

Rh(111)におけるシクロヘキサンの吸着サイトに依存したエネルギーレベルアラインメント

Site-specific energy level alignment of cyclohexane adsorbed on Rh(111)

小坂谷貴典、向井孝三、吉本真也、吉信淳
東京大学物性研究所

金属表面における有機分子のエネルギーレベルアラインメントは、界面での電荷移動を左右する重要な要素の1つである。従って、アラインメントを決める要因に関する知見は、有機デバイスや不均一触媒反応の理解に必要不可欠と言える。本研究では、走査トンネル顕微鏡 (STM) 及び光電子分光 (XPS, UPS) を用いて、Rh(111) に吸着したシクロヘキサンのエネルギーレベルアラインメントを調べた。

図1に Rh(111) に吸着したシクロヘキサンの STM 像を示す。分子は超構造を形成し、分子像の形や高さは吸着サイトによって異なる[1]。図中の分子像 A は atop サイトに吸着した分子に帰属でき、他の分子よりも高さが見かけ上約 0.1 \AA 低く観測される。

図2は吸着シクロヘキサンの高分解能 C 1s XPS スペクトルである。284.0 eV のメインピークとその振動微細構造の他に、283.7 eV にもピークがあることが分かる。強度比から、283.7 eV のピークは atop サイトに吸着した分子に帰属できる。UPS、および水素を前吸着させた表面の結果から、C 1s 束縛エネルギーに見られる差は、ケミカルシフトに由来するものではなく、エネルギーレベルアラインメントの吸着サイト依存性を反映していると考えられる。

理論計算による先行研究[2]も踏まえると、アラインメントの吸着サイト依存性は、表面-分子間距離が吸着サイトによって異なっていることが原因であると結論できる。

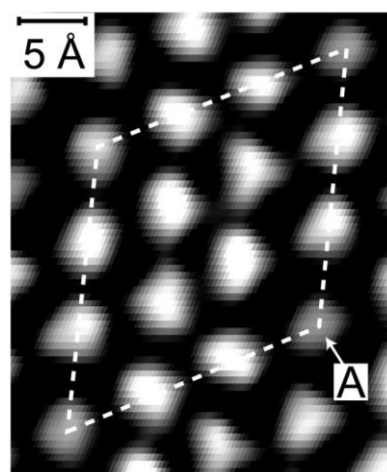


図 1. Rh(111) 表面に吸着したシクロヘキサン(1 ML)の STM 像。
($V_s = 526 \text{ mV}$, $I_t = 186 \text{ pA}$, $T = 97 \text{ K}$)

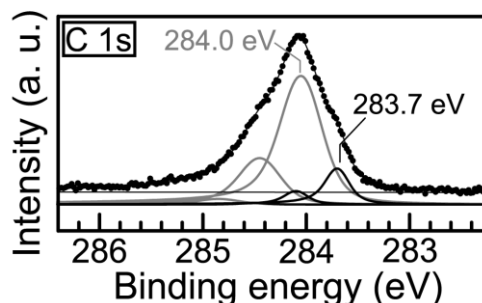


図 2. Rh(111) 表面に吸着したシクロヘキサン(1 ML)の C 1s XPS スペクトル。
($h\nu = 380 \text{ eV}$, $T = 90 \text{ K}$)

[1] T. Koitaya *et al.*, J. Chem. Phys. **135**, 234704 (2011).

[2] Y. Morikawa, H. Ishii, and K. Seki, Phys. Rev. B **69**, 041403 (2004).