



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	(001)Fe-3%Si単結晶における転位ループによる磁壁への作用力ならびに圧力の空間分布
Author(s)	石田, 巖; Ishida, Iwao; 中江, 仁 他
Citation	北海道大學工學部研究報告, 97, 11-24
Issue Date	1980-02-25
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41595
Type	departmental bulletin paper
File Information	97_11-24.pdf



(001) Fe-3% Si 単結晶における転位ループによる 磁壁への作用力ならびに圧力の空間分布

石田 巖* 中江 仁*

(昭和 54 年 9 月 29 日受理)

Forces and Spatially Distributed Pressure Exerted on Domain Wall by Dislocation Loops in (001) Fe-3% Si Single Crystal

Iwao ISHIDA Hitoshi NAKAE

(Received September 29, 1979)

Abstract

This paper presents a Monte Carlo simulation of the spatial distribution of the pressure exerted on a local rigid wall by dislocation loops in (001) Fe-3% Si single crystal. An expression of a force exerted on a rigid wall by a circular dislocation loops is developed by using the relation of Peach-Koehler. It is assumed that dislocation loops are distributed uniformly and the total force on the wall of area S which is approximated as rigid is the sum of the forces exerted on the wall by the dislocation loops. A distribution of the pressure which is estimated from the spatial distribution of the pressure agrees well with the theoretical results which are obtained by applying the central limit theorem to the forces exerted on the wall by the dislocation loops.

1. 序 論

先の論文において、磁壁に平行な直線転位による磁壁への作用力に関する Seeger らの取り扱い¹⁾を具体化した形で、(100) Fe-3% Si 単結晶における任意の直線転位による作用力を取扱い、転位線の確率密度関数を導入し、作用圧力の分布を求めた²⁾。他の論文において、磁壁に柔軟性を導入し、磁壁の各部分に作用する圧力の統計的ゆらぎから初磁化率、保磁力を形成するメカニズムを明らかにした³⁾。しかしながら、転位線の直線近似によって、さらに転位集団と磁壁との相互作用に関する取扱いを展開することは困難である。転位集団と磁壁との相互作用に関する静的あるいは動的モデルおよび理論において、磁壁に作用する圧力が材料空間内にどのように分布しているのかを決定することはきわめて重要である。一方、理論ならびに実験によって、材料内における具体的な磁壁に及ぼす圧力の空間分布を直接もとめることはきわめて困難である。

本論文においては、先の論文における直線転位の取り扱い²⁾を転位ループの場合に拡張することにより、一つの転位ループによる剛体磁壁への作用力をもとめる。これらの作用力をもとに剛体近似が成立すると思われる面積 S_0 の部分磁壁³⁾に相当する磁壁と転位ループ集団との相互

* 精密工学科 物理工学講座

作用による圧力の空間分布をモンテカルロ・シミュレーションによって求める。シミュレーションによる圧力の統計的分布は中心極限定理を適用することによって理論的に得られる圧力の分布と比較される。

2. 計算の前提

計算は Fe-3% Si について、以下の前提のもとに行われる。(i) 転位による磁壁への作用力は Peach-Koehler の関係⁴⁾による。(ii) 磁壁は (100) 面に平行な 180° 剛体磁壁で、磁壁の厚さ δ は $\delta=0.3141$ (μm)、磁壁の面積 S はとくにことわらない限り、 $S_0=170$ (μm^2) とする。(iii) 転位ループは (011) $[\bar{1}\bar{1}1]$, (0 $\bar{1}\bar{1}$) $[\bar{1}11]$, (101) $[\bar{1}11]$, ($\bar{1}01$) $[\bar{1}\bar{1}1]$ の4つのすべり系に同程度に残留し、各すべり面上で円形をなす。転位ループの中心は空間的に一様ランダムに分布しているものとする。(iv) 計算に用いられる諸定数は先の論文に掲載した諸定数²⁾を用いる。

3. 一つの転位ループと磁壁との磁気弾性的相互作用力

3.1 作用力 f_x の表現

結晶学的 $\langle 100 \rangle$ 方向を座標軸とする座標系において、(100) 磁壁に交わる転位線によって磁壁が受ける [100] 方向の作用力 f_x は Peach-Koehler の関係⁴⁾を用いた先の論文の (6) 式によって、

$$f_x = \int_l \left\{ (l_y b_z + l_z b_y) R_1 \sin^2 \varphi + (l_y b_y - l_z b_z) R_2 \sin 2\varphi \right\} dl \quad (1)$$

と表現できる²⁾。

(011) $[\bar{1}\bar{1}1]$ すべり系に属する半径 r の転位ループの場合、**Fig. 1** のように、(011) すべり面上で、転位ループの中心を原点とし、[100], [01 $\bar{1}$], [011] 方向を x' , y' , z' 軸とする座標系を導入する。原点と円形ループ上的一点 $(x', y', 0)$ を結ぶベクトルを \mathbf{r} とし、 \mathbf{r} と x' 軸とのなす角を θ とする。 θ の基準方向となる x' 軸の xyz 座標系における単位ベクトルを以下 \mathbf{u} と表現する。このとき、 \mathbf{r} は xyz 座標系で $(r/\sqrt{2})(\sqrt{2} \cos \theta, \sin \theta, -\sin \theta)$ と表現される。 \mathbf{r} における転位ループへの接線および接線の向きを考慮することにより、転位ループの線素 $d\mathbf{l}$ に平行な単位ベクトル \mathbf{l} は xyz 座標系において、

$$\mathbf{l} = (\cos \theta / \sqrt{2}) [\sqrt{2} \tan \theta, 1, \bar{1}] \quad (2)$$

と表現される。(2) 式および $\mathbf{b}=(a/2) [\bar{1}\bar{1}1]$ を (1) 式に代入し、このすべり系に属する磁壁に交わる一つの転位ループによる作用力 f_x を f_{x1} と表現して、

$$f_{x1} = \frac{aR_1}{\sqrt{2}} \int_l \cos \theta \sin^2 \varphi dl$$

となる。 $dl=r d\theta$ の関係を用いて、

$$f_{x1} = \frac{arR_1}{\sqrt{2}} \int_{\theta} \cos \theta \sin^2 \varphi d\theta = \int_{\theta} f_1 d\theta \quad (3)$$

となる。ここで、

$$f_1 = arR_1 \cos \theta \sin^2 \varphi / \sqrt{2} \quad (4)$$

とおいた。

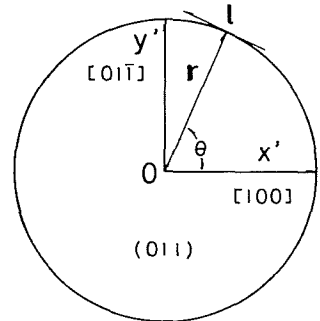


Fig. 1. Representation of unit vector of a line element of circular dislocation loop.

