

転位と不純物との相互作用に関する研究 その 20 結晶中の転位と不純物の凝集体とのモデルについて 凝集体による strain-rate sensitivity の 温度依存性からの模索

上月 陽一*

Study on the interaction between a dislocation and impurities
Part XX Groping for a suitable force-distance relation between a
dislocation and the agglomerate in crystals by the dependence of
temperature and the strain-rate sensitivity due to the agglomerates

Yohichi KOHZUKI

Abstract

The force-distance relation between a dislocation and the agglomerate (trimer) of impurity-vacancy dipoles cannot be approximated to the Fleischer's model taking account of the Friedel relation at 83 to 239 K, whereas the square force-distance relation between the two seems to be the most suitable model among the three: a square force-distance relation, a parabolic one, and a triangular one taking account of the Friedel relation. This is based on the relative curve of temperature and the strain-rate sensitivity due to the agglomerates.

Key words: force-distance relation, strain-rate sensitivity due to agglomerates

1. 緒言

温度 0 K での変形応力に及ぼす不純物濃度の影響や、温度による変形応力の熱的成分の変化から、転位が不純物を乗り越えるモデルが決められてきた [1]。ここでは、不純物による strain-rate sensitivity と温度との関係及び転位がその不純物を乗り越えるときに必要なエネルギー ΔH と温度との比例関係を基にして適合するモデルを模索する。そのモデルは、Fleischer のモデル [2]、転位と不純物との間の力対距離の形が角型(SQ)・放物線(PA)・三角形(TR) [3] の 4 つのモデルの中から、最も適合するものを調べている。これらのモデルには、Friedel の関係 [4] が導入されている。不純物による strain-rate sensitivity や ΔH は

$(\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon})_p$ から求められた。 $(\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon})_p$ と

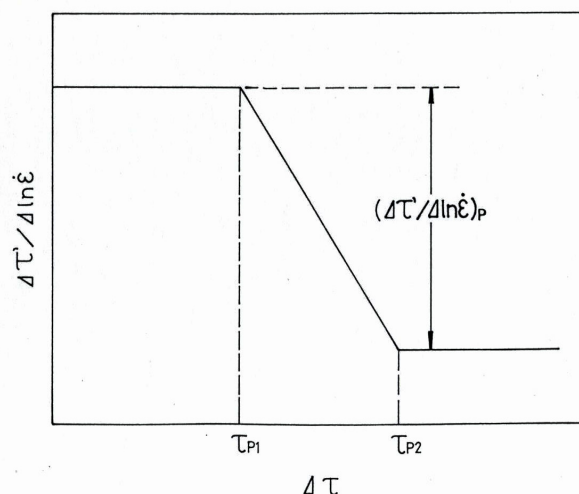


図 1 ある歪での strain-rate sensitivity $\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon}$ と応力減少量 $\Delta\tau$ との概略関係。

は、strain-rate sensitivity と振動による応力減少量 $\Delta\tau$ との関係図の第 1 と第 2 の平坦部に位置する strain-rate sensitivity の差によって求められている (図 1 参照)。($\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon}$)_p を不純物による strain-rate sensitivity と考える理由は、このシリーズのその 9 [5] でまとめられた。

このシリーズのその 5 [6] で用いられた KCl:Sr²⁺ (仕込み濃度 0.050 mol%) 単結晶を、超音波振動付加下での歪速度急変試験を行い、得られたデータから変形応力の strain-rate sensitivity ($\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon}$) を求めた。超音波振動応力付加下での歪速度急変試験は、このシリーズのその 3 [7] に概略的に示された。

2. 不純物による strain-rate sensitivity の温度依存性

転位が熱振動の助けで格子以上に分散した弱い障害物 (不純物) を乗り越えるとき、その活性化エンタルピー ΔH は次の式によって与えられている [8-11] :

$$\Delta H = -kT^2 \left(\frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial \tau} \right)_T \left(\frac{\partial \tau}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}} \quad (1)$$

ここで k はボルツマン定数、 T は絶対温度、そして $\dot{\epsilon}$ は歪速度である。エントロピーの変化を無視できるという仮定に基づいて、その ΔH は以下の方程式として表現することもできる [8, 10] :

$$\Delta H = \alpha kT \quad (2)$$

(2) 式の α は任意定数である。(1) と (2) 式を結合すると、下の (3) 式となる。

$$\left(\frac{\partial \tau}{\partial \ln \dot{\epsilon}} \right)_T = - \left(\frac{\partial \tau}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}} \frac{T}{\alpha} \quad (3)$$

