

NaCl型イオン結晶のパイエルス力の測定

Determination of the Peierls Stress of Some Ionic Crystals with NaCl Structure

金 鉉 奎*・中村和夫*・鈴木敬愛*
Hyongyu KIM, Kazuo NAKAMURA and Takayoshi SUZUKI

1. ま え が き

移動する転位以外にまったく欠陥を含まない結晶中で転位を動かすのに必要な力は、1940年Peierls¹⁾によって初めて計算されたのでパイエルス力と呼ばれている。

すでに報告したように、LiF^{2),3)}とNaCl^{4),5)}の単結晶の降伏応力は液体ヘリウム温度近くで急激に増大する。その領域での降伏応力と温度、歪速度の関係はパイエルス機構によって矛盾なく説明できる。降伏応力を絶対0度まで外挿して得られたパイエルス力はLiFで約2 kg/mm²、NaClで約1 kg/mm²で、いずれも5×10⁻⁴μ(μは剛性率)の程度である。パイエルス力の大きさは、同じ構造をもった結晶の間でも原子間相互作用の違いに応じて変化すると考えられる。しかしながら、原子間相互作用のどのような性質が個々の結晶のパイエルス力を決めていたのかということは実験的にも理論的にも明らかでない。

そこで、われわれはLiFとNaClで行ったと同様にして、数種のイオン結晶の降伏応力を十分低温まで測定することによってパイエルス力を推定し、それがNaCl型イオン結晶の間でどのように変化しているかを調べたので報告する。

2. 試 料

Harshaw Chemical Companyから購入したKCl, NaBr, KF, NaF単結晶のブロックから劈開によって2.5×2.5×10mm³の試料片を用意した。各試料片は乾燥した窒素ガス雰囲気中、融点より50°C位低い温度で2.5時間焼鈍し、1°C/minの冷却速度で室温までおろした。NaF以外の結晶は潮解性が強いので取り扱い相対湿度50%以下のところで行った。

3. 実験結果および解析

NaCl型イオン結晶の劈開面は{100}、圧縮軸の方位は<100>、ひりは{110}面上<110>方向で圧縮軸と45°をなす。以下、降伏応力 τ_y はこの方向への臨界分解せ

ん断応力と定義する。低温での降伏応力の測定は文献³⁾に記述したとおりである。

図1はLiF, NaClも含めて6種の結晶の降伏応力 τ_y と絶対温度Tの関係である。KFは77K以下では塑性変形する前に破壊するので降伏応力を測定する事ができなかった。またKClにおいても30K以下ではクラックが発生しやすく高歪速度の降伏応力のデータは十分にとれなかった。LiF, NaClの場合に見出されたと同様に、他の結晶においても数10K以下で降伏応力の急激な増大が見られる。以下において、パイエルス機構によってこの温度領域における実験結果の解析を試みる。

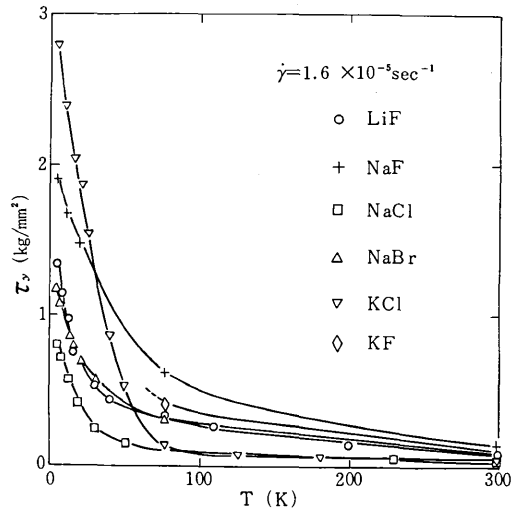


図1 降伏応力 τ_y と温度Tの関係

結晶の変形が転位の熱活性化運動によって制御されているものと仮定すると、歪速度 $\dot{\gamma}$ は次の形に表わされる。

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \cdot \exp[-U(\tau)/kT] \quad (1)$$

ここに、kはボルツマン定数、Tは絶対温度、U(τ)は活性化エネルギーである。

* 東京大学生産技術研究所 第1部

転位がパイエルス・ポテンシャルをキック対を形成して乗り越えるときの活性化エネルギーは、パイエルス・ポテンシャルをsin函数に仮定すると次の形に表わすことができる。

$$U(\tau) = U_0 \cdot g(\tau/\tau_p) \quad (2)$$

$$\text{ただし, } U_0 = \frac{4\sqrt{2}}{\pi\sqrt{\pi}} a\sqrt{ab\tau_p E} \quad (3)$$

