第 4 章　転位の諸性質

4.1　転位の結晶学

4.1.1　完全転位のバーガースベクトル

転位は μb^2 に比例する自己エネルギーを持つので，自己エネルギーをなるべく小さくするためには，b をなるべく小さくする必要がある．一方，転位の運動によってすべり変形が起こっても，結晶構造が変化するわけではない．以上のことから，バーガースベクトル **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，**b** が結晶の並進ベクトルの一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，図 4.1 のように，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．

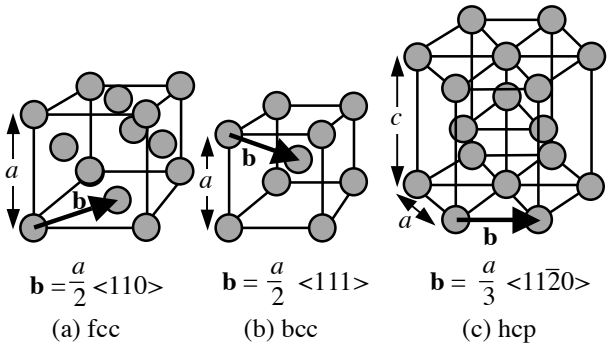

図 4.1　すべり転位のバーガースベクトル

4.1.2　部分転位と積層欠陥

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．このような転位を部分転位（partial dislocation）または不完全転位（imperfect dislocation）という．

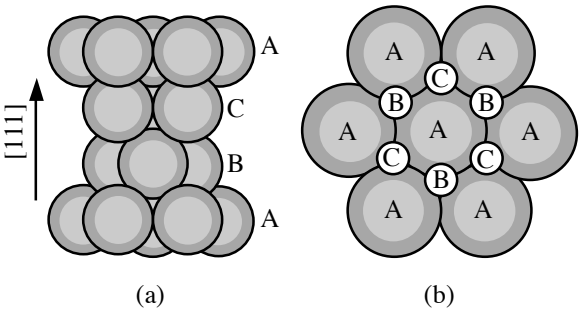

図 4.2　fcc の剛体球モデルと(111)面の積層

図 4.2(a)の fcc の剛体球モデルを考えると，{111}すべり面はこれ以上原子を密に詰めることのできない最密面(close packed plane)となる．fcc での最密面の原子の積み重なり（積層，stacking，という）は・・・ＡＢＣＡＢＣ・・・である．すなわち，(b)のように上から見ると，Ａ面の上にＢ面が，その上にＣ面が... という積層になっている．

図 4.3(a)のように，(111)面上で完全転位 $\mathbf{b}_1 = (a/2)[\bar{1}01]$ がＡ面とＢ面の間を走ると，$\mathbf{b}_1$ だけのずれがすべり面の上下の結晶に起こり，左のＢの位置の原子が右のＢの位置へと移動する．しかし，すべりの前後での原子位置がＢであることには変わりがないので・・・ＡＢＣＡＢＣ・・・積層には何の変化も生じない．しかし，もし部分転位 $\mathbf{b}_2 = (a/6)[\bar{1}\bar{1}2]$ が走ると積層に変化が生じる．剛体球モデルを考えると，図 4.3(a)のように，(111)面上で $\mathbf{b}_1 = (a/2)[\bar{1}01]$ という変位が一度に起こるよりも，$\mathbf{b}_2 = (a/6)[\bar{1}\bar{1}2]$（図 4.3(a)の左のＢ→Ｃ）と $\mathbf{b}_3 = (a/6)[\bar{2}\bar{1}1]$（Ｃ→右のＢ）の２段階の変位の方が，剛体球の接する谷間を通れるので容易と想像できる．実際，fcc 結晶中の完全転位は

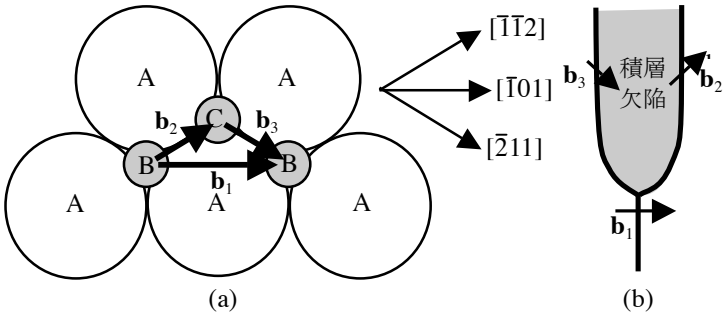

図 4.3　(a) fcc の(111)面上の完全転位（$\mathbf{b}_1$）とショックレーの部分転位（$\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$）のバーガースベクトル．
(b) 完全転位の拡張

