

異相界面の結晶学の幾何学的考察

解説

加藤 雅 治*

Geometrical Consideration of the Crystallography of Interphase Interfaces

Masaharu KATO

1. はじめに

二つの異なる結晶がシャープな界面を形成する場合、二結晶の間に特別な方位関係が存在することがよくある。たとえば、f. c. c. 結晶と b. c. c. 結晶の間には Kurdjumov-Sachs (KS)¹⁾ や Nishiyama-Wassermann (NW)²⁾³⁾ の方位関係がしばしば観察される。しかし、与えられた二結晶間になぜそのような特別な方位関係が実現するのかを理解することは、必ずしも容易ではない。

異相界面の結晶学には、幾何学的に説明できるものできないものの二通りがあるとよく言われる。本解説では当然説明できる界面を扱う。しかも、後述するように非常に簡単な場合のみを対象とする。より複雑な界面を取り扱わない理由は二つある。一つは筆者の理解のレベルを超えているためであり、もう一つはすでに立派な解説がある^{4)~8)}ためである。「単純すぎる」という読者の批判は覚悟の上であるが、それでも使えることもあると感じていただければ有り難い。

2. 幾何学的に好都合な界面

界面の結晶学を幾何学的に考察する理論の一つに、BOLLMANN の O 格子理論⁹⁾がある。一般に、あるベクトル x は 3×3 アフィン変換行列 A によって、

$$y = Ax \dots\dots\dots(1)$$

のように別のベクトル y に変換される。特に、界面を構成する二つの結晶格子 1, 2 を考え、 A を格子 1 から格子 2 への変換を表す行列、 I を単位行列とすると、次式で O 格子ベクトル $X^{(0)}$ が定義できるという。

$$(I - A^{-1})X^{(0)} = b^{(L)} \dots\dots\dots(2)$$

ここで、 A^{-1} は A の逆行列、 $b^{(L)}$ は格子 1 の任意の並進ベクトルである。(2)式は、 $X^{(0)}$ の三つの成分を求める三元一次連立方程式である。

二つの結晶格子面で形成される界面の幾何学的な対

応性は、 $I - A^{-1}$ の行列式の絶対値、すなわち、 $|\det(I - A^{-1})|$ が小さいほど良いと言われる^{5)~7)}。この行列は 3×3 行列なので、その階数 r は 0, 1, 2, 3 のいずれかである。 $r=3$ のときは、与えられた $b^{(L)}$ に対して $X^{(0)}$ はユニークに決まるので、O 格子点が定義できる。一方、線形代数学でよく知られているように、 $r \neq 3$ なら $|\det(I - A^{-1})|$ の値は最小値のゼロをとるので、幾何学的には都合の良い界面ということになる。本解説ではこのような特別な場合を主に考える。ただし、 $r=0$ のときは、 $A=I$ であり、界面が存在しない (A は不変体変形を表す) のので興味の対象から外し、 $r=1$ と $r=2$ の場合を議論する。

3. $r=1$ で記述される界面 (不変面変形)

$r=1$ のときは (2) の連立方程式のうち独立な式はただ一つなので、一般に $X^{(0)}$ の解は平面を表す⁹⁾。以下では、 $x_1-x_2-x_3$ 右手直交座標系を基底にとる。もし、行列 A が次式のような形のとき、 $I - A^{-1}$ の階数が 1 となることはすぐわかる。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & A_{13} \\ 0 & 1 & A_{23} \\ 0 & 0 & 1 + A_{33} \end{pmatrix} \dots\dots\dots(3)$$

図 1 に示すように、この変換行列は一般に x_3 軸に垂直な面 (x_3 面) を不変面とする不変面変形を表す。特に、 $A_{33}=0$ ならば単純せん断変形となる。

不変面変形を前提とする結晶学的理論の代表的なものに、いわゆるマルテンサイト変態の現象論¹⁰⁾¹¹⁾がある。この理論では、板状マルテンサイトと母相との界面 (晶癖面) が不変面、すなわち、無歪み・無回転面となるようにマルテンサイトの形態や結晶学が決まると考えている。この完成された理論はマルテンサイトに対してのみならず、析出物の結晶学を論じる際にも適用されている。

一般に、母相の結晶格子をマルテンサイトの結晶格子

平成 3 年 7 月 19 日受付 (Received July 19, 1991) (依頼解説)

* 東京工業大学大学院総合理工学研究科助教授 工博 (Graduate School of Science and Engineering at Nagatsuda, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuda Midori-Ku Yokohama 227)

Key words: interface; crystallography; geometry; lattice correspondence; orientation relationship; invariant plane; invariant line; martensitic transformation; thin film; epitaxy.

