

令和 3 年 5 月 27 日現在

機関番号：63903

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2018～2020

課題番号：18H03904

研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）The impact of electron-phonon coupling on the electron localization of molecular assemble

研究代表者

解良 聡（Kera, Satoshi）

分子科学研究所・光分子科学研究領域・教授

研究者番号：10334202

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 33,900,000円

研究成果の概要（和文）：高感度紫外光電子分光およびシンクロトロン放射光施設を利用した高分解能角度分解光電子分光実験により半導体機能が関与する分子薄膜表面・界面の電子状態研究を行った。有機・無機界面の弱いファンデルワールス相互作用による吸着構造と電子状態の相関について、各種分析法を駆使することにより精密に評価し、分子内の電子の局在性の点から機能や物性のメカニズムを議論した。特に次世代エネルギー変換材料として期待される有機無機ハイブリッド型のペロブスカイト結晶について、伝導帯電子の局在性を世界で初めて定量評価することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

機能分子関連の複雑な薄膜の集合構造を最適化することで物理現象を整理し、各種電子状態の精密計測に成功した。弱い相互作用やフォノン（分子振動）が電子の局在性に及ぼす影響を実験的に検出し、その重要性を見出すことに成功した。柔らかな物質系に対する既存の概念に基づく近似的な物理モデルを打破する必要性が明確になり、今後の理論的な発展や分子デバイスへの応用展開における設計指針を与える点で社会的貢献があった。

研究成果の概要（英文）：We investigated the electronic state of the surface and interface of molecular thin films in which semiconductor functions are expected by high-sensitivity ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS) and high-resolution angle-resolved UPS using synchrotron radiation. The correlation between the adsorption structure and the electronic state due to weak van der Waals interaction was precisely evaluated by making full use of various analytical methods, and the mechanism of function and materials properties was discussed from the viewpoint of electron localization. We also succeeded in evaluating the localization of conduction band structure for the first time for organic-inorganic hybrid perovskite crystal, which is expected as next-generation energy conversion materials.

研究分野：表面物理、有機薄膜物性

キーワード：有機半導体 電子フォノン相互作用 光電子分光 シンクロトロン放射光 電子状態

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

低環境負荷を実現するための材料開発とその応用技術革新が求められており、有機分子材料の研究は今後も高い需要が見込める学際領域である。一方、分子集合体の材料応用として技術開発の先端にいる有機エレクトロニクスデバイスでさえも、華やかな成功裏に基礎学術的視点では、無機半導体と異なる「有機半導体の本質的な特徴」が理解されぬまま爆発的にデバイス開発が進められている点が問題視されている。例えば電荷移動度の物理(ホッピング伝導、バンド伝導機構等)はブラックボックスとして残され、本質的に機能を示す要因である異物質間の界面エネルギー準位の接続モデルは明確とは言えず、無機半導体とは異なる分子機能の本質的可能性を理解せぬまま開発が進められている。ブレークスルーに繋げるためには、どのように量子論的に分子集合体の輸送電荷(準粒子)を特徴付ければ良いか、を理解する事なくしては始まらない。我々は、分子固体における集団振動と分子内振動がそれぞれ異なった形で電荷輸送に寄与し、結晶中で非局在化した電子雲がフォノン結合によって運動量空間で局在化する様子などを初めて実験的に捉えた[]。また電子雲が離散的な単分子層結晶においては、分子内振動と電子の結合強度が電子運動量依存を示す結果を得ている[]。分子固体における電荷輸送機構に対する理論的な取り扱いの見直しを求めるもので、「分子集合体における電子の真の姿=時空間階層性をもつ準粒子描像」の実験的な評価が強く求められる。このように基礎学術的な面で、弱い相互作用の分子集合体における電子準位の空間的局在性・エネルギー離散性とその強いフォノン結合による分極効果、の特徴を正しく描写できていないことが最大の問題点であることが見えており、早急に固体物性・量子化学から発展する大型分子系の学理を構築することが求められている。これらは何れも従来の紫外光電子分光(UPS)では測定が困難あるいは不可能と言われてきたものであるが、我々は膜構造精密制御と分子固体に特化した実験装置開発によって世界に先駆けて計測に成功し「分子集合体、特に有機半導体に本質的な特徴」の学理を手中に持つ。

