講 義 ノ ー ト

# 結晶転位論の基礎
# —点欠陥と転位の相関— II
# ～刃状転位とらせん転位～

蔵 元 英 一*

(前稿からの続き)

## 2. 刃状転位とらせん転位

### 2·1 転位線と格子間原子

刃状転位は，通常すべり面の上方に，余剰原子面(extra-half-plane)が存在する形態として知られており，通常この余剰原子面を分解して考えることはない．一方，照射による格子間原子(クラウディオン)の平面状集合体が，サイズを増大させた極限も刃状転位であるが，その場合には，余剰原子面を構成する個々のクラウディオンを，常に意識しながらものごとを考えることになる．さらに，格子欠陥という共通の土台の上でものごとを考える立場からは，この見方の方が一貫性がある．もちろん，クラウディオンの性質は，転位の中心からの距離が増大するとともに，変質して次第に完全結晶へと近づくことを，常に意識していなければならない．

この刃状転位の転位線の方向を変えていくと，らせん転位に近づいていくが，この刃状転位かららせん転位への変化の様子を，点欠陥の立場，すなわち，クラウディオンの状態の変化からみることは非常に重要である．この辺の事情を**図2·1**，**図2·2**に示している．クラウディオンの集積を半分に分けて，逆方向に試料の端まで移動させることにより，らせん転位を形成することができる．途中で止めれば混合転位になる．このことは，刃状転位からクラウディオンの性質，すなわち点欠陥性を一掃したものがらせん転位であるということを示している．いいかえれば，らせん転位はクラウディオンの性質を失った極限の特異点である．刃状転位は，移動しやすいクラウディオンの性質を保有しているが，これを失ったものがらせん転位であり，パイエルス応力の大きさに反映している点は重要である．この過程の中間に，図2·2に示すような混合転位が存在するが，この場合は構成しているクラウディオンの間隔が，刃状転位の場合よりも遠くなっているが，クラウディオンの性質を残している点では，刃状転位と同じである．刃状転位の運動はよく，‘しわ伸ばし’に例えて表現されるが，それを用いてらせん転位に移行する過程を**図2·3**に模式的に示す．すなわち，しわを半分に分けて反対方向に移動した極限がらせん転位である．これらの模式的説明の中で，意識しなければならないのはクラウディオンの性質はすべり面から離れるに従って変質しており完全結晶に近づいていること，すなわち，図2·1，2·2に示す移動の結果，表面に段差が形成されるのは，もと刃状転位のすべり面，図の水平方向だけであり，図の垂直方向には形成されない．らせん転位が特異点であるという認識は，格子欠陥の従来の分類法に影響を与えるものである．すなわち，形態学的観点から，点欠陥，線状欠陥という分類をこれまで行ってきた．しかし，その構成要素であるクラウディオンを意識するならば，点欠陥(クラウディオン)，転位ループ，刃状転位を一つのグループ(族，ファミリー)として，らせん転位は，別グループに所属する方が自然である．

### 2·2 刃状転位，転位ループのパイエルス応力

刃状転位のパイエルス応力の大きさに関しては，古くから

* 九州大学名誉教授，非常勤：(1)九州大学キャリア支援センター・コーディネータ，(2)福岡大学工学部非常勤講師(〒813-0025 福岡市東区青葉 5-15-8)
Fundamental Aspects of Crystal Dislocation Theory II—Correlation between Point Defect and Dislocation— 2. Edge Dislocation and Screw Dislocation; Eiichi Kuramoto(Emeritus Professor in Kyushu University, Fukuoka)
Keywords: *edge dislocation, screw discation, crowdion, lattice resistance, Peierls–Nabarro model, Peierls stress, fcc crystal, bcc crystal, Vitek representation*
2008年1月6日受理

