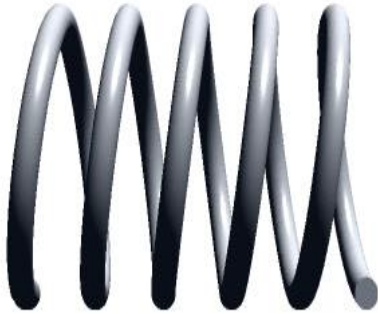


第3章 変形と理論強度

目的 弾性変形および塑性変形に関し、原子レベルからの理解を深める。



- 3.1 弾性変形 (elastic deformation)
 - 3.1.1 原子間に作用する力
 - 3.1.2 ポテンシャルエネルギー
 - 3.1.3 フックの法則
 - 3.1.4 弾性率の温度依存性
 - 3.1.5 弾性変形時のポアソン比
 - 3.1.6 理論強度
- 3.2 塑性変形 (plastic deformation)
 - 3.2.1 すべり
 - 3.2.2 すべり系
 - 3.2.3 シュミットの法則
 - 3.2.4 テーラー因子
 - 3.2.5 双晶変形
 - 3.2.6 粒界すべり
 - 3.2.7 理論せん断強度

3.1 弾性変形

3.1.1 原子間に作用する力

イオン結合を例として考える。静電気力による引力は、

$$f_a = -\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (\text{N}) \quad (3.1)$$

q_1, q_2 : 各イオンの電荷 (C)

ϵ_0 : 真空の誘電率 (F/m)

電子の干渉による斥力は、

$$f_r = -\frac{nb}{r^{n+1}} \quad (\text{N}) \quad (3.2)$$

n, b : 原子の種類に依存する定数

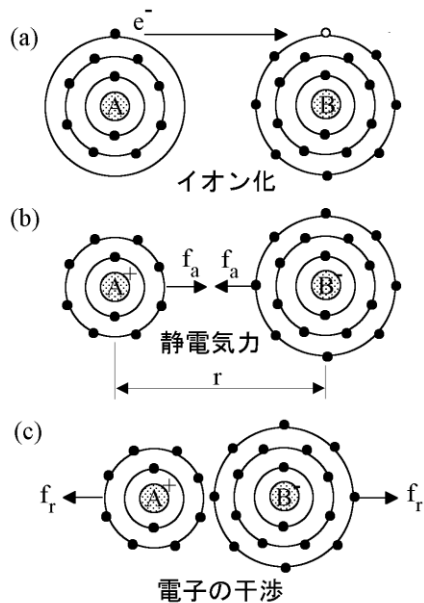


図3.1 原子間に作用する力(イオン結合)

以上の2式より、イオン間に作用する力は、

$$f(r) = -\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{nb}{r^{n+1}} \quad (3.3)$$

位置 $r=r_0$ では $f(r_0)=0$ であるから、上式より、

$$b = -\frac{q_1 q_2 r_0^{n+1}}{4\pi\epsilon_0 n} \quad (3.4)$$

式(3.3)に式(3.4)を代入すると、

$$f(r) = \frac{a}{r^2} \left\{ 1 - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{n+1} \right\} \quad (3.5)$$

ここで、 $a \equiv -\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}$

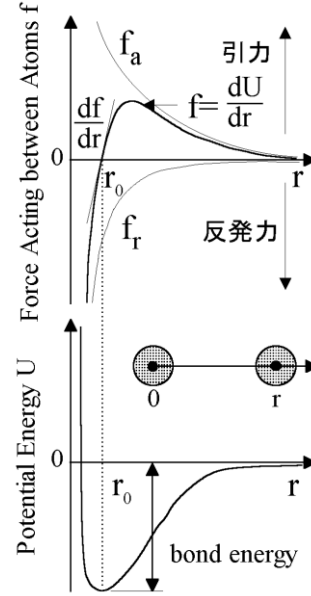


図3.2 原子間に作用する力とポテンシャルエネルギー

3.1.2 ポテンシャルエネルギー (potential energy)

さらに、原子を位置 $r=r_1$ から無限遠(∞)まで移動させるために必要なエネルギー $U(r_1)$ を考える。すなわち、式(3.5)を用いて、

$$U(r_1) = \int_{r_1}^{\infty} \{-f(r)\} dr = -\frac{a}{r_1} \left\{ 1 - \frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{r_1} \right)^{n+1} \right\} \quad (3.6)$$

