

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 15 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2020～2023

課題番号：20H02694

研究課題名(和文) 表面吸着分子のギャップリノーマリゼーションと分子物性変化の解明

研究課題名(英文) Study on the Gap Renormalization and the Property Change for Molecules Adsorbed on Surfaces

研究代表者

加藤 浩之 (Kato, Hiroyuki)

大阪大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号：80300862

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,800,000円

研究成果の概要(和文)：分子膜内を電荷が移動するとき、最高占有軌道(HOMO)準位および最低非占有軌道(LUMO)準位にはそれぞれ正孔/電子が流れるため、電極基板から受ける静電的相互作用が異なり、両軌道間のエネルギー準位差が表面からの距離に依存して変化(ギャップリノーマリゼーション)する。しかし、この現象の十分な議論はなされていなかった。そこで本課題では、機能性自己組織化単分子膜におけるHOMO/LUMOの各準位および物性(導電性や光学特性)を、それぞれ測定できる装置を構築し、総合的な実験からこの影響を解明することを目指した。成果として、ギャップリノーマリゼーションの解明に向けた各種の装置を構築することができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

分子デバイスにおいて、分子が求められる物性は導電性や吸光/発光特性であり、分子のHOMO準位およびLUMO準位の正確な情報が欠かせない。しかし、電極近傍のギャップリノーマリゼーションの影響については、十分な議論がなされていなかった。その要因として、電子状態変化と分子物性(導電性や光学特性)変化を直接的に結びつける研究が希薄だったことにある。特に、分子薄膜の物性を表面からの距離の関数として計測する研究は限られており、これを総合的に研究する術を構築することは、物性科学における基礎と応用の両面から重要と思われる。本研究課題では、既にある装置の改良や新奇装置の構築を進め、この解明を目指した。

研究成果の概要(英文)：In charge transport through molecular films, the highest occupied orbital (HOMO) and lowest unoccupied orbital (LUMO) levels receive different electrostatic interactions from the electrode substrate because holes/electrons flow in these levels. Therefore, the energy gap between the two orbitals changes with the distance from the surface, i.e. gap renormalization. However, this phenomenon has not been sufficiently discussed. In the present subject, we aimed to elucidate these phenomena through comprehensive experiments and constructed several apparatuses to measure the HOMO/LUMO levels and the properties (electrical conductivity and optical properties) of functionalized self-assembled monolayers.

研究分野：表面物理化学

キーワード：HOMO-LUMOギャップ 導電特性 光学特性 光電子分光法 走査トンネル顕微/分光法 差分反射分光法

1. 研究開始当初の背景

分子デバイスにおいて、分子が求められる物性は導電性や光吸収/発光特性であり、分子の最高占有軌道(HOMO)のみならず最低非占有軌道(LUMO)を含む電子準位の正確な情報が求められている。一般に、分子数層でできた超薄膜中の分子は、基板から少なからず影響を受けて電子状態を変化させるため、分子超薄膜の機能化には、基板-吸着分子間の相互作用の理解が不可欠である。分子超薄膜内を電荷が移動するとき、HOMO、LUMO には符号の異なる電荷(それぞれ正孔、電子)が流れるため、電極基板から受ける静電的な相互作用が異なり、両分子軌道間のエネルギー準位差が変化する(図1)。これは「ギャップリノーマリゼーション(Gap Renormalization)」と呼ばれ、これまでもしばしば議論されてきたが、未だ十分な理解には至っていない。

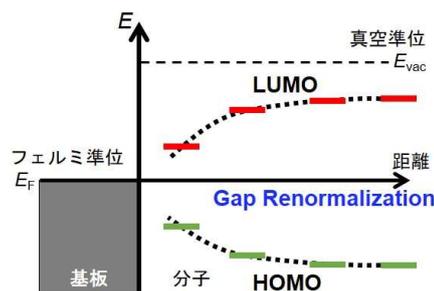


図1. 金属表面近傍で生じるギャップリノーマリゼーションのエネルギーダイアグラム。電荷キャリア(電子、正孔)の符号の違いから、HOMO、LUMO 準位には異なるエネルギーシフトが生じ、実行的に準位間ギャップが変化する。

