

泡模形によるディスクリネーションの観察

A bubble raft model of disclinations

石 田 洋 一*・井 山 俊 司**

Yoichi ISHIDA and Shunji IYAMA

1. 緒 言

ディスクリネーションは結晶に生ずる線状格子欠陥の 1 種である。すでに調査報告¹⁾で述べたようにこの概念はもうひとつの線状格子欠陥である転位と時を同じくして考えられたものであるが、注目されるようになったのはつい最近である。それはこの欠陥が液晶、高分子、生物結晶などで重要な役割りを果たしていることがわかってきたからである。金属結晶においても磁区のパターン²⁾や微細結晶³⁾にこれが見出されており、双晶変形⁴⁾や結晶粒界構造⁵⁾をディスクリネーション配列で説明する試みがすすめられている。これら解析は適当な実験材がないためあって原子配列を考えないか、あるいは模式図で考察したものばかりである。これでは現実の結晶に生ずる問題を見のがしかねないので泡模形を用いて観察してみた。ディスクリネーションの構造や配列など静的な観察だけでなく、格子転位との相互作用など動的な性質も調べてみた。

2. 泡模形作成法

泡結晶の作成法は前報⁶⁾と同じであるが使用した溶液は Bragg のもの⁷⁾である。公害対策の進歩のため前回

用いた市販の中性洗剤の泡の耐久性が劣化したことが変更の原因である。ディスクリネーションの作成法は、まず泡の完全結晶をつくり写真 1 に破線でかこんだ部分の泡を小型のハンダゴテを接触させて消去した。そうすると表面張力により両側がひきあって切り口の底の部分から合体しはじめ、写真 2(a)に示すような五角形状のくさび形ディスクリネーションができる。泡消去を点線でかこんだ範囲におこなうと写真 2(b)の七角形 ($-\pi/3$ くさび形ディスクリネーション) となる。泡は二次元であるが、三次元的重なりを考えれば中央部をとうって紙

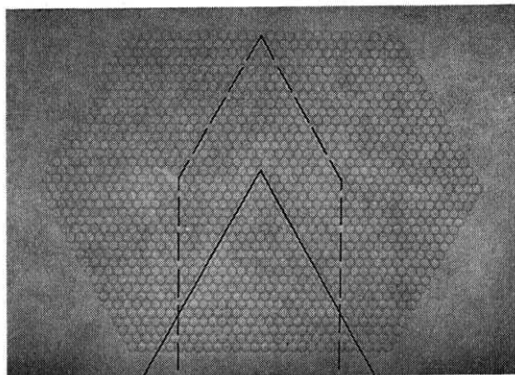
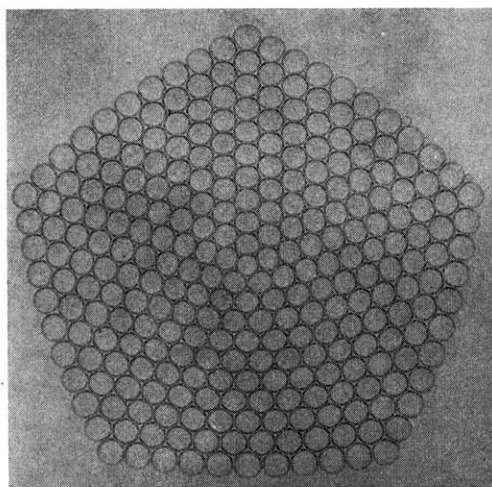
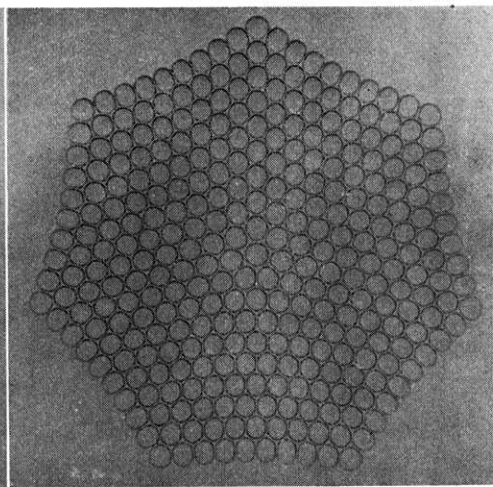