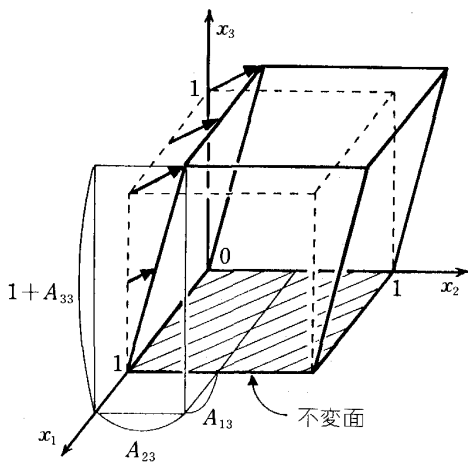


図 1 x_3 面を不変面とする不変面変形

に変換する格子変形 (たとえば Bain 変形) B のみでは不変面変形条件を満たすことができないので、格子不変変形 (双晶またはすべりによる) P と剛体回転 R を加えて、マルテンサイトの全形状変形を表す変換行列 A は

$$A = RBP \dots\dots\dots (4)$$

のように三つの行列の積の形で表されると考える。ここで、 B はマルテンサイトと母相との格子対応を仮定すれば、両相の格子定数より決まる既知の行列である。 P では、双晶系 (またはすべり系) は与えられる (既知) が、互いに双晶関係にある二つの結晶の体積比 (またはすべり量) は未知の量である。現象論ではこの未知の量や R は、 A が不変面変形を表すように決定され、その結果として晶癖面方位、双晶体積比、マルテンサイトと母相との方位関係などが求まる。

筆者らはこの現象論を小変形理論で記述することを試みた¹²⁾¹³⁾。小変形理論とは、おのおのの行列から単位行列を引いた残りの行列を考えて、変形や回転の組合せを行列の和の形で表すものである。すなわち、歪みの二次以上の高次項を無視した、大変形理論の近似に相当する。行列の積は一般には不可換であるが和は可換なので、計算がずっと楽になる。小変形理論によると (4) 式は

$$A^s = R^s + B^s + P^s \dots\dots\dots (5)$$

と表される。ここで、たとえば $A^s = A - I$ (他も同様) である。

A が (3) 式で与えられるとき、 A^s は次式のようになる。

$$A^s = \begin{pmatrix} 0 & 0 & A_{13} \\ 0 & 0 & A_{23} \\ 0 & 0 & A_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & A_{13}/2 \\ 0 & 0 & A_{23}/2 \\ A_{13}/2 & A_{23}/2 & A_{33} \end{pmatrix}$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & A_{13}/2 \\ 0 & 0 & A_{23}/2 \\ -A_{13}/2 & -A_{23}/2 & 0 \end{pmatrix} \dots\dots\dots (6)$$

ここで、第三辺の第一項 (対称行列) は歪みを、第二項 (反対称行列) は回転を表す。第一項からわかるように、 x_3 面に対する無歪み面条件は、歪み行列成分のうち 11, 12, 22 の各成分がゼロになるとき満たされる。さらに、第一項を対角化すればわかるが、三つの主軸歪みのうち一つは正、一つはゼロ、残りの一つは負のときのみは無歪み面条件が満たされる¹²⁾。大変形理論でもこれに相当する無歪み面条件が議論されている¹⁴⁾。小変形弾性論に基づく Eshelby の楕円体介在物理論¹⁵⁾を適用すれば、この無歪み面条件が満たされるとき、板状マルテンサイトが生成しても弾性エネルギーがゼロとなることが示される¹⁶⁾¹⁷⁾。すなわち、現象論の解析で求まるマルテンサイトの形態は弾性エネルギーに関しては最も都合の良いものになっていることが、小変形理論を使うとよくわかる。また、これが $r=1$ で記述される不変面界面が好都合な界面であることの物理的な意味である。