上式は位置 $r=r_1$ における原子のポテンシャルエネルギーを表す。これを図示すると、図3.2のように凹型の曲線になる。原子の釣り合い位置 $r=r_0$ でポテンシャルエネルギーを求めると、

$$U(r_0) = -\frac{a}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad (3.7)$$

これは原子間(上式はイオン間)の結合エネルギー(bond energy)である。すなわち、このエネルギーに相当する値を外から与えると原子結合は切断される。

3.1.3 フックの法則 (Hook's law)

図3.3に示す $r_0 \times r_0$ (薄墨部)に作用する応力は、式(3.5)で示した原子間力 $f(r)$ を用いると、

$$\sigma_{xx}(r) = \frac{4\{f(r)/4\}}{r_0^2} = \frac{f(r)}{r_0^2} \quad (3.8)$$

この時ひずみは、

$$\varepsilon_{xx}(r) = \frac{r - r_0}{r_0} \quad (3.9)$$

一方、ヤング率は、

$$E = \frac{d\sigma_{xx}}{d\varepsilon_{xx}} = \left(\frac{d\sigma_{xx}}{dr} \frac{1}{\frac{d\varepsilon_{xx}}{dr}} \right)_{r=r_0} \quad (3.10)$$

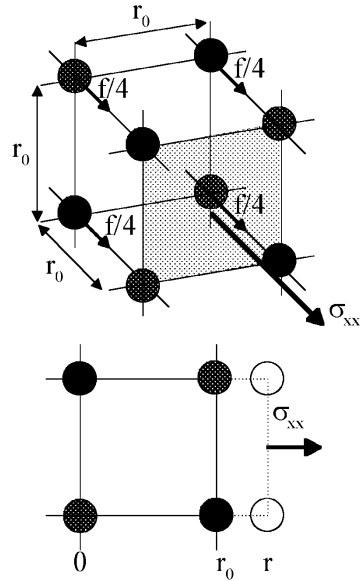


図3.3 引張り応力を受ける結晶

式(3.8)より、

$$\frac{d\sigma_{xx}}{dr} = \frac{a}{r_0^2} \left\{ -\frac{2}{r^3} + \frac{(n+1)r_0^{n-1}}{r^{n+2}} \right\} \quad (3.11)$$

式(3.9)より、

$$d\varepsilon_{xx} / dr = 1/r_0 \quad (3.12)$$

以上の2式を式(3.10)に代入すると、

$$E = \frac{a(n-1)}{r_0^4} \quad (3.13)$$

ヤング率と剛性率の関係式(等方性)より、

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} = \frac{a(n-1)}{2(1+\nu)r_0^4} \quad (3.14)$$

この関係は図3.4に示す実験結果とよく一致している。以上、結晶性材料のヤング率および剛性率を原子結合に基づいて導出した。なお、金属でも考え方は同じである。

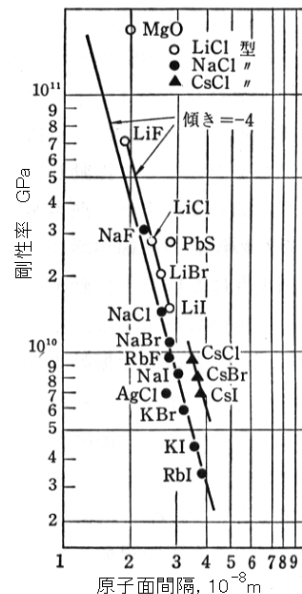


図3.4 原子面間隔 r_0 と剛性率の関係

3.1.4 弾性率の温度依存性

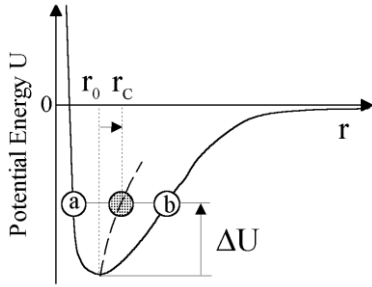


図3.5 原子間距離の変化

熱膨張 (thermal expansion)

絶対零度で、原子間距離は r_0 であるが、温度上昇(U の増加)にともない図中のa-b間で熱振動する。すなわち、平均原子間距離は r_c 間で増加する。これが熱膨張である。

