

© 1984 ISIJ

結晶粒界の構造と粒界の移動特性



石 田 洋 一*

Grain Boundary Structure and Its Mobility

Yoichi ISHIDA

1. はじめに

再結晶・粒成長の素過程である粒界移動は原子レベルでこれを記述しようとする、意外に多くの側面をもつた現象であることがわかる。粒界移動、粒界拡散、粒界すべり、拡散クリープなどと、一般に、相互に独立した事象として取り扱われてきた諸現象が実は相互に密接な関係にある。というよりは、素過程までさかのぼると、実は同一の原子過程であり、上記諸現象はこの粒界原子過程が積み重なってひきおこす巨視的变化を成分別にかけて定義したものにすぎないことがわかる。したがってこれらは一括して、粒界における熱的原子過程として扱うのが理論的にも素直な態度であろう。

このような主張は筆者がかなり以前から表明してきたことである¹⁾。本特集の巻頭記事の著者である阿部秀夫教授が部会長となつてすすめられた鉄鋼協会鉄鋼基礎共同研究会、再結晶部会の報告書においてすでに泡モデルをつかつてこのことを主張した²⁾。当時はしかしあまり注目されず、あくまで模型でしかない泡モデルで考えたことなど、どの程度意味があるかという懐疑的な反応が一般であつたと記憶している。その後これと同等な理論が欧米で発表されてはじめて市民権を得た感じであつた。当時私の文献が無視されたこともあつて、大いに不満であつたことを覚えている。もちろん、筆者も指をくわえて見ていたわけではない。コロイド結晶という光学顕微鏡のレベルで熱的挙動を観察できる模型による解析³⁾や電子顕微鏡格子像による粒界移動の動的観察⁴⁾という直接事実に立脚した研究へと歩みをすすめてきた。Photo. 1 (1) (2) (3) は金の [110] 粒界で粒界移動を原子レベルで観察した実例である。拡散誘起粒界移動⁵⁾⁶⁾や応力誘起粒界移動⁷⁾のように移動機構を定量的に解析できる双結晶研究も進展して、10年前の筆者の机上の理論¹⁾²⁾も今や事実として受け入れられるようになったことは喜ばしい。このような実験に勇気づけられて計算機によるシミュレーションも今やはじまつている⁸⁾。分子動力学法による粒界移動の計算は、さまざまな粒界

の、それも応力下における挙動を理解するうえで役立つであろう。ここでは基礎的に、まずは粒界の原子構造に

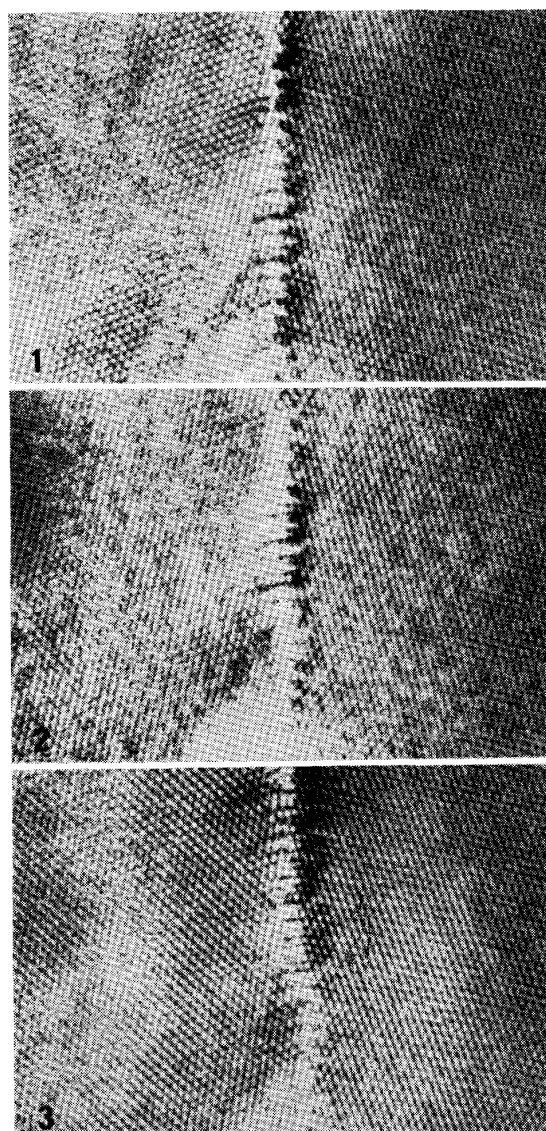


Photo. 1. Sequence of grain boundary migration observed by lattice imaging electron microscopy in an [110] tilt boundary of Au⁴⁾.

昭和 59 年 5 月 8 日受付 (Received May 8, 1984) (依頼解説)

* 東京大学生産技術研究所 (Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, 7-22-1 Roppongi Minato-ku 106)

ついて簡単に解説し、ついでこれをもとに粒界移動の原子過程を考察する。

2. 結晶粒界の構造

2.1 粒界原子構造の観察—粒界の厚さ—

結晶粒界の原子構造が高分解能電子顕微鏡で観察できるようになつて、これまで約一世紀の間に提唱されてきたさまざまな粒界モデルに対して一定の結論が下されたといふことができる。粒界の厚さが数原子層程度の薄いものであるといふことは規則粒界の存在など間接的な証拠から、かなり定説となつてきてはいたが規則構造をもたない粒界ですら数原子層程度の厚さだということを示したのが上述した電子顕微鏡写真である。周期規則構造をもつていてももたなくても金属の結晶粒界は薄いのである。金属以外ではたとえばセラミックス焼結体の粒界などが配列の乱れた厚い層からできているという報告があるにはあるが、これは焼結助剤層が残存したにすぎず化学蒸着法で作成した SiC の粒界など⁹⁾ 本来純度のよい材料ではセラミックスでもその幅は数原子層程度であることが示され、金属・セラミックスの別なく粒界は本来数原子の厚さしかない結論されるようになった。このように狭い粒界層内では粒界拡散や粒界移動は粒界構造の影響をつよくうける。単純に薄い液体層というような無構造な考えでは扱えない。粒界の原子構造をまず問題としなければならない理由がここにある。

