

シリコンアルコキッドを持つ有機分子と酸化物界面の化学結合状態

成田あゆみ^{1),2)}, 馬場祐治¹⁾, 関口哲弘¹⁾, 下山巖¹⁾, 平尾法恵¹⁾, 矢板 毅^{1),2)}
1) 原子力機構量子ビーム 2) 茨城大院理工

次世代のデバイス材料として期待されている有機薄膜は、その分子多様性から、様々な機能を持たせることが可能である。しかしながら、無機物基板上での有機分子の持つ機能を理解するためには、表面での電子構造や分子の配向および拡散などを知る必要がある。特に酸化物基板上での有機分子の挙動については、酸化物が化学的に不活性であることもあり、研究例は少ない。そこで本研究では、アルコキッドが酸化物と結合することを利用して酸化物表面への有機分子の固定化を試み、界面の化学結合状態および分子の配向について検討した。

実験はすべて BL-27A にて行った。吸着分子には両端にそれぞれチオール基(-SH)とシリコンアルコキッド(-Si(OCH₃)₃)を持つメルカプトプロピルトリメトキシシラン(MPTS)分子を用いた。吸着は、MPTS 溶液に浸して吸着させる方法と、真空中で吸着させる方法で行った。酸化物表面にはサファイア単結晶(-Al₂O₃, R(1,1,0,2)面)及び多結晶 Al₂O₃ 薄膜を用いた。

図 1 に Al₂O₃ 薄膜に吸着させた(a)3 レイヤーおよび(b)1 レイヤーの MPTS の Si1sXPS スペクトルを示す。スペクトル(b)には ピーク A の低エネルギー側にピーク B が確認される。(b)は、界面の情報をより強く反映しているとので、ピーク B は Al₂O₃ とシリコンアルコキッドの間に化学結合が形成されたことを示している。図 2 はモノレイヤー-MPTS の Si K-吸収端 NEXAFS スペクトルである。ピーク A(1846.4eV) は Si1s から Si-C 結合に局在した π^* 軌道への共鳴吸収であり同様にピーク B(1848.6eV) は Si-O 結合への共鳴吸収である。入射角が(a)45°と(b)15°の場合ではピーク A、B の強度が反転し偏光依存性が認められる。15°入射で Si-C 結合に由来するピーク A が大きくなることは、MPTS 分子のアルキル鎖が基板に対して垂直に近いことを示している。以上のことから、MPTS 分子は Al₂O₃ 上でシリコンアルコキッドを介して化学結合を形成し、さらに基板に対して垂直方向に並んでいることがわかった。

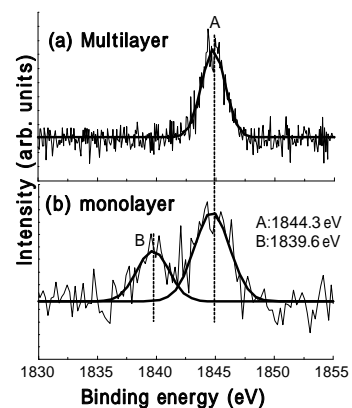


図 1 Al₂O₃ 上に吸着させた(a)3 レイヤーおよび(b)モノレイヤー-MPTS 分子の XPS スペクトル

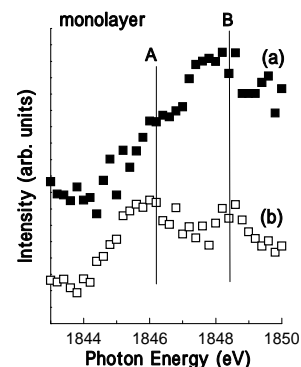


図 2 (a)45° 入射および(b)15° 入射のモノレイヤー-MPTS 分子 Si K-吸収端 NEXAFS スペクトル

