

π 共役系拡張現象によって現れる有機-金属界面電荷移動準位の研究**A study of charge-transfer states at organic/metal interfaces formed through surface-induced aromatic stabilization**○細貝拓也¹, 米澤恵一朗², 加藤賢悟², 牧野凜太郎², Jinpeng Yang²,K. Rasika Koswattage³, 上野信雄², 解良聡²,岩手大工¹, 千葉大院融合², 千葉大先進科学³, Iwate Univ.¹, Chiba Univ.^{2,3},°T. Hosokai¹, K. Yonezawa², K. Kato², R. Makino², Jinpeng Yang²,K. Rasika Koswattage², N. Ueno², S. Kera²**E-mail: t.hosokai.jp@gmail.com**

金属(電極)基板との接触によって誘起される吸着分子の π 共役系拡張現象は、有機/金属界面で形成される電荷移動(CT)準位の発現機構を統一的に解明するための新しい概念である[1]。これによって、金属基板の仕事関数と吸着分子種の電子構造からでは予想できない CT 準位の発現([2])がようやく説明できるようになり、有機/金属界面電子構造の制御も『有機合成』の観点から可能となりつつある。このことは、有機 EL や有機薄膜トランジスタ、有機太陽電池、単分子デバイスなどの有機デバイスから生体親和性コーティング法の開発まで、有機/金属界面が機能化や高効率化に影響を及ぼす種々のデバイスの研究開発を加速させ、さらに有機/金属界面の物理的・化学的理解を飛躍的に進むきっかけとなることが期待できる。

我々はこの数年、この π 共役系の拡張現象による CT 準位の発現条件の探索を進めてきた[3][4]。その鍵となる分子構造を始めとして、基板の種類や表面構造(単結晶、多結晶、結晶面)、および分子の吸着距離の役割など、CT 準位の発現だけでなくそのエネルギー位置の予測にも挑戦している。また、角度分解紫外光電子分光法と光電子放出角度シミュレーションを組み合わせ、CT 準位を形成している分子軌道(波動関数の空間分布)の可視化([5])も行い、最終的に CT 準位の量子論的理解も視野に入れつつ研究を行っている。

本発表では、我々がこれまでに報告してきた実験結果に加えて、今回新たに得られた有機薄膜上の金属電極との界面電子構造や、準安定励起原子電子分光法によって得られた CT 準位を形成する波動関数の空間的広がりについて報告する。

[参考文献]

[1] G. Heimel, et al., Nature Chem. 5 (2013) 187.

[2] S. Duhm, et al., Org. Electronics 9 (2008) 111.

[3] 細貝拓也ら：講演奨励賞受賞記念講演「 π 共役系拡張現象によって誘起される界面準位の発現条件」第 74 回応用物理学会秋季学術講演会 16p-C5-1 (2013).

[4] T. Hosokai, et al., 2013 MRS fall meeting proceedings, submitted.

[5] S. Kera, et al., Chem. Phys. 325 (2006) 113.