

マルチスケール材料科学講義ノート1 「結晶構造と結晶欠陥」 (先端材料学の復習)

1	結晶面・結晶方位	2
2	結晶欠陥の幾何学	3
2.1	点欠陥 (point defect)	3
2.2	線欠陥 (line defect)	3
2.2.1	転位の定義 (転位の導入の方法)	4
2.2.3	すべり転位の始端・終端	5
2.2.4	完全転位とShockley部分転位	5
2.2.5	フランクの不動転位	6
2.2.6	転位ループの作り方	7
3	点欠陥のダイナミクス (拡散)	8
3.1	Fickの法則 (流れとしての捉え方)	8
3.2	拡散の微視的捉え方	8
3.3	熱活性化過程と拡散	9
3.3.1	熱活性化過程 (固体の熱力学p41 の配布資料参照) の説明	9
3.3.2	アレニウスプロット	11
4	転位のダイナミクス	12
4.1	転位の変位場、応力場	12
4.1.1	直線らせん転位	12
4.1.2	直線刃状転位	13
4.2	転位に働く力 (ピーチケラーの式)	13
4.2.1	ピーチケラーの式	13
4.2.2	分解せん断応力 (一般化)	18
4.3	転位の運動と反応	18
4.3.1	保存運動と非保存運動	18
4.3.2	パイエルス応力 (ポテンシャル)	18

1 結晶面・結晶方位

・結晶面

ミラー指数(軸と面の交点の逆数)。(100),(110),(111)の3つを知っていれば80%は大丈夫。マイナスは上線 ($\bar{1}11$) で表す。(100),(010),(001), ($\bar{1}00$) などの等価な面は{111}と表現する。単位胞の大きさをa,b,cとして、面がxyz軸と交わる切片をOA,OB,OCとすると(交わらない場合は ∞)、平面ABCは(a/OA, b/OB, c/OC)であらわされる。比を維持したまま最小の整数比に直す。

・結晶方位

座標の原点を通り、その結晶面と垂直な方向(通常のベクトルと同じ)

[110],[101],[011]等の等価な方向を<110>と表現する。

※(001)ウェーハ・オリフラ<110>とはどういう意味か?

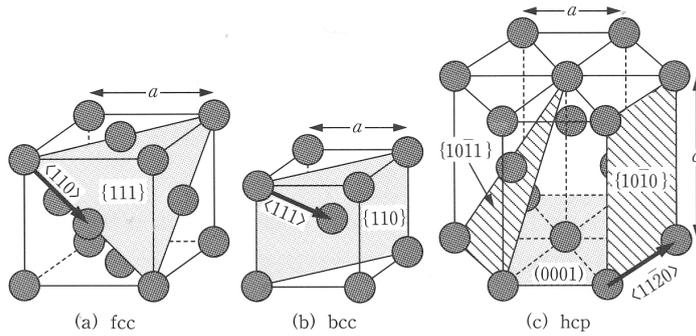


図 7.1 いくつかのすべり面とすべり方向の図示

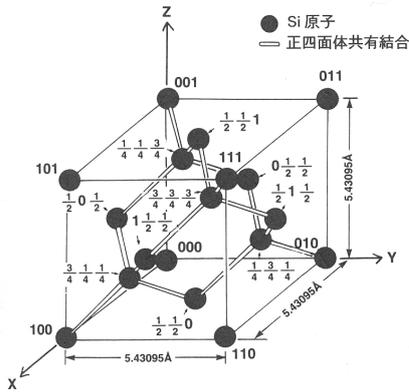


図 2.7 シリコン結晶の基本格子(ダイヤモンド構造).

いくつかの代表的な方向・面を覚えておけばよい。

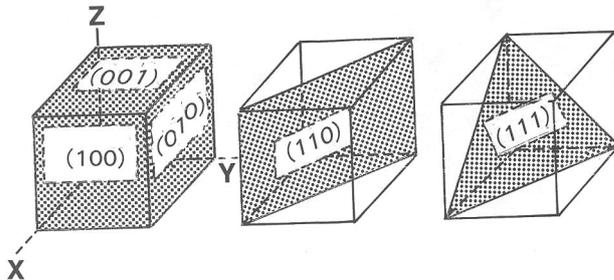


図 2.8 立方晶系の基本結晶面.

2 結晶欠陥の幾何学

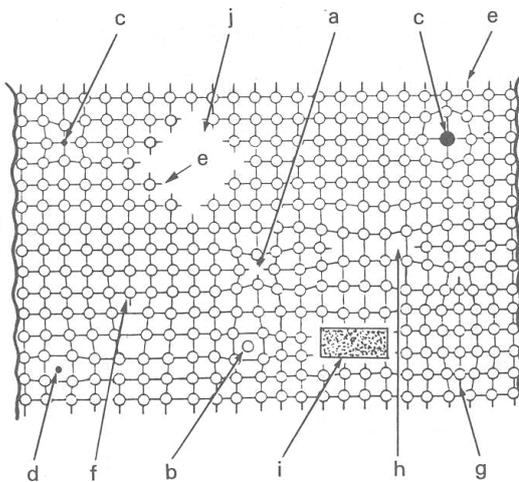


図 6.2 結晶欠陥の平面模式図。a~j は図 6.1 の a~j に対応。

2.1 点欠陥 (point defect)

✓ 内因性点欠陥 (intrinsic point defect)

- ・ 空孔 (vacancy) (a)
- ・ 自己格子間原子 (self interstitial atom) (b)

ある程度存在することによって自由エネルギーを下げる。平衡状態でも存在する欠陥(※2)。

✓ 外因性点欠陥 (extrinsic point defect)