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{a}{6}[\bar{2}11] \tag{4.1}$$

のように，２本の部分転位に分解している．

転位の自己エネルギーはb^2に比例するので，一般に

$$|\mathbf{b}_1|^2 > |\mathbf{b}_2|^2 + |\mathbf{b}_3|^2 \tag{4.2}$$

なら転位は２本に分解した方がエネルギー的に有利である．(4.1) の転位の分解反応式は，この条件を満たしている．ここで現れた２本の部分転位をショックレーの部分転位（Schockley's partial dislocation）と呼ぶ．また，図 4.3(b)のように，すべり面上に生じる２本のショックレー部分転位とその間の最密面の積層の乱れ（これを積層欠陥，stacking fault，という）まで含む全体を拡張転位（extended dislocation）という．

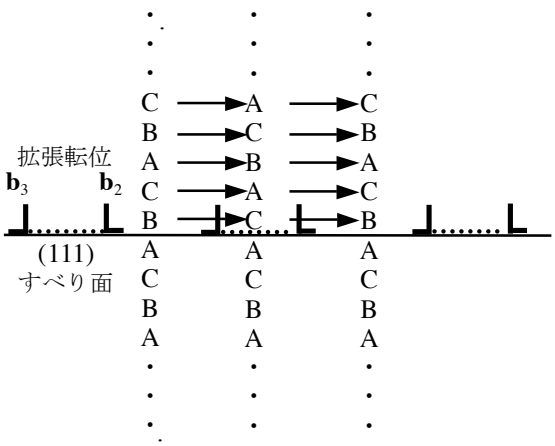

図 4.4　拡張転位の運動と積層欠陥

積層欠陥についてもう少し考えてみよう．図 4.4 で A 面と B 面の間に(111)すべり面を考え，拡張転位が左から右へ動くとする．左の積層はまだ転位が通る前で，通常の fcc 積層である．中央の積層は，図 4.3 の $\mathbf{b}_2$（B→C という変位を与える）のみが動いた後で，$\mathbf{b}_3$ はまだ通過していない状況である．このとき，下から・・・ＡＢＣＡＣＡＢＣＡ・・・と，積層に変化が現れ，部分転位 $\mathbf{b}_2$ と $\mathbf{b}_3$ の間に積層欠陥を生じている．一番右の積層は，$\mathbf{b}_3$ の転位（Ｃ→Ｂという変位を与える）も通過した後を表し，$\mathbf{b}_1$ という完全転位が通過した場合と同様に，正常の fcc 積層に戻っている．積層欠陥は面欠陥の一種で，表 4.1 のように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．

表 4.1　積層欠陥エネルギーの値，mJ/m^2

Ag	Cu	Ni	Al	Fe	Mo
20	40	80	150	950	1840

拡張転位の幅は積層欠陥エネルギーが小さいほど大きくなることを示そう．簡単のためにらせん転位の拡張を考える．図 4.5 のように，拡張転位の転位線方向を x_3，すべり面法線を x_2 方向にとった座標系を用い，拡張転位の幅を d とする．各々のショックレー部分転位のバーガースベクトルはこの座標系で $\mathbf{b}_2 = [a/(2\sqrt{6}),\ 0,\ a/(2\sqrt{2})]$，$\mathbf{b}_3 = [-a/(2\sqrt{6}),\ 0,\ a/(2\sqrt{2})]$ となり，x_1 成分は刃状成分，x_3 成分はらせん成分を表す．転位線に平行な単位ベクトルは双方とも $\mathbf{t} = [0,\ 0,\ 1]$ である．今，$\mathbf{b}_3$ 転位が $\mathbf{b}_2$ 転位の位置につくる応力場 $\sigma_{ij}^{(3)}$ はらせん成分については(4.1)，刃状成分については(4.3)に $x_1 = d$，$x_2 = 0$ を代入して得られる．$\mathbf{b}_2$ の成分を $b_i^{(2)}$（$i = 1,2,3$）と表すと，ピーチ・ケーラーの式(3.1)より，単位長さの $\mathbf{b}_2$ 転位が $\mathbf{b}_3$ 転位によって受ける x_1 方向の力 f_1 は

