

Au(111)上に気相吸着させた *p*-カルボランチオール の解析

Electronic states of *p*-carboranethiol absorbed on Au(111) surface

中濱優太¹、首藤健一^{1,2}、田之上航祐¹、眞銅雅子³、内山真伸²

(1.横浜国大院工、2.理研、3.大阪工業大学)

Yuta Nakahama¹, Ken-ichi Shudo^{1,2}, Kosuke Tanogami¹, Masako Shindo³, Masanobu Uchiyama²

(1. Fac. Eng., Yokohama Natl. Univ., 2. RIKEN, 3. Osaka Inst. Technol.)

E-mail: nakahama-yuta-ns@ynu.jp

【はじめに】カルボランは炭素とホウ素を正多面体の頂点に含むかご型有機物であり、その超芳香族性によって種々の誘導体が存在するため^[1]有望な機能性材料の一つである。多くの有機化合物は絶縁体であるが π 電子をもつ芳香族化合物は π 電子が電気伝導に関与するため半導体となる。中でもC60などの立体の多環芳香族が注目されている^[2]。そこで本研究では自己組織化単分子膜(SAM)形成のためチオール置換した *p*-カルボランチオール (*p*CT) を Au(111)上に吸着させた系の光電子分光法を用いての電子状態解析を行った。また、第一原理計算によって Au(111)表面上の *p*CT の吸着構造と安定性、電子状態を明らかにした。

【実験】Au(111)上に室温及び低温(200K)下でリークバルブを用いて超高真空(UHV)で *p*CT を蒸着し紫外光電子分光法(UPS)により測定した。光源は He I を使い、測定は UHV を保ったまま、室温下で行った。

【計算】最初に *p*CT 孤立分子系を Gaussian09 により計算した。さらに Au(111)表面への吸着位置ごとに VASP で構造最適化した。カットオフエネルギーは 400eV、真空層は 15.5Å とし、k-point mesh は $2 \times 2 \times 1$ で作成した。

【結果】*p*CT /Au(111)を測定した UPS スペクトルから 5d band 由来の電子状態が増加する結果が得られた {Fig.1}。増加した電子状態は Au の波動関数との共鳴により、基板の状態が染み出していることを示唆する。また、計算による結果から *p*CT は Au(111)上の hollow site に吸着することがわかった。この際 S-C 軸は Au(111)表面に対し斜めに吸着する一方で炭素軸は垂直に立っていた {Fig.2}。 *p*CT/Au(111)の電子状態計算については Au(111)由来ピークと同じ位置にピークが現れ、この結果は実験結果とも一致した。講演では計算と実験結果を包括してより詳細な吸着構造やどのような過程で吸着するのかも議論する。

[1] H. Naito, Y. Morisaki and Y. Chujo, Angew. Chem. Int. Ed. **54**(2015) 5084.

[2] Irfan, et. al. Organic Electronics. 12, 1588~1593 (2011)

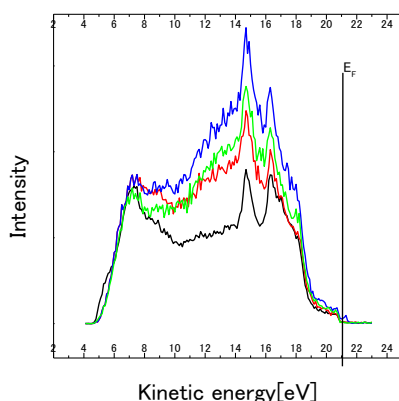


Fig.1 from the bottom UPS spectrum Au(111) clean, *p*CT/Au 0.05L, 1L, and 10L

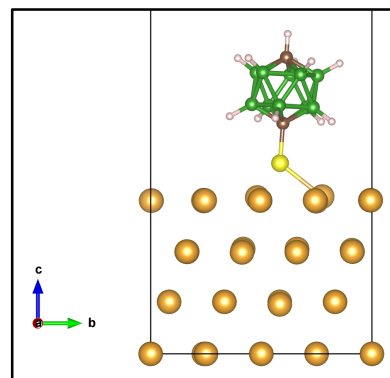


Fig.2 Adsorption structure of *p*CT on Au (111)