

2次元パイエルス・ポテンシャル中のらせん転位の運動

Motion of a Screw Dislocation in a Two-Dimensional Peierls Potential

枝 川 圭 一*・鈴 木 敬 愛*

Keiichi EDAGAWA and Takayoshi SUZUKI

1. は じ め に

結晶固体の塑性変形は転位の運動によって起こる。従って、結晶固体の強度は転位の運動に対する障害の大きさによって決まる。すべての結晶固体に存在する最も基本的な障害にパイエルス・ポテンシャルがある¹⁾。これは、結晶格子の周期性に従う転位の自己エネルギーの周期的な変動であり、転位がこのような周期的な障害を越えながら起こす運動をパイエルス機構による転位の運動とよぶ。従来、パイエルス機構による転位の運動の理論計算は、あるすべり面 (zx -面) 上に1次元のパイエルス・ポテンシャル $V_p(x)$ を仮定して行われてきた²⁻⁴⁾。ここで z は転位線の方角を示し、 x は転位の運動方向に対応する。しかしながら、転位がらせん転位の場合、その運動を最も一般的に取り扱うには、すべり面をアприオリに特定することをせず、転位線に垂直な面内に2次元のパイエルス・ポテンシャル $V_p(x, y)$ を仮定し、その中での転位の運動を調べる必要がある。なぜなら、らせん転位は原理的には任意の方向に運動できるからである。特に、結晶構造の対称性由来して発現する塑性異方性を系統的に理解する上で、このような取り扱いが重要となる。

最近、我々はこのようならせん転位の2次元パイエルス・ポテンシャル中の運動を転位の線張力モデルを用いて取り扱う方法を初めて定式化した^{5,6)}。本稿ではこの定式化と、それをく111>らせん転位が塑性変形を支配している bcc 金属に応用した研究について述べる。

2. 2次元パイエルス・ポテンシャル中の転位の熱活性化運動

パイエルス機構による転位の熱活性化運動の素過程は、ある安定位置にいる転位が外応力により、隣の安定位置に

*東京大学生産技術研究所 第1部

活性化障壁を越えて飛び移る過程である。Fig. 1 に2次元パイエルス・ポテンシャル中のこのような過程の模式図を示す。ここでは、最初の安定位置が I であり、飛び移る先の安定位置が II である。外応力による仕事を含めた、転位が感ずる実効的なポテンシャル (後述、式 (2)) は II の位置が I の位置より低い。本節の目的はこのような遷移の活性化エネルギーを求める式を導くことである。

さて、転位の全エネルギーは、転位の配置 $\mathbf{r}(z) = [x(z), y(z)]$ の関数として $E(\mathbf{r}(z))$ という形で与えられる。いま、空間の各点が転位の一つ一つの配置に対応するような多次元空間 (無限次元空間) を考える (Fig. 2)。転位の遷移の過程はこの多次元空間において初期配置と最終配置に対応する2点間の経路を指定することで記述される。実際に起こる過程は Fig. 2 に示すような最も「楽な」経路に沿うと考えてよい。このとき、この経路上でのエネルギー最大の点 (Fig. 2 の点 C) のエネルギーと、始点 (点 A) のエネルギーの差が遷移の活性化エネルギーを与

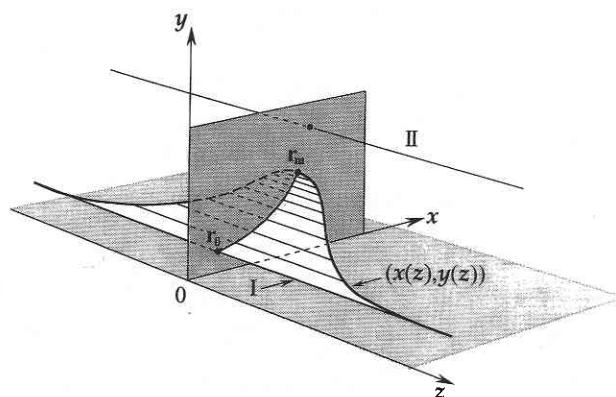


Fig. 1 2次元パイエルス・ポテンシャル $V_p(x, y)$ 中の転位の遷移の過程の模式図。ある安定位置 (I) にいた転位が隣の安定位置 (II) に移ろうとしている。

