## HOPG 上オクタエチルポルフィリンダブルデッカー型単分子磁石の 単分子膜分子配列制御

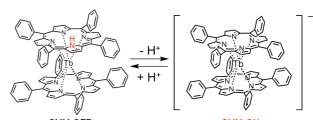
Control of molecular alignment of octaethylporphyrin double-decker single molecular magnet on HOPG

阪大院理<sup>1</sup>, K.U.Leuven<sup>2</sup>, 分子研<sup>3</sup> O猪瀬 朋子<sup>1</sup>, 田中 大輔<sup>1</sup>, 田中 啓文<sup>1</sup>, Oleksandr Ivasenko<sup>2</sup>, 永田 央<sup>3</sup>, Steven De Feyter<sup>2</sup>, 石川 直人<sup>1</sup>, 小川 琢治<sup>1</sup> Osaka Univ.<sup>1</sup>, K.U.Leuven<sup>2</sup>, IMS<sup>3</sup> Tomoko Inose<sup>1</sup>, Daisuke Tanaka<sup>1</sup>, Hirofumi Tanaka<sup>1</sup>, Oleksandr Ivasenko<sup>2</sup>, Toshi Nagata<sup>3</sup>, Steven De Feyter<sup>2</sup>, Naoto Ishikawa<sup>1</sup>, Takuji Ogawa<sup>1</sup> E-mail: ogawa@chem.sci.osaka-u.ac.jp

単分子磁石は、単一で磁石としての性質を示す分子であり、現在非常に注目を集めている物質群である。将来的には高密度メモリー素子や量子コンピューターへの応用が期待されており、現在活発に研究が進められている。特に、フタロシアニン (Pc) - テルビウムダブルデッカー型錯体は、40 K という比較的高温で単分子磁石性を示すことが近年報告され、注目が集まっている。さらに、炭素材料上で単分子磁石性を観測したという報告が、ごく最近なされており、単分子磁石への期待はますます高まっている。

我々はこれまで、フタロシアニンと同配位構造を取り、分子修飾がより容易なポルフィリンに着目し、ホモレピックなポルフィリン-テルビウムダブルデッカー型単分子磁石の研究を行ってきた。ダブルデッカー型錯体は、アニオン体、ラジカル体、プロトン体、カチオン体と、様々な電子状態を取ることが可能であるが、我々はその中でも特に、プロトン体とアニオン体に着目し、

単分子磁石性の評価を行ってきた。その結果、 テトラフェニルポルフィリン-テルビウムダ ブルデッカー型錯体について、プロトン付加 体と脱プロトン体を作り分けることにより、 単分子磁石性のスイッチングが可能であると いうことが明らかになった。



SMM OFF Seven-coordination mode

SMM ON Eight-coordination mode

このような単分子磁石を実際にデバイス化へと応用するためには、上記で述べたような炭素材料との複合が必要であると考えられる。しかし、分子配列を制御し、再現性良く炭素材料上で単分子磁石性を観測するのは難しいというのが現状である。我々は、これまでの予備的な実験から、オクタエチルポルフィリン-テルビウムダブルデッカー型錯体のプロトン付加体と脱プロトン体の HOPG (高配向性グラファイト)上での分子配列を走査型トンネル顕微鏡 (STM)を用いて観測し、その分子配列が異なることを明らかにしてきた。今回は、オクタエチルポルフィリンダブルデッカー型錯体について、その電子状態をアニオン体、プロトン付加体、ラジカル体と変化させた時に、分子配列がどのように異なるのかを報告する。また分子力学的計算手法を用いて、2次元集合体の極小エネルギー構造を求め、STM 像との比較を行った。