

# 面心立方金属最密格子面内拡張転位の転位線形状と 平均ヤング率による弾性定数決定

武末 尚久<sup>1)</sup>・藤 昇一<sup>1)</sup>

(平成25年11月21日受理)

## Determination of Elastic Constants of a Face-centered Cubic Crystal from Line Shapes of the Dislocations Extended in the Close-packed Planes and the Orientationally Averaged Young's Modulus

Naohisa TAKESUE<sup>1)</sup> and Shoichi TOH<sup>1)</sup>

(Received November 21, 2013)

### Abstract

Investigations of mechanical properties of crystals often require their elastic constants. The measurements are usually carried out by using single crystals. However, many cases of crystal growth do not supply the samples with the excellent qualities. Therefore, we have tried to develop a method for the determination which employs no single crystal. For this try, we used expression of line tension of bowed dislocations in the basal plane of a simple hexagonal crystal system, and invoked the morphological analogy with a simple face-centered cubic whose perfect dislocation tends to resolve into two partials, called *Heidenreich-Shockley half dislocations*. If they are extended in the close-packed plane, producing a stationary crystal defect in between of them, called *stacking fault*, the fault energy has a relationship with the line tension of the partials. This fact gives the equilibrium equation including the three elastic constants which are reduced to the orientationally averaged Young's modulus, easily obtained experimentally. The three values are determined mainly by a ratio of radii of curvature of either the partial lines. Assuming the several ratios between the pure edge and screw lines provide the reduced elastic constants which have been found to show their systematic dependence on the ratio. This result really makes us to imagine universality on the dependence for this cubic system, metals and alloys, at any temperature or pressure, which must be evidenced experimentally. The proof is to obtain through our future work.

### 1. 緒言

近年、結晶の弾性定数は、ヤング率、剛性率の計算だけでなく、金属・合金の理想強度を評価することにも用いられている。その例として、ゴムメタルやその類の合金に関する研究があげられる<sup>[1-3]</sup>。弾性定数の測定法は様々であり、どの手法にも単結晶が必要とされるが、その育成が困難であるケースは多い。この問題を打開するために、結晶欠陥の構造が結晶に弾性場（内力）を作ることに着目して、多結晶を用いた弾性定数の測定法を確立したい。

### 2. 転位の線張力と弾性定数

結晶欠陥の例として、六方晶P6の最密格子面内の転位を取り上げ、それが結晶に及ぼす内力を、以下、数式で表現していく。なお、この結晶系の最密面の形態は、面内の力学的な等方性を仮定しやすい<sup>[4-6]</sup>ので、数式表現を単純化できる。まず、等方最密面内で、Fig.1のような、転位線が直線の転位を考える。その単位長さあたりに蓄えら

1) 福岡大学理学部物理科学科, 〒814-0180 福岡市城南区七隈 8 -19- 1

Department of Applied Physics, Faculty of Science, Fukuoka University, 8 -19- 1, Nanakuma, Jonan-ku, Fukuoka 814-0180, Japan

れる弾性エネルギーは次式で表される<sup>[4]</sup>。

$$E(\theta) = \frac{b^2}{4\pi} (K_e \sin^2 \theta + K_s \cos^2 \theta) \ln \frac{R}{r_0} \quad (1)$$

ここで、 $E(\theta)$  は弾性エネルギー、 $b$ はこの転位のバーガースベクトルの大きさ、 $\theta$ は転位線とバーガースベクトルの成す角、 $r_0$ は転位芯のコア半径、 $R$ は転位芯まわりで転位芯の影響がない範囲を示す距離である（適当なカットオフ）。 $K_e$ と $K_s$ は、それぞれ弾性エネルギーのedge成分とscrew成分を与える項で、次式の通り六方晶の独立な5つの弾性定数の中を含む。

$$K_e = (\bar{c}_{13}^h + c_{13}^h) \left\{ \frac{c_{44}^h (\bar{c}_{13}^h - c_{13}^h)}{c_{33}^h (\bar{c}_{13}^h + c_{13}^h + 2c_{44}^h)} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$K_s = \left\{ \frac{1}{2} c_{44}^h (c_{11}^h - c_{12}^h) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

ここで、 $c_{ij}^h$  ( $i, j$ は1以上の整数) は六方晶の弾性定数であり、 $\bar{c}_{13}^h$  は、 $\bar{c}_{13}^h = (c_{11}^h c_{33}^h)^{\frac{1}{2}}$ である。一方、Fig.2のように、湾曲した転位線の場合、式(1)に“泡の表面張力モデル”の考え方を適用することにより、転位線にはたらく内力、すなわち線張力は次式で表される<sup>[7-9]</sup>。

$$T = E(\theta) + \frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2} \quad (4)$$