方程式 (3) の中で、F-F モデルの $\left(\frac{\partial \tau}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}}$ は下の式

$$\left(\frac{\tau_{p1}}{\tau_{p0}} \right)^{1/3} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \quad (4)$$

つまり、

$$\frac{\partial \tau}{\partial T} = \left(\frac{-3\tau_{p0}}{2T_c} \right) \left(\frac{T_c}{T} \right)^{1/2} \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \right\}^2 \quad (5)$$

従って、F-F モデルの不純物による strain-rate sensitivity は、上式 (5) を方程式 (3) へ代入することによって次のように求められる。

$$\frac{\partial \tau}{\partial \ln \dot{\epsilon}} = \left(\frac{3\tau_{p0}T}{2T_c} \right) \left(\frac{T_c}{T} \right)^{1/2} \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \right\}^2 / \alpha \quad (6)$$

T_c と τ_{p0} の値は表 1 にある。

表 1 KCl:Sr²⁺ (0.050 mol%) 単結晶中の転位と凝集体との力対距離関係を F-F で近似したときの T_c と τ_{p0} の値

力対距離の関係	T_c (K)	τ_{p0} (MPa)
F-F	322	10.30

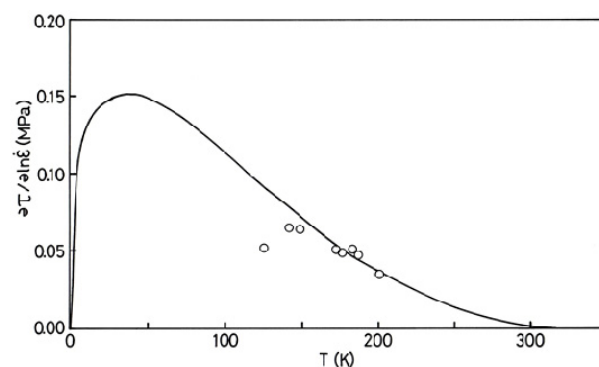


図 2 KCl:Sr²⁺ (0.050 mol%) 単結晶中の凝集体による strain-rate sensitivity ($\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon}$)_p の温度依存性。(○): ($\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon}$)_p を F-F モデルで近似している。

(6) 式の結果が図 2 の実線に示されている。丸印のプロットは、($\Delta\tau'/\Delta\ln\dot{\epsilon}$)_p である。図 2 から、その丸印のプロットは温度 150 K 以下でその実線から離れているように思われる。従って、その結晶中の転位と凝集体との相互作用は F-F で近似することはできないと考えられる。

転位と不純物との相互作用を SQ で近似できる

とすると下の式が成立する。

$$(\tau_{p1}/\tau_{p0})^{2/3} = 1 - (T/T_c) \quad (7)$$

τ_{p0} は温度 0 K での有効応力 τ_{p1} の値である。方程式 (5) の $(\partial\tau/\partial T)$ は方程式 (7) を温度 T で微分することから次のように得られる。

$$\partial\tau_{p1}/\partial T = -3(1-T/T_c)^{1/2}\tau_{p0}/(2T_c) \quad (8)$$

PA で近似できるとすると、方程式 (5) の $(\partial\tau/\partial T)$ は以下の式で与えられる。

$$\partial\tau_{p1}/\partial T = -\{(T_c/T)^{2/3} - 1\}^{1/2}\tau_{p0}/T_c \quad (9)$$

TR で近似できるとすると、方程式 (5) のそれは次のように与えられる。

$$\partial\tau_{p1}/\partial T = -3\{(T_c/T) - (T_c/T)^{1/2}\}^{1/2}\tau_{p0}/(4T_c) \quad (10)$$

さらに方程式 (6) に方程式 (8) を代入すると、SQ で転位と不純物との相互作用を近似したときのその不純物による strain-rate sensitivity は、
 $(\partial\tau/\partial \ln \dot{\epsilon}) = \{(3\tau_{p0})/(2T_c)\} \{1 - (T/T_c)\}^{1/2} T/\alpha$ (11)

同様に方程式 (6) と (9) から、PA で近似したときのその不純物による strain-rate sensitivity は、

$$(\partial\tau/\partial \ln \dot{\epsilon}) = (\tau_{p0}/T_c) \{(T_c/T)^{2/3} - 1\}^{1/2} T/\alpha \quad (12)$$

そしてまた方程式 (6) と (10) から、TR で近似したときのそれは

$$(\partial\tau/\partial \ln \dot{\epsilon}) = \{(3\tau_{p0})/(4T_c)\} \{(T_c/T) - (T_c/T)^{1/2}\}^{1/2} \times (T/\alpha) \quad (13)$$

