4. 多結晶の塑性変形

4.1 多結晶の変形

これまで単結晶の塑性変形を理解してきたが，一般の金属材料は複数の単結晶から成る多結晶（polycrysltal）である．多結晶における異なる結晶の配列（**結晶方位**：crystal orientation）を持つ**結晶粒**（crystal grain）の境界は，**結晶粒界**（grain boundary）と呼ばれる．図 4.1 に，微視的観点（原子レベル）における多結晶体の模式図を示す．図中の正方形で示される格子の単位胞の傾きで表現されるように，結晶 A と結晶 B は結晶の配列する向き（結晶方位）が異なる．その隣合う結晶粒の方位の相対的な差（この場合，角度で表す）は，結晶方位差（misorientation）と定義される．特に，方位差 15°以上を持つ粒界を大角粒界（high angle grain boundary），方位差 15°未満の粒界を小角粒界（low angle grain boundary）と定義される．

以上のように，多結晶体は様々な方位を持った単結晶（結晶粒）から構成されている．したがって，各結晶中の各すべり系の活動のしやすさ（シュミット因子の大小）には優劣があるため，多結晶体の変形には不均一性が生じる．

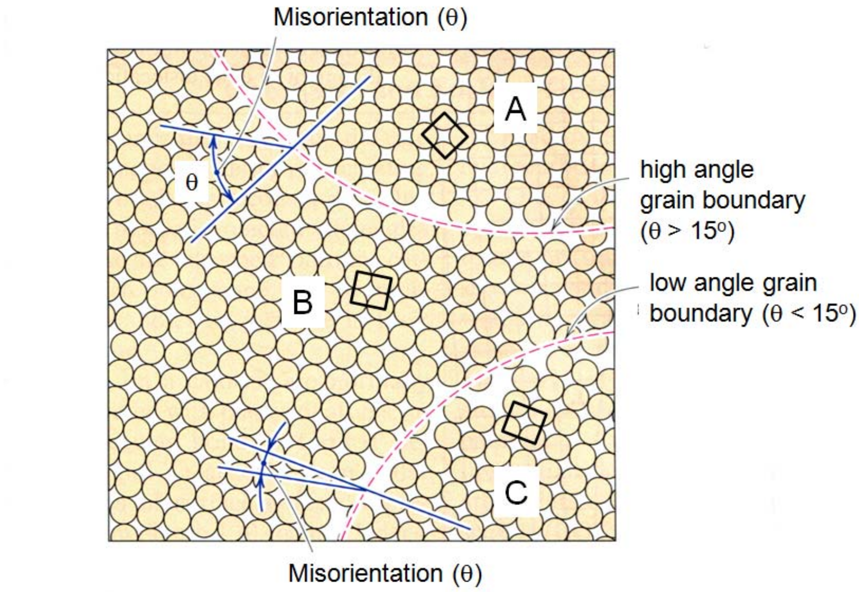

図 4.1 微視的観点（原子レベル）における多結晶体と結晶粒界の模式図[1]

単結晶を変形させる場合，変形はひとつの優先的なすべり系に沿って生じる．しかし，多結晶体における各々の結晶粒はそれぞれ異なる結晶方位を持つため，引張方向と結晶方位の関係は結晶粒毎に異なる．単結晶は優先的なすべり系の活動によって変形や回転を起こすが，多結晶体の粒界近傍において"空隙"や"重なり"を生じてしまう．図 4.2 に示すように，実際の多結晶体において，粒界部での変位の連続性を満足するように個々の結晶粒の変形が生じている．（例えば，多結晶中のある結晶（粒）にすべりが生じても，すべりは結晶粒界で止まってしまう（図 4.2(c)参照）.）

