光分子科学第三研究部門

解 良 聡 (教授) (2014 年 4 月 1 日着任)

福谷 圭祐 (助教)

下ヶ橋 龍之介 (特任助教)

WONGKANYA, Ratchada (インターンシップ)

西野 史 (大学院生)

PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela (大学院生)

神谷 美穂 (事務支援員)

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) 配向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
- c) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- d) 有機半導体薄膜の界面電子単位接合機構の研究
- e) 自己組織構造体の作製と分子機能の分光研究
- f) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- g) 低次元電子相関物質の物性機構解明

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。超短パルスレーザー光を励起源とする二光子光電子分光装置を構築し、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進めている。UVSOR では BL7U における低エネルギー励起光を用いた角度分解光電子分光 (ARPES) による分子界面電子状態の計測法開拓を推進しつつ、BL6U における光電子運動量顕微鏡 (PMM) の装置開発と分子系への最適化のためのパラメータ調整を進めている。
- b) 高配向分子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、有機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きた。その後、高配向試料では広波数空間二次元分解測定が分子軌道の可視化に対応することが指摘され、新たな量子計測ツールになりうると期待されている。前述の放射光を利用した PMM 装置による高効率計測が強力である。特に単層膜界面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定量化し、局在電子系における一電子近似の限界を吟味しつつ、弱相互作用系の物理現象を議論するための新たな方法論の構築を目指している。
- c) 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する技術確立した。分子間相互作用の大きさ、ホール有効質量、バンド伝導移動度の定量的評価と、分子結晶特有の物理モデルの構築を進めている。多体効果による電子構造への影響を検出し、非自明な機能開拓へ向けた研究を進めている。有機半導体結晶における振電相互作用の運動量異方性の検出に成功した。

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。

- d) 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。極めて高効率に光電子を捕捉し評価可能な高感度紫外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捉えた。また低エネルギー逆光電子分光装置の導入により、伝導帯構造を合わせて評価することが可能となり、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、エネルギー準位接合機構の解明を目指している。
- e) 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により発現する各種機能の解明を目指す。新規な共有結合性有機構造体の作製、自己組織化や原子・分子捕獲などによる有機無機複合構造体の作製に挑戦している。各種分子機能の起源について解明するため、電子状態の局在性の視点で構造との相関を各種先端分光法を駆使して研究を進めている。2022 年度より、キラル分子によるスピン選択性の定量的電子構造評価に向けた高配向キラル二次元膜の研究を開始した。分子薄膜や低次元物質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), 高分解能スポット解析型低速電子線回折 (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。
- f) 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進めている。
- g) 電子が物質中の様々な準粒子と相互作用することにより発現する特異物性はその複雑性・多様性から根本起源が未解明であるものが多い。二次元 ARPES や PMM 法などの電子と準粒子の直接観測を可能とする分光法を用いて、主に励起子絶縁体や電荷密度波物質の電子物性の解明・制御を目指した研究プロジェクトの立ち上げを行なっている。

B-1) 学術論文

T. YAMADA, S. KANAZAWA, K. FUKUTANI and S. KERA, “Growth of Transition-Metal Cobalt Nanoclusters on 2D Covalent Organic Frameworks,” *J. Phys. Chem. C* **128(3)**, 1477–1486 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c07435

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, “Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility,” *Electron. Struct.* **5(3)**, 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

F. MATSUI, K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, T. YANO, H. MATSUDA, Y. OKANO, S. KERA, E. HASHIMOTO, S. KOH, K. UENO, T. KOBAYASHI, E. IWAMOTO, K. SAKAMOTO, S. TANAKA and S. SUGA, “Soft X-Ray Photoelectron Momentum Microscope for Multimodal Valence Band Stereography,” *Rev. Sci. Instrum.* **94(8)**, 083701 (2023). DOI: 10.1063/5.0154156

Z. G. MA, Y. SHEN, K. ZHANG, L. X. CAO, H. REN, W. S. CHEN, H. X. WEI, Y. Q. LI, S. KERA and J. X. TANG, “Regulated Crystallization with Minimized Degradation for Pure-Red Lead-Free Perovskite Light-Emitting Diodes,” *J. Mater. Chem. C* **11(29)**, 9916–9924 (2023). DOI: 10.1039/d3tc01743e

O. ENDO, F. MATSUI, S. KERA, W.-J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, “Hole Doping to Perylene on Au(110): Photoelectron Momentum Microscopy,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **21(3)**, 236–240 (2023). DOI: 10.1380/ejsnt.2023-024

B-3) 総説, 著書

解良 聡, 「有機半導体の電子構造における多体効果」, 有機半導体の開発と最新動向, 第 23 章 (2024).

B-4) 招待講演

S. KERA, “Many body effects define the material properties of molecular solids,” Nanospec FY2023, Okazaki (Japan), March 2024.

S. KERA, “Deep insight into organic semiconductors by itinerant characteristics of the electronic structure,” International conference on Materials science, engineering and technology, Singapore (Singapore), September 2023.

S. KERA, “Impact of vibronic coupling on the electronic structure of organic semiconductor crystals,” 41st International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, Campinas (Brazil), July 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

AOF (Asia Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research) アジア・オセアニア放射光研究評議会庶務委員 (2021–).

学会の組織委員等

第 36 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 組織委員会委員 (2023–2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2019–).

KEK 加速器・共通基盤研究施設運営会議委員 (2021–2024).

KEK 物質構造科学研究所運営会議委員 (2021–2024).

東京大学物性研究所附属極限コヒーレント光科学研究センター軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (2022–2024).

科学技術交流財団あいちシンクロトロン光センター運営委員会委員 (2023–2025).

量子科学技術研究開発機構 NanoTerasu 共用ビームライン整備検討委員会委員 (2023–).

学会誌編集委員

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

B-8) 大学等での講義, 客員

東北大学大学院理学研究科, 委嘱教授, 「強相関電子物理学特論」, 2020年4月-

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-

蘇州大学, 客員教授, 2014年4月-

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(S), 「階層的準粒子の先端計測による可知化と分子材料研究の変革」, 解良 聡 (2023年度-2027年度).

科研費基盤研究(C), 「基底状態観測と物質設計に基づく定常励起子の制御」, 福谷圭祐 (2022年度-2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子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, 分子集合体における「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, 様々な放射光利用先端分光法や独自に開発した分光装置群を駆使して多角的に研究を進めている。2021年度に福谷助教が着任し, 低次元物性と精密計測に関する研究力を強化した。分子結晶や界面の階層性に着目し, 電子物性の多体効果問題に挑戦する。一方, UVSOR施設長として国内コミュニティの基盤強化を推進するための利用支援に注力している。2019年度から技術開発を進めているPMM装置について, スピン検出機能追加による第二期R&Dを開始した。松井教授らと共に多彩な計測機能をもつ複合システムの完成を目指す。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によって, 装置開発とその利用展開についての国際共同研究を推進するとともに, 国内では分子固体系のオールジャパン体制(実験班, 理論班)を構築し, 戦略的に上記装置を利用した新奇実験を牽引する。2023年度後期より下ヶ橋特任助教を採用し, 科研費基盤(S)課題による研究推進を強化した。40周年記念事業を遂行し, 施設長期計画として次世代研究施設UVSOR-IVの建設に向けた準備を多面的に進めている。国内外施設およびコミュニティの意見交換と情報収集に邁進している。