写真 1 ディスクリネーションの作成方法



(a)



(b)

写真 2 くさび形ディスクリネーション (a) $\pi/3$, (b) $-\pi/3$

* 東京大学生産技術研究所 第 4 部

** 東大大学院生

研 究 速 報

面に垂直な線状格子欠陥を考えることができる。泡模形は実際の結晶とくらべて次元が一つ足りないため観察はくさび型ディスクリネーションに限られる。

3. ディスクリネーションの構造

写真 2(a), (b) で明らかなように結晶は大きく歪んでいるが、最近接泡の数は中央のものを除きみな 6 個で完全結晶のそれと同じである。くさび形ディスクリネーションは刃状転位が 1 列に並んで途切れた場所と同じ性格の歪場をもつが、あとに述べる不完全ディスクリネーションの場合とはともかく、写真 2 の場合には転位列で記述するのは不自然である。転位の配列場所が一義的にきまらないという点でも無理がある。配列は写真 2 で示されるような中心対称なものばかりではなく写真 3 のように対称性のわるいものも存在する。写真 3 の場合は

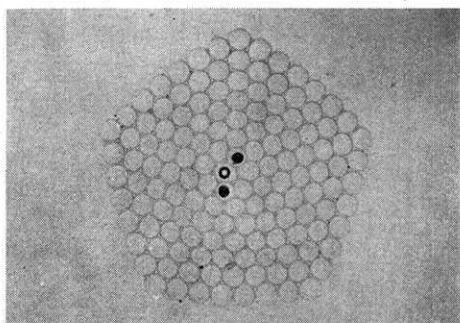


写真 3 芯構造が写真 2 (b) と異なる例

しかし芯と隣りあわせに格子転位があるとみなすこともできる。刃状転位は最近接泡配位数が 5 と 7 の泡が隣接した構造になっており、後述するディスクリネーション双極子のうちで間隔が最も小さいものとして解釈することができる。ディスクリネーションの歪場は芯から遠くなくても零に近づかず、一定値 (弾性論解, $\sigma_{\theta\theta} = \mu w / 2\pi(1-\nu)^{89})$ に近づくにすぎないのでそのエネルギーには結晶の形状が強く影響する。エネルギー的理由で、ディスクリネーションは薄い結晶や結晶表面近くに生じ易いと考えられ、このとき結晶の表面エネルギーが重要な役割をもつ。たとえば前述した写真 2 の場合、切り口がとじたことはこのとき消滅した表面のエネルギーよりディスクリネーションのエネルギーが小さいことが条件となっている。結晶生長の条件によっては生長の際にディスクリネーションが埋めこまれて結晶中に含まれるようになる場合が考えられよう。もっとも本実験では泡の直径が 1.5 mm 以下のときは切り欠きがとじなかったところからみて、孤立したディスクリネーションは金属結晶中には生じにくいものと考えられる。銅に似た挙動をする泡結晶は直径 1.2 mm 程度とされている⁹⁾。ディスクリネーションでも回転角度の小さい不完全ディスクリ

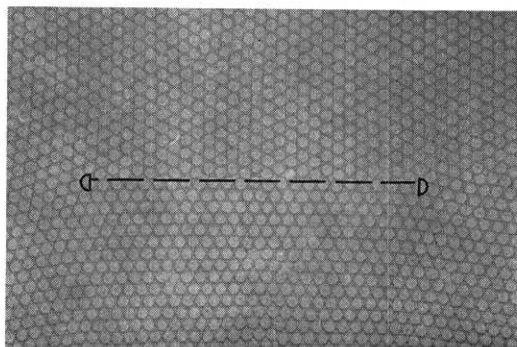


写真 4 拡張したディスクリネーション

ネーションなら存在可能である。ただしこの場合積層欠陥が生ずるので粒界がここでとぎれたようなかたちになる。写真 4 は $\pi/3$ ディスクリネーションが拡張して二個の $\pi/6$ 不完全ディスクリネーションに分解した場合である。