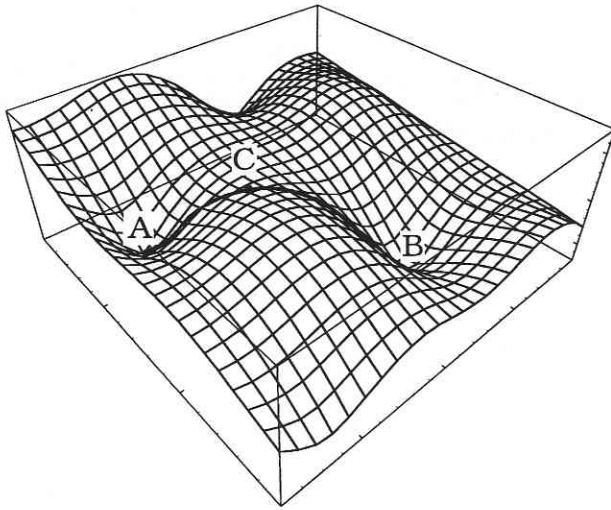


Fig. 2 転位の配置 $\mathbf{r}(z) = [x(z), y(z)]$ の関数として表した転位の全エネルギー $E(\mathbf{r}(z))$ の模式図. ここでは転位の配置を表す多次元空間を XY 平面にとり, Z 方向に全エネルギーの値をプロットしてある. A, B はそれぞれ転位の初期配置, 最終配置に対応し, 太線は最も「楽な」遷移の経路を示す. この経路上の最高点を C とする. C はこのエネルギー面の鞍部点である.

える. ここで点 C はいわゆる鞍部点になっている. 結局この鞍部点の転位配置を見つけることが課題となる.

例えば, Fig. 1 において I の位置にいる直線転位が直線の形を保ったまま II の位置に遷移するような過程も Fig. 2 において点 A と点 B を結ぶある経路に対応するが, このような過程はエネルギーの高いところを通るため実際には起こらず, Fig. 1 に示すように転位の一部が張り出して, その先端部が位置 II に至ってキンク対を形成し, そのキンク対がお互いに離れていって転位線全体が位置 II に移動するような過程が Fig. 2 に示すような最も「楽な」経路に対応し, 実現する. このような張り出しの途中のどこかに鞍部点配置がある.

線張力モデルを用いると転位の全エネルギー $E(\mathbf{r}(z))$ は, 初期配置のエネルギーを基準にして

$$E(\mathbf{r}(z)) = E([x(z), y(z)]) = \int_{-\infty}^{\infty} (T + U) dz \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$T = \frac{1}{2} \Gamma \left\{ \left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 \right\}$$

$$U = \Phi(x, y) - \Phi(x_0, y_0)$$

とかける. ここで T, U はそれぞれ線張力エネルギー, ポテンシャルエネルギーに対応する. また Γ は線張力, $\mathbf{r}_0 = [x_0, y_0]$ は転位の初期位置, $\Phi(\mathbf{r})$ は外応力下での転位が

感ずる実効的なポテンシャルエネルギー, すなわちパイエルス・ポテンシャルから work-done の項を引いたものである. これは τ を外せん断応力, b をバーガース・ベクトルの大きさ, \mathbf{n} を最大せん断応力が作用する面の方位 (次節参照) として

$$\Phi(\mathbf{r}) = V_p(\mathbf{r}) - \tau b \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} \quad \dots\dots\dots (2)$$

とかける. Fig. 2 の点 C のような鞍部点の転位の配置 $\mathbf{r}(z)$ は式 (1) の積分汎関数の停留点に対応し, 従って式 (1) のオイラー・ラグランジュの方程式,

$$\Gamma \frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{\partial U(x, y)}{\partial x}, \quad \Gamma \frac{d^2 y}{dz^2} = \frac{\partial U(x, y)}{\partial y} \quad \dots\dots\dots (3)$$

を満たす. 鞍部点配置は境界条件

$$x(-\infty) = x(+\infty) = x_0, \quad y(-\infty) = y(+\infty) = y_0$$

の下での式 (3) の解として与えられる.

