

(様式第5号)

金属単結晶上のトリプチセン誘導体単層膜の角度分解光電子分光  
および吸収端近傍 X 線吸収微細構造  
Angle-resolved photoelectron spectroscopy and near edge X-ray absorption fine  
structure of triptycene analogue on metal single crystals

水津理恵・近藤大雅・横倉聖也・山本勇  
Rie Suizu, Taiga Kondo, Seiya Yokokura, and Isamu Yamamoto

名古屋大学大学院理学研究科・佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター  
Department of Chemistry, Nagoya University and  
Synchrotron Light Application Center, Saga University

- ※1 先端創生利用（長期タイプ）課題は、実施課題名の末尾に期を表す（Ⅰ）、（Ⅱ）、（Ⅲ）を追記してください。
- ※2 利用情報の公開が必要な課題は、本利用報告書とは別に利用年度終了後 2 年以内に研究成果公開〔論文（査読付）の発表又は研究センターの研究成果公報で公表〕が必要です（トライアル利用を除く）。
- ※3 実験に参加された機関を全てご記載ください。
- ※4 共著者には実験参加者をご記載ください（各実験参加機関より 1 人以上）。

## 1. 概要（注：結論を含めて下さい）

本研究では、バンド計算によって、特異なバンド分散をもつことが期待されている分子性ハニカム格子の電子バンド構造についての実験的証拠を得ることを目的として、Au(111) 基板にトリプチセン類縁体 Trip-Phz を蒸着し、角度分解光電子分光を行った。膜厚依存を調べたところ、膜厚が増えるにしたがって真空準位のシフトが見られ、膜厚が 1 層になったところで値は一定となった。マシンタイムの関係で、金基板の清浄化が不十分であったため、価電子帯の光電子スペクトルは不鮮明であった。

### (English)

To obtain the knowledge of the band structure of the molecular honeycomb lattice, which expects to have a characteristic band dispersion by the band calculation, we carried out the angle-resolved photoelectron spectroscopy measurement of the triptycene monolayer on gold (111) substrate. A shift in the vacuum level was observed as the film thickness increased, and the value became constant when the film thickness became monolayer. Due to the limitation of machine time, since the cleaning of gold substrate was not sufficient, the photoelectron spectrum in the valence band was unclear.

## 2. 背景と目的

分子性ハニカム格子のバンド構造は、その高い対称性を反映して、Dirac Cone といった特異なバンド分散をもつことが知られている。また、炭素同素体のグラフェンと違い、格子内に大きな空孔をもつことから、ドーパントの侵入・脱離が容易なため、固体電気化学的なレドックス制御手法によって、バンドフィリングを制御することが可能である。近年、我々は $C_3$ 対称性をもつ立体 $\pi$ 共役分子であるトリプチセン誘導体のアニオンラジカル塩が、 $\pi$ 平面間の重なりによって、分子性ハニカム格子を形成することを明らかにしている[1,2]。この結晶構造をもとにバンド計算を行ったところ、グラフェン同様にDirac Coneを含むバンド構造のほか、グラフェンにはない、分散の全くないFlat Bandが含まれていた。このFlat Bandから強磁性および超伝導などのトポロジカル物性が発現することが期待されるため、注目を浴びているが、このような全波数空間に広がるFlat Bandを観測した例は未だ皆無である。フェナジン部位をもつトリプチセン誘導体Trip-Phz (図1) は、Au(111)上にハニカム格子を自己集積的に形成することをSTMによって明らかにしている。本課題では、分子性ハニカム

格子の特異な電子構造を明らかにすることを目的として、Au(111)上にTrip-Phz (図1) の単層膜を作製し、その角度分解光電子分光測定 (ARPES) および低速電子線回折 (LEED) を行った。

### 3. 実験内容 (試料、実験方法、解析方法の説明)

実験はBL10光電子分光ステーションにて行った。まず金(111)単結晶の清浄化をArスパッタ及びアニーリングを繰り返すことで行った。基板結晶軸はSPA-LEED測定により確認した。その後、Trip-Phz分子を真空環境下 ( $< 3.0 \times 10^{-7}$  Pa) において蒸着した。光電子分光の励起光は600 eVおよび40eVの放射光を用いた。