さらに角度分解 UPS 法の発展的な手法である次世代の光電子運動量顕微鏡(PMM)による顕微二次元画像測定は、現在欧州を中心に活発に研究展開されており、我が国は出遅れた感がある。この新規計測技術は前述の機能分子等の量子論的特徴を定量的に評価できる可能性を示唆しており、早急に我が国においても技術習得・開発を進め、国内展開する必要がある。本研究では PMM 装置の立ち上げによる実験環境の整備も視野に入れる。

2. 研究の目的

分子集合体の物性・機能の本質を理解するために重要な課題は、(1)空間秩序と電子状態の相関評価：分子軌道断層撮影による弱相互作用と電子局在性測定、(2)電子状態の時間的・空間的揺らぎ：電子局在性の電子-フォノン相互作用による動的異方性、の実験的検証である。高度に構造規定された分子薄膜試料について、シンクロトロン放射光・レーザー光源を用いた最先端光電子分光(角度分解 UPS ならびに PMM)および表面分析技術の融合により、精密な電子状態測定を実現し、基礎物性評価に有効な新奇分子機能計測技術の確立を目指す。諸物性に寄与する価電子状態の直接評価により、鍵となる物理量(特に電子局在性)の可視化を目指し、量子力学の数学的表現である「分子軌道」に分子の「形」以上の物理的な付加価値を持たせることで、応用研究への斬新なガイドライン提供を狙う。

3. 研究の方法

本研究で主眼とする UPS による電子状態計測では、一個のホール状態の情報を与えるので、価電子帯最上部(HOMO)からの光電子スペクトルの高精度測定から、伝導ホールによる電気伝導素過程を支配する電子論・量子化学的物理量が得られる。分子間の軌道間相互作用や、他物質との相互作用を受けて、分子軌道のエネルギー分布や量子的局在性が孤立分子のそれからどのように変化するかに着目して研究する。重要な評価技術は任意の集合体の作製と構造規定に始まり、特に知見が限られている分子積層膜あるいは結晶で得られる電子積層系(遍歴電子)の試料探査・調整が必須である。さらに先端光電子分光法による電子状態測定技術を融合し、スペクトル微細構造のエネルギーと運動量分布に加え、その強度の二次元運動量空間イメージングに着目することで、革新的な分子軌道断層撮影法(電子雲の可視化：光電子トモグラフィー実験)が実現する。弱い相互作用に依存した電子雲の僅かな形状変化を、系統的な試料選定によって追跡し、相互作用などの外因が軌道分布に影響を及ぼす様子を実験的に検出する。

第二段階は電子とフォノン(集団振動と分子内振動)の結合状態(準粒子)を分離精査して評価することである。軌道間相互作用の大きさ(移動積分： t)に依存して、分子内振動の影響は異なって観測されるだろう。振動微細構造の測定成功例は我々のグループが独占しており他者の追従を見ない。しかし実験例が極めて限定的であり、新規分子のデータ取得そのものが依然として挑戦的な課題である。電子-フォノン相互作用の温度依存性の評価によって、空間異方性・局

在性の異なるフォノンの影響を検討する。

4. 研究成果

複雑な分子薄膜の集合構造を最適化することで物理現象を整理し、高感度 UPS 装置およびシンクロトロン放射光施設を利用した各種光電子分光実験等により、弱い相互作用やフォノン（分子振動）が電子の局在性に及ぼす影響を実験的に検出し、その重要性を見出すことに成功した。ファンデルワールス相互作用が期待される有機・無機界面の吸着構造と電子状態の相関を表面分析法で精密に評価し各種機能や物性のメカニズムを議論した。また複雑な有機無機ハイブリッド型のペロブスカイト単結晶について、伝導帯電子の局在性を世界で初めて評価することに成功した。24 件の論文成果として発表した。

以下に成果の一例を紹介する。

< 1 : 有機半導体フッ化ペンタセンの結晶膜の作製 : p/n 接合結晶におけるエネルギー分散関係の世界初検出 >

有機半導体単結晶の電子構造測定は、その低い電気伝導度から実測例は極めて限定される。ペンタセン (PEN) 単結晶を下地基板として使う事で、フッ化ペンタセン (PFP) 分子の単結晶膜の作製に成功し、そのエネルギー分散関係と有効質量の異方性評価に成功した (図 1)。今後はその温度依存計測によりフォノン結合定数の評価が可能になると期待される []。

