固体の変形と力学(後半)

材料物理科学専攻 尾中 晋 J2 棟 1505 号室, 内線 5564 onaka.s.aa@m.titech.ac.jp

#### はじめに

本講義は、加藤教授の前半部分の変形の基礎を受け継いで、具体的に材料の格子欠陥や力学的性質 を理解することを目的としている.材料の力学的性質関連の授業の中でも、本講義は最も基礎的なも のである.

本講義内容の多くは、以下の教科書・参考書の内容を参考にしている. もちろん、購入を強制する わけではない.

· 加藤雅治, 熊井真次, 尾中 晋: 材料強度学, 朝倉書店, 1999.

· 加藤雅治:入門転位論,裳華房,1999.

本講義の構成

できるだけ中味の濃い講義を目指しているが、時間の制約で詳細をカバーできない箇所もある.しかし、一方で、そういう箇所に式だけ示して「憶えろ」というのでは、基礎科目講義としての面目がない.「憶えるより理解する」方がはるかに大切だと思うからである.したがって、式の導出を含めて、 講義時間にカバーできない箇所については、節や項の前に星印 ★ を示して便宜を図ることとした. ただ、そこでの結果は後に使うこともあるので、勉強したい人は読んでおいて欲しい.

# 第1章 格子欠陥と転位の概念

### 1.1 さまざまな格子欠陥

金属材料や無機材料の多くは構成原子が3次元的に規則正しく並んだ結晶である.原子配列の規則 性が完全な理想的な結晶を完全結晶(perfect crystal)という.しかし,実際の結晶には何らかの規 則性の乱れが必ず含まれている.それらを総称して格子欠陥(lattice defect または lattice imperfection)または結晶欠陥(crystal defect (imperfection))という.

格子欠陥は多くの場合,液相からの冷却・凝固(solidification)過程,または塑性変形によって 結晶内に導入される.図 1.1 のようなさまざまな格子欠陥のうち点欠陥のみが熱力学的に安定に存在 できる.他の欠陥は存在すると結晶の自由エネルギーを増大させるので,厳密には安定には存在でき ない.しかし,結晶生成段階や変形によって不可避的に導入された格子欠陥を全て除去することは不 可能で,点欠陥以外の格子欠陥も結晶中には必ず含まれていると考えて良い.

材料の力学的性質(特に降伏強度や引張強度などの塑性的性質)は材料内での格子欠陥の存在状態 に強く影響される.そして格子欠陥の存在状態は材料がそれまでに受けた履歴(熱処理や変形履歴) に大きく依存するので,履歴を知らなければ材料の力学的性質を知ることはできない.このように組 織や格子欠陥の存在状態に強く依存する性質を構造敏感な性質(structure-sensitive property)と いう.これに対して,ヤング率などの弾性的性質や密度,熱膨張率などの物性は,組織や格子欠陥の 存在状態にあまり強くは依存しない(弱い依存性はある).このような性質を構造不敏感な性質 (structure-insensitive property)という.



図 1.1 さまざまな格子欠陥, (a) 光学顕微鏡スケール(約50倍), (b) 電子顕微鏡スケール(約5万倍), (c) 原子スケール(約1千万倍)

### 1.2 点欠陥

# ★ 1.2.1 原子空孔の熱平衡濃度

熱力学的に安定に存在できる点欠陥が結晶中にどの程度含まれているかを原子空孔(vacancy,以下 単に空孔と呼ぶ)を例にとって考えてみよう.完全結晶中に空孔を1個導入するためには,完全結晶 の内部の原子1個を取り出して表面にまで持って来なければならない.このためには外から仕事を加 える必要があり,この仕事は結晶に自由エネルギーの増加として蓄えられる.しかし,多数の空孔が 形成されると,それらを結晶内のどの位置に配置するかという多様性が現れるため,自由エネルギー は必ずしも増加しない.統計熱力学ではこの多様性を配列のエントロピー(configurational entropy, または混合のエントロピー, mixing entropy という)として取り入れる.結晶の熱力学的安定性を議 論するためには,この配列のエントロピーまで考慮した結晶の自由エネルギー変化を考える必要があ る.

