

結晶転位論の基礎

一点欠陥と転位の相関— III ～転位と点欠陥との相互作用～

蔵元英一*

(前稿からの続き)

3. 刃状転位と点欠陥との相互作用

3.1 刃状転位と格子間原子およびその集合体との相互作用

上に述べてきたように、刃状転位は基本的には、格子間原子(クラウドイオン)の積み重ねにより構成されているので、新たなクラウドイオンが刃状転位の芯のところに到達すると、吸収されて刃状転位の上昇運動に寄与する。これは非常に理解しやすいことである。この際、刃状転位のバーガースベクトルとクラウドイオンの軸の向きがそろっている場合が最も理解しやすい。しかし、そろっていない場合、あるいはクラウドイオンでなくダンベルの場合にも、温度が高ければ熱活性化されてそろうようになる、すなわち、転位のバーガースベクトルと平行なクラウドイオンに変換されると考えられる。直線状刃状転位の場合にはこれらの素過程を直接観察するのは難しいが、照射下で発生した転位ループの成長は、超高压電子顕微鏡下での照射実験などにおいては通常よく観察されている。この場合には、転位ループは刃状転位のループであるため、そのバーガースベクトルと平行なクラウドイオンとして、格子間原子が吸収される結果、上昇運動が起こり、これがすなわち転位ループの成長として観察されている。照射下では原子空孔も同時に発生し結晶内を移動することにより、転位ループの位置に到達するが、格子間原子の方が余計に到達するために転位ループの成長が起こる。このことは非常に重要なことであり、転位バイアス効果として知ら

れており、照射組織形成の根本要因である。

単一のクラウドイオンではなく、その集合体と刃状転位の相互作用の場合には、温度が高ければ、転位芯の位置において分解して吸収され、転位線の部分的な上昇運動、すなわちジョグ形成に寄与すると考えられる。この辺の事情を明らかにするために、図3・1に、体心立方金属である鉄の中の刃状転位と、クラウドイオンの集合体の相互作用の計算結果を示す。3個の集合体の場合、集合体が単独に存在する場合、転位芯に存在する場合、分解して転位線にそって存在する場合、すなわちジョグを形成している場合と、エネルギーが明確に減少していることがわかる。図3・2に同様な計算結果を3個、5個、7個の集合体の場合について鉄のみならずニッケルの場合についても示す。ニッケルは面心立方金属であり、この場合、刃状転位は拡張して2本の部分転位と、そ

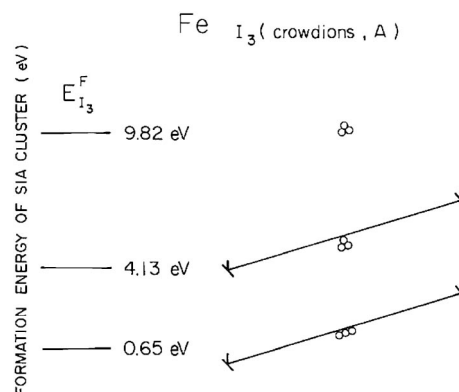


図3・1 鉄中の刃状転位とクラウドイオンの集合体の相互作用。

* 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 III—Correlation between Point Defect and Dislocation— Interaction between a Dislocation and Point Defects; Eiichi Kuramoto (Emeritus Professor in Kyushu University, Fukuoka)

Keywords: edge dislocation, screw dislocation, self-interstitial atom, vacancy, void, dislocation-defects interaction

2008年3月15日受理

れらをつなぐ積層欠陥から構成されている。この場合、クラウドイオンの集合体は2本の部分転位のどちらか一方と相互作用している。しかし、これが最終安定構造ではない。拡張転位に完全に吸収されて拡張転位の部分的上昇運動、すなわちジョグ形成に寄与してはじめて最終安定構造に達するが、その辺の事情を図3・3に示している。このような最終構造になるためには、クラウドイオンの数に対して条件があることが、クラウドイオンの数を変えて行った計算結果から判明し、それを図3・4に示している。すなわち拡張転位の部分的上昇運動、ジョグ形成が実現されるためには、クラウドイオンの数は10個を超してなければならない。