ここで、 $T$ は線張力である。は、(1)を(4)に代入することにより、次式で与えられる。

$$T = \frac{b^2}{8\pi} \{K_e (1 + 3 \cos 2\theta) + K_s (1 - 3 \cos 2\theta)\} \ln \frac{R}{r_0} \quad (5)$$

いま、六方晶の最密面積層体と面心立方の最密面積層体を比較してみる。後者の空間群はP3mであるので、後者はFig.3(a)に示すように明らかに六方晶と異なる結晶構造を持つ<sup>[5]</sup>。しかし、両積層体の形態は大変良く似ているので、六方晶と同様に、面心立方最密面内に力学的な等方性を与えると、空間群はFig.3(b)に示すようにクラス6になり、両積層体は本質的に同じ結晶構造のものと見なせる。そのような発想に基づいて、次の軸変換マトリックス  $\{Q\}$

$$\{Q\} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & -\sqrt{6} & -\sqrt{3} & \sqrt{2} & -\sqrt{6} & -\sqrt{3} & \sqrt{2} \\ 4 & 2 & 0 & 0 & 0 & -2\sqrt{2} & 0 & 0 & -2\sqrt{2} \\ 1 & 2 & 3 & \sqrt{6} & \sqrt{3} & \sqrt{2} & \sqrt{6} & \sqrt{3} & \sqrt{2} \\ -2 & 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & -2\sqrt{2} & 0 & -2\sqrt{3} & \sqrt{2} \\ 1 & 2 & -3 & -\sqrt{6} & \sqrt{3} & \sqrt{2} & \sqrt{6} & -\sqrt{3} & \sqrt{2} \\ -2 & 2 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & \sqrt{2} & -\sqrt{6} & 0 & -2\sqrt{2} \\ -2 & 2 & 0 & 0 & -2\sqrt{3} & \sqrt{2} & \sqrt{6} & 0 & -2\sqrt{2} \\ 1 & 2 & -3 & \sqrt{6} & -\sqrt{3} & \sqrt{2} & -\sqrt{6} & \sqrt{3} & \sqrt{2} \\ -2 & 2 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & -2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{3} & \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (6)$$

で、面心立方結晶の3本の直交軸を回転させると<sup>[5]</sup>、立方晶の弾性定数マトリックス $\{c\}$ には次の操作が施される。

$$\{c'\} = \{\tilde{Q}\} \{c\} \{Q\} \quad (7)$$

ここで、 $\{c\}$ は回転操作前の弾性定数マトリックスであり、各要素は $c_{11}$ 、 $c_{12}$ 、 $c_{44}$ か0である。また、 $\{\tilde{Q}\}$ は $\{Q\}$ の転置行列であり、 $\{c'\}$ は回転操作により得られるものである。 $\{c'\}$ の要素は次式で表されるので、