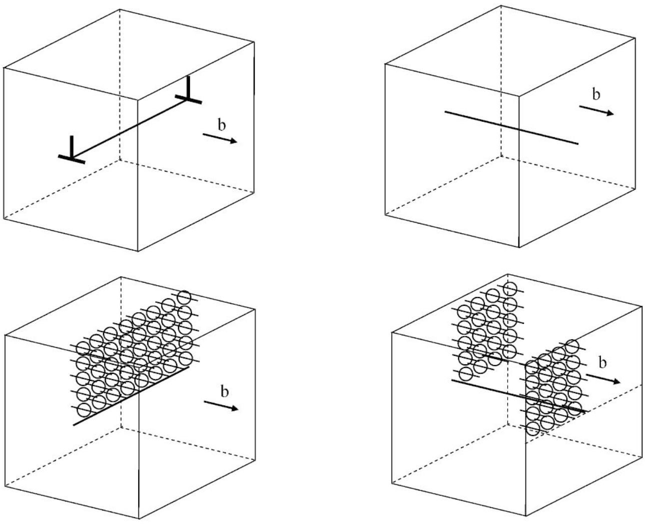


図2･1　刃状転位(左)，らせん転位(右)とクラウディオンの集合体との関係.

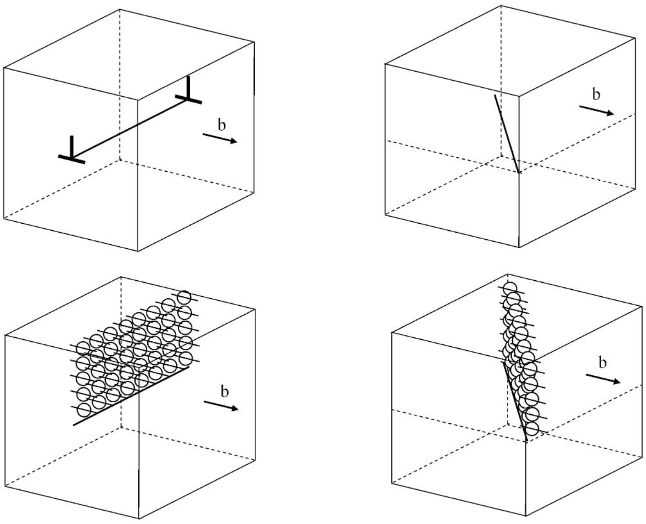


図2･2　刃状転位(左)，混合転位(右)とクラウディオンの集合体との関係.

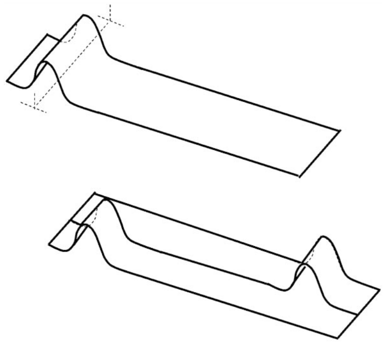

図2･3　刃状転位(上)，らせん転位(下)とじゅうたんのしわ伸ばしとの関係の概念図.

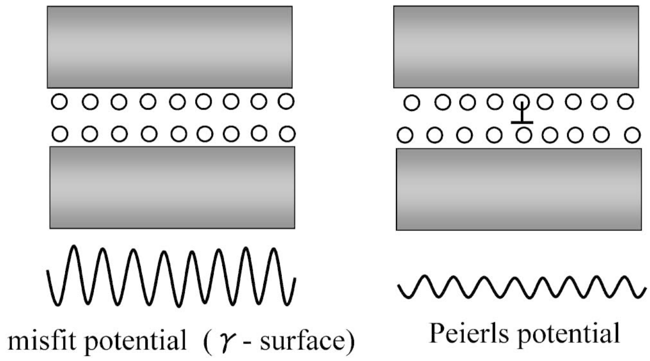


図2･4　パイエルス・ナバローモデル(Peierls–Nabarro Model).

