

弱い相互作用に誘起される分子内軌道エネルギー緩和

Intramolecular relaxation of orbital energy induced by weak interaction



○(PC)米澤 恵一朗¹、山口 拓真¹、牧野 凜太郎¹、須田 洋輔¹、

Kaveenga Rasika Koswattage¹、上野 信雄¹、解良 聡^{1,2} (1. 千葉大院融合、2. 分子研)

○(PC)K. Yonezawa¹, T. Yamaguchi¹, R. Makino¹, Y. Suda¹, K. R. Koswattage¹, N. Ueno¹, S. Kera^{1,2}

(Chiba Univ.¹, IMS²)

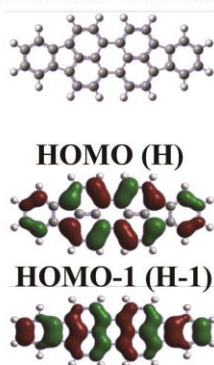
E-mail: k.yonezawa@chiba-u.jp

有機分子が持つ様々な機能をこれまで以上に活用した新奇デバイスの開発・研究が盛んに行われている。その一例として、温度や圧力など動作環境を変化させることによる、デバイス性能制御の可能性が模索されている。こうした外部刺激による機能性分子の光学・電気的性質の変化を理解するために、固相において弱い相互作用に誘起される電子状態の変化について詳細な検討が重要である。

ジインデノペリレン(DIP)は単結晶における分子骨格の温度依存性や、銀や銅など特定の金属基板との化学結合形成による骨格変化などの特性が報告されている分子である(Fig. 1(A))。^[1,2] 今回、我々は気相 DIP ならびに、グラファイト(HOPG)上に作製した DIP 単層膜(ML)の電子状態の温度依存性を紫外光電子分光法(UPS)により観測した。各 ML 膜では DIP 分子間、DIP/HOPG 間においてファンデルワールス力を主とした非常に弱い相互作用しか働かないことが予想される。しかし Fig. 1(B)に示すように、HOMO (H)と HOMO-1 (H-1)の軌道エネルギー間隔は、気相と低温 (77K) での ML 膜の結果は一致しているのに対し、ML 膜の室温 (300K) での結果は、約 50meV 程度小さくなっていることを見出した。本講演では、室温付近で観測されたこの H と H-1 の軌道エネルギー差の減少について

分子/基板間相互作用による ①分子骨格変化、②分子基板間距離の変化、また③基板による分極効果の変化とアイランドサイズの変化による影響を基に議論する。

(A) Molecular structure



(B) UPS spectra

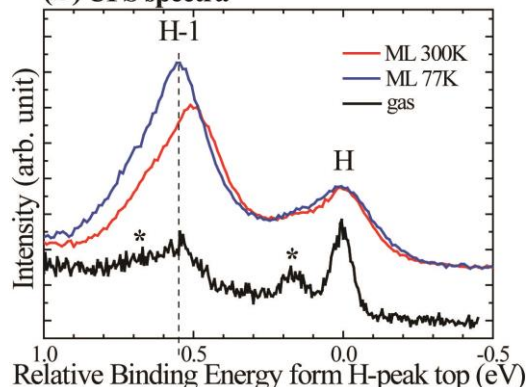


Fig. 1 (A) Molecular structure of DIP and orbital images of HOMO (H) and HOMO-1 (H-1) of that, respectively. (B) Gas UPS spectrum (black) and UPS spectra of DIP ML: (300K: red, 77K: blue). “*” indicates satellite peak caused by electron-phonon coupling. All spectra are aligned by relative binding energy from H-peak top

[1] M. A. Heinrich, J. Pflaum and T. Siegrist et al., J. Phys. Chem. C, 111, 18878-18881 (2007).

[2] T. Hosokai, K. Yonezawa, N. Ueno and S. Kera et al., MRS Proceedings, 1647 (2014).