

有機-金属接合から有機側へ広がる波動関数の検出

Detection of wave function spread at outermost surface of organic/metal junction
studied by metastable atom electron spectroscopy○細貝拓也¹, 米澤恵一朗², 加藤賢悟², 牧野凜太郎², 上野信雄², 解良聡³産総研¹, 千葉大院融合², 分子研³, AIST¹, Chiba Univ.², IMS³°T. Hosokai¹, K. Yonezawa², K. Kato², R. Makino², N. Ueno², S. Kera²

E-mail: t.hosokai@aist.go.jp

有機 EL や有機トランジスタ、有機太陽電池、単分子デバイスなど、一般に多くの有機デバイスには有機分子と金属(電極)との接合界面が複数存在し、それらの界面を電荷キャリアが通ることによってデバイスが動作する。このため上記デバイスの機能化・高効率化には有機/金属界面の幾何構造や電子物性の制御が大切であり、とくにキャリア注入・取り出し効率(η)を向上させるには電極のフェルミ準位と分子のフロンティア軌道のエネルギー差(Δ)を小さくする必要がある[1]。一方で、キャリアの移動は量子論として波動関数の重なりを通して行われる。したがって、高効率な η のためには Δ だけでなく界面または界面近傍における波動関数分布の情報も必要と考えられるが、実験的に直接調べることが困難なためかその知見は極めて乏しい。

本研究では、最表面敏感分光法として古くから知られる準安定励起原子電子分光法(MAES)を用いて、各種の有機/金属接合から表面真空側に広がる波動関数を調査した。MAES は試料プローブに励起三重項状態の He 原子を用いることで、固体表面外側に張り出す波動関数の情報を選択的に得ることができる[2]。今回、MAES を化学吸着系と物理吸着系の二種類の有機/貴金属接合に適用した。その結果、どちらの系も基板を完全に被覆した有機単層膜を測定しているにもかかわらず、基板由来のスペクトル構造が観測された。このことは、基板由来の波動関数が有機分子膜第一層目を越えて広がっていることを示唆している(図 1)。本番ではこの結果に加えて、増田らによる化学結合による吸着系の MAES[3]や波動関数の広がりや電気伝導の関係についても議論をする予定である。

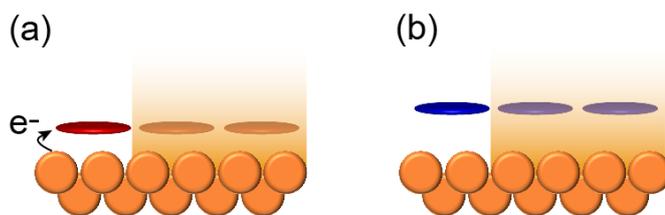


図 1 電荷移動による化学吸着(a)および物理吸着(b)における有機単層膜への金属基板波動関数の染み出し具合(茶色のカーテンコントラスト)の模式図。MAES の結果より、基板の波動関数は単分子層を越えて広がっていることが示唆された。

[参考文献]

[1] N. Koch, et al., Chem. Phys. Chem. 8 (2007) 1438.

[2] Y. Harada, et al., Chem. Rev. 97 (1997) 1897.

[3] S. Masuda, et al., J. Phys. Chem. Lett. 111 (2007) 11747.