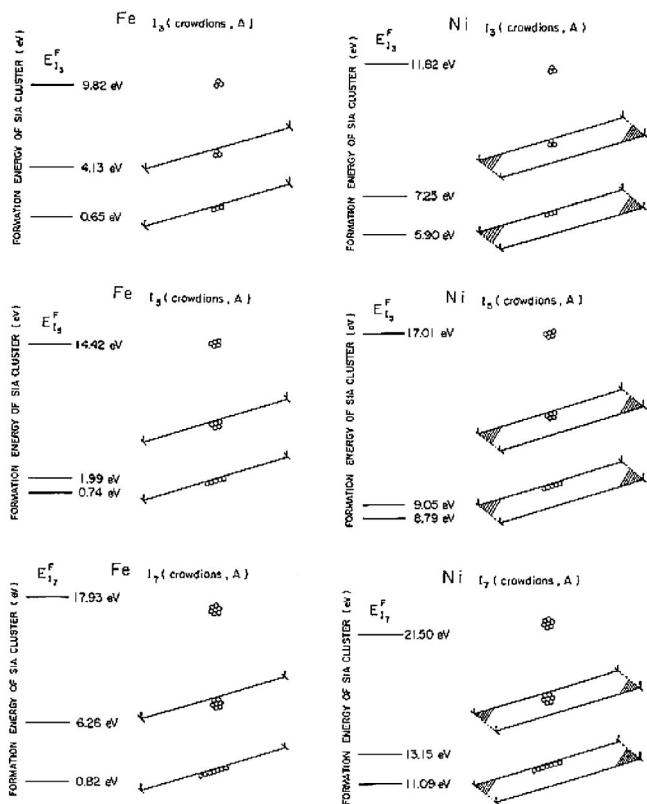


図3・2 鉄中の刃状転位、ニッケル中の拡張転位とクラウドイオン集合体の相互作用。

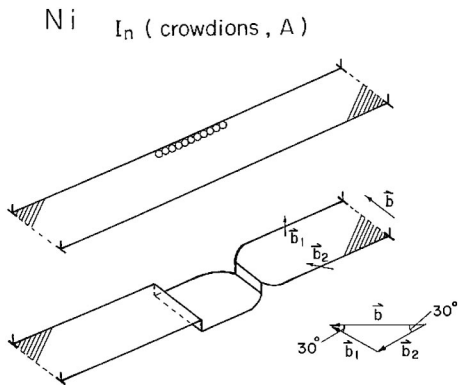


図3・3 ニッケル中の拡張転位のクラウドイオンの吸収による上昇運動。

図3・5、3・6に、拡張転位と原子空孔の相互作用の場合について行った同様な計算結果を示すが、原子空孔の場合には、20個を超えないと拡張転位の上昇運動、ジョグ形成が起きないという結果になっている。

これらの結果は、刃状転位と格子間原子(原子空孔)集合体の相互作用の結果、刃状転位線を構成するクラウドイオンの数の増加あるいは減少に至り、最終的に転位線の部分的上昇