大変形理論に基づくオリジナルな現象論では、晶癖面方位やマルテンサイトと母相との方位関係などの解を求めめるためには、コンピューター計算が不可欠である。一方、小変形理論を使えば、これらの解を簡単な解析解として手計算で得ることができる。例として、f.c.c. → b.c.c. マルテンサイト変態を考える¹²⁾。格子対応として通常の Bain 対応を採用する。すなわち、図 2 に示すように、f.c.c. の $(hkl)_f$ 面と b.c.c. の $(pqr)_b$ 面 (下つきの f と b は、それぞれ f.c.c. と b.c.c. を表す) は

$$(pqr)_b = (hkl)_f \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \dots\dots\dots (7)$$

のように、また、 $[abc]_f$ 方向と $[uvw]_b$ 方向は

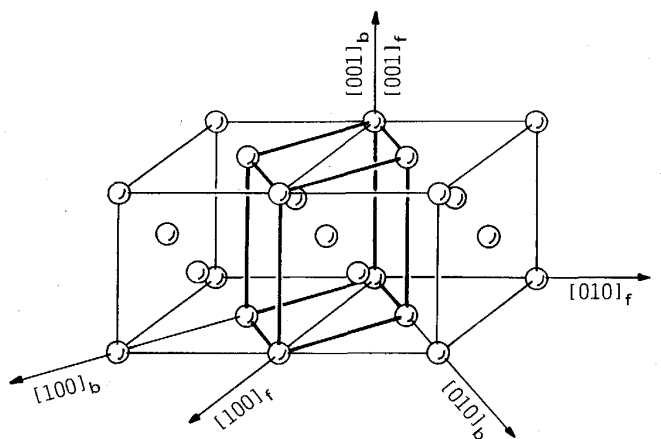


図 2 Bain 対応

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_b = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}_f \dots\dots\dots (8)$$

のように Bain 対応すると考える。このとき、格子変形を表す行列 B^S は Bain 変形として

$$B^S = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix} \dots\dots\dots (9)$$

と書ける。(9)式では座標系は f. c. c. 母相の三つの主軸に平行, すなわち, $x_1 // [100]_f$, $x_2 // [010]_f$, $x_3 // [001]_f$ にとってある。また, b. c. c. マルテンサイトと f. c. c. 母相の格子定数をそれぞれ a_b , a_f とすると, Bain 変形の主軸歪みは, $\epsilon_1 = \sqrt{2} (a_b/a_f) - 1$, $\epsilon_2 = (a_b/a_f) - 1$ と表される。オリジナルな現象論と同様に, 格子不変変形 P^S として母相での $(011)_f$ $[0\bar{1}1]_f$ 双晶系 (マルテンサイト内での $(\bar{1}12)_b$ $[1\bar{1}1]_b$ 双晶系に対応する) を採用して小変形理論の解析を行うと, 結晶学的に等価な解の一つとして, 表1のような簡単な解析解が得られる¹²⁾。この解析解を見ると, ϵ_1 , ϵ_2 が変化したときにマルテンサイトの結晶学がどのように変わるのかがすぐわかるので, たいへん便利である。

小変形理論は大変形理論の近似なので, 表1の解は大変形理論で得られる解と $\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0$ の極限で一致すべき

