北海道大学工学部研究報告
第74号(昭和49年)

Bulletin of the Faculty of Engineering,
Hokkaido University, No. 74 (1974)

結晶ディスクリネーションの基本的性質

丸 川 健 三 郎*

(昭和49年7月25日受理)

Some Fundamental Properties of Crystal Disclinations

Kenzaburo MARUKAWA

(Received July 25, 1974)

Abstract

Properties of crystal disclinantions were discussed and some fundamental relations were obtained. The discussion contains (1) conservation laws for disclination-disclination combination and for disclination-dislocation combination, (2) conditions for conservative motion of disclinations, and (3) the force on a disclination exerted by an applied stress. The motion of a disclination line and of the rotation axis associated with the disclination were treated separately. In these discussions the disclination is characterized by a tensor which represents the associated lattice rotation. This representation is in contrast with that of previous works in which the rotation was assumed to be infinitesimal and represented by a vector.

1. まえがき

ディスクリネーションが始めて構造欠陥と結びつけて議論されたのは液晶においてである。Frank[1]は，それまで光学顕微鏡観察により液晶中に認められていた特異な線状欠陥が，古くVolterraによって議論された弾性連続体中の特異線と同じ幾何学的構造を持つことを指摘し，これをディスクリネーションと命名した。その後，この液晶中のディスクリネーションについては種々，実験的理論的研究がなされて来たが，通常の結晶中ではディスクリネーションは存在し得ないと考えられて来た。しかし最近になって，これの結晶粒界模型[2]，変形双晶模型[3),4)]などへの応用の可能性が指摘され，注目されている。

ディスクリネーションを弾性連続体中の特異線として見た場合，これは転位と極めて似た性質を持っている。共にそのまわりの変位場に不連続を伴っており，その結果内部応力の原因となっている。両者の違いは変位の不連続量が並進的変位であるか，回転的変位であるかという点だけである[5]。このため，ディクスリネーションのまわりの応力場等の弾性的性質については，転位の場合同様かなりの研究がなされてきた。しかしその他の性質，特に媒質が結晶である場合に問題となるような性質に関しては殆んど研究がない。また弾性論的議論においては，例外なくディスクリネーションの伴う格子回転を微小量としてベクトル的に扱っているが，結晶中のディスクリネーションに対してはこのような扱いは許されない。

* 応用物理学科 応用X線粒子線講座

以下では，まず結晶ディスクリネーションを特徴ずける量として特性テンソルを導入し，これを用いて結晶中でのディスクリネーションの諸性質を議論する 。

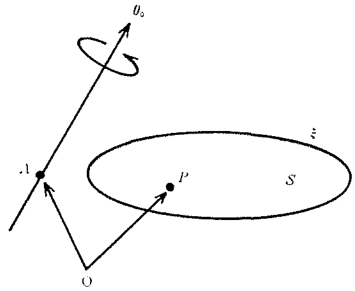

図1 ディスクリネーションの定義

2. ディスクリネーションの特性テンソル

2.1 特性テンソルの定義

まず以下の議論に使いやすい形に，ディスクリネーションの定義を与える。図1のように物体中の閉曲線ξと，それに囲まれた面Sを考える。この面(カット面)に沿って切れ目を入れ，その両側に相対的回転変位を与えた後その位置に固定したとする。このとき生じた隙間は同じ物質で埋め，生じた重なり部分は取り除くものとする。このようにすれば変位場にこの相対的変位に相当する不連続を生じ，閉曲線ξは特異線となるが，この線ξがディスクリネーションである。

このように，ディスクリネーションを特徴ずける量は回転型変位であるのでテンソルとして表わすべきであり，これをディスクリネーションの特性テンソルと呼ぶことにする。従来の弾性連続体中でのディスクリネーションの議論ではこの変位を微小量として扱い，回転をベクトルで表わしてきた。しかし結晶のディスクリネーションを考えるとき，後で述べるようにこの回転を微小量と見なせる場合はないので，ベクトルを用いたのでは誤りを導きやすい。簡単のために上記の回転を面Sの片側にだけ与え，他の側は固定しておくものとする。このとき面上の任意の点Pの位置ベクトルを$\boldsymbol{r}'$，その点の回転前での位置ベクトルを$\boldsymbol{r}$とすれば，このディスクリネーションの特性テンソル$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$は

$$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})\cdot\boldsymbol{r} \tag{1}$$