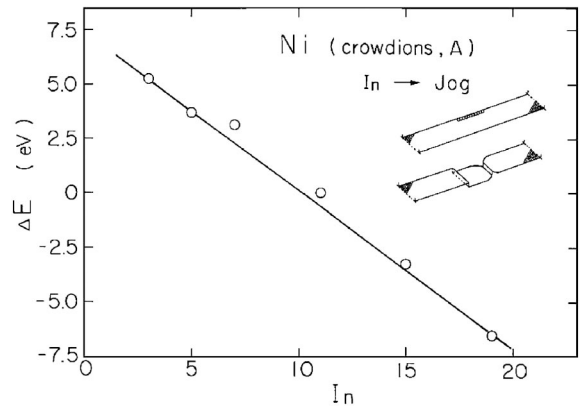


図3・4 ニッケル中の拡張転位のクラウドイオンの吸収による上昇運動とエネルギー変化。

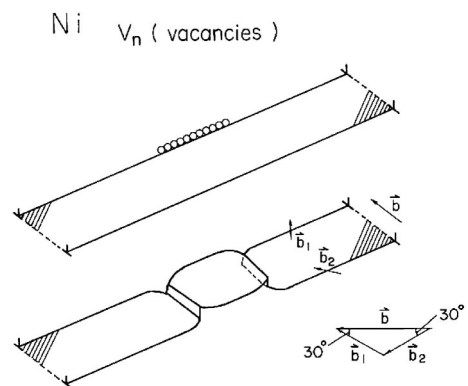


図3・5 ニッケル中の拡張転位の原子空孔の吸収による上昇運動。

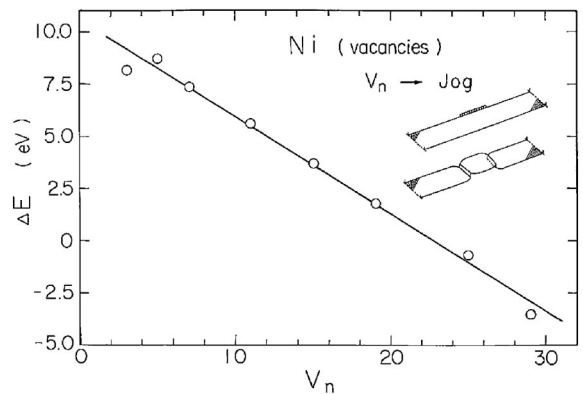


図3・6 ニッケル中の拡張転位の原子空孔の吸収による上昇運動とエネルギー変化。

運動，すなわちジョグ形成につながることを意味している。すなわち，刃状転位の点欠陥性に起因して生じている現象であり，当然の結果といえる。しかし，結果として刃状転位がジョグを有する構造になるものの，ジョグは可動であるために転位線全体としては運動の継続が可能であり，大きな運動抵抗になることは期待されない。むしろ，刃状転位と点欠陥の相互作用は，照射下でのボイドスエリングにつながる，いわゆる転位バイアス効果(生成バイアス効果も含む)の現象の基礎過程として重要である。とくに拡張転位が点欠陥を吸収して上昇運動を起こす機構を明らかにしている点が重要である。

3.2 刃状転位と転位ループとの相互作用

刃状転位と転位ループの相互作用は，従来の弦モデルによる扱いは，転位間の反応として考えられてきた。この場合にはバーガース・ベクトルの加算として反応後の生成転位を考える。これに対して結果はもちろん同じであるが，点欠陥，すなわちクラウドイオンの集合体として，刃状転位と転位ループを考える立場からは，クラウドイオンの集合体の再構成という見方になる。

図3.7に左からすべり運動してくる刃状転位と，転位ループの相互作用のシミュレーションの結果を，鉄の場合について図示する。バーガース・ベクトルはともに同方向(ここでは水平方向)を向いている。図の一番左の結果は，刃状転位が転位ループの中央付近を通過する例であるが，ループは上下2つに分かれ，下半分は刃状転位線に合体し，上半分は取り残されている。この結果の解釈を試みる。

転位間の反応の立場からは，ループを上下の2つの閉じた半ループに分け，下半分を刃状転位に合体させると水平部分は互いに逆符号の刃状成分を有しているので対消滅し，上半分はその場に残していくことになる。

一方，同一現象を，クラウドイオンの集合体の再構成という立場から考えてみると，転位ループを上下2つの閉じた半ループに分けることは，もとのループの構成クラウドイオ

ンを単に上下の2つのグループに分けただけのことであり，下のグループは刃状転位の真下に位置することにより，刃状転位を構成しているクラウドイオンの延長上に新たなクラウドイオンの領域を形成する，すなわち刃状転位を上昇運動させたことになっている。上の半分に所属するクラウドイオンはそれぞれが，刃状転位を構成しているクラウドイオンのどれかと同一の原子列上に位置しているため，その間に反発相互作用が生じる。刃状転位のうしろに半ループが取り残されたということは，この反発の結果，クラウドイオン同士が同一原子列上で入れ替わったと考えると理解できる。

