

ジナフトチエノチオフェン単結晶の価電子バンド構造の実測

Measurement of valence band structure of dinaphthothienothiophene single crystal

東理大院理工¹, 分子研², ○(M1)竹内陸¹, 伊澤誠一郎², (P)長谷川友里², (D)鶴田諒平¹山口拓真², Matthias Meissner², 出田真一郎², 田中清尚², 解良聡², 平本昌宏², 中山泰生¹Tokyo University of Science¹, Institute for Molecular Science², °Riku Takeuchi¹, Seiichiro Izawa²,Yuri Hasegawa², Ryohei Tsuruta¹, Takuma Yamaguchi², Matthias Meissner², Shin-ichiro Ideta²,Kiyohisa Tanaka², Satoshi Kera², Masahiro Hiramoto², Yasuo Nakayama¹

E-mail: 7219545@ed.tus.ac.jp

ジナフトチエノチフェン (DNNT) はその高い移動度と大気安定性から有望な p 型有機半導体材料として注目を集めている[1]。しかしその基礎的な電子構造などは未だに解明されていない。そこで、本研究では DNNT 単結晶試料に対して角度分解紫外光電子分光法 (ARUPS) を行い、イオン化エネルギー及び価電子バンド構造を決定した。

DNNT 単結晶は物理気相成長法を用いて作成した。また、作製した試料の結晶方位は低速電子回折及び偏光顕微鏡観察によって確認した。方位が確認できた試料に対して、励起光源として He-II α ($h\nu = 40.81$ eV)あるいは Xe-I α ($h\nu = 8.41$ eV)を用い、波長 375nm のレーザー光の照射下で ARUPS 測定を行なった。

Fig.1 に、DNNT 単結晶の価電子領域および二次電子領域の直出射 UPS 測定結果を示す。価電子帯上端 (VBM) はフェルミ準位から 0.70 eV に位置し、仕事関数は 4.32 eV であることから、DNNT 単結晶のイオン化エネルギーは 5.02 eV であると決定された。PYS 測定でも UPS 測定の値とほぼ一致した値が得られた。この値は、薄膜で報告されている値は 5.44 eV[2]より明らかに小さく、予想より電極からの正孔注入に有利であることが示唆される。Fig.2 に、DNNT 単結晶の Γ -X 方位に対して計測した ARUPS 結果に対してエネルギー方向に二階微分したマッピングを示す。価電子バンドは Γ 点においてフェルミ準位に最も近く、X 点へ向けて 2 本のバンドが深い結合エネルギー側へ並行に分散していく挙動が見られた。これは理論計算により予測されている DNNT の分散挙動と一致する。本講演では、他の方位における分散挙動についての観測結果も併せて報告し、 Γ 点近傍における曲率から算出されるホール有効質量の異方性についても議論する。

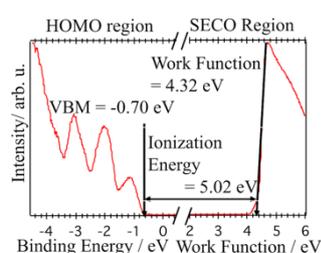


Fig. 1. UPS spectra of the DNNT single crystal in the HOMO region (left) and secondary electron region (right) taken with He-II α excitation

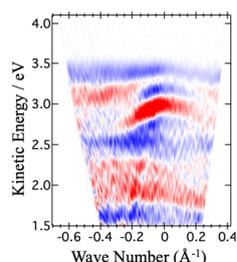


Fig. 2. ARUPS E - K_{\parallel} mapping image of the DNNT single crystal taken with the Xe-I α excitation

[1] T. Yamamoto *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **129**, (2007) 2224

[2] H. Yagi *et al.*, Chem. Phys. Lett. **563**, (2013) 55