

STM分子マニピュレーションによる Ir(III)錯体(*fac*-CF₃pim)

1 次元チェーンの分子間結合解明

STM study of racemic Ir(III) complex one-dimensional chains on Cu(111)

千葉大院工¹, °横田 健太¹, 根本 諒平¹, 中澤 芳洋¹, Peter Krüger¹, 唐津 孝¹, 山田 豊和¹

Chiba Univ.¹, °Kenta Yokota¹, Ryohei Nemoto¹, Yoshihiro Nakazawa¹, Peter Krüger¹,

Takashi Karatsu¹, Toyo Kazu Yamada¹

E-mail: toyoyamada@faculty.chiba-u.jp

キラリティを持つ分子は鏡映対称を有する。分子キラリティを利用した光デバイスへの応用が期待される。本研究で我々は、ラセミ化合物の1分子レベルでの金属基板への吸着制御、1次元分子チェーンの成長プロセス、分子チェーンからの1分子の引き抜きを、超高真空・極低温・走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて研究した。吸着分子の最安定構造は、第一原理DFT計算とSTM結果の比較より決定した。準備槽にて基板Cu(111)清浄化を行い、導入槽にて分子蒸着を行った。真空を破らずに試料は解析槽に輸送しSTM計測を行った(我々のSTM分子計測手法に関してはref. [1-2]参照)。

Cu(111)基板表面は、準備槽内でAr⁺ sputter (1 kV)・anneal (800 K)サイクルにより清浄化と平坦化を行った。*fac*-CF₃pim蒸着(坩堝温度420 K)は基板温度300 Kで行った。0.025 ML蒸着した表面では、3つの輝点からなる単分子を確認した(高さ100 pm, 輝点間距離0.5 nm)。DFT計算は、*fac*-CF₃pim分子のトリフルオロメチル基がCu(111)に対して上向きに吸着した場合の吸着エネルギーは-2.6 eV、下向きの場合は-1.8 eVを示したため、Cu(111)表面に対してトリフルオロメチル基が上向きになるように吸着していると考ええる。

Cu(111)表面上にIr(III)錯体(*fac*-CF₃pim)分子を室温吸着すると熱拡散する。分子の持つダイポール相互作用と基板との吸着エネルギーのバランスから、2個の分子が直線状配列し1次元チェーンを形成することを0.3 ML蒸着した際に確認した。1列2分子で構成され最大3列まで確認した。1列の幅2.1 nm、1列内の2分子間距離1.3 nm、基板からの高さ450 pmであった。STM電子分光(STS)はフェルミ準位下-1.8 eVにHOMOピークを確認した。

面白いことに、STM探針を分子鎖上に固定しセットポイント $V_s = -1.8$ V, $I_t = 100$ pAにてパルス電圧(100 ms, -5 V)を印加すると、鎖構造から1分子だけを正確に引き抜くことに成功した。引き抜いた後も分子鎖構造は破壊されなかった。正負バイアス依存など詳細を報告する。

References:

[1] R. Nemoto, T. K. Yamada, et al., **J. Phys Chem. C** 123, 18939 (2019).

[2] E. Inami, T. K. Yamada, et al., **Analytical Chemistry** 90, 8954 (2018).