2.2 粒界の原子構造理論

粒界構造理論はその多くが規則構造など巨視的な構造をもとにしたものである。直接粒界の原子構造を扱う理

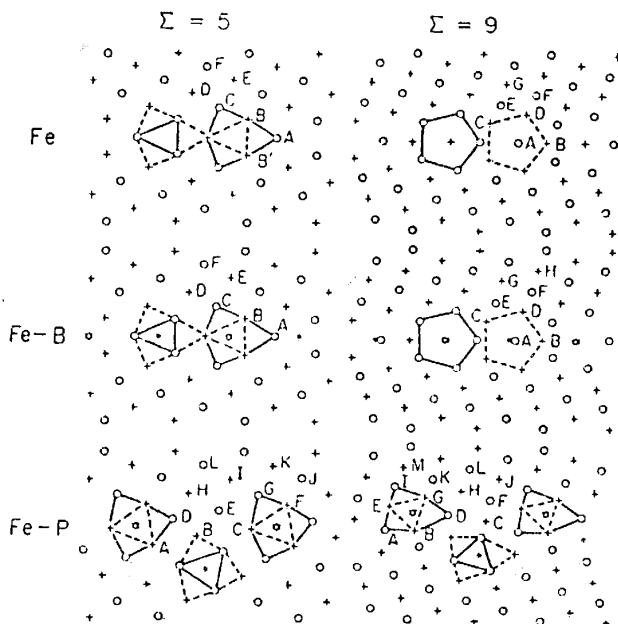


Fig. 1. Bernal polyhedra representation of boundary structures in simulated coincidence-related boundaries $\{013\}$ A/B ($\Sigma=5$) and $\{114\}$ A/B ($\Sigma=9$) in Fe, Fe-B and Fe-P systems¹¹⁾.

論は実はあまり多くはない。ASHBY らが行つたパネル多面体モデルによる解析¹⁰⁾はこのひとつで、粒界原子構造を計算機シミュレーションで研究する人達に重用されている。Fig. 1 は計算機で求めた低エネルギーな構造にこの理論を適用した例である¹¹⁾。原子配列の詳細が議論の対象となつた現在、このような配列単位をもとにした解析が重要である。パネル多面体は、しかし、本来液体や非晶質体の原子構造を考えるために考案されたもので粒界という異方性のある構造を記述するには十分でない。静水圧的に稠密に充填されているかどうか重要なのではなく、粒界面に垂直な方向の力学特性、あるいは粒界面に平行なせん断特性が問題になるわけだから、あくまで粒界面を基準にして原子配列を記述する理論でないと思ふ。粒界面という巨視的因子を含めて見通しのよい原子構造理論を展開するとすると、結局当面は配列単位の単純な規則粒界を扱うことになる。規則構造のある粒界は規則構造のない粒界より低エネルギーであつて存在頻度がたかいか、こういう特殊粒界を人工的に積み重ねて機能材料をつくるのが今や目標となつていくかといふ言い訳はここでは不要であろう。原子構造解析を厳密に行うためには当面規則粒界が便利なのである。適当な結合ポテンシャルを仮定して最低エネルギーな配列を計算機で求め、これを格子像写真とを比較して信頼性のたかい結合ポテンシャルを見出すという本格的研究¹²⁾とも関係がある。Fig. 2 はこのような計算との比較の 1 例である。非整合双晶境界 $\{112\}$ A/B で、上段は計算機や幾何学理論から報告された配列、下段はこの配列から期待される格子像の計算例である。Photo. 2 は金の非整合双晶境界の写真の 1 例である。水平にみえる $\{111\}$ 原子面が粒界においてくいちがっていないとするモデルや変位が数原子層以上にひろくひろがつた CROCKER らの結合ポテンシャル¹³⁾ は実際とは合わない結論される。以上は静的な解析であるが分子動力学法を用いると粒界移動に関しても同様に計算との比較研究が可能である。

2.3 規則粒界の構造理論

周期規則構造を前提とする粒界構造理論は前項の原子構造理論とくらべると比較的早い時期から研究が行われた。既に一応の定説化作業が終つて¹⁴⁾。対応格子粒界理論がこれで、一般にもよく知られているところから、ここではできるだけ簡略に記述することにする。

(1) 粒界面方位と周期間隔

粒界に沿つて一定の原子配列がくりかえし出現する結晶粒界はすべて対応格子という両側の結晶粒にとつて超格子の関係にある巨大格子の存在をその前提としている。粒界面の方位がこの超格子の格子面に平行なとき周期構造があらわれ、その周期間隔は対応する超格子格子面の格子間隔に等しいというのがこの理論の中味である。Fig. 3 はこれを 2 次的に図示したもので 2 重丸

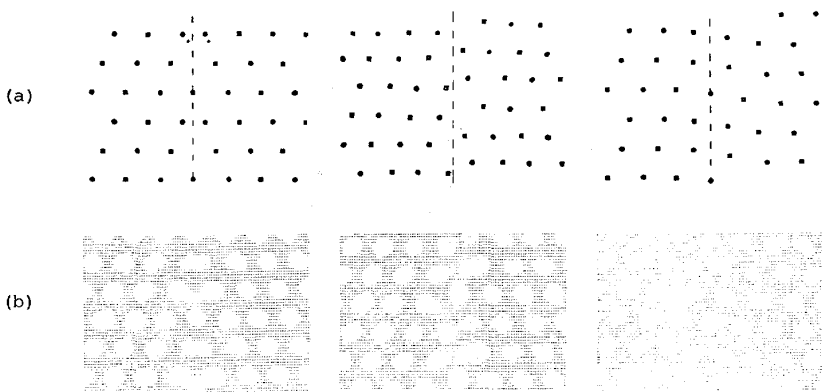


Fig. 2. Exact coincidence and simulated atomic structures of $\{112\}$ A/B incoherent twin (a) and corresponding lattice images (b) computed for the imaging condition of Photo. 2.