研究がなされている．パイエルス・ナバローモデル(Peierls–Nabarro Model)などが有名であり，解析的な答えを出すことに留意している．これに対して現代では，計算機の性能が著しく向上しており，モデル結晶中に刃状転位を導入して，外部せん断応力下でのすべり運動を詳細に追跡するという手段をとるが，この方法では得られた結果と，結晶の性質の因果関係が容易には理解されない．図2･4にパイエルス・ナバローモデルによる解析を簡単に図示する．解析的に問題を解くには，結晶構造を可能な限り単純化する必要があり，すべり面の上下の2枚の原子面のみを格子として扱い，その他の部分は連続体として扱う．図中の左が完全結晶であるが，2枚の原子面は，本来この結晶が有しているポテンシャルで結びついている．この結晶中に図中の右に示すように刃状転位を導入し，そのすべり運動に対するパイエルス応力を解析的に求める．その結果，パイエルス応力の大きさを決定する主要因は，すべり面上下の2枚の原子面の相互のずれに対するポテンシャルの大きさ，いわゆるミスフィットエネルギー(misfit energy, $\gamma$–surface)の大きさであるという結論が得られた．このことは，転位を導入する前の完全結晶の性質そのものが，刃状転位のパイエルス応力の大きさを決定していることを意味している．

これに対して本稿では，刃状転位は格子間原子(クラウディオン)の集合であるという見方，すなわち転位の点欠陥性について述べてきたが，この刃状転位のパイエルス応力の大きさに関しても，点欠陥性の立場から考えてみることは意味のあることである．この立場からパイエルス応力を考えるに当たり，刃状転位，転位ループ，格子間原子(クラウディオン)は，図1･5に示すように，せん断応力に反応して動く，いわば，シアファミリー(shear family)であることの認識がその基礎になる．通常，パイエルス応力という言葉は，直線状の転位に対してのみ用いられるが，これを，転位ループ，クラウディオンへ拡張しても本質を外れるものではない．もちろん，格子抵抗という言葉は一般的に使用されており，この表現なら何も問題ない．したがって，図1･12, 1･13に示すようにせん断応力をかけて，モデル結晶中で直線状刃状転位のみならず，種々の大きさの転位ループに対しても，格子抵抗，すなわち，パイエルス応力を測定する．この際，転位が

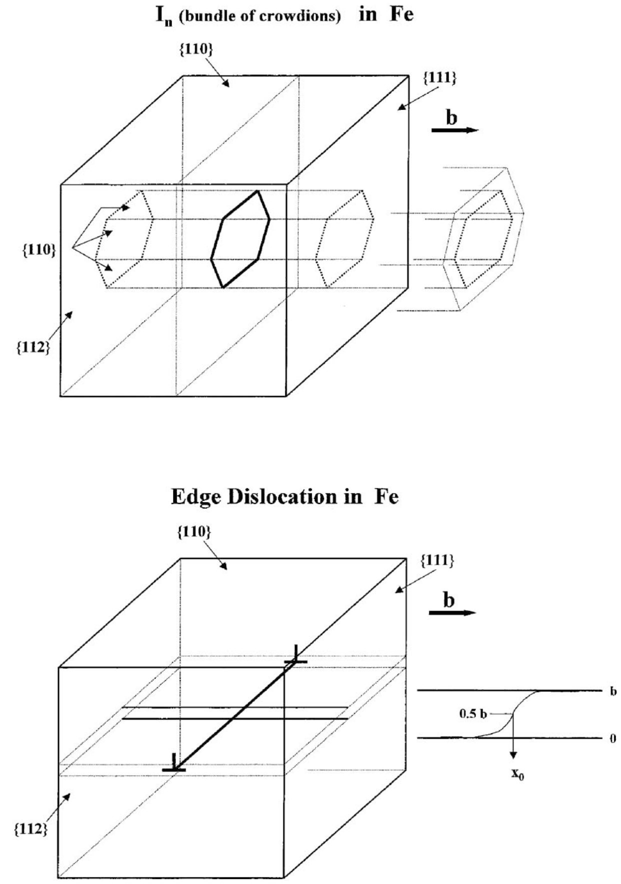


図2·5　転位ループの全周に沿って転位の中心の決め方.