今,一定温度 T の下で結晶が N 個の原子と n 個の空孔で構成されているとする.結晶は十分に大きく,N >> n >> 1が満たされていると仮定する(この仮定が正当であることは後にわかる).熱力学的安定性の議論では、与えられた束縛条件に対して適切な自由エネルギーを評価しなければならない. それらには、ヘルムホルツエネルギー(Helmholtz energy)やギブスエネルギー(Gibbs energy)が あるが、固体では1気圧付近での圧力の影響は以下に述べる内部エネルギーの寄与に比べて非常に小 さいので、一定温度*T*での熱平衡の条件としてはヘルムホルツエネルギーを採用して構わない.

n 個の空孔を含むことによる結晶のヘルムホルツエネルギーの変化 ΔF は以下のように表される.

(1.1)

 $\Delta F = n(E_{\rm V} - TS_{\rm V}) - TS_{\rm M}$ 

ここで $E_v \ge S_v$ は、1個の空孔が形成されたための結晶の内部エネルギーとエントロピーの増加分で、 それぞれ空孔の形成エネルギー (formation energy)、形成エントロピー (formation entropy) と呼 ばれる.  $S_M$ は前述の配列のエントロピーである.この項は空孔が存在するためにその周囲の原子振動 に変化が生じたことに由来する.この項を無視した議論でも通常はあまり問題がないが、まずはきち んと考えておくことにする.

n個の空孔をN+n個の格子点にちりばめる方法の総数Wは順列・組み合わせの考え方から

$$W = {}_{N+n}C_n = (N+n)!/(N!n!)$$

と表せる. 統計熱力学によると, このときの配列のエントロピーは $S_{M} = k \ln W$  (k: ボルツマン定数) と与えられる. さらに仮定より N >> n >> 1なのでスターリングの公式  $\ln x! \cong x \ln x - x$  (ただし x >> 1) が使え,  $S_{M}$ は以下のように書ける.

$$S_{\rm M} = k[(N+n)\ln(N+n) - N\ln N - n\ln n]$$
(1.2)

(1.1), (1.2)より

$$\Delta F = n(E_{\rm V} - TS_{\rm V}) - kT[(N+n)\ln(N+n) - N\ln N - n\ln n]$$
(1.3)

が得られる. 温度 T が一定のもとでの熱平衡条件は、ヘルムホルツエネルギーが最小となる条件、  $\partial(\Delta F)/\partial n = 0$ 、(N は一定)、で与えられる. すなわち、

 $\partial(\Delta F)/\partial n = E_{\rm V} - TS_{\rm V} - kT\ln(N+n)/n = 0$ 

これより空孔の平衡濃度(無次元量) Cvは

$$C_{\rm V} = \frac{n}{N+n} = \exp\left(\frac{S_{\rm V}}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_{\rm V}}{kT}\right)$$
(1.4a)

と求められる. すぐ下でわかるように,  $C_v$ は1に比べて十分小さい値をとるので, 確かにN >> nの 仮定が成り立っている. また,  $\exp(S_v/k)$ の項は金属では1から10程度の大きさなので, これを無視 した粗い近似を用いて

$$C_{\rm V} \approx \exp\left(\frac{-E_{\rm V}}{kT}\right)$$
 (1.4b)

としてしまってもそれほど大きな誤差は生じない.

(1.4a) や(1.4b)から、 $C_V$ は温度の上昇とともに急激に増大することがわかる、銅の場合、  $E_V \approx 1.0 \text{ eV} (=1.602 \times 10^{-19} \text{ J})$ なので、(1.4b)を用いると、室温(300 K)では $C_V \approx 1.6 \times 10^{-17}$ 、融点(1356 K) 直下では $C_V \approx 1.9 \times 10^4$ 程度となる、実際、結晶によらず融点直下の空孔の熱平衡濃度はおよそ $10^4$ 程度の値となることが知られている。

格子間原子の形成エネルギーの値は正確には知られていないが、銅については 3eV 程度と言われている. この場合も(1.4b)と同様な式が成り立つとすれば、融点直下でも10<sup>-11</sup>程度で、格子間原子の熱平衡濃度は空孔に比べてはるかに小さいことがわかる.