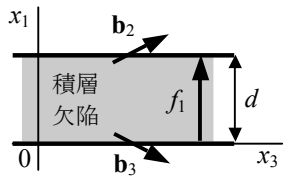

図 4.5　拡張転位の幅の計算

$$f_1 = \sigma_{12}^{(3)} b_1^{(2)} + \sigma_{32}^{(3)} b_3^{(2)}$$

と表せる．ここにすでに知られた $\sigma_{ij}^{(3)}$ と $b_i^{(2)}$ を代入すると，

$$f_1 = \frac{\mu a^2}{16\pi d}\left\{\frac{2-3\nu}{3(1-\nu)}\right\}$$

を得る．これは正の値なので，ショックレー部分転位同士は反発力によって互いに離れようとしていることがわかる（まさにこの理由によって，完全転位の分解が起こるのである）．一方，単位面積あたりの積層欠陥エネルギー Γ_{SFE} は表面張力と同様に積層欠陥の面積をなるべく小さくしようとし，２本のショックレー部分転位を近づけようとする．その張力は Γ_{SFE} そのものなので，これと(4.3)を等しい

と置くと，反発力と張力が釣り合ったところで，平衡の拡張転位の幅 d_{eq} が次式のように求まる．

$$d_{\mathrm{eq}} = \frac{\mu a^2}{16\pi\Gamma_{\mathrm{SFE}}}\left\{\frac{2-3\nu}{3(1-\nu)}\right\} \tag{4.4}$$

すなわち，拡張転位の幅と積層欠陥エネルギーの間には反比例の関係がある．(4.4)に銅の物性値を代入すると $d_{\mathrm{eq}} \approx 1.5\mathrm{nm}$ 程度となる．刃状転位の拡張の場合でも d_{eq} と Γ_{SFE} の反比例の関係は同様であるが，d_{eq} は(4.4)より２倍程度大きな値となる．

★　4.1.3　双晶形成と fcc→hcp 変態

ショックレーの部分転位の運動による fcc の{111}面の積層変化は，それが規則的に起こると，元の結晶と異なる結晶を生成させる．図 4.6 は fcc の{111}双晶（twin）の図である．双晶領域を挟んで(111)面積層が変化しているが，双晶の部分もまた（上下の結晶とは方位の異なる）fcc 結晶である．双晶とはこのように元の結晶と鏡面対称をもつ結晶のことをいう．そして鏡面(ここでは(111)面)のことを双晶面という．図 4.6 中，$[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向へ引いた太い矢印で双晶形成のせん断方向を示した．この矢印ベクトルは前述の $\mathbf{b}_2 = (a/6)[\bar{1}\bar{1}2]$ の整数倍の大きさを持つ．したがって，各(111)面にショックレー部分転位が１本ずつ走れば，双晶が形成されることがわかる．

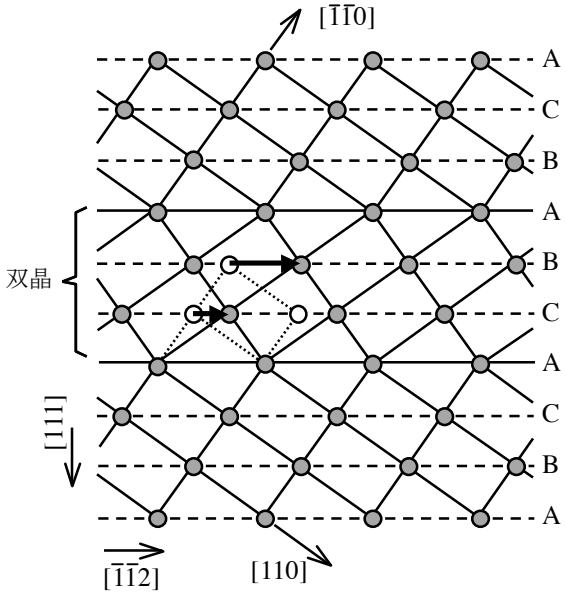

図 4.6　[$\bar{1}$10]方向から見た fcc の(111)双晶

hcp の(0001)面は fcc の(111)面と同様に最密原子面であるが，その積層は・・・ＡＢＡＢＡＢ・・・である．hcp 積層は fcc 構造中にショックレー部分転位が１原子面おきに走ることによって形成される．これは双晶とは異なり，結晶構造の変化（相変態）をもたらす．実際，fcc→hcp マルテンサイト変態はこのようなショックレー部分転位の運動によって起こることが確認されている．