他のすべり系についても同様にして f_x を求めることができ、各すべり系について以下のよ
うにまとめられる。各すべり系における u および l は

すべり系	u	l
(011) $[\bar{1}\bar{1}1]$	[100]	$(\cos \theta/\sqrt{2}) [\sqrt{2} \tan \theta, 1, \bar{1}]$
(0 $\bar{1}$ 1) $[\bar{1}11]$	[100]	$(\cos \theta/\sqrt{2}) [\sqrt{2} \tan \theta, 1, 1]$
(101) $[\bar{1}\bar{1}1]$	[10 $\bar{1}$]	$(\sin \theta/\sqrt{2}) [\bar{1}, \sqrt{2} \cot \theta, 1]$
($\bar{1}$ 01) $[\bar{1}\bar{1}1]$	[101]	$(\sin \theta/\sqrt{2}) [\bar{1}, \sqrt{2} \cot \theta, \bar{1}]$

となる。また各すべり系における作用力 f_{xi} は

$$f_{xi} = \int_0^\theta f_i d\theta \quad (5)$$

と表現されるものとして、各すべり系の f_i は

すべり系			
(011) $[\bar{1}\bar{1}1]$	$f_1 = arR_1 \cos \theta \sin^2 \varphi/\sqrt{2}$	}	(6)
(0 $\bar{1}$ 1) $[\bar{1}11]$	$f_2 = f_1$		
(101) $[\bar{1}\bar{1}1]$	$f_3 = ar \left\{ R_1 \sin^2 \varphi (\sqrt{2} \cos \theta + \sin \theta) + R_2 \sin 2\varphi (\sqrt{2} \cos \theta - \sin \theta) \right\}$		
($\bar{1}$ 01) $[\bar{1}\bar{1}1]$	$f_4 = ar \left\{ R_1 \sin^2 \varphi (\sqrt{2} \cos \theta + \sin \theta) - R_2 \sin 2\varphi (\sqrt{2} \cos \theta - \sin \theta) \right\}$		

となる。

3.2 数値積分による f_x

転位ループが磁壁といかに交わるかは、転位ループの半径 r 、転位ループの中心に対する磁壁の中心の位置 x_i 、磁壁の厚さ δ 、(100)面とすべり面とのなす角度 γ により決定される。転位ループの大きさが $2r \leq \delta/\cos \gamma$ あるいは $2r \geq \delta/\cos \gamma$ の場合に応じて、転位ループと磁壁との交叉における幾何学的関係を求め、(5)式を数値積分することにより作用力 f_x を求める。

(1) $2r \leq \delta/\cos \gamma$ の場合 すべり面上で転位ループが Fig. 2(a), (b), (c) のように磁壁に交叉しているものとする。幾何学的関係により次の諸関係を得る。

(i) Fig. 2(a) において、 $0 \leq x_1 \leq 2r$ の範囲において

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= \cos^{-1} \left\{ (x_1 - r)/r \right\}, & \theta_2 &= 2\pi - \theta_1 \\ \varphi &= \pi r (\cos \theta + 1) \cos \gamma / \delta + \varphi_0, & \varphi_0 &= (\delta - x_1 \cos \gamma) \pi / \delta \\ x_l &= (x_1 - r) \cos \gamma - \delta/2 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

という関係が成立する。ここで x_1 は Fig. 2(a) のように、磁壁表面から転位ループ先端までの距離であり、 φ_0 は転位ループ先端、すなわち $\theta = \pi$ の位置における磁化方向 φ を表現する。この x_1

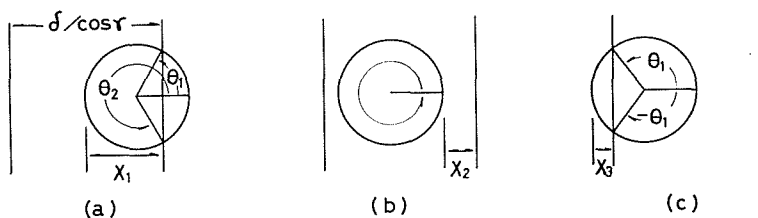


Fig. 2. Intersection of a circular loop ($2r \cos \gamma \leq \delta$) with the wall.

の範囲内で、各すべり系の転位ループによる作用力 $f_{xi}(x_i)$ は

$$f_{xi}(x_i) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} f_i d\theta \quad (8)$$

と表現される。

(ii) Fig. 2 (b) において、 $0 \leq x_2 \leq \delta/\cos \gamma - 2r$ の範囲で、

$$\left. \begin{aligned} \varphi &= \pi \left\{ (r \cos \theta - r - x_2) \cos \gamma + \delta \right\} / \delta \\ x_i &= (x_2 + r) \cos \gamma - \delta/2 \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

の関係をj得る。この範囲で $f_{xi}(x_i)$ は

$$f_{xi}(x_i) = \int_0^{2\pi} f_i d\theta \quad (10)$$

と表現される。

(iii) Fig. 2 (c) において、 $0 \leq x_3 \leq 2r$ の範囲で、

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= \cos^{-1} \left\{ (x_3 - r)/r \right\}, \quad \varphi = \pi r (\cos \theta - \cos \theta_1) \cos \gamma / \delta \\ x_i &= (x_3 - r) \cos \gamma + \delta/2 \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