ここに、 a はパイエルス・ポテンシャルの周期、 E は単位長さ当りの転位の線エネルギー、 b はバーガースベクトルである。 τ_p はパイエルス力で U_0 は応力 τ が0の時の活性化エネルギーである。 $g(\tau/\tau_p)$ は τ/τ_p が0から1まで変る時、1から0まで変る函数である。Celliら⁶⁾の方法と同様にして数値計算によって求めた $U(\tau)/U_0$ と τ/τ_p の関係を対数目盛にプロットしたのが図2である。

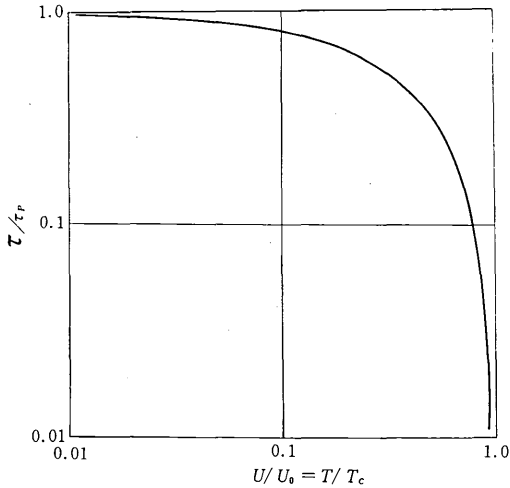


図2 パイエルス・ポテンシャルをsin函数に仮定した場合のキック形成活性化エネルギー $U(\tau)$ と応力 τ の関係

歪速度 $\dot{\gamma}$ が一定のときには(1)、(2)式から

$$\frac{T}{T_c} = \frac{U(\tau)}{U_0} = g(\tau/\tau_p),$$

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

となるから、図2は横軸を T/T_c に読みかえれば歪速度一定のときの τ と T の関係を表わす。

降伏応力 τ_y の温度依存性のデータ図1を両対数目盛にプロットすると、図3のようになる。図2の理論曲線を各結晶の低温部分のデータと最もよく一致するように重ね合わせると実線のようになる。

これから推定した各結晶の τ_p の値を表にまとめて示した。

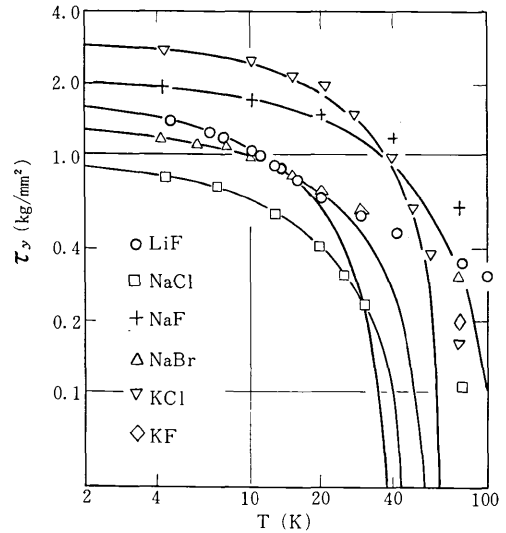


図3 降伏応力と温度の関係、曲線は図2の理論曲線が低温部分のデータに最もよく合うように描いたもの。

表 解析結果のまとめ

	τ_p (kg/mm ²)	U_0 (eV)	$\dot{\gamma}_0$ (sec ⁻¹)	$E/1/2\mu b^2$	
				edge	screw
LiF	1.8	0.09	3×10^{21}	1.0	2.9
NaCl	1.0	0.12	5×10^{17}	0.8	2.2
NaBr	1.4	0.13	2×10^{21}	0.7	2.0
KCl	3.2	0.18	2×10^{21}	0.3	0.8
NaF	< 2.1	—	—	—	—

応力 $\tau = 0$ の時の活性化エネルギー U_0 と(1)式の頻度因子 $\dot{\gamma}_0$ は次のようにして求める。(2)式を(3)に代入すると

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp[-U_0 \cdot g(\tau/\tau_p)/kT] \quad (4)$$

となる。従って実験データを、 $\log \dot{\gamma}$ と $g(\tau/\tau_p)/kT$ の關係にセミログにプロットすれば、その直線のこう配から U_0 が、直線が $\dot{\gamma}$ 軸を切る点から $\dot{\gamma}_0$ が求められる。

図4から図8までは、それぞれLiF、NaCl、NaBr、KCl、NaFの実験結果をこのような關係にプロットしたものである。 τ_p としては表に示した値を使った。

NaFを除く四つの結晶の実験データは、図に示した温度領域で(4)式をよく満している。これらの結晶について求めた U_0 と $\dot{\gamma}_0$ は表に示してある。NaFの場合図8から明らかなように(4)式の關係が成立っていないが、強