- ・ 置換不純物原子 (substitution impurity atom) (c)
- ・ 格子間不純物原子 (interstitial impurity atom) (d)

単結晶シリコンでは非常に重要。

ドーパントなどの置換不純物は電気的性質を作る。

Na や金属などの格子間不純物は拡散して悪影響を及ぼす。

2.2 線欠陥 (line defect)

✓ 転位 (dislocation) 転位の理解は重要・結構難しい。

- ・ 何故転位が必要か? → 結晶は一気にはずれることができず、少しずつずれる

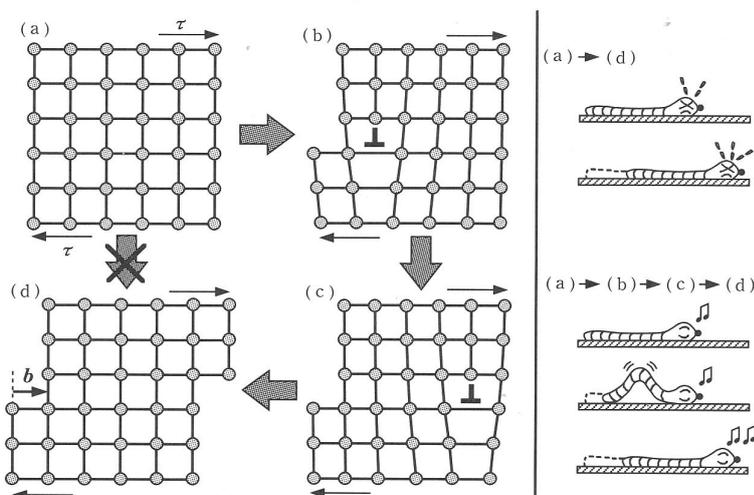


図 1-4 結晶のすべり変形と転位の運動

2.2.1 転位の定義（転位の導入の方法）

- すべり面 転位がすべる面 n : 例えば $\{111\}\{110\}$ など
- すべり方向 転位がすべる（ずれている）方向 b : $\langle 110 \rangle \langle 111 \rangle$ など
（バーガースベクトル：すべり面をはさんだ上限の結晶がすべり方向に相対的にずれる量 b ）
- 転位線の方法 円ループなら様々な方向がある。 L

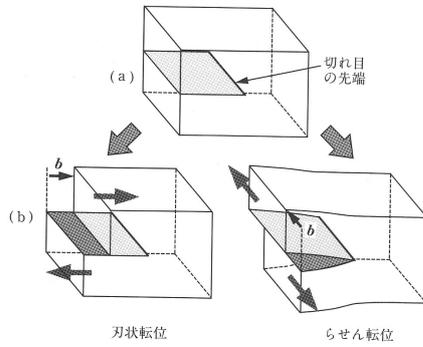


図 1-5 完全結晶への転位の導入
(a) すべり面に平行な切れ目を入れる。
(b) 切れ目の部分をすべり面に平行にせん断変形した後、切れ目を糊づけする。

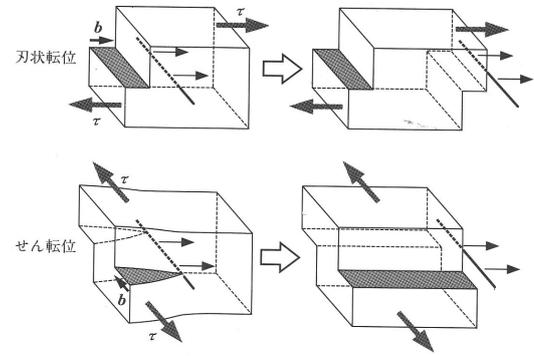


図 1-8 外部せん断応力 τ 下での刃状転位とらせん転位の左から右への運動と、それによって生じるすべりせん断変形

表 2.1 金属および合金の結晶構造とすべり系

金属または合金	結晶構造	すべり面	すべり方向	臨界せん断応力 (MPa)
Al	fcc	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	0.55
Cu	fcc	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	0.90
Cu-10at%Zn	fcc	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	11.7
α Fe	bcc	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	15.0
		$\langle 112 \rangle$	〃	—
		$\langle 123 \rangle$	〃	—
Zn	hcp	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.18
Mg	hcp	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.50
α Ti	hcp	$\{10\bar{1}0\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	14.0
FeAl	B2	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	450
		$\langle 112 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	—
Ni_3Al	$L1_2$	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	165
		$\{100\}$	〃	—

2.2.2 刃状転位とらせん転位

- 刃状転位(edge dislocation) $l \perp b$
刃状転位のすべり面は $l \times b = n$ で固定される
- らせん転位 (screw dislocation) $l // b$
らせん転位のすべり面は $l \times b = 0$ なので固定されない → どのすべり面でもすべるのではなく、実際は結晶面に依存する。すべり面が途中で切り替わる現象を交差すべりと呼ぶ。
→ 世の中にある転位はこの 2 種類ではない！湾曲している部分は混合転位。つまり、転位の分類ではなく、刃状転位成分、らせん転位成分という議論になる。

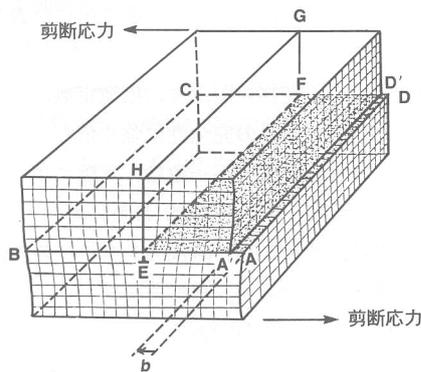


図 6.8 転位面 ABCD における刃状転位 EF.

