規則格子中の面欠陥と転位について ——atomistic な立場からの研究を中心として——

山 口 正 治* 馬 越 佑 吉**

1. は じ め に

純金属や単なる合金には期待すべくもない数々の特性を秘めた新しい材料として、規則合金や金属間化合物が注目されている。塑性の面からみれば、 Ni_3Al に代表される L1_2 型化合物や βCuZn に見られる強度の逆温度依存性など、その最たるものであろう。このような実用上重要な塑性上の特質を持つ規則合金および化合物の場合はもちろんのこと、機能的性質が注目されている化合物の場合にも実用化への道を切り開くための1つの道程として、その塑性挙動を明らかにすることがしばしば重要となる。本稿では、このような物質の塑性を考える上で基本となる規則格子中の転位や面欠陥に関して、最近行われた atomistic な立場からの研究について述べ、これらの研究の成果によって規則合金や金属間化合物の塑性におけるどのような問題が明らかにされ、又どのような問題が新たに提起されたかについて考察してみたいと思う。

2. 規則格子中の面欠陥の変位ベクトルと安定性

規則格子中には、基本となる格子にもともと存在する面欠陥の外、逆位相境界 (APB) のように原子の種類の違いを問題にしなければ欠陥とはならないような規則格子に特有の面欠陥が存在する。規則格子中の超格子転位は、このような面欠陥を介して超格子部分転位に分解しているから、その規則格子を持つ結晶の塑性挙動を理解するためには、その分解の仕方を知る必要がある。分解の仕方を知るには、いうまでもなくその規則格子に存在する面欠陥の種類を明らかにしなければならない。このような理由から、fcc, bcc および hcp 格子を基本とする比較的簡単な規則構造 (塑性上、興味のある金属間化合物の

多くはこのような構造に結晶する) については、剛体球モデルを用いて盛んに研究され、その結果は文献 (1), (2) にほぼ集大成されている。しかし、剛体球モデルに基づいて考え出された面欠陥がすべて結晶中に安定に存在し得るとは限らない。しかも時に単なる想像の産物も含まれている。このことは、たとえば剛体球モデルに基づいて提案された bcc 格子中のいろいろなタイプの面欠陥⁽²⁾⁽³⁾ が全てその存在を否定され、現在 bcc 格子中には安定な (少なくとも single layer の) 面欠陥は存在しないという考え方が定説になっている⁽³⁾ ことをみても明らかであろう。

ある面欠陥が安定に存在し得るか否かは、本来次のような方法によって判断されるべきである。すなわち、まず何らかの方法によって面欠陥のエネルギー、 γ を面欠陥の変位ベクトル、 $\mathbf{f}$ の関数として計算する。 $\gamma(\mathbf{f})$ は1つの曲面 (γ -surface と呼ばれる) を表わすことになるが、ある変位ベクトル、 $\mathbf{f}_1$ を持つ面欠陥が安定なものなら $\mathbf{f}=\mathbf{f}_1$ のところで γ -surface には極小が存在するはずである。もし極小が存在しなければ、その面欠陥はその結晶中に安定に存在し得ないということになる。このように、面欠陥の安定性を議論するためには、 γ -surface の形状を知る必要があるが、 γ -surface を計算によって求めることは必ずしも容易な仕事ではない。しかし幸いなことに結晶の対称性に注目すれば、 γ -surface の形状の特徴をかなり詳しく考察することが可能な場合が多い。次にこのことについて、fcc 型規則格子として最も典型的な L1_2 型構造を持つものを例として取り上げ、その $\{111\}$ 面上の面欠陥について具体的に説明しよう⁽⁴⁾。

図1は化学量論組成 A_3B を持つ L1_2 型構造の単位胞を、図2はこの格子の $\{111\}$ 面の原子の配列と積み重なり方を示している。又、図2の大きい丸印と小さい丸印はそれぞれネットワークで結んだ $\{111\}$ 原子面のすぐ上と下の $\{111\}$ 原子面上の原子を表わしている。以後、それぞれの $\{111\}$ 原子面を下から順に a, b, c 面と呼ぶことにする。いま、b 面と c 面の間に切り目を入れ、c 面上を b 面以下に対してずらせることによって面欠陥を結晶に導入したとしよう。その面欠陥のエネルギー γ をそ

* 大阪大学助教授；工学部金属材料工学科

** 大阪大学助手；工学部金属材料工学科

A Review of Recent Atomistic Studies of Planar Faults and Dislocations in Ordered Structures ; Masaharu Yamaguchi, Yukichi Umakoshi (Faculty of Eng, Osaka Univ, Suita)

Keywords: atomistic study, ordered lattice, planar fault, stability of planar faults, gamma surface, superlattice dislocation, dislocation core structure, dislocation dissociation, deformation
1983年4月25日受理

図 1 $L1_2$ 型構造. 図 2 $L1_2$ 型構造を持つ規則格子の $\{111\}$ 面上の原子配列とその積み重なり方(本文参照).

それぞれの変位ベクトルの終点で b 面に垂直に立てた座標に沿ってプロットすれば γ -surface が得られる. ところで図 1 からわかるように, $\{111\}$ 面には $(\bar{1}01)$, $(\bar{1}10)$, $(0\bar{1}1)$ の 3 種類の鏡面対称性を持った面が垂直に交わっている. したがって, γ -surface にも当然これら 3 種類の鏡面が受けつがれている. たとえば, 変位ベクトルの起点を b 面上の O_1 として γ -surface を描けば, O_1 からそれぞれ $[\bar{1}01]$, $[\bar{1}10]$, $[0\bar{1}1]$ 方向に鏡面の面間隔の $a/\sqrt{2}$ (a は格子定数) だけ進むごとにそれぞれ, $(\bar{1}01)$, $(\bar{1}10)$, $(0\bar{1}1)$ タイプの鏡面があらわれるはずである. γ -surface の場合, 鏡面に沿って谷が尾根が通っているはずであるから, 面欠陥を導入した時の原子配列から谷か尾根かを判断して, γ -surface を模式的に描けば図 3 (a) のようになるはずである (γ の大きさは等高線の太さが増すほど大きくなる). なお A , B 原子の区別を無視して fcc 格子と考えれば, $\{110\}$ タイプの鏡面の面間隔が $L1_2$ 型構造の場合の $1/2$, すなわち $a/2\sqrt{2}$ となるため, その $\{111\}$ 面に対する γ -surface の模式図は図 3 (b) のようになる.

さて, $L1_2$ 型構造を持つ規則格子の $\{111\}$ 面には APB のほか, complex stacking fault (CSF) と superlattice intrinsic stacking fault (SISF) の存在が知られていて, それらの変位ベクトルはそれぞれ $a/2\langle 110 \rangle$, $a/6\langle 112 \rangle$, $a/3\langle 112 \rangle$, たとえば図 2 の O_1A , O_1C_1 , O_1S に対応する. 又, fcc 格子の $\{111\}$ 面には, CSF と同じ $a/6\langle 112 \rangle$ を変位ベクトルとする積層欠陥が存在する. これらの変位ベクトルに対応する位置での γ -surface の形状をみれば, 次のようなことがわかる.