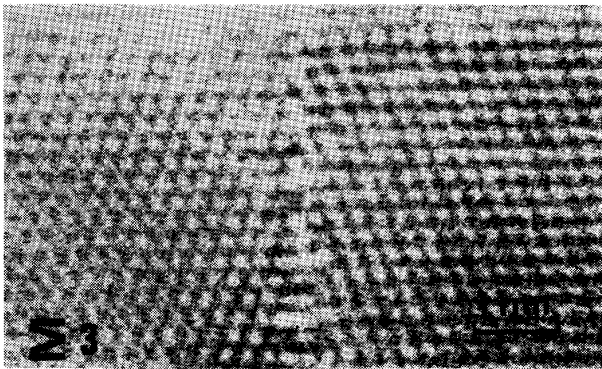


Photo. 2. Lattice image of an incoherent twin $\{112\}$ A/B of Au.

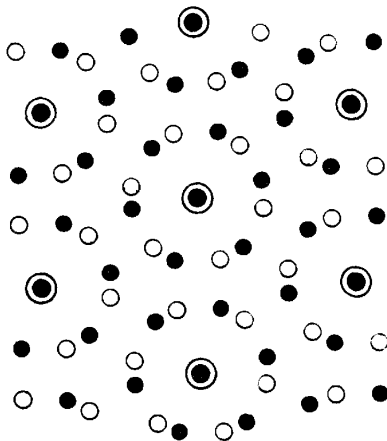


Fig. 3. Coincidence-site lattice of $\Sigma=7$ in double circles as a superlattice of the two crystal lattices.

の格子が対応格子。白丸と黒丸は両側の結晶の格子点である。このような超格子の共有関係は両側の結晶が特定の方位関係にあるときのみ可能で、粒界面の方位も何種類かにそれぞれきまつている。それぞれ対応格子で定義されていることがわかる。実際の原子配列は泡モデルで Photo. 3 に示すようにさまざまなものが可能であるが、配列周期は同じで対応格子の間隔と一致する¹⁵⁾。これが対応格子理論の骨子である。原子構造をきめる理論ではない。原子構造の実際については前章の実験的、あ

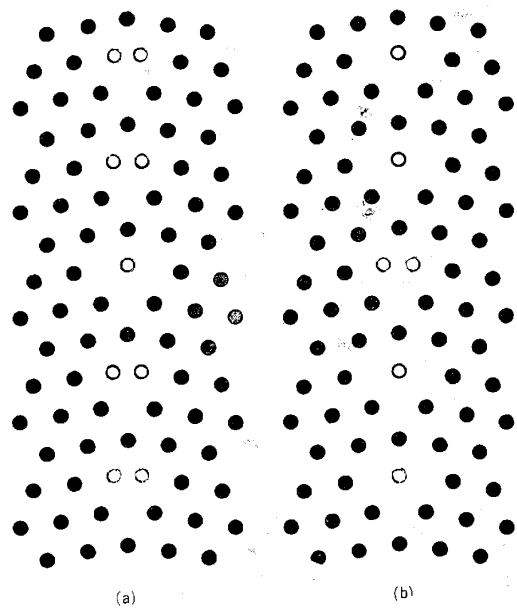


Fig. 4. Example of a vacancy (a) and an interstitial (b) represented schematically for a $\Sigma=7$ coincidence-related boundary.

るいは計算シミュレーションの成果を利用するよりしかたがない。

(2) 粒界点欠陥の構造

規則粒界では原子構造がきまつているから、その欠陥構造も特定の種類のものに限られてくる。Fig. 4 (a) (b)は Photo. 3 (a), (b)の配列を参考にして、この粒界に原子空孔を考えたものである。単なるモデルであるからここでは3次元的詳細は検討せず、界面内で一カ所だけ原子の不足した配列になつていと仮定している。これが逆になつた場合、すなわち Fig. 4(b)に示すように、中央部の一カ所だけ原子の多い構造となつている場合は格子間原子といふことができよう。結晶粒内とちがい、粒界構造は粒界に垂直な方向に緩和することができるから、空孔と格子間原子のエネルギー差が母相中とくらべ小さいと予想される、など静的・動的に母相のそれと異なる挙動が点欠陥に関して期待される。粒界原子空孔や格子間原子は母相の原子空孔を吸収・放出す

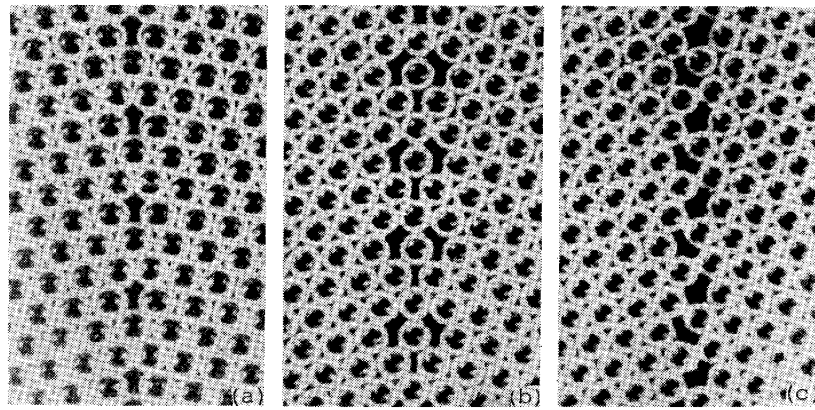


Photo. 3. Bubble raft model of $\Sigma=7$ coincidence related boundaries.

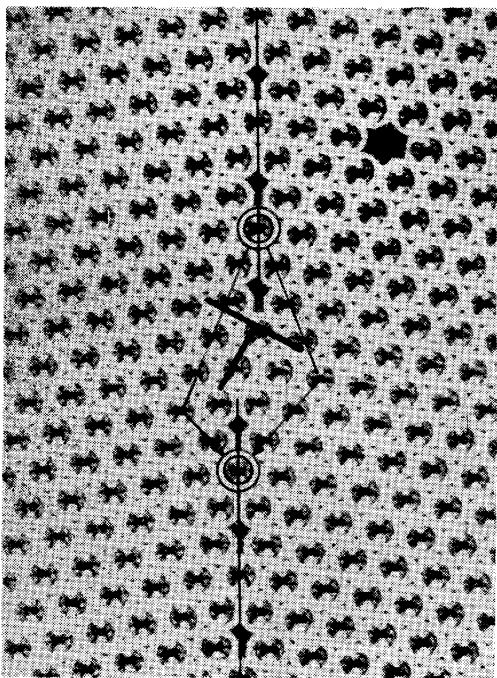


Photo. 4. A boundary dislocation in a $\Sigma=7$ coincidence related boundary.

