

報道関係者 各位

国立大学法人 北陸先端科学技術大学院大学
国立大学法人 金沢大学

ナノ物質の強度を決める表面1層の柔らかさ —電子顕微鏡観察下での金属ナノ接点のヤング率測定—

ポイント

- 金ナノ接点の物質強度（ヤング率）は接点が細くなると減少した。
- 独自開発の顕微メカニクス計測法でこの計測実験に成功。
- 最表面層のヤング率のみがバルク値の約1/4に減少。
- ナノ電気機械システム(NEMS)の開発に指針を与える成果である。

北陸先端科学技術大学院大学 ナノマテリアル・デバイス研究領域の大島義文教授、富取正彦教授、張家奇研究員、及び金沢大学 理工研究域 数物科学系の新井豊子教授は、[111]方位を軸とした金ナノ接点を引っ張る過程を透過型電子顕微鏡で観察しながら、等価ばね定数と電気伝導の同時に測定する手法（顕微メカニクス計測法）によって、金ナノ接点のヤング率がサイズに依存することを明らかにした。

金[111]ナノ接点は砂時計のようなくびれ形状を持つ。そのくびれは、0.24nm 引っ張るたびに、より小さな断面積をもつ(111)原子層1層が挿入されることで段階的に細くなっていく。この観察事実を基に、挿入前後の等価ばね定数値の差分から、挿入された(111)原子層の等価ばね定数を求め、さらにこの(111)原子層の形状とサイズを考慮してヤング率を算出した。サイズが2 nm 以下になると、ヤング率は約80 GPa から30 GPa へと徐々に減少した。この結果から、最外層のヤング率が約22 GPa と、バルク値(90GPa)の約1/4であることを見出した。このような材料表面での機械的強度の差は、ナノ電気機械システム(NEMS)の材料設計において考慮すべき重要な特性である。

本研究成果は、2022年4月5日（米国東部標準時間）に科学雑誌「Physical Review Letters」誌のオンライン版で公開された。なお、本研究は、日本学術振興会(JSPS) 科研費、18H01825、18H03879、笹川科学研究助成、丸文財団交流研究助成を受けて行われた。

金属配線のサイズが数 nm から原子スケールレベル（金属ナノワイヤ）になると、量子効果や表面効果によって物性が変化することが知られている。金属ナノワイヤの電気伝導は、量子効果によって電子は特定の決められた状態しか取れなくなるためその状態数に応じた値になること、つまり、コンダクタンス量子数 ($2e^2/h$ ($=12.9 \text{ k}\Omega^{-1}$); e : 素電荷量、 h : プランク定数) の整数倍になることが明らかになっている。近年、センサーへの応用が期待されナノ機械電気システムの開発が進められており、金属ナノワイヤを含むナノ材料のヤング率などといった機械的性質の理解が課題となっている。この解決に、例えば、透過型電子顕微鏡(TEM)にシリコン製カンチレバーを組み込んだ装

置を用いて、カンチレバーの曲がりから金属ナノワイヤに加えた力を求め、それによって生じた変位を TEM 像で得ることで、ヤング率が推量されている。しかし、この測定法は、個体差があるカンチレバーのばね定数を正確に知る必要があり、かつ、サブオングストロームの精度で変位を求める必要があるため、定量性が十分でないと指摘されている。

本研究チームは、原子配列を直接観察できる透過型電子顕微鏡 (TEM) のホルダーに細長い水晶振動子 (長辺振動水晶振動子 (LER) [*1]) を組み込んで、原子スケール物質の原子配列とその機械的強度の関係を明らかにする顕微メカニクス計測法を世界で初めて開発した (図 1 上段)。この手法では、水晶振動子の共振周波数が、物質との接触で相互作用を感じることによって変化することを利用する。共振周波数の変化量は物質の等価バネ定数に対応するので、その変化量を精密計測すればナノスケール/原子スケールの物質の力学特性を精緻に解析できる。水晶振動子の振動振幅は 27 pm (水素原子半径の約半分) で、TEM による原子像がぼやけることはない。この手法は、上述した従来の手法の問題点を克服しており、高精度測定を実現している。

本研究では、[111]方位を軸とした金ナノ接点 (金[111]ナノ接点) を LER 先端と固定電極間に作製し (図 1 上段参照)、この金[111]ナノ接点を一定速度で引っ張りながら構造を観察し、同時に、その電気伝導、および、ばね定数を測定した (図 1 下段)。金[111]ナノ接点は砂時計のようなくびれをもつ形状であり、0.24nm 引っ張る度により狭い断面をもつ(111)原子層 1 層がくびれに挿入されることで段階的に細くなることを観察した。これは、図 1 下段のグラフで電気伝導がほぼ 0.24nm 周期で階段状に変化することに対応していた。この事実から、挿入された(111)原子層の等価ばね定数を挿入前後の等価ばね定数の差分から算出することができ、さらに、この(111)原子層の形状やサイズを考慮することでヤング率を見積もった。なお、28 回の引っ張り過程を測定して可能な限り多数のヤング率を見積もることで統計的にサイズ依存性を求めた (図 2)。その結果、ヤング率は、サイズが 2 nm 以下になると、サイズが小さくなるとともに約 80 GPa から 30 GPa へと徐々に減少した。この結果から、最外層のヤング率が約 22 GPa と、バルク値 (90GPa) の約 1/4 であることを見出した。このような材料表面の強度は、ナノ電気機械システム(NEMS)の材料設計でも考慮すべき重要な特性である点で大きな成果である。

