

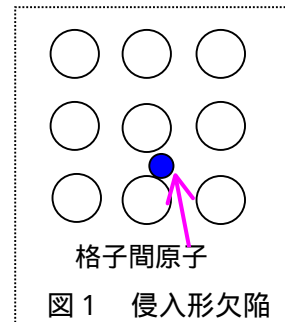
格子欠陥(lattice defect)

村上 奈穂

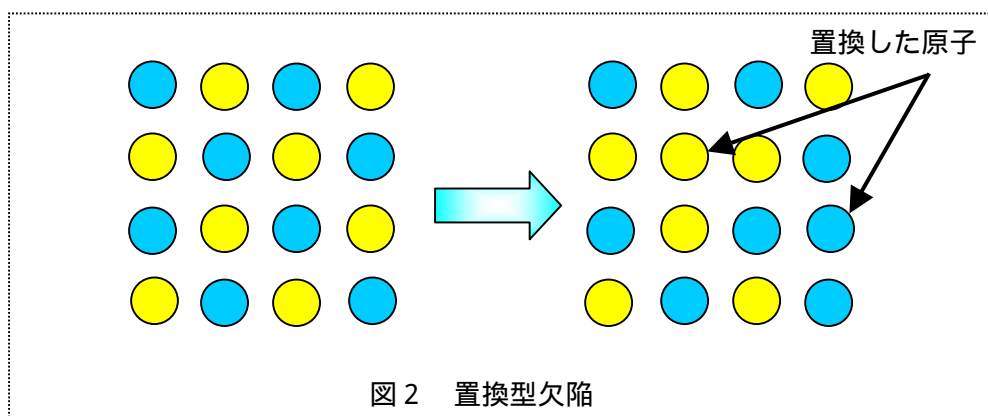
結晶とは、原子または分子が規則正しく配列したものである。しかし、実際の結晶では、原子配列に必要な原子が不足したり、不要な原子が侵入したり、またずれが生じたりする。このように、原子配列に不完全な部分が生じることを、**格子欠陥**という。

点欠陥

・侵入形欠陥：格子点(原子が位置する点)ではないところに原子が入り込むことをいう。入り込んだ原子を格子間原子という(図1)。格子間原子は、格子点の隙間に割り込むので、原子半径の大きい原子は入りにくい。



・置換型欠陥：結晶のもととなる原子と異なる原子が、もとの原子の位置と置き換わることができることをいう。図2の場合、二種類の原子からできている結晶内で、本来の格子点に位置する原子が片方の格子点の原子と置き換わった状態である。



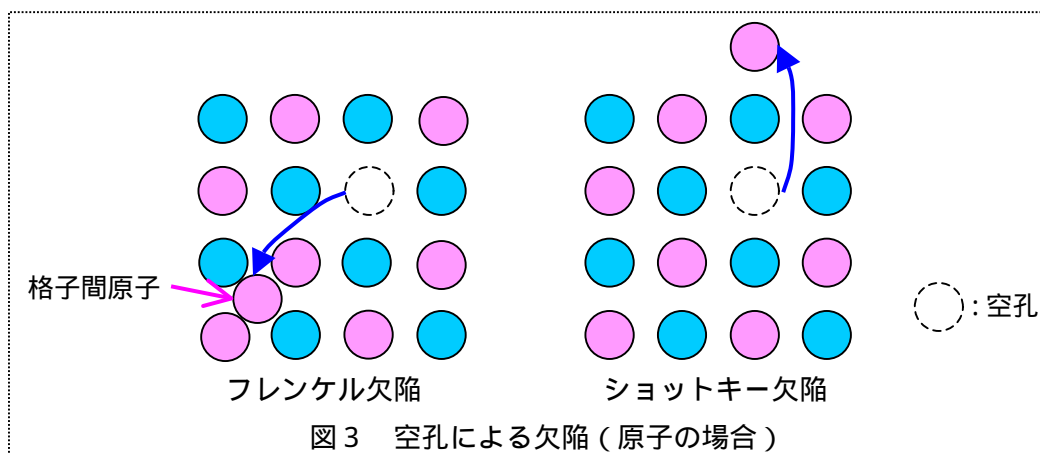
・空孔による欠陥: 格子点の原子が欠けている場合、原子の欠けた格子点を空孔という。