さて, 式 (3) は z を時間 t に置き換えると質量 Γ の質点が 2 次元ポテンシャル $V = -U$ 中を運動する場合のニュートンの運動方程式となる. この力学系のアナロジーを用いると, 転位の鞍部点配置は次のような質点の運動に対応することがわかる. 1) ポテンシャル V の極大点 \mathbf{r}_0 に置かれた質点がある方向に転がり始める. 2) ポテンシャルの谷に至るまでに運動エネルギーを得た質点がポテンシャルの山を登り初め, 運動エネルギーを失いつつ $V(\mathbf{r}_m) = V(\mathbf{r}_0)$ なる点 \mathbf{r}_m に達し, 停止する. 3) 質点が 1) 2) の経路を逆にたどり元の位置 \mathbf{r}_0 に至る. 最初の転がり出しの方向が適当でなければ, 質点は元の位置に戻ってこない. 逆に正しい方向に転がり始めれば, 運動方程式が時間反転対称であるため, 往きと帰りが正確に同じ経路をたどる. そこで往きか帰りか, どちらかの経路を見つければ十分であり, 実際の計算は位置 II のまわりの, 値 $V(\mathbf{r}_0)$ の等高線上の種々の点から質点を転がし始めて \mathbf{r}_0 に至る経路をみつけばよい (Fig. 4 参照). また, 質点の運動中に運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和が保存されることから常に $T + U = 0$ すなわち $T = V$ が成り立つ. これは転位の鞍部点配置において, いたるところで, 線張力エネルギーとポテンシャルエネルギーが等しいことを意味する. $T = V$ を式 (1) に代入し, xy 面内の経路に沿った積分に直すと, 鞍部点配置の転位の全エネルギー, すなわち遷移の過程の活性化エネルギー ΔE は,

$$\Delta E = 2\sqrt{2}\Gamma \int_{r_0}^{r_m} U^{\frac{1}{2}} dl \quad \dots\dots\dots (4)$$

とかける。ここで $dl = \sqrt{dx^2 + dy^2}$ である。

3. bcc 格子への応用

本節では、前節の理論に基づいて bcc 格子中の $\mathbf{b} = 1/2 < 111 >$ のらせん転位の運動を考察する。bcc 格子を $< 111 >$ 方向からながめると、 $< 111 >$ に平行な原子列が格子定数 $a = (2\sqrt{2}/3)|\mathbf{b}|$ の三角格子を組んでいることがわかる (Fig. 3)。 $< 111 >$ 軸は 3 回対称軸であり、2 次元パイエルス・ポテンシャルは $3m$ の点群対称性をもつ必要がある。さらに 3 角格子の 3 角形の中心に交互に山と谷をもつことが簡単な格子幾何学的な考察から示される⁷⁾。ここでは、このような特徴をもった最も単純な関数として次の形のパイエルス・ポテンシャルを仮定する (Fig. 3)。

$$V_p(\mathbf{r}) = -V_0 \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{G}_i \cdot \mathbf{r}) \quad \dots\dots\dots (5)$$

ここで $\mathbf{G}_i = 2/(\sqrt{3}a) [\sin(2\pi i/3), \cos(2\pi i/3)]$

($i = 1, 2, 3$) である。最大せん断応力の作用する面と $(\bar{1}01)$ 面の間の角度を χ とする。これは式 (2) において $\mathbf{n} = [\cos \chi, \sin \chi]$ とすることに対応する。 $\chi = -30^\circ, 0^\circ, 30^\circ$ はそれぞれ $(\bar{1}\bar{1}2), (\bar{1}01), (\bar{2}11)$ 面のせん断に対応する。Fig. 3 のように $-30^\circ < \chi < 30^\circ$ の外応力下で転位はある安定位置 B_0 から B_1, B_2, B_3 の 3 つの隣接する安定位置に遷移可能である。実験パラメータである τ, χ を与

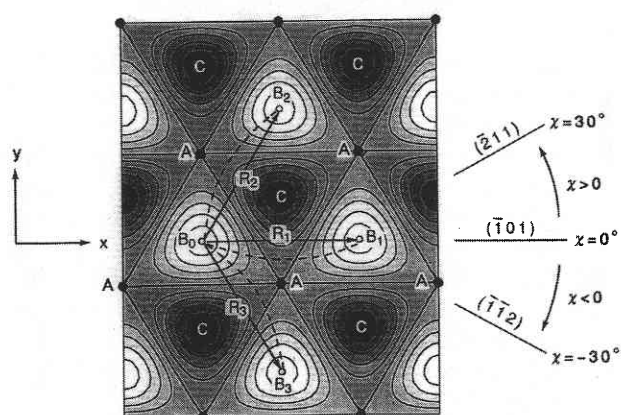


Fig. 3 計算に用いた 2 次元パイエルス・ポテンシャル $\bar{V}_p(x, y)$ (式 (5)). A は原子列の位置を示す。 B_i ($i = 0, \dots, 3$) は極小点, C は極大点である。 R_i ($i = 1, 2, 3$) は遷移ベクトルである。点線は各遷移の際の転位の張り出しの経路を模式的に示す。