から求めることができる。それぞれのモデルの T_c と τ_{p0} の値は表 2 にある。

(11) ~ (13) 式の結果が図 3 に示されている。丸印のプロットは、その結晶中の凝集体による $(\Delta\tau'/\Delta \ln \dot{\epsilon})_p$ である。その結晶中の転位と凝集体との相互作用は、その温度範囲で SQ によ

表 2 KCl:Sr²⁺(0.050 mol%) 単結晶中の転位と凝集体との力対距離関係を様々なモデルで近似したときの T_c と τ_{p0} の値

力対距離の関係	T_c (K)	τ_{p0} (MPa)
SQ	220	2.17
PA	225	3.28
TR	228	4.53

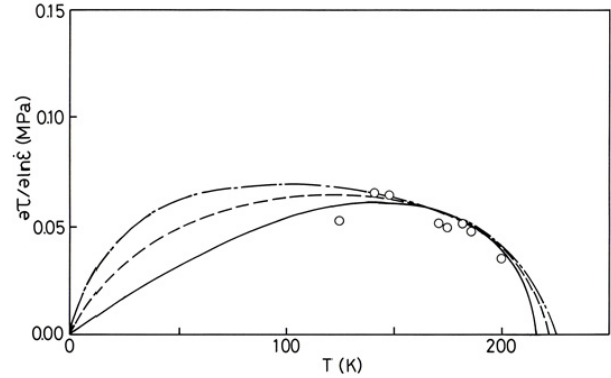


図 3 KCl:Sr²⁺(0.050 mol%) 単結晶中の凝集体による strain-rate sensitivity $(\Delta\tau'/\Delta \ln \dot{\epsilon})_p$ の温度依存性. (○): $(\Delta\tau'/\Delta \ln \dot{\epsilon})_p$ を様々なモデル(—)SQ, (- -)PA, (- · -)TR で近似している。

って近似できるかもしれない。もし約 100 K 以下の温度で $(\Delta\tau'/\Delta \ln \dot{\epsilon})_p$ を得ることができれば、不純物による strain-rate sensitivity と温度との関係から適合するモデルを明白に選択することができるようである (図 3 参照)。しかし、100 K 以下のその値は求めることができなかった。

3. 活性化エネルギーと温度との比例関係

転位と不純物との相互作用を SQ で近似したときの ΔH は、方程式 (8) を (1) 式へ代入することによって次式で表される。

$$\Delta H = 3kT^2(\Delta \ln \dot{\epsilon}/\Delta\tau')_p(1-T/T_c)^{1/2}\tau_{p0}/(2T_c) \quad (14)$$

PA で近似したときの ΔH は、方程式 (9) を (1) 式へ代入することから

$$\Delta H = kT^2(\Delta \ln \dot{\epsilon}/\Delta\tau')_p\{(T_c/T)^{2/3} - 1\}^{1/2}\tau_{p0}/T_c \quad (15)$$

TRでの ΔH は、方程式(1)、(10)から

$$\Delta H = 3kT^2(\Delta \ln \dot{\epsilon} / \Delta \tau')_p \{ (T_c / T) - (T_c / T)^{1/2} \}^{1/2} \times \tau_{p0} / (4T_c) \quad (16)$$

によってそれぞれ求めることができる。ここでは、 $(\partial \ln \dot{\epsilon} / \partial \tau)_T$ を図1で示されているように本研究で得られた strain-rate sensitivity と $\Delta \tau$ との関係図を基に、不純物による strain-rate sensitivity の逆数 $(\Delta \ln \dot{\epsilon} / \Delta \tau')_p$ から得ている[7]。(14)～(16)式の結果が図4(a)～(c)にそれぞれ示されている。その直線の傾きは、最小二乗法によって求められている。しかし、 $\Delta H(T)$ の比例関係の違いから適合する力対距離の関係を選択することは難しい。それぞれのモデルで近似したときのその $\Delta H(T_c)$ の値が表3に示されているように、ほぼ同じ値 0.41～0.43 eVである。