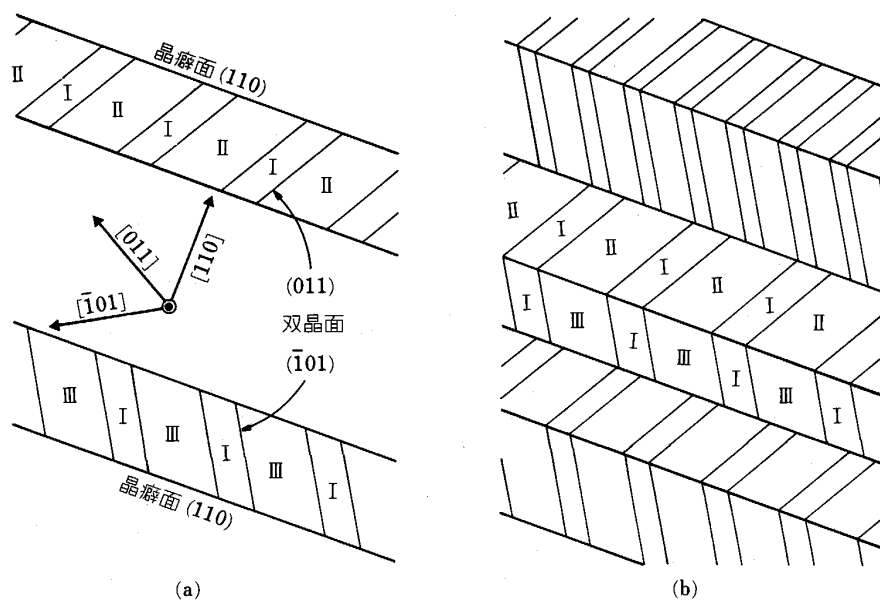
表1 小変形理論の現象論で得られる解

晶癖面方位 双晶比 全形状変形 膨張成分 せん断成分 方位関係	$(-\epsilon_1/\epsilon_2 ^{1/2}, [\epsilon_1+\epsilon_2 /\epsilon_2]^{1/2}, 0)_f$ $ \epsilon_1 : \epsilon_2 $ $2\epsilon_1 + \epsilon_2$ $-2\epsilon_1[-(\epsilon_1 + \epsilon_2)/\epsilon_1]^{1/2}$ $[100]_f \wedge [110]_b [-\epsilon_1(\epsilon_1 + \epsilon_2)]^{1/2}$ $[010]_f \wedge [110]_b (-\epsilon_1\epsilon_2)^{1/2}$ $[001]_f \wedge [001]_b \epsilon_1 $
--	---

ものである。したがって, 小変形理論で得られる解は, 格子変形歪み ϵ_1, ϵ_2 の大きさのオーダー (Δ とする) の相対誤差をもつことになる。すなわち, 鉄合金の f. c. c. \rightarrow b. c. c. (b. c. t.) マルテンサイト変態 ($\Delta \sim 0.1$) では, たとえば晶癖面方位で 10° (0.1 rad のオーダー) 程度の誤差があることになるが, ジルコニア合金の立方晶 \rightarrow 正方晶変態 ($\Delta \sim 0.01$) では, この誤差はせいぜい 1° 程度でかなり良い近似になっている¹²⁾。

小変形理論の解を用いて, 特別な場合を考えてみよう。もし, 変態に伴う体積変化がゼロ, すなわち $2\epsilon_1 + \epsilon_2 = 0$ ならば, 表1より晶癖面方位は (110), 双晶体積比は 1:2 という簡単な解となる。この解で表される二つの結晶学的に等価な板状マルテンサイトの形態を図3 (a) に示す。この二つのマルテンサイト板が交互に重なってできる形態を図3 (b) に示す。この形態は前述のように, 変態に伴う弾性エネルギーを最小にする都合の良いものの組合せで空間を埋めつくしたもので, マルテンサイト組織以外にも誘電体材料のドメイン構造¹⁸⁾ などに見られる。特に, ジルコニア合金ではヘリングボーン構造と呼ばれている^{19)~21)}。

以上のように, マルテンサイト変態の現象論を小変形理論で記述すると, 見通しの良い解析解を得ることができるので, これをうまく利用すれば非常に便利である。筆者らはもっと複雑な立方晶 \rightarrow 単斜晶変態に対しても小変形理論による解析的な計算を行い, TiNi 合金やジルコニア合金のマルテンサイト変態の結晶学を議論した¹³⁾。その結果, 得られた解析解は大変形理論に基づくコンピューター計算結果と非常に良く一致することを確認している。



(a) 共通の晶癖面をもつ二つの等価な解
 (b) 等価な解の交互の重ね合わせ
 図3 $2\epsilon_1 + \epsilon_2 = 0$ のとき小変形理論解析で求まるマルテンサイトの形態

4. $r=2$ で記述される界面 (不変線変形)

$r=2$ のときは (2) 式の連立方程式のうち独立な式が二つあるので、一般に $X^{(0)}$ の解は直線を表す⁹⁾。 $I-A^{-1}$ の階数が 2 となるような行列 A は次式のような形をしている。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & A_{12} & A_{13} \\ 0 & 1+A_{22} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & 1+A_{33} \end{pmatrix} \dots\dots\dots(10)$$

この行列は x_1 軸に平行な方向を不変線とする不変線変形を表す。以下に示すように、不変線変形条件を界面の結晶学に適用する場合は二次元問題となることが多い。そのときの 2×2 行列 A は次式の形となる。ただし、この場合は 2×2 行列である $I-A^{-1}$ の階数は 1 となる。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & A_{12} \\ 0 & 1+A_{22} \end{pmatrix} \dots\dots\dots(11)$$

