

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

世界初！ 個々の原子間の結合強度の測定に成功 —強く伸びる白金原子の鎖状物質—

ポイント

- 個々の原子の並びを見ながら、その結合強度を測る手法（顕微メカニクス計測法）の開発
- 白金原子が一行に並んだ鎖状物質を作製し、その結合強度を測定
- 結合強度が高く、よく伸びる白金原子の鎖状物質
- 原子スケールで制御された機能性物質探索への期待

北陸先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科 応用物理学領域の大島義文教授、富取正彦教授、張家奇 大学院生（博士後期課程）、石塚慧介 大学院生（博士後期課程）、環境・エネルギー領域の前園涼教授、本郷研太准教授、及び金沢大学・理工研究域 数物科学系の新井豊子教授は、International School for Advanced Studies (SISSA)の Erio Tosatti 教授との共同研究で、物質を構成する個々の原子の並びを観察しながら、その結合強度を計測できる顕微メカニクス計測法を開発した。この手法を使って、白金原子が一行に並んだ鎖状物質が強い結合強度を持つとともに、白金の塊（バルク）と比較してかなり大きく引き伸ばしても破断しないという特異な性質を持つことを発見した。実験結果を第一原理計算で解析したところ、この鎖状物質は、エネルギーが最小になる安定構造を取っているわけではなく、その形成に必要な張力が極小な構造であることを突きとめた。この鎖状物質がもつこの特異な性質の解明は、今後ますます期待される原子スケールで制御された機能性物質の創製に指針を与える大きな成果である。

本研究成果は、2021年4月29日（米国東部標準時間）に科学雑誌「Nano 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、2020-2006、ERC ULTRADISS Contract No. 834402, the Italian Ministry of University and Research through PRIN UTFROM N. 20178PZCB5 の助成を受けて行われた。

原子が鎖状に並んだ1次元物質の力学的性質は、同じ組成や構造を持つバルク物質と大きく異なることが理論計算によって予想されていた。しかし、1次元物質の性質はわずかな原子の変位にも敏感に変化するため測定例が少なく、解明が進んでいない。原子配列構造とその力学的性質の相関を明らかにできれば、1次元物質などの性質を決めるメカニズムの解明に繋がる。このメカニズムこそが、1次元物質を活用した新しい原理で動作する電子デバイスやセンサー開発の指針となる。

最近、私たちは、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）。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によって変化することを利用して。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、従来の手法（小さな Si 製テコを利用してその変位から力を計測する手法、TEM-AFM 法^[*1]）では困難だった結合強度の高精度測定を実現している。

本研究では、この TEM ホルダー内部で白金原子鎖を 150 個作製してその特性を詳細に調べ、白金原子鎖における原子結合強度が 25 N/m であることを突きとめた。この値は、白金のバルク結晶の原子結合強度 20 N/m よりも 25% 高い。また、原子間結合の長さ（0.25 nm）は最大 0.06 nm も延びることが分かった。これは原子結合の最大弾性ひずみが 24% になることを示しており、バルク結晶の値（5% 以下）と比較して著しく高い（図 2）。さらに、第一原理計算の結果を合わせて考察することで、このような特異な原子結合の性質は、白金原子鎖がエネルギー的に最安定な構造ではなく、形成に必要な張力が極小となる構造を取ることによって生まれることがわかった。

本研究は、1 次元物質がもつ特異な原子結合に関わる性質を明らかにし、理論計算と組み合わせることによって形成メカニズムを突きとめた点に大きな成果がある。今後ますます期待される原子スケールで制御された機能性物質の創製に指針を与える大きな成果である。

