

1. fcc-fct マルテンサイト変態における変態エンブリオの透過電子顕微鏡像コントラストの計算

渡 邊 昌 勝

Fe-Pd合金等におけるfcc-fctマルテンサイト変態の前駆現象の一つとして、透過型電子顕微鏡像（TEM像）中に出現するツイードと呼ばれる特徴的なコントラストが挙げられる。fcc-fctマルテンサイト変態の変態機構として様々なモデルが今までに提案されているが、Fe-Pd, Fe-Pt合金に対しては前駆現象を含めた変態機構を説明するため、fccオーステナイト中に低温相であるfctマルテンサイトの核（エンブリオ）が弾性歪エネルギーを最も小さくするような形状をもって生成し、さらにそれらが弾性歪エネルギーを最も小さくするような配列をとるとするバリエーションモザイク構造が提唱されている。

本研究は、動力学的電子線回折に基づいた二波のコラム近似法を用いた回折像コントラストの計算を行い、この変態モデルによってFe-Pd合金におけるツイードが説明できることを検証することを目的としている。モデルに基づけば、非常に多数のエンブリオが歪緩和のために変態温度近傍では存在しているはずであるが、その配置については弾性相互作用エネルギーと配置のエントロピーを考慮せねばならず、それを決定することは計算機の制約もあり困難である。そこで本研究では1個のエンブリオから生じるコントラストを計算し、ツイードの性質を再現できるかどうかを検証した。

像計算は以下の条件に対して行った。

組成 : Fe-30at%Pd
 温度 : 372 K, 292 K (それぞれMs点より100K, 20K高温に対応)
 試料厚さ : 100 nm (試料面//[110]_{fcc})
 反射の指数 : $1\bar{1}1$, $\bar{1}11$, 002 (exact Bragg condition)

但し、fct相のc軸はfccオーステナイトの[001]に平行、エンブリオの形状は扁平楕円体で近似し、その基底面法線（Basal Plane Normal: 以下BPN）方向はTEMによる測定値を用い、短軸/長軸の値はこの合金系の弾性定数の実測値を用いた異方性物体中の弾性歪エネルギーがBPN方向で最小になるように決定した。エンブリオに伴う歪はMURAらの連続体力学に基づく異方性物体中の歪の計算法を適用した。

結果は以下のようにまとめられる。

- 1) 111系統の反射に対し基底面を{011}とする4種のエンブリオのうち、その(110)へのトレースが反射ベクトルとほぼ平行となる2種のエンブリオが強い回折コントラストを与える。
- 2) 002反射による像は111系統の反射のものに比べコントラストが弱い。
- 3) 002反射で試料表面近くで強いコントラストを示す。

以上の結果はTEM観察によるツイードの温度変化及び回折条件によるコントラスト変化の結果をよく説明している。