

金属結晶における高次の対応粒界

High Order Coincidence Boundaries in Metal

石 田 洋 一*

Yoichi ISHIDA

前報¹⁾において対応粒界の普遍度を調べ報告したが Σ 21以上の高次の対応粒界を考慮に入れないかぎり鉄マンガン合金の粒界のすべてを対応粒界で説明することができないことが判明した。でははたしてそのように高次の対応粒界が存在可能であるかどうか原子配列の状態から検討したのがこの報告である。

簡単のために $[1\bar{1}0]$ 軸回転で説明できる対応関係について解析する。前報¹⁾の図 2 (b) において Σ 43 ぐらいのものまで考慮すると回転角のほとんど全域にわたって対応関係にもとづいた粒界として説明できることを見いだしたが今回はさらにその数をふやして Σ 59 までを考慮する。Table I はこのような対応関係を回転角度順に並べそれぞれについて対応格子点密度のたかい粒界面を表示したものである。表中下に直線をひいたものがその対応関係で対応格子点密度が最高の粒界面である。下に破線をひいたものは実際に原子配列を検討した結果直線をひいた粒界面より界面エネルギーがひくいと考えら

Table I. densely packed planes of coincidence sites in rotations about $[1\bar{1}0]$

rotation angles ϕ (degrees)	type of coincidence Σ	planes perpendicular to $(1\bar{1}0)$		planes are not perpendicular to $(1\bar{1}0)$
		planes of the adjoining grains are the same type	mixed type planes	
16.1	51 a	(1 1 10) (5 5 1)	(3 3 4) (11 11 8)	
20.0	33 a	(1 1 8) (4 4 1)	(7 7 10) (3 3 2)	
22.8	51 b	(1 1 7) (7 7 2)	(3 3 4) (8 8 5)	
26.5	19 a	(1 1 6) (3 3 1)	(5 5 8) (7 7 4)	
31.6	27	(1 1 5) (5 5 2)	(4 4 7) (6 6 3)	
38.9	9	(1 1 4) (2 2 1)	(1 1 2) (6 6 3)	(121)
44.0	57	(2 2 7) (7 7 4)	(5 5 11) (3 3 1)	
45.9	59	(3 3 10) (5 5 3)	(7 7 16) (13 13 4)	
50.5	11	(1 1 3) (3 3 2)	(1 1 8) (5 5 4)	
56.0	41	(3 3 8) (4 4 3)	(5 5 14) (11 11 2)	
59.0	33 b	(2 2 5) (5 5 4)	(1 1 14) (3 3 2)	
70.5	3	(1 1 2) (1 1 1)	(1 1 4) (1 1 0)	(121) (110)
80.6	43	(3 3 5) (5 5 6)	(1 1 16) (11 11 4)	
86.6	17 b	(3 3 4) (2 2 3)	(1 1 10) (7 7 2)	

れた面である。

これら粒界面について対応格子点あたりの粒界面積 S

を格子常数 a の二乗を単位

として表示したのが Fig. 1

である。 $[1\bar{1}0]$ 軸回転で

表示できる対応関係だけ表示し

たものであるが一般的傾向は

これだけで十分わかる。 Σ の

増加にともない S はほぼ一

貫して増加していることがわ

かる。ただし Σ が大きくな

るにしたがい S の増加傾向

は弱まる。Haynes, Smoluc-

howski²⁾ は鉄シリコン合金に

ついて同様に $[1\bar{1}0]$ 軸回転

の場合の原子配置を調べてい

る。それによると Σ のかなり

大きい粒界も原子配列の点

で十分存在可能であること、

その界面エネルギーは必ずし

も Σ 値の大小によらないこ

と、などが結論される。この

解析はしかし 1 原子面しかと

りあつかわなかった点で不十分である。体心立方格子は

$[1\bar{1}0]$ 軸方向に関し ABAB 型の積み重なりをしている

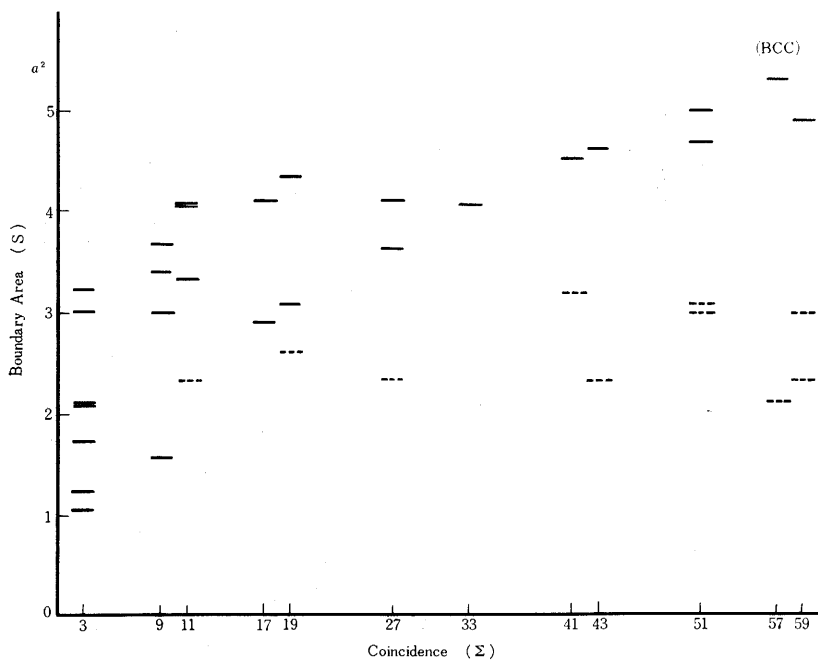


Fig. 1 a densely packed plane of coincidence-sites in a Σ 43 boundary. The atomic fitting is good although Σ number is high.