4.2　転位の増殖

焼鈍によって十分に軟化させた金属では，$\rho = 10^9 \sim 10^{11}\,\mathrm{m}^{-2}$ 程度の転位密度を持つが，塑性変形によって強加工された金属では転位密度が増大し，$\rho = 10^{14} \sim 10^{15}\,\mathrm{m}^{-2}$ 程度の値にまで達する．このことは，塑性変形中に転位が増殖（multiplication）することを意味している．

転位の増殖機構を理解するために，まず曲がった転位に働く力を考えてみよう．ピーチ・ケーラーの式で学んだように，すべり方向へのせん断応力を τ と書くと，単位長さの転位に働く力は $f = \tau b$ となり，常に転位線に垂直に働く．図 4.7 のような転位線の一部 Δs に着目すると，その両端の転位の線張力 T_{L} は(4.12)で与えられる．曲がった転位の曲率半径を r，図の角度を 2θ とすると，両端での線張力の合力は曲率中心 C の方向を向き，その大きさは θ が小さいとき $2T_{\mathrm{L}}\sin\theta \approx 2T_{\mathrm{L}}\theta$ となる．この力と長さ Δs の転位部分に働く力 $\tau b\Delta s$ が釣り合っているのだから，$\Delta s = 2r\theta$ より単位長さの転位に働く力の釣り合いの式

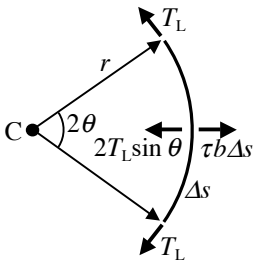

図 4.7　曲線転位に働く力の釣り合い

$$\tau b = T_{\mathrm{L}}/r, \quad \text{すなわち} \quad \tau = T_{\mathrm{L}}/rb \approx \mu b/(2r) \tag{4.5}$$

を得る．(4.5)は，転位をさらに曲げる（r を小さくする）ためには，より大きな力を加えなければならないことを意味している．

さて．よく焼鈍された金属中にも転位は存在し，それは，図 4.8 のように粗い網目（ネットワーク）

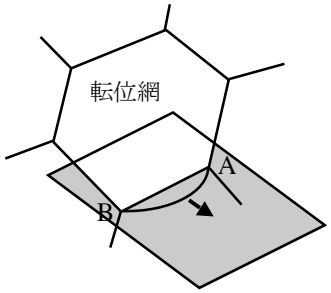

図 4.8　主すべり面上の転位の張り出し．A, B はピン止め点．

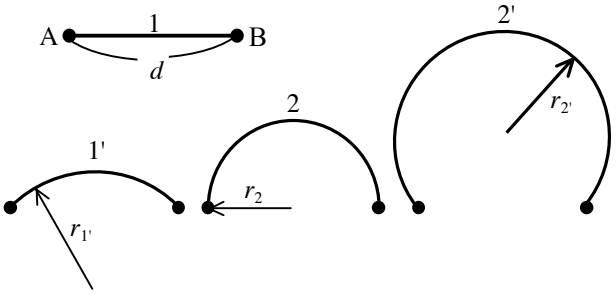

図 4.9　ピン止め点 A, B 間の転位の張り出し

を形成していると言われている．このとき，図の AB 部の転位線が主すべり面上に乗っているとしよう．A 点や B 点は転位網の節であり，この部分はせん断応力が加わっても動きにくい．したがって，応力下では，AB 部の転位は A 点と B 点をピン止め点（pinning point）として張り出すことになる．

この張り出しの過程を考えたのが図 4.9 である．AB の間隔を d とする．外力（せん断応力）を増加すると転位は AB 間で円弧状に張り出し，$1 \to 1' \to 2 \to 2'$ のようになる．各々の段階での転位の曲率半径を比較すると，図 4.9 の 2 の状況において最小になることがわかる．このとき，張り出した転位はちょうど半円形となり，$2r_2 = d$ が成り立つ．(4.4)から，曲率半径が最小のとき応力が最大となるので，図 4.9 の張り出しが半円形を越える段階まで張り出しが可能なためには，少なくとも次式の τ_{FR} 以上のせん断応力を加える必要があることになる．