以上は熱平衡濃度の議論であるが、実際の結晶中にはしばしばこれ以上の濃度の点欠陥が存在する. たとえば、電子線や放射線の照射によって、原子が結晶格子点位置からはじき出されて格子間原子と なると、一対の空孔と格子間原子の組ができる.単純に空孔のみを生じる場合をショットキー (Schottky)欠陥と呼ぶのに対して、このように空孔と格子間原子が同数存在する場合をフレンケル (Frenkel)欠陥という.照射のみならず、塑性変形によっても点欠陥濃度は増大する.

点欠陥は原子1個程度の大きさを持つので、電子顕微鏡を用いても認識することは困難である. そ

こで、電気抵抗測定や試料の長さ変化測定などの間接的な測定によって点欠陥濃度を求める.

#### 1.2.2 原子空孔と拡散

点欠陥の果たす役割のうち,非常に重要なものに拡散(diffusion)がある.拡散は原子の集団的な 移動によってもたらされる.とくに原子空孔は隣接原子との位置交換によって,原子を一つの格子点 から隣の格子点に移動させることができる.その様子を図1.2(a)→(b)→(c)に示す.図の場合,原子

は左から右に移動するが,空孔に着目すれば右 から左に移動したことになる.このように空孔 を介して拡散が起こる機構を空孔機構 (vacancy mechanism)という.ここでは,同種原子の自己 拡散 (self diffusion)を考えたが,置換型原 子の拡散や合金原子の相互拡散なども空孔機構 によって起こる.



図 1.2 の(b)の過程では、移動原子が上下の原子のすき間を通るときにすき間を押し広げる必要があることがわかる. これには余分なエネルギーが必要となる. このエネルギーを原子移動の活性化エネルギー (activation energy for atom migration),または単に移動エネルギー (migration energy)  $E_{\rm M}$  と呼び、金属では $E_{\rm M} \approx 1 {\rm eV}$  (=1.602×10<sup>-19</sup>J) 程度の値を持つ.

絶対零度以上の温度では、原子は格子点まわりに熱振動している.固体原子一個あたりの熱振動エネルギーの平均値は零点振動を除けば 3kT なので、室温付近では 0.1eV (= $1.602 \times 10^{-20}$ J)以下である. したがって、これより大きい  $E_M$  の活性化エネルギーの山を乗り越えるためには、かなり大きな原子振動のゆらぎがなければならない.統計力学によると、 $E_M$  だけの山の高さを原子の熱振動で乗り越える確率は、ボルツマン因子(Boltzmann factor)、 $exp(-E_M / kT)$ 、で与えられる.原子は振動数  $v_D$ (大体 $10^{12} \sim 10^{13}s^{-1}$ 程度)で熱振動しているから、1 秒間に  $E_M$  の山を乗り越える頻度  $f_M$  は

$$f_{\rm M} = v_{\rm D} \exp(-E_{\rm M} / kT)$$

(1.5)

のようになる.このように原子の熱振動の助けを借りてエネルギーの山を乗り越える過程を一般に熱活性化過程(thermally activated process)という.(1.5)の頻度で山を乗り越えようとしても、隣に空孔がなければ原子の移動は不可能である.ある原子の隣に空孔のある確率は、空孔の濃度 $C_V$ そのものと考えられるから、結局、原子の移動速度は $f_M C_V$ に比例することになる.拡散係数(diffusion coefficient または diffusion constant)Dもまた原子の移動速度に比例するので、(1.4a)と(1.5)より次式が成り立つ.

