

局所障壁高さによる Li 内包フラーレンの 電気双極子モーメントの分子レベル評価

Local electrical dipole moment of Li endohedral fullerene utilizing local barrier height

筑波大数理¹ 京大² 東北大³

○宗澤祐紀¹ 小野裕太郎¹ 河野優輝¹ 延山知弘² 上野裕³ 山田洋一¹

Univ. Tsukuba¹, Univ. Kyoto², Univ. Tohoku³

○Yuki Munezawa¹, Yutaro Ono¹, Yuki Kono¹, Tomohiro Nobeyama², Hiroshi Ueno³, Yoichi Yamada¹

Email: s2011871@u.tsukuba.ac.jp

[はじめに] 走査トンネル顕微鏡 (STM) におけるトンネル電流の大きさは $I_T = A \cdot \exp(-2\kappa z)$ で表され、 I_T の探針試料間距離 z に関する減衰定数 κ は局所障壁高さ (local barrier height : LBH) の情報をもつ。LBH はトンネル電流の z 依存性から以下のように求められる。

$$\text{LBH} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{d \ln I_T}{dz} \right)^2$$

LBH は探針と試料の仕事関数に関連する物理量であるため、試料表面の電気双極子モーメントによる影響を受ける。ゆえに、LBH 計測によって従来巨視的な理解にとどまっていた金属表面上の吸着分子の双極子モーメントを 1 分子レベルで理解できる可能性がある。

本研究では、LBH 計測の対象として $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ に注目した (Fig.1)。 $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ の双極子モーメントは内包された Li^+ に影響され、電荷輸送や電荷移動特性にも寄与すると考えられる[1]。そこで我々は $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ 薄膜に対して STM 及び LBH 計測を行い、 $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ の電気双極子モーメントや電子構造を分子スケールで明らかにした。

[実験] $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ 薄膜は $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ [NTf₂]⁻ 塩の昇華によって作製した。この成膜方法では $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ と C_{70} の混合薄膜が得られることが知られている。LBH 像を取得する際には z に正弦波変調を加え、トンネル電流をロックイン検出し、各点の dI_T/dz を求めた。

[結果・考察] $\text{Li}^+@\text{C}_{70}:\text{C}_{70}$ の混合分子薄膜の STM 像 (Fig.2.(a))

Fig1 $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ structure

からは、 $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ 分子において見かけの高さが大きく観察されるため、 $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ の識別が可能である[2]。一方 LBH 像 (Fig.2.(b)) からは $\text{Li}^+@\text{C}_{70}$ の LBH が C_{70} のそれより低くなることが明らかになった。この結果は内包 Li^+ によって真空側に向けた電気双極子モーメントが生じているためと考えられる。発表では I - z 特性と STS の結果も合わせて金属基板上的の内包フラーレンの電子構造について議論する予定である。

[1] H. Ueno, et al., Chem. Eur.

J. 30, e202303908 (2023)

[2] Y. Yamada, et al., J. Phys. Chem. Lett. 2021,

12, 7812

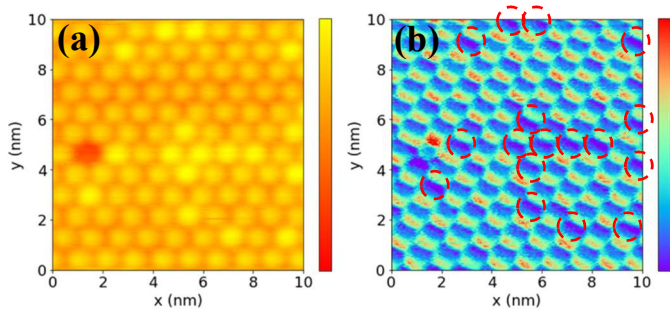


Fig.2 (a)STM image (b)LBH image