

準対応粒界の構造と粒界転位

Structures and Boundary Dislocations in Quasi-coincidence Grain Boundary

石 田 洋 一*

Yoichi ISHIDA

1. はじめに

金属結晶粒界の規則構造としては対応方位関係にもとづく周期規則粒界がよく知られている。ここ数年の粒界構造研究は主にこれに関するものであった。すでに対応粒界については粒界転位の構造に至るまで理論的、実験的成果の積重ねができあがってしまった感もないではない。問題はしかしその一般性で、粒界のうちどれだけが対応粒界に粒界転位網の重畳した構造で記述できるかはこの粒界構造の重要さを左右する因子として明らかにされねばならない。これに関し最近、対応粒界以外に周期規則性が近似あるいは一方向にのみ満足された準規則粒界とでも称すべき構造の存在が提唱され実験的にも見出されるようになった¹⁻⁶⁾。そしてむしろこのほうが対応粒界より一般的な粒界構造である可能性がでてきた。これに対し、筆者は前報で規則性が一方向にのみ満足された粒界の構造につき幾何学的に考察した⁷⁾。今回はそのとき取扱わなかった近似の対応関係が満足された粒界について考察したものである。とくにこの粒界の乱れ構造である粒界転位のバーガースベクトルに留意して調べた。

2. 準対応粒界の構造

対応粒界の特徴は適合性よい原子配列をどこまでも繰りかえすことが幾何学的に保障されていることで、低エネルギー粒界である原因もここからきていると考えられている。対応関係が完全でなく格子点一致が近似的に満足されている場合には原子配列単位は無限に繰りかえせないが、比較的長範囲にわたって繰返される可能性がある。なぜなら原子配列のエネルギーは配列の変化に対して変化が充分小さい範囲内では連続関数で、したがって充分小規模の変形が加わったとき同じエネルギーカブの範囲内に含まれると考えられるからである。この配列単位がくりかえされると完全な対応関係からのくい違いによる歪は粒界にそって重畳するので繰返し数は有限でくい違いを解消するために常に粒界転位網が分布している。この点が対応粒界と異なる。近似の対応関係にある格子ベクトルを b^{AL} , b^{BL} とすると、準対応格子ベクトル b^{QCSL} や喰い違い量 Δl , Σ 平均値は次式で定義

できる。

$$b^{QCSL} = \frac{1}{2} \{ |b^{AL}| + |b^{BL}| \} \quad (1)$$

$$\Delta l = |b^{BL}| - |b^{AL}| \quad (2)$$

$$\Sigma = \frac{1}{2} \{ (b^{AL})^2 + (b^{BL})^2 \} \quad (3)$$

ただし、 Σ は立方晶結晶の場合の値である。Fig. 1 に

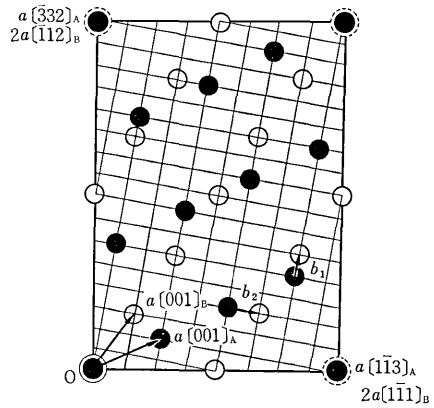


Fig. 1 $\Sigma 11.5$ Quasi-coincidence relationship

$$b_1^{GBD} = \frac{a}{6} (\bar{1}11)_A, \quad b_2^{GBD} = \frac{a}{6} (1\bar{1}2)_A$$

$[110]$ を回転軸とする $\Sigma = 11.5$ 準対応粒界 ($[110]$ 軸のまわりに 29.5° 回転, の場合を图示した。低指数軸を回転軸とする粒界では準対応格子点は三次元に分布するので、対応粒界と全く同様に、これらを含む何種類かの面が低エネルギー粒界面となりうる。Fig. 1 では $(\bar{3}32)_A // (\bar{1}12)_B$, $(1\bar{1}3)_A // (1\bar{1}1)_B$ などがこれに相当する。とくにこれら傾角粒界では回転軸方向には完全な対応関係が成立しており、かつ周期も短かいので低エネルギー粒界となる理由が充分ある。ただ、この近似の対応関係は幾何学的自由度の点では対応関係のそれと同じなため種類はそれほど多くはない。Table I. に $[110]$ を回転軸とするものにつき $8.5 \leq \Sigma \leq 33.5$ のものを示した。 Σ 値の大きいものは配列単位が複雑になるため対応粒界と同じ理由で低エネルギーになりにくいと考えられる。一方 Σ 値のあまり小さいものでは、完全な対応関係からのずれに由来する変位 $\epsilon = m/2\Sigma$ が相対的に大きくなりすぎ、よほど適合性のよい原子配列でもなければ低エネルギー境界として存在できない。ここで $m = \{ (b^{BL} - b^{AL})^2 \}$, m としては 1 の場合が対応関係からのずれが

* 東京大学生産技術研究所 第4部

研究速報

Table I. Quasi Coincidence Orientations (Simple cubic, rotation axis [110])