このように2つの解釈を比較してみると，従来の弦モデルによる解釈は転位線のみに着目しているのに対して，点欠陥立脚の見方，すなわちクラウドイオンの集合体の再構成という見方の場合は，物質の移動を忠実に追跡している点が異なっている。ただし，クラウドイオンは原子列上の孤立波であることを忘れてはいけない。すなわち，物質の移動とはいっても孤立波の入れ替わりである。

図3.7の中，右には，刃状転位と転位ループが交わらない場合，実際には一原子距離だけ，転位ループの方が下にある場合の結果も示してある。この場合には転位の弦モデルにもとづく解釈では何も生じないという答えが帰ってくるが，実際にはそうではない。もっとも温度が十分高ければ，どちらか一方が上昇運動して，正負の刃状転位の合体消滅が生じるという答えも可能である。一方，点欠陥立脚の見方，すなわちクラウドイオンの集合体同士が，一原子の近距離に隣接した結果として何か起こるかという視点に立つと，最終結果は同じであってもその途中経過に対する解釈が違ってくる。

図3.7からわかることは，刃状転位と転位ループの間の本来は完全結晶であった部分が，原子空孔列に変わってしまったことである。そしてその空孔列が後ろに残される代わりにクラウドイオンの列を，刃状転位と転位ループの間に置き，両者を完全に合体させたと解釈される。原子空孔列への変換をもう少し別の観点からみてみる。刃状転位と転位ループが一原子距離に隣接する状況は，見方をかえれば，両者はもともと同一の余剰原子面(クラウドイオンの面)を構成している

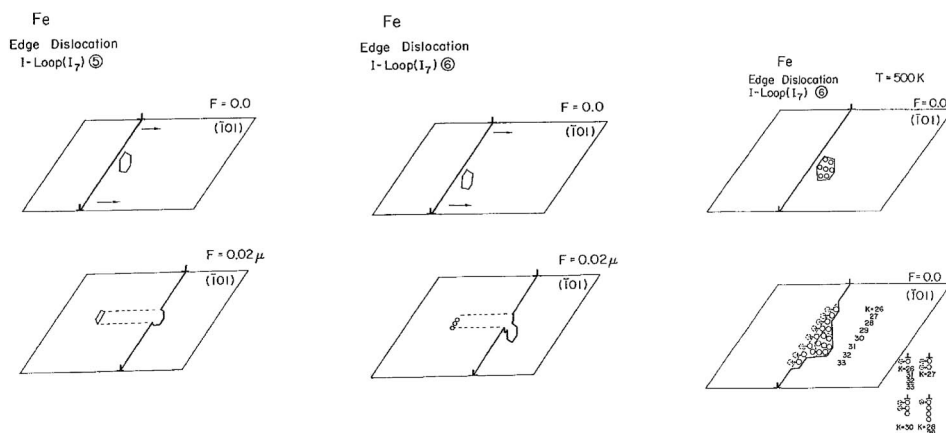


図3.7 鉄中のすべり運動している刃状転位と転位ループの相互作用の計算機シミュレーションの結果。

が、その面上に水平方向に一原子列だけクラウディオンの欠損が生じている状態とみてよい。すなわち、この欠損列は余剰原子面上の空孔列と見てもよく、つぶれた状態の原子空孔列である。それが本来の開いた状態の原子空孔列へと変化したともと考えられる。原子空孔は単一の場合には開いた状態が安定であるが、ある数以上の平面状、線状集合体になると、つぶれた状態、開いた状態の両方が可能になる性質を有しており、条件によってどちらかを選択するようになる。いずれにしても、このようにして転位ループと合体した刃状転位の運動に伴いこの原子空孔列は後ろに残され、合体した刃状転位は空孔を有していない構造になる。

