

討 18

鉄の転位のバーガス・ベクトル, 拡張転位などの問題について

東京大学物性研究所 竹内 伸

1. 緒言 結晶中に存在する転位の性質がその物質の機械的性質の基本的な因子になっていることは言うまでもない。にもかかわらず、鉄中の転位(或は一般にbcc金属中の転位)に関しては、転位芯の構造の問題のみならず、加工した鉄の中に存在する転位のバーガス・ベクトル自身についても近年いろいろと議論が行われており、今だに解決したとは云えない。

2. 転位のバーガス・ベクトル(以下B.V.と略す)

2.1 弾性論的考察 転位の弾性エネルギーはよく知られているように

$$E = \frac{Kb^2}{2\pi} \ln \frac{R}{R_0} \quad (1)$$

$\left\{ \begin{array}{l} K: \text{エネルギー因子} \\ b: \text{B.V.の大きさ} \\ R: \text{歪みのおよぶ半径} \\ R_0: \text{cut-off半径} \end{array} \right.$

と表われればに比例する。単純な b^2 則からすると、bcc金属中の転位はそのB.V.が $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$, $a\langle 100 \rangle$, $a\langle 110 \rangle$, $a\langle 111 \rangle$...の順にエネルギーが大きくなるが、 $a\langle 110 \rangle$ 以上の転位はすべて前二者の転位に分解した方がエネルギーが減少するため $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ と $a\langle 100 \rangle$ 以外の転位は存在し得ないことになる。(a[110]→ $\frac{a}{2}[111] + \frac{a}{2}[1\bar{1}\bar{1}]$ の分解によりエネルギーは25%減少する)ところが、(1)式のKは転位のnature(刃状からせんか)で変わると同時に弾性異方性を考慮すると自身に大きく依存する。鉄中の種々の転位に対するKの値および転位の $\frac{R}{R_0} = 1$ のときのEの値(E^*)は表1によると表1のようになる。 $a\langle 110 \rangle$ 転位は

表1 鉄中の種々の転位に対するエネルギーと易動度を表わすパラメータ¹⁾

転位の種類	K $\times 10^{10} \text{dyn/cm}^2$	E^* 10^4eV/cm	S
$\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ edge	12.93	7.99	0.08
on(110) screw	6.25	3.86	0.46
$a\langle 010 \rangle$ edge	11.18	9.21	0.49
on(101) screw	11.20	9.23	0.49
$a\langle 110 \rangle$ edge	10.45	17.2	0.22
on(110) screw	7.30	12.0	0.44
$a\langle 100 \rangle$ edge	10.45	8.61	0.68
on(101) screw	11.20	9.23	0.65

かなり大きなエネルギーを持つのでやはり存在し得ない。結晶中の転位の起源は(1)凝固の際入ったもの、(2)応力によって増殖したもの、(3)点欠陥の集合により生じた転位ループ、(4)焼鈍中に転位間の反応で生じたもの、等であるが、一般的には(2)が主原因であるので、エネルギーのみでは論じられない。応力下での転位の動き易さは、パイエルスカ、他の欠陥との相互作用力で決まり、これらはB.V.の大きさに依存するので大体転位のエネルギーに対応することになる。しかし、弾性異方性を考慮すると、パイエルス近似によるパイエルスカの大きさを示すパラメータ S^2 の大きさはエネルギーの大きさと対応せず、表1に示すような結果になる。すなわち、(110)面上の $a\langle 100 \rangle$, $a\langle 110 \rangle$ の転位は $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ のらせん転位と同程度に動き易いことになる。但し、パイエルスカの問題は、結晶構造も考慮して転位芯を厳密に取り扱う必要があるので上表の結果は必ずしも信用できない。

