

イオン結晶の低温塑性とパイエルス力

Low Temperature Plasticity and Peierls Stress of Ionic Crystals

鈴木敬愛・金 鉉奎・中村和夫

Takayoshi SUZUKI, Hyongu KIM and Kazuo NAKAMURA

パイエルス力は結晶転位の最も基本的な属性である。LiF 等数種のイオン結晶の降伏応力は数10 Kより低温で急激に上昇する。この領域ではパイエルス機構が転位の運動を支配している。それは転位速度の測定によっても示される。実験から求めたイオン結晶のパイエルス力は1~3 kg/mm²であり、電子計算機を使った計算でもこれに近い値を得る。

1. はじめに

純度がよくて完全度の高い結晶を絶対0度で塑性変形するためにはどれだけの力が要るであろうか。結晶の塑性変形は転位の運動によって起こるのであるから、転位を1本含むだけで他に欠陥のない結晶中で、その転位を動かすのに必要な力はいくらかということになる。結晶中では転位が1原子距離動くともまったく同じ構造になるから、転位のエネルギーはFig 1のように1原子距離の周期で変化する。これをパイエルス・ポテンシャルという。転位がパイエルス・ポテンシャルの山を乗り越えて動くためにはその最大傾斜に相当する外力が必要である。この力は最初 Peierls¹⁾によって、またその後 Nabarro²⁾によっても計算されたので「パイエルス力」または「パ

イエルス・ナバロ力」と呼ばれる。連続弾性体では転位は無限小の力で動くことができるわけで、パイエルス力は結晶の周期性に根ざした量である。

実験的にパイエルス力を求めるには、降伏応力や転位速度の測定が直接的な方法である。いろいろな結晶のパイエルス力の大きさについて現在までに知られていることは、およそつぎの通りである。SiやGe等の半導体は室温ではほとんど塑性変形を起こさないでパイエルス力はきわめて高く、計算³⁻⁵⁾によっても100 kg/mm²以上になる。f. c. c. 純金属は低温まで非常に軟かいので、パイエルス力は数10 g/mm²より小さいと考えられている。b. c. c. 金属の降伏応力は低温で急激に上昇する。これがパイエルス機構によるものとすれば、パイエルス力は数10 kg/mm²である。しかし、b. c. c. 金属の低温塑性がパイエルス機構かどうかについては、塑性異方性や固溶体軟化の問題とも関連して異なった立場もあり、くわしくは文献(6, 7)を参照していただきたい。イオン結晶の場合 Guyot らはパイエルス機構に関する総合報告⁸⁾の中で種々のデータを検討した結果、「通常の純度のイオン結晶ではパイエルス機構が塑性変形を支配することはない」と結論している。このように、パイエルス力は結晶塑性に関してもっとも基本的な量であるにもかかわらず、その大きさが明確に決定された例はない。

最近、筆者らはLiFをはじめいくつかのイオン結晶の降伏応力を液体ヘリウム温度の近くまで測定したところ従来の実験より低い温度領域(数10 K以下)ではパイエルス機構が塑性変形を支配することが見い出され、それらの結晶のパイエルス力を決定することができた⁹⁻¹¹⁾。また、LiFについては低温での転位速度の測定も行い、パイエルス機構による転位の運動過程の詳細を考察した¹²⁾。この報告では、それらの実験について解説し、さらに、電子計算機を使ったパイエルス力の計算¹³⁾について紹介するが、その前に次節でパイエルス機構の理論について簡単に説明しておく。

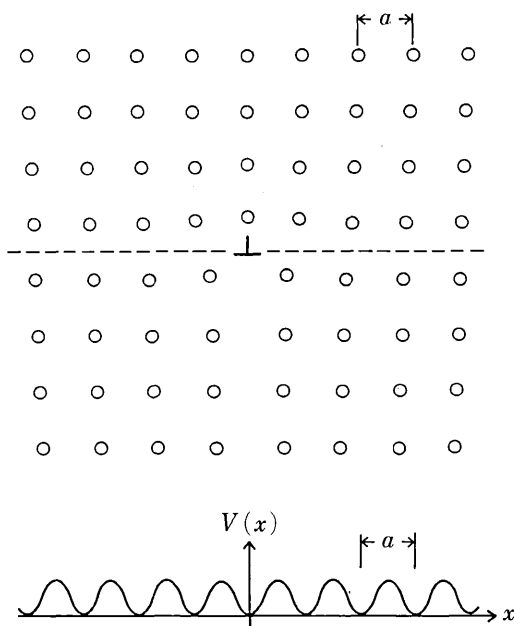


Fig.1 刃状転位の原子配列とパイエルス・ポテンシャル

2. パイエルス機構の理論

パイエルス・ポテンシャルの谷底に横たわっていた転位がキंक対を作ってポテンシャルを乗り越える様子が Fig.2 である. まっすぐな転位 (a) の一部分が (b) のようにふくらんで山を乗り越え, さらに (c) のように左右に広がれば, 結果として転位は1原子距離前進したことになる. これを次々と繰り返せば転位は前進してゆく. 転位線がパイエルス・ポテンシャルの谷から隣の谷へ折れ曲がって渡っている部分をキंक (kink) というので, Fig.2 は向き (符号) の逆な二つのキंकを対で形成する過程 (double kink formation process) である. キंक対を形成するとき転位はエネルギーの高い状態 (鞍点) を通らねばならないが, それは転位がまっすぐなままで山を乗り越えるよりはずっと低いエネルギーですむ. このエネルギーは結晶の熱振動によって供給される (熱活性化過程). 外力が作用しているときには, 活性化エネルギーは外力のなす仕事の分だけ少なくてすむ. これは, Fig.1 のパイエルス・ポテンシャルが外力に比例して傾斜し, 山と谷のエネルギーの差が小さくなることと同等である. 一度形成されたキंक対が Fig.2 (c) のように運動するとき受ける抵抗が小さいとすれば, 転位の前進速度はキंक対を形成する頻度によって決まる. それを求めるためにまず重要なことは, キंक対形成の活性化エネルギーを外力の関数として求めることである.