図3・7の中の右端に示す結果は、温度が有限の時の結果であり、転位ループと合体した刃状転位の形状をよりなめらかにするために、さらにクラウディオンの発生を繰り返した結果と解釈される。

3・3 刃状転位と原子空孔との相互作用

刃状転位芯に一個の空孔が位置すると、通常その部分だけが一原子距離だけ上昇運動をすることを考えられがちであるが、実際はそうではない。一原子距離の上昇が起こるためには刃状転位を構成しているクラウディオンを一個減らさなければならない。すなわち、原子空孔とクラウディオンの対消滅が起こることが必要である。しかし、実際には対消滅のかわりにクラウディオンの移動、すなわち原子空孔と入れ替わって、刃状転位芯の隣へ移動して、原子空孔はそのままつぶれないで転位芯に存在する。しかし、原子空孔が複数個刃状転位芯に並ぶとつぶれて対消滅、すなわちその部分の刃状転位の上昇運動が起こる。

単一の原子空孔ではなくその3次元集合体、すなわちポイドと刃状転位の相互作用を考えてみる。図3・8に刃状転位とポイドの相互作用の模式図を示す。刃状転位の通過はすべり面上の一原子距離のずれを意味するので、ポイドが上下で一原子距離だけずれるというのが通常の見方である。これをもう少し詳しく見てみると、図3・8(左)(中)(右)に示すように刃状転位がポイドに接するということは、ポイドの内表面に刃状転位の構成クラウディオンである原子を放出することである。さらに進んでポイド領域から刃状転位が抜け出す際には、ポイドの内表面から新たにクラウディオンを挿入

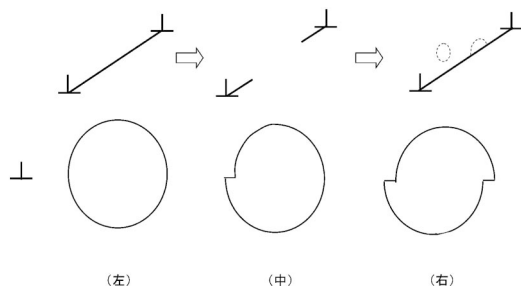


図3・8 刃状転位とポイドの相互作用の模式図。

しなければならない。放出したクラウディオンの数と、挿入したクラウディオンの数が完全に同数で、しかも対応する位置でなければ刃状転位はもとの状態にもどらない。もし挿入するクラウディオンの数の方が少なければ、図3・8(右)の点線で示したように、刃状転位は一部上昇運動した構造になったり、あるいは、原子空孔の平面状集合領域を残すことになる。すなわち、全体としてみると刃状転位の構成クラウディオンのうち一部をポイド内に残して通過したことになる。ポイド内表面が合金元素などにより状態が変化している場合には、とくにこの可能性がある。すなわち、刃状転位とポイドの相互作用は古くから考えられていた、一原子距離のずれに対応する新たな内表面の形成のみならず、物質のやりとりが生じる可能性もある。

3・4 らせん転位と点欠陥との相互作用

3・4・1 らせん転位と格子間原子およびその集合体との相互作用

らせん転位芯に格子間原子が到達すると、どのような影響を及ぼすかという問題に対して直感的には理解が容易ではない。そこでこれまで述べてきたように、らせん転位は刃状転位がクラウディオンの性質を失った極限の特異点であり、そのひずみは芯を構成している原子列の相互の原子列方向のずれから形成されている点に着目して、この問題を考えてみる。らせん転位芯のまわりのひずみの状態を表すのに、上記のVitek表示を用いるのが便利である。さらに、らせん転位線に平行な軸をもつクラウディオンのもつひずみを、同様にVitek表示で表してみることは、相互作用を考える上に有効なヒントになる。