図 3 γ -surface の模式図(本文参照).

(a) $L1_2$ 型構造を持つ規則格子の $\{111\}$ 面.
(b) fcc 格子の $\{111\}$ 面.

(i) fcc 格子の積層欠陥と $L1_2$ 型構造を持つ規則格子中の SISF は 3 つの鏡面の交わる所, すなわち 3 つの谷の合流点にあるため, これらの面欠陥に対応する極小は常に存在し, したがってこれらの面欠陥は常に安定である. 又, 極小の位置は結晶学的に定まっているから, それぞれの変位ベクトルは常に $a/6\langle 112 \rangle$ と $a/3\langle 112 \rangle$ である.

(ii) 一万, CSF や APB に対応する位置には 1 つの鏡面があるのみで, いい換えれば CSF と APB は P_2 からそれぞれ O_1 および S へ流れる谷の中間に位置している. 従って, CSF や APB に対応する極小の位置は, 剛体球モデルから予想される C や A の位置になければならないという必然性はなく, それぞれ P_2O_1 , P_2S を沿って C や A からずれていてもかまわないし, 極端な場合存在しないということも起こり得るはずである. このような理由で, CSF と APB は安定に存在し得ない場合もあり, たとえ安定に存在し得てもその変位ベクトルは一般には図 3 (a) のように O_1C_1 , O_1A からずれているものと考えられる.

図 4 は $L1_2$ 型構造を構成する原子間に 2 体力ポテンシャルを仮定し, 図 3 (a) の AS を通る断面を計算によって求めた例である. 計算は 5 種類の異なったポテンシャルを用いて atomistic に行われた[†]. ポテンシャルの種類が変わっても, (a) SISF に対応する極小の位置は常に S の位置にあること; (b) APB に対するそれは A の位置からずれること; (c) そのずれの量は用いるポテンシャル, 従って多分化合物や規則合金の種類によって変わること; (d) ポテンシャルによっては, APB に対応する極小がなくなること, などを明瞭に示している.

[†] 文献(5)に転位芯の構造を計算機シミュレーションによって atomistic に求める方法を詳述した. γ を計算する方法も基本は同じである. 同文献を参照されたい.

図4 $L1_2$ 型構造を持つ規則格子の $\{111\}$ 面に対する γ -surface(図3(a)のASを通る断面)⁽⁴⁾. 図中の1~5はそれぞれ異なったポテンシャルを用いて計算された結果を示す.

そもそも, $L1_2$ 型構造を持つ規則格子の $\{111\}$ 面上に fcc 格子の場合と違って, CSF, APB, SISF と3種類の異なった面欠陥が生じるのは, fcc 格子に比べて $L1_2$ 型構造を持つ規則格子の場合その $\langle 110 \rangle$ 方向の並進対称性が低下しているためである. さらに言えば, $\{110\}$ タイプの鏡面の面間隔が fcc のその2倍になっていることが直接の原因であるが, 図3(a)と(b)を比較すればわかるように, このことがまさに CSF や APB に上の(ii)で述べたような特性を与える原因にもなっている. 同様にして他の構造の規則格子にも CSF や APB と同じタイプの面欠陥が存在するはずであるから, その面欠陥が CSF や APB タイプのものか, あるいは SISF や fcc 格子の積層欠陥と同じタイプのものかを判定する方法を, もう少し簡単な形で述べておこう. 面欠陥が存在する面に垂直でかつ相交わる2種以上の鏡面が存在することがまず前提となるが, (i)と(ii)からわかるように, 方法の要点は面欠陥を導入した後もこれらの鏡面が保存されるか否かを判定することにある. もし1種類の鏡面のみが保存されれば前者のタイプ, 2種類以上の鏡面が保存されれば後者のタイプである. なお, 自明のことであるが, ある鏡面が保存されるか否かは, 導入される面欠陥の変位ベクトルのその鏡面に垂直方向の成分が, 鏡面の面間隔の整数倍になっているか否かによって判断すればよい.

図5 $L1_2$ 型構造を持つ規則格子中の (111) 面上における $a[110]$ 超格子転位の分解. (a) APB, CSF 共に安定な場合, (b) APB のみ安定な場合, (c) APB, CSF 共に不安定な場合.

このように, 規則格子中の面欠陥についてその安定性や変位ベクトルを詳細に検討すれば, 従来ほとんど *a priori* に安定に存在するものと考えられてきた規則格子中の APB も時に安定に存在し得ない場合もあり得ることがわかる. 次に本章での考察を踏まえながら, fcc , bcc , hcp 格子を基礎とする典型的な規則格子中の超格子

転位について, その分解形式や転位芯の構造, さらにそれらが規則合金や化合物の塑性挙動に及ぼす影響について考えることにしたい.

3. fcc 型規則格子 ($L1_2$ 型構造) 中の超格子転位

前章でも少し触れたように, この規則格子中には $a\langle 110 \rangle$ をバーガース・ベクトル(以後 B.V. 又は $\mathbf{b}$ を用いる)とする超格子転位が存在し, その通り面は $\{111\}$ あるいは $\{001\}$ 面である. $\{111\}$ 面上では, 前章に述べた CSF, APB, SISF を介して超格子部分転位に分解するが, (111) 面上の $\mathbf{b} = a[\bar{1}10]$ (図2の O_1O_2 に対応する)の超格子転位を例にとれば, その B.V. の分解には図5に示すような4つのタイプが一応考えられる. 図の(a)は, CSF, APB 共に安定でそのエネルギー(以後 γ_{CSF} , γ_{APB} のように表わす)が低い時に期待されるタイプ⁽⁶⁾

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 + \mathbf{b}_4 \quad (1)$$

および γ_{SISF} が非常に低い時に期待されるタイプ⁽⁷⁾

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_5 + \mathbf{b}_6 + \mathbf{b}_3 + \mathbf{b}_4 \quad (2)$$

を示している. 図の(b)は, γ_{CSF} が非常に高いかあるいは CSF が安定に存在し得ない場合, (c)は γ_{CSF} , γ_{APB} が共に非常に高いか, CSF, APB 共に不安定な場合に期待される分解の形式である. なお, 図は CSF, APB の変位ベクトルのずれを考慮して模式的に描かれている. ところが, このように分解した超格子転位の弾性エネルギーを計算してみると, まず式(2)による分解形式は転位の自己エネルギーが大きく, $\gamma_{APB} \gg \gamma_{SISF}$ でなければ式(1)又は図5(b)の分解より有利にはなり得ない. したがって, $a\langle 110 \rangle$ 超格子転位は $\{111\}$ 面上では, 式(1)あるいは図5(b), (c)のいずれかの分解をしているはずである. もし, このように分解した転位の中で fcc 格子中の $a/2\langle 110 \rangle$ 転位とは異なった動的特性を示すものがあれば, そのような転位が $L1_2$ 型化合物に特有の塑性挙動を担っていると考えてさしつかえないであろう.