2. 研究の目的

ギャップリノーマリゼーションの議論が進まなかった原因として、従来の研究では、(測定の難しさによる)LUMO 準位の情報の欠如や、吸着分子の構造および基板までの距離の正確な情報の欠如、さらに電子準位と物性(導電性や光学特性)を総合的に計測した研究が極めて少なかったことなどがあげられる。そこで本研究課題では、表面吸着分子における HOMO/LUMO 準位を基板からの距離の関数として電子準位を直接観測すると共に、同一の分子超薄膜に対し基板-分子間の導電性や分子膜の光学吸収特性を計測して、ギャップリノーマリゼーションがおよぼす分子物性への影響を総合的に解明することを目的とした。

3. 研究の方法

ギャップリノーマリゼーションがおよぼす分子物性への影響を総合的に解明するには、まず官能基の表面からの距離の制御が重要である。これには、既に官能基で終端したアルカンチオラート自己組織化単分子膜(SAM)の活用が有効であることを、以前の我々の研究で確認していた。これを応用する形で本研究室を進めた。また、より高度な機能を有する官能基の探索も重要であり、本課題の中で進めることができた。

一方、電子準位と物性(導電性や光学特性)を総合的に研究するために、目的に合った各種の測定手法の確立が不可欠である。そこで、単分子膜という希薄な吸着分子に関して高い感度を示す以下の装置の活用を計画した。

- | | | |
|--------------------|---|-------------------------|
| (A) 非占有準位(LUMO 準位) | ⇔ | (a) 2光子光電子(2PPE)分光 |
| (B) 占有準位(HOMO 準位) | ⇔ | (b) 紫外光電子分光(UPS) |
| (C) 表面-分子膜導電特性 | ⇔ | (c) 走査トンネル顕微分光(STM/STS) |
| (D) 表面吸着分子吸光特性 | ⇔ | (d) 差分反射分光(DRS) |

一般に、(A) LUMO 準位の計測手法は希少ではあるが、当研究室には (a) 2PPE 分光装置があり、これを積極的に活用した。また、(B) HOMO 準位の測定手法として、He 放電管を用いた (b) UPS 装置もある。しかし、この装置は分子膜にダメージを与えることが知られており、本研究では官能基を有する分子膜に対し低侵襲な UPS 装置の確立を目指した。また、(C) 表面-分子膜導電特性の測定には、既存の (c) STM 装置を活用した。装置はこれまで、顕微分光(STS)測定の機能が確立されてなかったが、これを構築し導電特性(di/dv 像)が得られるように拡張して研究を進めた。くわえて、(D) 表面吸着分子吸光特性測定については、新たに (d) DRS 装置を立ち上げ、単分子膜試料の吸光分光ができるように、測定装置の確立を目指した。

本研究課題では、これらの装置を駆使して、電子準位と物性(導電性や光学特性)の総理解を進めギャップリノーマリゼーションの解明を目指した。

4. 研究成果

本研究では、上記のように、既存装置の拡張を行う部分と新たな装置を開発する測定手法確立の部分と、各種装置を活用して電子準位や物性を調べる計測と分析の部分の2本の柱を中心として課題を進めた。その中で、新たな分子機能を有する分子膜の構築についても成果が得られたので、以下にそれぞれを示す。

(1) 測定手法確立

本研究課題では、計画した4種の測定手法の内、(b)~(d)の3種の装置で拡張と新たな構築を行った。本課題は2020年に採択されスタートしたが、残念ながら新型コロナウイルス感染症によるパンデミックが起こった年であり、大学での活動停滞はもとより、物流の混乱、物価の高騰も生じ、当初の予定の変更と遅延を防ぐことができなかった。それでも、期間内に個々の装置の構築はおおよそ達成できた点は評価に値するものと自負している。ただ、これらの装置が本題のギャップリノーマリゼーションの解明に寄与できなかったことは、たいへん心残りである。しかしこれらの装置は、申請者の今後の研究活動において、ギャップリノーマリゼーションの解明に役立つものと期待される上、新たな知見を見出す原動力になることが十分に期待される。それぞれの装置構築の状況を、次に示す。