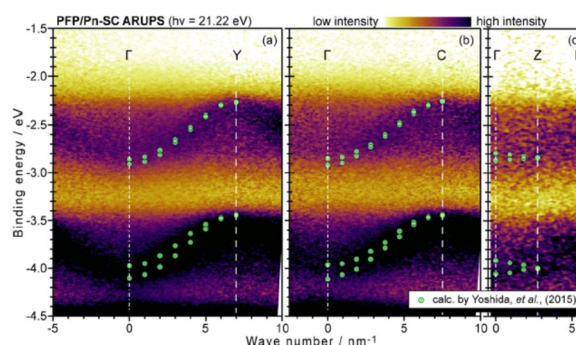


図 1. PFP 分子結晶のエネルギーバンド分散関係の初観測

< 2 : 有機二成分混合薄膜の積層構造と電子状態の相関 >

有機ドナー・アクセプター界面のモデルとしてペンタセン (PEN) 分子とフッ化ペンタセン (PFP) 分子の混合膜を成膜し光電子分光による電子状態を測定した。混合状態の結晶構造は X 線回折により確認した。各分子のもつ永久四極子の整列により構築される静電ポテンシャルがイオン化エネルギーを大きく変調させ、界面における電子準位接合に影響を及ぼし、半導体特性を支配することが見出された (図 2)。今後はヘテロ界面における異分子間の電子局在性の変化や、隣接分子の局所的な相違によるフォノンの影響を分離して議論できると期待される []。

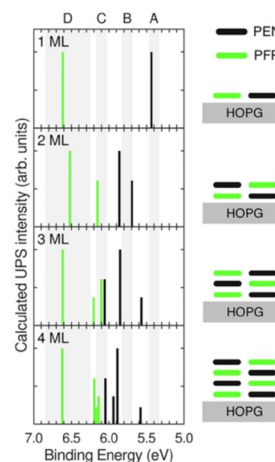


図 2. PFP と PEN 混合積層膜の電子準位分裂の検出

< 3 : 有機無機半導体界面の電子フォノン相互作用による電荷移動量への影響 >

有機アクセプターとして知られるフッ化 TCNQ 分子を層状化合物であるグラファイトの上に転写した硫化モリブデン単層膜を基板として成膜し、有機半導体 無機半導体接合界面を構築した。vdW 力による弱相互作用界面のモデル試料として検討が可能で、電荷移動のメカニズムを議論した。角度分解 UPS による温度依存特性と精密な界面電子構造計算の結果から、界面における電子雲結合と分子内電子フォノン結合の相乗によって実現し、電荷移動量が温度制御可能であることを見出した。今後は温度で特徴づけできる分子機能の開拓により、新たな光・電子デバイスの研究開発へつながる []。

< 4 : 有機無機ハイブリッドペロブスカイト結晶の電子構造 >

次世代太陽電池として期待される有機無機混合型ペロブスカイトは有機分子が担う柔らかさももたらす構造自由度と電子物性の関係性が注目されている。放射光を用いたエネルギー可変

光電子分光により初めて電子のエネルギー分散関係の検出に成功した[]。また表面元素組成の評価と合わせて価電子バンドのラシュバ分裂の検出に初めて成功した[]。さらに逆光電子分光および二光子光電子分光により世界で初めて伝導帯電子のエネルギー分散関係の検出に成功した[図 3,]。これら電子局在性の詳細な知見は今後の展開として、こうした柔らかな物質群の構造揺らぎの効果を議論するうえで有効である。

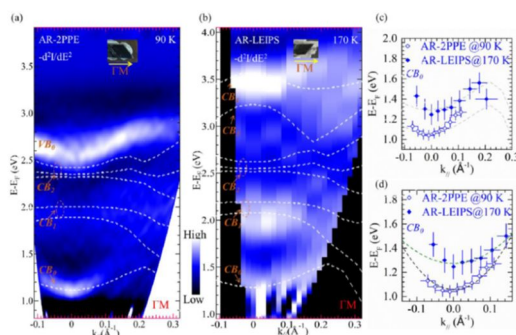


図 3. MAPbI3 単結晶で初観測された伝導帯バンド分散関係

< 5 : 次世代光電子分光システム : 光電子運動量顕微鏡の立ち上げ >

次世代の電子状態評価方法として、電子構造の完全決定が可能な光電子運動量顕微鏡の開発を UVSOR 放射光施設と連携して進めた。欧州で製品化された装置をプロトタイプ機器として国内初号機展開し、装置性能に関する論文を発表した[⑨⑩]。今後は、本研究で見出された電子局在性の変遷を示す良質な試料系に対して本顕微鏡装置を用いることで、電子の軌道イメージングが可能となり、柔らかな物質系の機能・物性の真の理解が深まることで周辺応用分野の飛躍的な発展が期待される。