これらの様子を図3・9、図3・10に体心立方結晶の場合について示す。すなわち、クラウディオンをらせん転位芯の3本の<111>原子列のうち的一本に、原子列の向きに挿入した場合を考える。このときクラウディオンの向きは、らせん転位線の向きと同じなので、らせん転位とクラウディオンのVitek表示のひずみの加算が可能になり、それに対応するらせん転位芯のひずみの変化を調べることができる。クラウディオンのもつひずみの特徴は、クラウディオンの軸上に伸びていることであり、そのために、らせん転位芯におかれたときに、らせん転位芯を隣の安定位置に移動させる力を有している。ただし、このクラウディオンのひずみは、その軸上で、クラウディオンの中心位置の前後でその向きが逆であることが重要な点であり、その結果、クラウディオンの前後でらせん転位芯を異なる方向に移動させることになる。この点が重要な点であり、重ね合わせた結果は、ねじれた状態のキング対をらせん転位線上に形成することになる。いずれにせよ、クラウディオンを完全に失った状態のらせん転位が、その転位芯にふたたびクラウディオンを吸収することにより、刃状成分をとりもどす結果になる。これはキング対形成の一種であると考えられる。

別な観点からの見方をすれば、通常、応力下での熱活性化

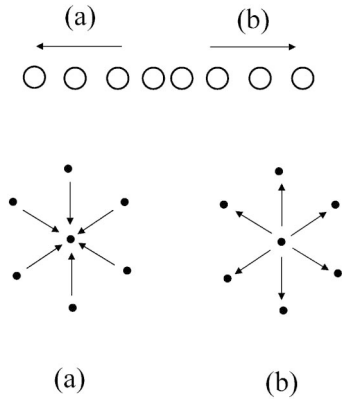


図3.9 BCC結晶中のクラウディオンのもつひずみのVitek表示.

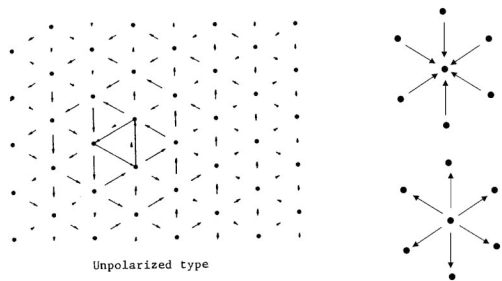


図3.10 モデル鉄結晶中のらせん転位の芯構造の計算結果の一例: Vitek表示.

過程を経てらせん転位線上にキンク対が形成され、すべり運動が実現しているが、クラウディオンの吸収は強制的なキンク対形成に対応する。したがってらせん転位のすべり運動を促進する働きがあることは予想される。この予想を見事に実現した実験結果が、低温照射軟化現象であり、純鉄に低温電子線照射した後の変形挙動を図3.11、図3.12に示す。顕著な降伏応力の減少の実験結果と、シミュレーションによるキンク対形成と、応力下でのキンクのサイドモーショングが示されている。シミュレーションでも大きな降伏応力の低下、すなわち、照射軟化現象が再現されている。

らせん転位芯とクラウディオンの相互作用の結果、ねじれたキンク対が形成されたことは、低温照射による軟化現象の解釈に非常に重要な寄与をした。しかし、この相互作用は決してこの軟化現象の解釈のみならず、それを超えて、さらに他の現象をも巻き込んでいくと考えられる。すなわち、図3.13に示すが、らせん転位がヘリカル転位へ変化していく際に、最初の核を形成するのがこの現象であると考えられる。クラウディオン一個で一つのねじれた状態のキンク対を形成するが、クラウディオンが次々に隣接する位置に吸収されていく過程を考えるならば、らせん転位が図3.13に示すようなヘリカル転位へ変換することが可能であると考えられる。すなわち、ねじれたキンク対形成が連続して生じる結果としてらせん状構造へと変化していく過程である。最も根本的な要因は、クラウディオンを失った特異点であるらせん転位