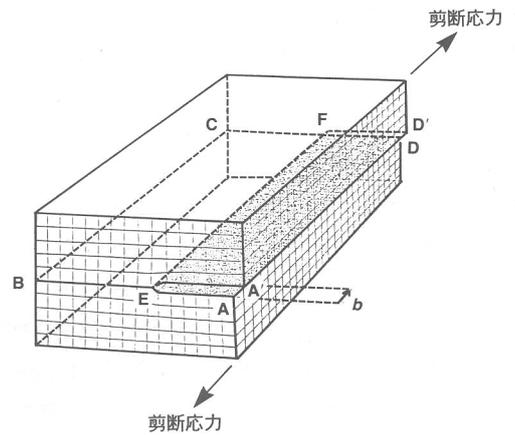


図 6.10 転位面 ABCD におけるらせん転位 EF

2.2.3 すべり転位の始端・終端

転位はループ上になっているか、端部が表面もしくは界面になければならない。物体内で転位が終端部を持つことは幾何学的に不可能である。

下記のようなループをフランクの不動転位ループに対して、すべり転位ループとも呼ぶ。

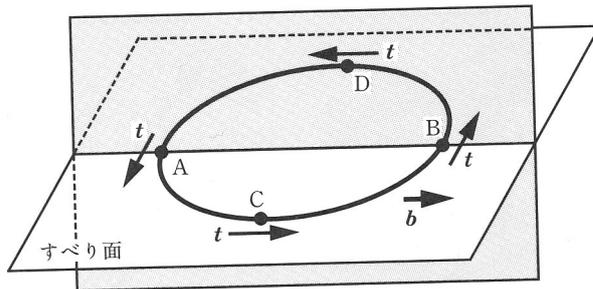


図 1.9 すべり面上の(せん断)転位ループ。バーガースベクトルは転位のどの部分でも等しいが、A 点と B 点では互いに反符号の刃状転位、C 点と D 点では互いに反符号のらせん転位となっている。

2.2.4 完全転位と Shockley 部分転位

FCC の例) $a/2[-1\ 0\ 1]$ の完全転位は、 $a/6[-1\ -1\ 2] + a/6[-2\ 1\ 1]$ の二つの Shockley 部分転位に分解してずれるほうがエネルギー的に有利 ($E \sim b^2$ より)。ただし、二本の部分転位の間は格子の積層(Stacking)の順序が異なる積層欠陥が作られる。このような二つの部分転位と積層欠陥のセットを拡張転位という。

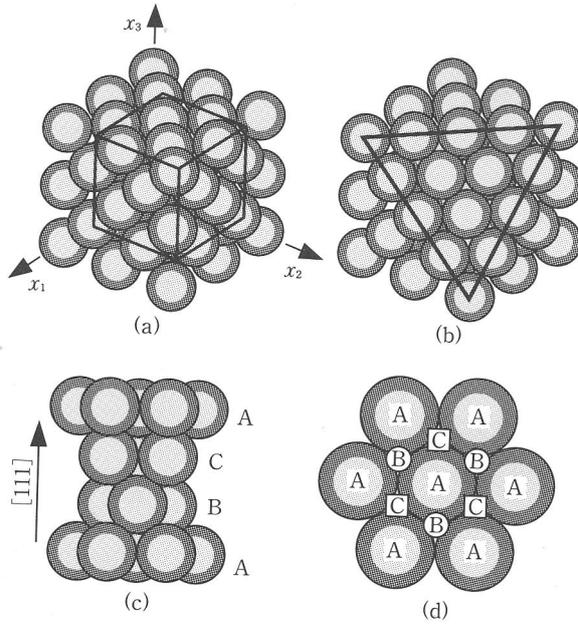


図 7.7 fcc の剛体球モデル

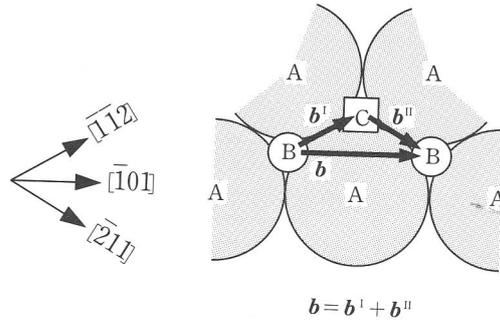


図 7.8 剛体球モデルによる完全転位の分解の説明図

2.2.5 フランクの不動転位

転位ループ (dislocation loop)

- 侵入型 (interstitial-type) (g)
- 空孔型 (vacancy-type) (h)

1層の積層欠陥を伴う転位ループ (フランクの不動転位)。格子間原子・空孔の凝集によって出来る。バーガースベクトルの向きがすべり面に垂直！よってすべり変形は起きない。だから不動転位

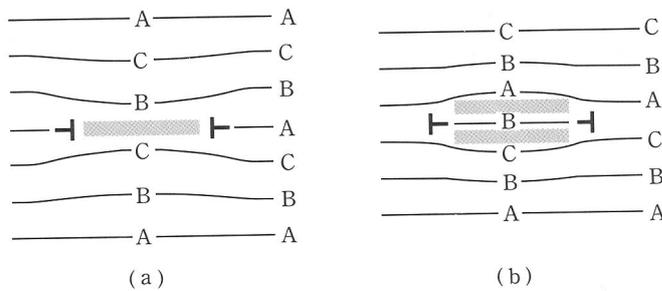
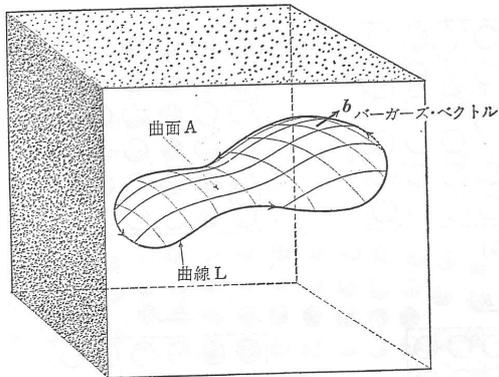