2.2 電子顕微鏡によるB.V.の決定 結晶中に存在する転位のB.V.を実験的に決める手段として、X線による方法、透過電顕による方法、また最近では電界イオン顕微鏡(FIMと略す)が用いられているが、鉄の場合にはX線では分解能が不足である。Carringtonら(1960)³⁾は焼鈍した鉄中の転位網を透過電顕で観察しそれらを幾何学的に考察して、 $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ 転位の外 $\frac{a}{2}[111] + \frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] \rightarrow a[100]$ の反応により $a[100]$ 転位の成分が存在すること、またあるものは二つの $a\langle 100 \rangle$ 転位から $a\langle 110 \rangle$ 転位を形成していることを推論した。OhrとBeshersは電顕像の回折条件を利用して*、転位網に $a[100]$ のB.V.のらせん転位が存在することを確認している⁴⁾。

*歪みのない結晶面でのBragg反射によってはcontrastが生じないので、らせん転位の場合は $g \cdot b = 0$, 刃状転位の場合はこれと $g \cdot (b \times \ell) = 0$ が満たされた時に転位像が消えることになる(等方弾性体の場合)。但し g は反射ベクトル, ℓ は転位線の方角を示す。

その後Dingley と Hale (1966)⁵⁾ は $g \cdot b = 0$ の転位像の消失条件を用いて、変形した純鉄および鉄合金中の転位の B.V. を調べた結果、 $g \cdot b < 111$ 転位は 60% で $g \cdot b < 100$ 転位および $g \cdot b < 110$ の転位がそれぞれ 20% づつも存在すると報告した。それまで鉄の転位系が $g \cdot b < 111$ に限られていると考えられていたが、この結果は $g \cdot b < 100$ および $g \cdot b < 110$ の転位系も活動することを示唆する画期的なものであった。彼等の方法は、大傾角の試料傾斜装置を用いて $g_1 = (123)$, $g_2 = (013)$, $g_3 = (222)$ のいずれかの Bragg 条件を満すように試料を傾斜し、その暗視野像と多重反射条件での明視野像を比較して、B.V. の型を決めたものである。 g_1 では 4 種の $g \cdot b < 111$ の内の 1 種が消え、 g_2 では 3 種の $g \cdot b < 100$ の内の 1 種が消え、 g_3 では 6 種の内の 3 種が消えることから、消失した転位の数にそれぞれ 4, 3, 2 の weight を乗じて 3 つの型の B.V. の転位の比率を求めた。weight を乗じた転位数の合計が大体 100% になっていることはこの測定の実験性を示すように思われた。彼等の写真の例を写真 1 に示す。McLean と Priestner は $g \cdot b < 100$, $g \cdot b < 110$ の転位が $g \cdot b < 111$ 方向の path を通って起るとすれば $g \cdot b < 111$ 転位と同程度に起り易いと考えてこの結果を説明した。⁶⁾

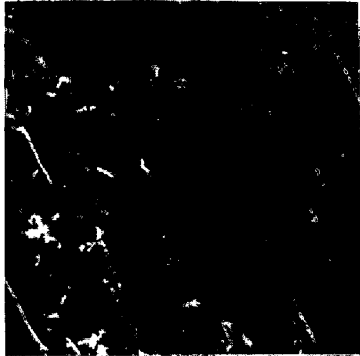


写真1. $g = (222)$ の暗視野像で消えた転位を示す。Dingley らはこれら B.V. が $g \cdot b < 110$ の転位と見做した。⁵⁾

ところが、その後 France と Loretto (1968)⁷⁾ は Dingley らの用いたものと同じ試料に関して、同一視野について小さな g (100 , 110 , 112) を用い明視野で $g \cdot b = 0$ の消失条件を求めて B.V. を決め、99% の転位が $g \cdot b < 111$ で約 1% の転位が $g \cdot b < 100$ で $g \cdot b < 110$ の転位は存在しないと結論した。彼等は更に Dingley らの用いたような大きな g を用いるとたとえ $g \cdot b = 0$ でも転位の contrast が実質的に消えてしまうことを示し、Dingley らの結論との相異を説明している。すなわち、 g と b の角度が 70 度ぐらいでも Bragg 条件を正確に満たしていない場合は contrast が殆んど生じないことを、実験的にも回折理論による計算からも確かめている。その一例を写真 2 に示す。