### 4. 実験結果と考察

時間の関係上 Au(111)の清浄化が不十分であり、不鮮明な LEED 像ではあったが、光電子分光にて内殻準位を調べたところ、十分に清浄化されていることが確認できたため、トリプチセン分子を蒸着した。膜厚が増えるに連れ、カットオフのシフトが見られ、1層ついたところでカットオフの値はほぼ一定となった (図 2)。角度分解光電子分光にて価電子帯の電子状態を測定したが、顕著なピークは確認できなかった。

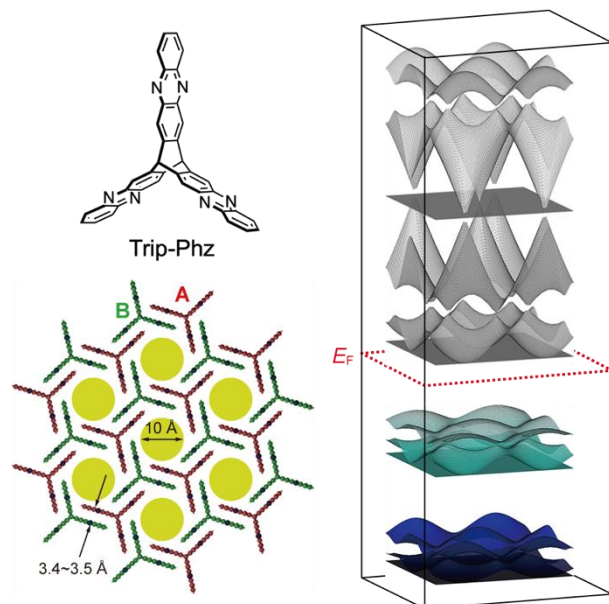


図 1. Trip-Phz 分子がつくる分子性ハニカム格子とバンド構造

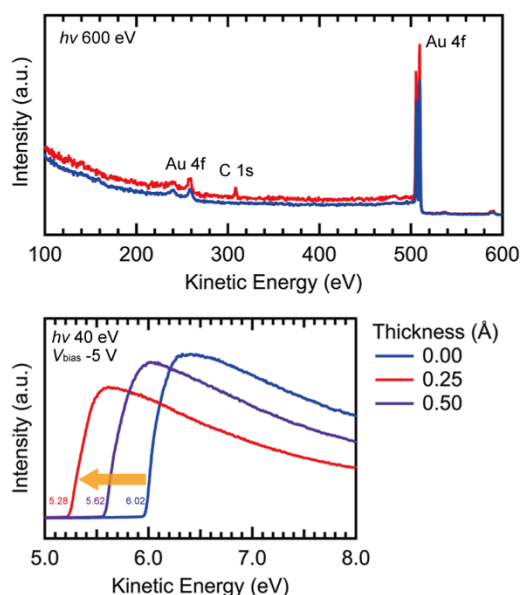


図 2. Au(111)上の Trip-Phz 単層膜の (上) 内殻準位, (下) 真空準位

### 5. 今後の課題

Au(111)の清浄化を十分に行い、シャープな LEED 像を得たのちに、Trip-Phz 分子を蒸着し、その蒸着量と電子構造の変化を調べる。

### 6. 参考文献

- [1] Y. Shuku, et al., *Chem. Commun.*, **54**, 3815 (2018).  
 [2] 阿波賀 邦夫、水津 理恵: 固体物理 **55**, No.9, 409 (2020).

### 7. 論文発表・特許 (注: 本課題に関連するこれまでの代表的な成果) なし

### 8. キーワード (注: 試料及び実験方法を特定する用語を2~3)

トリプチセン誘導体、ハニカム格子、ディラックコーン、フラットバンド

### 9. 研究成果公開について (注: ※2に記載した研究成果の公開について①と②のうち該当しない方を消してください。また、論文(査読付)発表と研究センターへの報告、または研究成果公報への原稿提出時期を記入してください。提出期限は利用年度終了後2年以内です。例えば2018年度実施課題であれば、2020年度末(2021年3月31日)となります。)

長期タイプ課題は、ご利用の最終期の利用報告書にご記入ください。

② 研究成果公報の原稿提出

(提出時期: 2022年6月)