Periodicity index ($\bar{\Sigma}$)	Near Coincidence Sites		rotation angles (θ)	
	$b^A = \{h, \bar{h}, l_1\}_A$	$b^B = \{h_2, \bar{h}_2, l_2\}_B$		
8.5	(220)	(221)	19.5	58.5
8.5	(220)	(003)	90.0	
11.5	(113)	(222)	29.5	
16.5	(004)	(223)	43.3	
17.5	(223)	(330)	46.7	62.8
17.5	(223)	(114)	23.8	
18.5	(330)	(331)	13.3	
18.5	(114)	(331)	57.3	
24.5	(224)	(005)	35.3	83.8
32.5	(440)	(441)	10.0	
32.5	(440)	(225)	60.5	
33.5	(441)	(334)	33.3	
33.5	(225)	(334)	17.2	76.2

$$\bar{\Sigma} = \frac{1}{2}(2h_1^2 + l_1^2 + 2h_2^2 + l_2^2)$$

最小で重要である。Table I は $m=1$ の場合のみ示してある。

このような近似的対応関係は通常の粒界では対応関係に準ずるものとしての意義しかもないが、異った結晶構造あるいは格子定数をもつ二相間の境界（異相境界）では一般的と考えられる。このような境界では完全な対応関係は存在しえないからである。異相境界の場合にも回転軸間には $[110]_A // [110]_B$ や $[100]_A // [100]_B$ のような同じ低指数軸を平行にした関係が重要である。このような場合、対称性がよいため近似的対応関係が成立すると直ちにこれが二次元に分布するからである。

3. 準対応粒界上の転位の構造

対応粒界では方位関係が対応関係のそれを完全に満足する場合粒界転位が存在しないのに対し準対応粒界では粒界転位網のない場合が考えられない。完全な準対応関係からの方位関係のずれはこの粒界転位網の間隔あるいは種類の変化として示される。この粒界転位のバーガースベクトル b^{GBD} と粒界階段の高さ h^{GBD} は対応格子解析を準用して計算できる。対応粒界の場合と全く同様に⁷⁾

$$b_{ij}^{GBD} = b_j^{BL} - b_i^{AL} \quad (4)$$

$$h_{ijk}^{GBD} = \frac{1}{2}(b_i^{AL} + b_j^{BL}) \cdot n_k^{GB} \quad (5)$$

ただし、ここで b_i^{AL} , b_j^{BL} は単位格子ベクトルではなく任意のものである。また、この解は対応粒界のそのように厳密ではなく完全な対応関係からのずれに由来する相対的不確定性 ($m/2\bar{\Sigma}$ 程度) が含まれている。対応粒界転位については種々の立方晶に対し単位バーガースベクトルの一般解が求められている⁸⁾。このうち [100],

Table II. Equations of Unit Burgers Vectors of the Boundary Dislocations in Quasi-Coincidence Boundaries.

Rotation Axis.	Unit Burgers Vector Equations*
[100]	$\Sigma_B^{-1}\{oh_2l_2\}_A$ or $\Sigma_A^{-1}\{ok_1l_1\}_B$ $\Sigma_B^{-1}\{ol_2k_2\}_A$ or $\Sigma_A^{-1}\{ol_1k_1\}_B$
[110]	$\Sigma_B^{-1}\{h_2\bar{h}_2l_2\}_A$ or $\Sigma_A^{-1}\{h_1\bar{h}_1l_1\}_B$ $\Sigma_B^{-1}\{l_2l_2h_2\}_A$ or $\Sigma_A^{-1}\{l_1l_1h_1\}_B$
[111]	$\Sigma_B^{-1}\{k_2h_2l_2\}_A$ or $\Sigma_A^{-1}\{k_1h_1l_1\}_B$ $\Sigma_B^{-1}\{l_2k_2h_2\}_A$ or $\Sigma_A^{-1}\{l_1k_1h_1\}_B$ $\Sigma_B^{-1}\{h_2l_2k_2\}_A$ or $\Sigma_A^{-1}\{h_1l_1k_1\}_B$

* Only b_S^{GBD} parallel to the rotation axis are listed for simple cubic crystal structure.

[110], [111]軸など低指数回転軸をもちこれに垂直なもの是对应格子ベクトルを Σ で除したものに等しい。準対応粒界でもそれは同様で Table II に示すような一般式が成立する。いずれも一方の結晶格子の指標を用いて表示したものであるが hkl 値としては他粒のものを入れなければならない。これは A, B 結晶が同等であるところから必要とされる b^{GBD} の解の対称性としては、もっとも単純な場合といえるであろう。粒界転位のもつ他の成分である粒界階段の高さ h は粒界面方位にも依存するので Fig. 1 のような対応関係図より直接求めるほうが容易である。

粒界転位の平場間隔 \bar{d} は次式で与えられる。

$$\bar{d} = b^{GBD} \cdot b^{QCSL} / \Delta l \quad (6)$$

ここで $\Delta l = \frac{1}{2}m(\Sigma)^{-1/2}$ 。転位間隔はいずれも数百 Å 以下で電顕観察にかからない場合が多いと考えられる。