で与えられる。但しこの式では座標原点を回転軸上にとってある。あるいは，変位の不連続量$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}$を用いて

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})\cdot\boldsymbol{r} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})-\boldsymbol{I} \tag{3}$$

($\boldsymbol{I}$は恒等テンソル) と表わし，$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})$を特性テンソルとして用いてもよい。

これらの特性テンソルは当然回転軸方向$\boldsymbol{\theta}_0$と回転の大きさΘで表現出来るが，簡単な幾何学的考察から$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$の成分として

$$R_{ij}=\delta_{ij}\cos\Theta+\alpha_i\alpha_j(1-\cos\Theta)-\varepsilon_{ijk}\alpha_k\sin\Theta \tag{4}$$

が得られる。ここにδ_{ij}はクロネッカー記号，ε_{ijk}は順列記号 (ijkが正順なら$\varepsilon_{ijk}=1$，逆順なら$\varepsilon_{ijk}=-1$，ijkのうち等しいものがあれば$\varepsilon_{ijk}=0$)，α_iは$\boldsymbol{\theta}_0$の方向余弦であり，テンソルの和に関する規約を使っている。また逆に$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$が与えられたとき，$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$の主軸として$\boldsymbol{\theta}_0$が得られ，Trace $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})=2\cos\Theta+1$により$\Theta$が得られる。ここで後のためにベクトル

$$\boldsymbol{\theta}\equiv\Theta\boldsymbol{\theta}_0 \tag{5}$$

を定義しておく。このベクトルによっても回転を区別できるが，本来回転はベクトル量ではないので[6]，これは便宜的な表現と考えておくべきである。例えば文献中しばしば変位の不連続量として

$$\boldsymbol{u}\approx\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{r} \tag{6}$$

なる表現が用いられてきたが，Θ が小さいときのみ使える近似式であって正しくは式 (2) を用いねばならない。なお式 (2) をベクトル的に書けば

$$\boldsymbol{u}=(1-\cos\Theta)\,\boldsymbol{\theta}_0\times\boldsymbol{\theta}_0\times\boldsymbol{r}+(\sin\Theta)\,\boldsymbol{\theta}_0\times\boldsymbol{r} \tag{2'}$$

である。

2.2　結晶中での特性テンソル

連続体ではどのような回転に対しても，カット面上には欠陥は生じない。つまり，特性テンソル $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$ として任意の回転テンソルを用いることができる。しかし結晶でカット面に欠陥を作らないようにするためには回転が特別のものでなければならない。図1でカット面の回転を施した側と回転を施さない側とがうまくつながることが条件であるので，明らかに式 (1) の $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$ はその結晶の回転対称要素の一つに一致しなければならない。従って例えば立方晶では，$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$ は [100] 方向を軸とした 90° 回転などを表わすことになる。これを式(5)に従って 90° [100] のように書くことにする。このように結晶ディスクリネーションの回転角は大きく，次に述べる部分ディスクリネーションの場合を含めても回転角には下限があり，これを微小量と見なすことはできない。

次にカット面上に低エネルギーの面欠陥，特に整合双晶境界が生ずる場合を考える。このときのディスクリネーションを部分ディスクリネーションと呼び，上記のものを完全ディスクリネーションと呼ぶことにする。部分ディスクリネーションはさらに，格子回転によって生じたもの (rotation 型) と，局所的双晶変形に伴う格子回転によって生じたもの (shear 型) の二つに分類することができる。前者については結晶の対称性に関する考察から，その回転角の下限が 60° であることを示すことができる[4]。また後者の回転角は，双晶変形の剪断歪み量によって決まる一定値をとる[4]。例として面心立方結晶で，関係する双晶境界を (111) 面に平行とすれば，前者では 60° [111]，70° [$1\bar{1}0$] などがあり，後者では 38.9° [$1\bar{1}0$] などがある。