表3 KCl:Sr²⁺(0.050 mol%) 単結晶中の転位と凝集体との力対距離関係を様々なモデルで近似したときの $\Delta H(T_c)$ の値

力対距離の関係	$\Delta H(T_c)$ (eV)
SQ	0.43
PA	0.41
TR	0.41

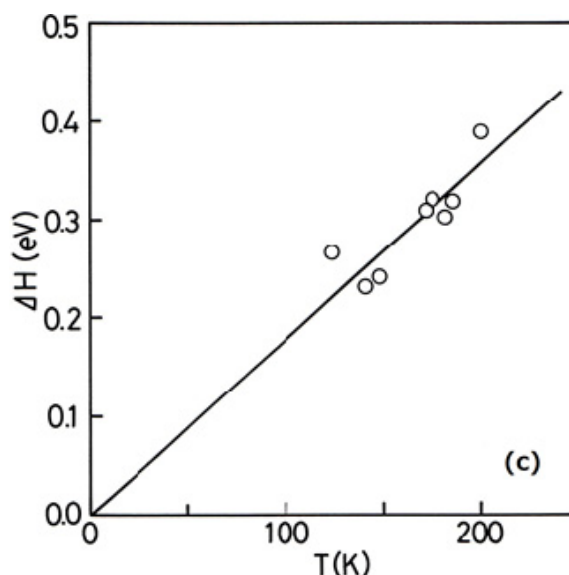
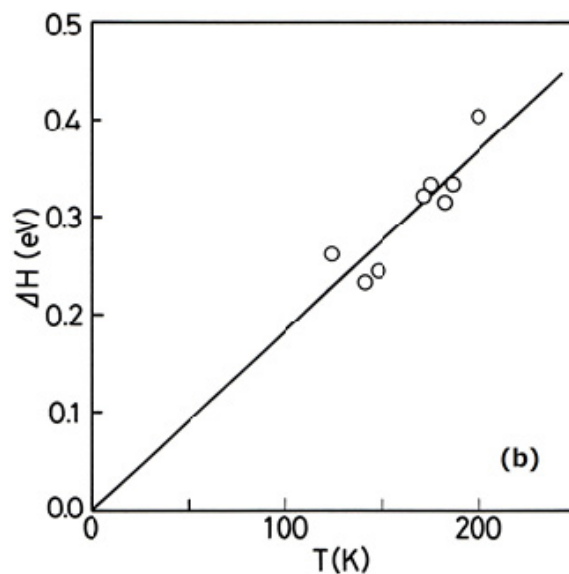
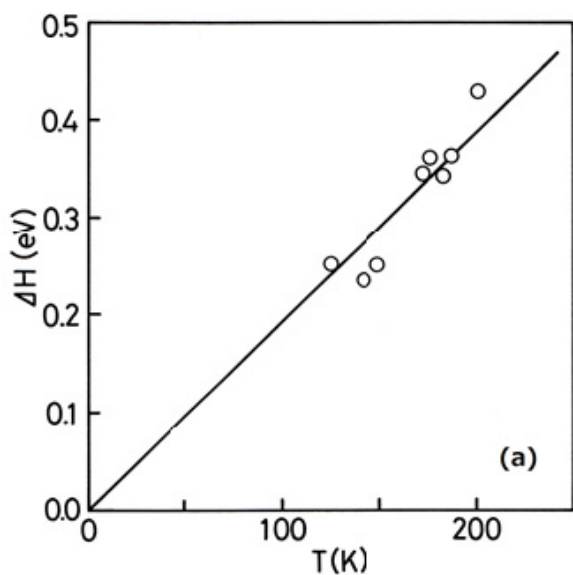


図4 温度と活性化エネルギーとの比例関係.その結晶中の転位と凝集体との間の力対距離関係の形:(a) SQ, (b) PA, (c) TR.

4. 結言

KCl:Sr²⁺単結晶中の転位とその不純物の凝集体との力対距離関係は、その凝集体による strain-rate sensitivity と温度との関係から調べた結果、Friedel の関係を導入した Fleischer のモデルでは近似できないようである。SQ が3つのモデル(SQ、PA、TR)の中で最も適合するモデルであると思われた。

参考文献

- [1] H. CONRAD, *Acta Metall.* **14** (1966) 1631.
- [2] R. L. FLEISCHER, *J. Appl. Phys.* **33** (1962) 3504.
- [3] A. J. E. FOREMAN and M. J. MAKIN, *Philos. Mag.* **14** (1966) 911.
- [4] J. FRIEDEL, "Dislocations" (Pergamon Press, Oxford, 1964) p.224.
- [5] 上月陽一, 大島商船高等専門学校紀要 第 41 号 (2008) 121.
- [6] *Idem, ibid.* 第 40 号 (2007) 97.
- [7] *Idem, ibid.* 第 39 号 (2006) 105.
- [8] H. CONRAD, *J. Metals* **16** (1964) 582.
- [9] *Idem, Can. J. Phys.* **45** (1967) 581.
- [10] B. N. DEY and W. R. TYSON, *Phys. Status Solidi. (a)* **9** (1972) 215.
- [11] T. KATAOKA, T. UEMATSU and T. YAMADA, *Japan. J. Appl. Phys.* **17** (1978) 271.