不変線変形が対象となる場合としては、基板結晶と蒸着結晶の間の界面の問題が挙げられる。この場合は、通常与えられた面方位をもつ基板結晶の上に異種結晶の薄膜を蒸着するので、問題は二次元となる。したがって、三次元空間から自由に選べるマルテンサイトと母相との界面とは異なり、一般に不変面界面の形成は不可能である。しかし、次善の策として、不変線を含むような界面形成は可能な場合がある。

二次元問題のときは、大変形理論を使っても解析的な議論が簡単にできる。今、基板結晶面と蒸着結晶面の間に、ある格子対応を仮定すると、前者を後者に変換する格子変形を表す行列 D は、(9)式と類似ではあるが二次元大変形理論に基づいて次式のように書ける。

$$D = \begin{pmatrix} 1+\epsilon_1 & 0 \\ 0 & 1+\epsilon_2 \end{pmatrix} \dots\dots\dots(12)$$

ここで、 ϵ_1, ϵ_2 は格子対応と二つの結晶の格子定数で決まる主軸歪みを意味する。図 4 (a) のように、基板結晶面を表す単位円領域 A は格子変形 D により、アスペクト比が $(1+\epsilon_2)/(1+\epsilon_1)$ の蒸着結晶面を表す楕円領域 B に変換される (ここでは $\epsilon_1 < \epsilon_2$ としている)。

これにより、円上のベクトル V_C は楕円上のベクトル V_E に変換されるが、図 4 (b) のように楕円を円に対して相対的に角度 θ だけ回転すれば、二つのベクトルは V_I に一致し、この方向が変換前後で長さも方向も変わらない不変線方向となる。 θ 回転は次のような行列 R で表される。

$$R = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \dots\dots\dots(13)$$

したがって、全変形を表す行列 A は

$$A = RD \dots\dots\dots(14)$$

と書ける。(4)式と比較すると、(14)式はマルテンサイト変態の現象論の二次元版に対応していることが理解できる。現象論での無歪み面条件に対応して、ここでの不変線存在条件は、図 4 から明らかなように、 ϵ_1, ϵ_2 のうち一つは正、もう一つは負となることである。DAHMEN は、 $\det(I-A^{-1})=0$ の条件より不変線条件を満たす θ が次のように表されることを導いた²²⁾。

$$\cos \theta = (1 + \eta_1 \eta_2) / (\eta_1 + \eta_2) \dots\dots\dots(15)$$

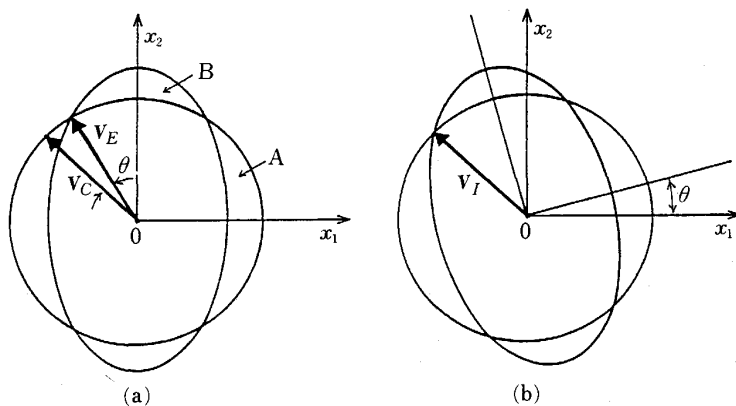
ここで、 $\eta_i = 1 + \epsilon_i (i=1, 2)$ である。また、不変線ベクトル V_I は成分表示で

$$V_I = \left[\pm \sqrt{\frac{\eta_2^2 - 1}{\eta_2^2 - \eta_1^2}}, \pm \sqrt{\frac{1 - \eta_1^2}{\eta_2^2 - \eta_1^2}} \right] \dots\dots\dots(16)$$

となる²³⁾。

実際に基板結晶/蒸着薄膜結晶系にどのようなエピタキシャル方位関係が観察されるのかを調べるために、Cu と Fe のうち一方を基板結晶に、他方を蒸着結晶に用いて実験を行った^{23)~29)}。まず、種々の面方位をもつ基板結晶の透過型電子顕微鏡 (TEM) 用試料を作製し、その上にもう一つの結晶を 10~50 nm 程度蒸着した。表 2 に種々の基板結晶面上に、TEM 観察によって確認された蒸着結晶の面方位をまとめて示す。これを見ると、界面を形成する f. c. c. と b. c. c. の面は、例外なく (7) 式の Bain 対応で結ばれていることがわかる。