図 7.15 フランクの不動転位ループの断面図。ハッチ部は積層欠陥。
(a) 原子空孔型 (イントリンジック型), (b) 格子間原子型 (エキストリンジック型)

2.2.6 転位ループの作り方

曲線 L でふちどられた曲面 A を考える（曲面 A の取り方は任意）。曲面 A に切れ目を入れて、片側の物質の表面を \mathbf{b} だけ無理やり変位させる。（原子の重なるところからは原子を取り除き、隙間には詰め込むと、曲面 A の切れ目のあとは全くもとの原子配列になり、） \mathbf{b} だけ変位させた影響は曲線 L のまわりにだけにしわ寄せされてしまう。このしわ寄せされた模様を転位と定義する。（...）は A が平面で \mathbf{b} が A に含まれる場合は不必要。



第22図 転位の一般的な定義 (Seitz による)。

3 点欠陥のダイナミクス (拡散)

3.1 Fickの法則 (流れとしての捉え方)

Fick の第一法則

$$J = -D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad c: \text{濃度、} D: \text{拡散定数、} J: \text{物質流束}$$

Fick の第二法則

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla J = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right)$$

D が x に依存しないなら,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

(例) いま溶質を全く含んでいない長い棒状試料の一端に溶質を薄膜上に α だけめっきする。もしも溶質を含まない同様の棒状の試料をこの棒のめっきされた端に拡散が起こらないように溶接し、ついて時間 t の間だけ拡散が起こるようにアニールしたとする。棒状試料の溶質濃度は次式で与えられる。

$$c = \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

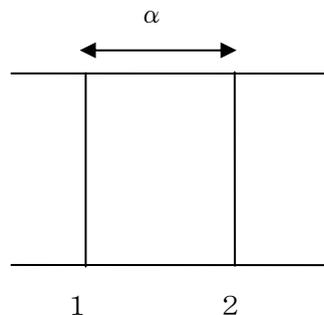
※境界条件

$|x| > 0$ では $t \rightarrow 0$ $C \rightarrow 0$

$|x| = 0$ では $t \rightarrow 0$ $C \rightarrow \infty$

$\int c(x, t) dx = \alpha$

3.2 拡散の微視的捉え方



仮定

- 1秒間の平均ジャンプ回数 Γ 回
- 面1上の単位面積あたりの拡散原子個数 n_1
- 面2上の単位面積あたりの拡散原子個数 n_2

面の上を左へ飛び出す原子数 $1/2 n_1 \Gamma \delta t$

面の上を右へ飛び出す原子数 $1/2 n_2 \Gamma \delta t$

面1から面2への正味の流束 $J = 1/2(n_1 - n_2) \Gamma = \text{原子の数/面積/時間}$

濃度は $c_1 = n_1/\alpha$ 、 $c_2 = n_2/\alpha$ 、なので、 $J = 1/2(c_1 - c_2) \alpha \Gamma$

濃度勾配がゆるやかならば

$$c_1 - c_2 = -\alpha \frac{\partial c}{\partial x} \cong \left(-\alpha \frac{c_1 - c_2}{\alpha} \right)$$

よって、

$$J = -\frac{1}{2} \alpha^2 \Gamma \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$D = \frac{1}{2} \alpha^2 \Gamma$$

拡散係数はジャンプ距離の自乗と頻度の積

$$D = 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s} \quad \text{C: } 900^\circ\text{C in } \alpha\text{-Fe}$$

$$\alpha = 10^{-8} \text{ cm ならば、} \Gamma = 10^{10} \text{ sec}^{-1}, \text{ Debye 振動数 } 10^{12} \sim 10^{13} \text{ sec}^{-1}$$

三次元理論では $D = 1/6 \alpha^2 \Gamma$

ジャンプ回数を n とすると、 $\Gamma = n/t$ より、 $6Dt = n \alpha^2$

3.3 熱活性化過程と拡散

拡散係数（平均ジャンプ回数）とは？

3.3.1 熱活性化過程（固体の熱力学p41の配布資料参照）の説明

エネルギー準位 $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_r$

原子数 $n_0, n_1, n_2, \dots, n_r$

各原子は不連続なエネルギーの値しかもてないとする。

$E_0 = n_0 \varepsilon_0$ は最小エネルギーでエントロピーの考慮がない → 熱力学的平衡状態は自由エネルギー最小

(エントロピー最大)

エントロピー
$$S = k \ln \frac{N_0!}{n_0! n_1! n_2! \dots n_r!} \xrightarrow{\text{Stirlingの近似}} S = -k \sum_{i=0}^r n_i \ln \frac{n_i}{N_0}$$

エネルギー
$$E = \sum_{i=0}^r n_i \varepsilon_i$$

原子数
$$N_0 = \sum_{i=0}^r n_i$$

E と N_0 が一定で S が最大の状態を考える

$$dS = -k \sum_{i=0}^r \left(1 + \ln \frac{n_i}{N_0} \right) dn_i = 0$$

$$dE = \sum_{i=0}^r \varepsilon_i dn_i = 0$$

$$dN_0 = \sum_{i=0}^r dn_i = 0$$

Lagrange の未定乗数法により（導出省略）

$$-\sum_{i=0}^r \left(\ln \frac{n_i}{N_0} - \lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_i \right) dn_i = 0$$

$$\ln \frac{n_i}{N_0} - \lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_i = 0 \quad (i=1 \dots r)$$