3.　ディスクリネーションに関する保存則

3.1　二本のディスクリネーションの合成

それぞれの特性テンソルが $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}_1)$, $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}_2)$ で与えられるような二本のディスクリネーションの合成を考える。図1の定義で明らかなように，曲線 ξ に沿って二本のディスクリネーションを重ねればカット面の片側の物質点は二回の回転を受ける。この結果点 $\boldsymbol{r}$ が $\boldsymbol{r}''$ まで移動したとすれば

$$\boldsymbol{r}''=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}_2)\cdot\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}_1)\cdot\boldsymbol{r}$$

である。但し回転軸は一点で交わるものとして，その点を座標原点にとってある。このような一点の回りでの回転の合成は，やはりその点の回りでの回転であるので，二本のディスクリネーションの合成によって生じたものはやはりディスクリネーションである。そしてその特性テンソル $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$ は

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}_2)\cdot\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}_1) \tag{7}$$

である。特に回転軸方向が一致するときにはベクトル的保存則

$$\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_1+\boldsymbol{\theta}_2 \tag{7'}$$

が成立する。但しこれらのベクトルは式 (5) によって定義されたものとする。式 (7) と (7′) は転位の場合のバーガースベクトルの保存則に相当するものである。回転軸が一点で交わらないときは回転軸の位置の移動が生じて変位の式が複雑になる。しかし合成されたものはやはりディスクリ

ネーションであって，その特性テンソルが式 (7) で与えられることを示すことができる。

合成ディスクリネーションに関する回転軸方向 $\boldsymbol{\theta}_0$ および回転角 Θ は勿論，式 (4) と式 (7) とから計算できるが，より簡単な幾何学的考察によって求めておく。いま回転軸の交点 O を中心とした単位球面を考え，各回転軸とこの球面との交点を R, S とする。また図 2 のように球面上の線分 RS から $-\Theta_1/2$, $\Theta_2/2$ の角度に引いた線の交点 T をとする。このように決めた点 T は，引き続く二回の回転，軸 OR 回りでの角度 Θ_1 の回転と軸 OS 回りでの角度 Θ_2 の回転における不動点である。従って合成回転の回転軸は OT である。同時に合成回転の大きさが図に示した角 RTU の 2 倍であることも分る。従って球面三角形の公式を用いて

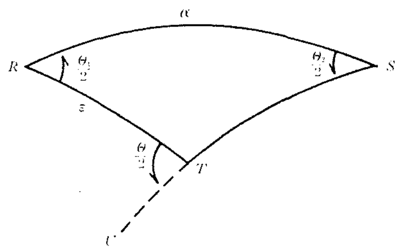

図 2 単位球面における回転の合成

$$\cos\frac{\Theta}{2}=\cos\frac{\Theta_1}{2}\cos\frac{\Theta_2}{2}-\sin\frac{\Theta_1}{2}\sin\frac{\Theta_2}{2}\cos\alpha \tag{8}$$

$$\sin\varepsilon=\sin\frac{\Theta_2}{2}\sin\alpha\,\mathrm{cosec}\frac{\Theta}{2} \tag{9}$$

を得る。但し α は軸 OR と軸 OS とのなす角，ε は軸 OR と軸 OT とのなす角である。

3.2 ディスクリネーションと転位の合成

この合成では回転軸の位置が問題になるので，図 1 のように座標原点を軸以外の点に選ぶ。そして回転軸位置は軸上に固定した任意の代表点 A の位置ベクトル $\boldsymbol{r}_A$ で与えるものとする。このとき式 (2) は

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A) \tag{10}$$

と書ける。軸に沿う任意のベクトル $(\boldsymbol{r}_A-\boldsymbol{r}'_A)$ に対して $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})\cdot(\boldsymbol{r}_A-\boldsymbol{r}'_A)=0$ であるので点 A の選び方は結果に影響を与えない。いま図 1 で特性テンソル $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})$ なるディスクリネーション ξ に，バーガースベクトル $\boldsymbol{b}$ なる転位を重ねたとすれば，面 S 上の点は $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{b}$ なる変位を受けるからこれを新たに $\boldsymbol{u}$ と書いて，