キंक対形成の活性化エネルギーの計算は, Seeger¹⁴⁾ 以来多くの人々¹⁵⁻²⁰⁾ によって行われたが, Celliら¹⁸⁾ と Dornら¹⁹⁾ による取り扱いがもっとも妥当なものと思われる. Celliら¹⁸⁾ の方法はつぎのようなものである.

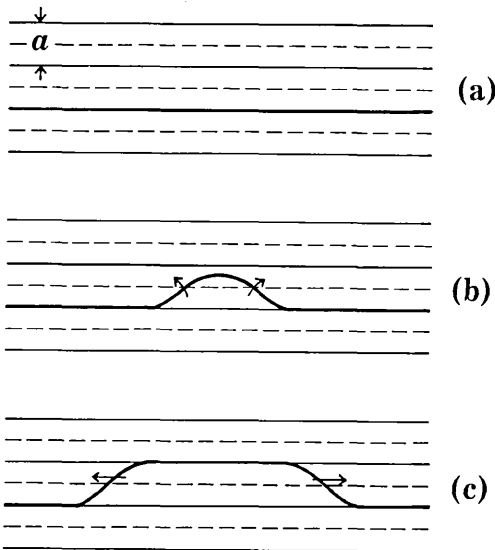


Fig.2 転位がキंक対を形成してパイエルス・ポテンシャルを乗り越える過程. 細い実線がエネルギー極大, 点線が極小, 太い実線が転位線

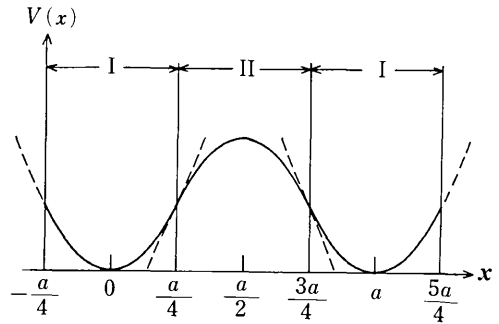


Fig.3 二次関数を組み合わせて作ったパイエルスポテンシャル:

$$I \quad V(x) = \frac{1}{2} P(x-na)^2$$

$$II \quad V(x) = \frac{1}{2} P\left\{x - \left(n + \frac{1}{2}\right)a\right\}^2 + \frac{1}{8} Pa^2,$$

ただし, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

転位線を一定の張力 (line tension) を持つ紐のようなものとする弦模型 (string model) を用い, 転位線の一部が Fig.2 (b) のように張り出して不安定平衡になっているときの形状 (saddle point configuration) とそのときのエネルギーの増加, すなわちキंक対を作るのに必要な活性化エネルギーを計算した. そのさい, 実際の結晶のパイエルス・ポテンシャルがどのような形かわからないので, 解析的に取り扱いやすい二, 三の周期関数が仮定された.

いま, パイエルス・ポテンシャルが Fig.3 のような二次関数の組み合わせで近似される場合を考えると, パイエルスカ τ_P はその最大傾斜から

$$\tau_P b = \frac{1}{4} Pa \tag{1}$$

によって与えられる. ただし, b はバーガース・ベクトルの大きさである. キंक対形成の活性化エネルギーは外力 τ が

$$\tau > (3 - 2\sqrt{2}) \tau_P = 0.1716 \tau_P \tag{2}$$

の範囲で

$$U(\tau) = U_0 \left(1 - \frac{\tau}{\tau_P}\right)^2, \tag{3a}$$

$$U_0 = \frac{1}{8} \left(1 + \frac{3}{4} \pi\right) a^2 \sqrt{PE}$$

$$= \frac{1}{4} \left(1 + \frac{3}{4} \pi\right) a \sqrt{ab \tau_P E}. \tag{3b}$$

ここに, E は転位の単位長さ当たりのエネルギーで線張力に等しいと考えてよく, $\frac{1}{2} \mu b^2$ (μ は剛性率) に近い大きさである. これは普通の結晶で1原子距離を単位として測ると数 eV になる. 外力 τ が (2) 式の値より小さいときには, $U(\tau)$ は (3) 式と違った複雑な形になる. τ の全範囲にわたって $U(\tau)$ を描くと Fig.4 の曲線 A のようになる. 外力がないときの活性化エネルギー $U(\tau=0)$ は (3b) 式の U_0 より約 5% 大きいだけなので, U_0 をキंक対形成の全活性化エネルギーと見なして実際上きつ

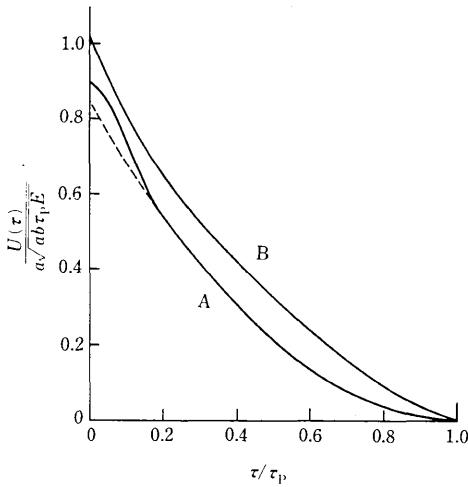


Fig. 4 キンク対形成の活性化エネルギーと応力の関係
A : パイエルス・ポテンシャルが Fig. 3 の形
B : パイエルス・ポテンシャルが正弦関数

かえない。

キンク対形成の活性化エネルギーが解析的に求められる場合は限られていて、一般には数値計算に依ることになる。パイエルス・ポテンシャルが周期 a の正弦関数の場合に、 $U(\tau)$ はつぎの形で表わされる。