界面方位がわかると、不変線条件を議論するための (12) 式の D を次のように求めることができる。(7) 式より、基板結晶 (f. c. c. とする) の $(hkl)_f$ 面は蒸着結晶 (b. c. c. とする) の $([h-k]/2, [h+k]/2, l)_b$ 面に



(a) 主軸変形 D (b) 回転 R
 図 4 不変線をもつ界面の形成

表 2 Cu/Fe(Cu-Ni/Fe) 系のエピタキシャル界面の方位関係

基板結晶	蒸着結晶	基板結晶	蒸着結晶
Cu(001)	Fe(001)	Cu(012)	Fe(111)
Cu(011)	Fe(011)	Cu(013)	Fe(013)
Cu(111)	Fe(001)	Cu(013)	Fe(114)
Cu(112)	Fe(112)	Cu(123)	Fe(012)
Cu(112)	Fe(011)	Cu(123)	Fe(233)
Cu-Ni(112)	Fe(123)	Cu(123)	Fe(116)
Cu(122)	Fe(012)	Fe(001)	Fe(122)
Cu(122)	Fe(134)	Fe(011)	Fe(136)
Cu(113)	Fe(012)	Fe(111)	Cu(001)
Cu(113)	Fe(013)	Fe(111)	Cu(111)
Cu(113)	Fe(112)	Fe(112)	Cu(012)
			Cu(011)

表 3 界面方位と主軸歪み方向の Bain 対応

f. c. c.	界面方位	b. c. c.
$(h, k, l)_f$	\longleftrightarrow	$[(h-k)/2, (h+k)/2, l]_b$
主軸歪み方向		
$x_1^f = [hl, kl, -(h^2+k^2)]_f$	\longleftrightarrow	$x_1^b = [(h-k)l, (h+k)l, -(h^2+k^2)]_b$
$x_2^f = [-k, h, 0]_f$	\longleftrightarrow	$x_2^b = [-(h+k), (h-k), 0]_b$

Bain 対応して界面を形成するが、この二つの面上に互いに Bain 対応で結ばれ、しかも直交関係を保っている二つの主軸歪み方向 x_1^f, x_2^f (f. c. c. 面上) と x_1^b, x_2^b (b. c. c. 面上) を一義的に表 3 に示すように求められることが証明できる²³⁾。したがって、 D の成分は次のように表せる。

$$1 + \epsilon_1 = \eta_1 = \frac{|x_1^b| a_b}{|x_1^f| a_f} \dots\dots\dots (17)$$

$$1 + \epsilon_2 = \eta_2 = \frac{|x_2^b| a_b}{|x_2^f| a_f} \dots\dots\dots (18)$$

ここで、 a_b, a_f はそれぞれ b. c. c. と f. c. c. の格子定数である。これらがわかると、(15), (16)式から不変線を求めることができる。(なお、 ϵ_1 と ϵ_2 が同符号のときは不変線条件を満足しないが、そのときは便宜上 $\theta = 0^\circ$ となる界面が形成されると仮定する。)

