## 17a-PA1-8

## ジオクチルクリセン超薄膜の準安定励起原子電子分光

Metastable atom electron spectroscopy of ultrathin dioctylchrysene films 東京農工大院工<sup>1</sup>・エ<sup>2</sup>・院 BASE,<sup>3</sup> ウシオケミックス (株)<sup>4</sup> ○奥田 昌平,<sup>1</sup> 山﨑 俊弥,<sup>1</sup> 仲本 真虎,<sup>1</sup> 藤井 悠基,<sup>1</sup> 川島 若奈,<sup>2</sup> 猪野 貴士,<sup>2</sup> 尾﨑 弘行,<sup>1</sup> 遠藤 理,<sup>1</sup> 荻野 賢司,<sup>3</sup> 大槻 裕之,<sup>4</sup> 岡本 一男<sup>4</sup> Grad. Sch. Engin.,<sup>1</sup> Fac. Engin.,<sup>2</sup> & Grad. Sch. BASE, Tokyo Univ. Agric. Tech.;<sup>3</sup> Ushio Chemix Co., Ltd.<sup>4</sup> <sup>o</sup>Shohei Okuda,<sup>1</sup> Shunya Yamazaki,<sup>1</sup> Matora Nakamoto,<sup>1</sup> Yuki Fujii,<sup>1</sup> Wakana Kawashima,<sup>2</sup> Takashi Ino,<sup>2</sup> Hiroyuki Ozaki,<sup>1</sup> Osamu Endo,<sup>1</sup> Kenji Ogino,<sup>3</sup> Hiroyuki Otsuki,<sup>4</sup> and Kazuo Okamoto<sup>4</sup> E-mail: 50014642208@st.tuat.ac.jp

グラファイトの (0001) 面に平面環状や鎖状の化合物を少量蒸着すると、分子が 炭素骨格を下地に平行にした flat-on 配向 (Fig. 1(a)) で並んだ単分子層が生成し、層 数増加や昇温に伴い構造変化を起こす。一方、結晶学的表面を持たない金属基板 では、アモルファス性や standing 配向 (b)の結晶性の膜が得られる。しかし、環と 鎖を併せ持つ分子を用いれば、また別の配向・配列・配座が現れ、微視的構造を 6,12-DOC 制御するための新しい指針が得られると期待される。この観点から、6,12-ジオクチルクリセン (DOC) 超薄膜の凝集構造と電子構造を準安定励起原子電子スペクトル (MAES) により検討した。

- standing (c) tilted-on (d) edged-on (a) flat-on Fig. 1 Orientations of all-trans chain molecules on solid surfaces.

Fig.2 に 120 K のグラファイト基板に形成した膜 I (4Å) と同温 のステンレス (SS) 基板に形成した膜 II (40 Å)を昇温したときの He\* (2<sup>3</sup>S, 19.82 eV) MAES の変化を示す。120-220 Kの膜 I では、 環の π<sub>9</sub>~π<sub>5</sub> MO に対応するバンド P<sub>9</sub>~P<sub>5</sub>が flat-on 配向のクリセン 単分子層の MAES (Ch; 青)の場合と同様の強度分布を示すため、 DOC の環の配向は flat-on である。また、主に鎖の擬 π MO が与え るバンドA~Eが著しく強調されるため、鎖の配向も flat-on であ る。290 K では π バンドの強度分布に変化はないが、バンド E は 弱くなり鎖の配向が tilted-on (c)[1] へ向かい始めたと考えられる。 120 Kの膜 II では、バンド A~E が 290 Kの膜 I の場合と似た形状 を示すので鎖の配向は tilted-on に近いが、純π領域が膜Iとは異 なりバンド P<sub>8</sub> が明瞭なピークを示す。このバンドは 2 位の炭素 C<sup>2</sup>に大きな分布を持つ MO に基づき、220 K になるとその相対強 度は C<sup>2</sup>-H を膜面に露出した standing 配向性の Ch 膜の MAES (緑) の場合と同程度まで増大する。その一方で、バンドEはバンドD と同程度に弱くなり edged-on 配向 (d) の鎖の特徴 [2] を示す。とこ ろが290Kでは、standing配向の鎖状分子に特有な、メチル末端に



 $C_8H_{17}$ 

C8H17



分布する σ MO に基づくバンド M [3] が現れるとともに、バンド P<sub>9</sub>~P<sub>5</sub> は不明瞭化する。一部の鎖 の末端が環上でHe\*と相互作用することにより、He\*の環への接近を妨げていると考えられる。

[1] H. Ozaki et al., J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 88-91, 867 (1998). [2] S. Yamazaki et al., Chem. Lett., 42, 1048 (2013). [3] H. Ozaki et al., J. Am. Chem. Soc., 112, 5735 (1990).