よって、

$$\frac{n_i}{N_0} = \exp(\lambda_1 + \lambda_2 \varepsilon_i)$$

$$\sum \frac{n_i}{N_0} = \exp(\lambda_1) \sum \exp(\lambda_2 \varepsilon_i) = 1 \quad \text{より、}$$

$$\exp \lambda_1 = \frac{1}{\sum \exp(\lambda_2 \varepsilon_i)} \quad \text{よって、}$$

$$f_i = \frac{n_i}{N_0} = \frac{\exp(\lambda_2 \varepsilon_i)}{\sum \exp(\lambda_2 \varepsilon_i)}$$

別式より（熱力学の第二法則 $dS=dQ/T$ を使い、統計的エントロピー定義と、熱力学的エントロピー定義を対応させる。）

$$\lambda_2 = -\frac{1}{kT}$$

$$f_i = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right)}{\sum \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right)} = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right)}{Z} \quad Z: \text{分配関数}$$

→ [拡散と熱活性化過程 \(配布資料\)](#) 〜

課題) 拡散のような固体反応には活性化された状態 (activated state) が存在することが多い。すなわち、原子が一つの位置から別の位置に移るときには、図に示すような ΔE の高さのエネルギーの壁を越さなければならない。正常な格子中の原子の平均エネルギーを E_1 とする。エネルギー準位は互いに非常に接近しているのが普通であるから、原子の移動過程を図に示すように連続した反応曲線で近似することができる。

1) 分配関数は $Z = \sum_i \exp[-\varepsilon_i/kT]$ で表される (ε_i はエネルギー状態)。導出過程を述べよ。

既出

2) 分配関数 $Z = \sum_i \exp[-\varepsilon_i/kT]$ が和の形ではなく、積分の形で書けるとして分配関数の値が kT となることを示せ。

$$Z = \int_0^{\infty} \exp(-E/kT) dE = kT$$

3) $E > E_2$ となっている原子 (励起された状態) と、 $E > E_1$ となっている原子 (基底状態) との比 f^* を求めよ。

エネルギーが連続であると仮定すると、原子が E と $E+dE$ の間のエネルギーを持つ確率は

$$f(E)dE = \frac{\exp(-E/kT)dE}{\int_0^{\infty} \exp(-E/kT)dE}$$

従って、

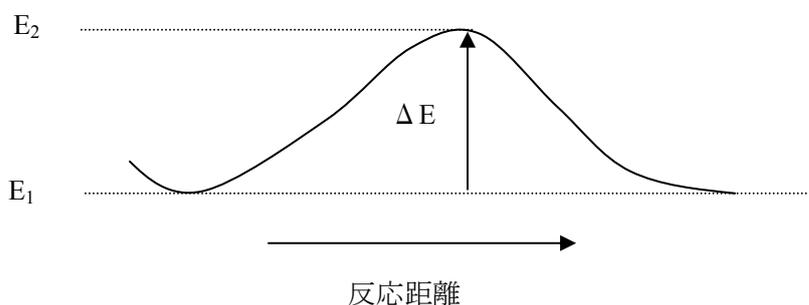
$$f(E > E_2) = \int_{E_2}^{\infty} f(E) dE = \frac{\int_{E_2}^{\infty} \exp(-E/kT) dE}{\int_0^{\infty} \exp(-E/kT) dE} = \exp(-E_2/kT)$$

$$f(E > E_1) = \exp(-E_1/kT)$$

よって、 $\Delta E = E_2 - E_1$ として、

$$f^* = \exp(-\Delta E/kT) \quad \Delta E \text{ を超えてエネルギーが励起する確率}$$

- 4) f^* は温度が高くなるとどのように増加するか考察せよ。
アレニウスプロットによって、対数的に増加する。

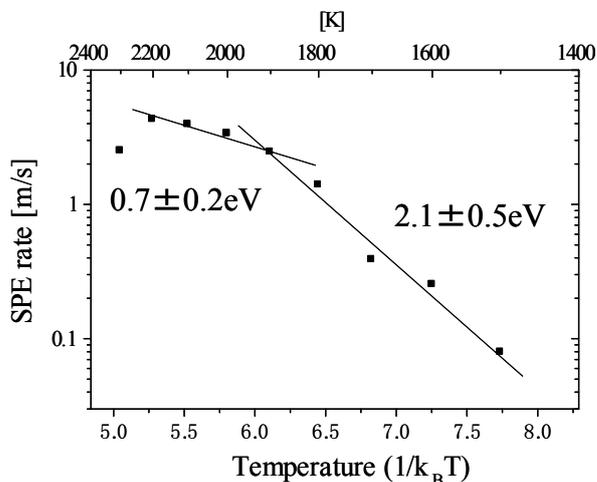


3.3.2 アレニウスプロット

熱活性化過程の現象の速度はアレニウスプロットで整理できる。
例えば、拡散定数の温度依存性は

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

で表すことができ、 ΔE は、活性化エネルギー（エネルギー障壁）に対応する。
対数グラフに拡散定数の温度依存性をプロットすると、以下のような図が書け、勾配より、活性化エネルギーが求まる。下の図は 1900K を境に活性化エネルギーが変化し、現象が変わることを示している。