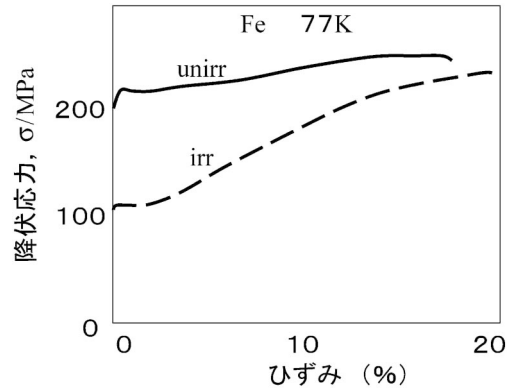


図3.11 低温電子線照射された純鉄単結晶における照射軟化現象.

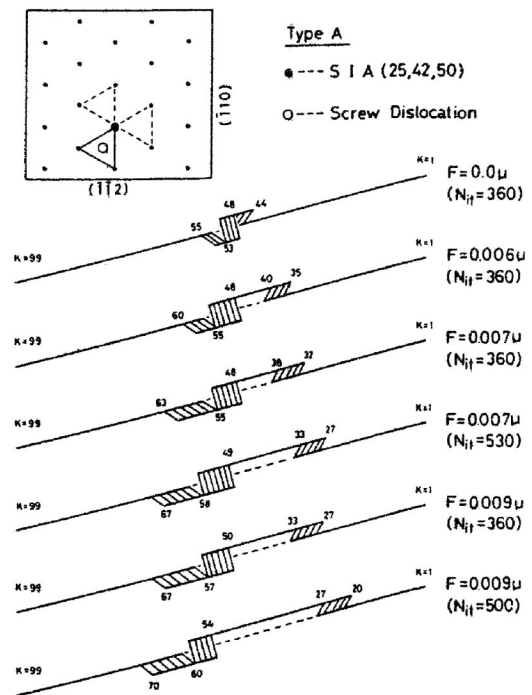


図3.12 照射軟化現象の計算機シミュレーション.

Formation of Helical Dislocation

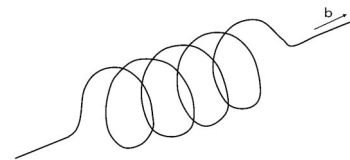


図3.13 らせん転位からヘリカル転位への変化の模式図.

が、ふたたびクラウディオンを取り戻し、刃状成分を回復することである。その操作が進んだ結果がまさにヘリカル転位である。ヘリカル化はもちろん原子空孔によっても生じる。

らせん転位がヘリカル化する過程は、多数の格子間原子が逐次、転位線に到達しらせん転位芯のひずみと相互作用した結果として考えるのが容易であるが、すでに格子間原子集合

体、すなわち転位ループが存在しているところに、らせん転位が遭遇して相互作用した結果でも形成される可能性がある。すなわち、完全結晶中で転位ループとして存在しているクラウディオンの集合が、らせん転位芯という特殊な状況へと配置換えされた場合に、らせん転位芯のひずみとの相互作用の結果、ねじれたキンク対の連続形成が自動的に生じてしまうと考えるのが妥当である。

らせん転位と原子空孔の相互作用の場合にも、ここで考えた同様の変化をらせん転位線上に生じさせることが考えられる。

3・5 転位線の分岐、合体について

転位線の分岐、合体については、図3・14にあるようにバーガス・ベクトルの間の関係で理解するのが通常の方法である。すなわち、すべり面上下のずれ b_1 を作り出すのに b_2 と b_3 の2段階にわけて行っても結果として同じずれを作り出すという解釈である。一方、点欠陥の視点に立つ解釈では、3枚のクラウディオンの壁の出会いとみることになる。すなわち、 b_2 と b_3 のクラウディオンを合体したものが b_1 のクラウディオンの同等のひずみを作り出すということである。この場合にはすべり面上下のずれという見方はしないで、単に一つのクラウディオンの働きを異なる2つのクラウディオに分ける、あるいはその逆という見方である。