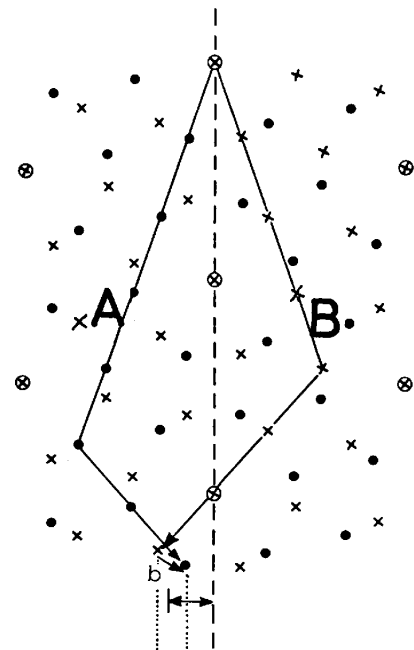


Fig. 5. Representation of the Burgers vector b of a boundary dislocation of Photo. 4.

る構造として注目されるが、まだあまり原子配列レベルの解析がない。電子顕微鏡観察による同定が容易でないので計算機シミュレーションにも熱がはいらないというのが正直なところであろう。

(3) 粒界転位の構造

点欠陥にくらべて観察の容易な線欠陥は、はやくから活発な研究の対象となつた。これは線状欠陥の歪み場が比較的長範囲に達し透過電子顕微鏡で容易に観察できるからで、とくに筆者は早い時期からこれに関与してきた¹⁶⁾。むしろ対応粒界理論の展開がこの粒界転位観察によつて触発されたというのがこの分野の歴史的事項となつている。

粒界転位の網目はちょうど小角粒界が格子転位の網目で形成されるように小さな角度を対応粒界の方位関係につけ加えるから、特定の対応方位関係にごく近い双結晶を作成して透過電顕観察し、転位網目の形状・間隔と完

全な対応方位関係からのズレとを比較して粒界転位のバーガースベクトルを判定する研究がまず BALLUFFI¹⁷⁾ のグループで行われた。粒界転位のバーガースベクトルは対応格子から GRIMMER の理論¹⁸⁾によつて計算できる。

$$A_{DSC}^* = A_A^* \cap A_B^* = A_{CSL}^*(A_A^*, A_B^*) \dots\dots\dots (1)$$

ただしここで A_{DSC} は粒界転位のバーガースベクトルのあつまりを格子 (DSC 格子と呼称されている) で示したもので A_A, A_B はそれぞれ両側の結晶格子、 A_{CSL} は両者の超格子である対応格子 (CSL 格子と呼称されている)、*印は逆格子を意味している。この関係は次のように考えると理解しやすい。粒界転位の1例を泡モデルで Photo. 4 に示したが、この構造は、泡配列を歪みのない完全な結晶である Fig. 5 に書きうつすとわかりやすい。図では考えやすいように両側の結晶格子を重ねあわせて書いてあることに注意する。粒界位置をいつたんきめたら、格子点で実在するのはそれぞれ粒界を境にし

て一方の側だけ、すなわち×印の格子点は図の右側、●印の格子点は左側だけに存在することはもちろんである。完全結晶の中に書き入れたためのくいちがい(- b)が、ちょうど格子転位を定義したときと同じように粒界転位バーガースベクトル(の負符号)となつている。これは結局この図の点線が重なるように矢印の黒丸と×印を無理やりくつつけて、下方をひろげてやつたとき周囲に生ずる歪みが Photo. 4 の粒界転位のまわりの歪みであり、上述の黒丸と×印間の差ベクトルが粒界転位のバーガースベクトルであると言つていることに相当する。この差ベクトルは Fig. 5 の重ねあわせ図からわかるように両側の結晶格子をさらにこまかくしたものである。逆格子を作成して比較すると、バーガースベクトル格子点の逆格子は両側の結晶の逆格子の超格子点に相当することがわかる。これをそのまま書いたのが GRIMMER の式ということになる。この粒界転位の運動が次章の粒界移動と密接に関係する。

3. 結晶粒界の移動機構

結晶粒界の移動機構に関する理論としては、むかしから様々な微視的あるいは巨視的モデルが提唱されてきた。反応を理論にもとづく古典的な取り扱い¹⁹⁾から、単数あるいは複数個の原子の所属替えを仮定する形式的理論²⁰⁾、粒界面上とぎれた原子面ステップ²¹⁾、キンク²²⁾、あるいは粒界転位の運動による原子ステップの高さだけの移動^{23) 1) 2)} の積み重ねを考える原子構造モデルあるいは偏析した不純物元素をひきずることによる移動抵抗論²⁴⁾、や原子空孔の拡散を律速段階とするもの²⁵⁾等さまざまな理論が存在する。前章で示したように粒界原子構造が直視できるようになった現在、これら理論はより具体的に粒界移動の原子過程を扱う構造理論の素材として見直され統一される段階にある。したがってここでは各理論の紹介はやめて、このような見直し作業の前提とな

