



第109回 OPERA研究交流セミナー
第101回 ISIT有機光エレクトロニクス研究特別室セミナー
第168回 未来化学創造センターセミナー



日時:2014年4月8日(火) 16:00-

場所:九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究棟 3F会議室

「分子システムにおけるエナジェティクス」

理化学研究所 Kim表面界面科学研究室
金 有洙

エネルギーの移動や変換の過程を個々の分子や原子に対して詳細に記述することは、微小デバイスにおけるエネルギー利用の高効率化・高機能化、あるいは触媒表面における物質変換の効率向上を図る上で最も重要な要素の1つである。我々は、表面および界面におけるエネルギー移動・変換過程の学理を探求することを目指し、主に走査トンネル顕微鏡法 (STM) による実験と密度汎関数法 (DFT) による理論計算の両面で、分子・原子レベル研究を行っている。

本講演では、次のような研究成果を中心に紹介する。

(1) フッ化フラーレン (C₆₀F₃₆) は有機分子の中でも電子親和力が大きく、有機デバイスにおけるn型半導体としての機能が期待される。Au(111)表面に均一な超構造をもつ単分子膜を形成しSTM像をDFT計算と比較することで、吸着構造と膜形成にかかわる分子 - 基板間の電荷移動の向きや大きさ、および分子間の静電引力の起源を同定することに成功した。またトンネル分光法 (STS) により、非常に大きいエネルギーギャップを持ち、LUMOはフェルミ準位に近いことが判明し、有機デバイス中の電子輸送層として機能する可能性が示唆された。

(2) フタロシアニン (H₂Pc) という詳細な性質が調べられてきた分子から、STM探針による単分子化学反応を用いて、H₀Pcという新しい分子を作製した。また、それらの分子が孤立分子の状態ではNaCl超薄膜上に吸着した際の光学的性質を、発光測定機構を備えた低温STMを用いて評価した。H₂PcのSTM発光スペクトルは、分子固有の蛍光を示した。発光ピークは、LUMOの振動基底状態から、HOMOの振動基底・励起状態への電子遷移によるものであると考えられる。H₀PcのSTM発光スペクトルには、1.3eVに燐光によるものと考えられるピークが現れ、また振動励起によるピークもH₂Pcのそれとは異なるエネルギーを持つことが確認され、H₀PcがH₂Pcとは大きく異なる光学的・電子的特性を持つことが明らかになった。

主催:九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター
:財団法人九州先端科学技術研究所 (ISIT)
共催:九州大学 未来化学創造センター