$$U(\tau) = U(0) \cdot g(\tau/\tau_p), \quad (4a)$$

$$U(0) = \frac{4\sqrt{2}}{\pi\pi} a \sqrt{ab\tau_p E}. \quad (4b)$$

ここで、 $U(0)$ は $\tau = 0$ のときの活性化エネルギー、関数 $g(x)$ は $x = 0$ のとき 1、 $x = 1$ のとき 0 となる減少関数で、数値計算によって求められる。(4)式の $U(\tau)$ が Fig. 4 の曲線 B である。一般に、 $U(\tau)$ の形はパイエルス・ポテンシャルの形にあまり強くは依存しない。

さて、形成されたキンクが転位線に沿って伝播する速度が十分速く、熱活性化によるキンク対の形成が律速過程ならば、転位の前進速度 v はつぎの形で表わされる。

$$v = v_0 \exp\left[-\frac{U(\tau)}{kT}\right] \quad (5)$$

ここに、 k はボルツマン定数、 T は絶対温度である。 v_0 は熱活性化によるキンク対形成頻度の具体的な計算によって与えられるが、4 節で述べるように、その τ 、 T 依存は(5)式の指数項にくらべて小さく、実際上は定数と見なすことができる。

結晶の巨視的な変形速度 (歪速度) $\dot{\gamma}$ は、動いている転位の密度を n とすると

$$\dot{\gamma} = nbv \quad (6)$$

で与えられるから、 $\dot{\gamma}_0 = nbv_0$ とすれば

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{U(\tau)}{kT}\right] \quad (7)$$

となる。

3. 低温の降伏応力

Fig. 5 に 5 種類の NaCl 型イオン結晶の降伏応力と温度の関係を示す⁹⁻¹¹⁾。LiF は応用光研製の真空紫外用、他の四つは Harshaw の高純度単結晶である。これらの結晶では液体ヘリウム温度までじり $\{110\} \langle 110 \rangle$ じり系で進行するので応力 τ 、歪 γ 等の量はこの方向への分解せん断成分をとってある。また、降伏応力 τ_y もこの方向への臨界分解せん断応力のことである。Fig. 5 で最も注目すべきことは、数 10 K 以下の極低温領域における降伏応力の急激な上昇である。さらに、NaF を除く四つの結晶では、降伏応力の温度依存性がこの温度領域においてほぼ相似の関係にあるように見える。このような低温における降伏応力の急上昇はパイエルス機構の特徴の一つである。以下に、この低温における降伏応力の測定結果が前節で説明したパイエルス機構によってよく理解できることを示し、それぞれの結晶のパイエルス力を推定するが、くわしい説明は主として LiF と NaCl について行い、他の結晶については解析結果のみを紹介する。

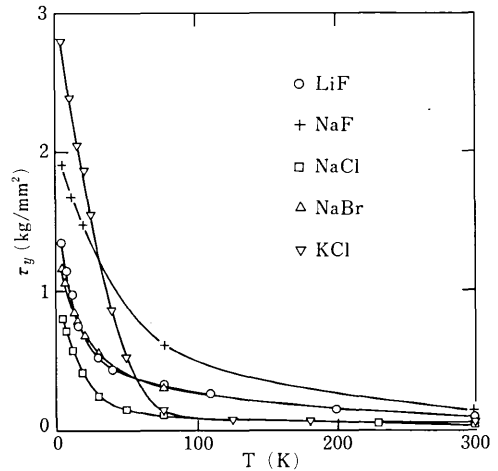


Fig. 5 5 種類のイオン結晶の降伏応力、 $\dot{\gamma} = 1.6 \times 10^{-4} \text{ sec}^{-1}$

(1) LiF と NaCl の降伏応力

降伏応力の実験によって転位の運動機構を考察するためには、降伏応力の温度依存性ととも歪速度依存性も知る必要がある。Fig. 6 と Fig. 7 はいくつかの歪速度 $\dot{\gamma}$ で測定した LiF⁹⁾ と NaCl¹⁰⁾ の降伏応力である。数 10 K 以下での降伏応力の急上昇は Fig. 5 よりよくわかり、絶対 0 度に近づくにしながら歪速度依存は少なくなっている。

パイエルス・ポテンシャルが Fig. 3 の形によく近似できる場合には、歪速度一定 ($\dot{\gamma} = \text{const.}$) の条件では、