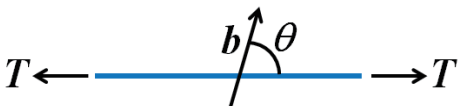


Fig. 1. 直線の転位線。Tは転位に働く線張力。

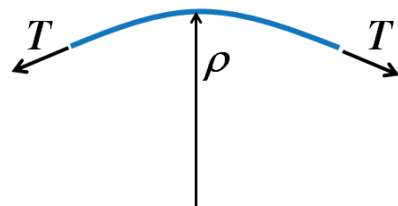


Fig. 2. 湾曲した転位線。rhoは転位線の曲率半径。

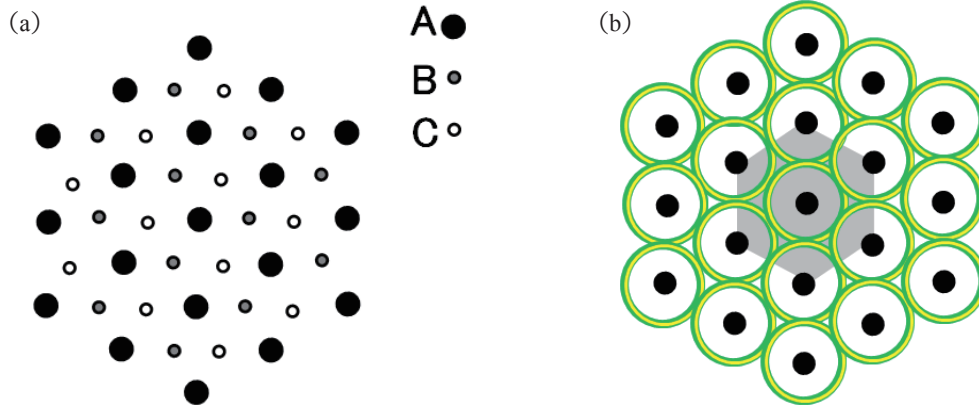


Fig. 3. (a)面心立方の最密面積層体。空間群はP3m。(b)最密面内を等方とした場合の模式図。

$$\{c'\} = \begin{pmatrix} c'_{11} & c'_{12} & c'_{13} & 0 & c'_{15} & 0 & 0 & c'_{15} & 0 \\ c'_{12} & c'_{11} & c'_{13} & 0 & -c'_{15} & 0 & 0 & -c'_{15} & 0 \\ c'_{13} & c'_{13} & c'_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c'_{44} & 0 & -c'_{15} & c'_{44} & 0 & -c'_{15} \\ c'_{15} & -c'_{15} & 0 & 0 & c'_{44} & 0 & 0 & c'_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c'_{15} & 0 & c'_{66} & -c'_{15} & 0 & c'_{66} \\ 0 & 0 & 0 & c'_{44} & 0 & -c'_{15} & c'_{44} & 0 & -c'_{15} \\ c'_{15} & -c'_{15} & 0 & 0 & c'_{44} & 0 & 0 & c'_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c'_{15} & 0 & c'_{66} & -c'_{15} & 0 & c'_{66} \end{pmatrix} \quad (8)$$

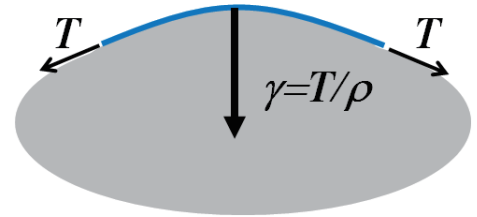


Fig. 4. 積層欠陥の停留状態。

この式の右辺とP6の弾性定数マトリックス<sup>[5,6]</sup>を照合すると、以下の関係式が得られる。

$$c_{11}^h = c_{11} + \frac{1}{2}(2c_{44} + c_{12} - c_{11}) \quad (9-1)$$

$$c_{33}^h = c_{11} + \frac{2}{3}(2c_{44} + c_{12} - c_{11}) \quad (9-2)$$

$$c_{13}^h = c_{12} - \frac{1}{3}(2c_{44} + c_{12} - c_{11}) \quad (9-3)$$

$$c_{12}^h = c_{12} - \frac{1}{6}(2c_{44} + c_{12} - c_{11}) \quad (9-4)$$

$$c_{44}^h = c_{44} - \frac{1}{3}(2c_{44} + c_{12} - c_{11}) \quad (9-5)$$

$$c_{66}^h = c_{44} - \frac{1}{6}(2c_{44} + c_{12} - c_{11}) \quad (9-6)$$

$$c_{15}^h = \frac{\sqrt{2}}{6}(2c_{44} + c_{12} - c_{11}) \cong 0 \quad (9-7)$$

ここで、照合しやすいように、 $\{c'\}$ の22の軸と33の軸をあらかじめ交換して(8)の右辺を示した。以上の近似を利用すれば、 $T$ と $\{c\}$ が明確な関係を持ち得ることが分かる。

ここで、面心立方結晶の完全転位について考える。そのバーガースベクトルは、単純な弾性論に従えば、最密面 $\{111\}$ 内の $\frac{1}{2}[1\bar{1}0]$ であり、その転位により結晶は弾性エネルギーを蓄積するが、しばしば以下のように2つの半転位に分解し、格子ひずみを緩和して弾性エネルギーを低くするときがある。

$$\frac{1}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{1}{6}[1\bar{2}1] + \frac{1}{6}[2\bar{1}\bar{1}] \quad (10)$$

