



PRESS RELEASE

大学記者クラブ加盟各社 御中

平成 22 年 11 月 17 日
岡 山 大 学

ピセンのカリウムドーピングに伴う電子構造変化の直接観測

概要：本学大学院自然科学研究科 岡崎宏之非常勤研究員（博士後期課程 3 年生）、横谷尚睦教授らの研究グループは、ピセンおよびカリウムドーピングピセンの電子構造を実験的に観測する事に世界で初めて成功しました。カリウムドーピングピセンは芳香族炭化水素¹⁾における初めての超電導体²⁾です。しかし、カリウムドーピングピセンの超電導メカニズム、また超電導を誘起する電子構造は解明されていません。我々は光電子分光法³⁾を用いピセンのカリウムドーピングに伴う電子構造変化を直接的に観測しました。この結果は、芳香族炭化水素超電導体の超電導メカニズム解明および新規超電導体探索の指針になると期待されます。

業績：岡山大学大学院自然科学研究科の岡崎宏之非常勤研究員（博士後期課程 3 年生）、脇田高德特任助教、横谷尚睦教授、神戸高志准教授、久保園芳博教授らは、長崎総合科学大学の加藤貴准教授らと共同で、ピセンのカリウムドーピングに伴う電子構造変化を観測することに世界で初めて成功しました。

背景：ピセンは 5 つのベンゼン環がジグザグに結合した分子で、その分子が積層した結晶構造をとります（図 1）。純粋ピセンは半導体ですが、カリウムをドーピングする事で超電導体（超電導転移温度 $T_c = 7\text{K}$ および 18K ）になる事が最近発見されました。カリウムドーピングによるピセンの電子構造変化を解明する事は、ピセンの超電導メカニズム解明の為に極めて重要です。しかし、カリウムドーピングピセンはおろか純粋ピセンの電子構造すら解明されていませんでした。我々は、広島大学放射光科学研究センター(HiSOR)に設置された「岡山大学ビームライン」で電子構造を直接観測できる光電子分光を用い、純粋及びカリウムドーピングピセン薄膜を測定し、カリウムドーピングによる電子構造変化を観測する事に成功しました（図 2）。分子軌道計算と実験結果との比較により、カリウムからピセン分子に移動した電導電子とピセン分子の振動との相互作用が電子構造変化を理解する上で重要である事が分かりました。

意義・波及効果：今回の研究結果は、カリウムからピセン分子に移動した電導電子とピセン分子の振動との相互作用の重要性を示します。電子と格子振動との相互作用が超電導を誘起する為、ピセンの超電導メカニズムを理解する上で、電子と分子振動の相互作用の重要性を示した意義は非常に大きいと思われます。電子と分子振動の相互作用の大きな芳香族炭化水素にドーピングする事がより高い T_c を有する芳香族炭化水素の発見に繋がる可能性があります。加えて、純粋ピセンの電子構造の理解はデバイス開発にも指針を与えます。この研究は科学研究補助金および戦略的創造研究事業の支援を受けて実施されました。

この成果は米国物理雑誌 Physical Review B の 11 月 15 日号に掲載される予定です。（論文題目 “Electronic structure of pristine and K-doped solid picene: Non-rigid-band change and its implication for electron-intramolecular-vibration interaction” 「純粋及びカリウムドー