$$D \propto v_{\rm D} \exp\left(\frac{S_{\rm V}}{k}\right) \exp\left\{\frac{-(E_{\rm V} + E_{\rm M})}{kT}\right\}$$
 (1.6)

一方, 拡散係数はしばしば

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-E_{\rm D}}{kT}\right) \tag{1.7}$$

の形に書かれる.ここで、 $D_0$ は振動数項、 $E_D$ は拡散の活性化エネルギーと呼ばれる.(1.6)、(1.7) を比較すると、拡散の活性化エネルギーは空孔の形成エネルギーと移動エネルギーの和として表され ることがわかる. $D_0$ 項の評価のためには、上述の因子の他に単位時間あたりの原子の平均移動距離の 情報が必要となる.

### 1.3 転位

### 1.3.1 結晶のすべり変形

材料を塑性変形することによって材料の形は変わるが、全体積はほぼ一定に保たれる. すなわち、  $\mathcal{E}_{i}^{\mu}$ を任意の塑性ひずみとすると、塑性変形に対しては

 $\varepsilon_{ii}^{p} \equiv \varepsilon_{11}^{p} + \varepsilon_{22}^{p} + \varepsilon_{33}^{p} = 0$ , (体積変化ゼロ) (1.8)が成り立つと考えて良い<sup>1</sup>. したがって、単軸引張の場合、材料は巨視的には引張軸方向へ伸び、それ に垂直な方向へは縮む.しかし、単結晶、多結晶を問わず、個々の結晶粒の内部では、塑性変形はす べり変形 (slip deformation) の組み合わせによって起こっていることが知られている. すべり変形 とは、ちょうど積み上げられたトランプカードをずらすような変形で、与えられた結晶によって決ま る特別な結晶面をすべり面とし、すべり面上の特別な結晶方向をすべり方向とするせん断変形のこと である.したがって、表面をよく磨いた金属を塑性変形させると、表面に微細な多数の平行な線(す べり線, slip line)と段差が光学顕微鏡で観察される.

表 1.1 に金属材料の代表的な3つの結晶で最もよく見ら れるすべり面とすべり方向を示した. すべり面とすべり方向 とを組にしてすべり系 (slip system) という. 条件や結晶 によってはこれ以外のすべり系も働くが、表1.1の代表的な すべり面は結晶の最密原子面(この面が最も面間隔が広い) であり、すべり方向は最近接原子を結ぶ方向であると憶えて おくと便利である.なお、面と方向を示す括弧は、等価なも のをまとめて示すときには、それぞれ { }, < > を用い、個

|--|

結晶構造	すべり面	すべり方向
面心立方晶(fcc)	{111}	<110>
体心立方晶(bcc)	{110}	<111>
最密六方晶(hcp)	(0001)	<1120>

別のものを示すときには() と[] を用いる. たとえば fcc では, 結晶学的に等価な{111}型の面は 4 個あり, 各 {111} 面上に<110>方向は3 つあるので, 表 1.1 の {111} < 110> すべり系の数は 4×3=12 個 あることになる.

ここで円筒形の単結晶試料の単軸引張試験を考える.図1.3のよう に引張力 F の方向とすべり面法線 n とのなす角を θ, 引張方向とす ベリ方向  $\mathbf{d}$  のなす角を $\phi$ とする. 当然ながら  $\mathbf{n}$  と  $\mathbf{d}$  のなす角は 90° である.しかし, F, n, d の三方向は必ずしも同一平面上にはない ので、一般には $\theta + \phi$ は 90°にはならない. 試料の断面積を A, 引張 力の大きさをFとすると、引張応力 $\sigma$ は $\sigma$ =F/Aである、一方、引 張力のすべり方向 d への分力は F cos Ø であり、すべり面の面積は  $A_{s} = A / \cos \theta$  であるから、このすべり系に分解したせん断応力(分 解せん断応力, resolved shear stress)  $\tau$ は