えることで $\Phi(\mathbf{r})$ が決まり、それに対して、前節の方法で各遷移の活性化エネルギー $\Delta E_i(\tau, \chi)$ ($i = 1, 2, 3$) が計算される。

転位の速度ベクトル \mathbf{v} は τ, χ それに温度 T の関数として、

$$\mathbf{v}(\tau, \chi; T) = \sum_{i=1}^3 v_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_i(\tau, \chi)}{kT}\right) \mathbf{R}_i \quad \dots\dots\dots (6)$$

とかける。ここで v_0 は振動数因子、 \mathbf{R}_i ($i = 1, 2, 3$) は遷移ベクトルである (Fig. 3)。実験では χ, T 一定の下で τ を徐々に大きくしていき、転位速度が実験条件によって決まるある値 v_c に達したときの τ (これを τ_c とする) の値とそのときの転位の平均的な運動方向 ψ ($\bar{1}01$) (面との間の角度として定義する) が測定される。 τ_c 及び ψ の χ 及び T 依存性を式 (6) により計算し、それらを実験データと比較する。

実際の計算は、 α -Fe などの bcc 遷移金属をシミュレートするために以下の値を用いた⁸⁾。すなわち、 $b = 2.8 \times 10^{-10} \text{m}$, $\mu b^3 = 2.0 \times 10^{-18} \text{J}$, $v_0 = 10^{13} \text{s}^{-1}$, $\Gamma = \mu b^2/2$, $V_0 = 1.0 \times 10^{-3} \mu b^2$ とした。また実験条件から $v_c = 10^{-6} \text{m/s}$ とした。

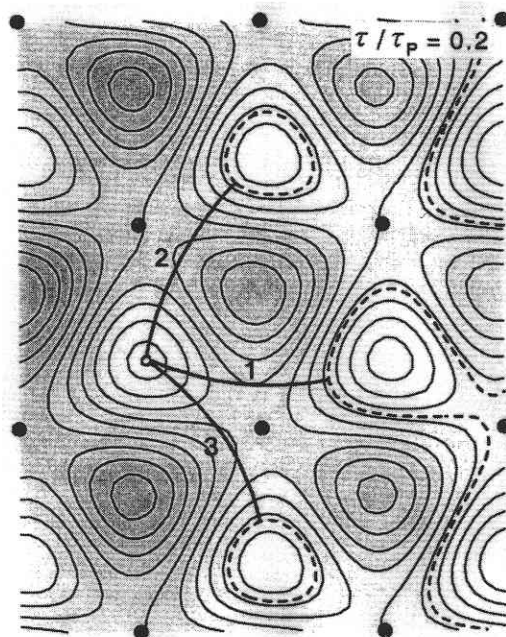


Fig. 4 鞍部点配置の計算例。等高線図は $\chi = 0^\circ$, $\tau = 0.2\tau_c$ のときの関数 $U(\mathbf{r})$ を示す。3 つの太線は各遷移の鞍部点配置の (111) 面上への射影を示し、点線は、値 $U(\mathbf{r}_0)$ の等高線を示す。

研 究 速 報

Fig. 4 に鞍部点配置の計算例を示す. この等高線図は $\chi = 0^\circ$, $\tau = 0.2\tau_p$ のときの関数 $U(\mathbf{r})$ を示す. ここで τ_p はパイエルス応力, すなわち $U(\mathbf{r})$ の極小値が消失する応力である. この $U(\mathbf{r})$ は Fig. 3 に示した $V_p(\mathbf{r})$ を左右に少し傾けたものに対応する (式 (2)). 3つの太線が各遷移の鞍部点配置の (111) 面上への射影を示す. 点線は, 値 $U(IV_0)$ の等高線を示し, 各鞍部点配置の転位の張り出しの頂点がこの点線上にのっている. これらの鞍部点配置は, 平面的ではなく (つまり射影は直線ではなく), 高い $V_p(\mathbf{r})$ の位置を避けて空間的に曲がっていることがわかる.

