

HOPG 基板上における分子配列のモデリング
Model study of molecular ordering on HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 西谷 暢彦

研究成果概要

分子を構成単位とするナノデバイスの構築に向けて、固液界面における自己組織化が注目されている。我々は近年、固液界面での協同的組織化プロセスにおいて、水素結合などの分子間相互作用が配列安定化に与える影響を定量的に評価する手法を報告した。^[1]

本研究では、多方向の相互作用が配列ドメインのサイズや形状に与える影響に関して走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて評価を行った。芳香環コアの側鎖にアミド基、ウレア基を持つ化合物 **1a**, **1u** に対してヒドロキシ基を芳香環、アルキル鎖末端にそれぞれ導入した化合物 **2a**, **2u**, **3a**, **3u** を合成した (Figure 1a)。化合物のオクタン酸/グラファイト界面での配列形成を STM で観察した結果、アミド誘導体と比較して、ウレア誘導体は顕著に小さな配列ドメインを形成することが認められた (Figure 1b–g)。被覆率の濃度依存性を核生成–伸長モデルを用いて評価したところ、ウレア誘導体はアミド誘導体に対して核生成平衡定数が非常に大きく、この違いが小さなドメイン形成に寄与することが示唆された。

さらに **2u** についてアスペクト比が約 10 の異方的なドメイン形成が観察された (Figure 1f)。実験的に得られた配列の格子定数を参考に、Materials Studio を用いた MM/MD 計算によって作成した配列モデルから、**2u** の配列ではウレア基およびヒドロキシ基の水素結合方向がドメイン成長方向と一致することが確認された。これより **2u** の異方的ドメイン成長はウレア基とヒドロキシ基による多方向の水素結合ネットワーク形成に由来することが示唆された。^[2]

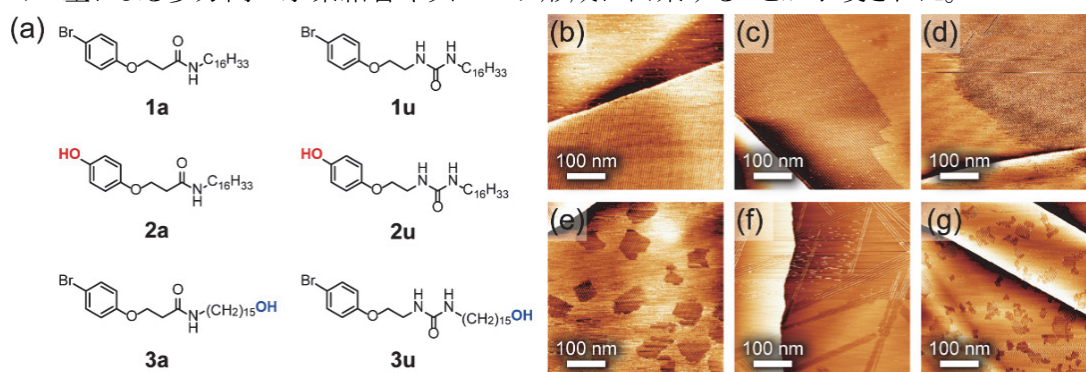


Figure 1. (a) Chemical structures of compounds **1a–3a** and **1u–3u**. STM images of the 2-D ordering of (b) **1a**, (c) **2a**, (d) **3a**, (e) **1u**, (f) **2u**, and (g) **3u** at the octanoic acid/HOPG interface.

発表論文 (謝辞なし)

[1] N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Asian J.* **2015**, *10*, 1926–1931.

[2] N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Langmuir* **2017**, *33*, 9151–9159.