

光電子収量分光法及び角度分解光電子分光法による ペンタセン単結晶の電子構造観察

Electronic Structure of Pentacene Single Crystal Studied by

Photoelectron Yield Spectroscopy and Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy

千葉大院融合¹, 千葉大工², 千葉大先進³

○浦上 裕希¹, 町田 真一¹, 山本 真之², Kaveenga Rasika Koswattage³, 中山 泰生³, 石井 久夫^{1,3}

AIS, Chiba Univ.¹, Faculty of engineering, Chiba Univ.², CFS, Chiba Univ.³

○Yuki Uragami¹, Shin'ichi Machida¹, Masayuki Yamamoto²

Kaveenga Rasika Koswattage³, Yasuo Nakayama³, Hisao Ishii^{1,3}

E-mail: uragami@chiba-u.jp

近年、有機エレクトロニクスの研究が大きな注目を集めており、有機 EL、有機電界効果トランジスタ(OFET)、有機太陽電池などの研究・開発が盛んに行われている。しかし、有機エレクトロニクスデバイスの動作を司る基本原理については未解明な部分も多く残っており、キャリアの注入過程や伝導機構の解明のために、光電子分光(PES)を用いて電子構造に関する研究が行われてきた。不純物や結晶粒界が少ない有機単結晶は、有機材料固有の物性を調べるのに適した試料であるが、 μm オーダーの厚みを有する有機単結晶に対し通常の PES を適用することは、試料帯電問題のため容易ではない。そこで本研究では、原理的に試料帯電の影響を受けない手法である光電子収量分光法(PYS)[1]及びレーザー照射によって試料帯電を緩和した角度分解光電子分光(ARPES)[2]を用い、代表的な p 型 OFET 材料であるペンタセンの単結晶の電子構造を評価した。

Fig.1 に PYS 測定に用いた試料の写真を載せる。イオン化エネルギーが高い、ガラスを基板に用いることによって、ペンタセン単結晶の PYS スペクトルを他の物質の寄与なく得られるようにした。単結晶は静電気力によってガラス基板に固定されている。ペンタセン単結晶の PYS スペクトルを Fig.2 に示す。検出光電子量を同時に計測した光量分布スペクトルで割ることで得られる光電子収量(Y)と、入射光のエネルギー($h\nu$)、イオン化エネルギー(I)との間には、有機材料の場合、 $Y \propto (h\nu - I)^3$ という関係が経験的に知られているので[3]、ペンタセン単結晶については Fig.2 より $I=4.95$ eV と見積もられる。これは、薄膜($I=4.90$ eV)よりやや大きな値だが、この理由としては、HOMO バンドの分散幅が単結晶相よりも薄膜相の方が大きいと予測されていること[4]、最外層のペンタセン分子の C-H 極性結合由来の電気二重層により真空準位が低下する効果[5]が分子配向の違いによって変化することなどが考えられる。この結果は、単結晶が非晶質薄膜より明確に小さなイオン化エネルギーを示すルブレソとは対照的である[6]。また、薄膜では、なんらかの欠陥に由来するギャップ内準位の存在を示唆する裾構造が閾値より低エネルギー側に観測されたが、これは、より欠陥が少ない単結晶ではみられなかった。講演では、ペンタセン単結晶の ARPES 測定についても報告する予定である。

本研究は、総合科学技術会議により制度設計された最先端研究開発支援プログラムにより、日本学術振興会を通して助成されたものです。

[1] Y. Nakayama *et al.*, Appl. Phys. Lett. **92**, 153306 (2008)

[2] S. Machida *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 156401 (2010)

[3] M. Kochi *et al.*, Bull. Chem. Soc. Jpn. **43**, 2690 (1970)

[4] H. Yoshida *et al.*, Phys. Rev. B **77**, 235205 (2008)

[5] I. Salzmann *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **130**, 12870 (2008)

[6] Y. Nakayama *et al.*, Appl. Phys. Lett. **93**, 173305 (2008)



Fig.1: Sample set up for PYS

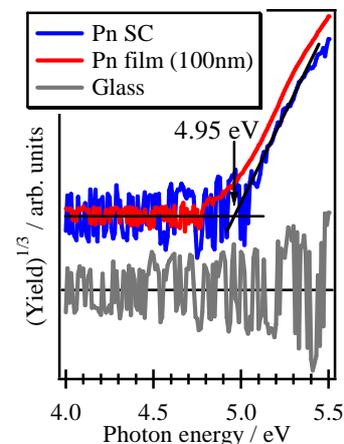


Fig.2: PYS spectra of a pentacene single crystal and thin film.

The spectrum of the glass substrate is also shown.