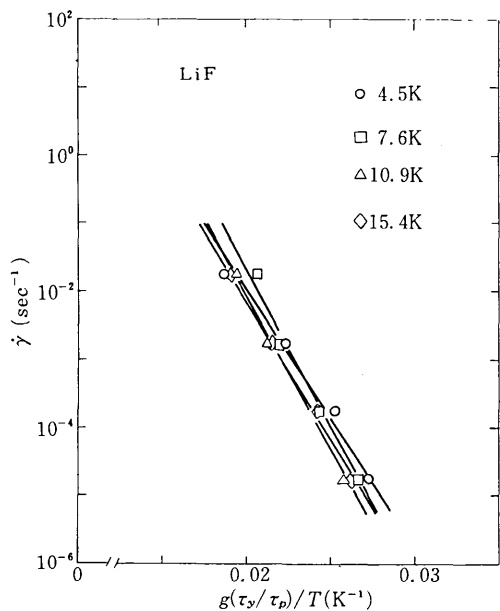


図4 LiF単結晶の $\log \dot{\gamma}$ と $g(\tau_y/\tau_p)/T$ の関係($\tau_p=1.8\text{kg/mm}^2$)

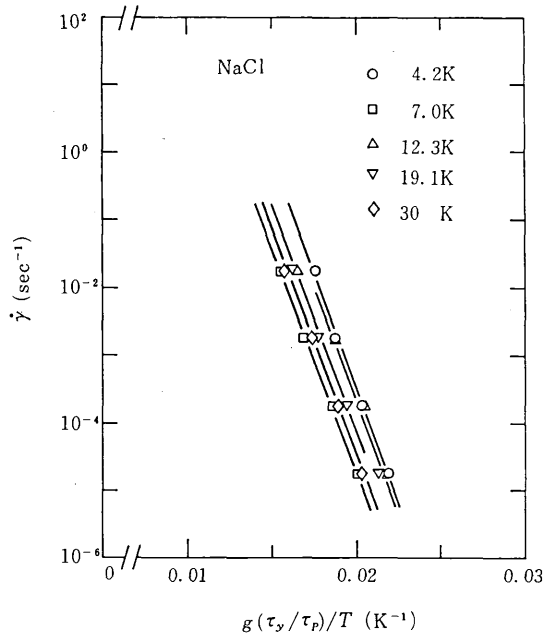


図5 NaCl単結晶の $\log \dot{\gamma}$ と $g(\tau_y/\tau_p)/T$ の関係($\tau_p=1.0\text{kg/mm}^2$)

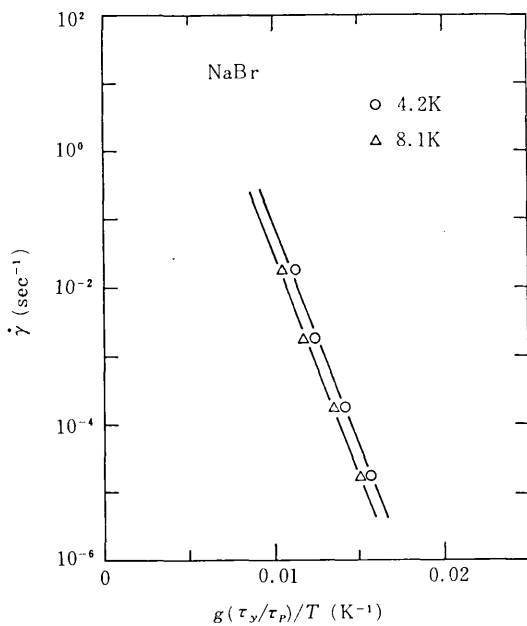


図6 NaBr単結晶の $\log \dot{\gamma}$ と $g(\tau_y/\tau_p)/T$ の関係($\tau_p=1.4\text{kg/mm}^2$)

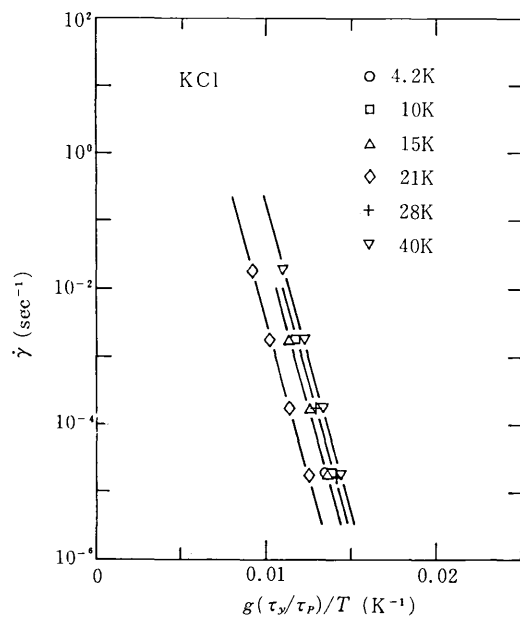


図7 KCl単結晶の $\log \dot{\gamma}$ と $g(\tau_y/\tau_p)/T$ の関係($\tau_p=3.2\text{kg/mm}^2$)