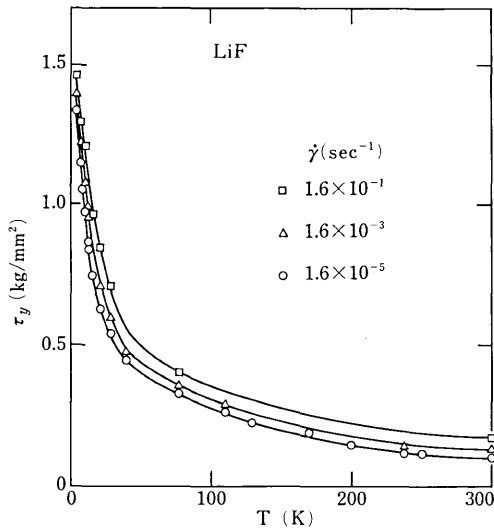


Fig. 6 LiF の降伏応力の温度、歪速度依存性

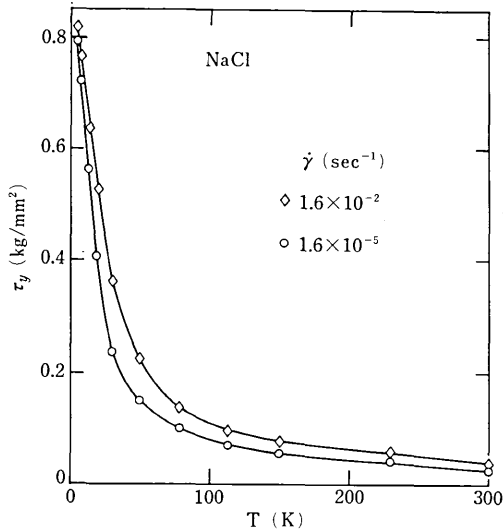


Fig. 7 NaCl の降伏応力の温度、歪速度依存性

(3), (7)式はつぎのような τ と T の関係に帰着する.

$$\frac{\tau}{\tau_p} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (8a)$$

ただし,

$$T_c = \frac{U_0}{k \ln(\dot{\gamma}_0/\dot{\gamma})}. \quad (8b)$$

U_0 と $\dot{\gamma}$ が τ や T に依存しないならば、(8a)式は τ と \sqrt{T} の間に直線的な関係を与える。降伏応力のデータを \sqrt{T} に対してプロットしたのがFig.8とFig.9である。Fig.9には、Fig.7で省いたデータも含めてある。LiFでは $T < 20$ Kで、NaClでは $T < 30$ Kのとき(8a)式の関係がよく成り立つことがわかる。 τ_p は τ_y を $T=0$ Kまで外挿した値である。

つぎに、(3)式の U_0 を求めて妥当な大ききか否かを検

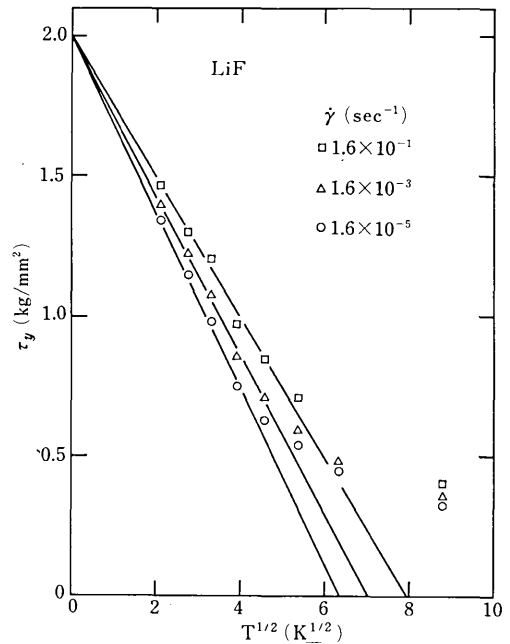


Fig. 8 LiF の τ_y と \sqrt{T} の関係

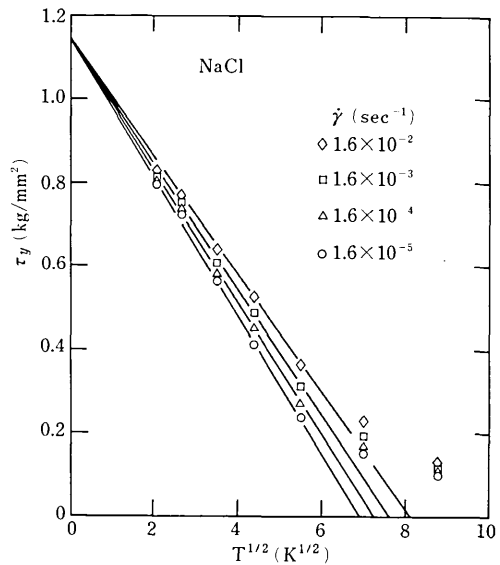


Fig. 9 NaCl の τ_y と \sqrt{T} の関係

討するために(3), (7)式を次の形に書き直す.

$$\ln \dot{\gamma} = \ln \dot{\gamma}_0 - \frac{U_0(1 - \tau/\tau_p)^2}{kT} \quad (9)$$

この式は $\log \dot{\gamma}$ と $(1 - \tau/\tau_p)^2/T$ の間に一つの直線関係を与える。その傾斜が U_0 に対応する。LiFのデータをこのような関係に引き直して見るとFig.10のようになる。これは拡散の実験データを解析するさいに用いられるアレニウス・プロットに相当する。ここで、 τ_p としては、先にFig.8から求めた 2.0 kg/mm^2 を用いている。Fig.10では、 $T < 20$ Kのデータはほとんど T によらずに

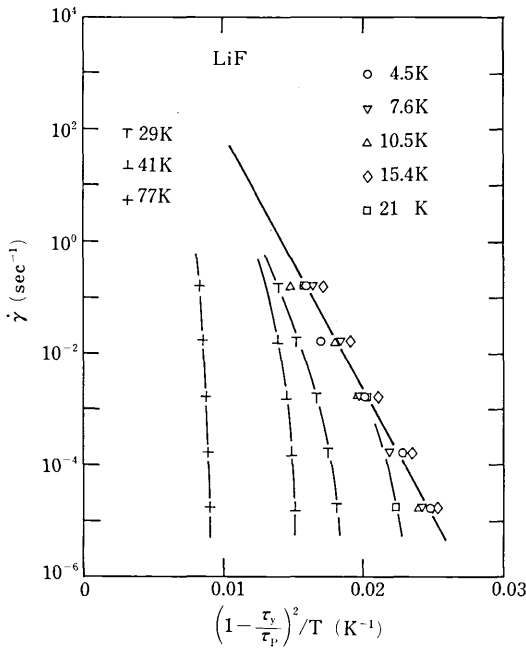


Fig.10 $\log \dot{\gamma}$ と $(1 - \tau_y/\tau_P)^2/T$ の関係 (LiF)
 $\tau_P = 2.0 \text{ kg/mm}^2$ とした