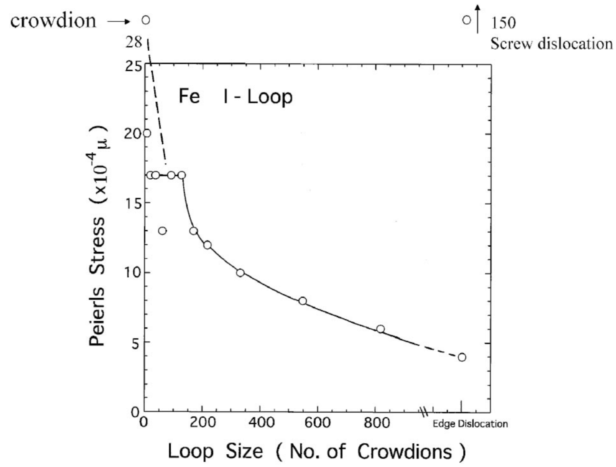


図2·6　転位ループから刃状転位に至る過程でパイエルス応力の計算値の変化：6角形ループの場合.

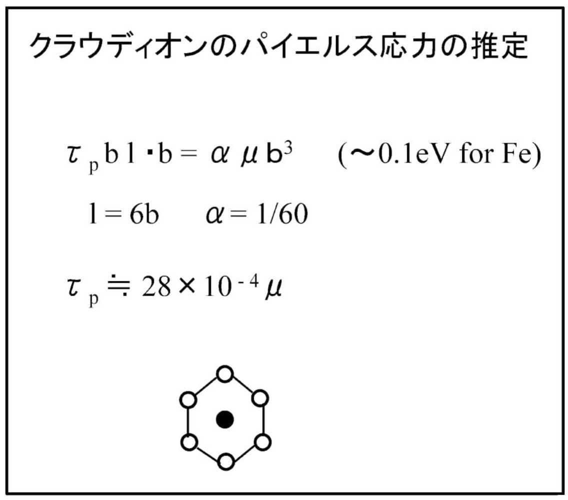


図2·7　クラウディオンのパイエルス応力の評価(鉄の場合).

移動したかどうかは，転位芯の中心位置を決定しながら観察しなければならない．転位芯の中心は，**図2·5**に示すように，すべり面上下の変位が b/2 になるところで決定する．6角形の転位ループの場合には，ループを囲む6角柱を2枚考え，その間の変位を求める．これは直線状の刃状転位に対する場合とまったく同じである．6角形でない転位ループに対しても同様にする．

このようにしてパイエルス応力が，直線状刃状転位から，転位ループ，格子間原子(クラウディオン)へと，どのように変化するかを調べることは，刃状転位のパイエルス応力の大きさの由来を，その最小構成員である格子間原子(クラウディオン)の特性と結びつけることを意味する．すなわち，パイエルス・ナバローモデルのように，刃状転位のパイエルス応力の大きさを，完全結晶の性質との関係で考える過程において，その途中にもう一つ段階を設けたことになる．さらにいいかえれば，単一クラウディオンと，その集合体の最終極限である直線状刃状転位とは，格子抵抗の大きさにおいて，何らかの相関性があるはずであり，このクラウディオンの性質を介して，刃状転位の性質が完全結晶の性質へと繋がっていると考える方が自然だからである．

その計算結果を，**図2·6**に鉄の場合について示してある．ここで分かることは，パイエルス応力は，直線状刃状転位の場合が最小で，転位ループの径が小さくなるにつれて増加すること，その極限である，単一のクラウディオンの場合が最も大きいことである．単一のクラウディオンに対する，パイエルス応力の大きさの見積もりは，**図2·7**に示してある．クラウディオンが一原子距離の移動に要するエネルギーの実験値は存在しない．しかし，低温照射された純鉄の電気抵抗の回復の実験は多く存在しており，そのステージⅠは，ダンベルの移動に対応すると考えられており，110 K 付近にある．エネルギーに直すと 0.3 eV 程度である．クラウディオンは，ダンベルよりかなり移動しやすいと考えられているので，それより低い 0.1 eV としてみる．クラウディオンを一原子距離移動させるのに必要な仕事が，この値に等しくなるように必要な応力を見積もると，図2·7から分かるように，単一クラウディオンに対するパイエルス応力は，$28\times10^{-4}\,\mu$ ($\mu$：剛性率)と評価される．ここで $\alpha$ はパイエルス障壁の高さ $\alpha\mu b^3$ ($\mu b^3$ はエネルギーの次元)を表す指標であるが，パイエルス障壁を三角形近似して，そのおよぶ距離が一原子距離

