



Title	THEORY OF DIFFRACTION AND ELECTRON MICROSCOPY OF MEDIUM RANGE ORDER IN AMORPHOUS METALS
Author(s)	Hamada, Tadashi
Citation	大阪大学, 1985, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/2255">https://hdl.handle.net/11094/2255</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名・(本籍)	瀬 田 糾
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	第 6765 号
学位授与の日付	昭和 60 年 3 月 20 日
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 2 項該当
学位論文題目	非晶質金属中の中距離秩序の回折及び電顕像に関する理論
論文審査委員	(主査) 教授 藤田 英一 (副査) 教授 長谷田泰一郎 教授 吉森 昭夫 教授 白江 公輔 教授 藤田 広志 助教授 大嶋隆一郎

## 論文内容の要旨

液体状態からの高速急冷によって作成される非晶質金属は諸分野に応用できる種々の新しい優れた性質を示すが、それらの性質の源である原子の無秩序配列とその中の結合の度合いについては明らかでない。従来、非晶質金属の構造に関して原子配置の規則性を考慮しない最密無秩序充填モデルが広く受け入れられていたが、最近の種々の実験事実は、その中に化学的短範囲規則だけでなく数原子間距離にも及ぶ中距離秩序 (MRO) が存在することを強く示唆している。それ故、この MRO の存在を考慮し非晶質金属構造として新しい概念である結晶エンブリオモデルを提唱するとともに、このモデルに基き回折関数や高分解能電子顕微鏡像の計算を行い実験との比較を行って来た。本論文では、非晶質構造中の MRO からの回折や電顕像に関する理論及びシミュレーションを展開する。

本論文で扱う MRO は、その起源を液体状態でゆらぎとして時間的・空間的に離合集散を繰返していると考えられる擬結晶的原子集団にもとめる。急冷の際、過冷却状態でこれらクラスターの大きさや数は増加するが、ガラス転移温度以下ではそのまま凍結され MRO を形成すると考える。まず第一章では、非晶質構造中の規則的原子配列に関する最近の実験事実を網羅する。続いてこれまで提唱されて来た非晶質構造モデルについて紹介し批判する。第二章では、非晶質構造の形成過程について考察し、上記擬結晶クラスターが結晶的エンブリオとして乱れた原子配置の中に多数存在すると言うエンブリオモデルの概念について記述する。この場合、非晶質固体は小さな微結晶の集合体であると考える微結晶モデルで取扱われて来た回折理論に重要な修正を行い、エンブリオモデルから導出される回折関数の有効性について考察する。次に、エンブリオモデルに基き、計算機によりモデル構造を構築する。第三章、第四章では、このモデル構造から回折関数や高分解能電顕像を計算し実験との対応を議論する。第五章で

は、実験との対応における他のモデルとの違いを明らかにするとともに、エンブリオモデルの妥当性について議論する。

従来、空間平均化された情報しか導びき出せない回折実験結果から、非晶質金属構造に関して原子の無秩序配列のみが強調されて来た。しかし、エンブリオモデルから計算された回折関数が実験を良く再現すること、また高分解能電子顕微鏡で観察される格子状の縞や像が同モデルによって再現されることから、非晶質構造中には直径が約 10 Å の大きさの MRO が乱れた原子配置に囲まれて存在することが明らかになった。

### 論文の審査結果の要旨

本論文は、非晶質金属・合金の新しい構造模型を提唱し、それに基いてコンピューターにより回折実験と比較すべき干渉関数、二体相関々数および高分解能電子顕微鏡によって観察される筈の原子配置投影像を計算した研究を纏めたものである。現在流行している高密無秩序充填 (dense random packing) 模型に対して、新しい構造模型は微結晶的な中距離秩序原子集団を含む無秩序構造であり、融液からの急冷過程の熱力学的な考察に根拠を置いている。このような局所秩序を含む構造に回折理論を適用して求めた干渉関数は実験で得られるハロー回折図形の強度分布、殊に第 1 ピークの高さ、幅、第 2 ピークの高さと分裂状態などを極めてよく説明する。またそのフーリエ逆変換で得られる二体相関々数も実験から求めたものによく一致する。理論の中で指摘している両関数間の繰返し変換の意味と取扱い方への注意は重要である。高分解能電顕像の計算においては、無秩序構造に対する運動学的結像理論を完成し、この場合の球面収差と焦点ずれの関係における最適条件を求め、それを利用して、上記の微結晶的原子集団がどのように影像として現れるかを具体的に示した。極めて最近、このような電顕像が実験的に得られるようになり、本研究は先見的・指導的な役割を果すことになった。以上の成果は非晶質構造模型を大幅に改良し、多くの実験事実を定量的に解釈し、且つ局所秩序を実際に見る方法を示したもので、この分野に与えるインパクトは大きい。

よって本研究は博士論文として価値があると認める。