そこで $a\langle 110 \rangle$ 超格子ラセン転位が式(1)と図5(b), (c)のように分解しているとして, その先導部分転位を図6のように結晶の中に取り込み, 各部分転位の芯構造と動的挙動および矢印の方向にそれらを動かすに必要な応力, τ の計算を試みた[†]. もし, τ が部分転位の背

後にある面欠陥を引きずるに要する力, すなわち γ/b (γ は面欠陥のエネルギー, b は計算に用いた結晶ブロック内の B.V. の和)と同程度なら, 面欠陥を引きずらず超転位全体として運動する時には大きな応力を必要とした

[†] 計算の方法の詳細は文献(8)および(9), (10)を参照されたい.

図6 $a\langle 110 \rangle$ 超格子転位を構成する部分転位の運動に要する応力(本文参照). (a)~(c)は図5 (a)~(c)の分解に対応する. (d)は $a/2\langle 110 \rangle$ 部分転位が $\{111\}$ 面から $\{001\}$ 面へ交差しりした場合.

い. したがって, その運動に伴う塑性現象は基礎となる *fcc* 格子の場合と大差ないはずである. 計算の結果, $\{111\}$ 面の運動に関する限り $\tau > \gamma/b$ となるのは, 図6 (c) すなわち図5 (c)の分解の場合だけであることがわかった. 同様の計算を, 図6 (a)と (b)の転位が $\{111\}$ 面から $\{001\}$ 面へ交差しりして生じる $\{001\}$ 面上の $a/2\langle 110 \rangle$ 転位についても行なったが(図6 (d)), $a/2\langle 110 \rangle$ 転位を $\{001\}$ 面に沿って運動させるには, 応力の効果だけでは不十分で熱活性化過程が不可欠であるという結論を得た. このことは $L1_2$ 型構造の場合, $a\langle 110 \rangle$ 超格子ラセン転位が

$\{001\}$ 面へ交差しりした時および $\{111\}$ 面上で図5 (c)のように分解している時に特異な塑性現象が現われる可能性があることを示唆している.

$\{001\}$ 面上の APB は, $\{111\}$ 面上の SISF と同じタイプの常に安定な面欠陥でありしかも $\gamma_{APB\{001\}} < \gamma_{APB\{111\}}$ であるから, $a\langle 110 \rangle$ 超格子転位は $\{001\}$ 面へ交差しりすることによってそのエネルギーを下げるができる. しかしながら, 交差しりの後 $\{001\}$ 面を運動するには熱活性化過程が必要であるから, ある適当な温度範囲では交差しりした部分が $\{001\}$ 面を長距離運動できず, 超格子転位の $\{111\}$ 面上の運動に対する強力な抵抗点を形成する. これがいわゆる Kear-Wilsdorf 不動化機構⁽¹¹⁾であり, それによってもたらされる異常塑性現象が Ni_3Al など $L1_2$ 型化合物によく知られた強度の逆温度依存性である. さて, この Kear-Wilsdorf 機構が働く上で重要な役割を果たしている $a/2\langle 110 \rangle$ 転位の $\{001\}$

面上での動き難さは何に起因しているだろうか. 図6 (d)の計算の結果, その原因が $a/2\langle 110 \rangle$ 転位芯にあることが明らかになった. 図7はその転位芯の一例を示したものである. 転位は $a/2[\bar{1}01]$ ラセン転位で, 紙面に垂直に入っている. 矢印は隣接する原子間の相対変位の大きさと向きを表わしているが, 大まかに大きな矢印の分布する領域が転位芯であると考えれば, $a/2[\bar{1}01]$ 転位が (010) 面へ交差しりした後 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面上に拡がって, (010) 面に対して sessile な芯になっていることを理解していただけたと思う. もちろん, 交差しりの後 (111) 面に拡がっても同様のことが言える. なお, ラセン(図7 (a))および刃状成分(図7 (b))の相対変位の分布を解析すれば, 転位芯の拡がりを互いに重なり合った2つの $a/6\langle 112 \rangle$ タイプ転位に分解していると解釈することができる.

図6 (c)に示すように, 図5 (c)の分解によって生じる $a/3\langle 112 \rangle$ 転位の場合にも $\tau > \gamma_{SISF}/b_9$ となるが, $a/3\langle 112 \rangle$ 転位の転位芯にその原因がある. 一般に $a/3\langle 112 \rangle$ のように大きな B.V. を持つ転位の場合, その大きな B.V. に由来する弾性的エネルギーを下げる

図7 (010) 面上に交差しりした $a/2[\bar{1}01]$ ラセン転位の芯構造. (a) 相対変位のラセン成分の分布, (b) 相対変位の刃状成分の分布. なお大小の六角は, それぞれ $[\bar{1}01]$ 方向の原子の積み重なりを形成する隣接した2枚の $(\bar{1}01)$ 面上の原子を表わしている. また, 白い六角はA原子, 黒い六角はB原子である(以下図8, 9についても同様).

ため, 転位芯の領域で原子が少しずつその位置をゆずり合って非平面的で複雑な転位芯を作り上げることが多い. その典型が後述する *bcc* 格子中の $1/2\langle 111 \rangle$ ラセン転位である. その結果, 静的状態でのエネルギーは下がるがそのままの形では運動することができなくなり, 運動に際して転位芯の sessile $\rightarrow$ glissile 変態を要することとなる. $a/3\langle 112 \rangle$ 転位の場合には, エネルギーの類似した3つの異なったタイプの転位芯が存在するが, そのうちの1つを図8に示した. 一見して大きな矢印が, 面である (111) 面のみならず, $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面にも分布していることがわかる(転位芯の詳細な解釈は文献(8), (9)を参照されたい). このような非平面性が, この転位芯を sessile にしている. このことは, 応力をかけて運動

† 相対変位の大きさと向きを示す矢印によって転位芯を表現する方法については, 文献(12)に詳述しているので参照されたい.

図 8 $a[101]$ 超格子ラセン転位の分解 ($a[101] \rightarrow a/3[211] + a/3[112]$) によって生じた $a/3[211]$ 転位の芯構造.
(a) 相対変位の $[101]$ 方向の成分, (b) 相対変位の $[121]$ 方向の成分.

図 9 sessile $\rightarrow$ glissile 変態した $a/3[211]$ 転位の芯構造 (図 8 の転位に応力をかけ、運動を開始する直前の状態). なお図 8 の格子の一部 (SISF の上下 3 枚の (111) 原子面のみ) を示している.
(a) 相対変位の $[101]$ 方向の成分, (b) 相対変位の $[121]$ 方向の成分.

