20a-D5-6

電極材料選択による単一分子π電子軌道の制御

Control of single molecular π orbitals on various electrodes

千葉大院融合，°中島 脩平，山田 豊和

Chiba Univ., °Shuhei Nakashima, Toyo Kazu Yamada

E-mail: toyoyamada@faculty.chiba-u.jp

有機エレクトロニクス研究において、分子と基板の界面電子状態はデバイス特性を決定する重要な要素の一つである。特に、次世代のナノ分子エレクトロニクス創成に向けて、基板上に吸着した 1nm サイズのナノ分子が､バルクと同じ電子状態を持つのかどうかは明確にする必要がある。

本研究では、π電子系フタロシアニン(H_2Pc)単一分子を異なる基板に吸着した際、ナノ分子の電子状態がバルクに対してどのように変化するか、走査トンネル顕微鏡(STM)分光法を用いて測定し電極基板の分子電子状態への影響を系統的に探った；(1)絶縁膜基板として Ag(001)上の MgO(001)超薄膜、(2) 貴金属基板として Ag(001)と Cu(111)単結晶、(3) 3d 磁性金属基板として Fe(001)whisker 単結晶と Mn(001)超薄膜を使用した [1]。

基板上の分子を STM 測定する場合､探針による分子への影響を小さくするため探針試料間距離を大きくするのが一般的である。しかし、STM 分光中の分子の電子状態の信号は微弱となり検出は困難となる。そこでトンネル確率関数規格化によるナノ分子の電子状態再現法を確立した [2]。

MgO(001)絶縁膜基板上の H_2Pc 分子は-1.5eV に HOMO、+1.0eV に LUMO、フェルミ準位近傍でギャップを持ちバルク電子特性と類似の特性を示した。貴金属基板上の H_2Pc 分子は物理吸着した。貴金属の種類によらず同じ電子状態ピークをフェルミ準位(=0V)近傍-300,+300,+600 meV に持つことが分かった。ギャップは無く金属的特性を有した。さらに図 1(a,c)に示すように、磁性基板上の単一分子は化学吸着し室温でも拡散しなかった。Fe(001)と Mn(001)上の単一分子は、+300 (図 1(b))と-300 meV (図 1(d))に電子状態を有しバルクとは全く異なる電子特性を有することが判明した。本研究により、基板・分子界面の電子状態は、接触電極基板に強く依存することが分かった。

[1] S. Nakashima,Y. Yamagishi, K. Oiso, and T. K. Yamada: Jpn. J. Appl. **52** (2013) 110115.
[2] Y. Yamagishi, S. Nakashima, K. Oiso and T. K. Yamada: Nanotechnology **24** (2013) 395704

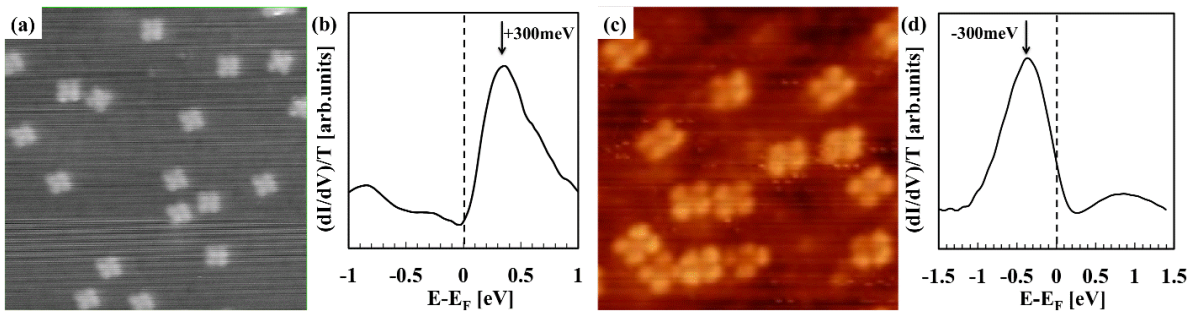

図 1:STM 像とトンネル関数規格化法により再現した単一分子電子状態。(a) H_2Pc/Fe(001)の STM 像(20 × 20 nm^2, V_s = −1V, I = 200pA), (b) H_2Pc/Fe(001)上の電子状態, (c) H_2Pc/Mn(001)の STM 像(16 × 16 nm^2, V_s = −1.5V, I = 200pA), (d) H_2Pc/Mn(001)上の電子状態。

© 2014 年　応用物理学会