4. ディスクリネーションの配列

ディスクリネーションは異符号同志なら引き合い、同符号なら反撥する。弾性解¹⁰⁾では両方の回転角度を w_1 , w_2 とすると、

$$F = \mu w_1 w_2 l \ln(R/l) / 2\pi(1-\nu)$$

ただし l は間隔である。同符号同志はエネルギーがたかいたため存在しないと考えられるが異符号対は低エネルギーになり存在し易い。写真 5 はこの 1 例である。上述したように双極子の最も小さいものは刃状転位と同等で、一般にバーガースベクトル $b = wl$ なる刃状転位と考えることができる。

バルク結晶中のディスクリネーションは互いに干渉して歪場を消し合っており (写真 6)、そのため R 値は配列間隔程度になっていると考えられる。転位とディスクリネーションがこのような高密度に混在しているとき、転位は正と負のディスクリネーションとして考えるほうが自然であろう。液体状態はこのような状態と考えること

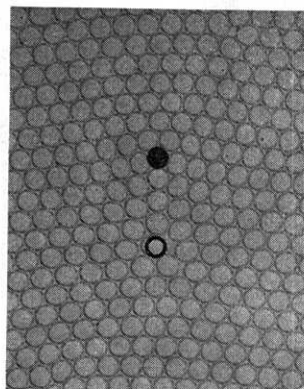


写真 5 双極子

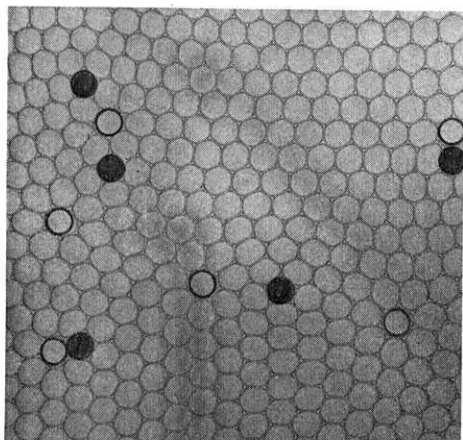


写真6 ディスクリネーションの分布

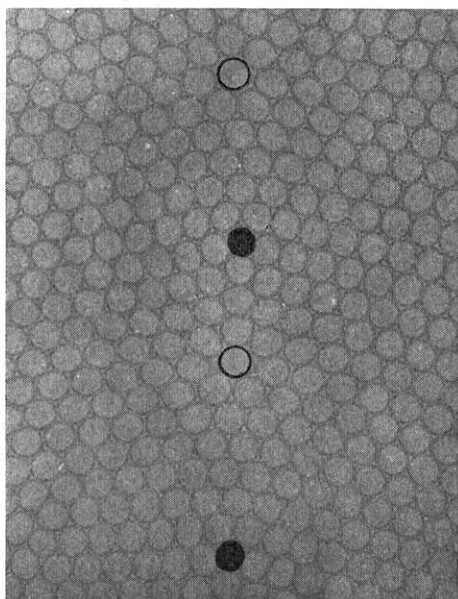


写真7 粒界のディスクリネーションモデル

ができるかもしれない。三次元的でなく二次元にこれが配列した場合は結晶粒界と考えることができる⁵⁾。写真7はこの1例であるが、小傾角粒界の転位モデルのようにディスクリネーション間には歪んだバルク結晶が存在している。真の界面は存在していない。このモデルが小傾角粒界の転位モデルと異なるのは傾角 θ がディスクリネーションの密度で決めるのではなく、正負配列したディスクリネーションの間隔比できまり、ディスクリネーションの密度自体は必ずしも高くなくてよいことである。すなわち、

$$\theta = w \cdot l_1 / (l_1 + l_2)$$

ここで l_1, l_2 は正負ディスクリネーションの間隔、 $\pi/3$ くさび形ディスクリネーションが等間隔で並んでいるとき傾角 θ は 30 度、これが写真7のような構造をしてい

