

第8章 結晶中の転位

8.1 完全転位のバーガースベクトル

第6章 (6.7) 式で学んだように、転位は単位長さあたり μb^2 程度の大きさの自己エネルギーを持つ。したがって、自己エネルギーをなるべく小さくするためには、 b をなるべく小さくしたい。一方、これも前に述べたように、転位の運動によるすべり変形が起こった結果、結晶構造が変わったとしたら大変である。したがって、 b をなるべく小さくといっても、原子配列の周期より小さくするわけにはいかない。以上のことから、バーガースベクトル $\mathbf{b}$ は結晶の最小の並進ベクトルとなることが最も合理的であることが理解できる。このように、 $\mathbf{b}$ が結晶の並進ベクトルの1つである転位を完全転位 (perfect dislocation) という。通常のすべり転位 (glide dislocation) は、バーガースベクトルがすべり方向に平行で、最近接原子同士を結ぶベクトルとなる完全転位である。図 8.1 は図 3.1 と似た図であるが、今度は各結晶における通常のすべり転位のバーガースベクトルの例を明記したものとなっている。

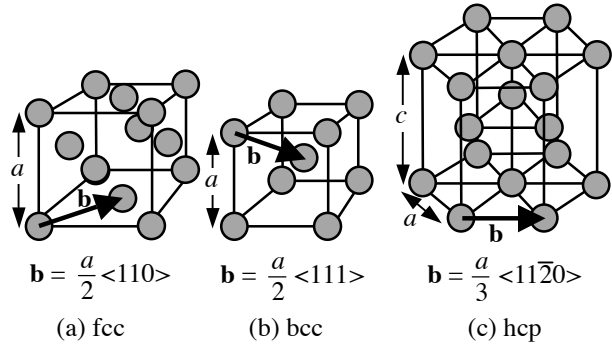


図 8.1 すべり転位のバーガースベクトル

8.2 部分転位と積層欠陥

上述のように、もしバーガースベクトルが結晶の並進ベクトルの1つと等しくなければ、その転位が運動したすべり面上には局所的に結晶構造の変化が生じる。今まで、「結晶構造が変わったら大変である」と言っただけで、舌の根も乾かないうちに申し訳ないのであるが、実はこのような「大変な」転位も存在し、それを部分転位 (partial dislocation) または不完全転位 (imperfect dislocation) とよぶ。

なぜこのような転位があるのかを理解してみよう。まず、図 4.8(c) を思い出そう。そこでは $\mathbf{b}_1$ という転位が $\mathbf{b}_2$ と $\mathbf{b}_3$ という2本の転位に分解して枝分かれしていた。もちろん、 $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$ というバーガースベクトルの保存則は成り立っている。ここで再び、転位の自己エネルギーはバーガースベクトルの大きさの2乗に比例することも思い出そう。そうすれば、分解がエネルギー的に都合の良いためには、それぞれのバーガースベクトルの大きさの間に

$$b_1^2 > b_2^2 + b_3^2 \quad (8.1)$$

という関係が必要であることが理解できるであろう。分解することによってエネルギーを小さくすることができるからである。

(8.1) のような不等式の条件を満たすためには、3つのバーガースベクトルの間にどのような幾何学が必要であろうか？それは、図 8.2 によって明らかとなる。(b) の直角三角形ではピタゴラスの定理より、(8.1) は等式になってしまい、(c) の鈍角三角形のときのみ (8.1) を満たす。

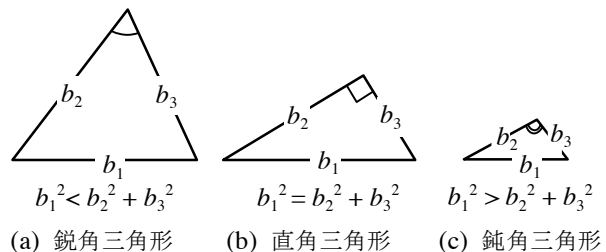


図 8.2 $\mathbf{b}_1$ の完全転位が $\mathbf{b}_2$ と $\mathbf{b}_3$ の2本の部分転位に分解するとき、エネルギー的に可能は分解は(c)の鈍角三角形のみである。