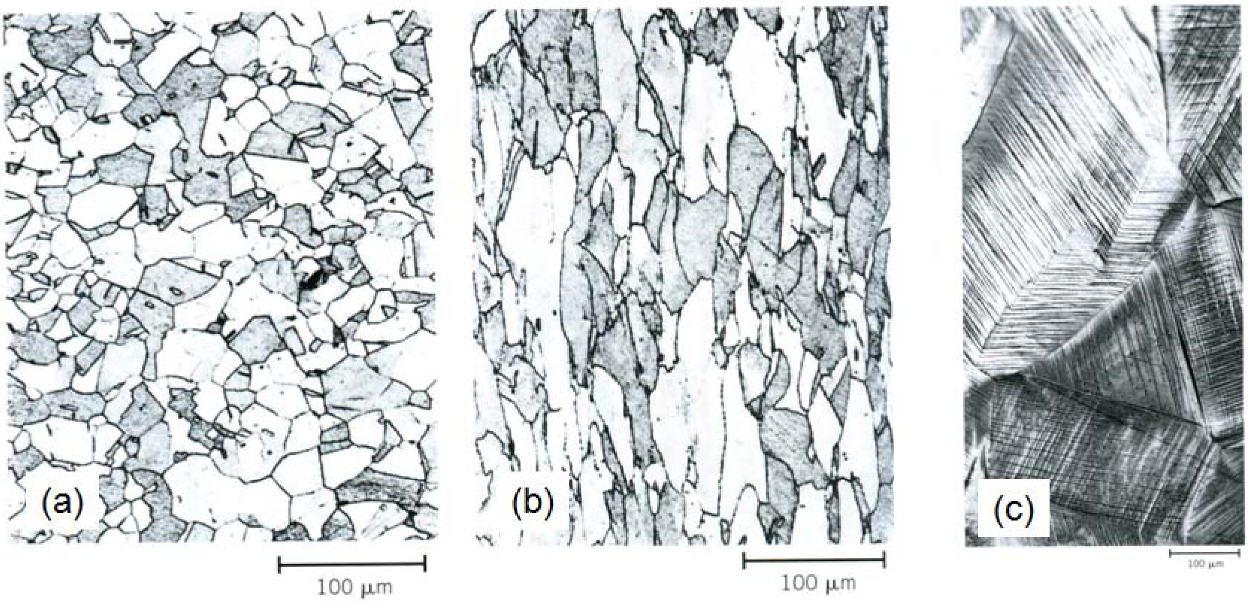

図 4.2　多結晶試験片における(a)引張変形前の組織と(b)引張変形後の組織及び(c)試験片表面に観察されるすべり線[1]

多結晶体の変形を考える場合，結晶粒界の拘束（constrain）を考慮する必要がある．粒界の拘束を満足させる（すべりによる塑性変形が粒界を横切って連続する）ためには，固体における 6 個の独立成分を持つひずみ（式(4.1)）を考慮すると，任意の 6 個の塑性ひずみ成分（ε_{xx}，ε_{yy}，ε_{zz}，ε_{xy}，ε_{xz}，ε_{yz}）が必要となる．固体の変形に関するひずみテンソルの詳細については，2 年次の材料力学の内容を参考にされたい[2].

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

これによって，結晶を任意の形に変形させる条件を満たす．一方，すべり変形は体積変化を伴わないことから，体積不変条件（$\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz} = 0$）を満たす必要がある．そのため，すべり変形における独立な塑性ひずみ成分は 5 個となる。従って、結晶を任意の形に変形させるためには，少なくとも 5 個の独立なすべり系が必要となる．これを，フォンミーゼスの条件（von Mises' condition）という．

fcc や bcc のような対称性の高い結晶は独立なすべり系を多数含み（表 2.1），フォンミーゼスの条件を満たすことは容易であると考えられる．例えば HCP 結晶の場合では，底面すべり（(0001)面）だけだと独立なすべり系は 3 つしかない（表 2.1）。したがって HCP 多結晶体が変形の連続性を確保するためには，柱面すべり（(10-10)面）や錐面すべり（(10-11)面）が活動する必要がある．しかし，これらの活動は底面すべりよりも困難である．このように対称性の低い結晶は独立なすべり系の数が少なく、フォンミーゼスの条件を満たすことが困難なため, fcc や bcc の金属に比べて小さなひずみで破壊に至ってしまう（延性が低い）.

4.2　粒界強化（結晶粒微細化強化）

一般の金属材料は複数の結晶粒から成る多結晶である．この金属材料を強化するためには，塑性変形を担う転位のすべりを抑制する必要がある．（すべりに要する応力を増大させる）その強化方法には，固溶強化，転位強化，析出強化（分散強化も含む），粒界強化の 4 つに分類される．先ず，多結晶体の**粒界強化**（grain boundary strengthening），すなわちすべりによる塑性変形に及ぼす結晶粒界の役割について述べる．

結晶粒界（grain boundary）は，異なる結晶方位を持つ隣接粒間の境界である．通常，ある結晶粒中のすべり面は粒界を挟んで不連続であり，通常転位は粒界を通り越えて移動できず，障害となる（図 4.3(a)）．一般に，材料の降伏強度 と平均結晶粒径 d の間は，次式のホール・ペッチの式（Hall-Petch relationship）が経験的に成り立つことが知られている（図 4.3(b)）．