基本的な例として、Cu の (111)_f 基板面上に蒸着された Fe 薄膜のエピタクシーを解析してみる。表 3 から

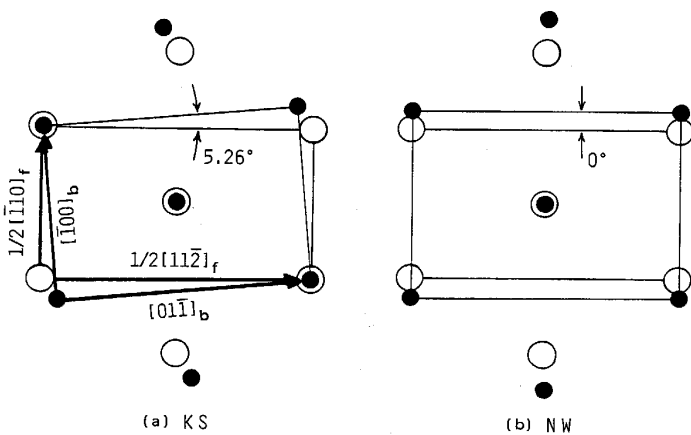
(111)_f 面は (011)_b 面に Bain 対応していることがわかる。また、おのおのの面上での二つの主軸方向は、 $x_1^f = [11\bar{2}]_f, x_2^f = [\bar{1}10]_f, x_1^b = [02\bar{2}]_b, x_2^b = [\bar{2}00]_b$ と定まる。今、 $a_f = 0.361 \text{ nm}, a_b = 0.286 \text{ nm}$ とすると、(17), (18)式より $\eta_1 = (2/\sqrt{3}) a_b/a_f = 0.9148, \eta_2 = \sqrt{2} a_b/a_f = 1.1204$ となるので、(15)式より $\theta = 5.75^\circ$ を得る。図 5 のように、 $\theta = 5.26^\circ$ のとき KS, $\theta = 0^\circ$ のとき NW の方位関係となる。したがって、不変線条件で予測される Cu (111)/Fe (011) 界面でのエピタキシャル方位関係は、ほぼ KS 関係であると言える。実際、Cu/Fe 系で KS 関係に近い方位関係が実験的に確認されている²⁴⁾²⁵⁾。また、 a_b/a_f がわかれば θ の値がわかるので、不変線条件を使って、種々の金属の組合せでできる (111)_f/(011)_b 界面がどのような方位関係をとるのかを予測することができる。この予測法は手計算でできる簡単な方法ではあるが、その結果は O 格子理論を用いた方法⁵⁾、模式図によるモアレ縞模様解析法³⁰⁾、界面エネルギーのコンピューター計算に基づく方法³¹⁾ などの、より複雑な方法で得られる結果と非常に良く一致している³²⁾。

Bain 対応と不変線条件を組み合わせれば、他の面方位をもつ基板上で形成されるエピタクシーについても同様の解析がすぐにできる。そして、この予測法が実際に観察された Cu/Fe 系でのエピタキシャル方位関係を良く説明することが示されている^{23)~29)}。

ここで注意すべきことは、基板面方位を一つ与えても、(7)式の Bain 対応が一般には複数の界面候補を予測するということである。その場合、どの界面候補が優先されて実際のエピタキシャル方位関係が決まるのかを知る基準が必要になる。筆者らはその基準として、弾性エネルギーに近似的に比例する次式で定義される M パラメーターを採用した^{26)~29)}。そして、この値が小さなエピタクシーほど優先的に実現されると考えることによつて、実験結果をうまく説明することができた。

$$M = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + (2/3) \epsilon_1 \epsilon_2 \dots\dots\dots (19)$$

ここで ϵ_1, ϵ_2 は (17), (18)式より求まる主軸歪みであ



○: f.c.c. 原子 ●: b.c.c. 原子
図 5 (a) KS と (b) NW の方位関係

る。筆者らはさらにこの M パラメーターを利用して、各種立方晶結晶の (001) 面基板上に他の立方晶結晶を蒸着したときに優先形成されるさまざまなエピタクシーを予測し、実験事実と良く一致する結果を得ている³³⁾。

以上のように、Bain 対応、不変線条件、 M パラメーターの三つの因子を考えることによって、異相界面でのエピタクシーを議論してきた。実は、このうちの Bain 対応は f. c. c. / b. c. c. 界面で、しかも二つの結晶の原子同士が 1:1 に対応するときのみに適用できるものである。これ以外の界面の場合は、他の適当な格子対応を決めなければ幾何学的な考察はできない。ところが、一般に格子対応は無数に考えられるので、どの対応が最も合理的なものかを判断しなければならないことになる。紙面の制約上詳しい説明はできないが、ZUR と MCGILL による“還元された超格子”(Reduced superlattice)の考え方³⁴⁾は、格子対応を決める際に有用なものである。実際、Si の (001) 面上に蒸着された Al のエピタクシーを説明するために、この考え方がうまく利用されている³⁵⁾。

5. おわりに

高分解能電子顕微鏡による原子配列の直接観察法や、固体物理学・量子化学の知識を駆使して界面構造を調べる近代的な解析法が異相界面の研究にも盛んに用いられている現在、ここで概観した幾何学的な解析法などはいかにも古く思われるであろう。確かに幾何学的な考察には限界があり、それでは説明できない界面の方がむしろ多いことは十分承知しているつもりである。しかし、多くの先達がすばらしいひらめきによって築き上げた美しい幾何学的理論が非常に明快に界面の結晶学を説明するとき、驚愕と感嘆の念を覚えるのは筆者だけであろうか。本拙文が幾何学的考察法の初歩を知るためのお役に立てれば嬉しい。