このように、温度依存のデータを取ることによって、現象解明が可能になる。

4 転位のダイナミクス

4.1 転位の変位場、応力場

4.1.1 直線らせん転位

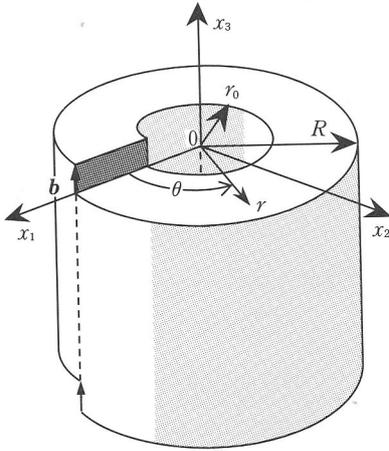


図 4・1 x_3 軸に沿った直線らせん転位

○変位

1 周すると変位が x_3 方向に b だけ大きくなるため、

$$u_3 = \theta b / 2\pi \quad \tan \theta = x_2 / x_1$$

$$\frac{\partial \arctan \theta}{\partial \theta} = \frac{1}{1 + x^2}$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial x_2} = \frac{b}{2\pi} \frac{1}{x_1} \frac{1}{1 + (x_2/x_1)^2} = \frac{b}{2\pi} \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2}$$

$$u_3 = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \left(\frac{x_2}{x_1} \right)$$

○応力

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} \\ 0 & 0 & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2} \\ -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2} & 0 \end{pmatrix}$$

※応力は $1/r$ なので、転位芯 ($r \rightarrow 0$) において ∞ に発散する

転位論では、転位芯部分(半径 $r_0 \sim 5b$)を扱わない \rightarrow 空洞と考える

○自己エネルギー (弾性ひずみエネルギーの和)

$$E^s = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \left(\frac{R}{r_0} \right) \quad r_0 \text{ は転位芯の半径}(r_0 \sim 5b), R \text{ は結晶の大きさ(結晶粒の半径)}$$

荒い近似 $E = \alpha \mu b^2$ ($\alpha = 1/2 \sim 1$ 程度の定数)

転位芯の部分のエネルギーは一定値と考え、 E^s に加算されると考える。しかし、その影響は無視できるほど小さい。

4.1.2 直線刃状転位

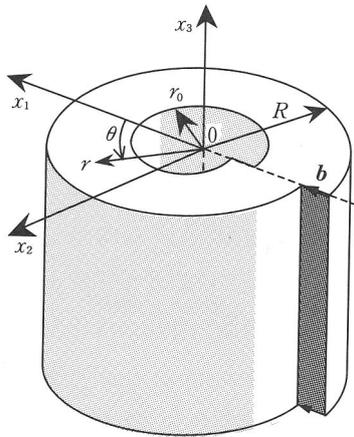


図 4・3 x_3 軸に沿った直線刃状転位

1. 変位

$$u_1 = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \left(\frac{x_2}{x_1} \right)$$

導出は弾性論の複雑な式になるので、省略。

2. 応力

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(3x_1^2 + x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} \end{pmatrix}$$

3. 自己エネルギー (弾性ひずみエネルギーの和)

$$E^s = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{R}{r_0} \right) \quad r_0 \text{ は転位芯の半径}(r_0 \sim 5b), R \text{ は結晶の大きさ(結晶粒の半径)}$$

4.2 転位に働く力 (ピーチケラーの式)

4.2.1 ピーチケラーの式

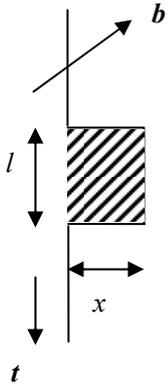
転位は応力が負荷されると移動する。

転位に働く力は、ピーチケラーの式で表される

$$\mathbf{F} = \mathbf{t} \times (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b})$$

\mathbf{t} は転位線の方、 $\boldsymbol{\sigma}$ は応力テンソル、 \mathbf{b} はバーガースベクトルである。

※ピーチケラー力の導出過程



外部応力 τ の作用下ですべり面上を運動する長さ l の転位素片

4. 転位の掃いた面積は $S = |l\mathbf{t} \times \mathbf{x}| = l|\mathbf{t} \times \mathbf{x}|$

5. すべり面上の単位法線ベクトル \mathbf{n} を考えると、

$$S\mathbf{n} = l\varepsilon_{jmn}t_m x_n$$

○ S面に作用する力 \mathbf{F} は (面力) \times (面積) であるから

$$\mathbf{F} = \mathbf{X}S$$

6. この力によって面積 S の部分の上下の結晶が相対的に \mathbf{b} だけ変位したため、 \mathbf{F} のした仕事は

$$\Delta W = \mathbf{F} \cdot \mathbf{b}$$

7. 系のギブスエネルギー変化は

$$\Delta G = -\Delta W$$

8. $\sigma_{ij}n_j = X_i$ より

$$\begin{aligned} \Delta G &= -\sigma_{ij}n_j b_i S = -\sigma_{ij} \left(\frac{l}{S} \varepsilon_{jmn} t_m x_n \right) b_i S \\ &= -l \sigma_{ij} \cdot \varepsilon_{jmn} t_m b_i x_n \end{aligned}$$

9. 転位 (単位長さ当たり) に働く力は

$$f_n = -\frac{1}{l} \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial x_n} \right) = \sigma_{ij} \varepsilon_{jmn} t_m b = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{t}$$

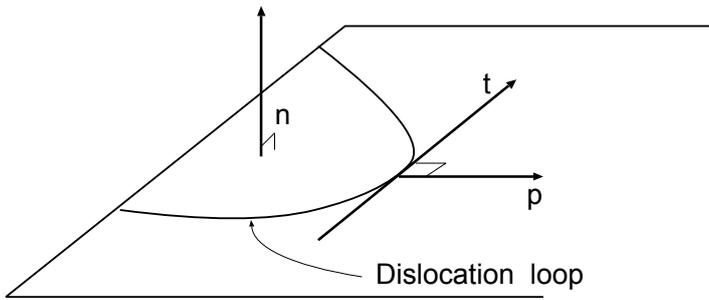
転位に働く力は必ず転位線に垂直。

※ここでの力は熱力学的力 (一般化力) と呼ばれ、系がどのように変化するのかの駆動力と解釈できる。

この力 \mathbf{F} のうち、転位ループをすべり面上ですべらせる (保存運動・すべり運動) ための駆動力 F_p (スカラー量) のみを求める。ここで、すべり面上の転位線と垂直な単位ベクトルを \mathbf{p} , すべり面に垂直な単位ベクトルを \mathbf{n} とすると、以下の関係が得られる。