る粒界移動原子過程の観察に重点をおいて解説する。

3.1 粒界移動原子過程の観察

Photo. 1 で示した格子像では原子が厚み方向に重なつているため移動の素過程を原子レベルで議論するには十分でない。ここではコロイド結晶モデルを用いて説明する。分子動力学法を用いた計算機シミュレーションも移動原子機構の解析に有効である⁸⁾が、ここではより自然に近いコロイドモデルを用いて説明する。Photo. 5 は金の単分散コロイド結晶の光学顕微鏡写真である⁹⁾。大きさ $0.1 \mu\text{m}$ 位の直径のよくそろつた金粒子を純水中に分散させると格子間隔 $1 \mu\text{m}$ 程度の面心立方晶となる。これは金粒子が電荷を帯び互いに反発するからで、水の分子がぶつかることによりはげしくブラウン運動している。写真のボケはおもにこの運動のためである。焦点位置を観察用の窓ガラスの内面から $1 \mu\text{m}$ 程度はなすとガラス面に平行な $\{111\}$ 面の格子像がみえてくる。焦点位置をより深い位置へずらせていくといつたん粒子像がボケてなにも見えなくなり3個のボケた粒子像の中間間に2層目の全粒子がみえてくる。一般に3~4層くらい内部まで焦点をあわせることができる。深くなると表面の粒子で散乱された光がバックグラウンドとなつて像のコントラストを低下させる。表面近傍とはいえ3次元構造を観察している。この写真(a), (b)は実は16ミリ映画のつづきコマを並べたものでそれぞれ露光時間は $1/41 \text{ s}$ 、2コマの間隔は $1/16 \text{ s}$ であつた。両方重ねた写真(c)にみられる線状の像は $1/16 \text{ s}$ の間に5~6個の粒子が数珠つなぎのかたちで運動したためと解釈される。このように複数個の粒子が連動するのが粒界と母相で異なるところで、母相でみられる粒子空孔の運動は常に1粒子過程をある間隔へだてて積み重ねていくものであつた。この連動現象の有無は拡散のアイソトープ効果が体拡散では著しいが粒界拡散では弱いなど粒界拡散にみられた諸現象を説明するものである。粒界のように

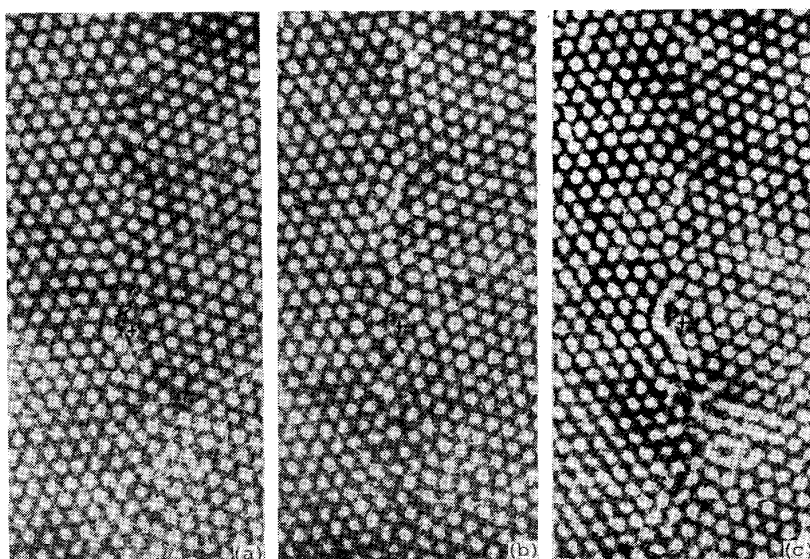


Photo. 5. An elementary process of grain boundary migration observed by back reflection light microscopy in a mono dispersive colloid crystal of Au particles. (a) was taken $1/16 \text{ s}$ before (b). The superimposed micrograph (c) reveals the sequential nature of the particle motion.

構造が数原子間隔のひろがりをもつとき、ひとつの熱活性化過程で生じた構造が準安定な構造で比較的短い時間ではかの構造へと転化し、一見するとひとつづきの運動にみえるということは容易に理解できよう。

このようなひとつづきの運動はその先端と後端、場合によってはその中間部も含めて粒子が一方の結晶から他方の結晶へと所属をかえたことを意味するから、粒界拡散の素過程であると同時に原子レベルの粒界移動もひきおこしている。また、この素過程の積み重ねの結果として両側の結晶は次第にその相互の位置をかえてゆくわけで、結局、粒界すべりとか拡散クリープとかいう言葉で表現される変形現象は、これら熱活性運動プロセスを素過程とする巨視的現象といえることができる。このように素過程を共有しているということは重要で、一方を活性化させると他方を活性化できる。粒界拡散を活性化すると粒界移動が促進される。応力を印加すると粒界移動が生ずるといふこれまでよく観察された加速現象を説明できるだけでなく、これを積極的に利用し粒界移動を制御することを可能にする。

3.2 規則粒界の移動機構

前章で説明した粒界移動機構が規則粒界でどのように規則構造の影響をうけるか考えてみる。規則構造は上記素過程の種類を限定するから、よりたち入った解析が期待できるからである。双結晶を用いた巨視的実験との対比も期待される。

周期規則粒界に可能な移動機構のうちで最も困難とみられるのは純粋な粒界移動、すなわち結晶粒相互の位置に変化がなく粒界面だけが移動する場合である。Fig. 5 に示した単位対応格子に含まれる原子が集団的にその位置をかえないと移動が完結しないからである。対応粒界の概念を最初に提唱した KRONBERG と WILSON の粒界移動モデル²⁶⁾は実はこれであるが前章で説明した運動プロセスと異なり同等な構造が並んでいるプロセスだから、そのままでは進行し難い。

界面移動が単位対応格子の高さのキンクの移動で生ずるとする BRANDON ら²²⁾のモデルはこれより現実性がたかい。キンクはバーガースベクトルはゼロで、芯エネルギーのたかい芯構造をもつ転位として解釈するとわかりやすい。キンク原子配列の変化は転位の芯構造の変化であり、パイエルズポテンシャルと同様な機構による運動抵抗が期待される。バーガースベクトルがゼロであるため、運動にともなつて歪みエネルギーを消費できないから、この転位芯エネルギーの周期的増減はかなり運動抵抗として影響すると考えられる。これに対し、第 3 の機構である粒界転位のステップによる粒界移動は歪みエネルギーを駆動源とできるので規則粒界の移動機構としてより有利である。Photo. 6 は泡モデルでこのような動きを観察した例である。粒界転位が粒界にそつて移動すると Fig. 6 に示すようにステップの高さの粒界移動が