とすれば，通常用いられている転位に対する障害物の強度式中の$\alpha$と同一になる．

図2·6には，らせん転位に対するパイエルス応力の計算値も示されており，$150\times10^{-4}\mu$と非常に高い値である．これに対する刃状転位のパイエルス応力の大きさの計算値は，$4\times10^{-4}\mu$と非常に低い値である．全体を通して考えてみると，単一のクラウディオンの移動に対する格子抵抗が基礎にあり，それが平面状集合体，すなわち，クラウディオンの束を形成することにより減少する．そして，その極限が直線状の刃状転位である．しかし，刃状転位からクラウディオンを一掃したらせん転位は，非常に高いパイエルス応力を示すという図式になっている．

これまでの長い転位論の歴史において，直線状の刃状転位，らせん転位のパイエルス応力の大きさに関して，個別に研究するのが主流であったが，両者の間に点欠陥(クラウディオン)をはさむことにより，クラウディオン，刃状転位，らせん転位の関係を，一連の流れの中で捉えることが可能になる．すなわち，点欠陥，線欠陥の枠を超えた包括的な視点に立つことの有効性に注目する必要がある．

単一クラウディオンから集合体になるにしたがって，パイエルス応力が減少する理由は，定性的には，次のように考えられる．単一のクラウディオンの場合には，結晶内に比較的安定な位置を探して存在しているが，平面状集合体を形成するにつれて，集合体の縁に存在しているクラウディオン，すなわち転位ループの芯に存在するクラウディオンは，本来，単一の時に存在していた比較的安定な位置を，見つけることができない状態にあると考えられる．それは集合体全体のエネルギー低減が優先されるためであり，個々の構成クラウディオンが安定位置に移行することの優先順位が下がるからである．結果として図1·12，1·13に示すような，軸対称のせん断応力下に置かれたときの格子抵抗は，クラウディオンの平面状集合化が進むにしたがって減少することになる．その減少の極限が刃状転位であり，したがってパイエルス応力が，最も低い値をとるのが刃状転位であると解釈される．すなわち，刃状転位のパイエルス応力が低い本質的要因は，動きやすいクラウディオンの性質を踏襲しているからであり，集合化の結果さらにその傾向が促進されていると考えられる．

これの反対の極にあるのが，クラウディオンを失った極限の，いわば，特異点にあたるらせん転位であり，その結果として高いパイエルス応力を示すのは，当然の結果である．特異点という表現は，やや抽象的であるが，自由度の多い状態がその自由度を失った極限と考えると分かりやすい．他に例をあげれば，非晶質構造の極限の特異点が結晶であるという表現に類似している．このように考えてくると，らせん転位のパイエルス応力こそ，より直接的に結晶そのものの特性を反映していると考えられる．具体的には，原子列をその原子列方向に互いに平行に移動させるときの原子列間に発生する抵抗力，すなわち原子列間ポテンシャルが基礎にあり，これがパイエルス応力を決定しているのが，らせん転位のケースである．すなわち，らせん転位のパイエルス応力の起源は，刃状転位のパイエルス応力の起源と比べて，その初期由来から見ても大きく異なっているといえる．

このように考えると，クラウディオンが移動しやすい性質を有している限り，普遍的に，刃状転位のパイエルス応力は低く，それを失ったらせん転位のパイエルス応力は高いということになる．ところが実際これまで言われてきたことは，この結論とは異なっており，**図2·8**に示すように，面心立方結晶の場合，らせん転位であってもパイエルス応力が低いことが知られており，この点が問題である．図の中で，体心立方結晶中のらせん転位のパイエルス応力は，純鉄のヘリウム温度における実験値$50\times10^{-4}\mu$を用いており，上述の経験ポテンシャルによる計算値の1/3程度である．この差は，計算に用いた経験ポテンシャルの限界を示している．面心立方結晶中のらせん転位のパイエルス応力が低い原因は，転位が拡張しているために，必ず刃状成分が残っていることである．すなわち，動きやすいクラウディオンの性質が残っているために，この拡張転位全体としての，パイエルス応力は低くなると考えられる．ただし，この拡張転位のバーガースベクトルは，(a/6)⟨112⟩(a：格子定数)であり，完全転位のバーガースベクトル(a/2)⟨110⟩よりも小さい．したがって，クラウディオンの平面状集合体とみるとき，そのクラウディオンは正規のものよりも小さい．それでも動きやすい性質を

