

STM / ARPES / DFT による環状分子クラウンエーテル分子膜における 3d 遷移金属吸着の研究

STM / ARPES / DFT study of 3d metal adsorption on crown-ether ring molecular films

千葉大院工¹, 産総研², 台湾清華大³, 分子研⁴, [○](D)根本 諒平¹, ピーター クリュージャー¹,
細貝 拓也², 堀江 正樹³, 長谷川 友里⁴, 解良 聡⁴, 山田 豊和¹

Chiba Univ.¹, AIST², Taiwan Tsing Hua Univ.³, IMS⁴, [○](D)Ryohei Nemoto¹, Peter Krüger¹,
Takuya Hosokai², Masaki Horie³, Yuri Hasegawa⁴, Satoshi Kera⁴, Toyo Kazu Yamada¹

E-mail: r.nemoto@chiba-u.jp

本研究では、環状分子の規則配列と磁性金属原子を複合し、環状分子を host、3d 遷移金属原子を guest とすることで、貴金属基板表面上に新奇・単分子層スピン配列の創成を目指す。

我々は、環状分子として tetrabromide dibenzo 18-crown-6 ether (Br-CR) [1]、貴金属基板として Cu(111)表面を使用した。角度分解紫外線光電子分光(ARUPS, 分子研)と、低温(78K)超高真空走査トンネル顕微鏡(STM, 千葉大)の 2 つの異なる装置にて研究を行ったため、水晶振動子マイクロバランス法による精密な昇華分子量制御を行い [2]、同一量の Br-CR 分子を Cu(111)に吸着することに成功した。

環状分子の分子骨格は極めて柔軟であるため、ガス状と単結晶における Br-CR の分子骨格構造は大きく異なる。そのため、Cu(111)基板に吸着した Br-CR 分子は基板—分子間相互作用と分子間相互作用のエネルギーバランスにより、Br-CR 分子は基板表面に対して平坦となる Cu(111)表面固有の分子骨格を持ち、(7×4)規則配列することが STM, LEED, DFT 計算分かった [3]。さらに、ARPES, STS 測定により、HOMO の状態ピークを約-1.5 eV に確認し、DFT 計算においても両者の結果を補填する情報を得ることができた。このように、STM, LEED, ARPES による実験結果と DFT による計算結果から、Cu(111)上の Br-CR 分子配列の周期構造・分子骨格構造と電子状態を系統的に明らかにした [3]。

この二次元 Br-CR 環状分子配列は、分子膜表面で周期ポテンシャルを有する。この表面に磁性原子 (コバルト Co) を吸着した。吸着させる Co 原子数を変化させ、環状分子配列が破壊または保持されるかを、STM / ARPES 測定より確認した。Br-CR 分子規則配列に対して、Co は複数の吸着パターンを有することが判明した。吸着構造の評価を DFT 計算結果と併せて議論し、その詳細を報告する。

文献

- [1] T. Hosokai *et al.*; J. Phys. Chem. C , 112, 4643 (2008).
- [2] E. Inami *et al.*; Anal. Chem., 90, 8954 (2018).
- [3] R. Nemoto *et al.*; J. Phys. Chem. C, 123, 18939 (2019).