をはじめる寸前には転位芯は図 9 のように変化することを見れば明らかであろう. 図 6 (c) の $\tau/\gamma_{\text{SISF}}/b_0$ は実は図 8 から図 9 への転位芯の構造変化, すなわち sessile $\rightarrow$ glissile 変態に要する応力なのである. このような sessile $\rightarrow$ glissile 変態は温度の上昇と共に容易になるはずであるから, もし $a\langle 110 \rangle$ 超格子ラセン転位が図 5 (c) のように分解していれば, 低温域の強度に強い温度依存性を生じる可能性がある. 我々は Pt_3Al 等の Pt 系 L_{12} 型化合物に見い出されている低温強度の温度依存性⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾をこの線に沿って説明できるのではないかと考えている.

$\{111\}$ 面上の APB や CSF の変位ベクトルのずれが, 塑性挙動に及ぼす効果については現在のところ不明である. しかし, たとえば $a\langle 110 \rangle$ 超格子ラセン転位が図 5 (b) のように分解すれば, 部分転位の B.V. に余分の刃状成分が生じるから, このような刃状成分が部分転位の交差りや超格子転位全体のり面あるいは超格子転位と点欠陥との相互作用に影響する可能性がある. 今後の問題であろう.

L_{12} 型のほか, L_{10} , L_{11} , DO_{22} , $\text{D}_{1\text{a}}$, Ni_3Ta , Ni_2Cr 等の構造を持つ規則格子中の超格子転位についても, その分解形式が剛体球モデルに基づいて議論されている⁽²⁾. 規則格子の構造が複雑になるにつれ, 分解の形式も当然複雑になるが, それらの分解が現実的であるかど

うかについては, 弾性論による計算と結晶の対称性に基づく安定性の考察による検討が必要である.

4. bcc 型規則格子 (B_2 型構造, DO_3 型構造, L_{21} 型構造) 中の面欠陥と超格子転位

(1) 面欠陥と超格子転位の分解

ここでは, bcc 型の規則格子として最も典型的な B_2 , DO_3 および L_{21} 型構造を持つものを取りあげる⁽¹⁵⁾. 図 10 は化学量論組成 AB (B_2 型), A_3B (DO_3 型) および A_2BC (L_{21} 型) を持つそれぞれの構造の規則格子を示している. bcc を基礎とする規則格子であるから, 原子の並び方の稠密さから考えて, りり方向は可能性の高い順に $\langle 111 \rangle$, $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ である. したがって, B_2 型構造の場合には $a\langle 111 \rangle$, DO_3 および L_{21} 型構造の場合には $2a\langle 111 \rangle$ あるいは $2a\langle 001 \rangle$ を B.V. とする超

格子転位が存在し得る (a は基本格子である bcc 格子の格子定数). 超格子転位の分解の形式を考えるとき, 規則格子中に存在する面欠陥の種類とその安定性に対する考察が重要であることを指摘したが, ここではまず第 2 章に述べた方法に従って B_2 , DO_3 , L_{21} 型構造を持つ格子中の最稠密面である $\{110\}$ 面上の APB についてその変位ベクトルと安定性について考えてみよう. 図 11 は

図 10 B_2 , DO_3 および L_{21} 型構造.

- (a) B_2 型構造の場合, α 位置は A 原子, β および γ 位置は B 原子.
- (b) DO_3 型構造の場合, α, γ 位置は A 原子, β 位置は B 原子.
- (c) L_{21} 型構造の場合 α 位置は A 原子, β 位置は B 原子, γ 位置は C 原子.

図 11 B2, DO₃ および L2₁ 型構造を持つ規則格子の (110) 面上の原子配列とその積み重なり方.
(a) B2 型構造の場合, (b) DO₃ 型構造の場合 (α, γ 位置は A 原子, β 位置は B 原子が占る), L2₁ 型構造の場合 (α 位置は A 原子, β 位置は B 原子, γ 位置は C 原子が占る).

B2, DO₃ 型構造を持つ規則格子の (110) 面上の原子の配列と積み重なり方を示している. 図の (a) からわかるように B2 型規則格子の場合, $a/2$ および $a/\sqrt{2}$ を面間隔とする (001) タイプおよび ($\bar{1}10$) タイプの鏡面が (110) 面に垂直に交わっている. 一方, (110) 面の APB の変位ベクトル, たとえば $a/2[\bar{1}11]$ (図の f) は $a/2[001] + a/\sqrt{2}[\bar{1}10]$ と分解できるから, この APB を (110) 面に導入した後も (001), ($\bar{1}10$) の 2 種の鏡面は保存される. したがって, B2 型構造を持つ規則格子中の $a/2\langle 111 \rangle$ APB は L2₁ 型構造の場合の $\{111\}$ 面上の SISF と同じタイプの面欠陥である. このことは (110) 面に関する γ -surface の計算結果とも良く一致する. なお基本格子が bcc 格子であるため, この APB 以外に安定な面欠陥は存在しない.

DO₃ 型構造の規則格子の場合 (図 11 (b)) には, $\langle 001 \rangle$ 方向の最小並進ベクトルが B2 型構造の場合の 2 倍の $2a$ となるため, (001) タイプの鏡面の面間隔が a に増加する ($\bar{1}10$ タイプのそれは不変). さて, この規則格子中には, たとえば $f_1 = a/2[\bar{1}11]$, $f_2 = a[001]$ ($f_3 = a[\bar{1}11]$ と等価) を変位ベクトルとする 2 種類の APB が考えられるが, 後者の APB を (110) 面に導入しても, 2 組の鏡面は共に保存され, したがってこの APB は L2₁ 型構造の場合の SISF と同じタイプである. 一方 $a/2[\bar{1}11]$ APB の場合 ($\bar{1}10$) タイプの鏡面のみが保存されるに留まるため, その変位ベクトルは $[001]$ 方向に沿ってずれる可能性がある. すなわち L2₁ 型構造における CSF などと同じタイプである.

ここで変位ベクトルのずれについてもう少し詳しく考えるため, 面欠陥を導入したことによって欠陥面を境に上下の結晶間に働く力を考えてみよう. この力は次のように定義される.

$$\mathbf{F} = \frac{1}{S} \sum_i \sum_j \frac{d\phi(r_{ij})}{dr} \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (3)$$

ここで $\mathbf{r}_{ij}$ は i (下部結晶中の原子) と j (上部結晶中の原子) 原子間の相対位置ベクトル, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$, $\phi(r)$ は原子間相互作用ポテンシャル, S は欠陥の面積である. この力, $\mathbf{F}$ は面欠陥が導入された後, その上下の結晶が互いに他をより安定な方向に引き戻そうとして働く力, restoring force であるから, もし面欠陥が安定に存在

図 12 DO₃ 型化合物 Fe₃Si 中の (110) 面上の γ -surface (図 11 (b) 参照). 番号の増加に伴い積層欠陥エネルギーは増加する.