基本の考え方は、これまで述べてきたように、すべり面上下のずれ、すなわち、すべりという現象の解釈であり、ずれそのものに注目するのが、通常すべりに対する考え方である。しかし、一原子距離のずれの後にはまた完全結晶にもどっており、その点よりも、すべった両端に変化が集中している、すなわち、格子間原子(クラウディオン)の壁、つまり刃状転位と原子空孔の壁が発生しているという点に注目するのが点欠陥に視点をおく見方である。他端が試料表面に到達している場合には、前者、すなわち、クラウディオンの壁、刃状転位のみでよい。結晶内の有限領域の場合には、原子空孔の壁を考えるが、原子空孔の壁は現実には姿を変えて、すなわち、つぶれて反対側のクラウディオンの壁、つまりは反対符号の刃状転位に変わっている。

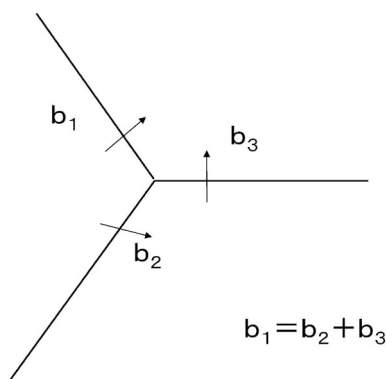


図3・14 転位の分岐とバーガス・ベクトル。

ま と め

以上、結晶転位論を、従来あまり注目されていなかった点欠陥からの視点に立ち、あらためて考察してきた。その発端は照射の研究である。従来、転位は刃状転位、らせん転位ともに線状欠陥として扱われ、点欠陥に分解するという発想はなかったが、刃状転位の場合には、その構成員である格子間原子、詳しくはクラウディオンの集合体であることに着目することは、諸現象の理解にとって有益である。さらにそのクラウディオンを一掃した極限がらせん転位であり、したがっておのずから、刃状転位とらせん転位の特性の差が生じてくる。その最たるものがパイエルス応力であり、クラウディオンの動きやすい性質を失っているらせん転位は、必然的に高いパイエルス応力を有している。さらに刃状転位を小さくしていくと、転位ループになり、その最小の極限は単一の格子間原子、クラウディオンであり、これらに境目はなく、格子のせん断という操作に反応して動く性質を共有している。せん断のかけ方は直線状の刃状転位に対しては通常の一様なせん断でよいが、転位ループに対しては軸対称になるようにはかけなければならない。刃状転位のパイエルス応力の大きさの起源は、単一のクラウディオンの移動のし易さにあると考えられる。刃状転位の場合が最も低くなった極限である。したがってらせん転位の反対の極にあたる。単一クラウディオンから刃状転位までの一連の族(ファミリー)に対して、しいて境界を見出そうとすれば、転位ループのサイズに依存して、キンク対形成が考えられるか否かという点である。当然のことながら、大きい場合には直線状転位の場合と同じようにキンク対形成が考えられる。

このような点欠陥由来の視点から変形を眺めることは、変形の基礎になっている転位のすべり、増殖などにも点欠陥的要素を追及する根拠を与える。しいては、結晶に対する照射現象、フレンケル対導入と、転位ループや刃状転位の導入、転位の増殖などに共通点が明らかになってくる。

転位と点欠陥との相互作用も、このような点欠陥に起因した考え方の上に立つことで、解釈が有利になることが知られる。刃状転位と欠陥、およびその集合体の相互作用を原子レベルで理解する上に非常に有効である。さらに、らせん転位が格子間原子を吸収して、刃状成分をもつことは、BCC結晶の低温照射による軟化現象や、さらにらせん転位からヘリカル転位の形成などに発展する。

このような一連の考察の結果として、結晶転位論に対して点欠陥由来の視点をもつことは、格子欠陥全体を統一的に理解するのに有利な視点であるという結論に達する。

文 献

- (1) 鈴木秀次：転位論入門，アグネ，(1967)。
- (2) 石野 榮：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: Phil. 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

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★