

討17

BCC金属の異方塑性の理論(II)

— 転位コアの拡張の問題を中心として —

東京大学工学部

橋口 隆吉

BCC金属の異方塑性の問題は竹内¹⁾の解説にその実験的事実が詳しく述べられているように、BCC金属の塑性に関する最も基本的な問題の一つである。転位論の立場からこの問題を解くことができるかできないかは、今日の転位論に向けられた重大な挑戦であるといえることができる。BCC金属においてはFCC金属に見られるような拡張転位(例えば $a/2[1\bar{1}0] \rightarrow a/6[1\bar{2}1] + a/6[2\bar{1}\bar{1}]$ のようなもの)の存在が理論的にも実験的にも殆んど否定された今日、FCC金属類似の拡張転位を仮定した考え方は捨てるべきではない。そこで今日この問題の解決のために、二つの方向での努力がなされている。すなわち(1)転位コアの拡張を考える行き方と、(2)拡張ということは考えずに別の点に異方塑性の原因を求めようとするものである。後者については鈴木²⁾の転位模型のその後の発展²⁾が期待される。前者についてはヨーロッパの研究者がその主流をなし、日本ではこの線に沿った研究を行っている者がいないので、筆者がオプティミスト的立場から概観してみたいと考える。

BCC金属の転位コアに関する研究については既に非常に多くの論文があるが、ここでは主としてVitek-Perrin-Bowen³⁾の論文を中心として述べてみたい。

Vitekらは今日極めて通常化された原子対間の相互作用エネルギーを加え合せて、格子欠陥の安定な形状やエネルギーを電子計算機によって求める方法を活用して、鉄のらせん転位の構造を詳細にしらべた。計算方法の詳細について興味のある方には原論文を参照していただくこととして、本稿においては結果について述べて行きたい。ただ使用した相互作用がかなり変わっても、結果を本質的に変えるものではないことを指摘しておきたい。使用された相互作用エネルギーを図1に示しておく。J₀はJohnsonのポテンシャルで、他はそれを修正変更したものである。どれを使っても結果に本質的な違いはない。のみならずBasinskiら⁴⁾のナトリウム結晶の結晶もVitekらの結果と非常によく似ている。このことは益々相互作用エネルギーの違いは余り問題ではないことを示しており、以下に述べる結果はBCCという結果構造に対して本質的なものであるということを示している。

図2にVitekらの結果の一例を示す。この図はBCC鉄の $a/2[111]$ らせん転位のコアの構造を示すものであるが、 $[111]$ 方向から見たものである。正三角形の配置を示す原子の図は投影図であって、同一面上にそれらがあるのではない。図中の矢印は次のような意味を持っている。矢の長さの中間点、今考えている原子対($\{110\}$ 面内)にあって矢の長さの方向の両端にある二つの原子)の中間点においてある。そしてその二つの原子の紙面に垂直方向の位置の差(これは転位がない場合には $a/6[111]$ となる)が、転位の導入によってどのように変るかというその変化分を矢の長さで示している。図上で原子間の長さ一

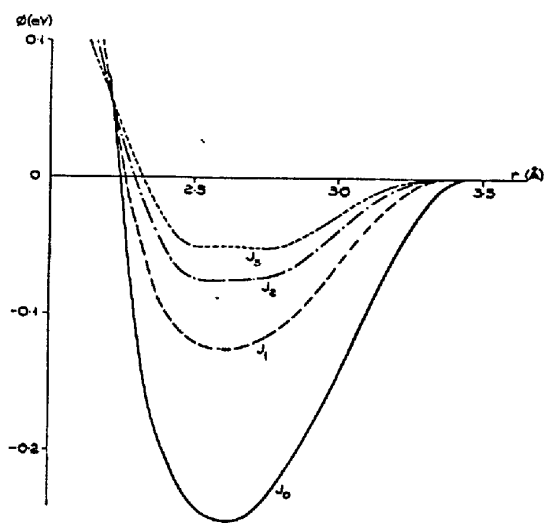


図1 使用された各種の原子対間相互作用エネルギー。(Vitekら³⁾による。)

