

弦モデルによる転位ループの熱活性化過程の解析

大澤, 一人
九州大学応用力学研究所

蔵元, 英一
九州大学応用力学研究所

<https://doi.org/10.15017/26806>

出版情報：九州大学応用力学研究所所報. 129, pp.143-150, 2005-09. Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University

バージョン：

権利関係：

弦モデルによる転位ループの熱活性化過程の解析

大澤一人*¹ 蔵元英一*

(2005 年 7 月 29 日受理)

Analysis of Thermally Activated Processes of Dislocation Loops within a Line Tension Model

Kazuhito OHSAWA, Eiichi KURAMOTO

E-mail of corresponding author: *ohsawa@riam.kyushu-u.ac.jp*

Abstract

We report an analytical study of thermally activated transport of perfect dislocation loops with high-mobility in terms of a line tension model, where the dislocation loops are assumed to be flexible strings with line tension. The activation energy and saddle-point configuration of the dislocation loops are analytically expressed within the framework of the present model. The activation energy increases with the loop length and converges to a finite value. However, the features of the thermally activated motion remarkably changes depending on the loop length. If the dislocation loops are longer than a critical length L_c , the saddle-point configuration is the well-known double-kink type. On the other hand, if the dislocation loops are shorter than L_c , the saddle-point configuration is the so-called trivial solution, that is, the dislocation loops overcome the potential barrier without changing their shapes except for thermal fluctuations. The former is regarded as dislocation-like transport, while the latter is point-defect-like migration. Therefore, as the dislocation loops grow, a transition from point defect to dislocation substantially occurs.

Key words : *dislocation loop, self interstitial atom cluster, radiation damage, thermal activation, saddle point, transition, bifurcation*

1. はじめに

転位ループの熱活性化による運動は主に計算機による分子動力学 (MD) シミュレーションによって研究されてきた。しかしながら、転位を張力を持つ弦 (Line Tension Model) とみなす古典的弾性モデルによる研究はまったくされていない。弾性モデルによる研究は様々な制約を受けるものの、物理現象を大局的に理解するには極めて役に立つ場合がある。また、そうすることで計算機シミュレーションだけでは見えてこない新しい視点を提供することもある。そこで本研究では転位ループの熱活性化過程に対応する弾性モデルを提案し、それから導出される結果、特に点欠陥から転位への一種の遷移が起こるといふ格子欠陥に関する新しい概念を紹介する¹⁾。

転位ループは高エネルギー粒子で照射された試料中によく見出される²⁾。その形が正六角形など対称性の高い形状のものもあり Prismatic Dislocation Loop と呼ばれることがある。特にカスケードと呼ばれる大きな損傷の周囲には自己格子間原子すなわち Self Interstitial Atom (SIA)

型の転位ループ (I-loop) が形成されることが MD シミュレーションによって明らかになった³⁾。それ以来 I-loop と照射損傷組織の形成に関する研究が盛んになった。たとえば Production Bias Model^{4, 5)} によると、I-loop の一次元 (1D) 運動⁶⁾ が損傷組織の形成に大きな役割を果たすとされている。

MD シミュレーションでは I-loop は 1 つの結晶面上に配置された SIA の集合体として扱われる。つまり SIA 集合体の縁の部分が刃状転位の転位線に対応する。それぞれの原子の運動は経験ポテンシャルを用いて計算される。純粋な α -Fe のシミュレーションは特に重要視されておりその有限温度における原子配置や活性化エネルギーが計算されている^{7, 8, 9, 10)}。特に形が正六角形になるマジックナンバー (7, 19, 37, 61, 91, ...) で構成された I-loop には関心が寄せられている⁷⁾。これらのシミュレーションによると I-loop (SIA 集合体) は極めて動きやすく、結晶の最密充填方向に 1D 的に拡散する。このような運動は crowdion の同様な 1D 運動と関連づけて説明できる¹¹⁾。と言うのも、I-loop はその原子構造を考慮すると平行な crowdion が多数集まった構造と考えられるからである^{7, 8)}。厳密に言え

*1 九州大学応用力学研究所

ば、 $\langle 111 \rangle$ split dumbbell と crowdion は区別されるべきではあるが⁷⁾、原子配置がほぼ同じなので本論文では両者を単に crowdion を呼ぶことにする。

さて既に述べたのであるが、多くの物理現象は連続体モデルなどによる解析があった後に計算機による数値シミュレーションがされるのが一般的である。格子欠陥関連の仕事でも、たとえば転位と不整合析出物の相互作用は Orowan 機構^{12, 13)} としてよく知られている。この Orowan 機構も最初は弾性モデルの枠組みで議論された後に、近年の計算機の著しい発達により MD シミュレーションによる研究が可能になった¹⁴⁾。言うまでもないが、弾性モデルによる解析と数値計算の結果は普通は完全に一致しない。しかしながら、両者の結果を比較することは研究の進歩のためにたいへんに示唆に富む有益なことである。そこで本論文では弾性モデルを使って転位ループの運動解析をしようと思う。