 $\tau = (F \cos \phi) / A_{\rm s} = (F / A) \cos \theta \cos \phi = \sigma \cos \theta \cos \phi$ (1.9)となる.この式は、引張応力σが与えられたとき、あるすべり系への 分解せん断応力 $\tau$ は方位因子  $S_{\rm F} = \cos\theta \cos\phi$  の値(の絶対値)が大き

なものほど大きいことを意味している.この方位因子  $S_F$  のことをシュミット因子 (Schmid factor) と いう. たとえば fcc 結晶での 12 個のすべり系の各々についてのシュミット因子が知れれば, そのうち の絶対値が最も大きなシュミット因子を持つすべり系がまず最初に活動すると考えて良い. このすべ り系のことを主すべり系 (primary slip system) という. 簡単な幾何学的考察でわかるように、シ ュミット因子の最大値は $\theta = \phi = 45^{\circ}$ のときの 0.5 である.



図1.3 分解せん断応力の求め方。

<sup>∑</sup> が省 1(1.8)で左辺の表式は同じ添え字(ここではi)が1つの項に2回現れたときは、自動的に総和記 略されたものと考える簡便表現を使ったものである.これについては第2章でも学ぶ.

単結晶試料で主すべり系のみが活動して降伏が起こるとき,降伏応力は同じ単結晶でも引張方向に よって異なるが,それを主すべり系に分解した臨界分解せん断応力(critical resolved shear stress, 略して CRSS)は引張方向に依存しないはずである.これをシュミットの法則(Schmid's law)と呼び, fcc や hcp で良く成り立つ.一方,多結晶の場合は,さまざまな方位を持つ結晶粒が多数存在している ために,単結晶のように簡単には臨界分解せん断応力を知ることができない.

#### 1.3.2 転位とすべり運動

すべり変形において、もしすべり面を挟んだ上下の結晶が一斉にせん断を起こすと考えると、実験 で求まる単結晶の CRSS の 104 倍にものぼる大きな応力が必要であることが理論的に示される. この実 験結果と理論予測との大きな相違は、線欠陥の一種である転位の運動を考えることによって説明する ことができる.

すべり面の上下の結晶原子が一斉にずれるのではなく,図 1.4 のように各々の原子のわずかな位置 移動によって局所的にすべりが進行すれば,理想強度よりはるかに小さな応力でのすべり変形が可能 となる.図 1.4 で両端の結晶は完全結晶であるが,中央の2つの結晶は局所的に原子配列の乱れが生 じている.この部分が転位である.原子配列が最も乱れている場所は,すべり面(点線)上の囲まれ た3つの原子の真下にある.ここを転位の芯(core)といい,「⊥」の記号で示されている.3次元の





結晶中では、囲まれた3つの原子はすべり面より上半分の結晶内に原子面を構成する.これを余分な 原子半面(extra half plane)という.もちろん3次元の結晶中では転位は紙面に垂直な方向へと線 状につながる欠陥となっている.

以上より,転位とは、「すべり面上ですでにすべった領域とまだすべっていない領域の境界線」とも 定義できる.図 1.4 の原子の集まりを結晶全体と考えれば、この場合の転位は左表面から結晶内に導 入され、すべり変形がすべり面全体にわたると右表面で消滅する.この過程の間のどこにも原子の総 数に変化はないので、転位は実在のある物質ではない.原子配列の乱れの一種が転位であると理解す べきである.

転位は線欠陥なので、結晶中に含まれる転位の量は下記の転位密度(dislocation density) pで表 される.

 $\rho \equiv (単位体積の結晶中に含まれる転位の全長) (1.10)$ 図 1.5 のように,高さ h,幅 w,厚さ l の結晶を考える.この 結晶内で長さ l の転位 n 本が左から右へと距離 w だけ動いたと すると,それによって生じる結晶の巨視的な(工学)せん断ひ ずみは  $\gamma = nb/h$  である.ただし,単位の1原子間距離のすべ りを表すベクトルを b,その大きさを b とした.もしこれらの 転位が距離 w ではなく,平均的に x (x < w とする)動いたと すると,そのときに生じる巨視的せん断ひずみは



図 1.5 転位の運動と結晶の巨視的な せん断変形の関係

 $\gamma = (nb/h)(x/w)$ と考えることができる.ここで、転位密度の定義(1.10)より $\rho = nl/hwl = n/hw$ な ので次式を得る.