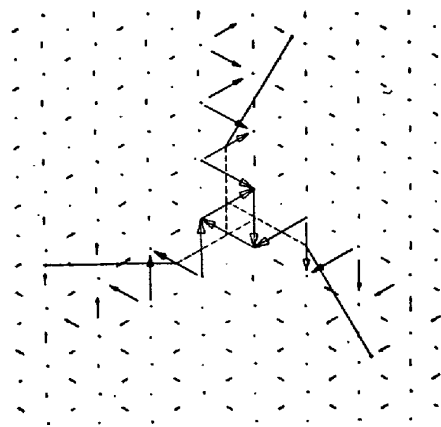


図2 BCC鉄の $a/2[111]$ ラセン転位のコアの拡張。{110}面内の変位図。(Vitekら³⁾による。)

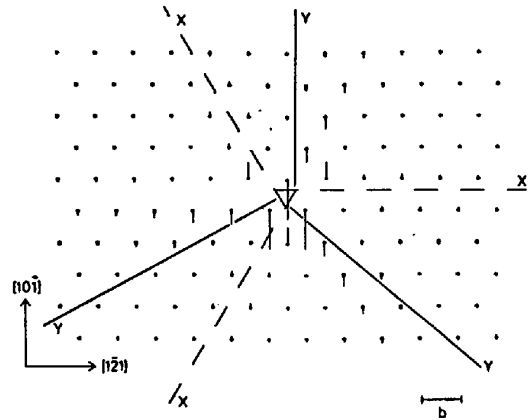


図3 BCCナトリウムの $a/2[111]$ ラセン転位のコアの拡張。<111>方向の変位図。(Basinskiら⁴⁾による。)

核の矢は $|a/6[111]|$ の長さに相当するよう
に取ってある。

さて 図2 を見ると次のような重要なこと
が分る。(1) 大きな歪の分布は三方向に限ら
れている。その方向と逆の方向には分布して
いないから、六回対称にはなっていない。

(2) 三方向の歪について更に正確に言えば、
破線で示した三つの {110} 面内でコアの中心
から外方に向けて単調に減少する歪と、実線
で示すコアから少し離れた位置に存在し、三
つの {211} 面内にあり、単調には減少しな
い歪となる。{211} 面内の歪を Vitekら
は従来の積層欠陥とは全く異なるが、一種の積
層欠陥であるという見方をしている。本稿に
おいてはこれを擬積層欠陥 (pseudo stacking
fault, PSF) と呼ぶことにしよう。PSF の外端に部分転位が存在するとしても、図2 から分るよ
うに、そのバーガース・ベクトルは $a/6[111]$ に較べて著しく小さいものである。従ってこのラセン
転位全体のバーガース・ベクトルの大部分はコアの中心にあることになる。

PSF はその剪断歪が双晶形成の方向に向いたものだけが形成される。これがBCC金属の異方塑性
の原因であって、双晶形成方向への歪りが起り易いことになる。PSFの中は1~2bの程度である。

図4 に示すように $a/2[111]$ ラセン転位にはエネルギーのやや異なる二つの形態がある。図の左側二
つがH(hard)型であり、右の二つがE(easy)型である。H型の方が約8%エネルギーが高い。E型
の方が中心からPSFまでの距離が遠い。図4 の形を紙面に垂直に180°回転した形は存在しない。
それはPSFの歪が反双晶方向になるからである。