以上を知って fcc 結晶を考えてみよう。

最密面である(111)面上の原子を剛体球モデルで表すと、図 8.3 のようになっている。(a) は見取図、(b) は横から見た図で、(111)面が...ABCABC...という3層周期の積み重なり (積層, stacking, という) でできていることがわかる。(c) は上から見た図であり、積み重なりの様子がわかる。

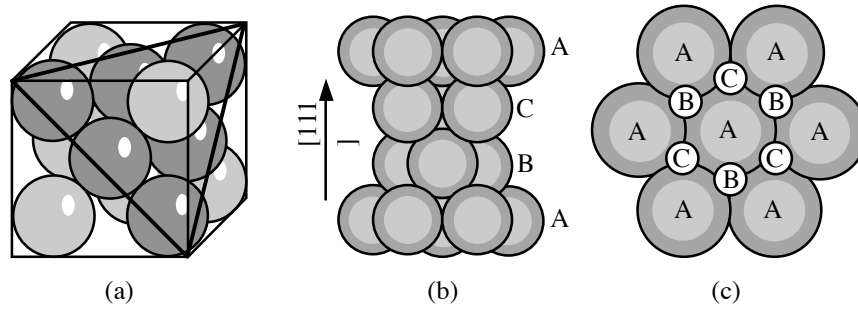


図 8.3 fcc の剛体球モデルと(111)面の積層. (a) 見取図, (b) (111)面を横から見た図, (c) (111)面を上から見た図

ここで図 8.3(b)で, A層とB層の間に完全転位である $\mathbf{b}_1 = (a/2)[\bar{1}01]$ が動くと考えよう. この転位が動くと $\mathbf{b}_1$ だけのずれがすべり面の上下の結晶に起こるが, 図 8.3(c)で左側のBの位置の原子が右側のBの位置へと移動することになる. すなわち $\mathbf{b}_1$ は fcc の並進ベクトルなので, この移動が起こっても, すべりの前後でB層はB層のままで, ...ABCABC...積層が維持される. この様子は図 8.4(a)を見ても明らかである.

一方, 球の積み重なりを考えると, (111)面上での $\mathbf{b}_1 = (a/2)[\bar{1}01]$ という変位は, $\mathbf{b}_2 = (a/6)[\bar{1}\bar{1}2]$ (図 8.4(a)の左側のB→C) と $\mathbf{b}_3 = (a/6)[2\bar{1}1]$ (C→右側のB) の2段階変位を経て起こると考えた方が, 球の接する谷間を通れるので容易と想像できる. ところが $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ は fcc 結晶の並進ベクトルではない. したがって, もし $\mathbf{b}_2$ や $\mathbf{b}_3$ の変位をバーガースベクトルとして持つ転位があれば, それは部分転位ということになる. そして, これらの部分転位の一方のみが動くことがあれば, その部分の結晶の積層が変化することになる. 実際, fcc 結晶中の完全転位 $\mathbf{b}_1 = (a/2)[\bar{1}01]$ は

$$\mathbf{b}_1 \rightarrow \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3, \text{ すなわち } \frac{a}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{a}{6}[2\bar{1}1] \quad (8.2)$$

のように, 2本の部分転位に分解する傾向にある. このとき3つのバーガースベクトルで作られる三角形は頂角が 120° の鈍角三角形であり, 確かに(8.1)を満たしている.