という関係をj得る。この範囲で $f_{xi}(x_i)$ は

$$f_{xi}(x_i) = \int_{-\theta_1}^{\theta_1} f_i d\theta \quad (12)$$

と表現される。

作用力 $f_{xi}(x_i)$ は転位ループの位置に応じて、(8)、(10) あるいは (12) 式を (7)、(9) あるいは (11) 式の関係を用いて、数値積分することにより求められる。Fig. 3 (a), (b), (c) に、 x_i に対する $f_{xi}(x_i)$ を示す。パラメータは $2r \cos \gamma$ を示す。 $2r \cos \gamma$ が一定の場合、すべり面によって r は異なるが作用範囲 $-r \cos \gamma - \delta/2 \leq x_i \leq r \cos \gamma + \delta/2$ は一定となる。

(2) $2r \geq \delta/\cos \theta$ の場合 転位ループはすべり面上で、Fig. 4 (a), (b), (c) のように磁壁に交叉しているものとする。

(i) Fig. 4 (a) において、 $0 \leq x_1 \leq \delta/\cos \gamma$ の範囲で、(1) の (i) と同じ次の諸関係をj得る。

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= \cos^{-1} \left\{ (x_1 - r)/r \right\}, \quad \theta_2 = 2\pi - \theta_1 \\ \varphi &= \pi r (\cos \theta + 1) \cos \gamma / \delta + \varphi_0, \quad \varphi_0 = (\delta - x_1 \cos \gamma) \pi / \delta \\ x_i &= (x_1 - r) \cos \gamma - \delta/2 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

$$f_{xi}(x_i) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} f_i d\theta \quad (14)$$

(ii) Fig. 4 (b) において、 $0 \leq x_2 \leq 2r - \delta/\cos \gamma$ の範囲で、

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= \cos^{-1} \left\{ (x_2 + \delta/\cos \gamma - r)/r \right\}, \quad \theta_2 = \cos^{-1} \left\{ (x_2 - r)/r \right\} \\ \theta_3 &= 2\pi - \theta_2, \quad \theta_4 = 2\pi - \theta_1 \\ \varphi &= \pi r (\cos \theta - \cos \theta_2) \cos \gamma / \delta \quad (\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2) \\ \varphi &= \pi r (\cos \theta - \cos \theta_3) \cos \gamma / \delta \quad (\theta_3 \leq \theta \leq \theta_4) \\ x_i &= (x_2 - r) \cos \gamma + \delta/2 \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

の関係が成立し、作用力 $f_{xi}(x_i)$ は

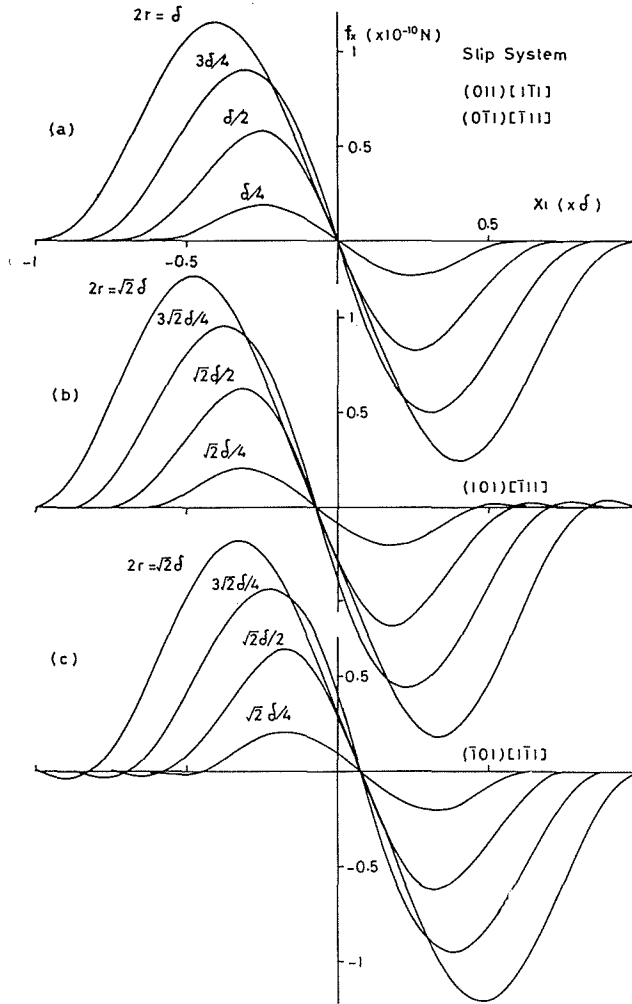


Fig. 3. The forces f_x exerted on a rigid wall by a circular dislocation loop ($2r \cos \bar{\tau} \leq \delta$) versus the distance x_l .

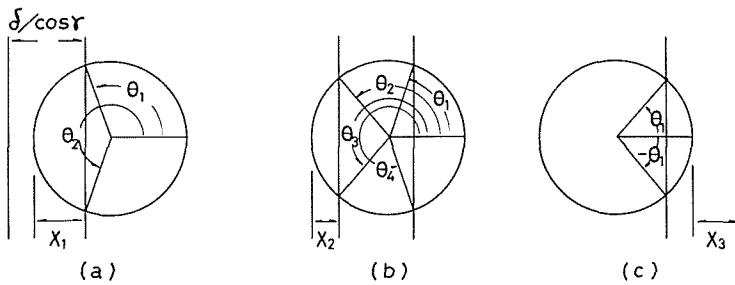


Fig. 4. Intersection of a circular dislocation loop ($2r \cos \bar{\tau} \geq \delta$) with the wall.

$$f_{xi}(x_i) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} f_i d\theta + \int_{\theta_3}^{\theta_4} f_i d\theta \quad (16)$$