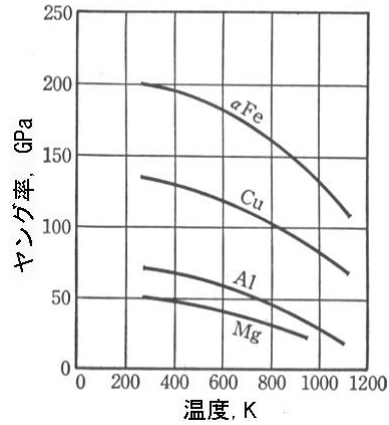


図3.6 ヤング率の温度依存性

一般に、

$$E, G \propto 1/r^m$$

温度上昇にともない原子間距離は r_0 から r_c まで増加する。

結果として、 E および G が低下する。

3.1.5 弾性変形時のポアソン比

図3.7のように半径 r の原子が密に詰まっている場合、

$$l_x = 2\sqrt{3}r, \quad l_y = 2r \quad (3.15)$$

x, y 方向の伸びを λ_x, λ_y とすると、

$$\varepsilon_x = -\lambda_x / l_x, \quad \varepsilon_y = \lambda_y / l_y \quad (3.16)$$

図より、

$$\left(\frac{l_x - \lambda_x}{2}\right)^2 + \left(\frac{l_y + \lambda_y}{2}\right)^2 = (2r)^2 \quad (3.17)$$

λ_x^2 および λ_y^2 は微小であるから省略し、さらに上式を整理すると、

$$\lambda_y / \lambda_x = \sqrt{3} \quad (3.18)$$

よって、 $\nu = -\varepsilon_x / \varepsilon_y = 1/3$ (3.19)

この値は、実際の金属の値とよく一致する。

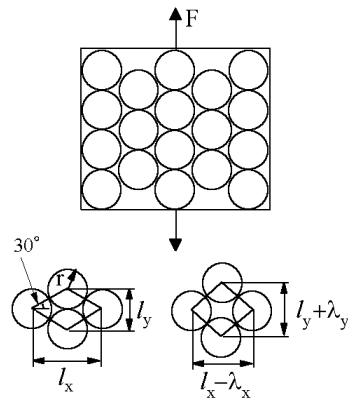


図3.7 ポアソン比の導出

表3.1 ポアソン比

Material	ν	Material	ν
Al	0.345	Cu	0.350
Fe	0.293	W	0.280
Mg	0.291	Ti	0.361

3.1.6 理論強度 (theoretical strength)

式(3.5)で原子間の結合力を与えた。この力が1結合あたり図3.8の f_{\max} を超えると材料が破壊するならば、

$$\left\{ \frac{df(r)}{dr} \right\}_{r=r_1} = 0 \quad (3.20)$$

よって臨界原子間距離は、

$$r_1 = r_0 \left(\frac{n+1}{2} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (3.21)$$

理論強度は、

$$\sigma_{\max} = \frac{f_{\max}}{r_0^2} = \frac{f(r_1)}{r_0^2} \quad (3.22)$$

なお、上式の $f(r_1)$ は式(3.5)で与えられる。

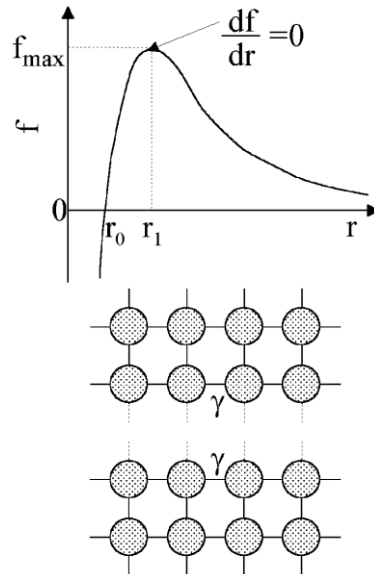


図3.8 垂直応力作用下での破壊

(例) MgOの場合

以下の値を用いてMgOの理論強度を求める。

$$q_1 = -q_2 = 3.2 \times 10^{-19} \text{ C}, \quad \epsilon_0 = 8.9 \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

$$r_0 = 2.1 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad n = 7$$

$$\text{結果は, } \sigma_{\max} = 140 \text{ GPa}$$

$$\text{実際には, } \sigma_{\max} = 3 \text{ GPa}$$

理論強度が達成されない理由

- ・欠陥による応力集中
- ・低応力での他の変形(塑性変形)