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_n = F_p \mathbf{n} + F_n \mathbf{p}, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{p} = 0, \quad \mathbf{p} \times \mathbf{t} = \mathbf{n}$$

$$F_p = \mathbf{F} \cdot \mathbf{p} = (\mathbf{t} \times (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b})) \cdot \mathbf{p} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{t}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n} \quad (\text{テンソル記号で書くと、} F_p = \sigma_{ij} b_j n_i)$$



転位ループの座標系

転位をすべり運動させる力は、応力・バーガースベクトル方向・すべり面法線方向で記述されることがわかり、転位線の方向に依存しないことがわかる。つまり、ある一様応力状態で転位ループが受ける力ほど転位素片においても同じである。

(例)

$t=[001], b=(b,0,0)$ の直線刃状転位

$t=[001], b=(0,0,b)$ の直線らせん転位にかかる PK 力は？

$F=(\sigma_{12}b, -\sigma_{11}b, 0)$ 刃状転位 (y 方向成分は上昇運動成分)

$F=(\sigma_{32}b, -\sigma_{31}b, 0)$ らせん転位 (任意の方向へ運動できるが、実際には結晶方位に規制される)。

※いずれも、すべり運動をする方向の力は、せん断応力とバーガースベクトルの式になっている。

(例題 1)互いに平行な日本のらせん転位

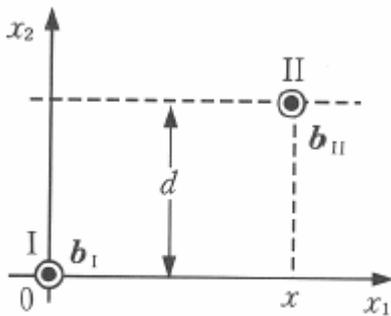


図 5.5 x_3 軸に平行な 2 本のらせん転位

らせん転位 I : $t=[001], b_I=(0,0,b_I)$

らせん転位 II : $t=[001], b_{II}=(0,0,b_{II})$

$$f_{II} = (\sigma \cdot b_{II}) \times t_{II}$$

$$(\sigma \cdot b_{II}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & 0 & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_{II} \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$f_{II} = (\sigma \cdot b_{II}) \times t_{II} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ 0 \end{pmatrix}$$

転位 II での位置の転位 I の応力場は

$$\sigma_{31} = -\frac{\mu b_I}{2\pi} \frac{d}{(x^2 + d^2)}, \quad \sigma_{32} = -\frac{\mu b_I}{2\pi} \frac{x}{(x^2 + d^2)}$$

従って、 f の大きさは

$$|f| = \sqrt{f_1^2 + f_2^2} = \frac{\mu b_I b_{II}}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{x^2 + d^2}} = \frac{\mu b_I b_{II}}{2\pi r}$$

(例題 2)互いに平行な二本の刃状転位 → レポート課題

刃状転位 I : $t=[001], b_I=(b_I, 0, 0)$

刃状転位 II : $t=[001], b_{II}=(b_{II}, 0, 0)$

$$f_{II} = (\sigma \cdot b_{II}) \times t_{II}$$

$$(\sigma \cdot b_{II}) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{II} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{12} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$f_{II} = (\sigma \cdot b_{II}) \times t_{II} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{12} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{12} \\ -\sigma_{11} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$f_x = \frac{\mu b_I b_{II}}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - d^2)}{(x^2 + d^2)^2} \quad \text{すべり成分}$$

刃状転位は直列に並んだほうが安定

(例題 3)互いに垂直な二本のらせん転位 → 転位論の基礎参照

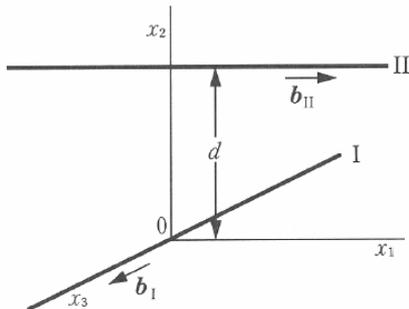


図 5・8 互いに垂直な 2 本のらせん転位

らせん転位 I : $t=[001], b_I=(0, 0, b_I)$

らせん転位 II : $t=[100], b_{II}=(b_{II}, 0, 0)$

$$f_{II} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_{II}) \times \mathbf{t}_{II}$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_{II}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & 0 & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{II} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma_{13} \end{pmatrix}$$

$$f_{II} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_{II}) \times \mathbf{t}_{II} = b_{II} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma_{13} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_{13} \\ 0 \end{pmatrix}$$

転位 II での位置の転位 I の応力場は

$$\sigma_{13} = -\frac{\mu b_I}{2\pi} \frac{d}{(x^2 + d^2)}$$

従って、f の大きさは

$$f_2 = -\frac{\mu b_I b_{II}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{x^2 + d^2} dx = -\frac{\mu b_I b_{II}}{2\pi r}$$