a) フレンケル欠陥: 格子点を抜けた原子が格子間原子となって、格子点ではないところに入り込む。このとき、空孔と格子間原子とが対をつくってできる欠陥。

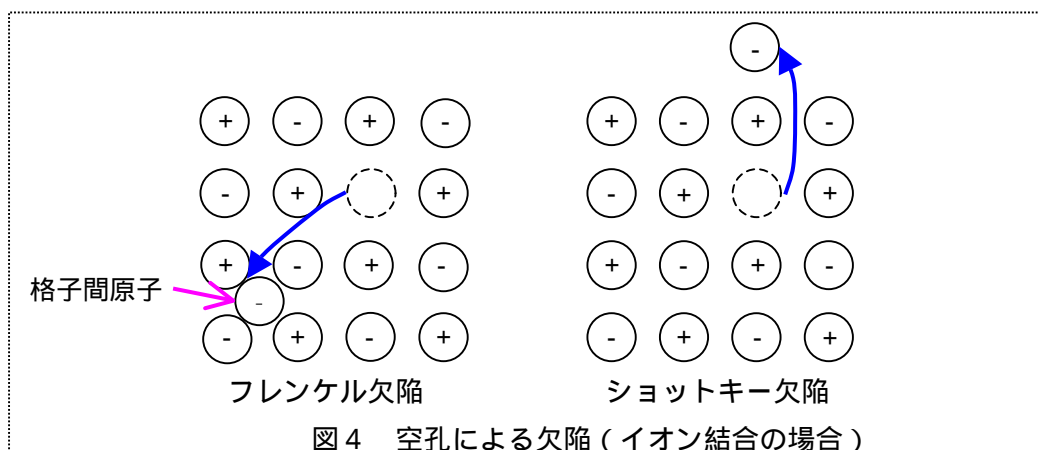
b) ショットキー欠陥: 原子が格子点を離れ結晶表面に移動し、結晶内には空孔だけが存在してできる欠陥。

フレンケル欠陥とショットキー欠陥の例を、原子による結合とイオン結合の場合とに分けて示す。

<例1 .原子の場合> フレンケル欠陥では、原子が格子点から離れ、格子点ではない隙間に入り込んだ状態となり、空孔ができる。同様に、ショットキー欠陥では、原子が格子点を離れ結晶表面に移動し、空孔ができる。



<例2 .イオン結合の場合> イオン性をもつ結晶では、格子点の原子がイオンのため、正イオンと負イオンの2種類の空孔ができる。図4の場合、フレンケル欠陥では、負イオンが格子間原子となって移動し、残った格子点には電気的に中性になるように、空孔として正イオンができる。ショットキー欠陥では、負イオンが結晶表面に移動し残った格子点に正イオンができる。結晶全体では、表面が負、内部が正に帯電した状態であり、電気的に中性が保たれる。

