



東北大学



平成 22 年 11 月 25 日

報道機関 各位

東北大学 原子分子材料科学高等研究機構

## 金属ガラスの局所構造の直接観察に成功

～金属ガラスが示す優れた諸物性の解明へ～

東北大学原子分子材料科学高等研究機構の平田 秋彦 助教、陳 明偉 教授らの研究グループは、極微細な電子線を用いることで、周期性の無いランダムな構造を持つ金属ガラスの局所構造の観察に成功しました。これは金属ガラスが示す優れた機械的性質などの諸物性を理解する上で重要な成果です。

本研究成果は平成 22 年 11 月 21 日(英国時間)発行の英国科学雑誌「Nature Materials」のオンライン速報版に掲載されます。

### <背景>

1960 年代に金属ガラス<sup>注1)</sup>が発見されて以来、様々な合金系で優れた諸物性を示す金属ガラスが開発されてきました。これらの諸物性を原子レベルから理解するには、原子配列の解明が必要です。しかし、結晶性材料とは異なり、具体的な原子構造の決定が困難であり、新たな手法の確立が望まれていました。これまで、金属ガラスを含む非晶質構造は、サンプル全体から得た X 線および中性子線回折スペクトルを解析することによって行われてきていますが、この解析方法では、局所構造の平均的な情報しか得ることができませんでした。また、コンピュータによる非晶質構造のシミュレーションも行われており、この方法では具体的な原子構造を得ることができますが、現実の構造との比較は上述した平均構造情報を参照する以外に方法はありません。このような背景から、本研究では、これまで X 線および中性子線回折などで得られている非晶質構造の平均構造情報を、個々の局所構造からの情報に分離するための手段を確立し、金属ガラスへの応用を試みました。

### <研究の内容>

本研究では、球面収差補正装置<sup>注2)</sup>と特注の集束絞りを備えた走査型透過電子顕微鏡

注3) を用い、ビーム径3~4オングストロームのほぼ平行な電子線を金属ガラス薄片試料上に走査させることにより、金属ガラスの局所構造単位と考えられている原子クラスター<sup>注4)</sup>(直径5~6オングストローム)からの電子回折パターン<sup>注5)</sup>を得ることに成功しました(図1)。電子線を広げた状態では非晶質構造特有のハローリング(ぼやけた円環状)パターンが得られるだけですが、ビーム径を小さくしていき1nmより小さくなると、電子回折パターン中にスポット(輝点)が見られるようになります。そして0.36nmまで電子線を絞ったときに得られる電子回折パターンは、コンピュータシミュレーションで得られる構造モデル中に見られる原子クラスターから計算したものと良い一致が得られ(図2)、このことから原子クラスターの存在が実験的に示唆されました。実際の試料には厚みがありますので、いくつかの原子クラスターが重なることが予想されますが、このような状況を考慮した計算によっても、一つの原子クラスターを検出することが可能であることがわかりました。さらに、数個の原子クラスターが結合した中範囲規則構造も検出することが可能であり、金属ガラス構造についての理解がこれまで以上に進展すると考えられます。

#### <今後の展望>

本研究で得られた重要な成果は、金属ガラスで提唱されていた原子クラスターを実験的に直接観察したことと、球面収差補正走査透過型電子顕微鏡を用いた局所構造解析法を確立したことです。前者についての展開としては、金属ガラスの局所構造とガラス形成能や延性などの諸物性との関係について、多くの合金系を調べることにより、これまでよりもさらに深い理解が得られることが予想されます。また、後者に関しては、金属ガラスにとどまらず、酸化物ガラスなどの他の非晶質構造にも適用できると考えられるため、幅広い展開が期待できます。また、非晶質構造のみならず、結晶構造の界面や欠陥構造などの局所領域にも応用することができるため、通常の走査透過型電子顕微鏡像観察や化学分析との併用によって、構造、組織、化学組成に関する情報を同時に取得することが可能となり、局所構造が諸物性の鍵となるような材料の解析には欠かせない方法になることが期待されます。

