金(111)表面上に吸着したBDA分子の吸着構造と電子状態

東北大多元研^A, CREST-JST^B 朱娜^A, 長田達朗^A, 道祖尾恭之^{AB}, 米田忠弘^{AB} Adsorption structure and electronic state of BDA molecule on Au(111) surface Tohoku Univ.^A, CREST-JST^B, IMRAM, Univ. of Tohoku^A, CREST-JST^B N. Zhu^A, T.Osada^A, Sainoo^{AB}, T. Komeda^{AB}

【序】有機分子が金属表面上で規則構造を形成するメカニズムとして重要なものに水素 結合があげられる。Cu(100)表面においてBDA(4,4'-biphenyldicarboxylic acid)分子(図1 に示す)は水素結合によって特徴規則構造を形成するとこが報告されている[1]。本研究 では基板をAu(111)に変えて観察したところ、Cu(100)表面とはまったく異なる規則構造 が観察されたので、報告する。

【実験装置】本実験では試作した10K以下で動 作する可能なSTMを用いた。STMはフロータイプ のヘリウム冷却装(Advanced Research systems Inc



LT3-110Heli-tran)を使用することで、ヘリウム沸騰による機械的振動の影響を小さくす ることができ、ヘッド周辺の剛性を高めることができた。STMヘッドにはバネなどの防 振機構を持たせず、ヘリウムデュワーと装置全体をエニダイン社製の空気圧ダンパに載 せることで防振している。

【実験方法】実験はすべてUHVチェンバー内で行った、単結晶Au(111)基板をスパッタ アニールによって清浄化し、Taボート上のBDA分子を加熱することで表面に薄膜成形し たもの(基板温度^{~250}℃)を用いて、homemade 10K STMをもちいて観察した。

【結果】Au(111)上に吸着したBDAのSTM像を図2の(A)に示す(観察温度は~70K)。BDA 分子一層で形成され、規則構造が得られた。そして、分子が一方向に整列する配列構造 が観察された。この配列構造を説明できるモデルを図2の(B)に示す。カルボン酸同士の 水素結合により新しい規則配列が形成されたと考える。この結果はCu(100)表面において 報告されている正方状の規則配列(図2の(C))とは明らかに異なっている。BDA分子間の 水素結合がカルボン酸とベンゼン環の間に形成されるとされている[1]。STSの測定から 得られた電子状態の解析をもとに分子-分子間の水素結合と基板-分子の相互作用との競 合を考え、この構造出現の機構を議論する。



図2 (A)Au(111)面上に蒸着したBDA分子の薄膜のSTM像area 20x20 nm², Vsample=-1.5 V, and Itunnel=0.4 nA. (B) BDA/Au(111)表面における分子配列のモデル。カルボン酸同士の水素結合で 配列する。(C) BDA/Cu(100)表面における分子配列のモデル^[1]、ベンゼン環の水素とカルボン酸 で作った水素結合

また、STM を用いて表面吸着分子に電流を注入しその変化を調べることは分子一電子 の相互作用および化学反応の素過程を直接観察する手法として注目されており、将来的 に分子一つ単位での化学操作ツールとして利用されることが期待されている。水素結合 により分子の規則配列が形成される場合についてトンネル電流注入による表面操作を行 った。実験は超高真空中で低温・室温の両方の温度でおこなった。Au(111)表面に吸着さ せた BDA 分子は Cu(100)とは異なった規則構造を示すが、トンネル電子注入を行い単分 子での化学反応を試みた。その結果、規則構造の変化および分子の配向にそった化学反 応(図 3) といった変化が見られたので発表する。



図 3 BDA/Au(111)の STM 像(70K)。 area 20x20 nm², Vsample=-1.36 V, Itunnel=0.4 nA. 白い枠では図 2(A)の上で電子注入した結果であ る。電子注入の条件は 3.0nA -2.0V 20sec.

[1] S. Stepanow et al., Nano *Letters* 5, 901 (2005).