るとき転位の高密度配列で説明することや規則配列単位 (structure unit) で解釈することは不自然であることはいうまでもない。とはいえ写真7でみられる歪は非常に大きく金属の結晶粒界がはたしてこのような構造をしているかには疑問がある。とくに傾角 θ は l_1/l_2 比を固定すればよいので l_1, l_2 を小さくして歪場を局所化することができ l_1, l_2 が原子の尺度になるまでエネルギー低下をもたらすように思われる。もっとも不完全ディスクリネーションの配列なら話は別で、これは規則配列単位二種類を配列させたものと幾何学的に同等である。ディスクリネーションモデルはこのような配列の歪場を与える点で有用であろう。この場合はしかし界面が存在するので歪場は複雑である。ディスクリネーションでは不純物が多量に偏折でき、そのエネルギーを下げるができる。この効果はとくに粒界モデルで重要と思われる。

5. ディスクリネーションの運動 (格子転位との反応)

ディスクリネーションのすべり運動は連続体幾何学では可能にみえても実際の結晶ではその構造によりすべり面が拘束されるためおこらない場合がある。泡結晶の場合、運動はすべりも上昇運動も常に格子転位の発生、吸収をとまっていた。写真8はこの一例で、 $\pi/3$ くさびディスクリネーションが刃状転位をひとつ放出して1原子間隔だけ移動した場合である。泡を一つ一つつぶして刃状転位を上昇運動させたところ結晶端部まで移動して消滅した。この転位の軌跡は一般に曲っているが、これはディスクリネーションと転位の干渉によるものでディスクリネーション近傍の転位のポテンシャルエネルギー E は⁶⁾

$$E = \mu b w y \ln \{R^2 / (x^2 + y^2)\} / 4\pi(1-\nu)$$

この最大は $(0, \pm R/e)$ にあり写真8の転位は上昇しながらこの最小点を通りすぎたことがわかる。ディスクリネーション芯の移動は転位がすべり運動して芯に吸収された場合にもみられた。 $-\pi/3$ ディスクリネーションにも同様なことがみられた。ただしディスクリネーションより転位を放出させるのには応力が必要であった。 $\pi/3$ より $-\pi/3$ のものから容易に転位が発生した。ディスクリネーション双極子はこのように転位をやりとりしながら運動した。同様なことが双晶変形の場合にもおこっている可能性がある。ディスクリネーション粒界の移動も同様な転位のやりとりで生ずると考えられる。ただこの場合、すべり面の問題があって、写真7の粒界の場合、すべり面がディスクリネーション同志をむすびつけている側で $-\pi/3$ の方から刃状転位が放出されて $\pi/3$ に吸収され、結果として1原子面だけ粒界移動が生ずる。この機構では粒界すべり量と移動量との間には一定の比例関