2. 転位ループの弦モデル

転位の弾性モデルでよく使われてきたのは弦モデル (Line Tension Model) である。そこでは転位はポテンシャルの影響を受ける張力を持った紐のように記述される。弦モデルは今までも無限に長い直線状転位がパイエルスポテンシャル (直線状転位の感じるポテンシャル) の影響下で運動する過程を研究するのに使われている^{15, 16, 17)}。その時、転位の活性化エネルギーは古典的な反応速度論で計算される¹⁸⁾。反応速度論では熱活性化過程は1つの安定状態から隣の安定状態へ向かう高次元位相空間中の遷移経路 (いわゆる minimum energy path) として表現される。遷移経路上の最もエネルギーの高い所が鞍点で、そこと最初の安定点とのエネルギー差が活性化エネルギーである。

本研究ではこのような研究の歴史に沿い、さらに転位ループの問題に合うように転位の弦モデルを改良した。そこで Fig. 1 のように円柱側面に巻き付いた刃状転位がその面上をすべるようなモデルを導入する。この転位ループは z 方向に法線を持つ面上に集積した SIA 集合体の縁に対応し、そのため転位ループの Burgers ベクトルは z 方向に向いている。このモデルは金属中で観察されたり、MD シミュレーションでも再現される SIA 集合体の 1D 運動をよく反映するように作られた。

Fig. 1 の弦モデルの妥当性について考えてみよう。実際の金属中の転位ループ (SIA 集合体) は単純な弦モデルよりもずっと複雑である。たとえば、 α -Fe 中の SIA 集合体は $\{111\}$ 面上というよりも $\{110\}$ 面上に乗っている⁷⁾ と言われている。従って、SIA 集合体が運動する方向は必ずしもその集積面に対して垂直ではない。また、結晶格子中の SIA 集合体を Fig. 1 のように円形に仮定するのは単純化のし過ぎと思われるかもしれない。だが、このような問題は将来弦モデルを改良すれば解決できるだろう。しか

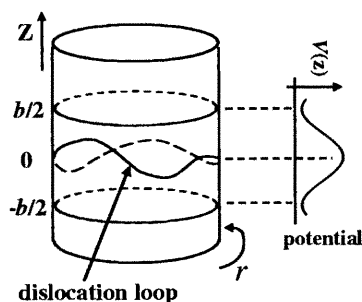


Fig. 1 Dislocation loop within the line tension model. A flexible edge dislocation with Burgers vector parallel to the z axis is on a circular cylinder. The potential barrier has maximum at $z = 0$ and minimum at $z = \pm b/2$.

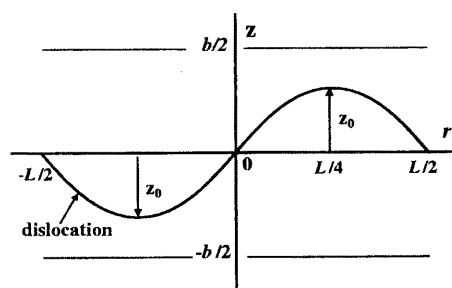


Fig. 2 Schematic view of the saddle-point configuration of the dislocation loop of the double-kink type. Parameter z_0 indicates the magnitude of the bow-out of the dislocation.

し、それ以上に重大な弦モデルの欠点がある。それは転位線の自己相互作用^{19, 20)} が考慮されていないことである。特に本論文で問題にしているような小さな転位ループの場合その影響が心配される。そこで、しばらく解析解を得るために自己相互作用は無視するが、後でその影響について評価することにする。幸いにも、その影響はそれほど大きくないことがわかる。

以降は例として BCC 金属中の、特に α -Fe 中の、格子間原子タイプの転位ループについて述べる。しかし、本論文で使った方法は、もしも可動型で拡張していない転位であれば、たとえば FCC 金属中の転位ループ²¹⁾ にも少し改良をすれば応用できるだろう。

3. 基本方程式

転位の弦モデル Fig. 1 を使って鞍点における転位ループの形状を計算する。転位の感じるポテンシャル $V(z)$ は $z = \pm b/2$ で極小、 $z = 0$ で極大をとることを仮定する。今後は Fig. 2 のように転位線の変位は展開図上に表示す

る。従って、周期的境界条件がこの図の横軸方向に課されている。無限に長い直線状転位の場合、熱活性化過程における鞍点構造はキंक対構造であることはよく知られている^{15, 16, 17)}。そこで、転位ループの場合も同様にその鞍点構造は Fig. 2 で示すようなキंक対構造であることを最初は仮定する。また図中のキंकの張り出しに対応する変数 z_0 は解析解を得るために重要なパラメーターである。鞍点構造としては多重キंक構造²²⁾ も考えられるが、それが与える活性化エネルギーはキंक対構造のものよりも大きいので今後は考えない。

転位の弦モデルより転位ループの全エネルギー E_t は次のようになる^{15, 16, 17)}。

$$E_t = \int_{-L/2}^{L/2} \left\{ \frac{1}{2} \gamma_0 \left(\frac{dz}{dr} \right)^2 + V(z) \right\} dr \quad (1)$$

ここで $z(r)$ は r における転位線の変位、 γ_0 は単位長さ当たりの転位のエネルギー(張力)、 L はループの全長である。厳密に言えば L は転位が巻き付いている円柱の周の長さであるが、熱活性化過程の間は転位ループの長さがほとんど一定なので単に L を転位ループの長さと呼ぶ。さらに、転位ループは十分滑らかであること、すなわち dz/dr はどこでも小さいことを仮定する。実際に dz/dr は式(4)からその最大値が計算できる。