右辺の半転位は、Heidenreich-Shockleyの半転位と呼ばれる。もしこれらが最密面内でFig.4のように湾曲して拡張すれば、両者の間には積層欠陥が生じ、欠陥の停留状態について以下の平衡状態方程式が得られる<sup>[4]</sup>。

$$\gamma = \frac{T}{\rho(\theta)} \quad (11)$$

ここで $\gamma$ は積層欠陥エネルギー、 $\rho(\theta)$ は半転位の転位線の曲率半径であり、転位線が湾曲していれば必ず $\theta$ の関数となる。(11)に(5)を代入し、曲率半径の比 $\frac{\rho(\theta)}{\rho(0^\circ)}$ について式を整えると、

$$\frac{\rho(\theta)}{\rho(0^\circ)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{K_e(1+3\cos 2\theta)}{2K_e - K_s} + \frac{K_s(1-3\cos 2\theta)}{2K_e - K_s} \right\} \quad (12)$$

を得る。ここで、 $\rho(0^\circ)$ は、 $\theta = 0^\circ$ のとき、すなわち純らせん転位の転位線の曲率半径である。(12)の両辺が無次元量を保ち続けるように、全結晶方位にわたって平均をとったヤング率、 $\bar{E}$ 、を用い、(12)の右辺に $\frac{\bar{E}}{E}$ を掛けて、次のように $K_e$ と $K_s$ を $\bar{E}$ で規格化 (reduced) する。ついで、それらに含まれる弾性定数も同様に規格化する。

$$\frac{K_e}{\bar{E}} = \frac{(c_{13}^h + c_{13}^h)}{\bar{E}} \left\{ \frac{(c_{44}^h / \bar{E})(c_{13}^h - c_{13}^h) / \bar{E}}{(c_{33}^h / \bar{E})(c_{13}^h + c_{13}^h + 2c_{44}^h) / \bar{E}} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

$$\frac{K_s}{\bar{E}} = \left\{ \frac{1}{2} \frac{c_{44}^h (c_{11}^h - c_{12}^h)}{\bar{E}} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

$\bar{E}$ は多結晶から実験的に得られる量であり、また、直交座標空間の全方位にわたるヤング率を平均しても得られる<sup>[3,6]</sup>。その多様体についても $\bar{E}$ で規格化すると次式を得る。

$$\frac{E_{xyz}}{\bar{E}} = \left\{ \frac{(c_{11} / \bar{E}) + (c_{12} / \bar{E})}{(c_{11} - c_{12}) / \bar{E} \cdot (c_{11} + 2c_{12}) / \bar{E}} + \left( \frac{1}{c_{44} / \bar{E}} - \frac{2}{(c_{11} - c_{12}) / \bar{E}} \right) (l^2 m^2 + m^2 n^2 + n^2 l^2) \right\}^{-1} \quad (15)$$

ここで、 $E_{xyz}$ は、任意の $[xyz]$ 方向のヤング率で、多様体を描く関数である。また、 $l, m, n$ は $[xyz]$ 方向と3本の主軸それぞれとの間の方向余弦である。なお、 $\frac{E_{xyz}}{\bar{E}}$ を全方位で平均すると1になる。 $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ をいろいろ変えて、(9-1)~(9-5)、(12)、(13)、(14)を用いて、(15)の平均値を与える弾性定数の規格化値を探索してみた。このとき、異方性因子 $A$ 、

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} = \frac{2(c_{44} / \bar{E})}{(c_{11} - c_{12}) / \bar{E}} \quad (16)$$

を1 (等方) として探索を始め、解が得られるように1より変化させていった。

### 3. 結果と考察

Fig.5に $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ に対する弾性定数の規格化値をプロットした。右側に、転位線を黒い $\frac{1}{4}$ 楕円で書いた。図中に示されている軸比は、 $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ より換算した長軸短軸比である。図より、規格化値は、に依存して変化することが分かる。図中の3本の曲線は、面心立方金属や合金については、温度、圧力、濃度によらず、普遍のものであると期待する。今後は、力学データが既知である面心立方金属について、透過電子顕微鏡によりそれぞれの金属の $\theta$ と $\rho(\theta)$ を採取し、データがユニバーサルカーブにのることを実証する。もし実証されれば、 $\theta, \rho(\theta)$ 、平均ヤング率を知るだけで、面心立方合金の力学物性が、温度、圧力、濃度によらず、容易に評価できるので、合金設計を高効率化できる。また、Fig.6に $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ に対する $A$ をプロットした。図より、 $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ が1に近い、すなわち、転位線が真円に近い

