

ダブルデッカー型イットリウム(III)ーフタロシアニナト錯体の磁性制御における基板選択の重要性に関する理論計算

Theoretical Study on the importance of substrate selection in controlling magnetism of Surface-Adsorbed Yttrium(III) Double-decker Phthalocyaninato Complexes

大阪大¹, 城西大² ○(B) 廣田 陸哉¹, 多田 幸平¹, 加藤 恵一², 岸 亮平¹, 北河 康隆¹
Osaka Univ¹, Josai Univ², ○(B) Rikuya Hirota¹, Kohei Tada¹, Keiichi Katoh², Ryohei Kishi¹, Yasutaka Kitagawa¹

E-mail: rikuya.hirota@cheng.es.osaka-u.ac.jp

単分子磁石は、その大きな磁気異方性と長いスピン緩和時間から次世代の大容量記録媒体としての利用が期待されている。ダブルデッカー型ランタノイド(III)ーフタロシアニナト錯体(LnPc₂)は単分子磁石材料の一つであり、配位子が電子スピンを持つため、単分子磁石性能の向上が期待できる。実装にあたっては、単分子磁石材料を基板上に吸着させて用いることが想定される。

先行研究[1]では、中心金属が電子スピンを持たない YPc₂ と Au(111)を用い、基板吸着が配位子の電子状態に与える影響解明のため、密度汎関数理論の計算条件最適化が行われた。YPc₂は、単分子ではフタロシアニン環に $S = 1/2$ の電子スピンを持つ。本研究では、最適化された条件(DFT-D3, 交換相関汎関数: GGA-PBE)を用いて YPc₂吸着状態の磁性・電子状態変化を検討した。

計算の結果、基板吸着により YPc₂から基板への電子移動が生じることが分かった (Fig. 1(a)). これは、配位子の持つ電子スピンの非局在化することを意味する。そこで YPc₂と基板の間にグラフェンを一層挿入することにより、YPc₂から基板への電子移動を防ぎ、配位子の電子状態を単分子状態のものに維持することができるか検討した。Fig. 1(b)に示すように、YPc₂ー基板間の電子移動を大幅に抑制できることが分かった。また Fig. 1(c)に示すように、吸着状態でも配位子の電子スピンの維持されることが分かった。従って、配位子が電子スピンを持つ分子を基板上に吸着させる際には、電子が移動しないよう適切な基板選択が求められる。

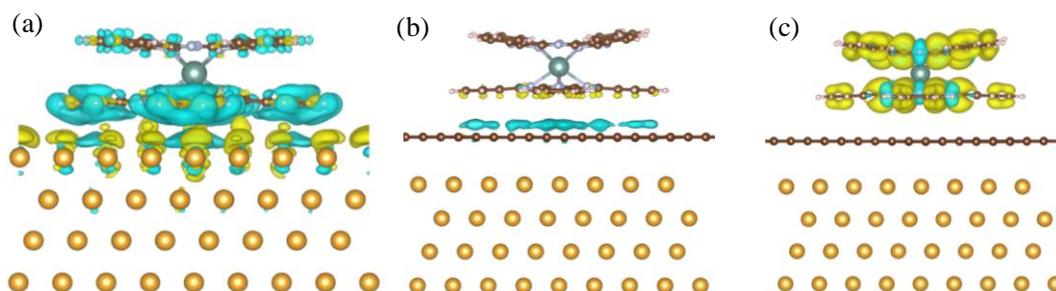


Fig.1 Differential charge distribution of (a)YPc₂/Au(111) and (b)YPc₂/Graphene/Au(111), and (c)spin density of YPc₂/Graphene/Au(111). Isosurface of densities is 3e-4 a.u.; yellow and blue represent an increase and decrease in the number of electrons in (a) and (b), and up and down spins in (c).

[1] K. Tada and Y. Kitagawa, AMTC letters, 2019, 6, 216.