

解 良 聡 (助手)(2003 年 4 月 1 日 ~ 2005 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：有機薄膜物性、電子分光

A-2) 研究課題：

- a) 高分解能光電子分光法による巨大分子吸着系の電子状態
- b) 内殻励起による有機薄膜の表面選択反応

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 多原子から構成される有機分子が構造異方性を持つことは自明であるが、その薄膜状態における吸着分子の配向の異方性と電子状態の関連は正しく理解されていない。これは吸着界面における種々の因子(吸着サイトの不均一性による相互作用の多様化が最も大きい)が複雑に絡み合った結果、本質的な現象が見えにくくなっているためである。グラファイト基板上の有機分子吸着系は、多くの相互作用を単純化することができる点で、こうした種々の複雑化した問題(エネルギー準位接合、分子間相互作用、キャリアダイナミクス)を議論する上で極めて有効である。本研究ではこうしたグラファイト上の高配向有機薄膜に対して、高分解能光電子分光法による電子状態の詳細な議論を行っている。一例として、分子内双極子を持つOTiフタロシアニン分子は膜の作製条件により、お互いの相互作用により双極子をうち消すように配向するアイランド構造と、基板との相互作用により双極子を配列した層構造の2種類を示す。このとき各々の膜構造の違い(配向変化による電気二重層によるポテンシャル面の形成)によって観測される価電子帯エネルギー位置は大きく変化した。一方、均一に配向した単分子膜において、巨大分子吸着系としては異例ともいえる振動と価電子帯ホールとの結合に基づく電子状態の微細構造を検出し、この分野における新たな議論展開の場を切り開いた。さらにペンタセン配向単分子膜の系において、気相状態と理論計算による詳細な比較検討により、固体(単分子膜)における結合定数および振動エネルギーの変化を捉えることに成功した。
- b) 軟X線を用いた内殻電子励起による吸収端微細構造(NEXAFS)は非占有準位に関する多くの情報を含んでいる。さらに励起状態の局在性を利用することで、特定の化学結合を選択的に切断することができるというような興味深い現象を示す。このような選択的結合切断と分子の励起状態は深く関連しており、新たな分子加工技術(分子メス)と共に励起状態の帰属評価法としての効果も期待される。これまでフッ素化有機化合物に関して、軟X線照射と共に放出されたイオン種および収量の励起波長依存性から、分子の結合切断と励起状態の関係を調べてきた。これにより表面近傍からの選択的なフッ素イオン放出が生じていることが明らかとなった。また放出イオンの励起波長依存性を測定することでNEXAFSスペクトルの非占有状態の帰属を行うことができた。

B-1) 学術論文

H. YAMANE, S. NAGAMATSU, H. FUKAGAWA, S. KERA, R. FRIEDLEIN, K. K. OKUDAIRA and N. UENO, "Hole-Vibration Coupling of the Highest Occupied State in Pentacene Thin Films," *Phys. Rev. B* **72**, 153412 (4 pages) (2005).
A. PATNAIK, K. K. OKUDAIRA, S. KERA, H. SETOYAMA, K. MASE and N. UENO, "Polarized Near-Edge X-Ray-Absorption Fine Structure Spectroscopy of C₆₀-Functionalized 11-Amino-1-Undecane Thiol Self-Assembled Monolayer: Molecular Orientation and Evidence for C₆₀ Aggregation," *J. Chem. Phys.* **122**, 154703 (9 pages) (2005).

