

立方晶金属における粒界転位バーガースベクトルの一般式

Burgers Vector Equations of the Boundary Dislocation in Cubic Metals

石 田 洋 一*

yoichi ISHIDA

粒界転位は規則粒界に生ずる線状欠陥である。このうち対応粒界上に生ずるものはそのバーガースベクトルをコインシデンス方位関係から一義的にきめることができる¹⁾²⁾。これまで実験的に個々の粒界転位についてそのバーガースベクトルを調べ同定する仕事はいくつか発表されているが³⁾、全てのコインシデンス方位関係について統一的にバーガースベクトルを調べたものはない。人工的に方位関係をきめて作成した双結晶の粒界はともかく、通常の多結晶試料中の粒界は種々の対応粒界が生ずるので、バーガースベクトルも全てのコインシデンス方位関係について計算しておく必要がある。計算方法としては、コインシデンス図による方法¹⁾のほかは Bollmann の定義した DSC 格子²⁾による方法、Bishop と Chalmers の原子配列単位による方法⁴⁾などが提唱されているが、ここでは、簡単でかつ付随する粒界階段の高さが明瞭にわかるコインシデンス図法を用いた。

粒界転位のバーガースベクトル b_{gb} は Fig. 1 に Σ 11 コインシデンス関係の例を示したが、この図中の格子点間の差ベクトルに一致する¹⁾。

$$b_{gb} = b_A^{(L)} - b_B^{(L)} \quad (1)$$

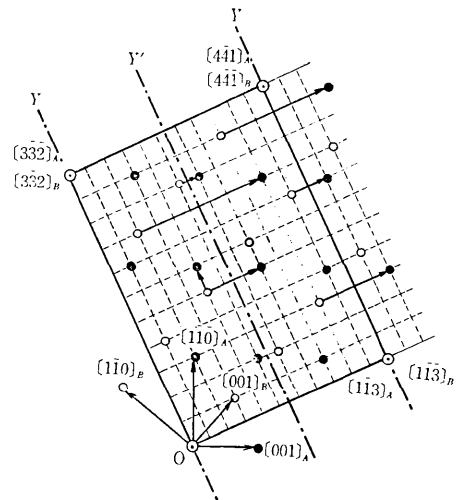


Fig. 1 Coincidence lattice plot (Σ 11)

ここで $b^{(L)}$ は A, B 各結晶の格子点の差ベクトルで、それぞれ格子転位の単位バーガースベクトルと同じあるいはその整数倍である。 b_{gb} は原点をきめて並べるとそれ自身格子をつくっており Fig. 1 に破線以示すよ

Table I Coincidence systems with {100} {110} and {111} rotation axes**

	Rotation*** angle (θ)	$h k l$	Σ		Rotation*** angle (θ)	$h k l$	Σ
Rotation about {100}	12.7	0 4 5	41	Rotation about {110}	16.1	5 $\bar{5}$ 1	51
	16.3	0 3 4	25		20.1	4 $\bar{4}$ 1	33
	18.9	0 1 6	37		22.8	1 $\bar{1}$ 7	51
	22.6	0 2 3	13		26.5	3 $\bar{3}$ 1	19
	28.1	0 1 4	17		31.6	1 $\bar{1}$ 5	27
	31.9	0 2 7	53		38.9	2 $\bar{2}$ 1	9
	36.9	0 1 2	5		44.0	2 $\bar{2}$ 7	57
43.6	0 2 5	29	46.5		5 $\bar{5}$ 3	59	
Rotation about {111}	9.4	3 4 $\bar{7}$	37		50.5	1 $\bar{1}$ 3	11
	13.2	2 3 $\bar{5}$	14		55.9	4 $\bar{4}$ 3	41
	15.2	1 6 $\bar{7}$	43		59.0	2 $\bar{2}$ 5	33
	16.4	3 5 $\bar{8}$	49		70.5	1 $\bar{1}$ 1	3
	17.9	1 5 $\bar{6}$	31		80.6	3 $\bar{3}$ 5	43
	21.8	1 2 $\bar{3}$	7		82.9	4 $\bar{4}$ 5	57
	27.8	1 3 $\bar{4}$	13	86.6	2 $\bar{2}$ 3	17	

