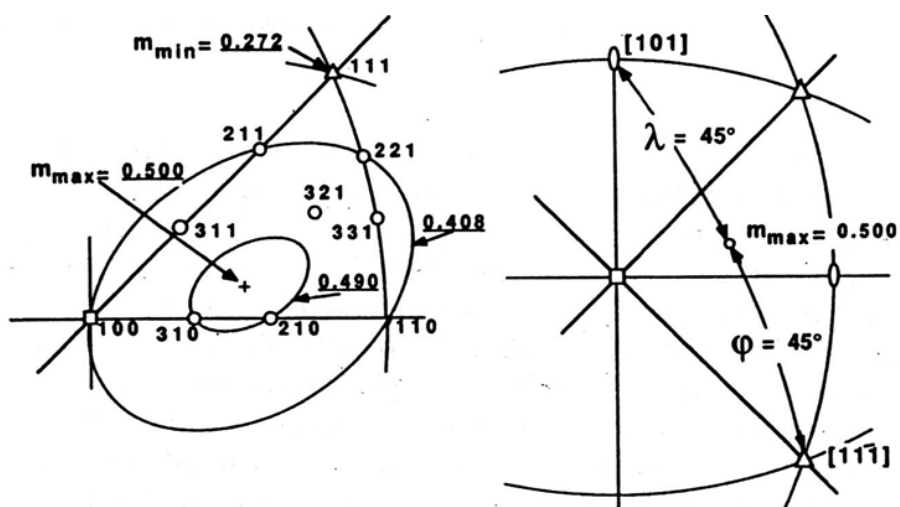


図 3.6 標準ステレオ投影図に表示した面心立方晶のシュミット因子の等高線[3]

単一のすべり系の活動で単結晶の引張変形が進行すると、理想的（試験片両端が固定されていない場合）には一方向にせん断した形状となる（図 3.7 (a)）しかし実際の引張試験において、試験片の両端は固定されている。そのため、上下方向のみの変位を賄う必要であり、すべり面上のせん断（すべり変形）に結晶の回転が伴う（図 3.7 (b)）。図 3.7(b)から定性的に理解できるように、引張方位はすべり方向に近づく。（圧縮変形の場合はこの逆の方位変化を示し、圧縮方位は変形に伴ってすべり面方位に近づく。）この方位回転は、すべり面法線方向と引張方向の成す角度 ϕ は増大し、すべり方向と引張方向の成す角度 λ は減少することに対応する。Al-Cu 合金単結晶（面心立方晶構造）の引張変形に伴う引張方向の変化を実験的に求めた結果[4]を、図 3.7 (c)に示す。これより、最もシュミット因子の高いすべり方向（ $[-101]$ 方向）に方位が変化していることは明らかである。

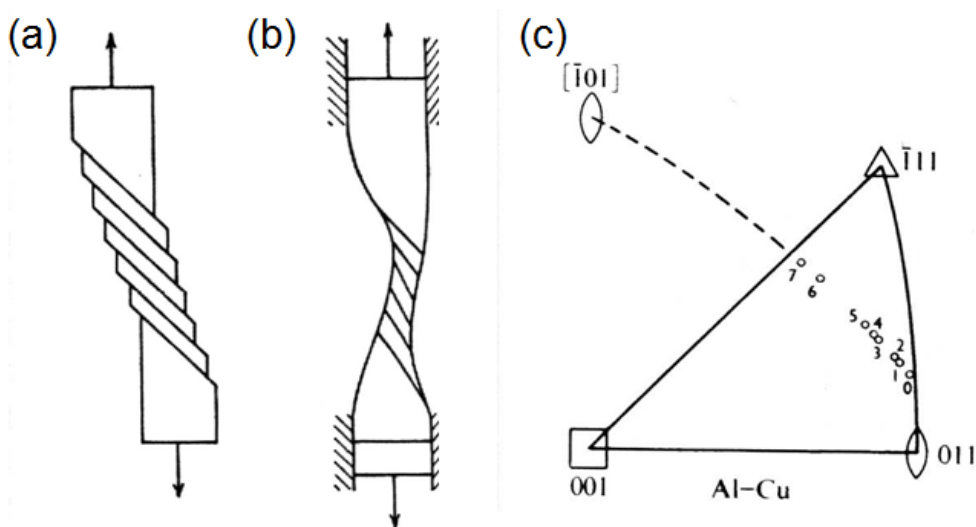


図 3.7 (a) 理想的な引張と(b) 両端固定された引張による単結晶試験片のすべり、
(c) Al-Cu 合金単結晶（面心立方晶構造）の引張変形に伴う引張方向の変化[4]