<参考図>

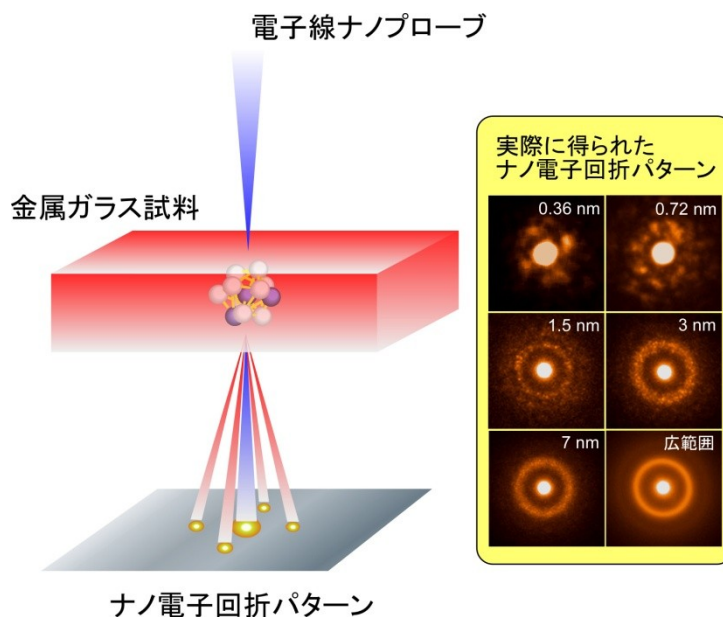


図1. 極微細ナノ電子線プローブを用いた金属ガラス局所構造解析法の模式図。ビーム径が1nmより小さくなると電子回折パターン中に不連続なスポットが現れ始め、0.36nmまで絞ると局所構造の解析が可能になる。

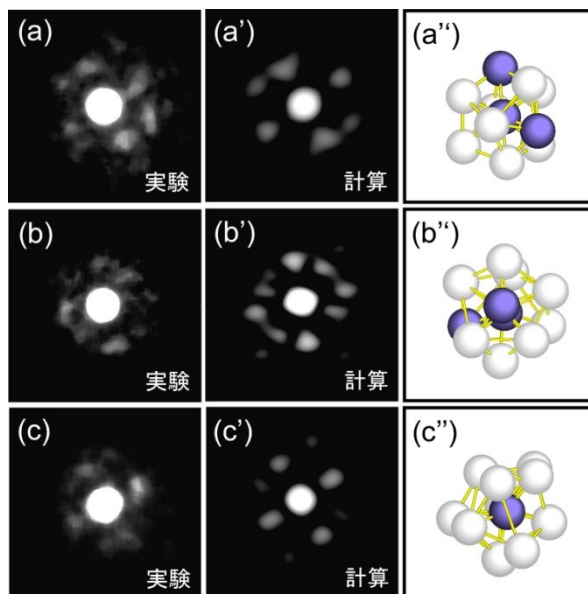


図2. (a)-(c) ZrNi 金属ガラスから実験的に得られた電子回折パターンと、(a')-(c') シミュレーションで得られた構造モデル中の原子クラスターから計算した電子回折パターン。計算に用いた原子クラスターを(a'')-(c'')に示す。

## <用語解説>

### 注1) 金属ガラス

結晶のような規則的な原子配列を持たず、ガラスのようなランダムな構造を有する金属材料のことを一般に金属ガラスと呼びます。一般に高温の液体状態から冷却することで金属ガラスが得られるため、基本的には液体のランダムな原子配列が凍結されたものと捉えることができます。

### 注2) 球面収差補正装置

電子顕微鏡では磁界レンズを用いて電子線を集束させているのですが、このレンズには球面収差があり、分解能低下の大きな原因となっていました。近年開発された補正装置によりレンズの球面収差を無くすことが可能となり、ビームを非常に小さい領域に集めることができるようになりました。その結果として、高分解能の走査電子顕微鏡像を得ることが可能となっています。

### 注3) 走査型透過電子顕微鏡

電子顕微鏡の観察法の一つで、細く絞った電子線を用いてサンプル上を走査し、それぞれの領域から透過した電子線の情報を検出器で電気信号に変換し、像を得ることができます。ビーム径が像の分解能を決めるため、より細く集束したビームを作ることが重要になっています。本研究では、この装置を用いて電子回折パターンを撮影しています。

### 注4) 原子クラスター

これまで、金属ガラスについては様々な構造モデルが提案されてきましたが、ある原子を中心とした原子の集合体である原子クラスターが重要な構造単位であることが指摘されています。この原子クラスターは合金系によって異なる特徴（配位数や結合長など）を持つことが知られています。

### 注5) 電子回折パターン

透過型電子顕微鏡は単なる拡大鏡ではなく、X線回折などで良く知られる原子配列からの回折現象を基本として像が形成されています。したがって、観察している組織の任意の場所から電子回折パターンを撮影することができ、これによりX線回折と同様な構造解析を行うことが可能です。

<お問い合わせ先>

平田 秋彦 (ヒラタ アキヒコ)

東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 助教

〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1

Tel: 022-217-5959 Fax: 022-217-5955

E-mail: hirata@mpi-aimr.tohoku.ac.jp

陳 明偉 (チェン ミンウェイ)

東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授

〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1

Tel: 022-217-5992 Fax: 022-217-5955

E-mail: mwchen@mpi-aimr.tohoku.ac.jp