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A)+\boldsymbol{b}$$

これを書き換えて

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})\cdot[\boldsymbol{r}-(\boldsymbol{r}_A+\boldsymbol{\Delta r}_A)] \tag{11}$$

但し

$$\boldsymbol{b}=-\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})\cdot\boldsymbol{\Delta r}_A \tag{12}$$

を得る。式 (11) を式 (10) と比べて見れば分るように，これは軸位置が $\boldsymbol{r}_A+\boldsymbol{\Delta r}_A$ で特性テンソル $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})$ なるディスクリネシーョンを表わしている。つまりディスクリネーションと転位とを合成したものはディスクリネーションであって，しかもこの合成でディスクリネーションの特性テンソルは保存される。但しその回転軸の位置は式 (12) で与えられる $\boldsymbol{\Delta r}_A$ だけ移動する。さらに完全ディスクリネーションではこの移動量は格子ベクトルの一つに一致する。何故なら完全ディスクリネーションでは特性テンソル $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta})$ が回転対称要素の一つで表わされるから，式 (3) を式 (12) に代入し，且つ転位のバーガースベクトルも格子スベクトルの一つに一致することを考慮すれば，$\boldsymbol{\Delta r}_A$ も格子ベクトルの一つになることが分る。式 (11), (12) の関係はまた，図 3 のようなディスクリネーションと転位との枝分れにおける保存則と見なしてもよい。図では点 $\boldsymbol{r}_A$ を軸が通る

ようなディスクリネーションの特性テンソルを $\boldsymbol{R}(\theta;\ \boldsymbol{r}_A)$ で示してある。なお式 (12) の関係は Harris と Scriven[7] が二次元結晶について得たものの三次元的表現になっている。

3.3　ディスクリネーション双極子

同じ大きさで符号だけが異なるような回転角を持つ二本のディスクリネーションが近接したものをディスクリネーション双極子と呼ぶ[5]。それぞれの特性テンソルを $\boldsymbol{R}(\theta)$, $\boldsymbol{R}(-\theta)$ と書くこととし，それぞれの回転軸の位置が $\boldsymbol{r}_A$, $\boldsymbol{r}_A+\boldsymbol{t}$ であるとする。この二本のディスクリネーションに関して共通のカット面をとり，$\boldsymbol{R}(\theta)$ のディスクリネーションがその端にあるものとする。図 4 ではこれをくさび型ディスクリネーションの場合について示した。つまりディスクリネーション線も回転軸も紙面に垂直であるとしている。また図では線と軸とが一致している場合を示しているが，一般にはその必要はない。やはりカット面の片側だけを動かすとし，いま物質点 $\boldsymbol{r}$ がディスクリネーション $\boldsymbol{R}(\theta)$ の導入によって $\boldsymbol{r}'$ まで移動し，次にディスクリネーション $\boldsymbol{R}(-\theta)$ の導入によって $\boldsymbol{r}''$ まで移動したとする。原点が軸上にないことに注意して式 (1) を書き直せば，

$$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{R}(\theta)\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A)+\boldsymbol{r}_A$$

$$\boldsymbol{r}''=\boldsymbol{R}(-\theta)\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_A-\boldsymbol{t})+\boldsymbol{r}_A+\boldsymbol{t}$$

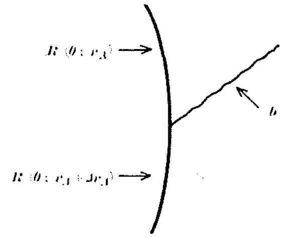

図 3　ディスクリネーション $\boldsymbol{R}(\theta)$ と転位 $\boldsymbol{b}$ との枝分れ

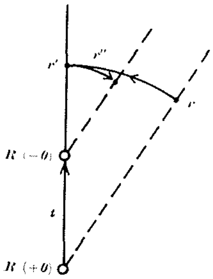

図 4　ディスクリネーション双極子

となる。物質点の変位は二本のディスクリネーションの間では式 (10) と同じであるが，二本の外側では $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}$ となり，

$$\boldsymbol{R}(-\theta)\cdot\boldsymbol{R}(\theta)=\boldsymbol{I}$$

に注意して，また式 (3) を使って結局

$$\boldsymbol{u}=-\boldsymbol{D}(-\theta)\cdot\boldsymbol{t} \tag{13}$$

を得る。この式は $\boldsymbol{r}$ を含んでいないのでカット面上で一様な並進型変位である。従ってこれを転位による変位と見なすこともできる。このようにディスクリネーション双極子は，その中心部から離れた所では式 (13) で与えられるバーガースベクトルを持った転位と見なすことが出来る。

