

## 光電子収量分光から材料の状態密度を求める解析法について (1): 金薄膜からの光電子の場合

### How to extract density-of-states of materials from photoelectron yield spectroscopy (1):

#### Case of the photoelectrons from gold film

千葉大先進<sup>1</sup>, MCRC<sup>2</sup>, 融合理工<sup>3</sup> ○石井久夫<sup>1,2,3</sup>, 渡邊研太<sup>3</sup>, 中澤遼太郎<sup>3</sup>, 田中有弥<sup>1</sup>

Chiba Univ. CFS<sup>1</sup>, MCRC<sup>2</sup>, GSSE<sup>3</sup>, °Hisao Ishii<sup>1,2,3</sup>, Kenta Watanabe<sup>2</sup>, Yuya Tanaka<sup>2</sup>

E-mail: ishii130@faculty.chiba-u.jp

【序】有機デバイス研究などに関連して、光電子収量分光(PYS)を用いた材料のイオン化エネルギー計測が広く行われている。PYSでは入射光のエネルギー $h\nu$ を掃引しながら、試料から放出される光電子の全電子収量 $Y$ を $h\nu$ の関数として計測し、光電子放出が始める $h\nu$ の閾値からイオン化エネルギー $I$ を決定する。また、PYSでは幾つかの仮定のもとで収量の微分 $dY/d(h\nu)$ が試料の状態密度DOSを大まかに反映するといわれており[1]、しばしばDOSを求めるのに利用されてきた。最近では、有機材料のバンドギャップ準位のDOSの推定に適用するケースも報告されるようになった[2]。しかしながら、微分解析法では光電子放出における遷移行列要素や光電子の脱出確率の $h\nu$ 依存性を無視するなどの仮定が不可欠である。さらに、イオン化閾値を決める際には立ち上がり付近で $Y \propto (h\nu - I)^n$ のような冪関数を仮定して解析する一方で、微分がDOSになるという相容れない解析法が併存していることになる。有機分子については、光電子脱出確率の効果をとりにいと $d^2Y/d(h\nu)^2$ の方が近似としては精度がよいという提案もされている[3]。

我々の研究室では、PYSと類似した手法として特定の運動エネルギーの光電子に対する収量分光である“一定終状態光電子収量分光(CFSYS)”の研究を進めている。この手法では、終状態を固定することでDOSを反映したスペクトルが得られる。しかし、我々は以前の講演会において、金の薄膜に対してスペクトルの立ち上がり領域で試料のDOSと合わなくなることを報告した[4]。これは上述したPYSの立ち上がり付近の問題と関係しているが、収量の見積りに実験誤差があったことなどにより、詳細な解釈はできていなかった。

本研究では、照射光量をより正しく測定するとともに、反射スペクトルの実測も行うことで、光電子収量をより正確に計測し、金薄膜の再測定を行った。得られたPYS、CFSYS、UPS測定をもとに、DOSの評価法としてその解析法を再度検討した。

【結果と考察】 Fig.1に膜厚30nmのAu薄膜の光電子スペクトル( $h\nu=7.7\text{eV}$ )とCFSYSの結果、ならびにPYSの微分を示す。どの曲線でも、4-6eVのspバンドに由来する構造、6-8eVのdバンドに由来する構造がおおむね再現されている。一方、Insetに示したフェルミ準位付近の拡大図をみると、UPSでは明瞭なフェルミ端構造が見えているのに対して、CFSYSやPYSではフェルミ準位近傍で強度が減少しており、PYSの微分ではフェルミ準位より深いエネルギーから立ち上がっている。これらの結果は、立ち上がり付近を除けば、CFSYS、PYSの微分ともに大まかに金のDOSを反映していることを示している。このように微分解析がうまくいくのは、節の多い原子軌道からなるAuに対しては遷移行列の $h\nu$ 依存性が無視できるためと考えられる。これは節の少ない原子軌道からなる有機材料の場合とは大きく異なる点だと考えられる。講演では、種々の $h\nu$ で計測したUPSスペクトルや一定始状態測定の結果などと合わせて、DOSを評価するための解析について論じる予定である。

[1] C. A. Sebenne, *IL Nuovo Cimento*, 39, 768(1977).

[2] K. Nakano, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 13, 28574 (2021). [3] S. Tadano et al., *Phys. Rev.*

*Appl.* 11, 054081 (2019). [4] 石井ら、第80回応用物理学会秋季学術講演会, 18p-E302-7 (2019/9/18)

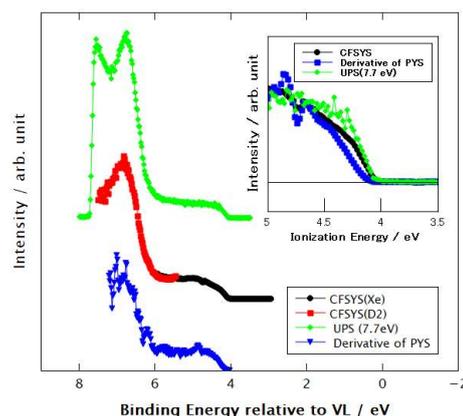


Fig.1 Comparison among UPS, CFS-YS, and the derivative of PYS for Au film. The inset is the magnification near Fermi level.