転位の状態が安定点か鞍点にある場合はどちらも次のような力学的平衡条件が成立する。

$$\gamma_0 \frac{d^2 z}{dr^2} = \frac{dV}{dz} \quad (2)$$

式(2)から次に示すようなトリビアルな解と呼ばれる鞍点構造がすぐ見つかる。

$$z(r) \equiv 0 \quad (3)$$

次に非トリビアルな解、すなわち Fig. 2 のようなキंक対形状の解を捜す。式(2)を積分する。

$$\frac{\gamma_0}{2} \left(\frac{dz}{dr} \right)^2 = V(z) - C_0 \quad (4)$$

ここで $C_0 = V(z_0)$ 。変数分離法よりループ長 L を得る。

$$L = 2\sqrt{2\gamma_0} \int_0^{z_0} \frac{1}{\sqrt{V(z) - C_0}} dz \quad (5)$$

式(4)を式(1)に代入し、再び式(4)を使うと鞍点における転位ループのエネルギー E_s が得られる。

$$E_s = C_0 L + 4\gamma_0 \int_0^{L/4} \left(\frac{dz}{dr} \right)^2 dr \quad (6)$$

$$= C_0 L + 4\sqrt{2\gamma_0} \int_0^{z_0} \sqrt{V(z) - C_0} dz$$

結局、転位の弦モデルに基づき解析に必要な2つの基本方程式(5)と(6)を得る。

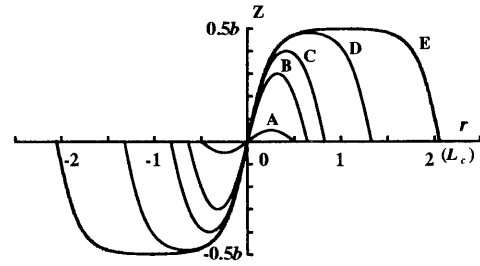


Fig. 3 Saddle-point configurations of the dislocation loop of the double-kink type. Lines A, B, C, D, and E correspond to the saddle-point configurations for a variety of values of the bow-out of the dislocation, $z_0 = 0.05b, 0.3b, 0.4b, 0.48b$, and $0.498b$, respectively. The characteristic length L_c is defined in Eq. (12).

転位の感じるポテンシャル $V(z)$ に関して本論文では最も簡単な周期関数ということで三角関数を仮定する。

$$V(z) = V_0 \left(1 + \cos \frac{2\pi z}{b} \right) \quad (7)$$

式(7)を式(5)と(6)に代入する。

$$L = \frac{2b}{\pi} \sqrt{\frac{\gamma_0}{V_0}} K(s_0) \quad (8)$$

$$E_s = \frac{4E_0}{\pi} \left\{ 2E(s_0) - \cos^2 \frac{\pi z_0}{b} K(s_0) \right\} \quad (9)$$

$$E_0 = \sqrt{\gamma_0 V_0} b \quad (10)$$

ここで $s_0 = \sin \frac{\pi z_0}{b}$ とする。 K と E はそれぞれ第一種と第二種の完全楕円積分である²³⁾。

$$K(k) = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2 t^2)}} dt \quad (11)$$

$$E(k) = \int_0^1 \sqrt{\frac{1-k^2 t^2}{1-t^2}} dt$$

式(10)の E_0 は系の特徴的なエネルギー単位を表す。式(7)を式(4)に代入するとキंक対タイプの鞍点構造が計算でき Fig. 3 のようになる。さらに周期的な力学系において、特にソリトンの研究分野においては、この節で述べたごとと類似した研究はすでに行われていることを付け加えておく²⁴⁾。

4. 転位ループの活性化エネルギーと臨界長

弦モデルに基づく転位ループの熱活性化過程の解析でわかった最も顕著な性質を述べる。式(3)で示すトリビアルな解であるが、これは任意の長さの転位ループの鞍点構造になることが可能である。一方で、キंक対タイプの解が

鞍点構造になるためには式 (8) より制限がある。ここで臨界長 L_c を定義しよう。

$$L_c = \sqrt{\frac{\gamma_0}{V_0}} b \quad (12)$$

式 (8) の第一種完全楕円積分 K は任意の指数 s_0 に対して $\pi/2$ より大きい²³⁾。従って、 $L_c < L$ のときに限り式 (8) には実数解があり、キंक対タイプの鞍点構造が存在する。その事実は Fig. 3 を見てもわかる。キंकの張り出し $z_0 = 0.05b$ に対応する図中の線 A を見てわかるように、 z_0 を 0 にした極限でも転位ループの長さは有限で L_c はその極限值である。従って、トリビアルとキंक対タイプの解は $L_c < L$ の範囲では両方が鞍点構造になり得る。一方で $0 < L < L_c$ の範囲ではトリビアルな解が唯一の鞍点構造である。