PRESS RELEASE

ピセンの電子構造:非リジッドバンド変化と電子—分子内振動相互作用への示唆」)。

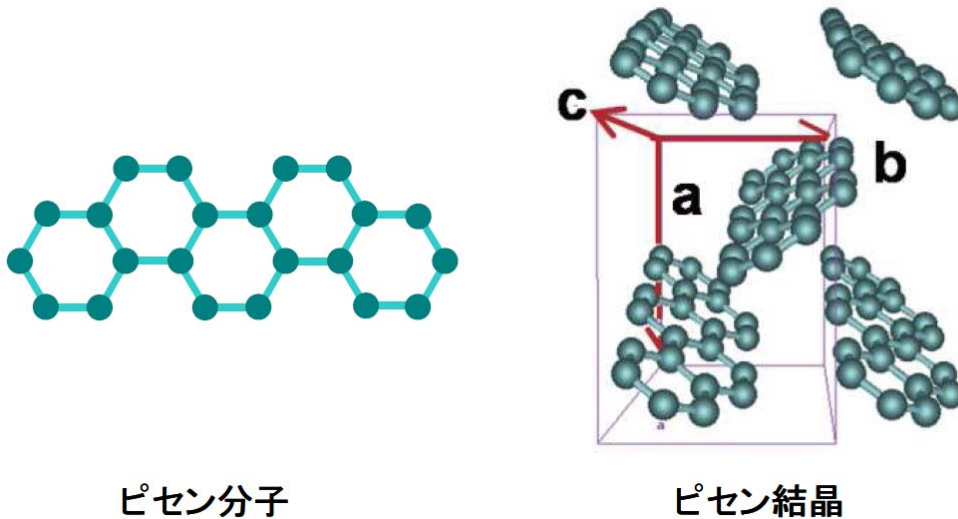


図1 ピセン (C₂₂H₁₄) 分子 (左) とピセン固体の結晶構造 (右)

ピセン分子は六角形のそれぞれの角に炭素原子を配置するベンゼン環が5つジグザグに並んだ構造をとります。ピセン固体はピセン分子が斜めに少し傾いた状態で配列した層が、c軸方向に積層した構造をとります。

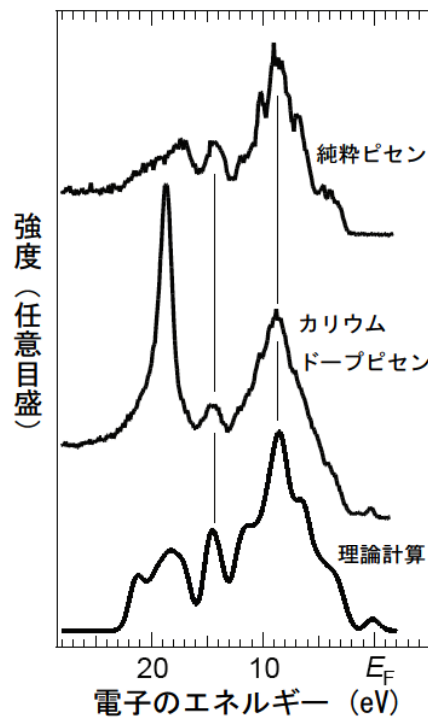


図2 純粋ピセンおよびカリウムドープピセンの光電子分光実験結果と理論計算との比較



PRESS RELEASE

測定した光電子分光データ（上段：純粋ピセン、中段：カリウムドープピセン）、及び分子軌道計算データ（下：電子ドープピセン）。純粋ピセンとカリウムドープピセンの実験データは大まかには似ている（縦線に対応）が、カリウムドープピセンにはフェルミ準位(E_F)⁵⁾近傍に新たなピークが出現しています。カリウムドープピセンの結果は、カリウムから移動した電子とピセン分子の振動との相互作用を考慮した計算結果（図の下）と大変良い一致を示しました。この相互作用を考慮しない計算では良い一致は得られませんでした。この結果は、カリウムドープピセンの電子状態を理解する上でカリウムからピセン分子に移動した電導電子とピセン分子の振動との相互作用が極めて重要であることを示しています。

用語解説

1) 芳香族炭化水素

ベンゼン環を基本フレームとした分子。

2) 超電導

ある種の金属の抵抗が、その物質に固有な温度以下でゼロになる現象。超電導に転移する温度を超電導転移温度(T_c)といい、通常の超電導体では T_c は絶対零度 ($0K=-273.15^\circ C$) に近い温度でおこります。超電導は電気抵抗ゼロで電流を運べるため、エネルギーロスのない送電線などで利用されています。また、大きな磁場を発生させることができるのでリニアモーターカーにも利用できます。 T_c を高めることにより、より安価に超電導の優れた特性を利用することができます。

3) 光電子分光

物質に高いエネルギーの光を照射し、光電効果により放出される光電子の運動エネルギーを測定することにより、物質内部の電子エネルギーを測定することができます。

4) フェルミ準位(E_F)

物質中の電子が持つ最高エネルギー。 E_F 近傍の電子が物質の電氣的性質を担います。

<お問い合わせ>

岡山大学 （所属）自然科学研究科

・（氏名）横谷尚睦

（電話番号）086-251-7897

（FAX番号）086-251-7903