

第6章 転位の作る弾性場と線張力

6.1 転位の周りの弾性ひずみと応力

3次元の (x_1, x_2, x_3) 直交座標系を考え、図 6.1 のように、 x_3 軸に沿って無限に長い直線らせん転位を置く。らせん転位であるから、バーガースベクトル $\mathbf{b}$ (大きさを b とする) の方向も x_3 軸に平行である。らせん転位の場合は、転位周りの原子を結んでぐりりと一周すると b だけの変位を生じるので、 (r, θ, x_3) 円柱極座標系で考えると、任意の点 $(r, \theta, 0)$ の x_3 方向への変位量は $u_3 = \theta b / (2\pi)$ と表せる。ここで、 $\tan \theta = x_2 / x_1$ であるから、

$$u_3 = (b / 2\pi) \tan^{-1}(x_2 / x_1) \quad (6.1)$$

となる。変位はこの u_3 のみで、 $u_1 = u_2 = 0$ である。変位が知れば、(5.1), (5.2) から弾性ひずみ e_{ij} 、(5.10) から応力 σ_{ij} が求まる。すなわち、直線らせん転位の周りの応力場 σ_{ij}^s の各成分を表す行列 (応力成分であるからもちろん対称行列である) として以下を得る。

$$\sigma_{ij}^s = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} \\ 0 & 0 & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2} \\ -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2}, & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2}, & 0 \end{bmatrix} \quad (6.2a)$$

円柱座標系ではもっと簡単な表現となり、ひずみと応力のゼロでない成分は下式のみとなる。

$$\epsilon_{\theta x_3} = \epsilon_{x_3 \theta} = \frac{b}{4\pi r}, \quad \sigma_{\theta x_3}^s = \sigma_{x_3 \theta}^s = \frac{\mu b}{2\pi r} \quad (6.2b)$$

このように、らせん転位の応力場は転位からの距離に反比例して小さくなる。

らせん転位より複雑なものとなるが、刃状転位の応力場も転位からの距離に反比例して小さくなることがわかっている。ここでは転位線が x_3 軸に平行、バーガースベクトルが x_1 軸に平行な刃状転位の応力成分 σ_{ij}^e の計算結果のみ示す。

$$\sigma_{ij}^e = \begin{bmatrix} -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(3x_1^2 + x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mu \nu b}{\pi(1-\nu)} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} \end{bmatrix} \quad (6.3)$$

らせん転位の周りの応力場(6.2)は対角和(トレース)がゼロであるのに対して刃状転位の応力場(6.3)はゼロではなく、いわゆる静水圧成分が存在する。しかし、刃状転位でも弾性場が転位からの距離の1乗に反比例して減衰することは変わらない。

このように転位の弾性場の減衰は、万有引力やクーロン力(共に距離の2乗に反比例する)に比べてゆるやかな減衰であり、弾性場は転位からかなりの遠方にまで広がっている、しばしば長距離応力場(long-range stress field)と呼ばれている。

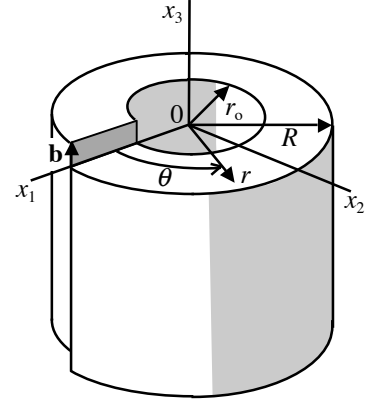


図 6.1 x_3 軸に沿った直線らせん転位

6.2 転位の弾性ひずみエネルギー

転位の周りの弾性場が知れば、(5.16)を使って転位の弾性ひずみエネルギーが計算できる。らせん転位については、極座標系でのひずみと応力(6.2b)を使えば簡単で、途中計算として次式を得る。

$$\begin{aligned} E_{\text{el}} &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} (\varepsilon_{\theta x_3} \sigma_{\theta x_3}^s + \varepsilon_{x_3 \theta} \sigma_{x_3 \theta}^s) r \, dr \, d\theta \, dx_3 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_{r_0}^R \{\mu b^2 / (8\pi^2 r^2)\} r \, dr \, d\theta \, dx_3 \end{aligned} \quad (6.4)$$