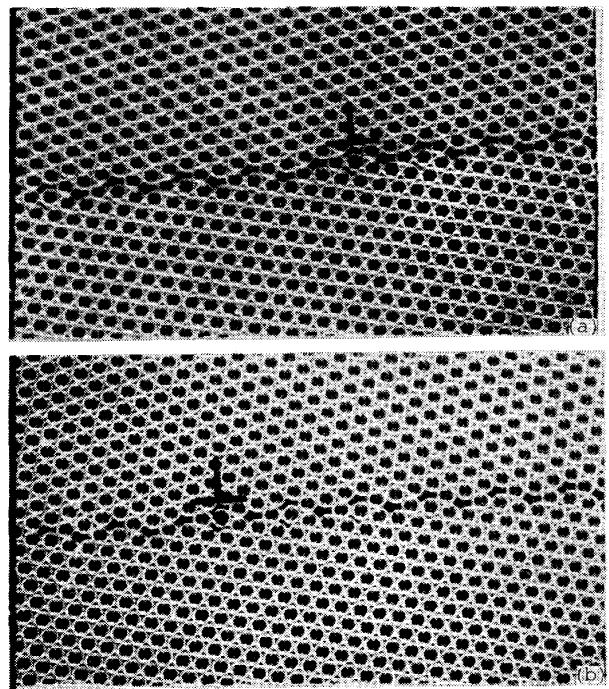


Photo. 6. Migration of a $\Sigma=13$ coincidence related boundary by the glide motion of a boundary dislocation by the amount of its step height h .

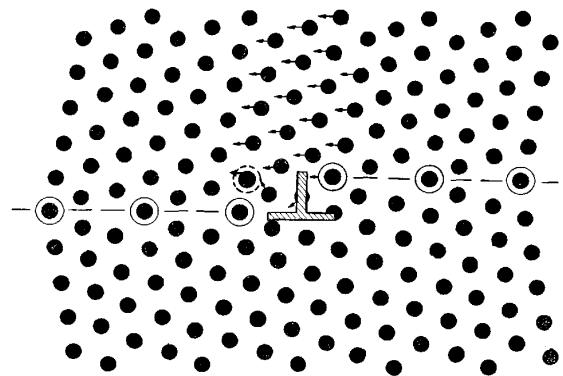


Fig. 6. Schematic representation of boundary migration by the glide of a boundary dislocation.

生ずる。運動する粒界転位のバーガースベクトルを (b)、ステップの高さを (h) とすると、せん断変形量と粒界移動量との比は h/b で与えられる。体心立方結晶の代表的対応粒界に対してこの比を計算したものが上述の再結晶部会の報告 (文献(1)) に示されている。最近この機構を証明する一連の双結晶研究が堀内のグループにより行われている⁷⁾。Photo. 7 はその 1 例である。試験まえ入れておいたけがき線が粒界移動部でも直線状になつており、微視的にも粒界移動とすべりの比が一定であることを示している。このような規則粒界のすべり・移動現象はその機構を同定するうえできめ手になるだけではない。この現象は一種の形状記憶現象であり可逆性があるから機能材料としての用途も期待できよう。

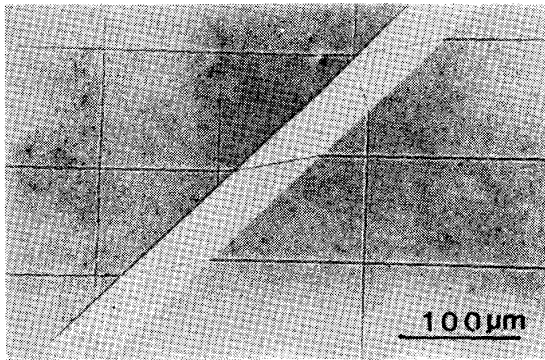


Photo. 7. Shear induced migration of a $\Sigma=15$ coincidence related boundary. The shear/migration ratio agrees with b/h of the gliding boundary dislocation. (TAKAHASHI and HORIUCHI⁷⁾)

4. 結晶粒界のモビリティ

結晶粒界移動の起こりやすさを示す指標として一般に用いられる概念がモビリティである。これは次式により定義される。

$$v = MF \dots\dots\dots (2)$$

ここでは v は粒界移動速度、 F は粒界移動の駆動力、 M がモビリティである。クリープ変形など固体材料の速度論の多くがそうであるように粒界移動は一般に線型でなくモビリティが駆動力のひろい範囲で一定ということはむしろ稀である。粒界移動の駆動力 F には Fig. 7 に示すように様々なものがあり、その大きさにも大幅なちがいがあ²⁷⁾。Fig. 8 に示すように駆動力のひくい側と駆動力のたかい側で2段にわかれてることが多く一般に粒界偏析の有無で説明されている²⁴⁾。

粒界移動が単純な熱活性化過程で示され F に対して線形な場合もある。このとき M はアルレニウスの式を満足する。

$$M = M_0 \exp(-Q/RT) \dots\dots\dots (3)$$

このみかけの活性化エネルギーが前章で示した原子素過程の何を示すかは、規則粒界においても十分理解されているわけではない。印加応力のちがいにより運動する粒界転位の種類も異なり、律速段階を構成する素過程が変化して M_0 値や Q 値をかえるからである。それだけに粒界移動の機構を同定する重要な手がかりであるということもできる。粒界移動の測定は比較的容易だから、この見かけの活性化エネルギーは種々の粒界移動プロセスに対し測定されている。再結晶・粒成長の場合には通常駆動力も時間とともに変化して扱いが厳密でない。ここでは例として拡散誘起粒界移動、照射誘起粒界移動、すべり誘起粒界移動など最近、話題とされていて駆動力がよく定義されている場合をとりあげ、モビリティという概念を実験の側から眺めてみる。

4.1 拡散誘起粒界移動

粒界移動の駆動力として試料表面から粒界に沿った合金元素の拡散侵入 (又は滲出) を利用する場合である。

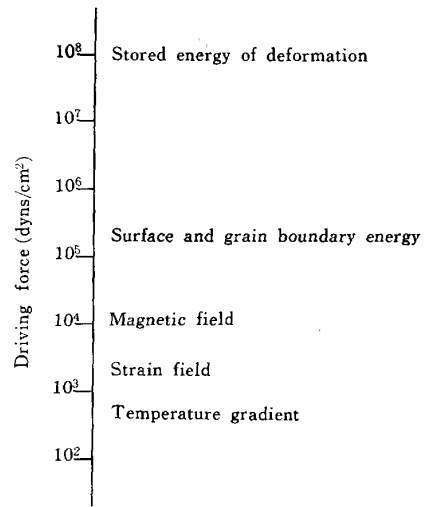


Fig. 7. Driving forces of the grain boundary migration.