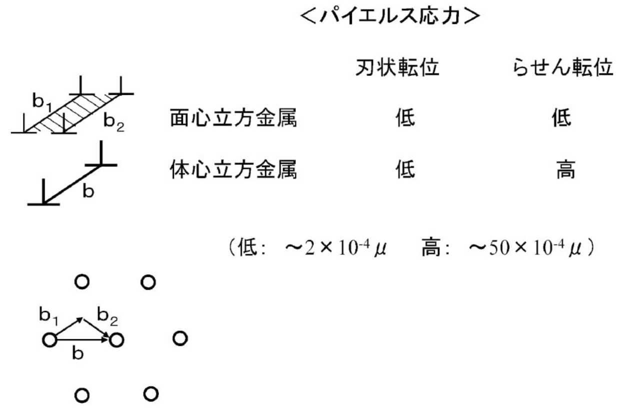

図2·8　パイエルス応力の大きさの比較．

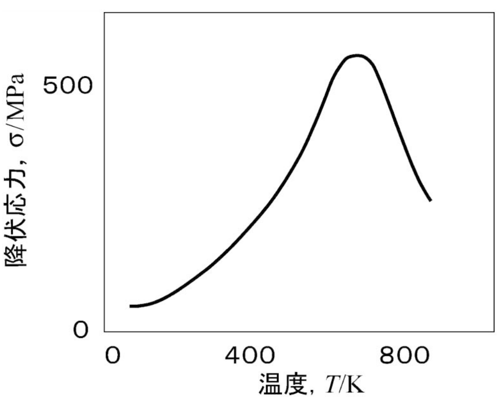

図2·9　金属間化合物の降伏応力の温度依存性．

有していると考えられる．

拡張していない転位は{111}面上には存在しないが，実は，**図2·9**に示すように，面心立方結晶を有する金属間化合物($L1_2$型，$Ni_3Al$など)の高温変形は，{100}面上で起こり，この場合，転位は拡張していない．電顕観察から⟨110⟩方向に伸びたらせん転位の運動が，変形を律速していることが分かるが，非常に高いパイエルス応力を示している．ただし，金属間化合物のもつ規則合金としての特徴から，2本の転位が対を形成し，その間に逆位相境界(anti-phase boundary)を有する，いわゆる超転位構造にはなっているので，他の要因も働くとは考えられるが，基本的には拡張していないらせん転位は，動きにくいことを示していると考えられる．すなわち，この事実は面心立方結晶といえども，本来らせん転位は高いパイエルス応力を有しているということを示している．

従来，体心立方結晶のらせん転位が高いパイエルス応力を有しており，その原因は体心立方構造そのものにあると考えられていた．**図2·10**にVitek表示で描かれたらせん転位芯周辺のひずみ分布を示す．Vitek表示は，相隣なる原子列，体心立方結晶の場合は⟨111⟩原子列相互の変位を表している．すなわち，完全結晶におけるお互いの位置関係を基準に，そこからのずれを表示している．ただし，ずれの方向が原子列方向，この場合，紙面に垂直な方向であるために，そのままでは表示が困難である．そこでそのずれのベクトルを90度倒して紙面内に矢印で表示することにする．矢印の大きさが変位の大きさを表し，矢印の向きは相隣なる2本の原子列の相対変位の向きを表す．したがってこの矢印は，転位芯から離れるにしたがって小さくなり，完全結晶のときは長さがゼロになる．矢印の向きを決めるには，例えば，相隣なる2本の原子列のうち，紙面に垂直に手前の方に完全結晶の状態からずれている方の原子列に，矢印が向くというふうに決める．矢印の大きさも2本の原子列を結ぶときにb/3(b: Burgers vectorの大きさ)と決める．このように決めると，らせん転位芯を三角形に取り囲むときに変位がbになる．すなわち，らせん転位の周りを一周すると一原子距離の変位が生じているという，転位本来の定義に一致する．らせん転位の周りを遠く回っても，小さな変位が集まってそれらの変位の合計はやはりbになる．転位芯を外れて回ると，変位の合計は当然のことながらゼロになる．