ここで現れた2本の部分転位 $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ を共にショックレーの部分転位 (Shockley's partial dislocation) とよぶ. ショックレーの部分転位の一方のみが運動すると, fcc 積層が変化する. たとえば, $\mathbf{b}_2$ 部分転位のみが走ると, 元はB層であったものがC層へと変化し, それから上の積層も順次変化する (図 8.5 の真ん中の積層). これは局所的な結晶構造の変化を意味する. しかし, $\mathbf{b}_2$ 部分転位の後に続いて $\mathbf{b}_3$ 部分転位が走ると, 結果として $\mathbf{b}_1$ 完全転位が走ったことになるので, 積層は元の fcc 積層に戻る (図 8.5 の右側の積層). このように, $\mathbf{b}_2$ 部分転位と $\mathbf{b}_3$ 部

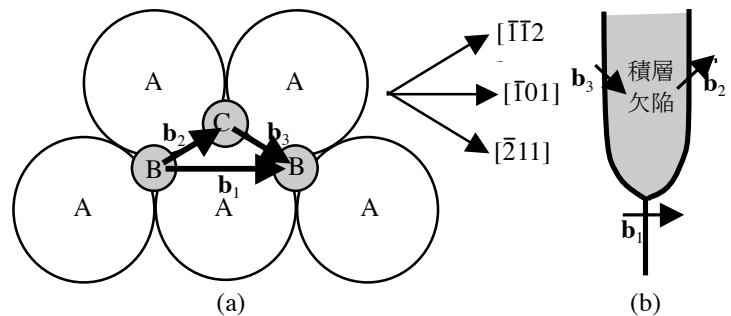


図 8.4 (a) fcc の(111)面上の完全転位 ($\mathbf{b}_1$) とショックレーの部分転位 ($\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$) のバーガースベクトル. (b) 完全転位の拡張

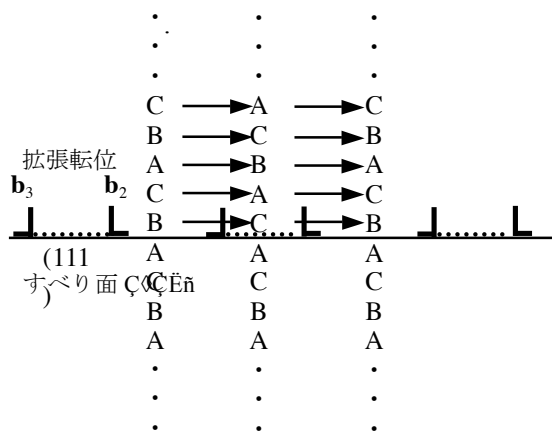


図 8.5 拡張転位の運動と積層欠陥

分転位は、たとえ分解していても通常は対になって運動する。

分解した $\mathbf{b}_2$ 部分転位と $\mathbf{b}_3$ 部分転位の間に存在する積層が局所的に乱れた場所を積層欠陥 (stacking fault) という (図 8.4(b))。積層欠陥は面欠陥の一種で、面積に比例するエネルギー (積層欠陥エネルギー, stacking fault energy, という) を持っている。その値は詳細には知られていないが、Cu で 40 mJ/m^2 程度、Al で 150 mJ/m^2 程度と言われている。bcc でも完全転位が部分転位に分解する可能性があるが、bcc の場合の積層欠陥エネルギーは Fe でおよそ 1000 mJ/m^2 と、fcc に比べてかなり高い値である。分解した 2 本の部分転位とその間に生成する積層欠陥を含めて、拡張転位 (extended dislocation) とよぶ。また、完全転位が拡張したともいう。

以上のように fcc 中の完全転位は 2 本のショックレー部分転位に分解して拡張転位になった方がエネルギー的に有利である。実際、7.2 節で考えたような転位同士に働く力を、fcc の 2 本のショックレー部分転位に対して計算してみても反発力が働いていることがわかる。それならば、分解が進んで 2 本の部分転位間の距離は非常に大きくなると思うかもしれない。しかし、そうになると、一方で積層欠陥の幅も大きくなり、積層欠陥エネルギーが増大してしまう。そこで、2 本の部分転位間の反発力と積層欠陥の面積を小さくしようとする面張力とのバランスで、部分転位間の平衡間隔 (拡張転位の幅といっても良い) が決まる。容易に予想されるように、積層欠陥エネルギーが小さいほど拡張転位の幅は大きくなる。このように、積層欠陥エネルギーと拡張転位の幅の間には反比例の関係がある。