

光分子科学第三研究部門

解 良 聡（教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：表面物理学，有機薄膜物性

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン放射光・レーザー光励起による弱相互作用系の電子状態計測
- b) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- c) 有機半導体薄膜の界面電子単位接合機構の研究
- d) 機能性分子薄膜の光電子放出強度の理論解析と分子軌道撮影法の開発
- e) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- f) 自己組織化と分子認識機能の分光研究
- g) 分子薄膜の作製と評価：成長ダイナミクス，構造と分子配向

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性分子薄膜の弱相互作用による電子状態変化を計測する技術開発を進めている。弱相互作用を定量的に評価するため，蒸気圧の低い大型分子対応の気相光電子分光実験装置を開発し，分子集合による電子状態の違いに関する議論を進めている。2014 年度より新たに超短パルスレーザー光を励起源として電子状態を測定し，ホール緩和や励起子拡散など，電荷ダイナミクス関連の研究を開始した。2019 年より新型運動量分解光電子顕微鏡の開発を UVSOR 施設の中期計画として進める。
- b) 有機半導体のバンド分散関係：良質な配向有機結晶膜を作製し，価電子エネルギーバンド分散を測定し，分子間相互作用の大きさ・ホール有効質量など，バンド伝導移動度を評価した。有機単結晶ヘテロ界面の成膜に成功し，エネルギー分散関係の検出に成功した。温度依存測定による準粒子評価を進めている。
有機半導体の電荷振動結合：配向有機超薄膜の作製により，大型の分子薄膜系における光電子スペクトルの高エネルギー分解測定を実現する方法論を開拓して，分子薄膜における伝導ホールと分子振動の結合状態を初めて実測し，ホッピング移動度（そのポーラロン効果を含む）を分光学的に得る方法を開拓した。これらの物理量を実測することで，準粒子描像に基づいた輸送機構の解明を目指している。
- c) 本質的には絶縁物である有機分子が n 型／p 型半導体として機能する起源を明らかにすべく研究を進めている。極めて高感度に光電子を捕捉し，評価可能な光電子分光装置を開発し，バンドギャップに生じる 10ppm レベルの状態密度検出に成功した。価電子帯トップバンドの状態密度分布がガウス型から指数関数型に変化し，基板フェルミ準位まで到達している様子をとらえた。ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から，分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括検討し，エネルギー単位接合機構の解明を目指している。数値解析による定量評価を実施した。
- d) 高配向有機薄膜からの光電子放出強度の角度依存性について，多重散乱理論による強度解析を行い，分子薄膜構造の定量的解析を行うための方法論を検討している。多様な有機薄膜の分子配向に依存した電子波のポテンシャル散乱と干渉問題を評価してきた。また理論計算から，二次元角度分解測定により分子軌道の可視化が行え，配向分子系（固体）における分子計測の新たなツールとなりうることを提案した。新たに放射光を利用した波数分解光電子

放射顕微測定を実施するとともに、局在電子系における一電子近似の限界を検討し、弱相互作用系の物理を議論している。UVSOR 施設における新型運動量分解光電子顕微鏡の利用が不可欠である。

- e) 低速電子エネルギー損失分光により、機能性分子薄膜の振動状態と電子励起状態を測定し、弱相互作用による振動構造への影響を調べている。国際共同による二次元検出器を利用したフォノン分散実験を開始した。
- f) 表面場で織り成すパイ共役分子系の超格子構造や、分子薄膜の自己組織化機構の解明を目指している。また超分子系の固相膜を作製し、自己組織化や原子・分子捕獲などによる電子状態への影響を測定することで、分子認識機能について分光学的に研究している。プローブ顕微鏡実験を共同研究で推進し、構造と電子状態の相関研究を開始した。
- g) 有機分子薄膜(高分子薄膜)の電子状態を議論する上で、試料調整方法の確立が鍵である。光電子放射顕微鏡(PEEM)、走査プローブ顕微鏡(STM)、高分解能低速電子線回折(SPALEED)、準安定励起原子電子分光(MAES)、X線定在波法(XSW)、軟X線吸収分光(NEXAFS)等を用い、基板界面における単分子膜成長から結晶膜成長までの多様な集合状態について構造(分子配向)と成長を観察している。

B-1) 学術論文

H. YAMANE, F. MATSUI, T. UEBA, T. HORIGOME, S. MAKITA, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI, “Acceptance-Cone-Tunable Electron Spectrometer for Highly-Efficient Constant Energy Mapping,” *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 093102 (7 pages) (2019).

R. NEMOTO, P. KRUEGER, A. HARTINI, T. HOSOKAI, M. HORIE, S. KERA and T. YAMADA, “Well-Ordered Monolayer Growth of Crown-Ether Ring Molecules on Cu(111) in Ultra-High Vacuum: A STM, UPS, and DFT Study,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 18939–18950 (2019).