以上のように、理論強度は必ずしも実際の材料の強度とは異なる。しかしながら、材料開発時等において、達成可能な最高強度を示す値としてしばしば参照される。

3.2 塑性変形 (plastic deformation)

3.2.1 すべり (slip)

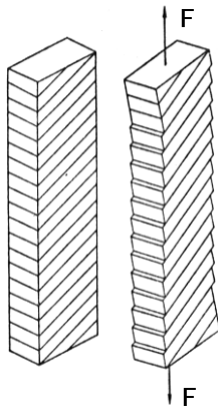


図3.9 すべり変形

すべり: 特定の面に作用するせん断応力により原子面が相対的にすべるために生ずる塑性変形(不可逆). 表面には, すべり線が観察される.

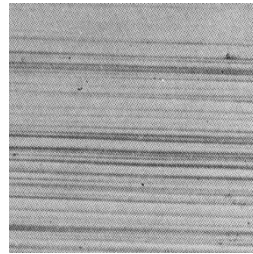


図3.10 すべり線 (slip lines)

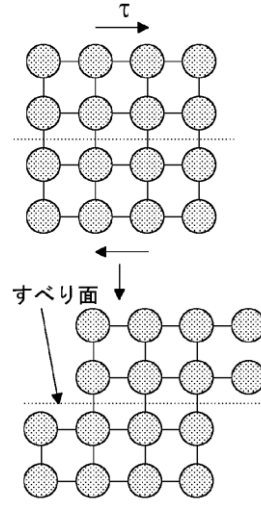


図3.11 すべり変形のモデル

3.2.2 すべり系 (slip system)

すべりは結晶学的に特定な面・方向に生じる.

すべり系: すべり面 (slip plane) とすべり方向 (slip direction) の組合せ.

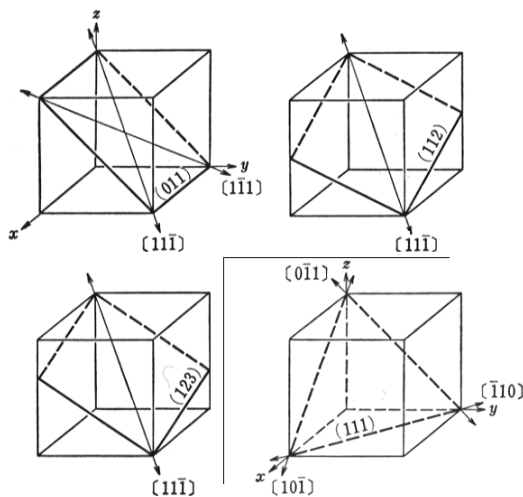


図3.12 すべり系 (BCC: 左3つ, FCC: 右下)

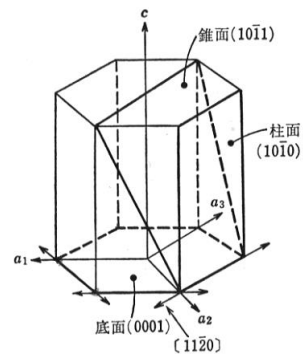


図3.13 すべり系 (HCP)

表3.2 すべり系

Structure	Materials(Example)	Slip Plane	Slip Direction	Number of Slip System
BCC	a-Fe,W,Mo	{011}	$\langle 11\bar{1} \rangle$	$6 \times 2 = 12$
		{112}	$\langle 11\bar{1} \rangle$	$12 \times 1 = 12$
		{123}	$\langle 11\bar{1} \rangle$	$24 \times 1 = 24$
FCC	Al,Cu,g-Fe	{111}	$\langle \bar{1}10 \rangle$	$4 \times 3 = 12$
HCP	Cd,Mg Ti,Be,Mg Ti,Be	(0001)	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$1 \times 3 = 3$
		{10 $\bar{1}$ 0}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$3 \times 1 = 3$
		{10 $\bar{1}$ 1}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$6 \times 1 = 6$

3.2.3 シュミットの法則 (Schmid's law)