4.　ディスクリネーションの運動

4.1　軸を固定した運動

ここではディスクリネーションの運動に伴う局所的体積増減，つまりディスクリネーションの保存，非保存運動を論ずる。なおこの問題は Das ら[8] が微小回転の場合については一部既に論じているが，ここでは有限回転の場合について論ずる。

いま点 P (座標 $\boldsymbol{x}$) にあるディスクリネーションの部分が $d\boldsymbol{x}$ だけ移動し，これにより $d\boldsymbol{S}$ の面積を通過したとしよう。このとき

$$d\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\xi}_0\times d\boldsymbol{x} \tag{14}$$

但し $\boldsymbol{\xi}_0$ はディスクリネーションの線方向を表わす単位ベクトルである。ディスクリネーションの通過した部分の各点は式 (2) だけの変位を受けるが，この様子を図 5 に示した。図で，回転軸は紙面に垂直であるとするが，ディスクリネーション線は紙面に垂直であるとは限らない。変位

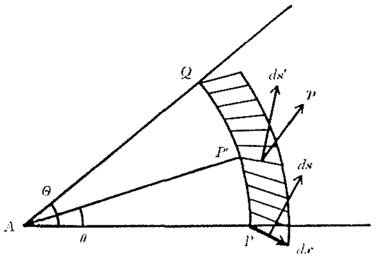

図5　ディスクリネーションの運動 ($d\boldsymbol{x}$) に伴う体積変化と，その際に外力のなす仕事

の大きさは弧に沿って測るものとすれば

$$|\boldsymbol{u}| = |\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x}| \tag{15}$$

従ってこのときの体積変化は図中斜線を施した部分であり，

$$dV = (\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{S} \tag{16}$$

である。保存運動の条件は $dV=0$, つまり

$$(\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{S} = 0 \tag{17}$$

である。この式はまたディスクリネーションのすべり面を決めている式と見なすことができる。従ってすべり面 $d\boldsymbol{S}$ は $(\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x})$ に垂直な面であり，これは回転軸を軸とした円柱面，円錐面または回転軸に垂直な平面などである。弧の長さを表わす式 (15) はたまたま回転角を微小と考えたときの変位，つまり式 (6) と同じ形であるため，式 (16) の結果も Das らの得たものと同じになっている。

4.2　回転軸だけの移動

ディスクリネーションの運動としては上記のもののほか，回転軸を伴った運動も考えられる。この運動は上のような軸を固定してのディスクリネーションだけの運動と，ディスクリネーションを固定しての軸だけの運動との合成と見られるので，次に後者について考える。

図1においてディスクリネーションループは固定し，軸を $d\boldsymbol{r}_A$ だけ動かしたとする。このとき式 (2) または式 (10) から明らかなように，面 S 上の各点の変位には余分に

$$d\boldsymbol{u} = -\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\theta})\cdot d\boldsymbol{r}_A \tag{18}$$

だけ付け加わる。つまり面 S 上での一様な変位 $d\boldsymbol{u}$ によって軸移動 $d\boldsymbol{r}_A$ が起る。このような一様な並進型変位はまた，転位によるものと解釈することもできる。つまりディスクリネーションが転位を放出または吸収することによっても軸移動が起る。このことは既に **3.2** でべた所である。但しこの過程で起る軸移動では式 (18) の変位が格子ベクトルに一致するので，軸移動量 $d\boldsymbol{r}_A$ も格子ベクトルに一致し，不連続的軸移動となる。実際の過程が面 S 上の一様な変位で起るか，それとも転位の放出，吸収で起るかということは，転位の動き易さおよびループの大きさなどに依存すると考えられる。