R. SCHLESINGER, F. BUSSOLOTTI, J. YANG, S. SADOFEV, A. VOLLMER, S. BLUMSTENGEL, S. KERA, N. UENO and N. KOCH, “Gap States Induce Soft Fermi Level Pinning upon Charge Transfer at ZnO/Molecular Acceptor Interfaces,” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 074601 (8 pages) (2019).

S. PARK, T. SCHULTZ, A. HAN, A. ALJARB, X. XU, P. BEYER, A. OPITZ, R. OVSYANNIKOV, L.-J. LI, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, S. KERA, P. AMSALEM and N. KOCH, “Electronic Band Dispersion Determination in Azimuthally Disordered Transition-Metal Dichalcogenide Monolayers,” *Commun. Phys.* **2**, 68 (6 pages) (2019).

T. KIRCHHUEBEL, O. L. A. MONTI, T. MUNAKATA, S. KERA, R. FORKER and T. FRITZ, “The Role of Initial and Final States in Molecular Spectroscopies,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 12730–12747 (2019).

Y. NAKAYAMA, R. TSURUTA, N. MORIYA, M. HIKASA, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, Y. MIZUNO, T. SUZUKI, T. KOGANEZAWA, T. HOSOKAI, T. UEBA and S. KERA, “Widely Dispersed Intermolecular Valence Bands of Epitaxially Grown Perfluoropentacene on Pentacene Single Crystals,” *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 1312–1318 (2019). (*Front Cover selected*)

M. SCHWARZE, C. GAUL, R. SCHOL, F. BUSSOLOTTI, A. HOFACKER, K. S. SCHELLHAMMER, B. NELL1, B. D. NAAB, Z. BAO, D. SPOLTRE, K. VANDEWAL, J. WIDMER, S. KERA, N. UENO, F. ORTMANN and K. LEO, “Molecular Parameters Responsible for Thermally Activated Transport in Doped Organic Semiconductors,” *Nat. Mater.* **18**, 242–248 (2019).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

S. KERA, “Energy and spatial distribution of frontier orbital state for organic thin films,” 2nd International Conference on Materials Research and Innovation (ICMARI), Bangkok (Thailand), December 2019.

S. KERA, “A perspective of frontier orbital state for weakly bound molecules on the surface,” 25th Users’ Meeting & Workshops at NSRRC; Workshop II: Scientific Opportunities of Soft X-Ray/VUV Nano-Spectroscopy & Nano-Imaging at TPS, Hsinchu (Taiwan), September 2019.

S. KERA, “Photoelectron spectroscopy of semiconducting organic molecules,” 18th European Conference on Applications of Surface and interface Analysis (ECASIA), Dresden (Germany), September 2019.* [Keynote]

S. KERA, “Evolution of π orbital state upon assembling the molecules on the surface,” 14th International Symposium on Functional π -Electron Systems (F π 14), Berlin (Germany), June 2019.

S. KERA, “Imaging electron delocalization upon assembling the molecules,” 1st international workshop on momentum microscopy and spectroscopy, Okazaki, February 2019.

S. KERA, “Electronic band dispersion of perovskite single crystal: MAPbI₃,” International Workshop on Organic Semiconductors and Related Materials, Chiba, January 2019.

解良 聡, 「有機半導体の輸送電荷の特徴: 光電子分光法による電子状態測定から」, 第4回固体化学フォーラム, 岡崎, 2019年6月.

解良 聡, 「有機半導体分子の電子状態の特徴とその局在性の変遷」, 日本学術振興会マイクロビームアナリシス第141委員会第176回研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2019年5月.

解良 聡, 「分子集合体における電子局在性」, 第17回SPRING-8 ユーザー協同体顕微ナノ材料科学研究会・第14回日本表面真空学会放射光表面化学研究部会・第3回日本表面真空学会プローブ顕微鏡研究部会合同シンポジウム, つくば, 2019年3月.

解良 聡, 「光電子分光法による有機半導体の物性・機能評価」, 第13回応化談話会節分サロン, 東大, 東京, 2019年2月.

解良 聡, 「有機半導体結晶における電子格子相互作用」, 第32回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 福岡国際会議場, 福岡, 2019年1月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

UVSOR 利用者懇談会世話人 (2012–2014).

VUVX (International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-Ray Physics) 真空紫外光物理およびX線物理国際会議国際諮問委員 (2014–).

SRI (International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation) シンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (2018).

学会の組織委員等

The 17th Japan-Korea Molecular Science Symposium, Chair (Nagoya 2019).

第32回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員会委員長, 同実行委員会副委員長 (2019).

The 9th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, International Program Committee (Germany 2018).

The 9th International Conference of Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces, Advisory Panel (Singapore 2017).

The 16th Japan-Korea Molecular Science Symposium, Co-Chair (Busan, Korea 2017).