し得るタイプのものでは, $\mathbf{F}$ は当然 0, 一方安定な位置が剛体球モデルから指摘される位置よりある方向にずれるタイプの面欠陥であれば, $\mathbf{F}$ はその方向に有限の値を持つはずである. さて $1/2a[\bar{1}11]$ APB の場合の restoring force を計算すると, $[\bar{1}10]$ 方向の成分は 0 となるが $[001]$ 方向のそれは

$$F = \left| \frac{dV}{dr} \right|_{r=r_1} / \sqrt{6} a^2 \quad (4)$$

(V は規格化エネルギーで, $V = (\phi_{AA}(r) + \phi_{BB}(r))/2 - \phi_{AB}(r)$, r_1 は第 1 隣接原子間距離) となり一般には 0 とならない. すなわち先の結晶の対称性による議論の結果とよく一致する. ただし, この結果は同時に V が r_1 の位置で極値を持てば $F=0$ となり $a/2[\bar{1}11]$ APB も $a[001]$ APB と同タイプとなることをも示している. なお, DO₃ 型構造の規則格子の場合にも Fe₃Si に似せてつくられた原子間ポテンシャルを用いて γ -surface の計算が行われている⁽¹⁶⁾. 図 12 は (110) 面に対するその γ -surface である. γ の値を表わす等高線が示すように, $a[001]$ APB に対応して $f_2 = a[001]$ の位置に極小が存在するが, $a/2[\bar{1}11]$ APB に対応する極小の位置は $f_1 = a/2[\bar{1}11]$ より $[00\bar{1}]$ 方向に遷移していることがよくわかる. 又, DO₃ 型構造の場合にも B2 型構造の場合と同様, APB 以外の安定な面欠陥は存在しない.

$\{112\}$ 面上の APB についても同様に考察すればよい. DO₃ 型構造における $a/2\langle 111 \rangle$ タイプの APB の変位ベクトルが, $\{112\}$ 面上では $\langle 111 \rangle$ 方向にずれる以外, B2, DO₃ 型構造の場合共に $\{110\}$ 面の場合と全く同じ結論が得られる. なお, L2₁ 型構造の場合について特に説明しなかったが, 結晶の対称性に関する限り L2₁ 型構造と DO₃ 型構造とは全く同等であるから, 式 (4) の V が $V = (\phi_{BB}(r) + \phi_{CC}(r))/2 - \phi_{BC}(r)$ となる以外 DO₃ 型構造について得られた結果がそのまま L2₁ 型構造を持つ規則格子にもあてはまると考えて差し支えない.

以上の APB に関する考察から, bcc 型規則格子中の超格子転位の分解の形式について次のようにまとめることができる. (i) B2 型構造における $a/2\langle 111 \rangle$ APB は

図 13 DO₃ および L₂₁ 型構造を持つ規則格子中の (a) (110) 面および (b) (112) 面上における $2a\langle 111 \rangle$ 超格子転位の分解. 実線は $a/2\langle 111 \rangle$ APB が安定な場合, 破線は同 APB が安定に存在し得ない場合の分解.

常に安定なタイプであるから, $a\langle 111 \rangle$ 超格子転位は常に $a/2\langle 111 \rangle$ 転位対に分解する. (ii) DO₃ および L₂₁ 型構造における $2a\langle 001 \rangle$ 超格子転位も同様にして, 常に $a\langle 001 \rangle$ 転位対として存在する. (iii) 一方, DO₃ および L₂₁ 型構造における $2a\langle 111 \rangle$ 超格子転位の場合, その B.V. は図 13 のように分解する. 図の実線は $a/2\langle 111 \rangle$ タイプの APB が安定な場合, 破線は同 APB が安定に存在し得ない場合を示している. なお, $\{110\}$ 面上の分解の場合には, $2a\langle 111 \rangle$ 超格子転位がラセン方位であっても部分転位の B.V. には刃状成分が生じる. この刃状成分がこの転位の迂り挙動, たとえば引張り, 圧縮など変形モードの違いによって交差迂りの容易さに違いを生じるなど, 何らかの影響を及ぼしている可能性があるが, 現在のところよくわかっていない. なお, 4 本の部分転位に分解した $2a\langle 111 \rangle$ 超格子転位および $a\langle 001 \rangle$ 転位対からなる $2a\langle 001 \rangle$ 超格子転位はそれぞれ Fe₃Al (DO₃ 型)⁽¹⁷⁾ と Co₂AlTi (L₂₁ 型)⁽¹⁸⁾ 中で実際に観察されている.

(2) 転位芯の構造と塑性異方性

bcc 型規則格子には APB 以外に安定な面欠陥がないため, 超格子転位は APB を介して超格子部分転位にまで分解するが, それ以上の分解は起こり得ない. したがって, これら規則格子中の超格子部分転位は, L₂₁ 型構造の規則格子中の $a/3\langle 112 \rangle$ 転位がそうであったように複雑な構造の転位芯をつくる傾向を持っている. このような理由から, bcc 型の規則格子を持つ規則合金や化合物の塑性には, 超格子部分転位芯の構造それ自体あるいはその応力下での動的性質と密接に関係した様々な効果いわば dislocation core effects が現われる. まず B2 型化合物を一例として, 塑性に及ぼす転位芯の影響について考えてみよう. この種の化合物には $\langle 001 \rangle$ および $\langle 111 \rangle$ 迂りが起こり得るが, 迂り方向を決定するのは主に $a/2\langle 111 \rangle$ APB エネルギーの大小で, その大きい NiAl, AuZn などに前者, 比較的小さい β CuZn などに後者の迂りが観察されている†. bcc 格子との類似性か

ら, $\langle 111 \rangle$ 迂りを担う転位はラセン方位の $a/2\langle 111 \rangle$ 転位対であろう. 又, 転位対の迂り面第 1 候補は転位対をつなぐ APB のエネルギーが最低となる $\{110\}$ 面である. 比較的高温では, 確かにかなりの化合物についてその迂り面は $\{110\}$ である. しかし転位芯の構造がその運動に直接影響すると考えられる低温での結果をみると, FeCo⁽²¹⁾ の例を除きほとんど $\{112\}$ 迂りが優先している⁽²²⁾. 一例として β CuZn の迂り面の結晶方位依存性††を 図 14 に示した. このことは, $a/2\langle 111 \rangle$ 転位対の迂り面を決めているのは APB のエネ

ルギーではなく, $a/2\langle 111 \rangle$ 転位の転位芯の特性であることを示唆している. 迂り面の選択に dislocation core effect が現われていると言ってもよい. そこで, $a/2\langle 111 \rangle$ ラセン転位対の転位芯の構造とその応力下での挙動を調べてみよう.