$$\tau_{\mathrm{FR}} = \frac{\mu b}{2r_2} = \frac{\mu b}{d} \tag{4.6}$$

さらに張り出しを続けると，図 4.10(a)の $2 \to 3 \to 4$ のようになる．すなわち，もともと線分 AB のみの長さの転位部分だったものが，増殖によって線分 AB に円（転位ループ）4 が加わったものとなる．線分 AB は再び張り出すので，この機構は繰り返し起こることができ，図 4.10(b)のようにどんどん転位は増殖される．この転位の増殖機構をフランク・リードの増殖機構（Frank-Read multiplication mechanism）と呼び，線分 AB のような増殖の基になる転位部分をフランク・リード源（Frank-Read source）と呼ぶ．フランク・リード機構を起こすことができる必要最小限の応力は(4.6)で与えられる．応力がこの値を越えると，転位は円弧状の釣り合いの形をとることができずに長距離運動を始め，結晶の巨視的な降伏が起こる．すなわち，τ_{FR} はこの材料の臨界分解せん断応力である．

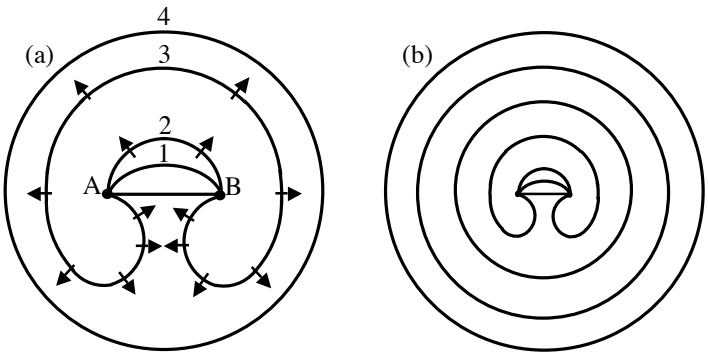

図 4.10　フランク・リードの転位増殖機構

材料を塑性変形させると，すべり転位は運動中にさまざまな障害物に出会う．障害物がピン止め点として働くに十分な強さがある場合は，フランク・リード機構が働き，転位の増殖が起こる．増殖された転位も，続いて動く転位の障害物となり得るので，塑性変形が進行するにつれてすべり転位の運動が困難になるであろう．これが後に学ぶように加工硬化（work hardening）の原因となる．

4.3　交差すべりと上昇運動

らせん転位では **b** と **t** が平行なため，転位が与えられてもすべり面が特定できない．すなわち，すべり面は **b** を含む面でさえあれば良く，らせん転位は適宜すべり面を変えて運動することができる．このように，らせん転位が前方にある障害物等を避けてすべり面を変えて運動する過程を交差すべり（cross slip）と言う．

しかし，らせん転位といえども，もし部分転位に分解して拡張転位になっていれば，積層欠陥を含む面としてすべり面が特定されてしまうので交差すべりは不可能となる．拡張転位が交差すべりを起こすためには，（よりエネルギーの高い）完全転位に戻る（収縮，contraction，という）必要がある．この様子を図 4.11 に示す．拡張転位の収縮過程にはエネルギーが必要であるが，少なくともその一部には原子の熱振動のエネルギーを借りる．熱振動のエネルギーは高温ほど大きくなるので，交差すべりも高温ほど容易になる．さらに，(4.4)で求まる拡張転位の幅が広ければ，収縮にはより大きなエネルギーが必要であろう．したがって，積層欠陥エネルギーの小さな材料では大きな材料に比べて交差すべりは困難である．