面積 A の上面に作用する垂直応力は、

$$\sigma = F / A \quad (3.23)$$

すべり面の面積とすべり方向の分力は、

$$\begin{aligned} A_s &= A / \cos \varphi \\ F_s &= F \cos \lambda \end{aligned} \quad (3.24)$$

すべり面上ですべり方向のせん断応力, すなわち分解せん断応力 (resolved shear stress) は、

$$\begin{aligned} \tau &= F_s / A_s \\ &= F / A \cos \lambda \cos \varphi \quad (3.25) \\ &= \sigma \cos \lambda \cos \varphi \end{aligned}$$

$\cos \lambda \cos \varphi$: シュミット因子

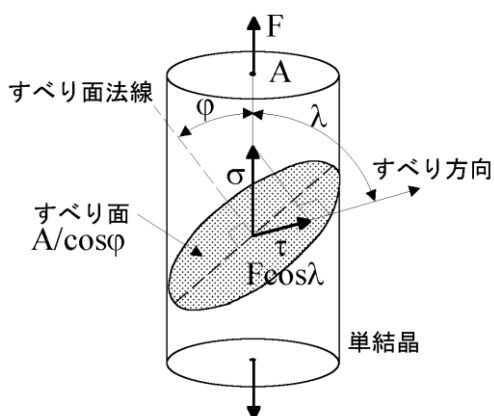


図3.14 分解せん断応力の説明

式(3.25)の τ が臨界分解せん断応力 (critical resolved shear stress) τ_{CRSS} に達するとすべり変形が開始する。

シュミットの法則

単結晶の降伏応力 σ_y は, 式(3.25)で

$$\tau = \tau_{CRSS}, \quad \sigma = \sigma_y$$

を代入することで, 下式のように求められる。

$$\sigma_y = \frac{\tau_{CRSS}}{\cos \lambda \cos \phi} \quad (3.26)$$

この関係は, 図3.15に示すように, 実際に実験結果と一致する。

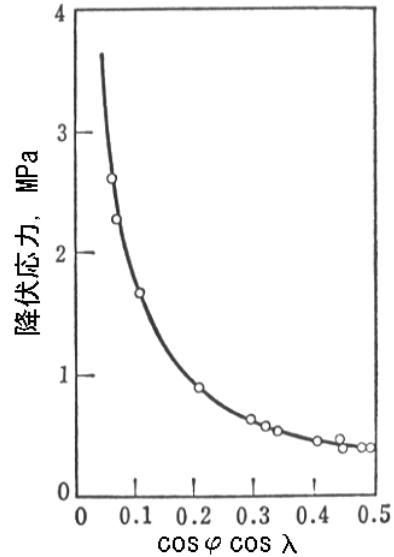


図3.15 単結晶の降伏応力とシュミット因子の関係

3.2.4 テーラー因子 (Taylor factor)

多結晶体の降伏応力

$$\sigma_y = M \tau_{CRSS} \quad (3.27)$$

M はテーラー因子であり, 全すべり系の活動を考慮して算出されている。

BCCの場合: $M=2.75$
 $\{011\}\langle 111 \rangle$, $\{112\}\langle 111 \rangle$,
 $\{123\}\langle 111 \rangle$ を考慮

FCCの場合: $M=3.07$
 $\{111\}\langle 110 \rangle$ を考慮

HCPの場合: 計算不能
 すべり系3個ではひずみの連続性が保てない。

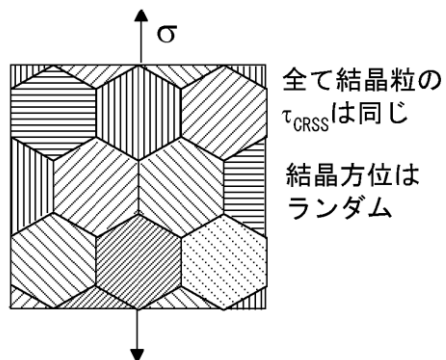


図3.16 多結晶の降伏

3.2.5 双晶変形 (twining)

