

# 対応粒界のあわ模型

Bubble Raft Model of Coincidence Grain Boundary

石 田 洋 一\*

Yoichi ISHIDA

泡模型は水面に石けんの泡をたくさん並べたものには似ないが金属結晶の原子配列を直観的に理解するには便利な模型であり、かなりよく金属結晶の物性を示すものとして古くから用いられてきたものである<sup>(1)(2)</sup>。写真1はこの泡模型で大傾角結晶粒界をつくった1例である。泡の寸法により泡が大きいときは原子同志の斥力の勾配のゆるやかな、いわゆる“軟かい”結晶に相当し、小さい泡は斥力勾配の大きい“硬い”結晶を示すが、泡の半径が1.2 mm 程度るとき銅結晶の結合状態と似ているとされている<sup>(3)</sup>。今日ではイオン顕微鏡で原子の位置を見ることができ、最近ではコンピューターを用いてエネルギー計算から原子配列を推定する研究も盛んである。だから今さら泡模型をかつぎだす必要があるかという議論もあるが、イオン顕微鏡では試料表面にある原子のすべてがみえているわけではないという欠点があるし、コンピューターの計算ではもともとなる擬ポテンシャルに疑問がある。結局、粒界構造について考えつかないような原子配列までを容易に現出させ、安定な粒界構造に関する定性的な情報を手っとり早く与えてくれる点で泡模型はまだまだ有用である。とくに予算のない研究室には便利である。

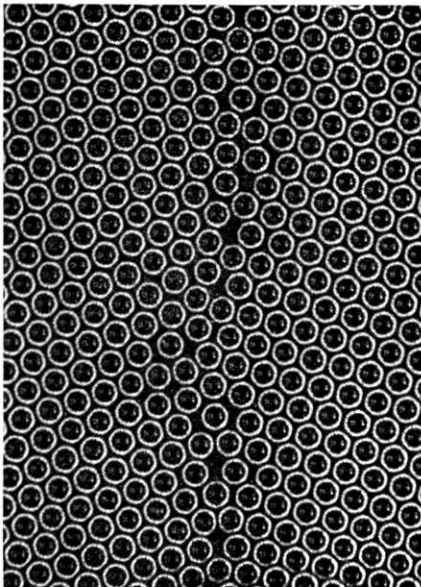


写真1 大傾角粒界泡模型の1例

泡模型の欠点、すなわち実際の結晶粒界とのちがいの第一は次元が一つ足りないことであろう。そのため粒界転位としては刃状転位しか存在し得ないし、粒界の種類にしても面心立方晶の〔111〕軸（稠密六方晶ならば〔0001〕軸）のまわりの回転関係をもつ粒界しか観察できないという制限がある。つぎに問題なのは泡模型は静止状態では熱振動がないために、いわば0°Kの結晶状態を示していることである。これは液に振動を与えることによってある程度解決された<sup>(2)</sup>が振動するのはあくまで水であって泡ではなく、振動数(90 cycle/sec)が原子の熱振動(10<sup>13</sup> cycle/sec)にくらべけた違いに小さいためか空孔の移動がほとんど観察されない。したがって得られた粒界は熱平衡状態にないといえる。実際の金属の結晶粒界は焼鈍状態では写真1などでみられるよりは、もっとずっと規則性のよい原子配列をしているものと考えてよいであろう。

筆者はこれまで対応方位関係をもつ粒界に関する研究をおこなってきたが<sup>(4)(5)</sup>、これは粒界に規則構造が存在する必要条件だけに着目した理論であって、粒界における原子配列の実際に関する考慮はされていない。しかし、粒界規則構造が存在するための必要条件である界面エネルギー値などは直接原子配列まで考慮しなければ正しく計算できないのは当然である。そこで、まづ手はじめとして泡模型を用いて考察しようとおもい学習院大学大川教授に泡模型の写真を大量に貸していただきそのなかで規則構造をもつものを調査した結果がこの報告である。文中であるが早く泡模型の写真を貸して下さった大川教授の御厚意に深く感謝します。

写真2, 3はこれら写真によくみられた規則粒界の例である。粒界をはさんで両側の結晶方位は〔111〕軸のまわりにそれぞれ21.8°, 27.8°回転した関係にありそれぞれ $\Sigma 7$ ,  $\Sigma 13$ なる対応粒界である。図1にそれぞれの原子配列を図示した。これは模式的に書いたもので原子の厳密な位置はその元素のポテンシャルのかたちによりある程度変化しているはずである。粒界線にそった原子配列の繰りかえしの周期はどの金属でも対応格子間隔に等しいであろうがその他の値は金属がちがえば異なるであろう。たとえば両側の結晶は一般にはお互いに粒界に垂直な方向にずれておりその結果双方の格子を仮想的に延長して重ねあわせてみると対応格子点が存在してい