活性化エネルギー E_a は Fig. 4 で示すように臨界長 L_c を境目に大きく様相が変わる。 E_a は転位ループの長さが $0 < L < L_c$ のときは L に比例して大きくなる。このことは鞍点構造がトリビアルな解であることを考慮すれば簡単に説明できる。転位ループの長さが長くなるにつれて、 $L = L_c$ で鞍点構造はトリビアルな解とキंक対タイプの解に分岐し、 $L_c < L$ では両方の存在が可能になる。しかし実際には、エネルギーが小さいキंक対タイプの鞍点構造の方が選択される¹⁸⁾。複数の鞍点からエネルギーが最小のものが選択されるという論理は化学反応論²⁵⁾ の分野でもしばしば登場する概念である。活性化エネルギー E_a の様相についてまとめると、まず L が十分小さいときは Fig. 4 の線 A で示すように E_a は L に比例して大きくなる。それに続いて $L = L_c$ で分岐し、次は線 B に沿って徐々に大きくなる。最後に有限の値 $8E_0/\pi$ に収束するが、これは勿論無限に長い転位のキंक対生成エネルギーに等しい¹⁵⁾。

この解析が有効なのは転位を弾性論的な弦モデルとみなせる範囲内である。だから極端に短い転位ループにはこの理論は適用できないだろう。後で現実の金属で L_c のおおよその値を見積もり本論文の解析方法が有効な範囲を決定する。

5. 点欠陥から転位への遷移

ここに転位の弦モデルによる解析から得られる、転位ループ (SIA 集合体) の熱活性化過程に関する新しい概念を説明する。例として BCC 金属を使って説明する。同一平面上に集積した SIA 集合体はその原子構造を考慮すると SIA と同数の互いに平行な crowdion で構成されているとみなすことができる。さらに直線状の刃状転位も無限個の crowdion で構成されているとみなせる²⁶⁾。直線状の刃状転位とは完全結晶に半無限の結晶平面を挿入して作られるが、その半無限の結晶面は無限個の SIA が同一面上に集積したものである。要するに、単独の SIA (1 本

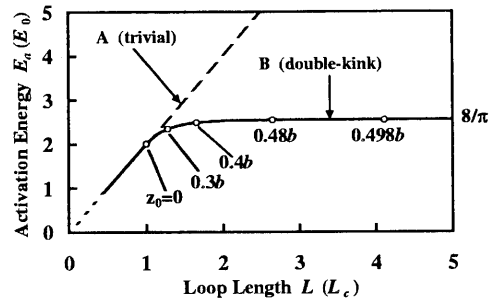


Fig. 4 Activation energy E_a versus dislocation loop length L . Lines A and B correspond to the saddle-point energy of the trivial and double-kink type solutions, respectively. The solid line represents activation energy realized within the present model. The values of z_0 , bow-out of the dislocation, are exhibited at some points

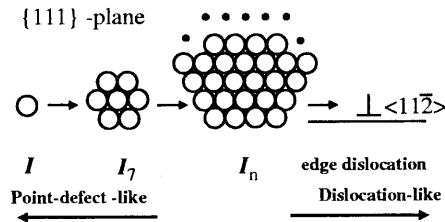


Fig. 5 Schematic view of formation of an edge dislocation in BCC by growth of SIA clusters in $\{111\}$ plane. Open circles present SIAs (crowdions perpendicular to the plane).

の crowdion)、様々なサイズの SIA 集合体 (刃状転位ループ)、そして直線状の刃状転位は Fig. 5 で示すように規模が違うだけで本質的には SIA (crowdion) で構成される同じ種類の I 型の格子欠陥である。しかしながら、今まで述べてきた解析によると SIA 集合体は点欠陥的から転位的な格子欠陥にどこかで質的な遷移を起こしていることが推測される。著者は式 (12) で定義した臨界長 L_c が点欠陥と転位を区別するよい指標ではないかと考える。前にも述べたように L_c よりも短い転位ループは移動する際にキंक対の生成はない。つまり転位ループは熱ゆらぎを除いてその形状を変化させることなくポテンシャルを越えてゆく。この剛体的な移動は点欠陥的な拡散とみなせるのではなからうか。一方で、 L_c よりも長い転位ループはよく知られたキंक対の生成を伴って移動する。これは直線状転位と同じなので当然転位的とみなせる。この考察から転位ループにはその長さが変わると点欠陥と転位との間で実質的な遷移が起きていることが予想される。

6. 現実の金属での E_0 と L_c の値

パラメーター γ_0 と V_0 を計算し、式 (10) と (12) から現実の金属に対する E_0 と L_c の値を計算してみよう。この見積もりはかなり大雑把ではあるが、転位の弦モデルの適用範囲を知っておくことは必要である。例として再び BCC 構造の α -Fe について計算する。 V_0 の値を見積もるために、転位ループが感じるポテンシャルはパイエルスポテンシャル (直線状転位の感じるポテンシャル) に等しいことを仮定する。この仮定はある程度長い転位ループに対しては妥当であろう。ポテンシャルは式 (7) で与えられるから V_0 はパイエルス応力 τ_P (直線状転位を動かす最小の応力) から計算できる¹⁵⁾。