と表現される。

(iii) Fig. 4(c) において, $0 \leq x_3 \leq \delta/\cos \tilde{\gamma}$ の範囲で,

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= \cos^{-1} \left\{ (r + x_3 - \delta/\cos \tilde{\gamma})/r \right\}, & \varphi &= \pi r (\cos \theta - \cos \theta_1) \cos \tilde{\gamma}/\delta \\ x_i &= (x_3 + r) \cos \tilde{\gamma} - \delta/2 \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

という関係が成立し, 作用力 $f_{xi}(x_i)$ は

$$f_{xi}(x_i) = \int_{-\theta_1}^{\theta_1} f_i d\theta \quad (18)$$

と表現される。

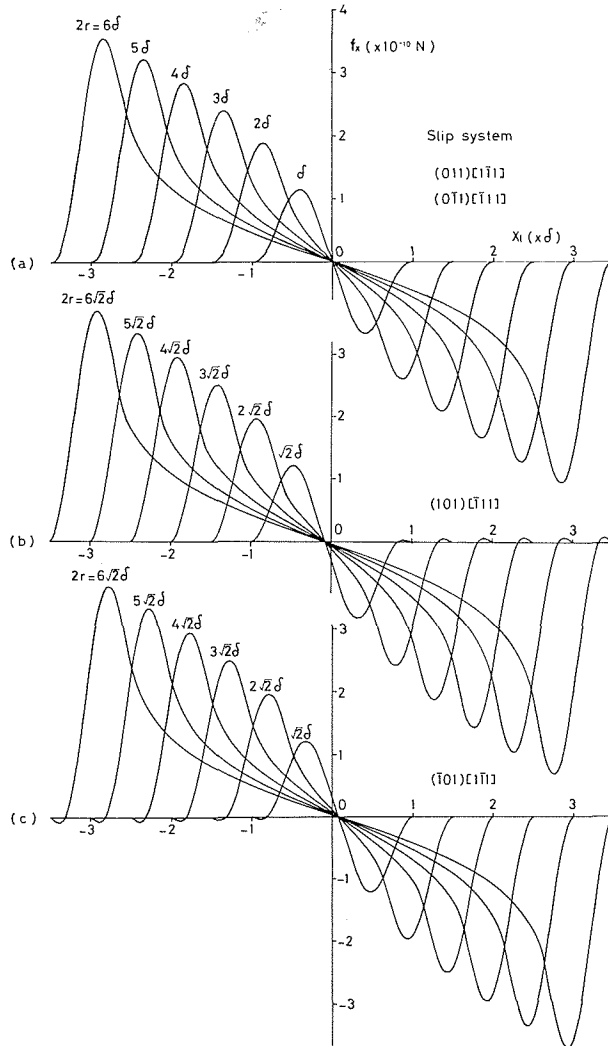


Fig. 5. The forces f_x exerted on a rigid wall by a circular dislocation loop ($2r \cos \tilde{\gamma} \leq \delta$) versus the distance x_i .

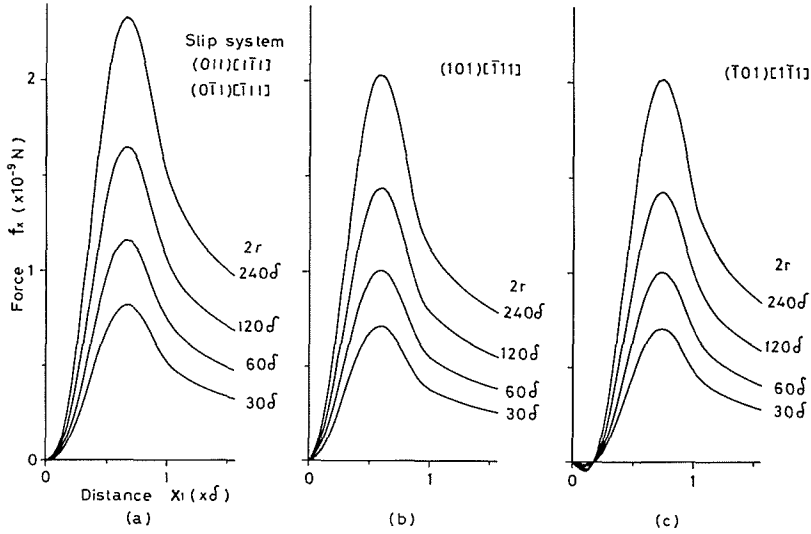


Fig. 6. The forces f_x exerted on a rigid wall by a circular dislocation loop ($2r \cos \gamma \gg \delta$) versus the distance x_l .

Fig. 5 (a), (b), (c) は転位ループの位置に応じて, (14), (16) あるいは (18) 式を, (13), (15) あるいは (17) 式の関係を用いて数値積分することにより求めた $f_{xi}(x_l)$ を示す。Fig. 3, Fig. 5 から明らかなように数値積分の結果は $f_{x1}(x_l)$, $f_{x2}(x_l)$ が奇関数で,

$$f_{x1}(-x_l) = -f_{x1}(x_l), \quad f_{x2}(-x_l) = -f_{x2}(x_l) \quad (19)$$

の関係があり, また, $f_{x3}(x_l)$ と $f_{x4}(x_l)$ との間には

$$f_{x3}(-x_l) = -f_{x4}(x_l) \quad (20)$$

の関係があることを示している。

Fig. 6 (a), (b), (c) は $2r \gg \delta / \cos \gamma$ の場合で, x_l に対する作用力 $f_{xi}(x_l)$ を示す。

4. 転位ループ集団による磁壁への作用圧力の分布

4.1 転位ループの分布

転位ループの中心が x 方向に一様分布すると仮定する。このとき, 半径 r の一つの転位ループが磁壁に交わるという条件のもとで, 転位ループの中心位置の x 方向における確率密度関数 p_u は

$$p_u = \frac{1}{2(r \cos \gamma + \delta/2)} \quad (21)$$

となる。

4.2 作用力の平均および分散

(21) 式の確率密度関数 p_u を用いて, 磁壁に交わる一つの転位ループによる平均の作用力 $E[f_x]$ は

$$E[f_x] = \frac{1}{8(r \cos \gamma + \delta/2)} \int_{-(r \cos \gamma + \delta/2)}^{(r \cos \gamma + \delta/2)} \{f_{x1}(x_l) + f_{x2}(x_l) + f_{x3}(x_l) + f_{x4}(x_l)\} dx_l \quad (22)$$