本課題で構築を予定した測定手法の中で、最も順調に立ち上がったのは、(c) STM 装置における STS 測定機能の確立であった。この測定手法の原理は既に確立しており、申請者らは微弱信号の処理について知識と経験があったことから、比較的スムーズに構築することができた。特に、新たな分子機能の創出する研究では、この機能を活用して機能性分子膜における導電物性制御の証明を実現することができた(後述)。本機能は今後、ギャップリノーマリゼーションの解明のみならず、様々な研究課題において成果をもたらすことが大いに期待される。

最も労を要したのが (b) 低侵襲 UPS 装置であった。購入予定の真空紫外光(VUV)光源ユニットが海外製であったため、コロナ禍による物流の延滞の影響を強く受け、納品の遅れが発生した。しかも、納品後もトラブルが相次いだ上、修理の対応も遅れたため、今もその影響が残る結果となった。それでも、新たに設計し装置に組込んだ VUV 光学系は、既存装置にフィットすることが確認することができた。本課題の期間中に成果を残すことができなかったが、今後は損傷を被りやすいアルカンチオール SAM をベースとした機能性単分子膜の電子準位の測定に効果を発揮するものと期待される。

一方、(d) DRS 装置を立ち上げは、装置そのものについては概ね計画どおりであった。装置は真空中のみならず大気や溶液中にある試料に対して、波長約 200~800 nm の広い範囲で単分子膜の反射スペクトル計測ができる性能を実現している。しかし、容易に解析できる波長範囲が長波長側に偏っていることが、計画の時点から危惧されていた。実際の性能評価においても短波長側のスペクトル歪は小さくなく、現状として長波長側に吸収を持つ分子膜のみを測定対象とせざるを得ない状態であり、ギャップリノーマリゼーションの解明で予定していた小分子からなる分子膜への適用には至らなかった。今後は模擬試料の吸光スペクトルのシミュレーションなどをおして短波長側の解析手法を確立し、ギャップリノーマリゼーションにおける光学特性変化の解明に役立たせたい。

(2) 分子膜の計測と分析

分子膜の電子準位と物性について新たな知見を得たのは、(a) 2PPE 分光装置を用いた実験であった。一般に電極表面近傍の分子は、励起電子がエネルギー的に安定な基板の電子準位へ直接的に遷移することや、間接的にエネルギー移動して失活してしまうため、励起状態を維持することが難しく、発光効率を著しく下げることが知られている。この現象は、有機 EL デバイスの画素数の高密度化を拒むものであり、対策が望まれていた。これに対し、2PPE 分光実験の中で、ペリレンやトリプチセンなどの一部の芳香族小分子において、表面に接した1層目から光励起発光を示すことが見出された(*J. Phys. Chem. C* 2020; 同 2024)。研究では、励起状態の電子準位のみならず分子配列なども詳しく調べた結果として、分子配向が鍵となっていることが見出された。くわえて、電子状態としてエキシマー状態と帰属される準位がみられることも共通する特徴となっており、このエキシマー状態とエネルギー移動減衰過程を抑制する効果との関連性について、今後の解明が期待される。

(3) 新たな分子機能を有する分子膜の構築と評価

装置の構築と並行して進めた研究として、新たな分子機能を有する分子膜の構築がある。こちらでは大きな進展があり、本研究課題で立ち上げた (c) STM/STS 装置による導電性変化の測定が役に立った。この研究では、水素カチオン(H⁺)のドナー分子/アクセプター分子からなる二分子膜間で、H⁺を能動的に移動させ、分子の導電性を制御することを試みた。実験では、STM 装置を用いた電界刺激によって、設計した通りに可逆な電界応答があり、STS 機能によって導電特性の変化が実証された(近日、原著論文として投稿予定)。くわえて、H⁺アクセプター分子の安定性に関しても、アクセプター分子膜の水素ラジカル付加反応の実験と理論計算の結果から証明することができた(こちらも近日、原著論文として投稿予定)。しかも、H⁺アクセプター分子の安定性には、基板のフェルミ準位とラジカル状態にある H 付加分子の SOMO 準位の相対位置が関与していることが、理論計算から推定された。このことは、ラジカル状態にある官能基と表面の距離の調整によって、ギャップリノーマリゼーション効果が影響し、H⁺移動制御特性を改良することを示唆するものであり、今後の進展に興味をもたれる。構築した装置を活用し、今後 発展的に研究課題を継続したいと考えている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 9件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 0件）