$$V_0 = \frac{b^2}{2\pi} \tau_P \quad (13)$$

ところが、今まで多くの研究者は BCC 金属中の螺旋転位のパイエルス応力 (τ_P^s) には関心を持ってきた^{27, 28)} が、刃状転位のパイエルス応力 (τ_P^e) はそれほど研究をしてこなかった。というのも、現実の BCC 金属の塑性変形は螺旋転位の運動に支配されているからである。第一原理計算も今のところ螺旋転位についてだけ行われている²⁹⁾。BCC 金属では螺旋転位のパイエルス応力 τ_P^s はおよそ $10^{-3}G$ のオーダーである³⁰⁾ (G は剪断弾性率)。一方で、非螺旋転位に関わる塑性変形の研究はごく少なく、だいたい以前の microyielding の実験^{31, 32)} や計算機シミュレーション³³⁾ があるだけである。しかしながら、少ない結果ではあるが τ_P^e は τ_P^s よりも一桁ほど小さいことが推定されている。最近、著者の研究室でも α -Fe に関して $\tau_P^e = 4 \times 10^{-4}G$ である³⁴⁾ ことが Finnis-Sinclair の経験ポテンシャル³⁵⁾ を使った数値計算でわかった。この値はこれまでの議論とも合致する。

転位線の単位長さ当たりのエネルギー γ_0 については何人かの研究者が、転位芯のエネルギーと同じか幾分小さい値を推奨している^{15, 17, 36)}。著者の研究室でも γ_0 はある程度長い転位ループ ($L > 30b$) では長さによらずほぼ一定である結果が得られた³⁴⁾。以上のことを考慮し、本論文では $\gamma_0 = 0.2Gb^2$ とした。

結局、得られたパラメーター γ_0 と V_0 の値より、式 (12) と (13) から転位ループの臨界長は $L_c = 56b$ 、式 (10) から特徴的なエネルギー単位は $E_0 = 0.040\text{eV}$ のように計算される。ここで剪断弾性率は $G = 117\text{GPa}$ とした³⁷⁾。2つのパラメーターが変わればこの結果もすぐ変わってしまう。しかし、ここで重要なのは弦モデルの特徴的スケールのおおよその値を知ることである。以上の結果から、十分に長い転位ループに対してはその活性化エネルギー E_a は約 0.10eV と見積もることができる。今、導いた臨界長 $L_c = 56b$ は直径が約 $20b$ の転位ループに対応する。この長さスケールは弾性論が適応されるのには十分長いと思われる。さらに式 (4) から転位線の傾き dz/dr の最大値が

0.036 と見積もられる。

7. 自己相互作用の影響

転位線間にはたらく自己相互作用の影響を本論文では今まで無視してきた。このことがこの解析の信憑性を欠くのではないかという心配があった。そこで、この節では自己相互作用およびそれに関連した転位線の自己エネルギーについて詳しく議論する。

厳密に言えば、転位ループの持つ自己エネルギーの大きさを正確に計算するためには、自己相互作用の影響を考慮した鞍点構造をまず求めなければならないが、それは難しい。その代わりに、弦モデルから導出される鞍点構造を使って自己エネルギーの近似値を計算する。近似とはいうものの、それは自己エネルギーの上限値を与えるということの後で示す。ここで2つ状態に対する自己エネルギーの値 E_1 と E_2 を導入する。

1. E_1 は安定点、すなわち転位線が $z \equiv \pm b/2$ の状態での自己エネルギー
2. E_2 は鞍点、すなわちキック対かトリビアルな解 $z \equiv 0$ に対する自己エネルギー。

ここで強調しておきたいのは、自己エネルギーの活性化エネルギーへの貢献はその絶対値ではなく、安定点と鞍点における自己エネルギーの差 $E_2 - E_1$ だということである¹⁸⁾。さらにこれはあくまでも弦モデルの枠内に限られることではあるが、特別な場合として転位ループの長さ L が臨界長 L_c よりも短いときは、自己エネルギーは活性化エネルギーには何の貢献もしない。というのは、この場合は転位ループの鞍点構造がトリビアルな解なので安定点での構造と同じ形状になる。従って $E_2 = E_1$ である。一方、 L_c よりも長い転位ループは熱活性化過程の途中でその形状が変化するので実際に自己エネルギーを計算しなければならない。

2本の転位間の相互作用エネルギーは転位線に沿った二重積分によって解析的に表される¹⁹⁾。自己エネルギーはその2本の転位が重なっていると同等な計算をすればよいが、発散を避けるために cut-off 長 (転位芯の大きさ) ρ_c を導入する必要がある。著者は任意の形状の転位について相互作用エネルギーを計算する計算機コード²⁰⁾ の提供を受けている³⁸⁾。ただし、この計算機コードは等方弾性体中の転位に対するものである。このコードを使って安定点における転位ループの自己エネルギー (E_1) と鞍点における自己エネルギー (E_2) の大きさを α -Fe の場合に計算し結果を Table 1 に示した。計算は3つの cut-off 長 $\rho_c = 0.707b, 2.0b, 4.0b$ について行った。ここで剪断弾性率 $G = 117\text{GPa}$ 、ポアソン比 $\nu = 0.31$ 、Burgers ベクトル $b = 0.248\text{nm}$ である³⁷⁾。Table 1 より cut-off 長が大きくなるにつれて自己エネルギー自身もその差 $E_2 - E_1$ も小