となる。(19), (20) 式の関係により,

$$E[f_x] = 0 \quad (23)$$

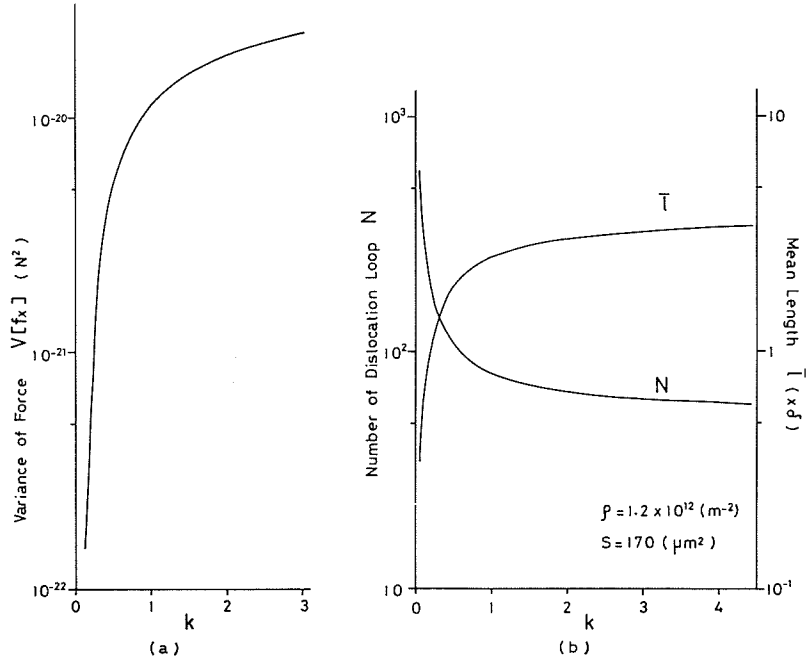


Fig. 7. (a) Variance $V[f_x]$ of the force exerted on a rigid wall by a dislocation loop. (b) Mean length \bar{l} of a dislocation loop intersecting the wall, and the numbers N of dislocation loops intersecting the wall as $\rho = 1.2 \times 10^{12} \text{ (m}^{-2}\text{)}$, $S = 170 \text{ (}\mu\text{m}^2\text{)}$. Horizontal axes $k\delta (= 2r \cos \gamma)$.

を得る。同様にして、作用力の分散 $V[f_x]$ は (23) 式を考慮し、(19), (20) 式の関係により、

$$V[f_x] = \frac{1}{4(r \cos \gamma + \delta/2)} \left\{ 2 \int_0^{(r \cos \gamma + \delta/2)} f_{x1}^2(x_l) dx_l + \int_{-(r \cos \gamma + \delta/2)}^{(r \cos \gamma + \delta/2)} f_{x3}^2(x_l) dx_l \right\} \quad (24)$$

となる。3.2 で得られた $f_{xi}(x_l)$ を使い、(24) 式を数値積分することにより $V[f_x]$ を得る。このようにして得られた結果を Fig. 7(a) に示す (ここで k は (27) 式の関係にある)。

4.3 磁壁に交わる転位ループ数

半径 r の一つの転位ループが磁壁に交わる場合、磁壁に交わる部分の転位線の平均の長さを \bar{l} とする。転位密度 ρ の場合に、磁壁に交わる転位ループの数を N 、磁壁面積を S とすれば、

$$\rho = N\bar{l}/S\delta \quad (25)$$

という関係が成立する。

他方、転位ループが磁壁と交わる x_l の範囲 $-(r \cos \gamma + \delta/2) \leq x_l \leq r \cos \gamma + \delta/2$ に入り得る転位ループ数を N' とすると、

$$\rho = 2\pi r N' / S(2r \cos \gamma + \delta) \quad (26)$$

という関係が成立する (5.1 参照)。ここで、4つのすべり系において

$$2r \cos \gamma = k\delta, \quad k; \text{一定} \quad (27)$$

とすると、(27) 式を (26) 式に代入して、

$$\rho = N' k\pi / S(k+1) \cos \gamma \quad (28)$$

となる。4つのすべり系は同等として、 $1/\cos \gamma$ の平均は

$$\overline{1/\cos \tilde{\gamma}} = (1 + \sqrt{2})/2 \quad (29)$$

となる。(28) 式の $1/\cos \tilde{\gamma}$ を $\overline{1/\cos \tilde{\gamma}}$ で置き換えれば, N' は N となり, (28) 式は

$$\rho = Nk\pi(1 + \sqrt{2})/2S(k+1) \quad (30)$$

となる。(30) 式と (25) 式を比較して,

$$\bar{l} = \pi(1 + \sqrt{2})k\delta/2(k+1) \quad (31)$$

を得る。(31) 式を (25) 式に代入し,

$$N = 2(k+1)\rho S/k\pi(1 + \sqrt{2}) \quad (32)$$

を得る。**Fig. 7 (b)** は $\rho = 1.2 \times 10^{12} (\text{m}^{-2})$, $S = S_0$ としたときの N および \bar{l} を横軸 $k\delta$ に対して示す。

4.4 作用圧力の分布

転位ループの中心が一様分布し, 転位密度が ρ である場合, (23), (24), (32) 式を使って, 中心極限定理を適用すれば, 先の論文^{2),3)}と同様にして, 磁壁面積 S に作用する圧力 p_x の分布は平均零, 分散 σ_p^2 が

$$\sigma_p^2 = \frac{NV[f_x]}{S^2} = \frac{2(k+1)\rho V[f_x]}{\pi(1 + \sqrt{2})kS} = \frac{\delta\rho V[f_x]}{\bar{l}S} \quad (33)$$