# $\gamma = \rho b x$

(1.11)

この式は転位の運動と巨視的な結晶の変形を結びつける重要な式である.

# 1.3.3 転位の種類とバーガースベクトル

図 1.4 や図 1.5 に示したすべりの大きさを表すベクトル b は、ある一本の転位が動くことによる単 位のすべり変形を示すもので、その転位に固有のものである.これを転位のバーガースベクトル (Burgers vector) という. 図 1.4 の例では、(紙面に垂直な) 転位線の方向と(すべり方向に平行な) バーガースベクトルの方向は垂直になっている.このような転位を刃状転位(edge dislocation)と いう.これに対して、転位線の方向とバーガースベクトルの方向が平行な転位はらせん転位(screw dislocation)と呼ばれる.また,刃状転位,らせん転位以外の転位は混合転位 (mixed dislocation) と呼ばれる.転位線の方向(曲がった転位のときは、転位線の接線方向)を表す単位ベクトルを t と 書くと,

(a) 刃状転位: **b** ⊥ **t**, (b) らせん転位: **b** // **t**, (c) 混合転位: それ以外

である.

トルを持つという.

図 1.6 に二本の刃状転位 A, B を記号「⊥」と「┳」で示し てある.この記号の縦線は余分な原子半面を表し、横線はすべ り方向を表している.図でせん断応力でを与えたとき、転位 A は左から右に、転位 B は右から左に動くが、このときどちらの 転位の運動によっても同一のせん断変形が生じる. このような 転位 A, B のうちの一方を正の転位と言い,他方を負の転位とい う. そして, 正の転位は b, 負の転位は -b のバーガースベク 図1.6 せん断応力 7下での正負の刃状



転位の運動

たとえば、図1.6を180°回転しても同じ図となるので、転位とそのバーガースベクトルの符号(向 き)のとり方には任意性が残る.そこで,混乱のない決め方をしなければならない.それには,バー ガース回路(Burgers circuit)の概念が必要となる.図1.7に(a)刃状転位と(b)らせん転位でのバー ガース回路のとり方を示す.

まず,転位線の方向 t を決める,次に,任意の 格子点Sを始点としてtベクトルの方向が進行方向 となるような右ネジ回転によって転位の周囲に格 子点を順次結んだ閉回路を作る.閉回路も任意のも ので良いが、その終点 F は始点 S と一致させなけ ればならない.次に参照のための(転位を含まない) 完全結晶を考える. そして, この完全結晶格子上に 同じ回路を作る.このとき,転位の周りでは完全な 閉回路であったものが,完全結晶ではそうはならな い. 閉じない部分 (closure failure という) を終 点 F から始点 S に向けてベクトルで結ぶと、これ が求めるバーガースベクトル **b** となる. このよう なバーガースベクトルの一義的な決め方を FS/RH (finish-to-start, right-handed) ということが



図 4.6 バーガース回路とバーガースベクトル

ある(本によっては異なる決め方をしてあるので注意されたい).図1.7 で確かに刃状転位はb ⊥ t, らせん転位は $\mathbf{b}//\mathbf{t}$ となっている.また、図1.6では、 $\mathbf{t}$ を紙面から上に向けてとれば、A は $\mathbf{b}$ 、B は- $\mathbf{b}$ というバーガースベクトルを持つこともわかる. 求まるバーガースベクトルはどのような閉回路を選 んでも同じになることを確認してほしい.