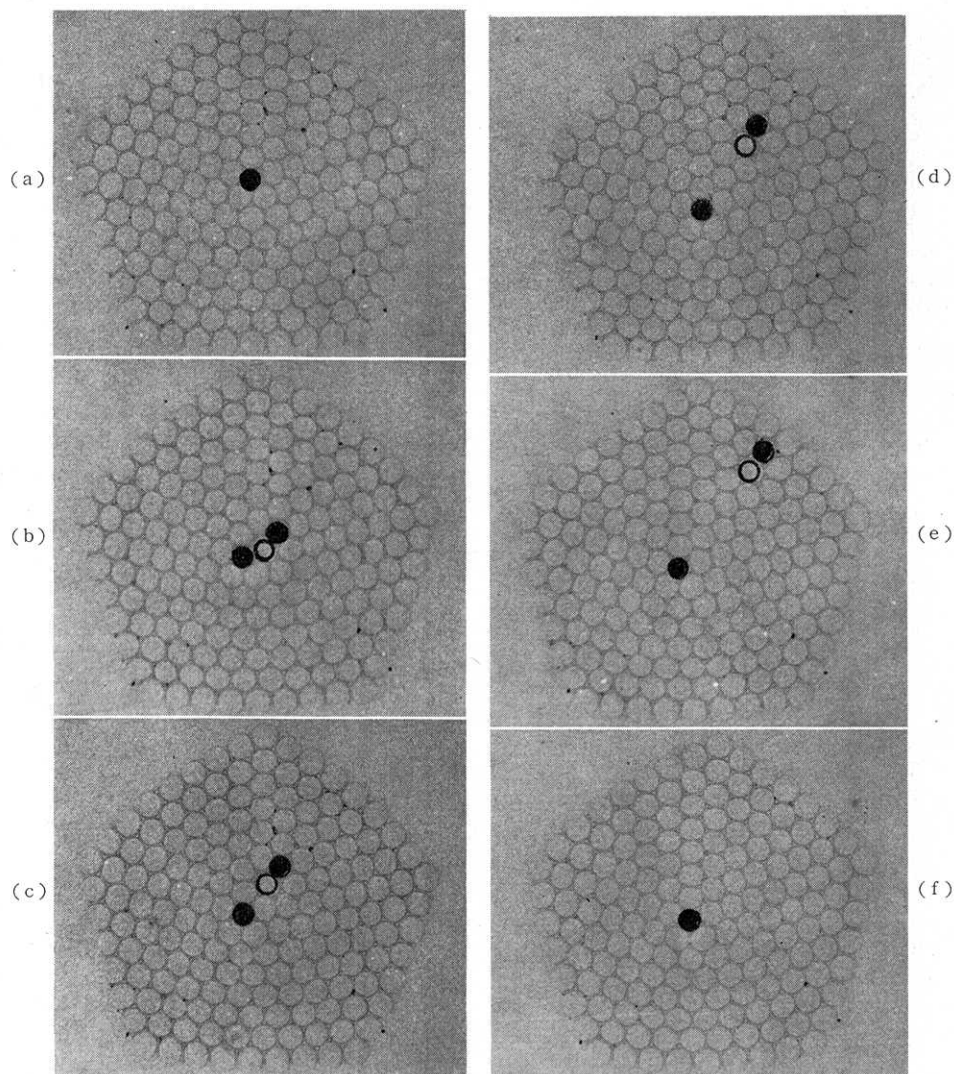


写真 8 ディスクリネーションからの転位放出

係が存在する。

6. む す び

以上、泡模形によるくさび形ディスクリネーションの観察結果の一部を報告した。あくまで模形であるから定性的解釈に限定し、歪分布など定量的解析には深入りすることをさけた。最近、ディスクリネーションへの関心はたかまっており我国では橋口⁽¹¹⁾、丸川⁽¹²⁾の理論的研究がある。泡模形はこれら成果を原子配列レベルで検討するうえで役立つと期待されるが、一方これらの知見をもとに実際の結晶にみられるディスクリネーションの構造を解析することも重要である。その手はじめとして金微粒子にみられる擬五角形ディスクリネーション (pseudo pentagonal disclination) を電顕格子像で調べている。

(1974年8月5日受理)

参 考 文 献

- 1) 石田：生産研究, 24, 477 (1972)
- 2) H. Träube and U. Essmann: Phys. Stat. Sol. 25, 373 (1968)
- 3) J. M. Galligan: Scripta Met. 6, 161 (1972)
- 4) R. W. Armstrong: Science 162, 799 (1968)
- 5) J. C. M. Li: Surface Science 31, 12 (1972)
- 6) Y. Ishida: J. Mat. Sci. 7, 75 (1972)
- 7) W. L. Bragg and J. F. Nye: Proc. Roy. Soc. A 190, 474 (1947)
- 8) W. Huang and T. Mura: J. Appl. Phys. 41, 5175 (1970)
- 9) W. L. Bragg and W. M. Lomer: Proc. Roy. Soc. A 196, 171 (1949)
- 10) F. Kroupa and L. Lejček: Phys. Stat. Sol. (b) 51, K 121 (1972)
- 11) R. R. Hasiguti: J. Phys. Soc. Japan, 357 313 (1973)
- 12) 丸川：日本物理学会分科会予稿集 (2) 119 (1973)