

π 共役系有機分子の吸着によって形成される電荷移動準位の発現条件Origin of charge-transfer state at π -conjugated organic molecule/metal interface○細貝拓也¹, 米澤恵一朗², 加藤賢悟², 上野信雄², 解良聡²,岩手大工¹, 千葉大院融合², Iwate Univ.¹, Chiba Univ.²,°T. Hosokai¹, K. Yonezawa², K. Kato², N. Ueno², S. Kera²

E-mail: thosokai@iwate-u.ac.jp

π 共役系有機分子の金属基板上への吸着によって現れる新たな電子準位、すなわち界面準位(IS)はその形成機構などの基礎学術的な側面だけでなく、界面物性が機能発現の鍵となる各種有機デバイスの高効率化の観点からも重要な研究対象である。特に、基板から分子への電荷移動(CT)によって形成される界面電荷移動準位(CT-IS)は、吸着分子が(半)金属的な性質に変化して界面のエネルギー障壁が消失するだけでなく、両物質の吸着前の電子構造からは全く予想できない系でも発現することから大きな関心が持たれてきた。例えば、Fig. 1 に示す Perylene 化合物の PTCDA は、同じ貴金属基板上でも Au(111)上では中性分子由来の電子構造を示すが、Ag, Cu(111)上では CT-IS を示すことが長年の疑問としてあった。近年、Duhm らはこれらの系における分子の吸着距離を X 線定在波法(XSW)によって調査し、CT-IS の発現の有無およびそのエネルギー位置が分子の吸着距離と明らかな相関があることを初めて見出した[1]。しかしながら、PTCDA の吸着は同時に側鎖の酸素原子が基板と化学結合を形成するため、CT-IS と分子吸着距離との直接的な議論までには至らなかった。

この課題を克服するために、我々は PTCDA と同様な Perylene 化合物でありながらもヘテロ原子を持たない DIP(Fig.1)に着目して近年研究を行ってきた。前回の発表[2]では、XSW を用いて決定した DIP の吸着距離が上記の 3 種類の貴金属基板上で PTCDA と似ていること、また Ag(111)上で PTCDA と同様な CT-IS を発現することを報告した。さらに今回は DIP/Cu(111)、および主骨格の影響を検討するために Perylene/Ag(111), Cu(111)の界面電子構造を角度分解紫外光電子分光法によって評価したので報告する。最後に、我々が現在提唱している基板によって誘発される分子の『共鳴構造』の概念[3]で CT-IS の発現が説明できることを紹介する。

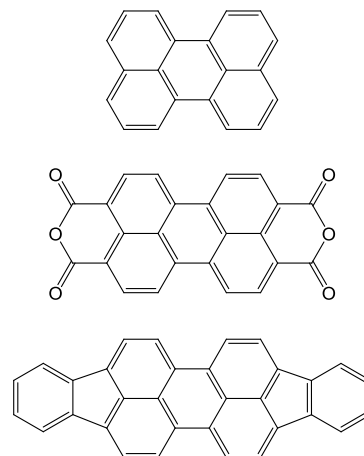


Fig.1 Chemical structure of Perylene(top), PTCDA(middle) and DIP(bottom).

[参考文献]

- [1] S. Duhm, et al., Org. Electronics, **9**, 111 (2008).
- [2] 細貝拓也ら：第 59 回応用物理関係連合講演会 16p-F10-9.
- [3] G. Heimel, et al., Nat. Chemistry, submitted (revised).