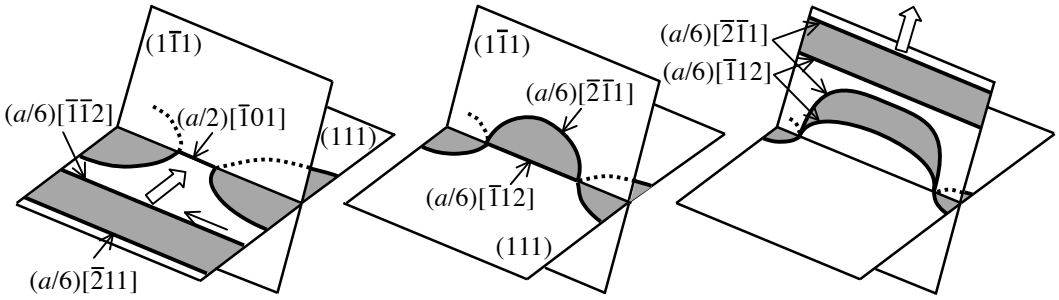

図 4.11　拡張した fcc のらせん転位の収縮と交差すべり

表 4.1 のように，鉄やモリブデンのような bcc 金属では一般に積層欠陥エネルギーが大きく，転位はほとんど拡張していないと考えて良い．したがって，交差すべりは fcc 金属に比べて容易に起こる．頻繁に起こる交差すべりのため，bcc 金属では塑性変形によって生じた表面のすべり線は直線性が悪く波打っている．また，図 4.12 のような二重交差すべりとフランク・リード源の組み合わせ（図の A，B 点がピン止め点になる）による転位の増殖機構も容易に起こる．

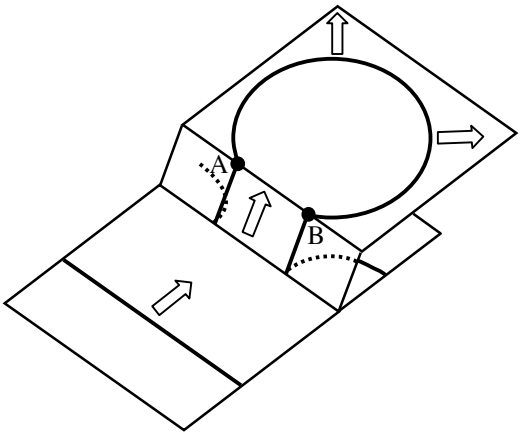

図 4.12　二重交差すべりによる転位の増殖機構．点 A, B がフランク・リード源ピン止め点となる．

らせん転位に対して刃状転位（あるいは刃状成分をもつ混合転位）では，バーガースベクトル **b** と転位線に平行なベクトル **t** を共に含む面として一つのすべり面が特定されてしまう．したがって交差すべりは不可能である．しかし，高温になると実は刃状転位もすべり面を逸脱した運動（上昇運動，climb，という）が可能となる．ただし上昇運動のためには局所的に転位芯を構成する原子を吸収または放出しなければならない（図 4.13）．これは転位芯にある原子と空孔の位置交換によって起こり，空孔機構（1.2.2 節参照）による拡散そのものなので，刃状転位の上昇運動も高温ほど起こりやすくなる．位置交換によって転位近傍の局所的な原子の数に増が生じる．その意味で，上昇運動のことを転位の非保存運動（non-conservative motion）という．一方，通常の転位のすべり運動やらせん転位の交差すべりには

局所的な原子の数の増減がないので，これらは転位の保存運動（conservative motion）と呼ばれる．

交差すべりや上昇運動によって，平行ではあるが異なるすべり面上にある異符号の転位同士が互いに近づいて対消滅を起こすことができる．これによって変形中に増大した転位密度を減少させることができる．これを回復（recovery）という．強加工して硬くて脆くなった材料を，高温に保持して再び柔らかくする熱処理を焼鈍（annealing）というが，これは回復現象を利用したものである．

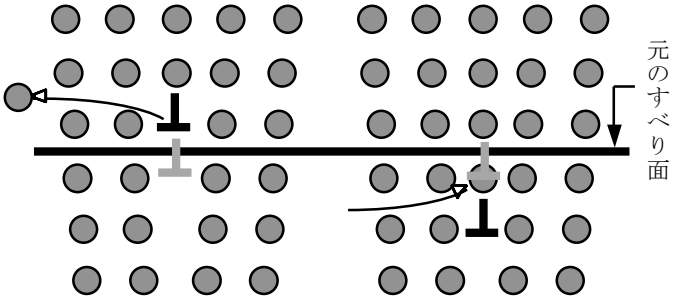

図 4.13　刃状転位の上昇運動

★　4.4　転位と他の欠陥の相互作用

転位は他の格子欠陥とさまざまな相互作用を起こす．このうち，転位同士の弾性相互作用については上で学んだ．ここでは，転位同士のその他の相互作用，および転位と点欠陥の弾性相互作用について考察を加える．

★　4.4.1　転位同士の相互作用

4.2.2 節で学んだように，2 本の平行な刃状転位があるとき，それらが同符号ならば上下に，異符号ならば互いに 45° の角度をなして安定配置になろうとする．今，多数の同符号の刃状転位があるとき，それらが上下に揃って安定配列すると，回復によるポリゴン化（polygonization）のように，小傾角粒界（small angle boundary）が形成される（図 4.14）．