であるような正規分布となる。 $\rho = 1.2 \times 10^{12} (\text{m}^{-2})$, $S = S_0$ として, (33) 式による σ_p^2 (theo.) はシミュレーションによる σ_p^2 (simu.) とともに **Table 1** に示される。圧力 p_x の確率密度関数 $p(p_x)$ は

$$p(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2\sigma_p^2}\right) \quad (34)$$

となる。

Table 1. Variances $V[f_x]$ of the force exerted on the wall by a dislocation loop, δ/\bar{l} , and variances σ_p^2 (theo.) and σ_p^2 (simu.) of the pressure in which $\rho = 1.2 \times 10^{12} (\text{m}^{-2})$ and $S = 170 (\mu\text{m}^2)$.

k	$V[f_x]$ ($\times 10^{-21} \text{N}^2$)	δ/\bar{l}	$\sigma_p^2 (P_x^2)$ (theo.)	$\sigma_p^2 (P_x^2)$ (simu.)
1/4	0.1492	1.318	1.388	1.702
1/2	1.346	0.7911	7.518	—
3/4	3.428	0.6153	14.89	—
1	5.4427	0.5274	20.26	20.56
2	11.48	0.3955	32.06	32.67
4	18.56	0.3296	43.17	45.62
6	22.82	0.3077	49.55	53.44

5. 計算機シミュレーション

5.1 シミュレーションの概要

計算機シミュレーションの流れ図を **Fig. 8** に示す。まず, 半径 r の転位ループに対する磁壁の中心の位置 x_i と作用力 $f_{xi}(x_i)$ を読み込む。次いで, 一様乱数 R_i によりすべり面が選択され, 他の一様乱数 R_j によりすべり面における転位ループの中心の位置 x_j が $x_j = x_0 R_j$ により決定される。 x_0 は x 方向の設定された試料の長さとする。この過程が設定された転位密度 ρ となるまで N 回繰り返される。 ρ と N との間には

$$\rho = 2\pi r N / S_0 x_0$$

という関係がある。試料の両端 ($0 \sim r \cos \tilde{\gamma}$), ($x_0 - r \cos \tilde{\gamma} \sim x_0$) の範囲では、周辺の効果により転位密度が低くなる。従って、磁壁の中心位置の移動可能な範囲は ($r \cos \tilde{\gamma} + 0.5\delta \sim x_0 - r \cos \tilde{\gamma} - 0.5\delta$) となる。

次に磁壁の中心位置 x_i を移動可能な範囲に設定し、磁壁に交わるすべての転位ループによる作用力の和および磁壁面積 S_0 から、位置 x_i における作用圧力 p_{xi} を計算する。続いて、磁壁の設定位置が $\delta/16$ の間隔で移動され、同様の計算が移動可能範囲まで繰り返される。さらに p_{xi} から、分散 σ_p^2 が

$$\sigma_p^2 = \frac{1}{n} \left\{ \sum_{i=1}^n p_{xi}^2 \right\} \quad (35)$$

という関係を用いて計算される。以上の計算結果は高速プリンターより出力される。

5.2 圧力 p_x の分布

Fig. 9 は、 $x_0 = 160\delta$, $n = 2560$ と設定したときの出力された p_x の一部を横軸 x に対して示す。Fig. 9 において、パラメータが $\delta/4 \sim 6\delta$ までは、転位密度 $\rho = 1.2 \times 10^{12} (\text{m}^{-2})$ であり、パラメータは $2r \cos \tilde{\gamma}$ を意味し、パラメータが $30\delta, 240\delta$ では $\rho = 10^{13} (\text{m}^{-2})$ であり、パラメータは $2r$ を意味する。パラメータが直線となっているのは、磁壁に平行な直線転位集団で、 $\rho = 10^{13} (\text{m}^{-2})$ の場合で、比較のため計算され、掲載されている。Fig. 9 は Porteseil らの Fe-3% Si 単結晶の実験結果から再構成されたポテンシャル関数 $V(x)$ ときわめて類似した対応を示している⁵⁾。

Fig. 9 のパラメータ $\delta/4 \sim 6\delta$ について、(35)式によって実験的にもとめられた σ_p^2 が Table 1 に示されている。シミュレーションによる σ_p^2 (simu.) は理論値 σ_p^2 (theo.) とよい一致を示している。

いま、 p_x の確率密度関数 $p(p_x)$ とすれば、 p_x が $p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x$ の範囲 j に入る確率 $\Delta P(p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x)$ は

$$\Delta P(p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x) = \int_{p_{xj}}^{p_{xj} + \Delta p_x} p(p_x) dp_x \quad (36)$$

と表現される。一方、 x のある区間距離 x_0 の $p_x - x$ 曲線上で、圧力範囲 j に入る x の K 番目の区間距離を $\Delta x_{jK} (p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x)$ とすれば、

$$\Delta P(p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x) = \lim_{x_0 \rightarrow \infty} \frac{\sum_K \Delta x_{jK} (p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x)}{x_0} \quad (37)$$

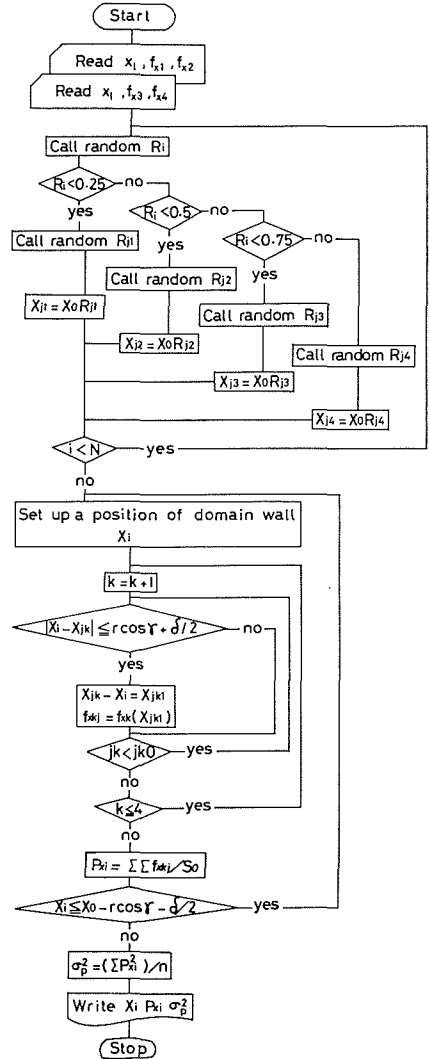


Fig. 8. A flow chart of computer simulation of the spatial distribution of the pressure due to the interaction between a local rigid wall and dislocation loops.