< 引用文献 >

F. Bussolotti, J. Yang, T. Yamaguchi, Y. Nakayama, M. Matsunami, H. Ishii, N. Ueno, and S. Kera, Nature Communications 8, 173-179 (2017).
 S. Kera, S. Hosoumi, K. Sato, H. Fukagawa, S. Nagamatsu, Y. Sakamoto, T. Suzuki, H. Huang, W. Chen, A. T. S. Wee, V. Coropceanu, and N. Ueno, J. Phys. Chem. C, 117, 22428-22437 (2013).
 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, J. Phys. Chem. Lett. 10, 1312-1318 (2019).
 G. D'Avino, S. Duhm, R. Della Valle, G. HeimeI, M. Oehzelt, S. Kera, N. Ueno, D. Beljonne, and I. Salzmann, Chem. Mater. 32(3), 1261-1271 (2020).
 S. Park, H. Wang, T. Schultz, D. Shin, R. Ovsyannikov, M. Zacharias, D. Maksimov, M. Meissner, Y. Hasegawa, T. Yamaguchi, S. Kera, A. Aljarb, A. Han, L-J. Li, V. C. Tung, P. Amsalem, M. Rossi, and N. Koch, Adv. Mater. 33, 2008677 (2021).
 J. Yang, S-X. Ren, T. Yamaguchi, M. Meissner, L. Cheng, L. Zhou, S. Ideta, K. Tanaka, S. Kera, Appl. Phys. Exp. 13, 011009-1-4 (2020).
 J. Yang, M. Meissner, T. Yamaguchi, B. Xi, K. Takahashi, S. Abdullah, X. Liu, H. Yoshida, M. Fahlman, and S. Kera, Phys. Rev. B 102, 245101-1-6 (2020).
 J. Yang, H. Sato, H. Orio, X. Liu, M. Fahlman, N. Ueno, H. Yoshida, T. Yamada, S. Kera, J. Phys. Chem. Lett. 12, 3773-3778 (2021).
 S. Makita, H. Matsuda, Y. Okano, T. Yano, E. Nakamura, Y. Hasegawa, S. Kera, S. Suga, and F. Matsui, e-Journal of Surf. Sci. and Nanotech. 19, 42-47 (2021).
 F. Matsui, S. Makita, H. Matsuda, T. Yano, E. Nakamura, K. Tanaka, S. Suga, S. Kera, Photoelectron Momentum Microscope at BL6U of UVSOR-III Synchrotron, Jpn. J. Appl. Phys. 59, 067001-1-9 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計24件（うち査読付論文 24件 / うち国際共著 15件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Matsui Fumihiko, Makita Seiji, Matsuda Hiroyuki, Ueba Takahiro, Horigome Toshio, Yamane Hiroyuki, Tanaka Kiyohisa, Kera Satoshi, Kosugi Nobuhiro	4. 巻 18
2. 論文標題 Bulk and Surface Band Dispersion Mapping of the Au(111) Surface by Acceptance-cone Tunable PES System	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 18 ~ 23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2020.18	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 D' Avino Gabriele, Duhm Steffen, Della Valle Raffaele Guido, Heimel Georg, Oehzelt Martin, Kera Satoshi, Ueno Nobuo, Beljonne David, Salzmann Ingo	4. 巻 32
2. 論文標題 Electrostatic Interactions Shape Molecular Organization and Electronic Structure of Organic Semiconductor Blends	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 1261 ~ 1271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.9b04763	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yang Jin-Peng, Ren Si-Xian, Yamaguchi Takuma, Meissner Matthias, Cheng Li-wen, Zhou Lei, Ideta Shinichiro, Tanaka Kiyohisa, Kera Satoshi	4. 巻 13
2. 論文標題 Valence band dispersion measured in the surface normal direction of CH ₃ NH ₃ PbI ₃ single crystals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 011009 ~ 011009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab6134	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yamane Hiroyuki, Matsui Fumihiko, Ueba Takahiro, Horigome Toshio, Makita Seiji, Tanaka Kiyohisa, Kera Satoshi, Kosugi Nobuhiro	4. 巻 90
2. 論文標題 Acceptance-cone-tunable electron spectrometer for highly-efficient constant energy mapping	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Review of Scientific Instruments	6. 最初と最後の頁 093102 ~ 093102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5109453	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nemoto Ryohei, Kroeger Peter, Putri Hartini Ayu Novita, Hosokai Takuya, Horie Masaki, Kera Satoshi, Yamada Toyo Kazu	4. 巻 123
2. 論文標題 Well-Ordered Monolayer Growth of Crown-Ether Ring Molecules on Cu(111) in Ultra-High Vacuum: An STM, UPS, and DFT Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 18939 ~ 18950
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03335	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Schlesinger Raphael, Bussolotti Fabio, Yang Jinpeng, Sadofev Sergey, Vollmer Antje, Blumstengel Sylke, Kera Satoshi, Ueno Nobuo, Koch Norbert	4. 巻 3
