紫外光電子分光によるテトラセン及びルブレンのホール–振動結合

Hole-vibration coupling of rubrene and tetracene by gas phase UPS

○佐藤 一至[1]、米澤 恵一朗[1]、山口 拓真[1]、須田 洋輔[1]、解良 聡[1,2]（1. 千葉大院、2. 分子研）

○Kazushi Sato[1], Keiichirou Yonezawa[1], Takuma Yamaguchi[1], Yosuke Suda[1], Satoshi Kera[1,2]

(1.Chiba Univ. , 2.IMS)

E-mail: k.sato@chiba-u.jp

【序】

ホッピング伝導は有機半導体の重要な電荷輸送機構のひとつである。特に電荷の移動度は、大型の有機半導体分子においては、局在した分子振動との相互作用に大きく依存する。このような電荷(ホール)– 分子振動結合は紫外光電子分光法(UPS)によって、スペクトル微細構造として観測され、特に分子の最高占有準位（HOMO）について解析することで、ホッピング伝導の移動度の尺度として重要なパラメータの一つである、再配向エネルギー(λ_{reorg})が求められる。本研究では、同一主骨格をもつテトラセン及びルブレンの気相および薄膜相について高分解能 UPS 測定を行い、ホール-振動結合を比較した。分子構造の違いによるホール-振動結合の変化を議論する。

【実験】

気相 UPS 測定は超高真空中で加熱により昇華させた分子に、HeI 共鳴線 (21.22eV)を照射して行った。我々の作製したイオン化セルは、蒸気圧の低い大型分子用に最適化されており、低温かつ微少量によるスペクトルの取得が可能となっている。また、エネルギー軸補正のために Ar ガス(~3 ×10^{-4}Pa)を同時に測定している。エネルギー分析器は VG 社 CLAM4 であり、装置分解能は約 60meV である。薄膜相 UPS はグラファイト基板上に配向単分子膜を作製し、低温（約 50K）で角度分解 UPS 測定を行い比較した。

【結果と考察】

Fig.1、Fig.2 にテトラセンおよびルブレンの気相 UPS スペクトル及び Gaussian09 による振動結合スペクトルのシミュレーション結果をそれぞれ示す。スペクトルから求められる λ_{reorg} はテトラセン:124meV, ルブレン:136meV となった。理論計算と気相実験を比較すると、テトラセンはよく一致しているが、ルブレンでは一致が良くない。主として実験結果の半値幅が理論計算よりも大きく表れている。ルブレンの薄膜相では振動結合が気相と比べ大きく変化していることが分かっている[1]。気相においても熱励起により振動状態の変化が起こっている可能性がある。講演では薄膜相の結果と合わせて、環境に依存した分子構造と再配向エネルギーの関係について議論する。

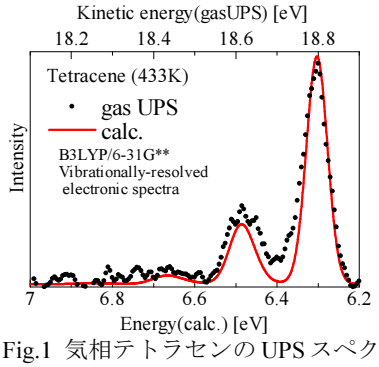

Fig.1 気相テトラセンの UPS スペクトルと振動構造計算結果

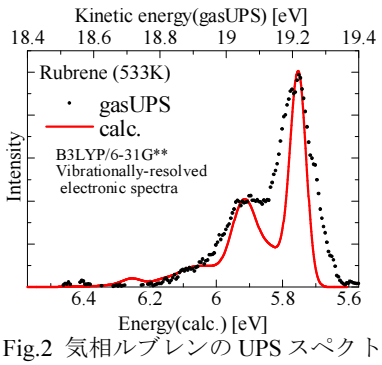

Fig.2 気相ルブレンの UPS スペクトルと振動構造計算結果

参考文献

[1] S.Duhm et al., Adv.Mater. 24, 901-905 (2012).

© 2015年 応用物理学会