4. 泡模形にみられた準対応粒界の一例

Photo 1 は泡模形の粒界にみられた準対応粒界の 1 例である。これは立方晶結晶 [111] 軸のまわりに 30° 回転した関係に相当し、泡模形では非常にひんばんに出現する。
(p.35 へつづく)

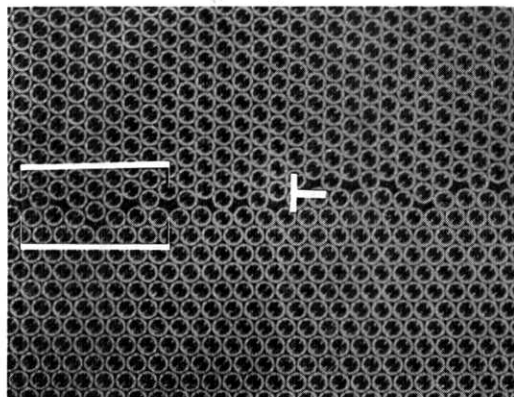


Photo 1 泡模形準対応粒界例

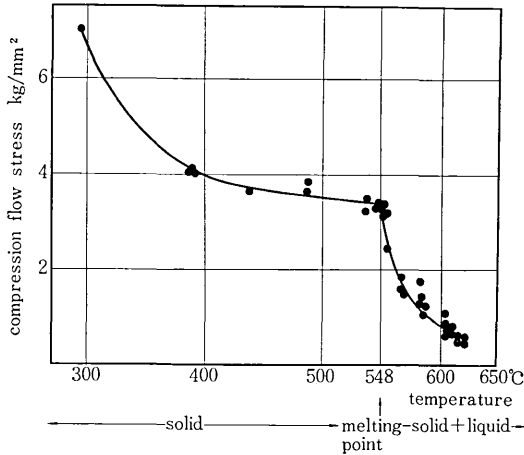


Fig. 8

to failure in these deformation processes. (Ref. Fig. 3). Pb-Sn alloy shows the sharper ten-

gency than Al-Cu.

4. Summary

Following results were obtained from the uni-axial compression test on Pb-Sn and Al-Cu alloys in solid-liquid's coexisting state.

- 1) The relationship between flow stress and solid content has been clarified.
- 2) According to decrease of solid content from 100% to 75~80%, the flow stress decreases to 1/4~1/5.
- 3) The alloys in solid-liquid's coexisting state failure in the strain range of 3~10% in uni-axial deformation.

(Manuscript received, October 16, 1973)

(p.20 よりつづく)

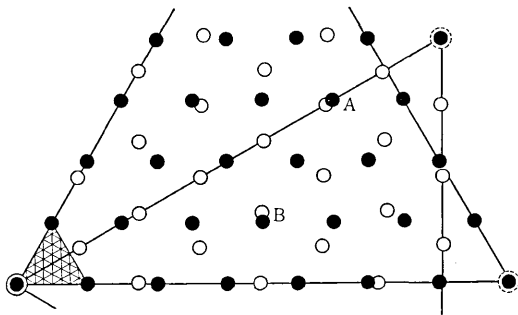


Fig. 2 $\sqrt{48.5}$ Quasi-coincidence relationship

Ashby⁹⁾らの実験は主にこれを調べている。この粒界は最稠密な $[1\bar{1}0]_A$ と二番目に網密な $[2\bar{1}\bar{1}]_B$ が平行になったため生じた準規則粒界と考えられるが、写真で示したように $[7\bar{7}0]_A$ と $[8\bar{4}4]_B$ との近似的一致が原因となって、同様な配列がひんばんにくりかえされていることがわかる。Fig. 2 はこれの対応関係図で図中左端に示したのがバーガースベクトル格子である。単位ベクトル $b^{GBD} = \frac{a}{49} [8\bar{4}4]_A$ (図中A) は大きな粒界階段をもつ

ためあまりみられず、かわりに $b^{GBD} = \frac{a}{8} [1\bar{1}0]_A$ が配列している。写真中央左側にある粒界階段は、Fig. 2 P の粒界転位 $b = \frac{a}{49} [4\bar{4}8]_A$ のものである。タングステンのイオン電界顕微鏡観察でこれに由来する準対応粒界が実際に観察された⁵⁾。(1973年10月11日受理)

参考文献

- 1) R. W. Balluffi and T. Y. Tan: Scripta Met. 6, 1033 (1972)
- 2) P. H. Pumph ey: Scripta Met. 6, 107 (1972)
- 3) B. Loberg and H. Norden: Acta Met. 21, 213 (1973)
- 4) J. Levy: Phys. Stat. Sol. 31, 193 (1969)
- 5) Y. Ishida and D. A. Smith: (to appear in Scripta Met.)
- 6) M. J. Weins and J. J. Weins: Phil. Mag. 26, 885 (1972)
- 7) 石田: 生産研究 25, 203 (1973)
- 8) Y. Ishida and M. McLean: Phil. Mag. 27, 1125 (1973)
- 9) M. F. Ashby: Surface Science 31, 498 (1972)