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \tag{4.2}$$

ここで，σ_y は降伏応力，σ_0 は摩擦応力，k は結晶粒界のすべりに対する抵抗示す定数である．この関係は，材料の結晶粒径が小さくなると大きな面積の結晶粒界（転位運動の障害として作用する）を含むためと定性的に理解できる．したがって，本強化機構は，**結晶粒微細化強化**（strengthening by grain refinement）とも呼ばれる．

この関係は，単相材料（単一の結晶構造を持つ材料）において降伏応力だけではなく，一定ひずみの時の変形応力についても成り立つ（図 4.4 (a)）．また，第二相が析出した二相合金においても比較的良く成り立ち，固溶元素によってホール・ペッチの式の k（結晶粒界のすべりに対する抵抗）は増大することも知られている（図 4.4 (b)）．

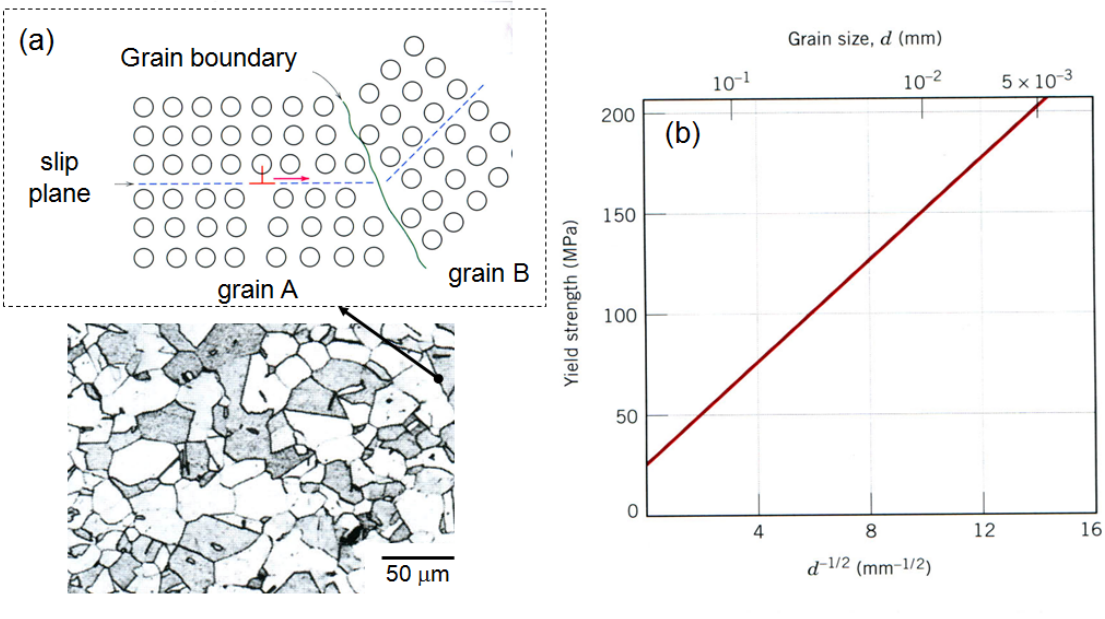

図 4.3 (a) 結晶粒界とすべり面の不連続性を示した模式図と(b) Cu-Zn 合金の降伏強度と結晶粒径の関係[1]