1本の直線の上に重なる。すなわち、(9)式の関係がよく成り立つことを示している。 U_0 の値は直線の傾斜から求まって、約0.09eVとなる。また、 $\dot{\gamma}_0$ の値は直線が縦軸と交わる場所まで外挿して求まる。

NaClの場合も、歪速度依存性をFig.10と同様のプロットに引き直してみると、 $T < 30 \text{ K}$ では(9)式の関係が成り立ち、 U_0 、 $\dot{\gamma}_0$ はTable 1に示した値となる。

こうして求めた U_0 がキック対形成の活性化エネルギーとして妥当な大きさかどうかを調べるには(3b)式を使う。 τ_P と U_0 の値を(3b)式に代入して計算した転位の線エネルギー E を $\frac{1}{2}\mu b^2$ に対する比の形で表わすとTable 1の最後に示したようになる。(3b)式に含まれているパイエルス・ポテンシャルの周期 a は転位の種類によって異なる大きさをとる。イオン結晶中の刃状転位では $a = b$ であるが、らせん転位では $a = b/\sqrt{2}$ である。変形の進行を律速しているのが、いずれの転位か不明であるので、Table 1にはそれぞれの場合を分けて書いてある。 μ としては、この場合 $\{110\} \langle 110 \rangle$ への剛性率 $\frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$ をとって0 Kでの値を使った。LiFでもNaClでも $E = \frac{1}{2}\mu b^2$ がよく成り立っている。とくに刃状転位の場合に一致がよい。よって、 U_0 の実験値はそれぞれの結晶でパイエルス力 τ_P に対応する妥当な大きさであると結論される。

このように、LiFとNaClの極低温における降伏応力はパイエルス機構の理論によって矛盾なく理解できた。なお、以上の解析では、パイエルス・ポテンシャルの形をFig.3のような二次関数を組み合わせた形に仮定した。

パイエルス・ポテンシャルを正弦関数とした場合には、解析の手順は多少変わる。NaClの場合には、 τ_y の温度依存性はよりよく理論と一致し、 τ_P の推定値はTable 1の値より10%程度小さくなる¹⁰⁾。

Table 1 降伏応力の解析結果

	τ_P (kg/mm^2)	τ_P/μ ($\times 10^{-3}$)	$U_0, U(0)$ (eV)	$E/\frac{1}{2}\mu b^2$		(注)
				edge	screw	
LiF	2.0	0.5	0.09	1.4	3.7	*
NaCl	1.1	0.5	0.12	0.8	2.3	*
NaBr	1.4	0.9	0.13	0.7	2.0	**
KCl	3.2	1.5	0.18	0.3	0.8	**
NaF	< 2.1	< 0.5	—	—	—	***

* パイエルス・ポテンシャルを二次関数 (Fig.3)とした
 ** パイエルス・ポテンシャルを正弦関数とした
 *** パイエルス力の上限

(2) KCl, NaBr, NaF

Fig.11はKCl単結晶の降伏応力を \sqrt{T} に対してプロットしたものである。Harshawの単結晶と応用光研の単結晶の2種について測定した。77 K以上の高温では、応用光研の結晶がHarshawの結晶より約3倍高い降伏応力を示す。これは不純物濃度の差によるものであろう。しかし、40 K以下の温度では両者に差がないことは、パイエルス機構の証拠と考えられる。Fig.11からわかるように、KClの場合(8a)式の関係はあまりよく成り立たないので、パイエルス・ポテンシャルとしてFig.3の形はあまりよい近似でないといえる。Fig.11の曲線は、パイエルス・ポテンシャルを正弦関数としたときの活性化エネルギー(4)式と(7)式を使ってデータに最もよく合うように描いた理論曲線である。この場合、広い温度範囲でよく一致する。NaBrの同様な関係がFig.12である。この場合、理論に合う温度範囲は比較的狭い。