図 15(a) は B2 型構造を安定にする原子間ポテンシャルを用いて計算された $a/2\langle 111 \rangle$ ラセン転位の転位芯の構造を示している^{(27)†††}. 個々の転位芯の構造は, すてによく知られている bcc 格子中の $1/2\langle 111 \rangle$ ラセン転位芯と同様, 転位芯近傍にある大きな相対変位が転位芯を晶帯軸として交わる 3 種の $\{110\}$ 面上に拡がって風車状

図 14 β CuZn (B2 型) 合金の ψ - χ 関係 (本文脚注参照).

△: 4.2 K (引張)⁽²³⁾, □: 77 K (引張)⁽²³⁾,
□: 77 K (引張)⁽²⁴⁾, ■: 77 K (圧縮)⁽²⁵⁾,
○: 293 K (引張)⁽²⁴⁾, ●: 293 K (圧縮)⁽²⁶⁾,
⊕: 373 K (圧縮)⁽²⁶⁾, ⊙: 473 K (圧縮)⁽²⁶⁾.

†† 迂り面の方位依存性は慣用される ψ - χ 関係を用いて表わされている. $|\psi| = 30^\circ$ のとき $\{112\}$ 迂り, $\psi = 0^\circ$ のとき $\{110\}$ 迂りである (文献 (22) ~ (27) 参照).

††† B2 型構造を持つ規則格子中の $a\langle 111 \rangle$ 超格子ラセン転位については原子列ポテンシャルを用いた竹内による先駆的な仕事⁽²⁸⁾⁽²⁹⁾が, bcc が格子中の $a/2\langle 111 \rangle$ ラセン転位芯については竹内, 蔵元らによる詳細な研究がある^{(30)~(32)}. なお後者については竹内の解説 (33) も合わせ参考にされたい.

† 高温においては $\langle 111 \rangle$ および $\langle 001 \rangle$ 転位と溶質原子との相互作用の違いにより $\langle 111 \rangle$ 迂りから $\langle 001 \rangle$ 迂りへの遷移が起る場合がある. 詳細は文献 (19), (20) を参照されたい.

図 15 (101)面上の $a/2[111]$ ラセン転位対の芯構造。矢印は相対変位の $[111]$ 方向の成分を示す。
(a) $\gamma_{APB\{110\}} = 485 \text{ mJ/m}^2$, $\tau = 0$, (b) $\gamma_{APB\{110\}} = 485 \text{ mJ/m}^2$, $\tau = 0.07 \mu$, (c) $\gamma_{APB\{110\}} = 95 \text{ mJ/m}^2$, $\tau = 0.055 \mu$
 μ は剛性率。なお図には $[111]$ 方向の原子の積み重さなりのユニットを形成する 6 枚の $\{111\}$ 面の内、3 枚の $\{111\}$ 面上の原子が $[111]$ 方向に投影してある。また白、黒の点はそれぞれ A, B 原子を示している。但し、図に示した 3 枚の $\{111\}$ 枚の前後にある 3 枚の $\{111\}$ 面をとれば、白、黒の点はそれぞれ B, A 原子を示すことになる。

を呈している。大きな矢印が並んでいるところには、大きな相対変位が存在し、したがって一種の面欠陥が形成されている。B2 型構造の場合には、APB 以外に安定な面欠陥は存在しないから、これらは不安定な面欠陥で欠陥面を狭む結晶に有限の restoring force が働いているはずである。したがってもし、この転位芯が運動を開始するために、その形を変えなければならないとすれば sessile $\rightarrow$ glissile 変態[†]、そのとき出来るだけ restoring force が小さくなるように相対変位を再分布[†]させるであろう。言い換えれば、restoring force の出来るだけ小さい不安定面欠陥を作ろうとするであろうことは容易に想像がつく。

さて、図 15 (b), (c) は応力下での転位対の挙動 2 例を示している。大小いろいろな APB エネルギーを与えるポテンシャルを用いて応力下での転位対の挙動を検討したが、APB エネルギーには直接関係なく大多数の場合、先導転位の芯が図 15 (b) に見るように双晶側の $\{112\}$ 面上に拡がり、ついにはその $\{112\}$ 面上を運動するという結果を得た。このことは先の $\{110\}$ 面に関する実験結果と大変よく一致している。転位対が APB エネルギーに関係なくこのような挙動を示し易いのは次のような理由による。すなわち、 $\{112\}$ 面に沿って転位芯が拡がり始めるとき、その先端に形成される面欠陥の変位ベクトル $f = a/6\langle 111 \rangle$, $2/3a\langle 111 \rangle$ に対する restoring force が、APB が存在することによって必然的に低下する傾向を

持つからである。図 16 は図 15 (b) と同じポテンシャルを用いて計算した $\{110\}$ と $\{112\}$ 面に対する γ -surface と restoring force surface の $\langle 111 \rangle$ 方向に沿う断面を示している。先に述べたことは、APB が存在すると $f = a/2\langle 111 \rangle$ のところで γ -surface が持ち上げられ、その結果 $f = a/6\langle 111 \rangle$, $2a/3\langle 111 \rangle$ のところの傾きがゆるやかになって restoring force ($\gamma(f)$) がわかっていれば、 $-\text{grad } \gamma(f)$ が低下すると大まかに理解して頂ければよい。このように B2 型化合物の低温における $\langle 111 \rangle$ 切りが $\{112\}$ 面で起り易いのは、B2 型構造の特性の 1 つであると言うことができる。図 16 からわかるように一般には、変位ベクトル $f = a/6\langle 111 \rangle$, $2a/3\langle 111 \rangle$ の面欠陥に対する restoring force は、面欠陥が $\{112\}$ 面上にある時の方が $\{110\}$ 面上にある時よりも低いか少なくとも同程度である。しかし $\{110\}$ 面上で $f = a/6$

$\langle 111 \rangle$ の変位ベクトルを持つ面欠陥に対する restoring force が $\{112\}$ 面上のそれより低い場合には図 15 (c) のように後続の転位は $\{112\}$ 面を運動するが先導の $a/2\langle 111 \rangle$ 転位は $\{110\}$ 面上を運動するようになる。 βCuZn の 473 K 近傍の強度の逆温度依存性⁽²⁵⁾はこのような後続転位の動きによって転位対全体の $\{110\}$ 面上の運動が阻害される場合に生じると解釈することも可能である^{(27) (29)}。

DO_3 あるいは L_{21} 型化合物の場合、 $\langle 111 \rangle$ 切りは低

図 16 B2 型構造を持つ規則格子中の (a) γ -surface と (b) restoring force-surface の $\langle 111 \rangle$ 方向に沿う断面。

† 相対変位の分布と restoring force の関係については、bcc 結晶中の $a/2\langle 111 \rangle$ 刃状転位を例にとって文献 (34) に詳述してある。併せて参考にされたい。