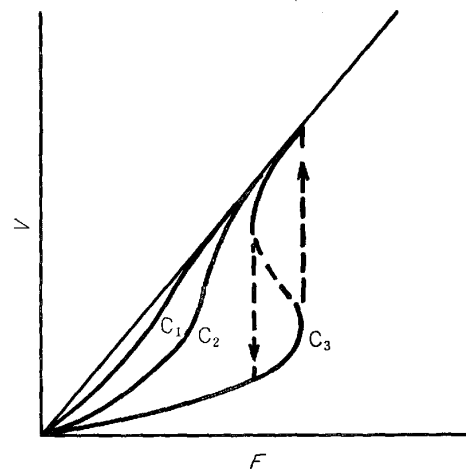


Fig. 8. Schematic illustration of relationship between migration velocity V and driving force F for different solute concentrations $C_1 < C_2 < C_3$.

固溶 (または相分離) の自由エネルギーが駆動力となり試料表面に顔を出した粒界部分が優先的に移動する。BALLUFFI と CAHN⁶⁾、や HILLERT⁵⁾ の実験がよく知られている。移動はいつたん始まるとその方向が逆転できないから2方向の領域が混在してS状の粒界となり、ついには相手の背後にまわりこんで複雑な形状を呈するようになる。この形状は TURNBALL などにより古くから不連続析出という名称で研究されてきたものとよく似ている。2相分離した片方が粒界を通って表面から拡散滲出したとすれば全く同じことになる。このような場合のモビリティはその活性化エネルギーが通常測定される粒界拡散のそれより小さい。これは移動しつづける粒界における拡散の活性化エネルギーが静止した粒界のそれより小さいためと考えられる。移動する粒界で拡散滲出が著しいことは一般によく経験されていることである²⁸⁾。

4.2 照射誘起粒界移動

粒界移動の駆動力として前項とよく似た効果をもつものとしてイオン照射などによる格子欠陥がある。照射欠陥を消費しながら粒界が移動する。この場合も、いつたんだきた結晶粒界は後方に照射欠陥がなくなるため同一方向に移動しつづける。この高速な粒界拡散を利用した表面層組成制御が表面被覆などの見地から期待される。拡散誘起粒界移動の場合と異なり、照射しつづけるかぎり移動は進行し、一度粒界が通過した領域もその後の照射で損傷を含むようになるため、拡散誘起粒界移動とちがって繰り返し粒界を通過させることが可能である。異相界面の場合、照射を電子線や γ 線ではなくイオンで行い、注入されたイオンによる化学組成の変化を利用して、界面移動の方向を制御することもできよう。このような照射誘起移動のみかけの活性化エネルギーは前項同様、通常の粒界拡散のそれより小さいと考えられる。オーステナイトステンレス SUS 316 の Ar^+ 照射により微細粒組織が常温でも生成したこと²⁰⁾は、定性的ながらこれを示している。

4.3 すべり誘起粒界移動

規則粒界においては 3.2 で述べたように粒界転位が実在し、この運動により転位の芯構造に含まれたステップの高さだけ粒界が移動する。移動の駆動力はこの場合印加応力で、その方向成分によつて運動する転位の種別と割合が異なるため、粒界構造を詳細に調べて解析しなければならない。そのかわり、粒界すべりと粒界移動の比がきめ手となつて巨視的実験データからその移動の機構を推論することができる。Photo. 7 に示された応力誘起粒界移動のモビリティに関する双結晶実験⁷⁾は、しかしその応力指数などにまだ理解できない問題を内蔵している。みかけの活性化エネルギーは粒界拡散のそれと同程度であるが、応力指数は 1 次でない。モビリティ自身に応力の影響が含まれている。

4.4 モビリティと粒界移動の機構

以上の 3 例で示されるように粒界移動のモビリティは駆動力が比較的良好に定義される場合でもその温度・応力依存性からみて、これを定義している (2), (3) 式に単純な物理的イメージを与えるものとなっていない。すべり誘起粒界移動のように規則粒界で移動の機構が一応同定されていてもこの始末である。これは結局、粒界移動の素過程が最初の原子の移動にひきつづいて多数の原子の移動をともし雪崩現象だからで、駆動力が変化したり、移動に関与する不純物元素の濃度が変化するとこれが敏感に反映するプロセスとなつているためであろう。モビリティの定量的な取り扱いにはこの雪崩過程に対する、より詳細な解析が今後必要であろう。

5. む す び

以上、再結晶・粒成長の素過程である粒界移動の機構

や移動特性を粒界構造の側から解説した。粒界移動の駆動力として実例をあげたものがいずれも特殊なもので、再結晶・粒成長に一般的な変形により導入されたものでないのは問題であるが、これは本報告で粒界構造や移動の駆動力をよく定義した実験に注目したためである。粒界移動のモビリティに単純な単原子的取り扱いがゆるされないのは数原子程度の厚さしかない構造をもつ粒界の宿命で、今後不純物原子の偏析構造まで規定した、拡散・移動・すべりを含む多元的粒界熱活性挙動理論の一環として微視的粒界移動理論の構築が行われることが期待される。

