

## 結晶性有機薄膜の電子準位への分子四重極モーメントの影響

### Impact molecular quadrupole on the energy levels of crystalline organic films

千葉大院工<sup>1</sup>, 千葉大分子キラリティ<sup>2</sup> ○吉田弘幸<sup>1,2</sup>

Chiba Univ.<sup>1</sup>, °Hiroyuki Yoshida<sup>1</sup>

E-mail: hyoshida@chiba-u.jp

電子準位は電子物性や反応性などを特徴づける重要なパラメータである。有機半導体の電子準位は、従来は構成する有機分子により決まるものと考えられてきた。最近、薄膜の分子配向[1]や薄膜の形状、分子の混合[2]などによって1 eV 近くも変化することがわかってきた。その原因は、分子の永久四重極と電荷の相互作用である静電相互作用が原因と考えられているが、もっぱら理論計算に頼った議論であり、実験的に十分検証されているわけではない。

有機半導体では、多くの場合、電荷は一分子に局在して分子イオンを生成する。このイオンは、電気的に中性な周囲分子と相互作用し、そのエネルギーは1 eV 程度である。これを分極エネルギーとよぶ。正イオンと負イオンに対する分極エネルギーをそれぞれ  $P_+$ 、 $P_-$  とすると、気相と固相(薄膜)のイオン化エネルギー  $I_g$ 、 $I_s$ 、電子親和力  $A_g$ 、 $A_s$  から求めることができる[3]。

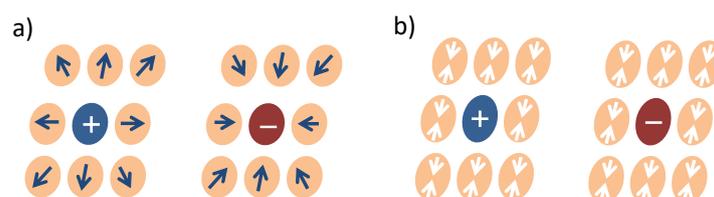


図1: 正・負イオンに対する周囲分子の相互作用。a) 電子分極と b) 静電相互作用。

この分極エネルギーは、イオンの電荷に対する周囲の中性分子の遮蔽効果である電子分極  $D$ 、電荷と中性分子がもともと持つ電荷分布との相互作用である静電相互作用  $W$  に分けることができる(図1)。 $D$  と  $W$  は正・負電荷に対する応答が異なることから、 $P_+$ 、 $P_-$  から求めることができる[4]。すなわち、紫外光電子分光法 (UPS) と低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS)[5] の測定から  $I_s$  と  $A_s$  を測定し、実験値を基に  $D$  と  $W$  を決定できる。 $W$  は、非極性分子の場合には電荷 - 永久四重極相互作用で近似できることから、分子の四重極との相関がある。この方法を用いて、分子配向、薄膜形状、分子混合による電子準位の変化が静電相互作用によるものであり、分子の永久四重極が重要であることを明らかにした。

1. Duhm, et al, *Nat. Mater.* **7**, 326 (2008).
2. Schwarze et al, *Science*, 352, 1446 (2016).
3. Yoshida, Yamada, Tsutsumi, Sato, *Phys. Rev. B* **92**, 075145 (2015).
4. Yamada, Yanagisawa, Koganezawa, Mase, Sato, Yoshida, *Phys. Rev. B* **97**, 245206 (2018).
5. Yoshida, *Chem. Phys. Lett.* **180-181**, 539 (2012); *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **204**, 116 (2015).