

ナノ粒子形状に由来する局所ひずみのサブピコメートル解析

Shape-dependent strain in nanoparticles revealed by sub-picometer precision analysis

北陸先端大マテ¹, ヘント大理², 九州大工³, 九州大超顕微セ⁴

○麻生 浩平¹, Jens Maebe², Xuan Quy Tran², 山本 知一⁴, 大島 義文¹, 松村 晶^{3,4}

JAIST¹, Ghent Univ.², Kyushu Univ.³, Kyushu Univ. URC⁴; ○Kohei Aso¹, Jens Maebe²,

Xuan Quy Tran³, Tomokazu Yamamoto⁴, Yoshifumi Oshima¹, and Syo Matsumura^{3,4}

E-mail: aso@jaist.ac.jp

金属ナノ粒子は、表面応力によって収縮ひずみが生じることが知られている。最安定形状を有するナノ粒子に関しては多くの報告例がある。一方、アスペクト比 (長さ/幅) が1ではない異方的なナノ粒子の場合、ひずみ分布が不均一になることが予想されている[1]。しかし、実験ではほとんど明らかにされていない。この理由として、サブ nm の空間分解能かつサブ pm の精度でひずみを測定する手法がないことが挙げられる。本研究では、機械学習手法の一つであるガウス過程回帰 (GPR) を導入することで高精度なひずみ解析法を確立し、アスペクト比が異なるナノ粒子内でのひずみ分布を明らかにすることを目的とした。

観察した金ナノ粒子は、幅が約 9 nm、長さが異なる 9 nm, 19 nm, 36 nm の3つである。長軸が [001] 方位であり、短軸が [110] 方位となっている。走査透過電子顕微鏡を用いて、金ナノ粒子の高角散乱環状暗視野 (HAADF) 像を得た。図 1 は、アスペクト比 2.1 の金ナノ粒子の HAADF 像である。表面近傍のひずみ分布は、ひずみが少ないと考えられる金ナノ粒子コア領域 (Fig. 1 の四角) の格子を参照して求めた[2]。

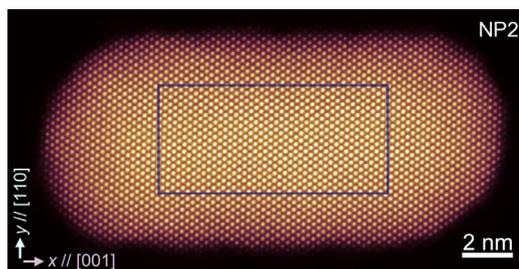


Fig. 1: HAADF image of a gold nanorod.

観察した HAADF 像では、統計ノイズや走査線間隔の揺らぎなどが原因で、原子カラム位置が真の位置からずれてしまうことがある。実際に、粒子のコア領域において原子カラム位置の揺らぎは 3.1 pm と見積もることができた。この値は、測定精度として不十分である。そこで、GPR を適用してひずみを計算したところ、その精度は 0.16% であり、距離にして 0.66 pm に相当する測定精度が達成できた。

金ナノ粒子の [001] 方位 (紙面横方向) に関するひずみマップを Fig. 2 に示す。コア領域での格子間隔 d_{001} の平均値に対して、収縮ひずみが暗青色、膨張ひずみが明黄色で示されている。球状粒子 (Fig. 2a) では、表面付近で格子が収縮しており、金属によく見られる表面収縮と考えられる。一方で、ロッド状粒子 (Fig. 2b) の先端付近に約 +0.6% の格子膨張が見出された。

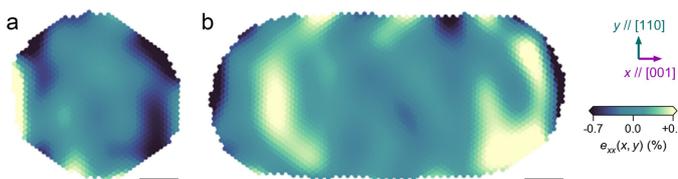


Fig. 2: Strain $e_{xx}(x,y)$ maps of (a) NP1 and (b) NP2. Scale bars are 2 nm.

[1] R. Shuttleworth, *Proc. Phys. Soc. A*, **63** (1950), p.444

[2] K. Aso, *Microscopy*, **65** (2016), p.391