単一配向 Picene 薄膜の光電子強度マッピング計測

Photoemission intensity mapping of one-dimensionally oriented picene film

筑波大数理¹, 分子研² ⁰岩澤柾人¹, 小林辰之輔¹, 長谷川友里², 佐々木正洋¹,松井文彦²,解良聡²,山田洋一¹

Tsukuba Univ.¹, IMS² [°]Masato Iwasawa¹, Shinnosuke Kobayashi¹, Yuri Hasegawa²,

Masahiro Sasaki¹, Fumihiko Matsui², Satoshi Kera², Yoichi Yamada¹

E-mail: mstiwsw@gmail.com

緒言

近年、光電子強度マッピング計測による分子軌道の再構成が注目されている。光電子強度マッ ピングの詳細な計測と解析のためには、分子配向が均一化されたモデル系が不可欠であるが、実際に単一方向に配向を制御した有機薄膜の作製は容易ではなく、これまでの報告例は比較的単純 な分子に限られている^[1]。本研究では、高移動度の有機デバイス材料として期待される picene の 分子軌道マッピングのため、Ag(110)基板の異方性を利用することで、分子を単一配向させた picene 薄膜を作製した。このモデル系の光電子強度マッピング計測では、エネルギー差の小さいHOMO、 HOMO-1のそれぞれの分子軌道のマッピングが可能となった。

実験

Piceneの単一配向膜は、Ag(110)基板上に、膜厚 10 nm 程度の picene を蒸着することで作製した。 試料の分子配列構造は、走査トンネル顕微鏡(STM)、低速電子線回折(LEED)を用いて観察した。 光電子強度マッピングは、分子科学研究所(UVSOR)の BL6U を用いた。マッピングの際には、 hv = 60eVの放射光を用い、試料-メッシュ電極に 400 Vの電圧を印加することで、光電子の取り 込み角を拡大した。STM 及び LEED での試料温度は室温、光電子分光での試料温度は 15 K で計 測を行った。

結果

Fig.1に Ag(110)上 picene 多層膜の STM 像を示す。STM 像から、Ag(110)基板の列方向である [1-10]方向に沿って、picene 分子が一次元の列構造を形成していることが確認できる。列構造内部 の拡大図からは、picene 分子の長軸が基板の[1-10]方向に沿うように配向していることがわかった。 したがって、異方性のある基板を用いることで picene 分子が単一配向した多層膜が作製できた。

Fig.2 に、作製した picene 多層膜の UPS スペクトルと光電子強度マッピングの結果を示す。picene の HOMO 軌道は MOHO-1 とのエネルギー差が小さく、軌道の混成等の要因により、これらを光 電子スペクトルで区別することは困難である。一方、光電子強度マッピングでは、HOMO と HOMO -1 に対応するエネルギーにおいて、明瞭に異なる強度分布が得られた。HOMO では、picene の短 軸方向で強度が極大になるのに対し、HOMO-1 では Picene の長軸方向の強度が増大していること がわかる。現段階ではバックグラウンド処理が不十分であるため、その分布はぼやけているもの の、これらの強度分布は、先行研究で報告されている計算結果ともよく一致しており^[2]、作製し た picene 多層膜において実際に picene 分子が単一方向に配向していることが示された。



Fig.1 STM images of Picene on Ag(110)

Fig.2 (a) UPS spectrum of Picene/Ag(110) and (b) photoemission intensity mapping of HOMO and HOMO-1

[1] Udhardt, C. et al. J. Phys. Chem. C 121, 12285–12293 (2017)

[2] Liu, Y. et al. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 195, 287-292 (2014)