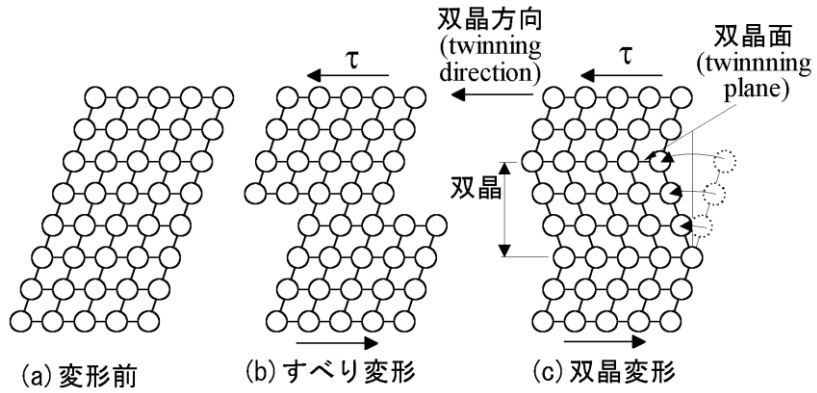


図3.17 すべり変形と双晶変形

双晶変形の発生には高応力が必要

↓
すべり変形が生じ難い条件(低温, 高ひずみ速度)で生ずる

3.2.6 粒界すべり (grain boundary sliding)

高温では粒界すべりが生ずる.

↓
時間経過に伴う変位量増大
(高温クリープの原因)

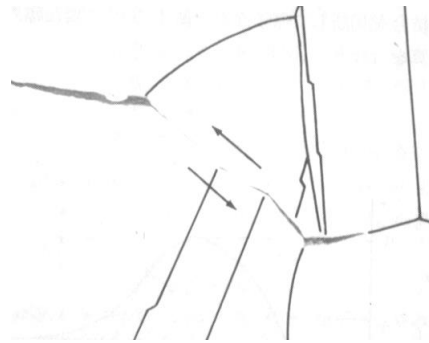


図3.18 粒界すべり

3.2.7 理論せん断強度 (theoretical shear strength)

図3.19において、原子を x だけ変位させるために必要なせん断応力 τ_{yx} を sin カーブで近似し、ひずみ γ_{yx} を考えると、

$$\tau_{yx} = \tau_{\max} \sin(\pi x / b) \quad (3.28)$$

$$\gamma_{yx} = x / b$$

式(3.10)と同様に考えると剛性率は、

$$G = \frac{d\tau_{yx}}{d\gamma_{yx}} = \left(\frac{d\tau_{yx}}{dx} \frac{1}{\frac{d\gamma_{yx}}{dx}} \right)_{x=0} \quad (3.29)$$

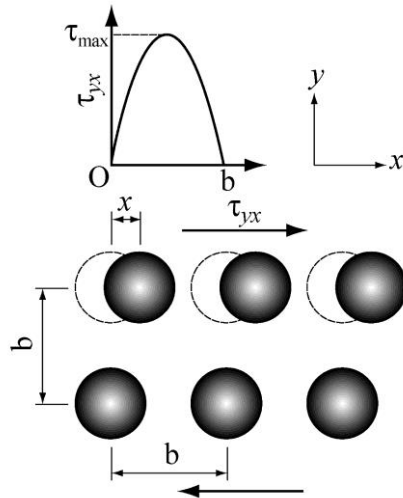


図3.19 理論せん断強度の導出

式(3.28)より、

$$\frac{d\tau_{yx}}{dx} = \frac{\pi\tau_{\max}}{b} \cos \frac{\pi x}{b}, \quad \frac{d\gamma_{yx}}{dx} = \frac{1}{b} \quad (3.30)$$

式(3.29)および(3.30)より、理論せん断強度は、

$$G = \pi\tau_{\max} \rightarrow \tau_{\max} = \frac{G}{\pi} \quad (3.31)$$

純金属では理論値と実測値
に著しい差がある!!

↓
推論

格子欠陥の存在により、
臨界せん断応力が低下する。

↓
「転位」という概念の発見

※ whisker: ひげ結晶

表3.3 理論せん断強度 τ_{\max} と実測値 τ_{CRSS} の比較

Materials	τ_{\max} (MPa)	τ_{CRSS} (MPa)	$\tau_{\max}/\tau_{\text{CRSS}}$
Fe whisker	5300	2000~3000	2.7~1.8
Cu whisker	6300	840	7.5
Ag whisker	4400	710	6.2
Fe	5300	15	350
Cu	6300	1	6300
Ag	4400	0.59	7500

