第２章　転位の弾性論

2.1　転位の周りの弾性ひずみと応力

点欠陥とは異なり，転位が存在すると結晶のヘルムホルツエネルギーは増加する．この増加分の主要な寄与は弾性ひずみエネルギーである．以下では今まで学んだ知識を使って，転位の周りの弾性場を求める．残念ながら，曲がった転位ではこれは非常に難しい．さらに，異方性のある結晶でも難しい．そこで，無限大の等方体物体中の直線転位のみを考えることになる．これは近似としては低レベルかもしれないが，実際にはこの近似で十分な話が多い．とくに材料の強化機構などの問題を考えるときは，これ以上の近似をたとえ使ったとしても，それ以外の要素の曖昧さの方が多く，あまり意味がない．むしろ等方体物体中の直線転位の方が一般性があって使い易いこともある．

2.1.1　直線らせん転位

図 2.1 のように (x_1, x_2, x_3) 直交座標系を考え，x_3 軸に沿って無限に長い直線らせん転位を置く．らせん転位の特徴は $x_1 - x_2$ 面で転位芯の周りをぐるり一周すれば，バーガースベクトルの大きさ b だけ x_3 方向に結晶面を上昇（下降）するところにある．そこで，図のようにもう一つの円筒座標系 (r, θ, x_3) も考えると，任意の点 (r, θ, x_3) の x_3 方向への変位量 u_3 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，

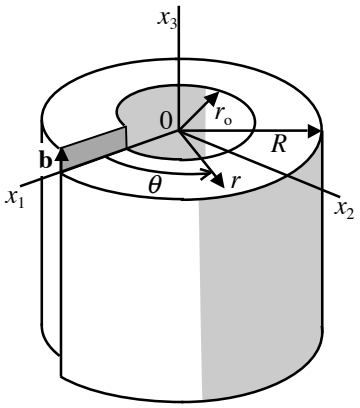


図 2.1　x_3 軸に沿った直線らせん転位

$$u_3 = \frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\left(\frac{x_2}{x_1}\right)$$

と表せる．変位はこの u_3 のみで，$u_1 = u_2 = 0$ であるから，この変位による弾性ひずみ e_{ij} のゼロでない成分は(2.2a)より次のように求められる．

$$e_{13} = e_{31} = \frac{1}{2}\left(u_{1,3} + u_{3,1}\right) = -\frac{b}{4\pi}\frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2}$$

$$e_{23} = e_{32} = \frac{1}{2}\left(u_{2,3} + u_{3,2}\right) = \frac{b}{4\pi}\frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2}$$

これらと等方体のフックの法則より，直線らせん転位の周りの応力場 σ_{ij}^{s} として以下を得る．

$$\sigma_{ij}^{\mathrm{s}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\dfrac{\mu b}{2\pi}\dfrac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} \\ 0 & 0 & \dfrac{\mu b}{2\pi}\dfrac{x_1}{x_1^2 + x_2^2} \\ -\dfrac{\mu b}{2\pi}\dfrac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} & \dfrac{\mu b}{2\pi}\dfrac{x_1}{x_1^2 + x_2^2} & 0 \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

円柱座標系ではより簡単な表現となり，ひずみと応力のゼロでない成分は下式のみとなる．

$$e_{\theta x_3} = e_{x_3\theta} = \frac{b}{4\pi r}, \quad \sigma_{\theta x_3} = \sigma_{x_3\theta} = \frac{\mu b}{2\pi r}, \tag{2.2}$$

このように，らせん転位の弾性場は転位からの距離の一乗に反比例して減衰する．

2.1.2　直線刃状転位

直線刃状転位の弾性場を求めることは，直線らせん転位の場合よりはるかに難しい．先に紹介した

「入門転位論」ですら，（やり方を簡単に述べただけで）完全な導出は行っていない．少しは不満なのであるが，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周りの応力場 σ_{ij}^{e} の計算結果のみ示す．

$$\sigma_{ij}^{\mathrm{e}} = \begin{bmatrix} -\dfrac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\dfrac{x_2(3x_1^2+x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & \dfrac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\dfrac{x_1(x_1^2-x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & 0 \\ \dfrac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\dfrac{x_1(x_1^2-x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & \dfrac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\dfrac{x_2(x_1^2-x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\dfrac{\mu\nu b}{\pi(1-\nu)}\dfrac{x_2}{x_1^2+x_2^2} \end{bmatrix} \tag{2.3}$$

らせん転位の周りの応力場(2.1)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(2.3)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ので，しばしば長距離応力場（long-range stress field）と呼ばれている．

★　2.1.3　直線混合転位

混合転位とは転位線とバーガースベクトルとが平行でも垂直でもない一般の転位である．このときバーガースベクトルは，常に転位線に平行ならせん成分 $\mathbf{b}_{//}$ と転位線に垂直な刃状成分 $\mathbf{b}_{\perp}$ に分解できる．また．線形弾性論の弾性場は重ね合わせが可能である．その結果，混合転位による弾性場は，バーガースベクトルが $\mathbf{b}_{//}$ のらせん転位の弾性場とバーガースベクトルが $\mathbf{b}_{\perp}$ の刃状転位の弾性場の和で表される．

