The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Dislocatiov core の話
Author(s)	山口, 正治
Citation	大阪大学低温センターだより. 1983, 41, p. 1-3
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/7081
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

研究ノート

Dislocation coreの話

工学部　山口正治（吹田　4443）

図1(a)に示す結晶の上半分を下半分に対して、辷り面(s)に沿って辷りベクトル**b**だけ辷らせたとしよう。もしこの辷りが結晶の途中でとまった場合、そこに図1(b)の様な線状の欠陥が残る。この様な線状の欠陥が転位である。さて、転位のまわりでは、当然のことながら、相隣接する原子間に相対変位が存在する。転位芯（dislocation core）とは、この相対変位が、フックの法則が成り立たぬ程に大きい領域のことである。この領域の拡がり方すなわち転位芯の構造は、転位の運動ひいては結晶の塑性を考える上で決定的に重要な意味を持っている。なぜなら、個々の転位を運動させるために必要な力（パイエルス力と呼ばれる）は転位芯の構造に依存するし、しかも転位芯の構造の幾何学的特徴が、直接的に結晶塑性の異方性に結びついている場合も多いからである。(1), (2)

我々は、この転位芯の特性が直接的に結晶塑性上の特性に結びついている場合、換言すれば、塑性に対するdislocation core effectsが顕著であるいろいろな場合について研究をつづけている。本稿ではA_3B組成を持つ$L1_2$型金属間化合物の中の転位をとり上げ、そのcore structureとcore effectsに関する我々の最近の研究の一端を述べてみたいと思う。$L1_2$型構造は面心立方を基礎にした規則構造でB原子が面心立方の体隅を占め、3個のA原子が面心を占めている構造であり、よく知られている様に、$L1_2$型構造を持つ金属間化合物の中には、Ni_3Alに代表される様な、高温で温度の上昇につれて強度も増加するという新しい高温材料としての魅力にあふれた化合物が含まれている。近年、この高温での特異な塑性的性質に加えて、低温でも延性を失わないことから、低温におけるこの種の化合物の塑性にも興味が持たれはじめている。

さて、転位芯の領域では、転位のまわりの変位に関する弾性解は成り立たないので、計算機シミュレーションの方法によって転位芯の構造を求めている。計算は、(i)まず、原子間に中心力ポテンシャルを仮定し、初期条件として弾性解に基づく転位のまわりの変位を結晶を構成する各原子に与える、(ii)その後、転位芯のまわりの原子を少しずつ移動（relax）させて、各原子間に働く力が全て十分小さくなる静的な平衡状態をさがす、という手順で行なっている。詳しくは文献(3)を参照されたい。

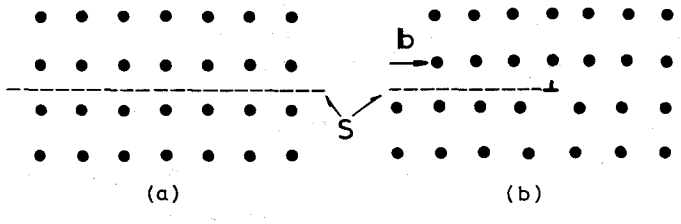

図 1.　(a) 完全な結晶　(b) 転位を含む結晶

$L1_2$型構造の場合には、よく知られている様に$\frac{1}{2}$＜110＞を fault vector とする逆位相境界（ＡＰＢ）や$\frac{1}{6}$＜112＞あるいは$\frac{1}{3}$＜112＞を fault vector とする積層欠陥が存在する。しかしこの中で、このタイプの構造の結晶中で常に安定に存在し得るのは$\frac{1}{3}$＜112＞積層欠陥だけで、$\frac{1}{2}$＜110＞ＡＰＢや$\frac{1}{6}$＜112＞積層欠陥は必ずしも常に安定に存在し得る訳ではない。[4] 特に、強固な結合を持つ化合物の場合には$\frac{1}{2}$＜110＞ＡＰＢや$\frac{1}{6}$＜112＞積層欠陥は、安定に存在し得ない場合もあり得る。ところで、$L1_2$ 型構造は fcc を基礎としているから、塑性を担う転位のバーガース・ベクトル（図１の辷りベクトル$\boldsymbol{b}$に等しい）は＜110＞である。しかし、転位の弾性エネルギー（バーガース・ベクトルの二乗に比例する）を下げるために、この転位は、前述のＡＰＢや積層欠陥を介して可能な限り小さいバーガース・ベクトルを持つ部分転位に分解しようとする。

すなわち、〔$\bar{1}01$〕転位を例にとれば、ＡＰＢや$\frac{1}{6}$＜112＞積層欠陥が安定なら、

$$[\bar{1}01] \rightarrow \frac{1}{2}[\bar{1}01] + \frac{1}{2}[\bar{1}01] \quad \cdots\cdots (1)$$

$$[\bar{1}01] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{1}{6}[\bar{2}11] + \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{1}{6}[\bar{2}11] \cdots\cdots (2)$$

のいずれかに従って、又$\frac{1}{3}$＜112＞積層欠陥のみが安定な場合には、

$$[\bar{1}01] \rightarrow \frac{1}{3}[\bar{2}11] + \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}2] \quad \cdots\cdots (3)$$

に従って分解する。(1)〜(3)の分解によって生じる$\frac{1}{2}$＜110＞，$\frac{1}{6}$＜112＞，$\frac{1}{3}$＜112＞部分転位について、それぞれの転位芯の構造とその応力下での挙動を研究した結果、$\frac{1}{2}$＜110＞，$\frac{1}{6}$＜112＞転位の場合には、転位芯の構造、動的挙動共に fcc 金属中の同じバーガース・ベクトルを持つ転位とほとんど同じであることがわかった。しかし$\frac{1}{3}$＜112＞転位の場合、その転位芯はたとえば図２に示す様に複雑な構造を持っていることが明らかとなった。[5] 図の(a)，(b)は、それぞれ相隣接する原子