2. 論文標題 Gap states induce soft Fermi level pinning upon charge transfer at ZnO/molecular acceptor interfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 074601-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.074601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Park S., Schultz T., Han A., Aljarb A., Xu X., Beyer P., Opitz A., Ovsyannikov R., Li L.-J., Meissner M., Yamaguchi T., Kera S., Amsalem P., Koch N.	4. 巻 2
2. 論文標題 Electronic band dispersion determination in azimuthally disordered transition-metal dichalcogenide monolayers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Communications Physics	6. 最初と最後の頁 68-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42005-019-0166-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Kirchhübel Tino, Monti Oliver L. A., Munakata Toshiaki, Kera Satoshi, Forker Roman, Fritz Torsten	4. 巻 21
2. 論文標題 The role of initial and final states in molecular spectroscopies	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 12730 ~ 12747
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CP07318J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakayama Yasuo, Tsuruta Ryohei, Moriya Naoki, Hikasa Masataka, Meissner Matthias, Yamaguchi Takuma, Mizuno Yuta, Suzuki Toshiyasu, Koganezawa Tomoyuki, Hosokai Takuya, Ueba Takahiro, Kera Satoshi	4. 巻 10
2. 論文標題 Widely Dispersed Intermolecular Valence Bands of Epitaxially Grown Perfluoropentacene on Pentacene Single Crystals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1312 ~ 1318
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.8b03866	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Schwarze Martin, Gaul Christopher, Scholz Reinhard, Bussolotti Fabio, Hofacker Andreas, Schellhammer Karl Sebastian, Nell Bernhard, Naab Benjamin D., Bao Zhenan, Spoltore Donato, Vandewal Koen, Widmer Johannes, Kera Satoshi, Ueno Nobuo, Ortmann Frank, Leo Karl	4. 巻 18
2. 論文標題 Molecular parameters responsible for thermally activated transport in doped organic semiconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Materials	6. 最初と最後の頁 242 ~ 248
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41563-018-0277-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Winkler Stefanie, Xin Qian, Li Chen, Kera Satoshi, Mullen Klaus, Ueno Nobuo, Koch Norbert, Duhm Steffen	4. 巻 1
2. 論文標題 Modification of TiO ₂ (110)/organic hole transport layer interface energy levels by a dipolar perylene derivative	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Electronic Structure	6. 最初と最後の頁 015007 ~ 015007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2516-1075/aada95	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakayama Yasuo, Hikasa Masataka, Moriya Naoki, Meissner Matthias, Yamaguchi Takuma, Yoshida Koki, Murata Mimi, Mase Kazuhiko, Ueba Takahiro, Kera Satoshi	4. 巻 33
2. 論文標題 Anisotropic valence band dispersion of single crystal pentacene as measured by angle-resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Materials Research	6. 最初と最後の頁 3362 ~ 3370
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1557/jmr.2018.315	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yang Jin-Peng, Meissner Matthias, Yamaguchi Takuma, Zhang Xiu-Yun, Ueba Takahiro, Cheng Li-Wen, Ideta Shinichiro, Tanaka Kiyohisa, Zeng Xiang-Hua, Ueno Nobuo, Kera Satoshi	4. 巻 2
2. 論文標題 Band Dispersion and Hole Effective Mass of Methylammonium Lead Iodide Perovskite	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Solar RRL	6. 最初と最後の頁 1800132 ~ 1800132
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/solr.201800132	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 You Cong, Xia Fang, Zhao Yue, Zhang Yin, Sheng Yongjian, Wu Yipei, Hang Xiao-Chun, Chen Fei, Ma HuiLi, Shen Kang, Sun Zhengyi, Ueba Takahiro, Kera Satoshi, Zhang Cong, Zhang Honghai, Chen Zhi-Kuan, Huang Wei	4. 巻 9
2. 論文標題 Probing Triplet Excited States and Managing Blue Light Emission of Neutral Tetradentate Platinum(II) Complexes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2285 ~ 2292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcclett.8b00797	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kashimoto Yuki, Yonezawa Keiichirou, Meissner Matthias, Gruenewald Marco, Ueba Takahiro, Kera Satoshi, Forker Roman, Fritz Torsten, Yoshida Hiroyuki	4. 巻 122
2. 論文標題 The Evolution of Intermolecular Energy Bands of Occupied and Unoccupied Molecular States in Organic Thin Films	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 12090 ~ 12097