文 献

- 1) G. KURDJUMOV and G. SACHS: *Z. Phys.*, **64** (1930), p. 325
- 2) Z. NISHIYAMA: *Sci. Rep. Tohoku Univ.*, **23** (1934), p. 638
- 3) G. WASSERMANN: *Mitt. Kaiser-Wilhelm-Inst. Eisenforsch.*, **17** (1935), p. 149
- 4) 石田洋一: *日本金属学会会報*, **22** (1983), p. 80
- 5) 橋本 敏: *日本金属学会会報*, **22** (1983), p. 151
- 6) 大森靖也: *結晶界面—基礎から応用まで—*(日本鉄鋼協会編)(1990), p. 7
- 7) 根本 実: *結晶界面—基礎から応用まで—*(日本鉄鋼協会編)(1990), p. 27
- 8) 榎本正人, 古原 忠: *鉄と鋼*, **77** (1991), p. 735
- 9) W. BOLLMANN: *Phil. Mag.*, **16** (1967), p. 363, p. 383
- 10) M. S. WECHSLER, D. S. LIEBERMAN and T. A. READ: *Trans. Metall. Soc. AIME*, **197** (1953), p. 1503
- 11) J. S. BOWLES and J. D. MACKENZIE: *Acta Metall.*, **2** (1954), p. 129, p. 138, p. 224
- 12) M. KATO and M. SHIBATA-YANAGISAWA: *J. Mater. Sci.*, **25** (1990), p. 194
- 13) M. SHIBATA-YANAGISAWA and M. KATO: *Mater. Trans. JIM*, **31** (1990), p. 18
- 14) D. S. LIEBERMAN, M. S. WECHSLER and T. A. READ: *J. Appl. Phys.*, **26** (1955), p. 473
- 15) J. D. ESHELBY: *Proc. R. Soc., London*, **A241** (1957), p. 376, **A252** (1959), p. 561
- 16) T. MURA, T. MORI and M. KATO: *J. Mech. Phys. Solids*, **24** (1976), p. 305
- 17) M. KATO, T. MIYAZAKI and Y. SUNAGA: *Scr. Metall.*, **11** (1977), p. 915
- 18) I. S. ZHELUDOV: *Modern Crystallography IV*, ed. by L. A. SHUVALOV (1988), p. 220 [Springer-Verlag]
- 19) T. SAKUMA, Y. YOSHIZAWA and H. SUTO: *J. Mater. Sci.*, **20** (1985), p. 2399
- 20) M. HAYAKAWA, M. TADA, H. OKAMOTO and M. OKA: *Trans. Jpn. Inst. Met.*, **27** (1986), p. 750
- 21) M. SHIBATA-YANAGISAWA, M. KATO, H. SETO, N. ISHIZAWA, N. MIZUTANI and M. KATO: *J. Am. Ceram. Soc.*, **70** (1987), p. 503
- 22) U. DAHMEN: *Acta Metall.*, **30** (1982), p. 63
- 23) M. KATO and T. MISHIMA: *Phil. Mag. A*, **56** (1987), p. 725
- 24) M. KATO, S. FUKASE, A. SATO and T. MORI: *Acta Metall.*, **7** (1986), p. 1179
- 25) M. KATO, S. FUKASE, T. MISHIMA, A. SATO and T. MORI: *Proc. Int. Conf. on Martensitic Transformations, The Japan Inst. Metals* (1986), p. 343
- 26) M. KATO, T. KUBO and T. MORI: *Acta Metall.*, **36** (1988), p. 2071
- 27) M. KATO, M. WADA, M. SHIBATA-YANAGISAWA and T. MORI: *Colloq. Phys.*, **51** (1990), p. C1-849
- 28) 井上眞吾: *東京工業大学修士論文* (1991)
- 29) 寺前 智: *東京工業大学卒業論文* (1991)
- 30) L. A. BRUCE and H. JAEGAR: *Phil. Mag. A*, **38** (1978), p. 223
- 31) 後藤芳彦, 福田 博: *日本金属学会会報*, **29** (1990), p. 219
- 32) M. KATO: *Mater. Sci. Engng.*, **A146** (1991), p. 205
- 33) M. KATO, M. WADA, A. SATO and T. MORI: *Acta Metall.*, **37** (1989), p. 749
- 34) A. ZUR and T. C. MCGILL: *J. Appl. Phys.*, **55** (1984), p. 378
- 35) M. KATO and H. NIWA: *Phil. Mag. B*, **64** (1991), p. 317