いずれにしても軸移動の際の体積変化は，ループ全体について

$$dV_1 = \int_S d\boldsymbol{u}\cdot d\boldsymbol{S} \tag{19}$$

である。このときも保存的軸移動の条件として $dV_1=0$ を用いることができるが，この式ではループの大きさ程度の距離にわたる質量移動については何も言えない。ただ $dV_1=0$ のときはループ外に対しては保存的と言えるだけである。

さらに局所的な体積変化を考える。いまディスクリネーション線を軸とする半径 δ の円筒を考えて，その中への質量流入を調べる。ディスクリネーションは変位 $d\boldsymbol{u}$ に関する不連続線であるので，軸移動によってこの線位置に $|\boldsymbol{\xi}_0\times d\boldsymbol{u}|$ だけの余分のくい違いを生じ，結局円筒内での体積変化はディスクリネーション単位長さあたり

$$dV' = \delta|\boldsymbol{\xi}_0\times d\boldsymbol{u}| \tag{20}$$

となる。従って局所的に考えた場合の保存的軸移動の条件は $dV'=0$, つまり軸移動に伴う余分の変位 $d\boldsymbol{u}$ がディスクリネーション線 $\boldsymbol{\xi}_0$ に平行であることである。式 (18) から分るように $d\boldsymbol{u}$ は

回転軸に垂直であるので，ξ_0 も軸に垂直である必要があり，言いかえれば，ねじれ型ディスクリネーションの場合だけこの型の保存的軸移動が可能である。なお局所的体積変化がある場合，これに必要な質量は，軸移動の際に放出，吸収される転位によって運ばれてくると考えることができる。

4.3 軸を伴った運動

ここで実際の運動過程を考えてみる。まず軸を固定しての運動では，各格子点は式(15)あるいは図4から分るように原子間隔程度以上に動かねばならない。従ってこれに対する格子の抵抗力，つまりディスクリネーションに対するパイエルス力は極めて大きいことが推定できる。一方軸の移動は転位の放出，吸収によっても起り得るから，転位の動き得る結晶ではこれは起り易い。従って実際には，まず軸だけの移動が起り，軸がディスクリネーション線に一致する所まで移動した後で，ディスクリネーションと軸が同時に動くと考えられる。

このような軸を伴った運動の例として，軸と一致するくさび型ディスクリネーションの運動を考えよう。このとき ξ_0 と θ とは平行である。ディスクリネーションが $d\boldsymbol{x}$ だけ移動したときの式(16)からの体積変化への寄与は，$\boldsymbol{x}=d\boldsymbol{x}/2$ として $dV=\Theta|d\boldsymbol{x}|^2/2$ である。一方このときの式(20)からの寄与は，式(18)で $d\boldsymbol{r}_A=d\boldsymbol{x}$ と書いて $dV'\doteqdot\delta\Theta|d\boldsymbol{x}|$ である。従ってこのディスクリネーションの運動は常に非保存的である。上二つを符号を考慮して加えると半径 δ の円筒内での体積変化として

$$dV+dV'\doteqdot\left(\delta-\frac{1}{2}|d\boldsymbol{x}|\right)\Theta|d\boldsymbol{x}|$$

を得る。式(20)の導出過程をふり返ってこの式と比較すれば分ることであるが，この式は転位がディスクリネーション線から $d\boldsymbol{x}/2$ の所へ来て合体すれば，ディスクリネーションは軸とともに $d\boldsymbol{x}$ だけ移動することを表わしている。このようにディスクリネーションとその軸との同時的運動も，軸だけの運動と同様転位の放出または吸収によって起り得る。

5. ディスクリネーションの受ける力

5.1 ディスクリネーション線の受ける力

応力テンソル σ で表わされるような外力が存在する場合について，ディスクリネーションの受ける力を求める。ディスクリネーションの動きがその線の動きとその回転軸の動きとに区別できるので，受ける力についてもそれぞれに対応したものを求める必要がある。まず回転軸は固定されているとしよう。なおこの問題に関しても，回転角が十分小さい場合について既に Das ら[8]の仕事があるが，ここではより一般的に議論する。