- K. K. OKUDAIRA, E. KOBAYASHI, S. KERA, K. MASE and N. UENO**, “Ion Desorption Induced by F1s Region Transitions of Poly(tetrafluoroethylene),” *Surf. Sci.* **593**, 297–302 (2005).
- H. YAMANE, H. FUKAGAWA, H. HONDA, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Fine Structure of the Highest Occupied Band in OTi-Phthalocyanine Monolayer,” *Synth. Met.* **152**, 297–300 (2005).
- M. SHIONOIRI, I. YAMAMOTO, M. ONOUE, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Substrate Dependent Anisotropic Surface Diffusion of Indium Atoms on PTCDA Thin Films Studied by PEEM,” *Synth. Met.* **152**, 301–304 (2005).
- K. K. OKUDAIRA, T. WATANABE, S. KERA, E. KOBAYASHI, K. MASE and N. UENO**, “Site-Specific Ion Desorption of Fluorinated Phthalocyanine Studied with Electron-Ion Coincidence Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 461–464 (2005).
- H. FUKAGAWA, H. YAMANE, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “UPS Fine Structures of Highest Occupied Band in Vanadyl-Phthalocyanine Ultrathin Film,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 475–478 (2005).
- M. ONO, H. YAMANE, H. FUKAGAWA, S. KERA, D. YOSHIMURA, K. K. OKUDAIRA, E. MORIKAWA, K. SEKI and N. UENO**, “UPS Study of VUV-Photodegradation of Polytetrafluoroethylene (PTFE) Ultrathin Film by Using Synchrotron Radiation,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **236**, 377–382 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- S. NAGAMATSU, S. KERA, K. K. OKUDAIRA, T. FUJIKAWA and N. UENO**, “Multiple-Scattering Approach, to Angle-Resolved Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy of Large Molecules,” *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **3**, 1–5 (2005).
- H. YAMANE, H. FUKAGAWA, S. NAGAMATSU, M. ONO, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Direct Observation of the HOMO-hole/Vibration Coupling in Pentacene Thin Films by means of High-Resolution Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 19–22 (2005).
- M. ONO, H. YAMANE, H. FUKAGAWA, S. KERA, D. YOSHIMURA, E. MORIKAWA, K. SEKI and N. UENO**, “Possibility of the Fermi Level Control by VUV-Induced Doping of an Organic Thin Film: Polytetrafluoroethylene,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 27–30 (2005).
- S. KERA and N. UENO**, “Deep Insight into a Valence Hole in Organic Semiconductors: High-Resolution Ultraviolet Photoemission Spectroscopy,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 51–56 (2005).
- H. FUKAGAWA, H. YAMANE, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Effects of the Dipole Density on the Electronic Structures of Oriented Thin Films of the Polarized Organic Molecule,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 73–75 (2005).
- K. K. OKUDAIRA, E. KOBAYASHI, H. YAGI, S. KERA, K. MASE and N. UENO**, “Site-Specific Ion Desorption of Poly(tetrafluoroethylene) Studied Using Electron-Ion Coincidence Spectroscopy,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 80–83 (2005).
- S. NAGAMATSU, M. ONO, S. KERA, K. K. OKUDAIRA, T. FUJIKAWA and N. UENO**, “Multiple Scattering Approach to Polarization-Dependent F K-edge XANES Spectra of Polytetrafluoroethylene,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 84–87 (2005).

B-3) 総説、著書

- 瀬戸山寛之、解良 聡、奥平幸司、原正彦、上野信雄,「準安定励起原子電子分光法による自己組織化単分子膜の研究：表面電子状態と表面選択反応」, *真空* **48**, 421–425 (2005).

B-10) 外部獲得資金

日本学術振興会特別研究費,「メタステーブル原子をプローブとする有機超薄膜表面の電子状態の研究」, 解良聡 (1998年-2000年).

若手研究(B),「高度に配向を規定した有機積層膜の電子状態と価電子帯スペクトル構造の真の原因」, 解良聡 (2002年-2004年).

若手研究(A),「巨大分子吸着系における価電子帯ホール・振動結合:有機電荷輸送機構の解明」, 解良聡 (2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

紫外電子分光法による有機薄膜の膜構造および電子状態の研究は、高性能有機デバイスの開発という応用化の側面のみならず、有機分子吸着系における表面・界面特有の現象を調べるといふ基礎学術的な面からも多くの興味深いテーマが残されている。グラファイト上の吸着分子系は有機薄膜における光電子スペクトルの価電子帯微細構造の研究に極めて有効であることがわかったため、今後そのバンド幅やエネルギー位置に着目して詳細な実験を系統的に行い、その起源を明確にすることが課題となる。また観測された価電子帯微細構造は、電荷ポンピングやホール振動カップリングなど、吸着分子の分子振動に誘起された界面現象であると考えられ、有機超伝導体などの有機電気伝導機構を紐解く鍵となると期待できる。今後は、結合定数の大きくなると予想されるカルコゲン原子を含んだ有機分子系の薄膜を作成し、その分子振動とのカップリング状態の検出を狙う。逆に、相互作用が大きな系では電子状態の高エネルギー分解能・角度分解能測定により、分子間相互作用に基づく薄膜面内方向エネルギーバンド分散に関する議論を行う。これらを統括して、有機分子薄膜におけるキャリア輸送機構に代表されるような種々の問題を解明し、この分野における学術的基盤の確立を目指す。

* 2005年4月1日千葉大学大学院助手