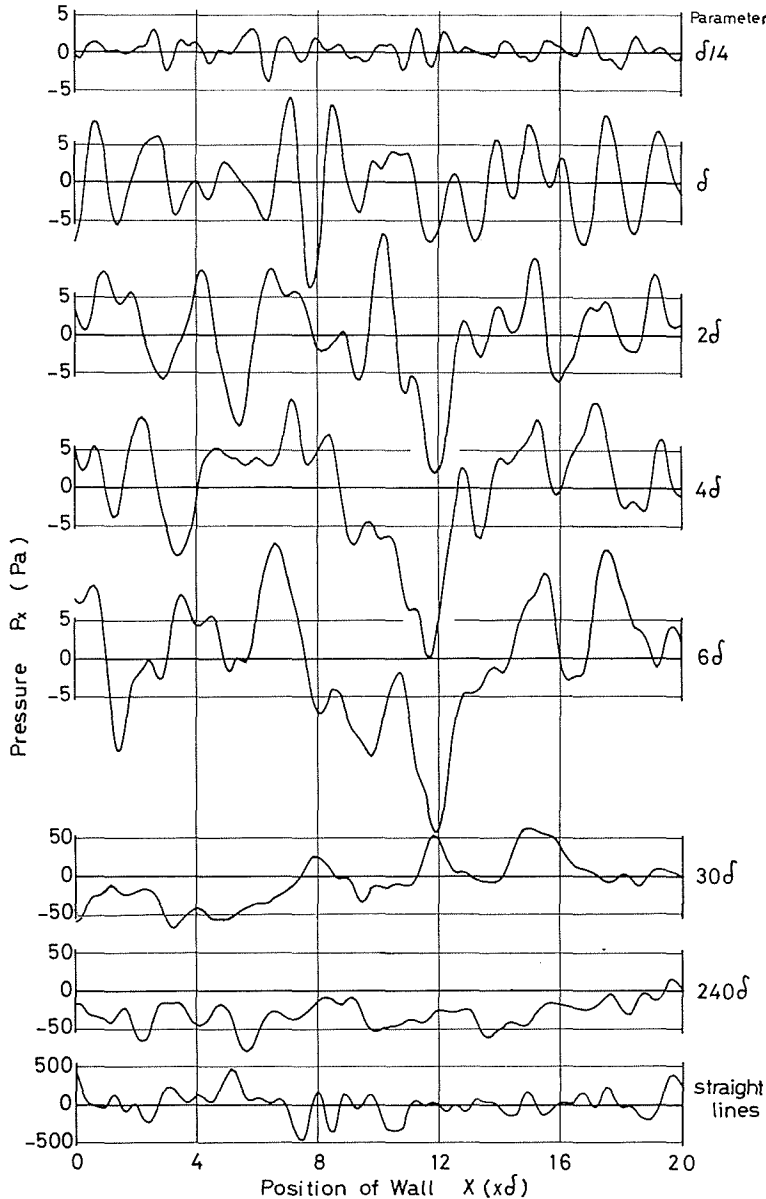


Fig. 9. Spatial distributions of the pressure exerted on the wall by dislocation loops.

と表現される。Fig. 10 は Fig 9 のパラメータ 6δ の場合について、 $x_0=160\delta$ にわたる $\sum_K \Delta x_{jK}$ ($p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x$) の測定値を (37) 式に代入することによって、実験的にもとめた確率 ΔP を $-$ で示す。一方、(34) 式の理論的確率密度関数 $p(p_x)$ の分散 σ_p^2 に、Table 1 の σ_p^2 (simu.) ($k=6$) を適用し、(36) 式からもとめた ΔP を \circ 印で示す。実験値と理論値とはよい一致を示している。

Fig. 11 は、磁壁面積を $S_0=170 (\mu\text{m}^2)$ 、あるいは転位密度を $\rho=10^{13} (\text{m}^{-2})$ で一定とし、転位密度 ρ 、あるいは磁壁面積 S に対する、 $2r=30\delta$ 、 $x_0=29\delta$ の場合についてシミュレーションから計算された圧力の偏差 σ_p との関係を示す。最小自乗法によって、

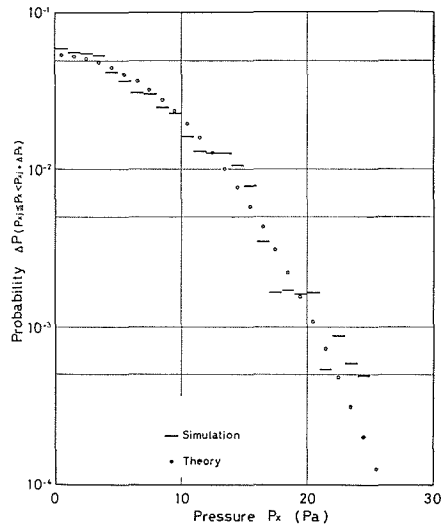


Fig. 10. Distributions of the pressure exerted on the wall by dislocation loops which are $2r \cos \gamma = 6\delta$. Probability ΔP in which pressure belongs to a range of pressure versus range of pressure.
—: by the simulation, \circ : by the theory.