** Σ up to 59 are listed.

*** The relation between the angle θ and the corresponding $[hkl]$ are determined graphically by Ranganathan's method.

* 東京大学生産技術研究所 第4部

Table II General equations of the unit burgers vector of the boundary dislocation
BCC structure

Rotation axis	unit burgers vector equations		
[100]	$\frac{a}{k^2+l^2} [0 \ k \ l]$	$\frac{a}{k^2+l^2} [0 \ l \ \bar{k}]$	$\frac{a}{2(k^2+l^2)} [k^2+l^2 \ k+l \ l-k]$
[110]	$\frac{a}{2(2h^2+l^2)} (h+l \ \bar{h}+l \ l-2h),$	$\frac{a}{2(2h^2+l^2)} [l+h \ h-l \ \bar{2h+l}],$	$\frac{a}{2(2h^2+l^2)} [2h^2+l^2+h \ 2h^2+l^2-h \ l]$
	$\frac{a}{2(2h^2+l^2)} (h \ \bar{h} \ l),$	$\frac{a}{2h^2+l^2} (l \ \bar{l} \ \bar{h}),$	$\frac{2}{2(2h^2+l^2)} (2h^2+l^2+l \ 2h^2+l^2-l \ 2\bar{h})$
[111]	$\frac{a}{h^2+k^2+l^2} (h \ k \ l),$	$\frac{a}{h^2+k^2+l^2} (k \ l \ h),$	$\frac{a}{h^2+k^2+l^2} (l \ h \ k)$
	$\frac{a}{6(h^2+k^2+l^2)} (h^2+k^2+l^2+4h-4k \ h^2+k^2+l^2+4k-4l \ h^2+k^2+l^2+4l-4h)$		
FCC structure			
Rotation axis	unit burgers vector equations		
[100]	$\frac{a}{2(k^2+l^2)} [0 \ k+l \ l-k],$	$\frac{a}{2(k^2+l^2)} [0 \ l-k \ \bar{k}+l],$	$\frac{a}{2(k^2+l^2)} [k^2+l^2 \ k \ l]$
[110]	$\frac{a}{2(2h^2+l^2)} (l \ \bar{l} \ \bar{h}),$	$\frac{a}{2h^2+l^2} (h \ \bar{h} \ l)$	
	$h \text{ even } \frac{a}{4(2h^2+l^2)} (2h^2+l^2+2h-l \ 2h^2+l^2+l-2h \ 2h-2l)$		
	$h \text{ odd } \frac{a}{4(2h^2+l^2)} (2h^2+l^2+l \ 2h^2+l^2-l \ 2\bar{h})$		
[111]	$\frac{a}{h^2+k^2+l^2} (h \ k \ l),$	$\frac{a}{h^2+k^2+l^2} (k \ l \ h),$	$\frac{a}{h^2+k^2+l^2} (l \ h \ k)$
	$\frac{a}{3(h^2+k^2+l^2)} (h^2+k^2+l^2+h-k \ h^2+k^2+l^2+k-l \ h^2+k^2+l^2+l-h)$		

うにコインシデンス格子を回転軸に垂直な方向（この場合、紙面に平行な方向）に $1/\Sigma$ に縮小した形状をもっている。ここで Σ はコインシデンス格子点密度と格子点密度の比の逆数である。図中、コインシデンス格子点の指標に用いた hkl は結晶格子を単位とした指標で、コインシデンス方位関係ごとに値がきまっている。Table I に [100], [110], [111] を回転軸とするものうち $\Sigma \leq 59$ 以下のものを記した。Fig. 1 に破線で示されるバーガースベクトル格子点全てに対して対応する格子点対がコインシデンス図中に存在することは次のようにして証明できる。

まず、結晶格子点をとおってかつ最近接コインシデンス格子点差ベクトル ($b_1(\Sigma)$) に平行な線をひく。同様な平行線を二番目に近接なコインシデンス格子点差ベクトル ($b_2(\Sigma)$) に平行にひく。最近接および二番目に近接なコインシデンス格子点からなる平行四辺形な単位コインシデンス格子が両辺とも Σ 個に等分割される。結晶格子点それぞれ Σ 個づつ単位コインシデンス格子中に規則的に分布するゆえこれは当然である。結晶格子点全てはこのサブ格子の格子点に存在するから格子点の差ベクトルであるバーガースベクトル (b_{gb}) は

