

非晶質の隠れた秩序のオングストロームビーム電子回折法による観察

Observation of Hidden Structural Order by Angstrom-beam Electron Diffraction

早稲田大理工¹, [○]平田 秋彦¹

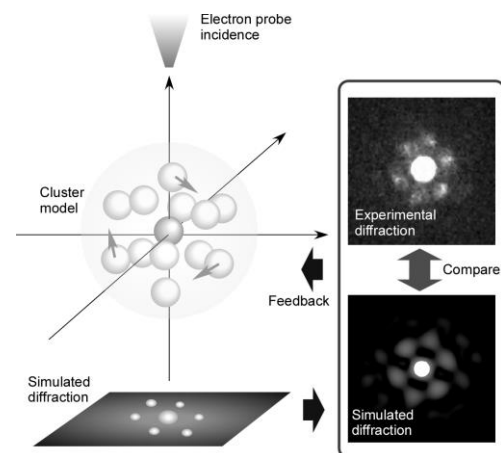
Waseda Univ.¹, [○]Akihiko Hirata¹

E-mail: ahirata@aoni.waseda.jp

材料の物性・特性を理解するにはその材料の原子配列を明らかにすることが欠かせないが、ガラスのような非晶質（アモルファス）と呼ばれる材料では、結晶とは異なり、原子配列に周期性が無く、その解明は未だ困難であり、この分野での挑戦的な課題の1つとなっている。これまで非晶質構造に関しては多くの実験的研究および計算を用いた構造モデリングがなされてきている。実験的には主に、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、特徴的な短・中距離秩序構造の存在が議論されてきている。さらに、分子動力学法や逆モンテカルロ法などの計算機シミュレーションによって、実験結果を満たす3次元構造のモデリングも試みられており、多くの有益な知見が得られている。一方で、動径分布関数は一次元の平均構造情報を表したものであるため、個々の短距離秩序構造の特徴やその繋がりをさらに理解するためには、そのような平均構造情報に加え、より直接的な局所構造情報が有用な場合もある。そこで、我々はこれまで走査型透過電子顕微鏡(STEM)を用いたオングストロームビーム電子回折法を手掛けてきた[1]。これにより、これまで平均情報を元に検討・モデリングされてきた非晶質の局所構造をより直接的に検証することが可能となった[2]-[4]。講演では、最近の金属ガラス局所構造に対する局所逆モンテカルロ解析(図)や計算ホモロジー解析[5]を含めた、いくつかの事例を紹介する。

<References>

- [1] A. Hirata, P. F. Guan, T. Fujita, Y. Hirotsu, A. Inoue, A. R. Yavari, T. Sakurai, and M. W. Chen, *Nat. Mater.* **10**, 28 (2011).
- [2] A. Hirata, L. J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A. R. Yavari, and M. W. Chen, *Science* **341**, 376 (2013).
- [3] A. Hirata, S. Kohara, T. Asada, M. Arao, C. Yogi, H. Imai, Y. W. Tan, T. Fujita, and M. W. Chen, *Nat. Commun.* **7**, 11591 (2016).
- [4] A. Hirata, T. Ichitsubo, P. F. Guan, T. Fujita, and M. W. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 205502 (2018).
- [5] A. Hirata, K. Matsue, M. W. Chen, Structural Analysis of Metallic Glasses with Computational Homology, *SpringerBriefs in the Mathematics of Materials* (2016).



図：局所逆モンテカルロ法による局所構造のモデリング