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b02581	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Makita Seiji, Matsuda Hiroyuki, Okano Yasuaki, Yano Takayuki, Nakamura Eiken, Hasegawa Yuri, Kera Satoshi, Suga Shigemasa, Matsui Fumihiko	4. 巻 19
2. 論文標題 Contrast Inversion of Photoelectron Spectro-microscopy Image	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 42 ~ 47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2021.42	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nozaki M., Haniuda M., Niki K., Fujikawa T., Kera S.	4. 巻 249
2. 論文標題 Many-body photoemission theory for organic molecular crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena	6. 最初と最後の頁 147071 ~ 147071
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.elspec.2021.147071	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yang Jinpeng, Sato Haruki, Orio Hibiki, Liu Xianjie, Fahlman Mats, Ueno Nobuo, Yoshida Hiroyuki, Yamada Takashi, Kera Satoshi	4. 巻 12
2. 論文標題 Accessing the Conduction Band Dispersion in CH ₃ NH ₃ PbI ₃ Single Crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 3773 ~ 3778
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcclett.1c00530	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 S. Park, H. Wang, T. Schultz, D. Shin, R. Ovsyannikov, M. Zacharias, D. Maksimov, M. Meissner, Y. Hasegawa, T. Yamaguchi, S. Kera, A. Aljarb, A. Han, L-J. Li, V. C. Tung, P. Amsalem, M. Rossi, and N. Koch	4. 巻 33
2. 論文標題 Temperature-dependent ground state charge transfer in van der Waals heterostructures	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 2008677 ~ 2008677
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adma.202008677	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Takeuchi Riku, Izawa Seiichiro, Hasegawa Yuri, Tsuruta Ryohei, Yamaguchi Takuma, Meissner Matthias, Ideta Shin-ichiro, Tanaka Kiyohisa, Kera Satoshi, Hiramoto Masahiro, Nakayama Yasuo	4. 巻 125
2. 論文標題 Experimental Observation of Anisotropic Valence Band Dispersion in Dinaphtho[2,3-b:2',3'-f]thieno[3,2-b]thiophene (DNFT) Single Crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2938 ~ 2943
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c09239	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Liu Yongfeng, Tang Shi, Fan Junpeng, Gracia-Espino Eduardo, Yang Jinpeng, Liu Xianjie, Kera Satoshi, Fahlman Mats, Larsen Christian, Wogberg Thomas, Edman Ludvig, Wang Jia	4. 巻 4
2. 論文標題 Highly Soluble CsPbBr ₃ Perovskite Quantum Dots for Solution-Processed Light-Emission Devices	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Nano Materials	6. 最初と最後の頁 1162 ~ 1174
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnm.0c02797	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yang Jinpeng, Meissner Matthias, Yamaguchi Takuma, Xi Bin, Takahashi Keishi, Rahman Shed A. Abd., Liu Xianjie, Yoshida Hiroyuki, Fahlman Mats, Kera Satoshi	4. 巻 102
2. 論文標題 Temperature-dependent band structure evolution determined by surface geometry in organic halide perovskite single crystals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 245101 ~ 245101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.245101	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kirchhübel Tino, Kera Satoshi, Munakata Toshiaki, Ueno Nobuo, Shiraishi Ryo, Yamaguchi Takuma, Yonezawa Keiichirou, Ueba Takahiro, Bussolotti Fabio, Yang Jinpeng, Yamada Takashi, Mori Ryosuke, Kunieda Shogo, Huempfer Tobias, Gruenewald Marco, Forker Roman, Fritz Torsten	4. 巻 124
2. 論文標題 Role of Initial and Final States in Molecular Spectroscopies: Example of Tetraphenyldibenzoperiflanthene (DBP) on Graphite	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 19622 ~ 19638
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c05448	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Matsui Fumihiko, Makita Seiji, Matsuda Hiroyuki, Yano Takayuki, Nakamura Eiken, Tanaka Kiyohisa, Suga Shigemasa, Kera Satoshi	4. 巻 59
2. 論文標題 Photoelectron Momentum Microscope at BL6U of UVSOR-III synchrotron	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 067001 ~ 067001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab9184	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計16件(うち招待講演 16件/うち国際学会 10件)