3章演習問題

問題 1 距離 r だけ離れた2つの原子間のポテンシャルエネルギーが,

$$U = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}, \quad m = 2, \quad n = 10$$

で与えられるとする。原子は間隔 0.3 nm でエネルギー -4 eV の時に安定となる。なお、 $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ である。

- (1-1) 定数 A および B を求めよ。
- (1-2) この結合を切断するために必要な力および臨界間隔を求めよ。
- (1-3) 単純立方格子であると考えて、理論強度を求めよ。

問題 2 塑性変形の原因を3つ挙げよ。

問題 3 単結晶の純鉄の臨界せん断応力は 15 MPa であり、体心立方格子のテラー因子は 2.75 である。多結晶体の純鉄の降伏応力をテラー因子を用いて推定せよ。

問題 4 単結晶において、荷重方向からすべり面が $\pi/4$ 、すべり方向が $\pi/3$ 傾いている(図3.14参照)。

- (4-1) シュミット因子を求めよ。
- (4-2) この単結晶の降伏応力は 45 MPa であった。臨界分解せん断応力を求めよ。

3章演習問題解答

問題 1

(1-1) 原子間力 $f = dU/dr$ は、平衡間隔が r_0 の時、つまり U が最小値 U_0 の時、0 と

なるから、
$$f(r_0) = \left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} = \frac{mA}{r_0^{m+1}} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} = 0 \quad \therefore B = A \frac{m}{n} r_0^{n-m}$$

これを用いれば、
$$U_0 = -\frac{A}{r_0^m} + \frac{B}{r_0^n} = -\frac{A}{r_0^m} \left(1 - \frac{m}{n} \right)$$

上式に $r_0 = 0.3 \text{ nm}$ 、 $U_0 = -4 \text{ eV}$ を代入し、 $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ に注意すれば、

$$A = 4 \times \left(\frac{1}{1 - 2/10} \right) \times 0.3^2 (\text{eVnm}^2) = 7.2 \times 10^{-20} (\text{Jnm}^2)$$

先に求めたAとBの関係より, $B = \frac{2}{10} \times 0.3^{10-2} \times 7.2 \times 10^{-20} = 9.4 \times 10^{-25} (\text{Jnm}^{10})$

(1-2) 力は, $f = \frac{dU}{dr} = \frac{mA}{r^{m+1}} - \frac{nB}{r^{n+1}}$

力が最大となる際の原子間距離を r_1 とすると,

$$\left(\frac{df}{dr} \right)_{r=r_1} = -\frac{m(m+1)A}{r_1^{m+2}} + \frac{n(n+1)B}{r_1^{n+2}} = 0$$

よって, $r_1 = \left\{ \frac{Bn(n+1)}{Am(m+1)} \right\}^{\frac{1}{n-m}} = r_0 \left(\frac{n+1}{m+1} \right)^{\frac{1}{n-m}} = 0.3 \left(\frac{10+1}{2+1} \right)^{\frac{1}{10-2}} = 0.35 (\text{nm})$

この時の力, すなわち結合を切断するために必要な力 f_{\max} は, 以上のA, Bおよび r_1 の値を, 先の f の式へ代入すれば求められる. すなわち,

$$f_{\max} = \frac{2 \times 7.2 \times 10^{-20}}{0.35^{2+1}} - \frac{10 \times 9.4 \times 10^{-25}}{0.35^{10+1}} = 2.4 \times 10^{-18} (\text{J/nm}) = 2.4 \times 10^{-9} (\text{N})$$

(1-3) 理論強度は, $\sigma_{\max} = \frac{f_{\max}}{r_0^2} = \frac{2.4 \times 10^{-9}}{(0.3 \times 10^{-9})^2} = 27 (\text{GPa})$

問題 2 すべり, 双晶, 粒界すべり

問題 3 降伏応力は, $\sigma_y = M \tau_{\text{CRSS}} = 2.75 \times 15 = 41.3 (\text{MPa})$

問題 4

(4-1) シュミット因子は, $\cos \lambda \cos \varphi = \cos \frac{\pi}{3} \cos \frac{\pi}{4} = 0.354$

(4-2) 臨界せん断応力は, $\tau_{\text{CRSS}} = \sigma_y \cos \lambda \cos \varphi = 45 \times 0.354 = 15.9 (\text{MPa})$