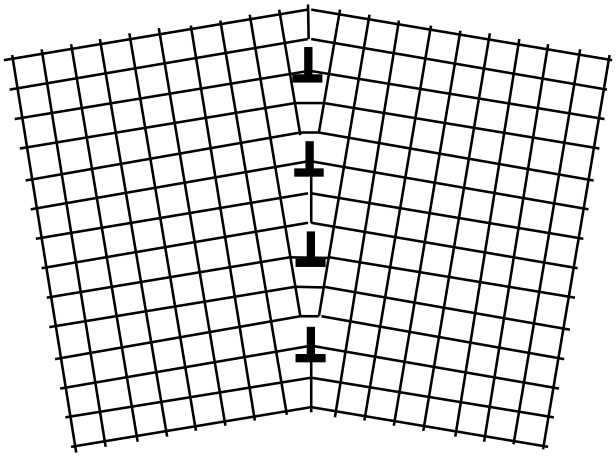

図 4.14　小傾角粒界の模式図

すべり面が平行ではない 2 本の転位の場合，弾性相互作用よりもむしろ転位の切り合いの方が重要となることがある．図 4.15 において，らせん転位 A がすべり面上を移動する際に，林立転位 I（刃状転位）と II（らせん転位）に出会って切り合いが起こり，転位 B になったとしよう．切り合いの後には，一方の転位には他方の転位のバーガースベクトルに等しいだけの段差を生じる．段差のうち，元のすべり面上に形成されるものをキンク（kink）と言い，元のすべり面を離れるものをジョグ（jog）と言う．バーガースベクトルの保存則より転位 A と転位 B のバーガースベクトルは同一である．したがって，図 4.15 で転位 B に生じたキンク部もジョグ部も刃状転位であることがわかる．転位 B のさらなるすべり運動によってキンクは容易に消滅するが，ジョグ部の刃状転位のすべり面は元のすべり面と異なるため，ジョグは転位 B の運動方向にはすべり運動できない（高温では上昇運動によってジョグは転位 B と一緒

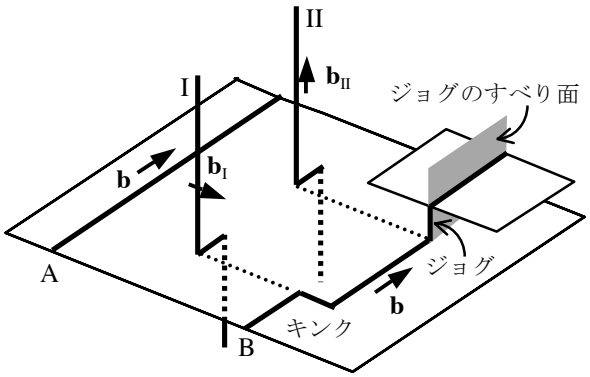

図 4.15　らせん転位 A と林立転位 I, II との切り合いによって生じるキンクとジョグ

に運動できるようになる)．したがって，らせん転位上のジョグは転位の運動に対する障害物（ピン止め点）として働く．このように一般には運動転位と林立転位との相互作用によって障害物が形成され，そこがフランク・リード源となると転位の増殖が起こる．

★　4.4.2　転位と点欠陥の弾性相互作用

転位と点欠陥の弾性相互作用のうち，最も重要なものに寸法効果（size effect）と呼ばれるものがある．原子空孔にしろ，溶質原子にしろ周囲の母相原子と大きさが異なるため，そこにはミスフィットひずみ（eigen ひずみの１種）が生じる．置換型溶質原子の場合，ミスフィットは δ_{ij} 型に取れ，

$$\varepsilon_{ij}^{*} = \varepsilon\delta_{ij}, \quad \varepsilon = (r_{\mathrm{s}} - r_{\mathrm{m}}) / r_{\mathrm{m}} \tag{4.7}$$

と書ける．ここで，r_{s} と r_{m} はそれぞれ溶質原子，母相原子の半径である．また，δ_{ij} はクロネッカーのデルタと呼ばれ，次式で定義できる．

$$\delta_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & (\text{for } i = j) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{4.8}$$

今，x_3 軸上に直線転位があり，１個の溶質原子が座標 $[x_1, x_2, 0]$ の点上にあるとき，転位と溶質原子との弾性相互作用エネルギー E_{int} は，前半の講義で学んだ手法を用いて，転位の周りの応力場(2.1)，(2.3)と(4.7)，(2.30)を使えば次式のように得られる．