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 Photoelectron spectroscopy of semiconducting organic molecules
3. 学会等名 18th European Conference on Applications of Surface and interface Analysis (ECASIA) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 Evolution of pi orbital state upon assembling the molecules on the surface
3. 学会等名 14th International Symposium on Functional pi-electron Systems (FP14) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 Energy and spatial distribution of frontier orbital state for organic thin films
3. 学会等名 2nd International Conference on Materials research and Innovation (ICMARI) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 A perspective of frontier orbital state for weakly bound molecules on the surface
3. 学会等名 25th Users' Meeting & Workshops at NSRRC (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第4回固体化学フォーラム（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 有機半導体分子の電子状態の特徴とその局在性の変遷
3. 学会等名 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（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 分子集合体における電子局在性
3. 学会等名 第17回SPring-8ユーザー協同体 顕微ナノ材料科学研究会合同シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 有機半導体結晶における電子格子相互作用
3. 学会等名 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（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 分子性結晶の電子状態の特徴：局在性の変遷
3. 学会等名 第79回応用物理学会秋季学術講演会（シンポジウム）（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 解良 聡
2. 発表標題 紫外光電子分光法による有機半導体の物性・機能評価
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季年会（シンポジウム：有機半導体の構造・キャリア輸送制御の最前線）（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Kera
2. 発表標題 Electronic band dispersion of perovskite single crystal: MAPbI3
3. 学会等名 International Workshop on Organic Semiconductors and Related Materials（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Kera
2. 発表標題 Evolution of electron localization upon assembling the molecules on the surface
3. 学会等名 9th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Kera
2. 発表標題 Charge delocalization upon molecular assembly
3. 学会等名 9th International Workshop on Low Energy Electron Diffraction and Related Techniques (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Kera
2. 発表標題 Exploring function and property of organic materials by photoelectron spectroscopy
3. 学会等名 Recent Progress of Organic Electronics in Japan and Korea (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Kera
2. 発表標題 Impacts of charge relaxation on the energy-level alignment: Tin(IV)phthalocyanine dichloride monolayer on graphite
3. 学会等名 The 9th International Conference on Technological Advances of Thin Films and Surface Coatings (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Kera
2. 発表標題 Evolution of Electron Localization upon Molecular Assembling
3. 学会等名 International Symposium on Spectroscopy and Dynamics at Surface and Interface (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

研究室サイト
https://groups.ims.ac.jp/organization/kera_g/

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
連携研究者	上羽 貴大 (Ueba Takahiro) (20759245)	分子科学研究所・光分子科学研究領域・助教 (63903)	
連携研究者	マイスナー マティアス (Meissner Matthias) (40814231)	分子科学研究所・光分子科学研究領域・IMSフェロー (63903)	
連携研究者	吉田 弘幸 (Yoshida Hiroyuki) (00283664)	千葉大学・大学院工学研究科・教授 (12501)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
中国	揚州大学	蘇州大学		
ドイツ	イェナ大学	ユーリッヒ総合研究機構	フンボルト大学ベルリン	他2機関

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	アリゾナ州立大学			
カナダ	モントリオール大学			
イスラエル	ワイツマン研究所			