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| 1. 著者名 Nojima Shuto, Murase Natsumi, Kim DaeGwi, Kato Hiroyuki S., Akai-Kasaya Megumi, Yamada Takashi, Shibuta Masahiro | 4. 巻 128 |
| 2. 論文標題 Probing of Photocarrier Electrons and Excitons at an Organic Monolayer Film Studied by Two-Photon Photoemission Spectroscopy | 5. 発行年 2024年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C | 6. 最初と最後の頁 2043 ~ 2051 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c07596 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Murase Natsumi, Kato Hiroyuki S., Akai-Kasaya Megumi, Yamada Takashi | 4. 巻 830 |
| 2. 論文標題 Real-space structural characterization of benzene monolayer on graphite (0001) surface investigated by low-temperature scanning tunneling microscopy | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 Chemical Physics Letters | 6. 最初と最後の頁 140815 ~ 140815 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2023.140815 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Li Han, Shibuta Masahiro, Yamada Takashi, Hojo Hajime, Kato Hiroyuki S., Teranishi Toshiharu, Sakamoto Masanori | 4. 巻 126 |
| 2. 論文標題 Band Engineering-Tuned Localized Surface Plasmon Resonance in Diverse-Phased Cu ₂ -xSySe _{1-y} Nanocrystals | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C | 6. 最初と最後の頁 8107 ~ 8112 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c01149 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Yamada Takashi, Tawa Takenori, Murase Natsumi, Kato Hiroyuki S. | 4. 巻 157 |
| 2. 論文標題 Formation and structural characterization of two-dimensional wetting water layer on graphite (0001) | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics | 6. 最初と最後の頁 074702 ~ 074702 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0097760 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 1. 著者名 Muneyasu Riku, Yamada Takashi, Akai-Kasaya Megumi, Kato Hiroyuki S. | 4. 巻 24 |
| 2. 論文標題 Self-assembly of heterogeneous bilayers stratified by Au-S and hydrogen bonds on Au(111) | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics | 6. 最初と最後の頁 22222 ~ 22230 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cp03356a | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|
| 1. 著者名 Yang Jinpeng, Sato Haruki, Orio Hibiki, Liu Xianjie, Fahlman Mats, Ueno Nobuo, Yoshida Hiroyuki, Yamada Takashi, Kera Satoshi | 4. 巻 12 |
| 2. 論文標題 Accessing the Conduction Band Dispersion in CH ₃ NH ₃ PbI ₃ Single Crystals | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters | 6. 最初と最後の頁 3773 ~ 3778 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcclett.1c00530 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 該当する |

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| 1. 著者名 Okaue D., Hayashi R., Wakayama K., Ito N., Munakata T., Yamada T. | 4. 巻 709 |
| 2. 論文標題 Lateral Distribution of Optical Excitation at Boundaries around Rubrene Islands Visualized by Microspot Two-Photon Photoemission Spectroscopy | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Surface Science | 6. 最初と最後の頁 121847 ~ 121847 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2021.121847 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|
| 1. 著者名 T. Yamada, K. Araragi, H. S. Kato, T. Munakata | 4. 巻 124 |
| 2. 論文標題 Structural Characterization and Photoluminescence Properties of Monolayer Perylene on Graphite Surface | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C | 6. 最初と最後の頁 12485-12491 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c02419 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|
| 1. 著者名 T. Kirchhübel, S. Kera, T. Munakata, N. Ueno, R. Shiraishi, T. Yamaguchi, K. Yonezawa, T. Ueba, F. Bussolotti, J. Yang, T. Yamada, R. Mori, S. Kunieda, T. Humpfer, M. Gruenewald, R. Forker, T. Fritz | 4. 巻 124 |
| 2. 論文標題 The Role of Initial and Final States in Molecular Spectroscopies: the Example of Tetraphenyldibenzoperiflanthene (DBP) on Graphite | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C | 6. 最初と最後の頁 19622-19638 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c05448 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 該当する |