※二本の転位の距離に依存しない

(例題 4)互いに垂直な刃状転位の基礎参照

刃状転位 I : $\mathbf{t}=[001]$, $\mathbf{b}_I=(b_I, 0, 0)$

刃状転位 II : $\mathbf{t}=[010]$, $\mathbf{b}_{II}=(b_{II}, 0, 0)$

$$f_{II} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_{II}) \times \mathbf{t}_{II}$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_{II}) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{II} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{12} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$f_{II} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_{II}) \times \mathbf{t}_{II} = b_{II} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{12} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = b_{II} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma_{11} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{f} = \left(0, \quad 0, \quad -\frac{\mu b_I b_{II}}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(3d^2 + x_2^2)}{(d^2 + x_2^2)^2} \right)$$

f_3 成分は、転位 II の上昇運動にのみ影響、すべり変形には寄与しない。

4.2.2 分解せん断応力（一般化）

転位のすべり運動に対する駆動力は $F_p = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n}$ で与えられる。この力は、すべり面法線方向とバーガースベクトル方向で作る面のせん断応力 τ にバーガースベクトル \mathbf{b} の絶対値をかけたものであることが知られている ($F = \tau b$)。これを証明する。

初期座標系 ([100], [010], [001]) を $\mathbf{e}_i : (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ 、転位ループの座標系 (x 方向をすべり面の法線方向、 y 方向をバーガースベクトルの方向とする) を $\mathbf{e}'_i : (\mathbf{n}, \mathbf{b}/|b|, \mathbf{n} \times \mathbf{b}/|b|)$ とすると、座標変換の回転行列は $\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j = \beta_{ij}$ となる。転位ループの座標系 \mathbf{e}'_i における τ'_{12} を求めるために、座標変換を行う。

(応力の座標変換の定義は $\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\beta}^{-1}$)

$$\tau'_{12} = \beta_{1j} \sigma_{jk} \beta_{2k} = n_j \sigma_{jk} b_k / |b| = F_p / |b|$$

つまり、転位ループ座標系 \mathbf{e}'_i のせん断応力 τ'_{12} は転位の駆動力 F_p を $|b|$ で割ったものである。この応力成分 τ'_{12} を一般に分解せん断応力と呼ぶ。

転位の駆動力 = 分解せん断応力 \times バーガースベクトルの絶対値となる。

4.3 転位の運動と反応

4.3.1 保存運動と非保存運動

すべり変形 (保存運動: $\mathbf{n} \perp \mathbf{b}$) は、すべり面にバーガースベクトルが含まれる場合。すべり変形によって、すべり終わると完全な結晶になる！

それ以外は上昇運動 (非保存運動 $\mathbf{n} \parallel \mathbf{b}$) といって、運動するためには、幾何学上原子の過不足が生じ、点欠陥 (空孔など) が生成される必要がある。図は、刃状転位の上昇運動を示したものである。

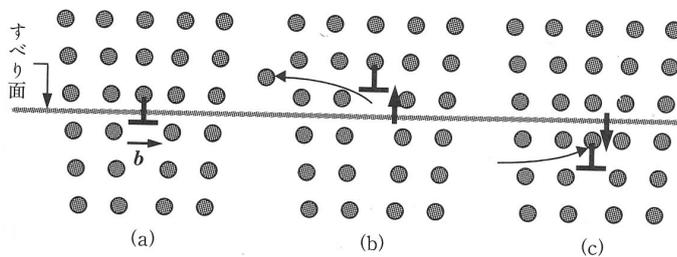


図 6・6 刃状転位の上昇運動 (a), (b) 原子放出型, (c) 原子吸収型

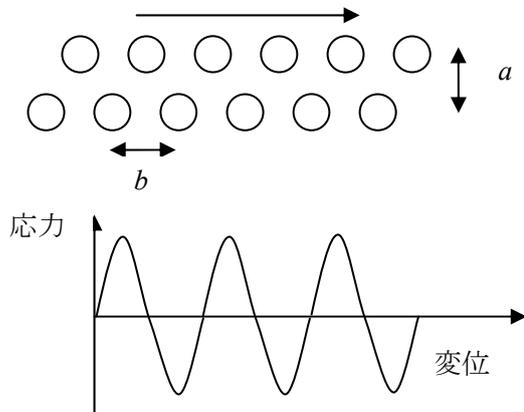
4.3.2 パイエルス応力 (ポテンシャル)

結晶中を転位が動きやすいかどうかを示す指標。あくまでも二次元的で定性的な指標。その物質のすべり面・すべり方向を規定する。

表 2.1 金属および合金の結晶構造とすべり系

金属または合金	結晶構造	すべり面	すべり方向	臨界せん断応力 (MPa)
Al	fcc	{111}	<110>	0.55
Cu	fcc	{111}	<110>	0.90
Cu-10at%Zn	fcc	{111}	<110>	11.7
αFe	bcc	<110>	<111>	15.0
		<112>	"	—
		<123>	"	—
Zn	hcp	{0001}	<11 $\bar{2}$ 0>	0.18
Mg	hcp	{0001}	<11 $\bar{2}$ 0>	0.50
αTi	hcp	{10 $\bar{1}$ 0}	<11 $\bar{2}$ 0>	14.0
FeAl	B2	<110>	<111>	450
		<112>	<100>	—
Ni ₃ Al	L ₂	{111}	<110>	165
		{100}	"	—

定義は以下のように、原子層をある面で反対方向にずらした時に必要な応力



$$\tau_c = \frac{2G}{(1-\nu)} \exp\left(-\frac{2\pi a}{(1-\nu)b}\right)$$

共有結合では高く、転位が動かないため脆性的に破壊する。金属では低く、転位が動くため延性的に破壊する。

この際に必要はエネルギーをパイエルスエネルギーと呼び、すべり易さの指標として同様に用いられる。