* 東京大学生産技術研究所 第 4 部

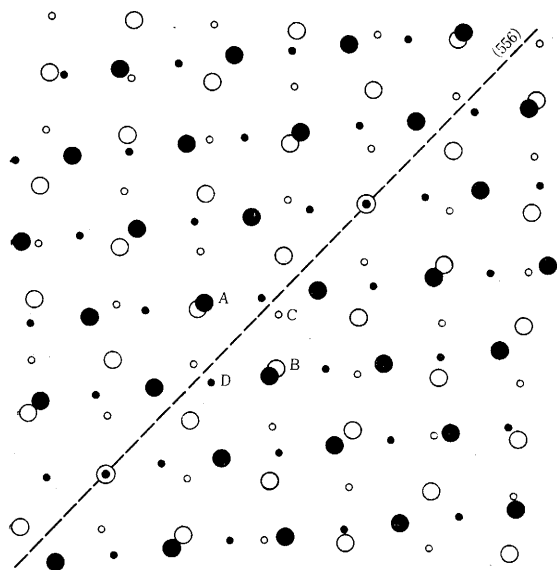


Fig. 2 Boundary Area per Coincidence Site for important Coincidence Boundaries

ため二原子面を取扱わなければならない。Haynes, Smochowski の Table. I では粒界の対応度のよさを同一面上の対応格子点間の距離 δ で表示しているが、 δ は S とちがい Σ 値との相関はよくない。たとえば $\Sigma 19$ は δ 値がこの種の δ のうちで3番目に小さく $\Sigma 3$ の δ のうち2番目に小さいものよりむしろ小さいことが示されている。したがって δ 値は粒界エネルギーの目安としては不適当であることがわかる。

S 値が $3a^2$ 程度より大きい粒界は界面エネルギーがランダム粒界のそれとあまりちがわないことが予想される。Brandon ら³⁾が $\Sigma 19$ までしか考慮しなかったのはこのことが理由であると考えられる。ところが Fig. 1 で破線で示したように対応度が比較的良好な粒界が高次の Σ でも発生する。このレベルは粒界面近傍での原子の幾何的配置を検討した結果評価された値である。たとえば

Fig. 2 に示したのは $\Sigma 43$ 粒界の原子配置である*1 が破線で示した対応粒界 (556) 上の対応格子点密度はたしかにひくい(対応格子点あたりの粒界面積 $S=4.62a^2$)。しかし図中 A や B で示した格子点对はほとんど重複しているので対応格子点とほぼ同じ状況にあると考えることができよう。同様に C や D も粒界をはさんでたがいに近接しており結局 ABCD によってかこまれた領域はエネルギー的にあたかも対応格子点があるかのように適合していると考えることができよう。(擬対応格子点)*2 とすると、エネルギー的にはこの粒界は対応格子点あたりの粒界面積 S が $2.3a^2$ 程度の粒界に匹敵すると考えてよいであろう。このようにして評価したものが Fig. 1 や Table I に破線で示したレベルである。 Σ が大きくなるほどこのような擬対応格子点がふえ破線で示したようなレベルが存在するようになる。この種の擬レベルの S 値は Σ が増大するにしたがい、しだいに増加してランダム粒界のそれに近づくとつである。だから限無に大きい Σ まで擬レベルの解析をすすめる必要はない。Fig. 1 ではまだその傾向があらわれていないがそれはここで取扱った Σ がまだ十分大きくないためと考えられる。銅において $\Sigma 39$ なる高次の対応粒界が存在したことが実際に報告されている⁵⁾。これはこのような擬対応格子点の効果によるものと考えられる。实在粒界の解析にあたってはこのような高次の対応粒界も考慮にいれる必要がある。

(1969年6月26日受理)

文 献

- 1) 石田, 長谷川: 生産研究, **21**, 148 (1969)
- 2) C. W. Haynes, R. Smoluchowski: Acta Met. **3**, 130 (1955)
- 3) D. G. Brandon et al.: Acta Met. **12**, 813 (1964)
- 4) W. Bollmann: Phil. Mag. **15**, 363 (1967)
- 5) M. L. Kronberg, F. H. Wilson: Trans. AIME **185**, 501 (1949)

*1 Fig. 2 において白丸黒丸はそれぞれ隣接する結晶の格子点を示す。白丸黒丸を重複させたのは粒界面の位置を理解しやすいように工夫したもので粒界面がいったんきまればその面より片側は白丸のみ反対側は黒丸のみ実在する。ここで大丸は紙面上にのっている格子点を示し、小丸はそれより一原子面上または下の面にのった格子点を示す。体心立方晶は上述したように [110] 軸方向に ABAB 型積み重なりをしているため二原子面を表示すればすべての原子を表示したことになる。二重丸は対

応格子点である。粒界が対応格子点を高密度に含むとき界面エネルギーは節約されて適合度のよい粒界になっていると考えられる。粒界近傍では原子の実際の位置は格子点位置よりずれていてたとえば図中 A や B では白丸と黒丸格子点の midpoint のあたりに原子が存在すると予想される。

*2 擬対応格子点は、このような場合には Bollmann のゼロ格子点のうち対応格子点でないもの (Cross point) と同等である。