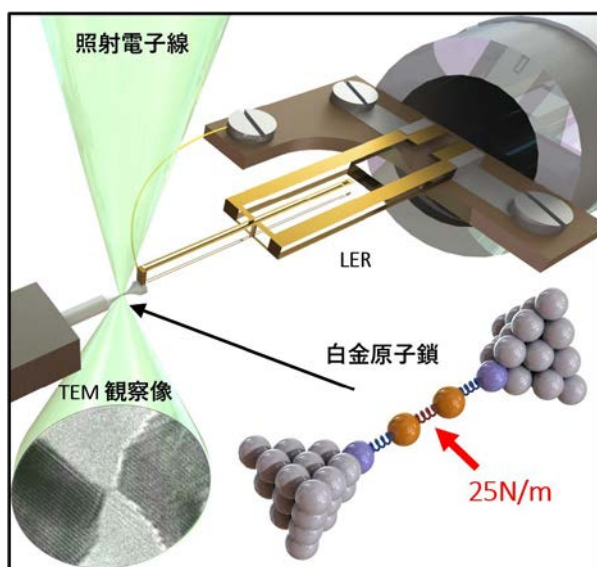


図 1. 個々の原子の並びを観察しながら、原子間の結合強度を計測する顕微メカニクス計測法。
透過型電子顕微鏡（TEM）を用いてナノ物質の構造観察をしながら、長辺振動水晶振動子（LER）を用いて物質の結合強度を計測できる。この測定によって、赤矢印で示す部位の白金原子鎖の原子間結合強度が 25 N/m であることがわかった。

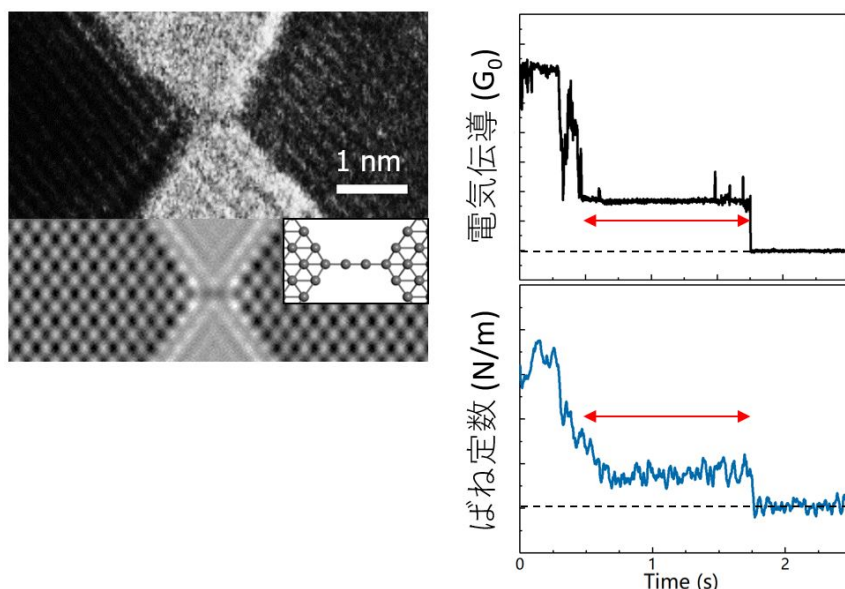


図2. 左上は透過型電子顕微鏡 (TEM) 像、左下はそのシミュレーション像である。原子4個からなる原子鎖が得られている。その観察時に測定された電気伝導 (コンダクタンス量子単位 G_0 でプロット) とばね定数の時間変化を、それぞれ右上と右下に示す。赤い矢印で示す領域は形成した原子鎖を破断することなく引っ張ることができた時間帯である。毎秒 0.08 nm の速度で引っ張っており、白金原子鎖は破断なく約 0.1 nm 伸びた。

【論文情報】

掲載誌 Nano Letters
 論文題目 Peculiar atomic bond nature in platinum monatomic chains
 著者 Jiaqi Zhang, Keisuke Ishizuka, Masahiko Tomitori, Toyoko Arai, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Erio Tosatti, Yoshifumi Oshima*
 掲載日 2021年4月29日付 (米国東部標準時間) にオンライン版に掲載
 DOI 10.1021/acs.nanolett.1c00564

【用語説明】

[*1] TEM-AFM 法 (透過型電子顕微鏡と原子間力顕微鏡を組み合わせた測定法)

従来の測定法の一つ。ナノ物質に接触した Si カンチレバーを引っ張ると、Si カンチレバーがたわむ (変位する)。このたわみ (変位) から、ナノ物質に負荷されている力を求める。一方、この負荷された力によって変形したナノ物質を透過型電子顕微鏡によって計測することで、このナノ物質の機械的強度を得る。ただし、10 nm 以下のサイズをもつナノ物質は 1\AA しか変形しない (原子間距離は $2\text{-}3\text{\AA}$ である)。このような変形を高い精度で測定することは難しく、ナノ物質の強度測定にばらつきが出てしまうという課題があった。

【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 応用物理学領域 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
評価・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