| | |
|-----------------------------------------------|---------------------|
| 1. 著者名 森初果, 加藤浩之, 藤野智子, 上田顕, 吉信淳 | 4. 巻 56 |
| 2. 論文標題 プロトン - 電子カップル型分子性結晶および二分子膜における機能開拓 | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 セラミックス | 6. 最初と最後の頁 88-91 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし | 査読の有無 無 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計26件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件)

| |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 M. Muroyama, S. Watanabe, Y. Kanematsu, M. Tachikawa, M. Kasaya-Akai, H.S. Kato |
| 2. 発表標題 Potential of charge transfer at the hydrogen radical addition to functional molecular films |
| 3. 学会等名 Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2023 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 M. Muroyama, S. Watanabe, Y. Kanematsu, M. Tachikawa, M. Akai-Kasaya, H.S. Kato |
| 2. 発表標題 Study on hydrogen radical reactions in a functional self-assembled monolayer: Examination of potential of charge transfer |
| 3. 学会等名 36th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC 2023) |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|----------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 室山瑞穂, 小早川なの, 渡部誠也, 兼松佑典, 立川仁典, 赤井恵, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 機能性アルカンチオラート単分子膜における官能基の反応と電荷移動: 分子軌道計算と仕事関数測定による解析 |
| 3. 学会等名 表面・界面スペクトロスコピー2023 (ISSPワークショップ) |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 小早川なの, 神林直哉, 岡村高明, 鬼塚清孝, 渡部誠也, 赤井恵, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 らせん状高分子による自己組織化単分子膜のキャラクタリゼーション: 電界に応じた形状変化 |
| 3. 学会等名 日本化学会春季年会2024 |
| 4. 発表年 2024年 |