第 28, 29, 30, 31 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

第 75, 76, 77, 78 回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

第 61, 62, 63, 64 回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-Chair (Soochow, China 2016).

学協会連携分子研研究会「表面科学の最先端技術と分子科学(第7回真空・表面科学若手研究会)」運営委員 (2016).

第 76 回岡崎コンファレンス “Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications” 主催者 (2016).

MPI-PKS 国際重点研究会 “Prospects and Limitations of Electronic Structure Imaging by Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy,” Co-Chair (Dresden, Germany 2016).

JSPS-NSFC Joint 3rd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Chair (IMS, Okazaki 2015).

JSPS-NSFC Joint 2nd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Soochow Univ., China 2014).

第 27 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2013).

JSPS-NSFC Joint 1st Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Tokyo Univ. of Sci., Japan 2013).

UVSOR 研究会「UVSOR 有機固体専用ラインの今後の展開」主催者 (2012).

The 4th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA4), Local Committee (Chiba, Japan 2007).

21 世紀 COE プログラム若手主導研究会主催者 (2006).

Workshop on Electrical and Electronic Properties in Crystalline Thin Films of Small-Molecules, Co-chair (Chiba, Japan 2005).

UVSOR 研究会「有機薄膜の放射光利用研究：BL8B2 の歩みと今後の展開」主催者 (2007).

学会誌編集委員

真空誌編集委員 (2008–2009).

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Guest Editor (2014).

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board (2015–).

その他

千葉大学工学部工学同窓会部会幹事 (2008–2013).

B-8) 大学での講義, 客員

京都大学大学院理学研究科, 客員教授, 「化学特別講義」, 2019 年

広島大学大学院理学研究科, 客員教授, 「放射光科学特論 II」, 2019 年.

千葉大学大学院融合科学研究科, 連携客員教授, 2014 年 9 月–.

千葉大学大学院融合科学研究科, 「ナノ創造物性工学特論 II」, 2014 年 9 月–2019 年.

蘇州大学, 客員教授, 2014 年 4 月–2019 年.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的萌芽研究,「有機デバイス材料の個性を知る:移動度の直接評価」,解良 聡(2008年-2009年).
科研費若手研究(A),「分子性固体における電荷輸送とその動的現象の解明」,解良 聡(2008年-2010年).
科研費基盤研究(B),「パイ共役分子による低次元超格子ヘテロ界面構造とその電子状態」,解良 聡(2011年-2013年).
日本学術振興会二国間交流事業共同研究費(NSFC),「有機タンデム光電子デバイスの有機半導体の本性を活用した高性能化」,解良 聡(2013年-2015年).
科研費基盤研究(A),「精密電子状態評価による有機半導体界面に特徴的な電子機能の解明」,解良 聡(2014年-2016年).
科研費基盤研究(A),「分子集合体における電子局在性とその電子-フォノン相互作用の影響」,解良 聡(2018年-).
科研費国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(B)),「光電子波数顕微鏡法で切り拓くナノスピン・オービトロニクス」,解良 聡(2019年-).

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子に代表される弱相互作用物質系の高配向試料作製法と精密電子状態計測で蓄積したノウハウを集結し,集合体における「電子の真の姿を見出すこと」でその機能・物性の根源を理解することを主眼として進めている。シンクロトロン放射光を利用した各先端分光法(角度分解光電子分光法,共鳴光電子分光法,軟X線吸収分光法,X線定在波分光法など),高感度紫外光電子分光法,気相光電子分光法,レーザー励起二光子光電子分光法,低エネルギー逆光電子分光法,スポット分析型低速電子線回折法を用いた実験を進めている。今年度はメンバーが総替わりし,新たに博士研究員2名による新体制でスタートした。継続的な国際共同研究により研究成果の発信力を維持した。次年度は助教の確保が責務である。一方,UVSOR 放射光施設の施設長として国内の当該コミュニティの基盤強化を推進するためのユーザー支援に注力している。UVSOR 施設は放射光を利用した分子科学研究分野で国際的な競争力があり,欧米の先端放射光施設と相補的な国際共同研究拠点として貢献している。放射光利用実験の新規軸として,運動量分解光電子顕微鏡(Momentum Microscope)装置を導入する。装置導入において,欧米からの遅れを取り戻すべく基本設計に独自性を含めるため,開発メーカーとの議論を進めてきた。またドイツの装置開発拠点であるユーリッヒ研究所との学術協定を締結し,装置開発とその利用展開についての共同研究を推進することで同意した。予算的な支援として国際共同研究加速基金(B)の獲得に成功した。次年度は本装置の利用を推進するが,有機固体系のオールジャパン体制(実験班,理論班)を構築し,戦略的に新奇実験を牽引する。国内の量子ビーム関連施設の将来計画が随所で俄かに動きだし,UVSOR 施設についても次世代施設UVSOR-IVの計画立案に奔走した。次年度は具体的な予算獲得の方策を検討する段階に移行する。