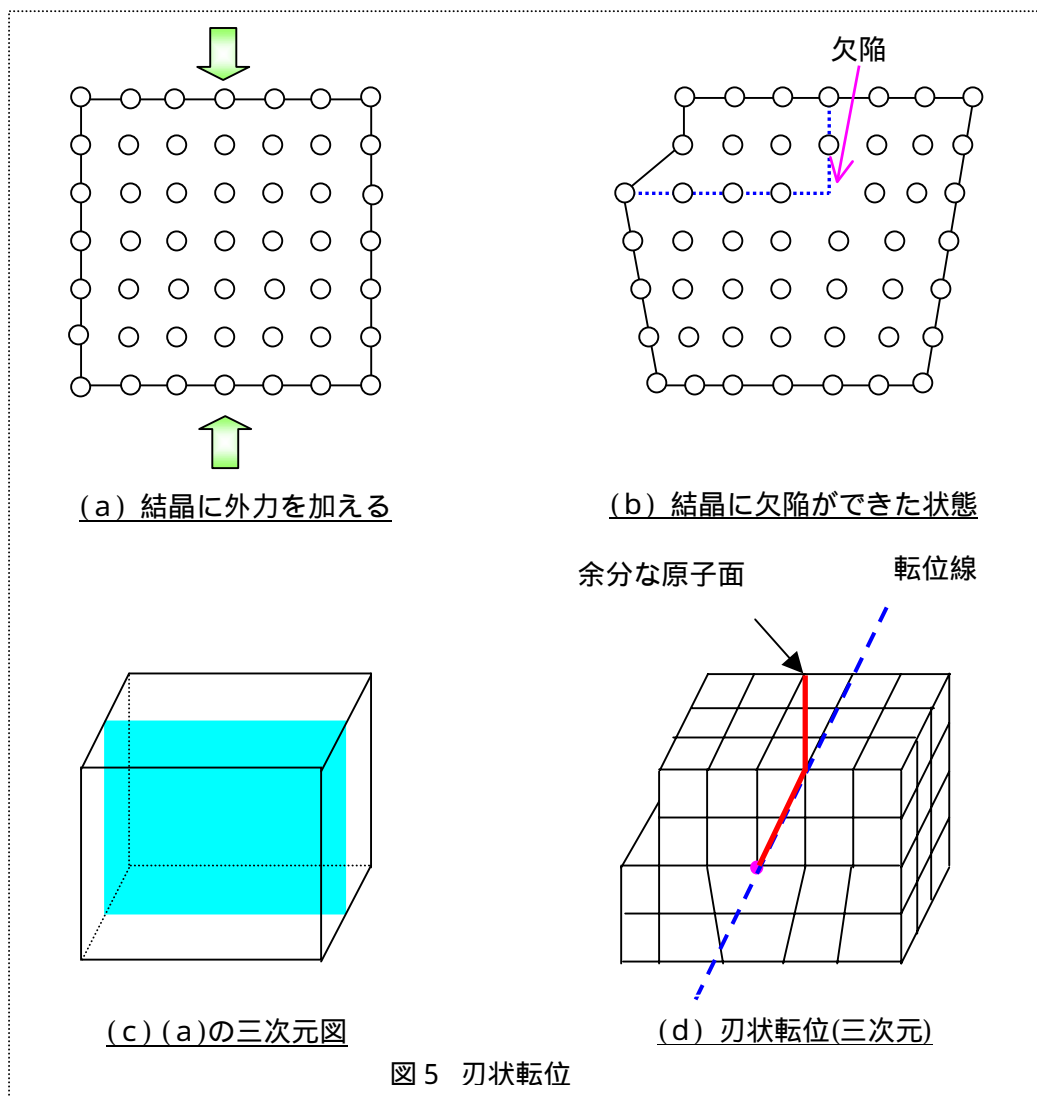


線欠陥

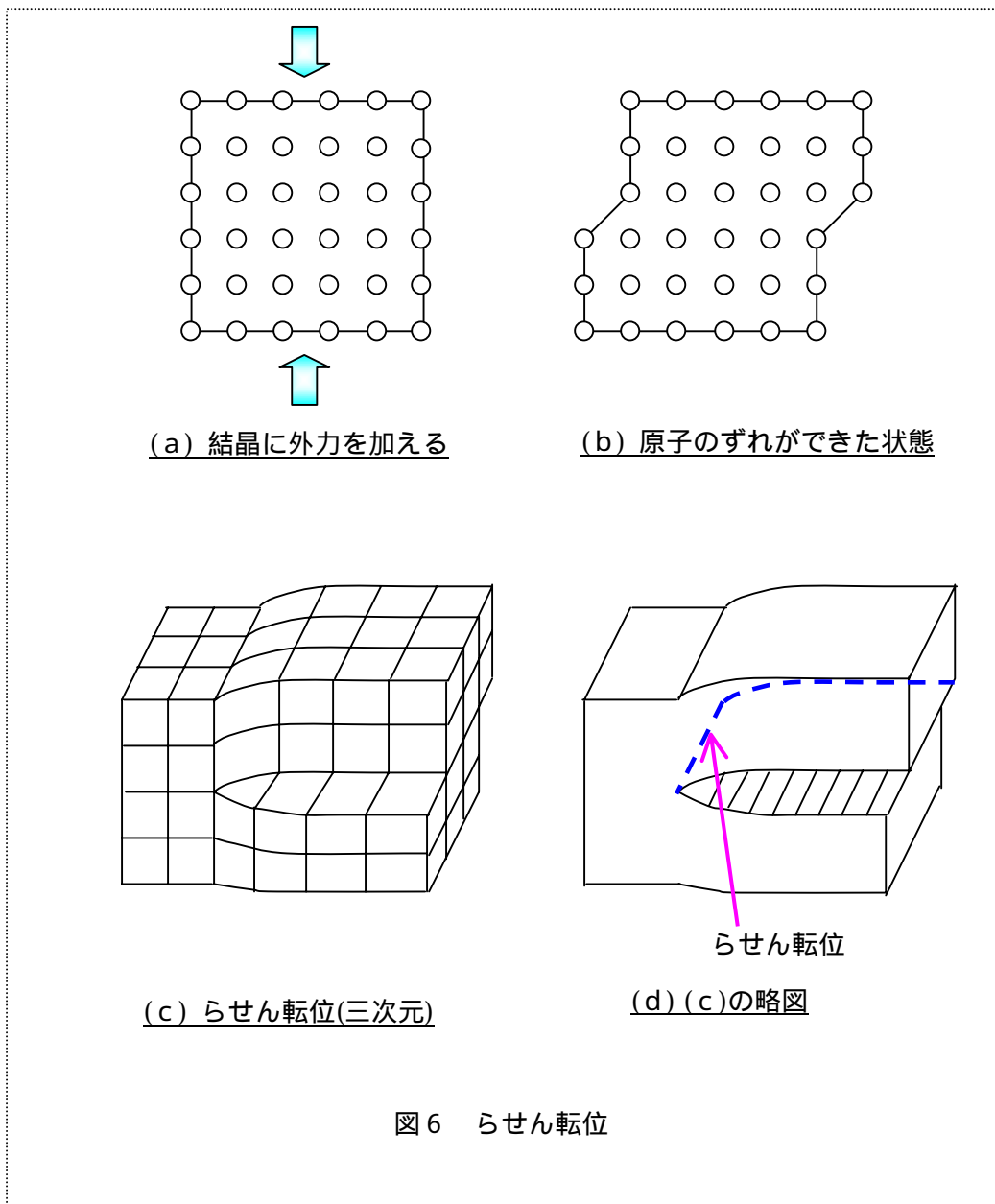
・転位による欠陥：結晶格子の原子配列のずれが線状になっている欠陥のことを、転位という。転位には、刃状転位とらせん転位の2種類がある。

結晶に外力を加えると結晶は変形するが、外力がある値以上になると、外力を取り去っても元に戻らずに変形した状態が残る(塑性変形)。転位はこの塑性変形によって生じる。

a) 刃状転位：結晶に外力を加えると、図5(b)のように原子配列は結晶の途中で切れた状態になり、原子のない欠陥ができる。実際には、結晶は三次元であるから、紙面に垂直な方向に同じ原子面が繰り返しになっている。したがって、原子配列が切れてできた欠陥は線状になる。この線状の欠陥を転位線という。転位線ができたことにより、結晶中に余分な原子面が生じる(図5(d))。



b) らせん転位：結晶に外力を加えると、刃状転位における結晶の原子配列のずれから、さらに結晶内の原子がずれた状態になる。したがって図6 (b)のように、上半分の結晶と下半分の結晶がずれた変形が起こる。



面欠陥

a) 積層欠陥

面心立方格子の場合、(111)面の重なり方が ABC となっている。このとき、ABC ABC ABC の順序で積み重なって空間格子をつくっている。ABC BAB CAB のように、順序が乱れることが生じる。このような面欠陥を積層欠陥という。

図 7 (a) は、面が ABCABC とつながっている、面欠陥のない状態を表わしている。図 7 (b) では、図 7 (a) と同様に ABCABC の順に面がつながっているが、A 面の一部が切れて、A 面の上下の面が歪んだ状態である。この面の欠陥によって積層欠陥ができる。図 7 (c) では、ABCABC と続く面の間に B 面が入り込んだ状態となり、積層欠陥が生じる。