当然であるが、引張変形に伴う方位の変化（すなわち結晶回転）から試験片のひずみを求めることができる。引張変形前後におけるすべり面法線方向と引張方向の成す角度をそれぞれ ϕ_0, ϕ (図 3.8 (b)) とし、引張変形前後におけるすべり方向と引張方向の成す角度をそれぞれ λ_0, λ (図 3.8 (c)) とすると、すべり起因するせん断ひずみ γ は以下のように表される。

$$\gamma = \frac{\cos\lambda}{\cos\phi} - \frac{\cos\lambda_0}{\cos\phi_0} \quad (3.2)$$

(3.2)式を用いて、引張変形前後の試験片長さをそれぞれ l_0, l と定義する (図 3.8 (b, c)) と、引張変形により付与されたひずみ ε は以下のように表される [3]。

$$\varepsilon = \frac{l}{l_0} - 1 = (1 + 2\gamma\cos\phi_0\cos\lambda_0 + \gamma^2\cos^2\phi_0)^{1/2} - 1 \quad (3.3)$$

(3.3)式は単結晶内の方位変化によってひずみを評価することができるものであり、多結晶体中の個々の結晶粒内部のひずみを評価する場合に有効である。

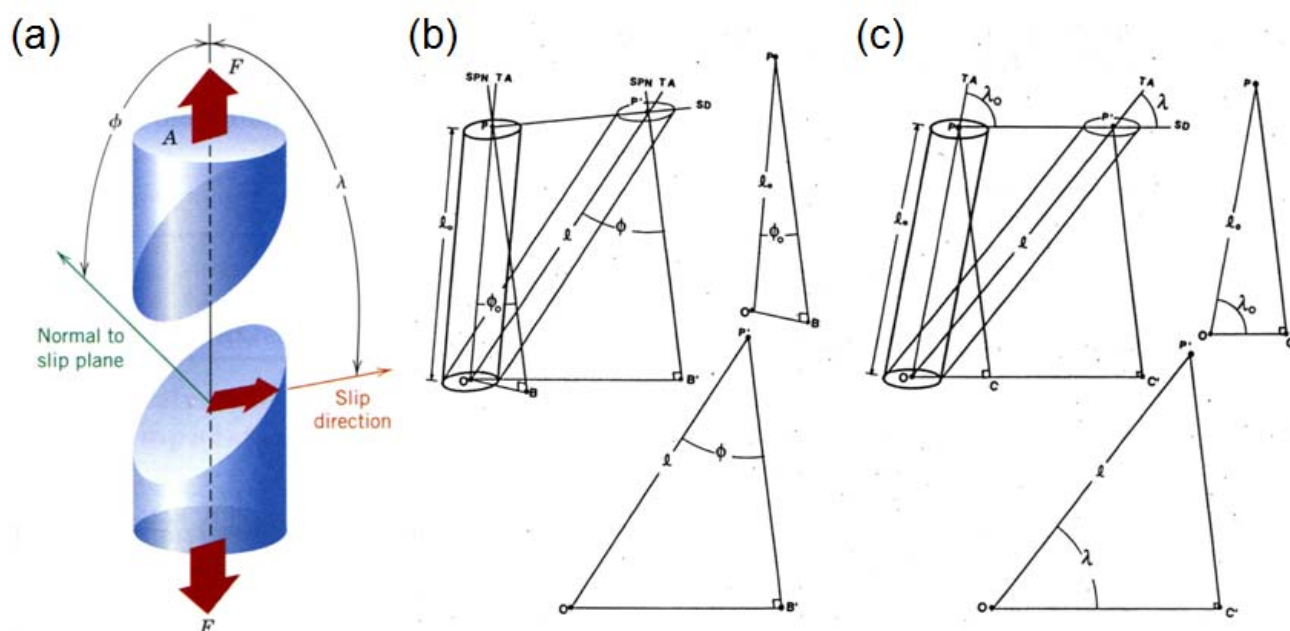


図 3.8 引張変形に伴う引張方向とすべり面法線方向 (ϕ_0, ϕ) 及びすべり方向 (λ_0, λ) との成す角度の変化と試験片長さ (l_0, l) の変化 [1,3]

参考図書

- [1] Materials Science and Engineering 8th edition, William D. Callister and David G. Rethwisch, Wiley (2011).
- [2] Crystallography and Crystal Defects, Anthony A. Kelly, Kevin M. Knowles, Wiley (2012).
- [3] The Mechanics of Crystals and Textured Polycrystals, William F. Hosford, Oxford University Press (1993).
- [4] Mechanical Behavior of Materials, William F. Hosford, Cambridge (2010).
- [5] 金属物理学序論, 幸田 成康, コロナ社 (1973).