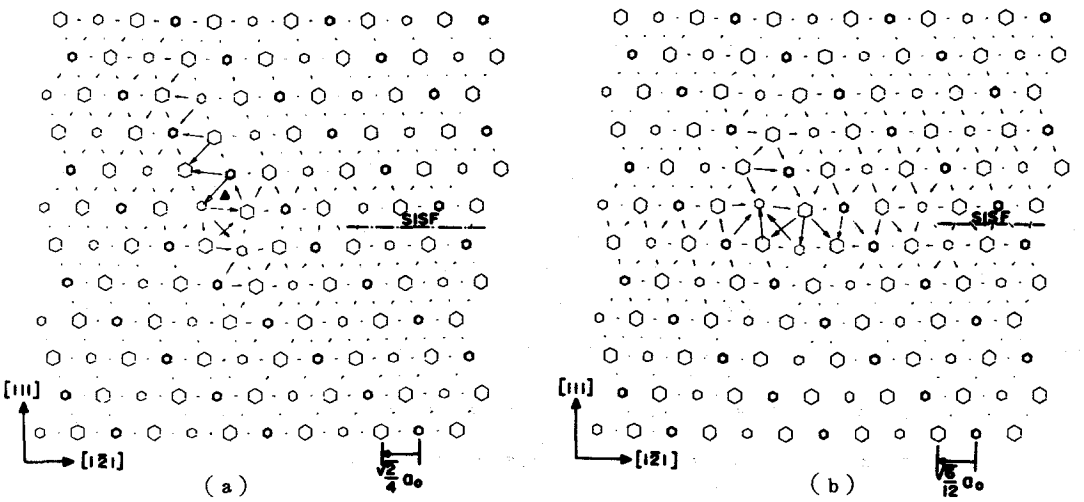

図 2.　$L1_2$ 型格子中の$\frac{1}{3}$＜112＞転位の転位芯

(a) 転位芯のまわりの相対変位（転位線と平行な成分）(b) 転位芯のまわりの相対変位（転位線に垂直な成分）一重と２重の六角形はそれぞれＡ，Ｂ原子を、大小の六角形は隣接する２枚の（$\bar{1}01$）面上の原子を示している。a_0は格子定数。

間に存在する相対変位の転位線と平行な成分および垂直な成分の大きさと方向を矢印をもって示している。従って、転位芯は大きな矢印が分布する領域であるということになる。一見してわかる様に、転位芯はこの転位の辷り面で $\frac{1}{3}$<112> 積層欠陥(図ではSISF(Superlattice Intrinsic Stacking Fault)と表示されている)がのっている(111)面以外の面にも拡がっていて、(111)面を辷るには不都合な形をしていることがわかる。大きなバーガース・ベクトルに由来する転位芯のまわりの大きな変位が、転位芯のエネルギーを上げない様に分布した結果、辷り運動には不都合な転位芯の構造になってしまったということが出来ると思う。事実(111)面にセン断応力をかけると、応力の増加と共に転位芯は、徐々にその形を変えて、次第に(111)面上にのみ拡がった平面的な転位芯($\frac{1}{2}$<110>, $\frac{1}{6}$<112>部分転位の転位芯は、無応力下ですでにその様な平面的な構造となっている)となり、(111)面上を辷ることが出来る状態となる。$\frac{1}{3}$<112>転位のパイエルス力は、この様な転位芯の構造変化を起こさせるために必要な力ということになりかなり高くなる。又、転位芯の構造が等方的でないから応力状態にも依存するはずである。このことは、$L1_2$化合物の<110>転位が $\frac{1}{2}$<110> APB や $\frac{1}{6}$<112> 積層欠陥を介して分解をしている場合と $\frac{1}{3}$<112> 積層欠陥のみを介した分解をしている場合とでは、その塑性、特に低温塑性に著しい差異をもたらすであろうことを示唆している。たとえば、前者の場合、fcc 金属と同様に、低温での降伏応力にはほとんど温度依存性は認められないはずであるし、後者の場合、大きい温度依存性や結晶方位依存性などの dislocation core effects が現われるはずである。$L1_2$化合物の低温塑性の研究は未だ十分ではないが、すでに低温で強度の著しい温度依存性を示す化合物(たとえば Pt_3Al, Pt_3Ga など[6])も発見されている。我々は、この種の $L1_2$ 化合物の低温塑性の特徴を、$\frac{1}{3}$<112>転位の動的特性を考えることによって説明出来ると考えている。今後、いろいろな応力状態での $\frac{1}{3}$<112> 転位の動的挙動を計算によって明らかにすると共に、我々自身、低温センターのインストロン等の装置を用いて $L1_2$ 型化合物の低温塑性に挑戦し、実験結果と計算結果の比較を試みたいと考えている。

参考文献

(1) V. Vitek and M. Yamaguchi, *Interatomic Potentials and Crystalline Defects*, edited by J. K. Lee (TMS A. I. M. E. Pub. 1981) P. 223.

(2) M. Yamaguchi, *Mechanical Properties of BCC Metals*, edited by M. Meshii (TMS A. I. M. E Pub., 1982).

(3) 山口正治, 日本金属学会会報 **7** (1976) 427.

(4) M. Yamaguchi, V. Vitek and D. P. Pope, Phil. Mag. A **43** (1981) 1027.

(5) M. Yamaguchi, V. Paidar, D. P. Pope and V. Vitek, Phil. Mag. A **45** (1982) 867.

(6) D. M. Wee, O. Oya and T. Suzuki, Trans. Japan Inst. Metals, **21** (1980) 237.