(i) らせん転位

$$E_{\mathrm{int}}^{\mathrm{s}} = 0 \tag{4.9}$$

(ii) 刃状転位

$$E_{\mathrm{int}}^{\mathrm{e}} = \frac{1+\nu}{\pi(1-\nu)} \mu b \varepsilon \Omega \left(\frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} \right) \tag{4.10}$$

ここで，Ωは母相中の溶質原子１個の体積で，弾性論の近似では通常 $\Omega \approx 4\pi r_{\mathrm{s}}^3 / 3$ とする．上式のように，らせん転位は置換型溶質原子とは弾性相互作用がない．これはらせん転位の応力場には静水圧成分が存在しないことによる（もちろん等方弾性論や直線転位という仮定を緩めれば話が変わってくる）．一方，侵入型溶質原子の場合はミスフィットひずみが δ_{ij} 型ではなくなるので，らせん転位とも刃状転位とも弾性相互作用を持つ．この理由によって，後に学ぶように，侵入型溶質原子による固溶強化の方が置換型溶質原子によるものより大きくなる．

(4.10)より，$\varepsilon < 0$（溶質原子の方が母相原子より小さい）のとき，$x_2 > 0$ なら $E_{\mathrm{int}}^{\mathrm{e}} < 0$（引力型相互作用）となることがわかる．すなわち，原子の拡散を許せば，小さな溶質原子は刃状転位の上方（余分な原子半面の側）に集まろうとする（逆に，大きな溶質原子の場合は刃状転位の下方に集まろうとする）．このように，刃状転位の周囲にはしばしば溶質原子が集まった雰囲気（atmosphere）が作られる．

第 4 章問題

Problem 4.1　fcc 結晶で，(111) と $(\bar{1}11)$ の２つのすべり面上のすべりが同時に起こる場合を考える．

(a) ２つのすべり面の交線の方向を求めよ．

(b) 今，それぞれの面をすべる完全転位のバーガースベクトルを，$\mathbf{b}_1 = (a/2)[\bar{1}01]$，$\mathbf{b}_2 = (a/2)[110]$ とする．この２本の転位は，２つのすべり面の交線上で出会うと，$\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 \rightarrow \mathbf{b}_3$ という反応を起こして１本の転位となる．$\mathbf{b}_3$ を求めよ．また，この反応がエネルギー的に都合が良いことを示せ．

(c) $\mathbf{b}_3$ 転位の転位線の方向 $\mathbf{t}_3$ は(a)で求めた交線方向である．$\mathbf{b}_3$ 転位が刃状転位であることを示せ．
(d) $\mathbf{b}_3$ と $\mathbf{t}_3$ を共に含む面として $\mathbf{b}_3$ 転位の可能なすべり面が決まる．一方，fcc ではすべり面は{111}型の面に限られる．$\mathbf{b}_3$ 転位の可能なすべり面が{111}型の面ではないことを示して，$\mathbf{b}_3$ 転位は実際上運動することができないことを理解せよ．（$\mathbf{b}_3$ 転位のことを，ローマーの不動転位（Lomer sessile dislocation）またはローマー固着（Lomer lock）と呼ぶ.）

Problem 4. 2　4.1.3 で,fcc の各(111)面にショックレー部分転位が１本ずつ走れば双晶が形成され，１原子面おきに１本づつ走れば hcp が形成されることを学んだ．これを，図 4.4 のような絵を描くことによって理解せよ．

Problem 4. 3　よく焼鈍された結晶での転位密度として，$\rho = 10^{10}\,\mathrm{m}^{-2}$ を考えよう．
(a) 転位が結晶内に粗い転位網を形成しながら均一に分布していると考えると，転位同士の平均間隔はどの程度のオーダーとなるか？
(b) この間隔を 4.2 節のフランク・リード源のピン止め点間隔と考えたとき,(4.6)から得られる τ_{FR} はどの程度の大きさとなるか？　剛性率μを単位として答えよ．ただし，$b = 2.5\times10^{-10}\,\mathrm{m}$ とせよ．
(c) τ_{FR} がこの結晶の降伏応力（臨界分解せん断応力）を決めているとすれば，(b)で得られた値と完全結晶の理想強度の間にはどの程度の相違があるか？