Table 1 α -Fe 中の転位ループの安定点と鞍点における構造指標。鞍点でのキンクの張り出し z_0 。ループの長さ L_1 と L_2 。cut-off 長 $\rho_c = 0.707b, 2.0b, 4.0b$ に対する自己エネルギー E_1 と E_2 。ここで L と E の下付け添え字 1 と 2 はそれぞれ安定点と鞍点における値を表す。それらの差 $L_2 - L_1$ と $E_2 - E_1$ を括弧の中に記す。

z_0 (b)	loop length (b)		self-energy (Gb^3)					
	L_1	L_2 ($L_2 - L_1$)	$\rho_c = 0.707b$		$\rho_c = 2.0b$		$\rho_c = 4.0b$	
			E_1	E_2 ($E_2 - E_1$)	E_1	E_2 ($E_2 - E_1$)	E_1	E_2 ($E_2 - E_1$)
0	< 56	—	—	—	—	—	—	—
		(0.0)						
0.3	71.838	71.851 (0.013)	26.26201	26.26335 (0.00134)	17.66048	17.66120 (0.00072)	11.96546	11.96579 (0.00033)
0.4	92.768	92.787 (0.019)	36.64781	36.65009 (0.00228)	25.53308	25.53442 (0.00134)	18.15408	18.15484 (0.00076)
0.48	148.345	148.367 (0.022)	66.63320	66.63668 (0.00348)	48.84929	48.85157 (0.00228)	37.01361	37.01518 (0.00157)
0.498	230.374	230.397 (0.023)	115.17303	115.17764 (0.00461)	87.54894	87.55213 (0.00319)	69.14760	69.15005 (0.00245)

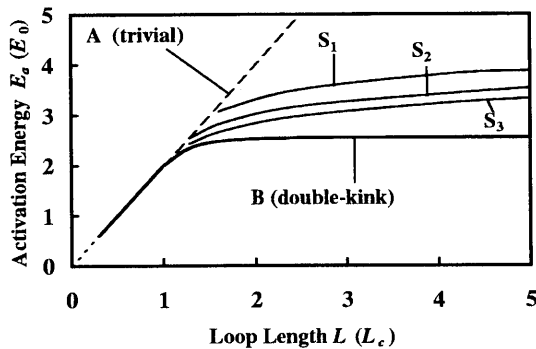


Fig. 6 Upper limit of the activation energy increased due to the influence of the self-interaction. Lines S_1 , S_2 , and S_3 correspond to the cut-off lengths $\rho_c = 0.707b, 2.0b$, and $4.0b$, respectively. Lines A and B mean the same saddle-point energy in Fig. 4 derived from the line tension model.

さくなる。Withrらは α -Feに対してcut-off長 $\rho_c = 2.9b$ を推奨している⁷⁾。

今計算した自己エネルギーの差 $E_2 - E_1$ と元々弦モデルから計算した活性化エネルギーを単純に足したものをFig. 6に示す。ここで Gb^3 は α -Feの場合に11eVと評価した。この図中の線 S_i ($i = 1, 2, 3$)は厳密な活性化エネルギーの上限值を与えている。その理由は転位ループは熱活性化過程において鞍点で最も大きく変形する。だから直感的に鞍点では自己エネルギーも最大に達すると考えられる。だから、Fig. 6の線 S_i で示されるエネルギーは転位ループがポテンシャルを越えるのに十分な大きさであることが推測

される。厳密な活性化エネルギーはFig. 6で示されるものよりも小さくなるだろう。

結論とすれば、もしも転位ループの自己エネルギーが導入されれば弦モデルよりも活性化エネルギーは間違いなく大きくなるだろう。しかしながら、Table 1で見るように E_1 と E_2 の値は極めて近く、熱活性化過程への影響は少なく、本研究のような定性的分析にそれほど影響することはない。

8. 議論

弦モデルを使って熱活性化過程を調べてきた。この研究で得られた重要な結果は、転位ループの鞍点構造はループが長くなるにつれてトリビアルな解からキンク対タイプの構造に変化することである。このことを別の角度から考えてみよう。直線状の無限に長い転位の場合、転位がポテンシャルの障壁を一斉に越えることはできない。そこで転位線の一部が先行してポテンシャルを越え、Fig. 7のようにキンク対を作る機構が考えられた¹⁵⁾。今までは転位がポテンシャルを如何にして越えるかという点ばかりが注目されてきたかに思う。しかし、キンク対を作るためには転位を曲げる必要がありそのためにはエネルギーが必要になることを忘れてはいけない。転位ループの場合は直線状転位とは事情が異り、一斉にポテンシャルを越えても有限のエネルギーで済む。そこで転位ループの熱活性化過程の場合は、転位を曲げてキンク対を作るかそれとも転位を曲げずに一斉にポテンシャルを越えるか、どちらがエネルギー的に有利か比較する必要がある。このように考えれば鞍点構造のトリビアルな解からキンク対解への遷移は特別なポテンシャル式(7)や弦モデルでのみ起こるのでなく、一般的に様々な転位ループでも起こりえることが予想される。同様に転位ループの点欠陥から転位への遷移も一般的に起こると考えられる。ポテンシャルを三角関数に仮定すること

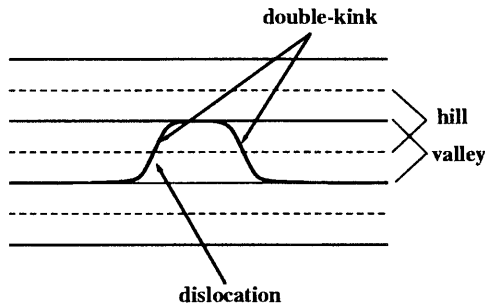


Fig. 7 Schematic view of double-kink formation on a straight dislocation.