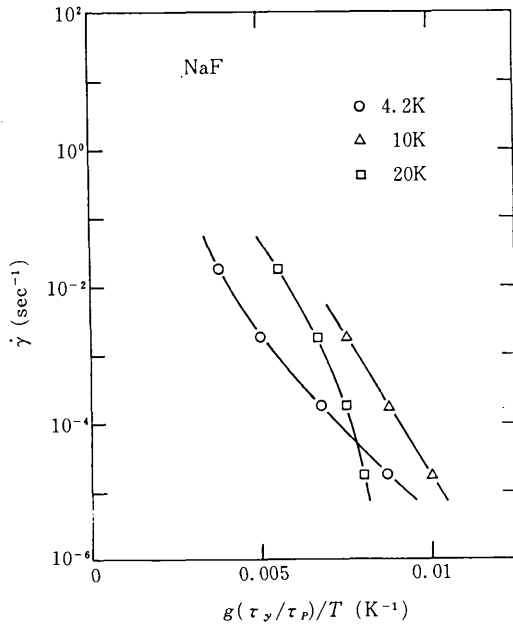


図8 NaF単結晶の $\log \dot{\gamma}$ と $g(\tau_y/\tau_p)/T$ の関係($\tau_p=2.1\text{kg/mm}^2$ とする)

いて U_0 を見積れば0.3eV程度になる。

求めた U_0 がパイエルス機構として妥当なものか否かは(3)式により E を見積り、それを弾性論による理論値 $\frac{1}{2}\mu b^2$ (μ は剛性率)と比較する事により判定する。その結果を表の最後の欄に示す。NaFを除く結晶では $E/\frac{1}{2}\mu b^2$ は大体1のオーダーであり、したがって U_0 の大きさは、それぞれの結晶の τ_p に対して妥当な大きさと見なすことができる。ここで剛性率としては $\{110\}\langle 110\rangle$ 向きを考慮して $\mu = \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$ を用いた。

NaF結晶においては、 $E/\frac{1}{2}\mu b^2$ の値が刃状転位の場合約3、ラセン転位の場合約7となり大きすぎる。したがってNaFの実験結果はパイエルス機構に適合しない。パイエルス力は降伏応力の0Kへの外挿値約2.1kg/mm²より小さいと考えられる。

Kurosawa⁷⁾はNaCl型イオン結晶の刃状転位のパイエルス力を a/ρ をパラメーターとして求めた。ここで、 a は最隣接原子間距離、 ρ はボルン・メーヤ型の斥

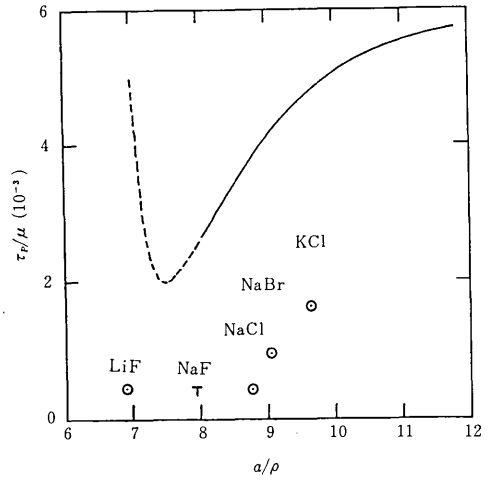


図9 τ_p/μ と a/ρ の関係。実線はKurosawaの計算値。

力の到達距離である。Kurosawaの計算結果を実験値と比較すると図9のようになる。縦軸は剛性率 μ を単位とした時の τ_p の値である。前述のようにNaFの実験結果はパイエルス機構に適合しないので τ_p の上限をプロットしてある。Kurosawaの計算結果は実験値に較べて1桁近く大きい a/ρ に対する依存性は似た傾向である。

本研究の一部は、昭和49年度の本所選定研究費による。
(1976年2月25日受理)

参考文献

- 1) R. Peierls : Proc. Phys. Soc. 52 (1940) 23.
- 2) 金 鉉奎, 中村和夫, 鈴木敬愛 : 生産研究 26 (1974) 174.
- 3) T. Suzuki and H. Kim : J. Phys. Soc. Japan 39 (1975) 1566.
- 4) 金 鉉奎, 中村和夫, 鈴木敬愛 : 生産研究 27 (1975) 173.
- 5) T. Suzuki and H. Kim : to be published in J. Phys. Soc. Japan 40 (1976) No.6
- 6) V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya and R. Thomson : Phys. Rev. 131 (1963) 58.
- 7) T. Kurosawa : J. Phys. Soc. Japan 19 (1964) 2096.