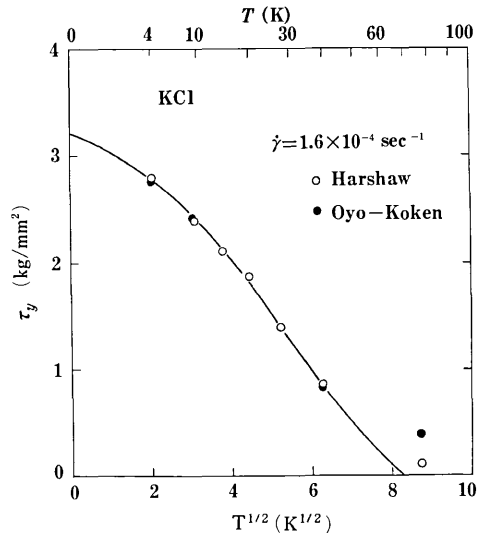


Fig.11 KClの降伏応力, 実線はパイエルス・ポテンシャルが正弦関数のときの理論曲線

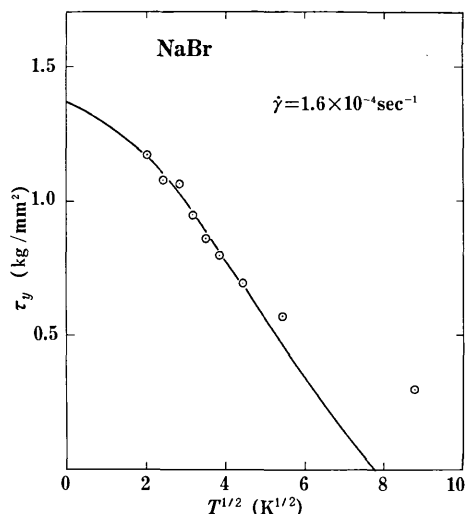


Fig.12 NaBrの降伏応力, 実線はパイエルス・ポテンシャルが正弦関数のときの理論曲線

それぞれの結晶のパイエルス力 τ_p の推定値は Table 1 に示してある。

KCl, NaBr の場合にも, 降伏応力の歪速度依存性を使って, 全活性化エネルギー $-U(0)$ を見積り, (4b) 式から E を求めて $\frac{1}{2}\mu b^2$ と比較すると Table 1 に示したようにほぼ妥当な大きさである。くわしくは文献¹¹⁾を参照していただきたい。

Fig. 5 からわかるように NaF の降伏応力は 4.2 K に到るまで他の結晶よりゆるやかな温度依存性を示し, いろいろな点から検討してもパイエルス機構には適合しない。したがって, 降伏応力を 0 K まで外挿した値はパイエルス力の上限を与えると考えられる。

いろいろな結晶のパイエルス力を比較するとき, τ_p を剛性率 μ で割った値が用いられるので, Table 1 にはそれぞれの結晶の τ_p/μ の値を示してある。b.c.c.金属の降伏応力を 0 K まで外挿した値がパイエルス力だとすれば, τ_p/μ は $3 \sim 7 \times 10^{-3}$ である²¹⁾。イオン結晶の τ_p/μ はこれよりほぼ1桁小さいといえる。

4. LiF 結晶中の転位速度

降伏応力の測定によって求められた τ_p は, 刃状転位からせん転位のいずれのパイエルス力であろうか。LiF の場合 Table 1 で見ると $E/\frac{1}{2}\mu b^2$ が1に近いのは刃状転位の方であるから, 塑性変形を律速しているのは刃状転位で, したがって求めた τ_p は刃状転位と考えた方が理論との一致はよい。しかし, 転位の線エネルギーの評価は多分にあいまいなものであって, 正確な判定を下すためには転位速度を測定する必要がある。また, 降伏応力の実験では, (7)式の $\dot{\gamma}_0$ に含まれる可動転位密度 n を見積ることができないので, 熱活性化によるキック対形成の頻

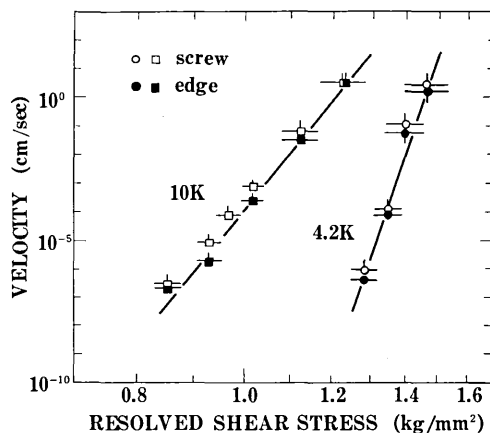


Fig.13 LiFの転位速度と応力の関係

度に関係した(5)式の v_0 について検討することができない。そのためにも, 転位速度の測定が必要である。

Fig.13は LiF中での転位の平均速度と応力の関係を両対数目盛にプロットしたものである¹²⁾。実験には降伏応力の測定に使ったのと同じ単結晶を用い, 4点曲げの方法で応力パルスを加え, その前後での個々の転位の位置の移動を腐蝕法で追跡した。Fig.13にみるように, らせん転位の速度は刃状転位より2~5倍大きい。らせん転位は交叉じりを起こすために見掛上速度が遅く見えることも考慮すれば, 刃状転位が塑性歪の進行を律速すると考えてよいであろう。したがって, 降伏応力から得られた τ_p は刃状転位のパイエルス力ということになる。

つぎに, Fig.13の実験結果を再びパイエルス機構の理論によって解析する。降伏応力の解析と同じように, パイエルス・ポテンシャルに Fig. 3 の形を仮定すると, (4)式の活性化エネルギーと(5)式は, $\log v$ と $(1-\tau/\tau_p)^2/T$ の間に一つの直線関係を期待させる。実際に刃状転位の速度をそのような関係に引き直してみると Fig. 14 のようになり, (5), (7)式をほぼ満たしている。ただし, τ_p の値としては降伏応力から求めた 2.0 kg/mm^2 を用いた。直線の傾斜から(4)式の U_0 を見積ると約 0.09 eV となつて, 降伏応力の解析で求めた値に一致する。すなわち, 転位速度と降伏応力の二つの実験結果は同じパイエルス力と活性化エネルギーによって consistent に説明できた。Fig. 10と Fig. 14を比較して(6)式の関係を用いれば, 可動転位密度 n は約 10^6 cm^{-2} と求まる。これは妥当な大きさである。(5)式の v_0 は, Fig. 14で直線を縦軸まで外挿すれば, つぎのように求まる。

$$v_0 \sim 10^8 \text{ cm/sec} \quad (10)$$

パイエルス機構における v_0 の理論的な計算は多くの人達^{8,16-20)}によって行われているが, Celliら¹⁸⁾の計算は普通無視されるエントロピー変化の寄与も自動的に含まれる取り扱いになっているので, 最も妥当なものである。