$$b_{gb} = mb_1(\Sigma)/\Sigma + nb_2(\Sigma)/\Sigma \quad (2)$$

で示される。 $b_{1,2}(\Sigma)$ はそれぞれ最近接、二番目に近接なコインシデンス格子の差ベクトルである。 m, n は整数でゼロも含まれる。次に m, n として全ての整数が含まれること、すなわちこのサブ格子点全てに対応する差ベクトルがコインシデンス図中に存在することを証明する。まず単位ベクトル $b_1(\equiv b_1(\Sigma)/\Sigma)$ および $b_2(\equiv b_2(\Sigma)/\Sigma)$ の存在は図中 Y, Y' 軸にみられる鏡面对称関係から容易にわかる。 (100), (110), (111) 三面については直方形格子が書けるのでこのような鏡面对称関係が存在する。次にこの二つの単位ベクトルに等しい並進操作をコインシデンス図中で考える。コインシデンス格子点かわるだけで、もともと全く同様なコインシデンス図ができあがる。これを繰り返して任意の mn に相当する並進操作をしてもコインシデンス格子点が生ずることから、コインシデンス図中のどこかに必ず対応する結晶格子点差ベクトルが存在することが証明される。

以上は回転軸に垂直なバーガースベクトルに関する解析であるが回転軸に平行な成分をもつもの b_3 は、まず回転軸に垂直な成分 b_3^* を上と同様にして解析し、これに平行成分を加えてやればよい。

$$b_3 = b_3^* + d \quad (3)$$

ここで d は回転軸に垂直な原子面の間隔である。考慮すべき原子面の数は回転軸や結晶系により異なるが体心、面心立方晶の場合〔100〕〔110〕は二原子面、〔111〕は三原子面考察すればよい。

Table II は解析結果で、金属に一般的な体心立方晶と面心立方晶につき、 b_{10} の単位ベクトル三種 ($b_1 b_2 b_3$) を示したものである。回転軸としては〔100〕、〔110〕、〔111〕軸の三種を示したが、重要なコインシデンス関係はほとんど全てこのどれかで示される。Table I の (hkl) 値をこれに代入すれば直ちに値が計算できる。この式だけではバーガースベクトル格子の形状がわかりにくいので次に列挙する。

まず〔100〕軸回転の場合、バーガースベクトル格子は全て $\Sigma^{-1}(0kl)$ 、 $\Sigma^{-1}(0l\bar{k})$ 、〔100〕の三単位軸をもつ正方晶で結晶格子が単純、体心、面心立方晶のときそれぞれ、単純、体心、面心正方晶となる。次に〔110〕軸のまわりに回転する場合、バーガースベクトル格子は、いずれも斜方晶で単純立方結晶のとき $\Sigma^{-1}(h\bar{h}l)$ 、 $\Sigma^{-1}(l\bar{l}2\bar{h})$ 、〔110〕の三単位軸をもち ($h\bar{h}l$) を底面とする底面心斜方晶。体心立方結晶では少し複雑で h が偶数のときは $\Sigma^{-1}(h\bar{h}l)$ 、 $\Sigma^{-1}(l\bar{l}2\bar{h})$ 、〔110〕を単位軸とする面心斜方晶、 h が奇数のときは $(2\Sigma)^{-1}(k\bar{h}l)$ 、 $\Sigma^{-1}(l\bar{l}2\bar{h})$ 、〔110〕を単位軸とし ($l\bar{l}2\bar{h}$) を底面とする底面心斜方晶となる。最後に面心立方結晶の場合、三軸を $\Sigma^{-1}(h\bar{h}l)$ 、 $(2\Sigma)^{-1}(l\bar{l}2\bar{h})$ 、 $1/2(110)$ とする体心斜方晶 (h 偶数) あるいは ($l\bar{l}2\bar{h}$) 面を底面とする底面心斜方晶 (h 奇数) となる。これに対し〔111〕軸まわりの回転のとき、結果は比較的簡単で全て〔111〕軸を三回対称軸とする菱面体晶となる。〔111〕軸の長さは、単純、面心立方結晶の場合 $\sqrt{3}$ 、体心立方晶のとき $\sqrt{3}/2$ である。〔111〕軸に垂直な粒界転位バーガースベクトルは、面心立方結晶では $\Sigma^{-1}(hkl)$ 、 $\Sigma^{-1}(klh)$ 、 $\Sigma^{-1}(lkh)$ 、単純および体心立方結晶の場合この2倍の大きさになる。