図1.8は外部せん断応力で下で、同一のすべり変形**b**をもたらすための刃状転位とらせん転位の運動 を比較したものである。**c**の方向とそれぞれの転位の運動方向との関係を良く理解してほしい。

今までは簡単のために直線的な転位のみを考えたが、曲線状の転位のときは、転位の場所によって 刃状,らせん,混合転位の部分を持つことがある.しかし,転位の運動による結晶のすべり量**b**は一 本の転位のどの部分をとっても同一なので、与えられた転位のバーガースベクトルはただ一つに決ま

り,転位のどの部分でも不変である.これをバーガース ベクトルの保存則 (conservation law) という. この保 存則はまた,転位は結晶内部に端点を持たないことも意 味している. 端点を持てば、そこでバーガースベクトル がある量**b**からゼロへと変化してしまうからである.

1.3.2節で転位の定義として「すべり面上ですでにす べった領域とまだすべっていない領域の境界線である」 と述べた.2次元の平面上に2つの異なる領域を区別す る境界線を描くとき,境界線は平面の端まで届いている か、または閉じたループの形となるかのどちらかである ことがわかる.いずれにせよ境界線(転位)の端点は結 晶内部には存在せず、表面や結晶粒界でのみ存在する. 閉じたループの形はもちろん,図1.9のように転位は枝 分かれの形も取ることができる. 枝分かれの形が組み合 図 1.8 外部せん断応力で下での(a) 刃状転位と わされば、転位網 (dislocation network) も形成でき る.実際の結晶内の転位の多くはこのようなループや網 目の形をとっている.



(b)らせん転位の運動と、(c) それによっ て生じる同一のせん断変形



図1.9 さまざまな転位の形

### 第1章問題

**Problem 1.1** 原子空孔の形成エネルギーを *E*<sub>v</sub> = 100 kJ/mol<sup>-1</sup> (=1.04 eV), 格子間原子の形成エネル ギーを E<sub>1</sub> = 300 kJ·mol<sup>-1</sup> (=3.11eV) として,それぞれの点欠陥の室温(300K)と 1000K での熱平衡 濃度を計算せよ.ただし、ボルツマン定数を $k = 1.38 \times 10^{-23}$  J·K<sup>-1</sup>、気体定数をR = 8.31 J·mol<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>と し, (1.4b)式を用いよ.

Problem 1.2 他に何も手がかりがないときに使える便利な式に,金属の自己拡散の活性化エネルギ  $-E_{\rm D}$ とその金属の絶対温度で測った融点 $T_{\rm m}$ の間に, $E_{\rm D}/T_{\rm m} \approx 150 \, \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ が成り立つという経験 式がある.

(a) この経験式を信じて,銅(融点は1356K)の自己拡散の活性化エネルギーを求めよ.単位はkJ·mol<sup>-1</sup> とせよ.

(b) 自己拡散係数 D の振動数項を  $D_0 = 5 \times 10^{-3} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$  と置いたとき,拡散係数(縦軸,  $\log \text{ A} f - \nu$ )の温度(横軸,線形スケール)依存性を表すグラフを描け.

(c) 固体材料の変形を考えるとき、高温変形と低温変形は、原子の拡散の寄与が重要であるか否かで 区別される. 拡散係数の値が  $D = 10^{-22} \sim D = 10^{-20} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$ 程度にならないと、変形における拡散の寄与 は小さいという. このことと(b) で得られたグラフより、融点の何倍程度の温度以上での変形が高温変 形の範疇に入るかを考察せよ.

**Problem 1.3** fcc や bcc などの立方晶の場合, (*hkl*) 面と[*hkl*] 方向とは互いに垂直である.このこととベクトルの内積計算法を利用して, fcc 金属単結晶を[213] 方向から引っ張るとき, (1 1)[011] すべり系に対するシュミット因子を求めよ.

**Problem 1.4** 図 1.9 にある転位ループは曲がっているため、場所によって刃状、混合、らせんとその種類を変える.それでは、(a) 全体が刃状転位の転位ループ、(b) 全体がらせん転位の転位ループ、のうち、実際にあり得るのはどちらか? 理由を付して答えよ.