図3 は Basinskiら⁴⁾ によるナトリウムのBCC結晶中の $a/2[111]$ ラセン転位である。ポテンシ

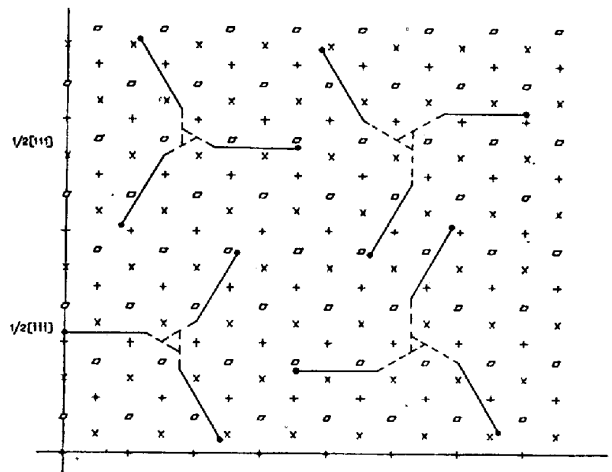


図4 鉄の $a/2[111]$ ラセン転位の四種の型態。
左の二つがH(hard)型、右の二つが
E(easy)型。(Vitekら³⁾による。)

ヤルが違いため Vitekらの結果と細かい点では異っているが、大筋においては非常によく似ている。図の各原子から縦方向に伸ばした線は、転位線に平行な変位の弾性理論による値との差を示している。図では実際の値が10倍に拡大してある。Basinskiらは $\{211\}$ PSFという考えをとっていないので、ラセン転位が次のように分解していると考え。すなわちそのバーガス・ベフトルの4/5は中心にあり、三つの $\{110\}$ 面上に1/25があると考えるのである。

文 献

- (1) 竹内伸：本討論会予稿。
- (2) 鈴木秀次：本討論会予稿。
- (3) V. Vitek, R. C. Perrin and D. K. Bowen: Phil. Mag. 21 (1970), 1049.
- (4) Z. S. Basinski, M. S. Duesberg and R. Taylor: Phil. Mag. 21 (1970), 1201.

付記：なお参考のために図5, 6, 7 を添付しておく。

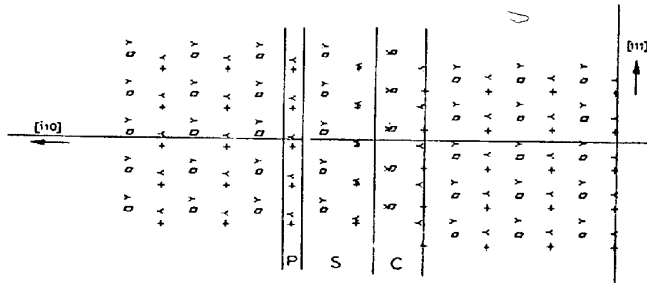


図5 Vitekら³⁾のPSF。図のCはコア、Sは積層欠陥、Pは部分転位。

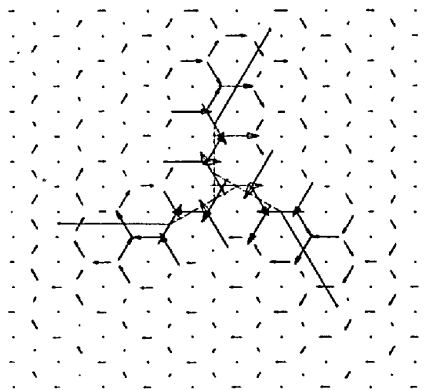


図6 Vitekら³⁾の $a/2[111]$ ラセン転位の $\{211\}$ 面内の変位。

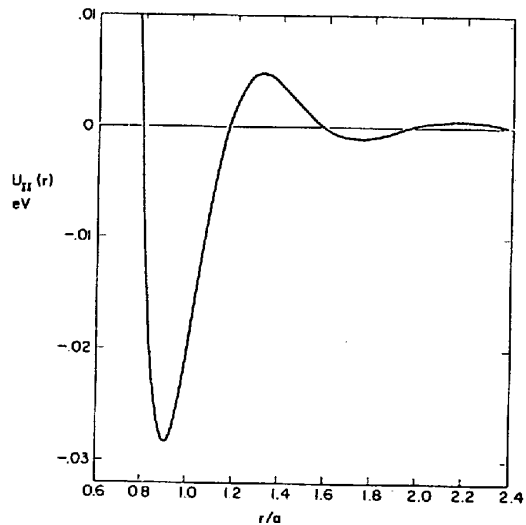


図7 Basinskiら⁴⁾のナトリウム・イオン対間ポテンシャル。