いずれの場合にも粒界転位の単位バーガースベクトルの大きさは回転軸に垂直な方向にはそれほど差はない。 b_1 と b_2 の比が一番大きいのは〔110〕回転の場合で、体心立方結晶で h が奇数のコインシデンス関係のとき、 $b_2 : b_1$ は $2\sqrt{2} : 1$ である。Fig. 1 に示した $\Sigma 11$ は単純立方晶の場合であるが体心立方結晶のときは b_1 と b_2 の差が大きい。鉄やタングステンの粒界では $\Sigma 11$ 対応粒界がよくみられるが粒界面がこの稠密方向に平行な場合が多く見出されている⁵⁾⁶⁾。一方回転軸方向に関してはバーガースベクトル格子はかなり細長い。とくに Σ が大きいとき甚しい。回転軸に垂直なもの (b_1, b_2) は大きさが $\Sigma^{-1/2}$ に比例して縮少するが、平行な成分をもつ

もの (b_3) は d に近づくにすぎないからである。たとえば $\Sigma 31$ 、〔(111) 軸のまわりに 17.9° 回転〕の場合、面心立方結晶では格子転位 (b_L) との比は $|b_1/b_L|=0.18$ 、 $|b_3/b_L|=0.82$ で4倍以上の差がある。このことから考えて透過電顕で多結晶中にみられた対応粒界に観察された粒界転位⁷⁾ はバーガースベクトルが b_3 タイプのものであったと考えられる。事実、人工的に方位をコインシデンス方位にあわせて作成した金の双結晶の透過観察では b_1, b_2 型の転位像は b_3 のそれに比してはるかに弱かった³⁾⁸⁾。

本解析で得られたバーガースベクトルは転位の両側で同様な周期規則構造の存在するもの、すなわち完全粒界転位のバーガースベクトルである。両側で原子配列が異なり片方が積層欠陥に相当する場合、粒界転位は不完全転位または部分転位でそのバーガースベクトルには両側の周期構造の格子点コインシデンス位置関係からのズレ成分が加わっている。このため上記コインシデンス図からは一義的にバーガースベクトルを決めることができない。

粒界転位はまた対応粒界以外の規則粒界にも生ずる。規則粒界としては、稠密原子面の一致した粒界⁹⁾、稠密原子面に平行な粒界¹⁰⁾¹¹⁾などがあり、それぞれに異なった性格の粒界転位が考えられる。たとえば前者は周期規則性が稠密原子面に垂直な方向にのみ保存されたような部分的規則粒界なので粒界転位のバーガースベクトルとしては上述したもののうち $b_3(=d)$ だけが存在する場合と考えることができる。これはバーガースベクトルに関しては、対応粒界において Σ を無限大にしたものと同様である。

今後、これら規則性の異なる粒界についてそれぞれ粒界転位のバーガースベクトルを解析し、これの粒界すべりや移動にはたす役割を考察する。

(1972年11月27日受理)

参考文献

- 1) Y. Ishida: Trans. J.I.M. 11, 107 (1970)
- 2) W. Bollmann: Crystals Defects and Crystalline Interfaces, Springer (1970).
- 3) T. Schober and R. W. Balluffi: Phil. Mag. 21, 109 (1970), and 24, 165 (1971), and Phys. Stat. Sol. (b) 44, 115 (1971).
- 4) G. Bishop and B. Chalmers: Phil. Mag. 24, 515 (1971).
- 5) D. G. Brandon, B. Ralph, S. Ranganathan and M. S. Wald: Acta Met. 12, 813 (1964).
- 6) 石田, D. A. Smith: 日本金属学会電界イオン顕微鏡シンポジウム講演 (昭和47年10月).
- 7) Y. Ishida, T. Hasegawa and F. Nagata: J. Appl. Phys. 40, 2182 (1969).
- 8) T. Schober: Phil. Mag. 22, 1063 (1970).
- 9) 石田: 生産研究, 25, 17 (1973).
- 10) Y. Ishida: J. Mat. Science 7, 72 (1972).
- 11) M. F. Ashby: Surface Science 31, 529 (1972).