種々の τ , χ で同様な計算を行い, 式 (4) で活性化エネ

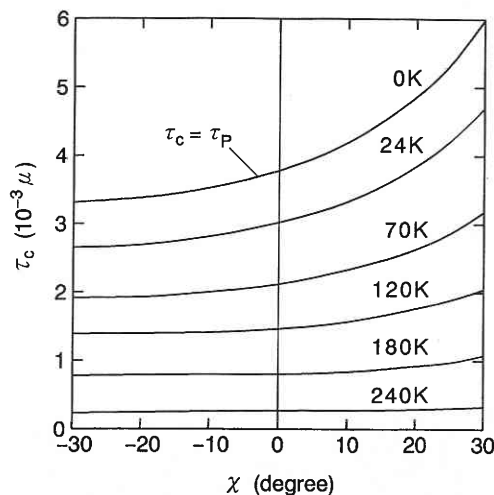


Fig. 5 計算により求めた種々の温度での $\tau_c - \chi$ 関係.

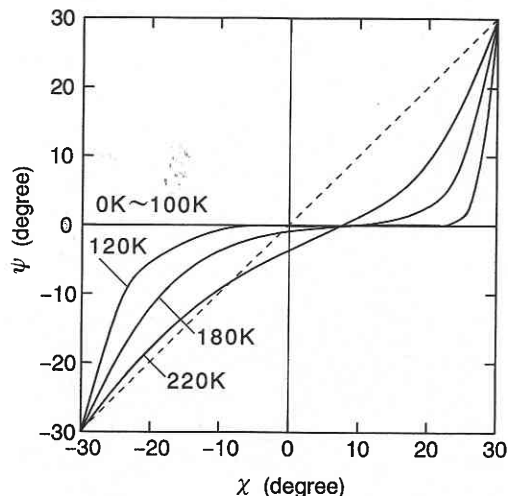


Fig. 6 計算により求めた種々の温度での $\psi - \chi$ 関係.

ルギーを求めた後に, 式 (6) を用いて τ_c 及び ψ の χ 及び T 依存性を求めた (Fig. 5, Fig. 6). これは次のような特徴をもっている. 1) τ_c は T に強く依存する. 2) τ_c の χ 依存性は, 低温ほど強い. 3) $\chi = 30^\circ$ の τ_c が $\chi = -30^\circ$ の τ_c より大きい. 4) 低温では χ の広い範囲で $\psi = 0^\circ$ である. これらは実験で得られている α -Fe など bcc 遷移金属の塑性データの特徴的な点をよく再現している.

4. お わ り に

らせん転位の 2 次元パイエルス・ポテンシャル中の運動を線張力モデルを用いて取り扱う方法の定式化を行い, それを bcc 遷移金属に応用した. 3 回対称の単純なパイエルス・ポテンシャルを用いた計算で bcc 遷移金属の実験データの特徴的な点がよく再現されることを示した. 従来, bcc 金属の塑性異方性をらせん転位の特殊な芯構造とそれに伴う挙動として説明しようとする試みが計算機シミュレーションの立場から多く行われてきた⁹⁾. しかしながら本研究の結果は, 塑性異方性の本質的な部分はらせん転位の周りの結晶構造の 3 回対称性によることであり, 転位芯の構造の詳細は本質的でないことを示唆している. 同様な方法を hcp 金属¹⁰⁾ 及び IV 族, III-V 族半導体¹¹⁾ に応用する試みが現在進行中である.

最後に本研究全般に亘って東京理科大学の竹内伸教授に有益なご助言をいただいた. ここに深く感謝の意を表します.

(1998 年 11 月 19 日受理)

参 考 文 献

- 1) R.E. Peierls, Proc. Phys. Soc. 52 (1940) 34.
- 2) V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya and R. Thomson, Phys. Rev. 131 (1963) 58.
- 3) J. E. Dorn and S. Rajnak, Trans. AIME 230 (1964) 1052.
- 4) H. Koizumi, H.O.K. Kirchner and T. Suzuki, Acta Metall. Mater. 41 (1993) 3483.
- 5) K. Edagawa, T. Suzuki and S. Takeuchi, Phys. Rev. B 55 (1997) 6180.
- 6) K. Edagawa, T. Suzuki and S. Takeuchi, Mater. Sci. and Eng. A234-236 (1997) 1103.
- 7) H. Suzuki, in Dislocation Dynamics, ed. by A.R. Rosenfield, G.T. Hahn, A.L. Bement and R.I. Jaffee (McGraw-Hill, New York, 1968) p.679.
- 8) S. Takeuchi and E. Kuramoto, J. Phys. Soc. Jpn. 38 (1975) 480.
- 9) V. Vitek, Crystal Lattice Defects 5 (1974) 1.
- 10) K. Edagawa, T. Suzuki and S. Takeuchi, Jpn. J. Appl. Phys. 37 (1998) 4086.
- 11) K. Edagawa and T. Suzuki, in preparation.