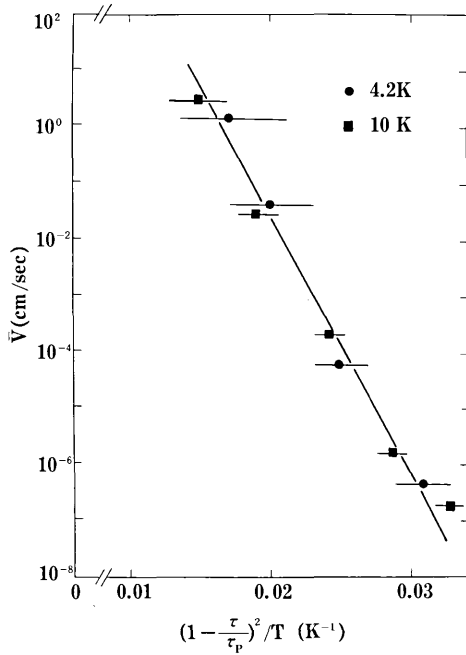


Fig. 14 $\log v$ と $(1 - \tau/\tau_p)^2/T$ の関係 (LiF)
 $\tau_p = 2.0 \text{ kg/mm}^2$ とした

いま、長さ L の転位線を考えると、キンの運動速度 v_k が十分速くて

$$v_k > \frac{L}{2a} v \tag{11}$$

を満たすならば、対で形成されたキンは反対符号のキンクと出会って消滅することなく L 全長を揮く。このような場合、Celli らの理論によれば、

$$v_0 \approx L \cdot \frac{4c_s E_p}{\pi^2 a E} \left(\frac{2\pi U(\tau)}{kT} \right)^{1/2} \cdot e^{3\pi/4} \tag{12}$$

となる。ここに c_s は横波の音速、 E_p はパイエルス・エネルギーで $\tau_p ab/4$ に等しい。 $(U(\tau)/kT)^{1/2}$ は Fig. 14 から見積ると 4 ~ 5.5 である。(12)式に含まれるそれぞれの定数に LiF の値を使って、(10)式の実験値を比較すると

$$L \approx 5 \times 10^{-4} \text{ cm} \tag{13}$$

を得る。この値はキンク対の幅 (約 $70b$) より大きく、転位クープの大きさ (数 $10 \sim 100 \mu$) より小さいから、妥当な大きさである。この L の値と測定した最大の転位速度 $v \sim 10 \text{ cm/sec}$ を考慮すると(11)式の条件は $v_k > 10^4 \text{ cm/sec}$ となる。低温ではフォノンの粘性抵抗はほとんど働かないので、 v_k は音速に近く、したがって(11)式は満たされていると考えられる。また、(13)式の L の値は、2価の不純物による転位の釘付けによって決まっていると考えるのが適当である。

以上のように、LiF の低温での転位速度は、降伏応力の実験と矛盾することなくパイエルス機構の理論によって理解できる。

5. パイエルス力の計算

結晶転位のパイエルス力は結晶の構造と原子間相互作用が与えられれば決ってしまうはずであるが、非常に多数の原子の間の相関を考慮した多体問題となるために、実際に計算するととなると困難な問題である。転位論の初期の段階では解析的に計算することが試みられたが、定量的に満足すべき結果を得るには到らなかった^{1,2,22)}。その後、電子計算機の発達によって転位の構造、エネルギーやパイエルス力をシミュレートすることが可能になった。この種の計算機実験は Huntington ら²³⁾ の NaCl についての仕事を初めとするが、パイエルス力の具体的な計算を最初に行ったのは Kurosawa²⁴⁾ で、それは NaCl 型イオン結晶中の刃状転位についてであった。しかし、イオン結晶のパイエルス力の実験値が得られていなかったこともあって、計算機実験はその後主として b.c.c. 金属について行われてきた²⁵⁻²⁷⁾。

Kurosawa²⁴⁾ はイオン間の相互作用としてクーロン力のほかに、ボルン・マイヤー型の斥力ポテンシャル

$$\phi_{BM}(r) = \frac{\alpha_M e^2 \rho}{6a^2} \exp \left\{ -\frac{r-a}{\rho} \right\}$$

を最近接イオン間に用いて、刃状転位のパイエルス力を計算した。ただし、 α_M はマデルング定数、 e は電荷、 a は最近接イオン間距離、 ρ は斥力の到達距離を表わすパラメータで結晶によって異なるが $a/10$ の程度である。

Kurosawa の計算では、転位の中心に近い 28本のイオン列に働く力が消えるようにそれらの位置を緩和させ、その外側では弾性論の解が成り立つと仮定した。外力の大きさを変えて転位の位置 (弾性論の解の中心) の変化を追跡し、転位が不安定になる限界の外力を求めてパイエルス力とした。Kurosawa の計算結果を Table 1 の実験値と比較すると Fig. 15 のようになる。実験値をプロットす

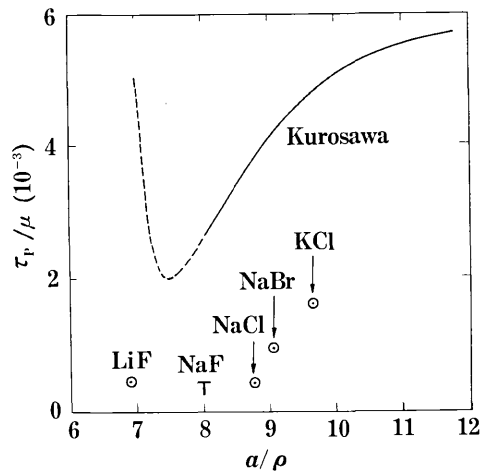


Fig. 15 パイエルス力の実験値と Kurosawa の計算値²⁴⁾

るときに用いた a/ρ の値は文献²⁸⁾による。Kurosawa の計算値は実験値より1桁近く大きい、これは当時の電子計算機の性能が今日ほど進んでいなかったために、十分に精度を上げることができなかったことによる。しかし、Kurosawa の計算方法は、パイエルス力が小さい場合には最も妥当なものである。