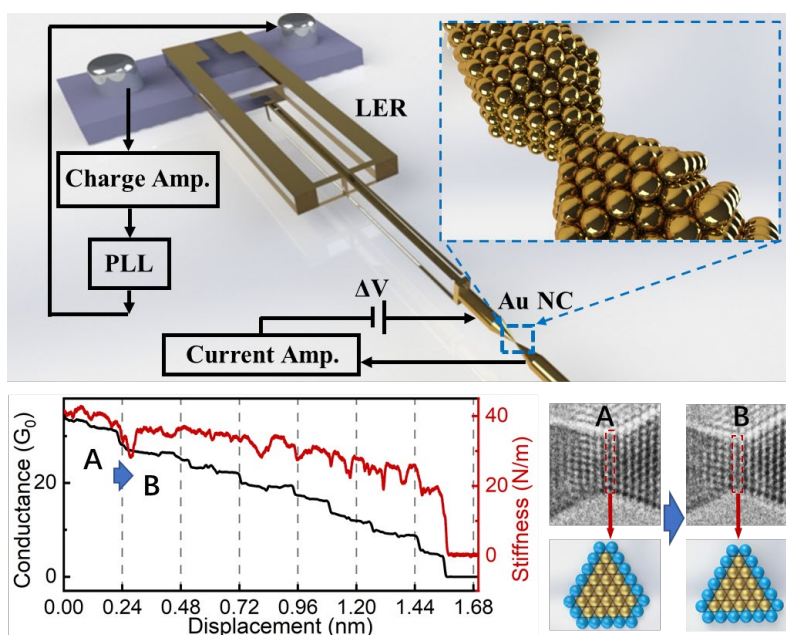


図 1. (上段) 金ナノコンタクトの等価ばね定数を計測する顕微メカニクス計測法。透過型電子顕微鏡 (TEM) を用いて金ナノ接点の構造観察をしながら、長辺振動水晶振動子 (LER) を用いて等価ばね定数を計測できる。
 (下段) (左) 金ナノ接点の引っ張り過程における変位に対する電気伝導及び等価ばね定数の変化を示すグラフ。(右) 変位 A と変位 B で得た金ナノ接点の TEM 像と最もくびれた断面の構造モデルを示す。黄色が内部にある原子、青が最表面原子である。

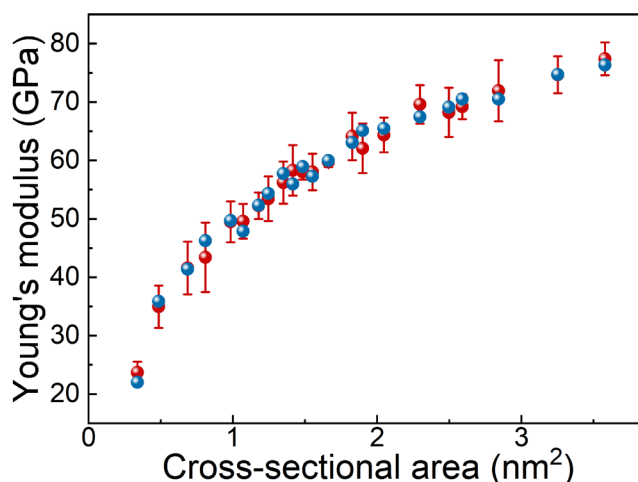


図 2. 金 [111] ナノ接点の引っ張り過程を 28 回測定して、統計的に求めた金 [111] ナノ接点ヤング率のサイズ依存性である。横軸は、断面積である。赤丸が実験値であり、誤差は、同じ断面の金 (111) 原子層に対して得られたヤング率のばらつきを示す。青丸は、第一原理計算によって得た結果である。

【論文情報】

掲載誌 Physical Review Letters
 論文題目 Surface Effect on Young's Modulus of Sub-2 Nanometer Gold [111] Nanocontacts
 著者 Jiaqi Zhang, Masahiko Tomitori, Toyoko Arai, and Yoshifumi Oshima
 掲載日 2022 年 4 月 5 日 (米国東部標準時間)
 DOI 10.1103/PhysRevLett.128.146101

【用語説明】

[*1] 長辺振動水晶振動子 (LER)

長辺振動水晶振動子 (LER、図 1 参照) は、細長い振動子 (長さ約 3 mm、幅約 0.1 mm) を長辺方向に伸縮振動させることで、周波数変調法の原理で金属ナノ接点などの等価バネ定数 (変位に対する力の傾き) を検出できる。特徴は、高い剛性 (1×10^5 N/m) と高い共振周波数 (1×10^6 Hz) である。特に、前者は、化学結合の剛性 (等価バネ定数) 測定に適しているだけでなく、小さい振幅による検出を可能とすることから、金属ナノ接点を壊すことなく弾性的な性質を得ることができ、さらには、原子分解能 TEM 像も同時に得られる点で大きな利点をもつ。

【お問合せ先】**研究内容に関すること**

国立大学法人 北陸先端科学技術大学院大学

先端科学技術研究科 ナノマテリアル・デバイス領域 教授 大島 義文（おおしま よしふみ）

〒923-1292 石川県能美市旭台 1-1

TEL : 0761-51-1500 E-mail : oshima@jaist.ac.jp

国立大学法人 金沢大学

理工研究域 数物科学系 教授 新井 豊子（あらい とよこ）

〒920-1192 石川県金沢市角間町

TEL : 076-264-5660 E-mail : arai@staff.kanazawa-u.ac.jp

報道発表に関すること

国立大学法人 北陸先端科学技術大学院大学

広報室 井村（いむら）

TEL : 0761-51-1031 E-mail : kouhou@ml.jaist.ac.jp

国立大学法人 金沢大学

理工系事務部総務課総務係 米田（よねだ）

TEL : 076-234-6826 E-mail : s-somu@adm.kanazawa-u.ac.jp