また、筆者が Fe-2%V 合金単結晶について $g \cdot b < 111$ 転位が起り難くしかも $g \cdot b < 100$ 転位が容易に起るような束縛を与えて変形した実験結果からも $g \cdot b < 100$ 転位が起った形跡は $g \cdot b < 111$ 線の観察からも電顕による転位の観察からも得られなかった。⁸⁾

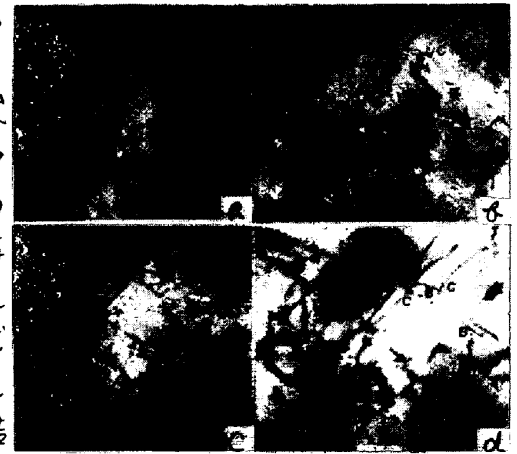


写真2 (a)(b)(c)(d) はそれぞれ $g = (110)$, (110) , (112) , (130) による明視野像。(a) で見える転位 A, C は (b), (c) で消えていることからその B.V. は $g \cdot b < 111$ であるが、(d) でも $g \cdot b = 0$ にもかかわらず消えている。⁷⁾

一方、最近 FIM によって鉄中に $g \cdot b < 110$ 転位が確認されたことが報告されたが、⁹⁾ France らは電顕観察では見られないことから FIM 観察での試料の特殊条件を問題にしている。¹⁰⁾

3. 転位芯の構造 　いづれにせよ、鉄の変形に与かる転位が殆んど $g \cdot b < 111$ 転位であることは疑いない。 $g \cdot b < 111$ のらせん転位の core の構造に関しては、低温強度の機構がパイエルス機構か擬パイエルス機構か¹¹⁾ の問題に関連して近年益々に論じられている。

3.1 積層欠陥 (S.F. と略す) 　転位が中よく拡張するためには S.F. が安定に存在しなくてはならない。昔から鉄などの bcc 金属中には双晶の成長機構との関連から $\{112\}$ 面上で $g \cdot b < 111$ の fault vector (F.V.) を持つ S.F. の可能性が考えられている。^{12, 13)} また、 $\{110\}$ 面上の S.F. の可能性も原子の剛体球モデルから Crussard¹⁴⁾, Cohen¹⁵⁾ によって提唱された。図 1 に示すように、原子を剛体球で考えると $(0\bar{1}1)$

面上で原子が $\frac{a}{2}\langle 011 \rangle$ ずれると安定な位置にはまり込むことになるのである。また、Wasilewski は $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ のS.F.は $\{110\}$ 面上の方が $\{112\}$ 面上よりもエネルギーが低くなることをやはり剛体球的な考えから主張している。¹⁶⁾

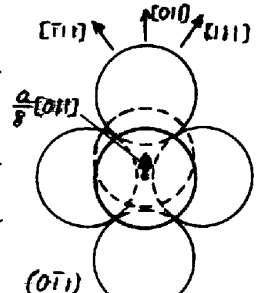


図1 剛体球で考えると $\{110\}$ 面で原子が $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ ずれるとより安定な位置にくることを示す。