\* 東京大学生産技術研究所 第4部

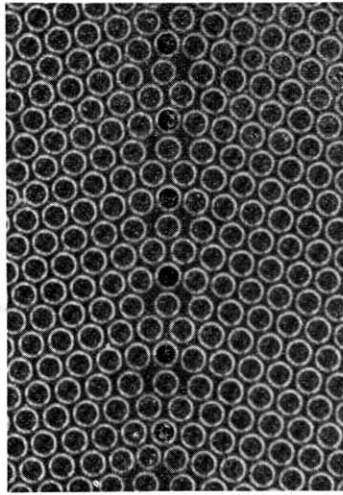


写真 2  $\Sigma 7$  対応粒界の泡模型 (振動状態)

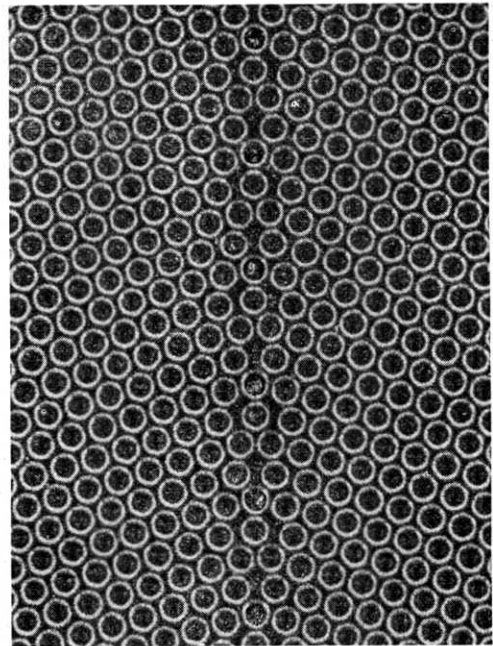


写真 3  $\Sigma 13b$  対応粒界の泡模型 (振動状態)

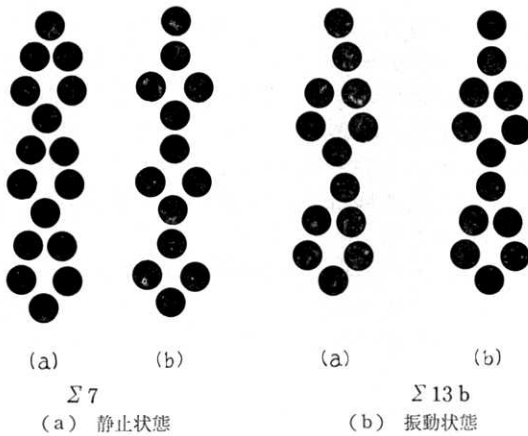


図 1  $\Sigma 7$ ,  $\Sigma 13b$  対応粒界の原子配列

ないものと考えられる。しかしこのずれは方位関係の解析には影響しないから対応方位関係は満足されている。影響ができるのは粒界が曲っているときで、二種類以上の対応粒界が複合して粒界ができあがっている際には粒界の曲り角に歪みを生じ全体として界面エネルギーを増加させることが考えられる。興味深いのはこれら粒界構造は液が振動状態のときと静止状態のときで異なっていることである。このことは当然期待されたことで高温ではエントロピー項の大きい構造が相対的に安定になるのであるから原子は当然自由度の大きい配置をとるものと期待される。図 1,  $\Sigma 13b$  (a)→(b) で黒点で印した泡が中央粒界線上に移動したのはこれに相当する変化と考えられる。 $\Sigma 7$  対応粒界でも写真例を比較すると  $\Sigma 7$  (a) の構造は静止状態のときに多く存在し (b) の構造は振動状態のときに多い。ただし、この場合には粒界上の原子数が 1 個変化するので変態には原子拡散が必要である。だからそれが十分おこなわれていないときには高温なり低温なりの粒界構造がそのまま残存している場合が

