

フッ化ペンタンセンにおけるホール-振動結合の光電子強度マッピング

Photoelectron intensity mapping of hole-vibration coupling in perfluoropentacene monolayer

分子研¹, Sabaragamuwa Univ. of Sri Lanka², 阪大理³ ○長谷川友里¹, KaveendraMaduwantha², Rasika Koswattage², 中村拓人³, 松井文彦¹, 解良聡¹IMS¹, Sarab. Univ. of Sri Lanka², Osaka Univ.³ ○Y. Hasegawa¹, K. Maduwantha², R. Koswattage², T.Nakamura³, F. Matsui¹, S. Kera¹

緒言 波動関数が局在する有機半導体薄膜において、伝導機構の理解には分子内振動の寄与を考慮に入れることが重要となる。これについて、角度分解光電子分光法により分子内振動とホールの結合を第一原理的に評価する手法が開発され、ホール-振動結合の非自明な角度依存が示唆されてきたが、分子内振動との因果関係はまだ十分に解明されていない[1]。そこで本研究では、分子内振動の空間分布とホール-振動結合の波数空間との相関を示すことで、有機薄膜内の電荷移動における分子内振動の寄与を解明することを目的とし、ホール-振動結合の顕著なフッ化ペンタセン (PFP) 分子を対象として光電子強度マッピングを試みた。

実験 PFP 単層膜は室温の Ag(111) 基板に 2.5 Å 厚相当の分子を蒸着することで作製し、低速電子回折 (LEED) および光電子の波数空間分布 (photoelectron momentum map: PMM) の温度依存を計測した。実験は UVSOR BL6U で行った。分子軌道からの光電子パターンの全域は、入射光 50 eV で Acceptance cone tunable 電子分析器を用いて PMM を取得した[2]。拡大 PMM は放出角 30° で得た。

結果と考察 PFP 単層膜におけるドメイン内の分子配向は LEED パターンから決定した。Ag(111) 上の PFP は分子の長軸と基板の (1 $\bar{1}$ 0) が平行となるような分子配列構造を形成する[3]。測定配置を Fig.1(a) に示す。光電子スペクトルでは、メインピーク (0) よりも低運動エネルギー側に、ホール-振動結合に由来するサテライトピーク (1, 2) が観察される (Fig. 1(b))。HOMO(0) および HOMO(1) の拡大 PMM を試料温度 16 K でそれぞれ計測した (Fig.1(d))。図中の分子 A, C からの光電子パターンの重ね合わせに対応し、図中の k_2 方向においてわずかに光電子パターンの強度分布に変化が見られる (Fig. 1(e))。これは分子軌道の波動関数分布がホール-振動結合によって変調されている可能性を示唆し、分子内振動と伝導機構の相関を理解するための糸口となり得る結果である。

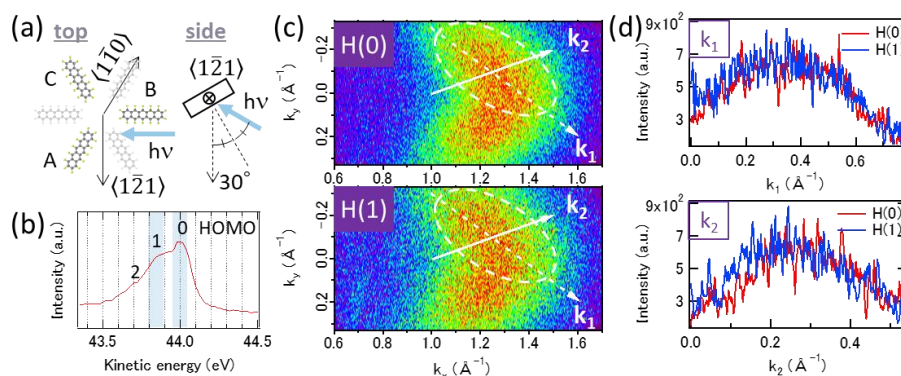


Fig. 1 (a) Measurement geometry. (b) UPS and (c) PMM image of HOMO, and (d) magnified PMM images of HOMO(0) and (1) of PFP/Ag(111). (d) Line profiles taken from HOMO(0) and (1) indicated by white arrows, k_1 (top) and k_2 (bottom) in Fig. 1(c). The color scaling and intensity are normalized at maximum intensity.

[1] S. Kera *et al.*,
Prog. Surf. Sci., **84**,
135 (2009)

[2] H. Yamane *et al.*,
Rev. Sci. Instrum.
90, 093102 (2019)

[3] J. Goetzen *et al.*,
Langmuir **27**, 939
(2011).