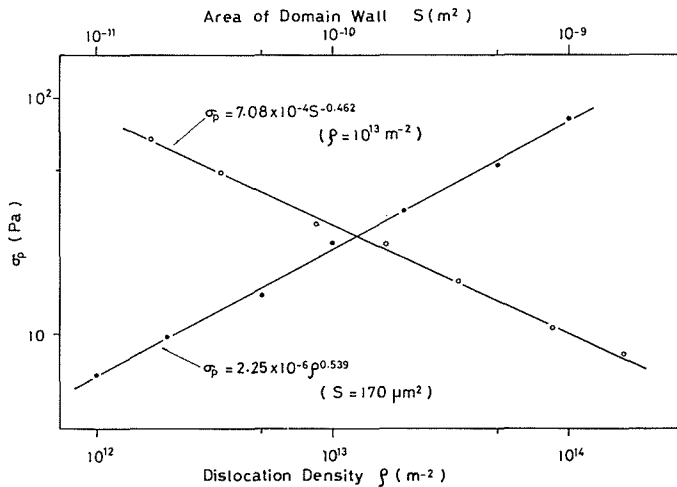


Fig. 11. Relation between the standard deviation of the pressure σ_p and dislocation density ρ or area of the wall S using the simulation as $2r = 30\delta$.

$$\sigma_p = 2.25 \times 10^{-6} \rho^{0.539} \quad (\text{Pa}) \quad (38)$$

$$\sigma_p = 7.08 \times 10^{-4} S^{-0.462} \quad (\text{Pa}) \quad (39)$$

という関係式を得る。 $x_0 = 29\delta$ という統計的取扱いには不十分な長さであることを考慮すれば、(38), (39) 式は $\sigma_p \propto \sqrt{\rho}$ 、 $\sigma_p \propto 1/\sqrt{S}$ という (33) 式の関係とよい一致を示すといえる。

(33) 式を

$$\sigma_p^2 = \kappa \rho \quad (40)$$

と書き換えて、 Fig. 9 の各 p_x のシミュレーションから求められた σ_p^2 に (40) 式を適用すること

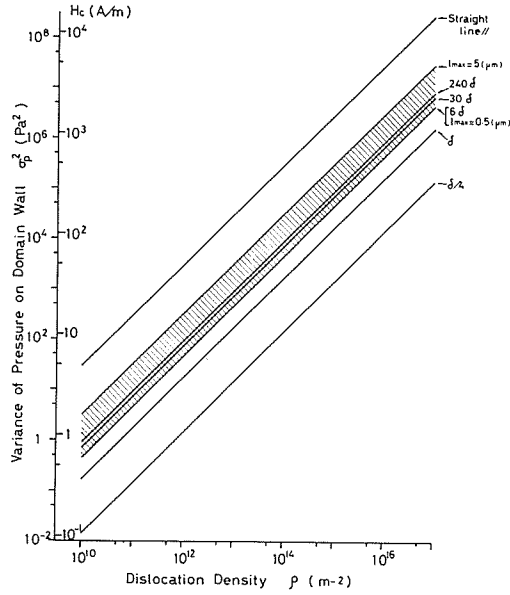


Fig. 12. Relation between variance of the pressure σ_p^2 and dislocation density ρ in which dislocation lines are loops or straight lines.

によって得られる ρ と σ_p^2 との関係を図 12 に示す。斜線が施された部分は、先の論文で、一様分布する直線転位集団、磁壁面積 S_0 、 l_{max} が $0.5 \sim 5 (\mu m)$ の範囲の場合の転位密度 ρ に対する σ_p^2 を示す^{2),3)}。Fig. 12 には先の論文の (16) 式³⁾ に相当する

$$H_c = \lambda \sigma_p / 2I_S \cos \phi \quad (41)$$

という関係において、 $\lambda = 3.53$ 、 $\cos \phi = 1$ として計算された H_c が対応する σ_p^2 の位置に示されている。

6. 結 論

磁壁と転位ループとの相互作用に関する理論ならびにモンテカルロ・シミュレーションによって、

(i) 一つの転位ループによる磁壁への作用力 $f_x(x_i)$ が数値積分によって計算され、さらに転位ループの中心が一様分布するとして、平均の作用力零、分散 $V[f_x]$ がもとめられた。転位密度 ρ の転位ループ集団の場合、中心極限定理を適用して、作用圧力 p_x の分布は平均零、分散 σ_p^2 の正規分布となる。確率密度関数 $p(p_x)$ 、分散 σ_p^2 ($2r \cos \gamma = k\delta$ として) は

$$p(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_p^2}} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2\sigma_p^2}\right), \quad \sigma_p^2 = \frac{2(k+1)\rho V[f_x]}{\pi(1+\sqrt{2})kS}$$

となる。

(ii) $f_x(x_i)$ にもとづき、シミュレーションが行われ、転位ループ集団による磁壁への作用圧力の空間分布 $p_x(x)$ がもとめられた。結果は、Porteseil らの実験によるポテンシャル関数 $V(x)$ と類似した対応を示した。

(iii) シミュレーションによる $p_x(x)$ からもとめられた σ_p^2 、 $\Delta P(p_{xj} \leq p_x < p_{xj} + \Delta p_x)$ は理論的結果とよい一致を示し、理論の妥当性と同時に、磁壁面積が $S_0 = 170 (\mu m^2)$ 程度においても、

統計的取扱いが十分可能であることを示した。

(iv) $\sigma_p \propto \sqrt{\rho}$, $\sigma_p \propto 1/\sqrt{S}$ という理論的關係はシミュレーションによっても得られた。

(v) 圧力の空間分布 $p_x(x)$ および σ_p は転位ループの半径 r , すなわち転位線の幾何学的形状に依存する。

最後に、本論文の数値計算ならびにシミュレーションはすべて北海道大学大型計算機センターを利用して行われたことを附記する。

参 考 文 献

- 1) Seeger, A., Kronmüller, H., Rieger, H. and Trauble, H.: J. Appl. Phys., **35** (1964), 3, p. 740.
- 2) 石田 巖, 中江 仁: 北海道大学工学部研究報告, 第96号 (昭和54年), p. 9.
- 3) 石田 巖, 中江 仁: 北海道大学工学部研究報告, 第96号 (昭和54年), p. 21.
- 4) Peach, M. and Koehler, J. S.: Phys. Rev., **80** (1950), 11, p. 436.
- 5) Porteseil, J. L., Vergne, R. et Cotillard, J. C.: J. Physique, **38** (1977), 12, p. 1541.