2.2　転位の弾性ひずみエネルギー

2.2.1　直線らせん転位

上で求まった弾性ひずみと応力から，転位の弾性ひずみエネルギーが計算できる．ここではらせん転位を例にとってみよう．(2.22)を使って，無限大物体中の直線らせん転位の弾性ひずみエネルギー E^{s} は，(x_1, x_2, x_3) 座標系では

$$E^{\mathrm{s}} = \frac{1}{2}\int_D \sigma_{ij}^{\mathrm{s}} e_{ij}\,\mathrm{d}\mathbf{x} \equiv \frac{1}{2}\int\int_{-\infty}^{\infty}\int (\sigma_{13}^{\mathrm{s}}e_{13} + \sigma_{31}^{\mathrm{s}}e_{31} + \sigma_{23}^{\mathrm{s}}e_{23} + \sigma_{32}^{\mathrm{s}}e_{32})\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3$$

と書け，(r, θ, x_3) 座標系では

$$E^{\mathrm{s}} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_{r_{\mathrm{o}}}^{R} (\sigma_{\theta x_3}^{\mathrm{s}} e_{\theta x_3} + \sigma_{x_3\theta}^{\mathrm{s}} e_{x_3\theta})\, r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}x_3 \tag{2.4}$$

と書ける．ここで，r の積分範囲の下限を r_{o}，上限を R と置いた．r_{o} は転位芯の半径という意味を持ち，$5b$ 程度の値を考える．$0 \le r < r_{\mathrm{o}}$ では微小変形に基づく弾性論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．(2.2)を(2.4)に代入して次式を得る．

$$E^{\mathrm{s}} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_{r_{\mathrm{o}}}^{R} \left(\frac{\mu b^2}{8\pi^2 r^2}\right) r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}x_3$$

この三重体積積分のうち $\mathrm{d}x_3$ に関するものは単に転位の長さに比例するのみなので，$\mathrm{d}r$ と $\mathrm{d}\theta$ に対する

積分を行うと，単位長さあたりのらせん転位の弾性ひずみエネルギーとして次式を得る．

$$E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{s}} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_{\mathrm{o}}}\right) \tag{2.5}$$

別の方法で評価した転位芯のエネルギーは $E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{s}}$ のせいぜい 10% 程度に過ぎないという．したがって，以下ではこれを無視する．

2.2.2　直線刃状転位

直線刃状転位についても同様の計算をすれば良い．「入門転位論」には簡便な導出方法が紹介されている．ここではまた結果だけを示すことにすると，単位長さあたりの刃状転位の弾性ひずみエネルギー $E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{e}}$ は

$$E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{e}} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{R}{r_{\mathrm{o}}}\right) \tag{2.6}$$

と求まる．ここで，ν はポアソン比である．

(2.6)の $E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{e}}$ は(2.5)の $E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{s}}$ より $1/(1-\nu)$ の因子だけ大きくなることがわかる．しかし，ポアソン比は多くの固体で 1/3 に近い値なので，これをそう大きな違いと考えなければ転位の弾性ひずみエネルギー（自己エネルギー）は転位の種類にはあまり依存しないとしても良い．たとえば，常識的な値として $r_{\mathrm{o}} = 10^{-9}\,\mathrm{m}$，$R_{\mathrm{o}} = 10^{-5}\,\mathrm{m}$ を選べば，(2.5)は $E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{s}} = 0.73\mu b^2$ となる．したがって，粗い近似のときは，転位の種類によらず，単位長さの転位の弾性ひずみエネルギーを

$$E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{s}} = \alpha\,\mu b^2 \qquad (\alpha \text{ は 1/2 から 1 程度の大きさ}) \tag{2.7}$$

としてしまうことがある．

★　2.2.3　直線混合転位

上述のように，最も粗い近似では，混合転位の弾性ひずみエネルギー $E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{m}}$ にも(2.7)を適用して構わないが，やや近似を上げた取り扱いでは 2.1.2 のように，バーガースベクトルをらせん成分 $\mathbf{b}_{//}$ と刃状成分 $\mathbf{b}_{\perp}$ に分解し，それぞれの転位のエネルギーに対して(2.5)と(2.6)を用いたものを足し合わせることを行う．すなわち，転位線方向とバーガースベクトル方向のなす角が θ のとき，次式で表す．

$$E_{\mathrm{o}}^{\mathrm{m}} = \frac{\mu b^2}{4\pi}\left(\cos^2\theta + \frac{\sin^2\theta}{1-\nu}\right)\ln\left(\frac{R}{r_{\mathrm{o}}}\right) = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}(1-\nu\cos^2\theta)\ln\left(\frac{R}{r_{\mathrm{o}}}\right) \tag{2.8}$$