温でも $\{110\}$ 面で起こり易いことが知られている⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾。このような迂り挙動をもたらす原因、あるいは B2 型化合物との違いは何に由来するのか、など現在のところよくわかっていない。restoring force surface の特徴あるいは $a/2\langle 111 \rangle$ タイプの APB の変位ベクトルのずれなど、格子の基本的な性質に根ざした考察が必要である。又 $L2_1$ 型化合物 Ni_2AlTi および Co_2AlTi において、最近 $\langle 001 \rangle$ 迂りおよび体心立方格子としてはまれな $\langle 110 \rangle$ 迂りも観察されており⁽¹⁸⁾⁽³⁷⁾、この転位芯構造に関する研究も報告されている。一方、B2 型構造を持つ規則格子中の転位については、 $a\langle 111 \rangle$ 超格子転位のほか、 $a\langle 001 \rangle$ 転位について、その芯構造と B2 型化合物に見られる $\{hk0\}\langle 001 \rangle$ 迂りとの関連などが検討されているが詳細は参考文献を参照していただきたい⁽³⁸⁾。

5. hcp 型規則格子 (DO_{19} 型構造) 中の面欠陥と超格子転位

hcp 型規則格子では、 DO_{19} 型構造を持つものがその典型である。Mg₃Cd, Ti₃Al, Ti₃Sn, Mn₃Sn などがこの構造に結晶する。この格子の格子定数 a および c と hcp 格子のそれらとの関係は $a_{DO_{19}} = 2a_{hcp}$, $c_{DO_{19}} = c_{hcp}$ である。 hcp 格子との比較を容易にするため、以後、面と方向の Miller 指数は hcp 格子を基本として表示する。 DO_{19} 型化合物の迂り面として $\{0001\}$, $\{10\bar{1}0\}$, $\{10\bar{1}1\}$, $\{10\bar{1}2\}$ などが報告されているから、これらの面上での面欠陥の安定性と転位分解について考えておこう⁽³⁹⁾。

図 17 は $\{0001\}$ 面上の原子配列とその積み重なり方を示している。 $L1_2$ 型構造を持つ規則格子の $\{111\}$ 面との対応性から、直ちにこの面上には、たとえば $a/3[\bar{1}2\bar{1}0]$

図 17 DO_{19} 型構造を持つ規則格子の $\{0001\}$, $\{10\bar{1}0\}$ 面上の原子配列とその積み重なり方。図の左に $\{10\bar{1}0\}$ 面の積み重なり方を示す。なお大円および小円は相隣接する $\{0001\}$ 原子面を示す。

図 18 DO_{19} 型構造を持つ規則格子中の $2a/3[\bar{1}2\bar{1}0]$ 超格子転位の分解。
(a) $\{0001\}$ 面上の場合、(b) $\{10\bar{1}0\}$ 面上の場合、(c) $\{10\bar{1}1\}$ または $\{10\bar{1}2\}$ 面上の場合。

(f_A), $a/3[01\bar{1}0]$ (f_C), $2a/3[\bar{1}100]$ (f_S) を変位ベクトルとする 3 種の面欠陥すなわち APB, CSF, SISF が存在し得ること、又これらの面欠陥は安定性および変位ベクトルのずれに関して、 $L1_2$ 型構造における対応する面欠陥と全く同じ性質を持っていることがわかる。 DO_{19} 型構造の場合、APB と CSF の変位ベクトルはそのずれを考慮すれば、それぞれ $f = f_A + x_A[\bar{1}010]$, $f = f_C + x_C[01\bar{1}0]$ のように書くことができる (x_A , x_C は変位ベクトルのずれの大きさを示している。化合物の種類によって変わると考えられる)。

$\{10\bar{1}0\}$ 柱面には、図のように欠陥を導入する面によって 2 種類の f_A を変位ベクトルとする APB が存在する。その内 APB_I はエネルギーが高く問題にはならないが、APB_I の場合、第 1 隣接原子の配列に乱れが生じないため、そのエネルギーは $\{0001\}$ 面上の APB に比して低く、しかも常に安定な SISF と同じタイプである。 $\{10\bar{1}1\}$, $\{10\bar{1}2\}$ 錐面上の APB についても restoring force を計算し、それらの結果に基づいて $2a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 超格子転位の分解形式を図示すれば図 18 のようになる。 $\{0001\}$ 面上では、CSF および APB が安定、APB のみ安定、共に不安定な場合にそれぞれ (i) $b = b_1 + b_2 + b_5 + b_6$ 又は $b = b_1 + b_2 + b_3 + b_4 + b_5 + b_6$, (ii) $b = b_1' + b_2'$, (iii) $b = b_1'' + b_2''$ の分解が一応可能である。分解の形式によっては部分転位の B.V. が大きくなり、第 3 章で述べたような理由から $2a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 超格子転位の $\{0001\}$ 面上の運動に大変大きな応力を要する場合は起こり得る。一方、 $\{10\bar{1}0\}$ 柱面上では常に図 18 (b) の分解が安定であるから、このような場合には $2a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 超格子転位は $\{0001\}$ 面よりむしろ $\{10\bar{1}0\}$ 面を容易に運動する可能性がある。2, 3 の DO_{19} 型化合物、たとえば Ti₃Sn⁽⁴⁰⁾ では底面迂りより柱面迂りの方が起こり易いことが知られているが、前述のような事情によっているのではないかと想像される。いわば 1 つの dislocation core effect である。

Mg₃Cd の場合には、 $\{0001\}$, $\{10\bar{1}0\}$, $\{10\bar{1}1\}$, $\{10\bar{1}2\}$ 面上の $a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ APB エネルギーの比較が行われている⁽³⁹⁾。それによれば、 $\{0001\}$ 面上の値が他のいずれの面上の値より大きい。このことは、 DO_{19} 型構造の場合にも $L1_2$ 型構造における Kear-Wilsdorf 機構と同様の機構によって異常強化が起こり得ることを示唆している。事実、Mn₃Sn にはすでにこのような降伏応力の逆温度依存性が発見されている⁽⁴¹⁾。

最近 hcp 格子において、 $\{10\bar{1}1\}$ および $\{11\bar{2}2\}$ 面上の

$a/3\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 転位芯の構造およびその運動についての詳細な研究がなされている⁽⁴²⁾⁽⁴³⁾。それによれば、転位は 2 本の $a/6\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 部分転位に分解し得ることを示唆している。DO₁₉ 型構造の規則格子中においても同様の分解が可能であれば、 $2a/3\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 超格子転位は $a/3\langle 11\bar{2}3 \rangle$ APB を含め 4 本の部分転位に分解出来る。Mg₃Cd⁽⁴⁴⁾⁽⁴⁵⁾、Ti₃Al⁽⁴⁶⁾などの化合物において $\{11\bar{2}\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ じりが観察されているが、その転位の分解をさらに検討するために $\{10\bar{1}1\}$ および $\{11\bar{2}\}$ 面上の γ -surface の計算が今後興味のある問題である。

