

Title	顕微ナノメカニックス計測法による金ナノ接点の弾性・塑性応答の解析
Author(s)	劉, 佳明
Citation	
Issue Date	2025-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	ETD
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/19943">http://hdl.handle.net/10119/19943</a>
Rights	
Description	Supervisor: 大島 義文, 先端科学技術研究科, 博士



氏 名	LIU, Jiaming	
学 位 の 種 類	博士 (マテリアルサイエンス)	
学 位 記 番 号	博材第 607 号	
学 位 授 与 年 月 日	令和 7 年 3 月 21 日	
論 文 題 目	Study of elastic and plastic responses of gold nanocontacts using microscopic nanomechanical measurement method	
論 文 審 査 委 員	大島 義文 北陸先端科学技術大学院大学 教授 高村由起子 同 教授 安 東秀 同 准教授 本郷 研太 同 准教授 新井 豊子 金沢大学 教授	

### 論文の内容の要旨

In this thesis, the elastic and plastic responses of gold nanocontacts (NC) was invested by microscopic nanomechanical measurement method (MNMM). Specifically, for the elastic response, we estimated the local Young's modulus of the internal local regions of the Au NCs. For the plastic response, we estimated the critical resolved shear stress (CRSS) required for slip to occur in the Au NCs. The Au NCs were fabricated using our developed in situ TEM holder, which is equipped with a quartz length-extension resonator (LER) as a force sensor for directly evaluating the force gradient (spring constant).

For nanocrystals, the Young's modulus exhibits both orientation dependence and size dependence. In devices made from nanomaterials, distribution of local Young's modulus is non-uniform. It is important to measure the local Young's modulus of nanocrystals. Our approach is based on the idea that under uniform shape and size conditions, a material with uniform Young's modulus will undergo uniform deformation under stress. However, if the Young's modulus is non-uniform, the deformation in different regions will vary. By measuring the local strain and its ratio to the overall strain, we can estimate the local Young's modulus for each region. Using our self-developed in situ TEM holder, we stretched Au NCs and observed their crystal structure through TEM, precisely measured the evolution of lattice spacing to obtain the local strain. Notably, the pixel size of the CCD we use is approximately 25 pm, while the maximum elastic elongation of the Au lattice is less than 10 pm, much smaller than the size of a single pixel. As a result, traditional methods cannot capture the elongation of the Au lattice. We fully utilized the large number of pixels in the TEM images and assumed that the TEM intensity follows a Gaussian distribution, enabling sub-pixel measurement of the Au lattice positions. In this way, we obtained the elongation of local regions during stretching. Additionally, we directly measured the force gradient (spring constant) applied to the Au NCs using FM method, and with the geometric information observed from TEM, we successfully estimated the local Young's modulus and studied its size dependence.

When the amount of stretching exceeds the material's elastic limit, it transitions from elastic deformation to plastic deformation. In nanocrystals, plastic deformation primarily occurs in the form of slip, and the necessary shear stress required for slip to occur in the slip direction is called as the CRSS. For bulk materials, the yield limit can be estimated by measuring the stress-strain curve. However, for nanomaterials, both stress and strain are extremely small, making direct measurement very difficult. We captured the energy dissipation associated with

plastic deformation to estimate the maximum elastic deformation of Au NCs. Using the geometric information observed through TEM and the mechanical response obtained from FM method, we estimated the yield stress of Au nanocontacts with various size and orientation. For [110] Au NCs, with conductance values of 60  $G_0$  and 30  $G_0$ , the yield stress was  $2.0 \pm 0.1 \text{ GPa}$ , regardless of size. In contrast, for [111] Au NCs with conductance of 30  $G_0$ , the yield stress was  $3.0 \pm 0.1 \text{ GPa}$ . Considering the partial slip system in FCC metals, we found that the Schmid factor for [110] direction Au nanocontacts is  $\sqrt{2}/3 (\approx 0.47)$ , the CRSS was calculated to be  $0.94 \pm 0.1 \text{ GPa}$ . Similarly, for [111] direction Au nanocontacts, the Schmid factor is  $2\sqrt{2}/9 (\approx 0.31)$ , yielding an estimated CRSS of  $0.94 \pm 0.1 \text{ GPa}$ . These two results are consistent. Therefore, we conclude that the CRSS for the  $\{11\bar{1}\} <112>$  slip system in Au NCs is  $0.94 \pm 0.1 \text{ GPa}$ .

In conclusion, a method for estimating the elastic and plastic responses of nanomaterials has been proposed. We studied Au NCs as an example, and our results had shown unique properties from bulk Au. This method is expected to be improved by introducing aberration-correct device to obtain better TEM resolution. The understanding of mechanics in atomic scale provide essential information for fundamental understanding and applications such as atomic scale nanodevices.

**Keywords:** nanomechanical, in-situ TEM, local Young's modulus, CRSS, dissipation energy.

## 論文審査の結果の要旨

ナノ・原子スケールにおける力学的性質は、摩擦の理解からナノ電気機械システムの開発に至る広い範囲で重要なため大変注目されている。10nm程度のナノ材料は、ほぼ単結晶であるため、結晶方位やサイズに敏感であることが指摘されており、力学的性質の理解には、測定対象の構造を把握する必要がある。最近、長辺振動水晶振動子（Length Extension Resonator (LER)）を組み込んだ透過型電子顕微鏡（TEM）ホルダーが開発され、顕微的ナノメカニックス計測法として注目されている。これまでに、この計測法を用いて、[111]方位を持つ金ナノ接点のヤング率のサイズ依存性が明らかになった。しかし、この成果は、この[111]ナノ接点の引張り変形過程が特殊なため可能であったが、他の方位を持つ金ナノ接点や他の金属ナノにおけるヤング率のサイズ依存性を明らかにすることは依然として難しい。

本研究では、顕微的ナノメカニックス計測法を用いて、金ナノ接点の局所的なヤング率を測定する解析法を開発し、サイズに依存するヤング率を得られることを検証すること、さらに、金ナノ接点の塑性変形に伴う散逸エネルギーを解析することで、金結晶の臨界せん断応力の値を求める目的としている。

局所的なヤング率は、試料全体の引っ張りによる変位とターゲット領域の変位の比と、測定した試料全体の等価ばね定数から求めることができるなどを提案し、[111]方位を持つ金ナノ接点のヤング率を求めた。得られたヤング率は、測定誤差が大きいものの、報告されている値と定量的に同じようなサイズ依存性を示しており、この解析法の有効性が検証できたとしている。測定誤差は、使用した透過型電子顕微鏡（TEM）の空間分解能が最先端のTEMに比べ低いことに原因があることを示しており、最先端のTEMを用いることでより高い精度でヤング率を得られると結論付けている。

散逸エネルギーの解析では、材料強度を示す重要な値である臨界せん断応力を得ることに成功している。転位が生じない金単結晶の臨界せん断応力が0.94GPaと高い値であることを明らかにした。この値は、従来行われていた金単結晶の臨界せん断応力を大きく上回っており、その理由として、従来の研究が $1\mu\text{m}$ 以上のサイズを持つ金単結晶であり、転位ループによる滑り変形であったためと指摘している。

以上、本論文は、顕微的ナノメカニックス計測法を用いて、金属ナノ接点の局所的なヤング率求める解

析法を確立し、さらに、材料強度を示す重要な値である臨界せん断応力の測定で成果を挙げており、学術的に貢献するところが大きい。よって博士（マテリアルサイエンス）の学位論文として十分価値あるものと認めた。