再び図5を参照して点P(座標 $\boldsymbol{x}$)にあるディスクリネーションが $d\boldsymbol{x}$ だけ移動したときの，外力のなす仕事をまず求める。なお本節ではテンソルは全て3行3列の行列として，またベクトルは3行1列の行列として表わすこととし，これらの転置行列を添字 t を付して表わすものとする。いま点Pが角度 θ まで回転されたとすれば，この回転を表わす行列を $\boldsymbol{L}$ としてベクトル的面素は $d\boldsymbol{S}'=\boldsymbol{L}\cdot d\boldsymbol{S}$ となる。但し $d\boldsymbol{S}$ は式(14)で与えられる。従ってこの面に現われる力は

$$\boldsymbol{p}=\sigma\cdot d\boldsymbol{S}'=\sigma\cdot\boldsymbol{L}\cdot d\boldsymbol{S}$$

また弧に沿う線素を $d\boldsymbol{l}$ とすると点Pでは $d\boldsymbol{l}=(\theta_0\times\boldsymbol{x})d\theta$，また点P′では

$$d\boldsymbol{l}'=\boldsymbol{L}\cdot(\theta_0\times\boldsymbol{x})d\theta$$

である。従ってPからQまで物質点を動かすときの外力のなす仕事として

$$dW=\int_0^{\Theta}(d\boldsymbol{l}')^t\cdot\boldsymbol{p}=\int_0^{\Theta}d\theta\,(\theta_0\times\boldsymbol{x})^t\cdot\boldsymbol{L}^t\cdot\sigma\cdot\boldsymbol{L}\cdot d\mathbf{S}$$

を得る。ここで平均の応力テンソルとして

$$\bar{\sigma}=\frac{1}{\Theta}\int_0^{\Theta}\boldsymbol{L}^t\cdot\sigma\cdot\boldsymbol{L}\cdot d\theta \tag{21}$$

と定義すれば上式は

$$dW=-(\theta\times\boldsymbol{x})^t\cdot\bar{\sigma}\cdot(\xi_0\times d\boldsymbol{x})=-\left\{[(\theta\times\boldsymbol{x})^t\cdot\bar{\sigma}]\times\xi_0\right\}d\boldsymbol{x}$$

となり，ディスクリネーションの移動 $d\boldsymbol{x}$ によって結晶のエネルギーがこれだけ増加するのであるから，ディスクリネーションの受ける力としては単位長さあたり

$$\boldsymbol{f}=-\nabla W=[\bar{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x})]\times\xi_0 \tag{22}$$

となる。この力は常にディスクリネーション線に垂直方向に働いている。この式は転位の場合の Peach-Koeher の式に相当するものである。なおこれは回転角が微小であるとすれば $\bar{\sigma}=\sigma$ となり，Das らの結果と一致する。

5.2　軸の受ける力

以上は軸を固定したときのディスクリネーションの受ける力であるが，次に軸だけを動かそうとする力を求める。これをディスクリネーションループについて求めることにする。ループ内の微小面積 $d\boldsymbol{S}$ に現われる力は $\sigma\cdot d\boldsymbol{S}$ であり，この部分が軸移動 $d\boldsymbol{r}_A$ に伴って，式 (18) で与えられる量だけ変位を受けるから，このときループ全体について外力のなす仕事は

$$dW=-\int_S(\sigma\cdot d\boldsymbol{S})^t\cdot\boldsymbol{D}\cdot d\boldsymbol{r}_A$$

である。従って軸を動かすための力として

$$\boldsymbol{F}=\int_S\boldsymbol{D}^t\cdot\sigma\cdot d\boldsymbol{S} \tag{23}$$

を得る。もしループが平面的であれば勿論

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{D}^t\cdot\sigma\cdot\boldsymbol{S} \tag{23'}$$

と書ける。

上式ではループ面全体に渡って一様な変位を受けると考えている。しかし既に述べたように転位の放出，吸収によっても軸移動は起る。この場合は上式は適当ではなく，転位の移動の際の外力のなす仕事を求め，これより力を求めることになるが，これは結局外力から転位が受ける力を求める問題になる。