| |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 H.S. Kato, R. Muneyasu, T. Fujino, A. Ueda, Y. Kanematsu, M. Tachikawa, J. Yoshinobu, H. Mori |
| 2. 発表標題 Field-Induced Response in a Self-Assembled Proton-Donor/Acceptor Bilayer on Au(111) |
| 3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 村瀬菜摘, 野島周人, 林田紘輝, 加藤浩之, 岡田美智雄, 赤井 恵, 金 大貴, 洪田昌弘, 山田剛司 |
| 2. 発表標題 グラファイト表面上の芳香族炭化水素超薄膜のナノスケール構造と電子特性 |
| 3. 学会等名 分子科学討論会2022 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|-------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 棟安 陸, 室山瑞穂, 小早川なの, 津田泰孝, 坂本徹哉, 渡部誠也, 山田剛司, 赤井 恵, 岡田美智雄, 吉越章隆, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 機能性アルカンチオール自己組織化単分子膜における官能基の反応とイオン化 |
| 3. 学会等名 分子科学討論会2022 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|-------------------------------------------|
| 1. 発表者名 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 自発的に並ぶ分子膜に機能をくわえる: 分子で創る小さなメモリ |
| 3. 学会等名 第7回 大阪大学豊中地区研究交流会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 二分子膜で創る分子メモリ |
| 3. 学会等名 神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム研究会議 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|-----------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 加藤浩之, 棟安 陸, 藤野智子, 上田 顕, 兼松佑典, 立川仁典, 吉信 淳, 森 初果 |
| 2. 発表標題 自己組織化異種二分子膜で創る水素カチオン分子メモリ |
| 3. 学会等名 2022年(第16回)物性科学領域横断研究会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|----------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 村瀬菜摘, 野島周人, 林田紘輝, 加藤浩之, 岡田美智雄, 赤井恵, 金大貴, 渋田昌弘, 山田剛司 |
| 2. 発表標題 グラファイト表面上の芳香族炭化水素超薄膜のナノスケール構造・電子状態・発光特性 |
| 3. 学会等名 表面・界面スペクトロスコピー2022 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 室山瑞穂, 渡部誠也, 兼松佑典, 立川仁典, 赤井恵, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 機能性分子膜における官能基の反応と電子移動: 分子軌道計算を用いた検討 |
| 3. 学会等名 表面・界面スペクトロスコピー2022 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 電界誘起化学反応による吸着分子膜への情報記憶 |
| 3. 学会等名 学術振興会拠点形成事業「マテリアル知能」研究会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|-----------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 室山瑞穂, 渡部誠也, 兼松佑典, 立川仁典, 赤井恵, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 吸着分子膜における水素ラジカル付加反応と電荷移動に関する分子軌道計算を用いた考察 |
| 3. 学会等名 日本化学会春季年会2023 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|-----------------------------------------------|
| 1. 発表者名 村瀬菜摘, 林田紘輝, 山田剛司, 加藤浩之, 岡田美智雄, 赤井恵 |
| 2. 発表標題 グラファイト表面上の芳香族炭化水素のナノスケール構造 |
| 3. 学会等名 分子科学討論会2021 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|-----------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 加藤浩之, 上田 顕, 藤野智子, 兼松佑典, 山田剛司, 立川仁典, 吉信 淳, 森 初果 |
| 2. 発表標題 プロトン・ドナー/アクセプター二分子膜におけるラジカル自己誘導 |
| 3. 学会等名 分子科学討論会2021 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 T. Yamada, T. Tawa, H.S. Kato |
| 2. 発表標題 Correlation between Superstructure, Photoluminescence Properties, and Excited-State Dynamics of PAH Ultrathin Films on Graphite |
| 3. 学会等名 The 10th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-10) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 H.S. Kato, A. Ueda, T. Fujino, Y. Kanematsu, T. Yamada, M. Tachikawa, J. Yoshinobu, H. Mori |
| 2. 発表標題 Self-Induction of Radicals in a Self-Assembled Proton-Donor/Acceptor Bilayer on Au(111) |
| 3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|-----------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 R. Muneyasu, T. Yamada, H.S. Kato |
| 2. 発表標題 Study on Self-Assembly for Functional Heterogeneous Bilayer on Au(111) |
| 3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|----------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 加藤浩之, 棟安陸, 津田泰孝, 坂本徹哉, 福田義博, 山田剛司, 赤井恵, 岡田美智雄, 吉越章隆 |
| 2. 発表標題 機能性自己組織化単分子膜の化学反応とイオン生成: 表面における無溶媒イオンの安定化 |
| 3. 学会等名 表面界面スペクトロスコピー2021 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 H.S. Kato, A. Ueda, T. Fujino, Y. Kanematsu, T. Yamada, M. Tachikawa, J. Yoshinobu, H. Mori |
| 2. 発表標題 Self-Induced Radicals in the Electron-Proton-Coupled Molecular Bilayer on Au(111) Surfaces |
| 3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 棟安陸, 山田剛司, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 階層的なAu-S結合と水素結合による異種二分子膜の自己組織化過程に関する研究 |
| 3. 学会等名 分子科学会討論会2020 オンライン討論会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|-------------------------------------------|
| 1. 発表者名 棟安陸, 山田剛司, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 水素結合とAu-S結合による異種二分子膜の階層的な自己組織化 |
| 3. 学会等名 2020年日本表面真空学会学術講演会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---------------------------------------------|
| 1. 発表者名 田和大典, 山田剛司, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 グラファイト表面上に吸着したピレンの吸着構造および電子状態の観測 |
| 3. 学会等名 表面・界面スペクトロスコピー2020 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|-----------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 棟安陸, 山田剛司, 加藤浩之 |
| 2. 発表標題 電子-プロトン相関物性の創出に向けた自己組織化異種二分子膜における形成条件の検討 |
| 3. 学会等名 2020年度 関西薄膜・表面物理セミナー |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 発表者名 R. Muneyasu, T. Yamada, H.S. Kato |
| 2. 発表標題 Self-Assembled Hetero-Bilayer Stratified by Covalent and Hydrogen bonds on Au(111) surfaces |
| 3. 学会等名 Joint Symposium of JSPS-DST Bilateral Research Project "Charge- and Spin-Blockade in Ultrathin-Layers of Single Molecule Magnets" (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|---------------|-------------------------------------------------|-----------------------------------------|----|
| 研究 分担 者 | 山田 剛司 (Yamada Takashi) (90432468) | 大阪大学・大学院理学研究科・助教 (14401) | |

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|---------|---------|