このように弾性ひずみエネルギーに対しても重ね合わせが有効な理由は，(2.1)，(2.3)からわかるように，らせん転位と刃状転位では同じ添字を持つ応力成分がないので，弾性相互作用エネルギーがゼロとなるからである．

★　2.2.4　曲線転位

曲がった転位の弾性ひずみエネルギーの厳密な計算は非常に難しい．もし正弦波のように局所的には波打っていても，全体として直線状になっている転位であれば，転位の長さは直線転位より長いが，遠方での弾性場は直線転位のものとあまり変わらないであろう．したがって，曲がった転位の単位長さの部分あたりに(2.8)を適用して，ある長さ分のエネルギーを見積もると，通常は過大評価となる．むしろ積分の上限として結晶粒径 R ではなく，曲がった転位の曲率半径程度を想定した方が実際に近いと考えられる．このことは，転位ループの場合にも言える．この場合，互いにループの反対側の位置にある転位部分同士は反対符号の転位となっており，それらの作る弾性場は遠方では互いに打ち消し合うからである．このことを考慮して，半径 L の転位ループのエネルギーとして

$$E^{\mathrm{L}} \cong 2\pi L \times \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln\left(\frac{L}{r_{\mathrm{o}}}\right) = \frac{\mu b^2 L}{2} \ln\left(\frac{L}{r_{\mathrm{o}}}\right) \tag{2.9}$$

という近似を用いることがある．

2.3　転位の線張力

以上ように，転位は単位長さあたりに割り付けられる弾性ひずみエネルギー（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．もし，転位が曲がっているならば，曲がった転位の一部分を考えると，その両端にかかる線張力の合力はそこでの曲率中心の方向に向かう（図 2.2）．この合力が転位線を直線にしようとする．

図 2.2　曲線転位の線張力の合力

では，線張力の大きさはどのように考えれば良いのであろうか？　単位長さの転位のエネルギーが E_{o} ならば，転位が $\mathrm{d}l$ だけ長さを増すと，転位のエネルギー（ヘルムホルツエネルギー）は $E_{\mathrm{o}}\mathrm{d}l$ だけ増加する．このとき，線張力 T_{L} は(1.19)に相当する式から求まる．すなわち，

$$T_{\mathrm{L}} = -\mathrm{d}(\Delta F)/\mathrm{d}l = -\lim_{\mathrm{d}l \to 0}\{(E_{\mathrm{o}}\mathrm{d}l)/\mathrm{d}l\} = -E_{\mathrm{o}} \tag{2.10}$$

となる．これは転位の長さを縮めようとする力なので負号が付くが，線張力の大きさのみを考えるときは負号をはずしても構わない．すなわち(2.7)から

$$T_{\mathrm{L}} = \alpha \mu b^2 \tag{2.11}$$

を得る．ただし，曲がった転位のときは 2.2.4 で述べたように，対数項の中には結晶の大きさ R ではなく曲線転位の曲率半径を用いた方が実際に近い．したがって，(2.11)中の α は(2.7)中の α より若干小さめの値と考えることにする．実際，

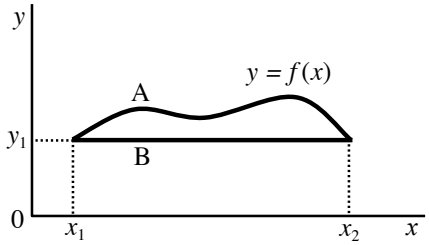
$$T_{\mathrm{L}} = \mu b^2 / 2 \tag{2.12}$$

としてしまうことが多い．

第 2 章問題

Problem 2.1　(2.1)や(2.3)で与えられる転位の周りの応力場（各応力成分）の等高線図（横軸 x，縦軸 y）をパソコンを使って描け．教科書に載っているような図が得られるだろうか？

Problem 2.2　転位の周りの弾性場は長距離応力場と言われる．これを理解するために，$r_{\mathrm{o}} = 1\,\mathrm{nm}$，$R_{\mathrm{o}} = 10\,\mu\mathrm{m}$ として(2.5)または(2.6)を使い，転位の弾性ひずみエネルギーの大きさの半分は $0.1\,\mu\mathrm{m} \le r < 10\,\mu\mathrm{m}$ 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．

Problem 2.3　単位長さあたりの転位の自己エネルギーとして，$\alpha = 1/2$ と置いた(2.7)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 $\mu = 5 \times 10^{10}\,\mathrm{N/m^2}$，バーガースベクトルの大きさを $b = 2.5 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}$ 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．
（$1\,\mathrm{eV} = 1.602 \times 10^{-19}\,\mathrm{J}$）
(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．

(d) $E_o = \mu b^2 / 2$ としたとき，図中の範囲 $x_1 \le x \le x_2$ で定義される転位 A と転位 B の自己エネルギーの差を式で表せ．ただし，$x_1 \le x \le x_2$ で転位 A は $y = f(x)$ という曲線で，転位 B は $y = y_1$ という直線で表されるものとする．