で楕円関数を使ってこの遷移を具体的に表現できたが、それは単にモデル化しただけに過ぎない。

弦モデルでは自己相互作用を無視したためその影響が心配された。しかし、前節でみたようにその影響はそれほど大きくはない。それは E_1 と E_2 はとても近い値を持つからであるがその理由は次のように考えられる。転位ループの臨界長は $L_c = 56b$ と見積もられた。さらに Table 1 によると、その伸び $L_2 - L_1$ は L_c と比較して非常に小さい。このことは転位ループは熱活性化過程においてほんの少ししか変形しないことを意味しており、それに伴う自己エネルギーの変化 $E_2 - E_1$ も小さい。多くの研究者は半径の小さな転位ループの自己エネルギーの影響を大きいように予想しているようだが、それは錯覚である。

この論文では現実の金属、中でも α -Fe 中の転位ループについて詳しく述べた。それは実験やシミュレーションで多くの知識が蓄積されているからである。しかし、もしも転位ループがよく動く完全転位であれば、本論文の解析方法は他の BCC や FCC 金属にも応用可能である。さらに、SIA 集合体タイプの転位ループばかりでなく空孔集合体タイプのものにも応用できる。しかし問題もある。弦モデルでは V_0 や γ_0 の値が空孔集合体タイプと SIA 集合体タイプの転位ループで同じになるので、双方に同じ結果を与えてしまう。このことは他の研究と比べても矛盾しているが、今のところこの問題を解決する方法はわからない。

よく MD シミュレーションで SIA や SIA 集合体が連続して数格子分の距離を跳ぶという結果を見る。このことから MD シミュレーションにおいて研究している現象は慣性 (inertia) に影響されている、いわば dynamical なプロセスであることがわかる。一方で、本論文で取り上げた方法は静的 (static) な方法、つまり位相空間の遷移経路 (minimum energy path) の中の鞍点をみつけるというものである。熱活性化過程を知るためには両方の方法で得られた結果を比較することは有益であろう。遷移経路に基づく研究は、大きな自由度の力学系で鞍点を見つける新しい方法 (nudged elastic band 法)³⁹⁾ が提唱されて以来、いくつかの研究分野で行われるようになった。格子欠陥分野

でも、直線状転位の熱活性化過程の研究⁴⁰⁾ や結晶格子中の亀裂進展の研究⁴¹⁾ に応用されている。

金属中の転位ループ (SIA 集合体) の熱活性化過程の機構については未だに論争の最中である。Osetsky ら⁸⁾ は α -Fe 中の SIA 集合体の活性化エネルギーは 0.021 から 0.024eV で集合体の大きさに依存せずほぼ一定であると言っている。彼らはこの結果から SIA 集合体を構成している crowdion が独立に移動することを示唆していると主張している。本論文でも十分に長い転位ループの活性化エネルギーはほぼ一定であるから、Osetsky らの得た結果と類似はしている。しかしながら、本論文の転位ループの移動はループ全体の集団運動を前提としている。Sonada ら⁹⁾ や Marian ら¹⁰⁾ は独立に同じような結果を得ている。つまり構成する SIA が 20 個以下の SIA 集合体の活性化エネルギーを計算し、単独 I_1 と小さな集合体 I_2 、 I_3 は他の大きな SIA 集合体よりも幾分大きな活性化エネルギーを持つという結果を得た。Wirth ら⁷⁾ はマジックナンバーと呼ばれる個数で構成された正六角形の SIA 集合体について計算し、 I_{19} と I_{37} の活性化エネルギーはそれぞれ 0.023eV と 0.052eV であった。これら MD シミュレーションで得られる活性化エネルギーが必ずしも一致しない理由は使う経験ポテンシャルが異なることと、著者が思うには活性化エネルギーの導出方法が統一されていないからである。

9. まとめ

古典的な転位の弦モデル (Line Tension Model) を使って転位ループの熱活性化過程を研究した。転位ループは照射によって作られる自己格子間原子 (SIA) 集合体の縁に対応している。活性化エネルギーは転位ループの鞍点構造から計算できる。鞍点構造は解析的に計算でき、さらにその構造は 2 種類、トリビアルな解とキंक対タイプの解、に分類される。その分類より臨界長 L_c よりも短い転位ループは点欠陥に属すると考えられる。また逆に L_c より長いループは転位に属する。つまり転位ループの長さによって点欠陥と転位の間での実質的な遷移が起こることが推察される。現実の金属の例として α -Fe を考えると、臨界長は $L_c = 56b$ 、特徴的なエネルギー単位は $E_0 = 0.040\text{eV}$ になる。本論文の解析では転位線間の自己相互作用は無視したが、その影響は小さく転位ループの運動には重大な影響がないことが証明できた。