一方、より信頼度の高いS.F.に関するモデルを得るため、原子間力近似による計算が行われている。鈴木は $\langle 111 \rangle$ 原子列間のポテンシャルを用いて $\{112\}$ 面上では安定なS.F.が存在し得ないことを示し、¹⁷⁾ Vitek は原子間ポテンシャルとして種々の型を用いて計算したが、bcc金属では $\{110\}$ 面 $\{112\}$ 面上共にS.F.が存在し得ないことを示している。¹⁸⁾ しかし、Pegelらは三次式型の原子間ポテンシャルを用い、そのcut-off半径を第2近接原子と第3近接原子の中間より小さく取ると、 $\{110\}$ 面上でも $\{112\}$ 面上でも安定なS.F.が存在し得る(但し、F.V.は簡単な有理数ではない)ことを示し、原子間ポテンシャルを用いた計算ではS.F.が存在するか否かに、決着をつけることはできないとしている。^{19,20)}

3.2 転位の拡張のモデル

上で述べた $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$, $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ のF.V.のS.F.を用いていろいろと転位の拡張のモデルが考えられている。これらはいずれもエネルギーの比較からすると、転位の弾性エネルギーは当然減少するようになっていて、拡張するか否かはS.F.のエネルギーの値如何にかかっている。B.V.の方向から見た転位の拡張のモデルを図2にまとめて示す。

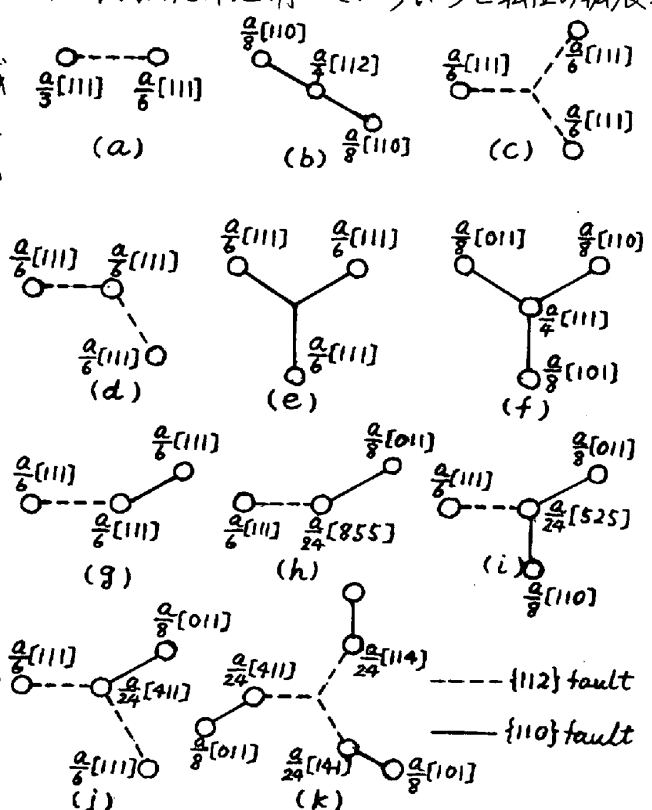


図2 B.V.の方向から見た $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ らせん転位に関する種々の拡張のモデル

単一の面での拡張のモデルとしては $\{112\}$ 面上では

$$\frac{a}{2}\langle 111 \rangle \rightarrow \frac{a}{2}\langle 111 \rangle + \frac{a}{6}\langle 111 \rangle \quad \dots(2)$$

が古くから考えられており(図2(a))¹³⁾ $\{110\}$ 面上では

$$\frac{a}{2}\langle 111 \rangle \rightarrow \frac{a}{8}\langle 110 \rangle + \frac{a}{4}\langle 112 \rangle + \frac{a}{8}\langle 110 \rangle \quad \dots(3)$$

が提唱されている(図2(b))¹⁵⁾ (2)の拡張に関してはS.F. energyの関数としての転位中が弾性論的に計算されている。^{21,22)}

らせん転位が

$$\frac{a}{2}\langle 111 \rangle \rightarrow \frac{a}{8}\langle 111 \rangle + \frac{a}{8}\langle 111 \rangle + \frac{a}{8}\langle 111 \rangle \quad \dots(4)$$

