

Cu(110) 表面上の NO 単分子のトグルスイッチ動作とその機構解明

Control of a single-molecule toggle switch of NO on Cu(110)

東大新領域¹, 阪大工² ○塩足 亮隼¹, 尾谷 卓史¹, Thanh Ngoc Pham², 濱本 雄治²,
森川 良忠², 濱田 幾太郎², 杉本 宜昭¹

Univ. of Tokyo¹, Osaka Univ.² ○A. Shiotari,¹ T. Odani,¹ T. N. Pham,² Y. Hamamoto,²

Y. Morikawa,² I. Hamada,² Y. Sugimoto¹

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

単分子スイッチの機構解明は単分子デバイスの創成と制御において重要な過程である。走査トンネル顕微鏡(STM) や非接触式原子間力顕微鏡(AFM)の探針を近づけることで指定した単分子の配向を変化させる「探針誘起分子スイッチ」がこれまでに複数報告されている[1,2]が、複雑な分子ではその反応の素過程を完全に理解するのは困難であった。Cu(110)表面上の一酸化窒素(NO)分子は、単純な2原子分子でありながら、直立配向と倒伏配向の2状態をとる[3,4]。これまでのAFM測定により、分子修飾探針からの斥力によって直立配向から倒伏配向に変化することを明らかにし(下図)、このNO単分子が「単分子トグルスイッチ」として振る舞うことを示した[5]。

今回、先端の構造が異なる複数の探針を用いて、探針を接近させたときの直立 NO 分子の応答を AFM 実験および密度汎関数理論 (DFT) によって調べた。探針先端の種類によってスイッチの可否が異なり、探針先端の剛性がスイッチ駆動のための重要な要素であることが示された。

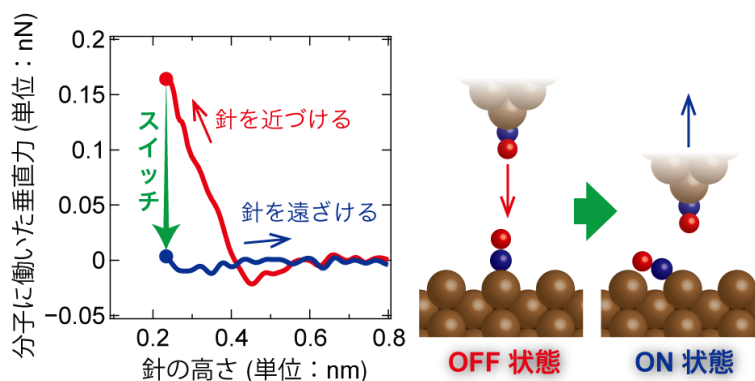
[1] R. Pawlak et al., ACS Nano **6**, 6318 (2012).

[2] J.N. Ladenthin et al., Nat. Chem. **8**, 935 (2016).

[3] A. Shiotari et al., Phys. Rev. Lett. **106**, 156104 (2011).

[4] T. N. Pham, M. Sugiyama, F. Muttapien, S. E. M. Putra, K. Inagaki, D. N. Son, Y. Hamamoto, I. Hamada, Y. Morikawa, J. Phys. Chem. C **122**, 11814 (2018).

[5] A. Shiotari, T. Odani, Y. Sugimoto, Phys. Rev. Lett. **121**, 116101 (2018).



図：AFMによって計測したNO単分子のスイッチ時における力の距離依存性(左)とスイッチ前後の分子配向の模式図(右)。