

# Cu(100)表面における F4-TCNQ 分子の吸着状態と配向

## Adsorption state and orientation of F4-TCNQ on the Cu(100) surface

吉本真也<sup>1</sup>、向井孝三<sup>1</sup>、清水皇<sup>1</sup>、小板谷貴典<sup>1</sup>、亀島一輝<sup>1</sup>、村瀬加内江<sup>1</sup>、  
水澤岳<sup>1</sup>、吉信淳<sup>1</sup>、間瀬一彦<sup>2</sup>

1 東大物性研、2 KEK-PF

有機デバイスにおいて金属・有機物界面の電荷注入障壁を制御することは重要であり、近年の研究によってアクセプタ分子がホール注入障壁を下げるのに有用であることが知られている。我々は特に典型的な電極金属である銅(100)表面に強力なアクセプタ分子である 2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane(F4-TCNQ)を吸着させ、XPS、UPS、HREELS、STMを用いて吸着による仕事関数変化や分子の吸着状態に関して研究を行ってきた<sup>[1]</sup>。その結果、吸着温度によって吸着状態が異なり、低温(<180 K)吸着の方が室温吸着の場合よりも仕事関数変化が大きいことが判明した。F4-TCNQ/Cu(111)<sup>[2]</sup>や TCNQ/Cu(100)<sup>[3]</sup>などの系では室温吸着において分子の大きな変形を伴う電子状態の再混成が生じ、逆供与結合だけでなく供与結合が形成される可能性が示唆されている。そこで、温度による分子構造の変化が仕事関数変化に大きな影響を与えている可能性があるが、低温吸着に関してはあまり研究例が報告されていない。

そこで、本研究では高分解能 XPS 及び NEXAFS を用いて、Cu(100)表面上の F4-TCNQ 分子の低温・室温吸着における配向・電子状態に関して実験を行った。右図に低温吸着・低被覆率での NEXAFS の結果を示す。室温吸着の TCNQ/Cu(100)では表面並行から約 10 度程度傾いていた CN 分子軌道の角度<sup>[3]</sup>が低温吸着の F4-TCNQ/Cu(100)では約 30 度程度と大きな角度になっていることが分かった。

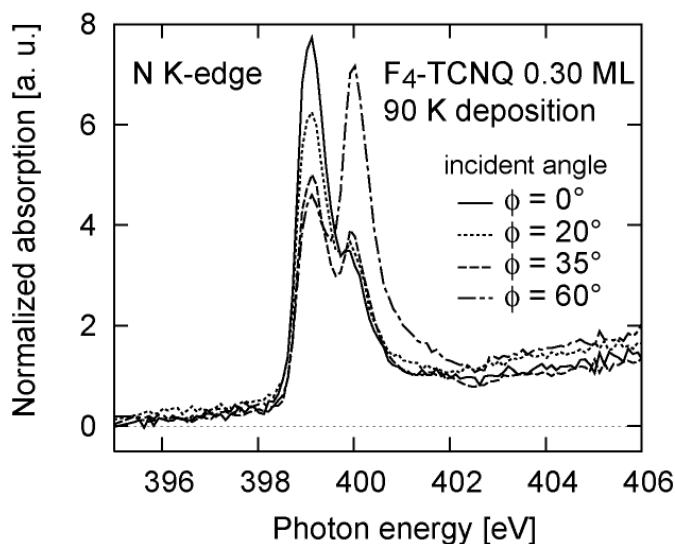


図: 低温吸着の NEXAFS スペクトル

[1] T. Katayama *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. **1**, 2917 (2010).

[2] L. Romaner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 256801 (2007).

[3] T.-C. Tseng *et al.*, Nature Chem. **2**, 374 (2010).