と120度で交わる3種の $\{112\}$ 面上でsessile typeに拡張し(図2(c)), このことが低温強度の原因となり得ることをHirschが提唱して以来、らせん転位についてsessile typeの拡張のモデルは数多く出されている。

Sleeswykは(4)の拡張の力学的安定性を論じ、3回対称には拡張できないことを示し(図2(d)),²³⁾ Wasilewskiは前述のように $\{112\}$ 面ではなくむしろ $\{110\}$ 面上で拡張あるとした(図2(e))¹⁶⁾ Kroupaらは

$$\frac{a}{2}\langle 111 \rangle \rightarrow \frac{a}{8}\langle 011 \rangle + \frac{a}{8}\langle 110 \rangle + \frac{a}{8}\langle 101 \rangle + \frac{a}{4}\langle 111 \rangle \quad \dots(5)$$

の反応により3種の $\{110\}$ 面上に3回対称に拡張するモデルを考えた(図2(f))^{24,25)} 更に $\{110\}$ と $\{112\}$ の2種類の面に拡張したモデルもFoxallら(図2(g),(h)),²⁶⁾ KroupaとVitek(図2(i),(j)),²⁵⁾ Mitchell(図2(k))²⁷⁾により提案されている。図2(k)の拡張は部分転位のエネルギーの和はエネルギーが比較に従うとすると、完全転位の実に $\frac{1}{4}$ になっている。さて、もしらせん転位が拡張するとすればこれら種々の拡張の可能性の内最もエネルギーの低い状態になる筈である。S.F.エネルギーを仮定したエネルギーの計算が何人かによって行われているが、^{25,29)} いずれにせよこれらは単なるモデルに過ぎない。

なお、らせん転位以外の転位に対する sessile type の拡張のモデルが Mitchell により示されているが³⁰⁾ここでは省略する。

3.3 原子間ポテンシャルを用いた転位芯の構造の計算 S.F.の場合と同じように、より信頼できる転位芯の構造に関する知見を得るため原子間ポテンシャルを仮定した計算が、 $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ のらせん転位について Suzuki³¹⁾, Bullough & Perrin³²⁾, Chang³³⁾ により、 $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ の刃状転位について Chang³⁴⁾ により、また $a\langle 100 \rangle$ の刃状転位 (これは bcc 金属の破壊の起源の問題との関連で行われている) について Gehlen ら³⁵⁾, Bullough ら³²⁾ によって行われている。 $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ のらせん転位に関する三者の結果はポテンシャルの取り方や計算方法が異なるので、必ずしも一致していないが、共通している点は、(1) 転位芯の半径は $2 \sim 3a$ 以下の大きさであること (2) 転位芯での歪は $\langle 111 \rangle$ の方向に広がっており、形式的に記述すれば、 $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ の刃状転位に $1 \sim 2$ 程度拡張しているといえることの二点である。しかし常識的には拡張していないと解釈すべきであろう。

3.4 FIM による観察 転位芯の構造の観察は電顕では分解能の点で不可能なので、FIM による方法が唯一でありまた決め手とも云えよう。W については Smith ら³⁶⁾, Tapsep ら³⁷⁾ によって $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ 転位が単一の $\langle 111 \rangle$ 面で拡張している (図 2(b)), その S.F. エネルギーは 50 erg/cm^2 という小さい値になることを報告している。鉄についても Smith らは単一の $\langle 111 \rangle$ 面上での拡張と $\langle 111 \rangle$ と $\langle 110 \rangle$ 面の両方に拡張した転位 (図 2(g), (h)) との二種類を観察しており、S.F. の中は 100 \AA order であるとしている³⁸⁾。これらの結果は原子間ポテンシャルを用いた計算結果とは真向から対立することになる。

4 総括 以上述べたような状況から判断すると、B.V. については France らのいうように殆んどが $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ であり、その外は $a\langle 100 \rangle$ 転位が二つの $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ 転位間の反応の結果として少数存在するという見方が恐らく正しいであろうが、転位芯の構造に関しては全く解釈に苦しむ。筆者の私見では、S.F. エネルギーがそれ程低いとはどうも考え難く、FIM 像の解釈に問題がないのかどうか疑問を感じる。