第3辺では、 r の積分範囲の下限を（ゼロではなく） r_0 、上限を（無限大ではなく） R と置いた。 r_0 は転位芯の半径という意味を持ち、 $5b$ 程度の値を考える。 $0 \leq r < r_0$ では微小変形に基づくフックの法則が適用できないほど原子配列が乱れているのでその部分を除いたわけである。したがって、転位芯のエネルギーは別の方法で評価しなければならない。また R は結晶の大きさの意味を持ち、多結晶の場合は結晶粒の半径をとれば良い。(6.4)のうち dx_3 に関する積分は、単に転位の長さ按比例するのみなので、単位長さあたりのらせん転位の弾性ひずみエネルギー E_0 を考えることとして、 dr と $d\theta$ に対する積分のみを行うと次式を得る。

$$E_0^s = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \left(\frac{R}{r_0} \right), \quad (\text{直線らせん転位}) \quad (6.5)$$

ここで、 $r_0 \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$ と置くと、 E_0 は発散してしまうことに注意してほしい。これは前述の転位の弾性場が転位からの距離の1乗に反比例するという緩い減衰であることに由来している。なお、別の方法で評価した転位芯のエネルギーは E_0 のせいぜい10%程度に過ぎない。したがって、以下ではこれを見捨て、転位の弾性ひずみエネルギーを転位の自己エネルギー (self energy) と考えることにする。

直線刃状転位についても同様の計算をすれば良い。計算はらせん転位に比べて複雑であるが、(6.5)に対応する単位長さあたりの弾性ひずみエネルギーは

$$E_0^e = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{R}{r_0} \right), \quad (\text{直線刃状転位}) \quad (6.6)$$

と求まる。ここで、 ν はポアソン比である。

(6.5)と(6.6)は $(1-\nu)$ の因子だけ異なる。ポアソン比は多くの固体で0.3に近い値なので、この因子をあまり大きな違いと考えなければ、転位の自己エネルギーは転位の種類にはそれほど依存しないと考えても良い。常識的な値として $r_0 = 10^{-9} \text{ m}$ 、 $R = 10^{-5} \text{ m}$ を選べば、(6.5)は $E_0 = 0.73 \mu b^2$ となる。したがって、最も簡単には転位の種類によらない単位長さの転位の自己エネルギーを

$$E_0 = \alpha \mu b^2, \quad (\alpha \text{ は } 1/2 \text{ から } 1 \text{ 程度}) \quad (6.7)$$

としてしまうこともある。

6.3 転位の線張力

以上のように、転位は長さに比例する自己エネルギーを持つ。そこで、自己エネルギーをなるべく小さくするために、他から力が働かない限り、転位は長さの最も短い直線状になろうとする。このことは、転位をあたかも「ひも」のように考えると、ひもの両端に線張力 (line tension) が作用していて、転位をぴんと張っているように理解することができる。

単位長さあたりの転位の自己エネルギーの単位は[J/m]である。これは力の単位である[N]に他ならない。実際、転位に働く線張力の大きさ T_L は(6.5)や(6.6)中の R を曲がった転位の曲率半径程度と考えて得られる。たとえば $r_0 = 10^{-9} \text{ m}$ 、 $R = 10^{-6} \text{ m}$ として(6.4)に代入すると、 $T_L = 0.55 \mu b^2$ が得ら

れる．本講義では，転位の線張力は転位の種類によらないとして，

$$T_L = \mu b^2 / 2 \quad (6.8)$$

と考えることにする．

第3回練習問題

問題 3.1 転位の周りの弾性場は長距離応力場といわれる．これを理解するために， $r_0 = 1\text{nm}$ ， $R = 10\mu\text{m}$ として (6.5) または (6.6) を用い，転位の弾性ひずみエネルギーの大きさの半分は $0.1\mu\text{m} \leq r \leq 10\mu\text{m}$ という転位からかなり離れた位置からの寄与であることを示せ．

問題 3.2 単位長さあたりの転位の自己エネルギーとして， $\alpha = 1$ と置いた (6.7) 式を考えよう．

(a) 長さ b の転位あたりに割り付けられる自己エネルギーはいくらか？

(b) 剛性率を $\mu = 5 \times 10^{10} \text{ Pa}$ ，バーガースベクトルの大きさを $b = 2.5 \times 10^{-10} \text{ m}$ とするとき，(a) で求めた自己エネルギーの値はいくらになるか？ [J] および [eV] を単位として答えよ．

($1\text{eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$)

(c) 上で得られた値は原子空孔の形成エネルギー (1eV 程度) と比べて大きいか小さいか？ この答は，原子空孔とは異なり，転位は厳密な熱平衡状態では存在できないことと密接に関係している．