

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		有機超構造界面で発現する新奇な電荷輸送機構の解明			
研究テーマ (欧文) AZ		Elucidation of the novel charge-transport mechanism at organic superstructure interfaces			
研究氏 代表 者	カタカナ CC	姓)ヤマネ	名)ヒロユキ	研究期間 B	2015 ~ 2016 年
	漢字 CB	山根	宏之	報告年度 YR	2016 年
	ローマ字 CZ	Yamane	Hiroyuki	研究機関名	分子科学研究所
研究代表者 CD 所属機関・職名		分子科学研究所・助教			
概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)					
<p>基礎学術と応用の両面で重要な素過程の一つである機能性有機分子の電荷輸送機構には、分子骨格に緩く結合した π 電子が直接的な役割を担い、分子の集合状態に依存した π 電子物性・機能を示す。</p> <p>本研究では、放射光を用いた角度分解光電子分光 (ARPES) を駆使し、分子が金属表面で超構造単結晶を形成することで発現する π 電子の新奇な非局在化現象の成因を解明し、電気伝導機構の制御が可能な有機界面の設計指針を確立することを目的とした以下の研究 (1) (2) を行った。</p> <p>(1) 貴金属単結晶表面に特有のショックレー状態と呼ばれる電子状態に注目して、分子吸着によるショックレー状態の変調を観測した。この変調を定量的に解析することで、分子内の元素毎に異なる界面相互作用により、分子の構造が変動し、新奇な電子状態を発現することを解明した。(論文発表済み)</p> <p>(2) 大きな電子親和力を有する電子アクセプター分子としてよく知られるフッ素化テトラシアノキノジメタン (F4TCNQ) を Au 基板上に蒸着すると、強い界面相互作用によって Au 原子が表面偏析し、F4TCNQ とネットワーク構造を自発形成する。ARPES による Au-F4TCNQ ネットワークの電子状態測定を行った結果、中性状態での F4TCNQ 分子とは大きく異なる電子状態を観測した。Au から F4TCNQ 分子への電荷移動 (CT) 相互作用により LUMO 準位が被占準位化し、フェルミ準位の近傍に新たなピークとして現れることを観測した。この CT ピークは、表面平行方向に沿った波数に依存して周期的な繰り返しシフトを示すことが分かった。これは、分子軌道が表面平行方向に強く非局在化し、バンドを形成していることを示している。以上の結果から、電子受容性分子が金属原子とのネットワークを形成することで、高効率な正孔輸送薄膜になり得ることを解明した。(論文作成中)</p>					
キーワード FA	有機半導体	表面・界面	電子状態	角度分解光電子分光	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Site-Specific Organic/Metal Interaction Revealed from Shockley-Type Interface State							
	著者名 ^{GA}	H. Yamane and N. Kosugi	雑誌名 ^{GC}	Journal of Physical Chemistry C					
	ページ ^{GF}	24307~24313	発行年 ^{GE}	2	0	1	6	巻号 ^{GD}	120
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要 EZ

Functionalities of organic semiconductors are governed not only by individual molecular properties but also by their intermolecular interactions. In this context, the electronic band dispersion, originating from the molecular stacking periodicity, is essential and sensitive to the intermolecular interaction. Using angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) with synchrotron radiation, we have succeeded in precise observation of the intermolecular valence-band dispersion of sub-100-meV scale in three- and two-dimensional crystalline films of organic semiconductors, which provides deeper insights into the intermolecular interaction giving unique molecular electronic properties.

In this project, the systematic examination of (1) the site-specificity in the modified Shockley-type interface state at the CoPc/Au(111) interface and (2) the largely dispersive hybrid band in molecule-metal coordination networks has been performed in terms of the intermolecular distance, intermolecular spacing, molecular arrangement, and orbital symmetry.