なお、上述した問題のほか、転位ループの nature の問題、パイエルス機構の問題等は紙数の関係で省略した。

References

- (1) C. N. Reid: Acta Met., 14 (1966), 13. (2) J. D. Eshelby: Phil. Mag., 40 (1949), 903.
- (3) W. Carrington, K. F. Hale and D. McLean: Proc. Roy. Soc., A259 (1960), 203. (4) S.M. Ohr and D. N. Beshers: Phil. Mag., 8 (1963), 1343. (5) D. J. Dingley and K. F. Hale: Proc. Roy. Soc., A295 (1966), 55. (6) D. McLean and R. Priestner: Metal Sci. J., 1 (1967), 121. (7) L. K. France and M. H. Loretto: Proc. Roy. Soc., A307 (1968), 83.
- (8) S. Takeuchi: Japan. J. appl. Phys., 8 (1969), 1205. (9) D. A. Smith, R. Morgan and B. Ralph: Phil. Mag., 18 (1968), 869. (10) L. K. France and M. H. Loretto: Phil. Mag., 19 (1969) 873. (11) 著者: 金属学会報, 7 (1968), 14. (12) A. H. Cottrell and B. A. Bilby: Phil. Mag., 42 (1951), 573. (13) F. C. Frank and J. F. Nicholas: Phil. Mag., 44 (1953), 1213. (14) C. Grassard: C. R. Acad. Sci. Paris, 252 (1961), 273. (15) J. B. Cohen, R. Hinton and S. Sass: Acta Met., 10 (1962), 894. (16) R. J. Wasilewski: Acta Met., 13 (1965), 40. (17) 鈴木秀次: 積層不整合と回折現象, 物性研究短期研究会予稿, (1966), p.139. (18) V. Vitek: Phil. Mag., 18 (1968), 773. (19) B. Pegel: Phys. stat. sol., 28 (1968), 603.
- (20) H. Eichler and B. Pegel: Phys. stat. sol., 35 (1969), 333. (21) L. J. Teutonico: Acta Met., 13 (1965), 605. (22) C. S. Hartley: Acta Met., 14 (1966), 1133. (23) A. W. Sleeswyk: Phil. Mag., 8 (1963), 1467. (24) F. Kroupa: Phys. stat. sol., 3 (1963), K391. (25) F. Kroupa and V. Vitek: Can. J. Phys., 45 (1967), 945. (26) R. A. Foxall, M. S. Duesbery and P. B. Hirsch: Can. J. Phys., 45 (1967), 607. (27) T. E. Mitchell: Phil. Mag., 17 (1968), 1169. (28) D. K. Bowen, J. E. Christian and G. Taylor: Can. J. Phys., 45 (1967), 903. (29) M. S. Duesbery and P. B. Hirsch: Dislocation Dynamics, ed. A. R. Rosenfield et al., (1968), p.57, McGraw-Hill, New York. (30) T. E. Mitchell: Scripta Met., 2 (1968), 591. (31) H. Suzuki: Dislocation Dynamics, (1968), p.679. (32) R. Bullough and R. C. Perrin: Dislocation Dynamics, (1968), p.175. (33) R. Chang: Phil. Mag., 16 (1967), 1021. (34) R. Chang and L. J. Graham: Phys. stat. sol., 18 (1966), 99. (35) P. C. Gehlen, A. R. Rosenfield and G. T. Hahn: J. appl. Phys., 39 (1968), 5246. (36) D. A. Smith and K. M. Bowkett: Phil. Mag., 18 (1968), 1219. (37) P. M. Tapsep, Ж. И. Дранова и И. М. Мухайловский: Физ. Твердого Тела, 10 (1968), 1012. (38) D. A. Smith and J. Gallow: Metal. Sci. J., 2 (1969), 79.