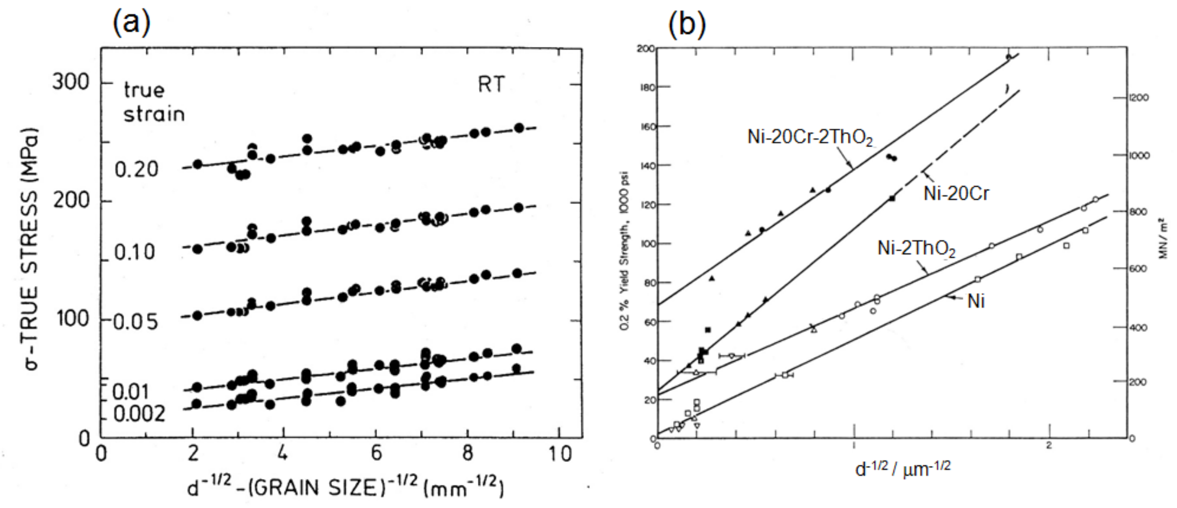

図 4.4 (a) 純 Al の異なるひずみにおける応力と結晶粒径の関係 [5]，(b) 純 Ni（fcc 単相），Ni-20Cr 合金（fcc 単相）及び Ni-Cr-2ThO$_2$ 合金（fcc 母相中に ThO$_2$ が分散）の降伏強度と結晶粒径の関係 [6]

ホール・ペッチの式（式(4.2)）は経験式であるが，粒界に堆積する転位を基にした理論も報告されている[3]．ここで図 4.5 に示すように，すべり変形が隣の結晶粒に伝播するには，転位の堆積に伴って粒界に集中する応力が大きくなり，ある臨界の応力（τ_c）に達したとき，隣接する結晶粒にすべりが生じると考える．せん断応力τ が負荷された場合，結晶粒内の中央に転位源から発生した n 本の同符号の刃状転位が粒界に堆積したとする．その転位の数 n は以下のように表される．

$$n = \frac{(\tau-\tau_0)d}{2\pi} \cdot \frac{2\pi\mu(1-\nu)}{b} \tag{4.3}$$

ここで，τ_0 は転位運動の摩擦応力（(4.2)式のσ_0 におけるすべり面に平行なせん断応力成分）であり，μ は剛性率，b はバーガースベクトル，ν はポアソン比を示す．

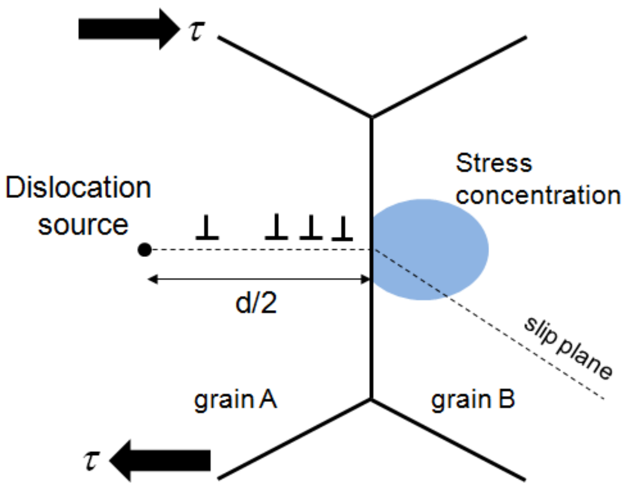

図 4.5 粒界に堆積した転位とそれによる応力集中

堆積した転位の先頭の転位に負荷される応力τ_Rは $n(\tau - \tau_0)$ であるため，次式で表される．

$$\tau_R = \frac{(\tau-\tau_0)^2 \cdot d}{2\pi} \cdot \frac{2\pi\mu(1-\nu)}{b} \tag{4.4}$$

このτ_Rが粒界で転位を発生させる応力に達するとすべりは隣接する結晶粒に伝播する．その臨界応力をτ_cとすると，(4.4)式より次式が導かれる．

$$\tau = \tau_0 + \sqrt{\frac{\tau_c b}{\mu(1-\nu)}} \cdot \frac{1}{\sqrt{d}} \tag{4.5}$$

したがって，ホール・ペッチの式の k は隣接する結晶粒に伝播するせん断応力に関係した値であることになり，結晶粒界のすべりに対する抵抗として理解できる．

参考図書及び参考文献

[1] Materials Science and Engineering 8th edition, William D. Callister and David G. Rethwisch, Wiley (2011).
[2] 入門転位論，加藤雅治，裳華房 (1999).
[3] 材料強度の考え方，木村宏，アグネ技術センター (2002).
[4] 工学基礎 材料力学 新訂版，清家政一郎，共立出版 (1997).
[5] B. A. Wilcox and A. H. Clauer：Acta Metall., 20(1972), 743.
[6] N. Hansen：Metall. Trans. 16A(1985), 2167.