

## Cu 表面上の NO の価電子状態と非弾性トンネル分光の相関

### Role of valence states in inelastic tunneling spectroscopy of NO on Cu surfaces

○塩足 亮隼<sup>1,2</sup>、奥山 弘<sup>1</sup>、八田 振一郎<sup>1</sup>、有賀 哲也<sup>1</sup>、Maite Alducin<sup>3,4</sup>、Thomas Frederiksen<sup>3,5</sup>

(1. 京大院理、2. 東大新領域、3. ドノスティア国際物理センター、4. CFM/MPC、5. IKERBASQUE)

○Akitoshi Shiotari<sup>1,2</sup>、Hiroshi Okuyama<sup>1</sup>、Shinichiro Hatta<sup>1</sup>、Tetsuya Aruga<sup>1</sup>、Maite Alducin<sup>3,4</sup>、

Thomas Frederiksen<sup>3,5</sup> (1. Kyoto Univ., 2. Univ. of Tokyo, 3. DIPIC, 4. CFM/MPC, 5. IKERBASQUE)

E-mail: shiotari@k.u-tokyo.ac.jp

非弾性トンネル分光 (IETS) は、走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて表面に吸着した個々の分子の化学同定を行うための強力な手法である。近年の理論研究によって、表面に吸着した分子の価電子軌道の対称性と振動モードの対称性との組み合わせによって非弾性トンネル強度が決まるという「傾向則 (propensity rule)」が提唱された [1,2]。しかしながら、価電子状態の観測の難しさから、この「傾向則」についての実験的な知見は不足していた。

本研究では、Cu(110) および Cu(001) 表面上の一酸化窒素 (NO) 分子について、超高真空・6 K における STM/IETS 測定を行った。NO 単分子の価電子準位 ( $2\pi^*$ ) は Fermi 準位近傍に存在しており、その軌道の形状を反映した STM 像が観測された [3]。さらに NO に対して IETS 測定を行い、分子振動に由来する特徴的なピークを検出した (Fig. 1a)。STM 像の形状 (Fig. 1b) と IETS 強度分布 (Fig. 1c) から、「傾向則」に基づいて振動モードの帰属を行った。この結果は理論計算と非常に良い一致を示し (Fig. 1d,e)、価電子状態と IETS の相関が明確に示された。

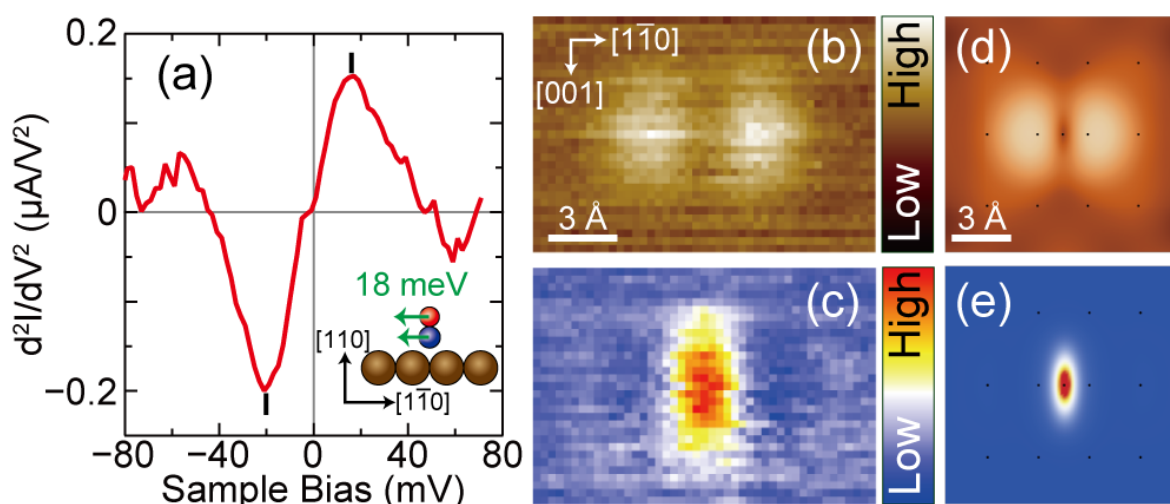


Fig. 1: (a) Cu(110) 表面上の NO 単分子の IETS。挿入図は束縛並進モード。実験による NO の (b) STM 像と (c) IETS 強度分布。密度汎関数法 (DFT) による (d) STM 像と (e) 束縛並進モードの IETS 強度分布のシミュレーション。

[1] M. Paulsson, T. Frederiksen, H. Ueba, N. Lorente, and M. Brandbyge, *PRL* **100**, 226604 (2008).

[2] M. Alducin, D. Sánchez-Portal, A. Arnau, and N. Lorente, *PRL* **104**, 136101 (2010).

[3] A. Shiotari, S. Hatta, H. Okuyama, and T. Aruga, *Chem. Sci.* **5**, 922 (2014).