筆者ら¹³⁾は $a/\rho = 10.0$ の場合について、Kurosawa と同様の方法で十分精度のよい計算を行った。そのとき転位芯に含まれるイオン列の数は200本にまで拡張し、それらの位置は 10^{-5} の精度で決定された。計算の結果はつぎのようになる。(1) 刃状転位の二つの対称なイオン構造のうちで、Kurosawa がパイエルス力を計算した方の配列は、実は不安定平衡である。(2) 安定配列の方では $\tau_p/\mu \approx 1.5 \times 10^{-3}$ となる。この値は NaCl の実験値の約3倍で KCl の実験値に近い。

6. おわりに

イオン結晶の低温塑性とパイエルス力について系統的に行ってきた研究の結果をまとめると以下の通りである。

- (1) イオン結晶の低温塑性はパイエルス機構によって理解することができて、降伏応力から推定したパイエルス力は $1 \sim 3 \text{ kg/mm}^2$ である。これは f.c.c. 金属よりかなり大きく、b.c.c. 金属より約1桁小さい。
- (2) LiF においては、転位速度の測定によって、刃状転位のパイエルス力が転位の運動、したがって塑性変形を支配していることが示された。また、熱活性化過程の頻度因子の問題も含めてパイエルス機構の理論に詳細な検討が加えられた。
- (3) 電子計算機によるパイエルス力の計算を Kurosawa の方法に従い、かつ十分に拡張した規模で行った結果、実験値と比較し得る値を得た。

本研究は、昭和49年度の本所選定研究費による。

(1951年6月10日受理)

文 献

- 1) R. Peierls: Proc. Phys. Soc., **52** (1940) 23.
- 2) F. R. N. Nabarro: Proc. Phys. Soc., **59** (1947) 256.
- 3) 鈴木秀次: 転位論入門 (アグネ, 1967) p. 233.
- 4) R. Labusch: Phys. Status solidi, **10** (1965) 645.
- 5) H. Teichler: Phys. Status solidi, **23** (1967) 341.
- 6) 竹内伸: 金属学会会報, **7** (1968) 14.
- 7) J. W. Christian: *2nd Intern. Conf. Strength of Metals and Alloys* (American Soc. Metals, 1970) p. 31.
- 8) P. Guyot and J. E. Dorn: Canad. J. Phys., **45** (1967) 983.
- 9) T. Suzuki and H. Kim: J. Phys. Soc. Japan, **39** (1975) 1566.
- 10) T. Suzuki and H. Kim: J. Phys. Soc. Japan, **40** (1976) 1703.

- 11) 鈴木敬愛, 金鉉奎: 日本物理学会講演(1975年秋の分科会予稿集No. 2, p. 155) 生産研究 **28** (1976) 222.
- 12) 鈴木敬愛, 中村和夫: 日本物理学会講演(1975年年会予稿集No. 2, p. 70) 生産研究 **27** (1975) 515.
- 13) 鈴木敬愛, 金鉉奎: 日本物理学会講演(1976年年会予稿集No. 2, p. 236.)
- 14) A. Seeger: Phil. Mag., **1** (1956) 651.
- 15) A. Seeger, H. Dorn and F. Pfaff: Disc. Faraday Soc., **23** (1957) 19.
- 16) J. Lothe and J. P. Hirth: Phys. Rev., **115** (1959) 543.
- 17) A. Seeger and P. Schiller: Acta Metallurgica, **10** (1962) 348.
- 18) V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya and R. Thomson: Phys. Rev., **131** (1963) 58.
- 19) J. E. Dorn and S. Rajnak: Trans. AIME, **230** (1964) 1052.
- 20) J. Friedel: *Dislocations* (Pergamon Press, London, 1964).
- 21) F. Minami, E. Kuramoto and S. Takeuchi: Phys. Status solidi, (a) **12** (1972) 581.
- 22) A. J. Foreman, M. A. Jaswan and J. K. Wood: Proc. Phys. Soc., **A64** (1951) 156.
- 23) H. B. Huntington, J. E. Dickey and R. Thomson: Phys. Rev. **100** (1955) 1117.
- 24) T. Kurosawa: J. Phys. Soc. Japan, **19** (1964) 2096.
- 25) H. Suzuki: *Dislocation Dynamics*, ed. A. R. Rosenfield, G. T. Hahn, A. L. Bement and R. I. Jaffe (McGraw-Hill, 1968) p. 679.
- 26) Z. S. Basinski, M. S. Duesbery and R. Taylor: Canad. J. Phys., **49** (1971) 2160.
- 27) F. Minami, E. Kuramoto and S. Takeuchi: Phys. Status solidi, (a) **22** (1974) 81.
- 28) C. Kittel: *Introduction to Solid State Physics*, 3rd ed. (John Wiley, 1966).

(46ページよりつづく)

参 考 文 献

- 1) John Lysmer, Roger L. Kuhlemeyer: FINITE DYNAMIC MODEL FOR INFINITE MEDIA, vol. 95 No. EM 4. ASCE. 1969. P.P. 859 - 877
- 2) 清水信行他4名: 簿層要素による地中に深く埋めこまれた原子炉建物の地震応答解析, Proceedings of the Fourth Japan Earthquake Engineering Symposium - 1975. P.P. 297 - 304
- 3) N. C. Nigam, P. C. Jennings: Calculation of Response Spectra from Strong - Motion Earthquake Records, Bull. Seism. Soc. Amer. vol. 59 No. 2 P.P. 909 - 922
- 4) 上原七司: 構造力学における振動解析に関する計算的研究, S. 50.4 学位請求論文