文 献

- 1) Y. ISHIDA: Trans. JIM., 11 (1970), p. 107
- 2) 石田洋一: 鉄鋼薄板の再結晶及び集合組織 (鉄鋼基礎共同研究会編) (1974), p. 15 [日本鉄鋼協会]
- 3) Y. ISHIDA, S. OKAMOTO and S. HACHISU: Acta Metall., 26 (1978), p. 651
- 4) Y. ISHIDA, H. ICHINOSE and M. MORI: Proc. Int. Congr. Electron Microscopy, 2 (1982), p. 345
- 5) M. HILLERT and G. R. PURDY: Acta Metall., 26 (1978), p. 333
- 6) R. W. BALLUFFI and J. W. CAHN: Acta Metall., 29 (1981), p. 493
- 7) 高橋 徹, 堀内 良: 日本金属学会誌に投稿中
- 8) G. H. BISHOP, R. H. HARRISON, T. KWOK and S. YIP: Progr. Mater. Sci., ed. by J. W. CHRISTIAN, P. HAASEN and T. B. MASSALSKI, Oxford (1981), p. 49 [Pergamon Press]
- 9) 平賀賢二: Journal of Electron Microscopy に投稿中
- 10) M. F. ASHBY, F. SPAEPEN and S. WILLIAMS: Acta Metall., 26 (1978), p. 1647
- 11) M. HASHIMOTO, Y. ISHIDA, R. YAMAMOTO and M. DOYAMA: Acta Metall., 32 (1984), p. 1
- 12) Y. ISHIDA, H. ICHINOSE, M. MORI and M. HASHIMOTO: Trans. JIM., 24 (1983), p. 349
- 13) A. G. CROCKER and B. A. FARIDI: Acta Metall., 28 (1980), p. 549
- 14) 石田洋一, 森 実, 市野瀬英喜: 表面科学, 2 (1981), p. 185
- 15) Y. ISHIDA: J. Mater. Sci., 7 (1972), p. 72
- 16) Y. ISHIDA and M. HENDERSON-BROWN: Acta Metall., 15 (1967), p. 857
- 17) T. SCHÖBER and R. W. BALLUFFI: Phil. Mag., 21 (1970), p. 109
- 18) H. GRIMMER: Scripta Metall., 8 (1974), p. 1221
- 19) D. TURNBULL: Trans. Metall. Soc. AIME, 191 (1951), p. 661
- 20) N. F. MOTT: Proc. Phys. Soc., 60 (1948), p. 391
- 21) H. GLEITER: Acta Metall., 17 (1969), p. 853
- 22) D. G. BRANDON, B. RALPH, S. RANGANATHAN and M. S. WALD: Acta Metall., 12 (1964), p. 813
- 23) D. A. SMITH and A. H. KING: Phil. Mag., A44 (1981), p. 333
- 24) K. LÜCKE and H. P. STÜWE: Acta Metall., 19 (1971), p. 1087

- 25) Y. ESTRIN and K. LÜCKE: Acta Metall., 30 (1982), p. 983
- 26) M. L. KRONBERG and F. H. WILSON: Metall. Trans., 185 (1949), p. 501
- 27) H. GLEITER and B. CHALMERS: High Angle Grain Boundaries, Progr. Materials Science, 16 (1972), p. 133 [Pergamon Press]
- 28) Y. ISHIDA, H. SHIMIZU, N. KOYAMA and H. ICHINOSE: Point Defects and Defect Interactions in Metals, ed. by J. TAKAMURA, M. DOYAMA and M. KIRITANI (1982), p. 958 [University of Tokyo Press]
- 29) 齊藤秀雄, 市野瀬英喜, 清水 肇, 石田洋一: 日本金属学会講演概要 (1984・4月), p. 231

コ ラ ム

ミ ラ ー 指 数

再結晶や粒成長にともなつてできる優先方位を表すミラー指数の表現法に混乱があるように思われるので、本特集号を機会に考えてみたい。ミラー指数は結晶座標系での結晶格子面の傾きを示す指数で、次のようにして求める¹⁾²⁾。(1)結晶面と基本3軸との各交点を単位格子の軸長を基準に求め、(2)それらの逆数を取り、(3)その比を最小値の整数の組 hkl に約し、(4)これを括弧で囲み (hkl) とする。このように結晶学では面指数を示す、() または { } で囲まれた、整数の組 hkl は coprime³⁾ (互いに素) でなければならないと定めている。回折線、したがって逆格子点を示すには hkl とし、括弧をつけない。 (hkl) 面の n 次の反射は $nhkn$ で、 $(nhkn)$ 面の反射ではない。回折データの記述として {200} 極点図のような記述が、200 回折線で測定した {100} 極点図という意味で、用いられることがある。ただし WASSERMANN⁴⁾ の本を繰ると、原論文で {200} 極点図と書いてあつたものが、すべて {100} 極点図と改めて掲載されていることに気づかれるだろう。

さらに進めて板面に平行な結晶粒方位や優先方位の表示として、(200) 方位粒、{222} 方位集合組織のように互いに素でない整数で結晶面指数を表現することは結晶学の定義からはずれる。それではたとえば (100) と (200) は同じなのだろうか。結晶面は解析幾何による平面の方程式で、結晶座標系 (単位格子を基準と

する x, y, z 軸) に関して、 $hx+ky+lz=n$ (n : 整数) として表される。この式でミラー指数の意味は、 h, k, l が互いに素で、 $n=1$ である格子面により同じ傾きをもつ結晶面を代表させるということになる。ここでわかるように (200) は (100) と面の位置の違いを示すもので、その必要がある Fermi 面などの表現で用いられるべきものである。また {200} という表現が必要となる理由をあえて求めるならば、200 回折強度から評価される存在量が、実際の {100} 方位粒の存在量に対応しないと考えられるときになるのではないだろうか。つまらないことのようにはあるが、やはり約束にしたがった表現を用いることが必要なのではないでしようか。

文 献

- 1) C.S. BARRETT and T.B. MASSALSKI: Structure of Metals, 3rd ed. (1966), p. 11 [McGraw-Hill]
- 2) C. KITTEL: Introduction to Solid State Physics, 2nd ed. (1959), p. 24 [John Wiley & Sons]
- 3) International Tables for X-ray Crystallography, Vol. 2, ed. by J.S. KASPER and K. LONSDALE (1959), p. 102 [The International Union of Crystallography]
- 4) G. WASSERMANN and J. GREWEN: Texturen Metallischer Werkstoffe, 2nd ed. (1962) [Springer Verlag]
(新日本製鉄(株)第一技術研究所 松尾宗次)