このようならせん転位を一原子距離移動させるとき，途中にエネルギーの高い位置を通らなければならない．その理由は，H. Suzukiによれば，らせん転位芯を構成する3本の⟨111⟩原子列上の原子が真横に位置する配置をとるためであり，原子間距離が近いことが結晶全体のエネルギーを高くするからである．確かに，体心立方結晶の場合には，この事実が高いパイエルス応力の直接の原因になっている．しかし，上で述べてきたように，らせん転位は根本的には，クラウディオンの動き安い特性を失っており，転位芯を構成する原子列の相対変位に対する原子列間ポテンシャル，すなわち完全結晶の性質に支配されていると考えられるので，結晶構造によらずパイエルス応力が高いと考える方が合理的である．

## 2·3　体心立方結晶中のらせん転位の熱活性化運動

応力下におかれたらせん転位が，パイエルスポテンシャルを熱活性化運動で乗り越えていく過程が，変形の律速過程になっている典型的な例が，体心立方結晶である．超高純度の鉄単結晶の降伏応力の温度依存性の実験結果を**図2·11**に示す．顕著な温度依存性がみられ，温度の低下とともに急速に降伏応力が上昇する．途中の温度域にハンプ(上に凸の領域)が存在するのは，らせん転位に対するパイエルスポテンシャルの形の詳細に起因している．詳しくは，b/2の位置にらせん転位の準安定状態が存在することによる，キャメルハンプ(らくだの瘤)タイプのポテンシャルの形に由来していると考えられている．この現象は，不純物，合金元素の存在とともに消失することが知られている．いずれにせよ，降伏応力の顕著な温度依存性は，らせん転位が，応力下でのキンク対形成を通して，パイエルスポテンシャルを熱活性化運動によって乗り越えて，すべり運動をしていることを示している．