謝辞

本研究を行うに際し UCLA の N.M. Ghoniem 教授からは転位線の相互作用エネルギーを計算する計算機コードの提供を受けました。九州大学応用力学研究所の及川正行教授からは数学に関するご指導を度々いただきました。また二宮敏行、鈴木敬愛東京大学名誉教授とは転位論に関する議論をしていただきました。論文完成にご協力いただいた方々に著者は深くお礼申し上げます。

参考文献

- 1) K. Ohsawa and E. Kuramoto, Phys. Rev. B **72**, 054105 (2005).
- 2) M. Kiritani, J. Nucl. Mater. **276**, 41 (2000).
- 3) T. Diaz de la Rubia and M. W. Guinan, Phys. Rev. Lett. **66**, 2766 (1991).
- 4) C. H. Woo and B. N. Singh, Philos. Mag. A **65**, 889 (1992).
- 5) B. N. Singh and A. J. E. Foreman, Philos. Mag. A **66**, 975 (1992).
- 6) S.I. Golubov, B.N. Singh, and H. Trinkaus, J. Nucl. Mater. **276**, 78 (2000).
- 7) B. D. Wirth, G. R. Odette, D. Maroudas, and G. E. Lucas, J. Nucl. Mater. **276**, 33 (2000).
- 8) Y. N. Osetsky, D. J. Bacon, A. Serra, B. N. Singh, and S. I. Golubov, Philos. Mag. **83**, 61 (2003).
- 9) N. Soneda and T. Diaz de la Rubia, Philos. Mag. A **81**, 331 (2001).
- 10) J. Marian, B. D. Wirth, A. Caro, B. Sadigh, G. R. Odette, J. M. Perlado, and T. Diaz de la Rubia, Phys. Rev. B **65**, 144102 (2002).
- 11) H. R. Paneth, Phys. Rev. **80**, 708 (1950).
- 12) E. Orowan, *Symp. on Internal Stresses* (Inst. Metals, London, 1948), p. 451.
- 13) E. Orowan, *Dislocations in Metals* (AIME., New York, 1954), p. 131.
- 14) D. J. Bacon and Yu. N. Osetsky, J. Nucl. Mater. **329-333**, 1233 (2004).
- 15) A. Seeger, Philos. Mag. **1**, 651 (1956).
- 16) V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya, and R. Thomson, Phys. Rev. **131**, 58 (1963).
- 17) T. Mori and M. Kato, Philos. Mag. A **43**, 1315 (1981).
- 18) G. H. Vineyard, J. Phys. Chem. Solids, **3**, 121 (1957).
- 19) R. de Wit, *Solid State Physics* (Academic Press, New York, 1960), Vol. 10, p. 249.
- 20) N. M. Ghoniem and L. Z. Sun, Phys. Rev. B **60**, 128 (1999).
- 21) D. Kuhlmann-Wilsdorf and H. G. F. Wilsdorf, J. Appl. Phys. **31**, 516 (1960).
- 22) T. Suzuki and H. Koizumi, Philos. Mag. A **67**, 1153 (1993).
- 23) Derek F. Lawden, *Elliptic Functions and Applications* (Springer-Verlag, New York, 1989), p. 73.
- 24) I. Bakas and C. Sourdis, Fortschr. Phys. **50**, 815 (2002).
- 25) K. Müller, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **19**, 1 (1980).
- 26) E. Kuramoto, J. Nucl. Mater. **276**, 143 (2000).
- 27) V. Vítex, R. C. Perrin, and D. K. Bowen, Philos. Mag. **21**, 1049 (1970).
- 28) E. Kuramoto, Y. Aono, K. Kitajima, K. Maeda, and S. Takeuchi, Philos. Mag. A **39**, 717 (1979).
- 29) C. Woodward and S. I. Rao, Phys. Rev. Lett. **88**, 216402 (2002).
- 30) K. Ohsawa, H. Koizumi, H. O. K. Kirchner, and T. Suzuki, Philos. Mag. A **69**, 171 (1994).
- 31) H. D. Solomon and C. J. McMahon, Jr., Acta Metall. **19**, 291 (1971).
- 32) A. Sato and M. Meshii, Phys. Status. Solidi. A **28**, 561 (1975).
- 33) M. Yamaguchi and V. Vitek, J. Phys. F: Met. Phys. **3**, 523 (1973); **3**, 537 (1973); **5**, 1 (1975); **5**, 11 (1975).
- 34) J. Imai and S. Obata, master's thesis, Kyushu University, 2003 (unpublished).
- 35) M. W. Finnis and J. E. Sinclair, Philos. Mag. A **50**, 45 (1984); **53**, 161 (1986).
- 36) J. P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations* (McGraw-Hill, New York, 1968), pp. 150, and 212.
- 37) *Smithells Metals Reference Book, seventh edition*, edited by E. A. Brandes and G. B. Brook (Butterworth-Heinemann Ltd., Oxford, 1992) p. 15-5.
- 38) N. M. Ghoniem (private communications).
- 39) G. Mills, H. Jónsson, and G. K. Schenter, Surf. Sci. **324**, 305 (1995).
- 40) K. Edagawa and T. Suzuki, Mater. Sci. Eng. A **309-310**, 164 (2001).
- 41) T. Zhu, J. Li, and S. Yip, Phys. Rev. Lett. **93**, 025503 (2004).