



AichiSR

軸配位型フタロシアニン分子系伝導体 TPP[(FePc)(CN)₂]₂ 単結晶の角度分解光電子分光

保科拓海^A, 仲武昌史^B, 高倉将一^B, 出田真一郎^C, 田中清尚^C, 松田真生^D, 花咲徳亮^E, 伊藤孝寛^{F, A}
名大院工^A, あいちSR^B, 熊本大理^D, 大阪大学^E, 名大SRセ^F

キーワード : 電子状態, 遷移金属フタロシアニン, 分子性伝導体

1. 背景と研究目的

金属フタロシアニン (M(Pc)) を含む系は、伝導電子を供給する π 共役系環状分子の中心に遷移金属を導入することにより、強相関系遷移金属酸化物と類似した強い π -d 相互作用が実現することに伴い、巨大な負の磁気抵抗効果に代表される特異な物性を示す[1]ことから興味深い系である。この系の中でも、擬一次元的な伝導特性を示す軸配位型フタロシアニン系伝導体 TPP[(FePc)(CN)₂]₂ 単結晶に着目し、我々は 2021L4001 および 2021L5001 期に、Fe L_{2,3} 端吸収分光 (XAS) および Fe 2p-3d 共鳴光電子分光 (PES) 測定の結果から、フェルミ準位近傍 1.5 eV における Fe 3d 軌道に帰属されるピーク構造および価電子帯スペクトルに重なって観測される運動エネルギー (K.E.) = 698.5 ± 1.5 eV における Fe LMM オーজে線が存在することを報告してきた。本研究では、価電子帯 PES スペクトルにおける軌道成分を詳細に分離することを目的として、N-K 端および C-K 端近傍における XAS/PES 測定を行った。

2. 実験内容

N-K 端および C-K 端近傍における XAS および PES 測定は、全電子収量法および光電子アナライザにより得られる ARPES イメージを、励起エネルギー $h\nu$ に対して一定の結合エネルギー領域で得られるように走査することにより行った。検出角度は無偏光条件に対応する $\theta = 9.7^\circ$ (magic angle) に設定して行った。試料温度は室温に設定した。清浄試料表面は、単結晶試料を(110)面について劈開することで得た。

3. 結果および考察

図 1 に TPP[(FePc)(CN)₂]₂ の Fe-L_{2,3} 端、N-K 端および C-K 端近傍において得られた XAS スペクトル、励起エネルギー依存 PES スペクトルおよび共鳴 PES スペクトルをまとめた結果を示す。Fe-L_{2,3} 端近傍 (a-c) と同様に、N-K 端近傍においても結合エネルギー 5~12 eV 近傍において N KLL オーজে線が観測されることを見出した。また、 $h\nu = 396 \sim 400$ eV を用いて得られた PES スペクトルにおいては、フェルミ準位近傍においてオーজে線とは逆に低結合エネルギー側にシフトする高次光の影響に伴うピーク構造が重なることが明らかになった。上記の影響を考慮することにより、TPP[(FePc)(CN)₂]₂ の価電子帯を形成する 1.5eV (A)、4 eV (B) および 6 eV (C) におけるピーク構造は、それぞれ、Fe 3d-C sp、Fe 3d-N sp および N sp-C sp 混成軌道に帰結されることを見出した。

4. 参考文献

1. N. Hanasaki, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 033703.

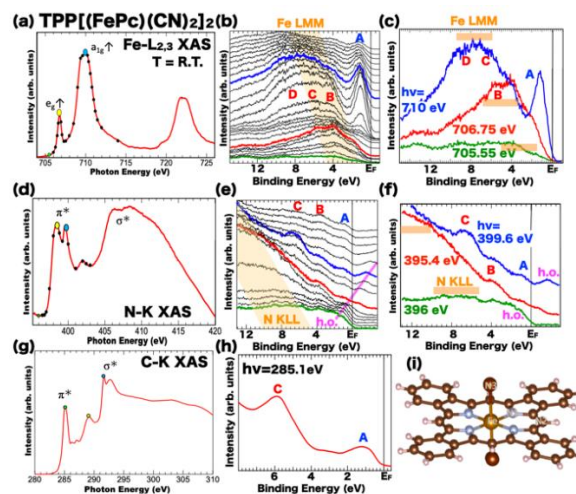


Fig.1 (a-h) TPP[(FePc)(CN)₂]₂ の Fe-L_{2,3} 端 (a-c) N-K 端 (d-f) および C-K 端 (g,h) 近傍における XAS スペクトル (a,d,g)、励起エネルギー依存 PES スペクトル (b,e) および Fe 2p-3d (c)、N 1s-2p (f) および C 1s-2p (h) 共鳴 PES スペクトル。橙領域は Fe LMM および N KLL オーজে線が重なるエネルギー領域にそれぞれ対応する。ピンク線 (h.o.) は高次光の影響。(i) FePc(CN)₂ 分子の模式図。