6. お わ り に

以上、代表的な規則格子中の面欠陥と超格子転位について、それらが規則格子中の欠陥であるが故に示す特性について解説した。今後、新しい材料を求めて規則合金や金属間化合物の研究がますます盛んになることと思われるが、その一助になれば幸いである。最後に本稿を書く機会を与えていただいた大阪大学 堀 茂徳教授、日頃有益な助言をいただいている山根寿己教授に深く感謝の意を表する。

文 献

- (1) M.J.Marcinkowski : *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, Ed. by G.Thomas and J.Washburn, Interscience, (1963), 333.
- (2) S.Amelinckx : *Dislocations in Solids, Vol.2*, Ed. by F.R.N.Nabarro, North-Holland Publishing Company, (1979), 66.
- (3) V.Vitek : *Crystal Lattice Defects*, **5**(1974), 1.
- (4) M.Yamaguchi, V.Vitek and D.P.Pope : *Phil. Mag.*, **43A**(1981), 1027.
- (5) 山口正治 : 日本金属学会会報, **15**(1976), 427.
- (6) M.J.Marcinkowski, N.Brown and R.M.Fisher : *Acta Met.*, **9**(1961), 124.
- (7) B.H.Kear, A.F.Giamei, J.M.Silcock and R.K.Ham : *Scripta Met.*, **2**(1968), 287.
- (8) M.Yamaguchi, V.Paidar, D.P.Pope and V.Vitek : *Phil. Mag.*, **45A**(1982), 867.
- (9) V.Paidar, M.Yamaguchi, D.P.Pope and V.Vitek : *Phil. Mag.*, **45A**(1982), 883.
- (10) V.Vitek and M.Yamaguchi : *Interatomic Potentials and Crystalline Defects*, Ed. by J.K.Lee, TMS-AIME, (1981), 223.
- (11) B.H.Kear and H.G.F.Wilsdorf : *Trans. AIME*, **224**(1962), 382.
- (12) 山口正治 : 日本金属学会会報, **13**(1974), 683.
- (13) D.M.Weese and T.Suzuki : *Trans. JIM*, **20**(1979), 634.
- (14) D.M.Weese, O.Noguchi, Y.Oya and T.Suzuki : *Trans. JIM*, **21**(1980), 237.
- (15) M.Yamaguchi, D.P.Pope, V.Vitek and Y.Umakoshi : *Phil. Mag.*, **43A**(1981), 1265.
- (16) V.Paidar : *Czech. J. Phys.*, **26B**(1976), 865.
- (17) M.J.Marcinkowski and N.Brown : *Acta Met.*, **9**(1961), 764.
- (18) 馬越佑吉, 山口正治, 山根寿己 : 日本金属学会講演概要, (1983・4月), 66.
- (19) K.Murakami, Y.Umakoshi and M.Yamaguchi : *Phil. Mag.*, **37A**(1978), 719.
- (20) Y.Umakoshi and M.Yamaguchi : *Phil. Mag.*, **41A**(1980), 573 ; **44A**(1981), 711.
- (21) M.Yamaguchi, Y.Umakoshi, T.Yamane, Y.Minonishi and S.Morozumi : *Scripta Met.*, **16**(1982), 607.
- (22) M.Yamaguchi : *Mechanical Properties of BCC Metals*, Ed. by M.Meshii, TMS-AIME Publication, (1982), 31.
- (23) S.Takeuchi, T.Hashimoto, K.Suzuki and M.Ichihara : *Acta Met.*, **30**(1982), 513.
- (24) S.Hanada and O.Izumi : *Phys. Status Solidi (a)*, **40**(1977), 589.
- (25) Y.Umakoshi, M.Yamaguchi, Y.Namba and K.Murakami : *Acta Met.*, **24**(1976), 89.
- (26) M.Yamaguchi and Y.Umakoshi : *Acta Met.*, **24**(1976), 1061.
- (27) Y.Umakoshi, M.Yamaguchi and V.Vitek : *Proc. of Inter Symposium on the Structure and Properties of Crystal Defects*, Part A, p.41, Praha, (1983).
- (28) S.Takeuchi : *Phil. Mag.*, **41A**(1980), 541.
- (29) S.Takeuchi : *Strength of Metals and Alloys*, Ed. by P.Haasen, V.Gerold and G.Kostorz, Pergamon Press, Oxford, (1979), 53.
- (30) F.Minami, E.Kuramoto and S.Takeuchi : *Phys. Status Solidi (a)*, **22**(1974), 81.
- (31) E.Kuramoto, F.Minami and S.Takeuchi : *Phys. Status Solidi (a)*, **22**(1974), 411.
- (32) S.Takeuchi and E.Kuramoto : *J. Phys. Soc. Jap.*, **38**(1975), 480.
- (33) S.Takeuchi : *Interatomic Potentials and Crystal-line Defects*, Ed. by J.K.Lee, TMS-AIME, (1981), 201.
- (34) V.Vitek, L.Lejček and D.K.Bowen : *Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects*, Battelle Colloquium, Ed. by P.C.Gehlen et al., New York, Plenum Press, (1971), 475.
- (35) S.Hanada, S.Watanabe, T.Sato and O.Izumi : *Trans. JIM*, **22**(1981), 873.
- (36) 花田修治, 渡辺貞夫, 佐藤 敬, 和泉 修 : 日本金属学会誌, **45**(1981), 1279.
- (37) M.Yamaguchi, Y.Umakoshi and T.Yamane : *Proc. of Inter Symposium on the Structure and Properties of Crystal Defects*, Part A, p.63, Praha, (1983).
- (38) M.Yamaguchi and Y.Umakoshi : *Scripta Met.*, **9**(1975), 637.
- (39) Y.Umakoshi and M.Yamaguchi : *Phys. Status Solidi (a)*, **68**(1981), 457.
- (40) P.J.Jones and J.W.Edington : *Phil. Mag.*, **27**(1973), 393.
- (41) S.Takeuchi and E.Kuramoto : *Acta Met.*, **22**(1974), 429.
- (42) Y.Minonishi, S.Ishioka, M.Koiwa, S.Morozumi and M.Yamaguchi : *Phil. Mag.*, **43A**(1981), 1017 ; **44A**(1981), 1225 ; **45A**(1982), 835.
- (43) Y.Minonishi, S.Ishioka, M.Koiwa and S.Morozumi : *Phil. Mag.*, **46A**(1982), 761.
- (44) N.S.Stoloff and R.G.Davies : *Trans. ASM*, **57**(1964), 247.
- (45) M.J.Blackburn : *Trans. MS-AIME*, **239**(1967), 660.
- (46) J.C.Williams and M.J.Blackburn : *Ordered Alloys*, Ed. by B.H.Kear, C.T.Sims, N.S.Stoloff and J.H.Westbrook, New York, Claitor's Publishing Division, Baton Rouge, (1970), 425.