

高空間分解能原子間力顕微鏡を用いた単分子の化学反応制御

東大新領域 塩足亮隼

shiotari@k.u-tokyo.ac.jp

非接触式原子間力顕微鏡(ncAFM)は、探針先端原子と表面原子間に働く力を検出し、表面形状を画像化する手法である。分子チップ、すなわち、一酸化炭素分子などで先端を修飾した探針を用いることで、ncAFM 像の空間分解能が向上し、固体表面の原子配列や表面に吸着した個々の分子の内部構造を画像化することができる[1]。これまでに、芳香族分子の炭素骨格[1,2]や水分子膜の水素結合ネットワーク[3]など様々な系が可視化されており、その構造の解明に大きく貢献している。試料の観察に限らず、ncAFM の探針を任意の点に移動・配置させ標的分子に刺激を与えることが可能であり、単分子スイッチの駆動[4]が実現している。我々はこの技術を原子レベルの化学反応制御に応用できると考えている。

本発表では主に、ncAFM 探針を用いて単一の有機分子の脱水素化を誘起した研究[5]について報告する。 sp^3 炭素原子を含む炭化水素は、金属表面の触媒作用により環化脱水素化などを起こして sp^2 構造の多環芳香族分子となりうるということが知られており、グラフェンナノリボンなどのナノ炭素材料の創成に活用されている。一方、加熱中における反応を実験的に追跡してメカニズムを調べることは困難であり、理論計算においても複数の反応過程が提唱されており依然結論が得られていない。本研究では Cu(001)表面上の炭化水素分子($C_{30}H_{17}$)を標的とし、5 K にて測定を行った。その分子は、 sp^3 炭素に結合した水素原子が真空側に突き出た構造である(dangling H atom; Fig. 1a)。その H 原子に Cu 探針を接近させると脱水素化が起こり、平坦な芳香族分子に変化した(Fig. 1b→c)。同じ探針を用いて選択的に複数の標的分子のdangling H を取り除くことができ、探針接近のみで C-H 結合の切断が誘起されることを明らかにした。このことは探針が「可動式の触媒表面」として働いたことを意味しており、表面合成における反応過程を特定するための重要な結果である。

Reference: [1] L. Gross et al., *Science* **325**, 1110 (2009). [2] A. Shiotari et al., *Nat. Commun.* **8**, 16089 (2017). [3] *Nat. Commun.* **8**, 14313 (2017). [4] *Phys. Rev. Lett.* **121**, 116101 (2018). [5] *Submitted*.

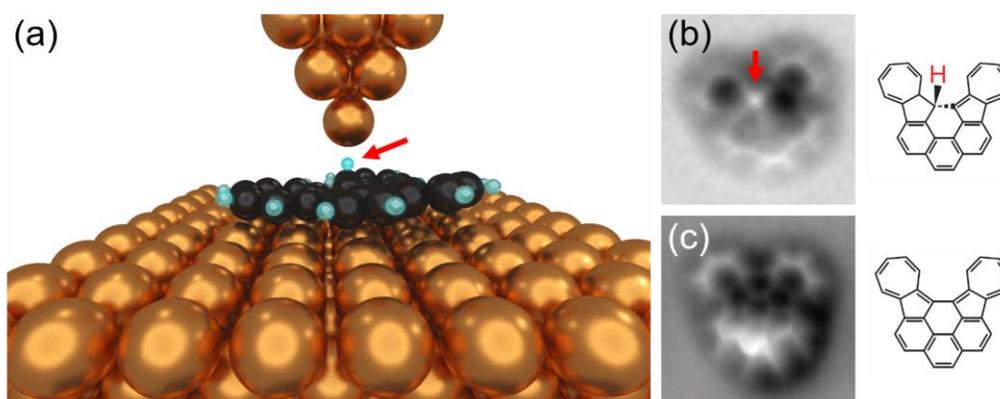


Fig. 1 (a) Cu(001)上の標的分子とそれに近接する Cu 探針の構造。赤矢印は dangling H。 (b) 探針の接近前、(c) 接近後に取得した標的分子の高空間分解能 ncAFM 像 (左) とその構造 (右)。