

オングストロームビーム電子回折法による金属ガラスの局所構造解析

平田 秋彦、陳 明偉
東北大学 原子分子材料科学高等研究機構

[緒言] これまで金属ガラスの局所構造に関して多くの研究がなされてきている。実験的には、広範囲から得た回折強度から動径分布関数を求め、配位数や原子間距離を計算することによって、特徴的な原子クラスター（短範囲秩序構造）の存在が議論されてきている。しかし、これは平均構造情報を元にモデル化したものであり、個々の原子クラスターの特徴をさらに理解するためには、平均構造情報に加え、より直接的な局所構造情報も必要になってくると思われる。そこで、我々は今回、極小の集束絞りを取りつけた、球面収差補正走査型透過電子顕微鏡を用いることにより 0.3-0.4nm 径の準平行ビームを作り、極微小領域からの回折を得ることで、金属ガラスの局所構造解析を行った [1-3]。

[実験方法] 金属ガラス試料には Zr 基合金を用い、電子顕微鏡用試料は電解研磨およびイオンミリングの両方法を用いて作製した。局所構造観察には、5 μ m 径の集束絞りと球面収差補正装置を搭載した JEM-2100F 走査型透過電子顕微鏡を用いた。電子回折パターンは十分に薄い試料領域から CCD カメラで連続的に取得し、動画あるいは静止画として記録した。局所領域における試料厚さは EELS を用いて見積もった。また、第一原理分子動力学法により得られた構造モデルから電子回折パターンを計算し、実験との比較検討を行った。

[結果] 電子線のビーム径を徐々に小さくして回折パターンを撮影した結果、ビーム径を 1nm 以下に絞った場合に、離散的な回折スポットが明瞭に観察された。最小のビーム径(0.36nm)で得られた電子回折パターンは、分子動力学構造モデル中の原子クラスターから得られるパターンをよく再現しており、実際に金属ガラス中には特徴的な秩序構造が存在すると考えられる。また試料厚み方向に沿った原子クラスターの重なりを考慮に入れた計算も行った。原子クラスターには、結晶と同様、強い回折反射を出す方位とそうでない方位があり、強い回折反射を出す原子クラスターのみが強調されて観察されることも明らかとなった。さらに、ビームをオングストロームステップでスキャンすることにより得た連続した回折パターンのシリーズから、中範囲秩序構造のサイズ等に関する議論も行った。

[文献]

1. A. Hirata, P. Guan, T. Fujita, Y. Hirotsu, A. Inoue, A.R. Yavari, T. Sakurai, and M.W. Chen, Direct observation of local atomic order in a metallic glass, *Nature Mater.* 10, 28 (2011).
2. 平田 秋彦、陳 明偉、収差補正 STEM を用いたオングストロームビーム電子回折による金属ガラスの局所構造解析、*日本結晶学会誌* 53, 326 (2011).
3. A. Hirata and M.W. Chen, Angstrom-beam electron diffraction of amorphous materials, (submitted to *J. Non-cryst. Solids*).