**図2·12**にはキンク対形成の様子を示す．通常は転位線の弦モデルに立って議論をするが，あえてここでは，上で行ってきたように点欠陥の立場からみた模式図を描いている．すな

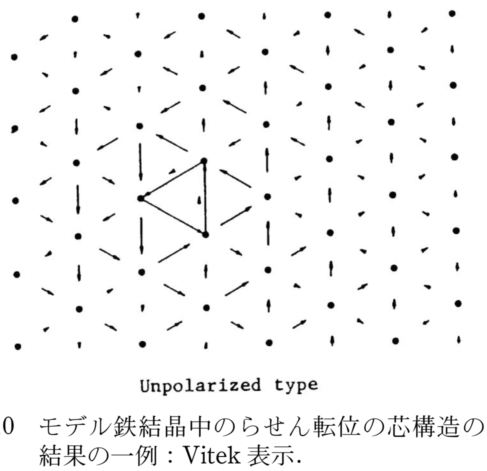

図2·10　モデル鉄結晶中のらせん転位の芯構造の計算結果の一例：Vitek表示．

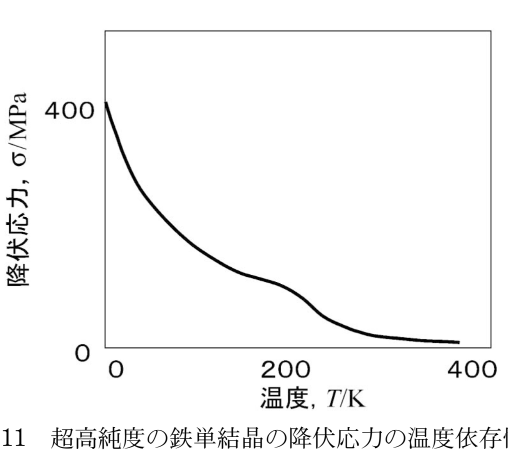

図2·11　超高純度の鉄単結晶の降伏応力の温度依存性．

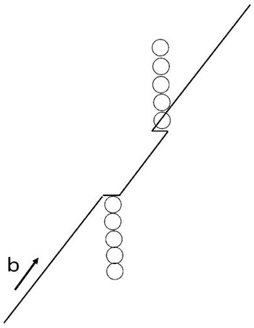


図2・12　らせん転位線上のキンク対形成とクラウディオン列．

わち，らせん転位線上のキンク対形成は，キンク対の長さに渡る一原子幅のすべりであるので，Ⅰ講の1・3・5節で考えた刃状転位対形成に当たる．ただし，刃状転位の長さはわずかに一原子距離である．繰り返しになるが，刃状転位対の形成は，どちらか一方にクラウディオンの縦の列，すなわち刃状転位を形成し，それにともなう原子列上の集団移動の結果，それに対応する原子空孔列が反対側に形成されるはずであるが，つぶれて表に現れない形で，すべり面の反対側へのクラウディオンの列，すなわち反対符号の刃状転位の形成へと変化する過程である．このように点欠陥に立脚したものの見方は，諸現象を解釈する上に非常に有効である．今後，照射による変形への影響，照射硬化，照射軟化などの解釈へも適用していくべきである．

## 文　　献


（1）鈴木秀次：転位論入門，アグネ，(1967)．
（2）石野　栞：照射損傷，東京大学出版会，(1979)．
（3）F. Minami, E. Kuramoto and S. Takeuchi: phys. stat. sol. (a), **12**(1972), 581–588.
（4）F. Minami, E. Kuramoto and S. Takeuchi: phys. stat. sol. (a), **22**(1974), 81–88.
（5）E. Kuramoto, F. Minami and S. Takeuchi: phys. stat. sol. (a), **22**(1974), 411–419.
（6）蔵元英一：金属学会会報，**14**(1975), 567–573.
（7）S. Takeuchi and E. Kuramoto: Acta Metall., **21**(1973), 415–425.
（8）E. Kuramoto and D. P. Pope: Mag., **33**(1976), 675–683.
（9）E. Kuramoto and D. P. Pope: Phil. Mag., **34**(1976), 593–601.
(10) E. Kuramoto and D. P. Pope: Acta Metall., **26**(1978), 207–210.
(11) E. Kuramoto, Y. Aono, K. Kitajima, K. Maeda and S. Takeuchi: Phil. Mag. A, **39**(1979) 717–724.
(12) 蔵元英一，青野泰久，北島一徳：金属学会会報，**19**(1980), 348–354.
(13) E. Kuramoto, N. Yoshida, N. Tsukuda, K. Kitajima, M. B. Lewis, N. H. Packan and L. K. Mansur: J. Nucl. Mat., **103 & 104**(1981), 1091–1096.
(14) 蔵元英一：金属学会会報，**23**(1984), 10–18.
(15) 蔵元英一：まてりあ，**35**(1996), 110–116.
(16) 蔵元英一，大沢一人，堤　哲男：まてりあ，**37**(1998), 461–469.
(17) 蔵元英一：日本物理学会誌，**58**(2003), 158–165.
(18) E. Kuramoto: J. Nucl. Mat., **276**(2000), 143–153.
(19) 関村直人，森下和功，蔵元英一，曾根田直樹，沖田泰良，平谷正人：プラズマ・核融合学会誌，**80**(2004), 228–234.
(20) 曾根田直樹，沖田泰良，森下和功，蔵元英一，平谷正人，関村直人：プラズマ・核融合学会誌，**80**(2004), 318–324.
(21) 蔵元英一，平谷正人，沖田泰良，森下和功，関村直人，曾根田直樹：プラズマ・核融合学会誌，**80**(2004), 492–499.



蔵元英一


★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

最終学歴：1970年３月　東京大学大学院理学系研究科博士課程修了（理学博士）

主な略歴：1984年４月　九州大学応用力学研究所教授
2005年３月　九州大学定年退職
2005年５月　九州大学名誉教授

専門分野：金属物性，結晶塑性，格子欠陥，陽電子消滅，核融合炉材料の照射効果．点欠陥，転位の分類を超えて広い視点に立った格子欠陥論

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★