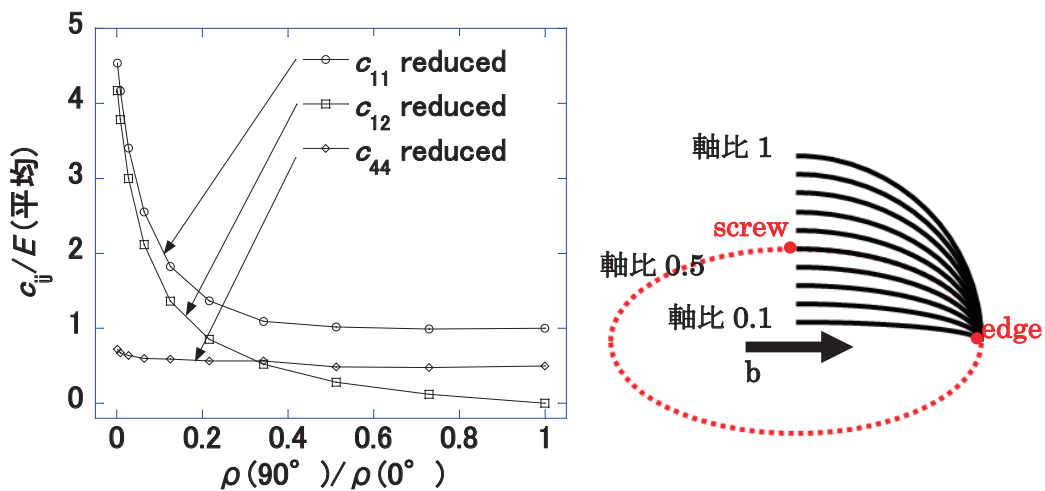


Fig. 5. 左の図は、 $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ に対する弾性定数の規格化値。右の図は、転位線を黒い $\frac{1}{4}$ 楕円で書いた。

図中の軸比は、 $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ より換算した長軸短軸比である。

いと、 $A$ も1に近く、結晶は等方的であることが分かる。このことより、逆のケースは容易くわかる。

#### 4. 結論

単結晶を使わない弾性定数測定法を開発するために、面心立方晶のHeidenreich-Shockleyの半転位が結晶に及ぼす内力に着目し、六方晶でよく使われる最密面内等方性を面心立方結晶にも適用し、平均ヤング率で規格化した弾性定数を得た。結果、規格化値は $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ に依存することが分かった。また、異方性因子も $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ に依存することが分かり、 $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ が1に近いとき異方性因子も1に近いことが分かった。今後、実験を行って、本研究結果、予想などの実証に努めていく。

#### <参考文献>

- [1] T. Saito et al., Science **300** (2003) 464.
- [2] S. Kuramoto et al., Appl. Phys. Lett. **95** (2009) 211901.
- [3] N. Takesue et al., J. of Crystal Growth **311** (2009) 3319-3324.
- [4] Y. T. Chou and J. D. Eshelby, J. Mech. Phys. Solids **10** (1962) 27-34.
- [5] “Theory of Dislocations”, J. P. Hirth and J. Lothe, Wiley-Interscience (1982) Ch.13.
- [6] “Physical Properties of Crystals”, J. F. Nye, Oxford University Press (1985) Ch. 8.
- [7] “The Physics of Powder Metallurgy”, Ed. W. E. Kingston, C. Herring, McGraw-Hill (1951) Ch. 8.; “Structure and Properties of Surfaces”, Eds. R. Gomer and C. S. Smith, C. Herring, Chicago University Press (1953) Ch. 1.
- [8] “Electron Microscopy and Strength of Crystals”, Eds. G. Thomas and J. Washburn, S. Amelinckx and P. Delavignette, Interscience (1961) Ch. 8.
- [9] R. Siems, P. Delavignette, and S. Amelinckx, Zeitschrift fur Physik **165** (1961) 502.

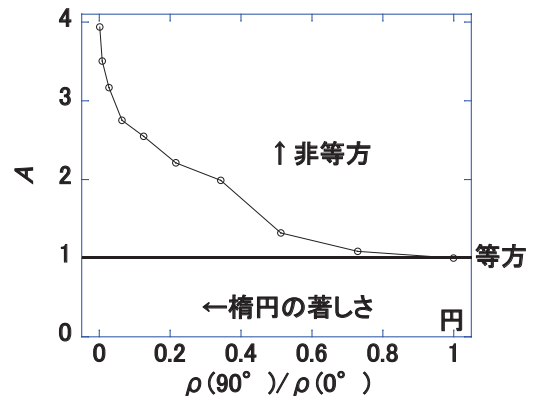


Fig. 6.  $\frac{\rho(90^\circ)}{\rho(0^\circ)}$ に対する $A$ のプロット。