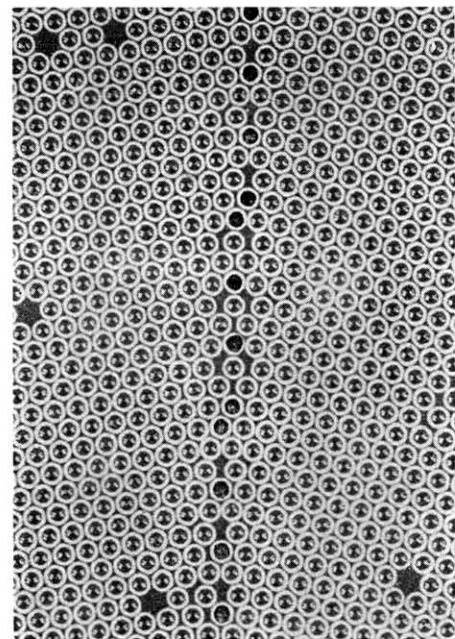


写真 4  $\Sigma 7$  対応粒界 (静止状態) にみられる粒界転位とそれに付随する粒界階段空孔も 5 個みえている

あり得る。写真 4 はこの例と考えられる。 $\Sigma 7$  粒界が三つの部分にわかれて連らなっているが中央部は高温状態の構造をそのまま残している。ここで三つの領域の間に二つの粒界階段があるがこれは実は粒界転位がここにあるからである。(泡模型にみられる粒界転位については

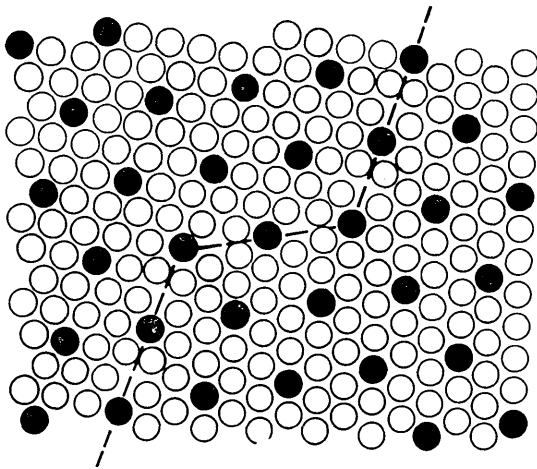


図 2 対応粒界の巨視的方向が対応格子点密度の高い面からずれている場合に生ずる粒界階段または粒界のジグザグ形状

後続する速報参照) 粒界階段は図 2 で示すように粒界面が対応格子点 (図の黒丸) 密度の高い面からとなりの面へ移動するときにも生ずるが、写真 4 では対応格子点をプロットしてみるとくいちがいが生じていることがわかる。したがってこれは別種の粒界階段であり後続の速報で説明するように粒界転位に付随したものである。粒界に転位がはいっているのであるから写真 4 の結晶全体に歪がはいっている。  
(1970 年 2 月 25 日受理)

文 献

- 1) W. L. Bragg, J. F. Nye; Proc. Roy. Soc. A **190**, 474, (1947)
- 2) E. Fukushima, A. Ookawa; J. Phys. Soc. Japan **8**, 609, (1953), **9**, 44 (1954), **12**, 139, (1957)
- 3) W. M. Lomer; Proc. Roy. Soc. A **196**, 182, (1949)
- 4) Y. Ishida, T. Hasegawa, F. Nagata; J. Appl. Phys. **40**, 2182, (1969)
- 5) 石田; 日本金属学会誌 **33**, 1129, (1969)

正 誤 表 (3 月号)

ページ	段	行	種 別	正	誤
3	右	上 2	本文	$\alpha$ -炭素	$\alpha$ -炭素上
"	"	下 5	"	ニトロンの場合には	ニトロンの場
"	"	下 3	"	合には をとる	
7	左	下 1	"	木炭	本炭
"	右	上 3	"	木炭	本炭
25	"	下 1	"	図 5 $\bar{\omega}_n$ を $\omega_n$	図 5 $\bar{\omega}_n$ を $\downarrow\omega_n$
表 3			筆者紹介	小嶋英一 ( ) 元大学院生	小嶋英一 ( ) 研究員

正 誤 表 (4 月号)

ページ	段	行	種 別	正	誤
10	左	下 7	本文	the 2 nd	2 nd
"	"	下 2	式	$z_b(t) = \int_0^t \bar{h}_b(t-\tau) [-\alpha_r(\tau)] d\tau$	$z_b(t) = \int_0^t \bar{h}_b(t-\tau) [-\alpha_r(t)] d\tau$
12	"	下 6	本文	numerical	nmerical
20	右	上 7	"	2.70	2.3
21	"	"	図 4 (b)	<chem>ClCH2CH2CCl2CH2CH2Cl</chem>	<chem>COCH2CH2CCl2CH2CH2Cl</chem>
37	左	上 14	本文	鈴木・鈴島のモデルを	鈴木・鮫島のモデルを