式 (23′) の例として図 4 で示したディスクリネーション双極子の受ける力を求めよう。回転軸はディスクリネーション線と同じ位置にあるので式 (22) からの寄与は小さいと考えてよい。また二本の間隔が適当に狭いときには，転位の放出，吸収によらない軸移動が起ると考えてよい。いまディスクリネーション線と平行に z 軸をとり，この二本が y 軸上 $y=0$ および $y=t$ の点を通るとする。また座標軸の単位ベクトルを $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ とする。この場合カット面は半無限平面であるが，それぞれのディスクリネーションにかかる力は逆符号となるので，結局合力 $\boldsymbol{F}$ を求めるためには式 (23′) の $\boldsymbol{S}$ として両者のはさむ面積 $\Delta\boldsymbol{S}$ を用いればよいことになる。従って，単位長さあたり

$$\Delta\boldsymbol{S}=t\boldsymbol{i}$$

また

$$D' = \begin{bmatrix} \cos\Theta-1, & \sin\Theta, & 0 \\ -\sin\Theta, & \cos\Theta-1, & 0 \\ 0, & 0, & 0 \end{bmatrix}$$

であるから，式(23′)よりこの双極子の受ける単位長さあたりの力として

$$\boldsymbol{F} = t\begin{bmatrix} \sigma_{xx}(\cos\Theta-1)+\sigma_{xy}\sin\Theta \\ -\sigma_{xx}\sin\Theta+\sigma_{xy}(\cos\Theta-1) \\ 0 \end{bmatrix}$$

を得る。予期されたように力の z 成分はない。特に剪断応力成分 σ_{xy} だけが外力としてある場合で，且つ回転角が小さい場合を考えると $\boldsymbol{F}=t\Theta\sigma_{xy}\boldsymbol{i}$ となる。これはバーガースベクトル $t\Theta$ なる転位が剪断応力 σ_{xy} の下で受ける力と同じになっている。

6. あとがき

以上，結晶中で特に問題になるようなディスクリネーションの性質，つまり(1)ディスクリネーションと他のディスクリネーションまたは他の転位との結合において成立する保存則，(2)ディスクリネーションの保存運動の条件，(3)ディスクリネーションが外力から受ける力，などを議論し，いくつかの基礎的関係式を得た。

ディスクリネーションの存在の可能性については **2.2** で結晶の対称性の要請に従って議論した。しかしディスクリネーションの弾性エネルギーは高く[9]，この制約からの検討も必要である。実際の検討[4]によれば，ディスクリネーションは双極子の形か，小さなループの形でしか存在し得ない。さらにその伴う回転角は1ラジアン程度以下である必要があり，このため完全ディスクリネーションの存在の可能性は殆んどない。しかし部分ディスクリネーションは実際に存在しており，**2.2** で例として上げたもののうち，70.5° $[1\bar{1}0]$ は転位コアに，また 38.9° $[1\bar{1}0]$ は変形双晶板先端に，それぞれ存在していることを示すことができる。このように本研究で求めた諸関係式は，転位コアあるいは双晶先端の構造の議論や，変形双晶形成の議論などに役立つはずである。

終りに，本研究を進めるにあたり，終始有益な討論と助言を下さった応用物理学科佐藤進一教授に感謝いたします。

文　　献

1) Frank, F. C.: Disc. Farady Soc. **25** (1958), p. 19.
2) Li, J. M. C.: Surface Science **31** (1972), p. 12.
3) Armstrong, R. W.: Science, N. Y. **162** (1968), p. 799.
4) 丸川健三郎: 金属学会会報 **13** (1974), p. 597.
5) Nabarro, F. R. N.: Theory of Crystal Dislocations, Oxford Univ. Press, Oxford (1967), p. 16.
6) 例えば H. Goldstein: Classical Mechanics, Addison-Wesley Publishing Co. (1950), p. 124.
7) Harris, W. F. and L. E. Scriven: J. Appl. Phys. **42** (1971), p. 3309.
8) Das, E. S. P., M. J. Marcinkowski, R. W. Armstrong, and R. de Wit: Phil. Mag. **27** (1973), p. 369.
9) Huang, W. and T. Mura: J. Appl. Phys. **41** (1970), p. 5175.