

Ag (110) 上単一配向 Picene 多層膜の光電子トモグラフィー

Photoemission Tomography of a One-Dimensionally Oriented Picene Multilayer on Ag(110)

1. 筑波大数理, 2. 分子研

○岩澤 柊人¹, 長谷川 友里², 石井 宏幸¹, 佐々木 正洋¹, 松井 文彦², 解良 聡², 山田 洋一¹

1. Tsukuba Univ., 2. IMS

○M. Iwasawa¹, Y. Hasegawa², H. Ishii¹, M. Sasaki¹, F. Matsui², S. Kera², Y. Yamada¹E-mail: mstiws@gmail.com

[諸言] 光電子トモグラフィー (PT) は、二次元運動量空間における光電子の運動量分布 (PMM) を取得することで、分子軌道のエネルギーと軌道形状の詳細解析が可能な最先端の分光手法である。しかしながら、複数のドメインを有する有機薄膜では、配向方向の異なる分子からの光電子放出分布が混在することで PMM が複雑になりやすく、これまでの研究の多くは pentacene などに代表されるモデル分子の、構造が比較的単純な単分子膜や二分子膜に限られてきた^[1]。このため、実用的な高移動度有機半導体やそれらの多層膜などの、膜構造が複雑になりがちな系における PT の適用例は非常に少ない。そこで本研究では、Ag(110)基板表面の異方性を利用することで、高移動度有機半導体の一つである picene の単一配向多層膜を作製した。これにより、PT をより実践的な有機多層膜の電子物性評価に適用した。

[実験] Picene 単一配向膜は、Ag(110)基板上に、picene を真空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。UPS 及び PMM 計測には、分子科学研究所 (UVSOR) の BL6U にて acceptance-cone-tunable ARPES^[2] を使用した。PMM 計測の際には、60 eV 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、PMM 計測時の試料温度は 15 K とした。

[結果] Fig.1 に Ag(110)上に作製した picene 多層膜の STM 像を示す。ここでは、基板の $[1\bar{1}0]$ 方位に沿って、一次元的な列構造の形成が見られた。STM の拡大像からは、列構造内部で、picene 分子が列方向におおよそ沿って配向している様子が確認でき、PMM 計測に適した単一配向の picene 多層膜が作製できた。

Fig.2(a)に作製した picene 多層膜の UPS スペクトルを示す。UPS 計測ではエネルギー的に近接した picene のフロンティア軌道を区別することはできないものの、このスペクトルは picene の各分子軌道に対応する三つのガウス関数でフィットすることができた。そこで、Fig.2(b-d)に、フィッティングの結果得られた各ピークのエネルギーで観測された PMM を示す。ここでは、各ピークにおいて明瞭に異なるパターンが観測された。これらの PMM パターンは、Fig.2(e-g)に示した、基板表面に平行に配向した孤立状態の picene の波動関数を用いたシミュレーションにより、非常によく再現できることがわかった。このことから、多層膜中における picene の電子状態は、孤立分子の状態から大きく変調されていないことが示された。

以上の結果から、Ag(110)基板を利用することで、より実践的な分子や系への PT の適用が可能であり、その膜中での詳細な電子状態や分子配向の評価が可能であることが示された。

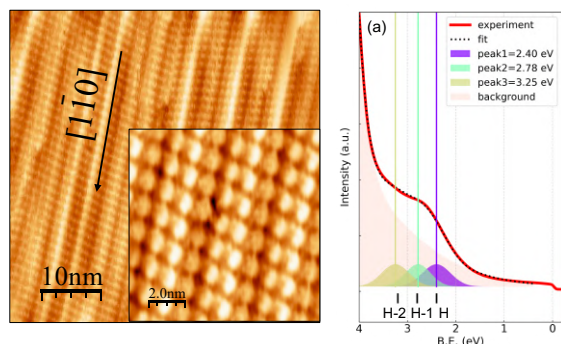


Fig.1 STM images of picene/Ag(110)

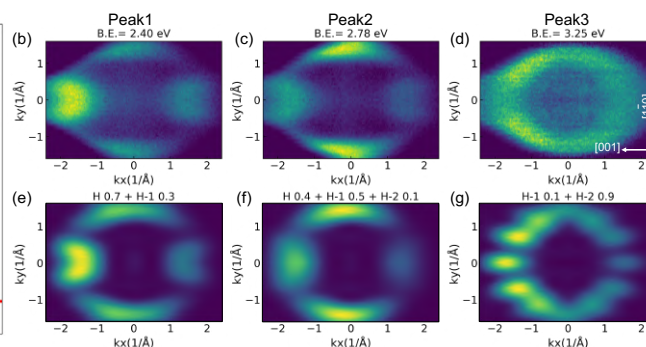


Fig.2 (a) EDC and (b-d) PMMs of picene/ Ag(110). (e-g) Simulated PMMs for isolated picene molecule.

[1] Grimm, M. et al., *Phys. Rev. B* **2018**, 98 (19), 195412.

[2] Yamane, H. et al., *Review of Scientific Instruments* **2019**, 90 (9), 093102.